

ンのenergy gap と band 幅, および Se_2 の結合距離の実験値を再現するように決めた。計算の結果, 規則的なラセン構造は結合距離 2.33 Å, 結合角 111.7° , 2面角 76.5° となって実験値をほぼ再現している。ラセンの周期は 3.3 で $t\text{-Se}$ のラセンより少しゆるい。またラセンの 1 bond まわりの回転ポテンシャルは 2面角が約 180° 大きいところにもう 1つの極小値をもち, その kink ラセンのエネルギー差は小さい。また Chain 末端は, 中性 2重項 ${}^2C_1^0$, 負イオン 1重項 ${}^1C_1^-$, 正イオン 1重項 ${}^1C_1^+$ および 3重項 ${}^3C_1^+$ の 4種が可能である。 ${}^2C_1^0$ は 4原子の zig-zag 構造, ${}^1C_1^-$ はラセン, ${}^1C_1^+$ は 4原子の zig-zag, ${}^3C_1^+$ は 3原子が鋭角三角形をなしている。n型 polaron ${}^2P^-$ はラセン構造を保った格子変形をするが, p型 polaron ${}^2P^+$ および 3重項 exciton 3Ex は 5原子の zig-zag 構造をつくる。また ${}^2C_1^0$, ${}^1C_1^+$, ${}^2P^+$ の zig-zag には, 近接したエネルギーの trans, cis, isomer がある。これらの欠陥構造はモルデナイト細孔中で生成可能だが, kink は不可能である。これらの欠陥の荷電・スピン分布, gap内準位およびその波動関数を求め, それらの格子変形がおこる機構を解明した。またそれらの生成エネルギー, 格子変形による安定化エネルギー, gap内準位の関与する励起エネルギーを求めた。その結果, ${}^2P^\pm$ はスピン反平行の中性末端, または逆荷電の末端で消滅することが示された。これらの結果から, 実験で見出された光誘起の gap内準位および ESR 中心の起源を論ずる。

2. アモルファスセレンの光黒化現象

池 本 弘 之

アモルファスカルコゲン系半導体では光照射により吸収端付近の光吸収スペクトルが低エネルギー側へ移動する所謂光黒化現象が観測される。本研究ではその微視的機構を明らかにするため, 最も単純なカルコゲン系半導体であるセレンをとりあげ, 光黒化現象に対する圧力・温度の影響を調べた。

光吸収スペクトルの測定は, サファイアの光学窓を備えたマレージング鋼製の高压セルを用いて行った。圧力媒体としては He ガスを使用した。測定温度範囲は室温から液体窒素温度まで, また圧力範囲は 1 bar から 1000 bar までであった。

実験から得られた主たる結果は以下のとおりである。

- (1) 液体窒素温度ではアモルファスセレン (a-Se) のバンドギャップは室温に比べて 0.1 eV

大きい。

(2) 液体窒素温度で光を照射すると吸収スペクトルは低エネルギー側へ移動する。この現象は室温では観測されない。

(3) 光黒化現象に対する照射光のしきい値は 2.0 eV であり, LP 軌道から σ^* 軌道への遷移によるバンドギャップ 2.2 eV に近い。

(4) ガラス転移温度 (約 40 °C) 近傍でアニールすると, 吸収端スペクトルは光照射前の状態に復帰する。

(5) 光照射-アニールサイクルに対して吸収端スペクトルは可逆的に変化する。

(6) 光照射による吸収端スペクトルの低エネルギー側への移動は, 圧力下でより顕著になる。

以上の結果から, 鎖状構造を有する a-Se の光黒化現象は, 鎖間距離や, そのゆらぎの大きさに大きく支配されることが結論される。

3. 興奮性素子の結合系の研究

岩本 貴司

大自由度散逸力学系の巨視変数のみに依る記述はいかに可能かという問題意識で, 興奮性素子の結合系を研究した。その結果, 臨界点近傍でのオーダーパラメータの方程式を得たので報告する。

扱った興奮性素子の結合系は, 最近, 神経ネットワークとの関連からも, 関心を集めている。従来, 素子としては, 離散時間・状態の McCulloch-Pitts モデルが広く採られてきたが, ここでは, それに代る連続時間・状態の, 以下のモデルを考え, 力学系理論をとり入れた手法で解析した。

系は, 位相 ϕ_i で記述される素子を一様に結合したもので, 個々の素子の時間発展は,

$$\begin{cases} \dot{\phi}_i(t) = \omega_i - b \sin \phi_i(t) + K\sigma(t) & (i = 1, \dots, N) \\ \sigma(t) = \sum_{i=1}^N \delta(\phi_i(t) + \pi/2) / N \end{cases}$$

で定まる。ここで, σ は他の素子からの“刺激” K は素子に依らない結合定数, $\{\omega_i\}_{i=1}^N$ はある分布をもつ正定数, b は正定数である。 $\omega_i \leq b$ の時, 外部からの“刺激”がなければ,