スピントロニクス・デザインコース
Spintronics Design Course

基　礎　1
Fundamentals 1

の基礎

白　井　正　文
Shirai, Masafumi

東北大学　電気通信研究所
Research Institute of Electrical Communication, Tohoku University

東北大学　スピントロニクス学術連携研究教育センター
Center for Spintronics Research Network, Tohoku University

第32回 CMD Workshop
（2018年2月26日～3月2日，大阪大学基礎工学研究科）

1

講　義　内　容
Contents

1．孤立イオンの磁気モーメント
Magnetic moments of an isolated ion

2．磁場中の磁気モーメントの運動
Motion of a magnetic moment in a magnetic field

3．結晶中の磁性イオン（結晶場）
Magnetic ions in a crystal (crystal field)

・単一イオンの磁気異方性
Magnetic anisotropy of a single ion

2

1．孤立イオンの磁気モーメント
Magnetic moments of an isolated ion

3

電子の軌道運動　orbital motion of electron

電磁界中の電子（質量 m，電荷 $-e$）のハミルトニアン
Hamiltonian for an electron (mass m, charge $-e$) in electromagnetic field

$$H = \frac{1}{2m}[\boldsymbol{p} + \frac{e}{c}\boldsymbol{A}]^2 - e\Phi$$

$$\boldsymbol{H} = \mathrm{rot}\,\boldsymbol{A} = (0,0,H)$$

ベクトルポテンシャル
vector potential

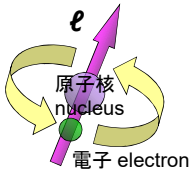
$$\boldsymbol{A} = \frac{H}{2}(-y, x, 0)$$

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + \boxed{\frac{eH}{2mc}(xp_x - yp_x)} + \frac{e^2H^2}{8mc^2}(x^2+y^2) - e\Phi$$

$$-\boldsymbol{\mu}_\ell \cdot \boldsymbol{H}$$

軌道角運動量
orbital angular momentum

$$\hbar\ell_z = (\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})_z = xp_y - yp_x$$



軌道磁気モーメント
orbital magnetic moment

$$\boldsymbol{\mu}_\ell = -\frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{l} = -\mu_B\boldsymbol{l}$$

ボーア磁子
Bohr magneton

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$$

4

電子スピン　electron spin

スピン角運動量 spin angular momentum

$$\hbar \boldsymbol{s} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma} \qquad s = 1/2$$

スピン量子数
spin quantum number

$= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

$= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

パウリ行列　Pauli matrix

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

交換関係
Commutation relation

$$[s_x, s_y] = s_x s_y - s_y s_x = i s_z$$

スピン磁気モーメント
spin magnetic moment

$$\boldsymbol{\mu}_s = -g\frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{s} = -g\mu_B \boldsymbol{s}$$

ボーア磁子
Bohr magneton

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$$

g-factor: $g = 2.0023$

5

スピン軌道相互作用　spin-orbit interaction

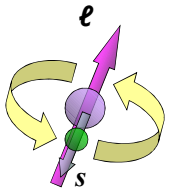
$$H_{SO} = \frac{\hbar}{2m^2c^2}[\nabla V \times \boldsymbol{p}]\cdot \boldsymbol{s}$$

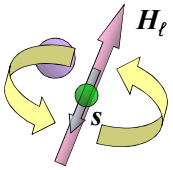
相対論効果
relativistic effect

球対称ポテンシャル中　in spherical potential

$$H_{SO} = \lambda \boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s} \qquad H_{SO} = -\boldsymbol{H}_\ell \cdot \boldsymbol{\mu}_s$$

$$\lambda = \frac{\hbar^2}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr} \qquad \boldsymbol{H}_\ell = \frac{\lambda}{g\mu_B}\boldsymbol{l}$$





