

期間番号：12608

研究種目：若手研究 (B)

研究期間：2007～2009

課題番号：19740177

研究課題名 (和文) 表面・界面でのスピンホール効果の特異な物性の研究

研究課題名 (英文) Theoretical research for novel physics of spin Hall effects on the system surfaces and interfaces

研究代表者 村上 修一 (MURAKAMI SHUICHI)

東京工業大学・大学院理工学研究科・准教授

研究者番号：30282685

研究成果の概要 (和文)：

トポロジカル絶縁体 (量子スピンホール系) の輸送特性について、2次元の場合にエッジ状態の熱電輸送特性を計算し、低温にするとエッジ状態が優勢になり、熱電変換性能指数が上昇することを見出した。またこうしたトポロジカル絶縁体と通常の絶縁体相との相転移を記述する相図を2次元・3次元の場合に得た。また白金の第一原理計算を行い、バンド交差によって白金のスピンホール効果が巨大になっていることを理論的に見出した。

研究成果の概要 (英文)：

We calculate thermoelectric properties of the topological insulators. For two-dimensional topological insulators, as the temperature is lowered, the edge-state transport becomes dominant over the bulk transport. We also obtain universal phase diagrams describing the phase transitions between the topological and ordinary insulators. Lastly, we calculate the spin Hall conductivity for platinum by first-principle methods, and show that the giant spin Hall effect in platinum is caused by the band crossings near the Fermi energy.

交付決定額

(金額単位：円)

| | 直接経費 | 間接経費 | 合計 |
|--------|-----------|---------|-----------|
| 2007年度 | 900,000 | 0 | 900,000 |
| 2008年度 | 800,000 | 240,000 | 1,040,000 |
| 2009年度 | 800,000 | 240,000 | 1,040,000 |
| 年度 | | | |
| 年度 | | | |
| 総計 | 2,500,000 | 480,000 | 2,980,000 |

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・物性I

キーワード：量子スピンホール系、トポロジカル絶縁体、エッジ状態、ビスマス、熱電変換、励起子、トポロジー、スピンホール効果

1. 研究開始当初の背景

(1)スピンホール効果は、スピン軌道相互作用を持つ金属・半導体で起こる現象で、外部電場をかけるとそれに垂直にスピン流が誘起される現象であり、本研究代表者らによりこの効果が固体のバンド構造に起因して起こることが2003年に理論的に予言された。当

時はスピンホール効果について、モデル計算に基づく理論的な研究はある程度行われていたものの、物質に即した理論は少なく、また実験については半導体系の実験がいくつもあるのみで、金属系に関する研究はあまりなかった。そのため、スピンホール効果の界面・表面効果については特異な物性が期待で

きるにも関わらず、あまり研究がなされていなかった。

(2) トポロジカル絶縁体は量子スピンホール系とも呼ばれ、前述のスピンホール効果の絶縁体版に相当する。このトポロジカル絶縁体は、バルク（試料内部）では絶縁体であるが、そのエッジや表面にギャップレス（金属的）な状態があり、それがスピン流を運ぶというものである。このエッジ状態・表面状態はトポロジカルに保護されていると呼ばれ、非磁性の不純物があってもその金属状態を保つ。このトポロジカル絶縁体については、研究開始当初はちょうど理論的予言が始まった段階であり、まだ実験による観測は出ていなかった。理論研究も緒に就いたばかりであり、基本的な物性現象、たとえば本研究で取り上げるような、通常の絶縁体との相転移や、またエッジ状態・表面状態の輸送の基礎的性質があまり明らかではなかった。

2. 研究の目的

(1) スピンホール効果についてそのスピン流の輸送特性を調べる。特に界面・表面に着目してその性質を理論的に調べ、どのような系でこの効果が大きくなるかを理論的に考察する。

(2) スピンホール系の絶縁体版であるトポロジカル絶縁体について、その基礎的な物性現象を理論的に予測する。界面・表面状態に特異性が現れると予想されるため、これらに着目して特異な現象を理論的に予言する。

3. 研究の方法

(1) スピンホール系については、モデルによる物性計算はある程度行ってきたが、物質に即した理論はまだあまりなされていないので、第一原理計算を用いてその物性現象の予言と探索を行う。

