

有賀 哲也

京都大学大学院理学研究科・教授

巨大 Rashba 効果によるスピン偏極電流

§ 1. 研究実施体制

(1) 京都大学グループ

① 研究代表者: 有賀 哲也 (京都大学大学院理学研究科、教授)

② 研究項目

・巨大 Rashba 効果と界面スピントロニクス

(2) 兵庫県立大学グループ

① 主たる共同研究者: 馬越 健次 (兵庫県立大学大学院物質理学研究科、教授)

② 研究項目

・スピン偏極電流の理論

§ 2. 研究実施内容

(文中右肩の番号は § 3(3-1) 原著論文リストの文献番号に対応する)

研究目的

本研究の目的は、界面に特有なスピン軌道相互作用である Rashba 効果を利用することによりスピン偏極電流を誘起し、外部磁場や磁性体をまったく用いず、しかもナノメートル以下のスケールで、電子のスピンを検出したり、特定のスピンのみの電流を作り出したる方法を実現することにある。

この技術の基礎となる Rashba 効果の大きさは、物質の種類や界面の構造に依存する物性定数によって決まる。Rashba 効果を利用してスピン偏極電流を実現するためには、(1) 半導体 (絶縁体) 表面上において、(2) 金属的伝導バンドが、(3) 巨大 Rashba 分裂を示す

ことが必要条件であり、さらに、大きなスピン偏極度を得るためには、(4) Rashba エネルギー E_R がフェルミエネルギー E_F と同程度になることが重要である。本研究ではこれまでに、Pb/Ge(111)表面において、Pb 吸着層に局在した表面状態バンドが(1~3)の 3 条件を満たすことを明らかにし、さらに、Bi/Ge(111)表面におけるショックレー型表面状態バンドがスピン偏極することを見出した。H23 年度は、さらに物質探索を進めるとともに、表面状態電気伝導測定の技術開発を進め、高精度な温度可変表面状態伝導測定を実現した。理論面では Rashba 効果の本質を見極め、スピン伝導の理論モデルを構築すべく、minimal モデルによる解析を行った。

主要な成果

A. 巨大 Rashba 効果と界面スピントロニクス

A-1. スピン偏極電流の実現を目指す物質探索

Si、Ge などの(111)-(1x1)表面の K 点は C_3 対称性を有するため、スピン縮退が解ける。これは Rashba 型のスピン分裂とは異なっている。本年度の研究においては、このメカニズムによってスピン偏極した金属的表面電子状態を探索した。その結果、Tl/Ge(111)-(1x1)表面において過剰の Tl 原子を導入することにより、従来の研究ではみつかっていなかった新たな金属的表面状態が K 点付近で電子フェルミ面を形成することを発見した³。この表面電子状態は表面垂直方向にスピン偏極し、しかも各 K 点において 100%スピン偏極していることを見出した。

図 1 は、Tl/Ge(111)-(1x1)表面の角度分解光電子分光(ARPES)の結果である。Tl 被覆率が 1 ML の表面では、既に知られているように Γ 点にホールのフェルミ面がある(図 1(b))。このフェルミ面のスピン偏極度は小さい。一方、この表面に Tl を数%ドーピングすることができる。STM によれば、このドーピングされた Tl 原子は(1x1)-Tl 層の下の Ge 原子を置換していると考えられる。このドーピングの結果、バンドの形状はほとんど変化しないまま、フェルミ準位が上方にシフトし、 Γ 点のフェルミ面は消失する(図 1(d))。一方、金属的なバンドが存在しなかった K 点においては、ドーピングにより、新たに電子フェルミ面が生じる(図 1(e))。第一原理計算によれば、このフェルミ面の電子はほぼ 100% の偏極率で表面垂直方向にスピン偏極している。図 2 に、ARPES で測定したフェルミ面およびその模式図を示すが、このフェルミ面からわかるように、電子がフォノンあるいは欠陥により散乱される時に、後方散乱はスピン反転を伴うため禁止される。このため、STM で観測される表面状態電子定在波や表面電気伝導にスピン偏極の影響が現れると予想される。

