

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成24年 6月 1日現在

機関番号：13801

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2008～2011

課題番号：20710076

研究課題名（和文）電子伝導素子に代わるスピン波束伝播型局在スピン素子の理論的研究

研究課題名（英文）Theoretical study of localized spin devices with spin-wave-packet propagation to replace electron conduction devices

研究代表者

古門 聡士 (KOKADO SATOSHI)

静岡大学・工学部・准教授

研究者番号：50377719

研究成果の概要（和文）：

スピン波束伝播の持続を妨げるスピン緩和について理論的研究を行った。特に、スピン緩和の起源であるスピン-原子振動相互作用 V_{SA} の表式の導出および V_{SA} による遷移確率(スピン緩和時間の逆数)の計算を行った。ここでスピン波束とは、連なった磁気モーメントの一部が傾いた励起状態である。また、スピン緩和は励起状態から基底状態への遷移を表し、 V_{SA} による遷移確率が小さいほど波束は存在しやすい。

研究成果の概要（英文）：

We theoretically studied the spin relaxation which suppressed the sustainability of the spin-wave-packet propagation. In particular, we derived an expression of the spin-atomic vibration interaction, V_{SA} , which was an origin of the spin relaxation, and calculated the transition probability due to V_{SA} (i.e., the reciprocal spin relaxation time). Here, the spin-wave-packet corresponds to an excited state, in which a part of spin moment is canted in a crystal with an ordered spin state. In addition, the spin relaxation represents the transition from the excited state to the ground state. As the transition probability due to V_{SA} becomes smaller, the spin-wave-packet has more possibility to propagate.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	800,000	240,000	1040,000
2009年度	500,000	150,000	650,000
2010年度	700,000	210,000	910,000
2011年度	500,000	150,000	650,000
年度			
総計	2500,000	750,000	3250,000

研究分野：複合新領域

科研費の分科・細目：ナノ・マイクロ科学・ナノ構造科学

キーワード：局在スピン系，スピン緩和，スピン-原子振動相互作用，スピン-フォノン相互作用，スピン-電気双極子相互作用，スピン-軌道相互作用，結晶場，理論

1. 研究開始当初の背景

我々の日常生活に深く関わりを持つメモ

リ，センサなどの電子デバイスは電子の伝導現象を利用した素子からなる。代表的な現象

はトンネル効果, 磁気抵抗効果, クーロンブロッケードなどである. 現在これらの素子では大容量・省エネルギーデバイスに向けた超微細化(ナノスケール化)・低エネルギー化が強く求められている. しかし現状は電流密度増大(素子面積減少が起因)による素子破壊, さらには高電圧(平均エネルギー: 約 2eV)といった解決すべき課題が残っている(図1). これらの解決に向けて, 最近では新材料, 新概念の提案が盛んに行われている. ただし電子伝導といった枠からはほとんど出ていないように思われる.

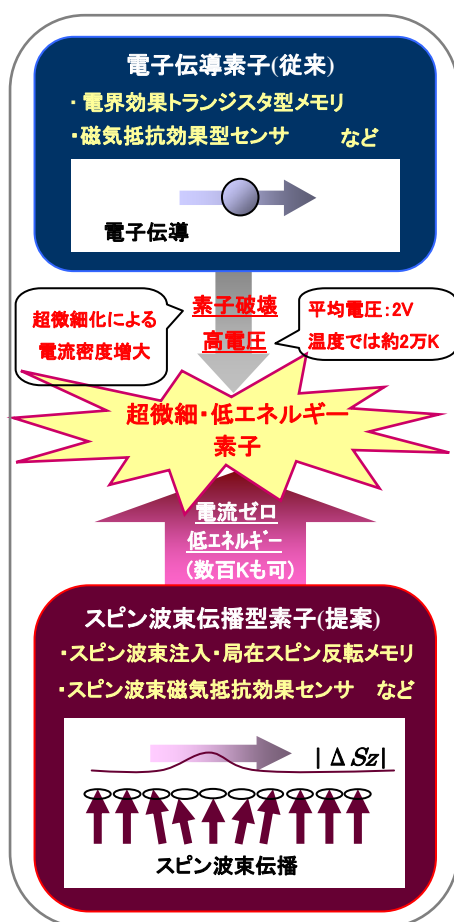


図1. 従来素子と提案素子. $|\Delta S_z|$ はスピンの縦成分の変化分の大きさを表す.

