
会場 D

領域 5, 6, 7

D-1 (BiS)_{1.11}NbS₂ の単結晶作製と ARPES 測定

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

ミスフィット層状物質は、遷移金属ダイカルコゲナイド (TMD) の層と岩塩構造の層が、*c* 軸方向に交互に積層した構造をもつ。2H-TMD は、単層にすると面内の空間反転対称性が破れる。その結果、面内の上部臨界磁場 H_{c2} がパウリ限界を超える可能性があるため注目されている。しかし、単層 TMD での実験は難しい。一方で、ミスフィット層状物質では、バルク中で単層 TMD の電子構造が実現している期待がある。

そこで我々は、(BiS)_{1.11}NbS₂ の単結晶作製を試み、フラックス法により、単結晶を得ることに成功した (図 1)。角度分解光電子分光により電子構造を調べた結果、 Γ -K 方向のバンド分散を得た (図 2)。フェルミ準位近傍に Nb の 4d 軌道に由来するエネルギーバンドがあり、その下に状態のないエネ

ルギー帯があることが分かった。このことから、(BiS)_{1.11}NbS₂ 内で、NbS₂ は単層として存在している可能性がある。

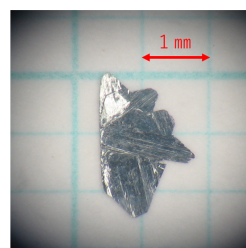


図 1 : 作製した (BiS)_{1.11}NbS₂

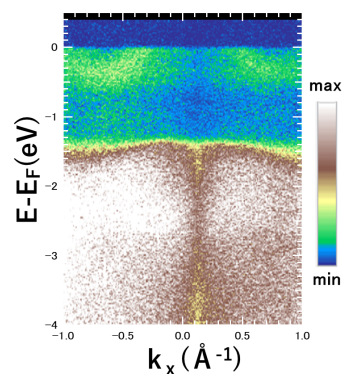


図 2 : Γ -K 方向の分散

D-2

ARPES による $(\text{SnS})_{1.15}\text{TaS}_2$ の非整合積層の研究

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

遷移金属ダイカルコゲナイド (TMD) とロックソルト構造が非整合積層した物質では、TMD の電子構造が変更を受ける可能性がある。実際に、非整合積層によって超伝導や電荷密度波への転移が変化することが知られている。そこで、非整合積層の電子構造への影響を直接調べるため、 $(\text{SnS})_{1.15}\text{TaS}_2$ の単結晶において、エネルギー可変なシンクロトロン光を用いた ARPES 測定を行った。図 1 に、 2H-TaS_2 の ARPES 測定の結果と共に、 $(\text{SnS})_{1.15}\text{TaS}_2$ における測定結果の一例を示す。フェルミ準位 (E_F) を横切る電子状態に大きな違いは見られない。一方で、図 1 の青枠部の S の p_z 軌道に由来したエネルギーバンド形状が大きく異なっていることが分かる。 $(\text{SnS})_{1.15}\text{TaS}_2$

では、この構造は SnS 構造に由来すると考えている。積層方向の分散やフェルミ面形状について当日発表する。

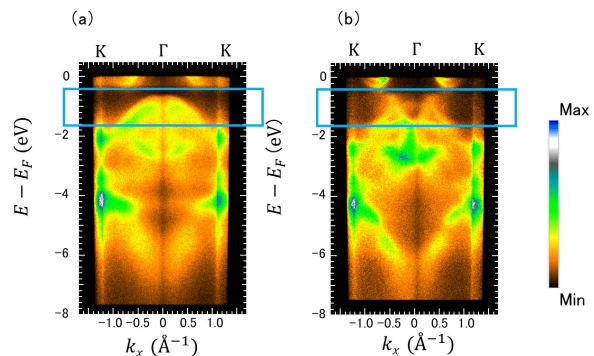


図1 入射光エネルギー100 eVで測定した ΓK 方向のバンド分散
(a) 2H-TaS_2 (b) $(\text{SnS})_{1.15}\text{TaS}_2$

D-3

固体材料におけるイオン拡散のキック挙動：ある可能な共通機構

大分高専^A, 熊大院先端科学^B 池田昌弘^A, 安仁屋勝^B

固体中の拡散は、機能性材料における様々な特性や固体内の現象において本質的な役割を果たす。特に近年、全固体電池に対する関心が高まっており^{1,2)}、固体中のイオン拡散機構を解明することは、基礎科学および応用の観点から極めて重要である。

