

会場 B

領域 5, 6, 9, 10

B-1

ミスフィット層状物質 $(\text{SnS})_{1.15}(\text{TaS}_2)$ の角度分解光電子分光

佐賀大理工^A, 佐賀大シンクロ^B 古賀安友^A, 山本勇^B, 東純平^B, 真木一^A

$(\text{SnS})_{1.15}(\text{TaS}_2)$ は、三角プリズム型の 2H-TaS₂ と岩塩型の SnS が c 軸方向に交互に積層した結晶構造をもつ。a 軸方向では、2H-TaS₂ と SnS の格子定数が非整合であるため、ミスフィット層状物質と呼ばれている。ミスフィット層状物質における層間結合のメカニズムは未解明である。また、2H-TaS₂ は約 75 K で CDW 状態へ、約 0.8 K で超伝導状態へ転移するが、 $(\text{SnS})_{1.15}(\text{TaS}_2)$ では CDW が抑制され、約 3 K で超伝導状態へ転移するなど、電子構造に対するミスフィット積層の影響が注目されている。

我々は、フラックス法を用いて $(\text{SnS})_{1.15}(\text{TaS}_2)$ の単結晶を作製し、角度分解光電子分光 (ARPES) により電子構造を調べた。40 K において、へき開面で測定を行ったところ、2H-TaS₂ のフェルミ面によく似たフェルミ面の観測に成功した (図 1)。ARPES 測定では、

光子エネルギーを変えることで、積層方向の分散を調べることができる。測定結果の詳細を当日発表する。

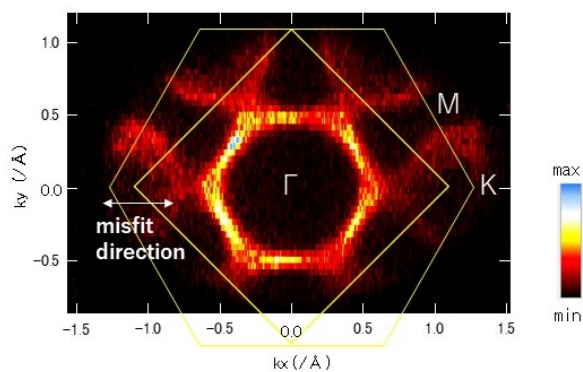


図1 $(\text{SnS})_{1.15}(\text{TaS}_2)$ のフェルミ面

B-2

NbN/Co₂MnSi 多層膜の近接効果と超伝導転移温度

鹿児島大院理工^A, 東北大院工^B, 東北大金研^C, 九州大院理^D, 原子力機構^E 奥柗太^A, 重田出^A, 窪田崇秀^B, 木村尚次郎^C, 関剛斎^C, 篠崎文重^D, 淡路智^C, 高梨弘毅^{E,C}, 廣井政彦^A

超伝導体 (S)/強磁性体 (F) 結合系研究では従来の「S へのスピン偏極した準粒子の注入」に加えて、近年 F の交換磁場、厚さを調節し「ジョセフソン接合を 0 接合から π 接合に変化」させるなどの研究も進展している。本研究では F 材料にハーフメタル Co₂MnSi (CMS) を用い、超伝導 NbN 薄膜 (15 nm) と CMS 薄膜 ($d_F = 3 \sim 15$ nm) をエピタキシャル成長させた多層膜で、CMS が NbN の輸送特性に与える影響を調べている。特徴的な結果に NbN/CMS 二層膜の超伝導転移温度 T_c の非単調な d_F 依存性がある。

図 1 に $T_c(d_F)$ の実験結果を (●) で示す。 T_c は $d_F \sim 5$ nm 近傍で極小値を取る。一方、(▼) は超伝導熱的揺らぎ伝導度解析から求めた対破壊パラメーター $\delta(d_F)$ である。何らかの対破壊機構によって超伝導転移温度が低下する場合、 T_c を外的対破壊がない場合の転移温度とすると素朴には $\delta \propto (T_{c0} - T_c)/T_c$ と考えられる。従って極大をとる $\delta(d_F)$ の

