

自己評価報告書

平成23年 4月21日現在

機関番号：13701

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2008 ～ 2012

課題番号：20540369

研究課題名（和文） 類似構造をもつ強誘電性及び超伝導性酸化物の相転移と量子ゆらぎの理論

研究課題名（英文） Theoretical Approach on Quantum Fluctuation and Phase Transition in Ferroelectric and Superconducting Oxides with the Similar Perovskite Structure

研究代表者

松下 栄子 (MATSUSHITA EIKO)

岐阜大学・工学部・教授

研究者番号：20183105

研究分野：物性物理学理論

科研費の分科・細目：物理学・数理物理・物性基礎

キーワード：強誘電性、超伝導、ペロフスカイト酸化物、相転移、量子効果、相境界、リラクサー、イオン伝導

1. 研究計画の概要

ペロフスカイト構造 (ABO_3 型) 及びその関連の類似構造をもつ酸化物は、誘電体から電気伝導体さらに超伝導体に至るまで幅広く存在し興味深い物性を示す。そして酸素八面体の積層構造を変化させると、強誘電性でも超伝導性でも類似した構造のところ転移点が高くなったり構造相転移の相境界近傍で応用上の有用な特性が見つかったりする。そのため酸素八面体の積層構造に特有のフォノンが特異な物性の発現に大事な役割を担っていて、種々の相転移をもたらず量子ゆらぎの正体が重要な鍵を握っていると考えられる。そこで、現在の物性物理が抱えるテーマの中で応用上そのメカニズムの早期解明が望まれる3つのサブテーマを掲げ、ペロフスカイト型とその変形である類似構造をもつ酸化物において、相転移点近傍の量子ゆらぎを理論的に解き明かし、応用に繋がる物性を開発する。

2. 研究の進捗状況

(1) ペロフスカイト型強誘電体の相境界

デバイス開発に有用なリラクサー特性の出現条件を突き止めるため、微視的理論に先行させて現象論による研究を遂行した。順調に成果を出している、国際学会での口頭発表を2回実施している。

(2) 量子ゆらぎによる常誘電性と高温超伝導

ペロフスカイト構造の変形である銅酸化物の高温超伝導体について、La系、Y系、Bi系の積層構造の変化に伴い、超伝導に関与した2種類のLOフォノンに着目した理論を展開している。意外な実験データが現れたため、計画を一部変更し、先に攻略を成し遂げた。国際学会と国内学会を合わせて3回の口頭発

表を実施している。

(3) 酸化物中の高速イオン伝導

燃料電池、リチウム二次電池の開発のため機構解明が待たれているので、微視的理論の開発を順調に進めている。追従する実験がなかなか進まず、理論先行型になっている。

3. 現在までの達成度

(1) ペロフスカイト型強誘電体の相境界

②おおむね順調に進展している。

リラクサー特性が出現する、Cubic-Tet と Cubic-Rhombo の2つの異なる相転移を隔てるモルフォトロピック相境界(MPB)について、ランダウ現象論を用いた出現条件の導出に成功し、実験による圧力効果と電場効果を説明できた。目標の6割程度を達成している。

(2) 量子ゆらぎによる常誘電性と高温超伝導

②おおむね順調に進展している。

常誘電体 $SrTiO_3$ の量子ゆらぎの理論成果を発展させた。共通要素をもつフラーレンと MgB_2 について微視的理論を作り、フォノンと超伝導との関連や T_c の導出に成功した。初期の計画には無かった研究を急遽組み込んだため、目標の3割程度の達成だが、新たな関連研究が9割完了したため、全体の達成度としては5割と評価する。

(3) 酸化物中の高速イオン伝導

①当初の計画以上に進展している。

ペロフスカイト型とその類似構造の酸化物中を H^+ , Li^+ , Ag^+ の各イオンが高速移動する電気伝導現象について、個々のイオン伝導を説明する微視的理論にそれぞれ成功した。理論側だけで遂行できる内容は7割程度達成しているが、追従する実験は③やや遅れている。

4. 今後の研究の推進方策

研究手法は解析理論を主とし、数学力を駆使した数式展開と同時に最近購入したワークステーションを用いた数値計算により、実験データと照合できる理論結果を導出する。

- (1) ペロフスカイト型酸化物の強誘電体混晶における現象論での成果を国際会議 (2011.6) で発表し、微視的理論の構築へ移行する。
- (2) フラーレンや MgB_2 を対象に開発した理論を元にし、構造変化や2ギャップがもたらす超伝導への寄与を取り入れて擬ギャップの出現条件を導出し、高温超伝導の転移温度 T_c を決める機構解明に迫る計画である。
- (3) 量子効果の大小や、イオンが移動可能な積層構造の違い (ペロフスカイト型、スピネル型)、ラットリングによる拡散とフォノンの効果の違い等を考慮し、各々の超イオン伝導を統一描像の下で扱い、適した応用に見合う物質探索を提言する。

5. 代表的な研究成果

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計6件) 全て査読有

- 1) Eiko Matsushita & S. Kusaba, "Aspect on T_c -Enhancement and FCC-A15 Structural Change in Cs_3C_{60} Superconductors", J. Phys. Soc. Jpn. 80 (2011) in press.
- 2) Eiko Matsushita, "Attempt at Extended BCS-Like Theory to Explain Fullerene Superconductors", Prog. Theor. Phys. 125 (2011) in press.
- 3) Eiko Matsushita, "Theoretical Aspect on Relaxor Appearance in Mixed Perovskite Oxides", IEEE-ISAF (2010) A5-(1-4).
- 4) K. Namikawa, Eiko Matsushita, et al., "Direct Observation of the Critical Relaxation of Polarization Clusters in $BaTiO_3$ Using a Pulsed X-Ray Laser Technique", Phys. Rev. Lett. 103 (2009) 197401-(1-4).
- 5) Eiko Matsushita & K. Hirayama, "Role of LO Phonon on Pseudo-Gap Phase in High- T_c Cuprate Superconductors", J. of Physics: C-S 150 (2009) 052158-(1-8).

[学会発表] (計4件)

- 1) Eiko Matsushita, "A Model for FCC-A15 Change and T_c -Enhancement in Cs_3C_{60} Superconductors" (フラレン超伝導体 Cs_3C_{60} の FCC-A15 構造変化と T_c 上昇の理論モデル), 39th Fullerenes-

Nanotubes General Symposium, (September 6, 2010) 京都大学百周年記念ホール, Kyoto.

- 2) Eiko Matsushita, "Theoretical Aspect on Relaxor Appearance in Mixed Perovskite-Oxides", 19th International Symposium on the Applications of Ferroelectrics, (August 10, 2010) Edinburgh Conference Center, Edinburgh, UK.
- 3) Eiko Matsushita, " T_c -Enhancement and FCC-A15 Structure Change in C_{60} -Based Superconductors", 9th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity, (September 8, 2009) Keio Plaza Hotel, Tokyo.
- 4) Eiko Matsushita, "Role of LO Phonon on Pseudo-Gap Phase in High- T_c Cuprate Superconductors", 25th International Conference on Low Temperature Physics, (August 7, 2008) RAI Convention Center, Amsterdam, Netherlands.

[図書] (計1件)

松下栄子「量子論のエッセンス」(裳華房) 2010.11 発行 (総ページ数 130)

[産業財産権]

○出願状況 (計0件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

○取得状況 (計0件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

[その他]