

微小超伝導複合体と超伝導ネットワークの数値 シミュレーション

大阪府立大工、JST-CREST 加藤勝、末松久孝、平山昌樹

日本原子力機構、JST-CREST 町田昌彦

東北大工、JST-CREST 林正彦

東北大金研、JST-CREST 小山富男

1. はじめに

ナノスケールの微細加工技術の発展とともに、微細加工された物質の特異な性質に関心が集まっている。例えば、微細加工された超伝導体においては、サブミクロンスケールの超伝導体に磁場を印可した場合に、バルクで現れる単一量子の磁束とは異なる磁束が現れることが、理論的に予測され、実験的にも傍証が得られている。

この研究では、微細加工された超伝導体の性質を調べるため、現象論的、微視的な方程式を数值的に解いた。主に対象とした系は、d-dotと呼んでいる、d-波超伝導体である高温超伝導体と従来のs-波超伝導体を組み合わせた構造、超伝導細線からなる超伝導ネットワークおよび超伝導微小板である。

2. 研究経過

超伝導複合体d-dotに関しては、2成分 Landau-Ginzburg方程式を解くことでd-波超伝導の異方性を取り入れた。このとき生じる半整数量子磁束の発生とそれに伴う安定状態の2重縮退を利用して、2状態デバイスや人工スピン系を作ることが可能であるが、さらに、そのため必要と思われる、d-dotの2体の相互作用について、d-dotが正方形の場合に、方向依存性と距離依存性を調べた。

微小s-波超伝導体に対しては、連続モデルのBogoliubov-de Gennes方程式を、有限要素法を用いて離散化し、固有値固有状態を数值的に求め、自己無撞着方程式を解いた。

また、微小な異方的超伝導体の場合には、s-波超伝導体の場合と異なり、Cooper対の対称性という内部自由度を持っており、さらに異方的超伝導は表面に敏感である。微小な超伝導体はまわりがすべて表面なので、表面の効果が、超伝導体全体に及ぶことがあり、このとき、超伝導体全体でCooper対の対称性が変化することがありうる。このような対称性の実空間での変化を取り入れるために、タイトバインディングモデルに同一格子点上の電子間と最近接格子点上の電子間に引力相互作用を取り入れたモデルを考え、実空間での超伝導秩序変数を考えた平均場近似の下での Bogoliubov-de Gennes方程式を解いた。

また超伝導ネットワークについては、これまでに有限サイズのネットワークについてその磁束構造を調べてきたが、低温における磁束構造、その温度変化を調べるために、Ginzburg-Landau方程式を数值的に解いた。

3. 研究成果

図1に相互作用の結果を示す。これは2つの正方形d-dotに対して、一つを固定した位置におき、もう一つをそのまわりのいろいろな位置において、2つの安定な状態すなわち強磁性状態と反強磁性状態を求め、自由エネルギーの差をd-dotの位置に関してプロットしたものである。図の座標(0,0)にはじめの正方形d-dotの右上の角がある。もう一つのd-dotの左下の角を座標として自由エネルギーの等高線図が描かれている。x=0もしくはy=0の近くでは反強磁性が安定になり、それより遠方では強磁性が安定になっている。また、遠方での強磁性はx方向やy方向に行った方が安定になっている。このように、d-dot間の相互作用は、距離と方向に強く依存するものであることが分かった。これは今後 d-dotをデバイスや人工スピン系として応用していく際に重要となる性質である。

