

代表的な研究成果

異なる専門性が生み出す、五つの研究成果

量子物質創製グループでは、合成、測定、理論を固定的に分けるのではなく、一つの新物質を起点として、課題に応じた研究手法を組み合わせています。

高圧合成によって得られた物質を中性子や放射光で解析し、構造解析から得られた情報を理論モデルに取り込みます。さらに、計算によって抽出された重要な相互作用や制御因子を、元素置換、結晶構造制御、複合アニオン化などによって検証します。

高温高圧合成、ペロブスカイト結晶化学、複合アニオン化学、単結晶育成、中性子散乱、量子磁性、統計力学、原子論的シミュレーションといった異なる専門性が、相互に補完しながら一つの物質研究へとつながっています。

物質を合成して終わるのではなく、その構造と物性を解明し、得られた理解を次の物質設計へ戻す。この循環が、量子物質創製グループの研究を前進させています。

ここでは、こうした研究の進め方と専門性の広がりを示す、近年の代表的な成果 5 件を紹介します。

1. 構造フラストレーションの解放による「戻らない巨大膨張」を発見

山浦 一成

高圧合成したルテニウム酸バリウム $\text{Ba}_4\text{Ru}_3\text{O}_{12}$ において、加熱により体積が約 4.4% 増加し、冷却後も元に戻らない巨大な不可逆膨張を発見しました。結晶対称性と酸素量を保ったまま生じるこの体積変化は、代表的な材料と比較しても極めて大きく、酸化物では異例の格子応答です。

放射光粉末 X 線回折により、450~650 K の温度域で、 RuO_6 三量体内部の Ru 原子が協同的に再配置し、その変化が格子体積の増加と直接対応していることを明らかにしました。

さらに、熱分析、電気抵抗・磁化測定、第一原理計算を組み合わせ、分解、酸化還元反応、電子相転移、磁気相転移が膨張の原因ではないことを確認しました。高圧合成によって準安定な状態に閉じ込められた Ru 原子の配置が、加熱によってより安定な配置へ移る際に、構造フラストレーションが解放され、巨大な格子膨張が生じるという、新しい熱応答機構を提案しました。

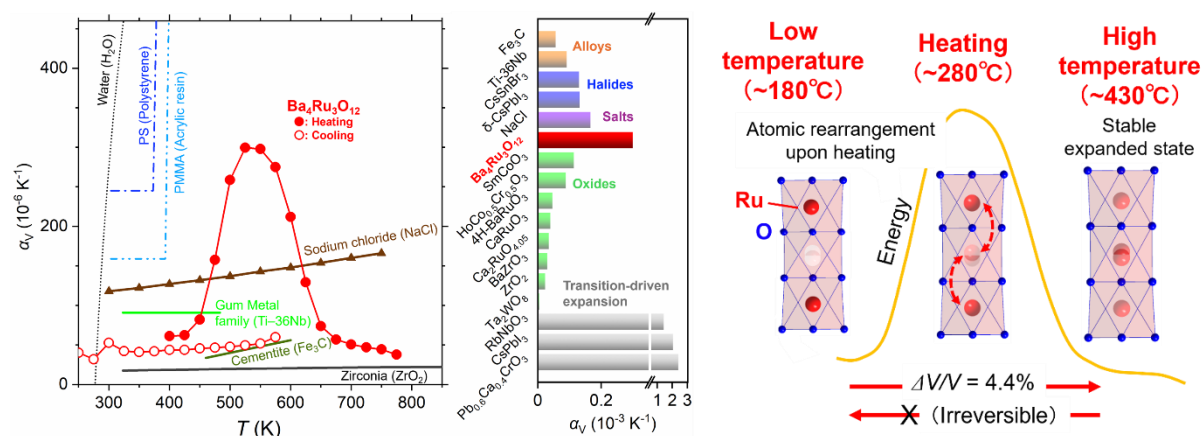
この成果が示す強み

高圧合成によって準安定な原子配置を創り出し、放射光構造解析、物性測定、第一原理計算を組み合わせることで、構造フラストレーションの解放に起因する新しい格子応答機構を解明する研究。

