

東北大学 電気通信研究所
研究室外部評価資料
(2013 年度-2018 年度)

**Activity Report of Research Laboratory
for External Review**

April 2013 – March 2019
(FY. 2013–2018)

**Research Institute of Electrical Communication
Tohoku University**

物性機能設計研究室
Materials Functionality Design

A. 研究室名 / Research Laboratory	
物性機能設計研究室 Materials Functionality Design	
B. 構成員 / Faculty and Research Staff (as of May 1, 2019)	
※ 欄を適宜追加削除等調整して下さい。期間内に異動等があった場合には、在籍期間を記載して下さい。	
教授 / Professor	
氏名 Name	白井 正文 Masafumi Shirai
分野名 Research Field	物性機能設計研究分野 Materials Functionality Design
准教授 / Associate Professor	
氏名 Name	阿部 和多加 Kazutaka Abe (April 2017 -)
分野名 Research Field	研究分野 Materials Science under Extreme Conditions
助教 / Assistant Professor	
氏名 / Name	三浦 良雄 / Yoshio Miura (- August 2013) 阿部 和多加 / Kazutaka Abe (- March 2017) 辻川 雅人 / Masahito Tsujikawa (April 2014 -) 新屋 ひかり / Hikari Shinya (April 2019 -)
他 / Others	
	研究支援員: 1 名 (- March 2014) 学術研究員: 1 名 (May 2018 -)
C. 研究目的 / Research Purpose	
<p>本研究室では、次世代情報デバイスにおける量子物理現象の理論解析、デバイス性能の向上のための新機能材料の理論設計、大規模計算と機械学習を駆使した物性・機能設計手法の開発を目指している。最近では、高スピン偏極材料を用いた磁気抵抗デバイス、不揮発性スピンメモリにおける磁気異方性の電界制御、高圧下で高温超伝導を示す水素化合物の金属相に焦点を当てて研究を行っている。</p> <p>Our research group aims at theoretical analyses of quantum phenomena in advanced information devices, computational design of new functional materials for improvement of device performances, and development of material/functionality design methods based on large-scale computation and machine learning. Our current research focuses on magneto-resistive devices using highly spin-polarized materials, voltage control of magnetic anisotropy in non-volatile spin memories, and metallic hydrides which show high-temperature superconductivity under high pressure.</p>	
D. 主な研究テーマ / Research Topics	
<ol style="list-style-type: none"> 1. 第一原理計算と機械学習に基づく新しいスピン機能材料の理論設計 2. スピントロニクス・デバイスにおける電気伝導特性の理論解析 3. 材料・デバイス機能を設計するシミュレーション手法の開発 4. 水素、水素化合物の金属化と超伝導 5. 第一原理構造探索手法の開発 	
<ol style="list-style-type: none"> 1. Design of new spintronic materials based on first-principles calculation and machine learning 2. Theoretical analysis of transport properties in spintronic devices 3. Development of simulation scheme for material/device functionality design 4. Metallization and superconductivity of hydrogen and hydrides 5. Development of first-principles structural search methods 	

E. 学術論文等の編数 / The Number of Research Papers							
	2013	2014	2015	2016	2017	2018	Total
(1) 査読付学術論文 Refereed journal papers	4	3	3	4	9	5	28
(2) 原著論文と同等に扱う 査読付国際会議発表論文 Full papers in refereed conference proceedings equivalent to journal papers	0	0	0	0	0	0	0
(3) 査読付国際会議 Presentations in refereed conferences	8	4	1	4	9	9	35
(4) 査読なし国際会議・シンポジウム等 Presentations in conferences	5	1	1	0	11	4	22
(5) 総説・解説 Review articles	0	0	0	0	0	2	2
(6) 査読付国内会議 Presentations in refereed domestic conferences	13	8	8	12	14	5	60
(7) 査読なし国内研究会・講演会 Presentations in domestic conferences	0	0	0	0	0	0	0
(8) 著書 Books	0	0	0	0	0	0	0
(9) 特許 Patents	0	0	0	2	1	0	3
(10) 招待講演 Invited Talks	4	4	5	3	6	5	27

F. 特筆すべき研究成果 / Significant Research Achievements (FY.2013-2018)

See Ref. 1. “#” mark indicates research carried out at a former organization.

