

平成 30 年度修士論文

カイラル分子における
スピン依存伝導

三重大学大学院 工学研究科 物理工学専攻
学籍番号 417M607

笹尾 直希

概要

近年、カイラル分子の分子接合における電子伝導において、スピン軌道相互作用が重要な役割を果たしていると考えられている。その一つとして、カイラル誘起スピン選択効果と呼ばれるスピフィルター効果が注目を浴びている。カイラル分子である二本鎖 DNA を用いた電気伝導実験において、DNA 分子がスピフィルターとして働き、透過スピンが分極することが観測された。カイラル分子を構成する原子には磁性原子が含まれないため、スピフィルター効果は分子内に生じるスピン軌道相互作用が原因であると考えられており、研究が進められている。このスピン軌道相互作用がスピン角運動量の変化に寄与するとき、磁気回転効果のように力学的角運動量とスピン角運動量が相互変換すると考えられる。強磁性体材料における磁気回転効果の理論は盛んに研究されているが、カイラル分子の分子接合においては、未だに研究がされていない。カイラル分子においてもスピン軌道相互作用の存在下でのスピン方向の変化によって、分子に角運動量が受け渡され、力学的なトルクへ変換されることが期待される。

本論文では、簡単なモデルとして両端を電極に接続した一本鎖 DNA を考えた。微視的な Hamiltonian からスピン連続方程式を導き、DNA 分子内の力学的回転を含む全角運動量の保存則を導出した。これにより、一方向から偏極した電子スピンを注入したとき、スピン流がスピン軌道相互作用を介して力学的トルクに変換されることを示した。また、数値計算から、DNA 分子の長さに依存して力学的トルクが周期的に変化し、スピン軌道相互作用が弱い極限ではユニットセル内の原子数に依存して振動周期が変化することを明らかにした。

目次

1	序論	4
1.1	カイラリティとカイラル分子の一例	4
1.1.1	カイラリティとカイラル分子	4
1.1.2	デオキシリボ核酸 (DNA)	4
1.2	カイラル誘起スピン選択効果	4
1.2.1	二本鎖 DNA の光電子の透過実験	5
1.2.2	二本鎖 DNA に対する電気伝導実験	7
1.2.3	理論研究について	8
1.3	スピン軌道相互作用	8
1.3.1	Rashba のスピン軌道相互作用	8
1.3.2	スピン分裂したバンド図	9
1.4	磁気回転効果	11
1.5	本論文の目的	11
1.6	本論文の構成	11
2	計算課程	12
2.1	一本鎖 DNA のモデルハミルトニアン	12
2.1.1	一重螺旋構造の DNA	12
2.1.2	Hamiltonian	14
2.2	スピンの連続方程式	15
2.3	Landauer 型の公式	17
3	結果と議論	19
3.1	力学的トルクの入射スピンのエネルギー依存性	19
3.2	力学的トルク of DNA 分子の鎖の長さ依存性	20
3.3	力学的トルクの大きさ	23
3.4	一本鎖 DNA のスピン分解コンダクタンス	24
4	まとめ	26
	付録 A 相対論的量子論によるスピン軌道相互作用の導出	27
	付録 B スピン軌道相互作用の強さの導出	30
	付録 C スピンの連続方程式の導出	31

付録 D	スピン流の期待値	35
付録 E	力学的トルクの振動周期	37
付録 F	Python のコード	40

1 序論

本章では本論文の研究背景と研究目的、論文構成について説明する。

1.1 カイラリティとカイラル分子の一例

1.1.1 カイラリティとカイラル分子

左手と右手のように互いに鏡写しの関係にあり、重ね合わせることができない性質をカイラリティ (キラリティ) という。カイラル (キラル) 分子とは、同じ元素から構成されるが、原子間の結合関係が異なるために、カイラリティを持つ分子のことである。このように鏡写しの関係にある分子は互いにエナンチオマー、鏡像異性体、あるいは対掌体と呼ばれる。対掌体の内、鏡写の関係の一方を右手系、もう一方を左手系と呼ぶ。

多くの場合、右手系と左手系の存在比率は一対一ではなく、一方に偏り (ホモカイラリティ) がある。代表的なカイラル分子として、デオキシリボ核酸 (DNA) などが挙げられる。カイラル分子は、次節で説明するカイラル誘起スピン選択則の発見によって、生体内のカイラル分子が持つホモカイラリティの起源の解明や、カイラル分子のスピントロニクスへの応用など、広い分野にわたる研究の可能性が示唆されており、注目を浴びている。

1.1.2 デオキシリボ核酸 (DNA)

デオキシリボ核酸 (以下 DNA) には、一般的に右巻き螺旋構造の A-form DNA と B-form DNA、左巻き螺旋構造の Z-form DNA の 3 種類が存在する。乾燥した環境下では A-form DNA、湿り気のある生体内では、B-form DNA の形で存在することが多い [1]。DNA 分子の螺旋構造は各塩基対 (base pair : bp) が鉛直方向に積み重なるように結合することによって形成される。bp は DNA 分子の長さの単位としても用いられる。塩基対間の π 結合により、電子の受け渡しができるため、DNA 分子は導電性を示す [2]。本修士論文中の計算では、一般的な B-form DNA の寸法を採用する。

1.2 カイラル誘起スピン選択効果

カイラル誘起スピン選択効果とは、右手系、あるいは左手系のカイラル分子が、分子内を透過する伝導電子スピンの方向の内、一方向のみを優先的に透過させるスピンフィルター効果 [3, 4, 5, 6, 7, 8] のことである。右手系のカイラル分子は下向きスピン、左手系のカイラル分子は上向きスピンを優先的に透過させることが確認されている [9, 10, 11, 12, 13]。カイラル誘起スピン選択効果は以下の実験によって発見された。

1.2.1 二本鎖 DNA の光電子の透過実験

以下の実験では、図 1 のように金の基盤上に二本鎖 DNA の自己組織膜を形成した後、金表面に対して垂直にレーザー光を照射するセットアップを考える [9]。この時、レーザー光を照射された金表面から、光電効果により電子が飛び出し、飛び出した電子は二本鎖 DNA の自己組織膜を透過する。この実験では、二本鎖 DNA 内を透過する前後で電子のスピンの分極率の変化を比較・検討する (図 2)。

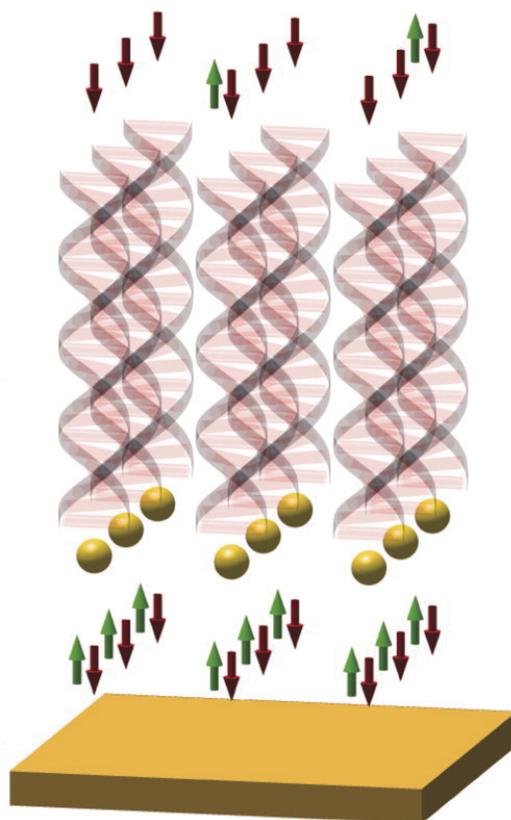


図 1: 金基盤の表面上に形成した二本鎖 DNA の自己組織膜の図 (論文 [9] より引用)

レーザー光は直線偏光の場合と時計回り、反時計回りの円偏光した場合の 3 種類が用いられている。図 2(A) は、3 種類のレーザー光それぞれを金表面に照射することで、光電効果により飛び出した直後の電子のスピンの分極率 (横軸) と試行回数 (縦軸) の関係を表している。電子のスピンの分極率は正の値ほど \uparrow -スピン、負の値ほど \downarrow -スピンの割合が高いことを示している。直線偏光のレーザー光 (青線) では、光電効果によって飛び出す電子がほとんど分極していないことが分かる。一方、時計回りの円偏光の場合 (緑線) は \downarrow -スピン、反時計回りの円偏光の場合 (赤線) は \uparrow -スピンの分極していることが分かる。

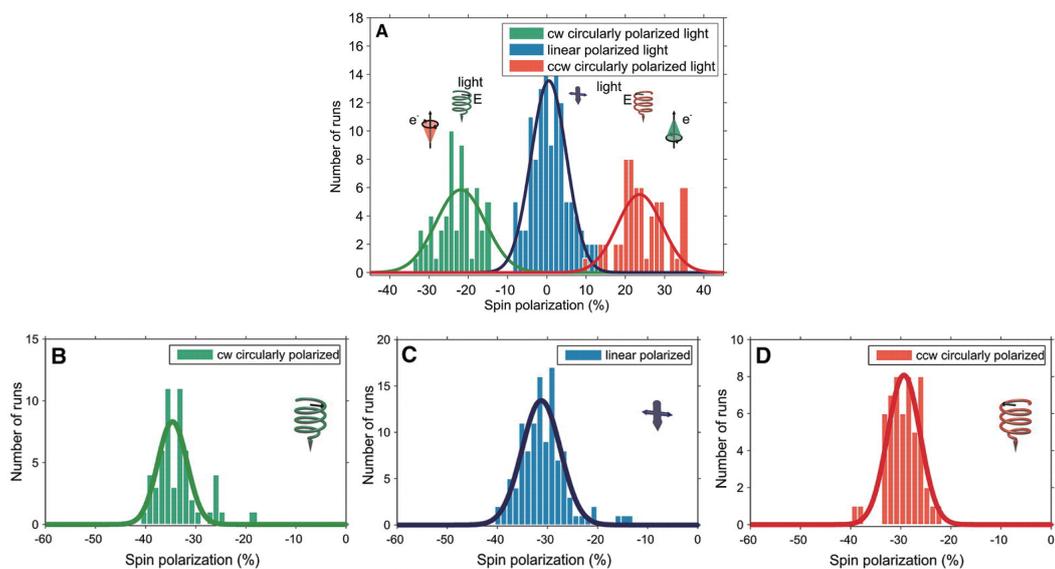


図 2: (A) 二本鎖 DNA を透過前の電子のスピンの分極を測定した結果。(B)(C)(D) は二本鎖 DNA を透過後の電子のスピンの分極を測定した結果。(B) 時計回りに円偏光したレーザー光を金基盤に照射した場合。(C) 直線偏光のレーザー光を金基盤に照射した場合。(D) 反時計回りに円偏光したレーザー光を金基盤に照射した場合。(図は論文 [9] より引用)

二本鎖 DNA を透過前の電子のスピンの分極 (図 2(A)) と二本鎖 DNA を透過後の電子のスピンの分極 (図 2(B)(C)(D)) を比較すると、どのレーザー光を照射した場合でも、二本鎖 DNA を透過後は \downarrow -スピンに分極した状態になることが観測されている。このことから、この場合は二本鎖 DNA がスピンを \downarrow -スピンの方向に揃えようとするスピフィルターとしての役割を果たしていることが確認できる。

1.2.2 二本鎖 DNA に対する電気伝導実験

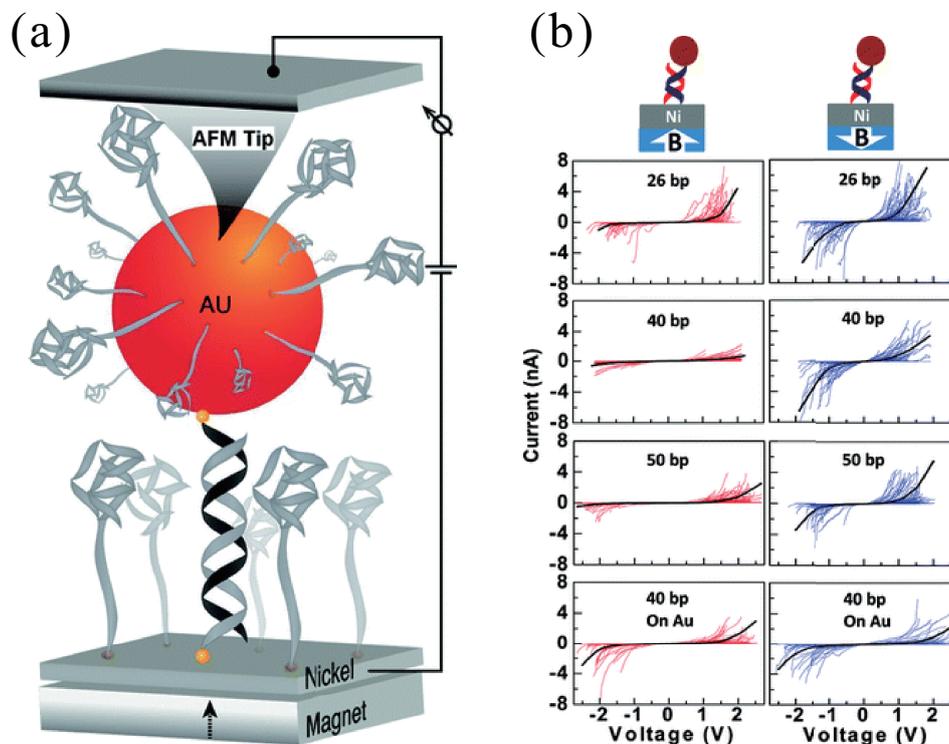


図 3: (a) 両端をニッケル基盤表面と金微粒子の球面上に接続した二本鎖 DNA のセットアップ。(b) 金属基盤を磁化させることにより、 \uparrow スピンに分極した電流を注入した場合 (左側) と \downarrow スピンに分極した電流を注入した場合 (右側) の DNA 分子の電流-電圧特性。左右ともに、上から 3 段目まではニッケル基盤、最下段は金基盤の場合である。(図は論文 [10] より引用)

以上の実験では、図 3(a) のようにニッケル表面上に形成した一本鎖 DNA の自己組織膜と、金微粒子の球面上に一端を接続した一本鎖 DNA が二本鎖 DNA を形成したセットアップを考えている [10]。ニッケル電極と金電極の二つの端子は電源に接続され、両端に電圧をかけることができる。金微粒子表面には原子間力顕微鏡のカンチレバーを接続することで、DNA 分子に流れる電流を計測する。ニッケル基盤は強磁性体のため、基盤下から外部磁場をかけることにより、流れる電流の電子スピンの方向を \uparrow -スピンか \downarrow -スピンのように制御できる。このように強磁性体の性質を利用して、DNA 分子にスピンの分極した電流を流したときの DNA 分子の電流-電圧特性を観測する。

図 3(b) は、 \uparrow -スピンに分極した電流を DNA 分子に流したとき (左側)、 \downarrow -スピンに分極した電流を流したとき (右側) の電流-電圧特性である。左右を比較すると、DNA 分子を形成する塩基対の数 (単位は bp) が多くなるほど、 \uparrow -スピンに分極した電流に対する電圧応答が鈍く、逆に \downarrow -スピンに分極した電流に対する電圧応答が鋭くなっているこ

とが分かる。これらの結果から、二本鎖 DNA は↑-スピンよりも ↓-スピンを選択的に透過させていることが分かる。左右ともに最下部の図は、ニッケル基盤を非磁性金属の金基盤に変更した場合の結果である。左右の最下部の図は同様の電流-電圧特性を示しており、↓-スピンの選択性が強磁性金属によるものと確認できる。

1.2.3 理論研究について

これらの実験以降、カイラル誘起スピン選択効果の起源を解明するため、理論の面から様々な研究がなされている。仮説の中でも、分子内に生じたスピン軌道相互作用の影響によるものとする仮説が有力とされている [14, 15, 16, 17, 18, 19, 20]。

1.3 スピン軌道相互作用

スピン軌道相互作用とは、電子の軌道角運動量とスピン角運動量が互いの向きを固定しようとする相互作用のことである [21]。相対論的量子論から微視的に導出され、一般的にスピン軌道相互作用の Hamiltonian は、

$$H_{SO} = \frac{e\hbar}{4m_e^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{p}) \quad (1)$$

と与えられる (詳しい導出は付録 A を参照)。 $\boldsymbol{\sigma}$ は Pauli 行列ベクトルであり、

$$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z), \quad (2)$$

と与えられる。このとき、Pauli 行列ベクトルの各成分は

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3)$$

をである。また、 \mathbf{E} は電場、 \mathbf{p} は電子の運動量であり、 e は素電荷、 \hbar は換算プランク定数、 c は光速、 m_e は電子の質量である。

1.3.1 Rashba のスピン軌道相互作用

スピン軌道相互作用の中でも、物質の表面や界面に形成された 2 次元電子系など、垂直に電場がかかる場合のスピン軌道相互作用を Rashba のスピン軌道相互作用と呼ぶ [22]。

このとき、物質表面、界面 (xy 平面) に垂直にかかる電場ベクトルを \mathbf{E}_\perp 、電子の運動量を \mathbf{p} として、

$$\mathbf{E}_\perp = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ E \end{pmatrix}, \quad \mathbf{p} = \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} \quad (4)$$

と定義し、Pauli 行列ベクトルを $\boldsymbol{\sigma}$ とすると、Rashba のスピン軌道相互作用の Hamiltonian は、

$$H_{RSO} = \frac{e\hbar}{4m_e^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{p}) = \lambda \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{p}) \quad (5)$$

と表すことができる。このとき、定数をまとめて

$$\lambda = \frac{e\hbar}{4m_e^2c^2} \quad (6)$$

と置いた。式 (5) から、図 4 のように、Rashba スピン軌道相互作用により、2次元電子系上を透過する電子の透過方向成分と、電場の両方に直交する方向に有効磁場が生じ、その有効磁場により電子のスピンが歳差運動することが分かる。

