



報道解禁：日本時間 2023 年 4 月 21 日午前 0 時

2023 年 4 月 20 日

兵庫県立大学

理化学研究所

超伝導の最適化：精密転移温度評価理論に基づく、 新高温超伝導物質の予言

1. 発表者：

北谷 基治（兵庫県立大学大学院理学研究科 助教、理化学研究所 創発物性科学研究センター 客員研究員）

有田 亮太郎（理化学研究所 創発物性科学研究センター チームリーダー、東京大学先端科学技術研究センター 教授）

2. 発表のポイント：

- ◆ 実験相図を適切に記述できる精密な転移温度評価理論を用いて、幅広いパラメータに対する包括的な計算を行い、超伝導（注1）転移温度を最適化するための方針を見出しました。
- ◆ その方針に従い、第一原理計算（注2）に基づいて、高い転移温度を持つ超伝導体の候補物質としてパラジウム酸化物を提案し、その相図を予言しました。
- ◆ 本研究は新たな超伝導物質群の発見につながるとともに、これまでに発見された超伝導体との比較を通して超伝導の仕組み解明への手掛かりとなることが期待できます。

3. 発表概要：

兵庫県立大学大学院理学研究科の北谷基治助教（理化学研究所 創発物性科学研究センター 客員研究員）、東京大学先端科学技術研究センターの有田亮太郎教授（理化学研究所 創発物性科学研究センター チームリーダー）、ウイーン工科大学 Karsten Held 教授らの研究グループは、高温超伝導体（注3）の転移温度の物質依存性について独自の計算プログラムを用いて高精度解析を行いました。

その結果、銅酸化物・ニッケル酸化物などの超伝導相図の説明を可能にするとともに、それらに基づいて新たなパラジウム酸化物での超伝導の提案とその相図の予言を行いました。今回の成果は新たな高温超伝導物質群の提案をするもので実社会への応用可能性を広げるとともに、これまでに発見されている高温超伝導体との比較を通して、超伝導の発現機構や



転移温度向上に対する理解が大きく進展することが期待されます。

本研究成果は、米国物理学会が刊行する学術雑誌「Physical Review Letters」誌にて4月20日午前11時（米国東部時間）にオンラインで掲載される予定です。また、当論文は特に重要な研究成果として「Editors' Suggestion」に選出されるとともに、米国物理学会オンラインマガジン「Physics」に取り上げられます。

4. 発表内容：

① 研究の背景

超伝導は低温で電気抵抗がゼロになる現象で、MRI やリニアモーターカーへ利用されるとともに、近年では量子コンピュータの素子としても使われ、さまざまな分野での応用が期待されています。その一方、実社会への応用にあたっての最大の難点はその転移温度の低さです。常圧で最高の転移温度を持つ銅酸化物超伝導体の発見以来、さまざまな類似物質の探索が行われてきました。2019年に発見されたニッケル酸化物での超伝導体は、銅酸化物との類似性から非常に注目を集めており、基盤の種類や加圧による転移温度向上など、それに基づいたより高い転移温度のための物質探索が活発に行われています。

② 研究内容と成果

以上の背景を踏まえて、本研究グループは銅酸化物・ニッケル酸化物の超伝導相図を記述できる最先端の計算手法を用いて、幅広いモデルパラメータに対する包括的な計算を行い、転移温度を最適化する可能性について調べました。動的平均場理論の空間拡張により、電子間に働く強い相互作用の効果を精密に考慮した解析を行いました。その結果、最近の実験結果である加圧による転移温度の向上を適切に説明でき、さらに最適な条件を導き出すことに成功しました（図1）。また、この結果を第一原理計算と組み合わせることで、同様の構造を持つ層状パラジウム酸化物において転移温度の向上が見込めることを示し、その相図を予言しました（図2）。

③ 社会的意義・今後の予定

今回の成果は新たな高温超伝導物質群の提案をするものでありリニアモーターカーやロスのない蓄電の実現に向けた1歩となることが期待されます。さらには、銅酸化物に代表されるこれまでに発見されている高温超伝導体との比較を通して、超伝導の発現機構や転移温度向上の方策の理解が大きく進展することが期待されます。

本研究は、科学研究費助成事業（科研費）若手研究[JP21K13887]・新学術領域研究「量子液晶の物性科学」[JP19H05825]、Austrian Science Funds (FWF)[P32044, I5398]の科学研究助成のもとに行われました。



兵庫県立大学
UNIVERSITY OF HYOGO



理化学研究所

5. 発表雑誌：

雑誌名：Physical Review Letters

論文タイトル：Optimizing Superconductivity: From Cuprates via Nickelates to Palladates

著者：Motoharu Kitatani, Liang Si, Paul Worm, Jan M. Tomczak, Ryotaro Arita, and Karsten Held

6. 問い合わせ先：

【研究内容に関すること】

兵庫県立大学大学院理学研究科 助教 北谷 基治（きたたに もとはる）

（理化学研究所 創発物性科学研究センター 客員研究員）

TEL:0791-58-0150

E-mail: kitatani@sci.u-hyogo.ac.jp

理化学研究所

創発物性科学研究センター チームリーダー 有田 亮太郎（ありた りょうたろう）

TEL: 048-467-4084

E-mail: arita@riken.jp

【報道に関すること】

兵庫県立大学播磨理学キャンパス経営部総務課

TEL：0791-58-0101

E-mail：soumu_harima@ofc.u-hyogo.ac.jp

理化学研究所 広報室 報道担当

TEL：050-3495-0247

E-mail：ex-press@ml.riken.jp

7. 用語解説：

(注1) 超伝導：

低温で電気抵抗がゼロになる現象で、MRI やリニアモーターカーへの応用がなされている。また、ロスのない蓄電や量子コンピュータなど、さまざまな分野への応用が期待されている。この現象を最初に発見したカマリン・オンネスは1913年にノーベル賞を受賞した。

