

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

2021 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。本年度も昨年度から引き続き、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輸送特性の計算手法開発を行なった。磁気構造計算に関しては、これまで開発してきたクラスター多極子理論に基づく磁気構造生成手法を発展させ、有限  $Q$  の磁気構造も取り扱えるように拡張を行った。今後は、第一原理計算結果からスピンモデルを構築するダウンフォールディング法と併用して、磁性体データベース構築に向けた磁気構造計算を進めていく。また、トポロジカル反強磁性体の制御方法に関する研究として、電流による磁化反転の理論構築を行った。反強磁性ドメインの制御と検出はスピントロニクス応用上重要な課題であり、今後も理論提案や解析を進めていく。その他、不純物系などの不規則系での輸送特性計算に向けた Wannier 強束縛模型を用いたコヒーレントポテンシャル近似(CPA)法の実装、および既存の KKR-CPA 計算との比較によるベンチマーク計算を行った。今後は輸送特性計算まで実装を行い、昨年度まで開発していた実空間計算手法などと組み合わせることで、トポロジカル磁性材料の機能評価を行なっていく。