

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

2022 年度  
年次報告書

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・新物性について、5つの論文を出版した。

相対論的なトポロジカル相を持つ分子性結晶の提案を行った[1]。提案物質の1つである  $K_4Ba_2[SnBi_4]$  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。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。

申請者らが提案したバンド絶縁体 FeSi における巨大分極による表面金属強磁性では、表面のキャップ層の制御によって室温での物性発現を実現した[2]。共有結合性の強い系に対し、フッ化物などのイオン性の強い結晶で界面を作成することにより、共有結合の破壊による金属状態を界面系で保つことに成功した。

触媒については、トポロジカル状態の効果を検討した[3]。具体的な物質として  $Pt_3Sn$  を提案した。具体的には表面における水素吸着の様相を、トポロジカル表面状態との関係の観点から検討した。

$Bi_2Te_3$  のひねり2層系におけるリング状の電子状態の提案を行った[4,5]。バンド反転(トポロジカル相転移)近傍の2層系を選定し、その積層パターンの違いによる相転移の有無によって、1電子状態として空間に広がったリング状の波動関数を持つモアレ干渉縞の系を提案した[4]。また、波数空間の電子構造の特徴と、実空間におけるトポロジカル相のドメインの繋がり方が対応していることを見出した[5]。

### 【代表的な原著論文情報】

- 1) T. Yu, R. Arita, and **M. Hirayama**, Interstitial-Electron-Induced Topological Molecular Crystals, *Adv. Phys. Res.* 2200041 (2022).
- 2) T. Hori, N. Kanazawa, **M. Hirayama**, K. Fujiwara, A. Tsukazaki, M. Ichikawa, M. Kawasaki, and Y. Tokura, A Noble-Metal-Free Spintronic System with Proximity-Enhanced Ferromagnetic Topological Surface State of FeSi above Room Temperature, *Adv. Mater.* 2206801 (2022).
- 3) M.-C. Jiang\*, G.-Y. Guo, **M. Hirayama\***, T. Yu, T. Nomoto, and R. Arita, *Efficient hydrogen evolution reaction due to topological polarization*, *Phys. Rev. B* **106**, 165120 (2022).
- 4) I. Tateishi and **M. Hirayama**, *Quantum spin Hall effect from multi-scale band inversion in twisted bilayer  $Bi_2(Te_{1-x}Se_x)_3$* , *Phys. Rev. Research* **4**, 043045 (2022).
- 5) I. Tateishi and **M. Hirayama**, *Topological invariant and domain connectivity in moiré materials*, *Phys. Rev. B* **107**, 125308 (2023).