

第一原理計算によるトポロジカル物性予測

Topological properties of electronic structures from first-principles calculations

東北大, 是常 隆

Tohoku Univ., Takashi Koretsune

E-mail: koretsune@cmpt.phys.tohoku.ac.jp

近年、電子構造のトポロジカルな性質であるワイル点やベリー曲率といったものが、直接物性に関わってくることが明らかになり、注目を集めている。なかでも、異常ホール効果や異常ネルンスト効果はその顕著な例である。もともと、これらの物理量は、磁化が磁場の代わりを担うことで発現する現象だと考えられていた。一方、理論的には、磁化が存在することによって電子構造が有するトポロジカルな性質が仮想磁場の役割を果たし、それによって異常ホール効果や異常ネルンスト効果が現れるということも分かっていた。近年発見された Mn_3Sn や Mn_3Ge といった反強磁性体における大きな異常ホール効果、異常ネルンスト効果は、磁化そのものではなく、この仮想磁場が重要であることを認識させるものだったといえる。

本講演では異常ホール効果や異常ネルンスト効果が電子構造のトポロジカルな性質とどう繋がっているかを説明し、反強磁性体を含む一般の磁性体で、これらの効果が発現する条件について議論する[1]。さらに、これらのトポロジカルな性質を第一原理的に計算する手法を紹介し、 Mn_3Sn や Mn_3Ge において計算結果がどの程度実験を再現するかを議論する[2]。また、これらの手法をもとに、最近我々が取り組んでいるトポロジカル磁性物質探索についても紹介する。

[1] M.-T. Suzuki, T. Koretsune, M. Ochi, and R. Arita, Phys. Rev. B **95** 094406 (2017).

[2] M. Ikhlas, et al. Nature Physics **13** 1085 (2017).