The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	First-principles study on magnetic, structural, transport, and optical properties in Heusler alloys for spintronics
Author(s)	黒田, 文彬
Citation	大阪大学, 2020, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/76601
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

様式３

論　文　内　容　の　要　旨

氏　名　（　黒田　文彬　）	
論文題名	First-principles study on magnetic, structural, transport, and optical properties in Heusler alloys for spintronics (スピントロニクスに向けたホイスラー合金の磁気, 構造、輸送、光学特性の第一原理的研究)

論文内容の要旨

近年、情報化社会の基盤としてスピントロニクス技術を用いたデバイスの需要が高まっている。特に巨大磁気抵抗(GMR)効果やトンネル磁気抵抗(TMR)効果を用いた素子は、この十数年で飛躍的な成長を遂げた。これらのスピントロニクスデバイスの主な目的は、電荷だけでなくスピン流も低消費電力かつ高速に制御することで、情報を転送できることである。最近、いくつかのホイスラー合金（例：Co_2MnSi）は、高いキュリー温度をもち、かつ、ハーフメタル（HM）な電子状態をもつため、スピントロニクスデバイスのスピン注入源として注目されている。これらの材料を用いることで、室温スピントロニクスデバイスの出力を改善することが期待できる。しかし、近い将来、情報化社会の急激な成長により、さらに高出力で集積化可能な、新たな機能を兼ね備えたスピントロニクスデバイスが求められる。さらに、基礎的な研究として、そのようなスピントロニクス材料のスピン偏極した電子状態を詳細に観測する方法が重要となってくる。本学位論文の目的は、第一原理に基づいた密度汎関数理論（DFT）の計算により、新たな機能性をもつホイスラー合金の物質設計をすることである。さらに、DFT計算を用いた解釈を加えることで、共鳴非弾性散乱(RIXS)がスピントロニクス材料の電子状態を観測する手法として有力であることを示唆することである。第3,4章では、ホイスラー合金の「スピンギャップレス半導体(SGS)」の電子状態をもつ物質群に焦点を当てている。これらの物質は、その特異な電子状態から、電界を印加することにより、スピン偏極した電子だけでなく、スピン偏極した正孔電流も生成すると考えられる。第3章では、SGSである四元ホイスラー 合金について議論した。特に、SGSの電子状態は構造の不規則化に弱いため、不規則化しにくい合金の元素の組み合わせを見つけることに注目した。また第4章では、SGSである反強磁性体ホイスラー 合金について議論した。特に、このホイスラー 合金の反強磁性はキャリア濃度に敏感であることがわかり、電界効果による磁性コントロールの可能性を見出した。第5章では、バルクとしてはSGSではないが、ヘテロ構造をなすことで、SGSと同様なスピン偏極電流が現れる「全ホイスラー 型半金属GMR素子」について、その特性を調べた。最後に、第6章では、RIXSとその磁気円二色性(MCD)について理論の観点から議論した。いくつかのHMホイスラー 合金において大きなRIXS-MCDが観測されたが、その起源については解明されていなかった。そこで、DFTに基づくRIXS-MCDスペクトル計算手法を提案した。この手法は、実験結果を定性的によく再現した。この研究から、DFT計算と実験結果を合わせることで、RIXS-MCDは非占有状態のみならず、占有状態のスピン偏極を観測する有力な方法となることを示唆した。

様式７

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏　名　（　黒田文彬　）			
論文審査担当者	（職）	氏　名	
	主査　教授	小口　多美夫	（産業科学研究所）
	副査　教授	関山　明	
	副査　教授	浜屋　宏平	

論文審査の結果の要旨

論文題目：First-principles study on magnetic, structural, transport, and optical properties in Heusler alloys for spintronics
(スピントロニクスに向けたホイスラー合金の磁気, 構造、輸送、光学特性の第一原理的研究)

本論文は、スピントロニクス分野への応用を視野におき、ホイスラー系を対象として、その磁気, 構造、輸送、光学特性を第一原理計算に基づき、物質探索・設計を行った研究である。ホイスラー系はX_2YZを組成とするフルホイスラーを代表とし、1903年にHeuslerにより強磁性でない元素の組合せからなるCu_2MnAlにおいて強磁性の発現が発見され、ハーフメタル性等の特異な電子状態とそれに関わる物性を呈することから活発な研究が進められている。ここで、X、Yは遷移元素であり、Zは典型元素が占め、X位置が半分欠損したハーフホイスラーXYZ及びX位置に二種類の元素を含む四元ホイスラーXX'YZを含めて、その膨大な数の組合せから特定の応用にターゲットをおいた物質探索・設計の研究が積極的に報告されている。本研究では、効率的な物質探索や設計に強力なツールとなっている密度汎関数理論に基づく第一原理計算が用いられた。まず、究極のハーフメタル性であるスピンギャップ状態を有する四元ホイスラーの探索がなされた。スピンギャップ状態に適すると経験的に知られている全価電子数18の合金系を対象として電子状態計算からの探索が行われ、新たに4種の合金が見つけられた。磁気交換相互作用、不規則合金化エネルギー、格子振動、弾性定数の計算により、それらの合金のキュリー温度や不規則化・格子の安定性が調べられ、応用に適した物質系であることが示された。次に、反強磁性ホイスラー系での物質探索が試みられた。反強磁性ホイスラーは強磁性のそれと比較して転移温度が低い点が応用への課題とされていた。V_3Alが比較的高いネール温度を有することをヒントに、V位置を元素置換することで探索がなされ、V_2NbAlとV_2TaAlが目的にかなう物質系であると結論された。V_2TaAlはまた歪みにより大きな磁気異方性を与えると明らかになり、応用への道が拓かれた。三番目の研究として、全てホイスラー合金の組合せからなる接合系が提案され、その界面における電子状態のマッチングから、巨大磁気抵抗デバイスに適した接合系であることが予測された。最後に、ハーフメタル性の証明として実験的に提案されている共鳴非弾性X線散乱と磁気円二色性の理論を展開し、ホイスラー系における内殻状態のスピン分極を考慮することで価電子状態におけるハーフメタル性が議論できることを示した。

以上により、博士（理学）の学位論文として価値のあるものと認める。