

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 5 年 6 月 6 日現在

機関番号：33302

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2020～2022

課題番号：20K03841

研究課題名（和文）円偏光照射による電子系のスピン偏極とスピン依存シフト電流の理論

研究課題名（英文）Spin polarization and spin dependent shift current in electron systems irradiated by circularly polarized light

研究代表者

田中 康寛（Tanaka, Yasuhiro）

金沢工業大学・基礎教育部・講師

研究者番号：50541801

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,400,000円

研究成果の概要（和文）：スピン軌道相互作用の強い半導体などにおいて、円偏光照射によってスピン偏極が起こることを示し、電子系のバンド構造の効果や、スピン偏極の光電場強度、振動数依存性を、数値計算およびフロケ理論を用いて明らかにした。特に、ミクロなモデルに基づいた計算によって、現象論や単純化された過去の理論結果が統一的に理解され、このスピン偏極がよく知られた逆ファラデー効果として解釈できることを示した。本研究では、シフト電流そのものの計算までには至らなかったが、得られたスピン偏極はフェルミ面近傍で生じることから、スピンの依存した電流が発生することが予想され、この点は今後の課題となった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究で得られた円偏光誘起スピン偏極に関する成果は、古くから知られた逆ファラデー効果に関する過去の多くの理論を現代的かつ統一的な視点から捉え直すとともに、スピン偏極に対する電子系のバンド構造の影響といった、これまでにない知見を与えているという点で学術的な意義がある。さらに、我々が行った理論解析結果は、スピン軌道相互作用の強い半導体において観測が可能であると予測され、将来的に光で電子系のスピンや光誘起電流を制御するといった応用上の観点からも重要な結果と考えられる。

研究成果の概要（英文）：We have theoretically studied spin polarization induced by circularly polarized light in semiconductors with strong spin-orbit interaction. We have used numerical simulations and the Floquet theory to investigate photoinduced dynamics of microscopic electronic models. We clarified how the magnitude and the sign of the photoinduced spin polarization depend on the light electric field, frequency, and the electronic band of the system. Our results are consistently interpreted as the inverse Faraday effect, and they enable us to understand the existing theories including phenomenological ones in a unified manner. In this research project, we have not calculated the shift current itself. However, our results show that the spin polarization mainly occurs near the Fermi surface, suggesting that the realization of spin dependent current due to circularly polarized light. This point is an important future problem.

研究分野：物性理論

キーワード：光誘起相転移

1. 研究開始当初の背景

固体に光照射をした際に生じる非線形応答として、直流電流が現れる現象は古くから知られ、例えば半導体におけるシフト電流は理論実験ともに研究が進んできた。この現象は、空間反転対称性のない物質において、価電子バンドから伝導バンドへ電子が励起される際、2つのバンドで波動関数の空間分布が異なるために、電荷分布のシフトが起きて電流として現れる現象である。一方、我々の最近の研究では、スピン軌道相互作用のある(空間反転対称性の破れた)電子系に円偏光を照射すると、高効率にスピン偏極を起こせることが分かってきた。この円偏光誘起スピン偏極を使うことで、シフト電流にスピン自由度を導入できる可能性があると考え、本研究を開始するに至った。

2. 研究の目的

本研究の目的は、スピン軌道相互作用の大きい半導体や、トポロジカル絶縁体における円偏光誘起スピン偏極とシフト電流の解析を行うことである。まず、円偏光照射によって生じるスピン偏極について、電子系のバンド構造や光の周波数、電場強度といったパラメータへの依存性を明らかにし、そこから生じるシフト電流について計算を行う。特に、これらの現象をミクロなモデルに基づいた数値シミュレーションや解析計算によって明らかにすることを目的としている。

3. 研究の方法

研究方法は、時間依存シュレディンガー方程式を用いた数値シミュレーションと、フロケ理論を用いた解析的な計算である。具体的には、光照射の効果を古典的な振動電場として扱って、電子の遷移積分に対するパイエルス位相の形でモデルに導入する。数値シミュレーションでは、個々のモデルに対する実時間発展を計算し、スピン偏極や電流などの物理量を計算する。また、フロケ理論では、電場が時間に周期的であることを使ってシュレディンガー方程式を時間についてフーリエ変換し、時間に依存しない固有値問題に置き換える。実際の計算では、フロケ理論における固有値問題は無限次元となるため、光の周波数が大きい極限における有効モデルを導出して解析するか、固有値問題を有限次元の範囲で打ち切り、数値的に解くことで物理量を計算する。

4. 研究成果

- (1) スピン軌道相互作用のある正方格子上的電子系において、円偏光誘起スピン偏極を詳細に調べ、その電場強度、周波数、電子密度依存性を明らかにした。特に、スピン偏極の大きさが電場強度の2次に比例し、周波数の3次に反比例することを見出した(図1)。この結果は、過去の現象論などの理論で知られた逆ファラデー効果における依存性と一致している。我々は、フロケ理論を用いた有効モデルを導出することにより、この依存性が自然に説明できることを示した。

