



第17卷
第3号
1977年9月

目 次

○内と外からみた物性研	吉森昭夫	1
○外から見る物性研	坂井信彦	3
○Brief impressions of Japan	S.K.Bhattacharya	7
短期研究会報告		
○磁性の発生機構の研究		10
世話人	糟谷忠雄, 守谷亭, 吉森昭夫	
○真空紫外領域の物性		14
世話人	小塩高文, 石井武比古, 菅野暁, 神前熙	
○液体の電子的物性		39
世話人	遠藤裕久, 米沢富美子, 田巻繁	
○物性研談話会		65
物性研ニュース		
○人事異動		70
○テクニカルレポート新刊リスト		72
編集後記		

内と外からみた物性研

阪大基礎工 吉森昭夫

昨年10月まで10年と7ヶ月物性研に在職して、内と外の期間が同じオーダーになったものとして、恒例の表題に対して何か書くのはもっとも適當な1人かもしれません、物性研での約10年はまだついそこにあって強烈な印象をたもっていますのでなかなか外からというわけにはいかないと思います。内と外からみた物性研ということでなしに物性研の席を長い間占めたものとしての反省をも含めて何かを書くのは義務といいう一面もある筈ですから、以下まづ研究活動としてどんなことをやったのかということから書いてみようと思います。

理論I部門に名古屋大学理学部からやって来まして、最初は名古屋でやっていたフェライト(Fe_3O_4 , LiFe_5O_8)の γ 席でのイオン配列の短距離秩序の理論の後始末をしていましたが、すぐに理論I部門の中心課題でありました近藤効果の研究に加わりました。

それ以来在任中の殆どの期間近藤効果の研究をやっていたわけですが、その中半分はs-dモデルを用いての金属中の局在スピンの基底状態(一重項束縛状態)の芳田理論に関するものでした。基底状態における高次の項を対数最異常項の近似ですべて集めることができると見出され、基底状態の理論の対数最異常項の近似での完成に役に立つことができたのが、自分では一番大きい寄与であったと思います。ついでその時短い米国滞在を終えて帰ってこられた芳田現所長と基底状態の性質を調べ、基底状態での物理的描像をえることができました。私が物性研にきてから一年ほどして助手に着任した桜井さんと後になって対数次異常項を線込群の手法を用いてすべて集め、一重項状態の結合エネルギーへの次異常項からの寄与をえ、また最異常項での基底状態の性質についての結論が変わることを示すことができたのもこのカテゴリーに入ります。

桜井さんとやりました、汎函数積分の方法を用いて、s-dモデルで金属中の局在スピンの状態を調べた計算は、異常グリーン函数を用いての高野一小川の計算の高次の項を、やはり対数最異常項の近似で集めたという意義はありましたが、一重項束縛状態での比熱がどうなるかという問題については、結局積極的な結果はえられませんでした。研究室の活動としては、桜井さんの超伝導体中の古典的スピンの基底状態についての解析、院生の小川さんと一緒にやった、近藤効果を示すY中のCe純物の基底状態への異方性の効果の理論があります。

s-dモデルの基礎になるAndersonモデルの問題については摂動論にもとづいて見事な山田一芳田理論がつくられましたが、軌道縮退がある場合に拡張した理論をやりました。これは伝

統的なダイアグラム法に全面的にによって理論の形をつくったという一面もあります。Anderson モデルについてはその前に Gutzwiller の方法による簡単な変分計算もあります。

この後、パイライト型磁性化合物の Ni S₂ の複雑な反強磁性構造のいくつかの特徴的なふるまいに興味をもち、磁性化合物の絶縁体極限からの展開として 4 次の相互作用の効果を、桜井さんの後の助手に着任した稻垣さんと調べ始めたわけです。

以上先にも述べましたように在任中は殆ど近藤効果に明けて暮れたという感じでしたが、好個の研究課題と " 大バス " をえて、緊張した日々（そのようにみえたからかもしれません）を送れたのは幸運であったと思っています。特に s - d モデルの基底状態の芳田理論は初期のころはなかなか正当に評価されず、内外からいろいろなのはづれの批判にさらされ、個人的には面白い経験をしたように思います。

一時期、多くの理論家がこの系の 0 K 近傍でのふるまいは特異的であるという主張をし、実験家たちも相互作用効果（不純物間の）のために現れる物理量の特異的な温度変化をこれらの希薄極限の理論に合せるという、正しくない理論と正しくない実験解釈が結合するという奇妙な事態が起きました。結局この主張は旗頭の P. W. Anderson がスケーリング則をもとに、系の 0 K 近傍のようすは正常であって、特異的であるという理論はみんな正しくないといってから、次第に旗色が悪くなり、異常な温度変化についての実験事実も前後して相互作用効果であることが確立し、0 K 近傍では局在スピニンが死んでいて、系の性質が正常であるという芳田理論の物理的描像が正しかったことがはっきりしたわけです。

物性研について感じていたこと、また感じていることをつぎにいくつかあまり関連がないままに書いてみたいと思います。いま物性研は転換期を控えているということで、将来計画の想が練られており、いくつかの物性研究としては大きな立派な計画も考られています。そのことに關して、そういう計画の発展が物性研の中に閉ぢずに外に拡るということも必要なのではないかという気がします。物性研自体の研究或は実験装置が高い水準にあるということは勿論そうでなければならないことですが、一方いくつか物性研で育った芽がさらに大きく発展して新しい研究所が生まれるというようなことがあってもいいのではないでしょうか。

物性研の運営の話ですが、物性研では原則として研究室が単位になっていっています。一方部門というものもあって、その 2 つがよくいえば渾然となって、わるくいえばあまりはっきりしないまま運営されています。結局のところこの制度はうまくいっているというのが全体としてのみかたかもしれません、気にしたすると大変気になる場合もあります。私は理論 I 部門で芳田現所長と協力して、実質的には部門単位で動いておりましたが、原則として研究室単位であることを気にしたこともありました。

物性研は研究所としてはそんなに大きい研究所でないかもしれません、物性グループにとつていろいろな意味で大きい研究所だと思います。いろんな問題をかかえているかもしれません、人の和を含めて（人により評価の仕方は違うかもしれません）うまく運営され成果をあげていると思います。しかし共同利用研として物性研は物性研究の大拠点でなければいけないと思いますし、それだけに物性グループももっと関心と議論の焦点にすべきだらうと思います。

書き初めるまではもっと書くことがあるように思いましたが、書きだしてみるとなかなかうまく書けず、書いたことも舌たらずのように思いますがお許下さい。終りですが、物性研在任中お世話になった皆様に感謝いたします。（8月10日）

外から見る物性研

理化学研究所 磁性研 坂井信彦

この四月に物性研から理研に移ったが、日もまだ浅いし、新しい勤務先が東京近郊にあることあって、物性研は依然身近かな存在である。しかし、こうして外から物性研を見る立場となると、物性研の共同利用研究所としての存在を、改めて考えてみる必要があるようである。

そう短くはない年月を物性研で過ごし、いくつかの共同利用の具体例も体験したり、見聞してきたのだが、それらがすべて好ましい姿であったとも言い切れない。もちろん物性研での私の経験は、一研究室から見た物性研の、ある時期の活動の、一断面にすぎず、又、組織としての物性研を深く追求したこととなかった私にとっては、共同利用はどうあるべきかなど、明確に述べられるわけがない。けれど、それは言っても、これから物性研とつき合っていく以上、物性研の共同利用研としての性格を理解していかなければならないだろう。以下に、これを機会に考えてみたことを書く。私の思い違いがあれば、質して下さい。

物性研の任務は、繰り返し語られ、そしてたゆみない努力によって維持されている様に、日本の固体物理が、世界の競争の中で、生き抜く為に努力することであり、又同時に、全国共同利用研究所として、全国の研究者に研究所を開放する事であろう。前者が優先されるべき任務であると、私は教え込まれて来た。実際、前者を遂行すべく苦腦する研究所の雰囲気、物性研究者層の厚さに、物性研の特質があるわけで、単に実験装置の利用のみを共同利用研の主目的とするのなら、

世界のトップレベルの実験装置がふんだんにあるわけでもなく、又、そうした利用者へのサービスがしる余裕もありない現在の物性研には、こうした形での共同利用研の機能は、きわめて不充分である。

共同利用としての形には、ⅰ) 小規模装置の利用（試料作成の為の電気炉、高磁場超電導マグネット等の利用や、液体ヘリウム温度の各種装置の利用等）、ⅱ) 大規模装置の利用（原子炉や、粒子加速器等の利用等）とかがよく言われる。上に記した様に、ⅰ) の利用は、現在の物性研では、各研究室の装置に空がある範囲内で行われている程度で、物性研が積極的に意図している姿ではないと思われる。ⅱ) は、将来、物性研のSOR等がどうなるかで、この形の共同利用のしめる比率は増えるのであろうが、人的余裕にとほしい物性研側に、どれほどのサービス業務が期待出来るか、はなはだ疑問である。ところで、これらⅰ), ⅱ) は、装置を先行させ、それに付随する人は後にまわした見方である。これと見方をかえて、人を先行させた共同利用、即ちⅲ) 共同利用研の研究者を中心とした研究グループを所内外の研究者で形成し、研究場所、装置の本拠地を物性研にするという共同利用が考えられる。すぐれた才能集団という物性研の特質を生かすには、この行き方が良い様に思われる。この行き方は、ヘソ曲りな言い方をすれば、物性研の人を全国の人が共同利用するということになる（ⅰ), ⅱ) でも間接的にそうである）が、これは“利用”にこだわるからで、ⅲ) の主旨をはっきりさせるのなら、共同利用研究所と言わずには、共同実験研究所とすれば、よいのであろう。ⅰ), ⅱ), ⅲ) ともに、今後の物性研の共同利用の行き方として存続するのであろうが、同じ装置利用でも、ⅲ) を建前とした（本音は各人各様でしょうが）共同利用が、一番利用のしがいがある様に思える。

物性研の共同利用の制度に、助手の任期制度が人事交流として、大きな役割をはたしていることは、すでに定着した考え方で、物性研の内情を知った人が、全国に居るということは、全国共同利用研が存続する素地として、重要である。しかし、これも又衆知のように、助手の任期制については、現状には、大小の不満があり、在職研究者のなげきや、相互批判を耳にすることが出来る。とりわけ、新竜土会が指摘した様に、(1)助手の任期制が全国的組織としてセルフコンシスティントでない点は、物性研の任期付助手に精神的な圧迫を加えている。又、(2)世界の実験技術が日進月歩で高度化する（そして所員は高令化する）中で、それと競う重要なスタッフが、任期故に、次の就職の為に論文書きに気を配らねばならないのは、大変なマイナスである。(1)については、人それぞれの考え方で、良しとも悪いとも言うであろうが、少くとも現状では、物性研に魅力を感じて応募する助手は減るであろう。(2)は、物性研の研究グループ単位が小さく、又、あまりに固体物理一色に塗られてしまい、融通性に欠けるという欠点の一つの現われと私は解している。もっと工学関係等の、技術だけで評価される分野との交流があってよいのではないか。又、

小グループという問題点は、共同利用を iii) の行き方でとらえるなら、解消すると思えるのだが。

ここで助手の任期制と並べて、所員の任期制についてふれたい。物性研内で、所員の任期について同意が得られていないのは、物性研の弱点である。人事交流という建前から、所員の任期は、考えられる事である。所員会は、それは研究所の“浮動化”になる危険があるとの見解を述べた以上にはとり組んでいないと私は記憶する。確かに、世界と競争出来る研究環境を作り上げ、そして物性研を食いつくして果てるのではなく、次の世代に道を拓いて果ててくださるのなら、約四十才からの約二十年間は、決して長い年月ではないと私は思う。けれども、助教授クラスの一部に任期制度を取り入れ、人事交流をより促進させることは、もっと議論されてよいのではないか。

物性研内の各研究室間に交流がとぼしいと言うのは、私自身も感じたが、こまつたことに、このことは所外でも通説となっているふしがある。実際、各研究室の仕事の内容は、専門化と呼ぶべきか非常にデジタライズしていて、各分野をベクトルの成分に例えて書けば、ある室の人は(1, 0, 0, ..., 0), ある室の人は(0, 1, 0, 0, ..., 0)で、共通成分(内積)は常に0なのである。たまたま私は境界領域の仕事をした為、ベクトル成分が分散して、幾つかの研究室とかろうじて有限の内積を持つことが出来たのは、幸いであった。しかし、いくつかのベクトル成分を持ち、且つ、ベクトルの絶対値も大きくと言うことは、私の様な凡人にはとても不可能である。せめてベクトルの次元数は保持して(好奇心だけは持つて)，他の人とコミュニケーションオペレーターCを通して、(1, 0, 0, ..., 0) C (0, 0, 1, 0, ..., 0)が有限にとどまる様に努力することであるが、それすらもコミュニケーションの時間に制限があり、交流がごく限られ、研究所といつ一つの建物に有能な方々が集合している環境が、もっと生かせなかつたのは、残念であった。(例えば、歴代所長と、どれだけ言葉を交したかを思い出してみると、あまりの少なさに愕然とする。)他面、スポーツというベクトル成分を次元数に加えておくと、所内での交流は、ずいぶんと楽になつたのが、私の経験であった。内積が有限であるのみならず、Cを通して仕事成分にも交流が成立した。

外から物性研と交流する立場からでも、物性研のベクトル成分がどうなつてゐるか、あるいは、将来どうしようとしているかがよくわかるのは必要なことである。学会や、短期研究会、学会誌等で知るものも一法であろうが、やはり“今なにをやっているのですか”と各研究室へ気軽に尋ねることが出来る様になりたいと願つてゐる。けれども、はっきり言って、そう聞くことは相手の時間つぶしになるのではないかと(そう思いたくなる程、みなさんあいさつもせずに、キツイ顔をして廊下を歩いておられます)遠慮してしまうのである。相手もこちらの仕事に興味があるという下地がなければ、こうしたコミュニケーションは、なかなか成り立たないのだろう。となれ

ば、なにはさておき、自分の仕事を豊富にしておくのが先決という、なかなかきびしい結論に落ち着くことになるのだが……。

共同利用というのは、結局、共同研究になるのではないだろうか。物性研で展開される研究活動に、こちらの問題意識の必要に応じて、共同利用制度を使って参加するという行き方が、お互に無理のない道だと考えている。

Brief impressions of Japan

S. K. Bhattacharya*

I am thankful to the editor of *Bussei ken Dayori* for inviting me to jot down some of my impressions of the Japanese life. For one thing, this gives me an opportunity to coherently express my feelings from among the multitude of pictures that invariably flood the mind of the foreigners here.

The most fascinating observation for a person with Indian background is the uniformity in Japanese life. In India we are used to extreme diversity in almost all spheres of life, in language, in culture, in philosophy. In contrast, there we see people speaking the same tongue from Kyushu to Hokkaido with minor dialectal variations, sharing the same attitude to life in conformity with time-honoured vertical hierarchy and believing in the same peculiar anti-religious assemblage of several religions. This uniformity is so deep that it sometimes reaches the height of absurdity like saying almost the same thing in marriage ceremony or naming the children in given order. I suppose in modern complex world this must be quite comforting when one can always fall back to heritage and precedence. But there are definite dissensions even among this well organized system. The impact and onslaught of western culture have upset much of the old values. This must be true for all oriental cultures. A modern Japanese boy or girl is prone to have a loss of balance when he compares the life style of his or her parents and that of a freedom oriented society like U.S.A. The sad fact remains that the East is giving way to the West. The consequences of this cultural transition are manifold. The motive force behind the western culture is a definite materialistic philosophy. But the cultural changes here are more on the surface. Consequently, there are, no doubt, dialectical problems. While deep in heart the people are Japanese, externally they are putting on differing attributes of a foreign culture. These changes can be appreciated if they are guided by corresponding changes in the world outlook which are ushered in by writers, philosophers, and artists. Do we see

* On leave from Physical Research Laboratory, Ahmedabad 380 009, India to work on cosmogenic radioisotopes in meteorites and lunar samples.

signs of stresses consequent of a modern affluent society ? There are some indications . There is a high rate of suicides among the sensitive people for reasons apparently stemming from a negative outlook on life . These are difficult questions and need more probing analysis . Perhaps , the mushroom-growth of various kinds of comic books and their extraordinary consumption indicate the strong desire for relaxation from such stresses .

Coming to a different subject we may touch upon the problem of communication . It is doubtless that in today's world English is a competitor to every language . India being a former colony of Britain we have a natural acceptance for this language . Personally I owe a lot to English so I may be biased to think that English is a must for understanding the world . There are numerous things which do not transpire in translations even when the recipient language is one as beautiful as Japanese . Incidentally , my scanty knowledge of Japanese has shown me that it is a powerful and efficient language . I am always fascinated by the beauty and economy of space in the kanji characters . Their picturesque structures bring out condensed meaning . I wish that I was initiated earlier . Anyway , coming back to the point , my impression is that many Japanese people possess surprising ability in reading English but writing , hearing and speaking tend to be progressively weaker in that order . From a larger perspective which includes Economics and Socio-political stability , not to mention the international communication befitting the economic strength of Japan , it is to be urged that there should be more stress on English . There are , in fact , about 10,000 Anglo-European words in Japanese . A little more careful way of looking at the imported words may enhance the strength of English vocabulary , like ロケーション and location , with distinction between 'r' and 'l' .

To move to the subject of 'nihon no ryori' , the Japanese food tends to be simpler in preparation compared to Indian food . I have developed a taste for 'sushi' easily (myself being from fish eating area of India , Bengal) and rice is also our staple food . I have still a long way to go to really like 'o-misho' , the salinity being rather high for my tongue . In summer there is nothing like a cool 'nihon-soba' lunch . 'O-yako-domburi' is a good preparation . The dry fishes from various corners of Japan are exquisite companions for beer . 'O-mochi' provides a good exercise to activate the jaw muscles . Incidentally , my first efforts at using 'hashi' were all failures until I started trying the square cross-section

types. The smooth, colourful original types are still eluding me, especially with foods like 'tofu'.

The best experience one can have in Japan are undoubtedly from Japanese girls. They are usually beautifully dressed and neat. They are polite but at the same time can initiate and encourage good conversation by right type of remark. We find them confident and independent in a quiet sort of way and quite knowledgeable without appearing to be so. One feature is surprising to me. In a wide range of ages they appear to be more like girls rather than women. They definitely know the secret of youth. No wonder, they are said to be finest companions.

In my extended stay of a year and a half I had the chance to visit several places. I have been to the top of Mt. Fuji on a clear day, to the sandy hills of Tokushima-ken Awacho in Shikoku, to the elegant city of Kobe, to the caves in water near Izu and to Kinugawa Onsen in a chilly evening. I carry back with me a memory and an album full of pictures. Japan had been an unforgettable experience for me.

Finally I take this opportunity to thank my host professor Masatake Honda for his innumerable kindnesses and extraordinary zeal to teach me cosmochemistry. I have learnt a lot from him and other colleagues of Hondaken. The science in this laboratory is rated high in the world and I consider myself lucky to have spent a long time with them. I thank 'Mombusho' for the financial help and 'Bussei ken' for the various laboratory facilities. I sincerely hope to come back again in future to this beautiful place.

