

スピントルクのシミュレーション

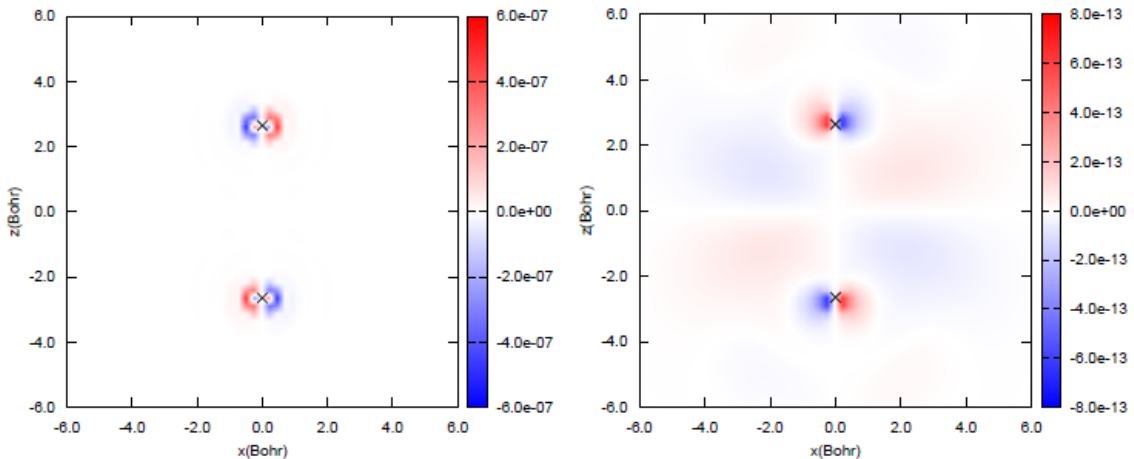
電子のスピンの働くトルクを第一原理計算により評価する方法について研究を行っている。スピントルクの局所的な分布について知ることができる点が画期的である。また、スピンの定常状態においては、スピントルクと拮抗するトルクであるツェータ力の存在についても予言している。スピントルクはストレステンソルの非対角成分の差として、ツェータ力はカイラル密度の勾配として物理的起源が理解される。

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_e^k(\mathbf{r}) \right] = \hat{t}_e^k(\mathbf{r}) + \hat{\zeta}_e^k(\mathbf{r})$$

$$\hat{t}_e^k(\mathbf{r}) = -\epsilon_{lnk} \hat{\tau}_e^{\Pi ln}(\mathbf{r})$$

$$\hat{\zeta}_e^k(\mathbf{r}) = -c \partial_k \left[\hat{\psi}(\mathbf{r}) \gamma^k \frac{1}{2} \hbar \sigma^k \hat{\psi}(\mathbf{r}) \right]$$

$$\hat{\tau}_e^{\Pi kl}(\mathbf{r}) = \frac{i\hbar c}{2} [\hat{\psi}(\mathbf{r}) \gamma^l \hat{D}_k(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) - \hat{D}_k^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \gamma^l \hat{\psi}(\mathbf{r})]$$



Li₂ 2原子系のスピントルク(左)とツェータ力(右)

この系ではスピントルクが非常に小さく、本研究の計算精度ではスピントルクとツェータ力の打ち消しあいとは再現できなかった。

See also, "Spin Torque and Zeta Force of Dimer of Alkali Atoms",
[Journal of the Physical Society of Japan, 79, 084302\(9\), \(2010\)](#)