

令和 3 年 5 月 19 日現在

機関番号：10101

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2020

課題番号：17K05484

研究課題名(和文)原子層積層構造の空間反転対称性の制御によるスピン流の生成

研究課題名(英文) Spin current generated by controlling the spatial inversion symmetry in atomic layer structures

研究代表者

明楽 浩史 (Akeru, Hiroshi)

北海道大学・工学研究院・教授

研究者番号：20184129

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：系に空間反転対称性の破れ(あるいは局所的な空間反転対称性の破れ)がある場合、電流を流すことでスピン角運動量の偏りが系全体で(あるいは局所的に)発生する。この電流誘起スピン偏極は、電極と接続することによりスピン流として取り出すことができる。本研究では、(1) 原子をらせんに沿って並べた原子鎖において、らせんの曲率や捩率を変えて空間反転対称性を制御することにより電流誘起スピン偏極を大きく変えられることを示した。また、(2) IV族元素からなる原子層において電子密度を変えることにより電流誘起スピン偏極の向きが反転することを見い出した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究の成果は、系の空間反転対称性と系に電流を流したときに発生するスピン偏極の関係をらせん状原子鎖とIV族原子層に対して解明したという基礎物理学上の意義をもつとともに、スピン流生成の効率向上のための指針という工学的意義をもつ。電流誘起スピン偏極から取り出されるスピン流はスピントロニクスにおいて磁化反転に用いられているので、電流誘起スピン偏極を増大させることができれば磁化反転の高速化につながり社会的にも波及効果が期待できる。

研究成果の概要(英文)：When the spatial inversion symmetry is globally (or locally) broken in a system, the current through the system generates the global (or local) polarization of the spin angular momentum. Such current-induced spin polarization produces the spin current through an attached electrode. This work has shown that (1) an atomic chain along a helix gives the current-induced spin polarization which is largely modified by controlling the spatial inversion symmetry through the change in the curvature and the torsion of the helix, and that (2) in an atomic layer of group IV element, the current-induced spin polarization changes its direction with changing the electron density.

研究分野：物性理論

キーワード：スピントロニクス 原子層 原子鎖

1. 研究開始当初の背景

グラフェンや遷移金属ダイカルコゲナイドに代表される原子層は様々な構造をもち、その空間反転対称性(ある点に関して各原子の座標 x, y, z をそれぞれ $-x, -y, -z$ に反転したとき構造が不変であるという対称性)が大局的に破れている原子層や、局所的にのみ破れている[1](ある原子の中心に関して空間反転対称性が破れている)原子層がある。また、原子層には物質科学上の利点として層間相互作用がファンデルワールス力であるため多様な積層構造が可能であるという長所がある。積層することにより対称性を変えることが可能で、空間反転対称性が局所的にも保たれている原子層も積層することで(少なくとも局所的には)空間反転対称性が破れる。さらに、遷移金属ダイカルコゲナイド原子層では3次元的な螺旋(らせん)構造を層に垂直な螺旋転位のまわりに形成することにも成功している[2]。一般に螺旋構造は空間反転対称性が大局的に破れている。

このように様々な原子層構造の作製が可能になり、空間反転対称性の有無およびその強度を制御することができるようになった。この空間反転対称性の制御性を活用することで電流誘起スピン偏極(電流を流すことで生じるスピン角運動量の偏り)やスピン流(スピン角運動量の流れ)などのスピン特性を最適化することが可能であり、この点で原子層構造はスピントロニクス素材として優れていると言える。そこで、原子層構造の空間反転対称性と原子層構造が発生するスピン偏極やスピン流との間の関係を十分に解明し、特性を最適化するための原子層構造の指針を作ることが望まれる。

また、螺旋構造を有する様々な系のスピン物性も注目されている。2011年にDNAの単分子層を光電子が透過する際に高効率のスピンフィルター効果(特定の向きのスピンを選択的に通す現象)を示すことが発見され[3]、さらにDNA1分子を通しての電気伝導においても高効率のスピンフィルター効果が観測された[4]。その後もDNAやオリゴペプチドなど様々な螺旋状有機分子において顕著なスピン選択性が観測され、**chirality induced spin selectivity** と呼ばれる実験・理論の両面から多数の研究がなされている。さらに2015年には螺旋構造を有するテルル結晶において螺旋軸に平行な電流により平行なスピン偏極が誘起されることが理論的に予言された[5]。

