
会場 A

領域 3, 6

A-1 第一原理計算に基づく β -タンタルの構造安定性および量子輸送特性の評価

九大院理^A 山崎太志郎^A, 飯森陸^A, 木村崇^A

Ta は薄膜化に伴い A15 構造の結晶粒が形成されることが知られている。A15 構造を有する金属は比較的高い超伝導転移温度を持つものが多く、さらに巨大な電流-スピン流変換現象も観測されていることから、スピントロニクスデバイスへの応用の観点から注目を集めている。しかし、 β -タンタルのスピン流輸送特性に関する報告例は、実験的にも理論的にも未だ少ない。

そこで、今回我々は密度汎関数法に基づいた第一原理計算により、 β -Ta の物性を評価した。まず、凝集エネルギーを求め beta 相の安定性を評価し、更に導出した格子定数が先行研究の XRD 解析の結果をよく再現することを確認した。そして、ホール係数やスピン輸送特性の評価したのでその結果についても報告する。

A-2

Ag/Bi 界面におけるラッシュバ・エデルシュタイン効果の電氣的測定の試み

九大物理^A 神本晋作^A, 飯森陸^A, 大日方初良^A, 大西紘平^A, 木村崇^A

非磁性重金属体の界面では、高いスピン軌道相互作用に伴う高効率なスピン-電気変換が期待されるため、近年、精力的に研究されている。このような界面スピン軌道相互作用を有する系におけるスピン流の実験では、強磁性共鳴を用いたスピンポンピング、いわゆる動的手法が主流であった。しかし、この手法では強磁性体の電流磁気効果や磁気熱電効果など不要な擬似信号が重畳するため、定量的な解析が困難という問題点があった。一方で、非局所法を用いた静的な純スピン流注入法では、前述の問題が回避されるが、多端子構造を有する素子の作製が困難と考えられていた。今回、高品質な Ag/Bi 界面を有する横型スピンバルブ素子を作製し、同界面におけるラッシュバ・エデ

ルシュタイン効果の実験的観測を試みたので報告をする。

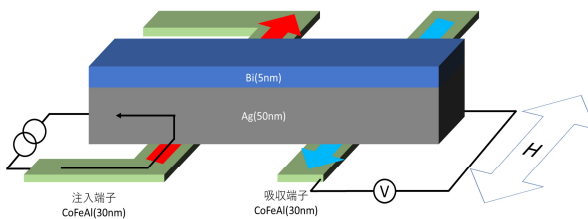


図1.横型スピンバルブ素子

A-4

スピネル型酸化物フェリ磁性体 CuCr_2O_4 ナノ粒子の磁性と電子スピン共鳴

九工大工^A, 福岡大理^B 市来直輝^A, 高橋俊介^A, 田尻恭之^B, 出口博之^A, 美藤正樹^A, 香野淳^B

スピネル型酸化物 CuCr_2O_4 は酸素四面体の A サイトを Cu^{2+} が、酸素八面体の B サイトを Cr^{3+} が占めるフェリ磁性体である。低温域では結晶構造が斜方晶であるが、磁気転移温度 $T_N=135$ K で正方晶に変化し、スピン系と結晶格子系が強く結合している。また B サイトはパイロクロア格子を形成し、かつ Cr^{3+} 間の相互作用は反強磁性であるため、スピン系が幾何学的フラストレーションを有する。このような磁性体をナノスケールサイズにした場合、結晶構造および磁気秩序にバルクとは異なるサイズ効果が期待される。ゆえに CuCr_2O_4 のナノ粒子を作成し、その磁性を調べて転移温度等のサイズ依存について明らかにした。また、バルクおよびナノ粒子について電子スピン共鳴 (ESR) 測定を行った。図 1 に 9.2 nm 径のナノ粒子の室温での ESR スペクトルを示す。バルク試料のスペクトルは 2 つのローレンツ型スペクトルの和で再現されたのに対して、ナノ粒子のスペクトル

(下の青色) は、上の 3 つのローレンツ型スペクトルの和 (下の赤色) で再現された。講演では、磁気測定結果および ESR スペクトルのサイズ依存、温度依存について報告する。

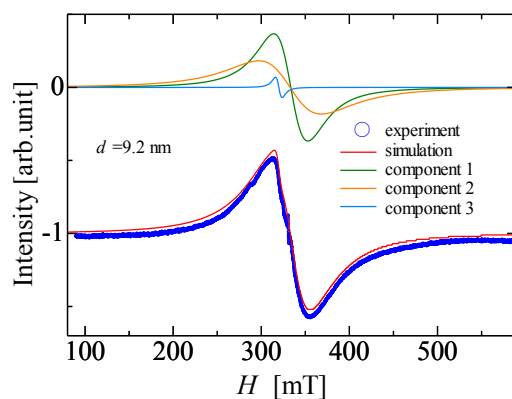


図 1 ナノ粒子 (9.2 nm 径) の ESR スペクトル (室温)