イオン結晶中のイオン拡散挙動において、内因性および外因性領域で2つの明瞭なアレニウスの挙動が観測されることは古くから知られている^{3,4)}。その際、電荷中性条件や質量作用の法則、結晶中の欠陥種等を考慮して、エントロピーやエンタルピーの変化などが調べられる。しかしながら、上の2つのアレニウスの挙動が温度変化に対して連続的に繋がっている点については、これまであまり議論されていない。更に、この挙動が2元系のイオン結晶に限らず、多成分イオン結合性固体⁵⁾や金属ガラス形成物質⁶⁾においても確認されることから、物質系に依存しない共通の拡散機構が存在するのではないかと推論される。

本研究では、上記の視座に立ち、固体材料におけるイオン拡散のキック挙動の微視的機構について考察する。講演では、従来の空孔形成理論を拡張して提案されたイオン拡散モデル^{7,8)}に基づき、固体状の物質系に依存しないイオン拡散機構を議論する。

- 1) R. Kanno: Electrochem. **91** (2023) 102001.
- 2) K. Sau, et al.: Commun. Mater. **5** (2024) 122.
- 3) C. Catlow, et al.: J. Phys. Colloq. **37** (1976) 253–259.
- 4) R.J. Lieb, L.M. Slifkin: J. Phys. Chem. Solids **57** (1996) 101–107.
- 5) A. Düvel, et al.: Phys. Chem. Chem. Phys. **12** (2010) 11251–11262.
- 6) F. Faupel, et al.: Rev. Mod. Phys. **75** (2003) 237–280.
- 7) M. Aniya, M. Ikeda: Solid State Phenom. **353** (2023) 143–148.
- 8) M. Ikeda, M. Aniya: Philos. Mag. **103** (2023) 101–118.

D-4

炭化タングステンの太陽光選択吸収性能評価

九州工業大学^A, 高純度化学研究所^B, 九州大学^C 長野利春^A, 徳富尚志^B, 矢吹智英^A, 中村和磨^A, 宮崎康次^C

太陽光を効率的に熱エネルギーに変換できる太陽光選択吸収材は、太陽熱発電、海水淡水化システムなどの太陽熱利用技術に必要不可欠である。太陽光を選択的に吸収するためには、波長 $2\ \mu\text{m}$ ($0.6\ \text{eV}$) をカットオフとして太陽光スペクトルが分布する $2\ \mu\text{m}$ 以下の光を吸収し、材料自身の熱放射損失を防ぐために $2\ \mu\text{m}$ 以上の光を放射しない波長選択的な吸収特性を持つ必要がある。この講演では、炭化タングステン (WC) の太陽光吸収性能について実験および理論からの研究成果を発表する。RESPACK を使用した第一原理光学応答計算により、WC は $2.0\ \mu\text{m}$ ($0.6\ \text{eV}$) 付近で低エネルギープラズマ励起を示し、太陽光選択吸収材として優れた性能をもつことが示された [1]。実験検証のため、多結晶 WC を合成し、これの反射スペクトルを測定した。放電プラズマ焼結法を用いて高融点の WC ペレットを測定サンプルとして作製し、表面研磨して表面粗さが Ra $0.001\ \mu\text{m}$ の鏡面試料を準備した。太陽光吸収には幅広い波長が関係するため、可視光から中赤外光の広い波長範囲 ($0.5\sim 10\ \mu\text{m}$) にわたって測定できるシステムを開発した。測定結果は第一原理計算とよく一致しており、WC は $2.0\ \mu\text{m}$ ($0.6\ \text{eV}$) の低エネルギープラズマ励起を持ち、優れた選択吸収材であることが実証された [2]。講演では、試料合成および測定の詳細に加えて、試料品質が反射率および太陽光吸収性能に与える影響、WC の太陽光吸収性能のさらなる向上に向けた反射防止膜に基づく物質設計についても説明する。

[1] S. Hayakawa, T. Chono, K. Watanabe, S. Kawano, K. Nakamura and K. Miyazaki, Scientific reports, 13.1, 9407, (2023).

