

第一原理手法による遷移金属酸化物人工超格子の大規模計算

著者	石井 史之
著者別表示	Ishii Fumiyuki
雑誌名	平成26(2014)年度 科学研究費補助金 新学術領域研究(研究領域提案型) 研究実績の概要
巻	2013-04-01 2015-03-31
ページ	3p.
発行年	2019-07-29
URL	http://doi.org/10.24517/00060053



[◀ Back to previous page](#)

第一原理手法による遷移金属酸化物人工超格子の大規模計算

Publicly

Project Area	Materials Design through Computics: Complex Correlation and Non-equilibrium Dynamics
Project/Area Number	25104714
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, 数物科学系, 准教授 (20432122)
Project Period (FY)	2013-04-01 – 2015-03-31
Project Status	Completed (Fiscal Year 2014)
Budget Amount *help	¥2,600,000 (Direct Cost: ¥2,000,000, Indirect Cost: ¥600,000) Fiscal Year 2014: ¥1,300,000 (Direct Cost: ¥1,000,000, Indirect Cost: ¥300,000) Fiscal Year 2013: ¥1,300,000 (Direct Cost: ¥1,000,000, Indirect Cost: ¥300,000)
Keywords	遷移金属酸化物ヘテロ界面 / スピン軌道相互作用 / スピンエレクトロニクス / ラシュバ効果 / 遷移金属酸化物 / 二次元電子ガス / 人工超格子 / 第一原理計算 / 界面 / 電子状態
Outline of Annual Research Achievements	<p>ペロブスカイト型遷移金属酸化物LaAlO₃/SrTiO₃のヘテロ界面の電子状態を詳しく調べた。ヘテロ界面をモデル化するため、人工超格子(LaAlO₃)_n/(SrTiO₃)_nによる計算と有効遮蔽体法による計算の二つの方法で密度汎関数法に基づき、スピン軌道相互作用を考慮した第一原理電子状態計算をおこなった。界面状態のスピン軌道分裂から見積もった、ラシュバ係数は両手法で大きく変わらず、実験結果とも同じオーダーであることが明らかになった。また、人工超格子系については、内部電場を見積り、ラシュバ係数の層数依存性について調べ、内部電場とラシュバ係数の相関を明らかにした。人工超格子の研究成果については、Molecular Simulation, published online DOI:10.1080/08927022.2014.987986として、論文発表をおこなった。界面近傍の歪みについて詳しく解析した結果については、投稿準備中である。</p> <p>遷移金属酸化物人工超格子によるトポロジカル界面状態の理論設計のため、トポロジカル不変量で分類される、トポロジカル絶縁体 (バルク) の探索をおこなった。他方、典型的なトポロジカル絶縁体Bi₂Te₃, Bi₂Se₃の表面状態のスピン構造の解析、また、Z₂不変量の計算によるBi₂Te₃, Bi₂Se₃内部パラメータの変化によるトポロジカル相転移を明らかにした。これらの研究成果は、Molecular Simulation, published online DOI:10.1080/08927022.2014.964476, ならびにJPS Conf. Proc. 5, 011022 (2015)に論文発表をおこなった。</p>
Research Progress Status	26年度が最終年度であるため、記入しない。
Strategy for Future Research Activity	26年度が最終年度であるため、記入しない。

Report (2 results)

2014 Annual Research Report

2013 Annual Research Report

Research Products (58 results)

	All	2015	2014	2013	Other
	All	Journal Article	Presentation	Remarks	
[Journal Article] First-Principles Study of Topological Insulators A ₂ B ₃ (A=Bi and Sb, and B=O, S, Se and Te)					2015 ▼
[Journal Article] Thermopower of Doped Quantum Anomalous Hall Insulators: The case of Dirac Hamiltonian					2015 ▼
[Journal Article] First-principles study of Exchange Interaction in Ising-type Multiferroic Ca ₃ CoMnO ₆					2014 ▼
[Journal Article] Contribution of Berry Curvature to Thermoelectric Effects					2014 ▼
[Journal Article] Spin-Orbit Interaction Effects in the Electronic Structure of B ₂₀ -type CoSi: First-Principles Density Functional Study					2014 ▼
[Journal Article] First-principles study of surface states in topological insulators Bi ₂ Te ₃ and Bi ₂ Se ₃					2014 ▼
[Journal Article] Magnetism-Driven Electric Polarization of Multiferroic Quasi-One-Dimensional Ca ₃ CoMnO ₆ : First-Principles Study Using Density Functional Theory					2014 ▼
[Journal Article] First-Principles Study of Rashba Effect in the (LaAlO ₃) ₂ /(SrTiO ₃) ₂					2014 ▼

