

# 圧力で磁石に変わる有機物質

## [1] 要旨

磁性体に圧力を加えることで磁化が発生するピエゾ磁気効果は従来、相対論的なスピン軌道結合項に起因する現象と認識されてきたが、近年の「交替磁性」の提唱によってその常識が覆りつつある。本研究では、交替磁性体の候補物質である有機導体  $\kappa$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>Cu[N(CN)<sub>2</sub>]Cl を対象とした第一原理計算と有効模型解析により、スピン軌道結合項を必要としないピエゾ磁気効果を予言した。これは、有機物質の顕著な利点である軽元素と柔軟性を活かした新たな磁性制御の可能性を拓く成果である。

## [2] 本文

巨視的な磁化を持たない磁性体に外部から圧力を印加し、結晶を歪ませることによって強磁性体のような磁化が誘起される現象を「ピエゾ磁気効果」と呼ぶ。これは、誘電体への圧力印加によって巨視的な電気分極が生じるピエゾ効果の磁性版に相当し、研究例は多くないものの古くから知られていた。ピエゾ磁気効果は従来、電子のスピンに働く相対論効果であるスピン軌道結合項に由来して、磁気異方性や磁気相互作用が圧力によって変化することにより生じると考えられてきた。しかし近年、ある種の結晶構造を持つ単純な反強磁性体において、スピン軌道結合項のないエネルギーバンドのスピン分裂の存在が指摘され、スピン流の生成など新しい現象が提唱されている。このような反強磁性体は、従来のもとは一線を画す性質を示すことから「交替磁性体」と名付けられた。交替磁性の発見をきっかけとして、スピン分裂に起因するピエゾ磁気効果の可能性に注目が集まっている。

東京電機大学、東京大学、物質・材料研究機構、理化学研究所からなる共同研究チームは、交替磁性体の候補物質である有機導体  $\kappa$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>Cu[N(CN)<sub>2</sub>]Cl に着目し、結晶の歪みによってピエゾ磁気効果が生じることを理論的に明らかにした。この研究成果は JPSJ の 2025 年 8 月号に掲載された。

$\kappa$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>Cu[N(CN)<sub>2</sub>]Cl は強相関電子系の典型物質であり、その低温状態は長らく通常の反強磁性状態と考えられてきた。しかし近年、特徴的な分子配列と反強磁性スピン配列との協力効果により、この物質が交替磁性状態であることが明らかになった。本研究では、第一原理計算を活用し、この系に単斜晶歪みが加えられた際の結晶構造と電子構造の変化を定量的に評価し、これに基づいて構築した有効ハバード模型およびハイゼンベルク模型を用いて、歪み下における磁氣的応答を解析した。その結果、基底状態が交替磁性を示す絶縁体において、単斜晶歪み下では、ネール温度以下の有限温度で一様磁化が生じることを見出した。この磁化は、歪みによって上向きスピン同士と下向きスピン同士の間で働く交換相互作用に生じる強度の差とスピンの熱揺らぎに起因しており、スピン軌道結合項がほとんど無視できる有機導体においても、ピエゾ磁気効果が実現することを強く示唆する。さらに、電子ドーピングした交替磁性金属状態では、スピン分裂したフェルミ面の存在によって絶対零度においてもピエゾ磁気効果が生じること、さらに歪みの大きさや分子内の多軌道性が誘起される磁化の大きさに強く影響することも明らかにした。

本研究は、有機導体における磁気応答の新たな可能性を切り拓くものであり、今後、有機導体を用いたスピントロニクスや機能材料分野への応用が期待される。

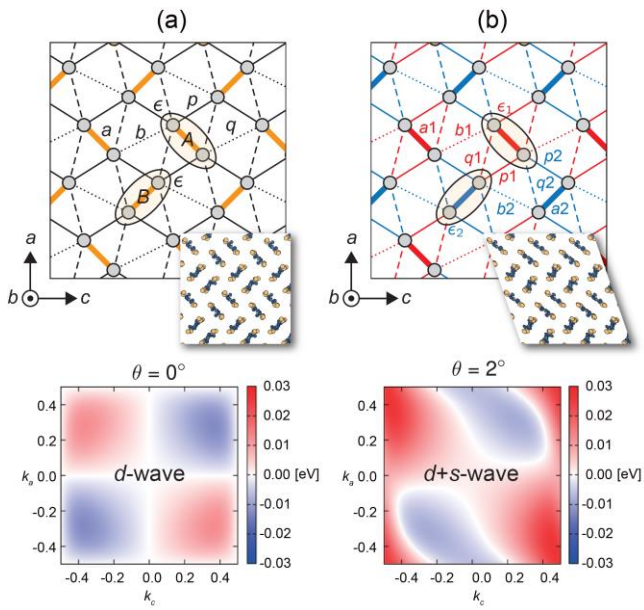


図 1.  $\kappa$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>Cu[N(CN)<sub>2</sub>]Cl の(a)常圧下、(b)加圧下における結晶構造の模式図とスピン分裂。

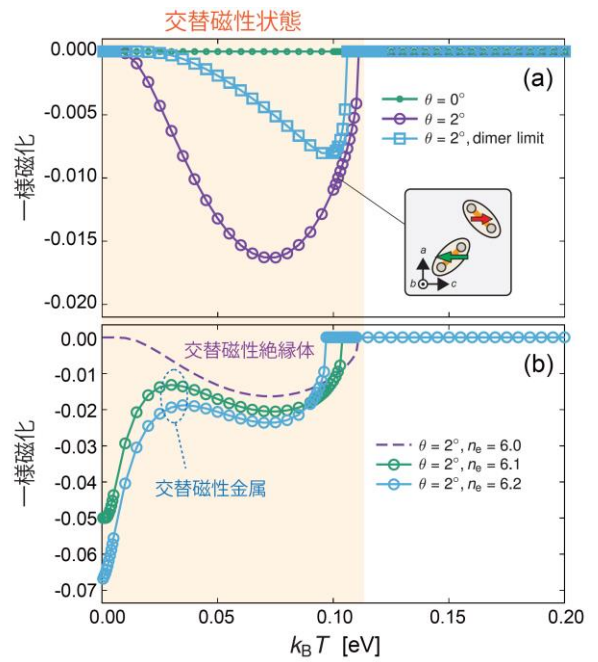


図 2. 交替磁性状態における一様磁化の温度変化。(a)は絶縁体、(b)は電子ドーピング下の金属状態での結果。(a)の挿入図は有限温度のスピン状態を示す。

原論文 (2025 年 7 月 8 日公開)

Nonrelativistic Piezomagnetic Effect in an Organic Altermagnet

M. Naka, Y. Motome, T. Miyazaki, and H. Seo, J. Phys. Soc. Jpn. **94**, 083702 (2025).

< 情報提供：中 惇 (東京電機大学 理工学部) >