

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

2020 年度 年次報告書
------------------

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

本研究は、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探索する新材料開発手法の開発を目的としている。本年度は、①垂直磁化膜や様々な強磁性体からなる界面マルチフェロイク構造における磁気-電気結合定数の算出、②界面マルチフェロイク構造における Bayes 最適化による界面設計、③強誘電体薄膜の高品質作製、について研究を実施した。

谷山グループは、垂直磁化膜と強誘電体とからなる界面マルチフェロイク構造をエピタキシャル成長、電界による磁気特性の変調効果について調査し、磁化の不揮発的な電界ヒステリシス効果を観測することに成功した。浜屋グループは、強磁性合金と強誘電体とからなるエピタキシャル界面マルチフェロイク構造を高品質形成することに成功し、磁化の電界スイッチング動作を実証した。また木村グループは、強磁性合金と強誘電体とからなる界面マルチフェロイク構造に対して磁気イメージング法により局所的な磁気-電気結合定数の算出に成功した。以上の界面マルチフェロイク構造において、いずれも  $10^{-6}$  s/m 以上の磁気-電気結合定数を達成した。一方、合田グループは、実験グループが実証可能な界面マルチフェロイク構造の設計を狙い、強磁性合金と強誘電体からなる界面マルチフェロイク構造に対して、第一原理計算と Bayes 最適化を併用することで、巨大磁気-電気結合定数を示す界面の設計を行なった。その結果、無作為な探索と比較して磁気-電気結合定数が 56%増大した界面構造を予測することに成功した。

以上のチーム連携研究により、巨大磁気-電気結合定数を持つ界面マルチフェロイク構造を創製するための指針が示された。

## § 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
  - ・ 垂直磁化をもつ界面マルチフェロイク構造における磁気-電気結合係数の算出
  - ・ 面内電気分極を持つ強誘電体薄膜の高品質作製

### (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
  - ・ 界面異種原子層組成に対する Bayes 最適化の実行
  - ・ 第一原理計算による磁気-電気結合の評価

### (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

- ・ 強誘電体上への強磁性 Heusler 合金の高品質作製
- ・ 磁気光学効果を用いた磁気-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 大学院理学研究院、教授)
- ② 研究項目
  - ・ 局所領域における磁化曲線の電界変調効果の評価
  - ・ 単一強誘電ドメイン上の強磁性薄膜のスピンダイナミクスの評価

【代表的な原著論文情報】

- [1] “In-plane ferroelectricity and enhanced Curie temperature in perovskite BaTiO<sub>3</sub> epitaxial thin films”, Applied Physics Letters, vol. 117, No. 7, pp. 072902, 2020
- [2] “Prediction of the Curie temperature considering the dependence of the phonon free energy on magnetic states”, npj Computational Materials, vol. 6, No. 1, pp. 184, 2020
- [3] “First-principles study of the adsorption of 3d transition metals on BaO- and TiO<sub>2</sub>-terminated cubic-phase BaTiO<sub>3</sub>(001) surfaces”, The Journal of Chemical Physics, vol. 152, No. 20, pp. 204701, 2020
- [4] “Giant magnetoelectric effect in an L<sub>21</sub>-ordered Co<sub>2</sub>FeSi/Pb(Mg<sub>1/3</sub>Nb<sub>2/3</sub>)O<sub>3</sub>-PbTiO<sub>3</sub> multiferroic heterostructure”, Applied Physics Letters, vol. 118, No. 14, pp. 142402, 2021