[Journal Article] Tunable Rashba effect on strained ZnO: First-principles density-functional study	2014	▼
[Journal Article] First-principles study of carrier-induced ferromagnetism in bilayer and multilayer zigzag graphene nanoribbons	2014	▼
[Presentation] バイロクロア型Ir酸化物における熱電効果の第一原理計算	2015	▼
[Presentation] Spin texture of the persistent spin helix on the wurtzite ZnO (10-10) surface: first-principles study	2015	▼
[Presentation] GaN中水素不純物の電子構造計算	2015	▼
[Presentation] Thermopower of Doped Quantum Anomalous Hall Insulators: Towards First-Principles Evaluation	2015	▼
[Presentation] First-principles study of Rashba effect in artificial superlattice (LaAlO ₃) _n /(SrTiO ₃) _n	2014	▼
[Presentation] Surface states of Bi (001) multi-layer nano film: spin distribution in the real space and momentum space	2014	▼
[Presentation] First-principles study of strain-induced topological phase transitions in bismuth chalcogenides	2014	▼
[Presentation] Spin-orbit coupling on wurtzite ZnO (1010) surface: first-principles density functional study	2014	▼
[Presentation] Ferroelectric tuning of spin-orbit field in ATiO ₃ (A=Sr,Ba, and Pb)	2014	▼
[Presentation] 酸化物半導体におけるラッシュバ効果と永久スピン旋回状態の理論設計	2014	▼
[Presentation] Rashba effect on clean and hydrogenated ZnO (10-10) non-polar surface: First-principles study	2014	▼
[Presentation] トポロジカル界面における熱電能の第一原理計算	2014	▼
[Presentation] 第一原理計算によるA ₂ B ₃ 型化合物トポロジカル絶縁体の探索	2014	▼
[Presentation] 人工超格子(LaAlO ₃) _n /(ATiO ₃) _n (A=Sr, Pb, Ba)における電気分極と電子状態の基板依存性の第一原理計算	2014	▼
[Presentation] 金属基板上グラフェンの電子状態計算	2014	▼
[Presentation] バイロクロア型Ir酸化物とRh酸化物の第一原理計算：金属絶縁体転移、磁性とトポロジー	2014	▼
[Presentation] Spin-Orbit Effects in Ferroelectric Oxides: Towards Oxide Spintronics	2014	▼
[Presentation] Thermopower at the Interfaces, -An Anomalous Contribution from First-Principles-	2014	▼
[Presentation] First-principles study of topological insulator A ₂ B ₃ (A=Bi, Sb, B=O,S, Se, Te)	2014	▼
[Presentation] First-Principles study on pyrochlore iridates and rhodates: metal-insulator transition, magnetism, and topology	2014	▼
[Presentation] 遷移金属酸化物のスピン制御	2014	▼
[Presentation] Tunable Rashba spin rotation of strained ZnO: First-principles density functional study	2014	▼
[Presentation] LaMO ₃ /SrTiO ₃ (M=Al,Mn)の第一原理計算：面方位と基板依存性	2014	▼
[Presentation] 遷移金属酸化物表面・界面における磁性不純物とラッシュバ効果の第一原理計算	2014	▼
[Presentation] 第一原理計算による遷移金属酸化物トポロジカル絶縁体の探索	2014	▼
[Presentation] Ni基板上グラフェンの電子状態計算	2014	▼
[Presentation] 酸化物界面における熱電効果の第一原理計算	2014	▼
[Presentation] Spin-Orbit Interaction Effects in the Electronic Structure of B20-type CoSi: First-Principles Density Functional Study	2013	▼
[Presentation] Contribution of Berry Curvature to Thermoelectric Effects	2013	▼
[Presentation] First-principles study of Exchange Interaction in Ising-type Multiferroic Ca ₃ CoMnO ₆	2013	▼
[Presentation] Seebeck効果において磁性不純物がもたらす異常項の寄与	2013	▼
[Presentation] Spin texture in strained ZnO: A first principle study	2013	▼
[Presentation] 空間反転対称性の破れた系におけるワイル点近傍のスピン分裂	2013	▼
[Presentation] BaTiO ₃ の構造相転移過程におけるスピン分裂の第一原理計算	2013	▼
[Presentation] ベリー曲率が寄与する熱電効果：二次元電子系の場合	2013	▼

[Presentation] 人工超格子(LaMnO3)m/(SrTiO3)nの第一原理計算	2013	▼
[Presentation] First-Principles Calculation of Surface State in Topological Insulators Bi2Te3 and Related Materials: Film Thickness Dependence	2013	▼
[Presentation] First-Principles Study of Artificial Superlattice (LaMnO3)n/(SrTiO3)m	2013	▼
[Presentation] First-Principles Study of Organic Molecular Antiferroelectric Squaric Acid	2013	▼
[Presentation] First-principles electronic structure calculations of the wurtzite ZnO slab	2013	▼
[Presentation] Ab initio study of electric polarization and spin textures in ATiO3 (A=Pb, Ba) with structural phase transition	2013	▼
[Presentation] スピン軌道相互作用が熱電能にもたらす効果	2013	▼
[Presentation] トポロジカル絶縁体 Bi2Te3と関連物質の表面状態における第一原理計算	2013	▼
[Presentation] 人工超格子(LaMnO3)n/(SrTiO3)mの第一原理計算	2013	▼
[Presentation] 遷移金属酸化物におけるRashba効果の第一原理計算	2013	▼
[Presentation] 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	2013	▼
[Remarks] 研究成果報告 科研費 25104714		▼
[Remarks] 金沢大学計算物性・物性理論研究室 石井グループ		▼

URL:

Published: 2013-05-15 Modified: 2019-07-29