

平成 30 年 5 月 17 日現在

機関番号：10101

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2016～2017

課題番号：16H06590

研究課題名(和文) スピン軌道相互作用が強い磁性体に潜むトロイダルモーメントの理論的探索・制御

研究課題名(英文) Theoretical search and control of toroidal moment hidden in magnetic states with strong spin-orbit coupling

研究代表者

速水 賢 (Hayami, Satoru)

北海道大学・理学研究院・助教

研究者番号：20776546

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,300,000円

研究成果の概要(和文)：時間・空間反転対称性がともに破れた系に現れるトロイダルモーメントに関する微視的な理論形式の構築と、実験的にどのようにして観測・制御できるかを調べた。(1)結晶場、スピン軌道相互作用、電子相関による対称性の破れを取り入れたモデルに対して、摂動論を用いることにより、トロイダルモーメントが秩序化した際に生じる有効的なスピン軌道相互作用を導出した。(2)2次元三角格子上のスピン軌道相互作用が強い強磁性体において、非磁性不純物をドーブすることで、トロイダルモーメントが不純物周りに誘起されることを明らかにした。(3)トロイダルモーメントを示す候補物質である5d電子系酸化物KOsO₄に対して解析を行った。

研究成果の概要(英文)：We microscopically formulated toroidal moments in the absence of time-reversal and spatial inversion symmetries. We also investigated how to observe and control toroidal moments in experiments from the theoretical side. (1)We derived an effective spin-orbit coupling under the toroidal ordering for the model including the crystalline-electric field, atomic spin-orbit coupling, and electron correlation by perturbative analysis. (2) We clarified that toroidal moments are induced around the nonmagnetic impurity site in the ferromagnets with the strong spin-orbit coupling on the triangular lattice. (3) We examined the 5d transition oxide KOsO₄, which is a potential candidate showing toroidal moments.

研究分野：物性理論

キーワード：強相関電子系 磁性 反対称スピン軌道相互作用 トロイダルモーメント 多極子 局所的な反転対称性の破れ マルチフェロイクス 遍歴電子系

1. 研究開始当初の背景

電気磁気応答や異常ホール効果といった興味深い物性を通じて、空間反転対称性のない磁性体の研究が著しい進展を見せている。中でも、本研究課題の主題であるトロイダルモーメントは、時間・空間反転対称性のない系において発現する多極子の一つである。トロイダルモーメントは元々、トロイダルコイルのようなトーラスの表面上を渦巻く電流密度として定義され、核物理学の分野で研究されてきた。一方で近年、電子が持つスピンによる渦巻き構造が、物性物理学におけるトロイダルモーメントと認識され、電気磁気応答などのマクロな物性を対称性の観点から理解するために用いられている。しかし、ミクロな立場からトロイダルモーメントを基礎づけ、コントロールしようという視点の研究はほとんど行われていないのが現状である。

こうした中、研究代表者はこれまでに、トロイダルモーメントをミクロな視点から理解し、電気磁気効果や伝導特性などの物性現象の更なる開拓・制御を目指した研究を遂行してきた。特に、従来の研究のほとんどが磁性絶縁体に限られていたのに対し、金属までを包含した解析を行い、以下の3つの点を明らかにした。具体的には、(1) トロイダルモーメントの発現には、(a) 強いスピン軌道相互作用をもつ $d \cdot f$ 電子系、(b) ズグザグ鎖やハニカム構造のような原子位置での局所的な反転対称性の破れをもつ格子、(c) 電子相関による磁気秩序の3要素が重要であることを明らかにした。(2) トロイダルモーメントを伴う交替的な反強磁性秩序の安定性の解析を行った。(3) 伝導バンドの重心シフトや、電気磁気効果を介した新しいホール効果といった遍歴電子系特有の新奇現象を見出した。

一方で最近、 f 電子系化合物 UNi_4B において、トロイダル秩序の発現を示す電気磁気効果やホール効果が実験的に観測されつつあり、トロイダルモーメントというミクロな新しい自由度を制御する試みは急速に加速している。こうした現状において、トロイダルモーメントを有する候補物質の更なる探索および観測・制御方法を理論の視点から確立することが、空間反転対称性のない磁性体に関する研究の更なる進展・開拓につながると期待されている。

2. 研究の目的

本研究の目的は、時間・空間反転対称性がともに破れた系に現れるトロイダルモーメントをミクロな視点から特徴づける理論形式を構築し、実験的に観測・制御するための理論を確立することである。特に空間反転対称性の破れを伴う磁気秩序に着目して、スピン軌道相互作用や電子相関が、トロイダルモ