振る舞いは極小値を示す $T_c(d_F)$ 特性と矛盾しない。非単調な $T_c(d_F)$ は近接効果により S から F へ侵入した超伝導オーダーパラメーターの振動を伴う減衰が原因と考えられる。一般化された GL 理論は F 領域での減衰長 ξ_F 及び S/F 界面での透過率をパラメーターに含む。講演では図 1 の非単調な $T_c(d_F)$ に理論¹⁾を適用し、議論する。

1) A. I. Buzdin, Rev. Mod. Phys. **77**, 935 (2005).

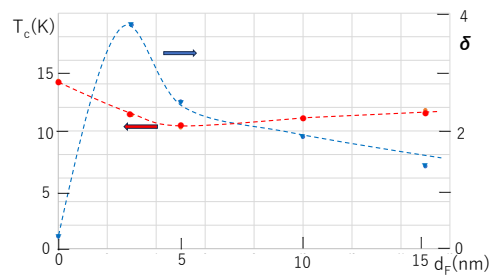


図 1 超伝導転移温度の磁性層の膜厚依存性

B-3

ハイエントロピー合金 (TaNb)_{0.7}(ZrHfTi)_{0.3} の磁束ピン止め特性

九産大院工^A, 九産大理工^B, 福工大工^C, 大阪公大工^D, 東北大金研^E 川崎佑太^A, 西崙照和^{A,B}, 末吉哲郎^{A,B}, 北川二郎^C, 石津直樹^C, 加藤勝^D, 野島勉^E, 淡路智^E, 佐々木孝彦^E

これまでに、超伝導ハイエントロピー合金 (TaNb)_{0.7}(ZrHfTi)_{0.3}[1] について磁場中の超伝導特性を測定し、臨界電流密度 J_c が熱処理によって上昇することを報告してきた [2]. 本研究では、(TaNb)_{0.7}(ZrHfTi)_{0.3} について J_c の最適熱処理条件を決定し、磁束ピン止め効果を議論する。試料はアーク溶解法で作製され、アーク溶解後の as-cast 試料とアーク溶解後に $T_{an} = 200 \text{ }^\circ\text{C} \sim 1000 \text{ }^\circ\text{C}$ で 4 日間の真空中熱処理を行った試料について SQUID 磁束計で磁化測定を行った。as-cast 試料の臨界温度は $T_c = 7.69 \text{ K}$ であり、熱処理による変化は 0.3 K 程度と小さかった。2 K における臨界電流密度 J_c は、as-cast, $T_{an} = 200 \text{ }^\circ\text{C} \sim 400 \text{ }^\circ\text{C}$ の試料では、 $3 \times 10^4 \text{ A/cm}^2$ 程度であり、これまで報告されている他のハイエントロピー合金の as-cast 試料 [3] と同程度の値であった。これに対し、 $T_{an} = 600 \text{ }^\circ\text{C}, 800 \text{ }^\circ\text{C}, 1000 \text{ }^\circ\text{C}$ で熱処理をした試料では、 J_c が急激に増加し、最適熱処理温度 $T_{an} = 600 \text{ }^\circ\text{C}$ では $J_c \simeq 10^6 \text{ A/cm}^2$ に達した。また、 J_c に加えて不可逆磁場 $H_{irr}(T)$ も熱処理で増加することから、熱処理により磁束ピン止め中心が導入されていることを示唆している。磁束ピン止め中心に関する情報を得るために、X 線回折と FE-SEM 観察を行った。X 線回折の結果から、結晶構造は熱処理によらず bcc 構造を取り、異なる結晶構造の析出相は観測されなかった。格子定数 a は $600 \text{ }^\circ\text{C}$ 以上の熱処理で急激に減少することから、格子歪みが磁束ピン止めに寄与していることを示唆している。また、FE-SEM による反射電子像と EDX 分析の結果から、元素の組成が空間的に分布していることが分かった。特に J_c が高い試料では筋状の微細組織構造が観測され、これが磁束のピン止めの要因となっていると考えられる。

参考文献

- [1] F. von Rohr et al., Proc. Natl. Acad. Sci., 113 (2016) E7144.
- [2] 川崎佑太 他, 第 70 回応用物理学会春季学術講演会 (2023) [講演番号: 16a-PB03-2].
- [3] G. Kim et al., Acta Materialia, 186 (2020) 250.

