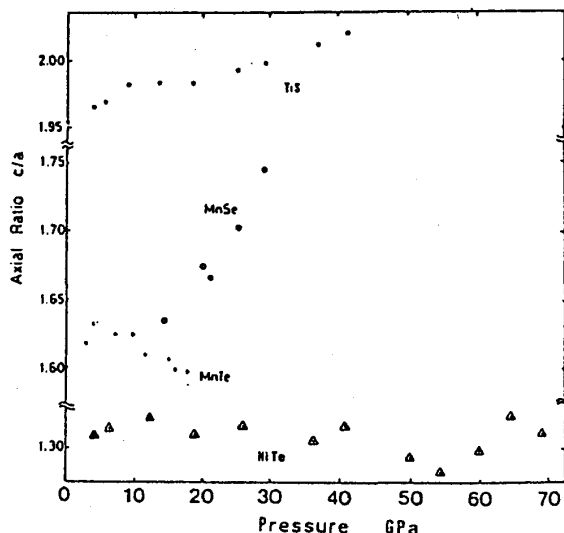


NiAs構造が期待されている。また、地球内部物質がこの構造をとり得る可能性も示唆されている。したがって高圧下でのNiAs型構造周辺の研究は固体物性、地球科学などの観点から極めて重要であると考えられる。

本研究では、常圧で軸比 c/a のきわめて大きいTiS(1.95)、きわめて小さいNiTe(1.35)の二つの物質を試料としてとりあげた。実験は、ダイヤモンド・アンビル・セルを使ったX線回折実験及び、2000トンプレスを使った8面体加圧方式による電気抵抗測定によった。

X線回折実験より、TiSは41GPaまで、NiTeは69GPaまでの圧力範囲で構造相転移がおこらないことが明かとなった。 c/a の値はいずれの物質もほぼ常圧での値のままであった。(図参照)このことから、軸比の値が常圧で極端に大きな物質、および小さな物質では、加圧にともなう軸比の変化が小さいことがわかった。TiSでは25GPaにて電気抵抗の激減が観測されたが、この圧力近辺ではX線回折パターンに何ら異常が見られなかった。このことから構造変化を伴わない電子転移である可能性が大きい。



14. 水素吸着 W(100)再構成表面の一次転移

坂 本 一 之

理想表面として 1×1 構造をもつW(100)清浄表面は室温以下で(約230K)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り変化することが知られている。低被覆度の領域では、清浄表面で $\langle 11 \rangle$ 方向にWが変位する $\sqrt{2} \times \sqrt{2}R45^\circ$ 構造だが、水素が吸着することにより $\langle 10 \rangle$ 方向にWが変位する $\sqrt{2} \times \sqrt{2}R45^\circ$ 構造になる。

水素吸着W(100)再構成表面の計算機実験は、これまで低被覆度での相図を調べるのが主な目的であったが、その様な計算をしているうちに一定の温度の下で化学ポテンシャルを変化させると、被覆度に'とび'のようなものが見え、これを一次転移と想定した。

今回の計算機実験の目的は、この転移についてFisher等[1]が紹介した有限系のスケーリング則を用いて、この転移を詳しく調べることにあった。Fisher等は、一次転移の'とび'が有限系では'丸め'られ、自由エネルギーの二階微分の最大値は発散せず、系のサイズを L としたとき、それは L^d に比例することをイジング模型を用いて主張した。しかし、Wについての計算結果がFisher等が想定した結果とは異なったため、より簡単な二次元イジング模型でも解析を行ない、W(100)再構成表面のとき

と比較した。その結果、二次元イジング模型の場合でも有限温度ではモンテカルロ・ステップが少ないとき、自由エネルギーの二階微分の最大値が L^d に比例しないという結果を得た。しかし、そのときに二次元イジング模型では 'とび' を外挿することができたので、この方法を用いて、W(100) 再構成表面の 'とび' の範囲を外挿することにした。また、W(100) 表面と同じ様に再構成表面をもつ Mo(100) 表面でも W と同様の結果が期待されるが、Mo(100) 再構成表面の構造は非常に複雑なため、今回は W(100) 再構成表面の計算機実験のみを行なった。

今回、計算機実験をするにあたっては、Ferrenberg 等 [2] によって紹介された、あるパラメータでの一回の計算で転移点近傍の熱力学的情報が得られるというモンテカルロ法を用いた。

参考文献

- [1] M.E.Fisher & A.N.Berker ; Phys.Rev.B26(1982) 2507
- [2] A.M.Ferrenberg & R.H.Swendsen ; Phys.Rev.Lett.61 (1988) 2635

15. GeO_2 の圧力誘起非晶質化

柴 田 強

近年、 H_2O 、 SiO_2 をはじめとするいくつかの物質において、『圧力誘起非晶質化現象』と呼ばれる新しい非晶質化過程が見いだされた。この現象は、「熔融無き非晶質化」とも表現され、地球科学的にはもちろん、構造相転移の観点からは物理的にも非常に興味深い現象である。

ガラスに代表されるように、通常われわれの目にふれる「非晶質」は、何れも熔融状態から急冷することによって生成され、結果として出発物質よりも密度が低い疎な構造を取る。ところが、圧力誘起非晶質化においては、出発物質よりも密度が高い「非晶質」が、しかも従来考えられなかったような低温において形成されると考えられ、従来の「非晶質」観に修正を迫るような現象であるといえる。

H_2O (Ice I_h) が 77K、~1GPa で非晶質化することを見いだした Mishima らは、その非晶質相について密度測定・熱測定をおこない、この相転移は固相における一種の熔融現象であり、その転移点は Ice I_h 相の melting curve の外挿線上にある、と推論した¹⁾。またこのほかにも、最近になって多くの物質について圧力誘起非晶質化が観測され、様々な測定方法が取られているが、非晶質転移のメカニズム自体について系統的に言及した報告は少ない。

そこで本実験の主な目的を、非晶質の生成領域の決定と Mishima の仮説の検証のふたつとし、この現象の機構解明を進めることにした。試料には、既に報告されている SiO_2 の圧力誘起非晶質化²⁾に注目して、そのアナロジーとして