螺旋構造は空間反転対称性を持たないためスピン軌道相互作用(相対論的な効果としてスピン自由度と軌道自由度の間に現れる相互作用)によりエネルギー準位のスピン分裂(スピンの向きによってエネルギーに差が現れること)が生じ、それによってスピン偏極やスピン流が現れてよいことまでは理解されている。ところが、回転と並進を合わせた対称性をもつ螺旋構造において発生するスピン偏極やスピン流の統一的記述は、螺旋構造の複雑さと多様性のため、まだ達成されていない。特に、スピン偏極やスピン流が螺旋構造のどの構造パラメータにより決定しているかという、スピン物性を制御する上で必要な知見が得られていない。

2. 研究の目的

本研究ではまず、螺旋状原子鎖[6,7]に着目した。DNA分子やテルル結晶では螺旋のピッチなどの構造パラメータを変えることは出来ないが、カーボンナノチューブ中の螺旋状原子鎖では螺旋のピッチを変えることができる。本研究では、様々な螺旋状有機分子において観測されている**chirality induced spin selectivity**の共通の機構を解明することを目指して、螺旋状原子鎖の電流誘起スピン偏極および軌道角運動量偏極を理論計算し、螺旋のピッチおよび半径という構造パラメータに関する依存性を解明した。

さらに本研究では、IV族元素スズからなる原子層スタネンに垂直に電場を加えて空間反転対称性を破った系について、電流誘起スピン偏極を理論計算し、電子密度および垂直に印加する電場に関する依存性を解明した。

3. 研究の方法

(1) 螺旋状原子鎖のモデル(図1)

螺旋曲線の構造パラメータとしてピッチと螺旋を含む円筒面の半径を選んだ。螺旋曲線上にヨウ素原子を等間隔で並べた原子鎖を考え、原子軌道として p_x, p_y, p_z 軌道を考慮し、スピン軌道相互作用をLS結合(原子内の軌道角運動量とスピン角運動量との結合)として取り入れた。

(2) 螺旋状原子鎖の電流誘起角運動量偏極の計算方法

強束縛モデル(電子が各原子に強く束縛されているとし、電子の波動関数を原子軌道の重ね合わせで記述する近似)を用いて電子のエネルギー、原子内軌道角運動量とスピン角運動量の期待値を計算し、ランダウアーの方法(電子の運動の向きに応じて、電流に依存する分布の違いを設定する方法)を用いて電流によって誘起される軌道角運動量の偏極とスピン角運動量の偏極

を計算した。

(3) 原子層スタネンのモデル

スタネンはバックリングをもち、単位胞内の A 原子と B 原子の座標は層に垂直な方向で異なる。このため電場を層に垂直に印加することで A 原子と B 原子に働くポテンシャルの差を導入することができる。原子軌道は s, px, py, pz 軌道を考慮し、スピン軌道相互作用を LS 結合として取り入れた。

(4) 原子層スタネンの電流誘起スピン偏極の計算方法

強束縛モデルを用いて電子のエネルギーとスピン角運動量の期待値を計算し、ボルツマン方程式(半古典的な電子の運動に基づいて電子分布の電流による変化を記述する方程式)を用いて、空間的に一様かつ時間的に定常の仮定のもとで、電流について 1 次の範囲で電流誘起スピン偏極を計算した。強束縛モデルに現れるパラメータは第一原理計算(実験によって得られた測定値を用いないで電子状態を大規模な数値計算により求める方法)により決定した。

