

スピン軌道結合とスピン軌道相互作用と Bi の電子構造

播磨尚朝, 十時泰明

神戸大理

用語の混乱が概念の不透明さを引き起こしているようだ。スピン軌道結合もスピン軌道相互作用も、元々は原子内の相対論効果（中心力場の Dirac 方程式からの帰結）に関するものを指していたはずだが、最近では結晶中でスピン自由度による分裂の原因となる相互作用も同じ様に呼ばれている。前者が無ければ後者は出てこないの、両者は全くの独立ではないが、素性は異なるものなので違う用語を用いて呼ばなければ意味不明となる。そもそも結晶内を拡がって運動している電子に座標中心が必要な軌道角運動量が定義できる訳もないだろう。相対論効果であるからと言って、結晶内の電子は光に近い速さで運動していると言う戯言は以ての外である。

そこで、原子内でスピンと軌道が不可分になることを「スピン軌道結合」と呼んで、それに起因してスピン自由度が顕に現われる現象の原因を「スピン軌道相互作用」と呼ぶべきではないかと思ひ至る。すると、自身でも混同した用語を使っていた[1]のに気がつく（文献[1]の表題は 2 番目の「相互作用」を「結合」とすべき）。こうなると、世に出回っている解説などは全く信用が置けない。

そもそも、原子内スピン軌道結合についての誤解が蔓延している。教科書に「スピン軌道結合の大きさは、 Z^2 (Z は原子番号) に比例して大きくなるので、原子番号の大きな原子で大きくなる」と書いてあるのが定番であるが、これは特定の一電子軌道 ($3d$ なら $3d$) についての話である。 ${}_{27}\text{Co-}3d$ に対するスピン軌道結合は、 ${}_{40}\text{Zr-}4d$ よりも大きい。 ${}_{27}\text{Co-}3d$ の下の ${}_{45}\text{Rh-}4d$ では大きくなるにはなるが、ほぼ Z^2 で大きくなるのは ${}_{45}\text{Rh-}3d$ であって、我々の関心がある ${}_{45}\text{Rh-}4d$ と ${}_{27}\text{Co-}3d$ や ${}_{45}\text{Rh-}3d$ に何か特別な関係がある訳でもない。原子内のスピン軌道結合は、波動関数の最初のピークの内側でその大きさが決まっているので、外場によって変えようがない[2]。さらに、原点近傍の波動関数の振る舞いから、軌道角運動量の小さな p 電子の方が大きな d/f 電子よりもスピン軌道結合は大きい。ただし、 ${}_{83}\text{Bi-}6p$ のスピン軌道結合はとても大きい。角運動量が小さな電子ほど原点により近づいているのでより大きな相対論の効果が現れる、と言ってもあながち誤りではない。具体的な数値は文献[1]に詳しい。

原点近傍の強いポテンシャルの影響でスピン軌道結合した電子は空間的には拡がっていて、時間反転対称性があれば少なくとも二重に縮退している。原子の原点が空間反転対称性を持っていれば、この二重に縮退した電子が隣接原子に伝わって行くだけである。空間反転対称性がなければパリティの異なる電子の線形結合が固有状態となって、異なるパリティの軌道間でスピンに依存した伝播が可能になりスピン自由度に関する縮退が解ける。この時に働いているように見えるのがスピン軌道相互作用である。成程、平面波を用いても Rashba 型の相互作用でスピン分裂は出て来るが定量性が追いつかない。それは、平面波近似で強磁性を論じるに似ている。

講演では、Bi の電子状態とネスティングについても簡単に触れる[4]。

参考文献

[1] 「スピン軌道相互作用と結晶中の電子状態（その 1）孤立原子におけるスピン軌道相互作用の定量的評価」柳瀬陽一・播磨尚朝、固体物理 Vol.46 No.5 (2011) 229-239.

[2] T. Kawai, H. Muranaka, T. Endo, N.D. Dung, Y. Doi, S. Ikeda, T.D. Matsuda, Y. Haga, H. Harima, R. Settai and Y. Onuki: J. Phys. Soc. Jpn.77 (2008) 064717.

[3] 「スピン軌道相互作用と結晶中の電子状態（その 2）空間反転対称性が破れた系の反対称スピン軌道相互作用」柳瀬陽一・播磨尚朝、固体物理 Vol.46 No.6 (2011) 283-292.

[4] 十時泰明: 「三方晶 Bi の構造安定性と電子状態」神戸大学卒業論文(2017).

物質のトポロジをバルク測定で決めるには

伏屋雄紀

電通大基盤理工

スピン軌道結合 (SOC) は現代固体物理学における中心的課題の一つである。SOC の効果を多様な物質間で統一的に理解することは、一体問題にも関わらず、今なお難しい問題である。例えば、SOC が生む顕著な効果として磁気モーメントの大きな変化が挙げられるが、磁気モーメントを理論的に計算するのは特別の場合 (ディラック電子近似が成り立つ) を除いて困難であった [1-3]。

一方実験的には、様々な物質において磁気モーメント (ゼーマン分裂) が測定されてきた。特に、ゼーマンエネルギーとサイクロトロンエネルギーの比 $M = \Delta E_z / \hbar \omega_c$ は、スピンと軌道それぞれに対する SOC の効果の比に相当するため、重要な指標として注目されてきた (図 1)。(M はサイクロトロン質量 m_c と g 因子を用いて $M = m_c g / 2m$ と表せる) M はスピン分解量子振動測定によって正確に決めることができ、**多様な物質間で統一的に用いることができる指標**である。

ビスマスの M については、過去 50 年間で多くの実験により、高い精度で決定されてきた [3-5]。従来の理論—2 バンドディラック模型—によると、強い SOC を持つ系の M は磁場に対して**等方的**で $M=1$ になる [1,2]。しかし Bi の正孔については、M は非常に**異方的**で trigonal 軸方向では $M > 2$ に及ぶ。この実験と理論の大きな食い違いは、半世紀以上にわたり謎であった。我々は、相対論的マルチバンド $k \cdot p$ 理論を多バンド系に適用することで、この問題を完全解明することに成功した [3,6]。M の大きな値と異方性は、SOC の多バンド間効果によるものであることが明らかになった。特に、M の大小と波動関数の対称性には密接な関係があることも分かった。

講演では、Bi 表面状態の厳密解 [7] および M の測定を通して物質のトポロジを決める方途についても議論する。

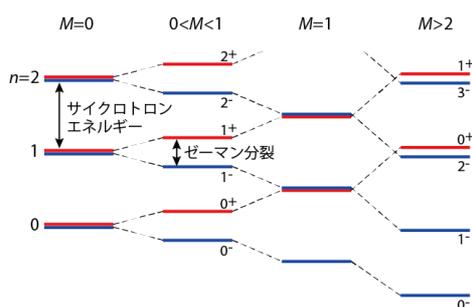


図 1 SOC が大きい場合のランダウ準位の模式図。SOC の効果が大きくなるにつれ M ($M = \Delta E_z / \hbar \omega_c = m_c g / 2m$) が大きくなる

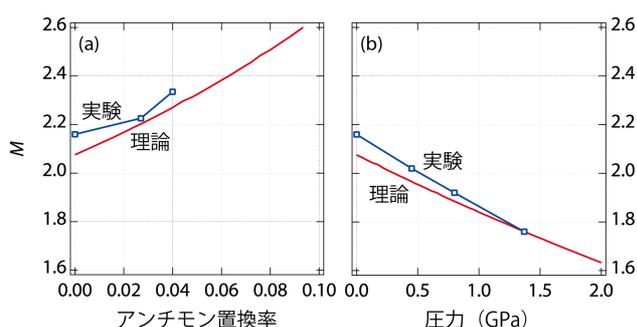


図 2 Bi をアンチモンで置換した場合 (左) と Bi に圧力を加えた場合の M の変化。理論と実験がよく一致する [5]。

参考文献

- [1] P. A. Wolff, J. Phys. Chem. Solids **25**, 1057 (1964)
- [2] Y. Fuseya, M. Ogata, and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. **84**, 012001 (2015) (review)
- [3] Z. Zhu, B. Fauqué, K. Behnia, Y. Fuseya, J. Phys.: Cond. Mat. **30**, 313001 (2018) (review)
- [4] G. E. Smith, G. A. Baraff, and J. M. Rowell, Phys. Rev. **135**, A1118 (1964).
- [5] Z. Zhu, B. Fauqué, Y. Fuseya, and K. Behnia, Phys. Rev. B **84**, 115137 (2011)
- [6] Y. Fuseya et al., Phys. Rev. Lett. **115**, 216401 (2015)
- [7] Y. Fuseya and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. **87**, 044710 (2018)

ウルマナイト (NiSbS, PdBiSe) と PbTe, PbS のフェルミ面と輸送現象

大貫惇睦, 垣花将司¹, 川勝祥矢¹, 仲井間憲李¹, 山川結衣¹, 宮里隼人¹,
竹内徹也², 木田孝則³, 田原大夢³, 萩原政幸³, 青木大⁴, 仲村愛⁴, 播磨尚朝⁵,
眞榮平孝裕, 辺土正人, 仲間隆男
琉球大理, 琉球大院理工¹, 阪大低温セ², 阪大先端強磁場³,
東北大金研⁴, 神戸大理⁵

Pb や Bi の 6p 電子はスピン・軌道結合が大きく, 質量補正を含めた相対論効果が無視できない. 最近の Bi 単体や Bi を含んだディラック半金属と呼ばれる化合物の研究が注目される.

