

計算物理学が拓く、新たな物質の可能性

○研究テーマ

1. ハーフメタルを用いたスピントロニクス素子の特性評価
2. 高磁気異方性材料の設計と磁性の電界制御の理論解析
3. 形状記憶合金の構造変態機構の解明と新材料設計

○研究によって期待される成果・効果

第一原理計算に基づいた物質設計・物性予測により、所望の物質を合理的かつ効率的に探索・開発することが可能となる。

○キーワード： 第一原理計算、物質設計、物性予測

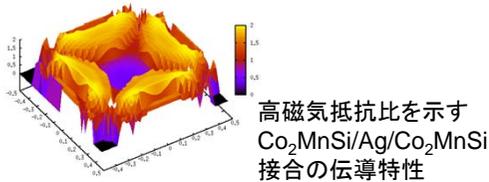
【目的・背景】

第一原理計算によるスピントロニクス材料を初めとする設計を目的とする。研究内容は、実験結果の解析から未知の物質の理論設計・物性予測にわたる。

【研究の一部紹介】

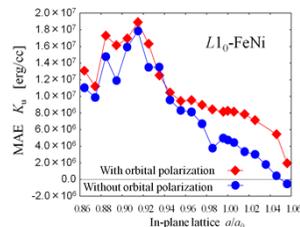
(1) ハーフメタルを用いたスピントロニクス素子の特性評価

磁気記録装置の読み出しヘッドに利用される巨大磁気抵抗素子の電気伝導特性を理論計算し、出力増大に適した材料開発の指針を提供した。



(2) 高磁気異方性材料の設計

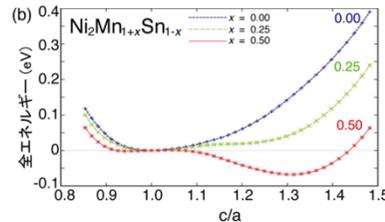
希少金属を含まない規則合金／多層膜を対象として高磁気異方性材料を理論設計した。



FeNi規則合金の磁気異方性は面内圧縮歪に対して増大することを理論予測した。

(3) 形状記憶合金の機構解明

形状記憶合金の組成と構造変態の関係を第一原理計算と光電子分光により解明した。



Ni-Mn-Sn合金の組成変化に伴う最安定構造の違いを理論的に明らかにした。

【優位性・アピールポイント】

金属・半導体・絶縁体など異種材料を接合したナノ構造デバイスにおけるスピン依存電気伝導や電界印加による物性変調を定量的に評価することができる。また、格子振動の計算に基づいて新材料の構造の安定性を予見することも可能である。

【教員からの提案】

- ▶ 情報通信機器の消費電力を飛躍的に低減することを可能にするスピントロニクス素子の性能向上に資する材料・素子開発支援
- ▶ 自動車用モーター・風力発電機の高効率化に資する希少金属を含まない高性能磁石材料の開発支援
- ▶ 形状記憶合金・磁気冷凍材料・熱電材料など各種機能磁性材料の開発支援
- ▶ その他の新材料開発の促進・効率化に資する物質設計・物性予測手法の講習

【企業との連携及び交流について】

これまでに培った物質設計の経験・知識を活かして、企業における新材料開発を支援することができる。また、企業における人材育成の一環として、実際の研究開発事例に則した第一原理計算に基づく物質設計・物性予測手法の講習も行う。