

First-principles Study of Control on Spin Splittings at Surfaces/Interfaces

メタデータ	言語: jpn 出版者: 公開日: 2020-01-08 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: メールアドレス: 所属:
URL	http://hdl.handle.net/2297/00056475

This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial-ShareAlike 3.0 International License.



学位論文要旨
表面及び界面におけるスピン分裂制御
の第一原理的研究

First-principles Study of Control on Spin Splittings at Surfaces/Interfaces

金沢大学大学院自然科学研究科
数物科学専攻
山口直也

1 要約

Recently, many researches towards spintronics has been done, and energy conversion via spin current is expected. Spin-to-charge conversion due to the Rashba effect, that is, the inverse Rashba-Edelstein effect (IREE) was observed in two-dimensional electron gas (2DEG) of various materials. The efficiency of the IREE may become higher as the Rashba coefficient, the strength of the Rashba effect, is larger. Therefore, the 2DEG with large spin splittings are promising candidates for spintronic materials of spin-to-charge conversion. In this study, using density functional calculations, we calculated Bi/ M surface alloys (M = Cu, Ag, Au, Ni, Co, Fe) to investigate giant Rashba spin splittings. We also calculated LaAlO₃/SrTiO₃ interfaces and investigated effects of the strain on spin splittings. We found that for Bi/ M surface alloys, there are Rashba states strongly localized at surfaces to make Rashba spin splittings huge and for LaAlO₃/SrTiO₃ interfaces, there are strain-induced large spin splittings and the persistent spin helix state, which possesses a long spin life time for the tensile strain.

2 はじめに

現代の電子機器などを動かす技術はエレクトロニクスの発展によってもたらされたものである。例えば、パソコンやスマートフォンなど高速化及び小型化は半導体上の素子の微細化などによりその集積率が向上したことに一因があるが、微細化の限界に至った際には従来の電荷、電流を用いるのみのエレクトロニクスでは不十分となる。近年、スピン及びスピンを活用したスピントロニクスが注目されている。そこでは主として、スピン角運動量の流れであるスピン流の制御が課題であり、スピン流を利用することでデバイスの低消費電力化などが期待される。しかしながら、スピントロニクスがある程度成熟した際には、従来のエレクトロニクスとの接続が必要不可欠となると考えられる。それによって、スピントロニクスデバイスと従来の電子機器を組み合わせる活用が期待されるが、それにはスピン流と電流との間で高効率な変換が必要である。最近、Bi/Ag 界面系において逆ラシュバ-エデルシュタイン効果によるスピン流-電流変換 (スピン流を電流へと変換する) 現象 [1] が注目され、様々な表面系及び界面系に対して盛んに研究されている。逆ラシュバ-エデルシュタイン効果は後述するラシュバ効果が起きる界面で発生し、逆スピンホール効果に代わるスピン流-電流変換現象として期待される。

ラシュバ効果はスピン軌道相互作用の強さを表すスピン軌道結合係数が大きい原子核の寄与と界面電場が要因であるとされ、その効果係数 α_R (ラシュバ係数) に関して様々な表面・界面系に対して盛んに研究されてきた。 α_R の制御は spin FET [2] などのデバイス特性を制御する観点からも重要な問題である。

逆ラシュバ-エデルシュタイン効果によって高効率なスピン流-電流変換を行うには大きなラシュバ係数 α_R とともに大きな有効緩和時間 τ が必要である。

3 本研究の構成と目的

1. Bi/ $M(111)-\sqrt{3}\times\sqrt{3}R30^\circ$ ($M=\text{Cu, Ag, Au, Fe, Co, Ni}$) 表面合金の計算。Bi/Ag 表面合金系は $3\text{ eV}\cdot\text{\AA}$ を超える巨大なラシュバ効果を有する系 (巨大ラシュバ系) と知られており、基板の原子種を変えることでさらなる巨大ラシュバ系が得られないかという動機のもと計算を行った。
2. $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ 界面の計算。逆ラシュバ-エデルシュタイン効果は $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ 界面においても報告されている。 $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ 界面は外部電場による α_R の制御が可能である [3] など、応用面でも注目されているが、 SrTiO_3 の性質である歪誘起分極を利用して界面電場を制御することで α_R の制御が見込まれる。巨大ラシュバ系には α_R は及ばないが、歪誘起分極によっては系の対称性が変わることにより大きなスピン緩和時間 τ_s を有する永久スピンらせん状態の発生が見込めるため、その際はより大きなスピン流-電流変換が期待でき、歪による制御の有効性を調べるといふ動機のもと計算を行った。

