

原子層物質の光吸収におけるバレー偏極

東北大学理学研究科物理学専攻 物性理論研究室 ガラムカリ和

1. 研究背景

六方格子はユニットセル内に 2 つの原子 A,B を含む。k-空間では正六角形のブリルアンゾーンの頂点に非等価な K バレーと K'バレーを有する。電子のもつバレーの情報を制御する技術をバレートロニクスと呼び、エレクトロニクス、スピントロニクスに次ぐ第三の技術として注目を集めている。バレートロニクスの基礎となる現象の 1 つにバレー偏極が挙げられる[1]。これは空間反転対称性の破れた六方格子に左 (右) 円偏光を照射することで K (K') バレーの電子が励起するというものである(図 1)。

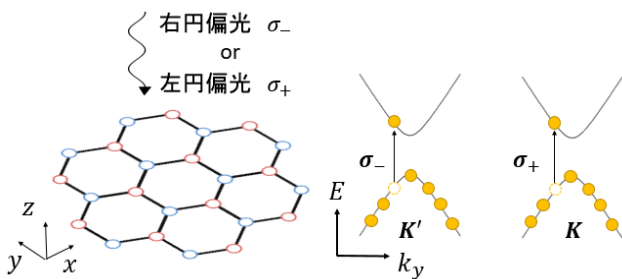


図 1 バレー偏極の概念図。σ₊(σ₋)は左(右)円偏光を意味する

A=B の時、六方格子は空間反転対称性を持ち、K バレー K'バレーで線形な分散関係を持つ。このときバレー偏極は生じない。一方で、A≠B の時、空間反転対称性が破れることによってエネルギーギャップが生じ、K バレーK'バレーでパラボリックな分散関係を持つ。A≠B の例としては A 原子にホウ素を、B 原子に窒素を並べた六方窒化ホウ素 (h-BN) などが知られている。

バレー偏極のデバイスへの応用を考えるにあたっては、バレー偏極が何らかの方法で制御可能であると便利である。そこで、ケイ素原子を六方格子に並べたシリセンと呼ばれる物質に、垂直一様電場 V を印加した系に注目する。シリセンは面外方向に変形した構造を持っている。シリセンにおいては A=B であるが、スピン軌道相互作用によってわずかなエネルギーギャップが生じる。シリセンは空間反転対称性と時間反転対称性を持つためにあらゆる点で 2 重にエネルギー縮退しているが、電場を与えることで、空間反転対称性を破り、この縮退を解くことができる。このとき、バレー偏極のみならず、スピン偏極や、電子が A 原子または B 原子に局在する擬スピン偏極も生じる。シリセンは V=0 でトポロジカル絶縁体であるが、電場によって徐々にエネルギーギャップが小さくなり、V=V_c でワイルセメタルになり、さらに電場を大きくすると、バンドギャップ絶縁体になる。

既に Ezawa が議論したとおり[2]、シリセンがトポロジカ

ル絶縁相にあるのか、バンドギャップ絶縁相にあるかでバレーの選択則が反転する(図 2)。なお、擬スピン偏極度も反転する(本論文の成果)。以上述べたように、シリセンは電子のバレー自由度、擬スピン自由度、スピン自由度という 3 つの自由度を電場で変調できるという点で多くの応用可能性を秘めている。

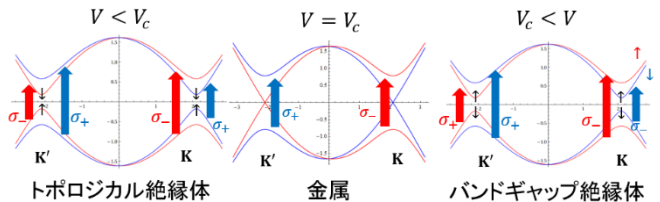


図 2 シリセンの分散関係の電場依存性。青(赤)はダウン(アップ)スピンを意味する。黒い矢印は擬スピンの向きを表し、↑(↓)は A(B)サイトに局在していることを意味する。