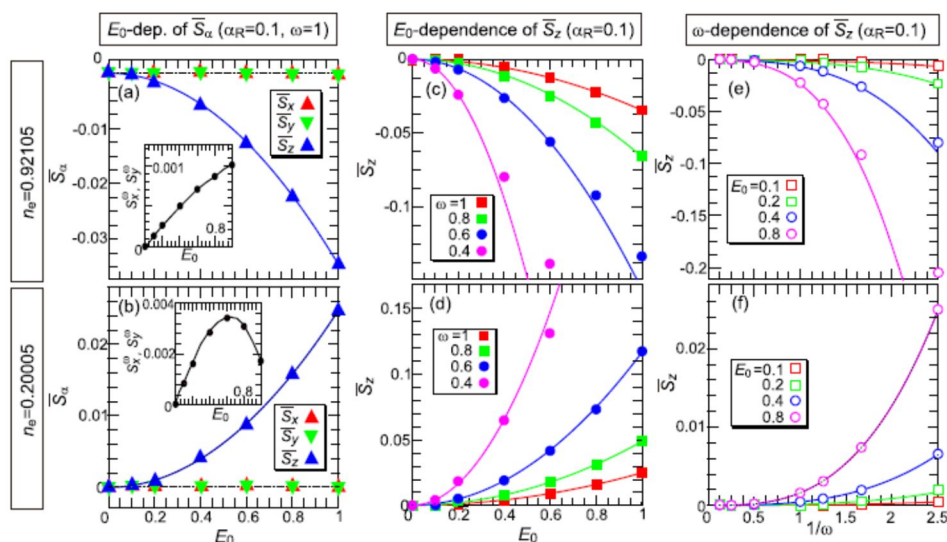


図1: 電子密度を固定した場合の光誘起スピン偏極の電場強度、周波数依存性

さらに、フロケ理論を用いた解析では、スピン軌道相互作用と光電場によって生じる有効磁場の波数依存性と、フェルミ面の形状によってスピン偏極の符号と大きさが決まることを明らかにした。また、光の磁場の効果についても同様な解析を行った。これらの結果から、スピン軌道相互作用の強い半導体において、円偏光誘起スピン偏極の観測可能性について議論を行った[Y. Tanaka, T. Inoue, and M. Mochizuki, New. J. Phys. 22 (2020) 083054]。

この研究は、これまで逆ファラデー効果として知られていた光誘起磁化について、電子系のバンド構造まで考慮したミクロなモデルを使って解析した初めての例であり、これによって現象論を含めた過去の理論が統一的に理解された点で大きな意義があると考えている。また、電子間相互作用や多バンドの効果などを考慮することで、現実の物質との対応を含めたより多くの知見が得られると期待される。

(2) 上記の研究で、円偏光照射によってフェルミ面近傍の電子がスピン偏極することが明らかとなったが、同時に、結晶全体で生じる磁化の大きさ自体はとて小さいことが分かった。このことから、円偏光誘起シフト電流が生じて、そのスピン依存性はとて小さくなることが示唆された。そこで我々は、円偏光照射が持つ、系のトポロジカルな性質を変化させる効果に着目した計算を行った。具体的には、電子間相互作用によって絶縁体となったディラック電子系を考え、円偏光を照射したときの光誘起相転移を調べた[Y. Tanaka and M. Mochizuki, Phys. Rev. Lett. 129, 047402 (2022)]。ここでも、時間依存シュレディンガー方程式とフロケ理論を用いた解析を行った。電子間相互作用に対しては、平均場近似を適用した。その結果、光照射によって絶縁体がまず融解してディラック電子系となり、そこからフロケチャーン絶縁体に転移するという新しいタイプの光誘起現象が現れることを示した。

光によるトポロジカルな相変化は、グラフェンに代表されるディラック電子系やワイル半金属ですでに多くの研究があるが、それらは弱相関の系であり、電子間相互作用は多くの場合無視される。これに対し本研究では、電子間相互作用が強い場合に、電子系の秩序変数に起因するダイナミクスと、円偏光によるトポロジカル転移の競合が生じ、新規な光誘起現象が起こることを初めて見出した。

(3) (2)に関連する研究として、有機導体 $-(\text{BEDT-TTF})_2\text{I}_3$ における様々な光誘起相転移をフロケ理論で解析した。また、時間依存シュレディンガー方程式を用いた数値シミュレーションによる研究も行った。これらについては、一連の論文[Y. Tanaka and M. Mochizuki, Phys. Rev. B 104, 085123 (2021), K Kitayama, M Mochizuki, Y Tanaka, M Ogata, Phys. Rev. B 104, 075127 (2021), K Kitayama, Y Tanaka, M Ogata, M Mochizuki, J. Phys. Soc. Jpn. 90, 104705 (2021), K Kitayama, M Ogata, M Mochizuki, Y Tanaka, J. Phys. Soc. Jpn. 91, 104704 (2022)]と解説記事の形で出版した[有機伝導 $-(\text{BEDT-TTF})_2\text{I}_3$ の光誘起トポロジカル相転移の理論研究, 望月 維人, 北山 圭亮, 田中 康寛, 小形 正男, 固体物理 Vol. 57, No. 7, 1-13 (2022)]。

