

[東京大学]

超格子 Cu-Zn のバンド計算

浅野 撰 郎 (山下研)

典型的な超格子 Cu-Zn (β' -brass) のバンド構造を、Kohn & Rostoker の Green 函数法によつて A, A, Σ 軸及びその他 3 5 点 (同等な点を含めて 5 1 2 点) について計算した。

Potential は Wigner-Seitz 近似を仮定し、Core-electrons は原子の Hartree-Fock 解を用い、conduction-electrons については、なるべく Self-consistent に近づくよう努力した。

その結果、d-Band は、それぞれ Cu の d-Band, Zn の d-Band, に対応する二つの Group に完全に分れ、上の Cu の d-Band は s-Band に割込んで、mixing を起し、その Band 巾は、Pure-Cu の d-Band 巾に比べてかなり小さかつた。又、超格子であることから s-Band に生ずる Band-Gap は 0.01 Ry の order で他の Gap に比べてずっと小さかつた。5 1 2 点から計算した State-Density-curve は Fermi 面附近で Rayne et al. の電子比熱の測定とほぼ一致した。尚、M 点附近の Band-Gap を Optical な実験と比較したが、もつと精しい実験がないと確定的なことは言えない。この計算に際しては、東大物性研の電子計算機 FACOM-202 を使用した。

非調和項によるフォノン脈動数のずれと減衰

石川 幸 志 (教養金沢研)

非調和項をもつフォノン系を考える。ハミルトニアンとしてはポテンシャルエネルギーをイオンの変位で展開するとき、変位に関して 4 次の項までとり、それをオ二量子化したものを使つた。このハミルトニアンで二次の項