

戦略的創造研究推進事業 CREST
研究領域「ナノ界面技術の基盤構築」
研究課題「巨大 Rashba 効果によるスピン偏極電流」

研究終了報告書

研究期間 平成19年10月～平成25年3月

研究代表者:有賀 哲也
(京都大学大学院理学研究科、教授)

§ 1 研究実施の概要

(1) 実施概要

本研究では、半導体表面で巨大 Rashba 効果を実現し、これを利用して表面でのスピン偏極電流を実現することを目的とした。実験グループは、構造解析、電子状態測定などによる物質探索を行い、さまざまなスピン偏極表面を発見した。さらに高精度な多端子表面伝導プローブを開発し、表面スピン輸送現象の実験的研究を行った。理論グループは、Rashba 系の特徴を再現する minimal モデルを構築し、次の展開に繋がる、Rashba 効果とオンサイト・クーロン相互作用の競合などによる新しい物理現象を扱う基盤を作った。

物質探索では、まず、 β -Pb/Ge(111)表面において、巨大 Rashba 効果によりスピン分裂した金属的電子バンドを発見した。フェルミ準位において、室温の熱エネルギーより1桁程度大きな、200 meV のスピン分裂を示し、また、10 Kにおいて 8.9 mS/□という高い電気伝導度を有することから、表面スピン輸送研究のモデル系になると期待している。

また、さまざまな元素が吸着した Ge(111)表面において共通に存在する新しい表面状態を発見した。この表面状態は、Ge のバルクバンドに由来し、結晶内の周期ポテンシャルが表面で截断されることにより生じるものであることを明らかにした。従来の巨大 Rashba 系表面がすべて第6周期の重元素における強いスピン軌道相互作用に依存していたのに対し、この新しい表面状態は、Ge のスピン軌道相互作用に基づく Rashba 効果によって 100 meV クラスのスピン分裂を示す。この電子状態は本質的には界面状態であり、バルクの Ge ヘテロ界面においても同様に生成すると考えられる。Ge/Si などのヘテロ界面において金属的スピン偏極状態が実現されると期待され、新たな半導体スピントロニクスの可能性を示している。

Tl/Ge(111)-(1×1)表面で、非 Rashba 型スピン軌道相互作用によるスピン偏極フェルミ面を発見した。このフェルミ面は表面ブリュアン・ゾーンの6つのK点における小さなヴァレイからなり、グラフェン・リボン等におけるフェルミ面と同様に、長周期の周期的摂動に対してロバストな性質を有する。さらに、スピン軌道相互作用により表面垂直方向にほぼ 100% スピン偏極している。このことから、興味深い伝導現象やスピン輸送現象が観測されると期待される。

表面電気/スピン伝導に関しては、極低温から室温の範囲での温度変化に対して非常に安定で、かつ高精度な表面電気伝導測定プローブを開発した。半導体表面の2次元表面状態での伝導度の温度依存性測定で $\Delta\sigma/\sigma < 1 \times 10^{-4}$ の精度を得た。強磁性端子をスピン注入源とした多端子構成によりスピン偏極電流(電流誘起スピン偏極 CISP)の精密測定を行った結果、電流のスピン偏極度は検出限界 1×10^{-4} 以下であった。一方、スピン・ポテンショメトリ測定では、有意な磁化反転異方性が観測され、その起源を明らかにする実験を進めている。

Rashba 系の理論研究では、強束縛近似に基づく1次元、2次元格子の minimal モデルを構築し、第一原理計算や角度分解光電子分光実験で観測されている Rashba スピン軌道相互作用のさまざまな性質を再現することに成功した。この minimal モデルを使うことにより、Rashba 相互作用とオンサイト・クーロン相互作用の競合などについて定性的かつ系統的に解析することが可能になる。このモデルにより、新しいタイプの磁気秩序の可能性など、新しい物理現象の探索が進むものと期待される。

(2) 顕著な成果

1. 半導体表面における金属的スピン分裂バンドの発見

概要: β -Pb/Ge(111)表面において、巨大 Rashba 効果によりスピン分裂した金属的電子バンドを観測した。半導体表面における初めての金属的スピン偏極バンドの発見である。単純なフェルミ面を有し、フェルミ準位において 200 meV の大きなスピン分裂を示すことから、表面スピン輸送のモデル系になると期待される。

"Large Rashba spin splitting of a metallic surface-state band on a semiconductor surface", K. Yaji, Y. Ohtsubo, S. Hatta, H. Okuyama, K. Miyamoto, T. Okuda, A. Kimura, H. Namatame, M. Taniguchi, and T. Aruga, *Nat. Commun.* **1**, 17 (2010).

2. Ge(111)のサブサーフェス領域に局在したスピン偏極表面状態の発見

概要: M /Ge(111)表面のサブサーフェス領域において、Si、GaAs など他の半導体表面も含めて従来まったく知られていなかった Shockley 型表面状態を発見し、これが Rashba 効果によりスピン偏極していることを明らかにした。同様のスピン分裂電子状態が Ge ヘテロ界面においても存在することを強く示唆しており、デバイス応用の可能性を示すことができた。

"Spin-polarized semiconductor surface states localized in subsurface layers", Y. Ohtsubo, S. Hatta, K. Yaji, H. Okuyama, K. Miyamoto, T. Okuda, A. Kimura, H. Namatame, M. Taniguchi and T. Aruga, *Phys. Rev. B* **82**, 201307(R) (2010).

3. 特異な対称性のフェルミ面を有する金属的スピン偏極表面状態の発見

概要: Tl/Ge(111)表面において、グラフェンと同様に6つの K 点における valley からなる対称性を有し、しかも 100%スピン偏極した表面状態を発見した。この表面の電子系は、グラフェンと同様に長周期の周期的摂動に対してロバストであると予想される。

"A metallic surface state with uniaxial spin polarization on Tl/Ge(111)-(1x1)", Y. Ohtsubo, S. Hatta, H. Okuyama, and T. Aruga, *J. Phys.: Condens. Matter* **24**, 092001 (2012).

§ 2. 研究構想

(1) 当初の研究構想

Rashba 効果とは界面に特有な量子効果であり、波数空間において伝導電子のスピン構造の対称性が破れる現象である。本申請者らは、本研究に先立って従来知られていたものより1桁近く大きい Rashba 効果が発現することを見いだしていた。本研究ではまず、このような巨大 Rashba 効果を半導体表面において実現することを第一目標とした。さらに、これにキャリアをドーピングすることにより金属伝導性を付与し、室温において高偏極度の表面スピン偏極電流を実現することを最終目標とした。

構想した研究の流れを図 1 に示す。

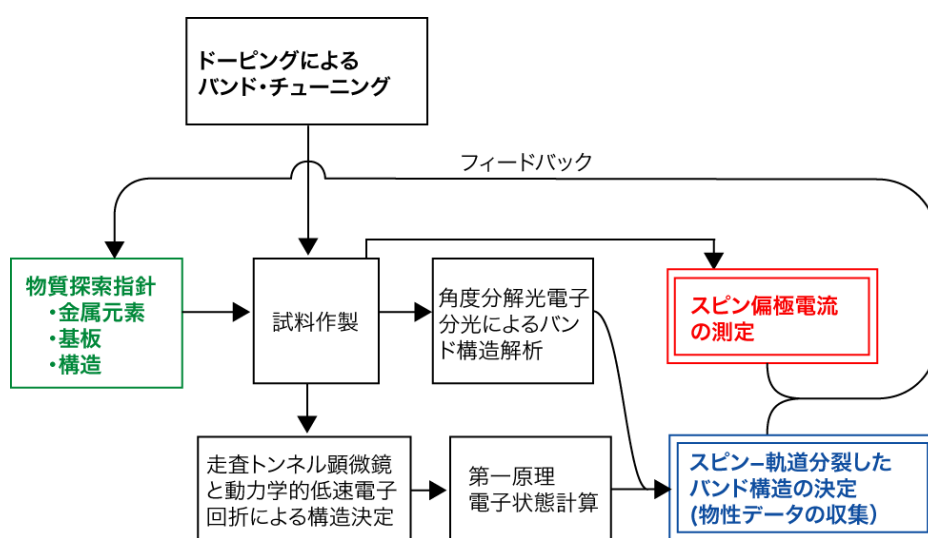


図1. 研究全体の流れ

第一の研究目標は物質探索にあり、実験担当の有賀グループが担った。物質探索は、半導体表面に重元素単原子層を形成し、そのバンド構造を角度分解光電子分光 (ARPES) で測定することが基本になる。しかし、ARPES だけでは Rashba 効果によるスピン軌道分裂について確定することはできない。そこで、走査トンネル顕微鏡、低速電子回折等により表面構造を決定し、この構造に基づいて全電子・フルポテンシャル法による第一原理電子状態計算を行う。計算結果と ARPES の結果を対照させることにより、バンド構造におけるスピン軌道分裂の様子を明らかにすることとした。この第一原理計算手法は、相対論的效果について Pauli 近似の範囲内で取り扱うものであり、実際に電子状態を正確に再現しうるものか否かが、明らかではなかった。そこで、理論担当の馬越グループが、比較的簡単なモデル系について Dirac 方程式に基づく電子状態計算を行い、Pauli 近似に基づく第一原理計算の妥当性・適用条件を明らかにすることとした。

半導体表面上に巨大 Rashba 効果が実現したとして、スピン伝導に利用するためには、金属伝導バンドである必要がある。半導体表面に異種原子を吸着させた系では多くの場合、絶

縁体的構造が安定になる。これに伝導性を持たせるためにキャリア・ドーピングが必要になるが、バルク半導体の場合と異なり、表面の単原子層にキャリアを安定的に注入する方法はこれまで研究されておらず、本研究課題のなかで取り組む必要のある課題であった。

スピン偏極電流を実測するための道筋としては、従来いくつかのグループで実施されていた四端子表面電気伝導測定技術を応用して、超高真空下での多端子スピン伝導測定法を開発することを計画した。ただし、従来の超高真空下での四端子法では、試料の温度を変化させたときに熱ドリフト等のために接点が不安定になるため、大きなノイズが生じていた。本研究では大きなバルク・バックグラウンドから表面伝導成分を確実に分離し、表面成分のなかでもさらに微弱なスピン偏極成分を検出するために、極低温までの伝導度の温度依存性を精度よく測定する必要があるがあった。そのための技術開発と、スピン偏極を検出するための多端子回路の開発を行うこととした。その上で、物質探索で得た試料によりスピン偏極電流の測定を行うことを構想した。

(2) 新たに追加・修正など変更した研究構想

物質探索については、当初、ARPES 装置の立ち上げに若干時間がかかったが、その後は順調に成果を挙げた。また、キャリア・ドーピングについても、効果的に且つ表面の安定性を維持したまま行う方法を開発した。当初は半導体表面上の重原子層の存在が不可欠と考えていたが、ゲルマニウムのサブサーフェス領域に從來全く知られていない新たな表面状態を見出し、これが有意なスピン偏極を示すことを見出した。

当初懸念された第一原理電子状態計算における Pauli 近似の妥当性についても、計算で得られたバンド構造が ARPES 実験の結果ときわめて良く一致することが次々と明らかになるに至り、研究遂行上の重要な問題ではないことがわかった。このため、理論グループによる Dirac 方程式に基づく電子状態計算は緊急性が失われた。予備的研究で、膨大な計算機パワーが必要なことがわかったこともあって、Dirac 方程式に基づく電子状態計算は打ち切った。

中間評価では、半導体表面として始めて金属的伝導バンドで巨大 Rashba スピン分裂が実現したことが高く評価される一方、理論グループの成果の遅れが指摘された。さらにデバイス化へ向けて、半導体デバイス寄りの実験グループとの協力により実験研究を加速することが求められた。

中間評価を受けて、まず、理論グループの研究方針を検討した。表面における巨大 Rashba 効果におけるミニマム・エッセンシャルを明らかにしてスピン偏極電流の理論を構築することが、時間はかかるが将来的には重要な意義をもつと判断し、強束縛近似に基づくミニマルなモデルによる Rashba 系の理論を展開することとした。

実験グループでは、上に述べたサブサーフェス領域の表面状態の発見により、半導体ヘテロ界面における巨大 Rashba 効果の可能性が示唆されたことから、当初の構想にはなかった軽元素で終端したゲルマニウム表面の研究を行い、重要な成果を得た。一方、デバイス

化に向けてプロジェクト後半の重要な課題であるスピン偏極電流の測定について、中間評価での助言にあるとおり国内外のグループとの共同研究の可能性を模索した。しかし、超高真空下で原子レベルで清浄な半導体表面における電気伝導測定技術を有しているグループがごく小数であり、本グループが既に達成していた技術水準から考えても、単独で進めるのが適切と判断した。よりデバイス寄りの、非真空下での高度なスピン輸送測定技術を有するグループは複数存在するが、本グループの物質系構築がそれらの技術を適用するレベル（すなわち超高真空チェンバー外に取り出して測定するレベル）にまで達していないことから共同研究は実現せず、本プロジェクト後半では、サイエンスベースの確固とした基礎を築くことに注力することとした。

後半の最重要目標であったスピン輸送現象の実測については、電流誘起スピン偏極(CISP)をターゲットにした多端子スピン伝導測定装置の開発と、スピン Hall 効果 (SHE) によるスピン蓄積をターゲットにした超高感度磁気光学 Kerr 効果(MOKE)顕微鏡の開発を並行して進めた。前者について、きわめて優れた対熱ドリフト安定性が得られ、従来技術を大きく上回る高精度温度可変測定が可能となった。これにより、CISP の存否について精度の高い検証実験を行い、否定的な結論を得た。SHE 等の可能性についても実験を進めている。測定技術そのものは本課題のサイエンスとしての目標ではなかったが、より汎用的な薄膜伝導測定技術へのスピンオフの可能性が開かれた。

