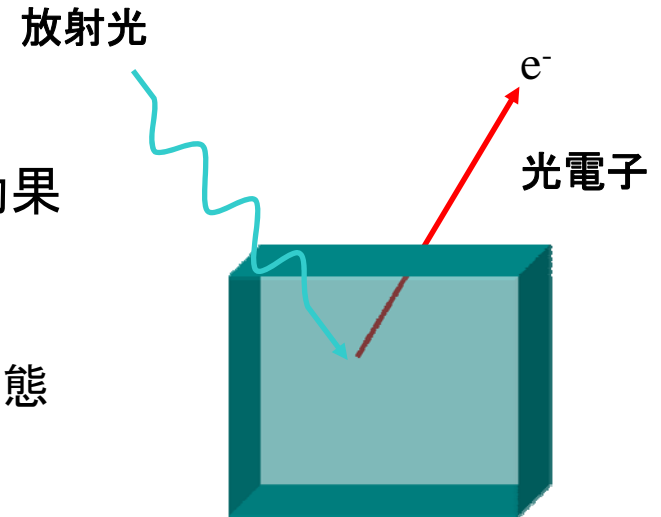


分光測定により電子構造をプローブ

光電子分光

- ◆ 内殻光電子分光・・・元素分析、化学状態、多体効果
- ◆ **価電子帯光電子分光**・・・電子構造(占有)

エネルギー分散関係、フェルミ面、準粒子状態



内殻吸収分光

- ◆ Extended X-ray Absorption Fine Structure (EXAFS)・・・局所構造
- ◆ **X-ray Absorption Spectroscopy (XAS)**・・・電子構造(非占有)

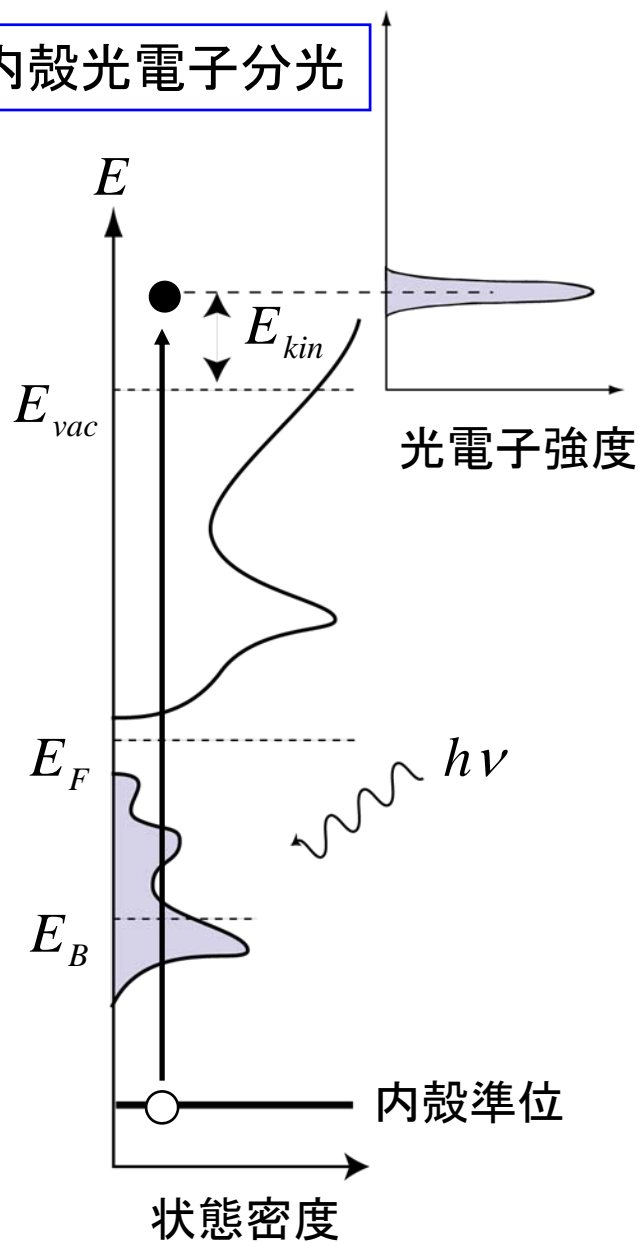
- (磁気)線二色性(XLD, XMLD)・・・軌道の対称性、異方性
- **磁気円二色性(XMCD)**・・・元素選択的磁気モーメント

発光分光(蛍光分光)

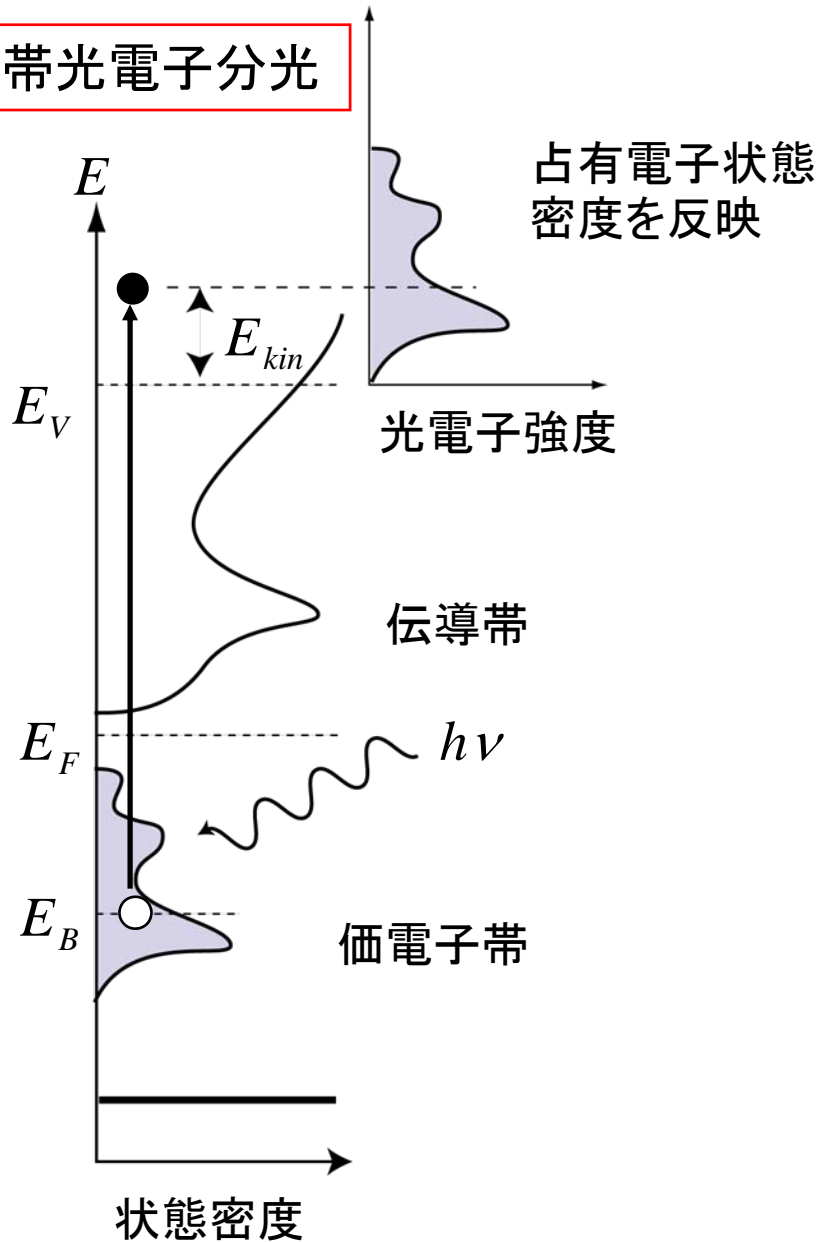
・・・微量元素分析, 電子構造(占有)

光電子分光

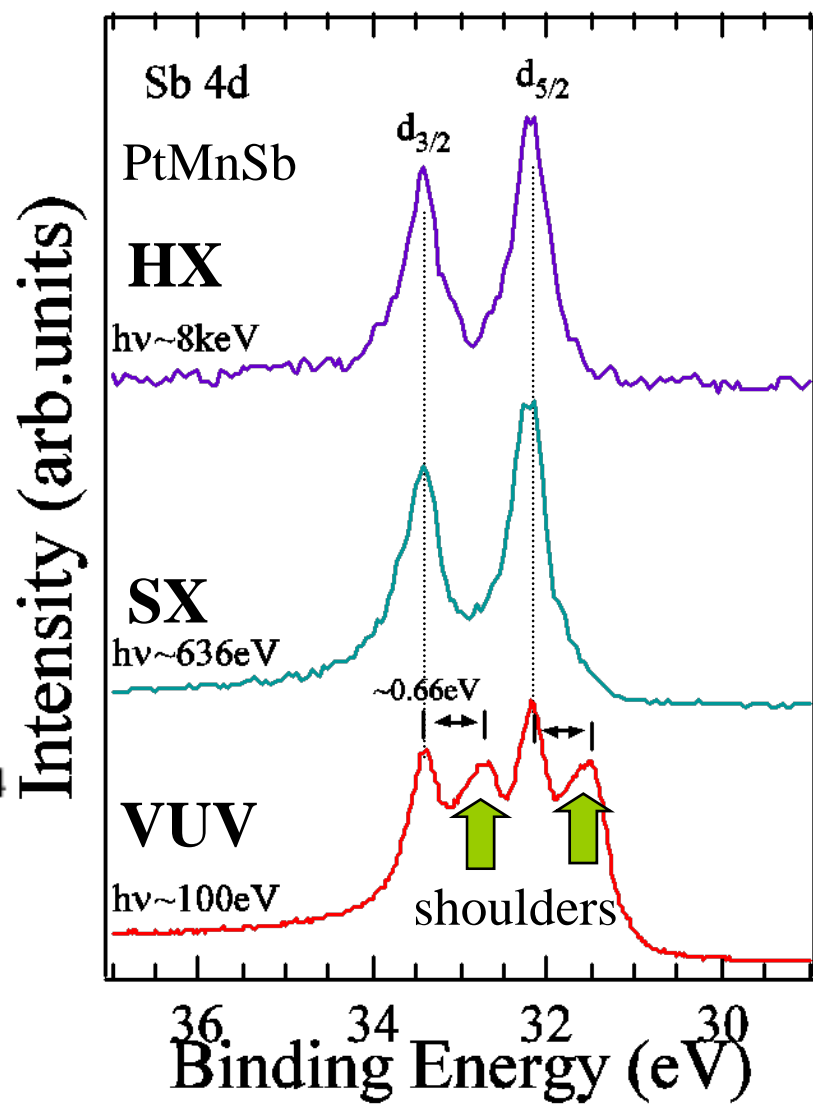
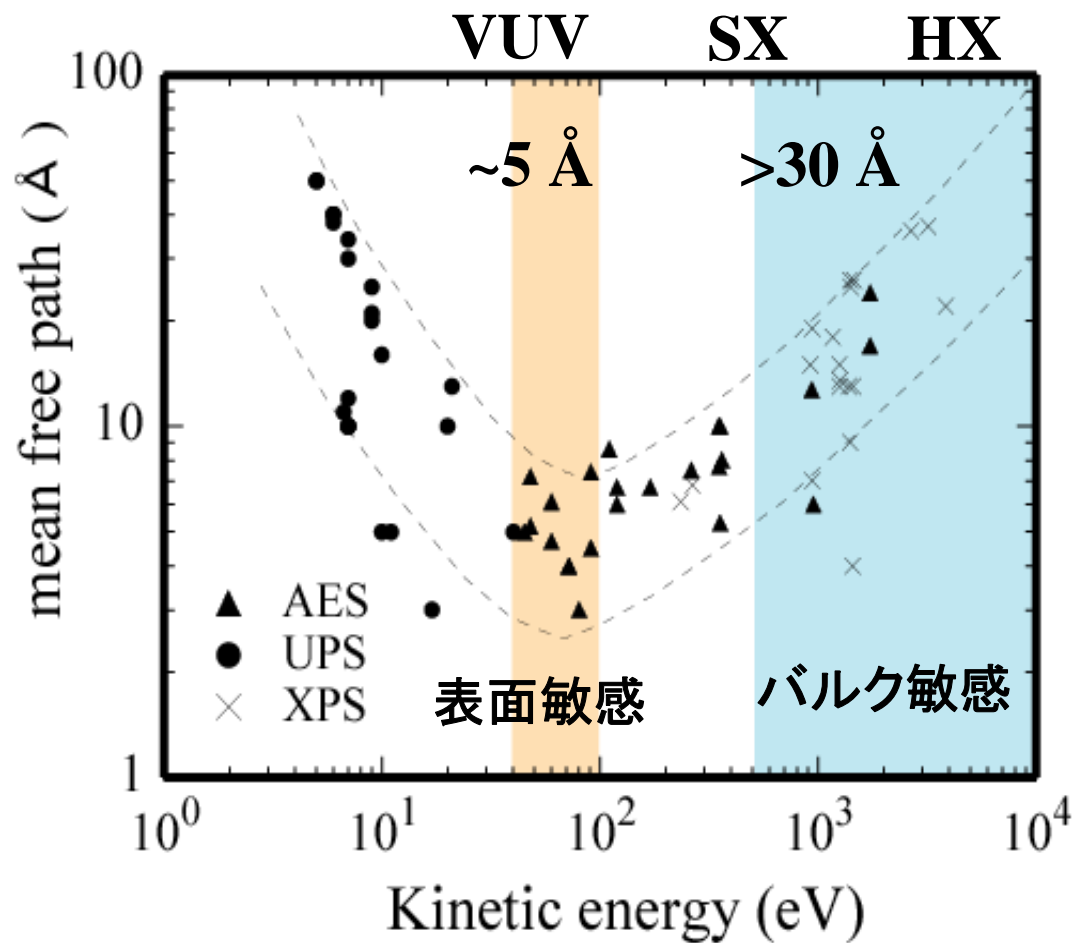
内殻光電子分光



