

付 記

ハミルトニアン(3)(4)に関して研究会で少し議論があったので検討した。電子系を朝永のボゾンで近似し、北原その他の人達で使用された正準変換を用いるともう少し厳密に導出することができる。その時、電子-正孔対のエネルギーが温度 T より大きい部分が重なり積分に寄与し、小さい部分が非断熱的な項を与える。

また、文献8)では唯一つの phase shift δ を仮定したが、他の対称性の phase shift δ' が存在する場合に δ' の1次までに限ると閉じた形の結果を得ることができた。

参考文献

- 1) S. Fujii and Y. Uemura, Solid State Comm. 26 (1978), 761.
S. Fujii, J. Phys. Soc. Jpn. 46 (1979), 1833.
- 2) Y. Kagan and M. I. Klinger, J. of Phys. C7 (1974) 2791.
- 3) R. Kadono et al., Hyperfine Interactions 17-19 (1984), 109 および本研究会報告中の門野と永嶺それぞれの報告参照.
- 4) K. Yamada, Prog. Theor. Phys. 72, 195.
- 5) J. Kondo, Physica, in press. および LT 17 での報告.
- 6) J. Kondo, Physica 84B (1976), 40.
- 7) K. Yamada and K. Yosida, Prog. Theor. Phys. 68 (1982), 1504.
- 8) K. Yamada, A. Sakurai and M. Takeshige, Prog. Theor. Phys. 70 (1983), 73.

7. 金属中の水素の拡散—実験

中大理工 深 井 有

拡散係数の測定には多くの方法が用いられる。弾性 効 (Gorsky 効果), 透過法, 吸収・放出法, NMR, 中性子擬弾性散乱などである。こうして得られた拡散係数のアレニウス・プロットを fcc, bcc 金属について第1, 2図に示す。

拡散係数は bcc 金属の方が一般に大きな値を持ち、同位元素効果も著しく non-classical な様相を示す。さらに bcc 金属においては、 $T \rightarrow D \rightarrow H$ の順に、また母体金属について $Ta \rightarrow Nd \rightarrow V \rightarrow Fe$ の順に拡散が速くなっているが、これは拡散が interstitial site 間のトンネル過程によって支配されているために、拡散原子の波動関数のひろがり と site 間の距離のかね合いでさる

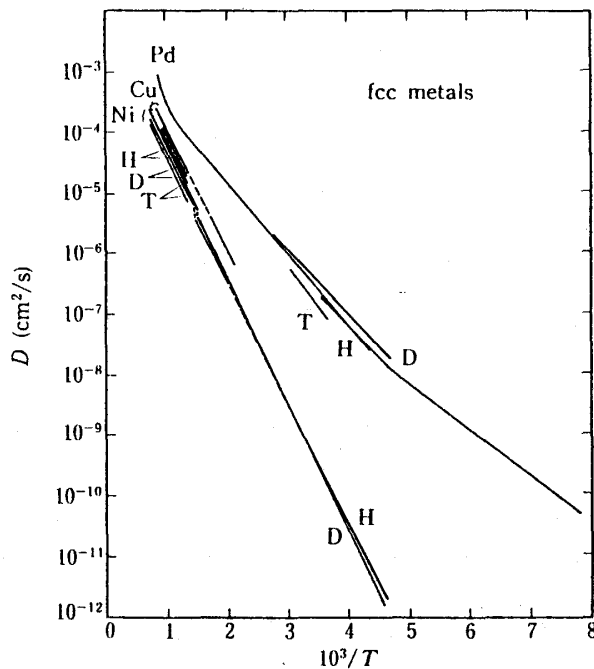


図 1

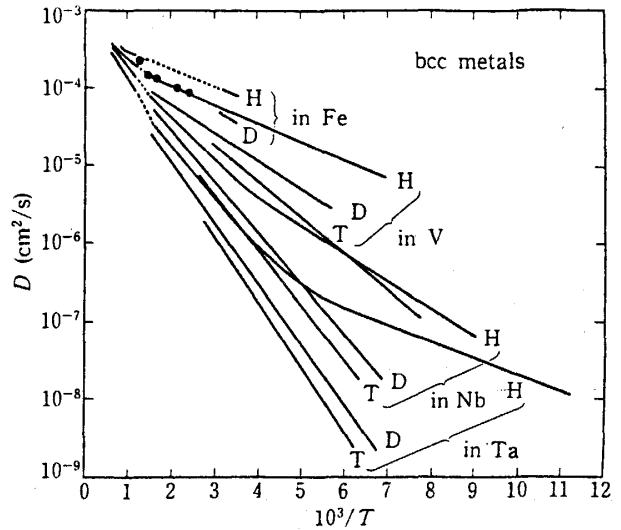


図 1

として自然に理解できる。fcc 金属では interstitial site 間の距離が速いので量子拡散の特徴はあまり顕著にあらわれない。

最近, bcc 金属中の水素原子拡散については 2 つの新しい進展があった。低温領域における拡散係数の決定と, 応力下における超拡散の発見である。以下, これらについて略述する。