短期研究会報告

「磁性の発生機構の研究」

開催期日 昭和51年12月16日(木), 17日(金)

開催場所 東京大学物性研究所

世話人 糟谷忠雄(東北大理)

守谷亨(東大物性研)

吉森昭夫(東大物性研)

研究会の目的

磁性の発生とゆう言葉は突込んでみると案外きちんととした定義が難かしいが、大雑把にいって外部磁場のない情況で(或は外部磁場があるときはそれと垂直方回の成分が)空間の特定の場所に有限時間有限の磁気モーメントの存在する状態の出現を意味するといってよいであらう。
つまり空間対称性の破れた状態の出現である。局在スピン系{S_n}のよく定義された一様な系では長距離秩序の発生を伴った相転移の最も典型的な例として理論実験共に詳細な研究があるが、遍歴電子系の場合には強い電子相関のからんだ多体問題の取扱いの困難さが表面に出て簡単な全局的分子場理論のわくを越えた理論の構成が難かしく、磁性発生近傍の critical な振舞いを記述するのは困難であった。最近になって漸く分子場理論を越える理論がいろいろ提案され局在スピン系の場合とは異った critical な振舞ひも議論される様になって来た。更には多体的強い電子相関の極限の様に思はれて来た4f電子系もそれがフェルミ面上に位置すると遍歴擬電子系の様に振舞ひ種々の異常現象を起すことが最近大きな関心を呼びその磁性の発生についてもいろいろな提案がなされて居る。ここでは単なる電子相関にとどまらず、種々のポーラロン効果も重要な効果を持つ。一方最近急速に研究の進んで来た不規則系に迄拡張すれば現象は更に多様化される。特にスピングラス系における磁性の発生及びその低温に於ける振舞ひは興味深い、又次元数を下げる事により臨界振動は拡大され新たな性質が現はれる。Kondo stateなどその典型的な例である。本研究会の目的は一面ではこの様に多種多様な磁性発生の機構及び現象を夫々の特種な性質に基いた立場での研究方法によって発展させると共に、一面ではそれらに共通に流れる基本的性格、機構を探ってより統一的な物理像を確立してゆこうとゆう立場で企画されたものである。

プログラム

12月16日

I バンド磁性と電子相関

- 1) 遍歴電子系のらせんスピン構造 守谷 享, 馬越健次
- 2) 反強磁性金属におけるスピン波 山田鉄次, 志水正男
- 3) 有限温度の Gutzwiller 近似 松原武生
- 4) 4 - スピン相互作用と反強磁性構造 稲垣 睿, 吉森昭夫

II 低次元系

- 1) 2つの不純物イオンに対する Anderson Hamiltonian の摂動展開 山田 耕作
- 2) 一次元系のパイエルス転移 福山 秀敏
- 3) 一次元金属における構造転移と singlet ground state system 村尾 剛
- 4) 表面磁性の問題点 金森順次郎
- 5) 1 T - Ta S₂ の nearly commensurate phase について 中西 一夫
- 6) 強場下の 2 次元電子系の CDW 福山 秀敏

12月17日

III 4 f バンド磁性

- 1) 磁性化合物のバンド構造 柳瀬 章, 長谷川彰
- 2) 強い相関のある 4 f バンドと s バンドの軌道混成 高山 一
- 3) マグネティックポーラロンに対する磁化の空間変化 大畠 永生
- 4) valence fluctuating state 糟谷 忠雄
- 5) Sm B₆ の理論と実験 糟谷 忠雄

IV 不規則系

- 1) 強磁性合金中の環境効果 浜田 典昭
- 2) マフィンティンポテンシャル模型の CPA 赤井 久純
- 3) 不規則合金における電子相関 広岡 繁, 志水正男

V 電子-格子系

- 1) KCoF₃ における磁気励起とフォノンの相互作用の機構 鈴木 直
- 2) 金属強磁性体での電子-格子相互作用 金 德州

発表内要要旨

I 低次元系の磁性の発生

(i) 零次元系

この場合の典型的な例は不純物 s-d exchange 系、所謂 Kondo state の研究であり、既に長い研究の歴史があり、その本質については略解明されたとみてよいであらう。ここでは上述の意味での磁性の発生は起らず、その critical fluctuation に伴った異常現象が観測されて居るわけであるが、本研究会に於ては 2 ケの不純物スピン系への拡張した試みが報告された。これは現実の有限濃度スピン系における稀薄領域からスピングラス領域への第一歩とも考へられる。

(ii) 一次元系

典型的な例として最近大きな関心を呼んで居る TTF-TCNQ に関連した一次元パイエルス転移のレビューがなされた。高温では Spin Density Wave と Charge Density Wave の両方の fluctuation があり、むしろ SDW の方が強く現はれるが T_c に近付くにつれて CDW の方が優勢になり T_c で CDW に対応したパイエルス転移が起るとゆう picture が紹介された、しかし乍ら問題の異常抵抗の方は未だはっきりした model が確立されて居ない。一方層状結晶の稀土類ダイカルコゲナイトの Fermi 面は稀土類金属或は Cr と類似の擬一次元的 nesting を起し易い情況にあり、それに伴った CDW の発生が報告されて居るが、(一種のパイエルス転移) その ordering に付て Cr と類似の手法による詳しい計算結果が報告された。又パイエルス転移の機構を singlet ground state (これも exchange と結晶場或は spin-orbit による spin queching の競走による典型的な磁性発生機構の一つである) 系に対するモデルハミルトニアンを用ひて書直す試みも紹介された。

(iii) 二次元系

結晶構造的な二次元格子系の磁性の発生に關しても種々の興味ある現象があるが、本研究会に於ては表面磁性の特性に関するレビューがあった。バンド理論の立場からも内部に於る磁性が表面で消失する dead layers の存在及び逆に表面に於て磁性の発生する active layers の存在の可能性の指摘があった。一方液体 He 上の 2 次元電子系の Wigner lattice の形成の問題、或は Bi 等に強磁場を加へて最低 Landau level に押込んだ時の擬二次元の ordering の問題等も議論された。

II 3d バンド磁性の発生

バンド弱(反)強磁性の分子場を越えた全局的理論の展開は守谷等により精力的になされ

て来たが、今回はその拡張として Mn Si に於て最近詳細に実験のなされた遍歴電子系の弱いスクリュー構造の理論が報告された。特に超音波吸収にみられる Tc 近傍の二重ピーク構造を Mn P に於るとは異った遍歴電子系特有の性格としたのは注目される。一方相関の強い遍歴電子系を扱う有力な方法の一つである Gutzwiller の方法を有限温度に拡張する試みが話され、特にその時の問題点であるエントロピーを如何に計算するかに付ての提案があった。又遍歴反強磁性体のスピン波の計算結果及び 4 体スピン相互作用がスピン構造に及ぼす効果に付ての報告があった。

III 4 f バンド磁性の発生

4 f 磁性は従来は最も典型的な局在磁性でありその相互作用は専ら伝導電子等を媒介とした間接相互作用として理解されて来た。しかし最近の試料作成の進歩により 4 f レベルが丁度フェルミ準位上に位置して大きな valence fluctuation を示す物質が純良に得られる様になり、4 f バンド（擬粒子）磁性の問題が活潑に論議される様になった。先づそのレビューが行はれ d (バンド) - f mixing を中心に考える dense な Kondo system として把える考え方と p (valence band) - f mixing によって先づ f バンドが作られ (0.1 ev の order) それに lattice polaron, magnetic polaron, correlation effect によって narrowing を受けた狭いバンド (0.01 ev の order) で d - f mixing が働くとする立場のあることが紹介された。次に東北大実験グループにより詳細な実験の行はれた Sw B₆, E_u B₆ について後者の立場でよく多くの異常性質（磁性、伝導等）が説明出来ることが示された。又稀土類磁性半導体に対するバンド計算の現状が報告された。4 f バンドを除いては charge transfer も含めた self consistent field の方法で良く合うが、4 f の位置が今後の問題として残って居る。

IV 不規則系、電子一格子系

強磁性合金中の各サイトの磁気能率の発現過程を single site CPA を拡張した形で議論された。又全局的電子状態を求める試みがなされた。

一方 KCo F₃ 中の磁気励起 (Frenkel type magnetic exciton) と phonon との相互作用に付ての考察、及び金属強磁性体における電子一格子相互作用に付ての電子の screening 効果に付ての新らしい観点からの考察がなされた。

むすび

以上各分野の最近の発展が紹介され活潑な議論がなされたが、初めてのことでもあり全体の統一的観点の整備とゆうところ迄は至らなかった。なお要旨は世話を人が独断でまとめたものであり、内容の紹介としては甚だ不備なものである。詳細を知りたい方は直接発表者にお問合せ願ひます。（糟谷記）

短期研究会報告

「真空紫外領域の物性」

開催期日 昭和52年6月30日，7月1日

開催場所 東京大学物性研究所 旧棟一階 講義室

司話人 小 塩 高 文 (大阪市大・原研)

石 井 武比古 (東北大・理)

菅 野 晓 (物性研)

神 前 熙 (物性研)

真空紫外領域の光による物質の研究が、適當な光源の欠如によって発展が遅れていたが、シンクロトロン放射(SOR)の利用によって急速に進歩したことは、今ではよく知られている。我国では、世界に先がけてSOR利用による分光研究をスタートさせたにもかかわらず、現在では、世界の主流より遅れてしまった。この方面的分光研究をより進展させる期待を抱って、300 MeV電子ストリーリングが完成し、光学的なデータを提供はじめた。一方、これまで我国における唯一のSOR光源であった1.3 GeV電子シンクロトロンを用いた研究も、物性研共同利用研究が軌道に乗って順調に進み、昨年度は興味深い多くの成果が得られた。この機会に、今後、真空紫外領域の研究をすすめていくにあたって、我が国が遅れている新しい研究の方向を探る目的で、SOR分光の周辺の勉強をしようというのが、この研究会の第一の目的である。また、昨年度従来のSOR光源によって得られた成果も、新しい試みと、従来の研究の着実な進展の両者が共存し、相互に連絡の少ない研究者の間で結果を披露し合って、互に批判、討論をし、切磋琢磨しようというのが第二の目的であった。

プログラムは後に示すが、二日にわかれており、第一日目は、昨年度の研究成果で、すべて極めてホットなオリジナルである。第二日目は、解説を中心とした周辺の勉強である。第一日に発表された仕事のうち、気体の分光実験が三つあり(笹沼、石黒、森岡氏ら)、それらは中村正年氏を中心としたグループの研究で、SF₆とH₂Oに対しては、いくつかの新発見を含むものであった。また、N₂、COに対する仕事のように、光電子分光法を採用(森岡氏)、成功していることは、これが世界の潮流であるだけに、高く評価されるものである。固体分光では尾中龍猛氏のグループと小貫英雄氏のグループが、三元化合物に挑戦している。新種の物質についてスペクトルを手にした時、はじめは茫漠として捕えどころのないことに戸惑うものであるが、スペクト

ルに多少にぎやかな構造があることもあって、励起子を主にして、巧みに定性的理解にもついていたのはさすがである。尾中氏らの場合も小貫氏の場合も、光吸収（反射）スペクトルと光電子分光のデータを結合させて解析している点が特長で、あの手この手で手品の種類を多く組合わせれば、それだけ、複雑なことが言える理屈である。この仕事で尾中グループがSORの偏光性を利用した実験をはじめて成功させたことは特筆されるべきであろう（斎藤節子氏）。江尻氏のグループは、以前から、金属の光吸収スペクトルを調べてきたが、今回はその一環の報告であった。究極のねらいは液体金属にあるようであるが、今後の発展が期待される。塘氏らのグループはSORによって励起された軟X線の放射スペクトルを得ることに成功した。基底状態で満されているバンドからの電子遷移を調べるには光電子スペクトルか放射スペクトルを測定するのがよいが、このような螢光励起による放射スペクトルは、表面に鈍感でバルクの情報を提供するという点で価値が高い。今後は、この方面の主流の研究になっていくものと思われる。以上は物質の電子状態を研究しようというものであったが、昨年度は分光学とは本質的に異種の研究が出現した。塩田氏らは、軟X線によるポリスチレンラテックの小角散乱の実験に成功し、SORの利用がこの方面的研究に如何に有用であるかを示した。また難波氏らのグループは、軟X線によるリソグラフィーの実験に成功し、超LSI開発にかかる基礎研究として、この種の研究を一躍世界の最前列にまで推進させた。ここで行われたこれら二種の研究は、分光における尾中グループの偏光実験、塘グループの螢光励起の実験、中村グループの光電子分光実験とともに、従来の殻を打破る方向の研究であるといえる。小塩氏のグループは、以前から標準光源としてのSORの特性を調べてきたが、このグループもまたそのデータを質・量ともにかなり充実させているのがうかがわれた。核研の1.3GeVシンクロトロンに対するこのグループのデータの貯積は、技術上の基礎データとして、盤石の重みを持ってきたといえる。

SOR-RING（物性研300MeV電子ストリジリングの通称）は、当初の設計目標を突破して高精能をもつことが明らかとなつたが、光学的データは、まだ実験がスタートしたばかりであるのと、各種測定系が調整中であることにより、まだはなやかではなかった。本研究会ではSOR-RINGとその周辺、今後の運用等につき、物性研の関係者から、二・三の実験データをmajieして、紹介が行われた。

第二日目の、渡部氏の話は、とくにSOR分光にこだわらず、広く原子分子の励起素過程につき解説していただくことを意図してなされたものであった。励起断面積を支配する一体的および多体的の両方の諸効果について、わかり易い、実験家むきの解説が行われた。岩田氏は、いろいろな分子を例にとって、紫外の分子スペクトルの特徴を述べ、その解析の方法につき解説した。とくに電子相関を取り入れた計算の重要性とか、従来の計算では見逃されていた高次項の重要性を

情熱的に述べられたのが印象的であった。

最近諸外国において、真空紫外領域の分光技術に、ホログラフィック回折格子とか透過型回折格子とかの素子の進歩が著しく、また、放射の検出技術もそうとう進んだので、この方面で碩学として知られる佐々木泰三氏がこれらの解説を行った。もう少し講演時間が欲しかったような気がした。

現在我国がこの分野の先進諸国に比べてもっとも遅れているのが表面物理とEXAFSである。SORを利用した表面物性の研究は、光電子分光の進歩によって、SOR物性の中のかなり大きな分野を占めているにもかかわらず、我国ではSORによる表面の研究は全く行われていない。恩地氏は、SORにこだわらずに表面そのものについて、豊富な実験例を示しつつ、解説された。SOR分光研究者が表面の研究に移動することもあるが、表面屋さんもSORの利用を考えることが重要であろうと思われた。従来、我国のSOR分光は、気体の場合を除いて、無機物の研究のみに使われてきた。有機化合物の極紫外スペクトルにはどのような物理と問題点があるのかを勉強する目的で原田氏が解説を行った。全体的に素人によくわかる面白い話であったが、ここでもまた、有機の人が、物性研のSORを利用してくれたらよいのに、という印象をもった。

SOR分光の花形は光電子分光である。これによってSOR分光の価値も一段と高くなるといってよい。我国はこの分野でもかなり遅れているが、黒田氏は、豊富な経験と博識をもって、SORにこだわらず、光電子分光全般にわたって解説した。これは現在のこの方面的水準を網羅したものであり、それのみで十分興味ある話であったが、専問的には、氏の研究室においてなされたサテライトの実験のオリジナルな話が面白かった。

光電子分光、表面と並んで、新しいSOR分光の三羽鳥の一羽がEXAFSである。それなのに！ 我国では全く研究が行われていない！

「エクサフス？ それ何ですか？」という次第である。これに答えるべく行われたのが小谷氏の話である。小谷氏は、そもそもEXAFSとは、というところから始めて、どうやって何がわかるか、現在どのレベルまできている、という話を短時間にもかかわらず、要領よく、わかりやすくまとめられた。EXAFSは、硬いX線について行われる研究がほとんどであるが、軟X線で計画している人達には、心中秘かに期せしめるものがあったと思う。山口氏は、氏のグループで最近行われたアルカリ金属とAlおよびその合金を中心にして、最近のデータを解説した。エネルギー・バンドの話と多体効果の話があり、地味ではあるが、物理的には重要なデータの抽出できることを示した。

以上、簡単に全体的印象を述べたが、もう少し具体的に内容を示すために、以下にプログラムと、講演者より寄せられた、講演の要旨を記すことにする。なを当日は、講演者の都合によって、

講演の順序を一部変更した。

プログラム

6月30日

- (1) SF₆ 分子の XUV 吸収構造 笹沼道雄(阪市大・工), 中村正年(筑波大・物理)
(2) H₂O 分子の XUV 吸収構造 石黒英治(阪市大・工), 増子治信(筑波大・物理)
(3) N₂, CO の光電離断面積 森岡弓男, 佐藤道博(筑波大・物理)
(4) KDP 属結晶の XUV 反射スペクトル 齋藤節子(明大・工), 尾中龍猛(教育大・光研)

- (5) KMgF₃, NaMgF₃ の励起子吸収帯

高橋晴夫, 尾中龍猛(教育大・光研)

- (6) 弗化物ペロブスカイトの光電子放出 小貫英雄(電総研)
(7) 多価金属およびその合金の極紫外吸収 江尻有郷(東大・教養)
(8) 軟X線領域における放射スペクトルの研究 塙賢二郎(阪府大・工)
(9) SORによる軟X線小角散乱 塙田安男(宮教大)
(10) SORの絶対測光 小塙高文(阪市大・原研)
(11) SOR軟X線露光法による超微細加工 難波進(阪大・基礎工)
(12) SOR-RINGの現状 北村英男(物性研)
(13) SOR-RINGによる光吸收実験Ⅰ 渡辺誠(物性研)
(14) SOR-RINGによる光吸收実験Ⅱ 佐藤繁(物性研)
(15) SOR-RINGの今後 神前熙(物性研)

7月1日

- (16) 原子分子の励起素過程 渡部力(東大・工)
(17) SOR光源を用いた分子分光と量子化学 岩田末広(理研)
(18) 最近の真空紫外分光技術 佐々木泰三(東大・教養)
(19) 固体の表面物性 恩地勝(京大・理)
(20) 有機結晶の極紫外分光 原田義也(東大・教養)
(21) SOR光電子分光 黒田晴雄(東大・理)
(22) EXAFSについて 小谷章雄(東北大・金研)
(23) 真空紫外領域での金属・合金の光学的性質 山口重雄(都立大・理)

(1) 「SF₆ の XUV 吸収構造」

笠 沼 道 雄 (阪市大・工)
中 村 正 年 (筑波大・物理)

核研 S Rによる SF₆ の L (2t_{1u}) 吸収測定では、2t_{1u} 電子が 4 個の励起状態 (6a_{1g}, 6t_{1u}, 2t_{2g}, 4e_g) へ遷移する吸収構造と、2t_{1u} 電子のイオン化に至るまでの Rydberg 系列が観測された。Dehmer らは、これらの吸収構造を説明するために、two well potential 模型を用いた。核研ではその後、SF₆ の価電子軌道電子の光吸収実験を積み重ね、VUV 域での巨大な吸収構造の並び、及びこの吸収構造に重った弱い振動構造の存在を観測した。これらの測定結果を解釈するに際し、巨大なスペクトル構造は、SF₆ の価電子が Dehmer の模型の内側のポテンシャルに束縛される励起状態へ遷移することに起因し、弱い振動構造は、価電子が外側のポテンシャルに束縛される Rydberg 状態への遷移と見做す。10 個の価電子軌道から 4 個の励起状態への遷移を考える場合、選択則から光学的許容遷移だけを選び出す。遷移に必要なエネルギーは、光電子スペクトル等から得られた軌道エネルギーと上記 L 吸収実験から得られた励起状態のエネルギーから定める。こうして得られた遷移エネルギーと VUV 吸収構造を対比した結果は実によい一致を示し、推論は正当づけられた。

弱い吸収構造は、P 対称性をもつ 4t_{1u} 電子が外側の Rydberg 軌道への遷移として考えられ、Quantum defect から、ns, a_{1g} (n ≥ 3) の Rydberg 系列と定められた。振動構造は 4t_{1u} 電子の強い結合性を示している。

