

Mn 吸着 GaAs(001)表面の電子状態と構造安定性評価 Electronic states and Structural Stability of the Mn Adsorbed GaAs(001) surfaces

電通大院 先進理工¹, 物材機構² ○萩原 敦¹, 大竹 晃浩², 奥北 和哉¹, 中村 淳¹

Department of Engineering Science, The Univ. of Electro-Communications(UEC-Tokyo)¹, NIMS²

○Atsushi Hagiwara¹, Akihiro Ohtake², Kazuya Okukita¹, and Jun Nakamura¹

E-mail: hagiwara@natori.ee.uec.jp

背景・目的

閃亜鉛鉱構造(ZB)の MnAs 薄膜は、ハーフメタル薄膜としての可能性が理論的には予想されているものの[1], 実際に作製されるには至っていない. 同じ閃亜鉛鉱構造の GaAs を基板として薄膜成長させることが精力的に行なわれているが, 原子レベルで精緻な結晶成長を実現するには, Mn 原子の初期吸着位置や原子レベル成長過程を理解することが重要である.

GaAs(001)表面の Mn 吸着において Mn 被覆量が 1/4 原子層のとき, (2x2) β -秩序相が観測されている[2]. さらに, 隣接する Ga-As ダイマー間に Mn が位置することによって (2x2) β -秩序相が形成されることが第一原理計算により明らかにされている[3].

本研究では, より低被覆量(1/8 原子層)の Mn 吸着構造の安定性および電子状態を第一原理計算によって明らかにし, 被覆量 1/4 原子層における秩序化の要因を探る.

モデル・計算方法

基板には, well-defined な表面としてよく知られている GaAs(001)-c(4x4)表面を考える. この表面の原子配列は Ohtake と Nakamura により決定され, 作製条件によって最表面に 3 対の Ga-As ダイマーを持つ α 表面と, As-As ダイマーを持つ β 表面の 2 種類が存在する[4, 5].

Mn 原子の初期吸着に対して, 単純吸着モデルと Ga 置換サイトモデルの 2 種類を考える. 単純吸着モデルでは, 様々なサイトに Mn 原子を吸着させ, 系の全エネルギーを比較することで最安定吸着サイトを求める. Ga 置換サイトモデルでは, 可能性として最表面の Ga-As ダイマーの Ga サイトに加え, 表面第 3 層の Ga サイトも考える[6].

スピン密度汎関数理論に基づく第一原理擬ポテンシャル計算を行う. 交換相関項には, 一般化勾配近似を用いる. 波動関数は平面波で展開し, 運動エネルギーのカットオフは 16Ry とする.

計算結果

単純吸着モデルにおける Mn の最安定吸着位置は, c(4x4) α , β とともにダイマー欠損位置周辺(格子間サイト)であることがわかった. 最安定吸着位置でのスピン磁気モーメントは, それぞれ 6.0, 5.0 $\mu_B/c(4\times 4)$ となり, 金属的なバンド構造を持った. これは, ZB-MnAs (4.0 μ_B /unit)のスピン状態[7]とは異なっており, 表面特有の磁性状態と言える. また, Mn の孤立 d 軌道は比較的低いエネルギー位置に存在した. これにより, 格子間サイトでは Mn はドナーと

して振る舞っていると言える.

c(4x4) α 表面の Ga 置換サイトモデルにおける Mn の安定位置は, 3 層目の Ga サイトではなく, 最表面の Ga-As ダイマーの Ga サイトであることがわかった. また, 最安定位置は, 3 つ並んだ Ga-As ダイマーのうち, 中央のダイマーの Ga サイトだった. c(4x4) β 表面の場合, 最安定位置は, As-As ダイマー直下の Ga サイトではなく, As-As ダイマー間の領域に位置する Ga サイトだった. 最安定吸着位置でのスピン磁気モーメントは, α , β とともに 4.0 $\mu_B/c(4\times 4)$ となり, 半導体的なバンド構造を示した. これは, 置換サイトの Mn が, 局在する 3d 軌道の電子を価電子として放出することにより 3 価になり, アクセプタとして振る舞っていることを示している.

単純吸着モデルと置換サイトモデルの表面エネルギーを求めた. Mn 吸着 GaAs(001)-c(4x4)表面の状態相図を図に示す. As-rich 条件下では Ga 置換の c(4x4) β 表面が安定となり, Ga-rich 条件下では Ga 置換の c(4x4) α 表面が安定となった. また, どの条件下においても, c(4x4) α , β の単純吸着モデルは安定にならないことがわかった.

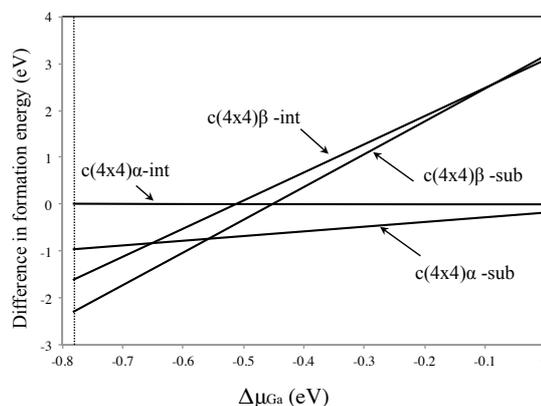


Fig. Mn 吸着 GaAs(001)-c(4x4)表面の状態相図. Mn 被覆量は 1/8 原子層.

- [1] A. Sakuma, J. Phys. Soc. Jpn. **71**, 2534 (2002).
 [2] A. Ohtake *et al.*, Phys. Rev. B **87**, 165301 (2013).
 [3] A. Hagiwara *et al.*, in preparation.
 [4] A. Ohtake and J. Nakamura, Phys. Rev. Lett. **89**, 206102 (2002).
 [5] A. Ohtake and J. Nakamura, Phys. Rev. Lett. **92**, 236105 (2004).
 [6] S. C. Erwin *et al.*, Phys. Rev. Lett. **89**, 206102 (2002).
 [7] I. Galanakis *et al.*, Phys. Rev. B **67**, 104417 (2003).