

らせん磁性体における電流による磁気カイラリティの制御

勝岡 拓也 (物性理論教室)

空間的に非一様な磁化構造をもつ磁性体は、新規磁性メモリやスピン流生成源として応用面からも注目を集めている。特に、磁化構造のトポロジカルな性質は、摂動に対して強固な性質を持ち、物質パラメータに寄らない普遍的な物性を生み出す。結晶構造に空間対称性がない場合、隣り合う磁化同士がねじれた磁化配置をとるジャロシンスキー・守谷相互作用 (DM 相互作用) が働き、磁気モーメントがらせん状になる物質が報告されている。らせん構造には右回りと左回りの自由度があり、DM 相互作用の符号によってどちらかに決定される。一方、空間反転対称性がない場合においても、ねじれた磁化構造が準安定状態として存在することができる。例えば、1次元模型において磁化間の第2近接相互作用まで考慮した系でもらせん磁化構造を形成する。この場合、螺旋構造の右回り・左回りはエネルギー縮退しており、どちらの構造になるかはランダムに決まる。

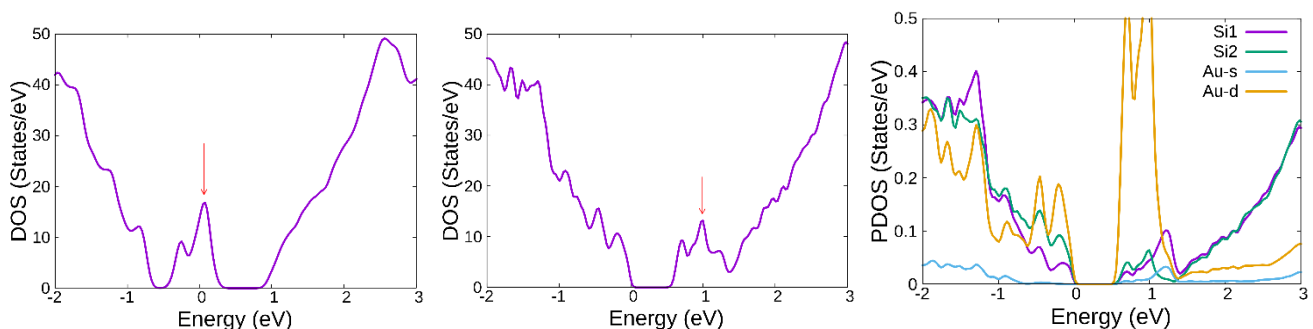
本研究では、上述のような空間反転対称性のない磁性体中のトポロジカルな磁化構造を制御することを目的とする。特に、電流によって磁化ダイナミクスに付加されるスピントルクを用いて、らせん磁性体の磁化構造を制御することを考える。研究では、空間反転対称性の破れていない一次元 $J_1 - J_2$ ハイゼンベルグモデルを用いて磁化構造を計算した。計算には磁化ダイナミクスを表す Landau-Lifshitz-Gilbert 方程式を用い、緩和による低エネルギー状態を実現することで磁化構造を得た。初期状態として強磁場による強制強磁性状態を選んだ。計算の結果、電流の方向によって、得られる螺旋磁性体のトポロジカル量 (右回り・左回り) が制御できることが分かった。また、らせん構造の軸を固定するために、面内磁気異方性を導入することで、制御の効率が上がることを示した。

第一原理計算を用いた SiGe: Au の電子状態と熱電効果に関する理論的研究

清藤 雄我 (物性理論教室)

温度差があるときのゼーベック効果によって発電する熱電発電技術は長寿命、高信頼性、メンテナンスフリーという特徴を持っており、昨今のエネルギー、環境問題への関心の高まりから未利用の排熱を用いて発電する技術として注目を集めている。しかし、現在の熱電変換の効率は高いとは言えず、宇宙開発などの一部の例外を除いて未だに広く実用化されているとは言えない。効率の良い熱電変換素子を作るための熱電変換材料に関する研究は盛んに行われており、SiGe: Au が室温で高い無次元性能指数(ZT)を示すことが実験にて分かった[1]。SiGe: Au はナノ構造を用いてフォノンを制御することで熱伝導率を小さくし、さらに Au を添加することで共鳴準位を形成し、RLE (Resonant Level Effect)[2]によりゼーベック係数を上昇させることを狙った材料である。