次に、微小s-波超伝導体の磁場下での準粒子構造を図2に示す。

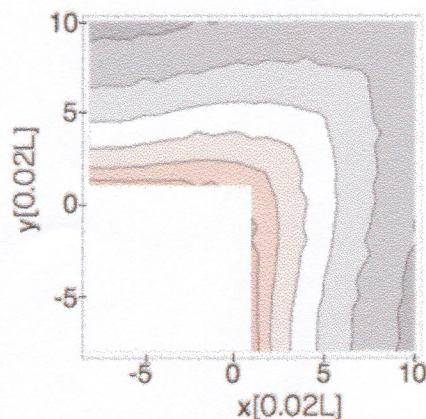


図1 d-dot の2体相互作用

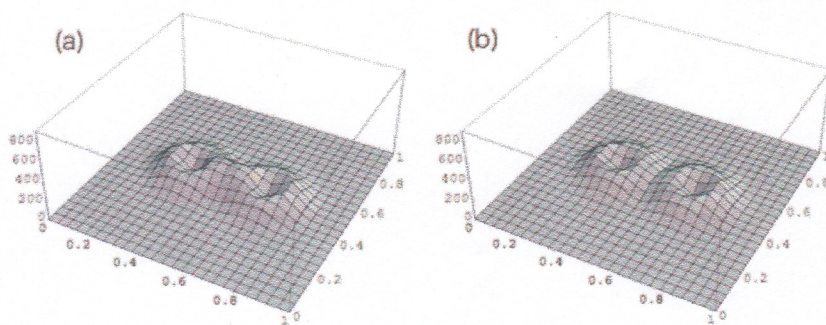


図2

(a)は周期境界条件を課したバルク系、(b)は有限な正方形の板の場合、(c)は形状を菱形に変えたものである。

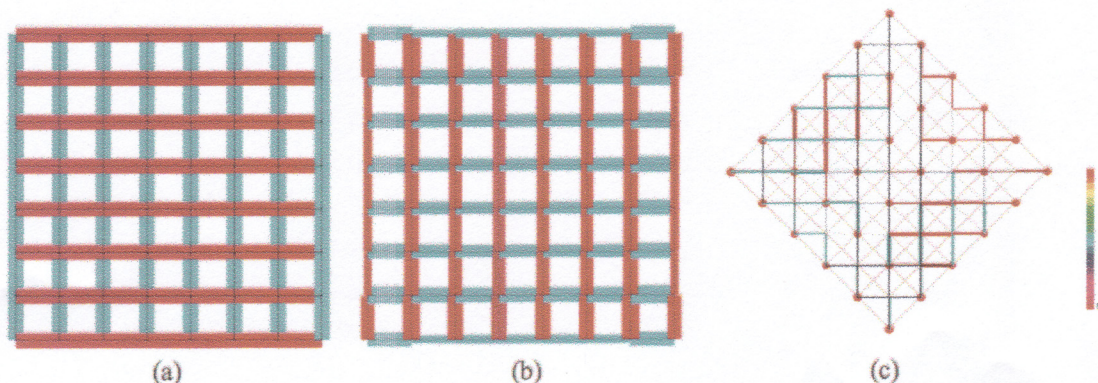


図3

図3で最近接格子点間の秩序変数をその位置の線で、同一格子点上の秩序変数を格子点上のドットで、大きさと位相を表している。無限系では、この状態が d-波超伝導を表している。有限の系では正方形と菱形では、秩序変数の表面と内部とで逆になっており、特に菱形の場合には、格子点上の超伝導秩序変数が現れ、これは s-波超伝導の出現を表している。すなわち、菱形においては、超伝導対称性が、形状によって変化したことを意味している。

4. まとめ

各種の超伝導微細系のシミュレーションを行った。特に、半磁束量子系では、特異な相互作用を見出すことができた。微小超伝導系では、渦糸分子の様なものを見出した。微小異方的超伝導体では、形状により超伝導対称性が変化することを見出した。今後は、これらの特異な性質のデバイス等の応用へ利用するよう、具体的かつ現実的なシミュレーションを行っていきたい。

5. 発表(投稿)論文

"Quasi-particle Spectrum of Nano-scale Conventional and Unconventional Superconductors under magnetic field", M. Kato, H. Suematsu, M. Machida, T. Koyama and Takekazu Ishida, Physica C, 426-431 (2005) 41-45.

"Quasi-particle Spectrum in Nano-Scale Superconducting Plates", M. Kato, H. Suematsu, M. Machida, T. Koyama, Takekazu Ishida, J. Phys. Chem. Solids, 67 (2006) 369-372.

"Ginzburg-Landau Approach for Vortex States of Micro-Superconducting Plates with Antidots", O. Sato, M. Kato, Journal of Physics and Chemistry of Solids, 67 (2006) pp. 476-478.

