

Title	3. 2H型Nb,Taカルコゲナイドにおける電子格子相互作用と構造相転移(大阪大学基礎工学部物性分野,修士論文アブストラクト(1981年度))
Author(s)	安藤, 悦夫
Citation	物性研究 (1982), 38(3): 123-124
Issue Date	1982-06-20
URL	<a href="http://hdl.handle.net/2433/90732">http://hdl.handle.net/2433/90732</a>
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

## 2. 有限温度における金属板の間に働く力の理論

別所 正弘

2つの無限に広がった完全にフラットな平行金属板の間に働く力を調べる。この力については  $0^\circ\text{K}$  においては、2つの引力がすでに紹介されている。その1つは、双極子間の相互作用によって生じる London-van der Waals 力によるもので長距離の力である。これは  $d^{-3}$  に比例する。(  $d$  は板間距離。)  $d$  が大きくなると、光の有限速度による遅延効果が働いて  $d^{-4}$  に比例した力になる。もう一つは、 $d$  がボーア半径ぐらいのところで働く粘着力である。

ここで考えるモデルは、温度効果を取り入れる。つまり金属板の間に電子が多く分布している状態である。金属中のイオンは一様にぬりつぶして正電荷の back-ground として取り扱う。また、電子は自由電子とし、その分布は Fermi-Dirac 分布を用いる。

力を求める過程は、Poisson 方程式から出発して、熱力学的ポテンシャルを考えて静電エネルギーを求め、それから力の表式を導出する。その結果は引力になることが確められた。さらに、この力が、板間距離と温度によってどのように変わるか調べる。

## 3. 2H型Nb, Ta カルコゲナイドにおける 電子格子相互作用と構造相転移

安藤 悦夫

2H-NbSe<sub>2</sub> では 33K で、2H-TaSe<sub>2</sub> では 95K で、二次の構造相転移をおこすことが、中性子散乱の結果確認されている。

私たちの研究の目的は、この相転移を電子格子相互作用というミクロスコピックな機構を通して、理解できるかどうか調べることにある。すなわち、低温相で観測されている変位の波数ベクトル  $\mathbf{q}$  とモード  $\lambda$  がどのように選択され、安定化するのかを、電子格子相互作用という機構を通して議論しようというのである。

変位のモード依存性まで議論しようと思えば、電子格子相互作用係数の波数ベクトル、モード依存性を正しくとりあつかう必要がある。そのためにはバンドの波動関数が必要となるので、まず第一に強結合近似で計算されるバンドを、APW法ですでに得られている Matthe-

ies のバンドに fit させることを試みた。Slater-Koster の方法を用い、遷移積分だけで、nesting に効いていそうなフェルミ面を再現することを試みた。次に、そのバンドを用いて、 $\chi^0(\mathbf{q})$  を計算した。この  $\chi^0(\mathbf{q})$  はフェルミ面の nesting だけの情報を与えるものである。その結果として、 $\mathbf{q} = 2/3 \vec{PM}$  (これは実験で観測されている波数ベクトル) と  $\mathbf{q} = 1/2 \vec{PK}$  に同程度のピークがみられた。

次に、 $\chi^0(\mathbf{q})$  でピークのみられた2つの  $\mathbf{q}$  に対して、電子格子相互作用係数の波数ベクトル、モード依存性を調べた。その結果、フェルミ面の nesting に効いていそうな部分では、常に longitudinal mode の方が transeverse mode より、電子格子相互作用係数の絶対値が大きいことがわかった。このことより、longitudinal mode の変位の可能性の方が大きいと期待される。

さらに、一般化された電子感受率  $\chi(\mathbf{q}_\lambda)$  の計算は現在実行中である。

#### 4. W(001) 表面再構成と水素吸着の効果

稲岡 毅

W(001) 表面に水素を吸着させると吸着水素が表面の再構成にきわめて大きな影響を与え、被覆度の変化に応じてさまざまな現象が現れる。

清浄表面は室温付近より低温で低速電子線回折のパターン (LEED pattern) の半整数スポットで示される再構成を起こしているが、これに水素を吸着させていくと被覆度  $\theta = 0.11$  ( $\theta = 1$  で飽和) で表面W原子の変位の周期性が変化し半整数スポットが4つに分離する (commensurate-incommensurate 転移, 以下この2相をC相, IC相と略記)。Lau と Ying のモデルに基づき平均場近似の範囲でこの転移について調べた結果、清浄表面ではC相が安定であるが、H-W間相互作用を第2近接まで考慮するとこの相互作用がC相をこわしてIC相に転移することがわかった。Lau と Ying もこの転移について論じているが、IC相を安定にする機構は異なっている。

電子エネルギー損失分光 (EELS) の実験により、bridge site に吸着したHの3つの固有振動数が測定できるとされている。その固有振動数の被覆度依存性の測定値から、吸着水素と変位しているその最近接Wの間の相互作用と吸着水素間の相互作用を考慮し、吸着水素の最近接Wの変位の被覆度依存性と吸着配置に関する短距離秩序度についてある程度の考察が可