

令和 2 年 6 月 15 日現在

機関番号：13801

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2016～2019

課題番号：16K04930

研究課題名(和文) 自己発電型ナノマシンに向けたスピンを介した電力-動力間変換に関する理論的研究

研究課題名(英文) Theoretical Study on Transformation between Electric Power and Motive Power Mediated by Spin for Electricity Self-Generation Type Nanomachine

研究代表者

古門 聡士 (Kokado, Satoshi)

静岡大学・工学部・教授

研究者番号：50377719

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,600,000円

研究成果の概要(和文)：運動を正確に遠隔操作でき、且つ自らが発電したエネルギーを用いて走行する「自己発電型ナノマシン」には、電子伝導と分子運動の間の相互変換が必要である。我々はその変換に局在スピンを介した伝導電子-分子運動間相互作用 $V$ を用いる案を提案した。この $V$ の構築にはまず伝導(s)電子から局在d軌道へのs-d散乱の特性を知る必要がある。本研究ではs-d散乱およびそれを直接反映する異方性磁気抵抗(AMR)効果の理論的研究を行った。まずは結晶場を取り入れたモデルに対してs-d散乱理論を開発し、次にその理論を用いて従来理論では説明できなかったNi, Fe, ハーフメタルのAMR効果の実験結果を定性的に説明した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

我々は自己発電型ナノマシンの開発に必要な伝導電子からd軌道への電子散乱に注目し、その散乱を直接反映する異方性磁気抵抗(AMR)の理論を開発した。AMRは電気抵抗が磁化方向に依存する現象であり、約160年前から実験を中心に研究されてきた。一方、一部の散乱のみを取り入れた従来理論は特定の物質には有効なものの汎用性は低かった。本研究では全ての散乱を取り入れ、ハーフメタルを含む種々の物質に適用可能な理論を開発した。本理論により、従来理論では説明できなかったNi, Fe, ハーフメタルのAMRの説明に成功し、また磁性材料にとって重要なd軌道状態をAMRで容易に調べられ得ることも確認された。

研究成果の概要(英文)："Electric generation type nanomachine", in which motions can be properly remote-controlled and travel motions are performed by the self-generated electric power, needs the mutual transformation between electron conduction and molecular motions. We proposed an idea that interactions between electrons and molecular motions mediated by localized spins can be used in the transformation. To formulate this  $V$ , we must find properties of s-d scatterings from the conduction (s) electron to the localized d orbitals. In this study, we theoretically studied the s-d scattering and anisotropic magnetoresistance (AMR) effect, which directly reflects the s-d scattering. We first developed the s-d scattering theory for a model with the crystal field, and then qualitatively explained experimental results of the AMR effects for Ni, Fe, and half-metal, which had not been explained by conventional theories.

研究分野：物性理論

キーワード：伝導電子-スピン相互作用 スピン-分子運動相互作用 スピン軌道相互作用 結晶場 s-d散乱 異方性磁気抵抗効果 摂動論

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

運動を正確に遠隔操作でき、且つ自らが発電したエネルギーを用いて走行する「自己発電型ナノマシン」は夢の技術であり、またナノマシンの究極の目標でもある。このようなマシンは、将来、ナノ領域での分子の合成・診断・修復等の作業マシンとして重要な役割を担うと考えられる。一方これまで提案されてきたマシンは、上記のものからは程遠く、「発電機能」はもちろんのこと「遠隔操作による正確な運動」も達成されてこなかった。

提案されたマシンの多くは、外部からの電磁波照射により分子運動が励起されるマシンであった[1]。しかし、深刻な問題として、電磁波による励起では、分子の振動と回転が同時に起きる上、回転は方向が定まらない無秩序回転になり、正確な遠隔操作が出来ない。ここで、正確な遠隔操作とは、一方向回転または振動が個別に励起されることを意味する。最近別の試みとして走査トンネル顕微鏡(STM)を用いて分子運動を励起する基礎研究が行われつつある。実際、STM探針からの電子注入(電子のエネルギーは約 2eV)により分子が一方向または逆方向へ回転するモーターが報告された[2]。しかし、STM探針が必要な時点で遠隔操作とは言えず、またこのままの装置系ではナノマシンに適さないと思われる。

我々はこれまでに、強磁性体電極/局在スピンを持つ量子ドット/強磁性体電極のスピン依存伝導、単一スピン系における原子運動によるスピン緩和に関して、いくつかの理論を構築してきた。は、伝導電子スピン - 局在スピン間の交換相互作用に基づく伝導ハミルトニアン( $V_{c-s}$ )を世界に先駆けて導出した[3]。では、原子振動による軌道の変調がスピン軌道相互作用を通してスピンの影響を与えると考え、従来のスピン - 仮想的熱浴間相互作用とは異なる、局在スピン - 原子振動相互作用( $V_{s-m}$ )の正確な理論を構築した[4]。この理論では、スピン緩和にはスピンの向きで原子運動を細かく個別に励起できる選択則があることが初めて明らかにされた。我々はこれらを踏まえ、 $V_{c-s}$ と $V_{s-m}$ を併せ持つ系では、伝導電子が局在スピンを介して分子運動を個別に励起できると予想した。また同時に、本系は伝導電子が関係することから逆過程の分子運動からの発電(電子伝導)も可能であり、「遠隔操作による正確な運動」だけでなく「発電機能」も兼ね備えた究極のマシンを開発できると考えた。

