

機能性量子物質のマテリアルデザイン基礎理論

楠瀬 博明

Fundamental Theory for Functional Quantum Materials Design

Hiroaki Kusunose

現代のエレクトロニクス文明を支える半導体や磁性体などの機能性物質は、電子の電荷またはスピンの機能を個々に利用したものである。物質科学の進展にともない、これら単独の機能だけではなく、電荷とスピンの複合的な自由度を利用し、その量子力学的な側面も最大限活用した機能性量子物質の開拓が近年活発に行われている。また、物質中の電子特性には未だ神秘的な側面があり、トポロジカル物性など物理学上の新発見も相次いでいる。応用的観点からは、複合電子自由度に着目したマテリアルインフォマティクスの物質デザインの促進も重要な課題である。

本研究では、物質中の電子がもつ電荷・スピン・軌道の自由度を系統的かつ直感的に理解するための理論基盤を整備し、磁場による熱制御や光による歪み制御など従来にはない機能性を有する量子物質を統括的にデザインする理論手法を確立することを目的として、以下の成果と教育への波及効果を得た。

1. 機能性量子物質設計の基礎理論

1. 1 完全直交基底による電子状態の表現

物質の原子位置や関係する電子軌道ならびに空間群の番号といった物質の構成情報から、電子状態を記述するための完全直交基底を自動生成する計算コード(Python: MultiPie ライブラリ)を開発し、グラフェン、 SrVO_3 、 MoS_2 などの典型物質に適用して電子状態の記述を行い、実用的な使用に耐えうることを確認した(図 1)。この成果については、おもに完全基底の生成方法と使用例を議論した論文として出版した[1]。また、並行して、この完全直交基底を用いて、物質の機能を決定する応答関数(線形応答、非線形応答)の数学的構造を解析して、応答の有無を決定づける物質モデルパラメータの抽出を行う一般的方法論を提案した [2]。これらの成果により、物質の構造や関連電子軌道の情報を与えるだけで、電子状態のモデリングが可能となり、また、各種物性応答に重要なモデルパラメータを特定することができるため、機能性量子物質の特性解明や新たな物質

設計、予測の方法論を飛躍的に発展させることができると期待される。

特に、カイラル結晶の代表物質テルルに対して上記手法を適用することで、これまで原子レベルで全く未知であった物質のカイラリティを特徴づける電子状態の要素を明らかにし、産業利用に置いて重要な右手系・左手系の作り分けを実現するための原理を解明した。この成果は、米国物理学会の *Physical Review Letters* 誌に掲載されており[3,4]、また、関連した特許を出願中である[5]。

1. 2 カイラル系の格子振動

さらに、この方法論を電子系だけでなく、結晶の格子振動に適用することで、カイラル結晶特有の格子振動の角運動量を議論し、保存角運動量を特徴づける指標を見出した(図 2)。カイラル物質では、電流によって物質がカイラリティに応じた向きで磁化する現象が報告されており、この発現機構は全くの未解明である。格子振動の角運動量とスピン角運動量の相互転換がこの現象解明の鍵であると考えられていることもあり、カイラル系の格子角運動量の特性を解明することは重要な課題である。この成果は日本物理学会の *Journal of the Physical Society of Japan* 誌に掲載され[6]、Editors Choice に選ばれるなど、注目を集めている。

1. 3 ナノ回転子と電気トロイダル双極子

また、カイラリティと関係の深い物理量である電気トロイダル双極子が原子レベルで電場や磁場を回転させる働きがあることを突き止め、これを利用したスピン流の生成が可能であることを提案した。電気トロイダル双極子は、それが秩序化しても時間反転も空間反転も破らない量であるため、顕著な効果がないと考えられていたが、この物理量は鏡映対称性を破るため、鏡映面に対して垂直な方向が非対称となり、入力に対して非対称な応答、すなわち、回転効果が得られる(図 3)。この成果も *Journal of the Physical Society of Japan* 誌に掲載され[7]、Editors Choice に選ばれている。

