

物性研だより

第25卷
第2号

1985年7月

目 次

○物性研究所に着任して	毛利信男	1
○「物性研究資料室」私記(下)	勝木渥	3
○物質開発と分析室	大道寺英弘	7
物性研短期研究会報告		10
○軟X線・真空紫外領域の新しい光物性の展望とSOR将来計画		10
世話人 石井武比古, 菅滋正, 佐々木泰三		
木原元央, 宮原恒昱		
○擬一次元導体の物性		25
世話人 鹿児島誠一, 福山秀敏		
白川英樹, 石黒武彦		
○量子多体系のシミュレーション		56
世話人 高橋實, 斯波弘行, 鈴木増雄		
物性研究所談話会		71
物性研ニュース		
○東京大学物性研究所 教授の公募		73
○東京大学物性研究所 助教授の公募		74
○人事異動		76
○昭和60年度 前期短期研究会予定		77
○テクニカルレポート 新刊リスト		77
○物性研究所夏期講座について		80
編集後記		

東京大学物性研究所

ISSN 0385-9843

物性研究所に着任して

毛 利 信 男

今年1月1日付で北海道大学理学部物理学科より極限物性部門超高压へ転任して参りました。白一色の千歳空港を後に、降り立った羽田空港は予想に反して風は冷たく今にも雪が降りそうな雲行きでした。しかしその後続いた陽気にやはり東京なんだなあとついワイシャツ姿で走り回り2ヶ月後に冷房病的症状で熱を出し、改めて東京の冬の寒さを認識することになりました。今、さつきが見事に咲いています。梅、もも、桜と時を分けて順次開花し散っていく様は北海道での瞬時に咲き乱れる強烈なイメージと対照的で、通勤電車の混み様とはとても似つかぬ落ち着いた風情です。歩道に沿って植え込んであるつつじの生け垣はそれはもう見事な花をつけ、毎年冬囲いをして枝の折れるのを防ぐ努力をしたにもかかわらず春になると無残な姿で花を咲かせているのをあわれと見てきたものにとっては自然のなさることとはいえ、不公平に感じられます。

さて、私の所属する超高压は秋本教授と昨年退官された箕村先生とが中心となって物性研究所設立時より超高压力発生技術の開発と物性研究への応用に取り組まれ、今日まで多大な業績を挙げられてきたことは改めて述べるまでもありませんが、大部門制に移行した際に極限物性部門の5本の柱の1つとして超高压実験室を含む大グループへ、と発展出来たことは偏に諸先輩方の研究成果の賜物であり、所内外からの期待がさらに大きく寄せられている結果と考えて良いでしょう。超高压を除いた極限物性部門ではすでに大型予算の投入によって新しい設備の建設が終わり、当初の計画通り研究が進められ、先般の短期研究会でその経過が報告されました（物性研だより第25巻第1号）。超高压も従来の経過を秋本教授が述べられ、将来計画については私が矢面に立たされることとなり、不十分ではありましたがあれども一応の方向を述べた積りです。「超高压グループでは以前から超高压の記録をうち立てることは考えず、専ら物性研究、物質合成への利用を念頭において高圧下技術の開発の積みあげ、その設備の共同利用にも広く供されてきました」と所長が述べられています様に（物性研だより第24巻第1号）今後とも従来の方針通り物性研究の手段として超高压力の技術をより高度に駆使出来る様努力することが必要と考えております。特にこれからは超高压下の物性研究を精密科学にすることが重要な課題と思っています。超高压下に置かれた物質は超高压力の発生手段に依存した非静水圧性と圧縮速度、加熱速度などに依存する非熱平衡性の影響を受け、平均としての圧力や温度で一義的にその性質が必ずしも決定されない場合が多く、この非静水圧性と非熱平衡性は超高压下の物性研究を精密科学にする上で非常に大きな障害となっています。しかしながら一方で、これらの性質のために高圧誘起相が常圧下で準安定状態として取り出せたり、常圧下で見られない種々の興味ある現象が見い出され、新しい物質合成や物性研究の有用な手段として超高压が脚光を浴びてきました。現在のこの様な状況を脱

出するには超高压下で静水圧性を高める技術の開発と同時に超高压下におかれた物質の微視的状態を定量的に評価する手段の導入が必要と考えます。特に複数の物理量を同時に高温高圧下や低温高圧下でその場観察することが有効でしょう。これによって超高压下での非静水圧性が物性に及ぼす効果や非熱平衡状態にある物質の性質が明らかにされ、超高压下で誘起する未知の物性についての知見をより正確に且つ精密に得ることが可能となり、超高压下の物性研究を質的に高めることができます。超高压下に置かれた物質の微視的状態が定量的に評価出来るとなると当然の帰結としてその状態をコントロールすることが可能となります。現在ではどうにも手に負えないこの非静水圧性と非熱平衡状態を超高压下で自由にコントロールすることによって新しい物質の開発と同時に新しい物性の発見へと道の開かれることが期待されます。しかしこの最終段階まで到達するのは容易なことではないと思っています。予算の裏付けがなければ全くの空論に終わるでしょう。何とか早い時期に概算要求を出したいと思っております。研究所内の方々はもとより所外の方々にも是非協力していただけます様、この紙面からお願いする次第です。

尚、共同利用につきましては従来通り御遠慮なくお申し越し下さい。

「物性研究資料室」私記（下）

信州大理 勝木 澪

前回（24, No. 6）は、I. 「物性研究資料室」提案のきっかけ、II. 理想的な資料の保存・管理体制と現状、について書いた。今回は、その現状の中でどのようなてだてを講じようとしているかについて、および、日本物性物理学史研究の現状と問題点について書きたい。

