

令和元年5月14日現在

機関番号：10101

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2016～2018

課題番号：16K04872

研究課題名(和文) スピン軌道相互作用が強い物質及び現象のトポロジープラットフォームに基づく研究とスピン素子への応用

研究課題名(英文) A study of both materials and phenomena with strong spin-orbit-interaction based on topology concept and an application of them to spintronics devices

研究代表者

近藤 憲治 (Kondo, Kenji)

北海道大学・電子科学研究所・准教授

研究者番号：50360946

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,700,000円

研究成果の概要(和文)：多くの研究者が、グラフェンのようなハニカム構造の量子スピンホール効果を研究してきた。しかしながら、その多くは開放端条件において、エッジをzigzag型であると仮定して電子構造を計算していた。その理由はarmchairのエッジ形状だと、バルクが量子スピンホール相であっても電子構造をよく見るとフェルミ・レベルにおいてギャップが存在するからである。一般的にバルク・エッジ対応によって、バルクで計算した量子スピンホール相の成立条件とリボンで計算した量子スピンホール相の成立条件は一致することになっている。しかしながら、ナノリボンにおいては、成立していないことを具体的な計算で確かめた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

ハニカム構造のzigzag型のリボンとアームチェア型のリボンではQSH相に転移する条件が明らかに違い、zigzag型は、ほぼバルクでの計算と一致するがアームチェア型では、その幅が薄いほど、バルクの条件とは異なっている。このことはバルク・エッジ対応という原理はエッジの形状に影響されることを意味しており、基礎物理学的にとっても重要である。また、実際にスピン素子を作製する時に、ナノリボンを使ったQSH効果を利用することを考えた場合、バルクでのQSH効果発現の条件は適用できないので、改めて、ナノリボン形状で計算しなくてはならない事が分かった。この結果は産業上もスピン素子の性能を根本的に左右するので重要である。

研究成果の概要(英文)：Many researchers have investigated quantum spin Hall effects (QSH) in honeycomb-materials like graphenes. However, they performed a calculation of electronic structures of QSH phase under the open boundary conditions, assuming that the shapes at the open boundaries (edges) are zigzag-type. This is because there exists a small gap at Fermi-level when you examine electronics structures of QSH phase of nanoribbons with armchair-type edges in detail. This fact suggests that the bulk-edge correspondence seems to be broken. Generally, the QSH phase in bulk materials matches the QSH phase in nanoribbons according to the bulk-edge correspondence. However, we have found that the QSH phase in nanoribbons does not match the QSH phase in bulk materials with decreasing the widths.

研究分野：スピントロニクス、物性理論

キーワード：トポロジカル絶縁体 非可換ゲージ場 スピントロニクス 第一原理計算

## 1. 研究開始当初の背景

当時、スピン軌道相互作用が強い系において、現象の背景にトポロジカル不変量(位相不変量)がある場合が多いことが明らかになって来ていた。その中でも、ベリー位相は当時知られた位相不変量の代表的なものであった。内因性スピンホール効果の研究以来、スピンホール効果には外因性と内因性の2通りがあり、そのうち、内因性スピンホール効果の現象の背後には、ベリー位相という位相不変量が隠れていることが判明していた。さらに、トポロジカル絶縁体の研究によって、Z<sub>2</sub>と呼ばれる新しい位相不変量を背景に持つ物質が存在する事も解明されていた。トポロジカル絶縁体は、バルクとしては絶縁体にも関わらず、表面は金属になっている。しかも、その表面に流れているのは、スピンと運動量がロックしたスピン流である。このような位相不変量のある物質の存在証明は、一般には、スピン分解光電子分光法でなされる。なぜなら、トポロジカル絶縁体の表面のバンド構造が特徴的で、電子のバンド構造が、等価的に質量のない Dirac 粒子となっていて線形分散になっているためである。ちなみにワイル半金属の場合は、表面ではなく、内部で線形分散をもっているのが特徴的なトポロジカルな物質である。しかし、スピン分解光電子分光法は装置が高額なうえ、表面が清浄な単結晶が必要なので、この方法は優れていない。そこで、これらの物質を電極や電子のチャネルとして使用した新規なスピン素子を考へて、その素子の電流・電圧特性を理論的に調べ、これらの物質を使用したことによる電流・電圧特性の異常を検出する方法を考へた。この方法の方が、感度も高いし、簡便であると考えた。そして、これらのトポロジカル不変量をもつ物質の基本物性を明らかにするとともに、これらの物質を使用した新規なスピン素子を研究することによって、スピントロニクスに寄与することを目指した。また同時にスピンが絡む現象の背景にもトポロジカル不変量があるので、その解明も目指して研究を始めた。

