

大阪大学大学院理学研究科物理学専攻・物性理論IIグループ



研究室紹介

赤井久純*

Condensed Matter Theory II Group, Department of Physics,
Graduate School of Science, Osaka University

Key Words : Computational nano-materials design, Nano-spintronics,
First-principles electronic structure calculations, Alloys, Magnetism

1. はじめに

物性理論IIグループでは固体電子論をはじめ幅広い研究を行っている。これらをすべて紹介するスペースはないので、主要なテーマの要約を最初にあげておく。

(1)第一原理に基づいて物質の示す様々な物性の発現の機構を探り、また、新しい様相や機能の可能性を見出す事を目的に、i)不規則合金や不純物系の電子状態、ii)希薄磁性半導体の磁気転移、iii)ナノスピントロニクス、iv)金属絶縁体転移、v)人工格子、半導体ヘテロ構造の電子状態、vi)核物性の理論的側面、vii)計算機マテリアルデザインの研究を行っている(赤井)。

(2)固体界面の滑り摩擦、粉体の摩擦、潤滑剤のある場合の摩擦、原子スケールの摩擦を始め、地震、電荷密度波や第2種超伝導体中の磁束格子の運動、量子トンネル現象なども含めた「摩擦の物理」を理論的数値的に調べ、摩擦の機構と「摩擦のユニバーサリティークラス」を明らかにする(松川)。

(3)不規則系、メゾスコピック系、ナノ構造の物理の研究。特に、i)不規則ポテンシャルを含んだメゾスコピック伝導体の量子輸送現象、ii)アンダーソン金属絶縁体転移における臨界指数とスケーリン

グの理論、iii)半導体ナノ構造の量子輸送現象の研究(スレヴィン)。

(4)第一原理的な電子状態計算のアルゴリズムの探求と適用の研究。現状では簡素化されたモデルを用いてのみ取り扱えるような電子相関等の問題をも現実の電子系で取り扱えるようにすること、あらゆる電子系のふるまいを計算機上で再現することが目標(小谷)。

(5)スピンの機能を用いた新しい機能デバイスや機能材料の開発を目指し、スピン機能半導体の創成、希薄磁性半導体におけるsp-d交換相互作用の起源の解明と制御、ならびにこれらを用いた光デバイスへの応用を研究している(安藤)。

2002年7月現在で、スタッフは赤井久純(教授)、松川宏(助教授)、Keith Slevin(助教授)、小谷岳生(助手)、安藤功兒(教授・連携併任)であり、大学院学生は後期課程学生が7名、前期課程学生が4名である。以下では上記のテーマの内、ナノスピントロニクスに関するものを紹介する。

2. ナノスピントロニクス

ナノスケールの構造を用いて、電荷とスピンの自由度を共に制御することにより、物質に新機能を与えることができる。物質科学において最近このような方向性をもった研究の進展が著しく、ナノスピントロニクスと呼ばれている。われわれは、ナノスピントロニクスのためのナノ構造材料を第一原理計算にもとづく理論によってデザインすることをめざしており、計算機ナノマテリアルデザインと称している。ナノスピントロニクス材料の電子状態、磁性、輸送現象、凝集的性質を計算し、また、それらの物性発現の機構を解明することにより、新しい物質を生み出していくことが目標である。



* Hisazumi AKAI
1947年11月生
1977年大阪大学大学院・理学研究科
博士課程修了
現在、大阪大学・大学院理学研究科・
物理学専攻、教授、理学博士、物性
理論
TEL 06-6850-5738
FAX 06-6850-5741
E-Mail akai@phys.sci.osaka-u.
ac.jp

2-1. 希薄磁性半導体の電子状態とキャリア誘起強磁性

希薄磁性半導体と呼ばれる一群の半導体は1980年代から盛んに研究されてきた。例えば(Cd, Mn)TeなどのII-VI族化合物希薄磁性半導体は良く研究され、現在では光アイソレータのための材料として広く用いられている。これらのII-VI族希薄磁性半導体は一般的には常磁性体であり、自発磁化を示すことはない。しかし、(Ga, Mn)As等のIII-V族希薄磁性半導体は、それ自身が強磁性を示す。最近では高いキュリー点を持つものも合成されてきており、スピントロニクス材料として非常に有望である。

われわれはこれらの希薄磁性半導体の電子状態を第一原理計算によって研究してきた。その結果、希薄磁性半導体の、強磁性発現の機構の説明に成功するとともに、これらの半導体がハーフメタリック(上向きスピンの場合は金属、下向きスピンの場合は絶縁体あるいは半導体)であり、その強磁性がキャリアの存在によって誘起されるキャリア誘起強磁性であることを明らかにした。また、この理論を基礎にして、より高いキュリー点を持つ、新しい希薄磁性半導体を得るための指導原理を確立してきた。