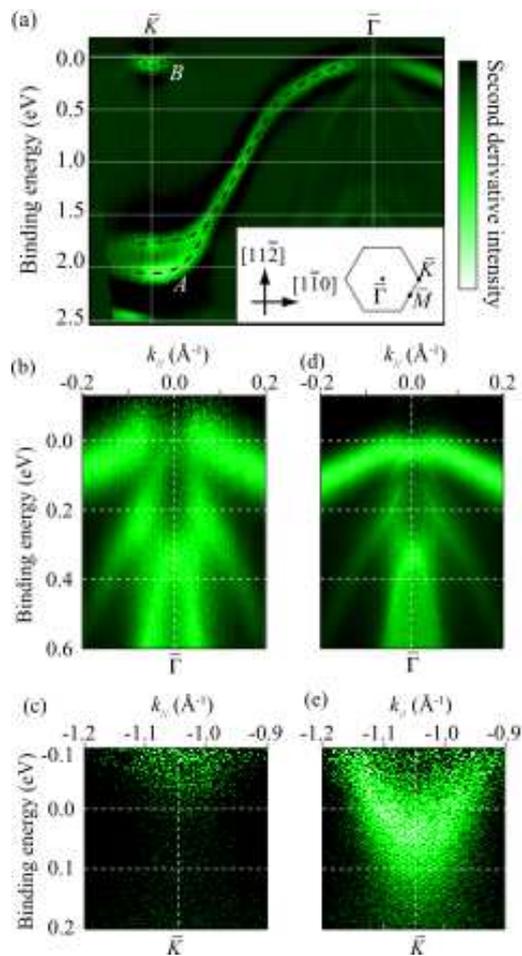


図 1. Tl/Ge(111)-(1x1)の ARPES。(a,d,e) Tl が 6%過剰な表面、(b,c) Tl が 1ML の表面。

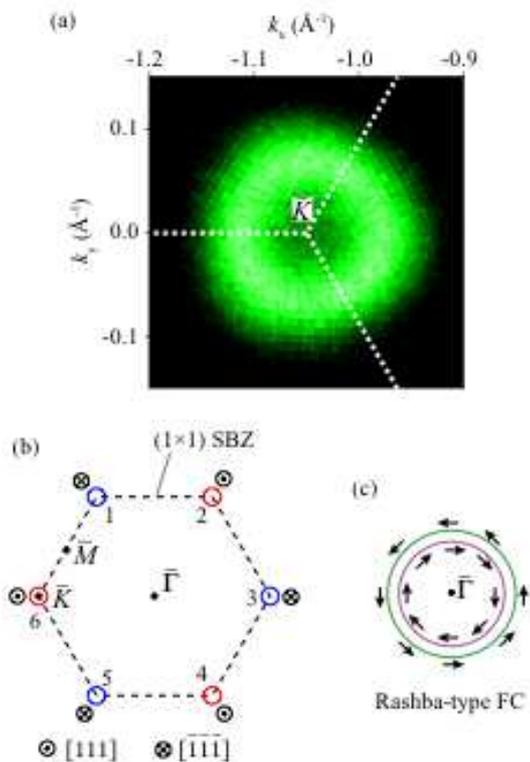


図 2. Tl 過剰 Tl/Ge(111)-(1x1)表面のフェルミ面。

A-2. スピン偏極電流実現のための表面状態伝導度測定

超高真空多端子表面伝導プローブを開発し、30～300 K の範囲で高精度な伝導度測定を実現した。金属的表面状態をもたない Bi/Ge(111)の伝導度の温度依存性が、Ge のバルクキャリアによる伝導で定量的に説明できることを明らかにした。これを標準として用いることにより、Pb/Ge(111)などの金属的表面状態をもつ表面の伝導度から、表面状態による伝導だけを精度良く見積もることができた。その結果、Pb/Ge(111)については、表面デバイ温度(～80 K)以上では Drude の式から予想される直線的な温度依存性が得られた。この表面のシート伝導度は 30 K において 6 mSm/sq.以上に達し、ARPES から得られたフェルミ面、有効質量等から予想される伝導度よりも 1 桁近く大きなものであった。表面状態伝導度は格子欠陥、不純物による影響を受けやすいため、一般に Drude の式から予想される伝導度よりも実測の方が小さくなるのが通例である。このことを考慮すると、観測された大きな電気伝導度には、スピン分裂したフェルミ面の効果が含まれている可能性がある。表面状態伝導度に対するスピン分裂の効果について理論的検討を進めている。

