



早稲田大学 先端生命医科学センター
Center for Advanced Biomedical Sciences, Waseda University

磁気物性・磁気光学の基礎と応用 (3)

佐藤勝昭

(独)科学技術振興機構

特別講義・スケジュール

- 第1回(12/18)

- 1.磁性の基礎

- 2.磁気光学概説

- 第2回(12/25)

- 第1回の復習

- 3.磁気ヒステリシスの謎

- 第3回(1/29)

- 第2回の復習

- 4.磁気光学の基礎

- 第4回(2/9)

- 第3回の復習

- 5.磁気光学の応用

- 6.磁気共鳴の基礎と応用

第2回の復習

「ヒステリシスの謎」復習



磁性体を特徴づける磁気ヒステリシス

- バルクの磁性体の磁化曲線は磁区を考えて初めて説明できます。しかし、磁性薄膜の場合、単磁区磁性体のナノ粒子から構成されると、磁区に分かれていなくてもヒステリシスが見られるのです。実際、ハードディスクには、単磁区ナノ粒子からなる磁気記録媒体が使われています。
- 実は、ヒステリシスのもとになっているのは**磁気異方性**なのです。特に最近のハードディスクは垂直磁気記録方式なので、垂直磁気異方性をもつ媒体材料が求められます。
- **保磁力**には磁気異方性が関わっているのですが、それだけでは説明できません。磁壁の核発生や、磁壁移動のピン止めなどが関わっているのです。磁気記録媒体や永久磁石の開発では、磁気異方性の高い材料を探索するとともに核発生や磁壁移動を抑えるための技術的な工夫が行われています。
- ここでは磁気異方性や保磁力の起源を解き明かす作業を通じて磁気ヒステリシスのナゾに迫ります。

かたい磁性体とやわらかい磁性体

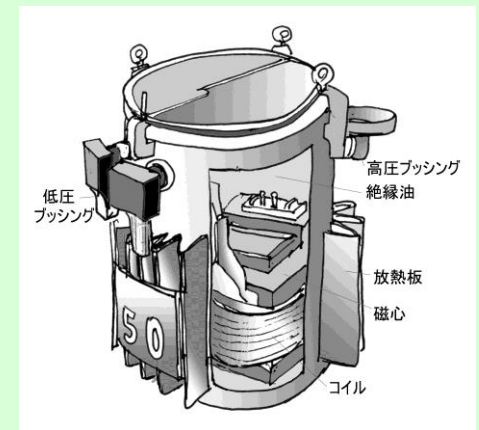
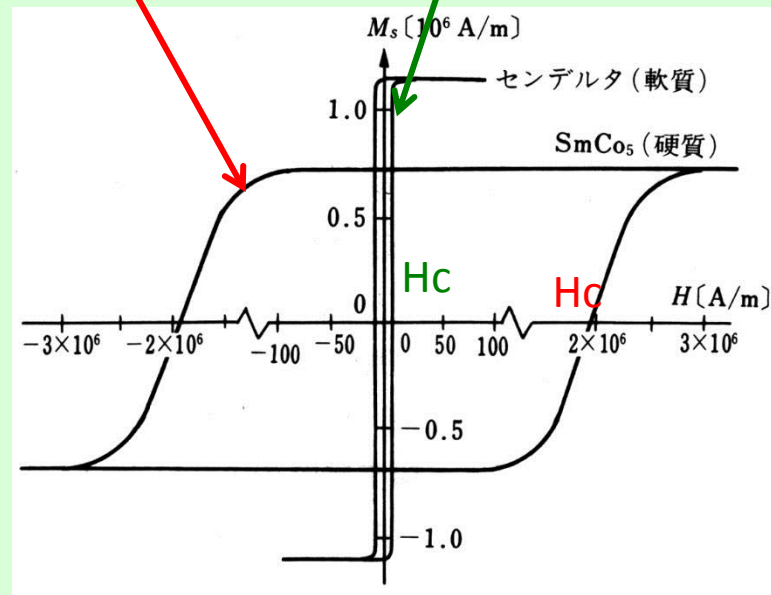
かたい磁性体

- 永久磁石・磁気記録媒体
- $(BH)_{max}$ が性能を表す
- H_c が大きいほどよい



軟らかい磁性体

- 電磁石や変圧器の磁心
- 初透磁率 μ_r が性能を表す
- H_c が小さく M_s が大きい程よい



磁気ヒステリシス曲線

- 図3.1は、磁性体の磁化 M を磁界 H に対して描いた磁化曲線です。消磁状態($H=0$, $M=0$)に磁界 H を加え増加したときの磁化 M の変化を初磁化曲線と呼びます。
- 磁化はこの曲線に沿って増加し、ついには飽和します。いったん飽和したあと、磁界を減じるともとには戻らず、図の矢印で示すようなループを描きます。
- このように、外場をプラスからマイナスに変化させたときとマイナスからプラスに変化させたときで径路が異なりループが生じる現象をヒステリシスといいます

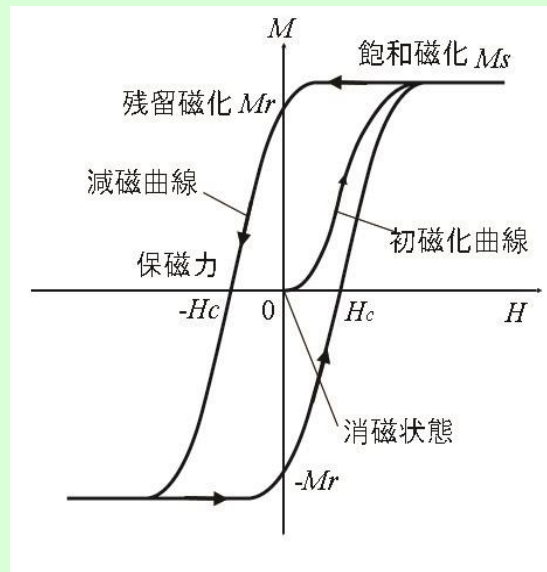
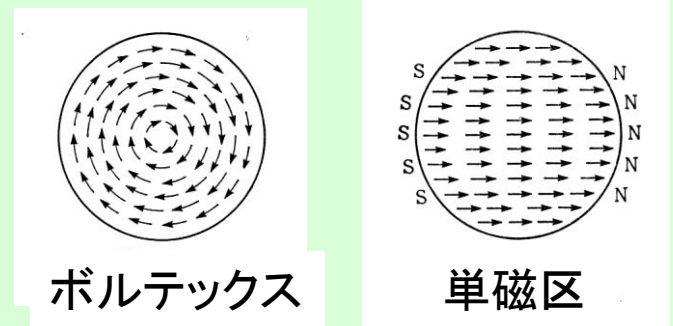
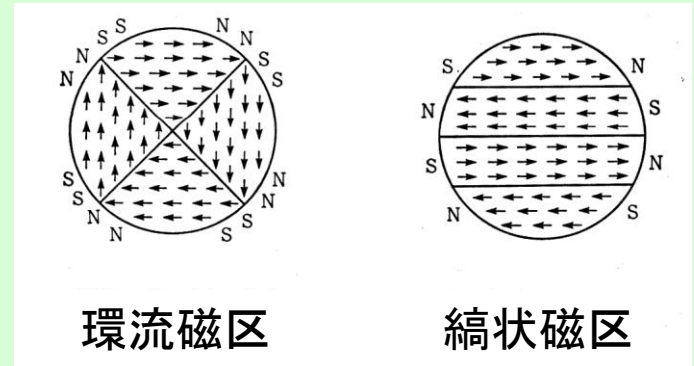


図3.1 強磁性体の典型的な磁化曲線

初磁化状態

- 強磁性体は自発磁化をもちますが、初磁化状態では磁化がゼロです。
- 磁区に分かれることによって、反磁界を打ち消し、磁化を安定に保ちます。
- 縞状磁区、環流磁区、ボルテックスなどさまざまな磁区が存在します。
- 100nmより小さいドットでは単磁区になります。



初磁化曲線と磁区

- 図のAにおいては、反磁界による静磁エネルギーを小さくしようとして磁区に分かれ全体の磁化がゼロになっています。
- 磁化容易方向に磁界を加えると、初磁化曲線のB点に相当する磁界 H_B より弱い磁界の場合、磁化は磁界とともに緩やかに増加しますが、磁界をゼロにすると磁化はゼロに戻ります。
- H_B より大きな磁界を加えると、磁化曲線は急に立ち上がり、磁化は非可逆的に変化します。磁壁がポテンシャル障壁を越えて移動すると磁界を減じても元に戻りません。この領域を**不連続磁化範囲**といいます。
- 磁界が H_C を超えると、磁化の増加が緩やかになります。この領域では磁区内の磁化が回転しているので、**回転磁化範囲**といいます。
- 最後は、全体の磁化が同じ方向を向きます。これを磁氣的に飽和したといいます。

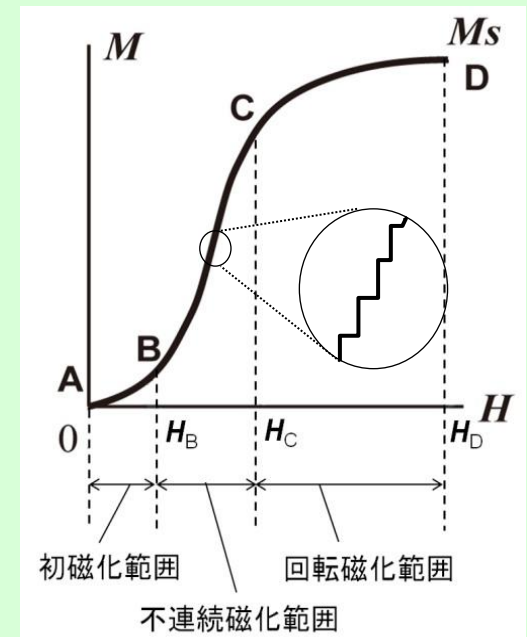


図3.4 初磁化曲線

カー効果で見る磁区の変化

- 初磁化状態では磁区に分かれ全体の磁化がゼロになっています。これを磁気光学効果による磁区イメージで表したのが図3.5(a)です。
- 磁化曲線A→Bの変化(初磁化範囲)は図(b)に示すように磁壁が動いて、磁界の方向の磁区が広がるとして説明できます。
- B→Cの磁化曲線の急な立ち上がりの領域では、図(c)に示すように磁壁は非可逆的に移動します。
- 磁界が H_C を超える領域では図(d)に示すように磁区内の磁化が回転します。
- 磁化の飽和は、図(e)に示すような単一磁区になったことに対応します。
- 初磁化曲線をたどっていったん飽和したあと、磁界を取り去っても、図3.1に示すように磁化は0に戻りません。磁化は有限の値をもちます。このときの磁化を残留磁化といい、 M_r と書きます。

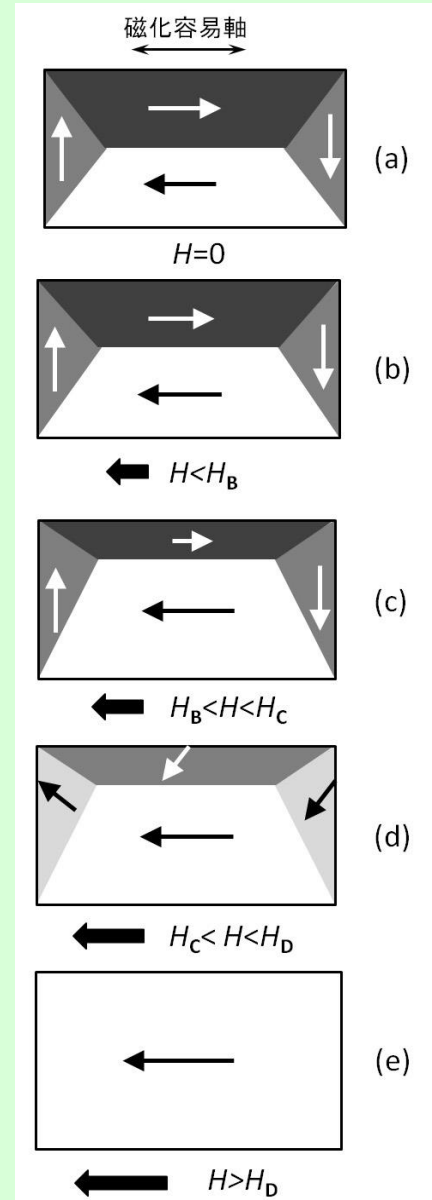


図3.5 初磁化曲線の磁壁移動・磁化回転による説明

磁気異方性

- 磁性体が初磁化曲線や磁気ヒステリシス曲線のような不可逆な磁化過程を示す原因のうち最も重要な原因は磁気異方性(magnetic anisotropy)です。
- 強磁性体は、その形状や結晶構造・原子配列に起因して、磁化されやすい方向(磁化容易方向)を持ちます。これを磁気異方性と呼びます。

結晶磁気異方性

磁化容易方向を向いている磁気モーメントを磁化困難方向に向けるのに必要なエネルギーのことを異方性エネルギーとよびます。

一軸異方性の磁性体に磁化容易方向から角度 θ だけ傾けて外部磁界を加えたときの異方性エネルギー E_u は、

$$E_u = K_u \sin^2 \theta \quad (3.1)$$

で与えられます。

K_u は異方性定数で、単位は $[J/m^3]$ です。

異方性エネルギーを θ の関数として表したのが図3.9です。

$K_u > 0$ のとき異方性エネルギーは $\theta = 0^\circ$, $\pm 180^\circ$ ($[100]$ 方向)のとき極小値を取り、 90° , -90° ($[110]$ 方向)で極大値をとります。

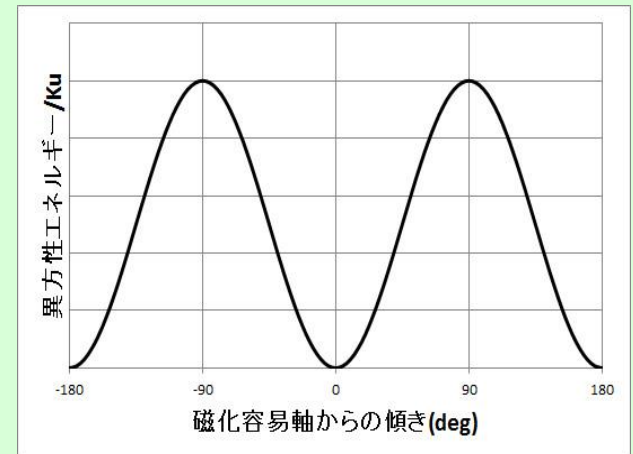


図3.9 磁化容易軸からの傾きと磁気異方性エネルギーの関係

Feは立方晶で等方的なのに、磁化曲線の折れ曲がりかたが結晶方位によって違うわけ

H//[100]の場合

- 磁壁移動のしかたが方位によって異なるのです。[100]方向に磁界を加えると、図に示すように磁界方向に磁化を向けている磁区の体積が増加するように180°磁壁や90°磁壁が移動して、ついに単磁区になって飽和磁化状態になります。磁壁移動を妨げるエネルギー障壁がなければ、この磁壁移動は極めて弱い磁界で終了します。これが下図の[100]方向の磁化曲線に対応します。

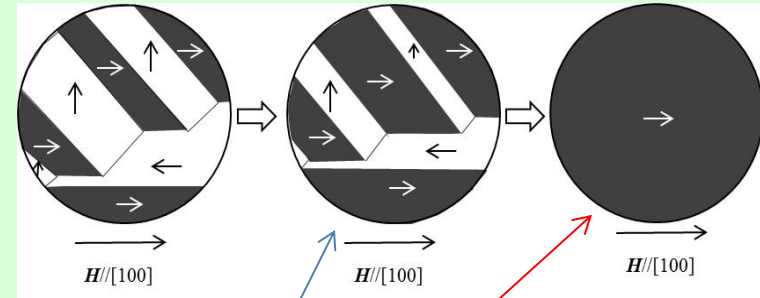


図3.10 Fe[100]方向に磁界を印加した時の磁壁移動と磁気飽和。弱い磁界で飽和磁化に達する

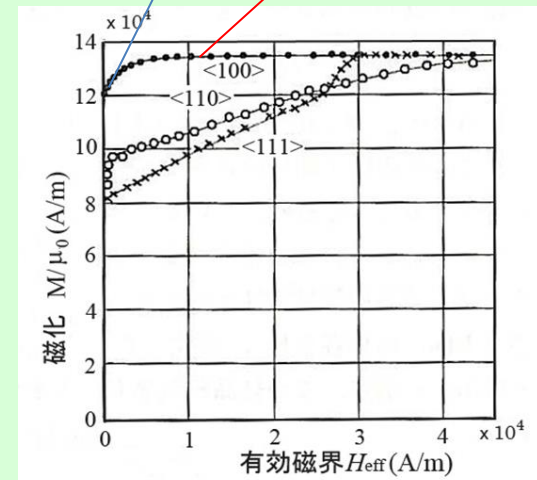


図3.8 Feの磁化曲線の結晶方位依存性 (Kayaによる。佐藤勝昭編著:応用物性p.209)

つづき

H// [110]の場合

- 磁界を[100]方位から 45° に傾いた[110]に加えた場合、図3.11のように[100]およびそれに垂直な[010]方向の磁化をもつ磁区は等価ですから、両磁区の体積を増加するよう磁壁が移動し、極めて弱い磁界によってこの2種類の磁区のみで埋められます。このときのH方向の磁化成分は飽和磁化 M_s の $1/\sqrt{2}=0.71$ です。磁界を増加すると磁化は縦軸から離れ磁化回転しながら飽和に向かいます。

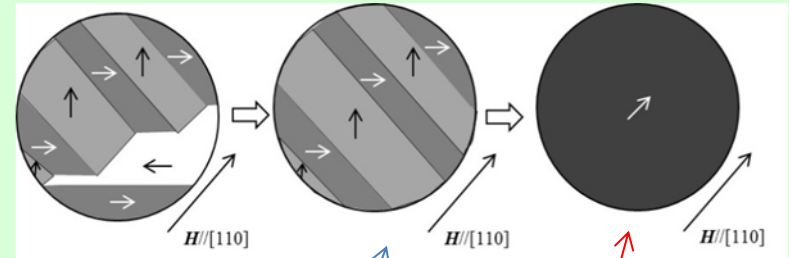


図3.11 Fe[110]方向に磁界を印加した時は、磁壁移動によって[100]磁区と[010]磁区が埋め尽くし磁化が $M_s/\sqrt{2}$ をとった後、磁化回転が起きて飽和磁化状態に達する。

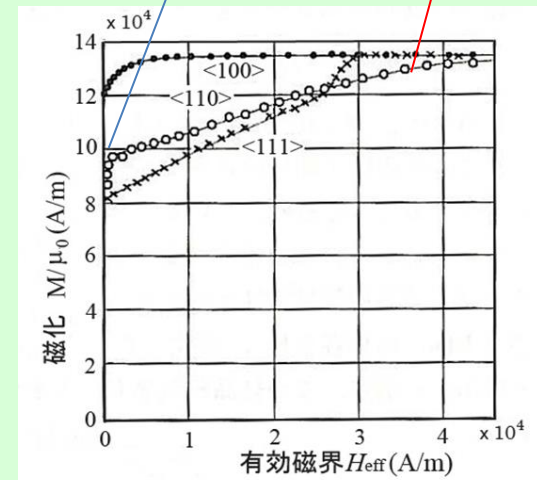


図3.8 Feの磁化曲線の結晶方位依存性 (Kayaによる。佐藤勝昭編著:応用物性p.209)

異方性磁界 H_K

いま、磁化容易軸から磁界を小角度 $\Delta\theta$ だけ傾けたときの復元力を求めると $F = \partial E_u / \partial \theta = Ku \sin 2\Delta\theta \sim 2Ku\Delta\theta$ となります。

