

令和 6 年 4 月 7 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(A)（一般）

研究期間：2021～2023

課題番号：21H04437

研究課題名（和文）マルチポロニクス第一原理物質設計

研究課題名（英文）Ab initio materials design of multipolonics

研究代表者

有田 亮太郎（Arita, Ryotaro）

東京大学・先端科学技術研究センター・教授

研究者番号：80332592

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 32,700,000円

研究成果の概要（和文）：クラスター多極子理論を反強磁性体の磁気構造予測に応用し、第一原理ハイスループット計算と組み合わせて、機能性反強磁性体の探索・設計を行った。三つの鉄、マンガン、コバルトの化合物については実際に合成が行われ、異常横伝導を示すことが確認された。このほか、反強磁性体における電流による磁化反転やトンネル磁気抵抗効果の理論研究が行われた。また、スピン軌道相互作用による拘束条件を考慮しないスピン空間群に注目し、非自明な磁気構造によって駆動される物性を簡便に同定する手法を開発した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

磁気転移を起こすことが知られている物質は数多くあるものの、磁気構造まで明らかになっている物質は限られている。実験的にも磁気構造の決定は難しい問題であるし、理論的にも与えられた結晶構造に対して、どのような磁気構造が実現するかを予言するには膨大な計算コストがかかる。本研究では効率的な磁気構造予測の方法を開発し、第一原理ハイスループット計算と組み合わせることで異常横伝導を示す反強磁性体の探索に成功した。この取り組みは今後社会に変革をもたらす磁性体の設計につながる重要な一歩となることが期待される。

研究成果の概要（英文）：We applied cluster multipole theory to predict the magnetic structure of antiferromagnetic materials and combined it with first-principles high-throughput calculations to explore and design functional antiferromagnetic materials. Actual synthesis was performed on three compounds of iron, manganese, and cobalt, and it was confirmed that they indeed exhibit anomalous transverse conductivity. In addition, theoretical studies on switching of magnetic order by electric current and tunneling magnetoresistance in antiferromagnetic materials were conducted. Furthermore, by focusing on spin space groups that exclude the constraints imposed by spin-orbit interaction, we developed a method to identify properties driven by non-trivial magnetic structures conveniently.

研究分野：物性理論

キーワード：第一原理計算 磁気構造予測 機能磁性体探索 異常ホール効果 異常ネルンスト効果 スピン結晶群
トンネル磁気効果

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

超スマート社会の実現に向けて情報通信や人工知能技術の高度化への要求が高まる中、超高速メモリー、超高感度センサーといった革新的デバイスにつながる新物質や、省・創・畜エネルギーを通して環境・エネルギー革命をもたらす新物質の探索・合成が喫緊の課題になっている。特に強磁性体は、磁化に比例した巨大応答をもつこと、磁気状態の制御と読み取りが比較的容易であることといった特長があり、これまでスピントロニクス分野で幅広い研究がなされてきた。しかしながら最近、デバイス要素のさらなる微細化とデータ処理の高速化の可能性がある反強磁性体に大きな注目が集まってきている。

そのような反強磁性体の中で最も顕著な例は 2015 年に中辻らによって巨大な異常ホール効果が発見された Mn_3Z ($Z=Sn, Ge$) である(図 1、引用文献 1,2)。通常、異常ホール効果は磁化の大きな強磁性体で発現するが、 Mn_3Z は反強磁性体で一樣磁化はほとんどゼロであるため、磁化の大きさで巨大異常ホール効果を説明することはできない。そこで申請者らは「クラスター多極子」という独自の量を導入し、これがホール係数の大きさを記述する秩序変数になっていることを示した(引用文献 3)。すなわち、 Mn_3Z においては、磁化(クラスター双極子)はゼロであるがクラスター八極子が有限であり、八極子の偏極が異常ホール効果を誘起すると理解できる(図 1 参照)。この八極子は強磁性体におけるスピンの役割を果たし、ホール係数の符号に応じて正負の二値の情報を持つことができる。その一方 Mn_3Z は反強磁性体であるため強磁性体と異なり漏れ磁場がなく高集積化が可能で、スピンドイナミクスエネルギースケールが高いため高速応答も期待できる。

