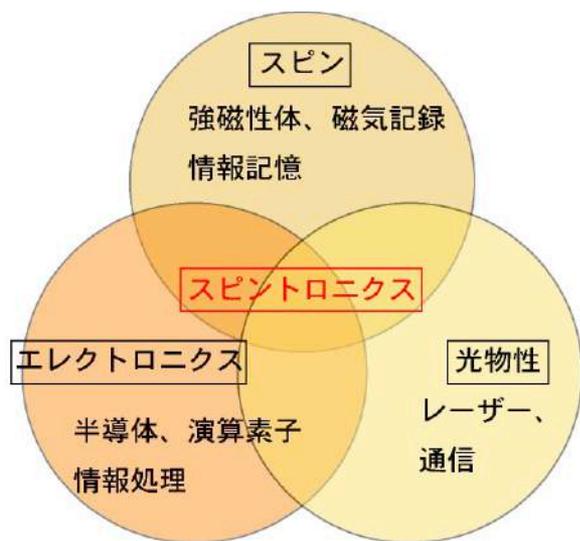


希薄磁性半導体

半導体ナノスピントロニクス デザイン

阪大工：佐藤和則

半導体スピントロニクス



電子の「スピン」を積極的に利用する
エレクトロニクス

- 電荷とスピンの自由度を使うエレクトロニクス
- GMR効果、TMR効果
→磁気ヘッド、
MRAM
- (In, Mn)As, (Ga, Mn)As
→強磁性体
従来の半導体と整合性良

References:

G. A. Prinz, Science 282 (1998) 1660. H. Ohno, JMMM 200 (1999) 110.
S. A. Wolf, Science 294 (2001) 1488. T. Dietl, Semicond. Sci. Tech. 17 (2002) 377.

ハードディスク磁気ヘッド

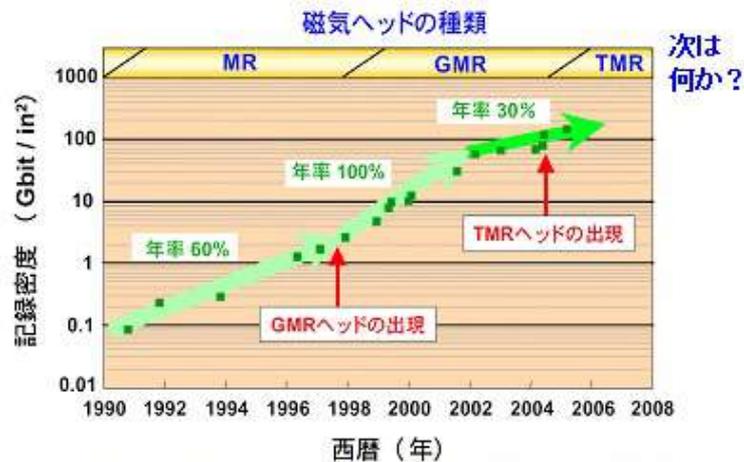
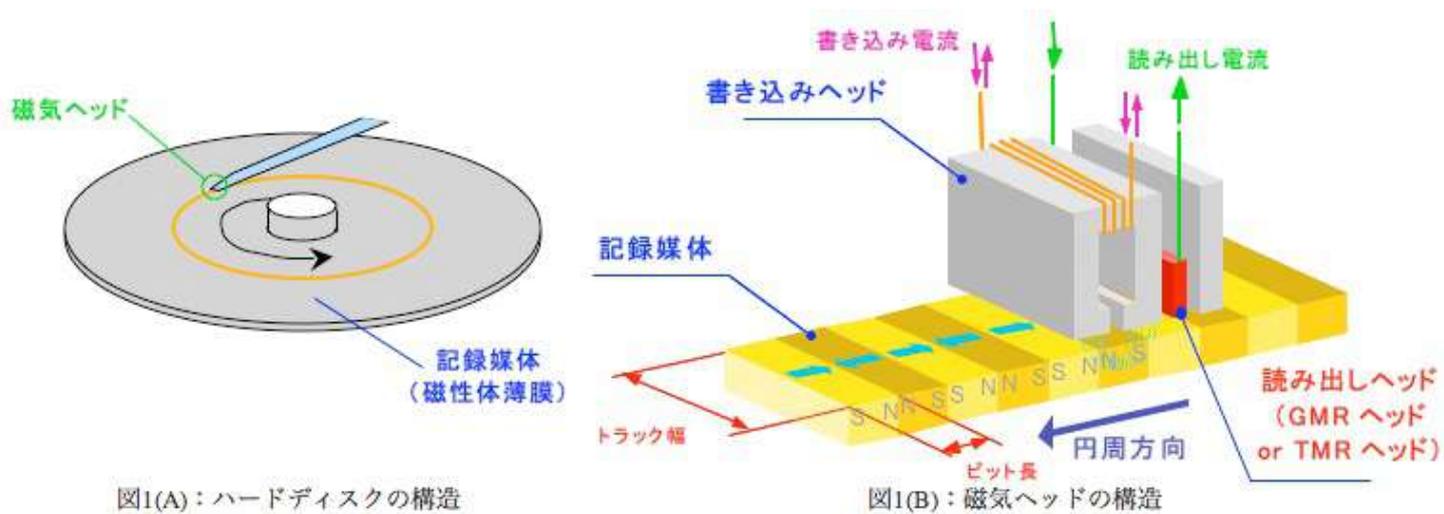
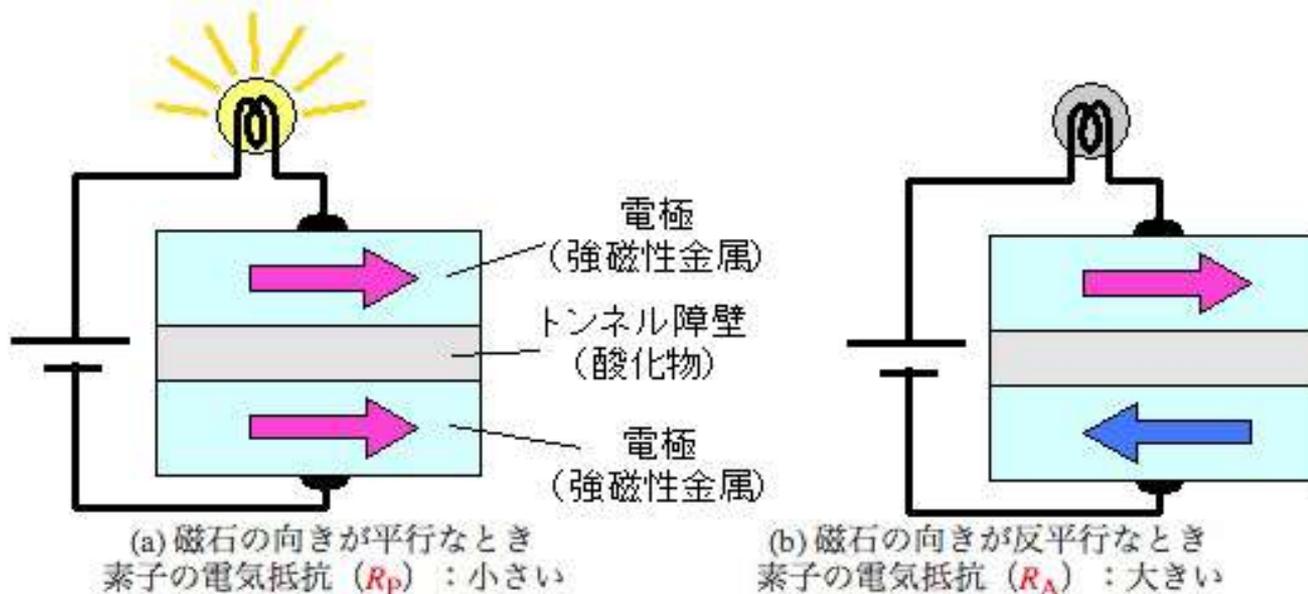


図2：ハードディスクの記録密度の磁気ヘッドの種類

産業技術総合研究所
ホームページより

GMR, TMR 効果

産業技術総合研究所
ホームページより



$$\text{磁気抵抗比} = (R_A - R_P) \div R_P (\%)$$

$$\text{素子抵抗} = R_P (\Omega(\mu\text{m})^2)$$

図3：TMR素子のトンネル磁気抵抗効果 (TMR効果)

記憶素子として用いる → MRAM



Physics



The Nobel Prize in Physics 2007

"for the discovery of Giant Magnetoresistance"

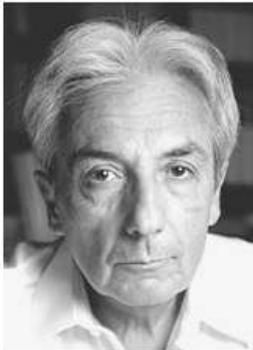


Photo: B. Fert, Invisuphoto

Albert Fert

1/2 of the prize

France

Université Paris-Sud;
Unité Mixte de Physique
CNRS/THALES
Orsay, France

b. 1938

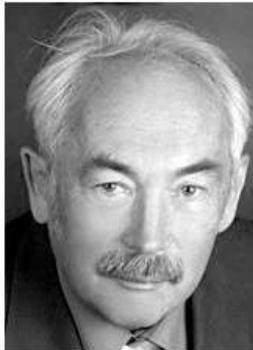


Photo: © Forschungszentrum Jülich

Peter Grünberg

1/2 of the prize

Germany

Forschungszentrum Jülich,
Jülich, Germany

b. 1939

Titles, data and places given above refer to the time of the award.

- Printer Friendly
- Comments & Questions
- Tell a Friend

The 2007 Prize in:

Physics

Prev. year

- The Nobel Prize in Physics 2007
- Prize Announcement
 - Press Release
 - Scientific Background
 - Information for the Public

- Albert Fert
- Nobel Lecture
 - Interview
 - Photo Gallery
 - Other Resources

- Peter Grünberg
- Nobel Lecture
 - Interview
 - Photo Gallery
 - Other Resources

See Also

Speed Read: Nobelprize.org's two minute summary of this year's award.

Articles - The physical world

Who are the awarded women?

Listen to Physics Nobel Laureates

Watch TheNobelPrize at YouTube

Quiz this year's Nobel Laureates

Sign up for News from Nobelprize.org

The 2007 Nobel Laureates!

強磁性半導体(Ga, Mn)As

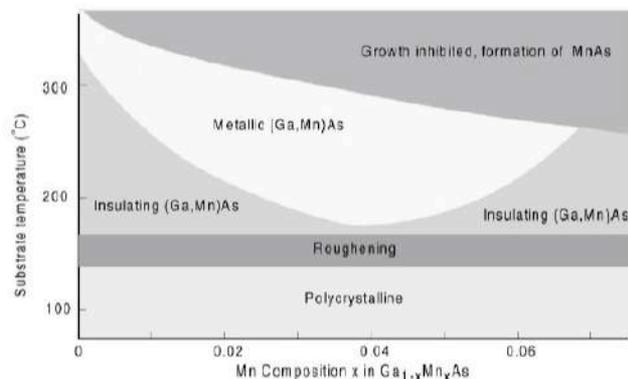


Fig. 1. Schematic phase diagram showing the relation between growth parameters (substrate temperature and Mn concentration) and the properties of (Ga,Mn)As grown by molecular beam epitaxy.

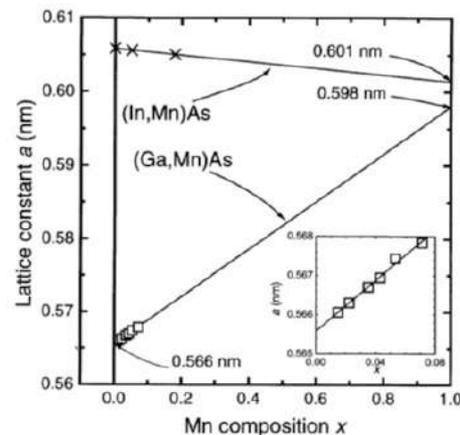


Fig. 2. Relaxed lattice constant a versus Mn composition x in $(\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x)\text{As}$ films a was calculated from the X-ray diffraction peaks at room temperature, assuming that (Ga,Mn)As layers are fully strained and that (Ga,Mn)As has the same elastic constant as GaAs. Inset shows a magnified view of a of (Ga,Mn)As.