B-4

共晶ハイエントロピー合金 NbScTiZr の臨界電流密度

九産大理工^A, 九産大院工^B, 福工大工^C, 大阪公大工^D, 東北大金研^E 上田遥翔^A, 上田高佑^A, 川崎佑太^B, 末吉哲郎^{A,B}, 西嶋照和^{A,B}, 関武留^C, 北川二郎^C, 加藤勝^D, 野島勉^E, 淡路智^E, 佐々木孝彦^E

ハイエントロピー合金 (HEA) は少なくとも 4 種類の主要元素を含む合金であり, その優れた特性により超伝導応用に有利な合金として期待されている. 本研究では, 共晶 HEA である NbScTiZr [1] について磁化測定を行い, 臨界電流密度 J_c などの磁場中超伝導特性を調べた. また, 共晶の微細組織構造が超伝導特性に与える影響を調べるために 800 °C で熱処理を行った試料との比較を行った.

NbScTiZr 試料はアーク溶解法で作製し [2], SQUID 磁束計 (MPMS3) を用いて磁化測定を行った. 磁化の温度依存性から求めた臨界温度は as-cast 試料で $T_c = 7.98$ K であり, 800 °C の熱処理により $T_c = 9.15$ K まで増加した. 図 1 に磁化ヒステリシス曲線から求めた臨界電流密度 J_c の磁場依存性を示す. as-cast 試料の J_c は 10^6 A/cm² を超え, 他の HEA の as-cast 試料よりも大きな値を示すが, 800 °C の熱処理により J_c は 1 桁程度減少した. X 線構造解析と FE-SEM 観察の結果, NbScTiZr は bcc 相と hcp 相から構成され, as-cast 試料ではラメラ状の微細組織構造が存在することが分かった [2]. このことから as-cast 試料では微細組織構造によって分

散された非超伝導相が磁束ピン止め中心として働くと考えられる. 微細組織構造は 800 °C の熱処理で粗大化するため J_c の低下と対応している. 発表では, 上部臨界磁場 H_{c2} や不可逆磁場 H_{irr} の特性についても報告する.

- [1] M. Krnel et al., Materials 15 (2022) 1122.
- [2] T. Seki et al., J. Supercond. Nov. Magn., accepted for publication (arXiv: 2311.00195)

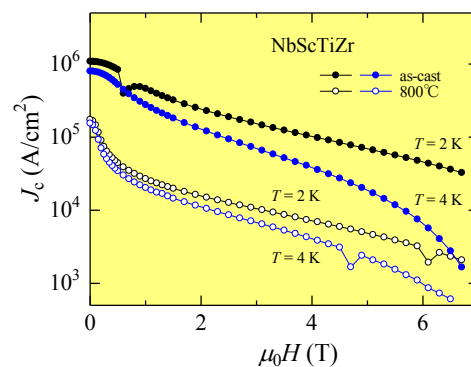


図1: NbScTiZrの臨界電流密度 J_c の磁場依存性.

B-5

低温で水素吸蔵させた PdHx 薄膜の残留抵抗

九大理工^A, 岡山理科大^B, 九大院理^C 吉田展一朗^A, 加藤遼馬^A, 太子周^A, 志賀雅巨^A, 稲垣祐次^B, 飯森陸^C, 木村崇^C, 河江達也^A

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], $T \leq 200$ 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. 180K で水素吸蔵させた膜厚 100 nm 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, 150K で再度水素吸蔵を行ったが, やはり残留抵抗がみられ, 転移幅は広がった. この残留抵抗には水素の量子性が関係している可能性がある. 発熱の可能性, 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).

