

多数パラメータの最適制御法

奈良 久*

Optimal Control of Parameters

Hisashi NARA

Abstract

The optimal determination of parameters introduced into a system is described. The method is based on minimizing the root-mean-square deviation. The method is applied to the band structures of elemental and compound semiconductors which reproduce accurately the observed energy spacings in a wide energy range of over 25 eV from the bottom of the valence band. The band structures thus obtained are used, with success, to a variety of semiconductors to calculate the Compton profiles, the positron annihilation, the phase transitions under pressure, the 3D momentum density distributions, the charge density distributions and so on. Applications to the other problems are also discussed.

キーワード: optimal control of parameters, semiconductors, pseudopotential

1 はじめに

いろいろな分野で、パラメータを持ち込んで実験結果を整理したり、あるいは理論的な議論を展開したりする例が多い。その際持ち込んだパラメータの値をどのように設定するのかについては、いろいろなケースがあろう。ある場合には値が事実上決まっていますそれ以外の値を設定することは不可能な場合もあろうし、経験に基づいて値を設定することもある。また別の場合には最小2乗法や最良近似の立場で値を決める方法もある。

われわれは、要素半導体および化合物半導体の電子状態を固体電子論的に調べる仕事を続けてきた。そのためにはこれら半導体のバンド構造を、実験と矛盾しない広いエネルギー範囲で正確に知る必要があった。

固体のバンド構造は、結晶ポテンシャルが与えられれば計算できるものである。ところが結晶ポテンシャルを第1原理から計算することはなかなか大仕事で、しかもまったく近似なしに計算することは不可能に近い。その上1電子近似を超える効果(多体効果あるいはコリレーション効果)もある。

そこでわれわれは、計算困難なポテンシャルにパラメータを持ち込んで、バンド構造に関する実験値を再現するようにパラメータの値を制御して、バンド構造を計算した。そしてこのバンド構造を用いてSiやGeの要素半導体と一連の化合物半導体のコンプトン散乱、コンプトン・プロファイル、陽電子消滅、圧力相転移、3次元運動量密度分布、電荷密度分布、等などの研究を行い、成功を収めてきた¹⁾⁻¹⁴⁾。

ポテンシャルに持ち込んだパラメータの制御法は、言ってみれば最小2乗法に基づく方法で、その具体的な制御の方法は今までどこにも発表はしていなかった。しかし、われわれが採用したポテンシャル関数はかなり複雑なもので、その決定法は最小2乗法に基づくといっても、膨大なサイズのハミルトン行列の各行列要素にパラメータが入り込み、この行列を対角化するユニタリ行列を用いて、すべてのパラメータを同時に決めるという方法である。物性物理学や計算物理学の問題としてではなく、パラメータ制御の方法としてはかなり一般性のある問題で、いわば一般最適化問題の一例である。どこかで発表してご批判を仰ぐ価値のある問題ではないかと考えた。そこで本発表では、バンド構造を反映する各種光学的実験データを入力とし、結晶ポテンシャルにパラメータを持ち込んで、この実験データを正確に再現するようにポテンシャルパラメータを制御する方法を論ずる。この方法が、他の多くの問題で利用されることを期待する。

2 ポテンシャルパラメータ制御の一般論

擬ポテンシャル理論¹⁵⁾⁻¹⁷⁾の範囲で半導体のバンド構造を調べる問題を考える。解くべき波動関数を平面波で展開し、ハミルトニアンをこの波動関数で挟んで求められるハミルトニアン行列 H の固有値問題を解くことによりエネルギーと波動関数が求められる。ハミルトニアンには結晶ポテンシャルがもろに入っているため、ハミルトニアン行列の各行列要素は結晶ポテンシャル(のフーリエ変換)の複雑な関数になっている。従って結晶ポテンシャルに N 個のパラメータ p_1, p_2, \dots, p_N を導入することは、ハミルトニアンに N 個のパラメータを導入