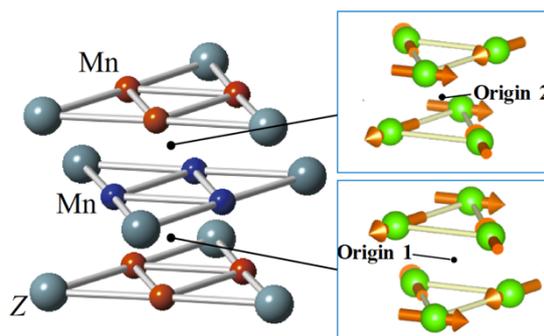


図 1. Mn_3Sn の結晶構造(左図)と磁気構造及びそこで定義されたクラスター多極子(右図)

2. 研究の目的

Mn_3Z はデバイス応用を考える上で際立って優れた物性を示すことがわかったが、これに匹敵する反強磁性体の探索が難航していた。一方、申請者らは、1400 種類の強磁性体に対するハイスループット計算により、 Fe_3Al と Fe_3Ga において巨大異常ネルンスト効果を実現することを見出している(引用文献 4)。この「無数の強磁性体の中に埋もれた高機能磁性体の発見」の成功をうけて、本研究課題では Mn_3Z を越える反強磁性材料の系統的、戦略的な探索に挑戦した。

高機能反強磁性体の探索は、電荷(モノポール)に着目したエレクトロニクス、スピン(双極子)に着目したスピントロニクスに続く、マルチポロニクスの確立につながると期待される。そこで本研究課題では、「マルチポロニクスはどの物質で成立するか、従来のエレクトロニクス、スピントロニクスを凌駕できるか」という学術的問いを設定しこれに解答を与えることを目指した(図 2)。



図 2. 本研究課題の学術的「問い」の概念図

3. 研究の方法

今日、結晶構造については信頼性の高いデータベースが複数存在し、そこから 20 万以上の物質の情報を比較的容易に手に入れることができる。特に非磁性体であれば、第一原理電子状態計算を自動実行し、その電子状態についてトポロジカルな特性に基づいた分類を行うといったことも可能で、実際トポロジカル物質のカタログなども作られている。一方、磁気構造については結晶構造のそれに匹敵する信頼性のある大規模なデータベースがない。これは結晶構造に比べて磁気構造を実験的に決定することがはるかに非自明で手間がかかることに由来する。そこで本研究課題では結晶構造の情報だけから、磁気構造を正確に予測することから始める。しかしながら、局所安定となりうる磁気構造を網羅するリストを生成し、それぞれのエネルギーを調べ尽くすことは自明な問題ではない。

この問題について、最近申請者らはクラスター多極子理論に基づく方法論開発を行った（引用文献5, 図3）。この方法では与えられた結晶構造に対して仮想クラスターを導入し、そのクラスターの上で多極子を系統的に生成する。この方法論によって与えられた物質について、そこで実現する可能性のある磁気構造をリストすることができる。申請者らは最近 100 種類あまりのノンコリニア磁性体についてベンチマーク計算し、ほぼすべての磁性体について実験構造に近い局所安定解を探索できることを示した(文献6)。本研究課題ではこのベンチマーク計算を大規模化、自動化した。すなわち、結晶構造のデータベースから結晶構造の情報を自動取得し、磁気構造を自動生成したあと、そのエネルギーを自動計算することで実際に実現する磁気構造の予測を行った。