III. 現実の状況とその中での方策

前回書いたように、資料室が資料室として機能しうるためには、専任アーキヴィストの配置が不可欠であるが、実際にはそれが欠けているというのが現状である。そのことは百も承知の上でともかく発足だけはした。現実にあるものは、資料室のスペースと、そのスペースを有効に利用しつつ日本物性物理学史研究の礎石をここに置きたいという意志と、だけである。

この現状から出発し、いわば“無”から“有”を生み出すために、具体的にどのようなてだてを講じたいと思っているか、私の考えをのべて理解と支援をお願いしたい。

まず考えていることは、資料室への定期駐在の体制を確かなものとすることである。

資料室が設けられることになって以後、私はほぼ年に2回（前期と後期に1回ずつ）資料室の整備・充実を目的として物性研に来ることにしている。最初の2回は資料室の性格・管理・運営についての物性研と物性史グループとの間での合意の確立にあて、3回目以後は、若干の資料をもちこんだり、すでにもちこまれている資料の暫定的な目録つくりなどをやってきた。しかし、半年に一度のこのような“訪問”ないし“見まわり”的なことだけでは、なかなか実のある仕事にはならないし、“貴重な資料”を安心して資料室に収納するわけにもいかないし、資料を利用したい人に扉を開くこともできない。

現状からの一步前進のために必要だと私が考えていることは、（少くとも）週1回の資料室への定期駐在がその役割を自覚した人によっておこなわれ、かつその定期駐在体制が着実に定着することである。そのような人としては、在京の物理学史研究志向者の若手を想定しているがその人には（特別の用があってもなくても）毎週曜日と時間を決めて資料室に駐在してもらう。さいわい資料室には勉強机と作業用テーブルが入っているから、とりたてて資料室でおこなうべき特別の用がないときには、自分の勉強なり仕事なりをその部屋でしてもらう。——大事なことは、少くとも毎週1回決まった曜日の決まった時間に資料室に人がいる、ということなのである。

その人がよく自分の役割を自覚してくれて、この定期駐在体制が信頼できるものとして定着しているということが確実になった段階で、これまでに集めてある資料を徐々に資料室にもちこむ。そういう状態になれば、定期駐在者にとって、もちこまれた資料の暫定的な目録作り* が駐在

時になすべき一つの作業となり、手持ち無沙汰のままだ資料室に詰めているだけ、という状況ではなくなるであろう。もちこまれる資料がふえるとともに駐在者のなすべき仕事はふえ、駐在時間・駐在回数もふえてゆくであろう。

適当に資料もたまり、定期駐在体制も定着してきたところで、無理のない程度に（たとえば曜日と時間をきめて）資料利用のための門戸をひらく。（もちろん、その前にちゃんとした利用規定を作つておかねばならないが——）

資料の収集・保存・管理・利用者への提供がこのような自発的奉仕によって支えられている以上、資料の利用者は単なる利用者としてのみとどまることは許されない。資料室への何らかの寄与をすること——自分の利用したファイルの資料目録をより充実したものにするための協力等——が道義的に期待されよう。

物性研究資料室の現実の状況から、次に踏み出すべき1・2歩分——それに続く千歩・万歩が可能となるための最初の1・2歩——として私が思いえがいているのはこのようのことである。

この「次の最初の1歩」を踏み出すために必要なことは、資料室への週1回の定期駐在ということの大しさと、そのような定期駐在者としての役割をよく自覚してくれて、たとえ最初は手持ち無沙汰なことがあろうとも、律儀に、『愚直』なほどに実直に、資料室に定期的に詰めてくれる在京の若手メンバーを見つけることである。物性研究資料室の成否はそのような人の有無にかかっている、といつても過言ではない。そして、そのような人は——いそうである。

IV. 日本物性物理学史研究の現状と問題点

前回のべたように、日本の物性物理学史は歴史学的研究対象としてきわめて興味深いはずのものであるが、その研究にはまだほとんど手がつけられていない。

これまでになされている研究としては、1971年から1976年にかけての河宮信郎による本多光太郎の磁気学・金属学研究に関する研究、1973年以後の勝木による本多光太郎と本多スクールの研究、および1984年以降、藤田秀によって手がけられている「我国における半導体研究外史」がある。河宮の仕事は『物理学史研究』、『科学史研究』に、勝木の仕事は『物理学史研究』、『物性研究』、『科学史研究』に発表され、藤田の仕事は『中央学院大学論叢』に発表されている。中央学院大学は藤田の勤務校である。

今のところ、私の知るかぎりでは、日本物性物理学史にかかわる、形になった研究はこれだけ

*) 「暫定的な」とことわったのは、本格的な目録作りのためには分類方式などを前もって決めておかねばならないが、どのような分類方式が適當かということは実際に集まつた資料を見た上でないと決まらないということがあり、さしあたっては「大福帳」式の目録を（将来の完備した状況からみれば二重手間に見えようとも）作つておこうというつもりだからである。

である。藤田は半導体研究史の研究をさらに進めることを意図しており、勝木は、本多スクール関係のものとしては茅誠司の研究の足取りを追うことを残しているが、それが終わったら（あるいはそれと並行して）、Heisenberg - Dirac の来日から物性研究所の設立にいたるまでの日本の近代的物性論史をてがける予定である。

河宮・藤田のいずれも科学史家としては素人であり、また「若い」といえる年頃でもない。若手の科学史家・物理学史家は、まだこの分野を研究対象として取上げようとはしていない。

科学史のオーソドックスな教育を受けた若手科学史家たちから見れば、すでに国際的にも共通の関心事として問題がクローズアップされているような分野、たとえば勝手に一知半解にあげてみれば、17世紀の機械論哲学だとか19世紀の物理学の諸特徴だとか、関係文献を広く深く読み込み、自分の独自の見解を形成してそれを披瀝することによって、直ちに国際的な知的な討論の場に参入できるような、いわば整備されたグランドをもつような、分野に比べて、いわば石っころのごろごろしているただの原っぱ、研究に着手する前に『屑屋の仕事』——故紙の収集と仕分け——と見紛うばかりの、とても知的とは呼べないような退屈な作業を必要とする、しかもどれだけの成果が得られるかの保証もないようにみえる分野は魅力に乏しいのであろう。しかし、まず未発掘の資料の所在をたしかめ、それを集めるという仕事から出発しなくては、科学史は自前の学問にはなりえないだろう。

