

8. Newns-Anderson モデルによる表面 増強ラマン散乱 (SERS) の理論

金 本 恭 三

SERS の機構として Gersten らによって提案され、Ueba によって詳しい定式化が行なわれた、effective resonant scattering のモデルでは、光散乱の中間状態でフェルミ面近傍に出現する effective resonant state が enhancement の主役とされている。しかし彼らの取扱いでは、この resonant state に対する電子-正孔対生成の寄与が充分に取り入れられていない。ここでは、多体問題でよく知られた方法を用いてこのフェルミ面近傍でのふるまいをもっと詳細に考察した。

ハミルトニアンとしては、分子の励起状態が金属の伝導電子と混り合う Newns-Anderson モデルを用い、この s - d 混合に関する摂動展開の most divergent term をくり込み群の方法により無限次まで足し合わせた。電子と分子振動の相互作用は最低次で取り扱った。得られた光散乱の強度は入射光あるいは放出光のエネルギーが threshold に近づいた時べき関数的に発散する形をしているが、これはよく知られた、金属における X 線の放射・吸収端の異常と同じである。

べきの指数を見積もるために、先ずそれを伝導電子の不純物散乱による phase shift に対応づけ、更に光遷移に伴う電荷の不均一が伝導電子によって遮蔽されると仮定して Friedel の和法則を用いた。また、べき関数の発散はフェルミ面の、温度によるぼけで抑えられるとすると、enhancement の最大値は 10^3 程度になる。

最後に、effective resonant state の候補として、最近実験的に見出された電荷移動遷移と我々のモデルとの関係を議論する。

9. 高圧下における非晶質 Fe-B 合金の結晶化

小 川 吉 司

Fe-B 合金系では B 濃度が 12 at % から 25 at % の範囲で非晶質状態が得られる。この非晶質合金はメタル-メタロイドの典型的な 2 元合金であるので、結晶化過程に関してはすでにい