2. 研究の目的

本研究は局在スピンを介した伝導電子 - 分子運動間相互作用  $V$  に関する理論的研究である。この  $V$  の構築には、まず  $V$  に大きな影響を与え得る伝導(s)電子から d 軌道への遷移確率(s-d 散乱)の特性を詳しく調べる必要がある。s-d 散乱を調べる手法として、電気抵抗が磁化方向に依存する現象「異方性磁気抵抗(AMR)効果」がある。

3. 研究の方法

AMR 効果を調べるためのモデルとして、正方対称の結晶場エネルギー、交換分裂エネルギー、およびスピン軌道相互作用を持つ強磁性体を考える(図 1 左図)。さらに磁化は(001)面内にあり、電流  $I$  は  $///[100]$ ,  $[110]$ ,  $[001]$  とする[5]。

まず、正方対称の結晶場エネルギー  $\Delta$ ,  $\delta_\epsilon$ ,  $\delta_\gamma$  (図 1 右図)、交換分裂エネルギー  $H$ , およびスピン軌道相互作用(結合定数は  $\lambda$ ) から成る 3d 電子系ハミルトニアンに対して摂動理論を適用することで、3d 軌道の波動関数をもとめた。ここで、スピンの向き(磁化と逆の向き)と  $[100]$  方向(x 軸)の間の相対角を  $\phi$ , スピンの向きと  $[110]$  方向の間の相対角を  $\phi'$  とした(図 1 左図)。

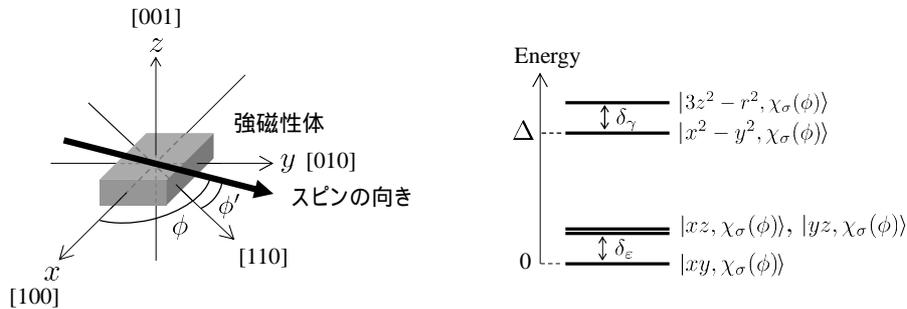


図 1 左図：強磁性体の AMR 効果の概略図。磁化の向きはスピンの向きの逆である。右図：正方対称結晶場を持つ 3d 軌道のエネルギー準位。  $xy$ ,  $yz$ ,  $xz$ ,  $x^2 - y^2$ ,  $3z^2 - r^2$  は軌道関数,  $\chi_\sigma(\phi)$  はスピン関数を表す。

次に、上記 3d 軌道を持つ強磁性体の AMR 比を調べた。 $///[100]$ と $///[110]$ の場合の AMR 比  $AMR^i(\phi)$  ( $i=[100]$ ,  $[001]$ )および $///[110]$ の場合の AMR 比  $AMR^{[110]}(\phi')$  は、

$$AMR^i(\phi) = \frac{\rho(\phi) - \rho(\pi/2)}{\rho(\pi/2)}, \quad AMR^{[110]}(\phi') = \frac{\rho(\phi') - \rho(\pi/2)}{\rho(\pi/2)} \quad (1)$$

としてそれぞれ定義される。ただし、 $\rho(\phi)$  は  $///[100]$  あるいは  $///[001]$  の場合でスピンの  $[100]$  方向 ( $x$  軸) の相対角が  $\phi$  のときの抵抗率である (図 1 右図)。  $\rho(\phi')$  は  $///[110]$  の場合でスピンの  $[110]$  方向の相対角が  $\phi'$  のときの抵抗率である。それぞれの抵抗率は

$$\rho(\phi) = \frac{\rho_+(\phi)\rho_-(\phi)}{\rho_+(\phi) + \rho_-(\phi)}, \quad \rho(\phi') = \frac{\rho_+(\phi')\rho_-(\phi')}{\rho_+(\phi') + \rho_-(\phi')} \quad (2)$$

である。  $\rho_\sigma(\phi)$  は  $///[100]$  あるいは  $///[001]$  での  $\sigma$  スピンの抵抗率、  $\rho_\sigma(\phi')$  は  $///[110]$  での  $\sigma$  スピンの抵抗率である。ボルツマン理論により、それぞれ

$$\rho_\sigma(\phi) = \frac{m_\sigma^*}{n_\sigma e^2 \tau_\sigma(\phi)}, \quad \rho_\sigma(\phi') = \frac{m_\sigma^*}{n_\sigma e^2 \tau_\sigma(\phi')} \quad (3)$$

