

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

大池 広志

東京大学 大学院工学系研究科／科学技術振興機構
特任研究員／さがけ研究者

準安定電子状態を活用した量子機能材料の開拓に関する研究

研究成果の概要

本研究課題の目的は、準安定電子相の学理を構築し、電子の量子力学的自由度を活かした機能材料を開拓することである。昨年度までの研究で、 β -(meso-DMBEDT-TTF)₂PF₆, TaS₂, Ba_{1-x}K_xFe₂As₂などを対象に準安定超伝導相の実現を狙ったが、いずれも準安定相が観測されなかった。

この研究を進展させるためには、電子系の準安定相を設計する指針の確立が欠かせない。しかし、電子系の準安定相の実現例は少ないため、一般則を導くことは難しい。そこで、すでに多様な準安定相が実現されている固体化学や冶金学などの知見を、電子相制御に活かす必要があると考えた。この足がかりを得るために異なる分野の7つの研究会で講演を行い、準安定に関する共通認識について議論した。例えば、「状態が持続する時間>>着目している時間スケール」のときに状態が安定であると認識できることや、同一環境で複数の安定相がある場合に自由エネルギーが高い方を準安定相と定義することである。この分野を跨いだ共通認識により、磁気秩序相(原著論文 1,2)の準安定性を、塩化物の結晶多形(原著論文 3)と同じ原理で理解可能になった。

次に、WドーパされたVO₂が急冷下で準安定金属相になることを示し、その準安定性の起源を考察した。これにより、Vイオンのd軌道の電子が形成する結合状態の変化が準安定性の起源になることが分かった。結合状態はトポロジーで記述できるため、金属相の準安定性も、これまでの研究で取り組んだ磁気スキルミオンと同様に「最安定相とトポロジーの異なる相は準安定相になる」という原理で理解できることを意味している。現在は、「最安定相と異なるトポロジーの相を作る」という準安定相の設計指針に基づいて、未来材料内の共同研究で物質探索を行い、特許化を念頭に準安定電子相の制御法の実証実験を進めている。また、異なるトポロジーの相を作る手法を、急加熱・急冷だけでなく、急加圧・急減圧にも拡張する準備を進めている。

【代表的な原著論文情報】

- 1) “Thermodynamic determination of the equilibrium first-order phase-transition line hidden by hysteresis in a phase diagram”, Keisuke Matsuura, Yo Nishizawa, Markus Kriener, Takashi Kurumaji, **Hiroshi Oike**, Yoshinori Tokura, Fumitaka Kagawa, *Scientific Reports* **13**, 6867 (2023).
- 2) “Low-temperature hysteresis broadening emerging from domain-wall creep dynamics in a two-phase competing system”, Keisuke Matsuura, Yo Nishizawa, Yuto Kinoshita, Takashi Kurumaji, Atsushi Miyake, **Hiroshi Oike**, Masashi Tokunaga, Yoshinori Tokura, Fumitaka Kagawa, *Communications Materials* **4**, 71 (2023).
- 3) “Stability and Metastability of Li₃YCl₆ and Li₃HoCl₆”, Hiroaki Ito, Yuki Nakahira, Naoki Ishimatsu, Yosuke Goto, Aichi Yamashita, Yoshikazu Mizuguchi, Chikako Moriyoshi, Takashi Toyao, Ken-ichi Shimizu, **Hiroshi Oike**, Masanori Enoki, Nataly Carolina Rosero-Navarro, Akira Miura, Kiyoharu Tadanaga, *Bulletin of the Chemical Society of Japan* **96**, 1262–1268 (2023).