

半導体中のスピン軌道相互作用入門 (その2)

江藤 幹雄

慶應義塾大学 理工学部

前回は、半導体中では真空中に比べてスピン軌道相互作用はずっと大きくなること、それを利用したスピントランジスタが提案されていること、等を述べた。今回は、スピン軌道相互作用に起因する重要な物理現象としてスピンホール効果を取り上げる。

3 スピンホール効果

スピンホール効果とは、電場と垂直方向にスピン流が生成される現象である。1.4 節で紹介したスピントランジスタでは強磁性体から半導体にスピンを注入するが、強磁性体金属を用いると半導体との大きなインピーダンス・ミスマッチのために効率的にスピン注入ができない。スピンホール効果を利用すれば、磁場や磁性体を使わずにスピン注入をおこなえる可能性があることから注目されている。

スピンホール効果の概要を第5図 (b),(c) に示す。通常のアール効果は電場と垂直に磁場をかけて測定される [第5図 (a)]。電子はローレンツ力によって横方向に曲げられ、アール電圧が発生する。スピンホール効果の場合、磁場は用いない。その機構として不純物散乱などの外因性によるもの [第5図 (b)] と半導体固有の性質である内因性のもの [第5図 (c)] がある。

外因性 (extrinsic) スピンホール効果は、電子が散乱を受けたときにスピンによって曲がる方向が異なる現象である。半古典的な扱いでは “skew scattering” や “side jump” 効果として議論されるが [1]、本稿では量子力学まで戻ってスピンホール効果の原因を考える。ランダウ・リフシッツやモット・マッセーの教科書 [2, 3] に従い、散乱問題の部分波展開の手法を用いる。

内因性 (intrinsic) スピンホール効果は2つの理論が提案されている。Sinova らはラシュバのスピン軌道相互作用のはたらく2次元電子系を考察し、スピンホール効果を導出した。村上らはバルク半導体中のアール状態に着目し、大きなスピン軌道相互作用によって分裂した heavy-hole バンドと light-hole バンドでのスピンホール効果を導いた。それらの触りの部分を、できるだけ直感的に解説したい。(理論の詳細は村上氏や永長氏の本誌連載記事 [4, 5, 6] を参照してください。) 村上らの理論の方が Sinova らのよりも早く出たが、本稿では話の都合上 Sinova らの理論から説明する。

3.1 外因性スピンホール効果 (1) 3次元系

3次元の半導体中、1個の不純物の作るポテンシャル

$$\begin{aligned}\tilde{V} &= V(r) + \frac{\lambda}{\hbar} \boldsymbol{\sigma} \cdot [\mathbf{p} \times \nabla V(r)] \\ &= V(r) + V_1(r) \mathbf{l} \cdot \mathbf{s}\end{aligned}\tag{15}$$

による電子の散乱問題を考える。 $V(r)$ は球対称で、格子定数に比べて滑らかに変化すると仮定する (以下で有効質量方程式を考えるため)。第2項は1.3節の式(3)で与えられるスピン軌道相互作用である:

$$\lambda = \frac{P^2}{3} \left[\frac{1}{E_0^2} - \frac{1}{(E_0 + \Delta_0)^2} \right]$$

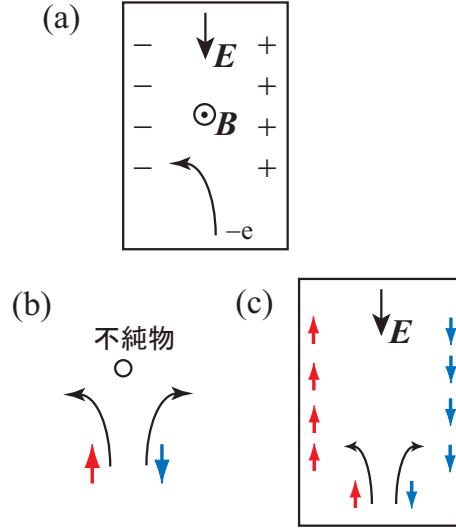


図 5: (a) 通常のホール効果の概念図。電流に垂直に磁場をかけると、電子は電流の垂直方向に運動し、ホール電圧が発生する。(b) 外因性のスピンホール効果の概念図。スピン軌道相互作用がはたらくとき、スピンの向きによって散乱されやすい方向が異なる。(c) 内因性のスピンホール効果の概念図。(a) のときのようにホール電流は発生しないが、スピン流が生成される。(b), (c) で、上向きスピン、下向きスピンはそれぞれ紙面に垂直で上向き、下向きを表す。

であり、真空中の $\lambda = \hbar^2 / (4m_0^2 c^2)$ (m_0 は真空中の電子の質量, c は光速) よりずっと大きい。

$$V_1(r) = -\lambda \frac{2}{r} \frac{dV}{dr}$$

で $V(r)$ の大きさは r の減少関数であろうから、 $\lambda > 0$ のとき、 $V_1(r)$ は $V(r)$ と同じ符号である。不純物の近傍以外ではスピン軌道相互作用 (Rashba 項や Dresselhaus 項) は無視できるとしよう。

固有方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \tilde{V} \right] \psi = E\psi, \quad (16)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m},$$

による散乱問題を考える (m は電子の伝導バンドでの有効質量、 Δ は 3 次元のラプラシアン)。 $l \cdot s$ は l^2, s^2 と交換するので、散乱のさい角運動量の量子数 l は保存する。したがって、 l 成分ごとに分けて散乱を議論する「部分波展開」の方法が有効である [2, 3, 7]。

ここでスピン軌道相互作用がない場合 ($V_1 = 0$) の部分波展開の方法をまとめておこう。入射波として z 方向に伝播する平面波を考える。それを l 成分ごとに分解すると

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (17)$$

(Rayleigh の公式). Legendre 多項式 $P_l(\cos \theta)$ は l 波 (その z 成分は $l_z = 0$) に対応する。 $e^{ikr \cos \theta}$ は φ を含まないので $l_z \neq 0$ の成分は含まない。 $j_l(kr)$ は球 Bessel 関数。球対称な場 $V(r)$ では l が保存するから、 l 波ごとに方程式 (16) を解けばよい。その動径方向成分 $R_l(r)$ は

