

京都大学教育研究振興財団助成事業
成果報告書

平成 28年1月8日

公益財団法人京都大学教育研究振興財団
会長 辻 井 昭 雄 様

所属部局・研究科 工学研究科

職名・学年 講師

氏 名 瀬 波 大 土

助成の種類	平成27年度 ・ 若手研究者在外研究支援 ・ 国際研究集会発表助成		
研究集会名	環太平洋国際化学会議2015 Pacifichem 2015		
発表題目	Spin torque and zeta force in molecules and magnetic materials		
開催場所	アメリカ合衆国・ハワイ州・ホノルル・Hawaii Convention Center		
渡航期間	平成 27 年 12 月 14 日 ～ 平成 27 年 12 月 20 日		
成果の概要	タイトルは「成果の概要／報告者名」として、A4版2000字程度・和文で作成し、添付して下さい。「成果の概要」以外に添付する資料 <input checked="" type="checkbox"/> 無 <input type="checkbox"/> 有()		
会計報告	交付を受けた助成金額	250,000円	
	使用した助成金額	250,000円	
	返納すべき助成金額	0円	
	助成金の使途内訳	会議参加登録料	90,000円
		航空運賃	115,600円
宿泊費		44,400円	
当財団の助成について	(今回の助成に対する感想、今後の助成に望むこと等お書き下さい。助成事業の参考にさせていただきます。)		

成果の概要

工学研究科 マイクロエンジニアリング専攻
講師 瀬波 大土

環太平洋国際化学会議 2015
Pacifichem 2015
2015年12月15日から20日

会議の概要

ハワイのホノルルのハワイコンベンションセンターと他数箇所のホテルで開催される環太平洋国際科学会議はとても大規模なものであった。この会議は化学と題しているが、非常に広い分野にまたがっており非常に多くの研究者が参加する。講演プログラム中の発表者リストだけで 100 ページを超えることからそれがわかると思われる。会場も分散していくつもパラレルセッションが開かれているが、みんな自分の興味のあるところに出るだけなので、日本の学会の規模を大きくしたようなものである。それでも国際会議であり多くの著名な研究者と一ヶ所で交流できるのは非常に有意義である。

報告者は主に物理・理論・計算のトピックに参加していたが、口頭発表が行われる部屋には常に多くの人が入り替わりながらも聴講していた。議論の活発さを欠いていた点だけが少し残念に思われたが、それでも多くの研究交流が行われていた。ポスター発表の会場は端が見えないくらい巨大なホールで行われて、目当てのポスターを探すのに都度大変であったが、みな熱心に説明してくれて良い議論が行えた。

講演の概要

報告者は初日の 15 日の午後にトピックエリア Physical, Theoretical & Computational の Computational Modeling of Magnetic Materials & Magnetic Properties のセッションで Spin torque and zeta force in molecules and magnetic materials (分子と時期材料中でのスピントルクとツェータ力)というタイトルで口頭発表を行った。

スピントロニクスなどのスピンの制御が重要となる分野では、外部磁場などを起源とするスピンを回転させる力であるスピントルクが重要である。これまで通常の取扱ではスピントルクは量子力学に基づいて取り扱われ、かつ、現象論的パラメーターを伴った有効理論で記述されていた。本研究では、量子力学よりも本質的な理論として信じられている場の量子論にしたがって記述されたスピンの方程式に注目した。この場の量子論によるスピンの記述では通常スピントルク項に加えてツェータ力項が現れ、スピンの定常状態は空間の各点各点でスピントルクとツェータ力がつりあうことにより実現する。通常量子力学による記述ではツェータ力は現れないことと、量子力学の物理量は内積で定義されているため、全空間積分後の値しか意味が無いため、各点各点でのつりあいは見られず、物質内での局所的なスピントルクなどは評価することができない。

本研究では、まず、このスピントルクとツェータ力のつりあいをベンゼン分子

の定常状態に対して数値計算により実証した。その上でツェータ力がツェータポテンシャルの勾配によって与えられていることを指摘し、そのツェータポテンシャルの持つ対称性が分子の持つ対称性とどのように関連しているのかを示した。具体的には回転対称性に対しては、同じ対称性を持ち、鏡映対称性に対しては反対称の性質を持つことを示した。次に、軌道ごとのツェータポテンシャルについて議論した。縮退した軌道は大きなツェータポテンシャルの値を持ち、縮退した軌道同士で反対の符号でほぼ等しい値を持つことを示した。この縮退軌道の持つツェータポテンシャルの値は分子全体の持つものよりも大きいものがたくさんあり、縮退軌道同士の大きなツェータポテンシャルの値の相殺の結果として分子の持つ小さな値のツェータポテンシャルが得られることを示した。

最後にツェータポテンシャルは電子のカイラリティに比例することを指摘し、キラルな分子に対してツェータポテンシャルの分布を示した。具体的にはもっともシンプルなアレンであるプロパジエンの4つの水素原子のうち2つをリチウム原子に置換した分子について示した。このツェータポテンシャルの分布は互いに光学異性体となる分子に対して符号が反対のツェータポテンシャルの分布をしていた。そして、その分子全体での積分値も、符号が反対でほぼ等しい値となっていることを示した。これは、自然界のキラリティの偏りの起源の可能性につながる新たな成果であり重要な結果である。

発表を聴講していた何人もの研究者が大きくなずきながら聴講してくれ、今後の研究の発展につながるような重要な質問は出なかったが、内容を確認する質問をたくさんいただき、研究を広く広め多くの交流が行えたことはすばらしかった。

謝辞

本年度は研究費が潤沢でなく、本助成金が無ければこの会議で発表することはできなかった。非常に大きな助けとなりました。ありがとうございました。