



Title	単原子層間スピン流の対称性操作による制御の理論的研究 [論文内容及び審査の要旨]
Author(s)	北川, 雄真
Citation	北海道大学. 博士(工学) 甲第15832号
Issue Date	2024-03-25
Doc URL	http://hdl.handle.net/2115/92138
Rights(URL)	https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/
Type	theses (doctoral - abstract and summary of review)
Additional Information	There are other files related to this item in HUSCAP. Check the above URL.
File Information	Yuma_Kitagawa_abstract.pdf (論文内容の要旨)



[Instructions for use](#)

学位論文内容の要旨

博士の専攻分野の名称 博士（工学） 氏名 北川 雄真

学位論文題名

単原子層間スピン流の対称性操作による制御の理論的研究

(Theoretical study on the control of inter-atomic-monolayer spin current by symmetry manipulation)

原子層は原子 1 層または数層からなる 2 次元の物質である。そのうち最も代表的なものは炭素原子のハニカム構造からなるグラフェンであり、その試料作製は 2004 年に初めて Novoselov と Geim により報告された。電気伝導をはじめとするグラフェンの特徴的な物性は非常に多くの興味を集め、その発見以降今日でも非常に盛んに研究されている。グラフェンを契機としてその他の様々な原子層の探索と物性の開拓にも注目が集まっており、たとえば同じ IV 族原子層ではシリコンあるいはゲルマニウムの原子 1 層からなるシリセンやゲルマネンについて、理論と実験の両面から多数の報告がなされている。

このような原子層そのものの研究や開発に加えて、原子層を積層した構造にも注目が集まっている。原子層が複数あれば、同種と異種とに関わらず、それらを積層することができる。面内では共有結合で強く結合した 2 次元結晶である一方で、層間ではファンデルワールス力による弱い結合が生じる。そのため、格子整合の制約に縛られずに、原理的には非常に多様な組み合わせの層状物質を人工的に作製できる。一般に異種の原子層を積層した構造はファンデルワールスヘテロ構造と呼ばれており、任意の特性を実現するデバイスを作製できる可能性がある。

特に、その積層時に層間に相対的な角度差をつける、すなわちツイストすることで系の電子状態を操作する方法が近年注目を集めている。最もよく知られているのは、魔法角と呼ばれる角度でツイストした 2 層グラフェンで超伝導が観測されたことである。また、電子のスピンを積極的に活用するスピントロニクス分野でも、グラフェンと遷移金属ダイカルコゲナイドの原子層からなるヘテロ構造において、強いスピン軌道相互作用をもつ遷移金属ダイカルコゲナイドによってグラフェンに誘導されるスピン軌道相互作用がツイスト角度に強く依存することが理論的に示されている。

ツイストによる制御は、このような電子状態だけでなく、輸送特性にも有効であると期待される。実際、2 層グラフェンの層間を流れる電流がツイスト角度に強く依存することが実験で示されている。本研究では、層間を流れるスピン流についてツイスト角度依存性を理論的に解明する。

スピン流を非磁性体において効率的に生成する方法の一つとして、電流によってスピンが偏極する現象、電流誘起スピン偏極 (CISP) を用いる方法が知られている。CISP は、系全体として空間反転対称性が破れてスピン分裂が生じたときのみ現れる。一方空間反転対称な系は、空間反転操作で入れ替わる副格子をもつ場合、それぞれの副格子の格子点において局所的に空間反転対称性が破れており、局所的 CISP を示す。この系の CISP は 2 つの副格子で反対向きであり互いに相殺するため系全体では正味の CISP が消失する。

スピン流は、CISP を示す系に電極を接合することにより CISP の拡散として取り出すことができる。このような拡散スピン流の生成は、局所的な反平行 CISP から可能な場合がある。たとえば副格子をもつ空間反転対称な原子層の上に電極を配置した場合、反対向きの CISP を生じる 2 つの副格子から同じだけ電極へ電子が拡散するならば正味のスピン流はゼロであるが、副格子が互いに面直方向にずれている原子層では一方の副格子が他方よりも電極に近く、電極への電子の流れはその副格子からの方が大きいため正味のスピン流が残る。