## 2. 研究の目的

本研究はスピントロニクス分野において、トポロジカル不変量を有する物質ならびに現象の理論を基礎から研究し、トポロジカル不変量が電子構造やスピン伝導やスピン緩和に与える影響を理論的に研究すること及びデバイス設計の観点から、基礎理論をデバイス設計に向く形に発展させ、トポロジカル絶縁体やワイル半金属やスカーミオンなどをデバイスに利用する方法を構築することを試みる。そして、新規なデバイスであるスピン量子十字構造素子にその理論を適用し、このデバイスの特性を計算し、どのような機能を発現出来るかを研究する。

## 3. 研究の方法

図1に示すようなスピン量子十字構造素子(Spin Quantum Cross Structure (SQCS)素子)をデバイスモデルとして、この素子の電極に用いる物質や接合部に挟む物質をトポロジカルな物質に変えた場合について、モデル・ハミルトニアンを構築し、素子の電子伝導特性、スピン伝導特性、ならびにスピン緩和時間を非平衡グリーン関数の手法を用いて計算を行う。但し、その前に、スピン素子に用いるトポロジカルな物質そのものの電子構造や輸送特性と言った基礎物理量を深く理解するために物性理論を使って、その電子構造や位相不変量の計算を試みる。また、スピン素子に応用可能なトポロジカルな現象(スカーミオン・ホール効果など)も定量的に理解することも平行して行う。その後、スピン素子のモデル・ハミルトニアンを検討する。それぞれの結果が得られるたびに、分担研究者と実験を行い、理論の検証を進める。

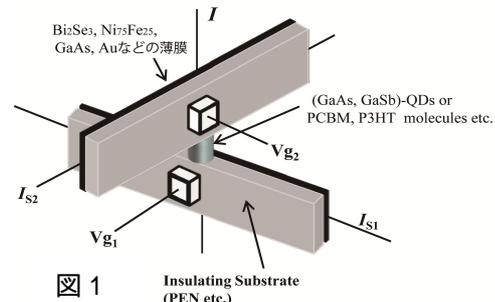


図1 Insulating Substrate (PEN etc.)

## 4. 研究成果

### (1) 高次 Rashba 効果によるアハラノフ・キャッシャー(AC)位相の導出

スピン軌道相互作用を非可換ゲージ場とみなした場合、1次の Rashba 効果や1次の Dresselhaus 効果では、その非可換ゲージ場を Hamiltonian の平方完成を用いて得ることが可能で、それを用いて、アハラノフ・キャッシャー(AC)位相が得られることが、先行研究で知られていた。しかしながら、2次や3次の Rashba 効果などの高次の場合には得ることが出来ていなかった。そのため1次 Rashba スピン軌道相互作用を有する AB リングの理論や実験は豊富に報告されているにも関わらず、2次や3次といった高次 Rashba スピン軌道相互作用による AB リングの理論や実験は報告されていなかった。そこで、非可換ゲージ場の理論を援用することにより、2次や3次の Rashba 効果等の高次のスピン軌道相互作用の場合に対しても AC 位相を導出することを行った。またその過程で断熱近似あるいはアーベリアン近似と呼ばれる近似に2種類の取り方があり、それらが等価であることも分かった。パウリスピン行列  $\sigma_\alpha$  ( $\alpha = x, y, z$ ) を基底とする

