

パラジウム-水素系におけるフォノン状態密度の理論的研究

Theoretical studies on phonon density of states in palladium hydrides

○安西 大地¹, 松尾 繁政¹, 畠中 憲之^{1*}

荻田 典男¹, 松田 健一², 安塚 周磨³

(1. 広大院総科, 2. 日大理工, 3. 広工大工)

○Daichi Anzai¹, Shigemasa Matsuo¹, Noriyuki Hatakenaka^{1*},

Norio Ogita¹, Ken-ichi Matsuda² and Syuma Yasuzuka³

(1. Hiroshima Univ., 2. Nihon Univ., 3. Hiroshima Inst. Tech.)

*E-mail: noriyuki@hiroshima-u.ac.jp

【研究の背景】 水素吸蔵合金として知られているパラジウム (Pd)-水素 (H) 系の合金 PdH_x ($x \equiv \text{H/Pd}$) は, $x \sim 0.81$ の時, 1972 年に Skoskiewicz によって転移温度 1.25K で超伝導状態に転移することが報告された [1]. $x = 1$ では転移温度が 10K に達し [2], この比較的高い転移温度を示す超伝導発現機構は, 通常の音響型でなく光学型格子振動 (フォノン) を媒介とする電子対形成機構だと考えられている [3]. Pd は面心立方格子の結晶構造を持ち, 水素は Pd 結晶のオクタヘドラルサイトに, 量子トンネル効果等の拡散によって不規則に吸蔵される. 従って, Pd-H 間の格子振動は不規則に局在する. しかし, 不規則な格子振動が, 超伝導のような巨視的な秩序を有する量子現象をいかにして引き起こすかは明らかではない.

【研究の目的】 本研究の目的は, PdH_x 系のフォノン状態密度の水素含有量による変化を通して, この系の秩序・無秩序の変遷を明らかにすることである. そこで, 我々は PdH_x 結晶を一次元二種原子結晶 (Burger-MacLachlan model)[4] とみなし, 水素含有量の違いによるフォノン状態密度の変化を調べる. 数値計算には, 矢久保らがパーコレーションネットワークにおけるフラクトン動力学 [5] を議論する際に使った強制振動子法 [5, 6] を用いる.

【計算結果】 Fig.1 に計算結果を示す. 水素含有量が増加すると, 低角振動数領域の音響フォノンに加え音響フォノンよりも高い角振動数領域に局在振動モードのピークが現れる (Fig.1(a)~(c)). 最終的に, 局在する振動は多くの原子が関与する集団運動となり, 光学フォノンが形成される (Fig.1(d)).

【結論】 以上の計算結果より, 不規則に局在する Pd-H 間の振動が, 水素含有量の増加に伴い集団的な運動へ変遷することが明らかになった. そして, その変遷時の水素含有量が, PdH_x 系の超伝導が出現しはじめる水素含有量と大筋一致していることがわかった. これより, 不規則格子系においても光学フォノンとみなせる格子振動が存在し, これまで考えられてきた光学フォノンによる超伝導発現機構と矛盾しないことがわかった.

- [1] T. Skoskiewicz, Phys. Stat. Sol. (a) **11**, K123 (1972)
- [2] T. Skoskiewicz, Phys. Stat. Sol. (b) **59**, 329 (1973)
- [3] B. N. Ganguly, Z. Phys. **265**, 433 (1973)
- [4] J. P. Burger and D. S. MacLachlan, J. Phys. (Paris) **37**, 1227 (1976)
- [5] K. Yakubo and T. Nakayama, Phys. Rev. B **36**, 8933 (1987)
- [6] M. L. Williams and H. J. Maris, Phys. Rev. B **31**, 4508 (1985)

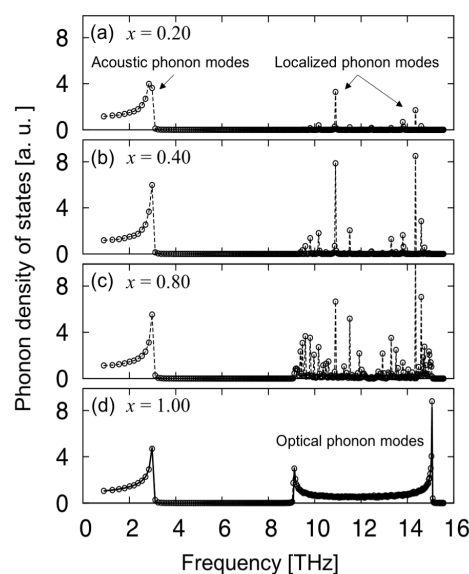


Fig. 1 The phonon density of states at various value of the stoichiometry x .