

## 高圧下における液体Csの電気抵抗の理論

東北大理 渡部 三雄

液体Csの電気抵抗の高圧下での振舞いは、固体Csで知られている同じfcc構造をもつCsⅡ—CsⅢ間の相転移や、それと密接に関係していると考えられている融点極大の現象との関連で興味をもたれている。最近この問題に関して興味ある理論が提案されているので紹介する。

融点極大のやや上の一定温度での液体Csの電気抵抗の圧力依存性の特徴は、(1)低圧の領域で圧力係数が負で約10kbarの附近で浅い極小をもつこと、(2)20～40kbarの領域で急激に増加すること、(3)45kbar以上で飽和の傾向を示すこと、等である。Jayaraman等<sup>1)</sup>は、固相でのCsⅡ—Ⅲ転移を説明する機構として提唱されている6s—5d electron collapseが液相では広い圧力領域にわたって連続的に起こっていると考えれば、融点極大の現象と上記(2)、(3)の抵抗の圧力依存性がコンシステントに説明出来ることを示した。この考えは、Rapoport<sup>2)</sup>により、液体Csは固相のCsⅠ、CsⅢ相に対応する二種粒子の混合物であると考え“two species model”の形に半経験的な定式化が与えられ、定量的にも実験をかなりうまく説明することが示された。

最近RameshとRemaseshan<sup>3)</sup>は、Jayaraman等やRapoportの考えをさらに具体化し、より基礎的な立場から“two species model”を定式化することにより電気抵抗の圧力依存性を計算することを試みた。彼等は6s—5d electron collapseは5d状態に対応するvirtual bound stateの形成であり、従ってそれはd波共鳴散乱をとまうと考える。CsⅢfcc相の最隣接原子間距離をこのelectron collapseが起こる臨界距離であると考え、液相では低圧においても局所的に短距離領域でこのような臨界距離をとることが有利となり、virtual bound stateに電子が入ったcollapsed atomが存在することが出来ると考える。すなわち、液体Csを通常の原子(正確にはイオンとそれを取りまく6s伝導電子の遮蔽雲からなるpseudo-atom)Aと、イオンとvirtual bound electronとからなるcollapsed atom Bの混合物と考える。そして、A種原子による電子の散乱はpseudo potentialを用いたBorn近似で取扱い、一方B種原子に対してはBorn近似の寄与の他に散乱振巾のd波成分の寄与として共鳴散乱の形のものを加えることを提案して

いる。電気抵抗を計算するのに、液体合金の抵抗に対する Ziman-Faber の式を拡張した形を用い、そこに現れる 3 種の構造因子  $S_{AA}(q)$ ,  $S_{BB}(q)$ ,  $S_{AB}(q)$  には剛体球の二元混合液体に対する Percus-Yevick の方程式の解を使い、各圧力での packing fraction は長波長での圧縮率公式が満足されるように選んで決めている。共鳴準位のパラメタを適当にとり、A, B 原子の割合に対して Rapoport により熱力学的解析から得られた値を借用して計算された電気抵抗の圧力依存性は上記 (1), (2), (3) の特徴を再現することが示されている。

以上の “two species model” による解釈に対し、ごく最近 Ratti と Jain<sup>4)</sup> は、電気抵抗に対する Ziman の nearly-free-electron (NFE) モデルを拡張した  $t$  行列型式を用いて、“two species model” を要請することなく抵抗の圧力依存性が説明出来ることを示した。Ziman の式は本来 NFE 近似のよく成立する単純液体金属を対象としたもので、イオンの弱い pseudo potential による伝導電子の散乱を Born 近似で考慮したものだが、各イオンによる散乱断面積として Born 近似をとらず、適当に作られたイオンの muffin-tin potential の phase shift を用いて表わされる  $t$  行列により計算するように拡張すれば、遷移金属や貴金属の液体の電気抵抗の議論にも適用出来ることが、最近 Bristol グループにより主張されている。<sup>5)</sup> Ratti と Jain の仕事は、液体 Cs も d 波散乱が重要であるという点で遷移金属や貴金属に似ていることに注目し、上記の  $t$  行列型式を応用したものである。彼等の計算結果によると、フェルミ・エネルギーでの d phase shift は圧力と共に急激に増加し、これにより電気抵抗の圧力依存性の特徴は定量的にも良く説明されている。

以上述べたように、液体 Cs の電気抵抗の 20 ~ 40 k bar での急激な増加に対して、“two species model” の場合には collapsed atom の割合が圧力と共に増加することが原因であると考えられているのに対し、Ratti と Jain の理論では d phase shift の増加がその原因とされている。問題点としては、“two species model” は電気抵抗のふるまいだけでなく、融点極大の現象をかなり容易に説明できる点で魅力的だが、モデルに含まれる仮定ないしは仮説をより基礎的な立場で正当化し定量化することが必要である。一方の single species 理論は、Ziman の NFE 理論の単純な拡張の上に立っており、抵抗計算に用いられた  $t$  行列型式の基礎づけは今のところ完全でない。特に電子構造、電子波動関数については大きな近似を含んでいるように思われる。また同じ立場で融点極大がどのように説明されるかを示す必要がある。

実験面では、問題の領域でのネオン構造の圧力依存性はもとより、熱電能、ポジトロン消滅、等の測定が問題の解明に大いに役立つものと期待される。

## 参 考 文 献

- 1) A. Jayaraman, R.C. Newton and J.M. McDonough, Phys. Rev. 159 (1967) 527
- 2) E. Rapoport, J. Chem. Phys. 46 (1967) 2891; Phys. Rev. Lett. 19 (1967) 345; J. Chem. Phys. 48 (1968) 1433.
- 3) T.G. Ramesh and S. Ramaseshan, Phys. Lett. 39A (1972) 308.
- 4) V.K. Ratti and A. Jain, preprint
- 5) R. Evans, B.L. Gyorffy, N. Szabo and J.M. Ziman,

第2回液体金属国際会議で(1972年9月, 於東京)での発表。

## 高 圧 下 の 融 解 現 象

## — 斥力ポテンシャルの“やわらかさ”と融解曲線 —

九 大 理      吉 田      健  
九産大教養      鎌 倉 史 郎

物質の融点は普通圧力を加えると増加するが、圧力の関数として融点に極大をもつものが、10年前頃から、アルカリ金属のセシウムを始めとしてかなりの物質で見つかっている。秩序—無秩序転移の観点で融解現象を調べることによって、対ポテンシャルの和で相互作用している多体系では、対ポテンシャルの斥力部分にある型の“やわらかさ”があれば、融点極大が現われることを私達は以前に示した<sup>1),2)</sup>。この結論は、Lennard-Jones & Devonshire の model<sup>3)</sup>あるいはそれをいくらか拡張した model に基づいて得られたも