

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 6 月 9 日現在

機関番号：32615

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2012～2015

課題番号：24540343

研究課題名(和文) ハーフメタル強磁性体における電子相関効果の研究

研究課題名(英文) Study of Electron Correlation Effect in Half-metallic Ferromagnets

研究代表者

平島 大 (HIRASHIMA, Dai)

国際基督教大学・教養学部・教授

研究者番号：20208820

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,800,000円

研究成果の概要(和文)：本研究の主目的は、ハーフメタル強磁性体における電子相関効果、特にフェルミ面近傍の偏極消失に対する効果、を明らかにすることである。種々の摂動論的な多体理論の有用性を検討したのち、自己無撞着T行列理論を、典型的なハーフメタル強磁性物質であるNiMnSbに適用した。その結果、最も顕著な寄与は化学ポテンシャルのシフトに伴うハーフメタル特性の消失によるものであることが確かめられた。また、並行して、特異な表面・界面状態の研究を行い、バンド幅ゼロの特異な表面状態が生成されるメカニズムを明らかにした。

研究成果の概要(英文)： Electron correlation effect on half-metallic ferromagnetic compounds is clarified using perturbational methods. In particular, the self-consistent T-matrix theory is applied to NiMnSb, which is a typical half-metallic compound, and it is found that the depolarization around the Fermi surface is mainly caused by the chemical potential shift. In addition, the mechanism of generation of peculiar edge/surface states such as the ones found on a zigzag edge of graphene is discussed and many examples where this kind of peculiar edge/surface states are generated are found.

研究分野：Condensed Matter Theory

キーワード：Half-metallic ferro. Electron correlation Depolarization Surface state Flat band

1. 研究開始当初の背景

ハーフメタル強磁性は、フェルミ面上で一方のスピンのみが有限の状態密度を有するため、理想的には完全偏極電流を流すことが可能な材料として注目を集めていた。しかしながら、有限温度効果あるいは境界面の効果がどのようにハーフメタル強磁性金属の物性に影響を与えるかは十分に明らかになっていなかった。特に、自発磁化の大きさとフェルミ面上での偏極の大きさの関係は明らかではなく、どのようなメカニズムによってフェルミ面上で偏極が消失していくのか、十分に明らかではなかった。多体効果の発現である非準粒子的(インコヒーレント)寄与あるいはスピン揺らぎの寄与などが偏極の消失に重要な役割を果たすことが議論されていた。

2. 研究の目的

研究の目的は、(1)ハーフメタル強磁性体における電子相関効果を研究するための手法を開発し、これまでによく研究されている多体系に適用し、その有効性を確かめること、(2)その方法をハーフメタル強磁性体に適用し、有限温度における偏極消失と自発磁化の減少の関係、インコヒーレント成分の寄与などを明らかにすること、および(3)実際の応用において重要になる表面・界面の効果を明らかにする、である。特に、電子相関効果に関しては、これまでの研究の多くは、動的平均場理論を用いており、そこで取り扱われている相関効果は局所的な相関効果のみであった。そこで、非局所的な相関効果に特に注目して研究を進めることにした。

3. 研究の方法

はじめに、ハーフメタル強磁性体における電子相関効果を扱うための適切な手法を開発し、それをこれまで比較的よく研究されてきた系に適用しその有効性を確かめる。具体的には、種々の摂動理論的な多体問題の手法の有効性を液体ヘリウム、遷移金属強磁性金属などに適用し、それらの系での多体効果をどの程度定量的に記述できるかを確かめる。その後、適切は手法をハーフメタル強磁性体に適用する。代表的なハーフメタル強磁性金属である NiMnSb を主対象として、フェルミ面近傍での偏極と自発磁化の関係、状態密度のインコヒーレント成分の寄与などを明らかにする。合わせて結晶の表面状態にも着目し、電子の偏極を引き起こしやすい、バンド幅の狭い表面状態生成のメカニズムを考察する。

4. 研究成果

まず、自己無撞着2次摂動法を2次元液体ヘリウム3に適用し、その電荷及びスピン揺らぎのスペクトルを研究した(論文、)。2次元液体ヘリウム3に関しては、Godfrinらの中性子散乱実験によって(H. Godfrin et

al. Nature 483, 576 (2012))、超流動ヘリウム4と同様に、ロトンの集団励起が観測されることが報告された。我々は、2次元ヘリウム3の有効モデルに対して自己無撞着2次摂動理論を適用することによって相関効果を取り込み、その動的な相関関数を計算した。特に、動的相関関数を計算するためには適切にパーテック補正を考慮することが必要であるが、部分的に局所的な近似を行うことによって、よい精度でパーテックス補正の効果を取り込むことができた。その結果、スピン、電荷ともに有限波長領域で低振動側にスペクトルウェイトが移動し、ロトンを思わせるような励起スペクトルが表れることが示された。しかしながら、当初 Godfrinらの論文で主張されたような本質的に幅ゼロの明瞭なピークは得られず、明確な結論を得るためには実験、理論ともにさらなる研究が必要である。

