

# 物質判定手法の理論的開発

Keyword : 物性理論

## 研究の背景

特定の性質を示す新奇物質開発においては、その特性判定が実験室レベルで容易に出来ることが、開発の加速にとって大切な要素である。特に、新奇物性であればあるほど、その需要と重要性は高いと言える。

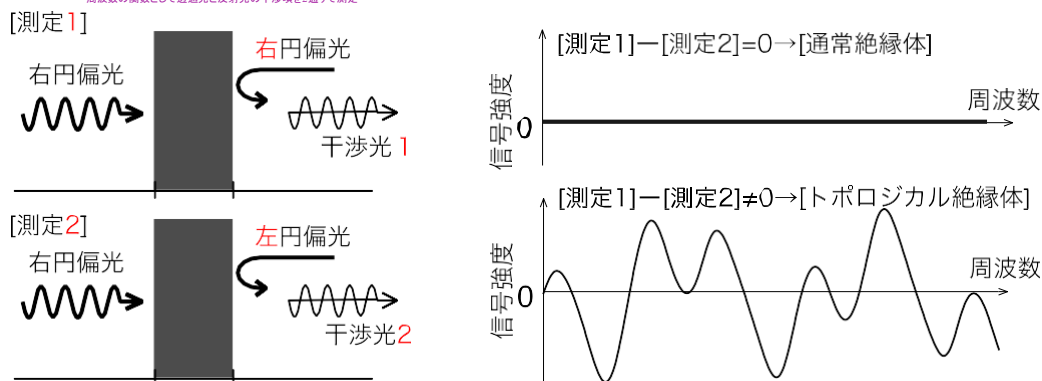
## 研究の狙い

上記要求にこたえるため、第一原理手法とは対照的な、有効モデルに基づく定式化により、当該物質の特性を発現する主要因を特定し、これに着目することで実験的に簡便な判定手法を提案する。

## 最先端研究トピックス

例として、近年理論的に認識されたトポロジカル絶縁体を取り上げた。この物質群は学術的な興味を集めるに留まらず、散逸のない、電荷の流れやスピンの流れが期待されることから、エネルギー材料として大きく注目を集めている。第一原理計算による物質提案に基づいて合成が行われた後、しかるべき性質を有しているか否かの判定は、光電子分光などの測定手段によることが一般で、簡便な判定法がなかった。光学手法を用いる本提案では、テーブルトップかつ無接触に簡便な判定が可能。

周波数の関数として透過光と反射光の干渉項を2通りで測定



## 文献

- J. Inoue, Optics Express 21, p.8564 (2013)
- J. Inoue, Optics Express 21, p.21317 (2013)

## まとめ

- トポロジカル絶縁体を例として、光学的手法を用いた新規判定法を理論的に提案
- 従来法と比較し、低コストで運用に高度な技術を必要とせず、解析も不要である点に優位性

## 実用化の目標

- 物質合成研究者にオンデマンドで対応することを目標にする。



ナノセオリー分野 材料特性理論グループ

井上 純一

E-mail: INOUE.Junichi@nims.go.jp