

物性研だより

第19卷
第3号
1979年9月

目 次

○雑 感	藤 井 保 彦	1
○研究室だより		
中村研究室	中 村 輝太郎	3
○軌道放射物性研究施設だより(2)	神前 熙, 菅 滋正	11
○軌道放射物性研究施設を利用して	有 留 宏 明	18
短期研究会報告		
○バンド理論の現状と将来		20
世話人 森田 章, 和光信光, 柳瀬 章, 寺倉清之		
奈良 久		
物性研談話会		46
物性研ニュース		
○助教授及び助手公募について		50
○人事異動		53
○テスニカルレポート新刊リスト		54
編集後記		

東 京 大 学 物 性 研 究 所

物性研時代慣れ親しんできた中性子回折実験に後髪を引かれながらも、5年前に魅了された研究環境と新しい光源（シンクロトロン軌道放射）にさらなる魅力を感じてブルックヘブンに着任して5ヶ月。現在日本でX線・中性子線回折関係の3大プロジェクト〔フォトンファクトリー（P F, 高エ研), 高中性子束炉 (K U R - II, 京大熊取), パルス中性子源 (K E N S, 高エ研)〕が進行しつゝある重要な時期に、何故それらを放棄してブルックヘブンに来たという質問を受けること十度を下らず。たゞタイミング悪く仕事口がなく、また物性研紳士協定の助手だけの任期を過ぎること3年7ヶ月にもなり、出てこざるを得なかったと言うも当らずとも遠からず。しかしこちらの新しいプロジェクトを始めるにあたって、まず国内外を問わず人を集めるという度量の広さとやり方のスマートさは、こゝ数年日本の新しい中性子源プロジェクト（前述）の進め方を目のあたりに見てきた筆者にとって誠に新鮮で感激的であった。こういうスマートさは実質的にプロジェクトの中心になって働くべきわれわれ若手（？）をして実にやる気を喚起してくれるもので、日本のプロジェクトの進め方と対照的である。特に大型プロジェクトは国内外の英智を結集してナショナルプロジェクトとしての意識をもって進めるべきであろう。しかしに当初理想的に真上を向いていたこのベクトルの方向が、妥協の積み重ね（金よりむしろ人間関係の）によって次第に下へ向けられてゆき、遂にはローカルプロジェクトのレベルで平衡に達してしまう過程を経験すると、たゞ消耗したという感じだけが残り若手をして意氣消沈させてしまう。

現在私はブルックヘブン研究所がナショナルプロジェクトとして建設しているN S L S (National Synchrotron Light Source)に参加して、この研究所の固体物理部門が設置するスペクトロメーターを担当しています。このN S L Sは規模といい完成時期といい日本のP Fとほとんど同じため日本側からは敵とも味方とも見られていますが、敵ながら天晴でありたいと願っている次第です。N S L Sの特徴は、X線リング (2.5 GeV)とVUVリング (0.7 GeV)の2つを設置する点、さらに同じ場所にあるH F B R (高中性子束炉)での中性子回折実験と相補的な役割を意識している点にあります。これらの点は日本でも似たような状況にあると思われ

* Y. Fujii
Department of Physics
Brookhaven National Laboratory
Upton, New York 11973

ます。すなわち、前者は P F と物性研 S O R - R I N G (0.3 GeV) , 後者は P F と K E N S あるいは J A E R I (原研東海) との関係ですが、これらの間のセクショナリズムを排して 積極的に相互作用を取り込むべきではないでしょうか。 また N S L S は立場上全国共同利用に供されますが、この運営方法は今後の大きな問題です。現段階ではユーザー側に Advisory Committee が組織されていてビームライン、スペクトロメーター等に対する要望が提出されています。ビームが出始めると実験のプロポーザルの採否を決める Program Advisory Committee が組織される予定ですが、これは共同利用研につきものの大へん難しい問題です。しかし 共同利用は共同便所ではないという名言(?)のとうりテーマの取捨選択をし、安易にすべてのプロポーザルを受け入れてその数でマシンタイムを割るべきではないでしょう。このことは物性研共同利用に関しても同様であろうと思われます。

今後 N S L S と P F の間ではコミュニケーションがさらに密になり、2年後にはどちらにもいきたい設備が出来上るものと期待しています。

ここまでで、編集委員の方から依頼された原稿量のまだ $\frac{1}{4}$ にしかならないのですが、一番書きたかったことは大幅に言葉足らずながら書いてしまったようです。残りは賢明なる読者の御想像にお任せして行間(特に下線部)を埋めていたじきたく存じます。

なお、ブルックヘブンはマンハッタンから約2時間(車、列車)の距離にありますので会議の行き帰りなどにブルックヘブン訪問を加えていたければ、単なる話の種的な見物以外は大歓迎致します。

研究室だより」を書いた。この「研究室だより」は、物性研の研究者たちが、各自の研究室の中、「中村研究室」や「豊沢研究室」などと名づけられた研究室で、その研究室の活動や、研究室の運営に関する情報を記載するものである。

中 村 輝太郎

§. 「研究室だより」を書けとのことである。考えてみれば、ずい分以前に「研究室だより」を書いたことがあったが、ここしばらくは、新任所員や去り行く所員の研究室についての報告にはよくお目にかかったが、ながく物性研に在任中の所員の「研究室だより」はたえてなかつたような気がする。本稿の執筆を引き受けてから、「物性研だより」の最近号をひもといてみると、そこには、田沼研究室、齊藤研究室、豊沢研究室など、続々と出ていた。物性研も研究所の第二の phase に進入するに際し、初心にかえって大いに「研究室だより」などを本誌に掲載し、その activity を研究所の内部に公表するのは大変よいことだと思う。また永年物性研にお世話になつてゐる身としては、そのような場所を通じて研究室の activity を報告するのは重要な社会的義務と考えるし、また、機会を大いに利用し、研究室の P R をする機会を与えられたのだとも云えよう。

前置きが長くなってしまったが、そのようなわけで、近年の中村研究室の主要な研究について概説しよう。

§. そもそもこの研究室は、誘電体部門として存続して來た（今回物性研の第二 phase への進入にさいし、その名称も變るようであるが）。

私が物性研に存在している間に、誘電体の研究はいちじるしい変貌を遂げた。近時誘電体に関する研究は、世界各国で盛んに行なわれており、ますます盛んになる趨勢が見られる。その研究には、あらゆる物性物理の精密測定手段が用いられ、あるいは用いられようとしており、対象となる物質に関して考えると、誘電体と云えば強誘電性だけが物理の興味の対象となつた時代は、もはや遙か遠い過去のものとなり、強誘電的相転移のみならず、強弾性的相転移、ゾーン境界相転移（スタガード相転移）、インコメンショレイト相転移、その他の種々の構造相転移をする多くの物質が研究の対象となっており、また、同一の結晶において、これらのいろいろな相転移がつぎつぎに起こる場合もあり、多彩な現象の研究がくり抜けられている。

§. このような誘電体研究の歴史の中にあって、当研究室では、フォノンの挙動を追求することによって、構造相転移を研究する立場を貫いて來た。初期は、当時の取扱い期に遠赤外分光計を用いて、ソフトモードの温度依存性を測定すべく、悪戦苦闘の日々が続いた。それでも、 NaNO_2

(これはソフトモードはないが), KH_2PO_4 , SbSI , $\text{NaH}_3(\text{SeO}_3)_2$ の遠赤外スペクトルは, 決定版を出すことができた。とくに後の 3 結晶では, 何ら仮定を設けることなく, 著るしく温度変化するソフトモードを, 遠赤外ではじめて明確に捕えたものであった。

この研究をやっていた頃, Henry-Hopfield が GaP でポラリトンの分散曲線を観測した有名な実験が出た。私はそのときから 10 年, ポラリトンに憑かれることになる。その理由はこうである。その頃, 遠赤外やラマン散乱の実験から, 強誘電的相転移にあずかるソフトフォノンは, ほとんどが過減衰であることが知られていた。過減衰フォノンのポラリトンはどのような挙動を示すのか。或いは, ポラリトンの測定によって過減衰ソフト・モードが直接的に測定できるのではないか。

この実験は, 物性研にレーザー特別予算がはいったとき, この予算で購入したアルゴンイオン・レーザーと, ナルミのダブルモノクロを使用させていたゞいて, 可能になった。私の最初にもった疑問は完全に答えられたらし, ポラリトンを用いたら, 通常の 90° ラマン散乱ではレーリー線のスカートがふくれるに過ぎないソフトモードが, 分離されたピークとして観測されるに違いないという私の予想は完全に正しかったことが立証された。この測定技術を確立し, データを完全に解析して, BaTiO_3 のポラリトン分散曲線を求めて, BaTiO_3 のソフトモードの知識は, ¹⁴⁾ はじめて完全なものとなった。

ポラリトン・ラマン散乱法は, そのほかにも副産物をもたらした。それは, ポラリトン分散曲線の $k = 0$ におけるスロープから, ラマン周波数領域での誘電率が求められるということである。

§. BaTiO_3 で成功したポラリトンラマン散乱法は, KH_2PO_4 に適用した。 KH_2PO_4 のソフトモードはいちじるしく過減衰であり, それまでの通常の 90° 散乱測定法では, レーリー線の裾野のひろがりとして観測にかかるにすぎなかった。この結晶では, 擬スピンの集団運動が存在し, 美しい形で理論に乗せられているが, 過減衰ソフトモードといわれていたものが, 実は緩和型のプロトン集団運動をみているのではないかという見解が発表されていた。もし緩和型でなくて振動型であるならば, ポラリトン・ラマン散乱法を用いれば, ソフトモードのピークが観測される筈である。この実験は, BaTiO_3 の場合と異り大変であった。最初は, KH_2PO_4 ではピークが観測されないかに見えた。しかし特別に欠陥の少ない結晶を使い, ピンホールつき光学系を用いて試料の欠陥のない部分からの散乱光を用い, 非常に小角 $\theta = 0.20 \sim 0.48^\circ$ における散乱を測定してピークの観測に成功した。^{14, 5)} これで振動型のソフトモードの存在が証明されたのである。それではプロトンの集団運動はラマン散乱にかからないのか。これに対する答はつぎのようである。上述の振動型のソフトモードは, B_2 対称のスペクトルに現れる。一方 E 対称のスペ

クトルには、奇怪な 0 cm^{-1} から 100 cm^{-1} に伸びる高原状のレスポンスがあることが知られている。奇怪なというのは、通常の振動子ではフィットできないという意味である。この高原状レスポンスは、E-T Oモードに現われ、E-L Oモードに現れない。これがプロトンのE対称の集団運動であると考えるとすべて矛盾なく説明される。^{14, 10)}

KH_2PO_4 の研究では、その他、ちょうど転移点の温度に保った結晶で相境界を観察することに成功して、長年問題となっていたこの結晶の転移が1次か2次かという問に對して、はじめて1次であるという答えを示した。これを契機として、比熱、X線などで、内外の研究者が追試を行って、1次相転移の結論が確立したのであった。これは、巧妙な実験装置を工夫して成功したのだが、2相の共存と相境界を眼でみて、まことに楽しいものであった。

§. 私は、かねてから、構造相転移に及ぼす圧力の影響について興味をもっていた。例えば変位型強誘電的相転移を考えると、静電力と格子力がたがいに相拮抗しており、温度が下って格子力がその非線型性の故に減少すると、静電力が打ち勝って自発分極を生ずる、従って、圧力を加えて格子がかたくなると、強誘電的になり難くなつて、転移点が下るにちがいないと、早くから考えていた。この考えは、誘電率の圧力依存性に関する世界のいくつかのグループの実験によって、例外なく正しいことが確認されて來た。一方、秩序無秩序型の強誘電的転移点は、例外なく圧力によって上昇する。（上に述べた KH_2PO_4 系では転移点は圧力を加えると下降する）

最近のように、誘電体にいろいろな種類の相転移の存在が見出だされると、この間の事情は大変興味ふかいものとなって來た。とくに、転移に伴うソフトモードの温度、圧力依存性を、ラマン散乱やブリルアン散乱で探求することは、大変興味のあることである。従前は、圧力下光散乱の実験はほとんど不可能であった。ところが近年、ダイヤモンド・アンビルが開発され、ルピー螢光の圧力尺度が確立して、少しずつ行なわれはじめて來た。幸い物性研の高圧部門では、近時きわめてすぐれたダイヤモンド・アンビルが開発されていたので、箕村研究室の御指導と御援助を仰いで、この研究に取り組むことにした。

それには、まず、当研究室のお家芸である精密偏光解析を利用して、ダイヤモンドアンビルを用い、高圧下相転移の光学的研究からはじめた。 $\text{Ba}_2\text{NaNb}_5\text{O}_{15}$ において、高圧を加えていつて22Kbarに達すると、相転移がおこり強弾性となって、強弾性分域が観察されることを発見した。⁶⁾ このカラー写真は、最近印刷配布された物性研究所要覧の表紙を飾っている。同じ方法で NH_4LiSO_4 の高圧相で分域構造を観察し、高圧相の点群を決定することができた。¹¹⁾

高圧下ラマン散乱を行うと一言で云っても容易ではない。100m μ 程度のガスケット孔の中に同程度の結晶を入れて散乱光を取り出すには、とくに迷光比の小さい分光器が必要で、また、ク

リピトンレーザーが必要であった。箕村研究室と共同で設備充実費を申請し、それによって、これらの装置を設置することができ、高圧下ラマン散乱技術を開発した。従来行われていた高圧ラマン散乱は、粉末もしくは結晶碎片を試料として用いていた。相転移におけるソフトモードの研究などを行うには、方位を決定して成型、研磨、仕上げ研磨を行った試料について偏光ラマン散乱を行わなければモードの対称性を指定することはできない。このような技術開発を行って、上述の $Ba_2NaNb_5O_{15}$ のラマン散乱スペクトルの圧力依存性の測定に成功し、圧力にとくに依存するモードの存在を見出だした。¹²⁾ また、最近 $Sr_2Ti_2O_7$ のラマン散乱の圧力依存性を測定し、ソフトモードの圧力依存性を測定するのに成功し、また、室温から $215^{\circ}C$ の転移点にむかってソフトモードが著しくソフト化することを見出だした。¹⁵⁾ この結晶は、インコメンシュレイト相転移をすることが最近知られて興味を引いているものである。

