

Title	量子もつれを有する新相関電子系における量子機能の開拓
Sub Title	Exploring quantum functions in new strongly correlated electronic systems with quantum entanglement
Author	的場, 正憲(Matoba, Masanori)
Publisher	慶應義塾大学
Publication year	2018
Jtitle	学事振興資金研究成果実績報告書 (2017. )
JaLC DOI	
Abstract	<p>量子もつれを有する新相関電子系における量子機能の探索的物性研究を行なった。得られた理学的研究成果(1)および工学的研究成果(2)を下記に抜粋する。</p> <p>(1) Fe系超伝導体や異常金属など量子臨界点(QCP)物質の非従来の物理的性質を計算物理および実験物理のハイブリッド的手法を用いて探求した。Feイオンのスピン分極の消滅とともに超伝導相の出現が同時に起こるLaFeAs(O,F)の密度汎関数理論に基づく計算はVASP(Vienna Ab-initio Simulation Package)コードを用いて行った。我々の理論計算は、斜方晶LaFeAsOにおけるストライプ型反強磁性秩序とLaFeAs(O,F)における反強磁性が抑制された非磁性相の安定性を示している。更に、LaFeAs(O,F)のFドーピング濃度が4%を超えると、理論的なFeスピン偏極は消失し、実験的に得られた電子磁気相図との整合性が示された。したがって、本方法により、QCP近傍の量子もつれ状態発現の予測が行える可能性があることを示唆している。</p> <p>(2) Ca &amp; F同時ドーピング(電子およびホールの同時ドーピング)を施した鉄系超伝導物質(La,Ca)FeAs(O,F)を注意深く合成し、粉末X線回折により結晶の同定を行った後、電気抵抗率および磁気測定を行った。超伝導は、Fドーピング濃度(y)とCaドーピング濃度(x)の差(y-x)が0.15以上で発現し、試料(x,y)=(0.25,0.50)は(La,Ca)FeAs(O,F)系で最高の超伝導温度を示した。また、バルク超伝導は、試料(x,y)=(0.25,0.40)および(0.25,0.50)で確認された。そして、最大磁気臨界電流密度(Jc)は、(x,y)=(0.25,0.50)の試料で1400(A/cm<sup>2</sup>)に達した。なお、As-Fe-As角度の依存性はLeeのプロット(2008年; LaFeAsO系のTcはAs-Fe-As角度に依存し、最も高いTcは正四面体の値の近くに現れる)の傾向に一致した。本結果は、超伝導母物質LaFeAsOへのCa &amp; F同時ドーピング(電子およびホールの同時ドーピング)により、母物質の電子状態がチューニングできることを示唆している。</p> <p>We have explored quantum functions in new strongly correlated electronic systems with quantum entanglement or the quantum critical point (QCP) materials (such as Fe-based superconductors and strange metals). Our overall findings are as follows.</p> <p>(1) The unconventional physical nature of quantum criticality in the QCP materials have been studied by means of hybrid computational and experimental approach. Density functional theory calculation of LaFeAs(O,F), in which the appearance of superconducting phases is simultaneously occurred with quenching of spin polarization in Fe ions, was performed by using Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) code. Our theoretical calculation demonstrates the most stable antiferromagnetic phase with stripe magnetic ordering in orthorhombic LaFeAsO, and experimental magnetic phase in LaFeAs(O,F). Indeed, theoretical Fe spin polarization disappears at F-doping concentration (x) &gt; 0.04 in LaFeAs(O,F), indicating the consistency with electronic magnetic phase diagrams obtained experimentally for LaFeAs(O,F) that could be tuned to the QCP enters a weird state of quantum criticality which develops a quantum entanglement.</p> <p>(2) Magnetic and structural properties of superconducting compound (La,Ca)FeAs(O,F) tuned by Ca &amp; F-doping (electron &amp; hole co-doping) have been also studied by materials synthesis, powder x-ray diffraction, electrical resistivity &amp; magnetic moment measurements. The superconducting phase appears at the difference doping concentration between F and Ca (y - x) &gt; 0.15, and the sample (x, y)=(0.25, 0.50) exceeds the maximum superconducting temperature (Tc) of (La,Ca)FeAs(O,F). Bulk superconductivity was confirmed at the samples (x, y)=(0.25, 0.40) and (0.25, 0.50). The maximum magnetic critical current density (Jc) attains 1.4 kA/cm<sup>2</sup> at the sample (x, y)=(0.25, 0.50). The dependence of As-Fe-As angles is correspond to the trend of so-called Lee's plot (reported in 2008); the Tc of LaFeAsO system depended on the angle and the highest Tc appeared near the value of the regular tetrahedron.</p>
Notes	
Genre	Research Paper
URL	<a href="https://koara.lib.keio.ac.jp/xoonips/modules/xoonips/detail.php?koara_id=2017000002-20170320">https://koara.lib.keio.ac.jp/xoonips/modules/xoonips/detail.php?koara_id=2017000002-20170320</a>

