

## スラブ系電子構造計算の開発と実装

金沢大学理工、小田竜樹、小幡正雄、中村慎、Van-Minh Vo、吉川大輝、中野博斗

結晶表面では、表面を境にして物質がなくなることにより対称性の大きな低下を伴い、結晶内部の性質とは異なった特徴を示す。特に反転対称性の破れが重要で、スピン軌道相互作用の表面での効果(ラシュバ効果)などについて、現実の系で具体的な研究成果が発表されている[1,2,3]。また、実験データを深く解析するために、現実的な理論計算が必要不可欠となっている。我々のグループでは、スラブ系を中心に、密度汎関数に基づく電子構造計算の開発と計算コードへの実装を行ってきた[4,5]。これらの実装により、磁性薄膜・表面、または磁性層/誘電体界面の磁気異方性研究、半導体表面のラシュバ効果の研究などへ適用することに成功している[6,7]。またファン・デル・ワールス密度汎関数[8]の開発・実装も推進している[9]。

磁気異方性研究においては、磁気異方性エネルギー(MAE)の直接計算を実施することによりFe薄膜やFeとの磁性合金薄膜、FeとMgOとの界面を中心に理論計算による研究を進めてきた。計算はスピン軌道相互作用を自己無撞着に考慮した密度汎関数理論に基づいたものを採用し、表面・界面構造の緩和についても可能である。有効遮蔽媒質法を利用して、電界印加を行ったうえで磁気異方性エネルギーを評価することにも成功した[5]。これまでFe/M, MgO/Fe/M及びMgO/M/Fe/Au (M=Pt, Au等)[7]において、磁気異方性エネルギーを見積もり面直磁気異方性や電界効果について議論してきた。

ラシュバ効果の研究においては、スピン分解角度分解光電子分光測定の実験結果を再現することに成功し[4]、電子ドーパされた系について表面Ti/Si(111)での単一スピン状態バレーの発見[6]に貢献している。ファン・デル・ワールス密度汎関数法の実装においては、各種の汎関数を実装し、実験で観測されているグラファイトの層間距離を良く再現する結果を得ている。また磁性物質への適用に向けた開発も始めている[9]。次世代デバイス材料の候補であるZnOは、極性ワイドギャップ半導体として知られ、酸化物エレクトロニクス研究の圧電(ピエゾ)素子や光学素子としても有望である。またMgを混入したMgZnOとの界面を作ることにより良好な2次元電子系を創製することに成功しているが、このような界面をスラブによりモデル化するため、ZnOの電子構造計算を実施している。

講演では、開発と実装を進めている計算コードの説明を行うとともに、これまでに適用した、あるいは今後適用できる得る系の電子構造計算について議論する。

文献

- [1] S. LaShell, B. A. McDougall, and E. Jensen, Phys. Rev. Lett. **77**, 046403 (1996)
- [2] T. Hirahara *et al.*, Phys. Rev. B **76**,153305 (2007)
- [3] P. Gambardella *et al.*, Nature **416**, 301 (2002)
- [4] K. Sakamoto *et al.*, Phys. Rev. Lett. **102**, 096805 (2009)
- [5] M. Tsujikawa and T. Oda, Phys. Rev. Lett. **102**, 247203 (2009)
- [6] K. Sakamoto *et al.*, Nat. Commun. **4**:2073, doi: 10.1038/ncomms3073, (2013)
- [7] M. Tsujikawa, S. Haraguchi, and T. Oda, J. Appl. Phys. **111**, 083910 (2012)
- [8] M. Dion *et al.*, Phys. Rev. Lett. **92**, 246401 (2004); *ibid* **95**, 109902(E) (2005)
- [9] M. Obata *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **82**, 093701 (2013)