

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ndeデバイスとして、hBNとGrapheneの積層構造に現れるスピバルブ効果の理論解析を進めた。hBN層にB原子欠損を与えると、hBN上に強い磁気秩序が現れる。この磁気効果は、B原子欠損を与えた単層のhBNによりグラフェンを挟み込んだ構造を構成しても強く生じることが、我々の共同研究によって明らかにされてきた。実際、B原子欠損を生じさせた単層hBNの磁化は、光学的観測で実験的にも確認されている。

そこで、B原子欠損を生じさせた構造で非磁性のグラフェン面を両側から挟み込み、これをスピバルブとして用いるhBN(B-vac)/Graphene/hBN(B-vac)構造を構成することで、巨大な磁気抵抗効果を生じるスピントロニクスデバイスが設計できる。この系のスピ伝導特性が、トンネル磁気抵抗比が400%にも至るものであることを理論的に示す研究に貢献を行った。[I-1, I-2]

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, 北谷基治

Kusakabe, K.

原子スケールの位置を選択して電子スピンを適切に配置できる水素化されたナノグラフェン構造を設計して、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構成できることを示した。[II-1] 具体的には、炭素骨格の設計をPTM法により行い、原子欠損の周期的配置を与えた例を、複数提供した。

これらの典型的な構造の実現可能性を議論するため、原子欠損の作成と同様な効果を与えるオントップ水素吸着によって局在ゼロモードが作れることを、密度汎関数法計算を併用して確認した。得られた局在ゼロモードを、最局在ワニエ化の手法を用いて具体的に得たうえで、それらの間に現れる電子ホッピングの強度を求めた。その結果、設計された系ではディラック電子が共存するにも関わらず、むしろ運動交換相互作用と直接交換相互作用がゼロモード間に適切に発生して、結果として $S = 3/2$ ハイゼンベルグ量子スピン系が現れることが分かった。

このようにしてナノグラフェンを基にした量子スピン系を、プロトン核スピンと電子スピンの共存系として構築する方法を提供した。この系では、さらに進んで、核スピンと電子スピンの磁気応答を基にした量子コンピューティング素子の構築が期待できる。この研究は、大学院博士前期課程の小松謙慎氏、JAXAの森下直樹氏との共同研究である。

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.

前年度からスピン磁気モーメントと電流回転の直接電磁相互作用の理論を開始した。この理論は、光子伝搬関数の解析的性質に基づいて、電子スピン演算子と電流回転演算子との直接相互作用の数学的表現を導いたものである。

これを進めて、我々の表現理論に基づいた電子状態計算理論についての考察を行った。
[III-1] 磁化 M から生じる電流寄与 $\text{rot}M$ を用いず、スピンと電流回転により表記することの利点として、磁気秩序変数の扱いが容易になる場合があることを指摘した。さらに、量子化されたスピン磁気モーメントからの相互作用の結果として、電流回転の量子化を議論できることを指摘した。また、電子相関効果を顕著に扱う電子状態理論の解説も行った。
[III-2]

IV 巨大ラシュバ・スピン軌道結合効果の理論

Theory of Giant Rashba Spin-Orbit Coupling Parameter

草部浩一

Kusakabe, K.

巨大ラシュバ・スピン軌道結合を発生するスピン依存伝導現象が注目されており、特に物質選択の自由度を高めながら強いラシュバ・スピン軌道結合を生じさせる理論設計が試みられている。その一つとして、スピン軌道相互作用が大きくなる重元素を取って用いず、卑金属や軽元素のみで構成された物質構造によりスピン依存伝導現象を発生させる方法の発見と開発が求められている。

そこで、前川らの発案による $\text{Cu}/\text{Cu}_3\text{N}$ 超格子に着目して、理化学研究所との共同研究として理論計算を進めた。その結果、超格子が作る原子配置によりこの効果が強く変化すること、界面での原子構造の選択によっては巨大ラシュバ・スピン軌道結合効果が現れること、その界面形成した超格子の合成は十分に期待ができること、などの結論を得ることに貢献した。[IV-1]

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, 北谷基治

Kusakabe, K., Kitatani, M.

生体関連物質のセンシング・デバイス開発へ貢献することを目指して、グラフェン表面に吸着した PASE 分子の挙動を理論的に解析した。この系では、表面吸着状態に特有の立体障害効果が生じて、直線状吸着状態から PASE 分子が曲がった配置を採る構造に至るエネルギー活性障壁が、グラフェン状の PASE 吸着状態では顕著に高まっていることを解明した。[V-1] さらに、3D-RISM 計算により溶液中での PASE 分子の動力学特性が水和により顕著に影響を受けていることを確認した。

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, 北谷基治

Kusakabe, K., Kitatani, M.

Bi_2Se_3 の各種表面構造を解析し、新たに Se 過剰表面の安定構造の一つを理論的に同定した。[VI-1] 光電子顕微鏡 (PEEM) の測定結果の解析に理論計算結果を提供しながら、 Bi_2Se_3 の特異なディラック電子系を示す表面状態の特徴を明らかにした。[VI-2] 半導体表面励起状態の精密理論解析を目指して、エキシトン状態の表現理論を展開し、GaN におけるエキシトン精密決定計算事例の発表にも貢献した。[VI-3,4]

VII 遷移金属酸化物超伝導の相図計算

Calculation of the phase diagram of nickelate superconductors

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、これまで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 Γ A) を用いて転移温度の計算を行うことで、実験結果に整合する相図が得られている。[VII-1] この成果を踏まえ、さらなる展開として、幅広いパラメータに対する包括的なモデル計算と第一原理計算を組み合わせることによって銅酸化物・ニッケル酸化物やパラジウム酸化物を総合した高温超伝導体に関する最適物質の設計を行った。[VII-2,3,4,5]

