

物性研だより

第5卷
第1号

1965年4月

目 次

研究室だより

○ 放射線物性部門	小林 晨作	1
○ 磁気II（理論を中心として）	守谷 亨	3
○ 松下電器東京研究所	山香 英三	7

研究会報告

○ イオン性結晶のバンド構造と輸送現象	豊沢 豊	11
○ 超電導	菅原 忠	18
	大塚 泰一郎	
	中嶋 貞雄	
○ 原子、分子の波動函数の改良	石黒 英一	24

サ ロン

○ 「物性研だより」について	齊藤 喜彦	40
----------------	-------	----

物性研ニュース

○ 人事異動		42
○ 短期研究会予告		42
○ 外来研究員		43
○ 滞在予定外国人		47
○ 公募		48

Technical Report of ISSP 新刊リスト 50

東京大学物性研究所

研究室だより

放射線物性部門

小林晨作

我々の部門は、実験の性質上研究室の区分にこだわらず成可く、部門単位に研究を行う方針で進んできました。ところで現在我々の部門は2つのグループに分かれて研究を進めています。即ち一つはMössbauer効果を利用しての物性研究であり、他方は整列核及び偏極速中性子を利用した核研究です。今回は後者の方の紹介に限ることにします。我々のグループが原子核の研究者の中で如何なる位置をしめるかは教育大の真田教授が最近どこかでいわれた次のとばで表わされます。"日本の原子核研究には二つの singular points がある。その一つは阪大杉本グループであり、他方は物性研グループである。" と。とはいいうものの西のグループは著々秀れた仕事を生産しつつあるのに東のグループは仕事が却々歩らず省みて耻しく思っています。しかしながら現在の時点に立つとき尚道険しくとも我々の目標の一つ（整列核と偏極速中性子の相互作用の研究）にかなり近づいて来たといえると思います。そこで East Singular Point の現状を御報告しましょう。

物性研サイクロトロンは可変エネルギーであるとはいえ、又加速器にとってその最高エネルギーは、必ずしも高きが故に貴からずといってみても、エネルギーの可変範囲、エネルギー精度、平均ビーム電流のどれをとっても今や世界的に標準となっている High Vol. 製の同じ位の最高エネルギーをもつ Van de graaff electrostatic generator に数段劣ることは否めません。唯一つこれらにたちうちできる点はビームがパルス化されて用いられる時、そのピーク電流が高いことです。因みに我々のサイクロは 2×10^{-9} sec の間隔にわたり $500 \mu A$ のプロトン。ビームを取出口から $6 m$ はなれた target 領域で利用出来ます。我々はこのパルス化したビームを 3 Mc/sec の繰返しで用いております。そしてこの特徴は time of flight 法とよばれる中性子の速度アナライザーとして現在最もよい精度の方法を用いる時有効に利用できます。我々の T-O-F 系は 1963 年に完成し、その内容は Technical Report Ser. A No. 89 と J.J.A.P. 3 ('64) 320 を御参照下さい。T-O-F 系完成後、筆者は約一年米国出張で留守をしましたが、昨年 10 月帰国以来、向うでの経験を取り入れ、速中性子実験にとって最大の難物であるバックグラウンドの減少に力を入れて来ました。サイクロトロンから出たビームをその強度を損失することなしに

又ある意味で同じことですが、一切のバックグラウンドを生ずることなしに、中性子発生ターゲットに導くかについて大巾の改造をすすめています。（例えば実験室側に新に強吸収Q電磁石が新設されたり、ビーム管を中性子発生の確率の小さい物質にとりかえるなど）その間T-O-F系のテスト実験をかねて、 $Mn^{55}(P, n)Fe^{55}$ 反応を使い、 Fe^{55} の低位準位の今まで明らかでなかつた性質の解明に成功しました。又一方NE213とよばれる液体シンチレーターを用いることにより、中性子と γ 線のパルスの波形のちがいを利用して γ 線パルスを中性子から区別する回路を1 MeV 中性子の範囲で開発に成功し又これは光電増倍管の雑音による信号をも区別することができます。ようやく、中性子研究の態勢が整のって来た段階です。一方scatterer である整列核の方はどうなつているかというと、これは主として大野研の上坪さんによつて進められています。整列核の実験は偏極中性子のターゲットを作るため始められました。整列には静的な方法を利用します。核実験のターゲットとしては、なるべく単体が好ましいので、静的方法で整列ターゲットが実現出来そうなものとして稀土類及び遷移元素を考えています。稀土類は内部場が大きく、 $0.1^\circ \sim 1^\circ K$ の程度の低温でもかなりの整列度が得られそうですが、金属のまゝでは電子スピニンをある空間方向へ揃えるのが、かなり大変です。我々はHo金属を $1^\circ K$ まで冷却してこれを24 KGの磁場の中に入れてターゲットにしています。現在液体Heの部分が2重になっている金属デュワーを作り減圧して $1^\circ K$ にしています。又遷移金属では、 $0.01^\circ K$ 前後にしないと充分な整列が得られません。そのため断熱消磁を利用しなければなりません。最近稀薄合金の内部場の研究が盛んになり、鉄等のような強磁性金属をホストにした場合非磁性原子でもかなりの内部場をもつことが明らかになってきています。そこでターゲット用以外にも放射性元素の稀薄合金の核整列の実験も行つています。これにより、放射される β 線、 γ 線の異方性から核構造を調べ又準位の磁気能率を求めるだけでなく、内部場の大きさや方向を求めることができます。現在はまず手初めに、FeとAg^{110m} 及びFeとTeの稀薄合金について実験しています。Co⁶⁰を温度計として用いていますが、クロムカリミヨウバンを用いて間接冷却で試料を $0.02 \sim 0.03^\circ K$ の程度まで冷却することが出来ています。このようにして今少しの技術的改良を試みた上でいよいよ当初の目標の実験にかかりたいと考えています。核相互作用におけるスピニースピニン相互作用について現在では、その大きさのorderもわかつていませんが、その大きさや形を仮定した核反応理論の計算が最近publishされ始め、この種の実験の機が熟して來た感じなので、できるだけ早く、取りかかりたいと考えています。

磁気 II (理論を中心として)

守 谷 亨

(1) 早いもので、伴野さんが研究室紹介を書かれてから既に2年半になります。部門設立の当初、実験としては、NMRから遠赤外迄の共鳴手段を主な武器として磁性体の電子状態を研究する、理論としては実験と協力する一方、もっと広い視野からの磁性理論の研究をも同時に行う。という構想のもとに、いくつかのテーマを掲げました。一昨年あたりで建設も一段落し、これらのテーマの研究がぼつぼつ実を結びつつあります。伴野さんがアリゾナへ出張されてお留守中ですので、今回は理論関係を中心として、これに関連した実験の話を折りこみながら、研究経過を報告させていただくことにします。

メンバーの変更としては、ハーバード大学で Van Vleck 教授の下で PhD をとり帰国した、井上通子が、昨年2月より理論の助手に就任しています。実験関係の人員が多いのに比して、理論家は僅かに2名ですが、理論Iの研究室がすぐ隣にありますので、理論の討論にはあまり不自由しません。特に最近やっている遷移金属、合金の研究では、同様な興味をもって居られる芳田さんのグループとの接触は大へん有意義です。

(2) 最近の磁性理論の興味の中心は、化合物から金属に移って来ていると思われますが、我々の興味も、このところ遷移金属、合金に傾いています。鉄、コバルト、ニッケルが何故強磁性を示すか、というのは古くからの問題で、モット、プロッホ、スレーター等のバンド理論以来、繰返し議論されてきました。原子内の電子相関の重要性を強調する Van Vleck モデル、その上に立って s-d covalent admixture を強調する Anderson の理論、更に最近では d-d スクリーニングを取り扱った、金森や Hubbard の理論、s-d スクリーニングが重要とする Mott や Herring の立場など、たくさんある理論があります。

ところでこのような議論の殆んどすべては、パウリの常磁性状態と、強磁性状態のエネルギーの比較をしているわけですが、狭いバンドの電子相関という難問にさえぎられて、なかなか信頼に足る取り扱いが出来ません。その上、この様な第一原理からのアプローチは、種々の金属、合金が強磁性になるか、反強磁性になるかという間に答えるまでには未だ程遠く思われます。

一方、よく知られている様に鉄族のシリーズでは、重い方のコバルト、ニッケルは強磁性、真中に近いクロム、マンガンは反強磁性、その間の鉄は b.c.c. で強磁性、f.c.c. び反強磁性を示しま

すが、この理由は、金属原子が磁気能率を持つという前提の下に理解できないものでしょうか。我々は、金属の中で原子の磁気能率が存在するとき、それらが互に平行になるときと、反平行になるときのエネルギー差を求めてみようと考えました。勿論金属の中では原子のd軌道がそのまま存在するわけではなく、s-バンドとまざり合ったり、互にとび移ったりして、いわゆる virtual state になつてゐるわけですから、その点に考慮が要ります。我々はAnderson model をとり、金属の中の2つの隣接原子に対応する virtual な局在状態の間に、covalent admixture をとり入れるという、Alexander とAnderson のやり方を一般化して、5重縮退した軌道を持つ種々の原子のスピンの間の相互作用を計算してみました。その結果は、d殻が半分つまっている原子は非常に反強磁性的に結合しやすく、電子数がふえると、次第に強磁性結合の方向に傾き、閉殻に近い状態は非常に強磁性になるということでした。これは実際、Cr、Mn、r-Feが反強磁性α-Fe、Co、Niが強磁性であるという事実と定性的によく合っています。更に鉄族の合金に理論を適用してみると、多くの合金のスピン配列が大へん好都合に説明できます。例えばFe、Co、Niは互にすべて強磁的に結合すること、Ni-Cr、Ni-V、Cr-Mn、Cr-Fe、Cr-Co等が反強磁的に結合すること等々です。又この様な結合に伴うスピンの大きさの変化をしらべて見ますと、Fe-Co、Fe-Ni、Co-Ni等では比較的変化が小さいのに対し、Cr-Niでは大きい変化が期待される等、中性子廻折の実験と定性的に一致する結果が得られます。次に磁気能率を持たない原子と持つ原子とが金属の中で隣接しているとき、前者にどの方向の磁気能率が induce されるかということも計算してみました。その結果は、例えば前者がPdやPtの様に閉殻に近い構造をもつているとき、後者が同様に閉殻に近ければ正（平行）、後者のd殻が半分に近く満たされているときは負（反平行）という結論がでて、Pd、Pt中に3d原子、Ni、Co、Fe、Mn、Crを入れた場合の実験と定性的に一致します。

この理論は virtual state のひろがりの機構として s-d admixture だけを考えている点、大いに批判の余地がありますが、定性的には、もっと一般的に virtual state に伴う磁気能率の間の相互作用のモデルと見ることも出来ると思います。即ち virtual d-level のエネルギー的ひろがりを起しているのは s-d mixing ばかりでなく d-d transfer でもあると考えるわけです。

以前 Friedel は強磁性稀薄合金に対して鋭い直観を用いて、電子状態の描像を提出しました。例えばNiの中のFe、CoのスピンはNiのスピンと平行に入るのに対してCr

は反対向に入るという説明が定性的になされています。併し乍らこの理論では、不純物原子のスピンの方向は、エネルギーが低いと考えられる一方をとるだけで、スピンが反対に向いた状態とのエネルギーの比較はなされていません。実際にはスピンが反対を向いた状態も一般的には存在するわけで、我々の理論を稀薄合金に適用すると、モデルは違いますが、そのエネルギー差を実際に求めたことになっていると思います。

勿論我々は、稀薄合金ばかりでなく、純金属や稀薄でない合金に対しても、この様な考えが問題の大筋を捉えている様に感じておりますが、その意味では、このモデルは、もっと基礎のはつきりした理論の母体になることを期待しています。

(3) 以上は昨年夏までの話ですが、その後 P d 合金の giant moment や、 long range polarization の話と関連して、 non-magnetic な host metal に magnetic な不純物を入れた稀薄合金のスピンの分極を、少し違った 2 つのやり方でしらべてみました。一つは Anderson のモデルで、伝導滯を d 滯とし、局在状態を不純物原子の 3 d 又は 4 f 軌道とみなします。もう一つは遷移金属同志の合金の場合のみに適用される Slater-Koster-Wolff-Clogston のモデルです。両者共に、今迄考慮されていなかった Host metal の中の交換相互作用を取り入れました。その結果は、これ等の 2 つのモデルが著しく似た結果を与えるばかりでなく、スピン分極の符号については(2)で述べた理論の結果とも大体一致するのです。更に結果はバンドの状態密度曲線の形にもあまり依存しない様です。このことは、以前に井上と筆者が、(2)の研究に関連して、結晶場の効果をしらべたとき、 virtual level を分裂させても effective な交換作互作用の変化は比較的小さかったことと思い合わせて興味深いことだと思います。

さて host metal の exchange の効果は P d の giant moment の出現には極めて重要な要素で、比熱と滞磁率の測定値から induced moment の exchange enhancement factor を約 10 と見つもると、その他には不確かなパラメーターを使うことなく、 giant moment の大きさが出て来ます。moment の大きなひろがりも exchange の効果によるものと考えられます。興味深いのは、この理論を Pt 合金に適用すると、moment のひろがりはずっと小さくなってしまうことです。