以上の一連の成果により、本学の第 28 回「連合

駿河台学術賞」を受賞した。

2. 本研究による教育的波及効果

上記の研究を行うにあたり、群論を効果的に用いている。具体的には、結晶中の電子状態を群論によって系統的に整理しているが、結晶を分類する230個の空間群に対する全ての対称操作を様々な電子状態や構造に適用して理解することは容易ではない。そこで、対称操作や電子軌道を視覚化するソフトウェアを開発した。これにより、インタラクティブに対称操作や電子軌道の構築を行って、視覚的に確認することができるようになった(図4)。このソフトウェアは、群論や電子状態の様子を視覚的に確認しながら学ぶことを容易にし、効果的な教材になると思われる。また、これらのソフトウェアは3次元の様々な物理量の視覚化を手助けするツール開発に役立つように汎用的に設計されており、物性研究に欠かせない教育的なツールに発展させることができる。

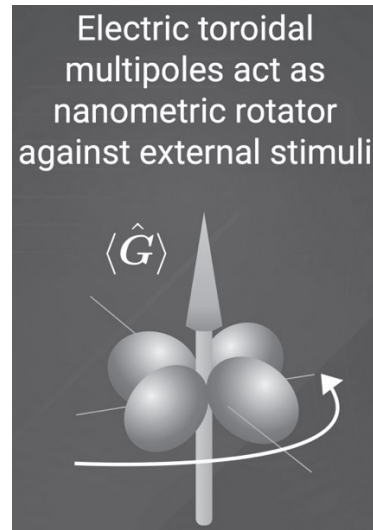


図3：電気トロイダル双極子$\langle \hat{G} \rangle$による回転効果。

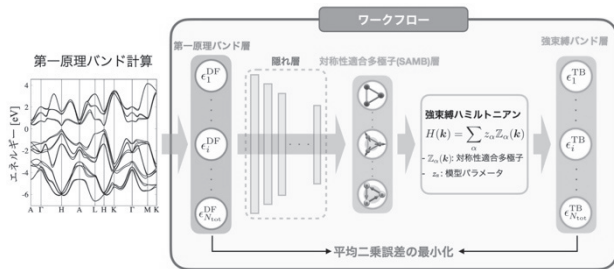


図1：量子物質のモデリングと解析。

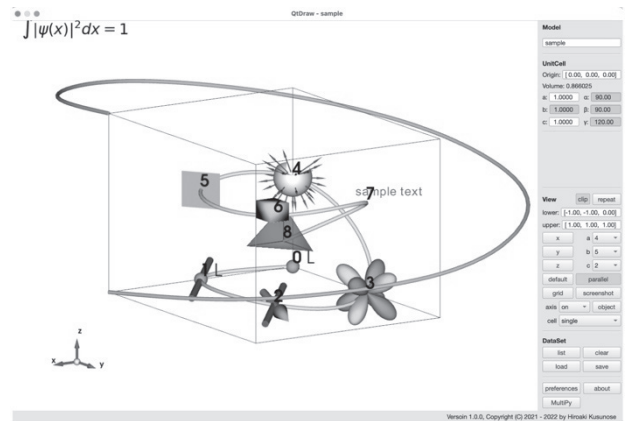


図4：視覚化ツール QtDraw。

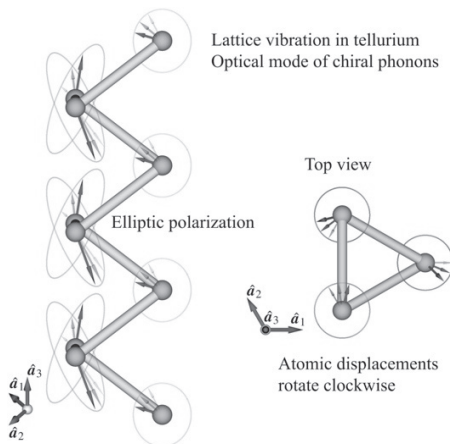


図2：カイラル系の格子角運動量。

＝ 文献 ＝

[1] H. Kusunose, R. Oiwa, and S. Hayami, Phys. Rev. B **107**, 195118 (2023).
 [2] R. Oiwa and H. Kusunose, J. Phys. Soc. Jpn. **91**, 014701 (2022).
 [3] R. Oiwa and H. Kusunose, Phys. Rev. Lett. **129**, 116401 (2022).
 [4] 楠瀬博明, 大岩陸人, 特許、特願 2022-027958
 [5] J. Kishine, H. Kusunose, and H.M. Yamamoto, Isr. J. Chem. **62**, e202200049 (2022).
 [6] H. Tsunetsugu and H. Kusunose, J. Phys. Soc. Jpn. **92**, 023601 (2023).
 [7] S. Hayami, R. Oiwa, and H. Kusunose, J. Phys. Soc. Jpn. **91**, 113702 (2022).