"Nano-scaled anisotropic superconductors", M. Kato, M. Machida, T. Koyama, T. Ishida, Physica C, to be published.

"The interaction between square d-dot's", M. Hirayama, M. Kato, M. Machida, T. Koyama, T. Ishida, Physica C, to be published.

"Phase Transition and Fluctuations in Superconducting Nanostructures", M. Hayashi, Hiromichi Ebisawa, M. Kato, Physica C, to be published.

"Nano-scaled anisotropic superconductors", M. Kato, M. Machida, T. Koyama, T. Ishida, Physica C, to be published.

"d-dot: as an Element of Superconducting Device"

M. Kato, Masaki Hirayama, H. Suematsu, M. Machida, T. Koyama and Takekazu Ishida, Journal of the Korean Physical Society, to be published.

"Non-equilibrium vortex states of superconducting inhomogeneous micro-plate with external current", O. Sato, M. Kato, Physica C, to be published.

異方的超伝導体の新しいトポロジ効果

北海道大学・工学研究科 浅野泰寛

1. はじめに (1 から 5 まで 10 ポイント)

超伝導の対称性を特徴付ける秩序関数の振幅は準粒子の励起エネルギーに現れるギャップに相当し、その位相 (符号) の変化の仕方によって様々な対称性が分類される。超伝導の対称性として p 波に属する一群の超伝導体のクーパー対はスピン自由度を持っており、ジョセフソン接合を作った場合スピンが流れる可能性がある。この事実は 80 年代の初めから指摘され、超流動ヘリウム 3 における実験によって検証されていた。しかしながら、スピン流の性質やその特性は非常に素朴な現象論の理解を超える事はなかった。

2. 研究経過

我々は、BCS 平均場近似に基づいて微視的にスピン流を計算する公式を導出し、それをジョセフソン接合に適用しスピン流の性質を微視的に理解する枠組みを構築してきた。何らかの理由でスピンを反転させるポテンシャルがない場合にはスピン流は一義的に定義され、その基本的な性質を理解する事が出来た。

3. 研究成果

以前から指摘されてきたように、二つのスピン 3 重項超伝導体の、d ベクトルが互いに平行に揃っていない場合にスピン流が流れる事を、微視的な理論から確認した。それと同時に我々の研究によってスピン流の振る舞いを定量的に予測する事が出来た。さらにトポロジカルな実空間構造を持つ p 波超伝導体に導いた公式を適用したところ、スピン流の方向を外的パラメータによって変えることが出来ない事がわかった。この事実は、d ベクトルの空間変化を特徴付けるトポロジカル数によって、スピン流のおおきさと方向が決まってしまうからである。

4. ま と め

我々の研究によって超伝導体を流れるスピン流の微視的理解が可能になった。また指向性をもつスピン流は、電流とは異なり、超伝導体の空間構造に敏感である事がわかった。スピン流を観測するためには、何らかの形でスピンを反転させる過程を含む観測系を構築する事が必要である。観測を考慮したうえでスピン流を改めて定義しなおし、スピン流を直接観測する実験を提案するのが今後の課題である。

5. 発表 (投稿) 論文

” Spin Current in p-wave Superconducting Rings”, Y. Asano, Physical Review B Vol.72, pp.~092508(1)-(4) (2005).

