



「非線形光学的ホール効果による

電子・スピン流生成機構の提案」

—エネルギーハーベスティング素子の設計応用に期待—

関西学院大学

KWANSEI GAKUIN UNIVERSITY

報道各位

関西学院広報室

関西学院大学工学部の若林克法教授と羽原廉氏(理工学研究科先進エネルギーナノ工学専攻1年)は、二次元物質 NbSe₂ における非線形光学的ホール効果を利用した電流およびスピン流を駆動する新しい機構を理論的に提案いたしました。これまでの理論提案では、二次元物質での非線形ホール効果によるスピン流生成には、外部からの一軸性歪みを与える必要がありました。本研究では、光照射による非線形光学的ホール効果を利用することで、一軸性歪みを与えなくても、二次元物質 NbSe₂ に電流またはスピン流が生成できることを解明しました。その結果、可視光領域の光によって電流またはスピン流を駆動できるため、電流およびスピン流を生成するエネルギーハーベスティング素子への応用が期待されます。この研究成果は3月23日、米国物理学会の学術誌「Physical Review Research」に掲載されました。本研究は一部、文部科学省科学研究費補助金の援助を受けています。

<ポイント>

- ・ 一軸性歪みを与えなくても、少数層 NbSe₂ における二次高調波発生過程を利用した電流およびスピン流の駆動機構を理論的に解明した。
- ・ 可視光領域の電磁波によって、スピン流・電流が駆動されることを明らかにした。
- ・ 光の偏向と層数による電荷およびスピン伝導度の選択則を明らかにした。
- ・ 可視光領域の光を利用することによって電流またはスピン流を駆動できるため、電流またはスピン流を生成するエネルギーハーベスティング素子への応用が期待される。

1. 研究の背景

炭素原子だけからなる一原子層膜であるグラフェンの発見以降、一から数原子分の厚みしか持たない二次元物質の研究が国内外で活発におこなわれています。グラフェンや新しい二次元物質である遷移金属ダイカルコゲナイド系物質(TMDC)は、熱力学的に安定なだけでなく、透明で機械的に柔らかい素材であるため、光・電子機能を有するフレキシブルデバイスへの応用が期待されています。さらに、グラフェンとは異なり TMDC はスピン軌道相互作用を有しており、スピン流の駆動や伝搬が生じるため、スピントロニクス素子への応用が期待されています。

これまで理論提案では、二次元物質における非線形ホール効果によるスピン流生成には、外部からの一軸性歪みを与える必要がありました。本研究では、光照射による非線形光学的ホール効

果を利用することで、一軸性歪みを与えなくても、二次元物質 NbSe₂ に電流またはスピン流が生成できることを解明しました。その結果、可視光領域の光によって電流またはスピン流を駆動できるため、電流およびスピン流を生成するエネルギーハーベスティング素子への応用が期待されます。

2. 研究内容と成果

本研究では、一から三層までの NbSe₂ の電子状態を解析した上で、非線形光学的ホール伝導度を数値計算によって解析しました。NbSe₂ は、TMDC の一つであり、室温では金属的な性質を示し、低温で超伝導転移を示すことが知られています。

図 1(a)-(c)は、NbSe₂ の結晶構造の模式図です。NbSe₂ は、図 1(a)に示すように各層同士が半周期分互いにずれて積層した構造をもちます (AB 積層構造)。また、面内では、六角格子構造を成しています。一般に、奇数層では、空間反転対称性が破れていますが、偶数層では、空間反転対称性を保持しています。そのため、奇数層 NbSe₂ では、Nb 原子に由来するスピン軌道相互作用に加えて、結晶構造の対称性に由来するイジング型スピン軌道相互作用を有しています。したがって、層数の偶奇によって、全く異なる非線形光学応答を示すことになります。