[2] T. Chono, H. Tokutomi, K. Nakamura and K. Miyazaki, submitted.

D-5

超伝導 NbN/強磁性 $\text{Co}_2\text{Fe}_{0.4}\text{Mn}_{0.6}\text{Si}$ 多層薄膜のパウリ常磁性対破壊効果

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 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^{C,E}, 廣井政彦^A

ハーフメタルホイスラー合金は高いスピン分極率とキュリー温度を持ち、トンネル型磁気抵抗素子等への応用研究が盛んである。一方、これら強磁性 (F)/超伝導 (S) 多層膜を超伝導揺らぎの観点から調べた基礎的研究はほとんどない。前回、超伝導転移温度 T_c の非単調な F 膜厚依存性を発表した。今回、強磁性体にハーフメタルホイスラー合金 $\text{Co}_2\text{Fe}_{0.4}\text{Mn}_{0.6}\text{Si}$ (CFMS) を選び、2 次元 (2D) 超伝導 NbN ($d_S = 15\ \text{nm}$)/CFMS ($d_F = 0, 1, 5, 10\ \text{nm}$) 多層膜の輸送特性を詳しく調べた。

一般に超伝導は磁場や不純物によって破壊される。磁場による対破壊効果には「軌道効果」と「超伝導電子対とゼーマン分裂の競合から生じるパウリ常磁性対破壊効果」がある。後者は平行磁場下の 2D 超伝導体で支配的となる。対破壊の程度は $T > T_c$ での熱揺らぎ余剰伝導度の解析から求まる対破壊パラメーター $\delta(H)$ で与えられる。図 1 は NbN 単層膜

($d_S = 15\ \text{nm}$ および $d_F = 0\ \text{nm}$) の結果で、(a) $T_c(H)/T_{c0}$ 、(b) $\delta(H_{\parallel})$ を示す。(a) は理論¹⁾に従う。 $\delta(H_{\parallel})$ の振る舞いも $\delta \propto (T_{c0} - T_c)/T_{c0}$ を考えれば、矛盾はない。これに対し、S/F 多層膜の $\delta(H_{\parallel})$ は異常な H 依存性を示した。

発表当日は、 $d_F > 0$ の $\delta(H_{\parallel})$ も合わせて紹介する。

1) M. Tinkham, Introduction to Superconductivity (2nd edition), McGraw Hill (New York) 1996, Chap. 10.

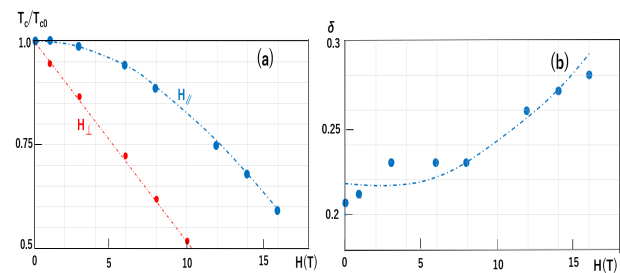


図1 NbN 単層膜の(a) $T_c(H)/T_{c0}$, (b) $\delta(H)$

D-6

PdH_x 超伝導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, 志賀雅亘^A, 飯森陸^B, 木村崇^B, 河江達也^A

PdH_x は水素濃度 x ($x = H / Pd$) がおよそ 0.75 以上で常圧でも $T \leq 10$ 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、その場で連続的に低温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い、超伝導転移後にゼロ抵抗を示さないことやブロードな転移幅を示す結果を報告してきた [3,4]。今回は、この超伝導転移後の電気抵抗の振る舞いを明らかにするため、スパッタリング法で成膜した膜厚 100 nm の Pd 薄膜を用いて電気抵抗測定をおこなった。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).

[4] R. Kato et al., J. Phys. Soc. Jpn, 93, 024073 (2024).

