

GPa)の回折パターンとよく一致する。また、低圧相において、加圧とともに IBr の分子内距離(結合距離)と分子間距離が接近してゆく過程も観測された。そして、体積が 55% に圧縮された点において、図 a→b に見られるように、高压相に転移して分子内、分子間の距離が等しくなり、分子性を失なうことがわかる。

この転移は、約 3% の体積減少を伴う一次相転移であり、このように、本研究により、固体 IBr は、ヨウ素に次いで、圧力誘起分子解離を引き起こすことが明らかになった。

## 7. BaPb<sub>1-x</sub>Bi<sub>x</sub>O<sub>3</sub>における電子-格子相互作用と超伝導

白井正文

Perovskite 型構造をもつ酸化物混晶系 BaPb<sub>1-x</sub>Bi<sub>x</sub>O<sub>3</sub> は、その組成(つまり Bi 濃度  $x$ )や温度の変化に伴って、結晶構造や電気伝導性に関する多彩な相転移を示すことが知られている。

BaPb<sub>1-x</sub>Bi<sub>x</sub>O<sub>3</sub> は、 $x < 0.35$  では金属であり、また  $x > 0.35$  では半導体になる。そして、この金属相に属する物質は低温で超伝導状態になる。その超伝導転移温度  $T_C$  は、組成の変化と共に著しく変化し、 $x = 0.25$  付近で最大値  $T_C = 13$  K という高い値を示す。にもかかわらず、この系の Fermi 準位での電子状態密度  $N(E_F)$  の値は、従来の高温超伝導体の  $N(E_F)$  より約一桁も小さい。

このような BaPb<sub>1-x</sub>Bi<sub>x</sub>O<sub>3</sub> の超伝導現象を微視的な観点から理解するために、Mattheiss and Hamann が LAPW 法を用いて計算した電子帯構造をもとにして、この系の電子-格子相互作用を直交化強束縛(OTB)法に基づいて評価した。Bi 濃度  $x$  の増加に伴う影響を伝導帯への電子の供給という形で考慮すると、Fermi 面の移動に伴う  $N(E_F)$  の増加に加えて、Fermi 面上の電子状態間に働く電子-格子相互作用の平均値  $\langle g^2 \rangle$  の増大の効果が相乗的に働いて、この系の  $T_C$  の組成変化をもたらしていることが確かめられた。また、BaPb<sub>1-x</sub>Bi<sub>x</sub>O<sub>3</sub> の高温超伝導に関しては、この物質を構成している他の原子よりもずっと質量の軽い酸素原子の(Pb, Bi)-O 結合方向への振動が、重要な役割を担っているものと結論される。