

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、半導体表面の内層に局在したショックレー型表面状態について、その成因、Rashba効果によるスピン分裂、ドーピングによる金属化など、巨大 Rashba 効果によるスピン偏極電流の実現に重要な意義を有する観点について重点的に研究した。その結果、Bi/Ge(111)表面において、内表面に局在したショックレー型表面状態を同定し、これの複雑なスピン偏極構造を明らかにした。第一原理電子状態計算により、原子的スピン軌道相互作用と Rashba 型スピン軌道相互作用、および分枝間の混成によってスピン偏極構造が理解できることを示した。さらに、この表面に正孔をドーピングすることにより、このショックレー型表面状態バンドを金属化できることを見出した。これらは、スピン偏極電流の実現に向けて大きな意義を有するものである。マクロ系でのスピン偏極電流の直接測定については、新たに7端子型スピン伝導プローブを開発し、また、磁性端子をトンネル接合させることによりスピン注入効率を向上させる方法を開発した。理論面では、強束縛モデルに基づき Rashba 効果を再検討し、従来考えられていたメカニズムの他にもう一つのメカニズムがあることを見出した。

§2. 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 研究分担グループ長: 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

§3. 研究実施内容

(文中に[1]などの番号がある場合は(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。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。

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。H21 年度の研究で、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た。H22 年度は、異なる観点から物質探索を進めた。また、理論面では強束縛モデルにもとづいて Rashba 効果のメカニズムについて検討を行った。

実験方法

ゲルマニウム、シリコン表面上のビスマス、鉛吸着層について、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 (ARPES)、スピン分解 ARPES、第一原理電子状態計算によった。スピン分解 ARPES は広島大学放射光科学研究センター HiSOR、高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所・東京大学物性研究所つくば分室において行った。

主な成果

(1) 半導体表面上において Rashba スピン分裂した金属的表面バンドの性質解明

前年度の研究において、Pb/Ge(111)表面において金属的表面状態バンドを見出し、これが大きな Rashba スピン分裂を示すことを見出した。この表面状態バンドについて、第一原理計算等に基づいてさらに詳細に解析した [1]。スピン軌道分裂したバンドは、表面最上層の Pb 原子の

$6p_x p_y$ 軌道に由来しているが、フェルミ準位近傍では、これがもう一つの $6sp_z$ 性軌道からなるバンドと混合しており、このために波動関数の表面垂直方向に沿った非対称性が生じ、大きなスピンスピン分裂を示すことを明らかにした(図 1)。この知見は、さらに一般的な系において巨大 Rashba 分裂を見出すうえでの有用な指針となるものである。