D-7

Vibrating Wire 法を用いた超伝導 NbH_x 中における水素トンネル現象の観測

九大院工^A, 九大院総理工^B, 岡山理科大学^C 小池健生^A, 芳賀雄仁^A, 太子周^A, 志賀雅亘^A, 橋爪健一^B, 稲垣裕次^C, 河江達也^A

水素は質量が最も小さい元素で、強い量子性を示す。例えば、水素が金属内へ侵入したとき、トンネル拡散や離散的なエネルギー準位形成などの量子的振る舞いが常伝導状態で確認されている。一方、母金属が超伝導転移した際、フェルミ面に超伝導ギャップが出現することに起因して、水素の量子的振る舞いも常伝導状態から大きく変化すると予想される。理論研究では、常伝導状態と比較してトンネル拡散が指数関数的に増大することが指摘されている [1,2]。そこで本研究では、超伝導転移によってトンネル拡散が増加するのかを明らかにするため、微量の水素を吸蔵したニオブ (Nb) と Pure Nb の機械的特性変化を Vibrating Wire 法 (VW 法) を用いて比較検討した。

定磁場中の金属ワイヤに交流電流を流すと、ワイヤはローレンツ力を受け振動する。電流の周波数を変化させると、周波数がワイヤの固有振動数と一致した際には共振により起電力が最大となり、ワイヤ両端の電圧を測定するとピークが現れる。この共振よりワイヤ特性を調べる方法が VW 法である [3]。このときワイヤの振動は運動方程式で表され、共振の線幅や Q 値はワイヤの内部摩擦を反映する [4]。そのためトンネル拡散の増大した場合には、内部摩擦が大きくなり線幅は広がり Q 値は下がると予想される。

ここで pure Nb ワイヤの低温側の共振周波数と $1/Q$ の温度変化を調べると、 $T = 7$ K 近傍より共振周波数、 $1/Q$ ともに超伝導転移温度にて大きく変化することが分かる。これは超伝導体中に磁束が侵入したことに起因する。また $1/Q$ の鋭いピークについては磁束の液体 - グラス転移に起因すると考えられる [5]。講演では Pure Nb に加えて NbH_{0.02} における結果も発表し、水素トンネルの影響について議論する。

[1] M. Matsumoto and Y. Ohashi, J. Phys. Soc. Jpn. 62, 2088 (1993). [2] Y. Ohashi and M. Matsumoto, J. Phys. Soc. Jpn. 62, 3532 (1993). [3] Y. Inagaki et al., Appl. Phys. Exp. 8, 095502 (2015). [4] R. Konig et al., Phys. Rev. B51, 11424 (1995). [5] Gammel et al., PRL, 61, 1666 (1988).

D-8

水晶振動子を用いた金属中水素のトンネル拡散現象の検出

九大工^A, 九大院工^B, 九大院理^C, 東大物性研^D 落合陽介^A, 芳賀雄仁^B, 飯森陸^C, 太子周^B, 志賀雅
亘^B, 木村崇^C, 三輪真嗣^D, 河江達也^B

質量の最も小さい元素である水素は強い量子性を持ち、金属内でトンネル効果による拡散現象を示すことが知られている。水素のトンネル拡散を検出する方法の1つとして機械的共振法が挙げられる。これはトンネルにともなう内部摩擦によるエネルギー散逸過程を、共振曲線の半値幅変化より追跡する。所属研究室ではこれまで Vibrating Wire 法を用いて水素検出を行ってきたが [1]、この方法では外部磁場が必要となる。そこで本研究では水晶振動子上に金属を蒸着した試料を作成し、その共振特性の変化を通して水素トンネルの検出を試みる。水晶振動子は水晶の圧電性を利用した素子であるため、ゼロ磁場で共振を追跡できるだけでなく高い Q 値を持つため、Vibrating Wire 法よりも高精度に水素トンネルを検出できると期待した。図 1 に Pd 薄膜を蒸着した水晶振動子の共振の周波数特性を示すが、非常に鋭いピークが見られる。測定は発振器より交流電圧を水晶振動子に印加し、出力をロックインアンプで読み出している。水晶振動子に Pd 薄膜 (100nm) を蒸着

すると共振周波数は低周波側にシフトするとともに半値幅が広がる。講演ではこれら水晶振動子を低温に冷却した際の結果を示し、水素トンネルの検出に利用できるか検討を行う。
[1] Y. Inagaki et al., Appl. Phys. Exp. 8, 095502 (2015).