§ 3 研究実施体制

(1) 京都大学グループ

① 研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
有賀 哲也	京都大学理学研究科	教授	H19.10～
八田 振一郎	同上	助教	H19.10～
矢治 光一郎	同上	CREST 研究員	H19.10～H22.8
矢治 光一郎	東京大学物性研究所	助教	H22.9～
大坪 嘉之	京都大学理学研究科	CREST専任 RA	H21.4～H24.3
大坪 嘉之	SOLEIL 放射光施設	研究員	H24.4～
河合 宣彦	京都大学理学研究科	D1～3	H22.4～

② 研究項目

- ・ 重元素吸着半導体表面における巨大 Rashba 効果
- ・ 非 Rashba 型半導体表面スピン偏極状態
- ・ 重元素を用いない半導体表面スピン偏極状態
- ・ 表面の 2 次元電気伝導と表面スピン輸送

(2) 兵庫県立大学グループ

① 研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
馬越 健次	兵庫県立大学物質理学 研究科	教授	H19.10～
島 信幸	同上	准教授	H19.10～
兼安 洋乃	同上	助教	H21.4～
大塚 泰弘	同上	客員教員	H20.4～H21.3
三井 隆志	同上	客員教員	H21.7～

② 研究項目

- ・ Rashba 効果の minimal モデルによる解析

§ 4 研究実施内容及び成果

4. 1 重元素吸着半導体表面における巨大 Rashba 効果(京都大学 有賀グループ)

(1)研究実施内容及び成果

(1-1) 研究のねらい

表面 Rashba 効果は、最初、Au(111)表面で発見され、その後、いくつかの重元素単体表面において確認された。2007 年になって我々のグループおよびドイツのグループが相次いで、Bi 単原子層/Ag(100)、AgBi 合金単原子層/Ag(111)での巨大 Rashba 効果を報告した。これが重要なターニングポイントとなり、軽元素の表面での巨大 Rashba 効果の探求が開始された。とくに、Si、Ge などの半導体表面で巨大 Rashba 効果を実現すれば、半導体スピントロニクスへの応用可能性が大きく開かれることになる。

スピン偏極電流を実現するためには、(1) 半導体(絶縁体)表面上において、(2) 金属的伝導バンドが、(3) 巨大 Rashba 分裂を示すことが必要条件であり、さらに、大きなスピン偏極度を得るためには、(4) Rashba エネルギー E_R がフェルミエネルギー E_F と同程度になることが重要である。以上の条件を満たす物質を見いだすことを目的として、半導体表面上に、スピン軌道相互作用の大きな重元素の単原子層を吸着させることにより巨大 Rashba 効果を示す物質を探索した。バンド伝導を念頭においているので、2 次元結晶性の高い表面原子層を作ることが大前提である。

方針として、半導体で広く使われている Si ではなく、Ge 基板を用いることにした。Si 自体のスピン軌道ギャップが 40 meV であるのに対し、Ge は 290 meV を有していることに着目したのである。もちろん、これがただちに Rashba スピン分裂に繋がるものではない。実際、Si、Ge の表面状態については 40 年の研究の歴史があるが、スピン分裂に関する報告は皆無であった。表面電子状態のスピン偏極について詳細に研究する中で、Si より 1 桁大きなスピン軌道相互作用によるなんらかの効果が見出されるのではないかと予想をたてた。Ge を選択したもう一つの理由は、近年、半導体デバイス分野で SiGe 層を導入することがさかんに研究されており、将来のデバイス化を考えた場合も道を開くことができると考えたことにある。なお、我々以外の競合グループはいずれも Si 基板を選択していたことが後に判明する。

(1-2) 研究方法

ゲルマニウム(111)表面上のトリウム、ビスマス、鉛吸着層について、成長機構、構造、電子状態等を検討した。構造、成長機構については、シンクロトロン表面 X 線回折、低速電子回折、走査トンネル顕微鏡等の手法を相補的に用いた。電子状態については、角度分解光電子分光 (ARPES)、スピン分解 ARPES、第一原理電子状態計算によった。スピン分解 ARPES は広島大学放射光グループとの協同により、広島大学放射光科学研究センター HiSOR において行った。

(1-3) 主な結果

(i) Tl/Ge(111)系

最初に Tl/Ge(111)系を検討した。半導体表面上での Rashba 効果の発現機構を検討する目的でこの系を取り上げる大きな理由は、以下の 2 点であった。(1) Tl/Ge 系は多バンド系であり、価電子帯にいくつかのバンドがある。これらの Rashba スピン分裂を比較することにより、Rashba 定数の大きさを決める因子を明確にできる。(2) Ge(111)表面上における Tl 原子は、2 次元的に均一に配列した(1x1)構造[1]と、1次元鎖状に配列した(3x1)構造(図 1)[2,3]を形成する。現在、Rashba 効果において面内異方性の効果が議論されており、同じ構成元素からなり、次元性のみが異なる 2 種の構造を比較することは意味がある。

Tl/Ge(111)-(3x1)表面について、表面 X 線回折による構造解析を行い、Tl 原子が Ge 表面第 1

層に埋め込まれた 1 次元鎖を形成している最適化構造を得た[3]。一方、この構造に基づいてスピン-軌道相互作用を含む第一原理電子状態を行い、この表面についての角度分解光電子分光より得られた価電子バンド構造とよく一致することを確認した[2]

計算により得られたバンド構造(図1)では、Tl 原子鎖と表面 Ge 原子のダングリリング結合に由来する5つのバンド(S_a , S_{bc} , S_d , U_1 , U_2)が同定できた。これらはいずれも Rashba 効果によりスピン分裂しているが、スピン分裂の大きさはバンドにより著しく異なっている。最大のスピン分裂はフェルミ準位直上の空状態バンド U_1 で観測され、その大きさは 200 meV であった。このバンドは、イオン性の強い Tl-Ge 結合の反結合状態に相当し、Tl原子位置に大きな状態振幅を有している。その他のバンドも含めて、各バンドのスピン分裂の大きさは Tl 原子位置における各バンドの状態密度の大きさに強く依存していることがわかった。つまり、伝導電子であっても、その波動関数が重原子位置に強く集中することにより、重原子の核ポテンシャルの影響が表れてスピン分裂が大きくなる[2]。一方、占有バンドにおけるスピン分裂は

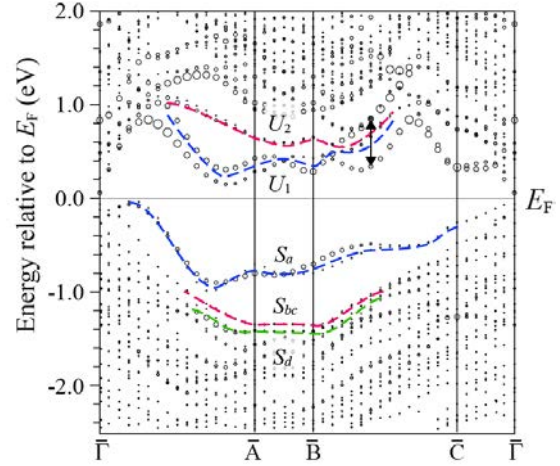


図 1. Tl/Ge(111)-(3x1)表面のバンド構造。

小さく、エネルギー分解能が不十分なため、ARPES によって直接観測することはできなかった。

Tl/Ge(111)-(3x1)表面は半導体的なバンド構造であり、(1x1)表面は Γ 点周囲に小さなホール・フェルミ面があるものの、このフェルミ面でのスピン分裂は 10 meV とごく小さく、いずれも、そのままではスピン輸送を実現するための条件を満たしていない。一方、この研究および(1x1)表面との比較からはじめて明らかになったこととして次の 3 点が挙げられる。

- (1) 軽元素半導体表面に埋め込まれた重原子単原子鎖であっても、重原子単体表面と同程度の大きさの Rashba スピン分裂が得られる。
- (2) 面内の構造異方性は、Rashba 分裂の大きさに関しては重要ではない。
- (3) Rashba スピン分裂の大きさは、注目するバンドの波動関数が重原子位置に集中するほど大きくなる。

これらの点は、その後の研究 [Nagano et al., J. Phys.: Condens. Matter 21, 064239 (2009).] によって理論的にも裏付けられた。

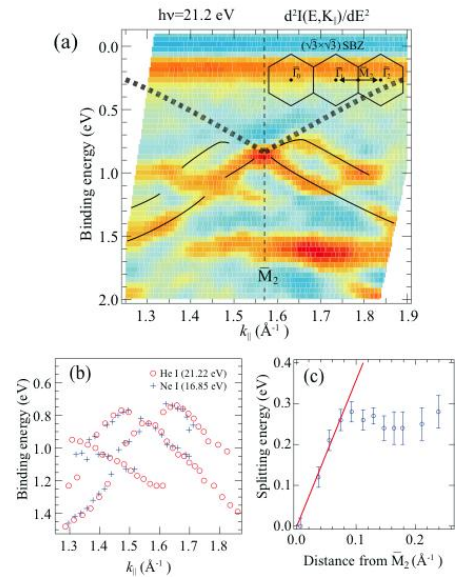


図 2. (a) Bi/Ge(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ 表面の M 点付近の ARPES スペクトル (光源は Ne I)。 (b) He I と Ne I の結果の比較。 (c) 分裂幅の k 依存性。

(ii) Bi/Ge(111)系

つづいて、Bi/Ge(111)系について検討した[5-7]。Tl/Ge(111)系と比較し、吸着原子の p 価電子が増え、(1x1)構造の場合、単純には占有バンドが 1 本から 2 本になる。Tl/Ge 系では非占有バンド(波動関数の振幅が Tl 側に偏ったバンド)で大きな Rashba 分裂が生じており、これがそのまま保たれれば、Fermi 準位に近い占有バンドで巨大 Rashba 効果が得られると予想された。

Bi/Ge(111)- $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 表面では少なくとも 2 本の明瞭な表面状態バンドを観測した。しかし、残念ながら Fermi 準位を横切る金属的バンドは観測されず、半導体的なバンド構造を有していることがわかった。図1に M 点付近の ARPES スペクトルを示す。M 点を中心として Rashba 効果に特徴的なバンド分裂が観測されている。このバンド構造は、Ne I、He I、放射光 (20 eV 付近) のいずれでも同じ位置に観測されており、表面バンドであることがわかる。さらに、ラシュバ・パラメータを評価したところ、 $\alpha = 1.8 \text{ eV \AA}$ となり、Bi(111)表面 (0.7 eV \AA) を上回り、Bi/Ag 系 ($3.1\sim 3.6 \text{ eV \AA}$) に次ぐ大きさであることがわかった。さらに、下に述べる構造解析の結果に基づいて、第一原理電子状態計算を行ったところ、M 点近傍の Rashba 分裂をよく再現することができた。この結果は、半導体表面における巨大 Rashba 効果を明確に示すものであった。我々の論文と前後して2つのグループが Bi/Si(111)表面でのほぼ同様の結果を報告した。この表面状態に関するかぎり、バンド分散、スピン分裂は Ge(111) と Si(111)でほぼ一致し、Bi 層だけの性質で決まっていることがわかる。

Bi/Ge(111)- $\sqrt{3}$ 表面の構造としては、従来の低速電子回折の解析から、1/3原子層の構造が有力とされてきた。しかし、本研究で新たに高品位な低速電子回折データを取得し、動力学的構造解析を行ったところ、従来のモデルは正しくないことがわかり、これにかわって、1原子層の被覆率を有し、面内で Bi 原子が 3 量体を形成しているモデルを導いた。Bi 原子は、Ge のダングリングボンドとの結合 1 本、3 量体内での Bi-Bi 結合 2 本を作り、その結果、3 個の 6p 電子が全て結合に使われるため、絶縁体的なバンド構造になると理解できた。

(iii) Pb/Ge(111)系

Ge(111)表面に被覆率 4/3 の鉛を吸着させた時に生成する $\beta\text{-(}\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{)R}30^\circ$ 表面において、大きな Rashba スピン分裂を示す金属的表面状態バンドを観測した[8]。図 1 に、ARPES によるバンド分散とフェルミ面マッピングの結果を示す。自由電子的な表面状態バンド S1 が、フェルミ準位を横切っており、同心の六角形状のフェルミ面を形成している。S1 は 2 本に分裂しており、その分裂幅はおおよそ k に比例している。スピン分解 ARPES、第一原理電子状態計算により、この分裂は Rashba 効果によるものであり、2 本のバンドの電子は逆向きにスピン偏極していることを明確に証明した。S1 バンドの Rashba パラメータ $\alpha_R = 0.24 \text{ eV \AA}$ 、Rashba 波数 $k_R = 0.016 \text{ \AA}^{-1}$ である。

これは、半導体表面上において金属的表面状

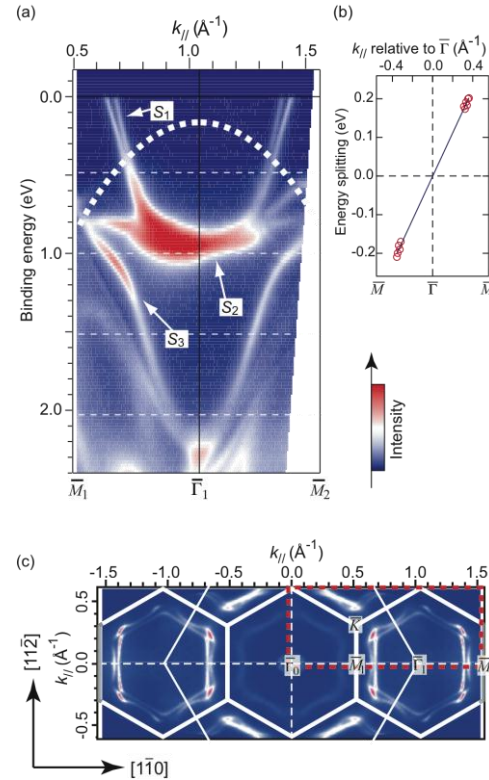


図 3. Pb/Ge(111)- $\beta(\sqrt{3}\times\sqrt{3})\text{R}30^\circ$ 表面の (a) ARPES、(b) スピン分裂の k 依存性、(c) フェルミ面。

態バンドが Rashba スピン分裂を示す初めての例である。フェルミ準位におけるスピン分裂の大きさは、200 meV であり、室温における熱エネルギーを遙かに上回っている。この発見により、半導体表面においてさまざまな非平衡スピン輸送現象を観測することが可能になった。

