



電子構造のトポロジーに由来した巨大なホール効果を発見 —磁性体におけるトポロジカル電子状態の新奇物質探索と物性機能開拓に道—

1. 発表者：

- 上田 健太郎（東京大学大学院 工学系研究科 物理工学専攻 博士課程三年（研究当時）
／理化学研究所 創発物性科学研究センター 研修生（研究当時）
／独マックスプランク研究所 博士研究員（現在））
- 金子 竜馬（東京大学大学院 工学系研究科 物理工学専攻 博士課程一年
／理化学研究所 創発物性科学研究センター 研修生）
- 石塚 大晃（東京大学大学院 工学系研究科 物理工学専攻 助教
／理化学研究所 創発物性科学研究センター 客員研究員）
- 藤岡 淳（筑波大学大学院 理工学群 応用理工学類 准教授
／理化学研究所 創発物性科学研究センター 客員研究員）
- 永長 直人（理化学研究所 創発物性科学研究センター 副センター長
／東京大学大学院 工学系研究科 物理工学専攻 教授）
- 十倉 好紀（理化学研究所 創発物性科学研究センター センター長
／東京大学大学院 工学系研究科 物理工学専攻 教授）

2. 発表のポイント：

- ◆理論的に予言されていた磁性体（注1）中におけるワイル半金属（注2）の発見を、輸送測定と理論計算を用いて実証した。
- ◆ワイル半金属の有する線形なバンド交差点（ワイル点）は、運動量空間中の磁気単極子（注3）に対応する。これに由来して、巨大な自発的ホール伝導度（注4）が生じることを見出した。
- ◆時間反転対称性を破る系でのワイル半金属状態の発見は、希少な一例として、今後のトポロジカル電子相（注5）の物質探索指針と物性機能開拓に役立ち、ひいては新たな磁気メモリ素子等の応用につながることを期待される。

3. 発表概要：

物質中の電子構造は位相幾何学（トポロジー）に基づいて分類することができます。トポロジカルに非自明な電子構造は、基礎科学的観点からだけでなく低消費電力化など応用の観点からも重要視されています。ワイル半金属はその一つであり、理論研究が盛んに行われています。しかし、物質例が少なく実験が困難であるため、理解が十分に進んでいませんでした。

東京大学大学院工学系研究科の上田健太郎大学院生（当時）、理化学研究所創発物性科学研究センターの十倉好紀センター長らの研究グループは、磁性体において実現するワイル半金属状態を輸送測定により観測し、その電子状態のトポロジカルな性質が巨大な自発的ホール効果を引き起こすことを明らかにしました。

磁性体におけるワイル半金属状態の発見は、トポロジカル電子状態に関する知見を深化させるための重要な一歩であると同時に、今後の物質探索への指針を与えると期待されます。また、今回のホール効果の発見とその微視的機構の解明は、新たな磁気メモリ素子等の応用化につながると期待されます。

4. 発表内容：

① 研究の背景

電流と垂直に磁場がかかった際に、それらと垂直に電位差が生じる現象をホール効果と呼びます。特に、有限の磁化によって誘起されるホール効果を異常ホール効果と呼びます。異常ホール効果は、磁場に比例する通常のホール効果とは異なりゼロ磁場でも生じるために、基礎科学分野、応用科学分野の双方で精力的に研究がなされてきました。

異常ホール効果の生じる微視的機構の一つとして、電子バンド構造の位相幾何学（トポロジー）的な性質に起因する内因的機構があります。近年、この機構による巨大ホール効果が、トポロジカルに非自明なバンド構造を持つワイル半金属状態で発現すると提案されました。ワイル半金属は、時間反転対称性又は空間反転対称性（注6）の破れによって生じる非縮退の線形な電子バンドの交差点（ワイル点）で特徴づけられます。ワイル点は、磁束の湧き出しや吸い込みに対応する磁気単極子と見なすことができます。そのため、巨大な異常ホール効果をはじめとした非従来の磁気輸送現象を引き起こす可能性があり、大きな注目を集めています。