最近、教養部等に科学史・科学論等の授業科目も設けられるようになり、そのための専任教員のポストにつく物理出身者もふえてきた。これらの人人が自前の現代日本（物性）物理学史に取組むことを私は期待しないわけではないが、その期待は甘すぎるかも知れない。物理出身者にとっては、慣れ親しんだ物理学の研究方法とは余りにもスタイルのちがった研究方法で科学史・科学論の問題に取組まねばならないことに戸惑いや違和感を覚え、ポストは生活の資を得るためにものと割切って、授業は義務として真面目にこなしつつ、研究は今までのものの延長で物理をやる、という道を選ぶことがなきにしもあらずだからである。

物理の研究を続けたい個人にとっては、これは一つの賢明な生き方のように見える。しかし、視点をかえて、これから新しく興ろうとする学問分野の側からみると、こんな無責任な虫のいい生き方はない。それらの新しいポストは新しい学問を興すための貴重な数少ないポストであって新しい学問をやろうとする人によって占められるべきなのである。すでに多数の研究者を擁し確固たる大分野として確立している物理学が、これから新しく築きあげようとしている小さな学問分野のための数少ないポストを、『窮民の救済』のために便宜的に利用しようとするならば、それは字義どおりの「物理学帝国主義」の帝国主義的ふるまいに他ならない。それは科学史・科学論の学問分野を物理学の植民地にし、ポストを掠奪し、そのポストについた人に割り当てられる科学史・科学論のための研究費を収奪するものとなる。

その極端な例が最近にもみられた。

「物理学帝国主義」という言葉は、もともとは物理学が学問的興味の対象を既成の伝統的物理学の中に狭く限定しないで、化学であれ、生物であれ、地学・天文であれ、物理学の学問対象として境界領域にどんどん進出してゆく、その学問的な進取の気象を、言葉あそび風に表現したものであった。しかし、こんなことでは言葉あそびが言葉あそびではなくなり、字義どおりの「物理学帝国主義」になってしまう。

これに対して、学問・研究の自由ということがあり、どのような看板をかけたポストであろうとも、そのポストを占めた個人の研究内容は自由ではないか、との反論があるかも知れない。それに対する私の答は次のとおりである。

学問・研究の自由を一個人の市民的自由の問題にのみ環元させて考えるのは間違っている。学問・研究の自由という概念によって擁護されるべきなのは、すでによく確立された体系をもった学問分野からはみ出した所で研究をする自由、大勢のおもむく所ではない方向や分野の研究をする自由、陽のあたる分野に背を向けて陽のあたらない分野の研究をする自由、権力によって強制された研究を拒否する自由、等である。これから築かれてゆくべき開発途上の・小さな・充分の成長をまだみていない学問分野のために用意されたポストについていた者が、すでによく確立された・多数の研究者を擁する・大きな学問分野の研究にたずさわることを擁護するものとして、学問・研究の自由なる概念があるのではない。その意味で、学問・研究の自由は“不可逆的”である。

日本物性物理学史研究が学問として活発に展開されてゆくためには、もっと多数の研究者をその戦列に加えてゆかなければならぬが、そのためには、自らの学問的魅力を形にして示すことによって人々を惹きつけることもさることながら、「物理学帝国主義」とのたたかいが不可欠のようである。

物質開発と分析室

化学分析室 大道寺 英 弘

先日、ある会社でLSIの材料となるシリコンウェーハの製作工場を見せていただいた。原料となるシリコンは高純度シリコンを得られやすいためガス化したケイ素化合物 (H_3SiCl_2 , $HSiCl_3$, $SiCl_4$)を使っている。LSIの性能はシリコンに含まれる不純物により左右されるから、まず初めに原料の純度を調べることから始める。もし純度が悪ければ精製により高純度ガスとする——。この場合 1 ppb ($10^{-9} g$) が問題となるので分析方法は必然的に $10^{-11} \sim 10^{-12} g$ (ppt) 測定できる方法を考える必要がでてくるわけである。この会社の研究者はこの 1 ppb 以下の不純物を除くことに必死となっているのであるが、これは次のシリコン単結晶を造る段階で ppm程度のⅢ属又はV属の元素を不純物としてドープし、この微量の不純物元素がLSIの性能を決める事になるからである。このシリコン単結晶から直径10~15cm、厚さが約100μmのウェーハを作り、ウェーハ中にドープした不純物が均一に分布しているか、目的とする濃度が入っているか調べることになる。その他にも膜の厚みの精度、面の平坦度の精度など、かなりきびしい基準が決められている。このようにシリコンウェーハ1枚をとっても製品になるまでいろいろな工程で分析をおこない、その結果をそれぞれの工程へフィードバックすることによって、高機能性を持つ材料を作りだすことに成功しているわけである。一口に ppb と言っても、例えて言うと世界の全人口の中で目的とする人、一人、二人を捜し出すようなものであるから、間違いなく目的とする元素の原子を見つけ、間違いなくその数を数えるのは容易でない事はおわかりいただけると思う。物質の中の不純物というのは物理的にも化学的にもその性質がよく似ているため除くことができないのであって、その分離できない不純物を同じように化学的手法、物理的手法（いわゆる化学分析、物理分析）で測定しようというのであるから話は簡単でない。

