

第一原理計算に基づく表面高温超伝導の候補物質 A_xWO_3 表面の電子状態

新潟大院自然, 新潟大理^A

関川卓也, 川井弘之, 大野義章^A

Surface electronic state of possible high- T_c surface superconductor A_xWO_3

based on the first-principles calculation

Graduate School of Science & Technology, Niigata Univ., Department of Physics, Niigata Univ.^A

T. Sekikawa, H. Kawai, Y. Ōno^A

約 3eV のバンドギャップをもつ絶縁体 WO_3 にアルカリ金属 (電子) をドーブしたタングステンブロンズ A_xWO_3 は、 x が 0.15~0.3 のとき超伝導を示し、その T_c は x の減少とともに急増することが知られていたが[1]、希薄 ($x \sim 0.05$) にドーブされた A_xWO_3 の固体表面で T_c が 91K ($A=Na$) [2]や 120K ($A=H$) [3]の表面高温超伝導が報告され、さらに注目を集めている。最近、バルクの T_c の x 依存性は、第一原理計算に基づいてプラズモン効果を考慮に入れた McMillan の式を用いて良く再現されたが[4,5]、表面の電子状態や表面超伝導については未だ議論されていない。

そこで本研究では、第一原理計算 (OpenMX コード) に基づいて、14 層スラブモデルを用いて WO_3 表面の電子状態を調べた。バルクのバンド分散の結果 (図 1(a)) は、 A_xWO_3 の ARPES 実験[6]によるバンド分散と、電子ドーブの効果を rigid band shift で考慮すると良く整合している。一方、14 層スラブモデルのバンド分散 (図 1(b)) には、伝導バンドより約 1 eV 下方に in-gap バンドが出現した。この in-gap バンドは主に表面の 1~2 層の軌道で構成されており、希薄な電子ドーブを上述の rigid band shift で考慮すると、表面高温超伝導の発現に主要な役割を果たしていると考えられる。In-gap バンドの詳細や高温超伝導の可能性については当日報告する。

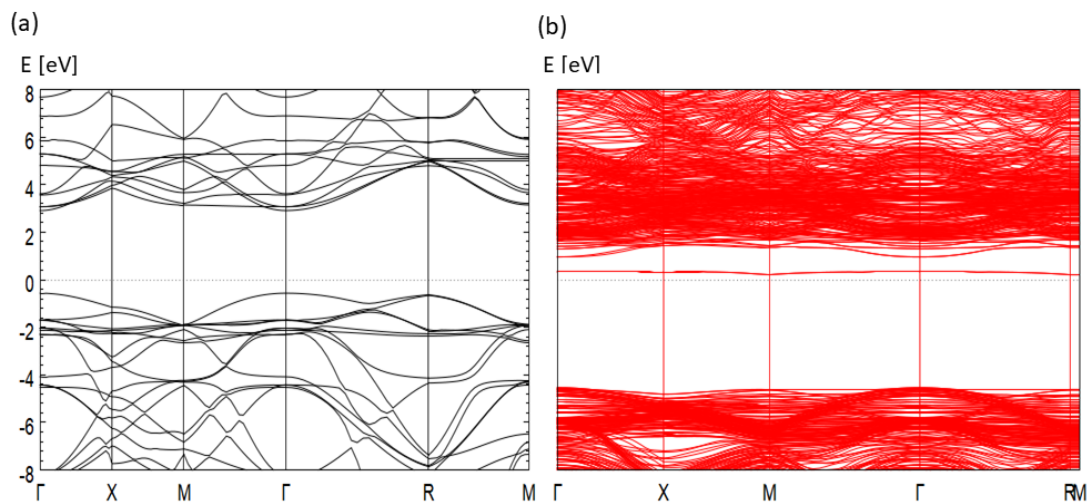


図 1. Tetragonal 構造の WO_3 のバンド分散. (a) バルク、および、(b) 14 層スラブモデル.

Numerical calculations were performed using Oakforest-PACS system provided by Multidisciplinary Cooperative Research Program in CCS, University of Tsukuba, and MASAMUNE-IMR system provided in CCMS, IMR, Tohoku University.

- [1] H. R. Shans, Solid State Commun. **15**, 753 (1974).
- [2] A. Shengelaya, S. Reich, Y. Tsabba, K. A. Müller, Eur. Phys. J. B **12**, 13 (1999).
- [3] S. Reich *et al.*, J. Supercond. Nov Magn **22**, 343 (2009).
- [4] T. Sekikawa *et al.*, JPS. Conf. Proc. **30**, 011043 (2020).
- [5] K. Sano, Y. Nitta and Y. Ōno, J. Phys. Soc. Jpn. **89**, 113704 (2020).
- [6] S. Raj *et al.*, Phys. Rev. B **75**, 155116 (2007).