

物質探索空間の拡大による未来材料の創製
2021 年度採択研究者

2021 年度 年次報告書

平山元昭

東京大学 大学院工学系研究科／理化学研究所 創発物性科学研究センター
特任准教授／ユニットリーダー

電子材料系における非原子軌道の物質設計

§ 1. 研究成果の概要

当該年度は、研究テーマである非原子軌道に由来する新物質・新物性について、基礎的な事項の開拓を行った。本さがけでは、量子力学的な干渉効果を用いて非原子軌道を設計し、従来の原子軌道では実現しない物性の創発を目指している。1つの対象として、電子化物の材料系の新たな可能性を探究した。電子化物(エレクトライド)とは、物質中で電子がアニオンとして振る舞いイオン結晶を構成している物質群のことである。アニオンによって空隙位置に安定化された電子は、一般に小さな仕事関数を持ち、化学分野では触媒などに応用されている。本さがけでは、その物質系を大きく拡大することを目指し、空隙電子由来の新奇物性の提案を狙う。本年度は、空隙電子を応用して、相対論的なトポロジカル相を持つ分子性結晶の可能性を検討した。分子性結晶では、波数依存性に由来するバンド反転が実現しにくく、十分なエネルギーギャップを持つトポロジカル絶縁体は発見されていなかった。本研究では、分子性結晶中のアニオンに囲まれた空隙軌道の活用による、フェルミ準位近傍での大きなバンド幅の設計を検討した。その結果、 $\text{K}_4\text{Ba}_2[\text{SnBi}_4]$ などの物質系を発見することができた。 $\text{K}_4\text{Ba}_2[\text{SnBi}_4]$ では、Kに囲まれた空隙軌道は SnBi_4 分子の最高被占軌道や最低空軌道と強く混成し、系はトポロジカル絶縁体になる。エネルギーギャップは従来のトポロジカル絶縁体と比べても巨大であり、数百 meV もの大きさを持つ。この系は、分子性結晶であると同時に、電子化物であり、トポロジカル絶縁体でもあるため、3種の特性が絡んだ新奇的な物性が期待できる。例えば、その1つは熱電特性であり、理論計算の範囲では Bi_2Te_3 などに迫る性能が見出された。本さがけでは、別な対象として、異なる原子間での共有結合を持つ系や、干渉縞に由来する電子状態も検討予定である。また、電子化物についても、さらなる物質系・新物性を検討していく予定である。