以上の結果は、これまで断片的な測定で解釈がなされていなかった諸々の吸収構造に対しても、一貫した説明を与えることが出来た。SF₆ の S の外殻電子は (3s)² (3p)⁴ ではなく 3d 軌道へ移っていて、S - F 間の結合には d 軌道の混成が大きく寄与していることが、この結果からも明らかにされている。

(2) H₂O 分子の XUV 吸収構造

石 黒 英 治 (阪市大・工)
増 子 治 信 (筑波大・物理)

H₂O と D₂O の 1800 ~ 500 Å の吸収スペクトルを SOR を光源にして測定した。分光器には 50 cm 濱谷型単色計 (1200 本 1 mm の grating) の出口スリットをフィムカセットに置き

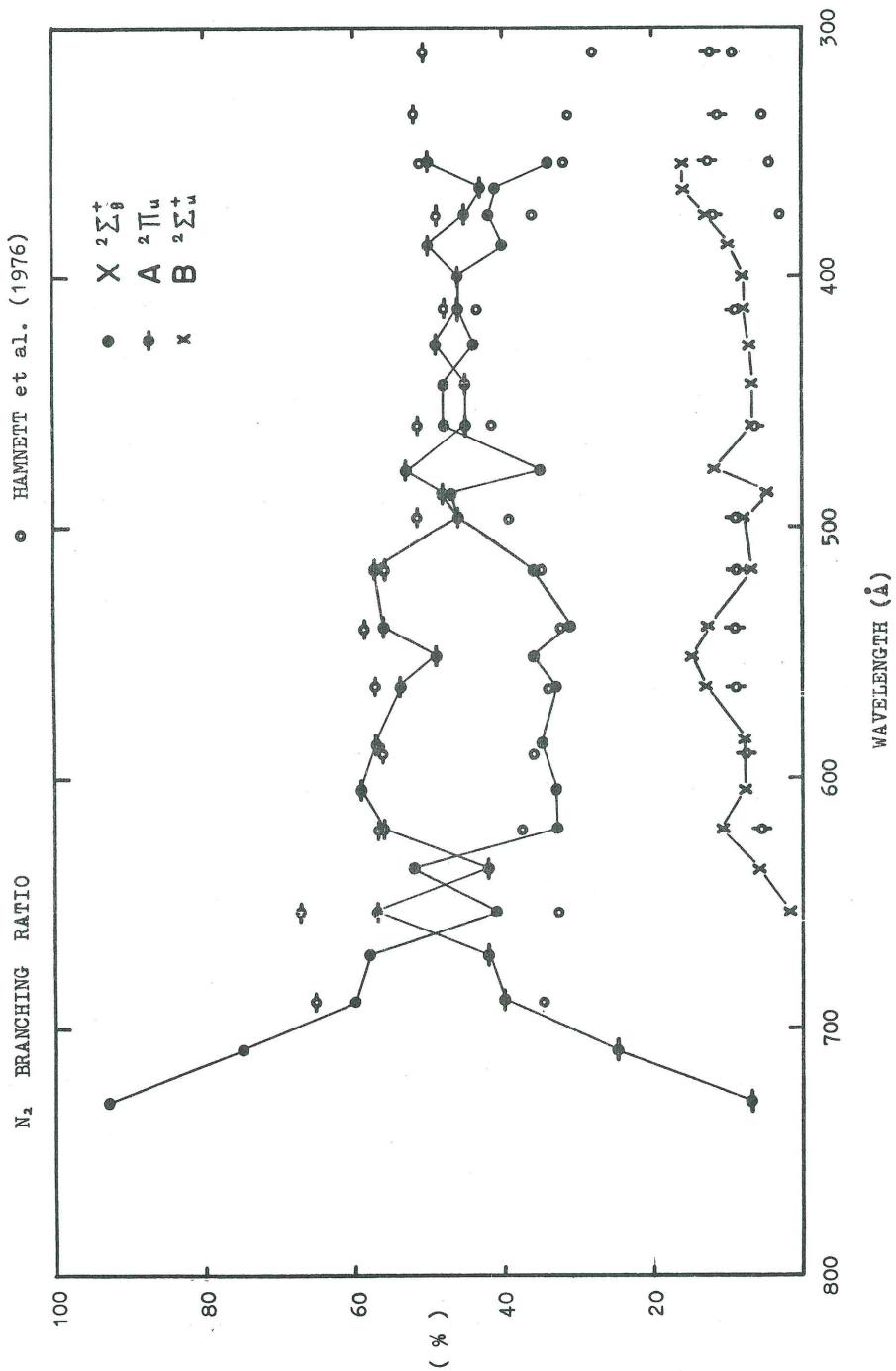
換えて使用した。 $1800 \sim 1130 \text{ \AA}^\circ$ の領域にはよく知られた $1b_1 \rightarrow 3p b_1$ の遷移による吸収バンドが観測される。 $1130 \sim 980 \text{ \AA}^\circ$ (980 \AA° は H_2O の第 1 イオン化ポテンシャル) には, Price によって C 及び D と名づけられた, それぞれのメンバーが非常に接近した二つの Rydberg series が存在するが, 今回の実験ではその C series は更に二つの Rydberg series から成る事が見つけられた。遷移エネルギーについての IVO 計算 (Goddard and Hunt) を参考にして, これらの series は $1b_1$ 電子の d-type Rydberg orbitals (nda_1 , nda_2 , ndb_1 , nda_1) への遷移に対応づけられた。又この領域には未だ帰属されていない多くのバンドが観測されたが, これらの多くは上記 Rydberg series の振動バンドとして分類された。 $1000 \sim 800 \text{ \AA}^\circ$ にはこの領域全体に拡がる強い連続吸収帯とその上に重って現れる非常に多くのバンドが観測される。これらのバンドは 2A_1 ($3a_1^{-1}$) へのイオン化に相当する光電子スペクトルとの対比の結果量子欠損 $\delta = 0.08$ (H_2O) or 0.05 (D_2O) をもつ $3a_1 \rightarrow nd$ Rydberg series ($n = 3$ から 10) の vibrational progressions として解析された。連続吸収帯は, $1b_1 \rightarrow 3sa_1$ 及び $3a_1 \rightarrow 3sa_1$ 遷移に基づく吸収構造との類似性及び $\delta = 1.38$ ($n = 3$ の時) をもつことから $1b_2 \rightarrow 3sa_1$ 遷移に帰属された。 $800 \sim 600 \text{ \AA}^\circ$ のバンドは, H_2O では 2B_2 ($1b_2^{-1}$) の光電子スペクトルとの比較の結果 $\delta = 1.38$ ($m = 4$ の時) をもつことがわかった。このことからこれらのバンドは $1b_2 \rightarrow 4sa_1$ Rydberg state に帰せられた。 D_2O では光電子スペクトルとの対応は余りよくないが, isotopic effect を考慮することによって $\delta = 1.43$ の値が得られた。

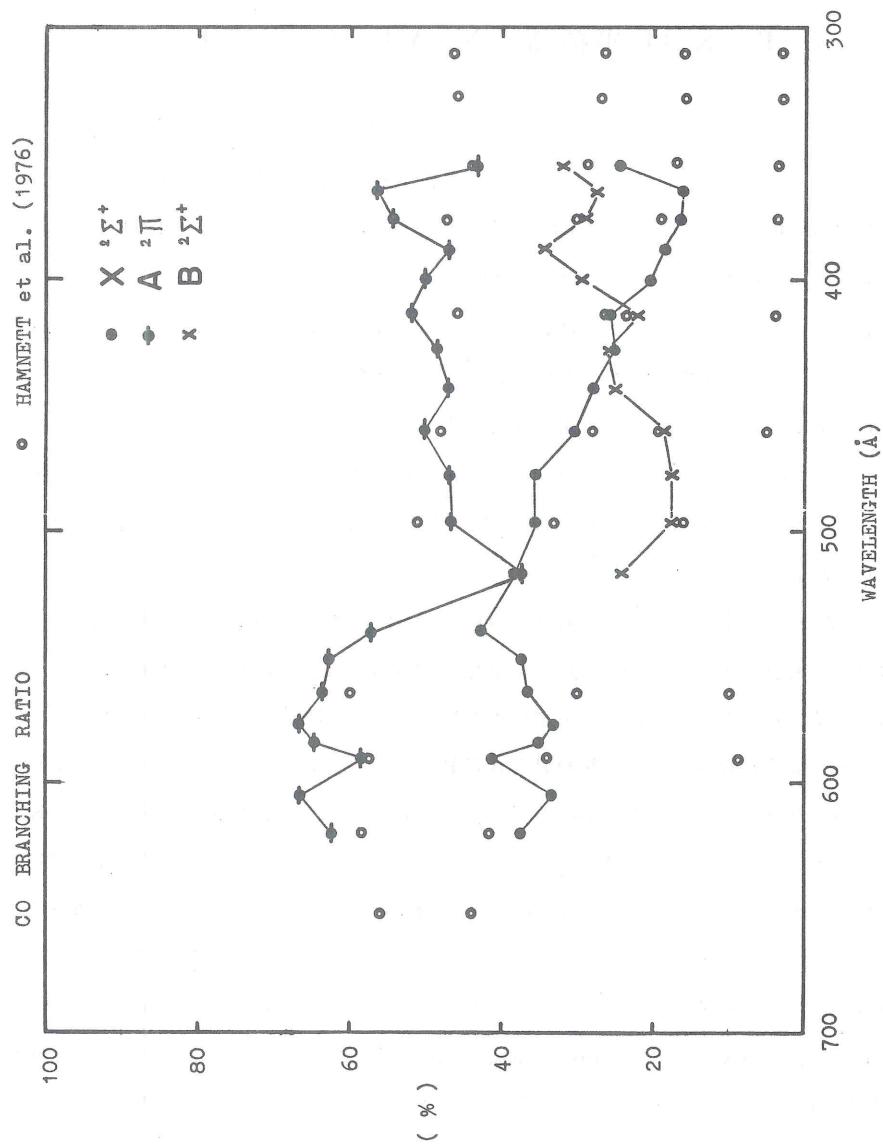
(3) N_2 と CO の光電離の branching ratio の測定

森 岡 弓 男 (筑波大・物理)

佐 藤 道 博 (筑波大・物理)

分子のイオン化部分断面積は, 上層大気と太陽光との相互作用によって起る現象(電離や解離)を研究する上で必要なものである。今回の実験では N_2 と CO の $X^2\Sigma$, $A^2\pi$, $B^2\Sigma$ のイオンの状態へ行く断面積の branching ratio を測定し, reasonable な結果が得られた。測定の方法は, 放出電子のエネルギーによってイオンの状態を区別し, 放出電子の相対的個数を測定する事により branching ratio を出す方法である。電子エネルギーアナライザーとしてはシリンドリカルミラー型を用いた。そして入射角として magic angle $54^\circ 44'$ を採用し, 非対称な角分布による誤差をなくした。結果は図に示されるように電子散乱のデータ (Hamnett et al 1976) とよく一致している。測定点は, 10 時間に一個程度しかとれないので, ばら





つきが大きい。実際はスムーズなカーブであろう。

(4) KDP 属結晶の XUV 反射スペクトル

齊藤節子（明大・工）

尾中龍猛（教育大・光研）

SOR を用いて KDP とその同属結晶の XUV 反射スペクトルを測定した。KDP 族結晶は一軸性結晶であり、このような低対称結晶では反射スペクトルを偏光を用いて測定しなければ正確な電子構造を知ることができない。SOR 光はもともと XUV 領域での偏光源としては最もすぐれたものである。しかし実際には水平方向の偏光だけでなく放射されるビームの広がりのため上下、斜方向に放射される光には垂直方向の偏光が含まれてくる。この中から水平方向の光のみを select するため、集光ミラーの直前にマスクを置き光を絞った結果、瀬谷型の分光器を通して出てくる光でも、 $1300 \sim 500 \text{ Å}^0$ の範囲ではほぼ 95% 程度の良い偏光度の光が得られることがわかった。

反射スペクトルの測定は KH_2PO_4 (KDP), $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$ (ADP), KD_2PO_4 (DKDP), KH_2AsO_4 (KDA) の 4 種類の結晶に対して $10 \sim 30 \text{ eV}$ のエネルギー領域にわたって行われた。その結果、水素放電管を使ってすでに測定されている低エネルギー側のスペクトルが偏光依存性をもち、KDP と ADP で非常に良く似たスペクトルであったのに対し、ここで得られたスペクトルの 15 eV より高エネルギー側では偏光依存性が小さく、KDP と ADP ではまったく異ったスペクトルを示した。このような結果から、KDP や ADP の低エネルギー側のスペクトルは主として anion である H_2PO_4^- 錯イオンの錯イオン内遷移であり、高エネルギー側のスペクトルはより深いエネルギー準位にある cation (K^+ , NH_4^+) に関係したバンドであることが明らかとなった。その他、これらのスペクトル測定から KDP で観測されている $\text{K}(3p) \rightarrow \text{K}(4s)$ の core exciton と考えられているシャープなバンドが KDA では観測されなかったことなど多くの情報を得ることができた。そして KDP 及びその同族結晶の電子構造を知ることができた。

(5) KMgF₃, NaMgF₃ の励起子吸収帯

高橋 晴夫 (教育大・光研)

尾中 龍猛 ("")

KMgF₃, NaMgF₃ はペロプスカイト型の結晶で、種々の物理的特性をもつ結晶でこの型に属するものは多い。我々は上の二つの結晶の基礎吸収帯の反射スペクトルを測定して、特に価電子帯励起子吸収帯に関し良い解釈を得た。価電子帯は F⁻ の 2p 軌道から成っており、Γ 点 ($\vec{k} = 0$) で Γ_{15} , Γ_{15} , Γ_{25} に分れている。伝導帯の底は K⁺ (Na⁺), Mg²⁺ の s 軌道から成っていて、Γ 点で Γ_1 である。 $\Gamma_{25} \rightarrow \Gamma_1$ は dipole 禁止遷移なので、基礎吸収端には $\Gamma_{25} \rightarrow \Gamma_1$ の二つの励起子が形成され観測されるはずである ($\Gamma_{15}^a \rightarrow \Gamma_1$, $\Gamma_{15}^b \rightarrow \Gamma_1$)。さらにこの二つの励起子は同じ configuration をもつために、Coulomb と exchange 相互作用により、互に混り合う。我々はこの混りを考慮して、価電子帯の line-shape を計算から求め、実験結果と良い一致を得た。計算によると、この混りによる励起子吸収帯の変形は非常に大きく、特に Coulomb エネルギーに対する変形は大きい。Coulomb エネルギーの大きさは 0.3 ~ 0.4 eV 必要であり、現在のところ、この値が適当かどうか検討中である。

(6) 弗化物ペロプスカイトの光電子放出

小貫 英雄 (電総研)

遷移金属化合物 AMF₃ (A=K, Rb; M=Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) は RbNiF₃ を除いて結晶構造はペロプスカイト型で、価電子帯を構成する 3p 電子をもつ F⁻ イオンの site symmetry は D_{4h} であって対称性が低く、そのため基礎吸収端にあらわれる励起子吸収の構造は、アルカリハライド等に比べると複雑である。我々は AMF₃ の吸収実験、ESCA 及び UPS 実験に引きづき更に電子構造を詳細に調べるため、光電子放出効率スペクトルとコレクターに阻止電圧を加えたときの効率スペクトルの変化をシンクロトロン放射を光源として直入射領域 8 ~ 35 eV で測った。その結果、KMnF₃ と KZnF₃ の場合に話を限ると、基礎吸収帯 A₁, A₂ を Γ 点における価電子励起子と解釈すると光電子放出スペクトルの実験と矛盾しない。KMnF₃ は KZnF₃ と比べて放出効率が小さく $1/2$ 程度で、又低速電子が多い。このことか

ら、逸脱光電子の散乱過程の中で遷移金属イオン $3d$ 電子の $d-d$ 遷移を伴なう非弾性散乱が大きな役割を演じているものと思われる。また、価電子帯及び内殻 $K^{+} 3p$ 準位からの光電子放出のしきい値が求まった。

(7) 多価金属及びその合金の極紫外吸収

江 尻 有 郷 (東大・教養)

d 殻電子をもつ多価金属の最外 d 殻による吸収端は、その多くが極紫外域 ($10 \sim 15 \text{ eV}$) に現われる。連続光源としての SOR を用い、Zn, In, Ga, Sn, Pb, Sb, 及び Bi 等について、それらの吸収端に注目して $10 \sim 40 \text{ eV}$ で吸収スペクトルを測定した。各々 $nd_{5/2}$ および $nd_{3/2}$ 成分に分離してそのプロファイルを調べ、見出されたピークが、バンド構造から期待される伝導帯の状態密度の極大と、多くの場合、定性的によく対応することが判明した。各々の吸収端エネルギーは 0.1 eV の精度で決定された。Sb $N_{4,5}$ ($324, 33.7 \text{ eV}$) 吸収は始めて明らかにされ、Bi $O_{4,5}$ ($243, 27.4 \text{ eV}$) と同様、吸収端に鋭い山が認められ、高エネルギー側の明確な 3 ケ (Sb) ないし 4 ケ (Bi) の山々と共に状態密度の極大によく対応する模様である。従って吸収端の鋭い立上りと Fermi 準位との対応が不明確になる。一方 Pb $O_{4,5}$ ($18.04, 20.70 \text{ eV}$) では、 O_5 吸収の立上りが、バンド構造より、ほぼ Fermi 準位に対応し、高エネルギー側の微小構造も状態密度に対応することが判明。吸収端から、約 10 eV 高エネルギー側にも吸収帯が認められたが計算はない。Ga $M_{4,5}$ ($18.46, 18.92 \text{ eV}$), In $N_{4,5}$ ($15.75, 16.75 \text{ eV}$) 及び Sn $N_{4,5}$ ($23.96, 25.0 \text{ eV}$) 吸収は、ほぼ階段状の吸収構造を示すが、 $d_{5/2}$ 及び $d_{3/2}$ を $3:2$ の比で分離すると、各々吸収端に比較的鋭い山が現れ、高エネルギー側に第二の山も出現し、状態密度の極大との対応も期待される。しかし、一方、強度比が原子の場合と同じとする仮定が正しいかどうかの問題が残る。Sb-Bi 合金の Bi $O_{4,5}$ 吸収端を Sb-15 at% 及び 60 at% で観測、吸収端の鋭い山が次第に広がり、60 at% で二つの成分を示して、Sb の山に連なることが判明した。なお、解析は続行中である。

(8) 軟X線領域における放射スペクトルの研究

塘 賢二郎 (阪府大・工)

3d 遷移金属化合物の X線スペクトルや XPS には、これらの物質に特徴的な励起状態に関する多重項によると思われる構造が見られ大変興味深い。一般に化合物の価電子スペクトルは帯理論では説明のつかない構造を示すものが多い。また絶縁物の内殻吸収スペクトルでは内殻励起子の存在が指摘されているが、それを確かめるため放射スペクトルに内殻励起子状態からの radiative decay が観測されるかどうか調べることは興味深い。しかしこれらの物質の放射スペクトルを電子励起法で測定するとき、ある物質は明らかに分解する。その場合蛍光励起法による測定が望ましいが、軟X線領域では蛍光収量が極めて小さく特に蛍光励起用の一次 X線の光源に強力なものがなく、蛍光スペクトルの測定例は数少ない。

本研究の第一の目的は SOR を励起光とし色々な化学結合状態にある遷移金属化合物の軟X線放射スペクトルを測定することであり、第二の目的は LiH, LiF のような電子配置の簡単な物質の価電子スペクトルを測定し、それが何を反映しているかを探索することである。第三の目的は先に述べた内殻励起子の radiative decay の問題である。そのためまず軽元素 (C, B, Be, Li, LiF 等) の SOR 励起 K 放射スペクトルの測定を試み、その可能性を探索する。