本研究では SiGe: Au の電子状態を第一原理計算を用いて求めることにより、大きな ZT が得られた物理的な起源を探ることを目的として理論的研究を行った。特に SiGe が n 型半導体として振る舞うための不純物準位形成の条件を明らかにした。具体的な計算法としてはパッケージとして APW (Augmented Plane Wave) 法を用いて計算する Wien2k[3] を利用し、交換・相関汎関数には半導体においてバンドギャップをよく再現するとされる TB-mBJ[4] を用いた。また、SiGe: Au は Primitive unit cell の $4 \times 4 \times 4$ 倍のサイズのスーパーセルを用意し、Si の一部を Ge または Au に置換することで作成した。計算の結果、Au 同士の波動関数が SiGe を通して混成するような距離にあったとき、バンドギャップ内に n 型の不純物準位、伝導バンド内に共鳴準位が形成することを確認した。ここで、n 型の不純物準位の起源は Au の d 電子、共鳴準位の起源は Au の s 電子であることが分かった。一方、波動関数が混成するような距離になかった場合はバンドギャップ内に p 型の不純物準位が形成されることを確認した。これらの結果により SiGe においてゼーベック係数を上昇するために重要な要素は不純物の d 電子と s 電子であり、これらを最外殻に持つような物質が添加する物質として適していると予想できる。



- [1] S. Sakane et al., J. Mater. Chem. A (2021) in press
- [2] S. K. Bux et al., Advanced Functional Materials 19, 2445 (2009)
- [3] P. Blaha et al., The Journal of Chemical Physics 152, 074101 (2020)
- [4] F. Tran and P. Blaha, Phys. Rev. Lett. 102, 226401 (2009)

スピン波から誘起されるポンピングスピン流・電流の数値的研究

橋本 健人（物性理論教室）

強磁性体/非磁性体接合系の接合面において、強磁性体中の局在スピンの歳差運動を行っている場合、接合界面に伝導電子スピンの角運動量が受け渡され、非磁性体中にスピン流が生成される。2002年に Tserkovnyak らは、強磁性体/非磁性体接合系において、強磁性体中の磁化が歳差運動している場合の接合界面における伝導電子の散乱問題を Brouwer の理論[1]を用いて、強磁性体を散乱体、非磁性体を熱浴として散乱問題を計算した[2]。

前述のとおり、一様な磁化の歳差運動から非磁性体にはスピン流が誘起されるが、電流は誘起されない。また、スピン流から電流への変換は、物質中の弱いスピン軌道相互作用を用いるため、効率が悪い。

本研究では、スピン波が励起されているような非一様磁化構造のダイナミクスから得られるスピン流・電流について数値解析を行い、より大きなスピン流・電流を得るための条件を調べた。計算手法としては、一次元強束縛モデルのスピン自由度を考慮した伝導電子に働くハミルトニアンに、再帰的 Green 関数法を用いて散乱行列を求め、Brouwer の公式によってスピン流及び電流を計算した。また磁性体の両側に非磁性体のリードを付けた二端系を扱った。計算の結果、右側のリードに注目すると、スピン流・電流ともに連続的なピークがあることがわかった。励起するスピン波の波数 k とシステムサイズ L を用いて $\Delta\phi = kL$ と定義する。 $\Delta\phi < 0$ のとき、すなわち強磁性体に励起するスピン波の群速度が右を正としたときの負の場合、右側のリードのスピン流が増強され、左側のリードのスピン流は抑制されるという結果が得られた。またシステムサイズによりスピン流の値は変化するが最大値は大きく変化しないことがわかった。システムサイズを長くすると最大値のピークが $\Delta\phi$ の負の方向へシフトしていくという結果が得られた。

[1] P. W. Brouwer, Phys. Rev. B 58, R10135(R), (1998).

[2] Y. Tserkovnyak, A. Brataas, G. E. W. Bauer, Phys. Rev. Lett. 88, 117601, (2002).