



HOKKAIDO UNIVERSITY

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; Yatsushiro, Megumi
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(理学)
Dissertation Number	甲第14781号
Issue Date	2022-03-24
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/85847
Rights(URL)	https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/
Type	doctoral thesis
File Information	Megumi_Yatsushiro_review.pdf, 審査の要旨



学位論文審査の要旨

博士の専攻分野の名称 博士(理学) 氏名 八城愛美

審査担当者 主査 教授 北 孝 文
副査 教授 網 塚 浩
副査 准教授 柳 澤 達 也
副査 講師 速 水 賢 (東京大学大学院工学系研究科)

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)

博士学位論文審査等の結果について (報告)

近年、電気磁気応答や異常ホール効果といった多様な電磁気応答現象を通じて、スピン軌道相互作用の強い d ・ f 電子系に対する研究が精力的に行われている。こうした物性現象を対称性や微視的な視点から系統的に理解する上で多極子という概念がしばしば用いられる。多極子は固体中の一原子・単一軌道上の異方的な電荷分布や電流分布を表すのに用いられており、電子が強く局在化している f 電子系を中心にして理解が進められてきた。一方で近年、こうした多極子を混成軌道やクラスターに拡張して適用し、その概念をより多くの電子自由度を包括的に表現できるように拡張することで(拡張多極子)、従来はありふれた秩序とみなされていた反強磁性秩序がもたらす新規物性現象を開拓しようとする試みが行われている。

多くの反強磁性秩序においては、時間反転対称性および時間反転操作と結晶点群操作の積からなる対称性の破れが生じるが、それらが破れた際にどのような電子自由度が顕在化し、種々の物性現象を引き起こすか、といった問題は重要課題のひとつとなっている。上記の背景のもと、本論文では、122 個の磁気点群全てに対して 4 つの多極子自由度(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)を系統的に分類することにより、磁気秩序相をはじめとする時間反転対称性の破れを示す電子秩序相が示す交差相関現象および輸送現象の理論的開拓を行った。その結果、未開拓の多極子の分類論を構築し、空間反転対称性の破れのもとで現れる奇パリティ多極子がもたらす電気磁気効果や非線形伝導の微視的な理解に成功した。本論文は 5 章から構成されており、以下にその概要を述べる。

第 1 章では、本研究の背景として、拡張多極子についての先行研究をまとめている。電子がもつ電荷・スピン・軌道自由度と多極子自由度の関係から、それらが 32 個の結晶点群のもとでどのように分類されるかを記述し、本論文の研究動機となる課題も明確に示している。

第 2 章では、122 個の全ての磁気点群のもとでの、4 つの多極子自由度に対する系統的な分類論について述べている。それぞれの磁気点群の既約表現に属する多極子自由度を記した網羅的な表の作成を行うことで、対称性と多極子自由度の関係性を明確に示した。さらに、多極子自由度が顕在化した際に生じる物性現象を系統的に明らかにした。その際、線形応答理論および非線形応答理論を用いて、微視的な電子の遷移プロセスとの関係性を議論した。

第 3 章では、時間反転対称性および空間反転対称性の両方が同時に破れた際に発現する磁気トロイダル双極子がもたらす非線形伝導現象の微視的起源について議論している。拡張多極子概念を用いて、模型構築および解析を行うことにより、磁気トロイダル双極子と結合するスピン軌道

相互作用の条件を見出し、それが非線形伝導現象の発現に本質的に重要な役割を担うことを明らかにした。また、磁気トロイダル双極子秩序下で生じる他の物性現象である電気磁気効果との比較を行うことで、非線形伝導と電気磁気効果の関係性を指摘した。

第4章では、近年、拡張奇パリティ多極子を内包する候補物質として提唱されている f 電子系化合物 CeCoSi を対象とした解析を行っている。CeCoSi では、圧力-温度-磁場下で現れる異なる二つの秩序相(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の発現が示唆されている。局在的および遍歴的な描像から二つの微視的モデルを構築し、それぞれのモデルに対して拡張奇パリティ多極子を伴う秩序相が発現する可能性を平均場計算によって調べた。その結果、局在モデルにおいては、実験で観測された反強四極子秩序相から反強磁性秩序相への相転移が再現され、遍歴モデルにおいては、反強四極子秩序が高圧領域で基底状態として安定に存在できることを示した。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い、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、奇パリティ多極子が検出可能であることを明らかにした。

第5章では、本研究によって得られた成果がまとめられている。

以上をまとめると本論文における磁気点群のもとでの多極子の網羅的な分類論の構築は、(1) 時間反転対称性の破れた電子系におけるあらゆる秩序変数の系統的な記述、(2) 物性現象に必要な微視的な電子自由度の理解、(3) 微視的な立場からの有効ハミルトニアン構築、を可能にする包括的な知見を与えるものである。この成果は、広く物質のもつ多様な自由度と交差相関現象や輸送現象といった様々な物性現象との関連の理解に大きく貢献し、今後のさらなる機能性物質探索への重要な指針を与えると期待される。

よって著者は、北海道大学博士(理学)の学位を授与される資格あるものと認める。