これに関連した実験として、阿部(高明)は Pt の中に Co を僅かに入れて Pt の核磁気共鳴をしらべています。最近の結果では、Pt のスピン分極のひろがりは P d の場合より大分小さい様です。長沢、竹下の β -Mn を主体とする諸合金の NMR の研究も、この問題に関連したものとして成果を期待しています。Nottingham の会議で Jaccarino は

Pdの中に入ったVのKnight shiftは滞磁率に比例しないということを報告しましたが、長沢はNi-V、Ni-Cu-V系でVのKnight shiftを測定し、同様に温度変化がないという結果を得ました。これら一連の遷移金属合金の研究は、実験的にも理論的にも更に進めたいものと考えています。

- (4) 強磁性遷移金属の核磁気緩和の理論を昨年発表しましたが、この理論は合金の場合にも拡張することが出来ます。溝口は強磁性金属に入った不純物のT₁の測定を手がけていますが、dataが蓄積されて来たら又理論の方も進めなければならないと思っています。
- (5) マグネタイトのB-siteでの電子拡散は、昔からよく知られていますが、溝口はスピニエコーの方法でA-siteのFe⁵⁷のT₁、T₂を低温から常温まで測定しました。T₁の温度変化は85°K附近に極小がありますが、溝口は神垣さんの超音波吸収の実験から求められた相関時間を使い、又ordering parameterの温度変化に簡単な仮定を使って、きれいに合わせることに成功しました。
- T₁、T₂の大きさと、T₂がT₁と等しく～85°K附近に極小を持つということは、B、P、P_zの拡数によるdipolar relaxationの機構では全く理解出来ませんが、B-siteの電子スピンとA-siteの核スピンとの間接相互作用（異方性交換相互作用とhyperfine相互作用を媒介とする）を考慮するとうまく説明出来ます。井上はこの様な考え方の下に詳細な計算を進めています。電子スピンの相関がありますのでB、P、P_zの様に簡単には行きません。溝口の実験に依れば、120°Kの変態点の上でT₁の磁場依存性がある領域があるのですが、これも同じ機構で説明出来るものと思われます。
- (6) この他実験の方にはまだいろいろ面白い研究があります。MnCr₂O₄のスピンの円錐らせん構造は有名ですが、長沢はまだ決められていないかったCrスピンのcone angleをNMRの実験で決めました。これは磁気Iの対馬さんとの共同研究です。白鳥は種々のクロマイトの遠赤外吸収と結晶構造との関係を研究していますし、船橋は同じ物質でESRをやっています。これ等の研究その他についての詳しい報告は次回にゆずることにします。

(昭和40年3月30日記)

松下電器東京研究所

山香英三

東京研究所が横浜市港北区の松下通信工業の一部を借りて看板をかかけスタートしたのは昭和35年8月のことですが、川崎市生田に新して建物が完成して移転し、本格的な研究設備の整備が始ったのは38年1月ですから、実質的には今月で2年余ということになります。その間に種々の設備も大体整い、人員も増加して研究所の形態も漸く整ってきました。小池社長の言を借りれば、「漸く創立期を終って安定成長期に入った」ということになるわけです。このように創立以来まだ日が浅く本格的な研究が始った段階に過ぎませんので、「物性研だより」に書く程の研究成果が数多くあるわけではありませんが、編集委員の方の求めに応じて研究所の現状について書いてみます。

ところで御存知の方も多いと思いますが、松下電器には中央研究所を始めとして照明研究所、電機技術研究所、生産技術研究所、無線研究所、電子工業研究所など多くの研究所が大阪地区に集中しております。それに加えて更に東京研究所が設立された所以は、松下電器の将来のエレクトロニクス技術を開発するためには、生産部門から分離した独立の研究所を必要とする事にあるわけです。そのため松下の他研究所と異って株式会社松下電器東京研究所として独立企業体の形で発足したわけです。勿論資本はすべて松下電器の本社より出ていますし、研究所に勤務する人は松下電気の社員であり、東京研究所に出向という形をとっています。

研究所は川崎市生田にあります。小田急線向ヶ丘遊園駅から車で約5分、駅から暫らく小田急線に沿って小田原方向に進み、昔の陸軍多摩研究所、現在の明治大学工学部の校舎を右に見ながら丘陵地帯を登って行きますと、間もなく研究所が見えます。近年夏の水不足になると話題にのぼる東京都長沢浄水場は目の前ですし、川崎ゴルフ場とは隣接しております。松下電器の研究所が関西に集中しているので、エレクトロニクスの基礎研究を主題とする研究所は立地的に東京地区が好ましいという基本方針は簡単に決った由ですが、その場所を都心から時間的に遠からず、しかも研究環境の良い所をということで、選定には苦心したということです。その甲斐あって全く閑静で清浄な環境は研究所には申し分のない所で、都心からくるとほっとするような空気の良さを感じます。ただ皮肉なことには浄水場を目の前に見ながら夏場には水不足に悩むことです。それというのも浄水場の水は東京都が買ったものですから、川崎市にある研究所には給水出来ないというわけで、地下水を汲みあげているからです。しかしこれも近く川崎市浄水場が完成すれば、解決されるでしょう。

研究所は現在小池社長、宮地常務以下基礎4研究室、電子装置4研究室、電子回路1研究室、試作及び事務部門で構成され、総勢約100名の人員がいます。建物の本館が3階建てで、これに低温棟、試作棟、電源棟が接続し、又隔壁実験室や集会室が敷地内に点在し、床面積は約1200坪で、殆んどの部屋は冷暖房になっています。電子装置研究室では主としてエレクトロニクスの応用研究が行われていますが、ここでは「物性研だより」を読まれる方々の関心の深い固体物性の研究室を中心に紹介して見たいと思います。

基礎第1研究室（室長 大貫）- 光電導性物質の材料合成を純化及び結晶生成に関する材料的研究と、それらの結晶中のキャリヤの振舞についての素過程の解明を目的とした研究を行っています。現在主としてCdS等のII-VI族化合物に焦点をおいています。先づ高純度の単結晶の生成が上記研究の出発点と考えて、CdSの粉末の合成純化とPiper法による単結晶生成の方法を確立しました。又最近設置したオートクレイブを用い溶融法によってCdS、CdSeなどについて不純物濃度を制御した大きな単結晶が出来るようになりました。これらの方法で製造された単結晶について各種の測定法を使ってその物性の研究を行っています。Block電極を用いたパルス又はAC法による光電導度及び光ホール効果、マイクロ波による光電導及びサイクロトロン共鳴、キャリヤの赤外光反射測定による有効質量、或いはCdやS処理効果の問題などを研究しております。

基礎第2研究室（室長 富来）- 少人数ですが、主としてイオン結晶の光学実験を目的として研究を進めています。現在までにKCl、NaClの結晶純化を行って基礎吸収帯を精密に測定してきました。粉末の合成純化やzoneによる純化を行った結果、イオン電導度測定によって 10^{-3} /cc程度以下の不純物濃度におさえた高純度のKClを得ています。これらの資料の測定に使用する自作の極紫外分光器は1000~6000Åの波長範囲で分解能は0.5Å程度です。この他にBeckmann分光計などが主たる測定器です。

基礎第3研究室（室長 浅沼）- 金属合金及び化合物の磁性を主たる研究対象とし、更に遷移金属酸化物等の伝導問題を少しづゝ取りあげています。金属合金の磁性を解明するためには、多種多様な実験方法を用いることが必要であると思い、帶磁率や自発磁化の測定は勿論、対象物によってはNMRやEPR、或いは極低温比熱、電気伝導度等の測定装置を整備してきました。VarianのNMR、EPRやルビコンのpotentiometerなどがそれです。今迄に

研究してきたものは主としてMnRh、CsCl型の金属合金と遷移金属を含む化合物です。

装置としては上記の測定用のもの以外に金属用として高周波誘導炉、プラズマフレーム炉、酸化物単結晶としてフラックス炉やブリッヂマン白金炉などを準備しています。

基礎第4研究室（室長 赤崎）-当面の研究対象はⅢ-V族化合物で、格子欠陥や不純物の状態を結晶製作条件や処理方法との関連において、或いはキャリヤの振舞を結晶やp-n接合で研究する予定です。しかしこの研究室はまだ発足後1年足らずであり、且つ少人数なので、これまで研究室の整備に明暮れて、本格的研究はこれからというところです。現在までに溶融法及び気相法でGaAsの単結晶を製作し、電気的性質をHe温度まで測定しています。光学測定の方も準備中です。

電子装置第4研究室（室長 山香）-当面の研究として半導体の不純物中心をEPR又はENDORで行っていますが、キャリヤに関係した研究もそのうち始めたいと思っています。又長谷川副室長によって有機化合物、主としてアンスラセンの光電導機構を、レーザー光を用いて研究しています。この研究室も基礎4研と同じく発足以来1年と少々で、装置が一応出来上り本格的な測定が始ったところです。EPR装置は各種の測定が便利なようにX帯の立体回路は組立式のスーパーになっています。ENDORはTiO₂によるテストを終って、基礎1、4研と共に不純物中心の研究を始めたいと思っているところです。他方アンスラセンは高純度の単結晶にて、TRGのGiantレーザー光を照射して、2量子吸収による光電導やその際の電流の振動波形を観測しています。

以上が各研究室の現状ですが、その他の関連部門について簡単にふれてみます。

先ず試作部門 - 機械工作及び設計関係は少人数ながら簡単なシャーシ等から複雑な装置までスイッチだけで気軽に製作に応じて貰えます。勿論特殊なものは外注に廻され日時がかかるのは止むを得ません。その他硝子細工、真空処理、半導体処理等の係があって、研究室から出る特殊な要求に応じています。近年の物性研究に欠かせないのが低温装置ですが、フリップスの窒素液化機が2台とADLのヘリウム液化機が低温棟にあります。毎周火、木曜日がヘリウム液化日で、その他の曜日でも申込んでおけば、貯蔵タンクを利用できるので、研究者には大変便利です。

次に共通装置 - Cary の分光計Perkin-Elmer の分光計やPhilips のX

線装置或いは電子計算機など共通的性格をもつた大きな装置は、使用頻度の大きい研究室に所属し、その世話を引受けて貰っています。

以上で固体物性の面から見た研究室の紹介を終りますが、始めに申しましたように研究活動の基礎が漸く出来上ったところで、これから本格的活動に入ろうとする段階です。

皆様の御支援を切にお願いする次第です。

物性研短期研究会報告

「イオン性結晶のバンド構造と輸送現象」

豊 沢 豊

上記の研究会が昭和40年1月25日から4日間にわたって行なわれた。

イオン結晶研究の歴史は非常に古く、特に結晶にふくまれる各種の格子欠陥については多彩な研究が行われ、豊富な知見が蓄積されてきたが、母体の intrinsic な性質に関する研究は、かえっておきぎりにされてきた觀がある。このような跛行的な状態から脱却して、イオン結晶に関する我々の知識をより完全なものにしたい、という趣旨で、早くから小林(浩)氏を中心に研究会の企画が進められ、その第1回として表記の研究会が行われることになり、植村氏及び私も世話人として協力することになった。第零近似としてえらばれた三つの主題 — バンド構造、ポーラロン、輸送現象 — を中心として、午前は講議風の解説が行なわれ、午後は主としてオリジナルな研究報告が行なわれた。参加者は平均100人近く、又連日ぎっしりとつまつたプログラムであったが、討論は極めて活潑に行なわれ、研究者の層が厚くなつたことを痛感した。なお豊富な図表や文献一覧表などを収めた予稿集が作られているので、詳細についてはそれを参照して頂きたい。

プログラム：

第1日

午前

- Introduction 小林 浩一 (物性研)

- イオン性結晶のバンド構造と光学的性質

- 井 上 正 晴 (物性研)

- 植 村 泰 忠 (東大理)

- 岡 崎 誠 (東大工)

- 長谷川 洋 (京大理)

午後

- 高磁場中の Cd S 及び層状構造をもつ Ga Se の基礎吸収端

- 青 柳 淳 (東大理)

- 三 須 明 (")

○ CdS の valence band の troidal surface effects

花 村 栄 一 (東大工)

○ 二次元結晶の基礎吸収端 品 田 正 樹 (物性研)

○ II-VI Wurtzite 型半導体のバンド構造と質量パラメター

長谷川 洋 (京大理)

○ IIb-VIb 族化合物結晶のバンド間 Faraday 効果

蝦 名 悅 子 (東北大通研)

国府田 隆 夫 (物性研)

塩 谷 繁 雄 ("")

○ KCl の伝導帶

大 山 精 一 (中大理工)

宮 川 涌

第2日

午前

○ イオン結晶のバンド構造と輸送現象

山 下 次 郎 (物性研)

○ コメント : KCl のバンド 山 崎 春 彦 (東北大理)

午後

○ イオン結晶のサイクロトロン共鳴

大 貫 正 実 (松下東研)

○ 硫化カドミウム電子の電流磁気効果

小 林 浩 一 (物性研)

藤 田 秀 ("")

川 井 孝 雄 ("")

志 賀 一 雅 (松下東研)

○ コメント : CdS の two photon conduction

吉野・渡部・犬石 (阪大工)

