

格子間 Cu 同時ドーピング法による高キュリー温度をもつ(Ga,Mn)As の物質設計

Material design of high- T_C (Ga,Mn)As by interstitial Cu codoping method

藤井将

Hitoshi Fujii

大阪大学大学院基礎工学研究科物質創成専攻

Department of Materials Engineering Science, Graduate School of Engineering Science,
Osaka University, Machikaneyama 1-3, Toyonaka Osaka 560-8531

希薄磁性半導体(DMS)の一つである(Ga,Mn)Asは、III-V族化合物半導体GaAsに磁性不純物としてMnを添加した物質であり、MnはGaとランダムに置換しアクセプターとしてホールを供給し、さらにその置換 Mn_{Ga} の局所磁気モーメントはホールを介したp-d交換相互作用により強磁性的に配向することが知られている。今迄の所、その強磁性転移温度(T_C)はせいぜい170Kと低い値であり、このことが(Ga,Mn)Asをスピントロニクスデバイスへ応用する際のボトルネックとなっている。実験によると、(Ga,Mn)Asの T_C はホール濃度、つまり、 Mn_{Ga} の濃度に依存することが示されており、また、理論的には、約30%の添加で468Kのキュリー温度が予測されている[1]。しかしながら、 Mn_{Ga} のGaAsに対する溶解度は低く、非平衡結晶成長法であっても8%程度しか添加出来ない事が実験的に知られている。

そこで、本研究では Mn_{Ga} の溶解度を上昇させる方法として「格子間Cu同時ドーピング法」を提案する[2]。この手法は以下の2ステップから成る。i) まず、 Mn_{Ga} に加えて、さらに格子間位置にCuを同時にGaAsに添加し、キャリア間の補償作用によるエネルギー利得で溶解度を上昇させる。ii) 次に、その格子間 Cu_i を結晶から追い出すことを考える。これは補償作用により失われたホール誘起強磁性を復活させる為である。

実際、Korringa-Kohn-Rostoker coherent potential approximation (KKR-CPA-LDA)法[2]に基づく第一原理計算の結果、GaAsの格子間位置に Cu_i などのドナーを同時ドーピングした系では Mn_{Ga} の単ドーピングの場合に比べ、 Mn_{Ga} のGaAsに対する混合のエネルギーが下がることが示され、 Mn_{Ga} は500Kの成長温度で20%以上溶解すると見積もられた。

また、(Ga,Mn)As中の Cu_i の原子拡散の様子がprojected augmented wave (PAW)法[3]によって調べられた。 Cu_i は Mn_{Ga} との結合にもかかわらず、小さな拡散障壁を有する事がわかった。これは結晶成長後の低温の熱処理などによって、 Cu_i だけを容易に結晶外へと追い出すこと示している。また、この第一原理計算により得られた拡散障壁をパラメータとして用いてモンテカルロシミュレーションを行い、 Cu_i は Mn_{Ga} 濃度が20%であっても1時間のポストアニーリングでアニーリング深さ0.025cmまで取り除く事が可能であることが示された。通常のGaAs薄膜は数十から数百nmのオーダーなので、以上の結果は Cu_i を結晶から完全に追い出すには十分な値であると言える。

[1] K. Sato, et al.: Rev. Mod. Phys. **82** (2010) 1633.

[2] H. Fujii, et al.: Appl. Phys. Express **4** (2011) 043003.

[3] H. Akai: <http://sham.phys.sci.osaka-u.ac.jp/kkr/>

[4] G. Kresse and J. Furthmuller: Phys. Rev. B **54** (1996) 11169.