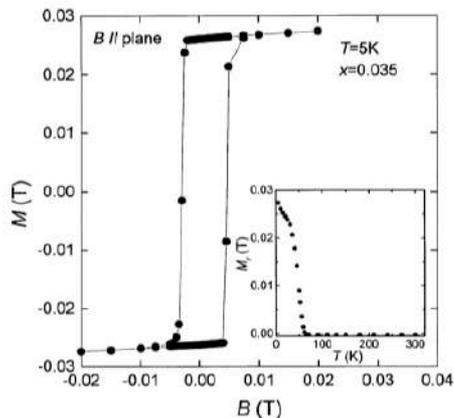


Fig. 3. Magnetic field dependence of magnetization M at 5 K for a (Ga,Mn)As film with Mn content $x = 0.035$. The field was applied parallel to the sample surface. Inset shows the temperature dependence of the remanent magnetization M_r of the same sample.

‘Properties of ferromagnetic
III-V semiconductors’

H. Ohno,

J. Magn. Magn. Matt. 200 (1999) 110.

(In, Mn)As: 磁性の制御

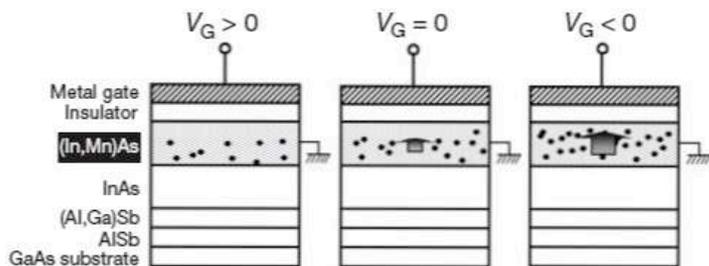


Figure 1 Field-effect control of the hole-induced ferromagnetism in magnetic semiconductor (In,Mn)As field-effect transistors. Shown are the cross-sections of a metal-insulator–semiconductor structure under gate biases V_G . This controls the hole concentration in the magnetic semiconductor channel (filled circles). Negative V_G increases hole concentration, resulting in enhancement of the ferromagnetic interaction among magnetic Mn ions, whereas positive V_G has an opposite effect. The arrow schematically shows the magnitude of the Mn magnetization. The InAs/(Al,Ga)Sb/AlSb structure under the (In,Mn)As layer serves as a buffer relaxing the lattice mismatch between the structure and the GaAs substrate to produce a smooth surface on which the magnetic layer is grown.

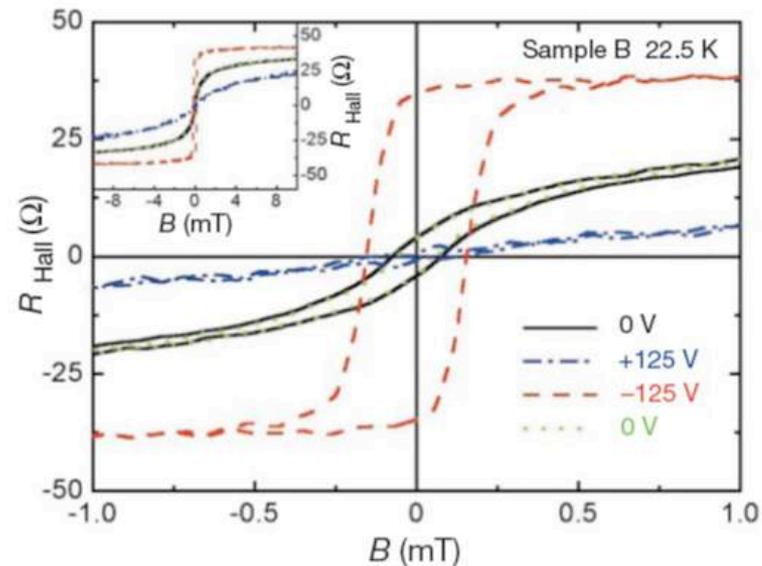


Figure 3 R_{Hall} versus field curves under three different gate biases. Application of $V_G = 0$, $+125$ and -125 V results in qualitatively different field dependence of R_{Hall} measured at 22.5 K (sample B). When holes are partially depleted from the channel ($V_G = +125$ V), a paramagnetic response is observed (blue dash-dotted line), whereas a clear hysteresis at low fields (<0.7 mT) appears as holes are accumulated in the channel ($V_G = -125$ V, red dashed line). Two R_{Hall} curves measured at $V_G = 0$ V before and after application of ± 125 V (black solid line and green dotted line, respectively) are virtually identical. Inset, the same curves shown at higher magnetic fields.

‘Electric-field control of ferromagnetism’
H. Ohno et al. Nature 408 (2000) 944.

(Ga, Mn)As: スピン注入

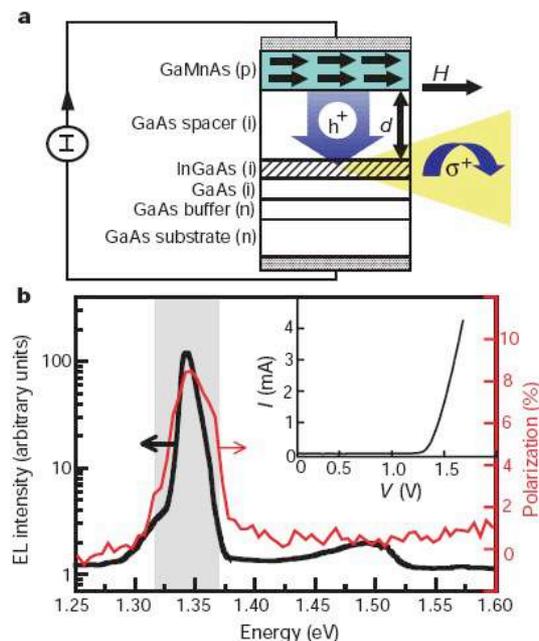


Figure 1 Electrical spin injection in an epitaxially grown ferromagnetic semiconductor heterostructure, based on GaAs. **a**, Spontaneous magnetization develops below the Curie temperature T_C in the ferromagnetic p-type semiconductor (Ga,Mn)As, depicted by the black arrows in the green layer. Under forward bias, spin-polarized holes from (Ga,Mn)As and unpolarized electrons from the n-type GaAs substrate are injected into the (In,Ga)As quantum well (QW, hatched region), through a spacer layer with thickness d , producing polarized EL. **b**, Total electroluminescence (EL) intensity of the device ($d = 20$ nm) under forward bias at temperature $T = 6$ K and magnetic field $H = 1,000$ Oe is shown (black curve) with its corresponding polarization (red curve). Current $I = 1.43$ mA. Note that the polarization is largest at the QW ground state ($E = 1.34$ eV). The EL and polarization are plotted on semi-log and linear scales, respectively. Inset, a current-voltage plot characteristic of a 20-nm spacer layer device. Shaded grey area, see Fig. 2.

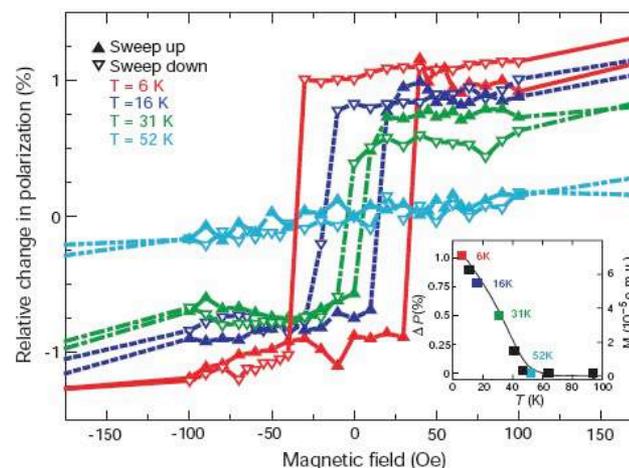


Figure 2 Hysteretic electroluminescence polarization is a direct result of spin injection from the ferromagnetic (Ga,Mn)As layer. Shown are relative changes in the energy-integrated (shaded grey area in Fig. 1b) polarization ΔP , at temperatures $T = 6$ – 52 K, as a function of in-plane field from a device with $d = 140$ nm. $E = 1.34$ eV, $I = 2.8$ mA. Triangles indicate points taken when the field is swept up or down. Inset, the relative remanent polarization (ΔP at $H = 0$ Oe) shown in solid squares at $T = 6$ – 94 K, and the temperature dependence of the (Ga,Mn)As magnetic moment, measured by a SQUID magnetometer (solid black curve), demonstrating that polarization is proportional to magnetic moment.

Y. Ohno et al., ‘Electrical spin injection in a ferromagnetic semiconductor heterostructure’,
Nature 402 (1999) 790.

半導体スピントロニクス マテリアルデザインのねらい

■ 高い T_C をもつ希薄磁性半導体の設計

- 希薄磁性半導体の強磁性のメカニズムの解明
- 希薄磁性半導体のキュリー温度の計算法の開発
- 設計指針の提案と実験との比較

■ ブレークスルーを求めて

- 磁性不純物を高濃度添加するには？
- 磁性不純物の不均一分布を応用できるのでは？
- 実験結果との比較

高い T_C をもつ希薄磁性半導体の設計

I. 強磁性のメカニズム

- a) 希薄磁性半導体の第一原理計算
 - MACHIKANNEYAMAコード
- b) 希薄磁性半導体の磁性と電子状態
 - GaN-DMSの**磁性の系統性**
 - **二重交換相互作用**と**超交換相互作用**

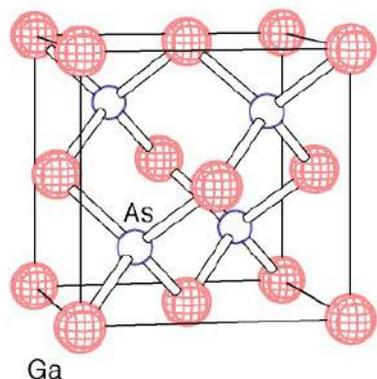
II. キュリー温度の計算法

- a) **平均場近似**によるキュリー温度の計算
 - **p - d 交換相互作用**
- b) **モンテカルロ法**によるキュリー温度の計算

III. 前半のまとめ：高い T_C を得るには？

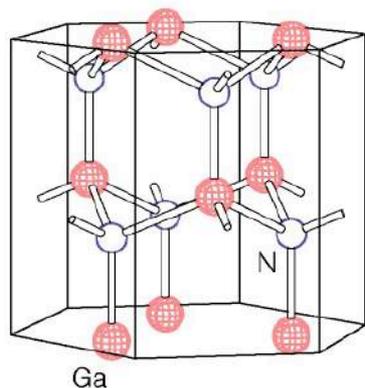
I. 希薄磁性半導体の第一原理計算

希薄磁性半導体(DMS)



閃亜鉛型構造

GaP, GaAs, GaSb,
ZnS, ZnSe, ZnTe



ウルツ鉱型構造

GaN, ZnO

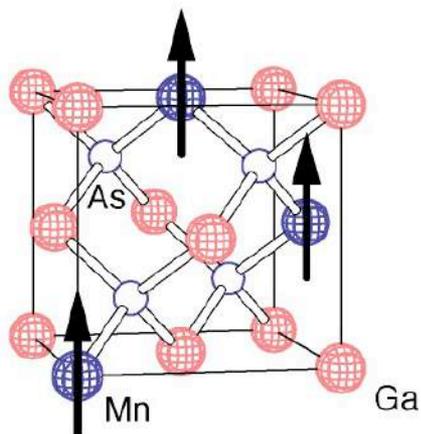
- III-V族、II-VI族化合物半導体に遷移金属不純物を添加したもの。
- (In, Mn)As; $T_C \sim 60\text{K}$ 、(Ga, Mn)As; $T_C \sim 150\text{K}$ 、で強磁性が発見された。
- 現在、 $T_C \sim 190\text{K}$ が最高
- 不規則置換型合金
→バンド計算適用不可

