

〔 東京大学 〕

超格子 Cu-Zn のバンド計算

浅 野 摂 郎 (山下研)

典型的な超格子 Cu-Zn (β' -brass) のバンド構造を、Kohn & Rostoker の Green 函数法によつて Δ , A , Σ 軸及びその他 35 点 (同等な点を含めて 512 点) について計算した。

Potential は Wigner-Seitz 近似を仮定し、Core-electrons は原子の Hartree-Fock 解を用い、conduction-electrons については、なるべく Self-consistent に近づくよう努力した。

その結果、d-Band は、それぞれ Cu の d-Band, Zn の d-Band, に対応する二つの Group に完全に分れ、上の Cu の d-Band は s-Band に割込んで、mixing を起し、その Band 巾は、Pure-Cu の d-Band 巾に比べてかなり小さかつた。又、超格子であることから s-Band に生ずる Band-Gap は 0.01 Ry の order で他の Gap に比べてずっと小さかつた。512 点から計算した State-Density-curve は Fermi 面附近で Rayne et al. の電子比熱の測定とほぼ一致した。尚、M 点附近の Band-Gap を Optical な実験と比較したが、もつと精しい実験がないと確定的なことは言えない。この計算に際しては、東大物性研の電子計算機 FACOM-202 を使用した。

非調和項によるフォノン脈動数のずれと減衰

石 川 幸 志 (教養金沢研)

非調和項をもつフォノン系を考える。ハミルトニアンとしてはポテンシャルエネルギーをイオンの変位で展開するとき、変位に関して 4 次の項までとり、それをオ二量子化したものを使つた。このハミルトニアンで二次の項

までとると格子振動はフォノンという良い素励起になつてゐるが、このフォノンの非調和項による振動数のずれと減衰を考えた。4次まで考えるのは3次と4次の項が同じオーダーの寄与を与えるからである。この問題はMaradudinとFeinによつてグリーン函数摂動論で求めることにより、又Cowleyによつて摂動論の結果を使つてセルフコンシステントにずれを求めることがなされてゐる。ここではカノニカル変換とフォノンの生成消滅演算子の二個の積を平均値で置き換へることによつて、非調和項を二次の項にハミルトニアンの中できり込みを行ないフォノン振動数のずれを求めた。これはCowleyと同じ結果を与えて、Cowleyの方法より、すぐれた点がある。さらにくり込んだハミルトニアンの中で残るリアルプロセスを表わす相互作用の項よりフォノンの衝突による遷移確率を求めて、衝突項を出してフォノン系のボルツマン方程式をえた。それよりフォノンの減衰を求めた。

Optical properties of graphite

小 林 謙 二 (植村研)

The dielectric functions due to π electrons in the graphite calculated. Two observed peaks in the optical absorption are assigned as inter- π -band transitions at the points K and W in the Brillouin zone respectively. The dielectric function in the lower frequency region including the first peak at 0.8 eV is well reproduced by assuming the Slonzewski-Weiss model, and that in the higher frequency region including the second peak as 0.8 eV is also well reproduced by using the Coulson-Taylor's model of two dimensional graphite. A slight discrepancy between expected and observed energy of the second peak may be removed by treating the three dimen-