

# 単層ヤヌス遷移金属ダイカルコゲナイドにおける 光誘起スピン流に関する理論研究

## Optically induced spin current in Janus transition-metal dichalcogenides

関学大理工<sup>1</sup> ○(DC) 亀田 智明<sup>1</sup>、若林 克法<sup>1</sup>

Kwangaku Univ.<sup>1</sup> ○(DC) Tomoaki Kameda<sup>1</sup>, Katsunori Wakabayashi<sup>1</sup>

E-mail: t.kameda@kwansei@ac.jp



VI 属遷移金属ダイカルコゲナイド (TMDC) は、遷移金属原子とカルコゲン原子 ( $MX_2$ , e.g.,  $M$ : Mo, W;  $X$ : S, Se, Te) から構成される二次元層状物質であり、単層 TMDC がファンデルワールス力により積層して形成されている。単層 TMDC は、1-2eV のエネルギーバンドギャップを有する直接遷移型の半導体として、オプトエレクトロニクスやスピントロニクス分野で注目されている [1]。

近年、単層ヤヌス遷移金属ダイカルコゲナイド (単層ヤヌス TMDC) が合成された [2]。ヤヌス TMDC ( $MX_2Y$ , e.g.,  $M$ : Mo, W;  $X, Y$ : S, Se, Te) は、単層 TMDC のカルコゲン原子層の一方を他のカルコゲン原子で置換した構造を持つため、面内反転対称性の破れを有するだけでなく、面外鏡面对称性の破れも示す (図 1(a))。また、異なるカルコゲン原子の電気陰性度の差により、面外方向に垂直な内部分極が生じ、自発的なラシュバ型スピン軌道相互作用 (ラシュバ型 SOC) が存在する。ラシュバ型 SOC は、電子の運動量に垂直な方向にスピンの偏極が固定されるスピン運動量ロックを引き起こす。この機構により光や電場などの外部刺激でスピン流が生成される。特に純スピン流は電荷の流れを伴わず、ジュール熱を発生させない特徴を持つ。従来のスピントロニクスデバイスでは、ラシュバ型 SOC を誘起するために強い外部電場が必要であり、試料の安定性に影響を与えることが課題となっている。一方、ヤヌス TMDC は外部電場なしで SOC を利用できるため、省エネルギーで安定したスピントロニクスデバイスへの応用が期待される。

本研究では、単層ヤヌス TMDC に光を照射することでスピン流が生成されることを、タイトバインディングモデルおよび線形応答理論に基づく久保公式を用いて理論的に明らかにした。生成されるスピン流は特定のスピン偏極方向を持ち、その生成効率がラシュバ型 SOC の強度に依存する (図 1(b))[3]。

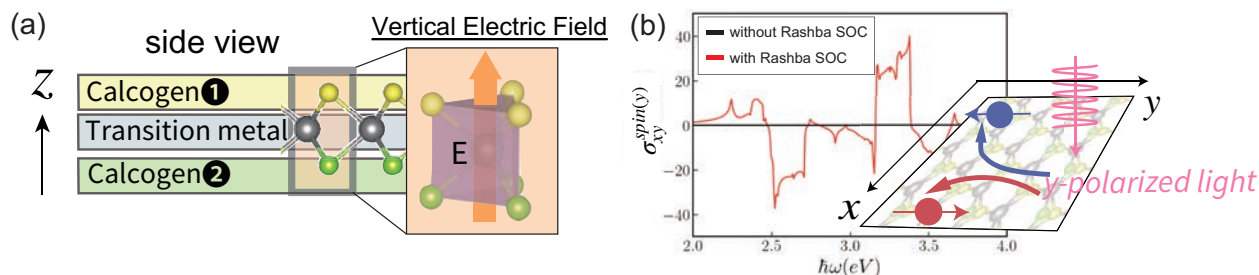


図 1: (a) Side view of the Janus TMDC structure. A vertical electric field  $E$  enhances Rashba spin-orbit coupling. (b) Spin-dependent optical conductivity  $\sigma_{xy}^{spin(y)}(\omega)$  in Janus TMDCs, with photon incidence along the  $y$ -direction and conductivity measured along the  $x$ -direction. The spin polarization is along the  $y$ -direction. The red (black) line represents the conductivity with (without) Rashba SOC.

## 参考文献

- [1] S. Manzeli, D. Ovchinnikov, D. Pasquier, O. V. Yazyev, and A. Kis, Nat. Rev. Mater. 2, 17033 (2017).
- [2] J. Zhang. et.al. ACS Nano 11, 8192 (2017).
- [3] T.Kameda and K.Wakabayashi, "Optically induced spin current in Janus transition-metal dichalcogenides", Manuscript in preparation (2025).