A-5

ベータ Mn 型格子ハバードモデルの磁気相図とスキルミオン磁気相互作用

琉球大理^A 梯祥郎^A

最近、従来の B20 型とは異なるベータ Mn 型格子を基本とする CoZn, CoZnMn, FePdMoN などの遍歴電子スキルミオン (Sk) が見出された [1]. これらの合金系では多様な磁気相互作用の競合によって磁気スキルミオンが発生していることが示唆されているが、ベータ Mn 型格子では単位胞に 20 個もの原子を含むため、スキルミオンの安定性をミクロな立場から系統的に説明する理論的研究は進んでいない. これらの新しいスキルミオン生成のメカニズムを明らかにするために、今回、ベータ Mn 型格子上のハバードモデル [2] を考え、一般化された Hartree-Fock 理論とリカージョン法を用いて、この系の電子状態、磁気相図、そして、磁気スキルミオン磁気相互作用について調べた. 強磁性 (F), ヘリカル構造 (1QH), フェリ磁性 (Ferri), 常磁性 (P) を仮定して U (クーロン相互作用) - n (電子数) 磁気相図を計算すると、この系では、強磁性とフェリ磁性の間の幅広い U - n 領域でヘリカル構造が安定化されることが分かった. その結果、一桁小さいジャロシンスキー・守谷 (DM) 相互作用を取り入れると、F 領域は F+DM の競合による Sk 出現領域、1QH 領域は F+AF の競合による Sk 出現領域と解釈できる. 構成磁性元素の d 電子数を $nd = 8$ (Co), 7 (Fe), $5\sim 6$ (Mn), U を $U \sim 7$ とすると、Co₁₀Zn₁₀ と Fe_{2-x}PdxMo₃N は F+DM 競合型 Sk, CoxZnyMnz ($x+y+z=20$) は F+AF 競合型 Sk と結論できる.

[1] X.Z. Yu et.al., Nature 564, 95 (2018); Karube et.al., PRB 102, 064408 (2020); Qiang et.al., APL 117, 141401 (2020).

[2] Y. Kakehashi, JPSJ 91, 024705 (2022).

A-6

高スピン分極ホイスラー合金 CoFeCrAl の磁化の圧力効果と電子状態

鹿大院理工^A, 東大物性研^B, 東北学院大院工^C, 東北大金研^D 青島英樹^A, 重田出^A, 郷地順^B, 山内徹^B, 鹿又武^C, 梅津理恵^D, 上床美也^B, 藤井伸平^A, 廣井政彦^A

スピングャップレス半導体は、フェルミエネルギーにおいてアップスピンの状態密度にギャップレスのディップ構造が存在し、ダウンスピンではギャップが存在することから、スピン分極率 $P = 100\%$ かつ少数キャリアであると期待されている機能性材料である. ホイスラー合金 CoFeCrAl は、第一原理バンド計算からスピングャップレス半導体であると予想されている. そこで、我々は高圧下の磁化測定から磁気特性を評価し、また第一原理バンド計算を用いて電子状態を調べた.

常圧下の自発磁化 M_s は $M_s = 2.02 \mu_B/\text{f.u.}$ と見積もられ、Slater-Pauling 則から予想される $2.00 \mu_B/\text{f.u.}$ とよく一致した. さらに、高圧下で磁化測定をしたところ、CoFeCrAl の自発磁化が圧力に依存しないことがわかった. これらの結果から、CoFeCrAl が高スピン分極

強磁性体であることを明らかにした. 発表当日は、第一原理バンド計算の結果についても議論する予定である.

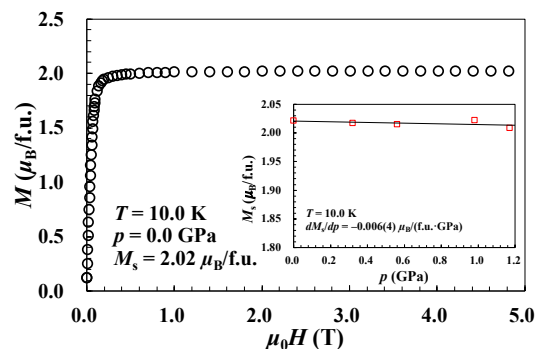


図1: CoFeCrAlの $T = 10.0 \text{ K}$ かつ常圧下での M - H 曲線. 挿入図は自発磁化 M_s の圧力依存性.

A-7

ホイスラー合金 Ru₂CrSi の電子状態と磁気特性

鹿大理^A, 鹿大理工^B, 物材機構^C 福井勇佑^A, 重田出^B, 三浦良雄^C, 藤井伸平^B, 廣井政彦^B

過去の研究において、第一原理バンド計算から Ru 基ホイスラー合金 Ru₂CrSi がハーフメタルであることが予想された。しかし、我々が実際に Ru₂CrSi を合成して磁気特性を評価してみたところ、ネール温度 $T_N \approx 13$ K 以下で反強磁性を示し、第一原理バンド計算と実験の結果が矛盾することが明らかになった。そこで本研究では、第一原理バンド計算の観点から、Ru₂CrSi の磁気特性をさらに詳しく調べたので報告する。