インコメンシュレイト相転移をする結晶のラマン散乱の研究としては、 Rb_2ZnCl_4 グループの結晶について系統的に行っている。 Rb_2ZnBr_4 においては、 A_1 ソフトモードが存在し、低温側からノーマルインコメンシュレイト相転移点 T_i に近づくとソフト化することを見出だした。¹⁷⁾

§. 私は、また、かねてから、強弾性相転移に興味をもっていた。強弾性という概念が確立されて以来久しいし、また強弾性を示す結晶は数多く存在するが、真正の強弾性相転移をすると考えられている結晶はきわめて数少い上に、真正の強弾性相転移——つまり、ゾーンセンターにおける ($k = 0$ の) 格子歪が秩序変数となる相転移——のミクロな説明は、まだない。ほとんどすべての強弾性体は $k = 0$ の格子歪とは異なる秩序変数のゆらぎの発散によって強弾性相へ転移し、その秩序変数と格子歪の結合によって強弾性現象が生ずる。果して真正の強弾性相転移は実現し得るのかという疑問もある。従来、真性の強弾性相転移をすると云われている結晶は、弾性スティフェスのみが転移点に向って減少し、他の量は大きく変わることからそのように考えられているが、それだけの証拠で結論できない場合がある(ヤーン・テラーで転移が起こる場合)。ところが、高対称相が圧電的であれば、誘電率と弾性スティフェスとは、真性の強誘電的相転移と真性の強弾性相転移において、その役割を交換していて、 ϵ^x , ϵ^X , c^P , c^E の温度依存性は予測できる。既存の ϵ^x と ϵ^X の温度依存性のデータから $LiNH_4C_4H_4O_6 \cdot H_2O$ は真性強弾性相転移をすると推論した。そこで、ブリルアン散乱によって、弾性スティフェスの温度依存性を測定した。実験と予測との一致は明快であった。^{3, 8)} 一方 KH_2PO_4 では、弾性スティフェスは、やはり転移点でゼロになるが、 $LiNH_4C_4H_4O_6 \cdot H_2O$ とは異り、真性強誘電的相転移の予測と明快に一致した。つまり、 $LiNH_4C_4H_4O_6 \cdot H_2O$ の強弾性相転移には、一つならず、幾つもの証拠が見出だされたことになる。^{14, 3, 8)}

§. $\text{Gd}_2(\text{MoO}_4)_3$ という結晶は、真性の強弾性転移でもなく、真性の強誘電的転移でもない転移をする。これは、強弾性という現象にはじめて注意を向いた結晶であるので、一時期私はこの結晶にかなりのめり込んで研究した。この結晶は、一時、光学的応用の可能性が論じられており、その電気光学効果などの基礎的データは十分に得られており、いかにももっともらしく見えていた。しかしそくチェックしてみると、解析は誤った物理の上になされていることに気がついた。そこで、そのとき設計自作していた高精度偏光計を用いて、その点を明らかにする実験を行った。結果は、従来の測定が電気光学定数の絶対値のみを測定していたため誤りがはいりこんだので、符号まで測定することにより、真性強誘電的転移でないこの結晶の転移において、その特性が、特異な電気光学現象として現れるという事実への発見に導びいたのであった。この発見は多くの研究者にインパクトを与え、とくに欧洲の研究者が興味をもって研究した。その後この結晶の電気光学的測定は、完全に行つた。

この結晶においても、転移点で相境界を観察した。結晶の中央部の温度が、周辺部よりほんの少し高いと、タンザク状の高温相が観測され、電界を加えてその正負を反転するとタンザクが 90° 回転する。もちろんそのメカニズムは解明した。

また、この結晶のブリルアン散乱の温度変化の測定を行ったが、これは $Gd_2(MoO_4)_3$ の基礎データとして多く引用されている。 $Gd_2(MoO_4)_3$ のブリルアン散乱の測定の結果、スティフェス C_{11} 、 C_{22} が、転移点にむかってある程度減少すること、転移点近傍でブリルアン線幅が著しく増大することを見出だした。この実験は欧州の研究者によって追試されたが、データは数値的にも、きわめて高精度で一致しており、ブリルアン散乱による弾性スティフェスの決定の精度および確度の高いことに今更ながら驚いた。

§. 最近、アモルファス誘電体の研究を開始した。これは、いまそれについて詳しく述べる研究段階にはないが、この研究も何とかうまく育てたいものである。以下に'78年以降の発表論文のリストを掲げる。

文 献

- 1) S. Kojima and T. Nakamura : "Prismatic Domain in $\text{Gd}_2(\text{MoO}_4)_3$ ". Jpn. J. Appl. Phys. 17 947 (1978)
- 2) T. Nakamura : "Several Classifications of Ferroelectric Crystals". Avtometriya 29 (1979)
- 3) M. Udagawa, K. Kohn and T. Nakamura : "Brillouin Scattering Study on Lithium Ammonium Tartrate Monohydrate in Paraelectric Phase". J. Phys. Soc. Japan 44 1873 (1978)
- 4) S. Kojima and T. Nakamura : "Electro-optical Properties of Gadolinium Molybdate." Phys. Rev. B 18 453 (1978)
- 5) Y. Tominaga, T. Nakamura : "Raman Scattering Spectra of B_2 -Polariton and B_2 (LO) Mode in Paraelectric KDP." Solid State Commun. 27 1375 (1978)
- 6) S. Kojima, K. Asaumi, T. Nakamura and S. Minomura: "Crystal Optic Observation of High-pressure Phase Transition in Barium Sodium Niobate". J. Phys. Soc. Japan 45 1433 (1978)
- 7) S. Kojima and T. Nakamura : "Optical Properties in Gadolinium Molybdate". Ferroelectrics 21 351 (1978)
- 8) M. Udagawa, K. Kohn and T. Nakamura : "Brillouin Scattering Study of $\text{Li NH}_4\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_6 \cdot \text{H}_2\text{O}$ in Paraelectric Phase." Ferroelectrics. 21 329 (1978)

- 9) Y. Tominaga and T. Nakamura : "Forward and Backward Raman Scattering from KH_2PO_4 ". *Ferroelectrics* 21 317 (1978)
- 10) Y. Tominaga, T. Nakamura and M. Udagawa : "E-Symmetry Raman Spectra of KH_2PO_4 ." *J. Phys. Soc. Japan* 46 574 (1979)
- 11) T. Nakamura, S. Kojima, M. Takashige, T. Mitsui, K. Asaumi, S. Itoh and S. Minomura : "Point Group Symmetry of NH_4LiSO_4 at High Pressure Phase." *Jpn. J. Appl. Phys.* 18 711 (1979)
- 12) S. Kojima, T. Nakamura, K. Asaumi, M. Takashige and S. Minomura : "Raman Scattering Studies on Phase Transition in Barium Sodium Niobate at High Pressure," *Solid State Commun.* 29 779 (1979)
- 13) T. Nakamura : "Ferroelastic Phase Transition"
Avtometriya, to be published
- 14) T. Nakamura, Y. Tominaga, M. Udagawa, S. Kojima and M. Takashige : "Light Scattering Studies on Structural Phase Transitions". *Solid State Commun.* to be published. (1980)
- 15) S. Kojima, K. Ohi, M. Takashige, T. Nakamura and H. Kakinuma : "Optical Mode Softening in the Incommensurate Phase of $\text{Sr}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$." *Solid State Commun.* to be published (1979)
- 16) M. Udagawa, T. Tominaga, K. Kohn, T. Nakamura and M. Maeda : "Raman Scattering Study on Anomalons Low-Lying Response in $\text{LiNH}_4\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_6 \cdot \text{H}_2\text{O}$ Crystal."

J. Phys. Soc. Japan. 47 869 (1979)

- 17) M. Takashige, T. Nakamura, M. Udagawa, S. Kojima,
S. Hirotsu and S. Sawada : "Raman Scattering Study
of Rb_2ZnBr_4 " J. Phys. Soc. Japan

軌道放射物性研究施設だより(2)

神前熙、菅滋正

本施設についての第1回目の紹介を物性研だより(第18巻第1号)に掲載していただいてから早くも1年余りになるが、この間に施設周辺ではいくつかの動きがあった。まず客員部門以来、SOR-RING建設に多大な貢献をされ、施設に移られてからも測定系整備に努力を惜しまれなかった渡辺誠氏が1月1日より分子科学研究所に、また佐藤繁氏が4月1日より高エネルギー物理学研究所にそれぞれ助教授として転出された。長い間の御苦労に対し深く感謝する次第である。代わって後任助手として磯山吾朗氏が6月16日付けで着任したばかりである。

SOR-RINGの性能は引き続き着実な性能向上を示し380MeVで定常運転されている。最大蓄積電流値は375mAを越え1/e寿命も200mA時で約3時間となり安定で強力な光源として益々使いやすいものとなってきた。特に本年度から定期的に加速器のマシンスタディを行う事になり、手始めとして行ったRFノックアウト法による単一バンチ試運転の成功など北村英男助手をはじめ施設職員全員の喜びであった。そのほかアルゴン放電洗浄によるリング真空の超高真空化、電磁石電源の改造と性能向上、電子入射効率の改善等々が行われた。

一方測定系に関しては物性研究所神前、小林、村田3研究室および本施設による整備ならびに習熟が終わり、今後分担して各ビームラインの測定系の管理をお願いしている。各ビームラインのどの分光系についても長時間使用による光学素子表面の劣化が深刻な問題であり定期的に整備する必要があるがこれらについては上記3研究室+本施設でマシンタイムを取り実施する事になっている。この他RING室シャッターパーにシールド扉をつけ、不要となった室内のコンクリートシールドブロックを搬出する事によって実験用のスペースを生みだす事ができた。その結果第1ビームラインを枝分けしてもう一つの直入射分光器(変形ワズワース型)に導く事が可能になり外部微調整機構付き枝分け用前置鏡および分光器の整備が神前研究室によって始められた。

52年度後期から共同利用に公開されたSOR-RING第3ビームラインに引き続いて、第1、第2ビームラインが53年度後期から、さらに第4ビームラインが54年度前期からそれぞれ公開されES-SORビームラインを加えて現在5本のビームラインすべてが共同利用されるに至った。それらの研究成果については1978年より創刊されたISSP Activity Report of Synchrotron Radiation Laboratoryに詳しく記載されているので興味のある方はそちらを御参照下さい。現在では本施設は我が国で稼動中の唯一のシンクロトロン放射源であるため非常に広汎な分野からの研究者に御利用いただいている。参考までに文末に最近のマシンタイム

についてまとめてあるが、内容的には高い評価でありながらマシンタイムの制約上採択出来ない課題が出る事は誠に残念である。

さて先に述べたように本施設でシンクロトロン放射を光源として利用したいという新規利用者が増加の一途をたどっている情勢に鑑み、軌道放射物性研究施設利用者ハンドブックの発行がかなてより急がれていたが、昭和54年2月に発行にこぎつける事が出来た。これまでに施設利用したグループおよび今後予定されている利用者グループには既に配布済みであるが、このハンドブックをお読みいただければ共同利用申込の事務手続きから分光器の使用法までが理解できるよう配慮してある。従って新しく施設利用を希望されるグループはマシンタイム申込以前に必ず本ハンドブックを読んだ上で各担当者に御相談いただきたい。またSOR-RINGでの実験はR I N Gの超高真空に影響を与えないよう特別に注意が必要なので、各グループで最低1名は施設が年に1~2回行う超高真空の講習会への出席が義務づけられている点に御注意いただきたい。

こうして所内、所外の共同利用が進み着実に成果を上げつつある事は誠に喜ばしい事であるが、何分にも物性研究所全体の共同利用の約3分の1を本施設が請負っている事になり施設職員1人当たりの仕事量は現状ではかなりのものである。従ってR I N G本体以外の測定系に関する随時の作業（光学系の変更や再調整および真空の仕上げ等）については、各利用者は施設のサービスを全面的に期待するというのではなく、施設職員に相談しながら実験者が行っていただきたい。これは利用者ハンドブックにも書いてあるので御理解いただいている事と思う。さて既に本施設に共同利用に来られた研究者ならばおわかりの様にSOR-RING棟においては実験エリア以外の居室のスペースが殆ど無く、電子入射時には実験エリアから待避した利用者が時には階段やコンロール室にあふれるという状態である。この居室の確保という長年の宿題に対して最近ようやく原子核研究所の理解が得られ現在具体案を検討中であるのでもうしばらく御辛抱いただきたい。

さて物性研究所では将来計画の5本の柱の1つとして軌道放射物性を取り上げている。これは現在のSOR-RINGがむしろVUVからSOFT-XUVの低エネルギー汎用光源であるのに対し1GeVクラスの中エネルギー光源として最新の加速器の技術開発の成果を取り入れて高輝度高安定性を持つリングを建設し、同時に現在の5本に限定されたビームラインを倍増するのみでなく十分な実験スペースを確保して特殊な物性実験を可能にする事を考えている。今後利用者の方からの御支援と種々の御提案を歓迎致します。

最後に共同利用関係の担当は現在は次の通りです。

- (1) 全般 神前、菅
- (2) マシンタイム 菅、磯山
- (3) 放射線管理 内田、三国

- (4) 第1ビームライン 近藤(神前研), 関(小林研)
(5) 第2ビームライン 村田, 大門(村田研)
(6) 第3ビームライン 菅, 内田
(7) 第4ビームライン 三国
(8) E S - S O R 三国
(9) 真空管理 北村, 三国
(10) 別刷, レポート 磯山
(11) 宿舎申込, 事務 平田(月, 火および木曜日午後)

日 月 火 水 木 金 土

最近のマシンタイム

昭和53年度 後期 採 択

- (I) E S - S O R
採 択 1件
1) U V および X U V 光によるシアン化物の解離, 励起過程の研究
新井 勝也, 上野草 大樹, 東 大 理, 朽 津 耕 三
2) S O R 特性の測定
大阪市大原子力 小 塩 高 文
3) S O R 利用による放射スペクトルの研究
大阪府大 工 塙 貴二郎

補 欠 1件
不 採 択 3件

- (II) S O R - R I N G 第1ビームライン
採 択
1) アルカリ金属合金の極紫外吸収係数の測定
都立大 工 理 宮 原 恒 昭
2) $(SN)_x$ および $(CH)_x$ ポリマーならびにアントラセンの光学的性質に関する研究
新井 勝也, 上野草 大樹, 東 大 工 理 三 谷 忠 興
3) 応力変調法によるアルカリハライド励起子帯電子構造の研究
東 大 理 桑 原 五 郎