4 計算方法

本研究は、主として密度汎関数理論 (DFT: density functional theory) に基づいた第一原理バンド計算を OpenMX(<http://www.openmx-square.org/>) コードを用いて遂行した。 $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ 界面系について、密度汎関数理論に基づく第一原理計算を行った。

5 Bi/ M ($M=\text{Cu, Ag, Au, Ni, Co, Fe}$) 表面合金系

Bi/Ag 表面合金において $\alpha_R = 3.05\text{ eV}\cdot\text{\AA}$ を持つ巨大ラシュバスピン分裂が報告されている [4]。それに続き Bi/Cu 表面合金においては $\alpha_R=1$ [5](0.82 [6]) $\text{eV}\cdot\text{\AA}$ のラシュバスピン分裂が報告されている。それら Bi/ M 表面合金とは Ag 表面の $1/3$ の Ag 原子を Bi に置換した構造をとり、セルは M の FCC(面心立方)(111) 表面を基準として $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 周期である。本研究では、まず、 $3d$ 遷移金属、貴金属の代表的な FCC 金属を M とした Bi/ M ($M=\text{Cu, Ag, Au, Ni, Co, Fe}$) 表面合金について α_R の傾向を調べ、Bi/Cu、Bi/Ag、Bi/Au に対して高精度の α_R の計算を行い、Bi/Au における α_R を予測した。また、本研究では時間反転対称性が破られていない場合に注目するために、いずれの場合も非磁性解について調べた。

5.1 Bi/ M -1 層モデル

まず、Bi/ M ($M=\text{Cu, Ag, Au, Ni, Co, Fe}$) 表面合金の傾向を調べるために、1 層モデルを扱った。ここで 1 層モデルとは M の表面層に相当する層のみを扱ったもので具体的には $1/3$ 層分の Bi、 $2/3$ 層分の M で構成された合金 1 層である。Bi/Ag に関するラシュババンド構造は図 1 のようになり、いずれも計 4 本のバンドから構成される 2 組のラシュバスピン分裂が Γ 点まわりにある。

他の M の場合についても同様のバンド構造が確認でき、それらのラシュババンド (Upper、Lower) に対するラシュバパラメータの計算結果を表 1 に示す。これらのパラメータはラシュババンド構造から決定でき、本研究では、波数空間において縮退点とエネルギーの極値点との 2 点の情報から E_R 及び k_R を決定した。 E_R の

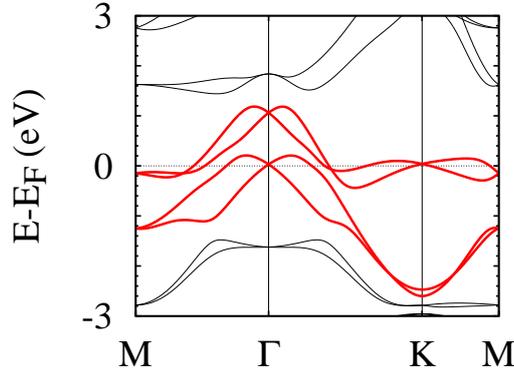


図1: Bi/Ag (1層モデル) におけるラッシュババンド (図の赤線部)

表1: Bi/M-1層モデルにおけるラッシュバ運動量オフセット k_R 、ラッシュバエネルギー E_R 、ラッシュバ係数 α_R

M	Cu	Ag	Au	Ni	Co	Fe
(Upper splitting)						
$k_R(\text{\AA}^{-1})$	0.036	0.075	0.046	0.067	0.077	0.082
$E_R(\text{eV})$	0.068	0.123	0.044	0.135	0.140	0.139
$\alpha_R(\text{eV}\cdot\text{\AA})$	3.76	3.28	1.91	4.05	3.71	3.40
(Lower splitting)						
$k_R(\text{\AA}^{-1})$	0.072	0.124	0.206	0.094	0.113	0.115
$E_R(\text{eV})$	0.093	0.177	0.168	0.107	0.112	0.067
$\alpha_R(\text{eV}\cdot\text{\AA})$	2.59	2.85	1.63	2.28	1.98	1.17

