

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 4 年 4 月 1 日現在

機関番号：63903

研究種目：若手研究

研究期間：2018～2021

課題番号：18K13508

研究課題名(和文) 温度勾配が誘起するスピンのダイナミクスの理論

研究課題名(英文) Theory of spin dynamics induced by temperature gradient

研究代表者

下出 敦夫 (Shitade, Atsuo)

分子科学研究所・理論・計算分子科学研究領域・助教

研究者番号：20747860

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,000,000円

研究成果の概要(和文)：結晶における磁気四極子モーメントの量子力学的な定式化を行った。温度勾配によって磁化が誘起される重力電気磁気効果を提案した。この感受率を計算する際に、Kubo公式から磁気四極子モーメントを差し引く必要がある。また、カイラル量子異常に由来するカイラル渦効果と軸性磁気効果に関して、生じる流れは全て磁化流であり、輸送測定では観測されないことを示した。カイラリティ誘起スピン選択性に関して、ナノスケールの分子で大きくなる新奇のスピン軌道相互作用を発見した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

電気磁気効果は古くから知られている交差相関応答であり、電場で磁性を制御できるという点で応用上も重要である。本研究によって温度勾配によっても磁性を制御できることが示され、磁気四極子モーメントの重要性も明らかになった。また、カイラル量子異常に由来する異常輸送現象に関する知見は高エネルギー物理における重イオン衝突実験の解釈にも影響を与える。スピン軌道相互作用はさまざまな物性をもたらすものであり、新奇のスピン軌道相互作用は見いだされたことはそれだけで意義がある。

研究成果の概要(英文)：We formulated the magnetic quadrupole moment in crystals quantum-mechanically. We proposed the gravitomagnetolectric effect in which the magnetization is induced by a temperature gradient. In order to calculate this susceptibility, we need to subtract the magnetic quadrupole moment from the Kubo formula. Regarding the chiral vortical and axial magnetic effects originating from the chiral anomaly, we proved that the resulting currents are magnetization currents that cannot be observed in transport experiments. We found a novel spin-orbit coupling that is enhanced in nanoscale molecules in the context of the chirality-induced spin selectivity.

研究分野：物性理論

キーワード：スピントロニクス 多極子 磁気四極子 電気磁気効果 カイラル量子異常 カイラル渦効果 軸性磁気効果 カイラリティ誘起スピン選択性

## 様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

情報を担うスピンを生成・制御・輸送することで、電荷のみを利用したエレクトロニクスでは実現できない機能や性能を目指す分野をスピントロニクスと呼ぶ。中でも、排熱をスピんに変換するスピнкаロリトロニクスは、スピンの Seebeck 効果の発見以降注目を集めている。スピンの Seebeck 効果は強磁性体に温度勾配をかけると、それと平行にスピン偏極電流が流れる現象である。このとき磁化が非一様であれば、磁化にトルクが働くはずであり、熱スピントルクと呼ばれている。さらに研究に先立ってスピンの Nernst 効果も 2017 年に観測された。これは常磁性体に温度勾配をかけると、それと垂直にスピン流が流れる現象である。現象論や半古典論を超え、量子力学的な微視的理論を構築することは、実験を定量的に理解し高性能のデバイスを設計する上でも重要である。

### 2. 研究の目的

温度勾配は統計力学的な力であるので、そのままでは量子力学的な応答理論にとりいれることはできない。そのため、Luttinger の重力ポテンシャルを導入し、重力電場に対する応答を考える必要がある。また、重力ポテンシャルに限らず、曲がった空間や非一様な系におけるスピンの相互作用や応答も興味深い問題である。本研究の具体的な目的は以下の 3 つである：

- (1) 電場によって磁化が誘起される電気磁気効果は古くから知られている交差相関応答である。温度勾配によって磁化が誘起される現象を新たに重力電気磁気効果と名付け、その量子力学的な微視的理論を構築する。
- (2) 回転するカイラル流体では、スピンは渦度と相互作用し、渦度と平行に電流が流れるカイラル渦効果が起こるとされている。また、軸性磁気効果はカイラル渦効果と相反関係にあり、軸性磁場と平行にエネルギー流が流れる現象である。これらの現象は高エネルギー物理においてカイラル量子異常が起源とされているが、物性物理の観点から捉え直す。
- (3) らせんなどのカイラルな 1 次元系では、流した電流がスピン偏極することが知られており、カイラリティ誘起スピン選択性と呼ばれている。この現象は室温でも観測されており、通常のスピン軌道相互作用では小さすぎて説明できない。この現象の起源となるスピン軌道相互作用を明らかにする。

