

物理学専攻・物理学科 談話会（兼）先端融合科学特論A

講師：鈴木 通人 氏（東北大学 金属材料研究所 計算材料科学センター）

日時：12月9日（木）17:00～

場所：Z103教室

題目：磁性表現論と第一原理計算による磁性体の物性解析

磁気秩序系における磁気モーメントの配向自由度は、秩序化に伴う磁気対称性の破れによって多彩な物性現象の源となる。磁気秩序に伴う対称性の破れはスピン・軌道相互作用を通してエネルギーバンドの縮退構造を変化させ、特定の条件下では磁性体における巨大輸送・応答現象の引き金になると考えられている。近年、第一原理計算から得られた電子構造をもとに有効タイトバインディングモデルを構築する理論手法が洗練化され、比較的低い計算コストで線形応答関数などの計算を行えるようになったことで物質の輸送現象に関する理解が大きく進展しているが、複雑な磁気秩序下で生じる磁性体の輸送現象の発現メカニズムの同定は困難であった。

発表者は、磁気秩序の新しい理論解析手法として磁性表現論と多極子理論を融合させたクラスター多極子法を考案し[1-3]（図1参照）、第一原理計算を併用した磁気構造と電子構造の解析から、 Mn_3Sn , Mn_3Ge の反強磁性秩序相で観測された巨大異常ホール効果の発現機構を明らかにしている他[2]、アンチペロブスカイトマンガン窒化物や反強磁性ディラック半金属 $MnCuAs$ を対象に行った解析から、エネルギーバンドの縮退構造が反強磁性体の異常ホール効果やスピンホール効果の増強に果たす役割を解析している[4, 5]。

本発表では磁性表現論と第一原理計算を利用したこれら反強磁性体の輸送現象に関する研究の他、クラスター多極子法とハイスループット第一原理計算を活用した磁気構造データベースの解析[6]や、有限波数によって特徴づけられる空間変調を伴うより複雑な磁気秩序系の解析への応用など、理論の進展に伴う近年の研究を紹介する。

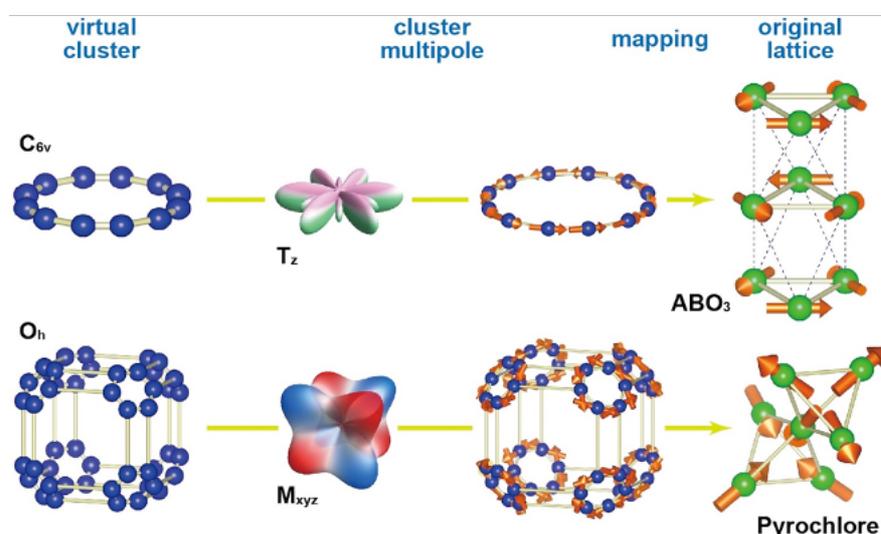


図 1 クラスター多極子法による磁気構造生成[3]

参考文献

- [1] クラスター多極子法と電子状態計算による反強磁性体の物性解析, 鈴木通人, 柳有起, 有田亮太郎, 固体物理 55, 561 (2020)
- [2] M.-T. Suzuki, T. Koretsune, M. Ochi, R. Arita, Phys. Rev. B 95, 094406(2017)
- [3] M.-T. Suzuki, T. Nomoto, R. Arita, Y. Yanagi, S. Hayami, 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)
- [5] V. T. N. Huyen, Y. Yanagi, M.-T. Suzuki, Phys. Rev. B 104, 035110 (2021)
- [6] M.-T. Huebsch, T. Nomoto, M.-T. Suzuki, R. Arita, Phys. Rev. X 11, 011031 (2021)