価電子帯光電子分光

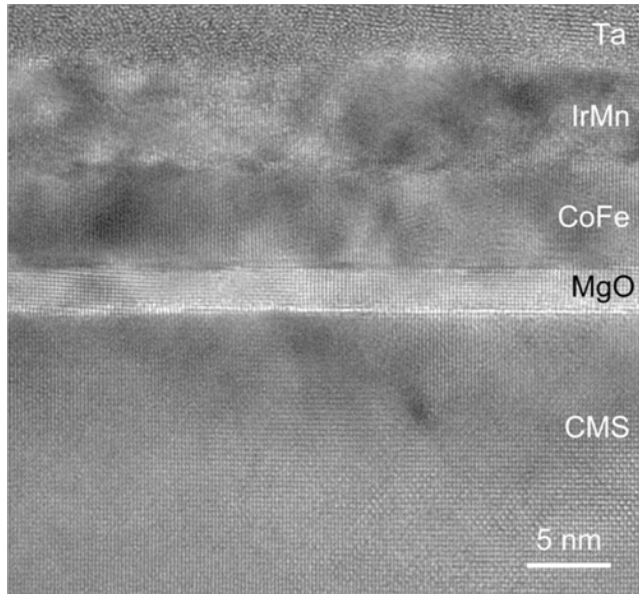


電子の平均自由行程



MTJ with Co_2MnSi electrodes -recent works-

HRTEM image



$\text{Co}_2\text{MnSi}/\text{MgO}/\text{CoFe}$ -MTJ

S. Tsunegi et al., Appl. Phys. Lett. **93** (2008) 112506.

TMR ~ 753% @2K

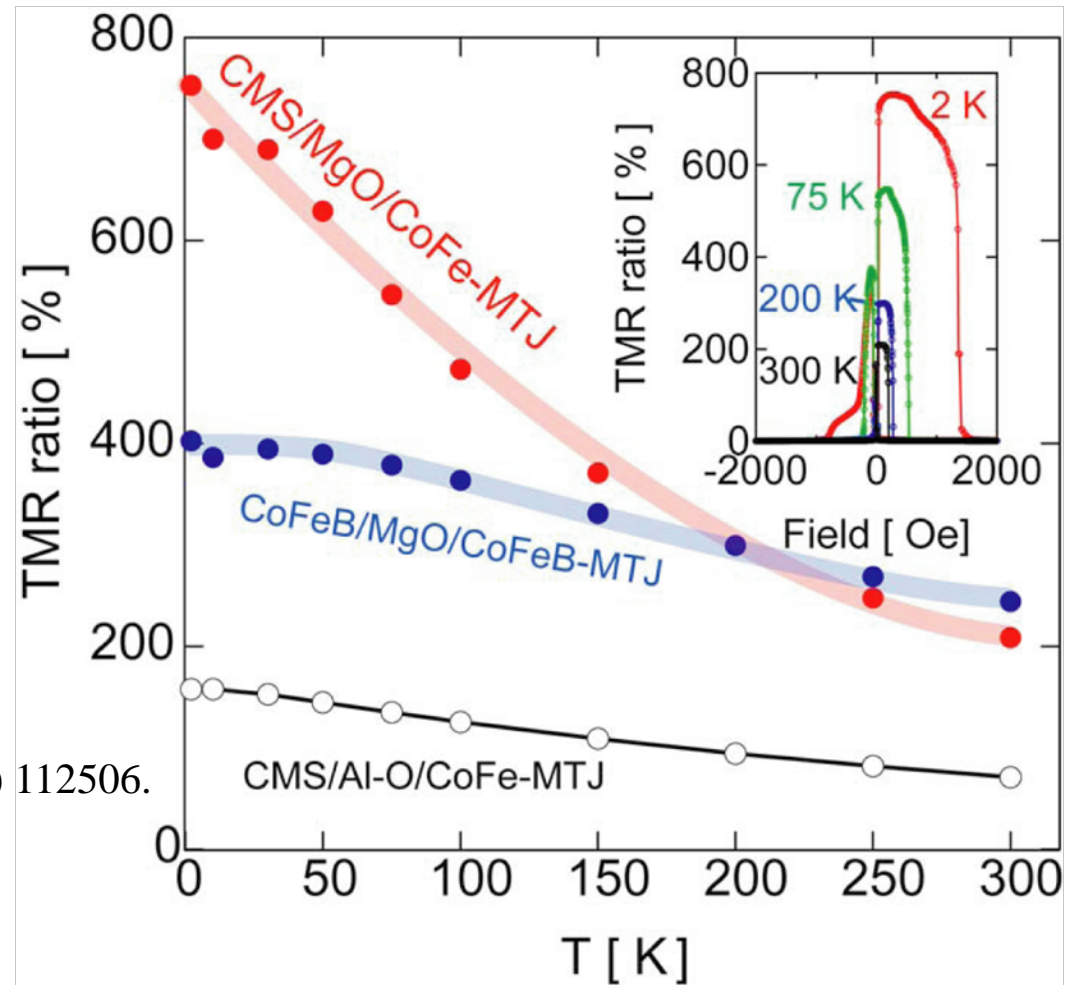
~ 217% @RT

$\text{Co}_2\text{FeAl}_{0.5}\text{Si}_{0.5}/\text{MgO}/\text{CoFe}$ -MTJ

N. Tezuka et al., Appl. Phys. Lett. **94** (2009) 162504.

TMR ~ 832% @9K

~ 386% @300K

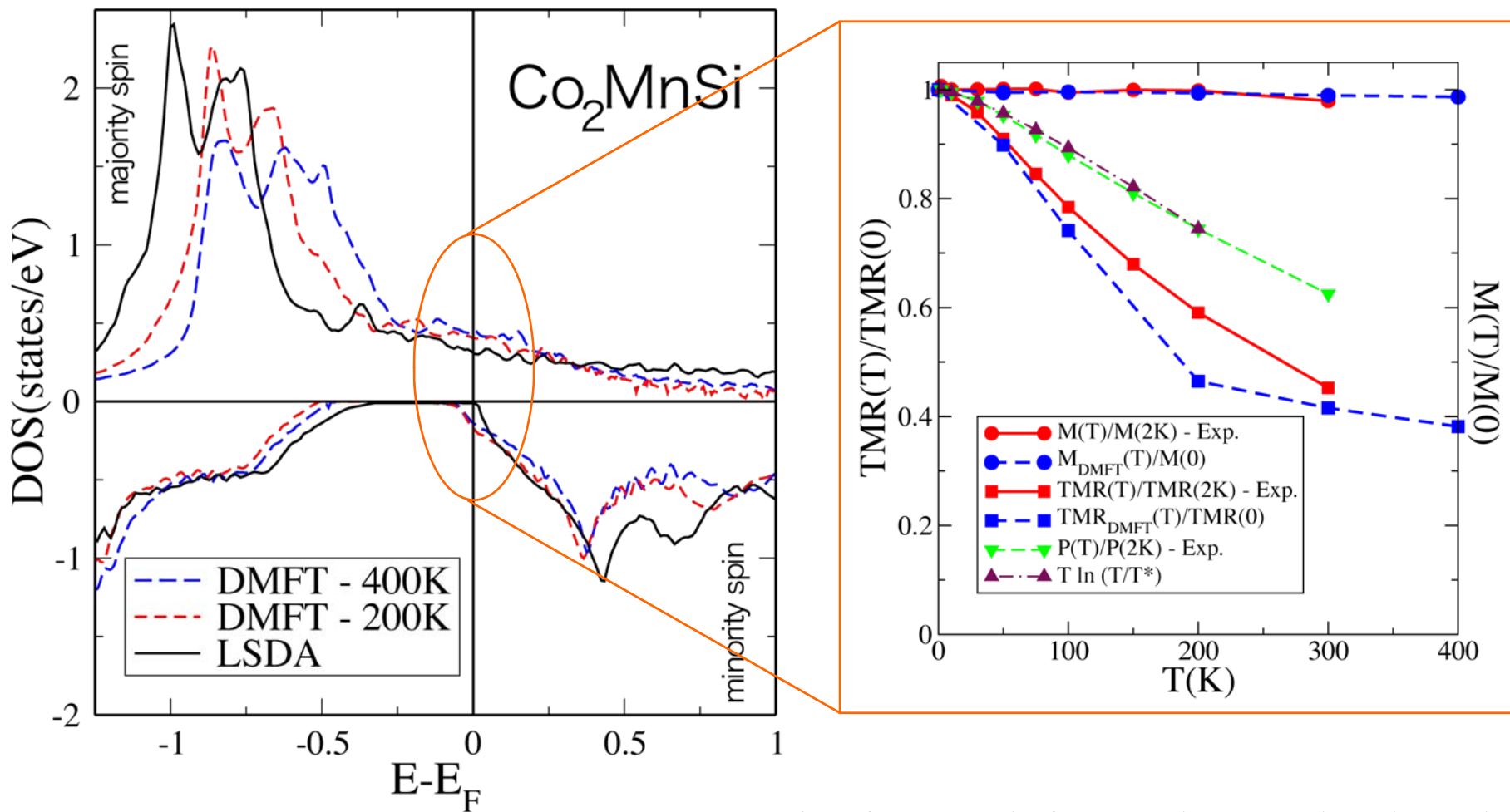


温度上昇によりTMR比が急激に減少

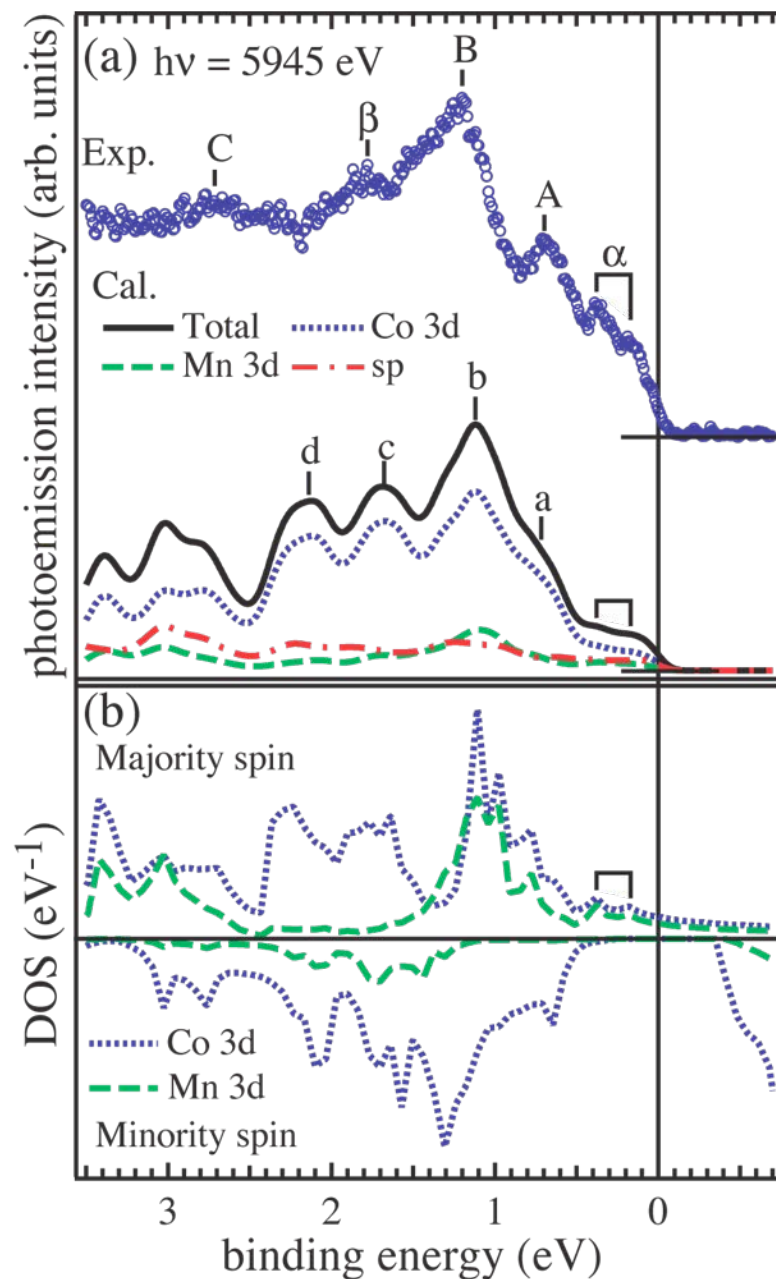
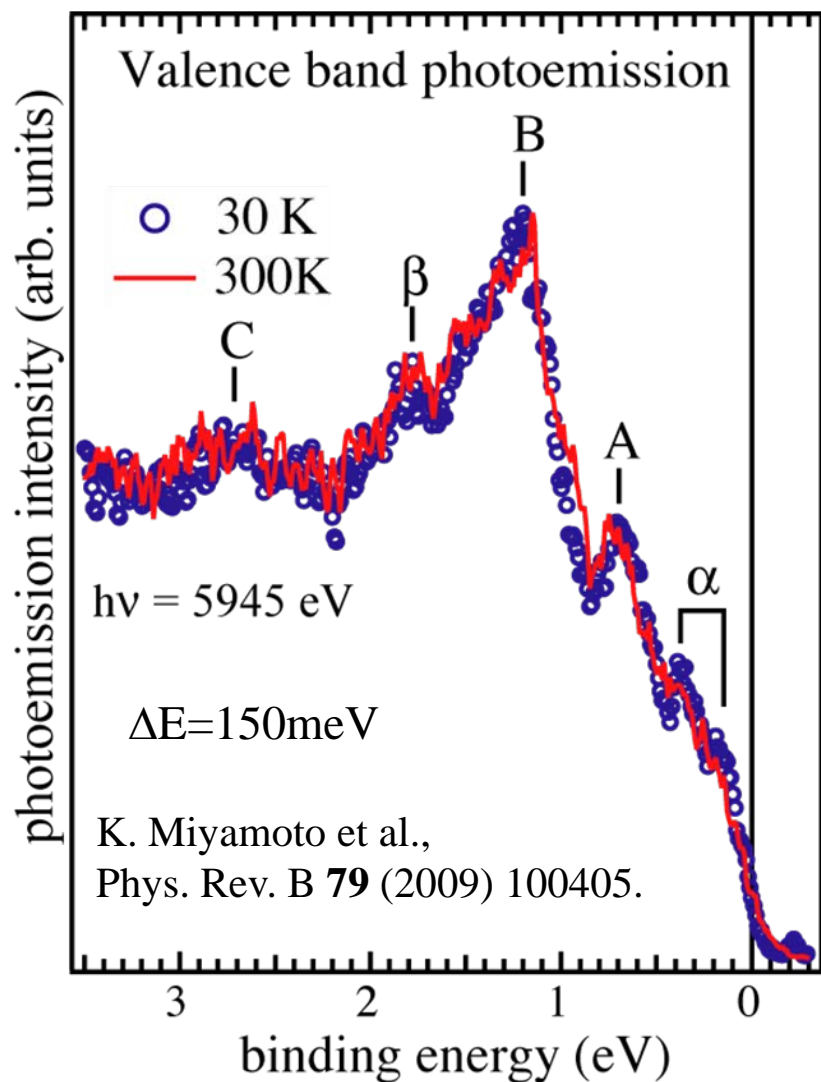
電子構造の大きな温度依存性？

バンド構造計算：LSDA+DMFT 法

L. Chioncel et al., Phys. Rev. Lett. **100** (2008) 086402.

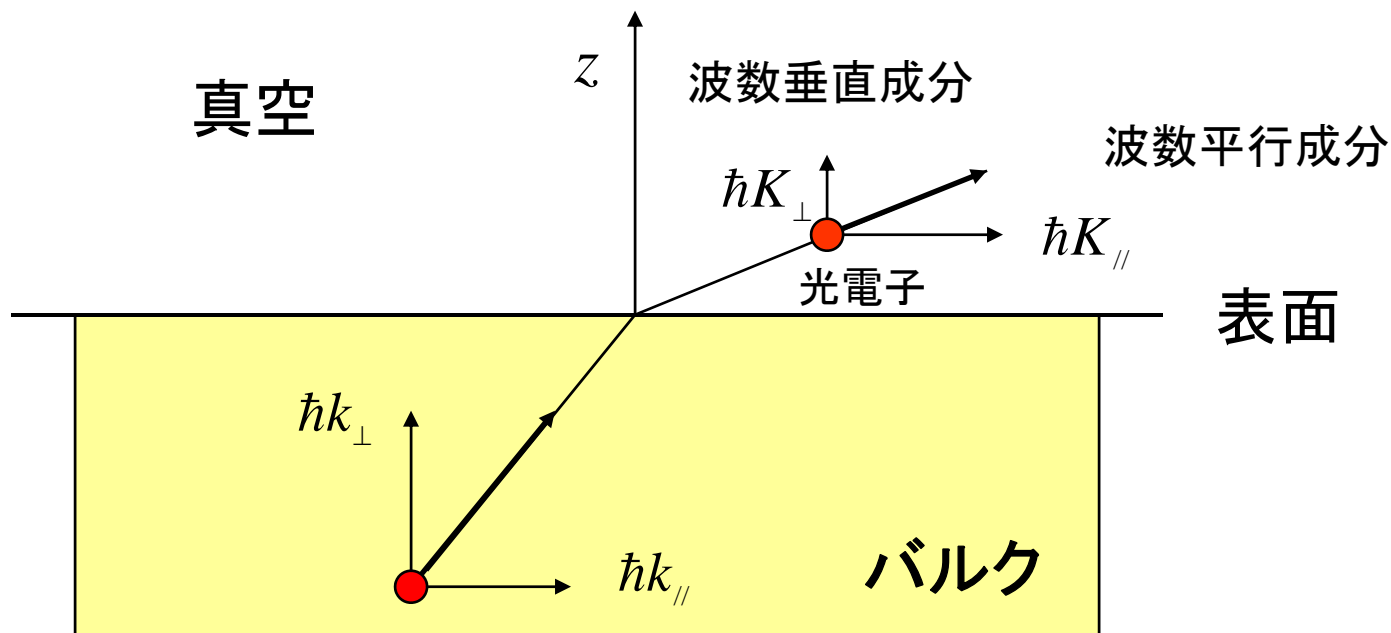


A NQP state is formed in the minority spin state near E_F with increasing temperature.