(III) S O R - R I N G 第 2 ビームライン

採 択

- 1) MnP および MnSi の極紫外光電子スペクトル

東北大理 石井武比古

- 2) MgO 極端紫外光電子スペクトル

物性研 村田好正

- 3) アルカリハライドの光電子スペクトル

東大大理 黒田晴雄

補 欠 1件

(IV) S O R - R I N G 第 3 ビームライン

採 択

- 1) 平面回折格子斜入射分光器の整備及び光分光による性能試験

物性研 菅滋正

- 2) 平面回折格子斜入射分光器の光電子分光による性能試験

物性研 村田好正

- 3) S O R - R I N G 軟X線露光法によるリソグラフィー

大阪大基礎工 難波進

補 欠 1件

昭和 54 年度 前 期

(I) E S - S O R

採 択

- 1) 遷移金属ハライドの L 吸収スペクトル

大阪大教養 松川徳雄

- 2) 気体の XUV 光による Fragmentation の測定

筑波大物理 森岡弓男

- 3) E S - S O R 軟X線リソグラフィによる光学素子の作製

大阪大基礎工 難波進

- 4) 合金系の内殻励起吸収

東大教養 江尻有郷

(II) R I N G本体

採 択

- 1) S O R - R I N Gへの低エネルギー電子の入射実験

検査者 岩井正樹 大阪大 分子研 研究員 渡辺一哉 田中誠一

(III) S O R - R I N G第1ビームラインへの水素吸収スペクトルの測定とその基礎的研究

採 択 藤田泰洋 水谷忠興

- 1) 第1ダクトの整備と増強

物性研 近藤泰洋

- 2) 固体水素の固有吸収スペクトル

物性研 神前熙

- 3) 一次元半導体ポリアセチレンにおける半導体-金属転移に関する分光学的研究

検査者 岩井正樹 東大工三 谷忠興

補助欠け 1件

(IV) 第2ビームライン

採 択 木村政典

- 1) CeB₆の紫外光電子スペクトルの研究 東北大理 糸谷忠雄

- 2) Si-SiO₂界面の光電子スペクトル 武藏工大工 服部健雄

- 3) 極端紫外光電子分光法による金属の初期酸化の研究

物性研 村田好正

(V) 第3ビームライン

採 択 佐野和也

- 1) 磁性体内殻電子遷移の温度変調分光 物性研 S O R 菅滋正

- 2) S O R - R I N G軟X線リソグラフィ 大阪大基礎工事 難波進

(VI) 第4ビームライン

採 択 佐野和也

- 1) 光電離における電子相関効果の研究 名大プラ研 大谷俊介

- 2) 高温プラズマからのXUV-VUV放射測定機器の絶対較正

宇崎の木村政典

- 3) 塩素化合物分子のC L_{II-III}吸収スペクトル

大阪市大石黒英治

検査者 岩井正樹

昭和54年度 後期

(I) E S - S O R

採 択

- 1) I N S - E S 軟X線リソグラフィ 大阪大 基礎工 有留宏明
- 2) 3 d 遷移金属及びその化合物の蛍光X線スペクトル測定
宇都宮大 工 中井俊一

(II) S O R - R I N G 第1ビームライン

採 択

- 1) 応力変調法によるアルカリ・ハライド励起子帶電子構造の研究
東大理桑原五郎
- 2) LiHの反射スペクトル 山口大工業短大部 池谷元伺
- 3) 氷及び低次元物質の光反射スペクトルの測定
物性研小林浩一
- 4) S O R - R I N G からのシンクロトロン放射のパルス特性を用いた反応ダイナミクス
東工大理旗野嘉彦

不採択 4件

(III) 第2ビームライン

採 択

- 1) 金属、半導体単結晶試料の角度分解型光電子放出の研究 (Cu, Ni, W, Si, Ge)
東北大理佐川敬
- 2) MgOの極端紫外光電子スペクトル 物性研村田好正
但し
極端紫外光電子分光法による金属一半導体界面の研究
日立中央研小林啓介
- 3) CuRh, AgRh, AuRh合金の価電子帶光電子分光スペクトルの測定
都立大理石井広義

補欠 1件

(IV) 第3ビームライン

採 択

- 1) 遷移金属化合物内殻遷移反射スペクトル 物性研菅滋正

2) LiHの反射スペクトル

山口大工業短大部 池谷元伺

3) SOR-RING軟X線リソグラフィによる光学素子作製のための基礎研究

大阪大 基礎工 有留宏明

不採択 1件 対照組・工具類

(V) 第4ビームライン

不採択 1件 対照組・工具類

1) 高温プラズマからのXUV-VUV放射測定機器の絶対較正

不採択 1件 対照組・工具類

2) 光電離における電子相関効果の研究

不採択 1件 対照組・工具類

3) 軟X線用回折格子の試作と評価

不採択 1件 対照組・工具類

4) 磷化物分子のP-L_{2,3}吸収スペクトル

不採択 1件 対照組・工具類

「軌道放射物性研究施設を利用して」

阪大基礎工・極限微細ビーム加工
実験施設 有留 宏明

昭和51年度後期にES-SORのマシンタイムの割当を受けて以来、INS-ES並びにSOR-RINGからのシンクロトロン放射によるX線リソグラフィの実験を行っている。

X線リソグラフィとは一種のパターン転写技術であり、あらかじめ所望のパターンをもつX線マスクを電子ビーム・リソグラフィやホログラフィック法で作製しておき、これをX線で転写するものであって、MIT Lincoln Lab. のH. I. Smith等によって最初に行なわれた。もともとは超LSI等開発のため、従来のフォトリソグラフィの限界を打ち破る微細加工技術として考案されたものであるが、現在では、X線リソグラフィ自身のもつ転写分解能は 100 \AA 程度と考えられており、加工精度を生かした材料物性面で興味ある課題を提起する報告もされている。

さて、X線源として通常はAl, Si, Cu等の特性X線が使われるが、実用的観点、即ち露光時間短縮のために、高感度・高分解能レジストの開発と共に、より強力なX線源の開発が要求され、この観点からシンクロトロン放射軟X線源が重要となる。

難波研究室においてSORを使用したリソグラフィが検討された昭和50年には、すでに西独DESY研究所で行ったIBMの結果が伝わってきていた。しかし、INS-ESとは電子エネルギー等、実験条件に差があり、どのような実験構成をとるかということについては、我々にとって未経験のことながらばかりであった。幸いにも客員部門におられた佐藤繁氏（現高エネルギー研）や渡辺誠氏（現分子研）、又SOR施設の菅滋正氏等の助言が得られ、とにかくやってみようということになり、マシンタイムを申請し採択された。

実際に実験を行ってみると、 $0.2\text{ }\mu\text{m}$ 巾、 $0.7\text{ }\mu\text{m}$ 周期、厚み $2.2\text{ }\mu\text{m}$ のSOR軟X線の指向性を如実に示す高さと巾の比（アスペクト比）が大きな、垂直性の良い壁面をもつ転写パターンが得られ、その後の実験結果からも、X線リソグラフィとして理想的な線源であることがわかつてきた。装置が大型で高価なことが唯一の欠点である。そこで電子エネルギー 300 MeV （当初）のSOR-RINGのマシンタイムの割当を受け、実験工程自体短縮時間である必要からも差圧排気系を取付けて同様の実験を行った。こちらの実験もやはりすぐれた転写結果を示した。

現在ではトムソンCSF（仏Orsay, ACO）やUniv. of California, Berkeley（米Stanford, SPEAR）の研究報告があり、世界の各地で計画が進行中である。SOR施設での実験結果に刺激されてか、アスペクト比大の微細線、垂直性の良い壁面等を如何にして得る

かが最近のリソグラフィに関する国際会議での流行になっている。

INS-ES, SOR-RING で行った我々の結果も含めて、下記の Review 論文中に掲載されている ("Synchrotron Radiation Research," S. Doniach and H. Winick, Eds., Plenum Press, to be published)。

我々が実験を開始した当初に比べれば、ES-SOR ダクトの真空系に関してはイオンポンプ、ターボモレキュラポンプが導入され、真空引き待ち時間は当初の 3 時間から 1 時間に短縮されている。SOR-RING では電子エネルギーが 400 MeV に up されただけでなく、350 mA というこのクラスでは世界のトップレベルの蓄積電流が実現され、リソグラフィに必要な露光時間は、PMMA (ポリメチルメタアクリレート) を使用して 10 秒以下と驚異的なまでに短縮されている。

研究室でパターンマスクをつくり、それをもってきて X 線露光し、再び研究室で SEM 等で観測し、その結果をみながらマスク作製その他の条件を変化させるという行程を 1 ~ 2 週間のマシンタイムで行なうという状態がしばしばであったが、上記のように予期以上の好結果が得られた。これはリソグラフィという技術的な研究課題に対しても理解を示し、終始有益な助言と協力をいただいた SOR 施設職員の方々に負うところが大きい。この紙面を借りて、難波研究室の一員として感謝したい。

今後は、筆者達の研究室において行なわれている微細加工技術を用いて、シンクロトロン放射実験に必要とされる軟 X 線光学素子の開発に微力ながらも貢献したいものと考えている。

電　　子　　工　　程

日　　本　　大　　学

東　　京　　大　　學

工　　業　　大　　學

大　　阪　　大　　學

短期研究会報告

「バンド理論の現状と将来」

開催日時 昭和 54 年 6 月 28, 29 日

開催場所 物性研旧棟 1 階講義室

上記研究会が東京サミット会議と日を同じくして開催された。この種の研究会としては、過去に 1959 年頃多体問題が盛んな折に基研で「バンド理論の基礎と限界」がテーマとして取り上げられ、最近は 3 年ほど前に山下教授退官記念として作並で今回と同じ題目の研究会が開かれている。実際に何らかの形でバンド理論に取り組んでいる研究者が集る機会は学会ではほとんど無い。そこで、これらの者が集って各自の問題意識や、そのかかえている問題点をざっくばらんに討論することによってバンド理論の発展と将来への展望をはかることに今回の研究会の主目的があった。今回は講演希望が予想を大幅に上回り、やむを得ずその若干を割愛させて頂いた。それでも午前 9 時から午後 6 時までの強行スケジュールにせざるを得なかった。幸に、各講演者、座長の協力によってほぼスケジュール通りに行なわれ、ほとんどの講演について大体必要な討論時間を確保できた。この研究会の主目的についても一応の成果が達成され、有意義であった。ただ、講演の中で最近のバンド理論の方法論の多彩な発展を反映して「何々の方法」と言うのが多数登場し、それを用いたレベルの高い研究結果が発表されたが、その大部分がいずれも外国の研究者によって考案されたものであった点が物寂しかった。この次の機会には我々自身の考案した「何々の方法」がいくつか登場することを期待したい。

以下、講演題目と講演者の提出した講演要旨を掲げる。

世話人	森 田 章
和 光 信 也	
柳 瀬 章	
寺 倉 清 之	
奈 良 久	

講演要旨

希土類金属化合物の電子構造

長谷川 彰（東北大理）

のような手法を用いていろいろな希土類金属化合物のエネルギー・バンド構造を計算している。

- (1) 1電子ポテンシャルの作り方としては local-spin-density 近似を使う。
- (2) 電荷移動の効果を考慮に入れるために APW 法によるセルフコンシスティント計算を行なう。
- (3) 相対論的効果を考慮を入れる。
- (4) Non-muffin-tin 補正を入れる。

このような手法を使って次のようないろいろな型の化合物のバンド構造を計算してきた。

- (a) NaCl 型: Gd-pnictide (GdN, GdP, GdAs, GdSb), La-pnictide (La-Sb), Sr-chalcogenide (SrO, SrS, SrSe, SrTe), Eu-chalcogenide (EuS)
- (b) CsCl 型: YZn, LaZn, LaAg, LaCd, LaIn
- (c) RB₆ 型: CaB₆, SrB₆, LaB₆, EuB₆
- (d) Laves 相: YAℓ₂, LaAℓ₂
- (e) ThSi₂ 型: LaGe₂

得られた結果はかなり満足的なものである。特に、金属的な化合物のうちでは、YZn, LaB₆, LaAℓ₂ のフェルミ面の計算結果の実験との一致は単体金属に見られる一致と同程度に良い。しかし、絶縁体や半導体に対しては、伝導バンドと価電子バンドの間のエネルギー・ギャップの計算値は実験値よりもかなり小さい。この不一致は、 $\rho^{1/3}$ 型ポテンシャルの限界を示しているのかも知れない。最近得られた主なる成果として、LaB₆ の E - k 曲線が、角度分解型光電子分光による実験結果とひじょうに良く一致していること、LaAℓ₂ のフェルミ面の計算結果が、価電子の数が偶数であるにもかゝわらず、ひじょうに良く実験と一致していることなどを報告した。

Heusler 合金の電子構造

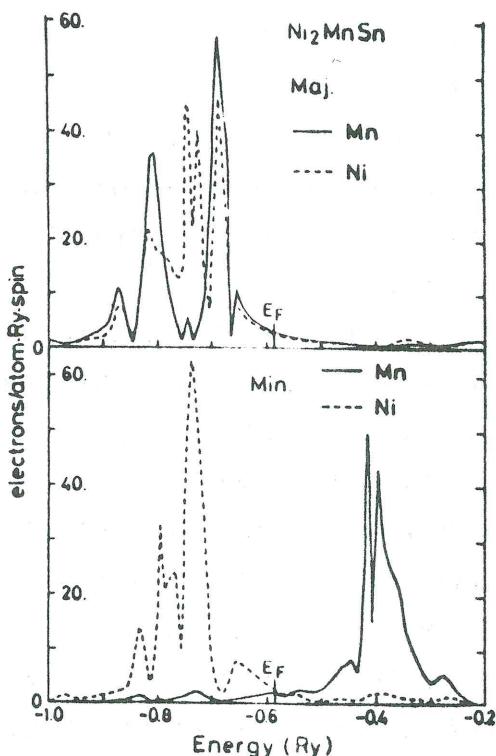
石 田 尚 治, 石 田 潤 二

久 保 康 則(鹿児島大理)

化学式 X_2MnY で記述される Heusler 合金のうち Cu_2MnAl , Pd_2MnSn , Ni_2MnSn の 3 つの強磁性合金の電子構造を APW 法より求めた。

