

電子格子相互作用に起因する電子物性の第一原理計算

First-principles study of the effect of el-ph interaction on electronic structures

是常 隆

Takashi Koretsune

東京工業大学 大学院理工学研究科 物性物理学専攻

Department of Physics, Tokyo Institute of Technology, Ookayama, Tokyo 152-8551

近年、第一原理的に計算した電子格子相互作用を用いて格子振動が電子状態に及ぼす影響を定量的に再現できることが明らかになってきた。実際、例えばダイヤモンドにおいてバンドギャップの温度依存性が定量的に再現できることなどが示されている[1,2]。また、電子格子相互作用由来の超伝導に関しても、密度汎関数超伝導理論など、McMillan の式を超えた議論がなされるようになってきている。そこで、我々は、電子格子相互作用を利用した新たな物質設計を念頭におき、これらの格子振動の寄与を定量的に取り込む汎用的なプログラムの開発を進めてきたので、その詳細について紹介したい。

まず、格子振動が自己エネルギーを介してバンド構造を変化させる効果について議論する。この寄与の計算手法としては、電子格子相互作用の値を求めて自己エネルギーを直接計算する方法と、フローズンフォノンを用いた方法が知られている。そこで、これら2つの手法を実際に実装し、ダイヤモンドにおけるバンドギャップの変化を計算した。その結果、2つの手法の結果がほぼ一致し、また、温度依存性などの実験結果をほぼ再現できることが確認できた。これは、各々の手法で行っている近似が妥当なものであることを意味していると考えられる。本発表では、その詳細、それぞれの利点、欠点、計算精度などについて議論したい。

また、超伝導を議論するため、電子格子相互作用の値を直接 Eliashberg 方程式に代入して解くプログラムも開発している。実際、フラーレンの超伝導を例にとって計算しているので、McMillan の式との違いなどについて議論したい。

[1] F. Giustino et al, Phys. Rev. Lett. **105**, 265501 (2010).

[2] T. Koretsune and S. Saito, unpublished.