代表文献

Z. Li, H. Yuan, A. A. Belik, T. Tadano, Y. Tsujimoto and K. Yamaura,

“Giant Lattice Expansion through Structural Frustration Release in a Dense Oxide,”



2. 四つのスピンの量子一重項とスピンギャップを解明

長谷 正司

近年、f 電子系、とくに Yb3+を含む物質は、スピン軌道相互作用と結晶電場の効果によって、擬似スピン 1/2 の量子スピン系を形成し得ることから注目されています。

本研究では、希土類酸化物 Yb2SiO5 について、帯磁率、比熱、中性子非弾性散乱を組み合わせで調べました。その結果、低温でスピン一重項基底状態が形成され、基底状態と磁気励起状態との間に有限のエネルギー差であるスピンギャップが存在することを明らかにしました。

中性子非弾性散乱では、0.7、1.2、1.9 meV に磁気励起を観測しました。これらの結果は、四つの有効スピンの反強磁性的に結合したテトラマーモデル

$$J_2(S_1 \cdot S_2 + S_3 \cdot S_4) + J_1 S_2 \cdot S_3$$

によって説明できます。J1 = 0.74 meV、J2 = 0.95 meV とすることで、磁気励起エネルギー、帯磁率、磁気比熱を一貫して再現しました。

さらに、J1 と J2 をそれぞれ異なる Yb–Yb 間の交換相互作用に対応させることで、中性子散乱強度の Q 依存性も説明できました。これにより、Yb2SiO5 が、反強磁性的に結合した四つのスピンからなる量子一重項物質であることを、バルク物性測定と中性子散乱の両面から明らかにしました。

この成果が示す強み

帯磁率・比熱測定と中性子非弾性散乱を組み合わせ、量子スピン系の基底状態、交換相互作用、磁気励起を、統一的なスピンモデルによって微視的かつ定量的に捉える研究。

代表文献

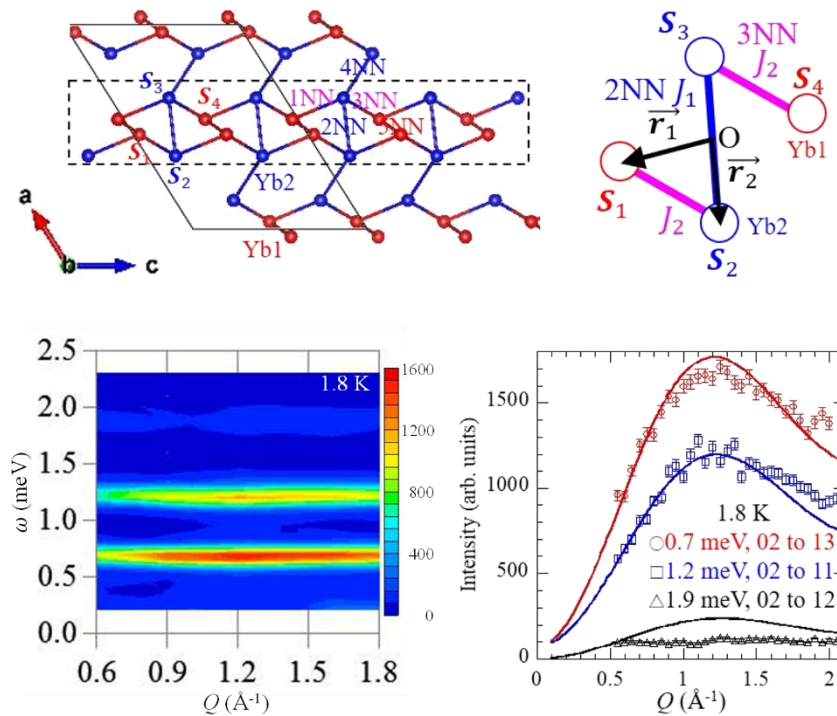
M. Hase, K. Kaneko, C. Tabata, H. Yamauchi, N. Tsujii and A. Dönni,

“Spin-Singlet Ground State with Spin Gap in $S_{\text{eff}} = 1/2$ Antiferromagnetic Tetramer Compound

Yb₂SiO₅,”

Physical Review B, 111, 094403 (2025).

