

エネルギー U を(6)と同じ表示で

$$U = V_0 \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \quad (7)$$

と仮定する。但し、(7)ではポテンシャルがあらゆるフーリエ成分を同じ重みで持つ、即ち、完全な δ -関数型であるとした。(6)と(7)に対して前節と同様の取り扱いを考えているがいろいろ問題点があると思われる。御批判願えれば幸いである。

Hg 合金系 についての 2, 3. の問題

豊田理研 武 内 隆
名 大 工 野 口 精一郎

Hg およびその合金系に対して Mott 理論と Ziman 理論のいずれが妥当であるか、short mean free path のために生ずるかもしれない様々の問題等基本的な事柄に関しては一応棚上した上で、Ziman の立場から伝導現象に関連して 2, 3 の問題を提起した。

1) Hg の 5d-levels が conduction band の中あるいは近くに存在するために生ずる影響。

最近 Evans 等¹⁾はこの効果を考慮して Hg の pseudo-potential を計算し、Animalu-Heine²⁾ の form factor (AH form factor ; 上の意味での d の影響は考慮されていない) よりも large K で深い型の form factor を得ている。これを用いると Hg の抵抗・熱電能をよく説明できる。又、Hg についてではないが、Harrison³⁾、Moriarty⁴⁾ 等は Cu, Ag, Au の form factor を計算し、simple metal のものに比し、s-d hybridization term によってより深められた form factor を得ている。Hg の form factor が d-levels の影響のために多少深くなっているということは大いにありそうなことに思われる。又抵抗の値を説明するためには AH form factor よりもたかだか $1 \text{ Ryd} \cdot \text{\AA}^3$ 程度深くなればよい。実際に

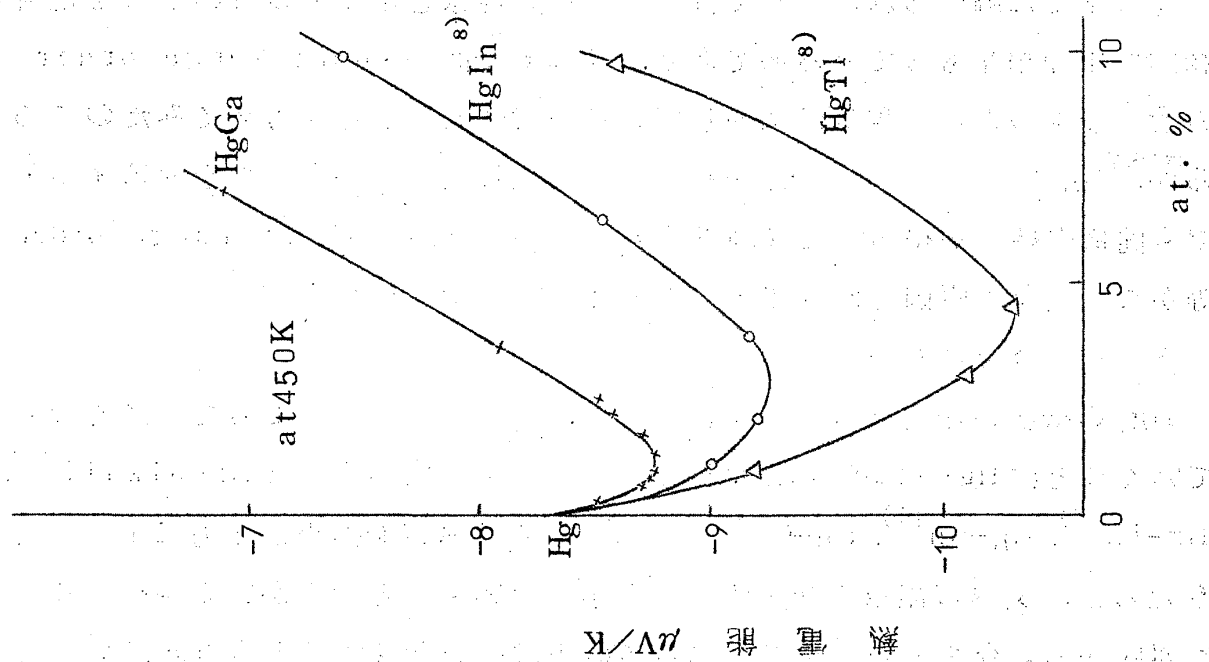
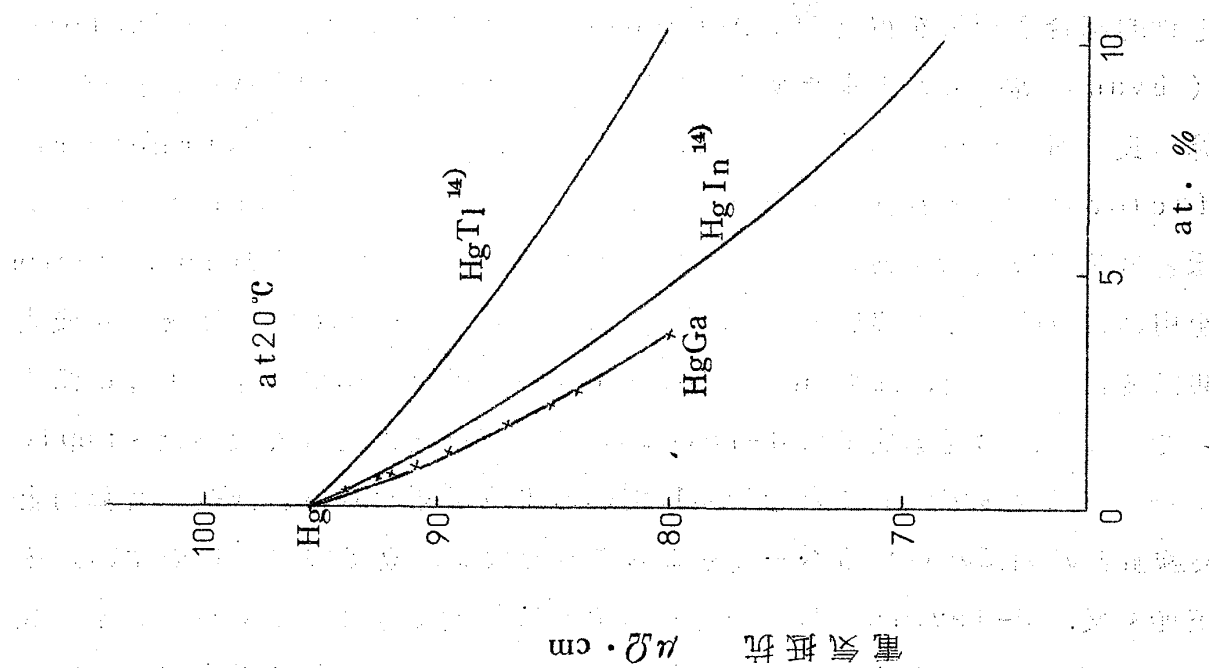
このような form factor (trial form factor ; Harrison のものに似た型をしている) を使って Hg alloys の抵抗を計算してみたが実験と定性的に合う結果を得た⁵⁾。Ashcroft 等⁶⁾も Ashcroft form factor (Evans 等のものと似た型をしている) を使って Hg alloys の抵抗を計算し良い結果を得ている。ただし、これらの計算で用いた structure factor はそれぞれ異なるものであるがそのちがいは form factor のちがいは抵抗に敏感に影響しない。一方 0% Hg 側では Hg に A H form factor を用いた方がむしろ良い結果を得る。このことは d-levels の影響が組成と共に変化すること、即ち Hg の form factor は Hg 中では深い type になっているが、他元素側では d-levels の影響がほとんどなくなった simple な type になっていることを暗示しているように思われる。抵抗の計算値と実験値との間にみられる不一致もこのような仮定に立てば理解しやすい。熱電能も又、d-levels の影響を考慮すれば説明できないであろうか？ 又 d の影響を組成による変化をもとり入れて Hg 合金に対して計算できないものであろうか。

