

16. $\text{BaPb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{O}_3$ に関する理論的研究

本 村 真 人

$\text{BaPb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{O}_3$ は $x \leq 0.35$ で金属, $x \geq 0.35$ で半導体となり, 金属領域で 12 K に及ぶ超伝導転移温度を持つなど, 複雑かつ特異な振舞いで興味を集めてきた。又, 本系は最近話題になっている高温超伝導体 ($(\text{La}, \text{Ba})_2\text{CuO}_4$ etc.) 発見の端緒となった物質であり, この発見により新たな光が投げかけられることになった。

本系の半導体相は酸素八面体が交互に膨張・収縮する breathing-mode が凍結した 3 次元的 CDW だと考えられ, 実験的に金属領域でも ($0.1 \leq x \leq 0.35$) 同 mode が系に何らかの instability を与えていることが指摘されている。超伝導転移温度が高くなる領域が instability の見出される領域と一致していることから両者の相関が注目されるが, この点を調べるためにまず同 instability の起源について計算を行った。

Pb を random に Bi に置換していくと, Bi が作る cluster 内では Bi site の negative potential 及び強い電子-格子相互作用により, cluster 内での酸素振動に対するポテンシャルが Jahn-Teller 的に変形し, 二つの平衡点を持つ double-well になることが計算により明らかになった。このような変形が起きるためには, Bi を入れることによってフェルミ球がある程度大きくなっていることが必要であり, その boundary は組成にして $x \simeq 0.1$ と, 実験的に instability が見出される領域に対応した値が求められた。更に cluster size の分布を考えに入れば, この様な instability の存在により, 金属領域での種々のパラメータの振舞いについて定性的にはあるが理解することができる。超伝導と上記 instability との相関については現在計算中であるが, double-well による Bi cluster 内での soft 化した local mode が, 本系の超伝導転移温度を高くしている要因ではないかと予想される。