磁化 M_0 に対して磁化容易軸から $\Delta\theta$ だけ傾けた方向に磁界を印加して異方性と同じ復元力を与えるとき、この磁界 H_K を異方性磁界といいます。このときの力は

$$F = \partial E / \partial \theta = -\partial M_0 H_K \cos \Delta\theta / \partial \theta = M_0 H_K \sin \Delta\theta \sim M_0 H_K \Delta\theta$$

となりますから両者を等しいと置いて、

$$H_K = 2K_u / M_0$$

が得られます。

異方性磁界の実際の値はどれくらいでしょう。六方晶のCoの単磁区微粒子では、磁化容易方向の磁気異方性エネルギーは $K_u = 4.53 \times 10^5$ [J/m³]、磁化は $M_0 = 1.79$ [Wb/m²]なので、 $H_K = 5.06 \times 10^5$ [A/m]となります。cgs-emu単位系では6.36 [kOe]です。

保磁力のなぞ

残留磁化状態から逆方向に磁界を加えると、図3.1の第2象限のように、磁化は急激に減少します。これを**減磁曲線**といいます。

減磁曲線が横軸と交わる(磁化が0になる)ときの磁界を**保磁力**といい、 H_c と書きます。添字cは保磁力を表す英語(coercivity)の頭文字です。Coerciveとは強制的なという意味で、磁化をゼロにするために無理矢理加えなければならない磁界という意味です。

単純に考えると、大きな磁気異方性をもつ磁性体では異方性磁界 H_k が大きいので、保磁力 H_c も大きいと考えられるのですが、実際に観測される保磁力は磁気異方性から期待されるものよりかなり小さいのです。

保磁力は作製法に依存する構造敏感な量で、その機構は現在に至るまで完全には解明されていないのです。

ここでは保磁力についての考え方を紹介するにとどめます。

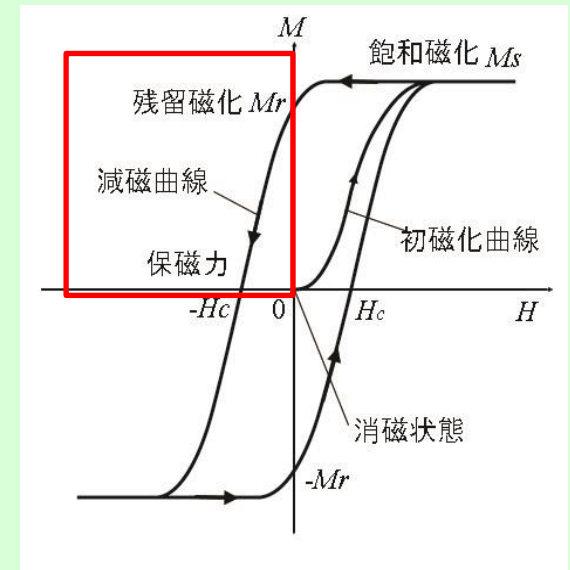


図3.1 強磁性体の典型的な磁化曲線

単磁区ナノ粒子集合体の保磁力は 異方性磁界 H_K に等しい

ナノサイズの磁性微粒子では単磁区になっています。

単磁区微粒子の集合体の系を考えます。単磁区粒子では、**磁壁移動がない**ので磁化過程は**磁化回転のみ**によります。

図に示すように、材料内のすべての磁気モーメントが一斉に回転する場合の磁化過程を記述するのが**ストーナー・ウォルファースのモデル**です。

この場合、磁化容易軸方向に磁界を加えたときの保磁力 H_c は異方性磁界 H_K に等しいと考えられ、

$$H_c = \frac{2K_u}{M_0}$$

で与えられます

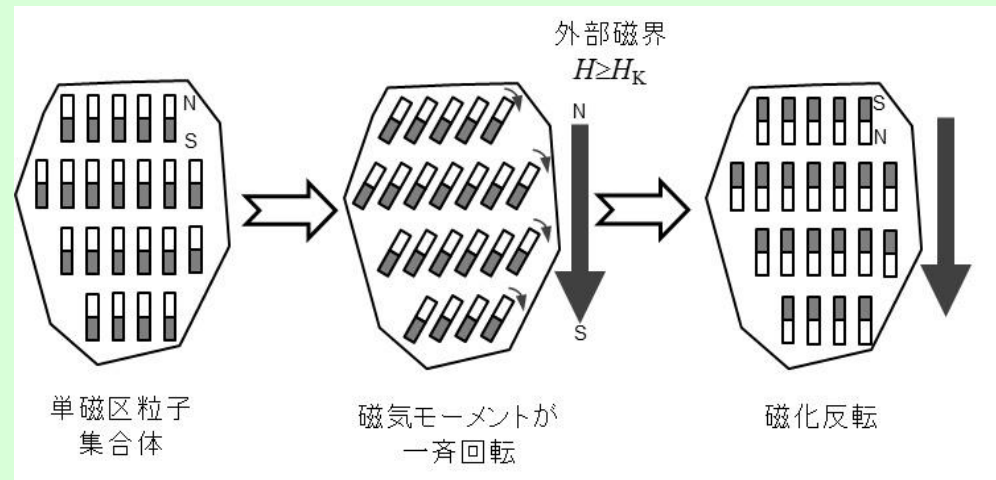


図3.12 単磁区粒子集合体における反転機構の模式図

磁壁が導入されると容易に磁壁移動が起き 保磁力は下がる

異方性の大きな磁性体でも、いったん磁壁が導入されると、外部磁界で容易に動くことができ、磁化反転が起きやすくなります。図3.13にこの場合の磁区の様子を示します。

反転核が発生する外部磁界は、理想的には異方性磁界 H_K に等しいはずですが、粒界の一部で異方性磁界が低下していたり、反磁界が局所的に大きくなっていたりすることで、 H_c は H_K よりも小さくなっています。

式で書くと、

$$H_c = \alpha H_K - NM_0$$

ここに α は**異方性磁界の局所的低下**を表す因子($\alpha < 1$)、 N は3.1で述べた反磁界係数ですが、隣接する結晶粒からの影響も受けた値になっています。

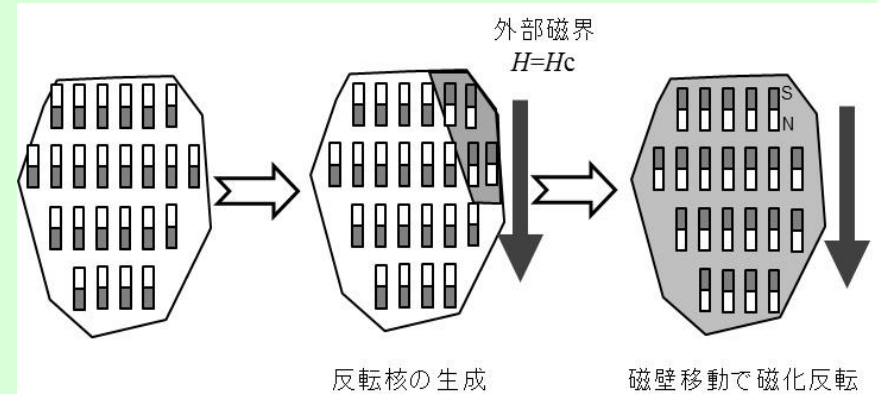


図3.13 核生成型磁性体における反転機構の模式図

ハード磁性材料にとっては磁壁の核発生をいかに抑えるかがキーになります。ネオジム磁石(Nd-Fe-B)では、結晶粒界付近での反転核の発生を抑えるために結晶粒間に異方性磁界の大きなDyを拡散させて界面の異方性を高めて、核発生を抑えています。単磁区にして界面制御で磁区の核発生を抑えるとDyを使わなくても H_c は下がりにません。

磁壁移動をピン止めするサイトがあると 保磁力は、それが無いときより高くなる

- **ピンニングサイト**があると、図に示すように、磁壁はそこにトラップされていますが、いったんそのサイトから脱出すると磁化反転が進行し、第2のピンニングサイトで磁壁がトラップされて止まります。ピンニングサイトと周りとの磁壁のエネルギーに差があることがトラップされる原因です。このエネルギーの差は異方性エネルギーの差であると考えられます。
- SmCo磁石はこのタイプであるとされています。ピンニングサイトは結晶粒界、格子欠陥や不純物などによってもたらされるため、材料作製プロセスに依存します。

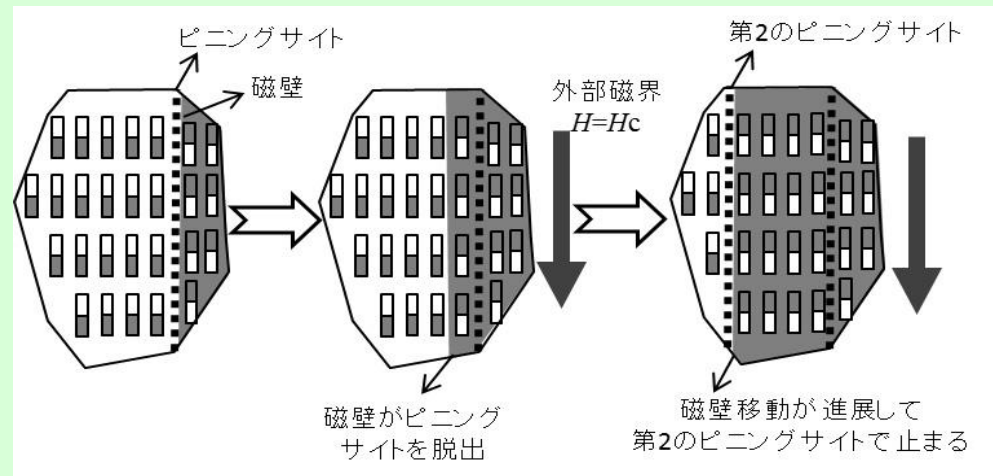


図3.14 ピンニング型磁性体の反転機構の模式図

残留磁化のなぞ

磁気ヒステリシスにおいて飽和に達したのち磁界をゼロにしても残っている磁化を残留磁化ということは3.1に述べました。飽和磁化に対する残留磁化の比を角形比と呼び、磁気記録においても永久磁石においてもこれが1に近いほどよいとされます。残留磁化状態とはどんな状態なのでしょうか。

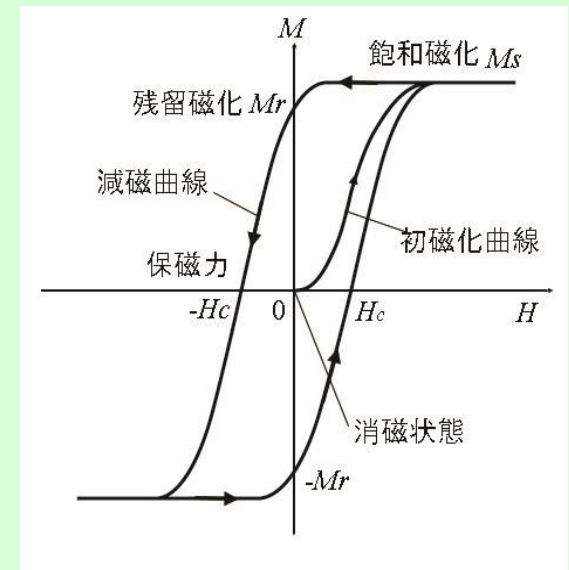


図3.1 強磁性体の典型的な磁化曲線

残留磁化のしくみ

磁氣的に飽和した単磁区の状態から磁界を減じるときの磁区の様子を模式的に表したのが図3.15です。

(a)の単磁区状態は磁極が生じ反磁界によって静磁エネルギーが高く不安定なのに、**外部磁界によって無理やり**単磁区にされているのです。

従って、外部磁界を減じると、反磁界を減るさまざまな磁化方向の磁区が核発生しようとしませんが、3.5に述べたように磁気異方性が強いと核発生が抑制されます。

いったん核ができると磁壁移動と磁化回転によって図 (b)のような状態になります。

ここで、磁壁の**ピンングサイト**があると逆方向の磁区は十分に成長できず、磁界をゼロにしても図 (c)のような磁化は打ち消されないで残ると考えられます。これが残留磁化です。

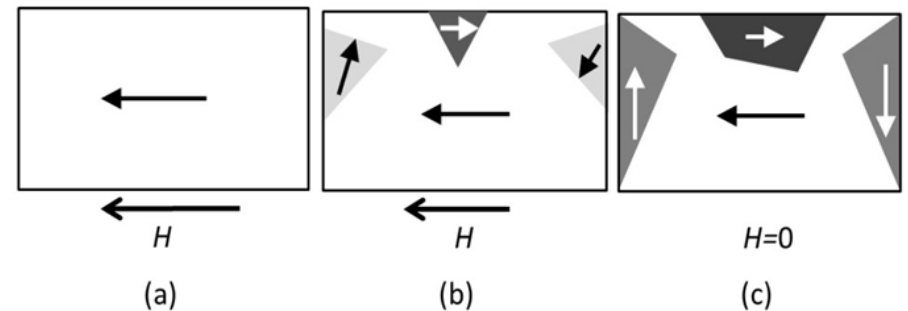


図3.15 磁気飽和状態から磁界を減らしていくと、さまざまな磁化方向の磁区が核発生し、成長するが、もとの状態には戻れない。

第2回の復習まとめ

- 第2回は、まぐねの国のふしぎである磁気ヒステリシスのナゾに迫りました。ヒステリシス現象は強誘電体の自発分極にも見られ、双安定な状態間の遷移に障壁があると生じる一般的な現象であることも学びました。
- 磁化曲線には、初磁化曲線、ヒステリシスループという非線形で非可逆な現象をともなっており、最も重要な物理量は磁気異方性であるが、磁壁移動のピンニングも重要であるということも学びました。
- 磁性体を応用するには、磁気ヒステリシスにともなう保磁力、残留磁化などを制御しなければなりません。形状・サイズ・作製法・加工法などに依存する構造敏感な量であるため、現在に至るまで完全にはナゾが解けていないことも学びました。

第3回 磁気光学の基礎と応用

4. 磁気光学効果の基礎



教科書・参考書：光と磁気

- この講義は、拙著「光と磁気(改訂版)」(2002年朝倉書店刊)に基づいています。
- この本の初版は1988年に出版され、日本応用磁気学会から出版賞を受賞しました。
- その後、2001年に改訂版を出版しました。

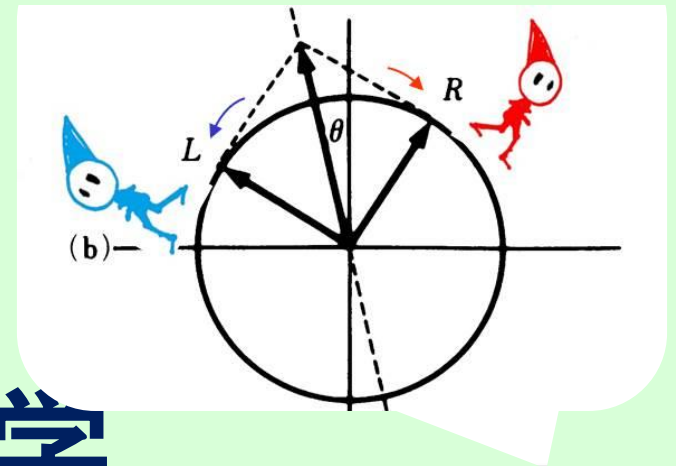


磁気光学効果の基礎

電磁気学と磁気光学

4.1 円偏光と旋光性・円二色性

4.2 電磁気学に基づく磁気光学の理論

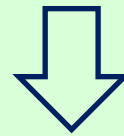
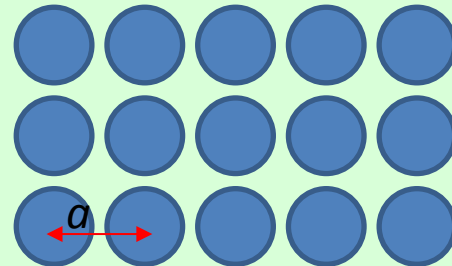


ここで学ぶこと

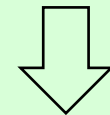
- この講義では磁気光学効果が媒体のどのような性質に基づいて生じるかをマクロな立場に立ってご説明します。
- 磁気光学効果は、左右円偏光に対して媒体の応答が異なることによって生じることを述べます。
- このとき媒体の応答を誘電率を使って表します。

マクロの扱いとは

- ここでは媒体のミクロな性質には目をつぶって、媒体を連続体のように扱い、偏光が伝わる様子を**電磁波の伝搬**として記述します。



実際の物質は、ミクロな原子の3次元配列
格子定数 $a \sim 0.5\text{nm}$
光の波長 $\lambda \sim 500\text{nm}$



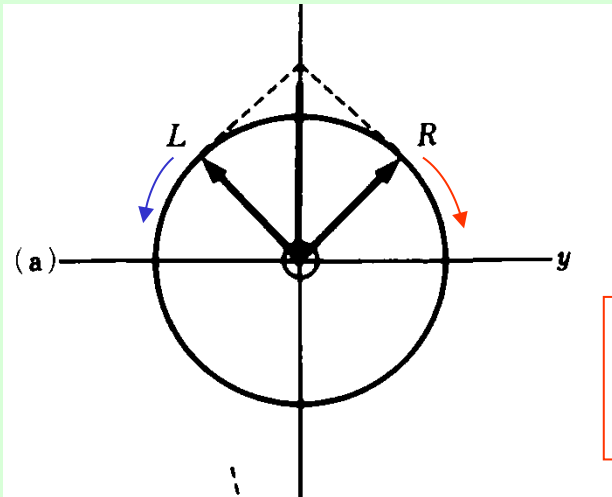
$a \ll \lambda$ なので、通常の電磁気学では、物質を連続体として扱い電磁波への応答をマクロなパラメータである ϵ や μ を用いて表す

4.1 円偏光と旋光性・円二色性

- 旋光性や円二色性は、左回りと右回りの円偏光に対する媒体の応答の差に基づいて生じます。

直線偏光は左右円偏光の合成

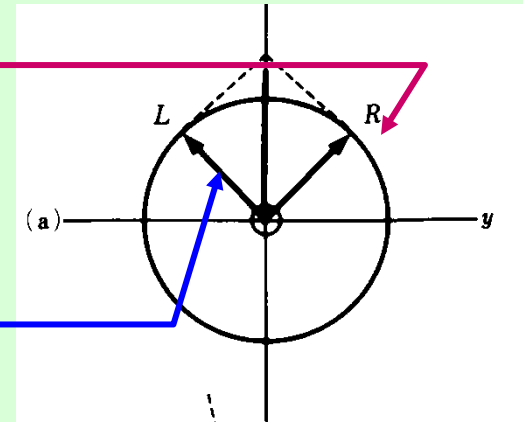
- 直線偏光の電界ベクトルの軌跡は図(a)のように、振幅と回転速度が等しい**右円偏光R**と**左円偏光L**との合成で表されます。



