

## 審査の結果の要旨

論文提出者氏名 坂野 昌人

「Band structures and spin polarizations in strongly spin-orbit coupled materials (強いスピン軌道相互作用を有する物質におけるバンド構造とスピン分極)」と題された本博士論文は8章から構成されており、第1章に研究の背景、第2章に実験原理と方法、第3章にレーザー角度分解光電子分光測定系の開発、第4章に  $3R\text{-MoS}_2$  におけるスピンバレー分極、第5章に  $\beta\text{-PdBi}_2$  超伝導体におけるトポロジカルな電子構造、第6章に極性半金属  $\beta\text{-MoTe}_2$  におけるトポロジカル表面状態、第7章にスピン軌道相互作用の役割に関する議論、第8章に全体の結論が述べられている。

空間反転対称性の破れた物質やバンド反転の生じた物質においては、スピン軌道相互作用によるバンドのスピン分裂やトポロジカル表面状態の出現を介して、運動量に結合したスピン分極が生じる。これらの非自明な電子・スピン構造はベリー位相に基づく多様な電子相や電気磁気現象の出現する舞台として注目されている。本研究は、固体中の相対論的効果であるスピン軌道相互作用に着目し、実際の物質に現れる非自明な電子構造やスピン構造の解明を目指したものである。本研究では主な実験的手法として、外部光電効果により物質内の電子の運動量、エネルギーおよびスピンを分解した測定が可能な「スピン・角度分解光電子分光」を用いている。これにより、各物質のバンド構造やトポロジカル表面状態、波数空間におけるスピン分極などの直接観測を行った。また同時に、論文提出者は、より微細な電子構造の観測を目的として、高いエネルギー・波数分解能や狭いスポットサイズ、偏光制御性を合わせ持つ紫外レーザー光源の開発を進め、レーザー角度分解光電子分光測定系として立ち上げた。

以下では各章ごとに内容を詳細に述べる。

第1章では、本研究の背景として、スピン軌道相互作用がバンド構造に及ぼす効果について説明されている。特に論文提出者が修士時代に行い本研究の契機ともなった極性半導体  $\text{BiTeI}$  における巨大ラッシュバ効果についてまとめられている。加えて、本研究の第5,6章に必要となるトポロジカル絶縁体やディラック、ワイル半金属、トポロジカル超伝導などの基礎知識について、これまでに内外で行われた実験および理論的研究の概要をもとに説明している。

第2章では、本研究において主に用いた実験手法であるスピン分解角度分解光電子分光法の原理や、解析に必要な基礎知識が述べられている。また、実際に使用した実験装置についても説明されている。

第3章では、レーザー角度分解光電子分光測定系の開発と性能評価について述べられている。論文提出者は、市販で得られる非線形光学結晶  $\text{BaB}_2\text{O}_4$  を用いてチタン・サファイアレーザーの第四次高調波(193 ~ 210 nm)光源を開発した。実際に得られた性能は、エネルギー分解能 < 0.9 meV、角度分解能 < 0.2 度、偏光度 > 99%、光源スポット径 0.1 mm 程度であり、これを用いることにより第6章の  $\text{MoTe}_2$  の極性ドメインを分離した実験が初めて可能となった。

第4章では、空間反転対称性の破れた半導体  $3R\text{-MoS}_2$  におけるスピン分裂の観測結果について

述べている。K 点および-K 点における価電子帯の頂点（バレー）において、それぞれ逆向きの面直方向成分を持つ 100%のスピンの偏極度が観測された。これは、近年ポストグラフェン材料として大流行している単層 MoS<sub>2</sub>の特徴である 3 回対称性が 3R-MoS<sub>2</sub>のバルク結晶において保持されることに由来しており、本物質のスピンのバレートロンクス材料としての可能性を強く示唆するものである。

第 5 章では、強いスピン軌道相互作用を持つ超伝導体  $\beta$ -PdBi<sub>2</sub> の電子構造について述べている。バルクのバンド計算にはないスピンの偏極したバンドを複数観測し、これらが  $Z_2$  トポロジカル不変量によって特徴づけられるトポロジカル表面状態であることをパリティ解析により説明した。また、ビスマスの強いスピン軌道相互作用とともに、ビスマス  $p$  軌道とパラジウム  $d$  軌道の混成がバンド反転に重要な役割を果たしていることが明らかとなった。

第 6 章では、極性半金属  $\beta$ -MoTe<sub>2</sub> で観測された電子構造について述べている。本物質は 250 K で非極性・極性構造相転移を示し、低温相が空間反転対称性の破れたワイル半金属であるとの理論提案が最近されている。極性ドメインが混在するため通常の測定では分離が困難であったが、論文提出者は自ら開発した紫外レーザー光源を用いて、ドメインを分離したバンド構造の観測に成功した。この結果、(001)と(00-1)面において異なるアーク状の表面状態を示唆する実験結果が得られた。これは現時点においてワイル半金属（候補物質含む）の表と裏のエッジ状態を別個に観測した初めての例となる。

第 7 章では、第 4~6 章において研究対象とした 3 物質のバンド構造に対するスピン軌道相互作用の効果を包括的に議論している。バンド分散を形成する軌道成分に注目することによって、大きなスピン分裂やバンド反転を引き起こすための物質設計指針に関する知見を得た。

第 8 章では、本研究によって得られた成果がまとめられている。

本研究は、半導体 MoS<sub>2</sub>、超伝導体 PdBi<sub>2</sub>、半金属 MoTe<sub>2</sub> という多様な物質における巨大なスピン分裂やトポロジカル状態を世界に先駆けて分光学的に解明し、固体中の電子に働くスピン軌道相互作用を主軸とした包括的な知見を得たものである。この結果は物質中のスピン軌道相互作用が新しい電子相や機能物性を生み出す可能性を提示しており、物性科学・物理工学の発展に大きく寄与すると期待される。

よって、本論文は博士(工学)の学位請求論文として合格と認められる。