

Theory of topological transport phenomena in magnetic Weyl semimetal

著者	Ozawa Akihiro
number	99
学位授与機関	Tohoku University
学位授与番号	理博第3443号
URL	http://hdl.handle.net/10097/00137472

論文内容要旨

(NO. 1)

氏名	OZAWA, Akihiro	提出年	令和 4 年
学位論文の 題目	Theory of topological transport phenomena in magnetic Weyl semimetal 磁性ワイル半金属におけるトポロジカル輸送現象の理論		

論文目次

1. Introduction	3
1.1 Basics of topological properties in electronic systems	3
1.1.1 Quantum Hall insulator	3
1.1.2 Topological insulators	4
1.2 Topological semimetals	5
1.2.1 Dirac semimetals and Weyl semimetals.....	6
1.2.2 Magnetic Weyl semimetals	7
1.2.3 Anomalous Hall effect and Berry curvature in magnetic Weyl semimetal model.....	8
1.3 Realization of Weyl semimetals with breaking of inversion/time-reversal symmetry	11
1.4 Ferromagnetic Weyl semimetal $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$	12
1.4.1 Electronic structure.....	13
1.4.2 Magnetism.....	14
1.5 Issues and purpose of this thesis.....	14
2. Effective model of magnetic Weyl semimetal and its electronic states	19
2.1 Model Hamiltonian.....	19
2.2 Nodal rings and Weyl points	22
2.3 Short summery	25

3. Self-consistent analysis for doping effect for magnetic orderings.....	27
3.1 Hartree-Fock approximation	27
3.2 Doping effect and the total number of electrons in restricted unit cell	32
3.3 Magnetic phase diagrams	32
3.4 Orbital magnetization and anomalous Hall effect in non-collinear antiferromagnetic state.....	34
3.5 Short-summary	36
4. Spin-charge transport in Dirac/Weyl state	37
4.1 Spin Hall effect in paramagnetic Dirac semimetal state.....	37
4.2 Spin Hall effect with ferromagnetic ordering	40
4.2.1 In-plane spin Hall effect	40
4.2.2 Out-of-plane spin and anomalous Hall effect	42
4.3 Conclusion	43
5. Summary and Conclusion.....	45

Weyl semimetals are three-dimensional gapless semiconductors with non-degenerate gapless nodes called Weyl points, suggested in 2011. In particular, magnetic Weyl semimetals, in which time-reversal symmetry is broken by magnetism, exhibit novel spin-dependent transport represented by anomalous Hall effect. Stacked-kagome lattice system $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ is one of the candidates of magnetic Weyl semimetal reported in 2018. This system shows a giant anomalous Hall effect and ferromagnetic ordering. In addition to such features, recent studies suggested characteristic response, such as the anomalous Nernst effect and magneto-optical effect, originating from the topologically non-trivial band structure. To obtain functional transport phenomena in magnetic Weyl semimetal $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$, a theoretical study based on a simple model using only small degrees of freedom is needed.

In this doctoral thesis, we theoretically study the electronic structure, magnetism, and spin/charge transport properties in an effective tight-binding model of magnetic Weyl semimetal $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$. First, we construct the effective tight-binding model of $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$, that simply describes the Weyl points configuration in momentum space. Next in the same model, we show that the paramagnetic, ferromagnetic, and antiferromagnetic orderings appear, depending on the electron number. Lastly, we study the relation between the magnetic orderings and anomalous/spin Hall conductivities.

First, we aim to construct an effective two-orbital tight-binding model for magnetic Weyl semimetal $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$. We extract one d orbital from Co and one p orbital from interlayer Sn and build an 8×8 matrix Hamiltonian. The band structure and configurations of the Weyl points of this model are similar to those calculated by first-principles calculations. It is also shown that the nodal ring states can be present even with spin-orbit coupling.

Next, based on the same effective model of magnetic Weyl semimetal, we analyze the magnetic properties. By using the Hartree-Fock approximation, we aim to obtain the phase diagrams of the magnetic order parameters as a function of electron filling and temperature. It is shown that the perpendicular ferromagnetic ordering is suppressed by hole doping. On the other hand, by electron-doping, a noncollinear antiferromagnetic state is realized. Additionally, in the noncollinear anti-ferromagnetic state, we find that this system shows a finite anomalous Hall conductivity and spontaneous orbital magnetization, by considering a certain realistic spin-orbit coupling.

Finally, we clarify the relation between the magnetic orderings and spin/anomalous Hall effect. We found enhancements of some Hall conductivities, depending on the direction of the magnetic moment. We find that these Hall effects originate from a certain type of spin-orbit coupling.

In this thesis, we theoretically studied electronic structure, magnetism, and the anomalous/spin Hall effect in Weyl semimetal, based on the effective tight-binding model of $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$. Our finding may expand the possibility of the magnetic Weyl semimetals as functional spintronics devices.

論文審査の結果の要旨

トポロジカル絶縁体の発見を契機にして、新しいトポロジカル物質の探索が大きく進展している。トポロジカル物質のなかでもトポロジカル半金属は、ブリルアンゾーン中において価電子帯と伝導帯の交点が縮退ノードを有し非自明なトポロジエをもつ興味深い物質系である。特に近年では磁気秩序を有する磁性ワイル半金属の研究が注目を集めている。本研究は、磁性ワイル半金属候補物質の一つである $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ における新規物性の理論提案を目的として、低エネルギー有効模型の構築とバンドトポロジエの起源解明、電子ドーピングによる磁気相図の解析、磁化方向に依存するスピントロニクス効果を明らかにした。

本論文では、 $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ に対して、フェルミ準位近傍にあるいくつかの軌道のみを取り入れた強束縛模型を構築し、ワイル半金属特有の線形分散やバンド交差点（ワイル点）の位置などに関する情報を再現できることを示した。また、バンドトポロジエの起源を、2次元カゴメ格子モデルを出発点として説明できることを示した。この模型に電子間相互作用を導入し、ハートリー・フォック理論に基づき、磁気秩序を解析したところ、ゼロドーピングでの強磁性状態から電子ドーピングするとノンコリニアール反強磁性状態に変わることが示唆された。さらにこのノンコリニアール反強磁性状態においてもワイル点が存在し、異常ホール効果が生じることを明らかにした。加えて、本論文では磁化方向に依存するスピントロニクス効果に関する解析を行った。ゼロドーピングの強磁性状態では面直方向に磁化が安定化されるが、その向きを変化させることで、様々なスピン成分に対するスピントロニクス伝導率が增大しうることが示された。特に界面（境界）に垂直なスピン成分を持つスピントロニクス流をもつことは、大きいスピントルクを与えるため、スピントルク生成の観点からも重要な特性と言える。これらの結果は磁性ワイル半金属候補物質における非自明な輸送現象を示したものであり、トポロジカル物質科学およびスピントロニクス分野の進展に大きく寄与するものである。

以上の成果は低エネルギー有効模型の解析による、磁性と輸送現象の協働に着目した新現象の実現可能性を理論的に示唆したものであり、小沢耀弘氏が自立して研究活動を行うのに必要な高度の研究能力と学識を有することを示している。したがって、小沢耀弘氏の博士論文を、博士（理学）の学位論文として合格と認める。