

## MgOベースd<sup>0</sup>強磁性体の計算機マテリアルデザイン

### Computational Materials Design of MgO-based d<sup>0</sup> Ferromagnets

清家 聖嘉<sup>1,2</sup>, 福島 鉄也<sup>1</sup>, 佐藤 和則<sup>1</sup>, 吉田 博<sup>1</sup>

Masayoshi Seike<sup>1,2</sup>, Tetsuya Fukushima<sup>1</sup>, Kazunori Sato<sup>1</sup>,  
Hiroshi Katayama-Yoshida<sup>1</sup>

阪大基礎工<sup>1</sup>, シスメックス中研<sup>2</sup>

Osaka Univ. Grad. School of Eng. Sci. <sup>1</sup>, Sysmex Cent. Research Lab. <sup>2</sup>

d<sup>0</sup>強磁性体は、遷移金属や希土類金属などの磁性元素を全く含むことなく、強磁性を発現する物質を指し、近年、大きな注目を集めている。我々はこれまで、Si又はGeがドーピングされたK<sub>2</sub>S[1,2]、C又はNがドーピングされたCaO、MgO、SrOなどの物質[2,3]において強磁性が発現することを第一原理計算[4]に基づいて示しており、Mg(O,N)では強磁性を発現することが後の実験で実証されている。本研究では、多階層連結型シミュレーション[4]に基づき、Mg(O,N)、(Mg,V<sub>Mg</sub>)Oの磁気特性を包括的に解析した。先ずドーパント間の原子対相互作用を求め、モンテカルロシミュレーションを行なうことにより、Mg(O,N)、(Mg,V<sub>Mg</sub>)Oでは、ドーパントがナノスケールでスピノーダルナノ分解し、超常磁性による高いブロッキング温度(High-T<sub>B</sub>)を有するd<sup>0</sup>強磁性体となり得ることを示した。次いでドーパントを均一に分布させた条件下でのキュリー温度の予測結果[5,6]と併せて考察することにより、最近実験的に報告されている13%のNがドーピングされたMg(O,N)及び数%の格子欠陥が導入された(Mg,V<sub>Mg</sub>)Oでの室温強磁性的な振る舞いは、スピノーダルナノ分解による超常磁性的なブロッキング現象を捉えたものであることを示した。更にd<sup>0</sup>強磁性は、p軌道由来の狭いバンドが部分的に電子で占有されることで自発的な局所磁気モーメントを形成し、スピン分局した電子が遍歴することによる運動エネルギーの利得から強磁性状態が安定化していると考えられることで統一的に理解できることを示した。本研究の意義は、(i) スピノーダルナノ分解を利用し、High-T<sub>B</sub>を目指したd<sup>0</sup>強磁性体のマテリアルデザインが行われている点、(ii) MgOベースd<sup>0</sup>強磁性の発現機構及び磁気特性が明らかにされている点にある。これら一連の成果は、d<sup>0</sup>強磁性に対する本質的な理解を与えると同時に、磁性元素を用いない環境調和性の高いスピントロニクス材料創出への活路を拓くものである。

#### 【参考文献】

- [1] M. Seike, et al., Jpn. J. of Appl. Phys., **43**, L 579 (2004).
- [2] H. Yoshida et al., P2006-510484 (registered).
- [3] K. Kenmochi, et al., J. Phys. Soc. Jpn., **73**, 2952 (2004).
- [4] K. Sato, et al. Rev. Mod. Phys. **82**, 1633 (2010).
- [5] M. Seike, et al., Physica B (2011 [in press])
- [6] M. Seike, M., Jpn. J. Appl. Phys. **50**, 090204 (2011).