その他にも、非フェルミ流体的系におけるネマティックな振る舞いに関する超伝導理論 [VII-6] や新しい有限温度実周波数依存性計算理論 [VII-7] に関する計算を進め、それぞれの学術論文として発表した。

発表論文 List of Publications

- I-1** H. Harfah, Y. Wicaksono, G. K. Sunnardianto, M. A. Majidi, and K. Kusakabe, “Ultra-thin van der Waals magnetic tunnel junction based on monoatomic boron vacancy of hexagonal boron nitride”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **26**, 9733-9740 (2024).
- I-2** H. Harfah, Y. Wicaksono, G.K. Sunnardianto, M.A. Majidi, K. Kusakabe, “Application of Monoatomic Boron Vacancy of Hexagonal Boron Nitride as Ultra-thin Van der Waals Magnetic Tunnel Junction”, 2024 年第 71 回応用物理学会春季学術講演会 (2024 年 3 月 22 日).
- II-1** K. Komatsu, N. Morishita, M. Kitatani, K. Kusakabe, “Designing a polymerized phenalenyl tessellation molecule to realize a super-honeycomb antiferromagnetic $S = 3/2$ spin system”, arXiv:2405.06249 (<https://arxiv.org/abs/2405.06249>, 10 pages)

- III-1** 草部浩一, “スピン・電流回転相互作用の量子化による電子状態計算理論”, 日本物理学会第 78 回年次大会 (2023 年 9 月 17 日).
- III-2** 草部浩一, “磁性と第一原理計算 第 2 回 第一原理計算の基礎”, まぐね/Magnetics Jpn. **18**, 287-294 (2023).
- IV-1** Y. Wicaksono, K. Kusakabe, S. Yunoki, S. Maekawa, “Giant Rashba Spin-Orbit Coupling Parameter in Cu/Cu₃N Polar Superlattice”, 2024 年第 71 回応用物理学会春季学術講演会 (2024 年 3 月 22 日).
- V-1** Y. Oishi, M. Kitatani, K. Kusakabe, “Possible bi-stable structures of pyrenebutanoic acid-linked protein molecules adsorbed on graphene: theoretical study”, Beil. J. Org. Chem., **20**, 570-577 (2024).
- VI-1** 山本陸人, 草部浩一, 北谷基治, “Bi₂Se₃ の Se 過剰表面における準安定構造の理論計算”, 日本物理学会第 78 回年次大会 (2023 年 9 月 18 日).
- VI-2** K. Fukumoto, S. Lee, Y. Suzuki, K. Kusakabe, M. Kitatani, R. Yamamoto, K. Ishida, Y. Nakagawa, D. Shiga, H. Kumigashira, M. Merkel, S. Adachi, “Surface Terminations Control Charge Transfer from Bulk to Surface States in Topological Insulators”, Sci Rep **14**, 10537-1-9 (2024).
- VI-3** 小橋正幹, 草部浩一, 石田邦夫第一原理計算に基づく GaN の格子モデル励起子理論 日本物理学会第 78 回年次大会 (2023 年 9 月 16 日)
- VI-4** 小橋正幹, 草部浩一, 石田邦夫第一原理有効モデルによる GaN 励起子理論と励起子間相互作用の定量評価 日本物理学会 2024 年春季大会 (2024 年 3 月 20 日)
- VII-1** M. Kitatani, “Calculation of the phase diagram of infinite-layer nickelate superconductors”, Workshop on High-Tc Nickelate Superconductors, Guangzhou, China, (2023 年 11 月 18 日).
- VII-2** M. Kitatani, L. Si, P. Worm, J.M. Tomczak, R. Arita, K. Held, “Optimizing Superconductivity: From Cuprates via Nickelates to Palladates”, Phys. Rev. Lett., **130**, 166002 (2023).
- VII-3** 北谷基治, 「ニッケル酸化物超伝導の相図計算とそれに基づく物質設計」, 研究会「強相関電子系のフロンティア」(名古屋大学), (2023 年 8 月 22 日).
- VII-4** 北谷基治, L. Si, P. Worm, J. M. Tomczak, 有田亮太郎, and K. Held, 「パラジウム酸化物での高温超伝導の可能性」, 日本物理学会第 78 回年次大会 (2023 年 9 月 16 日).
- VII-5** M. Kitatani, “Calculation of the phase diagram of nickelate superconductors and possible superconductivity in palladates”, The Asia-Pacific Workshop on Strongly Correlated Systems 2023 (APW 2023), Beijing, China, (2023 年 9 月 24 日).

VII-6 S. Sayyad, M. Kitatani, A. Vaezi, H. Aoki, “Nematicity-enhanced superconductivity in systems with a non-Fermi liquid behavior”, J. Phys. Condens. Matter, **35**, 245605 (2023).

VII-7 M. Kitatani, S. Sakai, R. Arita, “Natural orbital impurity solver for real-frequency properties at finite temperature Phys. Rev. B, **108**, 195124 (2023).

科学研究費補助金等

- 1 日本学術振興会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 日本学術振興会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 日本学術振興会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
- 4 日本学術振興会科学研究費助成事業（科学研究費補助金）（令和5年度～令和8年度）
学術変革領域研究(B) 課題番号: 23H03816
研究課題 量子古典融合アルゴリズムが拓く計算物質科学
研究代表者 品岡 寛
研究分担者 北谷基治
- 5 日本学術振興会科学研究費助成事業（科学研究費補助金）（令和5年度～令和8年度）
学術変革領域研究(B) 課題番号: 23H03817
研究課題 量子埋め込み理論による物質の有効模型構築
研究代表者 品岡 寛
研究分担者 北谷基治