3 つの合金のうち, Mi_2MnSn の d -band の状態密度曲線を図示する。これによると majority spin states に対しては, Ni (X atom) と Mn の d -band は互に重なり合い Fermi level 以下にあり, minority spin states に対しては, Ni (X atom) と Mn の d -band のほとんどが可成りはっきりと分かれており, Mn の d -band のほとんどが空である。他の 2 つの合金に対してても, Ni の役割を Cu, Pd に置きかえた事情が成り立つ。強磁性 Heusler 合金は一般に一分子当たり約 $4 \mu_B$ の磁気モーメントをもっているが, そのほとんどを Mn atom が担っていることが実験から分っている。図の状態密度曲線から, そのことが容易に分る。一般に Heusler 合金に対して X atom と Mn の d -band のようすはこの図に示されるような特徴をもっていることが推察される。

各原子の APW 球内の磁気モーメントは, X atom (Cu, Pd, Ni) に対してはいづれも正で $0.1 \mu_B$ 以下の値が, Y atom (Al, Sn) に対しては負で絶対値が $0.1 \mu_B$ より小さい値が得られた。これらの値は実測値によく一致している。一分子当たりの磁気モーメントも実測値非常によい一致を示し, そのほとんどを Mn atom が担っている。また各原子位置での APW 球内での conduction band の s-電子の spin 分極の符号と, 各原子の conduction electrons の内部磁場への寄与の符号の一致が得られた。



Cu₂MnAl の χ (q, ω)

久保 康則, 石田 潤治
石田 尚治(鹿児島大理)

強磁性ホイスラー合金, Cu₂MnAl の χ (q, ω) をバンド構造を忠実に取り入れたクックの方法により求めそのスピン波の機構を調べた。波動関数, エネルギー値は Mueller のインターポレーションスキームにより APW による E-k 関係を再現したものを用いた。中性子による磁気散乱断面積の横成分はクックによると¹⁾

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \frac{e^2 r}{mc^2} \frac{k'_0}{k_0} (1 + e_z^2) \{ 1 + f(\omega) \} |F(k+q)|^2$$

$$\times \frac{1}{2\pi} \sum_{\mu} \{ \text{Im}X_{\mu}(q, \omega - i\varepsilon) + \text{Im}X_{\mu}(-q, -\omega - i\varepsilon) \}$$

で表わされ, $\sum_{\mu} \text{Im}X_{\mu}$ のピーク値からスピン波が求められる。まず定性的な考察として Cu₂MnAl の E-k だけから ImX を調べた。この場合は d 電子間の相互作用としてのパラメーター U_{eff}^{d-d} に任意性があるため田島らの実測値を再現するべくその値を調べた結果, 0.033~0.036 eV とほぼ一定の値で実測値をよく再現できた。次にスピン波の機構を定量的に調べるため波動関数を取り入れて ImX_μ の計算を行った。この場合は代表的な q の値として ($2\pi/a$) を単位として, <0, 0, $\frac{1}{4}$ >, <0, 0, $\frac{1}{2}$ >, < $\frac{1}{4}$, $\frac{1}{4}$, 0>, < $\frac{1}{4}$, $\frac{1}{4}$, $\frac{1}{4}$ > の 4 つのものに対して状態密度から評価した U_{eff}^{d-d} の値 (Mn の d 電子に対して約 3.25 eV, Cu のそれを約 0.325 eV) を使って ImX_μ を求めた。その結果, q が <0 0 $\frac{1}{4}$ > の時は Mn の d 電子と s, p 電子間の相関が支配的で, <0 0 $\frac{1}{2}$ > では Mn の d 電子間の相関が支配的となるが, Mn, Cu の d 電子間の相関が 3% 程度みられ, Mn の d 電子と s, p 電子間の相関は 10% 程度に減少する。< $\frac{1}{4}$ $\frac{1}{4}$ 0> の時は Mn の d 電子間の相関が大きいが, Mn, Cu の d 電子間の相関が 20% 程度みられる, Mn の d 電子と s, p 電子間の相関は 10% に満たない。< $\frac{1}{4}$ $\frac{1}{4}$ $\frac{1}{4}$ > の時は Mn の d 電子間の相関が 70% 程度, Mn の d 電子と s, p 電子間の相関が 30% 程度であった。以上のことから, Cu₂MnAl のスピン波が q が小さい所ではいわゆる s-d 相互作用的機構から生じ, q が大きくなるにつれて Mn の d 電子間, Mn と Cu の d 電子間の相互作用より生じていることがうかがえる。又 d の電子間の相互作用の大きさとして約 3.25 eV と評価され, これは Hodge³⁾ らが Ni に対して 2.65 eV と評価したものに対応する。

次図に Cu₂MnAl のスピン波の分散関係を示す。細い白丸が E-k 関係だけからの結果, 黒丸が波動関数を考慮したものである。

1) Phy. Rev. B7 1108

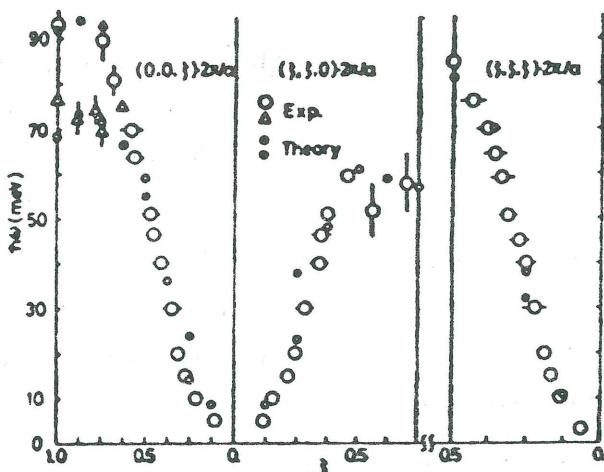
(1973).

2) J. Phys. Soc. Japan

43, 483 (1977)

3) Phy. Rev. 152, 505

(1966)



MnSi の 電 子 構 造

中 西 修 (東北大・金研)

MnSiを始めとするB20型遷移金属硅化物は多様な磁気的・電気的性質を示す。我々はこの多様性が、この物質系の特異なバンド構造によるのではないかと推察し、self-consistent APW法によってCrSi, MnSi, FeSi及びCoSiのバンド構造を求めた。金属イオンの原子番号Zが大きくなるに従って3-dバンドは少しずつ下ってくるが、バンドの大体の形状はほとんど変化しない。バレンス・バンドの一番下はSiの3s軌道、その上は金属の3dとSiの3pの結合軌道、その上は金属の3d軌道、その上は金属の3dとSiの3pの反結合軌道である。フェルミ準位近傍は金属の3d軌道に占められており、dispersionが非常に小さい。バレンス・バンドに電子を48個つめたところに非常に狭いバンド・ギャップが存在する。このためFeSiはnarrow gap semiconductorになる。このgapの大きさはCrSi, MnSi及びFeSiでそれぞれ0.0129 Ryd, 0.0091 Ryd及び0.0082 Rydであった。MnSiのフェルミ準位は5枚のバンドを横切りR点に電子のポケットがあり、Γ点にholeがいる。CoSiはR点に電子のポケットがありΓ点とM点にholeがいて、上のバンドと下のバンドの重なりがわずかなので半金属になっている。

なおXαパラメーターは $\alpha = \frac{2}{3}$ を用い、マフィンティン内の軌道は角運動量ℓが6までとり、 $0 \leq k \leq 3.6 (\frac{2\pi}{a})$ の補強された平面波はすべてとり込んだ。core-levelはiterationのたびにatomic likeに求めた。

化合物特に磁性化合物のバンド計算の現状

柳瀬 章（東北大理）

磁性化合物では、一般に $3d$ 又は $4f$ 状態がその磁性に重要な寄与をしている。ここではこれらの化合物の APW 法による、バンド計算の実際を我々のグループによる計算の実例をあげて説明した。以下お話しした内容の項目をあげる。

- (1) 結晶構造から空間群およびその既約表現を計算するプログラム
- (2) Self-consistent な結晶 potential を求める手続き
- (3) APW 法による、各種化合物のバンド計算の精度の議論
- (4) 原子位置の局所的な点対称性と Energy バンドとの関係
- (5) 内挿法として LCAO, 対称化フーリエ法、四面体内挿の利用法および、その限界の議論
- (6) フェルミ面の作図、状態密度の計算等への 2 次四面体内挿の有用性とその実際

なお、上記の(1)および(6)の部分については、現在東北大の大型計算センターにライブラリーとして登録する作業をすすめていることを報告した。

希土類金属 bccEu のバンド構造と

らせん型スピン秩序

—特に H 点のまわりのフェルミ面の役割—

小林 正一（日大文理）

福地 充（慶應工）

われわれは数年前から希土類の単体金属である bccEu のバンド構造の計算を行なっている。バンド理論も、化合物その他の複雑な系へ拡げられている現在、どうしてこの Eu のような簡単な金属に對してバンド構造の計算をやるのかと言えば、それは主張したいことがあるためである。この金属は bcc でありながら incommensurate ならせん型スピン秩序をもつことが、カリフォルニア大学の Nereson らの中性子回折の実験によって明らかにされている。われわれの目的は、このらせん型スピン秩序の起因を、 Fermi 面の精密な構造から、納得のいく仕方で、説明したいといふ一点に尽きる。

Eu のバンド構造を最初に計算したのは Freeman ら (1964) であるが、まだ初期であったため彼らはフェルミ面の形状とかスピン秩序とかには関心を示していない。次いで Loucks ら

(1968)は、まさにこのらせん型スピン秩序を目指してフェルミ面の詳しい形状を計算した。しかし彼らの計算結果に（またその過程にも）どうも納得できない一、二の点（特にH点のまわりのスーパー・エッグとよばれる電子フェルミ面の役割、その他）があった。そこでわれわれ（1976）はKKR法でHerman-SkillmanのAO'sを素材として $\alpha = 1$ として詳細なフェルミ面の構造を計算し、この点を解決したと思う。

しかし、なお $\alpha = \frac{1}{3}$ としてセルフ・コンシスティントにした場合にも、なお前回の $\alpha = 1$ のノン・セルフ・コンシスティント計算の場合と同様の結果が得られるのであるかどうかを明確におさえておく必要があり、現在これ、およびその周辺の計算を行なっている。

クロム・スピネルのバンド構造

小口多美夫、平下 紀夫

神原 武志、権平健一郎（電通大物工）

スピネル型強磁性半導体 $CdCr_2S_4 \cdot CdCr_2Se_4$ は磁気的 ordering に伴い吸収端の偏移、負の磁気抵抗効果など興味ある物性を示す。我々は EHT を用いてこれらの物質のバンド計算を行い、偏移を示す遷移を Cr を $3d$ bond から Cr の $4s$ から成る伝導帯への orbital promotion に assign し、偏移は伝導帯の底の交換分裂によるこことを明らかにした。これを含め光学的性質については essential には理解されたと思う。しかし、empirical な parameter を含まない self-consistent な計算によりいろいろな物性をすべて統一的に理解することが望ましい。

最近、Hartree-Fock-Slater model に基づく、DV-X α 法が多くの cluster model に対し用いられ、更に結晶や表面のバンド計算に応用されている。我々は DV-X α 法を Cr スピネルのバンド計算に応用した。DV 法における最大の特徴は matrix element の積分を空間的に分布した sample point での値にその素体積をかけたものの和として見積ることにある。したがって、基底とポテンシャルに解析的関数型を要求しない。しかしながら、Cr スピネルでは unit cell が大きく、多くの sample point を必要とするため計算の size がたいへん大きくなってしまう。したがって、最適な sample point の分布関数を求めることが重要であり、DV 法を応用する上でその sample point に計算の良否がかかっていると思われる。

論文 下井信也著「電子の運動量分布による金属中の電子状態の計算」 Linear Method in Band Structure Calculation

浅田寿生(静大工短)

O. K. Andersen の論文 (Phys. Rev. B 12 ('75) 3060) によって本格的に始められた Band 計算における linear method は, APW 法, KKR 法において, 近似的な, エネルギー依存性のない波動関数を用い, 固有値方程式の行列要素のエネルギー依存性を消す (linearize) ことにより, 高速化するものである。

こゝでは, まず, これまでに提唱されている中で, LAPW (linear APW), LMTO (linear muffin tin orbitals), ASW (augmented spherical wave) の 3 方法について簡単なレビューをした。LAPW は, APW にくらべて 10^2 位高速で, かつ, 十分精度もよいが, linearization の元々の目的である多数個の原子をもつ unit cell の結晶への適用に際し, 次元数の巨大化という困難は避けられない。LMTO は interstitial 領域で固有関数の運動エネルギーがゼロであるために, その適用は close-packing の結晶により有効である。次元数も小さく, 大きな unit cell をもつ A15, Chevrel 構造等に適用されているが精度は LAPW に劣る。ASW は, LMTO での tail function に改良を加え, 減近形が $e^{-\kappa r}/r$ となる様な関数を用いるが, κ は自由なパラメーターであると共に, どの様に optimum な κ を決めるかが問題となる。

次に, LMTO 法での種々の収束性, エネルギー及び固有関数の精度, 計算時間等を, 主として Cu について, APW 法との比較を示した。

最後に, KKR マトリックスで Atomic sphere 近似とエネルギーをゼロにおく近似から出て来る canonical band の概念とその効用について簡単に述べた。

金属中の電子の運動量分布

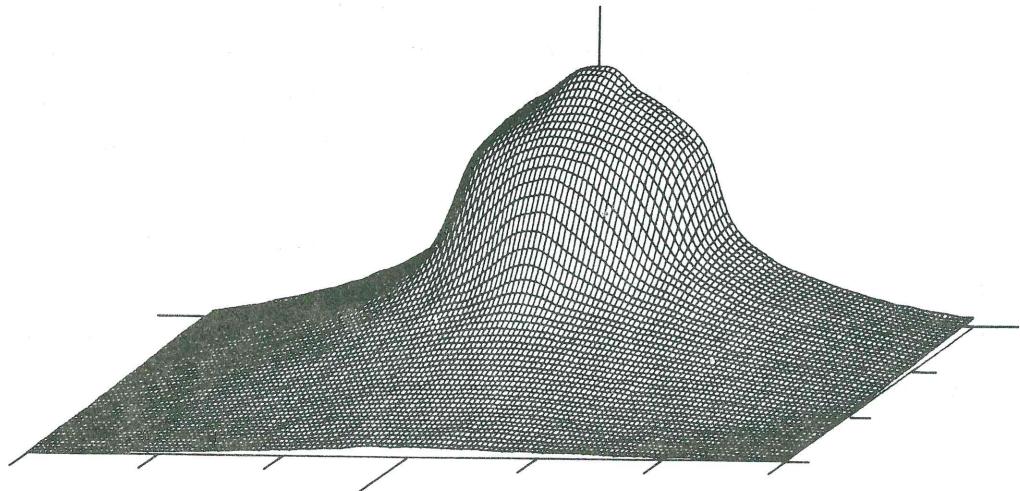
和光信也(物性研)