B. スピン偏極電流の理論

B-1. Rashba 効果の minimal モデルによる解析

モデルハミルトニアンのアプローチから Rashba 効果の本質を見極め、Rashba 効果によって何が本質的であるかを理解するために、考える最もシンプルなモデルに基づき解析を行った。系として 1 次元鎖及び 2 次元正方格子を考え、各格子点には s 軌道のみを考えた強束縛近似を用いる。電子スピン 1/2 を考えると、この時 up スピンと down スピンの 2 つの状態が縮退している。ここに一次元鎖、二次元正方格子の各々に垂直に電場をかける事により、空間反転対称性を破り、この時に生じるスピン-軌道相互作用から Rashba 分裂が起こると期待して解析した。

実際に 1 次元の場合には、エネルギー分散は単純に up スピンと down スピン状態が各々、正負の反対方向に位相がずれた余弦関数で表される (図 3 左)。時間反転不変運動量である原点とブリルアンゾーンの端で縮退している他はすべて分裂している。状態密度はスピン up/down だけで見ると位相がずれているだけなので、スピン-軌道相互作用が無い時と同じであるが、upper branch だけ (もしくは lower branch だけ) を取り出すと、原点とブリルアンゾーンの端 (1 次元 Dirac 点) で階段状の特異性が見られる (図 3 右)。

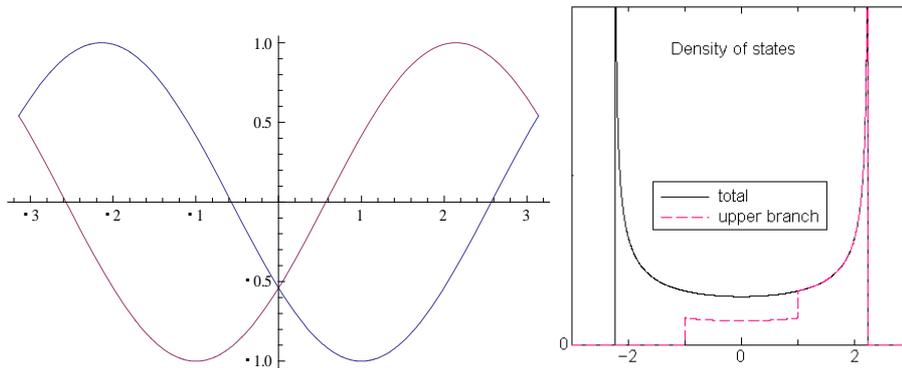


図 3. 1 次元のエネルギー分散と状態密度

2 次元正方格子の場合、 Γ 点、X 点、M 点が時間反転不変運動量であり、これらの点では縮退は解けない。実際、その他の点ではスピン分裂が起き、 Γ 点、X 点、M 点で各々違ったエネルギーを持つ Dirac cone が見られる (図 4 上左)。状態密度においては 2 次元の van Hove 特異点の他に Dirac 点での特異性も見られる (図 4 上右)。発散として現れる van Hove 特異点の位置は丁度 $\Gamma-X$ 方向での Rashba 分裂と $X-M$ 方向での Rashba 分裂のエネルギーに相当する。フェルミ準位は half filled では X 点での Dirac 点にある。運動量空間での各点でのスピンの期待値は面直方向では 0 であり、面内方向では、Dirac 点である Γ 点、M 点の周りを回るヘリカルな状態を示す (図 4 下左)。ところが X 点の周りでは図 4 下右に示すような特異なスピン構造をしている。(図は upper branch のみを示しており、lower branch ではスピンはすべての点で逆向きを向いている。)

