

遷移金属酸化物界面におけるスピン分裂の第一原理計算

Title: First-principles calculation of spin splitting in system without an inversion center

石井 史之, 大西峰志, 小鷹浩毅, 斎藤峯雄

Fumiyuki Ishii, Takashi Onishi, Hiroki Kotaka, and Mineo Saito

金沢大学 理工研究域 数物科学系

Institute of Science and Engineering, Kanazawa University, Kanazawa 920-1192, Japan

時間反転対称性有し、空間反転対称性を有する系では、波ベクトル k でのスピン \uparrow をもったブロッホ状態の固有値 $E(k, \uparrow)$ はその対称性からそれぞれ $E(k, \uparrow) = E(-k, \downarrow)$, $E(k, \uparrow) = E(-k, \uparrow)$ の関係を満たす。その結果、 $E(k, \uparrow) = E(k, \downarrow)$ と、全ての k 点でスピン縮退を起こす。一方で、空間反転対称性の破れた系では、時間反転不変な k 点を除いては、 $E(k, \uparrow) \neq E(k, \downarrow)$ となり、スピン分裂を生ずる。特に物質の表面ではこれらは Rashba 効果として知られており、近年研究が盛んにおこなわれている。我々はこれまで、ビスマス薄膜について Rashba 効果、すなわちスピン分裂と二次元 k 空間におけるスピン構造について、密度汎関数法に基づく第一原理計算手法によって調べてきた[1,2]。特に、フェルミ線上のスピン構造を詳しく解析するプログラムの開発をおこない[2,3]、高山らのビスマス多層膜のスピン角度分解光電子分光の実験結果[4]を説明した。

このような空間反転対称性の破れによるスピン分裂は、デバイス構造を考えた場合、基板や電極部の界面で重要となり、デバイス特性にも大きく影響を与えると考えられる。特にイオン性の強い遷移金属酸化物人工超格子界面では内部・界面電場によって大きなスピン分裂が生じると考えられる。

本発表では、外場による空間反転対称性の破れの制御が容易な強誘電体 PbTiO_3 のバルクおよび薄膜について電子状態と運動量空間でのスピン構造を調べた結果を紹介する。バルクでは価電子帯トップの X 点で Rashba 効果が確認された。Rashba 係数 α は、エネルギー分散より k_R と E_R (図 1(a)参照)を求め、自由電子のエネルギー分散関係式より見積もった。得られた Rashba 係数 α は図 1(b)に示すように、大きな電気分極依存性を示すことがわかった。さらに、図 1(c)(d)に示すように分極反転により波数空間でのスピン反転が起こることがわかった。Rashba 型スピンとは異なるスピン構造を示す系やウルツ鉱型酸化物についても紹介する。

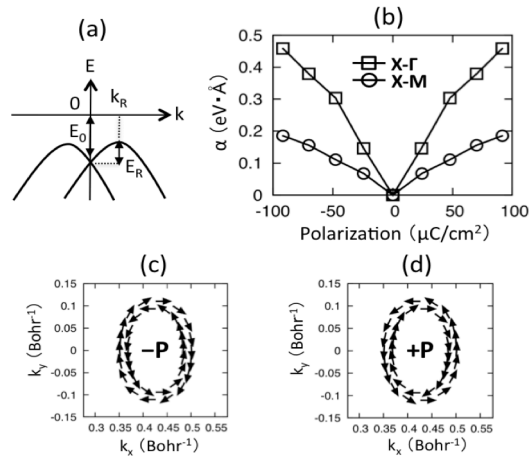


図 1: (a)エネルギー分散の模式図と k_R と E_R ,
(b) PbTiO_3 の Rashba 係数 α の電気分極依存性
(c),(d)波数空間におけるスピン渦

[1] H. Kotaka, F. Ishii, M. Saito, T. Nagao, and S. Yaginuma, Jpn. J. App. Phys., **51**, 025201 (2012).

[2] H. Kotaka, F. Ishii, and M. Saito, Jpn. J. App. Phys., **52**, 035204 (2013).

[3] T. Ozaki et al., [http:// www.openmx-square.org/](http://www.openmx-square.org/)

[4] A. Takayama, T. Sato, S. Souma and T. Takahashi, Phys. Rev. Lett. **106**, 166401(2011).