

博士論文審査報告書

申請者氏名 藤原 聖基 (ふじわら まさき)
学位の種類 博士 (理学)
学位記番号 論博理第22号
学位記授与報告番号 乙第68号
学位授与年月日 令和元年6月27日
学位授与の要件 学位規則第4条2項
論文題名 固体表面におけるラッシュバ効果の解析
Analysis of Rashba Effect on Solid Surfaces
論文審査委員 (主査) 教授 坂井 徹
(副査) 教授 住山 昭彦
(副査) 教授 田島 裕之
(副査) 教授 有賀 哲也
(京都大学大学院工学研究科)
(副査) 准教授 島 信幸

1. 論文内容の要旨

ラッシュバ効果は、表面電場中を電子が運動する際に、電場がスピン軌道相互作用を介してスピンに対する磁場として働くことによって生じる現象のことである。様々な系に対して実験的にも理論的にも研究がなされているが、何がラッシュバ効果を大きくするかははっきりしていない。

本研究では、ラッシュバ効果を大きくする要因を理解するために、LCAO(Linear combination of atomic orbitals)に基づく第一原理計算手法である DV-LDA (Discrete variational local density approximation) 法を用いることにした。この方法を用いることで、基底の対称性を用いてスピン軌道相互作用を分類し、電子状態について議論できる。

ラッシュバ効果にとって主要なスピン軌道相互作用を調べるために、Au(111)について DV-LDA 法による計算を行った。その結果、表面に平行で、各原子を通る鏡映操作に対し対称なポテンシャルから生じるスピン軌道相互作用が主要であることが分かった。その中でも特に原子核の球対称ポテンシャルから生じるスピン軌道相互作用($\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}$)が主要であると考えられる。

出版論文：

1. Masaki Fujiwara, Nobuyuki Shima, Kenji Makoshi and Toru Sakai
Analysis of Rashba Effect on Au(111) Surface
Journal of the Physical Society of Japan, 88 (2019) 034604-1-5

2. 論文審査結果

ラシュバ効果とは、固体表面での反転対称性の破れとスピン軌道相互作用効果により表面電子状態のクラマース縮退が解ける現象である。従来の研究では、ラシュバ効果の発現機構は、空間反転対称性の破れた表面において生じる反対称ポテンシャルによるスピン軌道相互作用に基づくと考えられて、第一原理計算の結果もほぼそれに従って解析されて来た。一方、タイト・バインディングモデルによる解析によると、対称ポテンシャルによるスピン軌道相互作用も、反対称ポテンシャルと結合することによりラシュバ効果を生じることが知られている。そこで本申請者は、基底の対称性を分類できる第一原理計算法である DV-LDA 法を用いることにより、Au(111) 表面における、対称ポテンシャルによるスピン軌道相互作用と、反対称ポテンシャルによるスピン軌道相互作用に起因するラシュバ効果をそれぞれ計算した。その結果、対称ポテンシャルによるスピン軌道相互作用の寄与がはるかに大きいことが示された。この研究は、従来の直感的な議論に基づくラシュバ効果のメカニズムに大きな修正を与える重要な成果である。

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。

また、平成 31 年 4 月 23 日、論文内容およびこれに関連する事項について試問を行った結果、合格と判定した。

博士論文審査報告書

論文題名：固体表面におけるラシュバ効果の解析

Analysis of Rashba Effect at Surfaces of Solids

申請者氏名：藤原聖基

1. 論文内容の要旨

ラシュバ効果は、表面電場中を電子が運動する際に、電場がスピン軌道相互作用を介してスピンに対する磁場として働くことによって生じる現象のことである。様々な系に対して実験的にも理論的にも研究がなされているが、何がラシュバ効果を大きくするかははっきりしていない。

本研究では、ラシュバ効果を大きくする要因を理解するために、LCAO(Linear combination of atomic orbitals)に基づく第一原理計算手法である DV-LDA

(Discrete variational local density approximation) 法を用いることにした。この方法を用いることで、基底の対称性を用いてスピン軌道相互作用を分類し、電子状態について議論できる。

ラシュバ効果にとって主要なスピン軌道相互作用を調べるために、Au(111)について DV-LDA 法による計算を行った。その結果、表面に平行で、各原子を通る鏡映操作に対し対称なポテンシャルから生じるスピン軌道相互作用が主要であることが分かった。その中でも特に原子核の球対称ポテンシャルから生じるスピン軌道相互作用($\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}$)が主要であると考えられる。

出版論文：

Masaki Fujiwara, Nobuyuki Shima, Kenji Makoshi and Toru Sakai

Analysis of Rashba Effect on Au(111) Surface

Journal of the Physical Society of Japan, 88 (2019) 034604-1-5

2. 論文審査結果

ラシュバ効果とは、固体表面での反転対称性の破れとスピン軌道相互作用効果により表面電子状態のクラマース縮退が解ける現象である。従来の研究では、ラシュバ効果の発現機構は、空間反転対称性の破れた表面において生じる反対称ポテンシャルによるスピン軌道相互作用に基づくと考えられて、第一原理計算の結果もほぼそれに従って解析されて来た。一方、タイト・バインディング模

型による解析によると、対称ポテンシャルによるスピン軌道相互作用も、反対称ポテンシャルと結合することによりラシュバ効果を生じることが知られている。そこで本申請者は、基底の対称性を分類できる第一原理計算法である DV-LDA 法を用いることにより、Au(111) 表面における、対称ポテンシャルによるスピン軌道相互作用と、反対称ポテンシャルによるスピン軌道相互作用に起因するラシュバ効果をそれぞれ計算した。その結果、対称ポテンシャルによるスピン軌道相互作用の寄与がはるかに大きいことが示された。この研究は、従来の直感的な議論に基づくラシュバ効果のメカニズムに大きな修正を与える重要な成果である。

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。

また、平成 31 年 4 月 23 日、論文内容およびこれに関連する事項について試問を行った結果、合格と判定した。

主査： 坂井 徹



副査： 住山 昭彦



: 田島 裕之



: 有賀 哲也



(京都大学大学院工学研究科、教授)

: 島 信幸

