

スピン軌道結合によるトポロジカル物性設計

求 幸年

東大院工

物質中のスピン軌道結合がもたらす顕著な効果の一つに、トポロジカルな物性の発現が挙げられる。典型的には、電子のバンド構造に線形分散が現れ、スピン軌道結合や電子相関によってそのノード点にギャップが開き、ギャップ内やその近傍にフェルミエネルギーが来ることによって、様々な物理量や外場応答に量子化を含む異常な振る舞いが現れる。そこで重要となるのは、こうしたトポロジカルなバンド構造をどのようにすれば物質中に実現できるのか？という問題である。本講演では、この問題に対する我々の理論研究の成果について議論する。

まずは、層状ハニカム構造を有する遷移金属化合物に対する研究を紹介する[1-3]。層状ハニカム物質は、近年、遷移金属ダイカルコゲナイドやトリカルコゲナイドなどを中心に、ポストグラフェン物質として盛んに研究されている。我々は、こうした系に対する第一原理計算とモデル計算を組み合わせたアプローチにより、 d 電子の e_g 軌道の自由度を活用することで、多彩なバンドトポロジーとトポロジカル物性の実現が可能であることを明らかにした。

次に、最近トポロジカル磁性体として大きな注目を集めているキタエフ磁性体に関する研究を紹介する。ここでは、電子の代わりに、スピンの分数化に伴うマヨラナフェルミオンの励起構造に線形分散が現れ、磁場によってギャップが開くことで、トポロジカルな物性が発現することが期待されている[4]。我々は、こうしたトポロジカル磁性体の実現可能性を広げる目的で、これまで考えられてきた低スピン d 系ではなく、高スピン d 系[5]や f 電子系[6]における物質提案を行った。

参考文献

- [1] Y. Sugita, T. Miyake, and Y. Motome, Phys. Rev. B **97** (2018) 035125.
- [2] Y. Sugita, T. Miyake, and Y. Motome, Physica B: Cond. Matter **536** (2018) 48.
- [3] Y. Sugita and Y. Motome, preprint (arXiv:1805.07068).
- [4] A. Kitaev, Ann. Phys. (NY) **321** (2006) 2.
- [5] R. Sano, Y. Kato, and Y. Motome, Phys. Rev. B **97** (2018) 014408.
- [6] S.-H. Jang, R. Sano, Y. Kato, and Y. Motome, preprint (arXiv:1807.01443).