非可換ゲージ場を  $\vec{A}_\mu$  とするとそれに対応する Field of Strength  $F_{\mu\nu}$  は

$$F_{\mu\nu} = (\partial_\mu A_\nu^\alpha - \partial_\nu A_\mu^\alpha) \sigma_\alpha - \frac{i\tilde{e}}{\hbar} [A_\mu^\alpha \sigma_\alpha, A_\nu^\beta \sigma_\beta]$$

と表現できる。一般的な断熱近似の場合の  $F_{\mu\nu}^{\text{ad}}$  は、ゲージ場の対角要素を残す近似であるが、それは、Field of Strength の対角要素を残すことに等しいことは一定の考察のもとにわかった。従って、一般的な断熱近似の場合の  $F_{\mu\nu}^{\text{ad}}$  は、 $F_{\mu\nu}^{\text{ad}} = (\partial_\mu A_\nu^z - \partial_\nu A_\mu^z) \sigma_z$  である。一方、ある条件を満たせば、実は、ゲージ場の対角要素をなくして、非対角要素のみで作られる次に示す量も等価な断熱近似の  $F_{\mu\nu}^{\text{ad}}$  になることが分かった  $F_{\mu\nu}^{\text{ad}} = \frac{2\tilde{e}}{\hbar} (A_\mu^x A_\nu^y - A_\mu^y A_\nu^x) \sigma_z$ 。

これは実空間での 1 次の Rashba 効果で自然に起こっている現象でもある。これを利用して、 $n$  次 Rashba 効果の AC 効果による位相演算子  $U_{AC}$  は以下のようになることが分かった。

$$U_{AC} = \exp(i\vec{\beta}_{AC} \cdot \vec{\sigma}), \quad \vec{\beta}_{AC} = k_{Rn} L(-nl_y, nl_x, 0)$$

ここで  $k_{Rn}$  は  $n$  次のスピン軌道相互作用定数、 $L$  は電子が走行した距離、 $l_x, l_y$  は電子が走行した方向の単位ベクトルの  $x, y$  成分である。この結果を用いて図 2(a) のようにリング状に形成された 2 個の量子ドットと量子ナノワイヤにおいて 1 次、2 次、そして 3 次の Rashba スピン軌道相互作用が働く場合に外部磁場を作用させた際に起きる AB 効果において、高次スピン軌道相互作用が及ぼす AC 効果の影響について検討した。図 2(b) は計算に用いた強結合近似のモデルである。図 3 は、この 2 個の量子ドットからなるアハラノフ・ボームリングのデバイスにおいて、1 次、2 次、3 次 Rashba 効果が働いた場合のスピン分極率の磁束依存性のグラフであり、1 次、2 次、そして 3 次の Rashba スピン軌道相互作用のスピンフィルタリング効果の違いを示す。この結果から、この素子でスピンを完全にフィルタリング出来ること、ならびに完全スピン偏極を起こす磁束の値から働いている Rashba スピン軌道相互作用の次数の決定を実行可能であることがわかった。

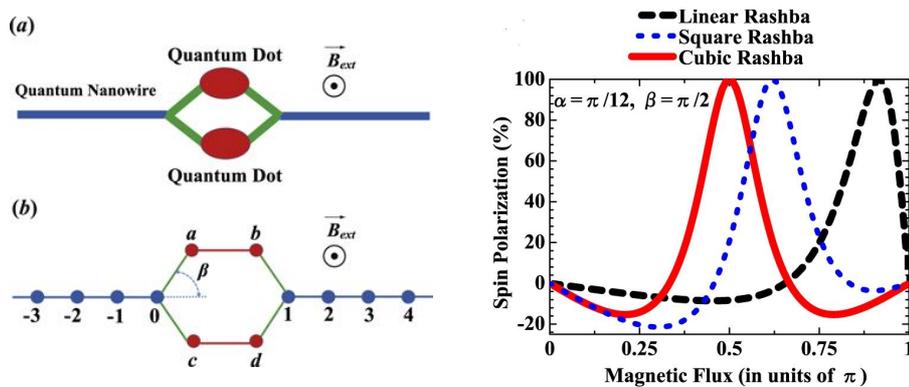


図 2: (a) モデル構造と (b) tight-binding 近似 図 3: AB リングによるスピンフィルタリング効果の高次 Rashba 相互作用による違い

