

第一原理計算による $\text{Zn}(\text{Sn,Mn})\text{As}_2$ の磁性と その Mn 配置に関する距離依存性

Magnetic Properties Dependence on Mn Configurations

in $\text{Zn}(\text{Sn,Mn})\text{As}_2$: First-Principles Study

阪大工, 阪大 CSRN, 京大 ESICB ○木崎 栄年, 森川 良忠

Osaka Univ., Kyoto Univ., ○Hidetoshi Kizaki, Yoshitada Morikawa

E-mail: hkizaki@prec.eng.osaka-u.ac.jp

半導体スピントロニクス実現のため室温強磁性を持つ希薄磁性半導体の作製が精力的に行われている。今まで $(\text{Ga,Mn})\text{As}$ のような III-V 族強磁性希薄磁性半導体がスピントロニクス材料として理論的にも実験的にもよく調べられてきた¹⁻³⁾。最近、 $\text{ZnSnAs}_2\text{:Mn}$ における室温強磁性が報告され、II-IV-V₂ 族に Mn がドーピングされた系について再調査が行われている^{4,7)}。

本研究ではまず $\text{Zn}(\text{Sn,TM})\text{As}_2$ (TM = V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni) における磁性を調べるため、それらの電子状態を KKR-CPA-LSDA 法による第一原理計算で調査した。また、平均場近似によりそれらのキュリー温度を見積もり、強磁性発現メカニズムについても調査した。その結果、 $\text{Zn}(\text{Sn,V})\text{As}_2$ 、 $\text{Zn}(\text{Sn,Cr})\text{As}_2$ 及び $\text{Zn}(\text{Sn,Mn})\text{As}_2$ においてハーフメタリックで高スピン状態の強磁性状態となり高いキュリー温度を示すことがわかった。特に $\text{Zn}(\text{Sn,Mn})\text{As}_2$ において最も高いキュリー温度を示した(Fig. 1)。これは Sn サイトに選択的に Mn を添加出来れば、高いキュリー温度を実現する可能性を示唆しており、実験的に報告された室温強磁性と矛盾しない結果となった。この結果を踏まえ、次に強磁性状態と反強磁性状態における Mn 間の距離依存性を調査した(Fig. 2)。その結果、強磁性の安定性は Mn 間距離に依存し、Mn 第二近接間以外は強磁性状態が安定であることがわかった。さらに、この Mn 間距離が長くなれば強磁性が安定化することがわかった。

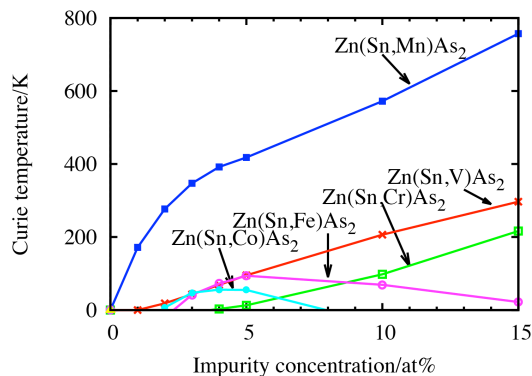


Fig. 1 Estimated T_C in $\text{Zn}(\text{Sn,TM})\text{As}_2$ within LDA

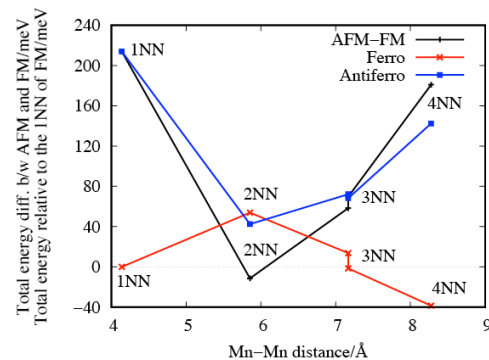


Fig. 2 Energetic stability as a function of Mn configurations

References

- 1) T. Jungwirth, J. Sinova, J. Masek, J. Kucera, and A. H. MacDonald, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 809, 2006.
- 2) K. Sato *et al.*, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1633, 2010.
- 3) T. Dietl and H. Ohno, *Rev. Mod. Phys.* **86**, 187, 2014.
- 4) S. Choi *et al.*, *Sol. Stat. Comm.* **122**, 165, 2002.
- 5) J. T. Asubar *et al.*, *J. Crystal Growth* **311**, 929, 2009.
- 6) N. Uchitomi *et al.*, *J. Appl. Phys.* **117**, 17B905, 2015.
- 7) K. Hayashi, N. Uchitomi *et al.* *J. Appl. Phys.* **119**, 125703, 2016.