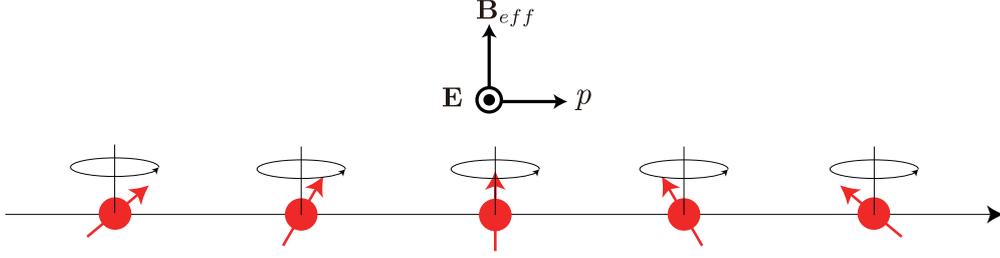


図 4: Rashba のスピン軌道相互作用によるスピンの歳差運動

1.3.2 スピン分裂したバンド図

本節では、Rashba のスピン軌道相互作用が存在する場合の 2次元電子系の Schrödinger 方程式を解く [22]。このとき、運動エネルギーの Hamiltonian は次のように表す。

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \quad (7)$$

また、式 (5) より、Rashba のスピン軌道相互作用の Hamiltonian は

$$H_{RSO} = \lambda E (\sigma_y p_x - \sigma_x p_y) \quad (8)$$

と表すことができる。ここで、二次元電子系のサイズを $L \times L$ として、波数空間を

$$\mathbf{k} = \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k \cos \phi \\ k \sin \phi \end{pmatrix} \quad (9)$$

のように極座標で表す。このとき、波動関数の解を xy 平面上の任意のベクトル \mathbf{r} を用いて

$$\psi(x, y) = \frac{1}{\sqrt{L^2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{L^2}} e^{ik(\cos \phi x + \sin \phi y)} \quad (10)$$

と置き、運動エネルギーの Hamiltonian に作用させれば、

$$H_0 \psi(x, y) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \psi(x, y) \quad (11)$$

を得る。同様にして、Rashba のスピン軌道相互作用の Hamiltonian に作用させれば、

$$H_{RSO} \psi(x, y) = \lambda E \hbar k (\sigma_y \cos \phi - \sigma_x \sin \phi) \psi(x, y) \quad (12)$$

である。ここで、 $(\sigma_y \cos \phi - \sigma_x \sin \phi)$ を対角化するユニタリ行列 $U = e^{-i(\frac{\pi}{4} + \frac{\phi}{2})\sigma_z} e^{-i\frac{\pi}{4}\sigma_y}$ を導入すると、式 (12) の右辺について

$$\lambda E \hbar k (\sigma_y \cos \phi - \sigma_x \sin \phi) = \lambda E \hbar k U \sigma_z U^{-1} \quad (13)$$

を得ることができる [23]。

次に、運動エネルギーの Hamiltonian と Rashba のスピン軌道相互作用の Hamiltonian の和について、波動関数 $\psi(x, y)$ を作用させると

$$\begin{aligned} (H_0 + H_{RSO}) \psi(x, y) &= \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + \lambda E \hbar k U \sigma_z U^{-1} \right) \psi(x, y) \\ &= U \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + \lambda E \hbar k \sigma_z \right) U^{-1} \psi(x, y) \\ &= U \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + \lambda E \hbar k & 0 \\ 0 & \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} - \lambda E \hbar k \end{pmatrix} U^{-1} \psi(x, y) \end{aligned} \quad (14)$$

であり、このときのエネルギー固有値は ϵ_+ と ϵ_- として

$$\epsilon_+ \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + \lambda E \hbar k \quad (15)$$

$$\epsilon_- \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} - \lambda E \hbar k \quad (16)$$

と定義することができる。 $\epsilon_{+(-)}$ と波数 k の関係を図 5 のバンド図に示す。

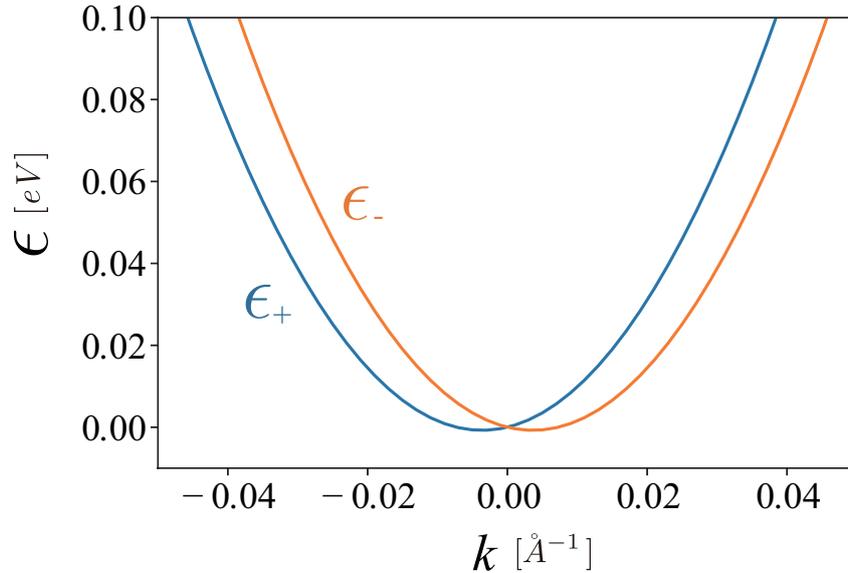


図 5: Rashba のスピン軌道相互作用の存在下におけるバンド図

このとき、 e は電荷素量、 \hbar は換算プランク定数、 m_e は電子の質量、 c は光の速度であり、電場の強さは $E = 5 \times 10^{12} [\text{V/m}]$ を用いた。本節では、GaAs の二次元電子系の場合を想定し、GaAs の換算質量 $m = 0.067m_e$ を採用した [24]。図 5 より、Rashba のスピン軌道相互によってスピンの縮退が解け、 \uparrow -スピンと \downarrow -スピンにそれぞれ分裂したバンド図が得られることが分かる。

1.4 磁気回転効果

強磁性体中の電子が持つスピンの方向と、物体自身の回転運動はスピン軌道相互作用を介して結び付けられ、角運動量が相互に変換される現象を磁気回転効果と呼ぶ [25, 26, 27, 28]。実験によって 1 世紀前に相次いで発見され、物体の磁化に伴って物体に回転運動を生じさせる現象は Einstein-de Haas 効果 [27] 物体の回転運動が物体を磁化させる現象は Barnett 効果 [28] とそれぞれ呼ばれる。

近年、スピン流と電流、熱流の相互交換現象の研究が実験、理論の両面から研究が盛んになる中で、スピン流と回転運動を相互交換も注目を浴び、理論の面から研究がされている [29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36]。

1.5 本論文の目的

本論文では、カイラル分子の分子接合におけるスピン角運動量と力学的角運動量の相互変換現象を理論的な面から明らかにする。カイラル分子においても、強磁性体材料における磁気回転効果と同様に、スピン軌道相互作用を介したスピン方向の変化によって、分子に角運動量が受け渡され、力学的なトルクが誘起されることが期待される。一本鎖 DNA の有効なモデルを用いて、誘起される力学的トルクとスピン流の関係を明らかにし、数値計算によってトルクの大きさを推定する。

1.6 本論文の構成

本論文は、次のような構成である。

第 2 章では、本論文で用いる一本鎖 DNA の有効モデルについて説明し、両電極と一本鎖 DNA の Hamiltonian、それらの界面の Tunneling Hamiltonian を定義する。次に、Born-Oppenheimer 近似の下でスピンの連続方程式を導出し、スピン流と力学的トルクの間関係を明らかにする。最後に、散乱理論からスピン流の Landauer 型の公式を導出し、定常状態で、スピン流が DNA 分子に作用する力学的トルクを決めることを明らかにする。第 3 章では、数値計算から得られた力学的トルクの入射エネルギー依存性と DNA の鎖の長さ依存性を議論する。また、力学的トルクは周期性と大きさについて議論する。第 4 章では、本論文によって明らかになった結果をまとめた。付録では、詳細な計算をまとめた。

2 計算課程

2.1 一本鎖 DNA のモデルハミルトニアン

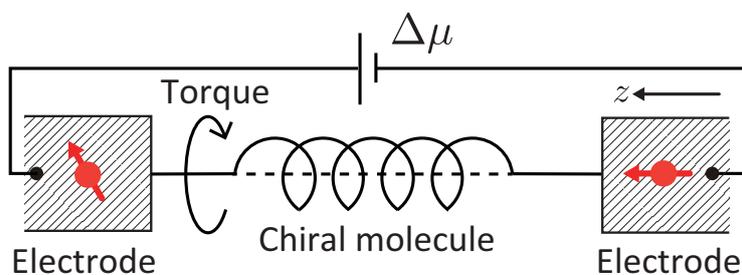


図 6: 両端に電極を接続した DNA

本論文では、簡単のために、図 6 のように一本鎖 DNA の両端に電極を接続したモデルを考える。本節では、本論文で用いる一本鎖 DNA の有効なモデルについて説明する。また、一本鎖 DNA、両端の電極の Hamiltonian と、それらの境界の Tunneling Hamiltonian を定義する。

2.1.1 一重螺旋構造の DNA

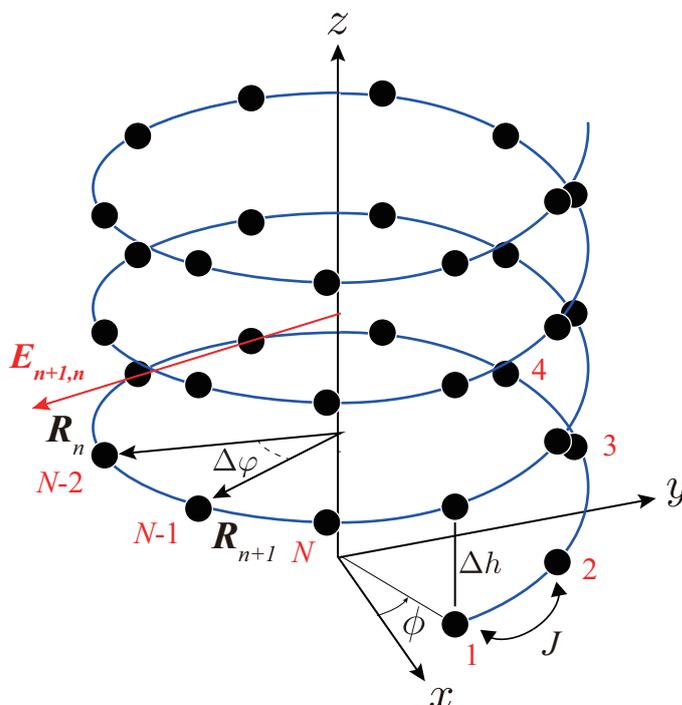


図 7: 一本鎖 DNA の有効モデル。全サイト数 $N_{\text{mol}} = 32$ の場合。

本節では、一次元の強束縛近似による鎖で作られ、一重螺旋構造の DNA 分子のセットアップ (図 7) について説明する。図 7 の黒丸は原子核の質点の位置 (サイト) である。螺旋一巻きをユニットセルとし、ユニットセルに含まれるサイト数を N 、ユニットセル間の距離を Δh 、螺旋半径を R とする。図 6 の右の電極に近い側から数えて n 番目のサイトの位置ベクトル \mathbf{R}_n を

$$\mathbf{R}_n = R[\cos(\varphi_n + \phi)\hat{\mathbf{x}} + \sin(\varphi_n + \phi)\hat{\mathbf{y}}] + \Delta h \frac{\varphi_n}{2\pi} \hat{\mathbf{z}} \quad (17)$$

$$\varphi_n = n\Delta\varphi, \Delta\varphi = \frac{2\pi}{N} \quad (18)$$

と定義する [16]。このとき、 φ_n は方位角、 $\Delta\varphi$ はねじり角を表す。ここで、 x 、 y 、 z 軸方向の単位ベクトルを、それぞれ

$$\hat{\mathbf{x}} = (1, 0, 0) \quad (19)$$

$$\hat{\mathbf{y}} = (0, 1, 0) \quad (20)$$

$$\hat{\mathbf{z}} = (0, 0, 1) \quad (21)$$

とした。角度 ϕ は $\hat{\mathbf{z}}$ 軸周りの回転角であり、 $\boldsymbol{\sigma}$ は Pauli 行列ベクトルである。次に、Rashba のスピン軌道相互作用による、スピンの歳差運動の回転軸方向を表すベクトル $\mathbf{K}_{n+1,n}$ を以下のように与える。

$$\mathbf{K}_{n+1,n} = \hat{\mathbf{K}}_{n,n+1} |\mathbf{K}_{n+1,n}| \quad (22)$$

$$= \frac{e\hbar}{4m_e^2 c^2} (\mathbf{R}_{n+1} - \mathbf{R}_n) \times \mathbf{E}_{n+1,n} \quad (23)$$

$\hat{\mathbf{K}}_{n,n+1}$ は $\mathbf{K}_{n+1,n}$ 方向の単位ベクトルである。また、 $\mathbf{R}_{n+1} - \mathbf{R}_n$ は n 番目のサイトから $n+1$ 番目のサイトに向いた方向ベクトルであり、 $\mathbf{E}_{n+1,n}$ は $n+1$ 番目と n 番目のサイト間の中点を貫き、 $\hat{\mathbf{z}}$ 軸に垂直な電場を表している。 $\mathbf{E}_{n+1,n}$ は以下のように定義される [16]。

$$\mathbf{E}_{n+1,n} = E_0 [\cos(\varphi_{n+1/2} + \phi)\hat{\mathbf{x}} + \sin(\varphi_{n+1/2} + \phi)\hat{\mathbf{y}}] \quad (24)$$

さらに、式 (18)、式 (23)、式 (24) より、本論文のモデルにおけるスピン軌道相互作用の強さは、

$$\alpha = |\mathbf{K}_{n+1,n}| = \frac{e\hbar E_0}{4m_e^2 c^2} \sqrt{4R^2 \sin^2\left(\frac{\pi}{N}\right) + \left(\frac{\Delta h}{N}\right)^2} \quad (25)$$

と求められる。導出過程の詳細は付録 B にまとめた。式 (25) より、我々のモデルでは、スピン軌道相互作用の強さが螺旋構造のパラメーター R 、 N 、 Δh と電場の強さ E_0 によって決定され、サイトの番号 n には依存しないことが分かる。

2.1.2 Hamiltonian

本節では、一本鎖 DNA、左右の電極の Hamiltonian と界面の Tunneling Hamiltonian を定義する。まず、系全体の Hamiltonian を \mathcal{H} とし、以下のように定義する。

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{mol}} + \mathcal{H}_L + \mathcal{H}_R + V \quad (26)$$

一本鎖 DNA の Hamiltonian を \mathcal{H}_{mol} として次のように定義する [16]。

$$\mathcal{H}_{\text{mol}} = \sum_{n=1}^{N_{\text{mol}}} \epsilon_n c_n^\dagger c_n - J \sum_{n=1}^{N_{\text{mol}}-1} c_{n+1}^\dagger V_n c_n + \text{H.c.} \quad (27)$$

ϵ_n は各サイト n におけるポテンシャルを表すが、以下では簡単のために $\epsilon_n = 0$ とした。 N_{mol} は一本鎖 DNA 内に含まれる全サイト数、 J は一本鎖 DNA 内における最近接のサイト間のホッピングである。一本鎖 DNA 内の電子の生成・消滅演算子はスピノル表示を用いて

$$c_n = \begin{pmatrix} c_{n\uparrow} \\ c_{n\downarrow} \end{pmatrix}. \quad (28)$$

とする。また、Rashba のスピン軌道相互作用により、DNA 分子内を透過中の電子スピンの方向が歳差することを記述する回転演算子を

$$V_n = e^{i\mathbf{K}_{n,n+1} \cdot \boldsymbol{\sigma}} = \cos(\alpha) + i \sin(\alpha) \hat{\mathbf{K}}_{n,n+1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (29)$$

と定義する。ベクトル $\mathbf{K}_{n+1,n}$ は、Rashba のスピン軌道相互作用によって、スピンの歳差運動する回転軸の方向を表している。また、左右の電極の Hamiltonian を $\mathcal{H}_r (r = R, L)$ として

$$\mathcal{H}_r = -J_0 \sum_{n=1}^{N_r-1} c_{r,n+1}^\dagger c_{r,n} + \text{H.c.} \quad (30)$$

と定義し、右側の電極を $r = R$ 、左側の電極を $r = L$ とする。 J_0 は、左右の電極における最近接のサイト間のホッピングである。このとき、両電極の電子の生成・消滅演算子は、一本鎖 DNA の Hamiltonian の場合と同様に

$$c_{r,n} = \begin{pmatrix} c_{r,n\uparrow} \\ c_{r,n\downarrow} \end{pmatrix}. \quad (31)$$

とする。最後に、界面の Tunneling Hamiltonian を V として、

$$V = v c_{1,R}^\dagger c_{R,1} + v c_{N_{\text{mol}},L}^\dagger c_{L,1} + \text{H.c.} \quad (32)$$

と定義する。 v は一本鎖 DNA と電極の界面における、サイト間のホッピングを表している。

2.2 スピンの連続方程式

本節では、Born-Oppenheimer 近似の下、スピンの連続方程式を導くことにより、スピン流と力学的トルクの直接的な関係を明らかにする (導出過程は付録 C)。

まず、一本鎖 DNA を理想的な剛体と考え、慣性モーメントを

$$I = N_{\text{mol}} m_I R^2 \quad (33)$$

と定義する。\$N_{\text{mol}}\$ は一本鎖 DNA 内に含まれる全サイト数、\$m_I\$ は原子核の質量、\$R\$ は DNA の螺旋半径である。これより、一本鎖 DNA の Lagrangian は

$$\mathcal{L}_{\text{mol}} = \frac{I}{2} \dot{\phi}^2 - \langle \psi(\phi) | \mathcal{H} | \psi(\phi) \rangle \quad (34)$$