平成 11 年 12 月 21 日受理

* 八戸工業大学 システム情報工学科 教授

することと同等である。すなわち

$$H=H(p_1, p_2, \dots, p_N) \quad (1)$$

である。パラメータの値が既知ならばハミルトニアンは確定する。

H を対角化するユニタリ行列を U とする。 i 番目と j 番目のバンド間のエネルギー差は

$$E_{ij}^{\text{theor}}=E_i-E_j=(U^{-1}HU)_{ii}-(U^{-1}HU)_{jj} \quad (2)$$

で与えられ、これが各種光学的実験²⁰⁾⁻³¹⁾で観測されるバンド間エネルギー E_{ij}^{exp} と比較されるべき量である。

さて、パラメータ p_α の値が $(n+1)$ 回目の反復計算の段階で

$$p_\alpha(n+1)=p_\alpha(n)+\Delta p_\alpha(n), \alpha=1, 2, \dots, N \quad (3)$$

と変化したとしよう。ここに $p_\alpha(n)$ は n 回目の反復計算段階におけるパラメータの値である。

われわれは最小2乗法を適用して各反復計算ステージでのパラメータの補正值 $\Delta p_\alpha(n)$ を求めたい。すなわち関数

$$D=(m-N)\delta^2=\sum_{(ij)}(E_{ij}^{\text{exp}}-E_{ij}^{\text{theor}})^2 \quad (4)$$

を最小にすることによって $\Delta p_\alpha(n)$ を決めたい。ただし、 m は採用する実験値の数、 $\sum_{(ij)}$ は (i, j) のペアについての和、 δ は rms (root mean square) 偏位である。

式 (3) の $\Delta p_\alpha(n)$ が $p_\alpha(n)$ に比べて小さいと仮定すると、ハミルトン行列の変化は

$$H(n+1)\doteq H(n)+\sum_\alpha \Delta p_\alpha(n) \partial H(n) / \partial p_\alpha(n) \quad (5)$$

としてよいであろう。ここに、 $H(n)$ は、パラメータの値が $p_\alpha(n)$ ($\alpha=1, 2, \dots, N$) であるときのハミルトニアンを表わす。すると $E_{ij}^{\text{theor}}(n+1)$ と $E_{ij}^{\text{theor}}(n)$ の関係は

$$E_{ij}^{\text{theor}}(n+1)\doteq E_{ij}^{\text{theor}}(n)+\sum_\alpha \Delta p_\alpha(n)(Q_\alpha^i-Q_\alpha^j) \quad (6)$$

で与えられる。ここに

$$Q_\alpha^i=\sum_{kk'}(U^{-1})_{ik}\{\partial H(n)/\partial p_\alpha(n)\}_{kk'}(U)_{k'i} \quad (7)$$

である。さて、

$$\partial D/\partial \Delta p_\alpha(n)=0, \alpha=1, 2, \dots, N \quad (8)$$

を適用すると、各反復計算ステージでのポテンシャル補正值 $\Delta p_\alpha(n)$ を決める連立方程式として、

$$\sum_\alpha \{\sum_{(ij)}(Q_\alpha^i-Q_\alpha^j)(Q_{\alpha'}^i-Q_{\alpha'}^j)\} \Delta p_\alpha(n) = \sum_{(ij)} \Delta E_{ij}(Q_{\alpha'}^i-Q_{\alpha'}^j) \quad \alpha, \alpha'=1, 2, \dots, N \quad (9)$$

が得られる。ここに $\Delta E_{ij}=E_{ij}^{\text{exp}}-E_{ij}^{\text{theor}}$ である。連立方程式 (9) を、適当な収束値に達するまで繰り返せば、ポテンシャルパラメータが得られることになる。

パラメータ決定法 (9) の最大の特徴は、すべてのパラメータを同時に決定できることにある。しばしば、パラメータの大部分を固定し、ごく少数の (1 個か 2 個の) パラメータを動かしてそのパラメータを決定し、次いでそ

