The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	Ab initio and Statistical Investigations of Electronic Structure and Finite Temperature Magnetism in Dilute Magnetic Semiconductors
Author(s)	福島, 鉄也
Citation	大阪大学, 2008, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/48801
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

【32】

氏　　名	福　島　鉄　也（ふくしま　てつや）
博士の専攻分野の名称	博　士（理　学）
学　位　記　番　号	第　２１７４７　号
学位授与年月日	平成 20 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	*Ab initio* and Statistical Investigations of Electronic Structure and Finite Temperature Magnetism in Dilute Magnetic Semiconductors **（第一原理計算と統計力学的手法を用いた希薄磁性半導体の電子構造と有限温度磁性の研究）**
論　文　審　査　委　員	（主査） 教　授　吉田　　博 （副査） 教　授　赤井　久純　　教　授　川村　　光　　教　授　野末　泰夫 准教授　森川　良忠

論　文　内　容　の　要　旨

電子の電荷とスピンを半導体内で同時に利用する半導体スピントロニクスは我々が現在使用している Si-CMOS デバイスに変わる次世代のデバイスを実現する技術の一つとして期待されている。半導体スピントロニクスを実現するマテリアルとして半導体に磁性不純物を少量ドープした希薄磁性半導体が注目されており、これまで希薄磁性半導体の強磁性特性を利用してスピンの生成、注入、蓄積などについて積極的に研究されてきた。希薄磁性半導体を用いて半導体スピントロニクスを実現するために最も重要な点は強磁性転移温度（キュリー温度）が少なくとも２、３倍高い希薄磁性半導体を合成することであるが、試料の取り扱いの難しさや強磁性の原因がまだ議論中でありはっきりしていないこともあって、室温をはるかに超えるキュリー温度を持つ希薄磁性半導体の作成には成功していない。

本研究の目的は希薄磁性半導体の電子状態と強磁性機構を第一原理計算と統計力学的手法を用いて解明することであり、解析した電子状態と磁性状態を基に高いキュリー温度を持つ希薄磁性半導体のデザインや希薄磁性半導体を利用した新奇なデバイスの提案を行う。電子状態は密度汎関数理論と局所密度近似に基づいた Korringa-Kohn-Rostoker（KKR）法を用いて計算を行い、また磁性不純物の配置平均は精度の高いシングルサイト近似であるコヒーレントポテンシャル近似（CPA）によって取り扱う。我々はまず希薄磁性半導体における磁性原子間の交換相互作用を Liechtenstein の方法により計算した。計算された交換相互作用とモデルを用いて、希薄磁性半導体のキュリー温度をモンテカルロ法により見積もり、スピン波励起を Tyabrikov の方法によって解析した。特にⅡ-Ⅳ族希薄磁性半導体（Zn，Cr）Te において見積られたキュリー温度は実験結果と正確に一致し我々の計算方法の妥当性が証明されている。

さらに、希薄磁性半導体内の磁性不純物の不均一性が磁性状態にどのように影響を与えるか調べた。実験において希薄磁性半導体は非平衡状態の結晶成長法によって作成されるため、スピノーダル分解により磁性不純物が母体半導体内で不均一に分布すると考えられる。我々は実際に希薄磁性半導体内における磁性原子の混合エネルギーそして磁性原子間の有効対相互作用を第一原理的に計算し原子間相互作用が引力的であることを示し磁性不純物が不均一に分布した方がエネルギー的により安定であることを示した。次に、計算された有効対相互作用とモンテカルロ法を用

いることによりスピノーダル分解のシミュレーションを行い、分子線エピタキシー法のような layer-by-layer の２次元の結晶成長では希薄磁性半導体内の磁性原子が結晶成長方向に準一次元的なクラスターを形成することを証明した。我々がこの結果を報告して以来、数々の実験者が透過電子顕微鏡や電子エネルギー損失分光法を用いて準一次元構造を観測し、我々のシミュレーション結果を支持している。