2013-2018 年度の研究成果（論文・特許など）のうち、前半（2013-2015 年度）と後半（2016-2018 年度）それぞれで代表的な数件（2-3 件程度ずつ）について、参考資料を引用して、その特徴と学術的意義などを簡単に紹介する。英文のみ、もしくは和文と英文で記載。

要約は 300 字程度。論文誌の要約/Abstract のコピー可。学術面での国際的インパクトならびに社会的影響を 100 字程度で記載。

必ずしも当該期間内に発表・出版したものに限りではなく、例えば過去に発表したものでもこの期間内に成果が得られたり、評価されるようになったりしたものも含むものとする。

インパクトファクターや被引用件数など、できる限り第三者が定量的に評価できる指標を用いてアピールすること。それらの指標にはそぐわない場合には、その事情とそれに変わる適当な評価指標・尺度を示すこと。

[FY2013-FY2015]

1. K. Abe and N.W. Ashcroft, “Quantum disproportionation: The high hydrides at elevated pressures,” Phys. Rev. B, Vol. 88, No. 17, Article no. 174110, pp. 1-5, 2013. [IF: 3.664], [Times Cited: 12]

要約: GeH₄ は常圧で存在できるが、熱力学的には Ge-H 相分離に対して不安定である。本研究では、この相分離した系 (Ge+4H) が 175 GPa 以上で GeH₃+H に転移することを第一原理計算から示した。GeH₃ の構造の候補としては *Pm-3n* (A15)、*P4₂/mmc*、*Cccm* 構造の三つがあり、エンタルピーの値はお互いに非常に近い。これら三つの構造は全て金属相であり、McMillan の式から、超伝導転移温度は 100 K 程度以上と見積もっている。GeH₃ が安定化される圧力は原子核の零点エネルギーの影響をかなり受け、不均一化に対して量子効果が重要な役割を果していることも指摘している。

学術面での国際的インパクトおよび社会的影響: 本研究では、GeH₄ がかなりの高圧でも安定化されず、代わりに GeH₃ が現れることを初めて示した。この GeH₃ 相は、現在の高圧技術で達成できる圧力範囲にありながら、予想される超伝導 T_c が高いという点で注目に値する。

Abstract: Although GeH₄ compound can be formed at ambient pressure, it is still thermodynamically unstable to decomposition into Ge and H. This study shows by using first-principles methods that the decomposed system (namely, Ge+4H) is transformed into GeH₃+H above 175 GPa. The results suggest three candidate structures for the GeH₃ phase, namely, the *Pm-3n* (A15), *P4₂/mmc*, and *Cccm* structures, whose enthalpies are quite close to each other. All the three structures are metallic, and their superconducting transition temperatures have been estimated to be about 100 K or higher according to the McMillan equation. The pressure at which GeH₃ becomes stable is significantly influenced by zero-point energy of nuclei, and quantum effects play an important role in a notable trend towards disproportionation.

International impact on both academic and social aspects: This is the first work which shows that GeH₄ remains to be unstable up to very high pressures, GeH₃ being stabilized instead. It is notable that the superconducting T_c in GeH₃ is very high while the required pressure lies within the reach of current experimental techniques.

2. G.-f. Li, Y. Honda, H.-x. Liu, K. Matsuda, M. Arita, T. Uemura, M. Yamamoto, Y. Miura, M. Shirai, T. Saito, F. Shi, and P. M. Voyles, “Effect of non-stoichiometry on the half-metallic character of Co₂MnSi investigated through saturation magnetization and tunneling spin polarization,” Phys. Rev. B, Vol. 89, No. 1, Article No. 014428, pp. 1-14, 2014. [IF: 3.736], [Times Cited: 29]

要約: 高スピン偏極ホイスラー合金 Co₂MnSi における組成ずれがスピン偏極率に及ぼす影響を、磁化とトンネル磁気抵抗比の実験ならびに第一原理計算により解明した。Mn 欠乏組成では Mn を置換した

