

# 固体電子論におけるスピン由来の電気分極と カイラリティ密度——ディラック場からみる多極子分類

星野晋太郎 〈埼玉大学大学院理工学研究科 hoshino@mail.saitama-u.ac.jp〉

鈴木通人 〈東北大学金属材料研究所 mts@tohoku.ac.jp〉

池田浩章 〈立命館大学理工学部 ikedah@fc.ritsumeai.ac.jp〉

固体物理で見られる多彩な量子現象は、基本的な物理量である電荷・スピン・電流密度の時空間分布によって特徴づけられる。近年、これらの密度分布を**多極子**の概念を用いて系統的に記述する研究が精力的に行われており、新奇な秩序現象の説明や**交差応答**を持つ物質の新規開拓の一助となっている。

対象物質がどのような多極子を有するかは物質の持つ対称性に依存し、空間反転および時間反転に対する偶奇性に応じて、電気多極子、磁気多極子、電気トロイダル多極子、磁気トロイダル多極子の4つのカテゴリーに分類される。例えばよく知られるように、強誘電体を特徴づける電荷分布は電気双極子を、強磁性体を特徴づけるスピン分布は磁気双極子を有する。また、トラス（ドーナツ形）状の電流分布は磁気トロイダル多極子に対応する。一方、電気トロイダル多極子はこれまであまり認識されてこなかった鏡映対称性を破る非磁性の自由度として、カイラル物質やフェロアキシシャル物質における**カイラル物性**との関連から、最近、大変注目されている。

これらの多極子の具体的な物理描像は、多極子の表現と相性のよい局在原子軌道を用いて調べることができる。その考察に基づくと、電気トロイダル多極子は電荷・スピン・電流密度といった基本的な物理量では捉え切れず、ミクロな物理量について再考する必要性に迫られる。

固体物理において、通常、電子の運動は座標 $\mathbf{r}$ にスピン $\sigma = \uparrow, \downarrow$ の電子を生成する演算子 $\psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r})$  (2成分場)によって記述されるが、より原理的には4成分ディラック場に基づいて考える必要がある。実際、電荷密度や電流密度といったミクロな物理量は

ディラック場によって定義され、その非相対論極限をとることで2成分場による表示を求めることが基本的である。この観点に立ち戻ってミクロな物理量を系統的に整理すると、電気トロイダル多極子に関連する物理量として、スピン自由度に由来する電気分極や**電子カイラリティ密度**という物理量を考える必要があることが明らかとなる。相対論効果に起因するこれらの物理量は、これまであまり重要視されてこなかったものであるが、スピントロニクスなどとの関連も深い。

右下の図は局在した電子系に内在する電気トロイダル双極子状態を考えた場合における、スピン自由度由来の電気分極と電子カイラリティ密度の空間分布である。電気トロイダル双極子の軸周りに電気分極が渦状に付随し、軸を含む面に対する鏡映対称性を破っていることがわかる。また、軸方向には電子カイラリティ密度が双極子分布を示し、電気トロイダル多極子が電子カイラリティ密度と一対一に対応するという描像が得られる。

こうして、電子カイラリティ密度はカイラル物質やフェロアキシシャル物質における左右対称の破れの度合いを定量的に示すようなミクロな物理量であり、スピン由来の電気分極とともにカイラル物性に関して新しい視点をもたらすものと期待される。ここで取り上げた物理量は第一原理的に各時空点において計算可能な量である。その時空間分布、マクロな積分量、輸送係数への影響を系統的かつ定量的に調べることにより、新奇な誘電体やカイラル物性の起源同定など様々な物性予言に繋がる可能性を秘めている。

## 用語解説

### 多極子：

物理量（例えば電荷密度）を球面調和関数で展開した際に現れる係数を、時間反転・空間反転対称性に基づいて分類したもの。

### 交差応答：

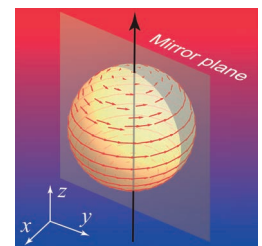
通常、磁場を印加すると磁化、電場を印加すると電気分極が誘起される。これに対して、磁場によって電気分極が生まれる電気磁気効果のような現象を交差応答と呼ぶ。

### カイラル物性：

左右の対称性（鏡映対称性）が破れた結晶構造を持つ化合物において観測される。光学活性、圧電効果、異常な磁気伝導、電気磁気効果などの新規な物性のこと。

### 電子カイラリティ：

ディラック場で定義される密度の次元を持つ微視的な物理量。右巻き・左巻き電子数の差を表し、電気トロイダル多極子の素となる。



電気トロイダル双極子を持つ系の電気分極（矢印）と電子カイラリティ密度（赤青濃淡）の分布の一例。