

# GaAs(110)最表面に置換した Mn 原子近傍の吸着 Ga 安定構造

## Stable structures of adsorbed Ga adatom around the topmost Mn on GaAs(110) surface

阿南高専<sup>1</sup>, ○(B)後藤 拓巳<sup>1</sup>, 平山 基<sup>1</sup>, 釜野 勝<sup>1</sup>

NIT-Anan.<sup>1</sup>, ○Takumi Goto<sup>1</sup>, Motoi Hirayama<sup>1</sup>, Masaru Kamano<sup>1</sup>

E-mail: hmotoi@anan-nct.ac.jp

半導体と磁性体は現代エレクトロニクスにとって欠かせない材料であり、電荷と電子の2つの性質を活用した高機能素子の実現に期待が寄せられている。代表的な化合物半導体である GaAs 中の Ga サイトに Mn を高濃度で注入することで得られる (Ga,Mn)As の最大の特徴は、キャリア濃度を高めると Mn の電子スピンの自発的に揃う点である。これまでの研究から GaAs(110)表面に置換された Mn 原子は異方的な強磁性相互作用を持つことが明らかになっており、基板温度 200℃の環境下では GaAs 表面に吸着した Mn 原子は自発的に最表面 Ga サイトに取り込まれることが実験的に確認されている。吸着 Mn 原子と最表面 Ga 原子との置換によりエネルギー利得が生じることが理論的にも確認できた。しかしながら、置換反応後の Ga 原子の振る舞いについては明らかになっていない。そこで、本研究では置換された Mn 原子近傍の吸着 Ga 原子の安定吸着サイトを明らかにし、スピン状態・電子状態の詳細を調べた。

本研究ではスピン密度関数理論に基づく第一原理計算により、構造安定性および電子状態とスピン状態について解明する。系の全エネルギーと安定構造はスピン密度関数理論に基づく第一原理擬ポテンシャル法により求めた。GaAs(110)表面モデルとして6原子層のスラブを用意し、裏面のダングリングボンドは水素終端を施した。GaAs(110)再構成表面の最表面の Ga 原子を Mn 原子に置換し、その近傍の準安定サイトに Ga 原子を吸着させた。面内のユニットセルは(4×4)の大きさを仮定した。Fig.1 は Ga 吸着表面の計算モデルを示す。

いずれの Ga 吸着位置においても $5\mu_B$ の磁気モーメントをもつことがわかった。最表面に置換した Mn 原子においては $4\mu_B$ の磁気モーメントをもつことから、吸着 Ga 原子は $1\mu_B$ の磁気モーメントをもち、近傍の Mn 原子と強磁性結合を有することもわかった。サイト G が最安定吸着位置となり、他と比べても 200 meV 以上安定であることもわかった。

### 参考文献

1. Motoi Hirayama and Shiro Tsukamoto, J. Cryst. Growth **378**, 50 (2013).
2. 岸上翔, 平山基, 第 78 回応用物理学会秋季学術講演会, 5p-C21-12, 福岡市, 2017 年 9 月

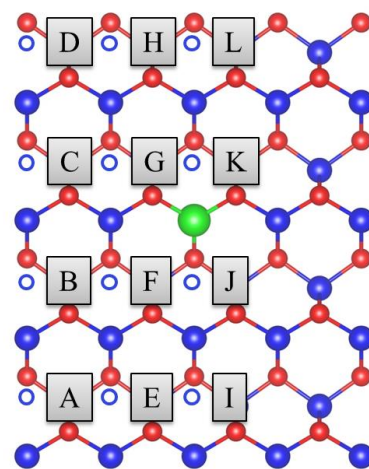


Fig.1: Calculation model of adsorbed Ga configurations near Mn atom substituted with the topmost Ga site on GaAs(110).