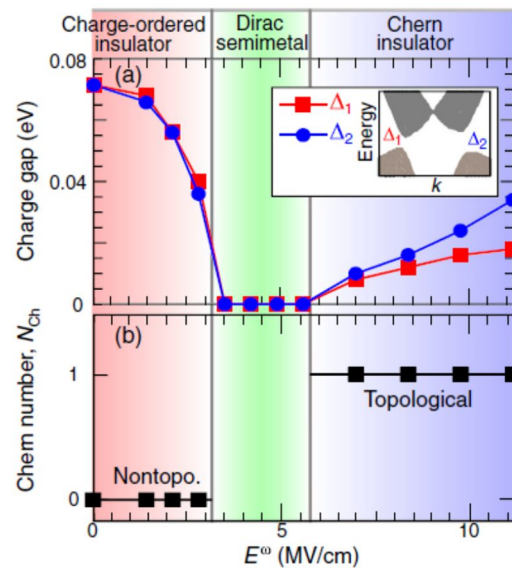


図 2: 電荷ギャップ(上)とトポロジカル数(下)の光電場依存性

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計8件（うち査読付論文 8件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Kitayama Keisuke, Tanaka Yasuhiro, Ogata Masao, Mochizuki Masahito	4. 巻 90
2. 論文標題 Floquet Theory of Photoinduced Topological Phase Transitions in the Organic Salt -(BEDT-TTF)2I3 Irradiated with Elliptically Polarized Light	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 1,12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.90.104705	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 Kitayama Keisuke, Mochizuki Masahito, Tanaka Yasuhiro, Ogata Masao	4. 巻 104
2. 論文標題 Predicted photoinduced pair annihilation of emergent magnetic charges in the organic salt -(BEDT-TTF)2I3 irradiated by linearly polarized light	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 1,9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.104.075127	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Tanaka Yasuhiro, Mochizuki Masahito	4. 巻 104
2. 論文標題 Real-time dynamics of the photoinduced topological state in the organic conductor -(BEDT-TTF)2I3 under continuous-wave and pulse excitations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 1,7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.104.085123	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Miyajima Yusuke, Murata Yusuke, Tanaka Yasuhiro, Mochizuki Masahito	4. 巻 104
2. 論文標題 Machine learning detection of Berezinskii-Kosterlitz-Thouless transitions in q-state clock models	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 1,10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.104.075114	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tanaka Yasuhiro、Inoue Takashi、Mochizuki Masahito	4. 巻 22
2. 論文標題 Theory of the inverse Faraday effect due to the Rashba spin-orbit interactions: roles of band dispersions and Fermi surfaces	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 New Journal of Physics	6. 最初と最後の頁 083054, 1-11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1367-2630/aba5be	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 Tanaka Yasuhiro、Mochizuki Masahito	4. 巻 129
2. 論文標題 Dynamical Phase Transitions in the Photodrive Charge-Ordered Dirac-Electron System	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 1,6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.129.047402	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kitayama Keisuke、Ogata Masao、Mochizuki Masahito、Tanaka Yasuhiro	4. 巻 91
2. 論文標題 Predicted Novel Type of Photoinduced Topological Phase Transition Accompanied by Collision and Collapse of Dirac-cone Pair in Organic Salt $(\text{BEDT-TTF})_2\text{I}_3$	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 1,8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.91.104704	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 望月維人、北山圭亮、田中康寛、小形正男	4. 巻 57
2. 論文標題 有機伝導 $(\text{BEDT-TTF})_2\text{I}_3$ の光誘起トポロジカル相転移の理論研究	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 固体物理	6. 最初と最後の頁 1,13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計7件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 2件）

1. 発表者名 田中康寛、望月維人
2. 発表標題 有機導体 -(BEDT-TTF)2I3における円偏光誘起トポロジカル状態の実時間ダイナミクス
3. 学会等名 物性研短期研究会「分子性固体研究の拡がり：新物質と新現象」
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yasuhiro Tanaka, Takashi Inoue, Masahito Mochizuki
2. 発表標題 Theory of optical spin polarization induction in Rashba spin-orbit electron systems
3. 学会等名 International Conference on Frustration, Topology, and Spin Textures (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田中康寛、望月維人
2. 発表標題 有機導体 -(BEDT-TTF)2I3における円偏光誘起トポロジカル状態
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田中康寛、望月維人
2. 発表標題 有機導体 -(BEDT-TTF)2I3における円偏光誘起トポロジカル状態：時間依存シュレディンガー方程式によるアプローチ
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 田中康寛、望月維人
2. 発表標題 有機導体 -(BEDT-TTF)2I3における円偏光誘起トポロジカル状態とホール伝導度
3. 学会等名 日本物理学会2021年年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田中康寛、望月維人
2. 発表標題 有機導体 -(BEDT-TTF)2I3における円偏光照射による電荷秩序融解とトポロジカル転移
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yasuhiro Tanaka
2. 発表標題 Dynamical phase transitions in the photodriven charge-ordered Dirac-electron system
3. 学会等名 Novel Quantum States in Condensed Matter 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022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
---------	---------------------------	-----------------------	----

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
---------	---------