

## 電子格子強結合によるカタストロフィー

### 自縄自縛と格子欠陥生成のダイナミックス

講師 東大物性研 豊 沢 豊

夏の学校の最終日にもかかわらず、非常に大勢の方が豊沢先生の講義を聞きに集まりました。電子と格子系との大きな相互作用があると、電子が自己のまわりの格子を變形させ、それが電子自身に反作用として働き、電子が動けなくなってしまう。これが self trapped electron です。実験的にはAgClでは hole の self trapping が観測されているが、AgBr ではされていない。これらの混晶によるルミネッセンスの実験から、drasticに self trapped state にかかわることが観測されている。なぜこういうことがおこるのか、ということの説明が講義されました。

電子と格子の相互作用として、optical phonon との相互作用だけを考えた場合には、polaron 状態は出てくるが、self trapped state は見出せない。acoustic phonon との相互作用を取り入れることによって始めて説明できる。簡単のために、結晶格子を連続媒質に置き換え、acoustic phonon は dilation  $\Delta(r)$  で、optical phonon は電気分極を表わすポテンシャル  $\Phi(r)$  で表わし、格子の運動エネルギーを無視した近似（断熱近似）で電子格子系の全エネルギーを求める。これを、 $\Delta(r)$ ,  $\Phi(r)$  と電子の波動関数  $\psi$  とで変分することによってエネルギー最小をさがす。変分函数として

$$\psi(r) = N \exp\left(-\pi \alpha^2 \frac{r^2}{a_0^2}\right)$$

を使い、 $\alpha$  を変分パラメータとして全エネルギーは

$$E = B (\alpha^2 - g_{ac} \alpha^3 - g_{op} \alpha)$$

となる。ここで  $B$  は電子の運動エネルギー、 $g_{ac}$ ,  $g_{op}$  はそれぞれ acoustic phonon, optical phonon と電子との相互作用の強さを表わす。 $\alpha$  は  $0 \leq \alpha \leq 1$  であって、 $\alpha=0$  が free な状態、 $\alpha=1$  が localize した状態を示す。 $E$  が  $\alpha$  のどの値で最小になるかは、 $g_{op}$  と  $g_{ac}$  の大きさによって決まる。こうして図 1 からわかる様に、安定状態は  $g_{ac}$  の大きさが変わると drastic に変化することが説明できる。これは force range のちが

いによって、 $\alpha$ のべきが異なっていることによるものである。

これまでは phonon のエネルギーを 0 にしていたが、振動の量子効果を取り入れた議論を次に行なう。簡単のために acoustic phonon だけを考え Einstein model を用いる。

電子のバンド幅を  $B$ 、phonon のエネルギーを  $\hbar\omega_0$ 、coupling const. を  $gB$  とする。

$r = \hbar\omega_0/B$ 、 $g$  を使って全エネルギーを phonon の数  $\sigma$  について minimize すると、

$$g = r\sigma (1 + r^{-1} e^{-\sigma})^2$$

$$E/B = - (1 + 2\sigma) e^{-\sigma} - r\sigma$$

となり、 $E/B$  を  $g$  に対して図示すると図 2 の様になる。これからみてわかる様にエネルギーは  $g$  とともに連続的に変化するが、その状態は  $\sigma \ll 0$  から  $\sigma \gg 1$  への drastic な変化があり有効質量は約  $e^{100}$  の変化をする。これは事実上とまっており、self trapped state を表わす。

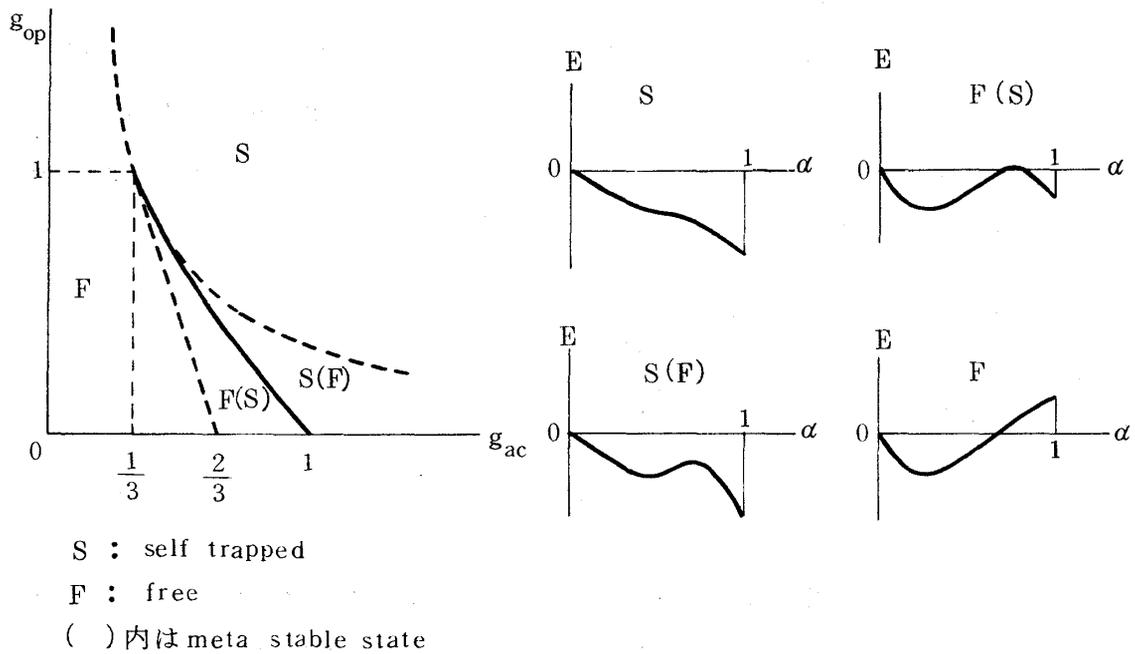


図 1

以上は一中心型の self trapped electron の話であったが、アルカリハライドなどでは二中心型の self trapped hole ができている。又 hole が self trap され電子がそのまわりをまわる、いわゆる self trapped exciton が観測されている。

以上が 講義の概略ですが、その他 Jahn Teller effect との関係、格子欠陥の生成などについての話がありました。

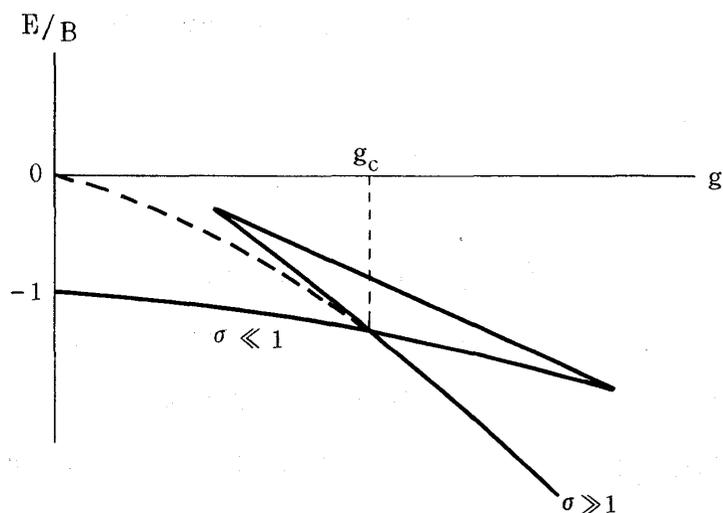


図 2

文責 阪大基礎工 井須俊郎