

有限温度第一原理計算と機械学習による磁性材料探索

材料工学およびその関連分野



研究者所属・職名 :
磁性・スピントロニクス材料研究センター・グループリーダー

ふりがな みうら よしお
氏名 : 三浦 良雄

主な採択課題 :

- [基盤研究\(B\)「スピン輸送現象の有限温度特性に関する理論研究」\(2020-2022\)](#)

分野 : 電気電子材料工学、スピントロニクス

キーワード : 第一原理計算、機械学習、ホイスラー合金、磁気抵抗効果、状態密度

課題

●なぜこの研究をおこなったのか？(研究の背景・目的)

非磁性体を磁性体で挟んだ構造を持つ磁気抵抗素子は、待機電力ゼロを可能にする磁気メモリや、高感度な磁場センサーに応用される。しかしながら、室温300K付近では、その出力が大きく減少してしまうのが問題となっている。その原因は、強磁性体の磁化が温度によって揺らいで強磁性体を流れる電流のスピン偏極率を減少させるためである。このような有限温度での磁気輸送特性の理論研究は、長きにわたり困難な課題となっていたが、近年、突破口が見えてきた。そこで、有限温度でかつ経験的パラメータフリーな計算手法(第一原理計算)と機械学習を合わせて、室温高スピン偏極材料の探索を行った。

●研究するにあたっての苦労や工夫(研究の手法)

有限温度での材料の磁気物性は、局所的なスピンモーメントの揺らぎを平均場的な内部磁場として温度でスケールする乱雑局所モーメント法を用いて行った。また、材料探索の効率化を行うため、ベイズ最適化を用いた。このように、有限温度第一原理計算と機械学習を組み合わせた材料探索は、今後、さまざまな物性を示す材料探索のプロトタイプとなることが期待できる。

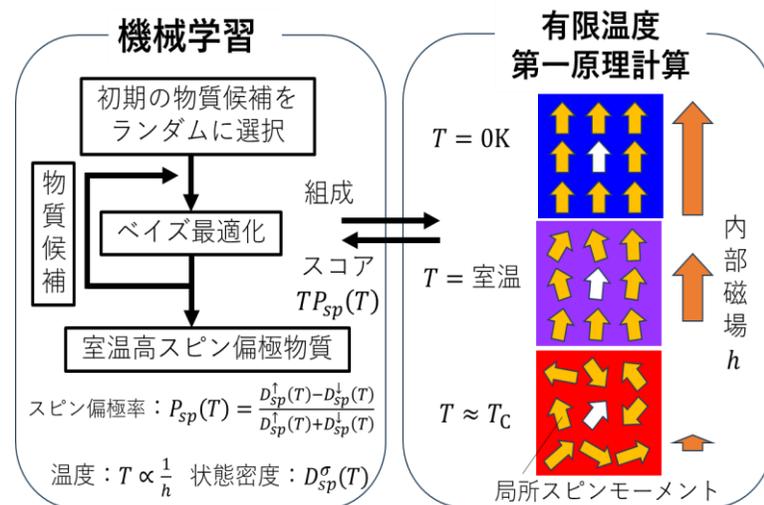


図1 有限温度第一原理計算と機械学習による材料探索のイメージ図

有限温度第一原理計算と機械学習による磁性材料探索

材料工学およびその関連分野

研究成果

●どんな成果がでたか？どんな発見があったか？

高いスピン機能特性を有するホイスラー合金(右図)と呼ばれる材料において、本研究手法を適用し、新材料の理論提案に成功した。具体的には、まずホイスラー合金組成 A_2BCI に対してAサイトにはFe, Co, Ru, Rh、BサイトにはSc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Y, Zr, Nb, Mo、CサイトにAl, Si, P, Ga, Ge, As, In, Sn, Sbを考慮し、更に材料探索の領域を広げるために、BサイトとCサイトは元素を異なる2種類の元素を混合させた $A_2(B_xB'_{1-x})(C_yC'_{1-y})$ に対して材料探索を行った。探索の結果AサイトにCo、BサイトにFeかMnを有する物質のみが有限温度で高いスピン分極率を示すことがわかった。右図に示すように、AサイトにFeやRhを有するホイスラー合金はスピン分極率の温度依存性が大きいいため、室温では使えない材料といえる。特に室温で高いスピン分極率を示す有望な新しいホイスラー合金として $Co_2Fe(Al, Sb)$ 、 $Co_2Fe(Ga, In)$ 、 $Co_2Mn(Ga, As)$ を提案した。 $Co_2Fe(Al, Sb)$ や $Co_2Fe(Ga, In)$ は非磁性単体金属Agと格子整合性がよいため巨大磁気抵抗素子の強磁性層として利用できる。また $Co_2Mn(Ga, As)$ はGaとAsを含ことからGaAsへのスピン注入源として期待できる(Phys. Rev. Mat. **6**, (2022) L091402.)。

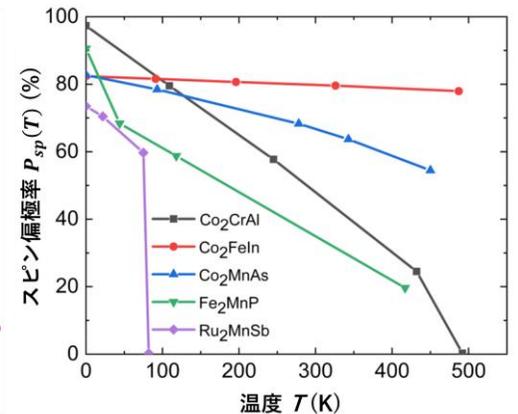
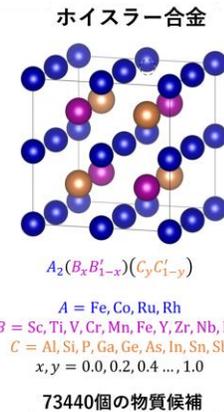


図2 ホイスラー合金の構造モデルとスピン偏極率の温度依存性

今後の展望

●今後の展望・期待される効果

今後は、巨大磁気抵抗素子やスピン注入素子の強磁性電極として用いたデバイスを実験において作製し、スピデバイスとしての有用性を検証することが重要である。このような有限温度での理論的な材料探索を、室温以上の特性が特に重要となる車載応用の磁気センサーやより高感度が求められる生体磁気センサーの開発などに活かして行きたい。

磁気抵抗素子 磁化の向きの変化で抵抗変化

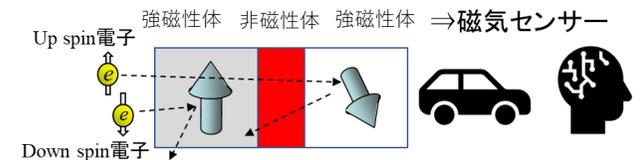


図3 磁気抵抗素子とその応用例