

Theoretical Physics II

応用数学

I 原子層物質を用いた電子デバイスの理論設計

Theoretical design of electronic devices based on atomic layer materials

草部浩一

Kusakabe, K.

原子層物質であるグラフェンや hBN に Ni を両面から積層させた、Ni/Graphene/Ni 構造や Ni/hBN/Ni 構造では、特異な TMR の上昇が発生する。この効果は、前者では磁気構造変調によるディラック点上のギャップ開閉効果として現れることを、後者では交差相関効果の発見として、報告した。このうち、Ni/Graphene/Ni では、3100%を超える磁気抵抗比が面内伝導度を通じて生じうる。我々は、密度汎関数法計算に基づく伝導度計算によって TMR 比を評価して、この効果を見出した。また、原子層の積層構造を進展させて、Graphene 層を置き換えた Ni/hBN/Graphene/hBN/Ni とすることで、共鳴状態が現れて、従来の設計事例より巨大な 1200 を超える TMR 比が現れうることを結論した。

II ナノグラフェン・点欠陥ゼロモードの理論

Theory of nanographene zero modes by point-defects

草部浩一

Kusakabe, K.

グラフェンやナノグラフェン分子では、原子欠損の周囲にゼロモードが現れることがある。森下と草部らは、このゼロモードの発生を系統的に検討してきた。その結果、幾つかの法則を見出し、物質設計によってゼロモード上の電子系からハイゼンベルグスピン系を構成できることを明らかにした。その結果、量子計算リソースを与える 1次元 $S=1$ ハイゼンベルグスピン鎖を物質設計することに成功した。この系では、プロトン NMR により量子観測を実行できることを指摘した。

III 銅酸化物超伝導体の理論設計

Theoretical design of cuprate superconductors

草部浩一

Kusakabe, K.

銅酸化物高温超伝導体のバッファ層を置き換える効果は、伝導電子が感じる有効遮蔽相互作用の強度変化としても現れる。寺西と草部らは、有効遮蔽相互作用の物質依存性と、それぞれの強度における超伝導ギャップ関数のホール濃度依存性を評価した。その結果、CuO₂ 面のフィリングを最適ドーブ濃度近傍に保ちながら、強い相関効果を発現しうるバッファ層物質の選択が可能であることを、数値計算によって明らかにできた。また、Hg1201 系銅酸化物での電子状態計算から、強磁性揺らぎ機構を論じ、ホールドーブによるオンサイト遮蔽クーロン相互作用の減少があって、この効果は、過剰ドーブ域における強磁性スピン揺らぎの顕在化として現れることを結論した。

IV 正方晶 ZrO_2 における THz 誘起相変態の理論

Theory of structural transformation of ZrO_2 by THz-light irradiation

草部浩一

Kusakabe, K.

正方晶 ZrO_2 では、 Γ 点光学フォノンの励起から、Klemens 過程を通じた音響フォノンモードの発生が、特に Z 点近傍に現れる集積効果を通じて、結晶の不安定化と、マルテンサイト変態の動的発生に寄与することを論じた。

V グラフェン上の PASE 分子構造の理論解析

Theoretical analysis of a PASE molecule on graphene

草部浩一

Kusakabe, K.

グラフェン表面上に吸着したリンカー分子 PASE は、周囲の液相が与える誘電応答の変調効果が、張り付いた直線状構造に相対的に屈曲した構造を安定化させることを論じた。この成果を用いて、生体物質センサーに応用する際に、リンカー分子の原子スケールでの挙動が設計可能であることを論じた。

VI 原子スケール薄膜の光励起状態の理論解析法

Development of methods for optical excitations in atomic scale thin films

草部浩一

Kusakabe, K.

光電子顕微鏡 (PEEM) の解析結果に現れている、GaAs 表面、 Bi_2Se_3 表面などの特異な表面電子励起状態の解析を進めるための理論計算法を整備した。特に、ドーピングされた GaAs スラブ構造における電子状態の精密評価が、密度汎関数法計算からワニエ関数決定を通じて行えることを示して、表面近傍の電子・正孔励起の原子スケールでの様相を議論した。

VII 進化的アルゴリズムを用いた爆轟化学反応解析

Development of theoretical methods for detonation dynamics

草部浩一

Kusakabe, K.

