

## 反強磁性 Cr における抵抗ひずみ感度の等方性に関する検討

Investigation of isotropy of strain sensitivity of resistance  
in antiferromagnetic Cr小田洋平<sup>a)†</sup>・直江正幸<sup>b)</sup>・丹羽英二<sup>b)</sup><sup>a)</sup>福島工業高等専門学校, 福島県いわき市平上荒川字長尾 30 (〒970-8034)<sup>b)</sup>電磁材料研究所, 宮城県富谷市成田 9-5-1 (〒981-3341)Y. Kota<sup>a)†</sup>, M. Naoe<sup>b)</sup>, and E. Niwa<sup>b)</sup><sup>a)</sup>National Institute of Technology, Fukushima College, Nagao 30, Taira-Kamiarakawa, Iwaki, Fukushima 970-8034, Japan<sup>b)</sup>Research Institute for Electromagnetic Materials, Narita 9-5-1, Tomiya, Miyagi 981-3341, Japan

We studied the isotropy of the Gauge factor (GF) of antiferromagnetic Cr in the commensurate spin-density-wave state. First-principles calculations were performed to compare the strain sensitivity of resistance under uniaxial stress along the [100] and [110] direction of crystal lattice. We found that the GF of Cr, which was approximately estimated from the result of calculating the density of states at the Fermi level, can be considered to be isotropic in the small strain range of less than 1%, reflecting the isotropic response of magnetism of Cr to uniaxial strain.

**Key words:** Strain sensor, Gauge factor, First-principles calculation, Antiferromagnet, Cr

## 1. はじめに

ひずみゲージは, 材料に加わる応力やひずみを電気信号として検出するセンサ素子であり, 様々な分野で広く応用されている. ゲージ率 (gauge factor; GF) は一軸ひずみ  $\varepsilon$  に対する抵抗  $R$  の相対的な変化を示す割合  $GF \equiv (\Delta R/R)/\varepsilon$  で定義され, ひずみ感度を表す重要な指標の一つである. 最新の研究では CoFeB/MgO 磁気トンネル接合あるいはアモルファル半導体  $Cr_2Ge_2Te_6$  からそれぞれ 1000, 60000 という極高の GF が観測されている<sup>1,2)</sup>. 一方, ひずみゲージ材料として我々は反強磁性 Cr および Cr-N に着目している. Cr および Cr-N は, 一般的な半導体ゲージの GF (~100) より小さいものの, 他の金属ゲージと比較してかなり大きな 10 を超える GF を示し<sup>3,4)</sup>, さらに Cr-N においては抵抗温度係数をほぼゼロに制御可能という長所があることから<sup>4)</sup>, 既に産業応用されている段階にある. また最近 Cr-N の GF の等方性に由来する大きな横感度応答が観測され, その性質を利用することで力学量センサのさらなる小型化と高耐荷重化が期待されている<sup>5,6)</sup>.

我々のこれまでの研究では, 反強磁性 Cr の大きな GF が, Cr 特有のスピンドensity波状態や Cr で顕著に観測される磁気体積効果と関連があると考え, 理論的な検討を行ってきた<sup>7)</sup>. GF はひずみが微小な範囲において

