

トポロジカル材料科学と革新的機能創出  
2020年度採択研究代表者

2022年度  
年次報告書

野本 拓也

東京大学 先端科学技術研究センター  
講師

第一原理計算に基づくトポロジカル磁性材料探索

## 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、特に短周期磁気スキルミオン物質とトポロジカル反強磁性体を主な研究対象としている。短周期磁気スキルミオン物質に関して、本年度はプロトタイプ的な結晶構造である  $\text{ThCr}_2\text{Si}_2$  構造に対して網羅的な計算を行い、この結晶構造に属する Gd/Eu 系化合物は弱い容易軸異方性を持ちやすく、スキルミオン相の発現に有利であることを見出した。もう一つ重要な要素である有限 Q 磁気構造を好むかどうかはフェルミ面の詳細等に依存するが、遷移金属として特に Ru, Os, Re, Ag などをとる物質がスキルミオン物質候補として有力であることも示された。また、トポロジカル反強磁性体を用いたスピントロニクスに関する研究も行い、特に  $\text{Mn}_3\text{Sn}/\text{MgO}/\text{Mn}_3\text{Sn}$  磁気トンネル接合において TMR 効果が得られることを理論と実験で示した。また、通常のコリニア反強磁性体やフェリ磁性体に関しても、強束縛モデルを用いた伝導度計算を行い、TMR 効果が界面磁気構造に敏感であること、また界面磁気構造を制御することによって negative TMR 効果を実現できることなどを示した。ノンコリニア反強磁性体の探索に関しては、現在網羅的な計算と解析を進めている最中であるが、その分類や機械学習ポテンシャルの作成等に有用である磁気構造記述子の開発も行った。最終年度は、これらの手法を組み合わせる本課題のメインテーマである物質探索・物質提案に繋げていきたい。

### 【代表的な原著論文情報】

- 1) “Perpendicular full switching of chiral antiferromagnetic order by current”, T. Higo, K. Kondou, T. Nomoto, et al., *Nature* **607**, 474 (2022).
- 2) “Generation of modulated magnetic structures based on cluster multipole expansion: Application to  $\alpha\text{-Mn}$  and  $\text{CoM}_3\text{S}_6$ ”, Y. Yanagi, H. Kusunose, T. Nomoto, R. Arita, and M-T. Suzuki, *Phys. Rev. B* **107**, 014407 (2023).
- 3) “Octupole-driven magnetoresistance in an antiferromagnetic tunnel junction”, X. Chen, T. Higo, K. Tanaka, T. Nomoto, et al., *Nature* **613**, 490 (2023).