として表される。ただし、  $m_\sigma^*$  は  $\sigma$  スピンの電子の有効質量、  $n_\sigma$  は  $\sigma$  スピンの電子の数密度、  $e$  は電荷である。  $1/\tau_\sigma(\phi)$  と  $1/\tau_\sigma(\phi')$  は、それぞれ、  $///[100]$  と  $///[110]$  の場合の  $\sigma$  スピンの電子の散乱率 (遷移確率) であり、両者には自由 (s) 電子から自由 (s) 電子への不純物とフォノンによる s-s 散乱率および自由 (s) 電子から 3d 軌道への不純物による s-d 散乱率が含まれている。

#### 4. 研究成果

ここでは主な成果である、「(1) 結晶場エネルギーおよびスピン軌道相互作用を持つ 3d 軌道の波動関数 [5]」、 「(2) Strong ferromagnet あるいはハーフメタルの AMR 比 [5]」、 「(3) Weak ferromagnet の AMR 比 [6]」について報告する。

##### (1) 結晶場エネルギーおよびスピン軌道相互作用を持つ 3d 軌道の波動関数

我々はまず無摂動系が縮退している場合の 2 次摂動理論の波動関数の一般式を導出した。その一般式を用いて、交換分裂エネルギー  $H$ 、結晶場エネルギー  $\Delta$ 、  $\delta_\epsilon$ 、  $\delta_\gamma$  (図 1 右図)、およびスピン軌道相互作用 (結合定数は  $\lambda$ ) を持つ 3d 軌道の波動関数を求めた。その波動関数は主成分の軌道に他の軌道 (混成軌道) が僅かに混ざっており、その混成軌道の確率振幅は  $\cos 2\phi$  または  $\sin 2\phi$  (ただし、  $\phi'$  で表わす際は  $\phi' = \phi - \pi/4$  を用いる) を含む形となった。

##### (2) $///[100]$ 、 $[110]$ 、 $[001]$ の場合の Strong ferromagnet あるいはハーフメタルの AMR 比

ボルツマン理論を用いて抵抗率をもとめ、その抵抗率から AMR 比を解析的に導出した。電流方向を  $i$  ( $= [100]$ 、  $[110]$ 、  $[001]$ ) とするとき、それぞれの AMR 比  $AMR^{[100]}(\phi)$ 、  $AMR^{[110]}(\phi)$ 、  $AMR^{[001]}(\phi)$  は、

$$AMR^{[100]}(\phi) = C_0^{[100]} + C_2^{[100]} \cos 2\phi + C_4^{[100]} \cos 4\phi \quad (4)$$

$$AMR^{[110]}(\phi') = C_0^{[110]} + C_2^{[110]} \cos 2\phi' + C_4^{[110]} \cos 4\phi' + C_6^{[110]} \cos 6\phi' + C_8^{[110]} \cos 8\phi' \quad (5)$$

$$AMR^{[001]}(\phi) = C_0^{[001]} + C_4^{[001]} \cos 4\phi \quad (6)$$

となった。ただし、  $C_0^{[100]} = C_2^{[100]} - C_4^{[100]}$ 、  $C_0^{[110]} = C_2^{[110]} - C_4^{[110]} + C_6^{[110]} - C_8^{[110]}$ 、  $C_0^{[001]} = -C_4^{[001]}$  である。  $C_j^i$  は電流方向  $i$  の場合の  $\cos j\phi$  の係数であり、  $\lambda$ 、  $H$ 、  $\Delta$  及び軌道ごとのフェルミ準位 ( $E_F$ ) 上の部分状態密度等で表された [5]。  $C_j^i$  の中の各項は、  $(\lambda/\Delta)^2$ 、  $(\lambda/H)^2$ 、  $[\lambda/(H \pm \Delta)]^2$ 、あるいは  $\lambda^2/(H\Delta)$  を係数として持ち、支配的な項は  $(\lambda/\Delta)^2$  の項である。  $C_2^{[100]}$  と  $C_2^{[110]}$  の中の支配的な項  $[(\lambda/\Delta)^2]$  を持つのは d 軌道と d 軌道間の部分状態密度の差で表された。  $C_4^i$  ( $i$  によらない)、  $C_6^{[110]}$ 、および  $C_8^{[110]}$  は d 軌道間の部分状態密度の差に比例した。なお、  $C_2^{[100]} \cos 2\phi$ 、  $C_2^{[110]} \cos 2\phi'$  項は混成軌道の確率振幅の実部、  $C_4^{[100]} \cos 4\phi$ 、  $C_4^{[110]} \cos 4\phi'$ 、  $C_4^{[001]} \cos 4\phi$  項は混成軌道の確率と関係づけられた。

