

2014S2-003: 結晶場解析による新しい量子格子液体系物質の研究 Study of the new quantum lattice liquid system by crystal field analysis

名古屋大学 工学研究科 応用物理 澤博

本研究課題の目的

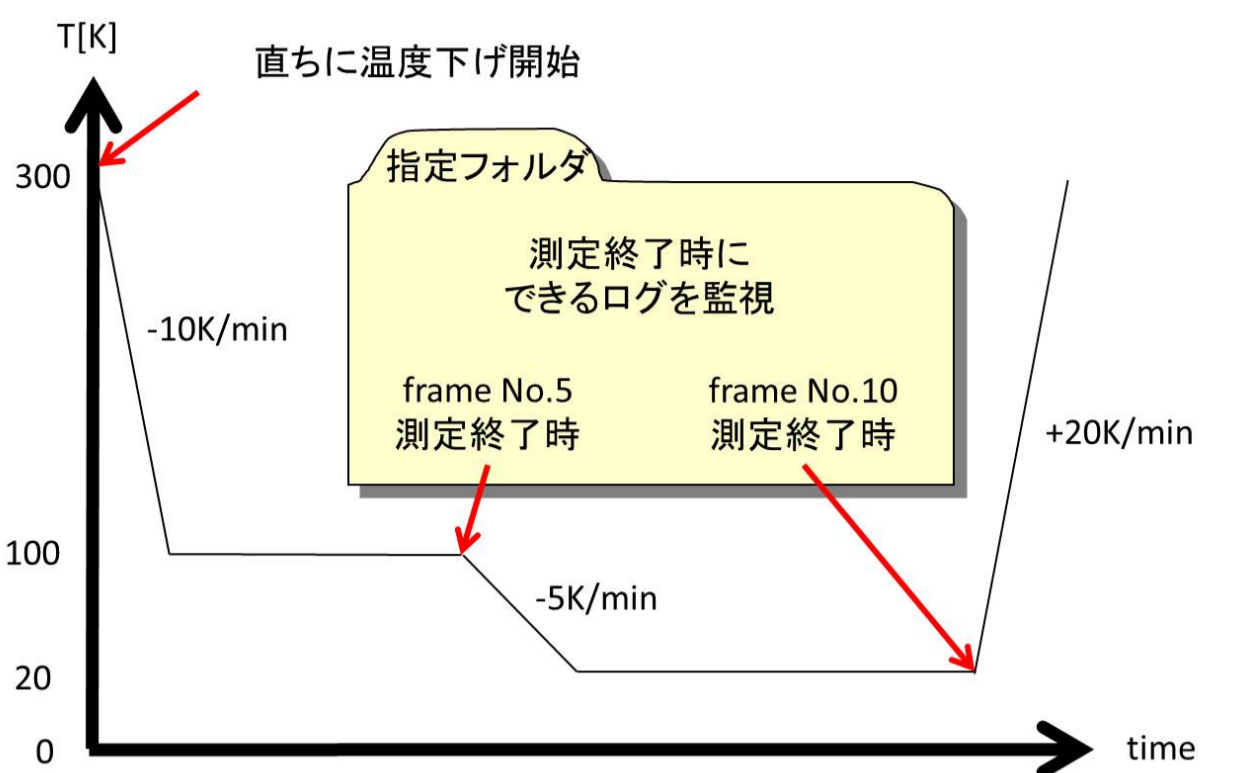
物性の起源となる電子系および格子系の情報に基づいて構造物性の観点から研究することを目的としている。電子軌道の形状を正確に把握することを目的とした電子密度解析には、Spring-8級の高輝度・高エネルギー放射光の利用が必要であるが、従来の放射光施設においても高い部分座標精度を持った原子座標の解析結果を得ることが出来れば、結晶場を解析して多くの物性研究に必要な情報を得ることができる。また、圧力・電場・磁場など外場を印加することでどのような構造変化が起こるかについて、解析した結晶場を元に、特定の逆格子空間の情報から推測することも可能である。長年の放射光X線実験研究から得られた蓄積を踏まえて、PFの放射光を用いた結晶構造解析、共鳴X線散乱を基軸とした更なる構造物性研究を展開することを目指して研究を進めている。

BL8Aの温調制御プログラム開発

共同研究者: 名古屋大学: 菅原健人 (M2)

