



令和5年11月24日

報道機関 各位

熊本大学

時間と空間が織りなす磁気成分の検出
-スピンの互いに平行な反強磁性体における
X線磁気円二色性-

(ポイント)

- 本研究では [100] 方向に反強磁性秩序^{*1}が発現したルチル構造物質RuO₂を対象として、電子状態解析とX線磁気円二色性応答(XMCD)^{*2}のシミュレーションを行いました
- 今回研究対象としたRuO₂では共線方向(スピンの互いに平行)に反強磁性の秩序化が起こっており、共線型の反強磁性体におけるXMCDを初めて理論予測しました
- 本成果は特異な空間・時間対称性を持つ物質の研究・開発を促進し、イノベーションに繋がる物質・材料の創出に貢献すると考えられます。

(概要説明)

熊本大学大学院先端科学研究部の雀部矩正特任助教(研究当時:公益財団法人高輝度光科学研究センター博士研究員)と同大学同研究部の水牧仁一朗教授の研究グループは、大阪公立大学の魚住孝幸教授、国立研究開発法人物質・材料研究機構の山崎裕一主幹研究員との共同研究により、ルチル化合物RuO₂の反強磁性状態を詳細に調べ、共線方向の反強磁性状態においてXMCDが観測できることを理論的に予言しました。

本研究成果は、アメリカ物理学会(American Physical Society)の発行するフィジカル・レビュー・レターズ(Physical Review Letters)誌に2023年11月24日(米国東部時間)に掲載されました。また、注目論文としてEditors' Suggestion及びFront Coverに選定されました。

(説明)

[背景]

「対称性の破れ」は物理学における重要な研究対象です。空間反転対称性がなくなる(破れる)ことで電気分極^{*3}が起こり、時間反転対称性が破れることで磁性が誘起します。携帯電話やパーソナルコンピュータ、家電などを電子制御している部品には、電気分極を示す誘電体や磁性を持つ磁石が用いられており、物性(物の性質)を深く理解することで利便性の高い社会の創生が実現してきました。誘電体の電場応答や磁石の磁場応答は電磁気学の基本で

あるマクスウェル方程式で記述(理解)されますが、磁場による電気分極や電場による磁化制御などのマクスウェル方程式では記述されない応答(交差相関応答)が見つかってきました。

物性物理学においては物質固有の対称性が重要となります。電気分極には空間反転対称性の破れが必要となり、物質の結晶構造において空間反転性がない場合は電気分極が起こります。一方、空間反転性がある結晶構造においては強磁性状態となることによって空間反転対称性が破れて電気分極が起こる場合があります。前者は電場によって電気分極を制御するのに対して、後者は磁化状態を磁場で操作することで電気分極を制御します。結晶構造(空間)と磁性状態(時間)が織りなす対称性は交差相関応答の源となり、非従来型超伝導や異常ホール効果などの物性現象においても物質固有の特異な対称性が重要となります。つまり、物性を深く理解するためには物質が持つ対称性を明らかにすることが重要となります。

[研究の内容と成果]

本研究では [100] 方向に反強磁性秩序が発現したルチル構造物質 RuO_2 を対象として、電子状態解析と X 線円磁気二色性応答 (XMCD) のシミュレーションを行いました。XMCD は物質内の電子のスピンの軌道運動を同定する強力な手法であり、XMCD の解析によって多くの強磁性体やフェリ磁性体の電子状態が解明されてきました。一般的に反強磁性状態では XMCD はないと考えられてきましたが、近年我々は非共線型(スピンの向きが互いに平行でない)カゴメ格子反強磁性体において XMCD が出ることを実験・理論両方から明らかにしてきました。今回研究対象とした RuO_2 では共線方向(スピンの向きが互いに平行)に反強磁性の秩序化が起こっており、共線型の反強磁性体における XMCD を初めて理論予測しました。

反強磁性体の XMCD では電子の異方的磁気双極子^{*4}の挙動が重要となり、異方的磁気双極子が残留する(揃っている)方向に X 線を入射すると XMCD が現れます。電子状態解析からルチル構造の [100] 方向に反強磁性が誘起した場合では、[010] 方向に異方的磁気双極子が残留することを明らかにしました(図 1)。図 2 は RuO_2 の XMCD のシミュレーション結果で、[100] 方向から X 線を入射した場合は XMCD が無いのに対して、[010] 方向から X 線を入射した場合は XMCD が現れます。つまり、 RuO_2 の XMCD は異方的磁気双極子に由来しており、反強磁性体中に誘起した異方的磁気双極子の強磁性成分が存在することの証拠となります。