(2) トポロジカル絶縁体については、波数の小さいところで展開した有効モデルを用いる。対称性により有効モデルに入りうる項を決定し、そのモデルのパラメータを変化させたときにバンド構造がどう変わるか、表面状態がどう変わるか、またそれがどのように物理的性質に反映されるかを調べる。またこの有効モデルを用いることで、トポロジカル絶縁体と通常の絶縁体との相転移、不純物効果など様々な現象を理論的に計算する。

(3) 輸送特性の計算の際には、2次元トポロジカル絶縁体のエッジ状態は弾道的伝導であることを用いてランダウアー公式を用いて計算し、他方バルク状態の拡散伝導についてはボルツマン型の輸送方程式で解析する。

なおこの場合はエッジ状態の非弾性散乱長が、弾道的伝導をする長さのスケールとなる。そのため非弾性散乱長を評価する必要があり、その際は前項(2)で作った有効モデルを用いて計算する。

4. 研究成果

(1) 2次元および3次元トポロジカル絶縁体について、通常の絶縁体との相転移がどうなるかを考察した。時間反転対称性を考慮して有効モデルを構築し、それが外部パラメータを変化させたときに、通常の絶縁体とトポロジカル絶縁体との相転移の条件を求めた。すると空間反転対称性の有無および系の次元により相転移の様子が異なることが分かった。

① 2次元トポロジカル絶縁体

まず2次元トポロジカル絶縁体の場合は、ある外部パラメータを変化させていくと相転移はある一点で起こることが分かった。この場合はバルクのバンドがそのパラメータ値で閉じて、その際にトポロジカルナンバーの変化が起きることが分かった（図1(b)）。

② 3次元トポロジカル絶縁体

一方3次元トポロジカル絶縁体では、空間反転対称性がある場合には相転移は外部パラメータのある単一の値で起こるが、空間反転対称性がない場合には、トポロジカル絶縁体と通常の絶縁体との間にギャップレス金属相が挟まることが分かった（図1(a)）。これはバルクギャップが閉じる縮退点が、波数空間の中で「モノポール」と呼ばれる構造を持つことに起因している。これは、波数空間での「モノポール」という微分幾何学的な構造が、相転移という物性現象に直接現れる点で非常に興味深い。

こうしたことより、トポロジカル絶縁体と通常の絶縁体との間の相転移を記述する相図の一般形は下図1のようになる。これは実験で観測できるはずである。

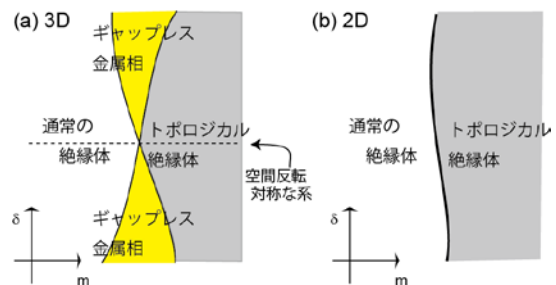


図1 トポロジカル絶縁体と通常の絶縁体との相転移を表わす相図の一般形

(2) 前述(1)で構築したモデルを用いて、不純物が有ったときに相転移がどのようになるかを研究した。不純物散乱を変化させていったときの相図の変化をプロットした。その結果確かに、不純物があると相転移は有限の幅を

持つこと、またトポロジカルナンバーが、トポロジカル絶縁体相と通常の絶縁体相とで異なることを反映して、不純物があっても必ず相転移が残ることが示された。

(3) 本研究で注目しているトポロジカル絶縁体の界面・表面上の状態について、その熱電輸送現象を理論的に考察した。2次元トポロジカル絶縁体を例にとると、エッジ状態は完全伝導チャンネルを形成するので、その状態は熱電輸送に関しても特異的に効くと考えられる。計算に際しては、エッジ状態を考察するために2次元のリボン状の系を考えた。

①リボン状の系での計算：

リボンの幅が小さい方が、エッジ状態が（バルク状態に比べて）相対的に優勢になると考えられるため、10nm・100nm程度の幅のリボン状の2次元トポロジカル絶縁体を考えてバルク状態、エッジ状態の輸送から全系の熱電輸送を計算した（模式図を図2に示す）。化学ポテンシャルが伝導バンド端の近傍にある場合を考えると、エッジ状態は正孔として働くためゼーベック係数は正、バルク状態は電子として働くためゼーベック係数が負となり、全体のゼーベック係数としては互いに打ち消し合い小さな値となる。このようにバルク状態とエッジ状態とは互いに競合関係にあることが分かった。このため全系の熱電変換性能指数も小さくなる。

