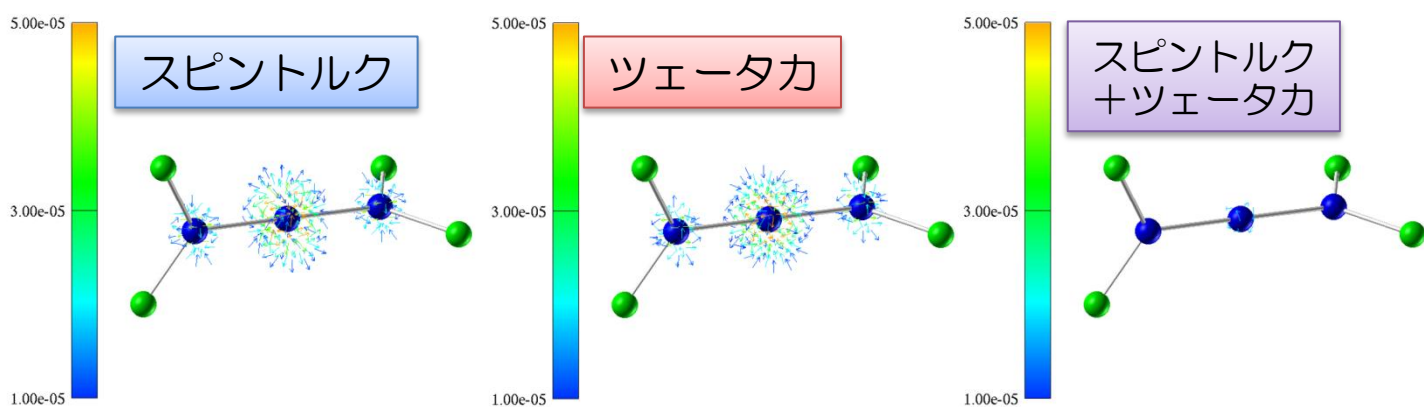


# アレン型分子内部のスピントルク

スピン定常状態にあるアレン型分子内部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。特に分子の対称性が局所的なスピントルク・ツェータ力の分布に影響することを示した。

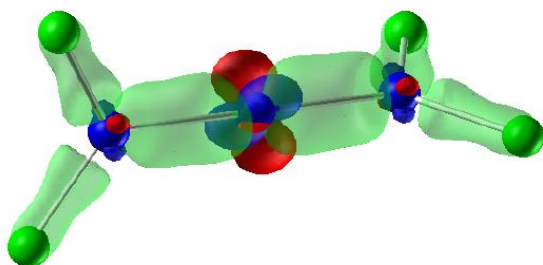
場の量子論に基づくスピンの運動方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{s}_e = \underbrace{\vec{t}_e}_{\text{スピントルク}} + \underbrace{\vec{\zeta}_e}_{\text{ツェータ力}}$$



アレンC<sub>3</sub>H<sub>4</sub>内部でのスピントルク(左)とツェータ力(中央)の分布とその和(右)。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。

アレンC<sub>3</sub>H<sub>4</sub>内部での電子密度(緑)の分布とツェータポテンシャルの正(赤)と負(青)の領域。電子密度とツェータポテンシャルの分布はどちらも分子の対称性を反映しているが、分布の様子は大きく異なる。



See also,

“Spin Torque and Zeta Force in Allene-Type Molecules”, [Progress in Theoretical Chemistry and Physics, Vol. 27, Chapter 7, pp.131-139 \(2013\)](#)