と表すことができる。このとき、電子の時間スケールは DNA 分子を構成する原子核の時間スケールよりも非常に短いので、Born-Oppenheimer 近似の下では原子核は古典的扱い、電子は量子力学的に扱う必要がある。したがって、右辺の第二項は電子の固有ベクトルを \$|\psi(\phi)\rangle\$ として期待値をとった。さらに式 (34) より、Eular-Lagrange 方程式

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}_{\text{mol}}}{\partial \dot{\phi}} \right) + \frac{\partial \mathcal{L}_{\text{mol}}}{\partial \phi} = 0 \quad (35)$$

を解くと、

$$I \ddot{\phi} = \langle \psi(\phi) | \frac{\partial \mathcal{H}_{\text{mol}}(\phi)}{\partial \phi} | \psi(\phi) \rangle \equiv \tau \quad (36)$$

を得る [37]。式 (36) の左辺について次元解析すると、次元は N・m となり、トルクの次元に一致する。ゆえに、力学的トルクを \$\tau\$ として定義する。式 (36) の右辺の \$\partial \mathcal{H}_{\text{mol}}(\phi)/\partial \phi\$ については、式 (23)、式 (24)、式 (29) より

$$\frac{\partial \mathcal{H}_{\text{mol}}(\phi)}{\partial \phi} = -iJ \sin(\alpha) \left(\sum_{n=1}^{N_{\text{mol}}-1} c_{n+1}^\dagger [\hat{\mathbf{K}}_{n+1,n} \times \boldsymbol{\sigma}]_z c_n - \text{H.c.} \right) \quad (37)$$

と求めることができる (付録 C)。

次に、式 (37) とスピン流の演算子の関係を明らかにする。まず、一本鎖 DNA の任意の方向 \$\hat{\ell}\$ (\$|\hat{\ell}| = 1\$) を向いた全スピン成分を

$$\mathbf{S}_{\text{mol}} \cdot \hat{\ell} = \frac{\hbar}{2} \sum_{n=1}^{N_{\text{mol}}} c_n^\dagger (\hat{\ell} \cdot \boldsymbol{\sigma}) c_n \quad (38)$$

$$\mathbf{S}_{\text{mol}} = (S_{\text{mol},x}, S_{\text{mol},y}, S_{\text{mol},z}) \quad (39)$$

と定義する。Heisenberg 表示により、式 (39) の時間依存性を

$$\mathbf{S}_{\text{mol}}(t) = \exp \left[i \frac{\mathcal{H}}{\hbar} (t - t_0) \right] \mathbf{S}_{\text{mol}} \exp \left[-i \frac{\mathcal{H}}{\hbar} (t - t_0) \right] \quad (40)$$

のように表しておく。よって、式 (39) と式 (40) から時間微分すると、Heisenberg の運動方程式は

$$\frac{d}{dt}[\mathbf{S}_{\text{mol}}(t) \cdot \hat{\boldsymbol{\ell}}] = I_{L,\hat{\boldsymbol{\ell}}}(t) + I_{R,\hat{\boldsymbol{\ell}}}(t) + \mathbf{J} \cdot \hat{\boldsymbol{\ell}} \quad (41)$$

と求められる (付録 C)。ここで、式 (41) の右辺の第一項と第二項はスピン流の演算子を表し、

$$I_{L(R),\hat{\boldsymbol{\ell}}} = \frac{iv}{2} \left(c_{L(R),1}^\dagger (\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \boldsymbol{\sigma}) c_{1(N_{\text{mol}})} - \text{H.c.} \right) \quad (42)$$

と置いた。さらに、右辺の第三項についても

$$\mathbf{J} \cdot \hat{\boldsymbol{\ell}} = -iJ \sin(\alpha) \left(\sum_{n=1}^{N_{\text{mol}}-1} c_{n+1}^\dagger [\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot (\hat{\mathbf{K}}_{n+1,n} \times \boldsymbol{\sigma})] c_n - \text{H.c.} \right) \quad (43)$$

と置いた。式 (43) は、 $\hat{\boldsymbol{\ell}} = \hat{\mathbf{z}}$ のとき、式 (37) に一致することから、式 (41) は、

$$\frac{dS_{\text{mol},z}(t)}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}_{\text{mol}}(\phi)}{\partial \phi} + I_{L,\hat{\mathbf{z}}}(t) + I_{R,\hat{\mathbf{z}}}(t) \quad (44)$$

と書き換えることで、スピンの連続方程式を導出できた。一方、 $\hat{\boldsymbol{\ell}} = \hat{\mathbf{x}}$ 、 $\hat{\boldsymbol{\ell}} = \hat{\mathbf{y}}$ の場合は、左右の電極で一本鎖 DNA が固定されていることから角運動量が保存しない。すなわち、 $\hat{\mathbf{x}}$ 、 $\hat{\mathbf{y}}$ 軸周りの回転運動は取り出されないと考えられる。したがって、定常状態 $dS_{\text{mol},z}(t)/dt = 0$ のとき、式 (36) と式 (44) から、さらに

$$I\ddot{\phi} = -\langle \psi(\phi) | (I_{L,\hat{\mathbf{z}}} + I_{R,\hat{\mathbf{z}}}) | \psi(\phi) \rangle = \tau \quad (45)$$

と書き換えることができる。以上より、スピン流と力学的トルクの間関係を明らかにすることができた。

2.3 Landauer 型の公式

本節では、定常状態におけるスピンの連続方程式から力学的トルクの大きさを求めるため、散乱理論の範囲内で式 (45) のスピン流演算子 $I_{L,\hat{z}}$ と $I_{R,\hat{z}}$ の期待値 $\langle \psi(\phi) | I_{L(R),\hat{z}} | \psi(\phi) \rangle$ を Landauer 型の公式 [38] として求める。

本節では、右側電極から電子を入射させた場合を考える。このときの電子の固有ベクトル $|\psi(\phi)\rangle$ について、 $|\ell\sigma\rangle_R = c_{R,\ell\sigma}^\dagger |0\rangle$ と置き換える。 σ はスピンの自由度である。ここで、 $|0\rangle$ は真空状態を表し、生成演算子 $c_{R,\ell\sigma}^\dagger$ は、

$$c_{R,\ell\sigma}^\dagger = \sqrt{\frac{2}{N_R}} \sum_{n=1}^{N_R} \sin\left(2\pi \frac{n\ell}{N_R}\right) c_{R,n\sigma}^\dagger \quad (46)$$

のように定義する。また、 $\mathcal{H}_R |\ell\sigma\rangle_R = E_{R,\ell\sigma} |\ell\sigma\rangle_R$ について、 $N_R \rightarrow \infty$ の極限におけるエネルギー固有値 $E_{R,\ell\sigma}$ は

$$E_{R,\ell\sigma} = -2J_0 \cos\left(\frac{2\pi\ell}{N_R}\right) \quad (47)$$

である。このとき、電子の固有ベクトル $|\ell\sigma\rangle_R$ の散乱状態 $|\ell\sigma^{(+)}(\phi)\rangle_R$ は、以下の Lippmann-Schwinger 方程式から解くことができる [23]。

$$|\ell\sigma^{(+)}(\phi)\rangle_R = [1 + G(E_{R,\ell\sigma} + i0)V] |\ell\sigma\rangle_R \quad (48)$$

ここで、 $G(E)$ は全系の Green 関数演算子であり、

$$G(E) = [E - \mathcal{H}]^{-1} . \quad (49)$$

と表される。式 (45) の波動関数 $|\psi(\phi)\rangle$ を散乱状態の波動関数 $|\ell\sigma^{(+)}(\phi)\rangle_R$ に入れ替え (詳細な計算は付録 D を参照)、エネルギー E とスピンの自由度 σ を持ったスピンを右側電極から注入したときのスピン流演算子 $I_{L,\hat{z}}$ 、 $I_{R,\hat{z}}$ の期待値を計算すると、

$$\begin{aligned} \tau &= \sum_{\ell} {}_R \langle \ell\sigma^{(+)}(\phi) | (I_{L,\hat{z}} + I_{R,\hat{z}}) | \ell\sigma^{(+)}(\phi) \rangle_R \delta(E_{R,\ell\sigma} - E) \Delta\mu \\ &= \Delta\mu [-g_{R\downarrow,R\uparrow} - g_{L\downarrow,R\uparrow} + g_{R\uparrow,R\downarrow} + g_{L\uparrow,R\downarrow}] \end{aligned} \quad (50)$$

を得る。 $\Delta\mu/e$ は一本鎖 DNA の両端にかかる電圧である (図 6)。このとき、 $g_{r\sigma,r'\bar{\sigma}}(E)$ はスピンミキシングコンダクタンスを表し、以下のように定義した。

$$g_{r\sigma,r'\bar{\sigma}}(E) = \pi \rho_{r\sigma}(E) |{}_r \langle 1\sigma | T(E) | 1\bar{\sigma} \rangle_{r'}|^2 \rho_{r'\bar{\sigma}}(E) \quad (51)$$

(ここで、 $\bar{\sigma}$ と σ はスピンの自由度であり、 $\sigma = \uparrow$ (\downarrow) のとき、 $\bar{\sigma} = \downarrow$ (\uparrow) である。また、 $|1\sigma\rangle_r$ ($r = R, L$) は、一本鎖 DNA に隣接する電極内のサイトの波動関数であり、

$$|1\sigma\rangle_r = c_{r,1\sigma}^\dagger |0\rangle \quad (52)$$

と表すことができる。そして、 $T(E)$ は T -行列演算子であり、

$$T(E) = V + VG(E)V \quad (53)$$

である。式 (51) において、 $\rho_{r\sigma}(E)$ は局所状態密度であり、次のように定義した。

$$\rho_{r\sigma}(E) = \sum_{\ell} |{}_r\langle 1\sigma | \ell\sigma \rangle_r|^2 \delta(E - E_{r,\ell\sigma}) \quad (54)$$

$$= -\text{Im}G_{r\sigma}(E + i0)/\pi \quad (55)$$

このとき、 $|{}_r\langle 1\sigma | \ell\sigma \rangle_r|^2 = (2/N_R) \sin^2(\pi\ell/N_R)$ である。式 (50) は、力学的トルクを表した Landauer 型の公式である。式 (50) のスピンミキシングコンダクタンスについて、

$$g_{L\sigma, L\bar{\sigma}}(E) = \frac{1}{\pi} \text{Im}\Sigma_{L\sigma}(E + i0) \text{Im}\Sigma_{L\bar{\sigma}}(E + i0) \times |\langle N_{\text{mol}}\sigma | G_{\text{mol}}(E + i0) | N_{\text{mol}}\bar{\sigma} \rangle|^2 \quad (56)$$

$$g_{R\sigma, R\bar{\sigma}}(E) = \frac{1}{\pi} \text{Im}\Sigma_{R\sigma}(E + i0) \text{Im}\Sigma_{R\bar{\sigma}}(E + i0) \times |\langle 1\sigma | G_{\text{mol}}(E + i0) | 1\bar{\sigma} \rangle|^2 \quad (57)$$

$$g_{L\sigma, R\bar{\sigma}}(E) = \frac{1}{\pi} \text{Im}\Sigma_{L\sigma}(E + i0) \text{Im}\Sigma_{R\bar{\sigma}}(E + i0) \times |\langle N_{\text{mol}}\sigma | G_{\text{mol}}(E + i0) | 1\bar{\sigma} \rangle|^2 \quad (58)$$

$$g_{R\sigma, L\bar{\sigma}}(E) = \frac{1}{\pi} \text{Im}\Sigma_{R\sigma}(E + i0) \text{Im}\Sigma_{L\bar{\sigma}}(E + i0) \times |\langle 1\sigma | G_{\text{mol}}(E + i0) | N_{\text{mol}}\bar{\sigma} \rangle|^2 \quad (59)$$

上の 2 つの式は反射、下の 2 つの式は透過の過程を表す。このとき、一本鎖 DNA の Green 関数を

$$G_{\text{mol}}(E) = \left[E - \mathcal{H}_{\text{mol}} - \sum_{r,\sigma} \Sigma_{r\sigma}(E) |n_r, \sigma\rangle \langle n_r, \sigma| \right]^{-1} \quad (60)$$

のように求め、自己エネルギーを

$$\Sigma_{r\sigma}(E) = v^2 G_{r\sigma}(E) \quad (61)$$

と定義した。界面の局所 Green 関数は

$$\begin{aligned} G_{r\sigma}(E + i0) &= {}_r\langle 1\sigma | [E + i0 - \mathcal{H}_r]^{-1} | 1\sigma \rangle_r \\ &= \frac{1}{J_0} \begin{cases} \varepsilon - \sqrt{\varepsilon^2 - 1} & (\varepsilon > 1) \\ \varepsilon - i\sqrt{1 - \varepsilon^2} & (|\varepsilon| \leq 1) \\ \varepsilon + \sqrt{\varepsilon^2 - 1} & (\varepsilon < -1) \end{cases} \end{aligned} \quad (62)$$

であり、このとき $\varepsilon = E/(2J)$ とした。式 (60) の逆行列を数値的に計算することでスピンミキシングコンダクタンスを求めることができる。次章では、本節の式 (50) からスピン流によって誘起された力学的トルクについて数値計算の結果を議論する。

3 結果と議論

本章では、スピン流の Landauer 型の公式 [式 (50) を参照] から得られた力学的トルクの特性を議論する。また、スピン流によって誘起された力学的トルクの大きさを現実的なスケールと比較し、考察した。

3.1 力学的トルクの入射スピンのエネルギー依存性

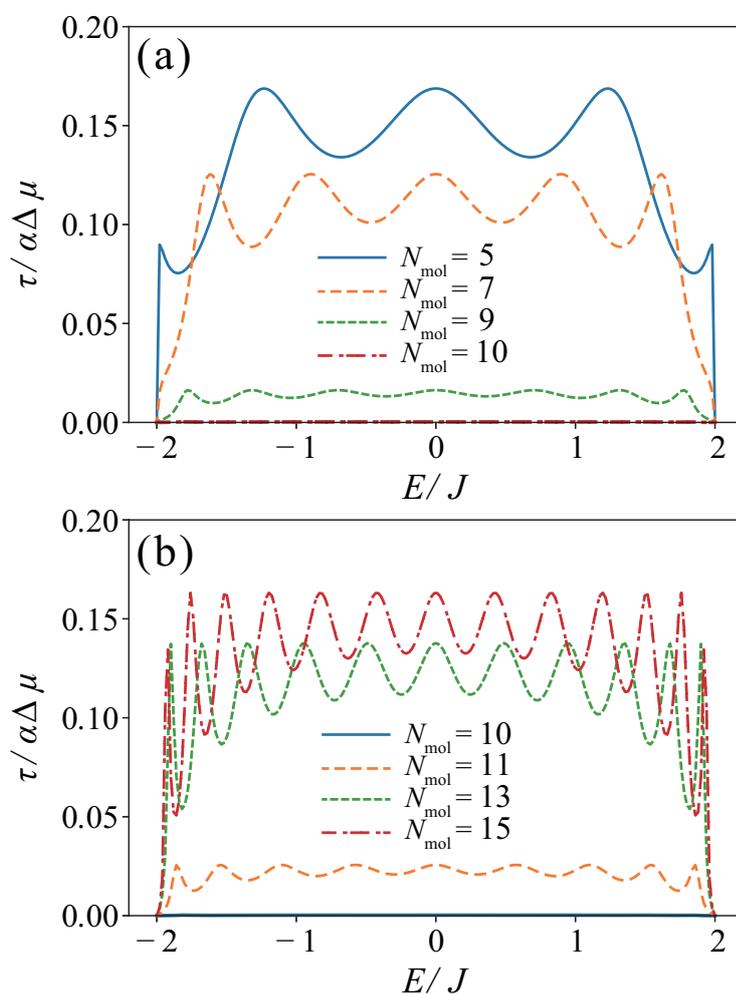


図 8: スピン軌道相互作用の強さで規格化された力学的トルクの入射電子スピンのエネルギー依存性。パラメータは $N = 10$, $J_0 = J$, $v = \sqrt{1.6}J$, $\Delta h/R = 18.1$ を用いた。(a) (b) は DNA 分子の鎖の長さが (a) $N_{\text{mol}} = 5, 7, 9, 10$, (b) $N_{\text{mol}} = 10, 11, 13, 15$ の場合。

図 8 は、 \hat{z} 方向に沿って分極した電子スピンを右側電極から入射したとき、誘起された力学的トルクの入射電子スピンのエネルギー E 依存性を示している。図 8(a) は DNA 分子の鎖の長さ N_{mol} がユニットセル以下 ($N_{\text{mol}} \leq N = 10$) の場合、図 8(b) は DNA 分子の鎖の長さがユニットセル以上 ($N_{\text{mol}} \geq N = 10$) の場合である。図 8(a)(b) から、力学的トルクは入射電子スピンのエネルギーに依存して振動することが確認できる。さらに、DNA 分子の鎖の長さ N_{mol} ごとの力学的トルクの大きさの変化を見ると、 $5 \leq N_{\text{mol}} \leq 15$ の範囲内では、 $N_{\text{mol}} = 10$ の周期で力学的トルクが振動することが分かる。