(2) 2次元八ニカム構造体ナノリボンの量子スピンホール効果へのエッジ形状の影響 Kane と Mele がグラフェンにおいて量子スピンホール効果を示すことを 2005 年に発表して以来、多くの研究者が、グラフェンのような八ニカム構造の量子スピンホール効果を研究してきた。しかしながら、その多くは開放端条件において、エッジを zigzag 型であると仮定して電子構造を計算していた。Kane と Mele もグラフェンの量子スピンホール相とノーマル相の電子構造として、zigzag のエッジ形状をもつグラフェンリボンを仮定して計算していた。その理由は armchair のエッジ形状だとバルクが、量子スピンホール相であっても電子構造をよく見ると、フェルミ・レベルにおいてギャップが存在するからである。一般的にバルク・エッジ対応によって、バルクで計算した量子スピンホール相の成立条件とリボンで計算した量子スピンホール相の成立条件は一致することになっている。しかしながら、2次元八ニカム構造体ナノリボンにおいては、成立していないことを具体的な計算で確かめた。一般的に論じるために、2種類の原子からなる八ニカム構造を考察した。図 4 は考察した計算モデルで、図 4(a) が zigzag エッジで、図 4(b) が armchair エッジである。ここで、赤丸と青丸は、それぞれ異なる原子で、異なるスピン軌道相互作用  $\lambda_A$  と  $\lambda_B$  を持つ。また、量子スピンホール相に対する摂動として、それぞれ異なる種類の原子には、 $\pm\lambda_V$  のポテンシャルがあるとした。

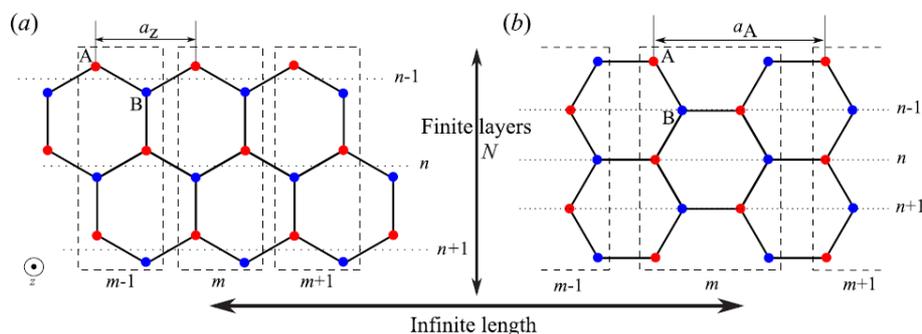


図 4(a) zigzag ナノリボン

図 4(b) armchair ナノリボン

このバルクのハミルトニアンは以下ようになる。

$$\begin{aligned}
 H = & -t \sum_{\sigma} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{c}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j,\sigma} + i\lambda_{\text{SO}}^{\text{A}} \sum_{\sigma} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \nu_{ij} \hat{b}_{i,\sigma}^{\dagger} s_z \hat{b}_{j,\sigma} \\
 & + i\lambda_{\text{SO}}^{\text{B}} \sum_{\sigma} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \nu_{ij} \hat{a}_{i,\sigma}^{\dagger} s_z \hat{a}_{j,\sigma} + \lambda_{\nu} \sum_{\sigma} \sum_i \xi_i \hat{c}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{i,\sigma}.
 \end{aligned}$$