DOI: 10.1103/PhysRevB.111.094403



3. 高度に秩序化したペロブスカイトで低温磁気冷却機能を開拓

ベリック アレクセイ

ペロブスカイト型酸化物の性質は、結晶中のどの位置に、どの元素が配置されるかによって大きく変化します。

本研究では、6 GPa の高温高压条件を用いて、A サイトとB サイトの双方に異なる陽イオン秩序を持つ、新しいペロブスカイト Nd₂ZnZn(Zn₂Sb₂)O₁₂ を合成しました。

この物質では、A サイトで Nd と Zn が柱状に秩序配列し、B サイトでは Zn と Sb が岩塩型に秩序配列しています。このような複数の陽イオン秩序を同時に持つ複雑な結晶構造を、高压合成によって実現しました。

さらに、磁化と比熱の測定から、低温域で磁気熱量効果を示すことを明らかにしました。これにより、複雑な元素配列の設計を、極低温磁気冷凍材料の探索へと展開しました。

この成果が示す強み

高压合成によって複数の陽イオンを異なる結晶サイトに秩序配列させ、その結晶構造を磁気・熱機能へと結び付ける結晶化学研究。

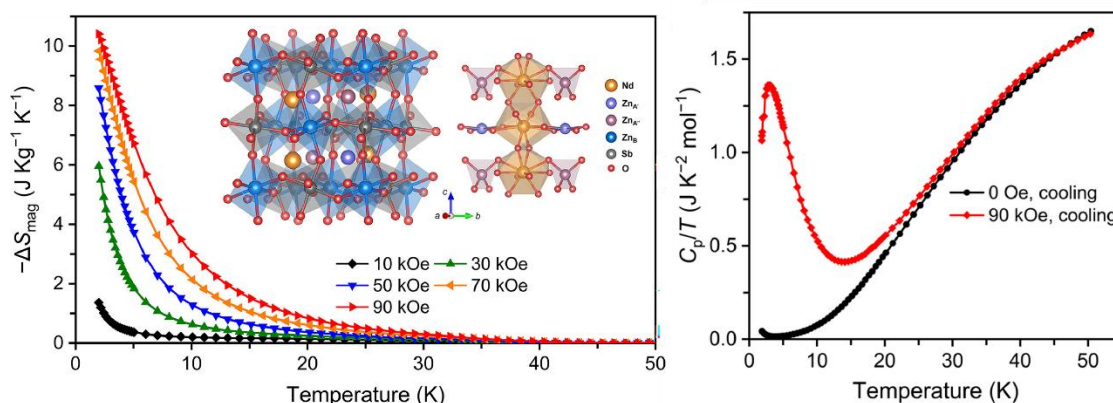
代表文献

X. Liang, K. Yamaura and A. A. Belik,

“Cryogenic Magnetocaloric Properties of Zinc-Based Perovskite $\text{Nd}_2\text{ZnZn}(\text{Zn}_2\text{Sb}_2)\text{O}_{12}$ with A-Site Columnar-Type and B-Site Rock-Salt-Type Orders,”

Acta Materialia, 302, 121626 (2026).

