

に再現できる。この事からアルカリ原子吸着系は長距離的秩序がないような無秩序状態でも、非常に強い、そして温度依存性のある短距離秩序状態にあることがわかる。

ところでこの高温展開の部分和によって得られた積分方程式は展開の低次に現われる簡単な項の繰返しをすべて含んでいるが、その物理的意味は必ずしもよくわかっているわけではない。そこで Kirkwood 等の液体論の方法をもちい、この積分方程式の近似の程度を調べてみた。これによると高温展開の部分和によって得られた積分方程式は液体論の方法の中で重ね合わせの近似をもちいその一部を平均場で近似したものと対応づけることができる。このことはこの積分方程式が幾分気体論的なものであることを示しており、秩序・無秩序相転移の議論まではこのままの形では困難であると考えられる。

また同じ系に対して 相転移までの議論が可能だと考えられる Green 関数の方法を用いて計算を行なった。高温展開と同様に、相関関数の自己無撞着型の積分方程式をうる事が出来るがその解を求めることには成功していない。今回は、高温展開の方法との対応を比較、検討してみたい。

1 超伝導近接効果における磁性不純物の影響

2 REBa₂Cu₃O_{7-δ}の研究

兼子哲幸

1 Nb に銅をクラッドした線材試料では、Nb 内のクーパー対が超伝導近接効果によって銅中に浸入するため銅がマイスター効果を示す。我々の測定によれば、30mKにおいてNb-Cuの界面からほぼ50μm以上離れた領域まで銅がマイスター効果を示すことが観測されている。この現象を稀薄な磁性不純物を含む系に應用してCu中に(Mn, Fe, Ni, Co)を混入したCuをNbにクラッドし線材試料をつくり、AC帯磁率法によってこの銅のマイスター効果を測定した。この結果磁性不純物による散乱、すなわちKondo効果によってクーパー対の浸入はス中に影響されることがわかった。

2 90K級超伝導体 YBa₂Cu₃O_{7-δ}のY siteをRare Earth (Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Ho, Er, Tm, Yb)におきかえた。REBa₂Cu₃O_{7-δ}

を作成し、その電気抵抗、AC帯磁率、DC帯磁率を測定した。
 それらの全てはほぼ 90K 付近で抵抗がゼロになった。RE イオンの
 有効磁矩の大きさはフリーな RE³⁺ イオンのそれとほぼ同じであった。また
 比熱等の測定によれば (Nd, Sm, Gd, Dy, Ho, Er, Yb) を含むものは
 それらの RE イオンのモーメントが低温でオーダーすることがわっている。
 しかし AC 帯磁率の結果によると 30mK まで完全マイスター効果が維持さ
 れている。よって磁気的な整列と超伝導は共存しており、このことから
 YBa₂Cu₃O_{7-δ} の構造において Y (RE) site の原子は超伝導に
 寄与していないものと考えられる。

固体 LiH の金属化圧の計算と状態方程式

川上 展弘

固体 LiH の衝撃波状態方程式 (Hugoniot) 及び圧力下における非金属～
 金属転移の転移圧を密度汎関数法に基づいて計算を行う。固体 LiH は常圧
 で B1 (NaCl 型) 構造の比較的バンド・ギャップの小さな (4.99 eV) の絶縁
 体であり、Marsh の衝撃波実験によると ~45 GPa で相転移を示さない。常
 圧下における格子定数の計算値 (rigid lattice) と実験値の比較を Ta-
 ble I に示す。零点振動の効果が無視できないが、計算値は ~3% 小さな値
 を与える。

凝集エネルギーを (分離した原子のエネルギー) - (T=0 K の固体のエ
 ネルギー) と定義すると、凝集エネルギーの計算値は 431 kJ/mole (実験
 値 ~463 kJ/mole) となる。

格子振動を Debye 近似をして、Hugoniot の計算を初めて行った。LiH の
 Hugoniot の実験との比較を Fig. 1 に示す。計算結果は、~10% 低い圧力を与
 えるが、傾向としては、かなり合っている。

金属転移圧の計算は、Beringer ($P_H=3.5$ TPa, $V_H=0.34$ cm³/mole) 及
 び、Vaisnys & Zmuidzinas ($P_H=110$ GPa, $V_H=5.0$ cm³/mole) があるが、
 前者は band closing mechanism を fcc He と同一 (W-L) と仮定していて、ま
 た、後者は古典的な Herzfeld 理論を用いて評価している。そこで、APW 法
 を使って、圧力下における電子状態を計算し、両者と異なる結果を得た
 ($P_H=226$ GPa, $V_H=3.35$ cm³/mole)。band gap の圧力変化を Fig. 2 に示す。

また、B1 (NaCl 型) 構造 ~ B2 (CsCl 型) 構造転移についても議論したいと思
 う。