

## 8. Newns-Anderson モデルによる表面 増強ラマン散乱 (SERS) の理論

金本 恭三

SERS の機構として Gersten らによって提案され、Ueba によって詳しい定式化が行なわれた、effective resonant scattering のモデルでは、光散乱の中間状態でフェルミ面近傍に出現する effective resonant state が enhancement の主役とされている。しかし彼らの取扱いでは、この resonant state に対する電子-正孔対生成の寄与が充分に取り入れられていない。ここでは、多体問題でよく知られた方法を用いてこのフェルミ面近傍でのふるまいをもっと詳細に考察した。

ハミルトニアンとしては、分子の励起状態が金属の伝導電子と混り合う Newns-Anderson モデルを用い、この  $s-d$  混合に関する摂動展開の most divergent term をくり込み群の方法により無限次まで足し合わせた。電子と分子振動の相互作用は最低次で取り扱った。得られた光散乱の強度は入射光あるいは放出光のエネルギーが threshold に近づいた時べき関数的に発散する形をしているが、これはよく知られた、金属における X 線の放射・吸収端の異常と同じである。

べきの指数を見積もるために、先ずそれを伝導電子の不純物散乱による phase shift に対応づけ、更に光遷移に伴う電荷の不均一が伝導電子によって遮蔽されると仮定して Friedel の和法則を用いた。また、べき関数の発散はフェルミ面の、温度によるぼけで抑えられるとすると、enhancement の最大値は  $10^3$  程度になる。

最後に、effective resonant state の候補として、最近実験的に見出された電荷移動遷移と我々のモデルとの関係を議論する。

## 9. 高圧下における非晶質 Fe-B 合金の結晶化

小川 吉司

Fe-B 合金系では B 濃度が 12 at % から 25 at % の範囲で非晶質状態が得られる。この非晶質合金はメタル-メタロイドの典型的な 2 元合金であるので、結晶化過程に関してはすでにい

ろいろな方法で調べられている。B濃度が17at%以下では $\alpha$ -Fe, 正方晶  $\text{Fe}_3\text{B}$  ( $\text{Ni}_3\text{P}$ 型)の順に2段階に析出する。17at%以上では $\alpha$ -Feと正方晶  $\text{Fe}_3\text{B}$  がほぼ同時に析出し, 25at%に近くなると $\alpha$ -Feは析出しなくなる。本研究の目的は以上のような結晶化が圧力によりどのように変化するかを調べることにある。

実験に用いた試料は液体急冷法により作製された比較的B濃度の低いFe-14at%BとB濃度の高いFe-25at%Bである。実験方法は高压下で昇温速度を一定にして電気抵抗を測定し, その結果から結晶化温度を決定し, その圧力依存性を調べた。また析出した結晶相に関しては *in situ* 及び大気圧下でのX線回折法により同定した。

実験結果によるとFe-14at%Bに関しては100kbar 当りまでは結晶化温度が圧力とともに上昇したが, 100kbar 以上では下がる傾向を示した。X線回折実験によると100kbar までは常圧下と同じように $\alpha$ -Fe, 正方晶  $\text{Fe}_3\text{B}$  の順に析出してきたが, 100kbar 以上では $\alpha$ -Feは析出せず, 正方晶  $\text{Fe}_3\text{B}$  と $r$ -Feが析出した。一方, Fe-25at%Bに関しては結晶化温度はやはり上昇したが, 100kbar 付近ではあまり圧力に依存しない傾向を示した。常圧下では正方晶  $\text{Fe}_3\text{B}$  とともに斜方晶  $\text{Fe}_3\text{B}$  ( $\text{Fe}_3\text{C}$ 型)が析出したが高压下では正方晶  $\text{Fe}_3\text{B}$  しか析出しなかった。

以上の結果より高压下では結晶化が抑制されること及び析出してくる結晶相はより密な相の方が析出しやすくなることなどが結論できる。高压下で結晶化が抑制されるのは原子の拡散が圧力によりおさえられるためとみなされるが, 14at%B合金における100kbarでの結晶化温度の低下の場合は析出する結晶相の違い, 特に合金中のFeの振舞いが関係していると思われる。

## 10. パルス磁場下における励起状態のスピン秩序

柄 木 良 友

パルス磁場を用いて励起状態の断熱磁化冷却を行ない, 相転移を観測した。図1は $\text{NaNi}(\text{Acac})_3 \cdot \text{benzene}$ 中の $\text{Ni}^{2+}$ イオンのエネルギー準位である。 $H_c = 21.1 \text{ kOe}$ で2つの準位が交差する。初期温度を初期分裂3.15Kにくらべて十分低くし, パルス磁場をかける。スピンスピン緩和時間にくらべて磁場掃引速度が十分に速いならば各準位の占有数は一定のまま $H_c$ に達する。もし $H_c$ 近傍で励起状態内で熱平衡になるならば, 励起状態の断熱磁化冷却