

南 谷 英 美（准教授）（2019 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：計算材料学，物性物理学

A-2) 研究課題：

- a) 固体におけるフォノン物性：電子フォノン及びフォノンフォノン相互作用
- b) 吸着分子が生み出す新奇界面磁性

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) フォノンは格子振動の量子であり，電気抵抗，超伝導体をもたらしクーパ対形成，絶縁体における熱伝導など，固体物理の各所で重要な役割を果たしている。これらの物性は，電子とフォノン，そしてフォノンとフォノンの相互作用によって決定されている。我々は特に，これらの相互作用が熱物性に与える影響に着目している。電子フォノン相互作用については，密度汎関数摂動理論を用いた相互作用強度の定量計算に加え，電子とフォノンのボルツマン方程式に基づいた，電子系からフォノン系へのエネルギー移行を追跡するためのプログラム開発を行っている。フォノンフォノン相互作用については，熱伝導率の計算に着目し，機械学習を援用することで計算時間を大幅に抑制することを目指している。フォノンフォノン相互作用の計算には，多数の変位パターン下で各原子にかかる力を計算することが必要になる。本年度は，高次元ニューラルネットワークポテンシャル（HDNNP）を用いて，微小な変位が入った Si および GaN 結晶における力を，第一原理計算と同等の精度で，かつ 800 分の 1 程度の計算時間で求められることを示した。さらに，HDNNP による熱伝導率計算が，第一原理計算を使った場合の結果を良く再現することも示した。
- b) 分子吸着が表面物性に様々な影響を与えることは，表面科学の分野では広く知られている。我々はこれまで，磁性を持った分子が吸着した際の近藤効果の発現を中心に理論的研究を進めてきた。最近では，分子吸着によって，金属基板の持つ磁性やスピン軌道相互作用に由来した電子状態を変調しうる可能性にも着目している。分子吸着に伴う界面磁性変調は spinterface と呼ばれ，スピントロニクス分野でも素子性能の向上や新規デバイス動作の可能性から注目されている。この分野の実験研究者と共同研究を進め，成果としてまず，鉛フタロシアニン（Pb-Phthalocyanine:PbPc）の単分子膜を Cu(111) 表面に形成した場合，スピン軌道相互作用由来の大きなバンド分裂をもった界面電子状態が現れ，スピン流を電流に変換する inverse Edelstein 効果が発現することを発見した。

B-1) 学術論文

H. ISSHIKI, K. KONDOU, S. TAKIZAWA, K. SHIMOSE, T. KAWABE, E. MINAMITANI, N. YAMAGUCHI, F. ISHII, A. SHIOTARI, Y. SUGIMOTO, S. MIWA and Y. OTANI, “Realization of Spin-Dependent Functionality by Covering a Metal Surface with a Single Layer of Molecules,” *Nano Lett.* **19**, 7119–7123 (2019).
E. MINAMITANI, M. OGURA and S. WATANABE, “Simulating Lattice Thermal Conductivity in Semiconducting Materials Using High-Dimensional Neural Network Potential,” *Appl. Phys. Express* **12**, 095001 (5 pages) (2019).
T. UCHIHASHI, S. YOSHIZAWA, E. MINAMITANI, S. WATANABE, Y. TAKAGI and T. YOKOYAMA, “Persistent Superconductivity in Atomic Layer-Magnetic Molecule van der Waals Heterostructures: A Comparative Study,” *Mol. Syst. Des. Eng.* **4**, 511–518 (2019).

B-4) 招待講演

E. MINAMITANI, “Computation of phonon related transport properties in semiconducting materials,” Summit of Materials Science 2019 and GIMRT User Meeting 2019, Tohoku University, Sendai (Japan), 2019年11月.

E. MINAMITANI, “Theory of single spin spectroscopy at surfaces: From Kondo singlet to spin-orbit interaction,” Exploring the Limits of Nanoscience with Scanning Probe Methods, Physikzentrum Bad Honnef (Germany), 2019年10月.

E. MINAMITANI, “Ab-initio simulation of phonon related transport phenomena: Inelastic electron tunneling spectroscopy & thermal conductivity,” Electron-phonon coupling: Computational methods for electronic transport in nanostructures and in bulk materials, Lugano (Switzerland), 2019年10月.

E. MINAMITANI, “Computation of Phonon Related Many-body Interactions in Semiconducting Materials,” The 17th Japan-Korea Symposium on Molecular Science, Nagoya (Japan), 2019年7月.

南谷英美, 「非弾性分光で探る表面界面の素励起: 理論的側面を中心に」, 第17回SPRING-8 ユーザー協同体顕微ナノ材料科学研究会・第14回日本表面科学会放射光表面科学研究部会・第3回プローブ顕微鏡研究部会合同シンポジウム, つくば, 2019年3月.

B-6) 受賞, 表彰

南谷英美, ロレアル・ユネスコ女性科学者日本奨励賞 (2008).

E. MINAMITANI, 6th International Symposium on Surface Science, Best Poster Awards (2011).

南谷英美, 日本物理学会若手奨励賞 (2017).

南谷英美, 分子科学研究奨励森野基金 (2018).

南谷英美, 平成31年度科学技術分野の文部科学大臣表彰 若手科学者賞 (2019).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本物理学会領域9領域運営委員 (2014–2015).

応用物理学会人材育成委員会委員 (2014–2015).

応用物理学会男女共同参画委員会委員 (2015–2016).

日本表面真空学会ダイバーシティ推進委員会委員 (2018–).

学会の組織委員等

22nd International Conference on Superlattices, Nanostructures and Nanodevices (ICSNN 2020), Program committee (2019–2020).

B-10) 競争的資金

科研費研究活動スタート支援, 「表面吸着磁性分子系における特異なスピン物性の解明」, 南谷英美 (2011年度–2012年度).

科研費若手研究(B), 「吸着分子のスピン状態解明に向けた階層的理論手法開発と近藤効果・磁気異方性への応用」, 南谷英美 (2013年度–2015年度).

科研費若手研究(B), 「スピン物性と電子相関を活用した分子素子設計のための理論手法開発」, 南谷英美 (2015年度–2016年度).

科学技術振興機構さきがけ研究,「層状物質における電子フォノン相互作用の波数・エネルギー分解第一原理解析」, 南谷 英美 (2017年度-2020年度).

C) 研究活動の課題と展望

物質における熱の生成と伝搬は、基礎科学と応用の双方で重要な課題である。応用面では特に、半導体における定量的な熱生成・熱伝導シミュレーションが強く求められている。まずは第一原理計算と半古典描像であるボルツマン方程式を組み合わせた手法のプログラム開発を進め、半導体材料内の熱生成とその伝搬を追跡する計算技術の構築を目指す。現在の研究は主に、完全結晶を対象としているが、さらにデバイス動作で重要となる表面・界面、そして現実の物質では避けられない欠陥を含んだ系に広げることに注力する。

電子のボルツマン方程式については、ベリー曲率に代表される多バンド効果を取り入れる手法が提案されている。一方で、フォノンのボルツマン方程式における多バンド効果の可能性や、温度勾配を多バンド効果にどのように取り入れるかについては、未だ不明な点が多い。ボルツマン方程式を介して、多バンド効果についての基礎理論研究と、第一原理計算による定量計算を組み合わせることで、現実物質における電磁場・歪・温度勾配を利用した、新奇な熱生成・熱伝搬の制御法の可能性を探る。