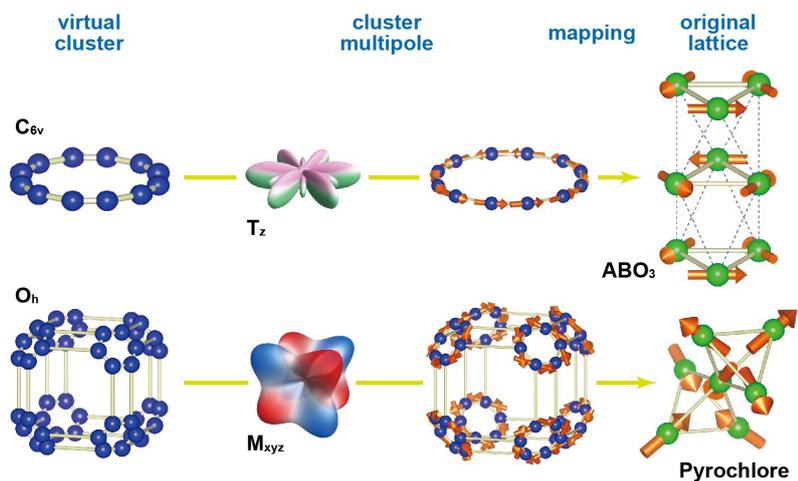


図 3. 仮想クラスターを使った多極子磁気構造の自動生成

本研究課題においては、ターゲット材料がもつべき特徴として、磁化がゼロであるにもかかわらず、応答関数の構造が強磁性体に似ていることと設定した（そうでなければ磁気状態の読み取りが著しく困難になる）。特に巨大な異常横伝導は応用範囲が広い。例えば異常ネルンスト効果による熱電変換はゼーベック効果による熱電変換と異なり、温度差と垂直方向に起電力が生じるため(図4a, c 参照)、大面積化やフレキシブル化が容易で高効率発電が行える(図4b, d 参照)。クラスター多極子は磁気構造の対称性の情報を含むため、応答関数の構造と一対一対応がある。従ってクラスター多極子の既約表現を見ればマルチポロニクス材料の候補物質のリストを作ることができる。

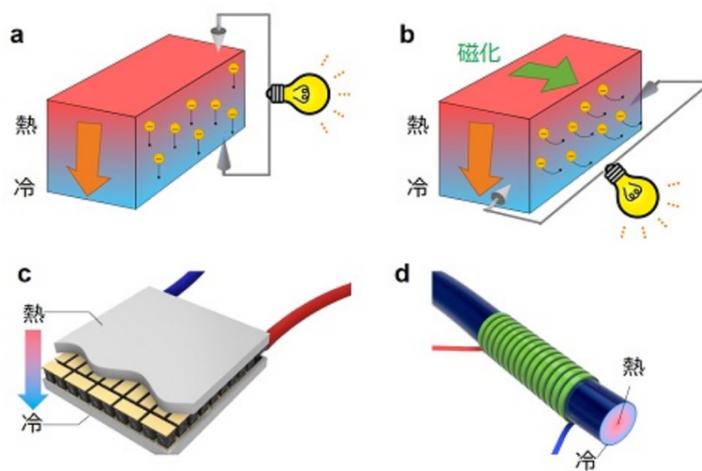


図 4. ゼーベック効果(a)とネルンスト効果(b)とそれを使った熱電変換デバイスの概念図。

4. 研究成果

本研究では、物質材料研究機構で構築されているデータベース Atomworks にリストされている磁性体のリストから、磁気転移温度の高く、ユニットセル中の磁性元素の数が少ない物質を約 200 種類選び、その磁気構造予測を行った。その結果、金属であり、かつ異常横伝導が有限でスピントロニクスなど応用に使える物質が 8 種類見つかった(引用文献7)。その中で、FeS, MnAlPt(図5)については東京大学の実験グループによって実際に異常横伝導が生じることが確認されている。

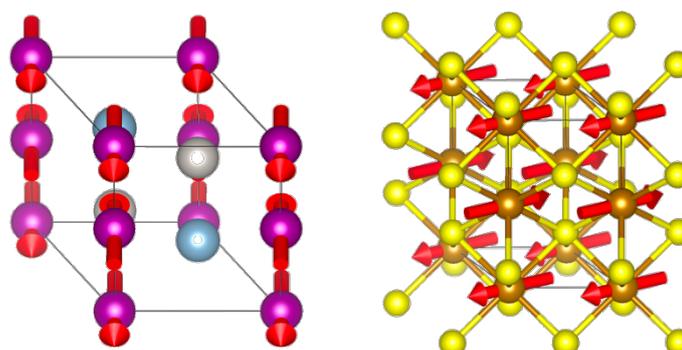


図 5. 異常横伝導を示すことがわかった FeS と MnAlPt

以上の物質探索では、磁気秩序の形成によりユニットセルのサイズが変わらないことが想定されていたが、引用文献8ではユニットセルが拡大する場合の考察がなされた。このアプローチは引用文献9における、Coを層間挿入したTaS₂およびNbS₂の磁気構造決定に活用された(図6)。

本研究では物質探索のほか、反強磁性体の応用を視野にいたれた研究も行われた。引用文献10, 11ではトンネル磁気抵抗効果についての研究がなされた。引用文献12では電流によって反強磁性体のスピン構造が制御できることを示している。