私が分析化学を始めるようになった20年前頃は丁度mgの分析から ppm ($10^{-6} g$) の分析へ移りつつある頃であった。物性研究所の試料も磁性体の二元、あるいは三元合金の組成分析のような試料が多くたが、稀には蛍光体や半導体のように 0.01~0.1% 程度特定の元素をドープした試料もあった。試料は各々の研究室の特徴を表すので有機系試料、無機系試料など広い範囲にわたり、分析元素も一部のものを除いたほぼ全元素にわたるものであった。このような試料の分析は從来からおこなわれてきた化学的手法、電気分析、アークを使った発光法、光電比色法などの方法によりおこなわれてきた。しかし感度や正確さの面から今後の分析に応じきれなくなるとの観点にたち田村先生は(60年3月退官)、当時最初の論文が出たばかりであった原子吸光法の導入を考えた。私が分析室に来たばかりの頃であったが、さっそく原子吸光分析に取り付き光源の開発、

原子化部の改良など装置の開発をおこなう一方で、分析方法の研究をおこなってきた。現在ではほとんどの元素で $10^{-10} \sim 10^{-12}$ g の測定が可能であり、元素によっては 10^{-14} g の測定がおこなえるようになってきた。この数字は高感度であるというだけでなく、高い濃度の分析でも高い精度で分析できるということを示している。最近ではこの方法で難しいP, S, I, Br, Th, Uなどの元素も高感度で測定できる新しい分析方法も開発しつつある。だが、現在我々が対称としているのは溶液化した試料についてのみでありH, C, N, Oや希ガスなどの分析や、結晶中の化合物形態を調べる状態分析などは他の方法に依るほかない。

物性研究所の分析室に長年居て分析依頼の動きを眺めていると研究室の試料造りがどのようにおこなわれてきたかが推察できる。分析依頼の件数だけ見ても昭和49年には延べ48研究室から、144件の依頼が有り、測定元素数が360元素であったが、昭和50年以後減少はじめた。昭和50年には19研究室から115件、分析元素数231、昭和56年は今迄の最低であるが7研究室から36件分析元素数77であった。しかし、試料造りの重要さが言われはじめ、物質開発のアドバルンが揚がり始めた昭和59年は15研究室から39件、分析元素数114と再び増加の兆が見えてきた。昭和55年～57年に減少したのは所員の交代時期とも関連があるようであり、物質開発をおこなう3研究室が発足した今後の分析依頼は増加することがあっても減少することはないものと考えられる。

ところで、昭和61年に新しく共通の物質開発室が発足する。担当する教授も決まり、将来は研究所の大きな目玉となるよう期待されている。開発室は現在の試料作成室を中心となることが決まっており、分析室も合同してもらいたいとの要望がある（現在はまだ決まっていない、今後の話し合いによることになっている）。ここで不思議に思うのは、分析室を無くして試料をどのようにして調べるつもりなのか——。調べるための手段を無くして一体どのような試料を造ろうというのかということである。冒頭のシリコンウェーハの例をあげるまでもなく、物質を造ることと分析することは車の両輪であり、物質開発を大きなテーマとして掲げた現在、分析室を充実させる事がより必要と考える。分析しないで出来る新物質などあるはずがないと思うのは私の知識不足のせいなのであろうか。

もう一つ長年心に燻り続けている問題がある。それは“人”的問題である。所は何故長年研究室や共通実験室で室のため、あるいは研究所のために仕事してきた人達を大事にしないのであるか。研究所でおこなわれてきた仕事のかなりの部分は直接にしろ、間接にしろこのような人達の努力に負うところが多いのである。20年近くも一研究室で仕事をしていて、所員が退官すると他の室の預かりとなって今迄の一連の仕事ができにくくなるだけでなく、居にくい雰囲気となる。生身の人間であるから「ここを辞めようか」「悪い意味でサラリーマンに撤しようか」など考えるが、その仕事一筋に一生懸命やってきた人程その苦惱は深く甲、乙決めかねる。

大学や研究所の組織のあり方がこの問題の一因となっているには違いないが、所員がもう少し技官を“人”として思いやる心を持ってば解決策も見出せるに違いない。又、これまで積み重ねてきた知識と経験を有効に使うことを考えれば、本人のためにも研究所のためにもプラスとなるものと考える。

物性研究所短期研究会報告

「軟X線・真空紫外領域の新しい光物性の展望とS O R将来計画」

期 日 昭和59年12月13, 14日

場 所 物性研究所講義室

提案者 石井武比古, 菅 滋正, 佐々木泰三
木原 元央, 宮原 恒昱

「物性研だより」の2号分ほど遅れてしまったが、標記の短期研究会の報告をする。

最近完成した分子科学研究所のシンクロトロン放射光源U V – S O Rまで含めると、我国にはシンクロトロン放射源専用の電子ストーリジリングが4基ほど稼動状態にある。測定系の整備もすすみ、実験がし易くなり、今では、試料と目的とする科学さえあれば、シンクロトロン放射は誰にでも気軽に利用できるものとなった。また、光源加速器においても、ウィグラーやアンジュレータのような挿入型光源が開発されたことにより、従来よりも桁違いに輝度の高い光を利用できるようになった。

東京大学物性研究所は、このような斯界の日進月歩の発展を考慮しつつ将来計画の検討をすすめてきたが、最近、その骨格が定まり、概算要求に向って、活動を開始した。この計画は、自由電子レーザーを究極の到達目標にした新型光源の開発促進、分光研究の画期的発展、および高輝度光源の使用によってはじめて可能になる新しい研究分野の開拓を目指して、挿入型光源を主体にした軟X線・真空紫外領域の高輝度シンクロトロン放射光源とそれに適合した測定系を建設することを骨子とし、東京大学物性研究所と高エネルギー物理学研究所が協同して実施するものである。両研究所における共同利用実験の成果があがっている折でもあり、この際、我々は、現在の軟X線・真空紫外線による光物性とその周辺の応用研究を総括的に見直し、将来計画に関連する新しい研究の方向についての展望を行うことにした。これが本研究会の目的である。研究会は以下のプログラムに従って行われた。

