

## 用途・応用分野

第一原理バンド計算に基づく

● 様々な物性(磁性、電気伝導、超伝導など)の解析および予測

● エレクトロニクス、スピントロニクスの物質・材料開発

## 本技術の特徴・従来技術との比較

● 微視的な理論を用いることで、物理現象・物性の本質となる因子を解明

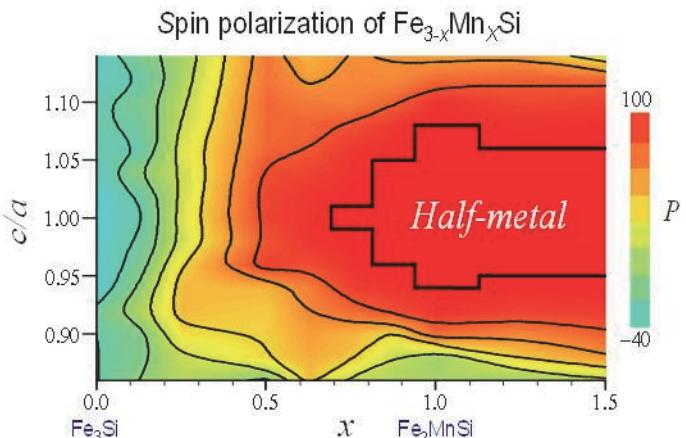
● 組成変調、格子歪み、圧力などによる物性制御の可能性を探索

● コンピュータ・シミュレーションを用い物質・材料を開発、設計指針構築が可能

## 技術の概要

一応用例として、磁性合金 $\text{Fe}_{3-x}\text{Mn}_x\text{Si}$ のスピン偏極率 $P$ がMn組成 $x$ にどのように依存するかを予測したケースを示す。ハーフメタルである $\text{Fe}_2\text{MnSi}$ は、 $P=100\%$ であるが、キュリー温度 $T_c$ は220Kと室温より低い。一方、 $\text{Fe}_3\text{Si}$ は、 $P=40\%$ であるものの $T_c=840\text{K}$ である。そこで、組成変調により、高スピン偏極率と高キュリー温度が両立できると仮定。また、半導体基板上に作成する場合には、格子歪みが生じるので、これがスピン偏極率に与える影響も調査。得られた結果を右図に示す。

$0.7 \leq x \leq 1.5$  の比較的幅広い Mn組成においてハーフメタル性は維持されている。これより、組成変調を行うことで、スピン偏極率を100%に保つままキュリー温度を $\text{Fe}_2\text{MnSi}$ より増加させることが可能と予測される。



## 特許・論文

### <論文>

- H. Itoh: J. Phys. D: Appl. Phys. **40**, 12228 (2007).  
K. Hamaya et al.: Phys. Rev. Lett. **102**, 137204 (2009).  
T. Ishikawa et al.: Phys. Rev. B **81**, 092104 (2010).  
H. Itoh et al.: Key Eng. Mater. **470**, 54 (2011).  
T. Ishikawa et al.: J. Phys. Soc. Jpn. **81**, 124601 (2012).  
S. Honda et al.: J. Phys. D: Appl. Phys. **47**, 485004 (2014).  
S. Honda et al.: JPS Conf. Proc. **5**, 011015 (2015).

## 研究者

### 伊藤 博介

システム理工学部 物理・応用物理学科  
物性理論研究室

### 本多 周太

システム理工学部 物理・応用物理学科  
物性理論研究室