

Ba₈T_xSi_{46-x} (T=Ag,Au) の第一原理計算

理研, NRC^A, Institute of Nuclear Physics^B, 岐阜大^C, 広島大^D
飯高敏晃, J. S. Tse^A, K. Parlinski^B, 久米徹二^C, 清水宏晏^C,
福岡宏^D, 山中昭司^D

First principles calculation of ternary clathrates of Ba₈T_xSi_{46-x} (T=Ag,Au)
RIKEN, NRC^A, Institute of Nuclear Physics^B, Gifu Univ.^C, Hiroshima Univ.^D
T.Iitaka, J.S.Tse^A, K.Parlinski^B, T.Kume^C, H.Shimizu^C, H.Fukuoka^D,
S.Yamanaka^D

Ba 原子を封入したシリコンクラスレート Ba₈Si₄₆ は、次世代エネルギー資源として注目されているメタンハイドレート(CH₄)₈(H₂O)₄₆ と相似な結晶構造を持ち、Si 原子で構成された多面体の籠状クラスターの内部に Ba 原子が封入されている。この Ba 原子が籠内ではがらと振動 (rattling) して Si 格子のフォノンを散乱するため格子熱伝導率が小さく、高い熱電効率を持つ機能性材料としても注目されている[1]。

この物質は、T_c=8K で超伝導状態に転移することが発見され[2]、超伝導機構を解明しようと電子状態と振動状態の実験的理論的研究が急速に進みつつある[1]。²⁸Si 原子を ³⁰Si 原子に置換えたときの同位体効果から、超伝導機構は s 波の対称性の BCS 理論で記述されるとされている[3]。また格子の Si 原子を Au 原子に置換したときの T_c の低下とラマンスペクトルの変化から、超伝導への主要な寄与は最高振動数の Si 原子の伸縮運動であるとされた[3]。しかし、これはこの振動の寄与が比較的小さいとする最近の第一原理計算の結果[4]と調和的でない。

そこで本講演では Ba₈Si₄₆ およびその置換物質の電子状態と振動状態の詳細な第一原理計算を行うことにより、超伝導機構の理解を深める[5]。

- [1] 清水宏晏、久米徹二、日本物理学会誌、第 60 巻 7 号 543 頁(2005).
T.Kume et al., Phys. Rev. Lett. 90, 155503(2003).
- [2] S.Yamanaka et al., Inorg. Chem. 39, 56 (2000).
- [3] K.Tanigaki et al., Nature Materials 2, 653 (2003).
- [4] D.Connetable et al., Phys. Rev. Lett. 91, 247001 (2003).
- [5] J.S.Tse et al., Phys. Rev. B (unpublished).

<http://www.iitaka.org/>