

研究種目：基盤研究 (A)

研究期間：2007～2010

課題番号：19204035

研究課題名 (和文) 遷移金属酸化物の電子相制御

研究課題名 (英文) Electronic phase control of transition metal oxides

研究代表者

前川 禎通 (SADAMICHI MAEKAWA)

東北大学・金属材料研究所・教授

研究者番号：60005973

研究代表者の専門分野：物性理論

科研費の分科・細目：物理学・物性 II

キーワード：強相関係、新機能材料

1. 研究計画の概要

近年遷移金属酸化物など強相関電子系のデバイス応用への関心が高まっている。これは、強相関電子系では様々な量子相が競合しているため、外部からの小さな摂動により、秩序相間の移り変わりやそれぞれの相とは全く違った量子現象が現れるからである。例えば、強磁性金属を2つの超伝導体ではさむことにより、強磁性金属中に両超伝導状態(ゼロ状態)とは違った超伝導状態(π 状態)が誘起される。このような電子の各自由度の示す性質や秩序がお互いに競合し様々な量子現象が現れる量子競合相の問題では、遷移金属酸化物だけでなく、分子性の有機化合物や生体物質についても重要である。また、様々な物質の界面で電子が閉じ込め効果を受ける時にも同様のことが期待される。

しかし現象が多体効果に基づくことから、定量的研究は容易ではない。理論的には数値シミュレーション法が有力であり、多くの研究が行われているが、非常に単純化したモデル計算が中心であり、物質の個性を取り込む段階には至っていない。しかし、強相関電子系では様々な量子相が微妙に競合することから、物質の個性を取り入れた研究が重要である。本研究では、多体電子系の数値計算法を用いて、強相関電子系における競合する相の関係を明らかにし、その競合から生じる新たな量子現象を引き出す。

2. 研究の進捗状況

強磁性半導体は、半導体中の電子と磁性イオンが相互作用として生じるユニークな物性を示す。そのためその磁性と伝導の研究には半導体の電子状態と強磁性を引き出す電

子相関を同時に考慮する必要がある。

我々は、半導体の電子状態を求める第一原理計算プログラムと磁性イオンの電子相関を取り扱う量子モンテカルロ計算プログラムを結合させる数値シミュレーションプログラムを完成させた。この手法は第一原理計算で求めた電子状態を、アンダーソンの不純物に対するハミルトニアン、いわゆるハルデン・アンダーソンモデルにマップし、このモデルハミルトニアンを量子モンテカルロ計算する、というものである。

このプログラムを用いて、(Ga, Mn) As の強磁性発現機構とその物性を研究した。その強磁性はエネルギーギャップの中に生じる不純物準位が支配している。当研究により、この不純物準位の特性とその温度依存性を詳細に調べることが可能になった。

我々はこの手法を遷移金属不純物を含む ZnO にも応用した。特に (Zn, Mn) O は透明磁石の可能性が注目されている。しかし、実験的には十分に確認されているとは言えない状況にある。開発した数値計算プログラムにより、この物質に対して次のことを明らかにした：

(1) ZnO で出現する結晶構造のなかで、Zincblend 型構造が強磁性にとって有利である。

(2) p-型半導体では強磁性が出現することが、n-型では出現が困難である。

また、近年磁性イオンを含まない強磁性体、「d0-強磁性体」の可能性が注目される。例えば、MgO 結晶中に N イオンを導入することにより N イオン中に局在した電子が強磁性を発現する可能性がある。MgO はトンネル磁気抵抗素子のトンネル障壁として利用される

ことから、トンネル障壁に磁性を導入できれば様々な新しい発展が期待される。我々は上記のプログラムをNイオンを含むMgOにも拡張し、室温強磁性の可能性を示した。

3. 現在までの達成度

①当初の計画以上に進展している。

(理由)特に、磁性半導体に関する研究では、Nature Materials, Physical Review Letters など、被引用度の高い有力雑誌に出版してきたほか、編集者推薦論文に選ばれるなど、研究コミュニティーの関心を集め、この分野の研究推進に貢献してきた。その他にも、多くの成果を有力雑誌で報告した。また、国際会議などにおいても多くの招待講演を行ってきた。

4. 今後の研究の推進方策

本研究で開発してきた数値計算プログラムを活用し、物質の個性を取り込んだ強相関電子デバイス開発の指針を見出していく。

5. 代表的な研究成果

(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66件)

1. S. R. Dunsiger, J. P. Carlo, T. Goko, G. Nieuwenhuys, T. Prokscha, A. Suter, E. Morenzoni, D. Chiba, Y. Nishitani, T. Tanikawa, F. Matsukura, H. Ohno, J. Ohe, S. Maekawa, Y. J. Uemura, Spatially homogeneous ferromagnetism of (Ga, Mn)As, Nature Materials, 9, 299-303 (2010). 査読有

2. G.-Y. Guo, S. Maekawa, and N. Nagaosa Enhanced Spin Hall Effect by Resonant Skew Scattering in the Orbital-Dependent Kondo Effect, Phys. Rev. Lett. 102, 036401 (2009). 査読有

3. J. Ohe, Y. Tomoda, N. Bulut, R. Arita, K. Nakamura, and S. Maekawa, Combined Approach of Density Functional Theory and Quantum Monte Carlo Method to Electron Correlation in Dilute Magnetic Semiconductors, J. Phys. Soc. Jpn. 78, 083703 (2009). 査読有

4. M. Mori, G. Khaliullin, T. Tohyama, and S. Maekawa, Origin of spatial variation of pairing gap in Bi-based high-Tc cuprates Phys. Rev. Lett. 101, 247003 (2008). 査読有

5. S. Takahashi, S. Hikino, M. Mori, J. Martinek, and S. Maekawa, Supercurrent Pumping in Josephson Junctions with a Half-Metallic Ferromagnet, Phys. Rev. Lett. 99, 057003 (2007). 査読有

[学会発表] (計107件)

1. S. Maekawa, Spin Injection and Accumulation, International Conference of Magnetism, July 28, 2009, Karlsruhe, Germany

2. M. Mori, Local structure and superconductivity in cuprates, The 7-th International Conference on New Theories, Discoveries and Applications of Superconductors and Related Materials, May. 13, 2009

Beijing, China

3. M. Mori, Origin of spatial variation of pairing gap in Bi-based high-Tc cuprates, The 7-th Asia-Pacific Workshop, Nov. 7-10, 2008, Tokyo, Japan.

4. S. Maekawa, Thermal Current, Spin Current and Charge Current in Strongly Correlated Materials, Hvar 2008 Conference on Concepts in Electron Correlation, September 23, 2008, Hvar, Croatia.

[図書] (計1件)

1. W. Koshibae, S. Maekawa, NATO Science for Peace and Security Series B: Physics and Biophysics, "Thermoelectric effect in transition metal oxides", 2009, pp.69-79

[その他]

<http://www.maekawa-lab.imr.tohoku.ac.jp>