一方, 一部の磁性体では電磁波(物質によってはエネルギー0.01 eV以下も可)の局所的な適用によりスピン波束の伝播が引き起こされることが知られている. ここでスピン波束とは, 連なった磁気モーメントの一部が傾いた励起状態であり, 伝播の際, 電

子の移動は伴わない(図1). 最近では, 非一様磁場下のフェリ磁性体イットリウム鉄ガーネット(バルクに近い系)でポテンシャル障壁によるスピン波束のトンネル伝播効果が実験で観測された[U. Hansen *et al.*, Phys. Rev. Lett. **99**, 127204 (2007)]. また関連現象に対して, 古典スピン系に基づく理論も提案されている. しかしナノスケールの系に相当する量子スピン系に関しては, ナノ磁石の研究は盛んなものの, スピン波束の伝播・緩和特性, さらにそれを用いた素子の提案はほとんど報告されていない.

2. 研究の目的

本研究の目的は, 電子伝導素子の素子破壊・高消費エネルギーの問題の解決を目指して局在量子スピン系(絶縁体)のスピン波束伝播に関する理論的研究を行うことである. 特に今回は, スピン波束伝播の持続に最も大きな影響を与え得るスピン緩和に注目する. ここでスピン緩和とは, スピン系が励起状態(スピン波束状態)から基底状態へ落ち着く現象であり, スピン緩和によりスピン波束の消滅が起こる. このスピン緩和の一因として原子振動(磁性イオンの振動)の関与が考えられていたが, その理論的研究はあまり進んでいなかった. そこで本研究では, スピン緩和の起源である, スピン-原子振動相互作用の導出とそれによる遷移確率の計算を行った[雑誌論文②,③参照].

3. 研究の方法

ここでは, 基板上に吸着した磁性イオンの系を考える. この系は結晶場中の単一磁性イオンのモデルとして記述され得る. このモデルに対して, 一次と二次の摂動論を用いてスピン-原子振動相互作用 V_{SA} を導出した. 具体的には, 磁性イオンに対し, 結晶場エネルギー V_c を無摂動項, スピン軌道相互作用 H_{so} および原子振動による V_c の変化 ΔV_c を摂動項として, 一次と二次の摂動エネルギーを求めた. さらに時間に依存した摂動論により, V_{SA} による遷移確率の計算を行った.

4. 研究成果

配位子(負電荷)による結晶電場中の単一磁性イオンの模型に対して、(1) V_{SA} の一般式の導出、(2) 実際の材料に対する $|V_{SA}|$ の評価、(3) 実際の材料に対する遷移確率の計算を行った。

結果として、 V_{SA} は、スピン軌道相互作用を通して「スピン」と「電子分極」が関係付けられ、「スピン」と「電子分極をもたらす原子振動」が結合することを表す。さらに、 V_{SA} と従来のスピンフォノン相互作用を比べることで、 V_{SA} が支配的になる振動数領域があることを示す。本研究により、電子分極がスピン原子振動結合の中で重要な役割を果たすことが初めて明らかになった。

詳細は次の通りである。

(1) V_{SA} の一般式の導出

V_{SA} は「局在スピン $S=(S_x, S_y, S_z)$ 」がスピン軌道相互作用を通して「振動している磁性イオンの軌道」と結びつくことを表す。ここで重要なことは磁性イオンの軌道は振動により変形することである(図2)。詳しく言うと、配位子(負電荷)による電場中で磁性イオンが振動する際、磁性イオンの原子核(正電荷)と電子(負電荷)の間では振動変位に差 Δr が生じる。要するに、振動により磁性イオン内に電子分極が起こる。

