

First-principles design of nano-spin conversion materials

メタデータ	言語: jpn 出版者: 公開日: 2020-12-11 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: Ishii, Fumiyuki メールアドレス: 所属:
URL	https://doi.org/10.24517/00059835

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



First-principles design of nano-spin conversion materials		Publicly
		All ▾
Project Area	nano spin conversion science	
Project/Area Number	17H05180	
Research Category	Grant-in-Aid for Scientific Research on Innovative Areas (Research in a proposed research area)	
Allocation Type	Single-year Grants	
Review Section	Science and Engineering	
Research Institution	Kanazawa University	
Principal Investigator	石井 史之 金沢大学, ナノマテリアル研究所, 准教授 (20432122)	
Project Period (FY)	2017-04-01 – 2019-03-31	
Project Status	Completed (Fiscal Year 2018)	
Budget Amount *help	¥2,600,000 (Direct Cost: ¥2,000,000, Indirect Cost: ¥600,000) Fiscal Year 2018: ¥1,300,000 (Direct Cost: ¥1,000,000, Indirect Cost: ¥300,000) Fiscal Year 2017: ¥1,300,000 (Direct Cost: ¥1,000,000, Indirect Cost: ¥300,000)	
Keywords	ラシュバ効果 / スピン流 / スピン軌道相互作用 / 酸化物 / 量子スピン液体 / スピンエレクトロニクス / ナノ材料 / 表面・界面物性 / 物性理論 / 計算物理 / スピン流-電流変換 / 酸化物界面	
Outline of Annual Research Achievements	スピン流－電流変換現象に焦点をあて、強誘電体界面・表面の研究を推進した。運動量空間の有効磁場である、ラシュバ係数を具体的物質について非経験的に求めることは新しい高効率なスピン流－電流変換物質をデザインする上で大変重要である。今年度は計算物質デザインとして、基板歪みによってSrTiO3表面に大きなスピン軌道分裂が生じる可能性があることを明らかにした。この成果はN. Yamaguchi and F. Ishii, First-principles Study of Rashba Spin Splitting at Strained SrTiO3 (001) Surfaces, e-J. Surf. Sci. Nanotechnol. 16, 360-363 (2018) として論文にまとめられた。 以前から継続して研究を実施してきたBi2O3/Cu(111)界面のラシュバ効果について、実験グループが測定した光誘起のスピン流－電流変換について非占有状態のRashba分裂を計算することで、理論的なサポートをおこなった。これらの研究成果はJ. Puebla, F. Auvray, N.Yamaguchi, M. Xu, S. Z. Bisri, Y. Iwasa, F. Ishii, Y. Otani, "Photoinduced Rashba spin to charge conversion via interfacial unoccupied state" arXiv:1902.00237として論文にまとめられた（投稿中）。他の公募班との共同研究として、スピネル型構造Ir2O4薄膜について基板制御を想定した系統的な電子状態計算をおこなった。その結果、スピンのN極とS極が分化した単極子が粒子のように振る舞う「U(1)量子スピン液体」状態が、従来よりも高温で出現しうることを理論的に見出した。この成果は S. Onoda and F. Ishii, “First-principles design of the spinel iridate Ir2O4 for high-temperature quantum spin ice”, Physical Review Letters. 122, 067201-106, (2019)として論文にまとめられ、プレスリリースをおこなった。	
Research Progress Status	平成30年度が最終年度であるため、記入しない。	
Strategy for Future Research Activity	平成30年度が最終年度であるため、記入しない。	

Report (2 results)

2018 Annual Research Report

2017 Annual Research Report

Research Products (58 results)

		All	2019	2018
		2017	Other	
All	Journal Article	Presentation	Remarks	
[Journal Article] First-principles design of the iridate spinel Ir2O4 for high-temperature quantum spin ice				2019 ▾
[Journal Article] First-principles Study of Spin-wave Excitations of 3d Transition Metals with Linear Combination of Pseudo-atomic Orbitals				2019 ▾
[Journal Article] Large anomalous Nernst coefficient in an oxide skyrmion crystal Chern insulator				2018 ▾
[Journal Article] Implementation of Generalized Bloch Theorem Using Linear Combination of Pseudo-Atomic Orbitals				2018 ▾
[Journal Article] First-principles study on thermoelectric properties of half-Heusler compounds CoMSb (M?=?Sc, Ti, V, Cr, and Mn)				2018 ▾
[Journal Article] Anisotropic thermoelectric effect on phosphorene and bismuthene: first-principles calculations based on nonequilibrium Green's function theory				2018 ▾
[Journal Article] First-principles study of electric-field-induced topological phase transition in one-bilayer Bi(111)				2018 ▾
[Journal Article] Strain-induced large spin splitting and persistent spin helix at LaAlO3/SrTiO3interface				2017 ▾

