

実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新
2018 年度採択研究代表者

2018 年度
実績報告書

谷山智康

名古屋大学大学院理学研究科
教授

界面マルチフェロイク材料の創製

§ 1. 研究成果の概要

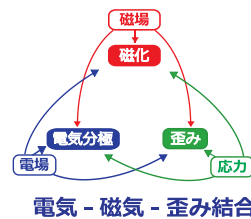
本研究では、実験的・計算的アプローチに立脚した材料・界面の設計を基盤として、巨大電気-磁気相関を有する界面マルチフェロイク材料を効率的に探索する新材料開発手法を開発することを目的としている。本年度は、①実験による高品質界面マルチフェロイクスの作製手法を構築、②第一原理計算による磁気-電気結合係数の算出手法の構築、③強磁性体/強誘電体ヘテロ構造における磁気・電気結合係数の評価手法の構築について研究を推進した。

谷山グループでは、種々の強磁性体と強誘電体とから構成される界面マルチフェロイク構造の高品質形成を行い、作製した界面マルチフェロイク構造に対して、界面歪み、界面分極の外部制御下において磁気特性、強磁性共鳴を評価し、界面歪み、界面分極が磁気異方性と明瞭な相関を持つことを実証した。結果、良好な界面マルチフェロイク状態が形成されることが実証された。合田グループでは、巨大な電気-磁気結合が期待されるホイスラー合金と強誘電体とのヘテロ界面における電気-磁気結合定数を第一原理計算に基づいて計算科学的アプローチから定量化した。界面の最安定構造を検討し、ホイスラー合金と強誘電体の界面に強磁性層を1原子層挿入することで、電気-磁気結合定数が格段に向上することを見出した。浜屋グループではホイスラー合金と強誘電体とのヘテロ界面を高品質化するための低温成長手法の構築を進め、界面磁気弾性効果が顕著に見られるホイスラー合金界面マルチフェロイクスの高品質形成に成功した。また、ホイスラー合金の低温高品質形成では、基板との格子整合に加え、界面の化学結合や電子状態がより本質的な役割を持つことを見出した。木村グループでは、谷山グループ、浜屋グループにより作製された界面マルチフェロイクスにおける磁気-電気結合定数を高精度に系統的に評価することを目的として、電圧印加型の微分強磁性共鳴測定システムを開発し、強磁性材料に対して高精度な強磁性共鳴スペクトルの計

測を実証した。さらにマルチフェロイク界面を通じた熱輸送評価を見据えた異常ネルンスト効果の計測手法の構築を進めた。

以上の研究およびグループ間連携により、実験・計算を併用した界面マルチフェロイク材料探索のための要素技術の準備が整い、次年度より本格的な界面マルチフェロイク材料探索が可能となる技術基盤が構築された。

実験的・計算的アプローチに立脚した界面マルチフェロイク材料の創製



界面マルチフェロイク構造

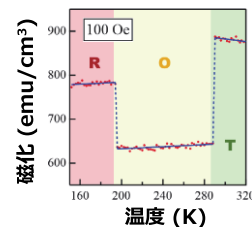
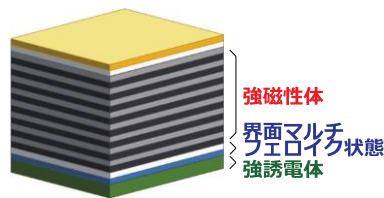


図 磁性多層膜からなる界面マルチフェロイクにおける磁気-弾性結合の実験例

§ 2. 研究実施体制

(1)「谷山」グループ

- ① 研究代表者:谷山 智康 (名古屋大学大学院理学研究科 教授)
- ② 研究項目
 - ・ 種々の界面マルチフェロイク材料の高品質形成
 - ・ 磁化および強磁性共鳴による電気-磁気結合の評価

(2)「合田」グループ

- ① 主たる共同研究者:合田 義弘 (東京工業大学物質理工学院 准教授)
- ② 研究項目
 - ・ 界面マルチフェロイクスの第一原理計算のための技術基盤の構築
 - ・ ベイズ最適化用訓練データの収集

(3)「浜屋」グループ

- ① 主たる共同研究者:浜屋 宏平 (大阪大学大学院基礎工学研究科 教授)
- ② 研究項目
 - ・ ペロブスカイト酸化物上への強磁性ホイスラー合金の作製
 - ・ 強磁性ホイスラー合金磁気特性の評価

(4)「木村」グループ

- ① 主たる共同研究者:木村 崇 (九州大学理学研究院 教授)
- ② 研究項目
 - ・ 強磁性共鳴実験による電気-磁気結合定数の算出
 - ・ 異常ネルンスト効果を用いたマルチフェロイック界面の熱伝導特性評価