

過去にこの理論と比較できる実験はなかった。

我々は温度及び電場を変化させ、Normal, 不整合, 整合 各相の構造的特徴をX線回折法を用いて研究した。その結果、不整合相内で観測された強い3次の衛星反射の存在は、高調波成分の必要性を積極的に支持している。一方、Normal-不整合相転移は2次相転移であることを検証した。変調構造の温度・電場依存性に関する情報は、これまで誘電率測定で決められた相境界のみであったが、今回、不整合相の衛星反射及びNormal相の散漫散乱の波数変化を加えた電場-温度相図を完成した。整合-不整合転移点近傍を除いて、等変調波数曲線はほぼ電場軸に平行であるが、電場の上昇につれて高温側に屈曲する。 NaNO_2 , $\text{SC}(\text{NH}_2)_2$ の変調波数にもみられる同様の傾向は、誘電体の不整合構造が示す一般的な特徴と考えられる。

ダイヤモンド焼結体アンビルによる超高压下での高温発生

仁田 隆 荘一郎

従来、20 GPa を越える圧力領域で高温を同時発生しての物質合成と in situ X線回折は、ダイヤモンドアンビルによらなければ成し得ないものであった。この場合、レーザー加熱によるため温度のestimationが困難であり、また微小な試料空間に大きな圧力・温度分布が存在するため、回折パターンが複雑になってしまう傾向があった。我々の研究室では以前からダイヤモンド焼結体アンビルによる高压発生を進めており、これを基に今回、高温高压実験の圧力領域拡大、試料体積の増大及び正確な温度測定を目指して、超高压下での高温発生とそれによる物質の高压相合成を試みた。

まず、圧力領域の拡大の観点から、ブリッジマンアンビル型に加工したダイヤモンド焼結体を立方体圧媒体中に対向させる6-2加圧方式により40 GPa 迄の圧力を発生させ、その下で試料を加熱した。この方法では真の圧力発生部分全体が発熱体となるため、高温下での圧力のestimationに問題があり、期待した圧力、温度条件が達成されていたか疑問の残るところであるが、石英(α -quartz: SiO_2)を出発物質にその高压相であるスティショバイトを合成することができた。

次に、試料体積の増大、発生圧力の均質性及び再現性、より正確な温度測定を目的に、立方体に加工したダイヤモンド焼結体を6-8加圧方式の第二段アンビルに使用し、30 GPa 迄の圧力領域での高温発生を試みた。この場合には、熱電対の指示で750℃迄温度を上げることが出来、ダイヤモンド焼結体アンビルは何の損傷も受けなかった。ここで、熱電対の零接点はダイヤモンド焼結体アンビ

ルの先端面にとっており、アンビル自体の温度も上がっているので、実際の試料温度はもっと高いはずである。

このダイヤモンド焼結体アンビルを用いた6-8加圧方式による高温高压下での in situ X線回折実験を、高エネルギー物理学研究所のAR（トリスタンの前段加速器）のシンクロトロン放射光と、DIA型キュービックプレス MAX 80により行った。その結果、スティショバイト及びrutile型SnO₂の高压相である α -PbO₂構造、螢石構造のSnO₂が合成でき、しかも高温高压下でのX線回折により、加圧に伴う回折パターンの変化の追跡から相転移の様子を確認することに成功した。

金属表面での遮蔽効果

橋村 淳司

金属の表面付近に外から点電荷を導入したとき、それが金属電子によってどのように遮蔽されるかということは金属表面の基本的な性質として重要である。このことについては、Maradudin et al.によって、金属をジェリウムのスラブで取扱いRPA（Random-phase approximation）を用いて数値的に計算されている。ここではより簡単なモデルを用い、モデルと遮蔽の機構の対応に留意しながら解析を行なった。まず最も簡単な近似として、以前 Newns によって用いられたトーマス-フェルミの近似を用いて金属を誘電率 $\epsilon(q)$ が、（金属； $z < 0$ ）

$$\epsilon(q) = [1 + \lambda^2 / q^2] \theta(-z)$$

で与えられるような半無限の一様な媒質であるとして、一個の点電荷によるポテンシャル、誘起電荷分布、二個の点電荷間の相互作用の計算を行なった。ただしここで、 λ は遮蔽距離の逆数である。その結果はこのモデルが表面による遮蔽の効果を取込みすぎていること示しているので、次に以下の様な表面での電荷分布の変化を考慮に入れたモデルを用意した。まず金属は同様にジェリウムであるとするのだが、電子は金属のジェリウムエッジよりも外に浸み出しており、モデルとしてIBM（Infinite Barrier Model）を採用し、線形応答の範囲内で表面によるフリーデル振動の影響を取り入れた遮蔽について論ずる。

またこの問題を散乱問題で取扱い部分波展開を行なってそのときの位相のずれを用いて遮蔽の機構を論ずることも行なったので、それについても少し紹介することにする。