

より大きいということで、そのときの時間応答から求めた寿命幅は、確かに Γ_r と Γ_n との和になっていた。

[1] K.Cho and M.Kwata : Phys.Rev. B25,3714(1982).

[2] K.Cho : J.Phys.Soc.Jpn. 55,4113(1986).

[3] R.Ruppin : J.Phys.Chem.Solids. 50,877(1989).

8. La 系高温酸化物超伝導体の格子振動と電子－格子相互作用

木 下 隆

電子－格子相互作用が高温酸化物超伝導体の諸物性に及ぼす影響は、最近の実験事実により再確認されつつある。実際、電子－格子相互作用によると考えられるフォノン分散の異常が非弾性中性子散乱実験により La_2CuO_4 および La_2NiO_4 で観測されている。 $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}$ ($M=\text{Sr}, \text{Ba}$) における、電子帯構造に基づく電子－格子相互作用の理論的研究は、Weberを始め幾つかのグループにより行われている。しかしその後、非弾性中性子散乱や種々の光学的実験によりフォノンについての研究が進められ、より現実的なフォノン状態を計算するためのデータが蓄積されている。一方、電子帯構造も、電子エネルギー損失分光などの実験からその妥当性が評価され、また第1原理からのバンド計算の結果がtight-binding法により詳細に検討されている。そこで、蓄積された実験事実をふまえ、電子帯構造にもとづく電子－格子相互作用を再検討し、フォノン状態および超伝導相転移について、その効果を調べた。

得られたフォノン分散曲線には CuO_6 八面体のbreathing-typeの振動モードにソフト化が見られる。その強さはSr, Baの濃度 x に依存し、 $x \sim 0.08$ で最大となる。Weberは、上記のモードの凍結による構造の不安定化を示したが、今回の計算では、 x の全領域で不安定化は見られなかった。これは、Weberの計算ではバンドのネスティングの効果が過大に評価されているためである。

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 X 依存性を調べた。 λ は $X \sim 0.08$ 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ズ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、