第一原理バンド計算には、Korringa-Kohn-Rostoker (KKR) グリーン関数法を用いたコードである Akai-KKR を使用した。強磁性状態、LMD (local moment disorder) 状態および反強磁性状態における全エネルギー ΔE の体積依存性を図 1 に示す。ここで、各曲線は Murnaghan の状態方程式を用いた解析結果である。図 1 からわかるように、Ru₂CrSi

は反強磁性状態が最も安定であることが明らかになった。

発表当日は、磁気特性の詳細についても議論する。

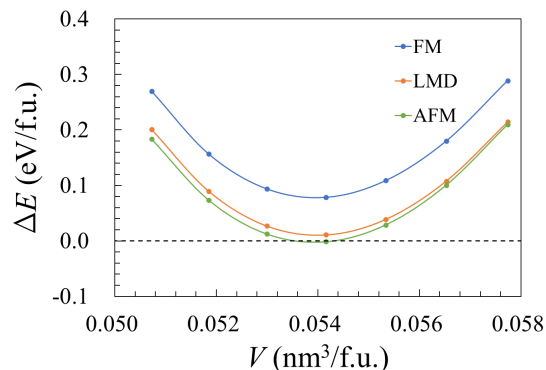


図1 各磁気状態の全エネルギー ΔE の体積依存性

A-8

Gd₅(Ge_{1-x}M_x)₄ (M=Si, Ga, Sn) の磁気熱量効果

九大理^A 白木陽^A, 和田裕文^A

Gd₅Ge₄ は 20~60K で反強磁性から強磁性へ一次転移する物質であり、その温度付近で大きな磁気熱量効果を示すことが知られている。磁気冷凍は磁気熱量効果を用いた冷凍技術で、近年では天然ガスの液化に利用することが考えられている。本研究の目的は Gd₅Ge₄ の Ge を Si に置換することで、天然ガスの液化温度の 110K 付近で大きな磁気熱量効果を生じる物質を作製することである。Gd₅(Ge_{1-x}Si_x)₄ の $x = 0.05, 0.10, 0.15$ の磁気エントロピー変化 ΔS_M の温度依存性を図に示す。 ΔS_M はどれも -30 J/kg \cdot K を超える大きな値になっており、また、 T_C も置換量に比例して上昇し $x=0.15$ では 100K 付近にピーク

が存在しているのが確認できた。講演の際には、これらのデータに加えて Si の代わりに Sn や Ga に置換したときの磁気熱量効果への影響について報告する予定である。

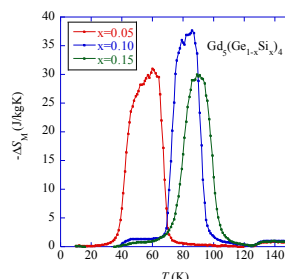


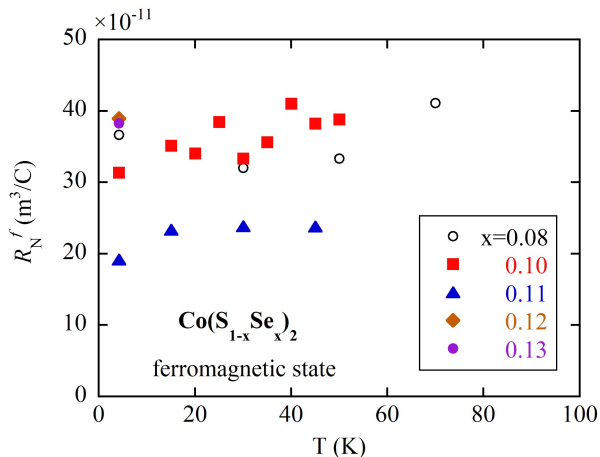
図 Gd₅(Ge_{1-x}Si_x)₄ の 5T での磁気エントロピー変化の温度依存性

A-9 遍歴電子メタ磁性体 $\text{Co}(\text{S}_{1-x}\text{Se}_x)_2$ のホール効果

九大理^A, 阪大産研^B, 神戸大理^C 田邊 巧祐^A, 和田 裕文^A, 前川 佳朗^A, 山内 邦彦^B, 小口 多美夫^B, 播磨 尚朝^C

遍歴電子メタ磁性とは磁場をかけることによってパウリ常磁性から強磁性へ一次相転移する現象のことである。この磁性体では同じ温度で磁場の有無により、常磁性と強磁性の両方が実現するので両者の電子状態を比較することができる。われわれは電子状態を調べる方法としてホール効果に着目した。磁性体のホール効果は正常ホール効果と異常ホール効果の和で書かれる。このうち、正常ホール効果はフェルミ面近傍の電子状態を反映し、計算で求めることができる。本研究では $\text{Co}(\text{S}_{1-x}\text{Se}_x)_2$ のホール抵抗率と磁化曲線を $0.08 \leq x \leq 0.14$ で測定し、強磁性と常磁性領域での正常ホール係数を求めた。図に強磁性領域の正常ホール係数 R_N^f の温度依存性を示す。 $x = 0.11$ を除くと R_N^f はおおむね $30 \sim 40 \times 10^{-11} \text{ m}^3/\text{C}$ の値を示している。発表

