

## 磁性半導体に対する新しい数値解析法の開発

スピントロニクスに代表される次世代デバイスを担う材料として、磁性半導体が注目されている。特に、電子の電荷、スピン両方の自由度をコントロールするためには、磁性半導体の磁氣的性質の制御、とりわけ磁性不純物間の強磁性秩序の実現が重要になる。現在までにいくつかの強磁性半導体が実験的に報告されているが、そのキュリー転移温度は室温に比べて非常に低く、例えば(Ga,Mn)As で 140K 程度である。次世代デバイスを実現するためには、室温で強磁性になるような半導体の出現が望まれており、数値的方法を含めた物質設計の担う役割は大きい。理論的には、第一原理に基づく数値計算により解析が行われているが、電子間相互作用を近似的に扱うことが多い。しかしながら、強磁性半導体のキュリー温度、磁氣的な臨界現象などを議論するためには、電子間相互作用の正確な扱いが必要である。一方、電子間相互作用を正確に扱う場合、磁性半導体を簡単なモデルにより表すことが多く、現実的な系での議論や物質設計は困難であった。

最近、東北大学金属材料研究所の大江純一郎・前川禎通氏らの研究グループは、東京大学工学研究科の中村和磨・有田亮太郎氏の研究グループと共同で、上述の磁性半導体に対する新しい数値解析方法を開発した。この方法を用いることで、現実的な物質中の磁氣的性質を、電子間相互作用を含めて正確に解析することが可能になった。この結果は、日本物理学会が発行する英文誌「Journal of the Physical Society of Japan」の 2009 年 8 月号に掲載される。

本研究で開発された数値計算法は、従来の 2 種類の計算法、密度汎関数法と量子モンテカルロ法のそれぞれの長所を利用することで行われる。計算ではまず、密度汎関数法を用いて、現実の物質構造における各原子・各軌道のエネルギー、軌道間の混成エネルギーを求める。次に、求められたエネルギーを、磁性不純物を含むアンダーソン模型に代入し、量子モンテカルロ法を用いて、物理量の量子的、熱力学的な平均を計算する。具体的には、磁性不純物における局在磁気モーメント、磁性不純物間の磁気相関、電気伝導を担うキャリアの磁氣的性質や実空間分布などが求められる。量子モンテカルロ法を用いることで、電子間相互作用を正確に扱うことができ、さらには今まで困難であった物理量の温度依存性も議論することが可能である。

論文では、この計算法の有効性を示すために、(Ga,Mn)As に対する解析が行われた。この物質中では、母物質 GaAs に添加された Mn 不純物が強磁性秩序を持つことが知られており、III-V 族磁性半導体中では最も高いキュリー温度 (140K) を示す。GaAs はジंकブレンド型の結晶構造をしており、添加された Mn 原子は Ga 原子と置換される (図 1)。この原子置換はランダムに行われ、低濃度の Mn 添加では、Mn 原子間に数格子定数程度の距離が開く。この長距離間の磁気相関を媒介するものとして、Mn 原子の添加で同時に導入されたホールキャリアが重要な役割を果たすことが指摘されている。また、Mn 添加により、フェルミエネルギーや、軌道混成による不純物準位がどこに現れるかなどが未解決の問題

であり、詳細な解析が望まれている。新しい計算法を用いた結果、Mn 添加による不純物準位が荷電子帯の上 0.1eV 付近に現れることが示された。また、フェルミエネルギーが荷電子帯と不純物準位の間にある場合、Mn 不純物間に長距離の強磁性磁気秩序が現れることが明らかになった (図 2)。強磁性秩序は低温になるほど大きくなり、キュリー温度付近では 8 近接原子間の距離まで強磁性秩序が保たれることが示された。さらに、強磁性の起源として、キャリアーと Mn 原子間の反強磁性結合が原因であることが明らかになった。計算結果は実験結果をよく再現しており、今回提案された方法が磁性半導体を解析する有効な手段であることを示している。

本研究で示された結果は、磁性半導体の理論的解析に新しい展開を与えており、多くの研究者の注目を集めている。高いキュリー温度を持つ強磁性半導体の物質設計や、強磁性半導体における磁氣的臨界現象に対しても有効な解析ができるものと期待される。

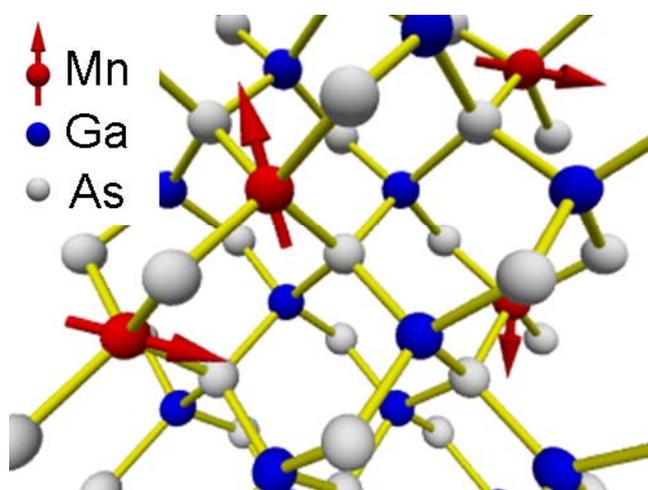


図 1 : (Ga,Mn)As ジンクブレンド構造。Ga はランダムに Mn と置換される。

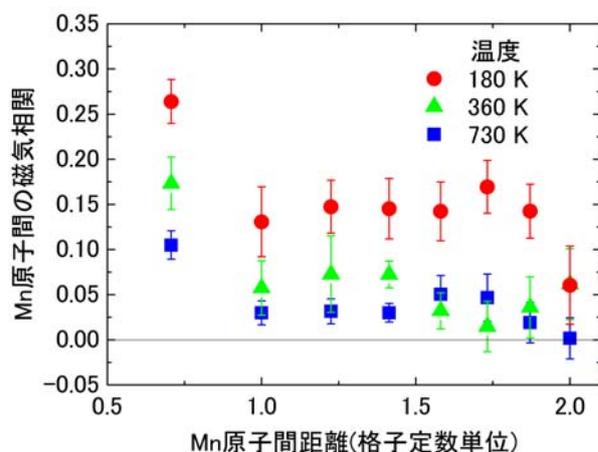


図 2 : 二つの Mn 磁性不純物間のスピン相関。横軸は Mn 間の距離。強磁性秩序が長距離にわたって見られ、低温になるほど強磁性秩序は大きくなる。

論文掲載誌: J. Phys. Soc. Jpn. **78** (2009) No. 8, p.083703

電子版: <http://jpsj.ipap.jp/link?JPSJ/78/083703>

<情報提供: 大江純一郎、前川禎通 (東北大金研) >