低温走査型トンネル顕微分光法による酸化物高温超伝導体の元素置換効果の研究

佐賀大理工
東北大金研

真木 一
西寄照和、小林典男

1. はじめに

走査型トンネル顕微分光法(STM/STS)とは、物質表面の電子状態を原子サイズの空間分解能で知ることができる実験手法である。不純物を混入した酸化物高温超伝導体でSTM/STSの測定を行うと、不純物によるクーパー対破壊の効果や準粒子の不純物散乱の効果が直接観察でき、超伝導ギャップの波数空間対称性、ひいてはクーパー対の形成メカニズムに関して有力な情報がもたらされる。ただ、酸化物高温超伝導体は電子状態の異なる原子面が積層した構造をもち、通常は超伝導の舞台であるCuO₂面は終端面(測定表面)にならない。そのため、今後のSTM/STS研究の指針として、①現在研究が先行しているBi₂Sr₂CaCu₂O_{8+δ}以外の物質でさらなる知見を得ること、②それぞれの物質で終端となる原子面とその電子構造を正しく把握すること、③測定表面とCuO₂面とを結ぶ面間方向の電子輸送機構を理解すること、が重要である。以上を踏まえ、本研究ではYBa₂Cu₃O_{7-δ}(YBCO)単結晶の低温STM/STS測定を行った。YBCOでは(破断により)BaO面とCuO鎖面が終端面を構成することが既に判っている。本研究ではCuO₂面にZnを混入した試料を準備して、それぞれの原子面にZn置換効果がどのように現れるかに着目した。

2. 研究経過

CuO₂面のCuを一部Znで置換したYBCO単結晶は、Y₂O₃坩堝を用いたSelf-flux法により作製した。結晶中の酸素含有量は1気圧の酸素雰囲気中における熱処理によって調整した。STM/STSの測定は約4.2 Kの低温、10⁻¹⁰ Torr以下の超高真空環境下で行った。YBCOは約40 K以上の温度で高真空環境に晒すと表面が劣化するため、20 K以下の低温で試料を破断して清浄な測定表面を準備した。

3. 研究成果

CuO鎖面ではその一次元的なフェルミ面を反映して電荷密度波(CDW)像が観測されるが、CDWに対しての顕著なZnの影響は認められなかった。これはCuO₂面における準粒子散乱の影響がCuO鎖にまでは及ばないことを示唆している。一方、Znを混入した試料では鎖間方向のCDW相関が僅かに強まる傾向があった。Znの一部がCuO鎖面にも混入し、一次元性を弱めている可能性が考えられる。

CuO₂面の直上に位置するBaO面では、不純物の混入に伴い鮮明な原子像が得られ難くなる傾向があった。現在、Zn周りの局所電子構造と断定できるSTM像の撮影には成功していないが、Zn置換と何らかの関係が予想される輝点の分布が観測できている。また、Znの混入と共に低バイアスで一次元的な電荷変調が出現すること、Ni置換体で4回対称の局所電子状態像が得られること等の測定結果も併せて得られている。今後は、引き続きこれらの実験結果間の整合性を検証しYBCOにおける不純物置換効果を微視的な観点から明らかにしたい。

4. まとめ

YBa₂Cu₃O_{7-δ}のZn置換効果をLT-STM/STS測定した結果、CuO鎖面のCDWに対しての顕著なZn混入の影響は認められなかった。BaO面では原子スケールの局所的な電子状態変化こそ未だ観測できていないが、直下のCuO₂面に含まれるZnの影響と思われるSTM像を観測した。Ni置換体におけるSTM像との対応関係、他の物質における測定結果との比較は今後の課題である。

5. 発表(投稿)論文

- (1) “Layered charge-density waves with nanoscale coherence in YBa₂Cu₃O_{7-δ}”, M. Maki, T. Nishizaki, K. Shibata and N. Kobayashi, Phys. Rev. B72 (2005) 024536 1-6.
- (2) “Vortex matter in YBa₂Cu₃O_y single crystals investigated by scanning tunneling spectroscopy”, K. Shibata, T. Nishizaki, M. Maki and N. Kobayashi, Phys. Rev. B72 (2005) 014525 1-6.
- (3) “STM/STS studies on vortex and electronic state in YBa₂Cu₃O_y”, T. Nishizaki, K. Shibata, M. Maki and N. Kobayashi, to be published in Physica C.

