

## 遷移金属酸化物のスピン制御

Title: Control of spin in transition metal oxides

石井史之<sup>1</sup>, 斎藤峯雄<sup>1</sup>, 西田美穂<sup>2</sup>,

大西峰志<sup>2</sup>, 小鷹浩毅<sup>2</sup>, Moh. Adhib Ulil Absor<sup>2</sup>

Fumiyuki Ishii<sup>1</sup>, Mineo Saito<sup>1</sup>, Miho Nishida<sup>2</sup>,  
Takashi Onishi<sup>2</sup>, Hiroki Kotaka<sup>2</sup>, and Moh. Adhib Ulil Absor<sup>2</sup>

<sup>1</sup>金沢大学理工研究域数物科学系, <sup>2</sup>金沢大学自然科学研究科数物科学専攻

<sup>1</sup>Faculty of Mathematics and Physics, Institute of Science and Engineering, Kanazawa University, Kakuma-machi, 920-1192

<sup>2</sup>Division of Mathematical and Physical Sciences, Graduate School of Natural Science and Technology, Kanazawa University, Kakuma-machi, 920-1192

近年トポロジカル絶縁体表面やラッシュバ効果など、スピン軌道相互作用に起因した非自明な運動量空間でのスピン分布が注目されている。これまで我々は密度汎関数法に基づく第一原理計算[1]によって、Bi 薄膜[2], B20 型 CoSi[3], トポロジカル絶縁体  $\text{Bi}_2\text{X}_3$  ( $\text{X}=\text{Se}, \text{Te}$ ) 薄膜[4]の運動量空間でのスピン構造を明らかにしてきた。運動量空間でのスピン分布は、スピントロニクス応用を視野に入れた場合、スピン電界効果トランジスタの実現にとっては大変重要となる。スピン分極の起源は、空間反転対称性の破れであるが、デバイス構造において、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。

デバイス応用を指向した遷移金属酸化物人工超格子の研究として、 $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$  において高いキャリア移動度[5]や Rashba 効果[6]が報告されている。これらの物性は人工超格子の界面に起因していると考えられる。しかし、人工超格子における界面の原子構造や現象の微視的な起源は明らかではない。スピントロニクスデバイスとして応用するためには、人工超格子における界面の電子状態を制御することが重要である。本講演では、第一原理計算により、人工超格子  $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$  の電子状態を明らかにし、その界面状態の運動量空間でのスピン分布を調べた結果[7]について報告する。 $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$  界面は、n 型界面 ( $\text{LaO}/\text{TiO}_2$ ) と p 型界面 ( $\text{SrO}/\text{AlO}_2$ ) のそれぞれが形成する界面状態においてそのスピン分布は異なる界面電場を反映したラッシュバ型であることが明らかとなった。n 型界面状態について見積もられた Rashba 係数は実験で報告されている値とよい一致を示した。講演では、基板歪みによる特殊なスピン構造の設計、ZnO のラッシュバ効果 [8]についても議論する。

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

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

[3] F. Ishii, T. Onishi, and H. Kotaka, JPS. Conf. Proc., in press (arXiv:1401.6515).

[4] T. Kato, H. Kotaka, and F. Ishii, submitted. [5] A. Ohtomo and Y. Hwang, Nature **427**, 423 (2004).

[6] A. D. Caviglia et al, Phys. Rev. Lett **104**, 126803 (2010). [7] M. Nishida, F. Ishii, H. Kotaka, and M. Saito, submitted. [8] M. Adhib, F. Ishii, and M. Saito, in preparation.