Pb/Ge(111)表面の構造解析[11]を行い、表面原子配列を決定した。4/3 ML の Pb 原子のうち1MLは下地の Ge ダングリングボンドと結合している。残りの1/3MLは1 ML の Pb 原子層中の3個の原子に囲まれた位置に存在し、下地 Ge との直接結合はない(図4)。このような構造の結果として、Pb-Ge 結合に対応する p_z 性軌道と、Pb 原子面内に局在する p_{xy} 性軌道が分離する。前者は、結合性、反結合性ともにフェルミ準位から離れたところに平坦なバンドを作る。後者は、自由電子的な放物線的分散を有するバンドを形成し、これがスピン偏極した金属的フェルミ面を形成する。このシナリオは、第一原理計算の結果(図5)から明解に理解される。

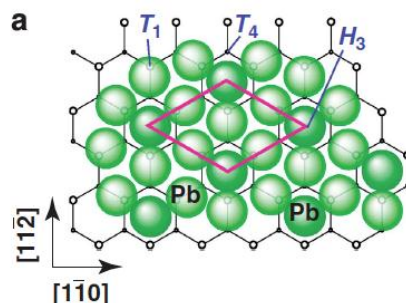


図4. β -Pb/Ge(111)の表面構造。

なお、Pb/Si(111)系では β 相に対応する表面構造は知られていない。このように急峻な分散(小さな有効質量)を有し、かつ大きな Rashba スピン分裂を示す半導体表面は現時点(2012.10)においてもこの β -Pb/Ge(111)表面のみである。

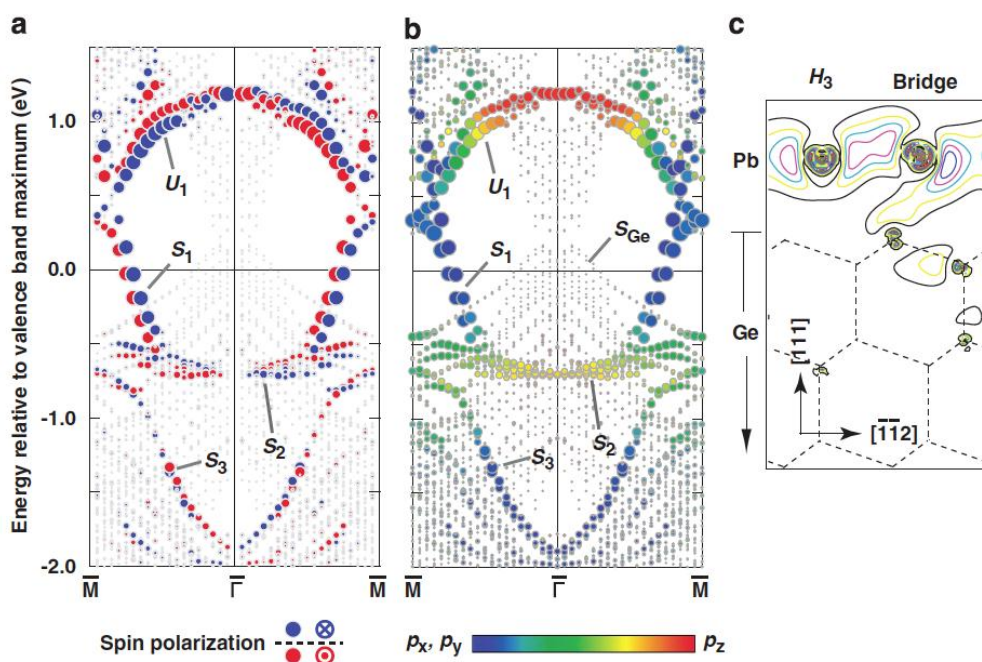


図5. β -Pb/Ge(111)表面電子構造の第一原理計算。(a) Pb 層に局在したスピン偏極成分を表示。赤と青は、逆向きに偏極したスピン成分を示す。スピン偏極の様子は Rashba 効果でよく説明できる。(b) p_{xy} , p_z 性の強さを色表示した。Pb-Ge 結合に関係した S_2 , U_1 が p_z 性、Pb 面内に局在した S_1 , S_3 が p_{xy} 性であることがわかる。(c) S_1

(2)研究成果の今後期待される展開

半導体表面においてスピン偏極した金属的表面状態が実現した。この成果に基づいて、Pb/Ge(111)表面などにおいて、スピン偏極電流、スピン Hall 効果など、表面でのスピン輸送、スピン蓄積に関する実験を進めている。これについては、5.4 項で述べる。

4. 2 非 Rashba 型半導体表面スピン偏極状態(京都大学 有賀グループ)

(1)研究実施内容及び成果

(1-1)研究のねらい

Si、Ge などの(111)-(1x1)表面の K 点は C_3 対称性を有するため、スピン縮退が解ける。しかし、スピン軌道相互作用の Rashba 項は厳密にゼロになる。結果として、電子スピンは表面垂直方向に量子化される。これは Rashba 型のスピン分裂とは異なっている。このようなスピン構造は、Ti/Si(111)-(1x1)の K 点の占有バンドに関して報告されているが、フェルミ面から 1 eV 程度も深い絶縁体的バンドなので、スピン輸送の観点からは重要でない。本研究では、金属的な表面電子状態を探索した。

(1-2)研究方法

ゲルマニウム(111)表面上のタリウム、ビスマス、鉛吸着層について、成長機構、構造、電子状態等を検討した。構造、成長機構については、シンクロトロン表面 X 線回折、低速電子回折、走査トンネル顕微鏡等の手法を相補的に用いた。電子状態については、角度分解光電子分光 (ARPES)、スピン分解 ARPES、第一原理電子状態計算によった。

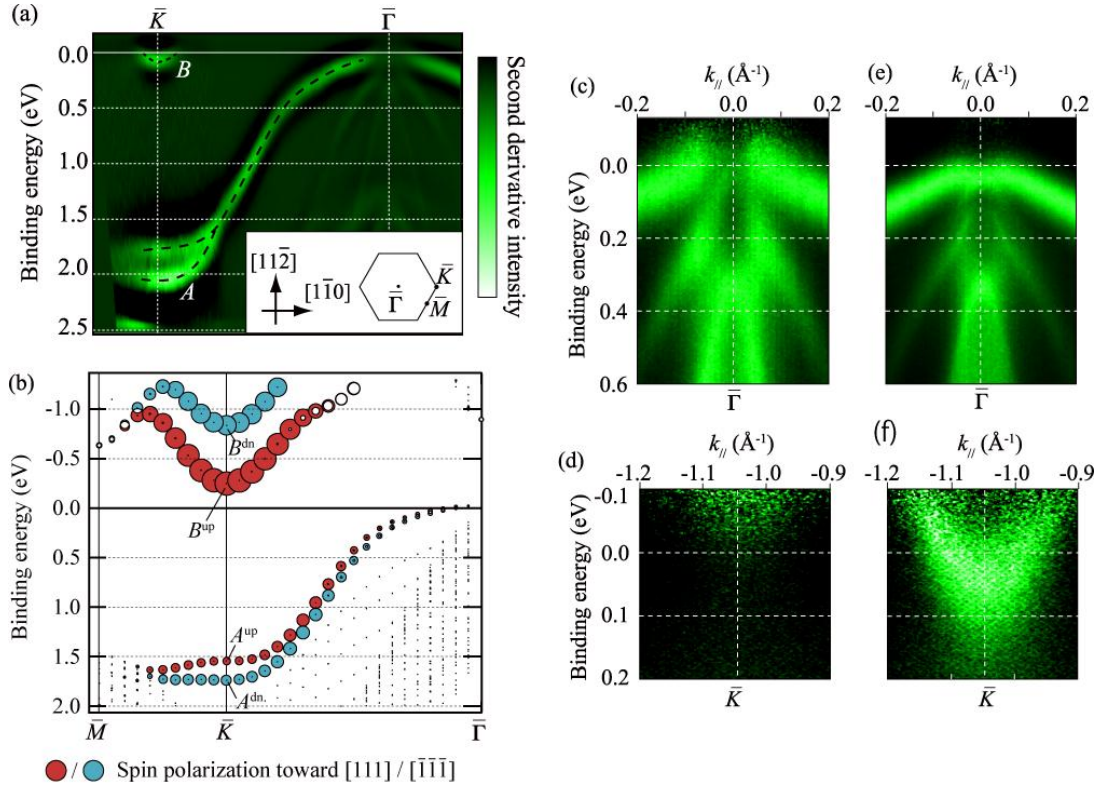


図 6. Tl/Ge(111)-(1x1)の電子構造。(a, e, f) Tl が 6%過剰な表面の ARPES、(c, d) Tl が 1ML の表面の ARPES。(b) 1 ML の表面についての第一原理計算。

(1-3) 主要な成果

Tl/Ge(111)-(1x1) 表面において過剰の Tl 原子を導入することにより、従来の研究ではみつかっていなかった新たな金属的表面状態が K 点付近で電子フェルミ面を形成することを発見した。この表面電子状態は表面垂直方向にスピン偏極し、しかも各 K 点において 100% スピン偏極していることを見出した。

図6は、Tl/Ge(111)-(1x1) 表面の電子構造についての ARPES と第一原理計算の結果である[14]。Tl 被覆率が 1 ML の表面では、既に知られているように Γ 点にホールのフェルミ面がある(図 1(c))。このフェルミ面のスピン偏極度は小さい。一方、この表面に Tl を数%ドーピングすることができる。STM によれば、このドーピングされた Tl 原子は(1x1)-Tl 層下の Ge 原子を置換していると考えられる。

ドーピングの結果、バンドの形状はほとんど変化しないまま、フェルミ準位が上方にシフトし、 Γ 点のフェルミ面は消失する(図 1(e))。一方、金属的なバンドが存在しなかった K 点においては、ドーピングにより、新たに電子フェルミ面が生じる(図 1(f))。第一原理計算の結果は、1ML における ARPES と非常によく一致している。さらに、計算によれば、K 点に生じるフェルミ面の電子はほぼ 100% の偏極率で表面垂直方向にスピン偏極している。図 2 に、ARPES で測定したフェルミ面およびその模式図を示す。

(2) 研究成果の今後期待される展開

図 7 に示したこの表面のフェルミ面からわかるように、グラフェンリボンなどで考えられているヴァレイ型フェルミ面形状をしている。このようなフェルミ面を有する電子系、長周期の周期的摂動に対してロバストであるという特徴があると予想される。これは、新しいタイプの 2 次元電子系として興味を持たれる。さらに、このフェルミ面は、電子スピン偏極が交互に上向き、下向きに偏極している。電子がフォノンあるいは欠陥により散乱される時に、スピン反転を伴う組み合わせは禁止される。このため、STM で観測される表面状態電子定在波や表面電気伝導にスピン偏極の影響が現れると予想される。現在、表面電気伝導による検討を進めている。

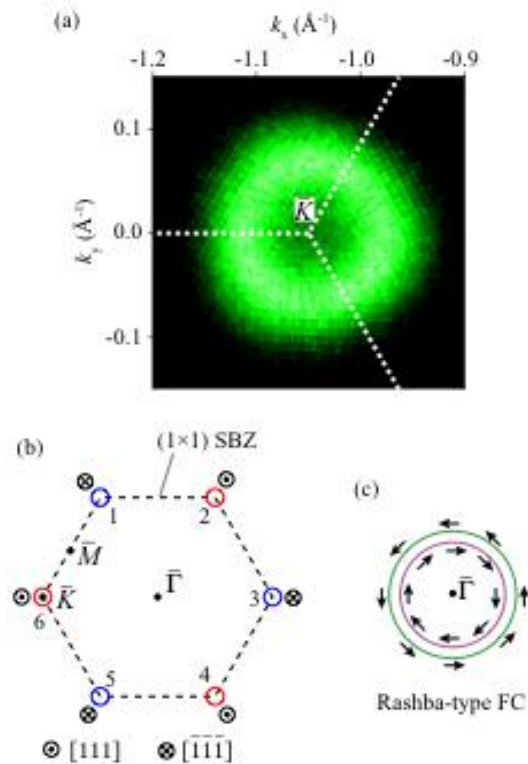


図 7. Tl 過剰 Tl/Ge(111)-(1x1) 表面のフェルミ面。

4. 3 重元素を用いない半導体表面スピン偏極状態(京都大学 有賀グループ)

(1) 研究実施内容及び成果

(1-1) 研究のねらい

5.1 項で述べた研究を遂行する過程で、表面ブリュアンゾーンの Γ 点のフェルミ準位近傍に特徴的なバンド構造があることに気づいた。過去の Ge(111)、Si(111) 表面の ARPES 研究の文献を調べると、類似のバンドが観測されているようだが、いずれにおいても表面バンドとは帰属されてい

い。バルクバンドとの峻別が困難なためと考えられる。われわれは、この Γ 点電子状態が表面状態であり、かつ Rashba スピン偏極していると可能性があると考え、系統的研究を行うこととした。その結果、これらの状態は Ge サブサーフェス領域に局在した Ge 由来の表面状態であり、Rashba 効果によりスピン偏極していることが明らかとなった。このスピン偏極電子状態は本質的には Ge と異種元素固体との界面において普遍的に存在するはずのものであり、積層構造からなる半導体デバイスへの応用可能性が非常に高いものである。

(1-2)実験方法

ゲルマニウム表面上のビスマス、臭素、タリウム吸着層について、成長機構、構造、電子状態等を

検討した。構造、成長機構については、シンクロトロン表面 X 線回折、低速電子回折、走査トンネル顕微鏡等の手法を相補的に用いた。電子状態については、角度分解光電子分光 (ARPES)、スピン分解 ARPES、第一原理電子状態計算によった。スピン分解 ARPES は広島大学グループとの共同研究に基づき広島大学放射光科学研究センター HiSOR で、また、東京大学物性研究所グループとの共同研究に基づき高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所・東京大学物性研究所つくば分室において行った。