酸化物超伝導体におけるジョセフソン磁束のピン止め機構と超伝導ギャップの相関

北陸先端大・材料 内藤智之、岩崎秀夫
東北大・金研 西寄照和、小林典男

1. はじめに

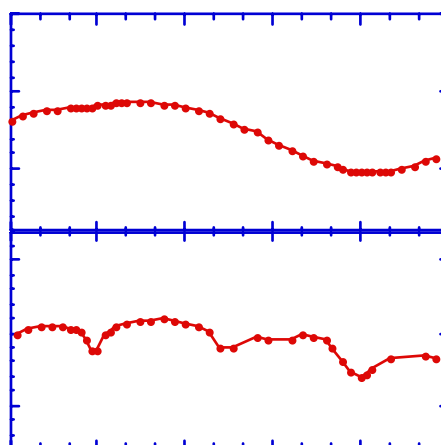
我々のグループでは、これまで代表的な酸化物高温超伝導体である $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LSCO) と $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ (YBCO) を用いてそれらの CuO_2 面内の異方性をジョセフソン磁束状態 (磁場を CuO_2 面に対して平行印加した状態) における電気抵抗率を測定し調べてきた。LSCO の場合、電気抵抗率の面内異方性は基本的には 4 回および 2 回対称性成分の重ね合わせで記述されることが分かった。前者の 4 回対称性はクーパー対が d 波対称性を有することに、後者の 2 回対称性は超伝導揺らぎにそれぞれ起因する。中でも特徴的なことは磁場と面内結晶軸が平行になったときに電気抵抗率が急激に減少するディップ構造が現れることにあり、これはジョセフソン磁束のピン止めがそれらの方向で強くなっていることを意味する。一方、YBCO の場合もほぼ LSCO の場合と同様の振る舞いが観測されるが、最適ドーブ試料では 2 回対称性のみが観測された (測定磁場は 1.5T のみ)。そこで本研究では、YBCO 最適ドーブ試料における電気抵抗率の面内異方性を磁場の関数として測定した。

2. 実験方法

YBCO 単結晶はイットリアるつぼを用いた自己溶媒法で育成された。その後、as-grown 単結晶を 1 気圧の酸素気流中で 480°C、1 週間熱処理することで最適ドーブ試料を用意した。測定に用いた試料の超伝導転移温度は 93.8K であった。電気抵抗率は通常の直流四端子法で測定した。実験は強磁場センターの 20T 超伝導マグネットおよび北陸先端大の 17T 超伝導マグネットを使用して行った。

3. 実験結果

右図に YBCO 最適ドーブ試料の 15T および 1T における電気抵抗率の面内異方性を示す。15T のデータは 2 回対称性で記述され、ディップ構造も観測されない。一方、1T のデータは 4 回+2 回対称性で記述されディップ構造も観測された。両者の違いはジョセフソン磁束系の相転移と関連がありそうに見える。15T の相転移は 1 次、1T の相転移は 2 次であった。つまり、ディップ構造が現れて磁束ピン止めが強い場合には磁束系相転移が 2 次になり、そうでない場合は 1 次になる。



4. まとめ

本研究からドーブ量に関係なく d 波超伝導の超伝導ギャップとジョセフソン磁束の間に強い相関があることを確認した。一方、ジョセフソン磁束系の相転移と面内異方性の振る舞いに強い相関があり、磁場領域によっては 4 回対称性成分が強く抑制 (もしくは消失) することが明らかになった。

5. 発表(投稿)論文

- Seiya. Haraguchi, Tomoyuki Naito, Hideo Iwasaki: Important role of Josephson-vortex pinning in the mixed state properties in oxygen-content controlled YBCO single crystals, J. Phys. Soc. Jpn. 74, 3365-3369 (2005).
- Tomoyuki Naito, Seiya. Haraguchi, Hideo Iwasaki, Terukazu Nishizaki, and Norio Kobayashi: Phase transition of the Josephson vortices in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ single crystals with various oxygen deficiencies, Physica C 426-431, 46-50 (2005).