進化的アルゴリズムを応用して、TNT/RDX 混晶相に現れうる酸化・還元反応を、有効的に表現する方法を開発した。特に、進化的アルゴリズムが与える演算操作の結果得られる TNT, RDX の不安定化を分子動力学計算によって明らかにして、高速反応がトリガーされる機構を明らかにした。

発表論文 List of Publications

- I-1** Y. Wicaksono, H. Harfah, G. K. Sunnardianto, M. A. Majidi, and K. Kusakabe: “Colossal In-plane Magnetoresistance Ratio of Graphene Sandwiched with Ni Nanostructures”, RSC Adv., **12**, 13985-13991 (2022).
- I-2** H. Harfah, Y. Wicaksono, G. K. Sunnardianto, M. A. Majidi, K. Kusakabe: “High magnetoresistance of a hexagonal boron nitride-graphene heterostructure-based MTJ through excited-electron transmission”, Nanoscale Adv., **4**, 117 (2022).
- I-3** Halimah Harfah¹, Yusuf Wicaksono, Gagus K. Sunnardianto, Muhammad A. Majidi, Koichi Kusakabe: “High magnetoresistance of hexagonal boron nitride-graphene heterostructure-based MTJ through excited-electron transmission”, 2022 年第 69 回応用物理学会春季学術講演会 (2022 年 3 月 24 日)
- I-4** Yusuf Wicaksono, Halimah Harfah, Gagus K. Sunnardianto, Muhammad A. Majidi, Koichi Kusakabe: “The Importance of Interface in Controlling Mass Gapped Dirac Cone of Graphene Through Pseudospin via Magnetic Proximity Effect”, 2022 年第 69 回応用物理学会春季学術講演会 (2022 年 3 月 25 日)
- II-1** N. Morishita, Y. Oishi, T. Yamaguchi, K. Kusakabe: “S=1 antiferromagnetic electron-spin systems on hydrogenated phenalenyl-tessellation molecules for material-based quantum-computation resources”, Appl. Phys. Express **14**, 121005 (2021).
- II-2** N. Morishita, K. Kusakabe: “Zero-energy modes in a super-chiral nanographene network of phenalenyl-tessellation molecules”, Phys. Lett. A, **408**, 127462 (2021).
- II-3** 森下直樹, 草部浩一: フェナレニル充填型分子に基づくナノグラフェン構造における有効量子多体模型, 日本物理学会 2021 年秋季大会 (2021 年 9 月 22 日)
- III-1** S. Teranishi, K. Nishiguchi, S. Yunoki, K. Kusakabe: “Effect of on-site Coulomb repulsion on ferromagnetic fluctuations in heavily overdoped cuprates”, J. Phys. Soc. Jpn., **90**, 094707 (2021).
- III-2** S. Teranishi, K. Nishiguchi, K. Kusakabe: “Material Optimization of Potent High-Tc Superconducting Single-layer Cuprates”, J. Phys. Soc. Jpn., **90**, 054705 (2021).
- IV-1** 永井正也, 東谷悠平, 芦田昌明, 草部浩一, 新岡宏彦, 服部梓, 田中秀和, 磯山悟朗, 尾崎典雅: 正方晶ジルコニアの THz 誘起相変態: 紫外・中赤外光励起での照射効果, 日本物理学会 2021 年秋季大会 (2021 年 9 月 20 日)
- V-1** 大石泰弘, 草部浩一: グラフェン上吸着リンカー分子の理論的構造解析, 日本物理学会 2021 年秋季大会 (2021 年 9 月 22 日)

- VI-1** 大内涼雅, 草部浩一, 福本恵紀, 石田邦夫第一原理計算に基づく GaAs 表面における 1 次過程光電子放出強度の評価の理論的検証, 日本物理学会第 77 回年次大会 (2022 年 3 月 16 日)
- VI-2** 大内涼雅, 草部浩一: 第一原理計算に基づく GaAs 表面における 1 次過程光電子放出強度の評価の理論的検証応用物理学会関西支部 2021 年度 第 2 回講演会 (2021 年 10 月 15 日)
- VII-1** Koichi Kusakabe: “Evolutionary algorithm for simulation of fast chemical reaction process”, Activity Report 2021/ Supercomputer Center, ISSP, Univ. of Tokyo, ISSN 2188-5001 (2022).

科学研究費補助金等

- 1 文部科学省科学研究費助成事業 (科学研究費補助金) (令和元年度～令和 4 年度)
基盤研究 (A) 課題番号: 19H00862
研究課題 ナノ薄膜炭素材料のフォノン物性学理の深化
研究代表者 荻博次 (大阪大学)
研究分担者 草部浩一
- 2 文部科学省科学研究費助成事業 (科学研究費補助金) (令和 3 年度～令和 5 年度)
基盤研究 (B) 課題番号: 21H01752
研究課題 表面終端により異なるトポロジカル表面状態とスピン流ダイナミクス
研究代表者 福本恵紀 (高エネルギー加速器研究機構)
研究分担者 草部浩一
- 3 ダイセル・エンジニアリング・サイエンス共同研究講座 (大阪大学基礎工学研究科)
共同研究 (令和 3 年度)
研究課題 1 爆轟ススの非酸化的脱水素触媒としての実用化を目指した基礎研究
研究課題 2 分子動力学計算と進化的アルゴリズムを組み合わせた爆轟反応機構の計算科学的研究
共同研究主担当者 阪本聡 (ダイセル)
共同研究パートナー 草部浩一