

。京都大学大学院理学研究科

- |   |         |
|---|---------|
| 1. Se 1本鎖の基底状態と欠陥の電子-格子構造   | 井川 淳 志  |
| 2. アモルファスセレンの光黒化現象  | 池本 弘 之  |
| 3. 興奮性素子の結合系の研究   | 岩本 貴 司  |
| 4. 光ポンピングによる不安定核 $^{170}_{69}\text{Tm}$ の核偏極と<br>$\beta$ 線, $r$ 線の角度分布による検出 | 植村 禎 夫  |
| 5. 多チャンネルサブミリ波干渉計によるWT-III トカマクプラズマ<br>の計測                                  | 尾崎 成 則  |
| 6. WT-III トカマクプラズマにおける放射軟X線の<br>二次元空間分布の測定                                  | 大穂 健 介  |
| 7. 一次元セレン鎖の光黒化現象  | 片山 芳 則  |
| 8. $\text{NaNO}_2$ における最低一重項励起子の反射スペクトルの研究                                  | 川浦 久 雄  |
| 9. SR光によるInハライドの偏光反射スペクトルについて   | 佐々木 靖 夫 |
| 10. NMRによる $uudd^3\text{He}$ の緩和測定  | 笹山 浩 二  |
| 11. $\text{As}_2\text{S}_3$ 結晶構造の縮退と欠陥のソリトンの生成                              | 下位 幸 弘  |
| 12. アルカリハライドハロゲン不純物系における局在励起子発光   | 田中 耕一郎  |
| 13. フッ素系高分子の分極反転機構  | 高橋 芳 行  |
| 14. 因子化キュムラント展開を用いた乱流の統計的研究   | 武井 利 文  |
| 15. 高過冷却におけるポリスチレン結晶の層厚   | 丹沢 和 寿  |
| 16. $\text{BaPb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{O}_3$ に関する理論的研究                      | 本村 真 人  |

1. Se 1本鎖の基底状態と欠陥の電子-格子構造

井川 淳 志

モルデナイト細孔中に閉じこめたSe 1本鎖について、その構造や電子状態、光誘起欠陥生成など興味ある実験が行われている。これらの実験を説明するため、本研究ではINDOモデルを用いて $\text{Se}_{16}$  1本鎖の電子・格子状態の計算を行った。INDOモデルのパラメーターはラセ

ンのenergy gap と band 幅, および  $\text{Se}_2$  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  $111.7^\circ$ , 2面角  $76.5^\circ$  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*-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  $180^\circ$  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