

## ヤヌス遷移金属ダイカルコゲナイドの面外鏡面对称性の破れに起因する電子状態と応答現象に関する理論研究

関西学院大学大学院理工学研究科先進エネルギーナノ工学専攻  
 博士後期課程 2年 (助成時)  
 博士後期課程 3年 (現在)  
 亀田 智明

**研究背景** 厚さが数原子層しかない二次元材料が注目を集めている。これらの材料は紙のように柔軟で、「曲げる」「重ねる」「切る」といったナノスケールの構造操作によって、電子の流れ方や光との相互作用を自在に制御できる。こうした「形を変えることで機能を制御する」特性は、省エネルギー電子デバイスの実現に直結する。特に、遷移金属ダイカルコゲナイド (TMDC) は、薄膜でも多彩な量子応答を示す材料群として注目されている。

さらに近年、上下のカルコゲン原子を入れ替えて面外鏡面对称性を意図的に破ったヤヌス型 TMDC が実現し、内部電場やラシュバ型スピン軌道相互作用 (ラシュバ SOC) が自発的に生じる舞台として期待されている (図 1)。

**研究目的** 本研究では、ナノスケールで変形させた TMDC が示す新しい電気伝導特性を理論的に解明する (図 2)。特にヤヌス型 TMDC において、構造の非対称性がどのように電子状態を変化させ、どのような量子応答を可能にするかを理論的に明らかにする。具体的には、面外鏡面对称性の破れに起因するスピン分裂と対称性の制約に注目し、光誘起スピンホール流、電場の二次応答としての非線形スピン流の発現条件を理解することを目指す。

**研究方法** 電子状態の記述には、多軌道タイトバインディング模型 (図 3) を用いた。これにより、原子軌道、結晶対称性、スピン軌道相互作用の効果を見通しよく取り入れた。応答計算には、外場に対する物質の応答を与える久保公式に基づく線形・非線形応答理論を適用した。さらに、波動関数の幾何学的性質を表すベリー曲率と、その運動量空間での偏りであるベリー曲率双極子を解析し、応答の起源を対称性と結び付けて整理した。

