

レーザー励起角度分解光電子分光による トポロジカル絶縁体における表面電子状態の研究

物質系専攻 学籍番号 47116033 中島 祐貴

指導教員：辛 埴（教授）

キーワード：トポロジカル絶縁体、光電子分光、スピン偏極

【序論・目的】

トポロジカル絶縁体は、固体内部は絶縁体であるがその表面は金属状態を有するという新しいタイプの物質である[1]。その表面電子状態は、ヘリカルなスピン構造を持つ線形の Dirac 分散を有することで特徴付けられる[2] [図 1(b)]。この表面偏極スピンはスピントロニクスへの応用が期待されており、工学的な観点からもトポロジカル絶縁体は興味を持たれている。

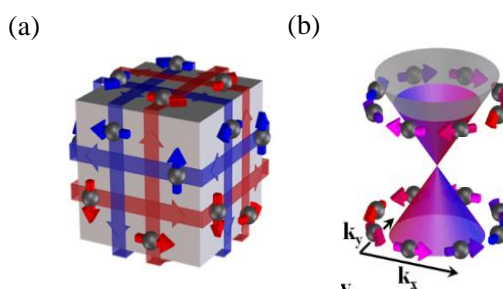


図1 トポロジカル絶縁体の表面スピン状態 (a)実空間と(b)波数空間での模式図[3]

我々はこのトポロジカル絶縁体の表面状態を理解するために、レーザー励起型の角度分解光電子分光 (Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy : ARPES) を用いて Bi_2Se_3 及び Bi_2Te_3 の電子構造を詳細に観測した。特に、偏光を容易に調整できるレーザーの特徴を活かすことで、通常の ARPES では得ることのできないスピンヘリカル構造と表面の波動関数に関する知見を得ることを目的とした。

【実験及び解析手法】

ARPES は、光電子を角度とエネルギーの関数として測定することで電子構造を直接的に観測する実験手法である。本研究における実験配置(光の入射、試料の回転、及び光電子の収集の関係)を図 2 に示す。我々が使用する半球型アナライザーでは、試料をある θ に固定した際、 $-15^\circ \leq \alpha \leq 15^\circ$ 方向に飛び出す光電子を一度に収集できる。試料を θ 方向に回転することで、広い運動量空間での電子構造を決定できる。

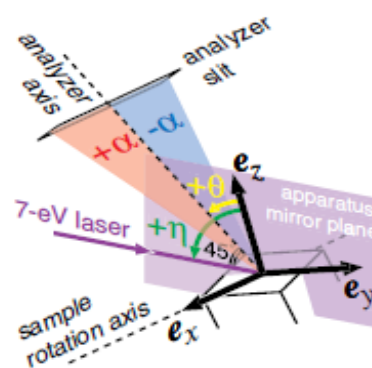


図2 実験配置

左右円偏光による光電子強度の差異 (円 2 色性(circular dichroism: CD)) は、スピン構造などによる電子状態を持つ非対称性に敏感である。トポロジカル絶縁体の表面に生じるスピン構造の詳細を解明する上でも CD が有用であることは理論的にも示されており [3]、本研究でも採用した。

Bi_2Te_3 の大きな特徴は、フェルミ面が円形から著しく歪んだ雪型形状を持つことである。そ

れに伴い、理想的なヘリカルスピン構造とは異なり、スピンの垂直成分(z成分)が生じていると考えられている。スピンの面内成分(xy方向)と垂直成分(z成分)は、それぞれ試料に対し水平(xy方向)に入射する光と垂直(z方向)に入射する光から得られるCDパターンに反映されることが期待される。ところが、光を試料に対し45°方向から光を入射する実験上の制約(図2)から、得られるCDパターンには、光の水平入射と垂直入射からの2成分の足し合わせとなっている。そこで我々は、図3に示すように試料をz軸周りに180°回転したデータを収集し、回転前のデータに足し合わせたり差し引いたりすることで、それぞれ水平入射と垂直入射で得られるCDパターンを選り分ける解析を行った。得られる解析結果をもとに、スピンの面内成分と垂直成分が持つ構造を研究した。

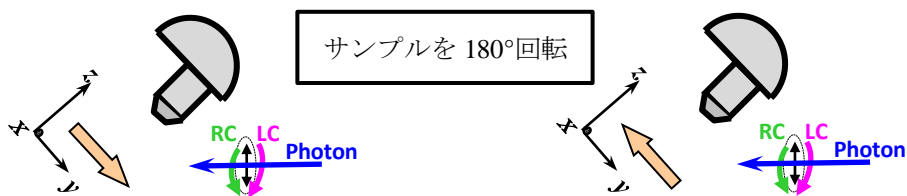


図3 2方向からのCD-ARPES

【実験結果】

図4(a)に Γ 点近傍で測定した Bi_2Te_3 のバンド分散を示す。表面由来の線形な分散が確認できる。図4(b)に様々なエネルギー(図(a)の点線)におけるARPES強度を示す。Dirac点近傍では分散に歪みのないDirac錐を有することを反映して、等エネルギー面が円形となる。一方、 E_F に近づくにつれてバンドが反り返ることを反映し、六角形そして雪型形状へと等エネルギー面が歪んでいく(“warping”)様子が確認できる。これは、 E_F において表面とバルクのバンド同士が混成することに起因すると考えられる。