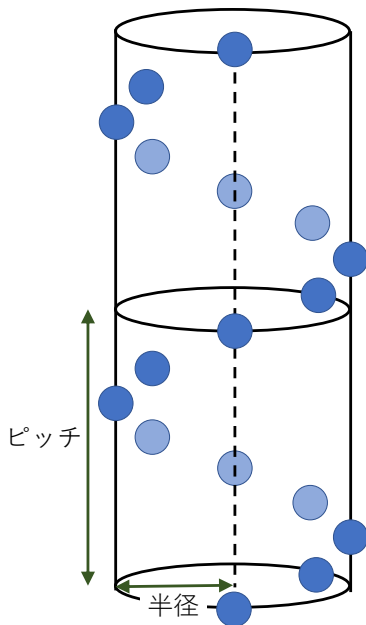


図1 螺旋状原子鎖のモデル

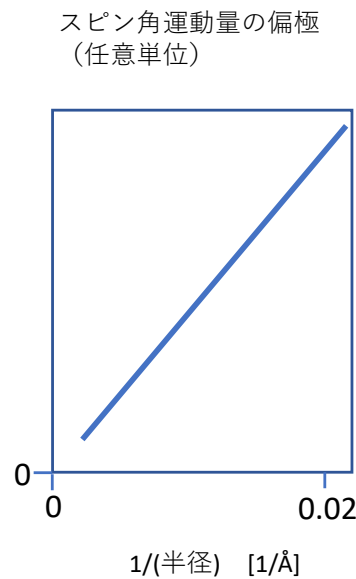


図2 螺旋軸方向のスピン角運動量の偏極

4. 研究成果

(1) 螺旋状原子鎖の電流誘起軌道角運動量偏極と電流誘起スピン偏極

電流によって誘起される軌道角運動量偏極は螺旋状原子鎖の曲率(螺旋を含む円筒面の半径の逆数)が小さい領域において曲率に比例することを明らかにし(図2)、電流誘起軌道角運動量偏極が曲率の存在が原因で生じること、曲率によって制御可能であることを示した。一方電流誘起スピン偏極は、曲率とスピン軌道相互作用(原子内 LS 結合)の両方が原因で生じることが明らかにした。スピンフィルター効果はこの電流誘起スピン偏極によって生じると考えられる。実際、螺旋状原子鎖の電流のスピン偏極率(ある向きのスピン角運動量を運ぶ電子の流れと逆向きのスピン角運動量を運ぶ電子の流れの割合の差)は曲率と原子内スピン軌道相互作用によって制御可能であることが明らかになった。

さらに、螺旋状原子鎖の曲率だけでなく振率(ねじれの度合い)にも着目し、電流が誘起するスピン角運動量偏極と軌道角運動量偏極の(螺旋曲線の)接線方向、主法線方向、従法線方向の成分について曲率依存性と振率依存性を調べ、接線成分は振率の1次に比例し、従法線成分は曲率の1次に比例することを明らかにした。この構造依存性を説明するために、ハミルトニアンから軌道角運動量とホッピング(原子間の電子の飛び移り)が曲率や振率によって結合する項を導出し、軌道角運動量偏極の構造依存性の起源を解明した。スピン角運動量偏極の構造依存性も軌道角運動量偏極がスピンに対して有効磁場として働くことから導かれる。

この研究成果は有機分子のようにスピン軌道相互作用が小さい軽元素からなる物質でも構造を制御することで十分大きいスピン流を生成することが可能であることを示唆している。

(2) 原子層スタネンの電流誘起スピン偏極

電子密度や A 原子と B 原子の間のポテンシャル差を変えることで電流誘起スピン偏極の向きが反転することを見出した。この結果は電子密度や層に垂直に印加する電場の大きさを変えることで電流誘起スピン偏極の向きを制御できることを示している。

この機構を解明するために有効ハミルトニアン（電子の自由度を着目する自由度に限定して電子の運動を記述するハミルトニアン）を構築し、結晶運動量と副格子自由度（A 原子と B 原子のどちらに在るかという自由度）の結合および副格子自由度に依存する Rashba 型スピン軌道相互作用（結晶運動量に垂直な向きの有効磁場がスピンに働く相互作用）の働きにより電流誘起スピン偏極の向きが反転することを明らかにした。

<引用文献>

- [1] X. Zhang et al., Nat. Phys. 10, 387 (2014).
- [2] L. Zhang et al., Nano Lett. 14, 6418 (2014).
- [3] B. Gohler et al., Science 331, 894 (2011).
- [4] Z. Xie et al., Nano Lett. 11, 4652 (2011).
- [5] T. Yoda et al., Sci. Rep. 5, 12024 (2015).
- [6] X. Fan et al., Phys. Rev. Lett. 84, 4621 (2000).
- [7] D. Rybkovskiy et al., Phys. Status Solidi B 249, 2608 (2012).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 7件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 5件）

1. 著者名 Iijima Tomonori, Akera Hiroshi	4. 巻 13
2. 論文標題 Gate-Voltage-Induced Switching of the Spin-Relaxation Rate in a Triple-Quantum-Well Structure	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Applied	6. 最初と最後の頁 064075-1~10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/physrevapplied.13.064075	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Iijima Tomonori, Egami Yoshiyuki, Akera Hiroshi	4. 巻 59
2. 論文標題 Suppressing effective magnetic field and spin-relaxation rate by tuning barrier compositions in a (111) quantum well	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 100901-1~5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/abb3d5	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Ishikawa Toshiya, Akera Hiroshi	4. 巻 100
2. 論文標題 Antiparallel spin Hall current in a bilayer with skew scattering	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 125307-1 10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.100.125307	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Hayashida Kenji, Akera Hiroshi	4. 巻 101
2. 論文標題 D'yakonov-Perel' spin relaxation in a bilayer with local structural inversion asymmetry	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 035306-1 7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.101.035306	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Y. Egami and H. Akera	4. 巻 10
2. 論文標題 Controlling Rashba spin-orbit interaction in quantum wells by adding symmetric potential	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Appl. Phys. Express	6. 最初と最後の頁 063007-1-4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/APEX.10.063007	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

[学会発表] 計33件(うち招待講演 0件/うち国際学会 7件)

