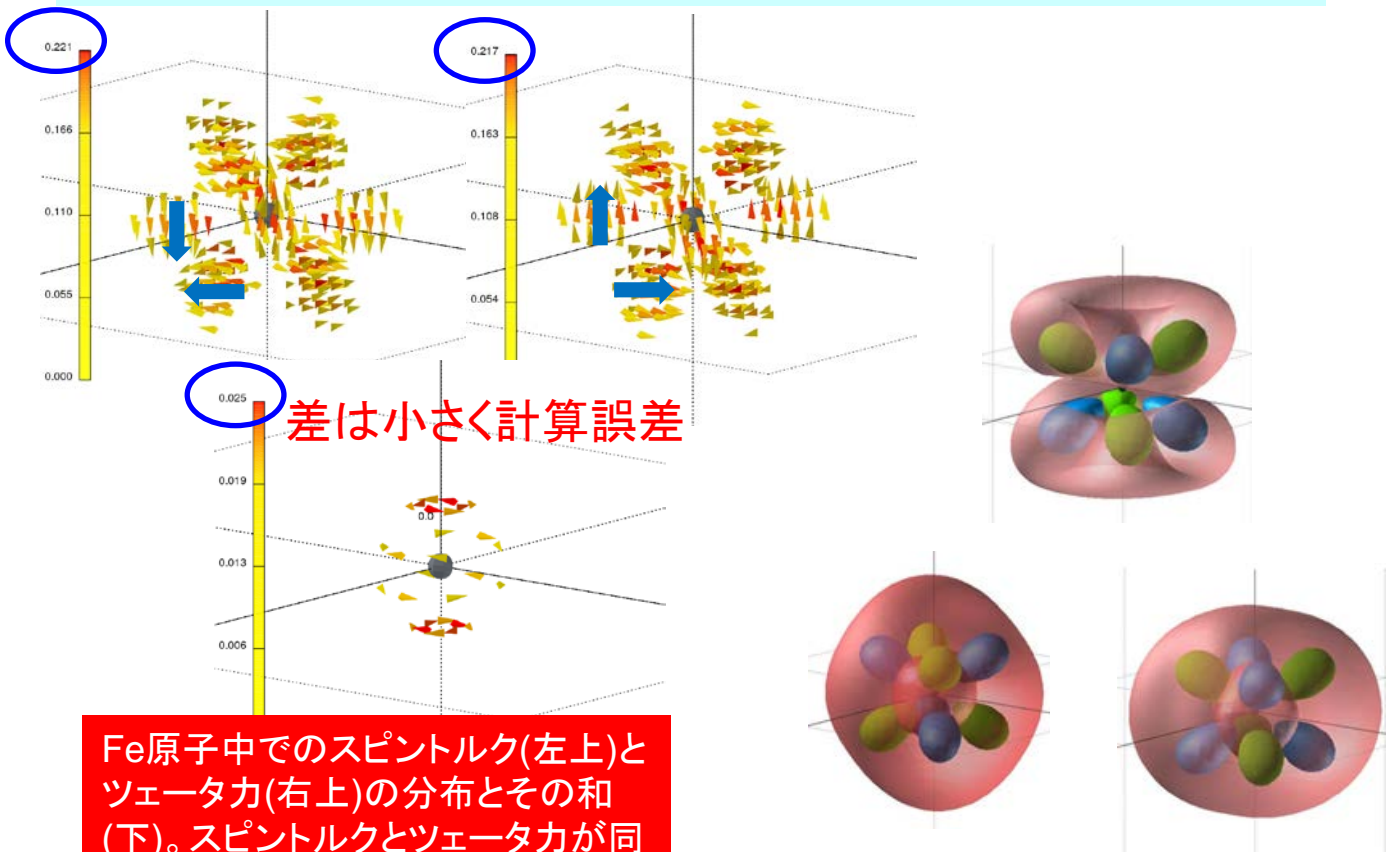


原子中の電子スピントルク

スピン定常状態にある単原子中の電子に働くスピントルクを量子化学計算を用いて研究を行っている。スピントルクが局所的なツェータ力と拮抗することによりスピン定常状態を実現していることを数値計算により示した。特にd軌道電子が大きな局所的スピントルクを作り出すことを、典型元素・遷移金属元素の定常状態・励起状態を用いて示した。また、原子中のカイラリティの破れを発見し、とその破れのパターンが第3周期の典型元素中で共通のパターンを持つことを示した。



Fe原子中でのスピントルク(左上)とツェータ力(右上)の分布とその和(下)。スピントルクとツェータ力が同じ大きさで反対方向を向いており、スピントルクとツェータ力の釣り合いを表している。

Fe(上), Co(左下), Ni(右下)中でのカイラリティ密度の正(緑)と負(青)の領域。赤は電子密度の分布を表している。電子密度の分布が異なるのに、カイラリティ密度の分布が等しいところが面白い。

See also,
“Electron Spin Torque in Atoms”,
[Physics Letters A 376, pp. 1434–1441 \(2012\)](#)