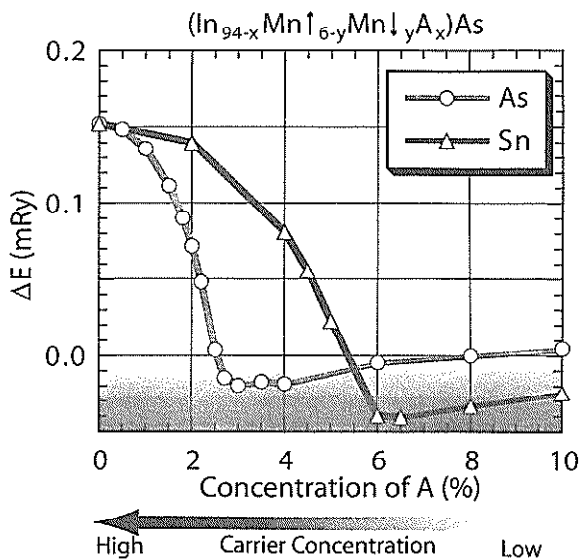


図 1

上の図は(In, Mn)AsのIII族位置に入ったAsやSnの濃度の関数として強磁性状態とスピングラス状態のエネルギー差を計算したものである(エネルギー差が正の領域では強磁性が安定)。III族位置に入っ

たV族原子の濃度が増すとホール濃度が小さくなり、それと共に強磁性が不安定化し、スピングラス状態になることが示されている。この結果は実験的に観測されているキャリア誘起強磁性をよく説明している。

2-2. 導体ナノ構造を用いた電荷とスピンの制御

II-VI族希薄磁性半導体は、磁性イオンの固溶限が高く、磁性材料を比較的容易に作製することが可能な一方、キャリア制御、特にホールドーピングが容易ではない。希薄磁性半導体の強磁性発現には磁性イオンのd状態に強く混成したホールが必要であり、dホールドーピングの困難さがII-VI Mn系希薄磁性半導体の強磁性発現を妨げている。一方、III-V族化合物半導体においてはキャリア制御が容易であり、n型、p型を作製することが可能である。しかし、遷移金属の固溶限は実際上ゼロであり高いキュリー温度の実現を阻む一因となっている。この問題を解決する一つの方法はII-VI/III-Vのような超構造を作ることである(右図参照)。II-IV層を磁性層、III-V層をキャリア層として用いることによって強磁性を実現すると共に、キャリア注入を通じて磁性制御を行う可能性も開けてくる。

希薄磁性半導体を用いた種々のII-VI/III-V超構造およびIII-V/III-V超構造に対して第一原理計算を行った結果、例えば、(In, Mn)As/(Al, Be)Sbにおいて(Al, Be)Sb層のキャリア濃度を変化させることによって強磁性転移温度が制御されることを示した。

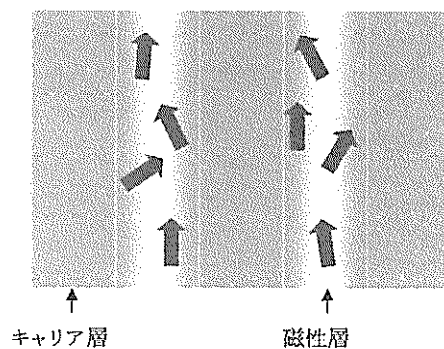


図 2

2-3. 新しいスピントロニクス材料—カルコパイライト型磁性半導体

カルコパイライト型半導体CdGeP₂やZnGeP₂にMnを拡散すると高いキュリー温度を持つ強磁性体になることが実験的に見出されている。このタイプ

の化合物半導体には多くの組み合わせがあるが、自然に作られたナノ構造とも言うべき物質であり、新しいスピントロニクス材料としての可能性を持っている。

われわれは(Cd, TM)GeP₂のようなII-IV-V₂タイプの遷移金属(TM)カルコパイライト半導体およびCu(Al, TM)As₂のようなI-III-VI₂カルコパイライト半導体について強磁性希薄磁性半導体の可能性を調べた。計算の結果によると、単にCdの一部をMnで置換するだけでは強磁性は実現しないが、MnがGeを置換している場合、空孔欠陥がある場合、あるいはGeやCdが過剰な場合には強磁性が発現する。すなわち、実験的に得られている強磁性状態は理想的な(Cd, Mn)P₂ではない可能性が高い。一方、Mnを他の3d遷移金属に置き換えた(Cd, TM)GeP₂ではTMとしてVやCrを用いると強磁性が安定化されることがわかった。これらはいまだに合成されていないが、実験的な検証が待たれる。I-III-VI₂タイプのCu(Al, TM)As₂についても計算機ナノマテリア

ルデザインの立場からの研究が進行中である。

3. おわりに

新しい物性物理学の手法、分野としての計算機ナノマテリアルデザインとナノスピントロニクスに関する研究について、簡単な紹介を行った。計算機ナノマテリアルデザインは、電子状態計算による単なる物性シミュレーションではなく、望んだ性質を設計するという側面が重要なポイントである。物性理論の新しい方向性を示しているとともに、産業構造の変革にともしない、今後の材料開発における最も重要な要素技術の基礎となると考えている。またナノスピントロニクスが高機能、超高速、省エネルギーデバイス開発のための有望な基盤技術であることは疑うべくもないが、それだけではなく、新しい物性物理の分野としての展開が著しく、目下、大変エキサイティングな場を提供している。今後もグループとしてこれらの研究テーマに取り組んでいきたい。