本研究では、このように局所的にのみ空間反転対称性が破れている原子層から抽出されるスピン流を、局所的 CISP を生じる原子層と電極との間にもう 1 層の原子層を挿入した積層構造に対して

計算した。この構造では原子層・原子層界面が原子層・金属界面より平坦なため、スピン流を原子層・原子層界面で計算することにより理論的取扱いが容易になるだけでなく、ツイスト角度によって層間スピン流を制御できるという利点がある。特にツイストは鏡映対称性を破り2層構造をカイラルにするので、この対称性の変化がスピン流にどのような影響を及ぼすか興味深い。本研究では、原子層積層構造の高い構造制御性を用いて対称性を操作することにより層間スピン流をどこまで制御できるか、を明らかにした。

まず第一の研究として、副格子が互いに面直方向にずれたIV族原子層を2層ツイストして積層した構造の層間スピン流の表式を導出し、原子層がシリセンの場合の層間スピン流をツイスト角度の関数として計算した。CISPを生じる原子層が空間反転対称性をもつか否か、すなわちスピン分裂の効果の有無によって、層間スピン流の表式が異なり、スピン分裂の効果がない場合、すなわち空間反転対称とみなせる場合にのみスピン演算子のサブバンド間行列要素が層間スピン流の表式に現れることを明らかにした。わずかな面直電場により空間反転対称性を破り、このサブバンド間行列要素の寄与がなくなるとスピン流は大きく変化することを計算により示した。また、ツイストによって鏡映対称性を破ると、層間スピン流が運ぶスピンの向きがCISPに平行な向きから面内で回転した向きにツイストすることを明らかにした。ツイストした場合でも3回回転対称性があるため、スピンが面直方向のスピン流は生じないことも示した。

第二の研究では、3回回転対称性を破ることでスピンが面直方向のスピン流が現れるか否かを解明するために、第一の研究で扱った2層のうち一方の層をチューブに置き換えて、原子層(シート)とチューブの間のスピン流をシリセンシートとシリセンチューブの組合せで計算した。この計算で必要になるシート・チューブ接合のトンネル行列要素の計算方法としては、シート・シート接合のトンネル行列要素に帰着できる近似的方法を本研究で開発した。この方法による計算から、シート・チューブ接合のスピン流は、接合幅を固定してチューブ周長を変えると準周期的に振動することが分かった。スピンが面直方向の成分も準周期的振動として現れ、3回回転対称性の破れが新たなスピンの成分をもたらすことが明らかになった。

以下に本論文の構成を述べる。

第1章では原子層とツイストに関する研究背景を概説し、層間スピン流の概念を述べる。

第2章では、ツイストしたIV族原子層の積層構造において、一方の層に生じる局所的な反平行CISPがもう一方の層へ取り出されるスピン流について述べる。空間反転対称性のある場合と無い場合で層間スピン流の式を導出し、層間スピン流のツイスト角度依存性を強束縛モデルと緩和時間近似のボルツマン方程式を用いて計算する。最も興味深い結果として、ツイストによるカイラリティがCISPに平行なスピンをもつ層間スピン流だけでなくCISPに垂直な面内スピン方向の成分も生成することを明らかにした。

第3章では、シート・チューブ間の電子の流れをシート・シート間のトンネル行列要素を用いて近似的に計算する方法を提案し、局所的CISPを有する単層シリセンからシリセンチューブへのスピン流の計算に適用した。この計算から、チューブ内のフェルミ点がシート内のフェルミ円を横切ることによりスピン流が準周期的に振動することを明らかにした。また、チューブ・シート接合では3回回転対称性が破れていることで、この対称性を持つ2層シリセンには存在しないスピンが面直方向のスピン流が振動の形で現れることも示した。

第4章では本研究をまとめ、課題と展望を示す。