

# 第一原理手法による界面電場・スピン軌道結合系数の見積とスピン変換物質デザイン

メタデータ	言語: jpn 出版者: 公開日: 2020-12-14 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	<a href="https://doi.org/10.24517/00059953">https://doi.org/10.24517/00059953</a>

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



[◀ Back to previous page](#)

# 第一原理手法による界面電場・スピン軌道結合係数の見積とスピン変換物質デザイン

Publicly

All

<b>Project Area</b>	nano spin conversion science
<b>Project/Area Number</b>	15H01015
<b>Research Category</b>	Grant-in-Aid for Scientific Research on Innovative Areas (Research in a proposed research area)
<b>Allocation Type</b>	Single-year Grants
<b>Review Section</b>	Science and Engineering
<b>Research Institution</b>	Kanazawa University
<b>Principal Investigator</b>	<b>石井 史之</b> 金沢大学, 数物科学系, 准教授 (20432122)
<b>Project Period (FY)</b>	<b>2015-04-01 – 2017-03-31</b>
<b>Project Status</b>	Completed (Fiscal Year 2016)
<b>Budget Amount *help</b>	<b>¥2,080,000 (Direct Cost: ¥1,600,000, Indirect Cost: ¥480,000)</b> Fiscal Year 2016: ¥1,040,000 (Direct Cost: ¥800,000, Indirect Cost: ¥240,000) Fiscal Year 2015: ¥1,040,000 (Direct Cost: ¥800,000, Indirect Cost: ¥240,000)
<b>Keywords</b>	スピン軌道相互作用 / ラッシュバ効果 / スピン流-電流変換 / 界面 / 薄膜 / 異常ネルンスト効果 / Skyrmion / 異常ホール効果 / 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 / 人工超格子 / 内部電場 / ノンコリニア磁性
<b>Outline of Annual Research Achievements</b>	今年度は貴金属fcc(111)表面, fcc金属(111)ビスマス表面合金, ビスマス酸化物(Bi2O3)/バルク, Bi2O3/貴金属fcc(111)界面のスピン軌道結合係数を定量的に求め、これまで報告されている実験結果との比較、実験グループで実施中の測定結果と比較をおこなった。また、運動量空間のスピン構造を計算し、詳細にスピン軌道結合係数を明らかにした。 fcc金属(111)Bi表面合金については、Rashba効果が発現する最小モデルであるBiM2(M=Cu, Ag, Au, Ni, Co, Fe)超薄膜についてfcc遷移金属, fcc貴金属について、系統的に調べた。これらの結果から、大きなスピン流-電流変換が報告されているBi/Ag系のみが特殊であり、Rashba係数の貴金属の層数依存性を調べた結果、Bi/Agのみ層数にほとんど依存せず、ラッシュバ状態が強く局在していることが明らかになった。この成果は、第18回結晶成長国際会議 (ICCGE-18) にて発表をおこない、論文としてまとめられた (N. Yamaguchi, H. Kotaka, and F. Ishii, J. Cryst. Growth, in press, arXiv:1609.09782)。 スピン変換現象の一つである異常ネルンスト効果について、前年に引き続き、Skyrmion結晶系について詳しく調べた。特に、スキルミオン結晶のサイズが大きくなればなるほど、異常ホール効果、異常ネルンスト効果が大きくなることが明らかになり、スキルミオン結晶が高効率な熱電変換材料の候補となりうる可能性を示した。この成果は論文としてまとめられた (Y. P. Mizuta and F. Ishii, Scientific Reports, 6, 28076(2016))。
<b>Research Progress Status</b>	28年度が最終年度であるため、記入しない。
<b>Strategy for Future Research Activity</b>	28年度が最終年度であるため、記入しない。

## Report (2 results)

2016 Annual Research Report

2015 Annual Research Report

## Research Products (54 results)

All 2017 2016 2015 Other

All Int'l Joint Research Journal Article Presentation Remarks

[Int'l Joint Research] Chinese Academy of Sciences(中華人民共和国)					▼
[Journal Article] First-principles study of Rashba effect in ultra-thin bismuth surface alloys					2017 ▼
[Journal Article] Strain-controlled spin splitting in the conduction band of monolayer WS2					2016 ▼
[Journal Article] Large Anomalous Nernst Effect in a Skyrmion Crystal					2016 ▼
[Journal Article] Spin-split bands of metallic hydrogenated ZnO (10-10) surface: First-principles study					2016 ▼
[Journal Article] First-Principles Study on Cubic Pyrochlore Iridates Y2Ir2O7 and Pr2Ir2O7					2015 ▼
[Journal Article] Persistent spin helix on a wurtzite ZnO(10 $\bar{1}$ 0) surface: First-principles density-functional study					2015 ▼
[Presentation] First-Principle Study of Carrier-Induced Spin Spiral State by Using Generalized Bloch Theorem					2017 ▼

