

磁性半導体中の不純物電子状態

高橋 正雄

神奈川工科大学 基礎・教養教育センター

Impurity electron states in magnetic semiconductors

Masao Takahashi

Kanagawa Institute of Technology

E-mail:taka@gen.kanagawa-it.ac.jp

Abstract

EuO、EuS などの磁性半導体中の不純物電子状態として、① Gd がドーピングされた場合、②格子欠陥が生じた場合、を考察する。不純物によって導入されたキャリア（伝導電子）は、 Eu^{2+} イオン上の局在スピンとの交換相互作用を通じて、温度や外部磁場の影響を受ける。今回は、これらの電子状態を扱うモデルを提案し、このモデルに対して動的 CPA を適用し定式化する。本格的な数値計算を行なう前段階として、常磁性・強磁性の 2 つの状態をまず調べる。

Key Word: magnetic semiconductor (MS), exchange interaction, coherent potential approximation (CPA), impurity, defect

1 はじめに

磁性半導体は物性物理学の中でも 30 年以上の歴史をもつ分野である。1970 年代には EuO、EuS などの Eu カルコゲナイドを中心に活発な研究が行なわれ、磁気ポーラロンなどの重要な物理概念を生み出した。1980 年代には II-VI 族化合物の +2 価の正イオンを同じ +2 価の Mn イオンで置き換えた $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ などの希薄磁性半導体が研究の中心になった。II-VI 族は、巨大ゼーマン効果など興味深い磁気光現象が観測され活発に研究されたが、キャリア（伝導電子またはホール）の数が少ないことから、半導体素子の材料としてはあまり注目をあびることはなかった。ところが、1996 年に東北大学のグループが III-V 族化合物の GaAs に Mn をドーピングして強磁性になることを発見すると、電子のもつ電荷とスピンの両方の特性を生かす新しいデバイスの材料として多くの研究者を引き付けた。その後の急速な発展は、「スピントロニクス」とよばれる工学分野を生んだほどである。強磁性の発現にホールが関与していることが確実なことから「キャリア誘起強磁性」と命名されたこの磁性の起源と発現のメカニズム

に関しては、私達はすでに一連の研究発表をしている [1]。私達はこの研究の中で、他の希薄磁性半導体と同様に、キャリア（p ホール）と局在スピン（Mn 3d スピン）との間の交換相互作用がこの物質で最も重要な役割を担っていると考えて簡単なモデルを仮定し、動的コヒーレント・ポテンシャル近似（動的 CPA）を適用した。その結果、この系では p ホールが結晶内を自由に動くのではなく、Mn イオンに準束縛され強くスピン結合し、ホッピング伝導する過程で局在スピンを揃えて強磁性を発現させる二重交換型のメカニズムがはたらく可能性が強いことを明らかにした [2, 3]。

最近、EuO や EuS などの磁性半導体が再び、実験的にも [4-7] 理論的にも [8-11] 新しい観点から検討され始めている。既に述べたように、このテーマそのものは長い歴史を持っている [12]。しかしこれまでの理論的研究は、1 つの不純物のまわりの電子状態が議論されたり [13, 14]、不純物のクーロン引力の効果を無視して電子が完全結晶の構造をもつ磁性半導体の伝導電子帯の中を運動するとして扱ったものだった [15, 16]。本研究報告では、EuO や EuS などの磁性半導体に、Gd

などの磁性不純物が導入されたり格子欠陥などが生じたりして、結晶内にキャリア（伝導電子）が導入された場合を取り上げる。そこでは伝導電子（ d 電子）と局在スピン（ f スピン）との間の d - f 交換相互作用と、不純物原子または格子欠陥の結晶内分布の不規則性（ランダムネス）が大きな役割を果たすことが期待される。準局在する場合でも、捕獲中心に交換相互作用を持つ場合（Gd-doped EuO, EuS）と交換相互作用を持たない場合（格子欠陥）とでは、電子状態の振る舞いは異なるはずである。さらに将来的には、2 電子が格子欠陥に捕まって引き起こす Eu-rich EuO の金属半導体転移のメカニズムはどうなっているのかを調べたい。これらの問題はかつて一通り研究されたものの、当時の理論的技法が未成熟なこともあって、不完全な結論のまま放置されている。これらの諸問題に最新の理論的技法を適用して、理論的な指針を与えることが本研究の目的である [17]。

