

(5) 超伝導性 PdH_x系の同位元素効果

京大理 松下栄子

Pdのスピソ常磁性を消した PdH(D)_x系は、 $x \geq 0.8(0.75)$ で超伝導を示す上、転移点 T_c に逆同位元素効果 ($T_c^{\text{PdH}} < T_c^{\text{PdD}}$) が存在し、BCS理論では説明がつかない。この逆同位元素効果の説明には、Debye 温度の大小関係 $\theta^{\text{H}} > \theta^{\text{D}}$ に打ち勝つだけの電子フォノン結合定数の大小関係 $\lambda^{\text{D}} > \lambda^{\text{H}}$ が必要である。そして、force const. について、中性子線回折の実験から予測される関係。

$$\phi_{\text{H}}/\phi_{\text{D}} \equiv m_{\text{H}}\omega_{\text{H}}^2/m_{\text{D}}\omega_{\text{D}}^2 \simeq 1.2 (\neq 1.0) \quad \dots\dots\dots (1)$$

の理論的説明ができたとき初めて、逆同位元素効果の説明は完了する。そこで、H(D)の非調和振動の問題を、まず Morse type の pair potential を仮定した原子論で扱った。Pd-H間相互作用の斥力部の寄与が大きいという副産物を重視して、H(D)の零点振動を丁寧に取り扱くと、 $\phi_{\text{H}} > \phi_{\text{D}}$ の説明が可能となり、Einstein model の範囲で変位の2乗平均 $\langle u^2 \rangle$ と ϕ とを self-consistent に定量的計算をした結果、(1)の関係を得た。以上の原子論を、さらに、遷移金属の凝集力の性質を鑑みて電子論から見直してみる。モデル・ハミルトニアンを設定し、単純化した tight-binding 法で DOS を計算し、一方 APWバンド計算から得られた DOS や、 $n(E_{\text{F}})$ の x 依存性を再現するようパラメーターを決める。HとDとの零点振動の違いは、Pd-H間の電子の hopping integral の違いで入れられる。そして、定性的にバンド計算を再現した DOS から数値計算したバンド・エネルギー E_{B} に、イオン核間反発力 E_{R} を加えて、2階微分で ϕ を求め、 $\langle u^2 \rangle_{\text{H}} > \langle u^2 \rangle_{\text{D}}$ との関係が $\phi_{\text{H}} > \phi_{\text{D}}$ を導くことを説明し、原子論での結論を補強した。

この電子論を基盤にすると、傍系の遷移金属水素化物の超伝導にも、即応用でき、興味深い同位元素効果を説明することが可能となる。