

## 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.

原子層物質特有のトポロジカルスピンデバイスとして、Ni/hBN-Graphene-hBN/Ni 構造に現れるスピンバルブ効果の理論解析を進めた。[I-1, I-2] この系を構成する Ni/hBN-ナノ構造を、Graphene 面に相対的にスライドさせると、ディラックコーンのギャップ構造を変調できる。これは、局所原子間力や局所応力を、スピン流の変化として検出できる新しいスピンデバイスの設計に相当する。この得意なスピンバルブ効果を、理論的に定量評価した結果を用いて、スピンメカトロニックデバイスの設計を推進した。

### 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.

$S = 1$  反強磁性ハイゼンベルグスピン鎖を与えるナノグラフェン量子計算リソースで、プロトン NMR による局在量子スピン状態の観測ができることを、GIPAW 計算を参照しながら議論した。[II-1] ゼロモードの局在中心位置にある水素は、ナノグラフェンの平面構造を終端する  $\sigma$ -結合する水素とは明瞭に異なる化学シフトを示す。さらに、ナノグラフェン構造上の吸着位置がもつ対称性に応じて、シグナルを分離することが可能である。局所電子スピンを適切に配置できるナノグラフェン構造を用いると、さらに局在ゼロモードを起源とするハニカム格子上の  $S = 3/2$  ハイゼンベルグ量子スピン系が設計できることを議論した。

### III スピン・電流回転相互作用の理論

Theoretical design of cuprate superconductors

草部浩一, 北谷基治

Kusakabe, K., Kitatani, M.

ナノメータスケールのデバイス構造において、非一様な電流分布が局所スピンと相互作用する現象に注目が集まっている。その起源が、量子化されたスピン自由度に対して電流回転成分から角運動量が与えられるスピン・電流回転間相互作用にあるとする有効理論が知られている。そこで、光子伝搬関数の解析的性質に基づいて、電子スピンと電流回転の直接相互作用の数学的表現を導いた。[III-1] このベクトル・ポテンシャルが媒介する相互作用モードは、既知の電流・電流相互作用を変形して得たものであるが、スピン自由度と電流回転の直接相互作用の振幅を定量計算する際に、量子化規則も定める有用なものである。

## IV 正方晶 $\text{ZrO}_2$ における THz 誘起相変態の理論

Theory of structural transformation of  $\text{ZrO}_2$  by THz-light irradiation

草部浩一

Kusakabe, K.

正方晶  $\text{ZrO}_2$  における THz 誘起相変態を定めるクレメンズ過程を定量的に評価するため、フォノン分散の定量計算を実施した。SCAN meta-GGA を用いた電子状態計算を利用しながら、スーパーセル計算による原子間力評価を実施し、Phonopy を利用することで、フォノンスペクトル決定を行った。その結果、実験データとの定量比較に耐えうる十分な精度でフォノン分散決定が可能であることが確認された。この結果を用いることで、クレメンズ過程の詳細が明らかになった。[IV-1, IV-2]

## 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 PASE 分子を用いる生体センサーにおいては、分子捕獲時には可動性を確保しながら、フォノン散乱を用いるセンシング時には剛直性を持たせるように、システム設計を行うことが望ましい。溶液中での PASE 分子の動力学特性評価を 3D-RISM 計算により行うと、液相中と真空中での吸着分子の動力学特性の変化が議論できる。真空中での断熱ポテンシャル面評価と、液中での 3D-RISM 計算が与える自由エネルギー評価をもとにして、実験的にセンシング測定精度を向上させる方法について議論した。[V-1, V-2]

## 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, 北谷基治

Kusakabe, K., Kitatani, M.

光電子顕微鏡 (PEEM) の測定結果に現れている、各種半導体 ( $\text{GaAs}$ ,  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ ,  $\text{MoS}_2$  等) の表面励起状態を解析するため、スラブ模型を用いた密度汎関数法計算を基にした有効模型の構築方法を系統的に議論した。[VI-1, VI-2, VI-3] スラブ模型により表面近傍から数~数十原子層に及ぶ範囲での局在電子模型を決定することが可能である。不純物置換サイトの状態を評価し、強結合模型を定めるトランスファー項の変化を不純物近傍で求めることが可能である。同時に、バルク模型中で求めた遮蔽相互作用の評価結果を用いると、実空間描像による相互作用電子系の模型の他に、波数空間描像による励起子有効ハミルトニアン の決定も可能となる。

## 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.

高速な化学的連鎖反応の反応経路を、短時間のシミュレーションから推論することを目指して、進化的アルゴリズムを用いた反応解析法を検討した。進化的アルゴリズムが与える原子置換演算を一般化して用いることにより、反応開始条件の推定、発生しうる中間生成物の逐次的導出、などが可能となることがわかった。この方法に関する報文を、共同研究者である石河博士らと纏めた。[VII-1]

## VIII D $\Gamma$ A を用いたニッケル酸化物超伝導の相図計算

Calculation of the phase diagram of nickelate superconductors  
by using the dynamical vertex approximation

北谷基治

Kitatani, M.

