

## SICORP EU final summary

**Project title : Light element molecular superconductivity : an interdisciplinary approach (LEMSUPER)**

**Coordinator of the EU part of the project : Kosmas Prassides (University of Durham)**

**Coordinator of the Japanese part of the project : Yoshihiro Iwasa (University of Tokyo)**

**Project period : 2011.10.1-2015.3.31**

### CONSOLIDATED PUBLIC SUMMARY IN ENGLISH

**Light element molecular superconductivity: an interdisciplinary approach**

***Catchy title of the project***

**Superconductivity lights up**

#### **Title 1**

To understand existing and design new light element molecular superconducting systems with high transition temperatures

The objective of the project was to develop methodology to design light element (B, C, O) cluster/molecule-based superconducting systems with high transition temperatures. This was achieved by integrating chemical synthesis of new materials with physical control of electron density and delocalisation underpinned by theoretical understanding benchmarked against evidence from advanced spectroscopies and electronic property measurements in the unique multidisciplinary training environment provided by ten world-leading groups from the EU and Japan. The step change in the fundamental understanding of the novel competing electronic ground states from which superconductivity emerged was achieved by focussing on light element materials in which a fine balance exists between electron correlations and electron-phonon coupling. Light elements are

cheap, abundant, non-toxic and environmentally benign and thus ideal candidates for sustainable energy-saving superconductor technologies without the need to use toxic and/or rare elements. The discovery of light element molecular superconductors with figures-of-merit needed for applications is a grand challenge requiring the fundamental research proposed here to identify proof-of-concept materials and scientific understanding.

In order to achieve the understanding and the experience necessary to design light element molecular superconducting systems, the synergic capabilities of the project team were integrated into four Core Technology Platforms to enable the synthesis-driven study of basic mechanisms of superconductivity. The Synthesis and Characterisation Platform addressed the synthetic targets of new structural and chemical classes of light element solids with enhanced functionalities defined as high superconducting transition temperatures and new competing electronic ground states (*e.g.* cooperative magnetism) for *s/p*-electron systems. The Control Platform addressed the systematic control of the competition between insulating and superconducting behaviour of these systems *via* the application of external stimuli such as ultrahigh pressures and very strong electric fields. The Measurement Platform addressed the identification of the new electronic ground states and their evolution with changes in external parameters. The Theory and Modelling Platform addressed the understanding of the electronic properties by modelling and evaluation of the key structural and chemical components of light element molecular superconductors and, through working-level engagement with the other platforms new high  $T_c$  materials.

### **Project main results**

Turning an insulator into a superconductor is a challenge that has occupied scientific research for decades – superconductors have no electrical resistance and carry electricity without losing energy, so finding new superconductors with enhanced performance is of paramount importance for energy applications. Most superconductors have simple structures built from atoms, but superconductors made from molecules arranged in regular solid structures also exist. Here we have

unveiled new molecular superconductors by resorting to chemistry (doping) and by employing physical means (application of ultrahigh pressures, generation of ultrahigh charge carrier densities by electrical fields). The success of our synergic approach (synthesis/measurement/theory) is illustrated by our results on the unconventional fulleride superconductors with the highest working temperature (at 38 K) for any molecular system where we showed that the electronic structure of the molecular building block directly controls the formation of the state of matter (an anomalous metal), from which both the superconductor and the parent antiferromagnetic Mott insulator emerge, providing this connection between molecule and property. As chemists can create new molecules, this opens the way to designing-in features conferring high-temperature superconductivity to classes of superconductor that are not restricted by the elements of the Periodic Table.

#### **Added Value from International collaborative work**

The project organized two open international conferences on superconductivity in Trieste and Okayama, providing a leading scientific forum in which the LEMSUPER research activity was promoted. In addition, we held 7 internal meetings so far, where we frequently had heated discussions on scientific issues. This has cemented extremely strong human relations between the partners. Testament to the defining influence of the human interactions in the LEMSUPER project is the move of the EU coordinator (Prof Prassides) to a permanent academic position in Japan (Tohoku University) and of Prof Akimitsu to the Okayama University partner institution.

