

## 【学術変革領域研究（B）】

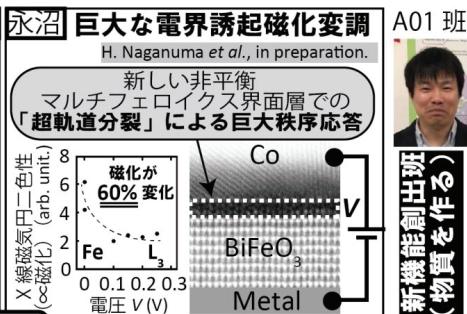
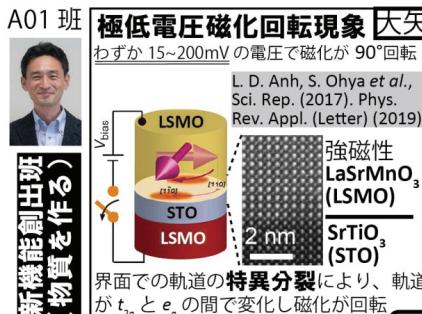
電界や磁場による物質界面の巨大な物性応答に関する研究（超軌道分裂による新奇巨大界面応答）

領域代表者	東京大学・大学院工学系研究科・教授 大矢 忍（おおや しのぶ） 研究者番号: 20401143
研究領域 情報	領域番号: 23B202 研究期間: 2023年度～2025年度 キーワード: 超軌道分裂 / 酸化物ヘテロ界面 / マルチフェロイクス / 電子顕微鏡 / 多階層連結シミュレーション

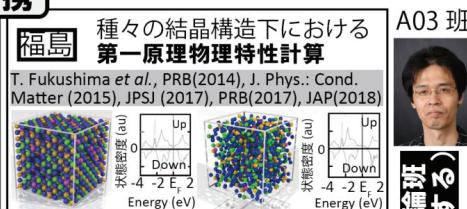
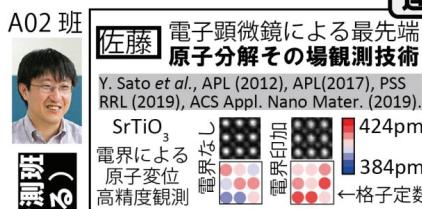
なぜこの研究を行おうと思ったのか（研究の背景・目的）

### ● 研究の全体像

近年、本領域研究のメンバーにより、酸化物や金属などの異なる物質同士間の接合界面において、理論的には予測されてこなかった電場による種々の巨大な磁化応答が観測されています。これらは、既存の学問では十分には理解されてこなかった界面での特異的な軌道分裂「超軌道分裂」に起因していると考えられます。これらの現象を応用することにより、非常に高効率なデバイスが実現できる可能性があると同時に、これらの発見は、様々な物質系のヘテロ界面に、未知の現象が隠されている可能性を示唆しています。本領域研究では、様々な界面を用いて、外場（電場・磁場など）による物性応答（磁化・スピノ・構造変化など）を詳細に調べることにより、「高効率デバイス」の実現に結びつく新たな機能性を生み出す「界面学理」の構築を目指します。本現象を原子スケールで観測し、第一原理計算を用いて理論的に理解し、その結果を実験にフィードバックする循環型研究体制により、新たな現象や材料系を開拓していきます。異種材料界面において、超軌道分裂の物理を理解し、高効率に制御することにより、外場による巨大応答を得る上で基礎となる新規の学問分野を創成することを目指します。



A01班 新機能創出班（物質を作れる）



A03班 新機能創出班（物質を作れる）

界面物性応答の新学理  
超軌道分裂（非対称界面における  
特異的な軌道分裂）の理解と応用。  
従来説明のつかなかった界面の巨  
大応答に関する新規物理の理解。

巨大応答新機能デバイス  
超低消費電力不揮発メモリ（高性能MRAM）  
超高感度センサ  
光界面秩序スイッチングデバイス

図1 本研究領域の概要

近年、本領域のメンバーにより観測された電場による巨大磁化応答は、界面での特異的な電子の超軌道分裂（図2）に起因していると考えられます。今までほとんど予期されてこなかった現象です。これらの結果は、異種物質界面に、バルクのシグナルに埋もれた未知の様々な外場誘起巨大応答現象が隠れていることを示唆しています。本領域では、上記の新奇現象の起源を実験面および理論面の双方から解明し、巨大応答が得られる軌道分裂を引き起こす新奇界面を開拓することにより、新たな機能性を開拓し、既存の学問分野に変革をもたらすことを目指します。このように本領域は、既存の学問分野の枠に収まらない全くの新しい発想で、新たな学術分野と産業分野の形成を目指します。