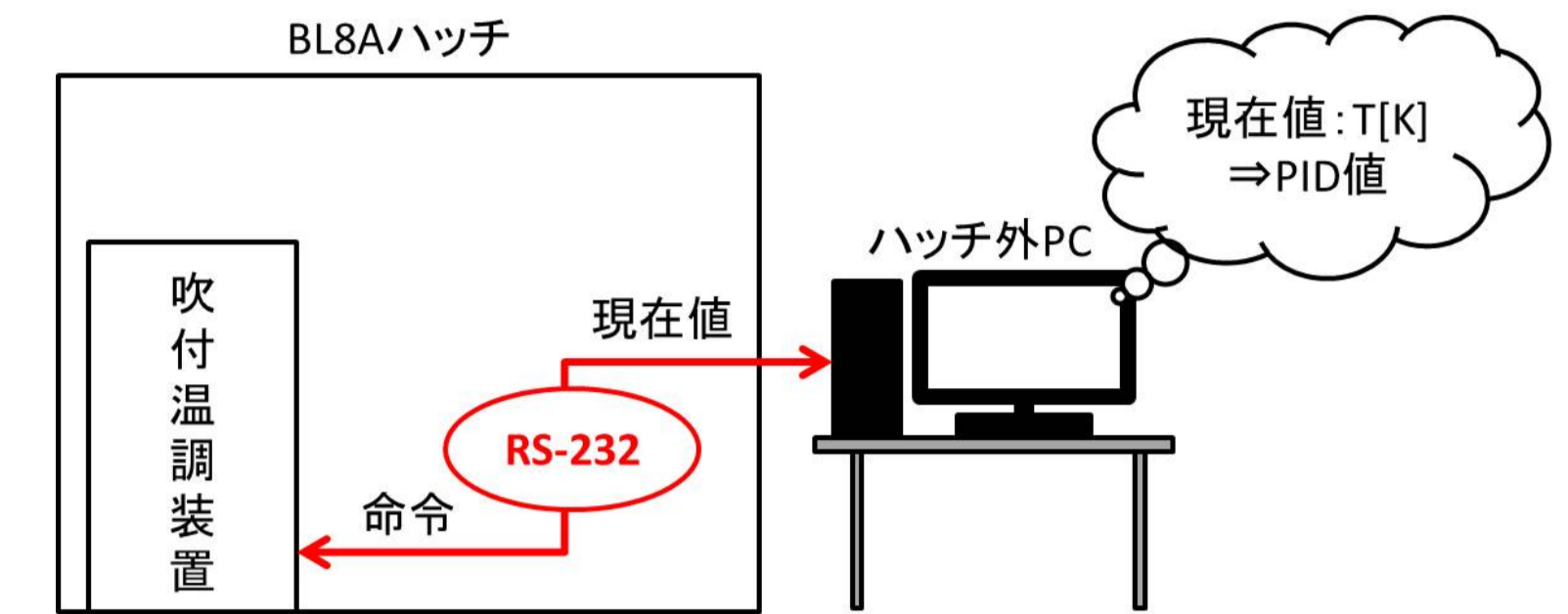
可能となった内容

- 測定終了時に出来るログを監視し、
- 温度変化のタイミング
- 目的温度
- 温度変化率
- のシーケンスを組むことができる。



その他

- ハッチ外部からハッチ内部の吹付温調装置をコントロール
- 現在値を取得し、制御に最適なPIDを自動選択
- 目的温度やPIDといった命令を送信
- 温度ログの作成