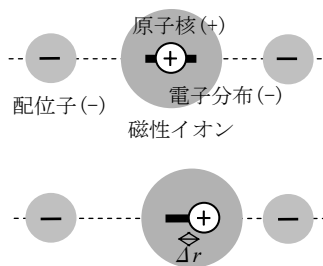


図2. 配位子による結晶電場中の磁性イオンの電子分極。磁性イオンの原子核は正電荷、電子は負電荷、配位子は負電荷を持つ。上図：平衡位置。下図：磁性イオンの振動により電子分極が生じる。 Δr は原子核と電子の振動変位の差を表す。

上記の振動変位の差 Δr は $\Delta r = -\eta \Delta r_n$ として記述され得る。ここで、 Δr_n は原子核の振動変位、 η は原子核と電子の振動変位の差の程度を表す無次元量である。この η の表式は配位子場中の原子内電子の模型を用いて解析的に求められる[雑誌論文②]。

この Δr を考慮に入れた H_{so} と ΔV_c を摂動項として、上記3に記した方法で摂動計算を行った。特にここでは、一次と二次の摂動エネルギーをもとめた。このエネルギーの中の支配的な項を V_{SA} とするとき、 V_{SA} は次式のようになる。

$$V_{SA} = [AS_z^2 + B(S_x S_z + S_z S_x) + C(S_y S_z + S_z S_y)] (a + a^\dagger) \quad (1)$$

ただし、 $a^\dagger(a)$ は磁性イオンの振動の生成(消滅)演算子である。また、 A, B, C はエネルギーの次元を持つ定数であり、 $|A| > |B| > |C|$ の関係がある。 A, B, C は全て η に比例しており、 Δr が V_{SA} の出現に不可欠であることがわかる。

なお、上記の電子分極を電気双極子モーメントを用いて表すとき、 V_{SA} はスピン電気双極子相互作用として書き換えられる。この相互作用は、磁性と誘電性を結びつけており、マルチフェロイック特性の一つと考えられる。

(2) 実際の材料に対する $|V_{SA}|$ の評価

実際の材料として CuN 基板上の Fe イオン [Hirjibehedin *et al.*, *Science* **317** (2007) 1199.] を考えた。結果は次のとおりである。

① η の評価

CuN イオンの電荷と Fe イオンの有効核電荷等を η の表式[雑誌論文②]に代入することで、 η を $\eta = 0.05$ と評価した。

② V_{SA} の評価

次に $\eta = 0.05$ を用いて、 V_{SA} の値を評価した(図3)。その結果、原子の振動数 f が $10^2 \text{ THz} < f < 10 \text{ THz}$ のとき、 V_{SA} は $10^{-7} \text{ eV} < |V_{SA}| < 10^{-4} \text{ eV}$ であることが分かった。ここで、磁性イオンそのものが持つ1軸性の異方性エネルギーの大きさを $|D|$ (CuN

基板上的 Fe イオンでは $|D|=1.5 \text{ meV}$ とするとき、 $10^{-5} < |V_{SA}/D| < 10^{-1}$ となる。

また、 V_{SA} と従来のスピンフォノン (格子振動) 相互作用 V_{SP} との比較も行った。ここで V_{SP} の格子振動に関しては、格子を構成する 1 つの振動子が 1 つのユニットセル (磁性イオンと周囲イオンから成る) であると仮定された。結果として、 $f < 1 \text{ THz}$ では $|V_{SA}| > |V_{SP}|$ であり、 $f > 1 \text{ THz}$ では $|V_{SA}| < |V_{SP}|$ になることが分かった。この大小関係は主に次の 2 点で説明された。

- V_{SA} , V_{SP} はそれぞれ $|V_{SA}| \propto 1/f^{1/2}$, $|V_{SP}| \propto f^{1/2}$ の関係をもち、 f の減少とともに $|V_{SA}|$ は増大、 $|V_{SP}|$ は減少する。
- $|V_{SA}|$ と $|V_{SP}|$ は、振動子の質量が小さいほど大きくなる。これは振動子の質量の減少と共に振動変位が増大することに起因する。ここで、 V_{SA} の振動子は磁性イオン、 V_{SP} の振動子は 1 つのユニットセル (磁性イオンと周囲イオンから成る全イオン) であり、 V_{SA} の方が振動子の質量が小さい。

