

さらに超伝導を議論するために、電子格子相互作用とフォノンの情報を正しくとりいれたスペクトル関数 $\alpha^2 F(\omega)$ を計算した。その結果、 $\alpha^2 F(\omega)$ は広いエネルギー領域に分布を持つことがわかった。つぎにスペクトル関数を用いて λ を計算し、その λ 依存性を調べた。 λ は $\lambda \sim 0.08$ で最大値をとり、その前後で急激に減少するという結果を得た。また、 λ を用いて評価した超伝導転移温度についても議論するつもりである。

9. 表面系の集団運動

喜 綿 洋 人

相互作用をしている半無限電子系の多体問題の取り扱いとは従来あまり行なわれていない。特にバルクの性質と表面の性質をうまく分離できる取り扱いが望ましい。また解析的な解が得られるような model surface potential があって、解析的な計算ができる見通しが良く一般的な性質に関する情報が得られる。

この論文では、その様な解析的な解が得られるポテンシャルについて考察と最も簡単な解を用いて相互作用をしている半無限電子系の性質の例として電荷分布の集団運動を選び、運動方程式の方法を用いて詳しく調べた。surface plasmon, bulk plasmon のそれぞれの解が得られ、波数が小さい極限での振動数モードの様子が得られる。

10. ポリチオフェンの高圧力下での光吸収

桑 原 眞 人

導電性高分子は C 原子の sp^2 混成軌道で作られた 1 次元的な骨格の上に、固体物理での自由電子に相当する π 電子雲が広がっており、 π 電子と骨格間の相互作用（電子格子相互作用）が強いことが特徴である。そのために導電性高分子はパイエルス転移により半導体になり、又イオンのドーピングで電気導度が 6 桁以上も上昇し金属的になったり、通常の半導体では例の無い素励起が存在する等の様々な興味深い物性が現れ、今までに多くの理論的・実験的な取り組みがなされてきた。電子格子相互作用が強い物質に圧力を加えて格子定数を変化させることは電子物性の変化も期待でき興味深い。又ポリマーの構成に関する情報も得られるので実用的な応用も期待できる。

ポリチオフェン（以下 PT）は導電性高分子の 1 種で S 原子を含む 5 員環から構成されており、バンドギャップは 2 eV で実験的な取り扱いが容易である。又 PT の誘導体であるポリ（3-アルキルチオフェン）（以下 PAT）はアルキル基がついていることで、

溶解・融解しそれに伴う興味深い多くの物性が現れることが報告されている。

分子軌道法による計算結果よりバンドギャップは2重結合と1重結合の長さの差や、モノマー間のねじれの角度に依存することが予想されている。又ポリアセチレンの実験結果からポリマー鎖間距離によってもバンドギャップが変化することが分かっている。常圧力下においてもバンドギャップはこれら3つの効果の和で表わせる。新しい導電性高分子の分子設計をする上でもバンドギャップに対するこれら3つの効果のウェイトを求めることは重要である。

本研究ではP Tのバンドギャップの圧力変化に興味をもち、電解重合法で作成したP Tにダイヤモンドアンビルセルを用いて高圧力を加えた。その結果バンドギャップが低エネルギー側にシフトすることが分かった。P A Tのフィルムでも同様の効果を確認した。ポリ(3-ヘキシルチオフェン)(以下P H T)をトルエンに溶解して圧力を加えたところ1 G P a未満でバンドギャップは急激に低エネルギー側にシフトする部分と、穏やかに変化する部分とが共存することが分かった。急激に変化する部分は1 G P a以降ではフィルムのときと同じ圧力依存性を示すことが分かった。

以上の実験結果とX線構造解析による類推より、

- ・ P Tのバンドギャップは、ポリマー鎖間相互作用の比率がP A Tと比較して高い。
- ・ P H Tはトルエンに溶解するとき1本1本のポリマー鎖がばらばらになるのではなく、ポリマー鎖が少なくとも数10本程度ずつ固まってフィブリルを形成する。従って溶液のときでもポリマー鎖間相互作用は無視できず、フィルムと本質的な違いが無いことが分かった。ただしフィブリルの表面と内部のポリマー鎖とでは圧力に対する振る舞いが異なり、フィブリルの表面ではモノマー同士のねじれ角が圧力に対して敏感に反応するが、フィブリル内部のポリマー鎖は鎖間相互作用でお互いに束縛されておりモノマー同士のねじれ角は圧力であまり変化しない。このことから吸収スペクトルに2つの成分が共存することが説明できる。

11. C, Si 結合電子密度と X 線禁制反射の温度依存性

小 谷 岳 生

局所密度汎関数法(LDA)+擬ポテンシャルの方法でイオンを平衡位置に固定した場合のC, Siの結合電子密度分布の計算が可能であるが、現実的な有限温度の場合にどれだけそれが変化するかを単純にイオンコアのときと同じDebye-Waller因子を用いて評価できるという理論的根拠はない。結合電子密度に対して用いるべきDebye-Waller因子の値についてはいくつか議論はあるがあいまいな所が多い^{1,2}。結合電子密度分布はイオンの位置の関数と考えることができ、温度Tでのそれはこの温度でのとりうる全てのイオン配置に関して平均することで得られるはずである。本研究ではこのシンプルなアイデアに基づいて有限温度での結合電子密度を求めるFormalismを考え、実行した。そのFormalismにおいて、実際に数値的に求めるべき量は、ダイヤモンド構造をつくる2つのfcc副格子を相互にずらしていったときの結合電子密度分布(using LDA+BHS擬ポテンシャル)と、イオン変位の自己及び隣接との相関のパラメータ $B_1(T)$, $B_2(T)$ (using 適当な調和近似格子力学モデル)である。