2 モデルの設定

EuO や EuS などは NaCl 型結晶構造をもつ磁性半導体である。結晶中で Eu^{2+} イオンは $4f^7$ 電子構造からくる局在スピン ($S = 7/2$) をもち、完全結晶では、 f スピン間の交換相互作用のため、強磁性体となる（キュリー温度は EuO が $T_c = 69\text{K}$ 、EuS は $T_c = 16\text{K}$ ）。光照射や不純物等により導入された伝導電子は d 電子の性格を持ち、 d - f 交換相互作用を通して外部磁場や温度、磁気秩序の影響を受ける。ここでは不純物半導体として、完全格子中の Eu イオンの一部（モル濃度にして x ）が、ランダムに Gd^{3+} や格子欠陥で置き換わっている場合を考える。それを記述するハミルトニアンは、

$$H = \sum_{m,n,\mu} \varepsilon_{mn} a_{m\mu}^\dagger a_{n\mu} + \sum_n u_n, \quad (1)$$

と表される。となる。この第 1 項は、伝導電子の運動エネルギーを表す項で、 $a_{n\mu}^\dagger (a_{n\mu})$ はスピン μ ($=\uparrow$ または \downarrow) をもつ n 番目のサイトのワニエ電子の生成（消滅）演算子である。 ε_{mn} は n 番目のサイトから m 番目のサイトへの遷移エネルギーで、両サイトが不純物原子や格子欠陥であっても母体の半導体化合物と等しいと仮定されている。 u_n は伝導電子が不純物サイト n で受ける局所的ポテンシャルを表し、そのサイトが母体の磁性イオン (Eu^{2+}) によって占有されるか、不純

物（格子欠陥）によって占有されるかで、以下に示すように異なる。すなわち、 n 番目のサイトが母体の磁性イオン (Eu^{2+}) で占められる場合は、電子スピンと磁性イオンのもつ局在スピン S_n との間に交換相互作用がはたらき、 u_n は次の u_n^M で与えられる：

$$u_n^M = -I \sum_{\mu,\nu} a_{n\mu}^\dagger \sigma_{\mu\nu} \cdot S_n a_{n\nu} \quad (2)$$

ここで $\sigma_{\mu\nu}$ は電子のパウリ行列の $\mu\nu$ 成分を表し、交換相互作用の強さは $IS (> 0)$ で与えられる。

n 番目のサイトが格子欠陥の場合には、（局在スピンは存在しないから交換相互作用ははたらかないが）強いクーロン引力がはたらく。このクーロン・ポテンシャルを次の井戸型の引力ポテンシャル (u_n^V) で仮定した：

$$u_n^V = E_V \sum_{\mu} a_{n\mu}^\dagger a_{n\mu} \quad (3)$$

引力ポテンシャルを仮定するから、 $E_V < 0$ である。

n 番目のサイトが Gd^{3+} のようにクーロン相互作用と交換相互相互作用の両方を含む場合には、次の u_n^G を取る：

$$u_n^G = E_G \sum_{\mu} a_{n\mu}^\dagger a_{n\mu} - I \sum_{\mu,\nu} a_{n\mu}^\dagger \sigma_{\mu\nu} \cdot S_n a_{n\nu} \quad (4)$$

ここで、 Eu^{2+} も Gd^{3+} も電子配置が等しく ($4f^7$)、 $S = 7/2$ の局在スピンをもつことから、交換相互作用の大きさ (IS) は Gd イオンでも Eu イオンでも等しいと仮定した。しかし母体化合物中の Eu^{2+} と置き換わった Gd^{3+} は、ドナーとなって電子を引き付ける。このクーロン引力は本来長距離型であるが、キャリア濃度が濃くなれば他の電子によってスクリーニングされ短距離型に移行する。今回のモデルではこのクーロン引力を、そのサイトに電子がいるときだけ作用すると仮定し、その引力の強さを $E_G (< 0)$ で表した。

このように、 H は、磁気イオンの配置の不規則性を含むだけではなく、磁気イオン上に存在する局在スピンの揺らぎからくる不規則性も含んでいる。動的コヒーレント・ポテンシャル近似（動的 CPA）は、このような局在スピンの揺らぎを含む不規則系に有効である [2]。