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V(r) + k^2 \right] R_l(r) = 0$$

を満たす。 $R_l(r)$ の $r \rightarrow \infty$ での漸近形

$$R_l(r) \sim \frac{e^{i\delta_l}}{kr} \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)$$

によって位相差 δ_l が定義される。 δ_l は遠方での波の位相が散乱がない場合 $[j_l(kr) \sim \sin(kr - l\pi/2)/(kr)]$ と比べてどれだけシフトするかを表す¹²: V が強過ぎず $|\delta_l| < \pi/2$ の場合、 $V < 0$ (引力ポテンシャル) では $\delta_l > 0$ (波がポテンシャル中心に引き寄せられる)、 $V > 0$ (斥力ポテンシャル) では $\delta_l < 0$ (波が外に押し出される)。

(θ, φ) 方向への散乱振幅は、 l 波ごとの散乱振幅の和となって

$$f(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} P_l(\cos \theta).$$

$V_1 = 0$ のとき散乱振幅は φ に依存しない。微分散乱断面積は $\sigma(\theta, \varphi) = |f(\theta, \varphi)|^2$, 全散乱断面積は

$$\begin{aligned} \sigma^{\text{tot}} &= \int \sigma(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l \end{aligned}$$

で与えられる。 l 波の散乱がないとき $\delta_l = 0$, 最も大きな散乱が生じるとき $\delta_l = \pm\pi/2$ で「ユニタリ極限」と呼ばれる。

さて l 波へのスピン軌道相互作用の影響を考察しよう。この場合、 $2\mathbf{l} \cdot \mathbf{s} = (\mathbf{l} + \mathbf{s})^2 - \mathbf{l}^2 - \mathbf{s}^2$ ($s^2 = 4/3$) より、全角運動量 $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$ が保存するが、 l_z, s_z は保存しない。式 (15) 中の $\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}$ の部分が散乱方向を決めるので、それを $P_l(\cos \theta)$ に演算させてみよう。関係式

$$\mathbf{l} \cdot \mathbf{s} = \frac{1}{2}(l_+s_- + l_-s_+) + l_zs_z$$

($l_{\pm} = l_x \pm il_y, s_{\pm} = s_x \pm is_y$ は l_z, s_z の昇降演算子) より、 $l = 0$ (S 波) 成分には影響がないことがわかる。 $l \geq 1$ のときは

$$\mathbf{l} \cdot \mathbf{s} P_l(\cos \theta) = \frac{1}{2}[-s_- e^{i\varphi} + s_+ e^{-i\varphi}] P_l^1(\cos \theta) \quad (18)$$

$$= i(-\sin \varphi s_x + \cos \varphi s_y) P_l^1(\cos \theta). \quad (19)$$

式 (18) では l_{\pm} が ($l, l_z = 0$) 成分に作用した結果、 ($l, l_z = \pm 1$) 成分 $P_l^1(\cos \theta) e^{\pm i\varphi}$ が現れている (P_l^1 は Legendre 陪多項式)。 $j_z = l_z + s_z$ は保存するので、スピンのアップ ($s_z = 1/2$) からダウン ($s_z = -1/2$) にフリップするとき z 軸の右回り成分 $e^{i\varphi}$ が増加し、スピンのダウンからアップにフリップするとき左回り成分 $e^{-i\varphi}$ を得る。入射方向 $\mathbf{n} = \hat{z} = (0, 0, 1)$ 、および散乱方向 $\mathbf{n}' = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$ に垂直な単位ベクトル

$$\boldsymbol{\nu} = \frac{\mathbf{n} \times \mathbf{n}'}{|\mathbf{n} \times \mathbf{n}'|} = (-\sin \varphi, \cos \varphi, 0)$$

を導入すると、式 (19) は $i\boldsymbol{\nu} \cdot \mathbf{s} P_l^1(\cos \theta)$ 。すなわち、スピンは散乱面に垂直な方向を向くことがわかる。

¹² l ごとの粒子数の保存から振幅は変わらず、位相のみが変化する。

実際の散乱問題の解法は補遺 A を見ていただき、ここでは結果を述べる。平面波 (17) に対する散乱振幅は

$$\begin{aligned}
f(\theta, \varphi) &= A + 2B\nu \cdot s, \\
A &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{2ik} [(l+1)(e^{2i\delta_l^+} - 1) + l(e^{2i\delta_l^-} - 1)] P_l(\cos \theta), \\
B &= \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{2k} (e^{2i\delta_l^+} - e^{2i\delta_l^-}) P_l^1(\cos \theta).
\end{aligned} \tag{20}$$

ここで δ_l^\pm は l 波中の全角運動量 $j = l \pm 1/2$ の成分の位相差である: 2 つの成分は異なるポテンシャル $V(r) + (1/2)V_1(r)[j(j+1) - l(l+1) - 3/4]$ によって散乱を受ける (補遺 A)。前述のように $V(r)$ と $V_1(r)$ は同符合だから、 $j = l + 1/2$ 成分の方が $j = l - 1/2$ 成分よりも散乱の影響は大きい。S 波では $\delta_0^+ = \delta_0^- \equiv \delta_0$ 。スピン偏極のない電子が入射したとき、 n' 方向への散乱波には ν 方向のスピン分極

$$\begin{aligned}
\mathbf{P} &= \frac{|A+B|^2 - |A-B|^2}{|A+B|^2 + |A-B|^2} \nu \\
&= \frac{2\text{Re}(AB^*)}{|A|^2 + |B|^2} \nu
\end{aligned} \tag{21}$$

が生じる。 $\text{Re}(AB^*) > 0$ の場合、 z 方向に進む平面波が x 方向に散乱されると y 方向にスピン分極が生じ、 $-x$ 方向には $-y$ 方向のスピン分極が起きる。

加藤らは、GaAs において電流に垂直方向の試料端に生じるスピンの蓄積を、円偏光のカー効果によって観測した [8]。この実験結果は、Engel らによって外因性のスピンホール効果として定量的に説明されている [1]。彼らは Si-doped GaAs (電子数密度 $n = 3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$) において、正電荷を持つ不純物ポテンシャル

