

スピントロニクス 期末レポート

61908697 佐々木良輔

問 1

電子ガスモデルを考える．2 点 r' , $r' + r$ に同時に電子を見出す確率はスピンの平行な場合と反平行な場合でそれぞれ

$$g_{\uparrow\uparrow}(r) = 1 - 9 \left(\frac{\sin k_F r - k_F r \cos k_F r}{k_F^3 r^3} \right)^2 \quad (1)$$

$$g_{\uparrow\downarrow}(r) = 1 \quad (2)$$

となり, これは図 1 のような確率分布である.[1][2] これは Pauli の排他率からスピンの等しい電子が近接して存在出来ないこと, またスピンの異なる電子はの存在確率は独立していることを示している．これによって各電子は同種電子が近寄れない領域を伴いながら運動しており, 電子密度が小さくなった領域を交換正孔または Ferimi 正孔と呼ぶ．

ここで r' , $r' + r$ に存在する電子が反平行なスピンを持っていた場合, それらは接近することができるため原子核からの電場を互いに遮蔽する．一方でこれらの電子が平行なスピンを持っていた場合, 交換正孔によって電子は互いに近づくことが出来ず, 遮蔽効果が低下する．これによって電子は原子核との Coulomb 相互作用により安定化できる．この機構によって電子は互いにスピンを揃えるほうがエネルギーが低くなるため, 強磁性が発現する．

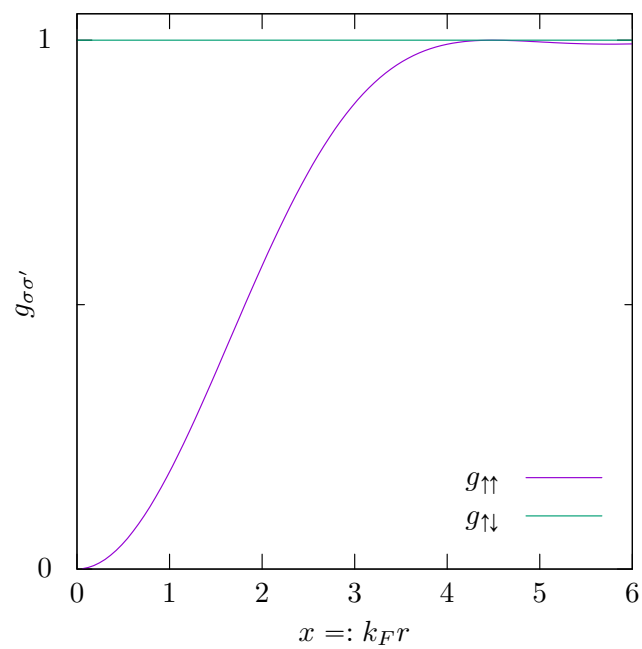


図 1 $g_{\sigma\sigma'}$ の分布

問 2

概要

本実験では Ni 基合金について残留抵抗 (0 K における抵抗) を測定し 2 流体モデルに基づいて解析を行うことで 3 元合金における不純物の \uparrow スピンと \downarrow スピンの残留抵抗率 ρ_{0i} ($i = \uparrow, \downarrow$) が求められた. その結果は図 2 のようになっており \uparrow スピンと \downarrow スピンで抵抗率が異なることがわかった.[3]

