The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	First-principles calculation of transport properties of metals, alloy and semiconductors
Author(s)	米原, 仁
Citation	大阪大学, 2005, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/45635
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

【33】

氏　　名	米原　仁（よねはら　ひとし）
博士の専攻分野の名称	博　士（理　学）
学　位　記　番　号	第　１９１８７　号
学位授与年月日	平成 17 年 3 月 25 日
学位授与の要件	学位規則第４条第１項該当 理学研究科物理学専攻
学　位　論　文　名	First-Principles calculation of transport properties of metals, alloy and semiconductors **（金属、合金および半導体の伝導特性の第一原理計算）**
論　文　審　査　委　員	（主査） 教　授　赤井　久純 （副査） 助教授　Keith Slevin　教　授　田島　節子　教　授　河原崎修三 教　授　吉田　博

論　文　内　容　の　要　旨

スピントロニクスとは電子の自由度だけでなくスピンの自由度も利用する新しいエレクトロニクスであり、近年この分野においては多くの研究が実験と理論の両面から活発に行われてきている。またこの分野では、その興味は物性に向けられるのみにとどまらず、新しいデバイス開発等にも向けられており、その成果は基礎物理学のみならず産業分野においても大きな貢献をなしてきている。スピントロニクスの分野においてはスピン自由度も利用する新しいデバイスの材料物質として様々な物質が提案されている。その中でもキャリア誘起強磁性を示す half-metallic な物質である希薄磁性半導体は、それらの性質に加え非常に高度な加工技術の存在もあり、スピントロニクスデバイスの材料物質として最も期待されているものの一つである。その磁性や輸送特性には基礎物性の面においても工業的な応用の面においても非常に大きな興味がもたれている。

希薄磁性半導体についてはこれまで多くの第一原理計算による研究がなされ、電子状態の詳細な解析や磁性のメカニズムの解明が行われてきた。しかしその一方で希薄磁性半導体の伝導特性についてはこれまでほとんど計算がなされてこなかった。そこで我々は赤井によって開発された KKR-CPA-LDA 第一原理計算コード上に久保－Greenwood 公式を用い電気伝導度を計算するコードを実装した。そしてそのコードをもちいて種々の物質の電気伝導率を計算することによって電子状態と電気伝導率の一般的な関係を議論するともに、希薄磁性半導体の電気伝導率の計算をおこないその性質を明らかにした。

まず我々はよい金属であるナトリウムの電気伝導率を計算し、それを自由電子系の厳密な値と比較することにより我々の手法の信頼性を確認した。また銅－プラチナ合金と鉄－コバルト合金の電気抵抗率の濃度依存性を計算して実験値と比較し、我々の手法により計算された電気抵抗率の濃度依存性が実験のそれとよく一致することを確認した。

次に我々は電子状態と電気伝導率の間の関係を、特に s、p、d などの電子状態がどのように散乱に寄与するのかに着目して解析した。その結果 d 状態が主に散乱に寄与し、系の緩和時間は主に d 状態によって決定されることがわかった。

最後に我々は希薄磁性半導体の電気伝導率を計算した。絶縁体に遷移金属をドープしていく場合では、不純物濃度を増やしていったときキャリアの増加、不純物の d 状態の増加による散乱の増加、不純物散乱の増加がおこりそれぞ

れ電気伝導率を上げる、下げる、下げる効果を及ぼす。希薄磁性半導体ではこれらの３つの効果が競合した結果、電気伝導率の不純物濃度依存性が決まっていると考えられる。我々の計算の結果、III-V 族半導体をベースにした（Ga, Mn）As、（In, Mn）As においては電気抵抗率が不純物濃度の増加と共に単調に減少することがわかった。これはこの系においてはキャリアの増加による効果が主に輸送現象を決めているためである。一方で II-VI 族半導体をベースにした（Zn, Cr）S においてはそれら３つの効果が競合した結果、電気抵抗率の濃度依存性は不純物濃４％の付近に抵抗率の極大値をもつ複雑な振る舞いを示すことが明らかになった。

論文審査の結果の要旨

スピントロニクスとは電子の自由度だけでなくスピンの自由度も利用する新しいエレクトロニクスであり、近年この分野においては多くの研究が実験と理論の両面から活発に行われてきている。スピントロニクスの分野においてはスピン自由度も利用する新しいデバイスの材料物質として様々な物質が提案されている。その中でもキャリア誘起強磁性を示す half-metallic な物質である希薄磁性半導体はスピントロニクスデバイスの材料物質として最も期待されているものの一つであり、その磁性や輸送特性には基礎物性の面においても応用の面においても非常に大きな興味がもたれている。

米原君は KKR-CPA-LDA 第一原理計算コード上に久保－Greenwood 公式を用い電気伝導度を計算するコードを実装した。そしてそのコードをもちいて種々の物質の電気伝導率を計算することによって電子状態と電気伝導率の一般的な関係を議論するともに、希薄磁性半導体の電気伝導率の計算をおこないその性質を明らかにした。

同君は、まず、よい金属であるナトリウムの電気伝導率を計算し、それを自由電子系の厳密な値と比較することにより我々の手法の信頼性を確認した。また銅－プラチナ合金と鉄－コバルト合金の電気抵抗率の濃度依存性を計算して実験値と比較し、計算された電気抵抗率の濃度依存性が実験のそれとよく一致することを確認した。

次に同君は電子状態と電気伝導率の間の関係を、特に s、p、d などの電子状態がどのように散乱に寄与するのかに着目して解析した。その結果 d 状態が主に散乱に寄与し、系の緩和時間は主に d 状態によって決定されることそ示した。

最後に同君は希薄磁性半導体の電気伝導率を計算した。絶縁体に遷移金属をドープしていく場合では、不純物濃度を増やしていったときキャリアの増加、不純物の d 状態の増加による散乱の増加、不純物散乱の増加がおこりそれぞれ電気伝導率を上げる、下げる、下げる効果を及ぼす。希薄磁性半導体ではこれらの３つの効果が競合した結果、電気伝導率の不純物濃度依存性が決まっていると考えられる。同君の計算の結果、III-V 族半導体をベースにした（Ga, Mn）As、（In, Mn）As においては電気抵抗率が不純物濃度の増加と共に単調に減少することを示した。これはこの系においてはキャリアの増加による効果が主に輸送現象を決めているためである。一方で II-VI 族半導体をベースにした（Zn, Cr）S においてはそれら３つの効果が競合した結果、電気抵抗率の濃度依存性は不純物濃４％の付近に抵抗率の極大値をもつ複雑な振る舞いを示すことが明らかにした。

本研究は、第一原理計算によって輸送現象を研究し新しい知見を得た意味で高く評価される。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。