

초전도체 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ (YBCO)와 금속 기판사이의 계면 문제 해결을 위한 CaRuO_3 (CRO)의 전자 상태 계산

Electronic structure of CaRuO_3 (CRO) for buffer layer between superconductor and metal substrates

백한중, 김양수, 노광수

한국과학기술원

(interkru2003@kaist.ac.kr)

초전도체 선재를 제작하기 위해 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ (YBCO)와 Ni substrates사이의 계면 문제를 해결하기 위한 buffer layer로써 CaRuO_3 (CRO) thin film이 제안되었는데, 이런 buffer layer의 조건으로는 Ni metal과 YBCO superconductor사이의 화학적 반응이 없어야 하고 metal component가 YBCO로 diffusion되는 것을 막아주어야 하며 substrates의 산화를 막아주어야 한다.

이런 조건을 만족시키는 것 중에서 CRO thin film이 가장 적절하였지만, CRO의 orthorhombic 구조의 distortion에 의한 lattice mismatch 문제가 발생하였다. 이러한 문제를 해결하기 위해 이론적인 구조 분석을 통한 CRO의 superconductor buffer layer로써의 가능성을 검토해 보는 것이 목적이다.

본 연구는 Dv-Xa 분자궤도법을 통해 pseudo-cubic ruthenates CaRuO_3 에 대한 전자 구조에 대한 계산을 통해 Ca 원자의 커다란 rotation motion에 의해 생기는 불완전한 ferromagnetic 성질을 oxygen 2p 오비탈과 Ru 4d 오비탈의 hybridization을 고려하여 lattice match를 위해 idealized cubic구조와 실제 orthorhombic구조에 대하여 계산하고자 하였다.