[Presentation] ビスマス酸化物/貴金属界面におけるラシュバ効果の第一原理計算	2017	▼
[Presentation] Bi/貴金属界面の第一原理計算	2017	▼
[Presentation] First-principles study of anomalous Nernst effect in skyrmion crystals	2017	▼
[Presentation] First-principles design of the spinel iridate Ir2O4 for high temperature quantum spin ice	2017	▼
[Presentation] First-principles study of nano-spin conversion materials	2017	▼
[Presentation] First-principles Calculations of Rashba Effect in Bi2O3/M (M=Cu, Ag, Au)	2017	▼
[Presentation] Skyrmion-driven thermoelectric conversion: An ab initio study	2017	▼
[Presentation] First-principles calculation of thermoelectric properties	2016	▼
[Presentation] 酸化物/金属界面の電子状態	2016	▼
[Presentation] 酸化物薄膜における異常ホール効果と異常ネルンスト効果の第一原理計算	2016	▼
[Presentation] Large Chern number in oxide thin films	2016	▼
[Presentation] First-principles Approach for Skyrmion-driven Thermoelectric Conversion	2016	▼
[Presentation] First-principles calculation of Rashba parameters in surface alloys of bismuth and noble metals	2016	▼
[Presentation] スキルミオン結晶薄膜における巨大Chern数と異常ネルンスト係数の第一原理計算	2016	▼
[Presentation] 化物表面・界面におけるラシュバ係数の第一原理計算	2016	▼
[Presentation] First-principles Study of Rashba Effect in Bi-based Systems	2016	▼
[Presentation] 大きな異常熱電効果を示すスキルミオン結晶物質の第一原理的探索に向けて	2016	▼
[Presentation] SrTiO3薄膜におけるスピン軌道相互作用と層分極の第一原理計算	2016	▼
[Presentation] SrTiO3薄膜におけるスピン軌道相互作用と電気分極の第一原理計算	2016	▼
[Presentation] III-V族半導体ヘテロ界面における界面分極とスピン軌道結合係数の第一原理計算	2016	▼
[Presentation] トポロジカル絶縁体の電界効果に関する第一原理計算	2016	▼
[Presentation] スキルミオン結晶が大きな熱起電力を生む可能性の検討	2016	▼
[Presentation] 大きな異常ネルンスト効果を示す系の第一原理的探索に向けて	2016	▼
[Presentation] 異常熱電効果の第一原理的研究	2016	▼
[Presentation] 異常熱電効果の第一原理的研究(First-principles study of anomalous thermoelectric effect)	2016	▼
[Presentation] 酸化物薄膜・界面におけるRashba効果の第一原理計算	2016	▼
[Presentation] 歪誘起強誘電SrTiO3超薄膜における層分極及び表面分極の第一原理計算	2015	▼
[Presentation] First-Principles Study of Layer Polarization in Transition Metal Oxide Thin-films and Interfaces using One-dimensional Wannier Functions	2015	▼
[Presentation] First-Principles Study of the Spin-Orbit Coupling Parameters and Layer Polarization in the III-V Semiconductor Heterostructures	2015	▼
[Presentation] Large Anomalous Thermoelectricity on Skyrmions	2015	▼
[Presentation] First-principles study of strain-induced polarization in bulk and thin-film SrTiO3	2015	▼
[Presentation] バイクロア型Ir酸化物における磁気秩序と電子状態の第一原理計算	2015	▼
[Presentation] La(Al,Mn)O3/SrTiO3における電気分極の層依存性と電子状態の第一原理計算	2015	▼
[Presentation] III-V族半導体/希薄磁性半導体界面におけるスピン軌道結合係数の第一原理計算	2015	▼
[Presentation] Hydrogen induced anisotropic Rashba effect on ZnO (10-10) surface : First-principles density-functional study	2015	▼
[Presentation] 異常Nernst係数の第一原理計算	2015	▼

[Presentation] Spin-orbit coupling and spin textures at oxide interfaces	2015	▼
[Presentation] First-principles study on cubic pyrochlore iridates Y <sub>2</sub> Ir <sub>2</sub> O <sub>7</sub> and Pr <sub>2</sub> Ir <sub>2</sub> O <sub>7</sub>	2015	▼
[Presentation] Possibility of Better Thermoelectricity in Anomalous Hall Systems	2015	▼
[Presentation] Rashba effect and surface spin texture in Bi (001) multi-layer nanofilm	2015	▼
[Presentation] First-Principles Study of Spin-Orbit Coupling Parameters and Built-in Electric Field in LaAlO <sub>3</sub> /SrTiO <sub>3</sub>	2015	▼
[Presentation] Persistent spin helix on ZnO (10-10) : Fully relativistic study	2015	▼
[Presentation] First-principles study of spin-orbit effects in LaAlO <sub>3</sub> /SrTiO <sub>3</sub>	2015	▼
[Presentation] Evolution of Electronic Structure and Thermopower : A First-Principles Study on Pyrochlore Iridates	2015	▼
[Presentation] First-principles study of topological phase transitions and spin textures by OpenMX	2015	▼
[Remarks] 科研費成果報告：第一原理手法による界面電場・スピン軌道結合係数の見積とスピン変換物質デザイン		▼

URL:

Published: 2015-04-16 Modified: 2018-03-28