$$GF \approx 1 + 2\sigma + \frac{\Delta\rho/\rho}{\varepsilon} \quad (1)$$

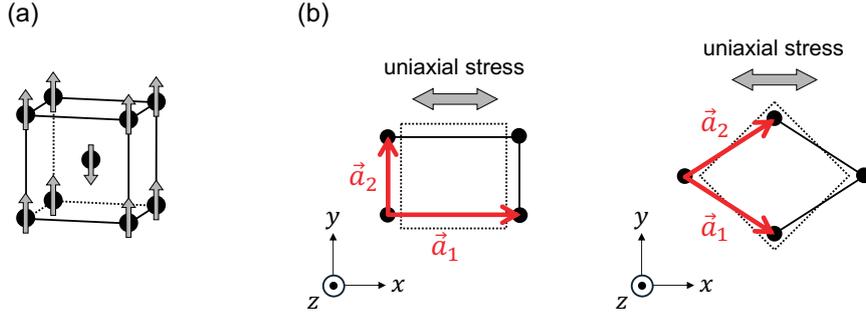
と近似される. ここで  $\sigma, \rho$  はそれぞれポアソン比と抵抗率である. 因子  $1 + 2\sigma$  はひずみによる抵抗の長さや断面積の変化を反映したものであるが, 一般的に  $\sigma < 0.5$  であるためこの因子は 2 より小さい. 一方, 因子  $(\Delta\rho/\rho)/\varepsilon$  はひずみによる抵抗率の相対的な変化を反映しており, もし抵抗率がひずみに対して大きな応答を示せば半導体ゲージと同様に金属ゲージでも GF が 2 より大き

くなることを説明できる. 実際 Cr のスピンドensity波状態を考慮した電子状態の第一原理計算によりひずみ応答を検証した結果, 一軸ひずみにより体積が変化すると, 静水圧を加える場合と同様に, 磁性や電子状態の大きな変化が生じることが明らかになった. さらに電子状態の変化によって電気伝導に関わるフェルミ準位の状態も影響を受け,  $\rho$  の変化が誘起される. 近似的な方法で GF を見積もったところ 10 程度の大きさとなり, 実験事実を半定量的に再現できることを示した. またこのメカニズムによる大きなひずみ応答は反強磁性 Cr 特有のものであり, 非磁性 V, 非磁性を仮定した Cr や強磁性 Fe からは観測されなかった. 反強磁性 Cr では原子内で交換分裂が生じることによる電子のクーロンエネルギーの利得と運動エネルギーの損分が競合しており, 僅かなひずみや体積の変化に対して敏感なためと考えられる.

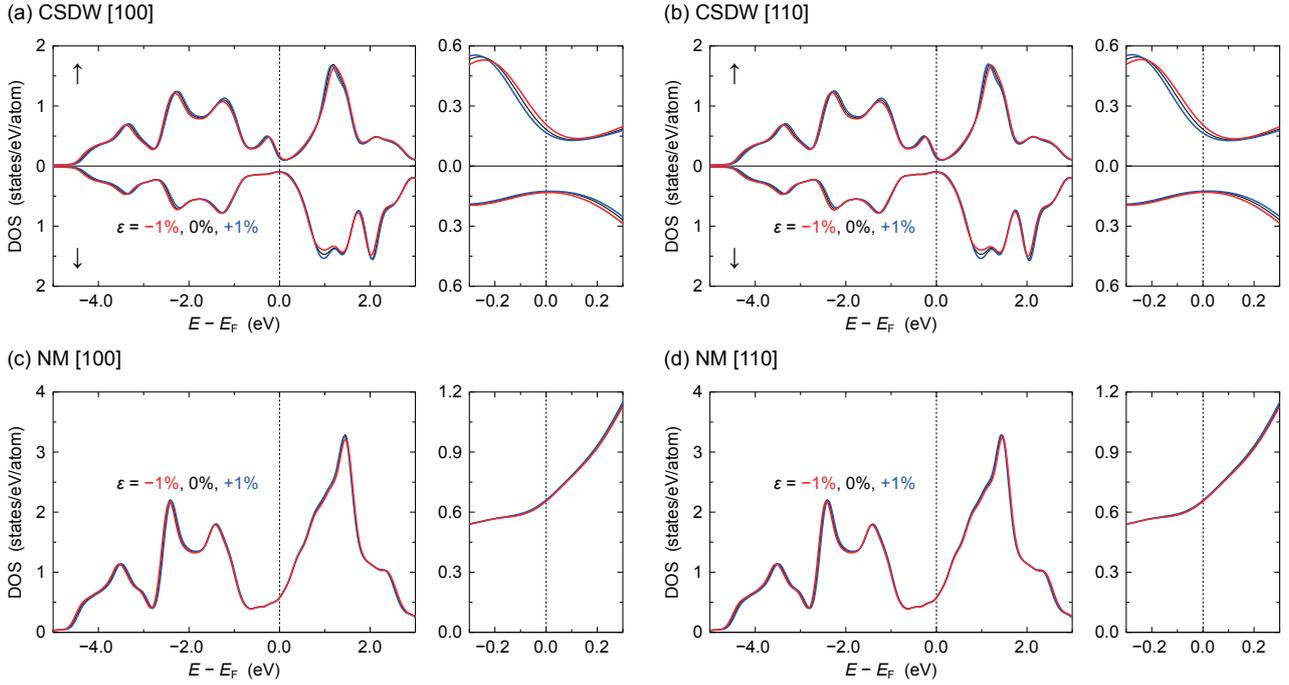
本研究では, Ref. 7 の追加検証として反強磁性 Cr の GF の等方性について調査するために, 一軸応力の方向を変えた場合の GF の第一原理計算を行った. Ref. 7 ではひずみ方向が結晶の [100] 方向の場合のみを考慮していたが, 本研究ではひずみ方向が [100] 方向の場合と [110] 方向の場合とを比較する.