図(a)直線偏光は等振幅等速度の左右円偏光に分解できる

式で書くと

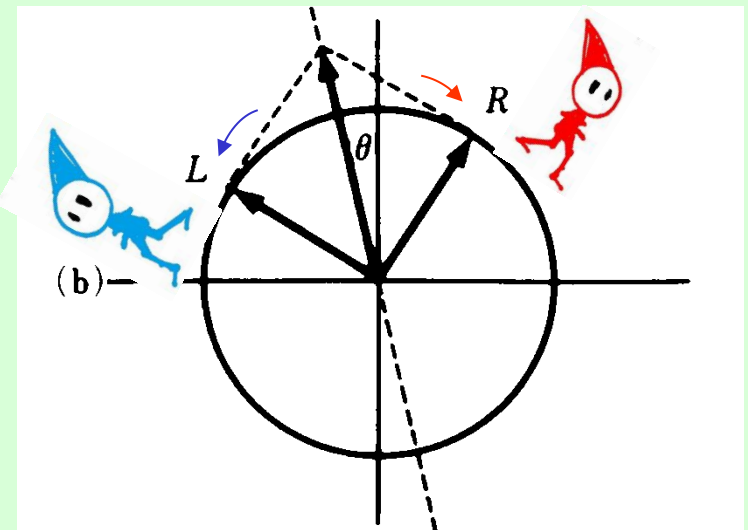
- $E = E_0 \exp(i\omega t) i$
ここに i は x 方向の単位ベクトル
- 右円偏光の単位ベクトル $r = (i + ij) / 2^{1/2}$
- 左円偏光の単位ベクトル $l = (i - ij) / 2^{1/2}$
 $i = (r + l) / 2^{1/2}$ となるので
- $E = 2^{-1/2} E_0 \{ \exp(i\omega t) r + \exp(i\omega t) l \}$



左右円偏光の位相が異なる場合

- 媒体を透過した後、図(b)のように左円偏光と右円偏光とに位相の差があると、合成した電界ベクトルの軌跡は直線で、その向きはもとの偏光の向きから傾いています。
- これが旋光性です。
回転角は左右円偏光の位相差の1/2です。

図 (b) 媒体を通ることにより左円偏光の位相と右円偏光の位相が異なると偏光が回転します



式で書くと

屈折率 n は、媒体中で光速がどれくらい遅くなるかを表す物理量です。

- 右円偏光に対する屈折率 n^+
- 左円偏光に対する屈折率 n^-

とすると、

- 右円偏光の位相は $\omega n^+ z/c$
- 左円偏光の位相は $\omega n^- z/c$

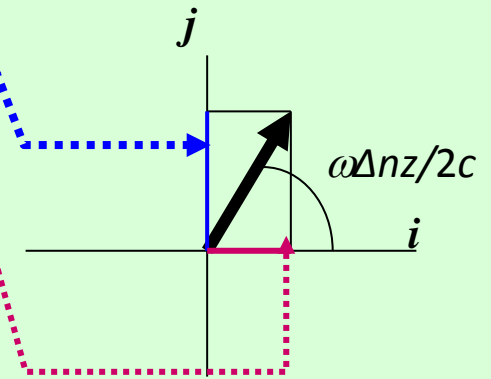
であるから右円偏光と左円偏光の位相差は $\omega(n^+ - n^-)z/c$

- この半分が回転角になります。

注： n は屈折率、 κ (カッパと読む)は消光係数

ベクトルで書くと

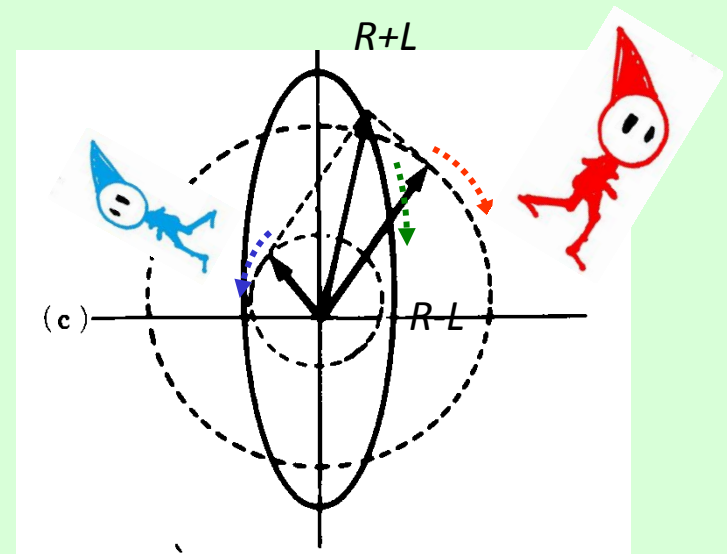
- $E = 2^{-1/2} E_0 \{ \exp(i\omega t) r + \exp(i\omega t) l \}$ が
右円偏光に対する屈折率 n^+ 、左円偏光に対する
屈折率 n^- の環境を通過すると、
- $E = 2^{-1/2} E_0 [\exp\{i\omega(t - n^+ z/c)\} r + \exp\{i\omega(t - n^- z/c)\} l]$
これを直交系に戻すと、
- $E = 2^{1/2} E_0 \exp(i\omega t) \exp(-i\omega n z/c)$
 $\times \{ \cos(\omega \Delta n z / 2c) i + \sin(\omega \Delta n z / 2c) j \}$
- ここに $\Delta n = n^+ - n^-$, $n = (n^+ + n^-) / 2$
回転角は $\omega \Delta n z / 2c$ であるから
左右円偏光の屈折率の差に相当



左右円偏光の振幅が異なると

- 媒体を透過した後、(c)のように右円偏光と左円偏光のベクトルの**振幅に差**が生じると、合成ベクトルの軌跡は楕円になります。
- 楕円の短軸と長軸の比の \tan^{-1} が楕円率角です。

図(c)媒体を通ることにより左円偏光の振幅と右円偏光の振幅が異なると合成した軌跡は**楕円**になります



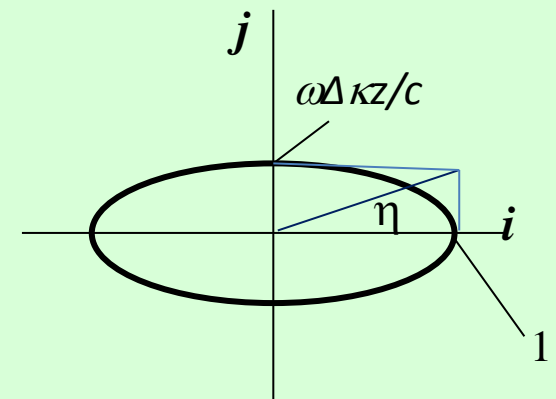
式で書くと

- 右円偏光に対する消光係数 κ^+
 - 左円偏光に対する消光係数 κ
- とすると、
- 右円偏光の振幅は $\exp(-\omega\kappa^+z/c)$
 - 左円偏光の振幅は $\exp(-\omega\kappa z/c)$
- 屈折率は左右円偏光に対し同じであると仮定*

ベクトルで書くと

- $E = 2^{-1/2} E_0 \{ \exp(i\omega t) r + \exp(i\omega t) l \}$ が
右円偏光に対する消光係数 κ^+ 、左円偏光に対する消光係数 κ^-
の環境を通過すると、
- $E = 2^{-1/2} E_0 \exp\{i\omega(t - nz/c)\} [\exp(-\omega\kappa^+ z/c) r + \exp(-\omega\kappa^- z/c) l]$
これを直交系に戻すと、
- $E \sim 2^{1/2} E_0 \exp(i\omega t) \exp(-\omega\kappa z/c) \{ i - i\omega\Delta\kappa z/c j \}$
- ここに $\Delta\kappa = \kappa^+ - \kappa^-$, $\kappa = (\kappa^+ + \kappa^-)/2$ 、
また $\omega\Delta\kappa z/c \ll 1$ とする
- 楕円率角 η は $\eta = \tan^{-1}(\omega\Delta\kappa z/c)$

左右円偏光に対する光吸収の差に相当



注: κ (カツパと読む) は消光係数

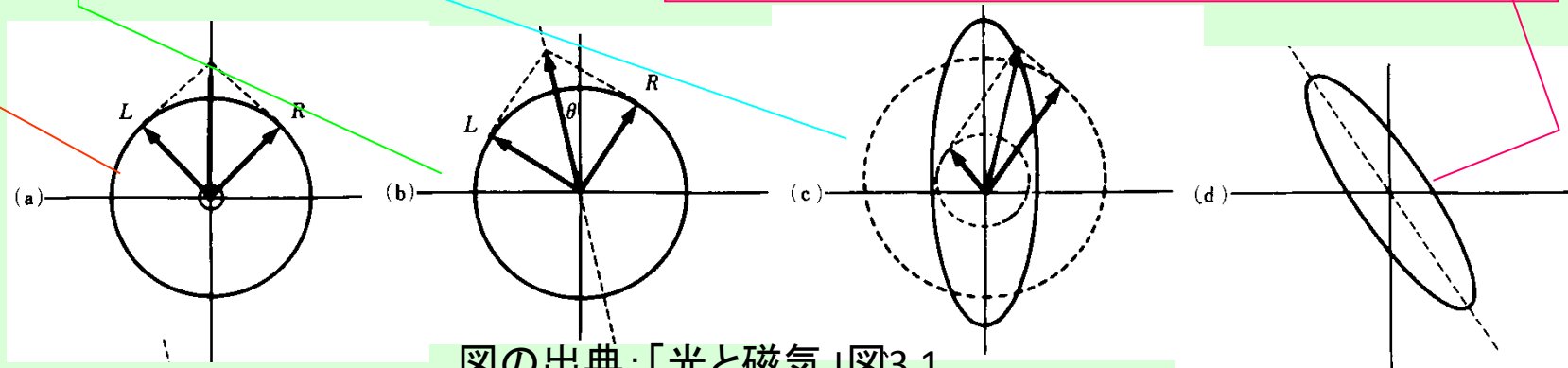
円偏光と磁気光学効果：まとめ

直線偏光は等振幅等速度の左右円偏光に分解できる

媒体を通ることにより左円偏光の位相と右円偏光の位相が異なると**旋光**する

媒体を通ることにより左円偏光の振幅と右円偏光の振幅が異なると**楕円**になる

一般には、主軸の傾いた楕円になる



図の出典：「光と磁気」図3.1

4.2 電磁気学に基づく磁気光学の理論

4.2.0 イントロ

4.2.1 誘電率テンソル

4.2.2 マクスウェル方程式を解く

4.2.3 固有方程式を解いてファラデー効果を誘電率テンソルで表す

イントロ

- 連続媒体中の光の伝わり方はマクスウェルの方程式で記述されます。
- マクスウェルの方程式は、電磁波の電界と磁界との間の関係を与える連立微分方程式であると理解しておいてください。
- 詳しい取り扱いは次回講義で詳しく述べます。

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\mu_0 \tilde{\mu} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \\ \operatorname{rot} \mathbf{H} &= \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \varepsilon_0 \tilde{\varepsilon} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \end{aligned}$$

James Clerk Maxwell



エジンバラ城を望む(佐藤勝昭画)



出生 1831年6月13日
エジンバラ

死去 1879年11月5日
ケンブリッジ

マクスウェル方程式

電界の渦

磁界の時間変化

$$\text{rot } \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\mu_0 \tilde{\mu} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}$$

電磁誘導の法則

$$\text{rot } \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \varepsilon_0 \tilde{\varepsilon} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}$$

アンペールの法則

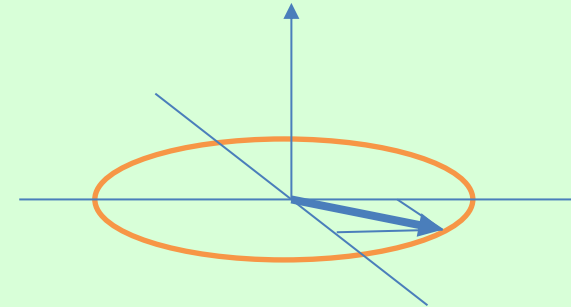
電束の時間変化: 電流

変位電流

磁界の渦

rotationってなに？

$$\begin{aligned} \bullet \text{ rot } E &= \nabla \times E = \begin{vmatrix} i & j & k \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ E_x & E_y & E_z \end{vmatrix} \\ &= \begin{vmatrix} \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ E_y & E_z \end{vmatrix} i + \begin{vmatrix} \frac{\partial}{\partial z} & \frac{\partial}{\partial x} \\ E_z & E_x \end{vmatrix} j + \begin{vmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} \\ E_x & E_y \end{vmatrix} k \end{aligned}$$



電界のy成分のx方向の勾配と電界のx成分のy方向の勾配の差がrotのz方向の成分になる。つまりzに垂直な面内の電界の回転

4.2.1 誘電率テンソル



誘電率

- マクスウェルの方程式で表される電磁波の伝搬において、媒体の応答を与えるのが、比誘電率 ϵ です。

- 電束密度 D と電界 E の関係は

$$D = \epsilon \epsilon_0 E \quad (4.1)$$

と表すことができます。ここに ϵ_0 は真空の誘電率で、 $\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12}$ F/m です。

比透磁率は1として扱う。

- 光の伝搬を考える場合 $B=\mu_0 H$ と扱います。
すなわち、比透磁率 μ は1とします。
- 磁性体中の伝搬であるから比透磁率 μ は1ではないと考える人があるかも知れませんね。
- 光の振動数 (10^{14} - 10^{15} Hz) くらいの高い周波数になると巨視的な磁気モーメントは、磁界に追従できなくなるため、透磁率を $\mu \cdot \mu_0$ としたときの比透磁率 μ は1として扱ってよいのです。 μ_0 は真空の透磁率で、 $\mu_0 = 1.257 \times 10^{-6}$ H/mと与えられます。

誘電率テンソル

D も E もベクトルなのでベクトルとベクトルの関係を与える量である ε は2階のテンソル量です。

2階のテンソルというのは、2つの添字をつかって表される量で、 3×3 の行列と考えてさしつかえありません。

(ここではテンソルを表すため記号 \sim (チルダ)をつけます)

$$\mathbf{D} = \tilde{\varepsilon} \varepsilon_0 \mathbf{E}$$

(4.2)

$$D_i = \varepsilon_{ij} \varepsilon_0 E_j$$

テンソル要素を使って表現すると下の式ようになります。
繰り返す添え字について総和をとるというテンソル演算の約束に従っています。

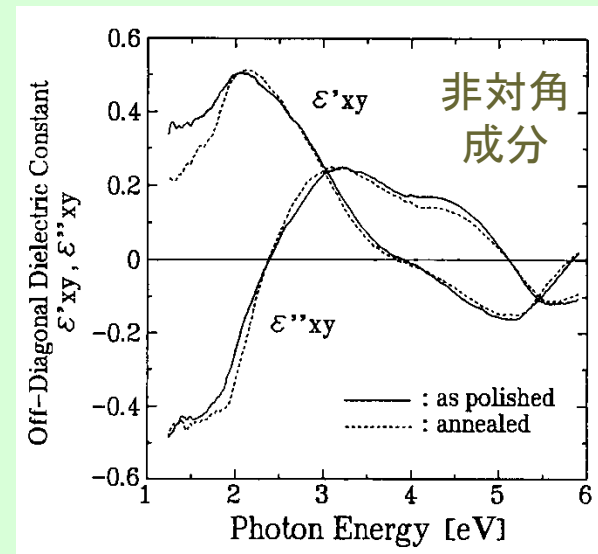
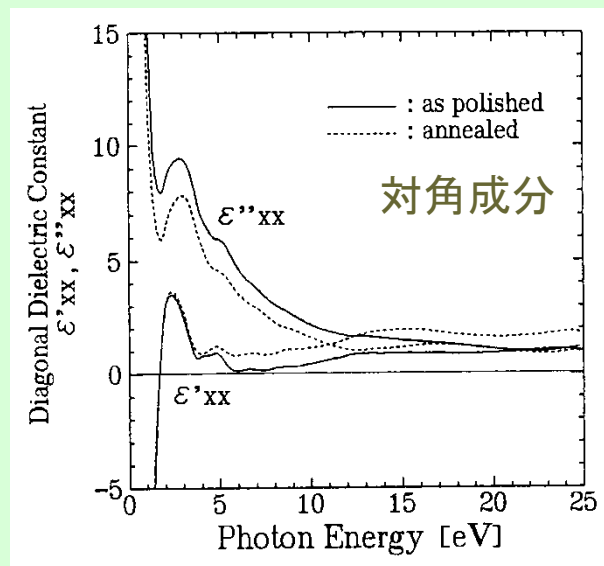
誘電率テンソルの一般的表示

- 一般的な場合、誘電率テンソルは、下記のような9個のテンソル要素で表すことができます。各要素は複素数です。
$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon'_{ij} + i\varepsilon''_{ij}$$

$$\tilde{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

誘電率スペクトルの一例 : PtMnSb

- 図をご覧ください。これは私たちが測定したPtMnSbという強磁性体の磁気光学効果に関する磁気光学スペクトルです。
- 測定したのは反射スペクトルと磁気カー効果のスペクトルですが、ここには比誘電率テンソルの対角、非対角成分のスペクトルが示されています。
- 左が誘電率テンソルの対角成分 ϵ_{xx} 、右が非対角成分 ϵ_{xy} のスペクトルです。



図の出典:「光と磁気」図6.24

なぜ誘電率テンソルを用いるの？

- 屈折率、反射率やカー回転角などは、入射角や磁化の向きに依存する量で、媒体固有の応答を表す量ではありません。これに対し、誘電率テンソルは媒体に固有の物理量です。
- また、誘電率テンソルは、物質中の電子構造や光学遷移の遷移行列に直接結びつけることができ、理論計算の結果とすぐに対応できる物理量です。

等方性の媒体の誘電率テンソル

- 媒体中の光の伝搬のしかたが光の進行方向によらないとき、その媒体は光学的に等方であるといえます。
- そのときの誘電率テンソルは、スカラーと同じなので、等しい3つの対角成分 ϵ_{xx} のみで表せます。

$$\tilde{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{xx} \end{pmatrix} = \epsilon_{xx} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

異方性のある媒体の誘電率テンソル

- 磁化がないとき等方性であった媒体にz軸方向に磁化を持たせたとしますと、z軸を異方軸とする一軸異方性を持ちます。(z軸に垂直な向きに関しては等方的)
- この場合、比誘電率のテンソルは、z軸のまわりの任意の角度の回転に対して不変となります。
- たとえば90° の回転 C_4 を施し次式となります。

$$C_4^{-1} \tilde{\epsilon} C_4 = \tilde{\epsilon} \quad (4.5)$$

座標系の回転操作 C_4 に対して、なぜ誘電率テンソルの回転が左辺のように表せるのかは、課題(1)としますので自分でやってみてください。

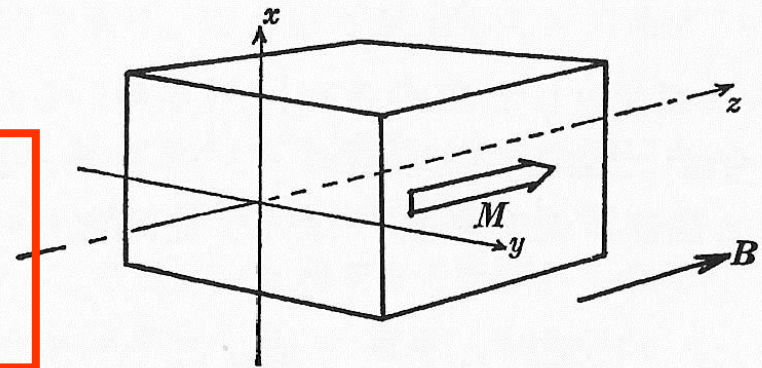


図 3.2 座標軸と磁化の向き

図の出典:「光と磁気」図3.2

誘電率テンソルに回転C4を施す

- (a)に実際にC₄の演算を施すと (b)となります。
- (a)=(b)として要素を比較すると式(3.11)が得られます。

$$\tilde{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{yx} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} & \epsilon_{zy} & \epsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad (a)$$

$$\tilde{\epsilon}' = C_4^{-1} \tilde{\epsilon} C_4 = \begin{pmatrix} \epsilon_{yy} & -\epsilon_{yx} & -\epsilon_{yz} \\ -\epsilon_{xy} & \epsilon_{xx} & \epsilon_{xz} \\ -\epsilon_{zy} & \epsilon_{zx} & \epsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad (b)$$

$$\begin{aligned} \epsilon_{xx} &= \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{yx} &= -\epsilon_{xy} \\ \epsilon_{xz} &= \epsilon_{yz} = \epsilon_{zx} = \epsilon_{zy} = 0 \end{aligned} \quad (4.6)$$

