

Title	First Principles Study of Lattice Dynamics and Superconductivity in Simple Elements under Pressure
Author(s)	S., Uma Maheswari
Citation	大阪大学, 2006, 博士論文
Version Type	
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/46791">https://hdl.handle.net/11094/46791</a>
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、 <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">〈a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"〉</a> 大阪大学の博士論文について <a>〉</a> をご参照ください。

***Osaka University Knowledge Archive : OUKA***

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

Osaka University

氏 名 <sup>ス</sup> <sup>ウマ</sup> <sup>マヘスワリ</sup>  
S. UMA MAHESWARI

博士の専攻分野の名称 博 士 (理 学)

学 位 記 番 号 第 20435 号

学 位 授 与 年 月 日 平成 18 年 3 月 24 日

学 位 授 与 の 要 件 学位規則第 4 条第 1 項該当

基礎工学研究科物質創成専攻

学 位 論 文 名 First Principles Study of Lattice Dynamics and Superconductivity in Simple Elements under Pressure  
(高压下の単純元素における格子力学と超伝導の第一原理的研究)

論 文 審 査 委 員 (主査)

教 授 三宅 和正

(副査)

教 授 井元 信之 教 授 清水 克哉 助教授 草部 浩一

#### 論 文 内 容 の 要 旨

圧力誘起超伝導を示すいくつかの元素の単体から、特徴的な超伝導転移温度 ( $T_c$ ) の圧力依存性を示すものを選び、その圧力依存性を理論的に調べることで、これらの物質の超伝導に関するより深い知見を得るとともに、より高い  $T_c$  をもつ物質探索のための手がかりを得ることを目指した。選んだ物質相に対し第一原理に基づくバンド計算手法の幾つか (FPLMTO 法、擬ポテンシャル法、FPLAPW 法) を用いて、ブリルアン域全域に渡ってのフォノン特性、電子フォノン相互作用とその圧力変化を詳細に調べ、転移温度  $T_c$  とその圧力依存性を評価した。まずヨウ素の FCC 相においては FCC 相の低圧側の相境界に近づくにつれてあるフォノンモードの振動数低下が起り、それに関連したフォノンモードで電子フォノン相互作用が著しく増大し  $T_c$  が増大することを見出した。ヨウ素のこのモードの振る舞いに関する指摘は今までなかった。評価された  $T_c$  の値そのものも今までの一桁小さい理論計算の結果とは異なり実験値に近い結果を得た。しかし  $T_c$  の圧力依存性に関しては実験との食い違いは残った。次にリチウムの面心立方 (FCC) 相に関して同様の研究を行った。この物質相でも  $T_c$  は実験結果と良い一致を示した。以前の理論計算では実験より 3、4 倍高い転移温度を与えていた。さらにこの物質相では  $T_c$  は圧力と共に増大するがそれもフォノンモードの異常 (圧力増大に伴う振動数低下) によることを見出した。また  $T_c$  増大は同じ FCC 相の中で、ある圧力から減少に転ずるといった結果を得た。これはある条件下での実権結果を定性的に説明するものである。さらにテルルについても同様の研究を行い、以前の実験及び理論研究との一致をみた。これらの研究結果からこれらの物質相における  $T_c$  の圧力変化はフォノンモードの異常によって支配されているという結論を得た。本研究では酸素の圧力誘起分子解離後の構造として理論的に予測されているベータポロニウム相についてもその構造の安定性を調べ、ベータポロニウム相は 400 GPa 近くまでは安定にはならないという結論も得た。

#### 論 文 審 査 の 結 果 の 要 旨

超伝導転移温度 ( $T_c$ ) が比較的高い圧力誘起超伝導を発現する幾つかの元素単体に対して、第一原理格子動力学法

を現在実施可能な範囲では最も正確に適用することで強結合超伝導理論の範囲での理論値を示すとともに、特徴的な圧力依存性の再現を含めた  $T_c$  の評価が可能であるか否かを精査することにより、より高い  $T_c$  をもつ物質探索のための指針を得ることを目指した研究が実施された。具体的には、バンド計算手法としては FPLMTO 法、擬ポテンシャル法、FPLAPW 法が併用され、ブリルアン域全域に渡ってのフォノン特性、電子フォノン相互作用とその圧力変化が決定され、転移温度  $T_c$  とその圧力依存性が評価された。

まず、ヨウ素の面心立方 (FCC) 相においては FCC 相の低圧側の相境界に近づくにつれてあるフォノンモードの振動数低下が起これ、関連した電子フォノン相互作用が著しく増大し、 $T_c$  が上昇することが見出された。ヨウ素のこのモードの振る舞いに関する指摘は今回初めて成されたものである。評価された  $T_c$  の値は、今までの一桁小さい理論計算の結果とは異なり実験値に近いものとなっている。 $T_c$  の圧力依存性に関しては実験との食い違があるが、これは実験の圧力条件を再現していると仮定すると電子間斥力効果の圧力依存性を示唆する結果であると判断される。

次に、リチウムの FCC 相に関して同様の研究が行われた。この物質相では  $T_c$  の理論値が定性的・定量的に実験結果と良い一致を示している。この物質相では  $T_c$  は圧力と共に増大するが、これもフォノンモードの異常 (圧力増大に伴う振動数低下) によることを見出されている。加えて、同じ FCC 相の中で、ある圧力から  $T_c$  の減少が始まること示された。これは、電子フォノン相互作用の上昇とフォノンモードの低下の競合から発生することが明らかにされており、実験結果を再現するものである。以前に行われたフォノンモードに関する近似を含む計算結果が実験値の 3~4 倍の理論値と単調な  $T_c$  の圧力依存性を推定したことに比して、今回圧力依存性も含めて大幅に修正したことは、フォノン機構の信憑性と理論の妥当性を示す画期的結果であると見なされる。

さらにヨウ素、リチウム、テルルの研究結果を総合して、これらの物質相における  $T_c$  の圧力変化はフォノンモードの異常によって支配されているという結論が得られている。また、酸素の単原子相の候補であるベータポロニウム相の安定性の議論にもフォノンモードの安定性の評価が重要であるとの結論が得られている。これらの結論は、物質の高圧相における高い  $T_c$  をもつ物質の特徴を理論的に解析出来ることを示すとともに、物質探索の指針が理論的に導出可能であることを示唆するものである。

従って、本論文は博士 (理学) の学位論文として十分な価値をもつものであると認める。