第3日

午前

- ポーラロン 大坂之雄（東北大通研）

午後

- CdSb の電流磁気効果 河崎達夫（松下電子研）

- ポーラロンと非線型伝導現象 真隅泰三（東大教養）

- アルカリハライドにおける電子伝導の high field effect

中沢文子（物性研）

神前熙（〃）

- コメント：着色KCl の高電界光電導

城・犬石（阪大工）

第4日

午前

- イオン結晶における非線型伝導現象

阿部竜藏（物性研）

午後

- Concluding Remarks 武藤俊之助（物性研）

- 自由討論及びまとめ 司会：豊沢 豊（物性研）

————— ○ ————— ○ —————

第1日、小林は introductory talk で、代表的なイオン結晶における輸送現象の実験的研究の現状をのべた。主な I-VII、II-VI 化合物でのドリフト易動度、ホール効果、磁気抵抗、サイクロトロン共鳴などの測定例と、それから知られる電子・正孔の有効質量についての話が主であった。IV 族から遠ざかるに従い測定は困難になってくるが、それでもかくにも、銀ハライドからアルカリ・ハライドあたりまでよくもこぎつけたものだと思う。

次いで植村らは、k-空間全域にわたってのバンド構造が、IV 族から I-VII 族に至る間にどのように推移して行くかについて、主として光学的物質（吸収と反射）と理論的研究にもとづいて現在までに得られている広汎な知見を、要領よくまとめて紹介した。バンド計算における OPW 法と cancellation theorem、結晶構造とバンド構造の関係、吸収スペクトルに反映す

る van Hove singularity、N体問題と($N \pm 1$)体問題の関係なども話題に上ったが、理論的立場からみてもすっきりと解決していない問題点が多く、なかでも van Hove singularity に対する Coulomb作用の効果、L—exciton の可能性などは、今後に残された大切な宿題であると思う。なお佐々木(泰)によると、Phillips のバンド構造の議論に使われている Ehrenreich 等のデータには若干の疑点があるという。

午後は先ず、菅野研・桑原研の共同研究として行われている、パルス高磁場による CdS 及び GaSe の基礎吸収端の研究の報告が、青柳らによって行なわれた。CdS の場合は、いわゆる A、B、C 値電子帯の中 B から伝導帯へ上の遷移に関するもので、exciton 的準位から、Landau 的準位に至る幾つかの強いピークと、それらの間にある弱いピークが観測され、この中後者については、花村が、結晶の反転対称欠如とスピン軌道相互作用に由来する k の一次の項(そのため価電子帯は toroidal surface となる)が Landau 準位間遷移の選択則($\Delta n = 0$)をこわす($\Delta n = \pm 1$ 也可能になる)ためであるとの説明を提案した。GaSe の方は、層状構造をもつという点に着目した研究であるが、事実、磁場の方向をかえてはかると、c 軸方向の質量は面内での質量よりかなり大きいことが知られる。これに関連して、品田は、GaSe 及び同様の構造をもつ GaTe、GaS での基礎吸収端の形状、特に continuum の下端にあらわれる、"こぶ" が、二次元結晶としての特徴であることを、Elliott 流の取扱いで示した。又長谷川は、Wurtzite 型 II-VI 化合物のバンド構造を群論的にしらべる方法をのべ、質量パラメータ、 g —factor、 k 一次の項などのバンド理論的基礎づけを行なった。

次いで国府田が、吸収測定と分散測定の特徴、得失を比較討論した後、塩谷研で行なわれている II-VI 化合物のバンド間 Faraday 効果の実験を、蝦名が報告した。波長依存性は、Boswarva 等の(simple band model による)理論式とよく合うが、基礎吸収端に近づくに従いそれからのずれが顕著になる。これはスピン軌道相互作用による価電子帯の分裂と関係づけられることが、色々な物質の比較によりわかった。固有吸収領域まで測定をひろげることができれば、更に直接的な知見が得られるものと思われる。

我が国でのバンドの絶対理論的計算は数少いが、大山、宮川は、KC1 の伝導帯を OPW で計算した多年にわたる研究結果を報告した。ポテンシャルとしては、Howland により計算された価電子帯の波動函数から逆算したものを使っている。価電子帯の底(Γ 点)のエネルギーや有効質量についてはほど reasonable な値が得られており、又 X 点での準位に関して Phillips の推測とはやや異った結果が得られている。

第2日午前、山下は、先ずバンド計算で用いられるA. P. W. の方法やグリーン函数法などの得失を比較し、又電子計算機の発達した現在、計算精度や近似の問題よりも、ポテンシャルのえらび方がバンド計算の結果に最もひびくことを、自ら手がけた NaClなどの計算例を引用して強調した。山下はつづいて、最近問題になっている CdS やGaAsでの非線型伝導現象についてのべた。一応 kinetic equation の立場に立って、電子及びフォノンの分布函数に関する連立方程式を解く。CdS で電子密度 $1 \cdot 0^{15} \text{ cm}^{-3}$ の場合、電子のドリフト速度が音速より大きい所から出発すると、大体 $1 \cdot 0^{-6}$ 秒程度でフォノンが build up して電子のドリフト速度が高速に近づく、という結果を得た。これは Smith の実験と定性的に一致する。但しその際に用いられる電子格子のピエゾ型相互作用に、電子による Debye 型スクリーニングを入れておくことが重要であることが強調された。フォノンが build up した後の解がどのようになるかはフォノン自身の非線型の問題で、これを正確に取扱うことは非常にむつかしいという。なおこの後、山崎が KC1 のバンド計算の結果を報告した。ポテンシャルの取り方に特徴があると思われる。

午後、大貫は、イオン結晶中の電子や正孔のバンド質量 m^* 、ポーラロン質量 m_p 、速度緩和時間 τ が、実験からどのようにして得られているかを示した。たとえば、ホール効動度を、ポーラロン効動度の理論式と比較することにより、一応三つともわかる筈だが、どの理論式を使うかによってかなり差異がでてくること、又 free carrier の赤外吸収、反射、Faraday 効果などから m^* と τ がわかること、サイクロトロン共鳴のピークとその巾から m_p （正確には tube mass）と τ が直接にわかる事などを、多くの実例で示し、又ピエゾポーラロン効果にもふれた。

次いで小林研で行なわれた CdS での電子輸送現象の研究が報告された。先づ小林は、ホール効果測定に際して実現される電荷電流分布が、伝導度の高い物質と低い物質とでは著しく異なる（夫々 steady state : $J_y = 0$ 及び transient state : $E_y = 0$ ）点を強調し、イオン結晶では、通常の半導体の時とは異り、外から E_y をかけ transient を steady にしてホール係数をはかる必要があることを説いた。この方法は、数年前小林、Brown 等が開拓し、ハログン化銀に適用したものであるが、今回藤田らによって報告された CdS の電子のホール効動度の温度依存性は、理論式と見事な一致を示す。高温側では光学モードによる散乱、低温側でピエゾ散乱が支配的であり、中間温度で変形ポテンシャル散乱が顔を出す。理論、実験の比較から求めた電子質量は $0.18 m$ で、他の測定とも consistent である。なお易動度や電流磁気効果

の異方性もはかられている。この種の実験でピエゾポーラロン効果がどの程度あらわれるかについて、理論家の検討も今後必要であろうと思われる。

最後に、ルビーレーザー光の二光子吸収による CdS での光電流を測定した大石等の実験の中間報告が行なわれた。

第3日午前、大坂がポーラロン理論の解説を行なった。場の量子論的手法や、Feynman の path integral 法など、実験家にはなじみの少ない箇所も、大坂は独得の直観的描像でわかりやすく説明した。ポーラロン易動度に関しては色々な計算が試みられていて、現在の所では、Osaka-Kadanoff の式が最もよいということになっているが、温度が光学モードの振動数と同程度になる所では、散乱過程にきてくる中間状態のとり扱いが難しいため、現存のどの理論も不満足であるという裏話もあった。このような裏話は、優秀な実験家を刺戟する筈である。理論家の泣き所を実験的におさえてしまうようなよい idea が出てきてもよいと思うのだが。

午後は、先づ河崎が、CdSb の電流磁気効果に関する系統的な研究結果を報告した。オーンドツクスな半導体的手法を駆使して、p- 及び n- 型 CdSb のホール係数、磁気抵抗効果の異方性をじらべ、それを説明するバンド構造として、many valley model、degenerate band model の種々の可能性を検討しているが、決定的な model は未だみつかっていない。

又、ホール易動度の温度依存性を T^{-n} であらわすと、n 型では $n \approx 1.5$ であるが、p 型では方向により $n = 1.02$ から 1.21 までの値をとって、単純な散乱でないことを示す。多くの未解決点を残しているが、この報告は、今度の研究会の一つの大きな収穫であったと思う。

真隅は、数年前イリノイ大学で行なった実験を中心として、ハロゲン化銀での光学的性質、輸送現象に関する詳しい解説を行なった。特に電子のドリフト速度が音速を超えた後は電流が電場の平方根に比例する、という現象は興味深い。その法則が成立する電場領域は極めて広く Ge、Si でみられるような hot electron の現象とはかなりちがつたものであろうと思われる。ポーラロンによる音響型格子波の Cerenkov radiation のようなものであろう、という漠然たる推定は行なわれているが、この法則を定量的に説明するような満足な理論はまだ出でていない。

中沢・神前は、KC1 の F 中心 L₁ バンドの光をあてたときの光電流の電場及び温度依存性をしらべ、これをホール易動度の温度依存性とも比較検討した結果、伝導電子生成の量子効率 η は温度や電場によらず 1 程度であり、Wild-Brown の結論 ($\eta \sim 10^{-2}$) は疑問である。

ることを指摘すると同時に、光電流の電場依存性は専ら伝導の非線型性によるものであると結論した。ドリフト速度が音速の数倍を超えた所から、広い電場領域にわたって電流が $E^{05} \sim 06$ に比例するという結果が得られているが、之は真隅がハロゲン化銀で見出した現象と非常によく似ている（同様な非線型現象は、小林らによってタリウムハライドでも見出されている）。なお神前らと同様の実験を F 光照射で行なった犬石らもコメントを行ない、窒素温度以上で Schubweg 効果を考える必要があることをのべた。

第4日午前、阿部は、イオン結晶の非線型伝導現象に関する理論的研究の、明快な現状分析を行なった。現象論的に、電荷分布と音波とにに対する連立運動方程式をたて、これを線型化して解くと、電子のドリフト速度 (v_d) が音速 (v_s) を超える所で、音波の減衰係数が正から負になって不安定性が起るということは確かに出て来るが、観測されるような非線型現象はこの方程式を線型化せずに解いてもでてこない。フォノン間の非線型相互作用を正確にとり扱うことが本質的に重要である。阿部は Klemens の熱伝導の理論を援用してこの相互作用を取り入れ、フォノン分布に対する Kinetic equation の解を球函数展開で解いて、 v_d が v_s より大きい所での電流と電圧の関係式を導いた。CdS では大きなピエゾ型電子格子相互作用のため $v_d \approx v_s$ となって実験と合致する。そこにあらわれるパラメーターの値がもっと小さければ、 $v_d - v_s \propto (E - E_c)^{\frac{1}{2}}$ となり、これで非ピエゾ型イオン結晶の非線型現象をうまく説明できるかも知れないが、ハロゲン化銀で、変形ポテンシャルの値と実際の平均電子密度を入れてパラメーターを計算した結果では、やはり $v_d \approx v_s$ となってしまい、問題は残る。

午後は武藤が研究会全体の resume' を行ないながら感想をのべたが、その中で、固体のバンド構造論の現状を、原子核における shell model 形成の時期と比較した条など興味深かった。この後豊沢の司会で、研究会で出された幾つかの問題点をめぐり自由討論が行なわれた。そこでの討論は、或る程度上記の各報告の部分に織りこんだつもりであるから、省略させて頂く。

総じてどの解説も研究報告もよく充実しており、討論も極めて活潑であった。色々な知識を吸収し得たという喜びもさることながら、今後解決しなければならない難問の数々により大きな刺戟を感じさせられる、そのような研究会であった。

「超電導」研究会

菅原忠、大塚泰一郎、中嶋貞雄

1965年1月28～30日 於 物性研

世話人 中嶋貞雄 大塚泰一郎 菅原忠 安河内昂

この研究会は63年秋の「これから超電導」に続く第2回であり、最近急増した日本の超電導研究者（但しあたり基礎研究にかぎる）の接触をふかめ、かならずしも米ソの流行を追わず、特色あってしかも一流の研究を助長したい、という目的は前回とおなじである。前回は研究計画の紹介と問題点の討論が主であり、今回はその後一年の進歩をチェックするために開かれた。