プ ロ グ ラ ム

12月13日（木）

9:30 緒言にかえて—研究会の趣旨 石井武比古（物性研）

9:55 シンクロトロン放射による物性研究—施設と研究に関する世界の情勢

菅 滋正（物性研）

10:10 高輝度放射光光源の現状と問題点—N S L SとA R A D D I Nの場合

木原 元央（高エネ研）

10：25	高輝度光源について	北村 英男（高エネ研）
10：55	高輝度光源Ⅱ——低エミッタングスリング	磯山 悟朗（物性研）
11：25	価数揺動状態とPES-BIS	糟谷 忠雄（東北大・理）
12：00	————昼休み————	
13：30	スピニ偏極光電子分光	菅原 英直（群馬大・教育）
13：55	光電子・吸収スペクトルに現れる多電子現象の一形態	宮原 恒昱（高エネ研）
14：20	希土類金属・アルカリ金属の極紫外スペクトル	羽生 隆昭（都立大・理）
14：45	コメント	小谷 章雄（阪大・理）
15：00	————休憩————	
15：15	微粒子の高エネルギー物性	柿崎 明人（筑波大・物質）
15：40	アモルファス半導体	井上 恒一・邑瀬 和生（阪大・理）
16：05	イオン結晶	三須 明（東理大・理）
16：30	半導体	張 紀久夫（阪大・基礎工）

12月14日（金）

10：00	放射線効果	檜枝光太郎（立教大・理）
10：25	リソグラフィー	北山 豊樹（厚木通研）
10：50	X線顕微鏡	青木 貞雄（筑波大・物工）
11：15	有機物の光物性	十倉 好紀（東大・工）
11：40	有機物の光電子分光	関口 一彦（分子研）
12：05	————昼休み————	
13：30	軟X線分光による不純物分析	飯田 厚夫（東大・工）
13：55	光電子回折（XPD）	佐川 敬（東北大・理）
14：20	真性表面準位	匂坂 康男（京大・理）
14：45	吸着表面および界面	村田 好正（物性研）
15：10	————休憩————	
15：25	相変態と電子状態	菅原 滋正（物性研）
15：50	原子の光電子分光	柳下 明（高エネ研）
16：15	分子の解離および電離過程	伊藤 健二（高エネ研）
16：40	まとめ	佐々木泰三（高エネ研）

このプログラムからわかるように本研究会は以下に述べる指針に従って構成されている。(1)世

界の情勢の分析。シンクロトロン放射源を実験に提供している国は、我国のほかに、米、英、ソ連、西独、仏、伊、スウェーデンがあり、中国、台湾、ブラジルなどで光源加速器の建設中ないしは建設計画中である。また、新しい大規模の高輝度光源の建設が米国とヨーロッパにおいて実行に移されようとしている。高輝度光源が入手されると、高分解能でかつ高精度の実験が可能になり、これまで到達不可能であった高次の効果を見ることができ、研究内容は質的にその様相を一変する。現在既にその兆候があらわれている。新しい計画が実現した暁に我々が世界を一步リードするためには、最近の実験技術の進歩の著しい欧米諸国の現状とその発展の方向をよく知っておくことが重要である。(2)高輝度光と高輝度光源の特徴の把握。高エネルギー光領域における我々の新しい物性研究は新型光源からの強い光によってもたらされたものであるから、その光源の性質と高輝度光の性質を知っておく必要がある。挿入型光源である多極ウィグラーーやアンジュレータからの光は従来我々が知っているストーリジリングの通常の偏向部からの光とは使い勝手が違っている。効率のよい分光系の設計には光源と放射される光の知識は不可欠である。また挿入型光源の動作効率を最良に保つためには、それに適合した光源リングの設計を行わねばならず、将来自由電子レーザーを目指すとき、その知識は重要となる。(3)内殻電子励起過程および関連する現象の解明。軟X線や真空紫外線の光領域では内殻電子励起が研究対象であり、そこにあるわれる多体効果の研究や内殻からの励起電子を情報の搬出体として外殻電子の挙動を写し出させる研究が有力である。価数揺動、相変態、スピニ偏極などと絡ませるのはその典型的な例と言える。現在はほとんどの研究が何らかの形で光電子放出の現象を利用した実験によっている。従って、光電離にかかる多体効果の研究もまた重要な問題にならざるを得ない。一方、可視域や近紫外域ではレーザーを利用して光のみを情報の搬出体とする研究が盛んである。発光や光散乱のような研究は軟X線・真空紫外領域ではほとんど行われていない。ここでは、不純物分析というむしろ応用の方面から発展が急がれているX線蛍光の問題を取りあげた。また固体表面に関する現象の解明もまたシンクロトロン放射を用いる物性研究の主要テーマの一つであり、今後ますます発展が期待されているものである。(4)とくに興味ある物質の高エネルギー光物性。現象としての内殻電子励起過程をとりあげることのほかに、物質の観点から内殻電子励起を眺めることも重要である。物質に特有な現象の詳細な解析はその物質を工業的に利用する上で重要であるからである。最近では、極めて基礎的な科学の領域に属する研究が重要な応用化への道をひらく場合がしばしば見られる。本研究会においては、特に興味ある物質として、微粒子、半導体、イオン結晶、有機物質、原子・分子、生体物質をとりあげた。生体分子のシンクロトロン放射による研究は幅が広いが、ここでは軟X線・真空紫外線にかかわりが深い放射線効果の問題を取りあげた。(5)応用研究。応用上の観点から興味ある問題は、内殻電子励起過程の問題と直接的にかかわり合っているものが多いが、ここではそれとは別の観点から二つほどとりあげてある。超L S I の開