値はその2点のエネルギーに関する差、 k_R の値は2点の波数に関する差とした。

実際に輸送特性に効くと思われるスピン分裂はより縮退点がフェルミ準位に近く、 k_R の大きいLowerのものであると期待されるが、Lowerのスピン分裂に対する α_R の傾向は貴金属に対してはBi/Cu>Bi/Ag>Bi/Au、3d遷移金属元素に対してはBi/Ni>Bi/Co>Bi/Feとなっている。しかし、定量的にはBi/Agの実験値($\alpha_R = 3.05 \text{ eV}\cdot\text{\AA}$ [4])は誤差10%以下でおおよそ合致しているが、Bi/Cuの実験値($\alpha_R=1$ [5])(0.82 [6]) $\text{ eV}\cdot\text{\AA}$)は再現できていない。これは、計算モデルが1層であるため表面ラッシュバ状態が広がる余地のある十分な膜厚が確保できていないためだと思われる。よって、Bi/Cu、Bi/AgなどBi/貴金属表面合金に対してARPESなど実験で見えているスピン分裂との対応を調べるために、節5.2にて層数を増やしたより実際に近いモデルでの計算結果を説明する。

5.2 Bi/Cu(111)、Bi/Ag(111)、Bi/Au(111)の層数依存性

Lowerのラッシュバスピン分裂に対して1層モデルの場合と同様にラッシュバパラメータを計算した結果を比較のため1層の値、実験値と共に表2に示す。

表2: Lower のラシュバスピンスplitに対するラシュバパラメータの層数依存性。実験値に関して Cu(括弧なし)は [5]、Cu(括弧あり)は [6]、Ag は [4] より引用。

M	Cu	Ag	Au
(1 層モデル)			
$k_R(\text{\AA}^{-1})$	0.072	0.124	0.206
$E_R(\text{eV})$	0.093	0.177	0.168
$\alpha_R(\text{eV}\cdot\text{\AA})$	2.59	2.85	1.63
(10 層モデル)			
$k_R(\text{\AA}^{-1})$	0.036	0.113	0.174
$E_R(\text{eV})$	0.015	0.159	0.056
$\alpha_R(\text{eV}\cdot\text{\AA})$	0.83	2.82	0.64
(実験値)			
$k_R(\text{\AA}^{-1})$	0.03(0.032)	0.13	-
$E_R(\text{eV})$	0.015(0.013)	0.2	-
$\alpha_R(\text{eV}\cdot\text{\AA})$	1(0.82)	3.05	-

10 層まで増やすと Bi/Au を除いて各パラメータはほぼ収束し、また、 α_R に関してはいずれの系も収束している。20 層まで増やすといずれの系に対してもラシュバパラメータは収束しており、さらにモデル A、モデル B の各パラメータも合致している。Bi/Cu、Bi/Ag の収束した各パラメータは、実験値とおおよそ合致していることから、Bi/Au の計算値は妥当であると考えられる。よって、Bi/Au のラシュバパラメータは $k_R=0.113 \text{\AA}^{-1}$ 、 $E_R=0.036 \text{ eV}$ 、 $\alpha_R=0.64 \text{ eV}\cdot\text{\AA}$ と予測される。ここで、層数依存性について、Bi/Ag の値は insensitive であり、約 $3 \text{ eV}\cdot\text{\AA}$ の巨大な α_R を持つが、Bi/Cu、Bi/Au については 1 層の値に比べ収束した値は α_R が 3 倍程度小さくなっている。Bi/Ag に関して、表面ラシュバ状態の電荷密度分布は層数に対して insensitive な描像となっているが、Bi/Cu、Bi/Ag に関して、表面ラシュバ状態の電荷密度分布は層数に対して様変わりし、10 層モデルでは非局在化していることが分かる。これは、1 層モデルでは局在するしかなかった表面ラシュバ状態が層が増えることで広がることのできるようになったからであると考えられ、非局在化が α_R の値を減少させた原因だと推測できる。対して、Bi/Ag は 1 層モデルのときの電荷密度分布をほぼ保っているために巨大な α_R を発現すると考えられる。以上のように、 α_R の起源は、局在性と関係がある。

