

論文 / 著書情報  
Article / Book Information

|                   |   |
|-------------------|---|
| 題目(和文)            | 歪み移動を伴うマルチフェロイク複合材料の第一原理的研究   |
| Title(English)    | First-principles study of multiferroic composite with strain transfer   |
| 著者(和文)            | YATMEIDHYAMRAN MAHFUDH  |
| Author(English)   | Amran Mahfudh Yatmeidhy   |
| 出典(和文)            | 学位:博士(理学),<br>学位授与機関:東京工業大学,<br>報告番号:甲第12508号,<br>授与年月日:2023年9月22日,<br>学位の種別:課程博士,<br>審査員:合田 義弘,史 蹟,木村 好里,中辻 寛,三宮 工   |
| Citation(English) | Degree:Doctor (Science),<br>Conferring organization: Tokyo Institute of Technology,<br>Report number:甲第12508号,<br>Conferred date:2023/9/22,<br>Degree Type:Course doctor,<br>Examiner:,,,,, |
| 学位種別(和文)          | 博士論文  |
| Category(English) | Doctoral Thesis   |
| 種別(和文)            | 審査の要旨   |
| Type(English)     | Exam Summary  |

(博士課程)

## 論文審査の要旨及び審査員

| 報告番号        | 甲第  | 号     | 学位申請者氏名 | Amran Mahfudh Yatmeidhy |      |     |
|-------------|-----|-------|---------|-------------------------|------|-----|
| 論文審査<br>審査員 |     | 氏名    | 職名      |                         | 氏名   | 職名  |
|             | 主査  | 合田 義弘 | 准教授     |                         | 三宮 工 | 准教授 |
|             | 審査員 | 史蹟    | 教授      | 審査員                     |      |     |
|             |     | 木村 好里 | 教授      |                         |      |     |
| 中辻 寛        |     | 准教授   |         |                         |      |     |

### 論文審査の要旨 (2000 字程度)

本論文は“First-principles study of multiferroic composite with strain transfer” (歪み移動を伴うマルチフェロイク複合材料の第一原理的研究) と題し、英文で 5 章からなる。

第 1 章“Introduction”では、マルチフェロイク複合材料に関する既往研究と課題を紹介した。磁気電気結合の巨大化のためには、電界により制御された強誘電分極が界面歪みを誘起し、その歪みにより強磁性相の磁気異方性を変調させる機構が有効である一方、その強磁性単相での磁気異方性変調機構すらまだ明らかになっていないこと、およびマルチフェロイク複合材料におけるバルク効果と界面効果の分離がなされていないことを示した。磁気異方性変調機構解明には量子力学的 2 次摂動論が、バルク効果と界面効果の切り分けのためには単相ではなく接合系に対するシミュレーションが有効であることを指摘し、本論文の目的がマルチフェロイク複合材料における磁気異方性変調機構の解明である旨を述べた。

第 2 章“Basic theory and computational methods”では、本研究で用いた理論的枠組が述べられた。第一原理電子論とスピン・軌道相互作用を取り入れた磁気異方性解析に関して、数値解析手法の要点を述べた。

第 3 章“Origin of modulated magnetic anisotropy in single-phase Heusler alloys”では、Heusler 合金  $\text{Co}_2\text{FeSi}$ 、 $\text{Co}_2\text{MnSi}$ 、 $\text{Fe}_3\text{Si}$  を例として、強磁性体単相における歪み印加による磁気異方性発現機構を検討した。2 次摂動論を適用した理論解析から、従来用いられてきた軌道磁気モーメントと電子密度四極子による枠組みは、スピン・軌道相互作用における軌道角運動量およびスピン角運動量の非対角成分、スピン・軌道相互作用による電子状態の変調の一部が無視されており、 $\text{Fe}_3\text{Si}$  などいくつかの Heusler 合金では定量的のみならず定性的にも不十分であることを明らかにした。従来手法より精緻な理論解析手法として、2 次摂動においてスピン不変・反転における全ての仮想励起を取り入れることが重要であることを指摘した。

第 4 章“Magnetoelastic effect in multiferroic composite by domain modification”では、強磁性体と強誘電体の接合系であるマルチフェロイク複合材料に対して、スピン・軌道相互作用を取り入れた大規模第一原理計算によりシミュレーションし、単相バルク効果では記述できない界面効果を検討した。まず界面の安定性を議論し、安定と同定された界面に対し、強誘電ドメインの変化に応じた歪みによる磁気異方性の変調を理論解析した。強誘電体のドメインが界面並行方向の電気分極となっている際には  $\text{Co}_2\text{FeSi}$  の面内一軸磁気異方性が見られた一方で、界面垂直方向の電気分極に対して磁化は面内において比較的容易に回転できることがわかった。磁気異方性の変調の主たる部分はサイズ効果として単相効果により支配されている一方で、強磁性超薄膜では界面効果に由来する対称性の破れが見られた。

第 5 章“Conclusion”では、本論文を総括し、今後の展望について述べた。

以上を要するに、本論文ではマルチフェロイク複合材料における磁気異方性変調機構を解明し、既存の理論的枠組みの限界を指摘するとともに、より精緻な解析手法を提案した。さらに、強誘電体上の強磁性体に対する薄膜化を進めることにより、界面効果に由来する磁気電気結合の変調が可能であることを示した。これらの結果はマルチフェロイク複合材料のさらなる高機能化に資する基礎的知見を提供し、磁気異方性およびマルチフェロイク複合材料を記述する理論の発展として、理学的に貢献するところが大きい。よって、本論文は博士 (理学) の学位論文として十分な価値があるものと認められる。

注意: 「論文審査の要旨及び審査員」は、東工大リサーチポジトリ(T2R2)にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。