

スラブ系の電子状態計算の開発と応用

金沢大学理工 齋藤峯雄、小田竜樹、石井史之

今後のデバイス応用に向けた材料開発において、異種材料界面や材料表面の原子構造及び電子構造を明らかにする必要がある。そのため、スラブ系の大規模第一原理計算の実行が必要である。とくに、スピントロニクス応用を考えた場合、スピン軌道相互作用(SOI)が、重要な役割を果たし、この相互作用を取り入れた計算を可能とするプログラムの開発や解析プログラムの開発が必要である。本研究では、擬原子局在基底を用いたプログラム OpenMX と平面波基底を用いたカー・パリネロ法プログラム CPVO による応用計算を行った。

極性ワイドギャップ半導体である ZnO は、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[1]。そこで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た。スラブにてモデル化することで接合材料の計算科学的アプローチを行い易くする可能性があり、実際の実験条件を模倣した計算を導入し易くなると考えられる。計算は、密度汎関数法を用いて行った。ZnO 表面層と内部層に相当するスラブ内バンド図や状態密度を評価した。内部層においては、結晶のバンドギャップに相当するエネルギーギャップが存在していることを確認した。またウルツ鉱型構造を反映した電気分極を見出した。

また、ウルツ鉱型の ZnO は、そのスピントロニクス応用も注目されている。ウルツ鉱型結晶構造は反転対称性を有しないため、SOI を考慮したバンド構造は時間反転不変な k 点を除いてはスピン分裂を生ずる。本研究では、相対論的第一原理電子状態計算によって、ZnO のスピン分裂と、逆格子空間(ブリルアンゾーン)におけるスピン分布を調べた。この系の価電子帯は、結晶場分裂により、エネルギーの高い Γ_5 とエネルギーの低い Γ_1 に分裂し、SOI により Γ_5 は Γ_9 と Γ_7 に分裂する。GaN の場合とは異なり、 $\Gamma_7(j=1/2)$ は $\Gamma_9(j=3/2)$ よりエネルギーが高く「負のスピン軌道結合」が見出されていた[2]。本研究から、 Γ_5 由来の Γ_7 状態は、 Γ_1 由来の状態と同じ既約表現を持つため、この二つの状態は強く混成し、見かけ上、負のスピン軌道結合が生じる事が分かった。したがって、ZnO の価電子帯では、極めて強い SOI が生じている事が分かった。この価電子帯および伝導帯において、典型的なラシュバ型スピン分布が生ずることを見いだした。そして、基板による歪みを導入することによって、スピン分裂ならびにラシュバ型スピン分布である時計周り、半時計回りの反転が制御可能であることを示した。この基板によるラシュバ効果の制御に関する発見は、スピン電界効果トランジスタへの応用へと繋がるものである。

文献

[1] A. Tsukazaki et al., Nature Mater. 9, 889 (2010).

[2] L.C.L.Y. Voon et al., Phys. Rev. B 53, 10703 (1996).