れを固定して他のごく少数のパラメータを動かす、ということを経り返すなどの方法がよく用いられる。これに反しわれわれの方法は、すべてのパラメータを自由に動かしてミニマムを探索する方法である。多数のパラメータを決定するということは、多次元のパラメータ空間の中のお椀の底を探すのに似ている。われわれの方法は、お椀のどこかから出発しさえすれば必ずその正しい底に達する方法である。ただし、もっと深いところに位置するお椀が存在する場合には、その底に達することが出来ない。それゆえどこから出発するか、言い換えるとパラメータの初期値の選び方が極めて重要である。多くの分野でどのようにパラメータの初期値を選ぶべきかについて、何らかのガイドラインが存在するはずである。幾つかのトライアルな計算は避けられないであろう。われわれの場合には、 δ の値がそう違わない明らかに違う複数のミニマムを探し出したという経験を持つ。いずれにしても、初期値の選び方は慎重にしたい。

3 半導体のバンド構造への適用

われわれの採用した結晶ポテンシャルは、

$$V(r)=V_L(r)+V_{NL}(r) \quad (10)$$

の形をした擬原子ポテンシャルの重ね合わせで作られる。 $V_L(r)$ は局在ポテンシャル (Local Potential) 部分である。 $V_{NL}(r)$ は非局在ポテンシャル (Nonlocal Potential) 部分であり、

$$V_{NL}(r)=\sum_l v_l(r) \sum_m |Y_{lm}\rangle \langle Y_{lm}| \quad (11)$$

と書ける。式 (11) の $\sum_m |Y_{lm}\rangle \langle Y_{lm}|$ は角運動量 l を捨い出すプロジェクトション・オペレータであり、非局在ポテンシャルは角運動量 l に依存する。非局在ポテンシャルの動径部分として、角井戸型¹⁸⁾あるいはガウス井戸型¹⁹⁾、

$$v_l(r)=A_l \Theta(R_l-r), \text{ または } v_l(r)=A_l \exp[-r^2/R_l^2] \quad (12)$$

を採用する。もちろん $\Theta(x)=1$ for $x \geq 0$, $\Theta(x)=0$ for $x < 0$ である。したがって、われわれが決めるべきポテンシャル・パラメータは、局所ポテンシャルのフーリエ成分と、非局在ポテンシャルの井戸の深さ (高さ) A_l およびカットオフ半径 R_l ということになる。

第1ブリルアン・ゾーンの k 点における ν 番目のバンドの波動関数 $\psi_{\nu,k}(r)$ は

$$\psi_{\nu,k}(r)=\sum_q C_q^\nu(k) \exp[i(k+k_q) \cdot r] \quad (13)$$

の形をしており、 $C_q^\nu(k)$ が作るベクトルの集合が式 (2) のユニタリ行列を構成する。式 (13) で K_q は逆格子ベクトルである。したがって、ポテンシャルを決めるための連立方程式 (9) に必要な Q_α^i は、状態を表わす量子数 i

を (ν, k) に書き換えて,

$$Q_{\alpha}^{(\nu, k)} = \sum_{q, q'} [C_{q'}^{\nu}(k)]^* \{\partial H(k) / \partial p_{\alpha}\}_{qq'} C_q^{\nu}(k) \quad (14)$$

となる。 δ のミニマムを探す際にパラメータ R_l に対して $\{\partial H(k) / \partial p_{\alpha}\}_{qq'}$ を正確に計算するのは困難なので、決めるべきパラメータ、 $V_L(K_i^2)$, A_l および R_l のうち R_l だけは、外部的に変動させることにする。

場合によっては (Ge の伝導帯ミニマムの位置が L 点にあることを保証する場合。詳細な議論は省略する), δ の絶対値ではなく、相対的な偏位

$$\bar{D} = (m - N) \delta^2 = \sum_{(i)} \{(E_{ij}^{\text{exp}} - E_{ij}^{\text{theor}}) / E_{ij}^{\text{exp}}\}^2 \quad (15)$$

をミニマムにするのが有効なことがある。ポテンシャル・パラメータは、補正値を

$$p_{\alpha}(n+1) = p_{\alpha}(n) + \Delta p_{\alpha}(n) = p_{\alpha}(n) [1 + \bar{\Delta} p_{\alpha}] \quad (16)$$

とおいたときの $\bar{\Delta} p_{\alpha}$ が、式 (14) を式 (15) と矛盾しないように若干書き換えてたものを使って、連立方程式 (9) を解いて求められる。

