

非磁性キラル物質におけるスピン依存電気伝導に関する数値的研究

五十嵐 宥介（物性理論教室）

空間反転対称性のない結晶 (キラル物質) を透過する電子には、カイラリティに対応した非自明なスピン分極が誘起される。これはカイラリティ誘起スピン選択則(Chirality-induced Spin Selectivity : CISS)[1]と呼ばれ、外部磁場や磁化を必要としないスピン伝導として注目されている。カイラリティ誘起スピン選択則の起源として、スピン軌道相互作用が考えられているが、1次元の単一チャネル強束縛モデルでは散乱行列の対称性の議論から、スピン軌道相互作用由来のスピン偏極が起きないことがわかっている。これに対して、有限幅の擬1次元系では、スピン偏極はゼロになるとは限らない。

本研究では、このカイラリティ誘起スピン選択則に対して、その起源を探るために数値的研究を行った。具体的には、スピン軌道相互作用が存在する2次元強束縛モデルを用いてらせん構造(図1)を作成し、複数チャネルでのスピン依存電気伝導の計算を行った。グリーン関数法を用いて、スピン依存透過率の計算を行い、最大7%のスピン偏極が起こることがわかった(図2)。さらに研究では、円筒形モデルを用いた計算結果との比較より、らせん構造特有のスピン分極であることを示した。また、通常のスピン分極現象とは異なり、系のサイズを大きくするほどスピン分極が大きくなる特徴があることを明らかにした。スピン分極の大きさはらせんピッチやスピン軌道相互作用の大きさにも依存することが明らかになり、実験で得られる値に関しても言及した。

[1] B. Göhler, V. Hamelbeck, T. Markus, M. Kettner, G. Hanne, Z. Vager, R. Naaman, and H. Zacharias, *Science*, 331, 894 (2011).

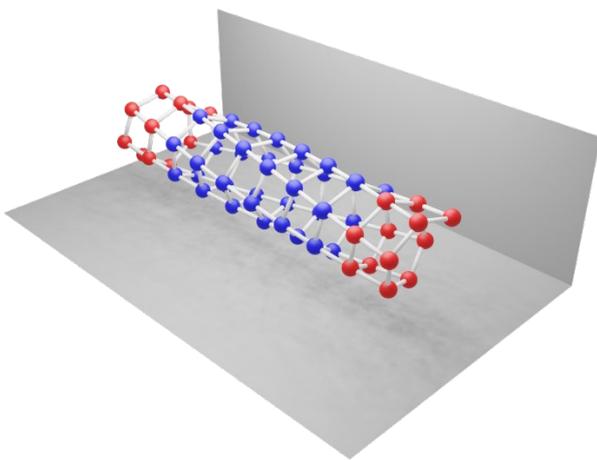


図1 らせん構造モデル。2次元正方格子に端をずらした周期境界条件を課すことで作成した。青点がスピン軌道相互作用を有するサンプル部分、赤点が相互作用を含まないリード部分。

