

# 研究スタッフ

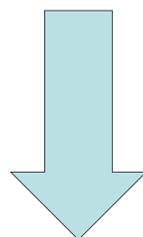
教授： 白井 正文、 准教授： 阿部 和多加  
助教： 辻川 雅人

## 研究目的

経験的パラメータを用いずに物質の電子状態が予測できる、第一原理計算を主な手法とし、新奇材料開発に取り組んでいる。次世代情報デバイスの基盤となるナノ構造などで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たな材料提案を試みている。また、この種の研究において基礎的部分を成す、構造探索手法の開発にも取り組んでいる。



|   |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |
|---|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
|   | 1  | 2  | 3  | 4  | 5  | 6  |    | 11 | 12 | 13 | 14 | 15 | 16 | 17 | 18 |    |    |    |
| 1 | H  |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    | He |    |    |    |
| 2 | Li | Be |    |    |    |    |    |    |    | B  | C  | N  | O  | F  | Ne |    |    |    |
| 3 | Na | Mg |    |    |    |    |    |    |    | Al | Si | P  | S  | Cl | Ar |    |    |    |
| 4 | K  | Ca | Sc | Ti | V  | Cr | Mn | Fe | Co | Ni | Cu | Zn | Ga | Ge | As | Se | Br | Kr |
| 5 | Rb | Sr | Y  | Zr | Nb | Mo | Tc | Ru | Rh | Pd | Ag | Cd | In | Sn | Sb | Te | I  | Xe |
| 6 | Os | Ba |    | Hf | Ta | W  | Re | Os | Ir | Pt | Au | Hg | Tl | Pb | Bi | Po | At | Rn |
| 7 | Fr | Ra |    | Rf | Db | Sg | Bh | Hs | Mt | Ds | Rg |    |    |    |    |    |    |    |



➤ Kohn-sham equation

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

➤ Total energy

$$E[n] = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i - \frac{e^2}{2} \int \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|} dr dr' + \int [\varepsilon_{xc}(n) - \mu_{xc}(n)] n(r) dr + \mu N$$

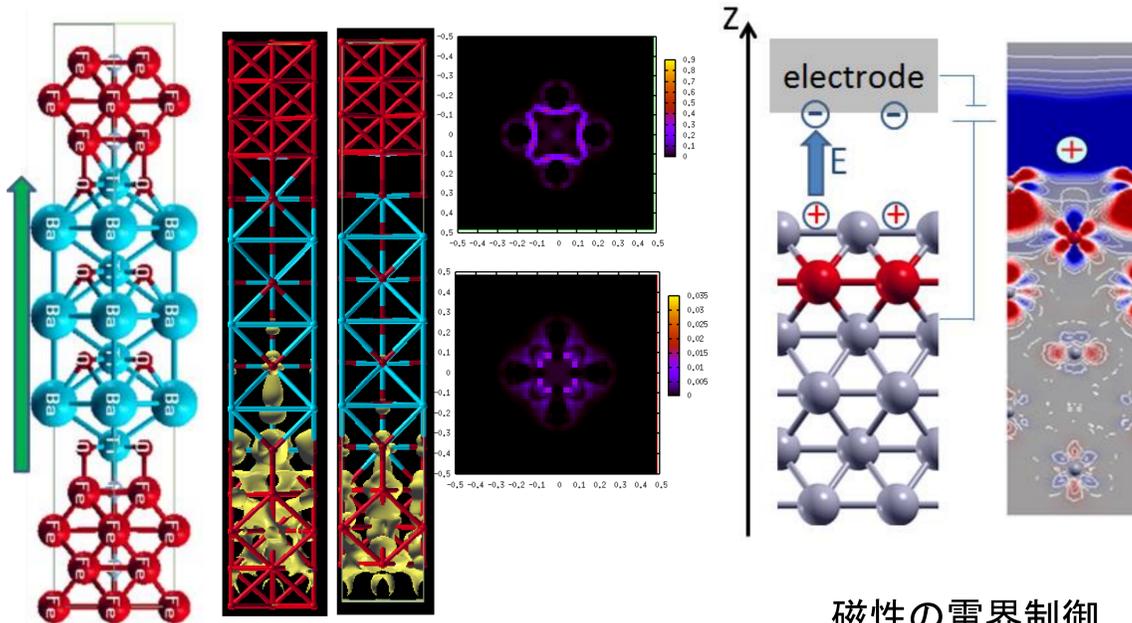
構造、物性、機能  
高機能性材料の理論設計

## 主な研究テーマ

### 1. 磁気抵抗素子

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に、磁性層およびバリア層材料の設計を行っている。また、超低消費電力室温動作スピントロニクスデバイスの実現においてキーテクノロジーと位置づけられている、金属磁性電界制御の可能性も探っている。大きな電界効果が得られる新材料の探索、並びに磁性が電界制御される起源の解明を進めている。