(1-3)主な成果

Ge(111)表面に種々の元素を吸着させた表面において、スピン偏極した新しいタイプの表面状態バンドが生成することを見出した。

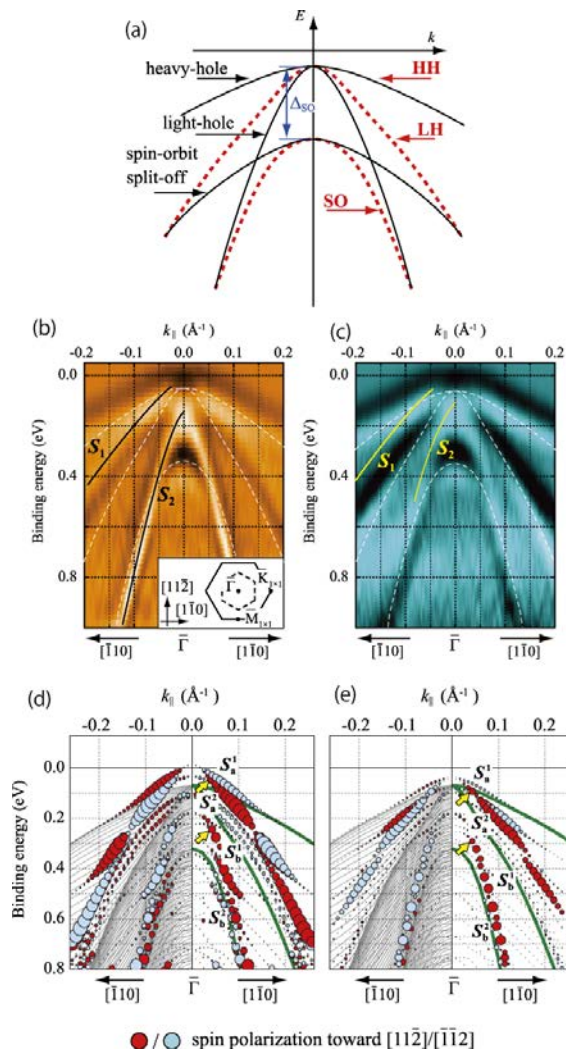


図 8. Bi/Ge(111)およびBr/Ge(111)表面の Γ 点表面状態, (a) Ge バルクバンドの模式図, (b) Bi/Ge(111) 表面の ARPES, (c) Br/Ge(111)の ARPES, (d) Bi/Ge(111)の第一原理電子状態計算, (e) Br/Ge(111)の第一原理電子状態計算

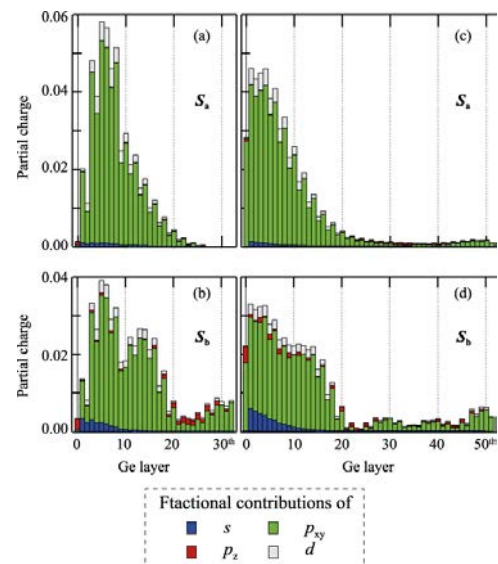


図 9. (a, b) Bi/Ge(111), (c, d) Br/Ge(111)の表面状態の原子層ごとの部分電荷分布。

図 8 には、このうち Bi/Ge(111) [9]と Br/Ge(111) [16]の結果を示す。

ARPES の結果(b,c)によれば、バルクバンド(a)と対応をつけるのが難しいバンドが Γ 点近傍で観測された。特に、バンド S2 はいずれの表面でも明瞭に観測されるが、バルクバンドとは全く異なる分散を示す。これらの表面についてスピン分解光電子分光の測定を行ったところ、いずれの表面についても S1 と S2 の位置に明確なスピン分極信号が観測された[9,16]。バルクバンドはスピン分極しないので、S1、S2 は表面状態であり、Rashba 効果によりスピン分極していると考えた。

さらに、第一原理計算の結果(d,e)は、ARPES で観測された S1、S2 の位置にスピン分極した表面状態バンドの存在を示している。しかも、部分電荷分布の計算結果(図 9)によれば、これらの表面状態バンドの波動関数は、表面 20 層程度の Ge 層に広がっており、典型的なショックレー型表面状態であると言える。およそ 50 年にわたる Si(111)、Ge(111)表面の研究において全く見過ごされてきた新しい表面状態が発見されたということである。

(2)研究成果の今後期待される展開

この成果の重要な点として、この表面状態バンドはゲルマニウム内層に広がっているため、表面上を絶縁層でキャップしても影響を受けずに保たれる可能性が高い。もしバンド構造を壊すことなく表面をキャップすることができれば、超高真空下から大気中に取り出すことが可能となる。

さらに、この電子状態は本質的にはバルクバンドに由来しており、表面における結晶の截断に伴う周期ポテンシャルの変調により表面状態となったものと言える。つまり、これと同様のスピン偏極電子状態は、表面ばかりではなく、異種結晶間のヘテロ界面においても生じるはずである。特別な表面効果型デバイスを作製しなくても、従来の半導体デバイス技術の応用により、実用的なスピントロニクスへの応用が可能であることを強く示唆している。

4. 4 表面の 2 次元電気伝導と表面スピン輸送(京都大学 有賀グループ)

(1)研究実施内容及び成果

(1-1) 研究のねらい

Rashba スピン分裂したフェルミ面を持つ 2 次元電子系(図 10)では、流れる電流の向きによりスピン偏極が生じると理論的に予想されてきた[1,2]。一方、電界印加によるスピン蓄積は起こるが、電流自体はスピン偏極しないとする理論計算もある[3]。半導体ヘテロ界面での実験的検証についても解釈が分かれている[4-6]。本研究では、巨大 Rashba 効果により大きくスピン分裂した表面 2 次元電子系を用いて、この予想を直接検証することをめざした。

(1-2) 研究方法

9~300 K の範囲で高精度な伝導度測定が可能な超高真空多端子表面伝導プローブ開発し、これにより、5.1、5.2 項で述べた各表面の電気伝導測定を行った。

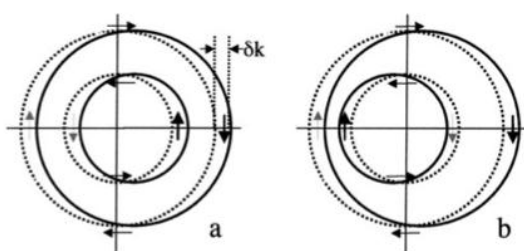


図 10. Rashba スピン分裂した 2 次元フェルミ面。(a) 電場に対する応答、(b) スピン注入に対する応答[2]。

(1-3) 主な成果

(i) 金属単原子層の電気伝導

M/Ge(111)系の4端子法による電気伝導度測定を行った。金属的表面状態をもたないBi/Ge(111)の伝導度の温度依存性が、Geのバルクキャリアによる伝導で定量的に説明できることを確認した。これを標準として用いることにより、Pb/Ge(111)などの金属的表面状態をもつ表面の伝導度から、表面状態による伝導だけを精度良く見積もることができた。その結果、Pb/Ge(111)については、表面デバイ温度(80 K)以上ではDrudeの式から予想される直線的な温度依存性が得られた。表面状態伝導度は格子欠陥、不純物による影響を受けやすいため、一般にDrudeの式から予想される伝導度よりも実測の方が小さくなるのが通例であるが、この表面のシート伝導度は10 Kにおいて8.9 mS/□に達する。これは、ARPESから得られたフェルミ面、有効質量等から予想される伝導度に比べて1桁近く大きい。端子間隔(0.5 mm)から考えて、表面状態電気伝導に対するステップ等表面欠陥の影響はごく小さいことがわかる。

(2)研究成果の今後期待される展開

表面Rashba系におけるスピン輸送現象を実現するという当初の目標には現時点で到達できていない。スピンHall効果等によるスピン蓄積については、本研究で開発した表面伝導測定プローブの応用により測定可能と考えている。これについて可能な限り早期に実現したい。スピンHall効果については、現象自体は理論的には確実と考えられ、光学的検出の可能性を検討していたが、高精度な多端子測定技術が確立したため、電氣的測定の方が容易と考えている。

本研究課題で開発した多端子伝導測定法は非常に高精度であり、さまざまな応用が考えられる。本研究の発展として、スピン伝導からは離れるが、半導体表面上の金属単原子層の電気伝導現象への展開の可能性が大きい。この種の測定では、試料を作製してからプローブを接触させて測定する接触プローブ型と、基板にあらかじめパッド電極を取り付けておいてから表面試料を作製するパッド型があった。接触プローブ型では、温度変化の際の接点不安定性のため、温度依存性の測定ではS/N比が低いという問題が、パッド型では、表面作製時にパッド材による不純物が混入しやすいという大きな制約があった。本研究で開発した装置では、接触プローブ型であるにも関わらず高いS/N比を実現し、両者の欠点を克服したといえる。従来法ではアプローチできなかった物質・現象の領域で新しい発見ができる可能性が高い。

- [1] M. Johnson, Phys. Rev. B 58, 9635 (1998).
- [2] R. H. Silsbee, J. Phys.: Condens. Matter 16, R179 (2004).
- [3] J. Inoue et al., Phys. Rev. B 67, 033104 (2003).
- [4] P. R. Hammar et al., Phys. Rev. Lett. 83, 203 (1999).
- [5] (Comments on Ref. [4] and Reply), Phys. Rev. Lett. 84, 5022, 5023, 5024 (2000).
- [6] P. R. Hammar and M. Johnson, Phys. Rev. B 61, 7207 (2000).
- [7] P. R. Hammar and M. Johnson, Appl. Phys. Lett. 79, 2591 (2001).
- [8] P. R. Hammar and M. Johnson, Phys. Rev. Lett. 88, 066806 (2002).

4. 5 Rashba 効果の minimal モデルによる解析(兵庫県立大学 馬越グループ)

当初、Dirac 方程式に基づく電子状態計算の実行を考えていた。実際に量子科学計算のコードを導入し、試行計算をしてみたが、Bi を対象とした場合、2原子の計算でもプログラムが大きくなり過ぎた。さらに固体表面特に Rashba パラメーターの大きくなる合金系にスラブ模型を用いて適用しようすると、単位胞内の原子数が、膨大となり、現在の計算資源では、精度の高い計算を実行することが無理であると考えられた。そのため、むしろ物理的描像のはっきりする強束縛近似の範囲で、スピン-軌道相互作用の行列要素を全て考えたときに Rashba 効果に対して有効な電子の移動積分がどれであるかを考察することにした。既に強束縛近似の理論は存在したが、詳細に検討すると、全てを取り込んでいるわけではなく、むしろ重要な寄与をすると思われる項が抜け落ちていることが分かった。既存の理論では、スピン-軌道相互作用のうち、原子内部すなわち、 $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ と書ける分しか取り入れていないが、移動積分に現れるスピン反転項がより重要になると考えられる。各種の項が存在するが、どの項が Rashba 分裂を引き起こし、重要な寄与をするのか見極めることができた。これにより系の対称性を考慮してブリュアンゾーンの各点におけるバンド構造の縮退・非縮退について議論することを可能にした。

(1)研究実施内容及び成果

Rashba 効果の物理的本質を理解するに当たって、モデルハミルトニアン的アプローチから Rashba 効果の本質を見極め、そもそも Rashba パラメータとは何によって、どのように決められるべきか、スピン構造はいかなる構造を持つべきか、またそれらの物理的理由は何なのかを第一原理に立ち返って考察する必要があると考えた。

<Step1>

まずは、もっとも単純で、かつ本質的な相互作用を取り入れた一次元原子鎖を考え、これに強束縛近似を適用した。このようなアプローチはすでに、L. Peterson (Surface Science, 459, 2000, 49)により 2 次元の場合に考察されているが、我々は彼らの見落とししている本質的に重要なスピン分裂の機構を見出した。

以下、多少テクニカルになるが、具体的に説明する。

Rashba 効果を生じる為には、空間反転対称性が破れている事が必要条件である。まずは、簡単の為一次元原子鎖を考え、各サイトにおいて、電子の感じるポテンシャルを球対称なものと、空間反転対称性を破るもの(具体的には一次元原子鎖に垂直方向にポテンシャル勾配を持つものを考える。)に別けて考える。つまり、各サイトにおいて、電子は以下の 4 種類のポテンシャルを感じる事とする。

- (1) 球対称なポテンシャル
- (2) 反転対称性の破れたポテンシャル
- (3) (1)により生じるスピン-軌道相互作用(軌道角運動量とスピン角運動量の内積で書ける)
- (4) (2)により生じるスピン-軌道相互作用

これらの 4 種類のポテンシャルにより生じる結晶場の効果により、エネルギーの分裂が起こり、さら

に、スピン分裂が起こることを期待した。これらのポテンシャルによる電子のホッピングは再隣接間のみを考慮する。さらに、実際の系においてはp-軌道が主にRashba効果を生じさせる事を考慮し(この事が必要条件でない事は後の研究により明らかになる。)p-軌道のみを考える事にし、この時、(1)+(2)では解析的に対角化出来る為、(3)と(4)を摂動的に取り扱う事にする。この場合、ポテンシャルはスピン自由度とカップルしていない為、スピン縮退している事は明らかである。また、(1)+(3)を考える時にも、空間反転対称性が保たれる為、スピン分裂しない。