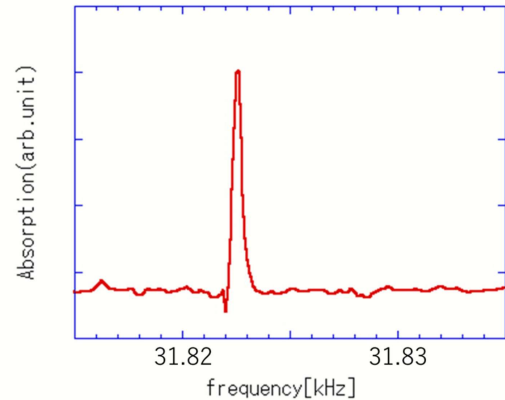


図 1：室温における Pd 薄膜を蒸着した水晶振動子の共振特性。測定は発振器より交流電圧を水晶振動子に印加し、出力をロックインアンプで読み出している。

D-9

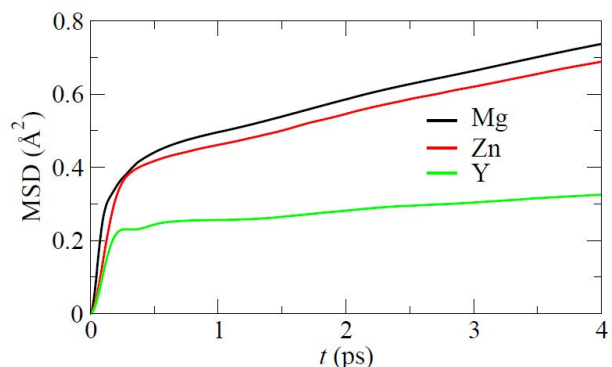
機械学習原子間ポテンシャルを用いた Mg-Zn-Y 合金の過冷却液体における原子拡散機構

熊大院先端^A, 熊大 MRC^B, 熊大院自然^C 島村孝平^A, 圓谷貴夫^B, 高良明英^C, 下條冬樹^A

Mg-Zn-RE 系合金 (RE: 希土類元素) は優れた機械的強度を持ち [1]、最近の単ロール式液体急冷法による Mg 薄帯の冷却速度の調整が、材料の強度や破壊靱性の改善に寄与することが示された。しかし、凝固過程における原子ダイナミクスや冷却速度の測定は実験的に困難であり、金属材料における粘性の温度依存性に関する情報は乏しい。そこで我々は、機械学習原子間ポテンシャル (MLIP) による分子動力学 (MD) 計算 [2] を用いて、Mg-Zn-RE 合金の粘性や原子ダイナミクスを研究している。これまでに、Mg₉₃Zn₂Y₅ 合金の過冷却液体状態における粘性の温度依存性を Green-Kubo 公式に基づいて計算し、fragile 液体の特徴が見られることを報告した [3]。凝固点が 900 K ほどの単体の Mg に比べて、600 K 以下でも液体状態を保っている。凝固し難くなる理由を調査するため、本研究では、MLIP による MD 計算から得られた原子座標データを解析している。図に示す平均二乗変位 (MSD) の傾きから、523 K の低温でも液体状態が維持されている。興味深いことに、Mg とは 2 倍以上の質量を持つ Zn が同程

度の拡散を見せている。このため、Zn の高い易動度が凝固を阻害している要因の一つであることが示唆された。講演では、Mg, Zn, Y の原子ダイナミクスについて詳細に報告する予定である。

- [1] Y. Kawamura et al., Mater. Trans. **42**, 1172 (2001).
- [2] A. Musaelian, et al., Nat. Commun., **14**, 579 (2023).
- [3] 圓谷ら, 日本物理学会 2024 年春季大会, 20pL2-6.