### 3. 研究の方法

- (1) Luttinger の重力ポテンシャルを導入し、Kubo 公式を用いてスピンの線形応答を計算すると、絶対零度で発散する。そこで、重力ポテンシャルによってスピンの揺動を受ける効果を考慮し、磁気四極子モーメントを差し引いた。
- (2) カイラル渦効果に関しては、渦度がある場合にスピン渦度相互作用を考慮して Noether の電流密度を計算すると、平衡状態であるにもかかわらず非零になる。そこで、波束の半古典論を用いて、渦度による磁化電流を差し引いた輸送電流密度を計算した。軸性磁気効果に関しては、低エネルギーで軸性磁場中の Weyl fermion を再現する格子模型を対角化し、エネルギー流密度の分布を計算した。
- (3) 任意の 1 次元的な曲線を記述する Frenet-Serret 標構を用いて曲がった空間における Dirac 方程式を書き下し、非相対論的極限において曲線に拘束された電子の Hamiltonian を得た。二重らせん模型において、半古典的な Boltzmann 方程式を用いて電流誘起スピン分極を計算した。

### 4. 研究成果

- (1) 磁気四極子モーメントの定式化と重力電気磁気効果に関して 3 つの成果を得た：  
磁場勾配に対する熱力学ポテンシャルの変化として軌道磁気四極子モーメントを定式化し、熱力学における Maxwell の方程式から電気磁気感受率との関係式を得た。局所的に空間反転対称性が破れた反強磁性体  $\text{BaMn}_2\text{As}_2$  の模型において軌道磁気四極子モーメントと電気磁気感受率を計算した。  
スピンの磁気四極子モーメントについても熱力学的な定式化を行い、重力電気磁気感受率の Kubo 公式に必要な補正項であることを示した。このようにして得られた重力電気磁気感受率は絶対零度で消えるのみならず、電気磁気感受率との間に Mott の関係式が成り立つ。そのため、バンド端で感受率は増大する。Rashba 型のスピン軌道相互作用をもつ強磁性体において(重力)電気磁気感受率を計算した。  
磁性絶縁体の低エネルギー励起であるマグノンの重力電気磁気効果についても微視的理論を構築した。電子系では Mott の関係式が成り立つために絶縁体では重力電気磁気効果が起こらないのに対し、磁性絶縁体では起こってもよい。ただし、単位胞に複数の種類の磁性イオンがある、あるいはスピン格子相互作用が強いなど、特殊な条件が必要である。電気磁気効果を示すことでよく知られた  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  の Cr を部分的に別の磁性イオンに置き換えた模型 (図 1:)において重力電気磁気感受率を計算した。

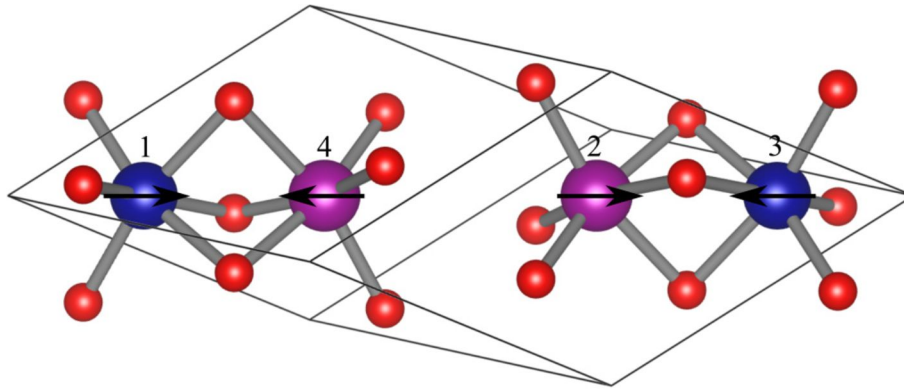


図 1: 重力電気磁気効果を示しうる，単位胞に複数の種類の磁性イオンがある磁性絶縁体．ここでは  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  の Cr を部分的に別の磁性イオンに置き換えた模型を考えた．

(2) カイラル渦効果と軸性磁気効果に関して 2 つの成果を得た：

相対論的な系では，カイラル渦効果による輸送電流密度は消える．すなわち輸送測定では観測されない．非相対論的な系では，回転対称性をもたない方向に非零の輸送電流密度が生じてよい N 型 Te の模型において異方的カイラル渦効果の計算を行った．相対論的な Wilson fermion と，Dirac 半金属  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  の模型を考えた．後者をひねることで軸性磁場が実現できるという提案がある．エネルギー流密度の分布は系中央では非零であるが，表面の寄与によって平均的には消えることを明らかにした．軸性磁気効果におけるエネルギー流は非一様な軸性ゲージ場による磁化エネルギー流であり，輸送測定では観測されない．カイラル量子異常に由来する異常輸送現象は輸送測定で観測されないという意味で輸送現象ではない．

(3) カイラリティ誘起スピン選択性に関して 1 つの成果を得た：

回転した Frenet-Serret 標構 (図 2:)を用いた曲線座標系における Dirac 方程式の非相対論的極限をとることで， $O(m^{-1})$  で曲線の曲率に比例する幾何学的スピン軌道相互作用を得た．ここで  $m$  は電子の質量である．これは  $O(m^{-2})$  である通常のスピン軌道相互作用に比べてはるかに大きく，DNA の典型的なパラメタを用いると 160 meV 程度と見積もられる．このスピン軌道相互作用をもつ二重らせん模型において電流誘起スピン分極を計算した．

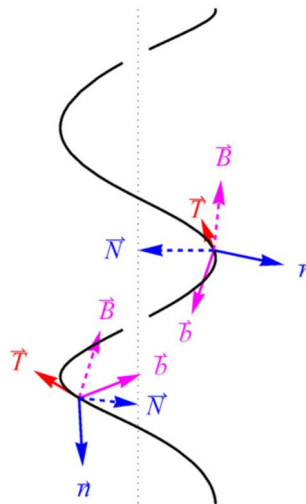


図 2: 任意の 1 次元的な曲線を記述する Frenet-Serret 標構  $(\vec{T}, \vec{N}, \vec{B})$  と，それを回転した標構  $(\vec{t} = \vec{T}, \vec{n}, \vec{b})$  .

