
2015年度夏学期 第9回 駒場物性セミナー

高圧下硫化水素における高温超伝導の 第一原理計算による解析

講師 明石 遼介 氏 (東京大学大学院 理学系研究科)

日時 2015年7月24日 (金) 午後4時50分

今シーズンから講義の時間変更に伴い、開始時間が昨年度と異なります！ご注意ください

場所 16号館 827

昨年12月、硫化水素が超高压下で金属化し、これが転移温度 (T_c)=190Kの超伝導を示すとの報告があった [1]。 T_c の最高記録は水銀系銅酸化物の発見 (高压下において $T_c = 160\text{K}$) 以降長年頭打ちになっていたが、本報告は久しぶりのレコード更新であり多くの人々の興味を引いている。

実験においては大きな同位体効果が観測されており、一方フォノンが媒介するペアリング引力が非常に強いと示唆する理論的研究も多数報告されている。このことから超伝導機構は大まかにはフォノン起源の従来型機構でよいと思われるが、さらなる T_c 上昇への道筋を見つけるためには実際どのような化合物が高 T_c をもたらしめているのかを突き止める必要がある。しかし 100GPa 以上という超高压環境での水素化合物の構造決定は非常に難しい。

「様々な組成・結晶構造を仮定した場合、各々から理論的に見積もられた T_c が実験とどの程度一致するか？」という観点から我々はこの問題を検討した [2]。結晶構造・圧力の差異が T_c にもたらす影響を定量化するために、我々は超伝導密度汎関数理論に基づく第一原理計算 [3,4] を行った。結晶構造のみをインプットとして算出した T_c を観測値と比較、次の可能性を導き出した：1, 従来の硫化水素 H_2S と異なる組成比の物質 H_3S の相が高 T_c を実現している；2, H_3S のあり得る結晶構造のうち、特定のもの単結晶が実現できれば T_c は 190K より上がる。講演においてはこの結果の紹介を、関連研究のレビューを交えつつ行う。

[1] A. P. Drozdov, M. I. Erements, I. A. Troyan, arXiv:1412.0460; A. P. Drozdov, M. I. Erements, I. A. Troyan, V. Ksenofontov, and S. I. Shylin, arXiv:1506.08190.

[2] R. Akashi, M. Kawamura, S. Tsuneyuki, Y. Nomura, and R. Arita, Phys. Rev. B 91, 224513 (2015).

[3] M. Lueders et al., Phys. Rev. B 72, 024545 (2005); M. A. L. Marques et al., Phys. Rev. B 72, 024546 (2005).

[4] R. Akashi and R. Arita, Phys. Rev. Lett. 111, 057006 (2013).

今回は冬学期で、10月頃に再開予定です。

物性セミナーのページ 「駒場物性セミナー」で検索！

駒場セミナーカレンダー (駒場内のみアクセス可)

<http://huku.c.u-tokyo.ac.jp/cgi-bin/webcal/webcal.cgi>

物性セミナー世話人： 加藤雄介 堺 和光 福島孝治 前田京剛 義口友紀