有効磁界
effective magnetic field

6

Q: Energy splitting of p-orbital states ($\ell = 1$)

$$m_\ell = +1, \quad 0, \quad -1$$

$$m_s = +1/2, -1/2$$

全角運動量
Total angular momentum

$$\boldsymbol{j} = \boldsymbol{l} + \boldsymbol{s}$$

$$H_{SO} = \lambda \boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s} = \frac{\lambda}{2}(\boldsymbol{j}^2 - \boldsymbol{l}^2 - \boldsymbol{s}^2)$$

$$= \frac{\lambda}{2}[j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)]$$

$$m_j = +3/2, \ +1/2, \ -1/2, \ -3/2$$

$j = 3/2$

$$\Delta = \frac{3}{2}\lambda$$

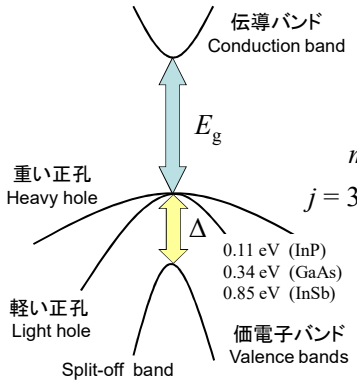
$j = 1/2$

$$m_j = +1/2, \ -1/2$$

7

円偏光によるスピン生成

Spin-polarized electrons created by circularly polarized light



$$m_j = +1/2, -1/2$$

$j = 1/2$

$$m_j = +3/2, +1/2, -1/2, -3/2$$

$j = 3/2$

$(3/2)\lambda$

$j = 1/2$

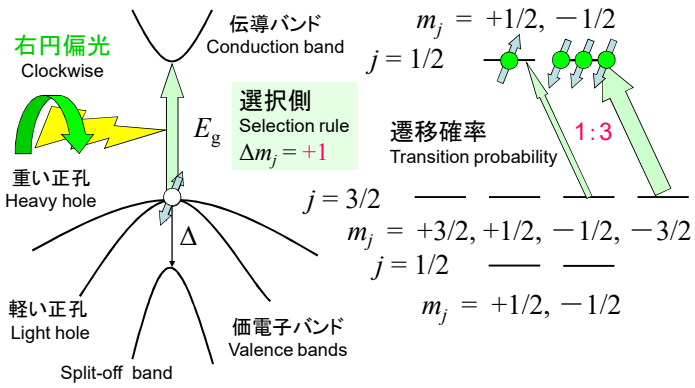
$$m_j = +1/2, -1/2$$

スピン軌道相互作用
Spin-orbit interaction

$$H_{SO} = \lambda \boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s}$$

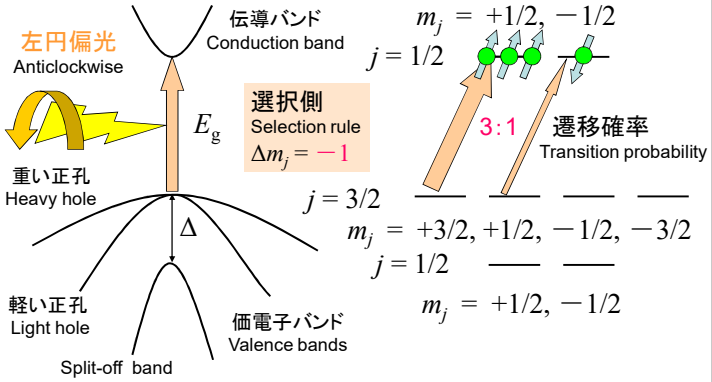
直接ギャップ半導体のバンド構造 ($k \approx 0$)
Band structure of direct-gap semiconductor

8



直接ギャップ半導体のバンド構造 ($k \approx 0$)
Band structure of direct-gap semiconductor

9



直接ギャップ半導体のバンド構造 ($k \approx 0$)
Band structure of direct-gap semiconductor

10

2. 磁場中の磁気モーメントの運動

Motion of a magnetic moment in a magnetic field

11

磁気モーメントの運動 Dynamics of magnetic moments

$$\boldsymbol{\mu} = -g\mu_B \boldsymbol{s} = -\gamma \hbar \boldsymbol{s}$$

磁気回転比 $\gamma = \dfrac{g\mu_B}{\hbar}$
gyromagnetic ratio

ハイゼンベルグの運動方程式
Heisenberg's equation of motion

$$i\hbar \frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} = [\boldsymbol{\mu}, H_{\text{Zeeman}}]$$