MACHIKANAYAMA2002

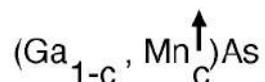
Akai et al.,

<http://kkr.phys.sci.osaka-u.ac.jp>

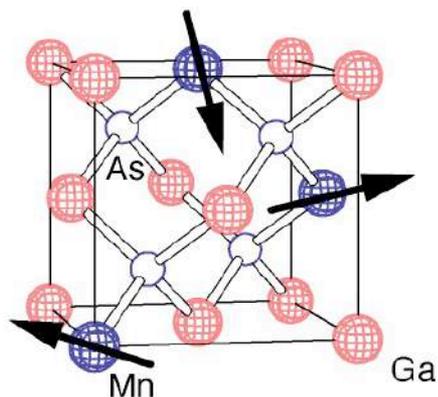
(Ga, Mn)As 希薄磁性半導体



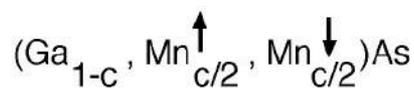
強磁性状態



磁気モーメント



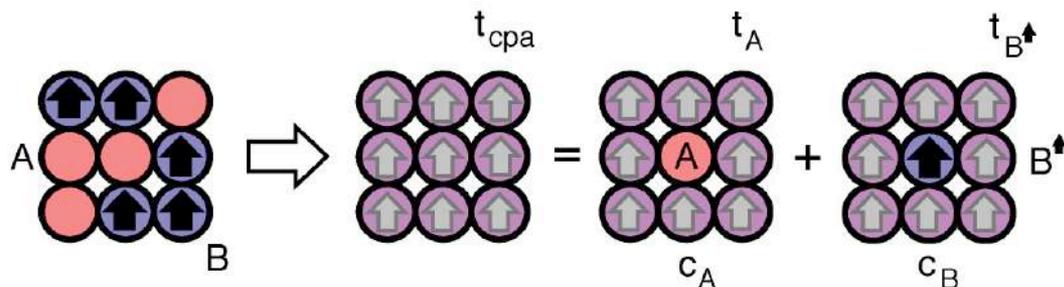
常磁性状態



- 局所密度近似(LDA)
- Korringa-Kohn-Rostoker (KKR)法
- コヒーレントポテンシャル近似(CPA)で**不規則系**が扱える
- **強磁性状態と常磁性状態のエネルギー差から磁性を議論できる。**

(コヒーレントポテンシャル近似**CPA**)

強磁性状態のDMS (全体の磁気モーメント $\neq 0$)



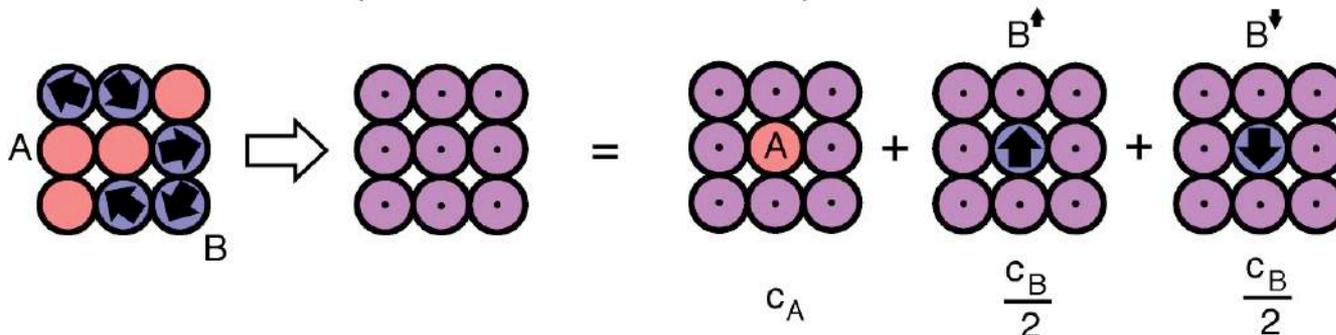
$$\tau_{\text{cpa}} = C_A \tau_A + C_B \tau_{B\uparrow}$$

Scattering path operator

$$\begin{cases} \tau_{\text{cpa}} = \sum_k [t_{\text{cpa}}^{-1} - g(k)]^{-1} \\ \tau = [t_i^{-1} - t_{\text{cpa}}^{-1} - \tau]^{-1}, \\ i = A, B \end{cases}$$

常磁性状態のDMS (全体の磁気モーメント = 0)

H. Akai and P. H. Dederichs: PRB47 (1993) 8739.

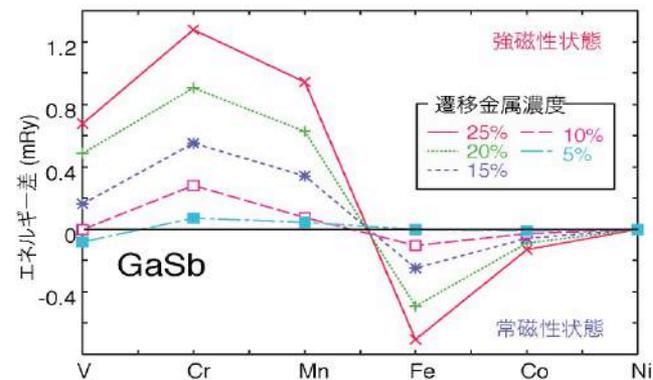
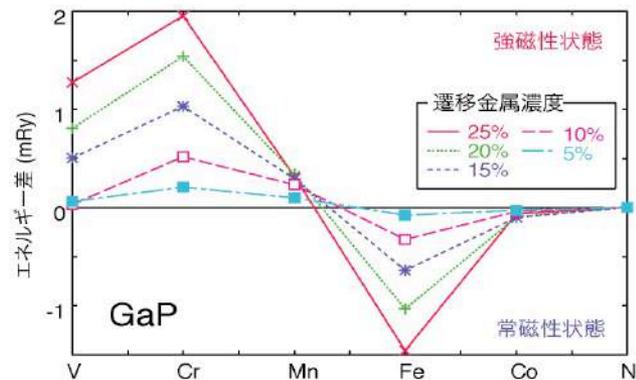
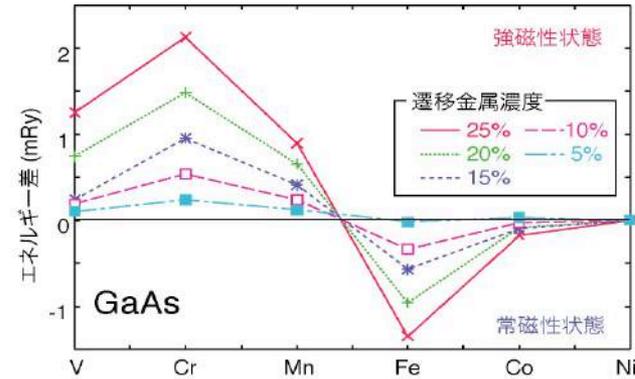
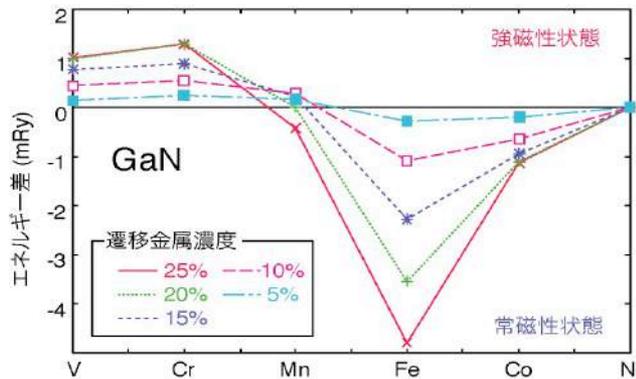


$$\tau_{\text{cpa}} = C_A \tau_A + \frac{C_B}{2} \tau_{B\uparrow} + \frac{C_B}{2} \tau_{B\downarrow}$$

不規則系の配置平均を計算する

III-V族希薄磁性半導体の磁性

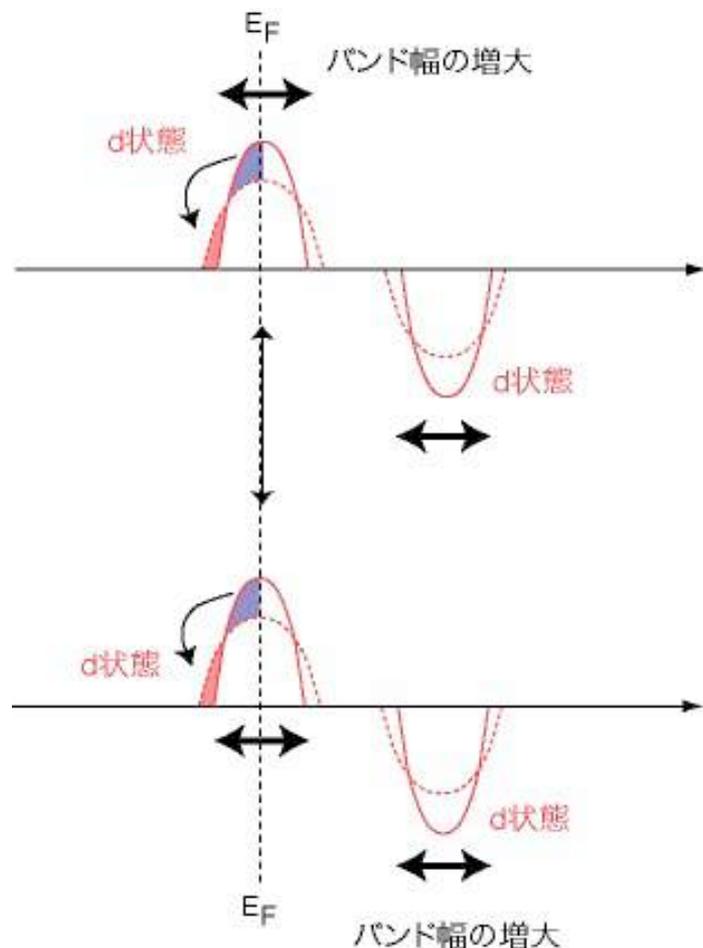
K. Sato and H. Katayama-Yoshida,
Semicond. Sci. Technol. 17 (2002) 367
K. Sato et al., RMP 82 (2010) 1633.



V, Cr, Mn添加 → 強磁性状態が安定

Fe, Co, Ni 添加 → 常磁性状態が安定

二重交換相互作用

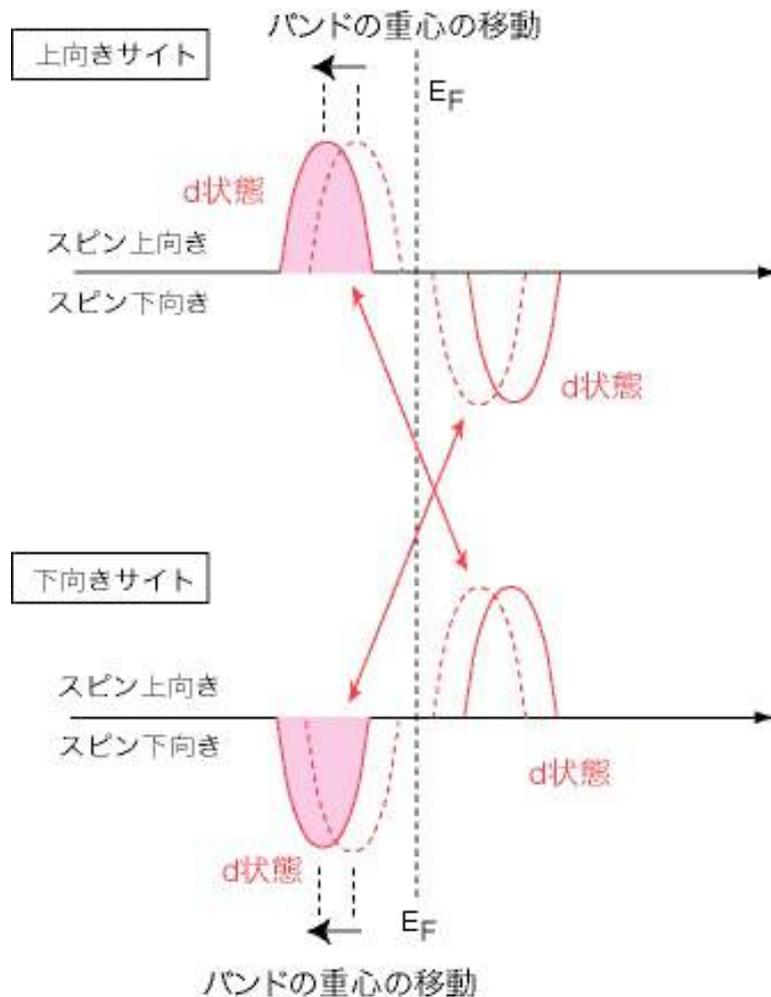


- 強磁性状態を安定化させる。
- 磁気モーメントが平行の時、バンド幅の広がりによりエネルギーを得する。
- 上向き、または下向きのdバンドが半分占有される時得分は最大

Akai PRL 81 (1998) 3002.

