

Weak coupling limit は U, V の小さい狭い領域でのみ成立する。

SDW, CDW の order parameter のソリトン, ポーラロンの計算をする。その結果, ソリトンは, $V = 0$ (Hubbard モデル) では pure amplitude 的で, $V > 0$ では amplitude-phase 的であることがわかる。また, nearly pure phase 的になる領域はない。

ソリトン, ポーラロンの拡がり, $E_{\text{SDW}} = E_{\text{CDW}}$ となる HF 相転移線上で最大となる。また, U が小さくなると拡がりが増え, U が大きくなると拡がりは減る。

ソリトンの構造は, 例えば荷電ソリトンは上記の相転移線上では, SDW 基底状態の場合, SDW の位相の反転とそれに伴う振幅のくぼみ, 局在した交代する SBO, 局在した非交代の net CD, BO からなる。CDW 基底状態の場合, CDW の位相の反転とそれに伴う振幅のくぼみと局在した交代 BO からなり, SD と SBO はない。これら 2 種の異なる構造の荷電ソリトンが存在するが, それらの energy spectra は全く等しくなる。

ポーラロンは SD (CD) のくぼみと局在した交代する CD (SD) を持ち, また中心でくぼんだ局在した BO と SBO を持つ。相転移線上でポーラロンは荷電 $1/2$, スピン $1/4$ の 2 つの部分に分裂する。この半ポーラロンは SDW と CDW のブロックの境界をなしている。ポーラロンの分裂により SDW と CDW のブロックが混在する状態がつけられる。

9. 孤立 Se-Te 混合鎖の光学的性質

久 貝 裕 一

2 配位共有結合で結ばれた Se や Te の鎖状構造, および半導体的性質は, 隣接する鎖間の相互作用に強く支配される。我々は, モルデナイト結晶の直径約 6.7 \AA の一次元細孔に Se, Te およびその混合系を閉じ込め, 隣接鎖間相互作用を取り除いた孤立カルコゲン鎖の物性について検討を加えた。

試料は脱水した Li 型モルデナイトと, Se や Te, またはその混合体の蒸気と共存させることにより作製した。Se を吸蔵させたモルデナイトはだいたい色をしているが, Te 濃度を増すと茶色に変色していき, Te を吸蔵させたものでは黒褐色になる。これらの試料について, 室温で光音響分光 (PAS) の測定を行なった。Se や Te の内蔵量に比例して光吸収量が変化することを利用し, PA 信号の強度から光吸収係数 α の相対値を求め, 光学ギャップ E_g を決定した。孤立 Se 鎖の E_g は約 2.3 eV で, 結晶 Se の E_g (1.8 eV) より大きい。孤立 Te 鎖の E_g は約 1.7

eVで、結晶 Te の E_g (0.3 eV) よりも約 1.4 eV も大きく、Se より変化が著しい。これは Se よりも Te の方が隣接鎖間相互作用が大きいので、孤立鎖にすることを効果が大きいためと考えられる。

さらに、Se, $\text{Se}_{0.8}\text{Te}_{0.2}$, $\text{Se}_{0.6}\text{Te}_{0.4}$, Te を吸蔵させたモルデナイト試料に、70 K でバンドギャップよりも高エネルギーの光を照射すると、ギャップ内に新しい吸収帯が現れることを見出した。この吸収帯は、Te 濃度が増加するとともに、低エネルギー側に移動する。

これらの結果、および乾らによる EXAFS 測定の結果をもとに、モルデナイト細孔中の孤立鎖の構造、および電子状態について議論する。

10. 反磁性水素型原子の光スペクトル

桑 田 雅 泰

一様磁場中の水素型原子は非可積分のハミルトン系の数少ない実存する物理系の例として関心を集めている。ここでは、我々は、実験から得られた L-mixing 領域⁽¹⁾(弱磁場中)と strong field mixing 領域⁽²⁾(強磁場中)の 2 つの光吸収スペクトルについて理論的解析を行う。

L-mixing 領域の Li 原子に対する光スペクトルの解析は、すでに Solov'ev の結果を適当に修正することで実行されているが、Solov'ev の結果、自体、しばしば混乱を招く。我々は、一様磁場中の水素原子に対する Hamiltonian

$$H = 1/2(P_\rho^2 + P_z^2) - 1/r + 1/8 r^2 \rho^2 \quad \text{for } m = 0$$

を適当な座標系で 2 つの調和振動子の結合系と見なし、その「等振動数共鳴」⁽³⁾の観点から問題を再考した。即ち、変換された Hamiltonian

$$H' = 1/2(P_u^2 + U^2) + 1/2(P_v^2 + V^2) + GU^2V^2(U^2 + V^2)$$

から resonance Hamiltonian を構成し、得られた近似的運動の定数に対して半古典的量子化条件を課した。この半古典量子化によって、Li 原子の光吸収スペクトルはよく説明がつき、Solov'ev の結果に伴う混乱を回避した。

次に我々は strong-field mixing 領域のスペクトルから実験的に得られた欠損数 $\delta\nu$ に対する簡単な analytic model を Main たち⁽²⁾の議論に基づいて提出する。この領域で位相空間の