しかしながら、ワイル半金属が発現する物質は数少なく、その物性を実験的に調べるには不十分でした。特に、時間反転対称性を破った系におけるワイル半金属状態においては、多くの興味深い磁気輸送特性を示すことが予言されており、新物質の開拓が強く望まれていました。

② 研究内容

本研究グループでは、ワイル半金属の存在が理論的に予想されているパイロクロア型イリジウム酸化物 $\text{Nd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ と一部 Pr に置換した $(\text{Nd}_{0.5}\text{Pr}_{0.5})_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ に着目しました。この物質群は、イリジウムイオンと希土類イオンがそれぞれ四面体を組んで連なった、対称性の高い結晶構造を持ちます（図 1a）。磁気構造は、四面体頂点の全ての磁気モーメントが重心方向か、もしくは反対側を向く反強磁性的磁気構造（all-in all-out 構造）をとります（図 1b）。この構造は結晶の対称性を保持しつつ時間反転対称性を破るため、結果として運動量空間中に八つのワイル点を持つワイル半金属が実現する可能性があります。

この系においては、温度・外部磁場・圧力を調整することによってさまざまな電子、磁気相が現れることが、本研究グループの先行研究で明らかになっています。温度の高い相では常磁性金属ですが、転移温度以下になると磁気秩序を伴い絶縁体へ相転移します（図 1c）。[111] 結晶軸方向に磁場が増大すると（図 1d）、電気伝導度やホール伝導度が非単調に変化します（図 1e）。これは、磁気構造の変化に伴って電子状態が変化したことに起因します。

本研究では、all-in all-out 磁気相にあたる低磁場の振る舞いに着目しました（図 1f）。高い温度領域では自発的ホール伝導度はゼロでしたが、転移温度直下ではゼロ磁場周辺に明らかなヒステリシスが現れました（図 2a）。温度をわずかに下げると自発的ホール効果が急速に抑制されました。さらに、圧力を調整し転移温度を変化させたところ、同様のホール効果は磁気転移温度直下でのみ普遍的に現れることがわかりました（図 2b,c）。この特徴的な温度変化から、不純物などによる外因的機構ではなく、電子バンド構造に由来する内因的ホール効果と考えられます。この起源についてより知見を得るために、 $(\text{Nd}_{0.5}\text{Pr}_{0.5})_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ の磁化測定を行ったところ、通常の強磁性体が示す磁化よりも三桁小さい値をとることがわかりました（図 3）。立方対称の all-in all-out 磁気構造では自発磁化はゼロとなるはずですが、これは、対称性が低下して all-in all-out 磁気構造から磁気モーメントがわずかに傾いたためと考えられます。

わずかな磁化による巨大なホール伝導度の発生は、限られた温度領域でワイル半金属状態が実現し、運動量空間内のワイル点がフェルミ準位（注7）付近に現れたためと考えられます。

この仮定に基づき、私たちはホール伝導度の数値計算を行いました。その結果、ホール伝導度はワイル点の場所に強く影響され (図 4a,b)、磁気モーメントが傾くことによって有限の値を取ることを見出しました (図 4c,d)。実験で得られた磁化の値から傾きを見積もってホール伝導度を計算すると、実験値に近い値を再現することができました。

③ 今後の展望

本成果により、理論的に提唱されていたワイル半金属相の発現を実証することに成功しました。さらに、運動量空間中の「磁気単極子」に対応するワイル点が生じ、巨大な磁気応答を起こすことを明らかにしました。以上の結果は、数少ないワイル半金属相の重要な一例として、トポロジカル電子状態に関する基礎学理の構築につながると考えられます。また、観測されたホール効果の微視的機構の解明により、電子のトポロジカルな性質を利用した新奇物性開拓の指針になると期待できます。

