OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	強磁性窒化物α''-Fe16N2の結晶構造と電子状態に関する研究
Author(s)	田中, 啓文
Citation	大阪大学, 1999, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.11501/3155384
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

氏名	田中啓文（たなかひろふみ）
博士の専攻分野の名称	博士（工学）
学位記番号	第14631号
学位授与年月日	平成11年3月25日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当 工学研究科材料物性工学専攻
学位論文名	**強磁性窒化物α"－$Fe_{16}N_2$の結晶構造と電子状態に関する研究**
論文審査委員	（主査） 教授 弘津 禎彦 （副査） 教授 山本 雅彦　教授 中嶋 英雄　教授 森 博太郎 教授 吉田 博

論文内容の要旨

本論文は，強磁性窒化物α"－$Fe_{16}N_2$の電子顕微鏡による析出形態の観察，電子回折による結晶構造解析，および，構造解析結果に基づいたバンド計算による磁性評価についての研究をまとめたものであり，6章から構成されている。

第1章では，本論文の歴史的背景，意義，目的，ならびに論文の構成について述べている。

第2章では，窒素鋼マルテンサイトα'相の焼戻しにより析出する強磁性窒化物α"相（$Fe_{16}N_2$）の組織形態，ならびに，結晶構造について得られた結果を述べている。焼戻しによりα'はα"と低窒素マルテンサイト α_1'に分解し，析出最終段階（160℃長時間焼戻し）においてはα"は厚さ100Å，幅1000Å程度の板状析出物として焼戻し母相 α_1'中に整合析出すること，ならびに，α"は空間群 $I4/mmm$ に属する正方晶であり，格子定数は a=5.72Å，c=6.31Åであることなどを明らかにしている。

第3章では，α"の析出初期過程に関する高分解能電子顕微鏡観察結果について述べている。70℃15分の焼戻しでは，α"析出の前駆段階として局所的に窒素原子の規則領域がα'中に出現すること，70℃60分の焼戻しでは，α"がクラスターとして析出し始めること，160℃長時間の焼戻しでα"の析出はほぼ終了することなどを見出し，さらに，析出相α"中には母相との境界付近で，窒素濃度のゆらぎが見られることを明らかにしている。

第4章では，イメージングプレート強度測定法を利用したα"－$Fe_{16}N_2$の電子線精密構造解析の結果を述べている。α"中の窒素電子配置により影響され変位するFe原子の位置パラメータは，従来報告されているものとは異なることを見出している。また，従来のX線多結晶法を用いたα"相のFe原子位置パラメータ決定については，その方法に誤りがあることを指摘している。

第5章では，第4章の実験により得られた原子位置パラメータ値，および従来から用いられている原子位置パラメータ値の双方に基づいたFLAPW（full-potential linearized augmented plane wave）法によるバンド計算を行ない，$Fe_{16}N_2$の磁性について評価している。両パラメータ値に基づいた計算結果を比較したところFe位置での部分状態密度の差異が大きいにも拘わらず，$Fe_{16}N_2$のFe原子の平均磁気モーメントは従来構造の場合は2.3μ_B，本研究で決定された構造の場合には2.2μ_Bであり，いずれもα－Feのものとほぼ一致することを見出している。得られた計算結果に基づき，従来の実験より議論されている実験値と計算値との不一致の原因に関する考察を行っている。

第6章では，本論文で得られた結果を総括し，本論文を締めくくっている。

論文審査の結果の要旨

強磁性窒化物$\alpha''-Fe_{16}N_2$は現存する強磁性体のうち，最も高い飽和磁化を有するものと報告されており，基礎および応用の両面から非常に興味が持たれている。本論文は，強磁性窒化物$\alpha''-Fe_{16}N_2$の電子顕微鏡による析出形態の観察，電子回折による結晶構造解析，および，構造解析結果に基づいたバンド計算による磁性評価についての研究をまとめたものであり，主な成果を要約すると以下のようになる。

(1) 窒素鋼マルテンサイトα'相の焼戻しにより析出する強磁性窒化物α''相（$Fe_{16}N_2$）の組織形態を観察し，結晶構造についての解析を行なっている。その結果，焼戻しによりα'はα''と低窒素マルテンサイトα_1'に分解し，析出最終段階（160℃長時間焼戻し）においてはα''は厚さ100Å，幅1000Å程度の板状析出物として焼戻し母相α_1'中に整合析出すること，ならびに，α''は空間群$I4/mmm$に属する正方晶であり，格子定数は$a=5.72$Å，$c=6.31$Åであることを明らかにしている。

(2) α''の析出過程に関する高分解能電子顕微鏡観察を行なった結果，70℃15分の焼戻しでは，α''析出の前駆段階として局所的に窒素原子の規則領域がα'中に出現すること，70℃60分の焼戻しでは，α''がクラスターとして析出し始めること，160℃長時間の焼戻しでα''の析出はほぼ終了することなどを見出し，さらに，析出相α''中には母相との境界付近で，窒素濃度のゆらぎが見られることを明らかにしている。

(3) イメージングプレート強度測定法を利用した$\alpha''-Fe_{16}N_2$の電子線精密構造解析を行なった結果，α''中の窒素原子配置により影響され変位するFe原子の位置パラメータは，従来報告されているものとは異なることを見出している。また，従来のX線多結晶法を用いたα''相のFe原子位置パラメータ決定については，その方法に誤りがあることを指摘している。

(4) 実験により得られた原子位置パラメータ値，および従来から用いられている原子位置パラメータ値の双方に基づいたFLAPW法によるバンド計算を行ない，$Fe_{16}N_2$の磁性について評価している。両パラメータ値に基づいた計算結果を比較したところFe位置での部分状態密度の差異が大きいにも拘らわらず，$Fe_{16}N_2$のFe原子の平均磁気モーメントは従来構造の場合は$2.3\mu_B$，本研究で決定された構造の場合は$2.2\mu_B$であり，いずれも$\alpha-Fe$のものとほぼ一致することを見出している。得られた計算結果に基づき，従来から議論されてきた実験値と計算値との不一致の原因に関する考察を行っている。

以上のように，本論文は電子顕微鏡・電子回折法により，窒素鋼マルテンサイトの焼戻しにより析出する$\alpha''-Fe_{16}N_2$の析出形態・析出過程，ならびに結晶構造を明らかにするとともに，構造解析で得られた原子位置パラメータに基づいて行なったFLAPW法によるバンド計算から$\alpha''-Fe_{16}N_2$の磁性についての知見を得ている。その成果はFe−N系磁性材料の研究に対し有用な指針を与えるものであり，材料物性工学に寄与するところが大きい。よって本論文は博士（工学）の学位論文として充分に価値ある内容であると認める。