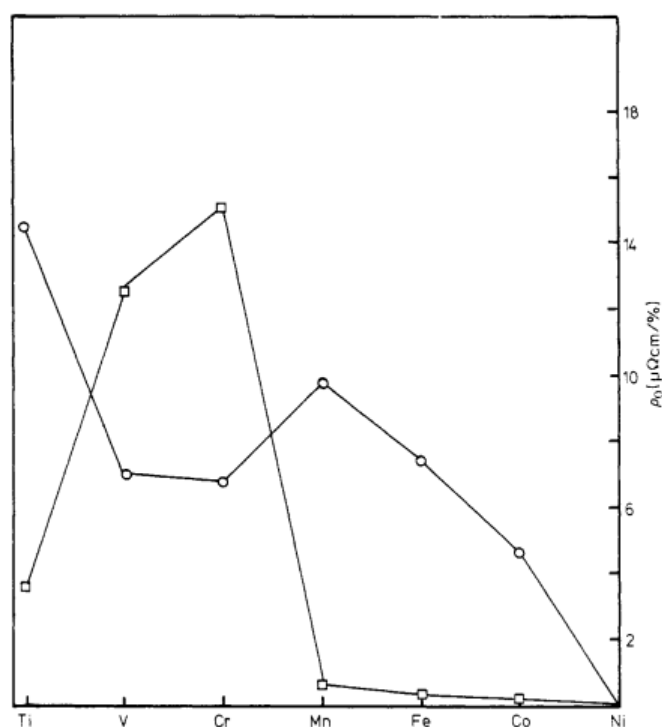


図 2 3 元合金における不純物の抵抗率 ($\rho_{0\uparrow}$, $\rho_{0\downarrow}$)[3]

原理

2 流体モデル

散乱機構が複数ある場合の抵抗率を表す法則として Matthiessen の法則が知られている. Matthiessen の法則では散乱機構 1 による抵抗率が ρ_1 , 機構 2 による抵抗率が ρ_2 であるとき, 全体の抵抗率は

$$\rho = \rho_1 + \rho_2 \quad (3)$$

として表される. これは抵抗を直列に接続した状態と対応して考えることができる.

一方で 2 流体モデルでは 1 種類の散乱機構に対して \uparrow スピンと \downarrow スピンが異なる抵抗率 ρ_{\uparrow} , ρ_{\downarrow}

を感じる場合を考える．これは図のように抵抗を並列に接続した状態と対応するため，抵抗率は

$$\rho = \frac{\rho_{\uparrow}\rho_{\downarrow}}{\rho_{\uparrow} + \rho_{\downarrow}} \quad (4)$$

となる．[4]

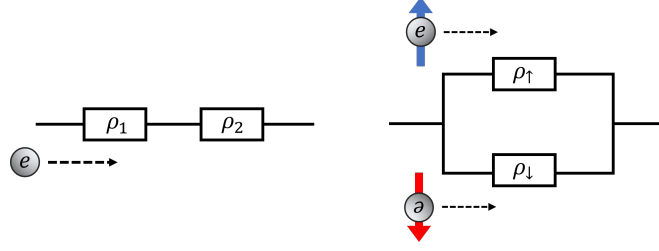


図3 Matthiessen の法則 (左), 2 流体モデル (右) の模式図

ρ_{\uparrow} , ρ_{\downarrow} の測定

Matthiessen の法則から 2 元合金 NiA_x (x / at%) の残留抵抗率は

$$\rho = \rho_0 + x\rho_A \quad (5)$$

と表され, x の異なる複数の 2 元合金について残留抵抗率を測定することで ρ_A が求まる．ただし ρ_0 は bulk の Ni の残留抵抗率, ρ_A は元素 A の at% あたりの残留抵抗率である．

一方で 3 元素合金 $\text{NiA}_{1-x}\text{B}_x$ の残留抵抗率 ρ_1 を Matthiessen の法則から求めると

$$\rho_1 = \rho_0 + (1-x)\rho_A + x\rho_B \quad (6)$$

と表される．ただし ρ_B は元素 B の at% あたりの残留抵抗率である．

一方で 2 流体モデルを用いて 3 元素合金の残留抵抗率 ρ_2 を計算すると, スピン s の電子が元素 A, B から感じる抵抗率を ρ_A^s , ρ_B^s とすると図のような回路に対応するので

$$\rho_2 = \rho_0 + \frac{\left((1-x)\rho_A^{\uparrow} + x\rho_B^{\uparrow}\right)\left((1-x)\rho_A^{\downarrow} + x\rho_B^{\downarrow}\right)}{(1-x)\rho_A^{\uparrow} + x\rho_B^{\uparrow} + (1-x)\rho_A^{\downarrow} + x\rho_B^{\downarrow}} \quad (7)$$