普通のバンド計算は一体近似であり, 波動関数としては, 単一スレーター行列式を用いていることになっている。しかし, 多くの場合, ポテンシャルとしては, 多体効果まで入っている有効ポテンシャルを使っている。だから種々の物理量が比較的良く求められているが, 多体効果によるフェルミ面のボケなどは原理的に再現することは不可能である。そこで我々は, 過去数年間バ

ンド理論による電子の運動量分布が、コンプトン散乱のプロフィールや、二光子過程陽電子消滅の角相関曲面などの実験結果と、どの程度一致するか、あるいはどの程度の相違が見つかるか、を研究するために極めて精度の高い計算を行って来た。

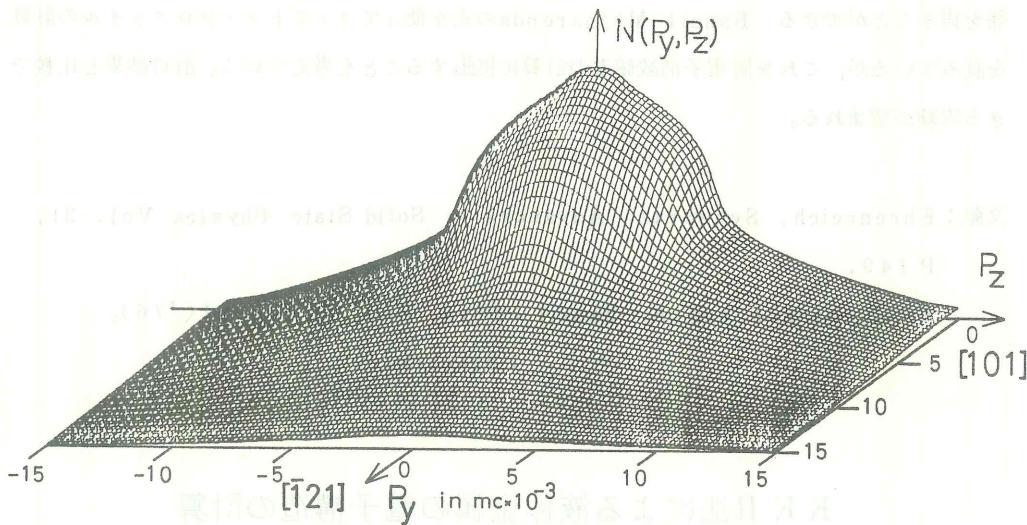
現在得られているコンプトン散乱の実験は、分解能が残念ながら充分良くはないために、電子-電子相関効果を評価するまでは至っていない。他方、陽電子消滅の分解能は極めて良く、理論計算とおどろくほど良く一致している。第1図はBerko等による銅の陽電子消滅二次元角相関曲面であり、第2図はそれに対応する理論である。詳細は文献1)-2)を参照して下さい。また、³⁾Berko等のより詳しい解析によると、電子一陽電子相関効果がはっきりと示されている。

- 1) S. Wakoh : Proc. of ICPA 5に発表
- 2) S. Wakoh, S. Berko等 : J. Phys. Fに投稿
- 3) S. Berko等 : 私信



第1図

計算によれば、電子の運動量分布の形は、規則格子中の運動量分布と同様であるが、不規則格子中の運動量分布は、規則格子中の運動量分布より複雑である。



(著者原稿) 第 2 図

規則格子中の電子の運動量分布と不規則格子中の電子の運動量分布の比較

不規則合金中の電子の運動量分布

中 尾 百 合 (青学大)
和 光 信 也 (物性研)

置換型不規則二元合金中の平均的な電子の状態を記述するための近似として、不規則格子を何らかの形の規則格子におきかえるコピーレントポテンシャル近似 (C P A), 平均された T - マトリックス近似 (A T A) がある。Bansil と Mijnarends は、マッフィン・ティン型ポテンシャルを用い、 A T A の近似で電子の運動量分布の表式を導いた。電子の運動量分布を求めるには散乱強度の運動量依存性が必要であるが、このことは、電子の波動関数の動径部分をマッフィン・ティンの半径上だけでなく、マッフィン・ティン内のすべての点について解かなければならないことに相当する。従ってエネルギー分布を求める場合に比べて計算は複雑になるが、この事情は勿論金属・合金に共通している。又、状態密度をエネルギーと運動量の関数であらわしたスペクトル関数 ρ は、金属の場合には $\rho (P, E) \sim \delta (E - E_p)$ であるが、合金ではエネルギー固有値が複素数になるため $\rho (P, E)$ は $E = E_p$ のまわりに巾をもつ。このために、実際の数值計算は金属の場合よりもかなりめんどうになる。電子の状態密度の運動量分布はコンプトン散

乱のプロファイルから得られるし、陽電子消滅確率の角度相関からも陽電子を媒介として同じ情報を得ることができる。Bansil-Mijnarendsの式を使ってコンピュトン・プロファイルの計算を試みているが、これを陽電子消滅確率の計算に拡張することも考えている。計算結果と比較できる実験が望まれる。

文献：Ehrenreich, Schwartz, Advances in Solid State Physics Vol. 31,

P 149.

E. Mijnarends and A. Bansil : Phys. Rev. B13 2381 ('76).

" " : preprint.

KKR法による液体金属の電子構造の計算

浅野 摂郎（東大教養）

KKR法の特徴は固体中の電子の波動関数を各イオンのまわりのマフィンティン球内で Schrödinger 方程式の解を用いて

$$\Psi(r+R) = \sum_{RL} C_{RL} J_L(E, r)$$

と表わすことにある。それと全く同様に、任意のマフィンティン球の集合からなる系のグリーン関数も

$$\begin{aligned} (r+R, r'+R'; E) &= -ik\delta_{RR'} \sum_L J_L(r<) H_L(r>) \\ &+ \sum_{LL'} J_L(r) F_{RL, R'L'}(E) J_{L'}(r') \end{aligned}$$

と展開できる。この方法は、点欠陥・合金のみならず液体金属のような不規則系の電子構造の計算にも応用できる。但し後者の場合、イオン配置についての平均処理が必要で、ここでは、QCA, IYA, EMA等の近似を用いた。イオンの散乱が弱い時には、QCAで充分良いが、遷移金属のdバンドのような場合には、固体の場合のCPAに相当するEMAを用いる必要がある。KKR法の場合、特にコンシスティントな近似が必要で、少し手を抜くと、たちまち解析性を破ってしまうからである。しかしEMAの計算結果は近距離秩序をかなり取り入れた物理的にも良い結果を与えるようである。例えば、液体Niの場合、その状態密度は固体のそれと非常によく似

ており、電気抵抗についても、液体Cu, Ni, Co, Fe, Mn等について、その傾向及び大きさについて予想以上に良い一致を与えていた。

固体アルゴンのバンド計算 (S C F-M S)

東 正彬(新潟大理)

変分法に基づくバンド計算法に就て述べられ、MS法を変分法に依つて基礎づける事等が話された。次いで、MS法を用いた固体アルゴンのバンド計算が述べられた。Schwentner等のphoto-emissionの実験は、APW法に依るnon self-consistentなバンド計算ではvacuum levelに対するvalence bandの位置が深過ぎる事を示して居る。Schwarz等に依つて求められた α の値を用いた同様な計算では $E_G = 8.70 \text{ eV}$, $E_V = 10.57 \text{ eV}$ とむしろ、実験との一致を悪くしてしまう。又、その様にして行ったバンド計算の結果得られるcharge densityを用いて $\alpha = 1$ とすると、 $E_G \sim 19 \text{ eV}$, $E_V \sim 20 \text{ eV}$ と云う値が得られてしまう。core charge densityを上の $X\alpha$ で求めたものにfreezeして、3s, 3pバンドのcharge densityをself-consistentに扱う計算に就て述べられた。

1) J. B. Pendry and G. Capart : J. Phys. C2(1969)841.

2) N. Schwentner, F. J. Himpel, V. Saile, M. Skibowski, W. Steinmann and E. E. Koch : Phys. Rev. Lett 34(1975)528.

3) L. F. Mattheiss : Phys. Rev. A 133(1964)1399.

4) K. Schwarz : Phys. Rev. B 5(1972)2466.

グラファイト・アルカリ層間化合物のセルフ・コンシスティント・バンド計算

大野 隆央, 中尾 憲司, 上村 洸(東大理)

グラファイト層間化合物に適した新しいバンド計算の方法を提唱し、その方法をカリウム・グラファイト層間化合物 C_8K に適用して、そのバンド構造を非経験的に計算した。我々の方法は本質的には永吉らが層状物質に対して開発したバンド計算の方法に従っている。彼らの方法では、全波動関数は層に平行な方向では2次元OPWを用い、層に垂直な方向では1次元ブロッホ関数

を用いて構成される。我々は彼らの用いたOPWの代りに、構成元素に対する原子の偽ポテンシャルを導入することにより、直交化の手続きを除いている。又計算をより容易にするために、原子の偽ポテンシャルを適当な解析関数を用いて表わした。

C₈Kのバンド計算においては、カリウム層からグラファイト層への電荷移動の効果を考慮しなければならないが、我々はこの電荷移動の量をセルフ・コンシスティントに決定し、この量が60%であることを見出した。これはグラファイト・アルカリ層間化合物における電荷移動の量を第一原理より決定した最初のものである。この計算では電荷移動による電荷分布は層に平行な方向では一様であると仮定し、この電荷分布による静電的なクーロン・ポテンシャルを結晶ポテンシャルに取り入れた。又セルフ・コンシスティントなバンド計算を実行する前に、計算時間を節約するために出発点にとる電荷移動の量の大体の目安を得ておく必要があり、そのような電荷移動の量を見積る簡単な物理的モデルを考案した。

得られたC₈Kのバンド構造は、井下らにより tight binding の方法で計算されたものとよく似ている。そのフェルミ面はカリウム的な殆ど等方的なものと、グラファイト的な円柱状のものの2種類に分類できる。

NbC, NbN, NbC_xN_{1-x}の電子構造と超伝導性

伊 原 英 雄（電総研）

NbC, NbNはNaCl型構造をとる比較的高い超伝導転移点をもつ（それぞれT_C = 11, 16K）物質である。また両者の固溶体であるNbC_xN_{1-x}は組成変化に対してx = 0.3付近で最高の転移点（T_C = 18K）をとることが知られている。

これらの物質のT_Cとその組成変化の原因を調べるために、APW法のバンド計算と格子振動の分散曲線の測定（中性子散乱）結果から、McMillanの式を用いて各物質のT_Cを計算した。計算の基礎となるNbCとNbNの理論状態密度はX線光電子分光（XPS）の測定結果とよい一致を示しており、またNbC_xN_{1-x}の電子状態密度はXPSによる測定結果ではNbCとNbNの状態密度が組成比に応じた割合で、それぞれ自己主張する型で重ね合わさった形状をしていることが分った。しかもNbCとNbNのバンド構造はよく似ているので、rigid band modelを用いてNb_xC_xN_{1-x}のバンド構造を推定して、それを基にしてT_Cを計算した。

T_Cの計算値はx = 1~0.5の範囲では実験値とよい一致を示したが、x = 0の近くではT_Cの計算値は実験値よりも遙かに高くなり30Kにもなることが予測される（図1）。その原因は電

子一格子相互作用パラメータ λ の式に含まれる、電子散乱に関与する N_{2p} の位相シフトが非常に大きいためである(図2)。そのため $X \rightarrow 0$ につれ N_{2p} の寄与が大きくなり λ が増大して T_C が非常に高くなる。さらに $N(E_F)$ の NbC から NbN にかけての増大による T_C の向上がそれに加わっていることが分かった。

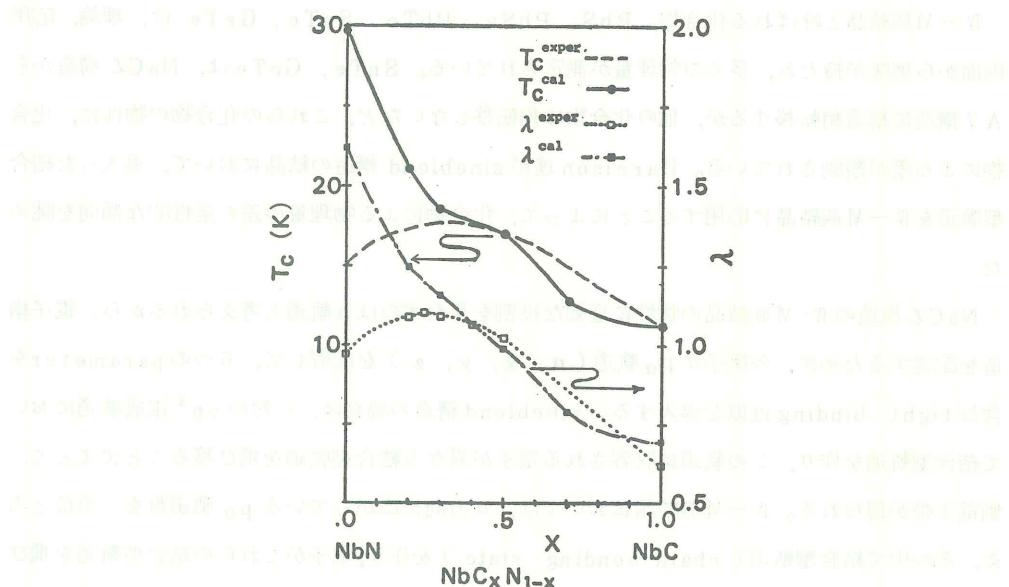


図1 NbC_xN_{1-x} の λ と T_C の組成 (x) 依存性

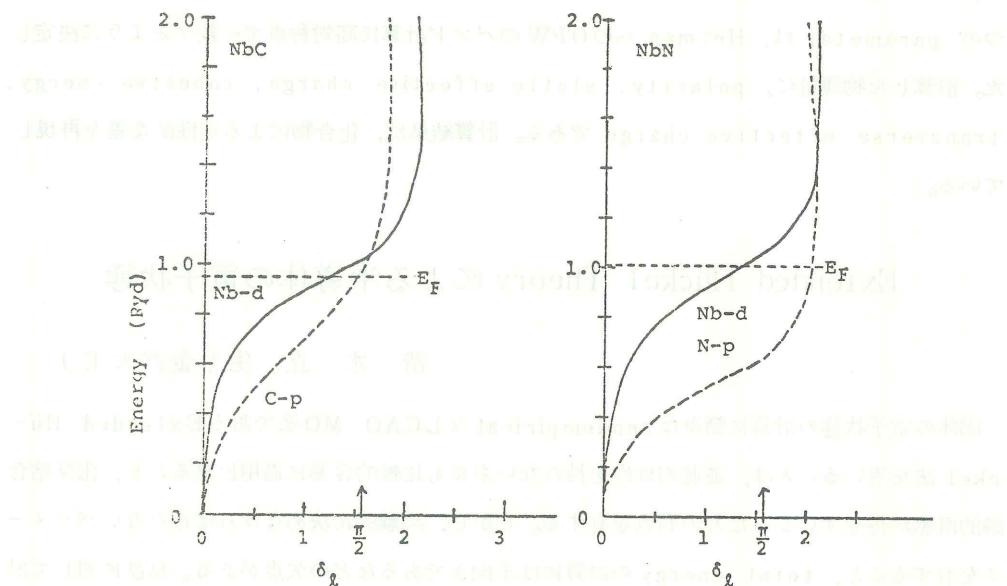


図2 $Nb\ 4d$ 及び $C\ 2p$ 及び $N\ 2p$ の位相シフトのエネルギー変化

IV-VI族結晶の"結合型軌道法"

