

GeTe ベース磁性半導体の電子状態計算と材料設計

First-principles studies of GeTe based dilute magnetic semiconductors

福島鉄也¹、新屋ひかり¹、藤井将²、佐藤和則³、吉田博¹、P. H. Dederichs⁴

T. Fukushima¹, H. Shinya¹, H. Fujii², K. Sato³,
H. Katayama-Yoshida¹ and P. H. Dederichs⁴

¹大阪大学大学院基礎工学研究科、²高輝度光科学研究センター、

³大阪大学大学院工学研究科、⁴ユーリッヒ研究センター

¹Graduate School of Engineering Science, Osaka University, ²JASRI,

³Graduate School of Engineering, Osaka University,

⁴Forschungszentrum Juelich, Juelich D-52425, Germany

PbTe や GeTe などの IV-VI 族化合物は少し変形した岩塩型結晶構造をとる半導体で、Mn を添加した系でキャリア誘起の強磁性が発現することが古くから知られている。しかし、キュリー温度が低いことや従来の半導体エレクトロニクスで使用されている物質との互換性が悪いことからあまり注目されておらず、とくに電子状態計算はほとんど行われていない。近年の福間らによる Mn 添加 GeTe の磁性についての系統的な実験によると、非平衡結晶成長法により高濃度の Mn 置換とホール添加が可能であることがわかっており、190K 程度のキュリー温度が観測されている[1]。本研究ではこの系における強磁性の起源および、どの程度の T_C が期待できるかを第一原理計算により明らかにする。

KKR-CPA-LDA 法により計算した Mn 添加 GeTe の状態密度をみると、Mn の d 軌道に由来する状態は主に価電子帯の下部に現れ、Ge 空孔の添加により価電子帯上部にホールが導入されている。Te の p 軌道との強い混成によりホール状態にはかなりの振幅の Mn の d 成分を含まれており、過去の議論から p-d 交換相互作用による強磁性が示唆される[2]。Mn のみの添加ではフェルミレベルはバンドギャップ中にあるため p-d 交換相互作用は働かず、Mn の d^5 電子配置に由来する反強磁性超交換相互作用が優勢となるが、Ge 空孔を導入してホールドープすることで強磁性を誘起することができる。図に Ge 空孔を 20% 含んだ系の T_C の Mn 濃度依存性を示す。Mn40% 付近で極大をとり、250K 程度の T_C が得られる。

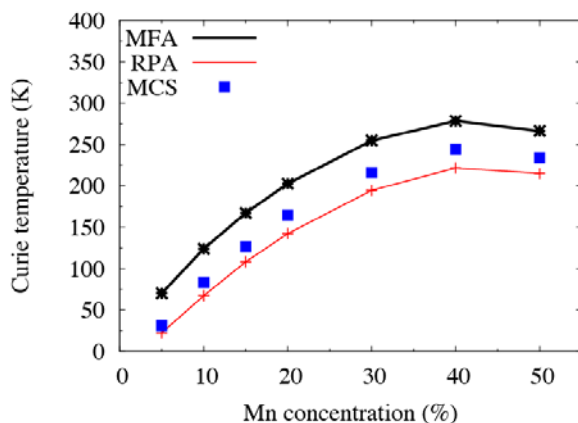


図: p 型 Mn 添加 GeTe の平均場近似 (MFA)、乱雑位相近似(RPA)およびモンテカルロシミュレーション(MCS)によるキュリー温度の計算値。Ge 空孔濃度は 20%

参考文献

[1] Y. Fukuma et al., Appl. Phys. Lett. **89**, 152506 (2006).

[2] K. Sato and H. Katayama-Yoshida, J. Non-Cryst. Sol. **358**, 2377 (2012).