K. Sato et al., J. Phys. Condens. Matter 16 (2004) S5491.(2004)

超交換相互作用



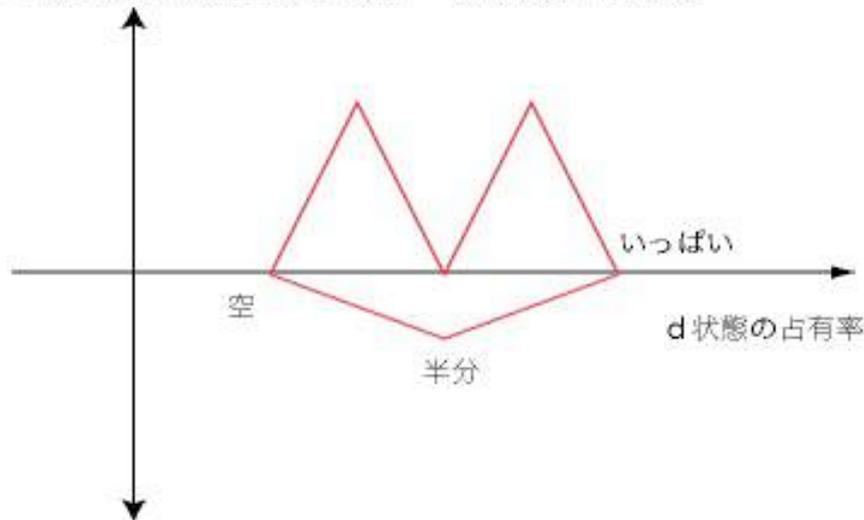
- 反強磁性状態を安定化させる。（軌道の組み合わせによって強磁性になる場合もある。）
- 磁気モーメントが反平行の時、占有状態と、非占有状態との混成によりバンドの重心が移動してエネルギーを稼ぐ。
- d状態がちょうど半分詰まったとき得点が最大。

Akai PRL 81 (1998) 3002.

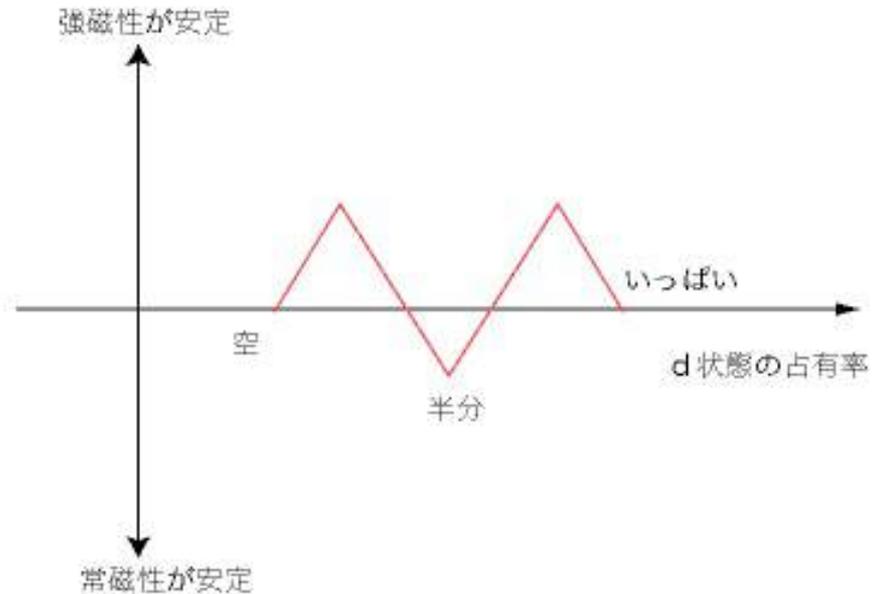
B. Belhadji et al., J. Phys. Condens. Matter 19 (2007) 436227

二重交換vs.超交換

二重交換相互作用によるエネルギーの稼ぎ (平行配列)



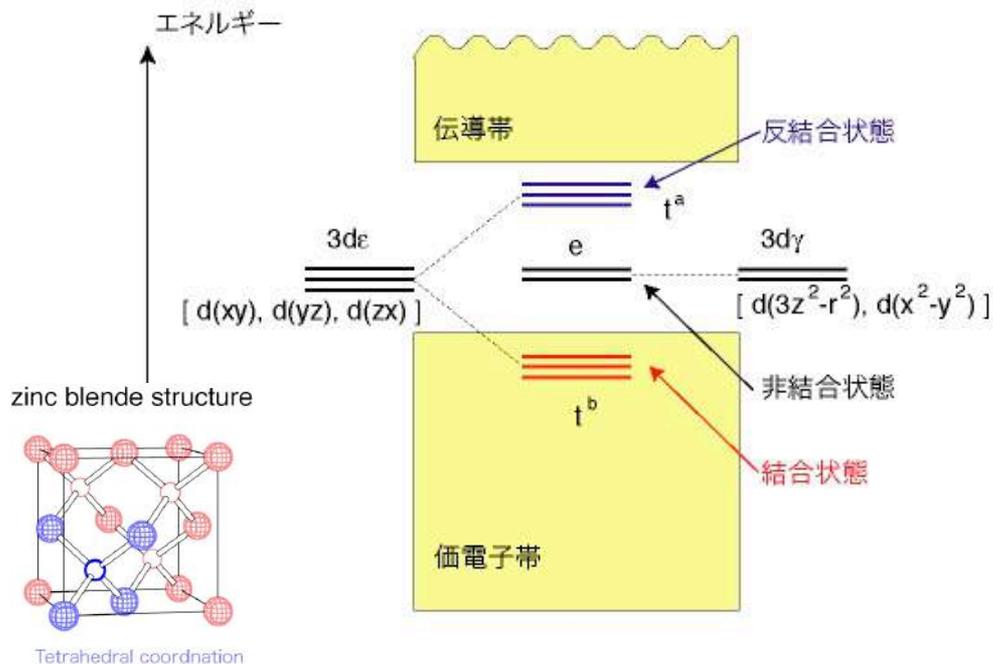
超交換相互作用によるエネルギーの稼ぎ (反平行配列)



二重交換、超交換のどちらが優勢かはd状態の占有数に依る。
磁性の大まかな様子を説明できる

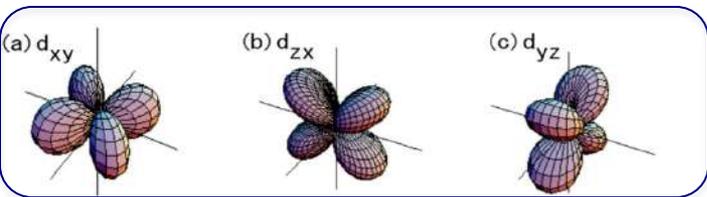
GaN-DMSの磁性

K. Sato and H. Katayama-Yoshida,
Semicond. Sci. Technol. 17 (2002) 367

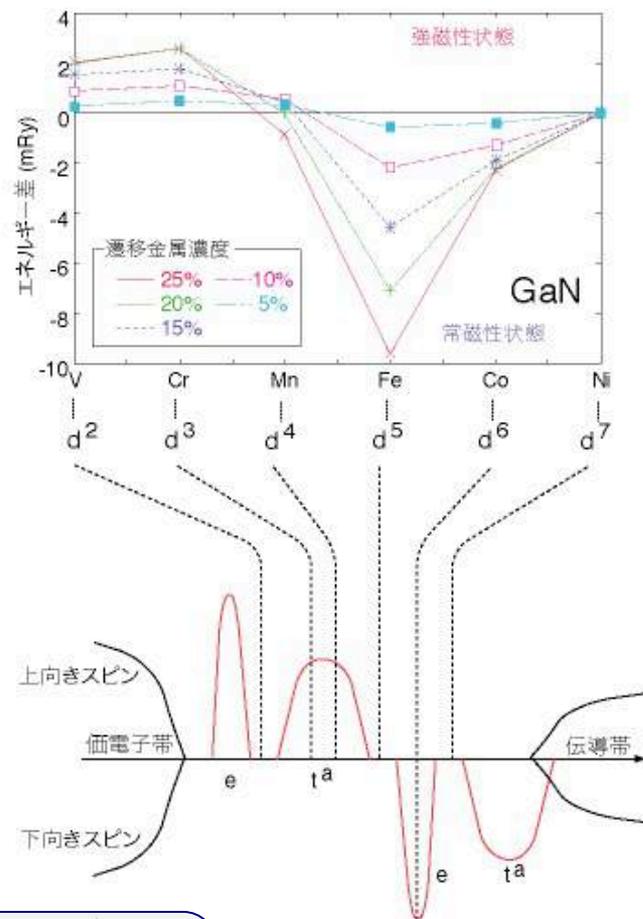
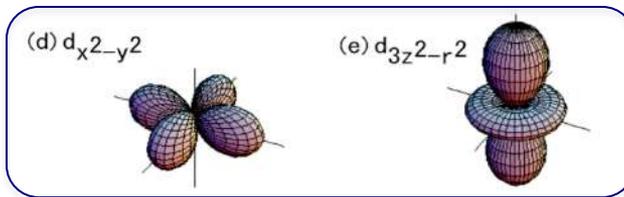


