# 科研費

# 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 30 年 5 月 31 日現在

機関番号: 1 2 6 0 1 研究種目: 若手研究(B) 研究期間: 2015~2017

課題番号: 15K17694

研究課題名(和文)5d電子系におけるジャロシンスキー・守谷相互作用の微視的模型からの導出とその応用

研究課題名(英文)Derivation of Dzyaloshinsky-Moriya interaction on 5d electron systems based on microscopic model and its application

#### 研究代表者

松浦 弘泰 (Matsuura, Hiroyasu)

東京大学・大学院理学系研究科(理学部)・助教

研究者番号:40596607

交付決定額(研究期間全体):(直接経費) 1,800,000円

研究成果の概要(和文):5d電子系におけるジャロシンスキー・守谷相互作用の導出とそれに関連した現象の理論的研究を行い、以下の結果を得た。(1)5d1電子系における多極子間のジャロシンスキー・守谷相互作用を導出した。(2)キラル磁性体CsCuCl3における高圧下、c軸に平行に磁場を印加した時の磁気相図を解明した。(3)磁気量子臨界点近傍での反対称スピン軌道相互作用の繰り込み効果を明らかにした。(4)強磁性体と重金属界面において、RKKY相互作用を用いてジャロシンスキー守谷相互作用を導出した。

研究成果の概要(英文): We studied the derivation of Dzyaloshinsky-Moriya interaction on 5d electron systems and the phenomena related with Dzyaloshinsky-Moriya interaction.(1) We derived the Dzyaloshinsky-Moriya interaction between multipoles of 5d electronic systems.(2)We solved the magnetic phase diagram of CsCuCl3 under the high pressure and the magnetic field parallel to c axis. (3) We clarified the renormalization effect of antisymmetric spin-orbit interaction near the magnetic quantum critical point.(4) We derived the Dzyaloshinsky-Moriya interaction based on RKKY interaction at the interface of ferromagnet and heavy metal heterostructure.

研究分野: 物性理論

キーワード: ジャロシンスキー・守谷相互作用 キラル磁性体 ラシュバ効果 スピン軌道相互作用

### 1. 研究開始当初の背景

近年、Sr<sub>2</sub>IrO<sub>4</sub> の Ir イオンや NaOsO<sub>3</sub> の Os イオンなど 5d 電子を含んだ系では、Fe イオンや Mn イオンなど 3d 電子系では見られなかった、新奇の金属絶縁体転移や磁気秩序などが実現している点で世界的に注目を集めている。この新奇の現象を理解するには、"電子間クーロン相互作用と同程度にスピン軌道相互作用が存在する"という 5d 電子系特有の状況を把握する必要がある。

5d 電子系では、スピンと軌道の自由度が絡みあった"多極子"の自由度が生じることが知られている。例えば、 $t_{2g}$  軌道に 5d 電子を3つもつ Os イオンでは、この時、多極子(四極子や八極子)自由度が現れる。4f 電子においては、四極子や八極子の自由度が現れることはよく知られている。よって、5d 電子化合物でも 4f 電子系と類似した多極子による現象が引き起こされる可能性がある。

5d イオン上のスピン間に相互作用が生じることは 3d 電子系と同様であるが、上記で述べた 5d 電子系の状況下では、多極子間の相互作用が生じる可能性がある。また、磁気モーメント(双極子)間の相互作用については、スピン軌道相互作用の大きさや、配位子の形状(点共有、面共有など)によっても、その符号や異方性が劇的に変化することが有り得ることがわかってきている。しかし、多極子間の相互作用でのこれらの効果については、議論されていない。

さらに、3d電子系化合物では、配位子が歪み、結晶がある種の対称性を欠如する時 "磁気モーメント(双極子)の向きを傾ける相互作用"である"ジャロシンスキー・守谷相互作用"が生じる。しかし、5d電子系での多極子間のジャロシンスキー・守谷相互作用は議論されていない。また、多極子間のジャロシンスキー守谷相互作用により新しいタイプの磁性状態が期待されるが議論されていない。

#### 2.研究の目的

そこで当初の研究目的は、

- (1)5d 電子系における多極子間のジャロ シンスキー・守谷相互作用の導出
- (2)多極子間ジャロシンスキー守谷相互 作用を用い5d電子系多極子秩序の開拓 であった。

### 3.研究の方法

申請者はこれまで 5d 電子系での研究経験があり、その際に用いた方法(有効模型の導出を行い、数値対角化や摂動計算を実行し、物理量などの計算・解析を行う)などを用いた。

また、共同研究者らと定期的な議論を通して 研究の方法論や方向性を決めた。

#### 4. 研究成果

以下の研究結果を得た。

(1)6d<sup>1</sup>電子系での多極子間のジャロシンスキー・守谷相互作用:

5d 軌道からなる  $t_{2g}$ 軌道に 1 つの電子が占有した状態を仮定し、その 5d 電子が保有する多極子 (双極子、四極子、八極子)間のジャロシンスキー・守谷相互作用のスピン軌道相互作用依存性を解析した。その結果、多極子間の DM 相互作用の存在を明らかにした。さらに、格子のゆがみの形状により、そのスピン軌道相互作用依存性が顕著に異なることを明らかにした。