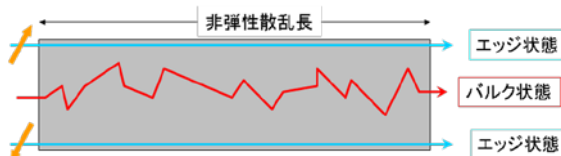


図2 2次元トポロジカル絶縁体の熱電輸送の模式図。エッジ状態は弾道的伝導を行う、バルク状態は拡散的伝導を行う。

②熱電変換性能指数の最適化

上記の計算には多種のパラメタが入っており、パラメタの値を変化させると ZT の最大値も変化する。これを最適化させるため、いくつかの近似のもとで2つの無次元パラメタ r, g で系を表わすこととした。それらのパラメタの関数として ZT をプロットした。その結果が図3である。ここでは輸送の担い手が、バルク状態、エッジ状態、フォノン伝導の3種あり、これらの中の比が2つの無次元パラメタ r, g に相当している。系の温度を低温にしていくと、エッジ状態の非弾性散乱長が長くなるため、エッジ状態が相対的に優勢になり、その結果 ZT は温度の関数として一旦減ってまた増えるという挙動を示すことを理論的に見出した。

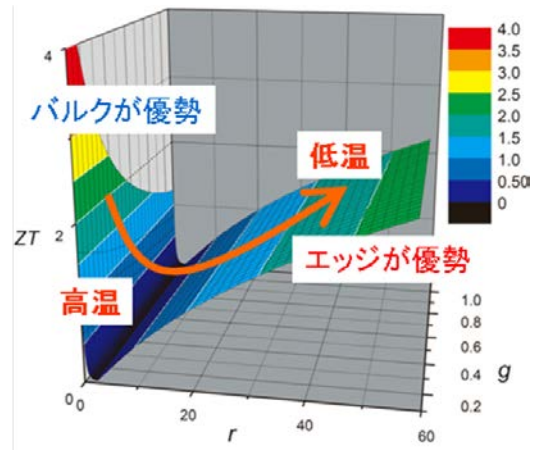


図3 2次元トポロジカル絶縁体の熱電変換性能指数 ZT の計算結果。 r はバルク状態に対するエッジ状態の比、 g はバルク状態に対するフォノン伝導の比

(4) スピンホール効果については実験により、白金 (Pt) のスピンホール効果が巨大であり室温でも観測されることが判明した。そこで第一原理計算の研究者と協力して、Pt の電子バンド構造の第一原理計算を行った。結果を図4に示す。このフェルミエネルギー付近にバンド交差（複数のバンド同士がエネルギー的に近接している点）があり、それが巨大な内因性スピンホール効果を生むことを理論的に見出した。

このように Pt ではスピンホール効果が大きく、現在ではスピン流の測定のためのプローブとして Pt の逆スピンホール効果が広く使われるようになってきている。

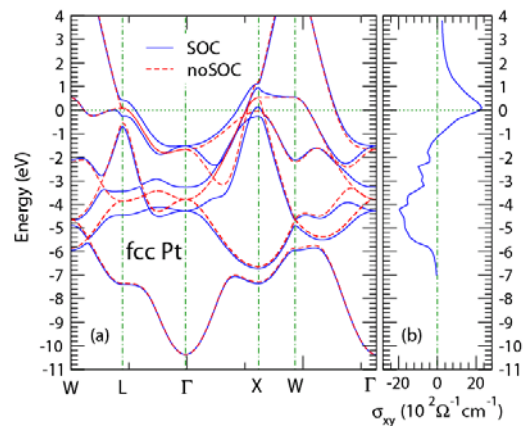


図4 (a) 白金 (Pt) の第一原理計算によるバンド構造。(b) フェルミエネルギーを仮想的に変化させたときのスピンホール伝導率。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 7 件)

① Ryuji Takahashi and Shuichi Murakami, "Thermoelectric transport in perfectly conducting channels in quantum spin Hall systems", Phys. Rev. B 81, 161302(R) (2010) 査読有

② Ryuichi Shindou and Shuichi Murakami, "Effects of disorder in three-dimensional Z2 quantum spin Hall systems", Phys. Rev. B 79, 045321 (2009) 査読有.