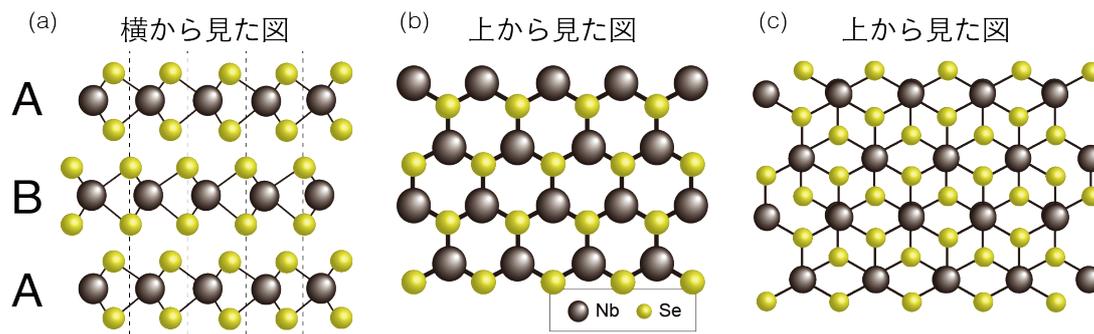


図 1: NbSe₂ の結晶構造の模式図。灰色が Nb 原子、黄色が Se 原子を表す。(a) ABA 積層での三層 NbSe₂ を横から見た結晶構造。(b) 単層 NbSe₂ の結晶構造を上から見た図。(c) 二層および三層 NbSe₂ の結晶構造を上から見た図。

図 2(a)-(f)は、数値解析によって得られた非線形光学的ホール伝導度の結果です。図 2(a)-(c)は、単層、二層、三層の場合についての非線形光学的スピンホール伝導度です。図 2(a)(c)に示す通り、単層および三層では、1.5eV 程度 (可視光のエネルギー程度) の y 偏向の光の入射によって、スピンホール伝導度がピークを持つことがわかります。つまり、y 偏向の光によって NbSe₂ 内にスピン流を生成することが可能です。しかし、二層 NbSe₂ では、図 2(b)に示すように、空間反転対称性が保たれるため、非線形光学的スピンホール伝導度はゼロになります。

同様に、図 2(d)(f)に示す通り、単層および三層では、1.5eV 程度 (可視光のエネルギー程度) の x 偏向の光の入射によって、電子ホール伝導度がピークを持つことがわかります。つまり、x 偏向の光によって NbSe₂ 内に電流を生成することが可能です。同様に、二層 NbSe₂ では、図 2(e)に示すように、空間反転対称性が保たれるため、非線形光学的電子ホール伝導度はゼロになります。

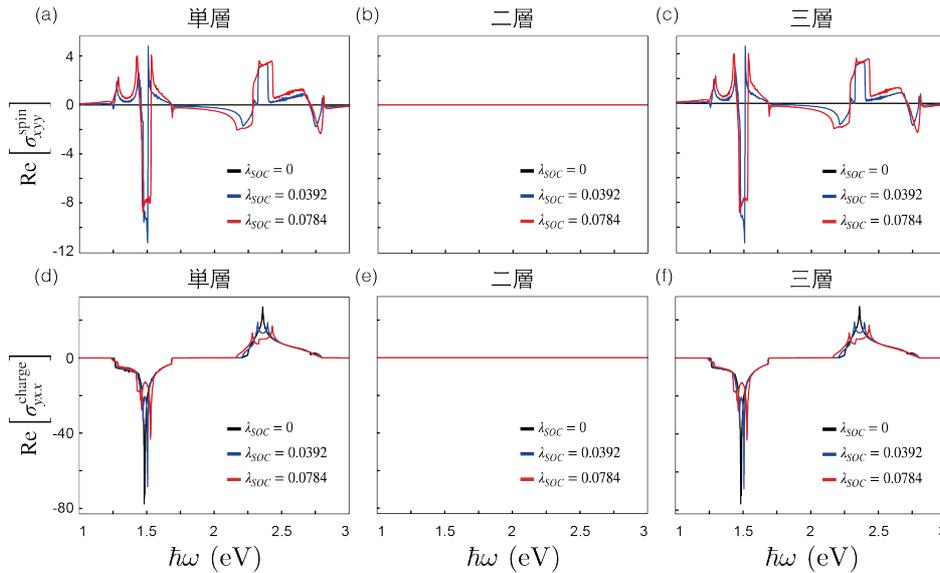


図 2: 少数層 NbSe2 の非線形光学的スピンホール伝導度 (a) 単層、(b)二層、(c)三層の場合。同様に、少数層 NbSe2 の非線形光学的電子ホール伝導度 (d) 単層、(e)二層、(f)三層の場合。

