

電流中のスピンに関する局所物理量の理論的研究

(京大院工) ○稲田 健, 曾我 康太, 福田 将大, 瀬波 大土, 立花 明知

Theoretical studies of local physical quantities for spin in electronic current

(Kyoto University) ○Ken Inada, Kota Soga, Masahiro Fukuda,
Masato Senami, Akitomo Tachibana

量子力学においては全空間での期待値を取り扱うため、物理量の局所的な寄与は失われてしまう。したがってデバイス内のような微小領域の物性評価を行うには、場の量子論に基づいた局所的な力学的物理量を取り扱う必要がある。そのため、我々は QED(Quantum ElectroDynamics, 量子電磁力学)に基づき定義された局所的な物理量を用いて、全く新しい観点から微小領域内の局所的描像を調べている[1]。

スピントロニクス分野の進歩により、電子スピンに関する観測・制御技術が発達してきた。将来的に実験の更なる高精度化が進み、全空間での期待値のみを記述する従来の量子力学的な計算手法では予測できない、局所的な効果が観測されることが期待される。そのため、場の理論に立脚した局所的なスピンドYNAMIKSの描像が必要となる。

場の量子論では、立花により提唱されている量子電子スピン渦理論[2]によって以下の電子スピンの運動方程式が導かれる。

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{s}_e(x) = \hat{t}_e(x) + \hat{\zeta}_e(x)$$

スピン角運動量密度 \hat{s}_e , スピントルク密度 \hat{t}_e , 及びツェータ力密度 $\hat{\zeta}_e$ は以下のように定義される。

$$\hat{s}_e = \left(\frac{\hbar}{2}\right) \hat{\psi}^\dagger \Sigma^k \hat{\psi}, \quad \hat{t}_e = -\varepsilon_{ijk} \hat{t}_e^{Pij}, \quad \hat{\zeta}_e = -\partial_k \hat{\phi}_5$$

ここで、 Σ^k は 4×4 パウリ行列である。また $\hat{\phi}_5$ はツェータポテンシャルと呼ばれ、次のように表される。

$$\hat{\phi}_5 = \frac{\hbar c}{2} \hat{\psi}^\dagger \gamma_5 \hat{\psi}, \quad \gamma_5 = i\gamma^0 \gamma^1 \gamma^2 \gamma^3$$

このように電子スピンの時間発展は、スピントルクとツェータ力により支配される。スピントルクは量子力学におけるハイゼンベルクの運動方程式に現れるトルクに対応するが、ツェータ力は局所的な効果を表し、量子力学では記述できない量である。これらは定常状態においても有限な値を持ち、空間の各点で拮抗することで電子スピンの定常状態は保たれる。

ツェータ力はツェータポテンシャルの勾配として表される。ツェータポテンシャルは右手型電子と左手型電子の密度差に比例するため、分子構造の対称性に関連した性質を持つ。

我々は様々な簡単な分子に対して電子スピンの局所物理量を計算し、局所的な効果について研究してきたが、本研究では、定常電流をかけたカーボン材料に対して局所物理量の計算を行い、電流との関係を調べた。まずプログラムコード OpenMX[3]を用いて量子力学に基づく波束を計算し、その計算結果から、プログラムコード QEDynamics[4]を用いて局所物理量の計算を行った。

例として、ベンゼンが一次元無限炭素鎖と結合され、一様なバイアス電圧 V が印加された系におけるツェータポテンシャル分布を図 1 に示す。 $V=0[V]$ のとき、「分子軌道スピノルが n 回回転対称性を持つならばツェータポテンシャルも n 回回転対称性を持ち、分子軌道スピノルが鏡映対称性を持つならばツェータポテンシャルは鏡映面に対して符号が逆転する」という分子構造に依存した性質を満たすことが確認できる。バイアス電圧を大きくすると、ツェータポテンシャルの値は大きくなっていき、対称に関する性質は崩れることがわかる。

今後の展望として、他の分子に対しても計算を行い、様々な局所物理量と電流の関係を明らかにする。

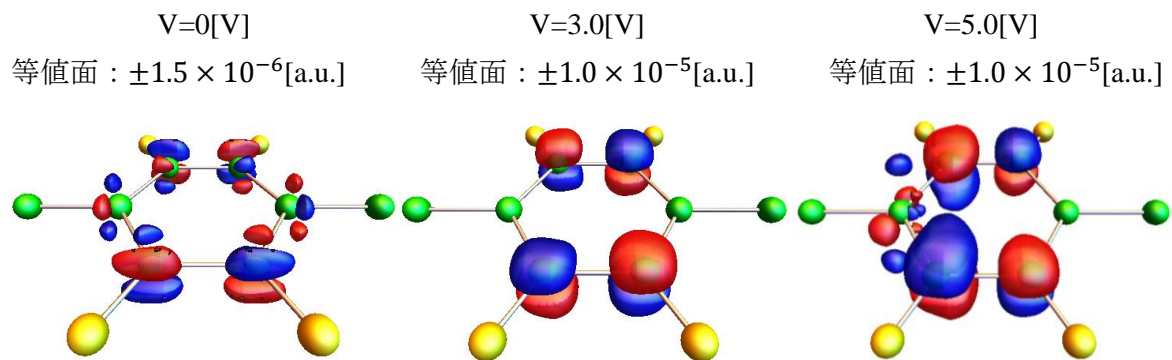


図 1. バイアス電圧を変化させた時のツェータポテンシャル分布。
図は等値面を示している(正 : 赤色, 負 : 青色)。

参考文献

- [1] A. Tachibana, J. Mol. Model. **11**, 301 (2005); J. Mol. Struct.: THEOCHEM **943**, 138 (2010).
- [2] A. Tachibana, J. Math. Chem. **50**, 669-688 (2012)
- [3] T. Ozaki, K. Nishio, and H. Kino, Phys. Rev. B **81** 035116 (2010); T. Ozaki, Phys. Rev. B **67** 115108 (2003).
- [4] QEDynamics, M. Senami, K. Ichikawa and A. Tachibana