2) Hg-alkali 金属, Hg-3 価金属合金にみられる熱電能極小 (組成に対する) について。

これまでに調べられた限りでは^{7,8,9)} この現象を示すものはいずれも化合物的な中間相をもっている系であり、異種原子間の short range order のようなものがこの現象に関連しているのではないかと考えてみたのであるが、Hg-Ga 系 (この系は液相で2相分離し上記の系と性質を異にする) でも同様の結果が得られた (図参照)。このことから short range order 等がこの現象の原因となっていることはないと考えられる。

3) Hg 合金系の抵抗・熱電能の圧力効果。

Hg の抵抗の圧力係数は非常に大きく、合金することによって小さくなっていくことは Hg-alloys のすべてに共通のようである。(Hg-alkali¹⁰⁾, Hg-In¹¹⁾, Hg-Sn¹²⁾, Hg-Ga¹³⁾)。熱電能では熱電能極小が圧力によってどうなるか、又熱電能極小を示すものと示さないものとのちがいを調べることは興味深い。今までの結果では熱電能極小は圧力と共に消える方向にあるようである (Hg-In¹¹⁾, Hg-Ga¹³⁾)。Hg-Sn は熱電能極小を示さないが、その



熱電能の圧力係数は熱電能極小を示す系に比べ、濃度と共に急激に減少する¹²⁾。
これらの点は今後更に調べる予定である。

参考文献

- 1) R.Evans, D.A.Greenwood, P.Lloyd and J.M.Ziman ; Phys. Letters 30A (1969) 313.
- 2) A.O.E.Animalu and V.Heine ; Phil.Mag.12 (1965) 1249.
- 3) W.A.Harrison; Phys.Rev. 181 (1969) 1036.
- 4) J.A.Moriarty; Phys. Rev. B 1 (1970) 1363.
- 5) 武内隆, 野口精一郎 ; 豊田研究報告23 (1970) 28. 物性研究 13 (1970) 406.
- 6) N.W.Ashcroft and D.C.Langreth ; Phys.Rev.159 (1967) 500.
- 7) N.Cusack, P.Kendall and M.Fielder ; Phil.Mag.10 (1964) 871.
- 8) T.Takeuchi and S.Noguchi; J.Phys.Soc.Japan 21 (1966) 2222.
- 9) M.Fielder; Adv. Phys. 16 (1967) 681.
- 10) 大島隆三, 遠藤裕久 ; 物理学会 (1969秋) .
- 11) C.C.Bradley; Phil.Mag. 14 (1966) 953.
- 12) 武内隆, 野口精一郎 ; 豊田研究報告22 (1969) 61.
- 13) 武内隆, 野口精一郎 ; 研究会後の実験より。
- 14) L.G.Schulz and P.Spiegler ; Trans. Met.Soc. AIME215 (1959) 87.