以下ではしばしば

$$nL + NL(l) \quad (17)$$

の記号を使う。これは、 n 個の局在パラメータ $\{V_L(K_i^2), q=1, 2, \dots, n\}$ と、角運動量 l に依存した局在パラメータ $\{A_l, R_l\}$ とを用いて最適化した結果を表わす。Si や Ge などの要素半導体では、3 個程度の局在パラメータと一組の非局在パラメータ A_l, R_l で十分であるが、GaAs や InSb などの化合物半導体では、結晶が反転対称性を持たないことに対応して結晶ポテンシャルは対称成分と非対称成分を持つので、決めるべきパラメータの数は 2 倍になる。

4 結果と議論

Fig. 1 に $\delta(\text{Si})$ と $\delta(\text{Ge})$ がカットオフ半径 R_l にどのように依存しているかを示す。ここに 3L (5L) などは、局在パラメータのみ 3 個 (5 個) でフィットした結果を表わし、3L+NL (d) などは、3 個の局在パラメータと $l=2$ の非局在パラメータでフィットした結果を表わす ($l=0$ は $s, 1$ は $p, 2$ は d, \dots)。また Table I には、Si と Ge

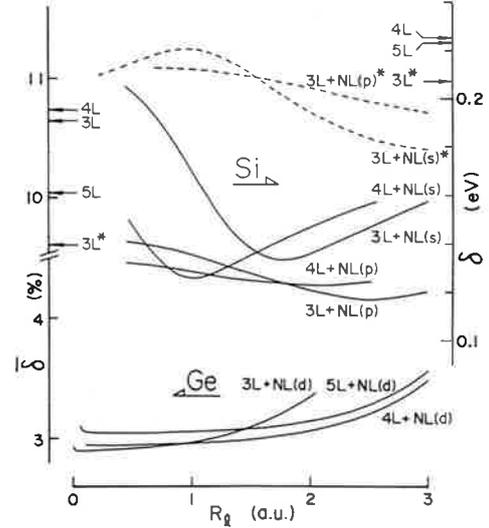


Fig. 1. The variation of the rms-deviation $\delta(\text{Si})$ in eV and $\bar{\delta}(\text{Ge})$ in % as functions of the cut-off radius R_l , for the several $nL + NL(l)$ EPP's. The results for the local fittings nL are indicated by the arrows. The dashed curves correspond to the higher minima of δ in the parameter space. For the meaning of the asterisked results, see text.

Table I. The empirical pseudopotential parameters, $V_L (G^2)$, A_l (in Ry/atom) and R_l (in a.u.) determined for Si and Ge corresponding to the typical values of $\delta(\text{Si})$ (in eV) and $\bar{\delta}(\text{Ge})$ (in %). For the meaning of the asterisked results, see text.

	$V_L(3)$	$V_L(8)$	$V_L(11)$	$V_L(16)$	$V_L(19)$	A_0	A_1	A_2	R_l	$\delta(\text{Si}), \bar{\delta}(\text{Ge})$
	3L*	-0.2213	0.0529	0.0763						0.207 eV
	4L	-0.2082	0.0409	0.0835	0.0189					0.225
	5L	-0.2066	0.0269	0.1106	0.0247	0.0760				0.223
Si	3L+NL (s)	-0.2289	0.0191	0.0676		0.2391			1.75	0.134
	3L+NL (p)	-0.2021	0.0363	0.0769			-0.0604		2.5	0.117
	4L+NL (s)	-0.2631	-0.0262	0.0504	-0.0617	2.233			1.0	0.127
	4L+NL (p)	-0.2019	0.0332	0.0797	-0.0134		-0.1385		2.0	0.123
	3L*	-0.2852	0.0604	0.0173						9.61 %
	3L	-0.2508	0.0257	0.0441						10.64
	4L	-0.2555	0.0363	0.0224	0.0627					10.73
	5L	-0.2440	-0.0139	0.0867	0.0181	0.1131				10.04
Ge	3L+NL (d)	-0.2425	0.0253	0.0529				4.892×10^{13}	0.02	2.89
	3L+NL (d)	-0.2422	0.0255	0.0526				83.77	0.98	2.96
	4L+NL (d)	-0.2437	0.0299	0.0432	0.0261			71.27	1.0	2.95
	5L+NL (d)	-0.2407	0.0223	0.0529	0.0140	0.0146		5.956×10^8	0.1	3.05
	5L+NL (d)	-0.2402	0.0223	0.0520	0.0184	0.0167		79.40	0.98	3.05