反強磁性体の異常横伝導については、スピン軌道相互作用に由来するケースと、非自明な磁気構造に由来するケースがある。現実の物質ではスピン軌道相互作用が必ず存在するため、異常横伝導がどちらの起源に由来するかを決定することは難しい。一方、理論計算では仮想的にスピン軌道相互作用をゼロにした場合の考察を行って磁気構造に由来するかどうかを調べることができる。その際、磁気構造の対称性に注目し群論に基づいた解析を行うことが重要なステップになる。磁性体の群論に基づいた解析については、通常磁気点群、磁気空間群に基づいた解析がなされるが、スピン軌道相互作用をゼロにした場合はスピン結晶群の解析をする必要がある。引用文献13では与えられた磁気構造からスピン結晶群を特定するコードを開発し、引用文献14ではそれに基づいて応答関数を計算する方法論開発を行った。その結果、顕著な例として、文献9で磁気構造が決定されたCoを層間挿入したTaS₂およびNbS₂の異常横伝導は純粋に磁気構造に由来するトポロジカルホール効果であることがわかった。

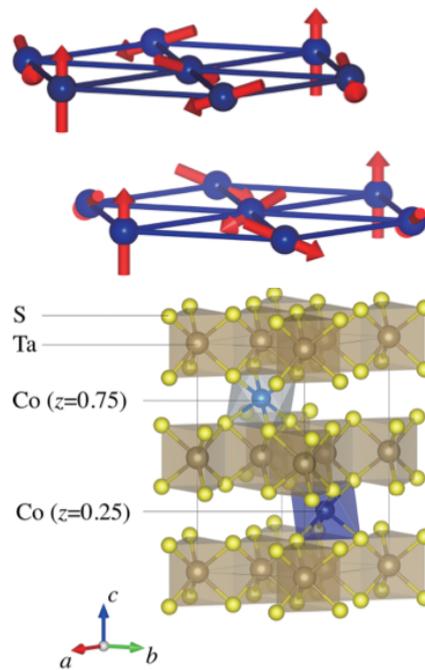


図6. Coを層間挿入したTaS₂およびNbS₂の磁気構造と結晶構造

<引用文献>

- ① S. Nakatsuji *et al.*, Nature 527, 212-215(2015)
- ② N. Kiyohara *et al.*, Phys. Rev. Applied 5, 064009 (2016)
- ③ M.-T. Suzuki, *et al.*, Phys. Rev. B 95, 094406 (2017)
- ④ A. Sakai, *et al.*, Nature 581, 53 (2020)
- ⑤ M.-T. Suzuki, *et al.*, Phys. Rev. B 99, 174407 (2019)
- ⑥ M. Huebsch *et al.*, Phys. Rev. X 11 0111031 (2021)
- ⑦ T. Nomoto, *et al.*, Phys. Rev. B 109 094435 (2024)
- ⑧ Y. Yanagi, *et al.*, Phys. Rev. B 107 014407 (2023)
- ⑨ H. Takagi *et al.*, Nature Physics 19 961 (2023)
- ⑩ X. Chen *et al.*, Nature 613 490 (2023)
- ⑪ K. Tanaka *et al.*, Phys. Rev. B 107 214442 (2023)
- ⑫ T. Higo, *et al.*, Nature 607 474(2022)
- ⑬ K. Shinohara *et al.*, Acta Cryst. A80 94(2024)
- ⑭ H. Watanabe *et al.*, Phys. Rev. B 109 094438 (2024)

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計15件（うち査読付論文 15件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Ito Naohiro, Nomoto Takuya, Kobayashi Koji, Mankovsky Sergiy, Nomura Kentaro, Arita Ryotaro, Ebert Hubert, Koretsune Takashi	4. 巻 105
2. 論文標題 Wannier-based implementation of the coherent potential approximation with applications to Fe-based transition metal alloys	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 125136/1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.105.125136	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 Huebsch M-T, Nomura Y, Sakai S, Arita R	4. 巻 34
2. 論文標題 Magnetic structures and electronic properties of cubic-pyrochlore ruthenates from first principles	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 194003 ~ 194003
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-648X/ac513c	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 Matsui Akira, Nomoto Takuya, Arita Ryotaro	4. 巻 104
2. 論文標題 Skyrmion-size dependence of the topological Hall effect: A real-space calculation	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 174432/1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.104.174432	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 Watanabe Hikaru, Shinohara Kohei, Nomoto Takuya, Togo Atsushi, Arita Ryotaro	4. 巻 109
2. 論文標題 Symmetry analysis with spin crystallographic groups: Disentangling effects free of spin-orbit coupling in emergent electromagnetism	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 094438/1-25
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.109.094438	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 -

