ナノテクノロジー・
材料

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

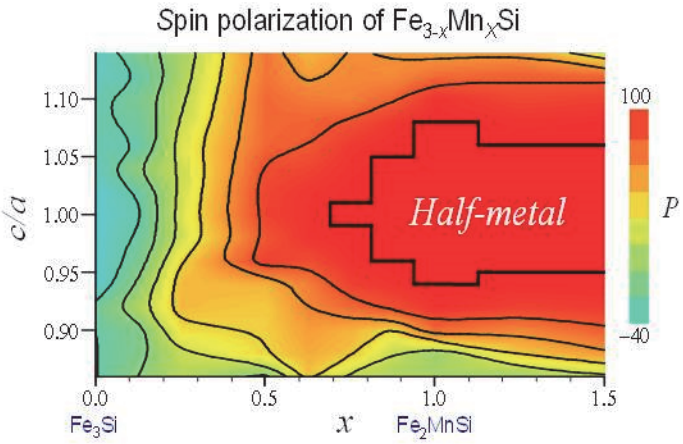
本技術の特徴・従来技術との比較

- 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$Fe_{3-x}Mn_xSi$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=840K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%に保っ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

お問合わせ先　関西大学 社会連携部 産学官連携センター
TEL：06-6368-1245
MAIL：sangakukan-mm@ml.kandai.jp