D-10

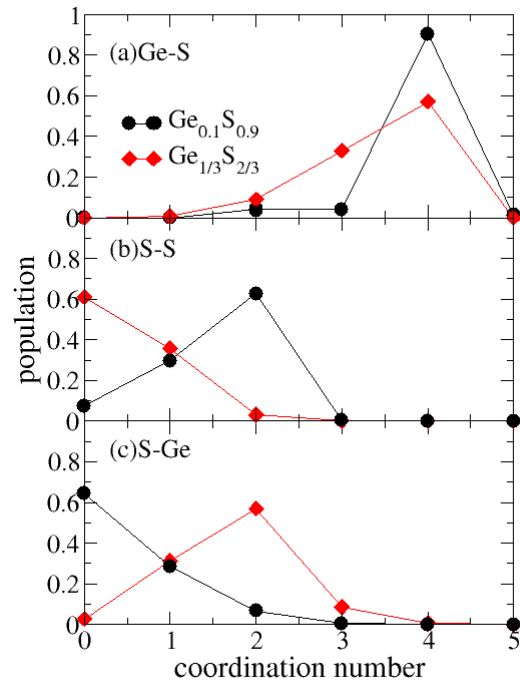
第一原理分子動力学に基づいた Ge-S ガラス系の静的構造

熊大院自然^A, CROSS^B, 熊大院先端^C 伊藤海^A, 坂口佳史^B, 高良明英^A, 島村孝平^C, 下條冬樹^C

カルコゲナイドガラス半導体の一種である Ge-S 系ガラスは、組成比と共に、物理的性質やネットワーク構造が変化するため、これまで、実験的にも理論的にも多くの研究が行われてきた。

我々は、 $\text{Ge}_x\text{S}_{1-x}$ ($0.1 \leq x \leq 1/3$) ガラスの構造を調べるために、第一原理分子動力学シミュレーションを実行した。図は $x = 0.1$ と $x = 1/3$ における配位数分布である。図 (a) から分かるように、 GeS_4 四面体を形成する Ge は $x = 1/3$ では 6 割であるのに対して、 $x = 0.1$ においては、9 割以上に上る。加えて、図 (b) から S と 2 配位を取る S は、 $x = 1/3$ ではほとんど見られないのに対して、 $x = 0.1$ では、6 割以上になる。一方、図 (c) から、 $x = 0.1$ では、S 周りの Ge の配位数は、ほとんど、0 または 1 である。これらのことから、 $x = 0.1$ では GeS_4 四面体と S 鎖による構造が大半を占めており、 GeS_4 四面体同士は直接つながっておらず、S 鎖によって接続されていることが示唆される。

講演では、 $x = 0.2$ の結果も含めて議論する。



D-11

第一原理分子動力学法に基づく液体 Se-Te 混合系の動的性質の圧力依存性

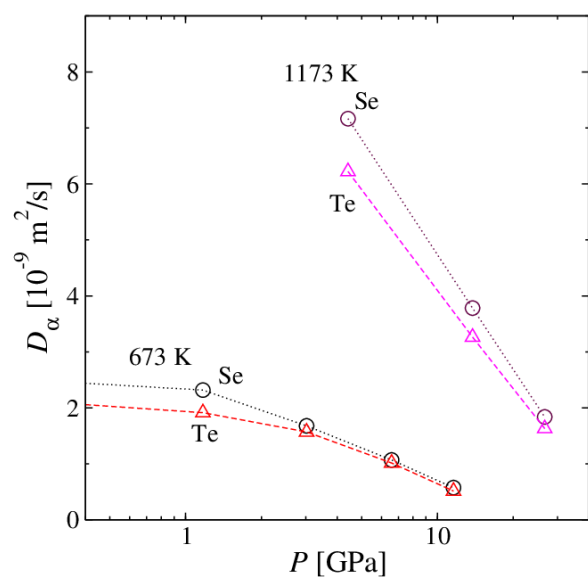
熊大技術部^A, 熊大院先端^B 高良明英^A, 島村孝平^B, 下條冬樹^B

半導体性物質として知られている Se-Te 混合系は、組成、温度や圧力など様々な条件の下で半導体-金属転移が生じる。例えば、Se 30% の濃度で 773 K 付近で半導体-金属転移を示し、その温度近傍では負の熱膨張係数を持つ。このような物理的性質の機構を理解するために、これまでに構造や電子状態などを調べるために実験 [1]、理論 [2] の両面からの研究が行われてきた。

本研究では、液体 $\text{Se}_{0.3}\text{Te}_{0.7}$ の動的性質に注目し、第一原理分子動力学法に基づく計算機シミュレーションを実行した。例として、得られた自己拡散係数 D_α の圧力依存性を図に示す。低い圧力では軽い Se 原子の拡散係数が多いが、加圧とともに Te との差が減少する。講演では、拡散係数の変化について、構造や結合性などの視点から詳しく議論する。

[1] A. Chiba, *et al.*, J. Non-Cryst. Solids **312-314**, 384 (2002).

[2] G. Zhao, *et al.*, Physica B **405**, 3342 (2010).



