

収端は α -Se に比べ低エネルギー側へシフトする。この光学ギャップの減少は、Te の添加により鎖内の σ 結合が弱まったためと考えられる。窒素温度での光照射により吸収端はシフトするが、明らかに平行移動ではなく、吸収係数の小さい領域でシフトが著しく大きい。

この結果から、光構造変化は光照射による欠陥生成とそれに伴う格子変形に起因し、観測された吸収端のシフトは吸収端近傍に出現した新しい吸収バンドによると考えられる。S, As を添加した α -Se の光吸収端のシフトは、Se と類似なふるまいを示す。

4. Vector Charge Density Wave (VCDW)

モデルによる trigonal Se, Te の電子－
格子構造とクーロン相互作用の効果

岡 達 治

電子相関の効果を取り入れて、Se, Te の物性を microscopic な立場から説明を試みた VCDW モデルに基づき、CNDO-UHF 近似によって trigonal Se, Te の Selfconsistent な電子－格子状態を解析する。

格子変形の効果を含まない cubic P バンドのフェルミ面は、非常に nesting を起こしやすい構造をしているが、incommensurate な nesting vector を持ち、むしろ defect をつくって soliton lattice 的になった方が安定になる可能性があることが示唆される。

effective on-site クーロン相互作用によって、valence P バンドは weak correlation 領域と strong correlation 領域の二段階で安定化される。しかし格子変形の効果が入っても VCDW が誘起されても、trigonal Se, Te のバンド構造はほぼ cubic P バンドの特徴によって支配されている。

effective on-site クーロン相互作用項のみを取り入れた SCF 計算を行うと、CNDO 近似によってイオン化エネルギーと電子親和力から求めた on-site クーロン反発積分をそのまま使うとギャップが大きすぎて実験に合わないが、スクリーニングを仮定 (Se 27 %, Te 42 %) すれば、strong correlation 領域で XPS, 光学ギャップの実験データを説明することができる。

さらに大野型ポテンシャルを用いて、nearest neighbor 交換相互作用項まで含めた完全な SCF 計算を行うと、on-site, nearest neighbor クーロンポテンシャルに対して dielectric 型のスクリーニングを仮定 (Se 50 %, Te 66 %) すれば、weak correlation 領域で XPS, 光学

ギャップ, Geometry のデータをほぼ無理なく説明することができる。

このように VCDWモデルは, trigonal Se, Teの格子変形とバンド構造の重要な特徴を, よく再現していることがわかった。

5. ポリプロピレンのノジュール構造

小 川 哲 也

ガラスから結晶化させたポリプロピレンの薄膜を電子顕微鏡で観察すると, 直径数十~数百 Åの粒状構造が見られた。このような構造は他の高分子 (PE, PET, PMMA等) でも見られノジュール構造と呼ばれているが, 現在のところ, その実体については, まだ充分研究されていない。そこで我々は, このポリプロピレンのノジュールの大きさの分布を調べ, 下のようなノジュールの発生, 成長のモデルと比べた。

すなわち, ガラス転移点において, ランダムな場所に同時に発生した結晶核が成長し, 隣り合うもの同士がぶつかり合う。この時, 1つのノジュールは, その核と周りのノジュールの核とを結ぶ線分の垂直二等分線で囲まれた多角形のうち最小のもの (ボロノイ多角形) となる。次に温度が上がると, 小さいものは, 熱的に不安定になって融けて, 周りのより大きいノジュールに食いつぶされる。この時, 新しい境界は, へこみを持つようなノジュール (不安定である。) を作らないとすれば, ノジュールは, ある大きさ (D_c) 以下のボロノイ多角形を作らないよう核の配置に制限をつけた場合のボロノイ多角形となるが, D_c がその時のボロノイ多角形の平均直径に比べ充分小さければ, その大きさの分布は, 核の配置をランダムにした場合のそれで近似できる。そこで核の配置をランダムとしてコンピューターシミュレーションをした結果と, 実際のノジュールの大きさの分布を比べたものが右図で, 両者はよく一致しており, 上のモデルと矛盾しない結果が得られた。

