

ング曲線の測定を行なった。RHEED, AES, TDSによる観察から考えられる Ag 原子配列のモデルは, Si(111) 7×7 表面上でクラスターを形成せず, Ag 被覆率が  $\frac{2}{3}$  ML で完成する Honey comb モデルであった。この Honey comb モデルをもとにして行なった RHEED 強度の計算結果と 00-ロッドロックンク曲線を比較することによって Si(111)  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  Ag 構造を検討した。その結果 Ag 原子が第 1 層の Si 原子より 0.34 Å もぐり込んだ Honey comb モデルが最もよく測定結果と一致した。

### 13. 溶液用 ac calorimetry 試料セルの試作

松浦正英

ac calorimetry は簡便で精度良く比熱の異常の測定が可能な測定法である。しかし比熱の絶対値測定が難しい場合が多い。特に溶液系や液晶の測定の場合, 測定条件が厳しい上に試料セルが必要になる。つまり容易に測定を行なえるセルの開発が重要である。そこで我々は光照射型装置用の絶対値測定が可能な試料セルを試作した。光照射型装置の場合, 直接加えられた熱を計算することは難しいので置換法による測定となる。我々が試みた絶対値測定法は, 測定条件を満たす領域内では試料の厚さと測定熱容量とは比例関係が成立するので, 標準試料と試料の比熱の相対値の厚さに対する傾きを比較することにより試料の比熱の絶対値を求める方法である。今後いくつかの改良を行なうことで精度良い測定が可能な測定法と考える。

### 14. チタン水素化物微粒子の成長と結晶構造

柳田明彦

不活性ガスに水素ガスを加えた反応性ガス蒸発法によりチタン水素化物微粒子の作製を行なった。水素およびヘリウムの混合ガスの全圧を 50 Torr と一定にし蒸発温度 2000 °C においては水素分圧 0.5 Torr 以上の条件で CaF<sub>2</sub> 型構造の TiH<sub>2</sub> (r 相) 微粒子が成長し, その晶癖は高温相の bcc 構造を反映した十二面体であった。水素分圧 0.5 Torr 以下の条件では, hcp 構造の d 相と r 相の二相からなるチタン水素化物微粒子が成長した。さらに, この方法で作製した TiH<sub>2</sub> 微粒子の真空中での加熱による水素脱離の実験およびチタン微粒子の水素雰囲気中での加熱による水素吸収の実験を行なった。その結果, 水素脱離においては fcc 構造から hcp

構造への変態が起き、水素吸収においては逆に hcp 構造から fcc 構造への変態が起こることが観察された。いずれの場合も変態により双晶が形成された。

## 15. 量子系のモンテカルロシミュレーション

山田 泰弘

統計物理学において、モンテカルロ法を応用し、多体系の熱力学的な性質や動的振舞をシミュレーションにより研究することが盛んになりつつある。モンテカルロシミュレーションは古典系においては原理あるいは方法論は、ほぼ確立されているが量子系においては、多体系を記述する力学変数の非可換性の取り扱いをめぐる困難さの故に、未だ決定的な方法論が確立されていないのが現状である。最近、本間、松田、荻田らは、量子系におけるモンテカルロシミュレーションの方法として Decoupled Cell Method を提出した。

ここでは、この方法の有効性を調べるため具体的な系として、1次元XYモデルでシミュレーションを試み、有意義な結果を得たので報告する。

## 16. X線領域における旋光分散の理論

山本 直樹

旋光分散に関する Nakano-Kimura の論文にそって、分子の大きさよりも入射波長の方が大きいとする近似（長波長近似）をせずに、話をすすめた。その結果、旋光分散の理論で重要な、Rotational Strength  $R_{\alpha\beta}$  の中に、波数依存性  $\mathcal{R}_1^{nn'}$ ,  $\mathcal{R}_2^{nn'}$ ,  $\mathcal{R}_4^{nn'}$  が入った。また、双極子モーメントと電気四重極モーメントのあいだの相互作用が、旋光現象に寄与する様になる事がわかった。

## 17. 光ファイバを用いた赤外レーザーカロリメーター

吉田 幸正

光ファイバを用いて赤外レーザーの出力を測定する方法を提案した。この方法での利点は、