Osaka University Knowledge Archive

Title	First-principles study on magnetic and piezoelectric properties in multiferroic Bi(Fe,Co)O3
Author(s)	勝本, 啓資
Citation	大阪大学, 2020, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/76600
rights	
Note	やむを得ない事由があると学位審査研究科が承認したため、全文に代えてその内容の要約を公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

Osaka University

様式３

論　文　内　容　の　要　旨

氏　名　（　勝　本　啓　資　）	
論文題名	First-principles study on magnetic and piezoelectric properties in multiferroic $Bi(Fe,Co)O_3$ （マルチフェロイック物質$Bi(Fe,Co)O_3$の磁性と圧電性の第一原理的研究）

論文内容の要旨

酸化物である$BiFeO_3$や$BiCoO_3$は、強誘電性と強磁性を示す。このような強誘電性と磁性が同時に共存している物質をマルチフェロイック物質と呼び、応用、基礎の両面から新たなデバイスの開発とその物理的な機構について興味が持たれている。応用面では、電場による磁性に対する効果やその逆効果に注目されて研究がなされている。基礎の面からでは、強的な秩序が共存しているために、物質の電子状態と物性に焦点が当てられている。本研究では、$BiFeO_3$と$BiCoO_3$の固溶体である物質$BiFe_{1-x}Co_xO_3$ (BFCO) について、その電子状態について第一原理計算を用いて研究を行い、特に圧電特性について議論した。BFCOでは、固溶率x が約0.2から0.4の時に、単斜晶系の構造が実現することが実験的にわかっており、従来の圧電物質と同様に単斜晶系と正方晶系の構造相転移に伴って圧電特性が増幅すると予想されていたが、薄膜の実験では圧電定数が大きくなることはなく、単斜晶系の構造で最も高い圧電定数が観測された。研究の方法として第一原理計算による電子状態計算から、BFCOの単斜晶系での磁性を決定し、交換相互作用の大きさを見積もった。また、単斜晶系と正方晶系の構造相転移に伴う圧電定数を求めた。最後に、薄膜で得られた構造についても圧電定数を求めた。結果として、磁気的な相互作用は面内の相互作用が強く、面内が反強磁性的なスピンが安定であることがわかった。圧電性に関しては、圧電定数が大きく増大することはなかったが、これはペロブスカイト構造の酸素の八面体が変化してピラミッド型になるために、酸素が頂点共有されていないことが原因であると結論づけることができた。薄膜における圧電定数の傾向は実験結果と一致するものであり、実験で得られていない圧電定数についても計算を報告する。

様式７

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏　名　（　勝　本　啓　資　）		
論文審査担当者	（職）	氏　名
	主 査　教 授	小 口 多 美 夫
	副 査　教 授	藤 本 聡
	副 査　教 授	石 渡 晋 太 郎

論文審査の結果の要旨

論文題目：First-principles study on magnetic and piezoelectric properties in multiferroic $Bi(Fe,Co)O_3$
(マルチフェロイック物質$Bi(Fe,Co)O_3$の磁性と圧電性の第一原理的研究)

マルチフェロイック物質は、磁性、誘電性、弾性に関する複数の長距離秩序を有し、その交差相関効果から新たなデバイス応用が期待されている物質群である。本論文では、マルチフェロイック物質として知られた$BiFeO_3$と$BiCoO_3$の固溶体である$BiFe_{1-x}Co_xO_3$ (BFCO)に焦点を当て、誘電性と弾性の交差相関である圧電性について、第一原理計算に基づく解析と典型的な圧電物質である$PbZr_{1-x}Ti_xO_3$（PZT）とに比較により、その圧電性の起源を明らかにした。PZTで知られる巨大圧電係数の発現はこれまでの研究において、x~0.5近傍のMorphotropic Phase Boundary（MPB）に現れる単斜晶の存在と歪みによる電気分極の回転の重要性が指摘されている。BFCOにおいてもx~0.3近傍で単斜晶が現れ、実験的にも圧電係数の増大が観測されている。本研究では、まず、BFCOに対してxを変化させ、菱面体晶（R相）、単斜晶（M相）、正方晶（T相）を仮定し、全エネルギー計算から構造安定性を解析し、xの増加に伴いR→M→T相への構造変化が起こることを示した。次に、原子間の磁気相互作用を見積もり安定な磁気構造を決定した。さらに、圧電係数の増大起源を調べるため、格子定数比c/aと単斜晶角度βを変化させ圧電係数を第一原理計算から見積もったが、圧電係数の増大は単斜晶の相内で起こり相境界ではないことが明らかとなった。圧電係数の増大が起こる近傍でのイオン変位をしらべ、PZTでは遷移金属を囲む酸素八面体の回転が重要である一方で、BFCOではBiと頂点Oの変位が大きく、酸素イオンのつくるピラミッド構造の特異性が重要であることが明らかとなった。圧電係数の増大は実験を定性的に再現するものであり、PZTとは違った新たな圧電増大機構の提案がなされた。

以上により、博士（理学）の学位論文として価値のあるものと認める。