本発表は, まず少数キャリア系でない普通の金属間化合物で, Bi を含むと何か特異なことが起こるのかという素朴な疑問から出発し, 立方晶キラル構造のウルマナイト化合物のフェルミ面について報告する[1-3]. 実験は, フェルミ面の極値断面積やサイクロトロン質量を決定するドハース・ファンアルフェン(dHvA)振動の検出で, その結果をエネルギーバンド計算結果と対比した. キラル構造の結晶反転対称性の破れを反映して, フェルミ面は2つに分裂する. NiSbS での主要フェルミ面(α と α' ブランチ)の分裂のエネルギーは 220 K と決定され, PdBiSe ではその分裂が 1050 K と大きい. PdBiSe のフェルミ面の分裂の大きさを理解するには, Bi-6p 電子の大きなスピン・軌道結合以外に, 相対論効果としての質量補正を取り入れることが重要である. なお, このウルマナイト化合物の結晶構造はスキルミオンとして知られる MnSi と同じ空間群に属し, 磁性体の EuPtSi でも同様な磁気構造が見出されている[3, 4].

次に, NaCl 型の立方晶で縮退半導体 PbTe, PbS の少数キャリア系に興味を持ち, dHvA, ホール効果, 磁気抵抗等の測定を通して研究した. これまでの研究から, これらの化合物は fcc ブリルアンゾーンの L 点で, ディラック型のエネルギー分散を持つことが指摘されている[5]. 本研究では, PbTe の単結晶はブリッジマン法で育成し, PbS はトランスポート法による. 両方ともキャリアは電子で, フェルミ面は, fcc ブリルアンゾーンの L 点に位置し, そのフェルミ面の占有率は 0.007 %と極めて小さいことが, dHvA 振動数の角度依存性から明らかにした. PbTe のフェルミ面は Γ L 方向に伸びた回転楕円体を Γ L 方向に少しつぶした形状で, PbS では更につぶれてほとんど球状に近い. 50 T までの磁気抵抗を測定したが, 磁場に対して直線的に増大する磁気抵抗であった.

参考文献

- [1] M. Kakihana *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **84** (2015) 033701.
- [2] M. Kakihana *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **84** (2015) 094711.
- [3] M. Kakihana *et al.*, J. Elec. Mat. **46** (2017) 3572.
- [4] M. Kakihana *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **87** (2018) 023701.
- [5] A. Svane *et al.*, Phys. Rev. B **81** (2010) 245120.

超音波による伝導電子系の研究

後藤輝孝, 根本祐一, 赤津光洋, 三本啓輔¹, 栗原綾佑²
新潟大理, 富山県立大工¹, 物性研究所²

私に与えられたテーマは、超音波による Bi の研究に関連して「わかっていること、今後明らかにしていかなければならないこと」を述べよとのことである。根本研究室では、数年前に超音波による Bi の磁場中の弾性定数と吸収係数の量子振動の実験を行った。結果は、半世紀ほど前の Bi の超音波実験と基本的に同じであった。これを踏まえて、解明すべき事項は何かであるかについて、私見を述べたい。

Bi の少数キャリアとその特有の小さな Fermi 面や、電子励起が波数 k に比例するディラック電子がやはり重要である。超音波実験からこれらの物性の解明に迫るには、「伝導電子と超音波との相互作用の正確な記述」が必要不可欠である。しかし、現状では電子-格子相互作用の理解がうまくできていない。

音響フォノン（超音波）には縦波と横波が存在する。縦波は、体積を変える対称性不変の歪みと、体積を一定に保つが対称性を低下させる歪みを励起する。他方、横波は、体積を一定に保つが対称性を低下させる歪みと、格子を僅かに回す回転を励起する。このような音響フォノンによって結晶中に誘起された歪みや回転は、伝導電子系と相互作用をする。特に Bi の磁場中の弾性定数と吸収係数の量子振動の解明には、Landau 状態と音響フォノンの歪みや回転と相互作用ハミルトニアンが必要であるが、最近になりその導出を行った。対称ゲージを用いれば、Landau 状態のハミルトニアンには、磁場に依存せずフェルミ面の形状に依存する項、磁場の 1 次に比例する軌道運動の項、磁場の 2 次に比例する反磁性の項が現れる。Landau 状態と歪みや回転との相互作用ハミルトニアンにも、それぞれに対応する項が現れる。これらの内で磁場の 1 次及び 2 次に比例する項は、Bi, CeCoIn₅, Ce_{1-x}La_xB₆ における横波超音波の吸収係数の強磁場中での異常な増大の原因ではないかと推察している。Laguerre 多項式で書かれた Landau 状態の 1 体電子波動関数を使えば、摂動計算がもちろん可能で、応答関数を求めることができる。また、もともと 1 体波動関数で書かれていた Landau 状態は、音響フォノンの歪みや回転の場を介して相互に結合し、新しい多体状態が現れると期待でき、興味もたれる。

最近になり、音響フォノンと電子系との相互作用を導く一般的な方法を研究している。音響フォノンが誘起する 6 個の歪みと 3 個の回転を扱い、電子系に作用する 9 個の変形演算子を導入し、電子系を記述するハミルトニアンとの交換子をとることで、音響フォノンと電子系との相互作用を導くことができる。この方法は、局在電子系だけではなく伝導電子系にも適用可能であり、最近の鉄ヒ素超伝導体 Ba(Fe_{1-x}Co_x)₂As₂ での臨界減速の研究で用いた取り扱いの自然な拡張になっている [1]。また、この方法を本 WS でのテーマであるスピン軌道結合系に作用させると、スピン系と超音波との相互作用を導くことができる。多様な電子系が示す量子振動や磁性を解明することで、超音波による物性物理の発展が大いに期待できる。

参考文献

[1] R. Kurihara, K. Mitsumoto, M. Akatsu, Y. Nemoto, T. Goto, Y. Kobayashi, and M. Sato, J. Phys. Soc. Jpn. **86**, 064706 (2017).

単結晶ビスマスの磁場誘起バレー分極と磁気抵抗異常

徳永将史, 岩浅歩, 近藤晃弘, 河智史朗, 秋葉和人, 金道浩一, 中西良樹¹, 吉澤正人¹
東大学物性研, 岩手大理工¹

強磁場下の半金属で実現可能な半金属-半導体転移近傍では、電子正孔対のボーズ凝縮状態である励起子相に代表される興味深い量子状態の形成が期待される [1]。このような相転移を探索する際、電子と正孔のフェルミポケットの数、もしくはバレー自由度、が重要な意味を持つ。フェルミポケットが異方的形状を持っている物質では磁場印加方向を選ぶことでバレー自由度を制御して、相転移実現に向けた理想的環境を整えることができる。我々は代表的半金属として知られるビスマスに対して、量子極限状態における完全バレー分極を実現し、その熱力学的検証を行った[2]。

ビスマスは無磁場下で逆格子空間の T 点に正孔のフェルミポケットが一つ、L 点に電子のフェルミポケットが三つ存在する。電子のフェルミポケットが異方的であるため、量子極限状態を超えた十分強い磁場を適切な方向に印加することで、三つのうち一つまたは二つのフェルミポケットからキャリアを取り除いた完全バレー分極状態を実現できると言われている [3]。しかし量子極限状態付近での電子状態の正確な計算が困難であり、モデルによってどの方向に磁場をかけたとき、どのポケットが残るかも違っている [3,4]。

我々はビスマスで期待されている完全バレー分極状態を実験的に検証するため単結晶試料に対して最高 60T までのパルス磁場下における磁気抵抗、磁化、超音波、磁歪測定を行った。これらの測定量の中で、磁歪は占有状態にあるキャリアのエネルギーと格子系の弾性エネルギーとのバランスで決まるため、バレー分極率を直接反映した物理量になる。今回我々がキャパシタンス法で測定した磁歪測定の結果をいくつかの理論と比較した結果、磁場を結晶の binary 方向に印加したときに一つのバレーだけが残るとするモデルと良い一致を示すことがわかった。しかし様々な測定手法で調べた量子振動の実験結果は、このモデルと定量的なずれを示した。特に磁気抵抗測定でのみ観測可能な異常が 50T 付近に現れており、この異常はモデルの範囲内では説明ができない。この異常の起源は現時点で明らかではないが、関連物質における先行研究との比較から、この異常が一種のリフシツト転移である可能性について議論する。

参考文献

- [1] E. W. Fenton, Phys. Rev. **170**, 816 (1968).
- [2] A. Iwasa *et al.*, submitted.
- [3] Z. Zhu *et al.*, Nat. Commun. **8**, 15297 (2017).
- [4] K. Hiruma and N. Miura, J. Phys. Soc. Jpn. **52**, 2118 (1983).