光電子スペクトルとバンド構造計算結果が良く対応

角度分解光電子分光の原理



$\hbar k_{\parallel} = \hbar K_{\parallel}$: 波数の表面に平行な成分は保存。

$\hbar k_{\perp} \neq \hbar K_{\perp}$: 波数の表面に垂直な成分は保存されない。

表面平行成分の波数 $k_{\parallel} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}} \sqrt{E_K} \cdot \sin\theta = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}} \sqrt{(h\nu - E_B - \phi) \cdot \sin\theta}$

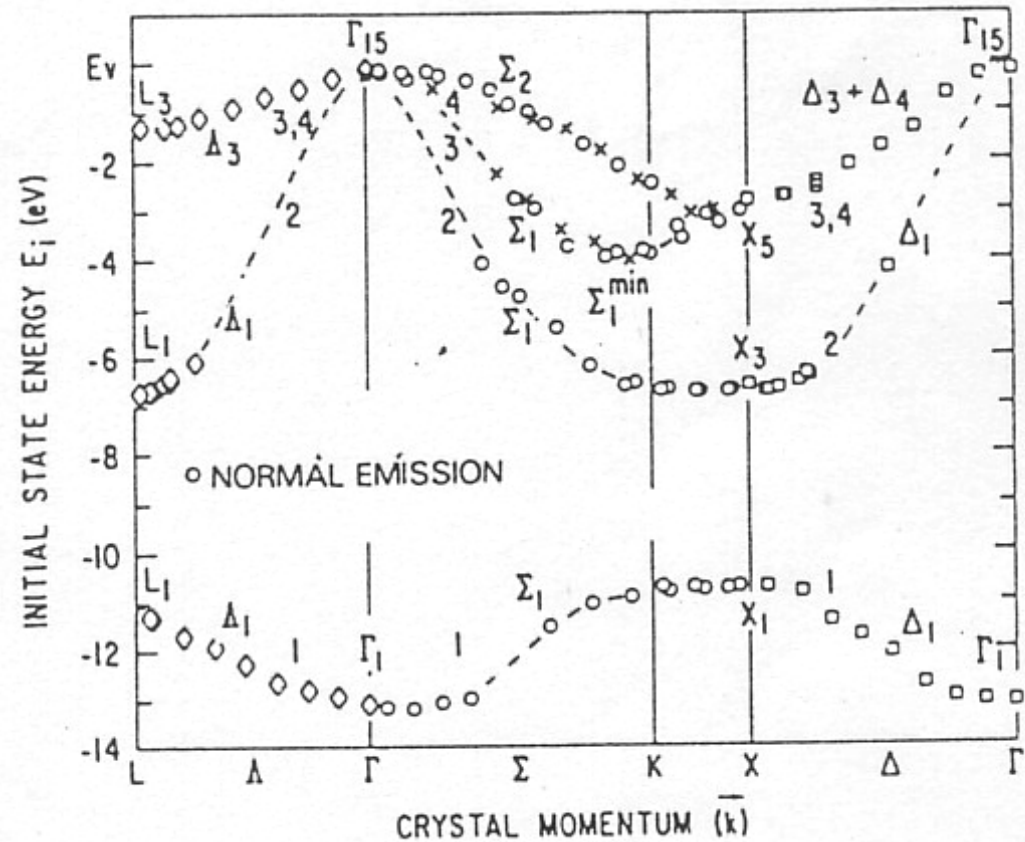
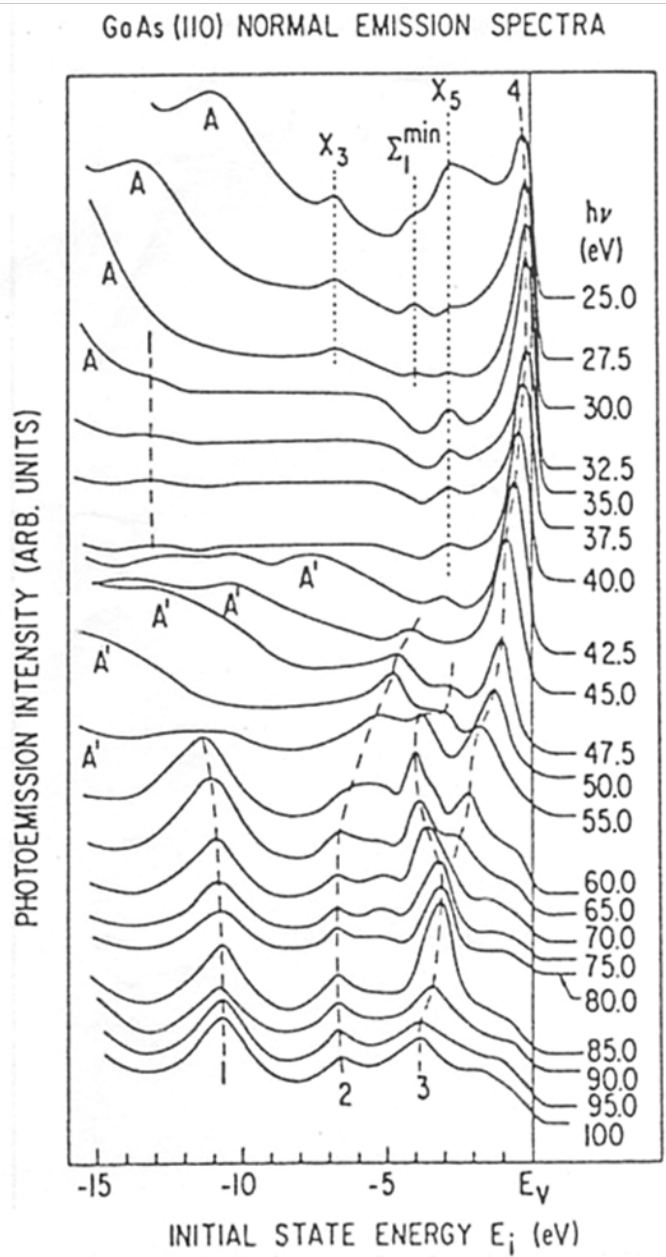
表面垂直成分の波数 $k_{\perp} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}} \sqrt{E_K \cos^2\theta + V_0} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}} \sqrt{(h\nu - E_B - \phi) \cos^2\theta + V_0}$

垂直光電子放出の場合 $k_{\perp} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}} \sqrt{h\nu - E_B - \phi + V_0}$ $V_0 = E_0 + \phi$ 内部ポテンシャル

3次元バンド構造 (GaAs)

T.-C. Chiang et al., Phys Rev. B **21**, 3513 (1980).

エネルギー分散関係

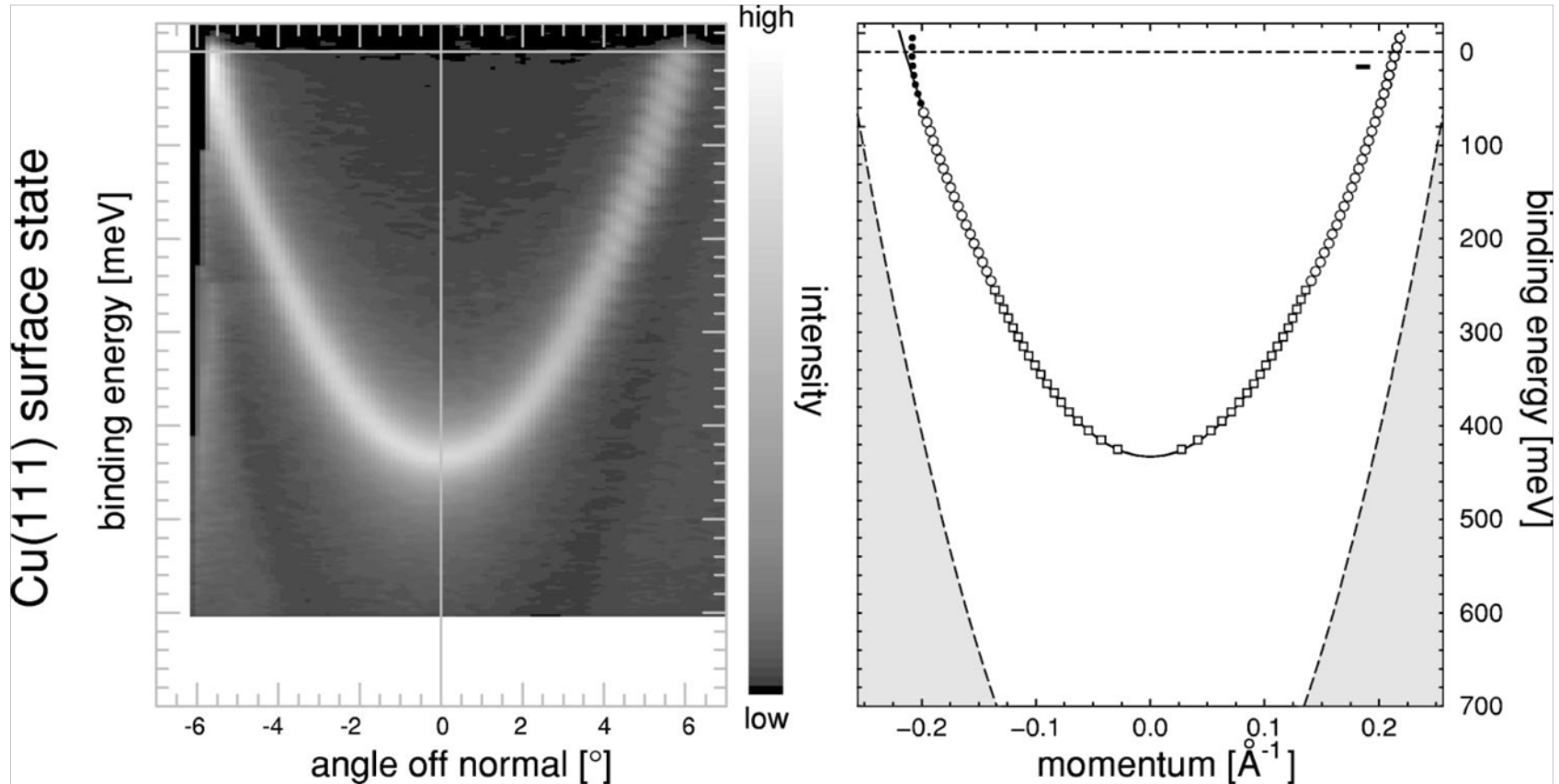


$$k_{\perp} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}} \sqrt{E_B + h\nu - \phi + V_0}$$

自由電子を捉える

Cu(111)

F. Reinert et al., Phys. Rev. B **63** (2001) 115415.



放物線型エネルギー分散

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

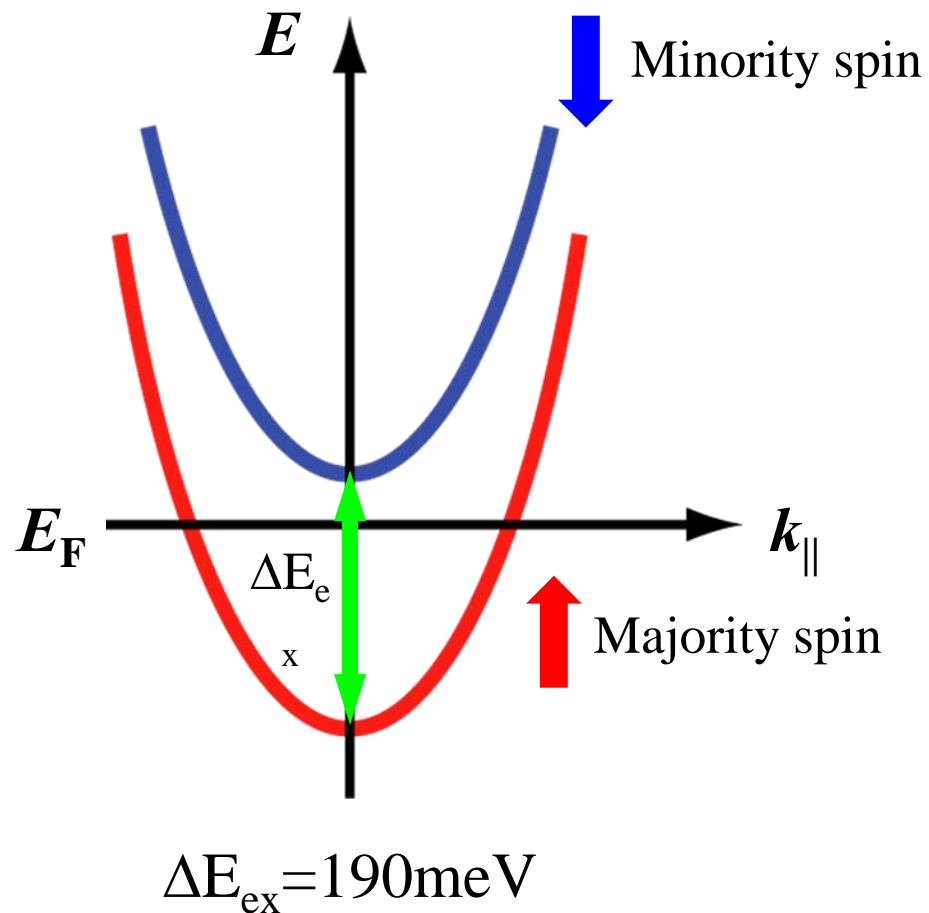
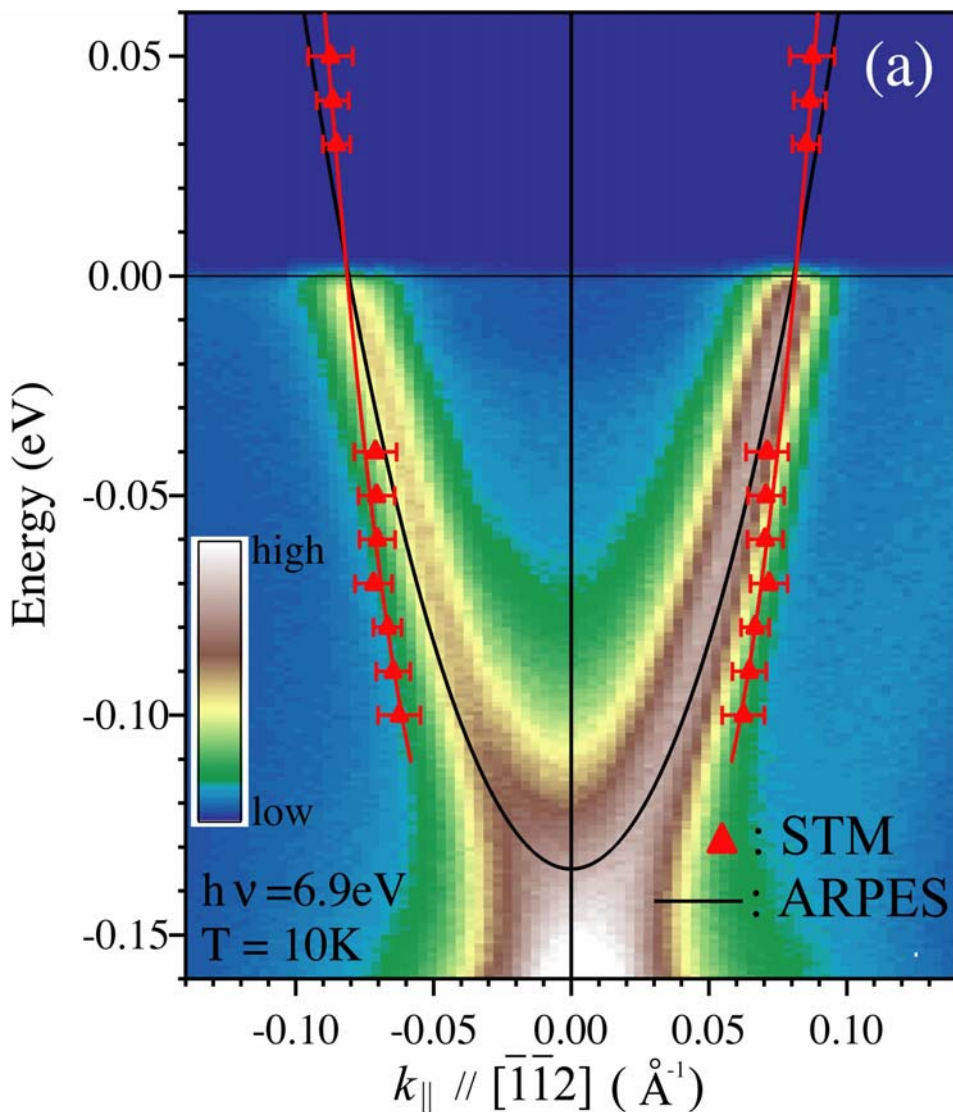
$$m^* = 0.412 m_e$$