(2) CsCuCl₃の磁場下(磁場が c 軸に平行な時)・高圧下で相図の解明:

最近、CsCuCI3の高圧下・高磁場下での磁化測定(磁場が c 軸に平行な時)から、Cu のスピン構造がこれまで発見されていないup-up-down (uud)構造であることが提案された。そこで、常圧下・高磁場下での解析に優れた二国・斯波らの理論研究を発展させ、高圧下・高磁場下での理論研究を展開した。その結果、高圧下で実験で提案されたものと同じ、uud 構造が現れることを明らかにした。さらに高圧下では、coplanar Y 構造が現れることを提案した。

(3)磁気量子臨界点近傍での反対称スピン 軌道相互作用の繰り込み効果:

量子臨界点近傍での反対称スピン軌道相互作用のくりこみ効果に関しての議論を行い、 強磁性量子臨界点近傍では反対称スピン軌 道相互作用は大きく繰り込まれること、反強 磁性量子臨界点では小さく繰り込まれることを明らかにした

(4)強磁性体と重い原子を含んだ金属界面 におけるジャロシンスキー・守谷相互作用の 導出・

5d 電子を含んだ重い金属と強磁性体界面には、ラシュバ効果が生じることが知られている。このラッシュバ効果を起源として、強磁性体中のスピン間にはジャロシンスキー

・守谷相互作用が生じることが知られているが、その相互作用とラシュバ効果の関係本語には調べられていなかった。そこで、本研究では、金属中の局在スピン間の相互作用を応用することで、強性体中のスピン間のジャロシンスキー・強谷相互作用を導出した。その結果、ラシュバ相互作用が小さな時、ジャロシンスキー・守谷相互作用はラシュバ相互作用と伝導電子ンスバーが同程度の時、ジャロシンスが同程度の時、ジャロシンスが開互作用がさらに大きくなると、ジャロシンスキー守谷相互作用が小さくなることを示した。

当初予期していなかったが、関連分野で下記 の成果を得ることができた。 (5)パイエルス位相の補正を含めた軌道磁 化率:

固体中の軌道磁化率を求める方法として、グリーン関数を用いた方法と、パイエルス位相による方法とが知られている。しかし、パイエルス位相による方法では、その導出過程に近似が入るため、結果として、グリーン関数を用いて導出された軌道磁化率とは異なることが知られていた。この違いの起源を明らかにするため、パイエルス位相導出の際に、近似を行うことなく計算を進めて軌道磁化率を導出し、グリーン関数の方法から導出された軌道磁化率と一致することを明らかにした。

# (6)励起子絶縁体の磁化率:

近年、Ta<sub>2</sub>NiSe<sub>2</sub>は励起子絶縁体の候補物質と して注目を集めている。Ta<sub>2</sub>NiSe<sub>5</sub>のバンド構 造は、Taの5d軌道の伝導体とNiの3d軌道 の価電子帯からなる半導体であり、これらの 軌道の役割と励起子絶縁体の関係性に興味 を持たれている。さらに、Ta2NiSe5の磁化率 の温度変化は励起子絶縁体の軌道磁性に由 来すると考えられていたが、最近まで理論的 に未解決だった。そこで、軌道磁化率の温度 依存性の起源を明らかにするため、磁場下で 電子とホールが励起子絶縁体を構成する二 軌道模型を構築し、平均場近似を用いて解析 した。また、磁場下での問題を扱うために、 (5)で明らかにした方法を用い、軌道磁化 率を導出した。解析の結果、励起子絶縁体転 移に伴い、軌道磁化率が負に大きくなること が分かった。

# 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 9 件)

- (1)M.Hosoi, <u>H. Matsuura</u> and M. Ogata "New magnetic phases on chiral magenet CsCuCl<sub>3</sub> under high pressures" Accepted for publication in J. Phys. Soc. Jpn, (查読有)
- (2)I.Tateishi,  $\underline{H.Matsuura}$  "Face centered cubic SnSe as a  $Z_2$  trivial Dirac nodal line material" Accepted for publication in J. Phys. Soc. Jpn,. (查読有)
- (3) 小形正男、<u>松浦弘泰</u> "固体中電子の磁性 再考:大統一理論" 固体物理(アグネ技術センター) Vol.52 (2017 年 10 月号) P.521-P.537 (査読有)
- (4) <u>H. Matsuura</u> and M. Ogata "Theory of Orbital Susceptibility on Excitonic Insulator" J.Phys. Soc. Jpn. 85 (2016)

