

半導体スピントロニクスのための計算機材料デザイン

佐藤 和則

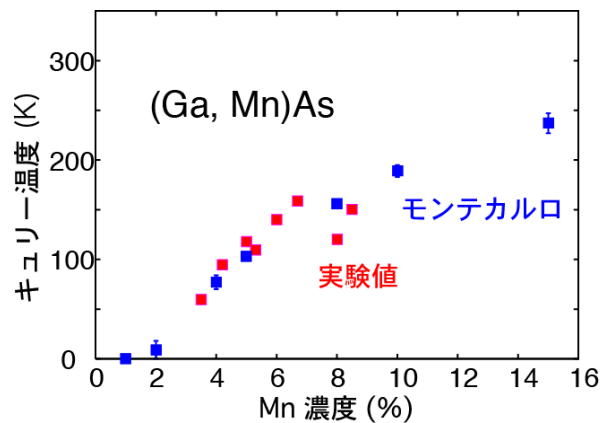
大阪大学大学院工学研究科材料生産科学専攻 (ksato@mat.eng.osaka-u.ac.jp)

電子のスピンを積極的に制御し情報処理に利用することで新しい次世代エレクトロニクスを開拓しようという試みが続けられており、半導体スピントロニクスという新しい研究分野として確立しつつある。基本的な材料と考えられている磁性半導体(Dilute Magnetic Semiconductor; DMS)は、その強磁性をキャリア密度を制御することで変化させることの出来る機能材料であるが、キュリー温度の高い DMS を合成することが材料開発の課題となっている。我々のグループでは第一原理計算に基づき DMS のキュリー温度を精密に計算する方法を開発し半導体スピントロニクスのための材料デザインに活用してきた [1]。

本講義では、Korringa-Kohn-Rostoker coherent potential approximation (KKR-CPA)法による電子状態計算の結果を解析し、DMS の強磁性のメカニズムについて議論した後、DMS 中の磁性不純物間に働く有効交換相互作用の計算とモンテカルロ法を使ったキュリー温度の精密計算について、対応する実験との比較を行いつつ議論する [1]。この方法によると図に示すように、典型的な DMS (例えば、Mn 添加 GaAs) についてそのキュリー温度を第一原理から正確に再現できることが解っている。

つぎに、近年実験的に検証が進んできた DMS の相分離と磁性の関係について整理し、第一原理計算に基づく相分離のシミュレーション結果と比較し、相分離が電子状態におよぼす効果について議論する [2]。

上記のシミュレーションによると、DMS では磁性不純物が希薄にしか存在しないため、パーコレーションの効果により特に低濃度領域で強磁性が抑制されることが理解される。この知見に基づき、高いキュリー温度を持つ DMS の合成法として、同時ドーピングにより磁性不純物を高濃度に添加する方法を提案する。



図： Mn 添加 GaAs のキュリー温度の計算結果と実験値の比較 (参考文献[1])

References.

- [1] K. Sato, L. Bergqvist, J. Kudrnovský, P. H. Dederichs, O. Eriksson, I. Turek, B. Sanyal, G. Bouzerar, H. Katayama-Yoshida, V. A. Dinh, T. Fukushima, H. Kizaki, and R. Zeller, *Rev. Mod. Phys.* **82**, (2010) 1633.
- [2] T. Dietl, K. Sato, T. Fukushima, A. Bonanni, M. Jamet, A. Barski, S. Kuroda, M. Tanaka, Pham Nam Hai, and H. Katayama-Yoshida, *Rev. Mod. Phys.* **87**, (2015) 1311.