

8. 表面再構成の計算機実験

杉 林 直 彦

タングステン(001)表面は室温付近より低温で再構成転移を起こし、より大きな単位格子の $\sqrt{2} \times \sqrt{2}$ R45° 構造になる。これがタングステン原子の平均位置が変位するために起こる現象であることは確められている。この表面に水素を吸着させていくと水素の量に応じて、まず $\sqrt{2} \times \sqrt{2}$ R45° 構造を保ったまま変位の方向が変わり、次に不整合相が現れ、次にその不整合相があるひとつの方向に乱れを持つ状態(一次元的秩序状態)になり、水素が表面で飽和すると表面は 1×1 構造になる。

このようにタングステン(001)表面水素吸着系には多様な現象が現れるが、我々はこれらの現象を格子ガスモデルと表面タングステン原子の変位モデルとを組合せて、モンテカルロ法計算機実験により解析を行なう。

我々は、水素はタングステンを介しての間接相互作用を持ち、水素が凝縮する転移が存在すること、平均場近似での結果とは異なり、変位方向の変化はゆるやかで相転移ではないことを示唆する結果を得た。又、不整合相及び一次元的秩序状態についても知見を得た。

9. Cross-section 法によるニッケルの照射損傷の研究

杉 本 勝

次世代エネルギー源として核融合が期待されているが、その開発を行なう上で、第一炉壁に如何なる材料を用いるべきかということが大きな問題の一つになっている。高エネルギー粒子の照射効果に拠って材料は劣化する。この材料の寿命が融合炉の寿命を決める要因となることから、耐照射損傷性の高い材料の開発が急がれている。その為の基礎研究として、高エネルギー粒子の照射に拠って材料中に生成される欠陥の挙動、点欠陥集合体の形状、振舞いを明らかにすることは重要である。中でも透過型電子顕微鏡に拠る観察は微視的な組織変化を調べるのに有効であり、照射初期からの損傷形態を追っていくことに拠って、損傷の機構を解明するこ