中西 章, 松原 武生(京大理)

IV-VI族結晶と呼ばれる化合物, PbS, PbSe, PbTe, SnTe, GeTe は, 理論, 応用両面から興味が持たれ, 多くの物理量が測定されている。SnTe, GeTe は, NaCl 構造からA7 構造に構造相転移するが, 他の化合物は相転移しないなど, これらの化合物の物性に, 化合物による差が観測されている。Harrison 達が zincblend 構造の結晶において, 導入した結合型軌道を IV-VI族結晶に応用することによって, 化合物による物理量の差の定性的な傾向を眺めた。

NaCl 構造の IV-VI族結晶の物性に重要な役割を果たすのは p 軌道と考えられるから, 電子構造を記述するために, 各原子に p_α 軌道 ($\alpha = x, y, z$) を配置して, 5つの parameter を含む tight binding 近似を導入する。zincblend 構造の場合は, 一対の sp^3 混成軌道において結合型軌道を作り, この軌道に収容される電子が異なる結合型軌道を飛び移ることによって, 値電子帯が得られる。IV-VI族結晶においては, α 方向に広がっている p_α 軌道群を一単位と考え, その中で結合型軌道 (chain bonding state) を作り, 電子がこれらの結合型軌道を飛び移ることによって値電子帯が得られる。結合型軌道によって, 物理量を計算する上で必要であった, Hamiltonian の対角化, Brillouin zone についての和は, 一次元積分に置き換わる。5つの parameter は, Herman らの OPW のバンド計算に高対称点で一致するように決定した。計算した物理量は, polarity, static effective charge, cohesive energy, transverse effective charge である。計算結果は, 化合物による定性的な差を再現している。

Extended Hückel Theory による半導体の電子状態

清水立生(金沢大工)

固体の電子状態の計算に簡単な semiempirical な LCAO MO 法である Extended Hückel 法を用いることは, 並進対称性を持たない系にも比較的容易に適用出来ること, 化学結合論的直感が得やすいことなどの利点を有する。しかし, 実験的に決めなければならないパラメータを有すること, total energy の計算には不向きであるなどの欠点がある。結晶に対して計算を行って, パラメータを定め, それを用いて, defect に対する計算を行ったり, アモルファ

ス状態、表面・界面・吸着などの状態について計算を行ったりすることが有用であると思われる。分子に対して Extended Hückel 法よりも、良い結果を与える CNDO 法が、固体に対しては、あまり良くない理由の考察をのべた。また、Extended Hückel 法を用いる時の注意点にもふれた。具体的計算結果については、Si, Ge, GaAs, GaP のバンドとその圧力依存性、ZnS 型と NaCl 型の InSb についての計算、Si(111) 表面と Cl 吸着状態についての計算などについてのべた。これらの計算は、福井高校 石井信秀、金沢工大 西田昌彦の両氏との協同研究によるものである。

島 信幸 中尾憲司 上村 洪 (東大理)

遷移金属-カルコゲン元素化合物、 MX_3 物質のうちの 1 つ NbSe₃ は一次元的で金属的な電気伝導を示し、比抵抗の温度特性は 2 つの山を持つ。X 線回折実験により、2 つの山の温度に於て独立な超周期構造が観測され、CDW 相転移であると推測されている。また転移領域での著しい非線型伝導も注目されている。

NbSe₃ 結晶は単斜晶系で、単位胞は 6 つの一次元的に伸びた三角柱より成り、Nb 原子 6 個、Se 原子 18 個で構成されている。三角柱内の原子間距離は、三角柱間の原子間距離に比べて短かいので、三角柱毎の軸方向一次元性電気伝導が予想され、軸方向に伸びた軌道がコンダクションバンドを形成すると思われる。Nb, Se の電子配位はそれぞれ 4d⁴5s, 4s²4p⁴ であるので Nb から Se へ電子が移り、その結果 Nb の 4d 軌道がコンダクションバンドを形成していると考えられる。そこで LCAO 法によりバンド計算を行なった。

結晶ポテンシャルには中性原子の自己無撞着ポテンシャルよりマフィンティンポテンシャルを構成し、4d, 5s, 4s, 4p 的な原子軌道を変分函数に用いた。重なり積分、共鳴積分等の多中心積分は、原子附近に標本点を沢山とる Painter-Ellis の数値計算法を利用して求めた。積分の精度は 3 術程度である。格子和は隣のセル迄とり、隣接する三角柱間の相互作用迄を取り入れた。

コンダクションバンドは 4 つのバンドから成る。それぞれのバンドは三角柱軸方向に伸びた Nb の 4d_{z²} 軌道から主に出来ており、隣の三角柱との相互作用が小さい事を反映してせまいバンドとなっている。4 つの一次元的なフェルミ面のうち、内側から二番目と三番目のフェルミ面でのネスティングが、2 つの独立な構造相転移を起しているものと思われる。現在自己無撞着な

バンド計算を進行中である。

自己無撞着 Tight Binding の方法 によるバンド計算

小野正利(東日本学園大教養)

H F 方程式を正確に扱おうとする努力は、Harris や Fry 等によって行われている。彼等の方法は、多中心積分の取り扱いを、フーリエ変換によって行う。我々は、Huzinaga 等によって行われている原子軌道の G T O による表現を採用し、G T O を用いての多中心積分の解析的表現を利用して、H F 方程式を扱うことが可能であるかどうかの試みを、リチウム金属のバンド計算を通して行っている。

先ず、我々の波動関数は、G T O での原子軌道 $U_j(r)$ を用い、一電子波動関数を

$$\phi_j(k, r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mu} \exp [i k \cdot R_{\mu}] U_j(r - R_{\mu})$$

とし、更に、これ等の線型結合によって、

$$\Phi_n(k, \sigma, r) = \sum_j A_{nj}(k, \sigma) \phi_j(k, r) \delta(\chi, \sigma)$$

を作る。ここで、 j はリチウム原子の一電子状態を表わし、 σ はスピン状態を指示する。また、 n はバンドの指標である。この Φ_n を H F 方程式に代入し、 A_{nj} について変分を行い、次の形の行列方程式

$$[H][A] = \lambda[S][A]$$

を得る。 $[S]$ は ϕ_i の重なり積分である。ここで、 $[H]$ の中には A_{nj} が含まれているので、くり返し計算を行うこととなる。

我々の計算での、多中心積分の取り扱いにおいては、この部分が必ずクーロン型の関数の、格子点にわたる和になることから、ここに Ewald の計算方法を採用する。

以上のことによる計算は、電子相関を計算するための、定量的基礎を与えるものと思われる。

立場からみた表面・界面の電子状態とその近似法による計算結果
と将来展望
Extended Hückel Theory, Tight Binding 法等によるバンド計算の現状と将来

上 村 洋（東大理）

E. Hückelは1931年に、共役化合物の π 電子系の状態を記述するのに有効な方法として、LCAO法に基づく経験的分子軌道法を提唱したが、その近似の基礎に問題があるにも拘らず（基底状態のエネルギーについて正しい答を与えない）、計算が簡単なために多くの π 電子系に適用され、結合距離や電子分布等分子の基底状態の諸量を非常に良く説明してきた。Hoffmannは1963年に、Hückel MO法を π 電子系のみならず σ 電子系にも適用できるように拡張したが、この方法は今日拡張されたHückel MO法とよばれ、分子のみならず広く固体、表面等にも応用されている。

本講演ではこれらの理論を紹介するとともに、LCAO・SCF・MO法の変分原理に基づいてこれらの経験的理論がどの程度基礎づけられるかについて講演を行った。その結果によれば、分子或は結晶中で分子軌道の状態が一様な電荷分布に対応する場合には、上記の経験的取扱いは近似的に正しく、従って π 電子系や伝導電子のような価電子については比較的良い近似であるが、 σ 電子のような内殻電子に拡張することには極めて問題があることを指摘した。

最後に tight binding 法によるバンド計算の近似法の今後の発展について述べ、電子密度 $\rho(\vec{r})$ を変分関数とする local density formalism によって、 $\rho(\vec{r})$ を self-consistent に解く方法が、計算は大変であるが近似方法の基礎がしっかりとしていて利点のあることを示した。

これをLCAO法に適用すれば、原子軌道の一次結合の係数のみならず、原子軌道そのものも固体の中の原子に適したように変分計算で決めることになり、LCAO・SCF・MOのHartree-Fock 法より進んだ近似になっているが、その応用例は本研究会で島信幸によって NbSe₃ の場合について報告されている。

表面準位、不純物準位の理論
—特にバンド理論の立場から見た—

鈴木 勝久（阪大理）

1. バンド理論の立場からみると、バルク状態と表面状態や不純物状態との最も著しい差異は、

それらを生成する系に周期性のないことである。表面の電子状態の計算に特有な方法で際立ったものは見当らず、バルクのバンド計算で使われているほとんどの方法は表面にも適用されている。しかし、表面ではプロッホの定理が成立たないので電子状態を計算する配置として種々なものが工夫されており、各配置に応じて便利な方法が選ばれている。代表的な配置として、次の4つを挙げ、その方法、結果、特長を論じた。

(1) 半無限

Forstman, Heine, Pendry : 1970 Cu, Ni(100).

Lang & Kohn : 1970 Jellium.

Appelbaum & Hamann : 1972 Na(100).

1973 Si(111).

(2) Slab-superlattice

Alldredge & Kleinman 1972 Li(100) (13 layers, NSC)

M. L. Cohen et al 1975 (Si₂ molecule)

Chelikovsky et al 1975 Al(111)

Schlüter et al 1975 Si(111)

(3) Single slab

平林 1969 C, Si, Ge, Sn LCAO

Alldredge & Kleinman 1974 Li(100)

(nonlocal pseudo potential, SC)

Pandey & Phillips 1974 Si(111), Ge(111)

寺倉と寺倉 1975 Ni, Fe, LCAO 7 layers

Kleinman一派 1976 Cu, Fe, LCAO 30~50 layers

Wang & Freeman 1978 Ni(100), SC LCAO LDFF

Krakauer, Posternak & Freeman 1979

Fe, Co, Ni, Au, Al linearized APW

Casula, Ossicini & Selloni 1979 Si(111)

chemical pseudopotential

(4) Cluster

Messmer, et al 1976 Cu, Ni, Pd, Pt 8~13 atoms

LCAO-MO SCF-Xα-SW

足立 Pd DV-Xα

寺倉, 寺倉, 寺岡 884 atoms (121 on surface) Recursion, Mo, W(100) の再構築

2. 周期性の有無にかかわらず適用可能なクラスター・ベーテ格子の方法で Si 中の点欠陥と表面の電子状態を論じた。モデルに必要なパラメーターは化学擬ポテンシャル法で決定するので原子配列以外の外部パラメーターを必要としない。Si 中の Ga, Zn, Fe, Ni 等の不純物の特徴, 差異, Si(111) 面のギャップ及び価電子帯中の表面準位, 表面緩和の効果などを半定量的に予言することができる。以上の計算は大阪大学理学部星野敏春氏が実行したものである。

リチウムの擬ポテンシャルと
マルテンサイト相転移

大野 佑一, 戸谷 富之(北大触媒研)
小野 正利(東日本学園大教養)

Li, Na 又はその他のアルカリ金属は $T \lesssim 100^{\circ}\text{K}$ の低温へもっていくと b.c.c. から h.c.p. 構造へマルテンサイト的構造相転移を引起す。我々はこれを自由エネルギーの温度変化によって解釈できるものと考え, b.c.c., f.c.c. および h.c.p. の 3 つの結晶構造について系の全エネルギー, 格子振動等を計算し転移温度を見積った。電子のバンド構造の計算では, Harrison の 2 次摂動擬ポテンシャル法を用いるが出発点における 1 電子ハミルトニアンとして, Hartree-Fock の代わりにここでは Modified-H-F (M-H-F) を採用する。このハミルトニアンの特徴は交換項において, 関係する波動関数 ψ が conduction band の plane wave part である時, 電子・電子相互作用 $v(r, r_1)$ に対して多体効果をくり込んだ遮蔽クーロン型 $e^2 \exp(-k_s |r - r_1|) / |r - r_1|$ で置き換えることにある。結晶の体積変化を無視するとデバイの格子モデルに基づくヘルムホルツの自由エネルギーは 1 原子当り

$$F = E + \frac{1}{2} h\bar{v} + k_B T \{ 3 \ln [1 - \exp(-\Theta/T)] - D(\Theta/T) \}$$