となる．ここで 2 流体モデルから

$$\rho_A = \frac{\rho_A^{\uparrow}\rho_A^{\downarrow}}{\rho_A^{\uparrow} + \rho_A^{\downarrow}}, \quad \rho_B = \frac{\rho_B^{\uparrow}\rho_B^{\downarrow}}{\rho_B^{\uparrow} + \rho_B^{\downarrow}} \quad (8)$$

また

$$\alpha_A = \frac{\rho_A^{\downarrow}}{\rho_A^{\uparrow}}, \quad \alpha_B = \frac{\rho_B^{\downarrow}}{\rho_B^{\uparrow}} \quad (9)$$

を用いて Matthiessen の法則と 2 流体モデルそれぞれから求めた残留抵抗率の差 $\Delta\rho = \rho_2 - \rho_1$ を求めると

$$\begin{aligned}
\Delta\rho &= \frac{\left((1-x)\rho_A^\uparrow + \rho_B^\uparrow\right)\left((1-x)\rho_A^\downarrow + x\rho_B^\downarrow\right)}{(1-x)\rho_A^\uparrow + x\rho_B^\uparrow + (1-x)\rho_A^\downarrow + x\rho_B^\downarrow} - ((1-x)\rho_A + x\rho_B) \\
&= \frac{(1-x)^2\rho_A^2\frac{(1+\alpha_A)^2}{\alpha_A} + x(1-x)\rho_A\rho_B\frac{(1+\alpha_A)(1+\alpha_B)(\alpha_A+\alpha_B)}{\alpha_A\alpha_B} + x^2\rho_B^2(1+\alpha_B)^2\alpha_A}{(1-x)\rho_A\frac{(1+\alpha_A)^2}{\alpha_A} + x\rho_B\frac{(1+\alpha_B)^2}{\alpha_B}} \\
&\quad - ((1-x)\rho_A + x\rho_B) \\
&= \frac{(1-x)^2\rho_A^2(1+\alpha_A)^2\alpha_B + \rho_A\rho_Bx(1-x)(1+\alpha_A)(1+\alpha_B)(\alpha_A+\alpha_B) + x^2\rho_B^2(1+\alpha_B)^2\alpha_A}{(1-x)\rho_A(1+\alpha_A)^2\alpha_B + x(\rho_B(1+\alpha_B)^2\alpha_A)} \\
&\quad - \frac{(1-x)^2\rho_A^2(1+\alpha_A)^2\alpha_B + x^2\rho_B^2(1+\alpha_B)^2\alpha_A + x(1-x)\rho_A\rho_B((1+\alpha_A)^2\alpha_B + (1+\alpha_B)^2\alpha_A)}{(1-x)\rho_A(1+\alpha_A)^2\alpha_B + x(\rho_B(1+\alpha_B)^2\alpha_A)} \\
&= \frac{(\alpha_A - \alpha_B)^2x(1-x)\rho_A\rho_B}{(1+\alpha_A)^2\alpha_B(1-x)\rho_A + (1+\alpha_B)^2\alpha_Ax\rho_B}
\end{aligned} \tag{10}$$

となる. 実際に 3 元合金の残留抵抗率の Matthiessen の法則からのズレを x の異なる合金について測定すると図 5 のようになる. (10) 式において ρ_A, ρ_B は 2 元合金の測定から既知であった. したがって α_A, α_B は図 5 を (10) 式で Fitting することで決定できる. この結果について (8) 式, (9) 式を連立することで各不純物の $\rho_\uparrow, \rho_\downarrow$ が求まる.[4][3]