このように極めてシンプルなモデルにも関わらず Rashba 効果に関連した様々な物理が

含まれていることが分かった。現在はこれらのモデルに基づく電子の伝導現象（電流及びスピン流）の理論的枠組みを構築中である。

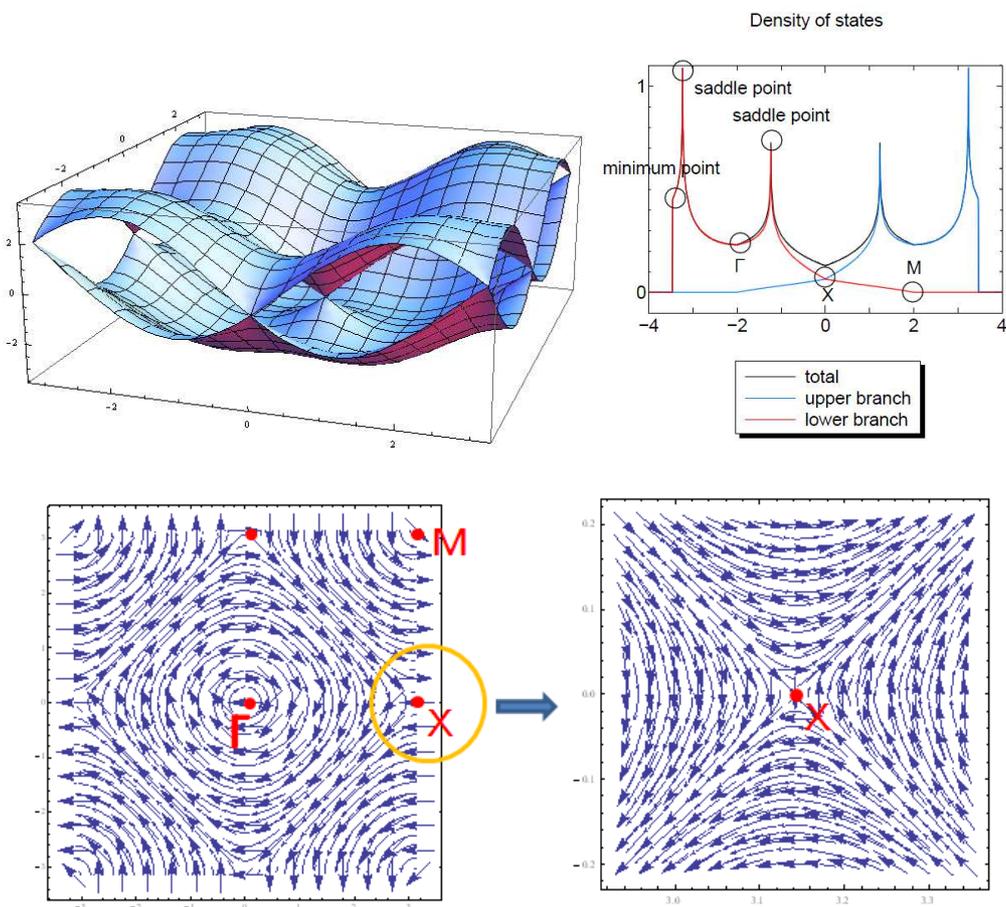


図 4. 2次元の場合のエネルギー分散、状態密度、スピン構造。

§3. 成果発表等

(3-1) 原著論文発表

- 論文詳細情報

1. Y. Ohtsubo, H. Muto, K. Yaji, S. Hatta, H. Okuyama, and T. Aruga, "Structure determination of Pb/Ge(111)- $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ R30° by dynamical low-energy electron diffraction analysis and first-principles calculation", *J. Phys.: Condens. Matter* 23, 435001 (6 pp.) (2011). (DOI: 10.1088/0953-8984/23/43/435001)

2. S. Hatta, Y. Ohtsubo, T. Aruga, S. Miyamoto, H. Okuyama, H. Tajiri, and O. Sakata, "Dynamical fluctuations in In nanowires on Si(111)", *Phys. Rev. B* 84, 245321 (8 pp.) (2011). (DOI: 10.1103/PhysRevB.84.245321)

3. Y. Ohtsubo, S. Hatta, H. Okuyama, and T. Aruga, "A metallic surface state with uniaxial spin polarization on Tl/Ge(111)-(1x1)", *J. Phys.: Condens. Matter* 24, 092101 (5 pp.) (2012). (DOI: 10.1088/0953-8984/24/9/092001)

4. Y. Kotani, N. Shima, and K. Makoshi, "Theoretical study of electric conductance of atomic contact with the Friedel sum rule", *Surf. Sci.* 605, 770-774 (2011). (DOI: 10.1016/j.susc.2011.01.016)