3.2 力学的トルクの DNA 分子の鎖の長さ依存性

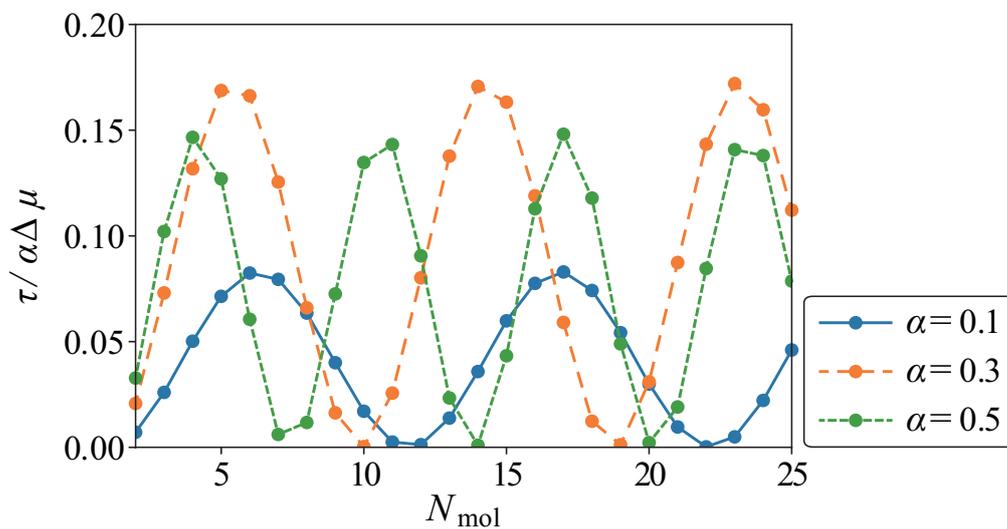


図 9: 入射された電子スピンのエネルギー $E = 0$ における、力学的トルクの DNA 分子の長さ (N_{mol}) 依存性。スピン軌道相互作用の強さがそれぞれ $\alpha = 0.1, 0.3, 0.5$ の場合である。その他のパラメータは図 8 と同様である。

図 9 は、図 8 において、入射スピンのエネルギーが $E = 0$ の場合における力学的トルクの DNA 分子の鎖の長さ依存性を示したものである。図 9 から、力学的トルクは DNA 分子の鎖の長さに依存して周期的に振動し、スピン軌道相互作用の強さが $0.1 \leq \alpha \leq 0.5$ の範囲では、スピン軌道相互作用を強くすると、トルクの振動周期が短くなることが分かった。

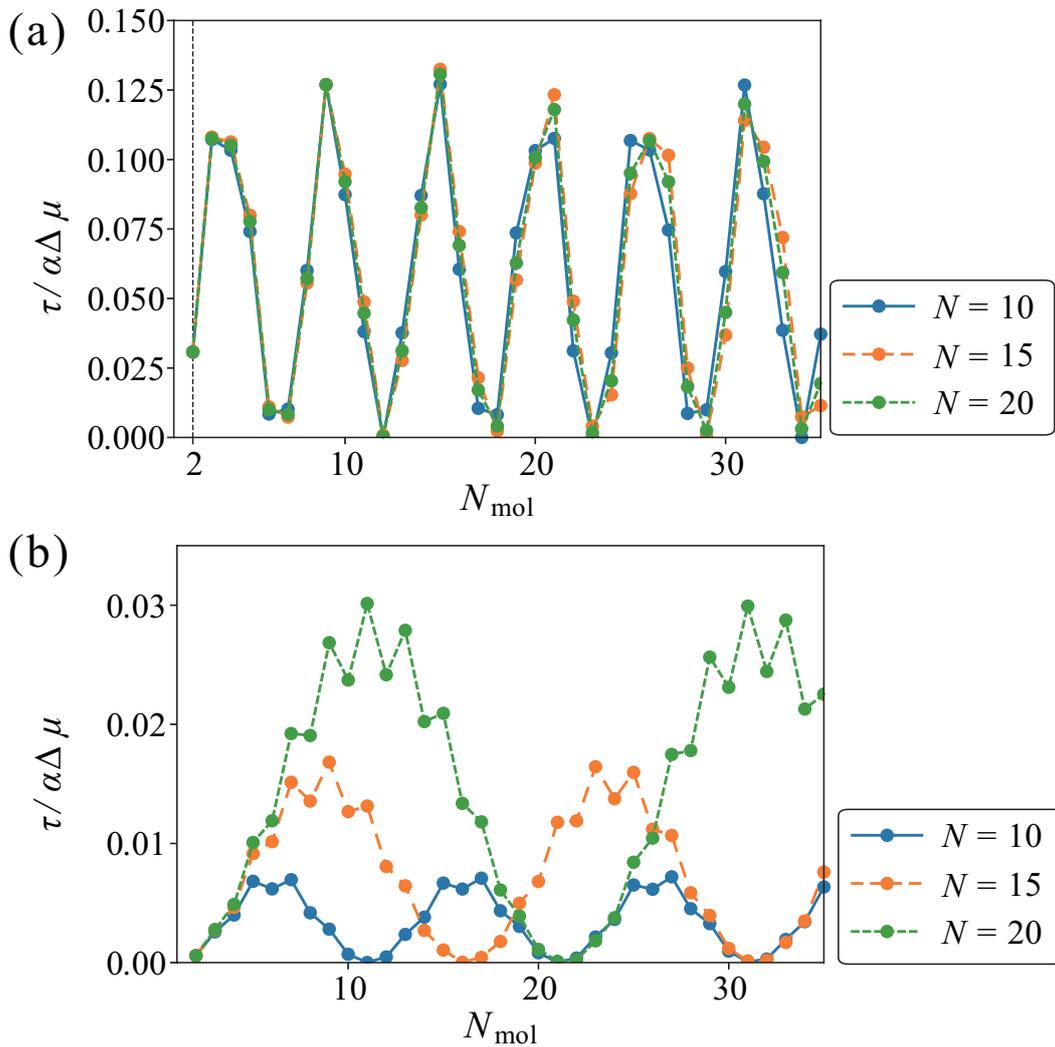


図 10: 入射された電子スピンのエネルギー $E = 0$ における、力学的トルクの DNA 分子の鎖の長さ依存性。ユニットセルに含まれるサイト数がそれぞれ $N = 10, 15, 20$ の場合。(a) (b) は (a) 強いスピン軌道相互作用 $\alpha = 0.6$ 、(b) 弱いスピン軌道相互作用 $\alpha = 0.01$ の場合。

図 10 は、ユニットセルに含まれるサイト数 $N = 10, 15, 20$ ごとの力学的トルクの DNA 分子の鎖の長さ依存性を示したものである。図 10(a) より、強いスピン軌道相互作用 $\alpha = 0.6$ の下では、ユニットセルに含まれるサイト数に関係なく、力学的トルクの振動周期は一致している。つまり、力学的トルクの振動周期はユニットセルに含まれるサイト数に依存しないことが分かる。一方、図 10(b) より、弱いスピン軌道相互作用 $\alpha = 0.01$ の下では、力学的トルクの振動周期がユニットセルに含まれるサイト数と一致する。したがって、力学的トルクの振動周期はユニットセルに含まれるサイト数に強く依存していることが分かる。

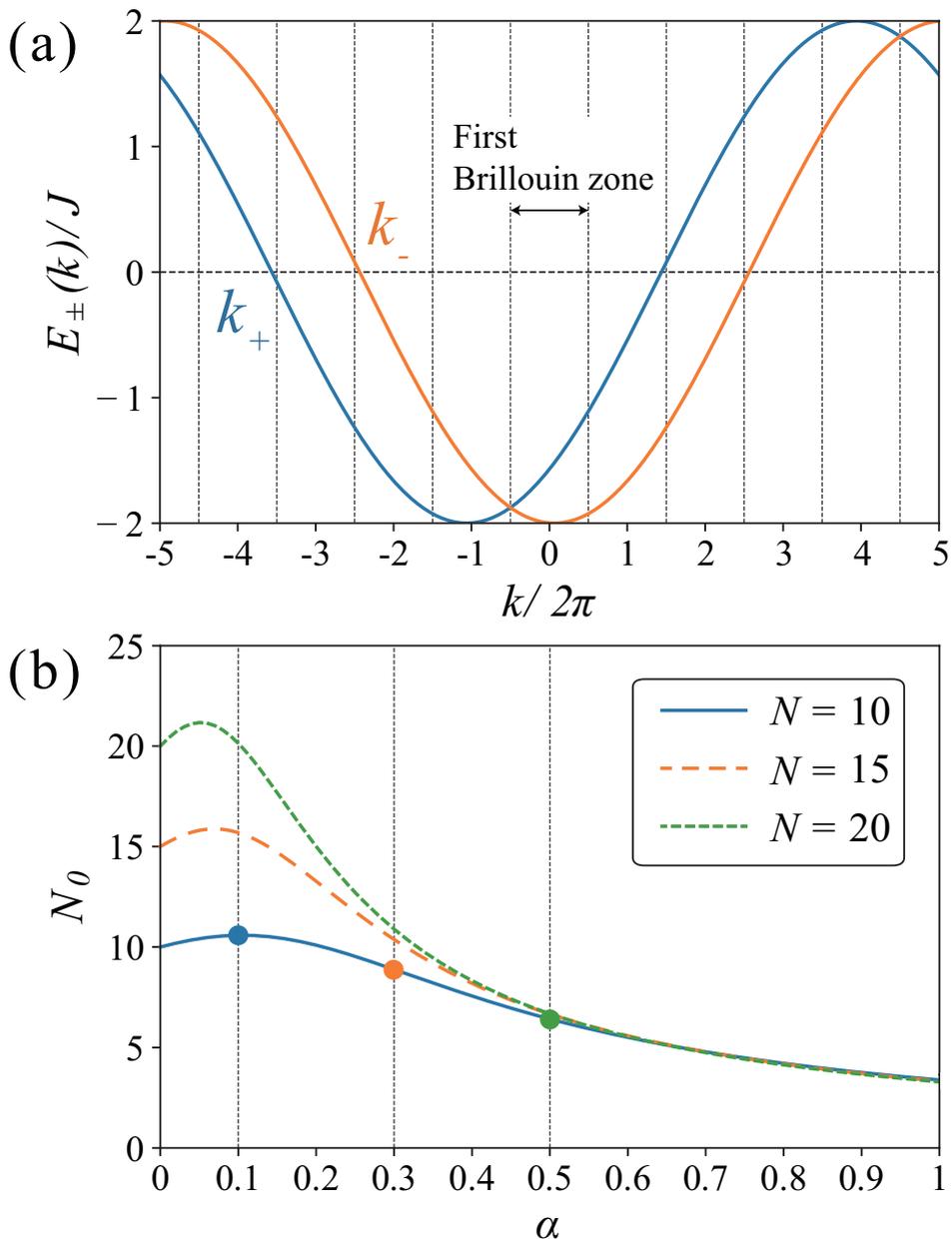


図 11: (a) 一本鎖 DNA の Hamiltonian 式 (27) の拡張ブリルアンゾーンで表されたバンド構造 [式 (156) を参照]。このときのスピ軌道相互作用の強さは $\alpha = 0.3$ である。スピ軌道相互作用と分子の螺旋構造により、2つのバンドがシフトしている。(b) ユニットセル内のサイト数ごとのトルクの振動周期のスピ軌道相互作用の強さ依存性。図中のドットは、それぞれ図 9 におけるスピ軌道相互作用の強さ $\alpha = 0.1, 0.3, 0.5$ の場合に対応している。

図 11(a) は、スピ軌道相互作用の強さが $\alpha = 0.3$ における一本鎖 DNA の Hamiltonian を拡張ブリルアンゾーンで表したバンド構造である。このとき、力学的トルクの

振動周期 N_0 は、図 11(a) から、2 つの波数の差 $k_+ - k_-$ によって求められ、以下のよう
に表すことができる (詳細な導出過程は付録 E を参照)。

$$N_0 = \frac{2\pi}{k_+ - k_-} = \frac{\pi}{\Delta k} \quad (63)$$

式 (63) はスピン軌道相互作用の強さが $\alpha \rightarrow 0$ の極限で $N_0 = N$ となることを付録 E
で確認した。

また、図 11(b) は、式 (63) において力学的トルクの振動周期 N_0 (縦軸) とスピン軌道
相互作用の強さ α (横軸) の関係を表したものである。図 11(b) から、スピン軌道相互作
用の強さ $\alpha \geq 0.6$ では、力学的トルクの振動周期がユニットセル内に含まれるサイト数
によらず、スピン軌道相互作用を強くするほどトルクの振動周期が短くなることが分か
る。さらに、弱いスピン軌道相互作用 $\alpha \leq 0.6$ の下では、ユニットセル内のサイト数 N
が多いほどトルクの振動周期が長くなることが確認できる。したがって、トルク振動周
期がユニットセル内のサイト数に依存することが分かる。

3.3 力学的トルクの大きさ

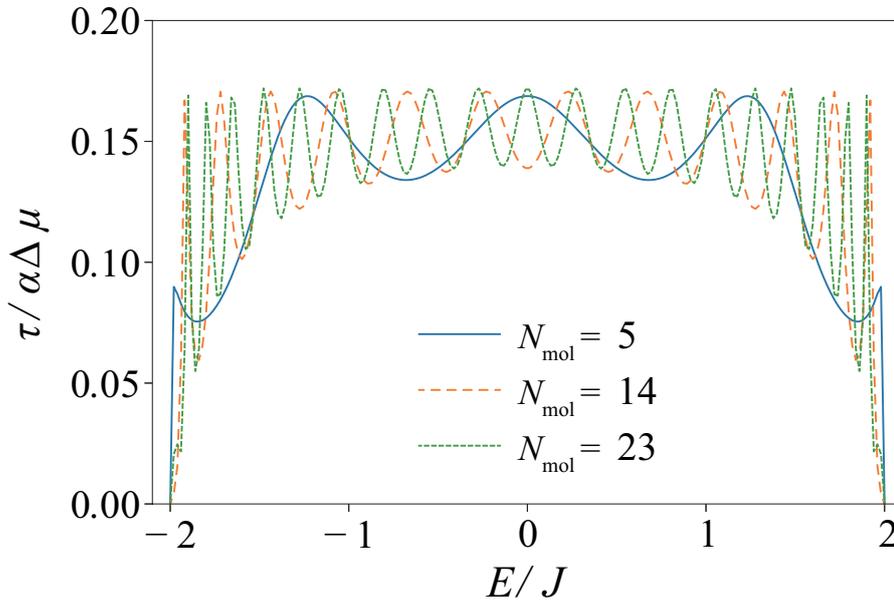


図 12: 図 9 における力学的トルクの最大値。スピン軌道相互作用の強さ $\alpha = 0.3$ 、DNA
分子の鎖の長さ $N_{\text{mol}} = 5, 14, 23$ の場合。

本節では、具体的に誘起された力学的トルクの大きさを見積もる。図 12 から、スピ
ン軌道相互作用によって規格化された力学的トルクの最大値の平均を約 $\tau / \alpha \Delta \mu = 0.15$
と見積もる。 $\Delta \mu$ は、左右の電極間の化学ポテンシャル差 (図 6) である。その上限は、
一本鎖 DNA のバンド幅で決まる。このとき、スピン軌道相互作用の強さ $\alpha = 0.3$ 、左

右の電極間の化学ポテンシャルが $\Delta\mu = 120[\text{meV}]$ なので [39]、力学的トルクの大きさは

$$\begin{aligned}\tau &= 0.15 \times \alpha \Delta\mu \\ &= 0.15 \times 0.3 \times 120 \times 10^{-3} \times 1.60218 \times 10^{-19} \\ &= 8.651772 \times 10^{-21} \\ &\sim 8.7 \times 10^{-21} [\text{N} \cdot \text{m}].\end{aligned}\tag{64}$$

である。計算の途中、電子ボルトをジュールに換算するため、以下の換算式を使った。

$$1[\text{eV}] = 1.60218 \times 10^{-19}[\text{J}]\tag{65}$$

また、一般的にトルクを求める式は、物体にかかる力の大きさ F と DNA 分子の螺旋半径 (腕の長さ) R から

$$\tau = F \times R\tag{66}$$

のように表される。すなわち、式 (64) の結果から、DNA 分子に作用する力の大きさは

$$\begin{aligned}F &= \frac{\tau}{R} \\ &\sim \frac{8.7 \times 10^{-21}}{10^{-9}} \\ &= 0.87 \times 10^{-12} [\text{N}]\end{aligned}\tag{67}$$

である。したがって、DNA 分子には約 0.87pN の力が作用していることが評価できる。この値は、二重螺旋 DNA のエントロピー弾性力 (約 10pN)[40, 41, 42] と比較して無視できない大きさと考えられる。

3.4 一本鎖 DNA のスピン分解コンダクタンス

図 13 は DNA 分子の鎖の長さ $N_{\text{mol}} = 23$ において、スピン分極をしていない電子を注入したときの入射電子スピンエネルギーに依存したスピン分解コンダクタンスである。それぞれ \uparrow スピン、 \downarrow スピンのスピン分解コンダクタンスは

$$\mathcal{G}_{\uparrow} R_K = 4\pi(g_{L\uparrow,R\uparrow} + g_{L\uparrow,R\downarrow}),\tag{69}$$

$$\mathcal{G}_{\downarrow} R_K = 4\pi(g_{L\downarrow,R\uparrow} + g_{L\downarrow,R\downarrow}),\tag{70}$$

であり、 $R_K = h/e^2$ は von Klitzing 定数である。このとき、 \uparrow -スピンのスピン分解コンダクタンスは \downarrow -スピンのスピン分解コンダクタンスと一致しているため、出力電流はスピン分極しない。この結果は、Bardarson の定理から推定することができる [42]。この定理は、時間反転対称であり、単一チャネルを持つ二端子の導体については、スピン量子化軸を適切に選ぶことによって、スピン分解透過確率がスピン空間において対角化されることを意味する。さらに、 \uparrow -スピン透過確率と \downarrow -スピン透過確率は同一である。

