

Cr ベース高温強磁性半導体の第一原理計算

First-principles calculations of Cr-based high-temperature ferromagnetic semiconductors

東北大学大学院工学研究科¹, 東北大学電気通信研究所², 東北大学 CSRN³, 大阪大 CSRN⁴○(M2)久保田天弥^{1,2}, 新屋ひかり^{2,3,4}, 白井正文^{2,3,4}Grad. Sch. of Eng., Tohoku Univ.¹, RIEC, Tohoku Univ.², CSRN, Tohoku Univ.³, CSRN, Osaka Univ.⁴○(M2) T. Kubota^{1,2}, H. Shinya^{2,3,4} and M. Shirai^{2,3,4}E-mail: takaya.kubota.p3@dc.tohoku.ac.jp

磁性半導体は非磁性半導体の一部原子を磁性原子で置換することで得られる物質であり、情報の高速処理とエネルギー効率を両立するとして、今日の情報社会では重要な材料であると認識されているが、実用化のためには高いキュリー温度が必要不可欠である。高いキュリー温度を持つ磁性半導体の探索は実験・理論両面から盛んに行われており、データ科学的手法を用いた材料探索の効率化も図られている。第一原理計算を用いたハイスループット材料計算では閃亜鉛鉱型構造の磁性半導体に対してキュリー温度の予測が行われ、(Al,Cr)As や (Al,Cr)P において高いキュリー温度を持つ可能性が示唆された^[1]。磁性半導体においてはアニーリングにより生じる半導体中の磁性不純物のミクロな原子不均一性が磁性に大きな影響を与えることが知られているため、本研究では第一原理計算を用いてこれらの物質におけるアニーリングの影響を調べた。電子状態計算には第一原理計算プログラムパッケージである Akai-KKR^[2]を使用し、キュリー温度の算出は乱雑位相近似 (RPA) により行った。

Fig. 1 は (Al_{0.8}Cr_{0.2})As 中で Cr 間にはたらく相互作用の計算結果である。(a)は交換結合定数 J_{ij} 、(b)は原子対相互作用 V_{ij} の距離依存性で、第一近接 Cr 原子間には強磁性的相互作用および引力的相互作用がはたらいっていることが見て取れる。これらの相互作用を基にアニーリング過程のシミュレーションを行った結果が Fig. 2 である。Fig. 2(a)のように初期状態ではばらばらに分布していた Cr 原子は、アニーリングを行うと Fig. 2(b)に示すように引力的相互作用に従いクラスター化する結果が得られた。このクラスタリングにより効率的な強磁性ネットワークが張り巡らされ、キュリー温度が上昇する。本発表ではキュリー温度のアニーリング条件への依存性についても考察を行う。

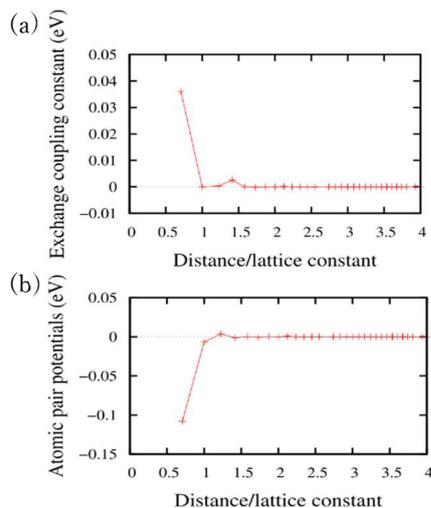


Fig. 1. (a) Exchange coupling J_{ij} and (b) atomic pair potentials V_{ij} as a function of the distance between Cr atoms in (Al_{0.8}Cr_{0.2})As.

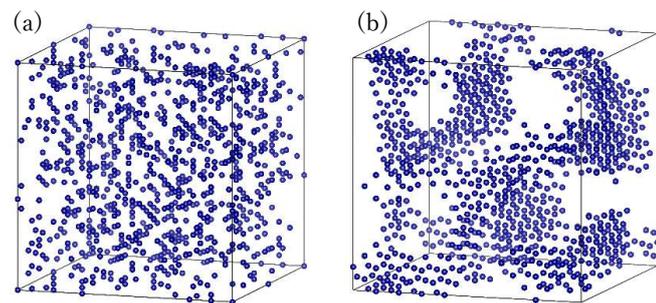


Fig. 2. Distribution of Cr atoms (blue dots) in (a) the initial phase and (b) an annealed phase of (Al_{0.8}Cr_{0.2})As after 1500 Monte Carlo steps.

References

- [1] H. Shinya, T. Kubota, Y. Tanaka, and M. Shirai (in preparation).
 [2] H. Akai, J. Phys.: Condens. Matter **1**, 8045 (1989).