発に必要な光転写にシンクロトロン放射を利用するのが有望で、多くの企業がこれに取組んでいるのは周知の事実である。この分野の現状を知り将来を予見することは重要である。もう一つの有望な応用はX線顕微鏡である。まだ、開発段階にあるが、現状の把握を試みる訳である。

研究会では活発な討論が行われ、多くの成果が得られた。以下に講演内容について簡単に紹介する。

(1) 世界の情勢の分析

菅滋正氏と木原元央氏がこの問題をとりあげた。菅氏は1984年8月に渡米し、米国の各研究施設を訪問し、現状を視察した。また、それに先立ちソ連のノボシビルスクで開催されたS R - 84と呼ばれる国際シンポジウムに出席し、情報を収集した。これらを基礎にして、欧米の研究施設のうち特に活動的で新しい開発の進んでいる二三のものにつき、測定系の開発という立場から現状を紹介した。スタンフォード大学のSSRL-SPEARでは1983年の運転実績は2400時間であり、45の研究グループから200人のユーザーが実験に訪れている。1983年に投下された研究費は17億円に達するという。注目されるのは、新しいアンジュレータの建設で、目的とするエネルギー領域に応じて交互に入れかえる4種類を装備し、基本波ピークで10~1000eVをカバーできる。このSSRL-SPEARとは別にスタンフォード大学の応用物理学科を中心に自由電子レーザー用の1GeVリングの建設が進行中である。

ブルックヘブン国立研究所NSLSでは、0.75GeV UV リングと 2.5GeV X線リングが建設されUV リングは週7日24時間運転が行われている。ここでは高分解能と高輝度を目指した分光器が建設されており、PGMが3台あった。現在調整中である。刮目に価するものは6m/10m切換えのTGMで5~1300eVの広いエネルギー範囲にわたって高分解能の固体光電子分光実験に提供されている。超高真空中で6枚の回折格子の交換ができる。NSLSでもアンジュレータが装備されている。第1期計画の完成をまたず、総額50億円の第2期計画が3年間の予定で出発している。

一方ヨーロッパでは、西ベルリンのBESSYの躍進ぶりが目についた。最大電流500mAを超えるこのリングは1983年には1386時間運転されたが、1984年には倍増することである。SX-700というPGMが独創的設計になっており、830eVで1eVの分解幅を実現した。実験ではJülichのKFAやフリッツハーバーのグループのスピニ偏極光電子分光実験が傑出している。この実験はBESSYグループの独壇場である。ソ連のシンクロトロン放射の研究は、ヘリカルウェイグラーの研究以外に、興味あるものがなかった。

木原元央氏は、ブルックヘブン国立研究所NSLSとウイスコンシンSRCのリングを視察した結果を中心にして、シンクロトロン放射源としての電子ストリージリングの問題点を述べた。NS

LS の UV リングでは最大 9 バンチまで蓄積可能であるが、現在のところバンチ間相互作用による不安定性のために、通常は 3 バンチで運転をしている。400mA でビームの不安定性が生じ、それ以上貯めることができない。ビームの寿命も 200mA、3 バンチのとき 90 分とかなり短い。諸々の考察から Touschek 効果がきいていると思われる。自由電子レーザーの研究用にアンジュレータを挿入しているが、250 MeV 程度までエネルギーを下げ、磁極ギャップを狭くするとビームの寿命が 5 分程度まで短くなる。イオン捕獲によるエミッターンスの増大とアンジュレータ磁場の非線形項が絡み合った現象によるものだろうと推測していた。X 線リングは 1982 年 3 月に最初のビームが入ってから何かと問題が多かったが、1984 年に入ってから目に見えて改善の兆しが現れてきた。蓄積電流が少ないので真空が悪いのが第一の原因である。RF のパワーが不足でエネルギーが 2 GeV にとどまっているが、2 台目の空腔を入れて 2.5 GeV に達するものと思われる。

ウィスコンシンの ALADDIN は 1981 年末に最初のビーム入射が行われてから蓄積電流が増えずに苦労していることはよく知られている。このリングでは 100 MeV マイクロトロンから入射し 800 MeV まで加速する。この低エネルギー入射がよくないと考えているようで、最高エネルギーでの入射に方針を変更し、そのための入射用シンクロトロンの設計について Scanditronix とかなり詳しい打合わせを始めている。完成までに 2.5 ~ 3 年が必要である。

木原氏は、これらの視察の結果をふまえて、低エミッターンスリング一般について見解を述べた。高輝度光源としての電子ストーリジングは低エミッターンスに設計されるのが常識になりつつあるが、今まで完成した低エミッターンスリングでは横方向のエミッターンスは因子 2 程度の差でほぼ設計値が達成されているのに、縦方向のエミッターンスが設計値の 10 倍にも達している。これはイオン化された残留ガスがトラップされるためと信じられている。この決定的な解決法は未だ手探りの状態である。また、Touschek 効果が寿命を短める問題も深刻になっている。これは本質的なことで高輝度と短寿命という排反性は宿命として考えに入れねばならぬことである。このほか木原氏は、入射後に加速する方式よりも、はじめから全エネルギーで入射することが重要であることを述べた。

(2) 高輝度光と高輝度光源

この問題は北村英男氏と磯山悟朗氏がとりあげた。両氏は異なる観点から異なる言葉を用いてほとんど同じ内容の話をした。それらが相補い合って、興味深い話ができ上った。まず北村氏は極めて明解に要領よくまとめられた図表を用いて従来の実験室光源、通常の偏向磁石部からのシンクロトロン放射、および挿入型光源の特性を比較してみせ、まず定性的に挿入型光源がいかにすぐれているかを示した。北村氏の言葉はけだし名言である。曰く。「シンクロトロン放射の最

