



Title	バンド間遷移機構に基づく交換スピン軌道結合と電子状態・輸送特性・熱力学的特性に関する理論研究 [論文内容及び審査の要旨]
Author(s)	林田, 健二
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(工学)
Dissertation Number	甲第15345号
Issue Date	2023-03-23
Doc URL	<a href="https://hdl.handle.net/2115/89395">https://hdl.handle.net/2115/89395</a>
Rights(URL)	<a href="https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/">https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/</a>
Type	doctoral thesis
File Information	Kenji_Hayashida_review.pdf, 審査の要旨



## 学位論文審査の要旨

博士の専攻分野の名称 博士 (工学) 氏名 林田 健二

審査担当者 主査教授 明楽 浩史  
副査教授 足立 智  
副査教授 植村 哲也 (大学院情報科学院)  
副査准教授 鈴木 秀勝

### 学位論文題名

バンド間遷移機構に基づく交換スピン軌道結合と電子状態・輸送特性・熱力学的特性に関する理論研究

(Theoretical Study on Exchange Spin-Orbit Coupling based on an Interband Transition Mechanism and its Effect on Electronic, Transport, and Thermodynamic Properties)

スピントロニクスにおいて重要な役割を果たしている相対論的スピン軌道結合は、III-V 族半導体の伝導帯においてはバンド間遷移により生じる。価電子帯でのスピンの依存する LS 結合が、波数に依存するバンド間遷移を通して、伝導帯においてスピンと波数に依存するスピン軌道結合をもたらす。このバンド間遷移による相対論的スピン軌道結合は  $k \cdot p$  法を用いてバンドギャップ等のパラメータで解析的に表されているので、結合の制御さらには材料・デバイスの改良の理論的指針を与えることができる。この解析式により相対論的スピン軌道結合の結合強度を大きくするために LS 結合が強い重元素が必要であることが分かる。

一方最近、軽元素からなる反強磁性体において大きいスピン軌道結合が理論的に見出された。このスピン軌道結合は、LS 結合ではなく交換相互作用に由来するため結合を強くするのに重元素は必要ないことが分かっている。ところが、これまでの研究では第一原理計算などにより数値的にスピン軌道結合が計算されていて結合強度の解析式がないため、結合制御の理論的指針が得られていない。

そこで本論文では、 $k \cdot p$  法を一般化することにより、交換相互作用とバンド間遷移によるスピン軌道結合 (交換スピン軌道結合) を導出し、結合制御の理論的指針を得ることを目的としている。まず本論文ではバンド間遷移機構によるスピン軌道結合を、スピン依存相互作用の起源を交換相互作用や LS 結合に限定せず、一般的に理論提案している。次にその具体例として、n 型強磁性半導体において価電子帯での  $p-d$  交換相互作用がバンド間遷移により伝導帯に誘起する交換スピン軌道結合を導出し、この  $p-d$  交換スピン軌道結合が電子状態、輸送特性および熱力学的特性に大きい影響を与えることを示している。

本研究で対象とする n 型強磁性半導体は、III-V 族半導体に鉄を添加した物質で、III 族元素を置換する鉄イオンは局在スピンを形成する。この局在スピンと半導体の伝導帯の電子スピンの間には  $s-d$  交換相互作用、価電子帯の電子スピンの間には  $p-d$  交換相互作用が働く。価電子帯での  $p-d$  交換相互作用は、波数に依存するバンド間遷移を通して、波数と局在スピンの依存する有効磁場として伝導帯の電子スピンの作用する。これが  $p-d$  交換スピン軌道結合である。

本研究において電子状態は、III-V 族半導体の  $k \cdot p$  ハミルトニアンと  $s-d$  および  $p-d$  交換相互作用

用により記述している。まず  $p$ - $d$  交換スピン軌道結合の解析式を得るために、伝導帯の電子に対する有効ハミルトニアンを  $k \cdot p$  摂動論によって構築している。この有効ハミルトニアンにおいて  $p$ - $d$  交換スピン軌道結合は局在スピンとキャリアスピンと波数が結合する項として解析的に表され、その結合強度はエネルギーギャップに反比例することを導いている。次に  $p$ - $d$  交換スピン軌道結合の大きさを定量的に見積もるために、 $k \cdot p$  ハミルトニアンの数値対角化を実行している。数値的に得られた  $p$ - $d$  交換スピン軌道結合による伝導帯のスピン分裂は相対論的スピン軌道結合に比べて 10 倍以上大きいことを示している。また III-V 族半導体からなる量子井戸におけるスピン分裂の数値計算も行い、井戸に垂直な波数の量子化により、面内波数がゼロでもスピン分裂が現れることを見出している。

このように電子状態に大きい影響を与える  $p$ - $d$  交換スピン軌道結合が輸送現象にどのように反映するかを解明するため、内因性異常ホール伝導率を計算し、 $p$ - $d$  交換相互作用を起源とするホール伝導率が、これまで考慮されてきた  $s$ - $d$  交換相互作用と相対論的スピン軌道結合を起源とするホール伝導率に比べて桁違いに大きいことを明らかにしている。さらに  $p$ - $d$  交換ホール伝導率が鉄濃度とともに増加する一因がエネルギーギャップに反比例する結合強度にあることを明らかにし、 $p$ - $d$  交換スピン軌道結合の解析式の有用性も示している。

本論文では輸送特性だけでなく熱力学的特性である強磁性転移温度にも  $p$ - $d$  交換相互作用が大きい影響を与えることを示している。n 型強磁性半導体の転移温度は、先行研究において  $s$ - $d$  交換相互作用のみを考慮して計算され、実験値に比べて桁違いに小さい値しか得られていなかった。本研究において  $s$ - $d$  交換相互作用とともに  $p$ - $d$  交換相互作用を取り入れて転移温度を計算したところ、実験値とオーダーが一致する計算値を得ている。また、InFeAs と InFeSb とで転移温度に顕著な差があるのはエネルギーギャップの違いが原因であることを突き止め、ここでも  $p$ - $d$  交換スピン軌道結合の解析式の有用性を示している。さらに転移温度が電子密度にほとんど依存しないことも見出している。これまで p 型と同様に n 型の強磁性半導体も強磁性発生機構はキャリア媒介型と考えられてきたが、本研究で得られた電子密度依存性はバンドギャップが小さい半導体の強磁性がキャリア媒介型でないことを示し、 $p$ - $d$  交換相互作用とバンド間遷移によって説明できることを明らかにしている。

これを要するに本論文は、n 型強磁性半導体においてバンド間遷移機構の交換スピン軌道結合が電子状態、輸送特性および熱力学的特性に大きい影響を与えることを理論的に示しており、スピントロニクスひいては応用物理学に対して貢献するところ大なるものがある。よって著者は、北海道大学博士(工学)の学位を授与される資格があるものと認める。