

る。

ところが、これまでの計算の大部分は Wigner-Seitz cell を Wigner-Seitz 球で置き換え、球内で球対称のポテンシャルを仮定する球近似で行われていた。この球近似では球外に電場をつくらず cell 同志の相互作用がなく、結晶構造を考慮していないことになる。そこで我々の研究室では結晶構造の依存性を調べる試みとして、APW法で使われる Muffin-tin ポテンシャル近似を導入した。これは、Wigner-Seitz cell をそれに内接する球で2つの領域に分ける。球内では球対称、球外では一定のポテンシャルを仮定し、球の表面で値がつながるような電子密度分布を求めるものである。この方法から状態方程式を求めたものと、球近似から求めた状態方程式は良く一致していて、状態方程式に関しては結晶構造の依存性は小さいと考えられる。そのことを確かめるため、より正確に結晶構造を取り入れようというのが本研究である。(我々は Non Muffin-tin T. F. D. と呼んでいる) cell を Muffin-tin 近似と同じく2つに分け、球内では電子密度分布関数を cubic harmonics で展開、球外はフーリエ展開し、球の表面で傾きまでつなぐというものである。

15. Cu-Fe 合金のメスバウア効果による研究

山本松樹

Cu-Fe 合金のメスバウア測定は、比較的古くから数多く報告されている。高温から急冷して得られる Cu-Fe 過飽和固溶体中には、単独鉄原子や鉄の小クラスターなどが形成され、焼鈍過程を通じて、そのクラスターが成長し、 γ -Fe 析出物となり、その後、安定相の α -Fe に変態する。しかしながら、析出前の過程における詳しい報告はまだない。本研究の目的は、メスバウア分光により、この時期における鉄原子小クラスターの状態とその形成過程に対する知見と無反跳分率の測定から、単独及びクラスター Fe 原子の格子振動に関する知見を得ることである。

スペクトルの解析方法は、薄膜近似を用い、ローレンツ関数の重ね合わせとして、最小二乗法による実験値との重ね合わせを基本とし、モデル計算との比較も行った。

スペクトルから鉄濃度 0.5 ~ 1.5 at. % の Cu-Fe 合金の急冷直後の鉄原子の状態として、単独 Fe, Fe-Fe 対及び Fe-Fe-Fe 等の小クラスター群が同定できた。更に、室温時効における、安定なクラスターへの移行なども観測された。この鉄原子の移動に空孔による機構を使い、反応速度論による計算を行い、急冷前の高温 (900 °C) 熱平衡状態の銅マトリックス

中の鉄原子の単独及び集合状態が、Fe-Fe間の結合エネルギーの値に依存して変化することが明瞭に示された。

実験結果を説明するためには、Fe-Fe間の結合エネルギーが0.2[eV]より小さな値であることもわかった。

温度変化によるスペクトル解析では、単独FeとFe-Feのみが存在しているようなCu-0.5 at.% Feを用い、無反跳分率の解析より、単独Feのデバイ温度が、Fe-Feのそれより大きいことが判明し、フォノン・スペクトルが、後者ではより低振動側に分布していることがわかった。

16. 非平衡超伝導の光学的方法による研究

西村 隆 司

非平衡超伝導とは、超伝導体に、レーザ光を照射したり、準粒子をトンネル注入するなどの方法によって、準粒子の数およびそのエネルギー分布を熱平衡状態から大きくずらせた状態をいう。

今までの報告によると、非平衡状態の特性は、トンネル注入による場合と、光励起の場合で異なっており、即ち、トンネル注入では、超伝導のエネルギーギャップがいくつかの離散的な値をとるという不均一ギャップ状態が作られ、光励起ではほぼ一様なギャップの減少が観測されている。しかし、この違いが何故なのかまだ明らかにされていないし、注入の時のギャップの不均一が空間的にどのように分布しているのかもまだよくわかっていない。

この研究では、Arレーザ光またはNe-Heレーザ光をSn トンネル接合に照射し、次の2つのことを行った。

- i) 一様な光を照射して、準粒子を作り、同じ接合でトンネル注入を行った場合と比較して、ギャップの不均一の様子を調べること。
- ii) トンネル注入によって不均一ギャップの状態になった接合の面上を約20 μ m径のスポット光を掃引し、ギャップの空間的不均一を調べること。

i)の結果からは、光励起の場合には、注入の場合のような不均一ギャップ状態は生じないで、ギャップは均一に減少していくことを確認した。このことから光励起では、注入の場合に考えられているような準粒子の異常拡散（低濃度領域から高濃度領域への拡散）はおこらないと考えられる。さらにii)の空間分布を求めた結果とあわせて考察すると、注入の場合の不均一ギャップの原因は、異常拡散が主ではなく、接合の配置などによる境界条件によって、接合