

超伝導密度汎関数理論の展開：  
粒子・ホール非対称性とプラズモン・フォノン協力  
Development of Density Functional Theory for Superconductors:  
Particle-hole Asymmetry and Plasmon-phonon Cooperation

明石遼介、有田亮太郎  
Ryosuke Akashi and Ryotaro Arita

東京大学工学系研究科物理工学専攻  
Department of Applied Physics, The University of Tokyo, Hongo Tokyo 113-8656

超伝導転移温度( $T_c$ )の高精度予言は固体物理学上の極めて困難な課題として認識されてきたが、近年の超伝導密度汎関数理論(SCDFT[1])の発展により達成への道筋がつつある。しかし現状の SCDFT の適用範囲は典型的な従来型超伝導体に限られているため、非従来超伝導体を含む一般的な超伝導体への拡張は極めて重要な意義を持つ。

現状の SCDFT においては、物質中の電子—原子・電子—電子相互作用を起源とする質量繰り込み効果および有効ペアリング相互作用はギャップ方程式の積分核  $Z$ ,  $K$  によって表現される：

$$\Delta_{nk} = -Z_{nk}\Delta_{nk} - \frac{1}{2} \sum_{n'k'} \mathcal{K}_{nk n'k'} \frac{\tanh[(\beta/2)E_{n'k'}]}{E_{n'k'}} \Delta_{n'k'}$$

我々はまず粒子・ホール非対称性の強い電子構造を持つ系の為の SCDFT の拡張を提案する。フェルミ面の上下に関する電子構造の非対称性(粒子・ホール非対称性)は  $Z$  積分核に対して数値的不安定性をもたらす為、この効果は従来の定式化においては取り入れることが出来なかった。我々は非対称性によって不安定にふるまう項が特定の極限では解析的に 0 となることを突き止め、それらを取り除くことで、電子構造の非対称性を数値的安定に取り扱う  $Z$  の新形式を構築した[2]。講演においては、非対称性が重大な影響を及ぼす例として、状態密度の非対称性が  $T_c$  を数十%下げる場合を提示する。

我々はまた、固体中の電子集団励起(プラズモン)によって引き起こされる周波数依存遮蔽クーロン相互作用の効果を取り入れる拡張も提案する。これまでの SCDFT においては遮蔽クーロン相互作用は専ら静的レベルで取り入れられてきたが、実際にはプラズモンのもたらす相互作用の動的構造は遅延効果を介して有効ペアリング相互作用を増強する[3]。計算コストを増やさずにこの効果を取り入れるために、我々は多極プラズモン近似に基づき  $K$  積分核の定式化を行った[4]。講演においては、プラズモンの効果が従来型フォノン媒介ペアリング引力と協力して高い  $T_c$  をもたらす例として、高圧下リチウムへの応用例を紹介する。

[1] M. Lueders *et al.*, Phys. Rev. B **72**, 024545 (2005); T. Kreibich and E. K. U. Gross, Phys. Rev. Lett. **86**, 2984 (2001); L. N. Oliveira *et al.*, Phys. Rev. Lett. **60**, 2430 (1988).

[2] R. Akashi and R. Arita, arXiv:1305.0390.

[3] Y. Takada, J. Phys. Soc. Jpn. **45**, 786 (1978).

[4] R. Akashi and R. Arita, arXiv:1303.5152.