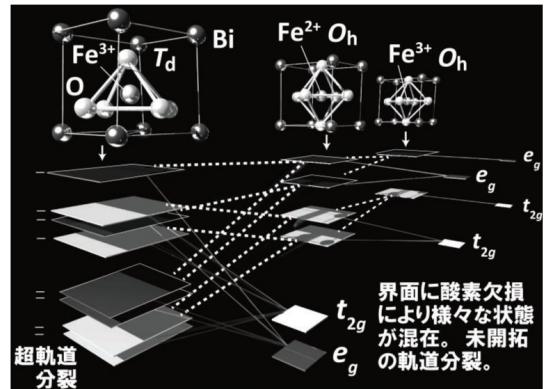


図2 超軌道分裂の概念図

この研究によって何をどこまで明らかにしようとしているのか

### ● 研究内容

班間の密接な共同研究により、下記のような様々な革新的な新規学術・技術を開拓します。最終的には巨大応答の得られる従来にない新しい界面構造を実現し、学術変革を目指します。

- ✓ 酸化物系界面における特異な軌道分裂状態の理論的解明。軌道状態と磁気異方性との関連性の理解。
- ✓ 非平衡界面マルチフェロイクス層の構造変位測定、超軌道分裂の理論的理。
- ✓ 巨大応答の得られる界面物質の予測と探索。
- ✓ 酸化物ヘテロ構造における外場による構造変位、電子エネルギー損失分光(EELS)測定。
- ✓ 様々な非平衡界面マルチフェロイクス層の創製、構造変位測定、超軌道分裂の理論予想。
- ✓ 巨大応答の得られる新界面の実現。

### ● 研究領域の波及効果

✓ 低電力磁化反転手法の実現により、革新的な極微小エネルギーでの革新的なデータ書き換え技術が確立され、将来は半導体デバイスのスピンドルバースへの置き換えや情報処理技術の大幅な効率化が期待されます。

✓ 超小型磁気センサの感度が大幅に向上し、生体磁気センサに広く使われているMRIやMEGを巨大界面応答素子に置き換えることができる可能性があります。He冷却が不要となり、大幅な医療診断の低コスト化が望めます。

✓ 本領域が示す新学理は界面構造・電子状態を均一な平面ではなく原子サイトごとに理解することで新物理の開拓を目指します。これにより光・X線・中性子・電子線など多様なプローブを用いた界面構造解析が活性化し、異分野からの参入が見込まれます。

✓ これまでの第一原理計算では無視されていた有限温度の効果（マグノン散乱やフォノン散乱）を統一的に取り扱える新しい物質デザイン手法を開拓し汎用化します。この手法は、他の省エネルギー・創エネルギー材料（電池材料、熱電材料、太陽電池材料）の設計にも拡張可能です。

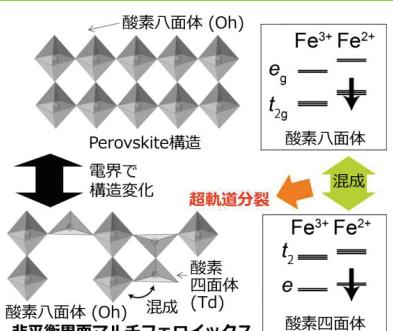


図3 非平衡界面層で超軌道分裂が起こるメカニズム。酸素欠損により $\text{Fe}^{2+}$ と $\text{Fe}^{3+}$ が混ざった状態となっている。非平衡界面マルチフェロイクス層ではそれぞれ2つ軌道をもつ4種類の状態が混成するため、最大で16( $=2^4$ )軌道が形成される。

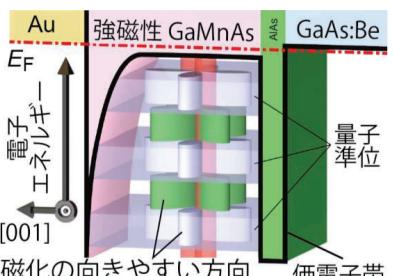


図4 2017年に、強磁性半導体量子井戸構造で、量子準位で磁気異方性の対称性が変わることを初めて観測し[Nature Commun. (2016) (2017)]、界面における特異な電子軌道の分裂を用いて磁化の向きを制御できる可能性を示した。

