

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 5 月 31 日現在

機関番号：13301

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2013～2016

課題番号：25790007

研究課題名(和文) 第一原理計算による強誘電体ナノ界面の巨大ラシュバ系探索とスピン流の起源解明

研究課題名(英文) Search for giant Rashba effect and understanding the origin of spin current of ferroelectric nanointerfaces by first-principles methods

研究代表者

石井 史之 (Ishii, Fumiyuki)

金沢大学・数物科学系・准教授

研究者番号：20432122

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,800,000円

研究成果の概要(和文)：物質の端もしくは異なる物質の接合面(界面)では、通常物質と異なる性質を示す。特に、電子のスピンを活用した、エレクトロニクスであるスピントロニクスの応用に繋がる、特徴的な電子の状態が出現する。本研究では、地球上に豊富に存在する酸素の化合物である、酸化物の表面や界面、新しい炭素材料であるグラフェンとの接合面などについて、その電子状態について詳しく調べた。その結果、酸化物誘電体とその界面においては電気分極を指標とする内部電場で生ずる強い有効磁場が生ずることが明らかになった。この性質はスピントロニクスのみならず、熱エネルギーを電気エネルギーに変換する熱電効果への応用が期待される。

研究成果の概要(英文)：At the surface of the materials and at the interface of different materials, they show properties different from ordinary bulk materials, the electronic state which can be used for spintronics applications. In this study, we have investigated the electronic state at the surface and interface of oxides material which abundantly present on Earth and the interface of graphene and oxide. As a result, we found that an effective magnetic field is generated by the internal electric field characterized by electric polarization at the interface between oxide and other substances. This property is expected to be applied not only for spin electronics but also for thermoelectric effect that converts thermal energy into electric energy.

研究分野：物性理論、計算物性物理学

キーワード：ラシュバ効果 強誘電体 ナノ界面 スピン流 スピン軌道相互作用 酸化物 表面 グラフェン

1. 研究開始当初の背景

低消費電力デバイスや高速デバイス等の次世代デバイス実現に向けて、電子のスピン自由度を利用するスピントロニクスの研究が重要になってきている。近年の微細加工技術の発展により、グラフェンなどのナノ物質で、スピントロニクスへの応用が試みられている。

角度分解光電子分光の技術発展により、物質表面でのナノスケールでの電界と重い原子核のポテンシャルに起因したスピン軌道相互作用によって起こるラシュバ効果(エネルギー準位のスピン分裂と波数空間でのスピン渦の発生)が近年盛んに測定されており、磁性を持たない系での波数空間でのスピン分布が明らかになってきている。このような波数空間でのスピン分布を電界で制御できれば、ナノ物質でのスピントロニクスデバイス性能のさらなる高性能化が可能になると期待される。

最近、強誘電体を基板にしたグラフェンのデバイス応用へ向けて、強誘電体をバックゲートとした FET 構造が Zheng らによって報告されている。しかし、スピントロニクス応用は意識されておらず、分極反転によるスピン制御については言及されていない。

2. 研究の目的

本研究ではナノスケールの電界が重要となる強誘電体ナノ界面を有する酸化物半導体/強誘電体、グラフェン/強誘電体の擬二次元電子系におけるスピン制御を目的とする。強誘電体バルク、強誘電体薄膜表面・界面、強誘電体基板上グラフェンについて、電気分極反転とスピン構造の相関について明らかにする。

3. 研究の方法

スピン軌道相互作用を考慮した密度汎関数法に基づく第一原理計算手法によって、バルク、表面、界面系について電子状態計算をおこない、運動量空間におけるスピン分布について調べる。代表者が開発に携わって来たオープンソースプログラムある OpenMX (www.openmx-square.org) と研究室で開発した運動量空間でのスピン分布を可視化するプログラムを用いて研究をおこなう。