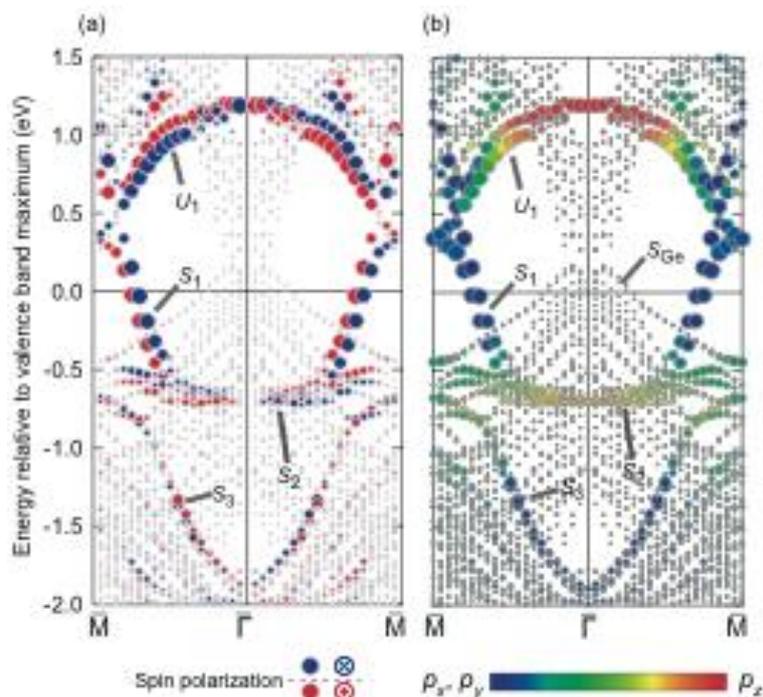


図 1. Pb/Ge(111)表面電子状態の第一原理計算。(a) 表面状態のスピンスピン偏極、(b) 表面状態の原子軌道成分。

(2) 吸着種に誘起されたショックレー型半導体表面状態バンドの Rashba スピンスピン分裂

Ge(111)表面に種々の元素を吸着させた表面において、スピンスピン偏極した新しいタイプの表面状態バンドが生成することを見出した(図 2 はBi吸着の例)[2]。第一原理計算の結果(図 3)によれば、この表面状態バンドの波動関数は、吸着原子からの寄与を含まず、表面 20 層程度の Ge 層に広がっており、典型的なショックレー型表面状態であると言える(図 3(d))。さらに詳細な解析により(図 3(a-c))、このショックレー型表面状態バンドは、ゲルマニウム原子核の原子スピンスピン軌道相互作用により、 Γ 点

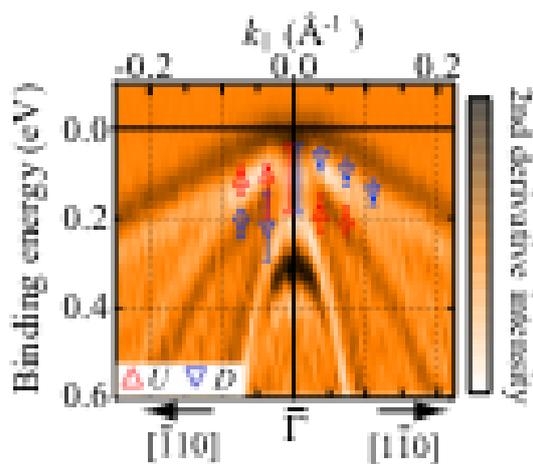


図 2. Bi/Ge(111)の角度分解光電子分光(ARPES)データ(濃淡画像)とスピンスピン分解 ARPES データ(△、赤と青は逆向きのスピンスピン配向を示す)。

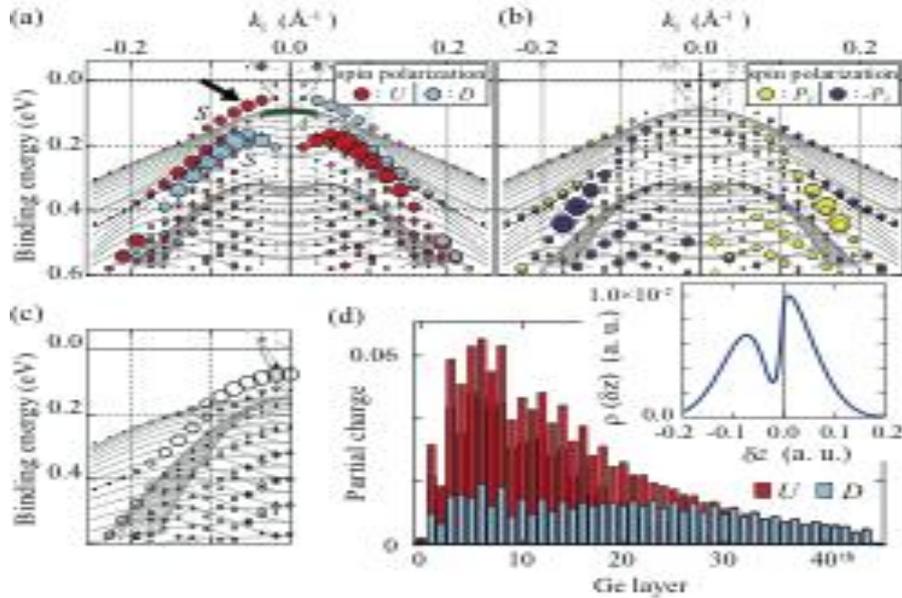


図 3. Bi/Ge(111)表面の第一原理電子状態計算。(a) 表面平行スピン成分、(b) 表面垂直スピン成分、(c) スピン軌道相互作用を含まない計算、(d) ショックレー表面状態の原子層毎の部分電荷。

においてスピン分裂(300 meV弱)した $j=3/2, 1/2$ の分枝に別れる。 Γ 点から離れると各分枝がそれぞれ Rashba 型スピン軌道相互作用によりスピン分裂する。さらに、分枝間の混成により、フェルミ準位直下には k の符合により逆向きにスピン偏極したバンドのみが残る。バンド位置は浅く、フェルミ準位に近い(<0.1 eV)。しかも、吸着原子の種類、被覆率によりバンド位置が変化し、半導体的にも金属的にもなりうる。適切に制御すると、 $E_R=E_F$ の条件を満足させることが可能である。即ち、この表面状態バンドは「研究目的」の項で上げた(1)~(4)の条件を全て満足する。

