

2. 近藤状態の理論

望 月 光 明

Kondo 系, I.V. 系のダイナミカルな物理量は, 静的な物理量より, その系に関する, より詳しい情報を含むので, 実験的・理論的にこの方面の研究は重要である。

本研究の目的は, 4f-状態密度, 帯磁率を計算することである。その為に, 4f 状態の自己エネルギーに対する self-consistent 方程式を数値的に解くことを試みた。

現在, 既に 4f 基底状態 $J = 5/2$ のみを取り込んだ self-consistent 方程式 (2 元連立積分方程式) が, 倉本, 小島両氏により詳細に調べられている。

しかし実際の実験と定量的に比較する為には, $J = 7/2$ 励起状態と, 結晶場まで取り込み, かつ, 伝導電子系のバンド構造まで考慮することが重要である。これらを取り入れた self-consistent 方程式は, 非常に複雑で, 自己エネルギーの非対角項が現われる。

そこで, 第 1 ステップとしては伝導電子状態密度一定とし, 励起状態 $J = 7/2$ は取り込むが, 非対角項は落とした self-consistent 方程式 (3 元連立積分方程式) を使うことにした。これは, $J = 5/2$ 状態が立方対称な結晶場で Γ_7 , Γ_8 に分裂した状態に対する式と同等である。(各種パラメーターは当然異なる)

数値計算の結果は, 自己エネルギー, スペクトル強度について報告する。状態密度 $\rho(\omega)$, 帯磁率 $\chi(\omega)$ については, まだ計算できないでいる。

3. アルカリ銀ハライド結晶の放射線損傷の研究

淡 野 照 義

1. 目的

アルカリ銀, 銅ハライドには, アルカリとハロゲンの組合せの変化により, 同一或いは類似の結晶構造の多くの物質が存在し, それらの間で物性を比較して研究することができる。一方アルカリハライドでは放射線損傷が起こるが, 銀・銅ハライドでは安定な欠陥は生成しないことが知られている。今回の実験は, (1) アルカリ銀・銅ハライドのうちどのような組成のもの

がX線や紫外線照射で放射線損傷を受けるかを実験的に明らかにし、結果を「放射線損傷を受けるか否かと、結晶のエネルギーバンド構造との関係」という新しい視点から考察する。

(2) アルカリ銀ハライドの放射線損傷により、どのような欠陥が生ずるかを調べるための光学的観測を行なう。

2. 実験方法

Rb_2AgI_3 の他に、 K_2AgI_3 、 Rb_2AgBr_3 、 K_2CuBr_3 、 K_2CuCl の大形の単結晶を作成できたので、これらについて実験を行なった。実験は、平行平板状に研磨した試料を低温（11 K、77 K）でX線（50 kV、10 mA、W-ターゲット）照射し、照射前後で光吸収を分光測定し、その変化を比較した。

3. 実験結果と考察

(1) 上記5物質のうち、 Rb_2AgI_3 、 K_2AgI_3 でのみ、可視部及び紫外部に、X線照射により新たな吸収帯の生成することが見出された。この結果は、価電子帯最上部の構成において、ハロゲン(p)バンドの寄与する割合の大きいものがX線着色を起こすと解釈でき、この解釈はアルカリハライド、銀・銅ハライドについても成り立つ。アルカリ銀・銅ハライドにおいて、放射線損傷の存否と価電子帯最上部の性質との関連は、放射線励起の結果生じる電子-正孔対が、単一金属イオンの励起状態として近似できる単純な状態に緩和するか否かという点にかかっていると解釈できる。

(2) Rb_2AgI_3 にX線照射により生じる主な吸収帯は、2.49, 2.9, 4.10, 4.22, 4.36 eV にあり、 K_2AgI_3 では同様の吸着帯が、2.52, 2.8, 4.2, 4.3 eVに生じる。これらの吸収はc軸とそれに垂直な方向に関して大きな異方性を示す。低温でX線照射後、結晶の温度を上昇させてアニールの実験を行なった。その結果、 $E//C$ 偏光に対する2.49 eVにある吸収ピークと $E\perp C$ 偏光に対する2.9 eVに吸収ピークが同じ損傷生成物に起因することがわかった。これらの吸収帯はX線照射によって生成した Ag^0 である可能性があるが、しかしはっきり同定することはできなかった。