

フラーレン超伝導体の電子格子相互作用を含む低エネルギーモデル導出
Ab initio derivation of low-energy model including phonon terms for C_{60} superconductors

野村悠祐、中村和磨^A、有田亮太郎

Yusuke Nomura, Kazuma Nakamura, and Ryotaro Arita

東京大学大学院工学系研究科、^A九州工業大学大学院工学府

Department of Applied Physics, The University of Tokyo, Hongo, Tokyo, 113-8656

^AQuantum Physics Section, Kyushu Institute of Technology, 1-1 Sensui-cho, Tobata,
Kitakyushu, Fukuoka, 804-8550

アルカリ金属をドーピングしたフラーレン A_3C_{60} ($A=K,Rb$)における超伝導はその格子定数と転移温度の正の相関から、電子格子相互作用がもたらす従来型の超伝導であると考えられてきた[1]。しかし、近年発見された Cs_3C_{60} は常圧において低スピン状態の絶縁体であり、圧力をかけて格子定数を縮めることによってはじめて超伝導が発現することがわかった[2,3]。その超伝導転移温度は格子定数に対しドーム型を示す。このような転移温度の非単調なふるまいや絶縁相は、弱相関に基づくBCS的描像では理解することができず、電子相関の重要性を示唆する。第一原理理論計算による電子間相互作用の見積もりからも、フラーレン超伝導体においてクーロン相互作用がバンド幅よりも大きいことが示され、これらの物質が強相関領域にいることがわかった[4]。しかしながら、電子間相互作用の正のフント結合のみでは絶縁相の低スピン状態を説明できないことから、ヤンテラー型の電子格子相互作用も重要な役割を果たすと考えられる。これらの状況をふまえると、超伝導、金属絶縁体転移などの機構解明のためには、電子間相互作用と電子格子相互作用の両方を含む低エネルギーモデルを導出し、それらを同等に取り扱える手法による解析が必須となる。

本研究では、フラーレン超伝導体について「制限密度汎関数摂動論」[5]を用いて、低エネルギーモデルに用いられる部分的に繰り込まれた電子格子相互作用とフォノンの周波数を導出した。その結果、フォノンを媒介とする有効的な負の電子間の交換相互作用の静的部分 ($\omega = 0$) の大きさ (~ -0.05 eV) が正のフント結合 (~ 0.035 eV) よりも大きいことがわかった。これにより、有効的に負のフント結合 (~ -0.015 eV) が実現し、その結果、絶縁相においては低スピン状態が実現されると考えられる。有効的な負のフント結合と超伝導との関係性についても議論する[6]。

- [1] O. Gunnarsson, *Rev. Mod. Phys.* **69**, 575 (1997).
- [2] Y. Takabayashi *et al.*, *Science* **323**, 1585(2009).
- [3] A.Y.Ganin *et al.*, *Nature* **466**, 221(2010).
- [4] Y. Nomura, K. Nakamura, R. Arita, *Phys. Rev. B* **85**, 155452 (2012).
- [5] Y. Nomura, K. Nakamura, R. Arita, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 027002 (2014).
- [6] M. Capone *et al.*, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 943 (2009).