

「ナノ界面技術の基盤構築」  
平成 19 年度採択研究代表者

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. 研究実施の概要

結晶表面における巨大 Rashba 効果を利用してスピン偏極電流を実現し、新しいナノスピントロニクス技術の基盤を構築することを目的としている。本年度は、半導体表面上の重元素吸着層の電子構造に関して、特に巨大 Rashba 効果の起源を明らかにすることを目標として、光電子分光、第一原理計算等により研究した。多バンド系に関する系統的な研究から、Rashba 効果の大小を決める要因として、重原子の核周辺への波動関数の閉じ込め効果があることを明らかにした。しかし、ゲルマニウムやシリコン表面の重元素吸着層においては、銀表面上のビスマス吸着層における巨大 Rashba 効果の数分の一の分裂しか得られていない。このことは、基板である銀表面の電子構造が、巨大 Rashba 効果の発現に重要な役割を担っている可能性を示唆しており、今後進めるべき物質探索の方向を示している。

### 2. 研究実施内容

(文中にある参照番号は 4. (1)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りす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が、実在の物質・界面構造に対してその大きさはほとんど調べられていない。本申請者は、これまで知られていた最大の Rashba 効果を示す単体 Bi 表面と比較して 1 桁近く大きな効果が、Ag 表面上の Bi 単原子層において発現することを

見いだした。この巨大 Rashba 効果を利用すれば、室温においてきわめて高い偏極度のスピン偏極電流が実現できる。実用的な素子技術を展開するための基礎として、表面上に形成した量子井戸、量子細線を中心とするさまざまな物質・界面構造に対してこの物性定数を系統的に決定し、巨大 Rashba 効果の起源を明らかにし、スピン偏極電流の実現に最適な表面を「設計」する。

平成 19 年度は、ゲルマニウム表面上のタリウム吸着層等の重金属/半導体表面の電子構造に関して、実験、理論の両面から検討し、巨大 Rashba 効果発現の要因を明らかにすることと、今後の物質探索の指針を得ることを目的とした。

## 研究方法

ゲルマニウム、シリコン表面上のタリウム、ビスマス、金吸着層について、成長機構、構造、電子状態等を検討した。構造、成長機構については、シンクロトロン表面 X 線回折、低速電子回折、走査トンネル顕微鏡等の手法を相補的に用いた。電子状態については、角度分解光電子分光、第一原理電子状態計算による。電子状態計算において、スピン-軌道相互作用はスカラ-相対論の範囲内で扱った。

## 主な結果

ここでは、主に Tl/Ge(111)系についての結果を述べる[1-3]。半導体表面上での Rashba 効果の発現機構を検討する目的でこの系を取り上げる大きな理由は、以下の 2 点である。

(1) Tl/Ge 系は多バンド系であり、価電子帯にいくつかのバンドがある。これらの Rashba スピン分裂を比較することにより、Rashba 定数の大きさを決める因子を明確にできる。

(2) Ge(111)表面上における Tl 原子は、2 次元的に均一に配列した(1x1)構造[3]と、1次元鎖状に配列した(3x1)構造(図 1)[1,2]を形成する。現在、Rashba 効果において面内異方性の効果が議論されており、同じ構成元素からなり、次元性のみが異なる 2 種の構造を比較することは意味がある。

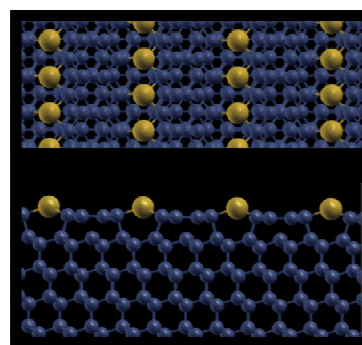


図 1. Tl/Ge(111)-(3x1)最適化構造。Tl 原子が一次元鎖を形成する。

Tl/Ge(111)-(3x1)表面について、表面 X 線回折による構造解析を行い、図 1 の最適化構造を得た[1]。Tl 原子が Ge 表面第 1 層に埋め込まれた 1 次元鎖を形成している。一方、この構造に基づいてスピン-軌道相互作用を含む第一原理電子状態を行い、この表面についての角度分解光電子分光より得られた価電子バンド構造とよく一致することを確認した[2]。