1. 発表者名 飯島智徳, 江上喜幸, 明楽浩史
2. 発表標題 (111)非対称二重量子井戸におけるスピン緩和スイッチング
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大原浩平, 明楽浩史
2. 発表標題 空間反転対称性が破れたスタネンにおける電流誘起スピン偏極
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 矢田部優哉, 明楽浩史
2. 発表標題 曲率を持つ原子鎖における電流誘起スピン偏極とスピン偏極電流
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 石川達也, 明楽浩史, 江上喜幸
2. 発表標題 歪を持つグラフェンhBN積層構造の電子状態
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 石川俊也, 明楽浩史
2. 発表標題 グラフェンの面内ヘテロ接合における透過率
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 林田健二, 明楽浩史
2. 発表標題 二重量子井戸における電流誘起スピン偏極
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 矢田部優哉, 明楽浩史
2. 発表標題 螺旋状原子鎖におけるスピン偏極電流
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 大原浩平, 江上喜幸, 明楽浩史
2. 発表標題 第一原理計算に基づく空間反転対称性の破れた 族原子層における電流誘起スピン偏極
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 石川俊也, 明楽浩史
2. 発表標題 原子層面内ヘテロ構造におけるバレー依存伝導
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 T. Iijima, Y. Egami and H. Akera
2. 発表標題 Switching of the spin-relaxation rate in quantum well structures
3. 学会等名 10th International School and Conference on Physics and Applications of Spin Phenomena in Solids (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 T. Ishikawa, T. Kato and H. Akera
2. 発表標題 Extrinsic spin Hall effect and the Edelstein effect in double quantum wells
3. 学会等名 10th International School and Conference on Physics and Applications of Spin Phenomena in Solids (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 R. Otsuto and H. Akera
2. 発表標題 Current-induced spin polarization in a helical atomic chain
3. 学会等名 10th International School and Conference on Physics and Applications of Spin Phenomena in Solids (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 石川俊也, 明楽浩史
2. 発表標題 二重量子井戸における外因性スピンホール効果の発現・消失のクロスオーバー
3. 学会等名 日本物理学会 2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 林田健二, 明楽浩史
2. 発表標題 二重量子井戸におけるスピン緩和率の層間トンネル効果による抑制
3. 学会等名 日本物理学会 2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 尾方幸博, 鈴浦秀勝
2. 発表標題 3次元巨大ラシユバ系における光学伝導度スペクトルの理論計算
3. 学会等名 日本物理学会 2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 石川俊也, 明楽浩史
2. 発表標題 二重量子井戸における反平行スピホール流
3. 学会等名 日本物理学会 第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 乙戸良介, 明楽浩史
2. 発表標題 螺旋状原子鎖における電流誘起スピン・軌道角運動量偏極
3. 学会等名 日本物理学会 第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 加藤貴大, 明楽浩史
2. 発表標題 反平行有効磁場を持つ二重量子井戸における電流誘起スピン偏極
3. 学会等名 日本物理学会 第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 H. Akera, Y. Egami, and T. Iijima
2. 発表標題 Band-Offset Engineering for Control of the Spin Relaxation
3. 学会等名 SPINTECH IX (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 石川俊也, 明楽浩史
2. 発表標題 複数サブバンドをもつ量子井戸における外因性スピンホール効果
3. 学会等名 日本物理学会 2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 江上喜幸, 明楽浩史
2. 発表標題 量子井戸の強束縛モデルにおけるRashbaスピン軌道相互作用の界面双極子による制御
3. 学会等名 日本物理学会 2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 加藤貴大, 明楽浩史
2. 発表標題 二重量子井戸のRashbaスピン軌道相互作用による電流誘起スピン偏極
3. 学会等名 日本物理学会 第73回年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 江上喜幸, 明楽浩史
2. 発表標題 InGaAs/AlGaAsSb量子井戸におけるRashbaスピン軌道相互作用の14バンドk・p計算
3. 学会等名 日本物理学会 第73回年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 飯島智徳, 明楽浩史
2. 発表標題 第1励起サブバンドを考慮した3重量子井戸におけるスピン緩和率の電場依存性
3. 学会等名 日本物理学会 第73回年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 乙戸良介, 明楽浩史
2. 発表標題 螺旋状原子鎖における電流誘起スピン偏極
3. 学会等名 日本物理学会 第73回年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 石川俊也, 明楽浩史
2. 発表標題 二重量子井戸における外因性スピンホール効果
3. 学会等名 日本物理学会 第73回年次大会
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分担者	鈴浦 秀勝 (Suzuura Hidekatsu) (10282683)	北海道大学・工学研究院・准教授 (10101)	

6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分 担 者	江上 喜幸 (Egami Yoshiyuki) (20397631)	北海道大学・工学研究院・助教 (10101)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関