また d 軌道内の 1 軌道と d 軌道の 2 軌道の部分状態密度が全て等しいとき、  $C_4^{[100]} = -C_4^{[110]}$  になることが確認された。この関係は Ni [7] や Fe<sub>4</sub>N [8] などの強磁性体に対して実験で観測されている。

本理論を用いて実際の物質 (Ni [7] とハーフメタル [5, 9]) の AMR 効果の実験結果を解析した。まず Ni [5, 7] に関しては、過去の研究で得られた部分状態密度の値などを用いることで、  $C_j^i$  の値を評価した (表 1)。  $C_2^i$  と  $C_4^i$  は符号を含め過去の評価値と定性的に合うことが確認された。なお我々の理論 [5] では  $C_6^i$  と  $C_8^i$  の値も得られ、それらは  $C_4^{[100]} (= -C_4^{[110]})$  より大きな値となった。今後、  $C_6^i$  と  $C_8^i$  が実験で確認されることが望まれる。

表1 Ni の  $C_j^i$  の評価値 . 実験結果[7]と現象論による式[11]を用いて評価された値と我々の理論[5]によって評価された値 .

	$C_2^{[100]}$	$C_4^{[100]}$	$C_2^{[110]}$	$C_4^{[110]}$	$C_6^{[110]}$	$C_8^{[110]}$
実験結果と現象論	$5.00 \times 10^{-3}$	$2.63 \times 10^{-3}$	$1.25 \times 10^{-2}$	$-2.63 \times 10^{-3}$	—	—
我々の理論	$3.55 \times 10^{-3}$	$4.54 \times 10^{-4}$	$1.24 \times 10^{-2}$	$-4.54 \times 10^{-4}$	$-3.23 \times 10^{-3}$	$-2.81 \times 10^{-3}$

次にハーフメタル[5,9]に関しては, 以前我々が開発した結晶場無しのモデル[10]では, ハーフメタルは必ず負の AMR 比になることを示された. しかし今回の結晶場有りのモデル[5]では, 電流方向  $i$  によって AMR 比の符号が変わり得ることが確認された. 実際, ハーフメタル  $\text{Co}_x(\text{Mn}_{0.44}\text{Ga}_{0.56})_{100-x}$  では, AMR 比の符号が電流方向によって変わることが実験で観測されている [9].

### (3) $///[100]$ の場合の Weak ferromagnet の AMR 比

3の手法により, 磁化が(001)面内にあり,  $///[100]$  の場合の Weak ferromagnet の抵抗率と AMR 比  $AMR^{[100]}(\phi)$  の式を解析的に導出した[6].  $AMR^{[100]}(\phi)$  の係数  $C_2^{[100]}$  と  $C_4^{[100]}$  は次のとおりである.

$$C_2^{[100]} = \frac{3}{8} \frac{1}{1+r+r_{s,+ \rightarrow \gamma,+} + r_{s,- \rightarrow \gamma,-}} \left\{ \frac{1+r_{s,+ \rightarrow \gamma,+}}{r+r_{s,- \rightarrow \gamma,-}} \left[ \left( \frac{\lambda}{\Delta} \right)^2 (r_{s,- \rightarrow \gamma,-} - r_{s,+ \rightarrow \epsilon 1,-}) + \left( \frac{\lambda}{H+\Delta} \right)^2 (r_{s,- \rightarrow \epsilon 2,-} - r_{s,- \rightarrow \gamma,-}) \right] \right. \\ \left. + \frac{r+r_{s,- \rightarrow \gamma,-}}{1+r_{s,+ \rightarrow \gamma,+}} \left[ \left( \frac{\lambda}{\Delta} \right)^2 (r_{s,+ \rightarrow \gamma,+} - r_{s,+ \rightarrow \epsilon 1,+}) + \left( \frac{\lambda}{H-\Delta} \right)^2 (r_{s,+ \rightarrow \epsilon 2,-} - r_{s,+ \rightarrow \gamma,+}) \right] \right\}, \quad (7)$$

$$C_4^{[100]} = \frac{3}{32} \frac{1}{1+r+r_{s,+ \rightarrow \gamma,+} + r_{s,- \rightarrow \gamma,-}} \left\{ \frac{1+r_{s,+ \rightarrow \gamma,+}}{r+r_{s,- \rightarrow \gamma,-}} \left[ \left( \frac{\lambda}{\Delta} \right)^2 (r_{s,- \rightarrow \epsilon 1,-} - r_{s,- \rightarrow \epsilon 2,-}) + \left( \frac{\lambda}{H+\Delta} \right)^2 (r_{s,- \rightarrow \epsilon 2,+} - r_{s,- \rightarrow \epsilon 1,+}) \right] \right. \\ \left. + \frac{r+r_{s,- \rightarrow \gamma,-}}{1+r_{s,+ \rightarrow \gamma,+}} \left[ \left( \frac{\lambda}{\Delta} \right)^2 (r_{s,+ \rightarrow \epsilon 1,+} - r_{s,+ \rightarrow \epsilon 2,+}) + \left( \frac{\lambda}{H-\Delta} \right)^2 (r_{s,+ \rightarrow \epsilon 2,-} - r_{s,+ \rightarrow \epsilon 1,-}) \right] \right\}, \quad (8)$$