DOI: 10.1016/j.actamat.2025.121626



4. Dy 置換による永久磁石のスピ再配向を原子スケールで解明

西野 正理

Nd-Fe-B 系磁石は、高性能永久磁石として、モーターや省エネルギー機器に広く利用されています。Nd の一部を Dy で置換すると保磁力を高めることができますが、Dy 置換によって磁化方向やスピ再配向転移がどのように変化するのかを、微視的に理解することが重要です。

本研究では、第一原理計算に基づいて、原子ごとのスピ、交換相互作用、結晶磁気異方性、熱揺らぎを取り入れた原子論的スピモデルを構築し、 $(\text{Nd}_{1-x}\text{Dy}_x)_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ の磁気特性を解析しました。

その結果、スピ再配向転移温度の Dy 濃度依存性を、実験結果とよく一致する形で再現しました。さらに、Nd と Dy の異なる磁気異方性が、温度に応じた磁化方向を決定する機構を明らかにするとともに、転移温度付近における磁化の温度微分に、Dy 濃度に依存したギャップが現れることを示しました。

これにより、転移温度、磁化方向、磁化応答の異常を一つの原子論的モデルによって統一的に説明し、希土類磁石におけるスピ再配向転移の微視的起源を明らかにしました。

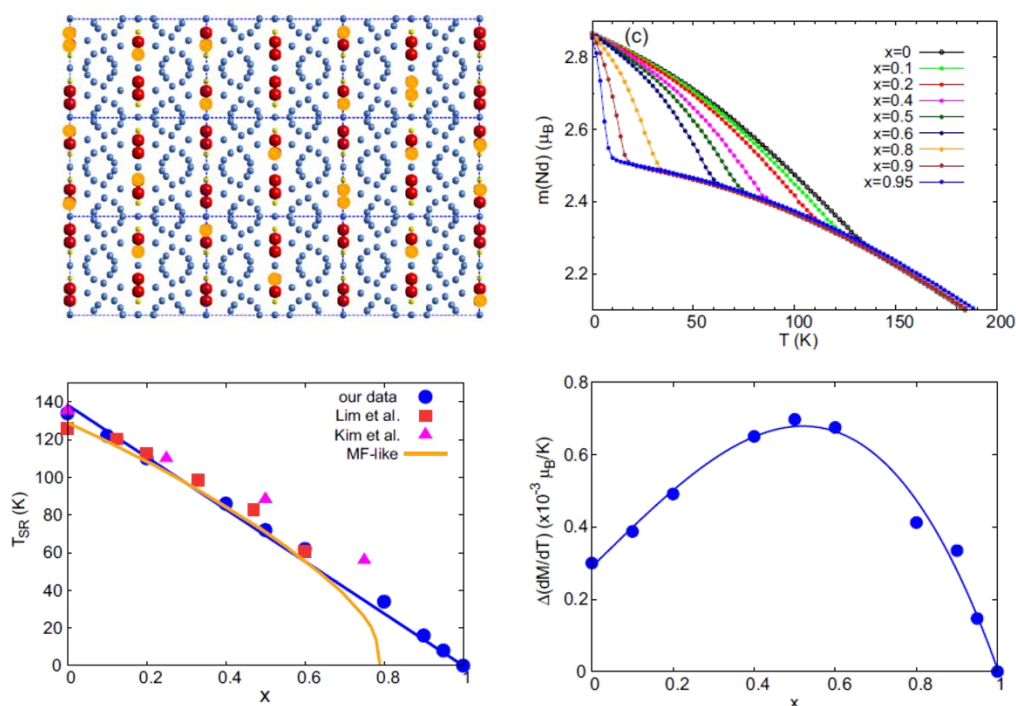
この成果が示す強み

第一原理計算に基づく原子論的スピモデルによって、実験で観測される転移温度と磁化応答を再現し、磁気異方性と熱揺らぎが生み出すスピ再配向機構を統一的に解明する理論研究。

代表文献

M. Nishino, R. Lamouri and H. Akai,

“Atomistic Model Analysis of the Spin Reorientation Transition in $(\text{Nd}_{1-x}\text{Dy}_x)_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ Systems,”