5.3 結論

本研究では、Bi 系界面におけるラシュバスピンスplitの α_R の傾向に関する研究を行った。Bi/ $M(111)-\sqrt{3}\times\sqrt{3}R30^\circ$ ($M=\text{Cu, Ag, Au, Fe, Co, Ni}$) 表面合金の計算を行った。1 層モデルにおいては、いずれの場合もフェルミ準位近傍に大きなスピンスplitが存在し、 α_R の大きさの傾向は M が貴金属の場合に対しては Bi/Cu>Bi/Ag>Bi/Au、 $3d$ 遷移金属元素の場合に対しては Bi/Ni>Bi/Co>Bi/Fe であると予測した。 M が貴金属 (Cu, Ag, Au) の場合の層数依存性について調べ、 α_R の起源について、局在性と関係があることが分かった。層数を減らして強く局在させた場合、いずれの M の場合も $1 \text{ eV}\cdot\text{\AA}$ を超える大きなラシュバ係数 α_R が得られた。巨大なラシュバ効果の発現要因の一つとして、強い局在状態が表面などの境界近傍に存在することが必要であることが挙げられる。

6 LaAlO₃/SrTiO₃ 界面における歪によるスピン分裂の制御

LaAlO₃/SrTiO₃ 界面ヘテロ構造は高移動度 2 次元電子ガス (2DEG: two-dimensional electronic gas) を伴う n 型界面を有する [7,8]。近年、LaAlO₃/SrTiO₃ 界面におけるラシュバスピン分裂が、外部電場を印加することにより制御可能であることが報告されるなどスピントロニクス応用に向けて注目されている [3]。さらに、LaAlO₃/SrTiO₃ 界面において逆ラシュバエデルシュタイン効果 (IREE) によるスピン流電流変換が実験的に確認された [9]。IREE は逆スピンホール効果 [10] を利用したスピン流検出に代わる機構として使われ、IREE の強さはラシュバ係数 α_R 及び有効緩和時間^{*1} τ に比例する。したがって、LaAlO₃/SrTiO₃ 界面におけるラシュバスピン分裂の制御はその IREE の制御のために重要である。

本研究では、密度汎関数理論に基づく第一原理計算を用いて、LaAlO₃/SrTiO₃n 型界面のスピン分裂に着目し、スピン軌道結合係数 α 及びスピントクスチャに対する歪の効果を調べた。詳しくは後述するが、スピン分裂の大きさに対応する α は歪によって変調可能であり、7% の引張歪では 5 倍まで大きくなる可能性があることが本計算により見出された。さらに、引張歪の効果は永久スピンらせん (PSH: persistent spin helix) 状態 [11–13] を発現させ、極めて長いスピン緩和時間を有する。PSH 状態は様々なスピントロニクス応用において重要であると期待される。

6.1 計算モデル

LaAlO₃/SrTiO₃ 界面系の計算モデルとして (LaAlO₃)₆/(SrTiO₃)₆ の超格子を用いた。この超格子モデルでは、LaAlO₃ 及び SrTiO₃ の層数が小さいと原子緩和させるときに金属的な 2DEG の状態が記述できないため [14–17]、それぞれ 6 組成分考慮した。このとき、n 型界面は TiO₂ 面と LaO 面の間の界面である。ここで、LaAlO₃、SrTiO₃ の格子定数 a_0^{LAO} 、 a_0^{STO} はそれぞれ、3.788 Å [18]、3.905 Å [19] の実験値を用いた。界面垂直方向の格子定数 c 、すなわち、超格子の長さは歪のない場合とセルの体積が同じになるように定めた。歪は面内格子定数 a を用いて $(a - a_0^{\text{STO}})/a_0^{\text{STO}}$ と定義し、符号が正だと引張歪、負だと圧縮歪に相当する。それぞれの歪に対して、原子緩和を考慮するために構造最適化を行った。