Zeeman相互作用

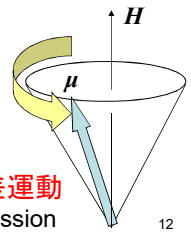
$$H_{\text{Zeeman}} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{H}$$

$$\therefore \frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} = -\gamma\, \boldsymbol{\mu} \times \boldsymbol{H}$$

$$\boldsymbol{H} = (0, 0, H)$$

$$\frac{d\mu_x}{dt} = -\gamma H \mu_y \qquad \frac{d\mu_y}{dt} = +\gamma H \mu_x$$

$$\frac{d^2\mu_\alpha}{dt^2} = -\omega_L^2 \mu_\alpha \qquad (\alpha = x, y)$$

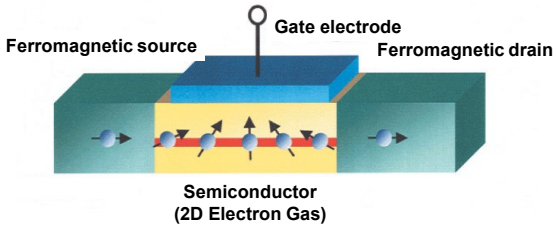


ラーモア周波数 $\omega_L = \gamma H$
Larmor frequency

ラーモア歳差運動
Larmor precession

12

スピン電界効果トランジスタ
Spin Field Effect Transistor (Spin FET)



Key Issues:

1. *Spin-injection* efficiency into semiconductor.
2. *Spin manipulation* by electric field (gate voltage).

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

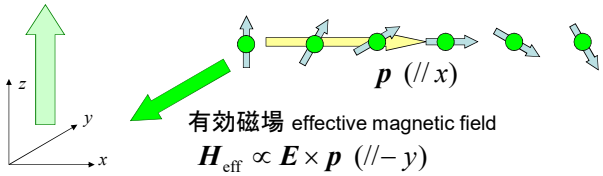
3. 結晶中の磁性イオン（結晶場）
Magnetic ions in a crystal (crystal field)

15

ゲート電圧によるスピン操作
Spin manipulation by gate voltage

ゲート電界 gate electric field

$\boldsymbol{E} = -\nabla V \quad (// z)$



有効磁場 effective magnetic field

$\boldsymbol{H}_{\mathrm{eff}} \propto \boldsymbol{E} \times \boldsymbol{p} \quad (// -y)$

スピン軌道相互作用 spin-orbit interaction

$$H_{\mathrm{SO}} = \frac{\hbar}{2m^2c^2}[\nabla V \times \boldsymbol{p}]\cdot \boldsymbol{s} = -\frac{\hbar}{2m^2c^2}[\boldsymbol{E} \times \boldsymbol{p}]\cdot \boldsymbol{s}$$