論文審査の結果の要旨

半導体をベースとして、電子のもつ電荷に加えて、スピン自由度を制御することにより、超高速（THz）、超高集積（Tbit/inch^2）、および、超省エネルギー（不揮発性）の新しいクラスのスピンをベースとナノエレクトロニクスの構築が社会から期待されているが、現実の半導体をベースとした（Ga，Mn）As などの希薄磁性半導体の強磁性転移温度（キュリー温度：Tc）は 170 K 程度であり、高い強磁性転移温度を持つ希薄磁性半導体のデザインと実証が期待されていた。福島鉄也氏は、希薄磁性半導体の電子状態と強磁性機構を第一原理計算と統計力学的手法を用いて解明し、解析した電子状態と磁性状態を基に高いキュリー温度を持つ希薄磁性半導体のデザインや希薄磁性半導体を利用した新奇なナノ超構造マテリアルとデバイスの提案をおこなった。第一原理電子状態計算を密度汎関数理論と局所密度近似に基づいた Korringa-Kohn-Rostoker（KKR）法を用いて計算を行い、また磁性不純物の配置平均は精度の高いシングルサイト近似であるコヒーレントポテンシャル近似（CPA）によって取り扱った。希薄磁性半導体における磁性原子間の交換相互作用を Liechtenstein の方法により計算し、計算された交換相互作用とモデルを用いて、希薄磁性半導体のキュリー温度をモンテカルロ法により見積もり、THz のスピン波励起を Tyabrikov の方法によって解析した。特にⅡ-Ⅳ族希薄磁性半導体（Zn，Cr）Te において見積られたキュリー温度（Tc）は 20％Cr ドープで 300 K であり、室温を超えていたが、理論予測に基づいて行われた実証実験の結果と定量的に良く一致し、室温強磁性半導体の実現とともに、Tc の計算方法の妥当性が証明された。さらに、希薄磁性半導体内の磁性不純物の不均一性が強磁性状態に与える結晶成長の次元依存性（３次元及び２次元）と自己組織化によるナノ超構造の形状制御機構を明らかにした。熱平衡状態でも遷移金属不純物の固溶度は低く、実験において希薄磁性半導体は非平衡状態の結晶成長法によって作成されるため、スピノーダル分解により磁性不純物が母体半導体内でナノスケールサイズの不均一性をもつ超構造を形成する可能性を予測した。実際に希薄磁性半導体内における磁性原子の混合エネルギーそして磁性原子間の有効対相互作用を第一原理計算に基づいて計算し、原子間相互作用が引力的であることを示し、磁性不純物がナノスケールで不均一に分布した方がエネルギー的により安定であることを示した。さらに、計算された有効対相互作用とモンテカルロ法を用いることによりナノ・スピノーダル分解のシミュレーションを行い、分子線エピタキシー法のような layer-by-layer の２次元の結晶成長では希薄磁性半導体内の磁性原子が結晶成長方向に自己組織化によって、一般的に、準一次元的なナノクラスターが形成されることを理論的に予言した。福島鉄也氏がこのようなスピノーダル分解によるナノ超構造のマテリアルデザインを報告して以来、多くの実験者が高分解能透過電子顕微鏡や電子エネルギー損失分光法を用いて実験を行い、実際に準一次元構造をもつナノ超構造マグネットが観測された。その結果、スピノーダル分解によるナノ超構造創成の世界的なブームに発展した。さらに、ナノ超構造による擬一次元ナノマグネットの磁気異方性に起因する磁化のヒステレシスと高いブロッキング温度を予測し、実証された。また、トップダウン・ナノテクノロジーによるナノ種付け（nano-seeding）と遷移金属不純物濃度を結晶成長中に制御することによって、ボトムアップ・ナノテクノロジーにおける自己組織化によるナノ超構造の形状制御が可能なことを示し、デバイス応用への可能性をもつナノ超構造創製法をデザインし、実証実験が行われた。これらのナノ超構造のマテリアル・デバイスデザインは、半導体ナノスピントロニクスを現実化するための基礎的デザインとして、ナノサイエンスの基礎やナノテクノロジーにも大きな寄与が認められる。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。