それゆえ、注入する電子スピンのエネルギーがスピンの分極していない場合は力学的トルクが誘起されない。

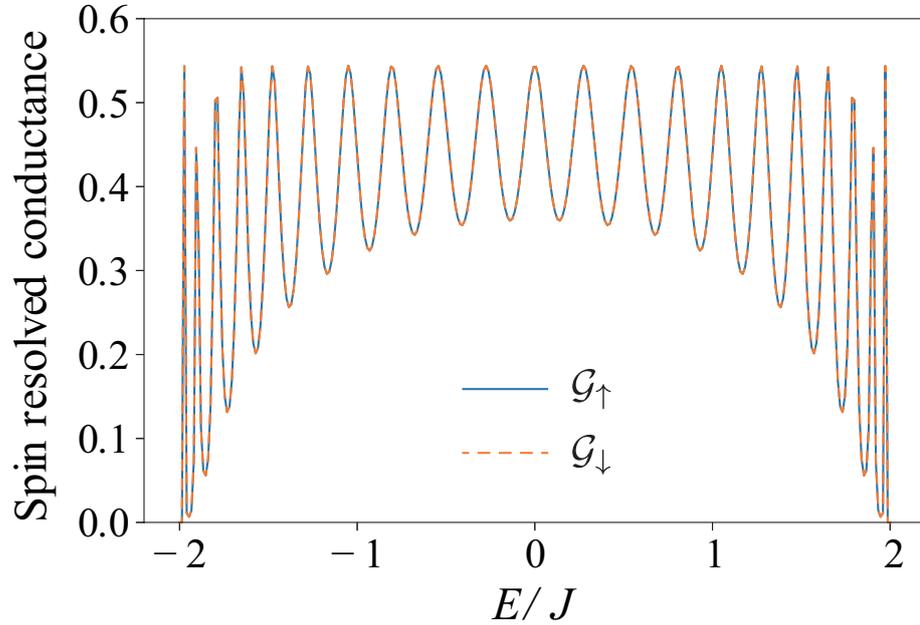


図 13: DNA 分子の鎖の長さ $N_{\text{mol}} = 23$ における、スピン分解コンダクタンスの入射電子スピンのエネルギー依存性。実線は↑スピン、破線は↓スピンにおけるスピン分解コンダクタンス。

このとき、一本鎖 DNA 内に流れる電流 I は、一本鎖 DNA のバンド幅 $\Delta\mu = 120[\text{meV}]$ 、図 13 におけるスピン分解コンダクタンスの最大値 $G_{\uparrow(\downarrow)} = 0.5$ を採用して、

$$I = \frac{\Delta\mu/e}{G_{\uparrow(\downarrow)} R_K} \quad (71)$$

$$\begin{aligned} &\sim \frac{120 \times 10^{-3}}{0.5 \times 25.8 \times 10^3} \\ &\sim 9.30 \times 10^{-6} [\text{A}] \end{aligned} \quad (72)$$

であり、 $9.30[\mu\text{A}]$ の電流が流れることが分かった。von Klitzing 定数は $R_K = 25.8[\text{k}\Omega]$ を用いた。

4 まとめ

本論文では、両端を電極に接続した一重螺旋構造の DNA 分子を想定した。このようなセットアップにおいて、スピン分極した電流を DNA 分子に注入することにより、スピン軌道相互作用を介して力学的トルクが誘起され、DNA 分子に作用する現象について議論した。スピンの連続方程式はカイラル分子における微視的な Hamiltonian から導出することができ、スピン流と定常状態における力学的トルクが結びつけられることを明らかにした。また、スピンミキシングコンダクタンスを含んだスピン流の Landauer 型の公式を導出し、スピン反転透過と反射のプロセスの反作用として生じる力学的トルクを数値的に解析した。誘起された力学的トルクは DNA 分子の長さに依存して周期的に振動し、その周期はスピン軌道相互作用の強度と螺旋構造に依存することを明らかにした。スピン軌道相互作用が強い範囲では、トルクの振動周期がスピン軌道相互作用の強さに依存して変化し、非常に弱い極限では、トルクの振動周期がユニットセル内に含まれるサイト数に依存することを明らかにした。このとき、スピン流から取り出されたトルクによって、DNA 分子に加わる力の最大値は約 0.87pN であり、DNA 分子のエントロピー弾性力の強さが 10pN 程度であることから、DNA 分子に作用する力の強さとして無視できない値であることが確認された。

付録 A 相対論的量子論によるスピン軌道相互作用の導出

本章では、参考文献 [43] に沿って、相対論的量子論からスピン軌道相互作用を導出する。

まず、Dirac の方程式を

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m_e c^2) \psi \quad (73)$$

と定義する。このとき、Dirac 行列 $\boldsymbol{\alpha}$ 、 β は 4×4 行列として

$$\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z), \beta = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & 0 \\ 0 & -\mathbf{I} \end{pmatrix} \quad (74)$$

かつ、

$$\alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{pmatrix}, \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{pmatrix}, \alpha_3 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_z \\ \sigma_z & 0 \end{pmatrix} \quad (75)$$

のように表した。 \mathbf{I} は単位行列、 σ_x 、 σ_y 、 σ_z は Pauli 行列である。また、運動量 \mathbf{p} は

$$\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z) \quad (76)$$

$$= -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (77)$$

とする。

次に、電磁場を表すため、ベクトルポテンシャル \mathbf{A} とスカラーポテンシャル Φ を

$$\mathbf{E} = -\nabla\Phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (78)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (79)$$

のように導入する。電子が持つ電荷は $-e$ なので、

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + e\mathbf{A} \quad (80)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi \quad (81)$$

のように置換すると、式 (73) は

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + e\Phi - (c\boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) + \beta m_e c^2) \right] \psi = 0 \quad (82)$$

と表すことができる。このとき、非相対論的な場合と同様に、式 (82) の定常解は、

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-ict/\hbar} \varphi(\mathbf{r}) \quad (83)$$

である。 $\epsilon = \hbar\omega$ はエネルギー固有値であり、 $\varphi(\mathbf{r})$ は式 (83) を式 (82) に代入したときに得られる方程式の解である。ここで、 $\varphi(\mathbf{r})$ は、

$$\varphi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \varphi_1(\mathbf{r}) \\ \varphi_2(\mathbf{r}) \\ \varphi_3(\mathbf{r}) \\ \varphi_4(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (84)$$

の 4 成分の関数であるが、以下の議論では便宜上、

$$\varphi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \varphi_+(\mathbf{r}) \\ \varphi_-(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \varphi_+(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \varphi_1(\mathbf{r}) \\ \varphi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \varphi_-(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \varphi_3(\mathbf{r}) \\ \varphi_4(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (85)$$

と置き換えておく。式 (83) を式 (82) に代入すると、

$$\begin{pmatrix} \epsilon + e\Phi - m_e c^2 & -c\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \\ -c\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) & \epsilon + e\Phi + m_e c^2 \end{pmatrix} \varphi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (86)$$

すなわち、

$$(\epsilon + e\Phi - m_e c^2)\varphi_+(\mathbf{r}) - c\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A})\varphi_-(\mathbf{r}) = 0 \quad (87)$$

$$(\epsilon + e\Phi + m_e c^2)\varphi_-(\mathbf{r}) - c\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A})\varphi_+(\mathbf{r}) = 0 \quad (88)$$

が得られる。このとき、相対論的な静止エネルギー $\epsilon = m_e c^2$ の近傍の場合を考えれば、 $|\epsilon'| \ll m_e c^2$ として

$$\epsilon = m_e c^2 + \epsilon' \quad (89)$$

とおくと、式 (87) と式 (88) は、

$$(\epsilon' + e\Phi)\varphi_+(\mathbf{r}) - (c\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}))\varphi_-(\mathbf{r}) = 0 \quad (90)$$

$$(2m_e c^2 + e\Phi)\varphi_-(\mathbf{r}) - (c\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}))\varphi_+(\mathbf{r}) = 0 \quad (91)$$

となる。式 (90) と式 (91) から、 $\varphi_-(\mathbf{r})$ を消去し、 $1/c^2$ の最低次で展開すると

$$(\epsilon' + e\Phi)\varphi_+(\mathbf{r}) = \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \frac{1}{2m_e + e\Phi/c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \varphi_+(\mathbf{r}) \quad (92)$$

$$\simeq \left(\frac{1}{2m_e} [\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A})] [\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A})] - \frac{e}{4m_e^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \Phi (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \right) \varphi_+(\mathbf{r}) \quad (93)$$

である。ここで、恒等式 (\mathbf{C} 、 \mathbf{D} は任意のベクトル)

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{C})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{D}) = \mathbf{C} \cdot \mathbf{D} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{C} \times \mathbf{D}) \quad (94)$$

の関係を利用すれば、式 (93) の右辺の第 1 項について

$$\begin{aligned} [\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A})] [\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A})] \varphi_+(\mathbf{r}) &= [(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \times (\mathbf{p} + e\mathbf{A})] \varphi_+(\mathbf{r}) \\ &= (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 \varphi_+(\mathbf{r}) + ie\boldsymbol{\sigma} \cdot [\mathbf{p} \times (\mathbf{A}\varphi_+(\mathbf{r})) + \mathbf{A} \times (\mathbf{p}\varphi_+(\mathbf{r}))] \\ &= (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 \varphi_+(\mathbf{r}) + e\hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}\varphi_+(\mathbf{r}) + ie\boldsymbol{\sigma} \cdot [\mathbf{A} \times (\mathbf{p}\varphi_+(\mathbf{r}))] \end{aligned} \quad (95)$$

第2項について

$$\begin{aligned}
 [(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\Phi(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})]\varphi_+(\mathbf{r}) &= (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}\Phi)(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}\varphi_+(\mathbf{r})) \\
 &= (\mathbf{p}\Phi \cdot \mathbf{p}\varphi_+(\mathbf{r})) + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p}\Phi \times \mathbf{p}\varphi_+(\mathbf{r})) \\
 &= i\hbar\mathbf{E} \cdot \mathbf{p}\varphi_+(\mathbf{r}) + \Phi\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}\varphi_+(\mathbf{r}) - \hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{p})\varphi_+(\mathbf{r})
 \end{aligned} \tag{96}$$

と計算できる。これを利用して、式(93)の主要な項だけを計算すると、

$$(\epsilon' + e\Phi)\varphi_+(\mathbf{r}) \simeq \left[\frac{1}{2m_e}(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 + \frac{e\hbar}{2m_e}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} + \frac{e\hbar}{4m_e^2c^2}\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{p}) \right] \varphi_+(\mathbf{r}) \tag{97}$$

と表すことができる。このとき、第3項がスピン軌道相互作用の項

$$H_{SO} = \frac{e\hbar}{4m_e^2c^2}\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{p}) \tag{98}$$

である。第1項は電磁場内を運動する電子の Hamiltonian を表し、第2項は Zeeman エネルギーを表している。

付録 B スピン軌道相互作用の強さの導出

本節では、節 2.1.1 で導いた式 (25) の導出過程の詳細を示す。まず、スピン軌道相互作用の強さ $|\mathbf{K}_{n+1,n}|$ について、式 (23) から、

$$\begin{aligned}\alpha &= |\mathbf{K}_{n+1,n}| \\ &= \frac{e\hbar E_0}{4m_e^2 c^2} \sqrt{[(\mathbf{R}_{n+1} - \mathbf{R}_n) \times \mathbf{E}_{n+1,n}]^2}\end{aligned}\quad (99)$$

と表すことができる。このとき、根号の中のベクトル積の平方は、スカラー四重積の関係により

$$[(\mathbf{R}_{n+1} - \mathbf{R}_n) \times \mathbf{E}_{n+1,n}]^2 = |\mathbf{R}_{n+1} - \mathbf{R}_n|^2 |\mathbf{E}_{n+1,n}|^2 - [(\mathbf{R}_{n+1} - \mathbf{R}_n) \cdot \mathbf{E}_{n+1,n}]^2 \quad (100)$$

のように変形することができる。ここで、一本鎖 DNA の n 番目のサイトから $n+1$ 番目のサイトに向かうベクトルと電場ベクトルは常に直交することから、

$$(\mathbf{R}_{n+1} - \mathbf{R}_n) \cdot \mathbf{E}_{n+1,n} = 0 \quad (101)$$

の関係が分かるので、式 (100) の第 1 項のみを計算すればよい。すなわち、式 (18) と式 (24) より、 n 番目のサイトから $n+1$ 番目のサイトへ向かうベクトルの平方は

$$\begin{aligned}|\mathbf{R}_{n+1} - \mathbf{R}_n|^2 &= R^2 [\cos(\varphi_{n+1} + \phi) - \cos(\varphi_n + \phi)]^2 \\ &\quad + R^2 [\sin(\varphi_{n+1} + \phi) - \sin(\varphi_n + \phi)]^2 + \left[\frac{\Delta h}{2\pi} (\varphi_{n+1} - \varphi_n) \right]^2 \\ &= R^2 \left[-2 \sin\left(\frac{\varphi_{n+1} + \varphi_n}{2} + \phi\right) \sin\left(\frac{\varphi_{n+1} - \varphi_n}{2}\right) \right]^2 \\ &\quad + R^2 \left[2 \cos\left(\frac{\varphi_{n+1} + \varphi_n}{2} + \phi\right) \sin\left(\frac{\varphi_{n+1} - \varphi_n}{2}\right) \right]^2 + \left(\frac{\Delta h}{N}\right)^2 \\ &= 4R^2 \sin^2\left(\frac{\varphi_{n+1} - \varphi_n}{2}\right) + \left(\frac{\Delta h}{N}\right)^2 \\ &= 4R^2 \sin^2\left(\frac{\pi}{N}\right) + \left(\frac{\Delta h}{N}\right)^2\end{aligned}\quad (102)$$

と求められ、電場ベクトルの平方も

$$|\mathbf{E}_{n+1,n}|^2 = E_0 \quad (103)$$

のように求められるので、式 (99) は

$$\alpha = \frac{e\hbar E_0}{4m_e^2 c^2} \sqrt{4R^2 \sin^2\left(\frac{\pi}{N}\right) + \left(\frac{\Delta h}{N}\right)^2} \quad (104)$$

である。

付録 C スピンの連続方程式の導出

式 (39) より、任意の方向を向いたスピンの和について、スピンの自由度 σ を露わに書いて表すと

$$\mathbf{S}_{\text{mol}} \cdot \hat{\boldsymbol{\ell}} = \frac{\hbar}{2} \sum_{n=1}^{N_{\text{mol}}} \sum_{\sigma, \sigma'} c_{n, \sigma}^\dagger \left[\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma, \sigma'} c_{n, \sigma'} \quad (105)$$

のように書き換えることができる。Heisenberg 表示の下、式 (105) の時間微分を計算すると、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\mathbf{S}_{\text{mol}} \cdot \hat{\boldsymbol{\ell}} \right) &= \frac{\hbar}{2} \sum_{n=1}^{N_{\text{mol}}} \sum_{\sigma, \sigma'} \left[\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma, \sigma'} \frac{d}{dt} (c_{n, \sigma}^\dagger c_{n, \sigma'}) \\ &= \frac{\hbar}{2} \sum_{n=1}^{N_{\text{mol}}} \sum_{\sigma, \sigma'} \left[\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma, \sigma'} \left(\frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, c_{n, \sigma}^\dagger c_{n, \sigma'}] \right) \\ &= \frac{i}{2} \sum_{n=1}^{N_{\text{mol}}} \sum_{\sigma, \sigma'} \left[\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma, \sigma'} \left([\mathcal{H}_{\text{mol}}, c_{n, \sigma}^\dagger c_{n, \sigma'}] + [V, c_{n, \sigma}^\dagger c_{n, \sigma'}] \right) \quad (106) \end{aligned}$$

のようになる。このとき、右側電極の Hamiltonian の \mathcal{H}_R 、左側電極の Hamiltonian の \mathcal{H}_L と、一本鎖 DNA の生成・消滅演算子 $c_{n, \sigma}^\dagger c_{n, \sigma'}$ は可換なので、 $[\mathcal{H}_{R(L)}, c_{n, \sigma}^\dagger c_{n, \sigma'}] = 0$ とした。式 (106) の第 1 項、第 2 項を詳しく計算すると、第 1 項は

$$\begin{aligned} & \frac{i}{2} \sum_{n=1}^{N_{\text{mol}}} \sum_{\sigma, \sigma'} \left[\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma, \sigma'} [\mathcal{H}_{\text{mol}}, c_{n, \sigma}^\dagger c_{n, \sigma'}] \\ &= \frac{i}{2} \sum_{n=1}^{N_{\text{mol}}} \sum_{\sigma, \sigma'} \left[\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma, \sigma'} \left([\mathcal{H}_{\text{mol}}, c_{n, \sigma}^\dagger] c_{n, \sigma'} + c_{n, \sigma}^\dagger [\mathcal{H}_{\text{mol}}, c_{n, \sigma'}] \right) \\ &= \frac{i}{2} \sum_{n=1}^{N_{\text{mol}}} \sum_{\sigma, \sigma'} \left[\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma, \sigma'} \left[-J \sum_{n'=1}^{N_{\text{mol}}-1} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} c_{n'+1, \sigma_1}^\dagger [V'_n]_{\sigma_1, \sigma_2} c_{n', \sigma_2} c_{n, \sigma}^\dagger \right] c_{n, \sigma'} \\ & \quad + c_{n, \sigma}^\dagger \left[-J \sum_{n'=1}^{N_{\text{mol}}-1} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} c_{n'+1, \sigma_1}^\dagger [V'_n]_{\sigma_1, \sigma_2} c_{n', \sigma_2} c_{n, \sigma'} \right] + \text{H.c.} \\ &= -\frac{iJ}{2} \sum_{n=1}^{N_{\text{mol}}} \sum_{n'=1}^{N_{\text{mol}}-1} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \left[\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma, \sigma'} [V'_n]_{\sigma_1, \sigma_2} \\ & \quad \times \left(\left[c_{n'+1, \sigma_1}^\dagger (\delta_{n', n} \delta_{\sigma_2, \sigma} - c_{n, \sigma}^\dagger c_{n', \sigma_2}) + c_{n'+1, \sigma_1}^\dagger c_{n, \sigma}^\dagger c_{n', \sigma_2} \right] c_{n, \sigma'} \right. \\ & \quad \left. + c_{n, \sigma}^\dagger \left[c_{n'+1, \sigma_1}^\dagger c_{n, \sigma'} c_{n', \sigma_2} - (\delta_{n, n'+1} \delta_{\sigma', \sigma_1} - c_{n'+1, \sigma_1}^\dagger c_{n, \sigma'}) \right] c_{n', \sigma_2} \right) + \text{H.c.} \\ &= -\frac{iJ}{2} \sum_{n=1}^{N_{\text{mol}}} \sum_{n'=1}^{N_{\text{mol}}-1} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \left[\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma, \sigma'} [V'_n]_{\sigma_1, \sigma_2} c_{n'+1, \sigma_1}^\dagger \delta_{n', n} \delta_{\sigma_2, \sigma} c_{n, \sigma'} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{iJ}{2} \sum_{n=1}^{N_{\text{mol}}} \sum_{n'=1}^{N_{\text{mol}}-1} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \left[\hat{\ell} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma, \sigma'} [V'_n]_{\sigma_1, \sigma_2} c_{n, \sigma}^\dagger \delta_{n, n'+1} \delta_{\sigma', \sigma_1} c_{n', \sigma_2} + \text{H.c.} \\
& = -\frac{iJ}{2} \sum_{n=1}^{N_{\text{mol}}-1} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\sigma_1} c_{n+1, \sigma_1}^\dagger [V_n]_{\sigma_1, \sigma} \left[\hat{\ell} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma, \sigma'} c_{n, \sigma'} \\
& + \frac{iJ}{2} \sum_{n=2}^{N_{\text{mol}}} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\sigma_2} c_{n, \sigma}^\dagger \left[\hat{\ell} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma, \sigma'} [V_{n-1}]_{\sigma', \sigma_2} c_{n-1, \sigma_2} + \text{H.c.} \\
& = -\frac{iJ}{2} \sum_{n=1}^{N_{\text{mol}}-1} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\sigma_1} c_{n+1, \sigma_1}^\dagger [V_n]_{\sigma_1, \sigma} \left[\hat{\ell} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma, \sigma'} c_{n, \sigma'} \\
& + \frac{iJ}{2} \sum_{n=1}^{N_{\text{mol}}-1} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\sigma_2} c_{n+1, \sigma}^\dagger \left[\hat{\ell} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma, \sigma'} [V_n]_{\sigma', \sigma_2} c_{n, \sigma_2} + \text{H.c.} \tag{107}
\end{aligned}$$