世話人の主観的判断によれば、全体としてはなほ今後の発展にまつものが多いが、しかし報告された成果のいくつかは、予想以上に高いレベルに達していたとおもわれる。とくに、第2種超電導体に関して真木・都築のすぐれた理論的研究があらわれ、Abrikosov 構造がふたつのパラメータ κ_1 、 κ_2 で記述されることがあきらかにされ、その温度変化が予言されたばかりでなく、これをチェックする実験もいちはやく行なわれた。この実験のひとつは、在来の抵抗測定や磁化測定ではなく、magnetocaloric 効果を利用して直接バルクな性質を測ったものである。またその際利用された高純度Nb の試料は、前回の研究会で予告され、その後に物性研で作られたものである。前回の宿題のひとつであったAbrikosovの混合状態における電子素過程の実験も、高純度 Nb 試料について超音波吸収・トンネル効果が測定され、一応の解析も行なわれているし、前回は議論されなかつたNMRの実験もはじまつた。なお Nb のトンネル効果については、正常状態におけるその異常性が Bell の Wyatt とは独立に発見されたこと、またこの異常性が Nb の超電導状態にも影響しているかもしれないこと、が今回の研究会で指摘された。前回の研究会のもうひとつの宿題であった不均一硬超電導体における transport current のメカニズムについても、今回かなり明快な回答があたえられ、問題は均一系の電流、磁束量子の相互作用に移ろうとしている。

以上のような発展をみると、『借り物』や『真似事』でない研究の成長という目的は必ずし

も空想でないと判断してよいようにおもえる。今回はまだ確定した結論でのなかつ不純物効果その他についても、次の機会にはかなり突込んだ成果が期待される。—これは世話人の我田引水であろうか。

以下、テーマ別に報告の概要をのべる。

1. 半導体・半金属・その他

御子柴宜夫（電試）、縮退半導体の超電導に關し、主としてCohenの理論的解析を綜合報告し、 GeTe や reduced SrTiO_3 等についての実験結果を報告。

これに関連して、 $\text{Sn}_1\text{As}_{1-x}$ が $x=0 \sim 0.05$ で 3.5°K 、grey Sn + Hg + Ge が約 5°K 、 $\text{InBi} + \text{InSb}$ の heterogeneous mixture が $3 \sim 4^\circ\text{K}$ で超電導になるらしい、というコメントがあつた。

いまのところ超電導を示すのは、あまり素直でない半導体ばかりである。

箕村 茂（物性研） 高圧下あるいは高圧で結晶変態を行なわせたのち圧力を除いて高圧型を保持できる物質の超電導につき、技術上の問題点、海外でえられている結果を紹介した。例は $\text{In}-\text{Sb}$ 、 $\text{In}-\text{Te}$ 。また Ge 、 Si に圧力を加えると変態がおこり、 Si に数万気圧加えて、液体窒素で圧力 quench する試みも紹介。

2. 遷移金属、合金、金属間化合物

請井一利（東北大金研）、 NbB_2 、 $(\text{Nb} - \text{Mo})\text{B}_2$ は層状構造をもち、正常状態で面白い性質を示すので、超電導の可能性を電子比熱、磁気測定でしらべてみた。 NbB_2 は超電導にならないが、Mo 約 13 at % は帶磁率、電子比熱が $2 \sim 3.4^\circ\text{K}$ で異常を示す。但し超電導状態といふ断定は下せなかった。

佐藤武郎（東大理） La 、 Y の相異を、構造の同一な金属間化合物の比較によってさぐろうとし、 T_c の従来のデータ、再測定値、電子比熱の測定値を整理した。また CoSi_2 ($T_c = 1.23^\circ\text{K}$)、 NiSi_2 の比熱を測定し、 NiSi_2 が 0.1°K まで超電導を示さないのは、状態密度の差として理解できることを指摘した。

大塚泰一郎（物性研） 全域固溶で一成分が磁性を示す $\text{V}-\text{Cr}$ 合金について、 T_c と比熱を測定し、超電導をひきおこす有効相互作用の大きさと状態密度との相関をしらべた。従来のデータから、 $\text{Cr } 10 \text{ at \%}$ のあたりで T_c が 0 になると予想したが、実際には $\text{Cr } 20 \%$ で

もなほ $T_c \sim 1^\circ K$ であり、もっと高濃度まで実験が必要であり、結論はまだ出せない。

青木亮三、大塚泰一郎（物性研） Al に 3d 遷移元素 (V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni) を微量添加したときの T_c の変化を測定した。mean free path effect による T_c の減少は非遷移金属を添加したときとほどおなじ。さらに高濃度では、 T_c の減少は残留抵抗に比例するが、比例係数は Cr のあたりで負から正に変る。これと Friedel のいう局在準位との関係を追求することが目的であるが、今後の検討がなお必要である。

太刀川泰治（金材研） 超電導材料開発の基礎的データのひとつとして、予め線状にした Nb に Sn を拡散させるばあい、その進行状況、および各段階であらわれる金属間化合物 (Nb_4Sn , Nb_3Sn , Nb_2Sn 等) を、顕微鏡、X線マイクロプローブアナライザ等によって観察し、また各相の超電導特性を測定した。

3. 第二種超電導体

都築俊夫（京大理） 第二種超電導体の混合状態を、磁場は upper critical field H_{c2} に近いが温度は一般的のばあいについて、Gorkov 方程式を変分法的に解いてしらべた。従来の (T_c に近い温度を考える) Abrikosov 理論とちがって、 H_{c2}/H_c をきめるパラメタ κ_1 と H_{c2} における $\delta M/\delta H$ をきめるパラメタ κ_2 とが一致せず、Ginzburg-Landau の κ とちがう。pure limit では $\kappa_2(T) \geq \kappa_1(T) \geq \kappa$ 、 $\kappa_1(0)/\kappa_1(T_c) = 1.25$ $\kappa_2(0) = \infty$ であり、dirty limit では $\kappa_1(T) \geq \kappa \geq \kappa_2(T)$ 、 $\kappa_1(0)/\kappa_1(T_c) = 1.20$ となる。また $1.01 > \kappa > \sqrt{2}/2$ のときには、第三種とでもよぶべき特異な磁化曲線があらわれる。最近 Serin 等 (P. R. L. 21, 365, 64) が pure Nb の H_{c2} における比熱のトビを温度の関数として測定し、Abrikosov 理論とくいちがうことを見たが、この結果は真木・都築の理論的予言と一致している。

津田雅雄、鈴木平（物性研）、浅見直人（三菱原子力） 電子ビーム溶解、gone melting (単結晶化)、超高真空 ($10^{-9} mm Hg$) 焼純で作製された高純度 Nb について、磁化曲線とトンネル効果を測定した。 $1.5 \sim 3.0 G sec^{-1}$ で磁場をスイープすると dB/dH が、 H_{c2} でピークを示したが、試料の純度を上げると消失した。

これは電気抵抗のピーク効果と同様の原因であろうというコメントがあった。トンネル効果は bulk Nb-Al junction で測定され、混合状態では、定性的には理論的予想と一致する磁場依存性がえられた。しかし定量的な抵抗の大きさは理論よりずっと小さく、エネルギー・ギヤ

ツプも他の方法による測定値より小さい。これらの事実は、正常状態におけるトンネル効果の異常 (Wyatt) と関係があるらしいが、詳しい解析は今後の問題である。

生嶋 明 (阪大基礎工) 前述の試料と同様の高純度Nb (抵抗比約1000)について、 $90\text{ Mc} \cdot \text{sec}^{-1}$ の超音波吸収を測定した。磁場がないときの吸収係数 α は、従来より報告されたような微細構造を示さないが、BCS理論からの系統的差がみとめられた。 $24(0^\circ\text{K})$ $1\text{kT}_c \approx 3.3$ 。混合状態における α の磁場依存性は、吸収をきめる平均ギャップ $\langle A \rangle$ がオーダ・パラメタ、したがって磁化の、平方根に比例するという単純なモデルと定性的には一致するが、定量的にはくいちがう。 $\langle A \rangle^2$ は混合状態全域で $H_{c2} - H$ に比例することがわかったが、これは Abrikosov 理論を一般の磁場のばあいへ拡張する手掛りのひとつともわれる。

大塚泰一郎 (物性研) 前二項とおなじ高純度Nb 単結晶について magnetocaloric 効果、つまり磁場の断熱変化にともなう温度変化を測定した。高純度第二種超電導体の混合状態では、この効果が可逆的におこるので、定量的解析が可能である。実際この解析により、 H_{c2} における転移が二次であることが証明でき、また、 $\delta T / \delta H$ 、比熱、 $H_{c2} - T$ 曲線の測定値を組合せることによって、 $(\delta M / \delta H)_{T_s}$ が熱力学的に算出できた。磁化曲線の外挿や、抵抗測定を利用する従来の方法にくらべると、この方法は表面効果にわずらわされることなく直接 bulk の値を求めうることが特長であり、また比熱測定よりはるかに簡単であるために、多くのデータを求めうるのが利点である。

測定された $\delta M / \delta H$ から求めた κ_2 は κ_1 にくらべて温度の減少とともに急激に増大し、真木・都築理論と定性的に一致するし、また Serin らの比熱測定の結果と数値的に一致している。しかし、 $H_{c2} - T$ 曲線からもとめた κ_1 は、Gorkov の理論値、真木・都築の理論値と定量的なくいちがいを示している ($\kappa_1(0) / \kappa_1(T_c) \sim 1.7$)

渋谷喜夫 (九大理) Clogston の指摘した Pauli 常磁性の H_{c2} への影響を、Goodman の層状モデルによって計算し、 $V - T_i$ 系のデータをかなりよく説明できることを示した。このモデルは数学が易しいといいう利点がある。

青峰隆文 (九大理) Sn - In 系の磁化曲線、磁場侵入度を測定した。In 3.07 at % で第二種の特性があらわれている。磁化を T_c のごく近傍で行うと、 H_c 、 H_{c1} 、 H_{c2} が異った T_c に外挿される。渋谷は T_c 附近で侵入度が長くなるため、反磁場が重要であると強調したが、他方、外挿値の不一致は試料の不均一によるものであろうというコメントがあった。

馬宮孝好（東北大金研） In — 5 at % Pb の熱伝導度を混合状態で測定し、Rutgers group の In — Bi 系と同様の磁場依存性をえ、同様の解析によつて $\langle d \rangle^2$ が $H_{c2} - H$ に比例することを示した。La についても熱伝導度、磁化曲線を測定し、第二種的なるまいをみとめたが、二相共存や不純物の問題があつて、La が intrinsic type II とは断定できない。

能登宏、武藤芳雄、袋井忠夫（東北大金研） In — 5 at % Pb の磁化曲線を測定した。 κ_1 の温度変化は Gorkov 理論に近い。抵抗測定からもとめた H_{c3} は H_{c2} の 2.7 倍程度であり、理論値よりかなり大きい。Pb 3.7 %あたりで Type I から Type II への転化がおこる。小笠原武、安河内昂（日大理工） 転位、析出物等の不均一性をふくむ第二種超電導体の磁化過程、transport current が、従来のデータ、モデルに日大グループの詳細な実験を加えて、明快に説明された。磁化過程の問題は、不均一中心が fluxoid line を pin down する力 F_p と、line density の勾配によつて生じる磁気的な力 F_m との釣合、つまりいわゆる臨界状態の方程式がどうなるかに帰着する。たとえば単純な Lorentz 力モデル $J_B = \text{const.} K_i m - Anderson$ の $J(B + B_0) = \text{const.}$ のほかに、安河内らの提案した $J/\sqrt{B} = \text{const.}$ がよく成立つばあいもある。

Net transport current I があるばあいにも、これが外場に直角ならば、試料内の B の分布を適当にシフトさせて非対称にすれば、複雑な実験結果がうまく説明できる。 I が外場に平行なばあいは未解決である。また pinning force そのものの本質、その磁場依存性はまだ研究不十分である。

さらに、均一な第二種超電導体における fluxoid line の運動、その dissipation のメカニズムは、今後に残された研究課題である。

4. 磁気的不純物

鈴木増雄（東大理） 局在磁気能率 κ_c に関する Anderson のハミルトニヤンにて導電子間の pairing force を加え、Green 関数の階級方程式を適当に打切つて、局在能率の存在が T_c をつねに引下げるという結論を導いた。理論的には、通常の sd モデルから Anderson モデルまでさかのぼる必要がどこにあるかといふ質問がでた。また $T_i - F_e$ 系の T_c の上昇については Matthias の実験に疑義のあることも指摘された。

菅原 忠（物性研） 稀土類金属をふくむ La の稀薄合金について、電気抵抗と T_c の減少を

測定し、残留抵抗と ΔT_c とに比例関係があることを指摘した。しかし、抵抗に近藤理論を適用してえられる $s-f$ 交換積分の値と、 ΔT_c に Suhl-Mathias 理論を適用してえられる値との間には系統的なくいちがいがある。

武藤芳雄、能登宏、袋井忠夫（東北大金研） $Zn-Mn$ 系、 $Sn-Mn$ 系の局在スピンによる T_c の減少を磁気的方法で測定した。 $Zn-Mn$ 系のはあい $dT_c/dc \sim 174^\circ K/at\%$ Mn で、Boato の結果と一致した。 $Sn-Mn$ 系でも T_c のわずかな減少がみとめられたが、このばあい固溶体かどうかに疑問がある。

5. NMR

朝山邦輔（阪大基礎工）、益田義賀（神戸大理） T_i-V 、 N_b-V 、 N_b-Z_r 、 Nb_3Sn 、 Nb 等の混合状態における NMR の T_1 が測定された。その温度依存性は、定性的には第一種のはあいと同じであり、定量的な差は、混合状態におけるエネルギー・ギャップの低下で説明できそうである。幅の測定も行なわれているが、まだ十分でない。