6.2 引張歪

引張歪のある LaAlO₃/SrTiO₃ 界面では、SrTiO₃ バルク由来の歪誘起分極が [110] 方向に沿って現れ、鏡映面が ($\bar{1}10$) に沿うもの一つのみになると見込まれる。いま、引張歪のある LaAlO₃/SrTiO₃ 界面では元からある界面を垂直に貫く内部電場に加え、[110] 方向に内部電場があるとみなせるので、スピン軌道ハミルトニアン H_{SO} は、 $H_{SO} = \alpha_{xy}^{\parallel} k_x \sigma_y + \alpha_{yx}^{\parallel} k_y \sigma_x + \alpha_{[\bar{1}10]}^{\perp} [(k_x - k_y)/\sqrt{2}] \sigma_z$ となる。ここで、 α_{xy}^{\parallel} 及び α_{yx}^{\parallel} はラシュバスピン分裂を含む面内成分のスピン分極を持つスピン分裂に対応するスピン軌道結合係数であり、 $\alpha_{[\bar{1}10]}^{\perp}$ は面直成分のスピン分極を持つスピン分裂に対応するスピン軌道結合係数である。以下、 $\alpha_{[\bar{1}10]}^{\perp}$ を $\alpha_{[110]}$ と表す。後者はいまの場合歪誘起分極由来である。引張歪が大きくなると、 $H_{[110]z}^{\perp} = \alpha_{[110]}^{\perp} [(k_x - k_y)/\sqrt{2}] \sigma_z$ は H_{SO} の中でも主となり、[110] 方向にスピン分裂が生じる。部分状態密度 (PDOS: partial density of states) を解

^{*1} 逆ラシュバエデルシュタイン効果が生じる際の緩和時間であるが、電子の運動量緩和及びスピン緩和が影響する。

析すると、n 型界面の伝導バンドの底（CBB: conduction band bottom）は主に $3d_{xy}$ 軌道から構成されることが確認され、先行研究と合致した [20]。引張歪がある場合においても、CBB はフェルミ準位より下にあり、界面が金属的であることが分かった。CBB は Γ 点まわりにあるが、スピン分裂のために Γ 点直上には存在しない。

次に、CBB の点を含む Γ 点まわりのスピン分裂に対してスピン軌道結合係数を見積もった。引張歪の下で n 型界面に形成された 2DEG において生じた $[1\bar{1}0]$ ($\Gamma \rightarrow M'$) 方向に沿った Γ 点まわりのスピン分裂に対するスピン軌道結合係数 $\alpha_{[1\bar{1}0]}$ を計算した結果、および、対応する運動量オフセット $k_{[1\bar{1}0]}$ を図 2 に示す。引張歪が大きくなると、 $\alpha_{[1\bar{1}0]}$ 及び $k_{[1\bar{1}0]}$ がともに単調増加する。 $\alpha_{[1\bar{1}0]}$ の値は引張歪 7% において、歪のない場合に比べておよそ 5 倍の大きさとなる。これらの密度汎関数計算の結果は絶対零度の場合に相当するが、実際、 SrTiO_3 の歪誘起強誘電相転移は室温でも生じることが報告されているため [21]、低温の場合に比べると、生じる電気分極の値はいくらか小さくとなると考えられるが、歪による制御は期待できる。

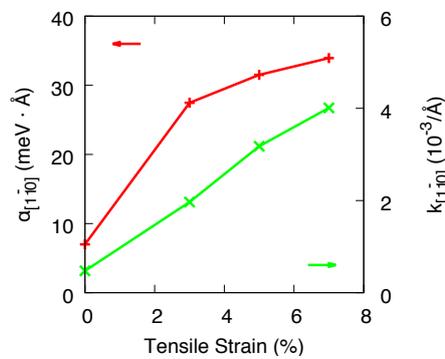


図2: スピン軌道結合係数 $\alpha_{[1\bar{1}0]}$ の引張歪依存性。

6.2.1 引張歪下でのスピントクスチャ

引張歪 5% の場合のスピントクスチャは図 3 のようになる。それはラシュバ型のスピントクスチャではないが、フェルミ線に関して内側のバンド及び外側のバンドは向きが反対のスピントクスチャを示すため、スピン蓄積を通して、それぞれのフェルミ線が互いに反対の向きにシフトし、IREE が実現すると期待される。この場合、 $\lambda_{\text{IREE}} = j_c/j_s = \alpha_R \tau / \hbar$ に関して $\alpha_{[1\bar{1}0]}$ が α_R に代わると考えられる。