3 動的 CPA の適用

動的 CPA についてはすでにレビューでも書いているので [2, 3, 16], ここでは簡単に述べるにとどめる。強磁性半導体中でキャリアが感じる有効ポテンシャルがキャリアのもつスピンの向き (上向きスピン↑か下向きスピン↓か) によって異なることを考慮して、2つのコヒーレント・ポテンシャル (Σ_\uparrow と Σ_\downarrow) で記述される有効媒質を仮定する。この有効媒質中のある1つのサイトに注目し、そこに Eu^{2+} イオン、格子欠陥、 Gd^{3+} イオンを置いたときの多重散乱を表す t 行列をそれぞれ、 t^M 、 t^V 、 t^G 、と表すことにする。すると、格子欠陥がモル濃度 x だけ生じた場合の CPA 条件は

$$(1-x)\langle t_{\uparrow\uparrow}^M \rangle + xt_{\uparrow\uparrow}^V = 0 \quad (5a)$$

$$(1-x)\langle t_{\downarrow\downarrow}^M \rangle + xt_{\downarrow\downarrow}^V = 0 \quad (5b)$$

で与えられる。 Gd^{3+} をモル濃度 x だけ導入した場合の CPA 条件は

$$(1-x)\langle t_{\uparrow\uparrow}^M \rangle + x\langle t_{\uparrow\uparrow}^G \rangle = 0 \quad (6a)$$

$$(1-x)\langle t_{\downarrow\downarrow}^M \rangle + x\langle t_{\downarrow\downarrow}^G \rangle = 0 \quad (6b)$$

で与えられる。 $t_{\uparrow\uparrow}^M$ ($t_{\downarrow\downarrow}^M$) と $t_{\uparrow\uparrow}^G$ ($t_{\downarrow\downarrow}^G$) は↑(↓) スピンをもつキャリアの多重散乱を表すが、その中に局在スピンの z 成分 S_z を含むので、

$$\langle t_{\uparrow\uparrow}^M \rangle = \sum_{S_z=-S}^S t_{\uparrow\uparrow}^M \exp\left(\frac{\hbar S_z}{k_B T}\right) / \sum_{S_z=-S}^S \exp\left(\frac{\hbar S_z}{k_B T}\right) \quad (7)$$

のように熱平均をとることにする。ここで \hbar は、局在スピンにはたらく有効磁場で、 T は温度、 k_B はボルツマン定数である。

本研究では簡単化のため、これまでと同様、非摂動系のバンド (親バンド) として、準楕円型バンド (バンド幅 2Δ) を仮定する:

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2}{\pi\Delta} \sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon}{\Delta}\right)^2}, \quad (8)$$

このとき、コヒーレント・ポテンシャル Σ_μ ($\mu = \uparrow$ or \downarrow) で記述される有効媒質中を運動する電子のグリーン関数の対角成分 $F_\mu(\omega)$ は計算できて、

$$F_\mu(\omega) = \int_{-\Delta}^{\Delta} d\varepsilon \frac{\rho(\varepsilon)}{\omega - \varepsilon - \Sigma_\mu(\omega)} \quad (9)$$

$$= \frac{2}{\Delta} \left\{ \left(\frac{\omega - \Sigma_\mu}{\Delta} \right) - \sqrt{\left(\frac{\omega - \Sigma_\mu}{\Delta} \right)^2 - 1} \right\} \quad (10)$$

となる。これから、

$$\frac{\Sigma}{\Delta} = \frac{\omega}{\Delta} - \frac{1}{(F\Delta)} - \frac{(F\Delta)}{4} \quad (11)$$