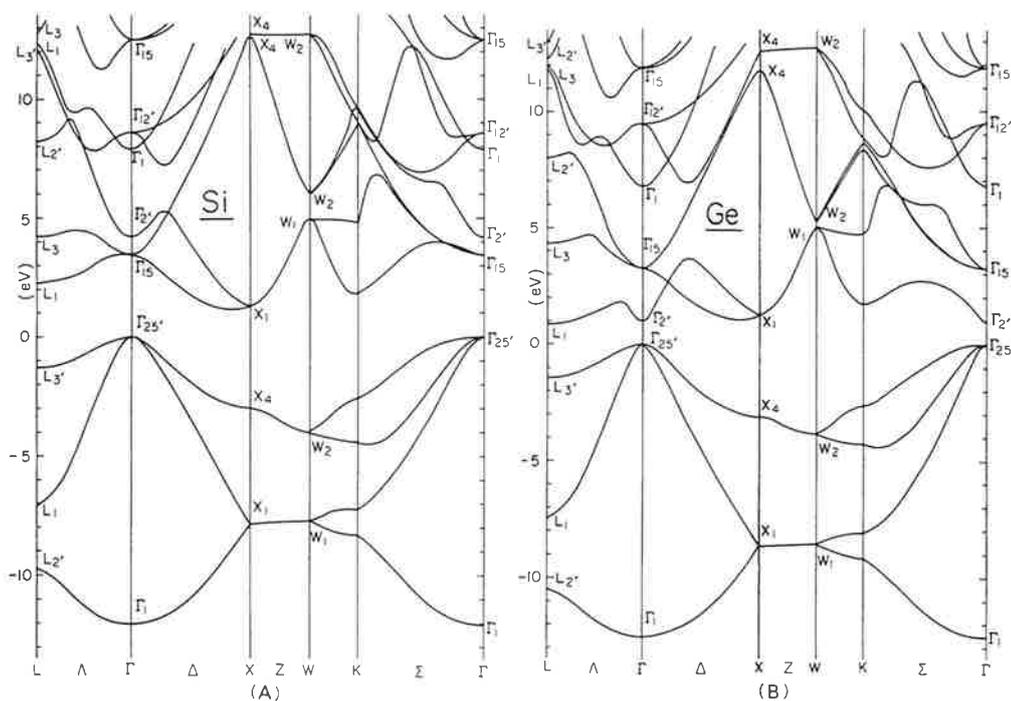


Fig. 2. (A) The energy band structure of Si along the principal symmetry directions calculated with the 3L+NL(p) EPP at $R_1=2.5$ a.u. given in Table I and (B) of Ge calculated with the 3L+NL(d) EPP at $R_2=0.98$ a.u. The energy is in units of eV.

Table II. Comparison of the calculated LS's (in eV) of Si with experiment. In the upper part of the table, the comparison with the experimental LS's adopted as the input data for determining the EPP is made. In the lower part the comparison with the other experimental data available is added.