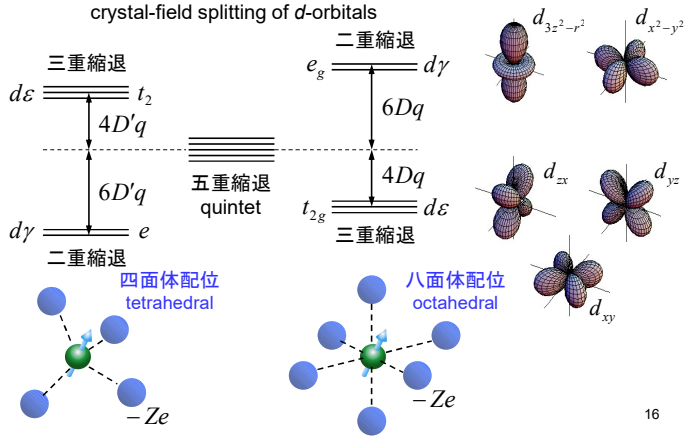
有効磁場 effective magnetic field

$\boldsymbol{H}_{\mathrm{eff}} \propto \boldsymbol{E} \times \boldsymbol{p}$

14

結晶場 crystal field

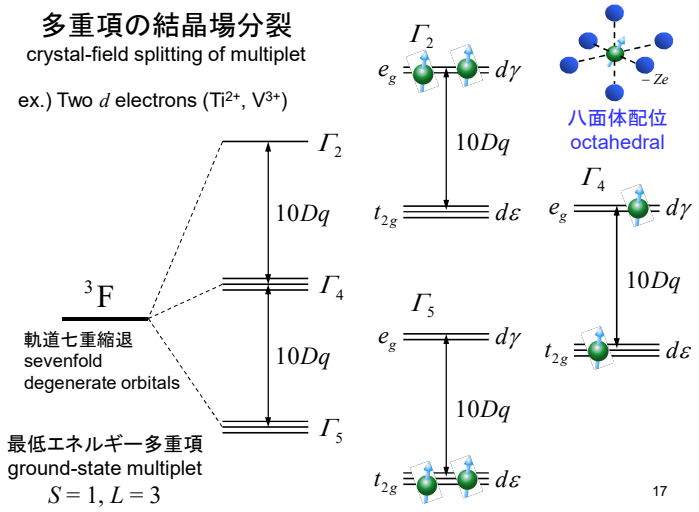
d 電子軌道の結晶場分裂
crystal-field splitting of *d*-orbitals



16

多重項の結晶場分裂
crystal-field splitting of multiplet

ex.) Two d electrons (Ti^{2+}, V^{3+})

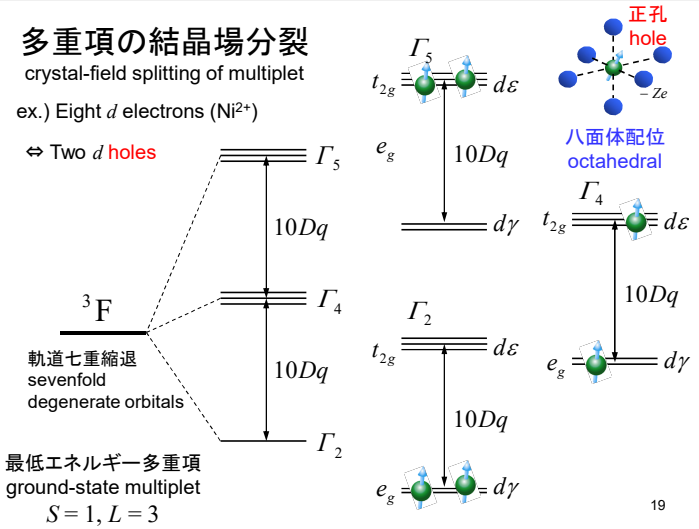


17

多重項の結晶場分裂
crystal-field splitting of multiplet

ex.) Eight d electrons (Ni^{2+})

⇔ Two d holes



19

多重項 multiplet

原子の多電子状態
Many-electron states of atom

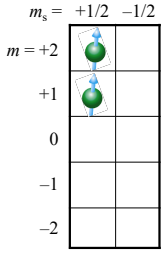
最低エネルギー多重項に関するフントの規則
Hund's rule for ground state multiplet

第1則：全スピン角運動量 S 最大
1st rule: Total spin angular momentum S : maximum

$$\boldsymbol{S} = \sum_{i=1}^{n_d} \boldsymbol{s}_i$$

第2則：全軌道角運動量 L 最大
2nd rule: Total orbital angular momentum L : maximum

$$\boldsymbol{L} = \sum_{i=1}^{n_d} \boldsymbol{l}_i$$



ex.) Two d electrons (Ti^{2+}, V^{3+})
最低エネルギー多重項
ground-state multiplet

^{3}F $\quad S = 1, L = 3$

General expression:

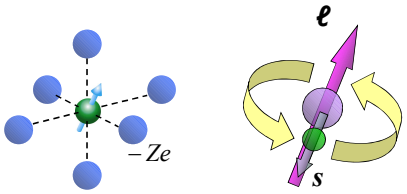
$^{2S+1}$L′ $\quad L = 0, 1, 2, 3, \cdots$
L′ = S, P, D, F, ⋯