テンソル(a)にC₄を操作して(b)になることを確かめて下さい。次にそれにもとづき(3.11)を証明して下さい。これを課題(2)とします。

ϵ_{zz} については何ら制約がありません。 $\epsilon_{xx} = \epsilon_{zz}$ である必要はありません。

磁化のある媒質の誘電率テンソル

- 従って、等方性媒質に磁化を付与したときの非誘電率 ϵ テンソルは ϵ_{xx} , ϵ_{xy} , ϵ_{zz} の3つの要素だけを使って、次のように簡単に書けます。

$$\tilde{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & 0 \\ -\epsilon_{xy} & \epsilon_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

よくある質問



- 誘電率テンソルの**対角・非対角**とは何ですか
A: 添え字が xx, yy, zz のように対角線上に来るものを対角成分、 xy, yz, zx のように対角線上にないものを非対角成分といいます。
- もともと異方性がある場合の誘電率テンソルはどのように考えればよいのでしょうか
A: もともと1軸異方性があるとき、その対称軸に平行な磁化がある場合は、今やった等方性の場合と同じですが、磁化が任意の方向を向いているときは、全ての非対角成分が有限の値をとります。

よくある質問



- 誘電率テンソルはどのように測定するのですか。

A:対角成分はエリプソメトリなど通常分光光学で、 n 、 κ を求め、 $\varepsilon_{xx}' = n^2 - \kappa^2$ 、 $\varepsilon_{xx}'' = 2n\kappa$ によって計算します。

– 非対角成分については、磁気光学効果測定装置を用いて回転角 θ 、楕円率 η のスペクトルを求め、上に述べた光学定数 n, κ を用いて計算で求めます。

$$\varepsilon'_{xy} = -\frac{2c}{\omega l} (n\eta + \kappa\theta) \quad (4.8)$$
$$\varepsilon''_{xy} = -\frac{2c}{\omega l} (\kappa\eta - n\theta) \quad (\text{Faraday効果の場合})$$

注： n は屈折率、 κ (カツパと読む)は消光係数

磁化 M の関数としての誘電率

- さて、磁気光学効果においての各成分は M の関数であるから、は次式のように表せるはずで

$$\tilde{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx}(M) & \varepsilon_{xy}(M) & 0 \\ -\varepsilon_{xy}(M) & \varepsilon_{xx}(M) & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz}(M) \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

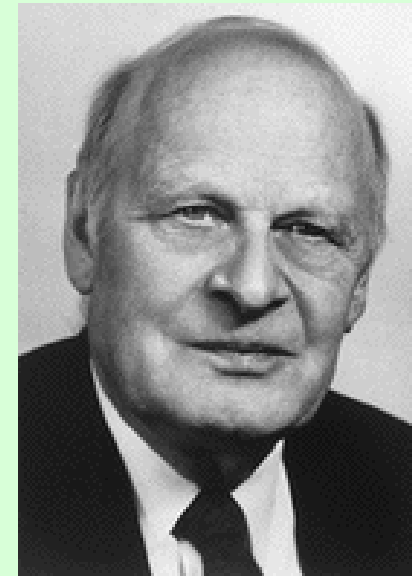
- $\varepsilon_{ij}(M)$ を次式のように M でべき級数展開します。
$$\varepsilon_{ij}(M) = \varepsilon_{ij}^{(0)} + \sum_n \frac{1}{n!} \varepsilon_{ij}^{(n)} M^n \quad (4.10)$$

Lars Onsager

- Norwegian-American chemist and physicist.

The Nobel Prize in Chemistry 1968

磁化がある場合は非相反になる



$$\varepsilon_{ij}(-M) = \varepsilon_{ji}(M) \quad (4.11)$$

出生 1903年11月27日
オスロ

死去 1976年10月5日

誘電率の成分と磁化依存性

- Onsagerの式 $\varepsilon_{ij}(-M) = \varepsilon_{ji}(M)$ (4.12)
を適用すると、対角成分は

$$\varepsilon_{xx}(M) = \varepsilon_{xx}(-M)$$

となり、Mについての偶関数であることが分かる。

- 一方、非対角成分については

$$\varepsilon_{xy}(M) = -\varepsilon_{yx}(-M)$$

が成り立つので、Mについて奇関数であることが
わかる

誘電率テンソルの磁気応答

- 対角成分は M の偶数次のみ、非対角成分は M の奇数次のみで展開できます。

$$\begin{aligned}\varepsilon_{xx}(M) &= \varepsilon_{xx}^{(0)} + \sum_n \varepsilon_{xx}^{(2n)} M^{2n} / (2n)! \\ \varepsilon_{xy}(M) &= \sum_n \varepsilon_{xy}^{(2n+1)} M^{2n+1} / (2n+1)! \quad (4.13) \\ \varepsilon_{zz}(M) &= \varepsilon_{zz}^{(0)} + \sum_n \varepsilon_{zz}^{(2n)} M^{2n} / (2n)!\end{aligned}$$

- $\varepsilon_{xy}(M)$ がファラデー効果やカー効果をもたらし、 $\varepsilon_{xx}(M)$ と $\varepsilon_{zz}(M)$ の差が磁気複屈折(コットン・ムートン効果)の原因となります。

誘電率と導電率

- 電流密度と電界の関係は次式であらわされます。

$$J = \tilde{\sigma}E$$
$$J_i = \sigma_{ij}E_j \quad (4.14)$$

- 導電率(電気伝導率)のテンソルは

$$\tilde{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \quad (4.15)$$

で表されます。

誘電率と導電率の関係

- 誘電率と導電率には右の式で表される関係があります。

$$\varepsilon_{ij} = \delta_{ij} + i \frac{\sigma_{ij}}{\omega \varepsilon_0} \quad (4.16)$$

- 成分で書くと

– 対角成分は \longrightarrow

$$\varepsilon_{xx} = 1 + i \frac{\sigma_{xx}}{\omega \varepsilon_0}$$

– 非対角成分は \longrightarrow

$$\varepsilon_{xy} = i \frac{\sigma_{xy}}{\omega \varepsilon_0}$$

- 誘電率の実数部・虚数部は導電率のそれぞれ虚数部・実数部に対応します。

誘電率と導電率のどちらを使うか

- 誘電率 ϵ と導電率 σ には簡単な関係が成り立つので、媒質の光応答を表すときに、 ϵ 、 σ のいずれを用いて記述してもよいのですが、一般には、**金属を扱うときは σ を**、**絶縁体であれば ϵ を用いるのが普通**です。
- 金属の ϵ は、 $\omega \rightarrow 0$ の極限すなわち直流においては自由電子の遮蔽効果のために発散してしまうのに対し、 σ は有限の値に収束するので都合がよいからです。

4.2.1 まとめ

- 等方性の媒質が z 軸方向の磁化をもったとき、その比誘電率テンソルは、3つの成分で表すことができることを学びました。
- 誘電率テンソルの対角成分は磁化の偶関数で表されるのに対し、非対角成分は磁化の奇関数で表されることを学びました。

次のステップ

- 次のステップでは、この誘電率テンソルをマクスウェルの方程式に代入して複素屈折率 N の固有値を求めます。

固有方程式は

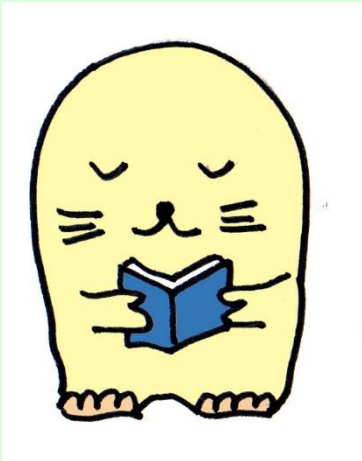
右の式になるので任意の E に対して式が成立する条件から複素屈折率の固有値が求められます。

$$\begin{pmatrix} \hat{N}^2 - \varepsilon_{xx} & -\varepsilon_{xy} & 0 \\ \varepsilon_{xy} & \hat{N}^2 - \varepsilon_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & -\varepsilon_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} = 0$$

$$\hat{N}_{\pm}^2 = \varepsilon_{xx} \pm i\varepsilon_{xy}$$

ここで N_+ と N_- に対応する固有関数はそれぞれ右円偏光、左円偏光であることが導かれます。さらに、非対角成分 ε_{xy} が無ければ、左右円偏光の応答に差がなく、光学活性が生じないということを学びます。

4.2.2 マクスウェル方程式を解く



4.2.2で学ぶこと

- 光の伝搬とマクスウェルの方程式
 - 固有解：波動解、固有値：複素屈折率
- ファラデー配置の場合の固有値と固有状態
 - 2つの固有値と対応する固有状態(円偏光)

マクスウェルの方程式

- 光の電界ベクトルを E 、電束密度ベクトルを D 、磁界ベクトルを H 、磁束密度ベクトルを B 、電流を J とすると、次の関係が成立します。

$$\text{rot } \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (4.17)$$

$$\text{rot } \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{J}$$

(SI単位系)

マクスウェル方程式をEとHで表す

- 簡単のため、 $J=0$ と置きます。

[つまり、伝導電流を分極電流(変位電流)の中に繰り込みます]

- B と H 、 D と E の関係式が得られます。
 $B = \mu_0 H$

$$D = \tilde{\epsilon} \epsilon_0 E$$

誘電率テンソル

- (3.17)に代入すると次の関係式が得られます。

$$\begin{aligned} \text{rot } \mathbf{E} &= -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \\ \text{rot } \mathbf{H} &= \tilde{\epsilon} \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \end{aligned} \quad (4.18)$$

式(3.18)においては、微分方程式が2個、変数もEとHの2個ですから、解を求めることができます。

マクスウェル方程式を解く

- 第2式を t で1回偏微分し $\partial/\partial t$ とrotの順番を入れ替え、 $\partial\mathbf{H}/\partial t$ に第1式を代入します。この後、 $\exp(-i\omega t+iKr)$ の形の波動式を代入し、 E についての2次方程式を得ます。

マクスウェル方程式を解く

$$\begin{aligned}\text{rot } \mathbf{E} &= -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \\ \text{rot } \mathbf{H} &= \tilde{\varepsilon} \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}\end{aligned}\quad (4.18)\text{再掲}$$

- 第2式を t で1回偏微分し $\partial/\partial t$ とrotの順番を入れ替え、 $\partial \mathbf{H}/\partial t$ に第1式を代入します。この後、 $\exp(-i\omega t + iKr)$ の形の波動式を代入し、 E についての2次方程式を得ます。

マクスウェル方程式を解く

- (4.18)の第2式の両辺を t で偏微分します。

$$\frac{\partial}{\partial t} \text{rot } \mathbf{H} = \tilde{\epsilon} \epsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}$$

- $\partial/\partial t$ とrotの順番を入れ替えます。

$$\text{rot} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = \tilde{\epsilon} \epsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}$$

- ここに(4.18)の第1式

$$\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu_0} \text{rot } \mathbf{E} \quad \text{を代入します。}$$

マクスウェル方程式を解く

これより $\text{rot}\left(-\frac{1}{\mu_0}\text{rot}\mathbf{E}\right) = \tilde{\varepsilon}\varepsilon_0\frac{\partial^2\mathbf{E}}{\partial t^2}$ が得られ、

$$\text{rot rot}\mathbf{E} = -\tilde{\varepsilon}\varepsilon_0\mu_0\frac{\partial^2\mathbf{E}}{\partial t^2} = -\frac{\tilde{\varepsilon}}{c^2}\frac{\partial^2\mathbf{E}}{\partial t^2} \quad \text{となります。}$$

ここで、 $\varepsilon_0\mu_0 = \frac{1}{c^2}$ という関係を用いました。

$$\text{rot rot}\mathbf{E} = -\frac{\tilde{\varepsilon}}{c^2}\frac{\partial^2\mathbf{E}}{\partial t^2} \quad (4.19)$$

をマクスウェルの方程式
ということがあります。

マクスウェル方程式を解く

- ここで、rot、grad、divの間に成り立つ次の公式を用います。

$$\text{rot rot } \mathbf{E} = \text{grad div } \mathbf{E} - \nabla^2 \mathbf{E}$$

- この結果Eについての2階の微分方程式が得られます。

$$\text{grad div } \mathbf{E} - \nabla^2 \mathbf{E} = -\tilde{\epsilon} \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}$$

- この式に次の波動の式 $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp(-i\omega t) \cdot \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r})$

を代入するとEについての方程式(4.20)が得られます。

$$(\mathbf{E} \cdot \mathbf{K})\mathbf{K} - |\mathbf{K}|^2 \mathbf{E} + (\omega/c)^2 \tilde{\epsilon} \mathbf{E} = 0 \quad (4.20)$$

固有方程式を解く [1]

- 式(4.20)が導かれました。

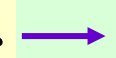
$$(E \cdot K)K - |K|^2 E + (\omega/c)^2 \tilde{\epsilon} E = 0 \quad (4.20)$$

それでは(4.20)を解いて K の固有値と対応する電界ベクトル E の固有関数を求めましょう。

- ここで複素屈折率、すなわち、 $\hat{N} = n + i\kappa$

を導入します。ここに n は屈折率、 κ は消光係数です。

- 媒質中において波数 K は  実数部は空間的な波の波長を与えます

[注] $K = \omega \hat{N} / c = \omega n / c + i \omega \kappa / c$  虚数部は波の減衰を与えます。

[注] 波数 K は $2\pi/\lambda'$ となる。ここに λ' は媒質中での波長で、媒質中での光速を c' とすると ω/c' と表される。媒質中での光速 c' は屈折率を n とすると c/n で与えられるから、 $K = \omega n / c$ である。ここで屈折率を拡張して複素屈折率 N 、すなわち $n + i\kappa$ を導入すると、上の式となる。

複素屈折率 $n+ik$

- 電磁波の空間変化を $\exp(iKz)$ で表します。
- $K = \omega N/c = \omega (n+ik)/c$ とします。
- $\exp(iKz) = \exp(i\omega n z/c) \exp(-\omega \kappa z/c)$ と書けます。
- この波動は、振幅が距離 z とともに振動しながら減衰する波を表します。
- 光の強度の減衰を表すときには $|\exp(iKz)|^2$ を考えます。
 $|\exp(iKz)|^2 = \exp(-2\omega \kappa z/c)$
- これを吸収係数 α を用いて $\exp(-\alpha z)$ に等しいと置くと、
 $\alpha = 2\omega \kappa/c = 4\pi \kappa/\lambda$ と表すことができます。

4.2.3 固有方程式を解いて ファラデー効果を ϵ テンソルで表す

- 波数ベクトルの向きに平行で長さが \hat{N} であるような屈折率ベクトル \hat{N} を用いると、(3.19)の第1式は

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp \{-i\omega(t - \hat{N} \cdot \mathbf{r} / c)\} \quad (4.21)$$

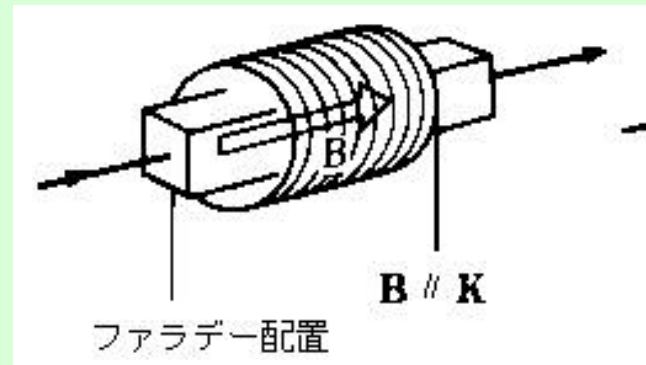
となり、固有方程式(3.20)は

$$\hat{N}^2 \mathbf{E} - (\mathbf{E} \cdot \hat{N}) \hat{N} - \tilde{\epsilon} \mathbf{E} = 0 \quad (4.22)$$

によって記述できます。

- 以下では、ファラデー配置について固有値を求めます。

ファラデー配置の場合



- 磁化がz軸方向にあるとして、z軸に平行に進む波($N // z$)に対して式(4.21)は

$$E = E_0 \exp \{-i\omega(t - \hat{N}z / c)\} \quad (4.23)$$

- と表されます。固有方程式(3.22)は

$$\begin{pmatrix} \hat{N}^2 - \varepsilon_{xx} & -\varepsilon_{xy} & 0 \\ \varepsilon_{xy} & \hat{N}^2 - \varepsilon_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & -\varepsilon_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} = 0 \quad (4.24)$$

と書けます。この式は下に2式に分けられます。

$$\begin{pmatrix} \hat{N}^2 - \varepsilon_{xx} & -\varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{xy} & \hat{N}^2 - \varepsilon_{xx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} = 0, \quad (4.24') \quad -\varepsilon_{zz} E_z = 0 \quad (4.24'')$$

プラズモン解

永年方程式

- 式(3.24')がEの如何によらず成立するには、

$$\begin{vmatrix} \hat{N}^2 - \varepsilon_{xx} & -\varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{xy} & \hat{N}^2 - \varepsilon_{xx} \end{vmatrix} = 0 \quad (4.25)$$

$$\implies (\hat{N}^2 - \varepsilon_{xx})^2 + \varepsilon_{xy}^2 = 0$$

- これより、 N^2 の固有値として2個の値

$$\hat{N}_{\pm}^2 = \varepsilon_{xx} \pm i\varepsilon_{xy} \quad (4.26)$$

$$\leftarrow (\hat{N}^2 - \varepsilon_{xx})^2 = -\varepsilon_{xy}^2 = (i\varepsilon_{xy})^2$$

- を得られます。これらの固有値に対応する固有関数は、

$$E_{\pm} = \frac{E_0}{2} (i \pm ij) \exp \left\{ -i\omega \left(t - \frac{\hat{N}_{\pm}}{c} z \right) \right\} \quad (4.27)$$

- E_+ 、 E_- は、それぞれ、右円偏光、左円偏光に対応します。

E^+ 、 E^- は、それぞれ、右円偏光、左円偏光に対応

$$E_+ = \frac{E_0}{2} (i + i j) \exp(-i\omega t)$$

実数部のみを考えると

$$\text{Re}(E_+) = \frac{E_0}{2} \{ \cos \omega t i + \sin \omega t j \}$$

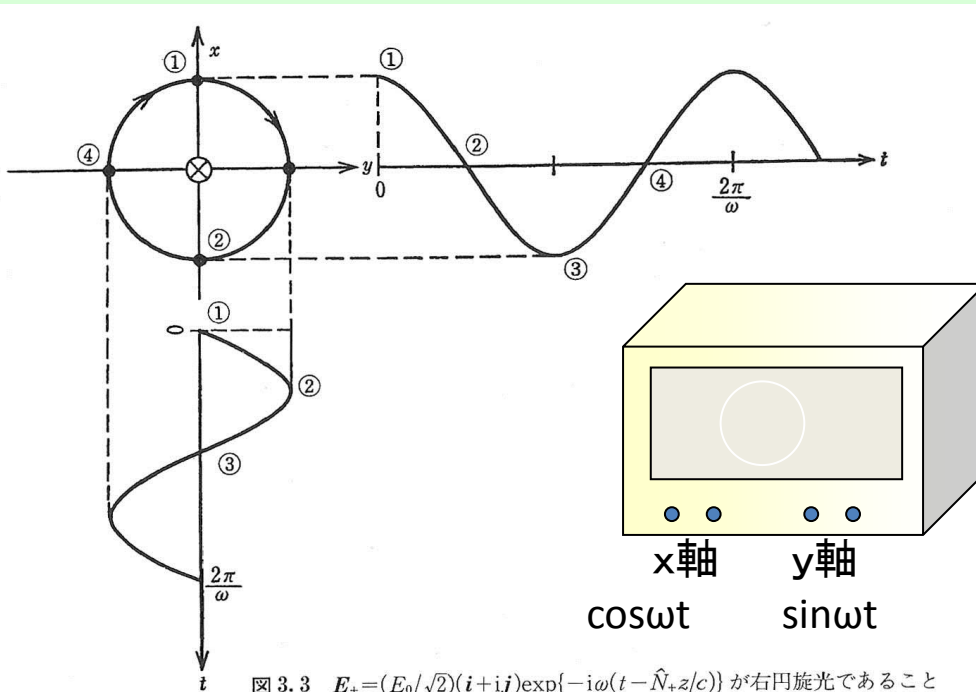


図 3.3 $E_+ = (E_0/\sqrt{2})(i + i j) \exp\{-i\omega(t - \hat{N}_+ z/c)\}$ が右円旋光であること