ここで,  $r_{s,\sigma \rightarrow \delta_\epsilon, \zeta} \equiv r_{s,\sigma \rightarrow \epsilon 1, \zeta}$ ,  $r_{s,\sigma \rightarrow \xi_+, \zeta} = r_{s,\sigma \rightarrow \xi_-, \zeta} \equiv r_{s,\sigma \rightarrow \epsilon 2, \zeta}$ ,  $r_{s,\sigma \rightarrow x^2-y^2, \zeta} = r_{s,\sigma \rightarrow 3z^2-r^2, \zeta} \equiv r_{s,\sigma \rightarrow \gamma, \zeta}$  [9,11] であり,  $\delta_\epsilon$ ,  $\xi_+$ ,  $\xi_-$  は d 軌道,  $x^2-y^2$ ,  $3z^2-r^2$  は d 軌道を表す. また,  $r = \rho_{s,-} / \rho_{s,+} = (m_-^* / m_+^*)^4 (D_+^{(s)} / D_-^{(s)})^2$ ,  $r_{s,+ \rightarrow m, \zeta} = \rho_{s,+ \rightarrow m, \zeta} / \rho_{s,+} = \beta_+ D_{m, \zeta}^{(d)} / D_+^{(s)}$ ,  $r_{s,- \rightarrow m, \zeta} = \rho_{s,- \rightarrow m, \zeta} / \rho_{s,+} = r \beta_- D_{m, \zeta}^{(d)} / D_-^{(s)}$  である. ただし,  $D_\sigma^{(s)}$  ( $D_{m, \zeta}^{(d)}$ ) は  $E_F$  上の  $\sigma$  スピンの s 軌道 ( $\zeta$  スピンの d 軌道  $m$ ) の部分状態密度であり,  $\beta_\sigma$  は不純物のポテンシャルや数密度などを含む量である.  $r_{s,\sigma \rightarrow m, \zeta} \propto D_{m, \zeta}^{(d)}$  より, 式(7)の  $C_2^{[100]}$  は d 軌道と d 間の部分状態密度の差, 式(8)の  $C_4^{[100]}$  は d 軌道間の部分状態密度の差で表すことができる.

式(7)と式(8)を用いて, 典型的な Weak ferromagnet である bcc Fe の  $C_2^{[100]}$  と  $C_4^{[100]}$  の数値計算を行った. ここでは, d 軌道と d 軌道間の部分状態密度の差あるいは d 軌道間の部分状態密度の差が  $C_2^{[100]}$  と  $C_4^{[100]}$  に与える影響について調べた. また実験で観測された bcc Fe の  $T=5K$  での負の  $AMR^{[100]}(0) (= 2C_2^{[100]}) \approx -0.04$  [12] と多結晶 Fe の  $T=5K$  での正の AMR 比「0.002」 [12] についても議論した.

まず d 軌道と d 軌道間の部分状態密度の差あるいは d 軌道間の部分状態密度の差を取り入れるため, 部分状態密度を次のように置いた.

$$D_{\epsilon 1, \zeta}^{(d)} = D_\zeta^{(d)} + \frac{1}{2} x_{\epsilon-\gamma} + \frac{1}{2} x_{\epsilon 1-\epsilon 2}, \quad D_{\epsilon 2, \zeta}^{(d)} = D_\zeta^{(d)} + \frac{1}{2} x_{\epsilon-\gamma} - \frac{1}{2} x_{\epsilon 1-\epsilon 2}, \quad D_{\gamma, \zeta}^{(d)} = D_\zeta^{(d)} - \frac{1}{2} x_{\epsilon-\gamma}, \quad (9)$$

ただし,  $D_\zeta^{(d)}$  は部分状態密度の中央値,  $x_{\epsilon 1-\epsilon 2}$  は  $D_{\epsilon 1, \zeta}^{(d)}$  と  $D_{\epsilon 2, \zeta}^{(d)}$  間の差, および  $x_{\epsilon-\gamma}$  は  $x_{\epsilon 1-\epsilon 2} = 0$  のときに  $D_{\epsilon 1, \zeta}^{(d)}$  ( $= D_{\epsilon 2, \zeta}^{(d)}$ ) と  $D_{\gamma, \zeta}^{(d)}$  間の差を表す. さらに, 過去の文献[10,13]をもとに bcc Fe に対するパラメータを,  $D_+^{(d)} = 0.20$  states/eV,  $D_-^{(d)} = 0.050$  states/eV,  $D_+^{(s)} = 0.037$  states/eV,  $D_-^{(d)} = 0.0040$  states/eV,  $x_{\epsilon-\gamma} = 0.10$  states/eV,  $x_{\epsilon 1-\epsilon 2} = 0$  states/eV,  $H = 1.8$  eV,  $\Delta = -0.1$  eV,  $\lambda = 0.052$  eV, および  $r = 0.38$  とした. また  $\beta_\sigma$  の  $\sigma$  依存性は無視し,  $\beta_\sigma = \beta$  とおいた.  $\beta$  は不純物の情報を含む量であり, 評価が難しいため, 今回は  $C_2$  の実験値[12]を再現するように決められた.