Si および Ge からなる新規クラスレート化合物とラマン分光による物性測定

東北大・理 谷 垣 勝 己、熊 代 良 太 郎 東北大・金研 岩 佐 義 宏、竹 延 大 志

1. はじめに

電子とフォノンの相互作用 (e-ph相互作用) は、金属絶縁体転移や超伝導などを発現させる重要な相互作用として知られている。この現象に関係するフォノンとしては、これまで結晶全体の格子振動に関係するフォノンがその研究対象とされてきた。しかし最近の研究により、多面体クラスタを基本構造とする結晶では、結晶全体ではなくクラスタ内に局在するクラスタフォノンが重要な働きをすることが判明してきた。例えば C_{60} や Si_{20} 多面体クラスタを結晶の基本構成単位とする固体では、クラスタに局在するクラスタ内フォノンが超伝導などの基本機構において、e-ph相互作用として重要な働きをする。この物質では、フォノンは通常の物質のフォノンとは異なり、エネルギーポテンシャルの中の等価な位置を自由に動き回る特殊なラットリングフォノンモードを有している。本研究では、結晶学的に等価な Si_{100} ならびに Ge_{100} (図1) においてラットリングフォノンが存在するために物性が大きく異なる事を示すことを目的とする。本物質系により、理論的にも非常に興味があった研究内容を、実験的に検証できる可能性がある事を示すことを試みる。

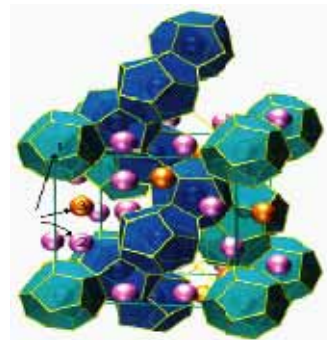


図1. SiおよびGe多面体クラスレート構造

2. 研究経過

$Ba_{24}Si_{100}$ は室温から低温まで電子相転移は示さず、そのまま1.45K で超伝導となる。一方、 $Ba_{24}Ge_{100}$ は、以前報告されているように、200Kで低抵抗の金属から高抵抗の金属へと電子相転移を生じ、その後さらに温度を下げていくと、270mKという極低温で超伝導となることを新しく見出した。 $Ba_{24}Ge_{100}$ で発現する超伝導は、既にこの物質に本質的なものであることが確かめられている。そこで、 $Ba_{24}Si_{100}$ で観測された超伝導がバルク試料全体から観測される本質的な超伝導であるかどうかを確認するために、交流帯磁率の実験を行なった。この結果から、 $Ba_{24}Si_{100}$ で観測された超伝導は、本質的なものである事を確認した。

このように、 Si_{100} 骨格と Ge_{100} 骨格は、同じIV 族元素で形成される同等のネットワーク構造であるが、電子物性は大きく異なる事を実験により確認することができた。そこで、この二種類の物質物性の比較を、さらに電気抵抗の圧力効果の実験から確認する事を試みた。その結果、 $Ba_{24}Ge_{100}$ は圧力を加えると T_c が急激に上昇する。そして、1.5GPa で T_c は3.2K 程度にまでなる。一方、 $Ba_{24}Si_{100}$ は、圧力を加えるとその T_c は逆に低下することがわかった。このように、電気抵抗の圧力効果は、同じ骨格構造を有する $Ba_{24}IV_{100}$ であっても、構成元素がGe であるかSiかに依存してその物性は大きく変化する事を示す、可能性を示唆する研究結果を得ることに初めて成功するに至った。

3. 研究成果

図2 に、 $Ba_{24}Si_{100}$ の電気抵抗率の温度依存性を示した。 $Ba_{24}Si_{100}$ は室温から低温まで電子相転移は示さず、そのまま1.45K で超伝導となる。一方、 $Ba_{24}Ge_{100}$ は、以前報告されているように、200Kで低抵抗の金属から高抵抗の金属へと電子相転移を生じ、その後さらに温度を下げていくと、270mKという極低温で超伝導となる。 $Ba_{24}Ge_{100}$ で発現する超伝導は、既にこの物質に本質的なものであることが確かめられている。このように、 Si_{100} 骨格と Ge_{100} 骨格は、同じIV 族元素で形成される同等のネットワーク構造であるが、電子物性は大きく異なる。この違いは、さらに電気抵抗の圧力効果の実験結果を見ると顕著である。図2に同時に電気抵抗の圧力効果を示した。 $Ba_{24}Ge_{100}$ は、圧力を加えると T_c が急激に上昇する。そして、1.5GPa で T_c は3.2K 程度にまでなる。一方、 $Ba_{24}Si_{100}$ は、圧力を加えるとその T_c は逆に低下することがわかった。このように、電気抵抗の圧力効果は、同じ骨格構造を有する $Ba_{24}IV_{100}$ であっても、構成元素がGe かSi かに依存してその物性は大きく変化する。

