

令和 6 年 5 月 16 日現在

機関番号：10101

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2021～2023

課題番号：21K03413

研究課題名（和文）局所的空間反転対称性の破れによる電流誘起スピン偏極の生成

研究課題名（英文）Generation of current-induced spin polarization due to the locally-broken spatial inversion symmetry

研究代表者

明楽 浩史（AKERA, 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） 3,100,000円

研究成果の概要（和文）：空間反転対称性が破れている系に電流を流すことでスピン角運動量の偏りが生じ（電流誘起スピン偏極）、空間反転対称性が特定の原子の周りで局所的に破れている系ではその原子に電流誘起スピン偏極が生じる。本研究では、原子を螺旋に沿って並べた螺旋状原子鎖を基本系として取り上げ、各原子に生じる電流誘起スピン偏極が螺旋の局所的な曲率と捻率に強く依存することを示した。さらにこの螺旋状原子鎖において、スピン角運動量の向きが電子の運動の向きによって決まるスピン・速度ロッキングが生じることを見出した。このロッキングによりスピン偏極度が高い電流が十分低温で実現される。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究の成果は、基本系としての螺旋状原子鎖を対象に、系の空間反転対称性の破れの度合いを表す曲率・捻率と電流誘起スピン偏極との間の関係を解明したという物理学上の意義をもつとともに、電流誘起スピン偏極と電流のスピン偏極度という特性を向上させるための指針として工学的意義をもつ。電流誘起スピン偏極から取り出されるスピントロニクス流やスピン偏極電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社会的にも波及効果が期待できる。

研究成果の概要（英文）：A system with broken spatial inversion symmetry produces the polarization of the spin angular momentum in the presence of current (current-induced spin polarization, CISP), while a system with the spatial inversion symmetry broken locally around an atom exhibits the CISP at the atom. This work has focused on a fundamental helical system, that is an atomic chain along a helix, and shown that the local CISP at each atom strongly depends on the curvature and the torsion which determine the extent of broken spatial inversion symmetry at each atom. Moreover it is found that the helical atomic chain exhibits the spin-velocity locking in which the spin orientation is determined by the direction of electron motion. This locking realizes the current with a high spin polarization at low enough temperatures.

研究分野：物性理論

キーワード：スピントロニクス 原子鎖

1. 研究開始当初の背景

(1) 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）の物理学は、スピンと電荷が関わる数多くの物理現象と概念を創出するとともに、情報処理の省エネルギー化を目指すスピントロニクスを格段に進展させてきた。特に結晶構造の空間反転対称性（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）が破れている系では、スピン軌道相互作用によりエネルギーバンドのスピン分裂（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、電流を流して時間反転対称性を破ることでスピン偏極（スピン角運動量の偏り）が発生する。この電流誘起スピン偏極は強磁性体の磁化反転の方法として有望でありスピントロニクス分野で注目を集めている。

(2) スピントロニクスの新しい展開として、結晶全体で空間反転対称性が破れていなくても局所的に各原子のまわりで空間反転対称性が破れてさえいれば、各原子のスピン偏極が電流によって誘起されることが理論的に示され[1, 2]、この局所的スピン偏極により反強磁性体の副格子磁化を反転できることも実証されている[3]。Zhangら[1]が示したように、局所的空間反転対称性の組み合わせにより結晶全体での空間反転対称性を判定できる（図1a, b）ことから、局所的空間反転対称性がより基本的な概念である。また、局所的な電流誘起スピン偏極を利用して反強磁性体の副格子磁化を制御する反強磁性スピントロニクス[4]は漏れ磁場が小さい点、応答速度が速い点で強磁性スピントロニクスより有利であり、応用面でも局所的空間反転対称性のインパクトは大きい。

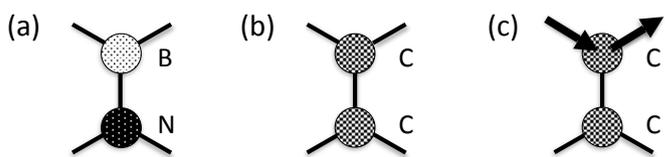


図1 空間反転対称性の破れ。(a)原子層h-BNは結晶全体の空間反転対称性が破れている。(b)グラフェンは各炭素原子で局所的には空間反転対称性が破れている。(c)原子間飛び移りによる電子経路の曲がり。

(3) このように局所的空間反転対称性は、物理学の基本概念として、また反強磁性スピントロニクス実用化への期待から、多方面の研究者の注目を集め物性物理学の中の一つの研究分野に発展しつつある。ところが、局所的電流誘起スピン偏極の大きさが何によって決まっているのかという基本的な問いへの答えは未だ得られていない。Zhangらの理論[1]は局所的空間反転対称性の破れの有無により局所的スピン偏極の有無が決まることを示したにとどまり、その後のいくつかの理論計算は特定の結晶において局所的電流誘起スピン偏極の大きさを得たが、その大きさを決めている要素を特定するまでには至っていない。この決定要素を見出すことは「局所的空間反転対称性」研究分野の将来の中心課題の一つであるとともに、局所的電流誘起スピン偏極の最適化を目指す反強磁性スピントロニクスの重要課題である。

