

学 位 審 査 報 告 書

（ふりがな） 氏 名	（おおつぼ よしゆき） 大坪 嘉之
学位（専攻分野）	博 士 （ 理 学 ）
学 位 記 番 号	理 博 第 号
学位授与の日付	平成 24 年 3 月 26 日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当
研究科・専攻	理学研究科 化学専攻
（学位論文題目） Ge(1 1 1)表面のスピソ偏極電子状態	
論文調査委員	（主査） 有賀 哲也 教授 吉村 一良 教授 小野 輝男 教授

(続紙 1)

京都大学	博士 (理 学)	氏名	大坪 嘉之
論文題目	Ge(111)表面のスピンの偏極電子状態		
(論文内容の要旨)			
<p>本論文は、Ge(111)基板上に単原子層程度の原子を吸着した表面の原子構造と電子状態について、特に表面電子状態のスピンの偏極に注目して行った研究に関するものである。結晶表面においては、3次元のバルク結晶中の並進対称性が打ち切られるために、表面近傍に局在した2次元的な電子状態が存在する。このような電子状態は表面における空間反転対称性の破れとスピンの軌道相互作用の影響によってスピンの偏極を示すため、スピンの偏極電流源などとしてスピントロニクス分野への応用が期待され、盛んに研究が行われている。これまでのスピンの偏極表面状態の研究は、金、ビスマス等の重元素に由来する状態に限られてきた。これは、表面状態のスピンの分裂には重元素の大きな核ポテンシャルの寄与が不可欠であると考えられていたためである。</p> <p>本研究では、Bi/Ge(111)表面において、スピンの・角度分解光電子分光及び第一原理計算によってバルク価電子帯頂点付近に新たな表面状態バンドを観測した。この電子状態はバルクバンドの射影ギャップ中を分散する表面状態であり、しかも明らかなスピンの偏極を示す。さらに、第一原理計算から、この電子状態は表面以下十数層のGe層に局在しており、Geのスピンの軌道相互作用によってスピンの偏極していることが示された。このスピンの偏極電子状態には、最表面のBi原子層からの寄与がほとんど無く、そのスピンの偏極はGe原子のスピンの軌道相互作用によると考えられる。比較的軽い元素のスピンの軌道相互作用によってスピンの偏極した表面状態の観測はこれが初の例である。</p> <p>つづいて、基板Ge層に局在した電子状態についてより詳細な情報を得るべく、臭素終端されたGe(111)-(1×1)表面の電子状態について研究を行った。この表面においても、スピンの・角度分解光電子分光により、バルク価電子帯頂点付近に表面状態バンドが観測され、表面状態バンドのスピンの偏極も観測された。この結果から、Ge基板に由来する電子状態のスピンの偏極は、重元素の有無に関わらず現れることが実験的に確認された。さらに、第一原理計算によって、観測された表面状態バンドをスピンの偏極も含めて良く再現することができた。本論文ではさらに、Ge基板領域に局在した電子状態はバルクの3次元的な電子状態のうち軽い正孔(LH)バンド、スピンの分裂(S0)バンドと同様の起源を持っており、これらのバルク状態が表面近傍での表面垂直方向の並進対称性の打ち切りによって表面近傍に局在した2次元的な表面状態に変化することを、理論計算に基づく考察から明らかにした。</p> <p>さらに、吸着原子が上記の2表面とは異なる吸着サイトを占めるTl/Ge(111)-(1×1)表面についても角度分解光電子分光及び第一原理計算を用いて価電子帯頂点付近の電子状態を調査した。その結果、Tl/Ge表面においては、上記2表面で観測されたLH、S0バンドに由来する表面状態以外に、重い正孔(HH)バンドに由来する表面状態も存在することを見出した。</p>			

(論文審査の結果の要旨)

従来の半導体エレクトロニクスが電子の電荷自由度のみを利用してきたのに対し、電子の有するスピン自由度を利用することにより新たな機能を実現する技術体系を半導体スピントロニクスとよび、近年、活発な研究が展開されている。半導体スピントロニクスにおいては、半導体中にスピン偏極した電子を注入するのが克服すべき重大な課題とされてきた。このような状況を背景として、半導体表面におけるラシュバ型スピン軌道相互作用によりスピン偏極した表面状態に関心が集まり、2010年には半導体表面上で初めて、スピン偏極した金属的表面状態バンドが見出された。

これまで、実用的な程度の大きさのスピン分裂を生じるためには、重元素の核ポテンシャルによる大きなスピン軌道相互作用が不可欠であると考えられてきた。このことは、物質探索のうえで大きな制約であった。本申請者大坪嘉之氏の研究は、以下に述べる通り、第4周期元素であるゲルマニウム程度の軽元素であっても、観測可能でかつ実用上も意味のあるスピン偏極度を有する表面状態が生成することを示したものである。

大坪氏はまず、Ge(111)表面に単原子層のビスマスを吸着させた表面について、スピン・角度分解光電子分光と第一原理電子状態計算を行い、バルク電子状態への表面摂動による表面状態をはじめで見出し、これがスピン偏極していることを示した。この表面は第6周期重元素であるビスマスを含んでいたため、これを第4周期軽元素である臭素に置き換えた表面についても同様の研究を行い、この表面でもスピン偏極した表面状態を確認した。これにより、重元素の全く存在しない半導体表面においても有意な大きさのスピン偏極を有する表面状態が生成することを、明確に実証した。さらに、ビスマス、臭素とは異なる吸着サイトを占めるタリウムの単原子層に置換した表面でも同様の研究を行った。これら三つの表面を比較することにより、バルク中の重い正孔バンド、軽い正孔バンド、スピン分裂バンドの各々から表面状態が生成する物理機構を、矛盾無く説明した。

以上の通り、大坪氏の研究は、過去半世紀にわたって展開されてきた半導体表面科学において全く知られていなかった「スピン偏極表面状態」を初めて見出し、その成因を説明したものである。これは、この分野の学術の発展に大きな意義を有するものであるとともに、将来の半導体スピントロニクスの発展にも貢献しうるものである。よって、本論文は博士(理学)の学位論文として価値あるものと認める。平成24年1月17日論文内容とそれに関連した口頭試問を行い、その結果合格と認めた。

要旨公開可能日： 年 月 日以降