

## 14. W(100) 表面水素吸着系の再構成の 計算機実験

原 雅 美

W(100) 表面は室温付近より低温で表面再構成を起し、 $\sqrt{2} \times \sqrt{2}$  R 45° 構造へ転移する。また水素吸着によってこの再構成も変化し、水素の吸着量に応じて  $\langle 11 \rangle$  方向の変位の  $\sqrt{2} \times \sqrt{2}$  R 45° 構造から  $\langle 10 \rangle$  方向の変位の  $\sqrt{2} \times \sqrt{2}$  R 45° 構造、続いて非整合相 STREAK 相、 $1 \times 1$  相へと変化していく。

我々はこの W(100) 表面水素吸着系に対して、表面 W 原子の変位モデルと、吸着水素の格子ガスモデルを組み合わせて水素の粒子数保存と非保存の両方に対するモンテカルロ計算機実験を行ない、水素の低被覆率の場合についての解析を行なった。

これらの解析の結果、再構成の転移温度以下で水素間の間接相互作用によって水素凝縮の一次転移が起こることがわかった。この一次転移の臨界温度と再構成の転移温度の間では、変位の  $\langle 11 \rangle$  方向から  $\langle 10 \rangle$  方向への転移は、かなり急ではあるが、なめらかに起こることがわかった。また赤外線吸収スペクトルによる水素のシンメトリックモードの被覆度依存性の結果との対応や、非整合相に対する結果を得た。

## 15. 核スピンと結合した基底一重項系の磁性

— 励起 2 重項磁性イオンと励起 3 重項磁性イオンが共存する場合 —

福 山 裕

基底 1 重項磁性体 dhcp-Praseodymium は、交換相互作用が弱いために電子スピン系のみでは絶対零度まで秩序化せず、核スピンとの結合を考慮して初めて低温において秩序化を示す [Murao]。

dhcp 構造は、単位胞に対称性の異なる 2 種類の site (hexagonal site と cubic site) を持っている。これらの各 site において  $\text{Pr}^{3+}$  イオンは、それぞれ第 1 励起状態が 2 重項 (d-イオン) と、3 重項 (t-イオン) の基底 1 重項磁性イオンとなっている。これまでの解析では

励起エネルギーの小さい d-イオンの寄与のみを扱い、t-イオンの磁性への寄与は無視できるとみなされてきた。しかし、最近の低温での分極中性子散乱の解析から t-イオンの核スピンにも長距離秩序が現れることが報告されている [Kawarazaki et al.]。このことは、dhcp-Pr の磁性を理解するためには、t-イオンの寄与が無視できないことを示している。

この研究では、d-イオンと t-イオンが単位胞に 1 個ずつ存在する系について、両イオンの電子スピン間の相互作用及び核スピン-電子スピン結合を考慮してその磁性を分子場近似に基づいて調べた。

$\eta$  を、

$$\eta = (1 - 2\mathcal{J}_0^{dd}/\Delta_d)(1 - 2\mathcal{J}_0^{tt}/\Delta_t) - (2\mathcal{J}_0^{dt})^2/(\Delta_d\Delta_t)$$

で定義すると、( $\Delta_d, \Delta_t$  は、d, t 各イオン内の励起エネルギー、 $\mathcal{J}_0$  は交換相互作用のフーリエ変換)、 $\eta < 0$  ならば、電子スピン間だけの相互作用で相転移が起こり (電子領域)、 $\eta > 0$  では電子スピンと核スピンの結合があって初めて相転移が起こる (核領域)、 $\eta > 0$  の場合、転移温度は d-イオンと t-イオンの相互作用  $\mathcal{J}_0^{dt}$  の大きさに強く依存する。また、秩序相での d-イオンと t-イオンの電子スピンモーメントの比も、 $\mathcal{J}_0^{dt}$  の大きさに依存し、ほとんどの温度領域で  $2\mathcal{J}_0^{dt}/(1 - 2r^2\mathcal{J}_0^{tt}/\Delta_t)$  で一定になる。また、核スピンモーメントの比は、高温では電子のそれと等しく、核スピン-電子スピン結合係数  $A$  と同じ程度の温度領域 ( $kT \sim A/\Delta_d, A/\Delta_t$ ) になると、それぞれのイオンの核スピンモーメントは急激な温度変化を示す。

現実の Pr では、d-イオンと t-イオンが 2 個ずつ単位胞に含まれており、また sin 型の複雑な磁気配列であるため今のモデルが直接あてはまるわけではないが、観測されている核スピンモーメントの温度変化より  $\mathcal{J}_0^{dt}$  の大きさに関する目安を得ることはできると思われる。また、磁気励起エネルギー及び磁場下での各 site での誘起モーメント等の実験との対応を議論する。