図4(c)と(d)は、それぞれ垂直入射と水平入射から期待されるCDパターンに選り分けた解析結果である。

E_F 近傍[図4(c1)-4(c3)]において、方位角 ϕ (図c1に記載)に沿った $\sin 3\phi$ の変調構造が見て取れる。スピンのz成分が $\cos 3\phi$ の変調構造を持つ場合のCDパターンが理論的

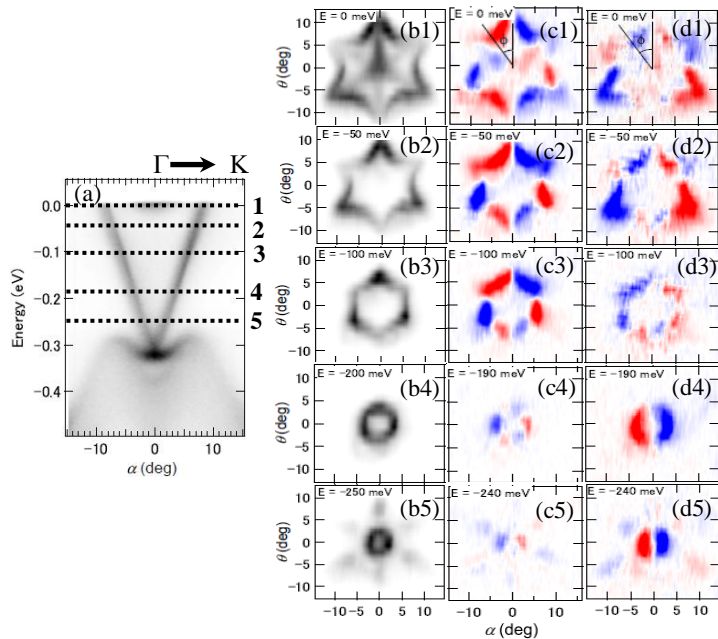


図4 (a) Bi_2Te_3 のバンド分散 (b) ARPESによる等エネルギー面マップ (c) スピンのz成分と(d) スピンの面内成分を反映したCDパターンの等エネルギー面マップ(各エネルギーは(a)の点線に対応)

に計算されており [4]、本研究で得られたパターンとほぼ一致することを確認した。Dirac 点近傍[図 4(c4) - (c5)]では Dirac 点に近づくにつれて円 2 色性が消失している。これは、warping の無い Dirac 点近傍では、スピンの z 成分を持たない理想的なヘリカルスピン構造が実現していることを意味する。

続いて、図 4(d)にサンプルに対して光が水平に入射する条件を作り出した場合の様々な結合エネルギーで得られる CD マップを示す。この条件では、スピンの面内成分に起因する CD パターンが現れることが期待される。まず、Dirac 点近傍の CD マップ[図 4(d4), (d5)]に注目すると、等エネルギー面に沿ったヘリカルスピン構造を反映したと考えられる $\sin\phi$ の変調構造が見られる。一方、 E_F 近傍の CD マップ[図 4(d1) - (d2)]に注目すると、雪型形状の 6 頂点の内 3 点において、 $\alpha = 0$ を境とする CD の符号の関係が Dirac 点近傍とは反転している。これは、 E_F に接近するとともに波動関数の対称性に变化が生じていることを意味し、さらには、 E_F 近傍で強くなる warping によってスピンの z 成分が生じるだけでなく、その面内成分までもが複雑化している可能性を示唆する。

Dirac 点近傍から E_F 近傍への変化として、バルクとの混成による 3 次元性の獲得が考えられる。表面電子がバルクのそれと混成することで、雪型形状を持つフェルミ面の 6 つの頂点のうち 3 つの頂点で面内のスピンの反転し渦を巻いていることが計算により示されている [4]。我々の結果は、この理論的提案を強く指示していると言える。

【結論】

トポロジカル絶縁体である Bi_2Te_3 に対して CD-ARPES を行い、その表面電子状態の持つスピン構造の知見を得る研究を行った。表面とバルク由来の電子構造が混成した結果、フェルミ面が円形から歪んだ雪型形状を持ち、さらには、スピンの z 成分が生じるだけでなく、その面内成分までもが影響を受けることを示唆する結果を得た。我々の結果は、フェルミ面の 6 つの頂点のうち 3 つの頂点で面内スピンの反転し渦を巻いていることを示す計算結果を強く指示する。

【参考文献】

- [1] Fu, L and C. L. Kane, Phys. Rev. B **76**, 045302 (2007).
- [2] D. Hsieh *et al.*, Science **323**, 919 (2009).
- [3] W. Jung *et al.*, Phys. Rev. B **84**, 245435 (2011).
- [4] H. Mirhoseini and J. Henk Phys. Rev. Lett. **109**, 036803 (2012).

【学会発表】

1. 日本物理学会第 67 回年次大会
2. 日本物理学会 2011 年秋季大会