

## 論文審査の要旨

博士の専攻分野の名称	博 士 ( 理 学 )	氏名	ZHANG KE
学位授与の要件	学位規則第4条第①・2項該当		
論文題目			
<p>Spin- and angle-resolved photoemission spectroscopy study of spin-momentum-layer locking in centrosymmetric BiOI</p> <p>(スピン角度分解光電子分光による中心対称BiOIにおけるスピン・運動量・レイヤーで固定化された電子状態の研究)</p>			
論文審査担当者			
主 査 教 授 島田 賢也 (放射光科学研究センター) 審査委員 教 授 奥田 太一 (放射光科学研究センター) 審査委員 教 授 森吉 千佳子			
〔論文審査の要旨〕			
<p>固体中の電子状態は、波数（結晶運動量に比例）、スピン、エネルギーで記述でき、結晶構造の空間反転対称性および時間反転対称性があれば、上向きスピンと下向きスピンの電子エネルギーは波数空間内の繰り返し基本単位であるブリュアン域の高対称点において縮退する。一方、常磁性体のように時間反転対称性があっても空間反転対称性が破れれば、スピン軌道相互作用により、波数空間で電子エネルギーはスピン分裂が生じうる。最近、常磁性体において、結晶を構成する原子サイトの対称性に依存してスピン偏極が生じる「隠れたスピン偏極 (Hidden Spin Polarization)」が注目を集めている。スピン軌道相互作用の強さは原子核ポテンシャルの勾配に比例するため、原子サイトの対称性に応じてポテンシャル勾配の方向が決まると電子スピンの向きは結晶運動量の方向に対して固定化される。これはスピン-運動量ロッキングと呼ばれている。</p> <p>従来、中心対称物質では結晶全体の空間反転対称性のために隠れたスピン偏極は生じないと思われていた。しかし2020年、Yaoらにより中心対称ノンシンモルフィックな層状結晶に含まれる2つのレイヤーにおいて、原子サイトの局所的な空間反転対称性の破れによりブリュアン域の境界線上で隠れたスピン偏極が存在し、かつそのスピン偏極度が100%にも達することが理論的に示された。従来、スピン偏極は波数空間で議論されていたが、ここでは実空間において隣接する2つのレイヤーで逆向きのスピン偏極が生じていることがポイントである。2つのレイヤーのスピン偏極度を足し合わせるとゼロになるため、従来のように波数空間だけをみてもスピン偏極は観測されない。すなわちレイヤー毎に射影された運動量空間でみないとスピン偏極が現れないのである。</p> <p>この理論が正しいかどうかはレイヤーを分離してスピン偏極を実験的に検証する必要がある。実験検証には放射光を用いたスピン角度分解光電子分光が最も直接的である。そこで申請者は、本研究において、このシナリオを提唱した理論グループと共同し、レイヤーに局在した隠れたスピン偏極を実験的に検証することにした。</p> <p>実験検証のために最も適した系の一つとして、光触媒として盛んに研究が行われている</p>			

層状半導体 BiOI を選択した。BiOI は  $c$  軸方向に大きな格子定数を持つため、真空紫外線域の放射光を用いた光電子分光の表面感性により、最表層のレイヤーからの信号を選択的に観測することができる。申請者はまず BiOI 単結晶の劈開面の周期構造を低速電子線回折像により確認し、内殻光電子スペクトルに化学シフトが検出されないことから、表面およびバルクにある原子の結合状態に顕著な違いがないことを確認した。次にバンド構造やフェルミ面構造をスピン積分した高分解能角度分解光電子分光実験で調べた。バンド構造は励起光エネルギーにはあまり依存せず、BiOI が二次元的電子構造をもつことを実験的に確認した。また第一原理バンド計算が与えるバンド構造と実験結果はよく対応していることを見出した。波数空間内の  $\Gamma$ -X および X-M 方向を検出するためには、 $k_z$  の値を特定する必要がある。そこで申請者は励起光エネルギーを変えながら詳細にバンド分散を測定し、励起光エネルギーを 65eV および 30eV に設定すれば  $\Gamma$  点を中心とした測定ができることをつきとめた。つぎにスピン角度分解光電子分光実験を行なったところ、理論が予測するとおり、ブリュアン域境界 X-M 方向では X 点（高対称点）近傍で面内のスピン偏極度が 80%にも達することを観測した。一方、ブリュアン域中心の  $\Gamma$  点近傍ではスピン偏極度は抑制されており、レイヤー間の打ち消しあいがあることと矛盾しない。面直方向のスピン偏極は極めて弱く、原子核ポテンシャル勾配の方向が実効的にレイヤーに対して垂直であることを示している。これらの実験結果は第一原理バンド計算結果および強束縛モデル計算とよく一致している。この結果、中心対称ノンシンモルフィック結晶構造の対称性により、電子スピンの向きは結晶運動量のみならず、レイヤーにも依存して固定化されることが実験的に確認された。