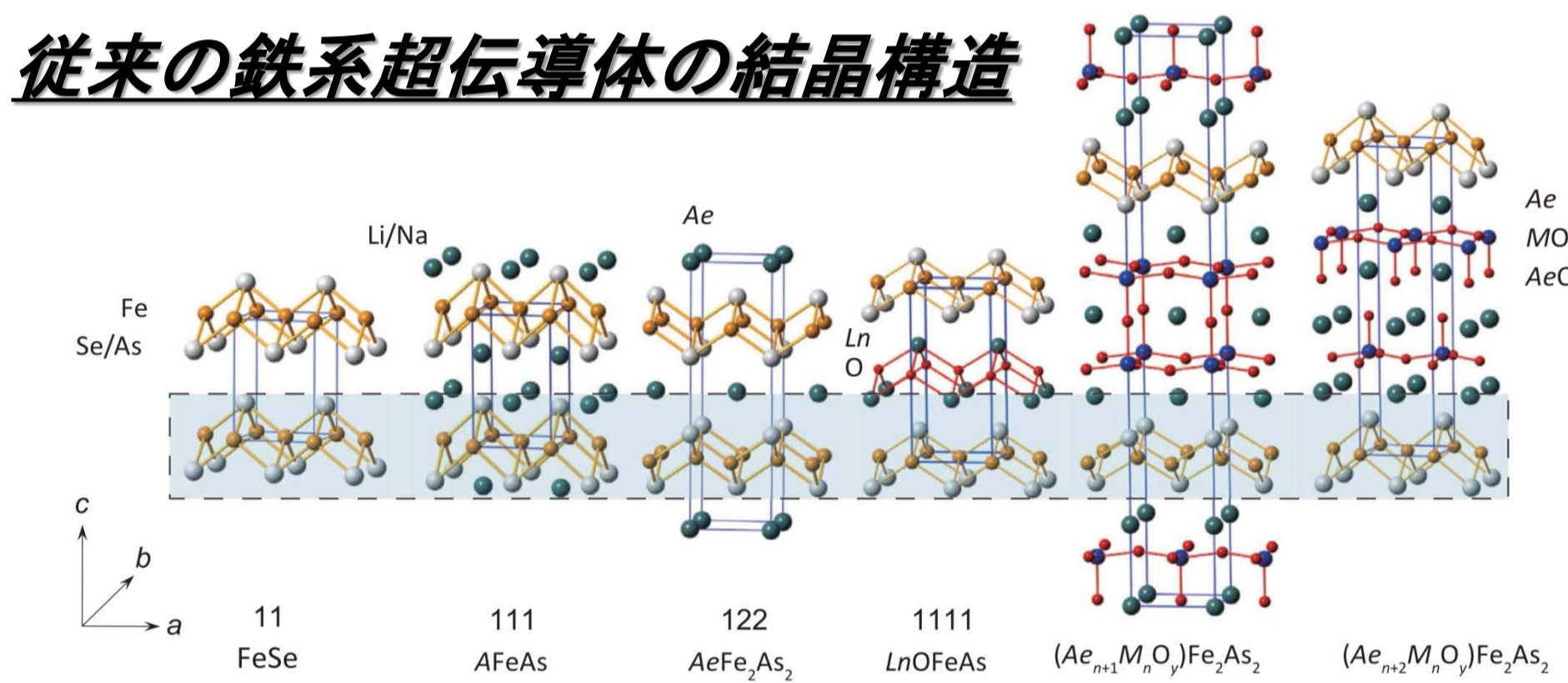


共同研究者: 名古屋大学: 片山尚幸 助教
岡山大学: 大成誠一郎 准教授
東大物性研: 松林和幸 助教 上床美也 教授

三次元ネットワークを持つ鉄ヒ化物の発見

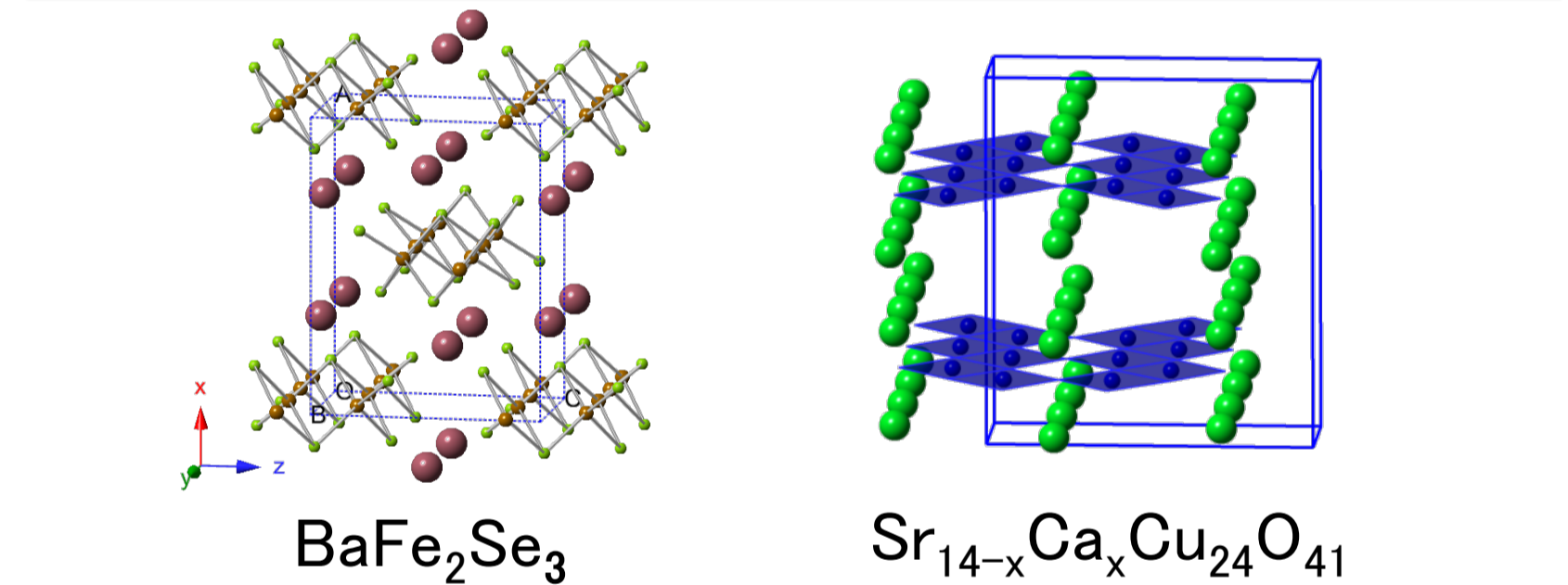
従来の二次元層状構造を持たず、FeAs層の三次元ネットワークを持つ新物質 $\text{Ca}_{3n}\text{Pt}_{n(n+1)/2}(\text{Fe,Pt})_{3n+5}\text{As}_{4n+2}$ ($n = 1$ and 2) を開発し、BL8Aで構造解析を行った。