反結合状態が部分的に占有されているときに
二重交換相互作用が有効に働く

dε 軌道



dγ 軌道

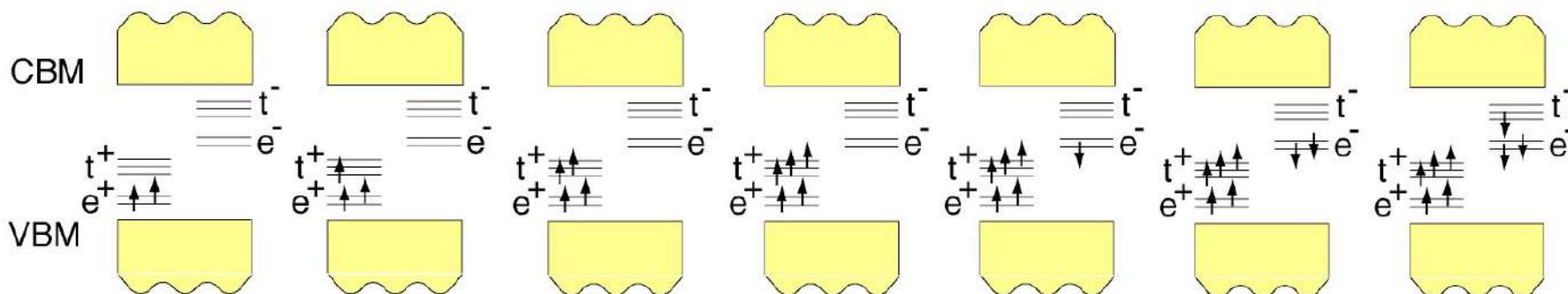


トレンドの非対称
を説明する。

希薄磁性半導体の磁性の系統性

K. Sato and H. Katayama-Yoshida,
Semicond. Sci. Technol. 17 (2002) 367

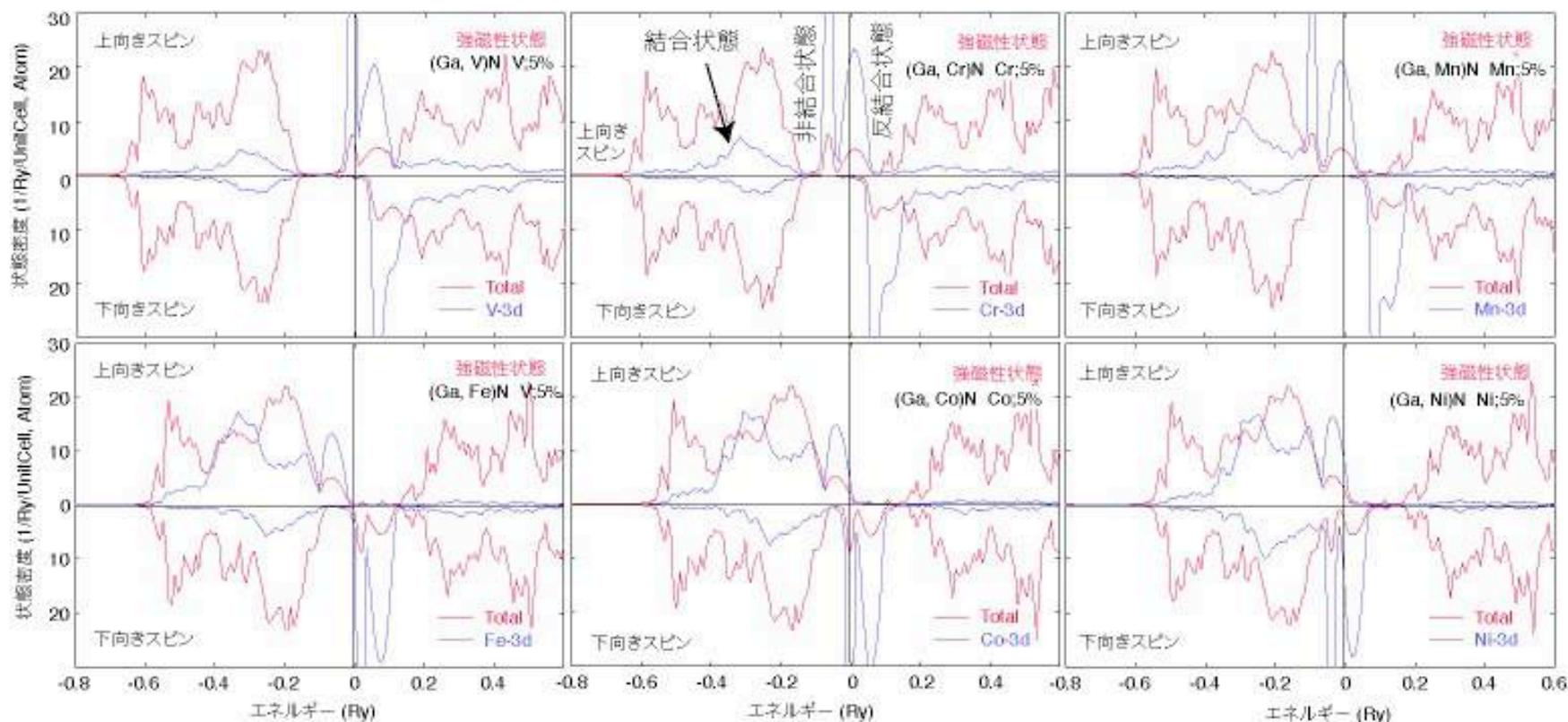
正四面体置換位置



II-VI	Ti ²⁺ (3d ²)	V ²⁺ (3d ³)	Cr ²⁺ (3d ⁴)	Mn ²⁺ (3d ⁵)	Fe ²⁺ (3d ⁶)	Co ²⁺ (3d ⁷)	Ni ²⁺ (3d ⁸)
III-V	V ³⁺ (3d ²)	Cr ³⁺ (3d ³)	Mn ³⁺ (3d ⁴)	Fe ³⁺ (3d ⁵)	Co ³⁺ (3d ⁶)	Ni ³⁺ (3d ⁷)	Cu ³⁺ (3d ⁸)
	常磁性	強磁性	強磁性	常磁性	常磁性	常磁性	強磁性

GaN希薄磁性半導体の状態密度

K. Sato and H. Katayama-Yoshida,
Semicond. Sci. Technol. 17 (2002) 367



I. 強磁性のメカニズムのまとめ

■ 希薄磁性半導体

- 磁性不純物がランダムに分布した**不規則系**
- **KKR-CPA法(MACHIKANEYAMA)**による第一原理電子状態計算
- 強磁性状態と常磁性状態のエネルギー差から**磁性**を議論

■ III-V族希薄磁性半導体の磁性の系統性

- ギャップ中の不純物バンドの占有率により磁性が系統的に変化する
- **二重交換相互作用 vs. 超交換相互作用**
- **II-VI族**希薄磁性半導体の磁性も系統的に理解可能

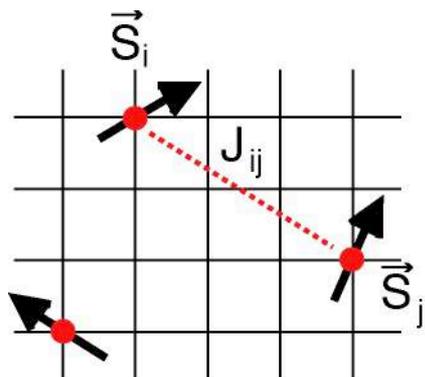
III. キュリー温度の計算法

a) 平均場近似によるキュリー温度の計算

- 古典**Heisenberg**模型を用いてエネルギー差から T_c を見積もる
- **Mn添加III-V族DMS**
 - T_c の濃度依存性
 - 強磁性相互作用と電子状態の関係
 - **二重交換相互作用** と p - d 交換相互作用
- 実験との比較
 - より精密なキュリー温度の計算が必要

古典Heisenberg模型

- 密度汎関数法は基底状態の議論（絶対0度）
- 有限温度の磁性をHeisenberg模型をもとにして行う



$$H = - \sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

J_{ij} : 交換相互作用

\vec{S}_i : サイトiの磁気モーメント

- 統計力学的取り扱いが確立している
- 一般的な磁性体のモデル
- 希薄磁性半導体はよく定義された磁気モーメントをもつ。

$$k_B T_C = \frac{2\Delta E}{3c}$$

ΔE : 強磁性状態と常磁性状態のエネルギー差
 c : 磁性不純物濃度

(平均場近似による T_c の見積もり)

K. Sato et al., Europhys. Lett. 61 (2003) 403

$$H = - \sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

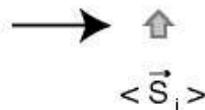
$$\vec{S}_i = \langle \vec{S}_i \rangle + (\vec{S}_i - \langle \vec{S}_i \rangle)$$

$$H = + \sum_{i \neq j} J_{ij} \langle \vec{S}_i \rangle \cdot \langle \vec{S}_j \rangle - 2 \sum_{i \neq j} J_{ij} \langle \vec{S}_i \rangle \cdot \vec{S}_j$$

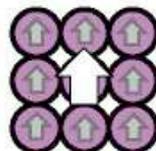
$$H_{\text{eff}} = \frac{1}{g\mu_B} 2cS \sum_{i \neq j} J_{ij}$$

キュリー温度

$$\begin{cases} H_{\text{eff}} = \lambda M \\ M = \frac{NcS}{V} g\mu_B B_S \left(\frac{g\mu_B S H_{\text{eff}}}{k_B T_C} \right) \end{cases}$$



スピンの平均



H_{eff} 平均のスピンの作る有効磁場



外部磁場中での磁性体の磁化Mはブリルアン関数 B_S で与えられる

$$k_B T_C = \frac{2}{3} S^2 c \sum_{i \neq j} J_{ij} = \frac{2}{3} \frac{\Delta E}{c}$$

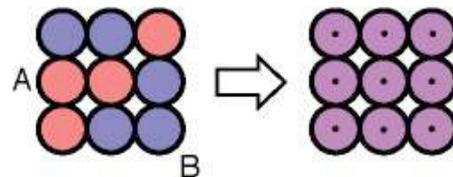
エネルギー差

$$\langle H \rangle_{\text{FM}} = - \sum_{i \neq j} J_{ij} \langle \vec{S}_i \rangle \cdot \langle \vec{S}_j \rangle = - S^2 c^2 N \sum_{i \neq j} J_{ij}$$

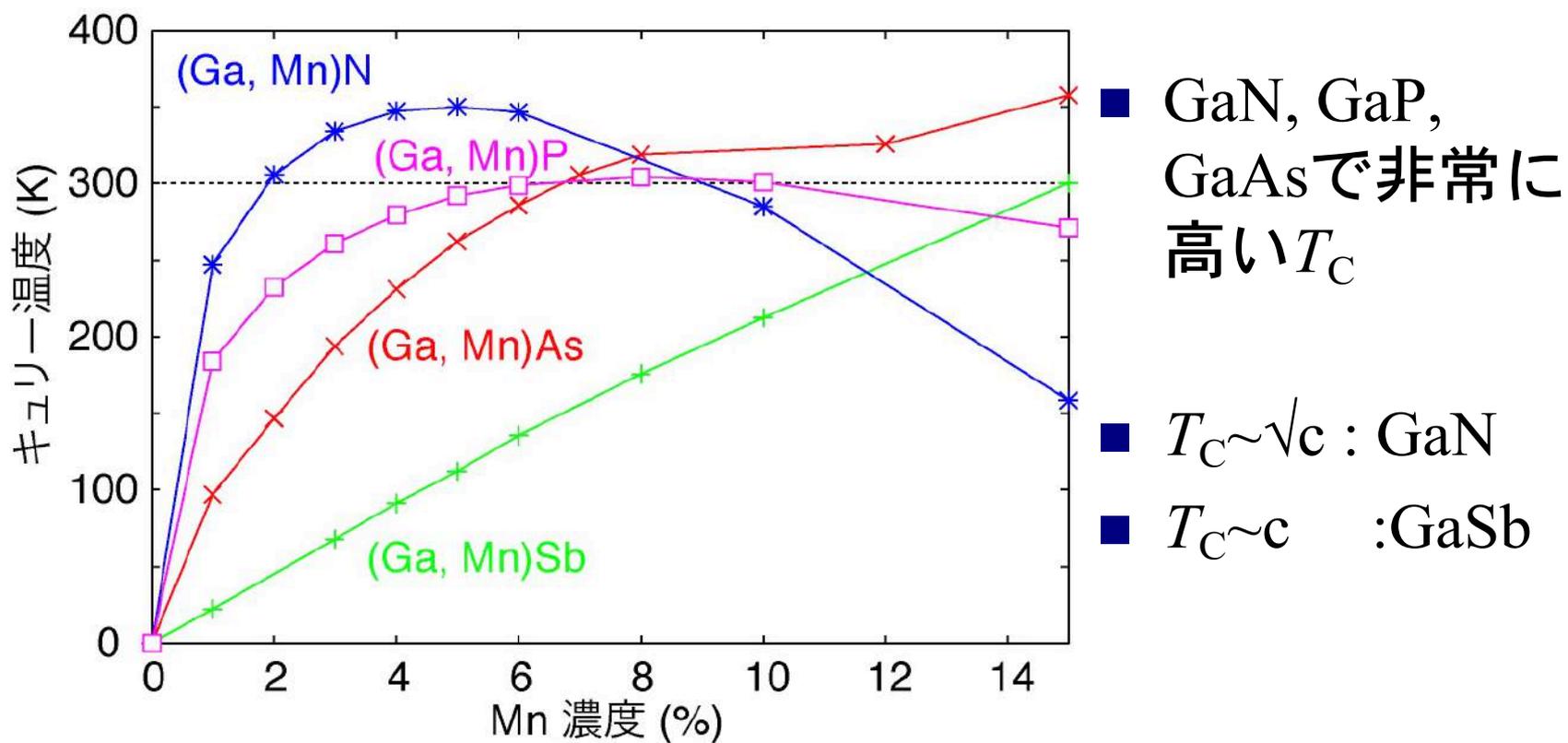
$$\langle H \rangle_{\text{PM}} = 0$$

$$\Delta E = [- \langle H \rangle_{\text{FM}} + \langle H \rangle_{\text{PM}}] / N = S^2 c^2 \sum_{i \neq j} J_{ij}$$