## 2. 計算方法

Fig. 1(a) は Cr の結晶構造と磁気構造の模式図である. それぞれ体心立方格子 (body-centered cubic; bcc) および整合スピンドensity波 (commensurate spin-density-wave; CSDW) 状態を考慮している. ここで Ref. 7 では CSDW 状態に加えて不整合スピンドensity波 (incommensurate spin-density-wave; ISDW) 状態を考慮していたが, CSDW 状態および ISDW 状態における高感度ひずみ応答の基本的なメカニズムは同様であったことから, 本研究では ISDW 状態を検討対象に含めなかった. また Fig. 1(b) は bcc-Cr において [100] 方向および [110] 方向に一軸応力を加えた場合の (001) 面の模式図である.  $x$  軸方向に一軸伸長または圧縮によるひずみを与えると,  $y$  軸方向および  $z$  軸方向には緩和による横



**Fig. 1** (a) Crystal and magnetic structure of bcc-CSDW-Cr. (b) (001)-plane of bcc-Cr when uniaxial stress is applied in the [100] direction (left) and the [110] direction (right).



**Fig. 2** Spin-resolved DOS of CSDW-Cr projected into the d-orbital state when uniaxial strain is applied in (a) the [100] direction and (b) the [110] direction, and spin-degeneracy-counted DOS of NM-Cr when uniaxial strain is applied in (c) the [100] direction and (d) the [110] direction. Upper (lower) panel in (a) and (b) indicates the up (down) spin state. Red, black, and blue lines present the results for  $\epsilon = -1\%$ ,  $0\%$ , and  $+1\%$ , respectively.

ひずみが生じる。縦ひずみを  $\epsilon$ ，横ひずみを  $\epsilon'$ ，平衡格子定数を  $a_{\text{eq}}$  として，基本並進ベクトル  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  を次のようにおく。

・ [100] 方向へのひずみ印加の場合

$$\vec{a}_1 = a_{\text{eq}} (1 + \epsilon, 0, 0) \quad (2a)$$

$$\vec{a}_2 = a_{\text{eq}} (0, 1 - \epsilon', 0) \quad (2b)$$

$$\vec{a}_3 = a_{\text{eq}} (0, 0, 1 - \epsilon') \quad (2c)$$

・ [110] 方向へのひずみ印加の場合

$$\vec{a}_1 = a_{\text{eq}} \left( \frac{1 + \epsilon}{\sqrt{2}}, -\frac{1 - \epsilon'}{\sqrt{2}}, 0 \right) \quad (3a)$$