同様の測定は、 $Ti-V$ 、 $V-N$ について 久米（物性研） も行っている。

中嶋貞雄（物性研） 混合状態における NMR の幅のうち、磁場の不均一性によるものは、 $\kappa \gg 1$ の硬超電導体では $H_{c1} \ll H \ll H_{c2}$ で、また一般の第二種超電導体では H_{c2} の近傍で、理論的に計算できる。たとえば後者のばあい、 $(\Delta H)^2$ はオーダ・パラメタの四乗平均に比例する。したがって、幅の磁場依存性が測定されれば、トンネルや超音波とならぶひとつのデータになる。

（この報告は、菅原、大塚、中嶋のノートによるものですが、最終的文責は中嶋にあります）

「原子・分子の波動函数の改良」研究会

石 黒 英 一

上記の研究会が昭和40年2月2日、3日の両日にわたって行なわれた。案内を出したのは68名、出席者は89名、そのうち大学関係が77名、残りが国立研究所、民間研究所関係であった。プログラムは次の通り。

第1日

はじめのことば	石 黒 英 一 (お茶の水大)
1. 電子の相関についての Sinanoglù の理論	土 方 克 法 (電 通 大)
2. Hartree - Foch の方法と電子間相関	藤 永 茂 (九 大 教 養)
3. 改良原子軌道による分子の電子状態の計算	細 矢 治 夫 (物 性 研)
4. Sternheimer 効果について	鳴 海 元 (広 島 大 理)

第2日

5. 化学結合の本質	大 旗 淳 (九 大 教 養)
6. π 電子理論	大 野 公 男 (北 大 理)
7. L C B O 法による質量スペクトルの解釈	広 田 鋼 藏 (阪 大 理)
8. Some Electronic Aspects of Electron Scattering from Atoms and molecules with Fast Electrons	R. A. Bonham (東 大 理)
9. 散乱状態の波動函数の改良	大 村 充 (日 大 理)
10. まとめ	荒 木 源太郎 (京 大 工)

個々の話の内容については、名講演者に簡単な要旨をかいて貰ったので、それにゆづる。特に文献等も詳しくあげて頂いたものもあるので、詳しくしらべたいむきには便利かと思う。また内容に質問のある方は、直接それぞれの項の著者に遠慮なく連絡されたい。

本研究会の主題は、原子・分子内電子がどういう風に相関しているかを、いろいろの角度からながめて見ることであった。ここで取り上げられなかつた現象でも相関と密接に関係のある事項は勿論たくさんある。しかし少くともここで論じられた項目だけですら、同じ対象が見方

によっていかに異った解釈をつけうるものかに驚かざるを得ない。(例えば、5.と8.の講演)

この会の雰囲気は10.で荒木先生がのべられたように、まことに和やかなものであった。また2月2日の晩は、渋谷銀杏荘で懇親会が開かれ、約60名が集まり盛会であった。また2月3日の晩は、原子・分子計算グループの連絡会がもたれ、種々の情報交換、意見発表があり、有益であった。以下、講演要旨をのせることにする。

1. 電子の相関についての Sinanoglu の理論 電通大 土方克法

主として次の三つの論文の内容を紹介した。

- Sinanoglu, Many—Electron Theory of Atoms and Molecules. I. Shells, Electron Pairs vs Many—Electron Correlations. *J. Chem. Phys.* 36 706 (1962).
- Sinanoglu, Many—Electron Theory of Atoms and Molecules. II. *J. Chem. Phys.* 36 3198 (1962).
- Sinanoglu, Many—Electron Theory of Atoms and Molecules III. Effect of Correlation Orbitals. *J. Chem. Phys.* 38 1740 (1963).

この一連の仕事の目的は原子・分子内ではどのような種類の相関が重要であるかを吟味し、 H_2 や He でなされたと同じ程度の正確な計算を N 電子系で行なう際の方針を定め、更に相間を考慮したときに通常の化学的なイメージ、半経験的な理論、閉殻構造等はどうなるかを検討するにある。

先ず相間が問題になるのは核内の核子の間金属内の電子の間等があるが、原子・分子内の電子の相間は(1)その対称性、(2)Pauli の原理、(3)核による引力に影響されるために、Short range でのみ顕著な影響があることが予想される。この事について、相間エネルギーの式を求めて検討している。

波動函数の厳密な形は、

$$\Phi_{HF} + A \{ (1. 2 \dots N) [\sum \frac{\hat{f}_i}{(i)} + \frac{1}{\sqrt{2!}} \sum \frac{\hat{U}_{ij}}{(ij)} + \frac{1}{\sqrt{3!}} \sum \frac{\hat{U}_{ijk}}{(ijk)} + \dots \dots \\ + \frac{1}{\sqrt{N!}} \frac{\hat{U}_{12\dots N}}{(12\dots N)}] \}$$

であらわされる。 Φ_{HF} は HF の波動函数であるから [] 中の第一項は甚だ小であり、第三の論文は主としてこのことを数値的に確かめている。相間の Short range 性より、三体以上の同時的相間の影響も小さく、上の波動函数は結局二体相間のみに關係した函数

$$\Phi_{HF} + A \{ (1, 2, \dots, N) \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \sum \hat{u}_{ij} + \frac{1}{2} \sum \frac{\hat{u}_{ij} \hat{u}_{kl}}{(ij kl)} + \dots \right] \}$$

で充分よく近似され、更に [] の中の第一項と第二項の大きさが比較されて、結局、

$$\Phi_{HF} + \frac{1}{\sqrt{2}} A (1, 2, \dots, N) \sum \frac{\hat{u}_{ij}}{(ij)}$$

を取ればよいという結論である。

この近似の下で π 電子理論の妥当性を論じ、 \hat{u}_{ij} の Effective Schrödinger Eq. を求め、個々の pair の独立性が強調される。そして最後に具体的に相関波動函数と相関エネルギーを取り扱う諸方法が、個別的に述べられている。

相関の問題は原子・分子の分野に於ては宿命的なものであり、何時かは解決されねばならないが、この仕事はその解決に向って正しい一步を踏み出したものであると思う。

2. Hartree-Fock の方法と電子間相関 九大教養 藤 永 茂

1 Hartree-Fock 法

この数年間の話題としては、(a) LCAO の考え方を一步進めた展開法 (Hartree-Fock-Roothaan 法) による、多数の原子・分子の Hartree-Fock 解の計算、(b) Open-shell 電子配置の場合の取扱い方法の進歩がまずあげられる。

(b)においては、いわゆる unrestricted Hartree-Fock (UHF) 法の使用が盛んに行なわれているが、波動函数として、ただ一つの Slater 行列を用いるという制限のため、計算結果の物理的解釈の際には慎重さが望まれる。過去に慣用された方法は restricted Hartree-Fock (RHF) ともよばれるが、ここでは coupling operator とよばれる数学的テクニックを用いて、off-diagonal な Lagrange 乗数を取扱う方法が確立して、広汎な open-shell 系を取扱えるようになった。

2 電子相関

correlation energy E_c の定義としては、

$$E_c = E_{exp} - E_{rel} - E_{RHF}$$

がとられる事が多い。 E_{exp} は全エネルギーの実験値、 E_{rel} は相対論的補正、 E_{RHF} は RHF による全エネルギーである。最近原子について多数の E_{RHF} が計算され、それを用いて、 E_c の系統的計算が行なわれ、そこから correlation energy を推定、考察する場合の

経験的なルールを見出す努力がなされた。その応用として、negative ions の安定性の問題、分子の結合エネルギーの、精度のよい推定などが試みられている。

一方 Hartree—Fock 解を一つの足場として、更によく電子相関を取り入れる理論的試みも盛んに行なわれるようになつた。Sinanoglu の仕事、geminal の考え方などがその例である。なお、相対論的效果を Hartree—Fock 法に正しく取入れる事が今後の一つの重要な課題になると思われる。

3. 改良原子軌道による分子の電子状態の計算 理研 細矢治夫

1 改良又は展開原子軌道 原子軌道 (AO) をいわゆる Slater 型 STO $r^{n-1} e^{-\zeta r}$ (n : 主量子数 ζ : 有効核荷電) に選んで原子の全エネルギーを最低にするように ζ についての変分操作を行なうと、実測の 9.9.2 ~ 9.9.4 %まで説明される。Hartree—Fock の自己無撞着場 (SCF) の方法によって数値的に表わされた AO を使うと 9.9.6 %まで改善される。Roothaan¹⁾ 等は最近系統的に STO の一次結合によって解析的にはこの SCF AO を再現したところ、2 項展開でほど十分であることがわかった。しかし 9.9.6 %以上の改善は電子相関、相対論的な補正を考慮しなければ得られない。以下は紹介するのは、この展開 AO を使って実際に分子の電子エネルギーを計算した論文^{2-7; 10}である。

2 Optimization の方法 分子軌道を

$$\text{molecule atom } \sum_i \sum_k C_{ik} r^{n_{ik}-1} e^{-\zeta_{ik} r} Y_{ikl}^m (\theta, \varphi)$$

で表わし全エネルギーが最低になるように、C、n、 ζ を optimize することは非常に困難であるので種々の便宜的な方法がとられている。

No optimization 原子について最良の C、n、 ζ の組を選んで、それを一つの AO として通常の SCF LCAO MO を求める。

partial optimization MO の中で一部分の ζ を固定し、主に価電子の ζ を C と共に変える。

complete optimization 全ての C, ζ を変える。しかし n の値は他の場合と同様に整数にとる。

angular distortion d 電子を加えて分子内での電子雲のひずみを考慮する。この効果がかなり大きいということは予想されていたが重要な結論である。

3 結果の解説 これまでに J. Chem. Phys. に発表されている 2 原子 分子 (H_2 を除く) の代表的な計算例は次のようなものである。

分子	電子数	S T O の 数	全エネルギー	原子エネルギーの和	結合エネルギー	文献
LiH	4	12	99.34(%)	99.43(%)	89.3(%)	2
HF	10	16	99.58	99.60	66.68	3
LiF	12	20	99.52	99.59	67.87	4
N ₂	14	24	99.44	99.61	48.91	5,6
CO	14	24	99.45	99.59	65.05	6
B F	14	24	99.49	99.58	67.89	6
F ₂	18	28	99.55	99.60	負 値	7

ここで分子の全エネルギーは、構成原子エネルギーの和よりも必ず精度が悪く求まっている。100%からのはずれを電子相関のエネルギーに帰すると、この差だけ、分子では原子の時よりも多くの相関エネルギーを持つことになる (molecular extra correlation energy)。これを結合次数で割った値は、種々の分子についてほど一定である。解離エネルギーや結合エネルギーは全エネルギーの 1 % 弱であるから実測との一致は悪い。又核間距離 R を変えてエネルギーを計算しポテンシャルエネルギー曲線を求めているものもあるが、平衡点附近の曲率は実測よりも大きく、平衡核間距離は短かく求まる。これは R の大きい所で他の配置間との相互作用の大きいことと関係している。その他種々の量が求められ議論されている。

軌道エネルギー E はイオン化エネルギー I に負号をつけた値に等しいといふ Koopman の定理を使うと、 $-E_{HF} > I_{obs.} > E_{Slater}$ という関係がほとんど例外なく得られる。 E_{HF} は展開 S T O を、 E_{Slater} は単項の S T O を使って求めた値である。励起状態についての計算がないので、励起エネルギーは求められていない。

他に、分子全体の波動函数を一中心について展開した計算例。⁸⁾ A O として $ganz$ 関数 $r^n e^{-ar^2}$ を使った例などがあるが省略する。⁹⁾

4 π 電子系への応用 不飽和化合物の電子状態を、 σ 電子から切り離した π 電子だけによって表わす近似計算があるが、松下等¹⁰⁾ は展開 S T O を用いて種々の分子積分を計算した。その結果一中心のクーロンの反振積分 $\int \chi^2(1) \frac{e^2}{r_{12}} \chi^2(2) d\tau_1 d\tau_2$ は単項の S T O から求めた

値よりかなり小さいことがわかった。

エチレン分子等へ応用した結果も合わせて電子相関について種々の知見が得られた。

1. C.C.J.Roothaan, L.M.Sachs, A.W.Weiss, Rev.Mod.Phys., 32, 186 (1960); E.Clementi, C.C.J.Roothaan, M.Yoshimine, Phys.Rev., 127, 1618(1962); C.C.J.Roothaan, P.S.Kelly, ibid., 131, 1177(1963); E.Clementi, J.Chem.Phys., 38, 996(1963); E.Clementi, A.D.McLean, Phys.Rev., 133, A419 (1964).
2. S.L.Kahalas, R.K.Nesbet, J.Chem.Phys., 39, 529(1963).
3. E.Clementi, J.Chem.Phys., 36, 33(1962); R.K.Nesbet, ibid., 36, 1518(1962).
4. A.D.McLean, J.Chem.Phys., 39, 2653(1963).
5. J.W.Richardson, J.Chem.Phys., 35, 1829(1961).
6. R.K.Nesbet, J.Chem.Phys., 40, 3619(1964).
7. A.C.Wahl, J.Chem.Phys., 41, 2600(1964).
8. B.J.Waznick, J.Chem.Phys., 40, 2860(1964); R.Moccia, ibid., 40, 2164, 2176, 2186(1964).
9. M.C.Harrison, J.Chem.Phys., 41, 499(1964); R.K.Nesbet, ibid., 32, 1114(1960); M.Krass, ibid., 38, 564(1963).
10. T. 松下、H. 細谷、S. 長倉、分子の電子状態討論会、東京 (1964)。

