

ボロン系クラスター固体へのドーピングと自己補償の利用

ドナーとアクセプターの共存

→ 自己補償物質

電子不足クラスター
(アクセプター1)



LiやMgのドーピングが可能
(約10~20原子%)

↓
最初は、侵入型サイト
が抜けて補償

次に、原子空孔が生じて補償

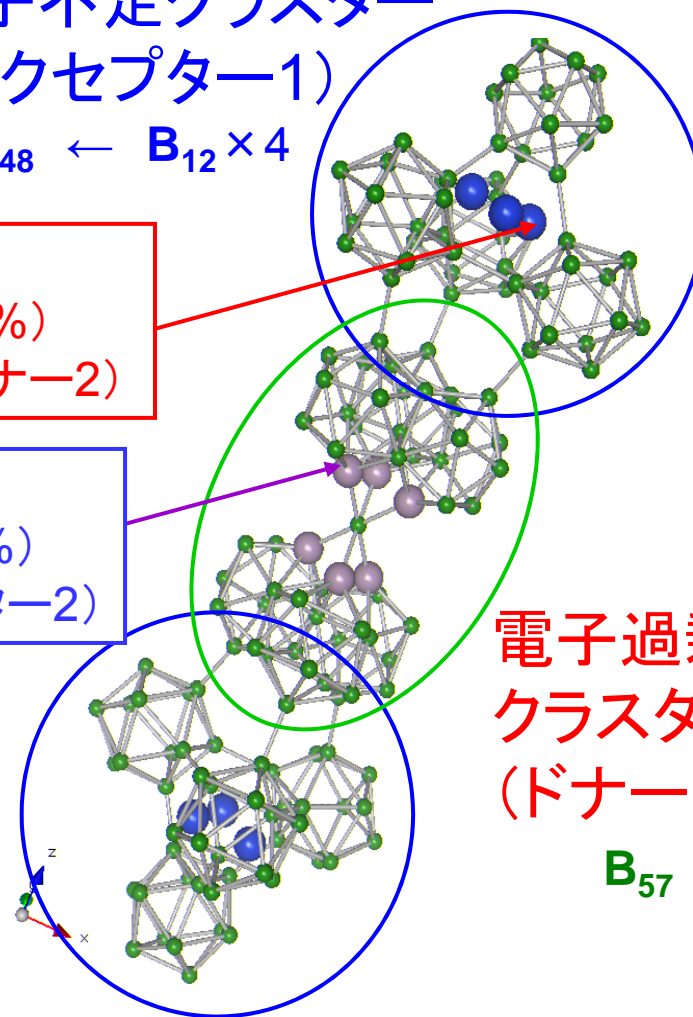
↓
ドーピング前も
他元素ドーピングに対しても
自己補償

侵入型サイト
B16 (占有率33%)
電子を供給 (ドナー2)

B13サイトの
原子空孔 (占有率67%)
電子を奪う (アクセプター2)

電子過剰
クラスター
(ドナー1)

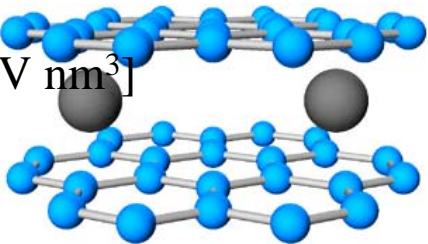
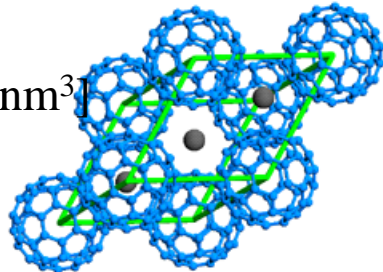
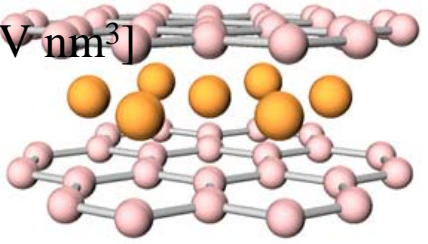
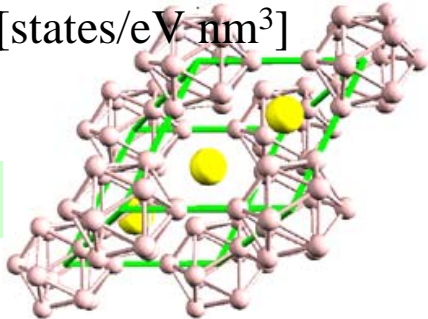
B_{57}



ボロン系クラスター固体における新規超伝導材料探索

高温超伝導材料として期待できる要素

- ① 高対称性 ② 軽元素 ③ 強い電子格子相互作用

	層状物質	クラスター固体
Carbon	$KC_8: T_c \sim 0.1[K],$ $N(\epsilon_F) \sim 14[\text{states/eV nm}^3]$  KC₈	$K_3C_{60}: T_c \sim 20[K],$ $N(\epsilon_F) \sim 25[\text{states/eV nm}^3]$  K₃C₆₀
Boron	$MgB_2: T_c \sim 40[K],$ $N(\epsilon_F) \sim 24[\text{states/eV nm}^3]$  MgB₂	$Li_xB_{12}: N(\epsilon_F) \sim 39[\text{states/eV nm}^3]$ Mg_xB_{12}, Mg_xB_{105} $T_c ?$ Li₃B₁₂ 

phonon振動数

$$T_c \propto \hbar\omega \exp\left(-\frac{1}{N(E_F) \cdot \lambda}\right)$$

フェルミ準位の状態密度

電子格子
相互作用定数