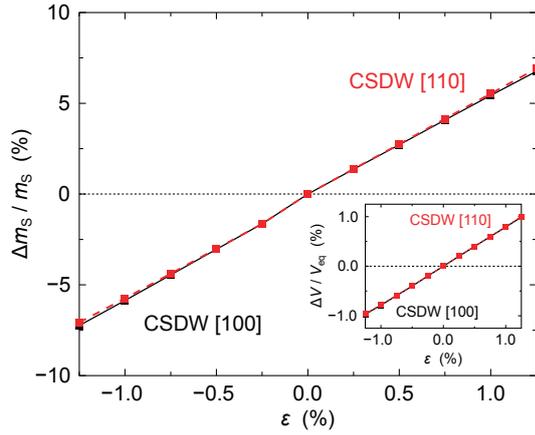
$$\vec{a}_2 = a_{\text{eq}} \left( \frac{1 + \epsilon}{\sqrt{2}}, \frac{1 - \epsilon'}{\sqrt{2}}, 0 \right) \quad (3b)$$

$$\vec{a}_3 = a_{\text{eq}} (0, 0, 1 - \epsilon') \quad (3c)$$

平衡状態からひずみが加わった状態を考える際は， $\epsilon$  を任意の値に固定し，構造の最適化により  $\epsilon'$  を決定する。なお電子状態の第一原理計算には Vienna ab-initio Simulation Package (VASP) を使用した<sup>89)</sup>。交換相関エネルギーは Perdew–Burke–Ernzerhof らによる一般化勾配近似の範囲内で扱い<sup>10)</sup>，平面波のカットオフエネルギーを 600 eV，第 1 ブリルアンゾーン内での  $k$  点のメッシュを  $24 \times 24 \times 24$  とした。また 3d 遷移金属では電子のスピン軌道相互作用のエネルギーがクーロンエネルギーや運動エネルギーと比較して十分に小さいため，スピン軌道相互作用の寄与を無視した。

### 3. 計算結果

Fig. 2 は [100] 方向および [110] 方向に一軸応力を加えた場合



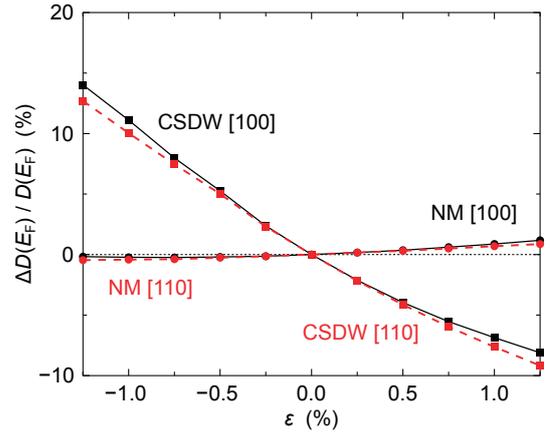
**Fig. 3** Variation ratio of spin magnetic moment of Cr atom in the CSDW state as a function of strain when uniaxial strain is applied in the [100] direction (black-squares) and the [110] direction (red-squares). The inset shows the volume variation by uniaxial strain. Note that the result of CSDW [100], which has been already shown in Ref. 7, is reproduced for comparison with the result of CSDW [110] obtained in this work.

の1原子あたりの状態密度 (density of states; DOS) の d 軌道の射影成分である。反強磁性 CSDW 状態の Cr についてはスピン別の DOS を示し、また比較のためスピン分極なしを仮定して計算した非磁性 (nonmagnetic; NM) 状態の Cr について、スピン縮退をカウントした DOS を示した。Fig. 2(a) および 2(b) より、CSDW-Cr の DOS にはひずみによる変化が現れている。大きさが 1% 程度のひずみでは DOS の全体的な形やピークの位置に大きな変化はないように見えるが、 $E_F$  近傍では DOS のピーク位置がシフトしている。一方、Fig. 2(c) および 2(d) より NM-Cr の DOS はひずみに対してほとんど変化しない。ゆえに Cr の高感度ひずみ応答は反強磁性の性質に由来するものと言える。