#### **Scientific production and patents since the beginning of the projects**

The consortium has produced to date 116 published articles (including 3 in *Science*, 7 in *Nature Materials/Physics/Communications/Nanotechnology*, 2 in *PNAS*, and 9 in *Phys. Rev. Lett.*) and 143 invited international conference presentations, including 8 plenary and 5 keynote lectures." Two applications for Japan Patents on "Electrolyte memory device" (2013-30527), "Voltage controllable window" (2013-028473) were published, and one application "Gas sensor" (2013-5235215) was registered.

## **Illustration**



The project conducted comprehensive research on light element molecular superconductors among which fullerenes occupy a prominent position

## **Factual information**

The LEMSUPER project is a fundamental research project coordinated by Professor Kosmas Prassides (Durham University, UK) in EU and by Professor Yoshihiro Iwasa (The University of Tokyo) in Japan. It associated Matthew J. Rosseinsky (University of Liverpool, UK), Denis Arcon (Jozef Stefan Institute, Slovenia), Claudia Felser (Max Planck Institute Dresden, Germany) and Erio Tosatti (SISSA, Italy), as well as the Jun Akimitsu (Aoyama Gakuin University), Hideo Aoki (The University of Tokyo), Tomoko Kagayama (Osaka University) and Yoshihiro Kubozono (Okayama University) laboratories. The project started on October 1<sup>st</sup>, 2011 and lasted 42 months. EU grant amounted to €1,606,660 and JST grant amounted to ¥200,000,000.

## CONSOLIDATED PUBLIC SUMMARY IN JAPANESE

### 研究題目

軽元素・分子系高温超伝導への多面的アプローチ

### Catchy title of the project

未来を照らす軽元素超伝導

### Title 1

高い超伝導転移温度を有する軽元素・分子系超伝導体を理解し、新物質を設計すること

本研究の目的は、軽元素（ホウ素、炭素、酸素）のクラスターや分子をベースにした高い転移温度を有する超伝導体を理解し、新規物質の設計指針を明らかにすることです。本研究では、その目的を、EU と日本における当該物質群の 10 人リーダーに率いられたグループがそれぞれに有する化学的物質合成と物質パラメータの物理的制御を組み合わせることによって達成しました。特に、先端分光、精密構造解析、電子物性計測などの実験とそれらに裏打ちされた理論モデルという多面的な技術を糾合したことが本プロジェクトの特徴です。もっとも中心的な成果は、分子性超伝導最高の臨界温度を有する物質の電子状態の理解が飛躍的に進んだことです。すなわち、電子相間と電子—格子相互作用、さらには分子間の波動関数の重なりという 3 つのパラメータの絶妙なバランスの上に生じた異常な金属状態のなかで超伝導が発現するというものです。軽元素は、安価で豊富、毒性もなく環境負荷の小さいため、省エネ技術の核となる超伝導物質にとって理想的な元素であり、したがって、高い性能指数を有する軽元素・分子性超伝導体の開発研究は、持続可能な社会の実現にとって非常に重要な国家的課題の一つと言えます。本プロジェクトでは、その基礎となる原理の証明と科学的な理解の深化に成功しました。

上記の目的を達成するため、プロジェクトチームを 4 つのコアテクノロジープラットフォームに分け、分子性超伝導最高の臨界温度を持つ物質の基本的理解を中心にテーマに据えて、物質合成主導の研究を展開しました。合成・評価プラットフォームでは、軽元素をベースにした新しい構造、化学組成を有し、超伝導転移温度などより優れた性能や特徴を求めて新超伝導体の合成を行いました。既知の超伝導体でも、競合する基底状態など物質系の特徴を抽出できるような新たな組成を有する物質群も数多く合成しました。制御プラットフォームでは、超高压や超強電場などの外場を用いて、物質の状態を制御する技術を導入しました。計