今回は試料と分光計入射スリット間の距離を約 3 cm にし、微弱な蛍光励起スペクトルの測定効率を改善した。その結果、炭素 (Graphite) 硼素、ペリリウムの SOR 励起 K 放射スペクトルの測定に成功した。スペクトル形状およびエネルギー位置は電子励起による場合とほぼ類似し、核研電子シンクロトロンは軟X線領域における蛍光励起起源として十分使えることが証明された。金属リウムの K 放射スペクトルには 525 eV の位置に半値幅が約 0.6 eV の尖鋭な放射ピークが観測された。現在のところ、この構造の説明はついていない。

(9) SOR による軟X線小角散乱

塩田 安男 (宮教大)

従来、我々は X線管より発生する炭素 K 線を用いてポリスチレンラテックスの X線小角散乱を測定してきた。しかしながら X線管を使用する限り強度、分解能などに限界がある。幸いに ES-

SORを昨年利用できた。その結果をX線管の場合と比較すると次の通りである。(1)X線管で得られたパターンと同じパターンを得るのに必要な露出時間は約200分の1である。(2)X線管では5次迄しか得られなかった干渉ピークがSORを用いると11次まで明瞭に観測された。このことはSORの場合、スペクトル幅およびSOR光のdivergenceが炭素K線使用の時に比べて極めて小さいからと考えられる。SORは軟X線小角散乱の研究にとって甚だ有用な強力な光源である。

本年度も幸いにSORを利用できる機会に恵まれた。本年度の目標は、(1)昨年の実験の再現性(2)実験条件の変更、(3)炭素K吸収端前後の波長によるラテックスの小角散乱写真の撮影、(4)使用ラテックス球の粒径を変える……以上である。

本年度の結果を以下述べる。(1)昨年度と同じ実験条件で更に高次数まで干渉ピークを鮮明に得ることができた。(2)実験条件を変えた時の散乱図形の変化について、二・三のデータを得ることができた。(3)炭素のK吸収端(43.6 \AA)をはさんで長波長側 48 \AA 、および短波長側 40 \AA の波長を用いて、ラテックス球の小角ピンホール写真を撮影できた。これらについて吸収の効果を現在研究中である。

得られた小角散乱図形のミクロフォトメーター曲線の解析から、干渉関数が求められた。ラテックス球は二次元の六方格子を形成していると考えられる。これは超高圧電子顕微鏡によって得られたラテックス球の写真と良く符合する。

以上、今までの研究結果を報告した。今後は、写真測光から光電測光に移りたいと考えている。

(10) SOR 絶対測光

小 塩 高 文 (大阪市大・原研)

SOR光の特性を定量的に測定して、SORの1次標準性を確めることを目的とする。特に、黒体放射を標準として使えない領域(240 nm 以下)で、有力な光源に仕立てることを目標とする。実験は次のサブグループに分けて実施している。

i)軌道内電子の分布(スポット)の撮影(名大)：イメージインテンシファイアを用いてスポットの形状を撮影し、電子のスポット内強度分布はほぼガウス型で、

半値全巾は

$$\text{縦方向 } Lh (\text{ mm}) = 8.2 \times E (\text{ MeV})^{-\frac{1}{2}}$$

$$\text{横方向 } L_w (\text{mm}) = 5.1 \times E (\text{MeV})^{-\frac{1}{2}}$$

であらわされることを明らかにした。

ii) 可視成分の角度分布(計量研)：フォトマルチプライヤ，干渉フィルタ，偏光フィルタ等を用い，600 nm前後の領域で，強度は10%の精度で理論と一致し，角度分布と偏光成分比についても理論と合致することを確かめた。

iii) 可視及びUV領域の放射束(電総研)：積分球・分光計方式で480 nm付近の分光放射束を測定し，5%の精度で理論と一致することを確かめた。また，SORが少くとも局部的には1次標準性を持つことを認めて，2次標準重水素ランプの目盛づけを210 nmまで延ばした。

iv) UV成分の強度と角度分布(阪市大，東教大，東大，電総研)：狭帯域イオン箱で120 nm域の強度を測定し，12%精度で理論と合致することを確かめた。角度分布も理論と一致し，判定には軌道内電子分布も考慮に入れなければならないことを示した。

v) X線領域の強度と角度分布(電総研，阪市大)：SSDと吸収体により，6 KeV(0.2 nm)付近の強度が50%の信頼度内で理論と一致することを確かめた。角度分布測定の結果は，スポット撮影から得た電子分布よりやや狭い分布に対応していた。この項は次回も引き続き測定する予定である。

(11) SOR軟X線露光法による超微細加工

難波進(阪大基礎工)

半導体デバイスの高密度化，高速度化を実現するには，サブミクロン加工という大きな技術の壁を破ることが必要となる。従来のLSI技術の主体となってきたフォトリソグラフィ技術は光の回折限界から使用できず，これに代る新しい技術が必要となる。

このような背景のもとに，電子ビーム露光法やX線露光法が注目されており，これらの組合せが，サブミクロン領域におけるリソグラフィの有力な方法と考えられる。X線リソグラフィは一つのパターン転写技術であり，通常はX線源として，AlのK α 線などを使用するが，この場合X線ビームの発散角が大きいため半影ボケが生じたり，又強度が十分でないため露光時間が長くなるという問題点がある。

一方，SOR X線は広い波長範囲にわたって，強度も大きく，X線ビームの発散角も極めて小さい。従ってリソグラフィ用として理想的なX線源と考えられる。このような観点の研究は，最近，DESYを使用したIBM，ACOを使用したThomson CSFから報告されている。本

年5月並びに6月に行なわれたリソグラフィに関する国際会議においても、Si, Si₃N₄, マイラー等各種マスク基板材料を使用して、レジスト上に転写されたパターン精度をしらべ、分解能、露光時間が改善されること、1～5 nmの波長範囲が有効であること、等が報告された。

我々はINS-ESからのSORX線を用いて、厚さ約3 μのSiマスク基板上にイオンエッチング法により作られた精密なAu薄膜パターンマスクを通して、Si基板上に塗布したPMMA及びP(MMA-CO-MA)レジストに露光する実験を行った。その結果、通常のX線露光に比較して必要露光時間を短縮できること、半影ボケの影響が極めて小さくなること、又線巾に対する加工深さの比が極めて大きい(線巾～0.2 μm, 深さ～2 μm)超微細パターンが得られること等、いくつかの知見を得、SORX線がリソグラフィ用として有力な方法であることを検証した。

(12) SOR-RINGの現状

北村英男(東大・物性研)

SOR-RINGは1974年12月に完成し、最初の試運転において数mA程度の蓄積電子ビームを得ることができたが、この時点では蓄積電子電流は低いばかりでなく、電子ビームの寿命も短かく、光源としての性能を満足するには程遠いものであった。しかしその後SOR-RING建設作業グループがくり返し行ったリングの試運転の結果、解決すべき問題点が明らかにされ、75年より76年にかけてリング構成部分(高周波加速系、電磁石系、ビームトランスポート系)の大巾な改造を行った。その結果、リングの性能は飛躍的に向上し、現在では最高蓄積電子電流330 mA, 100 mAにおけるビーム寿命71分を記録するに至り、また360 MeVの定常運転も可能となった。この場合SORの強度が最大になる波長は100 Åとなり、実用波長領域の短波長の極限は20～30 Åまで拡大されることになる。以上のような性能向上の要因は、上に述べた改造の他に、SOR-RINGのインジェクターである核研シンクロトロンの動作状況が最近非常に安定してきたことと、SOR-RINGの運転技術そのものが、経験の蓄積によってレベルアップしたことがあげられる。

SOR-RINGの動作特性の調査は、77年3月に基本的な部分については終了しており、設計パラメータのかなりの部分を測定値とおきかえることができた。また蓄積ビームの形状も、種々の動作点において詳しく調べられ、興味ある結果を得ることができた。しかし未だ重要な問題点が残されている。それは分光系の出口スリットにおける光強度の安定性と再現性である。こ

これらの特性はリング内ビームの位置とビーム断面の形状により、著しく影響を受けることが明らかにされている。ビームの位置と形状はリングの動作状況に極めて敏感であるので、リングの運動には充分の注意を払う必要がある。分光系をも含めたSOR-RINGの光源用加速器としての総合的なチェックは今後の課題である。

(13) SOR-RINGによる光吸収実験 I

渡辺 誠（東大・物性研）

SOR-RINGの第2ダクトに付属する変形ローランド型分光器の性能と、これを用いた銅ハライドの $Cu^{+} M_{2,3}$ 吸収の測定について報告した。

変形ローランド分光器は、菅原等の設計によるSOR専用分光器で、その特徴は入口スリットの運動方向と出口スリットの運動方向が固定している点にあり、機構は比較的簡単である。2400本/mmの回折格子を用いたが、 $90 \sim 200 \text{ \AA}$ で測定が行える。SOR-RINGのエネルギーを200 MeVから360 MeVにわたって変化させると、SORのスペクトルの強度は、ほぼ理論値に従って変化するが、300 MeV以上で用いるのが実用的であった。Bausch & Lomb社のブレーザ角 $1^{\circ}0'0''$ の回折格子と $2^{\circ}0'5''$ の回折格子を比較したところ、 $1^{\circ}0'0''$ のものによるSORのスペクトルは 140 \AA 付近にピークを持ち、 $2^{\circ}0'5''$ のものは 170 \AA 付近にピークを持った。迷光の成分は主として長波長成分（数 100 \AA 以上）であった。回折格子（レプリカ）に付着したほこりをとるため、乾燥窒素をふきつけたり、コロジョンを塗布してこれをはがしたりしたが、すべて分光効率を低下させることになった。

銅ハライドの $Cu^{+} M_{2,3}$ 吸収は 75 eV 付近ではじまる。金属銅では $M_{2,3}$ 吸収は dip のようになるが、銅ハライドの $Cu^{+} M_{2,3}$ 吸収は 2 本の弱い吸収ピークとして観測された。2 本のピークの分裂から $M_{2,3}$ 準位のスピニ-軌道分裂およそ 2.7 eV と推定される。この値は周期律表で隣の元素のイオンである Ni^{+} の $M_{2,3}$ 分裂（2.25 eV）と Zn^{++} の $M_{2,3}$ 分裂（3.2 eV）の値との中間である。2 本のピークは塩化物から沃化物に移るに従い、短波長に移動した。

(14) SOR-RINGによる光吸収実験 II

佐藤 繁（東大・物性研）

SOR-RINGから放出されるシンクロトロン放射を光源として、アルカリ金属（Na, K,

Rb, Cs) 蒸着薄膜の極紫外領域(10~25 eV)における吸収係数を測定し、光学的伝導度を求めた。測定系(BL-1)は、差圧排気系、前置鏡槽、1m縦分散瀬谷型モノクロメータ、超高真空試料槽(測定時の真空度 10^{-9} Torr 台)からなっている。2階に据付けられた分光器にシンクロトロン放射を反射・集光するため、トロイダル鏡を内蔵した前置鏡槽が1階に設置されている。高次光成分を少なくするため、Sn, In, LiFの蒸着薄膜をフィルターとして用いた。同時に Al でコートしたトロイダル鏡を用いて 400 \AA 以下の成分を落した。光路調整のため、電子を蓄積した後、光強度が最大になるように前置鏡及び偏向電磁石磁場を調整した。吸収係数はアルカリ金属を約 500 \AA の厚みで平均7回重ね蒸着し、透過光強度を測定して決めた。蒸着膜厚は、素子を液体窒素で冷却した水晶振動子膜厚計で監視した。透過光強度一膜厚曲線の勾配から吸収係数を求めた。

アルカリ金属の極紫外域吸収スペクトルでは、最も深い内殻からの遷移に対応した np スペクトル(Naの場合 n=2, K~3, Rb~4, Cs~5)が観測される。Cs 5p スペクトルでは 11.7 eV, Rb 4p スペクトルでは 14.85 eV, K 3p スペクトルでは 18.2 eV 付近から吸収強度が急激に立上がり、その後指数関数的に減少するいわゆる“吸収端異常”を示している。吸収端の光学的伝導度は、現在のところ、Cs で $3.0 \times 10^{14} \text{ sec}^{-1}$, Rb で $2.6 \times 10^{14} \text{ sec}^{-1}$ K で $2.1 \times 10^{14} \text{ sec}^{-1}$ 程度であり、理論的予測に近い値が得られている。K では、 $3p_{\frac{1}{2}}$ 内殻準位からの遷移に対応する第1吸収ピークと、そのスピン軌道分裂対である第2吸収ピークが近接して観測される。これに対して、Rb, Cs では分裂対は肩構造として観測されるだけで、明瞭なピークを示していない。np 吸収端よりも高エネルギー側には、いくつかのこぶや肩構造を伴った強く幅広い吸収帯が現われる。固相、気相両方のデータがある Na L_{2,3} 吸収のスペクトル形状の類似性から推測すると、この吸収帯は原子的遷移に起因して生ずると考えられるが、まだ確定的ではない。Na の場合、バンド計算が指摘するような強い吸収構造は、15, 19 eV 付近には見出されなかった。

(15) S O R - R I N G の今後

神 前 熙 (東大・物性研)

物性研SOR研究施設で管理運営するSOR実験の今後の進め方について概説的に報告したい。

(1) 近い将来; S O R - R I N G の性能向上は昨年度著しい進展を示し、マシンとしては一応完成の域に達した。SOR第3ダクトについては、近く改修を行った上で、本年度後半から共同利

用実験が開始される。第1, 第2ダクトにおいては、目下分光測定系の整備を兼ねた物性実験が行われており、来年度後半からの共同利用実験の開始が予定されている。この間、客員部門（S O R物性）から S O R施設及び物性研部門（神前・小林研）へのバトンタッチを行って、今後の定期的運営にそなえる「習熟・整備」の期間を必要とする。なお S O R-R I N G全体の共同利用のためには、データ処理系の整備や新ピームライン増設の必要が予想され、近く S O R-R I N G実験に対するユーザー側の計画につき、アンケートをとることを考えている。

(2)遠い将来；たとえば 10 年後の時点を考えると、物性研・核研の将来計画及び東大の立川移転など未定の要素が多いが、基本的には次のように考えている。分光学の発展をふり返ってみると、新しい技術開発を契機とする画期的な展開がいくつかなされており、S O Rの利用もその一つであるが、今後においても、より高輝度・より高安定度をもつ S O R光源を実現することによる新しい研究の発展が期待される。S O R研究施設の将来としては、このような技術開発に重点をおいて、Photon Factory 計画とは相補的な特徴を發揮する方向に進んでゆきたい。

(16) 原子・分子の励起素過程

渡 部 力 (東大・工)

原子・分子に対する光励起素過程は今日の S O R利用の中でも、物理学上最も基本的な問題を含んでいる。このために、励起素過程に関連をもつ現象は、S O R利用の中でも非常に広く存在する。ここではそのうちでも現在または近い将来の問題をトピックス的にとり上げることにする。

1. 光吸収の遷移確率、光子のエネルギーが 10 keV 以下であれば、双極子近似でよいとされている。この場合、原子・分子に対する光子吸収の断面積はおよそ次の三つの場合に分けて論ずることができる。(1)中性原子・分子の外殻電子の励起・電離、(2)負イオンの外殻電子の励起・電子離脱、(3)原子・分子の内殻電子の励起・電離である。(1)はクーロン・ポテンシャルの特徴として、リドベルグ状態が一般にあらわれるが、(2, 3)では電離の閾値の近傍で強い共鳴吸収があらわれる。これは励起される電子の感ずるポテンシャルが short-range であるためである。また結晶などで観測されている K 吸収端近くでの吸収断面積の振動 (EXAFS; Extended X-ray absorption spectroscopy) が分子 (Br_2 , GeCl_4) においても観測されている。
2. 電子相関、Hartree-Fock からのはみ出しとしてあらわれる電子相関は、励起素過程で

多くの現象に影響を及ぼしている。そのうちのいくつかの例として、Wannierの閾値則、PCI(Post Collision Interaction), Forbidden Shake-up(Dipole shake-up)について紹介する。これらはいずれも、遷移の終状態の Hartree-Fock 表示からのずれとして説明される。これを動的電子相関といふこともある。終状態での連続状態にある電子の運動エネルギーが小さくなると、この電子と他の電子との相互作用の効果が大きくなるために、ここに掲げた種々の現象があらわれる。

(17) SORを使った分子分光と量子化学

岩田末廣(理研)

- (1) Ne原子の2p電子については、光イオン化電子の角度分布の励起波長依存性が広い範囲について、Krauseらによって測定されている。100eV位までは $1 - \beta/2 P_2(\cos\theta)$ の形に分布しており、 β も理論と実験の一貫性は良好である。ところが1keVを越すと、 $P_1(\cos\theta)$ や $P_3(\cos\theta)$ の項を加えて解析しなければならなくなる。このことは、角度分布には、比較的低エネルギーから、電気四重極や磁気二重極遷移からの寄与を考慮しなければならないことを意味しており、詳しい理論的研究が待たれる。
- (2) 簡単な分子の内殻電子のイオン化しきい値付近に観測される吸収端には、かなり分子の個性があらわれる。SOR光を使った実験や電子エネルギー損失スペクトルの結果をみると、ほぼ三つの型に分類される。
 - (a) リドベルグ・シリーズがまず低エネルギー側に観測され、なめらかにイオン化しきい値(I_{th})に収斂して連続帯につながる。連続帯に二電子励起に伴う山があるが、強度は弱い。これらは自由原子のスペクトルの特徴と一致する。例 CH_4
 - (b) 非常に強い吸収帯がまず現われ、ついでリドベルグ・シリーズがつづいて、 I_{th} に収斂する。さらに連続帯の中に顕著なピークがいくつか見出される。このうちには、二電子励起によるものが強く観測されると理論的に予想される。例 N_2 , C_2H_4 , C_6H_6 , CO_2 の $S(L_{2,3})$ 。
 - (c) 非常に強い吸収帯が、XPSで予想される I_{th} の低エネルギー側に観測されるが、 I_{th} 付近には、リドベルグ帯も連続帯も殆んど目立ない。例 CF_4 の C と F, CO_2 の O。もちろん中間の場合もある。有名な SF_6 の S の $L_{2,3}$ 帯付近では、弱いながらもリドベルグ帯が見出されているから、(b)と(c)の間とも言えよう。 I_{th} 以上に顕著な吸収ピークが見出

されるのは $S F_6$ に限らないことが実験データの集積と共に明らかになった。これらの励起状態やイオン状態について、非経験的計算が、電子相関を含めて行われるようになった。

(18) 最近の真空紫外分光技術

佐々木 泰三（東大・教養）

1. 光源と測光の問題点、SOR-RINGの完成によって真空紫外の分光測光技術には、変調分光法・光電子の角度分布測定等、従来よりも一層高度なものが利用できる情勢になった。これには SOR-RING のビームの強度と位置の安定性が基礎になっている。しかしこの 1 年間、リング運転と分光実験の経験で、大電流蓄積時のビーム・プロファイルの変化、動作点（ペータトロン振動のモード）によるプロファイルと位置の変化が詳しく調べられ、高精度の実験のためにはリングの運転、分光器の調整法とともに、若干注意すべき問題点のあることがわかつてきた。これに関連して、光軸に測定系を正しくあわせる方法として、NBS で使われている Orbital Plane Locator、光源の変動に対して出力信号を規格化するモニターの必要性について述べた。