### トンネル磁気抵抗、巨大磁気抵抗 (MRAM etc.)



スピン依存伝導

磁性の電界制御

## 2. 高磁気異方性規則合金

希土類金属を用いることのない高性能永久磁石材料の開発が最近求められており、本研究では、高磁化、高磁気異方性を有する新たな規則合金の設計を行っている。既知のFe-Ni, Mn-Ga系合金へ第3元素を添加し、その磁性への影響を第一原理計算により調査している。

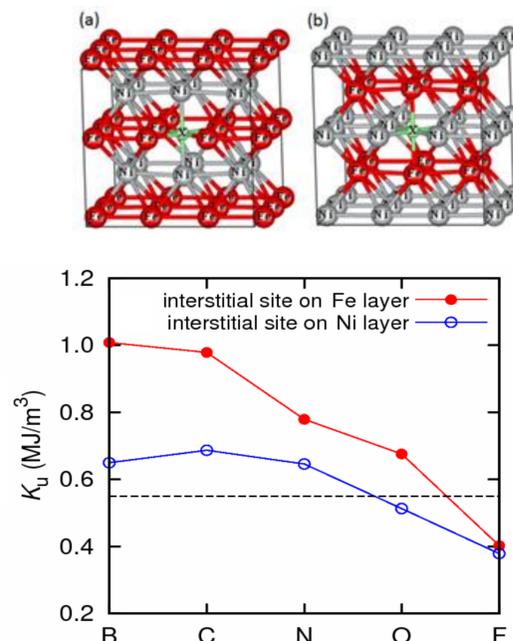
$L1_0$ -FeNi規則合金への軽元素添加の例では、B, C, Nを2.6%程度格子間サイトに添加することで大幅な垂直磁気異方性エネルギーの増大が見込まれることを示した。

## 3. 第一原理構造探索

高圧分野では最近、構造探索技術の開発が活発に行われている。特に広く使われているのは進化的アルゴリズムによる構造探索だが、本研究ではこれと異なるアプローチとして、ランダム構造探索法の開発を試みている。

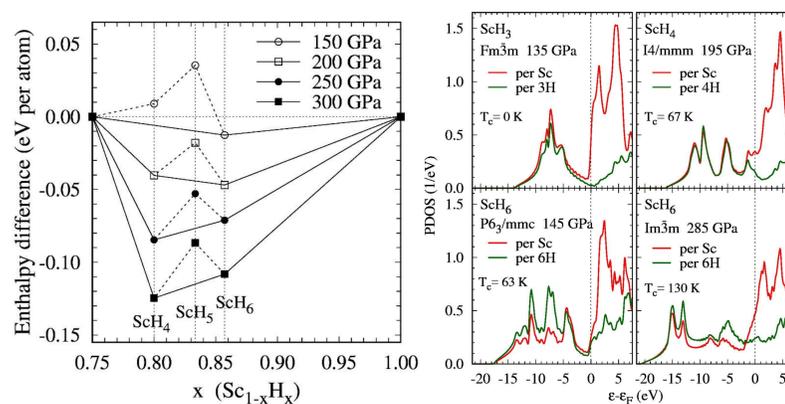
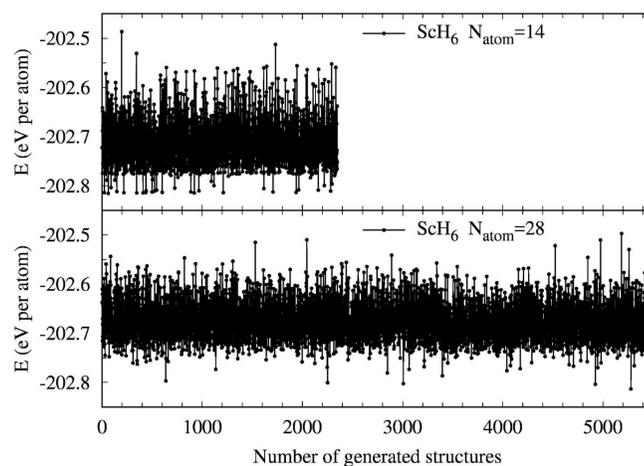
右上の図は200 GPa付近の $ScH_6$ に対し、ランダムに生成された構造から構造緩和を実施し、そのエネルギーをプロットしたものである。原子数14個のセルを用いた場合、安定構造は100回に1回程度現れた。また原子数28個の大きなセルでも、安定構造は1000回に1回程度現れる。進化的アルゴリズムと違って完全な並列処理が可能であるため、今後大規模系に拡張できるのではと期待している。

## 高性能磁石材料 (HDD, モーター etc.)



軽元素添加FeNi規則合金の一軸磁気異方性エネルギー

## 新物質探索、極限状態シミュレーション



高圧Sc水素化合物に対するランダム構造探索

## 産学連携を希望するテーマ例

- ・スピントロニクス素子（トンネル磁気抵抗素子、巨大磁気抵抗素子等）に適したナノ材料の研究
- ・新奇磁性材料（強磁性形状記憶合金、高磁気異方性合金等）の研究