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon r} e^{-q_s r}$$

を考慮した。 $1/q_s$ はトーマス・フェルミの遮蔽長で $\sim 9 \text{ nm}$ 。計算は半古典的な Boltzmann 方程式を用いている。部分波展開の方法は、ポテンシャルの到達距離を a とするとき $ka \ll 1$ のときに有効である: このとき $\delta_l \sim (ka)^{2l+1}$ で、小さな l のみを考えればよい [7]。今の状況は $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} \approx 0.096 \text{ nm}^{-1}$ より $k_F/q_s \sim 1$ で部分波展開が有効とは言えない。

3.2 外因性スピンホール効果 (2) 2次元系

次に、半導体ヘテロ構造で実現される 2次元電子系 (xy 平面) での外因性スピンホール効果を定式化し、具体例を紹介したい。3次元系よりはイメージがつかみやすい。以下、 r, θ は 2次元極座標を表す。

平面に垂直な z 方向の運動が無視できるとき、電子に働くポテンシャルは

$$\tilde{V} = V(r) + V_1(r)l_z s_z. \tag{22}$$

したがってスピン $s_z = 1/2$ に対して、 $l_z > 0$ の成分の散乱は増大し、 $l_z < 0$ の成分の散乱は抑制される。スピン $s_z = -1/2$ には反対の効果が現れる。これがスピンホール効果の原因となる。

$l_z = m$ ($m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) の部分波展開をおこなう (本節と補遺 B では電子の有効質量を m^* として m と区別する)。 xy 平面内を x 方向に伝播する平面波は

$$e^{ikx} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^m J_m(kr) e^{im\theta}, \tag{23}$$

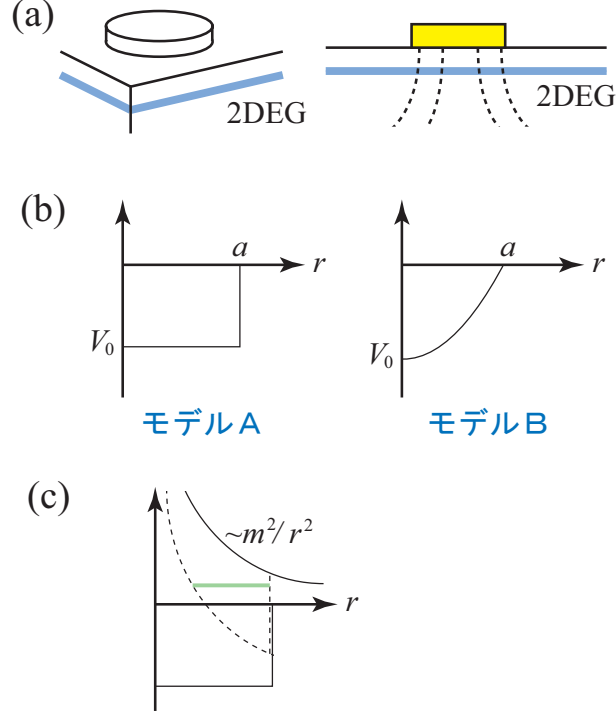


図 6: (a) 半導体ヘテロ構造の表面につけた微小な金属電極 (アンティ・ドット) の模式図。それに電圧をかけることで、右図のように 2次元電子系 (2DEG) にポテンシャルを作ることができる。(b) アンティ・ドットの作るポテンシャルの 2つのモデル。 $V_0 < 0$ の場合を示す。(c) モデル A に遠心力ポテンシャル $\propto m^2/r^2$ を加えたもの。仮想的な束縛状態に入射電子のエネルギーが一致するとき、共鳴散乱が生じる。

ここで $J_m(kr)$ は Bessel 関数である。スピン $s_z = \pm 1/2$ のそれぞれに対して、 m 波の動径方向成分 $R_m^\pm(r)$ を求める (補遺 B)。その $r \rightarrow \infty$ での漸近形

$$R_m^\pm(r) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} e^{i\delta_m^\pm} \cos(kr - m\pi/2 - \pi/4 + \delta_m^\pm) \quad (24)$$

によって位相差 δ_m^\pm が定義される [散乱がないとき $J_m(kr) \sim \sqrt{2/(\pi kr)} \cos(kr - m\pi/2 - \pi/4)$]。明らかに $\delta_m^\pm = \delta_m^\mp$, また S 波 ($m = 0$) にはスピン軌道相互作用が効かず $\delta_0^+ = \delta_0^- \equiv \delta_0$.

$s_z = \pm 1/2$ の散乱振幅は

$$\begin{aligned} f^\pm(\theta) &= A \pm B, \\ A &= \frac{1}{i\sqrt{2\pi k}} (e^{2i\delta_0^+} - 1) \\ &\quad + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{i\sqrt{2\pi k}} [(e^{2i\delta_m^+} - 1) + (e^{2i\delta_m^-} - 1)] \cos m\theta, \\ B &= \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi k}} (e^{2i\delta_m^+} - e^{2i\delta_m^-}) \sin m\theta, \end{aligned} \quad (25)$$

θ 方向への散乱波には z 方向のスピン分極

$$P_z = \frac{|f^+|^2 - |f^-|^2}{|f^+|^2 + |f^-|^2} = \frac{2\text{Re}(AB^*)}{|A|^2 + |B|^2} \quad (26)$$

が生じる。

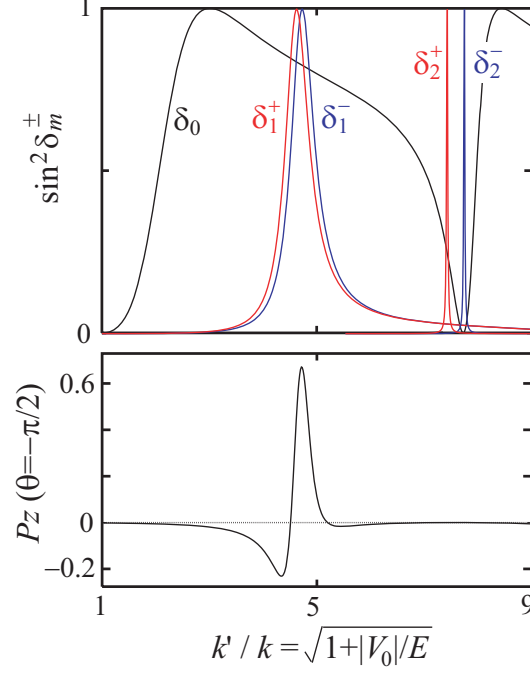


図 7: モデル A ($V_0 < 0$, $ka = 0.5$, $\lambda/a^2 = 0.01$) での S 波 ($m = 0$)、 P 波 ($m = \pm 1$)、 D 波 ($m = \pm 2$) の散乱強度 $\sin^2 \delta_m^\pm$. 横軸は $k'/k = \sqrt{1 + |V_0|/E}$ (補遺 B を参照)。下図は $\theta = -\pi/2$ 方向に散乱された電子のスピンスピン分極 P_z を示す。