これを使ってバルクでの量子スピンホール相の成立条件は  $\lambda_{\nu} < 3\sqrt{3}\lambda_{\text{SO}}^{\text{M}}$  となる。ここで、 $\lambda_{\text{SO}}^{\text{M}} = (\lambda_{\text{SO}}^{\text{A}} + \lambda_{\text{SO}}^{\text{B}})/2$  である。そこで、今度は、エッジ形状が zigzag と armchair 型のナノリボンで、量子スピンホール相の相図を描いたのが、図 5 である。これを見ると一目瞭然であるが、

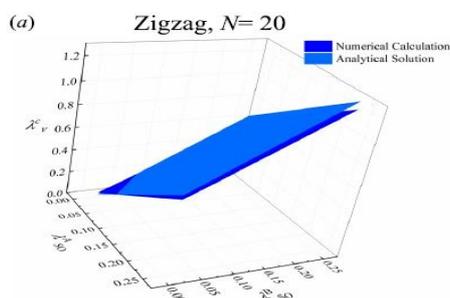


図 5(a) zigzag エッジの QSH 相とバルクの QSH 相の比較

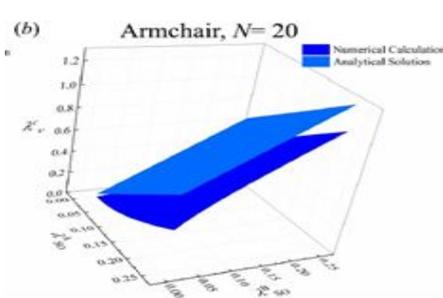


図 5(b) armchair エッジの QSH 相とバルク QSH 相の比較

zigzag のエッジでは、厚みが 20 層しかなくても、ナノリボンの QSH 相が、バルクでの QSH 相とほぼ一致しているにも関わらず、armchair エッジでは厚みが 20 層ではバルクでの QSH 相とナノリボンでの QSH 相が一致しておらず、バルク・エッジ対応が壊れていることがわかる。これは大変重要な結果で、ナノレベルの素子を作る際には極めてクリティカルなことである。Armchair ナノリボンの QSH 相がバルクの QSH 相と一致するには、100 層程度必要なことも分かった。この差はエッジの波動関数のコヒーレンス長が異なることに起因していることも発見した。armchair 型のエッジの波動関数のコヒーレンス長は、zigzag 型のエッジの波動関数のコヒーレンス長の 27.7 倍もあるせいで、エッジに局在することが難しくなっている。

## 5 . 主な発表論文等

[雑誌論文](計 9 件)

K. Kondo and R. Ito, “Quantum spin Hall phase in honeycomb nanoribbons with two different atoms: edge shape effect to bulk-edge correspondence”, *J. Phys. Commun.* (to be published) (2019), 査読有, DOI: 10.1088/2399-6528/ab1c67.

M. Inoue, K. Inubushi, D. Mouri, T. Tanimoto, K. Nakada, K. Kondo, M. Yamamoto, and T. Uemura, “Origin of biquadratic interlayer exchange coupling in Co2MnSi-based current-perpendicular-to-plane pseudo spin valves”, *Appl. Phys. Lett.* Vol. 114, pp. 062401-1-062401-5 (2019), 査読有, DOI: 10.1063/1.5082605.

H. Teramoto, K. Kondo, S. Izumiya, M. Toda, and T. Komatsuzaki, “Classification of Hamiltonians in neighborhoods of band crossings in terms of the theory of singularities”, *Journal of Mathematical Physics*, Vol. 58, pp. 073502-1-073502-39 (2017), 査読有, DOI: 10.1063/1.4991662.

K. Kondo, “A Derivation of Aharonov-Casher Phase and Another Adiabatic Approximation for

Pure Gauge under General Rashba Effects”, *SPIN, Journal of World Scientific* Vol. 6, pp. 1640006-1-1640006-11 (2016), 査読有, DOI: 10.1142/S2010324716400063.

Z. Lin, K. Kondo, M. Yamamoto, and T. Uemura, “Transient analysis of oblique Hanle signals observed in GaAs”, *Jpn. J. Appl. Phys.* Vol. 55, pp. 04EN03-1-04EN03-5 (2016), 査読有, DOI: 10.7567/JJAP.55.04EN03.