従来の鉄系超伝導体の結晶構造



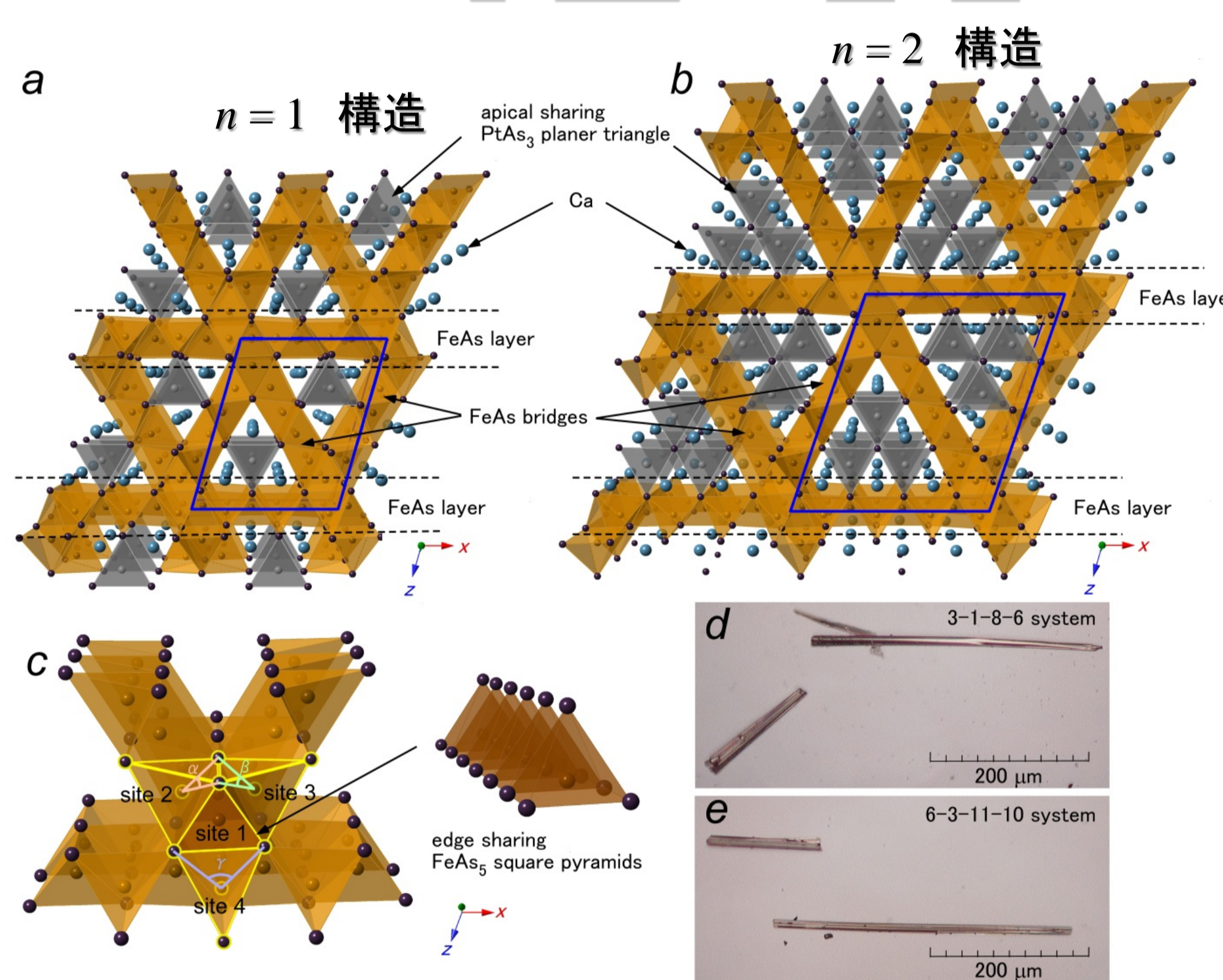
“鉄ヒ素層” + “スペーサー層”の二次元積層構造

銅酸化物&鉄系超伝導体: ラダー構造の実現

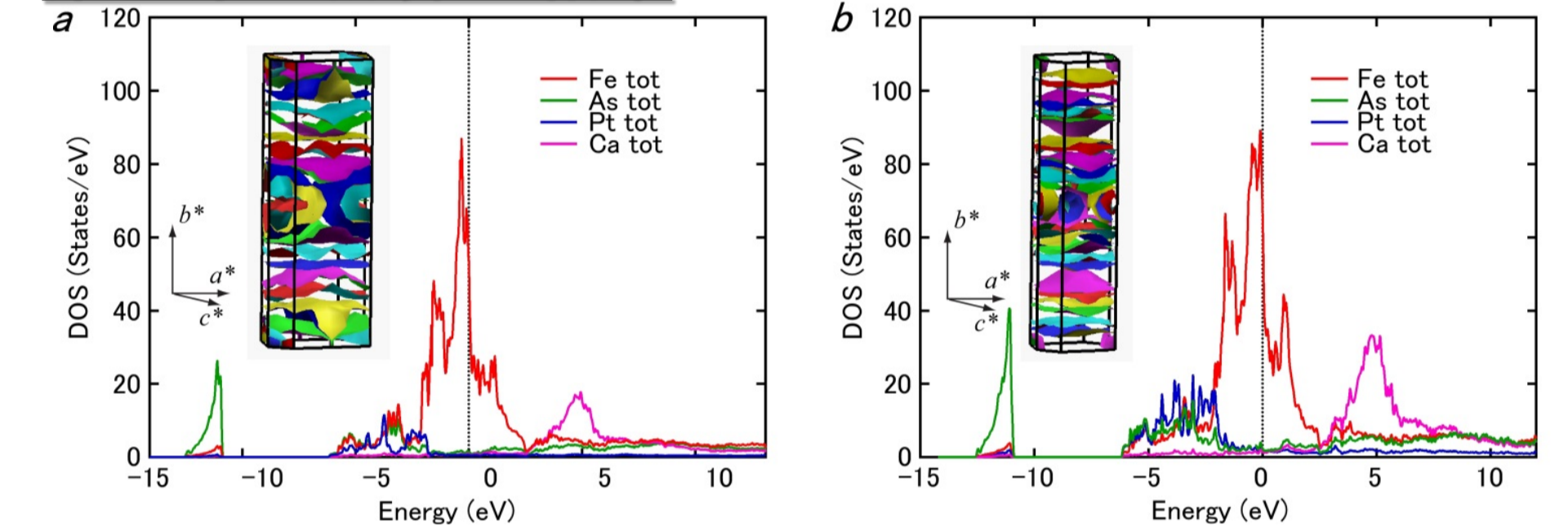