となる。ここで、第1項と第2項のスピンのだミーインデックスを統一すると、

$$\begin{aligned}
& -\frac{iJ}{2} \sum_{n=1}^{N_{\text{mol}}-1} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\sigma_1} c_{n+1, \sigma_1}^\dagger \left([V_n]_{\sigma_1, \sigma} \left[\hat{\ell} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma, \sigma'} - \left[\hat{\ell} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma_1, \sigma} [V_n]_{\sigma, \sigma'} \right) c_{n, \sigma'} + \text{H.c.} \\
& = -\frac{iJ}{2} \sum_{n=1}^{N_{\text{mol}}-1} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\sigma_1} c_{n+1, \sigma_1}^\dagger \left[V_n, \hat{\ell} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma_1, \sigma'} c_{n, \sigma'} + \text{H.c.} \tag{108}
\end{aligned}$$

さらに、 V_n について、

$$V_n = \cos \alpha + i \sin \alpha (\mathbf{K}_{n+1, n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \tag{109}$$

のように書いておくと、 V_n と $\hat{\ell} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ の交換関係は

$$\begin{aligned}
\left[V_n, \hat{\ell} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right] & = i \sin \alpha \left[\mathbf{K}_{n+1, n} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \hat{\ell} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right] \\
& = i \sin \alpha \left[(\mathbf{K}_{n+1, n} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\hat{\ell} \cdot \boldsymbol{\sigma}) - (\hat{\ell} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\mathbf{K}_{n+1, n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \right] \\
& = -2 \sin \alpha \left[\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{K}_{n+1, n} \times \hat{\ell}) \right] \\
& = 2 \sin \alpha \left[\hat{\ell} \cdot (\mathbf{K}_{n+1, n} \times \boldsymbol{\sigma}) \right] \tag{110}
\end{aligned}$$

すなわち、

$$\begin{aligned}
& \frac{i}{2} \sum_{n=1}^{N_{\text{mol}}} \sum_{\sigma, \sigma'} \left[\hat{\ell} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma, \sigma'} \left[\mathcal{H}_{\text{mol}}, c_{n, \sigma}^\dagger c_{n, \sigma'} \right] \\
& = -iJ \sin \alpha \sum_{n=1}^{N_{\text{mol}}-1} \sum_{\sigma, \sigma'} c_{n+1, \sigma}^\dagger \left[\hat{\ell} \cdot (\mathbf{K}_{n+1, n} \times \boldsymbol{\sigma}) \right]_{\sigma, \sigma'} c_{n, \sigma'} + \text{H.c.} \tag{111}
\end{aligned}$$

と求めることができる。次に、第2項について、

$$\frac{i}{2} \sum_{n=1}^{N_{\text{mol}}} \sum_{\sigma, \sigma'} \left[\hat{\ell} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma, \sigma'} [V, c_{n, \sigma}^\dagger c_{n, \sigma'}]$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{i}{2} \sum_{n=1}^{N_{\text{mol}}} \sum_{\sigma, \sigma'} \left[\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma, \sigma'} \left([V_R, c_{n, \sigma}^\dagger c_{n, \sigma'}] + [V_L, c_{n, \sigma}^\dagger c_{n, \sigma'}] \right) \\
&= \frac{iv}{2} \sum_{n=1}^{N_{\text{mol}}} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\sigma_3} \left[\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma, \sigma'} \\
&\quad \times \left(\left[c_{R, 1\sigma_3}^\dagger c_{1\sigma_3} + c_{1\sigma_3}^\dagger c_{R, 1\sigma_3}, c_{n, \sigma}^\dagger c_{n, \sigma'} \right] + \left[c_{L, 1\sigma_3}^\dagger c_{N_{\text{mol}}\sigma_3} + c_{N_{\text{mol}}\sigma_3}^\dagger c_{L, 1\sigma_3}, c_{n, \sigma}^\dagger c_{n, \sigma'} \right] \right) \\
&= \frac{iv}{2} \sum_{n=1}^{N_{\text{mol}}} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\sigma_3} \left[\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma, \sigma'} \left[c_{R, 1\sigma_3}^\dagger (\delta_{1, n} \delta_{\sigma_3, \sigma}) c_{n, \sigma'} - c_{n, \sigma}^\dagger (\delta_{n, 1} \delta_{\sigma', \sigma_3}) c_{R, 1\sigma_3} \right] \\
&\quad + \left[c_{L, 1\sigma_3}^\dagger (\delta_{N_{\text{mol}}, n} \delta_{\sigma_3, \sigma}) c_{n, \sigma'} - c_{n, \sigma}^\dagger (\delta_{n, N_{\text{mol}}} \delta_{\sigma, \sigma_3}) c_{L, 1\sigma_3} \right] \\
&= \frac{iv}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \left[\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma, \sigma'} \left(c_{R, 1\sigma}^\dagger c_{1\sigma'} - c_{1\sigma}^\dagger c_{R, 1\sigma'} + c_{L, 1\sigma}^\dagger c_{N_{\text{mol}}\sigma'} - c_{N_{\text{mol}}\sigma}^\dagger c_{L, 1\sigma'} \right) \\
&= \frac{iv}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \left(c_{R, 1\sigma}^\dagger \left[\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma, \sigma'} c_{1\sigma'} - c_{1\sigma}^\dagger \left[\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma, \sigma'} c_{R, 1\sigma'} \right) \\
&\quad + \left(c_{L, 1\sigma}^\dagger \left[\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma, \sigma'} c_{N_{\text{mol}}\sigma'} - c_{N_{\text{mol}}\sigma}^\dagger \left[\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma, \sigma'} c_{L, 1\sigma'} \right) \\
&= I_{R, \hat{\boldsymbol{\ell}}} + I_{L, \hat{\boldsymbol{\ell}}} \tag{112}
\end{aligned}$$

ここで、スピン流の演算子は

$$\begin{aligned}
I_{R, \hat{\boldsymbol{\ell}}} &= \frac{iv}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} c_{R, 1\sigma}^\dagger \left[\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma, \sigma'} c_{1\sigma'} - c_{1\sigma}^\dagger \left[\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma, \sigma'} c_{R, 1\sigma'} \\
&= \frac{iv}{2} \left(c_{R, 1}^\dagger (\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \boldsymbol{\sigma}) c_1 - c_1^\dagger (\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \boldsymbol{\sigma}) c_{R, 1} \right) \tag{113}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_{L, \hat{\boldsymbol{\ell}}} &= \frac{iv}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} c_{L, 1\sigma}^\dagger \left[\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma, \sigma'} c_{N_{\text{mol}}\sigma'} - c_{N_{\text{mol}}\sigma}^\dagger \left[\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]_{\sigma, \sigma'} c_{L, 1\sigma'} \\
&= \frac{iv}{2} \left(c_{L, 1}^\dagger (\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \boldsymbol{\sigma}) c_{N_{\text{mol}}} - c_{N_{\text{mol}}}^\dagger (\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \boldsymbol{\sigma}) c_{L, 1} \right) \tag{114}
\end{aligned}$$

と定義した。式 (106)、式 (111) と式 (112) より、

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \left(\mathbf{S}_{\text{mol}} \cdot \hat{\boldsymbol{\ell}} \right) &= -iJ \sin \alpha \sum_{n=1}^{N_{\text{mol}}-1} \sum_{\sigma, \sigma'} c_{n+1, \sigma}^\dagger \left[\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot (\mathbf{K}_{n+1, n} \times \boldsymbol{\sigma}) \right]_{\sigma, \sigma'} c_{n, \sigma'} + \text{H.c.} \\
&\quad + I_{R, \hat{\boldsymbol{\ell}}} + I_{L, \hat{\boldsymbol{\ell}}} \tag{115}
\end{aligned}$$

のように求めることができる。これは、2.2 章の式 (41) に一致する。右辺の第 1 項の z 成分を考えると

$$\frac{\partial \mathcal{H}_{\text{mol}}}{\partial \phi} = -J \sum_{n=1}^{N_{\text{mol}}-1} c_{n+1}^\dagger \frac{\partial V_n}{\partial \phi} c_n + \text{H.c.} \tag{116}$$

ここで、 $\partial V_n / \partial \phi$ は

$$\frac{\partial V_n}{\partial \phi} = \frac{\partial}{\partial \phi} (\cos \alpha + i \sin \alpha (\mathbf{K}_{n+1, n} \cdot \boldsymbol{\sigma}))$$

$$= i \sin \alpha \frac{\partial}{\partial \phi} (\mathbf{K}_{n+1,n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \quad (117)$$

であり、さらに $\mathbf{K}_{n+1,n}$ は

$$\mathbf{K}_{n+1,n} = \begin{pmatrix} K_x \\ K_y \\ K_z \end{pmatrix} = \lambda E_0 \begin{pmatrix} -\frac{\Delta h}{N} \sin(\varphi_{n+\frac{1}{2}} + \phi) \\ \frac{\Delta h}{N} \cos(\varphi_{n+\frac{1}{2}} + \phi) \\ -2R \sin(\varphi_{n+\frac{1}{2}}) \end{pmatrix} \quad (118)$$

なので、式 (29) は式 (118) から

$$\begin{aligned} i \sin \alpha \frac{\partial}{\partial \phi} (\mathbf{K}_{n+1,n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) &= -i \sin \alpha \frac{\lambda E_0 \Delta h}{N} \left[\cos(\varphi_{n+\frac{1}{2}} + \phi) \sigma_x + \sin(\varphi_{n+\frac{1}{2}} + \phi) \sigma_y \right] \\ &= i \sin \alpha (K_x \sigma_y - K_y \sigma_x) \\ &= i \sin \alpha [\mathbf{K}_{n+1,n} \times \boldsymbol{\sigma}]_z \end{aligned} \quad (119)$$

と求められる。すなわち、式 (116) と式 (119) より、 \mathcal{H}_{mol} の回転角微分は

$$\frac{\partial \mathcal{H}_{\text{mol}}}{\partial \phi} = -iJ \sin \alpha \sum_{n=1}^{N_{\text{mol}}-1} c_{n+1}^\dagger [\mathbf{K}_{n+1,n} \times \boldsymbol{\sigma}]_z c_n + \text{H.c.} \quad (120)$$

である。式 (115) で $\hat{\boldsymbol{\ell}} = \hat{\boldsymbol{z}}$ のとき、式 (120) から第 1 項が力学的トルクの次元を持ち、スピンの連続方程式

$$\frac{d}{dt} (\mathbf{S}_{\text{mol}} \cdot \hat{\boldsymbol{\ell}}) = \frac{\partial \mathcal{H}_{\text{mol}}}{\partial \phi} + I_{R,z} + I_{L,z} \quad (121)$$

を得る。このとき、スピン流の演算子の z 成分は、

$$I_{R,z} = \frac{iv}{2} \left(c_{R,1}^\dagger \sigma_z c_1 - c_1^\dagger \sigma_z c_{R,1} \right) \quad (122)$$

$$I_{L,z} = \frac{iv}{2} \left(c_{L,1}^\dagger \sigma_z c_{N_{\text{mol}}} - c_{N_{\text{mol}}}^\dagger \sigma_z c_{L,1} \right) \quad (123)$$

である。

付録 D スピン流の期待値

一本鎖 DNA の右側から偏極スピンを入射させた場合における、散乱状態の波動関数によるスピン流の演算子の期待値は

$$\begin{aligned}\langle I_r \rangle_{R, \ell\sigma} &\equiv {}_R \langle \ell\sigma^{(+)}(\phi) | I_R | \ell\sigma^{(+)}(\phi) \rangle_R \\ &= \sum_{\ell', \sigma'} \sum_{r=L, R} {}_R \langle \ell\sigma^{(+)}(\phi) | \ell'\sigma' \rangle_r \langle \ell'\sigma' | I_{R, \hat{\ell}} | \ell\sigma^{(+)}(\phi) \rangle_R, \quad (124)\end{aligned}$$

のように表すことができ、 $r = L, R$ である。このとき、完備性の条件、

$$\mathbf{1} = \sum_{r=L, R} \sum_{\ell} \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} |\ell\sigma\rangle_r \langle \ell\sigma| \quad (125)$$

を用いた。次に、DNA 分子内での散乱状態を無視して

$${}_r \langle \ell'\sigma' | I_r = -\frac{i}{2} {}_r \langle \ell'\sigma' | V \sigma' \quad (126)$$

の関係をを使うと、式 (124) は

$$\begin{aligned}\langle I_r \rangle_{R, \ell\sigma} &= -\frac{i}{2} \sum_{\ell', \sigma'} \sum_{r=L, R} \sigma' {}_R \langle k\sigma^{(+)}(\phi) | \ell'\sigma' \rangle_r \langle \ell'\sigma' | V | \ell\sigma^{(+)}(\phi) \rangle_R \\ &= -\frac{i}{2} \sum_{\ell', \sigma'} \sum_{r=L, R} \sigma' {}_R \langle \ell\sigma^{(+)}(\phi) | \ell'\sigma' \rangle_r \langle \ell'\sigma' | T(E_{R, \ell\sigma} + i0) | \ell\sigma \rangle_R \quad (127)\end{aligned}$$

のように書き換えることができ、 ${}_R \langle \ell\sigma^{(+)}(\phi) | \ell'\sigma' \rangle_r$ については、Lippmann-Schwinger 方程式 [23]

$$|\ell\sigma^{(+)}(\phi)\rangle_R = [1 + G_0(E_{R, \ell\sigma} + i0)T(E_{R, \ell\sigma} + i0)]|\ell\sigma\rangle_R \quad (128)$$

と自由電子の Green 関数演算子

$$G_0(E) = [E - \mathcal{H}_{\text{mol}} - \mathcal{H}_L - \mathcal{H}_R]^{-1} \quad (129)$$

を用いることにより、

$${}_R \langle \ell\sigma^{(+)}(\phi) | \ell'\sigma' \rangle_r = \delta_{R, r} \delta_{\ell, \ell'} \delta_{\sigma, \sigma'} + \frac{{}_R \langle \ell\sigma | T(E_{R, \ell\sigma} - i0) | \ell'\sigma' \rangle_r}{E_{R, \ell\sigma} - i0 - E_{r, \ell'\sigma'}} \quad (130)$$

のように求めることができる。したがって、式 (127) は

$$\begin{aligned}\langle I_r \rangle_{R, \ell\sigma} &= \sigma \frac{\delta_{R, r}}{2} \text{Im}_R \langle \ell\sigma | T(E_{R, \ell\sigma} + i0) | \ell\sigma \rangle_R \\ &\quad + \frac{\pi}{2} \sum_{\ell', \sigma'} \sum_{r=L, R} \sigma' \delta(E_{R, \ell\sigma} - E_{r, \ell'\sigma'}) |{}_r \langle \ell'\sigma' | T(E_{R, \ell\sigma} + i0) | \ell\sigma \rangle_R|^2 \quad (131)\end{aligned}$$

のように書き換えられる。第一項は光学定理 [23] により、

$$\text{Im}_R \langle \ell\sigma | T(E_{R,\ell\sigma} + i0) | \ell\sigma \rangle_R = -\pi \sum_{r',\ell',\sigma'} |_{r'} \langle \ell'\sigma' | T(E_{R,\ell\sigma} + i0) | \ell\sigma \rangle_R|^2 \delta(E_{R,\ell\sigma} - E_{r',\ell'\sigma'}), \quad (132)$$

