

# アルカリ金属ドーブ C<sub>60</sub> における軌道自由度の役割

筑波大学 物質工学系 鈴木修吾,<sup>1</sup> 中尾憲司

## 1 背景と目的

アルカリ金属ドーブ C<sub>60</sub> (A<sub>x</sub>C<sub>60</sub>, A はアルカリ金属) は、A<sub>3</sub>C<sub>60</sub> における超伝導の発見を契機に、多くの研究がなされてきた物質である。研究が進展するにつれ、A<sub>3</sub>C<sub>60</sub> の隣接相である A<sub>4</sub>C<sub>60</sub> は非磁性絶縁体であることが示され、次第にこの物質群の異常性が明らかになってきた。近年、このような異常性を理解するためには、電子間相互作用と電子格子相互作用がともに重要であることが認識されはじめており、超伝導体 A<sub>3</sub>C<sub>60</sub> と非磁性絶縁体 A<sub>4</sub>C<sub>60</sub> を統一的に説明する理論の構築、さらには、これに基づく A<sub>3</sub>C<sub>60</sub> における超伝導発現機構の解明が切望されている。

本研究の目的は、アルカリ金属ドーブ C<sub>60</sub> の電子状態における軌道自由度の役割について調べ、A<sub>3</sub>C<sub>60</sub> と A<sub>4</sub>C<sub>60</sub> を統一的に説明可能なモデルを基に、A<sub>3</sub>C<sub>60</sub> における超伝導発現機構を明らかにすることである。まず、このモデルを基に A<sub>3</sub>C<sub>60</sub> の BCS 理論を構築し、A<sub>3</sub>C<sub>60</sub> における超伝導が軌道自由度に由来する対遷移相互作用を起源とすることを示す。さらに、この対遷移相互作用による超伝導発現機構は実空間における描像では動的ヤーン-テラー効果であり、また、波数空間における描像ではスール-近藤機構であることを示す。

## 2 モデル

電子間相互作用と電子格子相互作用をともに考慮するため、ハミルトニアン

$$H = \sum_{m,n,a,b,\sigma} t_{ab}^{mn} a_{m\sigma}^\dagger b_{n\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma,\tau} \sum_{m,a,b,c,d} V_{abcd} a_{m\sigma}^\dagger c_{m\tau}^\dagger d_{m\tau} b_{m\sigma} \quad (1)$$

で記述されるモデルを導入する。ここで、 $t_{ab}^{mn}$  は  $m$  番目の C<sub>60</sub> 分子の  $t_{1u}$  軌道  $a$  と  $n$  番目の C<sub>60</sub> 分子の  $t_{1u}$  軌道  $b$  の間の電子移動積分である。また、 $V_{abcd}$  は電子間相互作用と電子格子相互作用をともに含んだ有効電子間相互作用であり、

$$V_{\text{intra}} = U_{\text{intra}} - \frac{1}{2} S_{Ag} - \frac{1}{2} S_{Hg} \quad (2)$$

$$V_{\text{inter}} = U_{\text{inter}} - \frac{1}{2} S_{Ag} + \frac{1}{4} S_{Hg} \quad (3)$$

$$J = J_C - \frac{3}{8} S_{Hg} \quad (4)$$

$$K = K_C - \frac{3}{8} S_{Hg} \quad (5)$$

<sup>1</sup> E-mail: shugo@ims.tsukuba.ac.jp

の4種類に分類される。ここで、 $U_{\text{intra}}$ 、 $U_{\text{inter}}$ 、 $J_C$ 、 $K_C$ は、それぞれ、軌道内クーロン斥力、軌道間クーロン斥力、クーロン斥力由来の交換相互作用、クーロン斥力由来の対遷移相互作用である。また、 $S_{Ag}$ 、 $S_{Hg}$ は、それぞれ、伝導電子と全対称モード、ヤーン-テラー・モードとの結合定数である。

### 3 超伝導

モデル・ハミルトニアン (1) に対し、BCS 型の波動関数

$$|\Psi\rangle = \prod_{\alpha\mathbf{k}} (u_{\alpha\mathbf{k}} + v_{\alpha\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) |0\rangle \quad (6)$$

を試行関数として採用し、基底状態を求める [1, 2]。ここで、 $\alpha_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$  はバンド  $\alpha$  に波数  $\mathbf{k}$ 、スピン  $\sigma$  の電子を生成する演算子である。 $u_{\alpha\mathbf{k}}$ 、 $v_{\alpha\mathbf{k}}$  は変分パラメータである。計算の結果、超伝導状態は、条件

$$V_{\text{intra}} + 2K < 0 \quad (7)$$

が成り立つときに発現することがわかった。これは、対遷移相互作用  $K$  によるエネルギーの利得が軌道内斥力  $V_{\text{intra}}$  に対して優位となることを意味する条件である。このとき、対遷移相互作用により実現される  $A_3C_{60}$  の超伝導状態では  $C_{60}^{2-}$  分子と  $C_{60}^{4-}$  分子が共存する状態が実現されており、また、これら  $C_{60}^{2-}$  分子、 $C_{60}^{4-}$  分子は動的ヤーン-テラー効果により異なる分子歪の線形結合の状態にあることがわかった。さらに、BCS 波動関数 (6) によるエネルギーの期待値を解析すると、超伝導状態の安定化には異なるバンド間の対遷移過程が重要な役割を果たしていることがわかった。つまり、 $A_3C_{60}$  の超伝導発現機構は、実空間における描像では動的ヤーン-テラー効果であり、また、波数空間における描像ではスール-近藤機構であると解釈できる。

### 4 結論

$A_3C_{60}$  の超伝導における軌道自由度の役割について調べた。その結果、この物質の超伝導発現機構は、実空間における描像では動的ヤーン-テラー効果であり、また、波数空間における描像ではスール-近藤機構であることがわかった。つまり、 $A_3C_{60}$  の超伝導において、軌道自由度に由来する対遷移相互作用が電子間引力の起源として重要な役割を果たしているといえる。

### 参考文献

- [1] 鈴木修吾, 千田忠彦, 岡田晋, 中尾憲司, 固体物理 **36** (2001), 71.
- [2] S. Suzuki, S. Okada, and K. Nakao, J. Phys. Soc. Jpn. **69** (2000), 2615.