保護されています。引用にあたっては、著作権法を遵守してご利用ください。

The copyrights of content available on the KeiO Associated Repository of Academic resources (KOARA) belong to the respective authors, academic societies, or publishers/issuers, and these rights are protected by the Japanese Copyright Act. When quoting the content, please follow the Japanese copyright act.

研究代表者	所属	理工学部	職名	教授	補助額	1,320 千円
	氏名	的場 正憲	氏名（英語）	Masanori Matoba		
研究課題（日本語）						
量子もつれを有する新相関電子系における量子機能の開拓						
研究課題（英訳）						
Exploring quantum functions in new strongly correlated electronic systems with quantum entanglement						
研究組織						
氏名 Name		所属・学科・職名 Affiliation, department, and position				
的場正憲 (Masanori Matoba)		理工学部・物理情報工学科・教授				
神原陽一 (Yoichi Kamihara)		理工学部・物理情報工学科・准教授				
山本崇史 (Takashi Yamamoto)		理工学部・化学科・専任講師				
1. 研究成果実績の概要						
<p>量子もつれを有する新相関電子系における量子機能の探索的物性研究を行なった。得られた理学的研究成果(1)および工学的研究成果(2)を下記に抜粋する。</p> <p>(1) Fe系超伝導体や異常金属など量子臨界点(QCP)物質の非従来の物理的性質を計算物理および実験物理のハイブリッド的手法を用いて探求した。Feイオンのスピン分極の消滅とともに超伝導相の出現が同時に起こるLaFeAs(O,F)の密度汎関数理論に基づく計算はVASP(Vienna Ab-initio Simulation Package)コードを用いて行った。我々の理論計算は、斜方晶LaFeAsOにおけるストライプ型反強磁性秩序とLaFeAs(O,F)における反強磁性が抑制された非磁性相の安定性を示している。実に、LaFeAs(O,F)のFドーピング濃度が4%を超えると、理論的なFeスピン偏極は消失し、実験的に得られた電子磁気相図との整合性が示された。したがって、本方法により、QCP近傍の量子もつれ状態発現の予測が行える可能性があることを示唆している。</p> <p>(2) Ca&amp;F同時ドーピング(電子およびホール)の同時ドーピングを施した鉄系超伝導物質(La,Ca)FeAs(O,F)を注意深く合成し、粉末X線回折により結晶の同定を行った後、電気抵抗率および磁気測定を行った。超伝導は、Fドーピング濃度(y)とCaドーピング濃度(x)の差(y-x)が0.15以上で発現し、試料(x,y)=(0.25,0.50)は(La,Ca)FeAs(O,F)系で最高の超伝導温度を示した。また、バルク超伝導は、試料(x,y)=(0.25,0.40)および(0.25,0.50)で確認された。そして、最大磁気臨界電流密度(Jc)は、(x,y)=(0.25,0.50)の試料で1400(A/cm<sup>2</sup>)に達した。なお、As-Fe-As角度の依存性はLeeのプロット(2008年;LaFeAsO系のTcはAs-Fe-As角度に依存し、最も高いTcは正四面体の値の近くに現れる)の傾向に一致した。本結果は、超伝導母物質LaFeAsOへのCa&amp;F同時ドーピング(電子およびホール)の同時ドーピングにより、母物質の電子状態がチューニングできることを示唆している。</p>						
2. 研究成果実績の概要（英訳）						
<p>We have explored quantum functions in new strongly correlated electronic systems with quantum entanglement or the quantum critical point (QCP) materials (such as Fe-based superconductors and strange metals). Our overall findings are as follows.</p> <p>(1) The unconventional physical nature of quantum criticality in the QCP materials have been studied by means of hybrid computational and experimental approach. Density functional theory calculation of LaFeAs(O,F), in which the appearance of superconducting phases is simultaneously occurred with quenching of spin polarization in Fe ions, was performed by using Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) code. Our theoretical calculation demonstrates the most stable antiferromagnetic phase with stripe magnetic ordering in orthorhombic LaFeAsO, and experimental magnetic phase in LaFeAs(O,F). Indeed, theoretical Fe spin polarization disappears at F-doping concentration (x) &gt; 0.04 in LaFeAs(O,F), indicating the consistency with electronic magnetic phase diagrams obtained experimentally for LaFeAs(O,F) that could be tuned to the QCP enters a weird state of quantum criticality which develops a quantum entanglement.</p> <p>(2) Magnetic and structural properties of superconducting compound (La,Ca)FeAs(O,F) tuned by Ca &amp; F-doping (electron &amp; hole co-doping) have been also studied by materials synthesis, powder x-ray diffraction, electrical resistivity &amp; magnetic moment measurements. The superconducting phase appears at the difference doping concentration between F and Ca (y-x) &gt; 0.15, and the sample (x, y)=(0.25, 0.50) exceeds the maximum superconducting temperature (Tc) of (La,Ca)FeAs(O,F). Bulk superconductivity was confirmed at the samples (x, y)=(0.25, 0.40) and (0.25, 0.50). The maximum magnetic critical current density (Jc) attains 1.4 kA/cm<sup>2</sup> at the sample (x, y)=(0.25, 0.50). The dependence of As-Fe-As angles is correspond to the trend of so-called Lee's plot (reported in 2008); the Tc of LaFeAsO system depended on the angle and the highest Tc appeared near the value of the regular tetrahedron.</p>						
3. 本研究課題に関する発表						
発表者氏名 (著者・講演者)	発表課題名 (著書名・演題)	発表学術誌名 (著書発行所・講演学会)	学術誌発行年月 (著書発行年月・講演年月)			
金安航大, 日比野拓, 的場正憲, 神原陽一	鉄系超伝導体 LaFeAsO <sub>1-x</sub> F <sub>x</sub> 中の磁気モーメント消失に関する計算化学的検証	日本材料科学会誌 54巻, p. 140-144 (2017)	2017年08月20日			
Kodai Kaneyasu, Masanori Matoba and Yoichi Kamihara	Synthesis of Ca and F Co-Doped LaFeAsO, as a Mother Compound of Iron-Based Superconductors	2017 Materials Research Society (MRS) Fall meeting	2017年09月22日			
Marie Hashimoto, Masanori Matoba, Yoichi Kamihara, and Manami Nakanishi	Investigation for kesterite-stannite photovoltaics: Stability and band gaps of the Cu <sub>2</sub> (Zn,Fe)SnS <sub>4</sub> alloy	4th Japan-Korea International Symposium on Materials Science and Technology 2017 (JKMST2017)	2017年08月25日			

