The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	Electron-Lattice Interaction and Superconductivity in BaPb1-x Bix O3 and Bax K1-x Bio3
Author(s)	白井, 正文
Citation	大阪大学, 1989, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/1131
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

【27】

氏名・(本籍)	白井正文（しらい まさふみ）
学位の種類	工学博士
学位記番号	第 8770 号
学位授与の日付	平成元年6月16日
学位授与の要件	学位規則第5条第2項該当
学位論文題目	Electron-Lattice Interaction and Superconductivity in $BaPb_{1-x}Bi_xO_3$ and $Ba_xK_{1-x}BiO_3$ （$BaPb_{1-x}Bi_xO_3$ と $Ba_xK_{1-x}BiO_3$ における電子－格子相互作用と超伝導）
論文審査委員	(主査) 教授 望月 和子 (副査) 教授 吉森 昭夫　教授 朝山 邦輔　助教授 鈴木 直

論文内容の要旨

ペロブスカイト型結晶構造をもつ酸化物超伝導体 $BaPb_{1-x}Bi_xO_3$（以下ＢＰＢと略記）と $Ba_xK_{1-x}BiO_3$（ＢＫＢと略記）を対象とし，その電子－格子相互作用を微視的に論じ，この物質の格子振動や超伝導に果す役割を明らかにした。

ＢＰＢは一連の高温超伝導酸化物の発見以前から注目を集めていた物質であり，組成 $x<0.35$ で金属的な性質を示し低温で超伝導状態に転移する。その転移温度 Tc は組成 x の増加と共に急激に増加し，$x=0.25$ で最大値 $T_c=13K$ をとる。一方，最近発見されたＢＫＢは $T_c=28K$（$x=0.7$）を示す。これらの物質に共通の特徴は，Fermi 準位での電子状態密度が比較的小さいにもかかわらず高い T_c を示すことである。

まず，Tight-Binding 法で求めた現実的な電子帯構造に基づき，電子－格子相互作用の強さを調べ，隣接する Pb（もしくは Bi）原子方向へのＯ原子の振動が電子状態と強く相互作用していることを確かめた。つぎに，この電子－格子相互作用を取入れて格子振動を計算し，電子－格子作用がＯ原子のストレッチング及びブリージング・モードの振動数を著しく下げ，かつ，その線幅を広げる働きをすることを見出した。

この系の超伝導をフォノン機構に基づく強結合理論にしたがって定量的に議論した。スペクトル関数を計算し，前述の振動モードの重要さを確かめた。Eliashberg 方程式を解いて T_c を求め，組成 x の増加に伴う T_c の著しい上昇と $x=0.7$ 付近で30Kを越える T_c を得た。これはＢＫＢの実験値と良く一致している。また，Ｏ原子の質量を替えて T_c を求め，T_c に及ぼす同位元素効果を調べ，弱結合ＢＣＳ理論の予言より小さく，かつ，化合物超伝導体に特徴的な同位元素効果を得た。絶対零度における超伝導

ギャップを計算した。ギャップとT_cとの比は弱結合超伝導体に近い結果を与えるが，ギャップのエネルギー依存性には強結合特有の構造が現れた。以上のように，この系の超伝導現象はフォノン機構に基づく強結合理論の枠組みで十分理解できる。

論文の審査結果の要旨

本論文は銅などの遷移金属元素を含まない超伝導体として注目されているペロブスカイト型結晶構造をもつ酸化物$BaPb_{1-x}Bi_xO_3$（ＢＰＢ）と$Ba_xK_{1-x}BiO_3$（ＢＫＢ）について，電子格子相互作用を電子帯構造に基づいて導出してその大きさ評価するとともに，電子格子相互作用の効果を正しく取り入れて格子振動を求め，これらの物質の超伝導を強結合のフォノン機構に基づいて理論的に解明しようとするものである。

まず，ＡＰＷ法で得られたバンドを用いて，原子変位に伴う電子状態間の結合の強さを表わす電子格子相互作用係数を計算し，酸素原子の隣接するBi（またはPb）原子方向への振動が電子状態と強く結合していることを明らかにした。さらに，電子格子相互作用から生じる長距離力をとりいれて格子振動を詳細に調べ，電子格子相互作用のためにＯ原子のストレッチングおよびブリージンク縦モードの振動数が著しく低下し，かつこれらの振動モードの巾が広がることを示した。次に，得られたフォノンスペクトルを用いてスペクトル関数を求め，Eliashberg方程式を解いて超伝導転移温度T_cと絶対零度における超伝導ギャップを求めている。T_cは温度ｘの増加に伴って著しい上昇を示しｘ＝0.7近傍で30Ｋに達しＢＫＢの測定結果とよい対応を得ている。しかしＢＰＢの実験との対応はよくない。ＢＰＢでは電子伝導帯の要因であるPbとBiの混晶であるために置換に伴うランダムネスの効果をあらわにとりいれなければならないと思われる。さらにＢＫＢについてT_cの同位元素効果を調べ最近の実験結果とよい一致を得ている。また本理論で得られた０Ｋにおけるギャップ$2\triangle_0$とk_BT_cの比は約3.5で本理論が強結合の扱いであるにもかかわらずＢＣＳの理論値に非常に近い。一方，微分コンダクタンスdI／dVはＢＣＳの理論の結果と異なり，強結合の超伝導体に特有な振舞いを示すことを見出している。

以上のように本研究はＢＫＢの超伝導が強結合のフォノン機構で説明できることを明白にした最初の仕事で，電子格子相互作用の果たす役割について重要な知見を与えるものであり，学位論文として十分の価値があると認める。