D-12

第一原理分子動力学計算を用いた液体リンゴ酸の構造の研究

熊大院自然^A, 新薬大薬^B, 中京大教育院^C, 島大材エネ^D, 熊大院先端^E 杉本亘^A, 伊藤海^A, 島倉宏典^B, 田原周太^C, 尾原幸治^D, 高良明英^A, 島村孝平^E, 下條冬樹^E

リンゴ酸には鏡像異性体 (L 体、D 体) が存在するが、L 体や D 体のみからなる系の融点に比べて、両者を等量混合した系 (ラセミ混合体) の融点が高いという特異的な性質がある [1]。このように融点異なる機構を調べるために、液体状態の L-リンゴ酸 (LMA) とラセミ混合体 (RMA) に対して X 線回折実験が行われた [2]。しかし、実験で得られた構造因子では大きな違いが観測できなかったことが報告された。

我々は、液体状態の LMA と RMA に対して、FPMD シミュレーションを実行し、静的構造を詳しく調べた。得られた構造因子を図 1(a) に示す。LMA の結果と RMA の結果は概ね一致しており、これは実験 [2] と同様の結果である。図 1(b) と図 1(c) は、部分構造因子を比較したものであり、比較の波数の小さな $k \leq 2.0 \text{ \AA}^{-1}$ でわずかな違いが見られる。

講演では、LMA と RMA の静的構造や配向相関の違いについて詳しく議論する。

[1] M. Andersson et al., Acta Chem. Scand. 20 (1966) 1060.

[2] 島倉ら, Spring-8/SACLA 利用研究成果集 11 (2023) 114

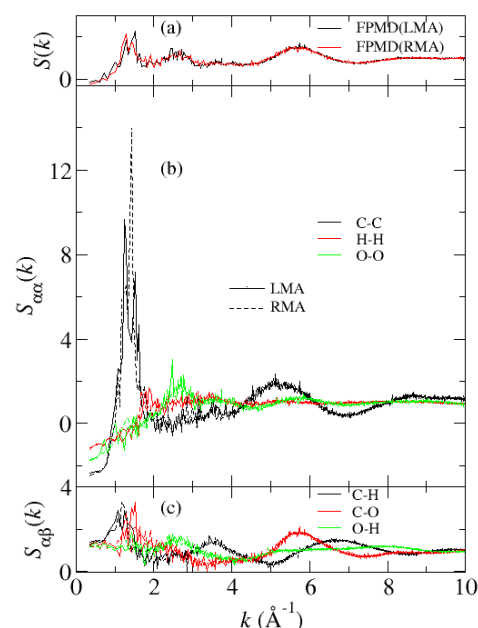


図 1 (a) LMA(黒線)とRMA(赤線)の構造因子 $S(k)$ の比較。
(b)(c) 部分構造因子 $S_{\alpha\beta}(k)$ についてLMA(実線)とRMA(破線)の比較。

D-13

第一原理計算による擬一次元分子性導体における強相関絶縁体状態の安定性解析

熊大^A, 物材機構 MANA^B, 理研^C, 理研 CEMS^D 圓谷貴夫^A, 宮崎剛^B, 妹尾仁嗣^{C,D}

分子性導体系が示す多様な電子相の発現には電子間クーロン相互作用が重要な役割を果たしている。その中で、近年の計算機能力向上と計算手法開発により、多くの原子数を含む分子性導体系に対しても密度汎関数理論 (Density-functional theory: DFT) に基づく第一原理計算が適用されるようになってきている。しかし、一般的に用いられている局所密度近似 (LDA) や一般化密度勾配近似 (GGA) に基づく計算を、電子相関由来の電荷秩序相や反強磁性相に対して実行すると、実験結果に反して金属的なバンド構造が得られてしまうことや、秩序自体が安定化しないことが頻繁にある。これは電子を過剰に非局在化させてしまう LDA や GGA における自己相互作用の問題として知られており、分子性導体に対する第一原理計算の問題点である。我々は近年、この枠組みを超えた計算手法を適用することにより、分子あたりの磁気モーメントや電荷不均一の程度を定量的に評価することを目的として研究を進めている [1,2]。本研究では、Mott 絶縁体 $\beta' - (\text{BEDT} - \text{TTF})_2\text{ICl}_2$ [3] および電荷秩序を起こす $(\text{TMTTF})_2\text{X}$ 系 [4] の低温構造に対し、スピン分極を考慮した計算を行うことによって反強磁性秩序の安定性を調べた。GGA 汎関数にハートレーフォック法の厳密な交換エネルギー項を取り入れるハイブリッド汎関数 $\text{Heyd} - \text{Scuseria} - \text{Ernzerhof}(\text{HSE06})$ [5] を用いて第一原理計算を実行した結果、これら 2 つの分子性導体系で反強磁性状態が安定な絶縁体的バンド構造が得られた。さらに $(\text{TMTTF})_2\text{X}$, $\text{X} = \text{NbF}_6, \text{AsF}_6, \text{PF}_6$ に対して原子座標の構造最適化を実施した結果、 $\text{X} = \text{NbF}_6, \text{AsF}_6$ では、低温実験構造に現れている TMTTF 分子の間に生じる電荷不均一も有意に残り、また物質間の傾向も再現できることがわかった [6]。