図2左図に  $x_{\varepsilon_1-\varepsilon_2}=0$  states/eV で  $\beta = 0.011, 0.03, 0.05$  の系の  $C_2^{[100]}$  の  $x_{\varepsilon-\gamma}$  依存性を示す．大雑把には  $x_{\varepsilon-\gamma} > 0$  ( $x_{\varepsilon-\gamma} < 0$ ) のとき  $C_2^{[100]} < 0$  ( $C_2^{[100]} > 0$ ) である．この振る舞いは  $C_2^{[100]}$  の支配的な項が  $-x_{\varepsilon-\gamma} - (1/2)x_{\varepsilon_1 \rightarrow \varepsilon_2}$  (ただし, 今は  $x_{\varepsilon_1-\varepsilon_2}=0$ ) として表されることを反映している．また, bcc Fe は  $x_{\varepsilon-\gamma}=0.10$  states/eV の系に相当し,  $x_{\varepsilon-\gamma}=0.10$  states/eV のとき,  $\beta = 0.011$  の  $C_2^{[100]}$  が bcc Fe の  $C_2^{[100]}$  の実験結果 ( $-0.02$ ) [12] と一致することがわかった．一方, 多結晶 Fe の正の  $C_2^{[100]}$  の実験結果 [14] は我々の結晶場無しモデルの AMR 比の式によって説明された．

図2右図に  $x_{\varepsilon-\gamma}=0.10$  states/eV,  $\beta = 0.011, 0.03, 0.05$  の系の  $C_4^{[100]}$  の  $x_{\varepsilon_1-\varepsilon_2}$  依存性を示す．ここでは,  $C_4^{[100]}$  における正方歪みの効果を調べた． $x_{\varepsilon_1-\varepsilon_2}=0$  では  $C_4^{[100]}=0$ ,  $x_{\varepsilon_1-\varepsilon_2} > 0$  ( $x_{\varepsilon_1-\varepsilon_2} < 0$ ) では  $C_4^{[100]} > 0$  ( $C_4^{[100]} < 0$ ) であり,  $x_{\varepsilon_1-\varepsilon_2} \neq 0$  の正方歪みの系で  $C_4^{[100]} \neq 0$  になることが確認された．この振る舞いは  $C_4^{[100]} \propto x_{\varepsilon_1 \rightarrow \varepsilon_2}$  の関係を反映している．

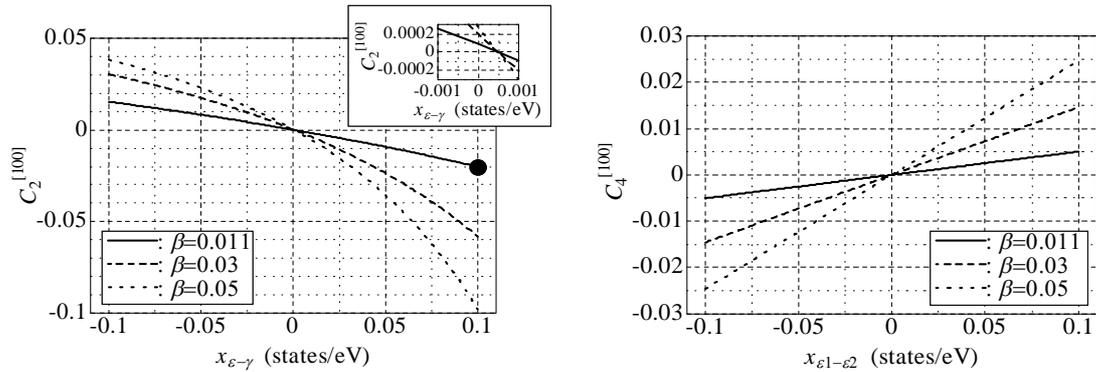


図2 左図:  $x_{\varepsilon_1-\varepsilon_2}=0$  states/eV で  $\beta = 0.011, 0.03, 0.05$  の系の  $C_2^{[100]}$  の  $x_{\varepsilon-\gamma}$  依存性．ここで bcc Fe は  $x_{\varepsilon-\gamma}=0.10$  states/eV の系に相当する．黒色の印で示されているように,  $x_{\varepsilon-\gamma}=0.10$  では,  $\beta = 0.011$  の  $C_2^{[100]}$  が bcc Fe の  $C_2^{[100]}$  の実験結果 ( $T=5K$  で  $-0.02$ ) [12] と一致した．差し込み図は  $x_{\varepsilon-\gamma}=0$  近傍を拡大した図である．右図:  $x_{\varepsilon-\gamma}=0.10$  states/eV,  $\beta = 0.011, 0.03, 0.05$  の系の  $C_4^{[100]}$  の  $x_{\varepsilon_1-\varepsilon_2}$  依存性．