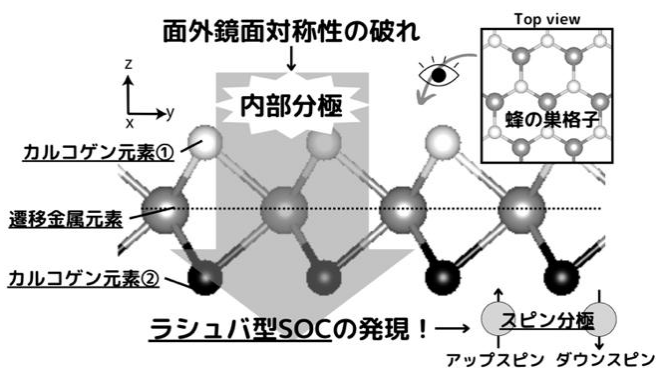


図 1: ヤヌス TMDC の構造と面外鏡面对称性の破れ

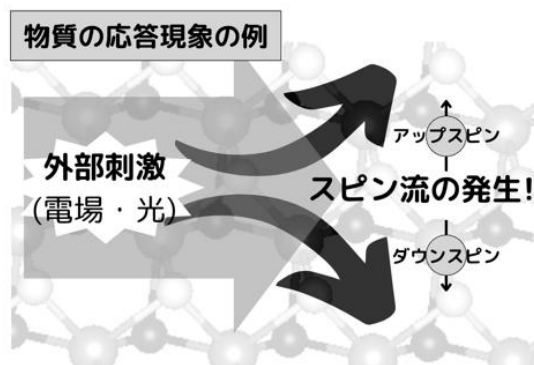


図 2: 物質の応答現象

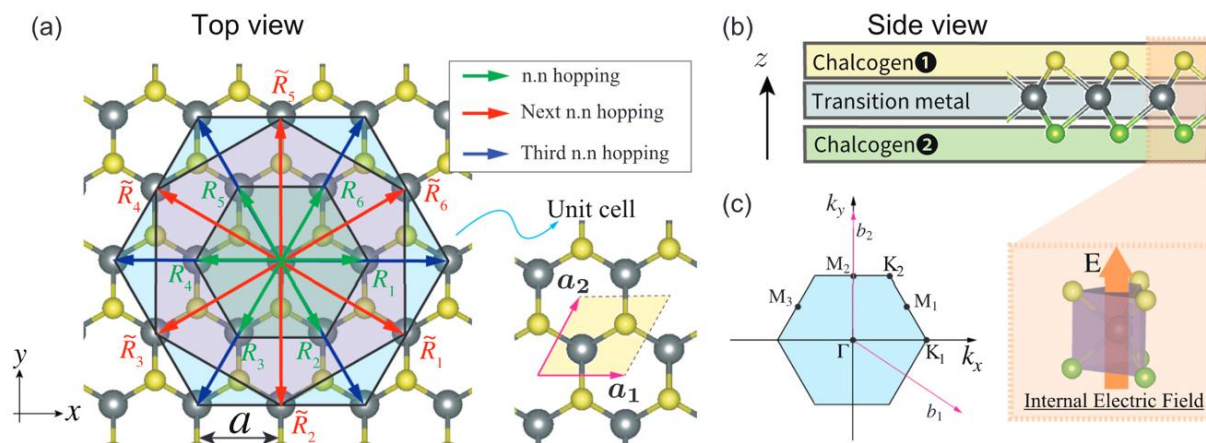
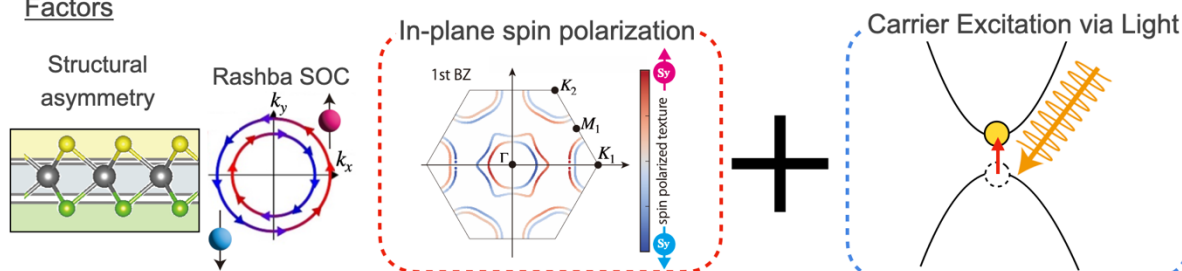


図3：ヤヌス TMDC の構造とタイトバインディングモデルにおけるホッピング

**結果** 面外鏡面对称性の破れにより生じるラシュバ SOC が、光照射下での純スピホール流の生成に本質的な役割を果たすことを示した。とくに、面内スピン偏極をもつスピン流が可視光領域で増大することを示した。また、低対称な構造を有する 1T' 型ヤヌス TMDC では、ベリー曲率双極子とラシュバ SOC の協働により、線形応答では現れない非線形スピホール流が発現し得ることを示した。

## Summary Optically induced pure spin current in Janus TMDC

### Factors

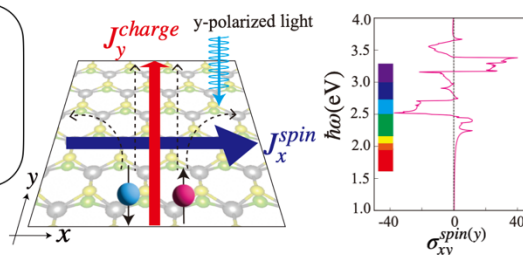


### Methods

- Step① Tight-binding model
- Step② Spin dependent optical hall conductivity
- Step③ Neumann's principle

Our results offer a new degree of freedom

for designing **optospintronic devices**, such as **spin current harvesting** via light irradiation in 2D materials



T. Kameda and K. Wakabayashi, "Optically induced spin current in Janus transition-metal dichalcogenides," submitted to *Phys. Rev. B* (2025).

## 参考文献

- [1] **Tomoaki Kameda**, Katsunori Wakabayashi, Optically induced spin Hall current in Janus transition-metal dichalcogenides, *Physical Review B* **111**, 195425 (2025).
- [2] Souren Adhikary, **Tomoaki Kameda**, Katsunori Wakabayashi, Optically induced spin Hall current in monolayer Janus NbSSe: a first-principles study, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **27**, 37 (2025).