

令和 2 年 5 月 29 日現在

機関番号：12701

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K05494

研究課題名(和文)Control of carrier localization in dilute magnetic semiconductors

研究課題名(英文)Control of carrier localization in dilute magnetic semiconductors

研究代表者

RAEBIGER HANNES (Raebiger, Hannes)

横浜国立大学・大学院工学研究院・准教授

研究者番号：20531403

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：磁性半導体に置ける伝導キャリアの局在性の理論研究を行なった。本研究開始前は、磁性半導体の磁性は伝導キャリア密度により制御できることは既知であったが、伝導キャリアの局在性に関する研究は乏しかった。本研究は(1)半導体に置ける伝導キャリアの局在性構造歪みによりの制御及び(2)磁性半導体の磁気相互作用の伝導キャリアによる制御及び(3)磁性半導体の磁性の構造歪みによる制御を解明した。したがって、新たなピエゾ磁性現象を発見した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

半導体・絶縁体に置ける伝道キャリアの局在性を計算するための理論手法の開発研究を行なった。伝導キャリアの局在性ととも磁性半導体の磁性を制御できる新たな物理現象を発見した。この研究は現代の薄膜デバイスに磁性の制御の機能を付与するための指針を与えるものである。現代の電子デバイスの発展は小型化や薄膜化によって牽引されており、数原子層単位における磁性の制御は近未来に向けたメモリ素子やスピン制御デバイスの開発の要である。本研究は薄膜における磁性の制御メカニズムを提示することで、これからの日本社会の薄膜磁性デバイスの開発への現実的な構図を提示するものである。

研究成果の概要(英文)：This is a theoretical study of carrier localization in magnetic semiconductors. When this project began, the control of magnetism in magnetic semiconductors by modulating carrier densities was established, but investigations on the role of carrier localization were scarce. During this study, we elucidated (1) control of carrier localization by axial strain in semiconductors, (2) control of magnetic interactions in magnetic semiconductors by charge carriers, and (3) modulation of magnetism in magnetic semiconductors by axial strain. We thus discovered a new piezo magnetic effect.

研究分野：物性理論

キーワード：磁性半導体 ピエゾ効果 ピエゾ磁性 第一原理計算

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

- (1) 磁性半導体は伝導キャリア(電子・電子成功のいずれ)の密度により磁性及び磁化の制御ができる。磁性半導体における伝導キャリア密度がある閾値より少ない場合は磁化ゼロの常磁性を示し、その閾値を超えると磁化されて強磁性体に変わる。磁性の原因は半導体にドーピングされている磁気不純物であり、伝導キャリアは不純物間の磁気相互作用を起こすものである。磁気相互作用の強度は伝導キャリアの局在性依存する。束縛されている伝導キャリアの場合短距離相互作用になり、広がっている場合長距離相互作用になる。従って、磁性半導体の磁性は磁性不純物及び伝導キャリア密度及び伝導キャリアの局在性のバランスによって決まる。本研究の開始当初は伝導キャリアの局在性による磁性の制御に関する研究は乏しいのが同時の状況であった。
- (2) 本研究グループは2016年に磁性半導体であるMnドーピングされたGaAsにおける伝導キャリアの局在・非局在の遷移を発見した[1]。同じ不純物によって束縛されている電子正孔も広がっている電子成功も形成することが可能であることを示した。その遷移とともに構造歪みも現れたことから、歪みによる伝導キャリアの局在性を制御できるという発想につながった。応力によって束縛された伝導キャリアを広がるように遷移されることができれば、その遷移とともに磁気相互作用も制御できると予測した。
- (3) 個体物質における伝導キャリアの局在性を評価するための理論計算は困難である。第一原理計算手法によって局在性に偏りが生じることにより正しく予測ができない問題点があった。当研究グループは密度汎関数理論の自己相互作用補正を導入し、実験で確かめられた伝導キャリア局在性を再現することに成功した[2]。

2. 研究の目的

- (1) 伝導キャリアの局在性を正しく表現できる密度汎関数理論の自己相互作用補正の開発研究。任意の半導体・絶縁体・磁性体で適用できる計算手法を目指す。
- (2) 伝導キャリアと磁性半導体における磁気相互作用の依存性を理論計算により解明。
- (3) 応力などの外力による伝導キャリアの局在性を制御できるかを理論研究によって解明。
- (4) 応力・構造歪みが磁性半導体における磁気相互作用にどのような影響及ぼすか解明。
- (5) 応力・構造歪みにより制御できる磁性半導体のマテリアルデザイン。新たな機能性物質を提案。

