

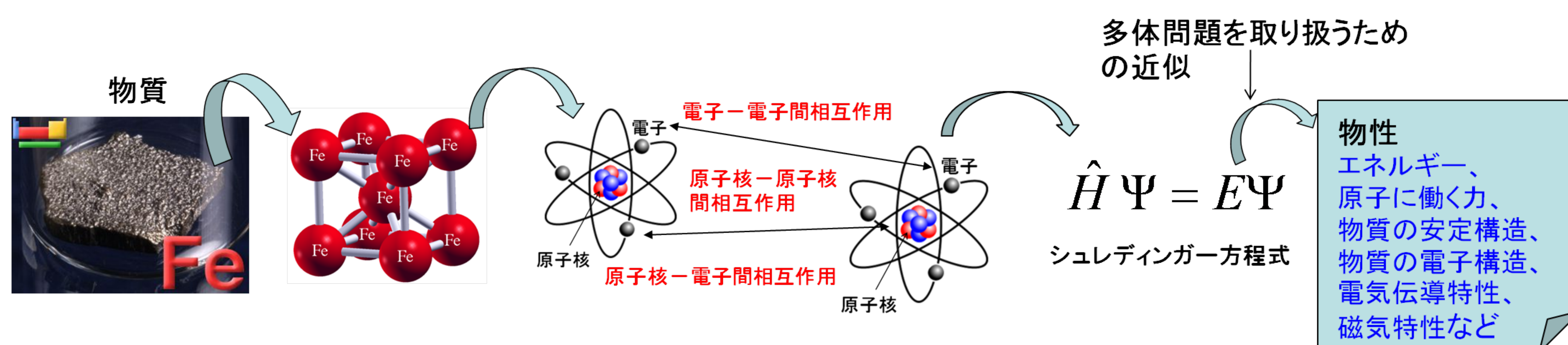
研究スタッフ

教授： 白井正文

助教： 阿部和多加、 研究員： 辻川雅人

研究目的

第一原理計算による物質設計、特にスピントロニクス材料の設計を目的とする。
研究内容は、実験結果の解析から未知の物質探索にわたる。

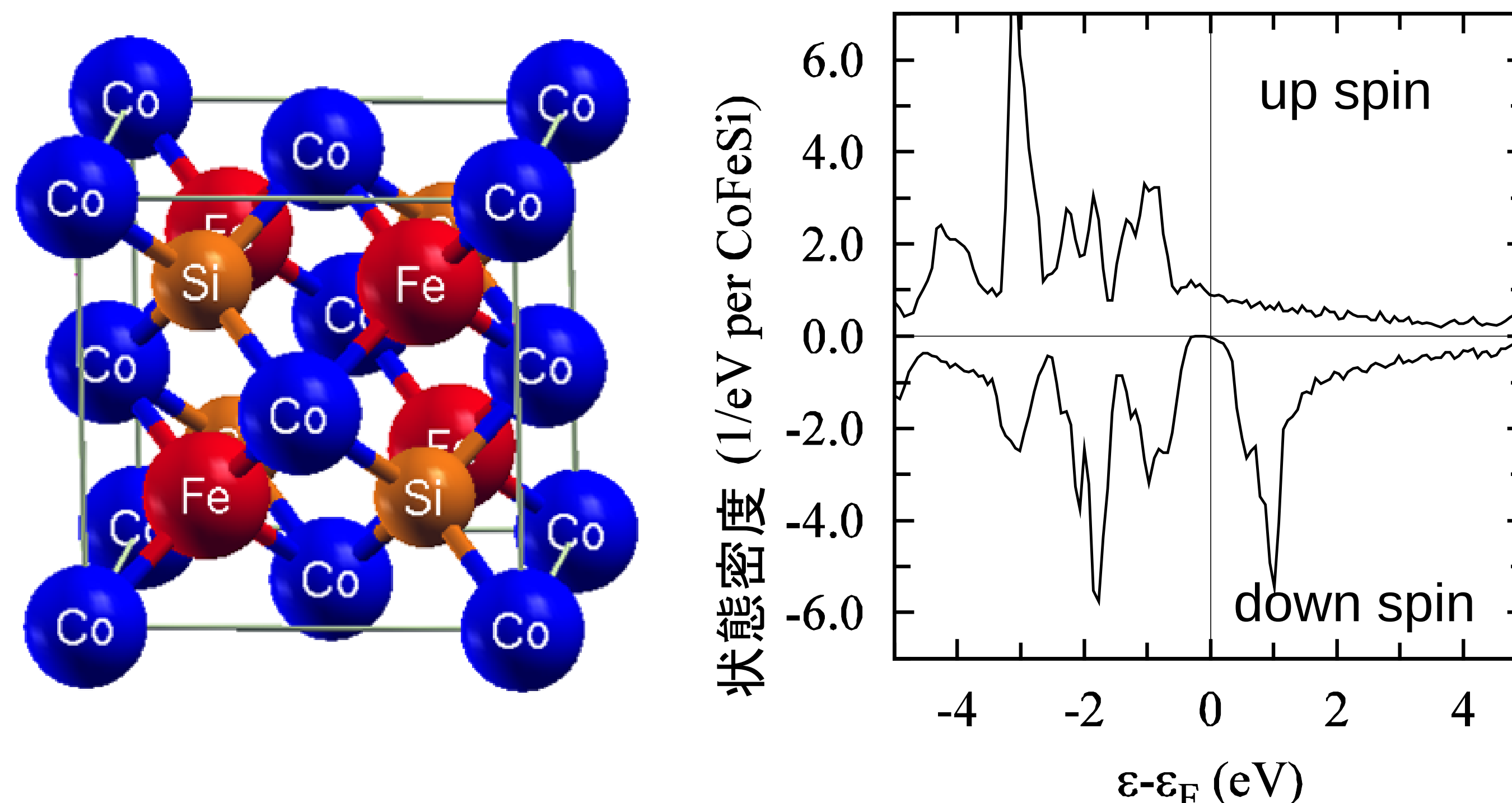


主な研究テーマ

1. ハーフメタルの探索

スピントロニクス材料では、磁気的に偏った電流（スピン偏極電流）が必要となる。最も理想的なのは、電流に寄与する電子のスピンのみが完全に揃っている場合であり、そのような電流を生み出す物質をハーフメタルと呼ぶ。

右図は、計算から見つけ出したハーフメタルの例だ。普通の物質ではアップスピン、ダウンスピンの双方が電流に寄与する。しかしハーフホイスラー合金CoFeSiでは、一方のスピンだけが電流に寄与するのが、その状態密度から分る。