が導かれる (添え字の μ を省略)。状態密度 $D_\mu(\omega)$ は

$$D_\mu(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{-\Delta}^{\Delta} d\varepsilon \frac{\rho(\varepsilon)}{\omega - \varepsilon - \Sigma_\mu(\omega)} \quad (12)$$

$$= -\frac{1}{\pi} \text{Im} F_\mu(\omega) \quad (13)$$

で計算される。

4 Gd をドーブした場合

4.1 常磁性温度領域

今回は、Gd をドーブした場合について、具体的に計算を進める。私達のモデルでは、Gd サイトは交換相互作用の他に $E_G (< 0)$ のクーロン・ポテンシャルを与える。常磁性温度領域では↑スピン電子も↓スピン電子も有効媒質中で同じコヒーレント・ポテンシャル $\Sigma (= \Sigma_\uparrow = \Sigma_\downarrow)$ を受ける。そのため有効媒質中を運動する電子のグリーン関数の体格成分も電子スピンの向きに関係なく $F (= F_\uparrow = F_\downarrow)$ とおくことができる。さらに簡単化のため局在 f スピンを古典的と仮定する。すなわち $S \rightarrow \infty$ とする、つまり IS の値を一定に保ったまま $1/S$ を無視する。そうすると、常磁性温度での Gd サイトの散乱の t 行列は

$$\begin{aligned} \langle t^G \rangle &= \left(\frac{1}{2} \right) \frac{E_G - \Sigma - IS}{1 - (E_G - \Sigma - IS)F} \\ &+ \left(\frac{1}{2} \right) \frac{E_G - \Sigma + I(S+1)}{1 - (E_G - \Sigma + IS)F} \end{aligned} \quad (14)$$

となる。これを使って、常磁性の CPA 条件は、

$$(1-x)\langle t^M \rangle + x\langle t^G \rangle = 0 \quad (15)$$

となる。この条件は変数 ξ を

$$\xi = \Sigma + \frac{1}{F} = \omega - \frac{\Delta^2}{4} \quad (16)$$

定義したとき、 ξ の5次関数に帰着し

$$\xi^5 + A\xi^4 + B\xi^3 + C\xi^2 + D\xi + E = 0 \quad (17)$$

係数は

$$A = -(2E_G + \omega) \quad (18)$$

$$B = E_G^2 + \frac{\Delta^2}{4} + 2\omega E_G - 2(IS)^2 \quad (19)$$

$$C = 2(\omega + E_G)(IS)^2 - \omega E_G^2 - \frac{E_G}{2}\Delta^2 + \frac{\Delta^2}{4}E_G x \quad (20)$$

$$D = \frac{\Delta^2}{4}[(1-x)E_G^2 - (IS)^2] + (IS)^2[(IS)^2 - E_G^2 - 2\omega E_G] \quad (21)$$

$$E = (E_G^2 - (IS)^2)\omega(IS)^2 + \frac{\Delta^2}{4}E_G(IS)^2 x \quad (22)$$

となる。

4.2 不純物準位のエネルギーの計算

磁性半導体結晶に不純物が1つだけ入ったときに生ずるエネルギー準位を、このモデルで計算しておく。CPA 条件 (15) 式で $x \rightarrow 0$ としたとき不純物による散乱項 $\langle t \rangle$ が意味をもつのは、(14) 式が発散するときである。 $x \rightarrow 0$ のときの CPA 条件は

$$\Sigma = (IS + \Sigma)(IS - \Sigma)F \quad (23)$$

である。(14) 式の分母が0になるエネルギー値 ω が不純物準位のエネルギー値を与える。このエネルギー値には、電子スピンの局在スピンの平行結合をする場合と反平行結合する場合の2つの値があるが、平行結合状態の場合には、この条件は

$$(E_G - IS)F - \Sigma F = 1 \quad (24)$$

である。楕円型モデル・バンドの満たす式 (11) とこれらの式を組み合わせるとスピンの平行結合状態の不純物準位のエネルギー値として

$$\omega = E_G - IS + \frac{(IS - E_G)\Delta^2}{4E_G(2IS - E_G)} \quad (25)$$

を得る。同様に反平行スピンの結合状態の不純物準位エネルギー値としては

$$\omega = E_G + IS + \frac{(IS + E_G)\Delta^2}{4E_G(2IS + E_G)} \quad (26)$$

を得る。

4.3 強磁性の場合

局在スピンの向きが $+z$ 方向に揃っているとする。考えているサイトに Gd イオンがあり、その局在スピンの z 成分も $S_z = S$ とする。しかし、Eu イオンと異なり、Gd イオンは引力ポテンシャル E_G も持つから、Gd サイトでの \uparrow スピン電子の t 行列は、

$$\langle t_{\uparrow\uparrow}^G \rangle = \frac{E_G - \Sigma_{\uparrow} - IS}{1 - (E_G - \Sigma_{\uparrow} - IS)F_{\uparrow}} \quad (27)$$

