

2023 年度年次報告書

物質探索空間の拡大による未来材料の創製

2021 年度採択研究代表者

平山 元昭

東京大学 大学院工学系研究科

特任准教授

電子材料系における非原子軌道の物質設計

研究成果の概要

本研究では、従来の原子軌道ではない、電子の量子力学的干渉効果によって発現する非原子軌道的状態に着目した物質設計を行い、その学術的基盤を確立することを目指す。本年度は、研究テーマである非原子軌道に由来する新物質・新物性、特に共有結合性を主軸にした研究について、注力して研究した。

10 数年未発見のままであった質量 0 の素粒子の性質を持つ半金属物質(非相対論的ディラック半金属相)の現実物質 RE_8CoX_3 (RE:希土類元素, X:Al,Ga,In)の発見に成功した。この半金属相は金属元素のみから構成されているが、金属元素間の共有結合によって、フェルミ準位上に点状のバンド交差点のみを持つゼロギャップ半導体の性質を発現している。スピンレスのディラック半金属相は数多くのトポロジカル電子相の相境界に位置しており、組成変化・摂動によって多彩な相変化を示すことが可能である。本化合物は過半数が希土類元素から構成されており、フェルミ準位近傍の電子状態も希土類元素の 5d 元素などを起源としているため、磁性元素置換によって大きな電子状態変化を与えることが可能である。本成果は現在投稿中である。

領域内の共同研究で鉄触媒 Fe_2P の研究を行った[1]。鉄は古くから触媒能が低いと考えられているが、本研究で鉄と p 軌道元素からなる化合物の新たな可能性を探索した。 Fe_2P の触媒効果については引き続き共同研究を行う。同じく、本さがけ内の共同研究として、スズの半金属相(α -Sn)-金属相(β -Sn)転移について検討を行った。また、金属バンド中の共有結合性を利用した、トポロジカル超伝導の提案[2]など、共有結合をはじめとする非原子軌道に関する研究をいくつか行った[3]。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Iron phosphide nanocrystals as an air-stable heterogeneous catalyst for liquid-phase nitrile hydrogenation, T. Tsuda, M. Sheng, H. Ishikawa, S. Yamazoe, J. Yamasaki, **M. Hirayama**, S. Yamaguchi, T. Mizugaki, and T. Mitsudome, Nat. Commun. **14**, 5959 (2023).
- 2) Topological band inversion and chiral Majorana mode in hcp thallium, **M. Hirayama**, T. Nomoto, and R. Arita, J. Phys.: Condens. Matter **36** 275502, (2024).
- 3) Colossal negative magnetoresistance in field-induced Weyl semimetal of magnetic half-Heusler compound, K. Ueda, T. Yu, **M. Hirayama**, R. Kurokawa, T. Nakajima, H. Saito, M. Kriener, M. Hoshino, D. Hashizume, T. Arima, R. Arita, and Y. Tokura, Nat. Commun. **14**, 6339 (2023).