17a-C8-4

第一原理計算に基づく高圧力下での銅酸化物超伝導体の物性の解析

First principle calculation of physical properties of cuprate superconductor under high pressure

九州工業大学　　和崎 省伍　堀出 朋哉　美藤 正樹　松本 要

Kyusyu Institute of Technology

Shogo Wasaki , Tomoya Horide , Masaki Mito , Kaname Matsumoto

Email: na0065s@post.matsc.kyutech.ac.jp

緒言　近年、超伝導体に圧力をかけることでT_Cが上昇するといった、高圧力下での超伝導体の物性の向上が確認されている。圧力によって格子定数、隣接原子の原子間距離を変化させるため、電子の波動関数の重なりが変化し、電子間相互作用も大きく変化する。そのため、磁性が消失して新たに超伝導が現れる現象が観測されている。今回の研究では、物性解明のため第一原理計算を用いて、数ある超伝導体の中で転移温度が高く資源的にも有望で実用化に有用な Y123(化学式$YBa_2Cu_3O_7$)と Y124(化学式$YBa_2Cu_4O_8$)の圧力と電子状態との関係について検討することを目的とした。

研究方法　今回の計算は、第一原理電子計算プログラム VASP による解析を行った。Y123、Y124 の結晶モデルを作成し、それぞれ外力 0GPa、2.5GPa、5GPa、7.5GPa、10GPa の静水圧をかけて構造最適化計算を行い、次に、最適化された構造について状態密度の計算を行った。

結果と考察　構造最適化計算の結果について、圧力をかけていくと、Y123 では a 軸長、b 軸長がほぼ同じくらい減少するのに対し、Y124 では a 軸長が b 軸長よりも大きく減少する結果となった。これは、Y124 の結晶構造(図 1)が、b 軸方向に CuO 鎖が 2 重に並ぶ構造をとるからであると考えられる。

状態密度図の結果(図 2)について、フェルミエネルギーでの状態密度は主に Cu が占めており、Y123 では圧力をかけていくと、フェルミエネルギー(エネルギー準位が 0eV)での状態密度が圧力 2.5GPa で最も大きくなり、Y124 ではフェルミエネルギーでの状態密度が圧力 7.5GPa で最大となり、これらのふるまいはT_Cの圧力依存性と関係があると思われる(図 3)。Y123 と Y124 で結果が異なるのは、Y124 が a 軸長の大きな収縮によって、超伝導に有利な結晶構造になったのではないかと考えられる。

結言　構造最適化の結果は、文献のデータと比較して似た傾向を示していたため、第一原理計算による計算シミュレーションの再現性は十分であると判断できる。また、状態密度の結果と文献の比較から、フェルミエネルギーでの状態密度はT_Cに影響すると考えられる。

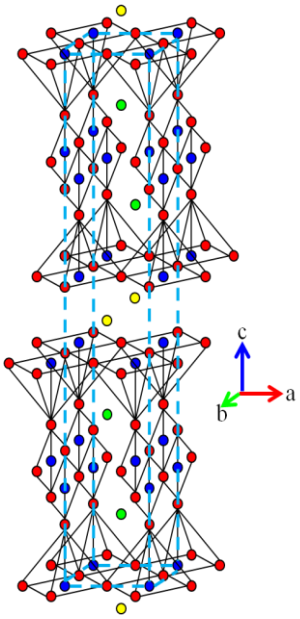

図 1.　Y124 の結晶構造

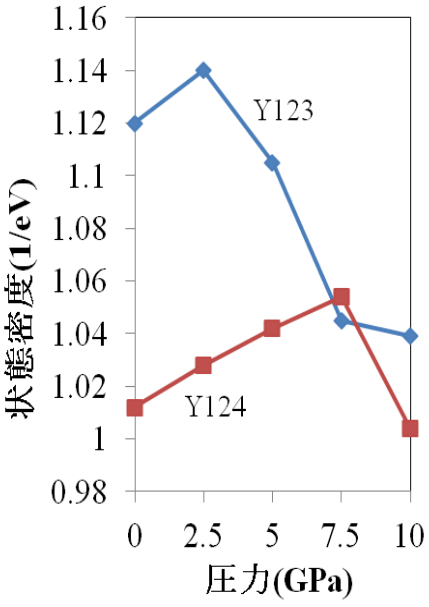

図 2.　圧力と Cu の状態密度の関係

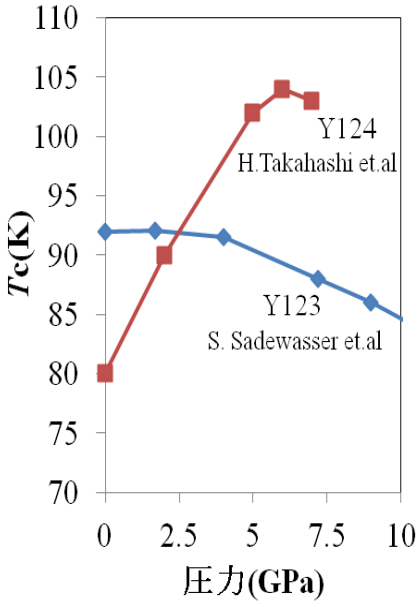

図 3.　圧力と T_C の関係

© 2013 年　応用物理学会