1. 低温領域における拡散係数 — 急冷・回復実験の再解析 (Y. Fukai, '84)

低温領域では水素の溶解度が著しく低下するために通常の実験法は用いられず, 急冷によって凍結された水素原子が移動してクラスターを形成する過程を電気抵抗変化によって追跡する方法が, 拡散に関する唯一の情報源となっている。この種の実験は花田らによって最も精力的に行われた。その結果, 1) 回復がいくつかの stage にわたって起ること, 2) 各 stage での回復は熱活性化過程によること, 3) Ta 中 H, D, T の回復過程は全体としてよく似ており, 温度 scale をずらすことによって重ね合わせられること, 4) Ta 中 D, T の対応する stage の活性化エネルギーはほぼ等しいこと, 等々が見出された。深井は, これらの回復過程はすべて何らかの trap から水素原子が熱的に解放されて動き出す過程を意味するものと考えて, trap の存在下での見かけの拡散係数から真の拡散係数を求めるこ

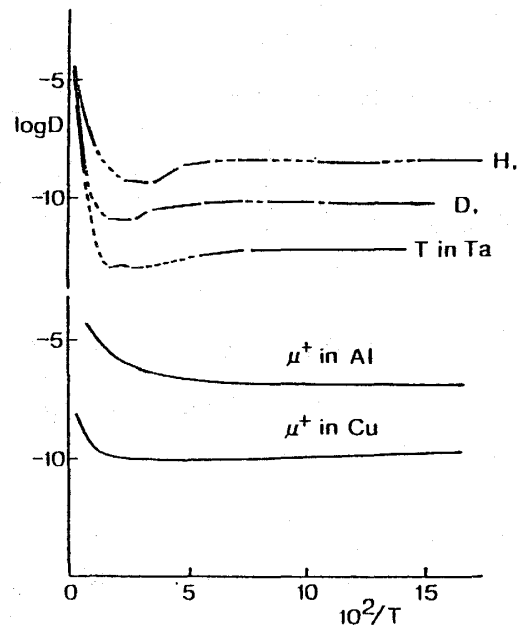


図 3

とを試みた。解析法の詳細は省略するが、真の拡散係数は温度についての滑らかな関数であるという唯一の要請からその概形を描き出すことができ、その結果は第3図のようになることが示された。高温側とは異なり低温での拡散係数はほぼ温度によらなくなっており、全体の形はAl, Cu中の μ^+ の場合と極めてよく似ていることがわかる。この結果はbcc金属中の水素同位元素拡散が、fcc金属中 μ^+ の拡散とほぼ同じ機構によることを示唆している。

2. 応力下における超拡散 (T. Suzuki *et al.* '83)

鈴木平らはV中のH, Dが応力下で著しく速い拡散をすることを見出して超拡散と名付けた。これは $\langle 111 \rangle$ 方向に数 kg/mm^2 以上の引張り応力をかけたときに観測され、 $\langle 100 \rangle$ 方向では観測されない。超拡散状態での拡散係数は $1 \times 10^{-3} \text{ cm}^2/\text{s}$ 程度の大きさを持ち、ほとんど温度によらない。鈴木らはこれが1個のTサイトを占めた状態(1T)から4個のTサイトにまたがった状態(4T)への状態変化に伴って起るものであると提唱している。すなわち4T-水素のコヒーレント・トンネル過程によるというわけである。

応力下でV中Hの存在状態に変化が起ることはX線のHuang 散乱(鈴木・小池ら)やチャンネルリング(八木・深井ら)によって確認されているが、4T状態の実体や、その拡散機構には未知の部分が多く残されている。今後の問題である。

T. Suzuki *et al.*: Phys. Rev. Lett. **51** (1983) 798.

Y. Fukai: Jpn. J. Appl. Phys. **23** (1984) 8月号

8. 金属中水素の量子拡散：理論

中大理工 杉 本 秀 彦

§1 はじめに

金属中で水素原子は格子間位置を占有し、そこでの局在振動準位間隔 $4E$ は 100 meV 程度の大きな値になる。この特徴は、水素原子の状態を量子論で記述しなければならないことを示唆している。更に、水素原子が占有した格子間位置のまわりの金属原子はその格子位置から変位していることが知られている。これは、金属原子と水素原子の間の相互作用によって、まわりの金属原子の変位をひきおこすことで、水素原子の局在状態が安定化される、所謂、self-trap 状態が形成されていることを意味する。従って、金属中の水素原子の拡散過程は polaron 効果