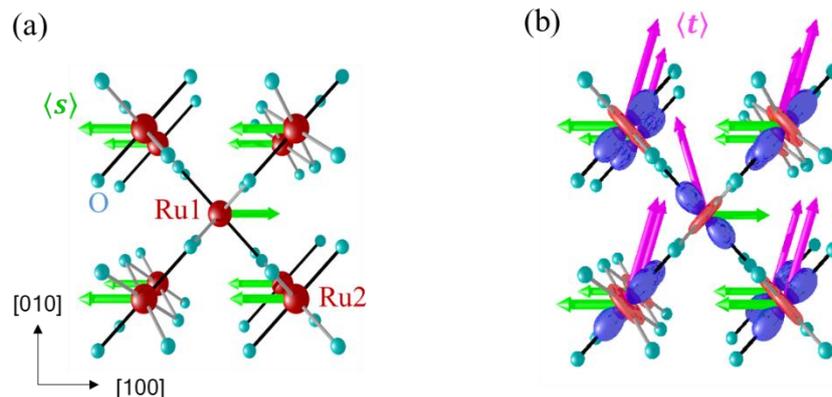


図 1. (a)ルチル構造の結晶構造([100]方向に反強磁性秩序)と(b)異方的磁気双極子項の誘起, 緑色の矢印と赤紫色の矢印はスピンと異方的磁気双極子の向きをそれぞれ表している。

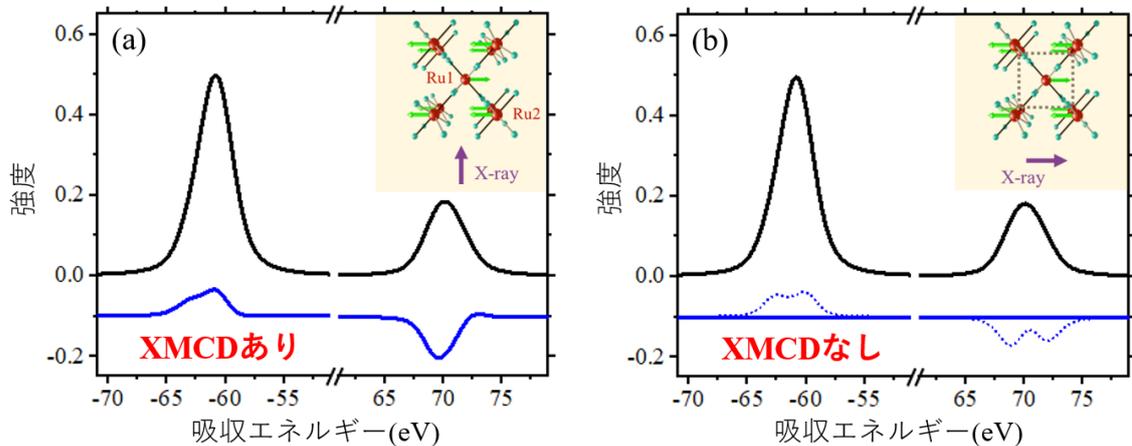


図 2. X線吸収分光(黒色)とXMCD(青色)のシミュレーション結果. (a)X線入射方向[010](XMCDあり)と(b)X線入射方向[100](XMCDなし). (b)内の青い点線はRu1サイトのXMCD応答を表し, Ru2サイトの応答はRu1サイトの応答と真逆になる。

[展開]

交差相関応答や新規物性現象を理解するとき、物質の空間・時間対称性と密接にかかわる異方的磁気双極子は今後ますます重要となります。異常ホール効果の発現に異方的磁気双極子項が重要であるという理論提案があり、我々の研究は XMCD や共鳴 X 線散乱などの放射光測定による異方的磁気双極子の振る舞いとその電子状態の解明に寄与します。本成果は特異な空間・時間対称性を持つ物質の研究・開発を促進し、イノベーションに繋がる物質・材料の創出に貢献すると考えられます。

[用語解説]

1. 反強磁性秩序

磁性材料は大きく強磁性体と反磁性体に区別され、ミクロな視点ではそれぞれ秩序状態を形成しています。強磁性秩序では、物質内の隣接する原子の電子スピン（電子が持つ磁気的な性質）が同じ向きに並ぶことで物質全体として磁化しており、磁石を使って磁化やスピンの制御が可能です。一方で反強磁性秩序では、電子スピンの互いに反対向きに並んでいるため磁化がゼロとなり、磁石にくっつかない性質があります。

2. X線磁気円二色性(XMCD)

XMCDは、磁性体を透過する円偏光 X 線の吸収係数が左回り円偏光と右回り円

偏光 X 線で差が生じる現象です。とくに磁性体のミクロな電子の情報を解明する手法として、XMCD は有効であることが知られています。

3. 電気分極

電気分極は、電荷が物体内でどのように分布するかを指す概念です。物体内の電子（負の電荷）や陽子（正の電荷）が、一方向に寄せられることによって、物体全体が電氣的に偏ります。この結果、物体は 2 つの異なる極を持つことがあり、これらの極は「正極」と「負極」と呼ばれます。

4. 異方的磁気双極子

磁気双極子モーメントは、物質内の磁氣的な極性を示すベクトル量です。空間内で方向に依存した磁気双極子を異方的磁気双極子と呼びます。

（論文情報）

論文名 : Ferroic Order for Anisotropic Magnetic Dipole Term in Collinear Antiferromagnets of $(t_{2g})^4$ System

著者 : Norimasa Sasabe, Masaichiro Mizumaki, Takayuki Uozumi, and Yuichi Yamasaki

掲載誌 : Physical Review Letters

DOI : 10.1103/PhysRevLett.131.216501

URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.131.216501>

【お問い合わせ先】

熊本大学大学院先端科学研究部

担当 : 雀部 矩正

電話 : +81-96-342-3513

e-mail : sasabe@kumamoto-u.ac.jp