もう一つの重要な点として、この表面状態バンドはゲルマニウム内層に広がっているので、表面上を絶縁層でキャップしても影響を受けずに保たれる可能性が高い。もしバンド構造を壊すことなく表面をキャップすることができれば、超高真空下から大気中に取り出すことが可能となる。そればかりではなく、この結果は、バルクのヘテロ界面においても同様なスピン偏極バンドが生じうることを示しており、特別な表面効果型デバイスを作製しなくても、従来の半導体デバイス技術の応用により、実用的なスピントロニクスへの応用が可能であることを示唆している。

(3) 正孔ドーピングによるショックレー型半導体表面状態バンドの金属化

前項で述べたBi/Ge(111)のショックレー表面状態バンドはフェルミ準位を横切らず、半導体的なバンドである。スピン輸送に応用するためには、これを金属化しなくてはならない。この表面の重原子被覆率を一定に保ったまま、価電子が1個少ないPb原子をドーピングする実験を行った。混合吸着させのちに適切な熱処理を行うことにより、 2×2 並進対称性を有する共吸着層が生成した。この表面は、基本的には Bi/Ge(111)表面と同じショックレー表面状態を持つが、上部バンドの一

部が正孔で占有され、金属的になっている。現在、この表面の構造解析と第一原理電子状態計算を進めている。

(4) 強束縛モデルによる Rashba 効果のメカニズム

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 パラメータとは何によって、どのように決められるべきなのかを第一原理に立ち返って考察するために、本質的相互作用を取り入れた一次元原子鎖を考え、これを強束縛近似を用いて扱った。従来の類似研究でもスピン分裂は得られているが、実は、非球対称ポテンシャルによるスピン軌道相互作用が直接取り入れられていなかった。本研究ではこれをとりいれた完全な形での Rashba スピン分裂のモデルを得た。これにより、きわめてシンプルなモデルで、Rashba スピン分裂の分裂幅を解析的に表すことができる。

このようなシンプルなモデルで Rashba 分裂が起こることを示せたことは別の意義も持ち合わせる。1 つは相対論的取り扱いへの拡張、もう 1 つはスピン偏極電流の解析的取り扱いである。モデルをそのままに Schrodinger 方程式から Dirac 方程式へ移行することで、スピン-軌道相互作用は自動的に繰りこまれ、Pauli 近似の妥当性、あるいは適用条件も議論出来るはずである。また、Rashba 効果を利用したスピン偏極電流を実際に利用しようとするれば、1 次元原子鎖を使い回路を設計することも必要であろう。このような意味で我々の現在得た結果は、非常に単純なモデルでありながら、Rashba 効果を理解、さらには応用に生かす上で、必要最小限なエッセンスを取り入れた効果的なアプローチであると考えている。

§4. 成果発表等

(4-1) 原著論文発表

●論文詳細情報

1. K. Yaji, Y. Ohtsubo, S. Hatta, H. Okuyama, K. Miyamoto, T. Okuda, A. Kimura, H. Namatame, M. Taniguchi and T. Aruga, "Large Rashba spin splitting of metallic surface state band on semiconductor surface", *Nature Comm.* 1, 17 (5 pp.) (2010). (DOI: 10.1038/ncomms1016)

2. Yoshiyuki Ohtsubo, Shinichiro Hatta, Koichiro Yaji, Hiroshi Okuyama, Koji Miyamoto, Taichi Okuda, Akio Kimura, Hirofumi Namatame, Masaki Taniguchi, and Tetsuya Aruga, "Spin-polarized semiconductor surface states localized in subsurface layers", *Phys. Rev. B* 82, 201307 (2010). (DOI: 10.1103/PhysRevB.82.201307)

3. H. Kaneyasu, N. Hayashi, B. Gut, K. Makoshi, and M. Sigrist, "Phase transition in the 3-kelvin phase of eutectic Sr₂RuO₄-Ru", *J. Phys. Soc. Jpn.* 79, 104705 (2010). (DOI: 10.1143/JPSJ.79.104705)

(4-2) 知財出願

①平成22年度特許出願件数(国内 0件)

②CREST 研究期間累積件数(国内 0件)