$$k_F = \pm 0.215 \text{\AA}^{-1}$$



強磁性Ni(111)表面

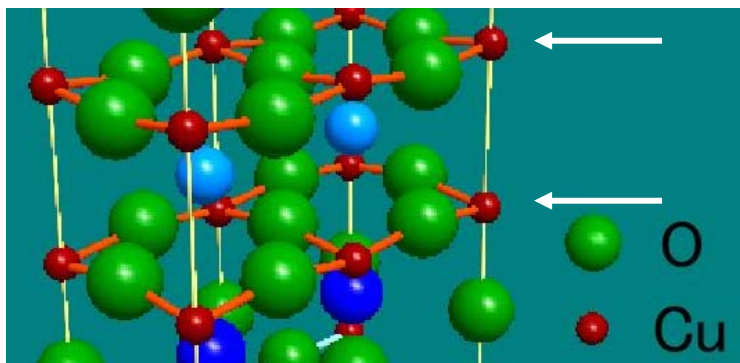
Y. Nishimura et al., Phys Rev. B **79**, 245402 (2009).



ハーフメタル的な表面状態が実現

Bi2212 の準粒子状態を捉える

HiSOR BL9A



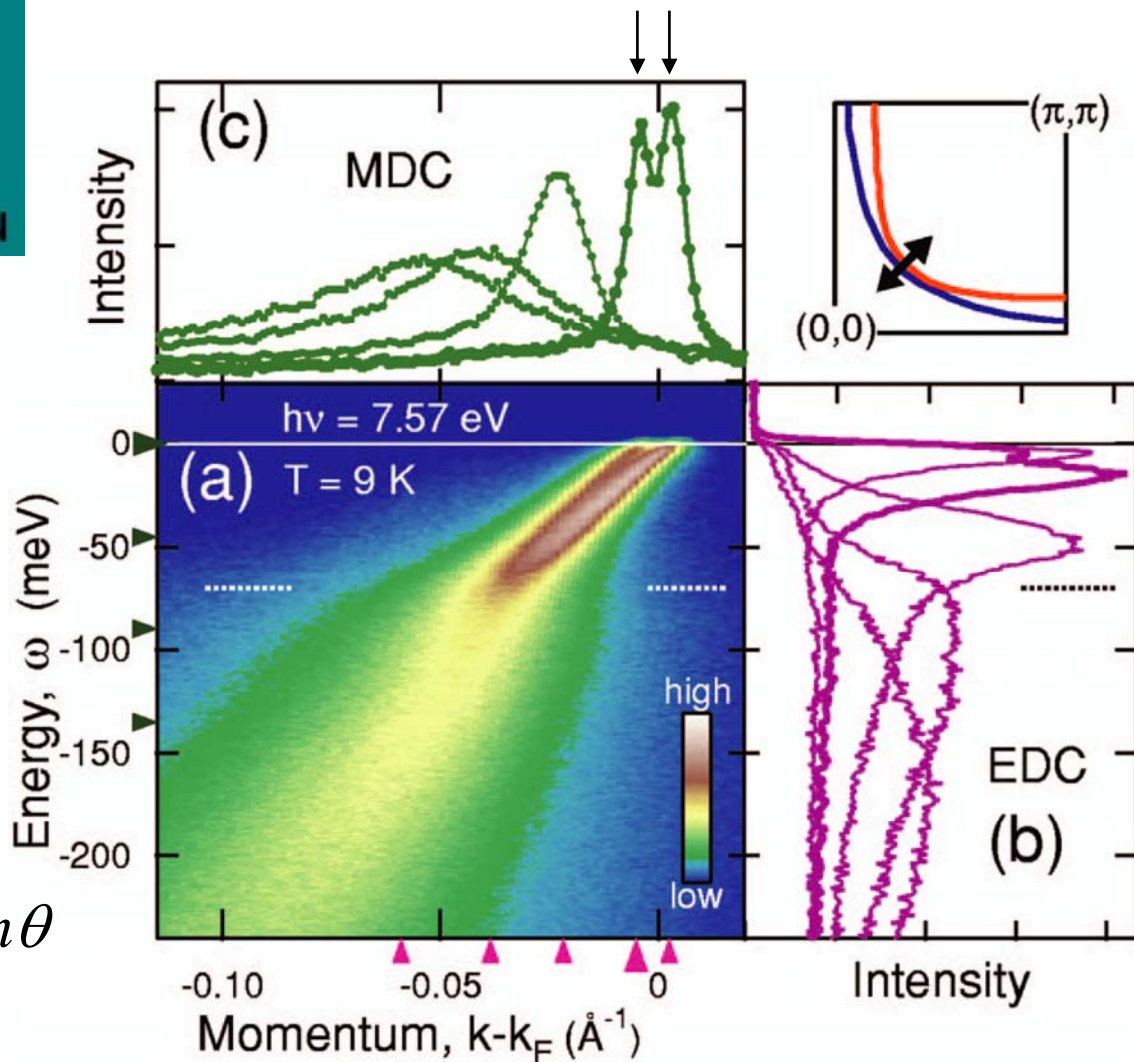
HiSOR BL-9A

$h\nu = 7.57 \text{ eV}$

$\Delta k = 0.0065 \text{ \AA}^{-1}$

$$\hbar k_{//} = \sqrt{2m(h\nu - E_B - \phi)} \cdot \sin\theta$$

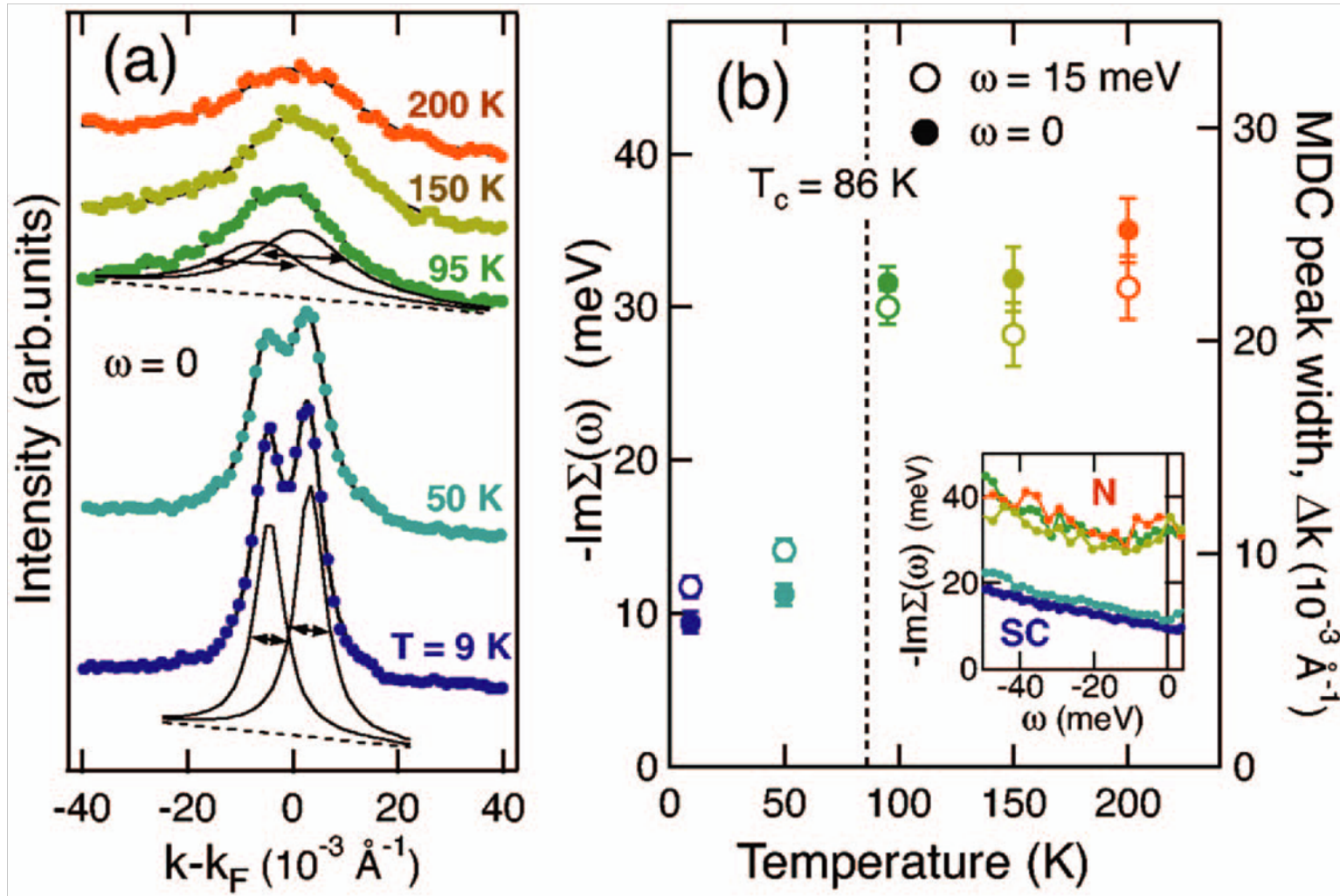
CuO₂ bilayer Bilayer splitting



Bi2212の準粒子状態の温度依存性



T. Yamasaki et al., Phys. Rev B **75**, 140513(R) (2007).

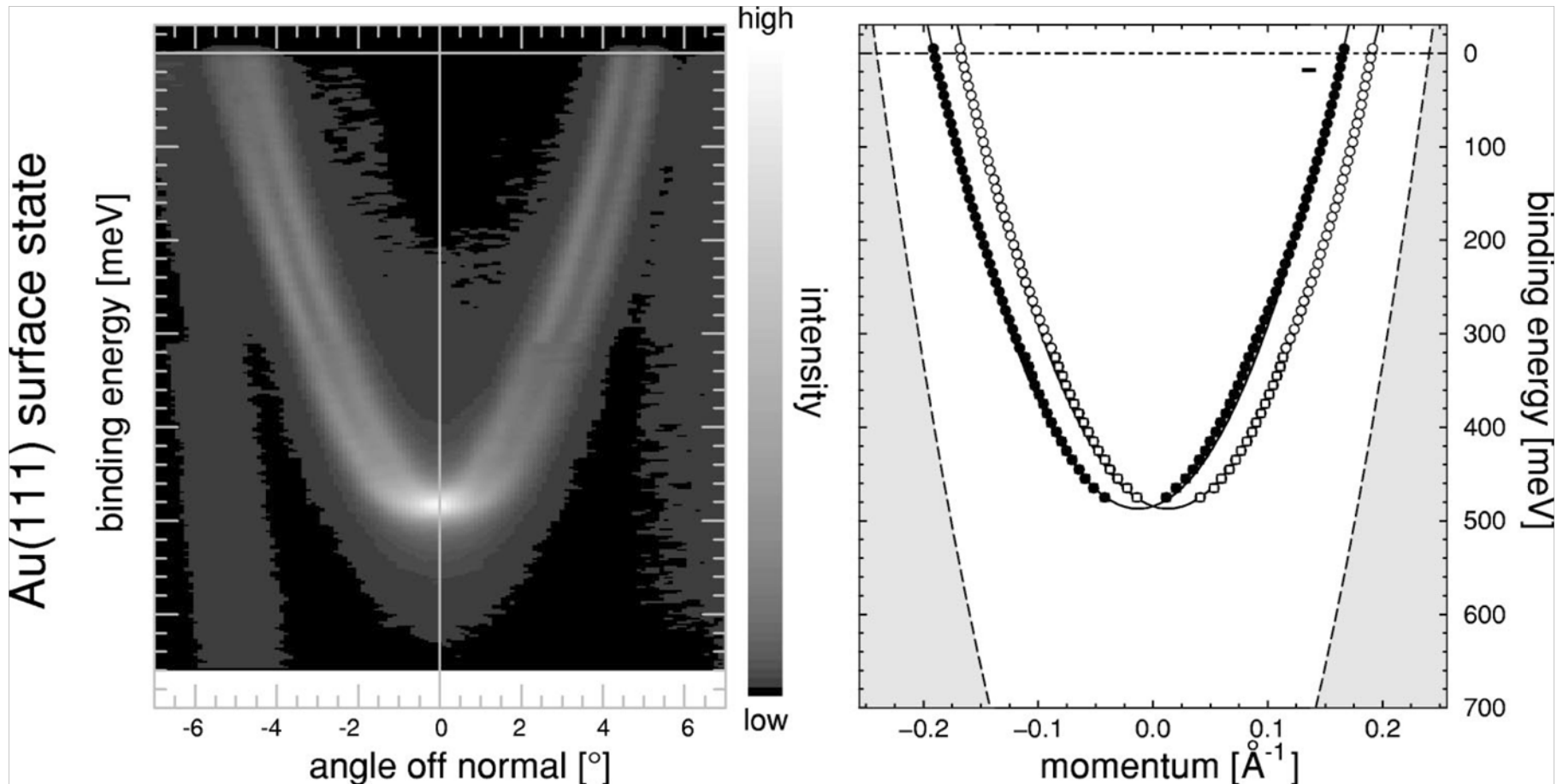


T_c 以下で散乱が大きく抑制される

Unexpected splitting ?

