

令和 6 年 6 月 2 日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2021～2023

課題番号：21H01789

研究課題名（和文）ハイスループット磁性・バンドエンジニアリングによるトポロジカル磁性材料の物質設計

研究課題名（英文）Theoretical design of magnetic topological material by high-throughput magnetism/band engineering

研究代表者

鈴木 通人 (Michi-To, Suzuki)

東北大学・金属材料研究所・准教授

研究者番号：10596547

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 13,300,000円

研究成果の概要（和文）：物質を特徴づけるエネルギーバンドの持つ特異な縮退構造が顕著な物性現象を生み出しているトポロジカル物質を系統的に解析・探索するフレームワークの構築を目指し、磁性体データベースの構築と磁性体の系統的な解析を実施するための理論手法を開発し、構築データベースに基づく探索から新しいトポロジカル物質を発見した。また、 $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ 、 MnCuAs 、 CoM_3S_6 ($M=\text{Nb}$, Ta)、 $\alpha\text{-Mn}$ 、 NbMnP の第一原理計算による解析に取り組み、実験グループとの共同研究によって、各種物質のトポロジカル物性の発現機構の解明などに貢献した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

近年、物性データベースの構築や機械学習を利用した解析を通して、目的の物性を示す物質を探索する研究が広く行われている。本研究はこれらの発展の促進に向けて、効率的に意義のあるデータベースを生成する理論的な枠組みや機械学習にして与える記述子による表現手法など、解析の基盤となる研究に取り組んでいる。実現確率が高い、高対称な磁気構造を自動的に生成する理論手法や、磁気構造のデータ表現手法の開発を通して、物性データベース解析の基礎理論の発展に貢献した他、実際のデータベース構築・解析を通しての新規トポロジカル物質の提案や各種トポロジカル物質の解析によるトポロジカル物性の機構解明に貢献している。

研究成果の概要（英文）：We have constructed a framework for systematically analyzing and exploring topological materials characterized by specific degeneracy of energy bands contributing physical phenomena by developing theoretical methods to systematically generate and analyze the database of antiferromagnetic topological materials. Through exploration based on the constructed database, we discovered new magnetic topological materials. Additionally, we conducted first-principles calculations on $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$, MnCuAs , CoM_3S_6 ($M=\text{Nb}$, Ta), $\alpha\text{-Mn}$, and NbMnP . Through collaborative research with experimental groups, we contributed to elucidating the mechanisms of topological properties in various materials.

研究分野：物性理論

キーワード：反強磁性 トポロジー 物性データベース

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

バンド構造のトポロジに保護されたバンド縮退(ワイル点・ノーダルライン)や表面状態(ディラック点・フェルミアーク)が源となって、エネルギー損失のない表面電流や巨大な応答現象を発現することが知られるトポロジカル物質の発見のため、国際的に熾烈な研究競争が展開され、非磁性体においては多くのトポロジカル物質が見出されてきた。一方で、応用上特に重要な、磁性体のトポロジカル物質(トポロジカル磁性体)の報告は極めて少ない状況にある。トポロジカル磁性体の発現物性としては、バルク絶縁体の表面電流として生じる量子異常ホール効果や、ワイル点が引き起こす負の磁気抵抗、ノーダルラインが引き起こす巨大熱応答など多彩な輸送・応答現象が知られている。このようなエネルギー損失のない表面電流を活用した低消費電力デバイスや、磁場の干渉に強く高い反応性を示す反強磁性デバイスの研究も展開されており、次世代のスピン트로ニクス・フォトニクスデバイスに大きな変革をもたらす、高い機能性を有するトポロジカル磁性材料が強く望まれている。

2. 研究の目的

- (1) ハイスループット第一原理計算・群論・トポロジ理論に基づく磁性・バンドエンジニアリングによるトポロジカル磁性材料の探索システムの確立。
- (2) (1)の探索システムに基づく新規トポロジカル磁性体の探索。

3. 研究の方法

磁気空間群理論、多極子理論に基づき、反強磁性体を中心とする磁気構造を効率的に解析する理論の開発に取り組む。これらの理論基盤のもとに第一原理計算に基づく電子構造の解析を系統的に実施するシステムを開発し、トポロジカル磁性体の系統的な探索を実施する。