ここで簡単な具体例を考えよう。半導体ヘテロ構造の表面にナノスケールの大きさの金属電極を蒸着したアンティ・ドット構造が作製されている¹³。アンティ・ドットに負や正の電圧をかけると、第 6 図 (a) のように 2 次元電子系にポテンシャルが加えられる。人工ポテンシャルの利点は、電圧を変えることでポテンシャルの大きさを制御できる点である。

第 6 図 (b) の 2 つのモデルを考えてみよう。

$$(A) \quad V(r) = V_0 \theta(a - r),$$

$$(B) \quad V(r) = V_0 [1 - (r/a)^2] \theta(a - r).$$

$a > 0$, $\theta(a - r)$ は階段関数 [$\theta(x) = 1 (x > 0)$, $0 (x < 0)$]。 $s_z = \pm 1/2$ の m 波に働くポテンシャルはそれぞれ

$$(A) \quad V_0 [\theta(a - r) \pm m(\lambda/a) \delta(r - a)],$$

$$(B) \quad V_0 [1 - (r/a)^2 \pm 2m\lambda/a^2] \theta(a - r).$$

(B) をさらに簡単化して

$$(B') \quad V_0 [1 \pm 2m\lambda/a^2] \theta(a - r)$$

としても本質は失わない。モデル A, B' での δ_m^\pm の計算は初等的である (補遺 B)。

引力ポテンシャルの場合 ($V_0 < 0$) に興味深いことが起きる。モデル A で、だんだんと井戸を深くしたときの m 波ごとの散乱強度 $\sin^2 \delta_m^\pm$ を第 7 図に示した。 $ka = 0.5$ (井戸の半径 a , およびフェルミ波長 $2\pi/k$ はいずれも数 $10 \sim 100\text{nm}$ を想定), $\lambda/a^2 = 0.01$ (おそらく現実の値より大き

¹³ 電子をナノスケールの領域に閉じ込めるデバイスを「量子ドット」と呼ぶ [9]。上述の系で表面の微小電極に負の電圧をかけると、その近傍から電子が排除されることから、このようなデバイスを「アンティ・ドット」と呼ぶ。

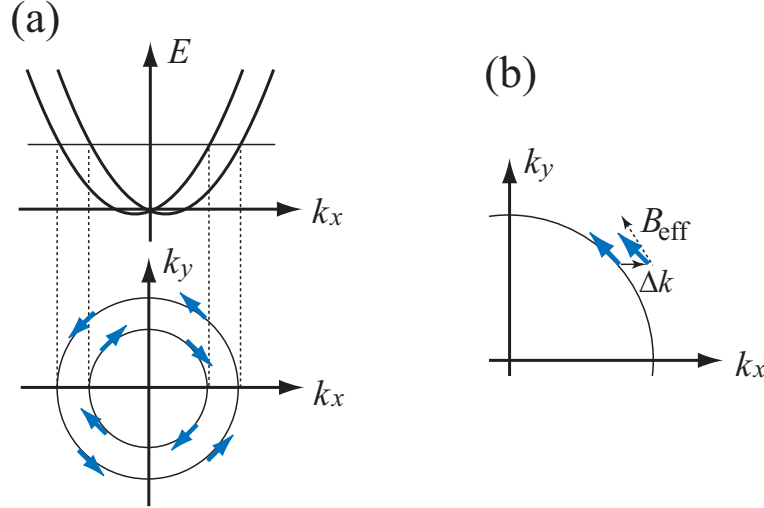


図 8: (a) InGaAs/GaAs ヘテロ構造 (2 次元電子系) における伝導電子のバンド図。ラシュバのスピノ軌道相互作用のために、スピンの向きによってバンドが分裂する。(b) Sinova らの理論での電子の運動。電場による電子のドリフト運動で k が Δk 変化するとき、有効磁場の方向が変わり、電子スピンはその周りで歳差運動をおこなう。

い)¹⁴とした。 $|V_0|$ を増加させると、まず S 波の散乱が、次に P 波 ($m = \pm 1$)、 D 波 ($m = \pm 2$) の散乱がユニタリ極限にまで増大する。これは井戸での仮想的束縛状態を介した共鳴散乱の結果である (第 6 図 (c))[7]。 S 波の場合には遠心力ポテンシャル $\propto m^2/r^2$ が働かないのでブロードな共鳴になる。 P 波、 D 波と $|m|$ の増加とともにより鋭い共鳴が現れる。

第 7 図の下図は式 (26) を用いて $-y$ 方向 ($\theta = -\pi/2$) へ散乱された電子のスピノ分極 P_z を示した ($\theta = -\pi/2$ では D 波の寄与はない)。 P 波の共鳴条件付近で大きなスピノ分極が得られることがわかる。(図示していないが、 $\lambda/a^2 = 0.001$ のときスピノ分極は 10%ほどになる。) この結果は、モデル B' や B を用いても定性的には変わらない。

3.3 内因性スピノホール効果

3.1 節、3.2 節では電子が不純物に散乱されて方向が変わるとき、スピノ軌道相互作用によってスピノ分極が生じることを示した。それでは周期的な結晶構造によって、同様のスピノ分極が生じるであろうか?

