



Title	Ti-(50- $\chi$ )Ni- $\chi$ FeならびにFe <sub>3</sub> Ptの電子構造と構造相変態
Author(s)	山本, 琢也
Citation	大阪大学, 2008, 博士論文
Version Type	
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/48600">https://hdl.handle.net/11094/48600</a>
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、<a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">大阪大学の博士論文について</a>をご参照ください。

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

氏 名 やまもと たくや  
山 本 琢 也

博士の専攻分野の名称 博 士 (工 学)

学 位 記 番 号 第 22026 号

学 位 授 与 年 月 日 平成 20 年 3 月 25 日

学 位 授 与 の 要 件 学位規則第 4 条第 1 項該当

工学研究科マテリアル生産科学専攻

学 位 論 文 名 Ti-(50-x)Ni-xFe ならびに Fe<sub>3</sub>Pt の電子構造と構造相変態

論 文 審 査 委 員 (主査)

教 授 掛下 知行

(副査)

教 授 弘津 禎彦 教 授 中谷 亮一 准教授 福田 隆

## 論 文 内 容 の 要 旨

本論文は、Ti-(50-x)Ni-xFe 合金と Fe<sub>3</sub>Pt を取り上げ、それぞれの合金に現れる二次的な構造相変態の起源についてその母相における電子状態に基づいて考察したものであり、以下の 7 章より構成されている。

第 1 章では、本研究の背景を述べた後、研究の目的と意義を述べた。

第 2 章では、従来 Ti-Ni 系形状記憶合金においてよく知られている R 相と、近年 Ti-44Ni-6Fe 合金において見出された整合相との関連を物性値測定ならびに電子線回折により調べた。その結果、整合相と R 相は本質的に異なる相であることがわかった。

第 3 章では、Ti-(50-x)Ni-xFe 合金 (x=6, 7, 8, 10) を用いて、これらの合金に現れる散漫散乱について調査した。その結果、いずれの合金においても冷却過程において散漫散乱が現れ始める温度は電気抵抗曲線が極小を示す温度  $T_{\min}$  とほぼ一致しており Fe 濃度の増加とともに下がること、この散漫散乱のピーク位置は  $q_d^{\max} = \langle \zeta_d \zeta_{d0} \rangle^*$  で表すことができ、 $\zeta_d$  は Fe 濃度の増加により小さくなり、温度の低下とともに 1/3 の位置に近づくことを明らかにした。

第 4 章では、散漫散乱を示す相への変態の原因として、Ti-(50-x)Ni-xFe 合金のフェルミ面のネスティングに関して調査した。その結果、Fe 濃度が 20 at.% 以下の合金母相には  $\langle 110 \rangle^*$  方向にフェルミ面のネスティングが現れることを示した。また、そのネスティングベクトル  $q_n$  を一般化感受率  $\chi(q)$  のピーク位置として計算から求めたところ、 $q_n$  は母相からの非整合相への転移温度付近における散漫散乱のピーク位置  $q_d^{\max}$  と一致することが確認できた。このことから、非整合相への変態は B2 型母相におけるフェルミ面のネスティングが原因であることを示した。

第 5 章では、Ti-42Ni-8Fe 合金のフォノンを中性子非弾性散乱実験とバンド計算により求めた。中性子非弾性散乱実験から求めた  $[110]^* \cdot \text{TA}_2$  フォノン分散曲線は、温度の低下とともに散漫散乱が現れる  $q_d^{\max}$  付近において軟化を示した。一方、この実験結果に対応したフォノンの軟化はバンド計算によっても得られることから、フォノンの軟化もまた散漫散乱と同様にフェルミ面のネスティングに由来することを示した。

第 6 章では、L1<sub>2</sub> 型 Fe<sub>3</sub>Pt に見られる L6<sub>0</sub> 型構造への二次的な相変態の原因を調査するために、その電子状態を計算した。完全規則状態においては、L1<sub>2</sub> 型構造が最も安定であり、相変態は生じないと示唆された。ところが、L1<sub>2</sub> 型構造のフェルミレベル  $E_F$  直下に状態密度の鋭いピークが存在することから、バンド・ヤーン・テラー効果の存在が考えられる。実際、電子数を減少させ  $E_F$  をピークの位置に近づけると、L1<sub>2</sub> 型構造よりも L6<sub>0</sub> 型構造の方が安定