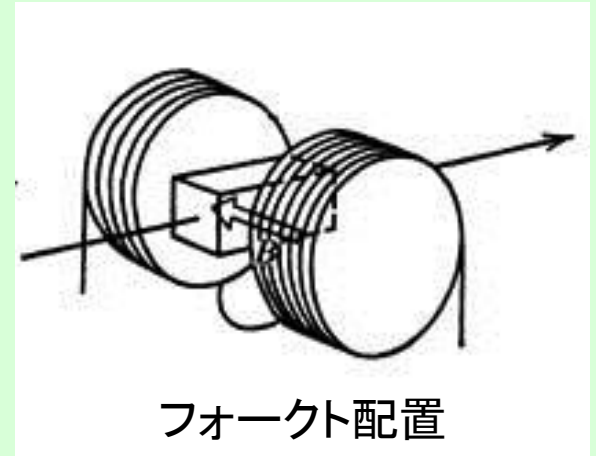
- 直交する2つの直線偏光の位相が90度異なっているときに合成したベクトルの軌跡は円になります。
- x軸に $\cos\omega t$ 、y軸に $\sin\omega t$ を入力したときのオシロスコープのリサージュ波形を思い出してください。

図の出典: 佐藤勝昭「光と磁気」

フォークト配置の場合

- N^2 の固有値として

- $$N_1^2 = \varepsilon_{xx} + \frac{\varepsilon_{xy}^2}{\varepsilon_{xx}}$$
 および
$$N_2^2 = \varepsilon_{zz}$$



という2つの解を得る。 N_1 および N_2 に対応する固有関数は

$$E_1 = A \exp\left\{-i\omega\left(t - \frac{N_1}{c}x\right)\right\}(\varepsilon_{xy}\mathbf{i} - \varepsilon_{xx}\mathbf{j})$$
$$E_2 = B \exp\left\{-i\omega\left(t - \frac{N_2}{c}x\right)\right\}\mathbf{k}$$

となり、複屈折を生じる。(コットンムートン効果)

左右円偏光に対する光学定数の差と誘電率テンソルの成分の関係

- 磁化と平行に進む光の複素屈折率の固有値は

$$N_{\pm}^2 = \varepsilon_{xx} \pm i\varepsilon_{xy}$$

- $N_+ = n_+ + i\kappa_+$ $N_- = n_- + i\kappa_-$

$$\Delta n = n_+ - n_-; \Delta\kappa = \kappa_+ - \kappa_-; n = \frac{n_+ + n_-}{2}; \kappa = \frac{\kappa_+ + \kappa_-}{2}$$

$$N_{\pm} = n \pm \frac{\Delta n}{2} + i \left(\kappa \pm \frac{\Delta\kappa}{2} \right) = (n + i\kappa) \pm \frac{1}{2} (\Delta n + i\Delta\kappa) \equiv N \pm \frac{1}{2} \Delta N$$

$$\Delta N = N_+ - N_- = \Delta n + i\Delta\kappa$$

- ここに

$$\varepsilon'_{xx} = n^2 - \kappa^2; \quad \varepsilon''_{xx} = 2n\kappa$$

- その結果

$$\varepsilon'_{xy} = n\Delta\kappa + \kappa\Delta n \quad \varepsilon''_{xy} = \kappa\Delta\kappa - n\Delta n$$

を得る

4.2.2のまとめ

- 光の伝搬をマクスウェルの方程式で記述すると、磁化された等方性物質の複素屈折率は

$$\hat{N}_{\pm}^2 = \varepsilon_{xx} \pm i\varepsilon_{xy}$$

で与えられる2つの固有値をとり、それぞれが右円偏光および左円偏光に対応します。

(ここに、 ε_{xx} は誘電テンソルの対角成分、 ε_{xy} は非対角成分です。)

- もし ε_{xy} が0であれば、円偏光は固有関数ではなく、磁気光学効果は生じません。

4. 磁気光学の基礎

磁気光学の電子論



4.3 磁気光学の電子論

4.3.1 磁気光学効果の古典電子論

4.3.2 磁気光学効果の量子論

4.3.1 磁気光学効果の古典電子論

- 4.3.1では、ローレンツの電子論に従って、電子を古典的な粒子として扱い、磁場中の古典的運動方程式を解いて電子の変位を求め、分極や誘電率を計算します。



Hendrik Antoon Lorentz
オランダLeiden大学教授



1853年7月18日 - 1928年2月4日

誘電率と電気分極

- 物質中の電束密度は D は、真空中での電束密度 $\varepsilon_0 E$ に物質の電気分極 P がもたらす電束密度を付け加えたものとなっています。

$$D \equiv \tilde{\varepsilon} \varepsilon_0 E = \varepsilon_0 E + P \quad (4.3.1)$$

- 一般に、電気分極 P は印加電圧に依存し、電気感受率テンソルを用いて、次式のように表せます。

$$P = \varepsilon_0 \tilde{\chi} E \quad (4.3.2)$$

$$\text{比誘電率テンソルは } \tilde{\varepsilon} = 1 + \tilde{\chi} \quad (4.3.3)$$

$$\text{成分で書くと } \varepsilon_{ij} = \delta_{ij} + \chi_{ij} \quad (4.3.4)$$

電気分極は、電気双極子の総和

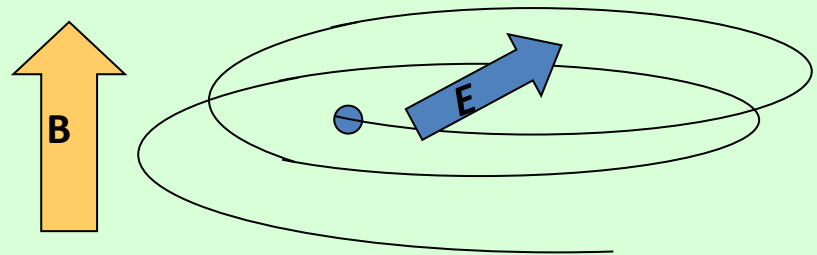
- 電気分極 P は単位体積あたりの電気双極子の総和を表しているので、電気双極子(電荷 $\pm q$ 、距離 u)密度を N とすると、 P は次式であらわされます。

$$P = Nqu \quad (4.3.5)$$

- したがって、電界 E を加えたときの電荷対の相対変位 u を見積もることができれば、電気感受率、ひいては、比誘電率を求めることができます。

電界・磁界のもとにおける 荷電粒子の運動

- 古典力学の運動方程式を考えます。
 - 荷電粒子の電荷 q [C], 質量 m [kg]
 - 荷電粒子の変位 $\mathbf{u}=(x, y, z)$ [m]
 - 慣性力 $m d^2\mathbf{u}/dt^2$
 - 摩擦力 $m\gamma d\mathbf{u}/dt$
 - Lorentz力 $q(\mathbf{E}+\mathbf{v}\times\mathbf{B})=q(\mathbf{E}+d\mathbf{u}/dt\times\mathbf{B})$



運動方程式の振動解

運動方程式 $m \frac{d^2 u}{dt^2} + m\gamma \frac{du}{dt} + m\omega_0^2 u = q \left(E + \frac{du}{dt} \times B \right)$ (4.3.6)

$\mathbf{B} = (0, 0, B)$ (磁界はz方向を向いているとします。)

$E = E_0 \exp(-i\omega t)$ $\mathbf{u} = \mathbf{u}_0 \exp(-i\omega t)$ (振動解を仮定します。)

$$-m\omega^2 \mathbf{u} - i m \omega \gamma \mathbf{u} + m\omega_0^2 \mathbf{u} = q(\mathbf{E} - i\omega \mathbf{u} \times \mathbf{B})$$
 (4.3.7)

$$\left. \begin{aligned} m(\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2)x - i\omega q B y &= -q E_x \\ i\omega q B x + m(\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2)y &= -q E_y \\ m(\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2)z &= -q E_z \end{aligned} \right\} (4.3.8)$$

という連立方程式が得られます。

変位 u を求める

- 連立方程式を解いて、変位 $u=(x, y, z)$ を求めます。

$$x = -\frac{q}{m} \frac{\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2}{\left(\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2\right)^2 - \omega^2\omega_c^2} E_x - \frac{q}{m} \frac{i\omega\omega_c}{\left(\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2\right)^2 - \omega^2\omega_c^2} E_y$$

$$y = \frac{q}{m} \frac{i\omega\omega_c}{\left(\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2\right)^2 - \omega^2\omega_c^2} E_x - \frac{q}{m} \frac{\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2}{\left(\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2\right)^2 - \omega^2\omega_c^2} E_y$$

$$z = -\frac{q}{m} \frac{1}{\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2} E_z$$

電気分極*P*を求める

- $P=nqu$ により分極*P*を求めます。

$$P_x = -\frac{nq^2}{m} \frac{\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2}{(\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2)^2 - \omega^2\omega_c^2} E_x - \frac{nq^2}{m} \frac{i\omega\omega_c}{(\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2)^2 - \omega^2\omega_c^2} E_y$$

$$P_y = \frac{nq^2}{m} \frac{i\omega\omega_c}{(\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2)^2 - \omega^2\omega_c^2} E_x - \frac{nq^2}{m} \frac{\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2}{(\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2)^2 - \omega^2\omega_c^2} E_y$$

$$P_z = -\frac{nq^2}{m} \frac{1}{\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2} E_z$$

ここに

$$\omega_c = qB/m$$

はサイクロトロン
角振動数です。

電気感受率を求める

- $P = \chi \varepsilon_0 E$ により電気感受率 χ を求めます。

$$P_x = \varepsilon_0 (\chi_{xx} E_x + \chi_{xy} E_y)$$

$$P_y = \varepsilon_0 (-\chi_{xy} E_x + \chi_{xx} E_y)$$

$$P_z = \varepsilon_0 \chi_{zz} E_z$$

$$\omega_c = qB/m$$

より、非対角成分は磁界に比例することがわかります。

$$\chi_{xx}(\omega) = -\frac{nq^2}{m\varepsilon_0} \cdot \frac{\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2}{(\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2)^2 - \omega^2 \omega_c^2}$$

$$\chi_{xy}(\omega) = -\frac{nq^2}{m\varepsilon_0} \cdot \frac{i\omega\omega_c}{(\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2)^2 - \omega^2 \omega_c^2} \quad (4.3.9)$$

$$\chi_{zz}(\omega) = -\frac{nq^2}{m\varepsilon_0} \cdot \frac{1}{\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2}$$

が得られます。

誘電率に変換する

- $\varepsilon_{ij} = \delta_{ij} + \chi_{ij}$ を用いて、誘電率テンソルに変換します。

$$\varepsilon_{xx}(\omega) = 1 - \frac{nq^2}{m\varepsilon_0} \cdot \frac{\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2}{(\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2)^2 - \omega^2\omega_c^2}$$

$$\omega_c = qB/m$$

$$\varepsilon_{xy}(\omega) = -\frac{nq^2}{m\varepsilon_0} \cdot \frac{i\omega\omega_c}{(\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2)^2 - \omega^2\omega_c^2} \quad (4.3.10)$$

$$\varepsilon_{zz}(\omega) = 1 - \frac{nq^2}{m\varepsilon_0} \cdot \frac{1}{\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2}$$

伝導率テンソルであらわすと

- (4.10)式を σ で書き直すと

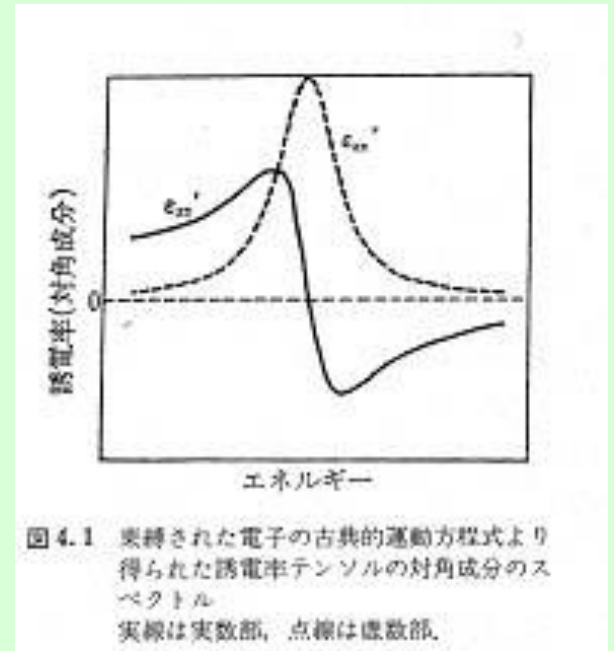
$$\begin{aligned}\sigma_{xx}(\omega) &= i\omega \frac{nq^2}{m} \cdot \frac{\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2}{(\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2)^2 - \omega^2\omega_c^2} \\ \sigma_{xy}(\omega) &= -\frac{nq^2}{m\epsilon_0} \cdot \frac{\omega^2\omega_c}{(\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2)^2 - \omega^2\omega_c^2} \\ \sigma_{zz}(\omega) &= i\omega \frac{nq^2}{m\epsilon_0} \cdot \frac{1}{\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2}\end{aligned}\tag{4.3.11}$$

磁界ゼロの場合：ローレンツの式

- $B=0$ なので $\omega_c=0$ を代入するとLorentzの分散式が得られます。

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_{xx}(\omega) = \varepsilon_{zz}(\omega) &= 1 - \frac{nq^2}{m\varepsilon_0} \cdot \frac{1}{\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2} \\ \varepsilon_{xy}(\omega) &= 0 \end{aligned} \right\} (4.3.12)$$

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon'_{xx}(\omega) &= 1 - \frac{nq^2}{m\varepsilon_0} \cdot \frac{\omega^2 - \omega_0^2}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \omega^2\gamma^2} \\ \varepsilon''_{xx}(\omega) &= \frac{nq^2}{m\varepsilon_0} \cdot \frac{\omega\gamma}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \omega^2\gamma^2} \end{aligned} \right\} (4.3.13)$$



磁界がなく, 束縛項もない場合: ドルーデの式

- $\omega_c=0, \omega_0=0$ とおくとDrudeの式が得られます。

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_{xx}(\omega) = \varepsilon_{zz}(\omega) &= 1 - \frac{nq^2}{m\varepsilon_0} \cdot \frac{1}{\omega(\omega + i\gamma)} \\ \varepsilon_{xy}(\omega) &= 0 \end{aligned} \right\} (4.3.14)$$

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon'_{xx}(\omega) &= 1 - \frac{nq^2}{m\varepsilon_0} \cdot \frac{1}{\omega^2 + \gamma^2} \\ \varepsilon''_{xx}(\omega) &= \frac{nq^2}{m\varepsilon_0} \cdot \frac{\gamma}{\omega(\omega^2 + \gamma^2)} \end{aligned} \right\} (4.3.15)$$

$\omega = \omega_p'$ のとき実数部はゼロを横切ります。

$\omega \rightarrow 0$ のとき虚数部は発散します。

$$\omega_p' = \sqrt{\omega_p^2 - \gamma^2} \quad \omega_p^2 = \frac{nq^2}{m\varepsilon_0}$$

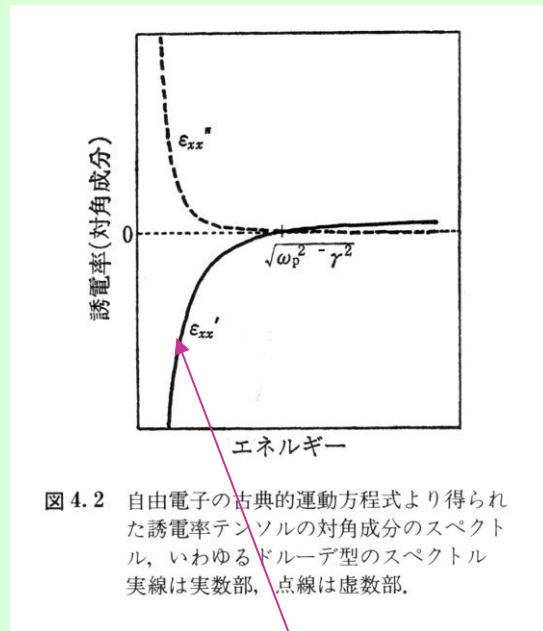


図 4.2 自由電子の古典的運動方程式より得られた誘電率テンソルの対角成分のスペクトル, いわゆるドルーデ型のスペクトル
実線は実数部, 点線は虚数部.