	(i, j)	$E_{\text{exp}}^{(i,j)}$	3L*	5L	3L+NL (s) $R_0=1.75$	3L+NL (p) $R_1=2.5$	4L+NL (s) $R_0=1.0$	4L+NL (p) $R_1=2.0$ a.u.
Optical	$\Gamma_{15}^c - \Gamma_{25}^c$	3.40	3.40	3.37	3.50	3.46	3.41	3.47
	$\Gamma_2^c - \Gamma_{25}^c$	4.20	4.30	4.31	4.13	4.21	4.22	4.19
	$X_1^c - X_4^c$	4.20	4.19	4.08	4.09	4.20	4.15	4.20
	$L_1^c - L_3^c$	3.45	3.40	3.38	3.34	3.45	3.42	3.46
	$L_3^c - L_3^c$	5.50	5.22	5.51	5.40	5.45	5.49	5.46
	$X_1^c - \Gamma_{25}^c$	1.20	1.16	1.15	1.15	1.09	1.20	1.13
XPS	$L_1^v - L_3^v$	2.6	2.91	2.92	2.64	2.57	2.61	2.57
	$X_4^v - L_1^v$	4.4	4.32	4.39	4.20	4.23	4.17	4.19
	$W_2^v - L_1^v$	3.0	3.35	3.40	3.21	3.31	3.19	3.19
UPS	$\Gamma_1^c - \Gamma_{25}^c$	7.6	8.32	7.63	7.63	7.64	7.60	7.61
	$\Gamma_{12}^c - \Gamma_{25}^c$	8.3	7.76	8.28	8.35	8.35	8.30	8.30
	δ (eV)		0.207	0.223	0.134	0.117	0.127	0.123
	$\Gamma_{25}^v - \Gamma_1^v$	$\begin{cases} 12.4 \pm 0.6 \\ 14.7 \end{cases}$	12.63	12.54	12.47	12.28	12.13	12.22
	$\Gamma_{25}^v - \Sigma_{\text{min}}^v$	$\begin{cases} 4.4 \pm 0.2 \\ 4.7 \end{cases}$	4.55	4.46	4.50	4.70	4.50	4.47
	$\Gamma_{25}^v - W_1^v$	7.8	8.19	8.16	7.79	7.92	7.74	7.84
	$\Gamma_{25}^v - L_3^v$	9.2	10.27	10.23	9.79	9.91	9.73	9.84
	$\Gamma_{25}^v - W_2^v$	3.6	4.01	3.92	3.94	4.13	3.93	4.07
	$\Gamma_{25}^v - L_1^v$	$\begin{cases} 6.4 \pm 0.4 \\ 6.6 \end{cases}$	7.36	7.32	7.15	7.34	7.12	7.26
	$\Sigma_3^c - \Sigma_2^c$	4.44	4.25	4.16	4.19	4.27	4.21	4.27
	$\Delta_{\text{min}}^c - \Gamma_{25}^c$	1.15	1.04	1.00	1.01	0.96	1.06	1.00

に対してわれわれが決めたポテンシャル・パラメータの値と、達成された $\delta(\text{Si})$ および $\bar{\delta}(\text{Ge})$ の値が与えられている (図および表に, $3L^*$, $3L+NL(s)^*$ などの, *印のついた結果があるが, ここではこの議論は省略する)。これらの結果から

- 達成された $\delta(\bar{\delta})$ の値は小さい。
- $\delta(\bar{\delta})$ の R_i 依存性はむしろ小さい。
- Si, Ge の両方で, 非局在パラメータが, 局在パラメータだけのフィッティングの質を実質的に改善している。
- Ge に対して, $3L+NL(d)$ と $5L+NL(d)$ の δ の極小は, $R_2=0.02$ a.u. という極めて小さい値のところで起こっている。一方 Si の $3L+NL(p)$ のミニマムは, $R_1=2.5$ a.u. で起こっており, これは Si-Si ボンドの半分よりも大きい。

などの特徴が読み取れる。

このようにして決定したポテンシャル・パラメータを用いて得られた Si と Ge のバンド構造を Fig. 2 に示す。

バンド間エネルギーの実験値 E_{ij}^{exp} と計算値 E_{ij}^{th} の詳細な比較を, Table II (Si) と Table III (Ge) に示す。実験値の出所 (文献) をあげることは省略するが, XPS や UPS の実験法の進歩や各種変調技術の採用などで, 半導体バンド構造に対する実験的知識は, バンドギャップの上下 10 eV 以上に及んでいることを強調しておこ

う。つまり, 非局在ポテンシャル・パラメータを導入することによって, バレンス・バンドの底から 25 eV 程度にわたる広いエネルギー範囲で, E_{ij}^{exp} を Si に対しては $\delta=0.1$ eV 程度, Ge に対しては $\bar{\delta}=3\%$ 程度の精度で再現するエネルギーバンドが求められたのである。

