

目 次

第 1 章 高压下水素化物の室温超伝導	1
1.1 高压下水素化物の研究の歴史	1
1.2 高温超伝導の発見	8
1.2.1 H_3S	8
1.2.2 LaH_{10}	11
第 2 章 超伝導体の構造予測	17
2.1 ポテンシャルエネルギー曲面	18
2.2 ランダム構造探索法	21
2.3 粒子群最適化法	23
2.4 進化アルゴリズム	25
2.5 擬似焼鈍法とベイスンホッピング法	27
2.6 極小値ホッピング法	28
2.7 メタダイナミクス	31
第 3 章 超伝導の第一原理計算	33
3.1 はじめに：何を計算しなければならないか？	33
3.2 格子振動とその量子化	38

3.2.1	格子振動の計算	39
3.2.2	格子振動の量子化	40
3.3	電子状態計算：密度汎関数理論	44
3.3.1	ホーエンベルグ-コーンの定理	44
3.3.2	コーン-シャムの方法	51
3.3.3	局所密度近似	55
3.3.4	バンド計算	56
3.4	フォノンの計算：密度汎関数摂動論	58
3.5	電子格子相互作用	59
3.5.1	原子の変位と電子格子相互作用	59
3.5.2	電子格子相互作用に媒介された電子間引力	61
3.6	遮蔽された電子間相互作用	63
3.7	非調和振動	66
3.8	BCS 理論	70
3.8.1	グリーン関数の運動方程式	71
3.8.2	ギャップ方程式の解	73
3.9	エリアシュベルグ理論	76
3.9.1	グリーン関数の運動方程式	76
3.9.2	南部形式	79
3.9.3	等方的ギャップ方程式	81
3.9.4	遅延効果	83
3.9.5	転移温度の近似式	85
3.10	超伝導密度汎関数理論	88
3.10.1	コーン-シャム-ボゴリユーボフ-ド・ジャン方程式	88
3.10.2	ギャップ方程式	91
3.11	計算精度について	93

第 4 章 代表的な水素化物超伝導体	95
4.1 PdH	95
4.2 H ₃ S	99
4.3 LaH ₁₀	104
4.4 三元素系	109
参考図書	111
索 引	113