[Presentation] 電場印加下におけるバルクの第一原理計算と磁性系への応用	2019	▼
[Presentation] バンドアンフォールディングを用いたBi/Ag表面合金系におけるラシュバ効果の第一原理的解析	2018	▼
[Presentation] 電場印加下の誘電体バルクにおけるスピン軌道分裂の第一原理計算	2018	▼
[Presentation] スピン分解アンフォーディング法による表面ラシュバ状態の解析	2018	▼
[Presentation] First-principles Study on Effects of Surface Coverage on Spin Splitting in Bi/Ag Surface Alloys	2018	▼
[Presentation] スピン流-電流変換制御に向けた界面スピン分裂の第一原理計算	2018	▼
[Presentation] First-principles Wannier Function Based Analysis of Rashba States in Ferroelectric Oxides and Bismuth Surface Alloys	2018	▼
[Presentation] First-principles study of electric-field induced Z ₂ topological phase transition in strained one-bilayer Bi(111)	2018	▼
[Presentation] Bi薄膜のトポロジカル絶縁体相における歪みと電界効果の第一原理計算	2018	▼
[Presentation] Z ₂ 不変量の第一原理計算コードの開発と2原子層Bi(111)への応用	2018	▼
[Presentation] 磁性ハーフホイスラー 合金の熱伝導率の第一原理計算	2018	▼
[Presentation] First-principles study on anomalous Nernst effect in Fe ₃ Al and related compounds	2018	▼
[Presentation] First-principles calculations on anomalous thermoelectric effect of ferromagnetic Hustler alloys	2018	▼
[Presentation] 強磁性ホイスラー合金における熱電効果の第一原理計算	2018	▼
[Presentation] 強磁性ハーフホイスラー化合物CoMnSbにおける熱電特性の第一原理計算	2018	▼
[Presentation] ハーフホイスラー型化合物CoMSb (M=Sc,Ti,V,Cr,Mn)における異常ネルンスト効果の第一原理計算	2018	▼
[Presentation] First-principles study of Berry-phase-mediated thermoelectric effects	2018	▼
[Presentation] Berry-phase-mediated Thermoelectric Effects in Magnetic Materials	2018	▼
[Presentation] Large anomalous Nernst effect in narrow-gap Chern insulator	2018	▼
[Presentation] First-principles study of anomalous thermoelectric effects	2018	▼
[Presentation] 酸化物強誘電体/金属界面におけるラシュバ係数の第一原理計算	2018	▼
[Presentation] First-principles study of topological phase transition in two-dimensional bismuth and its alloys	2018	▼
[Presentation] First-principles study of anomalous thermoelectric effect in CoMSb(M=Sc,Ti,V,Cr,Mn)	2018	▼
[Presentation] First-principles Wannier Function Approach to Rashba Effect	2018	▼
[Presentation] First-principles study of spin conversion materials	2018	▼
[Presentation] Strain-induced Large Spin Splitting at Oxide Surfaces and Interfaces	2018	▼
[Presentation] 半導体中ミュオニウムの電子構造計算	2017	▼
[Presentation] Bi酸化物並びに貴金属のヘテロ構造におけるラシュバ効果の第一原理計算	2017	▼
[Presentation] ハーフホイスラー型化合物XYSb(X=Sc,Ti,V,Cr,Mn; Y=Fe,Co,Ni)における磁性と熱電効果の第一原理計算	2017	▼
[Presentation] Bi界面系におけるスピン軌道相互作用の第一原理計算	2017	▼
[Presentation] Large Chern number in skyrmion crystals	2017	▼
[Presentation] Implementation of Generalized Bloch Theorem for Calculating Magnon Dispersion of Bcc Iron Using both Conventional and Primitive Constraint Scheme Methods	2017	▼
[Presentation] ハーフホイスラー型化合物における磁性と熱電効果の第一原理計算	2017	▼
[Presentation] First-principles approach to Rashba states for noble metal surfaces and interfaces using Wannier functions	2017	▼
[Presentation] First-principles Calculations of Rashba Spin Splitting at Bismuth compounds/noble-metal Interfaces	2017	▼
[Presentation] 酸化物表面・界面におけるラシュバ係数の第一原理計算	2017	▼

[Presentation] 非平衡グリーン関数法を用いたナノ構造における熱電効果の第一原理計算	2017	▼
[Presentation] ヘロブスカイト型酸化物/貴金属界面におけるラッシュバ効果の第一原理計算	2017	▼
[Presentation] Prediction of thermoelectricity in Heusler compounds	2017	▼
[Presentation] First-principles study of thermoelectricity in magnetic materials	2017	▼
[Presentation] First-principles calculation of the Rashba effect at the Bi/M (M=Cu, Ag, and Au) interface	2017	▼
[Presentation] First-principles study of topological phase in two-dimensional Bismuth	2017	▼
[Presentation] First-principles Study of Rashba Spin Splitting at Surfaces/Interfaces Using Wannier functions	2017	▼
[Presentation] Anomalous Nernst Effect in Half-Heusler Alloys	2017	▼
[Presentation] ハーフホイスラー合金の表面電子状態と 異常熱電効果の第一原理計算	2017	▼
[Presentation] Bi化合物/貴金属界面の第一原理電子状態計算	2017	▼
[Presentation] 二次元Biのトポロジカル相図の第一原理計算	2017	▼
[Presentation] ホイスラー合金における熱電効果の第一原理計算	2017	▼
[Presentation] First-principles Carrier Function Analysis of Surface Rashba States	2017	▼
[Remarks] 研究成果報告 科研費 17H05180		▼

URL: