

しかし、低い frequency の Ag-mode, Eg-mode に関しては、 ScCl_3 の Raman spectrum と良い一致が得られた。なお、上記のように決めたパラメータを用いて、phonon Dispersion を計算した。

「 TiSe_2 の電子状態と格子の不安定性」

吉田 幸正

層状物質 TiSe_2 は $T \simeq 200\text{K}$ 以下でもとの格子の 2 倍の周期をもつ超格子の生成を伴う構造相転移を起こす。伝導率、光電子放出等の実験で free carrier の存在が報告され、A. Zunger らの selfconsistent なエネルギーバンドの計算によると P 点付近に正孔、 L 点付近に電子をもつ半金属である事がわかった。このため TiSe_2 における構造相転移は P 点付近のフェルミ面と L 点付近のフェルミ面との nesting によるものではないかという説が出ている。

しかし、フェルミ面があまりにも小さい事、超格子の周期がもとの格子のちょうど 2 倍である事から TiSe_2 の場合には格子変形を特徴づける \vec{q} を決定しているのは nesting モデルのようにフェルミ面の形状ではなく、電子格子相互作用の \vec{q} -依存性が本質的なのではないかと思われる。

そこで我々は電子格子相互作用の \vec{q} -依存性を explicit に調べるため tight-binding 近似で LCAO 法を用い A. Zunger らによって得られたエネルギーバンドを再現した。このバンドをもとに、まず、電子格子相互作用の \vec{q} -依存性を落とした bare susceptibility $\bar{\chi}_{\vec{q}}$ を計算した。

結果は $\bar{\chi}_{\vec{q}}$ は L 点付近で broad な山をもつが M 点との差はわずかであり、この事から L 点に相当する格子変形が安定であるとは決定的には言い難い。

さらに電子格子相互作用の \vec{q} 依存性を含めた $\chi_{\vec{q}}$ を計算するために必要な電子格子相互作用係数を求めた。