

修論発表時は3)4)の実験結果につき発表するつもりである。

3. NMR 及び Mössbauer 効果による Fe-Ni-C マルテンサイト中の炭素原子位置の研究

伊藤伸器

Fe-C合金は侵入型合金であり、炭素原子は格子間原子位置に侵入する。高温では、fcc構造で常磁性体である安定固溶体のFe-C（オーステナイト相； γ 相）が、低温へ急冷されれば、マルテンサイト変態によって炭素が過飽和に固溶したbcc構造で強磁性体のマルテンサイト（ α_t 相）が得られる。 γ 相中では、炭素原子は八面体格子間位置（O位置）を占めることが知られている。一方、 α_t 相中の炭素原子の侵入位置は、O位置が安定であると考えられているが、変態直後にどの位置を占有するのは未だ明らかにされていない。

我々の研究室では、Fe-C合金の研究から α_t 相中で炭素原子は四面体格子間位置（T位置）とO位置、2種類の格子間原子位置を占めることを以前に報告した。しかしながら、Fe-C2元合金ではマルテンサイト変態開始温度（Ms点）が室温より高いので、変態直後のマルテンサイト（fresh martensite）を観測しているとは言えない。そこで、本研究では第3元素としてNiを添加することによりMs点を室温以下に下げ、低温でfresh martensiteを作り、 ^{57}Fe 、 ^{61}Ni 、 ^{13}C -NMRにより、各構成元素の内部磁場分布を測定した。また、第3元素による環境効果を調べるために、Fe-Mn、Fe-Ni2元合金についても内部磁場分布の濃度依存性を測定した。

その結果、Fe-Mn2元合金において、Mn濃度の変化から ^{57}Fe 内部磁場分布は、単純に最近接格子位置に置換するMn原子数で説明することができるが、 ^{55}Mn 内部磁場分布は、Mn濃度の増加につれて、純鉄中の ^{55}Mn 内部磁場の値に対して大小の成分にサテライトが存在し、 ^{57}Fe とは異なる。このことから、Fe中ではMn原子は磁気モーメントを持ち、Mn原子数が増すとMn-Mnペア、すなわちMn-dimerやtrimerは反強磁性的に結合すると考えられる。一方、Fe-Ni2元合金では、Ni濃度の増加につれて、 ^{57}Fe スペクトルはブロードになり、高周波数側にシフトし、環境効果が直接に現れるのではなくFeの磁気モーメントが大きくなる。それに比べて、 ^{61}Ni 内部磁場分布にはサテライトが複雑に現れ、Fe-Ni合金中でのNi原子の振舞いはFe原子とは異なることが判った。また、

Fe-Ni-Cマルテンサイト中の ^{57}Fe 内部磁場分布から、炭素原子の影響は、純鉄中の ^{57}Fe 内部磁場の値に対し、主に小さい成分に2つ、大きい成分に1つ現れ、Fe-Cマルテンサイトの測定と類似した結果を与えた。さらに、 ^{13}C -NMR測定から、 ^{13}C 内部磁場分布には、1つのピークと3つのサテライトが存在することが明かとなり、それらは、格子間原子位置に侵入した炭素原子とNi原子に影響を受けた成分であると考えられる。

4. W(100)再構成表面の計算機実験

大辻清太

W(100)清浄表面は室温付近より低温で再構成を起こし、 $\sqrt{2} \times \sqrt{2}R45^\circ$ 構造へと転移する。また、この再構成は、水素の吸着量によって変化する。吸着量が増加すると、(11)方向にWが変位する $\sqrt{2} \times \sqrt{2}R45^\circ$ 構造から、(10)方向にWが変位する $\sqrt{2} \times \sqrt{2}R45^\circ$ 構造、次いで、非整合相、STREEAK相、そして理想表面と同じ 1×1 相へと変化する。

このW(100)水素吸着再構成表面系に対して、表面W原子の変位モデルと、吸着水素原子の格子ガスモデルを組合せたものに基づいて、現象論的なハミルトニアンを設定した。水素原子数についてのグランドカノニカルアンサンブルにおける計算機実験を行ない、 $\sqrt{2} \times \sqrt{2}R45^\circ$ 構造での、(11)相から(10)相になる転移について、温度と被覆度(水素の吸着量)による変化を詳しく調べた。

このとき、状態和において、吸着水素の自由度については先に和を取り、その結果得られる表面W原子の変位間の実効相互作用を、初めに仮定した相互作用に組入れた。また、転移点近傍の挙動を詳しく見る為に、Ferrenberg-Swendsenの方法¹⁾を使って、化学ポテンシャルの変化についての被覆度の分布関数変化を計算した。

その結果、ある一点の化学ポテンシャルについての被覆度の分布関数をモンテカルロステップを増やして精密に求めれば、転移点近傍の化学ポテンシャルに対する、被覆度の分布関数の連続的な変化が得られることがわかった。その分布関数を使って、転移点付近の被覆度の変化や、そのサイズ依存性について解析した。

ある臨界温度以下では、(11)相と(10)相が共存する二相共存の領域がある。この領域の境界は、今までの方法では、計算の精度の問題やヒステリシスの為に、明確に決定することが困難であったが、これが可能になった。

この臨界温度より上では、(11)相から(10)相に連続的に変化する領域になる。この相方向変化の移り変わる点は、臨界点直上では明確に定める事が出来る。しかし高温では、計算に使った有限系の小ささの為に、小さなドメインが発生してしまい、定めることが出来なかった。

1) A.M.Ferrenberg,R.H.Swendsen Phys.Rev.Lett. 61 (1988) 2635