



原因を明らかにすることができれば、界面自由度を利用することで超伝導転移温度を制御できる可能性があることを示しています。発見以来 30 年近くにわたって精力的に研究が行われていて、もう研究されつくされたと思っていた銅酸化物高温超伝導体の界面で発見されたこの現象の驚きの大きさは、この論文のアブストラクトの最後にある次の表現からも伺い知ることができると思います[1]。

**"cuprate superconductors have not run out of surprises"**

### 3. 界面での超伝導の自発的最適化機構の解明

我々は、銅酸化物高温超伝導体の界面で発見した転移温度一定の謎を解くために、まずは界面を記述するもっとも基本的な理論模型として積層したハバード模型の解析を行いました[2]。この際に、実験で用いられている銅酸化物を忠実に再現する第一原理的な計算結果を参考にして理論模型を構築しました。通常銅酸化物をシミュレーションするときは周期性を利用して、計算規模を削減することができますが、界面では積層方向に周期性がないために、計算規模が莫大になります。この困難はスーパーコンピュータを用いることで克服し、世界でも類をみない最大規模かつ最高精度のシミュレーションを実行しました。

その結果、固体の場合とは異なり、界面では超伝導の大きさが常に一定に保たれることを見出しました[図 2 (a)]。これは、界面の実験結果と非常によく一致する結果です。さらに、バルク結晶の場合の計算結果[図 2 (b)]と比較することによって、バルク結晶の場合に内在していた相分離への不安定性が、界面という層状構造をとることで解消して、「層間相分離」というメカニズムによって、界面では超伝導が最適になる電子濃度に自動的に保たれ、超伝導の大きさがバルク結晶の場合の最適値になるという、モデルの詳細によらない普遍的な機構があることを発見しました[図 3]。この界面での超伝導の最適化機構解明は、バルク結晶を含めた銅酸化物の超伝導そのものが、相分離やキャリア濃度の不均一性と密接に関わって生じているという、今までバルク物質だけでは難しかった高温超伝導機構の解明にも役立つものです。またバルク固体と異なり、界面では超伝導を最適化するにあたって注意深い制御の必要がないことを意味しており、高特性超伝導を探索する研究の新しい方向性を示しています。

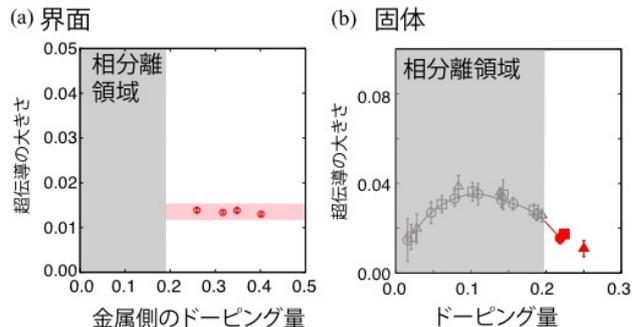


図 2：界面に対する理論模型の解析 I

(a) 銅酸化物高温超伝導体の界面を記述する理論模型を解析して、界面での超伝導の大きさを、金属側のドーピングに対してプロットした図。超伝導の大きさ(超伝導相関の遠距離部分)が、金属側のドーピング量を変化させても一定でほとんど変化していないことがわかります。さらに、この大きさはバルク結晶の場合の最大値に対応している[(b)を参照]、超伝導の大きさが界面で自動的に最適化されていることがわかりました。

(b) 固体(2次元ハバード模型)での超伝導の大きさのドーピング依存性の計算結果。灰色の相分離領域では、超伝導は安定に存在出来なため、相分離領域の端(～0.2)のところで超伝導の大きさが固体の場合の最適値になります。界面では、ほとんどこの最適値の値に自動的に保たれていることがわかりました。

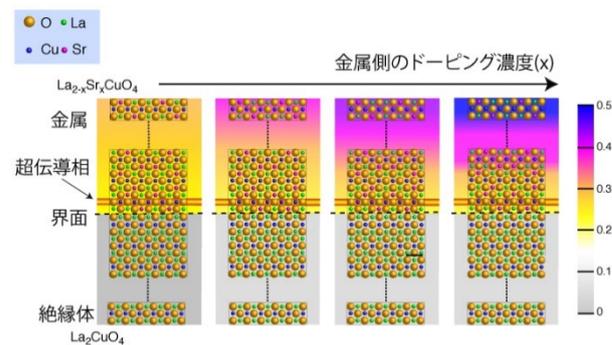


図 3：界面に対する理論模型の解析結果 II

銅酸化物高温超伝導体の界面を記述する理論模型の解析結果の模式図。金属側のドーピング量を変えても(上部の色が金属側のドーピング濃度を表しています)、界面でのドーピング濃度及び、超伝導の大きさが一定に保たれることを明らかにしました。また、超伝導は主に界面での銅の2次元平面で生じていることを明らかにしました。カラー目盛りの数値はおおよそ銅原子あたりのキャリア濃度です。

### 4. 終わりに

今までの超伝導研究は、転移温度の高い新たな化合物を探索するというバルク物質合成による研究が主流でした。しかし高温超伝導だけが持ち、その機構の本質から生じる特性を生かした制御が、人工構造において可能であることがこの研究でわかりました。シミュレーションの助けを借りて得られる理論的指針のもとに、界面のような人工構造