負の誘電率

プラズマ振動数

- Drudeの式で、ダンピング項 γ を0としたとき、 ε の実数部が0となる振動数を自由電子プラズマ振動数 ω_p とよび下の式で求められます。

$$\varepsilon'_{xx}(\omega) = 1 - \frac{nq^2}{m\varepsilon_0} \cdot \frac{1}{\omega_p^2} = 0 \quad \longrightarrow \quad \omega_p = \sqrt{\frac{nq^2}{m\varepsilon_0}}$$

ダンピングのある場合のDrudeの式を ω_p を使って書き直すと

$$\varepsilon'_{xx}(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \gamma^2} \quad \longrightarrow \quad \omega'_p = \sqrt{\omega_p^2 - \gamma^2}$$

$\varepsilon''_{xx}(\omega) = \frac{\gamma\omega_p^2}{\omega(\omega^2 + \gamma^2)}$

においてゼロを横切ります

FAQ

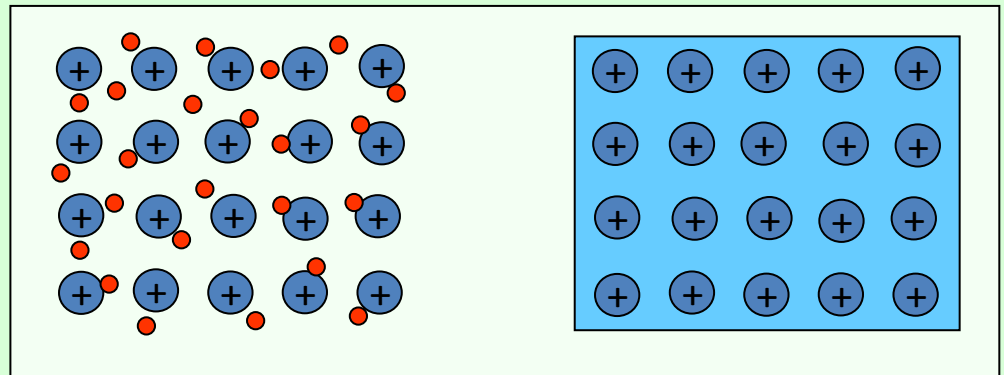
金属中の電子はなぜ自由電子と見なせるのか

- 金属では、構成している原子が外殻電子を放出して結晶全体に広がる電子の海を作っています。
- この電子の海による遮蔽効果で、原子核の正電荷からのクーロンポテンシャルは非常に弱められています。
- このため、電子はあたかも自由電子のように振る舞うのです。実際、有効質量もほとんど自由電子質量と一致すると言われていています。

FAQ

金属結合

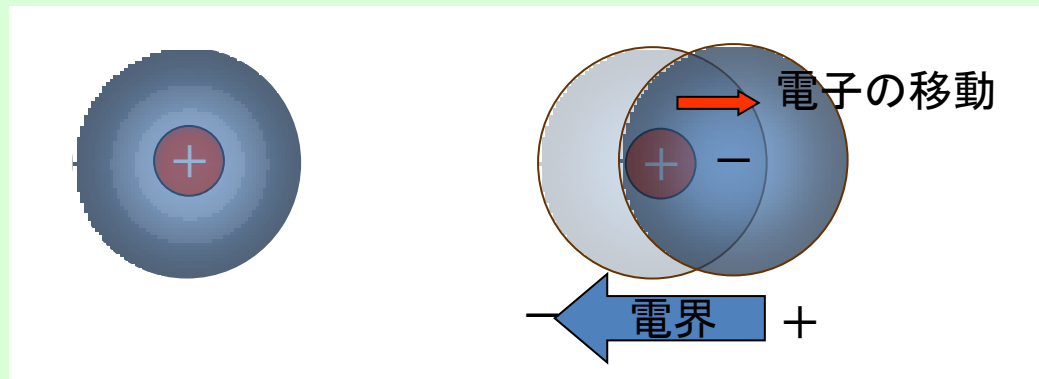
- 金属においては、原子同士が接近していて、外殻のs電子は互いに重なり合い、各軌道は2個の電子しか収容できないので膨大な数の分子軌道を形成しています。
- 電子は、それらの分子軌道を自由に行き来し、もとの電子軌道から離れて結晶全体に広がります。これを非局在化といいます。
- 正の原子核と負の非局在電子の間には強い引力が働き、金属の凝集が起きます。
- この状態を指して、**電子の海に正の原子核が浮かんでいる**と表現されます。



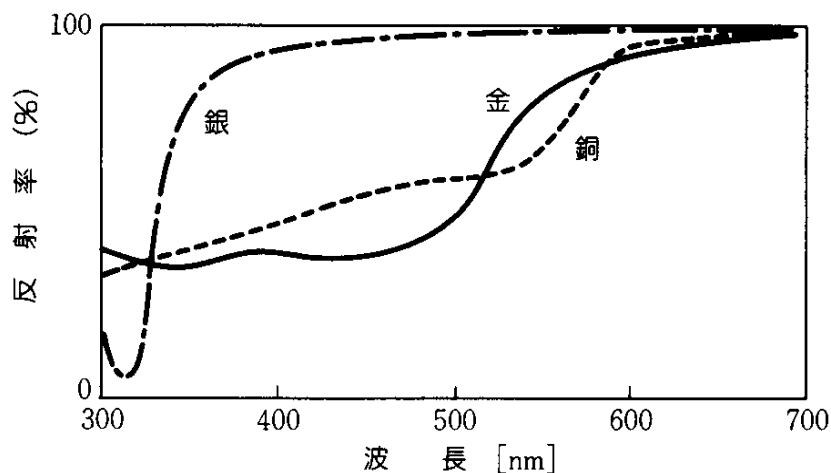
FAQ

自由電子とプラズマとの関係が分からない

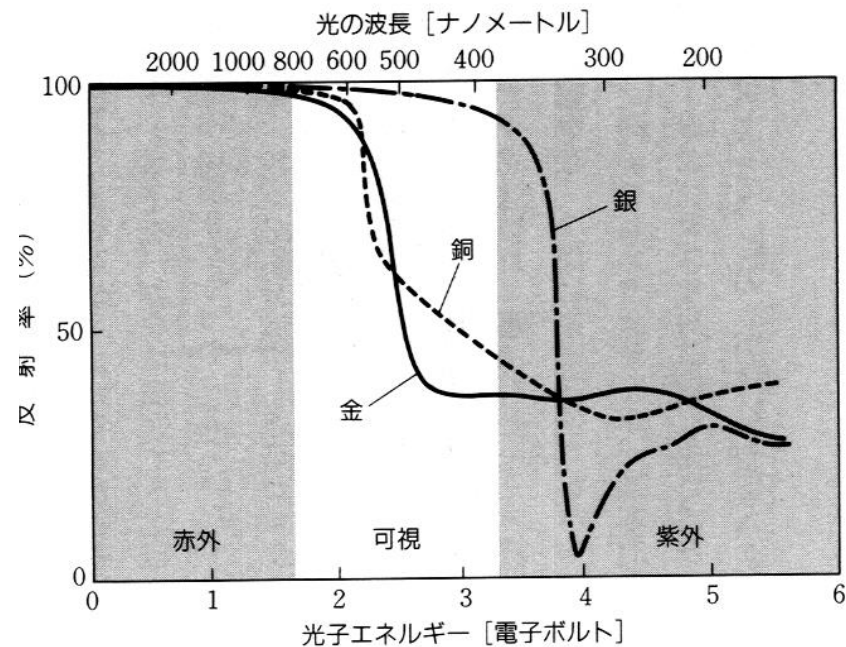
- 金属は電子がたくさんありますが、全体としては中性です。これは、電子による負電荷の分布の中心と原子核の正電荷の中心が一致しているからです。
- 光の電界を受けて電子が+側に移動すると、一側には正電荷が残されます。この結果電気分極が生じるのですが、このように正電荷と負電荷が空間的に分離した状態をプラズマというのです。



金銀銅の反射スペクトル



波長表示



エネルギー表示

$$E[\text{J}] = h[\text{J} \cdot \text{s}] \nu[\text{s}^{-1}] = \frac{h[\text{J} \cdot \text{s}] c[\text{m} \cdot \text{s}^{-1}]}{\lambda[\text{m}]}$$

$$E[\text{eV}] = \frac{h[\text{J} \cdot \text{s}] c[\text{m} \cdot \text{s}^{-1}]}{\lambda[\text{m}] e[\text{C}]} = \frac{6.626 \times 10^{-34} \times 2.998 \times 10^8}{\lambda[\text{nm}] \times 10^{-9} \times 1.602 \times 10^{-19}} = \frac{1240}{\lambda[\text{nm}]}$$

FAQ

貴金属の選択反射の原因

- 金属中に光がはいると金属中に振動電界ができ、この電界を受けて自由電子が加速され集団的に動きます。
- 電子はマイナスの電荷を持っているので、電位の高い方に引き寄せられます。その結果電位の高い方にマイナスの電荷がたまり、電位の低い側にプラスの電荷がたまって、**電気分極**が起きます。
- 外から金属に光の電界が進入しようとする時、逆向きの電気分極が生じて電界を遮蔽してしまっていて、**光は金属中に入れません**。光が入れないということは、いいかえれば、光が全部反射されてしまうということを意味します。

磁界がかかっており束縛項がない場合： マグネトプラズマ共鳴

- $\omega_0=0, \gamma=0$ を代入しますと

$$\varepsilon_{xx}(\omega) = 1 - \frac{nq^2}{m\varepsilon_0} \cdot \frac{1}{\omega^2 - \omega_c^2} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - \omega_c^2}$$

$$\varepsilon_{xy}(\omega) = \frac{nq^2}{m\varepsilon_0} \cdot \frac{-i\omega_c}{\omega(\omega^2 - \omega_c^2)} = -i \frac{\omega_p^2 \omega_c}{\omega(\omega^2 - \omega_c^2)}$$

$$\varepsilon_{zz}(\omega) = 1 - \frac{nq^2}{m\varepsilon_0} \frac{1}{\omega^2} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$$

$\omega^2 = \omega_p^2 + \omega_c^2$ で
ゼロを横切る

マグネトプラズマ共鳴

$\omega = \omega_c$ で発散

マグネトプラズマ共鳴の伝導率表現

- $\sigma_{ij} = -i\omega\varepsilon_0(\varepsilon_{ij} - \delta_{ij})$ により σ に変換すると

$$\sigma_{xx}(\omega) = -i\omega\varepsilon_0(\varepsilon_{zz} - 1) = \frac{i\omega\omega_p^2\varepsilon_0}{\omega^2 - \omega_c^2}$$

$$\sigma_{xy}(\omega) = -i\omega\varepsilon_0\varepsilon_{xy} = -\frac{\omega_p^2\omega_c}{\omega^2 - \omega_c^2}\varepsilon_0$$

$$\sigma_{zz}(\omega) = -i\omega\varepsilon_0(\varepsilon_{zz} - 1) = \frac{i\omega_p^2\varepsilon_0}{\omega}$$

(4.3.17)

ホール効果

(直流において、自由電子のみを考え、磁界のある場合)

DCにおいては、 $\omega \rightarrow 0$ とすることにより、次式を得ます。 σ_{xy} はx方向に電流が流れたときy方向に電圧が生じることを表していますから、まさにホール効果を記述するものとなっています。

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{xx}(0) &= \frac{nq^2}{m} \cdot \frac{\gamma}{\omega_c^2 + \gamma^2} = nq \frac{q}{m\gamma} \frac{\gamma^2}{\omega_c^2 + \gamma^2} = nq\mu \frac{\gamma^2}{\omega_c^2 + \gamma^2} = \frac{\sigma_0}{(\omega_c/\gamma)^2 + 1} \\ \sigma_{xy}(0) &= -\frac{nq^2}{m} \cdot \frac{\omega_c}{\omega_c^2 + \gamma^2} = -nq \frac{q}{m\gamma} \frac{\gamma\omega_c}{\omega_c^2 + \gamma^2} = -\sigma_0 \frac{\omega_c/\gamma}{(\omega_c/\gamma)^2 + 1} \\ \sigma_{zz}(0) &= \frac{nq^2}{m} \cdot \frac{1}{\gamma} = nq \frac{q}{m\gamma} = nq\mu = \sigma_0 \end{aligned} \right\} \quad (4.3.18)$$

ここに σ_0 は直流伝導率です。**抵抗率テンソル**に変換すると次式になります。

$$\left. \begin{aligned} \rho_{xx} = \rho_{zz} &= \frac{1}{\sigma_0} \\ \rho_{xy} &= R_H B \end{aligned} \right\} \quad (4.3.19)$$

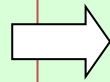
$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} 1/\sigma_0 & -R_H B & 0 \\ R_H B & 1/\sigma_0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/\sigma_0 \end{pmatrix}$$

磁界がかかっている、束縛がなく、 散乱のない場合

$$\varepsilon_{xx}(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - \omega_c^2}$$

$$\varepsilon_{xy}(\omega) = -i \frac{\omega_p^2 \omega_c}{\omega(\omega^2 - \omega_c^2)}$$

$$\varepsilon_{zz}(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$$



$$N_{\pm}^2 = \varepsilon_{xx} \pm i\varepsilon_{xy} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega^2 - \omega_c^2)}(\omega \pm \omega_c) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega \mp \omega_c)}$$

(4.3.21)

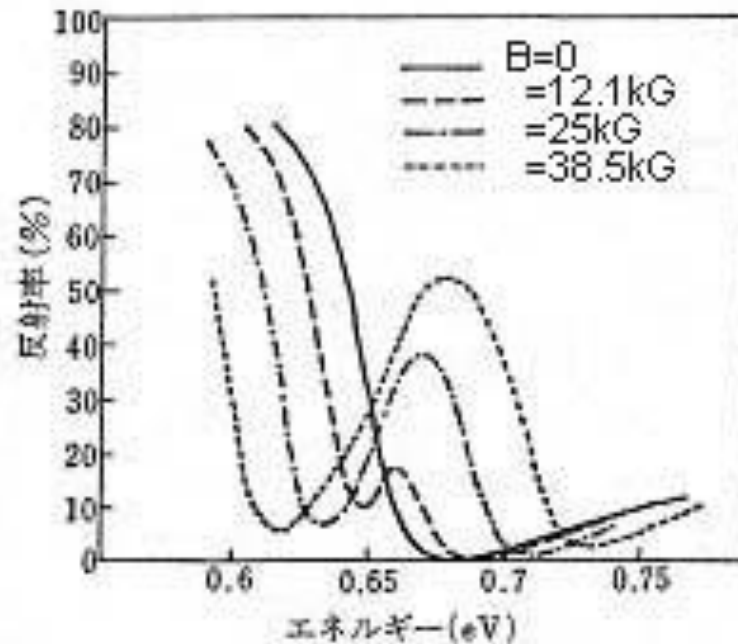


図 4.3 InSb のマグネトプラズマ反射スペクトル¹⁾

Feの磁気光学効果は古典電子論で説明できるか？

$$\varepsilon_{xy}(\omega) = -\frac{nq^2}{m\varepsilon_0} \cdot \frac{i\omega\omega_c}{\left(\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2\right)^2 - \omega^2\omega_c^2} \quad (4.3.10)$$

- 比誘電率の非対角成分の大きさ: 最大5の程度

$$\left. \begin{array}{l} \text{キャリア密度 } n = 10^{22} \text{ cm}^{-3} = 10^{28} \text{ m}^{-3} \\ \hbar\omega = \hbar\omega_0 = 2\text{eV} \quad \hbar\gamma = 0.1\text{eV} \end{array} \right\} \text{と仮定}$$

⇒ $B=3000\text{T}$ という非現実的な磁界が必要

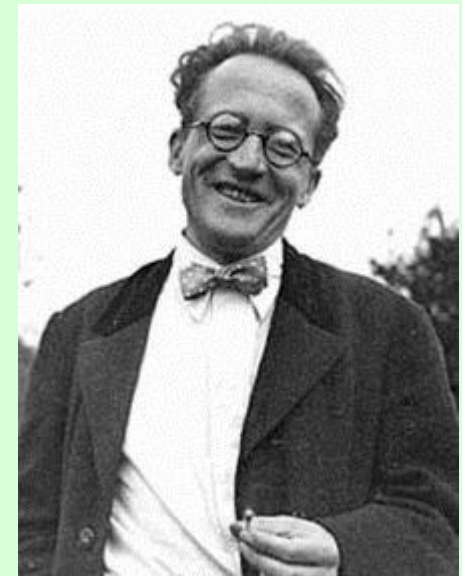
⇒ **磁気光学効果の量子論**

- スピン軌道相互作用によって初めて説明可能

4.3.1 のまとめ

- 古典電子論に従えば、誘電率テンソルの対角成分、非対角成分ともLorentz型のスペクトルで表されることが導かれました。
- 磁気光学効果をもたらす非対角成分は、磁気によるローレンツ力から生じます。
- 強磁性体の磁気光学効果を説明するには、現実には存在しないような強い内部磁界が存在すると仮定しなければならないことがわかりました。

4.3.2 磁気光学効果の量子論



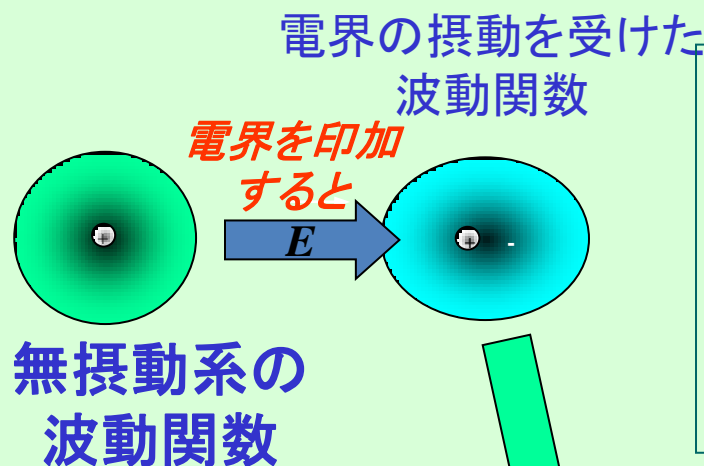
Erwin Schrödinger
Vienna 1887-1961



量子論に向けて

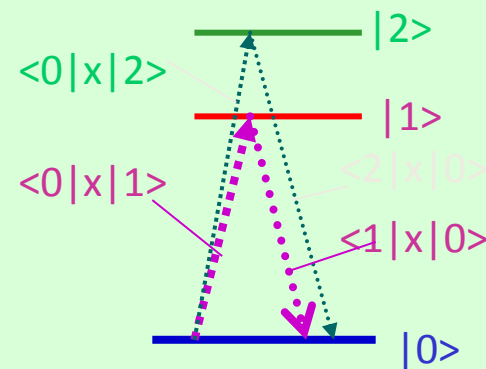
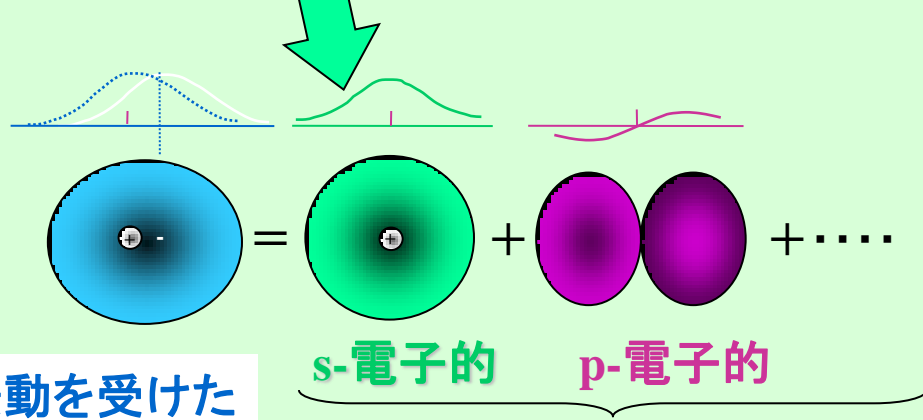
- 古典電子論では、電子が原子核にバネで結びついているイメージで説明しました。
- しかし、実際には、電子は原子核の付近にクーロン力で束縛され、その軌道のエネルギーは、量子数で指定されるとびとびの値をとります。
- 誘電率とは、物質に電界が加わったときの分極のできやすさを表す物理量です。分極とは、電界によって電子の波動関数の分布の形がゆがみ、重心(負電荷)が原子核(正電荷)の位置からずれることを意味します。
- 波動関数の分布のゆがみは、量子力学では、基底状態の波動関数に、励起状態の波動関数が混じり込むことによって生じます。この変化の様子を説明するのが「摂動論」です。

電子分極のミクロな扱い: 対角成分



$$\chi_{xx}(\omega) = \frac{2Nq^2}{\hbar\epsilon_0} \sum_j \omega_{j0} |\langle j|x|0\rangle|^2 \left[\frac{1}{\omega_{j0}^2 - \omega^2} \right]$$

$$= \frac{2Nq^2}{\hbar\epsilon_0} \left(\frac{\omega_{10} |\langle 1|x|0\rangle|^2}{\omega_{10}^2 - \omega^2} + \frac{\omega_{20} |\langle 2|x|0\rangle|^2}{\omega_{20}^2 - \omega^2} + \dots \right)$$



量子力学入門

- 量子力学では、電子は波動関数 φ で表されます。
- 波動関数の絶対値の2乗 $|\varphi|^2$ が存在確率を与えます。
- 電子の状態を記述するには、運動方程式の代わりに、シュレーディンガーの波動方程式を用います。
- シュレーディンガー方程式は、 $H\varphi=E\varphi$ と書きます。
ここに H はハミルトニアン演算子、 E はエネルギーの固有値です。
- ハミルトニアン演算子 H は、運動量演算子 p 、ポテンシャルエネルギー演算子 V を用いて $H=-(1/2m)p^2+V$ となります。ここに p は、
 $p = -i\hbar\nabla$ によって表される演算子です。
- 運動量の期待値は、 p を φ^* と φ で挟み全空間で積分して求めます。

$$\langle p \rangle = \frac{\int \varphi^* p \varphi d\tau}{\int \varphi^* \varphi d\tau}$$

