

第一原理計算による Mn 吸着 GaAs (001)-(nx2) の構造安定性評価 First-principles study on Mn-induced (nx2) reconstructions of the GaAs(001) surface

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

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

○Atsushi Hagiwara¹, Akihiro Ohtake², and Jun Nakamura¹

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

半導体である GaAs に磁性元素の Mn を数%の濃度で添加すると強磁性が発現する[1]. この希薄磁性半導体の室温における強磁性を実現するためには, エピタキシャル成長技術を用いて, GaAs 表面における Mn の吸着サイトや GaAs 基板への取り込みサイトを制御することが重要である.

GaAs(001)表面における Mn 吸着構造の詳細については, 実験とともに第一原理計算による研究が行なわれている. Zhang らは走査トンネル顕微鏡(STM)による観察に基づいて, Mn 吸着 GaAs(001)の再構成表面が(2x2)構造を持つことを明らかにした. さらに, 組成の異なる(2x2)構造について相対的な安定性を調べたところ, Mn 被覆量 1/4 原子層(ML)のとき, 作製条件(As-rich または Ga-rich)によらず Mn は表面格子間サイトに吸着することを示した[2]. 一方, 我々は, Mn 被覆量 1/4ML の(2x2)表面を As₂ 照射下で冷却することで, 主に 3 つの As-As ダイマーから構成される(4x2)ユニットが c(4x4)周期で並んだ構造へと変化することを示した[3]. さらに, STM による詳細な解析により, Mn 吸着 c(4x4)表面には(4x2)ユニットだけでなく, 2 つの As-As ダイマーから構成される(3x2)ユニットが混在することが明らかになった. ここで注目すべきは, この冷却による相変化によって, Mn が表面格子間サイトから基板の Ga 置換サイトに取り込まれることであり, これは強磁性の主要素として知られている Ga 置換型の Mn の量をエピタキシャル成長によって制御できる可能性を示唆している. 今回は, 局所的な c(4x4)構造と(3x2)ユニット構造の相対的な安定性について詳しく調べる. (3x2)構造における Mn の格子間吸着および Ga 置換について可能な原子配列を仮定し, 各構造モデルについて第一原理構造最適化計算を実行する. 組成の異なる表面の相対的な安定性を比較するために化学ポテンシャルを導入する.

計算の結果, (3x2)ユニット構造は, Mn 被覆量 1/12 ML で表面格子間吸着のときに安定になった(図 1). また, (3x2)ユニット構造は, [1-10]方向にユニットの位相がシフトした方が安定化した. STM で観察される(3x2)ユニットと(4x2)ユニットの混在状態は, 第一原理計算によって求めた状態相図によって説明されることが分かった.

[1] H. Ohno *et al.*, Appl. Phys. Lett. **69**, 363 (1996).

[2] S. B. Zhang *et al.*, Phys. Rev. B **69**, 121308(R) (2004).

[3] A.Ohtake, A.Hagiwara, and J.Nakamura, Phys.Rev.B **87**, 165301(2013).

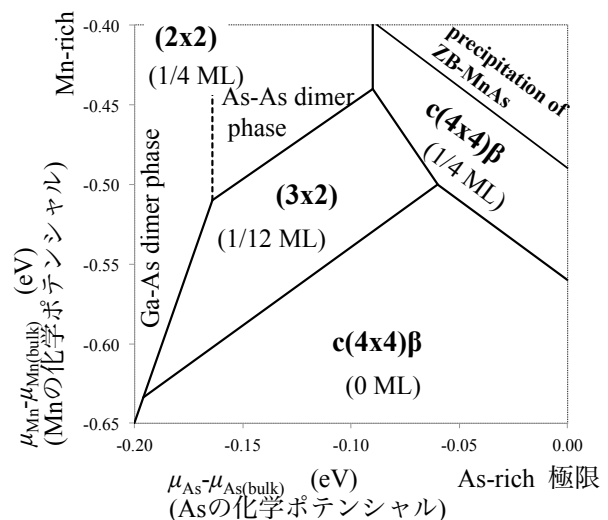


図 1. Mn 吸着 GaAs(001)表面の状態相図. 括弧内は Mn の被覆量.