

平面構造材料におけるスピン渦と電流の関係

¹京大院工

○野曾原直之¹, 瀬波大士¹

Relation between spin vorticity and electric current in planar structure materials

○Naoyuki Nosohara¹, Masato Senami¹

¹Department of Micro Engineering, Kyoto University, Japan

【Abstract】 We study the dynamical local picture of the spin Hall effect based on the quantum spin vorticity theory. The spin Hall effect is one of important effects in the field of spintronics, and this is the phenomenon that the spin current is generated in the direction perpendicular to the electric current due to the spin-orbit coupling, while this can be explained as “generation of the spin vorticity by applied electric field” by the local picture based on the quantum spin vorticity theory. The spin vorticity is the vorticity of the spin angular momentum and is the local physical quantity that is zero when integrated over the whole region. In this study, we calculated the local physical quantity in the steady electric current in planar structure materials of benzene and graphene, and investigate the relation between spin vorticity and electric current.

【序】

スピントロニクス分野において観測・制御技術が発達し、原子スケールの微小領域における物性評価が必要になっている。このような微小領域の研究を行うには空間の各点において局所的な取り扱いをする必要があるが、量子力学では局所物理量の時間発展を正しく記述することができない。局所的な記述を正しく行うには場の量子論に基づいて定義された局所物理量を取り扱う必要がある。

一般座標変換に対する対称性に基づく量子スピン渦理論[1]から導かれる電子の全運動量は動的運動量とスピン渦を含む。スピン渦はスピン角運動量の渦度であり、全空間で積分を行うとゼロになる局所物理量である。この電子のスピン渦に関する研究としてスピンホール効果の局所的描像が提案されている[2]。

スピンホール効果はスピントロニクス分野で重要な効果の一つであり、スピン軌道相互作用によって電流と垂直な方向にスピン流が生じるという現象であるが、スピン流を物理量として定義するには困難な点が存在する。しかし、量子スピン渦理論に基づく局所的描像によってスピンホール効果を「印加電場によりスピン渦が生成する現象」と説明することができる。

本研究では平面構造材料における定常状態のスピン渦と電流の分布を計算し、それぞれの間にもどのような関係があるのかを研究した。

【理論・計算方法】

電子スピン渦度は電子スピン角運動量 $\hat{s}_e = \hat{\psi}^\dagger \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma} \hat{\psi}$ の渦度であり、以下の式が成り立つことが知られている。

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

ここで $\hat{\Pi}_e$ は電子動的運動量密度である。

非相対論極限において電流は動的運動量とスピン渦の和に比例する。

$$\vec{j} = \frac{Ze e}{m} (\vec{\Pi} + \text{rots}\vec{s})$$

この式からスピン渦と電流の比例関係が予想され、空間各点においてスピン渦と電流の間に成り立つ式を提案する。

$$\text{rots}\hat{s}(\vec{r}) = \hat{\lambda}(\vec{r}) \hat{j}(\vec{r})$$

$\hat{\lambda}(\vec{r})$ は局所的なテンソルである。

計算対象として一次元炭素鎖を繋げたベンゼン、グラフェンといった平面構造材料を使用し、定常電流下における局所物理量を計算した。バイアス電圧は 0.0[V]から 0.1[V]刻みで 0.5[V]まで増加させた。電子状態計算にはプログラムパッケージ OpenMX[3]を使用し、計算手法を DFT(LSDA-CA),NEGF とした。局所物理量の計算にはプログラムパッケージ QEDynamics[4]を使用した。

【結果・考察】

Fig.1 と Fig.2 にベンゼン、グラフェンにおいてスピン渦と電流の x 成分を積分した値を示す。計算はバイアス電圧と積分範囲を変えて行った。ベンゼン、グラフェン共にスピン渦と電流の積分量が比例関係にあり、積分範囲を z 方向に拡大すると比例係数の絶対値が小さくなることが確認された。

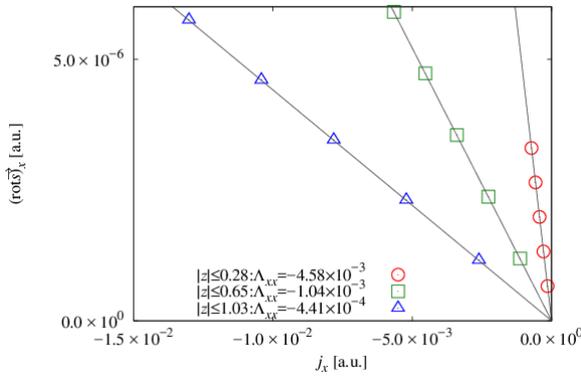


Fig. 1. Integrated value of x component of the spin vorticity and the electric current in benzene

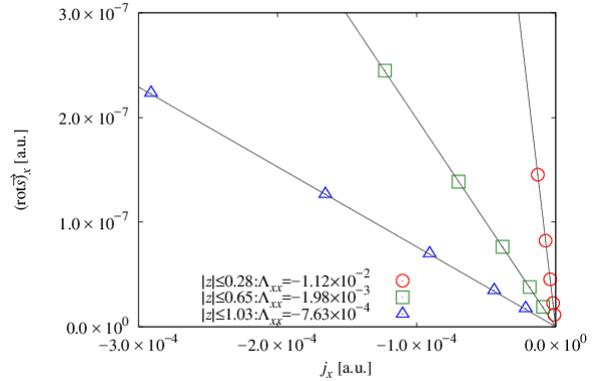


Fig. 2. Integrated value of x component of the spin vorticity and the electric current in graphene

【参考文献】

- [1] 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(2013), pp.235-251.
- [2] M. Fukuda, K. Ichikawa, M. Senami and A. Tachibana, AIP Advances **6**, 025108(2016).
- [3] T. Ozaki et al., OpenMX package, <http://www.openmx-square.org/>.
- [4] QEDynamics, M. Senami, K. Ichikawa, A. Tachibana (<https://github.com/mfukudaQED/QEDalpha>).