

第一原理計算による SrIrO₃ 薄膜における 非線形スピホール効果発現機構の解明

Nonlinear spin Hall effect in SrIrO₃ thin films revealed by first-principles calculations

物材機構¹, 筑波大², JST さきがけ³ ○小塚 裕介¹, 増田 啓介¹, 三浦 良雄¹, 藤岡 淳²,
磯上 慎二¹, Saikat Das¹, 大久保 忠勝¹, 葛西 伸哉^{1,3}

NIMS¹, Univ. Tsukuba², JST-PRESTO³, °Yusuke Kozuka¹, Keisuke Masuda¹, Yoshio Miura¹, Jun
Fujioka², Shinji Isogami¹, Saikat Das¹, Tadakatsu Ohkubo¹, Shinya Kasai¹

E-mail: KOZUKA.Yusuke@nims.go.jp

スピホール効果は印加電圧と直行する方向に生じるスピ流を生じ、スピ-電荷変換を可能とする。通常スピホール効果は印加電場に対して線形であるが、結晶反転対称性の破れた物質では電流に対し高次のスピホール効果が観測され、フェルミ面上のスピテクスチャに由来していることが提案された。しかし、反転対称性のあるペロブスカイト型酸化物 SrIrO₃ 薄膜においても室温で大きな非線形スピホール効果が観測され、その機構は明らかとなっていなかった。

本研究では、第一原理計算を用いて SrIrO₃ 薄膜における非線形スピホール効果の機構解明を行った[1]。薄膜をモデル化した SrO-IrO₂ を4層積層し、両側に真空層を導入したスラブモデルをユニットセルとした (図 1(a))。計算においてスピ軌道相互作用を考慮し、オンサイトクーロン相互作用 U は無視した。

図 1(b)に示すバンド構造では、フェルミ面は主に表面の Ir の軌道に由来している。また、電子状態を片側表面の Ir (Top Ir) に射影すると、不均質なスピテクスチャが現れた。表面での反転対称性の破れによって、この特徴的なスピテクスチャがフェルミ面上に現れ、非線形スピホール効果を引き起こしていることが推察された。一方、基板による歪の影響は定性的には大きな変化は与えず、結晶の反転対称性を局所的に変化させることが重要であることも示された。

[1] Y. Kozuka *et al.*, Phys. Rev. Lett. **126**, 236801 (2021).

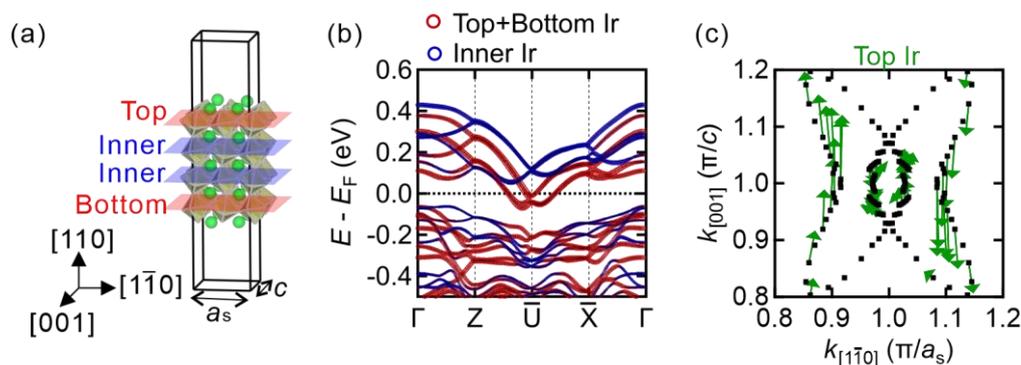


Fig. 1: (a) Crystal structure and (b) band structure of the slab model. Contributions from the surface (top and bottom) Ir layers (red) and from inner Ir layers (blue) are separately drawn by color. (c) Fermi surfaces and spin textures around the U point, where the contribution from top Ir layers is projected.