\downarrow スピン電子の t 行列は、古典スピンを仮定するならば、

$$\langle t_{\downarrow\downarrow}^M \rangle = \frac{E_G - \Sigma_{\downarrow} + IS}{1 - (E_G - \Sigma_{\downarrow} + IS)F_{\downarrow}} \quad (28)$$

となる。したがって CPA 条件は、 \uparrow スピン電子に対して、

$$(1-x)\langle t_{\uparrow\uparrow}^M \rangle + x\langle t_{\uparrow\uparrow}^G \rangle = 0 \quad (29)$$

\downarrow スピン電子に対して、

$$(1-x)\langle t_{\downarrow\downarrow}^M \rangle + x\langle t_{\downarrow\downarrow}^G \rangle = 0 \quad (30)$$

となる。

局在スピンを古典的に扱う場合（古典スピン近似）には、交換相互作用による電子スピンの反転はないから、更に簡単になり、CPA 条件は $(F\Delta)$ の3次方程式に帰着する。

$$(F\Delta)^3 + a(F\Delta)^2 + b(F\Delta) + c = 0 \quad (31)$$

係数は \uparrow スピン電子に対しては、

$$a = 4 \left[\frac{E_G - 2(\omega + IS)}{\Delta} \right] \quad (32)$$

$$b = 4 + 16 \left(\frac{\omega + IS}{\Delta} \right) \left(\frac{\omega + IS - E_G}{\Delta} \right) \quad (33)$$

$$a = -16 \left[x \left(\frac{E_G}{\Delta} \right) + \left(\frac{\omega + IS - E_G}{\Delta} \right) \right] \quad (34)$$

$$(35)$$

となる。 \downarrow スピン電子に対しては、上の係数 a, b, c の中で IS を $-IS$ で置換するだけでよい。

5 計算結果：常磁性の場合

5.1 EuX のパラメータ

各種パラメータの値を見積もるため、まず不純物が含まれていない場合 ($x = 0$) の状態密度の結果を図1

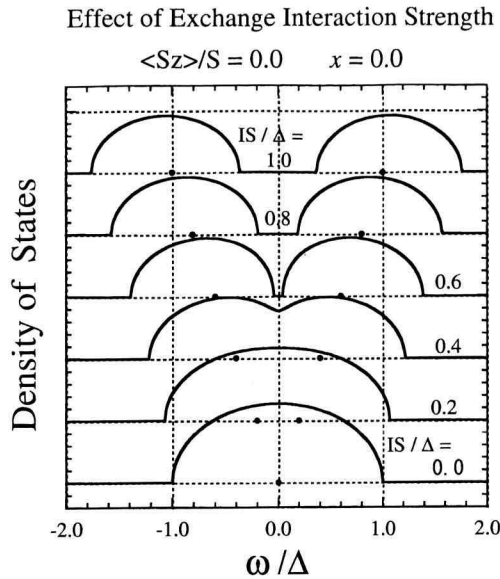


図 1: エネルギー ω の関数として示された常磁性温度での EuX の状態密度 ($x = 0$)。交換相互作用の大きさ $IS/\Delta = 0.0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$ に対して計算された結果を、横軸を上下にシフトさせて同じ図に描いた。横軸上の点線はエネルギー値 $\omega = \pm IS$ に対応する。

に示す。交換相互作用の大きさ IS が 0 のときは、式 (8) で定義した半楕円型のモデルバンド (バンド幅 2Δ) に一致する。バンドの形は交換相互作用の大きさ IS とバンド幅の半値 Δ の比によって大きく異なる。常磁性温度では各サイトの局在スピンは熱的に揺らいでいて、その向きは完全にランダムである。その局在スピンの間にはたらく交換相互作用によって散乱されるので、電子はブロッホ状態でなくなる。状態密度 (伝導電子バンド) はエネルギー的に広がりを見せる。それでも交換エネルギー IS が小さいうちは電子スピンはよい量子数となっていて、電子は \uparrow スピン電子、 \downarrow スピン電子の性格をほぼ保ちながら運動する。(常磁性では \uparrow と \downarrow は重なって、1つのバンドを保っている。) ところが、交換相互作用が強くなり ($IS/\Delta \gtrsim 0.5$) となると、バンドは2つに分裂する。交換相互作用のエネルギー固有値は $\pm IS$ であることに注意。交換相互作用が強くなり、電子の運動エネルギーの利得よりも優勢になると、電子は電子スピンの向きと局在スピンの向きが平行か反平行かでその状態が特徴付けられるようになるからである。交換エネルギーが大きいときに分離した2つのバンド (図 1) はそれぞれ、平行スピン