K. Kondo, “Spin Filter Effects in Aharonov-Bohm Ring with Double Quantum Dots under General Rashba Spin Orbit Interactions”, *New Journal of Physics* Vol. 18, pp. 013002-1 -013002-11 (2016), 査読有, DOI: 10.1088/1367-2630/18/1/013002.

[学会発表](計 23 件)

小森 至瑠\*、近藤 憲治: 「高次トポロジカル絶縁体で発現するヒンジ状態のロバスト性」, 日本物理学会第 74 回年次大会、九州大学 伊都キャンパス(福岡県・福岡市) (2019 年 3 月 15 日).

伊藤 蓮\*、近藤 憲治: 「2 種類の原子を加えた Honeycomb ナノリボンにおける 2 次元量子スピホール相の研究」, 第 66 回応用物理学会春季学術講演会、東京工業大学 大岡山キャンパス(東京都・目黒区) (2019 年 3 月 10 日).

Y. Ishida\* and K. Kondo: ”A Dependence of the Skyrmion Hall Effect on the Gilbert Damping Constant”, 2018 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM2018), Hongo Campus, The University of Tokyo (Japan) (2018 年 9 月 13 日).

R. Itoh\* and K. Kondo: ”Fermi arcs for Weyl semimetals and line-node semimetals in topological insulator superlattice”, 10th International School and Conference on Physics and Applications of Spin Phenomena in Solids (PASPS10), Linz (Austria) (2018 年 8 月 6 日).

伊藤 蓮\*、近藤 憲治: 「トポロジカル絶縁体超格子におけるフェルミアーク」, 第 65 回応用物理学会春季学術講演会、早稲田大学・西早稲田キャンパス(東京都・西新宿) (2018 年 3 月 17 日).

K. Kondo\* and H. Teramoto: ”An Arbitrary Order Effective Hamiltonian of Hexagonal Warping Effects of Dirac Cone”, The 62nd Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials, Pittsburg (USA) (2017 年 11 月 9 日).

伊藤 蓮\*、寺本 央、近藤 憲治: 「ディラック・コーンのヘキサゴナルな歪みの効果に対する任意次数の有効ハミルトニアン」の導出」, 第 78 回応用物理学会秋季学術講演会、福岡国際会議場・国際センター(福岡県・福岡市) (2017 年 9 月 7 日).

R. Itoh\* and K. Kondo: ”Topological Spin Currents in Graphene Nanoribbons”, Spintech IX, Fukuoka (Japan) (2017 年 6 月 7 日).

伊藤 蓮\*、近藤 憲治: 「グラフェンナノリボンと量子スピホール相」, 第 64 回応用物理学会春季学術講演会、パシフィコ横浜 (神奈川県・横浜市) (2017 年 3 月 14 日).

R. Itoh\* and K. Kondo: ”A Revisit of Quantum Spin Hall Effect in Graphene”, The 17th RIES-HOKUDAI INTERNATIONAL SYMPOSIUM on 柔, Sapporo (Japan) (2016 年 12 月 13 日).

K. Kondo\* and H. Teramoto: ”A Warping Effect of Dirac Cone by the Perturbation up to 5th Order under the Symmetry of  $C_{3v}$ ”, The 61st Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials, New Orleans (USA) (2016 年 11 月 1 日).

近藤 憲治\*、寺本 央: 「 $C_{3v}$  対称性の下での 5 次摂動による Dirac Cone のワーピング」, 2016 年日本物理学会秋季大会、金沢大学 (角間キャンパス) (石川県・金沢市) (2016 年 9 月 13 日).

[その他]

Editorial Board Member of Scientific Reports (Nature Publishing Group)

ホームページ: <http://qed4.es.hokudai.ac.jp/kondo.htm>

(1)研究分担者

研究分担者氏名：植村 哲也

ローマ字氏名：Uemura Tetsuya

所属研究機関名：北海道大学

部局名：情報科学研究科

職名：教授

研究者番号 (20344476) :

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。