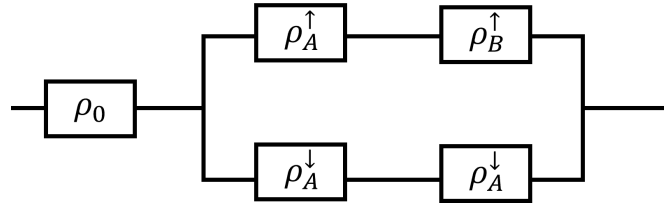


図 4 2 流体モデルでの 3 元素合金の抵抗率の計算

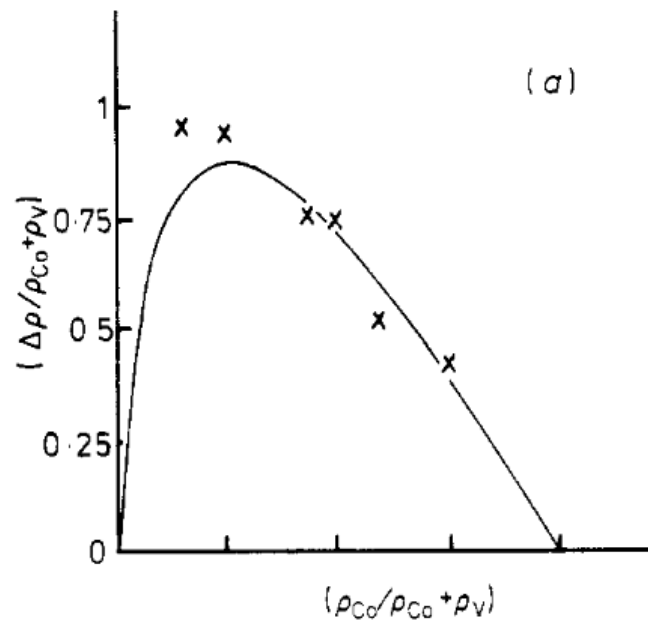


図 5 $NiCo_{1-x}V_x$ 合金の残留抵抗率の Matthiessen の法則からのズレ [3]

問 3

電荷は以下の連続の式を満たす.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (11)$$

ここで定常状態 ($\partial \rho / \partial t = 0$) とすると, $\mathbf{j}_s = \sigma_s / e \nabla \mu_s$ から

$$\begin{aligned} 0 &= \nabla \cdot \mathbf{j} \\ &= \nabla \cdot (\mathbf{j}_\uparrow + \mathbf{j}_\downarrow) \\ &= \frac{1}{e} \nabla^2 (\sigma_\uparrow \mu_\uparrow + \sigma_\downarrow \mu_\downarrow) \end{aligned} \quad (12)$$

したがって

$$\nabla^2 \sigma_\uparrow \mu_\uparrow = -\nabla^2 \sigma_\downarrow \mu_\downarrow \quad (13)$$

となる. また, 角運動量連続の式は以下の通りである.

$$\nabla \cdot \mathbf{j}'_\uparrow + \frac{d\rho'_\uparrow}{dt} = -\frac{\delta \rho'_\uparrow}{\tau_{\uparrow\downarrow}} + \frac{\delta \rho'_\downarrow}{\tau_{\downarrow\uparrow}} \quad (14)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{j}'_\downarrow + \frac{d\rho'_\downarrow}{dt} = -\frac{\delta \rho'_\downarrow}{\tau_{\downarrow\uparrow}} + \frac{\delta \rho'_\uparrow}{\tau_{\uparrow\downarrow}} \quad (15)$$

ここでスピン s の電荷の流れの式において Einstein 関係式を用いて

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_s &= \sigma_s \mathbf{E} + e D_s \nabla \delta n_s \\ &= -\sigma_s \nabla \phi + \frac{\sigma_s}{e N_s} \nabla \delta n \\ &= \frac{\sigma_s}{e} \nabla \left(\frac{\delta n}{N_s} - e \phi \right) = \frac{\sigma_s}{e} \nabla \mu_s \end{aligned} \quad (16)$$

