

キャリア誘起強磁性の起源 —強い交換作用の極限—

長谷野 修司¹・下田 尚弘¹・高橋 正雄²

¹ 応用化学科平成 15 年 3 月卒業

² 一般科

Origin of carrier-induced ferromagnetism - Limit of strong exchange interaction-

Shuji HASENO¹⁾, Naohiro SHIMODA¹⁾, Masao TAKAHASHI²⁾,

Abstract

We considered the case of a strong exchange interaction limit of a diluted magnetic semiconductor (DMS) where the magnetic impurity band is separate from a host band. In the case it is thought that a double exchange like mechanism works ideally. This model calculation showed that the curie temperature was proportional to \sqrt{x} .

Key Words: diluted magnetic semiconductor (DMS), double exchange type interaction, magnetic impurities band

1. 序論

希薄磁性半導体 (diluted magnetic semiconductor: DMS) とは半導体中の非磁性イオンの一部を磁性イオンでランダムに置換した半導体混晶である。DMS は、半導体と磁性体の両方の特性を持っており、特に $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ では $x=0.05$ 付近でキュリー温度 $T_C=110\text{K}$ の強磁性が出現することが確認されている。

しかしながら $T_C=110\text{K}$ では実用性はないに等しく、実用化に向けて常温で強磁性が発現する DMS の開発が進められている。その開発には強磁性発現のメカニズムを理解する必要がある。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発現するメカニズムを「磁気的不純物バンド内での二重交換型メカニズム」とする理論が提出されている [3]。

先の理論を前提として、 $\text{A}_{1-x}\text{Mn}_x\text{B}$ のモデルで $x=0.05$ の場合を考える。この時、強い交換作用の場合と、交換作用が弱くても強い引力ポテンシャルを持つ場合は、不純物準位のまわりに磁気的不純物バンドが形成される。我々は磁気的不純物バンド内のメカニズムを理解する一端として、強い交換作用の極限で磁気的不純物バンドがホスト・バンドから離れて生じる場合を考え、その時のキャリア数、エネルギー、キュリー温度を算出した。

2. 希薄磁性半導体中の磁気的不純物バンド

図 1 はスピン反平行結合の不純物バンド ($x=0.05$) を取り出して描いたもので、モデル・バンドとして半楕円型の磁気的不純物バンドの形を仮定している。不純物準位 A のまわりに、状態数 x の不純物バンドが形成される。このとき、常磁性 (点線) の状態密度は

$$D_p(\omega) = \frac{\sqrt{2x}}{\pi\Delta} \sqrt{1 - \left(\frac{\omega}{\sqrt{x/2}\Delta} \right)^2} \quad (1)$$

で求められ、エネルギー領域 ($-\sqrt{x/2}\Delta \leq \omega \leq \sqrt{x/2}\Delta$) に down-spin と up-spin は同数 ($x/2$) の状態数が存在するが、強磁性の状態密度は

$$D_F(\omega) = \frac{2\sqrt{x}}{\pi\Delta} \sqrt{1 - \left(\frac{\omega}{\sqrt{x}\Delta} \right)^2} \quad (2)$$

で求められ、エネルギー領域 ($-\sqrt{x}\Delta \leq \omega \leq \sqrt{x}\Delta$) に down-spin の状態だけが x 存在することとなり、エネルギー的にも A の周りに広がる。もしも少数のキャリアが導入されたら、常磁性の場合はバンドの底の $\omega = -\sqrt{x/2}\Delta \approx -0.16\Delta$ 付近に入るが、強磁性の場合は ω

$= -\sqrt{x}\Delta \approx -0.22\Delta$ 付近に入る。そのため、強磁性になった方がキャリアの運動エネルギーの利得を得て安定化する。その理由は、キャリアは不純物サイトで局在スピンと強く反平行結合しているの、飛び移る両サイトの局在スピン同士が同じ向きをむいていた方が動き易いからである。運動エネルギーの利得による強磁性発現のこの説明は、磁気的不純物バンド内で二重交換型メカニズムがはたらくことを意味する。

状態密度

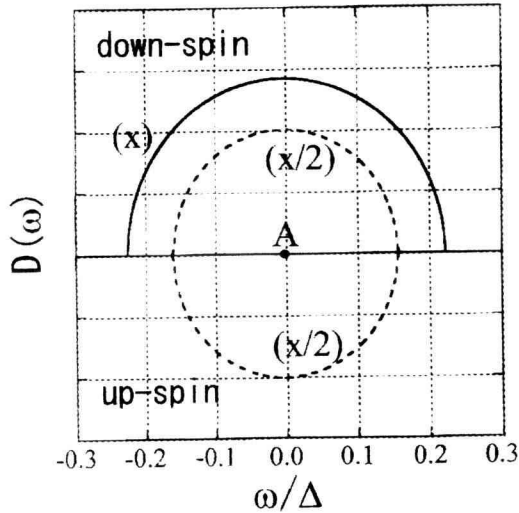


図1: 磁気的不純物バンドの説明図

3. 結果と解説

3-1 キャリア数

図2は常磁性時と強磁性時のキャリア数 n の図である。キャリアはこのように0から0.05まで単調増加する。実線が強磁性時、点線が常磁性のときで ϵ_F/Δ の値が異なる。先ほどの説明したように、低いエネルギーの方からキャリアが入るため、強磁性の方がエネルギー的に安定になる。常磁性キャリア数 n は

$$n_{\uparrow\downarrow} = \int_{-\infty}^{\epsilon_F} D_P(\omega) d\omega \quad (3)$$

