

れた状態は、エネルギー最低の状態ではないから、原子が移動し得る温度にまで加熱されると、原子配置が組み替えられ、より安定な非晶質状態に変化（構造緩和）したり、通常には存在しない準安定結晶相あるいは通常の最も安定な平衡結晶相に変化（結晶化）したりする。このような一連の現象は、非晶質合金の構造及びその中で原子の輸送と密接に関係しており、前者を観ることにより後者を調べることが我々の目的である。

本研究では、場所的に不均一に起こる結晶化の個々の過程を捉えるため、液体急冷された非晶質リボンを電解研磨により薄膜としたものを試料とし、電子顕微鏡内加熱・その場観察を行った。ここでは、 $a\text{-Fe-14a/oB}$ における Fe_3B 結晶（B.C.T.）の成長について報告する。

この合金を加熱すると、初めに $\alpha\text{-Fe}$ が一様に高密度に晶出するが、 $400 \sim 500 \text{ \AA}$ 程度の大きさになるとそれ以上成長しなくなる。その後、非晶質のMatrixに Fe_3B が核形成（非常に低密度）し、 $\alpha\text{-Fe}$ 結晶粒を包み込んで大きく2次的に成長する。一定温度でのこの成長の速度は、時間と共に減少する。減速は、緩和時間を τ として、 $v = dD/dt = A \exp(-t/\tau)$ で良く記述できる。Pulse Annealと名づけた方法で解析したところ、成長とその減速とは、異なる活性化エネルギーを持つ2つの独立した現象であることが判明した。成長は、界面での非晶質から結晶への構造変化であり、非晶質の状態が変化することによりその反応が減速されるものと考えられる。Slope Change法により、界面反応の活性化エネルギーは約 2eV と求められた。いくつかの温度での等温焼鈍から求めた緩和時間 τ の温度依存は、Arrhenius型（ $1/\tau \propto \exp(-E/kT)$ ）からはずれて、むしろ粘性流動のFulcher-Vogel型（ $\tau \propto \exp(B/(T - T_0))$ ）に従う。これは、この減速が、非晶質の粘性流動的な構造緩和に起因することを示唆している。

14. チャネリング高速イオン後方散乱による結晶表面の研究

—W(100)表面の再構成への応用—

畑 田 昌 幸

最近、結晶表面の原子構造を調べる重要な実験手段の一つとして、チャネリング現象を用いたMeV程度の高速イオン後方散乱が行われるようになったが、その解析には、計算機によるシミュレーションが主として用いられている。しかし、表面構造の種々のモデルに対し、すべてシミュレーションを行うのは大変時間がかかり、また、散乱の物理を詳しく理解するためにも、シミュレーションによらない解析方法が必要と思われる。

本研究では、表面原子の平衡位置がbulk中と違い得る場合を考え、原子列の始めの三原子

による後方散乱をより精密に扱い、第四番目以後の原子については、二原子による散乱が繰返されると仮定して解析的な方法によって計算を行った。シミュレーションの結果との比較から表面原子の平衡位置の bulk 中のそれからの変位及び原子の振動振幅があまり大きくない限り、この方法の近似が良いことが確かめられた。

この方法の適用の一例として、表面再構成を起こしている W (100) 清浄表面に対する実験結果を解析し、不整合構造のモデルが実験を説明できるかどうか詳しく調べた。不整合構造に対する計算は、シミュレーションによったのでは非常な時間を要するが、この方法によれば比較的短時間で結果が得られ、また、散乱の詳細及び格子振動の影響などが考察できる。

15. アントラセンにおける表面及びバルクエキシトン

宮本 克比古

Phillpot らはアントラセン (001) 面に垂直入射した b 軸偏光の光による反射率の測定を低温で行い、そのスペクトルの形状の解析により表面に局在したエキシトンの存在を結論した。

ここでは、この仕事に関連して次の二点について、更に立入った考察を加えた。(1) Phillpot の解析ではバルク励起子の寄与を理論的に導出することをせずに、実験から推定した反射スペクトルで代用するという不満足な取扱いがなされているので、これを励起子と格子振動の相互作用から導出することを試みて、ほぼ Phillpot の推定した形状が再現されることを示した。(2) 上記においては、表面に平行な分極をもち、面内の成分 k_{\parallel} がゼロの (表面およびバルク) 励起子を考えたが、この表面励起子は、少しでも面内方向の波動成分をもつ場合には、真の表面局在状態から、バルク連続帯に埋もれた表面共鳴状態へと移り変ってゆくという興味ある挙動をすることを理論的に示した。この際、分子間の双極子相互作用を面ごとにまとめてとるという取扱いをするが、 d だけ離れた 2 枚の面の間で $k_{\parallel} \exp[-k_{\parallel} d]$ に比例する双極子相互作用があるという簡単な事情のために半無限系における表面およびバルクモードの取扱いが厳密にできる。

16. 反強磁性相互作用を持つイジング三角格子系における磁気相転移

: NiNa(Acac)₃ · benzene

山田 典 克

「反強磁性相互作用を持つイジング三角格子系」は、スピンと格子が一種の不整合を起こす