4. 研究成果

(1) 結晶に適合する高対称磁気構造の自動生成手法の開発

実験による磁気構造の同定には高精度な中性子散乱実験の解析が必要になり、結晶構造は決まっているものの、磁気構造が同定されていない磁性体が多数存在する。研究代表者の鈴木らは、磁気空間群理論と多極子理論を用いて、与えられた結晶構造に適合する高対称磁気構造を系統的に生成する理論手法を提案しているが[1]、この理論は結晶周期を破らない磁気構造に限られていた。本研究でこの理論を磁気構造が有限の秩序ベクトルで特徴づけられる、より複雑な磁気構造を扱うことが可能な理論へと拡張し、反強磁性異常ホール効果の出現が報告されている α -Mn や $\text{Co}_2\text{M}_6\text{S}_6$ ($M=\text{Ta}, \text{Nb}$) の磁気構造解析を実施した[2]。 $\text{Co}_2\text{M}_6\text{S}_6$ については実験グループとの共同研究によって磁気構造のさらに詳しい解析を実施し、実験的に観測される反強磁性異常ホール効果が、有限波数の磁気構造の重ね合わせによって得られるトリプル- q 磁気構造のもとで発現していることを明らかにし、磁気構造の立体性を特徴づけるスカラーカイラリティが有限となる磁気構造による、トポロジカルホール効果であることを明らかにしている[3]。

(2) 磁気構造の記述子理論の構築、およびその性能評価のためのベンチマークテストの実施

磁性体の物性を機械学習によって系統的に解析するには、その発現と密接な関わりを持つ磁気構造の情報を、機械学習の記述子として適切な形で与える必要がある。空間座標とベクトル成分を用いた通常の磁気構造の表現では、座標軸や原点の取り方で値が変わってしまうため、座標軸や原点の選択などに依存しない、磁気構造の表現手法が必要である。本研究では原子配置を多次元ベクトルとして表現する理論手法として、原子配置の多次元ベクトル化手法として知られる Smooth Overlap of Atomic Positions (SOAP) の理論[4]を磁気構造へと拡張し、得られる多次元ベクトルから計算される相関係数によって磁気構造の類似性・相違性を定量的に評価することが可能な記述子を構築できることを示した[5]。また、理論の性能評価のためのベンチマークテストとして、反強磁性異常ホール効果を示すことで知られる Mn_3Ir や Mn_3Sn の磁気構造の解析を実施している。この検証により、物性の発現に影響を与える磁気異方性までを含めた磁気構造の正確な判別には、高次の類似関数から導出される部分スペクトル(trispectrum)が必要になることを示している。

(3) 第一原理計算によるトポロジカル磁性体の解析

代表的なワイル半金属磁性体として知られる $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ の In ドープ系の電子状態解析では、特異な線上の縮退構造であるノーダルリングと異常ホール効果・異常ネルンスト効果の相関を明

らかにした[6]。また、ディラック半金属として知られる MnCuAs の研究において、磁場下における異常ホール伝導度成分の影響を示したほか、巨大なスピホール効果が存在することを第一原理計算による解析から示した[7]。

(4) トポロジカル磁性体の電子状態解析による物性発現機構の解明

実験グループとの共同研究によって、各種物質のトポロジカル物性の発現機構の解明などに貢献している[3, 5-7]。実験グループとの共同研究によって、電子状態の理論解析から、トポロジカル磁性体の磁気熱電効果による起電力生成の発見に貢献した[6]。また、実験グループとの共同研究により、 CoM_3S_6 ($M=\text{Nb, Ta}$) において立体的な磁気構造が引き起こすトポロジカルホール効果の発見に貢献し[3, 8]、 NbMnP の反強磁性秩序下における巨大異常ホール効果の発見に貢献している[9]。

(5) 磁気構造データベースの構築と解析による新規反強磁性異常ホール物質の提案

高対称磁気構造の自動生成手法であるクラスター多極子法と第一原理計算を併用した、ハイスループット計算による反強磁性構造の解析システムを開発し、反強磁性異常ホール効果の探索を実施した[10]。この解析をもとに、これまでに発見されている、異常ホール効果を発現する反強磁性体が正しく予測されることを示したほか、実験的な報告のない、多くの新しい候補を提案している。