5. 発表雑誌：

雑誌名：「*Nature Communications*」

論文タイトル：Spontaneous Hall effect in the Weyl semimetal candidate of all-in all-out pyrochlore iridate

著者：K. Ueda *, R. Kaneko, H. Ishizuka, J. Fujioka, N. Nagaosa, and Y. Tokura *

DOI 番号：10.1038/s41467-018-05530-9

アブストラクト URL：<http://www.nature.com/ncomms>

6. 問い合わせ先：

(研究に関すること)

独マックスプランク研究所

博士研究員 上田 健太郎 (うえだ けんたろう)

東京大学大学院 工学系研究科 物理工学専攻 教授
理化学研究所 創発物性科学研究センター センター長
十倉 好紀 (とくら よしのり)

7. 用語解説：

(注1) 磁性体

磁性とは、内部に各電子の回転運動に起因した微小な磁石 (スピン) が生じさせる物性のこと。磁性を持つ物質 (磁性体) は通常冷却すると、巨視的な数の電子スピンの何らかのパターンで整列する磁気秩序を示す。主として、磁石としての巨視的な磁化を示す鉄・コバルト・ニッケルなどの「強磁性体」、磁化が内部で打ち消されている「反強磁性体」、スピンの秩序化しない「常磁性体」などに分類される。

(注2) ワイル半金属

ワイル半金属は、時間反転対称性又は空間反転対称性のいずれかが破れることで縮退の解かれた線形な電子バンドが点接触した電子構造を持つ。接点はワイル点と呼ばれる。ワイル点付近の電子の運動が相対論的量子力学で用いられるワイル方程式で記述できることが、名前の由来となっている。

(注3) 磁気単極子

磁気単極子とは、磁場の湧き出しもしくは吸い込みとなる素粒子のことで、P. M. A. Diracによってその存在が理論的に提唱された。

(注4) ホール伝導度

ホール効果とは、電流に対して磁場をかけたときに、電流と磁場の両方に直交する方向に起電力が現れる現象のこと。ホール抵抗率は、横方向の電圧に対して縦方向の電流で割った値として定義され、ホール伝導度は抵抗率テンソルの逆行列非対角項として定義される。

(注5) トポロジカル電子相

トポロジカル電子相とは、電子波動関数の特殊な幾何学的位相を反映した電子相のこと。固体中の電子は波として振る舞うため、波を特徴づける量である位相が、電子の運動に重要な役割を果たす。相対論的スピン軌道相互作用の強い系などにおいて、しばしば位相に量子力学的な項が生じ、古典論では説明できない現象が現れる。例として、中身は絶縁体であるにもかかわらず表面は金属であるトポロジカル絶縁体や、相対論的量子力学で用いられるディラック方程式またはワイル方程式で電子の運動を記述できるディラック半金属、ワイル半金属が挙げられる。

(注6) 時間反転対称性・空間反転対称性

時間反転対称性とは、ある事象が、時間の反転 ($t \rightarrow -t$) に対して不変かどうかを表す指標のこと。空間反転対称性とは、ある事象が、空間の反転 ($x, y, z \rightarrow -x, -y, -z$) に対して不変かどうかを表す指標のこと。

(注7) フェルミ準位

固体中の電子が取り得るエネルギーと運動量の関係を表した曲線をバンド構造と呼ぶ。電子は金属的なバンド構造の底から順にバンドを占有する。フェルミ準位とは、絶対零度において電子が占有する最大のエネルギーのこと。

(注8) チャーン数

位相幾何学における、分類を特徴づける数値のこと。固体物理学においては、フェルミ準位より下のブロッホバンド全てのベリー曲率の運動量積分で定義され、そのバンドのトポロジー（渦度）が表現される。

