

# 客員所員を経験して

東北大学金属材料研究所 野村 健太郎

2016 年度前期に加藤岳生所員のホストで客員准教授としてお世話になりました。客員期間中は加藤所員をはじめ、大谷所員、中辻所員、押川所員、松田（巖）所員、長田所員、近藤所員の方々と有益な議論をさせていただきました。第一線を牽引する最先端の研究成果に触れて大変刺激になりました。

客員公募研究のテーマは「スピン軌道結合の強い電子系における磁気輸送現象の理論的研究」です。近年、スピン軌道相互作用によって発現する、トポロジカル絶縁体やワイル半金属といった、物質の新しい量子状態の存在が解明されました。また最近、強いスピン軌道相互作用を有する磁性体が多く合成され、その新奇磁性が実験的に発見されています。物性研究所の所員の方々はこれらの急速に発展するアクティビティーで常に中心的役割を担っており、今回の客員期間中に聞かせていただいたお話は大変興味深いものばかりでした。特に  $Mn_3Sn$  における異常ホール効果は中辻所員によって初めて発見された現象で、私も以前から強い興味を持っていました。中辻研および大谷研のメンバーと緊密に議論をさせていただき、最新の興味深い実験結果を教えていただきました。理論家の視点から現状を見ると、これまでに行われた理論研究はすべて第一原理計算を用いたものであり、どういった原理でスピン磁化がゼロにも拘らず異常ホール効果が起こるのかが理解されてないと思いました。そこで私は加藤所員にご協力いただき、 $Mn_3Sn$  のもつ結晶構造である積層カゴメ格子上のタイトバインディングモデルを構築して、これにスピン軌道相互作用および局在スピンの交換相互作用を導入し、ホール伝導度の計算を行いました。ユニットセルに 6 個のサイトがありさらにスピンの自由度もあるので 12 バンドモデルとなりますが、これまでの計算から軌道磁気モーメントが基底状態で有限になることがわかりました。これがスピン磁化ゼロの異常ホール効果の起源であると予想し、さらなる考察を続けております。このモデルは、例えば現在大谷研究室で進められているスピントロニクス現象を理論的に解析する際にも有効モデルとして用いることができると期待しております。

客員期間中、理論家の方々とも有益な議論をしていただきました。加藤所員とは、私が現在興味をもっている磁性ワイル半金属を実現するための物質探索について議論していただきました。特に  $GdPtBi$  などのハーフホイスラー構造の反強磁性体に強磁性秩序を持たせることができるかが課題としてあげられました。この物質はパラボリックな分散をもつ伝導帯と価電子帯が点接触したゼロギャップ半導体ですが、強磁性秩序を保つことで線形分散をもつワイル半金属になることが期待できます。加藤所員には磁性体の第一原理計算の専門家である土浦宏紀先生（東北大工）を紹介していただき、現在も 3 名で共同研究を続けさせていただいております。また押川所員にはディラック電子系のスピン磁化率に関して議論していただきました。もしスピン軌道結合がないとすると、スピン磁化率は状態密度によって決まるため、ディラック点近傍で磁化率はゼロとなります。一方、スピン軌道結合のある系では Van Vleck 機構によるバンド間結合の寄与が加わります。連続近似のもとでディラック半金属のスピン磁化率を計算してみますと、カットオフに依存するがフェルミ準位には寄らないという、一見異常な振る舞いが得られます。このような特徴はバンド構造のトポロジーに着目することで理解できるのではないかという事を、押川所員に提案していただきました。その後計算を進めるとスピン磁化率をベリー接続の用いて表現し、スピン磁化率のバンド間結合による成分をベリー接続によって表すことに成功しました。今後も押川所員と共同研究としてプロジェクトを進めたいと考えております。

また、頭脳循環ワークショップ "Frontier of Quantum Material Science and Nano-Technology" に招待していただきました。私は "Spin-electromagnetic responses in topological matters" の題目で発表の機会をいただき、著名な Leon Balents 先生 (UCSB) や新進気鋭の若手研究者たちと討論を通じて大変有益なコメントをいただきました。

客員の期間は半年でしたが、大変実りある期間となりました。物性研究所の皆様とは是非今後も共同研究を続けさせていただきたいと思っております。