

南 谷 英 美 (准教授) (2019 年 4 月 1 日着任)

下出 敦夫 (助教)

三輪 邦之 (特任助教 (分子科学研究所特別研究員))

日野出 憲治 (研究員)

奥川 伸一 (研究員)

赤羽 厚子 (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
- c) Dirac 電子系における特異な輸送特性

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。本年は層状物質における電子フォノン相互作用の精密計算から，アルカリ原子をドーピングした層状物質において，圧力による超伝導転移温度制御の可能性を示した。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。固体の熱物性については，原子に加わる力と系のエネルギーの第一原理計算結果を再現するニューラルネットワークポテンシャルを作成し，それをフォノン物性の計算に応用することで熱伝導率の計算時間を大幅に軽減した。
- 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，吸着原子が生じる近藤状態のスペクトル形状から基板内の歪を解析しうること，層状超伝導物質にて生じるス波束縛状態の特異な空間分布について実験グループとの共同研究を進めた。加えて，最近は，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，鉄フタロシアニン (FePc) を Pt(111) 表面に吸着させた場合を対象として共同研究を行い，FePc の持つ磁気モーメントが Pt の伝導電子に対して磁性不純物として働いていること，FePc 分子において，スピン移行効果を用いた，電流による分子スピン制御が可能であることを示した。
- c) 電子のスピンとその相互作用は相対論的量子力学における Dirac 方程式に遡る。1 次元的な曲線に閉じ込められた電子を考えると，Dirac 方程式から出発して非相対論的極限をとることで，曲線の幾何学的構造と結合した新たなスピン軌道相互作用が生じることを示した。この幾何学的なスピン軌道相互作用によって，二重らせんに閉じ込められた系に電流を流すと，そのカイラリティに依存してスピン分極が生じる Edelstein 効果が起こることを示した。

B-1) 学術論文

- S. CHOI, S. HIROI, M. INUKAI, S. NISHINO, R. SOBOTA, D. BYEON, M. MIKAMI, E. MINAMITANI, M. MATSUNAMI and T. TAKEUCHI**, “Crossover in Periodic Length Dependence of Thermal Conductivity in 5d Element Substituted Fe₂ VAl-Based Superlattices,” *Phys. Rev. B* **102**, 104301 (10 pages) (2020). DOI: 10.1103/PhysRevB.102.104301
- H. GAMOU, K. SHIMOSE, R. ENOKI, E. MINAMITANI, A. SHIOTARI, Y. KOTANI, K. TOYOKI, T. NAKAMURA, Y. SUGIMOTO, M. KOHDA, J. NITTA and S. MIWA**, “Detection of Spin-Transfer from Metal to Molecule by Magnetoresistance Measurement,” *Nano Lett.* **20**, 75–80 (2020). DOI: 10.1021/acs.nanolett.9b03110
- K. SHIMIZU, W. LIU, W. LI, S. KASAMATSU, Y. ANDO, E. MINAMITANI and S. WATANABE**, “First-Principles Study of Li-Ion Distribution at γ -Li₃PO₄/Metal Interfaces,” *Phys. Rev. Mater.* **4**, 015402 (10 pages) (2020). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.4.015402
- Z. NI, E. MINAMITANI, K. KAWAHARA, R. ARAFUNE, C.-L. LIN, N. TAKAGI and S. WATANABE**, “Mechanically Tunable Spontaneous Vertical Charge Redistribution in Few-Layer WTe₂,” *J. Phys. Chem. C* **124**, 2008–2012 (2020). DOI: 10.1021/acs.jpcc.9b10423
- X. YANG, Y. YUAN, Y. PENG, E. MINAMITANI, L. PENG, J.-J. XIAN, W.-H. ZHANG and Y.-S. FU**, “Observation of Short-Range Yu-Shiba-Rusinov States with Threefold Symmetry in Layered Superconductor 2H-NbSe₂,” *Nanoscale* **12**, 8174–8179 (2020). DOI: 10.1039/d0nr01383h
- K. IWATA, T. MIYAMACHI, E. MINAMITANI and F. KOMORI**, “Sensing Surface Lattice Strain with Kondo Resonance of Single Co Adatom,” *Appl. Phys. Lett.* **116**, 051604 (4 pages) (2020). DOI: 10.1063/1.5142064
- P. MANO, E. MINAMITANI and S. WATANABE**, “Straintronic Effect for Superconductivity Enhancement in Li-Intercalated Bilayer MoS₂,” *Nanoscale Adv.* **3**, 3150–3155 (2020). DOI: 10.1039/D0NA00420K
- N. H. SHIMADA, E. MINAMITANI and S. WATANABE**, “Theoretical Prediction of Superconductivity in Monolayer h-BN Doped with Alkaline-Earth Metals (Ca, Sr, Ba),” *J. Phys.: Condens. Matter* **32**, 435002 (9 pages) (2020). DOI: 10.1088/1361-648X/aba674
- A. SHITADE and E. MINAMITANI**, “Geometric Spin–Orbit Coupling and Chirality-Induced Spin Selectivity,” *New J. Phys.* **22**, 113023 (8 pages) (2020). DOI: 10.1088/1367-2630/abc920
- A. SHITADE, K. MAMEDA and T. HAYATA**, “Chiral Vortical Effect in Relativistic and Nonrelativistic Systems,” *Phys. Rev. B* **102**, 205201 (6 pages) (2020). DOI: 10.1103/PhysRevB.102.205201
- A. DAIDO, A. SHITADE and Y. YANASE**, “Thermodynamic Approach to Electric Quadrupole Moments,” *Phys. Rev. B* **102**, 235149 (12 pages) (2020). DOI: 10.1103/PhysRevB.102.235149