4. Sternheimer 効果について

鳴 海 元

Sternheimer 効果については、1950 年以来問題となっているが、⁽¹⁾ まだ何かすつきりしない所がある。原子の場合、核の位置での電界の傾斜 q は、殻電子のわずかの歪みに強く影響される。価電子の存在により、殻電子がひずむことによる q の補正を Sternheimer 補正という。この補正を計算するのに、二つの方法がある。

一つは、電子の殻構造を仮定せず、完全な原子内電子の波動函数を求め、 q を計算する。この q と Hartree — Fock の解から求めた q との差をとる方法である。この方法は原子の正確な

波動函数を求めるのが難しいので困難であるが、もし出来れば、第二の方法の結論を判定するきめ手となる。

第二の方法は、適當な摂動計算をする方法である。Sternheimer の原論文はこの流儀のもので、相当大きい補正 (A1 で約 30 %) が必要となる。しかしこの計算に対する批判もある。⁽²⁾⁽³⁾

- (1) R. M. Sternheimer, Phys. Rev. 80, 102 (1950), 84, 244 (1951), 86 316 (1952), 95 736 (1954)
- (2) C. Schwartz Phys. Rev. 99, 1035 (1955), 105, 173 (1957),
- (3) L. C. Allen Phys. Rev. 118 167 (1960)

5. 化学結合の本質

(九大教養) 大旗 淳

最近の大型電子計算機の発達と共に分子の電子構造に関する精密計算の分野の進歩も著しい。その結果は勢い複雑になり、過去における素朴な化学結合の概念が通用しなくなつた。従って精密な計算の結果の分析は正しい化学結合の本質の解明に必要であるばかりか正しい半経験的方法の開拓への指針も与えるであろう。

2 原子分子の正しい波動関数はビリアル定理を満す。即ち次の関係式が成立するはずである。

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{運動エネルギーの平均値} \equiv T = -E - R \cdot \frac{dE}{dR}, \\ \text{位置エネルギーの平均値} \equiv V = 2E + R \cdot \frac{dE}{dR}, \end{array} \right.$$

ここで E は分子の全エネルギー、R は核間距離である。従って平衡点では $T = \frac{1}{2} |V|$ となるはずである。H₂ に対する Heitler-London 法による波動函数が上の条件を満すには程遠いものであることは Slater の本¹⁾ にも示されている通りである。しかし、変分をとれば、波動函数は、R の小さいところで、各原子核のまわりに収縮し、上の条件を満すようになる。

このことは 2 つの原子が近づき化学結合ができるためには各原子の電子分布が収縮することが重要であることを示していると考えられる。

Ruedenberg²⁾ は H₂ 分子の結合エネルギー (E^B) を次の 5 つの部分に分けて考えた。

$$E^B = E^P + E^{CL} + E^{SP} + E^{II} + E^{III},$$

ここで E^P は上述の電子分布の原子核近傍への収縮による各原子の昇位エネルギーの和、E^{CL} はここでは昇位した状態にある 2 つの中性 H 原子間の相互作用エネルギー、E^{SP} は各原子の

電子数は変わらないが各電子の原子への配属が確定していないために生ずるエネルギー変化。

E^I と E^{II} は接近する 2 つの電子分布が重なり干渉する、即ち、原子状態から分子状態へ移るとき、原子核近傍から結合領域へ電子分布が移動するために生ずるエネルギー変化である。Weinbaum³⁾ の計算を用いると、上述の各項のうち E^I が化学結合を与える最も重要な項であることがわかる。更にこの項を詳細にみれば運動エネルギーの減少の寄与の大きいことを知る。

結局、形成された分子で各原子核の近傍では電子分布が自由な原子のそれと異なり一般に収縮、配向が起り、結合領域では電子分布の堆積が起る。化学結合は特に後者による運動エネルギーの減少に起因すると考えられる。

- 1) J. C. Slater, "Quantum Theory of Molecules and Solids", vol. 1 (McGraw-Hill Book Co. Inc., New York, 1963), P.57.
- 2) K. Ruedenberg, Revs. Mod. Phys. 34 326, (1962).
- 3) S. Weinbaum, J. Chem. Phys. 1 593, (1933).

6. π 電子の理論

北大理 大野公男

現在まで π 電子系について夥しい数の計算が行なわれて來たが、それ等を大別すると、次の 5 つに分類することができるかと思う。

- A 自由電子模型
- B Hückel の分子軌道法
- C Pariser-Parr-Pople の方法
- D 非経験的分子軌道法
- E 新しい計算方法

これ等 π 電子の計算における一つの根本的な仮定は $\sigma-\pi$ separation assumption、つまり σ 電子雲は核と共に π 電子に対するポテンシャルを供給しているに止まって 電子自身が変化することは普通の現象を考える際には無視してよいという仮定である。

A はその模型の簡単さが魅力であるが、やや複雑な分子を扱うのには限界があるようである。

B における基本的仮定は、多電子系の Hamiltonian が

$$H(1, 2, \dots, n) = \sum_{i=1}^n h_{eff}^{(i)} \quad (1)$$

という形に書かれるということで、これを用えば問題は、 $h_{eff}^{(i)} \psi_i = \epsilon_i \psi_i$ という一電子問題を解くことに帰着する。この方法も簡単であるために広く各種分子に半経験的に使われ、相当

の成果をあげて来たが、問題は(1)式を満足するような h_{eff} が見つけられないという点にある。

D はベンゼンに対する Mayer-Sklar の計算から出発したもので、最も正々堂々とした方法である。現在、エチレン、ベンゼン等の極めて詳しい計算が行なわれているが、難点は多重心積分の評価等が極めて厄介であり、然も励起エネルギーなど計算結果の実験との一致が決して良いとは言えないことがある。

C はより簡単で、より実験との一致が良い計算方法として 1953 年に提唱されたもので、それに含まれている仮定の意味、パラメータの統一的な選び方など活潑な研究の対象になっている。かなり複雑な異種環式化合物の電子構造を扱うのに、現在ある方法の中で最も有力なもの一つである。

新らしい計算方法として筆者の目にとまったものの一つは、

A. Herzenberg, D. Sherrington & M. Suveges の "Correlation of electrons in small molecules" と題する論文で、Proc. Phys. Soc. の 1964 年の 10 月号にのっているが、核における giant dipole resonance の理論を分子に対して使っている。もう一つは J. Linderberg & Y. Ohm による "Improved Single-Particle Propagators in the Theory of Conjugated System" と題する論文で、プレプリントとして送られて来た。Double-time Green function の方法をエチレン、ベンゼンに適用して、三つのパラメータを使って実験と非常に良く合う励起エネルギーの値を得ている。

7. L C B O 法による質量スペクトルの解釈

廣田 鋼 藏

質量スペクトルの理論として、Eyring らの統計理論以外に、L C B O-MO 法とでも命名すべきものがある。この方法では、質量スペクトルの各線に対応するイオンは、電子衝撃により一次的に生成する親イオンが、次の条件のもとに、二次的過程で生ずると仮定する。"親イオンの或る結合の切断破率は、元の分子の H-O 準位にある電子のその結合における電子密度に比例する。"

この方法は Hall¹⁾ により、I.P. の算出に利用されて以来、この方面への応用は広がっているが、これを質量スペクトルの解釈に適用したのは、10 年前に $n-C_8H_{18}$ に対する試験的発表²⁾ と、さらにこれを多くの n -パラフィン系炭化水素に拡張した研究³⁾ 位である。その際の MO は Hückel 近似の程度で算出し、C-C の α と隣接 C-C 間の β とは I.P. から決定した。しかし理論値は実測値とよく合う成果を得た。

最近、上記方法を 電子以外の結合様式をふくむ n -メチルブチルケトンなどの不対称ケトンに適用すると、やはり実測値とよく合うことが判った。⁴⁾ この際には、新たに $C=O$ の α とその $C=O$ に隣接した $C-C$ との β をもきめる必要がある。新たにこの二つのパラメーターの選定により、計9ヶの不対称ケトンの MS が充分に説明できた。

最初の発表以来、本法には幾多の批判^{5), 6)} がある。ことにケトンの場合には、MOを構成する基底の結合軌道がいかなるものを意味するかなど、いくつかの問題点が残されている。

- 1) G.G. Hall, Proc. Roy. Soc., A205, 541 (1951); Trans. Faraday Soc., 49, 113 (1953).
- 2) R. Thomson, "Applied Mass Spectrometry", (1954) p. 154 (The Inst. of Petrol. Inst., London).
- 3) 笹木、広田、日化、 81, 212 (1961).
- 4) 畑田、広田、 Bull. Chem. Soc. Japan, 38, 4月号 (1965); 日化、 85, 3月号 (1965).
- 5) N.D. Coggeshall, J. Chem. Phys., 30, 505 (1959).
- 6) G.B. Lester, "Adv. in Mass Spectrometry", Vol. 1 (1959). p. 287.

Some Electronic Aspects of Electron Scattering From
Atoms and Molecules with Fast Electrons.^{†*}

R. A. Bonham

Department of Chemistry, Faculty of
Science, The University of Tokyo
Bunkyo-ku, Tokyo, Japan
and

Department of Chemistry, Indiana University,
Bloomington, Indiana

† Contribution number 1275 from the Chemical Laboratories of Indiana University.

* The author wishes to thank the U.S. Educational Commission in Japan for a Fulbright award.

The differential scattering cross section for the total scattering of fast electrons from atoms in the first Born approximation can be written as (1)

$$I_T(s) = 4(Z - F(s))^2 / (a_0^2 s^4) + S(s) / (a_0^2 s^4) \quad (1)$$

where

$$S(s) = Z - F^2(s) + \sum_{i \neq j=1}^z \sum_{i \neq j=1}^z \langle \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_z) e^{is \cdot \vec{r}_i} \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_z) \rangle \quad (1.1)$$

and

$$F(s) = \sum_{i=1}^z \langle \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_z) e^{is \cdot \vec{r}_i} \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_z) \rangle \quad (1.2)$$

For the case of elastic scattering from atoms the intensity is given as

$$I_E(s) = 4(Z - F(s))^2 / (a_0^2 s^4) \quad (1.3)$$

Bartell and Gavin (1) have pointed out that by experimental measurement of the total and elastic electron or X-ray scattering from atoms in the gas state that it should be possible to obtain the quantities $S(s)$ and $F(s)$ and hence, by Fourier transformation, the quantities

$$D(r_1) = 4\pi r_1^2 \Gamma_1(r_1) = 4\pi r_1^2 \int d\Omega_1 \int d\vec{r}_2 \dots \int d\vec{r}_z |\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_z)|^2 \quad (1.4)$$

and

$$P(r') = 4\pi r'^2 \int d\Omega' \int d\vec{r}_1 \Gamma_2(\vec{r}_1, \vec{r}' - \vec{r}_1) \quad (1.5)$$

where $D(r_1)$ is the probability of finding an electron a distance r_1 from the nucleus of the atom and $P(r')$ is the probability of finding an electron a distance r' from another electron. The term $\Gamma_1(r)$ denotes the diagonal component of the first order density matrix and $\Gamma_2(r_1, r_2)$

denotes the diagonal components of the second order density matrix. It has been shown in the case of He that there is little difference between $D(r)$ functions calculated using very exact wave functions (including r_{12} interactions) and those using the more approximate Hartree-Fock wave functions (1). On the other hand, the same comparison between wave functions for the quantity $P(r')$ shows that differences as large as 6-7% arise and as pointed out by Bartell and Gavin, such differences may be experimentally measurable (1).

At this point it should be mentioned that in the case of electron scattering the above results should only be useful for comparing the nature of wave functions with experiment in the case of the lighter elements ($z < 20$) because of the failure of the first Born approximation. Experimental measurements of $F(s)$ for Ar and Br_2 have been carried out approximately (2, 3) but so far measurements of both $S(s)$ and $F(s)$ have not been attempted.

Comparisons between theory and experiment for electron scattering from molecules made up of the lighter elements are also possible and have been carried out for the cases H_2 (4), CH_4 , NH_3 and H_2O (5). The procedure involved consists of calculating $I_T(s)$ according to Eq.(1.0) but with the use of molecular rather than atomic wave functions. Such calculations have been carried out for H_2^+ and H_2 (6,7) as well as CH_4 , NH_3 , H_2O and LiH (8,9,10). Comparison of the experimental result for H_2 with the result for the independent atom model (no chemical binding) shows that electron diffraction experiments mainly measure the size changes of the volume occupied by a fixed percentage of the electrons in the molecule. Binding effects lead to a volume decrease which indicates an increase in kinetic energy and through the virial theorem a lowering of the total energy. In molecules containing hetero-atoms size effects are also possible, but in addition, effects due to bond dipoles and permanent dipole moments are also present. So far the results, both experimental and theoretical, have not been sufficiently precise to establish such dipole effects.

