

## GaAs 表面上の Ga 置換 Mn 原子対のスピ状態と電子状態

### Spin and electronic states of Mn pair configurations on GaAs(110)

阿南高専<sup>1</sup>, ○(B)岡本 昂也<sup>1</sup>, 平山 基<sup>1</sup>

NIT-Anan.<sup>1</sup>, °Koya Okamoto<sup>1</sup>, Motoi Hirayama<sup>1</sup>

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

現代のエレクトロニクスは、半導体による電子回路と磁性体による記憶媒体で構成されている。従来の半導体素子は結晶内の電子が持つ電荷の流れを利用するのに対し、磁性体では電子のスピ状態（磁性）を利用している。この電子スピ状態を積極的に活用することで、スピントロニクス素子の高速化、高集積化、省エネルギー化などの基盤技術の構築に大きく貢献することが期待されている。これまでの研究で、GaAs(110)最表面の Ga サイトに置換された Mn 原子鎖は強い強磁性状態を持ち、1 次元的なハーフメタルとなることが理論的に明らかになった<sup>1</sup>。一方、分子線エピタキシー法による表面 Mn ナノ構造も実験的に作成し、基板温度 200°C では表面に吸着した Mn 原子が基板最表面の Ga サイトに取り込まれる現象が報告されている<sup>2</sup>。同時に Mn 原子が 2 原子取り込まれるような状況については未だに解明されていない。本研究では、GaAs(110)最表面上の Ga サイトを Mn 原子に 2 つ置換し、スピ密度汎関数理論に基づく第一原理計算により、構造安定性及び電子・スピ状態について明らかにする。

系の全エネルギーと安定構造はスピ密度汎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。スピ状態の安定性は 2 つの Mn コアスピ状態が強磁性および反強磁性的な結合状態について考慮した。Fig.1 は GaAs(110)表面の計算モデルを示す。

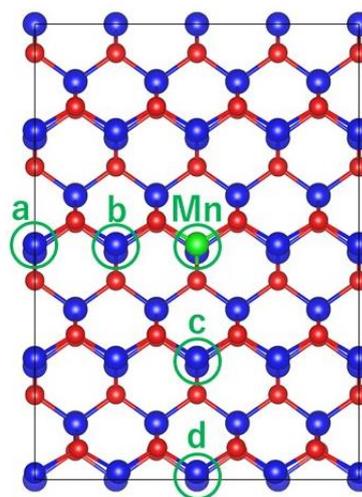


Fig.1: Atomic arrangement of paired Mn configurations on GaAs (110).

2 つの Mn コアスピ状態が強磁性結合をもつとき、最近接サイト（モデル b）の配置が最も安定となり、このとき Mn 原子あたり  $4\mu_B$  の磁気モーメントをもつことがわかった。[110]方向の次の最近接サイト（モデル a）と比較しても 0.246 eV のエネルギー差となった。一方、反強磁性結合をもつとき、モデル c の配置が最も安定となった。このことから、[110]原子列内での反強磁性結合が非常に不安定であり、長距離な強磁性結合が支配的であることがわかった。

#### 参考文献

1. Hirayama, Nakamura, Natori, J. Vac. Sci. Technol. B **27**, 27, 2062 (2009).
2. Motoi Hirayama, Shiro Tsukamoto, J. Cryst. Growth **378**, 50 (2013).