第一原理計算と量子多体計算による $SrTiO_3$ の電子状態と超伝導

新潟大院自然，新潟大理 [A] 三重大工 [B]
伊海田陸，関川卓也，大野義章 [A]，佐野和博 [B]

Electronic states and Superconductivity of $SrTiO_3$
based on the first-prinsiples and quantum many-body calculations

Graduate School of Science and Technology Niigata Univ.,
Faculty of Science Niigata Univ.[A], Mie Univ.[B]
R. Ikaida, T. Sekikawa, Y. Ōno[A], K.Sano[B]

基盤材料として広く用いられているペロブスカイト型 Ti 酸化物 $SrTiO_3$（図 1）は、約 3.2eV のバンドギャップをもつ絶縁体であるが（図 2）、Nb 置換により電子をドープした $SrTi_{1-x}Nb_xO_3$ は $x=0.0001$〜0.05（キャリア濃度：$n=10^{18}$〜$10^{21}/cm^3$）で超伝導を示し、その転移温度 T_c は x〜0.008（n〜$10^{20}/cm^3$）で最高値 0.45K となるドーム状の x 依存性を示す[1]。また、還元により電子ドープした $SrTiO_{3-\delta}$ は $n=5\times10^{17}$〜$5\times10^{18}/cm^3$ で超伝導を示し、その転移温度は n〜$2\times10^{18}/cm^3$ で最高値 0.2K をとるドーム状の x 依存性を示す[2]。Shubnikov–de Haas の実験によると[2]、ドープ量の増大とともにフェルミ準位を切る伝導バンド（主に Ti の t_{2g} 軌道からなる 3 バンド）の本数は 1→2→3 と変化し、その電子状態の変化と T_c の顕著なドーピング依存性との関係も注目されている。理論的には、第一原理計算に基づいてフォノンに加えてプラズモン効果も考慮した McMillan の式による最近の解析でも実験の T_c をかなり過小評価しており[3]、フォノン機構かどうかも含めて超伝導メカニズムは未解明である。

そこで本研究では、$SrTiO_3$ の第一原理計算に基づいて導出した 3 バンド有効模型（図 2）に基づいて、電子間クーロン相互作用と電子フォノン相互作用の効果を乱雑位相近似（RPA）の範囲で考慮し、それらの効果により増強される電子系の揺らぎ（強誘電揺らぎや軌道揺らぎ）、および、その揺らぎに媒介される超伝導の可能性について調べた結果を報告する。

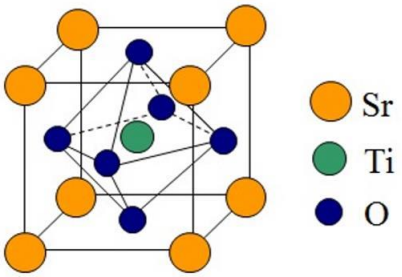

図 1 ：$SrTiO_3$ の結晶構造

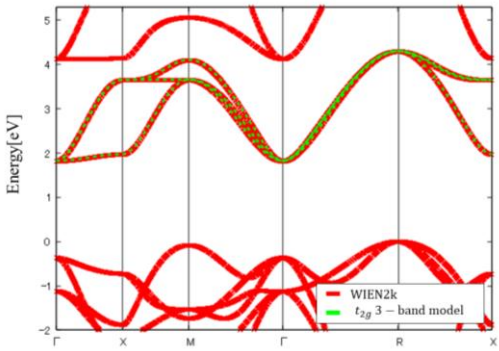

図 2：$SrTiO_3$ のバンド構造

[1] J. F. Schooley *et al*., Phys. Rev. Lett. **14**, 305 (1965)
[2] X. Lin *et al*., Phys. Rev. Lett. **112**, 207002 (2014)
[3] 枡田佳美：修士論文（三重大学大学院工学研究科）(2021)

© 2022年 応用物理学会