



Title	First-principles electronic structure calculations and topology analysis for anomalous Hall effect in the non-collinear antiferromagnets Mn <sub>3</sub> AN
Author(s)	Vu Thi Ngoc, Huyen
Citation	大阪大学, 2019, 博士論文
Version Type	VoR
URL	<a href="https://doi.org/10.18910/73591">https://doi.org/10.18910/73591</a>
rights	
Note	

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

## Abstract of Thesis

Name: VU THI NGOC HUYEN	
Title	First-principles electronic structure calculations and topology analysis for anomalous Hall effect in the non-collinear antiferromagnets $Mn_3AN$ (ノンコリニア反強磁性体 $Mn_3AN$ における異常ホール効果の第一原理電子状態計算およびトポロジー解析)
<p><b>Abstract of Thesis</b></p> <p>Anomalous Hall (AH) effect has been known as an important macroscopic phenomenon in materials science because of its application in spintronics such as electronic probes, switches, and memory devices. The discovery of large AH effect in non-collinear antiferromagnets with no net magnetization leading an increasing amount of attention in studying the topological features of electronic band structure for the AH effect because of the insensitivity against an applied magnetic field and no stray fields interfering with the neighboring cells as well as faster spin dynamics than ferromagnets. This thesis aims to get a comprehensive understanding for AH effect by investigating topological features of electronic structures which produce large AH effect in the non-collinear antiferromagnetic metallic states of anti-perovskite manganese nitrides <math>Mn_3AN</math> (<math>A</math>= Ni, Cu, Ga, Ge, In, Sn, Ir) by first-principles density-functional-theory calculations. Firstly, the stable magnetic structures of these compounds are predicted to be non-collinear antiferromagnetic structures characterized by either <math>T_{1g}</math> or <math>T_{2g}</math> irreducible representation by evaluating the total energy for all of the magnetic structures classified according to the symmetry and multipole moments. Secondly, systematic evaluation of the AH conductivity leads to understanding the chemical trends of band filling and spin-orbit coupling in the series of materials. In order to understand the microscopic mechanism of the AH conductivity in a non-collinear magnetic system, the topology analysis is next performed for the Wannier based tight-binding models obtained from the first-principles calculations. This study reveals that the small Berry curvature which is widely spread around the Fermi surface in the Brillouin zone, dominantly contributes after the <math>\mathbf{k}</math>-space integration to the AH conductivity. While the locally divergent Berry curvature around Weyl points has a rather small contribution to the AH conductivity.</p>	

## 論文審査の結果の要旨及び担当者

氏 名 ( VU THI NGOC HUYEN )		
論文審査担当者	(職)	氏 名
	主査 教授	小口 多美夫 (産業科学研究所)
	副査 教授	藤本 聰
	副査 教授	千葉 大地 (産業科学研究所)

## 論文審査の結果の要旨

異常ホール効果は物性物理学における重要なマクロ現象の一つとして認識されており、スピントロニクス分野において、電子プローブ、スイッチ、メモリデバイス等への応用が期待されている。通常、異常ホール効果は有限の磁化を有する強磁性体において観測されてきたが、最近、有限の磁化を有しないノンコリニア反強磁性体において大きな異常ホール効果が発見され、異常ホール効果に導く電子状態のトポロジカル性に関する研究が活発化していると同時に、外部磁場に対する非感受性や浮遊磁場がない点が応用における反強磁性体の優位性として大きく注目を浴びている。学位申請者は、ノンコリニア反強磁性のマンガン窒化物Mn<sub>3</sub>AN(A= Ni, Cu, Ga, Ge, In, Sn, Ir)に対して第一原理密度汎関数理論計算により、異常ホール効果に導く電子状態のトポロジー解析を行い、異常ホール効果の包括的な理解を試みた。まず、安定な磁気構造を求めるために、磁気対称性と多極子モーメントの観点から可能な磁気秩序構造に対して第一原理計算による全エネルギーが評価され、いずれの窒化物もT<sub>1g</sub>もしくはT<sub>2g</sub>既約表現のノンコリニア反強磁性秩序が安定であることが示された。次に、ホール伝導度の系統的な計算から一連の窒化物におけるバンド占有とスピン軌道相互作用における化学的傾向が議論された。ここでは、第一原理計算で得られた電子状態からワニエ基底のタイトバインディング模型によりトポロジー解析がなされ、ノンコリニア反強磁性体におけるホール伝導度の微視的機構が調べられた。その結果、これらのマンガン窒化物での大きな異常ホール効果は、これまでのいくつかのノンコリニア反強磁性系で指摘してきたワイル点近傍での局所的なベリー曲率の発散的な振る舞いによるのではなく、ブリュアンズーンに広くわたったフェルミ面近傍からの小さなベリー曲率の寄与が積分されることにより大きなホール伝導度を生じていることが明らかとなった。これらの成果は、スピントロニクス応用に有効な物質群候補であるノンコリニア反強磁性体における異常ホール効果の発現機構に新たな解釈を与えた点で重要であり、博士（理学）の学位論文として価値のあるものと認める。