The main problem in the evaluation of theoretical binding effects in molecules according to Eq.(1.0) is in the evaluation of the integrals encountered in the calculation of $S(s)$ and $F(s)$. Recent techniques have been devised for the evaluation of such integrals and are contained in Refs.(11-16).

The author wishes to thank Prof. Y. Morino and Dr. K. Kuchitsu for their kind hospitality and interesting discussions.

Bibliography

- 1) L.S. Bartell and R.M. Gavin, Jr., J. Am. Chem. Soc. 86, 3493 (1964).
- 2) L.S. Bartell and L.O. Brockway, Phys. Rev. 90, 833 (1953).
- 3) H.P. Hanson, J. Chem. Phys. 36, 1043 (1962).
- 4) R.A. Bonham and T. Iijima, J. Chem. Phys. (March 15, 1965). "Preliminary Electron Diffraction Study of H₂ at small Scattering Angles".
- 5) T. Iijima, R.A. Bonham, M. Roux, M. Cornille and C. Tavard (to be published)
"Small Angle Scattering from CH₄, NH₃ and H₂O by Fast Electrons".
- 6) T. Iijima and R.A. Bonham, J. Phys. Chem. 67, 2769 (1963).
- 7) R.A. Bonham and T. Iijima, J. Phys. Chem. 67, 2266 (1963).
- 8) M. Roux and M. Cornille, Cah. Phys. 16, 45 (1962).
- 9) C. Tavard, M. Rouault, M. Roux and M. Cornille, J. Chem. Phys. 39, 2390 (1962).
- 10) C. Tavard M. Rouault, M. Roux and M. Cornille, J. Chim. Phys. No. 116, 1324 (1964).
- 11) I. Sharritt, "Methods in Computational Physics", B. Allen et.al., eds., (Academic Press, New York, 1964) Vol. II, p. 1.
- 12) J.P. Wright, Mass. Inst. Tech. SSMTG Quarterly Progress Report No. 50, Oct. 1963, p.35.

- 13) R.A. Bonham, J.P. Peacher, and H.L. Cox, J. Chem. Phys. 40, 3083 (1964).
- 14) C. Tavard, M. Rouault, M. Roux and M. Cornille, J. Chim. Phys. No. 117, 1300 (1964).
- 15) J. Hinze and K.S. Pitzer, J. Chem. Phys. 41, 3484 (1964).
- 16) R.A. Bonham, J. Mol. Spect. (Feb. 1965)
"On Certain Atomic Integrals Involving Products of r_{ij} ".

9. 散乱状態の波動函数の改良

日大理工 大村 元

連続状態での波動函数を良くするには、標的状態（入射又は出射粒子が構造を持つてはその状態も）の波動函数を改良する事と、入出射粒子と標的との相関をより良く取入れる事の両方が一般に必要である。しかし標的状態の改良が結果にどのように効くかと言う方向の仕事は少なく、又理論も開発されていないと言ってよい現状なので、ここでは標的は正確にわかっている水素原子による電子の散乱について述べた。理論らしい理論が現在存在するのは弾性散乱についてであるから、以下専らその場合を考える。高エネルギーの散乱では Born 近似が良く、相関を取り入れる事は余り重要でないが、低エネルギーではそれを如何に取入れるかが問題になる。近似の改良を見る一つの方法は、例えば H- の光分解の計算で実行されているように、正確な波動函数を用いれば互に一致するような違った（この場合には三種類の）せん移行列要素を計算してそれ等の一一致のよさで精度を判断する。近似の改良度を見る他の方法には変分法で変分パラメーターを逐次増す方法もある。しかし散乱の変分法には、離散固有値に於けるような上限性がないので、パラメーターの数の増加に伴って必ず結果がよくなるとは限らないし、時として非常識な結果が出る事があるから注意が必要である¹⁾。その点ゼロエネルギーの散乱では scattering length に対して変分法の上限定理が（適当な条件のもとに）成立するから、どのような波動函数がどの程度近似がよいか、どちらがよいか、どのように近似が良くなつて行くか等がわかる。一つの判定基準を与える点でこの定理は重要である^{2) 4)}。前に述べたように一般的のエネルギーでの散乱の変分法は一般には上下限性を持たないが、用いる波動函数に制限をつけると Phase shift に対して下限定理が成立するよう出来る³⁾。例えば、全波動函数を標的状態の完全系（基底、励起及び連続状態）で展開して、順次展開基の数を増すと、phase shift は漸次増加する。水素原子の場合には、第一項の基底状態のみを探る Fock 近似に相当するものは既にかなりよい近似だが、2 p 状態を含めると更に近似が進むが、それ以上の状態を入れる事は余り改良にならない事がわかつて来た⁴⁾。このような展開に頼らずに変分函数を作つて phase shift の下限を与える変分法を作る事も出来る。（実際の計算はかなり面倒になるが）。これは文献 3 の第二番目の論文に述べられている。

1) C. Schwartz, Phys. Rev. 124 1468 (1961)

2) L. Rosenberg et al, Phys. Rev. 116 1034, 118 184, 124 130

3) Hahn, O'Malley and Spruch, Phys. Rev. 128 932, 130, 381

4) 例えば、大村元、日本物理学会誌 19 692 (1964). 表 4 及 8

10. 原子 分子の波動関数の改良

荒木 源太郎

原子 分子グループは昨春来その研究活動を一段と盛んにしはじめた。この会もその気運の形に現われたものの一つであろう。この活気の原因の一つはグループの中殻を作る優秀な研究者がその強い研究意欲をたずさえて世界の各地から続々と帰国してきたことにある。時は2月2日と3日、会場のすべての席はふさがれ、従来に類をみない活気ある会となった。

物理的に意味のある原子 分子の問題は遠い昔にわかつてしまつたかのような感じをもつ人が多いかもしれない。しかし決してそうではない。この会の中心問題は電子間の相関であったが、その討論を電子間相関とは何ぞやという所から、はじめざるをえないほどであった。それどころか、基礎になるHartree—Fock 理論でさえ、すでに沢山の問題を残している。数値計算のけたは最近すでに相対論の領域ふかく入りはじめた。

この会ではこれらの問題をさらにHartree—Fock の方法、Sinanoglu 理論、π電子理論、化学結合、分子における軌道、電子散乱等の各々の場合について具体化し、それぞれの専門家を中心にして白熱のなかにもなごやかな討論が行なわれた。かんたんな言葉であらわされる量も、計算の数値的だけではなく、いろいろの面からその性格を解明することは、自然にたいするわれわれの理解をふかめるために、最も重要である。“テクニツクは音楽ではない”、しかし、“演奏家にとっては音楽はテクニツクである”；“えものを追う猿泰山をみず”とはだれがいいはじめたのかしらない。研究者たちは自分の解釈にしたがって、おもいおもいの感想をいだくであろう。ともあれ、これはこのグループの催した最も有意義な、そして親しみのみちたシンポジウムの一つであったというのが筆者の感想である。

サ　　ロ　　ン

「物性研だより」について

齊　藤　喜　彦

昭和38年以来図書出版委員長をつとめて来ましたが、今度任期が満了したので長倉さんと交替することになりました。この機会に委員長交替の弁を書くようにとのことで筆を執ったわけです。今まで人は話を聞くとすぐに「それを一つ物性研だよりに載せて下さい」と原稿を頼んだり、おそい原稿の催促をしたりばかりしていたのだが、今度は反対に原稿の催促をされる立場となつてしまつた次第です。

「物性研だより」も遂に第5巻が発行される運びとなり、一応軌道に乗つたように感じられます。と同時に前の号で菅原さんが指摘されたとおり、多少マンネリズムにおちいりそうな傾向も見えて来ました。

御承知のとおり、「物性研だよりは」は共同利用のための校費をもつて印刷されるので、関係の方々に御申込に応じ無償で配布しております。発行部数も最初は600冊でしたが、現在では毎号650冊に及んでいます。

さて物性研だよりの内容は大体次のような考え方で編集されて来ました。

まず研究室だよりは、最初「研究室紹介」として各研究室で行なわれている研究内容の紹介がなされたわけです。現在ではそれも一段落し、研究室だよりとして研究室のその後の活動状況が掲載されております。この欄ではその他当研究所と関係の深い物性に関する研究が行なわれている他大学、研究所、会社などの仕事も紹介され、物性研究者間の相互連絡に役立つようつとめたつもりです。

その次は当研究所で行なわれる短期研究会の予告や報告で、これらが全体のかなり大きい部分を占めています。この他、共同利用という面でもっとも関心の大きい共通実験室の整備の状況については隨時関係の所員から原稿が寄せられ掲載されて来ました。第4巻第5号は特に共同利用の実態特集としたことは御存知のとおりです。

さらに、協同研究の成果についても、結果がまとまつたときに発表して載いております。

この他、ニュース、Technical Reports新刊リスト（今までの総目録は第3巻第4号にある）などを掲げ、当研究所に興味と関心をもつ人々にお知らせする役割を果しています。

このように「物性研だより」は研究所のP R誌としての役目を果しているわけです。これも決して一方的なものではなく、利用者の御意見、感想、苦情なども歓迎しており、また事務当局からの利用者に対する御願いなども掲載してきました。

さらに、内容を面白くする目的で、留学中の方や、国際会議に出席された方々のお話、随想、物性研究者全体の問題についての評論的な記事などを掲載し、この小冊子が物性研究所の機関誌であると同時に、全国の物性研究者共通の広場のような役割を果せばよいと念願しておりました。

この通りに行けば大変立派なものが出来上るはずでしたが、実情は決してそうではありませんでした。全く火の車というのでしょうか、原稿の催促に走りまわり、印刷がおくれるのを心配し、十分企画を練る余裕がなかつたことを白状せざるを得ません。原稿を恐る恐るお願ひしてもすぐなく断わられたり、さんざん催促してやっと載いた原稿はまるでアラビヤ語のようで文字の判読に苦しんだあげく、出版されてからミスが多いと御叱りを頂戴するという次第で、出版のむずかしさを十二分に味わいました。

とは申すものの、皆様の御助力のお蔭をもちまして、ともかく発行がつづけられて参りましたことを心から喜んでおります。

これで委員長も交替し、新しい構想のもとに出発いたしますから、今後共原稿を御依頼申上げました節は御面倒でも一つ御協力下さいますよう御願いする次第です。

物性研ニュース

人事異動

1. 武藤俊之助教授は、3月31日付で東大教授及び物性研究所長の職を辞し、定年退官されました。
2. 三宅静雄教授が、4月1日付で所長に選ばれました。
3. 半導体部門 川村肇教授が4月1日付で、大阪大学理学部へ転任されました。

短期研究会予告

研究会名		期間	提案者				
1	物性の将来計画研究会	40.5.20 40.5.22 (3日間)	久	保	亮	五	
2	磁性半導体の輸送現象	40.5下旬 (3日間)	平	原	栄	治	
			山	下	次	郎	
3	半導体の不純物伝導	40.5~6月 (3日間)	佐	木	亘	二	
			田	中	昭	洋	
			長	川		豊	
			豊	沢		豊	
4	磁性理論	40.6~7上旬 (4日間)	芳	田		奎	
5	多体問題	40.9上旬 (2日間)	久	保	亮	五	
			松	原	武	生	
			中	嶋	貞	雄	
			阿	部	竜	藏	
6	有機半導体	40.9.23 40.9.25 (3日間)	赤	松	秀	雄	
			永	井	芳	男	
			三	川		礼	
			中	田		郎	
			井	口	一	夫	
7	磁気 - 光効果	41.2上旬 (2日間)	仁	科	雄	一	
			長	谷	郎	洋	
			上	川		洸	
			菅	村		暁	
			野				

外来研究員（昭40年度前半）

-43-

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関 係 研究室	備 考
客 員 研 究 員					
阪大(理) 教 授	川 村 肇	40. 4. 1 40. 7.31	Ge のサイクロトン共鳴による格子散乱の研究	豊沢研	
東大(工) 教 授	犬 井 鉄 郎	40 4. 1 40. 9.30	半導体の非線型光学	"	
北大(理) 教 授	宮 原 将 平	40. 4. 1 41. 3.31	化合物の磁性と輸送現象	近角研	
北大(理) 大 学 院	沢 岡 昭	"	"	"	留学研究員
"	鈴 木 治 彦	"	"	"	"
京大(理) 教 授	山 本 常 信	40. 5. 1 4.0 5.31	super-normal transition の統計力学	理論第1 理論第3	
"	松 原 武 生	"	2次の相転移に関する理論的研究	"	

嘱 記 研 究 員

立教大(理) 助 教 授	石 森 達二郎	40. 4. 1 40. 9.30	遷移金属化合物の同位体交換 反応	本田研	
東京学芸大 助 教 授	田 野 隆 聰	40. 4. 1 40. 9.30	分子性結晶の弾性率	井口研	
東大(教養) 助 手	前 川 恒 夫	40. 4. 1 40. 9.30	有機遊離基の構造と磁化率	"	
東北大(金研) 助 教 授	仁 科 雄 一 郎	40. 4. 1 40. 9.30	GaSe の強磁場におけるファラデー効果	菅野 塩谷 研	
京大(理) 教 授	辻 川 郁 二	40. 6.21 40. 9.30	三方対格配位子場を持つMn 錯塩の線状吸収	菅野研	
京大(理) 助 手	阪 敏 郎	"	"	"	
石原産業kk 研究所所長	本 村 恒 行	40. 4. 1 40. 9.30	酸化チタンおよびチタン酸カリウム系誘電体の光物性的研究	牧島研	
日本皮革研 究所研究員	佐 伯 邦 臣	40. 4. 1 40. 9.30	高分解能核磁気共鳴によるアミノ酸ならびにトリプタインの研究	柿内研	
群馬大(工) 助 教 授	高 橋 晃	40. 4. 1 40. 9.30	高分解能核磁気共鳴によるイオンの水和の研究	"	
横浜国立大 (工)講師	十 川 篤 一	40. 4. 1 40. 9.30	X線による結晶内電子分布の 決定	三宅研	