量子振動から評価する PbTe の” Diracness ” とその圧力変化

秋葉和人¹, 三宅厚志¹, 酒井英明^{2,3}, 片山敬介², 村川寛²,
花咲徳亮², 鷹岡貞夫², 中西良樹⁴, 吉澤正人⁴, 小林達生, 徳永将史¹
岡山大院自然¹, 東大物性研¹, 阪大院理², JST-PRESTO³, 岩手大院工⁴

Dirac フェルミオンが固体の物性を担うトポロジカル物質の物性解明は、現在の物性物理学における主要なトピックの一つとなっている。ただしこれまでに知られているトポロジカル物質の多くは Dirac フェルミオン以外にも複数のキャリアが混在する複雑なバンド構造を持ち、Dirac フェルミオン由来の振る舞いだけを抽出して解析するのは難しい。またバンド構造はその物質に固有の場合が多く、何か特異な物性が見つかったとしてもそれが物質各論の域を出るのが難しいという問題をはらんでいる。

我々は上述の問題を解決しうる物質として、バンド構造がシンプルかつ外部パラメータで制御可能な PbTe (鉛テルル) に着目し研究を進めている。PbTe は常圧で Brillouin ゾーンの L 点に直接型ギャップを持つ縮退型半導体であることが知られており、L 点以外のバンドは物性にほとんど寄与しないとみなせる。また圧力や元素置換によってバンド構造を半導体・ゼロギャップ状態・トポロジカル結晶絶縁体へと制御可能であると考えられており[1,2]、ゼロギャップ状態では理想的な Dirac 電子系の実現が期待される。

近年の理論研究によって、Zeeman エネルギーとサイクロトロンエネルギーの比 (Zeeman サイクロトロン比、ZC 比) が 1 にどれだけ近いかを見ることで、着目する系と理想的な Dirac 電子系との類似性、すなわち “Diracness” を定量的に評価できることが提案された[3]。この ZC 比は、磁場中の量子振動現象の観測によって実験的に決定可能な量となっているため、Dirac 電子系を同定する際の定量的指標となることが期待できる。我々は ZC 比を利用した Dirac 電子系実現の実証と、その近傍での新奇物性の探求を目指して研究を進めている。

我々は最大 55 T までのパルス強磁場下で PbTe の電気抵抗・磁化・超音波による弾性特性の測定を行い、明瞭な Zeeman 分裂を伴った量子振動を観測した。量子極限状態に到達可能な強磁場下のデータを詳細に解析することで、PbTe の ZC 比が 0.52 であることを実験的に決定した[4]。また量子振動の位相は Zeeman 分裂の程度によって大きく左右され得る。そのため Berry 位相を求める手法として現在広く用いられているファンダイアグラム解析では、この点を正しく考慮しなければならない。

さらに対向アンビル型圧力セルを用いた最大 7.5 GPa までの圧力下における磁気抵抗測定においては、Shubnikov-de Haas 振動が 4.0 GPa までに 2 回位相反転する様子が観測された。このことは 4.0 GPa までに ZC 比が 2.5 以上まで変化していることを意味し、圧力を適切にチューンすることで ZC 比=1 の Dirac 電子系が実現可能であることを示唆している。

参考文献

- [1] S.-Y. Xu *et al.*, Nat. Commun. **3**, 1192 (2012).
- [2] P. Barone *et al.*, Phys. Rev. B **88**, 045207 (2013).
- [3] H. Hayasaka and Y. Fuseya, J. Phys.: Condens. Matter **28**, 31LT01 (2016).
- [4] K. Akiba *et al.*, Phys. Rev. B **98**, 115144 (2018).

Bi/Sb 正方格子を有するディラック電子系磁性体における 交換相互作用とスピン軌道相互作用

酒井英明

阪大理, JST さきがけ

近年、トポロジカルなディラック・ワイル電子状態を有する新しい磁性体が注目を集めている。ベリー位相による巨大な異常ホール・ネルンスト効果や、カイラル異常による磁気抵抗効果などの新奇輸送現象が発現するため、革新的なスピントロニクス応用も期待される[1]。しかし、トポロジカル電子状態を実現するためには、非自明な磁気構造と結晶対称性が要請されるため、ディラック・ワイル磁性体のバラエティーは未だ限られている。これに対し、近年、我々は層状磁性体 $AMnX_2$ に着目し、多彩なディラック磁性体を開拓している。本物質系は、 $A^{2+}-Mn^{2+}-X^3$ からなる磁性ブロック層と Bi^3/Sb^3 正方格子からなるディラック電子伝導層が交互に積層した構造を有するため（下図）、ブロック層の元素置換により、磁性とディラック電子状態の制御が可能である。この好例として、本講演では局在スピンと強く結合した量子伝導を示す $EuMnBi_2$ と、スピン軌道相互作用を制御できる $BaMnX_2$ ($X=Sb, Bi$) において、最近見出した特異な強相関ディラック電子状態について発表する。

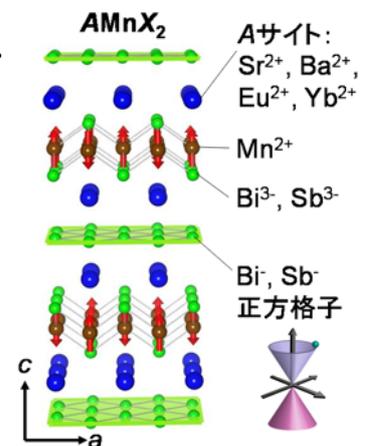
$EuMnBi_2$ では、ディラック電子を担う Bi 層に隣接する A サイトを磁性イオン Eu^{2+} ($S=7/2$) が占有するため、 Eu 層の反強磁性秩序がディラック電子の輸送現象に影響を及ぼす[2]。しかし、これまでディラックバンドが、 Eu スピンによりどのように変調されるは未解明であった。そこで本研究では、ゼーマンエネルギーとサイクロトロンエネルギーの比を制御できる傾斜磁場下において、ランダウ準位の分裂構造を高磁場まで測定し、傾斜角依存性を詳細に解析した。この結果、ディラック電子の有効 g 因子が Eu 層の反強磁性秩序に依存して大きく変化することを発見した。第一原理計算との比較により、このような g 因子の依存性は、ディラック電子と Eu スピンの交換相互作用により説明できることが明らかとなり、ゼーマン分裂を超える交換分裂がディラックバンドに生じていることを実証した[3]。

上記の交換相互作用に加え、本物質系ではディラック電子状態が Bi/Sb 正方格子に由来するため、スピン軌道相互作用も顕著となり得る。この効果を解明するために、同一の結晶構造でスピン軌道結合の強さのみが異なる $BaMnX_2$ ($X=Bi, Sb$) において強磁場下の量子振動測定を行い、ランダウ準位構造を比較した。この結果、両者ともランダウ指数 $N=1$ までは、グラフェンと同様にベリー位相 π を持つランダウ準位を形成しているが、 $N=0$ 近傍の振る舞いは、スピン軌道結合に依存して大きく異なることを見出した。これは、グラフェンでは不可能なスピン軌道相互作用によるディラック電子の状態制御を実証する結果である[4]。

本研究は、増田英俊、高橋英史、石渡晋太郎、秋葉和人、三宅厚志、栗原綾佑、徳永将史、藤村飛雄吾、鶴田圭吾、中川賢人、越智正之、黒木和彦、木田孝則、萩原政幸、村川寛、花咲徳亮、各氏との共同研究です。

参考文献

- [1] L. Šmejkal, T. Jungwirth, J. Sinova, Phys. Status Solidi RRL **11**, (2017) 1700044. (レビューとして)
- [2] H. Masuda *et al.*, Science Adv. **2** (2016) e1501117.
- [3] H. Masuda *et al.*, Phys. Rev. B **98**, (2018) 161108(R).
- [4] H. Fujimura *et al.*, (to be submitted)



