

# スピン空間群による磁性体の創発的応答の解明

渡邊 光 〈東京大学大学院理学系研究科 hikaru-watanabe@g.ecc.u-tokyo.ac.jp〉

野本拓也 〈東京都立大学理学部 tnomoto@tmu.ac.jp〉

有田亮太郎 〈東京大学大学院理学系研究科/理化学研究所創発物性科学研究センター arita@riken.jp〉

多粒子の系では、結晶格子の形成や電子スピンの一様な偏極など、様々な自発的対称性の破れが現れる。これら秩序化は個々の原子からは想像できない多彩な物性応答をもたらす、物性物理の研究における重要なキーワードの一つである。たとえば、結晶中の電子スピンの秩序化した磁性体においては時間反転対称性の破れが生じ、異常ホール効果や磁気ピエゾ効果と呼ばれる応答が現れうる。秩序相を特徴づけるこれらの物性を考える際は、いかなる対称性の破れが起きているか把握することが肝要であり、磁性体の場合には数学的道具として磁気空間群がしばしば用いられている。

実際に磁性体の物性を調べるためには、スピン秩序構造の情報を取り込んだ電子系のハミルトニアンに基づき各種物理量を計算すればよい。しかし、この手順より得られた結果が磁気空間群に基づく解析結果と一致しない場合がある。これは採用したハミルトニアンが磁気空間群よりも高い対称性を持ち、スピン空間と軌道空間（結晶格子などが定義された空間）が分離していることに起因する。このとき、ハミルトニアンは、磁気空間群とは異なる**スピン空間群**と呼ばれる対称性を持つ。例えば、スピンの一様に揃った強磁性体ではスピン空間の対称性は大幅に低下するが、軌道空間の対称性には変化がない。実際、スピン空間の回転操作は結晶の回転操作とは別個に取ることができて（**スピン空間群の対称操作**）、無秩序相（常磁性相）における結晶の並進や回転に関する対称性は強磁性状態でも保持される。

スピン空間群と磁気空間群を比較したとき、後者では**スピン軌道相互作用**の効果が

考慮されている。相対論的効果であるスピン軌道相互作用はスピン空間と軌道空間を結びつけるため、結晶格子とスピンは同じだけ回転させなければならない。この制約は対称性のさらなる低下を伴うため、スピン空間群では禁制されていた物理現象も磁気秩序とスピン軌道相互作用の組み合わせによって許容されるようになる。

では、対称性の破れによる応答を調べる上で、磁気空間群に比べて対称性の高いスピン空間群にはどのような利点があるのか？ その答えの一つとして、創発的な応答に関連するエネルギースケールの階層性を対称性により判定できる点が挙げられる。

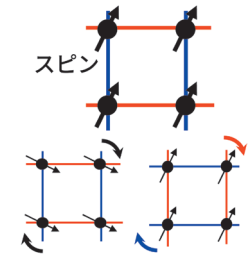
スピン空間群で特徴づけられる磁気秩序状態では無秩序状態と比較して、磁性の発現に関与した電子間クーロン相互作用による状態の変化が見られる。FeやMnなどの3d遷移金属元素の場合、そのエネルギースケールは1 eV程度となり、これらの元素の相対論的スピン軌道結合エネルギー（1-10 meV）に比べてはるかに大きい。そこで、常磁性相の対称性・スピン空間群・磁気空間群を用いて物性応答を解析し比較することで、物性応答に対するスピン秩序やスピン軌道相互作用の効果を調べることができる。例として、ある種の磁性体では、クーロン相互作用のためにスピン自由度の絡んだ巨大な物理応答が現れる。このときスピン軌道相互作用は応答係数の異方性を与えるのみで、本質的に応答を決めてはいない。特に3d遷移金属元素のような軽元素では、先述したエネルギースケールの大きな違いを利用することで、対称性の解析から物性値の半定量的な見積もりが可能である。

## 用語解説

### スピン空間群：

結晶格子の回転、スピンの回転、結晶格子とスピンの平行移動の組み合わせとして、元の結晶構造や磁気秩序のパターンを不変に保つもの集まり。ただし、結晶格子やスピンの回転操作は一致しなくてもよい。

### スピン空間群の対称操作：



（上段）格子点に局在した電子スピンの秩序。ここではスピンの向きが一様な強磁性状態を仮定した。

（下段）回転操作として、スピンのみ回転（左パネル）、格子のみ回転（右パネル）させる操作。スピン軌道相互作用を考慮する場合にはこれらの操作を同時に行う必要がある。

### スピン軌道相互作用：

ディラックハミルトニアンに非相対論的極限の近似を適用した場合に、相対論的補正として現れる軌道運動とスピンの間の結合エネルギー。典型的には原子番号や外殻電子の方位量子数に依存する。