B-6 金電極を用いた PdH_x 薄膜の電気抵抗測定

九大院工^A, 九大院理^B 加藤遼馬^A, 吉田展一朗^A, 飯森陸^B, 志賀雅巨^A, 木村崇^B, 河江達也^A

PdH_x は水素濃度 x ($x = H / Pd$) が約 0.75 以上で常圧でも $T < 10$ K で超伝導が出現する。我々は $T \leq 200$ K で水素吸蔵を行い、その場で連続的に測定を行うことで水素脱離が抑制された試料の超伝導特性について調べている [1,2]。これまでに Pd 薄膜で電気抵抗測定を行ったが、転移後のゼロ抵抗を観測できていない [3]。その理由として表面に端子付けした際の銀ペーストによって端子近傍で水素が十分に吸蔵されていない可能性を考えた。そこで今回は金電極を薄膜の基板側にセットした膜厚 100 nm の Pd 薄膜をスパッタリング法で成膜し (図 1)、均一に水素が吸蔵されることを期待して、その特性を調べることを目的とした。講演では得られた結果について報告する。

[1] Y. Inagaki et al., J. Phys. Soc. Jpn, 87, 123701 (2018).

[2] T. Kawae et al., J. Phys. Soc. Jpn, 87, 123701 (2020).

[3] R. Kato et al., JPS Conf. Proc., 38, 0110333 (2023).

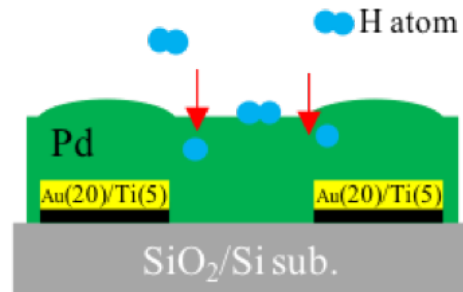


図1. Au電極を用いた膜厚100 nm のPd薄膜試料の模式図。

B-7 ジョセフソン電流の測定による超伝体内への水素吸蔵現象の観測

九州大学院工学府^A 太子周^A, 宮川一慶^A, 芳賀雄仁^A, 志賀雅巨^A, 河江達也^A

水素 (H) は質量が小さいため、強い量子性を示す。我々は、液体水素 (LH₂) 中に浸した金属ナノコンタクトの電気伝導特性の変化を追跡し、コンタクト間に微小電圧を印加することでトンネル効果による水素吸蔵が誘起されることを明らかにしている [1]。今回、数 mV の範囲で特徴的な特性を示す超伝導ナノコンタクトを利用することで、より高精度な水素吸蔵の検出ができなかと考え、水素または重水素を吸着させた超伝導状態の Nb ナノコンタクトの特性評価を行った [2]。図 1 に、 $T \sim 4$ K で H に曝した Nb ナノコンタクトの I-V 特性を示す。最大で 8-70 mV (H 吸着時) の電圧を印加後に測定した。最大電圧の増加に伴い、ジョセフソン電流が抑制されることが分かる。特に、50 mV 以上の電圧印加で、ジョセフソン電流はより大きく抑制される。これらの結果は、コンタクト間に印加する電圧の増加により、H 吸蔵がより促進されることで説明でき、LH₂ 中での実験結果と

一致する。本講演では実験結果について、その詳細を報告する。[1]K. Ienaga, H. Takata, Y. Onishi, et al., Appl. Phys. Lett. 106, 021605 (2015). [2] K. Miyakawa, H. Takata, T. Yamaguchi, et al., Appl. Phys. Express. 15, 013002 (2022)