以上のような f 依存性と振動子の質量の関係を主な理由として、低 f 領域では $|V_{SA}| > |V_{SP}|$ が得られた。この関係は、低 f 領域では V_{SA} によるスピン緩和が支配的であることを表す。

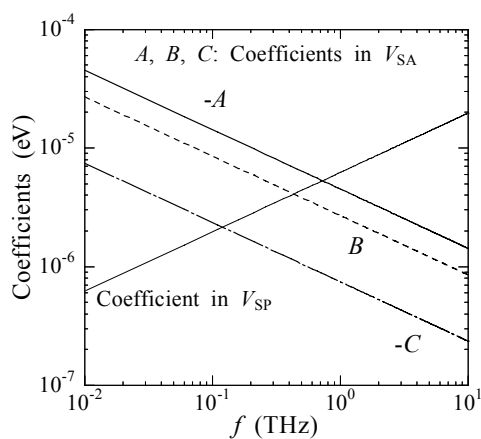


図3. 式(1)の V_{SA} の係数 A , B , C の磁性イオン振動数 (f) 依存性。また、スピンフォノン相互作用 V_{SP} の係数の f 依存性も示す。

(3) 実際の材料に対する遷移確率の計算

(2)と同様、実際の材料として CuN 基板上的 Fe イオンを考える。この系はスピンの大きさが $S=2$ であり、1 軸性の異方性エネルギー $-|D|S_z^2$ を持つ。したがって、エネルギー準位の間隔は $3|D|$ と $|D|$ となる (図 4)。この系に対して、基底状態と励起状態間の V_{SA} による遷移確率 W を計算した。 W の原子振動エネルギー $\hbar\omega$ 依存性については、 $\hbar\omega = 2|D|$ のオフ・レゾナンスの場合は $W=10^3 \text{ s}^{-1}$ であり、 $\hbar\omega = 3|D|$ のオン・レゾナンスの場合は $W=10^{16} \text{ s}^{-1}$ となった。また、スピン緩和時間 τ は、大雑把に書くと $\tau=1/W$ であることから、オフ・レゾナンスのときは $\tau=10^{-3} \text{ s}$ 、オン・レゾナンスのときは $\tau=10^{-16} \text{ s}$ になる。

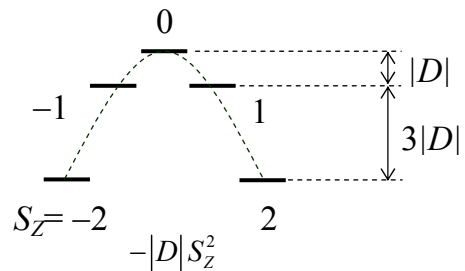


図4. 1軸性の異方性エネルギー $-|D|S_z^2$ のエネルギー準位。ただし、 $S=2$ の場合。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 7 件)

- ① Satoshi Kokado, Masakiyo Tsunoda, Kikuo Harigaya, and Akimasa Sakuma
Anisotropic Magnetoresistance Effects in Fe, Co, Ni, Fe₄N, and Half-Metallic Ferromagnet: A Systematic Analysis
J. Phys. Soc. Jpn. **79** (2012) 024705-1 - 024705-17. 査読有り
<http://ir.lib.shizuoka.ac.jp/handle/10297/6372>
- ② Satoshi Kokado, Kikuo Harigaya, and Akimasa Sakuma
Spin-atomic vibration interaction and spin-flip Hamiltonian of a single atomic spin in a crystal field
J. Phys. Soc. Jpn. **79** (2010) 114721-1 - 114721-24. 査読有り
<http://ir.lib.shizuoka.ac.jp/handle/10297/5404>
- ③ Satoshi Kokado, Kikuo Harigaya, and Akimasa Sakuma