以上, 半導体のバンド構造決定に必要な結晶ポテンシャルにパラメータを持ち込んで, そのパラメータを決定する方法について述べた。この方法の最大の特徴は, 基本的には持ち込んだパラメータすべてを, 連立方程式を解くことによって同時に決めることができることである。物性物理学の立場からは, このようにして求められたバンド構造を用いて, 他のいろいろな物性を論ずることが出来るという利点があるが, その詳細はここでは省略した。

フィットさせるべき物理量 (実験値や理論値, その他) があり, その物理量が原理的に厳密に定義されている量であれば, ここで述べたパラメータ制御の方法は原理的には適用できるであろう。パラメータが線形の形で入っている場合には (この例では, すべての局在パラメータと, 井戸の深さのパラメータ), パラメータ制御は比較的容易である。カットオフ半径のような非線形パラメータの場合は, この例のように外部的に変動させざるを得ず, 非線形パラメータが多い場合には別の制御方法を考えなければならないであろう。

Table III. The same comparison for Ge as in Table II.

(i, j)	E_{ij}^{exp}	$3L^*$	$3L$	$5L$	$3L+NL(d)$ $R_2=0.98$	$4L+NL(d)$ $R_2=1.0$	$5L+NL(d)$ $R_2=0.98$ a.u.
Optical	$\Gamma_2^c-\Gamma_{25}^v$	0.99	0.97	0.98	0.99	0.99	0.99
	$\Gamma_{15}^c-\Gamma_{25}^v$	3.23	2.95	3.31	2.99	3.24	3.19
	$L_1^c-L_3^v$	2.34	2.14	2.04	2.08	2.27	2.26
	$L_3^c-L_3^v$	5.80	4.89	5.18	5.34	5.72	5.71
	$X_1^c-X_4^v$	4.50	4.16	3.94	3.94	4.37	4.34
	$L_1^c-\Gamma_{25}^v$	0.84	0.90	0.89	0.86	0.85	0.85
	$X_1^c-\Gamma_{25}^v$	1.26	1.33	1.27	1.32	1.29	1.29
XPS	$\Gamma_{25}^v-\Gamma_1^v$	12.6 ± 0.3	12.20	12.14	11.99	12.55	12.51
	$\Gamma_{25}^v-L_2^v$	10.6 ± 0.4	10.23	10.15	10.11	10.47	10.45
	$\Gamma_{25}^v-L_1^c$	7.7 ± 0.2	7.11	7.06	7.02	7.44	7.41
	$\Gamma_{25}^v-L_3^c$	1.4 ± 0.2	1.24	1.15	1.22	1.42	1.41
	$\Gamma_{25}^v-X_4^c$	2.9 ± 0.3	2.83	2.67	2.62	3.08	3.07
UPS	$L_3^c-\Gamma_{25}^v$	4.3	3.66	4.03	4.12	4.31	4.29
	$\Gamma_1^c-\Gamma_{25}^v$	7.1	8.54	7.40	7.07	6.86	6.94
	$\Gamma_{12}^c-\Gamma_{25}^v$	9.6	7.21	7.83	8.33	9.34	9.62
$\bar{\delta}$ (%)		9.61	10.64	10.04	2.96	2.95	3.05
$\Sigma_3^c-\Sigma_2^v$	4.50	4.01	3.94	3.93	4.33	4.32	4.30
$\Gamma_{25}^v-\Delta_{\text{min}}^c$	1.06	1.16	1.13	1.15	1.08	1.10	1.07
$\Gamma_{25}^v-\Sigma_{\text{min}}^v$	$\left\{ \begin{array}{l} 4.5\pm 0.2 \\ 4.9 \end{array} \right.$	3.97	3.92	3.83	4.38	4.37	4.36
$\Gamma_{25}^v-W_2^v$	3.6	3.49	3.43	3.36	3.87	3.85	3.84
$\Gamma_{25}^v-W_1^c$	8.6	8.99	8.30	8.30	8.58	8.57	8.57

