

モリブデン系酸化物人工超格子による超伝導の理論的検討

Theoretical study on superconductivity in molybdenum oxide artificial superlattice

京大工¹, 阪大理² ○(M1) 山科 直也¹, 高津 浩¹, 黒木 和彦², 越智 正之², 陰山 洋¹

Kyoto Univ.¹, Osaka Univ.², °Naoya Yamashina¹, Hiroshi Takatsu¹, Kazuhiko Kuroki², Masayuki

Ochi², Hiroshi Kageyama¹

E-mail: yamashina.naoya.85e@st.kyoto-u.ac.jp

フェルミ準位近傍に wide-narrow バンドが共存している系は、高温超伝導体の候補であることが理論的に指摘されていた[1]。SrCu₂O₃や Sr₃Mo₂O₇が wide-narrow バンド共存系の候補物質であることが指摘されているものの超伝導は観測されていない。その理由として前者は超伝導発現のための電子ドーピングが十分に達成されていないこと、後者は酸素欠損の影響による問題が挙げられている[2]。

本研究では薄膜成長によって、モリブデン系酸化物を用いた人工超格子を作成し、対応する人工超格子のモデルを第一原理計算によってバンド分散の変化を検証した。その結果、人工超格子の各相の膜厚を制御することでバンド分散の制御ができることを示唆する結果を得られ、特に各酸化物相の膜厚を制御して、積層させることによって narrow バンドが実現することが明らかになった。また、膜厚を変化に対して密度揺らぎ近似によって超伝導発現の検討を行った。

- [1] K. Kuroki, T. Higashida, and R. Arita, “High-Tc superconductivity due to coexisting wide and narrow bands: A fluctuation exchange study of the Hubbard ladder as a test case,” *Phys. Rev. B* 72, 2–5, 2005
- [2] D. Ogura, H. Aoki, and K. Kuroki, “Possible high- Tc superconductivity due to incipient narrow bands originating from hidden ladders in Ruddlesden-Popper compounds,” *Phys. Rev. B* 96, 1–8, 2017