OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	Computational Materials Design of New Spintronics Materials by Controlling Phase Separation
Author(s)	Nguyen, Vu Dang
Citation	大阪大学, 2014, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/50556
rights	
Note	やむを得ない事由があると学位審査研究科が承認したため、全文に代えてその内容の要約を公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

Form 3

Abstract of Thesis

Name （Nguyen Dang Vu）	
Title	Computational Materials Design of New Spintronics Materials by Controlling Phase Separation (相分離制御による新規スピントロニクス材料の計算機マテリアルデザイン)

Abstract of Thesis

Spintronics, or spin electronics, is an emerging field where electron spin has been exploited in addiction to electronic charge in solid-state devices. Many studies have been performed for metallic alloys, insulators and semiconductors to realize the spintronics. Spintronics devices such as GMR read heads in large capacity hard disk drives (metallic spintronics), magnetic tunnel junctions (insulator spintronics) and so on, are expected to be used widely. Although spintronics has been studied for many years, many problems are still unresolved. In this study, based on the first principles calculation method, computational materials design of new spintronics materials is demonstrated. From the materials design, I propose new high Curie temperature (TC) ferromagnetic materials.

Firstly, I demonstrate that Fe nanowires can be formed within Cu matrix under layer by layer crystal growth condition due to spinodal decomposition. Wider hysteresis loops are observed in the alloy with inhomogeneous structure, up to 141 K. Thus, ferromagnetism of Fe-Cu alloy is proposed to be enhanced by this kind of structure. My calculations show that Fe-Cu alloy could be a promising candidate to replace existing ferromagnetic metallic alloys.

Second part of this work is to research for semiconductor spintronics materials. On the basis of the first principles calculations, electron-induced n-type ferromagnetic semiconductors are designed. By doping interstitial Be as a double-donor, (In,Fe)As exhibits ferromagnetic behavior. Monte Carlo simulation reveals that under suitable condition, ordered phase of Fe-rich regions can be obtained. When the exchange interactions are strong enough, the ordered phase boosts the ferromagnetic behavior of the system and TC could be up to 85 K for only Fe 5% doped InAs. Li(Zn,Mn)X systems, where X is As, N or P, are also studied. In these materials, double-doping is executed. By introducing Li into interstitial sites, one can expect not only large ferromagnetic exchange interactions but also to increase the solubility of Mn in these compounds. My calculations show that the systems could have TC of 100 K and more when Mn and interstitial Li are doped up to 15% and 30%, respectively.

My materials designs show that phase separation plays an important role for realizing high TC ferromagnetic materials. The systems might prefer spinodal decomposition (Fe-Cu alloy), ordered phase (Be-doped (In,Fe)As) or high solubility (Li-doped Li(Zn,Mn)As, Li(Zn,Mn)N, Li(Zn,Mn)P) to enhance ferromagnetism. By controlling phase separation, one can obtain new high TC spintronics materials.

様式7

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏　名　（　Nguyen Dang Vu　）		
	（職）	氏　名
論文審査担当者	主査　教授　吉田　博 副査　教授　宮坂　博 副査　教授　田中秀和	

論文審査の結果の要旨

スピントロニクスは電子のもつ電荷という自由度に、相対論的量子力学から生まれるスピンの自由度を取り入れることにより、シリコンCMOS半導体技術の壁を越える可能性として、その実現に、大きな期待が寄せられている。とくに、省エネルギー、高集積、高速演算を可能にする新しいクラスのエレクトロニクスとして、その実現が期待されている。スピントロニクス実現のためのに解決しなければならない、現時点での最重要課題は高い強磁性転移温度(Tc)を持ち、電場でスピンを制御できる新物質の実現である。これらの問題を解決するために、Nguyen Dang Vuさんは第一原理計算手法による電子状態の計算、磁気的相互作用の距離依存性と平均場近似やモンテカルロ法によるTcの計算、および、スピノダルナノ分解を制御・予測するための多階層連結計算を用いて、Cu-Fe、(In,Fe)As、および、Li(Zn,Mn)X (X=As,N,P)にこれらの計算手法を適用し、相分離制御による新規スピントロニクス材料の計算機マテリアルデザインを行った。Cu-Fe合金では、二次元原子層結晶成長により、昆布相と呼ばれる量子細線の自己組織化ナノ超構造の成長と高いブロッキング温度を予言した。また、現在は(Ga,Mn)Asなどのｐ型の磁性半導体に対して、円偏向磁性半導体レーザーや発光を可能にするためのｎ型磁性半導体として、格子間にBeドナーをドープした(In,Fe)Asについて、スピノダル分解を制御して規則構造を析出する結晶成長方法をデザインした。これらのデザイン結果は最近行われつつある実証実験について、新しいガイドラインを提供し、また、実験事実とも良い一致を示している。また、Li(Zn,Mn)X (X=As,N,P)について、格子間位置にドープしたLiドナー不純物濃度を制御することにより、相分離を避けつつ、Mn濃度を高濃度にドープすることができる二重ドーピング法（同時ドーピング法）を提案した。これらの第一原理計算による電子状態の予測、磁気的相互作用の機構とTcの予測、および、熱力学的な自由エネルギーの第一原理計算による相図の予測と多階層連結シミュレーションによる自己組織化ナノ超構造の結晶成長シミュレーションは、スピントロニクス実現のための新しいガイドラインを実験グループに提供した。さらに、Nguyen Dang Vuさんの研究は、物理機構や化学創製プロセスの予測・解明だけでなく、スピントロニクスに対する計算機ナノマテリアルデザインという新しい分野を切り開いた研究として博士（理学）の学位論文として価値のあるものと認める。