

## 南谷 英美 (准教授) (2019年4月1日～2022年8月31日)\*)

下出 敦夫 (助教)  
赤羽 厚子 (事務支援員)  
増田 道子 (事務支援員)

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：電子フォノン相互作用及び熱物性
- b) 吸着原子・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，超伝導体をもたらすクーパー対形成，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伝導特性や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た。それをバルク Si に適応し，高電界下でのドリフト速度の飽和を再現するだけでなく，電子キャリアとホールキャリアのジュール熱発生に寄与するフォノンモードが異なることを明らかにした。固体の熱物性については，アモルファス材料における研究を進めている。アモルファスの構造の特徴と熱伝導率を結びつけるために，パーシステントホモロジー群を用いて，トポロジカルな特徴を定量的に抽出し，それと熱伝導率を結びつける回帰モデルが作成できることを示した。
- 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，磁性を持った原子や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。本年は，さらにそれを発展させ，超伝導体である Pb(111) 表面上の Tb 錯体分子における特異な電子状態の研究を実験グループと共同で行った。ターゲットとした錯体分子は，2つの Tb 原子がフタロシアニン骨格3つに挟まれたトリプルデッカー構造を取る Tb<sub>2</sub>Pc<sub>3</sub> である。この分子は，単体では Tb の f 軌道以外のスピンを持たないが，Pb(111) 表面上では電荷移動にともない，フタロシアニンリガンド部位に不対電子が生じることが判明した。さらに，この不対電子が持つスピンの Pb(111) 中の電子と相互作用することによって，超伝導体中のクーパー対形成と，伝導電子と磁性不純物間の近藤効果の拮抗によって現れる Yu-Shiba-Rusinov (YSR) 束縛状態を生じていることが判明した。先行研究では，微分コンダクタンスの測定結果には，不対電子が1つであれば，YSR 束縛状態の形成によってギャップ内にピークのペアが1つ現れることが報告されている。しかし Pb(111) 表面上の Tb<sub>2</sub>Pc<sub>3</sub> では，不対電子が1つであるにも関わらず，ピークのペアが2つ現れた。そこで，電子状態を第一原理計算によって詳細に解明した結果，不対電子が入る軌道の2重縮退が表面吸着の際のひずみによって僅かに解けることで，1つの軌道が価数揺動状態になり，その結果低エネルギー励起で遷移できる状態が増えたことによって追加のピークが現れていることが判明した。軌道自由度とスピン自由度の結合が，YSR 束縛状態にも変調を与える例である。

B-1) 学術論文

**E. MINAMITANI, T. SHIGA, M. KASHIWAGI and I. OBAYASHI**, “Relationship between Local Coordinates and Thermal Conductivity in Amorphous Carbon,” *J. Vac. Sci. Technol., A* **40(3)**, 33408 (2022). DOI: 10.1116/6.0001744

**E. MINAMITANI, T. SHIGA, M. KASHIWAGI and I. OBAYASHI**, “Topological Descriptor of Thermal Conductivity in Amorphous Si,” *J. Chem. Phys.* **156(24)**, 244502 (2022). DOI: 10.1063/5.0093441

**A. SHITADE and G. TATARA**, “Spin Accumulation without Spin Current,” *Phys. Rev. B* **105(20)**, L201202 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevB.105.L201202

**A. SHITADE**, “Spin Accumulation in the Spin Nernst Effect,” *Phys. Rev. B* **106(4)**, 045203 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevB.106.045203

**S. SAKAMOTO, E. JACKSON, T. KAWABE, T. TSUKAHARA, Y. KOTANI, K. TOYOKI, E. MINAMITANI, Y. MIURA, T. NAKAMURA, A. HIROHATA and S. MIWA**, “Control of Perpendicular Magnetic Anisotropy at the Fe/MgO Interface by Phthalocyanine Insertion,” *Phys. Rev. B* **105(18)**, 184414 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevB.105.184414

**K. SHIMIZU, Y. DOU, E. F. ARGUELLES, T. MORIYA, E. MINAMITANI and S. WATANABE**, “Using Neural Network Potential to Study Point Defect Properties in Multiple Charge States of GaN with Nitrogen Vacancy,” *Phys. Rev. B* **106(5)**, 54108 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevB.106.054108

**N. KAWAKAMI, R. ARAFUNE, E. MINAMITANI, K. KAWAHARA, N. TAKAGI and C. L. LIN**, “Anomalous Dewetting Growth of Si on Ag(111),” *Nanoscale* **14(39)**, 14623–14629 (2022). DOI: 10.1039/d2nr03409c