最後に Weak ferromagnet の AMR 比の特徴について考察する．

d 軌道の部分状態密度の軌道依存性の無視および  $[\lambda/(H \pm \Delta)]^2 \approx (\lambda/H)^2$  ( $|\Delta/H| \ll 1$  による) の使用のもとで, 今回導出した結晶場有りのモデルの  $AMR^{[100]}(0) (=2C_2^{[100]})$  [5] が我々の結晶場無しモデルの AMR 比 [10] に帰着することを確認した．

Fe が満たす関係式 ( $\rho_{s \rightarrow d,+} > \rho_{s \rightarrow d,-}$  と  $\rho_{s,+} > \rho_{s,-}$ ) のもとでは, 結晶場無しモデルは正の AMR 比を示し, 多結晶 Fe の正の AMR 比の実験結果 [14] と一致する．

bcc Fe と多結晶 Fe の間での AMR 比 (大きさと符号) の相違に関して, bcc Fe の  $AMR^{[100]}(0)$  の実験結果 [12] は今回の結晶場有りのモデルの  $AMR^{[100]}(0)$  [5] によって説明され, 多結晶 Fe の AMR 比の実験結果 [14] は以前の結晶場無しモデルの AMR 比 [10] によって説明された．なお, 結晶場有りのモデルの  $AMR^{[100]}(0)$  の支配的な項は  $(\lambda/\Delta)^2$  項であるのに対し, 結晶場無しモデルの AMR 比は  $(\lambda/H)^2$  項のみからなる．このような違いが bcc Fe と多結晶 Fe 間の AMR 比 (大きさと符号) の相違をもたらすと考えられる．

#### <引用文献>

- [1] J.-F. Morin et al., *Organic Lett.* **8**, 1713 (2006).
- [2] P. Mishra et al., *Nano Lett.* **15**, 4793 (2015).
- [3] S. Kokado et al., *Phys. Rev. B* **76**, 054451 (2007).
- [4] S. Kokado et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 114721 (2010).
- [5] S. Kokado et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* **88**, 034706 (2019).
- [6] S. Kokado et al., *Materials Today: Proc.* (2020), in press.
- [7] G. Dedié, *J. Phys. F* **5**, 706 (1975).
- [8] M. Tsunoda et al., *Appl. Phys. Express* **3**, 113003 (2010).
- [9] T. Sato et al., *Appl. Phys. Express* **12**, 103005 (2019).
- [10] S. Kokado et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* **81**, 024705 (2012).
- [11] W. Döring, *Ann. Phys.* **32**, 259 (1938).
- [12] M. Tsunoda et al., in preparation.
- [13] D. A. Papaconstantopoulos, *Handbook of the Band Structure of Elemental Solids* (Plenum, New York, 1986) p. 111 (fcc Ni).
- [14] M. Tsunoda et al., *Appl. Phys. Express* **2**, 083001 (2009).

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 7件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 5件）

1. 著者名 Takashi Sato, Satoshi Kokado, Satoru Kosaka, Tsuyoshi Ishikawa, Tomoyuki Ogawa, and Masakiyo Tsunoda	4. 巻 113
2. 論文標題 Large negative anisotropic magnetoresistance in Co <sub>2</sub> MnGa Heusler alloy epitaxial thin films	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Applied Physics Letters	6. 最初と最後の頁 112407-1 - 5
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） <a href="https://doi.org/10.1063/1.5047821">https://doi.org/10.1063/1.5047821</a>	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Satoshi Kokado and Masakiyo Tsunoda	4. 巻 88
2. 論文標題 Theoretical Study on Anisotropic Magnetoresistance Effects of $l//[100]$ , $l//[110]$ , and $l//[001]$ for Ferromagnets with A Crystal Field of Tetragonal Symmetry	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 034706-1 - 17
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） <a href="https://journals.jps.jp/doi/10.7566/JPSJ.88.034706">https://journals.jps.jp/doi/10.7566/JPSJ.88.034706</a>	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Satoshi Kokado, Masakiyo Tsunoda	4. 巻 86
2. 論文標題 Erratum: ``Twofold and Fourfold Symmetric Anisotropic Magnetoresistance Effect in A Model with Crystal Field'' [J. Phys. Soc. Jpn. 84, 094710 (2015)]	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 108001-108001
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） <a href="https://doi.org/10.7566/JPSJ.86.108001">https://doi.org/10.7566/JPSJ.86.108001</a>	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Satoshi Kokado, Masakiyo Tsunoda	4. 巻 14
2. 論文標題 CORRECTION: Anisotropic Magnetoresistance Effect of a Strong Ferromagnet: Magnetization Direction Dependence in a Model With Crystal Field [Phys. Status Solidi C 11, No. 5-6, 1026-1032 (2014)]	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Physica Status Solidi C	6. 最初と最後の頁 1700218-1700218
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） <a href="https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/pssc.201700218">https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/pssc.201700218</a>	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Takashi Sato, Satoshi Kokado, Masahito Tsujikawa, Tomoyuki Ogawa, Satoru Kosaka, Masafumi Shirai, Masakiyo Tsunoda	4. 巻 12
2. 論文標題 Signs of anisotropic magnetoresistance in Co <sub>2</sub> MnGa Heusler alloy epitaxial thin films based on current direction	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 103005-1 - 5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) <a href="https://iopscience.iop.org/article/10.7567/1882-0786/ab42b4">https://iopscience.iop.org/article/10.7567/1882-0786/ab42b4</a>	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Satoshi Kokado, Masakiyo Tsunoda	4. 巻 27
2. 論文標題 Theoretical Study on Anisotropic Magnetoresistance Effect for Weak Ferromagnets with a Crystal Field of Tetragonal Symmetry	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Materials Today: Proceedings	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Satoshi Kokado, Masakiyo Tsunoda	4. 巻 88
2. 論文標題 Erratum II: ``Twofold and Fourfold Symmetric Anisotropic Magnetoresistance Effect in A Model with Crystal Field'' [J. Phys. Soc. Jpn. 84, 094710 (2015)]	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 068001-068001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) <a href="https://journals.jps.jp/doi/10.7566/JPSJ.88.068001">https://journals.jps.jp/doi/10.7566/JPSJ.88.068001</a>	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計10件 (うち招待講演 4件 / うち国際学会 8件)

