

2022年2月1日

電子の強いスピン軌道相互作用がもたらす量子干渉によりフラットバンドが実現

1. 発表者：

中井 宏紀（東京大学 大学院総合文化研究科 広域科学専攻 修士課程1年）

堀田 知佐（東京大学 大学院総合文化研究科 広域科学専攻 准教授）

2. 発表のポイント：

- ◆遷移金属酸化物 CsW_2O_6 の理論モデルで、タングステン原子由来の強いスピン軌道相互作用（注1）によって、フラットなエネルギーバンド（注2）が現れることを発見した。
- ◆電子がスピン軌道相互作用によってスピンの向きを回転させながら伝搬して量子干渉を起こすという新しいフラットバンドの発現機構を、数学的に厳密に明らかにした。
- ◆エネルギーバンドの形状をスピン軌道相互作用で制御する理論的な道筋が示され、新たなスピン伝導技術や量子相の発見・開発につながると期待される。

3. 発表概要：

東京大学大学院総合文化研究科の中井宏紀大学院生と堀田知佐准教授は、強いスピン軌道相互作用によって、固体中の電子のエネルギーバンド構造が平坦化する現象であるフラットバンドを発見しました。

通常エネルギーバンドの形状はスピンには依存しませんが、強いスピン軌道相互作用によってバンドがスピンに依存して大きく形状を変え、完全にフラット化することが理論で厳密に証明されました。遷移金属酸化物 CsW_2O_6 のモデルであるパイロクロア格子（注3）の上では、スピン軌道相互作用によって電子が伝搬しながら回転します。その結果、波動関数がスピンの向きに依存した量子干渉を起こして波長の情報を失うのがフラットバンドの起源です。フラットバンドと電子間のクーロン相互作用とが協力し合い、電荷がパイロクロア格子の四面体のうち三角形のユニットにだけ分布した相も生じます。この相は2020年に実験的に発見されたアンダーソン条件（注4）を満たす新しい電荷秩序相（注5）と考えられます。

フラットバンドの発現機構は古くから知られていますが、今回のフラットバンドは電子のスピンが特徴的な構造をつくって生じるため、磁場に強く依存する新しい性質を持っています。そのため新たなスピン伝導技術や新奇な量子相の舞台となることが期待されます。

本研究成果は、2022年2月1日（英国時間）に英国科学誌「Nature Communications」のオンライン版に掲載されました。

本研究は、科研費「基盤研究（C）（課題番号：JP17K05533）」、「基盤研究（B）（課題番号：JP18H01173）」、「学術変革領域研究（A）（課題番号：JP21H05191）」、「基盤研究（C）（課題番号：JP21K03440）」の支援により実施されました。

4. 発表内容：

スピン軌道相互作用は、電荷の移動とスピンの磁性を連動させる相対論的な相互作用です。固体中で生じる様々なスピン依存伝導現象や、スピントロニクス技術に不可欠な相互作用で、

これまで主に質量が軽い p 軌道の電子などからなる半導体において研究されてきました。これらの系では、半導体に強い面直電場をかけることによって人工的にスピン軌道相互作用を導入することができ、その結果、エネルギーバンドにおけるスピンを偏極させてスピンの向きに応じて電荷の流れが変わるような効果が観測されています。

一方で、原子そのものの質量が重いために生じるスピン軌道相互作用で、エネルギーバンド構造が劇的に変化する効果は、これまで数例しか知られていませんでした。本研究は、遷移金属酸化物 CsW_2O_6 においてタングステン原子(W)の強いスピン軌道相互作用が、物質のエネルギーバンドをフラット化する効果を理論的に発見しました。

この物質のタングステン原子は図 1 a のようにパイロクロア格子と呼ばれる、正四面体がつなぎ合わさった結晶構造をもちます。原子由来のスピン軌道相互作用は、結晶格子中で電荷がスピンをくるくると回転させながら伝搬する効果として現れます。回転角はスピン軌道相互作用の強さによって決まります。例えば四面体の 2 つの頂点に電子がいるループ型の波動関数を考えたとき、その電子が残りの 2 つの頂点に飛び移る際、回転角が特定の値を取ると、両者が飛び移った先で同じスピンの向きをもって干渉し合い、打ち消し合います (図 1b)。そのため実効的に電子が伝搬できなくなり結晶の一部に閉じ込められて一様な波ではなくなります。エネルギーが電子の波長によって変化するのがエネルギーバンドですが、電子が波長に依存しない一定のエネルギーを持つようになった状態がフラットバンドです (図 1c)。

パイロクロア格子をはじめとする特定の格子構造では、フラットバンド現象は古くから理論的に知られています。しかしこれらのフラットバンドでは電子のスピンの向きがバンド構造へ影響することはありませんでした。今回は、スピン軌道相互作用によって、格子点ごとにスピンの異なった方向を向く効果が、バンド構造をフラット化する役割を果たします。