5. 新規層状オキシ硫化物で二次元リチウムイオン伝導を実現

辻本 吉廣

酸化物中の酸素の一部を硫黄、窒素、ハロゲンなどに置き換えることで、通常の酸化物にはない結晶構造、電子状態、イオン伝導特性を持つ物質を設計できます。こうした複合アニオン化学は、新しい機能性固体材料を開拓する有力な手法として注目されています。

本研究では、ハロゲン化物フラックスを用いた単結晶育成により、Ruddlesden–Popper 型層状オキシ硫化物 $\text{LiLnTiO}_3\text{S}$ ($\text{Ln} = \text{La}–\text{Gd}$) の合成に成功しました。これらの物質は、二次元的な LiO 面を持つ正方晶構造を形成し、酸硫化物としては世界的にも希少なリチウムイオン伝導物質であることを明らかにしました。

さらに、 Nd を含む系では、 Ti の一部を Nb で置換して Li 欠損を導入することで、リチウムイオン導電率が向上し、既知の類似酸化物を上回る伝導特性を達成しました。また、結合価法による解析から、 LiO 面内に二次元的なリチウムイオン伝導経路が形成されていることを示しました。

この成果は、酸化物を中心に進められてきたリチウムイオン伝導体研究に対して、酸硫化物という新しい材料系を提示するとともに、複合アニオン化学に基づく固体電解質開発の新たな方向性を示すものです。

この成果が示す強み

アニオンの種類と配置、層状結晶構造、元素置換を一体的に設計し、単結晶育成、構造解析、イオン伝

導評価を組み合わせて、新しい複合アニオン系イオン伝導体を開拓する研究。

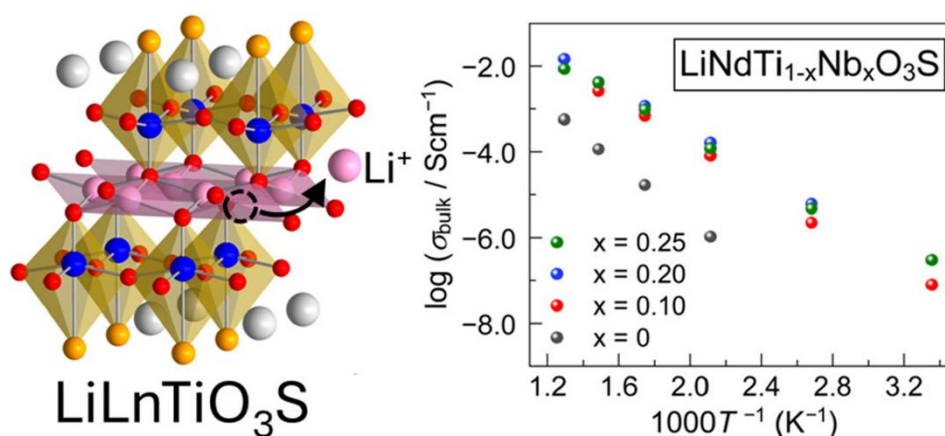
代表文献

H. Yuan, K. Sugii, G. Hasegawa, Y. Meng, Y. Matsushita, H. Akamatsu, N. Kuwata, K. Yamaura and Y. Tsujimoto,

“Flux Crystal Growth of Ruddlesden–Popper Titanium Oxysulfides $\text{LiLnTiO}_3\text{S}$ ($\text{Ln} = \text{La–Gd}$): Lithium-Ion Mobility in $\text{Li}_{1-x}\text{Nd}(\text{Ti}_{1-x}\text{Nb}_x)\text{O}_3\text{S}$ ($x = 0–0.25$),”

Chemistry of Materials, 38, 1457–1468 (2026).

DOI: 10.1021/acs.chemmater.5c02924



個々の専門性をつなぎ、創製・解析・理解を次の物質設計へ循環させることが、私たちの研究の特徴です。