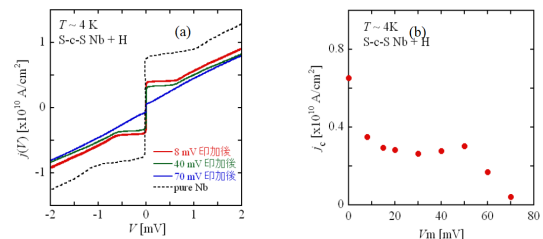


図1. $T \sim 4$ K で(a)水素中に曝した超伝導 Nb ナノコンタクトに対して、一定電圧を印加後に測定した I-V 特性。最大で 8, 40, 70 mV (水素吸着時) の電圧を印加後に測定した。なお、縦軸は電流密度で示している。また、比較として pure Nb の I-V 特性も示している。(b)はジョセフソン電流と印加電圧の関係を示している。

B-8

振動ワイヤ法を利用した金属内への水素吸蔵現象の検出

九大院工^A 芳賀雄仁^A, 宮川一慶^A, 太子周^A, 志賀雅巨^A, 河江達也^A

今日、液体水素の産業利用が増えており、水素と金属界面の相互作用に関する研究が注目されている。これまでに、我々はナノワイヤを用いた電気伝導測定を通して金属への水素吸蔵過程を追跡してきた [1]。本研究では、金属の脆化などのマクロ物性を評価することを目的として、振動ワイヤ法を用いた水素吸蔵検出を行った。図は、SUS304 を水素中に曝露した際の周波数と信号強度の関係を示している、それぞれ水素曝露直後、5 時間後、10 時間後に測定したものである。信号ピークは試料の共鳴周波数を示しており、時間経過に伴い、共鳴周波数が高周波数側にシフトしていることが分かる。これは水素吸蔵のために試料の物性が変化したためだと考えられる。本講演では以上の詳細について報告する。

[1] K. Ienaga, et al., Appl. Phys. Lett. 106, 021605 (2015)

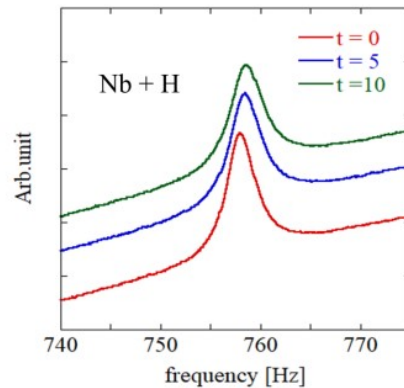


図. SUS304ワイヤを水素中に曝露した直後、5時間後、10時間後に測定した周波数特性の変化

B-9

第一原理計算を用いたグラフェンナノフィンの安定構造予測

福岡工大情工^A 西将輝^A, 福永海斗^A, 丸山勲^A

近年、少数層のグラフェンの表面にフィン状の様な突起物で構成されるグラフェンナノフィンが発見された [1]。グラフェンナノフィンはグラフェンの電気特性を活かした原子層サイズの電界効果トランジスタチャネルとして活用できる可能性がある。

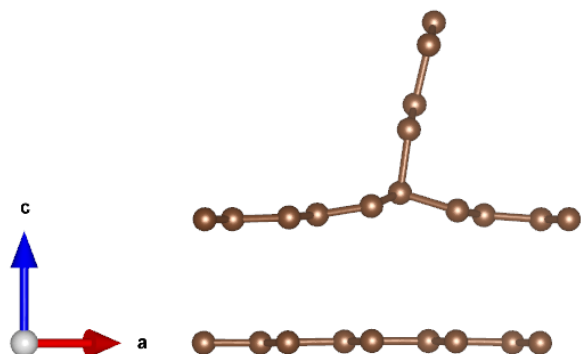
グラフェンナノフィンはグラフェンの成長実験によって発見されたものであり、理論的メカニズムは明らかではない。そこで、第一原理計算でグラフェンナノフィンの安定構造を予測することが本研究の目的である。3枚のグラフェンシートが sp^3 結合により作る Y 型ジャンクション構造の第一原理計算 [2] はあるが、グラフェンナノフィンを取り扱った第一原理計算はまだ行われていない。

