

て検出した。

電場変調吸収スペクトルの解析から、これら励起子の電場効果は、吸収線の低エネルギー側への電場に関する2次の shift を与えると考えられる。しかし peak energy shift は励起子 T を例にとれば、電場 $F = 2 \times 10^4$ v/cm で 0.02 meV しかない。これは通常観測される半導体の励起子の peak energy shift に比べて小さい。例えば GaAs 系での同様な電場での shift 量は約 10 meV である。またこの電場効果を Wannier モデルで解析すると、この励起子 T の電子-正孔間軌道半径は BiI_3 の molecular size 程度の 7 Å となり、Wannier モデルが完全には適用できないことがわかる。

以上より、この積層欠陥に束縛された励起子は、電子と正孔が強く結びついた Frenkel 励起子的特徴をもっていると考えられる。

4. 双極子相互作用によるランダム・ダイポール系のガラス転移

谷 田 義 明

双極子相互作用は各ダイポールの向きだけではなく、その位置にも大きく依存する。そのため、2個のダイポールから成る系では中心を結ぶ直線上を平行な向きに揃うが、3個以上の系では全てのダイポールに対して有利な向きが存在しなくなる。(フラストレーション)

このことからランダムに分布している $N (\sim 10^{20})$ 個のダイポール系は、その“競合する相互作用とランダム性”のために低温でガラス凍結を起こすことが予想される。

本論文では、永久ダイポールの系として KCl 結晶中の OH^- をモデルとして選んだ。この OH^- のダイポールの向きは $[100]$ に等価な6方向に限定されていることが知られている。ここではその間のトンネル運動は簡単のため無視する。この6方向の可能な向きをもつダイポールのランダム系に対して、モンテカルロ法による計算機実験を行ない、次のことを明らかにした。

(1) 誘電率の温度変化に極大があり ($T = T_0$)、これは実験結果に対応する。

$$q = (1/N) \sum_{i=1}^N \langle \rho_i \rangle^2$$

で定義したオーダーパラメーターは T_0 付近で減少するが、高温側においても残る。これは小さなクラスターの存在を示している。

- (2) $N = 3 \sim 7$ の少数系 (濃度 0.14 at. %) での $T = 0$ のエネルギー分布より多数 ($\sim \exp 0.612N$) の準安定状態が存在する。

以上より、「双極子相互作用によって結合したランダム・ダイポール系は低温でガラス凍結をすること」がわかる。

5. 強い異方性を持った物質中での励起子－格子系

渡 辺 卓 也

強い異方性を持つ層状半導体、絶縁体における光吸収の励起状態として、層内では2次元ワニアー型励起子を形成し、層方向にはそれにとまなう双極子－双極子相互作用を通して、エネルギーのみが伝達するモデルを提出し、その光吸収スペクトルの定式化を行なった。

この励起子の層方向の運動エネルギーが平均フォノンエネルギー、励起子－格子相互作用の大きさとあまり違わないため、単純に励起子－格子相互作用を摂動として取り扱うことができない。我々は正準変換の方法により、励起子－格子相互作用を消去し、格子ひずみで修正された運動エネルギーの熱平均値を非摂動項とし、その熱平均からのゆらぎを摂動項として、グリーン関数の方法により光吸収スペクトルを求めた。

この扱いでは、励起子の自己エネルギーは、従来の自己エネルギーのグラフのフォノン線をゆらぎの線でおきかえることにより得られ、そのエネルギー依存性はスペクトルの形状において重要な役割を演ずる。

以上のようにして得られた一般式のごく簡単な場合の数値計算の結果を示し、我々の取り扱いにより層状物質である BiI_3 で観測されている異常に幅の広い吸収スペクトルを説明できる可能性を示した。