

非線形応答を生み出すモデルパラメータの系統的抽出法

[1] 要旨

近年、反強磁性体の異常ホール効果・ネルンスト効果といった電気伝導や熱伝導、電気磁気効果などの交差相関応答が盛んに研究されている。このような線形および非線形物性応答の分析において、一体の遍歴電子模型に含まれる微視的パラメータのうち応答の発現に不可欠なパラメータを特定するための系統的な解析法が提案された。応答の発現に不可欠なパラメータが明らかになると、多様な物性応答に対して発現機構の微視的な理解が進み、新たな機能性物質の開発においても有益な指針が得られる。

[2] 本文

近年、反強磁性秩序下で生じる異常ホール効果や、空間反転対称性が欠如した非磁性体における非線形光学応答など、線形および非線形の多彩な物性応答に注目が集まっている。これらの物性応答の微視的起源の解明を目指す理論研究では、主に第一原理電子状態計算に基づく数値解析や、群論と多極子表現論に基づく分析が行われており、波数空間の仮想磁場であるベリー曲率やトポロジカルなエネルギーバンド構造との関連も議論されている。第一原理電子状態計算では詳細な電子状態を定量的に取り込むことができ、多極子を用いた議論では応答の発現に関わる電子自由度を特定できる。しかし、こうした議論には通常多くのモデルパラメータが含まれており、どのパラメータが応答の発現において本質的に重要であるのか自明ではない。また、各種物性応答において、電荷秩序や磁気秩序などの秩序変数と電子ホッピングといったパラメータ間のどのような結びつきが重要であるのか、あまり理解されていない。物性応答テンソルにおいて必須のパラメータが明らかになれば、その発現機構の微視的な理解に役立ち、新しい応答を探索する指針も得られる。

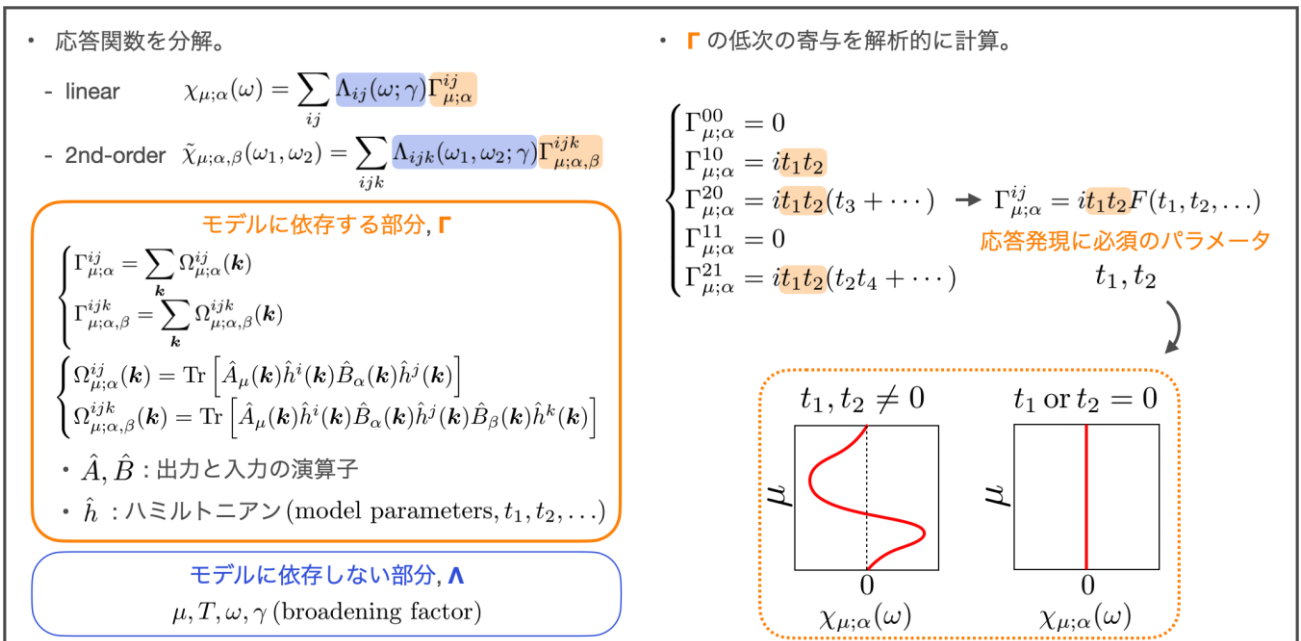


図 1. 応答関数における必須パラメータの抽出手法の概略。応答関数を 2 つの部分に分離し、モデル依存部分 Γ を解析することで、応答の発現に必須のパラメータを抽出する。

最近、明治大学大学院理工学研究科の研究グループは、任意の線形および非線形応答において、応答の発現に不可欠なモデルパラメータを系統的に抽出する一般的手法を提案した[図 1]。本手法は、異常ホール効果や電気磁気効果などの線形の応答現象だけではなく、非線形の光学応答や電気伝導、多種多様な交差相関応答に適用できる。この成果は、JPSJ の 2022 年 1 月号に掲載された。

研究グループはまず、応答関数を解析的に取り扱うため、ケルディッシュ形式のグリーン関数法を採用した。次に、応答関数を表すグリーン関数に対してチェビシェフ多項式展開を適用することで、モデル依存部分[図 1 の Γ]と環境パラメータのみを含むモデル非依存部分[図 1 の Λ]に分離した。ハミルトニアンが多項式を含む前者の Γ 部分を解析的に評価すると、応答関数を生み出す必須モデルパラメータを特定できる。例えば図 1 に示すように、秩序を表す分子場、軌道準位や電子ホッピングなどを含むハミルトニアンを用いて Γ の低次項を評価する。得られた結果において共通の因子をくくりだすと、これらが応答の発現に必須のパラメータであると結論できる。研究グループは、本手法の適用例として、SnTe の強誘電秩序下における非線形異常ホール効果を解析し、強誘電相で有限となる最近接ホッピングに加えて、無秩序下でも存在する軌道混成型次近接ホッピングの重要性を明らかにした。また、必須パラメータの分析から、線形の電流誘起磁化応答とそれに誘発される線形の異常ホール効果の組み合わせとして、この非線形異常ホール効果が定性的に理解できることを示した。

本論文で提案された手法は、周期結晶系に限らず孤立クラスター系に対しても適用できる。このため、固体物理学だけでなく、無機・有機化学や人工原子系などの広い分野で注目されている。本手法により、物性応答において必須の微視的要素が特定され、機能性物質の効率的な設計に有用な指針が得られる。このような知見は、新しい物質機能の探索にも有用と期待される。

原論文（2021 年 12 月 10 日公開済）

[Systematic Analysis Method for Nonlinear Response Tensors](#)

Rikuto Oiwa and Hiroaki Kusunose : J. Phys. Soc. Jpn. **91**, 014701 (2022).

<情報提供：大岩陸人（明治大学大学院理工学研究科物理学専攻）

楠瀬博明（明治大学理工学部） >