分光強度の絶対測定のためには、電子軌道面の決定精度のほか、プロファイル、軌道半径 ρ 、エネルギー E 、電子数 n_e の決定精度が重要であり、特に SOR-RING で現在用いている n_e 決定法を紹介した。また受光面での強度の計算にあたっては、電子軌道の optics と SOR の optics とを一貫した数学的手法の枠内で取扱えるようにした Green の位相空間概念が便利である。

2. 分光法、軟 X 線領域で用いられる斜入射回折格子分光器のための回折格子製作技術には最近多くの発展があり、わが国でもようやく国産化に向って開発努力が盛になりつつあるが、ここでは伝統的な手法から全くはなれた新しい分光法として、(1)オランダのユトレヒトで製作されている透過型回折格子、(2)名大プラ研で開発された稀ガス光電子計数法 (RPC) の 2 つについて紹介した。

(19) 固体表面の物性

恩地 勝（京大・理）

$10^{-10} \sim 10^{-11}$ Torr の超高真空技術と各種の電子分光学的手段との応用によって、単結晶

清浄表面に対する正しい再現性のある測定ができるようになったので、最近10数年間に固体表面科学のいくつもの分野で大きい進歩がみられた。本講ではこれら表面研究の現状について概説を試みた。まず表面の定義、原子的清浄面の意味とその作成・保持について述べた後、固体表面に関する4種の基本的情報、即ち、(1)表面の原子的組成、(2)表面の構造、とくに原子配列、(3)表面の電子的構造、(4)表面原子の運動、について測定手段と関連させつつ、得られた結果について大要を述べる。さらに気体分子・原子の吸着による(1)～(4)の因子の変化の詳細な研究が表面一気体分子間相互作用の解明の基礎となる。気体分子・原子の表面における状態は次の5種に大別できる。(A)物理吸着状態、(B)化学吸着状態、(C)再配列状態、(D)表面化合物、(E)残分。

吸着状態の研究は低速電子回折(LEED)、オージェ電子分光(AES)、紫外光電子分光(UPS)、電子エネルギー損失分光(ELS)などの*in-situ*測定、とくに二次電子の角度分布測定や、SOR偏光利用の角度分解型UPSにより著しく進展中である。これらについて紹介した後、表面研究の現状と将来の課題について要約を試みる。

- (1) 真空度、現状では $5 \times 10^{-11} \sim 1 \times 10^{-10}$ Torr であるが、原子的清浄面の保持にはまだ問題が多いので、 $10^{-12} \sim 10^{-13}$ Torr が経常的に使用できることが望ましい。
- (2) 表面構造、2次元周期性に関しては、複雑な場合を除き、ほぼ確立されたといえるが、真の3次元的表面構造の解析はまだかなり先のことになろう。長周期規則的ステップ構造の発見と作成によって、表面欠陥研究の道が開かれたが、一般的な欠陥の種類と密度の決定が急がれている。吸着構造生成の一般則が得られたが、表面原子の再配列、非再配列のユニークな決定はまだ模索中の段階である。
- (3) 表面の化学的組成、AESの検出感度は表面単原子層の0.01%に達したが、定量性に問題があり、一般的な較正標準法の確立が急務である。気体分子の表面被覆率の決定も特別の場合を除き、まだ困難といえる。
- (4) 表面の電子状態、UPS, ELSにより表面準位の存在、表面層の価電子帯の構造が次第に明らかとなったが、空いた伝導帯の構造については推定の域をでない。表面原子のコアレベルの構造についても不明な点が多い。吸着粒子と表面原子間のボンドジオメトリーについては興味ある結果が集積され始めており、解明の日も遠くはない。
- (5) 表面原子の運動、表面原子、吸着粒子の局在振動は、高分解能ELSによって明らかにされ、吸着状態の解明にも役立っている。吸着粒子(および吸着化合物分子)の表面移動(拡散)については、特殊な系を除いて明らかでない。広い温度領域における2次元order-disorder転移(吸着層の場合も含む)は未だ研究例が少ない。

(20) 有機結晶の極紫外分光

原田義也（東大・教養）

有機化合物は物性の上から、1) 単純有機化合物(アントラセン等一分子性結晶), 2) 電荷移動錯体(TTF-TCNQ等一分子性～イオン性結晶), 3) 高分子化合物(ポリエチレン等一分子性結晶, ただし分子内でバンドを形成)に分類される。これらの化合物の極紫外領域における光物性は主に吸収, 反射および光電子スペクトルによって研究されている。ただし吸収と反射スペクトルは近紫外領域からの測定を 1200 \AA 付近(LiFのcut off)まで延長したもので, 分子内遷移(Davydov分裂等)の帰属を主とする研究である。

単純有機化合物の光電子スペクトルに光電子放出の三段階モデルを適用すると, $\hbar\nu$ のエネルギーの光で放出されるエネルギーEの光電子数は

$$N(\hbar\nu, E) \propto P(\hbar\nu, E) L(E) T(E)$$

で近似される。ただしP($\hbar\nu, E$)はバンド間の光遷移の確率, L(E)はescape depth, T(E)は表面のポテンシャル障壁を通しての透過係数である。通常の有機結晶はバンド幅が極めて狭いので, 光遷移は非直接遷移となる。故に N_i, N_f をそれぞれ始状態, 終状態の状態密度とすると

$$P(\hbar\nu, E) \propto N_i(\hbar\nu - E) N_f(E)$$

が成立する。光電子スペクトルの測定結果によると, バンド幅が狭いことに対応して, N_i は分子の状態密度をよく反映している。 N_f の構造は高分子結晶の場合を除いて, 明確に認められていない。L(E)はとびとびのEで測られているに過ぎないが, ほぼ $10 \sim 100\text{ \AA}$ 程度である。なおT(E)はYieldスペクトルのthresholdから約2eV上までほぼEの一次に比例して増加し, それを越えると, T(E)=1となる。

有機結晶は無機結晶に比べるとはるかに種類も数も多く, 種々の興味深い物性をもつ化合物が存在すると思われる。

(21) SOR光電子分光

黒田晴雄（東大・理）

シンクロトロン放射を光源に用いることによって, 光電子分光に多くの興味ある発展が期待で

きるが、それらの中から二・三の話題をとりあげた。

原子・分子の各電子軌道の光イオン化断面積の励起光波長依存性の研究は、理論に興味ある研究課題であるが、まだ実験データが少ない。分子の場合、光イオン化断面積の励起光波長依存性はイオン化する分子軌道の波動関数の性格を反映しているので、いろいろな異なる波長の光を励起光に用いた光電子スペクトルの比較検討が、光電子スペクトルの解析に著しく有用である。

N_2 , CO , $CH_2 = CH_2$ その他の分子について、 $Al K\alpha$, $Mg K\alpha$, $He I$ 等を励起光にして測定した光電子スペクトルを例にとって、波長依存性の比較の有用性を解説し、また、 YMc , $Zr Mc$ 等の軟X線を光電子分光に用いる際の実験技術上の問題にも触れた。

固体のUPS領域の光電子スペクトルには初期状態と終状態の両方の性格が反映されることをいくつかの例で示したのち、励起光の波長と検出する光電子のエネルギーを連動して変化させ、一定の準位から放出される光電子を常にとらえるCISモードの測定により、固体内の空のバンドについての知見を得る方法を、 $Ga Se$ などを例にとって説明した。

このような励起波長を変える実験はシンクロトロン放射の利用により容易になり、光電子分光に新しい局面を開くものと期待されることを強調したのち、スタンホーツ大学のグループが行ったシンクロトロン放射を用いたX線光電子分光の実験についても触れた。

(22) EXAFSについて

小 谷 章 雄 (東北大・金研)

EXAFSという的是 Extended X-ray Absorption Fine Structure の略で、分子や固体等の内殻電子のX線吸収スペクトルにおいて吸収端の上、数10eVから約1keVの範囲にわたって観測されるスペクトルの振動構造を指す。振動周期は通常50~100eVのorderであり、これは励起電子の球面進行波と、それが周囲の原子によって散乱された後方散乱波が、励起原子位置において干渉することによって生じる。したがってこの振動構造を解析すれば、励起原子の周りの原子配列についての情報が得られる。通常のX線回折や電子線回折に比べてEXAFSによる構造研究のもつ利点は、(1)励起原子の周囲の局部的な原子配列(長距離秩序でない)の情報が得られること、(2)特定の種類の原子の周囲の情報を選択的に(その原子に特有の吸収端を選ぶことによって)分離できること、(3)多重散乱の影響が比較的小さいこと、等である。したがって、その応用範囲は、(A)高分子、生体物質等、幾種類もの原子を含む複雑な系、(B)アモルファス、溶液等の非周期系、更には(C)表面吸着原子の研究等に適しており、有力な研

究手段となることが期待される。このようなユニークな利点に加えて、最近S O R光源の利用によって精密なデータを得ることができるようになったため、EXAFSを用いた研究は近年米国を中心にして非常な流行を招んでいる。

一方、EXAFSそのもののもつ歴史は古く、その機構について研究は1931年のKronigの理論にまで遡り、我国からもHayashi理論やSawada理論のような世界に先がけた研究が出されてきた。しかし上記のように精密且つ定量的な研究が物質の構造解析を目的にして行われるようになったのはたかだか1970年代に入ってからのことで、このEXAFS研究の新しい時代をむかえてからは、残念ながら我国における研究は如んど皆無である。

研究会では、EXAFSの機構、その物質構造研究の手段としての利点、研究の歴史的背景、そして最近の研究状況についてレビューをおこなう。

(23) 真空紫外領域での金属・合金の光学的性質

山 口 重 雄 (都立大・理)

単体金属の極紫外線、軟X線領域の光吸収スペクトルは、その周期律表上に占める位置によって系統的な特徴をもつ。内殻電子が関与する吸収には原子効果と凝集効果とが重なっている。

- (1) 空のd(f)-band。ドルーデの吸収の終端と内殻励起吸収端との間の透明領域に現れる吸収帶で、現存するデータから、殆んど全ての金属について存在すると思われる。遷移金属では幅が狭く、構造が豊富であるが、アルカリ金属、Mg, Alでは幅の広い単純な分布を持つ。理論計算では遷移金属について、むしろよい結果を得ている。
- (2) 内殻励起吸収端に引続く構造。この構造は液体金属で消滅し、Band効果に結びつけられるべきものであるが、アルカリ金属の場合でも、Band構造との単純な対応は必ずしも説得力あるものとは言い難い。
- (3) スピン軌道分裂対の強度関係。重金属となる程Auger効果(含Koster-Kronig効果)等の多体効果が強くなることを示している。
- (4) 吸収端異常。Liに関するさまざまな研究結果は、多体効果よりもむしろ一電子論的であると結論されている。しかし、他の金属についても同様であるかどうかは今後の研究に負う所が多い。
- (5) 遷移金属、貴金属のd-band。この分野は角度分解法を含む光電子分光による研究が盛んである。遷移金属のM_{2,3}吸収スペクトルの多重項による理論解析が進められている。

(6) 合金効果。 合金化によって、吸収係数が成分元素の吸収係数の和になるものと、かなり異なるものとに分類される。前者はC P Aが成り立つ合金にあてはまり、後者は共有結合性の強い合金間化合物にあてはまるようと思われる。また、スペクトル構造の一部には、酸化物、イオン結晶、合金等の凝集状態に殆んど影響されないものも見出されている。

短期研究会報告

「液体の電子的物性」

開催期日 昭和52年7月18日(月)・19日(火)

開催場所 東京大学物性研究所旧棟1階講義室

司会人 遠藤裕久(京大理)

米沢富美子(京大基研)

田巻繁(新潟大理)

7月18日(月)

第三回液体金属国際会議報告と液体金属研究の将来(実験的側面)

遠藤裕久(京大・理)

同上 (理論的側面)

米沢富美子(京大・基研)

液体遷移金属の電子状態

浅野摂郎(東大・教養)

不規則系の電気伝導度

新関駒二郎(東北大・理)

液体金属の磁性

志水正男(名大・工)

γ線コンプトン散乱プロファイルにみられる固体・液体金属の差異について

鈴木謙爾, 伊藤文武(東北大・金研)

液体Seの分子内構造と分子間構造 鈴木謙爾, 三沢正勝(〃)

液体IIIb-Te合金における電子局在の phase diagram

土屋良海(新潟大・理)

液体Tl-Te合金の miscibility gap 星野英興(弘前大・教育)

高圧下の液体半導体 田村剛三郎(京大・理)

7月19日(火)

Electrons in Fluidに関する国際会議報告 下地光雄(北大・理)

アルカリ金属-アンモニア(アミン)溶液中の金属-非金属転移

中村義男(〃)

binary mixtureの格子模型について 上田顕(京大・工)

binary mixture の臨界点	八 尾 誠(京大・理)
高温高圧下における液体金属の物性	辻 和彦(京大・理)
臨界点近傍の液体Hgの音速と吸収	鈴木 賢二郎(東大・教養)
臨界点近傍の液体金属に対するモデル	松原 武生(京大・理)
Metal-Dielect Transition に関する第2回ソヴィエト国際会議報告	小田垣 孝(")
第7回 Amorphous and Liquid Semiconductor 国際会議報告	米沢 富美子(京大・基研)

第三回液体金属国際会議報告と 液体金属研究の将来(実験的側面)

遠藤 裕久(京大理)

ブリストルでの第3回液体金属国際会議から既に一年の月日が経過している。将来の展望との関聯で第3回国際会議をふり返ってみたい。会議では研究対象物質として単純金属に加えて、

- (i) liquid transition and rare earth metals,
- (ii) expanded liquid metals,
- (iii) elemental liquid semiconductors (Se, Te等),
- (iv) semiconducting liquid alloys (Ga₂Tc₃, In₂Te₃, Tl₂Te等),
- (v) metal-molten salt solutions(Bi-BiI₃等),
- (vi) metal-ammonia solutions(Na, Cs-NH₃等),

のような物質系が取り上げられていた。また注目したいことは高融点、反応性の強い物質についての測定技術の発展に伴って、実験領域は著しく拡げられ高温、高圧下での多くの物性の測定が可能になったことである。

さて、国際会議で報告されたいくつかの話題を以下に述べる。

[I] 二成分液体における組合せの面白さ。

- (a) Li-Pb の中性子散乱と濃度のゆらぎ。

⁷Liの中性子散乱振巾は負でPbは正である。半導体の特性を示すLi₄Pbの組成近傍で合金の中性子散乱の平均の振巾が略ゼロとなるため、中性子散乱強度は「濃度のゆらぎ」に関係した成分濃度の相関 $S_{cc}(q)$ についての情報を抽出する。 $S_{cc}(q)$ と混合熱のような熱力学的諸量との関係についての理論的研究は今後の大きな課題の一つであろう。

(b) 液体Cs-Au合金などにみられる金属－非金属転移

Cs-Auでは成分比を変えると $Cs_{0.5}Au_{0.5}$ の組成近傍の狭い領域で非金属になり、その伝導はイオン性である。金属と金属、金属と半導体、金属と塩、半導体と半導体等を組合せることによって作られた溶液におけるmetallic, covalent, ionic結合の度合等がXPS, NMR, 電伝度、熱起電力、帯磁率、混合熱等の測定を通じて詳細に検討されつゝあり将来のこの分野の興味ある問題の一つである。

(c) 半導体的性質を示す二元系液体における「macroscopic」と「microscopic」conductivity

Knightシフトやスピン－格子緩和時間 T_1 の測定は「microscopic」な電子状態あるいは電子輸送現象についての情報を与える優れたprobeとなる。Ga-Te合金についてNMRの測定とdc conductivityの測定結果からWarrenは合金の半導体的性質を検討する上でそのイオン分布を局所的にhomogeneousと見るか、あるいはinhomogeneousと見るか、また前者の立場に立ったMottの提唱するPseudo-gapモデルが伝導現象の解析に妥当なモデルか、あるいは後者のinhomogeneousモデルに立ち滲透現論を用いて伝導現象を説明しようとするCohen-Jortnerの解析が妥当かを詳細に検討している。液体半導体における局存電子状態についての描像も次第に明らかになりつつあるようと思う。

EXAFS や $\gamma-\gamma$ 角相関の実験等も将来この方面の研究手段の一つとして期待される。

[II] 臨界点近傍での金属－非金属転移

臨界点近傍での低密度金属の電子状態、金属－非金属転移の様相と熱力学的転移、特に一価金属Csと二価金属Hgの差異等が議論された。この高温、高圧領域での測定技術の進歩は著しく、伝導度、熱起電力、ホール係数、Knightシフト、比熱、粘性、音速、中性子散乱の実験が可能になりつゝあり、対象物質もK, Rb, 更にSe, Hgアマルガムへと拡げられている。

以上2～3の問題にしづって液体の電子的物性に関する第3回国際会議の報告および関連した将来の問題を述べた。液体の電子的物性の研究は物理、化学、冶金学の境界領域にある新しい分野として将来の一歩を今踏み出したばかりではなかろうか。

第三回液体金属国際会議報告と 液体金属研究の将来（理論的側面）

米 沢 富美子（京大基研）

東京での第2回液体金属国際会議（1972）から、ブリストルでの第3回会議（1976）の間の4年間に、液体金属の理論的研究は多くの面で進歩をみせたが、その中でも特筆すべきは、
(I) 非単純金属液体の電子的性質；
(II) 単純金属液体の熱力学的性質；
に関する理論の著しい発展である。

まず(I)に関連して歴史的な経緯をふり返ってみると、単純金属液体の電子的性質についての理論は、殆んど自由な電子（NFE）の近似に基くZimanの理論、EdwardsやFaberの仕事等は1960年代前半に定式化が終り、これらの理論を使って単純金属液体の電子的諸性質が定性的に矛盾なく説明されることが示された。1966年にブルックヘブンで開かれた第1回会議から、1972年の東京会議の間に、これらの理論の、具体的な物質への応用が進められ、パラメタや数値計算の精密化を通して、東京会議までにはほぼ単純金属液体の理論は完成したと考えられる。これにひきかえ、非単純金属液体の方は、第1回会議、第2回会議で、それぞれ1編ずつの論文が発表されただけであった。前者は、液体金属に対する強結合近似（TBA）の表示を使って、擬結晶近似とよばれる近似のはんいで状態密度を計算しようとする試みであった。後者では同じTBA表示で、近似をセルフコンシスティントにするなど、前者の近似の欠点をとり除いたIshida-Yonezawa(IY)近似が提案された。この近似はセルフエネルギー Σ がエネルギーのみで決まるようにとられたselfconsistent single-site近似のはんいでは、とり込める近似を全てとり込んだ最も進んだ近似であり、しかも、 Σ に k -依存性がないがゆえに計算が比較的簡単に行えるという利点があったために、第2回会議以後、非単純金属液体の状態密度や電気伝導度などについていくつかの定状的・定量的な議論が行われた。一方、固体の不規則系2次元合金に対するコヒーレント・ポテンシャル近似（CPA）に相当するものとして、液体金属に対する有効媒質近似（EMA）が提案された。

TBAは、強く束縛された電子系に対して最も良い近似であるが、束縛がそれ程強くない系やむしろNFEに近い系まで、広いはんいの物質や、環境条件の変化に伴う物状の変化を系統的に扱う目的のためには、たとえば、結晶還移金属等多くの結晶金属のバンド計算で有力であったKKR法の液体金属への拡張が有利であると考えられる。液体金属に拡張されたKKR法の表式

は、記号の解釈などを適当に対応づけることにより、TBA表示における式と等価のものであることも示された。

又、実際の遷移金属液体などの状態密度やその他の電子的物性の計算に応用できるようより現実的な形にする目的で、非直交性の効果のとり入れ方、複数の軌道が縮退している場合や多バンドが関与している場合などへの拡張や、電気伝導度・ホール係数の計算などへの応用も考えられ、具体的な非単純液体金属の信頼できる状態密度が計算できるようになった。その例として、臨界点近傍の水銀への応用については第3回会議の Proceedings(a paper by Yonezawa, Ishida, Asano & Martino) を参照されたい。又、液体遷移金属層については、次の浅野氏の講演を参照されたい。

