

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))

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

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，最もシンプルな磁性を持つ分子である NO が Au(110)-1×2 再構成表面に吸着した場合に生じる近藤効果について，実験グループとの共同研究を進めた。この系では bridge (安定) / ontop (準安定) サイトに吸着した NO モノマー分子，3つの NO 分子が bridge-ontop-bridge サイトに吸着したトライマー構造や，その繰り返しからなる鎖状の構造が生じる。興味深いことに，ontop に吸着した NO 分子でのみ，局在スピンの由来した近藤効果によって生じていると考えられる微分コンダクタンス中のスペクトル構造が現れる。さらに，同じ ontop サイトに吸着した NO 分子でも，モノマーとトライマー内部の分子では，微分コンダクタンスのスペクトル形状が大きく異なる（前者ではディップ形状が現れるが，後者ではピーク形状が現れる）。密度汎関数理論による電子状態計算と数値くりこみ群による理論解析から，Au(110)-2×1 再構成表面上の NO 分子では2つの π^* 軌道の占有状態が吸着構造に対して非常に鋭敏に反応することがこれらのスペクトル形状の違いを生じていることが明らかになった。

B-1) 学術論文

T. ICHIKAWA, E. MINAMITANI, Y. SHIGESATO, M. KASHIWAGI and T. SHIGA, “How Mass Disorder Affects Heat Conduction in Ternary Amorphous Alloys,” *AIP Adv.* **11(6)**, 65026 (7 pages) (2021). DOI: 10.1063/5.0051285

H. KOSHIDA, H. OKUYAMA, S. HATTA, T. ARUGA and E. MINAMITANI, “Effect of Local Geometry on Magnetic Property of Nitric Oxide on Au(110)-(1×2),” *Phys. Rev. B* **103(15)**, 155412 (8 pages) (2021). DOI: 10.1103/PhysRevB.103.155412

K. SHIMIZU, E. F. ARGUELLES, W. LI, Y. ANDO, E. MINAMITANI and S. WATANABE, “Phase Stability of Au-Li Binary Systems Studied Using Neural Network Potential,” *Phys. Rev. B* **103(9)**, 94112 (10 pages) (2021). DOI: 10.1103/PhysRevB.103.094112

A. SHITADE and Y. ARAKI, “Magnetization Energy Current in the Axial Magnetic Effect,” *Phys. Rev. B* **103(15)**, 155202 (8 pages) (2021). DOI: 10.1103/PhysRevB.103.155202

H. IMADA, M. IMAI-IMADA, K. MIWA, H. YAMANE, T. IWASA, Y. TANAKA, N. TORIUMI, K. KIMURA, N. YOKOSHI, A. MURANAKA, M. UCHIYAMA, T. TAKETSUGU, Y. K. KATO, H. ISHIHARA and Y. KIM, “Single-Molecule Laser Nanospectroscopy with Micro-Electron Volt Energy Resolution,” *Science* **373(6550)**, 95–98 (2021). DOI: 10.1126/science.abg8790

E. MINAMITANI, “Ab Initio Analysis for the Initial Process of Joule Heating in Semiconductor,” *Phys. Rev. B* **104**, 85202 (9 pages) (2021). DOI: 10.1103/PhysRevB.104.085202

B-3) 総説, 著書

南谷英美, 「電子フォノン相互作用の第一原理シミュレーション」, 「マイクロ・熱工学の進展」, 第1編第4章第2節(部分を執筆), (株) エヌ・ティー・エス (2021). ISBN: 978-4-86043-722-0 C3042

B-4) 招待講演

南谷英美, 「ナノスケール磁性およびフォノンの計算物質科学」, ISSP Women's week 2021, オンライン開催, 2021年8月.

南谷英美, 「電子フォノン相互作用と発熱の理論」, 表面界面スペクトロスコープ 2021, オンライン開催, 2021年12月.

E. MINAMITANI, “Atomic scale simulation of thermal transport and heat generation in semiconducting materials,” The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2021 (Pacifichem 2021), Honolulu (U. S. A.) (online), December 2021.

E. MINAMITANI, “Ab-initio predictions of superconductivity in layered materials,” Pacifichem 2021, Honolulu (U. S. A.) (online), December 2021.

南谷英美, 「ナノスケール磁性およびフォノンの計算物質科学研究」, 日本物理学会第77回年次大会, オンライン開催, 2022年3月. (米沢賞受賞記念講演)

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–).

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 Vacuum Congress, Program subcommittee in Surface Science division (2021).

B-10) 競争的資金

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). (* 補助事業期間延長承認申請書提出済)

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」, 南谷英美 (2021年度–2024年度).

科研費若手研究, 「単一分子接合系における光・電子・スピンの超高速ダイナミクスに関する理論的研究」, 三輪邦之 (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(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, 剛性率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。