

電子相関と電子格子相互作用の競合

— 4-サイト-4-電子モデル —

滝 本 淳 一

電子間相互作用と電子格子相互作用の競合を有限系を数値的に解くことにより調べた。

電子系に対しては4-サイト(リング)の Hubbard モデルを用い, 電子数も4とする。電子格子相互作用としては, 格子ひずみによりサイトエネルギーが変化するもの(サイト対角型)か, 最近接サイト間の transfer integral が変化するもの(サイト非対角型)のどちらか一方だけが存在するとする。格子は断熱近似で扱う。断熱ポテンシャル W の極少としては多くの種類の格子ひずみが有り得るが, そのうち W の最少値を与えるのは格子のひずんでいない反強磁性(AF)相か, 交互に格子のひずんだ電荷密度波(CDW)相であり, サイト対角型の電子格子相互作用の場合この2つの相の境界(1次転移)は transfer integral によらずほぼ $U = S$ で与えられる(U はサイト内 Coulomb 反発, S は同一サイトに電子を2個完全に局在させたときの格子緩和エネルギーである)。一方, サイト非対角型の電子格子相互作用は電子間相互作用とまともには競合せず, AF相-CDW相の転移は2次転移となる。2つの相の電子状態や, 相図の系のサイズに対する依存性についても調べた。

○ 立教大学大学院理学研究科

希ガス, 希ガス・窒素混合ガス中での亜励起電子の熱電子化過程

高 橋 哲 彦

核分裂片励起による希ガス, 希ガス・窒素混合ガスの再結合発光に時間遅れを見出した。この遅れは, 電子の熱電子化時間に相当していることを明らかにした。実験から得られた熱電子化時間は, 計算値とよい一致を見た。電離放射線励起で生成された亜励起電子の初期エネルギー分布, 空間分布についての知見を得た。