

# ナノスケールのエレクトロニクス・スピントロニクス材料の局所物性量による材料特性評価

瀬波 大土\*

Analysis of nanoscale electro- and spintronics material by local physical quantities

Masato Senami\*

The purpose of our project is the establishment of the analysis method of electro- and spintronics materials using local physical quantities in quantum field theory. For electronics, it is shown numerically that the tension force is the counter force to the Lorentz force, and a new method to clarify the relation between the local conductivity and the conductance of a material is proposed. For spintronics, the relation between the symmetry of a material and the distribution of spin torque is shown, and it is proposed that spin Hall effect can be understood in terms of spin vorticity.

## 1. 序論

近年の電子デバイス材料はナノメートルの領域まで微細化した。ナノ材料の物性量は全体の平均的效果ではなく、欠陥等の不純物や界面の効果に支配される。例えば、半導体素子中のリーク電流の場所依存性が観測されており、それが酸素空孔により増大する可能性も指摘されている。この特質を無視して素子全体の性質だけに注目した観測では材料間の性能の違いの原因を解明できない。ナノ材料では、物性量に対し局所的な領域がどのように寄与するのかの理解が重要である。

この目的に対し場の量子論に基づいて定義された局所物性量を第一原理計算から評価することが有効である。不純物の有無による変化を調べ、全体の物性量への影響を定量的に検討できる。そして、材料内の各点における物性量を評価し、材料内のどの領域がどの程度寄与するかも理論的に明らかにできる。これらの結果として、どのような物理現象から物性量が影響を受けるかを理論的に明らかにできる。

本研究では、エレクトロニクス材料に向けてベンゼンジチオール(BDT)分子内の局所的な電気伝導特性に関する研究と将来のスピントロニクス材料についての局所的な材料特性評価に向けた基礎研究を行った。4本の査読論文<sup>(1-4)</sup>の出版と多数の学会発表を行った。以下にその概要を記す。

## 2. エレクトロニクス材料の局所物性量による材料特性評価

ローレンツ力と拮抗する力が場の量子論において電子テンション密度であることを数値的に実証した。定常電流に対して、ローレンツ力による加速は何らかの力と釣り合っていないとしない。古典的には摩擦力として取り扱われ、量子力学では散乱による状態遷移として定式化されるが、複雑な式になるため結局のところ緩和時間という現象論パラメータにより記述される。本研究ではテンション密度がその拮抗する力であり、状態ベクトルを用いた簡単な計算から知ることができることを数値的に示した。<sup>(1)</sup>

図1がその結果の一例である。この計算は非平衡グリーン関数法を用いてBDTを例として行ったが、そのような多くの仮定に依存した計算であっても、非平衡定常状態における2つの力の釣り合いが確認できることを示した。

次に局所的な電気伝導率とコンダクタンスとの関係を解析する方法の研究を行った。<sup>(2)</sup>局所電気伝導率テンソル演算子 $\hat{\sigma}$ は、次のように定義されている。

$$\hat{j}(\vec{r}) = \hat{\sigma}_{ext}(\vec{r})\hat{D}(\vec{r}) = \hat{\sigma}_{ext}(\vec{r})\hat{E}(\vec{r})\hat{E}(\vec{r}) = \hat{\sigma}_{int}(\vec{r})\hat{E}(\vec{r}) \quad (1)$$

ここで、 $\hat{j}(\vec{r})$ は電流密度演算子であり、 $\hat{D}(\vec{r})$ は外部電場演算子、 $\hat{E}(\vec{r})$ は電場演算子である。このとき $\hat{E}(\vec{r})$ は $\vec{r}$ における局所誘電率テンソル演算子である。ここで、電流 $I$ とバイアス電圧 $V_B$ によって表現されるコンダクタンス $G=I/V_B$ の関係式

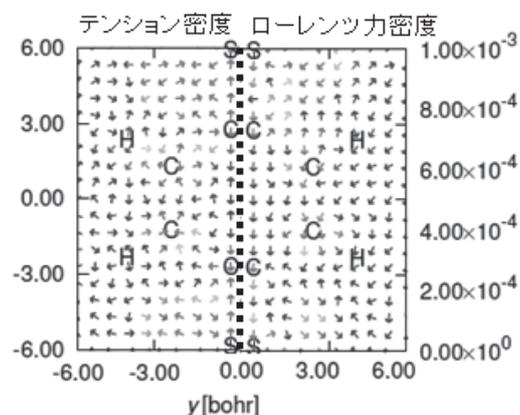


図 1. テンション密度とローレンツ力密度の釣り合い

を出発点として次の2種類の評価方法を提案した。直方体領域中で、外部電場の方向に対する領域の長さを  $L$ 、直交する面の面積を  $S$  として、(1)式を平均化した式  $I/S = \sigma_{ave} V_B/L$  に対し、 $\langle \hat{\sigma}_{ext}^j(\vec{r}) \rangle$  の平均を考えたもの  $\sigma_{ave}^{ij} = 1/V \int_V \sigma_{ext}^{ij}(\vec{r}) d\vec{r}$  と合わせることで導かれるものを method1 とし、領域の両端を流れる電流の平均を用いて  $G = I/V_B$  の関係から計算したものを method2 とする。