計算により得られたバンド構造(図2)では、Tl原子鎖と表面Ge原子のダングリング結合に由来する5つのバンドが同定できた。これらはいずれもRashba効果によりスピンスplitしている。スピンスplitの大きさはバンドにより著しく異なっている。最大のスピンスplitはフェルミ準位直上の空状態バンドで観測され、その大きさは200 meVであった。このバンドは、イオン性の強いTl-Ge結合の反結合状態に相当し、Tl原子位置に大きな状態振幅を有している。その他のバンドも含めて、各バンドのスピンスplitの大きさはTl原子位置における各バンドの状態密度の大きさに強く依存していることがわかった。つまり、伝導電子であっても、その波動関数が重原子位置に強く集中することにより、重原子の核ポテンシャルの影響が表れてスピンスplitが大きくなるのである[2]。

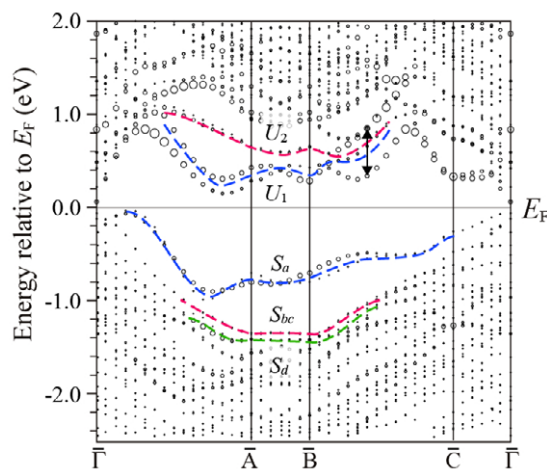


図2. Tl/Ge(111)-(3x1)表面のバンド構造。

この研究および(1x1)表面[3]との比較から明らかになったことは以下の4点である。

- (1) 軽元素半導体表面に埋め込まれた重原子単原子鎖であっても、重原子単体表面と同程度の大きさのRashbaスピンスplitが得られる。(半導体表面を使ったスピンスplit電流の実現に向けて一つのハードルをクリアしたと考えている。)
- (2) 面内の構造異方性は、Rashbaスピンスplitの大きさに関しては重要ではない。
- (3) Rashbaスピンスplitの大きさは、注目するバンドの波動関数が重原子位置に集中するほど大きくなる。(これは、以降の物質探索の指針として重要である。)
- (4) しかし、Bi/Ag系に比較すると、スピンスplitの大きさは数分の一にしかならない。(この理由としてさまざまなことが考えられるが、Rashbaスピンスplit軌道相互作用の発現において基板の電子状態が重要な役割を果たしている可能性がある。次年度に検証を行いたい。)

### 3. 研究実施体制

#### (1) 京都大学グループ

① 研究分担グループ長: 有賀 哲也 (京都大学大学院、教授)

② 研究項目

- ・ 巨大Rashba効果に関する物質探索
- ・ 巨大Rashba効果によるスピンスplit電流

(2) 兵庫県立大学グループ

① 研究分担グループ長: 馬越 健次 (兵庫県立大学、教授)

② 研究項目

- Dirac 方程式による電子状態計算
- スピン偏極電流の理論

#### 4. 研究成果の発表等

(1) 論文発表(原著論文)

1. S. Hatta, R. Ohtomo, C. Kato, O. Sakata, H. Okuyama, and T. Aruga, "Structure determination of Tl/Ge(111)-(3x1) by surface X-ray diffraction", J. Phys.: Cond. Matt., to be published.
2. S. Hatta, C. Kato, S. Takahashi, H. Okuyama, A. Harasawa, T. Okuda, T. Kinoshita, and T. Aruga, "Band structure and giant Rashba effect on Tl/Ge(111)-(3x1) surface: angle-resolved photoemission and first-principles calculation", Phys. Rev. B, submitted for publication.
3. S. Hatta, C. Kato, N. Tsuboi, S. Takahashi, H. Okuyama, T. Aruga, A. Harasawa, T. Okuda, and T. Kinoshita, "Atomic and electronic structure of Tl/Ge(111)-(1x1): LEED and ARPES measurements and first-principles calculations", Phys. Rev. B 76, 075427 (1-8) (2007).