一方、(II)の熱力学的性質の理論についていえば、これまでには理論として閉じたもののがなく、たとえば表式の中にあらわれる構造因子を入力情報として他から借りて来るような形になっていたが、剛体球流体に対する摂動変分法を使って、熱力学的性質と構造因子とがひとつの理論体系の中でセルフコンシステントに決められる方法が提案された。この方法は、単純金属液体およびその合金に対して有効であることが、いくつかの例で示されている。

ここで、第2回会議の際に、第3回会議までの宿題として出された方向を思い出してみよう。
すなわち、

- (1) 物理と化学の境界領域
- (2) 高温高圧下の液体金属、特に金属非金属転移
- (3) 液体金属およびその合金に於る臨界現象
- (4) 状態密度の測定

を第3回会議までの研究の中で強調していくと申し合わされた。

この計画の中でいうならば、前述の(1)は、高温高圧下や臨界現象のおこる附近での液体金属を扱う理論として、(2)や(3)に方向を与えたものであり、又、(4)についていえば、状態密度の測定がいろいろの液体金属に対して行われたとき、それに呼応する理論的状態密度が計算できるための基礎をきづいたことになる。一方、臨界点近傍などでは、電子的性質は熱力学的性質と切り離して考えることは出来ず、両者のより深い理解のための第一歩として(II)を位置づけることが出来る。

上述の第3回会議の宿題はまだ完全に終ったとはいはず、同じ宿題が第4回会議へのひとつのバックボーンになると考えられる。又、理論的研究の姿勢として大切なことは、液体金属に固有の性質(uniqueness)をどのように抽出するかという面と、一方、液体金属を不規則系の一例とみなして他の不規則系全体に共通の問題(generality)の中でどの様にとらえていくかの両面を常に念頭におくべき点である。

上述の「宿題」の個々についていま少し詳しくいようと、(1)については液体半導体の研究などと関連して、イオン性(ionicity)と共有結合性(covalency)の問題、lone pairsの役割の問題などがあり、これはアモルファス半導体の問題とも関連して興味ある問題である。又、(2)(3)に関していえば、これらの極限状態における電子的性質と熱力学的性質の相関の問題が、この領域での液体金属の物性を理解する上に必須である。このためにも、(I)の研究の更に具体的な物質への応用、(II)のはんいを出た非単純金属液体に対する熱力学的性質の理論をうち立てことなどが重要な課題になる。又、generalityの面から、伝導性局在性の問題などまだまだ未解決の問題は多い。(4)については、実験の進歩に匹敵しうるよう、より多くの物質へのより確実な理論的状態密度を求める仕事等、(I)の内容をふまえての今後の発展が楽しみである。

液体遷移金属の電子構造

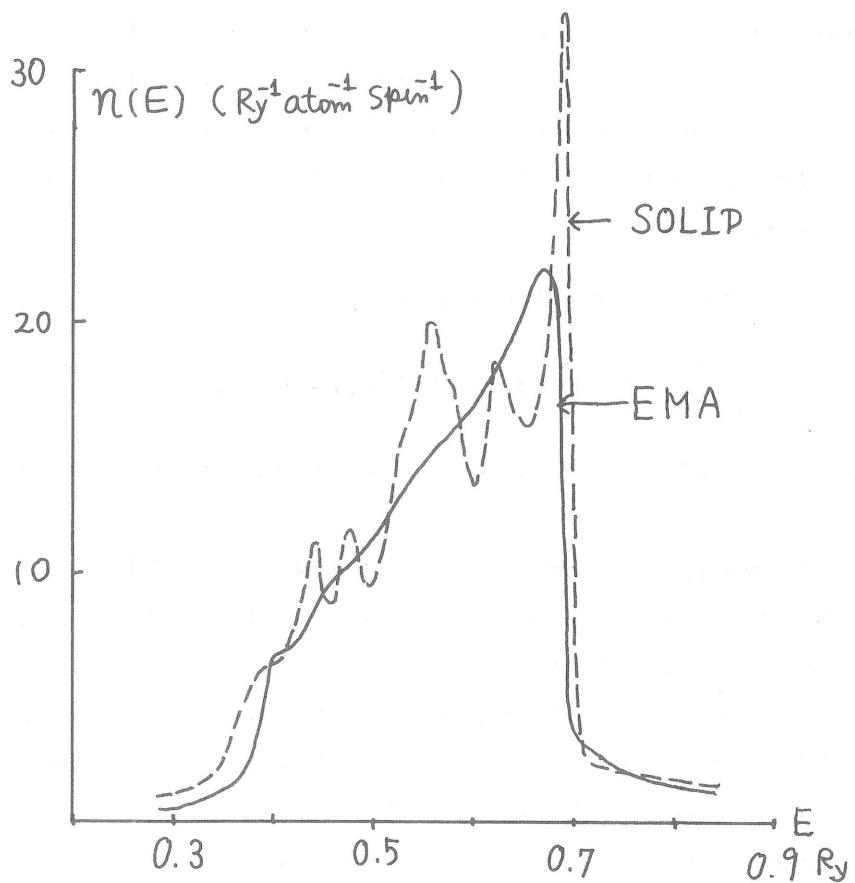
浅野 摂郎 (東大教養)

研究会では、これまで石田・米沢と共同で進めて来た非単純液体金属の電子構造、特に液体ニッケルの計算結果を、固体遷移金属と関連させながら報告したが、本稿ではKKR法の結果のみをまとめておく。

T.B.近似では一電子グリーン関数を各siteの原子軌道で展開するが、KKR法では各イオンのまわりのマフィンティン球内で Schrödinger 方程式の解で展開される。しかしその展開係数は形式的にはT.B.近似と全く同じ形に書けるから、これまで主としてT.B.近似で用いられて来たのと同じ近似(QCA, IY, EMA)で一電子グリーン関数を計算出来る。KKR法は散乱の弱い場合(S.M.)も、強い場合(T.M.)も統一的に取扱える厳密な方法であるが、反面厳密すぎてゆう通がきかず、例えばイオンの構造因子にしても、実験かP.Y.近似のような現実的なものを用いる必要がある。散乱が弱い場合にはQCAで充分であるが、強い場合にはくり込みが必要になる。残念ながらIY近似だけでは不充分で、EMAを使わないと物理的に合理的な結果が得られない。EMAで計算した状態密度曲線は、予想されるように固体の場合特にfccの固体に非常に近いものであった。特にdバンドの上端の鋭い立上がりが液体でも保存されるのは著しいが、これはNiの帯磁率がゆう点付近で殆んど変化しないことに対応しているし、その前後の状態密度の形も、液体Ni,Co,Fe,Mnの帯磁率の変化^{*}とよく対応しているように思われる。スペクトラル関数も調べたが、dバンドの真中で比較的構造を持つ。これはK ≈ 0での固体のdispersionを反映しているらしいが、液体Crの電気抵抗が異常に小さい原因是

案外こんな所にあるのかも知れない。このように見て来ると EMA の結果は案外良いのかも知れないという気もしてくる。もう少し計算してみる必要がありそうである。

※) G.Busch et al.: Solid State Physics 29 p. 289



不規則系の電気伝導度

新 関 駒二郎 (東北大理)

不規則系中の準粒子(電子・フォノン等)の運動の研究に於いて、計算機実験は從来から有力な研究手段の一つであった。というのは、これらの系では Bloch の定理が成立せず、その為にその解析的取扱いが極めて困難だからである。我々は縮退した電子系を持つ一連の不規則系(不規則合金・液体金属・アモルファス金属)の電気伝導度を計算機実験によって調べることを計画し、その手始めとして、二次元正方格子についての Anderson model を取上げた。

モデルハミルトニアン H は最近接対間の transfer energy ($= -V < 0$) と site energy の分布(矩形分布)の幅 U によって特徴づけられる。計算の出発点は次式で与えられる Kubo-Greenwood の公式である。

$$\sigma(E_F) = \frac{2\pi\hbar}{\Omega} \text{Tr} \left\{ J_x \delta(E_F - H) J_x \delta(E_F - H) \right\} \quad (1)$$

$$= \frac{2\pi\hbar}{\Omega} \sum_{n,k=1}^N \delta(E_F - E_n) \delta(E_F - E_k) | \langle n | J_x | k \rangle |^2 \quad (2)$$

巨視的物理量 σ を有限系を用いた計算機実験によって求める際には次の三点の注意が必要である。

- (i) 巨視的な系の energy spectrum は準連続的であるが有限系のそれは離散的である。従って意味のある σ を得るには δ -函数に適當な幅を持たせる必要がある。実際の計算では幅 2γ の Lorentzian 型の函数で近似した。
 - (ii) 有限系で顕著な表面効果を押えるためには周期的境界条件を採るのが望ましい。また、系の大きさは平均自由行程(何等かの方法で見積る)の数倍以上に取る必要がある。実際の計算では $14 \times 14 = 196$ 個の格子点から成る有限格子を用いた。
 - (iii) 一つの有限系をとった場合に、巨視的な系に含まれる様々の微視的構造のうちの限られた構造しか取入れることができない。その為に有限系では σ 等の物理量の試料依存性が大きい。従って多数の試料について計算し、平均する必要がある。実際の計算では 16 個の試料についての平均値をとった。
- (2) 式を用いて σ を計算する場合には H を対角化する必要がある。しかし “ δ -函数” として Lorentzian 型をとった場合には、一度逆行列 $\{(E_F - H)^2 + r^2\}^{-1}$ を計算するだけ

で(1式から直接 σ を求めることが出来、極めて有利である。

以上の様な方法によって $U/V = 5$ の場合について σ を E_F の函数として計算した結果、一応滑らかなものが得られた ($r = 0.1$ Vとした)。 σ の試料毎の変動は 3 ~ 40 %に達するが平均化によって誤差は最終的には 10 %以下に押えることができた。この結果と CPA を用いて計算した結果とを比較すると、前者が後者に比べて 10 %程小さいが E_F 依存性はかなり良く一致する。

次に E_F を固定 ($E_F = 0$) し、 σ を不規則性の程度を示すパラメータ U/V の函数として調べた。その結果 U/V が小さいときには CPA との一致が極めて良いが U/V が大きくなるにつれ CPA からズレ、 $U/V = 1/2$ では CPA の値の約半分となった。また $U/V \leq 1/2$ の範囲では明確な Anderson Transition は見られなかった。

液 体 金 属 の 磁 性

志 水 正 男 (名大工)

液体金属の磁性に関する研究としては、強磁性を示すものがあるかどうかということと帯磁率の値が固体状態のそれと比較してどれくらいかどうかということが主な問題であろう。まず最初の問題については、液体 Au-Co 合金がやはり強磁性を示すという実験結果がまた発表されている (Kraeft and Alexander, Phys. kondens. Materie 16 (1973) 281)。アモルファス強磁性体は沢山例があるので、強磁性を示す液体金属合金は原理的に可能と思われるが、決定的な例がまだ見いだされていないのは、結局強磁性になりそうな金属合金で融解点の比較的低いものをうることが困難であるためのように思われる。高圧によって融解点を下げることは可能かもしれない。バンド模型ではフェルミ準位における状態密度の値が大きくなれば強磁性になりやすくなるので、アモルファスのときと同様、bcc 構造の Cr のように固体状態ではフェルミ準位が状態密度曲線の谷間にあるときには、液体状態では状態密度がならされて谷間がもちあげられ、スピンドル磁率が大きくなり、場合によっては強磁性が出現することも可能と予想される。しかし実際には液体状態の Cr の帯磁率は融解点においてあまり変化していない。帯磁率の問題としては、固体状態の軌道帯磁率の計算が非常に困難であるのに反し、実測された構造因子を利用できれば液体状態の方がむしろ容易である。多くの単純金属について行った我々の計算では Li, Cs など一部の金属を除いては実験値とよい一致を示している。スピンドル磁率では固体のときのバンド構造の影響がかなり残っていることがわかった。遷移金属についても Anomalous のモ

デルポテンシャルを使って同様な計算を行うことが可能であるが、あまりよい結果は期待できそうにないので、これは今後の問題である。最近の実験で見い出された液体合金における不純物による帯磁率の電子濃度に対する急激な変化は不純物原子の resonance 準位によるものらしく興味深い。

γ 線コンプトン散乱プロファイルにみられる固体・液体金属の差異について

鈴木謙爾（東北大金研）
伊藤文武（〃）

高エネルギーの γ 線 (5.954 keV , Am-241) と半導体検出器を用いるコンプトン散乱実験は、液体金属の電子状態を調べる手段として、次のような利点を有する。(1)試料表面の汚染等により妨害されることなく bulk のデータを得ることができる、(2)高温炉や試料容器の設計が容易である、(3)液体一固体両状態で装置の配置を変更する必要がない、(4)比較的短時間に高い計数値を得ることができる、等々。しかし逆に、(1)測定のエネルギー分解能が低い、(2)多重散乱の寄与が無視できないと云う 2 つの大きな欠点が存在する。

我々は、液体一固体両状態のコンプトン・プロファイルを同一条件の下で測定して両者の差異を求めるることは、上述の欠点（特に 2）に束縛されることなく可能であろうと考え、手はじめにアルカリ金属について測定を試みた。一部のデータは Bristol 会議で公表したが、自由電子模型に立脚した液体一固体両状態の密度の差によるもの以上の有意の電子状態の差異が果して存在するのか否かについては言及することができなかった。

そこで Bristol 会議以後、計数効率を 1 衍向上させるべく装置を改良し、コンプトン・プロファイルのピーク位置で 10^5 カウントのオーダーのデータが現在容易に得られるようになった。その結果、液体一固体両状態のコンプトン・プロファイルの差は、Na では自由電子模型では説明できるが、Li では明らかに自由電子模型では解釈し得ない差異が存在することが確認された。

欠点 1, 2 に対するデータの補正方法も一通り確立されたので、今後は一連の金属について液体一固体両状態におけるコンプトン・プロファイルの測定を続けて行くつもりである。

液体 Se の分子内構造と分子間構造

鈴木謙爾（東北大金研）
三沢正勝（〃）

Lone-pair 半導体の基本物質である非晶質 Se は、液体からの quenching により容易に作られることはよく知られているが、果して Se の非晶質構造が液体構造と如何なる点で同じであり、如何なる点で異っているのかは明らかではない。そこで、我々は電子ライナックにより作り出されるパルス熱外中性子を用いて散乱ベクトルが約 40 \AA^{-1} の高い波数領域まで延長された構造因子を測定し、先ず液体 Se の分子構造を求める試みを試みた。

その結果、液体 Se は純粋の環状ならびに鎖状分子の単なる混合物ではなく、一つの分子内に両状態の原子配置が局所的に統計的に実現しているとする disordered chain molecule 模型による分子形状因子が最も良く実測の構造因子を説明することが見い出された。DCM 模型は、dihedral angle を cis にとるか trans にとるかによって potential energy に僅な差異があるとする考え方を基礎として得られる一つの帰結であり、平均分子長に対しても妥当な説明を与えることができる。DCM を Monte-Carlo 法により Simulation して作った模型にもとづいて、分子間相関について予備的検討が行われた。Valence-Alternation Pair 模型において提案されている 3 配位結合の出現についても、DCM 模型は無理なく説明を与えるのではないかと考えられる。

液体 IIIb - Te 合金における電子局在の phase diagram

土屋良海（新潟大理）

液体 Ga-Te, In-Te 及び Tl-Te 2 元合金ではそれぞれ Ga_2Te_3 , In_2Te_3 , Tl_2Te の組成近傍で半導体的性質を示し、融点直上の電子状態は局在状態にあることが知られている。これらの合金系の磁化率を測定することによって、電子局在の phase diagram を作成した。¹⁾ 電子局在の開始温度 (onset temperature) T_c を表 1 に示した。磁化率の測定から求めた T_c は NMR から求めた値と良く一致している。

また X 線、中性子線回析によってこれらの合金系の構造因子 $S(Q)$ の組成及び温度変化を調べた。 $S(Q)$ の測定結果は磁化率の測定と consistent であり、Ga-Te, In-Te 2 元合金の電子構造の

変化は液体の構造変化に伴なうものであることが明らかにされた。一方、Tl-Te 系の場合は、 $S(Q)$ (or $g(r)$) は本質的には純 Tl 液体と変らず $Tl_2 Te$ 組成の $S(Q)$ の温度変化も非常に小さく、 $Ga_2 Te_3$, $In_2 Te_3$ の場合とは全く異なる。Tl-Te 系の電子構造とその構造については、今後さらに詳細な研究が必要と考えられる。

1) Y.Tsuchiya et al.: J.Phys Soc.Japan 42 (1977) 1578.

