

学位論文及び審査結果の要旨

氏 名 藤田 武士

学位の種類 博士(工学)

学位記番号 工府博甲第423号

学位授与年月日 平成26年3月26日

学位授与の根拠 学位規則(昭和28年4月1日文部省令第9号)第4条第1項及び横浜国立大学学位規則第5条第1項

学府・専攻名 工学府 物理情報工学専攻

学位論文題目 Magnetic and chemical interactions of the nearest neighbor transition metal impurity pairs in semiconductors: A density-functional study
(第一原理計算による半導体中の最隣接遷移金属不純物対の磁気・化学相互作用に関する研究)

論文審査委員 主査 横浜国立大学 准教授 Hannes Raebiger
大阪大学 准教授 佐藤 和則
横浜国立大学 教授 梅原 出
横浜国立大学 教授 大野 かおる
横浜国立大学 教授 関谷 隆夫
横浜国立大学 教授 田中 正俊
横浜国立大学 准教授 蔵本 哲治

論文及び審査結果の要旨

希薄磁性半導体と呼ばれる遷移金属を少量添加した半導体は、半導体の特性に加え、新規な強磁性を示す事もあり、新規のスピン트로ニクス材料として期待されている。しかし、室温よりも高い強磁性相転移温度を示す希薄磁性半導体を再現性良く製作する為の指針が確立されておらず実用化に至っていない。そのような指針を確立する為に、世界中で、半導体中の遷移金属不純物間の磁気・化学相互作用の機構の解明に向けた研究が行われている。それらの機構に対しては、現象論的模型を用いた様々な研究がされておりますが、統一の見解は未だ存在しない。

申請論文は、密度汎関数理論に基づく第一原理計算を用いて、半導体中の最隣接遷移金属不純物対の磁気・化学相互作用を詳細に調べた。その結果、それらの相互作用の機構の記述に対して、磁性の教科書では無視して良いとされている陰イオンで隔たれた隣接遷移金属間の直接的相互作用が支配的となる例を明らかにし、更に、その直接的相互作用が支配

的となる条件・系を明らかにした。これらの結果は、半導体中の遷移金属不純物間の磁気・化学相互作用の機構に対する統一的理解を得る際に有用になると考えられる。具体的に、申請論文は多くの半導体及び絶縁体に置ける遷移金属不純物・不純物間相互作用の世界最先端的な第一原理解散の成果が述べている。申請論文では、それらの計算成果の物理的解釈をした上に新たな不純物間相互作用理論を提案されている。

申請論文の主な成果は多くの国際学会で発表されましたし、査読付き発表論文に掲載されています。それらの研究成果及び提案された相互作用理論は既に国際的に認められている。申請論文の研究中身は物理情報工学専攻の博士（工学）の学位論文にふさわしいと判定した。