Au(111)

F. Reinert et al., Phys. Rev. B **63** (2001) 115415.



非磁性体にもかかわらず分裂構造が観測される

表面における空間反転対称性の破れ

時間反転対称性

$$E(\vec{k}, \uparrow) = E(-\vec{k}, \downarrow)$$

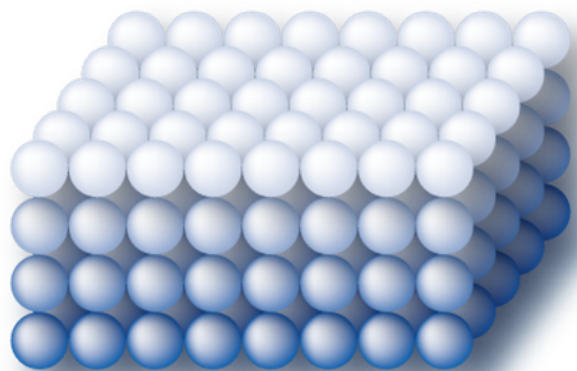
空間反転対称性

$$E(\vec{k}, \uparrow) = E(-\vec{k}, \uparrow)$$

クラマース縮退 (スピン縮退)

$$E(\vec{k}, \uparrow) = E(\vec{k}, \downarrow)$$

空間反転対称性の破れ



$$E(\vec{k}, \uparrow) \neq E(\vec{k}, \downarrow)$$

スピン縮退が解ける

Rashba 効果

スピン・軌道相互作用

$$H_{\text{SO}} = \frac{1}{2m^2c^2} [\vec{\nabla}V \times \vec{p}] \cdot \vec{s}$$
$$= \frac{1}{2m^2c^2} \vec{\nabla}V \cdot [\vec{p} \times \vec{s}]$$

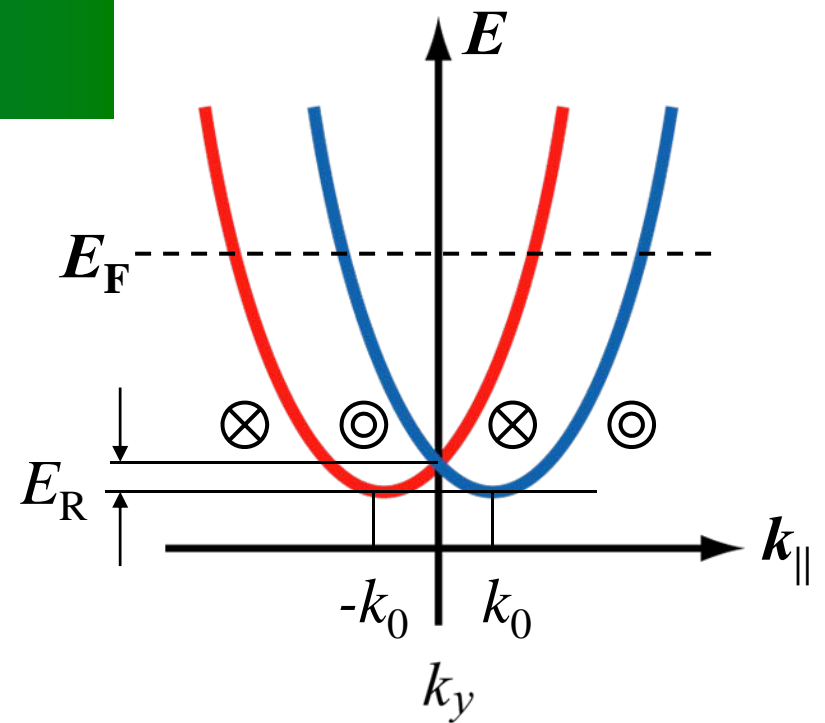
表面 $\vec{\nabla}V // z$

Rashba ハミルトニアン

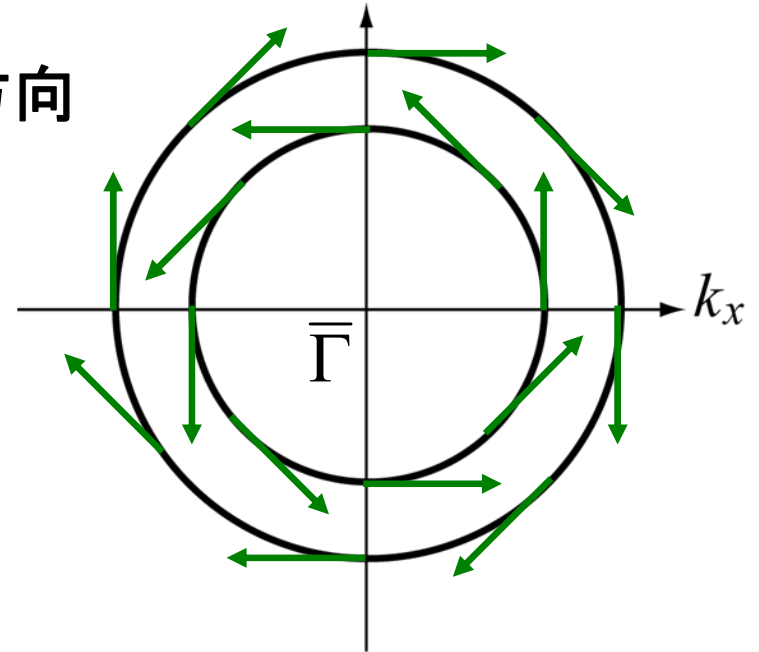
$$H_{\text{RB}} = \alpha_R (k_x \sigma_y - k_y \sigma_x)$$

$$\alpha_R = \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} (\vec{\nabla}V)_z$$

Rashba parameter



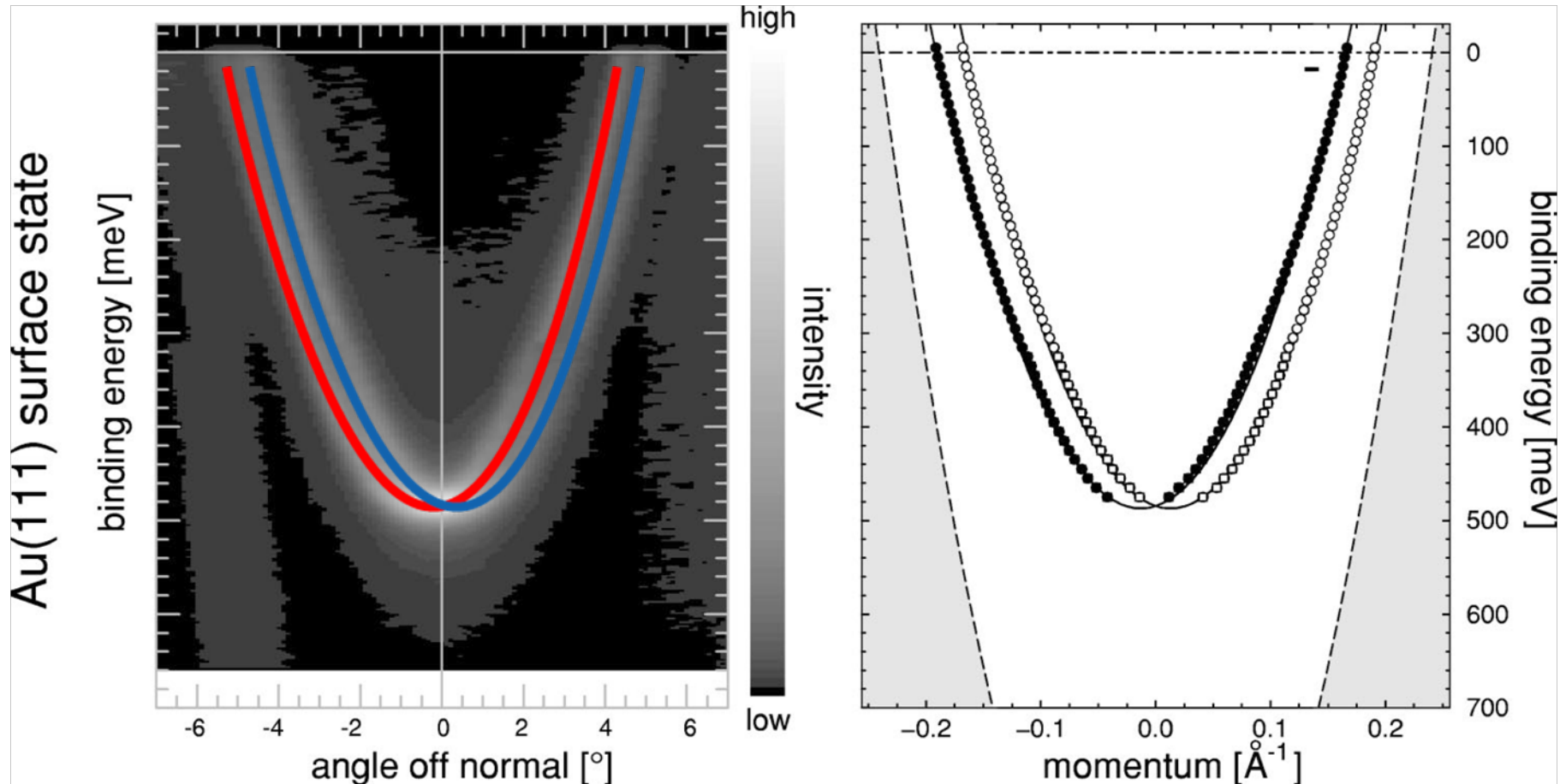
スピンの方向



非磁性体表面に現れるスピン分裂バンド

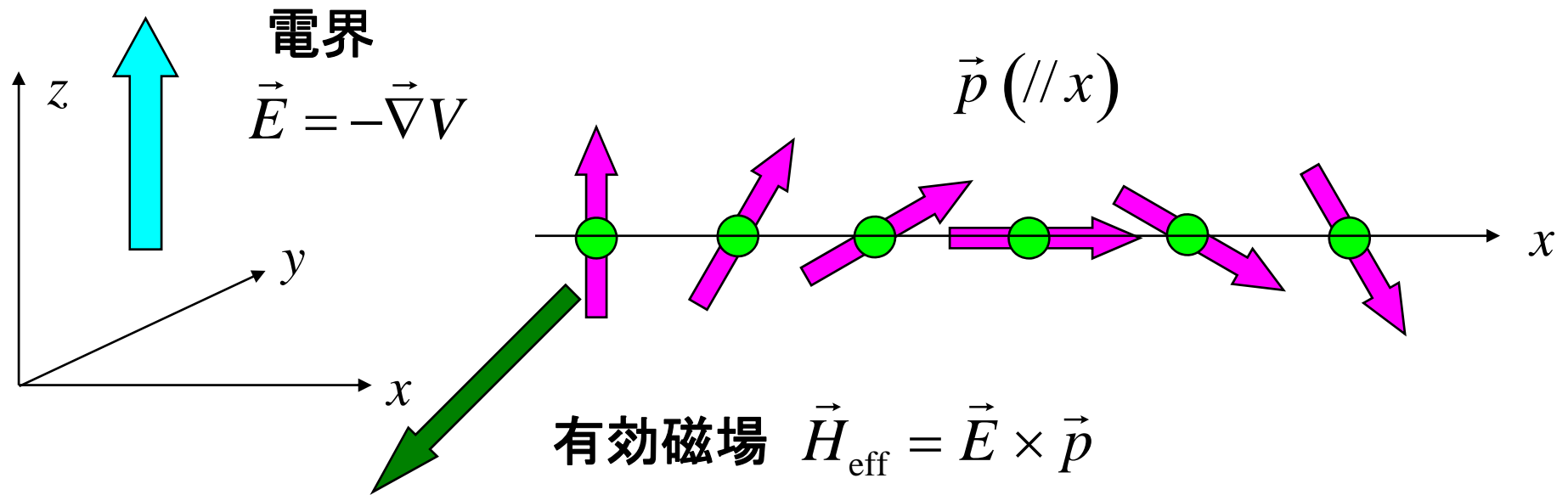
Au(111)

F. Reinert et al., Phys. Rev. B **63** (2001) 115415.



表面における対称性の破れが原因

電界によるスピンの制御

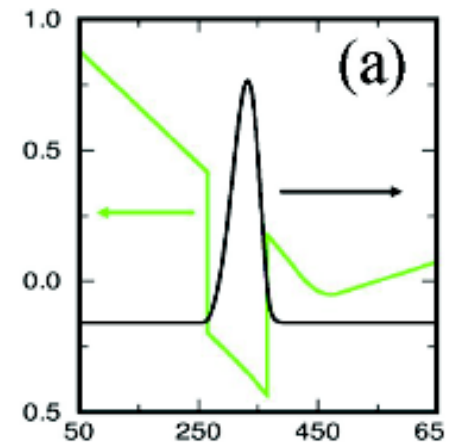
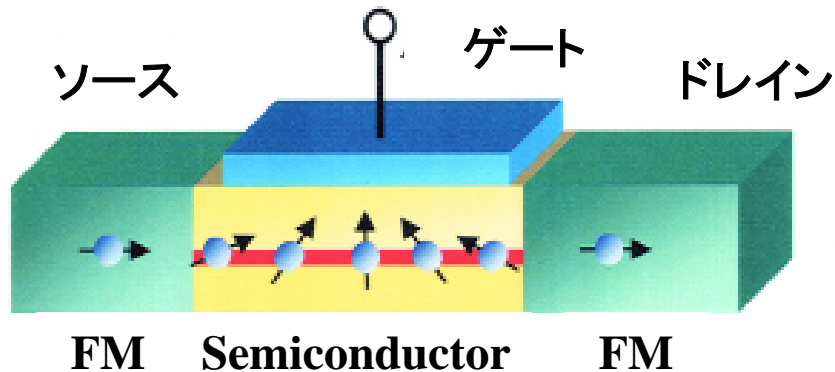


スピン・軌道相互作用

$$H_{\text{SO}} = \frac{1}{2m^2c^2} [\vec{\nabla}V \times \vec{p}] \cdot \vec{s} = -\frac{1}{2m^2c^2} [\vec{E} \times \vec{p}] \cdot \vec{s}$$
$$\propto \vec{H}_{\text{eff}} \cdot \vec{s}$$

スピン電界効果トランジスタ (Spin-FET)

