

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。

異常ホール効果は強磁性秩序に伴う非対角応答現象と考えられてきましたが、近年私達は、強磁性と同様の対称性の破れを引き起こすことで異常ホール効果を発現させる反強磁性秩序の存在を示しています [1]。このような反強磁性秩序は高次の磁気多極子モーメントによって特徴付けることができ、 Mn_3Sn や Mn_3Ge の非線形磁気構造のもとで実験的に観測された巨大異常ホール効果 [2] は、磁気双極子と同じ既約表現に属する磁気八極子の秩序によって、強磁性磁化のもとで生じる異常ホール効果と同じように、対称性の破れの観点から説明できます [1]。

私達はこの磁気構造の多極子理論を拡張し、任意の結晶構造において、結晶点群の既約表現と多極子によって分類される、互いに直交する磁気構造をシステムティックに生成する方法を提案しています [3]。この理論手法の構築によって、与えられた結晶構造のもとで異常ホール効果のような特定の物性を引き起こす具体的な磁気構造が容易に同定できるようになり、磁気構造と物性現象の関係を系統的に研究するための指針が得られました。最近の研究で私達は、この磁気構造の多極子展開手法と第一原理計算手法を組み合わせ、アンチペロブスカイトマンガン窒化物の安定磁気構造の評価を行い、これらの物質で異常ホール効果を引き起こす反強磁性構造が安定・準安定な状態として存在することを示した上で、反強磁性秩序による異常ホール効果の系統的な解析を実施しています [4]。異常ホール伝導度はベリー曲率の占有バンドの和と波数空間の積分によって得られるため、この研究では、異常ホール効果を起こす反強磁性秩序状態に対して波数空間のベリー曲率を解析しています。この解析をもとに、これらの磁気秩序相で異常ホール伝導度の大きさを決定づけているのが、ワイル点近傍の発散的に大きなベリー曲率ではなく、フェルミ準位近傍に広がった比較的小さなベリー曲率の分布 (図1) であることなど、磁性金属における異常ホール伝導度の増強要因について多くの知見を得ています [4]。現在も強磁

性体を含む様々な磁性体を対象に、磁気秩序のもとで発現する巨大物性の発現機構を電子状態レベルで理解する研究に取り組んでいます。

本研究成果は Vu Thi Ngoc Huyen、野本拓也、柳有起、速水賢、有田亮太郎、楠瀬博明、山内邦彦、小口多美夫各氏との共同研究によるものです。

- [1] M.-T. Suzuki, T. Koretsune, M. Ochi, R. Arita, Phys. Rev. B **95**, 094406 (2017).
- [2] S. Nakatsuji, N. Kiyohara, and T. Higo, Nature **527**, 212 (2015).
- [3] M.-T. Suzuki, T. Nomoto, R. Arita, Y. Yanagi, S. Hayami, and H. Kusunose, Phys. Rev. B **99**, 174407 (2019).
- [4] V. T. N. Huyen, M.-T. Suzuki, K. Yamauchi, T. Oguchi, Phys. Rev. B **100**, 094426 (2019).

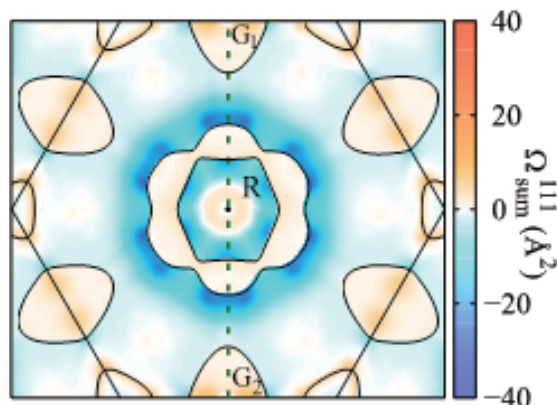


図1 Mn_3PtN のブリルアンゾーン [111] 断面におけるフェルミ面 (実線) と異常ホール伝導度に寄与するベリー曲率の分布。