

アルカリ金属ドープフラーレン：
超伝導密度汎関数理論に基づく研究
Alkali-Doped Fullerenes:
Study based on Density Functional Theory for Superconductors

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

π 電子系における超伝導は多くの研究者が取り組んできた興味深い問題である。この分野の代表的成果として、アルカリ金属をドープしたフラーレン固体 A_3C_{60} ($A=K, Rb, Cs$) における超伝導 ($T_c \sim 40K$) の発見がある[1,2]。しかしその超伝導発現機構は未だ論争のさなかにある。実験的には従来型フォノン媒介引力機構を支持する報告[1]が多数ある一方で、試料作製技術の発達につれ非従来型機構を示唆する観測結果も報告されてきている[2]。理論的観点からは電子—格子相互作用と電子—電子クーロン相互作用の双方ともに T_c に大きな影響を及ぼすと考えられてきた[1,3]が、従来研究においては各々の効果は概ね個別に議論されており、両者を一貫した近似で同時に取り扱った結果何が言えるのかという観点からの理解は不十分である。

“電子—電子クーロン相互作用の存在下でも電子—格子相互作用起源の従来型引力機構が実験的 T_c を説明しうるのか” を検証するために、我々は電子—格子および電子—電子相互作用の双方を非経験的に取り扱う超伝導密度汎関数理論(SCDFT[4])を fcc 相 A_3C_{60} に応用し、 T_c を計算した。第一原理計算コード[5]により評価した電子—格子および電子—電子相互作用は次を示した：(i) 電子—格子相互作用による電子質量繰り込み係数 $1+Z$ は理論的典型値 $1+\lambda$ より有意に小さい。(ii) フェルミ面を形成する t_{1u} バンドと非占有 t_{1g} バンドの間の電子間相互作用は大きく、これが強い遅延効果をもたらす。上記(i)、(ii)は共に McMillan 近似公式 $T_c = (\text{フォノン周波数}/1.2) \times \exp[-1.04 (1+\lambda) / (\lambda - \mu^*(1+0.62\lambda))]$ (μ^* : 有効電子—電子遮蔽クーロン相互作用) による見積もりに比して T_c を増強する効果を持つ。しかしこれらの T_c 増強効果を導入しても最終的な T_c 計算値は 7.5 ($A=K$)、9.0 ($A=Rb$)、15.7 K ($A=Cs$) であり、実験値 (19、29、35 K) よりはるかに小さかった[6]。講演においては以上の結果に加え、実験値を再現するための手法改良の可能性を議論する。

[1] O. Gunnarsson, Rev. Mod. Phys. **69** 575 (1997); *Alkali-doped Fullerenes: Narrow-band Solids with Unusual Properties* (World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore, 2004).

[2] A. Y. Ganin *et al.*, Nat. Mater. **7**, 367 (2008); Y. Takabayashi *et al.*, Science **323**, 1585 (2009); A. Y. Ganin *et al.*, Nature **466**, 221 (2010).

[3] M. Capone *et al.*, Rev. Mod. Phys. **81**, 943 (2009).

[4] 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)

[5] <http://www.quantum-espresso.org>.

[6] R. Akashi and R. Arita, arXiv:1303.5138.