Anisotropy energy, spin-atomic vibration interaction, and spin-flip Hamiltonian of a single atomic spin system: application to iron ion

phys. stat. solidi (c) **7** No. 11 - 12 (2010) 2612 - 2615. 査読有り

- ④ Masakiyo Tsunoda, Hirokazu Takahashi, Satoshi Kokado, Yosuke Komasaki, Akimasa Sakuma, and Migaku Takahashi
Anomalous Anisotropic Magnetoresistance in Pseudo Single Crystal γ' -Fe₄N Films
Appl. Phys. Express **3** (2010) 113003-1 - 113003-3. 査読有り
- ⑤ Satoshi Kokado, Kikuo Harigaya, and Akimasa Sakuma
Switching of a single atomic spin induced by spin injection: Effect of spin relaxation
phys. stat. solidi (c) **6** No. 10 (2009) 2113 - 2118. 査読有り
- ⑥ Satoshi Kokado, Kikuo Harigaya, and Akimasa Sakuma
Switching of a single atomic spin induced by spin injection: A model calculation
Proc. of the 9th Int. Symp. on Foundations of Quantum Mechanics in the Light of New Technology - ISQM-TOKYO'08 (2009) 142 - 145. 査読有り
- ⑦ Masakiyo Tsunoda, Yosuke Komasaki, Satoshi Kokado, Shinji Isogami, Che-Chin Chen, and Migaku Takahashi
Negative Anisotropic Magnetoresistance in Fe₄N Film
Appl. Phys. Express **2** (2009) 083001-1 - 083001-3. 査読有り

[学会発表] (計 19 件)

- ① Satoshi Kokado, Masakiyo Tsunoda, Kikuo Harigaya, and Akimasa Sakuma
Anisotropic Magnetoresistance Effects in Fe, Co, Ni, Fe₄N, and Half-Metallic Ferromagnet: A Systematic Analysis
American Physical Society March Meeting, 2012 年 2 月 29 日
Boston, Massachusetts, USA
- ② Satoshi Kokado, Masakiyo Tsunoda, Kikuo Harigaya, and Akimasa Sakuma
Anisotropic Magnetoresistance Effects in Fe, Co, Ni, Fe₄N, and Half-Metallic Ferromagnet: A Systematic Analysis
International Workshop for Group-IV Spintronics, 2012 年 1 月 20 日
Osaka University, Toyonaka, Japan
- ③ 古門聡士, 角田匡清, 針谷喜久雄, 佐久間昭正
種々の強磁性体の異方性磁気抵抗効果の理論的研究
日本物理学会, 2011 年 9 月 19 日
富山大学五福キャンパス

- ④ Masakiyo Tsunoda, Satoshi Kokado, Yosuke Komasaki, Shinji Isogami, Hirokazu Takahashi, Akimasa Sakuma, Migaku Takahashi
Negative Spin Polarization and Magneto-Transport Properties of γ' -Fe₄N Thin Films
5th International Workshop on Spin Currents, 2011 年 7 月 26 日
Sendai, Japan
- ⑤ Satoshi Kokado, Kikuo Harigaya, and Akimasa Sakuma
Spin-Atomic Vibration Interaction, and Spin-Flip Hamiltonian of a Single Atomic Spin in a Crystal Field
16th International Symposium on Intercalation Compounds, 2011 年 5 月 23 日
Seč-Ústupy, Czech Republic
- ⑥ Satoshi Kokado, Kikuo Harigaya, and Akimasa Sakuma
Anisotropy Energy, Spin-Atomic Vibration Interaction, and Spin-Flip Hamiltonian of a Single Atomic Spin in a Crystal Field
American Physical Society March Meeting, 2011 年 3 月 22 日
Dallas, Texas, USA
- ⑦ Satoshi Kokado, Kikuo Harigaya, and Akimasa Sakuma
Spin-Atomic Vibration Interaction, and Spin-Flip Hamiltonian of a Single Atomic Spin in a Crystal Field
The Third International Workshop on Dynamics and Manipulation of Quantum Systems, 2011 年 2 月 15 日
University of Tokyo, Hongo, Japan
- ⑧ Masakiyo Tsunoda, Hirokazu Takahashi, Satoshi Kokado, Tetsuya Nakamura, Yosuke Komasaki, and Migaku Takahashi
AMR and XMCD Study of Pseudo Single Crystal γ' -Fe₄N Films
International Conference of AUMS 2010, 2010 年 12 月 6 日
Jeju Island, Korea
- ⑨ Masakiyo Tsunoda, Hirokazu Takahashi, Satoshi Kokado, Yosuke Komasaki, Migaku Takahashi
Anisotropic magnetoresistance effect in pseudo single crystal γ' -Fe₄N films
55th Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials, 2010 年 11 月 17 日
Atlanta, Georgia, USA
- ⑩ 古門聡士, 針谷喜久雄, 佐久間昭正
単一原子スピン系のスピナー原子振動相互作用 II
日本物理学会, 2010 年 9 月 25 日
大阪府立大学中百舌鳥キャンパス
- ⑪ 角田匡清, 高橋宏和, 古門聡士, 駒崎洋亮, 高橋研

