

27. 層状物質 遷移金属ダイカルコゲナイドに於ける 電子-格子相互作用と超伝導

西尾好正

層状物質 遷移金属ダイカルコゲナイド $2H-MX_2$ ($M=Nb, Ta$ $X=S, Se$) は、 NbS_2 を除き、高温から温度を下げていくことで正常相→CDW 相→超伝導相へと逐次相転移を示す。一方、 NbS_2 のみは CDW 転移を示さず、正常相から直接超伝導相へ相転移をする。ここでの目的は、物質による相転移の違いを微視的に計算された電子帯構造、電子-格子相互作用、格子振動に基づいて理解することである。

Wexler たちによってなされた Layer 法によるバンド計算の結果によれば、4 物質はほぼ同じ電子帯構造を持っている。ここでは、彼らの電子帯構造を再現するように Tight Binding 法によって電子帯構造を計算した。その結果、結晶の層状性（2次元性）を強く反映して Fermi Surface は、層に垂直な k_z 方向には柱状であることがわかった。また Fermi Level 近傍で、状態密度に鋭い Peak がみられる。これは、Fermi Level 付近では、 k_z 方向にはバンドにほぼ分散がないという2次元的な特徴の現れとみなせる。

次に、格子振動について、短距離力を Parameter として Force Constant Model により計算した。構造相転移に重要な寄与をする格子振動の分枝を4つの物質で比べてみた結果では、 NbS_2 のみが比較的高い振動数を持ち、電子-格子相互作用によるソフト化により構造相転移を起こしにくくなっている。これは、他の3つの物質に比べ NbS_2 が構造相転移をおこさない原因が、主として元素の質量の違いから生じるなまの格子振動の違いによるものであることを示唆している。

また、電子-格子結合係数を、ここで得られたバンド構造をもとに計算した。その結果、電子-格子結合係数は強い波数ベクトル依存性をもつとともに、格子振動のモードにも強く依存することがわかった。特に Nb(もしくは Ta) 原子の層内方向への変位による電子-格子相互作用は、なまの格子振動を顕著に変えるとともに超伝導にも重要な寄与をすることが期待される。