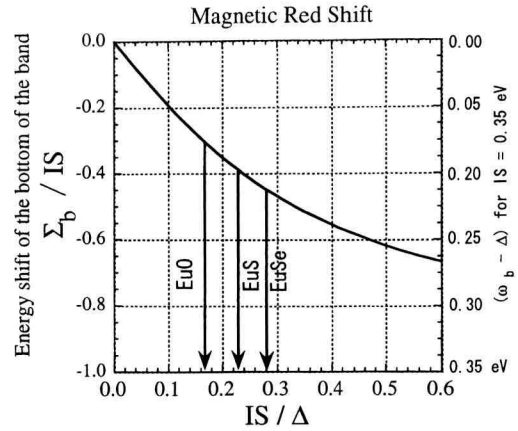


図 2: 交換相互作用の大きさ IS/Δ の関数として示された常磁性温度でのバンドの底のエネルギー変化 (実線)。矢印は $IS = 0.35$ eV としたときの、磁化による EuO と EuS の光学的吸収エネルギーの低下 (Magnetic Red Shift) を示す。

結合バンド ($-IS$ のまわり) と反平行スピン結合バンド ($+IS$ のまわり) である。

EuX ではこの2つのバンドへの分離は確認されていないから、対応するパラメーターは $(IS/\Delta) \lesssim 0.5$ の範囲にある。ところで、EuX では常磁性から強磁性に移るとき光学的吸収端のエネルギーが低下する (磁気的赤方変移、Magnetic Red Shift)。光学吸収がバンド間遷移によって起こされていると考え、バンドの底のエネルギーの低下は、伝導バンドの底が交換相互作用を通してエネルギー的に低下したためであると解釈できる。強磁性の場合のバンドの底のエネルギーは $\omega_b = -\Delta - IS$ である。すなわちモデル・バンドの底のエネルギー $-\Delta$ よりも交換相互作用の利得の分 $-IS$ だけ低い。コヒーレント・ポテンシャル中を運動する準粒子のエネルギーは $\omega = \varepsilon + \Sigma$ とみなせる。そうすると、バンドの底のエネルギーは $\varepsilon = -\Delta$ に対応し $\omega_b = -\Delta + \Sigma_b$ である。この場合には、(10) 式は $F\Delta = -2$ と簡単になり、これを常磁性温度での CPA 条件 (15) 式 ($x = 0$) に代入すると、常磁性温度での交換相互作用によるバンドの底のエネルギーのシフト値 Σ_b として

$$\begin{aligned} \Sigma_b &= \omega_b + \Delta \\ &= -\frac{\Delta}{4} \left\{ \sqrt{1 + 16 \left(\frac{IS}{\Delta} \right)^2} - 1 \right\} \quad (36) \end{aligned}$$

を得る。(32) 式で計算されたバンドの底のエネルギーのシフト値 Σ_b を交換エネルギー (IS/Δ) の関数として図 2 に示す。ただし、シフト値は交換エネルギーで規格化して Σ_b/IS で示してあることに注意。EuX での交換相互作用はすべて、Eu 原子での $5d$ 電子と $4f$ スピンとの間の交換相互作用に起因すると思われる。このとき、 $4f$ 電子は局在しているから IS/Δ の違いは、伝導バンド幅 2Δ の違いに相当する。そこで $IS = 0.35\text{eV}$ として、EuO、EuS、EuSe の $5d$ バンド幅として、それぞれ 4.2eV 、 3.0eV 、 2.5eV を当てはめると、 IS/Δ の値は 0.166 、 0.234 、 0.280 となり、磁氣的赤方変移は 0.24eV 、 0.21eV 、 0.19eV と計算される。実験的に観測される磁氣的赤方変移はそれぞれ 0.27eV (EuO)、 0.18eV (EuS)、 0.13eV (EuSe) であるから、合理的な結果を与えることがわかる。

