

研究スタッフ

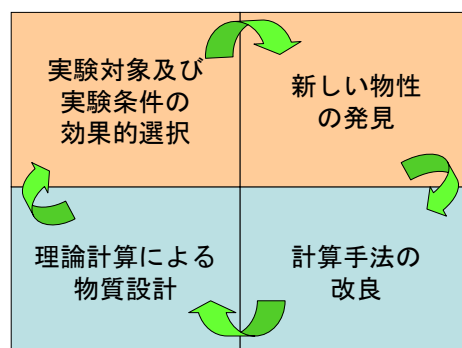
教授： 白井 正文

助教： 阿部 和多加

助教： 三浦 良雄

研究目的

微視的立場からの**計算機実験**（主に**第一原理計算**）を利用し、電子・通信・情報技術の開発に関連した**新機能物質の設計**を行う。最近の研究対象の具体例としては、**スピントロニクス分野**で注目されているハーフメタル、希薄磁性半導体などが挙げられる。将来的には、**デバイス作成過程に指針**を与えられるような、計算機による物質・デバイス設計を目的としている。

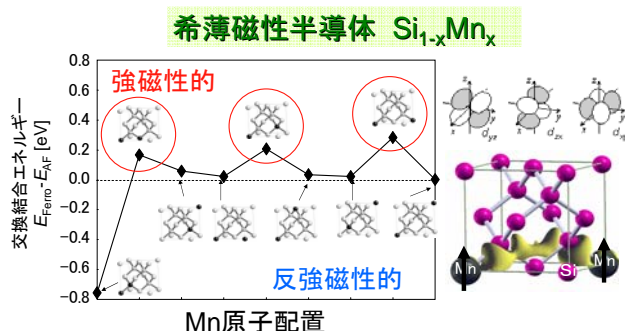
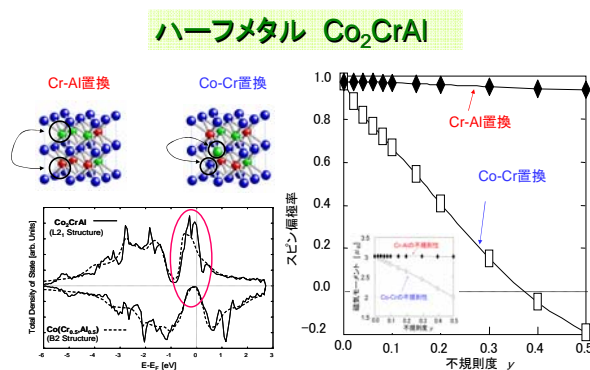


主な研究テーマ

1. 第一原理計算による物質設計と物性予測

・ **高いスピン偏極率を有する** ホイスラー合金 Co_2CrAl において、そのハーフメタル性に影響しない欠陥のパターンを探り、作成条件の緩和の可能性を探った。その結果、作成過程でCrとAlに**置換型欠陥**が生じてても、**ハーフメタル性は比較的良く保たれる**という作成指針を得た。

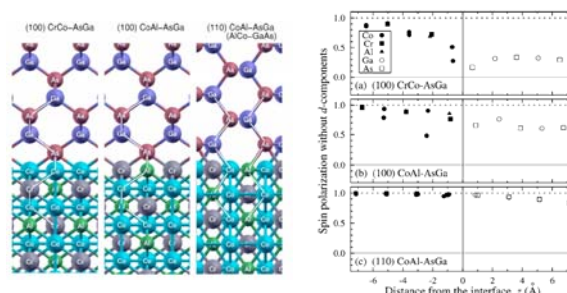
・ Siベースの希薄磁性半導体は**従来の半導体エレクトロニクスと整合性のよい**有望な材料とされている。Siに磁性不純物としてMnをドーピングしたときにMn-Mn間に働く磁氣的相互作用を解析した。そして磁性不純物としてドーピングされたMnがSi結晶の**[110]方向に配置するとき、強い強磁性相互作用**が期待できることを見出した。