したがって $\delta \rho'_s = \hbar / 2 \delta n$ から

$$\delta \rho'_s = \frac{\hbar}{2} N_s (\mu_s + e \phi) \quad (17)$$

また

$$\mathbf{j}'_s = \frac{\hbar \sigma_s}{2} \frac{\nabla \mu_s}{e^2} \quad (18)$$

を用いて (14) と (15) を定常状態 ($d\rho'/dt = 0$) とした上で両辺引くと

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\mathbf{j}'_\uparrow - \mathbf{j}'_\downarrow) &= -\frac{\hbar}{2e^2} \nabla^2 (\sigma_\uparrow \mu_\uparrow - \sigma_\downarrow \mu_\downarrow) \\ &= 2 \left(-\frac{\delta \rho'_\uparrow}{\tau_{\uparrow\downarrow}} + \frac{\delta \rho'_\downarrow}{\tau_{\downarrow\uparrow}} \right) \\ &= -\frac{\hbar N_\uparrow}{\tau_{\uparrow\downarrow}} (\mu_\uparrow + e \phi) + \frac{\hbar N_\downarrow}{\tau_{\downarrow\uparrow}} (\mu_\downarrow + e \phi) \end{aligned} \quad (19)$$

したがって

$$\frac{1}{2e^2} \nabla^2 (\sigma_{\uparrow} \mu_{\uparrow} - \sigma_{\downarrow} \mu_{\downarrow}) = \frac{N_{\uparrow}}{\tau_{\uparrow\downarrow}} (\mu_{\uparrow} + e\phi) - \frac{N_{\downarrow}}{\tau_{\downarrow\uparrow}} (\mu_{\downarrow} + e\phi) \quad (20)$$

ここで詳細釣り合い条件

$$\frac{N_{\uparrow}}{\tau_{\uparrow\downarrow}} = \frac{N_{\downarrow}}{\tau_{\downarrow\uparrow}} \quad (21)$$

を用いて

$$\begin{aligned} \frac{N_{\uparrow}}{\tau_{\uparrow\downarrow}} (\mu_{\uparrow} + e\phi) - \frac{N_{\downarrow}}{\tau_{\downarrow\uparrow}} (\mu_{\downarrow} + e\phi) &= \frac{N_{\uparrow}}{\tau_{\uparrow\downarrow}} (\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}) \\ &= \frac{N_{\downarrow}}{\tau_{\downarrow\uparrow}} (\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}) \end{aligned} \quad (22)$$

これと (13), (20), Einstein 関係式から

$$\begin{aligned} \frac{1}{e^2} \nabla^2 \mu_{\uparrow} \sigma_{\uparrow} &= \frac{N_{\uparrow}}{\tau_{\uparrow\downarrow}} (\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}) \\ &= \frac{\sigma_{\uparrow}}{\tau_{\uparrow\downarrow} e^2 D_{\uparrow}} (\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}) \end{aligned} \quad (23)$$

よって

$$\nabla^2 \mu_{\uparrow} = \frac{1}{\tau_{\uparrow\downarrow} D_{\uparrow}} (\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}) \quad (24)$$

同様に

$$-\nabla^2 \mu_{\downarrow} = \frac{1}{\tau_{\downarrow\uparrow} D_{\downarrow}} (\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}) \quad (25)$$

これらを両辺足して

$$\nabla^2 (\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}) = \left(\frac{1}{\tau_{\uparrow\downarrow} D_{\uparrow}} + \frac{1}{\tau_{\downarrow\uparrow} D_{\downarrow}} \right) (\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}) \quad (26)$$

となる.[5][6]

問 4

非平衡スピン密度の拡散方程式

$$D_0 \nabla^2 \delta \hat{\mathbf{m}}_i - \frac{1}{\tau_{\text{ex}}} \delta \hat{\mathbf{m}}_i \times \hat{\mathbf{n}}_i - \frac{\delta \hat{\mathbf{m}}_i}{\tau_{\text{sf}}} = n_0 \frac{\partial \hat{\mathbf{n}}_i}{\partial t} - \frac{\mu_B P}{e} (\mathbf{j}_e \cdot \nabla) \hat{\mathbf{n}}_i \quad (27)$$