γ' -Fe₄N 擬単結晶薄膜の異方性磁気抵抗効果

日本磁気学会, 2010年9月6日
つくば国際会議場

- ⑫ Masakiyo Tsunoda, Yosuke Komasaki, Shinji Isogami, Satoshi Kokado, Migaku Takahashi
Negative Spin Polarization and Magnetoresistance Effects of γ' -Fe₄N Thin Films

The 2nd International Symposium on Advanced Magnetic Materials and Applications, 2010年7月13日
Sendai, Japan

- ⑬ 角田匡清, 駒崎洋亮, 古門聡士, 磯上慎二, 陳哲勤, 高橋研
 γ' -Fe₄N 薄膜の負のスピン分極と磁気抵抗効果

日本金属学会, 2010年3月29日
筑波大学筑波キャンパス

- ⑭ 古門聡士, 針谷喜久雄, 佐久間昭正
スピン量子ドットにおけるスピン注入局在量子スピン反転: 模型計算
日本物理学会, 2009年9月25日
熊本大学黒髪キャンパス

- ⑮ 角田匡清, 駒崎洋亮, 古門聡士, 磯上慎二, 陳哲勤, 高橋研
Fe₄N 薄膜の負の異方性磁気抵抗効果～少数スピン伝導の証拠～
日本磁気学会, 2009年9月13日
長崎大学文教キャンパス

- ⑯ Satoshi Kokado, Kikuo Harigaya, and Akimasa Sakuma
Spin-atomic vibration interaction and spin-flip Hamiltonian of a single atomic spin
Trends in Nanotechnology Conference, 2009年9月9日
Barcelona, Spain

- ⑰ 古門聡士, 針谷喜久雄, 佐久間昭正
単一原子スピンのスピン-原子振動相互作用
日本物理学会, 2008年9月22日
岩手大学上田キャンパス

- ⑱ Satoshi Kokado, Kikuo Harigaya, and Akimasa Sakuma
A Localized Quantum Spin Reversal by Spin Injection in A Spin Quantum Dot: Effect of Spin Relaxation
Trends in Nanotechnology Conference, 2008年9月3日
Oviedo, Spain

- ⑲ Satoshi Kokado, Kikuo Harigaya, and Akimasa Sakuma
Theoretical Study of A Localized Quantum Spin Reversal by The Spin Injection in A Spin Quantum Dot: A Data Writing Method for A Single-Atom Memory
The 9th International Symposium on Foundations of Quantum Mechanics in the

Light of New Technology (ISQM-Tokyo '08),
2008年8月25日

Hitachi Ltd., Advanced Research Laboratory,
Saitama, Japan

[その他]

ホームページ等

<http://www.ipc.shizuoka.ac.jp/~tskokad/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

古門 聡士 (KOKADO SATOSHI)
静岡大学・工学部・准教授
研究者番号: 50377719

(2) 研究分担者

()

研究者番号:

(3) 連携研究者

()

研究者番号: