



Title	Classification of Multipole in Magnetic Point Group and Exploration of Augmented Odd-Parity Multipole Physics [an abstract of dissertation and a summary of dissertation review]
Author(s)	八城, 愛美
Citation	北海道大学. 博士(理学) 甲第14781号
Issue Date	2022-03-24
Doc URL	http://hdl.handle.net/2115/85847
Rights(URL)	https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/
Type	theses (doctoral - abstract and summary of review)
Additional Information	There are other files related to this item in HUSCAP. Check the above URL.
File Information	Megumi_Yatsushiro_abstract.pdf (論文内容の要旨)



[Instructions for use](#)

学位論文内容の要旨

博士の専攻分野の名称 博士 (理 学) 氏 名 八城 愛美

学位論文題名

Classification of Multipole in Magnetic Point Group
and Exploration of Augmented Odd-Parity Multipole Physics
(磁気点群のもとでの多極子の分類論と拡張奇パリティ多極子物理の開拓)

多極子の概念は、元々古典電磁気学においてスカラーポテンシャルやベクトルポテンシャルの源である電荷や電流の空間分布を表現する際に導入されたものである。量子力学におけるミクロな世界では、多極子は演算子として表され、電子がもつ電荷、スピン、軌道といった電子自由度のミクロな空間分布を表現する際に用いられる。特にミクロな多極子は、固体中における相対論的スピン軌道結合や結晶場効果などの複合的な要因のもとで生じる電子の異方性を系統的に表現することができるため、電子相関の効果により複雑な電子秩序相が生じる d, f 電子系において用いられてきた。

一方近年では、さまざまな物性現象を多極子の概念に基づいて整理・理解することを目的とし、従来 d, f 電子系で対象とされていた、1 原子内かつ単一の軌道角運動量内の電子自由度だけではなく、異なる軌道角運動量間にまたがる電子自由度や、複数原子にわたる電子自由度についても多極子を用いて表現する、といった形でミクロな多極子の概念を拡張する試みが行われている。こうした様々な方向性のもとで拡張された多極子の概念は、総称して「拡張多極子」と呼ばれる。拡張多極子には、異なる軌道角運動量間の電子自由度を表現するハイブリッド多極子、複数原子にわたる自由度を表現するクラスター多極子、複数原子を結ぶボンド自由度を表現するボンド多極子、運動量空間における電子のバンド構造を表現する k 多極子が存在する。これらの多様な電子自由度を多極子という共通した概念で系統的に表現することで、固体中にみられる多様な物性現象の起源を、ミクロな電子自由度の立場から見通しよく理解することが可能になる。また、自発的な電子秩序の分類や、電子秩序中で生じるバンド変調、外場応答などを統一的に調べることができる。加えて、多極子自由度は固体中の対称性に適合した基底であるため、物性現象に対して微視的な電子自由度かつ対称性に基づいた解析を行うことができるという利点がある。

著者と共同研究者らは、固体の点群対称性を特徴づける 32 種類の結晶点群のもとで多極子自由度がどのような表現の基底であるかを分類することで、対称性の枠組みを超えて物性現象をより見通しよく理解するための方法論を確立してきた。その一方で、近年では磁性体、特に反強磁性体において巨大な異常ホール効果、電気磁気効果、非線形光学応答などの興味深い現象が見出されている。こうした磁性体が示す多彩な物性現象を多極子の立場から系統的に分類・整理するためには、32 種類の結晶点群では不十分であり、時間反転対称性を考慮した 122 種類の磁気点群まで理論形式の枠組み拡張する必要があった。

そこで本研究では、122 種類の磁気点群のもとで、電子自由度を系統的に表現することができる四種類の多極子（電気多極子、磁気多極子、電気トロイダル多極子、磁気トロイダル多極子）を用いて、各磁気点群の既約表現における基底を群論的手法により系統的に分類した。従来の結晶点群における解析では取り扱われていなかった時間反転操作を含む非ユニタリー群に対する表現論を用いることで、磁気点群で表されるあらゆる磁気秩序状態およびそれらが示す外場応答に重要な多極子を統一的に明らかにした。また、既知である線形応答関数と多極子自由度の関係性のみならず、非線形応答関数に対して理論を発展させることで、二次の非線形応答関数と多極子自由度の関係性を明らかにした。これにより、多極子を用いて強磁性体や反強磁性体を系統的に分類することに成功し、さらにそれらのもとで生じる物性現象の微視的起源を系統的に調べることが可能になった。

加えて著者は、上記で得た理論形式を2つの具体的な物質に適用することで、空間反転対称性が破れた際に現れる拡張奇パリティ多極子が示す物性現象の開拓を行った。一つ目は、スピンの渦状配置を表現する磁気トロイダル双極子の秩序が生じた際の非線形伝導現象である。磁気トロイダル双極子が生じた場合には、対称性からは電場に関して二次の非線形伝導の発現が期待されるが、加えてホッピングや相対論的スピン軌道相互作用などの微視的要素の内、どのような要素が不可欠であるかは自明ではない。そこで、ジグザグ鎖上の磁気トロイダル双極子を伴う共線型反強磁性構造に対し、二次の非線形伝導の発現に必要な微視的要素を模型計算によって調べた。その結果、磁気トロイダル双極子と原子サイトの局所反転対称性の破れに由来した反対称スピン軌道相互作用の微視的な結合が二次の非線形伝導の発現に不可欠であることを明らかにした。また、非線形伝導度をより大きくするための条件や、磁気トロイダル双極子の下で生じるその他の物性現象である電気磁気効果の模型パラメータ依存性や温度依存性との相違点についても議論している。

二つ目は、*f*電子系化合物 CeCoSi を対象とした奇パリティ拡張多極子秩序および交差相関応答現象の理論解析である。CeCoSi では、圧力-温度-磁場下で現れる異なる二つの相（反強磁性相と反強四極子秩序相）で拡張奇パリティ多極子が発現している可能性が実験的に指摘されている。そこで、局在および遍歴的な立場から二つの模型を構築し、それぞれの模型に対して拡張奇パリティ多極子を伴う反強磁性秩序と反強四極子秩序の安定性を自己無撞着な平均場計算を用いて調べた。局在模型に対する解析からは、実験的に常圧から 1.5 GPa 程度で示唆されている反強四極子秩序相から反強磁性相への転移を再現することが可能であり、一方で遍歴模型に対する解析からは、反強四極子秩序が高圧領域の基底状態で安定に存在することが可能であることを明らかにした。加えて、平均場解を用いて拡張奇パリティ多極子秩序中で生じる電気磁気効果の振る舞いを二軌道遍歴模型を用いて解析することで、Ce 電子がもつ軌道間自由度が重要な微視的要素であることを明らかにした。さらに、奇パリティ多極子を直接観測するための理論枠組みの構築を核四極子共鳴 (NQR)・核磁気共鳴 (NMR) の共鳴スペクトルに対して行った。その結果、奇パリティ多極子の発現は Co 核における NQR・NMR スペクトルの副格子位置に依存したスペクトル分裂として検出可能であり、さらに外部磁場の角度依存性を測定することで奇パリティ多極子秩序変数の同定が可能であることを明らかにした。