1. 著者名 Iguchi Junta, Watanabe Hikaru, Murakami Yuta, Nomoto Takuya, Arita Ryotaro	4. 巻 109
2. 論文標題 Bulk photovoltaic effect in antiferromagnet: Role of collective spin dynamics	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 064407/1-17
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.109.064407	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 Shinohara Kohei, Togo Atsushi, Watanabe Hikaru, Nomoto Takuya, Tanaka Isao, Arita Ryotaro	4. 巻 80
2. 論文標題 Algorithm for spin symmetry operation search	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Acta Crystallographica Section A Foundations and Advances	6. 最初と最後の頁 94 ~ 103
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1107/S2053273323009257	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 Wang Meng, Tanaka Katsuhiro, Sakai Shiro, Wang Ziqian, Deng Ke, Lyu Yingjie, Li Cong, Tian Di, Shen Shengchun, Ogawa Naoki, Kanazawa Naoya, Yu Pu, Arita Ryotaro, Kagawa Fumitaka	4. 巻 14
2. 論文標題 Emergent zero-field anomalous Hall effect in a reconstructed rutile antiferromagnetic metal	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 8240/1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-023-43962-0	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 Tanaka Katsuhiko, Nomoto Takuya, Arita Ryotaro	4. 巻 107
2. 論文標題 Local density of states as a probe for tunneling magnetoresistance effect: Application to ferrimagnetic tunnel junctions	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 214442/1-12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.107.214442	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 Hatanaka Tatsuto, Nomoto Takuya, Arita Ryotaro	4. 巻 107
2. 論文標題 Magnetic interactions in intercalated transition metal dichalcogenides: A study based on ab initio model construction	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 184429/1-12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.107.184429	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, Arita Ryotaro	4. 巻 133
2. 論文標題 Ab initio exploration of short-pitch skyrmion materials: Role of orbital frustration	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 150901/1-12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0141628	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 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 Chen Xianzhe, Higo Tomoya, Tanaka Katsuhiko, Nomoto Takuya, Tsai Hanshen, Idzuchi Hiroshi, Shiga Masanobu, Sakamoto Shoya, Ando Ryoya, Kosaki Hidetoshi, Matsuo Takumi, Nishio-Hamane Daisuke, Arita Ryotaro, Miwa Shinji, Nakatsuji Satoru	4. 巻 613
2. 論文標題 Octupole-driven magnetoresistance in an antiferromagnetic tunnel junction	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Nature	6. 最初と最後の頁 490 ~ 495
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41586-022-05463-w	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, 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 CoMnSi	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 Higo Tomoya, Kondou Kouta, Nomoto Takuya, Shiga Masanobu, Sakamoto Shoya, Chen Xianzhe, Nishio-Hamane Daisuke, Arita Ryotaro, Otani Yoshichika, Miwa Shinji, Nakatsuji Satoru	4. 巻 607
2. 論文標題 Perpendicular full switching of chiral antiferromagnetic order by current	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Nature	6. 最初と最後の頁 474 ~ 479
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41586-022-04864-1	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24件 (うち招待講演 11件 / うち国際学会 8件)