S. Datta and B. Das, Appl. Phys. Lett. **56** (1990) 665.



InAlAs/InGaAs/InAlAs

電界でスピンを制御

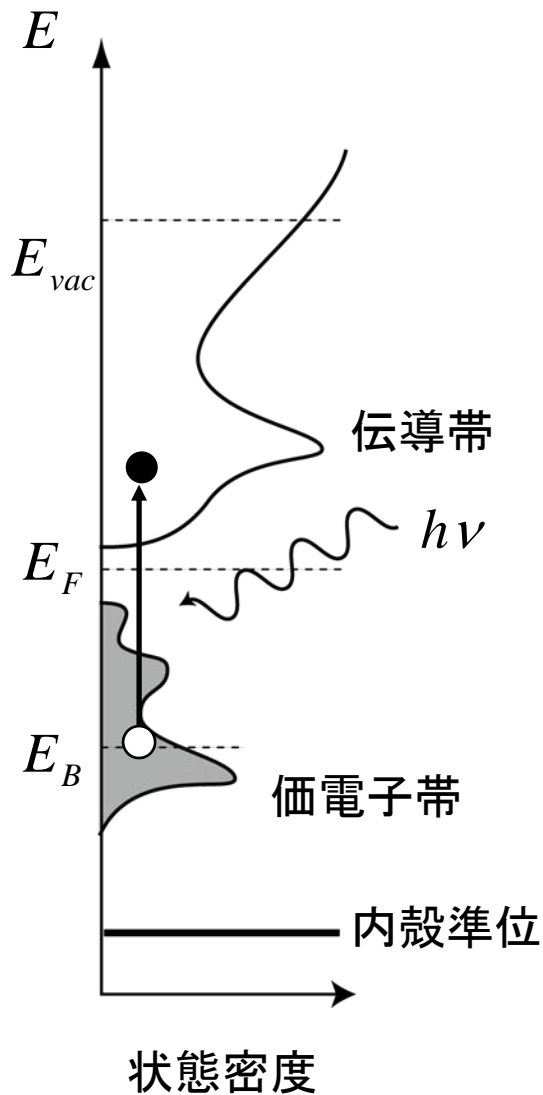
➡ 超低消費電力化につながる

$$\Delta\theta = 2\alpha m^* L / \eta^2$$

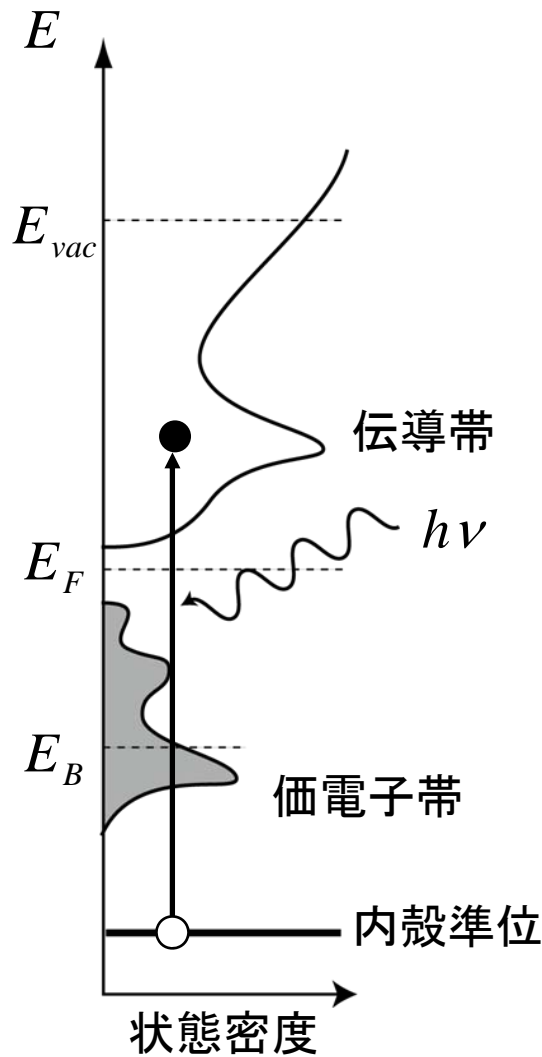
L : ソース-ドレイン間の距離

α : スピン・軌道相互作用係数

内殻吸収分光



バンド間遷移



内殻吸収分光

元素選択的

軌道の対称性

電気双極子遷移の選択則

O, C

$1s \rightarrow 2p$

3d 遷移金属元素

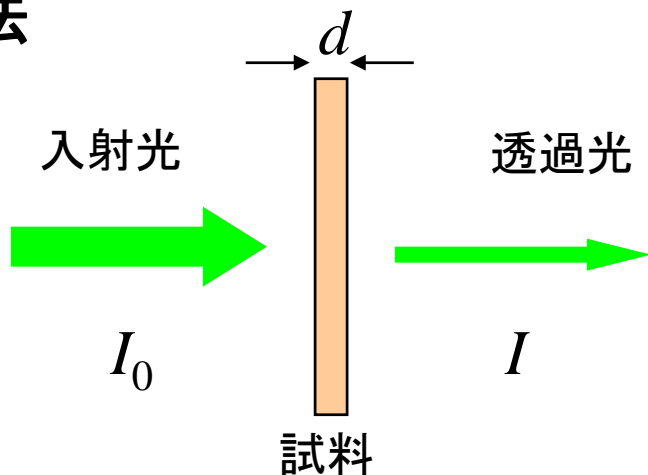
$2p \rightarrow 3d$

希土類元素

$3d \rightarrow 4f$

吸収スペクトルの測定法

透過法



$$I = I_0 \exp(-\mu d)$$

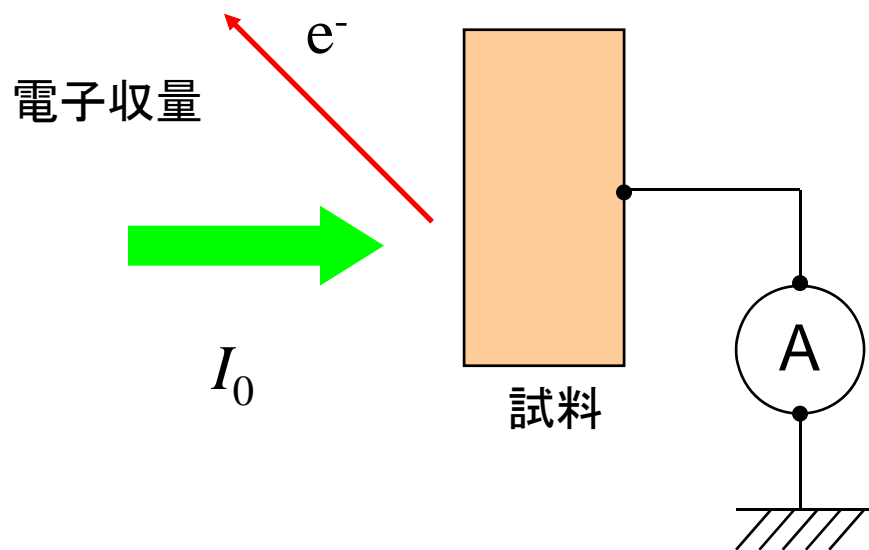
$$\mu = \frac{1}{d} \log\left(\frac{I_0}{I}\right)$$

軟X線領域での
吸収係数

$$\mu \sim 10^{-8} - 10^{-7} [\text{m}^{-1}]$$

非常に薄っぺらい試料が必要。

電子収量法

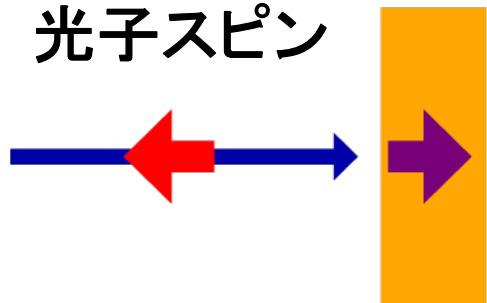


分厚い試料もOK

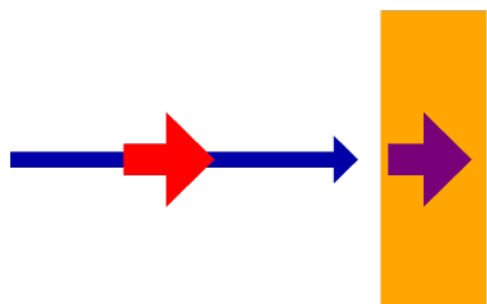
内殻吸収磁気円二色性(XMCD)

円偏光

光子スピン

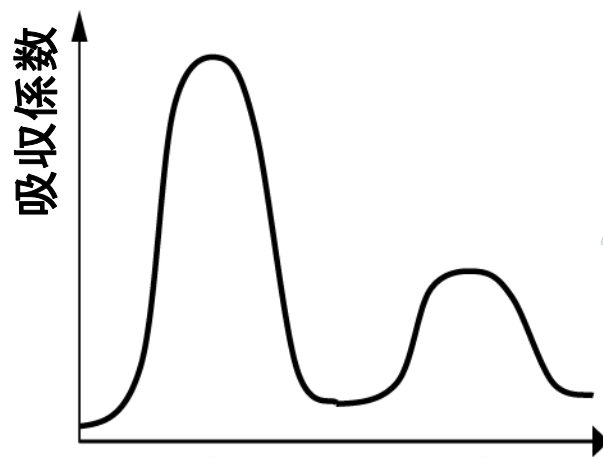
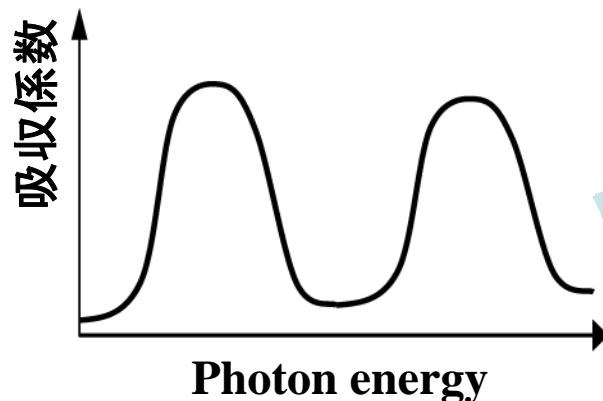


磁化 M



試料

2p→3d 内殻吸収

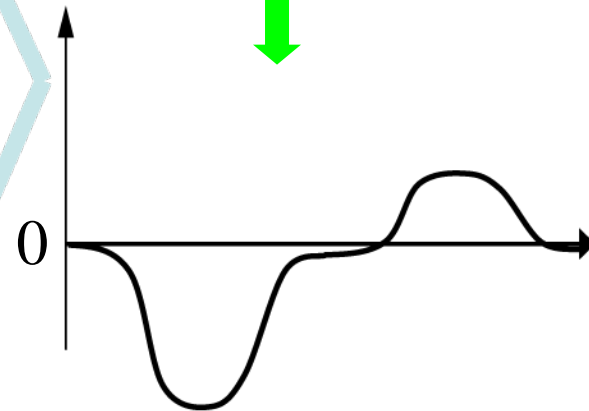


$j=3/2$

$j=1/2$

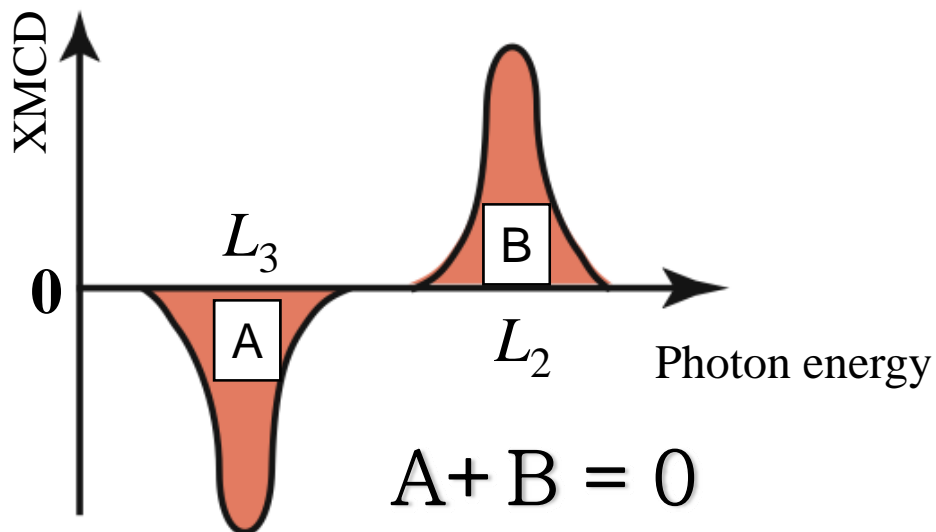
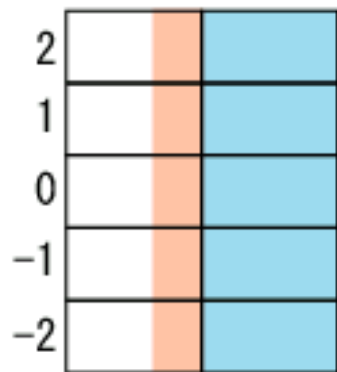
スピン軌道相互作用

差分=XMCD

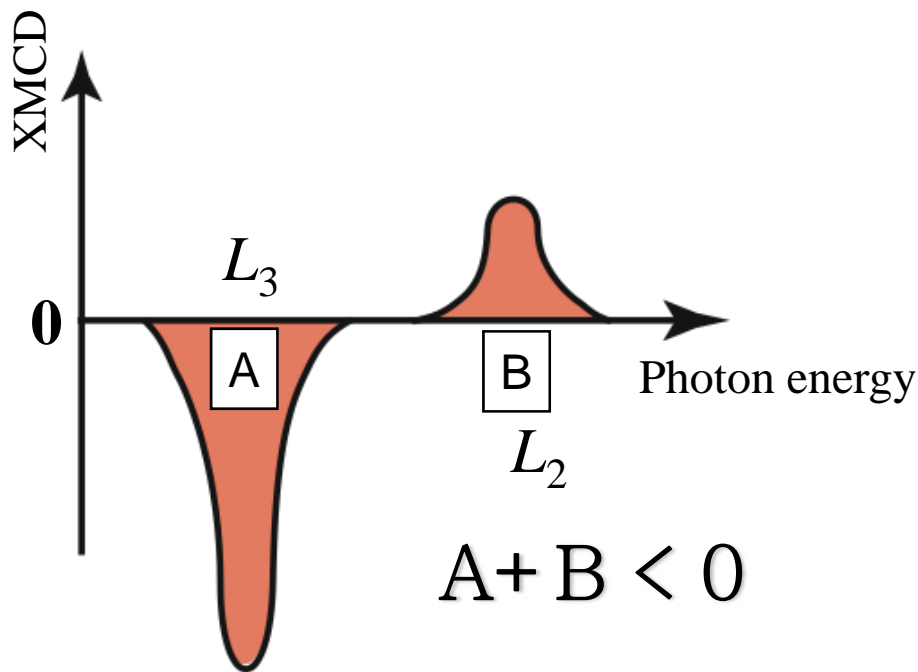
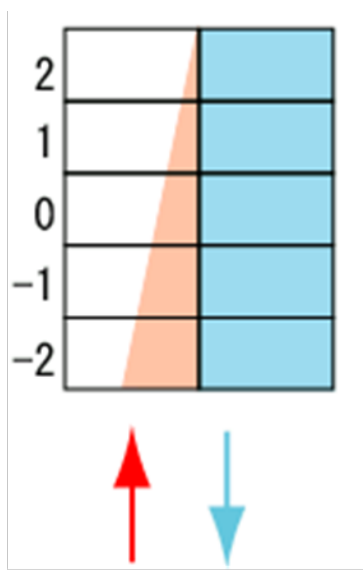


内殻吸収磁気円二色性 (XMCD)