c : concentration of magnetic ions
 N : Number of lattice sites

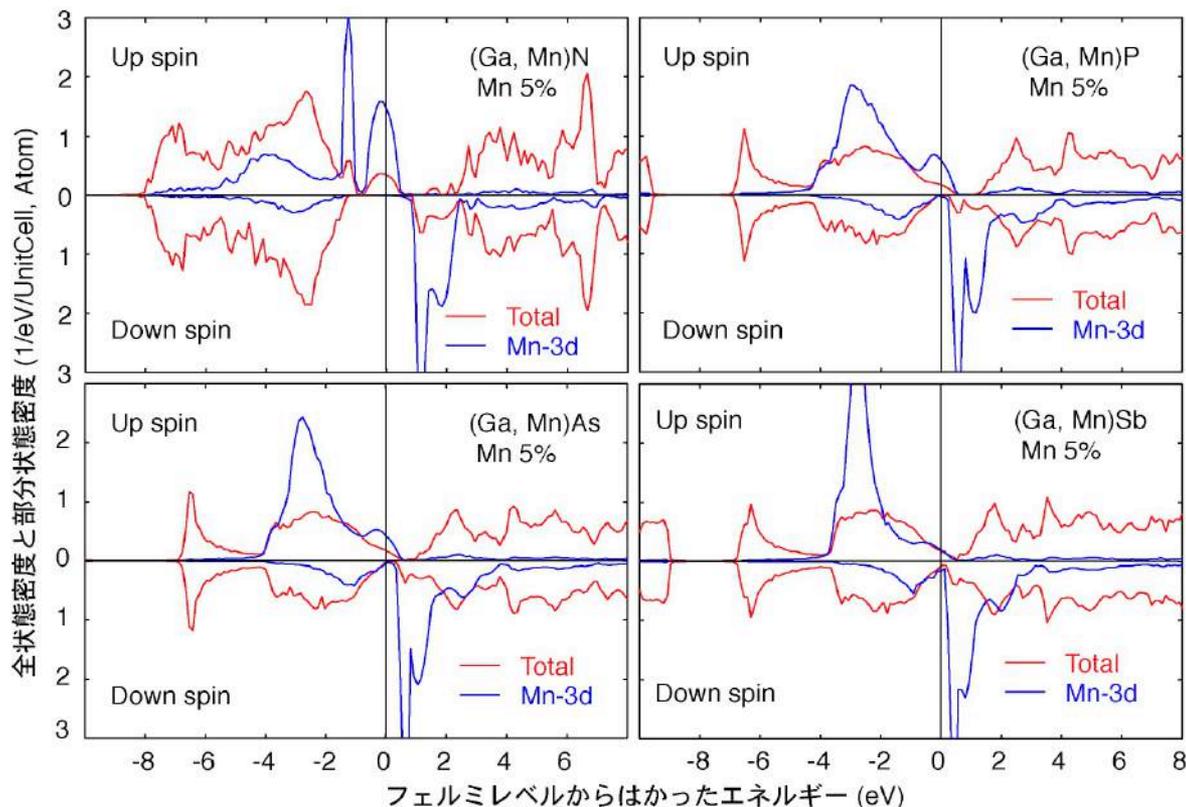


Mn添加III-V族希薄磁性半導体の T_C



K. Sato et al.,
 J. Phys. Condens. Matter 16 (2004) S5491.(2004)

Mn-III-Vの電子状態



K. Sato et al.,
 J. Phys. Condens. Matter 16 (2004) S5491.(2004)

■(Ga, Mn)N

- 不純物バンドが形成される
- 二重交換相互作用
- $T_C \sim \sqrt{c}$

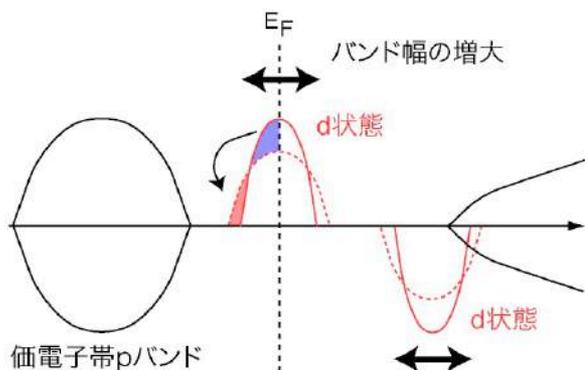
■(Ga, Mn)Sb

- d状態は局在している
- p-d交換相互作用
- $T_C \sim c$

■電子状態により強磁性のメカニズムが異なる

(Ga, Mn)N: 不純物バンドのある系

(i) 強磁性状態

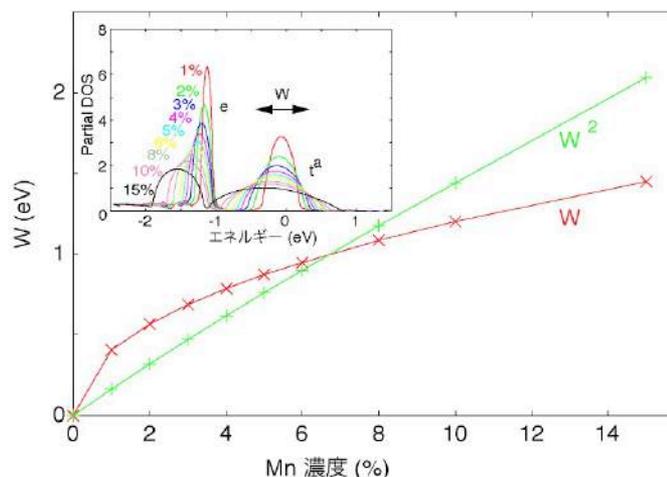


不純物バンドでのバンドエネルギーの利得

フェルミレベルが不純物バンド中にあるとき

↓
エネルギーの利得 \sim バンド幅 $W \sim c^{1/2}$

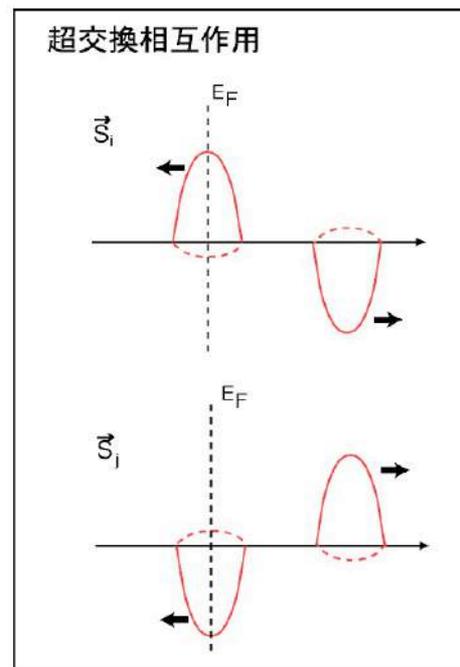
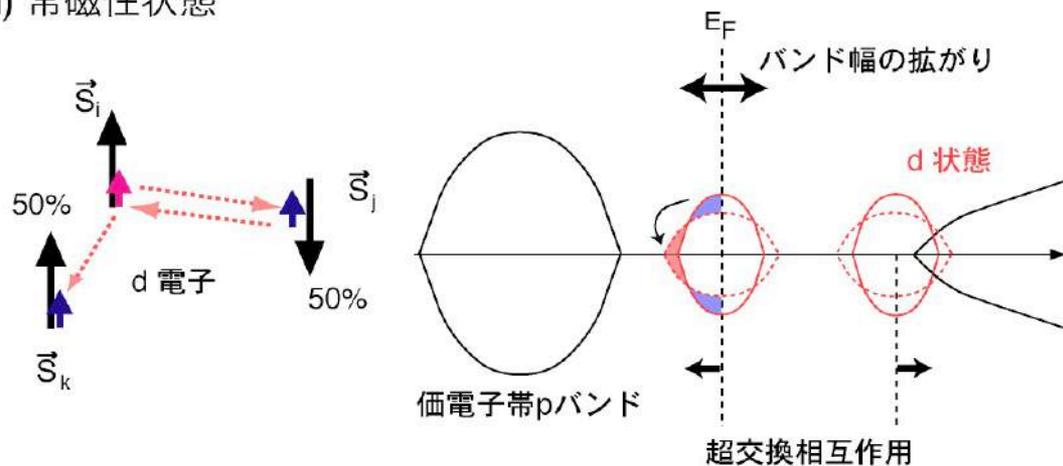
不純物バンド幅



不純物バンド中に E_F があるとき
二重交換相互作用が主要で
 T_C はバンド幅、すなわち
濃度の平方根に比例する。

(Ga, Mn)N: 不純物バンドのある系

(ii) 常磁性状態



バンドエネルギーの利得

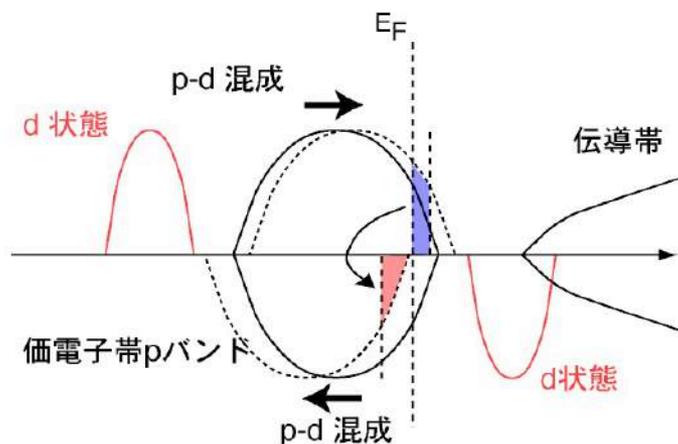
= 二重交換相互作用の寄与 $\sim W \sim \left(\frac{c}{2}\right)^{1/2} > 0$

+ 超交換相互作用の寄与 $\sim c \frac{t^2}{U} > 0$

不純物バンドがいっぱい、または空の時は
超交換相互作用のため常磁性状態となる。

(Ga, Mn)Sb: 局在したd状態のある系

(i) 強磁性状態



ハーフメタリックの場合

価電子帯の偏極 : $-1 \mu_B / \text{Mn}$

平均の偏極 (平均場) : $-c \mu_B$

Mn間の相互作用の大きさ $\sim c$

ホールが強磁性を誘起する
価電子帯の偏極 ---> 有効磁場

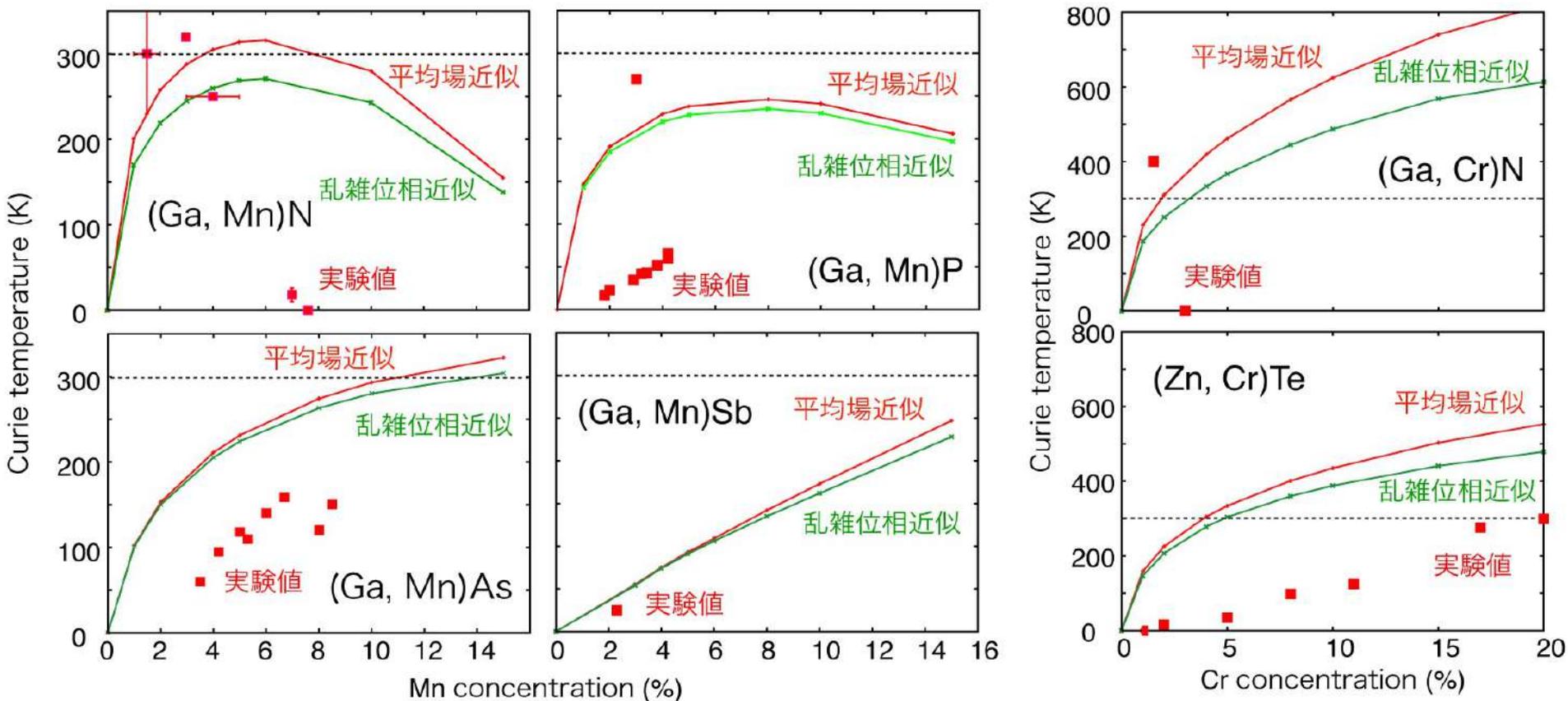
(ii) スピングラス状態

価電子帯の偏極は0 → エネルギーの利得はなく、超交換相互作用の寄与のみ

局在したd状態があるときは、p-d交換相互作用が主要となり
キュリー温度は濃度に比例する。

(T. Dietl Science 287 (2000) 1019, Kanamori and Terakura, JPSJ 70 (2001) 1433.)