続いて、同じく自己無撞着2次摂動理論を典型的な強磁性金属である鉄に適用し、その有限温度における相関効果を研究した(論文、)。キュリー温度に関しては実験と比較的によく一致する結果が得られたが、残念ながら計算の結果得られた転移は1次転移であり、実験とは矛盾する。強磁性状態における相関効果に関しては、各バンドに関する有効質量を計算した。その結果、全体的なバンド幅の縮小に関しては諸実験とよく一致する結果が得られたが、特にフェルミ面近傍における質量増強に関しては、実験で見出されているような顕著な増強を得ることはできなかった。また、これらの論文においては、動的スピン相関関数が、パーテック補正効果も含めて求められた。

鉄に関する計算で自己無撞着2次摂動理論によってある程度の電子相関効果の記述には成功したが、定量的にはいまだ不十分な点も多かった。そこで、鉄の他にニッケルに関しても同様の計算およびそれ以外の計算を行い、さまざまな手法の比較検討を行った。その結果、(1)自己無撞着2次摂動理論はキュリー温度を、実際に比べてやや低く見積もること(たとえばニッケルに適用するとキュリー温度はゼロになってしまう)(2)一方、自己無撞着T行列理論は正しく2次転移を再現するなど好ましい結果を導くが、一方、相関効果はやや小さく見積もりすぎ、キュリー温度は実際に比べて高く見積もる傾向があること、(3)スピン揺らぎの効果をとりこんだ揺らぎ交換近似を用いると強磁性体状態自体が不安定となり、(鉄においても)強磁性状態の記述ができなくなることなどの結果が得られた。これらの結果を参考に、ハーフメタル強磁性金属の研究には自己無撞着T行列理論を適用することにした。

NiMnSbは、代表的なハーフメタル強磁性体であり、実験、理論ともにさまざまな研究が行われてきている。本研究では、自己無撞着T行列理論を適用し、有限温度における相

関効果を研究することにした(論文)。最も興味ある点は、有限温度における偏極の消失のメカニズムである。これまでの研究では、(電子相関効果による)インコヒーレント成分の寄与、スピン揺らぎの寄与など議論されてきた。まず、自己無撞着T行列によって低温でハーフメタル強磁性状態が得られることが確かめられた。温度上昇に伴ってフェルミ面近傍での偏極は急速に失われるが、本研究で偏極の消失に最も影響があるのは化学ポテンシャルの温度変化に伴うシフトであった。すなわち、十分低温では化学ポテンシャルは一方のスピン状態密度のギャップ内にあり、ハーフメタル強磁性状態が実現しているが、温度上昇とともに化学ポテンシャルが移動し、両方のスピン成分が有限値をとる領域に移動してしまう。これにともなう偏極の消失効果が最も顕著な効果として得られた。これは本質的には1電子的な効果であり、必ずしも電子相関効果が本質的ではない可能性を示唆する。

実験的にはかなりの低温(70K程度)から急速な偏極の消失が観測されるが、仮に、温度ゼロで、第1原理計算で予想されるよりも、化学ポテンシャルがギャップエッジに近いところに位置しているとすると、化学ポテンシャルのシフトによって偏極の消失が説明される可能性がある。しかしながら、本研究では、偏極(あるいは自発磁化)に対するスピン揺らぎの効果が取り込まれていないので、最終的な結論にはまだ到達できない。既に述べたように、未だスピンの揺らぎの効果を取り込んで強磁性状態を記述する理論的な手法の開発に成功していないので、今後そのような理論の開発を目指す必要がある。実際、本研究で用いられた手法は、原理的には非局所的な相関を取り込みうる形式にはなっているが、結果として得られた自己エネルギーを解析すると、非局所的な効果は小さいことが分かった。強磁性状態で重要になりうる非局所的な効果はスピン揺らぎを通して得られることが強く示唆される。局所的な相関効果のほかに、スピン揺らぎの効果を自己無撞着に取り込んだ第1原理的な遍歴磁性の理論開発は未達の大きな目標である。また、自己無撞着性をあきらめれば、スピン揺らぎの効果を低温領域で調べることは可能であり、現在その研究に着手している。

常磁性状態においてはスピン揺らぎの効果を取り込んだ理論はかなり成功を収めている。本研究では、電子ドープ系に対してその理論を応用し、フェルミ流体的な描像が成立することを示した(論文)。また、局在モーメントから遍歴的な相関の強い電子状態へのクロスオーバーについても議論した(論文)。

ハーフメタル強磁性体を用いて偏極電流をつくらうとするときに、界面・表面の効果は本質的に重要である。本研究でも特異な表面状態に着目して、研究を行った。グラフ

エンのいわゆるジグザグ端においては、端近傍に局在するバンド幅の小さい特異な状態が存在することがよく知られている。このような状態は、容易に偏極を起こすことが予想される。本研究では、この状態が、多数の不純物準位の縮退として理解できることを示し、さらに同様な特異な表面状態が、異なる結晶構造においても、あるいは、軌道縮退がある場合に対しても拡張されることを示した(論文)。この成果は、これまでによく研究されてきた半導体(Siやダイヤモンドなど)における表面状態に対しても新たな知見を与える可能性がある。

