

# 準結晶の物性解明に向けて: 近似結晶における非共線磁気秩序

## [1] 要旨

準結晶と呼ばれる原子が非周期的かつ規則的に配列した固体の物性はよく分かっていない。その解明へ向けて、希土類系 20 面体 1/1 近似結晶の磁気モデルが構築され、磁気的な性質が明らかにされた。この成果により、正のキュリーワイス温度をもつ系で反強磁性秩序と強磁性秩序が現れる機構およびそれらの磁気構造が理論的に説明されたのみならず、トポロジカル磁気構造を含む新たな非共線磁気構造が見出された。

## [2] 本文

原子が非周期的かつ規則的に配列した固体を準結晶とよぶ。固体物理学の教科書では結晶の周期性を前提にした記述がほとんどであり、準結晶の物性はベールに包まれている。準結晶と共通の局所原子配置をもち、かつ周期性をもつ固体を近似結晶とよぶ。近似結晶は準結晶と既知の周期結晶をつなぐユニークな固体である。1/1 近似結晶 Au-SM-R (SM=Al, Ga, Si; R=希土類元素) は原子を頂点にもつ多面体の殻構造により構成されており、20 面体の頂点を希土類原子が占めている。20 面体は体心立方格子の格子点に位置している (空間群は  $Im\bar{3}$ )。希土類原子の 4f 電子間には強いクーロン斥力がはたらいており、新たな強相関電子系としても魅力的な研究の舞台を提供している。

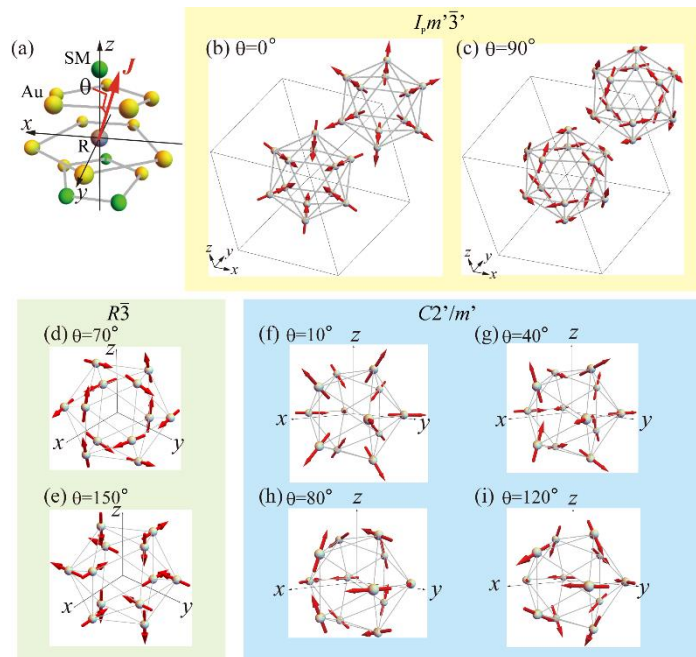


図 1(a) 20 面体 1/1 近似結晶 Au-SM-R の希土類原子周りの局所原子配置 (Au (黄色)、SM=Al, Ga, Si (緑色)、R=希土類原子 (灰色))。 (b)ヘッジホッグ-反ヘッジホッグ秩序。 (c)ワイヤリング-反ワイヤリング秩序。 (b), (c)の枠は磁気単位胞であり、角に図示する 20 面体の磁気構造は 8 つの角全てに位置している。 (d)-(i)非共線強磁性秩序。 (d)-(i)に示す磁気構造が体心立方格子の各頂点の 20 面体で実現している。

これまで、正のキュリーワイス温度を示す、 $T_b$  をはじめとする希土類系 1/1 近似結晶 Au-SM-R において、強磁性秩序および反強磁性秩序が観測されているが、これらの磁気構造を統一的に説明する微視的理論の構築が切望されていた。