<引用文献>

- [1] “Multipole expansion for magnetic structures: A generation scheme for symmetry-adapted orthonormal basis set in crystallographic point group”, M.-T. Suzuki, T. Nomoto, R. Arita, Y. Yanagi, S. Hayami, and H. Kusunose, *Phys. Rev. B* **99**, 174407 (2019)
- [2] “Generation of modulated magnetic structures based on cluster multipole expansion: Application to α -Mn and CoM_3S_6 ”, Y. Yanagi, H. Kusunose, T. Nomoto, R. Arita, and M.-T. Suzuki, *Phys. Rev. B* **107**, 014407(2023)
- [3] “Spontaneous topological Hall effect induced by non-coplanar antiferromagnetic order in intercalated van der Waals materials”, H. Takagi, R. Takagi, S. Minami, T. Nomoto, K. Ohishi, Michi-To Suzuki, Y. Yanagi, M. Hirayama, N. D. Khanh, K. Karube, H. Saito, D. Hashizume, R. Kiyonagi, Y. Tokura, R. Arita, T. Nakajima, and S. Seki, *Nature Phys.* **19**, 961 (2023)
- [4] “On representing chemical environments”, A. P. Bartók, R. Kondor, and G. Csányi, *Phys. Rev. B* **87**, 184115 (2013)
- [5] “High-performance descriptor for magnetic materials: Accurate discrimination of magnetic structure”, M.-T. Suzuki, T. Nomoto, E. V. Morooka, Y. Yanagi, and H. Kusunose, *Phys. Rev. B* **108**, 014403(2023)
- [6] “First-principles investigation of magnetic and transport properties in hole-doped shandite compounds $\text{Co}_3\text{In}_x\text{Sn}_{2-x}\text{S}_2$ ”, Y. Yanagi, J. Ikeda, K. Fujiwara, K. Nomura, A. Tsukazaki, and M.-T. Suzuki, *Phys. Rev. B* **103**, 205112 (2021)
- [7] “Spin and anomalous Hall effects emerging from topological degeneracy in the Dirac fermion system CuMnAs ”, V.T.N. Huyen, Y. Yanagi, and M.-T. Suzuki, *Phys. Rev. B* **104**, 035110 (2021)
- [8] “Bipolarity of large anomalous Nernst effect in Weyl magnet-based alloy films”, S. Noguchi, K. Fujiwara, Y. Yanagi, M.-T. Suzuki, T. Hirai, T. Seki, K. Uchida, A. Tsukazaki, *Nature Phys.* **20**, 254 (2024)
- [9] “Large anomalous Hall effect and unusual domain switching in an orthorhombic antiferromagnetic material NbMnP ”, H. Kotegawa, Y. Kuwata, V.T.N. Huyen, Y. Arai, H. Tou, M. Matsuda, K. Takeda, H. Sugawara, M.-T. Suzuki, *npj Quantum Mater.* **8**, **56** (2023)
- [10] “High-throughput calculations of antiferromagnets hosting anomalous transport phenomena”, T. Nomoto, S. Minami, Y. Yanagi, M.-T. Suzuki, T. Koretsune, and R. Arita, *Phys. Rev. B* **109**, 094435 (2024)

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計11件（うち査読付論文 11件 / うち国際共著 3件 / うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Yanagi Yuki, Kusunose Hiroaki, Nomoto Takuya, Arita Ryotaro, Suzuki Michi-To	4. 巻 107
2. 論文標題 Generation of modulated magnetic structures based on cluster multipole expansion: Application to alpha-Mn and CoM3S6	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 014407/1-15
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.107.014407	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Huyen Vu Thi Ngoc, Yanagi Yuki, Suzuki Michi-To	4. 巻 104
2. 論文標題 Spin and anomalous Hall effects emerging from topological degeneracy in the Dirac fermion system CuMnAs	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 035110/1-12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.104.035110	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Yanagi Yuki, Ikeda Junya, Fujiwara Kohei, Nomura Kentaro, Tsukazaki Atsushi, Suzuki Michi-To	4. 巻 103
2. 論文標題 First-principles investigation of magnetic and transport properties in hole-doped shandite compounds Co3InxSn2-xS2	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 205112/1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.103.205112	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Watanabe Haruki, Po Hoi Chun	4. 巻 11
2. 論文標題 Fractional Corner Charge of Sodium Chloride	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review X	6. 最初と最後の頁 041064/1-15
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevX.11.041064	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Takagi H., Takagi R., Minami S., Nomoto T., Ohishi K., Suzuki M.-T., Yanagi Y., Hirayama M., Khanh N. D., Karube K., Saito H., Hashizume D., Kiyonagi R., Tokura Y., Arita R., Nakajima T., Seki S.	4. 巻 19
2. 論文標題 Spontaneous topological Hall effect induced by non-coplanar antiferromagnetic order in intercalated van der Waals materials	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Nature Physics	6. 最初と最後の頁 961 ~ 968
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41567-023-02017-3	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Suzuki Michi-To, Nomoto Takuya, Morooka Eiaki V., Yanagi Yuki, Kusunose Hiroaki	4. 巻 108
2. 論文標題 High-performance descriptor for magnetic materials: Accurate discrimination of magnetic structure	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 014403-1-11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.108.014403	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Hoshino Shintaro, Suzuki Michi-To, Ikeda Hiroaki	4. 巻 130
2. 論文標題 Spin-Derived Electric Polarization and Chirality Density Inherent in Localized Electron Orbitals	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 256801-1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.130.256801	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sudo Kenta, Yanagi Yuki, Takahashi Takeshi, Huynh Kim-Khuong, Tanigaki Katsumi, Kobayashi Kaya, Suzuki Michi-To, Kimata Motoi	4. 巻 108
2. 論文標題 Valley polarization dependence of nonreciprocal transport in a chiral semiconductor	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 125137-1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.108.125137	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kotegawa Hisashi, Kuwata Yoshiki, Huyen Vu Thi Ngoc, Arai Yuki, Tou Hideki, Matsuda Masaaki, Takeda Keiki, Sugawara Hitoshi, Suzuki Michi-To	4. 巻 8
2. 論文標題 Large anomalous Hall effect and unusual domain switching in an orthorhombic antiferromagnetic material NbMnP	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 npj Quantum Materials	6. 最初と最後の頁 56-1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41535-023-00587-2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Noguchi Shun, Fujiwara Kohei, Yanagi Yuki, Suzuki Michi-To, Hirai Takamasa, Seki Takeshi, Uchida Ken-ichi, Tsukazaki Atsushi	4. 巻 20
2. 論文標題 Bipolarity of large anomalous Nernst effect in Weyl magnet-based alloy films	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Nature Physics	6. 最初と最後の頁 254 ~ 260
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41567-023-02293-z	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nomoto Takuya, Minami Susumu, Yanagi Yuki, Suzuki Michi-To, Koretsune Takashi, Arita Ryotaro	4. 巻 109
2. 論文標題 High-throughput calculations of antiferromagnets hosting anomalous transport phenomena	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 094435-1-12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.109.094435	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計13件 (うち招待講演 5件 / うち国際学会 6件)