我々が得た結論は以下の様なものである。今、p-軌道を考えている為に、スピンを含めて6つの自由度がある。(1)+(2)+(3)を考えた場合、6つの準位の内4つはスピン分裂するが、残りの2つの軌道は依然スピン縮退したままである。先のPetersonによる取り扱いはこの範囲にとどまっている。これにさらに(4)の効果を取り入れる事により初めてすべての軌道がスピン分裂することを示した。すなわち、Rashba効果の必要条件はポテンシャルの空間反転対称性の破れだと言っても、スピン-軌道相互作用が無ければ、スピン自由度の縮退が解けるはずもない。そのスピン-軌道相互作用は2種類あり、空間反転対称性のある電子ポテンシャルから生じるスピン-軌道相互作用と、空間反転対称性のない電子ポテンシャルから生じるスピン-軌道相互作用がある。どちらのスピン-軌道相互作用がスピン分裂に主に寄与しているかを区別することは定量的にも重要である。なぜなら、2つのRashbaパラメータは本質的に違っているからである。

これが実験で得られている巨大Rashba効果を直接説明する訳ではないが、少なくともRashba効果が観測されていると言われている実験結果の中で、Rashba分裂の生じる物理的メカニズムが違う2種類の物があり、それらを区別する事は、実験結果を考察する上で、あるいは、さらに大きなRashba効果を示す物質、構造を探る上で重要であると考えられる。

<Step2>

Step1の結果を受けて、さらにモデルを簡略化することを試みた。Rashba効果を生じる為のスピン-軌道相互作用において、空間反転対称性を保つポテンシャルによって生じるスピン-軌道相互作用と、空間反転対称性を破るポテンシャルによって生じるスピン-軌道相互作用との2つのメカニズムを区別すべきだとの<Step1>の結果を受けて、より効果が大きいであろうと予想される後者の効果について重点的に調べることを試みた。その為には3つのp-軌道を考える必要はなく、1つの例えばs-軌道だけで充分である。複数の軌道が存在するからこそ、反転対称性の破れたポテンシャルによって軌道混成が起こり、反転対称性の保たれたポテンシャルによって生じるスピン-軌道相互作用によってスピン分裂が起こるからである。<Step1>の表記をそのまま使えば、軌道をs-軌道だけに限れば、スピン分裂が起こりうる唯一のポテンシャルは(4)である。このさらなる単純化により、並進対称性のある系(1次元、2次元を問わず)では、解くべき問題はユニットセルに1つの原子がある限り、スピンの自由度のみの2行2列の問題を解けば良いことに簡略化される。しかも、この場合、問題は解析的に解ける。

<Step2-1> 一次元原子鎖

最も単純な一次元原子鎖を考える場合でも、Rashba 分裂することが示される。スピンの量子化軸の取り方にも依るが、それを上手く取ってやれば、スピン up/down の二つのブランチにスピン分裂することが示せる。そのエネルギー分散と状態密度を図 11-(a, b)に示す。

時間反転不変運動量である Γ 点とブリルアンゾーンで縮退(Dirac point)を示す事は当然であるが、その他の点においてスピン分裂している事が分かる。全状態密度は 2 つのブランチ共に位相がずれているだけなので、1 次元の原子鎖の状態密度を同じになることは明らかであるが、upper ブランチ、lower ブランチの各々の状態密度を別々に描くと、Dirac point で不連続となる特異性を示す。

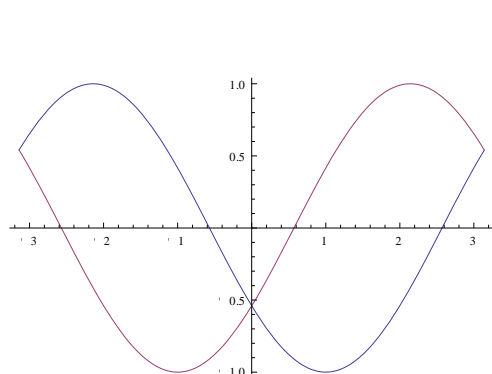


図 11-a : エネルギー分散

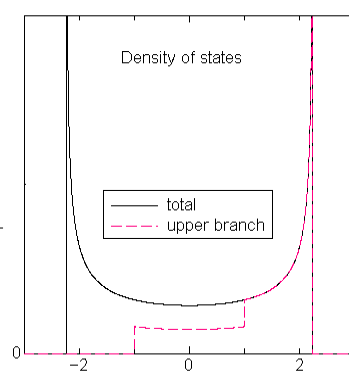


図 11-b : 状態密度

<Step2-2> 二次元正方格子(面直方向の反対称ポテンシャル)

次に二次元の正方格子の場合の結果を示す。分散関係、及び状態密度を図 12-(a, b)に示す。この場合には、 Γ 点、X 点、M 点が時間反転不変運動量であり、これらの点では縮退は解けず、その各々の点で Dirac point となっているが、その他の点においてはすべてスピン分裂している。状態密度は、通常の二次元の正方格子の場合と違いスピン分裂する為に saddle point の数が upper ブランチ、lower ブランチ共に 2 つずつ生じ、そこで van Hove 特異点を示し、かつ、Dirac point において、2 次元の Dirac point における特異性である、一回微分が不連続となる振る舞いが見られる。

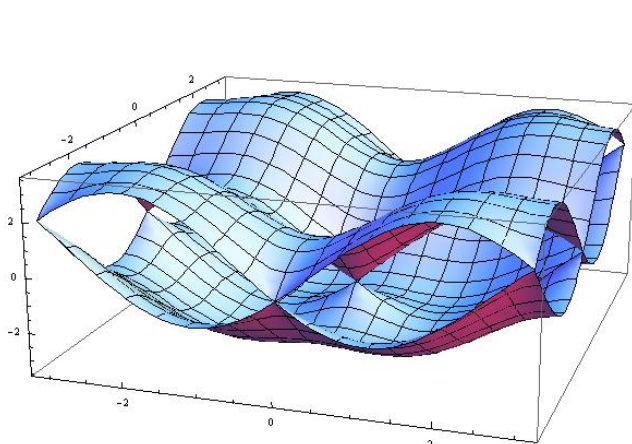


図 12-a : エネルギー分散

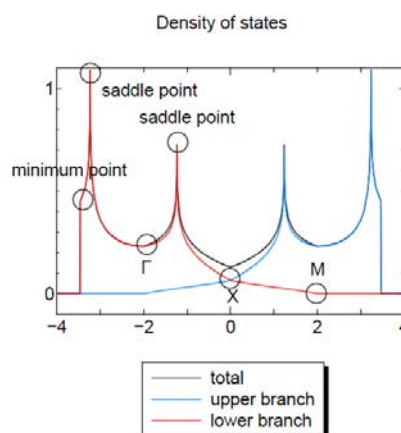


図 12-b : 状態密度

さらに、二次元の場合にはスピン構造も少々複雑になる。図 12-c に示すように、Dirac point である Γ 点、M 点で vortical な構造を持ち、同じく、Dirac point である M 点において hyperbolic な構造を示す。今まで、実験的に観測されている Rashba 系においては三角格子が一般的で正方格子についてはあまり報告例がないが、最近、千葉大の坂本グループにおいて、長方格子を構成する Rashba 系の報告があり、我々の理論との整合性を議論する予定である。

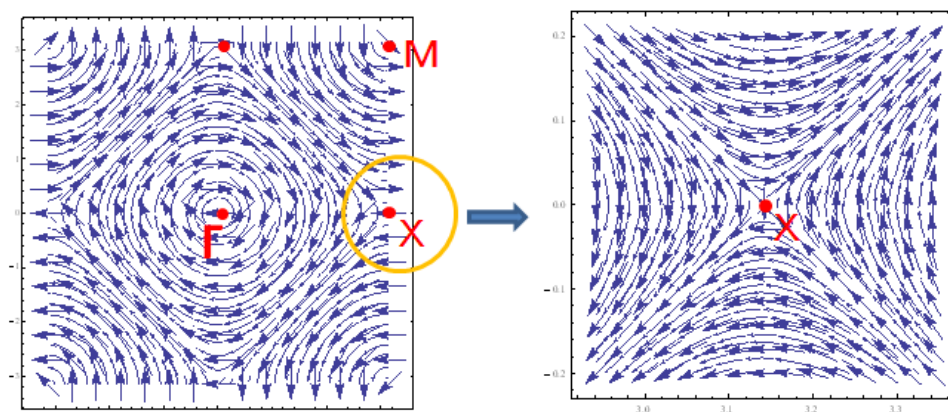


図 12-c : 面内方向のスピン構造、右は X 点付近を拡大

<Step2-3> 二次元三角格子-(1) 面直方向の反対称ポテンシャル

先に述べたように、実際の Rashba 系は三角格子を組んでいるものが殆どである為、三角格子の場合について議論するのが自然であろう。この場合も正方格子と同様に簡単に計算出来て、分散関係、スピン構造は図 13-a のようになる。

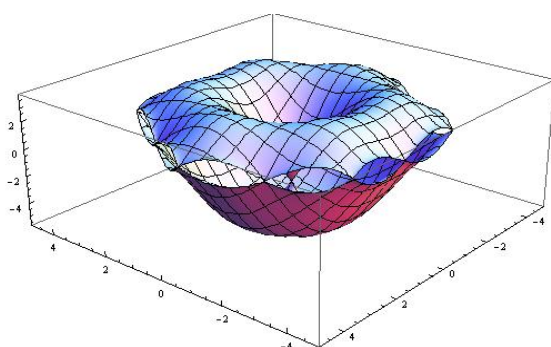


図 13-a : エネルギー分散

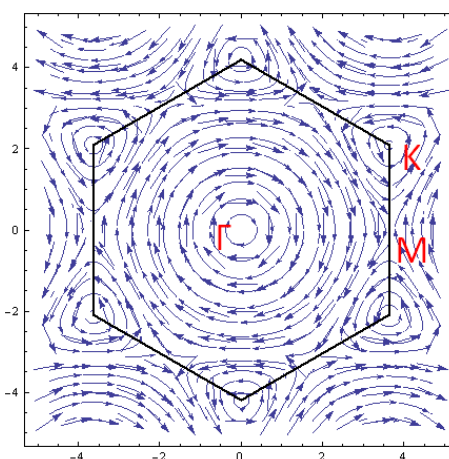


図 13-b : 面内方向のスピン構造

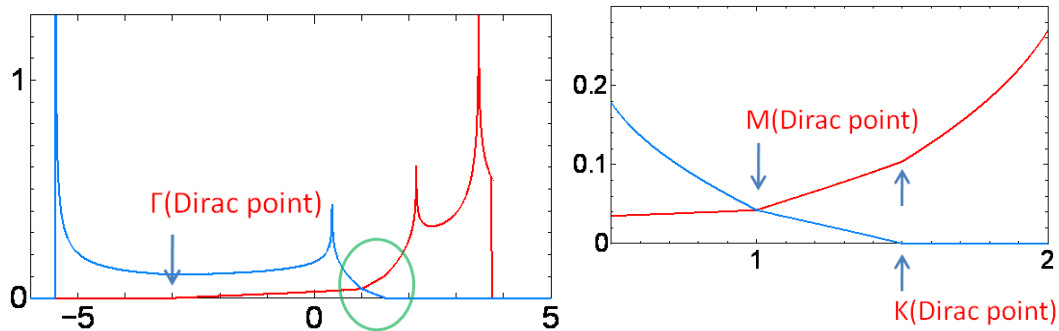


図 13-c : 状態密度(赤/青 : upper/lower branch) 図 13-d : 図 13-c の緑丸部分の拡大

ここで、注意すべきは、時間反転不変運動量である Γ 点、M点において縮退しているのは当然であるが、時間反転不変運動量ではないK点でも縮退している点である。これと同様の結果はすでに実験により観測されていた。(K. Sakamoto et al., PRL 103, 156801 (2009)) 彼らの主張は系が C_{3v} 対称性を持つ場合には、K 点での縮退が起こるというもので、このことは群論的な考察からも証明されている。(T. Oguchi et al., J. Phys. Condens. Matter 21, 092001 (2009)) 我々のモデルの場合、三角格子を組みポテンシャルの対称性は面に垂直方向に反対称なので、 C_{3v} 対称性を持っており、実験及び先行理論ともコンシステントである。また、スピン構造においても、 Γ 点、K点において **vortical** であり、M 点において **hyperbolic** であることも実験及び先行理論と整合性がある。状態密度においても、ほぼ、正方格子と同じ振る舞いを見せるが緑色の丸で囲った部分に現れる M 点、K点での Dirac point での特異性に注意されたい。

<Step2-4> 二次元三角格子-(2) (面内方向のポテンシャル勾配)

さて、<Step2-3>において、三角格子におけるエネルギー分散、及び、スピン構造が、この簡単なモデルでも再現できる事(K 点でのスピン縮退)を示した。しかしながら、同じ三角格子においても、別の系(Si(111)上の Tl)においては K 点でスピン分裂することが報告されている。(K. Sakamoto et al., PRL 102, 096805 (2009)) これは、結晶の対称性が C_{3v} ではなくて、 C_3 であることに起因すると報告されている。我々はこの実験結果を説明する為に、次の様な事を試みた。

表面の対称性が重要であると言う事は面内のポテンシャル勾配を取り入れる必要がある事を意味する。この事を加味し、表面垂直方向のポテンシャル勾配に加えて、下地原子のポテンシャルの影響を最低次で取り入れ、面内方向のポテンシャルを C_3 となるように(3 回対称性を持つが、鏡映面は持たない)取り入れた。それにより得られたエネルギー分散、スピン構造を図 14-(a, b, c)に示す。エネルギー分散から表面が C_{3v} 対称性を持つ時に見られた K 点での縮退が解け、スピン分裂している事が分かる。面内方向のスピン構造は C_{3v} とほぼ同じで、これは第一原理計算とコンシステントではないが、面直方向のスピン構造(K 点近傍でのみ up/down 成分を持ち、K 点の所では、完全にスピン up/down が固有状態となる。)は実験、及び第一原理計算とコンシステントである。我々は、パラメータを 2 つしか用いていない簡単なモデルにも関わらず、定性的に実験結果を説

明出来ている事に注意されたい。状態密度においては、 C_{3v} 対称性を持つ場合には Dirac point であったK点においてスピン分裂することにより、upper ブランチでは local minimum に、lower ブランチでは maximum になる為に、不連続な特異性を示し、そのことは実際に図 14-(d, e)において見られる。