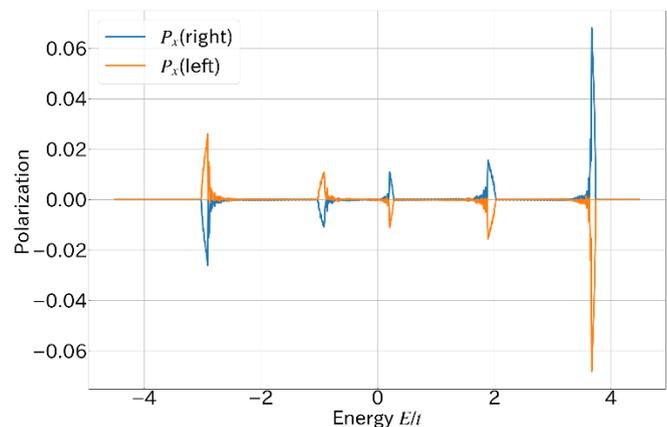


図2 らせん構造モデルを透過する伝導電子のスピン偏極。横軸は伝導電子のエネルギー。らせんのカイラリティ(right, left)に依存したスピン偏極が現れる。

らせん磁性体中の磁化構造に対する数値的研究

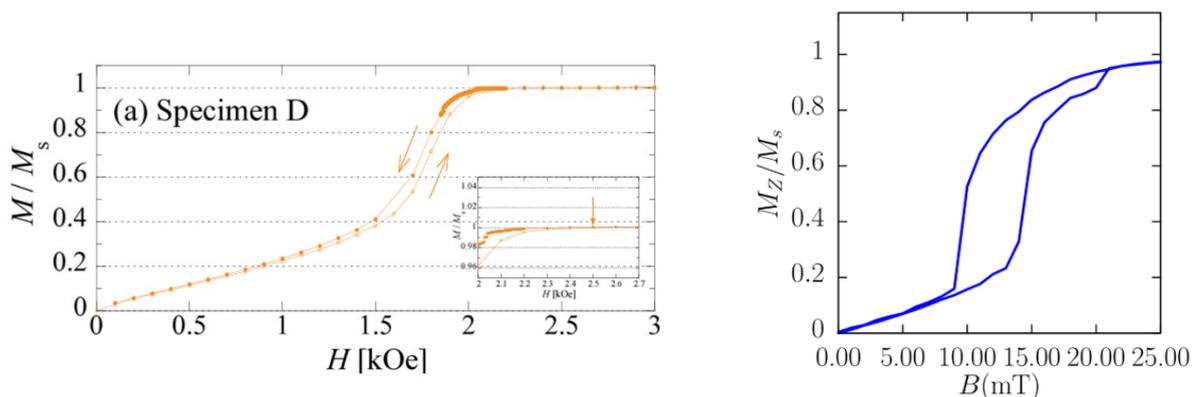
金田 純 (物性理論教室)

強磁性結合と一軸性 Dzyaloshinskii-Moriya 相互作用が共存する磁性体中では、螺旋磁気構造が形成される。螺旋軸垂直方向に磁場を印加することによって、らせん構造が周期的にほどけ、カイラルソリトン格子と呼ばれる磁気超格子構造ができる。ねじれた磁化構造がソリトンとして振る舞いトポロジカルに安定のため、磁化曲線はヒステリシスを示す。CrNb₃S₆ の微小薄膜試料を用いた実験ではヒステリシスが観測されているが、バルク試料を用いた実験ではヒステリシスは観測されていない[1]。この違いを明らかにするために、磁化構造の磁場掃引による変化を数値シミュレーションを用いて解析した。

解析方法として、古典ハイゼンベルグ模型を用いて、磁化のダイナミクスを表す Landau-Lifshitz-Gilbert 方程式を 4 次のルンゲクッタ法で数値的に解いた。最近接強磁性相互作用と DM 相互作用、磁気異方性効果を用いてらせん構造を形成し、らせん軸に対し垂直方向に磁場を加えることで磁化曲線の計算を行った。また、有限温度の効果として、揺動散逸定理から求められるランダム磁場を印加した。

解析結果として、薄膜試料を再現した 2 次元正方格子モデルでは、増磁過程においてトポロジカルに安定なねじれた磁化構造は解消されず、ある閾磁場において強制強磁性状態になる。減磁過程においては、ねじれた磁化構造は系の端からしか生成することができず、ゼロ磁場近くの閾磁場において螺旋磁化構造になる。このため磁化曲線はヒステリシス構造になる。2 次元正方格子モデルを層状に重ねた 3 次元モデルでも同様に磁化曲線にヒステリシス構造が見られ、バルク試料の実験における磁化曲線の再現はできなかった。次に、強磁性相互作用・DM 相互作用を一部の値をゼロにすることで、格子欠陥による影響を疑似的に再現し計算を行うとヒステリシス構造が小さくなるがソリトンの保存ができないことが分かった。磁化配置を六方最密構造のように変え計算を行ったが、磁化曲線にヒステリシス構造が見られた。強磁性相互作用の一部を反強磁性相互作用に変える、磁気双極子相互作用を加える等を行ったが、いずれもヒステリシス構造を有する薄膜試料の実験結果を再現し、バルク構造で得られるような磁化曲線は得られなかった。このことから、最近接における相互作用や磁気双極子相互作用だけではバルク試料の再現は難しく、実験試料における構造欠陥などの効果を取り入れる必要があると考えられる。

[1] M. Mito et al, *phys. Rev. B* **97**, 024408 (2018)



図：(左) CrNb₃S₆ のバルク試料における磁化曲線。(右) 反強磁性相互作用を含んだモデルの磁化曲線の計算結果。