電気分極と摂動論

- **電気分極**とは、「電界によって正負の電荷がずれることにより誘起された**電気双極子**の単位体積における総和」のことを表します。
- 「電界の効果」を、電界を与える前の系(無摂動系)のハミルトニアンに対する「**摂動**」として扱います。
- 「摂動を受けた場合の波動関数」を「無摂動系の固有関数」の1次結合として展開。この波動関数を用いて「電気双極子の期待値」を計算します。

量子力学から導かれた 誘電率の対角成分

古典電子論と同様のLorentz型曲線となる。

$$\varepsilon_{xx}(\omega) = 1 + \frac{Ne^2}{m\varepsilon_0} \sum_j f_{xj} \frac{1}{(\omega_{j0}^2 - \omega^2 + \gamma^2) + 2i\gamma\omega}$$

ここに $f_{xj} = 2m\omega_{j0} |\langle j|x|0\rangle|^2 / \hbar$

は、光学遷移の振動子強度

量子力学から導かれた 誘電率の非対角成分

古典電子論と同様のLorentz型曲線となる。

$$\varepsilon_{xy} = \chi_{xy}(\omega) = -i \frac{Nq^2}{2m\varepsilon_0} \sum_j \frac{f_{j0}^+ - f_{j0}^-}{\omega_{j0}^2 - (\omega + i\gamma)^2}$$

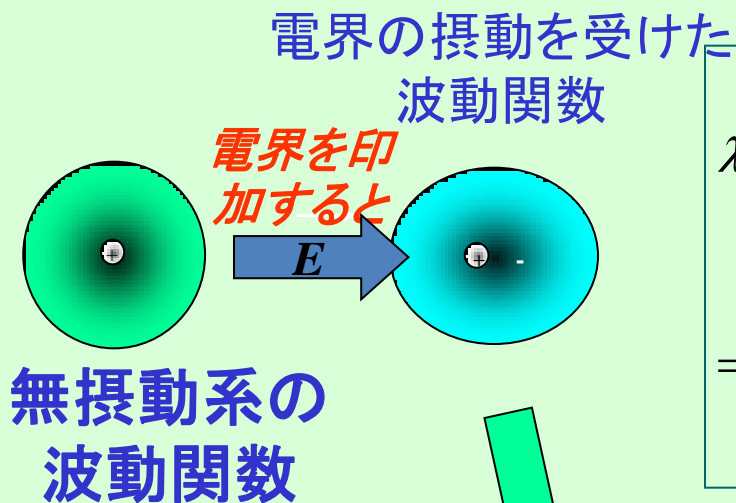
ここに $f_{j0}^{\pm} = \frac{m\omega_{j0} \left| \langle j | x^{\pm} | 0 \rangle \right|^2}{\hbar}$

は、右回り(+)および左回り(-)の円偏光による
光学遷移の振動子強度

磁化の存在がどう寄与するか

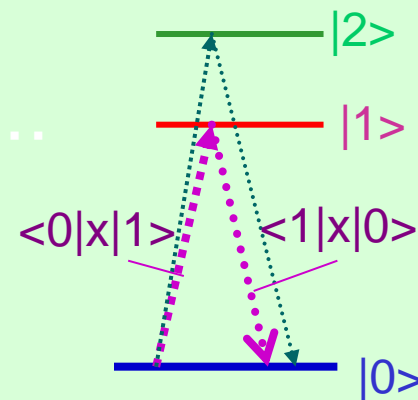
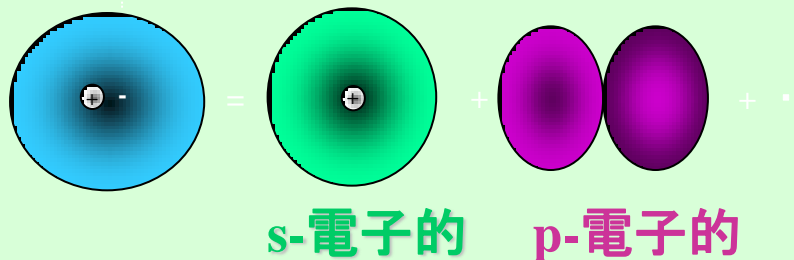
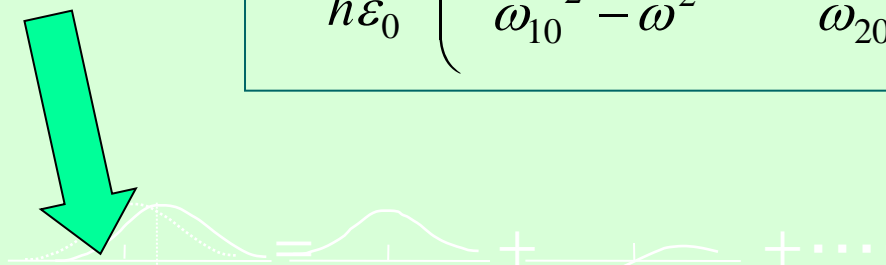
- 磁化が存在するとスピン状態が分裂する。
 - しかし左右円偏光の選択則には影響しない。
- スピン軌道相互作用があって初めて軌道状態の分裂に結びつく。
- 右(左)回り光吸収は右(左)回り電子運動を誘起する。
- 以下では、磁気光学の量子論を図を使って説明する。

電子分極のミクロな扱い: 対角成分



$$\chi_{xx}(\omega) = \frac{2Nq^2}{\hbar\epsilon_0} \sum_j \omega_{j0} |\langle j|x|0\rangle|^2 \left[\frac{1}{\omega_{j0}^2 - \omega^2} \right]$$

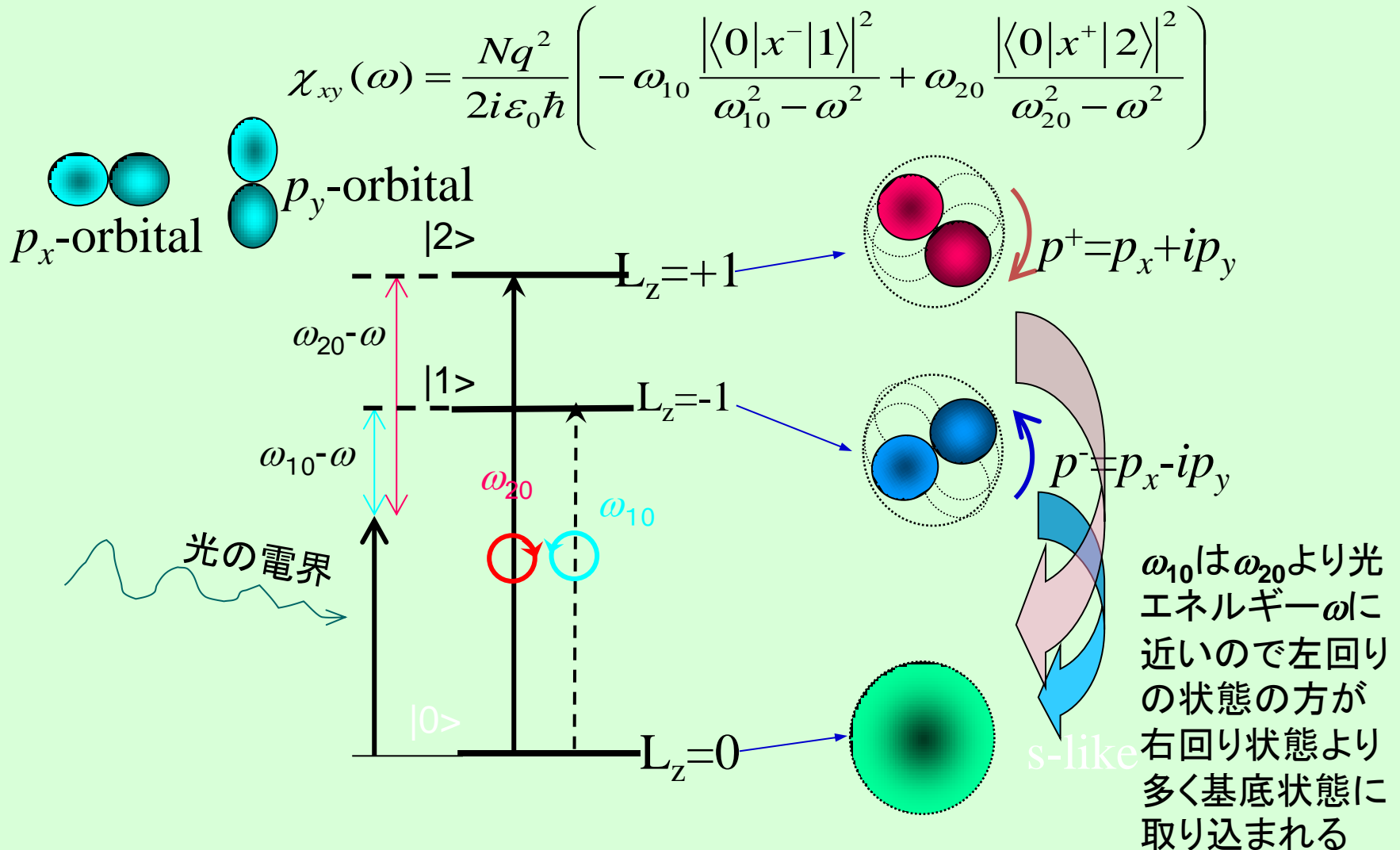
$$= \frac{2Nq^2}{\hbar\epsilon_0} \left(\frac{\omega_{10} |\langle 1|x|0\rangle|^2}{\omega_{10}^2 - \omega^2} + \frac{\omega_{20} |\langle 2|x|0\rangle|^2}{\omega_{20}^2 - \omega^2} + \dots \right)$$



摂動を受けた
波動関数

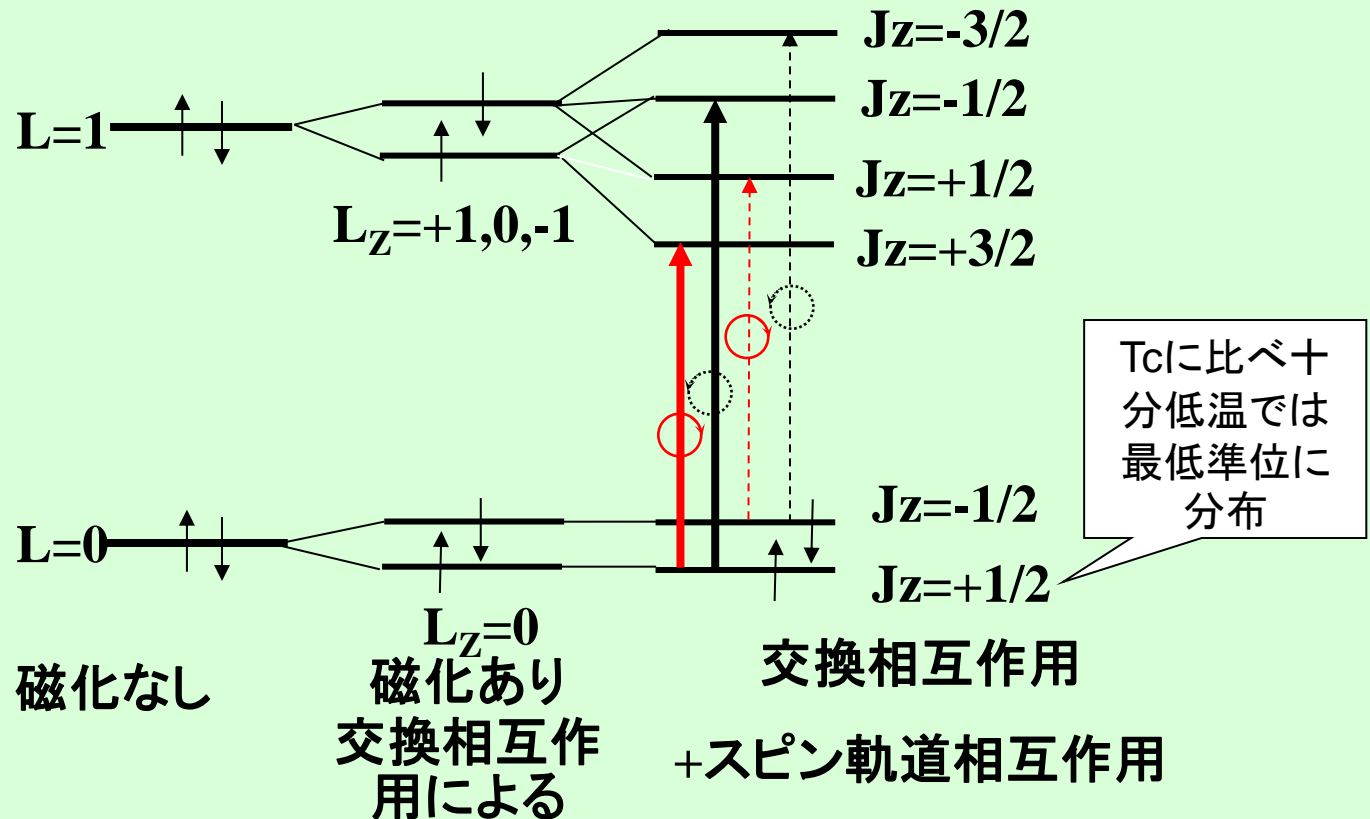
無摂動系の固有関数で展開

円偏光の吸収と電子構造：非対角成分



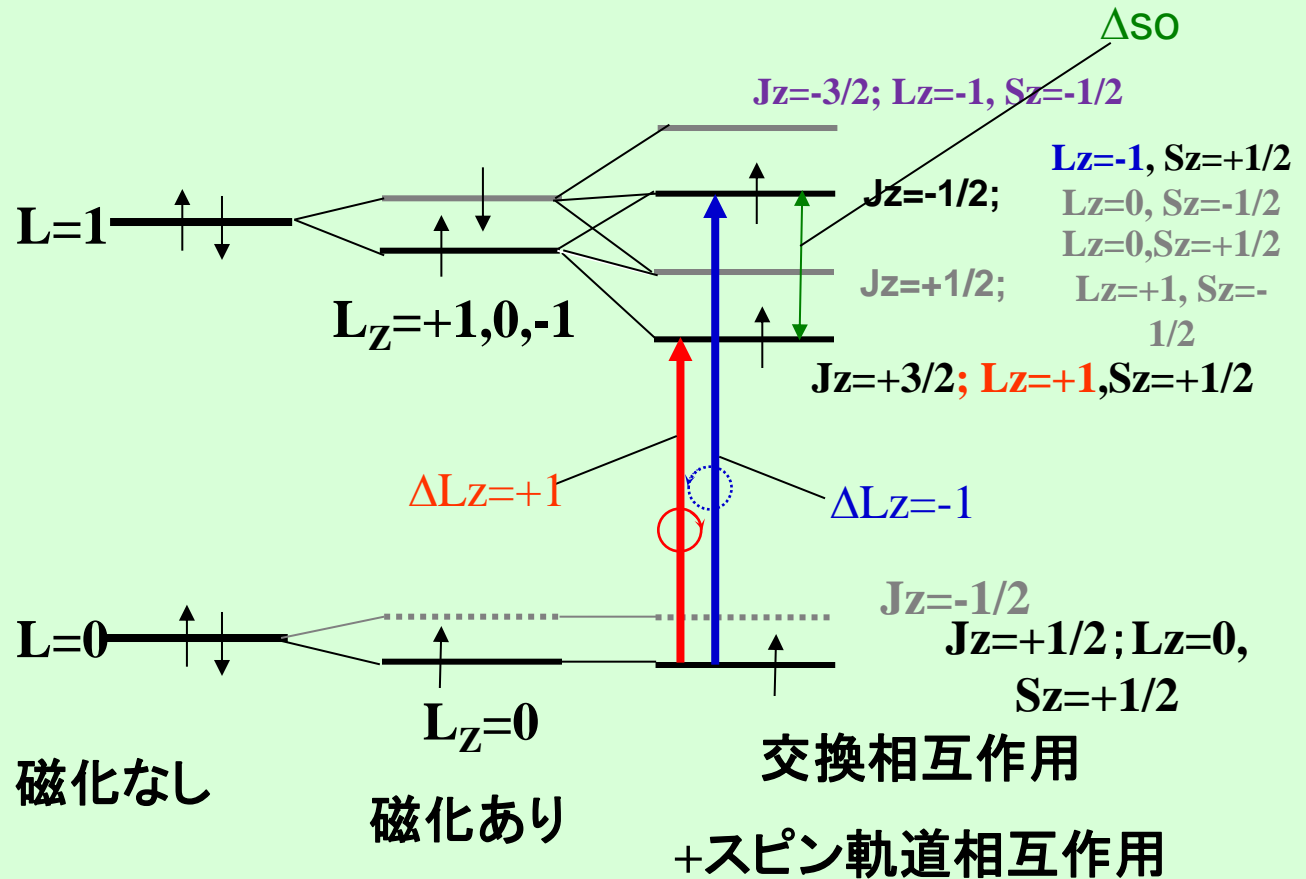
スピン軌道相互作用の重要性

- 磁化があるだけでは、軌道状態は分裂しません。
スピン軌道相互作用があるために



スピン軌道相互作用の重要性

- T_c に比べ十分低温では最低準位にのみ分布



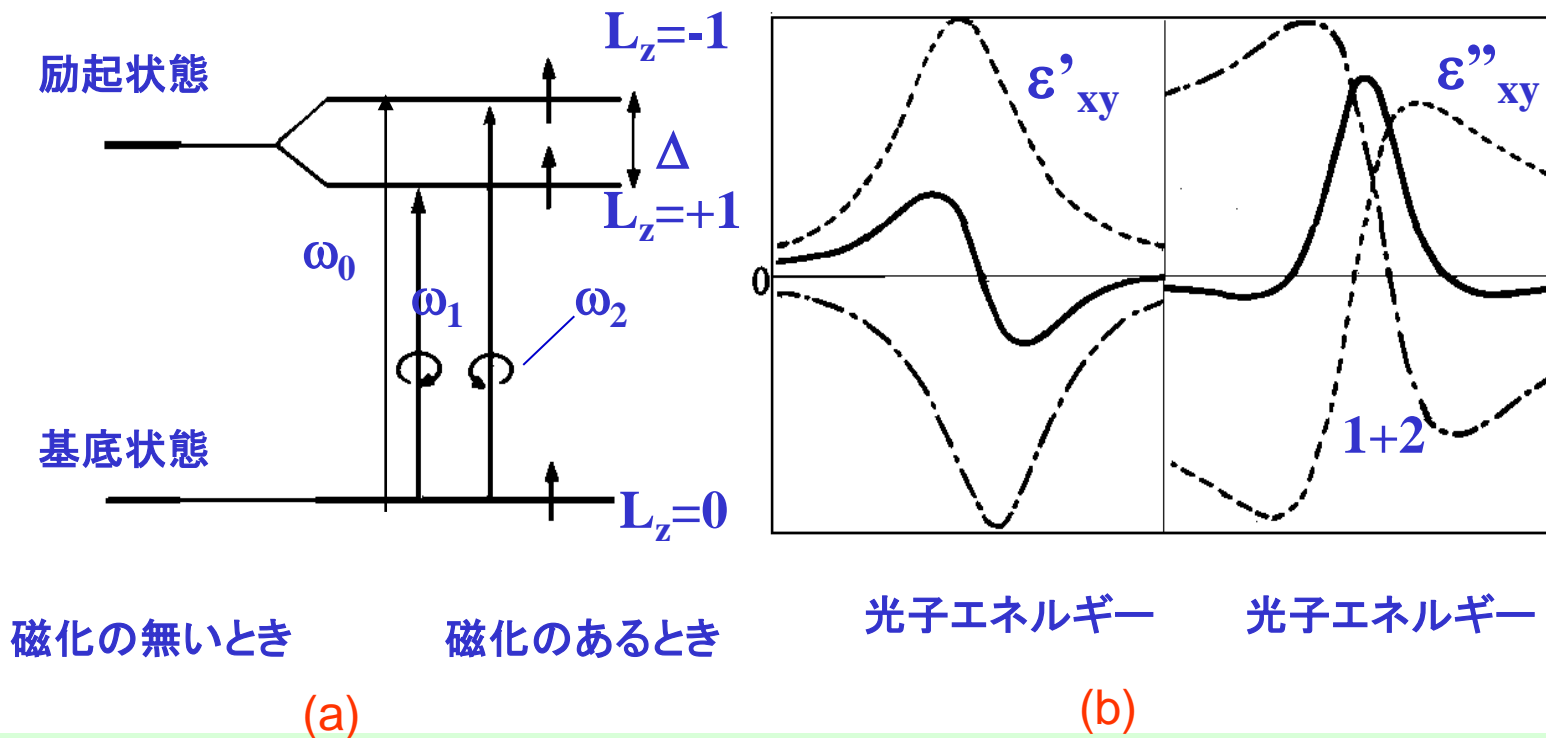
磁気光学スペクトルの形

(1)局在電子系

- 磁気光学効果スペクトルは式(4.38)をきちんと計算すれば、説明できるはずのものだが、単純化するために、遷移の性質により、典型的な2つの場合にわけている。
- 励起状態がスピン軌道相互作用で分かれた2つの電子準位からなる場合は、伝統的に**反磁性項**と呼ぶ。
- 一方、励起電子準位が1つで、基底状態との間の左右円偏光による光学遷移確率異なる場合は、伝統的に**常磁性項**とよぶ。