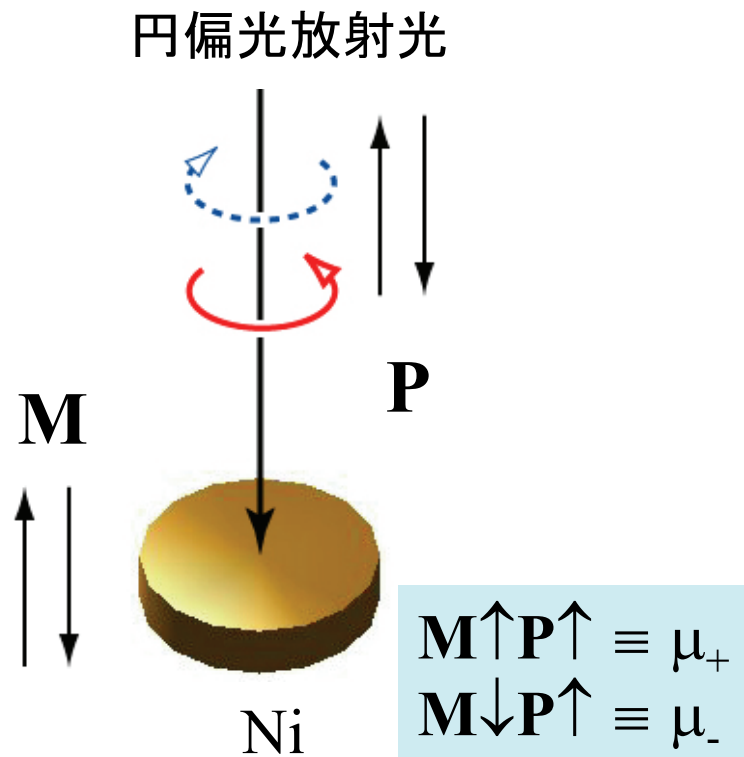
(a) スピン磁気モーメント



(b) スピン&軌道磁気モーメント



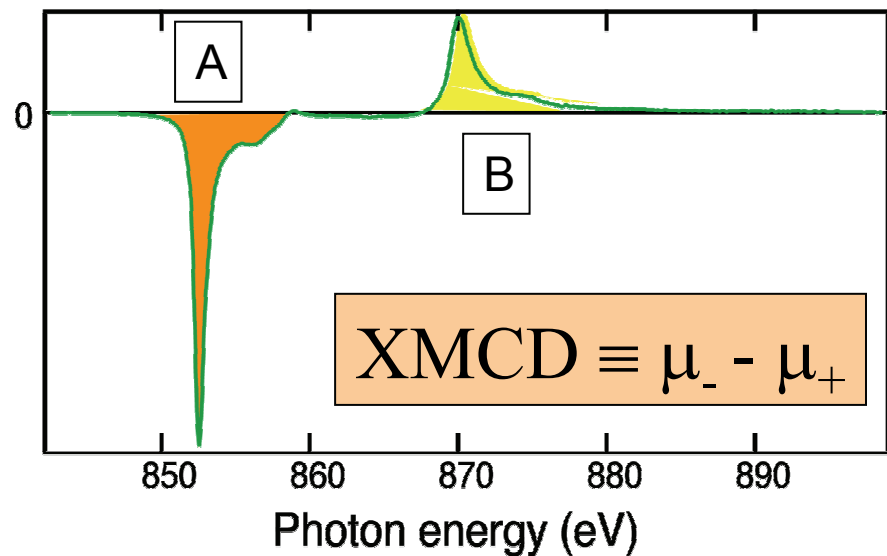
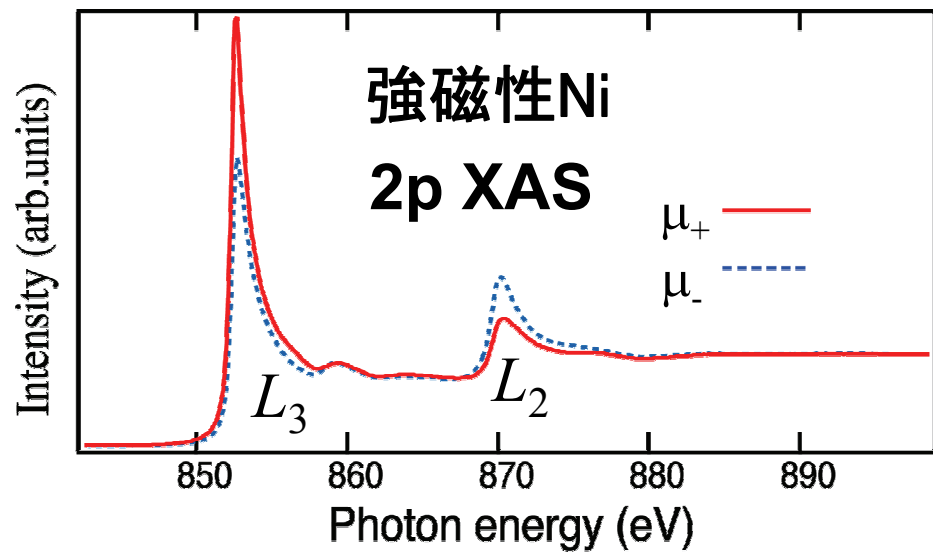
内殻吸収磁気円二色性 (XMCD)



$$m_{\text{orb}} \propto A+B$$

$$m_{\text{spin}} \propto |A|+2|B|$$

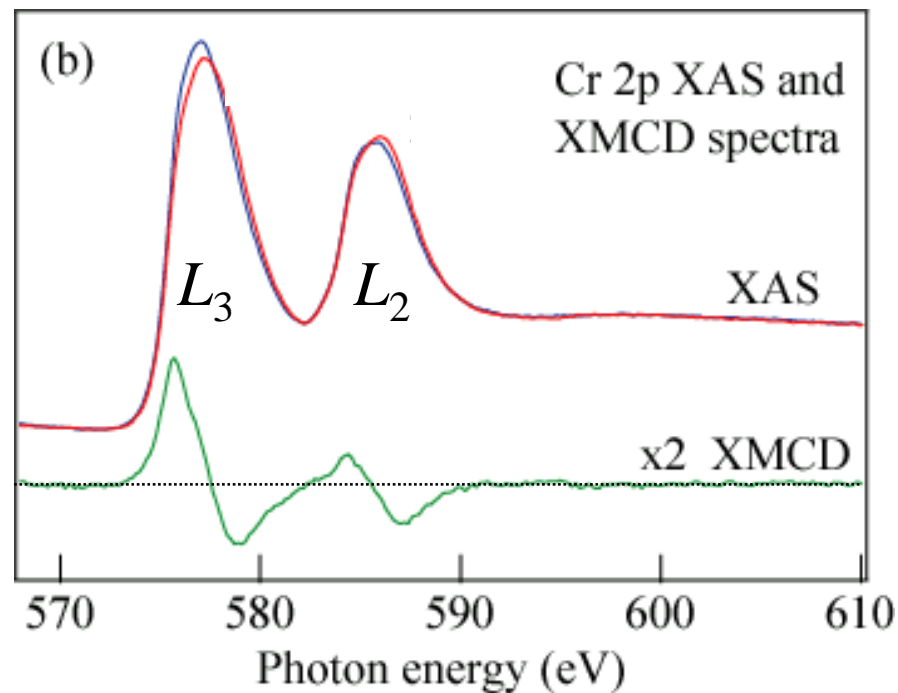
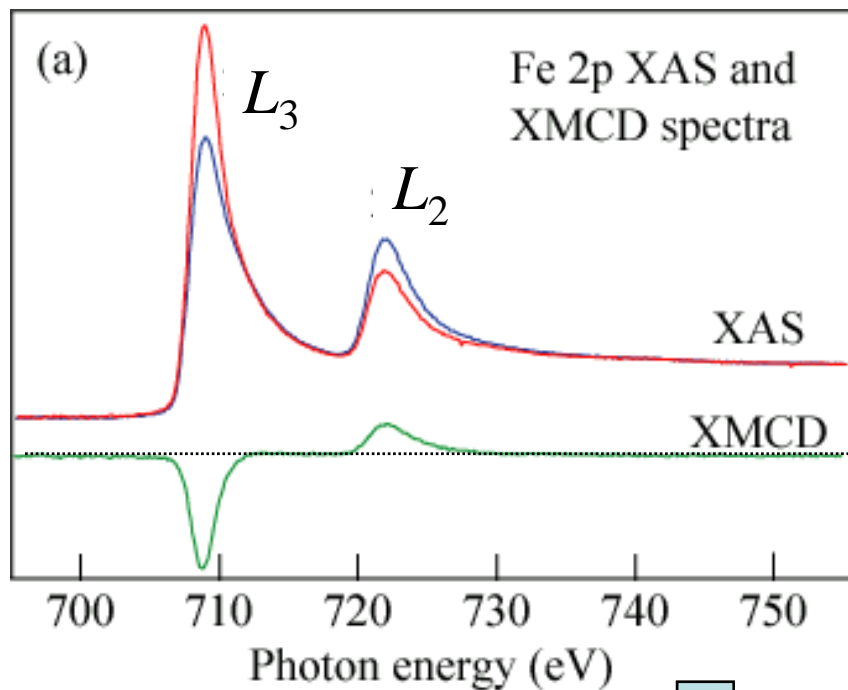
元素選択的
 スピン・軌道磁気モーメント



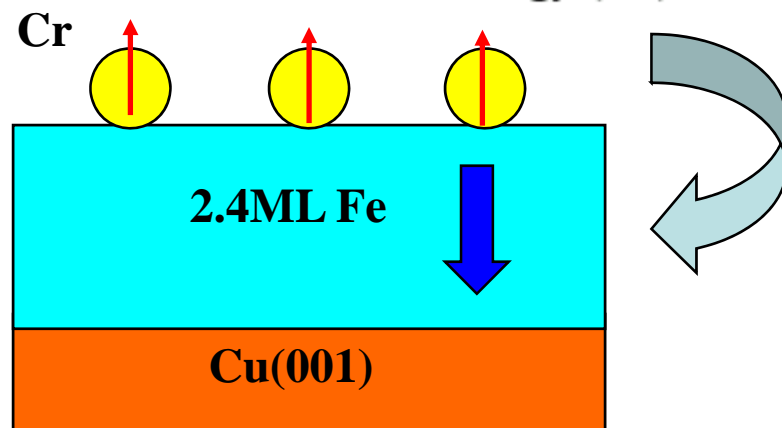
$$m_{\text{orb}} = 0.07 \mu_B \quad m_{\text{spin}} = 0.51 \mu_B$$



K. Yaji et al., Phys. Rev B **76**, 214403 (2007).



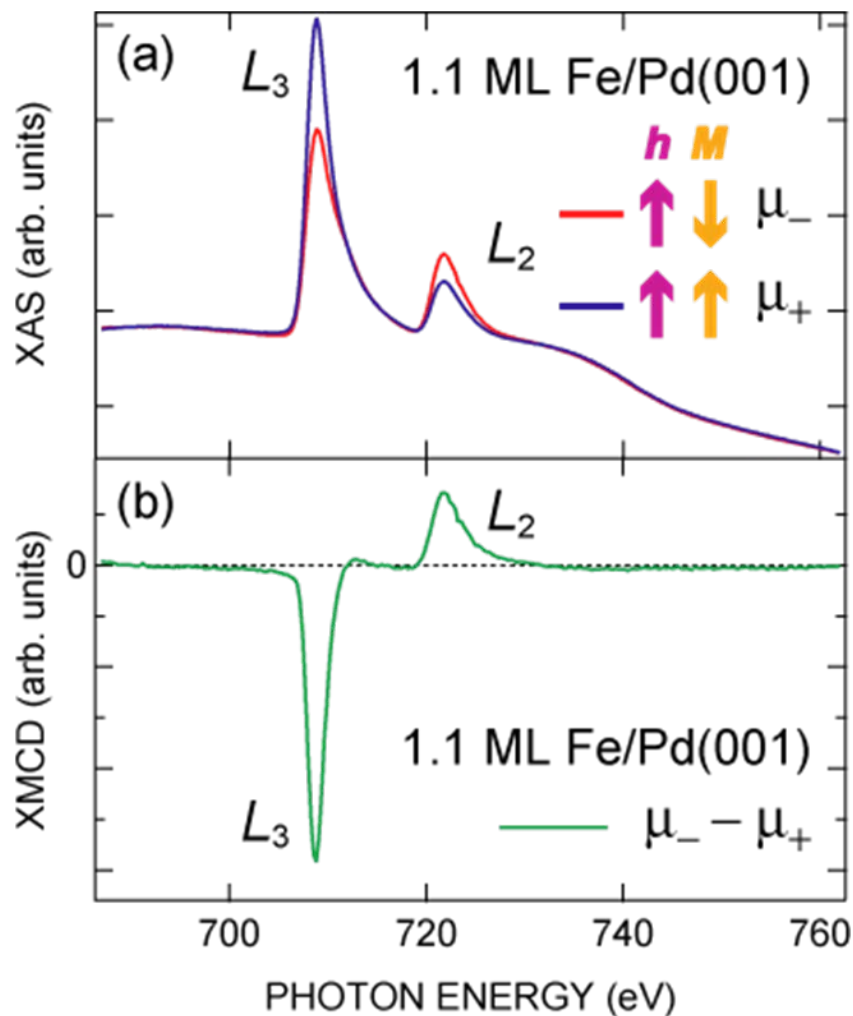
Cr 3d および Fe 3d スピン磁気モーメントが反平行にカップルしていることを示す。



