

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

2019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実験による種々の界面マルチフェロイク構造の作製と磁気-電気結合効果の実験的評価、②第一原理計算による界面マルチフェロイク構造界面における磁気-電気結合の原子層挿入効果の理論的研究、③微分型強磁性共鳴評価装置の高精度化と磁気-電気結合効果の実験的評価、について研究を推進した。

谷山グループでは、強磁性体  $\text{La}_{0.62}\text{Sr}_{0.38}\text{MnO}_3$  と強誘電体  $[\text{Pb}(\text{Mg}_{1/2}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3]_{0.7}-[\text{PbTiO}_3]_{0.3}$  とからなる界面マルチフェロイク構造に着眼し、高品質なエピタキシャル界面を有するヘテロ界面の形成と電界による磁気特性の変調効果について調査した。その結果、電界印加によって誘起される強誘電体の分極反転とそれに伴う界面歪が強磁性体の磁化配向を大きく変化させることを実証した。本成果は、当該ヘテロ界面における巨大磁気-電気結合を示した成果である。浜屋グループでは、Heusler 強磁性合金  $\text{Co}_2\text{FeSi}$  と強誘電体  $\text{BaTiO}_3$  とからなる 2 次元エピタキシャル界面マルチフェロイク構造を高品質成長することに成功し、さらに電流磁気効果(磁気抵抗効果)の電界変調について調査した。その結果、 $\text{Co}_2\text{FeSi}/\text{BaTiO}_3$  界面における磁性が電界変調され、磁気抵抗効果に電界スイッチング現象が発現することを見出した。

一方、合田グループでは、第一原理計算に基づいて Heusler 合金  $\text{Fe}_3\text{Si}$  と強誘電体  $\text{BaTiO}_3$  の界面に種々の原子層を挿入することで発現する磁気-電気結合の変調効果について網羅的に調査した。その結果、Co に加え、Cr および Mn の単原子層を挿入することで磁気-電気結合定数が格段に向上することを理論的に実証した。さらに、木村グループでは、磁気-電気結合定数を高精度に評価するために微分型強磁性共鳴評価装置の開発と高精度化を進め、Heusler 合金  $\text{Co}_2\text{FeSi}$  と強誘電体  $\text{BaTiO}_3$  とからなる界面マルチフェロイク構造に対して、磁気異方性の電界変調効果を観測することに成功した。

以上の研究及びグループ間連携により、界面マルチフェロイク構造を構成する強磁性体、強誘電体の組合せや最適な界面構造を予測するための基盤が構築され、巨大応答を示す新規界面マルチフェロイク材料の探索への道筋が付けられた。

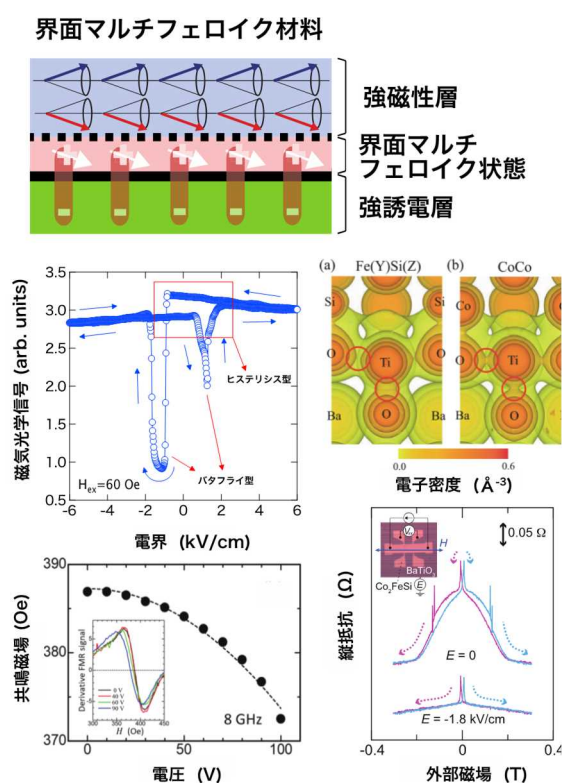


図 界面マルチフェロイク材料の概念図と磁気-電気結合効果の実証例

【代表的な原著論文】

1. Y. Hamazaki and Y. Gohda, “Enhancement of magnetoelectric coupling by insertion of Co atomic layer into  $\text{Fe}_3\text{Si}/\text{BaTiO}_3(001)$  interfaces identified by first-principles calculations”, J. Appl. Phys. vol. 126, pp.233902-1-6, 2019
2. S. P. Pati and T. Taniyama, “Voltage-driven strain-induced coexistence of both volatile and non-volatile interfacial magnetoelectric behaviors in LSMO/PMN-PT (001)”, J. Phys. D: Appl. Phys. vol. 53, pp.054003-1-8, 2020
3. K. Kudo, Y. Hamazaki, S. Yamada, S. Abo, Y. Gohda, and K. Hamaya, “Great differences between low-temperature grown  $\text{Co}_2\text{FeSi}$  and  $\text{Co}_2\text{MnSi}$  films on single-crystalline oxides”, ACS Appl. Electronic Mater. vol.1, pp.2371-2379, 2019

## § 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磁気-電気結合の評価

### (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に対する第一原理計算のための技術基盤の構築
  - ・ 界面への原子層挿入による磁気-電気結合定数の巨大化の理論的研究

### (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
  - ・ 磁気輸送現象を利用した磁気-電気結合効果の評価

### (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
  - ・ 電気-磁気結合効果の評価のための微分型強磁性共鳴評価装置の開発
  - ・ 強磁性共鳴による磁気-電気結合の評価