図は第一原理計算ソフト VASP(Ver.5.3.3) により得られたグラフェンナノフィンの安定構造である。特徴としてナノフィンの根元部分でのみダイヤモンドの様な sp^3 結合を形成していた。計算条件は、カットオフエネルギーを 450eV, k 点数を $1 \times 3 \times 1$, 幅 0.2eV のガウス型スミアリング。擬ポテンシャルは Perdew, Burke, Ernzerhof(PBE), ファンデルワールス相互作用を導入するために Grimme の DFT-D2 を

使用している。

発表では、計算の詳しい条件や条件ごとに得られた計算結果について議論する予定である。

[1]F. Maeda, and H. Hibino, Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 51, p. 06FD16, 2012. doi: 10.1143/JJAP.51 [2]T. Kawai, S. Okada, Y. Miyamoto, and A. Oshiyama, Phys. Rev. B, Vol. 72, p. 035428, 2005. doi: 10.1103/PhysRevB.72.035428



B-10 第一原理計算による CsCa₂Ta₃O₁₀ の安定構造

熊本大学 産業ナノ^A 横井 裕之^A

ABX₃ という組成で代表されるペロブスカイト型物質は、結晶構造の多様性と A, B, X のどのサイトにおいても比較的容易な化学置換性により、幅広い物理的・化学的特性を示す。CsCa₂Ta₃O₁₀ は Dion-Jacobson 相と呼ばれる層状ペロブスカイトのひとつであり、Ca₂Ta₃O₁₀ の 3 重ペロブスカイト層と Cs イオンの岩塩層から成る。層状ペロブスカイトの岩塩層のカチオンは容易にイオン交換可能であり、カチオン種により物理的・化学的特性の制御が可能であるため、不均質触媒やイオン伝導体、蛍光体としての応用が期待され、また、岩塩層での剥離によりペロブスカイト単層物質として新たな材料開発も展開されている。

立方晶ペロブスカイト構造では B サイトの陽イオンを中心として正八面体の頂点の X サイトに陰イオンが位置しており、この正八面体配置にずれやゆがみが生じた構造では強誘電性などの特性が発現する。そのため、ペロブスカイト型物質の八面体骨格は正確な同定が求められる。CsCa₂Ta₃O₁₀ は粉末 X 線回折により室温で正方晶の結晶構造をもつことが報告されている [1] が、Raman 散乱スペクトルには正方晶ではあらわれないピーク構造が観測される [2]。本研究では、第一原理計算により八面体ユニットが *a* 軸方向でねじれて *c* 軸方向では屈曲して連結する構造が正方晶よりもエネルギー的に安定となり、Raman 散乱スペクトルに観察された特徴がよく再現するという計算結果が得られたので、それについて報告する。

[1] K. Toda *et al.*, *Mat. Res. Bull.* **34**, 971 (1999).

[2] C.-W. Hsu *et al.*, *Chem. Mater.* **33**, 6068 (2021).

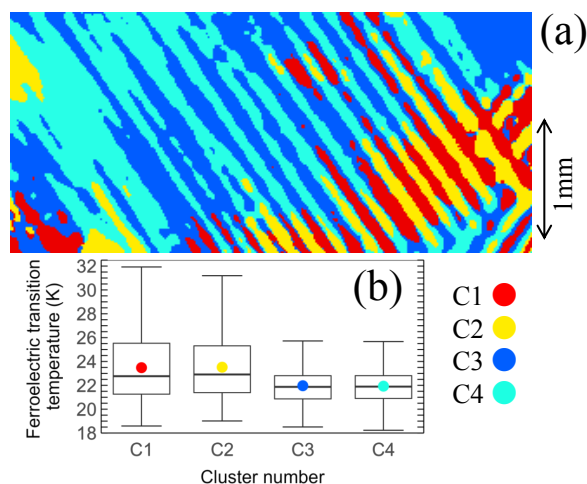
B-11 バイズ推定を用いた応力誘起強誘電状態 SiTiO₃ の解析

鹿児島大院理工^A, 鈴鹿高専^B 豊田健辰^A, 三浦陽子^B, 真中浩貴^A

量子常誘電体 SrTiO₃ に [001] から外力を加えると内部で応力が発生し、30 K 以下で強誘電転移が起こる。我々はこの強誘電転移現象を調べるため、複屈折イメージング法を用いて位相差と短軸方位の温度依存性を測定した。その結果、応力分布によって複屈折量も分布するため、試料の場所によって解析結果が異なる問題が起こった。この問題を解決するため、機械学習によるクラスタリング法を用いた複屈折画像の全量解析法についてこれまで報告してきた。その結果、複屈折量の温度変化を温度系列データとみなすことで、従来の時系列分析法が活用できることが分かってきた。