1. 発表者名 Satoshi Kokado and Masakiyo Tsunoda
2. 発表標題 Intuitive Explanation of Anisotropic Magnetoresistance (AMR) Effect and Necessary Condition for Half-Metallic Ferromagnet "Negative AMR"
3. 学会等名 SPIE(The international society for optics and photonics) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 佐藤岳, 古門聡士, 小坂悟, 石川剛, 小川智之, 角田匡清
2. 発表標題 Co <sub>2</sub> MnGaエピタキシャル薄膜の異方性磁気抵抗効果
3. 学会等名 応用物理学会 春季学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Satoshi Kokado, Yuya Sakuraba, Masakiyo Tsunoda
2. 発表標題 Theoretical Study on Anisotropic Magnetoresistance Effect
3. 学会等名 Junjiro Kanamori Memorial International Symposium: New Horizon of Magnetism (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Satoshi Kokado, Masakiyo Tsunoda
2. 発表標題 Theoretical Study on Anisotropic Magnetoresistance Effects of $l//[100]$ , $l//[110]$ , and $l//[001]$ for Ferromagnets
3. 学会等名 American Physical Society (APS) March Meeting 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Satoshi Kokado and Masakiyo Tsunoda
2. 発表標題 Theoretical Study on Anisotropic Magnetoresistance Effects in Ferromagnets
3. 学会等名 International Symposium on Innovative Materials and Physics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Satoshi Kokado, Masakiyo Tsunoda
2. 発表標題 Theoretical Study on Anisotropic Magnetoresistance Effects for Various Ferromagnets
3. 学会等名 2nd International Conference on Semiconductors, Optoelectronics and Nanostructures (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Satoshi Kokado, Masakiyo Tsunoda
2. 発表標題 Theoretical Study on Anisotropic Magnetoresistance Effect
3. 学会等名 5th World Congress on Materials Science & Engineering (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Satoshi Kokado, Masakiyo Tsunoda
2. 発表標題 Theoretical Study on Anisotropic Magnetoresistance Effect
3. 学会等名 9th International Advances in Applied Physics & Materials Science Congress (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 佐藤岳, 古門聡士, 辻川雅人, 小川智之, 小坂悟, 白井正文, 角田匡清
2. 発表標題 Co <sub>2</sub> MnGaエピタキシャル薄膜における異方性磁気抵抗効果の電流方向による符号変化
3. 学会等名 応用物理学会 春季学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Satoshi Kokado, Masakiyo Tsunoda
2. 発表標題 Theoretical Study on Anisotropic Magnetoresistance Effect for Weak Ferromagnets with a Crystal Field of Tetragonal Symmetry
3. 学会等名 The 10th International Conference on Key Engineering Materials (国際学会)
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>古門研究室ホームページ  <a href="https://wpp.shizuoka.ac.jp/kokado">https://wpp.shizuoka.ac.jp/kokado</a>          静岡大学教員データベース 古門聡士  <a href="https://tdb.shizuoka.ac.jp/RDB/public/Default2.aspx?id=10335&amp;l=0">https://tdb.shizuoka.ac.jp/RDB/public/Default2.aspx?id=10335&amp;l=0</a>          東北大学研究者紹介 角田匡清  <a href="http://db.tohoku.ac.jp/whois/detail/2d38facafb7796ce6bea4ad4ec927cdd.html">http://db.tohoku.ac.jp/whois/detail/2d38facafb7796ce6bea4ad4ec927cdd.html</a></p>
--

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	角田 匡清  (Tsunoda Masakiyo)  (80250702)	東北大学・工学研究科・准教授    (11301)	