この物性の違いを説明する鍵を握ると考えられるのが、Ba のラットリング運動である。籠の形成するポテンシャルの中のBa 原子の状態を見る一つの方法としてX 線回折による電子密度分布を調べる方法が有効である。そこで、高エネルギー施設 (SPring-8、BL02B2) で測定されたX 線回折の実験結果MEM/Rietveld 法を用いて解析した。 IV_{100} 物質には3 種類の籠状空間がある。すなわち、Ba 原子は、正12 面体の閉鎖籠空間[Ba(1)] 疑似4 面体空間[Ba(2)] および開放籠空間[Ba(3)] の3 種類の空間に内包される。電子密度分布をみると、この3 種類の籠ポテンシャルの中にあるBa 原子の中で、Ba(3) の電子密度分布が、 $Ba_{24}Ge_{100}$ において、電子相転移200Kの前後で特に大きく変化することがわかった。同様の変化は、電子相転移の観測

されないBa₂₄Si₁₀₀では、室温から20Kまでの温度範囲では存在しない。この結果を考えると、観測された200Kにおける電子相転移にBaのフォノンが関係していると思われる

超伝導臨界温度T_cは、Ba₂₄Ge₁₀₀では、圧力を加えていくと、急激に上昇して1.5GPaの圧力でT_c=3.2Kまで上昇する。一方同様の実験をBa₂₄Si₁₀₀に対して行くと、圧力を加えるに従ってT_cは逆に低下していくことは述べた。Ba₂₄Ge₁₀₀で観測される加圧する場合の効果は、金属（低抵抗）-金属（高抵抗）の電子相転移を抑制する効果である事はわかっている。従って、圧力の効果はBaのラットリングフォノンによって引き起こされる結晶格子の歪みを抑制し、フェルミ面を元の状態に戻す効果である考えると、Ba₂₄Ge₁₀₀で観測されたT_cの上昇は、加圧下で復活したフェルミ準位の状態密度の増加により理解できる。そこで、加圧状態におけるBa₂₄Ge₁₀₀とBa₂₄Si₁₀₀の電子状態を比較してスケールリングしてみる事は興味深いと考えられる。この場合、容易に想像されるようにデバイ温度はBa₂₄Si₁₀₀の方が高い。また、観測されるパウリ帯磁率から、Ba₂₄Si₁₀₀とBa₂₄Ge₁₀₀ではフェルミ準位における状態密度N_{EF}はほぼ同程度であるので、T_cはBa₂₄Si₁₀₀の方がBa₂₄Ge₁₀₀よりも高くなる事になる。しかし、実験結果はその逆になっている。この事実は、同様の形状をした籠内のBaのラットリングフォノンではあるが、大きな空間を有するGe原子から作られる籠の中でBaがより大きくラットリング運動を行っている点にその理由を求める事が理にかなっているように思われる。すなわち、ラットリングフォノンがより顕著なGe₁₀₀骨格においてより大きな電子格子結合定数が得られ、これがBa₂₄Ge₁₀₀の高いT_cの要因であると解釈する立場である。

$\langle \theta_D \rangle = 430\text{K}$	$\langle \theta_D \rangle = 370\text{K}$
$N_{EF} = 0.148 \text{ states Si-atom}^{-1}$	$N_{EF} = 0.149 \text{ states Ge-atom}^{-1}$
$T_c = 1.4\text{K}$ $V = 29.8 \text{ meV}$	(Ba ₂₄ Ge ₁₀₀ High-T) $T_c = 3.5\text{K}$ $V = 72.9 \text{ meV}$

4. ま と め

C、Si、GeなどのIV族元素は多くの種類の多面体クラスタを形成する。このような多面体には、IV₂₀、IV₂₄、IV₂₈、IV₆₀ならびにナノチューブ(CNT)などがある。この中で特に開殻系の電子構造を有