大の特長は、連続スペクトル分布を示すことで波長選択の融通性が良いことであった。しかし、連続分布光源が優秀であるとは決して言えない。実際には単色化して使用するのであるから、使用しない波長領域の光は捨てているばかりでなく、迷光あるいは高次光の原因にもなるし、光学素子に損傷を与えることになる。利用者にとって最も望ましい光源とは、任意の波長の単色光が取出せるものである。北村氏はつづいて挿入型光源からの光を特徴づける二、三のパラメタに言及した。 $K = \varphi_0 / \gamma^{-1} = 0.934 \times B \lambda_\mu$ (φ_0 は電子ビームの最大ふれ角, γ^{-1} はシンクロトロン放射の自然の発散角, B は磁場強度, λ_μ は単位磁極長), $\lambda = \lambda_\mu (1 + K^2/2) / 2\gamma^2$ など利用者の方は丸暗記しておけばよい公式が紹介された。それから、挿入型光源の各種が比べられ、その特徴が示された。アンジュレータに所期の性能を發揮させるためには、低エミッタансリングではなくてはならぬことが強調された。これらの解説の最後に、北村氏は、将来のストーリジングがどのような姿になっているかについて述べた。従来のリングでは、そのエネルギーがVUV用では1GeV以下X線用では3GeV以下であったのに対し、挿入型光源用リングではVUV用が2GeV、X線用は8GeVまで引上げる必要があること、数多くの長い直線部を挿入することによるリングの巨大化が避けられないことが述べられた。

磯山氏もまたシンクロトロン放射を利用するときにおかし易い誤りを通常の偏向磁石部からのシンクロトロン放射を利用する場合について述べ、輝度の概念への入門とした。磯山氏によると例えば物性研SOR-RINGとPFリングの輝度を比較するとPFリングの方が数倍高い値を示している。しかし、だからと言って実際に利用できる光量がPFリングにおいてそれだけ高くなるとは言えないと言うのである。というのは、実験装置がリング内の発光点にどのくらい接近できるかで、光のとりこみ角が異なるからである。この考えを土台にして、磯山氏は結局利用できる光の量は、とりこみ角できる偏向部の周長によるとした。多極ウィグラーの強度が上るのは、実質的に偏向磁石を分割し、周長をかせいでいるからであると説明した。その後、多極ウィグラーからの光を互に干渉させるとどうなるかを、計算結果を用いて説明し、アンジュレータ光の何たるかを説明した。その際、北村氏と同様に、諸々の理論的パラメタの説明が行われた。これらの考察をふまえて、挿入型光源を主体とした新リングが満足すべき条件は北村氏のものと同じで、(1)十分な長さの直線部をもつ、(2)十分な数の直線部をもつ、(3)電子ビームのエミッタансおよびエネルギー幅が小さい、というものであった。最後に現在世界で稼動中、ないしは提案されている低エミッタансリングとして、EUROPE RING (ESRF), ALS (LBL), SEPFF I (Stanford), SEPFF II (Stanford), SUPER ACO (Orsay), BESSY (Berlin), NSLS VUV (BNL), NSLS X-RAY (BNL), UV-SOR (IMS) の特性の比較が行われた。

(3) 内殻電子励起および関連する現象

この大きな問題は、糟谷忠雄氏、菅原英直氏、宮原恒昱氏、小谷章雄氏、飯田厚夫氏、佐川敬氏、匂坂康男氏、村田好正氏、菅滋正氏によってとりあげられた。

糟谷忠雄氏は、光電子分光と制動放射特色線スペクトル（PES と BIS）から眺めた価数揺動の問題について、詳細な解説を行った。価数揺動ないしは原子価混合を起こす物質をその現象によって分類しそれらの特徴を述べた。(1) 静的または準静的原子価混合。Eu₃S₄ と Sm₃S₄。フェルミ準位が f 準位の上にある。Sm₃S₄ の場合には、これが 0.3 eV 分離し、±U 離れた 3 ピーク構造が PES と BIS でみられる筈である。これは価数揺動の基本型ではあるが原子価混合の特徴として、他の 3 ピーク構造に比べ、4d → 4f 共鳴の共鳴エネルギーが異なる。(2) SmB₆ 型。SmB₆ と YbB₁₂。分離幅を 0.1 eV 以下にする必要がある。YbB₁₂ では Yb²⁺ が non-mag という意味で最も簡潔な系であり、今後の研究が望まれる。BIS のデータがほしいところである。(3) 高濃度 Kondo 型 Ce および Yb 化合物。U だけ離れて PES と BIS に主ピークがあり、第 3 の peak がフェルミ準位にある筈である。今のところ CeB₆ が唯一のデータであるが低温でより分解能をあげた実験が望まれる。(4) α-Ce 型価数揺動。高濃度 Kondo 型から f バンド型へ移行する中間状態と考えられる。フェルミ準位上のピークは BIS 側で大きく成長し、こちらの方により重要な情報がある。実験解析には理論の手助けが必要である。Yb 化合物では Ce に比べて、PES と BIS の役割が逆転する。(5) 5f 系。5f 系は 3d と 4f を結ぶものとして興味がある。Am より重いものは 4f と同じ局在的振舞いを示し、多くの U 化合物は 5f バンド的振舞いを示す。その間に価数揺動的振舞いをするものがあるが、4f 系のものとは異なった振舞いを示す。UBe₁₃ はまさに高濃度 Kondo 型の超伝導体であるが 3 ピーク構造ではなく、フェルミ準位より少し上にピークをもった 5 eV くらいの幅をもった单一ピークがあらわれる。分解能をあげかつ低温になるとフェルミ準位上に鋭い Kondo ピークがあらわれる。(6) その他。PES-BIS 以外の光学観測も重要である。吸収構造も重要で CeO₂ の構造が Ce⁴⁺ に対応していることなど当然の結果である。以上糟谷氏が解説した詳しい内容の一部を紹介したが、最後に糟谷氏は、今後やるべきこととして 0.03 eV ~ 0.1 eV の高分解能化、液体窒素温度から mK に至る低温化、角度分解、スピニ偏極などむずかしい実験をすべきことを強調された。