では同様に評価した常磁性状態の正常ホール係数の結果と、バンド計算から求めたホール係数との比較も紹介する。



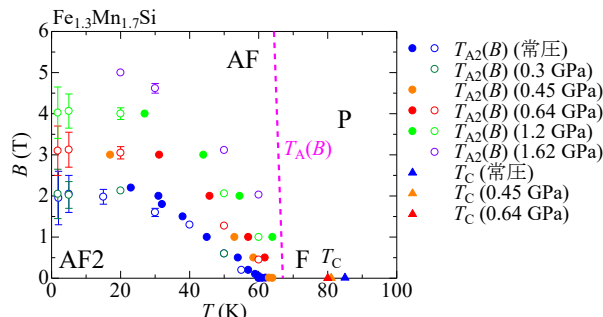
A-10 高圧下における $\text{Fe}_{3-x}\text{Mn}_x\text{Si}$ ($x \sim 1.7$) の磁気特性

鹿大院理工^A, 東大物性研^B 赤石幸起^A, 重田出^A, 廣井政彦^A, 郷地順^B, 上床美也^B

ホイスラー化合物 $\text{Fe}_{3-x}\text{Mn}_x\text{Si}$ は広い範囲の組成で研究されており、低温で複雑な磁性を示すことが知られている。 Fe_3Si ($x = 0$) は強磁性体であるが、 x の量を増やすとキュリー温度 (T_C) が下がっていき、 $x > 0.75$ では T_C のさらに低温 (T_A) で強磁性を含む反強磁性的な磁性をもつ AF 相が現れる。最近の研究で $x = 1.7$ の近傍では T_A よりさらに低温 (T_{A2}) で新たな反強磁性的な磁性をもつ AF2 相が現れることが発見された。また等温磁化曲線において磁化が急激に上昇する磁場誘起の転移も発見され、この転移は T_{A2} における AF2 相への転移と同様のものであることが確認された [1]。本研究では $\text{Fe}_{3-x}\text{Mn}_x\text{Si}$ ($x \sim 1.7$) における各磁気相転移の転移磁場や転移温度が圧力によってどのように変化するか調べた。その結果、 T_A は圧力による影響は受けなかったが、 T_{A2} は圧力の増加に伴い高温側・高磁場側へシフトすることが分

かった。また T_C は圧力をかけることで減少し、約 1 GPa 以上では消滅することが確認された。これらの常圧下と高圧下での性質を比較し、各転移点の圧力依存性も考察する。

[1] M.Hiroi et al. J.Phys: Conf. Ser. **969** (2018) 012098



図：各圧力下における $\text{Fe}_{1.3}\text{Mn}_{1.7}\text{Si}$ の磁気相図

A-11

ホイスラー化合物 $\text{Fe}_{3-x}\text{Mn}_x\text{Si}$ における磁気熱量効果

鹿大院理工^A, 東大物性研^B 高本翼^A, 赤石幸起^A, 重田出^A, 廣井政彦^A, 郷地順^B, 上床美也^B

ホイスラー化合物 $\text{Fe}_{3-x}\text{Mn}_x\text{Si}$ は低温で複雑な磁気特性を示すことが知られている。特に $x = 1.7$ の場合は、ゼロ磁場においてキュリー温度 $T_C \approx 85$ K で強磁性的に秩序化するが、それより低温の $T_A \approx 67$ K で磁化の減少が見られ、さらに低温の $T_{A2} \approx 60$ K 以下で磁化が急激に減少し反強磁性的に秩序化することが分かっている [1]。また、磁気冷凍は正の磁気熱量効果を利用し断熱的に消磁することによって冷却を行うことであるが、最近では断熱的な磁化によって冷却が起こる負の磁気熱量効果についても注目が集まっている。今回 $\text{Fe}_{3-x}\text{Mn}_x\text{Si}$ の試料において、磁気エントロピーの変化 ΔS を調べ、磁気熱量効果の正負や程度について評価した。 ΔS については以下の式から求めた。