しかし、シリセンにおいては、エネルギーギャップが 8meV と極めて小さくデバイス開発においては必ずしも有利ではない。また、電場を連続的に変化させたときに、系が金属である状態は V=V_c の 1 点だけであり、金属状態を維持しない問題がある。

2. 研究目的

本研究では、より重い Bi 原子で椅子型六方格子(図 3)を形成した原子層 Bi(110)に注目し、金属絶縁体転移が電場によって変調する原子層を設計する。Bi(110)は重い原子から構成されるために、スピン軌道相互作用によってシリセンより大きなバンドギャップが開くことが予想できる。また、椅子型六方格子上に Bi 原子を並べることによってスピン軌道相互作用の原子層に垂直な成分(ラッシュバ項)が大きく、以下に示す新規なふるまいを示す。

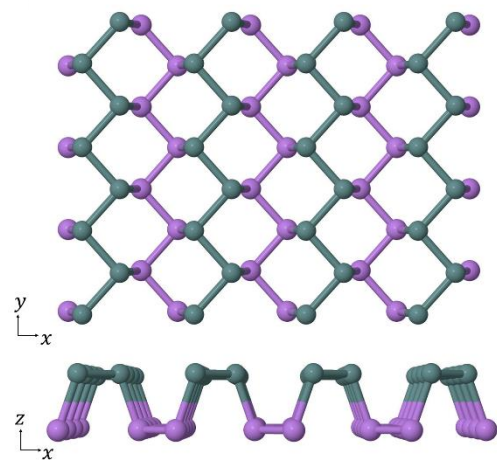


図 3 Bi(110)の構造。上の鎖を深緑,下の鎖を紫で書いた。

3. 計算方法

Bi(110)のハミルトニアンを対角化することによって、エネルギー分散関係と波動関数を電場の関数として求める。求

めた波動関数を用いて、光遷移確率を k の関数として求め、バレー偏極を議論する。また電子が図3の紫の鎖と深緑の鎖のどちらに局在するかを表す量として擬スピン偏極度を定義して、その電場依存性を議論する。擬スピン偏極度は深緑の鎖にいるときに+1、紫の鎖にいるときに-1をとると定義する。

4. 計算結果

4-1. Bi(110)のエネルギー分散関係の電場依存性

Bi(110)はスピン軌道相互作用によって165meVのエネルギーギャップを持つことが分かった。エネルギーバンドは、系に垂直に印加する一様電場 V によって、変調可能で、 $V < 92[\text{meV}/\text{\AA}]$ で絶縁体、 $92[\text{meV}/\text{\AA}] < V < 404[\text{meV}/\text{\AA}]$ で金属状態になる。さらに $404[\text{meV}/\text{\AA}] < V$ で再び絶縁体になる。図4は、バレーの分裂の様子を示したものであり、 $V=0$ で $k_x = 0$ 上にあった2つのバレーが、 $92[\text{meV}/\text{\AA}] < V < 404[\text{meV}/\text{\AA}]$ で2つずつ分裂し4つのコーンをもった後に、 $404[\text{meV}/\text{\AA}] < V$ で今度は $k_y = 0$ 上に2つのバレーが生じる。4つのコーンの出現はラシュバ項の小さいシリセンには見られなかった現象である。