Coに起因した電子状態がバンドギャップ内に生じて、スピン偏極率の低下をもたらす。一方、Mn過剰組成ではCoのMn置換が抑制されて、高いトンネル磁気抵抗比が得られる。

学術面での国際的インパクトおよび社会的影響： Mn過剰組成のホイスラー合金において高いトンネル磁気抵抗比が得られる理由を解明した本研究の成果は国際的にも注目されており、これまでに29回引用されている。本研究成果は不揮発性磁気メモリや磁気記録装置の読出しヘッドへの応用への展開が期待できる。

Abstract: This paper elucidated the influence of non-stoichiometry on the spin polarization of a half-metallic Heusler alloy Co_2MnSi by the measurements of magnetization and tunneling magnetoresistance (TMR) as well as first-principles electronic structure calculations. In Mn-deficient samples, the Co atoms which substitute Mn atoms causes the electronic states in the energy gap of the minority-spin band, leading to the degradation of the spin polarization. In Mn-excess samples, on the other hand, the high TMR ratio was obtained due to the suppression of the anti-site Co atoms.

International impact on both academic and social aspects: This work attracted much attention from world-wide readers since it elucidated the reason why the Mn-excess Heusler alloys show high TMR ratio, and has been cited 29 times so far. This result will contribute to the development of non-volatile magnetic random access memories and the read-out head of magnetic recording systems.

3. S. Kanai, M. Tsujikawa, Y. Miura, M. Shirai, F. Matsukura, and H. Ohno, "Magnetic anisotropy in Ta/CoFeB/MgO investigated by x-ray magnetic circular dichroism and first-principles calculation," *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 105, No. 22, Article No. 222409, pp. 1-4, 2014. [IF: 3.302], [Times Cited: 26]

要約： コバルト鉄ボロン/酸化マグネシウム界面における大きな垂直磁気異方性の起源を X線磁気円二色性と第一原理計算を用いて解明した。酸化マグネシウムとの界面において鉄の軌道磁気モーメントはコバルトに比べ磁化方向に対して大きな異方性を示すことが明らかとなり、鉄がコバルトに比べ界面垂直磁気異方性へ大きく寄与しているとの知見が得られた。

学術面での国際的インパクトおよび社会的影響： コバルト鉄ボロン/酸化マグネシウム界面における垂直磁気異方性の起源を解明した本研究の成果は国際的にも注目されており、これまでに26回引用されている。本研究成果は不揮発性磁気メモリへの応用が期待される。

Abstract: We reveal the origin of large perpendicular magnetic anisotropy at the CoFeB/MgO interface by using X-ray magnetic circular dichroism and first principles calculations. The orbital magnetic moment of interfacial Fe atom exhibits a large anisotropy for the magnetization direction compared to Co atom, and this result indicates that Fe atoms at the interface contributes more than Co to the perpendicular magnetic anisotropy.

International impact on both academic and social aspects: This work is highly evaluated for elucidating the origin of the perpendicular magnetic anisotropy at the CoFeB/MgO interface, and has been cited 26 times. This research result is expected to be applied to nonvolatile magnetic memory.

[FY2016-FY2018]

1. S. Miwa, M. Suzuki, M. Tsujikawa, K. Matsuda, T. Nozaki, K. Tanaka, T. Tsukahara, K. Nawaoka, M. Goto, Y. Kotani, T. Ohkubo, F. Bonell, E. Tamura, K. Hono, T. Nakamura, M. Shirai, S. Yuasa and Y. Suzuki, "Voltage control of platinum orbit: A contribution to interfacial magnetism," Nature Commun., Vol. 8, Article no. 15848, pp. 1-9, 2017. [IF: 12.353], [Times Cited: 40]

要約: 鉄白金/酸化マグネシウム界面における磁気異方性の電界変調の機構を、放射光を用いた X 線磁気円二色性と第一原理計算に基づいて解明した。界面の白金原子の電子分布が電界印加により変形し、その結果として磁気双極子モーメントが誘起される機構が有力であることを初めて明らかにした。

