

令和 4 年 6 月 7 日現在

機関番号：11301

研究種目：挑戦的研究(萌芽)

研究期間：2020～2021

課題番号：20K21067

研究課題名(和文)反強磁性ドメインの形成と制御の理論研究

研究課題名(英文)Theoretical study for formation and control of antiferromagnetic domain

研究代表者

鈴木 通人(Suzuki, Michi-To)

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) 5,000,000円

研究成果の概要(和文)：磁性体の磁気構造評価や複雑な磁気秩序形成下における物性発現機構の研究に取り組み、第一原理計算による磁性体の輸送現象を対象とした研究を実施した。磁性体におけるスピンホール効果や磁場下における輸送現象にも研究対象を広げ、磁気構造や電子構造が磁性体に特有の現象である異常ホール効果や異常ネルンスト効果の他、磁性体のスピンホール効果や磁場下における異常ホール効果・スピンホール効果、トポロジカルホール効果などの輸送現象に与える影響を、第一原理計算を活用して詳細に調べた。これらの結果は論文としてまとめ、出版している。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究成果は近年発見された反強磁性体における物性現象の理解を深め、磁性体の詳細な磁気構造と物性機構の関わりを明らかにし、また、詳細な磁気構造を取り入れた磁性体の物性評価手法の発展に貢献するものである。磁気的相互作用と磁気秩序の形成、及びその物性の予測手法の研究を通して、詳細な磁気構造の情報を取り込んだ磁性体の物性シミュレーション手法の発展へとつながる知見を得ている。これらの磁性状態の第一原理手法から得られる結果をスピンモデルの構築に活用していくことで、より実践的な磁気物性のシミュレーション手法の発展が期待できる。

研究成果の概要(英文)：We have studied the mechanism of physical properties under complex magnetic order formation with the evaluation of the magnetic structure of magnetic materials, and carried out research of transport phenomena in magnetic materials by first-principles calculations. We have extended the scope of our research to spin Hall effect and transport phenomena in magnetic materials under magnetic fields, and have studied the effects of magnetic and electronic structures on transport phenomena such as anomalous Hall effect, anomalous Nernst effect, spin Hall effect and topological Hall effect in magnetic materials under magnetic fields, as well as anomalous Hall effect and spin Hall effect in magnetic materials. The effects on transport phenomena were investigated in detail using first-principles calculations. These results are published as academic papers.

研究分野：第一原理計算

キーワード：磁性体 輸送現象 第一原理計算

1. 研究開始当初の背景

Mn₃Sn や Mn₃Ge の反強磁性相において異常ホール効果をはじめとする物性現象が巨大な効果として観測され、強磁性体になる磁性材料として反強磁性体が大きな注目を集めている。これまで強磁性体における物性現象については多くの研究がなされてきたが、磁性体の詳細な秩序構造と物性現象の関わりについての理解はまだ浅く、新規機能性磁性体の開拓に向け、反強磁性体の磁性状態と物性に関する実践的なシミュレーション手法の発展が望まれている。

2. 研究の目的

研究代表者らが発展させてきた磁性体の詳細な磁気構造と物性の理論解析手法などを発展させ、第一原理計算による磁気交換相互作用の見積もりやスピンモデルの解析手法を活用した磁性体の理論手法を研究し、磁気ドメインの形成に重要な磁気相互作用の評価、磁気構造の予測精度の向上と、それらの解析結果に基づくスピンモデルの構築などを通して、磁気ドメインの形成などをシミュレーションすることが可能な、より実践的な磁性体のシミュレーション手法の開発へとつなげる。

3. 研究の方法

研究代表者が発展させた高対称な磁気構造生成手法に基づく反強磁性の秩序パラメータ解析、第一原理計算手法による反強磁性の電子状態解析、及びスピンモデルによるスピンドायナミクスの解析手法などを通して、磁氣的相互作用の評価や物性評価に基づく磁性体の物性シミュレーション手法を発展させる。

4. 研究成果

(1) 与えられた結晶に対して異なる磁気構造の秩序パラメータと物性を第一原理計算から系統的に評価するための研究基盤として、第一原理計算とクラスター多極子法による磁気構造生成手法を組み合わせた系統的な磁気構造の安定性評価システムを構築し、磁気構造データベース上の実験から同定された磁気構造と、上記理論システムから得られる安定磁気構造の整合性について系統的な評価を実施した。これにより遷移金属をはじめとする多くの磁性体について理論的に予測された安定磁気構造と実験磁気構造の整合性を確認しており(図1参照)[Huebsch et al., Phys. Rev. X 11, 011031 (2021)]、磁気ドメインの形成に重要な寄与を及ぼす、磁気異方性の予測精度に関する知見も得られている。

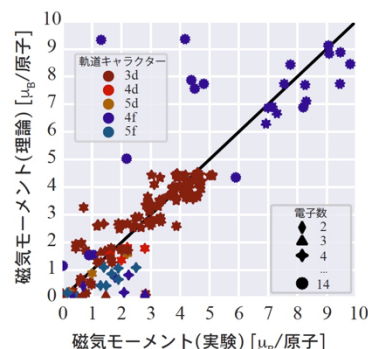


図1 磁気モーメントの予測精度の解析 (Huebsch et al. (2021))