8. 添付資料：

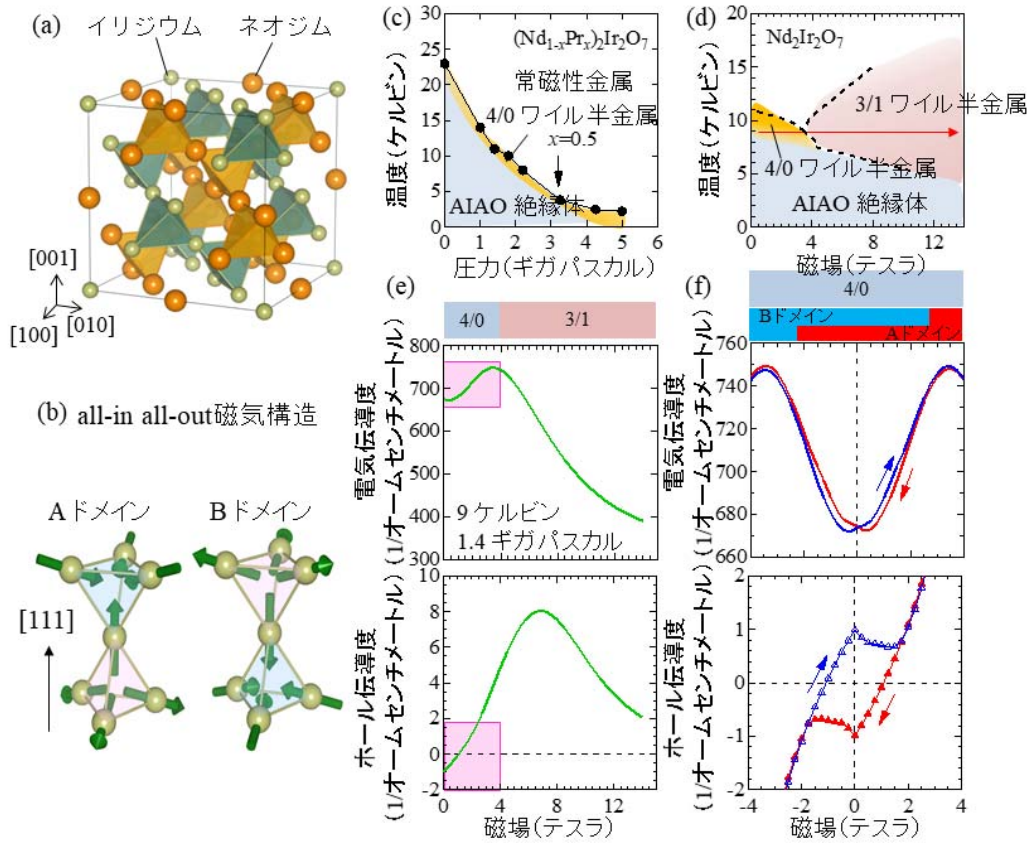


図1：(a) パイロクロア型イリジウム酸化物 ($\text{Nd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$) の結晶構造。(b) all-in all-out 磁気構造。頂点上のモーメント (矢印) が内向きの四面体 (青) と外向きの四面体 (赤) があり、磁気ドメインによって対応する四面体が異なる。(c) 温度、圧力の相図。(d) 1.4 ギガパスカルにおける温度、磁場の相図。(e) 9 ケルビン、1.4 ギガパスカルにおける電気伝導度とホール伝導度の磁場依存性。(f) 図 1e の低磁場領域。赤線が降磁場過程、青線が昇磁場過程。矢印は、磁場の掃印過程を示す。