本発表では階層バイズ推定を用いて、強誘電転移温度を 1 ピクセル単位で求めた結果について報告する。本物質は温度を下げていくと、位相差が強誘電転移温度近傍で緩やかに折れ曲がるため、2 本の最小二乗直線の交点として強誘電転移温度を決定してきた。しかし最小二乗法は点推定であるため、測定値の誤差を考慮して交点を決定することは難しく、また最小二乗法を行う温度範囲によっても交点がズレてしまう問題がある。本研究ではバイズ推定による事後確率分布を用いてハミルトニアンモンテカルロ法による 2 つの直線の交点の確率分布か

ら強誘電転移温度を決定した。(a) はすでに報告しているクラスタリングの結果である。1 ピクセル単位での直線の交点の推定と、クラスタ毎に全体での交点を階層化することで相転移温度を求めた。(b) は 4 つのクラスタの強誘電転移温度の箱ひげ図である。当日は、時系列分析との比較や、階層バイズ推定による解析手法の有効性や結果の解釈についても考察する。



本グループでは、複屈折イメージング法を利用して空間的に不均一な物性状態を観察してきた。しかし複屈折量が不均一に広がる場合、解析を行う場所によって結果の解釈が異なる可能性があり、解析の恣意性という本質的な問題に直面した。そこで、機械学習を用いて11万ピクセル分のデータを1ピクセル単位で解析する手法の開発を行っている。その過程において、物性の温度変化を温度系列データとみなし、すでにある時系列分析法を活用することで、隠れた規則性を見つけ出せることが分かってきている。

本研究では機械学習のさらなる発展として、深層学習を用いた温度系列分析を通じて物性変化の予測に取り組んだ。今回、外力下で試料内に生じる応力によって強誘電転移が誘起されるSrTiO₃(110)試料の絶対零度における臨界応力の予測を行った。計算には時系列予測において評価が高いGoogleが開発したTensorflowを利用し、再帰型深層学習の一種である長・短期記憶(Long Short-Term Memory : LSTM)を採用した。図1には深層学習に用いられるニューラルネットワークの基本構成を示している。入力層と出力層との間の中

間層(隠れ層)には2層のLSTMを配置し、ニューロンの数はそれぞれ100個と70個とした。これによりLSTM層を経て特徴量を段階的に圧縮させ、ネットワークを5つの異なる出力ブランチに分岐させた。これらのシステムは、異なる特徴量の個別の予測が可能となり、各ブランチからの出力に重み付けをすることによって温度系列予測へと最終的にまとめられる。本手法は入力データの様々な特徴を捉える能力に優れている。本発表では、時系列分析と温度系列分析との共通点と相違点を中心にして、本手法の有用性について議論する。

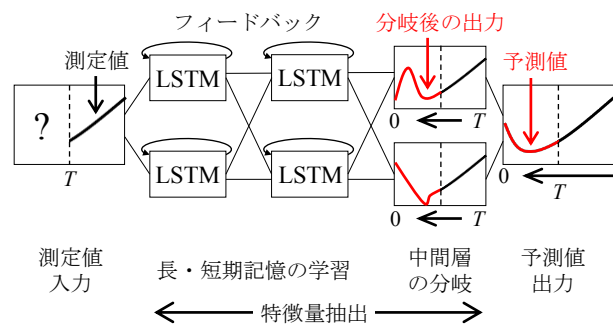


図1. LSTMを用いた深層学習の基本構成