1. 発表者名 松井彬, 野本拓也, 有田亮太郎
2. 発表標題 反強磁性スキルミオン相における輸送現象の数値計算を用いた研究
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 畑中樹人, 野本拓也, 有田亮太郎
2. 発表標題 層間挿入された遷移金属ダイカルコゲナイドの第一原理計算
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 伊東直洋, 野本拓也, 小林浩二, Sergiy Mankovsky, 野村健太郎, 有田亮太郎, Hubert Ebert, 是常隆
2. 発表標題 Wannier関数を用いたCPA計算の実装
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高木寛貴, 高木里奈, 齋藤開, Nguyen Duy Khanh, 大石一城, 鬼柳亮嗣, 野本拓也, 見波将, 鈴木通人, 柳有起, 平山元昭, 軽部皓介, 橋爪大輔, 十倉好紀, 有田亮太郎, 中島多朗, 関真一郎
2. 発表標題 異常ホール反強磁性体CoM ₃ S ₆ (M=Nb, Ta)の偏極中性子散乱による磁気構造解析
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高木寛貴, 高木里奈, 中島多朗, 齋藤開, 野本拓也, 見波将, 鈴木通人, 柳有起, 平山元昭, カーン・ドゥイ・ヌイエン, 軽部皓介, 橋爪大輔, 十倉好紀, 有田亮太郎, 関真一郎
2. 発表標題 キラルな反強磁性体CoTa ₃ S ₆ における巨大な異常ホール効果
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 有田亮太郎
2. 発表標題 機能反強磁性体に対するクラスター多極子理論
3. 学会等名 応用電子物性分科会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Ryotaro Arita
2. 発表標題 Cluster multipole theory for functional antiferromagnets
3. 学会等名 International Symposium on Frontier of Materials Science (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ryotaro Arita
2. 発表標題 Ab initio material search for functional antiferromagnets based on cluster multipole theory
3. 学会等名 RIKEN-Tsinghua-Kavli One-day Workshop on Condensed Matter Physics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ryotaro Arita
2. 発表標題 Recent advances in DFT calculations of topological magnetic materials
3. 学会等名 Topology in Magnetic Materials (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ryotaro Arita
2. 発表標題 Ab initio magnetic structure prediction for topological magnets
3. 学会等名 APS March Meeting 2023 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Ryotaro Arita
2. 発表標題 Exploration of short-pitch skyrmion materials based on first-principles modeling
3. 学会等名 International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2023 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Ryotaro Arita
2. 発表標題 Magnetic structure prediction and its application to high-throughput search for functional magnets
3. 学会等名 CCP2023 - 34th IUPAP Conference on Computational Physics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Ryotaro Arita
2. 発表標題 Disentangling spin-orbit-free effects in emergent electromagnetism: Symmetry analysis with spin crystallography groups
3. 学会等名 The Asia-Pacific workshop on strongly correlated systems (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Ryotaro Arita
2. 発表標題 High-throughput material search for functional antiferromagnets
3. 学会等名 QUAST (Forschergruppe 5249) colloquium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 有田亮太郎
2. 発表標題 機能性強磁性体の物質探索
3. 学会等名 Kyutech 物性グループセミナー「輸送現象と物理」(招待講演)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 肥後友也, Xianzhe Chen, 田中克大, 野本拓也, Hanshen Tsai, 井土宏, 志賀雅巨, 坂本祥哉, 安藤遼哉, 甲崎秀俊, 松尾拓海, 浜根大輔, 有田亮太郎, 三輪真嗣, 中辻知
2. 発表標題 カイラル反強磁性体Mn ₃ Sn磁気トンネル接合素子における磁気抵抗効果
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 田中克大, Xianzhe Chen, 肥後友也, 野本拓也, Hanshen Tsai, 井土宏, 志賀雅巨, 坂本祥哉, 安藤遼哉, 甲崎秀俊, 松尾拓海, 浜根大輔, 有田亮太郎, 三輪真嗣, 中辻知
2. 発表標題 カイラル反強磁性体Mn ₃ Snを用いたトンネル磁気接合素子におけるトンネル磁気抵抗効果の第一原理計算
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 有田亮太郎
2. 発表標題 トポロジカル磁性体の第一原理探索
3. 学会等名 日本物理学会（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 渡邊光，篠原航平，野本拓也，東後篤史，有田亮太郎
2. 発表標題 物性応答に対するスピン軌道相互作用の役割：スピン群対称性の観点から
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 田中克大，野本拓也，有田亮太郎
2. 発表標題 反強磁性体を用いたトンネル磁気抵抗効果の理論計算
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 井口純太，渡邊光，村上雄太，野本拓也，有田亮太郎
2. 発表標題 光起電力効果におけるスピンの集団励起モードの影響
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 畑中樹人, 野本拓也, 有田亮太郎
2. 発表標題 スピクラスター展開を用いた古典スピン模型の第一原理的導出
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 服部航平, 渡邊光, 野本拓也, 有田亮太郎
2. 発表標題 実時間シミュレーションによる電荷スピン結合系の光学応答の研究
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 大岩陸人, 印田朱音, 速水賢, 野本拓也, 有田亮太郎, 楠瀬博明
2. 発表標題 多極子基底を用いた対称性適合Closestワニ工模型の構築
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2023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	鈴木 通人 (Suzuki Michi-To) (10596547)	東北大学・金属材料研究所・准教授 (11301)	

6. 研究組織（つづき）

	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	袖山 慶太郎 (Sodeyama Keitaro) (40386610)	国立研究開発法人物質・材料研究機構・統合型材料開発・情報基盤部門・グループリーダー (82108)	
研究分担者	是常 隆 (Koretsune Takashi) (90391953)	東北大学・理学研究科・教授 (11301)	

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