ここで第 1 項は完全格子系の全エネルギー, 第 2 項はその平衡点における零点振動エネルギー, 第 3 項の Θ はデバイ特性温度, D はデバイ関数である。計算結果を表で示すと,

	E (cal/mol)	$\frac{1}{2} h\bar{v}$	Θ (°K)
b.c.c.	40	286	342
f.c.c.	20	300	353
h.c.p.	0	300	360

これらの結晶構造に関する F-T 曲線の交わりから転移温度 $\approx 150^{\circ}\text{K}$ が得られ実験値 ($70 \sim 100^{\circ}\text{K}$) と

よい一致を示している。終りにエネルギーバンド計算における摂動の高次の効果、有効価電子数に対する2次摂動の影響等、いくつかの問題点が残されていることを指摘しておく。

擬ポテンシャル法による遷移金属の バンド理論の研究の現状と問題点

小林悌二(東北大医短大)

初めに、単純金属、半導体の電子構造、諸物性量の取扱いで多大の成功を収めた擬pot. 法の特徴、利点を遷移金属(貴金属を含む)に拡張しようとする場合、s, p 価電子帯と共に存するd 状態の為に通常の擬pot. 法の前提条件がいかに馴まないかを見、d に対する浅くない擬pot. の顕著な nonlocality、波動関数の十分には滑かでない特徴を挙げる。次に遷移金属の帶構造の顕著な特徴に着目し擬pot. 法の先駆となった Combined Interpolation 法、Model pot. 法、及び Hybridization parameter 擬pot. 法にふれた後、最近の重要な発展に主題を置く。擬pot. の d に対する顕著な nonlocality を ℓ -依存した形で取込む具体的計算が経験的擬pot. 法でうまくいく事が確められてから、¹⁾ モデル擬pot. 法と微視的理論に基づく self-consistent pot. 決定法との結合へと進み、この流れから更に現在最も強力に進められている first-principle self-consistent 擬pot. 法を取上げる。これは true \rightarrow pseudo 系変換と local density functional 法に基づく微視的理論とを結合させたもので、実は対象は何ら遷移金属に限らない。擬pot. の強弱を気にせず、muffin-tin型も仮定せず、self-consistent 計算もやるという意味ではバンド計算法としても最も信頼できるものであろう。Cohen 等は波動関数の展開に平面波、d 軌道による混合展開を探っているが、特に浅くはない d-nonlocal 擬pot. に伴うエネルギー、波動関数の収斂性、pot. 高次フーリエ成分に伴う物性量計算の収斂性の問題は膨大な個数の平面波を問題ともせず computer を駆使して扱っている。Mo, W で凝集エネルギー、平衡格子定数、体積弾性率等のバルク量の計算もなされ^{2), 3)} ている。表面状態への適用が super lattice 方式による周期系構成で取扱われつつある。以下の文献にはこの流れの方向のうかがえるものを挙げた。

1) C. Y. Fong and M. L. Cohen : Phys. Rev. Lett. 24 306 (1970)

C. Y. Fong and M. L. Cohen : Phys. Lett. A44 375 (1973)

J. F. Alward, C. M. Perlov, C. Y. Fong and C. G. Sridhar :

Phys. Rev. B15 5724 (1977)

- 2) K. M. Ho, S. G. Louie, J. R. Cherkowsky and M. L. Cohen : *Phys. Rev. B* 15 1755 (1977)
 S. G. Louie, K. M. Ho, J. R. Cherkowsky and M. L. Cohen : *Phys. Rev. B* 15 5627 (1977)
 G. P. Kerker, K. M. Ho and M. L. Cohen : *Phys. Rev. B* 18 5473 (1978)
 3) A. Zunger and M. A. Ratner : *Chem. Phys.* 30 423 (1978)
 S. Topiol, A. Zunger and M. A. Ratner : *Chem. Phys. Lett.* 49 367 (1977)
 A. Zunger and M. L. Cohen : *Phys. Rev. B* 18 5449 (1979)
 4) A. Zunger and M. L. Cohen : *Phys. Rev. B* 19 568 (1979)

経験的擬ポテンシャル法によるⅣ族 および<Ⅳ>族半導体の電子状態

(35ノス子爵)一喜 錦直
理化学研究所(二喜)林誠、(三喜)小林悌二

奈 良 久(東北大教養)
小 林 悌 二(東北大医技短大)

Ⅳ族半導体Si, Ge, Snおよび<Ⅳ>族半導体GaAs, ZnSe, InSb, CdTeの1電子運動量分布のprofileの J_{100} に相対的な異方性を論じた。計算法は以前と同じである(*J. Phys. Soc. Jpn.*, 46(1979) 77)。Ⅲ-V族、更にⅡ-VI族に移行するにしたがって異方性が小さくなるのは、この順にイオン結合性が混ってくるためである(図1)。

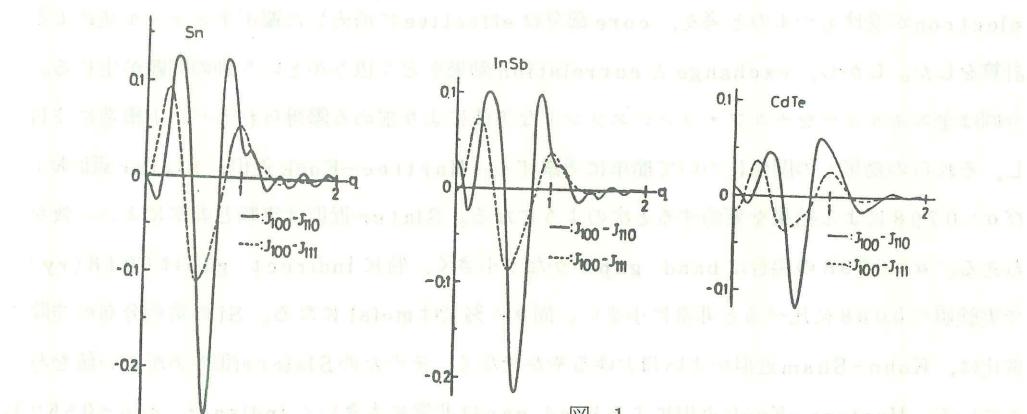


図 1 1電子運動量分布の相対的異方性

しかし、IV族のSi-Ge-Sn, III-V族のGaAs-InSb, II-VI族のZnSe-CdTeの縦の系列で見ると、計算したすべての異方性に対し、ほとんど差は見られず、SiとGeの場合と同じように、プロフィルの異方性はバンド構造やポテンシャルに対してむしろ鈍感である。

図2は異方性に対する最底価電子帯からの寄与の例を示したものである。この寄与は $q \sim 0.7$ a.u.あたりではほとんど完全に無くなってしまっており、したがって図1の $q \sim 1$ a.u.附近の異方性のピークは上の3つの価電子帯だけからきていることがわかる。したがってこのピークを調べることにより、理論的、実験的に結合性について議論できる可能性がある（実験はSi, Ge以外にない）。事実、このピークの高さをJ.C.Phillipsのionicity parameter f_i (f_h でも同じ)に対してプロットするとほとんど直線上にのる。

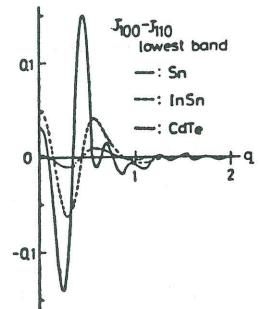


図 2

セルフ・コンシスティント擬ポテンシャル法 によるSiのバンド構造

進藤 浩一（岩手大人社）
朝比奈秀夫, 嶋村 修二（東北大理工）

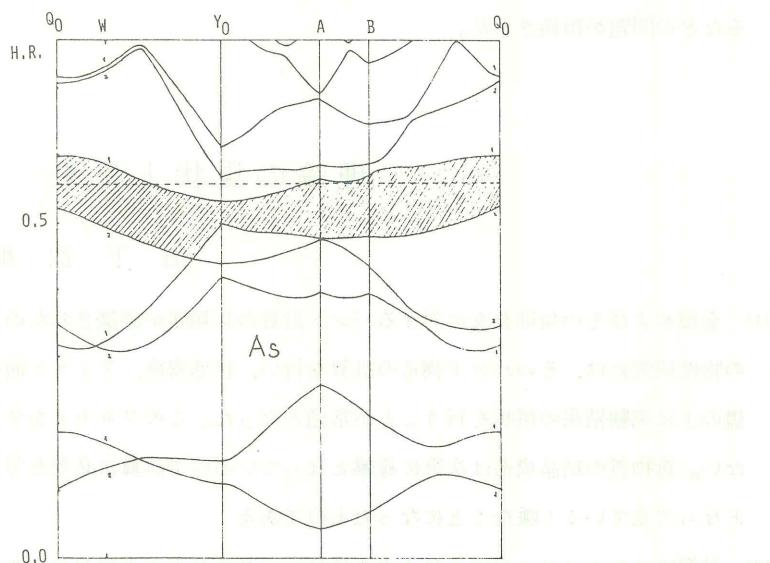
我々の目的は共有結合性半導体の凝集エネルギーをどのように計算するかである。その際、core electronを含めた全電子を扱うのは、凝集エネルギーが全エネルギーの $10^{-4} \sim 10^{-5}$ 程度であるため5~6桁の精度の計算が要求される。他方valence electronのみに注目するとその比は 10^{-2} 位で3桁の精度で十分である。我々は凝集エネルギーのかなりの部分はvalence electronが受けもつものと考え、core部分はeffectiveに消去した擬ポテンシャル法による計算をした。しかし、exchangeとcorrelation効果をどう扱うかという別の問題が生じる。今回は全エネルギーをセルフ・コンシスティントな方法により求める際得られるバンド構造に注目し、それらの効果との関係について簡単に考察する。Hartree-Fock近似、Slater近似および $\alpha=0.798$ による結果を要約すると次のようになる。Slater近似は実験と非常によい一致を与える。 $\alpha=0.798$ の場合はband gapがかなり小さく、特にindirect gapは0.018(ry)で実験値の0.088に比べると非常に小さい。尚 $\alpha=2\%$ ではmetalになる。Siの電荷分布の空間変化は、Kohn-Sham近似がよいほどゆるやかでなく、そのためSlater近似の方がよい値を与えていている。Hartree-Fock近似によるband gapは非常に大きい(indirect gap=0.552)。

この gap が大きいのは、Koopmans の理論による correlation 効果を 2 次の振動計算で考慮することにより理解できる。Hartree-Fock 近似の計算は、基底状態については意味をもつ。しかし、我々が実験から得る情報は励起状態との差ゆえ、励起状態をどう考えるかという問題が生じる。特に correlation 効果をいかに扱うかが重要である。それら全ての問題の starting point として、あいまいさのない Hartree-Fock の band 計算は重要である。尚 Si の場合、Slater 近似が実験値をよく再現したのは、その近似が一種の transition state を表わしているのかもしれない。

V 族結晶の Jones zone

岩松 雅夫（都立大理）

IV, IV-VI 族半導体では典型的なエネルギーギャップを拡張ゾーン（Jones zone）面上に現われるほぼ一定のギャップで代表させるという考えが、Heine-Jones の指摘以来広く使われている。共有結合性が同様に重要であると考えられている V 族半金属についてもそのような考え方方が出来るかどうかは、はっきりと示されている訳ではない。そこで V 族(As, Sb) の正確な Jones zone (第 5 Brillouin zone) を作り、その面上でバンド構造を Falicov らの経験的な擬ポテンシャルを使って計算してみた。Jones zone は $(31\bar{1})$, $(3\bar{1}\bar{1})$, $(3\bar{1}\bar{1})$ の 3 種類の面で囲まれ、図の様に $(31\bar{1})$ 面上には、はっきりと一定のギャップが現われる。



半導体、半金属のバンド理論のPseudo-pot. 法 による研究の現状と問題点

森 田 章（東北大理）

1. Introduction — pseudopotential(p. p.)法が登場した頃の事, p. p. 法の特長と利点についての簡単な説明。
2. Empirical pseudopotential method (EPM) — EPMによるIV, V, IV-VI, VIのバンド計算の現状の説明。計算結果と実験との一致は良好, nonlocal と localとの差は意外に小さいこと, バンド計算に関しては truncated ポテンシャルで十分であることが指摘された。
3. Self-consistent pseudopotential calculation (S C P C) — EPMにくらべて計算は大変であるが, 原子準位のデーターのみを用いてバンド構造が良い精度で求まることを具体例で説明。
4. Application — p.p. 法の応用の一つとして, 結晶構造の安定性, 結晶エネルギー, 格子定数, 弹性定数の計算の現状を説明。S C P C の方法と structural expansion method の 2 つの方法があるが, 前者による Si, As, 後者による As についてのこれまでに得られている結果は良好である。しかし, 前者は計算時間のため低い対称性結晶への適用が制限されること, 後者は計算精度を上げるには展開の高次項の適切なる近似方法の開発が要求されているなどの問題が指摘された。

バンド理論の現状と将来

山 下 次 郎（日大文理）

- (1) 金属およびその規則合金に対するバンド計算の信頼度が認識されたので, 新物質(金属合金)の物性研究には, そのバンド構造の計算を行い, 状態密度, フェルミ面の形を推定し, その基礎の上に実験結果の解析を行うことが常道となった。このプロセスをサボルことはもはや出来ない。新物質の結晶構造は次第に複雑となっているので計算に必要な労力は非常に大きなものとなって来ている(嫌なことになったものである)。
- (2) 計算はノン・マフィンティン・セルフコンシスティント・ポテンシャルを必要とする場合が多

くなって来た。これに対する方針が二つある。ひとつはヨーロッパの人々が主にやっているように、APW, KKR法の改良(簡単化)による能率の向上である。他は広義の偽ポテンシャル法(適当なコア関数+多数の平面波を用いる方法)である。後者はもっぱら大計算機にたよる方法であるが、ポテンシャルの球対称性の制限をはずすことが容易であり、セルフコンシスティントにすることも簡単であるため次第に用いられるようになると思う。正にアメリカン・ウェイである。(日本はヨーロッパとアメリカの間を行きつ戻りつか。)

- (3) バンド計算が強力であるのはプロッホの条件に守られているからであって、これが無くなると威力は激減する。(遷移金属の格子振動スペクトルすらまだ求められていない) ここをどう切り抜けるかが将来の重要な課題でありかつ興味あるところである。
- (4) 大きな仮想規則格子を用いて、不規則格子の電子構造を論ずることは第1近似としては充分に意味がある。ただし基本格子にすくなくとも十数個の原子を入れないと、不規則な原子配置の効果を充分に考慮出来ないであろう。計算に必要な労力は大変であるが、この研究はそのうちに初まるにちがいない。
- (5) 最後に、バンド理論は1電子近似であるから、結局はゴマカシをやっているわけであり、現状ではそれは1電子ポテンシャルにおしこめられていることを忘れてはならない。われわれは経験をつんで、簡単な金属や貴金属、遷移金属(および合金)に対しては曲りなりにも切り抜ける仕方を見出したのである。(一度見出せば、あとは機械的な仕事になって行く。)しかし、多分稀土類金属に対してはまだ最終的な処方せんは発見されていないであろうし、金属結合に同極結合やライオン結合の混在しているような物質に対してはこの問題は未開発の問題であるのであろう。しかし、これを一刀両断に解決することは恐らく困難であろうから、なお未知の領域に進むためには地味な努力が必要であろう。

物性研究所談話会

日 時 1979年7月2日(月)午後4:00～5:00
場 所 物性研旧棟1階講義室
講 師 Donald J. Weidner
New York State Univ. Stony Brook
題 目 Elasticity of Minerals: The effects of crystal structure
and chemical composition

要 旨

The varieties of minerals which can be elastically characterized has been greatly expanded with the development of a measurement technique based on Brillouin scattering. This technique can be used to measure these properties on low-symmetry single crystals as small as 100 μm .