2. 第一原理計算を用いたナノヘテロ界面の物性解析

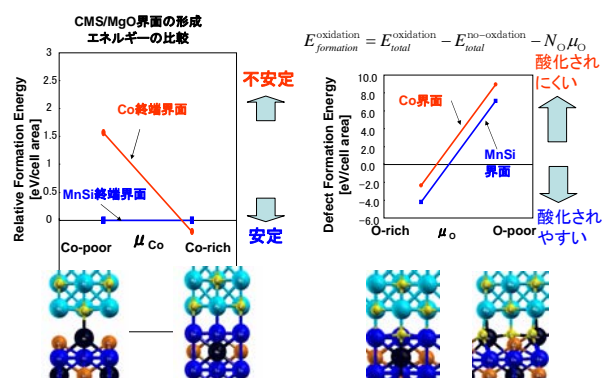
・ハーフメタル/半導体ヘテロ接合系の電子状態を第一原理計算し、**界面でもハーフメタル性が保たれる極めて稀な例**を見出した。ホイスラー合金 Co_2CrAl 、 Co_2MnSi 、 Co_2MnGe とGaAsとのヘテロ接合系では、エネルギー的に安定な**(110)界面**において**非常に高いスピン偏極率が保たれる**。これらの系は半導体への高効率なスピン注入源としての応用が期待できる。

ハーフメタル/半導体界面 $\text{Co}_2\text{CrAl}/\text{GaAs}$



・ハーフメタル/酸化物絶縁体ヘテロ接合界面における安定性について解析した。 $\text{Co}_2\text{MnSi}/\text{MgO}$ の(001)界面では、**Co終端面とMnSi終端面の2種類が考えられる**(右図)。両界面が酸化された場合の形成エネルギーの計算より、**MnSi終端面の方がCo界面よりも酸化されやすいことがわかった**。以上の結果より、 $\text{Co}_2\text{MnSi}/\text{MgO}$ 界面が酸化される場合は、MnSi終端面よりもCo終端面を形成すればよいという**デバイス作成指針**を得た。

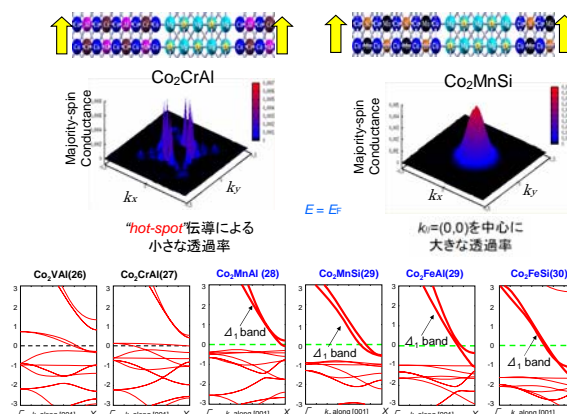
ハーフメタル/酸化物絶縁体界面 $\text{Co}_2\text{MnSi}/\text{MgO}$



3. 第一原理計算をベースとしたナノデバイスの量子輸送特性解析

・ホイスラー合金を強磁性電極、**単結晶酸化マグネシウム**を絶縁体層に用いた**磁気トンネル接合(MTJ)**におけるスピン偏極電気伝導の解析を行った。その結果、 Δ_1 バンドとフェルミエネルギーの位置関係から**価電子数の多いホイスラー合金**(Co_2MnSi , Co_2FeAl , Co_2FeSi など)が電極材料として適していることを見出し、ホイスラー合金/酸化マグネシウムを用いたMTJの**電極材料選択の指針**を得た。

$\text{Co}_2\text{YZ}/\text{MgO}/\text{Co}_2\text{YZ}$ 磁気トンネル接合



・大きな一軸磁気異方性を示す L_1_0 構造の**FePt**は磁気トンネル接合(MTJ)の微細化に伴う磁化の熱ゆらぎ耐性の問題を解決できる材料として有望である。 $\text{FePt}/\text{MgO}/\text{FePt}$ (001)のMTJのトンネル磁気抵抗比(TMR)を第一原理計算した結果、**Pt終端面よりもFe終端面の方が大きなTMRを有する傾向にあること**を見出した。

$\text{FePt}/\text{MgO}/\text{FePt}$ 磁気トンネル接合

