

## 審査の結果の要旨

論文提出者氏名 桂 法称

磁性と誘電性は固体の物性として最も基本的な性質であるが、両者の結合—電気磁気効果—は従来非常に弱いものとされてきた。ところが近年この常識を覆す実験がなされ、磁気秩序と強誘電性が同時に存在し、しかも両者が強く結合する系—マルチフェロイック系—が見出されたのである。桂氏は、この問題に対して物性理論の立場からアプローチし、微視的理論を構築することで新たな実験・現象の提案、新奇な実験結果の説明を行なった。特にスピン軌道相互作用の存在下で非共線スピン構造が誘起する電気分極の微視的理論を発展させ、これをヘリカル磁性体に適用することでその基底状態、集団励起モード、スピンの量子揺らぎの効果などを体系的に調べた。

まず、遷移金属イオン2つが酸素をはさむ超交換相互作用の配置のクラスター模型を用いて、電気分極  $P$  はスピン  $S_i$ 、 $S_j$  と両者のスピン位置を結ぶボンド方向の単位ベクトル  $e_{ij}$  を用いて

$P \propto e_{ij} \times (S_i \times S_j)$  という公式で見出された。これをヘリカル磁性体に適用し、どのような構造のスピン配列が、どの方向に電気分極を出すか？という問題を考察した。この理論は現在マルチフェロイック物質として知られている物質の中のかなりの数の強誘電性を説明することが実証されるに至っており、桂氏の理論は物質探索、物性実験双方の指導原理を与えるものとして高く評価されている。さらに進んで、ヘリカル磁性体の集団励起モードをスピン波近似のもとで考察し、「エレクトロマグノン」の誘電応答を明らかにして、当時ドイツで行なわれた  $TbMnO_3$  の実験結果を解析した。しかし、その後日本で行なわれた同物質に関するテラヘルツ分光の研究により、この「エレクトロマグノン」による解釈は否定され、それに応じて、スピンの量子揺らぎを摂動論を超えて解析する必要が生じた。この目的のために、桂氏は **Schwinger boson** 法を用いた、ヘリカル磁性体の量子論を発展させた。この解析により、ヘリカルスピン相の上の温度で共線反強磁性状態が現れること、2マグノン過程によって特異な赤外吸収スペクトルが得られること、などを明らかにした。

最後に、金属ヘリカル磁性体中の電子状態に関する研究も行なった。非整合相では電子の感じるポテンシャルも結晶の周期と有理数の関係にないものとなるために、ブロッホの定理が使えなくなる。そのために、電子状態の局在という問題が浮かび上がってくる。桂氏は、この問題を転送行列法を用いた数値計算により研究し、局在—非局在の相図を完成させた。この研究は今後、金属ヘリカル磁性体の輸送現象の理解に資するものと考えられる。

本論文は6つの Chapter, Appendix A-G からなる。

Chapter1 は"Introduction"として電気磁気効果、マルチフェロイック、フラストレートヘリカル磁性体、スピン軌道相互作用、に関する基本的な予備知識をまとめている。研究の歴史や、現在までに知られているマルチフェロイック物質のリスト、スピン軌道相互作用と結晶場分裂など、本編の理解のための準備を述べるとともに、最後に本論文の構成を述べている。

Chapter2 は"Microscopic Mechanism of Magnetically Driven Ferroelectricity in Helical

Magnets”として、クラスター模型を用いた、スピンの由来する電気分極の量子力学的計算について述べている。摂動論を用いた表式と同時に数値的にハミルトニアン行列を対角化して求めた結果をも示している。この結果を周期的結晶に応用し、種々のヘリカル磁性体における電気分極を議論し、実験との対応をまとめた。さらに他の著者による理論との関係を議論し、最後にゲージ場理論との関連について言及している。

Chapter3は"Dynamical Magneto-electric Coupling in Helical Magnets"として電気分極と結合したヘリカル磁性体の模型を設定し、その集団励起モードの解析を行なっている。グリーン関数法を用いて、スピン波による各種応答関数を計算し、その結果「エレクトロマグノン」による誘電応答が最も顕著に現れることを見出した。その振動子強度を評価し、ドイツのゲルプのTbMnO<sub>3</sub>に対する実験と比較した。

Chapter4は"Quantum Theory of Multiferroic Helimagnets: Collinear and Helical Phases"として、Schwinger boson法を用いたヘリカル磁性体の量子論について述べている。有限温度の相図、励起スペクトルを平均場近似の範囲内で求めた。量子揺らぎが「共線磁気構造」を好むことを明らかにし、それがヘリカル相の上の温度で共線反強磁性状態をもたらすことを見出した。さらにこの励起スペクトルがもたらす特異な赤外吸収スペクトルを議論している。

Chapter5は"Electron Localization/Delocalization in Incommensurate Helical Magnets"で、非整合 (incommensurate) スピン構造による電子波の局在・非局在を転送行列法を用いた数値計算で調べた結果を述べている。この結果から、金属ヘリカル磁性体の輸送現象について議論した。

Chapter6は"Summary"として、全体のまとめとともに今後の展望について述べている。付録として Appendix A では軌道間の飛び移り積分に関する Slater-Koster Table, Appendix B では群論の Wigner and Clebsch-Gordan coefficients, Appendix C では電気分極の計算に必要な Matrix Element for Polarization, Appendix D では電気分極の微視的理論である Berry Phase Formula for Electric Polarization, Appendix E では Schwinger Boson Mean Field Theory, Appendix F では Generalized Bogoliubov transformation and Bloch-DeDominics theorem, Appendix G では中性子散乱実験にかんする Polarized Neutron Scattering について解説している。

以上をまとめると、本論文ではマルチフェロイック現象に理論の立場から新しい原理を提唱し、その基底状態、励起状態を微視的な立場から研究した重要な研究であり、多くの実験結果を説明するとともに、新奇な効果・現象の予言・提案を行った。本論文の研究により、マルチフェロイック物質の基礎・応用に関する理解が進展し、今後の物理工学へ寄与するところが大きい。よって本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。

なお本論文は桂法称氏、(部分的には) 田中宗氏、および指導教員永長直人との共同研究であるが、論文提出者が主体となった計算、解析において、論文提出者の寄与が、学位授与に当たって、十分であることが認められた。