[1] T. Tsumuraya, H. Seo, and T. Miyazaki, Phys. Rev. B 101, 045114 (2020). [2] T. Tsumuraya, H. Seo, and T. Miyazaki, Crystals 11(9), 1109 (2021). [3] H. Taniguchi et al., J. Phys. Soc. Jpn. 72, 468-471 (2003). [4] S. Kito et al., Phys. Rev. B 103, 184112 (2021). [5] J. Heyd, G. E. Scuseria, and M. Ernzerhof, J. Chem. Phys. 124, 219906 (2006). [6] T. Tsumuraya, T. Miyazaki, H. Seo, arXiv:2407.03455

熊大教育^A, 兵庫県立大学理学^B 岸木敬太^A, 長谷川泰正^B

質量ゼロの二次元ディラック電子系として, グラフェン [1] や α -(BEDT-TTF)₂I₃[2] がよく知られている。ディラックコーンの傾きにより三種類に分類される。コーンが傾いても過傾斜ではない場合を第一種, 過傾斜を第二種, 水平な臨界的な傾きを第三種と呼ぶ。

第一種では, 状態密度 (D) が $|\varepsilon|$ に比例するので, 電子比熱 (C) は T^2 に比例する。鴻池らのによる比熱測定 [3] でも, $T^{1.8}$ に比例する値 (T^2 に近い値) が実験的に確認されている。また, 第一種では, 圧力印加などで, ディラック点が重なり消滅するとトポロジカル相転移が出現し, 通常の絶縁体になる (グラフェン [4], α -(BEDT-TTF)₂I₃[5])。我々は, トポロジカル相転移近傍で, C の温度依存にクロスオーバー (クロスオーバー温度 (T_{CO}) 未満で C は T^2 , T_{CO} より高温で $T^{\frac{3}{2}}$ に比例) が存在することを示した [6]。これは, D がフェルミエネルギー近傍で $|\varepsilon|$, フェルミエネルギーから離れると $|\varepsilon|^{\frac{1}{2}}$ に比例することによる。

一方, 第三種では D がフェルミエネルギーで発散し, 特異な現象が期待される。本研究では, 数値計算により, 第三種を経て第一種から第二種に傾斜を連続変化させ, C の温度依存にクロスオーバー (例えば, T_{CO} より低温で $C \propto T^2$, 高温で $C \propto T^{\frac{1}{2}}$) が存在することを明らかにした [7]。これはトポロジカル相転移付近でみられるクロスオーバー [6] とは異なる。

- [1] K. S. Novoselov, et al., Science 306, 666 (2004).
- [2] K. Kajita, et al., J. Phys. Soc. Jpn. 83, 072002 (2014).
- [3] T. Konoike, K. Uchida, and T. Osada, J. Phys. Soc. Jpn. 81, 043601 (2012).
- [4] Y. Hasegawa, R. Konno, H. Nakano, and M. Kohmoto, Phys. Rev. B74, 033413 (2006).
- [5] Y. Suzumura, T. Morinari, and F. Piechon, J. Phys. Soc. Jpn. 82, 023708 (2013).
- [6] K. Kishigi, K. Tsukidashi, and Y. Hasegawa, J. Phys. Soc. Jpn. 92, 104601 (2023).
- [7] K. Kishigi and Y. Hasegawa, submitted.