表1 Onset of Electron Localization (T_c in K)

	present	NMR	T_c/T_m
$Ga_2 Te_3$	1 2 4 3	1 2 4 0	1.2
$In_2 Te_3$	1 1 1 8	1 0 7 0	1.2
$Tl_2 Te$	1 4 7 0	—	2.2

T_m : melting point

液体 Tl-Te 合金の miscibility gap

星野英興（弘前大教育）

一成分系、例えば液体水銀の臨界点近傍においては、密度のゆらぎが顕著になる。臨界温度以下では、液一気相の二相共存が出現するが、共存曲線上における電気的性質の研究は、液相を除き殆んどなされていない。これに対し、二成分系においては、臨界完溶点近傍で濃度のゆらぎが顕著になる。臨界温度以下では、miscibility gap が生じ、共存する両相間の比重の違いが大きい程、二相分離が顕著となる。組成-温度(共存曲線)の関係を調べる事により、miscibility gap に対する臨界指数を議論する事は、非金属性液体に対し、熱力学的立場から良く調べられている。一方、組成と共に変化する共存曲線上の電気伝導度は、Ga-Hg, Tl-Se 等の金属性液体で測られている。一成分系の場合と異なり、臨界組成で共存できる両相についての変化が、良く追跡されている。

ここでは、Ⅲb族元素-カルコゲン元素の組合せにおいて出現する二相分離のうち、熱力学的にも良く検討されている液体 Tl-Te 合金系に注目した。この系において、(1)臨界完溶点は、

$x_{T1} = 0.81 \pm 0.01$, $t_c = 580^\circ\text{C}$ にあるとされているが、筆者の知る所では、実証されていない、(2)二相分離において、Cutler は、 T_1 rich と $Tl_2\text{Te}$ rich の二相が一方 Thompson らは、 T_1 rich と Te rich の二相が共存すると考えている。分離した両相において、電気伝導度の温度変化が、存在する構成要素の違いを反映するならば、二つの異なった立場の検証ができる。パイレックス管にタンクスチレン電極を封じたセルを用い、 $x_{T1} = 0.82$ について電気抵抗を測った。 583°C で相分離が生じ、温度低下と共に、上部層の電気抵抗は増加したのに対し、下部層のは減少した。これらは夫々 Te (又は $Tl_2\text{Te}$) rich 層と T_1 rich 層によると考えられるが、詳細については検討中である。又、 $x_{T1} = 0.95$ では 536°C , $x_{T1} = 0.75$ では 563°C に相分離が生じ、共存曲線は非対称であると思われる。

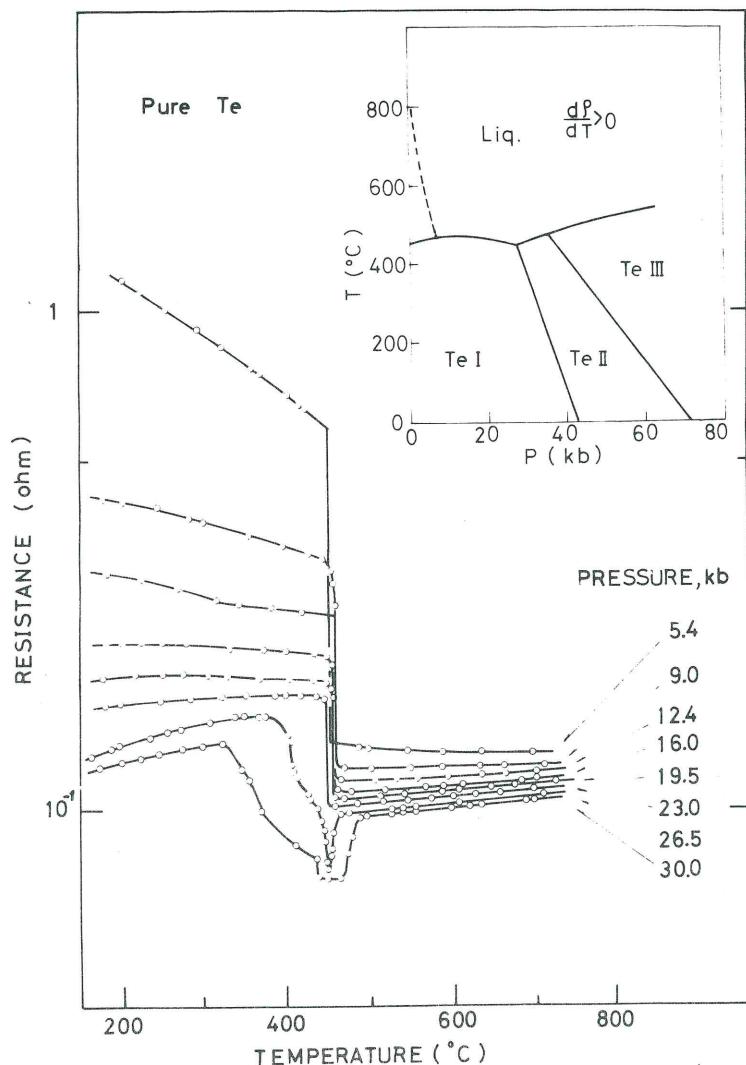
高圧下の液体半導体

田 村 剛三郎 (京大理)

常圧下での液体半導体に関する研究は数多くなされているが、広い温度、とくに圧力領域におけるそれらの物性は全んど調べられていない。我々のグループ(田村、御園生、森安、虫上、遠藤)は、種々の液体半導体が高圧下においていかなる電子的性質を示すか、あるいは半導体から金属への転移が圧力によってどのような形で誘起されるかという点に興味を持ち、まず液体試料の電気伝導度を高温高圧下で安定に測定する方法を確立し、次に常圧下で興味のある二、三の液体半導体、すなわち Te および、 Ga-Te , In-Te , Tl-Te 系について、高温高圧下で電気伝導度の測定を行なった。

高圧セルとして Drickamer 型のアンビルを用いた。圧力発生部に関する詳しい説明^(*)は省くが、重要な点だけを挙げると、試料容器には極微小なルビーを用い、高温を得るためにヒーターとして白金箔、断熱用にマイカーフィルムを使ってある。試料部の発生圧を較正するために In , Pb の融点と圧力の関係を利用した。現在この方法で 900°C , 50 kbar までの高温高圧下で液体試料の電気抵抗を安定に測定することができる。

測定結果の一例を図に示す。液体 Te は低圧で半導体的な温度変化をするが、7 kbar 以上では抵抗の温度係数が正になる。小枠の相図にその境界を破線で示してある。同様な測定を液体 Ga-Te , In-Te , Tl-Te 系について濃度を変えながら行なった。これらの系は各々 Ga_2Te_3 , In_2Te_3 , Tl_2Te の濃度で強い半導体的性質を示すことが知られている。電気抵抗の測定結果を P-T 面上に整理して明らかになったことは、液体 Ga_2Te_3 および In_2Te_3 の抵抗は共に比



較的低い温度圧力領域で、温度圧力と共に急激に減少し、 $\rho \sim 3,000 \mu\Omega cm$ の値に達するまで速かに変化する。これに対し $Tl_2 Te$ の場合は全測定温度圧力領域で変化が非常に緩慢で容易に金属化しない。これらの差異は、前者の結合が共有性であるのに対し後者にはイオン結合のみられることと相関があると考えられる。今後の課題としては対象を液体半導体に限らず Au-Cs, BiI₃, CuCl 等のイオン性液体にまで拡げ、結合性の違いが高温高圧下の電子輸送現象にどのように反映するか調べたい。

(*) K.Tamura, M.Misonou and H.Endo : Proceeding of the Third Interna-

tional Conference on Liquid Metals, 1976, Bristol, p504.

Electrons in Fluids 国際会議報告

下 地 光 雄 (北大理)

液体, 高圧気体など流体中の電子の挙動の研究の発展には飛躍的なものがあるが, 異なった分野での成果について各研究者の理解は必ずしも十分とはいえない。この会議はこうした点の充足をはかるため, カナダ, アルバータ大の Freeman が実質的な企画世話人となって 76 年 9 月 5 ~ 11 日, カナディアンロッキーで有名なバンフで開催された。参加人員は約 100 名, 発表論文は 72 篇, 大体 20 % が液体半導体, 金属関係, 残り 80 % が放射線化学関係であった。バンフセンターに全員宿泊, 会議はセンター内の 1 講堂で 10 セッション行われた。約 2 ヶ月前のブリストルでの液体金属会議で一緒だったメンバーなどのように, 電子の集団, density of states に关心のある 20 % のグループと, 放射線化学者のように易動度, 反応性など電子個々の挙動に注目するグループがあったわけだが, 両グループそれぞれの使用術語には特有のものがある。たとえば pseudogap, Ziman 理論などが後者のグループにとって jargon term であり, dry electron, scavenger, spur などが前者のグループにとって耳新しかった。放射線化学の画期的成果として感銘を受けたのは, Hunt (トロント大) の創始した picosecond pulse radiolysis の確立であった。LINA C での電子マイクロ波加速と Cerenkov 光効果を巧みに利用して, 従来のフラッシュ分光の時間分解能が数万倍に高められ, 所謂 dry electron の挙動, 反応性がスペクトル的に観測可能になり, 多くの反応機構が明らかにされつつある。この分野の研究装置は巨大化し, 今や big science 的様相を見せつつあるように感じた。会議全体の成果は討論を含め, Canadian J. Chemistry に印刷刊行され当初の目的は達せられたようにみえる。尙, 温容にして哲学的な Onsager が chairman の一人として元気に参加していたが, 意外にも約 3 週間後その訃をきいた。心から冥福を祈りたい。

アルカリ金属 —— アンモニア (アミン) 溶液 中の金属 —— 非金属転移

中 村 義 男 (北大理)

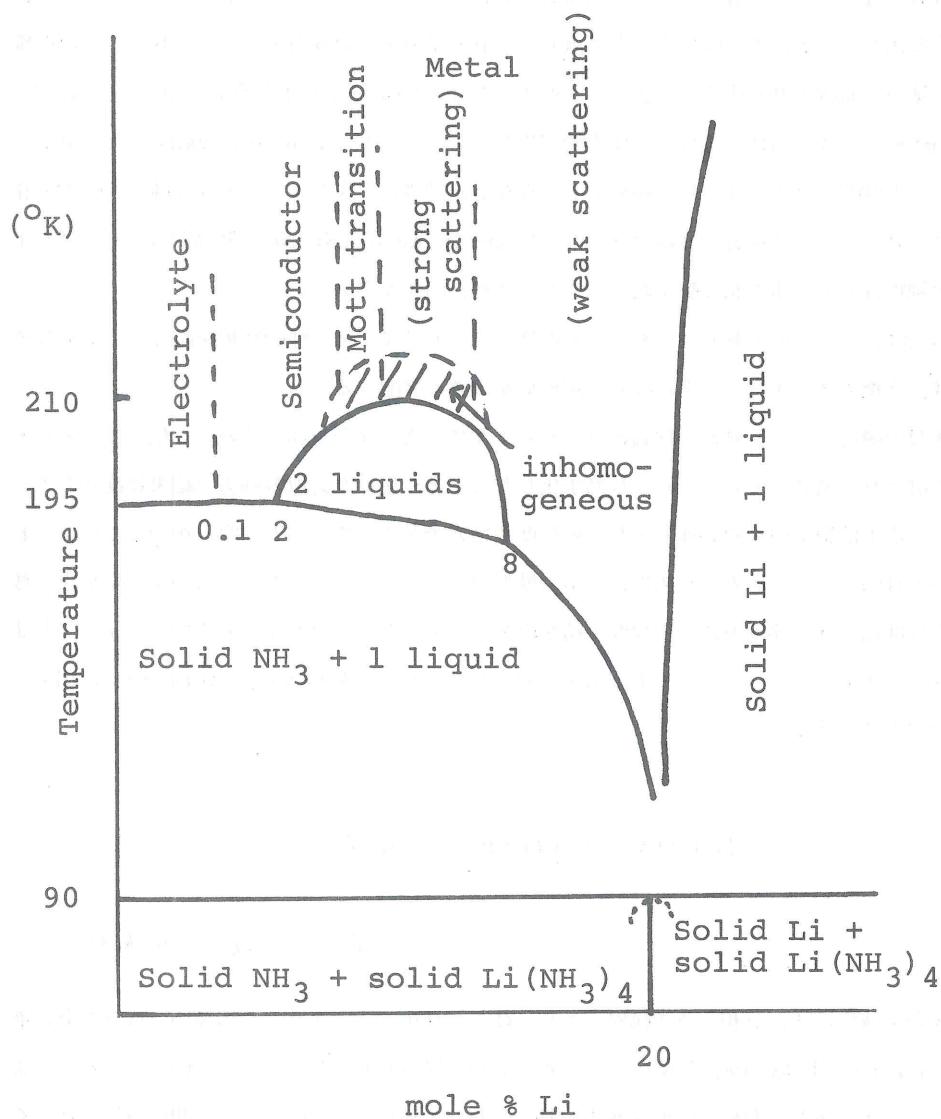
液体アンモニアがアルカリ金属を良く溶かすことは古く 1864 年に Weyl によって発見され¹⁾ ている。²⁾ この発見から 100 年目の 1963 年より彼の名を冠した国際会議 "Colloque Weyl" が現在まで四回開かれている。この分野の研究の進展のあとは、これらの会議の記録に明らかである。³⁾ アルカリ金属を溶かしたアンモニアという限られた対象が、このように多くの研究者の関心を集めているのは、この溶液が電子の溶媒和、金属—非金属転移といった極めて興味ある挙動を示すことによるものである。金属の良い溶媒はアンモニアしかないのであろうか。我々は種々のアミン類を取り上げて調べてみたが、高濃度の溶液を作ることができたのは、今のところチウムとメチルアミンの組合せに限られている。⁴⁾

これらの金属—アンモニア (アミン) 溶液 (MAS) は化学的に準安定状態にあり、通常の条件で数時間経ると溶液の化学的分解の影響が表われる。この MAS は低い金属濃度では溶媒和電子と金属イオンからなる電解質溶液の性質を示し、高金属濃度では NFE モデルが適用できる液体金属として振舞うことが知られている。中間の金属濃度での挙動に対しては未だ確立した描像はないが、電子濃度の減少と共に電子相関が主役となっている Mott 転移が起り、これ以下の濃度では半導体として記述できる領域が存在することが実験から示唆されている。³⁾⁴⁾ この描像に全く対立するものに Cohen-Jortner⁵⁾ の不均質モデルがある。MAS の二液相分離の臨界点近くには、濃度のゆらぎによる微視的不均一性が存在することは中性子の小角散乱からも報告されている。⁶⁾ しかし、この不均一性が系の電子的性質を支配している濃度、温度領域はどの程度であるのか。これは今後の研究にまたねばならない。

参考文献

- 1) W.Weyl, Ann.Phys. 121, 601 (1864).
- 2) "Colloque Weyl IV", J.Phys.Chem. 79, №.26 (1975).
- 3) T.Toma, Y.Nakamura, and M.Shimoji, Phil.Mag. 33, 181 (1976),
Y.Nakamura, T.Toma, M.Shimoji, and S.Shimokawa, Phys.Lett. 60A, 373
(1977).

- 4) M. Hirasawa, Y. Nakamura and M. Shimoji, to be published.
- 5) J. Jortner and M. H. Cohen, Phys. Rev. B 13, 1538 (1976).
- 6) P. Chieux, J. Phys. Chem. 79, 2892 (1975).



binary mixture の格子模型について

上 田 頴 (京大工)

物質 A の臨界点は物質 B のそれより高温高圧側に位置するとする。A と B を混合していくと、混合比の函数として、A の臨界点を出発点とする P-T 曲線（臨界曲線）が描かれる。この曲線は A の蒸気圧曲線より高圧側に位置し、このような高圧高温の領域で混合比の異なる binary mixture の気体一気体、気体一液体平衡が生じる。このことは van der waals が予見していたが、実験的には 1940 年に初めてその存在が確認され、現在までに約 50 種の混合物で見出されている。とくに最近では稀ガスの混合物 Kr-Ar, Ar-Ne, Kr-Ne の実験が行われ、このような単純物質でも上述の相分離が起ることが示され、興味を引いている。

講演では、これらの実験およびその結果の格子ガス模型による定性的解釈を紹介した。それによれば、交換エネルギーの大小が臨界曲線の形を大きく支配する。

LJD の融解の秩序・無秩序理論にみられるように、格子模型では、連続系を格子化することにより計算を容易にしている。しかし格子化したことと、用いた近似の両方が結果に混在しているため、格子模型そのものが連続系をどの程度の精度で記述しているのか明らかではない。これを調べる目的で、モンテカルロ法による格子模型のシミュレーションを行っている。格子点の数をどの程度増せば、連続系にどの程度の精度内で近づくかを、soft-core ポテンシャル、LJ ポテンシャルについて行っている中間結果を報告し、この方法を binary mixture に応用する際の問題点に言及した。

Binary Mixtures の臨界点

八 尾 誠 (京大理)

一成分系液体には、液相一気相臨界点 (L-G) が存在する。また、ある種の二成分系混合液体は、miscibility gap に関係した液相一液相臨界点 (L-L) をもっている。これらの臨界点を含む状態図の実例を、伝導性液体 (Hg の L-G, Na+Li の L-L) と、非伝導性液体 (Xe の L-G, nitrobenzene + n-hexane の L-L) 双方にについて示した。L-G では密度のゆらぎが大きくなるのに対し、L-L では濃度のゆらぎが大きくなる。

非伝導性液体での臨界現象は従来から研究されている。例えば音波測定の結果、L-G では定積比熱が発散するのに対応して音速に異常が現われるが、L-L では異常が見られないことがわかっている。また、L-L では粒子の拡散係数が小さくなるために、音波の異常吸収が起こる。音波測定は伝導性液体の臨界現象を調べるのにも有力な手段であると考えられる。

伝導性液体のL-L 臨界点付近での濃度のゆらぎを見るために、我々のグループでNa+Li 系の中性子散乱実験が進行中である。中性子散乱強度 $I(Q)$ は次式によって与えられる。

$$I(Q) = \langle b \rangle^2 S_{NN}(Q) + \Delta b \langle b \rangle S_{NC}(Q) + (\Delta b)^2 S_{CC}(Q)$$

ここで、 S_{NN} , S_{NC} , S_{CC} はそれぞれ密度一密度、密度一濃度、濃度一濃度の相関関数であり、 $\langle b \rangle$, Δb は二種の原子核による中性子散乱振幅の平均、および差である。 $^{7}\text{Li} + ^{23}\text{Na}$ 系では、臨界濃度に近い 40 at.% Na で $\langle b \rangle = 0$ となり、散乱には S_{CC} からの寄与のみがあらわれる。臨界温度は $T_c \approx 305^\circ\text{C}$ で、測定は 345°C と 440°C とで行なった。その結果、 440°C で見られなかったピークが 345°C で発見された。このことより、 345°C で濃度のゆらぎが大きくなっていることがわかった。

高温高圧下における液体金属の電気的性質

辻 和彦（京大理）

液体金属に高圧をかけ気化を防ぐことによって、高温までの実験が可能になり、広い密度領域にわたっての物性測定ができる。ここでは、名大プラズマ研の共同研究による「臨界点近傍における液体水銀合金の物性（辻、遠藤、八尾、犬竹、藤若、鈴木、星野）」と、京大グループによる「高温高圧下における液体テルル合金の電気的性質（辻、遠藤、八尾、石田）」について報告した。

水銀の臨界点は 1510 bar , 1475°C (臨界密度 $\sim 5.5\text{ g/cm}^3$) であり、これより高圧では温度を上げることにより、高密度の液体金属から低密度の非金属液体まで密度を連続的に変え得る。このときみられる金属一非金属転移や、低密度領域での電子輸送現象、臨界点の近傍で特に顕著になる密度のゆらぎ等の興味ある物性が、種々の価電子数をもつ他元素の微量の添加によりどのように変わるかを、電気伝導度・熱起電力の同時測定 ($\lesssim 1700\text{ bar}$, $\lesssim 1600^\circ\text{C}$) により調べた。その結果、次のことがわかった。

- (1) 微量の他元素によって、臨界点が著しく移動する。例えば、Hg-0.5% Cd の臨界点は $1680 \pm 20\text{ bar}$, $1500 \pm 20^\circ\text{C}$ である。

- (2) 電気伝導度・熱起電力も著しく変化する。水銀と同じ2価のカドミウムを添加した場合は、主として密度の温度依存性が異ったことによるが、金・タリウム・ビスマスを添加した場合には、電子状態密度の変化・フェルミレベルの移動等の電子状態の変化もあわせて考えなければならない。
- (3) 超臨界領域でみられた、水銀の熱起電力が非常に大きな負の値 ($\lesssim -100 \mu\text{V}/^\circ\text{C}$) から突如零に近づく現象が、Hg - 0.16% Cd や Hg - 0.3% Cd の合金系においても見つかった。

液体テルルは融点直上では2配位構造を多く残し、温度の上昇とともに次第に3配位構造へ移る。フェルミレベル近傍にd一電子をもつ遷移金属や貴金属の添加により、電気伝導度は大きく変化するが、この効果が温度で液体テルルの構造をえていったときにどう変化するかを、微量のコバルト・クロム・金・銀を添加し 1500°C までの電気伝導度の測定により調べた。又、代表的な液体半導体である In_2Te_3 と Tl_2Te の電気伝導度の温度依存性が高温に至るまで著しく異なることがわかった。

臨界点近傍の Hg の音速と減衰

鈴木 賢次郎 (東大教養)
犬竹 正明 (名大プリズマ研)
藤若 節也 (")

臨界点近傍での水銀中における音速及び音波の減衰の測定の新結果について報告する。測定は常温常圧から温度 1600°C 、圧力 1700 kg/cm^2 まで、ほぼ蒸気圧曲線に沿った温度圧力領域において行なわれた。測定方法としては、このような高温高圧下での測定を可能とするよう新たに開発された超音波パルス透過・反射法が用いられた。

実験装置は、測定セル、加圧装置及び超音波パルス送・受信装置から成っている。測定セルは両端をサファイア・ロッドで密閉されたニオブ・チューブで、測定部のサイズは厚さ 1mm 、直径 10mm である。測定セル内の水銀資料は電気ヒーターにより加熱され、高圧のアルゴン・ガスを用いて加圧された。資料の音速は、サファイア・ロッド \rightarrow 水銀資料 \rightarrow サファイア・ロッドを超音波パルス (搬送周波数 20 MHz) が透過するに要する時間と、サファイア・ロッド内を超音波パルスが反射往復するに要する時間との差を用いて決定され、音波の減衰は上記の透過波及び反射波の振幅を比較測定することにより決定された (超音波パルス透過・反射法)。