3. 研究の方法

- (1) 密度汎関数理論に基づく第一原理計算により磁性半導体物質の電子構造・結晶構造を解析する。電子構造はスピン分極に注目し、それぞれの磁気構造を分析する。磁気構造・結晶構造の歪み・伝導キャリアの束縛性に注目した。
- (2) 第一原理計算はVASPコードで行う。ただし、伝導キャリアの局在性を正しく評価するための自己相互作用補正は当研究室で開発した独自のコードを用いる。自己相互作用補正の強度パラメータをそれぞれの半導体物質に対して決定した。
- (3) 第一原理計算は当研究室の80CPUで構成されているクラスタ計算機及び共同利用スーパーコンピュータ計算機で行う。東京大学物性研究所の計算機及び米国NSF/XSEDEの計算機を利用した。
- (4) データ処理・解析および計算管理は自作のソフトウェアで行なった。

4. 研究成果

- (1) GaN、Ga₂O₃などワイドギャップ半導体に注目した。バンドギャップ補正及び自己相互作用補正のポテンシャルパラメータを求めた。計算手法の妥当性を確かめるため、光学的物性などの計算を行い、計算手法の妥当性を示した。(Physical Review Material, Journal of Applied Physics, Applied Physics Expressに掲載)

- (2) GaN に置いて、伝導キャリアとして電子成功に注目した。電子成功は Mg 不純物によって生成し、いくつかの束縛状態及び広がっている電子成功状態を確かめた。ピエゾ効果により、束縛状態から広がっている伝導キャリア状態に遷移を計算上で実現した。よって、構造歪みによる伝導キャリアの局在性の制御の方法を明らかにした。(発表予定)
- (3) Ga₂O₃ に置く Cr 不純物間の磁気相互作用を計算し、磁気相互作用の電動キャリア依存について第一原理計算を行った。伝導キャリアが存在しない場合、磁気相互作用は存在せず常磁性を示すことが、電子ドーピングを行い、n 型伝導キャリアが Cr 不純物のうどの 1/2 ほどの閾値を越えると距離強磁性相互作用が現れ、強磁性体に遷移できること発見した。この結果により磁性半導体の新たな磁性メカニズム提案した。(Applied Physics Express に掲載)
- (4) GaN 中の Mn および Fe 不純物は磁性半導体の磁気不純物の役割に果たすが、磁気相互作用に必要な電子成功は窒素に強く区束縛され、キャリアの媒介による強磁性の実現が困難であった。本研究室の研究で、歪みによるピエゾ効果により束縛された電子成功は広がっている伝導キャリア状態に遷移することを発見した。図 1 でこのシステムにおける正孔の束縛の制御に関する概略図を示す。本研究により、磁気相互作用は構造歪みでピエゾ効果により制御できる新たな磁性発現のメカニズムを提唱した。このメカニズムはピエゾ効果により強磁性を制御するものであり、ピエゾ磁性と名付けられた。(Physical Review Materials にて発表済み)

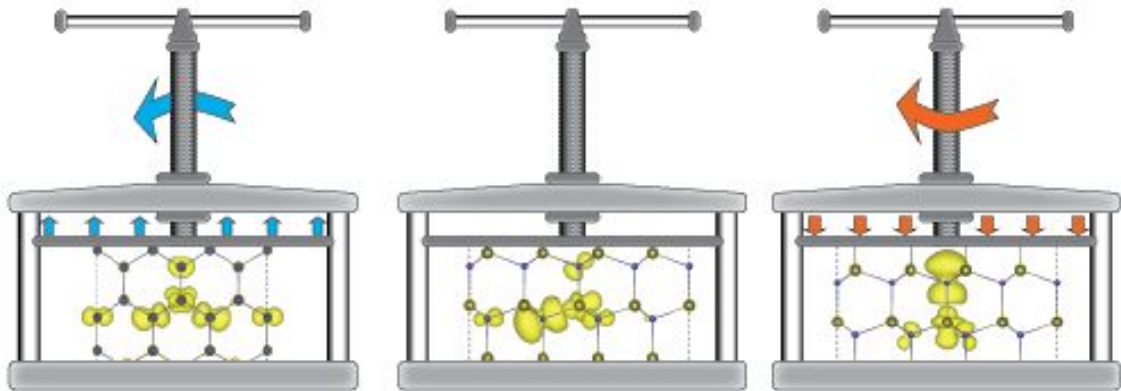


図 1 GaN における Fe 不純物付近の伝導キャリアの局在状態。真ん中の図は構造歪みのない場合の束縛状態を示し、右図と右図はそれぞれ c 軸を圧縮、膨張の場合のキャリアの状態を示す。