Manami Nakanishi, Masanori Matoba and Yoichi Kamihara	Theoretical research on dissociation of N <sub>2</sub> for designing new ammonia catalysis supporting Ru	4th Japan-Korea International Symposium on Materials Science and Technology 2017 (JKMST2017)	2017年08月25日
S. Okada, Y. Kamihara, N. Ohkubo, S. Ban, and M. Matoba	Transport Properties of the layered transition metal oxypnictide Sr <sub>2</sub> ScCo <sub>1-x</sub> Fe <sub>x</sub> PO <sub>3</sub> with Fe-doped Co <sub>1-x</sub> Fe <sub>x</sub> P layers	28th International Conference on Low Temperature Physics (LT28)	2017年08月10日
山口道太郎, 岩崎秀, 的場正憲, 神原陽一	鉄系超伝導体 Sr <sub>2</sub> VFeAsO <sub>3-d</sub> の電子磁気特性とNbドーピング	日本磁気学会 第41回学術講演会	2017年07月19日
金安航大, 坂上良介, 的場正憲, 神原陽一	鉄系超伝導体母相 LaFeAsO への Ca, F 同時ドーピング	日本材料科学会 第1回マテリアルズ・インフォマティクス基礎研究会	2017年06月26日
橋本万梨恵, 中西愛, 的場正憲, 神原陽一	Cu <sub>2</sub> (Zn,Fe)SnS <sub>4</sub> のスタンナイト構造からケステライト構造の結晶安定性と光学禁制帯に関する検討	日本材料科学会 平成29年度学術講演大会	2017年06月26日