図：層状ディラック電子系磁性体 $AMnX_2$ の結晶構造。各イオンの価数は形式価数。

Bi のスピン軌道相互作用 — 弱局在と表面スピン分裂バンド

小森文夫

東京大学物性研究所

大学院生であったころ、ビスマスはスピン軌道相互作用が強いので弱反局在が観測できるだろうと考えて、薄膜を作製して実験した。[1]この薄膜は、現在多くの研究が行われている単結晶薄膜ではなく、酸素や炭素などを不純物として含む薄膜であった。そして、そのような薄膜では、確かに弱反局在が観測された。しかし、薄膜作製制御が不十分であり、その試料を使ってスピン軌道相互作用に関連する詳しい研究を行うことはできなかった。

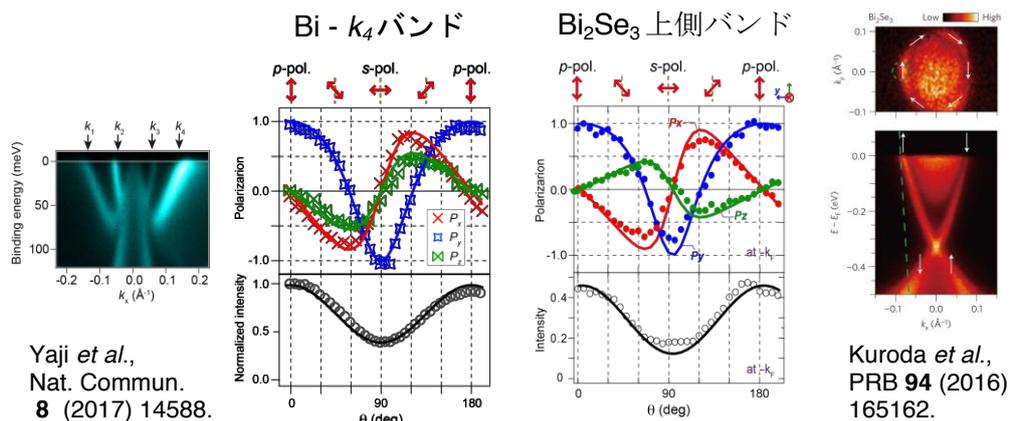
21 世紀になって、スピン軌道相互作用の強い系でのスピン分裂表面状態の研究が行われるようになった。そのような研究の流れの中で、ビスマス単結晶劈開面の表面状態も、強いスピン軌道相互作用のためにスピン分裂していることが報告された。[2] そして、現在までに、十分に制御された高品質な単結晶薄膜を用いた研究も含めて、表面スピン偏極電子状態だけでなく電気伝導など多くの研究がなされてきた。我々は、直線偏光レーザー光を用いたスピン角度分解光電子分によって、Bi(111)単結晶薄膜の表面状態を調べた。検出されるスピン偏極光電子のスピン方向と入射光の直線偏光角との関係を測定することにより、この表面状態の波動関数は、異なるスピン向きをもつ状態の重ね合わせになっていることを実験的に明らかにした。[3] このことは、同じようにスピン軌道相互作用が強く、スピン偏極した表面状態をもつ三次元トポロジカル絶縁体 $\text{Bi}_2\text{Se}_3(111)$ の表面でも同様であり、表面バンドのスピン偏極度は異なるスピン向きをもつ状態の重ね合わせの重みの違いに依存している。

従来、ビスマスはトポロジカル物質ではなくアンチモンと合金化するとトポロジカル物質へと転移するということがあった。現在、単結晶薄膜を用いた研究により、それがゆらいでいる。この研究会でも話題となるように、ビスマスがトポロジカル物質であるかどうかという議論は、表面状態の起源に関する本質的な問題で興味深いものである。一方、金銀銅のようなありふれた金属も三次元トポロジカル物質であるので、ビスマスがトポロジカル物質であったとしてそれ自体が珍しいということではない。むしろ、そしてより一般的に、スピン軌道相互作用が強い系での表面・界面スピン物性の理解には、電子運動量とスピン方向とがどのように結合した量子状態がその表面あるいは異なる物質との界面に現れるか、が重要である。

参考文献

- [1] F. Komori, S. Kobayashi and W. Sasaki, J. Phys. Soc. Jpn. **52** (1983) 368.
- [2] P. Hofmann, Prog. Surf. Sci. **81** (2006) 191.
- [3] 矢治光一郎ら、固体物理 **52** (2017) 559.

図 Bi(111)面と $\text{Bi}_2\text{Se}_3(111)$ 面の表面状態から放出される光電子スピン方向および強度の入射直線偏光角依存性。



ビスマス薄膜の電子状態：表面、バルク、その他

平原 徹

東工大理

半金属であるビスマスは固体中において最初にディラック電子が発現した系として長らく注目を集めてきた [1]。またビスマス薄膜はその長いフェルミ波長により量子サイズ効果の研究にも用いられてきた。とりわけ興味深いのは膜厚が 300 Å 程度になるとバンドがフェルミ準位を横切らなくなる（半金属半導体転移）という理論予測であった [2]。1960 年代からこの予測を検証しようと多くの実験がなされたが、はっきりとした結論は出ていなかった [3]。その理由の一つが、バルクのバンド構造からは想定されていないキャリアの存在であった。事実、2001 年に Ast 等によってバルクよりもはるかに大きいフェルミ面を持つ表面状態が Bi(111)表面で明確に観測された [4]。それ以降、Bi は単結晶・薄膜を用いた表面電子状態の研究対象として盛んに研究されてきた [5]。特にこれらの表面状態がマクロな輸送現象測定において、膜厚を薄くしていったときにその影響が支配的になるのではないかということが指摘されている [6,7]。逆に、表面状態の輸送特性を議論する上でもバルク状態の金属性(半金属半導体転移の有無)を検証する必要がある [8,9]。さらにビスマス表面上には通常の表面状態のみならず、ステップに沿って一次元的なエッジ状態も存在することが最近報告され [10,11]、高次トポロジカル物質に現れるトポロジカルなヒンジ状態との関連性が議論されている [12]。本講演では上記について概説し、今後の展望を述べる。

参考文献

- [1] P. A. Wolff, J. Phys. Chem. Solids 25, 1057 (1964).
- [2] V. B. Sandomirskii, Sov. Phys. JETP 25, 101 (1967).
- [3] 例えば C. A. Hoffman *et al.*, Phys. Rev. B 48, 11431 (1993).
- [4] C. R. Ast and H. Höchst, Phys. Rev. Lett. 87, 177602 (2001).
- [5] 例えば T. Hirahara Jour. Elec. Spec. Rel. Phen. 201, 98 (2015).
- [6] S. Xiao *et al.*, Phys. Rev. Lett. 109, 166805 (2012).
- [7] K. Zhu *et al.*, Phys. Rev. B 94, 121401(R) (2016).
- [8] T. Hirahara *et al.*, Phys. Rev. Lett. 115, 106803 (2015).
- [9] T. Hirahara and S. Hasegawa, Phys. Rev. B 97, 207401 (2018).
- [10] A. Takayama *et al.*, Phys. Rev. Lett. 114, 066402 (2015).
- [11] I. K. Drozdov *et al.*, Nature Phys. 10, 663 (2014).
- [12] F. Schindler *et al.*, Nature Phys. 14, 918 (2018).

Bi 及び $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ 結晶電子状態の量子化とトポロジー

松田 巖

東京大学物性研究所

近年の著しい表面分析法の発展によって薄膜や表面の電子状態を詳細に調べることが可能となり[1]、その結果、トポロジカル量に基づく理論構築及び物質合成が実施されてきた。現代の物性物理学では多種多様な Bi 化合物が研究対象となっており、ビスマス(Bi)は紛れもなくその中心となっている元素である。Sb がドーピングされた Bi 単結晶 $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ ($x \sim 0.1$) は世界初のトポロジカル絶縁体と提唱され、我々は世界に先駆けてその全スピン偏極バンド構造の決定に成功した[2]。さらに Sb ドーピングに伴う電子状態変化を明らかにし[3]、そして複数の劈開面の表面状態も観測した[4]。当時、発見からの約 1 年間、トポロジカル絶縁体は見向きもされなかったが、その後、世界中で爆発的に研究が実施されるようになった。一方、Bi 単体の電子状態のトポロジーについては、研究者の間で議論が続いていた。そこで、我々は Bi のエピタキシャル膜成長を駆使することで膜内に内在する電子状態の量子化を制御し、実験的に Bi 結晶のトポロジーを決定した[5]。さらにアルカリ吸着や膜厚に伴う Bi の電子状態変化を追跡し、その特殊な電子物性の起源も明らかにした[6]。本講演では、我々を含めた Bi 及び $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ の電子構造研究を振り返るとともに、これまでの議論の争点や今後の展開を解説する予定である。