実験値との比較



Experimental values:

1. Reed et al. APL 79 (2001) 3473.
2. Thaler et al. APL 80 (2002) 3964.
3. Theodoropoulou et al. APL (2001) 3475.
4. Overberg et al. APL 79 (2001) 1312.
5. Ploog et al. J. Vac. Sci. Technol. B21 (2003) 1756.
6. Scarpulla et al. Physica B340 (2003) 908.
7. SSC 140 (2006) 443
8. Theodoropoulou et al. PRL 89 (2002) 107203.
9. Edmonds et al. APL 81 (2002) 4991.
10. Ku et al. APL 82 (2003) 2302.
11. Edmonds et al. PRL 92 (2004) 37201.
12. Abe et al. Physica E7 (2000) 981.
13. Hashimoto et al. J. Cryst. Growth 251 (2003) 327.
14. Yamaguchi et al. JJAP 43 (2004) L1312.
15. Saito et al. PRL 90 (2003) 207202.
16. Ozaki et al. Phys. Stat. Sol. 1 (2004) 957.

■ 計算は実験値の傾向を再現するが一致は悪い (GaN系をのぞく)

II-a) 平均場近似による T_C 計算まとめ

- 古典Heisenberg模型を用いて有限温度をシミュレートできる。
 - 平均場近似によりエネルギー差を T_C と関係づけた。
- T_C の濃度依存性からメカニズムを詳細に議論
 - Mn-III-V族希薄磁性半導体
 - 二重交換相互作用：不純物バンドを作る系、 $T_C \sim \sqrt{c}$
 - p - d 交換相互作用：局在モーメントを持つ系、 $T_C \sim c$
- 実験との一致は不満足、 T_C の計算法の改良必要

II-b) モンテカルロ法による T_c の計算

■ 平均場近似では精度が不満足

- 実験の傾向は再現するが定量的な一致は悪い。
- 一般に平均場近似は T_c を **過大評価** する。
- 遷移金属不純物の分布の平均化

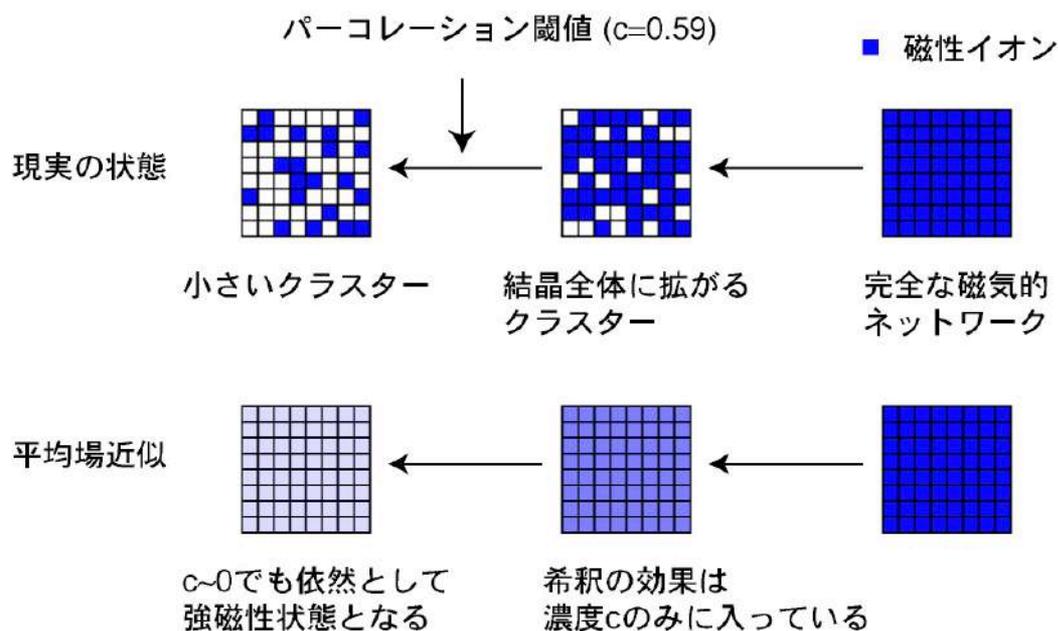
⇒ (磁氣的) パーコレーションの効果が入らない

■ モンテカルロシミュレーション

- 古典 **Heisenberg** 模型に対して統計誤差の範囲で **厳密値** を与える
- 磁気モーメントの熱揺らぎのシミュレーション
- **Mn** の **ランダムな配置** をシミュレート

不規則性：磁氣的パーコレーション

例: 2次元正方格子（最近接相互作用のみ）



パーコレーション閾値
(最近接相互作用)

格子	閾値
正方	0.59
三角	0.50
diamond	0.43
sc	0.31
bcc	0.25
fcc	0.20

相互作用が短距離の場合、磁性イオンのランダムな配置を考慮する必要がある → 平均場近似は×

(メトロポリスのアルゴリズム)

磁化Mの熱平均 (K. Binder and D. W. Heermann, 'Monte Carlo Simulation in Statistical Physics', Springer, 2002)

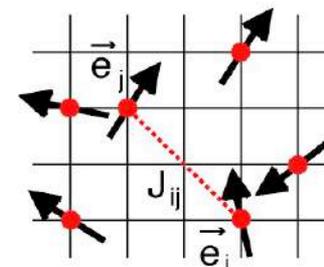
$$\langle M \rangle = \frac{1}{Z} \int dx \exp[-H(x)/k_B T] M(x) = \frac{\sum_{i=1}^M \exp[-H(x_i)/k_B T] M(x_i)}{\sum_{i=1}^M \exp[-H(x_i)/k_B T]}$$

Z: 分配関数
H: モデルハミルトニアン
 k_B : ボルツマン定数
T: 温度

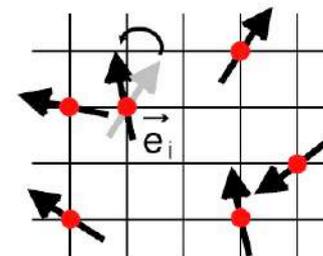
メトロポリスのアルゴリズム 非常に有効な位相空間のサンプリング

1) 結晶中にMnをランダムにばらまく

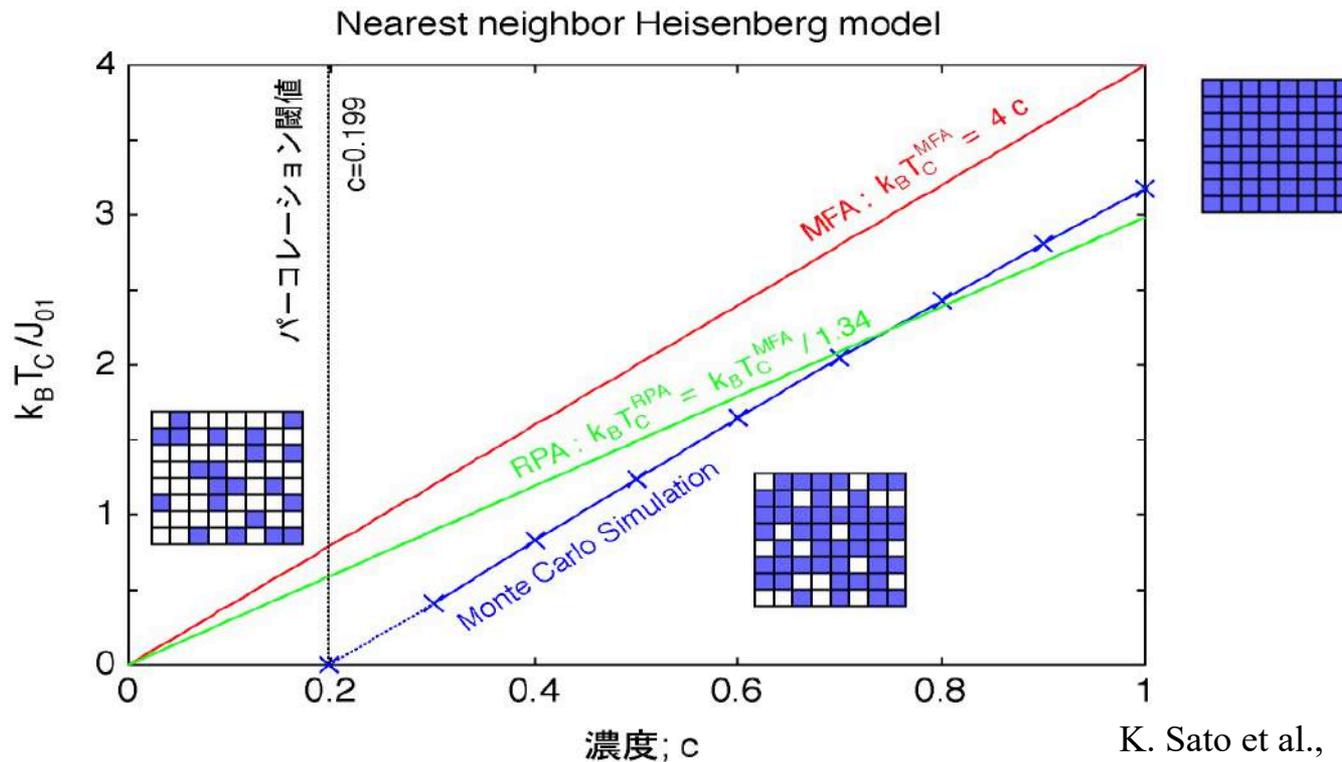
$$H = - \sum_{i \sim j} J_{ij} \vec{e}_i \cdot \vec{e}_j$$



- 2) あるサイトiを選ぶ。磁気モーメントをランダムに回転させたときのエネルギーの変化 ΔE を計算する。
- 3) 0と1の間のランダムな数 r を生成する。
- 4) もし $r < \exp[-\Delta E/k_B T]$ ならば磁気モーメントを回転させる。そうでなければなにもしない。
- 5) 全ての格子点にわたって上記のことをおこない新しい配置とする。結果を解析して平均を計算するために保存しておく。



例：最近接希薄Heisenberg模型



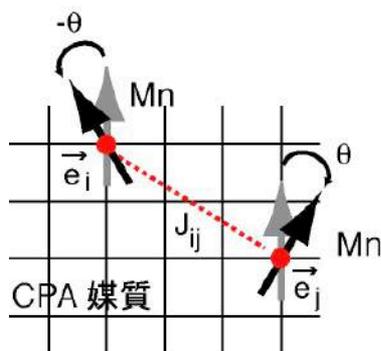
K. Sato et al.,
Phys. Rev. B 70 (2004) 201202R

濃度 $c \sim 1$ のとき、平均場近似による T_C の見積もりはよい。

パーコレーション閾値以下では平均場近似は定性的に正しくない。 35

有効交換相互作用

■ Liechtensteinによる (JMMM 67 (1987) 65.)



$$H = - \sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{e}_i \cdot \vec{e}_j$$

J_{ij} : CPA媒質中に置かれた2つのMn間の有効交換相互作用

\vec{e}_i : サイトiのMnの磁気モーメントの向き

$$J_{ij} = \frac{1}{4\pi} \text{Im} \int d\varepsilon \text{Tr} [\Delta_i(\varepsilon) \tau_{ij}^\uparrow(\varepsilon) \Delta_j(\varepsilon) \tau_{ji}^\downarrow(\varepsilon)]$$

$$\begin{cases} \Delta_i(\varepsilon) = t_{i\uparrow}^{-1}(\varepsilon) - t_{i\downarrow}^{-1}(\varepsilon) \\ \tau_{ij}(\varepsilon) = \sum_{\vec{k}} [t^{-1}(\varepsilon) - g(\vec{k}, \varepsilon)]^{-1} \exp\{ i \vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j) \} \end{cases}$$