18

結晶磁気異方性
magneto-crystalline anisotropy

局在スピン系（絶縁体）localized spin system (insulator)

結晶場 ＋ スピン軌道相互作用
crystal field spin-orbit interaction



量子力学的
quantum mechanical

$$H_{SO} = \lambda \boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{s}$$

20

スピン軌道相互作用 spin-orbit interaction

$$H_{\mathrm{SO}} = \lambda\, \boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S} \qquad \lambda = \frac{\hbar^2}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}$$

相対論効果
relativistic effect

重元素に対して顕著
significant for heavy elements

スピン軌道相互作用の効果（二次摂動）
Effect of spin-orbit interaction (2nd order)

$$H_S = -\lambda^2 \sum_{\mu,\nu} \Lambda_{\mu\nu} S_\mu S_\nu \qquad \Lambda_{\mu\nu} = \sum_{n(\neq 0)} \frac{\langle 0|L_\mu|n\rangle\langle n|L_\nu|0\rangle}{E_n - E_0}$$

$(\mu,\nu = x, y, z)$

Price's spin Hamiltonian

結晶磁気異方性（二次）
Magneto-crystalline anisotropy

結晶の対称性
crystal symmetry

$$H_{\mathrm{A}}^{(2)} = DS_z^2 + E(S_x^2 - S_y^2)$$

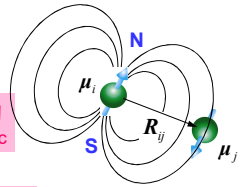
$D > 0$： 面内容易型 easy plane

$D < 0$： 一軸容易型 uniaxial

正方晶 tetragonal　斜方晶 orthorhombic

21

磁気異方性
Magnetic anisotropy



磁気双極子・双極子相互作用
magnetic dipole-dipole interaction

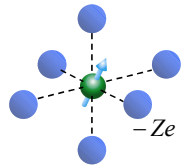
電磁気学的
Electromagnetic

結晶磁気異方性
magneto-crystalline anisotropy

量子力学的
Quantum mechanical

局在スピン系（絶縁体）
Localized spin system (insulator)

結晶場 ＋ スピン軌道相互作用
crystal field　spin-orbit interaction



遍歴スピン系（金属）
Itinerant electron system (metal)

電子バンド構造 ＋ スピン軌道相互作用
electronic structure　spin-orbit interaction

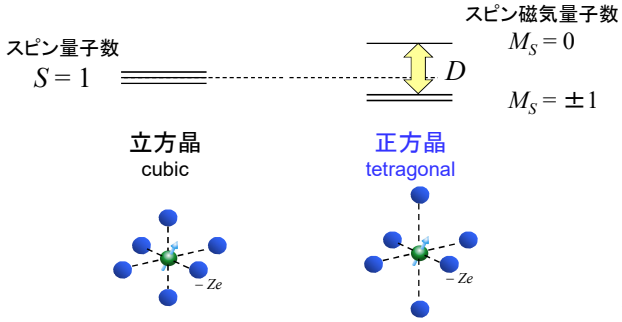
23

Q: Energy splitting by uniaxial magnetic anisotropy (S = 1)

結晶磁気異方性（正方晶）
Magneto-crystalline anisotropy (trtragonal)

$$H_{\mathrm{A}}^{(2)} = DS_z^2$$

$D < 0$： 一軸容易型 uniaxial



22

参考文献

[1] 金森順次郎：「磁性」（培風館，1969）.

[2] 近角總信：「強磁性体の物理（上）」（裳華房，1978）.

[3] 金森順次郎，米沢富美子，川村　清，寺倉清之：「固体」（岩波書店，1994）.

[4] 安達健五：「化合物磁性　局在スピン系」（裳華房，1996）.

[5] 望月和子，鈴木　直：「固体の電子状態と磁性」（大学教育出版，2003）.

白井　正文 (Shirai, Masafumi)
〒980-8577 仙台市青葉区片平2-1-1
東北大学　電気通信研究所
E-mail: shirai@riec.tohoku.ac.jp

24