<step2-2>と<step2-3>から学ぶべきことは、スピン・軌道相互作用におけるポテンシャル勾配の中で、表面に垂直成分と水平成分とに分けて考える時、各々の成分から生じる Rashba 効果はスピン構造において本質的に違った性質を持つという事である。我々は前者を”surface-normal Rashba 効果”、後者を”in-plane Rashba 効果”と区別している。これら二つのスピン分裂機構がお互いに Rashba 分裂を強めあったり、あるいは打ち消し合ったりすることにより、全体の Rashba パラメータにどのような影響をもたらすかを解明することは今後の課題である。

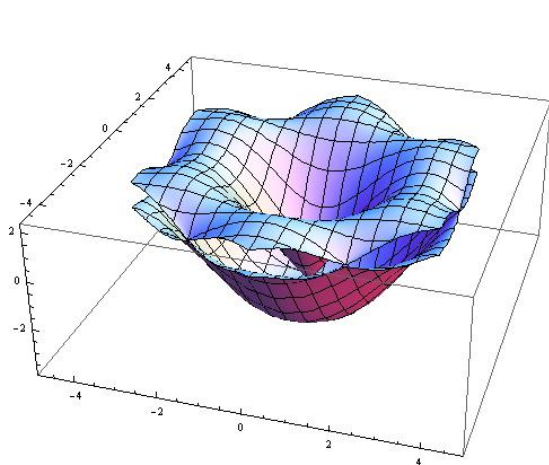


図 14-a : エネルギー分散

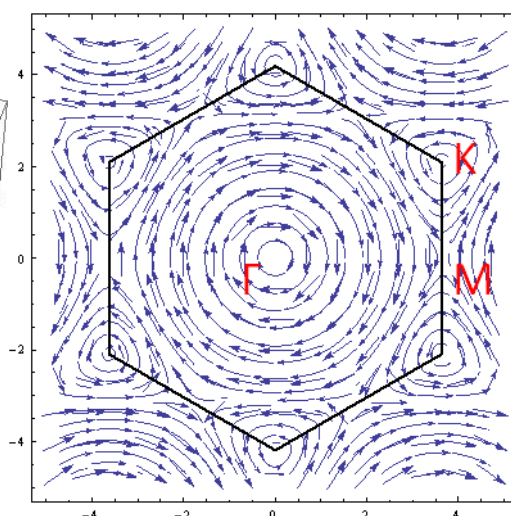


図 14-b : スピンの面内成分

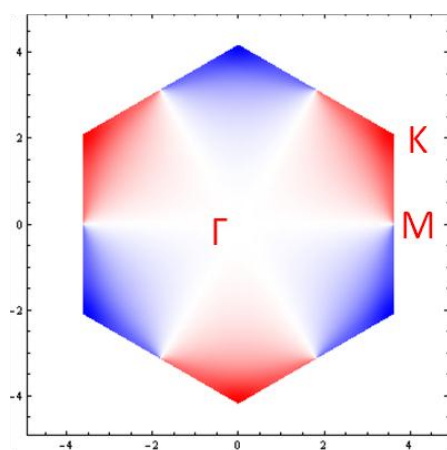


図 14-c: スピンの面直成分 (赤/青は up/down spin, 濃度はスピンの大きさに比例)

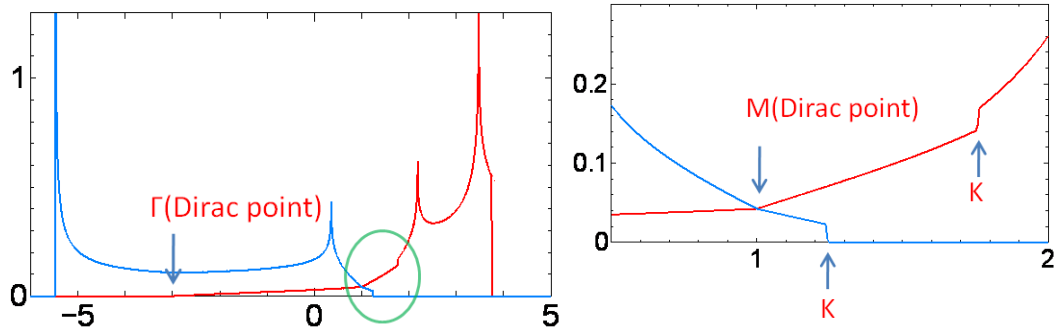


図 14-d : 状態密度(赤/青 : upper/lower branch) 図 14-e : 図 14-d の緑丸部分の拡大

<step 3> Coulomb 相互作用と Rashba 効果との競合

これまでの強束縛近似を用いて Rashba 効果を定性的に議論してきた。定量的な議論は第一原理計算に及ぶべくもないが、我々のアプローチは何が本質かを見極めようという姿勢である。その延長上として、我々のフォーマリズムで簡単に導入出来るのが、オンサイトの Coulomb 相互作用である。今の場合 Hubbard モデルに Rashba 効果の影響を取り入れる事と同等である。通常の Hubbard モデルの場合、再隣接サイトへの「スピンを保存した」電子遷移を考えるが、(surface-normal) Rashba 効果の場合には、「スピンを反転する」電子遷移も同時に考える事になる。良く知られているように、通常の Hubbard モデルは half-filled で反強磁性的な相関を示す。これはスピンを保存する電子遷移に起因する。ここに、Rashba 効果によるスピンを反転させる電子遷移を導入すると、Rashba 効果は Hubbard モデルに強磁性的な相関を導入することになる。すなわち、Coulomb 相互作用と Rashba 効果の競合は反強磁性的な相関と強磁性的な相関との競合問題を考える事になり、複雑であるが、興味深いスピン物性を示すと予想される。

このような動機から、まず我々は一次元原子鎖において、Rashba 効果とオンサイトの Coulomb 相互作用の競合現象を考えた。まずは、乱雑位相近似が良い指針を与えるであろう。Rashba coupling が無い場合、スピンにとって特別な軸方向はないから、スピン感受率は方向に依らず全て同じであり、それが発散するところで、常磁性・反強磁性・強磁性転移を生じる事は良く知られた議論である。ここに Rashba coupling を導入すると、スピンと軌道がカップルする為にスピンにとって特別な軸方向が生じ、スピン感受率はテンソルとなる。例えば、一次元原子鎖の方向を x 方向と取り(これは運動量が x 方向だと言う事)、ポテンシャルが z 軸方向に反対称(これにより Rashba 効果を生じる)と仮定すると、y 方向の有効磁場を生じ、それとスピンがカップルすることによりスピン-軌道相互作用が生じる。従ってスピン感受率の y 成分に関わる成分は対角成分(y, y)成分しかなく、Rashba coupling が無い時と同じだが、x, z 成分に関わる成分は対角成分(x, x), (z, z)だけでなく、非対角成分(x, z), (z, x)が生じる。これを対角化することにより、 $(-i s_x + s_z)$ と $(i s_x + s_z)$ という”helical”な長距離秩序を持ったスピン構造を励起することが分かる。(ここに s_k は k 方向のスピン演算子)この時に、具体的に Coulomb エネルギー、電子遷移確率、Rashba パラメータの値

によってどのようなスピン秩序が現れるかは、現在研究進行中である。このようなスピン秩序が出現した時には自発的に時間反転対称性が破れ、**Kramers** ペアが壊れる為に、後方散乱が出現するなど、伝導現象にも大きな影響を及ぼす事も、予想される興味深い現象の一つである。言うまでもなく、二次元系への同様の影響も考察に値する。正方格子の場合にはどんなに小さい **Coulomb** エネルギーでも **half-filled** で反強磁性を示すことから、このような、**Rashba** 効果と **Coulomb** 相互作用の影響は実験的にも観測されうかも知れない。三角格子の場合にはフラストレーションがある為に、さらに複雑であるが、豊富な物理を含んでいると期待される。

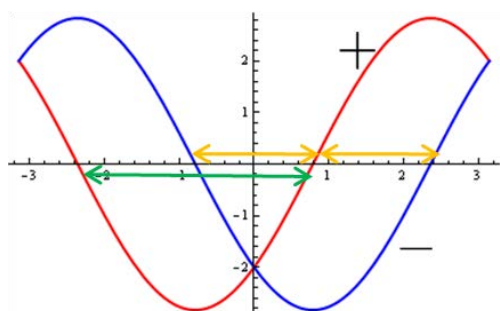


図 15: 一次元原子鎖において **Rashba** 分裂したエネルギー分散 (+/- は y 軸方向にスピンを量子化した時の up/down に対応する。) 緑/オレンジの矢印は **half-filled** の場合に $y/(x, z)$ 方向の磁場に対して励起可能な遷移。

§ 5 成果発表等

(1)原著論文発表 (国内(和文)誌 0 件、 国際(欧文)誌 21 件)

1. 著者、論文タイトル、掲載誌 巻、号、発行年

1. S. Hatta, C. Kato, N. Tsuboi, S. Takahashi, H. Okuyama, T. Aruga, A. Harasawa, T. Okuda, and T. Kinoshita, "Atomic and electronic structure of Tl/Ge(111)-(1×1): LEED and ARPES measurements and first-principles calculations", *Phys. Rev. B* **76**, 075427 (8 pp.) (2007).
2. Shinichiro Hatta, Tetsuya Aruga, Chihiro Kato, Shin Takahashi, Hiroshi Okuyama, Ayumi Harasawa, Taichi Okuda, and Toyohiko Kinoshita, "Band structure of Tl/Ge(111)-(3×1) : Angle-resolved photoemission and first-principles prediction of giant Rashba effect", *Phys. Rev. B* **77**, 245436 (8 pp.) (2008)
3. Shinichiro Hatta, Ryosuke Ohtomo, Chihiro Kato, Osami Sakata, Hiroshi Okuyama and Tetsuya Aruga, "Structure determination of Tl/Ge(111)-(3×1) by surface x-ray diffraction", *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 395226 (6 pp.) (2008).
4. Satoru Miyaki, Kenji Makoshi and Hiroyasu Koizumi, Two-copper-atom Units Induce a Pseudo Jahn-Teller Polaron in Hole-doped Cuprate Superconductors, *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 034702-1-7 (2008).
5. Shin Takahashi, Shinichiro Hatta, Akitaka Yoshigoe, Yuden Teraoka and Tetsuya Aruga, "High resolution X-ray photoelectron spectroscopy study on initial oxidation of 4H-SiC(0001)-($\sqrt{3}\times\sqrt{3}$)R30° surface", *Surf. Sci.* **603**, 221-225 (2009).
6. Y. Ohtsubo, S. Hatta, M. Iwata, K. Yaji, H. Okuyama and T. Aruga, "Structure determination of Bi/Ge(111)-($\sqrt{3}\times\sqrt{3}$)R30° by dynamical low-energy electron diffraction analysis and scanning tunneling microscopy", *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 405001 (6 pp.) (2009).
DOI: 10.1088/0953-8984/21/40/405001
7. S. Hatta, T. Aruga, Y. Ohtsubo and H. Okuyama, "Large Rashba spin splitting of surface resonance bands on semiconductor surface", *Phys. Rev. B* **80**, 113309 (4 pp.) (2009).
DOI: 10.1103/PhysRevB.80.113309
8. S. Hatta, Y. Ohtsubo, S. Miyamoto, H. Okuyama and T. Aruga, "Epitaxial growth of Bi films on Ge(111)", *Appl. Surf. Sci.* **256**, 1252-1256 (2009).
DOI: 10.1016/j.apsusc.2009.05.079
9. T. Nobukuni, H. Kaneyasu, N. Shima and K. Makoshi, Increase in d -Wave Superconducting Transition Temperature near Imperfect Layer in Correlated Electron System, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **78**, 113703-1-4 (2009).
10. K. Yaji, Y. Ohtsubo, S. Hatta, H. Okuyama, K. Miyamoto, T. Okuda, A. Kimura, H. Namatame, M. Taniguchi, and T. Aruga, "Large Rashba spin splitting of a metallic surface-state band on a semiconductor surface", *Nature Commun.* **1**, 17 (2010).
DOI: 10.1038/ncomms1016

11. Yoshiyuki Ohtsubo, Shinichiro Hatta, Koichiro Yaji, Hiroshi Okuyama, Koji Miyamoto, Taichi Okuda, Akio Kimura, Hirofumi Namatame, Masaki Taniguchi, and Tetsuya Aruga, "Spin-polarized semiconductor surface states localized in subsurface layers", *Phys. Rev. B* **82**, 201307(R) (4 pp.) (2010).
DOI: 10.1103/PhysRevB.82.201307
12. Kazuki Nozawa, Yasushi Ishii and Kenji Makoshi, First-principles study for effect of lattice defects on the crystal structure of the Zn-Sc cubic crystalline approximant, *Journal of Physics: Conference series* **226**, 12031 (2010).
13. Hirono Kaneyasu, Nobuhiko Hayashi, Bruno Gut, Kenji Makoshi, and Manfred Sigrist, "Phase transition in the 3-kelvin phase of eutectic Sr₂RuO₄-Ru", *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 104705 (2010). DOI: 10.1143/JPSJ.79.104705
14. Y. Ohtsubo, H. Muto, K. Yaji, S. Hatta, H. Okuyama and T. Aruga, "Structure determination of Pb/Ge(111)-beta-($\sqrt{3}\times\sqrt{3}$)R30° by dynamical low-energy electron diffraction analysis and first-principles calculation", *J. Phys.: Condens. Matter* **23**, 435001 (6 pp.) (2011).
DOI: 10.1088/0953-8984/23/43/435001
15. S. Hatta, Y. Ohtsubo, T. Aruga, S. Miyamoto, H. Okuyama, H. Tajiri, and O. Sakata, "Dynamical fluctuations in In nanowires on Si(111)", *Phys. Rev. B* **84**, 245321 (8 pp.) (2011).
DOI: 10.1103/PhysRevB.84.245321
16. Yusuke Kotani, Nobuyuki Shima, and Kenji Makoshi, "Theoretical study of electric conductance of atomic contact with the Friedel sum rule", *Surf. Sci.* **605**, 770-774 (2011).
DOI: 10.1016/j.susc.2011.01.016
17. Y. Ohtsubo, S. Hatta, H. Okuyama, and T. Aruga, "A metallic surface state with unitiaxial spin polarization on Ti/Ge(111)-(1x1)", *J. Phys.: Condens. Matter* **24**, 092001 (5 pp.) (2012).
DOI: 10.1088/0953-8984/24/9/092001
18. Y. Kotani, N. Shima, and K. Makoshi, "The relation between the electric conductance of nanostructure bridge and Friedel sum rule", *J. Phys. Conference Series* **344**, 012018 (2010).
DOI: 10.1088/1742-6596/344/1/012018
19. Y. Ohtsubo, S. Hatta, N. Kawai, A. Mori, Y. Takeichi, K. Yaji, H. Okuyama, and T. Aruga, "Spin-polarized surface states on Br/Ge(111)-(1x1) - the surface spin polarization without heavy elements", *Phys. Rev. B* **86**, 165325 (2012).
DOI: 10.1103/PhysRevB.86.165325
20. K. Yaji, S. Hatta, T. Aruga, and H. Okuyama, "Structural and electronic properties of Pb/Ge(111)- β ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30° surface studied by photoelectron spectroscopy and first-principles calculations", *Phys. Rev. B* **86**, 235317 (2012).
DOI: 10.1103/PhysRevB.86.235317
21. Y. Ohtsubo, J. Mauchain, J. Faure, E. Papalazarou, M. Marsi, P. Le Fevre, F. Bertran, A. Taleb-Ibrahimi, and L. Perfetti, "Giant anisotropy of spin-orbit splitting at the bismuth surface", *Phys. Rev. Lett.* **109**, 122502 (2013).

