



Tokyo Tech

平成 30 年 12 月 19 日

報道機関各位

東京工業大学広報・社会連携本部長

佐藤 勲

## 原子スケールの構造制御でエネルギー損失を軽減する ーナノ材料の設計に新指針ー

### 【要点】

- 材料中の欠陥による電子の散乱で、電流がエネルギーを失うことが問題
- 電子スピンを電流の伝搬方向ごとに逆向きに制御
- 電流はスピン流となり、スピンの反転禁止に応じて後方散乱が抑制

### 【概要】

東京工業大学 物質理工学院 材料系の合田義弘准教授と田中友規大学院生（博士後期課程 2 年）は、ナノ材料の原子配列と**電子の後方散乱**（注 1）を発生させない**電子スピン**（注 2）状態との相関関係を明らかにしました。

今回、第一原理計算と呼ばれる量子力学の基本原則に基づいた数値シミュレーションをビスマス（Bi）とインジウム（In）で構成されるナノワイヤに対して行ったところ、原子スケールで構造を制御する事で、正方向電流の電子スピンと負方向電流の電子スピンを逆向きにできる事を示しました。一般的に、電子は材料中の欠陥により逆向きに散乱されますが、散乱の際にスピンの向きは保存されるため、ナノサイズ材料では電流の後方散乱が抑制され、デバイス中でのエネルギー損失が軽減されます。

本研究成果は、12 月 18 日付の米物理学誌『*Physical Review B*』に Rapid Communication（速報）として掲載されました。

## ●背景

物質の中を流れる電流は、不純物や粒界などの格子の欠陥によって、進行方向の逆向きに散乱されます。その際に電流の担い手である電子の運動エネルギーの一部が熱エネルギーとなって失われるため、この現象が様々なデバイスのエネルギー効率を低下させる原因となっています。

## ●研究成果

本研究では、電流の後方散乱を抑制するためのナノ材料設計指針を新たに提示しました。スパコンを用いたシミュレーションでは、量子力学の基本原理と基礎的な物理定数に基づいた、経験的なパラメーターによる調整のない第一原理計算を行いました。

今回理論解析したナノワイヤは、ナノスケールの発電・バッテリーなどに利用される可能性があります。ナノワイヤを構成するシリコン (Si) の表面上には In 原子を 1 次元的に配置できますが、その In 原子鎖に、Bi を加える事で電子状態を変調させ、電流の伝搬する方向の電子スピンを逆方向電流のスピンの正反対の向きにできる事を示しました。磁性元素を含まない格子欠陥による散乱では、スピンの向きは保存されます。したがって、電子の後方散乱が抑制され、電流の伝搬に伴うエネルギー損失が軽減されます。

このような電子状態の変調は、相対論効果の一種である **Rashba (ラシュバ) 効果** (注3) によってもたらされます。本研究では、図 1 左の破線円で示す逆向きスピンの持つ 2 つの由来の異なる **Rashba 状態** が同じ対称性に属し、図 1 右のように両者の交差が起これば電子状態にエネルギーギャップを作る事を、**群論** (注4) と第一原理計算 (シミュレーション) により明らかにしました。これにより、正の運動量  $k$  に対しては図 1 右の青色で示す下向きのスピンによる **Rashba 状態** のみがギャップ中に存在する事になり、この **Rashba 状態** は上向きのスピン状態に変化できないため、電気伝導を担う電子 (エネルギー  $\varepsilon \approx \varepsilon_F$ ) の後方散乱は完全に禁止されます。

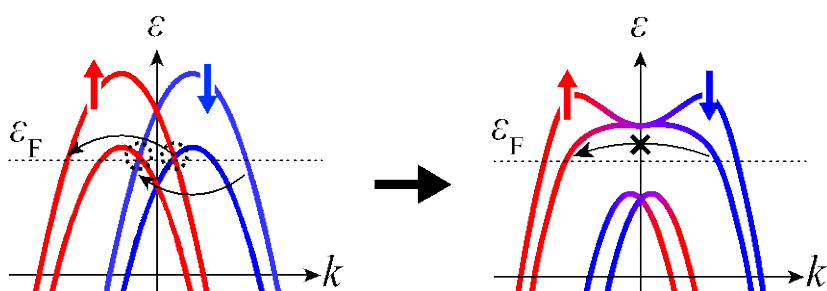


図 1: 電子のエネルギー  $\varepsilon$  と運動量  $k$  およびスピンの向き (上: 赤、下: 青) との関係

## ●今後の展開

本研究成果で提示された、新たなナノ材料設計指針に基づき、電流の後方散乱が完全に抑制された新材料 (電気伝導体) の開発に向けた研究が加速されると期待されます。

## 【用語説明】

- (注1) 電子の後方散乱：運動している電子が後ろ向きに跳ね返され、運動量  $k$  の正負が逆転すること。
- (注2) 電子スピン：電子の持つ、磁気源となる固有の物理量。向きと大きさを持つベクトル量で、1つの電子スピンの大きさは一定。通常は互いに上下逆向きのスピンを持つ2つの電子が対になっている。
- (注3) Rashba 効果：相対論効果により、表面や1次元ナノワイヤの様な対称性の低い系において、電子のエネルギー  $\varepsilon$  がスピンの向きに応じて変化し、互いに上下逆向きのスピンを持つ2つの電子が対となくなる効果。
- (注4) 群論：対称性を扱うための数学理論。

## 【論文情報】

掲載誌：*Physical Review B*

論文タイトル：First-principles prediction of one-dimensional giant Rashba splittings in Bi-adsorbed In atomic chains

著者：Tomonori Tanaka and Yoshihiro Gohda

DOI：[10.1103/PhysRevB.98.241409](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.241409)

## 【特記事項】

本研究は、文部科学省ポスト「京」重点課題7「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」(CDMSI)、JSPS 科研費 17K04978、理化学研究所スーパーコンピュータ「京」課題 (hp170269, hp180206) における成果です。

## 【問い合わせ先】

東京工業大学 物質理工学院 材料系 准教授

合田 義弘 (ごうだ よしひろ)

Email: [gohda.y.ab@m.titech.ac.jp](mailto:gohda.y.ab@m.titech.ac.jp)

TEL/FAX: 045-924-5636

## 【取材申し込み先】

東京工業大学 広報・社会連携本部 広報・地域連携部門

Email: [media@jim.titech.ac.jp](mailto:media@jim.titech.ac.jp)

TEL: 03-5734-2975 FAX: 03-5734-3661