審 査 の 結 果 の 要 旨

氏　名　王　娟

本論文は，高ひずみ下における磁性特性変化メカニズムの解明を目的とし，磁性を持つ様々な構造の結晶材料を対象として第一原理解析および原子モデリング解析を行い，その結果を磁性材料開発の観点からまとめたものである．

磁性材料はセンサ，メモリデバイス，モーターなど様々な応用が展開されていることからも，磁性は興味深い物性の一つである．ひずみが磁性に与える影響は以前から研究例があるが，高ひずみ領域の挙動に重点を置いた研究は少ない．界面ミスマッチ等の影響が顕著となるナノデバイスでは高ひずみの影響を明らかにすることが重要である．また，様々な結晶構造について体系的に研究し，ひずみ—磁性発現メカニズムの違いを検討した例はみられない．

本論文では，チオゲルマニウム酸塩・プルシアンブルーといった有機化合物，六方最密格子構造コバルト結晶，ネオジム結晶の 4 つ材料を取り上げ，密度汎関数法に基づく第一原理計算を用いて高ひずみが磁性に及ぼす影響を検討した．

本論文は以下のような構成となっている．第 1 章では磁性の物理について整理し，過去の研究例についてレビューした．第 2 章では本研究で用いた密度汎関数法による第一原理計算法と，経験的ポテンシャルを用いた原子シミュレーション法について概説した．

第 3 章ではチオゲルマニウム酸塩を対象として，引張り・圧縮およびせん断変形を加えた際の機械的特性および磁性変化について第一原理計算を行った．チオゲルマニウム酸塩はネットワーク構造からなる結晶であり，外部応力あるいはひずみ負荷によるネットワーク構成単位の四面体構造形状変化が磁性変化の本質的要因であることが明らかとなった．また，相変態を生じず結晶構造が大きく変化しない場合でも，ひずみにより磁気モーメントが急激に変化することがあることを示した．

第 4 章ではプリシアンブルー化合物について，引張り・圧縮を加えた際の結晶構造変化および磁性変化を，第一原理計算により評価した．プルシアンブルーでは応力負荷により相変態が生じ，それが結果的に磁性変化を引き起こすことを明らかにした．

第 5 章ではコバルト結晶の磁気異方性に注目し，引張り・圧縮およびせん断ひずみを受けた際の磁性変化を第一原理計算によって求めた．コバルト結晶においては単純な六方最密格子構造をとっており，ある程度大きなひずみを与えても原子構造が大きく変化することはないが，ひずみによる電子構造の変化が磁気異方性などに大きな変化をもたらすことがわかった．磁気記憶デバイスのヘッド部にコバルト系合金が用いられており，動作中の接触による変形がデバイス特性の低下をもたらすことが問題となっているが，この現象が本解析によって明らかとなったせん断による磁気異方性の低下によって説明できることを示した．

第 6 章では，ネオジム磁石について，第一原理および原子モデル解析を行った．ネオジム結晶は結晶構造が非常に複雑であるだけでなく粒界や界面近傍における原子構造の乱れが磁気的特性の悪化をもたらすとされているが，原子モデル解析により粒界・界面近傍の局所ひずみ分布を求めることで不均質構造が磁性変化に及ぼす影響を定量的に見積もることに成功した．

第 7 章では得られた結果を総括するとともに，将来的な課題としてひずみ—磁性関係の構成式構築の可能性について議論した．ひずみ—磁性関係のメカニズムは材料によって異なり複雑であるため，現時点では難しいものの，将来的に支配方程式を導くための道筋を提示した．

以上要するに，本論文は高ひずみが磁性変化に与える影響を結晶構造に着目して分類し，局所ひずみを評価することで磁性変化を説明できることを示しており，学術的に独創性が認められる．また，ネオジム磁石やコバルト結晶など工業的に重要な磁性材料の性能劣化メカニズムを明らかにするとともに，将来的なひずみ—磁性関係式構築への道筋についても議論するなど，工業的にもインパクトの大きい研究といえる．

よって本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる．