

ることがわかってきている。

本研究では、リカージョン法によりこの物質について状態密度を求め、これに基づき、遍歴電子モデルにスピンゆらぎの効果を考慮することによって磁性に関する計算を行なった。又実験値より超伝導状態の自由エネルギーを推定し、上の計算で得られた強磁性状態の自由エネルギーと比較して転移に関する議論を行なった。

この結果、強磁性を出現させる機構が理解され、スピンゆらぎの効果を取り入れた遍歴電子モデルが磁性をよく説明することがわかった。又 T_s が T_c よりも低くなることが説明できた。

9. 電子スピン共鳴法による LiKSO_4 の構造相転移に関する研究

柴 田 知 尋

LiKSO_4 は室温で空間群 $P6_3$ に属することが明らかにされているが、室温以下の領域での相転移については研究者間に見解の相違が存在して、最終的な結論が得られるまでに至っていない。本研究では、電子スピン共鳴 (ESR) と誘電率測定及び両者の同時測定を行なうことにより、 LiKSO_4 の相転移に関する新たな情報を得ることを目的とした。

今回の研究の結果、

- i) 室温では等価な2つの SO_4 四面体が低温 (約 150 K 以下) では等価になっていないこと
- ii) 今までに提唱されているモデルでは、 SO_4 四面体の運動のみが相転移に関係するとして議論されているが、実際には SO_4 四面体と Li の間に相互作用が存在するため、その影響を考慮する必要があること

等を示唆する結果が得られた。

10. インターカレーション化合物 Tl_xTaS_2 の構造研究

島 田 勝 人

最近、層状構造をもつ物質の層間に異種の物質を挿入して、インターカレーション化合物と

呼ばれる新しい物質をつくる研究が盛んに行われている。インターカレーション化合物は、挿入物質の多様性、種々のステージの存在に応じて様々な物性を示すが、応用面からも極めて有用な物質として注目されている。例えば、小型で軽量かつ鉛蓄電池の数倍にも及ぶ蓄電能力をもつ2次電池、銅より高い電導性をもつ導体、層間空間の大きい吸着面積を利用した水素貯蔵物質などである。本研究では、 Tl_XTaS_2 の構造研究を行った。その結果、次のことがわかった。X線回折法を使って Tl_XTaS_2 ($0 < X \leq 0.5$) のステージングと層間距離を調べた。これまで報告されていた stage-1 の構造に加えて stage-2 の存在が明らかになった。また Tl の濃度 x の相違によって層間距離の著しく異なる2種類の stage-1 が存在することもわかった。stage-1 Tl_XTaS_2 ($X \approx 0.5$) の単結晶を作成して構造解析を行った。その結果、Tl原子は、S原子に囲まれた三角プリズム配位をとり、Tl層内で α 、 β の2種のサイトを占有し、その比率が3:1であることがわかった。単色X線を使用したラウエ写真から、Tl原子の層内での短距離秩序による散漫散乱が観測された。この散漫散乱は c^* 方向に柱状になっており、Tl原子が、層内での相関しかもたないことがわかったので a^*b^* 面内での散漫散乱強度測定を行い、その平面での短範囲規則度を表わすパラメータを決定した。

11. イジング正方格子における反強磁性磁化率

鈴木 隆 司

イジング正方格子における反強磁性磁化率 $\chi(T)$ の転移温度 T_c での特異性が、短距離相関できまるということに着目して、 $\chi(T)$ を強磁性における相関関数 $X(m, n)$ から

$$k_B T \chi(T) = \lim_{r \rightarrow \infty} \chi_r(T), \quad \chi_{r+1}(T) \equiv \sum_{m=-r}^{r+1} \sum_{n=-r}^{r+1} (-1)^{m+n} X(m, n)$$

のように定義し、具体的に $\chi_r(T)$ ($1 \leq r \leq 3$)を厳密に計算した。その結果 $\chi_r(T)$ ($1 \leq r \leq 3$)は転移温度 T_c 近傍でのもっとも強い特異性として

$$\chi_r(T) = A_r + B_r (1 - T/T_c) \ln |1 - T/T_c|$$

のように対数的特異性を持つことがわかった。ここで A_r 、 B_r は温度によらない定数である。この結果は、対数的特異性を仮定したクラスター展開によるSykes等の結果と矛盾しないが、彼等とは異なり T_c の上下で A 、 B は完全に等しくなり、対数的特異性 $(1 - T/T_c) \ln |1 - T/T_c|$