4. 研究成果

(1) ZnO のバルクについて、歪みによる分極変化を明らかにした。ウルツ鉱型構造をもつ ZnO は Zn, O がそれぞれ四面体頂点とするネットワークを形成し、O, Zn はそれぞれその四面体の中心付近に位置するように配置する。歪みを加えることで、Zn の位置が四面体の中心からずれることが明らかになり、これによって、Zn の位置における内部電場が反転することが明らかになった。これは伝導帯の Rashba 効果を示すスピン回転が反転することによって確かめられた。これらの成果は

Applied Physics Express 7, 053002(1)-053002(4) (2014)として報告した。また、ZnO (10 $\bar{1}$ 0)面を表面とした系についてはホールドーピングを想定すると、スピンの緩和時間が長くなる、永久スピン旋回 (Persistent spin helix) 状態を示すことが明らかになった。この成果は Applied Physics Express, 8, 073006 (2015)として報告した。

(2) LaAlO₃/SrTiO₃の界面を人工超格子によってモデル化をおこない、界面に形成される二次元電子ガス状態の Rashba スピン分布、ラシュバ係数が人工超格子の周期にそれほど依存しないことを明らかにした。この成果は Mol. Simul., 41, 923-926(2015)として報告した。

(3) Bi/FCC 金属の表面合金を超薄膜でモデル化をおこない、ラシュバ効果の物質依存性を明らかにした。実験がおこなわれている貴金属系ではラシュバ係数の大きさが Bi/Ag のみ Ag の層数に依らずに、Bi/Cu, Bi/Au では大きく依存することが明らかになり、Rashba 効果を示す状態の波動関数の局在性が重要であることが明らかになった。この成果は J. Cryst. Growth の論文として報告した。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 11 件)

- ① N. Yamaguchi, H. Kotaka, and F. Ishii, First-principles study of Rashba effect in ultra-thin bismuth surface alloys, J. Cryst. Growth, 査読有, in press.
- ② Y. P. Mizuta and F. Ishii, Large Anomalous Nernst Effect in a Skyrmion Crystal, Scientific Reports, 査読有 Vol. 6, 28076(2016).
- ③ F. Ishii, Y. P. Mizuta, T. Kato, T. Ozaki, H. Weng, and S. Onoda, First-principles study on cubic pyrochlore iridates Y₂Ir₂O₇ and Pr₂Ir₂O₇, J. Phys. Soc. Jpn., 査読有 84, 073703 (2015).
- ④ M. A. Absor, F. Ishii, H. Kotaka, nd M. Saito, Spin-split bands of metallic hydrogenated ZnO (10-10) surface: First-principles study, AIP Advances, 査読有, Vol. 6, 025309 (2016).
- ⑤ M. A. Absor, F. Ishii, H. Kotaka, nd M. Saito, Persistent spin helix on a wurtzite ZnO (10-10) surface: First-principles density-functional

- study, Applied Physics Express, 査読有, Vol. 8, 073006 (2015).
- ⑥ M. Nishida, F. Ishii, H. Kotaka, and M. Saito, First-Principles Study of Rashba Effect in the $(\text{LaAlO}_3)_2/(\text{SrTiO}_3)_2$, Mol. Simul., 査読有, Vol. 41, 923-926(2015).
 - ⑦ T. Kato, H. Kotaka, and F. Ishii, First-principles study of surface states in topological insulators Bi_2Te_3 and Bi_2Se_3 : Film thickness dependence, Mol. Simul., 査読有, Vol. 41, 892-895(2015).
 - ⑧ F. Ishii, T. Onishi, and H. Kotaka, Spin-Orbit Interaction Effects in the Electronic Structure of B20-type CoSi: First-Principles Density Functional Study: JPS Conf. Proc., 査読有, Vol. 3, 016019(1)-016019(6) (2014).
 - ⑨ Y. P. Mizuta, and F. Ishii, Contribution of Berry Curvature to Thermoelectric Effects: JPS Conf. Proc., 査読有, Vol. 3, 017035(1)-017035(6) (2014).
 - ⑩ K. Sawada, F. Ishii, and M. Saito, First-principles study of carrier-induced ferromagnetism in bilayer and multilayer zigzag graphene nano ribbons, Applied Physics Letters, 査読有, Vol. 104, 143111 (2014).
 - ⑪ M. A. Absor, H. Kotaka, F. Ishii, and M. Saito, Tunable Rashba effect on strained ZnO: First-principles density-functional study, Applied Physics Express, 査読有, Vol. 7, 053002(1)-053002(4) (2014).

