

電子格子強結合によるカタストロフィー

自縄自縛と格子欠陥生成のダイナミックス

講師 東大物性研 豊 沢 豊

夏の学校の最終日にもかかわらず、非常に大勢の方が豊沢先生の講義を聞きに集まりました。電子と格子系との大きな相互作用があると、電子が自己のまわりの格子を変形させ、それが電子自身に反作用として働き、電子が動けなくなってしまう。これが self trapped electron です。実験的にはAgClでは hole の self trapping が観測されているが、AgBr ではされていない。これらの混晶によるルミネッセンスの実験から、drasticに self trapped state にかかわることが観測されている。なぜこういうことがおこるのか、ということの説明が講義されました。

電子と格子の相互作用として、optical phonon との相互作用だけを考えた場合には、polaron状態は出てくるが、self trapped stateは見出せない。acoustic phonon との相互作用を取り入れることによって始めて説明できる。簡単のために、結晶格子を連続媒質に置き換え、acoustic phononはdilation $\Delta(r)$ で、optical phononは電気分極を表わすポテンシャル $\Phi(r)$ で表わし、格子の運動エネルギーを無視した近似（断熱近似）で電子格子系の全エネルギーを求める。これを、 $\Delta(r)$ 、 $\Phi(r)$ と電子の波動関数 ψ とで変分することによってエネルギー最小をさがす。変分函数として

$$\psi(r) = N \exp \left(-\pi \alpha^2 \frac{r^2}{a_0^2} \right)$$

を使い、 α を変分パラメータとして全エネルギーは

$$E = B \left(\alpha^2 - g_{ac} \alpha^3 - g_{op} \alpha \right)$$

となる。ここでBは電子の運動エネルギー g_{ac}, g_{op} はそれぞれ acoustic phonon, optical phonon と電子との相互作用の強さを表わす。 α は $0 \leq \alpha \leq 1$ であって、 $\alpha=0$ が freeな状態、 $\alpha=1$ が localize した状態を示す。Eが α のどの値で最小になるかは、 g_{op} と g_{ac} の大きさによって決まる。こうして図1からわかる様に、安定状態は g_{ac} の大きさが変わると drastic に変化することが説明できる。これは force range のちが

いによって、 α のべきが異なっていることによるものである。

これまでは phonon のエネルギーを 0 にしていたが、振動の量子効果を取り入れた 議論を次に行なう。簡単のために acoustic phonon だけを考え Einstein model を用いる。

電子のバンド幅を B 、phonon のエネルギーを $\hbar\omega_0$ 、coupling const. を gB とする。

$r = \hbar\omega_0/B$ 、 g を使って全エネルギーを phonon の数 σ について minimize すると、

$$g = r \sigma (1 + r^{-1} e^{-\sigma})^2$$

$$E/B = - (1 + 2 \sigma) e^{-\sigma} - r \sigma$$

となり、 E/B を g に対して図示すると図 2 の様になる。これからみてわかる様にエネルギーは g とともに連続的に変化するが、その状態は $\sigma \ll 0$ から $\sigma \gg 1$ への drastic な変化があり有効質量は約 e^{100} の変化をする。これは事実上とまっており、self trapped state を表わす。

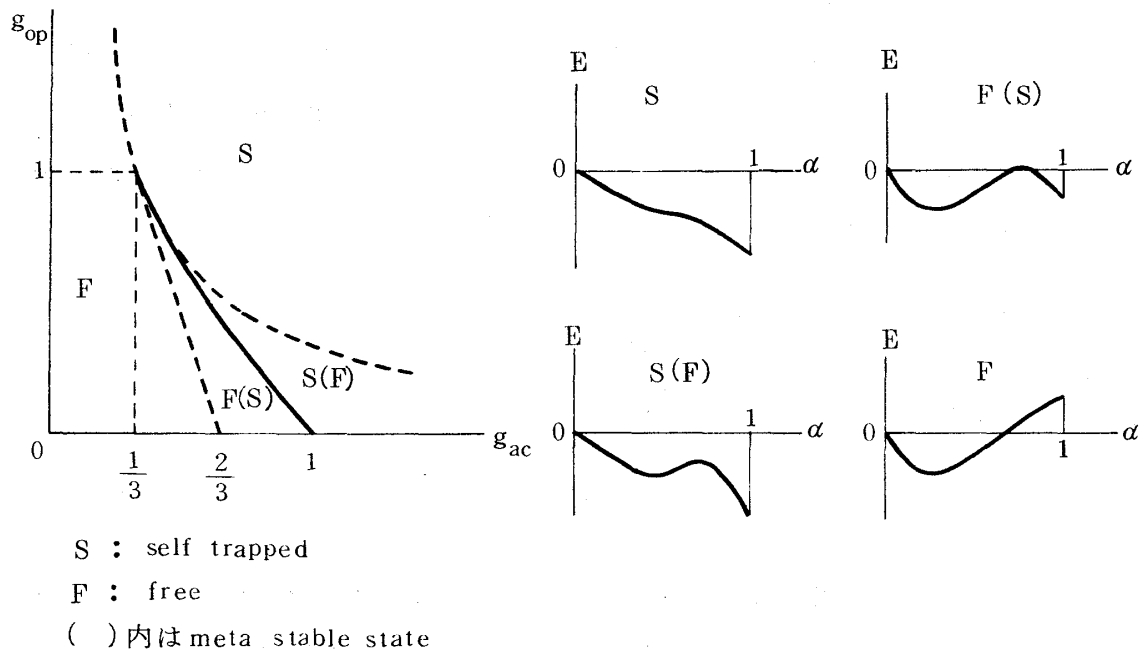


図 1

以上は一中心型の self trapped electron の話であったが、アルカリハライドなどでは二中心型の self trapped hole ができている。又 hole が self trap され電子がそのまわりをまわる、いわゆる self trapped exciton が観測されている。

以上が 講義の概略ですが、その他 Jahn Teller effect との関係、格子欠陥の生成などについての話がありました。

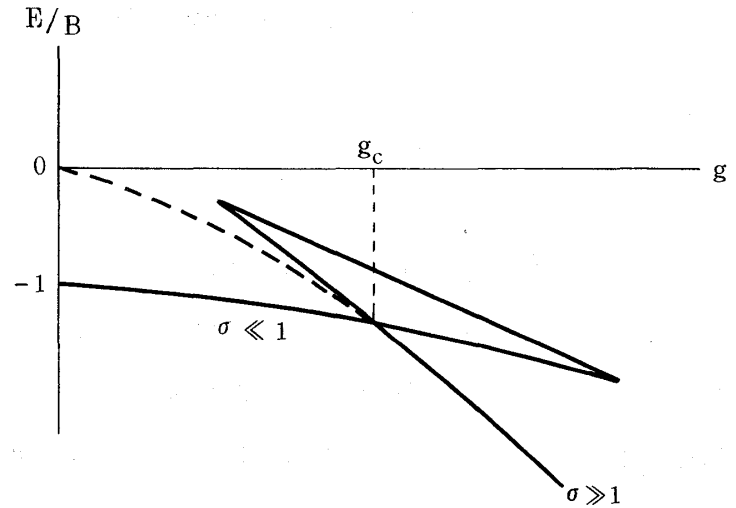


図 2

文責 阪大基礎工 井 須 俊 郎