This technique has enabled us to measure the elastic properties of minerals with small differences in composition or crystal structure. These include alumino silicates and pyroxenes. A qualitative analysis of the data suggests that subtle differences in crystal structure have a more profound effect on the elastic properties than do major changes of composition.

日 時 1979年7月9日(月)午後4:00～5:00
場 所 物性研究所旧棟1階講義室
講 師 菊池 誠
題 目 最近の技術環境と研究の話
要 旨

この20～30年に、例えば半導体について考えても技術の情況は非常に変り、研究の重点もそれにともなって大きく動いて来ている。これは単なる変化でなく“成熟”であると考える。

技術の成熟は、当然、研究のすゝめ方やテーマのウェイトづけに影響を与えていた。Jack Morton と Casimir の有名な "honeymoon" 論争や、W. Shockley の "respect for scientific aspect of practical problems" という言葉が現実的な響きをもって来る様になった。

こういった視点から、研究のいくつかの例をあげて問題点を話された。

日 時 1979年7月13日(金)午後4時～5時

場 所 物性研A棟2階講義室(輪講室)

講 師 K. A. Chao
Linköping Univ.

題 目 Thermodynamic properties of magnetic
impurities in non-magnetic metals

要 旨

The thermodynamic properties of magnetic impurities in metals have been investigated in terms of the nondegenerate Wolff model with a trial function scheme which explicitly specifies the configurations of the magnetic impurity. Assuming a microcanonical ensemble, the change of free energy due to the introduction of a single impurity to the host metal has been derived. The impurity contributions of the thermodynamic quantities can then be calculated. A broad maximum of the specific heat is obtained. The magnetic susceptibility is temperature-insensitive at lower T, and turns into the Curie-Weiss behavior at higher T. The effective local moment vanishes at $T = 0$, while with rising T it increases to a saturated value of reduced moment. Under accessible experimental condition, the magnetic field dependence of the impurity specific heat is drastic if the local moment exists. In the absence

of local moments, the specific heat is practically field-independent. If accurate specific heat can be measured, our theory suggests a new method to detect local moments in dilute magnetic alloys. Generalization of the present results to include the orbital degeneracy and the polarization effect will be discussed. A new model will be suggested for more realistic investigations.

日 時 1979年7月16日(月)午後4:00～5:00

場 所 物性研旧棟1階講義室

講 師 里 洋 (Purdue University)

題 目 Kinetics of Phase Transitions

要 旨

平衡状態から離れた場合の状態変化を Path Probability method を用いて記述し二元合金の規則一不規則変態に応用する。平衡状態に近い場合には変化を記述する律速方程式は線形化され Onsager の非可逆熱力学形式に一致する。この場合駆動力が自由エネルギー関数の偏微分として記述されるので、一般の場合にも運動が自由エネルギー表面上の変化として理解出来る。平衡状態から近い場合及び遠い場合の等温緩和効果と任意の状態の合金を一定速度で加熱又は冷却した場合の緩和効果を説明した。

日 時 1979年8月27日(月)p.m. 4:00～

場 所 物性研究所旧棟1階講義室

講 師 Professor L. J. Sham (University of California.
San Diego)

題 目 Electronic Properties at the Semiconductor-
Insulator Interface

要 旨

The effective mass approximation is reformulated taking into account the sharp variation at the interface. Applications

to the electrons in the inversion layer of Si on SiO_2 for high and low symmetry crystal faces of Si are discussed and comparisons with various experiments are made.

日 時 1979年8月31日(金) p.m. 4:00~

場所 物性研究所旧棟 1 階講義室

講 師 Professor B. I. Halperin (Harvard University)

題 目 Dynamics of Superfluid Transition in Two and Three Dimensions

(氏は今回山田財団の招きで来日され、「2次元系の電子物性」の国際会議及び京都国際夏の学校に出席された。)

~~~~~  
物性研ニュース  
~~~~~

東京大学物性研究所の助教授公募の通知

下記により助教授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) 専門分野及び公募人員数

表面物性 助教授 1名

物性研究所では将来計画の一環として、表面物性の研究計画の準備が進められている。この計画は単結晶の清浄表面と、そこでの化学吸着について、微視的構造、電子構造及び反応性を調べようとするもので、測定法、試料作成法等についての技術開発に裏付けられた研究を進めて行く。

今回の公募は、主に反応性を通して表面の特異性を取り上げて研究する人で、表面物性の将来計画を村田所員と協力して推進し、それに必要な装置の製作に意欲のある研究者が望ましい。

(2) 公募締切

昭和54年10月15日(月)

(3) 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(必ずタイプすること)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(必ずタイプすること)及び主な論文の別刷、研究計画書
- 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

(4) 宛先

〒106 東京都港区六本木7丁目22番1号

東京大学物性研究所 総務課人事掛

Tel (402) 6231・6254

(5) 注意事項

表面物性助教授公募書類在中、または意見書在中の旨を表記し、書留で郵送のこと。

(6) 選考方法

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

芳 田 奎

下記により助教授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) 公募人員数

助教授 1名

(2) 研究分野及び内容

レーザー開発及び関連した物性研究——当研究所では、極限レーザー開発計画が昭和54年度より発足し、現在、塩谷、矢島、黒田 3研究室がこれを推進している。この計画は、短波長化、超短パルス化、広域波長可変化などの極限的性能を目指した物性研究用高性能大出力レーザーシステムの研究開発並びに関連した量子光学・光物性の研究やX線レーザーの基礎研究を行うものである。今回の助教授は上記3研究室と協力してこの計画の推進に当り、特に短波長領域の大出力ガスレーザー（電子ビーム及び放電励起）の開発に重点をおいた研究を行うことが要請される。

(3) 公募締切

昭和54年10月15日（月）

(4) 提出書類

(i) 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（必ずタイプすること）ほかに出来れば主な論文の別刷

(ii) 応募の場合

- 履歴書
- 業績リスト（必ずタイプすること）及び主な論文の別刷、研究計画書
- 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

(5) 宛 先

〒106 東京都港区六本木7丁目22番1号

東京大学物性研究所 総務課人事掛

Tel (402) 6231・6254

(6) 注意事項

レーザー関係助教授公募書類在中、または意見書在中の旨を表記し、書留で郵送のこと。

(7) 選考方法

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

芳 田 垣

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

分子部門 木下研究室

助 手 1名

(2) 内 容

有機又は金属錯体の結晶の物性を実験によって研究する。特に、興味ある物性を示す物質の作成に意欲があり、その物性実験を行う人が望ましい。

(3) 資 格

応募資格としては修士課程修了又はこれと同等以上の能力を持つ人。

(4) 任 期

5年以内を原則とする。

(5) 公 募 締 切

昭和54年11月15日(木)

(6) 就 任 時 期

なるべく早い時期を希望する。

(7) 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（略歴で結構ですが、学位名・単位取得のみ・論文提出中等を明示のこと）
- 主要業績リスト（必ずタイプすること）、ほかに出来れば主な論文の別刷

(b) 応募の場合

- 履歴書（学位名・単位取得のみ・論文提出中等を明示のこと）
- 業績リスト（必ずタイプすること）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

(8) 宛 先

東京都港区六本木 7 丁目 22 番 1 号

東京大学物性研究所 総務課 人事掛

〒106 電話 (402) 6231・6254

(9) 注意事項

木下研助手公募書類在中、又は意見書在中の旨を表記し、書留で郵送のこと。

(10) 選考方法

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

芳 田 奎

人 事 異 動

			異動事項	現(旧)官職
			(昇 任)	
54. 6. 16	西 信 之		分子科学研究所助教授	分子部門助手
54. 7. 1	守 屋 健		名古屋工業大学助教授	塑性部門助手
"	深 野 海 藏		経理課司計掛長	経理部主計課
			(配 置 換)	
54. 7. 1	福 井 信 義		経理部給与課給与第三掛長	経理課司計掛長
"	片 野 武 男		生産技術研究所経理課	経理課施設掛
			(辞 職)	理論第三部門助手
54. 7. 31	栗 原 康 成		(採 用)	
54. 8. 1	濱 田 典 昭	助 手		理論第二部門

Technical Report of ISSP 新刊リスト

Ser. A.

- No. 971 Theory of Resonance Raman Scattering and Luminescence of Exciton in Self-Trapping Process. by Atsuko Sumi
- No. 972 A Model for Elastic Anomalies in $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3}3H_2O$. by Susumu Kurihara, Hidetoshi Fukuyama and Sadao Nakajima
- No. 973 Diamond-Anvil Pressure Cell for X-ray Diffraction with SSD and PSPC System. by Ken-ichi Takemura, Osamu Shimomura, Kiyoo Tsuji and Shigeru Minomura
- No. 974 Ground State of the Asymmetric Anderson Model - Perturbation Approach with Respect to the Mixing Integral - by Satoru Inagaki
- No. 975 Measurement of Absolute Intensity of Weak Magnetic Field Using Rf Biased Squid. by Kazuo Kosuge, Yasukage Oda and Hiroshi Nagano
- No. 976 Picosecond Time of Flight Measurements of Excitonic Polariton in CuCl. by Yasuaki Masumoto, Yutaka Unuma, Yuichi Tanaka and Shigeo Shionoya
- No. 977 The Meissner Effect of Polysulfur Nitride, $(SN)_x$. Yasukage Oda, Hisashi Takenaka, Hiroshi Nagano and Ichiroh Nakada
- No. 978 Superconductivity in Graphite-Potassium Intercalation Compound C_8K . by Yoji Koike, Sei-ichi Tanuma, Hiroyoshi Suematsu and Kohei Higuchi
- No. 979 Two-Dimensional Angular Correlation of Positron Annihilation Radiation in Copper. by Shinya Wakoh, Stephan Berko, Mohammad Haghgooie and J. J. Mader

- No. 980 Neutron Scattering Investigation of the Magnetic Excitations in CoBr_2 . by Hideki Yoshizawa, Koji Ubukoshi and Kinshiro Hirakawa
- No. 981 Magneto-Optical Studies of the $Z_{1,2}$ Exciton-Polaritons in CuI . by Shigemasa Suga, Kikuo Cho, Yasuhiro Niji, J. C. Merle and T. Sauder
- No. 982 The Nonregistered-Registered Phase Transition of Rare Gas Monolayers Adsorbed on Graphite II. by Hiroyuki Shiba
- No. 983 Crystal Structure of the High-Pressure Phase of Tellurium. by K. Aoki, O. Shimomura S. Minomura
- No. 984 Raman Scattering of Trigonal Se and Te at Very High Pressure. by K. Aoki, O. Shimomura and S. Minomura
- No. 985 Recent Progress in the Theory of Itinerant Electron Magnetism. by Tôru Moriya
- No. 986 Magneto-Optical Absorption in Dysprosium Iron Garnet in High Magnetic Fields. by Fu Min Yang, Isamu Oguro, Giyuu Kido, Noboru Miura, Sôshin Chikazumi, Shûkô Washimiya and Hiroshi Kamimura
- No. 987 Faraday Rotation and Transition of Spin Configuration in Terbium Iron Garnet at Very High Magnetic Fields. by Fu Min Yang, Noboru Miura, Giyuu Kido and Sôshin Chikazumi
- No. 988 Effect of Ti-Impurities on Ferromagnetic Properties of Fe, Co and Ni. by Wen Shan Chan, Katsuya Mitsuoka, Hideki Miyajima and Soshin Chikazumi
- No. 989 The Phase Angle Determination by Anomalous X-ray Scattering with a Four-Circle SSD Diffractometer. by Toshio Sakamaki, Sukeaki Hosoya and Tomoe Fukamachi

- No. 990 Two Stage Nuclear Demagnetization Refrigerator.
by Kazuo Ono, Sinroku Kobayashi, Motoo Shinohara
Koichiro Asahi, Hidehiko Ishimoto, Nobuhiko
Nishida, Minoru Imaizumi, Akihiko Nakaizumi,
Jibanmay Ray, Yutaka Iseki, Shigeru Takayanagi,
Kenji Terui, and Tadashi Sugawara
- No. 991 Reconstruction-Induced Mean-Square Displacements
on the (001)-(2 x 1) Surface of Diamond-Structure
Crystals. by Kenji Ohkuma and Katsuhiro
Nakamura

編 集 後 記

本号の締切は8月10日でした。予定原稿でおくれたものもある代り、予期しないものが頂けたりして、分量は充分となりました。

今は丁度暑い盛りですが、本号がお手元に届くのは共同施設専門委員会が開かれ、間もなく今年度後半の共同利用が始まる頃かと思います。色々な御意見など物性研図書委員会あて隨時お寄せ下さるようお願い致します。

◎次号の〆切は10月10日です。

〒106 東京都港区六本木7丁目22番1号

東京大学物性研究所

細 谷 資 明

村 田 好 正