測プラットフォームでは、放射光 X 線、NMR、赤外分光、ESR、光電子分光などを用いて、徹底的な物性評価を行いました。理論・モデリングプラットフォームでは、第 1 原理計算によるバンド構造の決定、そのダウンフォールディングによる超伝導モデルの設定をいくつかの方向から試し、実験との対応を試みました。

### 主要結果

絶縁体と超伝導の間を制御することは、軽元素系に限らず、超伝導転移温度を増加させるための非常に有力な手法で、この数 10 年の間、固体物性科学の中心的テーマであり続けてきました。本研究では、分子性超伝導体の中で最高の転移温度(38 K)を有するフラレンと呼ばれる分子を基本単位とする化合物を中心に、上記の手法を用い、その電子状態の解明を行いました。その結果、固体中の競合する様々なエネルギースケールの拮抗によって、分子の変形を伴った非常に異常な金属相が発生していることが明らかになりました。しかも、その異常な状態で超伝導転移温度が最高になるとともに、超伝導が非常に安定になり、80 テスラを超える超強磁場を印加しないと超伝導が失われない様子が明らかになりました。そこでは、フラレン分子の特徴的な構造が非常に大きな役割をしていることも明らかになりました。一方、芳香族系をはじめとする様々な系で新規超伝導の発見、電界効果を用いた超伝導の発見と精密電子相図の決定など、重要な成果があがりました。

### 国際共同研究から生まれた付加的成果

本研究プロジェクトでは、EU と日本の化学、物理、材料科学の専門家たちの強力なチームプレーが行われ、これまでに公開の国際会議を 2 回（トリエステ、岡山）、計 7 回、全 10 チームが参加するクローズドの LEMSUPER ミーティングを計 7 回、開催してきました。国際会議では、非常に多くの超伝導研究者に本プロジェクトの活動をアピールするとともに、緊密な情報交換を行うことができました。LEMSUPER ミーティングでは時には口角泡を飛ばし、けんかの一步手前になるくらいの非常に活発な議論が行われるとともに、研究成果や人脈の構築に直結しました。実際、2014 年に EU 側代表者の Prassides 教授が東北大に移籍、さらに 2015 年 4 月に青山学院大学の秋光教授が岡山大に異動しますが、これは、本プロジェクトがなければあり得ない人事でした。

## 学術的成果と特許

本プロジェクトから、計 116 報の査読付き原著論文が出版されました。そこには、Science 3 報、Nature Materials/Physics/Communications/Nanotechnology 7 報、PNAS 2 報、Phys. Rev. Lett. 9 報が含まれます。国際会議の招待講演は計 143 件で、基調講演(8)、キーノート講演(5)を含みます。また、日本特許公開 2 件（電解質メモリー素子 2013-30527、電気制御調光素子 2013-028473）と、1 件の登録（ガスセンサー 2013-5235215）がありました。

## イラスト



C<sub>60</sub> 化合物は分子からなる超伝導体の中で最高の転移温度をもっています。これを中心に軽元素・分子性超伝導の可能性を追求しました。

## 事実情報

LEMSUPER プロジェクトは、EU の Kosmas Prassides 教授 (Durham 大学 英国)と日本の岩佐義宏教授 (東京大学)をコーディネータとする超伝導に関する基礎研究プロジェクトです。EU からは、Matthew J. Rosseinsky 教授 (Liverpool 大学 英国)、Denis Arcon 教授 (Jozef Stefan 研究所 スロベニア)、Claudia Felser 教授 (Max Planck 研究所 Dresden ドイツ)、Erio Tosatti 教授 (SISSA イタリア)、日本からは秋光純教授 (青山学院大)、青木秀夫教授 (東京大学)、加賀山朋子 (阪大)、久保園芳博 (岡山大) の計 10 名が参画しました。プロジェクトは、2011 年 10 月 1 日から開始され、EU の研究費総額は 1,606,660 ユーロ、JST は 2 億円でした。