<参考文献>

- [1] S. Bae, H. Raebiger: "Critical metal-insulator transition due to nuclear quantum effects in Mn-doped GaAs, Physical Review B (Rapid Communications), **94**, 241115(R) (2016).
- [2] S. Lany, H. Raebiger, A. Zunger: "Magnetic interactions of Cr-Cr and Co-Co impurity pairs in ZnO within a band-gap corrected density functional approach," Physical Review B (Rapid Communications) **77**, 241201(R) (2008).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 2件/うち国際共著 2件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Yoshida Daisuke, Raebiger Hannes, Shudo Ken-ichi, Ohno Koichi	4. 巻 57
2. 論文標題 Core Electron Topologies in Chemical Compounds: Case Study of Carbon versus Silicon	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 7012 ~ 7018
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201713108	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Raebiger Hannes, Bae Soungmin, Echeverria-Arrondo Carlos, Ayuela Andres	4. 巻 2
2. 論文標題 Control of hole localization in magnetic semiconductors by axial strain	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 24402
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.2.024402	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Yamanaka K., Raebiger H., Mukai K., Shudo K.	4. 巻 127
2. 論文標題 Modulation of the optical absorption edge of α - and β -Ga ₂ O ₃ due to Co impurities caused by band structure changes: Work function measurements and first-principle calculations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 065701 ~ 065701
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5134521	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Ichihashi Kodai, Shinya Hikari, Raebiger Hannes	4. 巻 13
2. 論文標題 Carrier mediated ferromagnetism in Ga ₂ O ₃ :Cr	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 021002 ~ 021002
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1882-0786/ab6ca6	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計8件（うち招待講演 6件 / うち国際学会 2件）

1. 発表者名 Hannes Raebiger and Soungmin Bae
2. 発表標題 Carrier localization and piezomagnetism in magnetic semiconductors
3. 学会等名 10th international conference and school on physics and applications of spin phenomena in solids (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 H. Raebiger
2. 発表標題 Defect Theory from first principles calculations
3. 学会等名 29th International Conference on Defects in Semiconductors, Matsue, Japan (招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 H. Raebiger
2. 発表標題 Hole localization trends and engineering them in magnetic semiconductors
3. 学会等名 Workshop on Computational Semiconductors Physics (CSP2017), Hohhot, Inner Mongolia, P. R. China (招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 H. Raebiger
2. 発表標題 Engineering hole localization in magnetic semiconductors
3. 学会等名 The 9th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-9), Kuala Lumpur, Malaysia (招待講演)
4. 発表年 2017年

1 . 発表者名 H. Raebiger, S. Bae
2 . 発表標題 Strain control of carrier localization in piezoelectrics
3 . 学会等名 30th International Conference on Defects in Semiconductors, Seattle, WA, USA (招待講演)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 K. Ichihashi, H. Raebiger
2 . 発表標題 Calculation of ferromagnetic semiconductors: Cr-doped beta-Ga ₂ O ₃
3 . 学会等名 30th International Conference on Defects in Semiconductors, Seattle, WA, USA (招待講演)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 K. Yamanaka, K. Shudo, H. Raebiger
2 . 発表標題 Electronic states and band gap adjustment of Co-impurity doped epsilon-Ga ₂ O ₃ and kappa-Ga ₂ O ₃
3 . 学会等名 30th International Conference on Defects in Semiconductors, Seattle, WA, USA (招待講演)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 R. Shirota, H. Raebiger
2 . 発表標題 First principles calculation of hole doped La ₂ CuO ₄
3 . 学会等名 29th annual meeting of MRS-J, Yokohama, Japan (国際学会)
4 . 発表年 2019年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 Ertekin Elif, Raebiger Hannes	4. 発行年 2019年
2. 出版社 The IET, United Kingdom	5. 総ページ数 289-343
3. 書名 First principles methods for defects: state-of-the-art and emerging approaches in Characterization and Control of Defects in Semiconductors	

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----