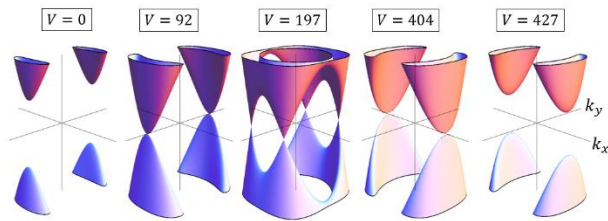


図4 Bi(110)のエネルギー分散関係の電場依存性

4-2. Bi(110)のバレー偏極度の電場依存性

次に各電場 V で Bi(110)のバレー偏極の様子を調べた。Bi(110)の原子層に垂直に円偏光を照射してもバレー偏極は生じない。そこで原子層の横(100)方向から円偏光を照射したときの遷移行列要素の絶対値を左右円偏光に対してプロットした(図5)。赤は遷移行列要素の絶対値が大きく、青は小さいことを意味する。実線は、入射する円偏光のエネルギーが165meVの場合のエネルギー等高線である。電場が小さい領域ではバレーの近傍は赤か青に彩色され、バレー偏極が生じるが、電場が大きい領域では赤と青が混在しバレー偏極が消失する。

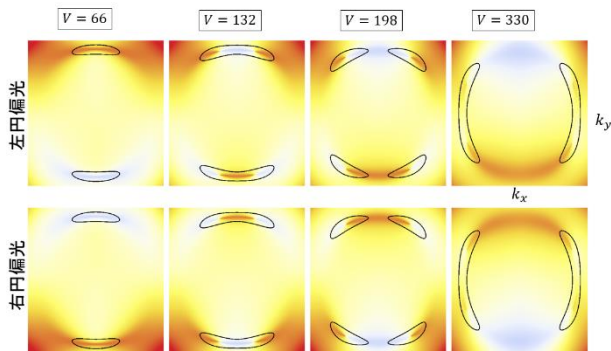


図5 Bi(110)に横から円偏光を照射したときの遷移行列要素の絶対値のプロット。電場によってバレー偏極が消失する。

4-3. Bi(110)の擬スピン偏極度

擬スピン偏極度も電場によって変調できることが分かった。図6は各電場でのBi(110)のエネルギー分散関係を擬スピン偏極度で彩色したものである。青は擬スピン偏極度が小さく、赤は擬スピン偏極度が大きいことを意味する。赤く彩色されていた価電子帯が電場によって、青く変化していく様子が分かる。

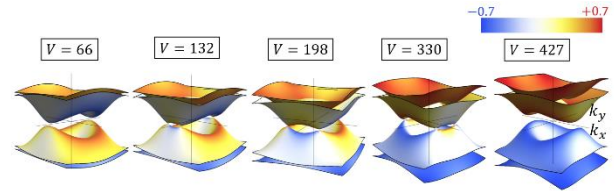


図6 Bi(110)の擬スピン偏極度の電場依存性

5. まとめ

Bi(110)は電場によってバレーが分裂し、金属絶縁体転移が生じる。シリセンと同じように電場によって擬スピン偏極が反転する。また電場によってバレー偏極が失われる。バレー偏極や擬スピン偏極が電場によって変調可能である。その他、本研究で調べた4つの物質に対してスピン偏極,擬スピン偏極,バレー偏極の有無を表1にまとめた。

	Graphene	h-BN	Silicene with V	Bi(110) with V
スピン	×	×	○	×
擬スピン	×	○	◎	◎
バレー	×	○	◎	◎
Band gap	×	○	◎	◎

表1 各物質のスピン偏極,擬スピン偏極,バレー偏極,バンドギャップの有無をまとめた。○は有り、×は無し、◎は電場によって変調可能であることを意味する。

学会発表

ガラムカリ和 “遷移金属カルコゲン物質におけるバレー偏極のバンドギャップと電場依存性” 日本物理学会 第72回年次大会 2017.3.16

論文発表

Y.Tatsumi, [K.Ghalamkari](#) and R.Saito

“Laser energy dependence of valley polarization in transition-metal dichalcogenides” Phys. Rev. B 94, 235408(2016)

[K.Ghalamkari](#), Y.Tatsumi and R.Saito

“Energy Band Gap Dependence of Valley Polarization of the Hexagonal Lattice” J. Phys. Soc. Jpn. in press.

参考文献

[1] Di Xiao, *et al.*, Phys.Rev.Lett **108** 196802(2012)

[2] Motohiko Ezawa, Phys.Rev.B **86**,161407(R) (2012)