音速の測定値は、密度 $13.6 - 9\text{ g/cm}^3$ の間では密度の減少に伴いほぼ直線的に減少し、密度 $9 - 7\text{ g/cm}^3$ の間ではよりゆるやかに減少した。この遷移密度 (9 g/cm^3) は、電気伝導度等の

測定によって示された金属一非金属転移の起る密度に一致する。また、臨界点近傍（臨界密度 5.5 g/cm^3 ）では、音速の測定値は最小値（ $\lesssim 300 \text{ m/sec}$ ）を示すとともに、音波の異常減衰（ $\gtrsim 400 \text{ dB/cm}$ ）が観測された。さらに低い密度領域では音速は増加し、減衰は減少した。

臨界点近傍の液体金属の模型

松原武生（京大理）

液体金属の格子模型（S.Nara, T.Ogawa & T.Matsubara : Prog. Theor Phys. 57 (1977) 1474）によって臨界点近傍で見られる金属一非金属転移とそれに伴う熱力学的性質の異常を定性的に説明することを試みた。

原子の配置については格子気体（液体）模型を、電子の配置についてはHubbard模型を考え両者を組合せる。電子は原子が占める格子点の間のみとび移れるものとすると、模型に含まれる主要なパラメータは、原子間の自由電子を介さない引力の強さJ、自由電子のエネルギー・バンドの幅W、電子間の相関の強さをきめるクーロン斥力Uとなる。J, U, Wを種々に変えて、圧力-温度、圧力-密度、密度-温度曲線を相図に画く。その際格子気体に対しては高木近似を、Hubbard模型についてはGutzwiller近似を用い、金属一非金属転移点はBrinkman-Riceの方法で決定した。

この模型と近似を用いて得られる結論の中で興味あるものを挙げると、

- (1) 自由電子が存在するために液体状態の領域が自由電子のない場合に比べてひろがること。
 - (2) 非金属一金属転移に際して凝集機構の変化が現われ、それに伴う物性の異常として、例えは圧縮率の折れ曲りなどが期待されること。
 - (3) 液体一気体転移と金属・非金属転移とは原理的にことなった機構で起つてよく、そのためパラメータの値によっては、まず絶縁体のままで気体一液体転移をおこし、後液体内で金属一非金属転移がおこることが可能である（またこの模型では逆の場合、即ち先に気体内で金属一非金属転移に相当するものが起り、後に気体一液体転移が現われることも可能である。）。
 - (4) 結局臨界点近傍の転移として可能な型が3つありうること。
- 等である。

Metal-Dielectric Transition に関する 第2回ソヴィエト国際会議報告

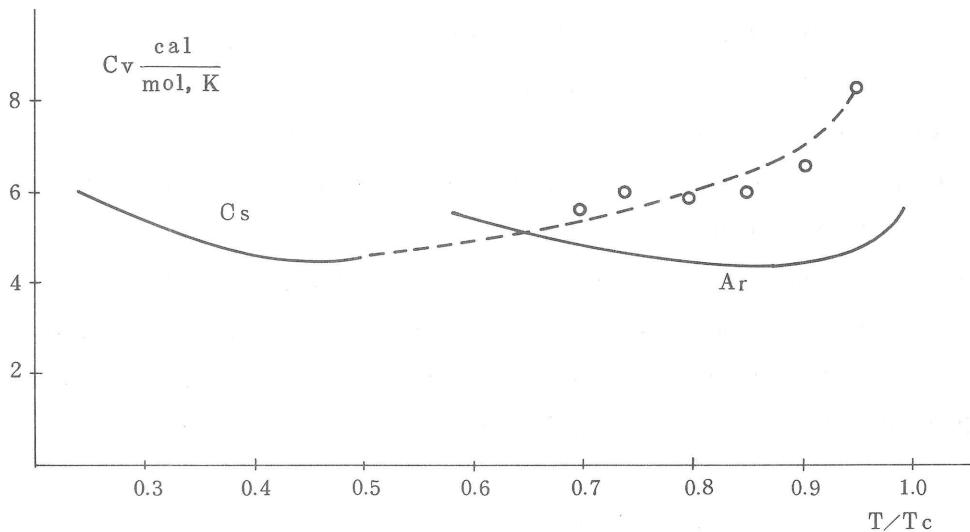
小田垣 孝（京大理）

会議でのV.A.Alekseev の講演及び我々のグループ（九大：松田博嗣，理研：荻田直史）の最近の研究を報告した。

Hg と Cs の臨界点近傍における金属一非金属(MI)転移の比較が可能になり、例えば転移の起こると考えられている密度(ρ/ρ_c)がHg では約1.7, 一方Cs では約1.0という事実からもその転移の機構の相違が推察される。一方、気液臨界点の臨界指数 β ($(\rho_L - \rho_G)/2\rho_c = B(1-T/T_c)^\beta$)は共に約1/3 であるのに対し、Bの値はHg では1.6, Cs では2.0である。また、Alekseev は臨界点近傍の液体Cs の比熱の測定を報告した。図に示すように、直接測定された定圧比熱から換算された定積比熱は、Ar に比べより低い温度からTc 近くの立ち上がりが見られる。

これらの点に関する理論上の興味をまとめると、(i)金属状態と非金属状態は密度のみで区別されるか、或いは原子の空間的な構造に依存するか、(ii) MI 転移の機構は何か (Mott 転移, Wilson 転移, Anderson 転移), (iii) MI 転移の機構と気液臨界点等の熱力学的性質との関係、などになる。

(i)の問題に対する知見をうる為に、最近接格子点にある原子にのみ引力の働く格子気体を考え電子は原子上にのみ存在でき、かつ最近接原子間のみを遷移できるという系を考える。この系は(1)原子の無限に大きなクラスター(最近接原子を互いに結んでできる原子の集合)が存在し、(2)このクラスター上の電子が量子力学的に拡散できるならば金属的になる。我々は、適当な判定条件を用いて、あらゆる温度で、電子の非局在化が、原子の無限に大きなクラスターが出現する密度で同時に起こる事を示した。即ち、二つの条件のうち前者がMI 転移密度を決定し、非常に大きな温度依存性が期待される事を示した。



第7回 Amorphous and Liquid Semiconductors 国際会議報告

米 沢 富美子（京大基研）

1977年6月27日から7月1日までの5日間、スコットランドのエдинバラ大学で、表題の研究会が開催された。世界30カ国から300人以上の研究者を集めて開かれた、非常に国際的な研究会であった。この会議のシリーズの第1回は、1965年にプラハで行われ、それ以後2年ごとに開かれている。会議の名称からも想像がつくように、不規則系としてとらえたアモルファス半導体と液体半導体とに共通の側面をベースにして、それぞれの問題を比較対照しながら研究していくというのがそもそもの発想であったと考えられる。実際には、第3回会議以後会議の様相が変り、全体としてアモルファス半導体が中心になり、姿勢もかなりプラグマティックになったと考えられる。この変化のきっかけを作ったのは、Ovshinsky効果の発表(1968)である。Ovshinsky効果の対象とされたカルコゲンガラスは、その後いろいろの事情で実用化されずに今に至っているが、この話題が多くの研究者を刺激し、アモルファス半導体の研究を今日あるものにしたのは衆知の事実である。さて、アモルファス半導体が液体半導体と本質的に

異なるのは、熱力学的に平衡状態にないという点で、そのためには、試料の物性が、試料の作製法やその作られた過程に依存するなど、再現性が保証されていなかったため、第3回会議以後も、アモルファス半導体の研究は、理論面でも実験面でもかなり混沌としたものであった。1973年前後から、glow discharge 法が実用化され、理想的なアモルファス物質が作られるようになり、続いて1976年ころまでには、a-SiをPなどでdopeして浅い不純物準位をもつn型のアモルファス半導体の作製が可能になり、有利なデバイスを作る目的のみでなく、更に進んで太陽電池への応用の見通しがつけられた。同様に、浅い不純物準位をギャップの中に作る目的でカルコゲンガラスをdopeする方法も、今回の会議の話題の中心になった。この問題は、まさしく物理と化学の境界に関連した問題であり、イオン性とか lone pairs の役割など、液体半導体の問題とも共通に論じられるべき基礎的な問題は、今後の課題として残されている。

パネル・ディカッション 液体金属研究の将来

2日目の最後のセッションのあと、40分程度の時間をとって、液体金属研究の将来に関してパネルディスカッションを行いました。特に、昨年のプリストルでの第3回国際会議において、日本のいくつかのグループから発表された研究成果が、液体金属研究の歴史に記されるべき貢献を残した事実をふまえて、3年後に予定されているグルノーブルでの第4回国際会議にむけて、どのように研究を進めていくべきかを中心課題としました。日本の中の個々のグループは、陣容の面でも予算の面でも必ずしもオールマイティではなく、しかも、世界の他の国々から地理的に隔離され、迅速な情報から疎外されているわれわれにとっては、国内の研究グループの有機的な協力体制こそが、欧米諸国にたちうちするための第一条件であろうと考えたからです。

討論は、その性質から期待されるように、非常に系統的に展開されたのではなく、試行錯誤的な意見のやりとりや、コメントの形式になりました。紙面の制約から、ひとつひとつの発言を詳細に記録することはできませんので、世話人の責任で要約して、アウトラインだけを以下に示します。世話人の力不足のために、発言者の本来の意図が曲解されている部分もあるかもしれません、その点は御容赦下さい。

A ; 今、第7回アモルファス半導体の会議報告があったが、アモルファス半導体の研究と液体金属の研究とを比較すると、前者の活発さに比べて、後者は、理論の方は別として、実験の方では、伝統的な方法でできることはすんだのではないかという気がする。今後は、大きい

装置のあるところでやれる実験が中心になっていくと思われる所以、協力して進めていくべきだ。

B ; やることがなくなったという意見だが、それは何を目的としているかによって決まる。たとえば、ランダム系としての液体の理解は、非単純液体金属の理論によって質的に深まったのではないだろうか？

C ; 液体金属の構造がどこまで明らかになったかといえば、現在の精度のはんいでは単純液体については一応終ったとおもえる。Arなどの、非伝導性液体との違いも大体わかった。これから方向としては、構造のある液体、たとえば、Se-, H₂O, molton salts等、液体金属から少しずれた方向に進むのではないだろうか？液体の構造は、2体相関だけではわかったことにはならないので、特に上述の系では local なイオン構造まできちんと見てやることが必要である。幸い日本でも、プロトン L I N A C により数年後には世界最先端の測定精度の実験が可能になる。単純液体金属の合金やダイナミックスなど残されている問題は多い。

D ; これから実験的研究は、次第にビッグ・サイエンスになっていくのではないか。お金でかなわない部分はアイディアで勝負しなければならないだろう。方向としては、液体状態における物質の化学的性質、すなわち、ionicity, covalency等の定量的理解が必要なのではないか。

E ; 液体金属の分野でまだ面白い問題は残っているとおもう。液体金属の研究が進んで来るにつけ、最初本質的な問題だとおもっていたことが、だんだん焦点が diverge していったような気がする。今、何がいちばん本質的なことだとおもうか、皆自分に問うてみる必要があるのではないか。

F ; 液体金属の研究にも、アモルファス半導体の研究にも、対象物質特有の固有性 (uniqueness) という側面と、不規則系一般の問題として共通的一般性 (generality) という側面との2つの面がある。理論の側からいえば、generality の立場から不規則系の一例としてとらえているというのが現状で、uniqueness はまだ十分抽出されていないのではないか。

G ; generality と uniqueness についていえば、液体金属の研究では uniqueness の問題も面白いとおもう。物質としての uniqueness の中におどろきがあるような問題が残されているのではないか？

H ; 物理と化学の境界領域が重要であるが、しかし、それ以前にも、液体金属と固体金属あるいは蒸気との界面の問題は、まだほとんど手つかずの状態であって、未解決の問題が多くあるのではないか。

I ; なぜ液体金属の研究をするのかという問題はすぐに答えられる問題ではない。しかし、不規則系での電子の問題としてやるべきことは数多く残されていると思うし、又、物質の中におどろきはある、あってほしいし、見つけねばならないとおもう。具体的にいえば、環境条件を変えて、例えば高温高圧などの広い領域での液体の研究、更に測定手段に関していえば、NMR（ミクロなレベルでの情報を与える量）や、 $\gamma-\gamma$ 角相関（液体のダイナミックスに関連して、短時間 (10^{-12} sec) に起る事実についての知識を与える）などの併用を考えられる。又、熱力学的諸量の重要性なども考えて、物質系としては組み合わせの面白さを工夫していくことで、研究が大巾に進んでいくのではないか。

今後の方向としては、物理・化学・金属の各分野との協力のみでなく、アモルファス物質（金属、磁性体、半導体）の研究者とも協力しあって、境界領域の研究を進めていくことが必要であろう。

物性研究所談話会

日 時 昭和52年7月11日(火) 4:00

場 所 旧棟講義室

講 師 Professor R. Bray
Department of Physics
Purdue University

題 目

MECHANISM OF ABSORPTION EDGE BROADENING IN GaAs BY
PIEZOELECTRIC PHONONS

要旨 The broadening of the intrinsic absorption edge by intense acousto-electrically amplified phonons in piezoelectric semiconductors has been studied for a long time in GaAs and CdS. The interesting problem is to distinguish which, of many suggested mechanisms, is responsible for the effect. We shall present a series of definitive experiments for GaAs to test for the following mechanisms : (a) very strong resonant Brillouin scattering, (b) intense strain due to the phonons, (c) high applied dc fields in the phonon domains, and (d) ac piezoelectric fields of the phonons themselves. Mechanisms (c) and (d) act through a Franz-Keldysh effect. Mechanism (a) is tested by repeating the experiment under conditions whereby different scattering selection rules apply, thus permitting us to vary the strength of the light scattering process. The field effect mechanisms are tested by using intense extrinsic generation of excess electrons by a Q-switched YAG laser, which can screen out the piezoelectric fields of the phonons without affecting the acoustic intensity. Definitive proof was obtained of the dominance of the piezoelectric field mechanism. Interestingly enough, experiments in CdS by other investigators, arrive at different conclusions.

日 時 昭和52年7月15日(金) 4時
場 所 物性研A棟2階輪講室
講 師 Prof. E. R. Dobbs
Bedford College, University of London
題 目 Transverse Acoustic Impedance of Liquid Helium 3

要 旨

Dobbs 教授は超音波を用いた物性研究の権威であるが、最近は超流動³He 中の横波の伝播を測定すべく準備中と聞いている。談話会では、その前段階の成果と見られる常流動³He での横波ゼロ音波の実験結果について語っていただき、併せて超流動³He での計画もうかがう。

日 時 昭和 52 年 9 月 2 日 (金) 4 : 00
場 所 旧棟講義室
講 師 Professor E. L. Hahn
University of California, Berkeley
題 目 Coherence Effects and Some Parallels between Spin
Magnetic Resonance and Quantum Optics

要 旨 The propagation of classically describable light, sound, and microwaves in two level quantum systems is adequately treated by semi-classical coupling of Bloch-type equations to propagation wave equations. Where propagation and fluorescence are not dominant, numerous quantum optics coherent phenomena are analogues of well known effects in spin resonance NMR experiments. Propagation introduces a unique effect, related for example to self-induced transparency, known as zero area pulse propagation. "Hole burning" like effects are imposed on the Fourier pulse spectrum, allowing for pulse propagation over distances which exceed the classical absorption length. The applicability of optical coherence principles of stimulated emission is demonstrated by coherent phonon emission from electron spins in a Kramer's doublet system. A microwave X-band ESR (electron spin resonance) experiment establishes phase matching between spins and phonon waves by means of intense magnetic field gradient pulses acting on the ESR system in laboratory or rotating frames of reference. As a function of distance in a crystal, a sinusoidally phased array of transverse precessing spin polarization is prepared for a short coherence time at the particular wavelength of a phonon pulse to be emitted. The

accompanying cooperative spin polarization emission damping, dependent upon the zero temperature direct process spin-lattice relaxation mechanism, is inferred from ESR spin-echo measurements.

日 時 昭和52年9月9日(金)午前10時30分
場 所 旧棟講議室
講 師 Prof. W. Kaiser
Physik-Department
Technische Universität München
題 目 Ultrashort Relaxation Processes
要 旨 波長可変超短パルス・レーザーを用いたピコ秒分光法により、分子の振動モードの超高速緩和現象の測定結果を紹介する。誘導ラマン散乱および赤外吸収の測定から簡単な多原子分子(CH_3I , CH_3OH , CH_3CCl など)の振動モードの位相緩和時間および分布緩和時間を求めた結果を述べ、それについて論ずる。

人 事 異 動

光 物 性 部 門	助 教 授	櫛 田 孝 司	52. 8. 1	昇 任	阪大(理)教授へ
界 面 物 性 部 門	助 手	柄 原 浩	52. 8. 1	採 用	
理 論 第 III 部 門	助 手	黒 田 義 浩	52. 8. 1	休職期間 更 新	
理 論 第 III 部 門	助 手	栗 原 康 成	52. 8. 1	休職期間 更 新	
超 低 温 物 性 部 門	助 手	旭 耕一郎	52. 9. 16	採 用	

Technical Report ISSP 新刊リスト

Ser. A.

- No. 824 Tunable Picosecond Pulse Generation by Optical Parametric Oscillator. by Takashi Kushida, Yuichi Tanaka and Masahiro Ojima
- No. 825 The Nearly Commensurate Phase and Effect of Harmonics on the Successive Phase Transition in 1T-TaS₂. by Kazuo Nakanishi, Hiroshi Takatera, Yasusada Yamada and Hiroyuki Shiba
- No. 826 Domain-like Incommensurate Charge-Density-Wave States and the First-Order Incommensurate-Commensurate Transitions in Layered Tantalum Dichalcogenides, I 1T-Polytype. by Kazuo Nakanishi and Hiroyuki Shiba
- No. 827 Polariton and Central Mode in BaTiO₃. by Terutaro Nakamura and Yasunori Tominaga
- No. 828 Elementary Process of Deformation of Amorphous Metals : Computer Simulation for Two-Dimensional Model. by Koji Maeda and Shin Takeuchi
- No. 829 Effect of Magnetic Field on Itinerant Electron Antiferromagnetism. by Kan Usami and Tôru Moriya
- No. 830 Statistical Mechanics of Classical One-Dimensional Heisenberg Ferromagnets with Single-Site Anisotropy. by Katsuhiro Nakamura and Tomohei Sasada
- No. 831 Preparation of Some Chalcogenide Spinel Single Crystals and Their Electronic Properties. by Tsuneo Watanabe and Ichiroh Nakada
- No. 832 Practical Design of Heat Exchanger for Dilution Refrigerator I. by Yasukage Oda, Genshiro Fujii and Hiroshi Nagano

編 集 後 記

今号は三氏から原稿をいたゞいた。“物性研だより”を魅力あるものにする上で、共通の問題を論じた記事や肩から力を抜いた隨筆風のものがもっとあってもいいと思うが、編集子の力の足りなさから、なかなか思うようにはゆかぬ。その様な点からも三氏にはお礼を申したい。今後とも所内外からの投稿をお願いしたく、又、編集子もそのように努力するつもりである。

次号〆切りは10月10日、皆様の御支援をいたゞければ幸である。

〒106 東京都港区六本木7丁目22の1

東京大学物性研究所

大 川 房 義

小 林 浩 一

