

れた三次元的にスピントルを解析できる高分解能 SARPES 装置を用いて行われた[8]。

Sn/SiC(0001)の K_{SiC} 方向[図 1(e)]の ARPES 測定を行うと、 K_{SiC} 点近傍において二つの Sn 由来のバンド(S_1, S_2)が観測された[図 2(a)]。 S_1 は結合エネルギー1.5 eV 付近でエネルギーギャップをもち S_1 と S_1' を形成している。また SARPES より S_1, S_1' それぞれは K_{SiC} 点において面直方向のスピンをもっていることがわかった[図 2(b)]。したがって、 S_1 は K_{SiC} においてゼーマン型にスピンスplitしたバンドである。一方、 S_2 はフェルミ準位近傍において運動量方向にsplitしており、 K_{SiC} 点においてスピンス縮退し、 K_{SiC} 点を挟んでスピンス偏極が反転していることがわかった[図 2(c)]。したがって S_2 はラッシュバ型にスピンスplitしたバンドである。

これまででは結晶の対称性とスピンスplitバンド構造は一対一で対応すると考えられていた[2,5]にもかかわらず、この Sn/SiC(0001)では、一つの K_{SiC} 点においてゼーマン型とラッシュバ型両方のスピンスplitバンドが共存している。Sn/SiC(0001)においてSiC基板も含めた結晶構造を考えると、 K_{SiC} 点は鏡映面を含まないため、その対称性は C_3 である。したがって、ゼーマン型スピンスplitは結晶対称性を考慮することにより矛盾なく説明できる。一方、ラッシュバ型のスピンスplitは従来の結晶構造の対称性を用いた考え方だけでは説明できない。

このメカニズムを解明するために第一原理電子状態計算を行った[6]。計算においても、 K 点においてゼーマン型とラッシュバ型両方のスピンスplitバンドが現れており、実験結果とよく一致する[図 3(a,b)]。そこで、 K 点における電荷密度分布の対称性を調べてみた。まず、 S_1 の K 点における電荷密度分布を図 3(c)に示す。電荷密度分布の鏡映面が単位格子ベクトルに対して垂直になっていることがわかる。したがって、 S_1 の電荷密度分布は平面群 $p3m1$ に属し、 K 点の対称性は C_3 である。これは基板も含めた Sn/SiC(0001)の結晶の対称性と同じである。したがって、電荷密度分布も S_1 のゼーマン型のスピンスplitと矛盾しない。次に S_2 の電荷密度分布を図 3(d)に示す。 S_2 の電荷密度分布では、その鏡映面と単位格子ベクトルが平行になっている。よって S_2 の電荷密度分布は平面群 $p6m$ に属し、その場合は K 点の対称性は C_{3v} である。この電荷密度分布の対称性は Sn/SiC(0001)の基板も含めた対称性とは異なり、この対称性からはラッシュバ型のスピンスplitバンドが誘起されてよい。

同じ K 点であるにも関わらず電荷密度分布の対称性が

異なる原因は、それぞれの電子状態が感じる結晶ポテンシャルの違いに起因する。 S_1 の電荷密度分布[図 3(c)]には、SiC 基板の二層目の C 原子の真上の位置に空孔が存在している。これは S_1 電子が SiC 基板の結晶ポテンシャルの影響を強く受けていることを意味している。この場合、結晶の対称性と電荷密度分布の対称性が同じになる。一方、 S_2 は Sn 原子と SiC 基板最上層の Si 原子との間の結合状態であり、SiC 基板の二層目の C 原子より下(つまりバルク)の結晶ポテンシャルの影響を受けていない。最上層の Sn-Si 結合の原子配列のみに注目すると、その結晶格子の平面群は $p6m$ になっており結晶構造と電荷密度分布の対称性は一致している。すなわち、表面電子状態が基板の結晶ポテンシャルの影響を受けるかどうかで、電荷密度分布の対称性だけでなくそのスピンスplitバンド構造も変化することがわかった。

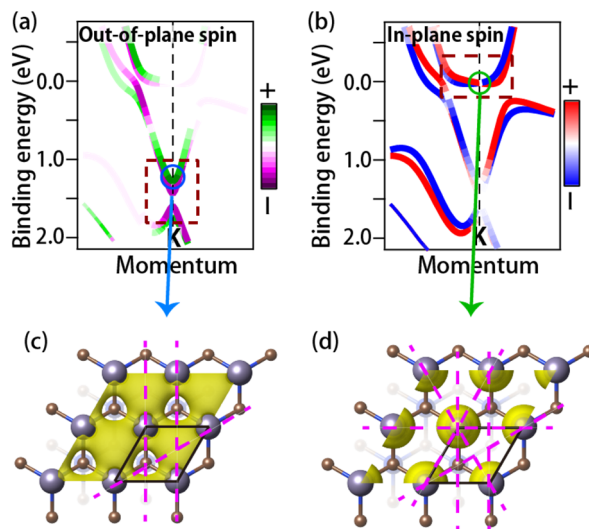


図 3. (a,b) 第一原理計算によって得られた Sn/SiC(0001)のバンド構造。緑-白-紫で面直方向のスピンス偏極度、赤-白-青で面内方向のスピンス偏極度をあらわす。(a)は面直スピンス成分、(b)は面内スピンス成分をあらわす。(c,d) S_1 および S_2 それぞれの K 点における電荷密度分布。実線は単位格子、点線は電荷密度分布の鏡映面をあらわす[6]。

【まとめと展望】

本研究では、SiC 基板上的 Sn 単原子膜が大きくスピンス偏極した電子状態をもつことを発見した。さらに、 K 点において原子膜面直方向のスピンスを持ちゼーマン型にスピンスplitした電子バンドと面内方向のスピンスを持ちラッシュバ型にスピンスplitした電子バンドが共存していることを発見した。従来の結晶の対称性のみを取り入れた考え方ではこの結果は説明できないが、電荷密度分布の対称性まで考慮に

入れるとこの結果をよく理解できる。またここまでは考慮してこなかったが、この Sn 単原子膜の表面はグラフェンで覆われている。グラフェンはとても頑丈で安定な物質であるため、この試料は大気中でも安定である。グラフェンを保護膜として用いることで、これまで真空中でしか取り扱えなかったスピン偏極電子材料を大気中に取り出して利用することが可能となる。

【謝辞】

本研究は、東京大学物性研究所の辛埴、飯盛拓嗣、黒田健太、及び九州大学工學院の林真吾、梶原隆司の各氏との共同研究により行われました。本研究は JSPS 科研費 15K17675, 26287061, 18K01146, 18K03484 の助成を受けて行われました。

【参考文献】

- [1] K. Yaji *et al.*, Phys. Rev. B **98**, 041404(R) (2018).
- [2] T. Oguchi *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter **21**, 092001 (2009).
- [3] K. Sakamoto *et al.*, Phys. Rev. Lett. **102**, 096805 (2009).
- [4] K. Sakamoto *et al.*, Phys. Rev. Lett. **103**, 156801 (2009).
- [5] K. Nakajin *et al.*, Phys. Rev. B **91**, 245428 (2015).
- [6] K. Yaji *et al.*, Phys. Rev. Lett. **122**, 126403 (2019).
- [7] S. Hayashi *et al.*, Appl. Phys. Exp. **11**, 015202 (2018).
- [8] K. Yaji *et al.*, Rev. Sci. Instrum. **87**, 053111 (2016).