

による後方散乱をより精密に扱い、第四番目以後の原子については、二原子による散乱が繰返されると仮定して解析的な方法によって計算を行った。シミュレーションの結果との比較から表面原子の平衡位置の bulk 中のそれからの変位及び原子の振動振幅があまり大きくない限り、この方法の近似が良いことが確かめられた。

この方法の適用の一例として、表面再構成を起こしている W (100) 清浄表面に対する実験結果を解析し、不整合構造のモデルが実験を説明できるかどうか詳しく調べた。不整合構造に対する計算は、シミュレーションによったのでは非常な時間を要するが、この方法によれば比較的短時間で結果が得られ、また、散乱の詳細及び格子振動の影響などが考察できる。

15. アントラセンにおける表面及びバルクエキシトン

宮本 克比古

Phillpot らはアントラセン (001) 面に垂直入射した b 軸偏光の光による反射率の測定を低温で行い、そのスペクトルの形状の解析により表面に局在したエキシトンの存在を結論した。

ここでは、この仕事に関連して次の二点について、更に立入った考察を加えた。(1) Phillpot の解析ではバルク励起子の寄与を理論的に導出することをせずに、実験から推定した反射スペクトルで代用するという不満足な取扱いがなされているので、これを励起子と格子振動の相互作用から導出することを試みて、ほぼ Phillpot の推定した形状が再現されることを示した。(2) 上記においては、表面に平行な分極をもち、面内の成分 k_{\parallel} がゼロの (表面およびバルク) 励起子を考えたが、この表面励起子は、少しでも面内方向の波動成分をもつ場合には、真の表面局在状態から、バルク連続帯に埋もれた表面共鳴状態へと移り変ってゆくという興味ある挙動をすることを理論的に示した。この際、分子間の双極子相互作用を面ごとにまとめてとるという取扱いをするが、 d だけ離れた 2 枚の面の間で $k_{\parallel} \exp[-k_{\parallel} d]$ に比例する双極子相互作用があるという簡単な事情のために半無限系における表面およびバルクモードの取扱いが厳密にできる。

16. 反強磁性相互作用を持つイジング三角格子系における磁気相転移

: NiNa(Acac)₃ · benzene

山田 典 克

「反強磁性相互作用を持つイジング三角格子系」は、スピンと格子が一種の不整合を起こす

とも考えられる非常に興味深い系である。理論的には G.H. Wannier 以来の研究があり、M. Mekata の研究では「三副格子のうちの一つが常磁性のままの秩序相」の存在が予想されている。実験については、 CsCoCl_3 がその例であるとして報告されているが、この結晶については擬一次元系が3次元的な相転移をする際に、「この系」になっていると考えているため、まだ疑問の残るところである。

本研究においては、 $\text{NiNa}(\text{Acac})_3 \cdot \text{benzene}$ という結晶に着目し、 $0.02(\text{K}) \geq T \geq 2(\text{K})$, $0 \leq H \leq 500(\text{Oe})$ の領域で磁化率の測定を行い、 $0.045(\text{K}) \leq T \leq 0.21(\text{K})$ の領域で比熱の測定を行って、この結晶の磁気相転移現象を明らかにした。その結果より、この結晶における磁気相転移現象が「反強磁性相互作用を持つイジング三角格子系」における磁気相転移現象の性格を大きく反映したものとして理解できることを論じる。

右図1～4は各々零磁場における $1/\chi$ vs T , 秩序相における χ vs H , 最低温における χ vs H より求めた M vs H , 及び C/R vs T である。特に図3は「反強磁性相互作用を持つイジング三角格子系」に予想されるフェリ磁性を示すものである。さらに図1に示す70mK以下の磁化率のずれが、上述した「三副格子のうちの一つが常磁性のままの秩序相」の存在を示すものではないかと期待したが、図4に示す様に、比熱の異常は見られず、常磁性から直接フェリ磁性へ相転移する場合である事が結論される。