無限層ニッケル酸化物での超伝導について、第一原理計算に基づき強相関手法である動的バーテックス近似(D $\Gamma$ A)を用いて転移温度の計算を行い、実験結果に整合する相図を得た。[VIII-1, VIII-2, VIII-3, VIII-4] また、D $\Gamma$ A に代表される動的平均場法の空間拡張理論を用いた超伝導の計算について総説論文を執筆した。[VIII-5] さらに同様の手法を、新しく報告のあった5層系ニッケル酸化物の超伝導や理論的に提案されている類似物質にも適用し、転移温度を求めた。[VIII-6, VIII-7]

### 発表論文 List of Publications

- I-1 Y. Wicaksono, H. Harfah, G. K. Sunnardianto, M. A. Majidi, K. Kusakabe, "Spin-topological electronic valve in Ni/hBN-Graphene-hBN/Ni Magnetic Junction", *Magnetochem.* **9**, 113 (2023).
- I-2 Y. Wicaksono, H. Harfah, G.K. Sunnardianto, M.A. Majidi, K. Kusakabe, "Spin-mechatronics device based on controllable mass gapped Dirac cone of graphene in a Ni/hBN-graphene-hBN/Ni magnetic junction", 2023 年第 70 回応用物理学会春季学術講演会, (2023 年 3 月 15 日).
- II-1 小松 謙慎, 草部 浩一, 森下 直樹, "局在ゼロモードを有するナノグラフェンの電子状態と水素 NMR", 日本物理学会 2023 年春季大会, (2023 年 3 月 23 日).
- III-1 草部 浩一, 北谷 基治, 大内 涼雅, 柚木 清司, 前川 禎通, "遅延ベクトルポテンシャルに媒介された電流回転・スピン間結合の理論", 日本物理学会 2023 年春季大会, (2023 年 3 月 22 日).

- IV-1** M. Nagai, Y. Higashitani, M. Ashida, K. Kusakabe, H. Niioka, A. Hattori, H. Tanaka, G. Isoyama, N. Ozaki, "Terahertz-induced martensitic transformation in partially stabilized zirconia", *Commun. Phys.*, **6**, 88 (2023).
- IV-2** 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, "テラヘルツ誘起マルテンサイト変態における励起フォノン依存性", 日本物理学会 2023 年春季大会, (2023 年 3 月 24 日).
- V-1** Y. Oishi, H. Ogi, S. Hagiwara, M. Otani, and K. Kusakabe, "Theoretical Analysis on the Stability of 1-Pyrenebutanoic Acid Succinimidyl Ester Adsorbed on Graphene", *ACS Omega*, **7**, 35, 31120–31125 (2022).
- V-2** 大石 泰弘, 萩 博次, 萩原 聡, 大谷 実, 草部 浩一, "グラフェン上に吸着した PASE の理論的構造評価", 2022 年第 83 回応用物理学会秋季学術講演会, (2022 年 9 月 22 日).
- VI-1** 大内 涼雅, 草部 浩一, 北谷 基治, 福本 恵紀, 石田 邦夫, "n-GaAs 表面における光励起キャリアの第一原理計算理論", 2022 年第 83 回応用物理学会秋季学術講演会, (2022 年 9 月 21 日).
- VI-2** 草部 浩一, 山本 陸人, 福本 恵紀, 石田 邦夫, "光電子放出量定量評価のための Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 表面計算", 2022 年第 83 回応用物理学会秋季学術講演会, (2022 年 9 月 22 日).
- VI-3** 東田 歩, 草部 浩一, 石田 邦夫, "単層 MoS<sub>2</sub> の格子モデル励起子理論と励起子 ARPES スペクトルの計算", 日本物理学会 2023 年春季大会, (2023 年 3 月 22 日).
- VII-1** T. Ishikawa, K. Kusakabe, Y. Makino, S. Sakamoto, N. Okuyama, "Search for the decomposition process of 2,4,6-trinitrotoluene by an evolutionary algorithm", *J. Phys. Chem. A*, **126**, 8082-8087 (2022).
- VIII-1** M. Kitatani, L. Si, O. Janson, Z. Zhong, P. Worm, J. M. Tomczak, R. Arita, K. Held, "Calculation of the Phase Diagram of Nickelate Superconductors", 13th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity (M2S 2022), (2022 年 7 月 19 日).
- VIII-2** M. Kitatani, L. Si, O. Janson, Z. Zhong, P. Worm, J. M. Tomczak, R. Arita, K. Held, "Calculation of the Phase Diagram of Nickelate Superconductors", 29th International Conference on Low Temperature Physics (LT29), (2022 年 8 月 23 日).
- VIII-3** 北谷 基治, "層状ニッケル酸化物の超伝導相図とそれに基づく物質設計", 基研研究会「非自明な電子状態で発現する超伝導現象の新しい潮流」, (2022 年 12 月 23 日).
- VIII-4** 北谷 基治, "ニッケル酸化物の超伝導相図とそれに基づく物質設計", 高温超伝導フォーラム第 10 回, (2023 年 3 月 21 日).
- VIII-5** M. Kitatani, R. Arita, T. Schäfer, K. Held, "Strongly correlated superconductivity with long-range spatial fluctuations", *Journal of Physics: Materials* **5**, 034005 (2022).

**VIII-6** P. Worm, L. Si, M. Kitatani, R. Arita, J. M. Tomczak, K. Held, "Correlations tune the electronic structure of pentalayer nickelates into the superconducting regime", *Physical Review Materials* **6**, L091801 (2022).

**VIII-7** M. Kitatani, Y. Nomura, M. Hirayama, R. Arita, "Ab initio materials design of superconductivity in d9 nickelates", *APL Materials* **11**, 030701 (2023).

## 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4年度～令和6年度）

基盤研究(C) 課題番号: 22K04864

研究課題 ナノグラフェン設計による量子多体効果デバイスの理論

研究代表者 草部浩一

研究分担者 森下直樹 (JAXA)

**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4年度）

研究課題 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

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

**4** 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）

若手研究 課題番号: 21K13887

研究課題 第一原理  $D\Gamma A$  の開発による非従来型超伝導体の定量計算の実現

研究代表者 北谷基治