(2)その他の著作物(総説、書籍など)

1. 「結晶表面におけるパイエルス転移」
有賀哲也, 八田振一郎, 日本物理学会誌, 63, 178-186 (2008).
2. 「Tl吸着Ge(111)表面のラシュバ効果」
八田振一郎, 有賀哲也, 表面科学, 30, 16-21 (2009).
3. 「表面系のRashba効果」
有賀哲也, 八田振一郎, J. Vac. Soc. Jpn. 52, 577-581 (2009).
4. 「結晶表面における電荷密度波相転移」
八田振一郎, 有賀哲也, 表面科学 33, 513-518 (2012).
5. 「低次元物性」
有賀哲也, 「現代表面科学 3 表面物性」, 共立出版 (2012).

(3)国際学会発表及び主要な国内学会発表

① 招待講演 (国内会議 15 件、国際会議 5 件)

1. 有賀哲也(京大理)
「光電子分光による表面低次元構造の物性」
光ナノサイエンス特別講義 (奈良先端科学技術大学、2007.10.22).
2. 有賀哲也(京大理)
「巨大 Rashba 効果と界面スピントロニクス」
シンポジウム「物性化学のフロンティア」(東京大学物性研究所、2007.11.20-22)
3. 有賀哲也(京大理)
「表面吸着系における巨大 Rashba 効果」
日本表面科学会研究会「Rashba 効果とナノスピントロニクス」(東京大学、2008. 3.10)
4. 有賀哲也(京大理)
「表面吸着系における巨大 Rashba 効果」
日本物理学会シンポジウム「反転対称性の破れた表面におけるスピンと軌道」(近畿大学、2008.3.24)
5. 有賀哲也(京大理)
「光電子分光で見る表面 Rashba 効果」
表面科学講演大会(東京、2008.11.14).
6. 有賀哲也(京大理)
「重原子吸着半導体表面における巨大 Rashba 効果」
日本表面科学会東北・北海道支部講演会(仙台、2009.3.12).
7. 八田振一郎(京大理)
「Tl および Bi 吸着 Ge(111) 表面における巨大ラシュバ効果」
日本物理学会シンポジウム「光で探る半導体スピンダイナミクス」(立教大学、2009.3.29).

8. 有賀哲也(京大理)
「表面における Rashba 効果」
第 1 回岩澤コンファレンス (2009.5.30, 東京).
9. 八田振一郎(京大理)
「BiおよびPb吸着Ge(111)表面のRashba 型スピン分裂」
ISSPワークショップ「真空紫外アンジュレータビームラインの高度化と物性科学」
(2009/12/18, 柏).
10. T. Aruga(京大理)
"Rashba Effect at Surfaces"
4th International Workshop on Spin Currents & 2nd International Workshop on
Spin caloritronics (2010.2.8-10, Sendai).
11. 有賀哲也(京大理)
「金属表面の構造変化・相転移・電子状態」
梶原浩先生退官記念シンポジウム(九州大学、2010.2.12)
12. T. Aruga(京大理)
"Rashba spin splitting at semiconductor surfaces"
SSSJ-A3 Foresight Joint Symposium on Nanomaterials and Nanostructures, (5-7 July 2010,
Tokyo).
13. T. Aruga(京大理)
"Large Rashba Spin Splitting on Semiconductor Surfaces"
29th International Brandt Ritchie Workshop on Particle Penetration Phenomena and
Excitations of Solids, (May 12-15, 2011, Matsue).
14. T. Aruga(京大理)
"Spin-polarized surface states induced by spin-orbit interaction on semiconductor surfaces"
Collaborative Conference on Materials Research (June 25-29, 2012, Seoul)
15. 有賀哲也(京大理)
"Spin-polarized surface states induced by spin-orbit interaction on semiconductor surfaces"
村田セミナー, (東京大学、2012.7.29)
16. 矢治光一郎(東大物性研)
「半導体表面上でスピン偏極した金属的表面電子状態」
第 4 回放射光若手研究会「表面電子のスピンが生み出す物理の最前線: ラッシュバ効果、ト
ポロジカル絶縁体」(東京大学、2012.8.28-29)
17. 八田振一郎(京大理)
「重元素吸着 Ge(111)表面のスピン偏極状態と電気伝導」
第 4 回放射光若手研究会「表面電子のスピンが生み出す物理の最前線: ラッシュバ効果、ト
ポロジカル絶縁体」(東京大学、2012.8.28-29)
18. T. Aruga(京大理)
"Spin-polarized electronic states at surfaces and interfaces of Ge"
10th Japan-Russia Seminar on Semiconductor Surfaces (16-18 Sep. 2012, Tokyo).

19. 有賀哲也(京大理)

「半導体表面・界面における Rashba スピン偏極電子状態」
東京大学物性研究所談話会 (30 Jan. 2013, Kashiwa).

20. 矢治光一郎(東大物性研)

「半導体上でスピン分裂した金属表面状態の発見」
日本物理学会第 68 回年次大会、広島、2013.3.26-29.

② 口頭発表 (国内会議 40 件、国際会議 5 件)

1. 八田振一郎(京大理), 本多潤(京大理)、大坪嘉之(京大理), 坂田修身(JASRI)、奥山弘(京大理), 有賀哲也(京大理)

「Ga/Cu(001)-(5x1)表面の擬一次元的な原子構造と電子状態」
日本表面科学会第 27 回表面科学講演大会(早稲田大学、2007.11.1-3)

2. 大坪嘉之(京大理), 宮本早苗(京大理), 八田振一郎(京大理), 奥山弘(京大理), 有賀哲也(京大理)

「Ge(111)表面上の Bi 薄膜の成長と電子状態 2」
日本物理学会第 63 回年次大会(近畿大学、2008.3.22-26)

3. 宮本早苗(京大理), 大坪嘉之(京大理), 田尻寛男(JASRI), 坂田修身(JASRI)、八田振一郎(京大理), 奥山弘(京大理), 有賀哲也(京大理)

「表面 X 線回折法による In/Si(111)-(4x1)表面の相転移の研究」
日本物理学会第 63 回年次大会(近畿大学、2008.3.22-26)

4. 大塚泰弘、島信幸、馬越健次、

「ナノサイズ架橋構造におけるコンダクタンスの電極接合部分による影響」
日本物理学会第 63 回年次大会(近畿大学、2008.3.22-26)

5. S. Hatta, Y. Ohtsubo, H. Okuyama, T. Aruga

“Giant Rashba spin splitting of surface-resonance bands on Bi/Ge(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)”
26th European Conference on Surface Science, (2009/8/30-9/4, Parma, Italy).

6. 大坪嘉之(京大理), 宮本早苗(京大理), 八田振一郎(京大理), 原沢あゆみ(東大)、奥田太一(東大)、松田巖(東大)、奥山弘(京大理), 有賀哲也(京大理)

「Bi/Ge(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30° 表面の電子状態とRashba効果」
日本物理学会2008年秋季大会(山形大学、2008.9.20-23).

7. 野澤和生, 石井靖, 馬越健次

「Zn6Sc立方晶の低温相転移におけるCu添加の影響」
日本物理学会2008年秋季大会(山形大学、2008.9.20-23).

8. 小谷祐介, 馬越健次, 島信幸

「原子架橋系の電気伝導度とフリーデルの総和則」
日本物理学会2008年秋季大会(山形大学、2008.9.20-23)

9. 大坪嘉之(京大理), 宮本早苗(京大理), 八田振一郎(京大理), 奥山弘(京大理), 有賀哲也(京大理)

「Bi/Ge(111)表面の構造と電子状態」

日本物理学会第64回年次大会(立教大学、2009.3.27-30)

10. 矢治光一郎(京大理)、大坪嘉之(京大理)、八田振一郎(京大理)、奥山弘(京大理)、有賀哲也(京大理)

「金属吸着Ge(111)表面の電子状態とホール・サブバンド構造」

日本物理学会第64回年次大会(立教大学、2009.3.27-30)

11. 小谷祐介, 島信幸, 馬越健次

「架橋系の電気伝導度とフリーデルの総和則」

日本物理学会第64回年次大会(立教大学、2009.3.27-30)

12. 八田振一郎, 奥山弘, 有賀哲也

「角度分解光電子分光法によるSb/Ge(111)-(2×1)表面の電子状態の研究」

日本物理学会2009年秋季大会(2009/9/25-9/28, 熊本)

13. 矢治光一郎, 大坪嘉之, 八田振一郎, 奥山弘, 宮本幸治, 奥田太一, 木村昭夫, 生天目博文, 谷口雅樹, 有賀哲也

「4/3原子層鉛吸着したGe(111)表面のスピン分裂した電子状態」

日本物理学会2009年秋季大会(2009.9.25-28, 熊本)

14. 大坪嘉之, 松原弘佳, 八田振一郎, 原沢あゆみ, 奥田太一, 松田巖, 奥山弘, 有賀哲也

「Bi/Ge(111)-(2×1)表面の原子構造と電子状態」

日本物理学会2009年秋季大会(2009/9/25-28, 熊本).

15. 矢治光一郎, 大坪嘉之, 八田振一郎, 奥山弘, 宮本幸治, 奥田太一, 木村昭夫, 生天目博文, 谷口雅樹, 有賀哲也

「4/3原子層鉛吸着Ge(111)表面のラッシュバ分裂した電子状態」

日本表面科学会学術講演会(2009.10.27-29, 東京).

16. 大坪嘉之, 矢治光一郎, 八田振一郎, 奥山弘, 宮本幸治, 奥田太一, 木村昭夫, 生天目博文, 谷口雅樹, 有賀哲也

「Geに由来する表面状態のRashba分裂」

表面・界面スペクトロスコープ2009(2009/12/4~5, 札幌).

17. 八田振一郎, 宮本早苗, 大坪嘉之, 田尻寛男, 坂田修身, 奥山弘, 有賀哲也

「表面X線回折法によるIn/Si(111)-(4×1)表面の相転移の研究II」

日本物理学会第65回年次大会(2010.3.20-23, 岡山).

18. 大坪嘉之, 矢治光一郎, 八田振一郎, 奥山弘, 宮本幸治, 奥田太一, 木村昭夫, 生天目博文, 谷口雅樹, 有賀哲也

「Geに由来する表面状態のRashbaスピン分裂構造」

日本物理学会第65回年次大会(2010.3.20-23, 岡山).

19. K. Yaji, Y. Ohtsubo, S. Hatta, H. Okuyama, T. Aruga

“Rashba spin-orbit interaction in metallic semiconductor surface states”

18th International Vacuum Congress, (Beijing, Aug. 23-27, 2010).

20. S. Hatta, S. Miyamoto, Y. Ohtsubo, H. Tajiri, O. Sakata, H. Okuyama, T. Aruga
"First-order transition following precursory relaxation of Peierls distortion on In/Si(111)"
18th International Vacuum Congress, (Beijing, Aug. 23-27, 2010).
21. 矢治光一郎, 大坪嘉之, 八田振一郎, 武市泰男, 奥山弘, 有賀哲也
「PbBi 共吸着 Ge(111)表面のスピン偏極した金属的ショックレー状態」
2010 年日本物理学会秋季大会、大阪、2010.9.23-26.
22. 矢治光一郎, 大坪嘉之, 八田振一郎, 武市泰男, 奥山弘, 有賀哲也
「PbBi 共吸着 Ge(111)表面のスピン偏極した金属的表面電子状態」
真空協会・日本表面科学会合同講演会、大阪、2010.11.4-6.
23. 岩田学, 八田振一郎, 矢治光一郎, 河合宣彦, 田尻寛男, 坂田修身, 奥山弘, 有賀哲也
「PbBi 共吸着 Ge(111)表面の原子構造」
2010 年関西薄膜表面物理セミナー、大阪、2010.11.26-27.
24. 岩田学, 八田振一郎, 矢治光一郎, 河合宣彦, 林幸広, 田尻寛男, 坂田修身, 奥山弘, 有賀哲也
「PbBi 共吸着 Ge(111)表面の原子構造 II」
第 66 回日本物理学会年次大会、新潟、2011.3.25-28.
25. 大坪嘉之, 森亮順, 八田振一郎, 奥山弘, 有賀哲也
「Br 終端 Ge(111)基板の subsurface 領域に局在するスピン偏極電子状態」
第 66 回日本物理学会年次大会、新潟、2011.3.25-28.
26. 大坪嘉之, 森亮順, 矢治光一郎, 武市泰男, 金聖憲, 八田振一郎, 奥山弘, 有賀哲也
「Br/Ge(111)-(1×1)表面 subsurface 領域に局在した電子状態のスピン分解光電子分光」
日本物理学会 2011 年秋季大会、富山、2011.9.21-24.
27. 塩足亮隼, 北口雄也, 八田振一郎, 奥山弘, 有賀哲也
「Cu(110)に吸着した NO の電子状態の制御」
日本物理学会 2011 年秋季大会、富山、2011.9.21-24.
28. 塩足 亮隼, 北口 雄也, 八田 振一郎, 奥山 弘, 有賀 哲也
「Cu(110)表面における NO 分子間に形成された共有結合の実空間観測」
第 31 回表面科学学術講演会、東京、2011.12.15-17.
29. 北口雄也, 塩足亮隼, 八田振一郎, 奥山弘, 有賀哲也
「Cu(110)におけるメタノールと脱水素化物の単分子観測」
第 31 回表面科学学術講演会、東京、2011.12.15-17.
30. 大坪嘉之, 八田 振一郎, 奥山 弘, 有賀 哲也
「Ti/Ge(111)-(1×1)表面の金属的なスピン偏極表面状態」
表面・界面スペクトロスコープ2011、神奈川、2011.12.2-3.
31. 森亮順, 大坪嘉之, 矢治光一郎, 武市泰男, 金聖憲, 八田振一郎, 奥山弘, 有賀 哲也
「Br/Ge(111)-(1×1)表面の電子状態」
表面・界面スペクトロスコープ2011、神奈川、2011.12.2-3.