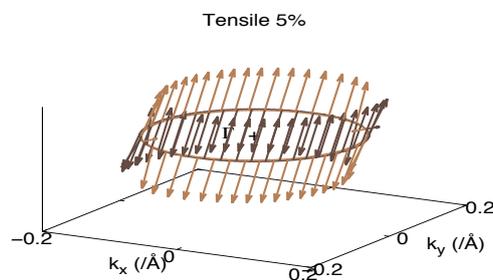


図3: 引張歪 5% の場合におけるスピントクスチャ。曲線はフェルミ線を表す。

スピン分裂を生じるスピン軌道ハミルトニアンを解析を行うために、スピン分極を面内成分と面直成分に分けて調べた。歪のない場合、ほぼ面内成分のみが現れた典型的なラッシュバースピン分裂を生じ、スピン構造は先行研究 [17] に合致する。引張歪のある場合、スピン構造は面直成分が支配的になる (図 4)。これは、スピン分極の面直成分に寄与するスピン軌道ハミルトニアン $H_{[1\bar{1}0]z}^{\perp} = \alpha_{[1\bar{1}0]}^{\perp} [(k_x - k_y)/\sqrt{2}] \sigma_z$ に由来し、面内成分に寄与するスピン軌道ハミルトニアンより支配的になるためだと考えられる。このハミルトニアンの場合、面直成分が異なる k 点に対しほぼ一定になる (ただし、フェルミ線の縮退点を除く) ため、電子状態は大きな τ_s を実現する PSH 状態 [11–13] であると見込まれる。PSH 状態はある一軸方向のみにスピン分極を生じるため、長いスピン緩和時間 τ_s が期待できる。そのため、引張歪のある $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ 界面における τ_s は先行研究 [22–24] と比較して大きいと期待できるため、より高効率なスピン流-電流変換が見込まれる。また、spin FET [2] の応用において重要ならせん周期長 $\lambda_{\text{PSH}} = \pi/k_{[1\bar{1}0]}$ であるが、引張歪 5% の場合、 $0.098 \mu\text{m}$ であり、GaAs/AlGaAs 量子井戸の $7.3\text{--}10 \mu\text{m}$ [13] の数% 以下であるため、引張歪のある $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ 界面は spin FET の微細化という観点では有用である可能性があると考えられる。

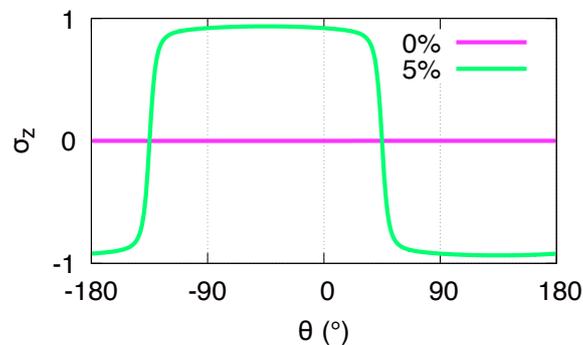


図4: 歪のない場合及び引張歪 5% の場合におけるスピンの面直成分の角度依存性

以上のことから、この歪の効果は、 α 、 τ_s の両面から、 $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ における λ_{IREE} [9] を大きくし、高効率なスピン流-電流変換を実現する可能性がある。

6.2.2 結論

$\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ 界面における歪の効果について調べた。特に引張歪の場合、その n 型界面におけるスピン分裂の界面状態について、IREE に関するスピン軌道結合係数 α は歪により制御可能であり、引張歪 7% では歪のない場合に比べ α がおよそ 5 倍になることを予測した。その際永久スピンらせん状態を伴うことで、極めて長いスピン緩和時間 τ が現れることも予測したが、それは引張歪によってスピン寿命が長くなるということであり、実現すれば $0.1 \mu\text{m}$ 程の小さならせん周期長が得られるため、spin FET デバイスの微細化が期待できる。また、酸化物表面及び界面の 2DEG [18,25,26] に関しても、そうしたスピントロニクス応用の候補として注目の余地があるが、 $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ 界面における歪の効果はスピン流-電流変換をはじめとした様々なスピントロニクス応用に資すると期待できる。

