

「ホウ素，硬い半導体による高 T_c 超伝導物質探索」

Survey of high T_c materials in hard semiconducting boron crystals

白井光雲

Koun Shirai

大阪大学・産業科学研究所

ISIR, Osaka University, 8-1, Mihogaoka, Ibaraki, Osaka 567-0047

軽い半導体は固いものも多く，十分なドーピング量が達成できるならばフォノン媒介の機構によっても T_c が 50K を上回る超伝導出現の可能性はある。そのような硬い半導体を用いた新たな超伝導体の物質探索を行っている。昨年度までは α 相のホウ素による超伝導実現をめざし、高圧[1]、ドーピング[2]とも達成した。さらにドーピングの最適化という課題は引き続きめざすが、今年度からは探索する物質を以下のように拡大した。まだ試行錯誤の段階であるが、選択としてはより広がった。

1) α -tetragonal 相のボロンの構造探索。 α -rhombohedral 相と β -rhombohedral 相は超伝導が実現されている。しかしそれ以外のボロンの構造ではまだ実現されていない。その中で α -tetragonal 相は構造自体疑問視されている。しかし最近 Ekimov が高圧で作成することに成功した[3]。しかし構造には疑問も多く、理論からその存在を検証する必要があり、第一原理からの構造探索を行っている[4]。その構造安定化には、最近に β -rhombohedral において判明されたフラストレーションが寄与していると考えられる。

2) ボロンカーバイトはある組成で金属となり、超伝導となり $T_c \sim 40\text{K}$ 以上と予測されている[5]。しかしながら実験的には、半導体でドーピングにも成功していない。どうしてそうなるのかを理論から研究している[6]。それにより、金属化の方法が提案されると期待される。また実験グループと共同して金属相をめざす。

3) 六方晶の BN に C をドーピングすることは行われているが、これまでのところ金属にはならない。最近、山中（広島大）により $(\text{BN})_8\text{C}$ という組成の結晶が合成された[7]。構造はまだわかっておらず、それを第一原理計算で調べる。併せてドーピングによる金属化の可能性を探る。

[1] K. Shirai, H. Dekura, Y. Mori, Y. Fujii, H. Hyodo and K. Kimura, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **80**, (2011) 084601

[2] H. Dekura, K. Shirai, A. Yanase, *Phys. Rev. B* **84**, 094117 (2011).

[3] E. A. Ekimov and I. P. Zibrov, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **12**, 055009 (2011).

[4] N. Uemura and K. Shirai, *Japan-France Joint Seminar*, (2012).

[5] M. Calandra, N. Vast, and F. Mauri, *Phys. Rev. B* **69**, 224505 (2004).

[6] K. Sakuma and K. Shirai, *2013 Spring Meeting of Jpn. Phys. Soc.* (2013).

[7] S. Yamanaka, *Japan-France Joint Seminar*, (2012).