

第一原理計算による磁性半導体のマテリアルデザインとデバイスデザイン

大阪大学産業科学研究所・量子機能科学研究部門 吉田 博、佐藤和則

経験的パラメータ(実験データ)を一切含まない第一原理計算に基づく新機能磁性半導体のマテリアルデザインとデバイスデザインについて報告する。半導体中の電子は、電荷とスピンの二つの自由度を持っている。ドーピングによる価電子制御によって電荷を制御する従来のエレクトロニクスに対して、もう一つの自由度であるスピンを用いたエレクトロニクスを半導体スピントロニクス(Semiconductor Spintronics)という。半導体中の局在スピン間の相互作用は、キャリア濃度 N とそのタイプ(p 型 or n 型) スケールサイズ(L)、および次元性($d=0,1,2,3$)に依っており、これらを制御することによりスピンを思いのままに操ることができる。新機能を持つ半導体スピントロニクス材料の効率的な開発のためには、第一原理計算による物性予測と、考え抜いた独創的なアイデアを併用することによるマテリアルデザインが不可欠である⁽¹⁾。講演では II-VI 族の ZnO や ZnSe また III-V 族 GaAs, III-V 族窒化物 GaN や AlN などをもとにした磁性半導体のマテリアルデザインの具体例をあげ、予言の後に行われた実験との比較を通して、半導体スピントロニクスのための第一原理計算によるマテリアルデザインのノウハウの有効性と、将来の半導体スピントロニクス・デバイスへの展望を明らかにする。

価電子制御のマテリアルデザイン: キャリア濃度 N (p 型 or n 型)を変えて、半導体の局在した電子スピン間の相互作用を制御するため、アクセプターとドナーを同時にドーピングする同時ドーピング法と呼ばれる新しい価電子制御法のマテリアルデザインをおこなった⁽²⁻³⁾。これらに基づいて低抵抗 p 型 ZnO の創製がレーザー MBE を用いて実際に行われた⁽⁴⁾。同時ドーピング法はドーピングの難しい GaN^(5,6), AlN⁽¹⁾, ダイヤモンドなどのワイドギャップ半導体に一般的に有効なものであり、熱平衡状態や従来の結晶成長方法では実現できない高濃度ドーピングを可能にし、実際多くのワイドギャップ半導体系に適用され始めている⁽¹⁾。

スピン制御のマテリアルデザイン: ワイドギャップ半導体を舞台として局在電子スピン間相互作用を制御するために、ZnO, GaN, AlN を母体とした遷移金属磁性イオンからなる磁性半導体についての第一原理計算による透明超強磁性体や光誘起強磁性体のためのマテリアルデザインをおこなった^(7,8,9)。ZnO 中に遷移金属である Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu をドーピングしたとき、Mn は反強磁性絶縁体、Mn と正孔・ドーピングでは強磁性状態、V, Cr, Fe, Co, Ni はすべて強磁性ハーフ・メタル状態(一方のスピンはフェルミ面を持つ金属状態であり、逆向きスピンはバンドギャップを持つ絶縁体状態)、また Ti, Cu は常磁性状態となる⁽⁹⁾。ZnO 中の V, Cr, Mn+hole, Fe, Co, Ni は高スピン状態となって大きな強磁性磁気モーメントを持ち、遠赤外の光は吸収するが可視光をほとんど吸収しないので透明超強磁性体となる。GaN や GaAs に Mn をドーピングすると Ga^{3+} が 2 個の Mn^{2+} で置換されるために正孔・ドーピングとなり、ハーフ・メタル状態の強磁性体を実現される⁽¹⁾。GaN や GaAs 中の $Fe^{3+}(d^5)$ では、キャリアはドーピングされず反強磁性超交換相互作用により反強磁性的なスピングラスが安定となる。V, Cr, Mn では強磁性的な 2 重交換相互作用が支配的となり強磁性状態が安定となる⁽¹⁰⁾。GaAs, GaN 中の Co, Ni は伝導帯との強い p - d 混成のため反強磁性超交換相互作用が強くなり反強磁性的スピングラスが安定となる⁽¹⁰⁾。

半導体スピントロニクス・デバイス: ZnO 中に Mn と Fe ($ZnO:Fe_xMn_{1-x}$)、または Cr と Mn ($ZnO:Cr_xMn_{1-x}$) の混晶を作製する事により、強磁性状態直前の常磁性状態に保ち、この上に成長させた GaAs や Si などの半導体に可視光を当てて電子と正孔を励起し、バイアス電圧を印加することにより、正孔や電子を磁性領域に導くことにより、光励起による強磁性ハーフ・メタル状態を実現でき、光で磁石をつくることが可能となる。また、Mn ドーピングの ZnO ($ZnO:Mn$) は反強磁性絶縁体であるが、半導体超構造を用いて、 p 型-ZnO/絶縁型-ZnO/ZnO:Mn/から構成される金属/絶縁体/半導体の超構造を作製し、バイアス電圧により ZnO:Mn 層に正孔をドーピングして反強磁性絶縁体から強磁性ハーフ・メタル状態に変えると、100% スピン分極した電流が流れるためスピン-FET やスピントランジスタをつくることが可能となる。このような半導体スピントロニクスのためのデバイス応用についても講演する。

参考文献: (1) 吉田博、佐藤和則、加藤竜次、山本哲也、「ワイドギャップ半導体の新しい価電子制御法: 予測と実験」: までりあ 第39 巻、第9号(2000)。 (2) T. Yamamoto and H. Katayama-Yoshida: Jpn. J. Appl. Phys. 38, L166-L169 (1999)。 (3) 吉田博、山本哲也、特許出願: 低抵抗 p 型 ZnO の製造方法 (JP H10-287966)。 (4) M. Joseph, H. Tabata and T. Kawai: Jpn. J. Appl. Phys. 38, L1205-L1207 (1999)。 (5) T. Yamamoto and H. Katayama-Yoshida: Jpn. J. Appl. Phys. 36 (1997), p. L180。 (6) 吉田博、特許出願: 低抵抗 p 型 GaN の結晶の製造方法 (特願平 8-258054 特開平 10-101496)。 (7) 吉田博、佐藤和則、特許出願: 強磁性 p 型単結晶酸化亜鉛およびその製造方法 (特願平 11-247959)。 (8) 吉田博、佐藤和則、特許出願: 遷移金属を含有する強磁性 ZnO 系化合物およびその強磁性特性の調整方法 (特願平 11-308911)。 (9) K. Sato and H. Katayama-Yoshida: Jpn. J. Appl. Phys. 39 (2000) L555-L558。 (10) K. Sato and H. Katayama-Yoshida: Jpn. J. Appl. Phys. 40 (2001) L334。 Jpn. J. Appl. Phys. 40 (2001) L485。