

スピン渦理論による相対論的電子状態の局所描像

(京大院工) ○ 福田 将大, 曾我 康太, 瀬波 大土, 立花 明知

Local picture of relativistic electronic state
based on the spin vorticity principle

(Kyoto Univ.) ○ Masahiro Fukuda, Kota Soga, Masato Senami, Akitomo Tachibana

【序】スピン渦理論は場の量子論に基づいて定義される局所的な力学的物理量とそれらとを関係付ける方程式を導き、その局所物理量や関係式が電子状態に与える描像は物性や化学反応機構などを全く新しい視点から眺めることを可能にする。特に、そのような局所描像は電子スピンの関係する相対論的電子状態に対して全く新しい見方を与える。本研究では、量子力学的な第一原理計算から得られる相対論的電子状態に対して、局所物理量の分布を計算して可視化し、相対論的電子状態の局所描像について議論する。

【理論】スピン渦理論はミンコフスキー時空への極限において電子スピン角運動量密度 \hat{s}_e のダイナミクスを記述する方程式を導く [1–3]。

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{s}_e = \hat{t}_e + \hat{\zeta}_e, \quad (1)$$

$$\text{rot} \hat{s}_e = \frac{1}{2} \left(\hat{\psi} \vec{\gamma} (i\hbar \hat{D}_{e0}) \hat{\psi} + h.c. \right) - \hat{\Pi}_e. \quad (2)$$

ここで、 \hat{s}_e はスピン角運動量密度、 \hat{t}_e はスピントルク密度、 $\hat{\zeta}_e$ はツェータ力密度、 $\hat{\Pi}_e$ は動的運動量密度である。式 (1) については、原子・分子の相対論的電子状態を用いた数値計算による研究がすでになされている [4]。本研究では式 (2) に現れる $\text{rot} \hat{s}_e$ に注目する。このスピン角運動量の渦度で表わされる電子スピン渦はスピンドYNAMICSにおいて重要な役割を果たす。その役割を見るため、一般相対性理論から導かれる電子の対称ストレステンソル $\hat{T}_e^{\mu\nu}$ より得られる電子の全運動量 $\hat{P}_e^i = \frac{1}{c} \hat{T}_e^{0i}$ に注目すると、

$$\hat{P}_e = \hat{\Pi}_e + \frac{1}{2} \text{rot} \hat{s}_e, \quad (3)$$

となり、動的運動量密度とスピン渦を含む。その時間発展は、

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{P}_e = \frac{\partial}{\partial t} \left(\hat{\Pi}_e + \frac{1}{2} \text{rot} \hat{s}_e \right) = \hat{L}_e + \hat{\tau}_e^S, \quad (4)$$

となる [1–3]。ここで、 \hat{L}_e はローレンツ力密度、 $\hat{\tau}_e^S$ は張力密度である。この式から、外場によって生じたローレンツ力密度は電子に動的運動量密度を生じさせるだけでなく、スピン渦を生成するという描像が予言される。

【計算方法】炭素鎖に対してスピン-軌道相互作用を含む相対論的擬ポテンシャルを用いた局所スピン密度近似 (LSDA) により、ノンコリニア DFT 計算を行った。非平衡グリーン関数法に基づいて求めた 300K におけるバイアス電圧下の相対論的な電子状態から種々の局所物理量を計算した。電子状態計算および局所物理量計算には DFT プログラムコード OpenMX [5] に改良を加えたものを使用した。

【結果と考察】右図は非平衡グリーン関数法を用いた相対論的電子状態計算により求めた定常電流下における炭素鎖の局所物理量分布を表している。動的運動量密度 $\vec{\Pi}_e$ は炭素間の π 結合に沿うように分布している。一方で、スピン角運動量密度 \vec{s}_e は原子核周りに渦を巻くように生じ、スピン渦度は原子核付近に分布していることが確認される。このことから、バイアス電圧が加わった後に定常状態に至る過程において、電子は動的運動量を得るだけでなく、原子核付近にスピン渦度を生じることが第一原理計算によっても示されたといえる。

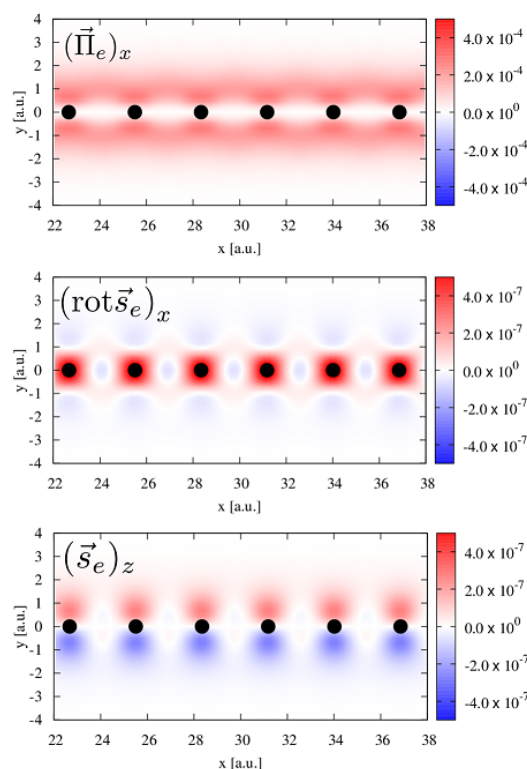


図 1: 定常電流下における炭素鎖の局所物理量の分布。上から動的運動量密度の x 成分、スピン渦度の x 成分、スピン角運動量密度の z 成分を表す。

【参考文献】

- [1] A. Tachibana, J. Math. Chem. **50**, 669-688 (2012).
- [2] A. Tachibana, Electronic Stress with Spin Vorticity. In *Concepts and Methods in Modern Theoretical Chemistry*, S. K. Ghosh and P. K. Chattaraj Eds., CRC Press, Florida, pp.235-251 (2013).
- [3] A. Tachibana, J. Comput. Chem. Jpn., **13**, 18 (2014).
- [4] M. Fukuda, M. Senami, A. Tachibana, *Progress in Theoretical Chemistry and Physics*, Vol. 27; Eds. M. Hotokka, E. J. Brändas, J. Maruani, G. Delgado-Barrio; Springer, Chapter 7, pp.131-139 (2013).
- [5] T. Ozaki *et al.*, OpenMX package, <http://www.openmx-square.org/>.