一次元構造はあるが、高温超伝導を三次元構造にした例はない

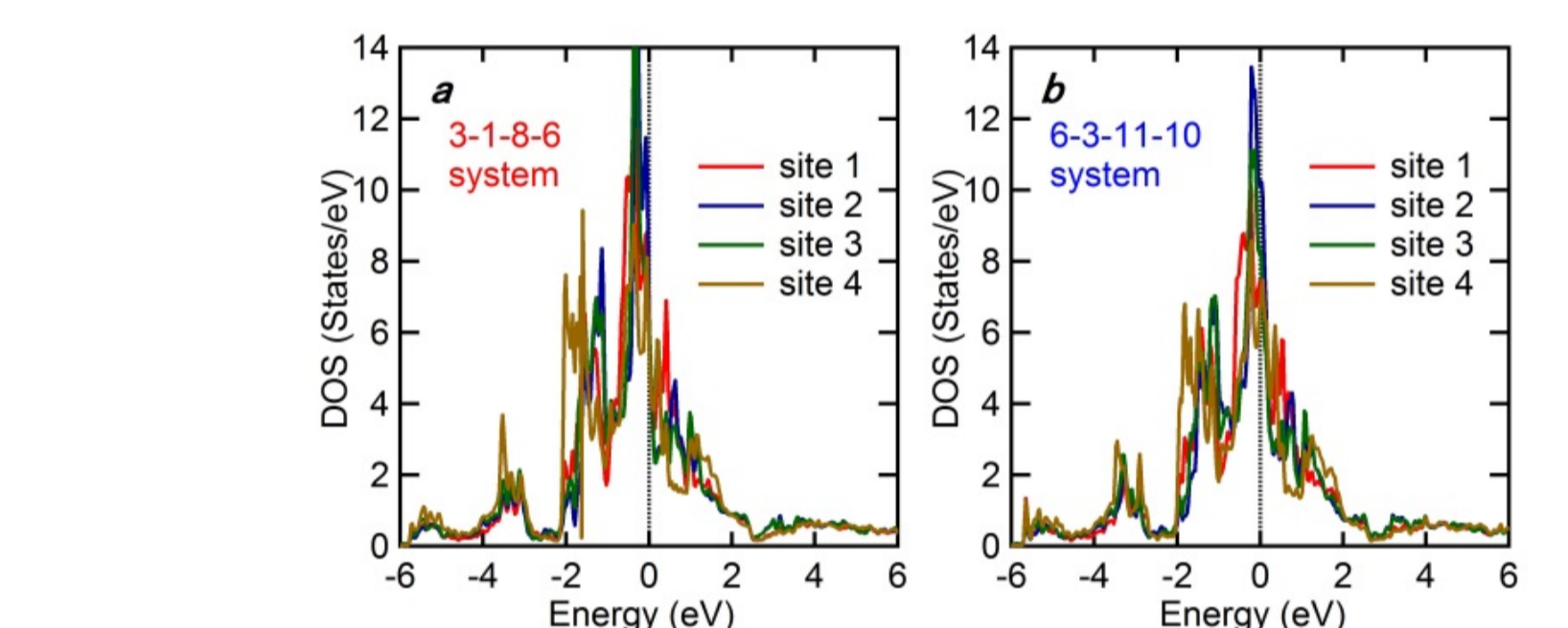
初の三次元鉄ヒ化物 $\text{Ca}_{3n}\text{Pt}_{n(n+1)/2}(\text{Fe,Pt})_{3n+5}\text{As}_{4n+2}$ の構造