学術面での国際的インパクトおよび社会的影響: この論文は、鉄白金/酸化マグネシウム界面における磁気異方性の電界変調の機構を解明したことで高く評価され、これまでに 40 回引用されている。関連記事が化学工業日報 (2017 年 6 月 28 日刊)、科学新聞 (2017 年 7 月 28 日刊) に掲載され、将来的に不揮発性磁気メモリの書き込み消費電力の大幅な抑制をもたらす研究成果であると期待されている。

Abstract: In this work, we revealed the mechanism of electric field modulation of magnetic anisotropy at the FePt/MgO interface by X-ray magnetic circular dichroism and first principles calculation. This is the first work to mention that the magnetic dipole moment induced by deformation of electron distribution of Pt atom due to the electric field provides a magnetic anisotropy change.

International impact on both academic and social aspects: This paper is highly evaluated for elucidating the mechanism of electric field modulation of magnetic anisotropy at the FePt/MgO interface, and has been cited 40 times. Related articles are published in the Chemical-Industry Newspaper (June 28, 2017) and the Science News (July 28, 2017), since this result will provide the significant suppression of write power consumption of nonvolatile magnetic memory in the future.

2. K. Abe, "Hydrogen-rich scandium compounds at high pressures," Phys. Rev. B, Vol. 96, No. 14, Article no. 144108, pp. 1-7, 2017. [IF: 3.813], [Times Cited: 9]

要約: 第一原理計算及びランダム構造探索により、水素リッチな Sc 化合物高压相を予測した。160 GPa 以上における $I4/mmm$ ScH₄、135~265 GPa における $P6_3/mmc$ ScH₆、そして 265 GPa 以上における $Im-3m$ ScH₆ がそれである。この三つは全て金属相であり、その超伝導転移温度は McMillan の式から、 $I4/mmm$ ScH₄ (195 GPa) で 67 K、 $P6_3/mmc$ ScH₆ (145 GPa) で 63 K、そして $Im-3m$ ScH₆ (285 GPa) で 130 K と見積もっている。また、Mg, Sc, Ca, Y の比較から、周期表で対角的に並ぶ元素の高密度水素化合物において構造類似性 (対角関係) が成り立つ可能性も示している。

学術面での国際的インパクトおよび社会的影響: Sc 水素化合物における high- T_c 相の予測に加え、対角関係の存在を指摘しており、これは今後、新たな水素化合物金属相を探索する上で有効な指針になると期待される。

Abstract: By using *ab initio* calculations and random structure searches, hydrogen-rich Sc compounds are predicted to be possible at high pressures. These are ScH₄ in the $I4/mmm$ structure above 160 GPa, ScH₆ in the $P6_3/mmc$ structure from 135 to 265 GPa, and ScH₆ in the $Im-3m$ structure above 265 GPa. The three phases are all metallic,

and the superconducting transition temperatures estimated from the McMillan equation are 67 K in the $I4/mmm$ ScH_4 (195 GPa), 63 K in the $P6_3/mmc$ ScH_6 (145 GPa), and 130 K in the $Im-3m$ ScH_6 (285 GPa). Also, by comparing Mg, Sc, Ca, and Y hydrides, it is suggested that there exist diagonal relationships, namely, structural similarities in dense hydrides of diagonally adjacent elements on the periodic table.

International impact on both academic and social aspects: In addition to the prediction of the high- T_c phases of Sc hydrides, this work suggests the existence of diagonal relationships, which are expected to serve as a practical clue in searching for new metallic hydrides.

3. T. Nozaki, A. Koziol-Rachwal, M. Tsujikawa, Y. Shiota, X. Xu, T. Ohkubo, T. Tsukahara, S. Miwa, M. Suzuki, S. Tamaru, H. Kubota, A. Fukushima, K. Hono, M. Shirai, Y. Suzuki and S. Yuasa, "Highly efficient voltage control of spin and enhanced interfacial perpendicular magnetic anisotropy in iridium-doped Fe/MgO magnetic tunnel junctions," *NPG Asia Mater.*, Vol. 9, Article no. e451, pp. 1-10, 2017. [IF: 7.208], [Times Cited: 18]