[学会発表] (計 12 件)

- ① F. Ishii, H. Sawahata, Y.P. Mizuta, First-principles study of anomalous Nernst effect, 18th International Workshop on Computational Physics and Materials Science, 2017年1月11日-14日, トリエステ, イタリア
- ② 山口直也, 石井史之, SrTiO_3 薄膜におけるスピン軌道相互作用と電気分極の第一原理計算, 日本物理学会第71回年次大会, 2016年3月19日, 東北学院大学泉キャンパス, 宮城県仙台市
- ③ N. Yamaguchi and F. Ishii, First-principles study of strain-induced polarization in bulk and thin-film SrTiO_3 , TOE0-9(国際学会), つくば国際会議場, 茨城県つくば市, 2015年10月19日
- ④ F. Ishii, M. Nishida, N. Yamaguchi, H. Kotaka, M.A.U. Absor, and M. Saito, Spin-orbit coupling and spin textures at oxide interfaces, PSI-K 2015

- CONFERENCE(国際会議), 2015年9月8日, Donostia/San Sebastian, Spain
- ⑤ F. Ishii, N. Yamaguchi, M. Nishida, H. Kotaka, and M. Saito, First-principles study of spin-orbit coupling parameters and built-in electric-field in $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$, New Perspectives in Spintronic and Mesoscopic Physics (国際学会), 柏の葉コンファレンスセンター, 千葉県柏市, 2015年6月11日
 - ⑥ F. Ishii, First-principles study of topological phase transitions and spin textures by OpenMX, (招待講演)(国際学会), The 3rd OpenMX/QMAS Workshop 2015, 東京大学物性研究所, 千葉県柏市, 2015年5月11日
 - ⑦ 石井史之, 大西峰志, 小鷹浩毅, 酸化物半導体におけるラッシュバ効果と永久スピン旋回状態の理論設計, 日本物理学会2014年秋季大会, 2014年9月10日, 中部大学, 愛知県名古屋
 - ⑧ M.A.U. Absor, H. Kotaka, F. Ishii and M. Saito, Rashba effect on clean and hydrogenated ZnO (1010) non-polar surface: First-principles study, 日本物理学会2014年秋季大会, 2014年9月9日, 中部大学, 愛知県名古屋
 - ⑨ F. Ishii, Spin-Orbit Effects in Ferroelectric Oxides: Towards Oxide Spintronics, IUMRS-ICA2014, (招待講演)(国際学会), 2014年8月27日, 福岡大学, 福岡県福岡市
 - ⑩ M.A.U. Absor, H. Kotaka, F. Ishii, and M. Saito, Tunable Rashba spin rotation of strained ZnO: First-principles density functional study, 日本物理学会第69回年次大会, 2014年3月28日, 東海大学湘南キャンパス, 神奈川県平塚市
 - ⑪ M. Nishida, F. Ishii, H. Kotaka, and M. Saito, First-principles study of artificial superlattice $(\text{LaMnO}_3)_n/(\text{SrTiO}_3)_m$, ICMS2013(国際学会), 2013年11月18日-20日, Kobe international conference center, Kobe, Hyogo, Japan,
 - ⑫ M.A.U. Absor, F. Ishii, M. Saito, Spin texture in strained ZnO: A first principle study, 日本物理学会2013年秋季大会, 2013年9月26日, 徳島大学, 徳島県徳島市

[その他]

ホームページ等

http://f-ishii.w3.kanazawa-u.ac.jp/summary_25790007.html

6. 研究組織

(1) 研究代表者

石井 史之 (ISHII, Fumiyuki)

金沢大学・理工研究域数物科学系・准教授

研究者番号：20432122

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし

(4) 研究協力者

なし