ーメントの発現やそれに伴う電気磁気効果・量子伝導などにどのような影響を及ぼすかを明らかにする。

3. 研究の方法

電子がもつ複数の自由度が複雑に絡み合った系において、磁気秩序がトロイダルモーメントを伴うかどうかを判定する基礎的な理論を構築するために、結晶場、スピン軌道相互作用、電子相関による対称性の破れを取り入れた多軌道モデルを考える。こうしたモデルに対して、摂動論や群論といった解析的な手法と、平均場計算、実空間モンテカルロ法、厳密対角化法といった数値的な手法を併用することにより、多角的な視点から研究を行う。

4. 研究成果

- (1) トロイダルモーメントの発現機構の理論的探索: 上記の多軌道モデルに対して、サイト間のホッピングを摂動と見なすことにより、秩序形成の元での有効的な反対称スピン軌道相互作用の導出を行った。得られた反対称スピン軌道相互作用の時間・空間反転対称性の有無および波数ベクトル依存性から、トロイダルモーメントの有無を判定する枠組みを構築した。さらにこのスキームを一般の多極子に拡張することで、トロイダルモーメントがどのモデルパラメータに強く依存しているかを明らかにし、また単純な磁気秩序だけではなく、軌道自由度やバレー自由度を含んだ磁気と軌道の複合秩序や磁気四極子などの高次多極子の同定にも適用できることを示した。
- (2) トロイダルモーメントを伴う典型物質に対する解析: ここでは交替的な反強磁性秩序相においてトロイダルモーメントが活性化している可能性のある $5d$ 電子系化合物 $KOsO_4$ に対して解析を行い、磁気モーメントの向きに応じてトロイダルモーメントの向きが変化し、それに伴って異なる電気磁気応答が得られることを明らかにした。さらに、 $CsOsO_4$ に対して同様の解析を行うことにより、高次の磁気多極子秩序が発現している可能性を議論した。
- (3) 非磁性不純物を利用したトロイダルモーメントの観測・制御: 2 次元正方格子および三角格子上のスピン軌道相互作用が強い強磁性体において、非磁性不純物をドーピングすることで、トロイダルモーメントが不純物まわりに誘起されることを明らかにした。対象としたモデルは最近接スピン間に強磁性相互作用および容易軸異方性をもつスピンモデルである。

こうした格子系においては、非磁性不純物が局所的な反転対称性の破れをもたらすことから、有効的なスピン軌道相互作用が不純物周りに局所的に誘起されるが、その際の磁気構造がトロイダルモーメントを有するような渦状のスピン構造に変調することを明らかにした。解析手法としては、強磁性体に1つの不純物をドーピングした局在スピン模型に対して、ランチョス法を用いた厳密対角化法を用い、不純物周りに局在した束縛準位を解析した。また相補的な手法として、基底状態空間を効率良く探索できるシミュレーテッド・アニーリング法を用い、スピンの最安定配置がトロイダルモーメントを有する渦状のスピン構造になることを確認した。こうした理解を通じて、磁気異方性や格子の対称性を考慮することでトロイダルモーメントだけではなく、磁気単極子や磁気四極子型の磁気渦も誘起できることを理論的に明らかにした。

さらに当初は予期していなかった研究成果が以下のように得られた。

- (4) トロイダル多極子の微視的立場からの定式化: 多極子は空間反転対称性および時間反転対称性の有無に応じて電気多極子、磁気多極子、磁気トロイダル多極子、電気トロイダル多極子の4種類に分類されるが、この中でも空間反転操作に対するパリティが $(-1)^l$ (l は多極子のランク)、時間反転操作に対するパリティが -1 の磁気トロイダル多極子と空間反転操作に対するパリティが $(-1)^{l+1}$ (l は多極子のランク)、時間反転操作に対するパリティが $+1$ の電気トロイダル多極子が局所的に活性となる状況を微視的な立場から明らかにした。具体的には電磁気的なスカラー・ベクトルポテンシャルに関して多極子展開を行い、得られた多極子の量子力学的な演算子表現を導出することにより、トロイダル多極子が局所パリティ混成系において活性となることを示した。また、対称性の観点からこうしたトロイダル多極子が秩序化した際にもたらす電気・磁気・弾性自由度間のマルチフェロイクス現象をまとめた。
- (5) 遍歴磁性体における有効的なスピン間相互作用が誘起するスキルミオン結晶相の解析: 非共面的な磁気構造として特徴づけられるスキルミオンは、2009年に空間反転対称性をもたないB20系合金で観測されて以来、スピントロニクスへの応用も視野に入れた精力的な研究が行われている。これらのスキルミオンの発現には、スピン軌道相互作用が重要な役割を担っていることが知られてい

