

〔京都大学〕

積層欠陥の電子論

秋元興一(富田研)

面心立方金属中の積層欠陥による電子エネルギーの変化および電気抵抗の増加についての今までの理論的研究をまとめ、問題点をさぐってみた。積層欠陥の本質は格子の周期性のフェイズの不連続にあるが、問題が電子論の立場で取扱われるものであるため、近年次第に明らかにされつつある諸金属の電子構造についての知識が、格子欠陥のようないわば実際的な問題にどのように応用されているかを知る一例となる。

従来の理論の大要は例えば Buturi 1964年8月号の鈴木氏のレポートに尽くされているが、理論的な問題点はいくらかもある。

(1). 計算のむつかしさが要求するあるいは近似を評価するには実験が不十分であり、また実験は金属内の欠陥の分布について平均化された形をとるため、モデルについて得られる特定の性質の評価が出来ない。従つて元来近似とその改良の上に立つ電子構造の理論的知識は、この問題にまだ充分役立っていない。

(2). 積層欠陥の両側での電子波を欠陥面でつなぐというのが従来の理論のとつた方法だが、その際必要な複素数波動ベクトルを持つ波については、根本的議論が必要である。この波は、Imura et al. (1963) の指摘したように積層欠陥バンドをエネルギー禁止帯内に形成するかもしれないが、許容帯内でも波のマツチングに使われる必要がある。また Imura らのように自由表面の問題を積層欠陥にそのまま使うのは疑問である。

(3). 複素数波動ベクトルを含めての固有値問題では、波動函数を $\exp(i\vec{k}\cdot\vec{r})$ で展開すると永年方程式は非対角成分も \vec{k} に依存する。従つて Howie (1960) のように理想結晶の場合の解をそのまま用いるのは意味がない。

(4). 積層欠陥エネルギーの計算では固有値の変化を求めるわけだが、一方抵抗の計算では理想結晶のフェルミ準位を問題としている。

複素数波動ベクトルを考慮に入れる場合、その際の差違を無視出来るとは限らない。いずれにしても、従来の簡単な反射係数の求め方では不充分のように思われる。

問題提起に終つてしまつたが、このような理論的問題を電子構造の知識と組み合わせて解明していく必要がある。Imura らの束縛電子を反発ポテンシャルに置き換える事の物理的可否はその後の問題である。

誘電体に於ける Diagram Formulation に関して

金 吉 敬 人 (松原研)

現在スピン系の diagram formulation が精力的に研究されつつある。そこで双極子系に対し diagram formulation を適用しようと言うわけである。従来双極子系を統計力学的に取扱う手段として spherical model があり、M. Lax 等により研究されて来た。また Van Vleck に始る partition function を高温展開し初めの数項を数値計算し Onsager 方程式との定量的比較も幾人かの人々によつてなされてきた。

そこで diagram formulation によりこれらの事が何様な diagram 近似で説明できるか、また従来 spherical model は永久双極子系に対し適用されてきたが、これを永久双極子が誘起分極率を有する場合にも拡張することを研究目的とした。

現在これらの説明は可能である。大体はスピン系の diagram formulation と変らない。ただうるさい事は双極子-双極子相互作用が tensor である事だが、これも格子の対称性が高いと言う仮定をすると(事実 spherical model 及び Onsager 方程式は等方性の仮定が暗黙の内に含まれておる) diagram formulation で対角成分しか生じないことにより簡単になる。また Onsager 方程式は M. Lax に従い spherical model で特定の固有値を取ると良い。