

2P136

PBC-DFT 計算によるスピントロニクス材料設計 (Ⅱ): X_2YSi ($X, Y = Mn, Fe, Co$) 薄膜の電子状態の比較

(九大院・総理工¹, 東洋鋼鉄², お茶の水女子大学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

【序】

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_2FeSi 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、盛んに研究されている^[3]。

本研究においては、この X_2YSi ($X, Y = Mn, Fe, Co$) 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_2FeSi , Co_2FeSi , Mn_2FeSi に加え Fe_2CoSi , Fe_2MnSi の (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】

X_2YSi の結晶構造は図1の通りである。X, Y が Fe の場合は DO3 型, X, Y が Mn, Co と Fe の場合は $L2_1$ 型構造である。(111) 面方向の数層 (5, 9, 13 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

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

Si:GTF (65111/5111/1)

を使い、PBE - PBE による密度汎関数計算を行った。格子定数はそれぞれの合金の実測値を使用した(Mn_2FeSi のみ Fe_2FeSi の実測値を使用)。

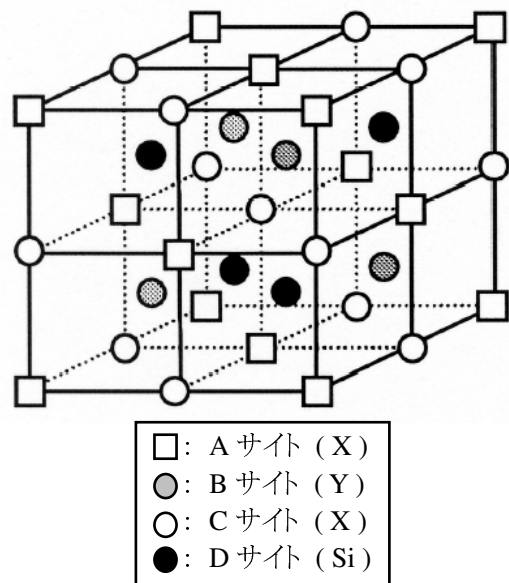


図 1. X_2YSi の結晶構造

【結果と考察】

図2に(111)面薄膜のSiが最表面である5層モデルの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 , Fe_2MnSi , Fe_2FeSi , Fe_2CoSi 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おり, $P = |(D_{\uparrow} - D_{\downarrow}) / (D_{\uparrow} + D_{\downarrow})|$ で定義される分極率はそれぞれ 21%, 57%, 45%, 86%である。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 0.5 eV のバンドギャップを持ち, マジョリティ・スピンの100%分極しており, ハーフメタルの特性を示している。5層以外の層数について同様に比較を行うと, Fe_2MnSi や Fe_2FeSi においてもマイノリティ・スピン側にギャップが確認できるが, いずれもフェルミ準位と交差していないため分極率は低くなっている。また層数が増加するにつれギャップがマジョリティ・スピン, マイノリティ・スピンの両側で存在なくなる傾向が見られた。これは、層厚による組成比の変化と関わりがあると考えられる。

最終的に, 一連の評価から Co_2FeSi (111)面5層・多重度5モデルが最もスピントロニクスデバイスに適した材料であることが明らかとなった。その他, 異なる表面層での電子状態の比較, DOS やスピン偏極率の層厚による変化などは当日発表する。

[1] 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).

[2] 小田原洋介, 執行大輔, 森寛敏, 吉武剛, 三好永作, 分子科学討論会(仙台, 2007).

[3] I. Galanakis, P. H. Dederichs, and N. Papanikolaou, Phys. Rev. B 66, 174429 (2002).

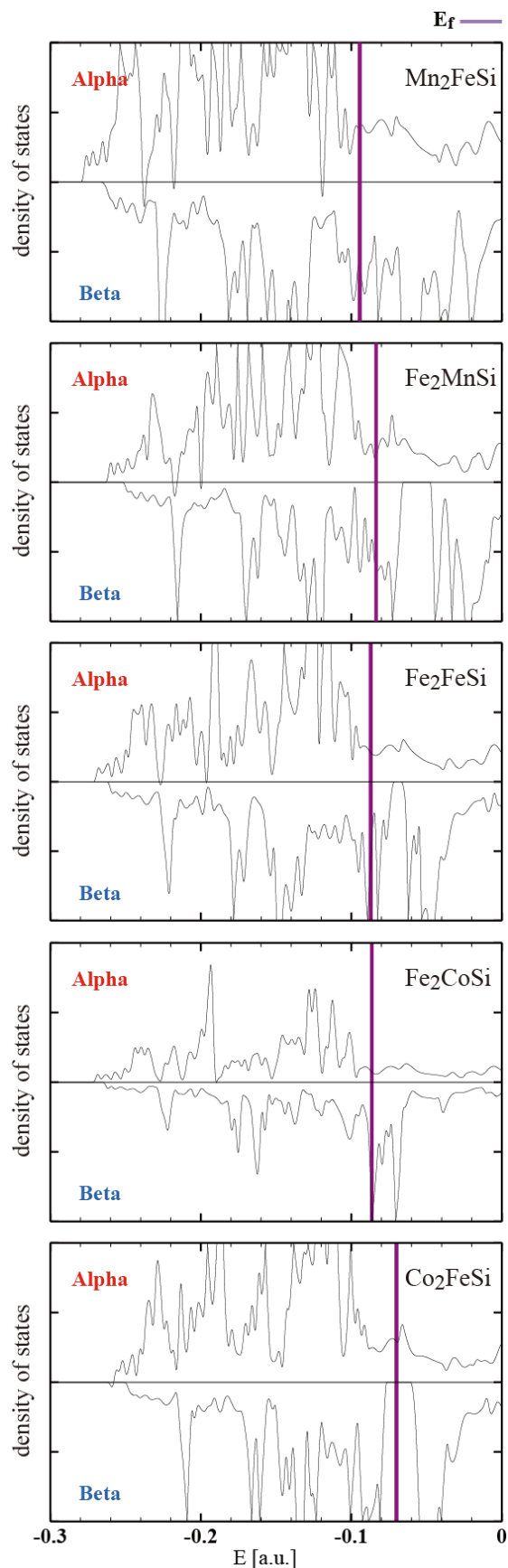


図 2. (111) 面 5 層モデルの最安定なスピン多重度における DOS