



Title	Computational Materials Design of d0 Ferromagnets
Author(s)	Seike, Masayoshi
Citation	大阪大学, 2012, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/2523
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

【65】

氏 名 せい け まき よし
清 家 聖 嘉

博士の専攻分野の名称 博 士（理学）

学 位 記 番 号 第 2 5 2 5 0 号

学 位 授 与 年 月 日 平成 24 年 3 月 22 日

学 位 授 与 の 要 件 学位規則第 4 条第 1 項該当

基礎工学研究科物質創成専攻

学 位 論 文 名 Computational Materials Design of d⁰ Ferromagnets

(d⁰ 強磁性体の計算機マテリアルデザイン)

論 文 審 査 委 員 (主査)
教 授 吉 田 博

(副査)
教 授 北 岡 良 雄 教 授 宮 坂 博 教 授 田 中 秀 和

論 文 内 容 の 要 旨

d^0 強磁性体は、遷移金属や希土類金属などの磁性元素を全く含むことなく、強磁性を発現する物質を指し、近年、大きな注目を集めている。申請者は世界に先駆けて、Si又はGeがドーブされた K_2S 、C又はNがドーブされたCaO、MgO、SrO

などの物質において強磁性が発現することを第一原理計算に基づいて示した。Mg(O, N)では強磁性を発現することが後の実験で実証されている。次いでドーバント間の原子対相互作用を求め、モンテカルロシミュレーションを行なうことにより、Mg(O, N)、Ca(O, N)、Sr(O, N)、(Mg, V₀)Oでは、ドーバントがナノスケールでスピノーダルナノ分解し、超常磁性による高いブロッキング温度(High- T_B)を有する d^0 強磁性体となり得ることを示した。更にドーバントを均一に分布させた条件下でのキュリー温度の予測結果と併せて考察することにより、最近実験的に報告されている13%のNがドーブされたMg(O, N)及び数%の格子欠陥が導入された(Mg, V₀)Oでの室温強磁性的な振る舞いは、スピノーダルナノ分解による超常磁性的なブロッキング現象を捉えたものであることを示した。そして d^0 強磁性は、Stoner条件を満たす p 軌道由来の狭いバンドが部分的に電子で占有されることで自発的な局所磁気モーメントを形成し、Zenerの二重交換相互作用により強磁性状態が安定化していると考ええることで統一的に理解できることを示した。本研究の意義は、(i) 世界に先駆けて d^0 強磁性体の計算機マテリアルデザインを行い、本研究分野のその後の発展に大きく貢献している点、(ii) スピノーダルナノ分解を利用し、High- T_B を目指した d^0 強磁性体のマテリアルデザインが行われている点、(iii) d^0 強磁性の発現機構及び磁気特性が明らかにされている点にある。これら一連の成果は、 d^0 強磁性に対する本質的な理解を与えるとともに、磁性元素を用いない環境調和性の高いスピントロニクス材料創出への活路を拓くものである。

論 文 審 査 の 結 果 の 要 旨

本研究で取り扱った d^0 強磁性体では、遷移金属や希土類金属などの磁性元素を全く含むことなく、強磁性を発現する物質のデザインを目指しており、近年、大きな注目を集めている。清家聖 嘉氏は世界に先駆けて、Si又はGeがドーブされた K_2S 、C又はNがドーブされたCaO、MgO、SrOなどの物質において強磁性が発現することを第一原理計算に基づいて示した。Mg(O, N)では強磁性を発現することが後の実験で実証されている。次いでドーバント間の原子対相互作用を求め、モンテカルロシミュレーションを行なうことにより、Mg(O, N)、Ca(O, N)、Sr(O, N)、(Mg, V₀)Oでは、ドーバントがナノスケールでスピノーダルナノ分解し、超常磁性による高いブロッキング温度(High- T_B)を有する d^0 強磁性体となり得ることを示した。更にドーバントを均一に分布させた条件下でのキュリー温度の予測結果と併せて考察することにより、最近実験的に報告されている13%のNがドーブされたMg(O, N)及び数%の格子欠陥が導入された(Mg, V₀)Oでの室温強磁性的な振る舞いは、スピノーダルナノ分解による超常磁性的なブロッキング現象を捉えたものであることを示した。そして d^0 強磁性は、Stoner条件を満たす p 軌道由来の狭いバンドが部分的に電子で占有されることで自発的な局所磁気モーメントを形成し、Zenerの二重交換相互作用により強磁性状態が安定化していると考ええることで統一的に理解できることを示した。本研究は、(i) 世界に先駆けて d^0 強磁性体の計算機マテリアルデザインを行い、本研究分野のその後の発展に大きく貢献している点、(ii) スピノーダルナノ分解を利用し、High- T_B を目指した d^0 強磁性体のマテリアルデザインが行われている点、(iii) d^0 強磁性の発現機構及び磁気特性が明らかにされている点にある。これら一連の成果は、 d^0 強磁性に対する本質的な理解を与えるとともに、磁性元素を用いない環境調和性の高いスピントロニクス材料創出への活路を拓くものである点に重要な意義があり、博士（理学）の学位論文として価値のあるものと認める。