するIV₂₀、IV₂₄、IV₂₈多面体クラスタは、面を共有した共有結合性のネットワークからなる結晶を構成する。このような多面体クラスタ結晶は、その内部空間に他の異元素を取り込むことができ、取り込まれた元素はクラスタネットワークが作るポテンシャルの中に閉じ込められた状態で特有のフォノン状態を示す。クラスタが作るポテンシャル中で、よい広い自由度を有する動的な挙動を示す原子のフォノンは、エネルギーポテンシャルを構成する電子と電子格子相互作用を介して、そのエネルギーポテンシャルを歪め、エネルギー障壁を有するポテンシャルである多重ポテンシャルを新たに形成することがある。このような場合には、ポテンシャルに閉じ込められた元素は、幾つかのエネルギーポテンシャルをある時間スケールで障壁を飛び越えて相互に移動することができる。あるいは、エネルギー障壁が小さい場合には、トンネリング現象により相互移動することが可能となる。このような原子の運動は、結晶の対称性とは異なる自由度の電子相転移を結晶の電子状態に誘起する可能性が生じる。物質の電子状態が結晶の周期性に基づいたブロッホ状態を示す波動状態を有するのに対して、このような特有のフォノンは、結晶の対称性とは異なるラットリングフォノンとして存在する事が考えられる。このフォノンと電子系の相互作用は、基礎的観点からも応用的な観点からも次世代材料設計へ向けて多くの可能性を秘めている。

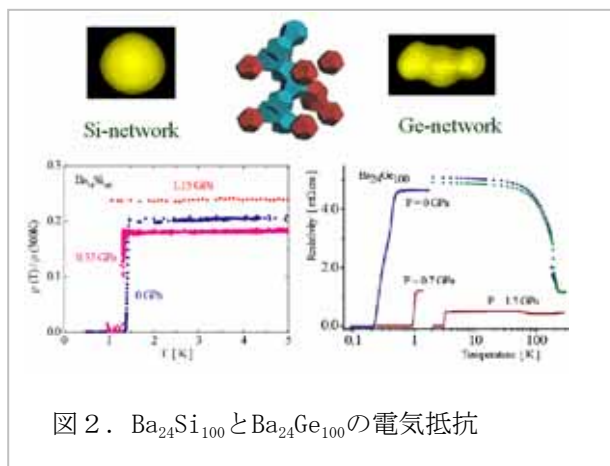


図2. Ba₂₄Si₁₀₀とBa₂₄Ge₁₀₀の電気抵抗

1. 発表（投稿）論文

“Preparation and electronic states of Na16Ba8Si136 clathrate”, T. Rachi, K. Tanigaki, R. Kumashiro, J. Winter, and H. Kuzmany, Chem. Phys. Lett., 409, 48 (2005).

“Soft x-ray spectroscopy of Ba24Ge100: Electronic phase transition and Ba-atom rattling”, Takeshi Rachi, Masaki Kitajima, Kensuke Kobayashi, FangZhun Guo, Takehito Nakano, Yuka Ikemoto, Keisuke Kobayashi and Katsumi Tanigaki, J. Chem. Phys., **123**, 18359225 (2005).

“Superconductivity and physical properties of Ba24Si100 determined from electric transport, specific-heat capacity, and magnetic susceptibility measurements”, Takeshi Rachi, Harukazu Yoshino, Ryotaro Kumashiro, Masaki Kitajima, Kensuke Kobayashi, Keiichi Yokogawa, Keizo Murata, Noriaki Kimura, Haruyoshi Aoki, Hiroshi Fukuoka, Syoji Yamanaka, Hidekazu Shimotani, Taishi Takenobu, Yoshihiro Iwasa, Takahiko Sasaki, Norio Kobayashi, Yuji Miyazaki, Kazuya Saito, FangZhun Guo, Keisuke Kobayashi, Keiichi Osaka, Kenichi Kato, Masaki Takata, and Katsumi Tanigaki, Phys. Rev. B, **72**, 144504 (2005).