第一原理計算の結果



従来の鉄系超伝導と同じくフェルミ面は強いFe-3d性を持つ



ジョイント部分を含むすべてのFeサイトがフェルミ面に寄与 → 三次元電子構造を実現

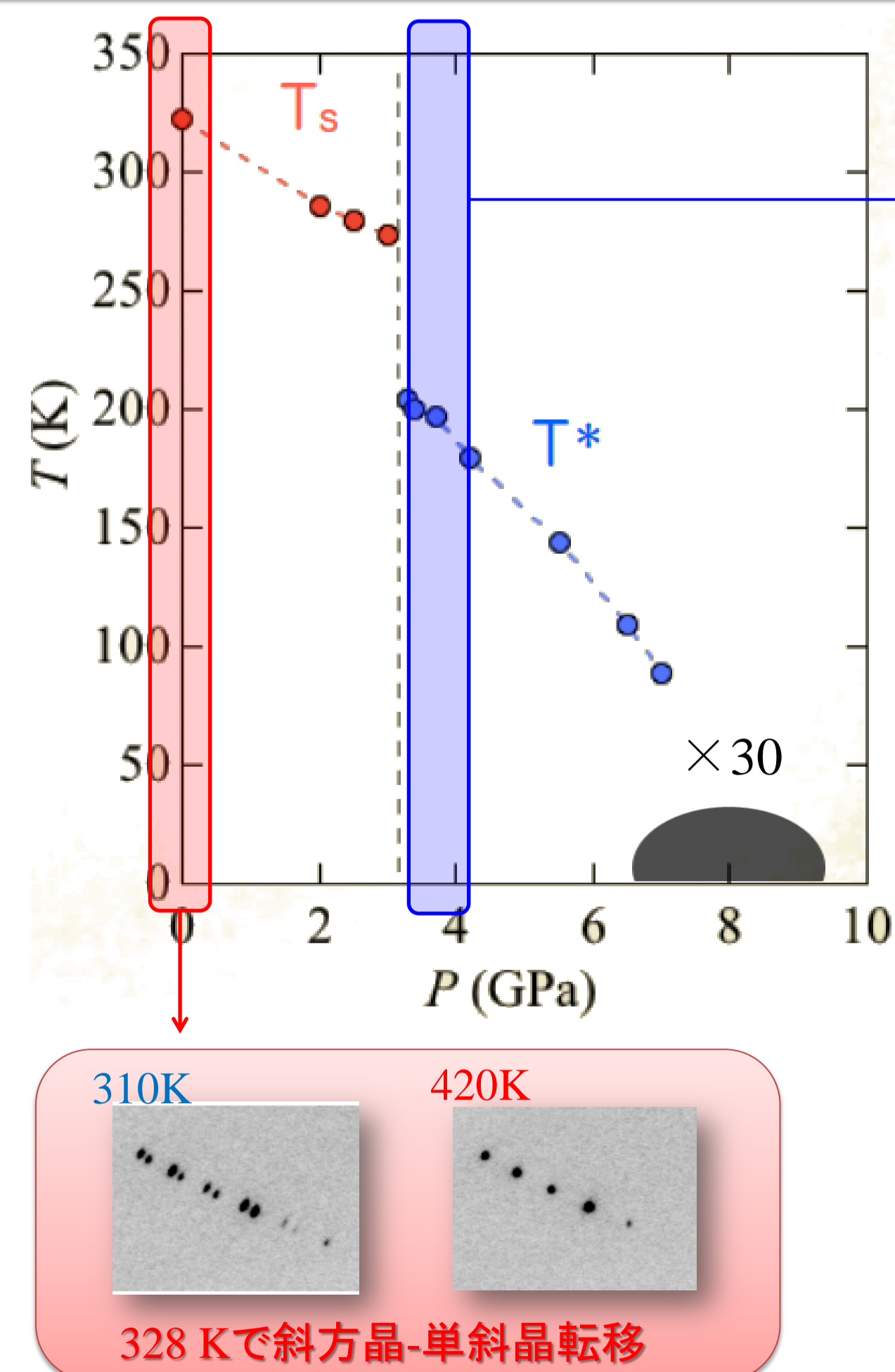