(2) 線形応答理論に基づく輸送係数の第一原理計算を利用し、磁性体に特有の現象である異常ホール効果や異常ネルンスト効果の発現機構の研究に取り組み、その微視的機構を調べた。ワイル磁性体として知られる Co₃Sn₂S₂ の In ドープ系 Co₃In_xSn_{2-x}S₂ の第一原理計算による研究では、フェルミ準位近傍の特異な電子構造が大きなネルンスト効果の起源となっていることを示し、異常ホール効果の In ドープ依存性を実施した実験グループとの共同研究により、In ドープ下における電子構造の変化が磁性と輸送現象に与える影響を明らかにしている[Yanagi et al., Phys. Rev. B 103, 205112 (2021)]。

(3) クラスター多極子法による安定磁気構造の解析と線形応答理論に基づく輸送係数の第一原理計算を利用し、特異な電子構造を持つ反強磁性体として知られる CuMnAs の反強磁性相におけるスピホール効果や磁場下における輸送現象の解析を行なった。クラスター多極子法によって結晶構造に適合する高対称な磁気構造を生成し、第一原理計算による全エネルギー計算によって安定磁気構造を評価し、実験によって観測される磁気構造の安定性を解析している。また、磁性体に特有の現象である異常ホール効果や反強磁性相のスピホール効果の解析を行い、反強磁性相で大きなスピホール効果が生じることを示し、その起源となるスピンバリー曲率の解析によって、大きなスピホール効果を生み出すエネルギーバンドの縮退構造を明らかにしたほか、磁場下における異常ホール効果・スピホール効果などの輸送現象に与える影響を、第一原理計算を活用して詳細に調べている(図2参照)[Huyen et al., Phys. Rev. B 104, 035110 (2021)]。

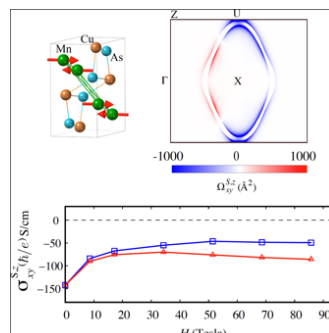


図2 反強磁性体のスピホール伝導度の解析(Huyen et al. (2021))

(3) 磁性体の磁気構造を対称性と秩序パラメータの観点から解析する理論手法であるクラスター多極子法を、より複雑な磁気秩序状態の解析理論として拡張するため、有限伝搬ベクトルによって特徴づけられる長周期磁気秩序への理論拡張に取り組んだ (Yanagi et al., arXiv:2201.07361 (2022))。この磁気構造型理論をもとに、複雑な反強磁性秩序構造下での異常ホール効果が観測されている α -Mn と CoM_3S_6 ($M=\text{Nb}, \text{Ta}$) の磁気構造の解析を行った。 α -Mn の磁気構造解析では、観測されている圧力下異常ホール効果が、圧力下における磁気構造の変化から説明されることを示し、 CoM_3S_6 ($M=\text{Nb}, \text{Ta}$) の研究では、従来提案されていた磁気構造とは異なる、複雑な多重 k 磁気秩序によって異常ホール効果が説明できることを示している (図 3 参照)。

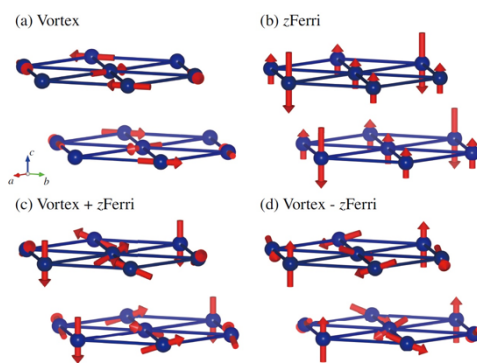


図 3 CoM_3S_6 の triple- k 磁気構造の例

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 M.-T. Huebsch, T. Nomoto, M.-T. Suzuki, R.Arita	4. 巻 11
2. 論文標題 Benchmark for Ab Initio Prediction of Magnetic Structures Based on Cluster-Multipole Theory	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review X	6. 最初と最後の頁 011031/1-25
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevX.11.011031	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 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 $\text{Co}_3\text{In}_x\text{Sn}_2-x\text{S}_2$	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 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 -

〔学会発表〕 計7件（うち招待講演 2件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 鈴木通人
2. 発表標題 磁気対称性の破れとトポロジーが生み出す巨大輸送現象の研究
3. 学会等名 スピントロニクス学術研究基盤と連携ネットワーク拠点 2020年度（令和2年度）年次報告会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 鈴木通人
2. 発表標題 Local environment representation of magnetic structure by multipole expansion
3. 学会等名 新学術領域ハイパーマテリアル 第5回領域Web会議
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 鈴木通人
2. 発表標題 Magnetic structure analysis for approximants based on cluster multipole theory
3. 学会等名 新学術領域ハイパーマテリアル 第4回領域Web会議
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 鈴木通人
2. 発表標題 多極子理論とデータ科学の融合による物質設計
3. 学会等名 さきがけ研究領域「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築」第10回領域会議
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 鈴木通人
2. 発表標題 クラスター多極子法による準結晶の磁気構造と物性現象の研究
3. 学会等名 新学術領域ハイパーマテリアル 第3回領域Web会議,
4. 発表年 2020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

〔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	野本 拓也 (Nomoto Takuya) (60804200)	東京大学・大学院工学系研究科(工学部)・助教 (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
---------	---------