る。一方で近年、スピン軌道相互作用をもたない遍歴磁性体においても、スキルミオン結晶相を含む様々な非共面的な磁気構造を誘起する機構が内在していることと示唆されるが、電子の遍歴性由来して現れる有効相互作用は多種多様であるため、本質的なメカニズムに対する統一的な理解は未だに得られていなかった。そこで我々は、遍歴電子由来した有効交換相互作用を詳細に調べた。具体的には、近藤格子模型において、局在スピンと遍歴電子スピン間に働く交換相互作用に関する摂動展開を高次まで系統的に行い、局在スピンに生じる有効交換相互作用を導出した。さらに、最も重要な寄与をもたらす有効交換相互作用のみを抽出した有効スピン模型を構築し、それに対してモンテカルロ計算を用いることにより、どのような磁気秩序相が安定に存在するかを系統的に調べた。その結果、波数空間における双二次交換相互作用がスキルミオンをはじめとする非共面的な磁気秩序の発現に本質的な役割を果たしていることを明らかにした。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計5件)

- ① S. Hayami, H. Kusunose, and Y. Motome, “Mean-field study of correlation-induced antisymmetric spin-orbit coupling in a two-orbital honeycomb model”, *Physica B: Condensed Matter* **536**, 649-653 (2018). (査読有り)
DOI: 10.1016/j.physb.2017.08.063
- ② S. Hayami and H. Kusunose, “Microscopic Description of Electric and Magnetic Toroidal Multipoles in Hybrid Orbitals”, *Journal of Physical Society of Japan* **87**, 033709-1-5, (2018). (査読有り)
DOI: 10.7566/JPSJ.87.033709
- ③ S. Hayami, H. Kusunose, and Y. Motome, “Emergent odd-parity multipoles and magnetoelectric effects on a diamond structure: implication to 5d transition metal oxides AOsO₄ (A=K, Rb, and Cs)”, *Physical Review B* **97**, 024414-1-11 (2018). (査読有り)
DOI: 10.1103/PhysRevB.97.024414
- ④ Y. Yanagi, S. Hayami, and H. Kusunose, “Manipulating the magnetoelectric effect: Essence

learned from Co4Nb2O9”, Physical Review B **97**, 020404-1-5 (2018). (査読有り)
DOI: 10.1103/PhysRevB.97.020404

- ⑤ S. Hayami, R. Ozawa, and Y. Motome, “Effective bilinear-biquadratic model for noncoplanar ordering in itinerant magnets”, Physical Review B **95**, 224424-1-20 (2017). (査読有り)
DOI: 10.1103/PhysRevB.95.224424

[学会発表] (計 13 件)

- ① 速水 賢、楠瀬 博明、求 幸年、「5d 電子系ダイヤモンド構造物質 AOsO₄ (A=K, Rb, Cs)における奇パリティ多極子と電気磁気効果」、日本物理学会第 73 回年次大会 (2018)
- ② 速水 賢、「軌道混成によるハイブリッド多極子」、研究会「反転対称無き系における多極子応答」(2018) (invited)
- ③ S. Hayami, “Magnetic vortex and skyrmion crystals in frustrated magnets”, International workshop Frontiers in Strongly Correlated Electron System (2017) (invited)
- ④ S. Hayami, “Emergent odd-parity multipoles by spontaneous parity breaking”, J-Physics 2017: International Workshop on Multipole Physics and Related Phenomena (2017) (invited)
- ⑤ 速水 賢、楠瀬 博明、「局所パリティ混成系におけるトロイダル多極子」、日本物理学会 2017 年秋季大会 (2017)
- ⑥ 速水 賢、求 幸年、「近藤格子模型において発現するスキルミオン結晶に対する磁気異方性の効果」、日本物理学会 2017 年秋季大会 (2017)
- ⑦ 速水 賢、求 幸年、「スピン軌道相互作用を有する近藤格子模型において発現する多重 Q 磁気秩序相」、日本物理学会 2017 年秋季大会 (2017)
- ⑧ S. Hayami, “Vortex and Skyrmion Crystals in Frustrated Itinerant Magnets”, Skyrmionics: Materials, Phenomena and Applications (2017) (invited)
- ⑨ 速水 賢、「磁性絶縁体および金属磁性体におけるスキルミオン結晶」、第 238 回エンレイソウの会 (2017) (invited)

- ⑩ S. Hayami, “Spontaneous cluster multipoles by local parity mixing”, International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2017 (2017) (invited)

- ⑪ S. Hayami, “Emergent spin-valley-orbital physics by cluster multipoles”, EMN Bali Meeting 2017 (2017) (invited)

- ⑫ 速水 賢、「近藤格子模型における有効的なスピン間相互作用が誘起する磁気渦結晶」、新学術領域 J-Physics トピカルミーティング「拡張多極子研究の進展と課題」 (2017) (invited)

- ⑬ 速水 賢、小澤 遼、求 幸年、「近藤格子模型における有効的なスピン間相互作用が誘起するスキルミオン結晶相」、日本物理学会第 72 回年次大会 (2017)

[図書] (計 0 件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

○取得状況 (計 0 件)

[その他]

ホームページ等

<http://phys.sci.hokudai.ac.jp/~hayami/index.html>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

速水 賢 (HAYAMI, Satoru)
北海道大学・理学研究院・助教
研究者番号：20776546