

Title	ROLE OF ELECTRON-LATTICE INTERACTION IN LATTICE DYNAMICS AND SUPERCONDUCTIVITY OF PHOSPHORUS
Author(s)	青木, 正人
Citation	大阪大学, 1987, 博士論文
Version Type	VoR
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/1696">https://hdl.handle.net/11094/1696</a>
rights	
Note	

*Osaka University Knowledge Archive : OUKA*

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

Osaka University

氏名・(本籍)	青 木 正 人
学位の種類	工 学 博 士
学位記番号	第 7747 号
学位授与の日付	昭和62年3月26日
学位授与の要件	基礎工学研究科物理系専攻 学位規則第5条第1項該当
学位論文題目	燐の格子振動と超伝導における電子格子相互作用の役割
論文審査委員	(主査) 教 授 望月 和子 (副査) 教 授 吉森 昭夫 教 授 遠藤 将一 教 授 藤井 保彦

### 論 文 内 容 の 要 旨

最近、比較的大きな黒燐単結晶が作製され、燐の物理的性質に関する研究が多くなされてきた。特に黒燐において観測される圧力によって誘起されたフォノンのソフト化、および単純立方構造の燐における高い超伝導転移温度、そしてその圧力依存性は高い注目を集めてきている。これらの特徴的な現象は強い電子格子相互作用と関係している。

第I部では、ナローギャップ半導体である黒燐の格子振動における電子格子相互作用の役割が微視的な理論によって研究された。電子格子結合定数をtightbinding法によるバンド構造に基づいて導き、一般化された電子感受率を計算した。さらにこれらの結果をもとに面間力を求めた。この物質では、その狭いギャップを反映して、比較的長距離の面間力まで大きな値を持つ。さらに面間力に対する圧力の効果を調べた。加圧によるエネルギーギャップの際立った減少によって、面間力は特徴を持った圧力変化を示す。これらの有効力に、適切に決められた短距離の斥力を加えあわせることによって、測定されたフォノン分散の圧力依存性が説明される。我々は特に電子格子相互作用から生じる有効面間力が、測定されたLAモードの加圧によるソフト化を説明するために重要であることを強調する。

第II部では、110kbar以上で安定である単純立方構造の燐において観測されている圧力誘起超伝導における電子格子相互作用の役割について研究されている。まず我々はセルフコンシステントAPW法によってバンド構造を計算した。状態密度とフェルミ面およびそれらの圧力変化を調べた。圧力が132kbarから304kbarに上昇するとき、フェルミ準位の状態密度の変化は小さいが、フェルミ面は際立った変化を示すことを見出した。状態密度が小さいことと5~11Kという高い超伝導転移温度はこの物質における強い電子格子相互作用の存在を示唆する。このため我々は上で求められたバンドを用いてrigid

muffin-tin近似に基づき電子格子相互作用の行列要素を計算した。このフェルミ面上での平均値を計算し、マクミラン-アレン-ダイネスの公式にしたがって超伝導転移温度を見積もった。超伝導転移温度として、132kbarで3~10K、304kbarで4~11Kの値が得られた。これらの値の大きさのオーダーは測定値と良く一致している。しかし計算によって得られた超伝導転移温度の圧力変化は、赤浜等によって測定されたものよりも小さい。この不一致はフォノン振動数に対する我々の粗い見積りのために生じたものであると考えられる。

## 論文の審査結果の要旨

本論文は、黒燐で観測されている圧力によって誘起されたフォノンのソフト化、及び金属燐が示す圧力誘起超伝導において電子格子相互作用が果たす役割に注目し、黒燐及び金属燐のそれぞれの電子帯構造に基づいて電子格子相互作用を導出してその大きさを評価するとともに、電子格子相互作用の効果を正しく取り入れて、黒燐の格子振動と金属燐の超伝導を理論的に解明しようとするものである。

第一部は「黒燐の格子振動における電子格子相互作用の役割」に関する理論で、強結合法で求めた電子帯構造に基づいて電子格子結合係数を求め、 $\Delta_1$ の対称性（ソフト化を示すフォノンは[100] LA × フォノンで $\Delta_1$ の対称性を持つ）をもつフォノンで結びつく伝導帯と価電子帯の電子状態の間で最も大きな結合係数をもつことを見出した。次に、一般化された電子感受率を計算した。その結果から黒燐の面間に働く有効力を求めることを考案し、黒燐ではその狭いバンドギャップを反映してかなり遠く離れた面間にも大きな力が働くことを見出した。さらに面間力に及ぼす圧力の効果を詳細に調べ、第四燐接の原子を含む面間力の成分の加圧による大きな変化が[100] LA × フォノン分枝の加圧によるソフト化に重要な役割を果たすことを明らかにした。最後に、ここで求めた電子を媒介とする有効力に短距離の面間力を加えてフォノンの分散曲線を計算し、中性子非弾性散乱の測定で得られた加圧による分散曲線の変化を見事に説明した。本研究により問題とされていた[100] LA × フォノンモードのソフト化は強い電子格子相互作用に由来するものであることが明らかになった。

第二部は110kbar以上で安定な単純立方構造の「金属燐において観測されている圧力誘起超伝導における電子格子相互作用の役割」に関する研究である。まず、著者は圧力下における電子状態をセルフコンシステントAPW法によって求め、状態密度、フェルミ面の圧力変化を詳しく調べた。フェルミ面の圧力による変化が超伝導の転移点の圧力変化にきいてくる。フェルミレベルでの状態密度は極めて小さく、従って5~10Kという高い転移点をもつこの物質の超伝導には電子格子相互作用が強いことが不可欠である。ここでは、著者自身の求めたバンドに基づいて電子格子結合係数を計算し、電子格子相互作用の強い系であることを明らかにした。次に結合係数のフェルミ面上での平均値をもとめて、BCS機構に基づく強結合の場合の超伝導温度の見積りをMcMillan-Allen-Dynesの公式に従って実行した。ただしフォノン振動数に対する直接的情報が得られていないので、単純立方格子に対する簡単なフォノン分散関係を仮定し体積弾性率とポアソン比から音速を見積ってフォノン振動数を評価した。計算で求

れた $T_c$ の大きさのオーダーは測定値とよく一致している。圧力変化に関しては計算結果は測定結果に比べて小さいが、この不一致はフォノン振動数の見積りの粗さによるものであろう。本研究は金属燐の超伝導がBCS機構に基づく強結合の理論によって理解できることを明らかにしたものである。

以上のように、本研究はバンド構造に基づいて燐の興味ある現象を微視的に解明した新しい仕事で、電子格子相互作用の果たす役割について数々の重要な知見を与えるものであり、学位論文として十分な価値があると認める。