で求めることができる。(1) 式をいれて計算すると

$$n_{\uparrow} = n_{\downarrow} = \frac{x}{2\pi} \left\{ \frac{\epsilon_F}{\Delta\sqrt{x/2}} \sqrt{1 - \left(\frac{\epsilon_F}{\Delta\sqrt{x/2}} \right)^2} + \frac{\pi}{2} + \sin^{-1} \left(\frac{\epsilon_F}{\Delta\sqrt{x/2}} \right) \right\} \quad (4)$$

が求められる。一方、強磁性キャリア数 n は

$$n_{\downarrow} = \int_{-\infty}^{\epsilon_F} D_F(\omega) d\omega \quad (6)$$

のように求めることができ、(2) を代入して計算すると

$$n_{\uparrow} = 0$$

$$n_{\downarrow} = \frac{x}{\pi} \left\{ \frac{\epsilon_F}{\Delta\sqrt{x}} \sqrt{1 - \left(\frac{\epsilon_F}{\Delta\sqrt{x}} \right)^2} + \frac{\pi}{2} + \sin^{-1} \left(\frac{\epsilon_F}{\Delta\sqrt{x}} \right) \right\} \quad (7)$$

を求められる。

キャリア数

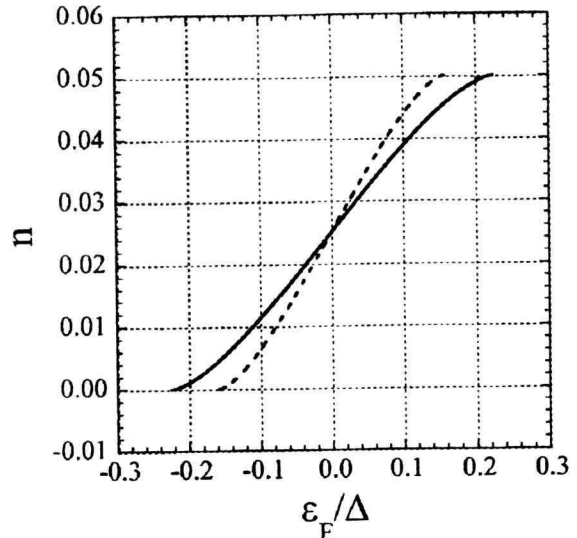


図2: キャリア数 n の図。キャリアのスピンの向きは up と down の2つの向きがある。

3-2 エネルギー

図3は常磁性時と強磁性時のエネルギー E_F と E_P の図である。

エネルギー

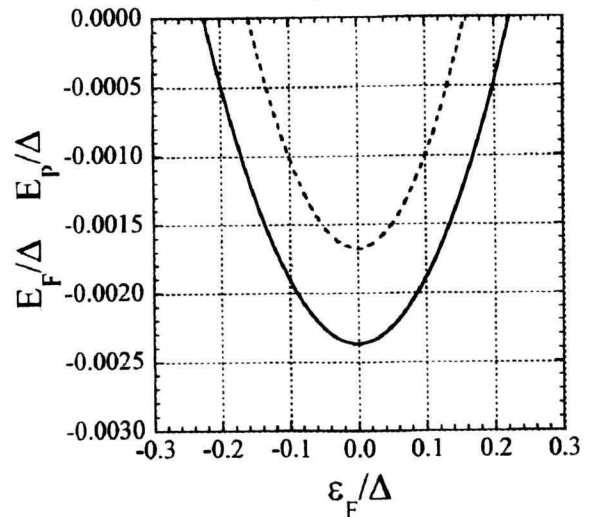


図3: エネルギーの図
実線が強磁性エネルギー E_F でこれは

$$E_F = \int_{-\infty}^{\epsilon_F} \omega D_F(\omega) d\omega \quad (8)$$

で求められ

$$E_F = -\frac{2x\sqrt{x}}{3\pi} \Delta \left\{ 1 - \left(\frac{\epsilon_F}{\Delta\sqrt{x}} \right)^2 \right\}^{\frac{3}{2}} \quad (9)$$