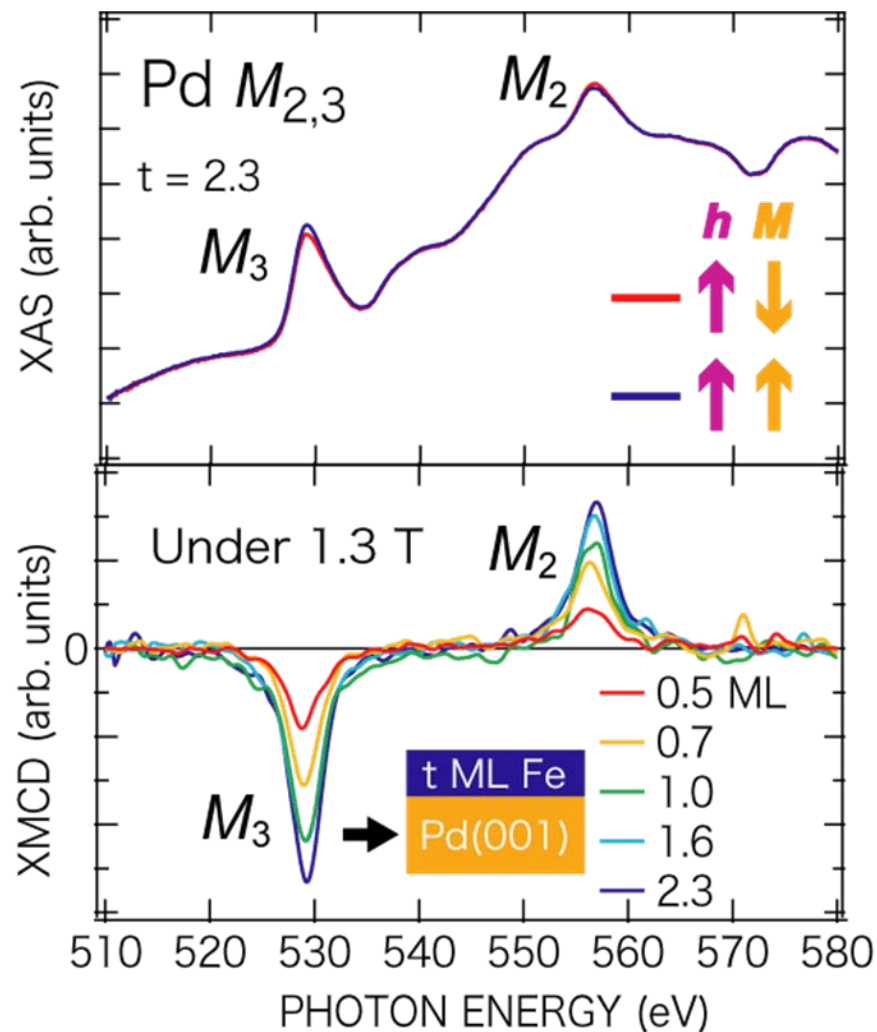


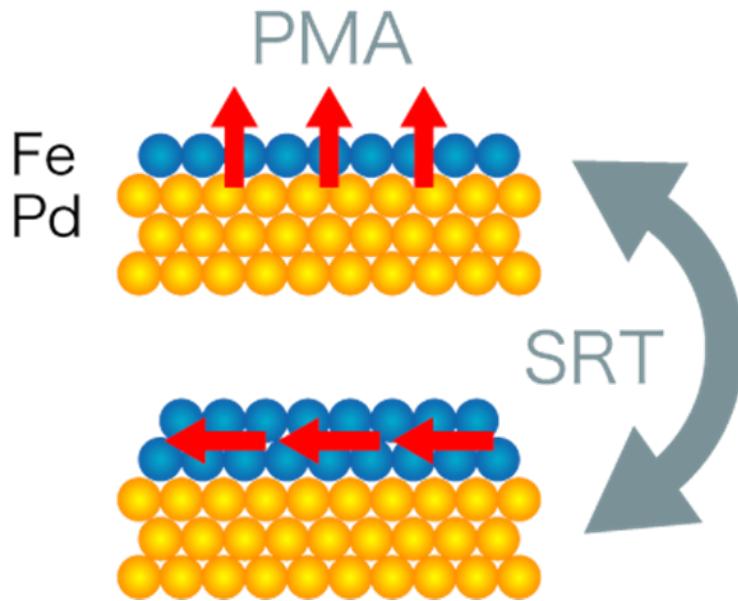
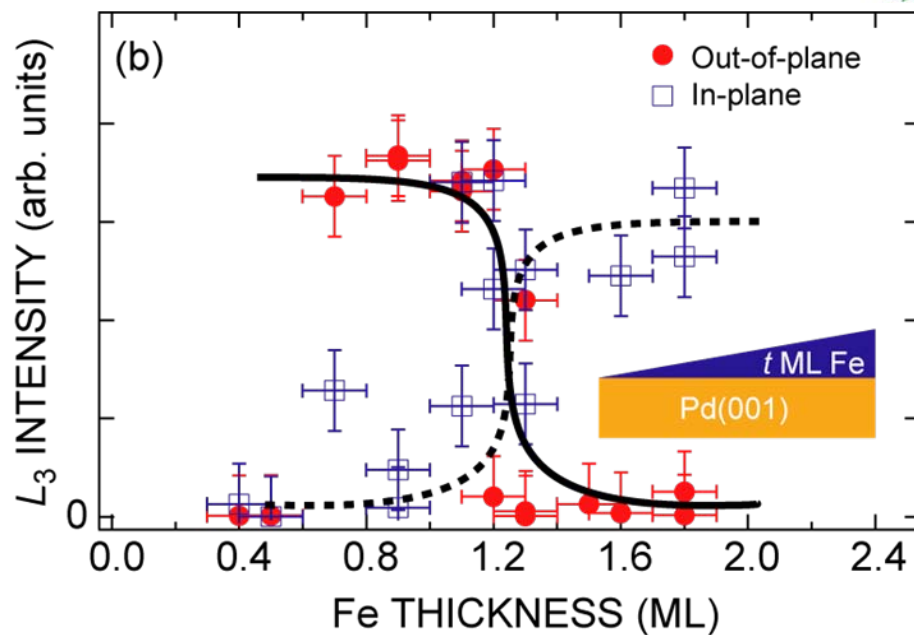
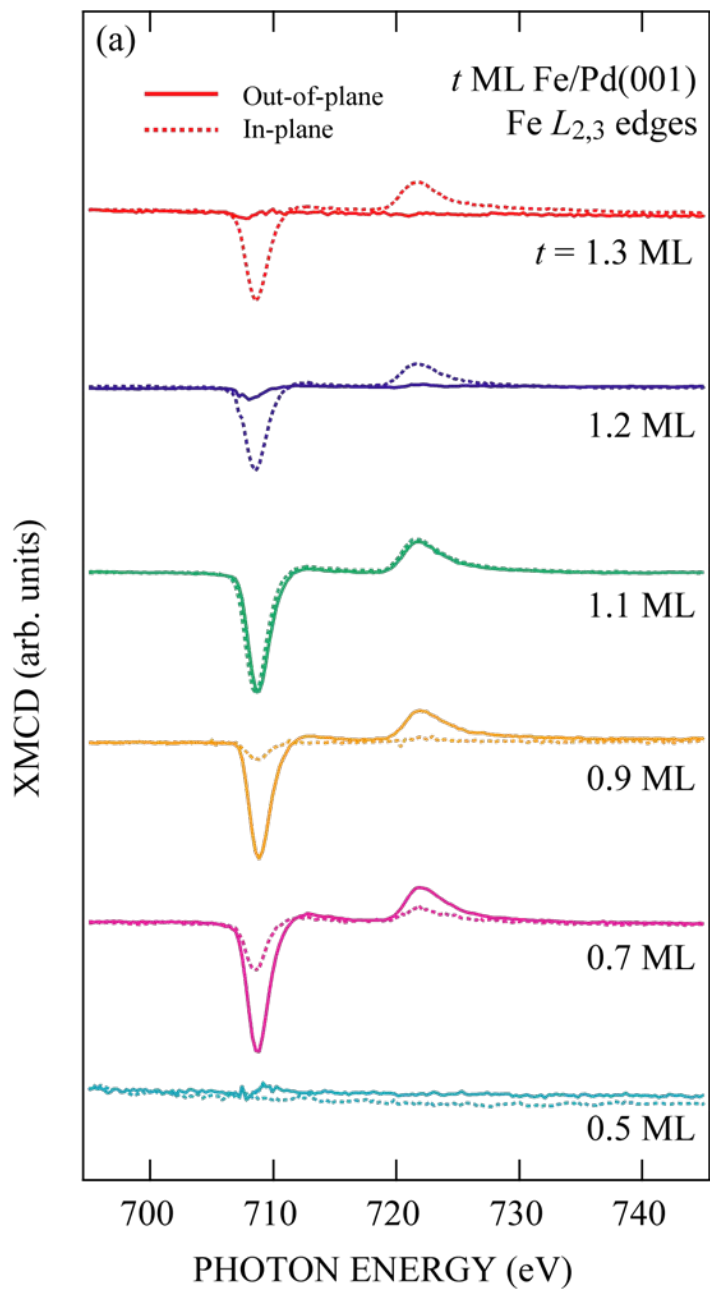
T. Ueno *et al.*, e-J. Surf. Sci. Nanotech. **6**, 246 (2008).

Fe 2p → 3d (Fe L_{23})



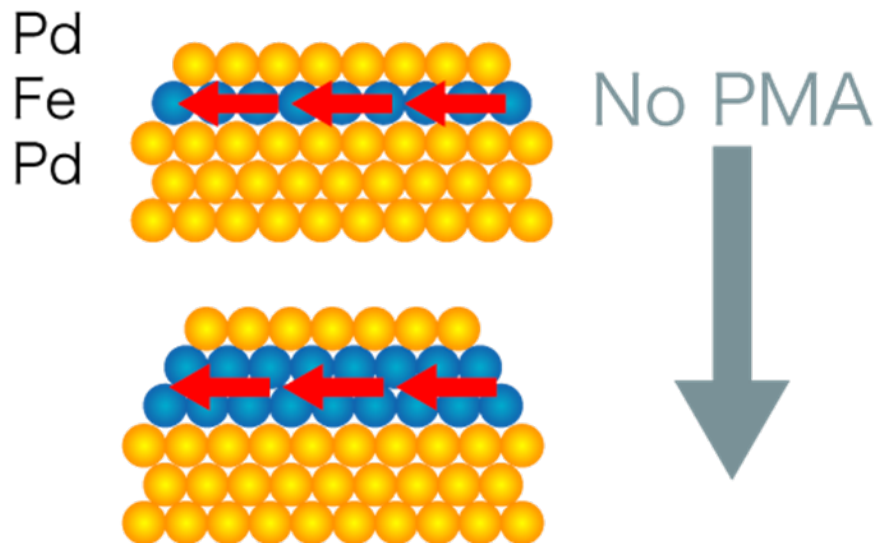
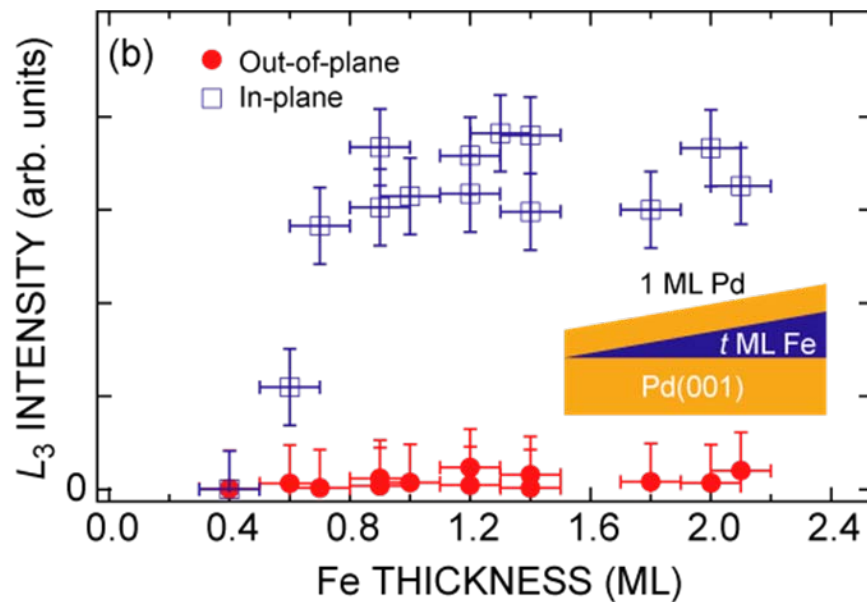
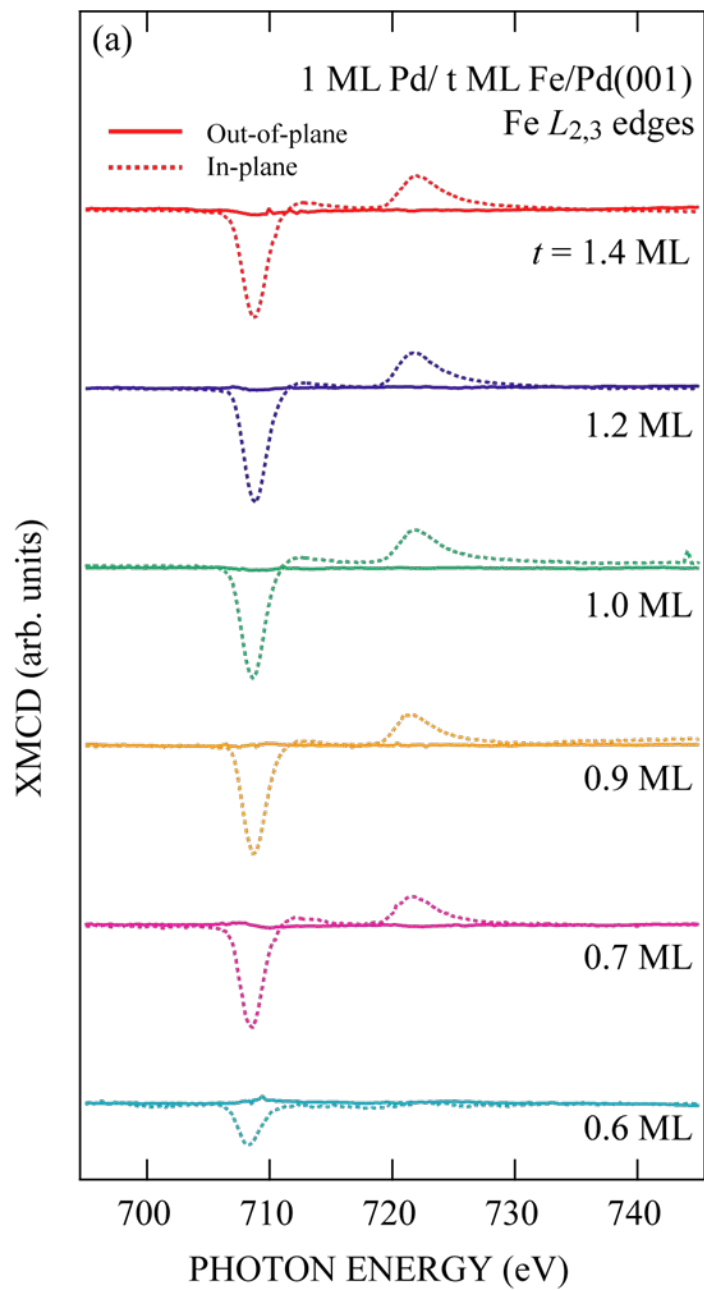
Pd 3p → 4d (Pd M_{23})





1MLPd/Fe/Pd(001)

T. Ueno et al., (2008).



まとめ

放射光分光により物質の電子構造を観測し、物性発現機構を解明

内殻吸収分光

- ◆ 線二色性(XLD) 軌道の異方性、軌道秩序
- ◆ 磁気円二色性(XMCD) 元素選択的な磁気モーメント(スピン&軌道)
磁気異方性起源解明
ナノ磁性体の磁区観察(光電子顕微鏡)

光電子分光

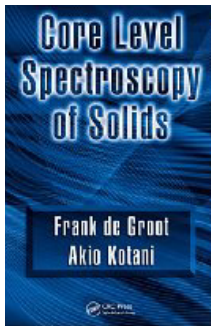
- ◆ 内殻光電子分光 元素分析、化学ポテンシャルシフト、多体効果
- ◆ 価電子帯光電子分光 占有電子状態密度
角度分解光電子分光(ARPES)を用いて
エネルギー分散関係、フェルミ面、準粒子状態
を捉えることができる。

参考書・専門書



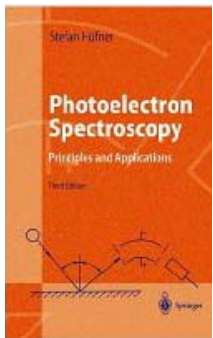
「放射光X線磁気分光と散乱(橋爪弘雄, 岩住俊明編)」
(アイピーシー2007).

「内殻分光(横山利彦, 太田俊明編)」(アイピーシー2007).



A. Kotani & F. de Groot, *Core Level Spectroscopy of Solids*
(CRC Press 2008).

S. Hüfner, *Photoelectron spectroscopy -Principles and Applications-*
(3rd edition, Springer-Verlag 2003).



S. Hüfner: *Very High Resolution Photoelectron Spectroscopy*
(Springer-Verlag 2007).