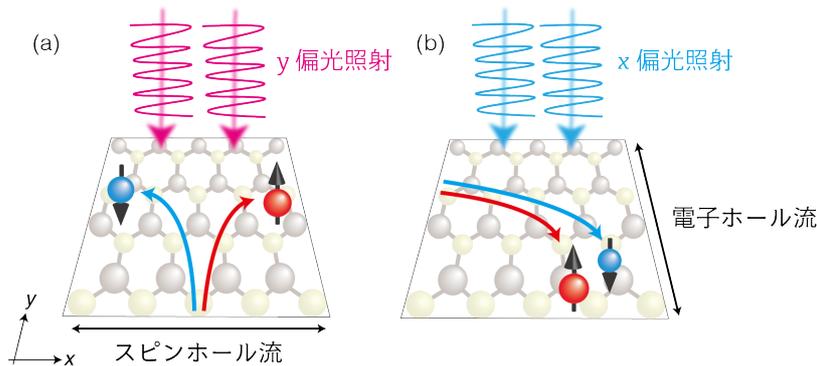


図 3: NbSe2 における非線形光学的ホール効果の概念図。(a) y 偏向の光の二次高調波発生過程によるスピンホール流の生成。(b) x 偏向の光の二次高調波発生過程による電子ホール流の生成。

これまで二次元物質では、非線形ホール効果によるスピン流生成には外部からの一軸性歪みを与える必要がありました。本研究では、光照射による非線形光学的ホール効果を利用することで、一軸性歪みを与えなくても、二次元物質 NbSe2 に電流またはスピン流が生成できることがわかりました。今回の提案では、可視光領域の光によって電流またはスピン流を駆動できるため、電流およびスピン流を生成するエネルギーハーベスティング素子への応用が期待されます。

図 3 は、本研究での結果を模式的に表したものです。奇数層 NbSe2 に、y 偏向の光を照射すると、その非線形光学効果によって、スピンホール流が生成されます (図 3(a))。また、同様に、x 偏向の光を照射すると、その非線形光学効果によって、電子ホール流が生成されます (図 3(a))。これらの結果から、NbSe2 に光を照射することで、スピン流または電流を生成することが可能であることがわかります。

加えて発表論文では、二層 NbSe2 であっても、垂直電場を引加することで空間反転対称性を破

り、スピン流または電流を光で誘起できることを示しています。また、MoS₂などの半導体 TMDC では、非線形ホール効果の誘起には、外部からの一軸性歪みだけでなく、ホールドーピングが必要とされていました。しかし、本研究では、半導体 TMDC にホールドーピングをすることなく、さらに一軸性歪みを与えなくても、光を照射することによって半導体 TMDC に電流またはスピン流が生成できることを明らかにしました。

3. 今後の展開

本研究成果によって、新しい二次元物質である TMDC において、非線形光学応答を利用したスピン流および電流の生成機構が明らかになりました。本研究で明らかになった原理は、NbSe₂だけでなく、MoS₂などの半導体 TMDC などにも適用できます。特に、入射光のエネルギーは、可視光領域であるため、エネルギーハーベスティング素子などへの応用も期待されます。今後、この理論指針にしたがった物質設計およびデバイス設計が期待されます。

【論文タイトル】

原題: Nonlinear optical Hall effect of few-layered NbSe₂

【タイトル和訳】

少数層 NbSe₂ における非線形光学的ホール効果

【著者名】

Ren Habara, Katsunori Wakabayashi

【DOI】

[10.1103/PhysRevResearch.4.013219](https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.4.013219)

【用語解説】

注1) 遷移金属ダイカルコゲナイド系物質(TMDC)

TMDC は、一般に MX₂(M=Mo, W, Nb, Ta; X = S, Se)を組成にもつ物質群であり、元素の組み合わせによって、半導体、金属、超伝導など様々な電子物性を有することが知られています。

注2) スピン流

電子には、電荷の他にスピンと呼ばれる角運動量をもちます。スピンは、電子の自転運動と解釈できます。電荷の流れである電流と対比して、電子スピンの流れをスピン流とよびます。

注3) スピン軌道相互作用

電子は、原子核の周りを公転しています。特殊相対論の効果を考えると、電子の位置の変化(軌道自由度)とスピンの間に相互作用が生じることが知られています。これをスピン軌道相互作用と呼び、トポロジカル絶縁体などの新奇な量子状態を実現するうえでも重要な役割を果たします。

【問い合わせ先】

■ 関西学院大学 工学部

若林 克法 教授 waka@kwansei.ac.jp

研究室 079-565-9751

■ 関西学院広報室 (0798-54-6017)