となる。

一方、点線が常磁性エネルギー E_P でこれは

$$E_P = 2 \times \int_{-\infty}^{\epsilon_F} \omega D_P(\omega) d\omega$$

で求められ

$$E_P = -\frac{x\sqrt{2x}}{3\pi} \Delta \left\{ 1 - \frac{2}{x} \left(\frac{\epsilon_F}{\Delta} \right)^2 \right\}^{\frac{3}{2}} \quad (10)$$

式になる。

キャリア数が同じとしたときに常磁性と強磁性のどちらが安定かを調べるために、 n の関数としてのエネルギーの図を、図4に示す。この図は、図3で ϵ_F/Δ の関数として表したエネルギーを n の関数にしたものである。

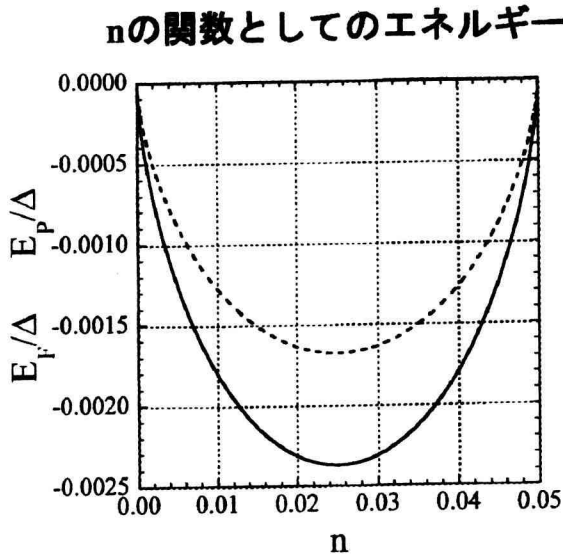


図4: n の関数としてのエネルギー

この図から n の関数として常磁性のときと強磁性のときのエネルギー差 (エネルギー利得) が得られる。この差がキャリア誘起強磁性を引き起こす。図から、キャリア数 n が $x/2$ の時にエネルギー利得が最大になることがわかる。

常磁性と強磁性のエネルギー差がキャリア数 n の関数として求められているので、

$$k_B T_C = \frac{2}{3x} (E_P - E_F) \quad (11)$$

の式を用いてキュリー温度とキャリア数 n の関数として

図5に示した。実線が今回の結果で、鎖線の方は高橋らが発表した $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ の計算値である。右側の温度はバンド幅 (Δ) を 2.0eV とすると求められる。高橋らが発表した $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ の最大キュリー温度が 110K なのに対して、今回の最大キュリー温度は 203.8K だった。これは $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ はホストバンドと溶け合っているので up-spin と down-spin が完全に片方のみになっていないため二重交換型メカニズムが一部完全には働かなかったのに対して、今回のモデルは二重交換型メカニズムが理想的に働く場合を想定したため、このような差がでたものと思われる。従って強い交換相互作用を持ち、磁気的不純物バンドがホストバンドから独立した物質を開発できれば、最大キュリー温度が約2倍まで上昇した強磁性体を作ることができると思われる。

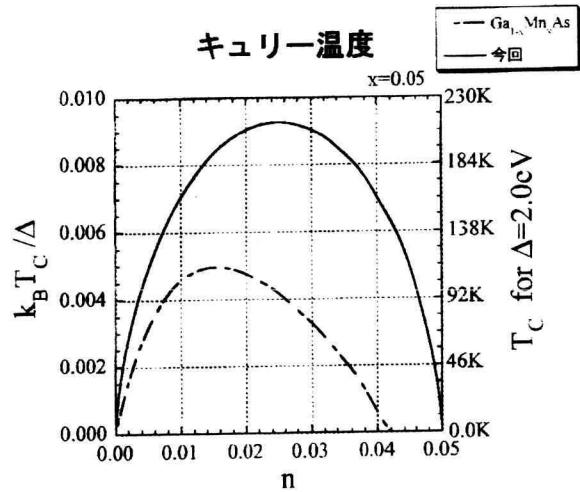


図5: 鎖線が $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ [3]、実線が今回の結果

4. まとめ

図5から、強い交換作用の極限で磁気的不純物バンドがホストバンドから離れて生じる場合、キャリア数 n が $x/2$ の時最大キュリー温度

$$k_B T_C = \frac{2(2-\sqrt{2})}{9\pi} \sqrt{x} \Delta \quad (12)$$

をとることと、キュリー温度は \sqrt{x} に比例するということがわかった。

5. 参考文献

- [1] 小暮 仁: Fortran 90—入門編— (産業図書)
- [2] M. Takahashi :
Phys. Rev. B 60 (1999) 15859
- [3] M. Takahashi and K. Kubo :
Phys. Rev. B 66 (2002) 153202
- [4] M. Takahashi and K. Kubo :
J. Phys. Soc. Jpn. 72 No.11 (2003) 2866