参考文献

- [1] Iwao Matsuda ed., *Monatomic Two-Dimensional Layers: Modern Experimental Approaches for Structure, Properties, and Industrial Use*, (Elsevier, 2018)
- [2] A. Nishide, A. A. Taskin, Y. Takeichi, T. Okuda, A. Kakizaki, T. Hirahara, K. Nakatsuji, F. Komori, Y. Ando, and I. Matsuda, Direct mapping of the spin-filtered surface bands of a three-dimensional quantum spin Hall insulator, *Phys. Rev. B* **81**, 041309-1, 041309-4 (2010).
- [3] F. Nakamura, Y. Kousa, A. A. Taskin, Y. Takeichi, A. Nishide, A. Kakizaki, M. D'Angelo, P. Lefevre, F. Bertran, A. Taleb-Ibrahimi, F. Komori, S. Kimura, H. Kondo, Y. Ando, and I. Matsuda, Topological transition in $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ studied as a function of Sb doping, *Phys. Rev. B* **84**, 235308-1, 235308-8 (2011).
- [4] I. Matsuda, K. Yaji, A.A. Taskin, M. D'angelo, R. Yukawa, Y. Ohtsubo, P. Le Fèvre, F. Bertran, S. Yoshizawa, A. Taleb-Ibrahimi, A. Kakizaki, Yoichi Ando, and F. Komori, Surface state of the dual topological insulator Bi Sb (112), *Physica B* **516**, 100-104 (2017).
- [5] S. Ito, B. Feng, M. Arita, A. Takayama, T. Someya, W.-C. Chen, C.-M. Cheng, C.-H. Lin, S. Yamamoto, T. Iimori, H. Namatame, M. Taniguchi, S.-J. Tang, F. Komori, K. Kobayashi, and I. Matsuda, Proving nontrivial topology in pure bismuth by quantum confinement, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 236402-1,-6 (2016).
- [6] S. Ito, B. Feng, M. Arita, T. Someya, W.-C. Chen, A. Takayama, T. Iimori, H. Namatame, M. Taniguchi, C.-M. Cheng, S.-J. Tang, F. Komori, and I. Matsuda, Alkali-metal induced band structure deformation investigated by angle-resolved photoemission spectroscopy and first-principles calculations, *Phys. Rev. B* **97**, 155423-1,-8 (2018).

表面電子状態から探るビスマス単結晶のトポロジカル秩序

大坪嘉之

大阪大学大学院生命機能研究科 / 理学研究科

結晶表面にバルク電子構造のトポロジカル量子数により保護された金属的な電子状態が現れる、いわゆるトポロジカル物質に関する研究は近年の物性物理学において最も注目を集めているテーマの1つである[1]。ビスマス(Bi)はその大きなスピン軌道相互作用から多くの既知のトポロジカル物質の主要な構成元素として用いられてきた。

一方、Bi単結晶のトポロジカル秩序については現在も議論が続けられている。微量のアンチモン(Sb)との合金相 $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ は初めて実験的に確認された3次元トポロジカル絶縁体であることと[2]、Sbとの合金化によりバルク電子状態が絶縁体化することは明らかであるが、Bi単結晶自体については通常半金属である[2, 3]とする立場と角度分解光電子分光(ARPES)で得られた表面バンド分散に基づいてトポロジカル半金属とする[4, 5]立場に分かれており、未だ完全な決着はみられていない。

本発表ではまずARPESにより得られた単結晶表面電子状態[4]について概観し、続いて、経験的な強束縛近似を用いた2種類の計算により、実験的に得られている表面電子状態をどのように理解し得るかについて紹介する。BiおよびSbに関する強束縛近似パラメータは既に広く知られているが[6]、表面電子状態の計算に際してはこのパラメータでは実験結果の一部を再現できないことが明らかになった。講演者等はこの乖離を強束縛近似パラメータの修正により解決した。また、Bi単結晶の格子定数変調によりトポロジカル秩序相が反転することと、変調前のトポロジカル秩序が自明か非自明かによってトポロジカル相転移が起きる格子定数変調の方向（縮める/広げる）が反転することが見出された[7]。

並行して、室温より上の高温におけるBi単結晶の表面電子状態およびトポロジカル秩序に関してARPESにより調査した結果も紹介したい。一般に、高温では熱膨張により結晶格子にわずかな変調が生じる。最新の理論計算によればBi単結晶のトポロジカル相転移に必要な格子変調は1%未満であり[3]、10 K程度の低温から450 Kまでの温度上昇によりこの範囲を横切るとは十分に期待できる。温度を掃引したARPES測定を行ったところ、表面ブリルアンゾーンの Γ 点近傍では表面電子状態が低結合エネルギー側にシフトするが、M点近傍では逆に高結合エネルギー側にシフトする様子が確認された。物質のトポロジカル秩序相を反映するバルク電子状態の射影領域と表面電子状態の関係においては、M点近傍で全ての表面電子状態がバルク価電子帯バンドに入り込む、通常（トポロジカルに自明な）半金属において予測される振る舞いを示しているように見えた。この結果がトポロジカル相転移を支持するか否か等、詳細な解釈については講演で議論する予定である。

参考文献

- [1] L. Fu, C. L. Kane, Phys. Rev. B **76** (2007) 045302.
- [2] D. Hsieh *et al.*, Nature **452** (2008) 970.
- [3] I. Aguilera *et al.*, Phys. Rev. B **91** (2015) 125129.
- [4] Y. Ohtsubo *et al.*, New J. Phys. **15** (2013) 033041.
- [5] S. Ito *et al.*, Phys. Rev. Lett. **117** (2016) 236402.
- [6] Y. Liu and R. E. Allen, Phys. Rev. B **52** (1995) 1566.
- [7] Y. Ohtsubo and S. Kimura, New J. Phys. **18** (2016) 123015.

スピン軌道結合金属 $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$ における遍歴多極子秩序

広井善二

東京大学物性研究所

組成式 $\text{A}_2\text{B}_2\text{O}_7$ で表されるパイロクロア酸化物の中で唯一の超伝導体 ($T_c = 1.0 \text{ K}$) である $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$ は、 200 K (T_{s1}) と 120 K (T_{s2}) で構造相転移を示し、前者で空間反転対称性を失う [1]。 T_{s1} 転移は圧力印加により低下し、約 4 GPa の臨界圧力で消失する [2]。 臨界圧力付近で超伝導相の上部臨界磁場が増大しパウリリミットを超えることから、三重項などの特異な超伝導の発現が示唆されていた [3]。 一方、最近になって、強いスピン軌道相互作用をもち、空間反転対称性を有する系 (スピン結合金属) における特有のフェルミ液体不安定性が注目されている [4]。 ここでは反転対称性を破る相転移が自発的に起こり、結果として誘起される反対称スピン軌道相互作用によりフェルミ面がスピン分裂して多極子秩序などの秩序相が現れると期待されている。 さらに興味深いことに、多極子秩序への揺らぎ (パリティ揺らぎ) により三重項超伝導が誘起される可能性が指摘された [5]。 $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$ がスピン結合金属のモデル物質と考えられることから、その物性の再検討が進行中である。

$\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$ の単結晶育成は比較的容易であり、ほぼ全ての物性報告において単結晶が用いられてきた。 しかしながら、結晶の質に問題があり、特に低温の T_{s2} 転移に関してはこれを否定する報告もある。 また、試料の質の目安となる残留抵抗比 (RRR) はせいぜい 40 であった。 われわれは試薬の精製と合成条件の最適化により、はるかに大きな RRR を有する純良単結晶 (RRR: 100-360) の育成に成功した (下図参照)。 これを用いて dHvA 効果によるフェルミ面の観測や高圧ラマン散乱実験など様々な実験が行われている。 また、最近では磁場や応力を利用して単ドメイン化する実験が行われている。 $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$ における遍歴多極子秩序と超伝導に関して、その背景と最近の結果について報告する。

参考文献

- [1] M. Hanawa et al.: Phys. Rev. Lett. **87**, 187001 (2001); Z. Hiroi et al.: J. Phys. Soc. Jpn. **87**, 024702 (2017).
- [2] J. Yamaura et al.: Phys. Rev. B **95** (2017) 020102(R).
- [3] T. C. Kobayashi et al.: J. Phys. Soc. Jpn. **80** (2011) 023715.
- [4] L. Fu: Phys. Rev. Lett. **115**, 026401 (2015).
- [5] V. Kozii et al.: Phys. Rev. Lett. **115** (2015) 207002; Y. Wang et al.: Phys. Rev. B **93**, 134512 (2016).

