

令和 4 年 6 月 8 日現在

機関番号：13301

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2017～2021

課題番号：17K05118

研究課題名（和文）スピン偏極陽電子消滅のシミュレーション研究

研究課題名（英文）Simulation study of spin polarized positron annihilation

研究代表者

斎藤 峯雄 (Saito, Mineo)

金沢大学・数物科学系・教授

研究者番号：60377398

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,500,000円

研究成果の概要（和文）：スピン偏極陽電子消滅実験手法の適用対象であるII-VIおよびIII-Vワイドギャップ半導体中陽イオン空孔において、欠陥レベルの既約表現を明らかにし、空孔の対称性とスピン分極の関係を明らかにした。また、強磁性金属において多数スピンおよび少数スピンに対する運動量密度の違いが、電子系の多体効果を反映したものであることを示唆した。スピン軌道相互作用の影響が運動量密度に有意の差を与えることを明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

物質のスピン分極を観測することのできる新しい研究手法であるスピン偏極陽電子消滅実験手法の可能性を、第一原理計算の実行により明らかにした。ワイドギャップ半導体中陽イオン空孔のスピン分極のメカニズムを明らかにした。また、強磁性金属における多数スピンおよび少数スピンに対する運動量密度を観測することで、電子の多体効果について有益な情報を得ることができることを示した。

研究成果の概要（英文）：Spin-polarized positron annihilation method was used to study cation vacancies in II-VI and III-V wide-gap semiconductors. We clarified irreducible representations of defect levels and revealed that the relation between the symmetry of the defects and electronic spin polarization. We also suggested that the difference between the momentum densities of majority and minority spins in ferromagnetic metals originates from the electron many-body effect. Furthermore, we clarified that the spin-orbit interaction affects momentum densities.

研究分野：物性科学

キーワード：スピン偏極陽電子消滅 運動量密度 密度汎関数理論

1. 研究開始当初の背景

スピントロニクス研究分野において、電子スピン分極を直接観測することが重要であるが、スピン偏極陽電子消滅実験は、そのような観測を可能とする新しい手法として登場した。本実験手法で観測される多数および少数スピンに対する陽電子寿命や運動量密度が実験で得られていた。これらの観測結果よりどのような物理的情報が得られるかや、その結果がどのような物理的起源に由来するのかなどについて理解は十分ではなく、この点を明らかにすることが、今後の同実験手法をスピントロニクス研究に応用する上で重要であった。

実験では、運動量密度が多数スピンと少数スピンで異なることが観測されているが、これらの実験結果を第一原理計算の実行により解析することが必要であった。しかし、このような研究はこれまで十分に行われてこなかった。また、これまでスピン軌道相互作用を考慮した計算はほとんど行われていなかった。したがって、スピン軌道相互作用が、観測される物理量に対してどの程度の影響を与えるかが不明であり、そのため、実験結果の解析において、この作用を取り入れた解析が必要であるかどうかについてはよく理解されていなかった。

2. 研究の目的

本研究では、第一原理計算を電子スピン分極した系に対して行う。対象とする系として第一に、ワイドギャップ半導体における陽イオン空孔を取り扱う。本系は、スピン偏極陽電子消滅実験の研究対象となっており、本研究では、電子スピン分極の起源を明らかにする。とくに、スピン分極を引き起こす欠陥準位に着目し、対称性に基づく議論を行い、電子準位のキャラクターと欠陥の幾何学的構造の関係を明らかにする。

第二に、強磁性金属における電子スピン分極の問題を取り扱う。本研究では、スピン偏極陽電子消滅実験手法を用いて観測される運動量密度がどのような物理的情報を与えるのかを明らかにする。とくに、多数スピンおよび少数スピンに対する運動量密度分布の差の物理的起源を明らかにする。また、スピン軌道相互作用を考慮した計算を行い、その効果が物理量にどの程度影響を与えるのかを明らかにする。

3. 研究の方法

本研究では、電子系に対する密度汎関数理論に基づく計算により、スピン偏極陽電子消滅実験がターゲットとする物質系の計算を行う。とくに、電子スピン分極した系を取り扱うため、スピン分極密度汎関数理論を用いる。さらに、これまでほとんど行われていないスピン軌道相互作用を含めた計算も行う。

本研究では、はじめに、ワイドギャップ半導体中の陽イオン空孔に対して計算を行う。この系の電子スピン分極を詳しく調べるため、バンドギャップ中に現れる欠陥準位について群論に基づく議論を行う。このため、欠陥準位の既約表現を求めることが必要になるが、すでに、既約表現をコンピュータの使用により自動的にもとめるプログラムを作成済みでありこれを用いる。

スピン偏極陽電子消滅実験より運動量密度が観測される。とくに、強磁性金属の運動量密度の研究を行う。この運動量密度の分布には、異方性が現れる。この原因は、結晶の対称性に由来するものであり、群論に基づいて解析を行う。また、運動量密度は、一般に多数スピンの方が広い分布を持つことに着目する。この局在した分布の原因が何に由来するのかを調べるため、運動量空間だけではなく、実空間におけるスピンの分布を解析する。