5.2 不純物バンドの形成

以下で私達は、EuO、EuS を念頭に、交換相互作用の強さを $IS/\Delta = 0.2$ に固定した。図 3 に引力ポテンシャルが強い場合の例として $E_G/\Delta = -1$ の状態密度の計算結果を色々な不純物濃度 x について示す。 $x \rightarrow 0$ の極限では式 (26) と (27) で示した不純物準位エネルギー (図 3 中の点) が出現する。不純物濃度 x が小さいときには、平行スピン結合、反平行スピン結合に相当する 2 つの不純物バンドが形成される。これは強い引力ポテンシャルによって不純物サイトに強く束縛された電子状態ができるため、交換相互作用によるエネルギー利得が大きいためである。不純物濃度が大きくなるにつれて ($x \gtrsim 0.02$)、エネルギーが高い反平行スピン結合の不純物バンドから親バンドに融合する。さらに x が大きくなると ($x \gtrsim 0.08$)、エネルギーの低い平行スピン結合の不純物バンドも親バンドに融合する。しかし、EuO、EuS ではこのような 2 つの不純物バンド (準位) は観測されていない。

次に図 4 に引力ポテンシャルが中間くらい強さである場合として、 $E_G/\Delta = -0.7$ の場合を示す。この場合にはエネルギーが高い反平行スピン結合の不純物バンドは最初から親バンドにほぼ融合していて、エネルギーの低い平行スピン結合の不純物バンドも比較的低い不純物濃度 ($x \gtrsim 0.02$) で親バンドに融合する。実際

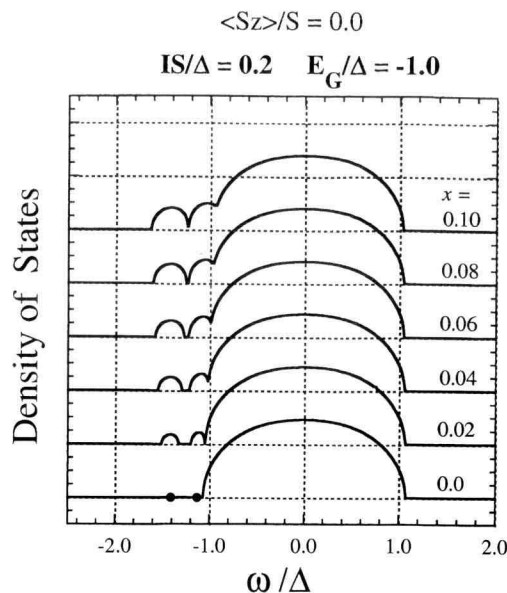


図 3: 強い引力ポテンシャル

の EuO はドナー準位が 0.03eV と非常に浅い状態であるから、図 4 のようなタイプと考えられる。このような不純物バンドの電子状態についてはこれまでほとんど知見が得られていないので、これからの課題である。

6 今後の課題と結び

今回の研究報告では、問題の所在を述べ、簡単なモデルを提案し解くべき方程式を導いた。しかし、具体的に実験と比較できる結果を出すためには、どのようなパラメータを取るのかがまず解決すべき課題となる。EuO、EuS の光学的吸収端の磁氣的赤方遷移を説明するためには、 $IS/\Delta = 0.2$ 程度と見積もられた。私達はこのモデルでの $x \rightarrow 0$ の極限で不純物準位のエネルギーを与える式も導いた。

実際に計算した強い引力ポテンシャルの場合 ($E_G/\Delta = -1$) には平行スピン結合バンドと反平行スピンバンドの 2 つが出現することがわかった (図 3)。中間強さの引力 ($E_G/\Delta = -0.7$) では平行スピン結合バンドだけが $x \rightarrow 0$ で出現し反平行スピンバンドは親バンドにあらかじめ融合していることがわかった。平行スピン結合バンドは $x \rightarrow 0$ で分離しているが、不純物濃度が濃くなるとすぐ親バンドと融合する。