2. 研究の目的

(1) 本研究課題では、この「決定要素」として電子の原子間飛び移りに着目した。空間反転対称性が破れている原子においては、図1cのように原子間飛び移りによる電子経路が折れ曲がり、この経路の曲がり原子内の軌道角運動量を誘起すると考えた。軌道角運動量は原子内スピン軌道相互作用によりスピン角運動量に変換されるので、電流が原子内に誘起するスピン偏極の大きさを決める重要な要素は、経路の曲率になる。すなわち局所的空間反転対称性の破れの「度合い」が経路の曲率によって表されることになる。

(2) 本研究では、この曲率に基づく局所的電流誘起スピン偏極を螺旋状原子鎖[5]（図2）において解明する。螺旋に原子を並べた螺旋状原子鎖はブロッホの定理を適用できる高い対称性を持ち、その特別な場合としてジグザグ原子鎖を包含している。螺旋状原子鎖上のどの原子においても原子間飛び移りの電子経路が同一の曲率をもつことから局所的電流誘起スピン偏極の基本モデルとして最適である。本研究では、螺旋状原子鎖における局所的電流誘起角運動量偏極（軌道角運動量とスピンの偏り）が曲率および振率（ねじれの度合い）にどのように依存するか解明することによりスピン偏極の設計指針を提案する。

局所的電流誘起スピン偏極は電極への拡散によりスピン流（スピン角運動量の流れ）として取り出すことができ、磁化反転に利用できる。本研究では、側鎖（図2）を接続することによって得られるスピン

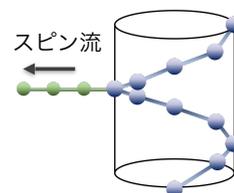


図2 螺旋状原子鎖

流の構造依存性を解明する。特に、側鎖の接続位置や角度によってスピン流を大きく制御する可能性を探求する。

### 3. 研究の方法

(1)本研究では、第一原理計算手法、強束縛モデル、有効ハミルトニアンを有機的に用いて研究を推進する。主として強束縛モデルに基づく数値計算により局所的電流誘起スピン偏極やスピン流を求めるが、強束縛モデルで用いるパラメタの値は、第一原理計算で求めたバンド構造に一致するように、決定する。また、強束縛モデルによる計算結果を記述できる有効ハミルトニアンを構築し、局所的電流誘起スピン偏極やスピン流の曲率・振率依存性の起源を明らかにする。

#### (2)螺旋状原子鎖のモデル

螺旋曲線の構造パラメタとして曲率と振率を選んだ。螺旋曲線上に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の間の結合）として取り入れた。

#### (3)螺旋状原子鎖の電流誘起角運動量偏極・スピン偏極電流の計算方法

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・スピン角運動量の偏極および電流のスピン偏極度を計算した。

### 4. 研究成果

(1)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と軌道角運動量の偏りの（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、曲率と振率が十分に小さい場合、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。

(2)電子の運動の向きによって電子スピンの向きが決まるというスピン・速度ロッキング[6]から着想を得て、先行研究[6]で用いられた連続体モデルだけでなく原子鎖においてもスピン・速度ロッキングが生じることを示した。さらに、さまざまな形状の螺旋に対する計算を行うことで、ロッキングには螺旋の曲率と振率の両方が必須であることを突き止めた。このロッキングを利用することによりスピントラップ効率が十分低温でほぼ100%に達するため、磁気抵抗メモリ(MRAM)の磁化スイッチングの効率の向上につながることを期待される。

[1] X. Zhang et al., Nat. Phys. 10, 387 (2014).

[2] J. Zelezny et al., Phys. Rev. Lett. 113, 157201 (2014).

[3] P. Wadley et al., Science 351, 587 (2016).

[4] T. Jungwirth et al., Nature Nanotech. 11, 231 (2016).

[5] X. Fan et al., Phys. Rev. Lett. 84, 4621 (2000).

[6] K. Michaeli and R. Naaman, J. Phys. Chem. C 123, 17043 (2019).

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計9件（うち査読付論文 9件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 9件）