4. 研究成果

(1) ワイドギャップ半導体中陽イオン空孔における電子スピン分極

スピン偏極陽電子消滅実験により検出されているワイドギャップ中陽イオン空孔についてその電子スピン分極について研究を行った。 C_{3v} の対称性を持つ構造が最安定であることを確認した。II-VI化合物半導体においては、2個の多数スピン電子がE準位を占有し、2ポア磁子の磁気モーメントを持つ。また、III-V化合物半導体では、3個の多数スピン電子がE準位と A_1 準位を占有し、3ポア磁子の磁気モーメントを持つことが分かった。原子半径の小さな陰イオンがエネルギー的に安定なスピン分極を示すことが分かり、II-VIおよびIII-V化合物半導体では、それぞれ酸化物半導体および窒化物半導体において、安定なスピン分極が生じることが分かった。磁気モーメントの減少を引き起こす対称性の低下は、系のエネルギーを上昇させ、 C_{3v} の構造が最安定であることを確認した。GaNにおいて、Gaイオン空孔は、空孔間の距離が大きいと反強磁性となり、小さいと強磁性になる傾向があることを確認した。したがって、空孔濃度が大きいときに強磁性が観測されると予想される。

(2) 強磁性金属における運動量密度

4種類の強磁性金属(Fe, Co, Ni, Gd)に対し、運動量密度は、多数スピンの方が広い分布を持つことが計算から示され、このことは実験結果と一致する。この原因をさぐるためスピン密度の空間分布を調べたところ、多数スピンの方が少数スピンよりも、原子核近傍により局在すること

が明らかになった。各スピンに対する波動関数の空間分布と各スピンの運動量密度分布はおおよそフーリエ変換の関係にあると考えられ、そのことが上記のスピン密度の空間分布と運動量密度分布の関係に影響を与えたものと考えられる。多数スピンの方が狭い空間分布を持つのは、電子の多体効果の影響によるものと考えられ、それが、スピン偏極陽電子消滅実験で得られる運動量密度分布に反映されると解釈できる。したがって、本実験手法は、物質系における電子の多体効果について知見を与えるものとする。

これらの物質における運動量分布の異方性は、結晶の対称性に由来するものである。群論に基づく議論から、一般に、対称性の高い軸の方が、消滅しないバンドの数が多くなり、運動量密度が小さくなることが分かった。

最後に、電子系のスピン軌道相互作用を取り入れた計算を行った。その結果、スピン軌道相互作用が、運動量密度分布に対し、有意の差を与えることを明らかにした。このことにより、スピン偏極陽電子消滅実験で得られた運動量密度分布を第一原理計算に基づいて解析する際、スピン軌道相互作用を考慮することの重要性を示した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計8件（うち査読付論文 8件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 4件）

1. 著者名 Widianto Muhammad Yusuf Hakim, Saito Mineo	4. 巻 61
2. 論文標題 Analysis of band structures of phosphorene and bismuthene based on the double group theory	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 035503 ~ 035503
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ac4c4e	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Widianto Muhammad Yusuf Hakim, Zaharo Aflah, Namari Nuning Anugrah Putri, Saito Mineo	4. 巻 60
2. 論文標題 Electronic structures of puckered bilayer group-V two-dimensional materials: group theoretical analysis	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 061001 ~ 061001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ac0004	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Putri Salsabila Amanda, Yamaguchi Yuki, Ariasoca Thomas Aquino, Widianto Muhammad Yusuf Hakim, Tagami Katsunori, Saito Mineo	4. 巻 714
2. 論文標題 Electronic band structures of group-IV two-dimensional materials: Spin-orbit coupling and group theoretical analysis	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Surface Science	6. 最初と最後の頁 121917 ~ 121917
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.susc.2021.121917	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Zaharo Aflah, Purqon Acep, Winata Toto, Saito Mineo	4. 巻 59
2. 論文標題 Electronic structure of puckered group IV-VI two-dimensional monolayer materials	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 071006 ~ 071006
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ab984c	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Widianto Muhammad Yusuf Hakim, Kadarisman Hana Pratiwi, Yatmeidhy Amran Mahfudh, Saito Mineo	4. 巻 59
2. 論文標題 Spin-polarized cation monovacancies in wurtzite structure semiconductors: first-principles study	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 071001 ~ 071001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ab9654	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Namari Nuning Anugrah Putri, Saito Mineo	4. 巻 58
2. 論文標題 Electronic band structures of group-V two-dimensional materials	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 061003 ~ 061003
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/1347-4065/ab19a1	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Manaf Muhamad Nasruddin, Minami Susumu, Ishii Fumiyuki, Saito Mineo	4. 巻 58
2. 論文標題 First-principles calculation of anomalous muonium in silicon: origin of the negative Fermi contact interaction constant	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 081008 ~ 081008
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/1347-4065/ab2f9a	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tanaka Yuto, Saito Mineo, Ishii Fumiyuki	4. 巻 57
2. 論文標題 Anisotropic thermoelectric effect on phosphorene and bismuthene: first-principles calculations based on nonequilibrium Green's function theory	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 125201 ~ 125201
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/JJAP.57.125201	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計21件（うち招待講演 2件 / うち国際学会 4件）