7 終わりに

本研究では、高効率なスピン流-電流変換物質の探求を目指して、巨大なラシュバ係数の観点から Bi/ $M(111)-\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ$ ($M=\text{Cu, Ag, Au, Fe, Co, Ni}$) 表面合金の計算 [27]、長大なスピン緩和時間の観点から LaAlO₃/SrTiO₃ 界面の計算 [28] を行った。Bi/ $M(111)-\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ$ 表面合金は層数依存性を調べることで、Bi/Ag 表面合金のみ強く表面に局在したラシュバ状態が現れることが分かり、Ag 以外の基板表面についても層数が小さくなればラシュバ状態は強く局在せざるを得なくなり、巨大なラシュバ係数を示すことが分かった。巨大な α_R の起源について、局在性に関係があることが分かったため、ラシュバ状態の局在長やワニア中心に着目してそれらの関係を調べるといった解析が有効なのではないかと考えられる。

LaAlO₃/SrTiO₃ 界面の計算では歪依存性を調べることで、引張歪がある場合では、長いスピン緩和時間を持つと期待される永久スピンらせん状態が発現し、さらに、そのスピン分裂が歪によって大きくなるように制御できることが分かった。LaAlO₃/SrTiO₃ 界面に歪の効果を取り入れることで、スピン分裂を大きくすることができると期待できるため、より高効率なスピン流-電流変換の可能性が見いだせた。また、本研究とは別の研究において、圧縮歪のある SrTiO₃ 表面では誘起される電気分極によってラシュバ係数が 100 meV·Å を超える計算結果が得られ、すなわち、酸化物であっても歪によって Au(111) 表面のラシュバ係数と同じオーダーの大きなラシュバ効果が現れる可能性があることを示した [29]。SrTiO₃ の歪誘起分極のように酸化物には多彩な性質があるため、それをうまく利用することで、スピン流-電流変換に限らず高性能もしくは新奇なスピントロニクス材料の設計につながることを期待される。

参考文献

- [1] R. J. Sánchez, L. Vila, G. Desfonds, S. Gambarelli, J. Attané, D. J. Teresa, C. Magén, and A. Fert, Nat. Commun. **4**, 2944 (2013).
- [2] S. Datta and B. Das, Appl. Phys. Lett. **56**, 665 (1990).
- [3] A. Caviglia, M. Gabay, S. Gariglio, N. Reyren, C. Cancellieri, and J. Triscone, Phys. Rev. Lett. **104**, 126803 (2010).
- [4] C. Ast, J. Henk, A. Ernst, L. Moreschini, M. Falub, D. Pacilé, P. Bruno, K. Kern, and M. Gioni, Phys. Rev. Lett. **98**, 186807 (2007).
- [5] L. Moreschini, A. Bendounan, H. Bentmann, M. Assig, K. Kern, F. Reinert, J. Henk, C. Ast, and M. Gioni, Phys. Rev. B **80**, 035438 (2009).
- [6] H. Bentmann, F. Forster, G. Bihlmayer, E. Chulkov, L. Moreschini, M. Gioni, and F. Reinert, EPL **87**, 37003 (2009).
- [7] A. Ohtomo and H. Hwang, Nature **427**, 423 (2004).
- [8] S. Thiel, Science **313**, 1942 (2006).

