

RESEARCH DO3

第一原理計算による反強磁性体の電子構造トポロジーとマクロ物性の研究

鈴木 通人 / 東北大学 金属材料研究所 准教授



すずき・みちと

1979年埼玉県生まれ。2007年神戸大学大学院博士後期課程修了。2007年神戸大学博士研究員。同年ウプサラ大学(スウェーデン)博士研究員。2010年より日本原子力研究開発機構 研究員。2014年より理化学研究所 研究員。2017年より 科学技術振興機構さきがけ研究員(兼任)。2018年より現職。

強磁性体では異常ホール効果や異常ネルンスト効果、磁気光学 Kerr 効果などが起こることが知られていますが、近年、 Mn_3Z ($Z=Sn, Ge$) の磁化のほとんどない非線形磁気構造が秩序した(広義の)反強磁性秩序相において、非常に大きな異常ホール効果やネルンスト効果、磁気光学 Kerr 効果が観測され注目を集めています [1-3]。私達はこれら Mn_3Z ($Z=Sn, Ge$) の反強磁性秩序相で観測された大きな異常ホール効果が、特有の反強磁性構造によって引き起こされていることを明らかにしています [4]。具体的には、強磁性を特徴付ける磁気双極子の自然な拡張として反強磁性を特徴付ける高次磁気多極子による秩序パラメータを提案し、 Mn_3Z の反強磁性構造が磁気双極子と同じ対称性に属する磁気八極子で特徴付けられることを示しました (図 1(a))。この研究で提案した新しい秩序パラメータ群(クラスター多極子)は、結晶中の一般の磁気秩序に伴う対称性の破れを定量化するため、反強磁性秩序に伴う対称性の破れとマクロ物性の相関やトポロジーとの関係を調べる上で有用な理論ツールになると考えています。

私のこれまでの研究では、第一原理計算によって物質中の様々な秩序形成下の電子構造とそれらが物性に与える影響を調べてきましたが、この異常ホール効果の研究を機に、本プロジェクトの研究協力者である東北大学の是常氏とともに、ベリー曲率やワイル点を特徴付けるモノポール電荷の分布を計算するプログラムやマクロ物性の計算プログラムを開発したことで、磁性状態に対してより豊富な情報を引き出すことが可能になっています [2-6]。上記 Mn_3Z の反強磁性秩序相の異常ホール効果の研究では、これらのプログラムと磁気空間群理論による解析を併用することで、ベリー曲率とワイル点の分布の解析に取り組んでおり、 Mn_3Z の反強磁性金属においては、占有バンドに広がったベリー曲率が異常ホール伝導度に支配的に寄与することも明らかにしています (図 1 (b))。本研究プロジェクトを通して、このような解析を様々な

磁性体に対して行っていくことで、新しいトポロジカル物質の発見につなげたいと考えています。

- [1] S. Nakatsuji, N. Kiyohara, and T. Higo, *Nature* **527**, 212 (2015).
- [2] M. Ikhlas et al., *Nat. Phys.* **13**, 1085 (2017).
- [3] T. Higo et al., *Nat. Photon.* **12**, 73 (2018).
- [4] M.-T. Suzuki, T. Koretsune, M. Ochi, R. Arita, *Phys. Rev. B* **95**, 094406 (2017).
- [5] K. Kuroda et al., *Nat. Mater.* **16**, 1090 (2017).
- [6] L. Huang et al., *Nat. Mater.* **15**, 1155 (2016).

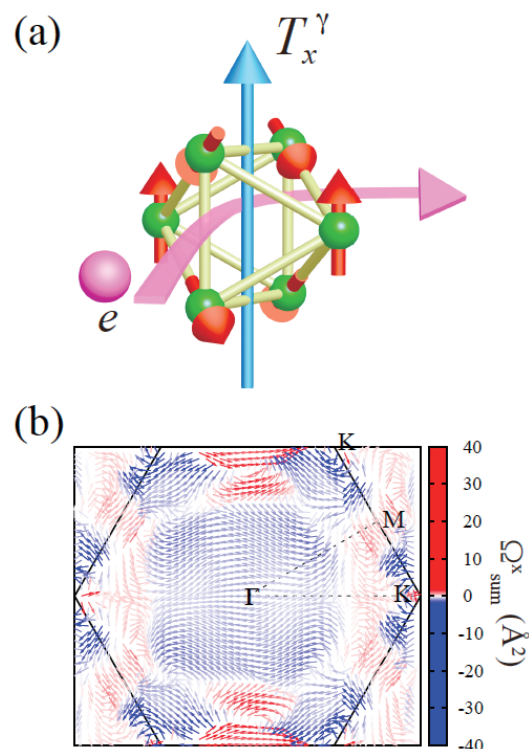


図 1:(a) 磁気八極子 (T_x^γ) によって特徴付けられる Mn_3Z の磁気構造と異常ホール効果の概念図。(b) Mn_3Z のベリー曲率の分布 (AHC に寄与する成分によって色付け)。