

大阪大学基礎工学研究科物理系専攻物性学分野

作成した Cu-Al-Ni 合金薄帯は平均粒径が数 μm 程度で、良好な形状記憶効果を示すだけでなく、可逆形状記憶効果も観察された。しかし結晶粒径が通常の方法で作成したものに比べて 2~3 桁も小さくなったにもかかわらず母相状態では殆んど塑性変形せずに脆性破壊を起こす。しかしながら Ti, Zr 等の酸素と親和力の強い元素を 0.3~1wt% (~0.5at.%) 程度添加するだけで形状記憶効果を損わずに母相の脆性が著しく改善されることが明らかになった。そこで Cu-Al-Ni 合金薄帯の脆性に及ぼす添加元素の効果について、酸素と親和力の強い元素について系統的に調べた結果、これらの添加元素は母相中にそれぞれ数 10~数 100Å 程度の微細な析出物を形成することが分かった。これらの析出物により母相の粒界への酸素析出が抑制された結果、脆性が改善されたと結論出来た。

極微細粒 Cu-Al-Ni 合金のマルテンサイト変態を調べ、以下のことが判明した。まず変態開始温度が通常の方法で作成した試料に比べて 20K も低く、また冷却だけで r_1' (2H) マルテンサイトのみならず、単結晶では応力でのみ誘起される β_1' (18R) マルテンサイトも出現した。変態は粒界から核形成し、 r_1' マルテンサイトには 100~200Å の厚さをもつ $\{121\}r_1'$ 内部双晶が観察された。その双晶板の厚さは通常の方法で作成した試料で観察されている値に比べて 1 桁も小さく、微細結晶粒組織における変態の特性であることが示唆された。

また銅基合金は相分離を起こし易く、実用的観点からは時効の問題が重要であるため、473~673K の母相状態での時効実験を行なった。その結果、時効とともに相分離が進行し、残留 β_1 相の変態温度が上昇し、また形状記憶効果能も劣下することが分かり、その現象がアレニウス型であると仮定した場合の見かけの活性化エネルギーは 0.7 eV であった。

15. 層状半金属 1T-TiSe₂ の電子格子相互作用と、 電荷密度波状態

山本 敦志

1T-TiSe₂ は、202 K で構造相転移を起こし、転移点以下では、 $2a_0 \times 2a_0 \times 2c_0$ の commensurate な超格子を形成する。その構造は、3つの L 点のフォノン・モードの重ね合わせで記述される、triple-q structure である。望月研究室では、この物質の高温相における格子の不安定性・格子振動をバンド型ヤーン・テラー・モデルにもとづいて、詳細に研究してきた。ここでは、その理論を拡張して、電荷密度波状態 (転移点以下) における電子帯構造を計算した。電子格子相互作用により、 Γ 点のまわりの hole bands (Se p 状態) と L 点のまわ

りの electron bands (Ti d 状態) とが強く結合する。この強い結合のため、フェルミ・エネルギー近傍のエネルギー・バンドが大きく変化する。したがって、状態密度にもフェルミ・エネルギー近傍に著しい変化が見られるが、これは、Margaritondoらにより、photoemission で観測されたものとよく一致している。また、電子系のエネルギーを、歪みの大きさの関数として計算し、一方、歪みによる弾性エネルギーの変化を、高温相の lattice dynamics から評価して、全エネルギー最小の条件から歪みの大きさを決定した。その結果は観測値とほぼ一致した。さらに、single-q structure より、triple-q structure のほうが安定であるということも示すことができた。

16. 金属表面でのイオンの中性化確立に及ぼす 電子間相互作用の効果

河 合 伸

金属表面に入射されたイオン状態の原子は、ある確率で金属中の電子を獲得して金属表面から散乱される。電子を獲得したことによりイオンは、中性もしくは負に帯電する。入射原子上の時間とともに変化する電子数の期待値が問題である。獲得された原子上のスピンの異なった2つの電子間には、反発の相互作用が働く。今まで調べられていなかった原子上の電子間相互作用が電子数の時間依存性に及ぼす効果を単純化されたいくつかの場合に調べた。表面で散乱される過程において原子は、古典的に定まったある軌道に沿って運動すると近似する。電子が表面と入射原子との間で移動する過程としては、直接過程を考え、時間に依存する Newns-Anderson モデルを用いた。電子間相互作用は、Hartree-Fock 近似の範囲内で取り扱い、時間の関数としての原子上での上向きスピン電子と下向きスピン電子の平均数の self-consistent な解を数値計算によって求めた。計算の結果原子上の電子数の平均は、振動しながら平衡状態の値へ収束していくこと、majority spin と minority spin の電子数の差がある種の rate equation で記述できる時間領域があることなどの興味深い結果を得ることができた。

17. 二次元XY強磁性体のモデルとしての CoCl_2 -GIC の 磁化過程