において $\nabla^2 \delta \hat{\mathbf{m}}_i = 0$ とした上で $\hat{\mathbf{n}}_i \times$ をかけると

$$-\frac{1}{\tau_{\text{ex}}} \hat{\mathbf{n}}_i \times (\delta \hat{\mathbf{m}}_i \times \hat{\mathbf{n}}_i) + \frac{1}{\tau_{\text{sf}}} \delta \hat{\mathbf{m}}_i \times \hat{\mathbf{n}} = n_0 \hat{\mathbf{n}}_i \times \dot{\hat{\mathbf{n}}}_i - \frac{\mu_B P}{e} \hat{\mathbf{n}}_i \times (\mathbf{j}_e \cdot \nabla) \hat{\mathbf{n}}_i \quad (28)$$

ここで

$$\hat{\mathbf{m}}_i = \hat{\mathbf{m}}_{i0} + \delta \hat{\mathbf{m}}_{in} = n_0 \hat{\mathbf{n}}_i + \delta \hat{\mathbf{m}}_{in} \quad (29)$$

という定義から $\delta \hat{\mathbf{m}}_{in}$ と $\hat{\mathbf{n}}$ は直交している. したがって

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{n}}_i \times (\delta \hat{\mathbf{m}}_i \times \hat{\mathbf{n}}_i) &= (\hat{\mathbf{n}}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_i) \delta \hat{\mathbf{m}}_i - (\hat{\mathbf{n}}_i \cdot \delta \hat{\mathbf{m}}_i) \hat{\mathbf{n}}_i \\ &= \delta \hat{\mathbf{m}}_i \end{aligned} \quad (30)$$

となる. したがって

$$-\frac{1}{\tau_{\text{ex}}} \delta \hat{\mathbf{m}}_i + \xi \frac{1}{\tau_{\text{ex}}} \delta \hat{\mathbf{m}}_i \times \hat{\mathbf{n}} = n_0 \hat{\mathbf{n}}_i \times \dot{\hat{\mathbf{n}}}_i - \frac{\mu_B P}{e} \hat{\mathbf{n}}_i \times (\mathbf{j}_e \cdot \nabla) \hat{\mathbf{n}}_i \quad (31)$$

これを (27) 式と連立すると

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\tau_{\text{ex}}} \delta \hat{\mathbf{m}}_i + \xi \left(-\frac{\delta \hat{\mathbf{m}}_i}{\tau_{\text{sf}}} - n_0 \dot{\hat{\mathbf{n}}}_i + \frac{\mu_B P}{e} (\mathbf{j}_e \cdot \nabla) \hat{\mathbf{n}} \right) &= n_0 \hat{\mathbf{n}}_i \times \dot{\hat{\mathbf{n}}}_i - \frac{\mu_B P}{e} \hat{\mathbf{n}}_i \times (\mathbf{j}_e \cdot \nabla) \hat{\mathbf{n}}_i \\ \delta \hat{\mathbf{m}}_i \left(\frac{1}{\tau_{\text{ex}}} + \frac{\xi}{\tau_{\text{sf}}} \right) &= -\xi n_0 \dot{\hat{\mathbf{n}}}_i - n_0 \hat{\mathbf{n}}_i \times \dot{\hat{\mathbf{n}}}_i + \xi \frac{\mu_B P}{e} (\mathbf{j}_e \cdot \nabla) \hat{\mathbf{n}}_i + \frac{\mu_B P}{e} \hat{\mathbf{n}}_i \times (\mathbf{j}_e \cdot \nabla) \hat{\mathbf{n}}_i \end{aligned} \quad (32)$$

ここで

$$\frac{1}{\tau_{\text{ex}}} + \frac{\xi}{\tau_{\text{sf}}} = \frac{1 + \frac{\xi}{\tau_{\text{sf}}} \tau_{\text{ex}}}{\tau_{\text{ex}}} = \frac{1 + \xi^2}{\tau_{\text{ex}}} \quad (33)$$