$$\Delta S(T, B) = \int_0^B \left(\frac{\partial M}{\partial T} \right)_B dB$$

各磁場における $\text{Fe}_{1.3}\text{Mn}_{1.7}\text{Si}$ の磁気エントロピーの変化 ΔS

の温度変化の結果を図 1 に示す。常圧下では T_C 近傍の温度で正、 T_A, T_{A2} 近傍の温度で負の磁気熱量効果が得られた。

参考文献

[1] M. Hiroi et al. J.Phys: Conf. Ser. **969** (2018) 012098

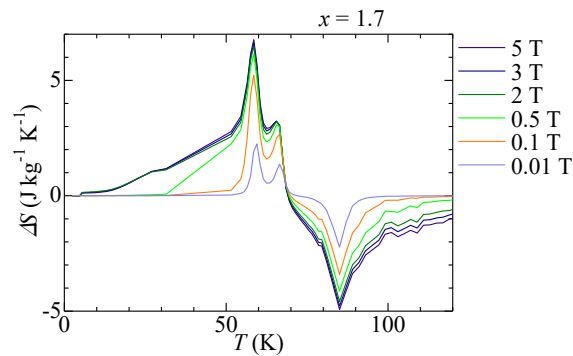


図 1

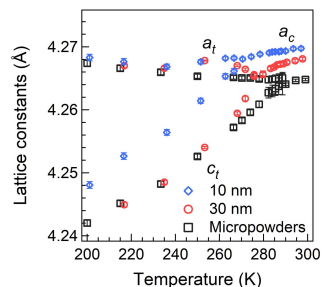
A-12

CoO における正方晶歪みの発現機構の研究

佐賀大理工^A, NSRR^B, 東大物性研^C, 岡山理科大^D, 九大工^E, 熊本大院自然^F, ファインセラミックスセンター^G, 理研^H, CEMS^I 赤瀬慶祐^A, 川原岳^A, 富永泰佑^A, 宮崎駿^A, 石井啓文^B, 松尾晶^C, 金道浩一^C, 稲垣祐次^D, 河江達也^E, 木田徹也^F, 末廣智^G, 南任真史^H, 石橋幸治^{H,I}, 石渡洋一^A

CoO は NaCl 構造 (立方晶) をとり、290 K で反強磁性転移を起こす。その際、Co のみで構成される (111) 面内のスピンの揃い、隣り合う (111) 面間のスピンの反平行となり磁化を打ち消しあう。類似の磁気構造は MnO、NiO でも実現され、これらは磁気秩序に従って、[111] 方向に収縮した三方晶への構造転移が示される。対して CoO は [001] 方向に収縮した正方晶に構造転移するという異常が示される。これについて、ヤーンテラー変形の影響が議論されてきたが、その解明には至っていない。今回、CoO の正方晶歪みを理解することを目的に、CoO ナノ結晶の磁性と構造を調べた。一般的にナノ結晶では磁気相転移温度がサイズの低下に伴い減少することが知られているが、ヤーンテラー変形は Co²⁺ 価イオン周囲の局所的な環境で決まる現象であるために、転移温度が結晶サイ

ズに依存しないことが期待される。実験の結果、2つの転移温度は分離することなく、ナノ結晶のサイズの低下に伴って、ともに減少する様子が示された。これにより磁気秩序の形成がトリガーとなって正方晶歪みが発生することが分かった。



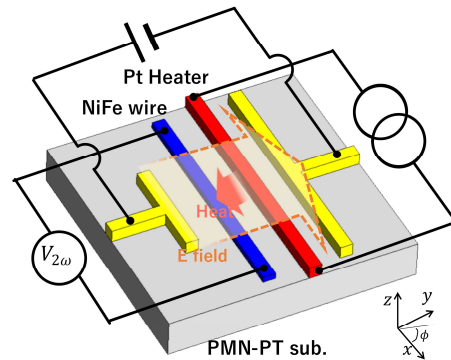
CoO ナノ結晶 (約 10 nm; 約 30 nm) およびミクロン粒子の格子定数の温度依存性。

A-13

マルチフェロイク構造と磁気熱電効果を用いた強誘電体基板の熱伝導率の測定

九大物理^A 小谷悠太^A, 井上建吾^A, 一兜博人^A, 胡少杰^A, 大西紘平^A, 山田和正^A, 木村崇^A

強磁性体と強誘電体を積層した界面にて発現する界面マルチフェロイク構造では、磁化の電氣的制御や強誘電体ドメインの磁場制御など、応用的にも興味深い物性が報告されている。今回、我々は、界面マルチフェロイク構造における熱伝導特性の評価、およびそれらの電氣的制御を試みたので報告する。図に示すように、我々は、強磁性体 NiFe 細線を強誘電体基板 PMN-PT 上に作製し、この基板の熱伝導特性を、第二高調波ロックイン検波法を用いた NiFe の磁気熱電効果の角度依存性から評価した。更に、サイドゲートを用いて、強誘電体の分極ドメインを制御した際の系統的实验を行い、分極と熱伝導の相関を実験的に調べた。



A-14

低温水素吸蔵を利用した Pd 薄膜の電気抵抗測定

九大工^A, 九大院工^B, 九大院理^C 吉田展一朗^A, 加藤遼馬^B, 古賀陸生^B, 飯森陸^C, 大日方初良^C, 大西紘平^C, 木村崇^C, 河江達也^B

パラジウム水素化物 (PdH_x) は、水素濃度 ($x = \text{H}/\text{Pd}$) が $x = 0.75$ 以上になると超伝導が出現する。しかし水素脱離の影響で、その超伝導特性が十分解明されたとは言い難い。そこで我々は低温で水素吸蔵すれば高濃度の水素化物が作製できるという先行研究を参考に [1]、 $T \leq 200 \text{ K}$ において水素吸蔵、低温冷却、測定を連続的に行うことで、水素脱離を抑制した上でその超伝導特性を調べている [2, 3]。