093701-1-4 (査読有)

http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.85.09370

- (5) <u>H. Matsuura</u> and M. Ogata "Theory of Orbital Susceptibility in the Tight-Binding Model: Corrections to the Peierls Phase"
- J.Phys. Soc. Jpn. 85 (2016) 074709-1-6 (査 読有)

https://journals.jps.jp/doi/10.7566/JPS J.85.074709

(6). T.Shibuya, <u>H. Matsuura</u> and M. Ogata "Magnetic Chirality Induced from Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida Interaction at an Interface of a Ferromagnet/Heavy Metal Heterostructure J. Phys. Soc. Jpn. **85** (2016) 114701-1-4

https://journals.jps.jp/doi/abs/10.7566 /JPSJ.85.114701

- (7) N. Yoshioka, <u>H. Matsuura</u>, and M. Ogata "Quantum Hall Effect of Massless Dirac Fermions and Free Fermions in Hofstadter's Butterfly"
- J. Phys. Soc. Jpn. 85, (2016) 064712-1-6 (査読有)

https://journals.jps.jp/doi/abs/10.7566 /JPSJ.85.064712

# (8) 松浦弘泰、三宅和正

(査読有)

- "スピン軌道相互作用と多体効果の協奏" 固体物理(アグネ技術センター) 査読有 Vol.51 (2016) 109-125
- (9) Y. Fujimoto1, K. Miyake, and <u>H. Matsuura</u> "Deformation of the Fermi Surface and Anomalous Mass Renormalization by Critical Spin Fluctuations through Asymmetric Spin-Orbit Interaction"
- J. Phys. Soc. Jpn. 84, (2015) 043702-1-5 (査読有)

https://journals.jps.jp/doi/abs/10.7566 /JPSJ.84.043702

# [学会発表](計16件)

- (1) 細井將史、溝口知成、檜原太一、<u>松浦弘</u> 泰、小形正男
- "5d1 電子系における四極子間 Dzyaloshinskii-Moriya 相互作用" 日本物理学会、東京理科大学 (2018年)

# (2)H. Matsuura

"Theory of Charge Kondo Effect due to Valence skipping Phenomenon"

The 6<sup>th</sup> Toyota RIKEN International Workshop 2017 (2017 年)

### (3) H. Matsuura

"Theory of Orbital Susceptibility in the Tight Binding model: Correction to the Peierls Phase and Application to Excitonic Insulator"

Trend in Theory of Correlated Materials (TTCM2017) (2017年)

#### (4) H. Matsuura

"Theory of Orbital Susceptibility in the Tight Binding model: Correction to the Peierls Phase and Application to Excitonic Insulator"

RIKEN Symposium Int. Workshop on Organic Molecule Systems (2017年)

(5) 立石幾真、<u>松浦弘泰</u>、小形正男 "ドープされたディラック電子系である Ag1-xSn1+xSe2 の電子状態の解析" 日本物理学会、岩手大学 (2017年)

#### (6)H. Matsuura

"Study of interfacial DM interaction in a heavy metal/ferromagnet heterostructure and Orbital magnetism" Chiral Core to Core meeting (2017年)

# (7)松浦弘泰、小形正男

"励起子絶縁体の軌道磁化率の理論" 日本物理学会、年次大会 (2017年)

# (8)松浦弘泰、小形正男

"強束縛近似を用いた軌道磁化率の理論:パイエルス位相の補正項の考察" 日本物理学会、秋季大会 (2016年)

# (9)松浦弘泰

<u>" バルク内やヘテロ構造におけるスピン軌</u> 道相互作用の効果 " 超低速ミュオンが拓く科学シンポジウム (2016 年)

#### (10)松浦弘泰

(10)<u>14(用)3条</u> "強束縛近似を用いた軌道磁化率の理論:パイエルス位相の補正項の考察" 第二回ディラック電子系マルチフェロイク ス研究会 (2016年)

# (11) 松浦弘泰

"実践的な磁性入門" キラル若手の学校 (2016年)

# (12) H. Matsuura

"Dyaloshinski-Moriya interaction induced by RKKY interaction at interface of ferromagnet/heavy metal heterostructure"
Core to Core International Meeting, XMag2016 Symposium (2016年)

#### (13) H. Matsuura

"Spin-Orbit Interaction in Bulk and Interface"
CMSI-USMM-International Workshop
(2016年)

# (14)H. Matsuura

"Spin-Orbit interaction and Superexchange Mechanism on 5d Materials" Joint of The 9th International Conference on the Science and Technology for Advanced Ceramics and The 9th Symposium on Transparent Oxide and Related Materials for Electronic and Optics (2015年)

#### (15)H. Matsuura

"Study of Interfacial
Dzyaloshinskii-Moriya Interaction in a
heavy metal/ferromagnet
heterostructure"
Core to Core Kick off meeting
(2015年)

#### (16)H. Matsuura

"Theory of Dzyaloshinskii-Moriya Interaction derived from screw structure of crystal"

III International Workshop Dzyaloshinskii-Moriya Interaction and Exotic Spin Structures (2015年)

# 〔その他〕

ホームページ

:http://ogata.phys.s.u-tokyo.ac.jp/

#### 6. 研究組織

#### (1)研究代表者

松浦 弘泰 (MATSUURA, Hi royasu) 東京大学・大学院理学系研究科・助教 研究者番号: 40596607