- [9] E. Lesne, Y. Fu, S. Oyarzun, R. JC, D. Vaz, H. Naganuma, G. Sicoli, J. Attané, M. Jamet, E. Jacquet, J. George, A. Barthélémy, H. Jaffrès, A. Fert, M. Bibes, and L. Vila, *Nat. Mater.* **15**, 1261 (2016).
- [10] E. Saitoh, M. Ueda, H. Miyajima, and G. Tatara, *Appl. Phys. Lett.* **88**, 182509 (2006).
- [11] B. Bernevig, J. Orenstein, and S. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 236601 (2006).
- [12] J. Koralek, C. Weber, J. Orenstein, B. Bernevig, S. Zhang, S. Mack, and D. Awschalom, *Nature* **458**, 610 (2009).
- [13] M. Walser, C. Reichl, W. Wegscheider, and G. Salis, *Nat. Phys.* **8**, 757 (2012).
- [14] S. Ishibashi and K. Terakura, **77**, 104706 (2008).
- [15] M. Park, S. Rhim, and A. Freeman, *Phys. Rev. B* (2006).
- [16] R. Pentcheva and W. Pickett, *Phys. Rev. Lett.* (2009).
- [17] M. Nishida, F. Ishii, H. Kotaka, and M. Saito, *Mol. Simulat.* **41**, 923 (2014).
- [18] V. Savchenko, L. Ivashkevich, and V. Meleshko, *Inorg. Mater.* **21**, 1499 (1985).
- [19] Y. Inaguma, J. Sohn, I. Kim, M. Itoh, and T. Nakamura, *J. Phys. Soc. Jpn.* **61**, 3831 (1992).
- [20] Y. Du, C. Wang, J. Li, X. Zhang, F. Wang, Y. Zhu, N. Yin, and L. Mei, *Comput. Mater. Sci.* **99**, 57 (2015).
- [21] J. H. Haeni, P. Irvin, W. Chang, R. Uecker, P. Reiche, Y. Li, S. Choudhury, W. Tian, M. Hawley, B. Craigo, A. Tagantsev, X. Pan, S. Streiffer, L. Chen, S. Kirchoefer, J. Levy, and D. Schlom, *Nature* **430**, 758 (2004).
- [22] C. Şahin, G. Vignale, and M. E. Flatté, *Phys. Rev. B* **89**, 155402 (2014).
- [23] R. Ohshima, Y. Ando, K. Matsuzaki, T. Susaki, M. Weiler, S. Klingler, H. Huebl, E. Shikoh, T. Shinjo, S. T. B. Goennenwein, and M. Shiraishi, *Nat. Mater.* **16**, 609 (2017).
- [24] M.-J. Jin, S. Y. Moon, J. Park, V. Modepalli, J. Jo, S.-I. Kim, H. C. Koo, B.-C. Min, H.-W. Lee, S.-H. Baek, and J.-W. Yoo, *Nano Lett.* **17**, 36 (2017).
- [25] P. King, R. He, T. Eknapakul, P. Buaphet, S. Mo, Y. Kaneko, S. Harashima, Y. Hikita, M. Bahramy, C. Bell, Z. Hussain, Y. Tokura, Z. Shen, H. Hwang, F. Baumberger, and W. Meevasana, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 117602 (2012).
- [26] K. Yang, S. Nazir, M. Behtash, and J. Cheng, *Sci. Rep.* **6**, 34667 (2016).
- [27] N. Yamaguchi, H. Kotaka, and F. Ishii, *J. Cryst. Growth* **468**, 688 (2017).
- [28] N. Yamaguchi and F. Ishii, *Appl. Phys. Express* **10**, 123003 (2017).
- [29] N. Yamaguchi and F. Ishii, *e-J. Surf. Sci. Nanotechnol.* **16**, 360 (2018).

学位論文審査報告書（甲）

1. 学位論文題目（外国語の場合は和訳を付けること。）

表面及び界面におけるスピン分裂制御の第一原理的研究

2. 論文提出者 (1) 所 属 数物科学 専攻

(2) 氏 名 ^{ふり} ^{がな} ^{やまぐち} ^{なおや}
山口 直也

3. 審査結果の要旨（600～650字）

山口直也氏の学位論文について、7月31日に学位論文公聴会を実施した。公聴会の後、審査委員で審議を行い、合格と判断した。近年、実験の技術的な発展により、物質の界面において、スピン流を電流に変換する現象が発見されている。特にビスマス等の重元素と貴金属界面や酸化物界面が大きなスピン流電流変換を示すことが実験的に報告されている。その起源は、界面においてスピン軌道相互作用によってスピン分裂が生じる現象である Rashba 効果とスピン流によって電場が生じる現象である逆 Rashba-Edelstein 効果であると考えられている。しかし、スピン流電流変換の効率を表す、スピン流電流変換係数の物質依存性が何に起因するか、よく判っておらず、その制御方法についても明らかになっていない。山口氏はこの問題を解決するため、スピン軌道相互作用が大きくなると期待される重元素を含む典型的な系である Bi 貴金属表面合金超薄膜の電子状態を系統的に調べ、スピン軌道相互作用の起源を明らかにした。さらに、高い電子移動度を有する二次元電子ガス系である $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ について、スピン軌道相互作用の基板歪み依存性を調べ、引張歪みによってスピン分裂が増大すること、スピン寿命が長くなることを明らかにし、スピン流電流変換効率を制御できる可能性を明らかにした。以上の様に、山口直也氏の研究はスピントロニクス応用のための基礎研究として重要であると判断し、合格と結論した。

4. 審査結果 (1) 判 定 (いずれかに○印) (合格) ・ 不合格

(2) 授与学位 博士(理学)