局在スピンは有限 $S = 7/2$ だが、そのまま $T = 0$ の場合でも量子効果が存在するため、古典スピンを仮

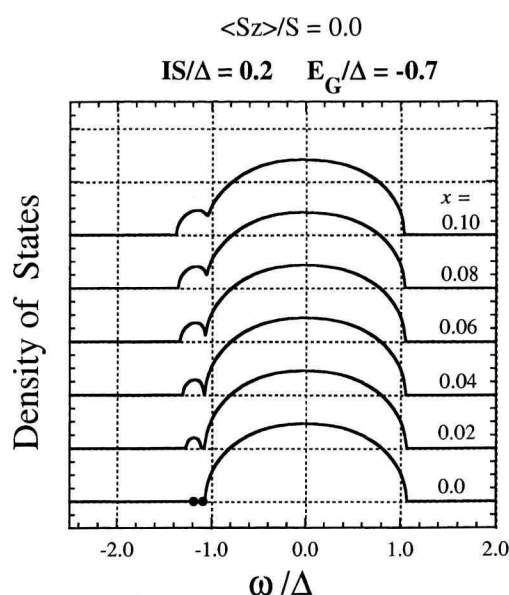


図 4: 中間引力ポテンシャル

定した。今回は状態密度だけを示したが、温度と自発磁化の関係、電気抵抗の磁化依存性なども今後の研究課題として上がってくるだろう。いずれにしろ、数値計算の実行が急がれる。

参考文献

- [1] 高橋 正雄:「磁性半導体の磁性と伝導および光学の性質の理論的研究」平成 14 年度～平成 16 年度 科学研究費補助金(基盤研究(C)(2)) 研究成果報告書(課題番号:14540311)、2005 年 5 月
- [2] 高橋正雄・久保健: 固体物理 Vol.38, no.10 (2003) 691-700.
- [3] Masao Takahashi: Recent Research Developments in Magnetism & Magnetic Materials Vol.1 -2003 Part I Ed. by S. G. Pandalai (Transworld Research Network, Kerala, India) pp. 195-225 (2003).
- [4] P. G. Steeneken, L. H. Tjeng, I. Elfimov, G. A. Sawatzky, G. Ghiringhelli, N. B. Brookes, and D.-J. Huang: Phys. Rev. Lett. **88**, (2002) 047201.
- [5] T. Matsumoto, K. Yamaguchi, M. Yuri, K. Kawaguchi, N. Koshizaki and K. Yamada : J. Phys.: Condens. Matter **16**, (2004) 6017.
- [6] A. Comment, J.-P. Ansermet, C. P. Slicher, H. Rho, C. S. Snow, and S. L. Cooper : Phys. Rev. B **72**, (2005) 014428.
- [7] H. Ott, S. J. Heise, R. Sutarto, Z. Hu, C. F. Chang, H. H. Hsieh, H.-J. Lin, and L. H. Tjeng : Phys. Rev. B **73**, (2006) 094407.
- [8] R. Schiller and W. Nolting: Phys. Rev. Lett. **86**, (2001) 3847.
- [9] P. Sinjukow and W. Nolting: Phys. Rev. B **69** (2004) 214432.
- [10] P. Sinjukow and W. Nolting: J. Magn. Magn. Mat. 272-276, e303 (2004)
- [11] D. B. Ghosh and M. De, and S. K. De: Phys. Rev. B **70** (2004) 115211.
- [12] 磁性半導体のレビューとして、A. Mauger and C. Godart: Phys. Rep. 141 (1986) 51.
- [13] M. Takahashi and T. Kasuya: J. Phys. Soc. Jpn. **52**, (1983) 3127.
- [14] M. Takahashi and T. Kasuya: J. Phys. Soc. Jpn. **52**, (1983) 3138.
- [15] この時期までの理論的なレビューとして、高橋正雄: 固体物理 Vol.32, no.12 (1997) pp.929-1014.
- [16] 高橋正雄:物性研究, Vol. 70, No. 1 (1998) p. 26-35.
- [17] Masao Takahashi : 4th International Conference on Physics and Application of Spin-related phenomena in Semiconductors (August, 15-18, 2006, Sendai) Program and Abstracts Booklet, PB47.