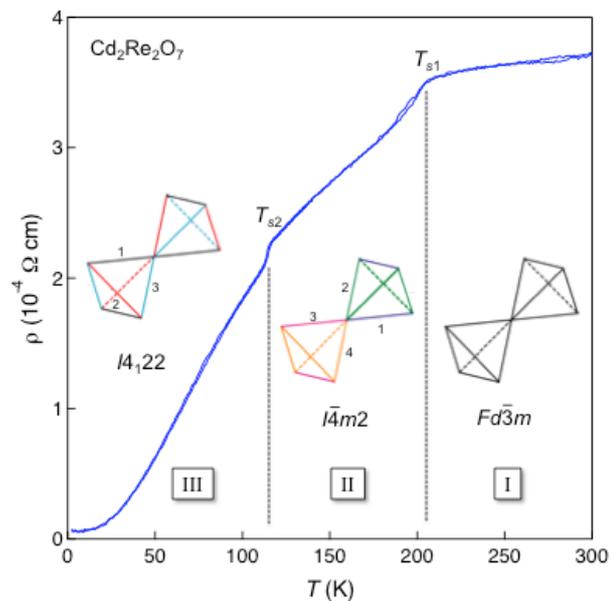


図 1 電気抵抗率の温度依存性

j フェルミオン伝導物質の開発

野原実

岡山大学異分野基礎科学研究所

局在電子系においてスピン軌道結合が強い場合、全角運動量 j が良い量子数になる。例えば、オレンジ色に輝くナトリウム D 線の分裂は 3p 軌道が $j = 3/2$ と $j = 1/2$ へ分裂したことに起因するし、X 線回折実験で用いる Cu 特性 X 線の $K\alpha_1$ と $K\alpha_2$ への分裂は 2p 軌道が $j = 3/2$ と $j = 1/2$ へ分裂していることによる。局在 4f 電子についても同様だが、そこで現れる物理は豊かである。例えば $\text{PrTM}_2\text{Zn}_{20}$ では、 Pr^{3+} の $J = 5$ 状態が結晶場分裂し、基底状態が純粋な電気四極子を持つ Γ_3 になる。ここでは、四極子秩序や四極子近藤効果などが見出されている [1]。

さて、これらの電子は全角運動量 j を保持したまま遍歴することができるだろうか。単純には、原子核からの束縛を離れた電子はスピン角運動量 $s = 1/2$ を担って運動すると考えられる。スピン軌道相互作用は、このスピンをある方向にロックする。一方、強束縛近似では、伝導電子の波動関数は、ブロッホの定理に従うように、原子軌道の線型結合から作られるので、伝導電子が j の情報を保持すると思われる。実際、池田らは URu_2Si_2 のフェルミ面を $j = 5/2$ の異なる j_z 成分で色分けし、フェルミ面が場所によって異なる j_z 成分を持つこと、さらにネスティングによって 32 極子の感受率が増大すること、すなわち URu_2Si_2 の隠れた秩序の正体が 32 極子秩序である可能性を指摘している [2]。鉄系超伝導体では、 j ではなく 1 によるフェルミ面マッピングが行われている。実際は軌道角運動量が凍結しているので、 d_{xy} , d_{yz} , d_{zx} 軌道成分によるマッピングである [3]。

それでは、スピン軌道結合が大きい 5d 遷移金属や 5p, 6p 電子を持つ Te や Bi などの重元素を含む化合物においても、5f 電子系に類似した、伝導する j フェルミオンが存在するだろうか。さらに、遷移元素や典型元素の化学の特徴である共有結合性を活かした物質開発を進めることで、f 電子系とは異なる量子伝導や超伝導を見出すことができるだろうか。本講演では、その手がかりとなる物質を紹介する。

1. 単体 Te : ブリルアンゾーンの H 点近傍に $j_z = +3/2$ と $j_z = -3/2$ のホールポケットが存在し、これに起因して電流誘起の磁化が観測されている [4]。
2. ハーフホイスラー合金 YPtBi : トポロジカル半金属で、 HgTe と同様、Bi 6p 軌道に由来した $j = 3/2$ の価電子帯バンドと伝導体バンドが Γ 点で接している。0.8 K で超伝導を示し [5]、 $j = 3/2$ フェルミオンの電子対形成が理論的に提唱されている [6]。同じ対称性 ($F-43m$, T_d^2 , #216) を持つ CaAuBi や Li_2AuBi など同様のバンド構造を持つ。
3. ウルマナイト構造 PdAsS ($P2_13$, T^4 , #198) とパイライト構造 PtSb_2 ($Pa-3$, T_h^6 , #205) : R 点に 6 重縮退したバンドを持つ。非共形空間群の対称性によって $j = 5/2$ フェルミオンが創発したものと考えられる [7]。

参考文献

- [1] T. Onimaru and H. Kusunose, J. Phys. Soc. Jpn. **85**, 082002 (2016).
- [2] H. Ikeda et al. Nature Physics **8**, 528 (2012).
- [3] 例えば S. Onari and H. Kontani, Phys. Rev. Lett. **109**, 137001 (2012).
- [4] T. Furukawa, Y. Shimokawa, K. Kobayashi, and T. Itou, Nature Commun. **8**, 954 (2017).
- [5] Y. Nakajima et al., Science Advances **1**, e1500242 (2015).
- [6] P. M. R. Brydon et al. Phys. Rev. Lett. **116**, 177001 (2016).
- [7] B. Bradlyn et al. Science **353**, aaf5037 (2018).

重い電子系 URu₂Si₂ の異方的 g-factor と超伝導、 ハイブリッド多極子秩序

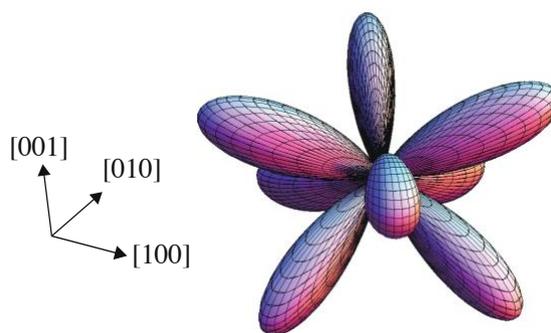
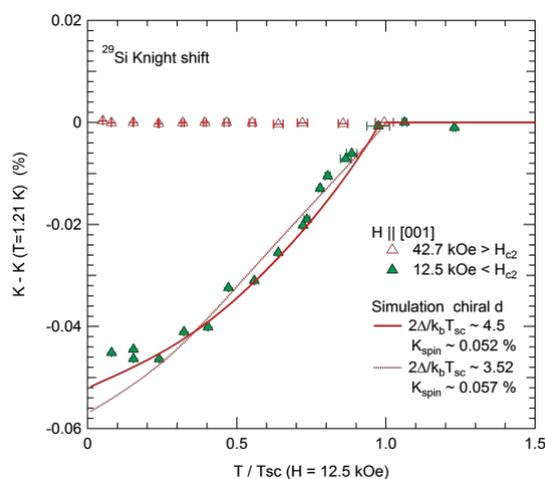
神戸振作

日本原子力研究開発機構 先端基礎研究センター

URu₂Si₂ は、重い電子状態、異方的超伝導、隠れた秩序という強相関電子物性研究の豊富な field を与える興味深い物質である。また最近では Weyl 超伝導の可能性も指摘され、トポロジカルな側面も興味もたれている。しかし、一筋縄で理解できる物性はほとんどない。例えば、重い電子になるコヒーレント温度より十分高温の物性も *f* 電子局在モデルではうまく説明できない。電子相関、結晶場、スピン軌道相互作用を全て取り入れなければならず、遍歴/局在の狭間にいる影響を強く受けているからである（こういうと振り出しに戻る感じだが）。

ここでは、主に NMR 法を用いて得られた以下の実験結果を議論する。1) URu₂Si₂ の超伝導はスピン一重項状態であり *d*-wave と考えられること [1,2]。2) 重い電子という遍歴準粒子の見方では *g*-factor が強い異方性を持っているように見えること [2]。3) 隠れた秩序は、奇パリティ多極子であり、*U5f* 軌道だけでなく *d* 軌道の寄与も必要なハイブリッド多極子と考えられること [3]。

以上の新奇な状態発現には、明らかにスピン軌道相互作用も効いているのだが、遍歴/局在の狭間に隠れている印象である。どうすればここをこじ開けられるかご議論いただきたい。



Knight shift の温度依存。T_c 以下で明確な減少が見られる(H < H_{c2})。H > H_{c2} では減少しない。

奇パリティ多極子秩序の電子分布(D₄)

参考文献

- [1] T. Hattori *et al*, J. Phys. Soc. Jpn. **85** (2016) 073711.
- [2] T. Hattori *et al*, Phys. Rev. Lett. **120** (2018) 027001.
- [3] S. Kambe *et al*, Phys. Rev. **B97** (2018) 235142.

