

研究スタッフ

教授： 白井 正文

助教： 阿部 和多加、 助教： 辻川 雅人

研究目的

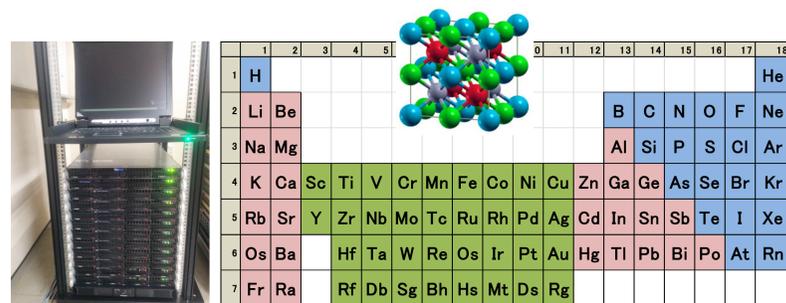
次世代情報デバイスの基盤となる材料やナノ構造において発現する量子物理現象を理論的に解明し、デバイス性能の向上につながる新機能を有する材料を理論設計することを研究目標としている。また、大規模シミュレーション技術を駆使した画期的な物性や機能の設計手法を確立することを目指している。現在では、垂直磁気材料の電界制御による超低消費電力デバイス創製、レアアースフリー高性能磁石材料の探索、強磁性形状記憶ホイスラー合金の構造変態の微視的機構の解明等の研究テーマに取り組んでいる。

主な研究テーマ

1. 垂直磁化トンネル磁気抵抗素子に関する研究

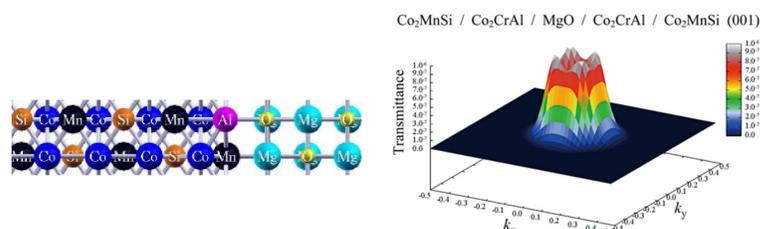
不揮発性磁気メモリに用いられるトンネル磁気抵抗素子の性能向上のため、新たな垂直磁化材料の開発が求められている。本研究では、 $D0_{22}$ 型 Mn_3Ga および Mn_3Ge を電極材料に用いた MgO 障壁トンネル接合におけるスピン依存伝導特性を第一原理計算に基づいて解析した。その結果、 Mn_3Ga 電極では磁気抵抗比が顕著な界面依存性（ $MnMn$ 終端600%、 $MnGa$ 終端35%）を示すのに対して、 Mn_3Ge 電極では界面構造に依らず4,000%を超える巨大なTMR比が得られた。これは MgO 障壁を優先的に透過する Δ_1 電子が、 Mn_3Ge では完全にスピン偏極しているためであることを明らかにした [1]。

[1] Y. Miura and M. Shirai, *IEEE Trans. Magn.* 50, 1400504 (2013).



$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + v(r) + e^2 \int \frac{n(r')}{|r-r'|} dr' + \mu_{xc}(r) - \mu \right] \psi_i(r) = \epsilon_i \psi_i(r)$$

構造、物性、機能



ホイスラー合金(Co_2MnSi / Co_2CrAl) 電極と MgO 障壁を有する磁気トンネル接合の平行磁化配置に対して計算された電子透過率の面内波数依存性

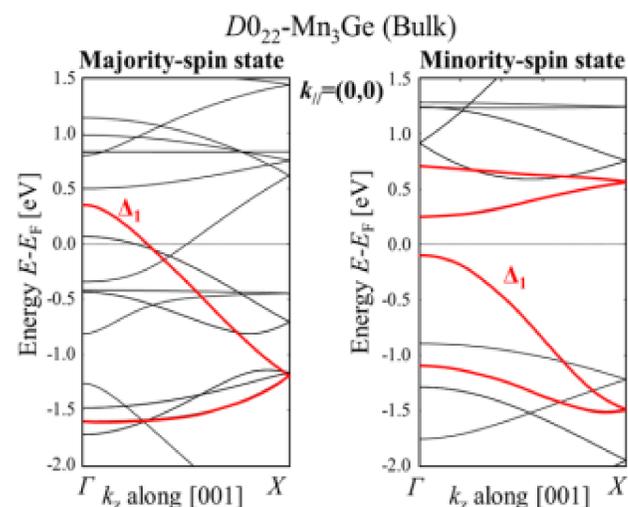


図1. Mn_3Ge の[001]方向の電子バンド分散。太線が MgO 障壁を優先的に透過する Δ_1 バンド。

2. 高磁気異方性規則合金に関する研究

高い磁化と一軸磁気異方性を有する $L1_0$ 型 FeNi規則合金は、希少金属を含まない磁石材料として注目されている。FeNi規則合金の磁気特性向上のため、軽元素 (B, C, N, F, O) 添加による磁性への影響を評価した。その結果、B, C, Nを格子間サイトに添加した規則合金では垂直磁気異方性の向上が得られた。効果の大きかったC添加では、2.6 at%添加により一軸結晶磁気異方性エネルギー (K_u) が5.5 MJ/m³から9.8 MJ/m³へ大幅に増大した。また、軽元素添加に伴うFe 3d軌道を占有する電子数の増加が、 K_u の増加の要因となっていることを明らかにした。

