

トポロジカル材料科学と革新的機能創出
2020 年度採択研究者

2020 年度 年次報告書

野本 拓也

東京大学 大学院工学系研究科
助教

第一原理計算に基づくトポロジカル磁性材料探索

§ 1. 研究成果の概要

本研究課題は、第一原理計算に基づくトポロジカル磁性材料の理解と探索を目的としている。当該年度は、短周期磁気スキルミオン物質やトポロジカル反強磁性体などの複雑な磁気構造を持つ物質に対して適用可能な、磁気構造計算手法の開発およびホール効果の計算手法開発を行った。特に、トポロジカル反強磁性体の磁気構造計算に関して、クラスター多極子理論に基づいた磁気構造生成手法を第一原理計算と組み合わせ、現実的な計算コストで安定な磁気構造を網羅的に探索するための計算アルゴリズムを考案した。磁気構造データベース(MAGNDATA)に収録された磁性体に対するベンチマーク計算の結果、考案したアルゴリズムが実験的な磁気構造を82%の精度で、また磁気空間群に限れば90%の精度で予測できることが示され、その有効性が実証された。この研究成果は、広域の反強磁性体に対して系統的に適用、検証された世界で初めての磁気構造予測手法である。また、ホール効果の計算手法開発に関しては、大きな単位胞を持つ複雑磁気構造系に対して適用可能な実空間計算手法を磁気スキルミオン系に適用し、トポロジカルホール効果のスキルミオンサイズ依存性を検証した。特に、トポロジカルホール効果の大きさがスキルミオンサイズに対してユニバーサルなピーク構造を持つこと、また解析計算が困難な非断熱領域における振る舞いについて、その詳細を明らかにした。これらの成果は、今後のトポロジカル磁性体提案および輸送応答などの物理量を含めた磁性体データベース構築に利用される。

【代表的な原著論文情報】

- 1) M. -T. Huebsch, T. Nomoto, M. -T. Suzuki, R. Arita, “Benchmark for Ab Initio Prediction of Magnetic Structures Based on Cluster-Multipole Theory”, *Physical Review X*, vol. 11, No. 1, 011031, 2021.