大阪大学基礎工学研究科物理系

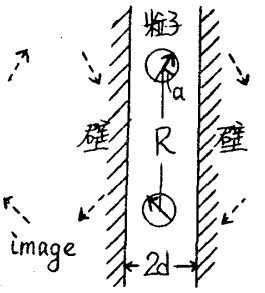
本研究では，常圧常温下でＢ８構造をとり，軸比の異なるMnTe（$c/a=1.62$）とCrSb（$c/a=1.32$），そしてＢ１構造からＢ８構造への圧力誘起相転移が報告されているMnSeの３種の化合物についての高圧下におけるＸ線回折・電気抵抗測定実験をすすめた。Ｘ線回折によって，MnTeでは約23 GPa，CrSbでは約17 GPaで，いずれもＢ８構造から斜方晶MnP型（Ｂ31）構造へ転移することが見出された。また，MnSeについては約10 GPaにおいて既報のＢ１→Ｂ２転移を確認したのち，新たに約32 GPaにおいて相転移を見出だした。

これらの結果と電気抵抗測定の結果とをあわせて，Ｂ８構造の高圧下における構造相転移の機構について議論する。

22. 大きさを持った粒子間の分散力

村　田　道　夫

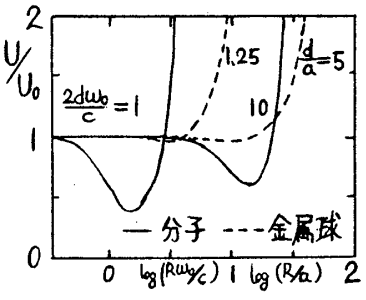
平行な２枚の壁に挟まれた狭い空間にある大きさを持った粒子及び分子間の分散力は壁の電磁気的な相互作用の為に自由空間にある場合とは大きく変化することが分かった。壁が金属の場合及び誘電体の場合について分散力の変化を計算した。



一般に，分散力は次の式で与えられる。

$$U=-\frac{\hbar}{2\pi}\int_0^\infty \mathrm{Tr}\,[\boldsymbol{\alpha}_1(\mathrm{i}\,\xi)\boldsymbol{\Psi}^{\mathrm{EE}}(r_1 r_2\,\mathrm{i}\,\xi)\boldsymbol{\alpha}_2(\mathrm{i}\,\xi)\boldsymbol{\Psi}^{\mathrm{EE}}(r_2 r_1\,\mathrm{i}\,\xi)$$
$$+\boldsymbol{\beta}_1(\mathrm{i}\,\xi)\boldsymbol{\Psi}^{\mathrm{MM}}(r_1 r_2\,\mathrm{i}\,\xi)\boldsymbol{\beta}_2(\mathrm{i}\,\xi)\boldsymbol{\Psi}^{\mathrm{MM}}(r_2 r_1\,\mathrm{i}\,\xi)$$
$$+\boldsymbol{\alpha}_1(\mathrm{i}\,\xi)\boldsymbol{\Psi}^{\mathrm{EM}}(r_1 r_2\,\mathrm{i}\,\xi)\boldsymbol{\beta}_2(\mathrm{i}\,\xi)\boldsymbol{\Psi}^{\mathrm{ME}}(r_2 r_1\,\mathrm{i}\,\xi)$$
$$+\boldsymbol{\beta}_1(\mathrm{i}\,\xi)\boldsymbol{\Psi}^{\mathrm{ME}}(r_1 r_2\,\mathrm{i}\,\xi)\boldsymbol{\alpha}_2(\mathrm{i}\,\xi)\boldsymbol{\Psi}^{\mathrm{EM}}(r_2 r_1\,\mathrm{i}\,\xi)]\,\mathrm{d}\,\xi$$

ここに，$\boldsymbol{\alpha}$，$\boldsymbol{\beta}$ はそれぞれ粒子の電気的，磁気的な分極率，$\boldsymbol{\Psi}^{\mathrm{AB}}(r'\ r\ \omega)$ は r 点にあり，ω で振動しているＢ（電気 or 磁気）ダイポールによる r' 点でのＡ（電場 or 磁場）を表わすテンソルである。金属球の場合には磁気的な項が電気的な項と同程度の寄与をするが，それ



以外の場合は磁気的な項の寄与は非常に小さい。壁が金属の場合には，壁の効果を壁の中にイメージダイポールを想定することで置き換えられる。電気的ダイポールのイメージは図の様に壁に垂直な成分は同じ向き，平行な成分は向きが交互に変わる。遅延の効果を無視すれば，現実のダイポールと違う向きのイメージは分散力を弱め，同じ向きのイメージは分散力を強める働きをする。このことから粒子間の距離Rが比較的小さな領域では壁に平行な2成分のイメージが分散力を弱め，Rが大きい領域では壁に垂直な成分の巨大イメージダイポールが形成され，これにより分散力が強められると理解される。しかし実際には，遅延の効果でイメージからの距離によって位相が変わるので，これほど単純には考えられない。磁気的な壁の効果は，電気的なものと性質が異なっていることも報告する。

23. 1T型遷移金属ダイカルコゲナイド層間化合物 M_xTiS_2の電子構造

山 崎 隆 浩

1T型層状遷移金属ダイカルコゲナイドTiS_2の層間に3d遷移金属をインターカレートしたM_xTiS_2（M＝3d遷移金属）は磁性及び輸送現象に興味深い現象を示す。これらの層間化合物の磁性，輸送現象及びインターカレーションの構造を理論的に解明するために，電子状態の計算を行なってきこ。M_xTiS_2の電子帯構造の計算は，マッフィンーティン球近似を使ったself-consistent APW法を用いて行なった。電荷密度の決定は1/100 Ryの精度内でエネルギー固有値が求まるように行なった。実際の計算は，比較的結晶構造の簡単なTiS_2，$FeTiS_2$，$CrTiS_2$，$Fe_{1/3}TiS_2$の常磁性状態に対して行なった。$FeTiS_2$，$Fe_{1/3}TiS_2$のフェルミレベルは状態密度のピーク付近にあり，そこでの状態密度$\rho(E_F)$は大きな値を持ち，強磁性のでやすい実験結果と対応する。しかし，$Fe_{1/3}TiS_2$の$\rho(E_F)$は$FeTiS_2$の$\rho(E_F)$の半分程度の値である。このことは$Fe_{1/3}TiS_2$のT_C（＝55K）は$FeTiS_2$のT_C（＝160K）に比べて低いという実験事実と対応している。また$Fe_{1/3}TiS_2$の$\rho(E_F)$には，Feの3d成分