実験は MPMS に研究室自作 3He インサートを組み合わせ、その内部に試料をセットして LR700 ブリッジを用いて電気抵抗測定を行なっている。膜厚 $1.5 \mu\text{m}$ の Pd 膜における電気抵抗測定を行ったところ、転移点近傍では抵抗が急激に減少する一方、十分低温側では転移がブロードになりゼロ抵抗が観測されなかった。その原因として水素濃度の不均一性が考えられるため、水素濃度の不均一性を低減した上でその超伝導特性を調べることを目的に、本実験ではスパッタリング法によって成膜した厚さ 100 nm の Pd 薄膜を試料として用いた。 $T = 120 \text{ K}$ で水素吸蔵させ、電気抵抗測定を行った。磁場依存性などの詳細については本講演で発表する予定である。

- [1] H. Akiba et al., Phys. Rev. B 92, 064202 (2015).
- [2] Y. Inagaki et al., J. Phys. Soc. Jpn, 87, 123701 (2018).
- [3] T. Kawae et al., J. Phys. Soc. Jpn, 89, 051004 (2020).

A-15

点接合アンドレエフ反射法を用いた強磁性体/超伝導体界面の電子状態測定

九大工^A, 九大院工^B, 東大物性研^C, 東大 TQSI^D 草場将人^A, 寺本翼^B, 高橋拓也^B, 志賀雅巨^B, 坂本祥哉^C, 三輪真嗣^{C,D}, 河江達也^B

超伝導体/常伝導体界面では、超伝導体中のクーパー対が常伝導体に染み出すことで、常伝導体が超伝導状態になる。この現象は近接効果と呼ばれ、これまで様々な超伝導体/常伝導体界面での研究が行われている。その結果、s波超伝導体/強磁性体 (sS/F) 界面では、強磁性体中の交換相互作用によりクーパー対の染み出し距離が極端に短くなることが分かっている [1]。一方、近年いくつかの sS/F 界面において、スピン三重項超伝導の発現を示唆する長距離の近接効果が報告された [2]。しかしながら、スピン三重項超伝導状態の電子状態などの微視的な実験研究の報告は非常に限られている [3]。そこで我々は、点接合アンドレエフ反射法を用いたスピン三重項超伝導状態の電子状態の直接観測を目指している。本実験では先行研究 [2] を参考に、s波超伝導体/Cr/Fe 多層膜を用いた (図 1)。多層膜は分子線エピタキシー法で作製し、RHED

によりエピタキシャル成長していることを確認した。講演では、点接合アンドレエフ反射法によって得られた実験結果について報告する。[1] A. I. Buzdin, Rev. Mod. Phys. 77, 935 (2005). [2] S. Komori et al., Sci. Adv. 7, eabe0128 (2021). [3] S. Diesch et al., Nat. Commun. 9, 5248 (2018)

Au: 1.5 nm
Fe: 0, 1, 2, 4, 6 nm
Cr: 0, 0.5, 1, 2, 5 nm
V: 100 nm
MgO: 5nm
MgO (001): sub.

図 1 本実験に使用したエピタキシャル多層膜の膜構造

A-16

低温水素吸蔵を用いた PdH_x の超伝導転移の研究

九大院工^A, 九大工^B, 九大院理^C 加藤遼馬^A, 古賀陸生^A, 吉田展一朗^B, 飯森陸^C, 大日方初良^C, 大西紘平^C, 木村崇^C, 河江達也^A

PdH_x は水素濃度 x ($x = H / Pd$) が 0.75 以上になると $T \leq 10$ K で常圧でも超伝導が出現する。この水素化物超伝導の発見以降、多くの実験が行われてきたが、水素脱離の影響などで十分に物性が解明されたとは言い難い。そこで、我々は $T \leq 200$ K で水素吸蔵させ連続的に低温測定を行うことで、水素脱離が抑制された均一な試料における超伝導特性を調べている [1,2]。

実験は MPMS に研究室自作 3He インサートを組み合わせ、その内部に試料をセットして行っており、粒径 $2 \mu\text{m}$ の Pd 粉末での磁化率測定や、膜厚 $1.5 \mu\text{m}$ の Pd 膜での電気抵抗測定より、図 1 に示す温度—磁場相図などを明らかにしてきた。今回の学会では、これらの超伝導特性について報告する予定である。

- [1] Y. Inagaki et al., J. Phys. Soc. Jpn, 87, 123701 (2018).
[2] T. Kawae et al., J. Phys. Soc. Jpn, 89, 051004 (2020).

