

3P061 PBC-DFT 計算によるスピントロニクス材料設計 (I) : Fe_2FeSi , Co_2FeSi および Mn_2FeSi 薄膜の電子状態の比較

(九大院・総理工¹, 東洋鋼鈹², アイオワ州立大学³)

○小田原洋介¹, 執行 大輔², 森 寛敏³, 吉武 剛¹, 三好 永作¹

【はじめに】

電子の特徴のひとつである電荷を利用した半導体と、もうひとつの電子の特徴であるスピンを利用した磁性体は、現代のエレクトロニクスを支えている最も重要な材料である。近年、このように全く別々の分野で発展してきた二つの電子の特徴を同時に利用するスピントロニクス研究が盛んに行われている。スピントロニクスでは、スピンの特性をいかして、電荷に基づいた従来のエレクトロニクスでは不可能だったようなデバイスも実現できるようになると考えられている。 Fe-Si 系には半導体相と強磁性体相がともに存在し、スピントロニクスの新しい系として興味深い。強磁性 Fe_3Si は半導体相へのスピン注入用強磁性体として注目を集めており、われわれはその薄膜の理論研究を行ってきた[1,2]。一方、その Fe の一部を Co に置き換えた Co_2FeSi ホイスラー合金がハーフメタル性を持つと予測され注目をあびている。本研究においては、 Fe_3Si , Co_2FeSi および Mn_2FeSi のバルクおよび(111)面無限系薄膜についてその電子状態を調べることでこれらの物質のスピン注入用強磁性体としての特性の評価を行なうことを目的としている。

これらの特性を評価するためのキーとなる情報は、これらの薄膜のフェルミ準位付近の電子状態である。今回は、 Fe_3Si , Co_2FeSi および Mn_2FeSi のDO3型(111)面無限系の様々な厚さの薄膜についての電子状態を密度汎関数法により計算し、フェルミ準位近傍の状態密度DOS (Density Of State)を調べ比較検討した。

【計算方法】

DO3 型 Fe_3Si の結晶構造は図1の通りである。この結晶中の黒丸サイトに Si 原子が位置し、その他のサイトに Fe 原子が位置している。 Co_2FeSi および Mn_2FeSi では、白丸と白四角のサイトの Fe 原子が、それぞれ、 Co 原子および Mn 原子に置き換わったものである。

(111)面方向の数層を考え、水平方向については周期境界条件を使い、無限系を考える。全電子計算を行なうこととして基底関数には、

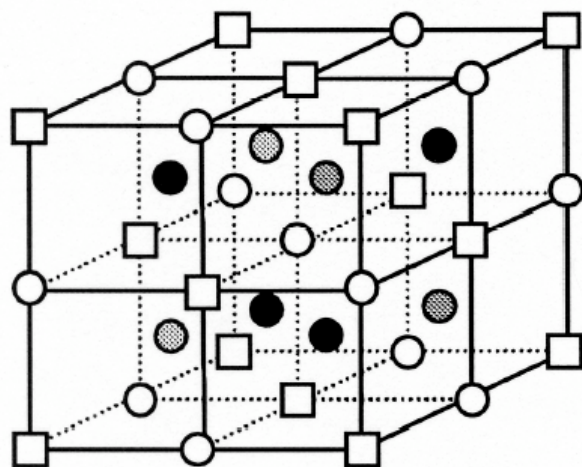


図1. DO3 型 Fe_3Si 結晶の構造

Fe, Co, Mn : (864111/64111/41),

Si : (65111/5111/1)

を使い, B3LYP による密度汎関数計算を行った.

【結果と議論】

表 1 に Mn_2FeSi , Fe_3Si および Co_2FeSi の(111)面5層モデルにおける各スピン多重度の全エネルギーを示す. Mn_2FeSi は7重項が, Fe_3Si も7重項が, Co_2FeSi は3重項が最安定となっている様子がうかがえる.

表 1. (111)面5層モデルにおける各スピン多重度の全エネルギー (a.u.)

スピン多重度	Mn_2FeSi	Fe_3Si	Co_2FeSi
1重項	---	---	-4607.1093
3重項	-4143.6562	-4369.0175	-4607.1782
5重項	-4143.7106	-4369.0343	-4607.1607
7重項	-4143.7490	-4369.0581	-4607.1518
9重項	-4143.7307	-4369.0502	-4607.1231
11重項	-4143.6983	-4368.9941	-4607.0251

図 1 にそれぞれ最安定なスピン多重度における DOS を示す. 上側がマジョリティ・スピン, 下側がマイノリティ・スピンの DOS を表わしている. Mn_2FeSi および Fe_3Si では, フェルミ準位においてマイノリティ・スピンの方に分極しているが, その分極率は大きくはない様子がうかがえる. それらに対して, Co_2FeSi では, マイノリティ・スピンのフェルミ準位付近で約 0.04 a.u. のバンド・ギャップを持ち, マジョリティ・スピンに 100%分極しており, ハーフメタルの特性を示している. これらの DOS についての層厚依存性など詳細は当日発表する.

【参考文献】

- [1] 執行大輔, 森寛敏, 吉武剛, 三好永作, 分子構造総合討論会(広島, 2004).
- [2] 執行大輔, 森寛敏, 小川哲也, 吉武剛, 三好永作, 分子構造総合討論会(東京, 2005).