スピノ軌道相互作用が存在する場合でも、ポテンシャルが周期的であれば Bloch の定理が成り立つ。波動関数は

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}},$$

ここで n はバンド指数、 \mathbf{k} は結晶運動量でブリルアン領域の値を取る。 $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ は結晶構造と同じ周期を持つ周期関数である。電子の運動中結晶運動量 \mathbf{k} は保存され、したがって外因性のスピノホール効果は期待されない。しかし、このような場合に別の機構によるスピノホール効果が 2 つのグループによって提案された [10, 14]。2 つの提案は状況も機構も異なるが、いずれも「バイアス電場で誘起された電子のドリフト運動に伴うスピノの変化」に起因するものである。

¹⁴文献 [1] では GaAs で $\lambda = 5.3\text{\AA}^2$ と見積もっているが、そうであると $\lambda/a^2 \sim 10^{-4}$ 。 InGaAs での Rashba 項の測定値を考えると $\alpha \sim \lambda|V_0|/a \sim 10\text{meV}\cdot\text{nm}$ 、 $|V_0| \sim 10\text{meV}$ のとき $\lambda/a^2 \sim 10^{-2}$ 。いずれにせよ、このモデル計算の観測可能性については詳細な検討を要する。

3.3.1 Sinova らの理論

2次元電子ガスにラシュバのスピノ軌道相互作用がはたらく場合を考える (例えば InGaAs ヘテロ構造での伝導電子)。Hamiltonian は

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{\alpha}{\hbar} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} \times \hat{z}). \quad (27)$$

この固有状態と固有値は

$$\psi_{\mathbf{k},\pm}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \chi_{\mathbf{k},\pm}, \quad (28)$$

$$E_{\mathbf{k},\pm} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \mp \alpha k = \frac{\hbar^2}{2m} (k \mp k_\alpha)^2 - \frac{\hbar^2 k_\alpha^2}{2m}, \quad (29)$$

ここで $\chi_{\mathbf{k},\pm}$ は $\mathbf{k} \times \hat{z}$ 方向のスピノ固有状態である:

$$\begin{aligned} \sigma_{\mathbf{k} \times \hat{z}} &= \boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{\mathbf{k} \times \hat{z}}{|\mathbf{k} \times \hat{z}|}, \\ \sigma_{\mathbf{k} \times \hat{z}} \chi_{\mathbf{k},\pm} &= \pm \chi_{\mathbf{k},\pm}. \end{aligned}$$

$\chi_{\mathbf{k},+}$ の向きを第 8 図 (a) に示した。 $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ によってスピノの向きが異なることが重要である。1.4 節と同様に、Hamiltonian (27) の第 2 項を Zeeman 項とみなすと、有効磁場

$$\gamma \hbar \mathbf{B}_{\text{eff}} = 2\alpha (\mathbf{k} \times \hat{z})$$

が \mathbf{k} によって異なると解釈できる。

この電子系に電場 E_x をかけると電子はドリフト運動をおこない、結晶運動量 \mathbf{k} が変化する:

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -i[\mathbf{k}, H - (-e)E_x x] = -eE_x \hat{x} \quad (30)$$

より $\hbar \Delta \mathbf{k} = (-e)E_x \hat{x} \Delta t$ (以下短時間を考えて緩和項を無視する)。それに伴って有効磁場の向きが $\mathbf{B}_{\text{eff}}(\mathbf{k} + \Delta \mathbf{k})$ に変化するから、最初 $\mathbf{B}_{\text{eff}}(\mathbf{k})$ を向いていたスピノは歳差運動を始める:

$$\begin{aligned} \hbar \frac{d\mathbf{s}}{dt} &= \mathbf{s} \times \tilde{\mathbf{B}}(t), \\ \tilde{\mathbf{B}}(t) &= -\gamma \hbar \mathbf{B}_{\text{eff}}(t) \end{aligned}$$

[第 8 図 (b)]。その結果、スピノの z 成分 (および \mathbf{k} に平行な成分) が現れる。文献 [10] の見積もりによると

$$s_z = \frac{\hbar}{2\tilde{B}^2} \frac{d\tilde{B}_\perp}{dt}.$$

ここで \tilde{B}_\perp は $\Delta \mathbf{B}_{\text{eff}}(t)$ の $\mathbf{B}_{\text{eff}}(\mathbf{k})$ に垂直 (すなわち \mathbf{k} に平行) な成分

$$\frac{d\tilde{B}_\perp}{dt} = 2\alpha (\hat{z} \times \dot{\mathbf{k}}) \cdot \frac{\mathbf{k}}{k} = \frac{2\alpha(-e)E_x}{\hbar} \frac{k_y}{k}$$

である。したがって

$$s_z = \frac{\hbar}{2(2\alpha k)^2} \frac{2\alpha(-e)E_x}{\hbar} \frac{k_y}{k} = \frac{(-e)k_y}{4\alpha k^3} E_x,$$

y 方向へのスピノ流は¹⁵

$$\begin{aligned} j_{s,y} &= \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \hbar s_z(\mathbf{k}) \frac{\hbar k_y}{m} \\ &= \frac{(-e)\hbar^2}{16\pi\alpha m} (k_{F,+} - k_{F,-}) E_x \end{aligned}$$

¹⁵ 電子の y 方向の速度は $v_y = \frac{1}{i\hbar} [y, H - (-e)E_x x] = \frac{\hbar k_y}{m} + \alpha \sigma_x$ であるが、第 2 項は積分に効かない。

