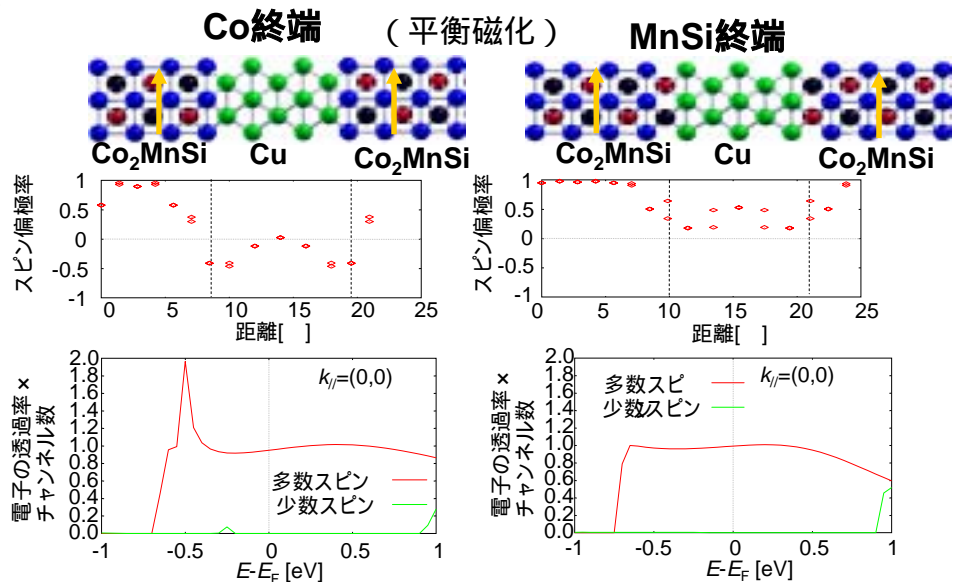
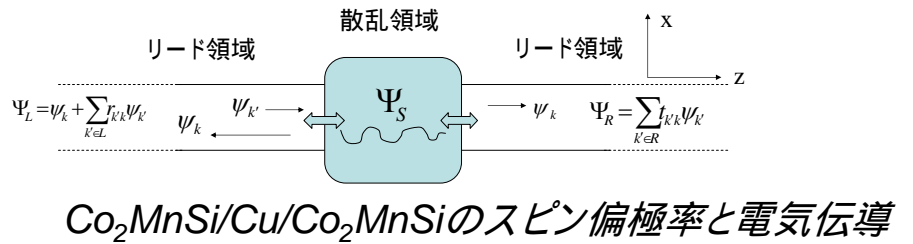


2. デバイス構造におけるスピン依存電気伝導の解析

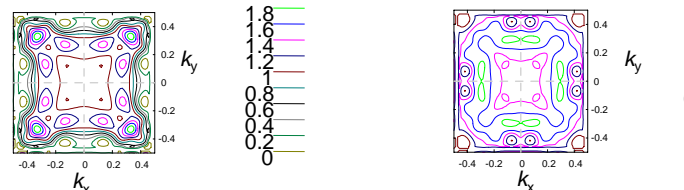
問題点：デバイスの性能は個々の材料の**電子的特性だけでは決まらない**。異なる材料を組み合わせたときに**電流がどうながれるか**を解析して性能を評価する必要がある。

目的：CPP-GMRを想定して、フリー層にCu, 強磁性層に**ハーフメタル**であるCo₂MnSiを用いたときの**バリスティックなスピン依存電気伝導**を解析する。

手法：**ランダウアー公式**に基づいて、ナノ領域での**バリスティック電気伝導度**を計算する。この手法では、電気伝導度がリード領域から入射する電子の**透過確率に比例**する。**界面での散乱効果**を正確に取り扱うことができる。



フェルミ準位での多数スピン透過率の $k_{||}$ 分布

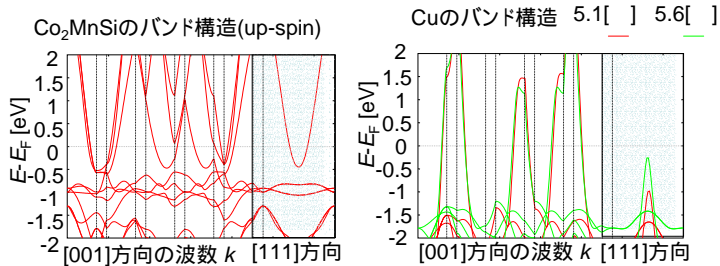


フェルミ準位での透過率の総和

$$\frac{\Omega}{2\pi} \int_{BZ} \sum_k T_k(k_{||}, E_F) dk_{||} = \begin{cases} 0.797 (\text{多数スピン}) \\ 0.0 (\text{少数スピン}) \end{cases} \quad \frac{\Omega}{2\pi} \int_{BZ} \sum_k T_k(k_{\perp}, E_F) dk_{\perp} = \begin{cases} 1.21 (\text{多数スピン}) \\ 0.0 (\text{少数スピン}) \end{cases}$$

Co終端

MnSi終端

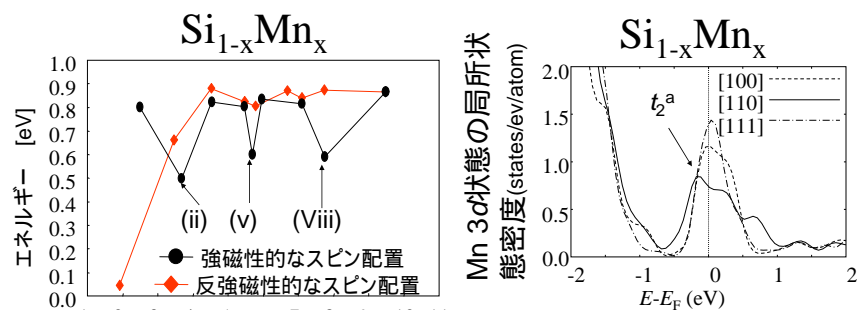


3. 希薄磁性半導体の結晶成長プロセスシミュレーション

問題点：高い強磁性転移温度(T_c)を有する希薄磁性半導体を実現するため、電子状態解析だけではなく、**結晶成長プロセス**の解析を行い作製指針を提案することも重要である。

指針：希薄磁性半導体Si_{1-x}Mn_xの場合、**[110]方向に配置するMnスピン間に強い強磁性カップリング**が存在する。したがって、Si母体結晶中で**[110]方向に配置するMnを多くすれば、高いT_cを持つ希薄磁性半導体**が得られる。

方法：**Siの[111]微斜面のステップエッジ**を利用して、**[110]方向に配置したMnの濃度を高める**。また、Si_{1-x}Mn_x表面の第一原理ポテンシャルエネルギー曲面上での**モンテカルロ・シミュレーション**を行い、実際の成長過程を検証する。



Mnが[110]方向に配置する場合に強磁性状態が安定になる。

