

大阪科学・大学記者クラブ 御中

(同時提供先：文部科学記者会、科学記者会)

2024年4月24日

大阪公立大学

## 理論予測と実証実験で明らかに！ 新しい磁性体「交替磁性体」特有の“指紋”を発見

### <ポイント>

- ◇近年注目を集める新たな磁性体「交替磁性体」の同定方法を、理論・実験の両面から検証。
- ◇交替磁性体にもみ見られる特有の X 線磁気円二色性 (XMCD) 応答を、理論的に予測。
- ◇XMCD 測定実験により、理論予測が正しいことを実験で実証。

### <概要>

2022年に新たに提案された「交替磁性体」は、ハードディスクなどの記憶メディアに使用される「強磁性体」と、磁場の大きさ・方向を計測する磁気センサなどへの応用が進む「反強磁性体」の両方の性質を併せ持つ、新たな磁性体です。交替磁性体は、超高速な情報処理が可能な記憶メディアへの応用などが期待されており、既存の磁性物質の中から交替磁性体を探し出す方法の確立が求められています。

大阪公立大学大学院工学研究科の播木 敦准教授と山口 達也大学院生(当時 博士前期課程2年)の研究グループは、ウィーン工科大学の Jan Kuneš 教授らの研究グループと共同で、交替磁性体の候補物質である  $\alpha$ -MnTe を対象に、交替磁性体の同定方法を理論・実験の両面から検証。交替磁性体特有の“指紋”(X 線磁気円二色性 (XMCD) スペクトル<sup>\*1</sup>) をスーパーコンピュータによる理論シミュレーションで発見し、英国の大型放射光実験施設 Diamond Light Source での XMCD 測定実験により、本スペクトルの実験的実証に世界で初めて成功しました。本成果は、交替磁性体の簡単な同定や性能評価に XMCD 測定が有効手法であることを示しており、交替磁性体のスピントロニクスへの応用をより一層加速させると期待されます。

本研究成果は、米国物理学会が刊行する国際学術誌「Physical Review Letters」に、2024年4月23日に掲載されました。

実験に先駆けて行った理論計算では、信頼性のある予言スペクトルを得るために何度も検証を重ねて計算を行いました。最終的に理論計算と検証実験の結果が完璧に一致したときは嬉しかったです。今後は、XMCD を用いて新しい交替磁性体の同定や性能評価が行われることを期待します。自分の携わった研究成果が、このような形で世に出ることを光栄に思います。

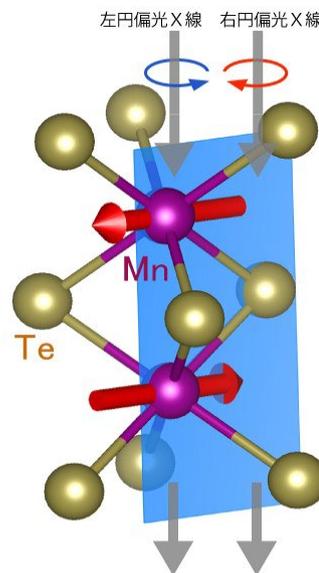
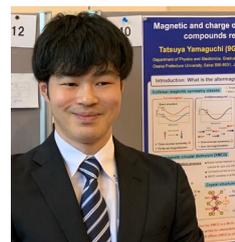


図1 交替磁性体に円偏光した X 線を入射する様子



山口 達也大学院生

## <研究の背景>

電子は、電流を担う電荷の性質に加えてスピンと呼ばれる小さな磁石の性質を有します。このスピンの物質内部で一斉に、かつ一つの方向に整列して磁力を強め合った「強磁性体」は、永久磁石やハードディスクなどに使われています。一方で、電子のスピンが原子の配列に沿って交互に整列し互いの磁石を打ち消した物質は「反強磁性体」と呼ばれ、磁気センサなどの磁気デバイスへの応用が進められています。

ごく最近、この2つの磁性体の応用上有益な特徴を併せ持った新しい磁性体「交替磁性体 (Altermagnet)」の存在が理論的に提案されました。交替磁性体は、強磁性体のようにスピン分裂したバンド構造を持ちながら、反強磁性体のように磁力（磁化）を打ち消す特徴があり、高速なスピントロニクス技術を実現する新しい磁性材料として期待されています。しかし、数多ある既存の磁性体の中から交替磁性体を見つけ出し、その磁気性能を評価できる方法はまだ確立されていません。