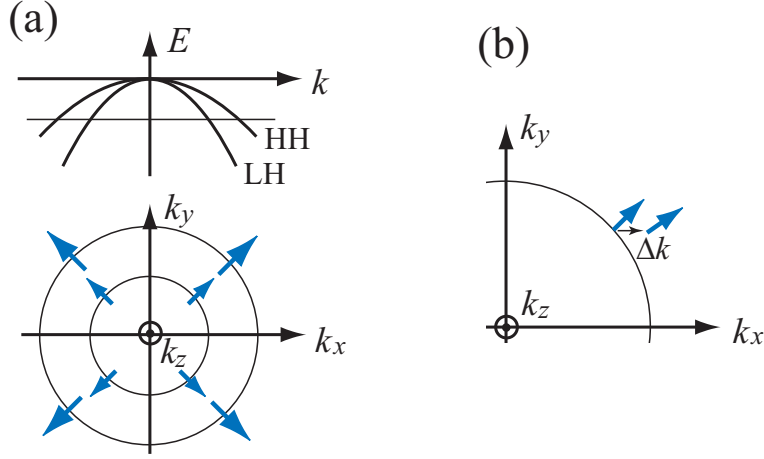


図 9: (a) GaAs 等の 3 次元半導体での価電子バンドの模式図。Γ 点近傍に heavy-hole (HH) バンド ($\lambda = \pm 3/2$) と heavy-hole (LH) バンド ($\lambda = \pm 1/2$) が存在する。下図では $\lambda = 3/2, 1/2$ に対するスピン S の方向を k_x - k_y 平面上で図示した。(b) 村上らの理論での電子の運動。電場による電子のドリフト運動はバンドの中で起こる (バンド間遷移を考えない断熱過程)。 k が Δk 変化するとき、 λ の値が一定になるように S の向きも変化する。

となる。ここで $k_{F,\pm}$ は 2 つのフェルミ円の半径で $k_{F,+} - k_{F,-} = 2k_\alpha = 2m\alpha/\hbar^2$ となることを用いると、スピンホール伝導度は

$$\sigma_{\text{SH}} = -\frac{j_{s,y}}{E_x} = \frac{e}{8\pi}$$

と universal な値をとることがわかる。

以上は半古典的な導出であるが、Sinova らはスピン流演算子を $j_{\text{spin}}^z = \frac{\hbar}{2}\{s_z, v\}$ で定義し、久保公式を用いることで同じ結果を導いている [10]。

この内因性スピンホール効果は、後の研究で不純物散乱に対して弱いことがわかってきた。井上ら [11] や Chalaev ら [12] によると、不純物散乱のあるバルク系では vertex 補正によって上述の σ_{SH} が完全に打ち消され、ゼロになってしまう! 一方、サンプルの端のある形状まで考慮すれば σ_{SH} が復活し、スピンホール効果として測定可能との報告もある [13]。今後の実験結果が待たれている。

3.3.2 村上らの理論

村上らは GaAs 等の半導体 (3 次元のバルク) の価電子バンドに着目した。1.2 節で見たように、価電子バンドのトップ (Γ 点) 近傍では、原子起源のスピン軌道相互作用によって、全角運動量が $j = 3/2$ と $j = 1/2$ の 2 つのバンドに分裂する。 $j = 3/2$ 状態は、Γ 点から離れるとさらに $j_z = \pm 3/2$ の heavy-hole バンド、 $j_z = \pm 1/2$ の light-hole バンドの 2 つに分かれる。その場合のスピンホール効果はどうなるであろうか。

まず heavy-hole バンド、light-hole バンドを Luttinger Hamiltonian で記述する。Spherical 近似をおこなうと

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma_2 \right) k^2 - 2\gamma_2 (\mathbf{k} \cdot \mathbf{S})^2 \right], \quad (31)$$

ここで S は「スピン 3/2」の演算子¹⁶、 γ_1, γ_2 は物質によって決まる定数である。Hamiltonian

¹⁶正確には原子の p 軌道 ($l = 1$) とスピン $s = 1/2$ の合成による全角運動量である。が、 k で記述される原子スケールより大きな運動の持つ角運動量とは無関係なので、混乱を避けるためにあえてスピンと記述する。

(31) は、 S の k 方向成分 $\lambda = S \cdot k/k$ (helicity と呼ばれる) によって異なる固有エネルギーをとる。 $\lambda = \pm 3/2$ のとき

$$E_H(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m}(\gamma_1 - 2\gamma_2)k^2 \equiv \frac{\hbar^2}{2m_H}k^2$$

(heavy-hole バンド)、 $\lambda = \pm 1/2$ のとき

$$E_L(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m}(\gamma_1 + 2\gamma_2)k^2 \equiv \frac{\hbar^2}{2m_L}k^2$$

(light-hole バンド) となる。これらを第 9 図 (a) に示すが、スピン S の向きが k に依存する点が第 8 図 (a) と共通する特徴である。

このホール系に電場 E_x をかけるとドリフト運動が生じるが、村上らはホール状態は同じバンドにとどまる断熱過程を考えてそれを議論した。すなわち結晶運動量は

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = eE_x \hat{x}$$

にしたがい、そのバンド中を変化する。例えば第 9 図 (b) に示したように、heavy-hole バンドの $\lambda = 3/2$ の状態は、 λ の値を保つようにスピンの向きも変化する。この断熱近似は、スピン軌道相互作用が大きく、heavy-hole と light-hole バンドが互いに十分離れている状況で正当化される。

k 空間において、ホールはバンドによって決まる「曲がった空間」を動く。その影響が実空間での運動に現れることを文献 [14] にしたがって簡単に考察しよう。Hamiltonian (31) にユニタリー変換 $U(\mathbf{k}) = e^{i\theta S_y} e^{i\varphi S_z}$ を施すと、 S の量子化軸がすべての k で S_z 方向を向く (θ, φ は k の方向の極座標)¹⁷。外部ポテンシャル $-eE_x x$ も含めて

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= U(\mathbf{k})(H - eE_x x)U^\dagger(\mathbf{k}) \\ &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma_2 - 2\gamma_2 S_z^2 \right) - eE_x \left[x + iU(\mathbf{k}) \frac{\partial}{\partial k_x} U^\dagger(\mathbf{k}) \right]. \end{aligned}$$

このように k と S に依存するポテンシャルが加わり、これがスピンホール効果の原因となる。電子はその影響を受けながら、(バンド内に留まるために) スピンを常に S_z 方向を向けるように運動をおこなう。

村上らの計算によると¹⁸、 y 方向のドリフト運動は

$$\dot{y} = \frac{\hbar k_y}{m_{\text{eff}}} - \lambda \frac{e k_z}{\hbar k^3} E_x. \quad (32)$$

第 1 項は通常の群速度 (m_{eff} はバンドによって m_H または m_L) である。それに $\lambda = 3/2, 1/2$ のバンドと、 $\lambda = -3/2, -1/2$ のバンドとで、反対方向の速度が加わる。スピンホール伝導度を評価すると

$$\sigma_{\text{sH}} = -\frac{j_{s,y}}{E_x} = \frac{e}{12\pi} (3k_F^H - k_F^L),$$