反磁性型スペクトル

- 図(a)のような電子構造を考えます。基底状態として交換分裂した最低のエネルギー準位を考える。このときの誘電率の非対角成分の実数部・虚数部は図(b)のように表される。



反磁性スペクトルの誘電率の式

- 図(a)のような準位図を考えたときの誘電率の非対角成分は次式になる。

$$\varepsilon'_{xy} = \frac{Ne^2 f_0 \Delta_{so}}{2m\varepsilon_0 \omega \tau} \cdot \frac{\omega_0 - \omega}{\left((\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2\right)^2}$$

$$\varepsilon''_{xy} = -\frac{Ne^2 f_0 \Delta_{so}}{4m\varepsilon_0 \omega} \cdot \frac{(\omega_0 - \omega)^2 - \gamma^2}{\left\{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2\right\}^2}$$

これを図示したのが図(b)の実線である。すなわち、 ε_{xy} の
実数部は分散型、虚数部は両側に翼のあるベル型となる。

誘電率の非対角成分のピーク値

- 大きな磁気光学効果を示す物質では、ほとんど、ここに述べた反磁性型スペクトルとなっている。 $\omega=\omega_0$ において ε_{xy}'' のピーク値は

$$\varepsilon_{xy}'' \Big|_{peak} = \frac{Ne^2 f \Delta_{so}}{4m\varepsilon_0 \omega \gamma^2}$$

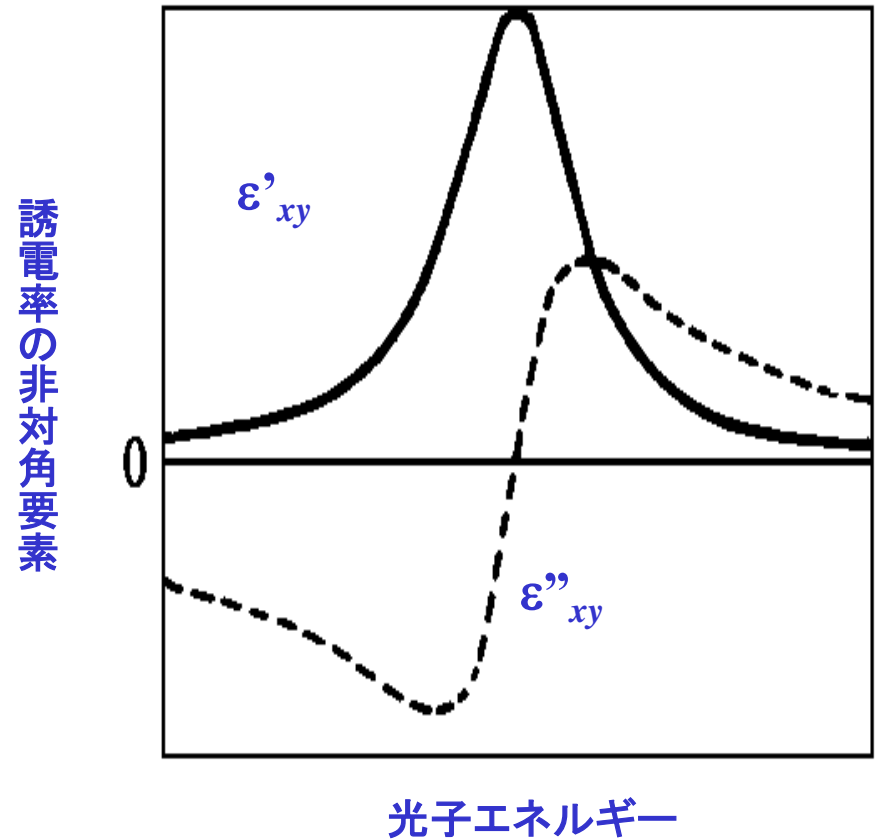
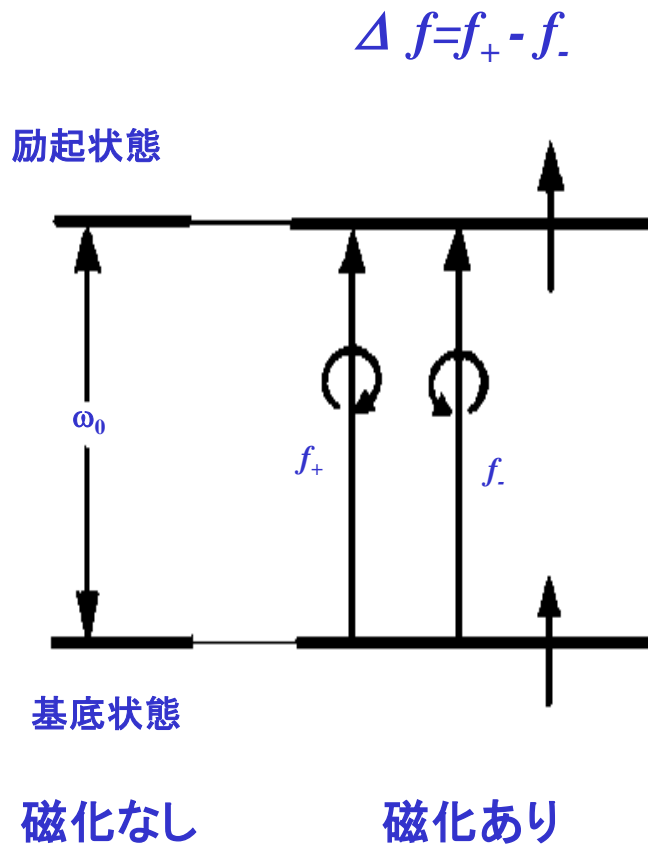
鉄の場合: $N=10^{28}\text{m}^{-3}$, $f_0=1$, $\hbar\Delta_{so}=0.05\text{eV}$, $\hbar\omega_0=2\text{eV}$,
 $\hbar/\tau=0.1\text{eV}$ という常識的な値を代入 $\varepsilon_{xy}'' \Big|_{peak}=3.5$ を得る。

大きな磁気光学効果を持つ条件:

- ・光学遷移の振動子強度 f が大きい
- ・スピン軌道相互作用が大きい
- ・遷移のピーク幅が狭い

常磁性型スペクトル

- 図(a)に示すように、基底状態にも励起状態にも分裂はないが、両状態間の遷移の振動子強度 f_+ と f_- とに差 Δf がある場合を考える。



常磁性スペクトルの誘電率の式

- この場合の誘電率を実数部・虚数部に分けて書くと次の式になる。

$$\varepsilon'_{xy} = \frac{Ne^2 \Delta f}{m\varepsilon_0 \tau} \cdot \frac{\omega_0}{\left(\omega_0^2 - \omega^2 + \gamma^2\right)^2 + 4\omega^2 \gamma^2}$$

$$\varepsilon''_{xy} = \frac{-Ne^2 \Delta f}{2m\varepsilon_0} \cdot \frac{\omega_0 \left(\omega_0^2 - \omega^2 + \gamma^2\right)}{\omega \left\{ \left(\omega_0^2 - \omega^2 + \gamma^2\right)^2 + 4\omega^2 \gamma^2 \right\}}$$

これを図示したのが図(b)の実線である。すなわち、 ε_{xy} の実数部が(翼のない)ベル型、虚数部が分散型を示す。

3.2.2 のまとめ

- 量子論にもとづいて誘電率テンソルの非対角成分の実数部、虚数部を導いた。
- 強磁性体の大きな磁気光学効果は、交換相互作用とスピン軌道相互作用がともに起きることによって生じていることがわかった。
- 磁気光学スペクトルの形状は電子状態間の円偏光による電子双極子遷移の重ね合わせで説明でき、第1原理バンド計算によって実験結果が再現されることを学んだ。

磁気光学スペクトルの形

(2) バンド電子系

- 金属磁性体や磁性半導体の光学現象は、絶縁性の磁性体と異なって、バンド間遷移という概念で理解せねばなりません。
- なぜなら、d電子はもはや原子の状態と同様の局在準位ではなく、空間的に広がって、バンド状態になっているからです。
- このような場合には、バンド計算によってバンド状態の固有値と固有関数を求め、久保公式に基づいて分散式を計算することになります。

誘電率テンソルの成分を求める式

- 局在電子系では、各原子の応答は等しいものとして単位体積あたりの原子の数 N をかけました。
- 金属の場合は、 k -空間の各点においてバンド計算から遷移エネルギーと遷移行列を求め、すべての k についての和をとる必要があります。
- 電子状態がバンドで記述できる系について久保公式に基づいて誘電率テンソルの成分を求める式はWang, Callawayにより導出されました。

運動量演算子 π と σ_{xy}

- 運動量演算子 Π を次のように定義します。

$$\Pi = p + \frac{\pi}{4mc^2} \sigma \times \nabla V(r)$$

第1項は運動量の演算子, 第2項はスピン軌道相互作用の寄与です。導電率の非対角成分を見積もると

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta} = & \frac{iNq^2}{\omega + i\gamma} \left(\frac{1}{m^*} \right)_{\alpha\beta} - \frac{2iq^2}{m^2\hbar} \\ & \times \sum_{l,k}^{occ} \sum_{n,k}^{unocc} \left(\frac{\omega + i\gamma}{\omega_{nl}} \operatorname{Re}(\langle l | \Pi^\alpha | n \rangle \langle n | \Pi^\beta | l \rangle) + i \operatorname{Im}(\langle l | \Pi^\alpha | n \rangle \langle n | \Pi^\beta | l \rangle) \right) \frac{1}{\omega_{nl}^2 - (\omega + i\gamma)^2} \end{aligned} \quad (4.42)$$

$\alpha, \beta = (x, y)$

となります。

遷移行列要素

- 遷移行列要素はブロッホ関数の格子周期成分 $u(k,r)$ を用いて,

$$\langle l | \pi^\alpha | n \rangle = \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \int u_l^*(k, r) \left[p^\alpha + \frac{\hbar}{4mc^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(r))_\alpha \right] u_n(k, r) d^3 r$$

- と表されます。

対角・非対角成分

- 対角成分の実数部は，散乱寿命を無限大とすると，

$$\sigma'_{xx} = \text{Re}(\sigma_{xx}) = \frac{\pi q^2}{m^2 \hbar} \sum_{l,k}^{occ} \sum_{n,k}^{unocc} |\langle l | \Pi^x | n \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{ln,k})$$

- 非対角成分の虚数部は，

$$\begin{aligned} \sigma''_{xy}(\omega) = \text{Im}(\sigma_{xy}) &= \frac{2q^2}{\hbar m^2} \sum_{l,k}^{occ} \sum_{n,k}^{unocc} \frac{\text{Im}(\langle l | \Pi^x | n \rangle \langle n | \Pi^y | l \rangle)}{\omega_{nl}^2 - (\omega + i\gamma)^2} \\ &= \frac{\pi q^2}{m^2 \hbar \omega} \sum_{l,k}^{occ} \sum_{n,k}^{unocc} \text{Im}(\langle l | \Pi^x | n \rangle \langle n | \Pi^y | l \rangle) \delta(\omega - \omega_{nl,k}) \end{aligned}$$

- $\Pi^\pm = \Pi^x \pm i\Pi^y$ と置き換えると，

$$\sigma''_{xy}(\omega) = \text{Im}(\sigma_{xy}) = -\frac{\pi q^2}{2m^2 \hbar \omega} \sum_{l,k}^{occ} \sum_{n,k}^{unocc} \left(|\langle l | \Pi^+ | n \rangle|^2 - |\langle l | \Pi^- | n \rangle|^2 \right) \delta(\omega - \omega_{nl,k}) \quad (4.45)$$

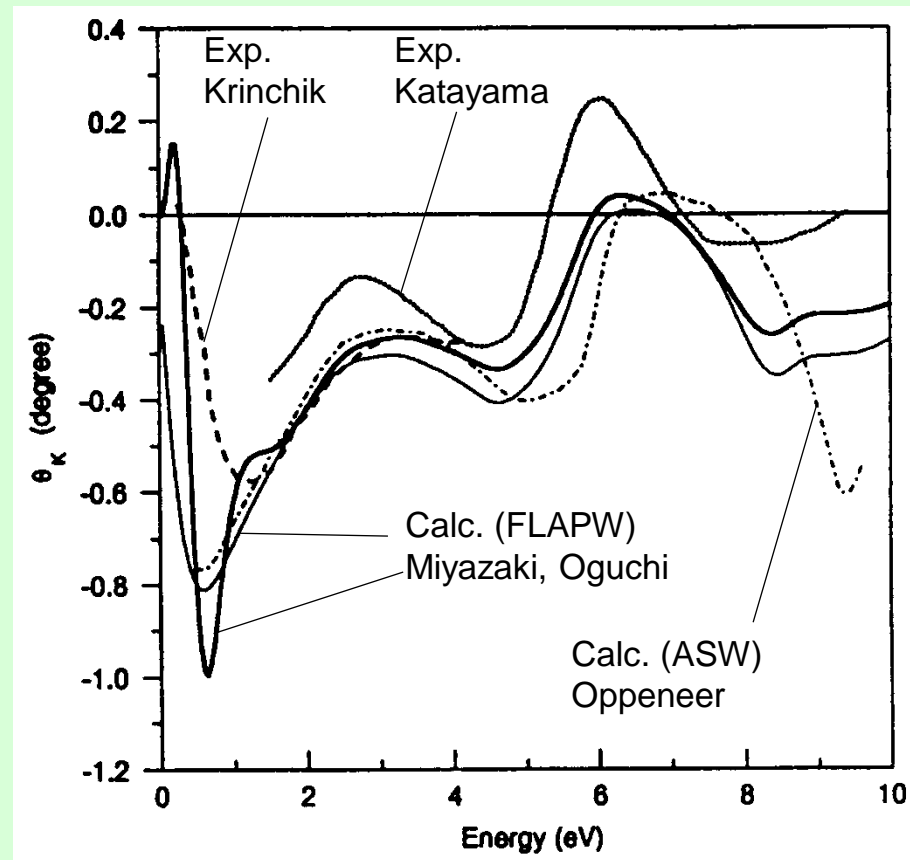
σ_{xy} の評価法

- σ_{xy} を評価するには、スピン軌道相互作用を含めて、スピン偏極バンドを計算し、ブリルアン域の各 k における ω_{nm} 、および、 Π^+ と Π^- を計算して、式(4.45)に従って全ての k について和(積分)をとればよいのです。
- 実際、そのような手続きはWangとCallawayによってFe, Niについておこなわれました。
- 最近、バンド計算技術が発展し、多くの物質で第1原理計算に基づく磁気光学スペクトルの計算がなされ、実験ときわめてよい一致を示すことが明らかになりました。(このことは、後の講義で触れたいと思います。)

こんなによく合う第1原理計算と実験結果(1)

- Feのバンド計算:
計算法により多少の違いはあるが、
実験で得られた形状をよく再現して
おり、回転角の値もほぼ実験値を説明
できます。

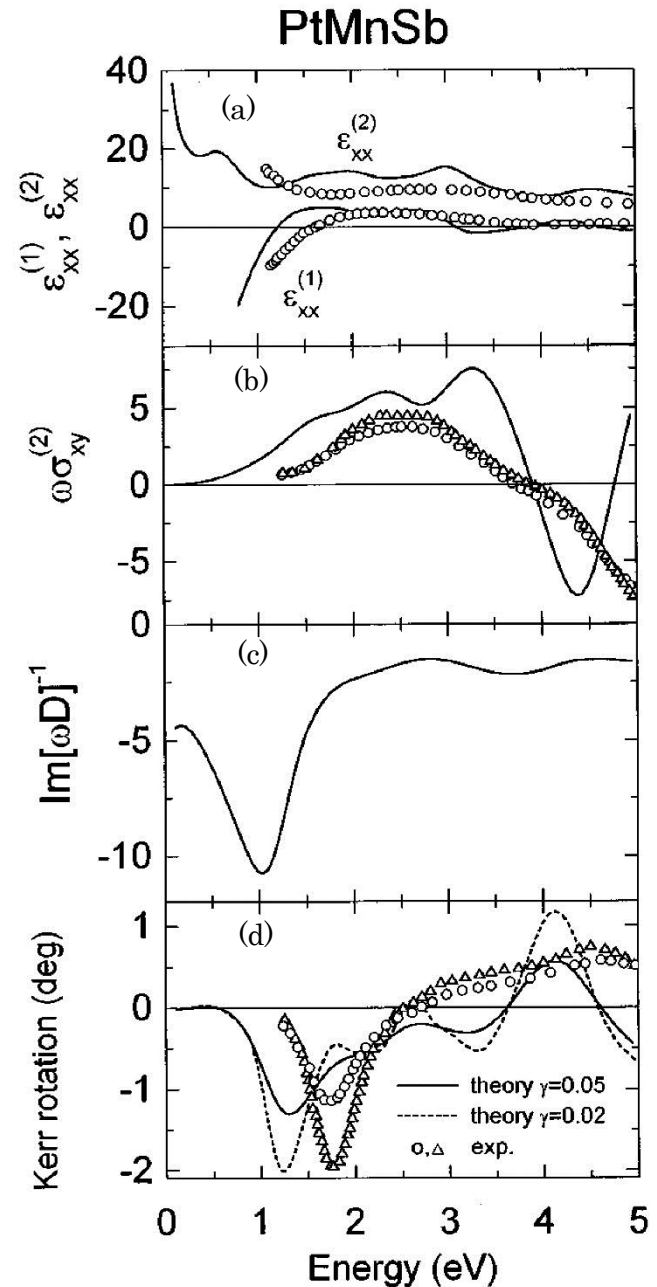
佐藤勝昭:光と磁気 図6.27



こんなによく合う第1原理 計算と実験結果(2)

- ハーフメタルPtMnSbの磁気
光学スペクトルの第1原理
計算値(P. Oppeneer)と実験
値(K.Sato)

佐藤勝昭:光と磁気 図6.25



4.2 のまとめ

- 量子論にもとづいて誘電率テンソルの非対角成分の実数部、虚数部を導きました。
- 強磁性体の大きな磁気光学効果は、交換相互作用とスピン軌道相互作用がともに起きることによって生じていることがわかりました。
- 磁気光学スペクトルの形状は電子状態間の円偏光による電子双極子遷移の重ね合わせで説明でき、第1原理バンド計算によって実験結果が再現されることを学びました。