1. 著者名 Ishikawa Toshiya, Akera Hiroshi	4. 巻 61
2. 論文標題 AC response of spin-pseudospin current in a double quantum well	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 063002 ~ 063002
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.35848/1347-4065/ac6644	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 105
2. 論文標題 Spin splitting of the conduction band by exchange interaction in the valence band through a k · p interband process in ferromagnetic semiconductors	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 235203-1 ~ 13
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/physrevb.105.235203	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 Suzuki Yuta, Kitagawa Yuma, Tezuka Shin-ichiro, Akera Hiroshi	4. 巻 107
2. 論文標題 Spin-current generation from local spin polarization induced by current through local inversion asymmetry: Double quantum well structure	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 115306-1 ~ 9
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/physrevb.107.115306	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 Otsuto Ryosuke, Yatabe Yuya, Akera Hiroshi	4. 巻 104
2. 論文標題 Orbital and spin polarizations induced by current through a helical atomic chain	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 035431-1-8
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.104.035431	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 Kashiwa Shinnosuke, Akera Hiroshi	4. 巻 158
2. 論文標題 Spin-velocity locking in a helical chain of atomic p+- orbitals	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 214705-1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0152103	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 Yatabe Yuya, Akera Hiroshi	4. 巻 159
2. 論文標題 Coupling of orbital and spin polarizations to interatomic hopping in a helical atomic chain	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 074701-1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0156461	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 Kitagawa Yuma, Suzuki Yuta, Tezuka Shin-ichiro, Akera Hiroshi	4. 巻 108
2. 論文標題 Spin current between buckled atomic layers with a twist generated by locally broken inversion symmetry	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 115431-1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/physrevb.108.115431	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 Kato Takahiro, Akera Hiroshi	4. 巻 260
2. 論文標題 Antiparallel Spin Polarization Induced by Current in a Bilayer	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 physica status solidi (b)	6. 最初と最後の頁 2300237-1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pssb.202300237	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 Suzuki Yuta, Kitagawa Yuma, Tezuka Shin ichiro, Akera Hiroshi	4. 巻 18
2. 論文標題 Antiparallel Spin Polarization and Spin Current Induced by Thermal Current and Locally Broken Inversion Symmetry in a Double Quantum Well Structure	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 physica status solidi (RRL)	6. 最初と最後の頁 2300433-1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pssr.202300433	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18件(うち招待講演 0件/うち国際学会 8件)

1. 発表者名 Kenji Hayashida, Hiroshi Akera
2. 発表標題 Exchange-Induced Spin-Orbit Interaction in Conduction Band by Valence Band Exchange interaction through k·p mechanism
3. 学会等名 29th International Conference on Low Temperature Physics (LT29) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yuta Suzuki, Yuma Kitagawa, Shin-ichiro Tezuka, Hiroshi Akera
2. 発表標題 Spin Current Generated by Antiparallel Current-Induced Spin Polarization in Double Quantum Wells
3. 学会等名 29th International Conference on Low Temperature Physics (LT29) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yuma Kitagawa, Yuta Suzuki, Shin-ichiro Tezuka, Hiroshi Akera
2. 発表標題 Interlayer Spin Current in Twisted Bilayer Silicene Generated by Local Current-Induced Spin Polarization
3. 学会等名 29th International Conference on Low Temperature Physics (LT29) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Shinnosuke Kashiwa, Hiroshi Akera
2. 発表標題 Spin-Velocity Locking in a Helical Atomic Chain
3. 学会等名 29th International Conference on Low Temperature Physics (LT29) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kenji Hayashida, Hiroshi Akera
2. 発表標題 Theory of Exchange Spin-Orbit Coupling
3. 学会等名 Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems (WINDS) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 林田健二, 明楽浩史
2. 発表標題 n型強磁性半導体のキュリー温度に関する平均場理論
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 明楽浩史
2. 発表標題 らせん状原子鎖における電流誘起スピン偏極・軌道偏極とスピン流・軌道流
3. 学会等名 ISSPワークショップ「カイラル物質科学の新展開」
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 鈴木雄太, 北川雄真, 手塚信一郎, 明楽浩史
2. 発表標題 二重量子井戸構造における局所的熱流誘起スピン偏極とスピン流
3. 学会等名 日本物理学会2023年春季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Kenji Hayashida, Hiroshi Akera
2. 発表標題 k·p Approach to p-d Exchange Induced Spin Splitting of Conduction Band
3. 学会等名 EP2DS-24/MSS-20 Joint Conference (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 北川雄真, 鈴木雄太, 手塚信一郎, 明楽浩史
2. 発表標題 同種のIV族原子層から成るツイスト積層構造における層間スピン流
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 鈴木雄太, 北川雄真, 手塚信一郎, 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によるスピン流生成
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 氏家勇, 明楽浩史
2. 発表標題 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 2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 鈴木雄太, 北川雄真, 手塚信一郎, 明楽浩史
2. 発表標題 二重量子井戸構造における局所的スピン偏極とスピン流
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 柏慎之介, 明楽浩史
2. 発表標題 らせん状原子鎖におけるスピンの運動方向依存性
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 林田健二, 明楽浩史
2. 発表標題 n 型強磁性半導体における伝導電子の価電子帯交換相互作用による内因性異常ホール効果
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 北川雄真, 鈴木雄太, 手塚信一郎, 明楽浩史
2. 発表標題 空間反転対称性の破れたハニカム格子を有する原子層積層構造における層間スピン流
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Hiroshi Akera
2. 発表標題 Spin-velocity locking originating from the helical symmetry
3. 学会等名 25th International Conference on the Electronic Properties of Two-Dimensional Systems (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Hiroshi Akera
2. 発表標題 Spin-velocity locking originating from the helical symmetry
3. 学会等名 Gordon Research Conference: Electron Spin Interactions with Chiral Molecules and Materials (国際学会)
4. 発表年 2023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	江上 喜幸	北海道大学・工学研究院・助教	
	(EGAMI Yoshiyuki)		
	(20397631)	(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
---------	---------