Fig. 3 は Cr 1 原子あたりの局所スピン磁気モーメント  $m_s$  のひずみによる変化率と  $\varepsilon$  の関係をプロットしたものである。[100] 方向および [110] 方向に一軸応力を加えた場合を比較しているが、ひずみ方向による差はほとんどなく、等方的な変化となっている。ここで  $m_s$  の値はある原子サイトのスピン別の DOS の差分をバンドの底から  $E_F$  まで積分した値

$$m_s = \int_{-\infty}^{E_F} [D_{\uparrow}(E) - D_{\downarrow}(E)] dE \quad (4)$$

に対応する。Fig. 2(a) および 2(b) の  $E_F$  近傍の拡大図を参照すると、一軸圧縮ひずみを加えた場合は  $\uparrow$  スピン状態の DOS が高エネルギー側に、 $\downarrow$  スピン状態の DOS が低エネルギー側にそれぞれシフトし、その結果、Eq. (4) の積分値が小さくなる。これは一軸圧縮により、横方向には緩和による伸長が生じるものの全体の体積が減少することに起因する。つまり体積の減少によって平均的な原子間距離が収縮し、電子の局在性が弱くなる。すると d バンドの交換分裂が抑えられる傾向となる (一軸伸長の場合はその逆となる)。実際に、一軸圧縮ではないが、静水圧を加えた場合はおよそ 15 GPa の圧力により Cr の磁性が消失することが実験・理論の両面から確認されている<sup>7,11)</sup>。Fig. 3 の挿入図に示すように、



**Fig. 4** Variation ratio of DOS of CSDW-Cr at the Fermi level as a function of strain when uniaxial strain is applied in the [100] direction (black-squares) and the [110] direction (red-squares). Same for NM-Cr when uniaxial strain is applied in the [100] direction (black-circles) and the [110] direction (red-circles) is also plotted. Note that the result of CSDW [100] and NM [100], which has been already shown in Ref. 7, is reproduced for comparison with the result of CSDW [110] and NM [110] obtained in this work, respectively.

一軸ひずみの方向が異なる場合でも縦横のひずみによる平衡状態からの体積の変化  $\Delta V / V_{eq}$  がほぼ同じになることを確認できるため、 $m_s$  のひずみ応答は等方的になるものと考えられる。

次に GF のひずみ方向依存性について考える。現象論的な電気伝導の理論<sup>12)</sup>によると、ボルツマン方程式に基づく電気伝導度 (抵抗率の逆数) は

$$\rho^{-1} = \frac{e^2}{(2\pi)^3} \int v^2(\vec{k}) \tau(\vec{k}) \left( -\frac{df}{dE} \right) d\vec{k} \quad (5)$$

と与えられる。ここで  $v(\vec{k})$ ,  $\tau(\vec{k})$ ,  $df/dE$  はそれぞれ電場と同じ方向の電子速度、緩和時間、フェルミ分布関数のエネルギー微分である。緩和時間の波数  $\vec{k}$  依存性を無視し、さらに自由電子モデルを仮定すれば

$$\rho^{-1} = \frac{e^2 n \tau}{m} \quad (6)$$

となり、ドルーデ理論と同じ形の式を得る。ここで  $n, m$  はそれぞれ  $E_F$  近傍の自由電子密度と有効質量である。また不純物による電子の散乱を考えた場合、その散乱確率 (緩和時間の逆数) は近似的に  $\tau^{-1} \propto D(E_F)$  となり、 $E_F$  での DOS に比例する。Ref. 7 では、自由電子として主に伝導を担うのは s バンドの電子、一方で  $E_F$  近傍の DOS の大半を占めるのは d バンドの電子であることを踏まえ、Eq. (6) 中の  $n, m$  のひずみ依存性を無視し、 $D(E_F)$  を介した  $\tau$  のひずみ依存性のみを考慮した。その上、Eq. (1) で与えられる GF において因子  $1 + 2\sigma$  の寄与は小さいものとして除外し、近似的に因子  $(\Delta\rho/\rho)/\varepsilon$  の寄与のみを考えて

$$GF \approx \frac{\Delta D(E_F)/D(E_F)}{\varepsilon} \quad (7)$$

とおけば、DOS の計算結果から GF を推定できる。

Fig. 4 はひずみによる  $D(E_F)$  の変化率と  $\varepsilon$  の関係をプロットしたものである。既に Fig. 2 の結果より明らかな通り、NM-Cr で

