

## GaAs (110) 表面上の MnAs 単分子膜のスピンの状態への歪効果

## Strain effects on spin states of MnAs monolayer on GaAs(110)

阿南高専 ○平山 基

NIT, Anan College, ○Motoi Hirayama

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

スピントロニクス分野を中心に希薄磁性半導体 GaAs/Mn に注目が集まる中、我々は GaAs(110) 表面上に 1 次元的に置換された Mn 原子列が表面電子状態と相互作用し、強磁性的な性質をもつ 1 次元ハーフメタルであることを見出した[1]。また、Mn 原子列の最密構造である GaAs(110) 表面上の MnAs 単分子膜についても詳細な電子状態評価を行い、原子列の電子状態と同様の 1 次元ハーフメタルであり、キャリア密度によって磁気結合の強さを制御できる可能性も理論的に明らかにした[2]。半導体表面上の単分子膜の磁性については発現機構も含めて明らかとなっていない要素が多く、本研究では表面単分子膜のスピンの状態への歪の効果について調べた。計算モデルは図 1 のような 6 分子層厚のスラブの最表面に MnAs 単分子膜を配置し、表面[110]方向のスピンの結合の強さについて調べた。構造安定性および電子・スピン状態は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によって計算を行った。

等方的な 2 次元歪を加えた結果を図 2 に示す。[110]方向に隣り合う Mn 間のスピンの結合が強磁性の全エネルギー  $E_{\text{FM}}$  と反強磁性の全エネルギー  $E_{\text{AFM}}$  のエネルギー差  $\Delta E$  を評価したところ、表面平行方向の歪が  $-3\% \sim +7\%$  の範囲では強磁性結合が安定となり、 $+3\%$  のとき強磁性結合が最も安定となった。

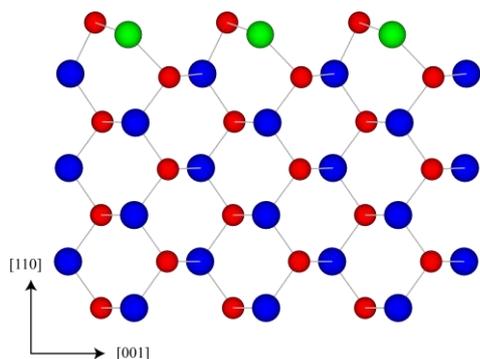


Figure 1: Atomic arrangement of MnAs single molecular layer on GaAs(110). Green, blue, and red balls indicate Mn, Ga, As atoms, respectively.

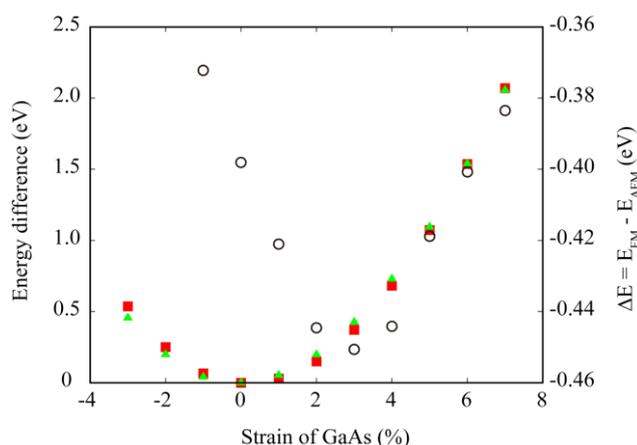


Figure 2: Relative total energies of FM and AFM configurations (red square and green triangle, left axis) and energy difference  $\Delta E$  between FM and AFM states of Mn core spin (open circle, right axis).

[1] M. Hirayama, J. Nakamura, and A. Natori, J. Vac. Sci. Technol. B **27**, 2062 (2009)

[2] M. Hirayama, J. Nakamura, and A. Natori, Phys. Rev. B **87**, 075428 (2013)