と求められる。DNA 分子内での散乱状態を無視しているので、式 (131) に代入すると次のように求められる。

$$\begin{aligned} \langle I_r \rangle_{R,\ell\sigma} &= \sum_{r',\sigma'} \frac{\sigma' \delta_{r',r} - \sigma \delta_{R,r}}{2} \\ &\quad \times \pi \sum_{\ell'} |_{r'} \langle \ell'\sigma' | T(E_{R,\ell\sigma} + i0) | \ell\sigma \rangle_R|^2 \delta(E_{R,\ell\sigma} - E_{r',\ell'\sigma'}) \end{aligned} \quad (133)$$

右側電極のエネルギー準位の間隔 δE の範囲 $E < E_{R,\ell\sigma} < E + \delta E$ にある電子によって、力学的トルクは

$$\tau = \sum_{r,r',\sigma'} \frac{\sigma' \delta_{r',r} - \sigma \delta_{R,r}}{2} g_{\sigma'r,\sigma R} \delta E, \quad (134)$$

となる。ここで、 $g_{r\sigma',R\sigma}$ はスピン分解コンダクタンスであり、

$$\begin{aligned} g_{r'\sigma',r\sigma} &= \pi \sum_{\ell',\ell} |_{r'} \langle \ell'\sigma' | T(E_{R,\ell\sigma} + i0) | \ell\sigma \rangle_R|^2 \delta(E_{R,\ell\sigma} - E_{r',\ell'\sigma'}) \delta(E_{R,\ell\sigma} - E) \\ &= \pi \rho_{r'\sigma'}(E) |_{r'} \langle 1\sigma' | T(E + i0) | 1\sigma \rangle_r|^2 \rho_{r\sigma}(E), \end{aligned} \quad (135)$$

と表す。局所状態密度 $\rho_{r\sigma}(E)$ は式 (55) で与えられる。

分子接合にバイアスがかけられたとき、スピン流に寄与する電子のエネルギー E の範囲は $\mu_L < E < \mu_L + \Delta\mu$ であり、 μ_L は左側電極の化学ポテンシャルを表している。したがって、式 (134) の δE を化学ポテンシャル差 $\Delta\mu$ に置き換えることで、線形応答の範囲内と絶対零度の条件下で式 (50) を得ることができる。

付録 E 力学的トルクの振動周期

本章では、式 (27) の一本鎖 DNA のハミルトニアンを対角化することで、力学的トルクの振動周期を数値的に説明する。

式 (27) の生成・消滅演算子について、周期的境界条件、 $c_j = c_{j+N_{\text{mol}}}$ を新たに導入する。このとき、DNA 分子上のサイト数 N_{mol} は、ユニットセルの数 M (M は正の整数) を導入することで、ユニットセル内のサイト数 N の整数倍 $N_{\text{mol}} = MN$ で表すようにする。このような準備から、一本鎖 DNA の Hamiltonian を以下のように書き換える [16]。

$$\mathcal{H}_{\text{mol}} = -J \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N c_{m,n+1}^\dagger V_n c_{m,n} + \text{H.c.}, \quad (136)$$

このとき、各サイトのポテンシャル ϵ_n は $\epsilon_n = 0$ とした。さらに、生成・消滅演算子に以下の境界条件を設ける。

$$c_{m,n+N} = c_{m+1,n}, \quad c_{m+M,n} = c_{m,n}. \quad (137)$$

次のように離散フーリエ変換を導入すると

$$c_{\ell,n}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{m=1}^M e^{i2\pi\ell m/M} c_{m,n}^\dagger, \quad (138)$$

式 (27) の Hamiltonian は

$$\mathcal{H}_{\text{mol}} = \sum_{\ell=-M/2}^{M/2-1} \mathcal{H}_{\text{mol}}(\ell), \quad (139)$$

かつ、

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{mol}}(\ell) = & -J \sum_{n=1}^{N-1} c_{\ell,n+1}^\dagger V_n c_{\ell,n} \\ & -J c_{\ell,1}^\dagger V_N c_{\ell,N} e^{-i2\pi\ell/M} + \text{H.c.}. \end{aligned} \quad (140)$$

と書き換えられる。このとき、 $\mathcal{H}_{\text{mol}}(\ell)$ は Bloch Hamiltonian である。スピンの回転演算子 V_n は式 (29) より、

$$\begin{aligned} V_n = & \exp[-i((n+1/2)\Delta\varphi + \pi/2 + \phi)\sigma_z/2] e^{i\alpha\hat{\mathbf{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma}} \\ & \times \exp[i((n+1/2)\Delta\varphi + \pi/2 + \phi)\sigma_z/2] \end{aligned} \quad (141)$$

のように書き換えることができる。 $\hat{\mathbf{n}}$ は単位ベクトルであり、次のように与えられる。

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{n}} = & [\sin(\theta), 0, \cos(\theta)]^T, \\ \tan(\theta) = & -\frac{\Delta h \Delta\varphi}{4\pi R \sin(\Delta\varphi/2)}. \end{aligned} \quad (142)$$

式 (141) を簡単にするために、 \hat{z} 軸周りの回転角を $\phi = -\Delta\varphi/2 - \pi/2 = -\pi/N - \pi/2$ とすると、

$$V_n = e^{-in\Delta\varphi\sigma_z/2} e^{i\alpha\hat{n}\cdot\sigma} e^{in\Delta\varphi\sigma_z/2} \quad (143)$$

となる。ここで、生成・消滅演算子を

$$\tilde{c}_{\ell,n} = e^{i2\pi\ell n/(MN)} e^{-in\Delta\varphi(\sigma_z-1)/2} c_{\ell,n} \quad (144)$$

のように変換することによって、DNA 分子上の各サイトでスピンの量子化軸を回転させる（回転した演算子は周期的境界条件 $\tilde{c}_{\ell,n+N} = \tilde{c}_{\ell,n}$ に従う）。この回転により、式 (140) の Hamiltonian を対角化することができる。以下の離散フーリエ変換

$$\tilde{c}_{\ell,p}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{i2\pi pn/N} \tilde{c}_{\ell,n}^\dagger \quad (145)$$

を使うと、Hamiltonian は

$$\mathcal{H}_{\text{mol}}(\ell) = \sum_{p=0}^{N-1} \tilde{c}_{\ell,p}^\dagger \mathcal{H}_p(\ell) \tilde{c}_{\ell,p}, \quad (146)$$

かつ、

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_p(\ell) = & -J \exp \left[-i \left(\frac{(2p+1)\pi}{N} + k(\ell) \right) \right] \\ & \times \exp \left[i\pi\sigma_z/N \right] \exp \left[i\alpha\hat{n}\cdot\sigma \right] + \text{H.c.} \end{aligned} \quad (147)$$

と書き換えられる。このとき、波数を $k(\ell) = 2\pi\ell/M$ と表し、 p はバンド指数である。そして、次のような関係を導入する。

$$\exp \left[i\pi\sigma_z/N \right] \exp \left[i\alpha\hat{n}\cdot\sigma \right] = B_0 \mathbf{1} + i \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}, \quad (148)$$

このとき、 $B_0^2 + |\mathbf{B}|^2 = 1$ を満たし、

$$\begin{aligned} B_0 &= \cos \left(\frac{\pi}{N} \right) \cos(\alpha) - \cos(\theta) \sin \left(\frac{\pi}{N} \right) \sin(\alpha), \\ B_x &= \sin(\theta) \cos \left(\frac{\pi}{N} \right) \sin(\alpha), \\ B_y &= -\sin(\theta) \sin \left(\frac{\pi}{N} \right) \sin(\alpha), \\ B_z &= \cos(\theta) \cos \left(\frac{\pi}{N} \right) \sin(\alpha) + \sin \left(\frac{\pi}{N} \right) \cos(\alpha). \end{aligned} \quad (149)$$

である。これらから、式 (147) は

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_p(\ell) = & -2J \left[B_0 \cos \left(\frac{(2p+1)\pi}{N} + k(\ell) \right) \right. \\ & \left. - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \sin \left(\frac{(2p+1)\pi}{N} + k(\ell) \right) \right] \end{aligned} \quad (150)$$

と表すことができる。このとき、エネルギーは

$$E_{p,\pm}[k(\ell)] = -2J \cos\left(\frac{(2p+1)\pi}{N} + k(\ell) \pm \Delta k\right), \quad (151)$$

と求められる。 Δk は位相シフトであり、

$$\Delta k = \arctan\left(\frac{|B|}{B_0}\right). \quad (152)$$

と表される。スピン軌道相互作用が存在しない場合 ($\alpha = 0$ のとき)、位相シフトは $\Delta k = \pi/N$ となり、エネルギー固有値は

$$E_{p,+}[k(\ell)] = -2J \cos[k(\ell)/N + 2\pi(p+1)/N] \quad (153)$$

$$E_{p,-}[k(\ell)] = -2J \cos[k(\ell)/N + 2\pi p/N] \quad (154)$$

のように求められる。スピン軌道相互作用が存在しない場合でも、 \uparrow -スピンと \downarrow -スピンのエネルギー分散は一致しない ($E_{p,+}[k(\ell)] \neq E_{p,-}[k(\ell)]$)。一般に、与えられたエネルギー E には、左右に動く電子と 2 つのスピン成分に関連する 4 つの波数が存在する。左側に移動する電子に対応する波数ベクトルは、

$$k_{\pm} = \arccos\left(-\frac{E}{2J}\right) \mp \Delta k - \frac{\pi}{N}, \quad (155)$$

と表すことができる。また、エネルギー E を拡張ゾーン形式で表すと、

$$E_{\pm}(k) = -2J \cos(k/N + \pi/N \pm \Delta k). \quad (156)$$

となる。したがって、 k の周期は $2\pi N$ であることが分かる。伝搬する電子の 2 つのスピンの波動関数は異なる波数ベクトルを有するので、伝搬は 2 つの波動関数の干渉、すなわちスピン歳差運動を伴う。結果として生じる振動の周期性 N_0 (この場合は力学的トルク) は、2 つの波数ベクトルの差、つまり、

$$N_0 = \frac{2\pi}{k_+ - k_-} = \frac{\pi}{\Delta k}. \quad (157)$$

で説明することができる。

付録 F Python のコード

本章では、本研究の数値計算で用いた Python のコードの詳細を示す。

図のラベル

```
-----  
from matplotlib import rc  
  
def setprop():  
    rc('font', **{'family': 'serif', 'serif': ['times new roman']})  
    rc('font', weight = 'bold')  
    rc('text', usetex=True)  
    rc('font', size = 18)  
    rc('xtick', labelsizes = 16)  
    rc('ytick', labelsizes = 16)  
    rc('axes', labelsizes = 20)  
    rc('figure', titlesize = 28)  
    rc('figure', autolayout = False)  
    rc('figure.subplot', hspace=0.3)
```

setprop()
図のラベル

スピンの回転演算子

```
-----  
# z : z 軸周りの回転角  
# y : y 軸周りの回転角  
# n : DNA の全サイト数  
# N_ : ユニットセルのサイト数  
# k : スピン軌道相互作用の強さ  
# p : z 軸周りの回転角等を便宜上まとめたもの  
  
import numpy as np  
import matplotlib.pyplot as plt  
  
def Vn(z,y,n,N_,k) :  
    s0 = np.array([[1,0],[0,1]])  
    sx = np.array([[0,1],[1,0]])  
    sy = np.array([[0,-1j],[1j,0]])  
    sz = np.array([[1,0],[0,-1]])  
    p = z + 2*np.pi*(n+1/2)/N_ + np.pi/2  
    #dp = (2*np.pi)/N_  
    #p = t + n*dp + (np.pi+dp)/2  
    v1 = s0*np.cos(p/2) - 1j*sz*np.sin(p/2)  
    v2 = s0*np.cos(y/2) - 1j*sy*np.sin(y/2)  
    v3 = s0*np.cos(k) + 1j*sz*np.sin(k)  
  
    vn = np.dot(v1, np.dot(v2, np.dot(v3, np.dot(np.conjugate(v2.T), np.conjugate(v1.T)))))  
    #v1 = s0*np.cos(p/2) - 1j*sz*np.sin(p/2)  
    #v2 = s0*np.cos(y/2) - 1j*sy*np.sin(y/2)  
    #v3 = s0*np.cos(k) + 1j*sz*np.sin(k)  
  
    #vn = np.dot(v1, np.dot(v2, np.dot(v3, np.dot(np.conjugate(v2.T), np.conjugate(v1.T)))))/2  
  
    return vn  
  
print(Vn(0,0,4,2,0.1))  
-----
```

自己エネルギー

```
-----  
# e : フェルミエネルギー  
# jm : DNA の隣接サイト間のホッピング  
# j0 : 電極のホッピング  
# v : 境界のホッピング  
  
#fig=plt.figure(figsize=(8,6))
```

```

#fi=fig.add_subplot(1,1,1)

def Sigma(e,jm,j0,v):
    if (e/jm) < 0 :
        selfene=(1/2)*((v/j0)**2)*(e - 1j*np.sqrt((2*j0)**2 - e**2,dtype=np.complex))
    else :
        selfene=(1/2)*((v/j0)**2)*(e - np.sqrt(-(2*j0)**2 + e**2,dtype=np.complex))
    return selfene

x0 = np.linspace(-5,5,100)

Rese = np.real([Sigma(e,1,1,1) for e in x0])
Imse = np.imag([Sigma(e,1,1,1) for e in x0])

plt.plot(x0,Rese)
plt.plot(x0,Imse)
plt.xlabel('$E$')
plt.ylabel('$\Sigma$')
#fig.savefig('self_energy.eps')
plt.show()

```

Green 関数のスピン成分

e0 : ポテンシャルの傾斜の高低差
e : フェルミエネルギー
jm : DDNA の隣接サイト間のホッピング
n : DNA 内の全サイト数

```

def Gspin(e0,e,jm,n,j):
    matrix = np.zeros((2, 2),dtype=np.complex)

    matrix[0, 0] = e - ( e0 - ( (2*e0)/(n-1) ) *j )
    matrix[1, 1] = e - ( e0 - ( (2*e0)/(n-1) ) *j )

    return matrix

```

```

e0 = 1
e = 0
jm = 1
n = 4

```

```

print(Gspin(e0,e,jm,n,0))
print(Gspin(e0,e,jm,n,1))
print(Gspin(e0,e,jm,n,2))
print(Gspin(e0,e,jm,n,3))

```

ユニットセル間のホッピング

jn : ユニットセル間のホッピング

```

def Unit(jn):
    un = np.zeros((2, 2),dtype=np.complex)
    un[0, 0] = jn
    un[1, 1] = jn

    return un

```

```

print(Unit(1))

```

Green 関数 (DNA)

e : 入射電子のエネルギー
n : DNA 内の全サイト数

e0 : ポテンシャルの傾斜の高低差
jm : DNA の隣接サイト間のホッピング

```

# j0 : 電極の隣接サイト間のホッピング
# jn : ユニットセル間のホッピング
# v : 境界のホッピング
# z : z 軸周りの回転角
# y : y 軸周りの回転角
# N_ : 1 ユニットセルに含まれるサイト数
# k : スピン軌道相互作用の強さ
# b : ゼーマンエネルギー

#def GreenFunc(e0,e,v,j0,b,jm,jn,z,y,n,N_,k):
def GreenFunc(e,n,para):

    e0,jm,j0,jn,v,vx,z,y,N_,k,b = para

    ginv = np.zeros((2*n, 2*n),dtype=np.complex)

    for m in range(0,n-1):
        ginv[2*(m+1):2*(m+2), 2*m:2*(m+1)] = Vn(z,y,m+1,N_,k)*jm

    for m in range(0,n-N_):
        ginv[2*(m+N_):2*(m+N_+1), 2*m:2*(m+1)] = Unit(jn)

    ginv = ginv + np.conjugate(ginv.T)

    for j in range(0,n):
        ginv[2*j:2*(j+1), 2*j:2*(j+1)] = Gspin(e0,e,jm,n,j)

    for j in range(1,n-1):
        ginv[2*j ,2*j ] = ginv[2*j ,2*j ] - Sigma(e+e0-(2*e0/(n-1))*j,jm,j0,vx)
        ginv[2*j+1,2*j+1] = ginv[2*j+1,2*j+1] - Sigma(e+e0-(2*e0/(n-1))*j,jm,j0,vx)

    ginv[0,0] = ginv[0,0] - Sigma(e-e0+b/2,jm,j0,v)
    ginv[1,1] = ginv[1,1] - Sigma(e-e0-b/2,jm,j0,v)
    ginv[2*(n-1),2*(n-1)] = ginv[2*(n-1),2*(n-1)] - Sigma(e+e0,jm,j0,v)
    ginv[2*(n-1)+1,2*(n-1)+1] = ginv[2*(n-1)+1,2*(n-1)+1] - Sigma(e+e0,jm,j0,v)

    g = np.linalg.inv(ginv)

    #return ginv
    return g
-----

透過確率の定義
-----
def Trans(e,n,para):

    g = GreenFunc(e,n,para)

    Tud=
    np.abs(g[2*(n-1)+1,0]*g[0,2*(n-1)+1])*(-1/np.pi)
    *np.imag(Sigma(e-e0+b/2,jm,j0,v))*(-1/np.pi)*np.imag(Sigma(z+e,jm,j0,v))*(2*np.pi)**2
    Tuu=
    np.abs(g[0,2*(n-1)])**2*(-1/np.pi)
    *np.imag(Sigma(e-e0+b/2,jm,j0,v))*(-1/np.pi)*np.imag(Sigma(e+e0,jm,j0,v))*(2*np.pi)**2
    Tdu=
    np.abs(g[1,2*(n-1)])**2*(-1/np.pi)
    *np.imag(Sigma(e-e0-b/2,jm,j0,v))*(-1/np.pi)*np.imag(Sigma(e+e0,jm,j0,v))*(2*np.pi)**2
    Tdd=
    np.abs(g[1,2*(n-1)+1])**2*(-1/np.pi)
    *np.imag(Sigma(e-e0-b/2,jm,j0,v))*(-1/np.pi)*np.imag(Sigma(e+e0,jm,j0,v))*(2*np.pi)**2

    return [Tud,Tuu,Tdu,Tdd]
-----

分極していない電流について
-----
xx = np.linspace(-2,2,300)

def current(e,n,para):