→ MACHIKANEYAで既に計算してある。

t : single site t-matrix

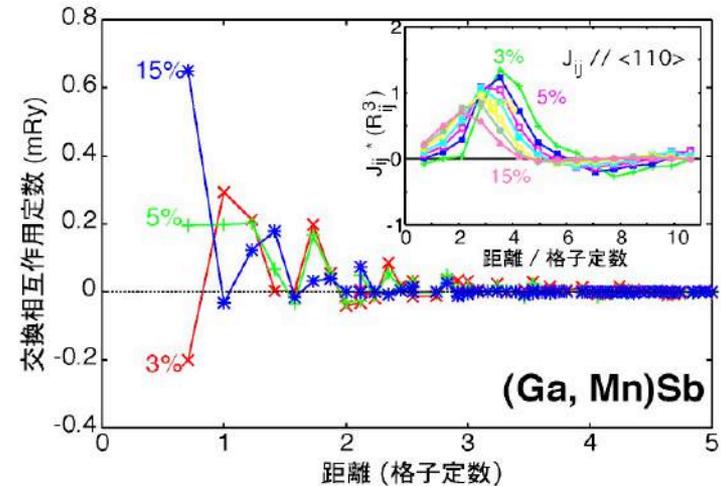
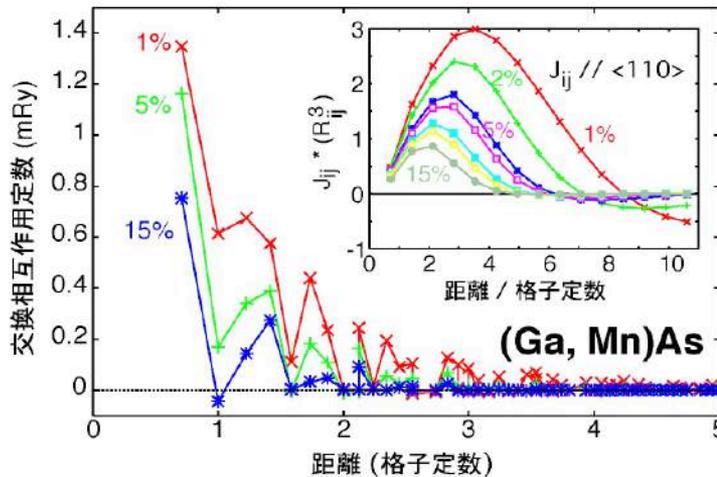
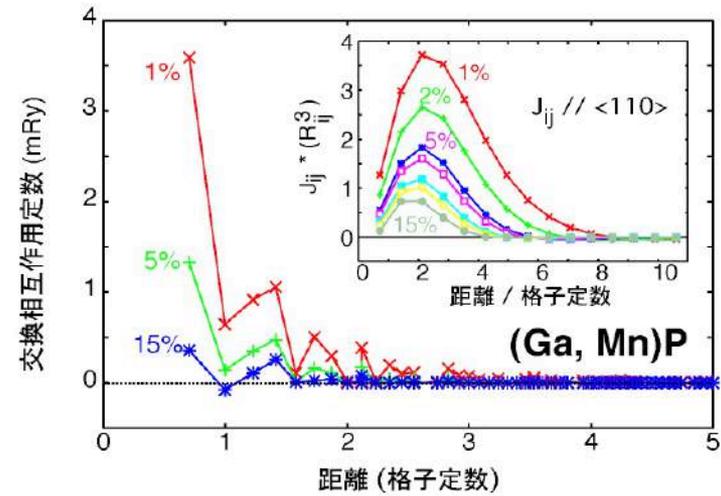
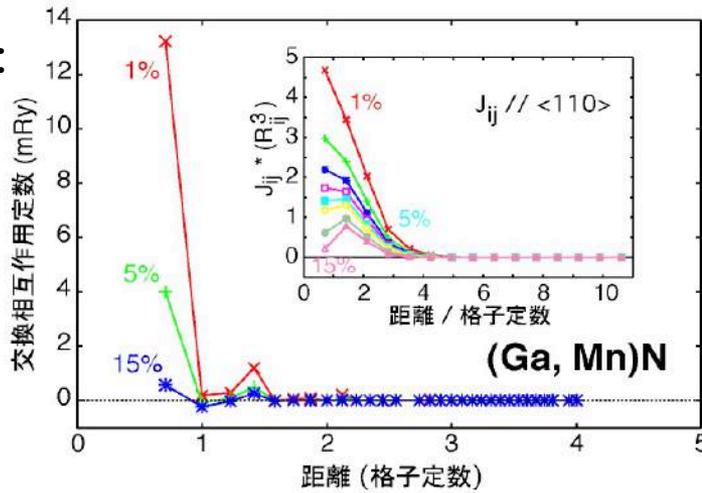
τ : scattering path operator

\vec{R} : lattice vector

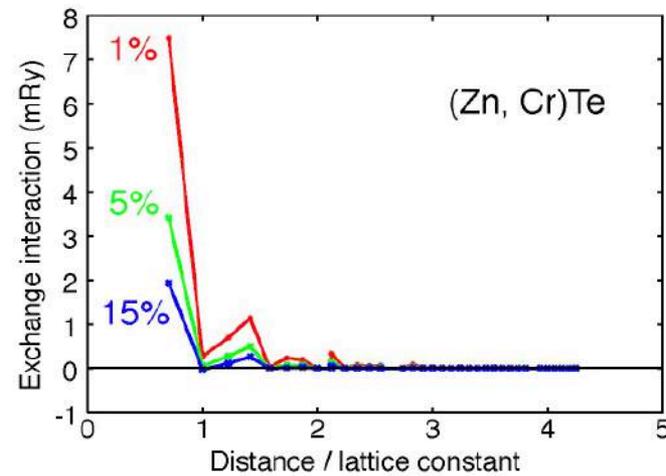
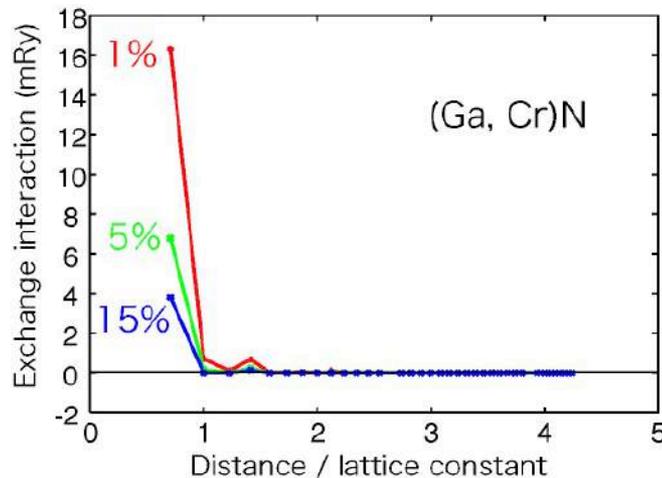
g : KKR structure constant

Mn-III-V中の有効交換相互作用

(Ga, Mn)N:
短距離
相互作用



Cr系DMS中の有効交換相互作用



(Ga, Cr)N, (Zn, Cr)Te: 短距離相互作用

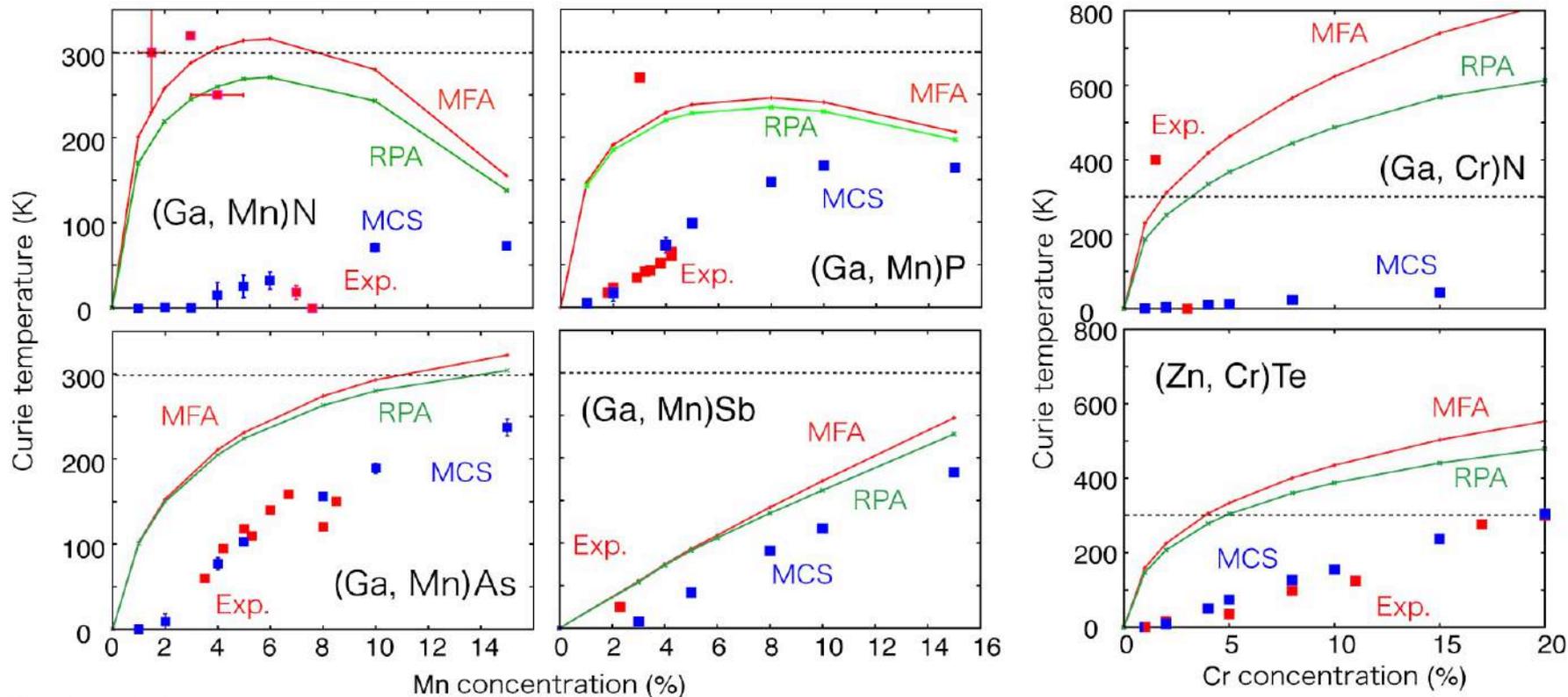
二重交換相互作用：深い不純物バンド

→波動関数の速い減衰により相互作用は**短距離**

***p-d*交換相互作用**：価電子帯の偏極

→広がった状態が相互作用を媒介し**長距離**

モンテカルロ法によるキュリー温度



Experimental values:

1. Reed et al. APL 79 (2001) 3473. 2. Thaler et al. APL 80 (2002) 3964. 3. Theodoropoulou et al. APL (2001) 3475. 4. Overberg et al. APL 79 (2001) 1312.
5. Ploog et al. J. Vac. Sci. Technol. B21 (2003) 1756. 6. Scarpulla et al. Physica B340 (2003) 908. SSC 140 (2006) 443 7. Theodoropoulou et al. PRL 89 (2002) 107203.
8. Matsukura et al. PRB 57 (1998) R2037. 9. Edmonds et al. APL 81 (2002) 4991. 10. Ku et al. APL 82 (2993) 2302. 11. Edmonds et al. PRL 92 (2004) 37201.
12. Abe et al. Physica E7 (2000) 981. 13. Hashimoto et al. J. Cryst. Growth 251 (2003) 327. 14. Yamaguchi et al. JJAP 43 (2004) L1312.
15. Saito et al. PRL 90 (2003) 207202. 16. Ozaki et al. Phys. Stat. Sol. I (2004) 957.

■ パーコレーションを考慮した T_C の計算はよく実験を再現する。

■ 低濃度では高い T_C の実現は難しい。

K. Sato et al., PRB 70 (2004) 201202R

T. Fukushima et al., JJAP 43 (2004) L1416

K. Sato et al., RMP 82 (2010) 1633.

II-b)モンテカルロ法による T_C 計算まとめ

- 第一原理計算とモンテカルロ法による T_C の計算法
 - 平均場近似を超えた取り扱い
 - 不純物のランダム分布を考慮に入れた T_C 計算
 - 磁氣的パーコレーションの重要性
- 電子状態と相互作用長の関係
 - 不純物バンド(二重交換)の系：短距離相互作用
 - 局在モーメント($p-d$ 交換)の系：長距離相互作用

- 高いキュリー温度実現への指針
 - 不純物を高濃度添加(~20%以上)する必要がある
 - (ただし磁性不純物が均一に分布しているとした場合)