

第一原理計算による WO₃ ナノワイヤの電気伝導と超伝導の検討 II

First-principles calculation of WO₃ nanowire electric state and superconductivity II

新潟大院自然^A, 東大院工^B, 九大先導研^C, 新潟大理^D

○(D1) 関川卓也^A, 長島一樹^B, Guozhu Zhang^B, 柳田剛^{B,C}, 大野義章^D

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

School of Engineering, The Univ. of Tokyo^B

IMCE Kyushu Univ.^C,

Department of Physics, Niigata Univ.^D

OT. Sekikawa^A, K. Nagashima^B, G. Zhang^B, T. Yanagida^{B,C}, Y. Ōno^D

タングステンブロンズ A_xWO₃ 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 ($x \sim 0.05$) にドーピングされた A_xWO₃ の固体表面で T_c が 91K (A=Na) [2]や 120K (A=H) [3]の高温超伝導が報告され、さらに注目を集めている。

我々は実験で報告された高温超伝導の機構を解明すべく、第一原理バンド計算から導出された WO₃ cubic の t_{2g} の 3 軌道有効模型に基づいて、構造相転移点に向けて発散的に増大する軌道揺らぎを媒介とする超伝導を議論してきた。既にこれまで、Tetragonal モードのフォノンと W-5d 電子との相互作用 g の効果が超伝導転移温度を大幅に引き上げることを RPA および Eliashberg 方程式により調べた結果を報告済みである[4]。

長島らは理解が不十分であり任意形態制御が困難であった WO₃ ナノワイヤの形成メカニズムを解明し、ナノワイヤ形態の任意制御に成功した[5]。我々はこの研究成果を受けて、報告された高温超伝導と同様に表面効果が重要になると予想される WO₃ ナノワイヤの電子状態を解明し、超伝導が発現する条件を第一原理バンド計算及び強相関の理論の観点から議論する。最終的には WO₃ において発現する高温超伝導の機構を解明し、高温超伝導ナノワイヤの実現を目指す。

現在、我々は第一原理計算ソフトウェア OpenMX による構造最適化計算で 3 つの大きさの WO₃ ナノワイヤの電子構造を手に入れた。その構造をもとにして電気伝導度の計算を行い、電子相関効果も含めた検討を行い、スケール依存性も含めて超伝導の可能性について当日議論する。

引用文献

- [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] Takuya Sekikawa, Rai Watabe, Jun Ishizuka, Hiroyuki Kawai, Yoshihiro Nitta, Kazuhiro Sano, Yoshiaki Ono, First-Principles Study and Orbital-Fluctuation Effect on the Superconductivity in Tungsten Bronze A_xWO₃, *Proceedings of International Conference on Strongly Correlated Electron Systems*, JPS Conf. Proc, 30, 011043 (2020)
- [5] Sho Nekita, Kazuki Nagashima, Guozhu Zhang, Qianli Wang, Masaki Kanai, Tsunaki Takahashi, Takuro Hosomi, Kentaro Nakamura, Tetsuya Okuyama, and Takeshi Yanagida, ACS Appl. Nano Mater. **3** 10252-10260 (2020).