**H. N. XIA, E. MINAMITANI, R. ŽITKO, Z. Y. LIU, X. LIAO, M. CAI, Z. H. LING, W. H. ZHANG, S. KLYATSKAYA, M. RUBEN and Y. S. FU**, “Spin–Orbital Yu-Shiba-Rusinov States in Single Kondo Molecular Magnet,” *Nat. Commun.* **13(1)**, 6388 (2022). DOI: 10.1038/s41467-022-34187-8

**K. YOKOTA, S. INAGAKI, W. QIAN, R. NEMOTO, S. YOSHIKAWA, E. MINAMITANI, K. SAKAMOTO and T. UCHIHASHI**, “Non-Charge-Transfer Origin of  $T_c$  Enhancement in a Surface Superconductor Si(111)-( $\sqrt{7}\times\sqrt{3}$ )-In with Adsorbed Organic Molecules,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **91(12)**, 123704 (2022). DOI: 10.7566/JPSJ.91.123704

B-3) 総説, 著書

下出 敦夫, 「スピン流によらないスピンホール(ネルンスト)効果の定式化」, *日本物理学会誌*, **78(3)**, 146–151 (2023). DOI: 10.11316/butsuri.78.3\_146

B-4) 招待講演

南谷 英美, 「発熱と熱輸送の第一原理計算」, 日本表面真空学会 2022年度関東支部講演会, オンライン開催, 2022年4月.

**E. MINAMITANI**, “Relationship between structural characteristics and thermal conductivity in covalent amorphous solids,” The 26<sup>th</sup> SANKEN International Symposium, Osaka (Japan) (Hybrid), January 2023.

**E. MINAMITANI**, “Topological descriptor of thermal conductivity in covalent amorphous solids,” 14<sup>th</sup> International Symposium on Atomic Level Characterizations for New Materials and Devices '22, Nago (Japan). October 2022.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本表面真空学会ダイバーシティー推進委員会委員 (2018-).

B-8) 大学等での講義, 客員

理化学研究所, 客員研究員, 2021年4月-2024年3月.

東京大学物性研究所 MP-CoMS, オンライン講義「マテリアルズ・インフォマティクスの基礎と応用」, 2022年9月.

東京理科大学理学部, オンラインセミナー講師, 「スピン流によらないスピン蓄積」, 2022年07月. (下出敦夫)

東京大学物性研究所, セミナー講師, 「スピン流によらないスピンHall効果・スピンNernst効果」, 2022年10月. (下出敦夫)

東京工業大学理学院, セミナー講師, 「スピン流によらないスピンHall効果・スピンNernst効果」, 2022年12月. (下出敦夫)

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B), 「データサイエンス技術を活用した二次元アモルファス材料における熱物性の理論研究」(代表: 南谷英美), 下出敦夫(研究分担者)(2021年度-2024年度).

科学技術振興機構さきがけ研究, 「構造トポロジー情報を応用した靱やかな機械学習力場の構築」, 南谷英美(2021年度-2024年度).

科研費基盤研究(C), 「曲がった時空における波束の半古典論の構築と非線形応答への応用」, 下出敦夫(2022年度-2024年度).

科研費基盤研究(B), 「層状物質とその局所構造におけるフォノン関連物性の理論解析」(代表: 渡邊 聡), 南谷英美(研究分担者)(2019年度-2022年度).

C) 研究活動の課題と展望

トポロジカルデータ解析を用いた, アモルファス材料を始めとする乱れを含んだ系へ研究を進めている。実際に, パーシステントホモロジーの情報が物理量と相関を持つことが見えてきており, 乱れた複雑な系での物理現象に取り組む有望なテクニックであるという手応えを感じている。これまでは熱物性を主な対象としてきたが, 弾性定数といった力学特性に対しても応用を広げていきたい。さらに, 機械学習ポテンシャルなどにこの技術を応用するためには, 異なった構造におけるパーシステントホモロジーのあいだの距離をどのように定義するか, その距離を用いて損失関数をどう設計するかの部分に工夫が必要である。近年, 画像認識の分野ではこの課題に対して最適輸送理論や Wasserstein 距離を用いた事例が報告されている。先行している分野での進展をキャッチアップして物性科学に応用していきたい。

\*) 2022年9月1日大阪大学産業科学研究所教授