



Title	First-Principles Study on Dilute Magnetic States and Half Metallicity in Chalcopyrite Semiconductors
Author(s)	Shahjahan, Mohammad
Citation	大阪大学, 2013, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/34052
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

Abstract of Thesis

Name (Mohammad Shahjahan)

Title

First-Principles Study on Dilute Magnetic States and Half Metallicity in Chalcopyrite Semiconductors

(カルコパイライト半導体における希薄磁気状態とハーフメタル性に関する第一原理的研究)

Abstract of Thesis

Electronic states, band structures, dilute magnetic states and magnetic properties of group I-III-VI₂ based transition metal (TM) doped chalcopyrite compounds A(BX)C₂ and A(BXY)C₂ are calculated using the Green's function method of Korringa-Kohn-Rostoker and full-potential linearized augmented plane wave method, where A=Cu, Ag, B=Al, In, C=S, Se and X, Y = Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, and Ni. Single impurity doped compounds A(BX)C₂ exhibit a stable ferromagnetic (FM) states and half metallicity relative to a disordered spin moment (DSM) state, when X=Ti, V, Cr, and Mn at low-concentration of each TM ion are incorporated at host cation B³⁺ site. Some of them exhibit magnetic transition temperatures above room temperature. On the contrary, in Fe, Co, and Ni doped alloys, instability of FM states to DSM is obtained. The situation is contrasting for a simultaneous doping of a TM pair. Codoped compounds A(BXY)C₂ can exhibit a FM, ferrimagnetic (FiM) and antiferromagnetic (AF) states depending on the orientation of the local spins and net moments. A parallel order of spins determines FM states, whereas the antiparallel arrangements give rise to FiM states and especially AF states are obtained for null net moments. Some of the FiM and AF states are stable energetically relative to a DSM state and depict the half metallicity when TM pairs at equal concentrations and with *d* electrons occupancy less and more than half filled are implanted at host cation B³⁺ site. In some other codopant cases, instability of FiM states to DSM is obtained. Total energy, electronic charge density, magnetic critical temperatures, net moments, local spin moments, fixed spin moments, spin-orbit interaction properties, hyperfine fields, and enthalpy of formations are calculated. Calculated dilute magnetic states, half metallicity and other several magnetic properties imply that TM doped chalcopyrite type compounds A(BX)C₂ and A(BXY)C₂ are promising for respective spintronics applications.

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏 名 (Mohammad Shahjahan)			
	(職)	氏 名	
論文審査担当者	主 査	教 授	小口 多美夫
	副 査	教 授	小川 哲生
	副 査	教 授	川村 光
	副 査	教 授	黒木 和彦
	副 査	准教授	白井 光雲

論文審査の結果の要旨

次世代のデバイス応用を目指してスピントロニクス材料が注目を集めている。ここでは、従来の電流による信号処理に代わり損失の少ないスピン流がその担い手となる。1987年のGrünbergとFertらによる磁性多層膜における巨大磁気抵抗効果 (GMR) の発見以降活発な研究がなされ、特に半導体中への磁性イオンのドーピングによる磁気秩序およびハーフメタル性の発現に関する研究はOhnoらの先駆的な研究が発端となり、従来の半導体技術との接続性の良さも相まってスピントロニクス分野の一つの潮流となっている。しかしながら、ここでの一番の問題は室温以上で磁気秩序およびハーフメタル性を示す物質がほとんど無いことにある。本論文「First-Principles Study on Dilute Magnetic States and Half Metallicity in Chalcopyrite Semiconductors (カルコパイライト半導体における希薄磁気状態とハーフメタル性に関する第一原理的研究)」では、I-III-VI₂型カルコパイライト半導体への遷移金属磁性イオンのドーピングによりいくつかの強磁性ハーフメタルおよび反強磁性ハーフメタルの室温以上での発現を第一原理計算に基づき理論予測した。これまで限られたカルコパイライト半導体系での強磁性もしくは反強磁性発現に関する第一原理計算の報告はなされていたが、4種類のI-III-VI₂型カルコパイライト半導体に対して、強磁性と反強磁性の安定性を調べ、かつハーフメタル性を包括的に議論した研究としてたいへん意義のある研究である。加えて、ドーピングする遷移金属磁性イオン種によってダブル交換相互作用、pd交換相互作用、超交換相互作用の異なる微視的機構が支配的となっている磁気安定性機構がそのドーピング量依存性から明らかにされた。本研究に用いた第一原理計算手法は一般化勾配近似の範囲での密度汎関数理論に基づくKorringa-Kohn-Rostoker (KKR) グリーン関数法であり、ドーピングされた不規則系を合金系の扱いで有効な手法であるコヒーレントポテンシャル近似で扱った。このKKRグリーン関数法ではマフィンティン (MT) ポテンシャル近似を付加的に用いるため原子充填率の低い多元化合物構造でのその近似の粗さが問題とされるが、原子間位置への適切なMT球の挿入により仮想的に最密構造とすることでこれを解決し、フルポテンシャル法の併用によって計算精度、モデルの検証を行った。

以上のように、本論文はカルコパイライト半導体への遷移金属磁性イオンのドーピングによる希薄磁気状態とハーフメタル性の発現機構を解明し、学術的にもスピントロニクスへの応用面からも重要な研究として位置づけられる。よって、本論文は博士 (理学) の学位論文として十分価値あるものと認める。