

論文審査の結果の要旨

氏名: 曲 冠雄

印加電場とは垂直方向にスピン流が発生するスピホール効果 (SHE) は、常磁性材料を主な対象として広く研究されてきた。一方、強磁性体における SHE は、観察の難しさから実験的な報告例が少なく、理論的枠組みも整っていない。本研究では、強磁性体の SHE に関する 2 つの問題に着目した。(1) 発現機構を共有すると考えられている異常ホール効果 (AHE) との関係はどのようなものか。(2) 強磁性体の磁化方向に依存するかどうか。これらに対し、本研究では、数値的および解析的な第一原理的手法を用いて、様々なタイプの強磁性体を対象に SHE を研究した。特に、同じ向きにスピン偏極したバンド同士が交わる点をフェルミ準位が過ぎる場合(クラス I)と、反対の向きにスピン偏極したバンド同士が交わる点をフェルミ準位が過ぎる場合(クラス II)に分類し比較することで、後者が支配的に AHE と SHE の差異を生むことを見出した。その分類に基づき具体的な強磁性物質・電子系を対象に計算することで、上記(1)(2)の問いに対する興味深い知見を得た。論文は全 7 章からなり、以下にその概要を記す。

第 1 章では、本研究の背景として、歴史的経緯と共に AHE と SHE に関する物理的な解説がされている。これらの現象は、ブロッホ波動関数のベリー曲率とスピンベリー曲率によって表現され、数学的には久保公式によって記述できる。AHE と SHE には内因性のもの以外に、スキュー散乱およびサイドジャンプという外因性に由来する機構が知られているが、本研究では内因性に由来するものに注目するとの説明がある。

第 2 章では、異常ホール伝導率(AHC)やスピホール伝導率(SHC)、及びそれらの要素となるベリー曲率やスピンベリーの曲率を示す式が紹介されている。また、第一原理計算で用いた密度汎関数理論 (DFT) についての解説、及び理論的枠組みとなるグリーン関数法や久保公式についての式展開がされている。

第 3 章では、AHE と SHE の関係を調べる目的で、特にその対称性に着目する。対象物質として強磁性 $L1_0$ -CoPt を選び、AHC と SHC を第一原理計算から導出した。ベリー曲率は、結晶の対称性と同じ C_{4v} 回転対称性を持つ一方、スピンベリー曲率の対称性は C_{2v} に減少することが分かった。この対称性の低下は、逆向きのスピン偏極バンド同士が交差する波数空間(つまりクラス II)からの寄与により生じる。そのような交差点では、久保公式に現れる速度演算子とスピン電流演算子のバンド間行列要素に差異が生じることが、SHC で特に対称性が低下する要因となる。またこの章では、単純なモデルハミルトニアンを用いて、スピンベリー曲率のこのような対称性の減少が強磁性体の一般的な特徴であることが示されている。これらの結果を踏まえて、強磁性体における AHE と SHE は相関しないと結論されている。

第4章では、強磁性体の AHE と SHE に対する磁化方向への応答を導出し両者を比較している。対象物質として、立方晶の典型的な強磁性体である bcc-Fe と fcc-Ni を選び、それぞれの AHC と SHC を第一原理的に計算した。AHC の伝導テンソル成分は磁化の向きに追従するのみで大ききも不変であるのに対し、SHC の伝導方向は磁化の向きに依存せず、その絶対値は4倍以上にも増大することが分かった。その起源は、これらの伝導を担う交わるバンド同士のスピン特性が同じか否か、つまりクラス I とクラス II による寄与の競合により理解できることが示された。

第5章では、ラシュバ型及びドレッセルハウス型のスピン軌道相互作用 (SOC) が共に効く場合の強磁性 2 次元電子ガスを設定し、SHC の磁化方向依存性を調べている。ラシュバ型 SOC とドレッセルハウス型 SOC の大小関係により SHC の絶対値が決まり、またこれらの SOC が交換相互作用とエンタングルすることで、磁化方向に対して異方性が生じることを明らかにした。

第6章では、強磁性ディラック電子系を設定し、その SHC における磁化依存性を研究した。この系での磁化に対する SHC の異方性は大きく、磁化が特定の軸に沿っている場合に最大となり、磁化がその向きとは直交しているときにはほぼ消失することが分かった。さらに、磁化がゼロに近づくにつれて、その振る舞いが発散することも見出した。この発散現象は、ディラック電子系における強磁性状態と常磁性状態の間の遷移に起因すると主張されている。

第7章では、本論文の総括と、今後の展望が述べられている。

この論文では、「強磁性体の AHE と SHE の相関」及び「磁化に関する SHC の異方性」の 2 つの問題に焦点を当て、さまざまなタイプの強磁性体の内因性スピンホール効果を数値的・分析的な第一原理手法を用いて研究している。前者に対しては、AHE と SHE とに直接的な関係がないことを示す結果を得た。また後者に対して、SHE が磁化方向に対し異方的であり、強磁性体で発生するスピン電流の大きさを磁化の方向変化で制御できることを示した。強磁性体の SHE は、実験的検証の難しさが壁となり理論的にも未熟な研究分野である。本研究は、将来のスピン트로ニクス研究を見据えて、その理論的な理解を深めようとする野心的な試みである。とくに、ベリー曲率を生むバンド構造をクラス I とクラス II に分類し、計算される結果を理解しやすい形で整理しつつ議論を展開した点が高く評価できる。実験へのフィードバックが今後期待され、物性科学、特にスピン트로ニクス研究分野への波及効果が期待できる。

なお、本論文は林将光、中村浩次の各氏との共同研究であるが、論文提出者が主体となって計画し計算・解析を行ったもので、論文提出者の寄与が十分であると判断する。したがって、博士 (理学) の学位を授与できると、審査員全員で判定した。