③ S. Kuga, S. Murakami, N. Nagaosa, "Spin Hall effect of excitons", Phys. Rev. B 78, 205201-1 -- 205201-5 (2008) 査読有.

④ S. Murakami, S. Kuga, "Universal phase diagrams for the quantum spin Hall systems", Phys. Rev. B 78, 165313-1 -- 165313-10 (2008) 査読有.

⑤ G. Y. Guo, S. Murakami, T.-W. Chen, and N. Nagaosa, "Intrinsic Spin Hall Effect in Platinum : First-Principles Calculations", Phys. Rev. Lett. 100, 096401-1 -- 096401-4 (2008) 査読有.

⑥ Shuichi Murakami, "Phase transition between the quantum spin Hall and insulator phases in 3D: emergence of a topological gapless phase", New J. Phys. 9, 356 (2007), 査読有.

⑦ Shuichi Murakami, Satoshi Iso, Yshai Avishai, Masaru Onoda, and Naoto Nagaosa, "Tuning phase transition between quantum spin Hall and ordinary insulating phases", Phys. Rev. B 76, 205304-1 -- 205304-6 (2007) 査読有.

[学会発表] (計 20 件)

① Shuichi Murakami, "Thermoelectric transport in 2D quantum spin Hall systems", 4th International Workshop on Spin Currents, 2010.02.08, Sendai, Japan

② Shuichi Murakami, "Physics of surface states in topological insulators", "Symposium on Surface and Nano Science, 2010.01.17, Shizukuishi, Japan

③ 村上修一, "Spin Hall effect and Berry phase", 5th CAS Cross-Strait and International Conference on Quantum

Manipulation, 2009.12.20, Beijing, China

④ 村上修一, 「トポロジカル絶縁体と表面ディラック電子」、物性研究所短期研究会 “ディラック電子系の物性-グラフェンおよび関連物質の最近の研究”, 2009.10.22、東京大学

⑤ Shuichi Murakami, "Universal Phase Diagrams for Quantum Spin Hall Phases", Novel Topological States in Condensed Matter Physics, 2009.6.22, Hong Kong.

⑥ Shuichi Murakami, "Quantum spin Hall phases and topological surface states", Annual Meeting of the German Physical Society, 2009.3.26, Dresden, Germany.

⑦ Shuichi Murakami, "Quantum spin Hall phase in bismuth ultrathin film", 421st Wilhelm and Else Heraeus Seminar on Spin Hall Effect, 2008.10.20, Bad-Honnef, Germany.

⑧ 村上修一, 「ビスマスにおける量子スピンホール効果とエッジ状態の理論」、日本物理学会 2008 年秋季大会、2008.09.20、岩手大学

⑨ Shuichi Murakami, "Spin Hall effect and quantum spin Hall effect -- spin current in metals and insulators--", Gordon Research Conference "Magnetic Nanostructures", 2008.09.04, Aussois, France

⑩ Shuichi Murakami, "Universal phase diagram for the quantum spin Hall phase in 2D and 3D", Topological Aspects of Solid State Physics, 2008.6.26, Kyoto, Japan.

⑪ 村上修一, 磯暁、Yshai Avishai、小野田勝、永長直人、「量子スピンホール相と絶縁相との間の相転移」、日本物理学会第 63 回年次大会、2008.03.23、近畿大学

⑫ Shuichi Murakami, "Quantum Spin Hall Effect--Surface Spin Current on an Insulator --", International Workshop on Spin Current, 2008.2.19, Sendai, Japan.

⑬ Shuichi Murakami, "Spin Hall effect and quantum spin Hall effect", "YKIS2007 "Interaction and Nanostructural Effects in Low-Dimensional Systems"", 2007.11.16, Kyoto, Japan

〔図書〕(計 1 件)

①村上修一、シーエムシー出版、スピントロニクスの基礎と材料・応用技術の最前線第13章「スピンホール効果の理論」(監修：高梨弘毅)、2009年、149-158頁

6. 研究組織

(1) 研究代表者

村上 修一 (MURAKAMI SHUICHI)

東京工業大学・大学院理工学研究科・准教授

研究者番号：30282685

(2) 研究分担者

()

研究者番号：

(3) 連携研究者

()

研究者番号：