1. 発表者名 Michi-To Suzuki
2. 発表標題 Partial spectrum descriptors of local magnetic environments
3. 学会等名 GIMRT, REIMEI, IRN Aperiodic joint international workshop (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 鈴木通人
2. 発表標題 強相関電子系の第一原理計算における一電子ポテンシャルと軌道異方性の研究
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Michi-To Suzuki
2. 発表標題 Partial spectrum descriptors of local magnetic environments
3. 学会等名 10th International Conference on Aperiodic Crystals (Aperiodic 2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 鈴木通人
2. 発表標題 準結晶における対称性適合磁気構造の研究
3. 学会等名 新学術領域ハイパーマテリアル 第8回領域Web会議
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 鈴木通人
2. 発表標題 Magnetic materials design by representation theory & first-principles calculation,
3. 学会等名 東京大学物性研究所理論セミナー (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 鈴木通人
2. 発表標題 準結晶における対称性適な磁気構造の生成に向けた研究
3. 学会等名 新学術領域ハイパーマテリアル 第6回領域Web会議
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Vu Thi Ngoc Huyen, Yuki Yanagi, Michi-To Suzuki
2. 発表標題 First-principles calculations of Piezomagnetic coefficients in antiferromagnets Mn ₃ AN (A=Ni, Cu, Zn, Ga, Ge) and Mn ₃ X (X=Sn, Ge)
3. 学会等名 International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2023 (SCES2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Michi-To Suzuki
2. 発表標題 First-principles analysis of anomalous transport phenomena and piezomagnetic effect in antiferromagnets
3. 学会等名 Topology, spin-orbit interactions and superconductivity in strongly correlated quantum materials under extreme conditions (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Michi-To Suzuki
2. 発表標題 Exploring Functional Antiferromagnetic Materials with Magnetic Structure Screening and First-Principles Calculation
3. 学会等名 Summit of Materials Science 2023 and GIMRT User Meeting 2023 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 鈴木通人
2. 発表標題 磁性体の高性能な記述子の研究：磁気構造の精密な識別
3. 学会等名 計算科学と情報学を用いた材料開発の新展開-2023（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 鈴木通人, 野本拓也, Eiaki V. Morooka, 柳有起, 楠瀬博明
2. 発表標題 磁性体の高性能な記述子の研究：磁気構造の精密な識別
3. 学会等名 第47回日本磁気学会学術講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 鈴木通人
2. 発表標題 磁性体の巨大輸送現象における時間反転対称性の破れたベリー曲率分布の解析
3. 学会等名 トピカルミーティング「アシンメトリ量子物質の開発 -現状と展望-
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 鈴木通人
2. 発表標題 クラスター多極子法と第一原理計算による反強磁性体の物性探索
3. 学会等名 日本物理学会2024年春季大会シンポジウム講演（国際学会）
4. 発表年 2024年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分担 者	渡辺 悠樹 (Watanabe Haruki) (20785323)	東京大学・大学院工学系研究科(工学部)・准教授 (12601)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
米国	Massachusetts Institute of Technology			
フィンランド	Aalto University			