

「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における巨大 Rashba 効果の実証を目指して研究した。その結果、Bi/Ge(111)表面において、半導体表面として初めて、Rashba スピン分裂を角度分解光電子分光と第一原理計算により確認した。しかも、そのスピン分裂の大きさ(Rashba パラメータ $1.8 \text{ eV}\text{\AA}$)は、単体 Bi 表面($0.7 \text{ eV}\text{\AA}$)を上回るものである。半導体表面において、しかも、フェルミ準位のごく近傍で、大きな Rashba スピン分裂が得られたことは、スピン偏極電流の実現にむけて大きな意義をもつものである。この成果を踏まえ、今後は当初の研究計画に基づいてスピン偏極電流の実現に向けて研究を推進する。

2. 研究実施内容

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。本研究代表者は、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 20 年度は、ゲルマニウム表面上のビスマス吸着層等の重金属/半導体界面の電子構造に関して、実験、理論の両面から検討し、半導体表面において初めて巨大 Rashba 効果を実証することを目的とした。

研究方法

ゲルマニウム、シリコン表面上のビスマス、タリウム吸着層について、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った。電子状態計算において、スピン-軌道相互作用はスカラー相対論の範囲内で扱った。

主な結果

○ Bi/Ag(111)表面の M 点における Rashba スピン分裂

ここでは、主に Bi/Ge(111)系についての結果を述べる[投稿準備中]。半導体表面上での Rashba 効果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(111)系と比較し、吸着原子の p 価電子が増え、(1x1)構造の場合、単純には占有バンドが 1 本から 2 本になる。Tl/Ge 系では非占有バンド側で大きな Rashba 分裂が生じており、これがそのまま保たれれば、占有バンドで巨大 Rashba 効果が得られると予想される。
- (2) Bi/Ge(111) 表面では、(1x1) と $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ の 2 種の構造がある(以前の構造解析の論文があるが、いずれの表面も構造は確定していないと考えている)。これらの違いは、Bi 原子間の結合の性質にあると推定している。もしそうであれば、占有バンドの占有度に差がある(つまり、どちらかの表面は金属的である)可能性がある。
- (3) 巨大 Rashba 効果が観測されている Bi/Ag 系との比較から、基板の相違による Rashba 効果への影響に関して知見が得られる。

Bi/Ag(111)- $\sqrt{3}$ 表面の電子構造を角度分解光電子分光 (ARPES) で検討した。実験は、物質構造科学研究所放射光実験施設 KEK-PF BL-18A および京都大学研究室で行った。研究室実験では、He I および Ne I を光源として用いた。

Bi/Ag(111)- $\sqrt{3}$ 表面では少なくとも 2 本の明瞭な表面状態バンドを観測した。Fermi 準位を横切る

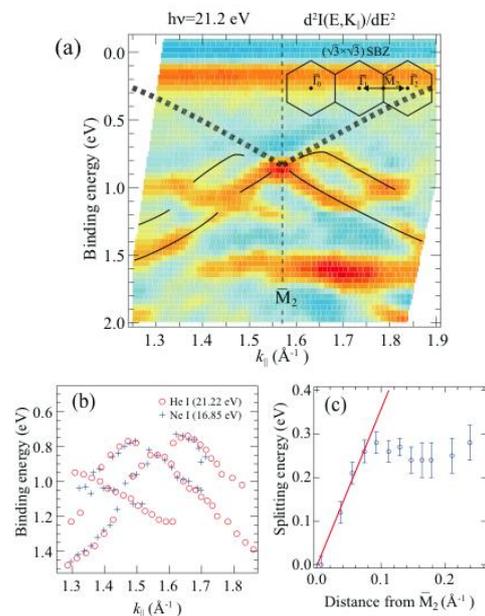


図 1. (a) Bi/Ge(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ 表面の M 点付近の ARPES スペクトル (光源は Ne I)。 (b) He I と Ne I の結果の比較。 (c) 分裂幅の k 依存性。

バンドは観測されず、半導体的なバンド構造を有していることがわかった。図1に M 点付近の ARPES スペクトルを示す。M 点を中心として Rashba 効果に特徴的なバンド分裂が観測されている。このバンド構造は、Ne I、He I、放射光(20 eV 付近)のいずれでも同じ位置に観測されており、表面バンドであることがわかる。さらに、ラシュバ・パラメータを評価したところ、 $\alpha = 1.8 \text{ eV \AA}$ となり、Bi(111)表面(0.7 eV \AA)を上回り、Bi/Ag 系(3.1–3.6 eV \AA)に次ぐ大きさであることがわかった。従来、半導体表面では、唯一、Au/Si(111)表面で Rashba スピン分裂を観測したとの主張があった(これは第一原理計算でもスピン分解光電子分光でも支持されていない)。仮に Au/Si(111)系のバンド構造が Rashba 効果によるものとしても、その Rashba パラメータは 0.2 eV \AA であり、今回の観測はこれを大きく上回っている。

下に述べる構造解析の結果に基づいて、第一原理電子状態計算を行ったところ、M 点近傍の Rashba 分裂をよく再現することができた。

Bi/Ag(111)- $\sqrt{3}$ 表面の構造としては、従来の低速電子回折の解析から、1/3 原子層の構造が有力とされてきた。しかし、本研究で新たに高品位な低速電子回折データを取得し、動力学的構造解析を行ったところ、従来のモデルは正しくないことがわかった。かわって、1原子層の被覆率を有し、面内で Bi 原子が 3 量体を形成しているモデルを導いた。

現在、さらに Bi 等の重金属が吸着した Ge(111)表面についての実験を進めている。また、スピン偏極表面電気伝導度測定のための装置開発を進めており、スピン偏極電流用 4 端子プローブの最適化と測定条件の検討を行っている。

実験的に決定した電子状態の理論解析は、馬越グループや広島大の小口グループなど理論グループとの密接な協力によって進めている。さらに、馬越グループでは、ディラック方程式に基づく電子状態計算法を導入し、ナノ系への適用を進めている。従来から行われている電子状態計算では、相対論的効果を厳密に取り扱っていないため、占有バンドの Rashba 効果などについて一見すると実験と対応する結果が得られたとしても、どこかに大きな誤謬が生じている可能性がある。今後、Rashba 効果を伝導現象などへ幅広く展開するためには、一度おもとに立ち返ってディラック方程式に基づいて根本的に検証しておくことが、本質的に重要である。ディラック方程式による計算プログラムは、計算量が非常に大きいため、現在、効率化を進めているところである。

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、教授)

②研究項目

- ・巨大 Rashba 効果に関する物質探索
- ・巨大 Rashba 効果によるスピン偏極電流

(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. "Band structure of Tl/Ge(111)-(3×1) : Angle-resolved photoemission and first-principles prediction of giant Rashba effect" Shinichiro Hatta, Tetsuya Aruga, Chihiro Kato, Shin Takahashi, Hiroshi Okuyama, Ayumi Harasawa, Taichi Okuda, and Toyohiko Kinoshita Phys. Rev. B 77, 245436 (8pp) (2008).
2. "Structure determination of Tl/Ge(111)-(3×1) by surface x-ray diffraction" Shinichiro Hatta, Ryosuke Ohtomo, Chihiro Kato, Osami Sakata, Hiroshi Okuyama and Tetsuya Aruga J. Phys.: Condens. Matter 20, 395226 (6pp) (2008).

(2) 特許出願

平成 20 年度 国内特許出願件数 : 0 件 (CREST 研究期間累積件数 : 0 件)