から

$$\delta \hat{\mathbf{m}}_i = \frac{\tau_{\text{ex}}}{1 + \xi^2} \left(-\xi n_0 \dot{\hat{\mathbf{n}}}_i - n_0 \hat{\mathbf{n}}_i \times \dot{\hat{\mathbf{n}}}_i + \xi \frac{\mu_B P}{e} (\mathbf{j}_e \cdot \nabla) \hat{\mathbf{n}}_i + \frac{\mu_B P}{e} \hat{\mathbf{n}}_i \times (\mathbf{j}_e \cdot \nabla) \hat{\mathbf{n}}_i \right) \quad (34)$$

となる. 一方で sd 相互作用が局所磁化に及ぼすトルクは

$$\mathbf{T} = -\frac{1}{\tau_{\text{ex}}} \hat{\mathbf{n}}_i \times \hat{\mathbf{m}}_i \quad (35)$$

だったので (29) 式, (34) 式を用いると

$$\begin{aligned} \mathbf{T} &= -\frac{1}{\tau_{\text{ex}}} \hat{\mathbf{n}}_i \times (n_0 \hat{\mathbf{n}}_i + \delta \hat{\mathbf{m}}_i) \\ &= -\frac{1}{\tau_{\text{ex}}} \hat{\mathbf{n}}_i \times \delta \hat{\mathbf{m}}_i \end{aligned} \quad (36)$$

ここで $\dot{\hat{\mathbf{n}}}_i \perp \hat{\mathbf{n}}_i$ なので

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{n}}_i \times (\hat{\mathbf{n}}_i \times \dot{\hat{\mathbf{n}}}_i) &= (\hat{\mathbf{n}}_i \cdot \dot{\hat{\mathbf{n}}}_i) \hat{\mathbf{n}}_i - (\hat{\mathbf{n}}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_i) \dot{\hat{\mathbf{n}}}_i \\ &= -\dot{\hat{\mathbf{n}}}_i \end{aligned} \quad (37)$$

より

$$\mathbf{T} = \frac{1}{1 + \xi^2} \left(\xi n_0 \hat{\mathbf{n}}_i \times \dot{\hat{\mathbf{n}}}_i - n_0 \dot{\hat{\mathbf{n}}}_i - \xi \frac{\mu_B P}{e} \hat{\mathbf{n}}_i \times (\mathbf{j}_e \cdot \nabla) \hat{\mathbf{n}}_i - \frac{\mu_B P}{e} \hat{\mathbf{n}}_i \times (\hat{\mathbf{n}}_i \times (\mathbf{j}_e \cdot \nabla) \hat{\mathbf{n}}_i) \right) \quad (38)$$

となる.

参考文献

- [1] 能崎幸雄. スピンエレクトロニクス 第 4 回 (2) 交換相互作用. <https://keio.app.box.com/s/evzo6zvhu5rentcw7ibe0lncgw1vrs1>. (Accessed on 07/16/2022).
- [2] 田口幸広. Hartree-fock 方程式. <http://www.ms.osakafu-u.ac.jp/~taguchi/densi/3rd.pdf>. (Accessed on 07/16/2022).
- [3] A Fert and I A Campbell. Electrical resistivity of ferromagnetic nickel and iron based alloys. *Journal of Physics F: Metal Physics*, Vol. 6, No. 5, pp. 849–871, May 1976.
- [4] 宮崎照宣, 土浦広紀. スピントロニクスの基礎, pp. 124–132. 共立出版, 2013.
- [5] 能崎幸雄. スピンエレクトロニクス 第 10 回 (1) スピン蓄積. <https://keio.app.box.com/s/dv2z0he7miwmzmz1vddgy15mospy5aax>. (Accessed on 07/16/2022).
- [6] 齊藤英治, 村上修一. スピン流とトポロジカル絶縁体: 量子物性とスピントロニクスの発展, pp. 34–37. 共立出版, 2014.