申請者は一貫してこの研究を主導し、放射光を用いたスピン角度分解光電子分光実験を行うと同時に、理論グループと議論しながらデータ解析を進め、電子スピンの結晶運動量およびレイヤーに依存して固定化されることを明瞭に示した。本研究は隠れたスピン偏極が中心対称ノンシンモルフィック結晶に生じるメカニズムを確立した点でも特筆すべきである。

以上、審査の結果、本論文の著者は博士（理学）の学位を授与される十分な資格があるものと認める。

## 公表論文

1. Ke Zhang, Shixuan Zhao, Zhanyang Hao, Shiv Kumar, Eike F. Schwier, Yingjie Zhang, Hongyi Sun, Yuan Wang, Yujie Hao, Xiaoming Ma, Cai Liu, Xiaoxiao Wang, Koji Miyamoto, Taichi Okuda, Chang Liu, Jiawei Mei, Kenya Shimada, Chaoyu Chen, and Qihang Liu: Observation of spin-momentum-layer locking in a centrosymmetric crystal, accepted to Physical Review Letters (2021).
2. Xiao-Ming Ma, Yufei Zhao, Ke Zhang (Co-first author), Shiv Kumar, Ruie Lu, Jiayu Li, Qiushi Yao, Jifeng Shao, Fuchen Hou, Xuefeng Wu, Meng Zeng, Yu-Jie Hao, Zhanyang Hao, Yuan Wang, Xiang-Rui Liu, Qiushi Yao, Huiwen Shen, Hongyi Sun, Jiawei Mei, Koji Miyamoto, Taichi Okuda, Masashi Arita, Eike F. Schwier, Kenya Shimada, Ke Deng, Cai Liu, Junhao Lin, Yue Zhao, Chaoyu Chen, Qihang Liu and Chang Liu: Realization of a tunable surface Dirac gap in Sb-doped  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ , Physical Review B **103**(12) L121112 (8p) (2021).

## 参考論文

1. Zhenyu Wang, Zhanyang Hao, Yayun Yu, Yuan Wang, Shiv Kumar, Xiangnan Xie, Mingyu Tong, Ke Deng, Yu-Jie Hao, Xiao-Ming Ma, Ke Zhang, Cai Liu, Mingxiang Ma, Jiawei Mei, Guang Wang, Eike F Schwier, Kenya Shimada, Fufang Xu, Chang Liu, Wen Huang, Jianfeng Wang, Tian Jiang, Chaoyu Chen: Fermi Velocity Reduction of Dirac Fermions around the Brillouin Zone Center in  $\text{In}_2\text{Se}_3$ -Bilayer Graphene Heterostructures, Advanced Materials **33**(17) 2007503 (8p) (2021).
2. Ruie Lu, Hongyi Sun, Shiv Kumar, Yuan Wang, Mingqiang Gu, Meng Zeng, Yu-Jie Hao, Jiayu Li, Jifeng Shao, Xiao-Ming Ma, Zhanyang Hao, Ke Zhang, Wumiti Mansuer, Jiawei Mei, Yue Zhao, Cai Liu, Ke Deng, Wen Huang, Bing Shen, Kenya Shimada, Eike F. Schwier, Chang Liu, Qihang Liu, Chaoyu Chen: Half-Magnetic Topological Insulator with Magnetization-Induced Dirac Gap at a Selected Surface, Physical Review X **11**(1) 011039 (9p) (2021).
3. Xiao-Ming Ma, Zhongjia Chen, Eike F Schwier, Yang Zhang, Yu-Jie Hao, Shiv Kumar, Ruie Lu, Jifeng Shao, Yuanjun Jin, Meng Zeng, Xiang-Rui Liu, Zhanyang Hao, Ke Zhang, Wumiti Mansuer, Chunyao Song, Yuan Wang, Boyan Zhao, Cai Liu, Ke Deng, Jiawei Mei, Kenya Shimada, Yue Zhao, Xingjiang Zhou, Bing Shen, Wen Huang, Chang Liu, Hu Xu, Chaoyu Chen, Qihang Liu, Chang Liu: Hybridization-induced gapped and gapless states on the surface of magnetic topological insulators, Physical Review X **9**(4) 041038 (10p) (2019).