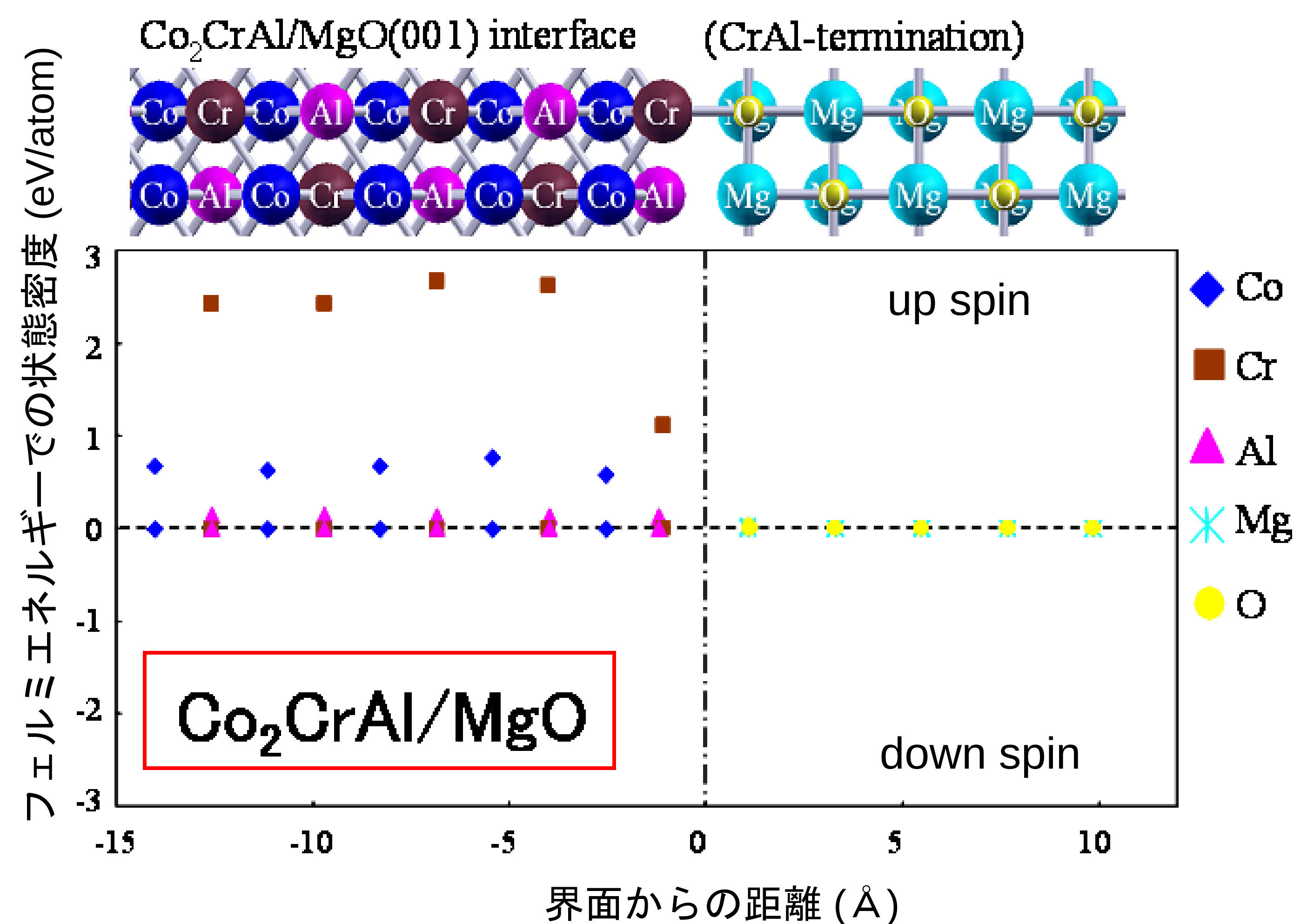


ハーフホイスラー合金CoFeSiの構造と状態密度。ダウンスピンの状態密度は負符号で示されている。フェルミエネルギーにおけるダウンスピンの状態密度はゼロであり、つまり、アップスピンの電子のみが電流に寄与する。

2. ハーフメタリック界面の探索

ハーフメタルが他物質との界面でもハーフメタル性を保持するかどうかは興味を惹く問題だ。特にトンネル磁気抵抗素子では、界面でのスピン偏極が性能に重要な影響を与えていると考えられている。

右図は、 $\text{Co}_2\text{CrAl}/\text{MgO}$ 界面の状態密度を示しているが、ハーフメタル性が界面でも維持されているのが分る。このようなケースは非常に稀であり、実際、今まで提案されたハーフメタリック界面は数例しかないのが実情だ。酸化物との界面に限れば、これは初めて提案されたハーフメタリック界面である。



$\text{Co}_2\text{CrAl}/\text{MgO}$ 界面付近におけるフェルミエネルギーでの状態密度。ダウンスピンの状態密度は負符号で示しているが、このスケールでは、ほぼゼロに見える。つまり、界面でもハーフメタル性が保たれている。

3. 垂直磁気材料のTMR効果

トンネル磁気抵抗 (TMR) 素子の熱耐性を高めるため、結晶磁気異方性を利用した垂直磁気材料の開発が試みられている。電極の結晶磁気異方性が大きく、且つ高いTMR比を与える材料が目標だ。以下に一例として、 L_{10} 型FePt電極に対する計算結果を示す。FePt電極とMgO絶縁層の間に鉄を数原子層挿入するだけで、TMR比が著しく向上することが分る。