1. 発表者名 M. Y. H. Widiyanto, S. A. Putri, Y. Yamaguchi, T. A. Ariasoca, K. Tagami, M. Saito
2. 発表標題 Analysis of Band Structures of Group-IV 2D Materials Based on the Double Group Theory
3. 学会等名 13th International Symposium on Atomic Level Characterizations for New Materials and Devices (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Muhammad Widiyanto, Hana Kadarisman, Amran Yatmeidhy, Mineo Saito
2. 発表標題 First-Principles Study of Spin-Polarized Cation Vacancies in II-VI and III-V Semiconductors
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Aflah Zaharo, Mineo Saito
2. 発表標題 Group-theoretical Analysis of Puckered Group IV-VI Two-dimensional Monolayer Materials
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Muhammad Y.H. Widiyanto, Aflah Zaharo, Nuning A. P. Namaria and Mineo Saito
2. 発表標題 Electronic Band Structures of Puckered Group-V Two-Dimensional Materials: Group Theoretical Analysis
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 山口悠樹, Thomas Ariasoca, Salsabila Amanda Putri, 斎藤峯雄, 田上勝規
2. 発表標題 族2次元物質のバンド構造: 2重群に基づく解析
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Aflah Zaharo and Mineo Saito
2. 発表標題 Electronic structures of phosphorene-like group IV-VI two-dimensional materials
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会プログラム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Muhammad Widiyanto, Hana Kadarisman, Amran Yatmeidhy, and Mineo Saito
2. 発表標題 Systematic study of spin-polarized cation monovacancies in wide-gap semiconductors
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会プログラム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Muhamad Nasruddin Manaf, Susumu Minami, Fumiyuki Ishii and Mineo Saito
2. 発表標題 Origin of the negative Fermi contact interaction constant of the anomalous muonium in silicon
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会プログラム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Muhamad Nasruddin Manaf and Mineo Saito
2. 発表標題 Electron Correlation in the Anomalous Muonium in Silicon
3. 学会等名 International Conference on Frontiers of Correlated Electron Sciences (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Muhammad Y. H. Widiyanto, Hana P. Kadarisman, Amran M. Yatmeidhy and Mineo Saito
2. 発表標題 Spin-Polarized Cation Vacancies in Compound Semiconductors: First-principles Study
3. 学会等名 The 22nd Asian Workshop on First-Principles electronic structure calculations (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 A. Zaharo and M. Saito
2. 発表標題 Band Structure of Group IV-VI 2D Materials
3. 学会等名 The 22nd Asian Workshop on First-Principles electronic structure calculations (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 斎藤峯雄
2. 発表標題 2次元物質のバンド構造：群論に基づく解析
3. 学会等名 NIMS ナノシミュレーション ワークショップ 2019 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Muhamad Nasruddin Manaf, Susumu Minami, Fumiyuki Ishii and Mineo Saito
2. 発表標題 Hyperfine parameters for anomalous muonium in silicon: Density functional calculations
3. 学会等名 日本物理学会 2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Mineo Saito, Nuning Anugrah Putri Namar, Amran Mahfudh Yatmeidhy, Muhamad Nasruddin Manaf
2. 発表標題 2次元物質における電子構造の群論に基づく解析
3. 学会等名 日本物理学会 2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 見波将, 斎藤峯雄
2. 発表標題 グラフェンおよびシリセンにおけるディラックコーンの出現: 群論に基づく解析
3. 学会等名 日本物理学会 2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 田中悠斗, 石井史之, 斎藤峯雄
2. 発表標題 非平衡グリーン関数を用いたナノ構造における熱電効果の第一原理計算
3. 学会等名 日本物理学会2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 見波将 , 石井史之 , 水田耀ピエール , 斎藤峯雄
2. 発表標題 ホイスラー合金における熱電効果の第一 原理計算
3. 学会等名 第 31 回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 ANUGRAH PUTRI NAMARI NUNING , 斎藤峯雄
2. 発表標題 Electronic structures of 2-dimentional group-V materials : First-principles calculation
3. 学会等名 第31回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 斎藤峯雄
2. 発表標題 ZnO中Zn原子空孔の第一原理計算
3. 学会等名 NIMS ナノシミュレーション ワークショップ 2017 (招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Nuning Anugrah Putri Namari, Mineo Saito
2. 発表標題 Electronic structure of Group-V two dimensional materials
3. 学会等名 日本物理学会 第73回年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Amran Mahfudh Yatmeidhy, Mineo Saito
2. 発表標題 First-principles calculations on positron annihilation in the Zn vacancy in ZnO
3. 学会等名 日本物理学会 第73回年次大会
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関