図2は0.5~4.0[V]のバイアス電圧を印加した際のコンダクタンスである。コンダクタンスのバイアス電圧依存性は、定義の違いによる相違がでている。今後も詳しく調べる必要がある。また、この定義では負のコンダクタンスが現れえるのも特徴である。これは分子内の局所的領域では外部電場方向に対して逆の方向へ電子の運動が加速されることがあり得ることに対応している。

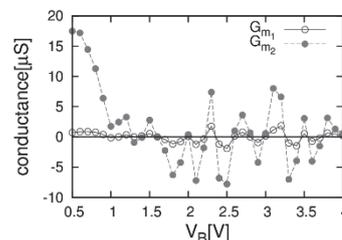


図2. 局所量からのコンダクタンス

### 3. スピントロニクス材料の局所物性量による材料特性評価に対する基礎研究

場の量子論に基づいて電子スピンに対する局所的な描像を採用し理論的研究を行った。このスピンの局所的描像の理解が将来スピントロニクス材料の新たな特性評価手法の確立につながると考えている。場の量子論の電子スピン角運動量密度演算子の運動方程式では電子スピンの働くトルクは、従来の量子力学のスピントルクと、カイラリティの空間的分布に起因するツェータ力という局所的トルクがある。スピン定常状態では、スピントルクがツェータ力と拮抗することで定常な状態を実現しているという描像が場の量子論によって予言されている。

まず、定常状態の分子内のスピントルクを調べた。<sup>(2)</sup> これまで量子力学で考慮されていなかったツェータ力の効果が、分子内では大きな寄与をもつことを明らかにした。また、空間対称性に関する議論から、ツェータ力のポテンシャルであるツェータポテンシャルの分布は分子の回転対称性と同一対称性を持ち、分子の鏡映面に対して符号が逆転することを示し、ベンゼン分子に対して数値的に実証した。分子軌道ごとの局所物理量の分布から、軌道エネルギーにはほとんど影響を与えない相対論的な相互作用が局所描像に対しては強い影響を与えることを示した。

次に、電子の永久電子双極子モーメント(EDM)の存在下におけるスピンについての理論的研究を行った。<sup>(3)</sup> EDMの観測は時間反転対称性の破れの直接確認に加えて、素粒子の標準模型の拡張理論の検証に重要である。近年は重原子を含む極性分子(YbF, ThO, BaF)が広く用いられており、これら分子内の大きな有効電場は局所的なスピン分布に起因することを明らかにした。さらに、EDMの存在によりスピンの運動方程式に新たな局所的スピントルクが生じることを示した。

また、一般相対性原理に基づく量子スピン渦理論によるスピンホール効果の力学的局所描像についての理論的研究を行った。<sup>(4)</sup> スピンの微分で書かれたスピンの渦度は全空間で積分を行うとゼロとなることから、これまで注目されていなかったが、スピン角運動量密度が空間的に分布する局所領域では重要である。この研究ではスピンホール効果を量子スピン渦理論に基づいて新たな描像が得られることを指摘した。そして、非平衡グリーン関数法により、定常電流下における1次元炭素鎖に対して、スピンの局所描像を示した。これにより、バイアス電圧印加後に定常状態に至る過程において、電子は動的運動量に加えてスピン渦度を生じることを示した。

### 4. まとめ

場の量子論に基づく局所物性量を用いてエレクトロニクス・スピントロニクス材料の材料特性評価法の確立に向けて第一原理計算を用いた理論研究を進めた。ベンゼンジチオール分子を用いて、ローレンツ力と拮抗する力がテンション力であることを示すとともに局所的な電気伝導率と材料全体のコンダクタンスとの関連を明らかにする手法を提案した。スピントロニクス材料に対しては、材料内部のスピントルク分布についての基礎研究を進め、材料の持つ対称性とトルク分布の関係を示すと同時に、スピントロニクスで重要なスピンホール効果を新たなスピン渦という描像で理解することが可能であることを示した。

### REFERENCES

- (1) H. Nozaki, M. Senami, K. Ichikawa, A. Tachibana, Jpn. J. Appl. Phys., in press.
- (2) M. Fukuda, K. Soga, M. Senami, A. Tachibana, Int. J. Quant. Chem., in press.
- (3) M. Fukuda, K. Soga, M. Senami, A. Tachibana, Phys. Rev. A 93, 012518 (2016).
- (4) M. Fukuda, K. Ichikawa, M. Senami, A. Tachibana, AIP Advances 6, 025108 (2016).
- (5) 中西 真, 埜崎 寛雄, 瀬波 大土, 立花 明知, P-21 「局所電気伝導率を用いたコンダクタンス評価方法」, 第21回電子デバイス界面テクノロジー研究会, 2016/1/22, 東レ研修センター(神奈川).