



Title	First-principles investigation of electronic structures and transport properties of new half-metallic materials
Author(s)	Nguyen, Hoang Long
Citation	大阪大学, 2009, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/49736
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、 〈a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"〉 大阪大学の博士論文について 〈/a〉 をご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

氏名	グエン ホアング ロン NGUYEN HOANG LONG
博士の専攻分野の名称	博士(理学)
学位記番号	第 22670 号
学位授与年月日	平成21年3月24日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当 理学研究科物理学専攻
学位論文名	First-principles investigation of electronic structures and transport properties of new half-metallic materials (新規ハーフメタルの電子状態と輸送現象の第一原理計算に基づく研究)
論文審査委員	(主査) 教授 赤井 久純 (副査) 教授 朝日 一 教授 小川 哲生 准教授 Keith M. Slevin 教授 野末 泰夫 教授 吉田 博

論文内容の要旨

一方向を向いたスピンの電子に対しては金属であるが、逆方向を向いたスピンの電子に対しては絶縁体であるような物質はハーフメタルと呼ばれる。ハーフメタルはスピントロニクスにおいて重要なキーとなる物質である。本研究の目的は化学的に安定でかつ合成が簡単であり、また、十分に高い磁気転移温度をもつ物質をデザインすることである。そのような物質は新しいスピントロニクスデバイス材料として高い可能性をもつはずである。まず、最初のステップとして、完全不規則状態を参照系とした原子対相互作用を精度よく決めることのできる手法を開発して、希薄磁性半導体の化学的な安定性と相図を議論した。次に新しいタイプのフェリ磁性ハーフメタルのデザインを行った。この物質群は $(Mn, TM)X$ (ここで TM 遷移金属元素、 X はカルコゲン) で表される化学組成をもつ化合物である。さらに、ハーフメタルの応用の可能性を広げるために、磁化が完全に消えるフェリ磁性ハーフメタル(反強磁性ハーフメタルと呼ばれる)のデザインを上述のフェリ磁性ハーフメタルを出発点にして行った。デザインした反強磁性ハーフメタルは $(AB)X_2$ で表される金属間化合物であり、反強磁性ハーフメタルとして際立った性質を備えている。これらの物質は化学的に安定であり、また磁気転移温度が比較的高いことが理論的に予測された。これらの中にはネール温度が $1000K$ を超えるものもいくつかある。最後のステップとして、デザインした反強磁性ハーフメタルおよびその GMR 素子(巨大磁気抵抗素子)、 TMR 素子(トンネル磁気抵抗素子)構造をシミュレートする超構造を構成して、その直流電気抵抗と GMR 比、 TMR 比を、久保グリーンウッド公式を用いて計算した。これらの計算の結果、デザインされた反強磁性ハーフメタルは GMR/TMR 素子や磁気ランダムアクセスメモリの構成要素として機能することが示された。この研究における計算はすべて密度反関数法にもとづく局所密度近似を用いた第一原理 KKR - CPA 法によりなされた。

論文審査の結果の要旨

グエン・ロン氏の研究は第一原理電子状態計算をもとに新しいスピントロニクスデバイスに用いることができる材料をデザインすることである。そのために、グエン・ロン氏は4つのステップをへて体系的な研究を行った。第一に、安定な金属間化合物や混晶、合金を得られるか否かを判定するために必要となる原子間相互作用を精度よく計算するための新しい手法を開発した。この手法はGPM（一般化摂動法）と呼ばれる従来からある単純な2次摂動に加えて、多重散乱の効果と電子間相互作用の効果を加えて原子間相互作用を高精度で決めようとする試みであり、信頼性のある物質設計には欠かせないものである。次にグエン・ロン氏はフェリ磁性体ハーフメタルをスピントロニクス材料の候補としてデザインした。これは $(M_{n_1}, M_x)X$ （ M は磁性遷移金属、 X はカルコゲン）で表される組成をもった不規則金属間化合物であるが、十分に高い磁気転移点を持ち、実用材料としての可能性がある。第3ステップとして、ロン君フェリ磁性体の特別な場合として、磁化が完全に消える、ハーフメタルのデザインを行った。その結果 $(AB)X_2$ （ A, B はそれぞれ磁性イオンであり、その有効電子数の和が10になる組み合わせ、 X はカルコゲンあるいはプニクトゲン）の化学組成を持つ金属間化合物が磁化を持たないハーフメタル（反強磁性ハーフメタルと呼ばれる）を示す可能性が高いことを見いだした。実際このような組成をもつ反強磁性ハーフメタルの多くの例の存在を第一原理計算によって示し、その化学的安定性、磁性、可能な結晶構造、磁気転移点を理論的に予測した。最後のステップとして、これらの物質のスピントロニクス材料としての可能性を示すために、これらの物質を層状に積み上げたGMR構造、TMR構造についてそのDC伝導度を計算しそのGMR比、TMR比を計算し、現在使われている磁気センサーに比して格段の性能の向上が得られることを示した。この研究は第一原理計算のもとづいて緻密な計算機マテリアルデザインを行ったものである。その結果はこれまで知られていない有用な新物質の創成につながるものであり、その学問的、応用的価値は高い。よって、本論文は博士（理学）の学位論文として十分価値あるものと認める。