(注2) 高温超伝導体：

1986年にベドノルツとミュラーによって発見された銅酸化物での超伝導に代表される、転移温度の比較的高い物質の総称。

(注3) 第一原理計算：

物質の状態を経験的なパラメータを用いずに、原子番号や構造のみから計算を行う手法のこと。本研究では「密度汎関数理論」と呼ばれる近似理論を用いて計算を行った。

8. 添付資料：

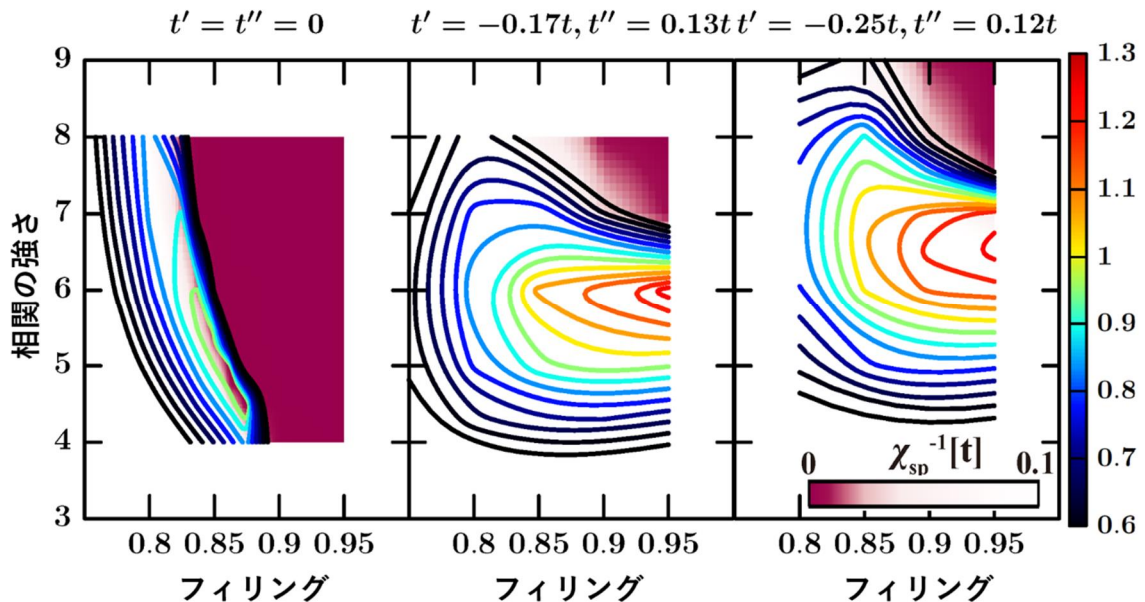


図1. 超伝導不安定性の等高線プロット。幅広い領域で精密解析を行うことで、最適な領域を見出しました。

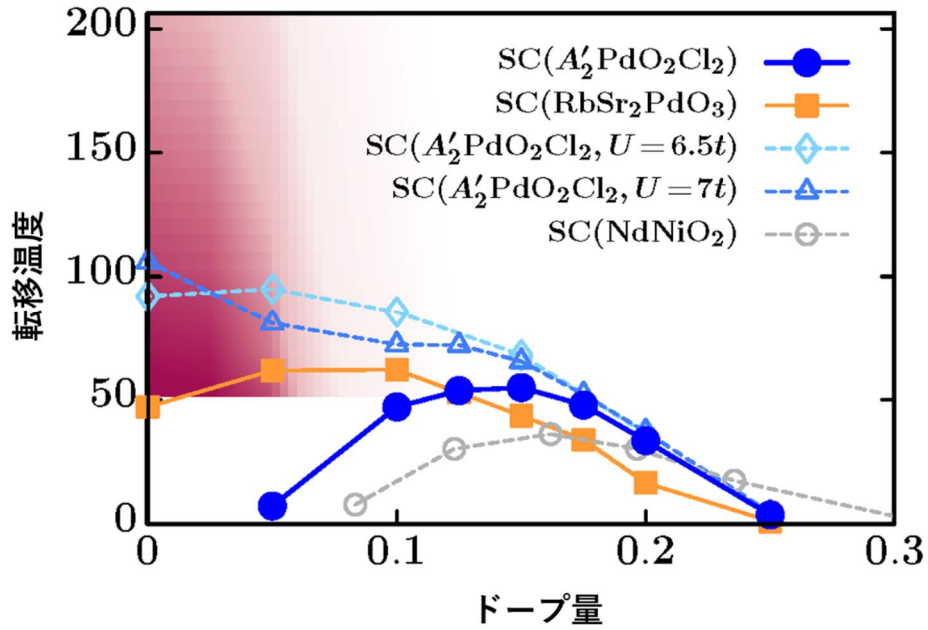


図2. 本研究で予言したパラジウム酸化物の超伝導相図。実験結果に整合することが確認されているニッケル酸化物の計算結果(グレー)に比べて転移温度が高いことが分かります。