強相関電子状態を理解する第一歩は、結晶場を明らかにすることである。希土類原子の周りは図 1(a)のように 5 角形の原子配置をしている。よく知られているように 5 回回転対称性と結晶の並進対称性は両立しないこともあり、よく確立している結晶点群に基づいた結晶場の理論が準結晶および近似結晶に適用できず、電子状態の理解を妨げていた。

近年、九州工業大学の研究グループは、点電荷モデルに基づいて近似結晶の結晶場の理論を構築した。Tb 系および Dy 系 1/1 近似結晶の結晶場基底状態を理論解析した結果、磁気容易軸が鏡映面（図 1(a)の  $yz$  面）内を向くことを明らかにした。同グループは、結晶場による磁気異方性の効果を取り入れた 1/1 近似結晶の磁気モデルを構築し、強磁性相互作用の場合の基底状態相図を数値的に厳密に決定した。その結果、これまでに実験で報告されている強磁性および反強磁性磁気構造を説明するのみならず、新たな磁気構造を理論的に見出した。このことは、上記の磁気モデルが希土類系 1/1 近似結晶の磁性の本質を捉えた有効モデルであることを示唆している。この成果は JPSJ の 2026 年 4 月号に掲載された。

1/1 近似結晶の 20 面体内および 20 面体間の 4f 磁気モーメント間に最近接相互作用  $J_1$ 、次近接相互作用  $J_2$  がはたらく一軸異方性をもつモデルの全固有状態を数値的に厳密に計算することで、基底状態が求められた。その結果、 $J_2/J_1$  と磁気異方性の角  $\theta$ （図 1(a)）に応じて図 1 (b), (c) に示す非共線反強磁性秩序と図 1(d)-(i) に示す非共線強磁性秩序が現れることが示された。

反強磁性秩序を示すヘッジホッグ-反ヘッジホッグ秩序（図 1(b)）およびワイヤリング-反ワイヤリング秩序（図 1(c)）はトポロジカル数（それぞれ +1, -1 および +3, -3）で特徴づけられるトポロジカル磁気秩序であり、同じ磁気空間群  $I_{\rho}m'\bar{3}'$  に属することが明らかにされた。また、強磁性秩序を示す磁気構造は、図 1(d), (e) が磁気空間群  $R\bar{3}$ 、図 1(f)-(i) が磁気空間群  $C2'/m'$ 、という 2 種類に分類されることが示された。これらの結果は、中性子散乱実験により Tb, Dy, Ho 系 1/1 近似結晶でこれまでに同定された反強磁性秩序（図 1(c)）および強磁性秩序（図 1(d)）の磁気構造を、磁気異方性の角  $\theta$  も含めてよく説明する。

さらに興味深いことに、1/1 近似結晶 Au-SM-R は金属である。図 1(b)-(i) に示すように 20 面体の各三角面に対して各 3 頂点での磁気モーメントは非共面磁気構造をもつことから、スカラーカイラリティに由来する創発仮想磁場が発生し、伝導電子はホール効果を示すことが期待される。創発仮想磁場は、実験では未観測の磁気空間群  $C2'/m'$  の磁気構造（特に図 1(h)）で顕著に大きいことも理論的に見出された。

これまでに観測された 1/1 近似結晶 Au-SM-R の磁気秩序のうち、磁気構造が同定されたものは R=Tb, Dy, Ho などのごく一部である。本研究で構築された有効磁気モデルに基づいて、3 次元準結晶の磁性の解明に向けて、他の希土類系近似結晶についても磁性およびトポロジカル物性をはじめとする強相関物性の全貌を解明する研究の発展が期待される。

原論文（2026 年 3 月 11 日公開済）

Non-Collinear and Non-Coplanar Magnetic Orders in 1/1 Periodic Approximant to the Icosahedral Quasicrystal

S. Watanabe and T. Iwasaki, J. Phys. Soc. Jpn. **95**, 044705 (2026).

< 情報提供：渡辺真仁（九州工業大学大学院工学研究院基礎科学研究系） >