

晶構造は NaCl 型である。(3) HgTe は 120 kbar でさらに, NaCl 構造から別の構造へと相転移する。なお, このときも電気的には金属的である。(4) HgSe は 140 kbar から 160 kbar, 100 °C 以上において新しい半導体相の存在する可能性がある。

20. 固体Xeの金属化の非経験論的研究

— HCP 構造について —

得 居 康 男

Nelson, Ruoff によって固体Xeの金属化が 330 kbar の圧力で起こることが観測された。

その後の詳しい実験によると, 圧力 360 kbar で電気抵抗値 R は 5 桁急減し, その後 $\log R$ は圧力にはほぼ比例して減少する。比抵抗値が約 $10^2 \mu\Omega\text{cm}$ で金属になるとすると, 固体Xeは結晶構造の転移を経た後, 約 550 kbar で連続的に金属になることが予想される。

最近 Ray と Trickey 及び Christensen による理論的研究があるが, 実験を説明するに至らず, また hcp の可能性が見落されている。

我々は hcp 構造について, Local-density functional 法を用いて core electron 及び 5s, 5p の valence electron を, それぞれ atom-like 及び SAPW を用いて self-consistent に計算をした。 $T=0$ における Gibbs の自由エネルギーをこれまで求められている fcc 及び bcc の値と比較して, 安定な結晶構造を議論する。

またエネルギー・バンド・ギャップにおけるスピン-軌道相互作用の効果も議論する。

21. Cu-Sn 合金のオメガ変態とマルテンサイト変態

谷 本 益 久

Cu-Sn 合金の β 相は不規則 bcc 構造で室温に急冷すると DO_3 型規則格子 (β_1 相) に転移する。しかしながら, 一般にはその電子回折像に規則格子斑点以外に顕著な散漫散乱を伴った異常回折斑点が出現する。これは急冷相が単純な DO_3 型規則構造のみではないことを示し, これらの異常回折斑点及び散漫散乱の原因については種々の説があるが, まだ解っていない。

又、この試料にはマルテンサイト変態が存在し Sn の成分により熱的にできるマルテンサイト及び応力による応力誘起マルテンサイトが現われ、さらに、これらの変態に関係して形状記憶効果が観察される。本研究の目的は β 相から急冷した時の母相の構造を解明すること及びマルテンサイト変態と形状記憶効果特性を調べることである。さらに新しい急冷法としてこれらの試料を液体状態から直接急冷する装置を作成した。この装置による超急冷試料の相変態及び形状記憶効果特性についても調べた。

試料は bulk から切り出し塩浴にて加熱し、 β 相から氷水に焼入れたものと液体状態から単ロール法により急冷したものとを作成し透過電子顕微鏡で組織観察し電子線回折、X線回折で構造解析を行い、電気抵抗により変態特性温度を決定した。

実験の結果、異常回折斑点及び散漫散乱の原因として DO_3 型規則相に数 10\AA ~ 数 100\AA 程度の大きさの変態生成物（オメガ相）が析出しているためであることを明らかにした。又この析出物は(1) 室温時効すること、(2) Sn の成分を増すことにより成長しそれに伴って散漫散乱の強度が減衰し異常回折斑点の強度が増していくことが解った。

液体急冷法による急冷速度は通常の急冷速度に比べて $10^2 \sim 10^3$ 倍程速い。この方法で得られた β_1 相は、結晶粒径が平均数 μm と通常の場合に較べて3桁程度小さい他は通常の急冷で得られた試料と同じく、その電子線回折像には異常回折斑点及び散漫散乱が観察された。又この試料は、マルテンサイト変態に伴う顕著な形状記憶効果を示し、その特性は次の通りである。

- (1) 変態温度は bulk から作成したものに比べて数 10 度低くこれは結晶粒が小さくなったことによる。
- (2) ある Sn の成分では、冷却すると自発的に曲がり昇温すると戻るという液体急冷した試料特有の形状記憶効果特性がある。
- (3) 室温時効とともに変態温度が降下（形状記憶効果特性も変わる）

22. A15 型超伝導化合物 $\text{-Nb}_3\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x\text{-}$ の高压高温合成

中 村 恒 夫

A15 型超伝導化合物は高い超伝導転移温度 T_c に着目され、種々の方法で合成が試みられている。そして、今までにこの化合物の T_c は組成比、長距離秩序度に依存していることが明らかになっている。Nb-Ge 系では、定比組成の A15 型 Nb_3Ge は平衡状態では存在せず、