

第一原理バンド計算に基づく
物性解析・予測および物質開発

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

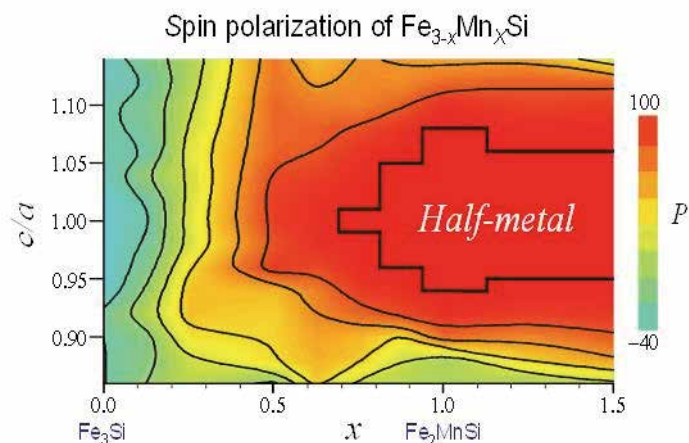
本技術の特徴・従来技術との比較

- 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 Fe_2MnSi
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、 Fe_3Si 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、これがスピンの偏極率に与える
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、スピンの偏極率を100%に保つ
たままキュリー温度を Fe_2MnSi 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**, 1228 (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