スピン軌道結合によるトポロジカル物性設計

求 幸年

東大院工

物質中のスピン軌道結合がもたらす顕著な効果の一つに、トポロジカルな物性の発現が挙げられる。典型的には、電子のバンド構造に線形分散が現れ、スピン軌道結合や電子相関によってそのノード点にギャップが開き、ギャップ内やその近傍にフェルミエネルギーが来ることによって、様々な物理量や外場応答に量子化を含む異常な振る舞いが現れる。そこで重要となるのは、こうしたトポロジカルなバンド構造をどのようにすれば物質中に実現できるのか？という問題である。本講演では、この問題に対する我々の理論研究の成果について議論する。

まずは、層状ハニカム構造を有する遷移金属化合物に対する研究を紹介する[1-3]。層状ハニカム物質は、近年、遷移金属ダイカルコゲナイドやトリカルコゲナイドなどを中心に、ポストグラフェン物質として盛んに研究されている。我々は、こうした系に対する第一原理計算とモデル計算を組み合わせたアプローチにより、 d 電子の e_g 軌道の自由度を活用することで、多彩なバンドトポロジーとトポロジカル物性の実現が可能であることを明らかにした。

次に、最近トポロジカル磁性体として大きな注目を集めているキタエフ磁性体に関する研究を紹介する。ここでは、電子の代わりに、スピンの分数化に伴うマヨラナフェルミオンの励起構造に線形分散が現れ、磁場によってギャップが開くことで、トポロジカルな物性が発現することが期待されている[4]。我々は、こうしたトポロジカル磁性体の実現可能性を広げる目的で、これまで考えられてきた低スピン d 系ではなく、高スピン d 系[5]や f 電子系[6]における物質提案を行った。

参考文献

- [1] Y. Sugita, T. Miyake, and Y. Motome, Phys. Rev. B **97** (2018) 035125.
- [2] Y. Sugita, T. Miyake, and Y. Motome, Physica B: Cond. Matter **536** (2018) 48.
- [3] Y. Sugita and Y. Motome, preprint (arXiv:1805.07068).
- [4] A. Kitaev, Ann. Phys. (NY) **321** (2006) 2.
- [5] R. Sano, Y. Kato, and Y. Motome, Phys. Rev. B **97** (2018) 014408.
- [6] S.-H. Jang, R. Sano, Y. Kato, and Y. Motome, preprint (arXiv:1807.01443).

単結晶 Bi ナノワイヤーの作製と物性測定

長谷川靖洋, 埼玉大院

Bi を熱電変換の基本材料と考えた場合、超格子・ナノワイヤーなどの低次元材料の概念を用いることで、低次元状態密度導入によるゼーベック係数の飛躍的な向上が期待されている[1]。その一方、実際にどのように低次元材料を作製するか、また有効なゼーベック係数を測定するためにどのように温度差を与えるかなどの測定の見地からも大きな問題となっていた。一方、最近の熱電変換研究では、材料中にナノ粒子を混ぜることでフォノン散乱を促進させ、その性能を向上するアプローチが採られている[2]。

本研究グループでは光ファイバー作製技術を適用・発展させ、外径 1mm, 長さ数 mm の円筒形石英ガラスにナノ空孔を空けた石英テンプレートと呼ばれる鑄型を作製し、そのナノ空孔中に液化された Bi を圧入し、再結晶化させることで、単結晶 Bi ナノワイヤーの作製を進めている (図 1)。特徴として、**1)**最小ワイヤー直径 20nm までの作製が可能であること、**2)**ミリスケール長さ方向に一様な温度勾配を与えることができ、ゼーベック係数をはじめとする物性測定が可能になること、**3)**絶縁物に取り囲まれており理論に近い量子閉じ込め状態を実現できること、**4)**石英ガラスを透した X 線回折から結晶方向を同定できること、**5)**Bi 表面が酸化されず良好な結晶性と表面状態を保持できることなどが挙げられる。一方、Bi は化学的に比較的不安定な材料であるが、集束イオンビーム(FIB)を用いた独自のナノ加工技術を用いることで、**6)**石英ガラステンプレート中の Bi ナノワイヤー熱電変換素子側面など任意の場所に数~数十 nm 角の局所ナノ加工電極を取り付けることが可能となった。ワイヤー直径 750nm の Bi ナノワイヤーを用い 4 端子測定による抵抗率、ホール係数測定に成功した[3]。今後の

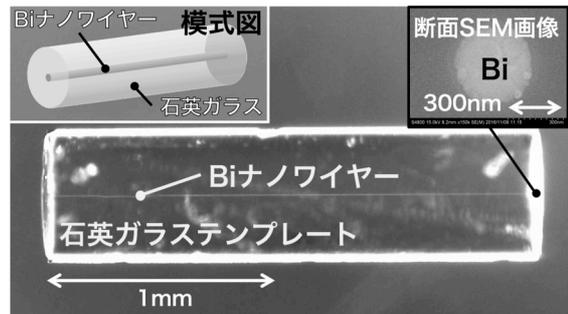


図 1：石英ガラステンプレートに封入された単結晶 Bi 製ナノワイヤー

研究の進展によりワイヤー直径が数十 nm まで小さくなった場合、その長さ故に内部インピーダンスが MΩ オーダーに上昇することが予想される。この問題を解決するために、図 2 はバルク Bi と同等の物性値が予想されるワイヤー直径 1.90 μm の例となるが、図 1 に示した石英ガラスの熱容量が圧倒的に大きいことに着目して、その長さ方向の電極間で低インピーダンスを実現しつつ熱起電力を測定することで、ゼーベック係数の同定にも成功している。

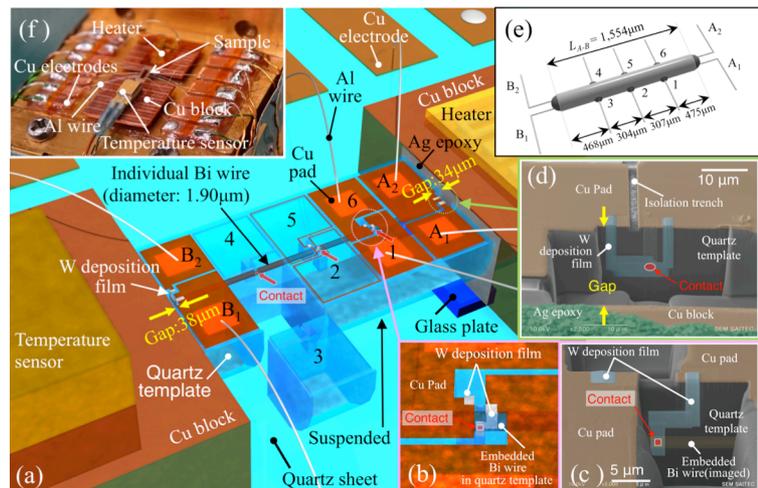


図 2：ナノ加工を用いた Bi ナノワイヤーの測定配位例

参考文献

- [1] L. D. Hicks and M. S. Dresselhaus, Phys. Rev. B **47** (1993)12727.
- [2] A. I. Hochbaum et al., Nature **451** (2008) 163.
- [3] M. Murata et al., Nano Letters **17** (2017) 110.
- [4] M. Morita et al., Appl. Phys. Express, Under review.

トポロジカル結晶絶縁体の電子物性評価とその応用

秋山了太

東京大学理学系研究科

トポロジカル絶縁体ではスピン軌道相互作用が強く、時間反転対称性の成り立つ系で表面状態が生じるが、トポロジカル結晶絶縁体 (TCI) では結晶の鏡映対称性が起源となって表面状態が与えられる。TCIは2012年に理論的にその存在が提唱され [1,2]、実験的には ARPES によって同年表面バンドが示された [3]。典型物質としては SnTe を含む $\text{Pb}_x\text{Sn}_{1-x}\text{Te}$ 、 $\text{Pb}_x\text{Sn}_{1-x}\text{Se}$ など

である。電気伝導によって弱反局在効果の観測などにより表面状態の探索が進められ [4,5]、伝導の二次元性も確かめられた [6]。

しかし、肝心の表面バンドについては、 $\text{Pb}_x\text{Sn}_{1-x}\text{Se}$ は n 型になりうるため 2012 年に ARPES で観測されたが、SnTe は Sn 欠損が生じやすいことでハイドープな p 型になるためディラックコーン(DC)を直接観測することは難しく、詳細も不明であった。そこで我々は東大物性研辛研究室と共同でレーザー時間分解 ARPES(TARPES)によって非占有状態を観測することで表面バンドの全容解明を目指した。観測試料は SnTe(111)を CdTe/GaAs テンプレート上へ成長したもので [7]、それを真空ポータブルチャンバーによって輸送し、TARPES 観測を行った。その結果、図 1 のように DC が観測され、従来の外挿によって推測された報告と異なり価電子帯よりも下側にディラック点が来ていることが分かった。また同様のバンド分散は $\text{Pb}_x\text{Sn}_{1-x}\text{Te}$ においても観測され、TCI の表面バンドについて直接的に初めて観測に成功した。

