



東北大学

2009年7月30日

報道機関 各位

東北大学金属材料研究所

スピントロニクス材料開発シミュレーション法の確立

—室温強磁性半導体の実現に向けて—

(説明)

今回、東北大学金属材料研究所の大江純一郎研究員、前川禎通教授らの研究グループは、東京大学大学院工学系研究科の中村和磨助教、有田亮太郎准教授の研究グループと共同で、磁性半導体に対する新しいコンピュータシミュレーション法を開発しましたのでお知らせします。

この方法を用いることにより、現実的な物質中の磁氣的性質を、電子間相互作用を含めて正確に解析することが可能になりました。

今回開発された方法は、磁性半導体の理論的解析に新しい展開を与えています。これまで強磁性半導体は低温でしか作成できませんでしたが、この方法を用いて、高温でも強磁性を示す磁性半導体の物質設計がなされ、スピントロニクスデバイス(*1)の実現に多大な貢献をするものと期待されます。

本研究成果は日本物理学会が発行する英文誌「Journal of the Physical Society of Japan」の注目記事として選ばれました(2009年8月号)。

(概要説明)

○研究の背景と概要

私達が日常使う電化製品の中には無数の電子デバイスが組み込まれています。一般的なデバイスは、トランジスタのように電氣的性質を利用するものか、ハードディスクのように磁氣的性質を利用するものに分かれます。近年、これら電氣的、磁氣的性質の両方を一つのデバイスの中で利用する「スピントロニクス」と呼ばれる分野が提唱され、国内外、さらには企業と大学の垣根を越えて盛んに研究が行われています。このスピントロニクスデバイスを実現するための材料として、磁性半導体が注目されています。通常の半導体には磁氣的性質はありませんが、電気伝導を大きくするために添加する不純物として磁性を持つ原子を選ぶと、電気・磁気両方の性質を持つようになります。デバイス中で磁氣的な性質を利用するには、この磁性不純物の磁石の向きが同じ方向を向く(強磁性結合)必要があります。現在までに、この強磁性結合を示す磁性半導体がいくつか報告されていますが、強磁性結合を得るにはデバイスをマイナス130℃程度(キュリー温度)まで冷やさなければなりません。もちろんこのままではデバイスとしては使えないので、高温でも強磁性結合を示す半導体の探索が必要になります。探索の方法として、闇雲に物質を変えて実験しているのでは、時間と費用がいくらあっても足りません。そこで、理論的に強磁性の原因を理解し、よい磁性半導体材料の予想をする必要があります。その際、実際の物質の磁氣的性質を予想する方法として、コンピュータを用いて物質のシミュレーションを行う方法があります。

○ 主要な成果

物質の磁性を議論する際、電子が原子核の近くに局在した軌道にいるか、物質の中で広がった分布をしているかが重要になります。電子が局在している場合、電子同士の反発力が顕著になり、問題を複雑にします。現在までに行われているコンピュータシミュレーションでは、電子間の反発力を近似を用いて扱っていました。一方、電子間の反発力を正確に扱うには、材料を簡単なモデルに焼きなおす必要があるため、実際の物質設計などを行うのは困難でした。

本研究ではこれらの困難を克服するため、2種類の方法を利用することを提案しました。一つは密度汎関数法(*2)と呼ばれる方法で、現実の物質を記述できますが、反発力は近似でしか取り込めません。もう一つは量子モンテカルロ法(*3)と呼ばれるもので、反発力は正しく取り込めますが、今までは簡単なモデルにしか適応できませんでした。開発された方法では、密度汎関数法で求められた現実的なパラメータを用いて、量子モンテカルロ法の計算を行います。このことにより、磁性半導体のより正確な記述が可能になります。論文では、実際の強磁性半導体(Ga,Mn)As(図1)に対して計算が行われ、実験とよい一致を得ました。二つの磁性不純物間には、長距離にわたって強磁性結合を示し、低温になるほど強磁性結合は強くなることが示されました。このことにより、開発された方法が磁性半導体を解析する強力な手段となることが明らかになりました。

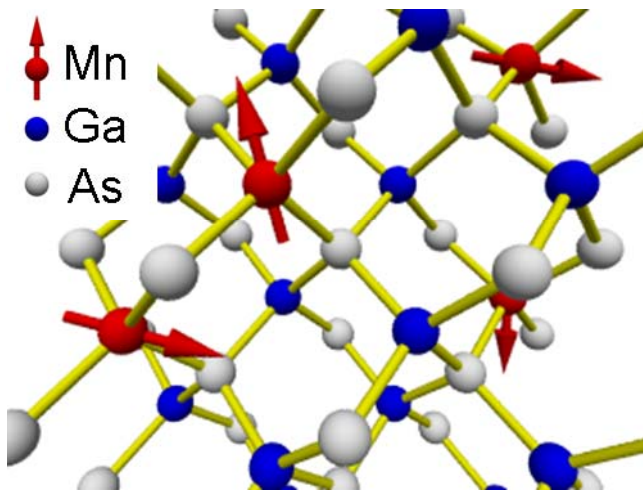


図1：磁性半導体(Ga,Mn)Asの構造。
Ga原子がランダムにMn原子に置換される。Mn原子は磁石の性質を持っており、それぞれの磁石が同じ方向を向く場合、強磁性半導体となる。

○本研究のインパクト

今回開発された方法は、実際の磁性半導体を電子間相互作用まで含めて正確にシミュレートできるものであり、磁性半導体の理論的解析に新しい展開を与えています。この方法を用いて、高いキュリー温度を持つ強磁性半導体の物質設計や、強磁性半導体における磁氣的臨界現象に対しても有効な解析ができるものと期待されます。

(用語解説)

- *1 スピントロニクスデバイス 電子の持つ電氣的性質(電荷)、磁氣的性質(スピン)の両方を一つの素子の中で利用するデバイス。次世代メモリーなどに応用が期待される。
- *2 密度汎関数法 1960年代にWalter Kohnらによって提唱された、電子状態を計算するための方法。電子を多数含む系でも、少ない計算量でエネルギーなどを求められる。
- *3 量子モンテカルロ法 与えられた系の物理量を、量子効果まで含めて正確に計算する方法。有限温度の効果なども取り込むことができる。

(論文名・著者名)

論文名

Combined Approach of Density Functional Theory and Quantum Monte Carlo Method to Electron Correlation in Dilute Magnetic Semiconductors

雑誌名

Journal of the Physical Society of Japan **78** (2009) No. 8 p. 083703

著者名 (日本語表記)

Jun-ichiro Ohe (大江純一郎), Yoshihiro Tomoda (友田良寛), Nejat Bulut, Ryotaro Arita (有田亮太郎), Kazuma Nakamura (中村和磨), Sadamichi Maekawa (前川禎通)

(著者所属)

東北大学金属材料研究所 (大江、友田、Bulut、前川)

東京大学大学院工学系研究科 (有田、中村)

(お問い合わせ先)

東北大学金属材料研究所 金属物性論研究部門

前川 禎通 (教授)

TEL: 022-215-2005, FAX: 022-215-2006

Eメール: maekawa@imr.tohoku.ac.jp