文 献

- 1) H. Nara and M. Schlesinger ; J. Phys. C : Solid State Phys. 5 (1972) 606.
- 2) H. Nara and T. Kobayasi ; J. Phys. Soc. Jpn. 41 (1976) 1429.
- 3) H. Nara, K. Shindo and T. Kobayasi ; J. Phys. Soc. Jpn. 46 (1979) 77.
- 4) H. Nara, T. Kobayasi and K. Shindo ; Ext. Abs. VII Sagamore Int'l Conf. on Spin, Charge and Mom. Densities. (1982) 89.
- 5) H. Nara, T. Kobayasi and K. Shindo ; J. Phys. C : Solid State Phys. 17 (1984) 3967.
- 6) F. Itoh, M.J. Cooper, R.S. Holt, D. Laundry, D. Cardwell and H. Nara ; Chemica Scripta 26 (1986) 393.
- 7) F. Itoh, H. Nara, T. Kobayasi and K. Suzuki ; Chemica Scripta 26 (1986) 594.
- 8) D.N. Timms, M.J. Cooper, R.S. Holt, F. Itoh, T. Kobayasi and H. Nara ; J. Phys. : Condens. Matter 2 (1987) 10517.
- 9) T. Kobayasi and H. Nara ; Bull. Coll. Med. Sci. Tohoku Univ. 1 (1991) 15.
- 10) T. Kobayasi and H. Nara ; Z. Naturforsch. 48a (1993) 193.
- 11) T. Kobayasi and H. Nara ; Bull. Coll. Med. Sci. Tohoku Univ. 2 (1993) 7.
- 12) H. Nara, T. Kobayasi, T. Takegahara, M.J. Cooper and D.N. Timms ; Com. Mat. Sci. 2 (1994) 366.
- 13) T. Kobayasi and H. Nara ; Mat. Sci. Forum 175-178 (1995) 903.
- 14) T. Kobayasi, H. Nara, M.J. Cooper and D.N. Timms ; Bull. Coll. Med. Sci. Tohoku Univ. 4 (1995) 93.
- 15) V. Heine ; Solid State Physics, ed. F. Seitz and F. Turnbull (1970) 1.
- 16) M.L. Cohen and V. Heine ; Solid State Physics, ed. F. Seitz and F. Turnbull (1970) 38.
- 17) M.L. Cohen and T.K. Bergstresser ; Phys. Rev. 141 (1966) 789.
- 18) I. Abarenkov and V. Heine ; Phil. Mag. 12 (1965) 529.
- 19) J.R. Chelikowsky and M.L. Cohen ; Phys. Rev. Lett. 32 (1972) 674.
- 20) L. Ley, Skowalczyk and R.A. Pollak ; Phys. Rev. Lett., 29 (1972) 1088.
- 21) R.A. Pollak, L. Ley, Kowalczyk, et. Al ; Phys. Rev. Lett. 29 (1972) 1103
- 22) L. Ley, R.A. Pollak, F.R. McFeely, et. Al ; Phys. Rev. B9 (1974) 600.
- 23) W.D. Grobman and D.E. Eastman ; Phys. Rev. Lett. 29 (1972) 1508.
- 24) D.E. Aspnes ; Phys. Rev. Lett. 28 (1972) 913.
- 25) D.E. Aspnes and J.E. Rowe ; Phys. Rev. B7 (1973) 887.
- 26) D.E. Aspnes and A.A. Studna ; Phys. Rev. Phys. Rev. B7 (1973) 4605.
- 27) W.E. Spicer and R.C. Eden ; Proc. 9th Int'l Conf. on Semicon. Nauka, Leningrad, USSR, 1 (1968) 65.
- 28) D.E. Aspnes and A. A. Studna ; Solid State Commun. 11 (1972) 1375.
- 29) R.R.Z. Zucca and Y.R. Shen ; Phys. Rev. B1 (1970) 2668.
- 30) A. Frova and P. Handker ; Phys. Rev. Lett. 14 (1965) 178.
- 31) B.O. Seraphin ; Phys. Rev. Lett. ; 140 (1965) A1716.