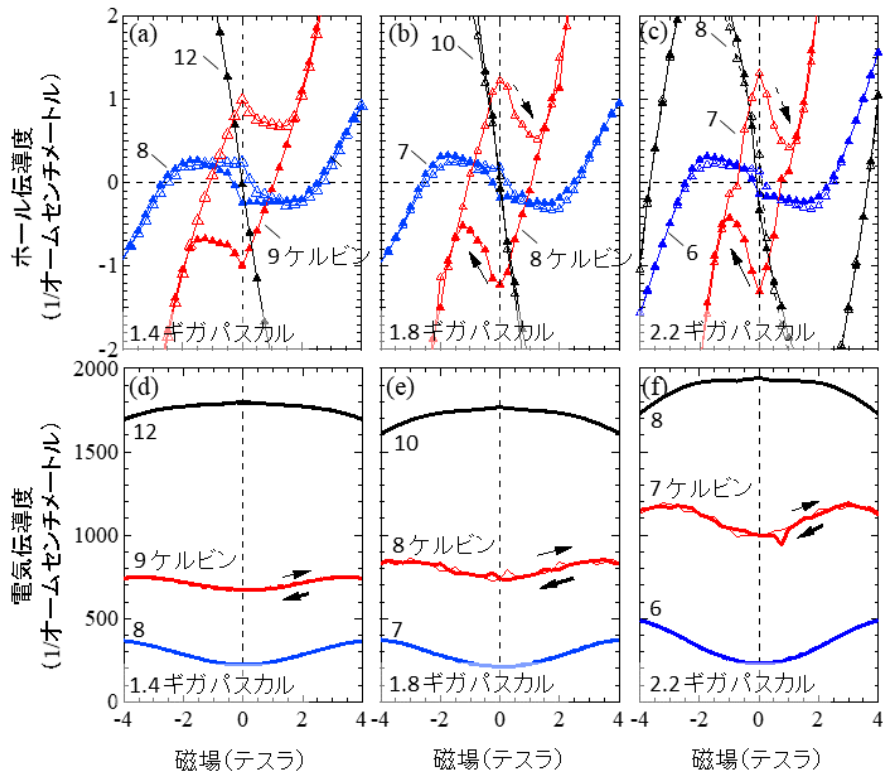


図 2： (a) 1.4 ギガパスカル、 (b) 1.8 ギガパスカル、 (c) 2.2 ギガパスカルにおけるホール伝導度の磁場依存性。 (d) 1.4 ギガパスカル、 (e) 1.8 ギガパスカル、 (f) 2.2 ギガパスカルにおける電気伝導度の磁場依存性。

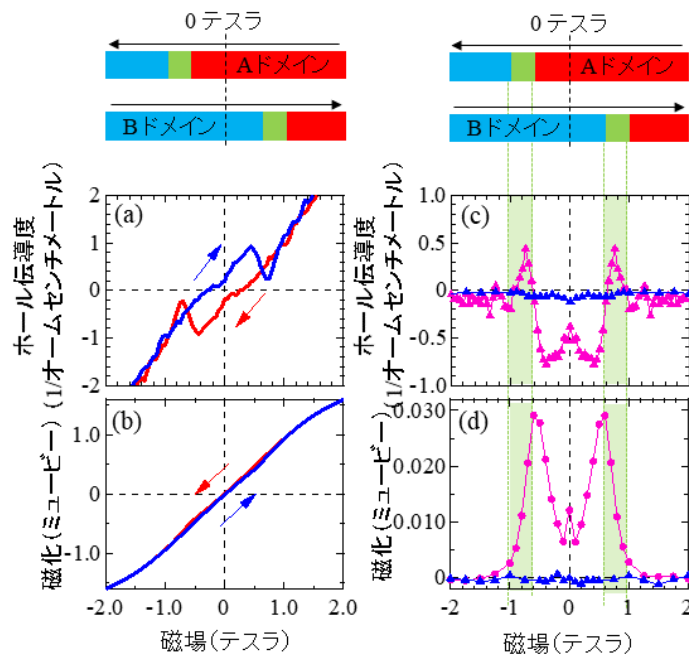


図 3： (a) ホール伝導度の磁場依存性。 (b) 磁化の磁場依存性。下向きの矢印のある赤線が降磁場過程、上向き矢印のある青線が昇磁場過程。 (c) 降磁場過程と昇磁場過程のホール伝導度の差。 (d) 降磁場過程と昇磁場過程の電気伝導度の差。図上部のバーは降磁場過程と昇磁場過程における磁気ドメインの状態を表す。ドメインが切り替わるところでホール伝導度、磁化のヒステリシスが閉じているのがわかる。