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関 係 研究室	備 考
-----	-----	-----	---------	------------	-----

嘱 託 研 究 員

武藏工大 講師	佐竹誠也	40. 4. 1 40. 9.30	結晶解析に伴う諸計算	細谷研	
東京工大 助手	原田仁平	40. 4. 1 40. 9.30	BaTiO ₃ の分極振動のX線による研究	星埜研	
阪大(理) 講師	山田安定	40. 4. 1 40. 9.30	Or-Fe 合金の中性子回折研究	星埜研 石川研	
阪大(理) 助手	山田竹実	40. 4. 1 40. 9.30	"	"	
東北大(金研) 教授	平林真	40. 4. 1 40. 9.30	Gd-Rh 箔による中性子回析写真法	星埜研	
東大(理) 助教授	二宮敏行	40. 4. 1 40. 9.30	Ge 中の転位による超音波吸収の研究	鈴木研	
東大(理) 助手	石岡俊也	40. 4. 1 40. 9.30	"	"	
京大(理) 助手	都築俊夫	40. 4. 1 40. 9.30	金属における電子間及び電子-格子間相互作用	中嶋研	
電試技官	御子柴宣夫	40. 4. 1 40. 9.30	電子-格子間相互作用	中嶋研 阿部研	
東大(教養) 助教授	今井勇	40. 4. 1 40. 9.30	ゲルマニウムの二重サイクロトロン共鳴	豊沢研	
"	真隈泰三	40. 4. 1 40. 9.30	イオン結晶の電子論的研究	小林皓研	
東大(理) 助教授	飯田修一	40. 4. 1 40. 9.30	低温における電子比熱	大塚研	
東大(理) 学院	佐藤武郎	40. 4. 1 40. 9.30	"	"	留学研究員
北大(理) 教授	三井利夫	40. 4. 1 40. 9.30	BaTiO ₃ の分極振動のX線による研究	星埜研	
北大(理) 学院	茂木博	40. 4. 1 40. 9.30	"	"	留学研究員
東京理大 助教授	大竹周一	40. 4. 1 40. 9.30	遷移金属の超電導の研究	鈴木研	
東京理大 学院	小池茂年	40. 4. 1 40. 9.30	"	"	留学研究員
東北大(理) 教 授	中西香爾	40. 4. 1 40. 9.30	天然有機化合物のX線解析	齊藤研	
東北大(理) 学院	小沼茂樹	40. 4. 1 40. 9.30	"	"	留学研究員

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関 係 研究室	備 考
-----	-----	-----	---------	------------	-----

理 研究員	桜 井 敏 雄	40. 4. 1 40. 9.30	複雑な結晶構造解析用諸計算 のプログラミング開発	齊藤研	
東 大(理) 講 師	小 島 稔	"	Rb-Sr法による岩石の絶対 年代測定	本田研	
東 大(理) 大 学員	北 村 直 子	"	"	"	留学研究員
東工大(資源 研) 助 手	旗 野 昌 弘	"	有機重合体の電導機構の研究	中田研	
学習院大(理) 教 授	大 川 章 哉	"	有機半導体の伝導機構の研究	"	
学習院大(理) 大 学院	石 原 裕	"	アンスラセンの移動度の測定	"	留学研究員
"	宮 本 昌 男	"	アンスラセンの表面準位の研究	"	"
"	一 宮 彪 彦	"	アンスラセンの加圧下の電導 機構の研究	"	"
東 工 大 助 教 授	齊 藤 進 六	"	Cr _x Fe _{1-x} O ₂ の高圧下の 合成と電気的性質	箕村研	
東 大 工 学 院	福 永 修	"	"	"	留学研究員
東 大(理) 教 授	桑 原 五 郎	40. 4. 1 41. 3.31	パルス高磁場を用いた光物性	菅野研	共同研究
東 大(理) 助 手	青 柳 淳	"	"	"	"
"	三 須 明	"	"	"	"
早 講 師	山 田 昌	40. 4. 1 40. 9.30	プロピオン酸ニカルシウム・ ストロンチウムの研究	中村研	
早 助 教 授	小 林 澄 三	"	"	"	
早 大 学 院	藤 井 義 正	"	"	"	留学研究員

留 学 研 究 員

学習院大(理) 大 学 院	今 村 修 武	40. 4. 1 41. 3.31	磁性薄膜のスイッチング	近角研	指導教官 近角聰信
"	田 島 圭 介	"	希土類金属の磁性	"	"

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関 係 研究室	備 考
-----	-----	-----	---------	---------	-----

学習院大(理) 大 学 院	山 田 敏 郎	4 0. 4. 1 4 1. 3.31	マグネタイトの低温変態	近角研	指導教官 近角聰信
東 大 (工) 助 手	花 村 栄 一	4 0. 4. 1 4 0. 9.30	半導体と非線型光学	豊沢研	
日立(中研) 研 究 員	伊 藤 良 一	"	サイクロトロン共鳴による半導体の研究	"	受託研究員
川 研 鉄 員	田 中 智 夫	4 0. 4. 1 4 1. 3.31	金属の機械的性質に関する基礎的研究	塑 性	"
昭 和 電 工 員	田 中 信 義	4 0. 4. 1 4 0. 9.30	核磁気共鳴によるボレオレフインの微細構造に関する研究	柿内研	"
沖 電 気 員	小 池 田 敏 晃	4 0. 4. 1 4 1. 3.31	磁性薄膜の磁気異方性	近角研	"
松 下 電 器 研	中 村 英	4 0. 4. 1 4 0. 9.30	半導体結晶構造に関する研究	塑 性	"
昭 和 電 工 研	駒 田 英 治	"	超高压高温の利用研究	秋本研	"
学 振 奨 励 研 究 生	山 口 幸 夫	4 0. 4. 1 4 1. 3.31	極低温での伝導現象に関する研究	田沼研	
学習院大(理) 大 学 院	矢 島 勝 彌	4 0. 4. 1 4 0. 9.31	金属の積層欠陥の研究	鈴木研	指導教官 鈴木平
"	石 井 武	"	銅及び銅合金単結晶の塑性	"	"
学 振 奖 励 研 究 生	梅 林 宏 道	4 0. 4. 1 4 1. 3.31	反強磁性金属の研究	石川研	

施 設 利 用

北 大 (理) 助 手	塩 崎 洋 一	4 0. 4. 1 4 0. 9.30	ロッジュル塩の中性子回折による研究	星埜研	
北 大 (工) 教 授	六 車 二 郎	4 0. 6. 1 4 0. 6.30	氷結晶の内部摩擦	鈴木研	
京 大 (理) 大 学 院	泉 邦 英	4 0. 5. 5 4 0. 5.12	アルミ・銅合金の析出に関する研究	"	
阪 大 (工) 助 手	岡 田 東 一	(4 0. 5.10 (4 0. 5.24)	アルカリハライド中のO ₂ 中心と転移との相互作用	鈴木 神前研	
阪 技 大 官	柴 田 孝 次	"	"	"	

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関 係 研 究 室	備 考
東北大(通研) 助 教 授	大 坂 之 雄	40. 7.21 40. 8.20	金属間の電子間相互作用	理論Ⅲ	
東北大(通研) 教 授	武 内 義 尚	40.4 下旬 或は 5 月	半導体におけるトンネル効果 の理論的研究	豊沢研	
京 大(理)学 院	北 川 泰 司	(40: 4.15 40: 8.15)	芳香族気体の真空紫外吸収スペクトル	井口研	

滞 在 予 定 外 国 人

(1) ウイリアムズ大学の Prof. F. Brown

40.9～9カ月間（誘電体部門）

(2) カリフォルニア大学の Mr. Salamon

40.秋～1カ年間（伴野研）

(3) アムハースト大学の Prof. Dempsey

40.9～1カ年間（菅原・大野研）

東京大学物性研究所の助手公募の通知

下記により助手の公募をいたします。適任者の推薦、希望者の応募をお願いいたします。

(1) 研究室名及び公募人員数

電波分光部門（柿内研究室）助手 1 名

この部門は（教授 柿内賢信氏が在職中）

(2) 内 容

分子および分子間の相互作用を主として電波分光学および光学的方法を用いて研究することに熱意をもち部門の研究に協力する方を希望する。

当初は高分解能核磁気分光とくに二重共鳴スピニエコーなどにより緩和機構を通して比較的簡単な分子の研究を行う。

(3) 資 格

応募資格としては修士課程修了またはこれと同等の学力以上の方で専門や経験の如何は問わない。

(4) 任期は原則として 5 年とする。

(5) 公 募 締 切 昭和 40 年 5 月 31 日 (月)

(6) 提 出 書 類

(イ) 推薦の場合

- 推薦書（健康に関する所見を含む）
- 履歴書（略歴で結構です）
- 主要業績リスト（ほかに出来れば主な論文の別刷）

(ロ) 応募の場合

- 履歴書
- 業績リスト及び主な論文の別刷
- 所属の長又は指導教授等の本人についての意見書（宛先へ直送のこと）
- 健康診断書

(7) 宛 先

東京都港区麻布新竜土町 10 番地

東京大学物性研究所 人事掛

電話 (402) 6254.6255.6258.6259.

(8) 注意事項

公募書類在中又は意見書在中の旨を表記し、書留で郵送のこと

(9) 選定方法

東京大学物性研究所教授会で審査決定いたします。ただし、適任者のない場合は決定を保留いたします。

東京大学物性研究所長

三宅 静雄

基 研 助 手 公 募

今回、基礎物理学研究所で助手 1 名を公募いたします。

- (1) 任 期：3 + 1.5 年（就任してから少くとも 1 年半は基研に落着いて研究されることを希望します。）
- (2) 専門分野：物 性 理 論
- (3) 応募書類：履歴書、研究歴、発表論文リスト、就任した場合の研究計画
主論文各 2 通
- (4) 締 切：1965 年 5 月 31 日（月）
- (5) 選考機関：基研運営委員会
- (6) 宛 先：京都市左京区北白川追分町

京都大学基礎物理学研究所

湯 川 秀 樹

- ◎ 封筒の表に「助手応募書類在中」と明記して下さい。

東京大学物性研究所の助手公募の通知

下記により助手の公募をいたします。適任者の推薦、希望者の応募をお願いいたします。

(1) 研究室名及び公募人員数

光物性部門（塩谷研究室）助手1名

この部門は（教授 牧島象二氏、助教授には塩谷繁雄氏が在職中）

(2) 内 容

主として化合物半導体の光物性に関する研究を行う。

このような研究に意欲と興味をもつ人を希望する。

(3) 資 格

応募資格としては修士課程修了またはこれと同等の学力以上の方で専門や経験の如何は問わない

(4) 任期は原則として5年とする。

(5) 公 募 締 切 昭和40年5月31日(月)

(6) 提 出 書 類

(イ) 推薦の場合

- 推薦書（健康に関する所見を含む）
- 履歴書（略歴で結構です）
- 主要業績リスト（ほかに出来れば主な論文の別刷）

(ロ) 応募の場合

- 履歴書
- 業績リスト及び主な論文の別刷
- 所属の長または指導教授等の本人についての意見書（宛先へ直送のこと）
- 健康診断書

(7) 宛 先

東京都港区麻布新竜土町10番地

東京大学物性研究所 人事掛

電話 (402) 6254.6255.6258.6259

(8) 注 意 事 項 公募書類在中または意見書在中の旨を表記し、書留で郵送のこと。

(9) 選 定 方 法 東京大学物性研究所教授会で審査決定いたします。ただし、適任者のない場合は決定を保留いたします。

東京大学物性研究所長

三宅 静雄

Technical Report of ISSP 新刊リスト

Ser. A

- No. 146 Toshinosuke Muto, Syoiti Kobayasi and Hiroko Hayakawa:
On Indirect Knight Shift and NMR in Ferromagnetic
Metals. Part III: Numerical Calculation of NMR
Frequency and Hyperfine Field in Ni, Co and Fe.

編集後記

- 今年度より、図書委員長がかわり、長倉三郎になりました。「物性研だより」の編集は、第5巻1、2、3号を、豊沢豊、小林浩一が、又第5巻4、5、6号を大塚泰一郎、阿部竜藏が行う予定になっております。
- サロンへの投稿を募ります。400字詰原稿用紙5枚以内程度で、物性研に関する事、学問に関する事、或は又、その他建設的な御意見であれば結構です。
肩のこらないお話を歓迎致します。

原稿送り先、御連絡先は次の通りです。

東京都港区麻布新竜土町10

東京大学物性研究所

図書委員長 長倉三郎

投稿原稿の〆切は

奇数月 10日

偶数月 20日

です。