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 7件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 5件）

1. 著者名 Atsuo Shitade and Yasufumi Araki	4. 巻 103
2. 論文標題 Magnetization energy current in the axial magnetic effect	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 155202-1--8
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.103.155202	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Atsuo Shitade, Kazuya Mameda, and Tomoya Hayata	4. 巻 102
2. 論文標題 Chiral vortical effect in relativistic and nonrelativistic systems	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 205201-1--6
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.102.205201	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Atsuo Shitade and Emi Minamitani	4. 巻 22
2. 論文標題 Geometric spin-orbit coupling and chirality-induced spin selectivity	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 New Journal of Physics	6. 最初と最後の頁 113023-1--7
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1088/1367-2630/abc920	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Akito Daido, Atsuo Shitade, and Youichi Yanase	4. 巻 102
2. 論文標題 Thermodynamic approach to electric quadrupole moments	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 235149-1--12
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.102.235149	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Atsuo Shitade and Youichi Yanase	4. 巻 100
2. 論文標題 Magnon gravitomagnetolectric effect in noncentrosymmetric antiferromagnetic insulators	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 224416-1--8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.100.224416	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Atsuo Shitade, Hikaru Watanabe, and Youichi Yanase	4. 巻 98
2. 論文標題 Theory of orbital magnetic quadrupole moment and magnetoelectric susceptibility	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 020407-1--6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.98.020407	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Atsuo Shitade, Akito Daido, and Youichi Yanase	4. 巻 99
2. 論文標題 Theory of spin magnetic quadrupole moment and temperature-gradient-induced magnetization	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 024404-1--12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.99.024404	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計14件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 5件)

1. 発表者名 下出 敦夫, 荒木 康史
2. 発表標題 軸性磁気効果における磁化エネルギー流
3. 学会等名 日本物理学会 2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 下出 敦夫, 南谷 英美
2. 発表標題 幾何学的スピン軌道相互作用とカイラリティ誘起スピン選択性
3. 学会等名 日本物理学会 2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 下出 敦夫, 豆田 和也, 早田 智也
2. 発表標題 相対論的および非相対論的な系におけるカイラル渦効果
3. 学会等名 日本物理学会 第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 下出 敦夫
2. 発表標題 結晶における多極子の定式化と交差相関応答の理論的研究
3. 学会等名 日本物理学会 第76回年次大会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 下出 敦夫
2. 発表標題 空間反転対称性の破れた磁性体における重力電気磁気効果
3. 学会等名 J-Physics 地域研究会-札幌
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 下出 敦夫, 大同 暁人, 柳瀬 陽一
2. 発表標題 スピン磁気四極子モーメントと温度勾配によって誘起される磁化の理論
3. 学会等名 日本物理学会 2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 下出 敦夫, 柳瀬 陽一
2. 発表標題 空間反転対称性の破れた反強磁性絶縁体における重力電気磁気効果
3. 学会等名 日本物理学会 2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Atsuo Shitade
2. 発表標題 Application of kinetic theory in condensed matter physics
3. 学会等名 Quantum kinetic theories in magnetic and vortical fields (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Atsuo Shitade, Akito Daido, and Youichi Yanase
2. 発表標題 Theory of spin magnetic quadrupole moment and temperature-gradient-induced magnetization
3. 学会等名 APS March Meeting 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Atsuo Shitade, Hikaru Watanabe, and Youichi Yanase
2. 発表標題 Theory of Orbital Magnetic Quadrupole Moment and Magnetoelectric Susceptibility
3. 学会等名 International Conference on Magnetism 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Atsuo Shitade
2. 発表標題 Theory of the thermal Hall effect
3. 学会等名 Avenues of quantum field theory in curved spacetime (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 下出 敦夫
2. 発表標題 スピン磁気四極子と温度勾配によって誘起される磁化の理論
3. 学会等名 J-Physics トピカルミーティング「拡張多極子研究の進展と展望」
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Atsuo Shitade, Hikaru Watanabe, and Youichi Yanase
2. 発表標題 Theory of orbital magnetic quadrupole moment and magnetoelectric susceptibility
3. 学会等名 APS March Meeting 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年



1. 発表者名 下出 敦夫, 渡邊 光, 柳瀬 陽一
2. 発表標題 軌道磁気四極子モーメントと電気磁気感受率の理論
3. 学会等名 日本物理学会 第74回年次大会
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関