

## データ駆動的な手法を用いた圧力誘起超伝導体の探索

## Data-driven Search for Pressure-induced Superconductor

○松本 凌<sup>1, 2</sup>, Hou Zhufeng<sup>1</sup>, 原 裕<sup>1, 2</sup>, 長尾 雅則<sup>3</sup>, 足立 伸太郎<sup>1</sup>, 仲村 和貴<sup>4</sup>, 村上 諒<sup>4</sup>,  
山本 紗矢香<sup>4</sup>, 田中 博美<sup>4</sup>, Song Peng<sup>1, 2</sup>, 齋藤 嘉人<sup>1, 2</sup>, 山下 愛智<sup>1, 2</sup>, 入船 徹男<sup>5</sup>,  
竹屋 浩幸<sup>1</sup>, 寺倉 清之<sup>1</sup>, 高野 義彦<sup>1, 2</sup>

(1. 物材機構, 2. 筑波大, 3. 山梨大, 4. 米子高専, 5. 愛媛大)

○Ryo Matsumoto<sup>1, 2</sup>, Zhufeng Hou<sup>1</sup>, Hiroshi Hara<sup>1, 2</sup>, Masanori Nagao<sup>3</sup>, Shintaro Adachi<sup>1</sup>,  
Kazuki Nakamura<sup>4</sup>, Ryo Murakami<sup>4</sup>, Sayaka Yamamoto<sup>4</sup>, Hiromi Tanaka<sup>4</sup>, Peng Song<sup>1, 2</sup>, Yoshito Saito<sup>1, 2</sup>,  
Aichi Yamashita<sup>1, 2</sup>, Tetsuo Irifune<sup>5</sup>, Hiroyuki Takeya<sup>1</sup>, Kiyoyuki Terakura<sup>1</sup>, Yoshihiko Takano<sup>1, 2</sup>  
(1. NIMS, 2. Univ. of Tsukuba, 3. Univ. of Yamanashi, 4. NIT, Yonago Collage. 5. Ehime Univ.)

E-mail: MATSUMOTO.Ryo@nims.go.jp

マテリアルズ・インフォマティクスをはじめとしたデータ駆動型材料研究の実用化が進む中、超伝導体などの物質探索は、未だに研究者の知識や経験に依存した絨毯爆撃型の手法によって行われている。本研究では、無機化合物データベースから抽出した約 1570 の三元系化合物に対して、①ナローギャップ半導体であること、②バンド端が平坦でフェルミ準位近傍の状態密度が高いこと、③圧力下でバンドギャップが小さくなることの 3 つの拘束条件に基づいたスクリーニングを行い、圧力誘起超伝導体の候補を選定した。候補物質のひとつである  $\text{SnBi}_2\text{Se}_4$  を実際に合成し、電気特性を評価した<sup>(1)</sup>。

図 1 に  $\text{SnBi}_2\text{Se}_4$  の電子構造を示す。図から、この物質のバンドギャップは 270 meV 程度であり、伝導帯と価電子帯の両方のバンド端の形状が平坦であることが分かる。高圧力下のバンド計算から、ギャップは 10 GPa 程度の圧力で閉じ、金属-絶縁体転移を起こすことが示唆された。

溶融徐冷法により  $\text{SnBi}_2\text{Se}_4$  単結晶を合成し、ホウ素ドープダイヤモンド電極導入型ダイヤモンドアンビルセル<sup>(2)</sup>を用いて高圧力下での電気抵抗を測定した。図 2 に電気特性の圧力相図と、挿入図に低温付近の電気抵抗の温度依存性を示す。理論で予測された通り、試料は 10 GPa で金属-絶縁体転移を起こした。加圧を進めると、20 GPa で超伝導転移温度  $T_c = 2.4$  K の圧力誘起超伝導が観測された。さらに 47 GPa で  $T_c$  が突如上昇し、63 GPa で最大  $T_c = 5.9$  K を示す第二超伝導相が発見された。これはデータ駆動型物質探索の第一歩となる重要なケーススタディといえる。

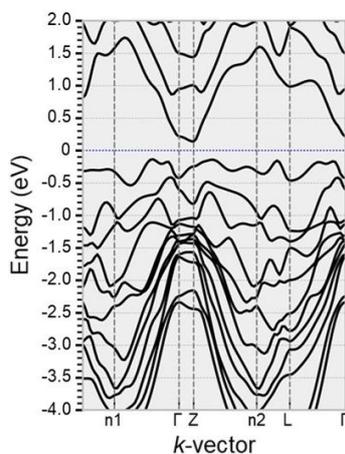


図 1  $\text{SnBi}_2\text{Se}_4$  のバンド構造

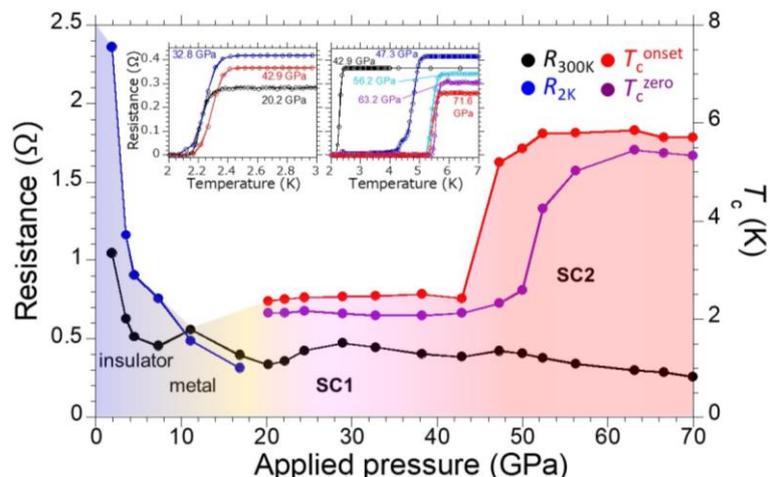


図 2  $\text{SnBi}_2\text{Se}_4$  の圧力相図. 挿入図は超伝導転移近傍の  $R$ - $T$  特性

## 文 献

(1) R. Matsumoto et al., arXiv: 1806.09284 (2018).

(2) R. Matsumoto et al., Appl. Phys. Express **11**, 053101 (2018).