のひずみ応答は小さいが、CSDW-Cr では顕著な応答となる。CSDW-Cr では大きさ 1% のひずみに対して  $\Delta D(E_F)/D(E_F)$  が 10% 程度の変化が見られることから、Eq. (7) より GF が 10 のオーダーとなって実験事実を再現できるという点が Ref. 7 での主要な結論であった。一方、本研究で着目する [100] 方向および [110] 方向に一軸応力を加えた場合の比較においては、 $\pm 1\%$  以上のひずみがかわると徐々に差が生じて異方的となっている。ただ実際に使用されるひずみゲージにかわるひずみの大きさは 1% よりも十分に小さく、この範囲内であればひずみ応答に異方性はほぼないものとみなされる。また本研究では Eq. (6) における  $n, m$  のひずみ依存性、あるいは Eq. (5) における  $\vec{k}$  を考慮した  $v, \tau$  のひずみ依存性の影響を無視しており、もし仮にこれらの影響を取り入れた第一原理計算が実行できれば、ひずみが小さい範囲でも GF に多少の異方性が生じる可能性はある。しかしながら Fig. 3 で示した通り、反強磁性 Cr の磁性に関するひずみ応答は、ひずみ方向に依存せず等方的となっている。したがってそれに関連して起こる抵抗の高感度ひずみ応答のメカニズム自体はひずみ方向に対して不変であり、オーダーエスティメーションの結果としては GF は等方的と言える。

#### 4. まとめ

本研究では、Ref. 7 の追加検証として、反強磁性 Cr の  $m_S$  および GF のひずみ方向依存性に関する第一原理計算を行った。その結果、一軸応力に対する  $m_S$  の変化はひずみ方向に依存せず等

方的であることが分かった。さらに  $D(E_F)$  の変化から GF を推定し、実験事実と同様に抵抗のひずみ感度の等方性を示唆する結果を得た。

**謝辞** 本研究で使用した計算機の一部は JSPS 科研費 JP20K15017 の助成を受けて調達されたものである。

#### References

- 1) K. Saito, A. Imai, S. Ota, T. Koyama, A. Ando, and D. Chiba: *Appl. Phys. Lett.*, **120**, 072407 (2022).
- 2) Y. Wang, Y. Shuang, M. Kim, D. Ando, F. Narita, and Y. Sutou: *Mater. Horiz.*, **11**, 5631 (2024).
- 3) H. Yamadera and Y. Taga: *Appl. Phys. Lett.*, **55**, 1080 (1989).
- 4) E. Niwa and Y. Sasaki: *IEEEJ Trans. Sens. Micromachines*, **134**, 385 (2014).
- 5) E. Niwa: *IEEEJ Trans. Sens. Micromachines*, **141**, 409 (2021).
- 6) E. Niwa: *IEEEJ Trans. Sens. Micromachines*, **143**, 211 (2023).
- 7) Y. Kota, E. Niwa, and M. Naoe: *J. Appl. Phys.*, **129**, 203901 (2021).
- 8) G. Kresse and J. Hafner: *Phys. Rev. B*, **47**, 558 (1993).
- 9) G. Kresse and J. Furthmüller: *Phys. Rev. B*, **54**, 11169 (1996).
- 10) J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof: *Phys. Rev. Lett.*, **77**, 3865 (1996).
- 11) K. Shimizu, K. Amaya, N. Suzuki, and Y. Onuki: *Physica B*, **378–380**, 632 (2006).
- 12) J. Inoue and H. Itoh: *Spintronics – Basic Edition* (in Japanese), p. 81 (Kyoritsu Shuppan, Tokyo, 2010).

2024年10月31日受理, 2025年3月6日再受理, 2025年3月19日採録