```

```

tup = (Trans(e,n,para)[0])**2 + (Trans(e,n,para)[1])**2
tdown = (Trans(e,n,para)[2])**2 + (Trans(e,n,para)[3])**2

return [tup,tdown]
-----

スピン分解コンダクタンス
-----
#fig=plt.figure(figsize=(6,4))
#fi=fig.add_subplot(1,1,1)

def Cgraph(e,n,para):

    tup = np.array([current(e,n,para)[0] for e in xx], dtype = float)
    tdown = np.array([current(e,n,para)[1] for e in xx], dtype = float)

    up = '$4\pi(g_{L\uparrow,R\uparrow}+g_{L\uparrow,R\downarrow})$'
    down = '$4\pi(g_{L\downarrow,R\uparrow}+g_{L\downarrow,R\downarrow})$'

    plt.plot(xx,tup,label = up)
    plt.plot(xx,tdown,label = down)

    return

e0 = 0
jm = 1
j0 = 1
jn = 0
v = 1.26
vx = 0
z = 0
y = 1.9
N_ = 10
k = 0.3
b = 0

para = [e0,jm,j0,jn,v,vx,z,y,N_,k,b]
Cgraph(e,23,para)

#plt.xlim([-2.1,2.1])
plt.ylim([0,0.6])
plt.xlabel('$E/J$')
plt.ylabel('Spin resolved conductance')
#plt.ylabel('$\mathcal{G}_R(\rm K)$')
plt.tick_params(labelsize=18)
plt.legend(fontsize=18)
#fig.savefig('Spin_resolved_conductance.eps')

plt.show()
-----

力学的トルクの入射スピンのエネルギー依存性
-----
#fig=plt.figure(figsize=(6,4))
#fi=fig.add_subplot(1,1,1)

def enegraph(e,n,para):

    x4 = np.linspace(-2,2,200)
    up = np.array([Trans(e,n,para)[0]/(jm*(4*np.pi*k)) for e in x4])#,dtype = complex)

    return plt.plot(x4,up,label = n)

e = 0
e0 = 0
jm = 1
j0 = 1
jn = 0
v = 1.26

```

```

vx = 0
z = 0
y = 1.9
N_ = 10
k = 0.3
b = 0

n = 5
para = [e0, jm, j0, jn, v, vx, z, y, N_, k, b]
enegraph(e, n, para)

n = 7
para = [e0, jm, j0, jn, v, vx, z, y, N_, k, b]
enegraph(e, n, para)

n = 9
para = [e0, jm, j0, jn, v, vx, z, y, N_, k, b]
enegraph(e, n, para)

n = 10
para = [e0, jm, j0, jn, v, vx, z, y, N_, k, b]
enegraph(e, n, para)

plt.xlim([-2.2, 2.2])
plt.ylim([0, 0.2])
plt.xlabel('$E/J$')
plt.ylabel('$\tau/\alpha \Delta \mu$')
plt.tick_params(labelsize=18)
plt.legend(fontsize=18)
#fig.savefig('Torque_energy_n5_n10.eps')
plt.show()

#fig=plt.figure(figsize=(6,4))
#fi=fig.add_subplot(1,1,1)

n = 10
para = [e0, jm, j0, jn, v, vx, z, y, N_, k, b]
enegraph(e, n, para)

n = 11
para = [e0, jm, j0, jn, v, vx, z, y, N_, k, b]
enegraph(e, n, para)

n = 13
para = [e0, jm, j0, jn, v, vx, z, y, N_, k, b]
enegraph(e, n, para)

n = 15
para = [e0, jm, j0, jn, v, vx, z, y, N_, k, b]
enegraph(e, n, para)

plt.xlim([-2.2, 2.2])
plt.ylim([0, 0.2])
plt.xlabel('$E/J$')
plt.ylabel('$\tau/\alpha \Delta \mu$')
plt.tick_params(labelsize=18)
plt.legend(fontsize=18)
#fig.savefig('Torque_energy_n10_n15.eps')
plt.show()

#fig=plt.figure(figsize=(6,4))
#fi=fig.add_subplot(1,1,1)

n = 5
para = [e0, jm, j0, jn, v, vx, z, y, N_, k, b]
enegraph(e, n, para)

n = 14
para = [e0, jm, j0, jn, v, vx, z, y, N_, k, b]
enegraph(e, n, para)

```

```

n = 23
para = [e0,jm,j0,jn,v,vx,z,y,N_,k,b]
enegraph(e,n,para)

plt.xlim([-2.1,2.1])
plt.ylim([0,0.2])
plt.xlabel('$E/J$')
plt.ylabel('$\tau/\alpha \Delta \mu$')
plt.tick_params(labelsize=18)
plt.legend(fontsize=18)
#fig.savefig('Torque_energy.eps')

plt.show()
-----

力学的トルクの DNA の長さ依存性
-----
#fig=plt.figure(figsize=(6,4))
#fi=fig.add_subplot(1,1,1)

    m1 = np.arange(1,n+1)
    up = np.array([Trans(e,n,para)[0]/(4*np.pi*k) for n in m1], dtype = float)

    return plt.plot(m1,up,label = k, marker="o")

e = 0
n = 25

e0 = 0
jm = 1
j0 = 1
jn = 0
v = 1
vx = 0
z = 0
y = 1.9
N_ = 10
b = 0

k=0.1
para = [e0,jm,j0,jn,v,vx,z,y,N_,k,b]
periodgraph(e,n,para)

k=0.3
para = [e0,jm,j0,jn,v,vx,z,y,N_,k,b]
periodgraph(e,n,para)

k=0.5
para = [e0,jm,j0,jn,v,vx,z,y,N_,k,b]
periodgraph(e,n,para)

plt.xlim([2,25])
plt.ylim([0,0.2])
plt.xlabel('$N_{mol}$')
plt.ylabel('$\tau/\alpha eV$')
plt.tick_params(labelsize=18)
plt.legend()
#fig.savefig('Torque_period.eps')
plt.show()
-----

力学的トルクのユニットセル内のサイト依存性
-----
スピン軌道相互作用が強い場合

#fig=plt.figure(figsize=(6,4))
#fi=fig.add_subplot(1,1,1)

def periodgraph(e,n,para):

    m1 = np.arange(1,n+1)

```

```

up = np.array([Trans(e,n,para)[0]/(4*np.pi*k) for n in m1], dtype = float)

return plt.plot(m1,up,label = N_, marker="o")

e = 0
n = 35

e0 = 0
jm = 1
j0 = 1
jn = 0
v = 1.26
vx = 0
z = 0
k = 0.6
b = 0

N_ = 10
y = -1.2415926535897934+np.pi
para = [e0,jm,j0,jn,v,vx,z,y,N_,k,b]
periodgraph(e,n,para)

N_ = 15
y = -1.2387733232243117+np.pi
para = [e0,jm,j0,jn,v,vx,z,y,N_,k,b]
periodgraph(e,n,para)

N_ = 20
y = -1.2377841909309006+np.pi
para = [e0,jm,j0,jn,v,vx,z,y,N_,k,b]
periodgraph(e,n,para)

plt.xlim([1,35])
plt.ylim([0,0.15])
plt.xlabel('$N_{\rm mol}$')
plt.ylabel('$\tau/\alpha \Delta \mu$')
plt.tick_params(labelsize=18)
plt.legend()
#fig.savefig('Torque_period4.eps')
plt.show()

-----
スピン軌道相互作用が弱い場合

#fig=plt.figure(figsize=(6,4))
#fi=fig.add_subplot(1,1,1)

def periodgraph(e,n,para):

    m1 = np.arange(1,n+1)
    up = np.array([Trans(e,n,para)[0]/(4*np.pi*k) for n in m1], dtype = float)

    return plt.plot(m1,up,label = N_, marker="o")

e = 0
n = 35

e0 = 0
jm = 1
j0 = 1
jn = 0
v = 1.26
vx = 0
z = 0
k = 0.01
b = 0

N_ = 10
y = -1.2415926535897934+np.pi

```

```

para = [e0,jm,j0,jn,v,vx,z,y,N_,k,b]
periodgraph(e,n,para)

N_ = 15
y = -1.2387733232243117+np.pi
para = [e0,jm,j0,jn,v,vx,z,y,N_,k,b]
periodgraph(e,n,para)

N_ = 20
y = -1.2377841909309006+np.pi
para = [e0,jm,j0,jn,v,vx,z,y,N_,k,b]
periodgraph(e,n,para)

plt.xlim([1,35])
plt.ylim([0,0.035])
plt.xlabel('$N_{\rm mol}$')
plt.ylabel('$\tau/\alpha \Delta \mu$')
plt.tick_params(labelsize=18)
plt.legend()
#fig.savefig('Torque_period3.eps')
plt.show()
-----

```

参考文献

- [1] B. Bhushan, D. Luo, S. R. Schrick, W. Sigmund, and S. Zauscher, *Handbook of Nanomaterials Properties*, (Springer, Berlin Heidelberg, 2014).
- [2] Sarah Delaney and Jacqueline K. Barton, *Long-Range DNA Charge Transport*, *J. Org. Chem.* **68**, 6475-6483 (2003)
- [3] P. Středa and P. Šeba, *Antisymmetric Spin Filtering in One-Dimensional Electron Systems with Uniform Spin-Orbit Coupling*, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 256601 (2003).
- [4] T. P. Pareek, *Pure Spin Currents and the Associated Electrical Voltage*, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 076601 (2004).
- [5] M. Eto, T. Hayashi, and Y. Kurotani, *Spin Polarization at Semiconductor Point Contacts in Absence of Magnetic Field*, *J. Phys. Soc. Jpn.* **74**, 1934 (2005).
- [6] N. Hatano, R. Shirasaki, and H. Nakamura, *Non-Abelian gauge field theory of the spin-orbit interaction and a perfect spin filter*, *Phys. Rev. A* **75**, 032107 (2007).
- [7] A. Aharony, Y. Tokura, G. Z. Cohen, O. Entin-Wohlman, and S. Katsumoto, *Filtering and analyzing mobile qubit information via Rashba-Dresselhaus Aharonov-Bohm interferometers*, *Phys. Rev. B* **84**, 035323 (2011).
- [8] S. Matityahu, A. Aharony, O. Entin-Wohlman, and C. A. Balseiro, *Spin filtering in all-electrical three-terminal interferometers*, *Phys. Rev. B* **95**, 085411 (2017).
- [9] B. Göhler, V. Hamelbeck, T. Z. Markus, M. Kettner, G. F. Hanne, Z. Vager, R. Naaman, and H. Zacharias, *Spin Selectivity in Electron Transmission Through Self-Assembled Monolayers of Double-Stranded DNA*, *Science* **331**, 894 (2011).
- [10] Z. Xie, T. Z. Markus, S. R. Cohen, Z. Vager, R. Gutierrez, and R. Naaman, *Spin Specific Electron Conduction through DNA Oligomers*, *Nano Lett.* **11**, 4652 (2011).
- [11] P. C. Mondal, C. Fontanesi, D. H. Waldeck, and R. Naaman, *Field and Chirality Effects on Electrochemical Charge Transfer Rates: Spin Dependent Electrochemistry*, *ACS Nano* **9**, 3377 (2015).
- [12] A. C. Aragonès, E. Medina, M. Ferrer-Huerta, N. Gimeno, M. Teixido, J. L. Palma, N. Tao, J. M. Ugalde, E. Giralt, I. Díez-Pérez, and V. Mujica, *Measuring the Spin-Polarization Power of a Single Chiral Molecule*, *Small*, **13**,

- 1602519 (2017).
- [13] R. Naaman and D. H. Waldeck, *Chiral-Induced Spin Selectivity Effect*, J. Phys. Chem. Lett. **3**, 2178 (2012).
- [14] A.-M. Guo and Q.-F. Sun, *Spin-Selective Transport of Electrons in DNA Double Helix*, Phys. Rev. Lett. **108**, 218102 (2012).
- [15] A.-M. Guo and Q.-F. Sun, *Spin-dependent electron transport in protein-like single-helical molecules*, PNAS **111**, 11658 (2014).
- [16] S. Matityahu, Y. Utsumi, A. Aharony, O. Entin-Wohlman, and C. A. Balseiro, *Spin-dependent transport through a chiral molecule in the presence of spin-orbit interaction and nonunitary effects*, Phys. Rev. B **93**, 075407 (2016).
- [17] S. Varela, V. Mujica, and E. Medina, *Effective spin-orbit couplings in an analytical tight-binding model of DNA: Spin filtering and chiral spin transport*, Phys. Rev. B **93**, 155436 (2016).
- [18] K. Michaeli, N. Kantor-Uriel, R. Naaman, and D. H. Waldeck, *The electron's spin and molecular chirality - how are they related and how do they affect life processes?* Chem. Soc. Rev. **45**, 6478 (2016).
- [19] K. Michaeli, V. Varade, R. Naaman, and D. H. Waldeck, *A new approach towards spintronics spintronics with no magnets*, J. Phys.: Condens. Matter **29**, 103002 (2017).
- [20] X. Yang, C. H. van der Wal, and B. J. van Wees, *Spin-dependent electron transmission model for chiral molecules in mesoscopic devices*, Phys. Rev. B **99**, 024418 (2019).
- [21] 小出昭一郎,(1969)『基礎物理学選書 5B. 量子力学 (I) (改訂版)』裳華房
- [22] Thomas Ihn, *Semiconductor Nanostructures: Quantum states and electronic transport*, (Oxford University Press, New York, 2010)
- [23] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics* (Benjamin/Cummings, Menlo Park, California, 1985).
- [24] John H. Davies,(2004)『低次元半導体の物理』シュプリンガー・ジャパン株式会社
- [25] S. Chikazumi and C. D. Graham, *Physics of Ferromagnetism*, 2nd Ed., (Oxford University Press, New York, 1997).
- [26] O. W. Richardson, *A Mechanical Effect Accompanying Magnetization*, Phys. Rev. **26**, 248 (1908).
- [27] A. Einstein and W. J. de Haas, *Experimental proof of the existence of Ampere's molecular currents*, in: Deut. Phys. Gesellsch. Verhandlungen **17**, 152 (1915).
- [28] S. J. Barnett, *Magnetization by Rotation*, Phys. Rev. **6**, 239 (1915).
- [29] P. Fulde and S. Kettmann, *Spin Flip Torsion Balance*, Ann. Phys. (Berlin) **7**, 241 (1998).

- [30] P. Mohanty, G. Zolfagharkhani, S. Kettemann, and P. Fulde, *Spin-mechanical device for detection and control of spin current by nanomechanical torque*, Phys. Rev. B **70**, 195301 (2004).
- [31] A. .G. Mal'shukov, C. S. Tang, C. S. Chu, and K. A. Chao, *Strain-Induced Coupling of Spin Current to Nanomechanical Oscillations*, Phys. Rev. Lett. **95**, 107203 (2005).
- [32] A. A. Kovalev, G. E. W. Bauer, and A. Brataas, *Current-driven ferromagnetic resonance, mechanical torques, and rotary motion in magnetic nanostructures*, Phys. Rev. B **75**, 014430 (2007).
- [33] M. Matsuo, J. Ieda, K. Hirai, E. Saitoh, and S. Maekawa, *Mechanical generation of spin current by spin-rotation coupling*, Phys. Rev. B **87**, 180402(R) (2013).
- [34] M. Matsuo, J. Ieda, and S. Maekawa, *Theory of mechanical spin current generation via spinorbit coupling*, Solid State Commun. **198**, 57 (2014).
- [35] M. Matsuo, J. Ieda, and S. Maekawa, *Mechanical generation of spin current*, Front. Phys. **3**, 54 (2015).
- [36] M. Matsuo, E. Saitoh, and S. Maekawa, *Spin-Mechatronics*, J. Phys. Soc. Jpn **86**, 011011 (2017).
- [37] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Mechanics*, 2nd ed. (Pergamon, Oxford, 1969).
- [38] Supriyo Datta, *Quantum Transport: Atom to Transistor*, (Cambridge University Press,Cambridge ,2005).
- [39] R. Gutierrez, E. Dias, R. Naaman, and G. B. Smith, *Spin-selective transport through helical molecular systems*, Phys. Rev. B **85**, 081404(R) (2012).
- [40] C. Bustamante, Z. Bryant, and S. B. Smith, *Ten years of tension: single-molecule DNA mechanics*, Nature **421**, 423 (2003).
- [41] C. Bustamante, J. F. Marko, E. D. Siggia, and S. Smith, *Entropic Elasticity of λ -Phage DNA*, Science **265**, 1599 (1994).
- [42] J. H. Bardarson, *A proof of the Kramers degeneracy of transmission eigenvalues from antisymmetry of the scattering matrix*, J. Phys. A: Math. Theor. **41**, 405203 (2008).
- [43] 小出昭一郎,(1969)『基礎物理学選書 5B. 量子力学 (II) (改訂版)』裳華房

謝辞

本修士論文の研究は、三重大学大学院 工学研究科 物理工学専攻の物性物理学研究室において行われました。同研究室の内海裕洋准教授には、お忙しいところ、研究に関する議論や発表練習にも柔軟に対応していただきました。私が学部生の頃から3年間にわたり、全面的なサポートを賜りましたこと厚く御礼申し上げます。

また、同研究室、博士後期課程の岡田先輩には、研究室の Python の環境の構築・メンテナンスから、本研究で用いたプログラムコードのチェックまで、ご協力いただきましたこと厚く御礼申し上げます。

Ben-Gurion 大学、Tel-Aviv 大学の Amnon Aharony 教授と Ora Entin-Wohlman 教授には、多忙なスケジュールの中、電子メール上での議論に応じていただきました。本修士論文の研究背景についての補足、計算のチェックや論文構成のアドバイスに至るまで、多大なご協力いただきましたこと、厚く御礼申し上げます。