更に、フラットバンドに電子間のクーロン相互作用が加わると、パイロクロア格子の四面体のうち三角形のユニットにだけ電子が分布する、空間的な電荷分離型の電荷秩序相が実現することも計算によって示されました。この電荷秩序相は、2020 年に名古屋大学の実験グループによって発見された、 CsW_2O_6 の三量体電荷秩序であると考えられます。この実験で発見された状態は、アンダーソン条件と呼ばれる電気的中性条件を保ったまま電荷が秩序化する、歴史的に初めて物質で見出された相です。本理論研究では、従来の常識を破るような電荷秩序が形成される背後に、量子干渉効果によるフラットバンドがあるという理解を得ることに成功しました。

今回のフラットバンドは発現機構そのものが新たな発見であると同時に、フラットバンドで実現する量子相がこれまでにない磁気的な性質を秘めている可能性があります。理論の結果を実験で検証することによって、今後、新たな性質が明らかになっていくことが期待されます。

5. 発表雑誌：

雑誌名：Nature Communications (オンライン版：2月1日)

論文タイトル：Perfect flat band with chirality and charge ordering out of strong spin-orbit interaction

著者：Hiroki Nakai and Chisa Hotta*

DOI 番号 : [10.1038/s41467-022-28132-y](https://doi.org/10.1038/s41467-022-28132-y)

6. 問い合わせ先 :

東京大学 大学院総合文化研究科

准教授 堀田 知佐 (ほった ちさ)

Email: chisa (末尾に “@phys.c.u-tokyo.ac.jp” をつけてください)

7. 用語解説 :

(注1) スピン軌道相互作用

電子が持つスピン角運動量と軌道角運動量の相互作用のこと。電子の速さが光速に近い場合の相対論的効果で、たとえば原子核と電子の間や人工的につくられた電場勾配があるときに生じる。前者では一般に重い元素で大きくなる傾向がある。

(注2) エネルギーバンド

電子が波として固体中を伝搬すると、エネルギーが波数 (波長の逆数) に依存して変化するエネルギーバンドが生じる。特別な場合にはエネルギーが波数に依存せず一定であるようなフラットバンドが現れる。

(注3) パイロクロア格子

正四面体が頂点を共有して連なることでできる格子 (図 1 a)。多くの遷移金属酸化物などで見られる結晶構造である。

(注4) アンダーソン条件

パイロクロア格子上の電荷秩序相において、全ての四面体の電荷量が等しくなるという電気的中性条件で、P. W. Anderson によって 1956 年に提案された。この条件を満たすとき各四面体間でのクーロンエネルギーが低くなる。この条件を満たす物質は見つかっていなかったが、2020 年になって初めて CsW₂O₆ において観測された [Okamoto, *et.al.* Nature Communications, 11, 3144 (2020)]。

(注5) 電荷秩序相

結晶格子上で電子のいる格子点 (原子) といない格子点が周期的に配列した秩序相。典型的には、隣接する格子点にいる電子間の斥力相互作用の影響が大きい状況で、電子が格子点の半分の数だけ存在するときに、隣同士にならないよう規則的に 1 つおき間隔で並んだエネルギー的に安定な電荷配置として生じる。

8. 添付資料：

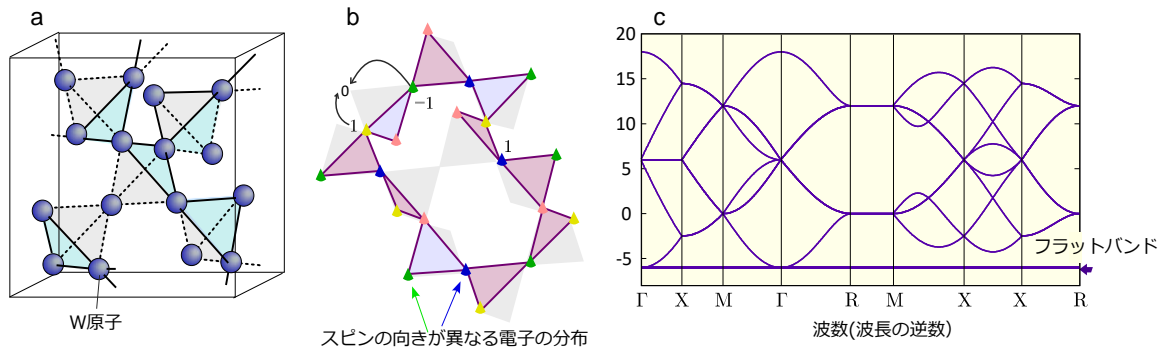


図1. (a) CsW₂O₆においてタングステン(W)原子が作るパイロクロア格子構造。水色の三角部分に電荷が局在して三量体電荷秩序が生じる。(b) フラットバンド波動関数の干渉効果。スピンの異なった電荷同士が回転して飛び移った先で干渉しあって打ち消し合う。(c) エネルギーバンド図。フラットバンドが下端に出現している。