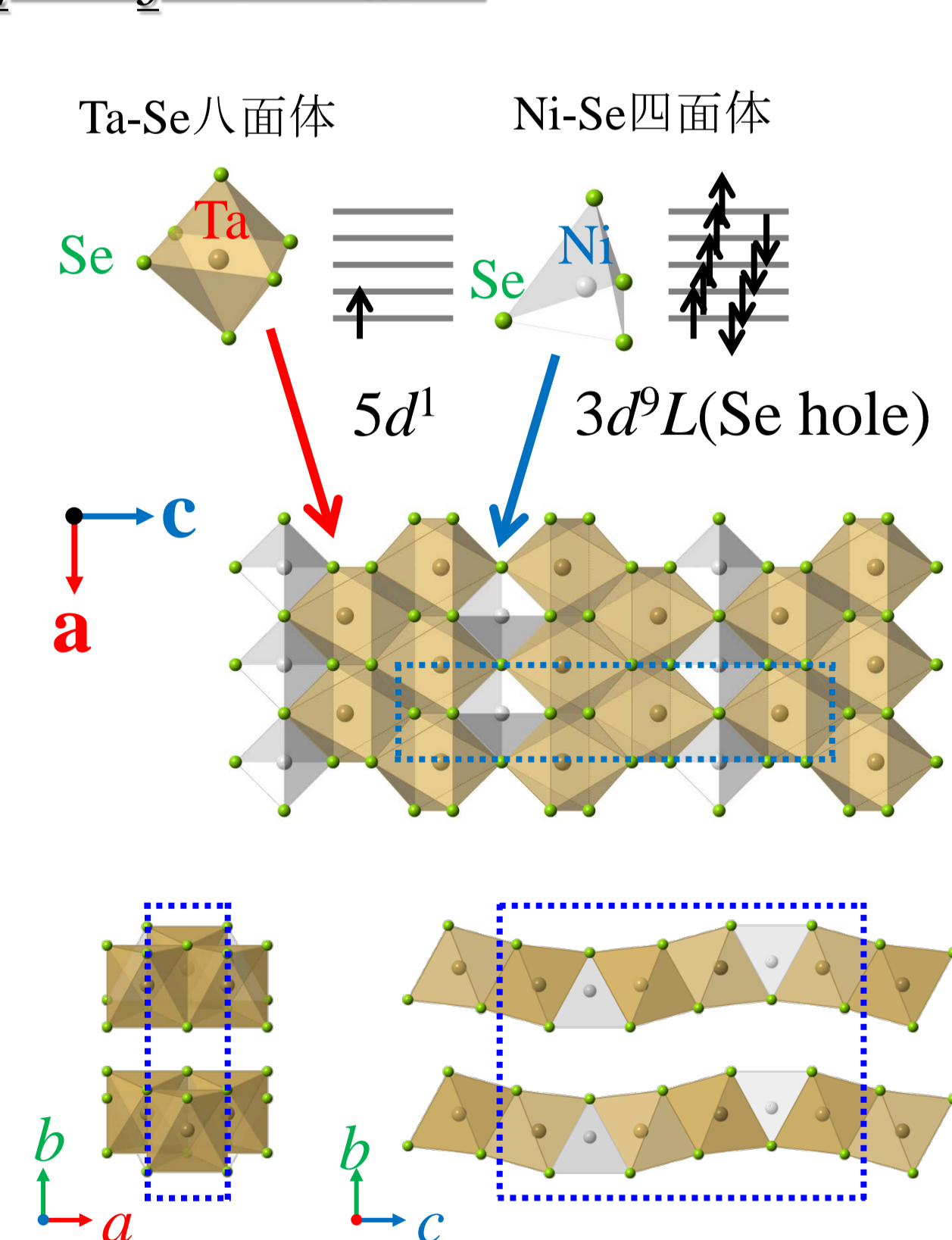
共同研究者: 名古屋大学: 片山尚幸 助教 中埜彰俊 (M1) 鬼頭俊介 (B4)
KEK 物構研: 佐賀山基 准教授 熊井玲児 教授
東大物性研: 松林和幸 助教 上床美也 教授

