

造相転移を起こし、更に、低温で超伝導を示す物質として注目されている。2H-TaSe<sub>2</sub> は  $T = 122\text{K}$  で Normal 相 (N相) から Incommensurate 相 (IC相) へ、 $T = 90\text{K}$  で IC相から、 $3a_0 \times 3a_0 \times c_0$  の Commensurate 相 (C相) へと逐次構造相転移を示し、 $T = 0.15\text{K}$  で超伝導を示す。2H-NbSe<sub>2</sub> は  $T = 33\text{K}$  で N相から IC相へと構造相転移を示し、 $T = 7.2\text{K}$  で超伝導を示す。これら両物質の高温相における格子振動はラマン散乱や非弾性中性子回折によりくわしく調べられているが、理論的には格子振動はあまり調べられていないので、構造相転移を調べる手始めとして、rigid ion model の範囲内で格子振動を調べた。イオン間に働くポテンシャルとしては、クーロン・ポテンシャルとイオン間の距離のみに依存する短距離ポテンシャルとして最隣接の Ta (Nb)-Se 間、層内の Ta-Ta (Nb-Nb) 間、層内の Se-Se 間、層間の Se-Se 間に働く五種類のポテンシャルを仮定した。計算に含まれるパラメーターは、 $\Gamma$  点のフォノンの振動数及び  $\Gamma$ -M 方向の音響モードの立ち上がりより決めた。このようにして決めたパラメーターを用いて計算で求めたフォノンの分散曲線は、ソフト化するフォノン・モードを除いて観測結果をよく再現した。ソフト化するフォノン・モードと計算結果との不一致は、電子-格子相互作用を考慮することによって除かれると思われる。そこで、さらに電子-格子相互作用を求めるために、まず簡単な取扱いとして、Matheiss により APW を用いて計算されたエネルギー・バンドの伝導電子帯を tight-binding 近似で再現することを試みている。

## 6. メスバウアー分光を用いた Fe-Pd 合金の相転移の研究

### 小 菅 要

Fe-Pd 合金の相転移は、Pd 濃度により、20at % Pd 付近で FCC → BCC マルテンサイト変態、50at % Pd 及び 75at % Pd 付近でそれぞれ FCC → L1<sub>0</sub> と FCC → L1<sub>2</sub> の2種類の規則-不規則変態が存在することがすでに知られている。新たに、我々はインバー効果を示す 30 at % Pd 付近の合金の相変態を調べた結果、鉄系合金では初めて FCC → FCT マルテンサイト変態を発見した。本研究の目的は、新たに見つかった FCC → FCT マルテンサイト変態の、その変態挙動と変態機構を明らかにしようとするものである。X線回折及び光学顕微鏡観察からこの FCC → FCT マルテンサイト変態の特徴は、1. 温度履歴の小さい可逆的な熱弾性型変態であること。2. 変態挙動 (格子定数, 正方性, 変態温度) が Pd のわずかな濃度変化に敏感であること。(Fig. 1) 3. 形状記憶効果を示すこと、以上3点である。

変態挙動が Pd 濃度に敏感であり、29.7 at % Pd では FCC → FCT → BCT と 2 段のマルテンサイト変態をおこし、しかし FCC → FCT は熱弾性型変態であるのに対して FCT → BCT は

非熱弾性型である等、これらの変態機構について全く未知であり、結晶学的知見を得るだけでなく母相の電子状態とマルテンサイト変態との相関に興味をもたれる。そこで、メスバウアー効果を用いて、変態に伴う母相の電子状態の変化を調べ、更に、第3元素 (Ni, Pt, Rh, Ir) を添加することで、合金中の電子濃度をかえ、変態挙動の変化を調べた。FCC→FCTマルテンサイト変態と同様な結晶構造変化が 50at % Pd の規則-不規則変態についてもみられる。前者は、せん断で後者は原子の拡散による変態であるにもかかわらず、両者とも  $c/a \sim 0.96$  で {011} 双晶を内部欠陥として含んでいることなど結晶学的に酷似しており、50at % Pd の規則-不規則変態について比較、検討を行なった。

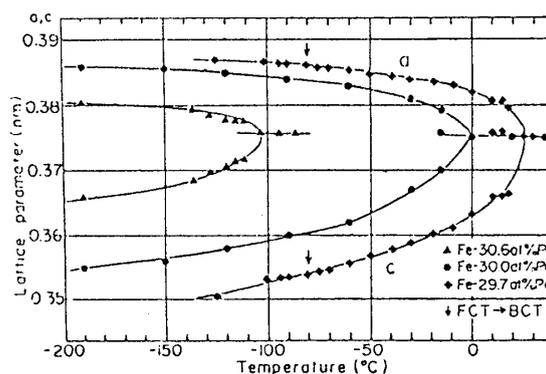


Fig. 1 FCC→FCTマルテンサイト変態による格子定数の変化

## 7. 2次元 Heisenberg 反強磁性体 $\text{Mn}(\text{HCOO})_2 \cdot 2\text{D}_2\text{O}$ 及びその Zn ランダム希釈系の磁性

小山晋之

$\text{Mn}(\text{HCOO})_2 \cdot 2\text{D}_2\text{O}$  は、 $T_N = 3.686\text{K}$  の擬二次元 Heisenberg (H) 反強磁性体  $\text{Mn}(\text{HCOO})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  の結晶水を重水で置換したものである。プロトン NMR により、 $T > T_N$  で、A, B 各 site の部分格子帯磁率  $\chi_A, \chi_B$  を独立にかつ直接的に測定した。 $\chi_B$  の温度変化は Curie-Weiss 的で、 $\chi_A$  は低次元反強磁性体特有の Broad Max を示し、二次元 H 系の理論曲線と  $J/k \approx -0.4\text{K}$  としてよく一致する。 $T < T_N$  で、共鳴周波数の温度変化を解析し、A, B 各 site の反強磁性自発磁化  $L_A, L_B$  を求めた。 $L_A$  の Critical Index  $\beta$  が  $\varepsilon (= T_N - T/T_N) \sim 2 \times 10^{-2}$  で、0.23 から三次元系の index 0.30 へ変化することが今回明らかになった。一方、 $L_A/L_B$  は Curie-Weiss 的であり  $L_B$  が  $L_A$  の作る内部磁場で磁化したと考えてよい。

Mn を Zn でランダムに希釈した系では、帯磁率、比熱のピークが二つに分裂する。(ピーク