要約: 第一原理計算に基づいて設計された鉄イリジウム合金薄膜磁石を電極材料とすることにより、界面磁気異方性の電界変調効率を従来比で約3倍にすることに成功した。これにより電圧トルク不揮発性磁気メモリの実用化に求められる電圧スピン制御効率を初めて達成した。

学術面での国際的インパクトおよび社会的影響: この論文は、電圧スピン制御を高効率化する鉄イリジウム合金薄膜磁石の開発したことで高く評価され、これまでに18回引用されている。この研究成果は、待機電力と駆動電力がともに低い究極の不揮発性メモリの実現に向け重要であり、関連特許が、2017年3月30日に産業技術総合研究所、東北大学、物質・材料研究機構から共同出願された。

Abstract: We succeeded in increasing the electric field modulation efficiency of interfacial magnetic anisotropy by about 3 times compared to the conventional one by using the FeIr alloy electrode designed based on first principles calculations. As a result, we have achieved the voltage spin control efficiency required for the application of voltage torque nonvolatile magnetic memory.

International impact on both academic and social aspects: This paper is highly evaluated for the development of iron-iridium alloy thin film magnets that make voltage spin control more efficient, and has been cited 18 times. This result is important for realizing the non-volatile memory with low standby power and low driving power, and related patent is applied jointly by National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Tohoku University, Materials and Materials Research on March 30, 2017.

G. 特筆すべき活動 / Significant Activities (FY.2013-2018)

See Ref. 2-9. “#” mark indicates research carried out at a former organization.

研究室外部評価参考資料の2以降を参照しながら、2013-2018年度のなどの活動の中から特筆すべきものを取り出し、前半（2013-2015年度）と後半（2016-2018年度）に分けて簡単に紹介する。英文のみ、もしくは和文と英文で記載。

[FY2013-FY2015]

6. 共同利用・共同研究拠点活動の実績

Achievements of work done under the framework of Joint Usage/Research Center

[3] 研究課題：スピントロニクス学術連携（H26/S2）

Research Title: Spintronics academic alliance

本共同プロジェクト研究において東京大学・大阪大学・慶應義塾大学と共同で準備を進めてきた提案課題「スピントロニクス学術研究基盤と連携ネットワーク」拠点の整備が、日本学術会議の第22期「学術の大型研究計画に関するマスタープラン（マスタープラン2014）」の重点大型研究計画に採択された（2014年2月）。さらに本提案課題は文部科学省の「学術研究の大型プロジェクトロードマップ2014」10件のうちの1件にも採択された（2014年8月）。

Our proposal entitled “Spintronics Research Infrastructure and Network” was adopted to the High-priority Large-scale Research Plans of “Master Plan 2014” by the Science Council of Japan in February 2014. The proposal was also accepted to the “Large-scale Scientific Research Projects – Roadmap 2014” by the Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology (MEXT) of Japan in August 2014. The proposal had been prepared in collaboration with the University of Tokyo, Osaka University, and Keio University under the RIEC Nation-wide Cooperative Research Project entitled “Spintronics academic alliance.”

[FY2016-FY2018]

6. 共同利用・共同研究拠点活動の実績

Achievements of work done under the framework of Joint Usage/Research Center

[3] 研究課題：スピントロニクス学術連携（H26/S2）

Research Title: Spintronics academic alliance

本共同プロジェクト研究において準備を進めてきた「スピントロニクス学術研究基盤と連携ネットワーク」拠点の整備に関する概算要求が認められたことを受けて、拠点4大学（東北大学、東京大学、大阪大学、慶應義塾大学）にスピントロニクス学術連携研究教育センターが設置され、スピントロニクス連携ネットワークの活動が本格的に開始された（2016年4月）。本連携ネットワークは緊密な研究交流と共同研究の促進により、スピントロニクス研究の活性化を目指している。

Following the acceptance of our budget demand on “Spintronics Research Infrastructure and Network,” the Center for Spintronics Research Network (CSRN) was established in each of four base universities, i.e. Tohoku University, the University of Tokyo, Osaka University, and Kieo University. The Spintronics Research Network of Japan (Spin-RNJ) was officially launched in April 2016. The objective of Spin-RNJ is activation of spintronics research by promotion of the close exchange and joint research.