トポロジカル絶縁体においてその表面バンドを利用し電子デバイス化しようという試みは多くなされており、 $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ におけるスピン非局所測定 [8]、マイクロ波を用いたスピン注入 [9]、FET 動作 [10] などが挙げられる。しかし TCI については、その表面状態が時間反転対称性に強い可能性があったり、表面状態を電圧変化などで制御できると期待されるなど特異な性質があるにもかかわらず、高品質な単結晶薄膜の作製技術が必要なことなどからデバイス化については未だほとんど報告はない。そこで我々は SnTe についてスピンポンピング実験を行い、SnTe に注入されたスピン流を逆スピンホール効果として観測した結果、スピンホール角は TI と同程度の ~ 0.013 と見積られた [11]。SnTe ではフェルミ準位が価電子帯と表面状態のオーバーラップ領域にあるため、スピンホール角などのパラメータは表面状態のみの寄与とは言えないが、TCI のデバイスへの応用可能性について示したと考えている。講演では、これらを中心に TCI の基礎物性と応用について触れたい。

参考文献

[1] L. Fu, Phys. Rev. Lett. **106**, 106802 (2011). [2] T. H. Hsieh *et al.*, Nature Commun. **3**, 982 (2012). [3] Y. Tanaka *et al.*, Nature Phys. **8**, 800 (2012). [4] B. A. Assaf *et al.*, Appl. Phys. Lett. **105**, 102108 (2014). [5] R. Akiyama *et al.*, J. Phys.: Conf. Ser. **568** 052001 (2014). [6] R. Akiyama *et al.*, Nano Research **9**, 490 (2016). [7] R. Ishikawa *et al.*, J Cryst. Growth **453**, 124 (2016). [8] Y. Ando *et al.*, Nano Lett., **14**, 6226 (2014). [9] Y. Shiomi *et al.*, Phys. Rev. Lett. **113**, 196601 (2014). [10] D. Kong *et al.*, Nature Nanotech. **6**, 705 (2011). [11] S. Ohya *et al.*, Phys. Rev. B **96**, 094424 (2017).

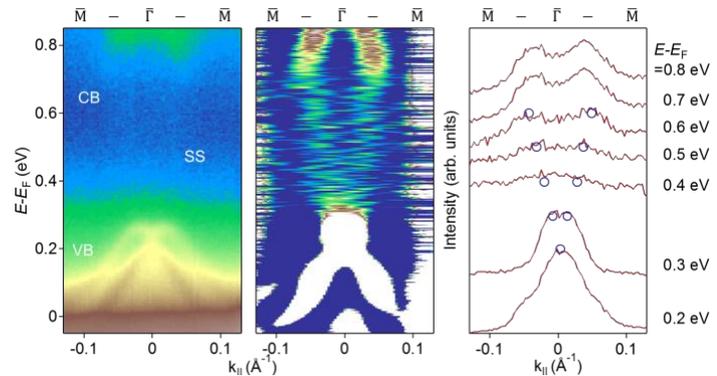


図 1 左：TARPES による SnTe のバンド分散。中央：二階微分像、右：ADC。伝導帯(CB)、表面バンド(SS)、価電子帯(VB)が見えている。SS はディラックコーンの上半分がギャップ中に来ている。

超高性能純スピン注入源としてのBiSb トポロジカル絶縁体

Pham Nam Hai^{1,2,3}, Nguyen Huynh Duy Khang¹, 八尾 健一郎¹, 白倉 孝典¹
 東工大¹, 東大 CSRN², JST-CREST³

近年トポロジカル絶縁体における巨大なスピンホール効果が報告されている [1,2]。これらの材料では 1 を超えるスピンホール角が示されており純スピン注入源として用いることでスピン軌道トルク磁気抵抗メモリ (SOT-MRAM) における低電流かつ高速な磁化反転技術が期待できる。しかし、Bi₂Se₃ や (Bi,Se)₂Te₃ トポロジカル絶縁体は電気伝導率が 10³~10⁴ Ω⁻¹m⁻¹ 台と低いため、実用的ではない。本研究では、キャリア移動度が高いかつ表面状態が多い Bi_{1-x}Sb_x 合金を用いることで高い電気伝導率と巨大なスピンホール角が両立できることを実証した。我々は分子線エピタキシー結晶成長技術を用いて、様々な組成の Bi_{1-x}Sb_x(001) 薄膜の GaAs(111)A 基板上へのエピタキシャル成長を行い、Bi_{1-x}Sb_x 薄膜の伝導率は 10³~10⁶ Ω⁻¹m⁻¹ 台と他の Bi 系のトポロジカル絶縁体よりも 1~2 桁高いことを確認した[3]。また、抵抗率の温度依存性の測定から 90 nm 程度以下のサンプルにおいて量子サイズ効果によりバンドギャップが増大し、少なくとも x~0.4 までに金属的な表面と絶縁的なバルクを持つことが分かった。さらに Bi_{0.9}Sb_{0.1}(012)面/MnGa 垂直直磁性膜の接合において、Bi_{0.9}Sb_{0.1}(012)面のスピン軌道トルクを評価したところ、室温でも超強大なスピンホール角 $\theta_{SH} \sim 52$ を観測した。図 1 に示すように、BiSb/MnGa の接合において、従来よりも 1 桁~2 桁少ない超低電流密度で MnGa のスピン軌道トルクによる磁化反転を実証した[4]。また、超強大なスピンホール角の起源を探るために、50 nm の絶縁的な Bi_{0.4}Sb_{0.6}(001) 薄膜および半金属的な Bi_{0.2}Sb_{0.8}(001) 薄膜/MnAs 面内磁性膜の接合において、面内磁化回転法を用いてスピンホール効果を評価した。その結果、絶縁的な Bi_{0.4}Sb_{0.6}(001) 膜は室温では $\theta_{SH} \sim 38$ 、低温では $\theta_{SH} \sim 450-530$ が得られたことに対して、半金属的な Bi_{0.2}Sb_{0.8}(001) 膜は低温でも $\theta_{SH} \sim -4.4$ と小さい負の値しか示さなかった[5]。これらの結果は BiSb における超強大なスピンホール角の起源がトポロジカル表面状態にあることを強く示唆している [5]。

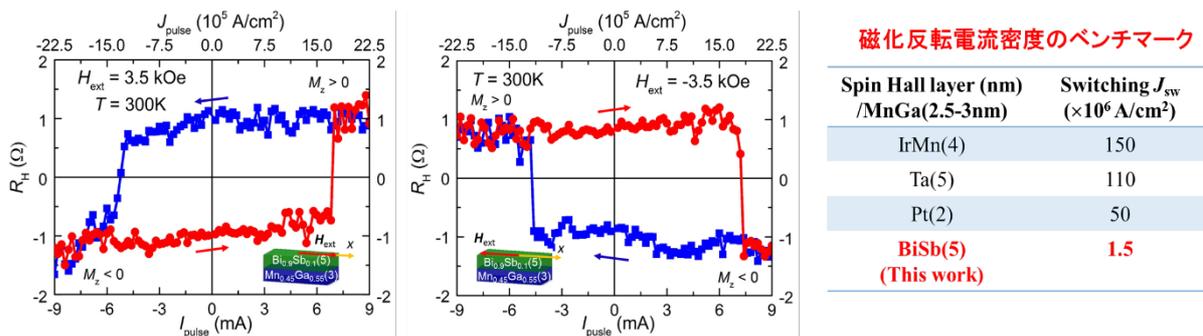


図1. 幅 50 μ m の BiSb(5nm)/MnGa(3nm)接合におけるスピン軌道トルクによる磁化反転の実証および磁化反転電流密度のベンチマーク。MnGa の磁化の向きを異常ホール効果により評価した。BiSb による MnGa 磁化反転の電流密度は 1.5×10^6 A/cm² と既存の材料より 1 桁~2 桁少ないことを実証した[3]。

参考文献

- [1] A. H. Mellnik *et al.*, Nature **511** (2014) 13534.
- [2] Y. Fan *et al.*, Nat. Mater. **13** (2014) 3973.
- [3] Y. Ueda, N. H. D. Khang, K. Yao, P. N. Hai. Appl. Phys. Lett. **110** (2017) 062401.
- [4] N. H. D. Khang, Y. Ueda, P. N. Hai, Nat. Mater. **17** (2018) 808.
- [5] T. Shirokura, K. Yao, Y. Ueda, P. N. Hai, arXiv:1810.10840 [cond-mat.mes-hall]