ここで $k_F^{\text{H,L}}$ は heavy-hole, light-hole バンドのフェルミ波数である。(3次元系を考えているので、Sinova らの 2次元の計算結果と σ_{sH} の次元が異なることに注意。)

この内因性スピンホール効果は Wunderlich らの実験で観測されている [15]。発光ダイオードの構造を作り、スピンホール効果によってスピン偏極したホールと電子の再結合によって放出される光を測定する。その円偏光度からホールのスピン偏極度が観測される。

¹⁷最初 S は k 方向を向いているから、まず z 軸の周りに $-\varphi$ 回転、次に y 軸の周りに $-\theta$ 回転させれば z 方向を向く。

¹⁸式 (32) は、 $i\hbar \dot{y} = [y, \tilde{H}]$ からは正確に求められない。バンドの中への制限が考慮されないためにスピンの方向が S_z からずれてしまう。式 (32) の導出には、曲がった空間でのゲージ場の理論を用いて \mathbf{r} と \mathbf{k} の非自明な交換関係を使う必要がある [4, 5, 6, 14]。

不純物散乱の効果については、Sinovaらのスピンホール効果とは異なり、vertex補正が効かない [16]。何故このスピンホール効果は不純物散乱に対して強いのか、の理由も含めて幾何学的な理解が進展している。興味のある方は、村上氏や永長氏の解説 [4, 5, 6] を是非読んでください。

A 3.1節の計算

ポテンシャル (15) による l 波 ($l \geq 1$) の散乱を計算する。 l 波の角度部分はスピンも含めると $P_l(\cos \theta)\chi_{\pm}$ (χ_{\pm} は σ_z の固有状態)。散乱過程で全角運動量 $j = l + s$ は保存するので (j, j_z) の成分に分けると都合が良い。 $P_l(\cos \theta)\chi_{\pm}$ は $j = l \pm 1/2$ の2つの成分からなる。

まず $P_l(\cos \theta)\chi_+$ を考える。Clebsch-Gordan 係数を用いると

$$P_l(\cos \theta)\chi_+ = \frac{\sqrt{4\pi}}{2l+1} \left(\sqrt{l+1}\psi_{l+1/2,1/2} - \sqrt{l}\psi_{l-1/2,1/2} \right),$$

ここで $\psi_{j=l\pm 1/2, j_z=1/2}$ は全角運動量とその z 成分の固有状態。これらに対してポテンシャル (15) は

$$V(r) + \frac{1}{2}V_1(r) \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \equiv \tilde{V}_{l,\pm}(r).$$

したがって、 $\psi_{l\pm 1/2,1/2}$ の散乱は球対称ポテンシャル $\tilde{V}_{l,\pm}(r)$ の散乱問題に帰着し、それを解くことで位相差 δ_l^{\pm} が計算される。 $P_l(\cos \theta)\chi_+$ の散乱振幅 $f_{l,+}$ は

$$f_{l,+} = \sqrt{4\pi} \left(\sqrt{l+1} \frac{e^{2i\delta_l^+} - 1}{2ik} \psi_{l+1/2,1/2} - \sqrt{l} \frac{e^{2i\delta_l^-} - 1}{2ik} \psi_{l-1/2,1/2} \right). \quad (33)$$

ここで再び Clebsch-Gordan 係数を用い、今度は $\psi_{l\pm 1/2,1/2}$ を逆に ($l, l_z = 0; s_z = 1/2$) および ($l, l_z = 1; s_z = -1/2$) の成分で表すと

$$\begin{aligned} \psi_{l+1/2,1/2} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left[\sqrt{l+1} P_l(\cos \theta)\chi_+ - \frac{1}{\sqrt{l+1}} P_l^1(\cos \theta) e^{i\varphi} \chi_- \right], \\ \psi_{l-1/2,1/2} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left[-\sqrt{l} P_l(\cos \theta)\chi_+ - \frac{1}{\sqrt{l}} P_l^1(\cos \theta) e^{i\varphi} \chi_- \right]. \end{aligned}$$

これらを式 (33) に代入すると

$$\begin{aligned} f_{l,+} &= \frac{1}{2ik} [(l+1)(e^{2i\delta_l^+} - 1) + l(e^{2i\delta_l^-} - 1)] P_l(\cos \theta)\chi_+ \\ &\quad - \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_l^+} - e^{2i\delta_l^-}) P_l^1(\cos \theta) e^{i\varphi} \chi_- \end{aligned} \quad (34)$$

が得られる。

同様に $P_l(\cos \theta)\chi_-$ の散乱振幅 $f_{l,-}$ を求め、式 (34) とまとめて書くと

$$\begin{aligned} f_{l,\pm} &= \frac{1}{2ik} [(l+1)(e^{2i\delta_l^+} - 1) + l(e^{2i\delta_l^-} - 1)] P_l(\cos \theta)\chi_{\pm} \\ &\quad \mp \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_l^+} - e^{2i\delta_l^-}) P_l^1(\cos \theta) e^{i\varphi} \chi_{\mp}. \end{aligned} \quad (35)$$

すべての l について $f_{l,\pm}$ の和をとると、本文中の式 (20) と等価な結果を得る。

B 2次元での散乱問題

xy 平面内において、 x 方向に進む平面波 (23) の散乱問題を考える (しばらくスピン $s_z = \pm 1/2$ に対応する添え字 \pm を省略)。波動関数の $r \rightarrow \infty$ での漸近形を

$$\psi \sim e^{ikx} + f(\theta) \frac{e^{i(kr+\pi/4)}}{\sqrt{r}}$$

とすると¹⁹、散乱断面積 (断長さ?) は $\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2$ で与えられる。