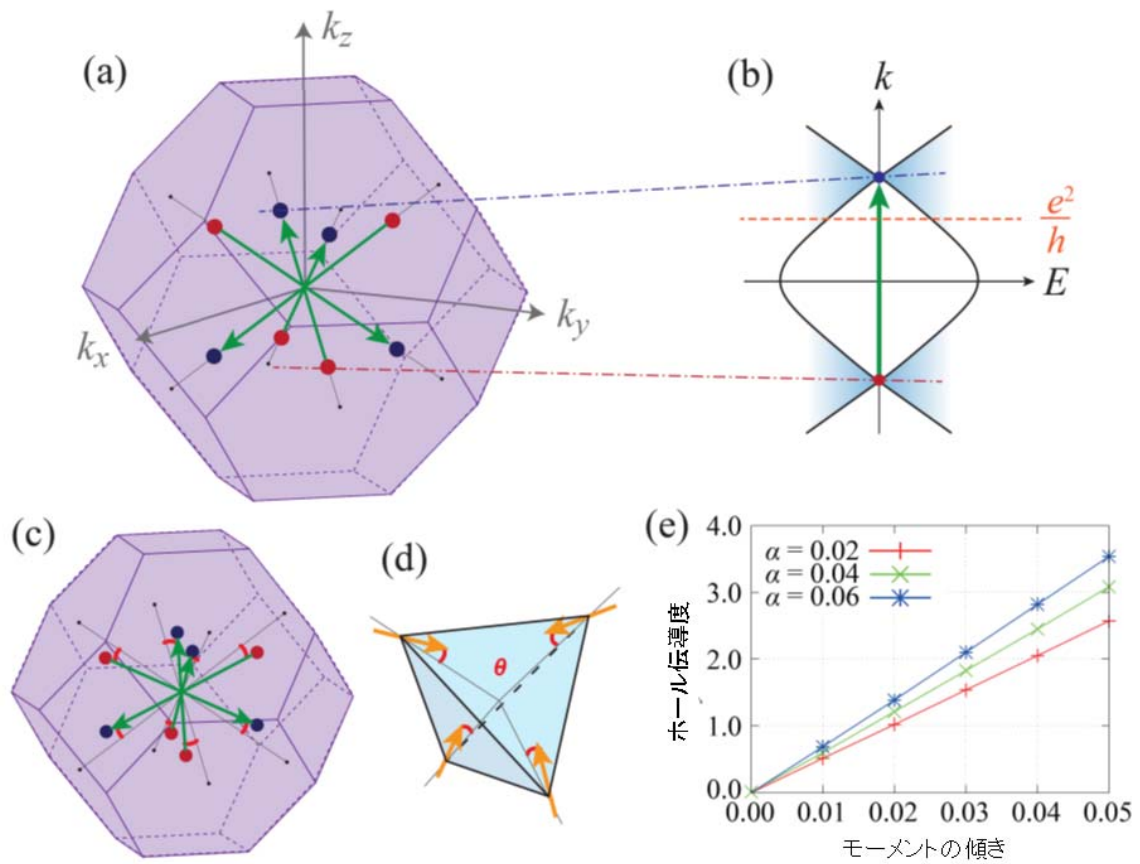


図 4: (a) ブリルアンゾーン内におけるワイル点の模式図。赤（矢印の出発点）、青（矢印の先）の点がそれぞれ量子磁束の湧き出し、吸い込みに対応している。(b) ブリルアンゾーンの断面。ワイル点間において、トポロジカルな性質を特徴づけるチャーン数（注 8）が有限の値 (e^2/h) を取ることを示している。(c) 四面体の頂点に位置する磁気モーメントが傾いたときのワイル点の位置関係。(d) 磁気モーメントが傾いた時の模式図。(e) モーメントの傾きに対するホール伝導度の計算結果。