## <研究の内容>

研究の始まりは、交替磁性体の候補物質  $\alpha$ -MnTe に対して、右回りと左回りに円偏光した X 線を、物質に照射した際の吸収の差分スペクトル「X 線磁気円二色性 (XMCD)」が生じる可能性を見出したことです。交替磁性体と同じく磁化がゼロの反強磁性体では、XMCD は反対向きのスピンの間で逆符号となり、互いに打ち消しあってゼロになることがよく知られています。この常識を覆し、交替磁性体のみに見られる XMCD を特定し、実験検証をするためには、高精度な理論予測が必要です。

そこでまず、本学で開発した第一原理計算と量子多体理論（動的平均場理論）を融合させた X 線スペクトル計算パッケージと、スーパーコンピュータを組み合わせた数値シミュレーションによる理論予測を行いました。その結果、XMCD スペクトルの振動構造が、交替磁性体固有のスペクトル（指紋）であることを見つけました（図2中段）。

次に、本理論予測を確認するため、英国、ドイツ、チェコ、オーストリアの実験グループと共同で、英国の大型放射光施設 Diamond Light Source で検証実験を行いました。その結果、理論予測と完璧に一致したスペクトルの振動構造を得ることができました。磁場をかけて磁性状態を変えた場合の XMCD スペクトル（図2下段）が、元の形状から一変するという検証結果も、交替磁性体に固有なスペクトルであることを裏付けています。このように、XMCD の形状から交替磁性体を特定し、磁化の情報を抽出できることが示されました。

## <期待される効果・今後の展開>

本研究成果により、磁性体に広く適用できる比較的簡便な実験手法である XMCD を用いることで、交替磁性体の同定や性能評価が可能になりました。今後は、XMCD により新しい交替磁性材料の発見が効率よく進むことで、交替磁性体を利用した高速スピントロニクス技術の実現が加速することが期待されます。

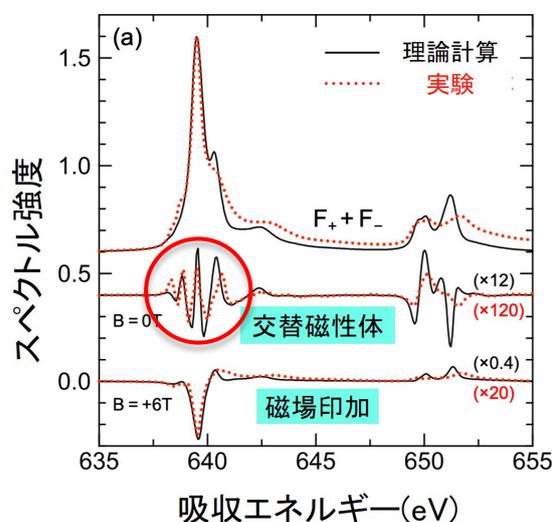


図2 X線の吸収強度（上段）とその差分のXMCD（中段）の理論計算（黒線）と実験結果（赤線）の比較。下段は磁場を印加した場合の結果。

### <資金情報>

本研究は、日本学術振興会 科研費 若手研究 (21K13884)、基盤研究 B (21H01003)、基盤研究 C (23K03324)、学術変革領域研究 B (23H03816、23H03817)、2023 年度大阪公立大学戦略的研究推進事業 (若手研究者支援) による支援を受けて行われたものです。

### <用語解説>

※1 XMCD スペクトル…XMCD 法では、高いエネルギー (約 645 電子ボルト) の X 線を照射することで、Mn 原子の 2p 内殻電子を、交替磁性を担う Mn 3d 軌道(バンド)へ励起する。右回りと左回りの円偏光で励起 (吸収) 強度が違うことに加えて、Mn 2p 内殻軌道にできる正孔と Mn 3d 電子の間の相互作用 (多重項効果) により振動構造が生じる。この構造は磁性状態に固有で“指紋”と見なすことができる。

### <掲載誌情報>

【発表雑誌】 Physical Review Letters

【論文名】 X-ray Magnetic Circular Dichroism in Altermagnetic  $\alpha$ -MnTe

【著者】 A. Hariki, A. Dal Din, O. J. Amin, T. Yamaguchi, A. Badura, D. Kriegner, K. W. Edmonds, R. P. Champion, P. Wadley, D. Backes, L. S. I. Veiga, S. S. Dhesi, G. Springholz, L. Smejkal, K. Vyborny, T. Jungwirth, and J. Kunes

【掲載 URL】 <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.132.176701>

#### 【研究内容に関する問い合わせ先】

大阪公立大学大学院工学研究科  
准教授 播木 敦 (はりき あつし)  
E-mail : [hariki@omu.ac.jp](mailto:hariki@omu.ac.jp)

#### 【報道に関する問い合わせ先】

大阪公立大学 広報課  
担当 : 竹内  
TEL : 06-6605-3411  
E-mail : [koho-list@ml.omu.ac.jp](mailto:koho-list@ml.omu.ac.jp)