32. 大坪嘉之、八田振一郎、奥山弘、有賀哲也
「Tl/Ge(111)-(1×1)表面における過剰 Tl による金属的スピン分裂バンドの形成」
日本物理学会第 67 回年次大会、兵庫、2012.3.24-27.
33. 矢治光一郎、大坪嘉之、八田振一郎、原沢あゆみ、奥山弘、柿崎明人、有賀哲也
「単原子層 Pb 吸着 Ge(111)の電子状態とそのスピン構造」
日本物理学会第 67 回年次大会、兵庫、2012.3.24-27.
34. 八田振一郎、奥山弘、有賀哲也
「金属吸着 Ge(111)表面の電気伝導測定」
日本物理学会第 67 回年次大会、兵庫、2012.3.24-27.
35. Y. Ohtsubo, S. Hatta, K. Yaji, H. Okuyama, and T. Aruga
"Spin-polarized metallic surface states induced by spin-orbit interaction on semiconductors without heavy elements"
29th European Conference on Surface Science, Edinburgh, 3-7 Sep. 2012.
36. T. Mii, N. Shima, and K. Makoshi
"Theoretical study of Rashba effect based on tight-binding model"
29th European Conference on Surface Science, Edinburgh, 3-7 Sep. 2012.
37. 八田振一郎、野間俊、奥山弘、有賀哲也
「Tl 吸着 Ge(111)表面の電気伝導度測定」
日本物理学会 2012 年秋季大会、横浜、2012.9.18-21.
38. 三井隆志、島信幸、馬越健次
「強束縛近似による Rashba 効果の理論的考察」
日本物理学会 2012 年秋季大会、横浜、2012.9.18-21.
39. 北口雄也、羽深智、乗本信吾、八田振一郎、奥山弘、有賀哲也
「Cu(110)に吸着したフェノール分子の STM 観測」
第 32 回表面科学学術講演会、仙台、2012.11.20-22.
40. 八田振一郎
「半導体表面における表面電気伝導とスピン輸送」
デバイスと界面～ナノ構造による電子操作と新型デバイス、CREST「ナノ界面技術の基盤構築」研究領域 第2回公開ワークショップ、東京 2013.2.27.
41. 有賀哲也
「半導体表面の巨大 Rashba 効果とスピントロニクス」
デバイスと界面～ナノ構造による電子操作と新型デバイス、CREST「ナノ界面技術の基盤構築」研究領域 第2回公開ワークショップ、東京 2013.2.27.
42. 八田振一郎、野間俊、奥山弘、有賀哲也
「ラッシュバ分裂した表面電子系におけるスピン偏極電流の検証」
日本物理学会第 68 回年次大会、広島、2013.3.26-29.
43. 矢治光一郎、望月出海、金聖憲、武市泰男、原沢あゆみ、大坪嘉之、P. Le Fevre, F. Bertran, A. Taleb-Ibrahimi, 柿崎明人、小森文夫

「Pt/Ge(001)表面の一次元金属的な電子状態」
日本物理学会第 68 回年次大会、広島、2013.3.26-29.

44. 三井隆志、島信幸、馬越健次
「蜂の巣格子における Rashba 効果とスピン構造」
日本物理学会第 68 回年次大会、広島、2013.3.26-29.

45. 狩野恒一、馬越健次
「合金表面におけるランシュバ効果の増強」
日本物理学会第 68 回年次大会、広島、2013.3.26-29.

③ ポスター発表 (国内会議 13 件、国際会議 8 件)

1. 矢治光一郎, 大坪嘉之, 八田振一郎, 奥山弘, 宮本幸治, 奥田太一, 木村昭夫, 生天目博文, 谷口雅樹, 有賀哲也

“Rashba spin splitting of metallic surface state for 4/3-monolayer Pb/Ge(111)”
第5回放射光表面科学部会シンポジウム (2009.10.5, 奈良)

2. 大坪嘉之, 矢治光一郎, 八田振一郎, 奥山弘, 宮本幸治, 奥田太一, 木村昭夫, 生天目博文, 谷口雅樹, 有賀哲也

“Large Rashba spin splitting on Bi/Ge(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30° ”
第5回放射光表面科学部会シンポジウム(2009.10.5, 奈良)

3. K. Yaji, Y. Ohtsubo, S. Hatta, H. Okuyama, K. Miyamoto, T. Okuda, A. Kimura, H. Namatame, M. Taniguchi, and T. Aruga

“Rashba spin splitting of metallic surface state for 4/3-monolayer Pb/Ge(111)”
11th International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure (ICESS-11),
(2009.10.6-10, Nara).

4. Y. Ohtsubo, K. Yaji, S. Hatta, H. Okuyama, K. Miyamoto, T. Okuda, A. Kimura, H. Namatame, M. Taniguchi, T. Aruga

“Large Rashba spin splitting on Bi/Ge(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30° ”
11th International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure (ICESS-11),
(2009/10/6-11, Nara).

5. 矢治光一郎, 大坪嘉之, 武藤宏, 八田振一郎, 奥山弘, 有賀哲也

「Pb/Ge(111)- β ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30° の表面構造と電子状態」
日本物理学会第65回年次大会 (2010.3.20-23, 岡山).

6. K. Yaji, Y. Ohtsubo, S. Hatta, H. Okuyama, K. Miyamoto, T. Okuda, A. Kimura, H. Namatame, M. Taniguchi, T. Aruga, “Rashba spin splitting of a monolayer Pb-covered Ge(111) surface”, 37th International Conference on Vacuum Ultraviolet and X-ray Physics, (Vancouver, July 11-16, 2010).

7. Y. Ohtsubo, K. Yaji, S. Hatta, H. Okuyama, K. Miyamoto, T. Okuda, A. Kimura, H. Namatame, M. Taniguchi, T. Aruga, “Spin polarization of Shockley-type semiconductor surface state”, 37th International Conference on Vacuum Ultraviolet and X-ray Physics, (Vancouver, July 11-16, 2010).

8. 矢治 光一郎, 大坪 嘉之, 八田 振一郎, 奥山 弘, 宮本 幸治, 奥田 太一, 木村 昭夫, 生天目 博文, 谷口 雅樹, 有賀 哲也, 「鉛吸着したGe(111)表面のスピンスピン分裂した電子状態」、特定領域研究「スピンの創出と制御」平成22 年度研究会、京都、2010.6.23-25.
9. 大坪嘉之, 森亮順, 矢治光一郎, 八田振一郎, 奥山弘, 有賀哲也, 「Br/Ge(111)表面のShockley 状態とスピンスピン軌道相互作用」、2010 年日本物理学会秋季大会、大阪、2010.9.23-26.
10. 岩田学, 八田振一郎, 矢治光一郎, 河合宣彦, 田尻寛男, 坂田修身, 奥山弘, 有賀哲也, 「PbBi 共吸着 Ge(111)表面の原子構造」、2010 年日本物理学会秋季大会、大阪、2010.9.23-26.
11. 有賀哲也, 「半導体表面の Rashba 効果 --- 半導体スピントロニクスへむけて」、SORST シンポジウム「IT/BT ならびに省エネの支え役『磁性材料』の将来像」、東京、2011/1/19-20.
12. 矢治光一郎, 大坪嘉之, 八田振一郎, 岩田学, 奥山弘, 有賀哲也, 「Ge(111)の表面吸着種に誘起された Ge 由来のスピンスピン偏極した表面電子状態」、第 66 回日本物理学会年次大会、新潟、2011.3.25-28.
13. 武市泰男, 奥田太一, 金聖憲, 矢治光一郎, 常丸靖史, Ran FanYong, 原沢あゆみ, 松田巖, 柿崎明人, 「高効率スピンスピン分解光電子分光による表面電子状態のスピンスピン構造の直接測定」、第 66 回日本物理学会年次大会、新潟、2011.3.25-28.
14. A. Shiotari, Y. Kitaguchi, H. Okuyama, S. Hatta, T. Aruga, "Visualization of covalent bonding between NO on Cu(110)", 28th European Conference on Surface Science, Wroclaw, Aug 28 - Sep 2, 2011.
15. Y. Kitaguchi, A. Shiotari, H. Okuyama, S. Hatta, T. Aruga, "STM observation of methanol and its dehydrogenation products on Cu(110)", 28th European Conference on Surface Science, Wroclaw, Aug 28 - Sep 2, 2011.
16. Takashi Mii, "Tight-binding Model of Rashba Spin Splitting in 1D Atomic Chain", International meeting on Novel Catalyst Design and Surface Science, Himeji, Japan, December 8-10, 2011
17. 林幸広, 八田振一郎, 奥山弘, 有賀哲也
「Pb/Ge/Si(111)-(1x1)表面の構造と電子状態」
日本物理学会 2012 年秋季大会、横浜、2012.9.18-21.
18. 八田振一郎, 野間俊, 奥山弘, 有賀哲也
「金属吸着 Ge(111)表面の電気伝導度測定 II」
日本物理学会 2012 年秋季大会、横浜、2012.9.18-21.
19. Y. Ohtsubo, L. Perfetti, P. Le Fevre, F. Bertran, and A. Taleb-Ibrahimi
"Possible non-trivial surface-band dispersion on Bi(111)"
12th International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure, Saint-Malo, Sep. 16-21, 2012.

20. 河合宣彦、八田振一郎、奥山弘、有賀哲也
「Au/Si(001)-c(8x2)表面の構造と電子状態」
日本物理学会第 68 回年次大会、広島、2013.3.26-29.

21. 野間俊、八田振一郎、奥山弘、有賀哲也
「Pb/Ge(111)-($\sqrt{3}\times\sqrt{3}$)- β 表面における伝導度の温度依存性」
日本物理学会第 68 回年次大会、広島、2013.3.26-29.

(4)知財出願

- ① 国内出願 (1 件)
- ② 外国出願 (0 件)

(5)受賞・報道等

① 受賞

- 1. 矢治 光一郎、平成 21 年度日本表面科学会放射光表面科学シンポジウム最優秀ポスター賞 (2009.10.5)
- 2. 矢治光一郎、平成 21 年度日本表面科学会若手研究者奨励賞 (2010.5)。
- 3. 大坪嘉之、表面・界面スペクトロスコーピー2011 スチューデント奨励賞 (2011.12.3)。
- 4. 矢治光一郎、平成 24 年度日本物理学会若手奨励賞 (2013.3)
- 5. 有賀哲也、第 17 回日本表面科学会学会賞 (2013.5)

②マスコミ(新聞・TV等)報道

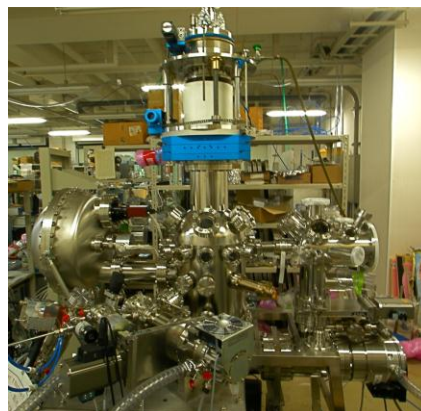
- ・「電子スピンの向きを揃える半導体表面の作製に成功」(H22 年 5 月 18 日、有賀グループ)
日刊工業新聞 (H22 年 5 月 19 日)
産経新聞 (H22 年 5 月 19 日)

§ 6 研究期間中の活動

年月日	名称	場所	参加人数	概要
2011年7月 29日	山梨日川会講演会	山梨市民会館	100人	理科教育に関する一般向け講演(有賀)
2012年1月 7,8日	色と香りであやどる科学と芸術	京都文化博物館	900人	京大理学研究科社会交流室主催の一般向けイベント。「色と化学」講演(有賀)。
2012年10月 20日	京都大学理学部九州講演会「ノーベル賞の源へ」	福岡銀行本店大ホール	500人	益川名誉教授、京大理教授らによる高校生向け講演会。
2012年11月 22日	京都府立嵯峨野高校SSH 特別講義	嵯峨野高校	40人	「色と化学」講義(有賀)

§ 7 結び

適度なプレッシャーのもとで、精一杯研究をさせていただきました。CRESTに参加させて頂いて、真に有意義な基礎研究とはなにかということを考える機会を与えて頂いたと思っています。得られた成果として、物質科学的な観点からは当初の目標を上回るものが得られたと思います。最大の目標であったスピン偏極電流についてネガティブな結論を得たことは残念ですが、Rashba系のスピン輸送についての理解が進み、進むべき方向が確認できたと考えています。また、当初は予想だにしていなかったものが見えてきました。気持ちを新たに、今後の展開にむけて頑張りたいと思います。



角度分解光電子分光 (ARPES) 装置