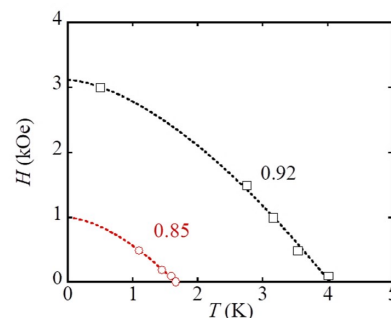


図 1. PdH_x の温度—磁場相図。
 $x = 0.85$ (電気抵抗測定)、 $x = 0.92$ (磁化率測定)

A-17

FeCr₂S₄-CuCr₂S₄ 系硫化スピネルの熱輸送特性

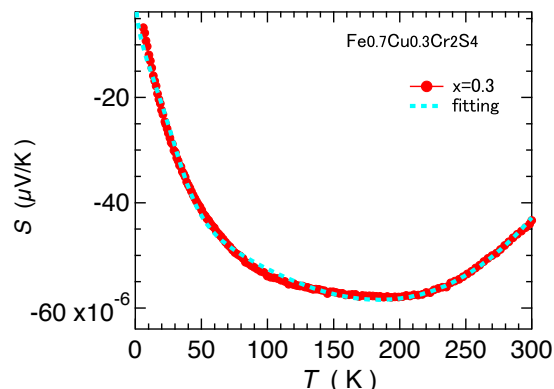
鹿児島大学理工学研究科^A, 鹿児島大学理学部^B, 鹿児島大学共通教育センター^C 坂井奎太^A, 井元達郎^B, 伊藤昌和^C

化学式 AB₂X₄ で表されるスピネル構造を持つ化合物は興味深い物性を示すものが多く、活発に研究が行われている。硫化スピネル FeCr₂S₄ は、半導体的性質な電気抵抗率の温度依存性を示す。一方、FeCr₂S₄ の Fe を Cu で置き換えた CuCr₂S₄ は、金属的振る舞いを示し、両者で大きく異なる。本研究では両者の物性の違いの起源を調べるため、硫化スピネル Fe_{1-x}Cu_xCr₂S₄ の電気抵抗率 ρ 、熱伝導率 κ 、ゼーベック係数 S を測定した。また、これらから無次元性能指数 ZT を導き出した。図-1 に $x=0.3$ のゼーベック係数 S の温度 T 、依存性を示す。全温度域で負の値を取っておりキャリアが電子であることが分かる。 $S(T)$ はデバイ温度は 328K とした Matoba, Anzai and Fujimori の半経験式でフィッティングすることができた。講演では Fe_{1-x}Cu_xCr₂S₄ の ZT についても報告する。

図-1 Fe_{0.7}Cu_{0.3}Cr₂S₄ のゼーベック係数 S の温度依存性。破線は Matoba, Anzai and Fujimori の半経験式によ

るフィッティング結果。

参考文献 [1] T. Rudolf, K. Pucher, F. Mayr, D. Samusi, V. Tsurkan, R. Tidecks, J. Deisenhofer, and A. Lodrl, Phys. Rev. B 72, 014450 (2005) [2] 伊藤昌和, 山下敏広, 日本熱電学会 (2013) [3] J. B. Goodenough, Solid State Commun. 5, 577 (1967)



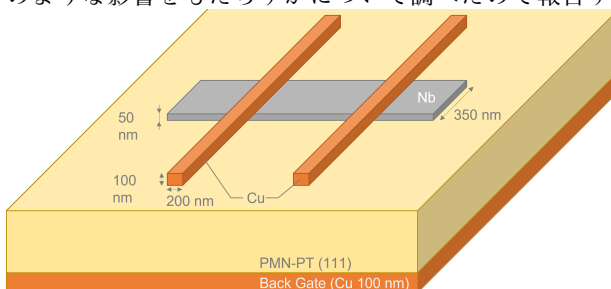
A-18

PMN-PT 基板を用いた超伝導 Nb 細線における準粒子緩和過程の電界制御

九大物理^A 入倉大輔^A, 岩堀拓真^A, 大西紘平^A, 木村崇^A

常伝導体から超伝導体に電子を注入する際、超伝導ギャップより高いエネルギーを有する電子は瞬時にクーパー対を作らず、暫くの間、準粒子として拡散する。この準粒子の流れは超伝導体内において電圧降下を生じさせ、非局所的に配置された電極に電圧を発生させる。このような準粒子伝導を理解することは超伝導体における輸送現象を記述するために重要であり、理論・実験双方から長年に渡り研究されており、近年、この準粒子を用いたトリプレット・クーパー対の形成や巨大なスピン-電気変換現象などが注目されている。もし、この準粒子緩和過程を外的パラメータにより制御できれば、準粒子伝導特性のより深い理解に加え、

準粒子を用いた新奇的な物性応用への展開が期待できる。そこで本研究では強誘電体 PMN-PT 基板上に Nb 細線を作製し、電氣的に制御された基板の歪が準粒子緩和過程にどのような影響をもたらすかについて調べたので報告する。



A-19 分子性液体の粘度と局所構造緩和

大分大学工学研究科^A, 大分大学理工学部^B 森川光太郎^A, 岩下拓哉^{A,B}

液体の流動特性である粘度は、液体中の原子・分子の運動状態を反映している物性の一つである。高温領域においては、その粘度は特徴的な温度依存性であるアレニウス則を示す。これは、一見不規則な構造変化に見える液体中にも、粘性緩和における熱活性化過程が存在していることを示唆している。粘性の微視的起源と動的構造との関係を見出すことが、物性物理学の課題のひとつであるが、いまだに満足いく関係が見出されていない。