これ以外にも、本研究の初期において、スピンホール効果の研究を行い、鉄系超伝導体において、多軌道性にともなう大きなスピンホール効果の発現の可能性を明らかにした(論文)。また、強相関量子系における局在問題についても研究し、スケーリング則と数値計算を用いて、固相気相転移における量子効果を明らかにした(論文)。

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 10 件)

D. S. Hirashima, Completely Flat Band in a Crystal of Finite Thickness, *J. Phys. Soc. Jpn.* 85 (2016) 44705(9 pages), 10.7566/JPSJ.85.044705, 査読有。

D. S. Hirashima, Finite Temperature Properties of the Half-Metallic Compound NiMnSb: A Self-Consistent T-Matrix Theory, *J. Phys. Soc. Jpn.* 84 (2015) 124707(5 pages), 10.7566/JPSJ.84.124707, 査読有。

E. Nagira, S. Fujita, and T. Mutou, Crossover from a Low-Temperature Heavy-Quasiparticle State to a High-Temperature Local-Moment State in the Heavy Fermion System, *J. Phys. Soc. Jpn.* 83 (2014) 124710(6 pages), 10.7566/JPSJ.83.124710, 査読有。

K. Yamashita, Y. Kwon, Y. Koike, and D. S. Hirashima, Gas-Solid Transition of Quantum Particles Interacting with Inverse-Power-Law Repulsive Potential, *J. Phys. Soc. Jpn.* 83 (2014) 43601(4 pages), 10.7566/JPSJ.83.043602, 査読有。

A. Kotani and D. S. Hirashima, Dynamical density and spin response functions of two-dimensional correlated fermion systems: Self-consistent second-order perturbation theory, *Phys. Rev. B* 88 (2013) 014529(12 pages), 10.1103/PhysRevB.88.014529, 査読有。

M. Nishishita, D. S. Hirashima, and S. Pandey, Self-consistent Second-order Perturbation Theory of Correlation Effect in bcc Iron at Finite Temperatures,

J. Phys. Soc. Jpn. 82 (2013) 114705(10 pages), 10.7566/JPSJ.82.114705, 査読有

T. Mutou and D. S. Hirashima, Validity of Fermi-Liquid Description of Low-Energy Magnetic Excitations in Electron Doped Cuprate Superconductors, J. Phys. Soc. Jpn. 82 (2013) 094703(7 pages), 10.7566/JPSJ.82.094703, 査読有.

M. Nishishita, D. Hirashima, and S. Pandey, Correlation Effect in bcc Iron at Finite Temperatures, Journal of the Korean Physical Society, 62 (2013), 2160-2163, <http://link.springer.com/article/10.3938/jkps.62.2160>, 査読有.

A. Kotani and D. Hirashima, Density fluctuation spectrum of two-dimensional correlated fermion systems, J. Phys.: Conf. Ser. 400 (2012) 12035(4 pages), 10.1088/1742-6596/400/012035, 査読有.

S. Pandey, H. Kontani, D. S. Hirashima, R. Arita, and H. Aoki, Spin Hall effect in iron-based superconductors: A Dirac point effect, Phys. Rev. B 86 (2012) 060507(4 pages), 10.1103/PhysRev.86.060507, 査読有.

〔学会発表〕(計 5 件)

Tetsuya Mutou, Shohei Fujita, and Hiroaki Kusunose, Two-Particle Excitations of the Kondo Insulator around the Critical Point, The International Conference on Strongly Correlated Electron Systems, 08/05-08/09, 2013, Tokyo(Japan).

武藤哲也, 電子ドーブ系銅酸化物高温超伝導体の動的帯磁率, 理化学研究所第 2 回「京」物性セミナー, 05/27, 2013, 理化学研究所計算科学研究機構(神戸).

山下耕平, Y. Kwon, 平島大, 有限温度におけるソフトコア粒子系の固体・気体相転移 II, 日本物理学会 2013 年秋季大会, 09/25-09/28, 2013, 徳島大学(徳島).

K. Yamashita, Y. Kwon, and D. Hirashima, Gas-Solid Phase Transition in Hardcore-like Systems, International Symposium on Quantum Fluids and Solids, 08/01-08/06, 2013, Matsue(Japan).

M. Nishishita, D. Hirashima and S. Pandey, Correlation effect in iron at finite temperatures, The 19th International Conference on Magnetism, 07/08-07/13, 2012, Busan(Korea).

〔その他〕

ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究代表者

平島 大(HIRASHIMA, Dai)

国際基督教大学・教養学部・教授

研究者番号：20208820

(2) 研究分担者

武藤 哲也 (MUTOU, Tetsuya)

島根大学・総合理工学研究科・准教授

研究者番号：50312244