となる。規則度が下がることにより、 $E_F$  はピーク位置に近づく予想されることから、不完全規則状態の  $\text{Fe}_3\text{Pt}$  で現われる  $\text{L6}_0$  型構造への相変態の起源はバンド・ヤーン・テラー効果によると結論される。

第7章では、本研究で得られた成果を総括した。

## 論文審査の結果の要旨

本論文は、形状記憶特性に優れた  $\text{Ti-(50-x)Ni-xFe}$  合金 ( $6 \leq x \leq 10$ ) ならびに近年強磁性形状記憶合金として注目されている  $\text{Fe}_3\text{Pt}$  において現れる二次的な構造相変態の起源を母相における電子構造の不安定性から考察したものであり、以下の知見を得ている。

(1)  $\text{Ti-(50-x)Ni-xFe}$  合金 ( $6 \leq x \leq 10$ ) における電子線回折図形の温度依存性を調査し、これらの合金では、温度低下にともない母相から非整合相への二次的な構造相変態が存在することを見出している。すなわち、非整合相は  $\langle 110 \rangle$  方向に現れる散漫散乱を特徴としており、その出現開始温度がこれらの合金において従来報告されている電気抵抗が極小を示す温度とほぼ一致することを明確にしている。さらに、この散漫散乱の最大強度を示す波数ベクトルの大きさは温度低下にともない大きくなること、ならびに  $\text{Fe}$  濃度の増加にともない小さくなることを見出すとともに、この散漫散乱はバルク試料においても現れることを中性子回折実験により確認している。

(2)  $\text{Ti-42Ni-8Fe}$  合金を用いて中性子非弾性散乱実験を行い、この合金における母相から非整合相への変態に前駆して  $\text{TA}_2$  フォノン分枝が温度低下にともない軟化すること、ならびにこの軟化が起きる波数ベクトルと散漫散乱が最大強度を示す波数ベクトルとが一致することを見出している。

(3) 上記した母相から非整合相への相変態の起源を明らかにするために、 $\text{Ti-(50-x)Ni-xFe}$  合金母相の電子構造、およびそれをもとにして一般化感受率を計算し、この系においてフェルミ面のネスティングが存在すること、ならびにそのネスティングベクトルが電子線回折図形における散漫散乱の最大強度を示す波数ベクトルと良く一致することを示している。また、 $\text{Ti-42Ni-8Fe}$  合金に見られる  $\text{TA}_2$  フォノン分枝の軟化は、電子構造を用いて計算したフォノン分散関係から説明できることを示している。以上の結果から、 $\text{Ti-(50-x)Ni-xFe}$  合金における母相から非整合相への変態がフェルミ面のネスティング効果に由来することを明確にしている。

(4) 規則度が 0.8 近傍の  $\text{Fe}_3\text{Pt}$  において生じる  $\text{L1}_2$  型の立方晶から  $\text{L6}_0$  型の正方晶への二次的な構造相変態の起源がバンドヤーンテラー効果によるものであることを、電子構造の計算から明らかにしている。すなわち、 $\text{Fe}_3\text{Pt}$  の  $\text{L1}_2$  型規則構造におけるフェルミエネルギー近傍の高い電子状態密度が、正方晶に歪むと分裂し、エネルギーの低い状態に電子が入ることにより、 $\text{L1}_2$  型構造よりも  $\text{L6}_0$  型構造が安定化することを示している。

以上のように、本論文は  $\text{Ti-(50-x)Ni-xFe}$  合金ならびに  $\text{Fe}_3\text{Pt}$  に現れる二次的な構造相変態の起源をそれらの母相における電子状態をもとに明瞭にしたものであり、学術的にもまた形状記憶合金の特性を向上させるためにも、極めて有用な知見を含んでおり材料工学に寄与するところが大きい。

よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。