近年、単純な原子から成る液体金属のような単純液体において、液体の粘度と局所構造緩和の関係が見出された [1]。ここで局所構造緩和とは、原子の最近接粒子の数、つまり、原子の配位数が±1 変化するイベントに着目した構造緩和の素過程である。そのイベントにかかる平均的な緩和時間が、粘性緩和を特徴づける巨視的なマクスウェル緩和時間 ($\tau_m = \eta / G_\infty$) と等しいことが分子動力学シミュレーションにより明らかにされた。ここで、 η は粘度、 G_∞ は高周波極限での剪断弾性をあらわす。本研究では、単純液体で発見された関係を、シリカのような分子性液体までに拡張し、その妥当性について検証する。

参考文献

- [1] T. Iwashita, D. M. Nicholson, and T. Egami, “Elementary Excitations and Crossover Phenomenon in Liquids”, Phys. Rev. Lett. 110, 205504 (2013).

A-20 Al₁₃Fe₄ への Pt 微量添加に関する第一原理計算

鹿児島大学大学院理工学研究科^A, 中央大学理工学部物理学科^B 岩戸翔太^A, 石井靖^B, 野澤和生^A

準結晶の近似結晶である Al₁₃Fe₄ は、Pt を微量添加することでプロピンの水素付加反応に対し高い触媒活性を示す [1]。金属原子は、孤立した環境に置かれることでバルクとは異なる化学的特性を有することがあることから、このプロピンの水素付加反応に対する高い触媒活性も、Al₁₃Fe₄ 合金中に孤立した Pt に起因するものであることが期待される。本研究は、Pt を微量添加した Al₁₃Fe₄ の構造を理解し、Al₁₃Fe₄ 合金中に孤立した Pt の触媒活性を理論的に解明することを目的としている。計算には VASP (Vienna Ab initio Simulation Package) を使用した。電子とイオン芯の相互作用は PAW (Projector Augmented Wave) 法で近似し、交換相関汎関数には Perdew-Burke-Ernzerhof による一般化勾配近似を用いた。

Al₁₃Fe₄ は単斜晶 mS102 構造であり、単位胞内に 102 個の原子及び 20 個の原子サイトが存在する [2]。実験では、Pt が Fe(1) サイトを優先的に置換することが報告されている [1]。そこで 20 個の原子サイトの原子のうち 1 つを Pt に置換して、構造緩和計算を行ったところ、実験で得られている Fe(1) サイトではなく、Al(7) サイトを置換することで最安定な構造になるという結果が得られた。一方で、有限温度においては Al(5)、Al(7)、Al(9) サイトが Fe に置き換わる可能性が指摘されている [3]。このことから、Al サイトを Fe 原子に置き換えたうえで Pt を各原子サイトに置換し、構造緩和計算によって安定性の検証を行なっている。詳細は当日報告する。

【参考文献】

- [1] T. Yamada et al., J. Am. Chem. Soc. 140, 3839 (2018).
[2] J. Grin et al., Cryst. Mater. 209, 479 – 487 (1994).
[3] C. M. Fang et al., J. Phys. Mater. 2, 015004 (2019).

A-21

機械学習ポテンシャルを用いた Ag_2S のせん断変形シミュレーション

熊大院自然^A, 熊大院先端^B 法橋陽^A, 高良明英^A, 島村孝平^B, 下條冬樹^B

室温下で Ag_2S は半導体でありながら金属的な延性をもつ。この延性の微視的機構を解明するため、我々は第一原理分子動力学法に基づき、(100)[010], (100)[001], (010)[100], (010)[001], (001)[100], (001)[010] ((KLM)[klm]: 結晶の (KLM) 面を [klm] 方向にスライドさせる) 計 6 種類の単純せん断変形シミュレーションを行い、変形過程における硫黄副格子の構造回復について議論してきた。しかし、第一原理分子動力学法の計算コストの高さから、原子数は 192 原子に限られていた。そこで、この計算コストの問題を解決し、より大きな系でのシミュレーションを実施するため、第一原理計算のデータを学習させた機械学習ポテンシャルの利用を試みた。

今回、(001)[100] せん断変形の第一原理データを学習したポテンシャルを用いて、192 原子系、1536 原子系での 6 方向への単純せん断変形を行った。192 原子系では、計算コストが大幅に削減されたことにより、十分なシミュレーション時間を確保することができ、より明確に硫黄副格子の構造回復を再現することができた。1536 原子系でも 6 方向全ての構造回復を確認することができたが、192 原子系とは異なる回復機構が現れた。(100)[010] せん断変形において、192 原子系では、(100) 面内の原子移動により構造を回復させたのに対し、1536 原子系では、(001) 面内での原子移動により構造回復が起こる。構造回復過程における硫黄原子の平均移動距離は、192 原子系では 5.2 Å であったのに対し、1536 原子系では 2.8 Å であり、192 原子系の場合より原子の移動距離が小さい緩和機構で起こることが分かった。

講演では、系のサイズにより構造回復機構が異なる理由について議論する。