B-3) 総説, 著書

- C.-L. LIN, N. KAWAKAMI, R. ARAFUNE, E. MINAMITANI and N. TAKAGI**, “Scanning Tunneling Spectroscopy Studies of Topological Materials,” *J. Phys.: Condens. Matter* **32**, 243001 (24 pages) (2020). DOI: 10.1088/1361-648X/ab777d
- S. WATANABE, W. LI, W. JEONG, D. LEE, K. SHIMIZU, E. MINAMITANI, Y. ANDO and S. HAN**, “High-Dimensional Neural Network Atomic Potential for Examining Energy Materials: Some Recent Simulations,” *J. Phys.: Energy* **3**, 012003 (16 pages) (2021). DOI: 10.1088/2515-7655/abc7f3

渡邊 光, 柳瀬陽一, 石塚 淳, 金杉翔太, 大同暁人, 角田峻太郎, 下出敦夫, 塩見雄毅, 「奇パリティ多極子相の分類学と電磁応答・超伝導」, *固体物理* **55**, 535–549 (2020).

B-4) 招待講演

E. MINAMITANI, “Molecular spins at surfaces: From Kondo singlet to application for spintronics,” The 3rd Symposium for The Core Research Clusters for Materials Science and Spintronics, Sendai (Japan), February 2020.

南谷英美, 「半導体材料における電子フォノン相互作用と熱伝導率のシミュレーション」, 2020年度関東支部学術講演会, 2020年4月. (新型コロナウイルスの影響により中止・招待講演は成立)

南谷英美, 「半導体における電子フォノン相互作用の精密解析」, 第4回フォノンエンジニアリング研究会, オンライン開催, 2020年12月.

E. MINAMITANI, “Ab-initio calculation of electron-phonon coupling in layered materials,” 2021 Taiwan-AVS symposium: Advances in Scanned Probe Microscopy, Online, January 2021.

南谷英美, 「表面界面物性における量子多体効果」(受賞記念講演), 2020年日本表面真空学会学術講演会, オンライン開催, 2020年11月.

下出敦夫, 「結晶における多極子の定式化と交差相関応答の理論的研究」(受賞記念講演), 日本物理学会第76回年次大会, オンライン開催, 2021年3月.

三輪邦之, 「ナノ接合内の分子における光電変換に関する理論的研究」(受賞記念講演), 日本物理学会第76回年次大会, オンライン開催, 2021年3月.

B-6) 受賞, 表彰

南谷英美, 第1回日本表面真空学会若手女性研究者優秀賞(2020).

下出敦夫, 日本物理学会若手奨励賞(領域8)(2020).

三輪邦之, 日本物理学会若手奨励賞(領域9)(2020).

南谷英美, 日本物理学会第二回米沢富美子記念賞(2021).

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推進委員会委員(2018–).

日本物理学会運営委員(領域3)(2020.10–2021.9). (下出敦夫)

学会の組織委員等

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

その他

IOP, Trusted Reviewer (2020).

B-8) 大学での講義, 客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「基礎物理化学II」, 2020年7月1日–3日.

B-10) 競争的資金

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).

科研費若手研究,「温度勾配が誘起するスピンのダイナミクスの理論」, 下出敦夫 (2018年度-2020年度).

C) 研究活動の課題と展望

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つつあるが, 結晶とは異なる「不規則ではあるが何らかの幾何的な構造」がある場合を扱うための工夫が必要であることを実感している。たとえば, ニューラルネットワークポテンシャルに関しては乱れの情報や短距離・中距離相関をよく記述できる特徴量が物理量の高精度予測のためには必要となることが予想される。この課題にデータサイエンス分野で発展が著しいトポロジカルデータ解析や多様体学習などの手法を試していきたい。

また, Dirac 電子系における特異な輸送特性について, 現実物質での発現・制御の可能性を探るため, 第一原理計算からの強束縛模型構築などと組み合わせた計算手法の開発や, それを応用した物質探索を進めていきたい。