部分波展開は 3次元の場合と同様に定式化される。平面波の展開式 (23) を代入し、 m 波の S 行列

$$S_m = 1 + i\sqrt{2\pi k} f_m = e^{2i\delta_m}$$

[f_m は $f(\theta)$ のフーリエ成分: $f(\theta) = \sum_m f_m e^{im\theta}$] で位相差を定義すると、

$$\begin{aligned} \psi &\sim \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} i^m e^{i\delta_m} \cos(kr - m\pi/2 - \pi/4 + \delta_m) e^{im\theta}, \\ f(\theta) &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{e^{2i\delta_m} - 1}{i\sqrt{2\pi k}} e^{im\theta}. \end{aligned} \quad (36)$$

全散乱断面積は

$$\begin{aligned} \sigma^{\text{tot}} &= \int_0^{2\pi} \sigma(\theta) d\theta \\ &= \frac{2}{\pi k} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sin^2 \delta_m, \end{aligned}$$

また光学定理

$$\sigma^{\text{tot}} = \sqrt{\frac{2}{\pi k}} \text{Im} f(0)$$

が確かめられる。なお、2次元 (3次元円筒座標) の散乱問題の具体例として、Aharonov-Bohm 効果の原著論文 [17] が教育的である。

さて、スピン軌道相互作用を含んだポテンシャル (22) の問題に戻ろう。スピン $s_z = \pm 1/2$ に対する位相差 δ_m^\pm は、波動関数の m 波の動径方向 $R_m^\pm(r)$ から求められる。その方程式は

$$\begin{aligned} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{m^2}{r^2} - \frac{2m^*}{\hbar^2} \tilde{V}_m^\pm(r) + k^2 \right] R_m^\pm(r) &= 0, \\ \tilde{V}_m^\pm(r) &= V(r) \pm mV_1(r)/2. \end{aligned}$$

ただし $E = \hbar^2 k^2 / (2m^*)$ 。 $R_m^\pm = R_{-m}^\mp$ 、すなわち $\delta_m^\pm = \delta_{-m}^\mp$ が成り立つ。この関係式を式 (36) に用いると本文中の式 (25) を得る。

具体例としてモデル A を考えよう。 $\delta_m^\pm = \delta_{-m}^\mp$ より $m \geq 0$ として良い。 $r > a$ では $\tilde{V} = 0$ より

$$R_m^\pm(r) = C_1 J_m(kr) + C_2 Y_m(kr) \quad (37)$$

$$\sim \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} [C_1 \cos(kr - m\pi/2 - \pi/4) + C_2 \sin(kr - m\pi/2 - \pi/4)], \quad (38)$$

¹⁹ 第 2 項、指数関数の肩の $\pi/4$ はなくてもよい (物理量である $\sigma(\theta)$ には影響しない) が、このように定義すると後述の光学定理が成り立つ。

ここで $Y_m(kr)$ はノイマン関数。式 (38) と $R_m^\pm(r)$ の漸近形 (24) との比較より

$$\tan \delta_m^\pm = -C_2/C_1. \quad (39)$$

一方、 $r < a$ では

$$R_m^\pm(r) = C_3 J_m(k'r), \quad (40)$$

$$\hbar^2 k'^2 / (2m^*) = E - V_0. \quad (41)$$

式 (37), (40) を $r = a$ で接続すると、 $V_0 < 0$ のとき

$$\begin{aligned} \tan \delta_m^\pm &= \frac{[J_{m-1}(ka) - J_{m+1}(ka)]J_m(k'a) - \alpha_m^\pm J_m(ka)}{[Y_{m-1}(ka) - Y_{m+1}(ka)]J_m(k'a) - \alpha_m^\pm Y_m(ka)}, \\ \alpha_m^\pm &= (k'/k)[J_{m-1}(k'a) - J_{m+1}(k'a)] \mp 2m[1 + (k'/k)^2](k\lambda/a)J_m(k'a), \end{aligned}$$

が得られる。途中

$$\frac{d}{dx} J_m(x) = \frac{1}{2}[J_{m-1}(x) - J_{m+1}(x)]$$

(Y_m も同様) を用いた。

モデル B' では

$$\begin{aligned} \hbar^2 k'^2 / (2m^*) &= E - V_0(1 \pm 2m\lambda/a^2), \\ \alpha_m^\pm &= (k'/k)[J_{m-1}(k'a) - J_{m+1}(k'a)] \end{aligned}$$

と置き換えをすれば良い。モデル B では $r < a$ での方程式を数値的に解き、式 (39) から δ_m^\pm が求められる。

参考文献

- [1] H. Engel, B. I. Halperin and E. I. Rashba: Phys. Rev. Lett. **95** (2005) 166605.
- [2] ランダウ、リフシッツ: 「量子力学 2」(第 3 版、東京図書、1983), §140, p. 696.
- [3] モット、マッセイ: 「衝突の理論」(第 3 版、吉岡図書、1975), 第 X 章.
- [4] 村上修一、永長直人: 固体物理 **39** (2004) 27.
- [5] 村上修一: 日本物理学会誌 **62** (2007) 2.
- [6] 永長直人: 固体物理 **41** (2006) 877; **42** (2007) 1, 487, 873; **43** (2008) 73.
- [7] J. J. Sakurai: 「現代の量子力学」(吉岡書店、1989), 第 7 章.
- [8] Y. K. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard and D. D. Awschalom: Science **306** (2004) 1910.
- [9] 勝本信吾: 「メゾスコピック系」(朝倉書店、2003).
- [10] J. Sinova, D. Culcer, Q. Niu, N. A. Sinitsyn, T. Jungwirth and A. H. MacDonald: Phys. Rev. Lett. **92** (2004) 126603.
- [11] J. Inoue, G. E. W. Bauer, L. W. Molenkamp: Phys. Rev. B **70** (2004) 041303(R).

- [12] O. Chalaev and D. Loss: Phys. Rev. B **71** (2005) 245318.
- [13] I. Adagideli and G. E. W. Bauer: Phys. Rev. Lett. **95** (2005) 256602.
- [14] S. Murakami, N. Nagaosa and S. C. Zhang: Science **301** (2003) 1348.
- [15] J. Wunderlich, B. Kaestner, J. Sinova and T. Jungwirth: Phys. Rev. Lett. **94** (2005) 47204.
- [16] S. Murakami: Phys. Rev. B **69** (2004) 241202(R).
- [17] Y. Aharonov and D. Bohm: Phys. Rev. **115** (1959) 485.