Excitonic絶縁体候補物質 Ta_2NiSe_5 の高圧下单結晶 X線回折

Excitonic 絶縁体候補物質 Ta_2NiSe_5 に静水圧を印加すると、約3GPaで構造相転移を示し、約8GPaで超伝導転移を示す。高圧低温相の構造をDACを用いて調べた。

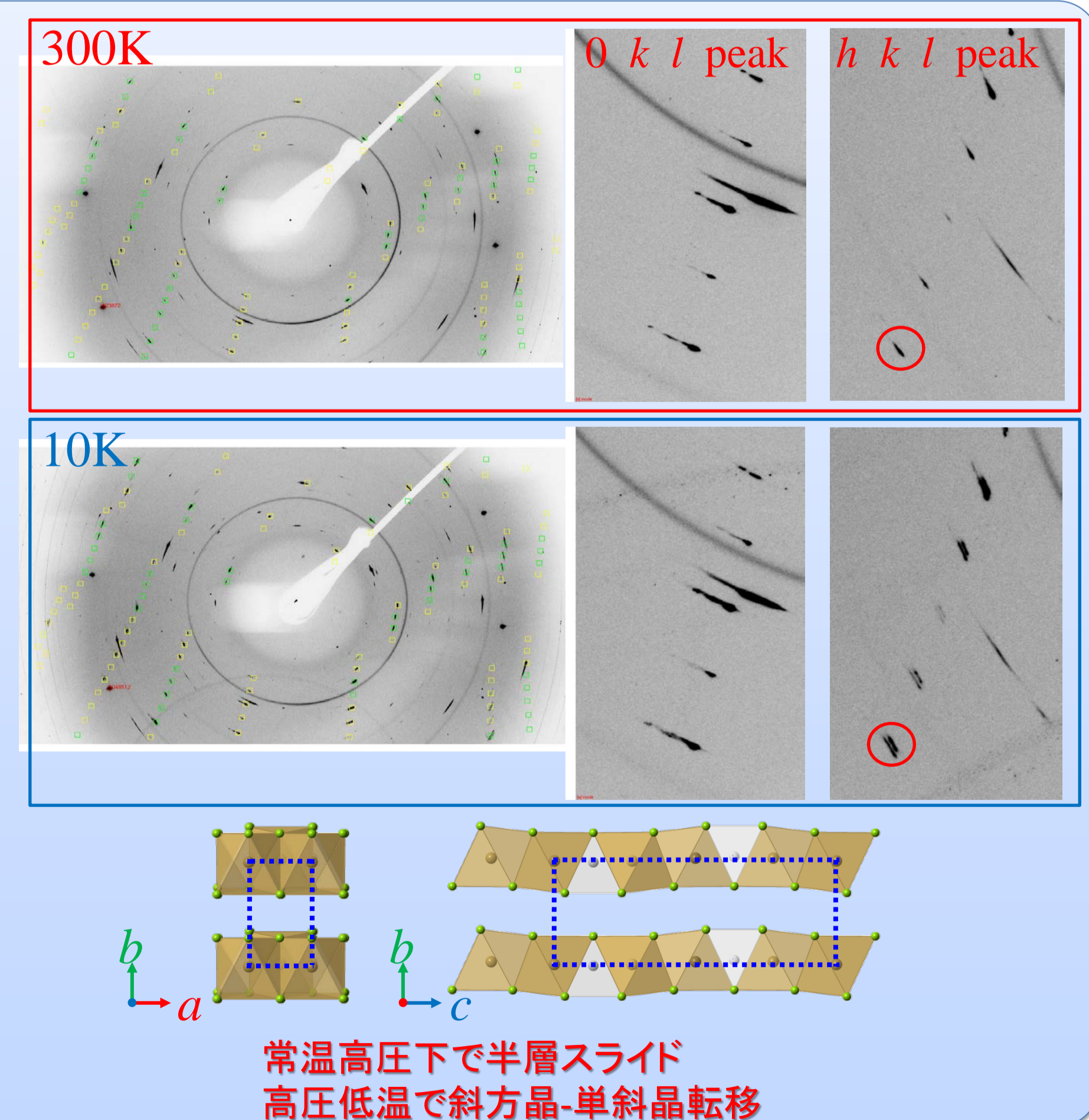
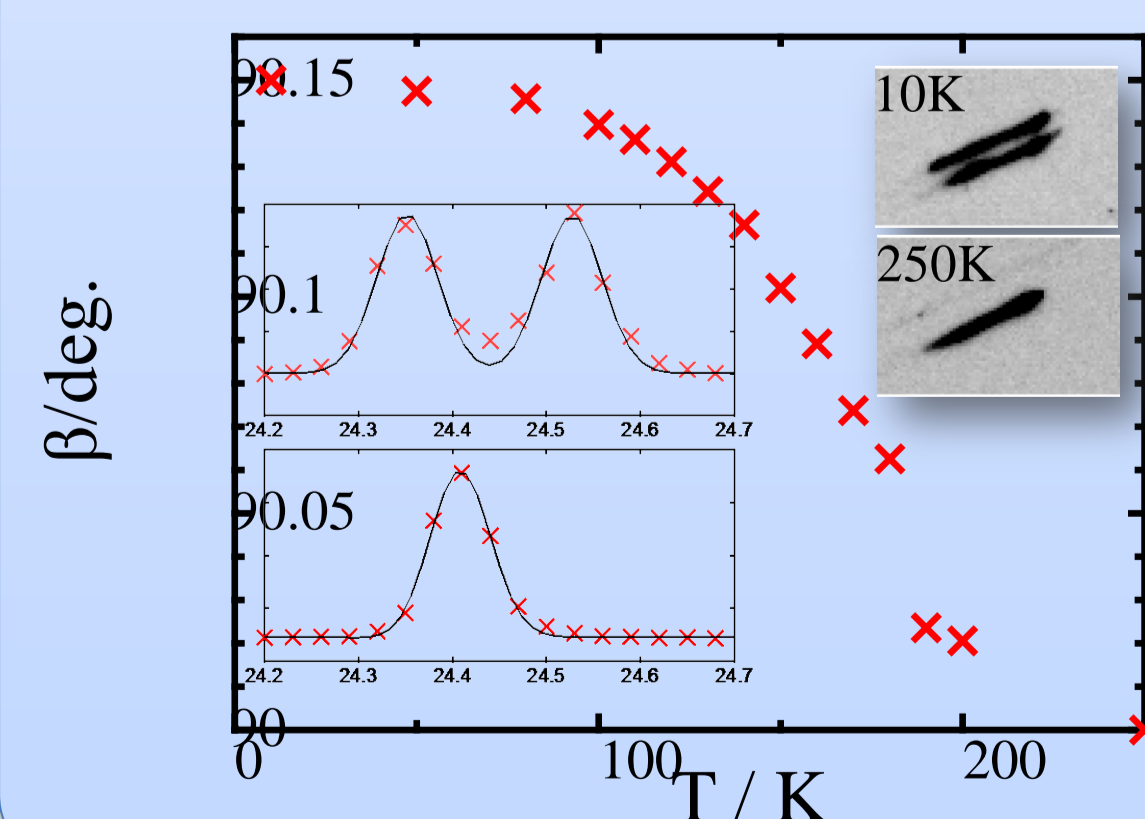
エキシトニック絶縁体候補物質

Ta_2NiSe_5 の結晶構造



DACによる単結晶X線回折実験

キュレットサイズ: 0.8mm
ガスケット: sus301 ガスケット径: 0.4mm
圧力媒体: エタノール: メタノール = 4:1
圧力マーカー: ルビー, NaCl



常温高圧下で半層スライド
高圧低温で斜方晶-単斜晶転移

まとめ

- BL8Aで利用可能な温調制御ソフトウェアを開発した。
- 初の三次元構造を持つ鉄ヒ化物を開発し、その構造を明らかにした。
- Excitonic絶縁体候補物質 Ta_2NiSe_5 の高圧下構造相転移の詳細をDACを用いた単結晶X線構造解析により明らかにした。