また、 $L1_0$ 相ほど研究が進んでいない六方晶系の $L1_1$ 型の規則合金についても研究を進めている。Fe, Co, Niの組み合わせからなる $L1_1$ 型の規則合金について磁気異方性および磁気緩和定数の定量評価を行い、スピントロニクスおよび永久磁石材料として適した材料の設計を行っている。

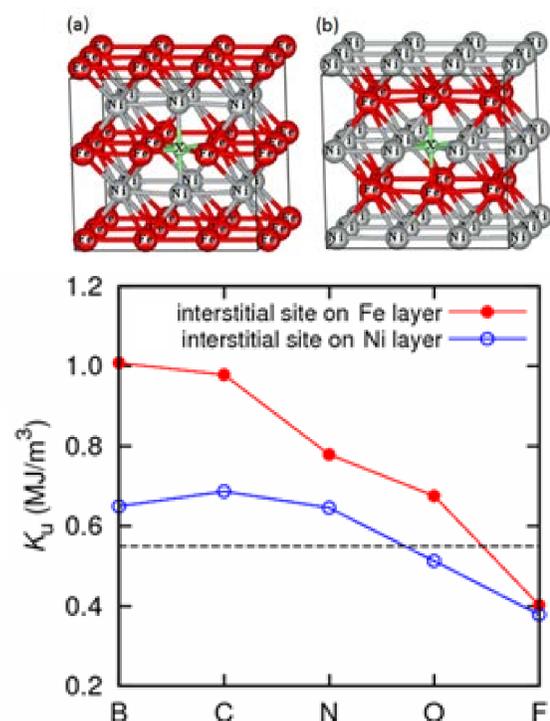


図2. 上図：(a) Feまたは (b) Ni原子層の格子間八面体位置に軽元素を添加した $L1_0$ 型 FeNi規則合金の結晶構造。下図：軽元素を2.6 at%添加したFeNi規則合金の一軸磁気異方性エネルギー (K_u)。

3. 強磁性形状記憶ホイスラー合金に関する研究

強磁性形状記憶合金は、磁場駆動アクチュエータや大きな磁気熱量効果を利用した磁気冷凍材料への応用が期待されている。そこでホイスラー合金 $Ni_2Mn_{1+x}Sn_{1-x}$ の構造変態の機構を明らかにするために、硬X線光電子分光と第一原理計算を組合せて電子構造を詳細に研究した。その結果、光電子分光で観測されたピーク構造が、Mn組成の増加に伴ってフェルミ準位に近づき、そのピーク強度は構造変態温度より低温で著しく減少することを見出した。第一原理計算の結果は、これらの実験結果をよく再現し、Mn組成の増加に伴って高温相の立方晶構造が、エネルギー的に不安定になることを示した。縮退したNi 3d eg軌道のエネルギー分裂に起因したJahn-Teller機構により、この合金の構造変態が引き起こされていることを解明した[2]。

[2] M. Ye, A. Kimura et al., *Phys. Rev. Lett.* 104, 176401 (2010).

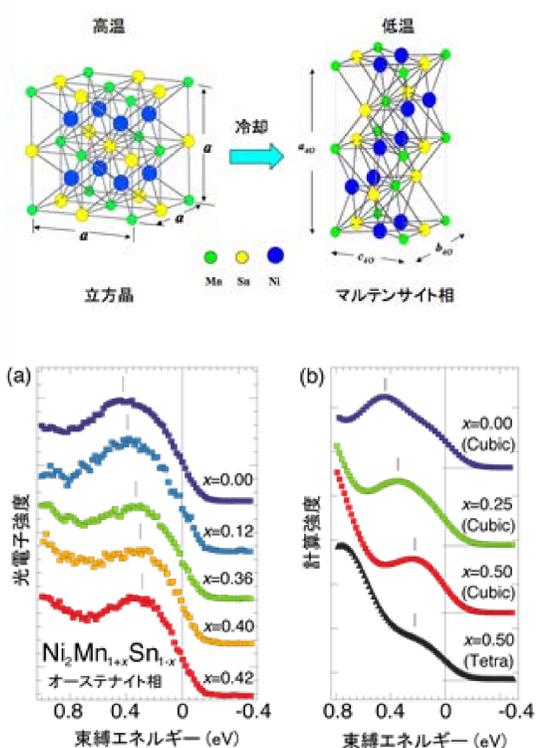


図3. 強磁性形状記憶ホイスラー合金 $Ni_2Mn_{1+x}Sn_{1-x}$ の構造変態の模式図と光電子スペクトルのMn組成依存性：(a) 実験データ、(b) 理論計算。