菅原英直氏は、一昨年から昨年にかけて BESSYにおいてスピニ偏極光電子分光の実験に関与した。これを暗黙の背景にして、光電子のスピニ解析実験について解説した。スピニ解析実験では、物質から放出される光電子のスピニ偏極度とエネルギー分布曲線および運動量分布曲線が測定される。スピニ偏極度 $P = (N\uparrow - N\downarrow)/(N\uparrow + N\downarrow)$ とエネルギー分布曲線 $N(E) = (N\uparrow + N\downarrow)$ より $N\uparrow(E)$ と $N\downarrow(E)$ が独立に求められるが、信号が弱いので、高輝度光の使用が重要となる。菅原氏がとりあげたのは固体についての実験例で、エネルギーバンド構造解析、表面磁性研究、

Auger 電子のスピン偏極, 2次電子のスピン偏極である。Fe の例では運動量分布から↑スピンバンドと↓スピンバンドの分散が求められ, バンド計算の結果とよく一致する。また↑スピンバンドと↓スピンバンドの光学的な DOS の温度依存性が求められ, 温度の上昇と共にフェルミ面近所の強い偏極が消失していく様子がきれいに示されている。表面磁性との関連については, O₂を吸着させた FeTi の例や H₂ にさらした ErFe₂ の例が示された。偏極度の磁場依存性より, 吸着により表面に Fe クラスタが生成されることが知れる。磁気モーメントを測定して, クラスタ内の Fe 原子の平均数を見積った。ErFe₂ では O₂ によって表面に安定層が形成されるが, H₂ にさらすことによって ErFe₂ の真性表面ができる。この様子がスピン偏極度の変化を通して観測されている。Auger 電子のスピン解析については Fe₈₃B₁₇ なるアモルファス合金を例にして, この方法が局在的な磁性研究に有用であることを示した。菅原氏はこれらの話を通して固体の場合にはスピンに依存した現象がきわめて多く, 今後の研究の発展が期待されることを強調した。

宮原恒昱氏は, 光吸収スペクトルにあらわれる内殻電子励起に伴う多体効果について述べた。光吸収スペクトルを理解するのに, 内殻に生じた正孔の影響による緩和の効果が, スペクトルプロファイルのどの部分にどのような形で姿をあらわしていくかが興味あることである。宮原氏は有名なアルカリ金属のフェルミ端異常を例にとってどこが問題なのかを突込んでいった。問題を一般的にひろげて行って, Ba の 4d → 4f 吸収がどのように理解されたか, K ハライドの K 2p スペクトルのどこが理解できないかが述べられた。最後に宮原氏らのグループで最近測定した Cs → Ba → Sm → Tb → Ho → Er → Yb という金属群でこの順序にスペクトルがどのように変化しているかを示し, これをどう解釈するかについて, いろいろな角度から検討がなされた。元来宮原氏の手にかかると一見簡単明瞭に見える現象にも複雑な理屈がつき, 凡人の理解の浅薄なるを知らさせる結果となる。その宮原氏が複雑な現象を簡単に説明しようとしたので, 話は若干ややこしくなり, 凡夫の理解の限度を超える部分もあったが, 内殻励起の現象を一つの統一した視点で捕え, 問題を単純化しようとした点で大変に興味深い話であった。

小谷章雄氏は最近出席された MMM 会議でとりあげられた招待講演を紹介し, 今後のこの分野の発展を占うまでの参考になるとした。「シンクロトロン放射と磁性」に関するシンポジウム。(1) 加速器およびストーリジリング用磁石 (Halbach), (2) スピン偏極光電子分光 (Gudat), (3) X 線磁気散乱 (弹性散乱理論 Blume, 実験 Gibbs, 非弹性散乱理論 platzman)。「磁性表面および電子分光」に関するシンポジウム。(1) スピン偏極逆光電子分光 (Kirschner), (2) スピン偏極オージェ分光 (実験 Landolt, 共鳴光電子放出を含む理論 Kotani), (3) 磁性表面 (実験 Seiler, 理論 Weinert)。そのほかにヘビーフェルミオン系の光電子スペクトルの紹介とスピン偏極電子損失におけるストーナー励起の観測が報告された。小谷氏はさらに今後発展していくと思われるテーマを挙げた。(1) 遷移金属の内殻光吸収スペクトルおよび内殻光電子スペクトルに反映されるバン

ド性と局所性。(i) $M_{2,3}$ 吸収における多重項分裂、自動イオン化と干渉効果。(ii) 3s, 3p (2p) 光電子放出における多重項分裂、電子遮蔽効果と直交性カタストロフィー。(2) 共鳴光電子スペクトル。(i) 遷移金属の2正孔束縛状態。(ii) 絶縁体・半導体の共鳴光電子放出。(iii) 単純金属の共鳴光電子スペクトル。(3) 逆光電子スペクトル。Co, Ni における電子相関効果——2正孔束縛状態は存在するか。(4) 光電子スペクトルと相転移。(i) ヘビーフェルミオン系の光電子スペクトル。(ii) バイエルス転移、SDW・CDW と直交性カタストロフィーの関係。(5) 稀土類化合物の内殻光吸收端と内殻光電子スペクトルの構造。(i) 光吸収によって励起された電子の影響。(ii) 混成原子価化合物への応用。(6) 二次電子スペクトル。遷移金属における二次電子スピノ偏極。(7) スピノ偏極オージェ分光。(8) 共鳴X線散乱。(9) 時間分解光電子スペクトル。(i) 共鳴光電子放出のサテライトとオージェは時間分解によって区別できるか。(iii) 三段階過程は時間分解によって区別できるか。

飯田厚夫氏は軟X線分光による不純物分析というテーマで蛍光分析の話をした。X線が元素の微量分析に利用されることよく知られたことである。最近半導体工業において、材料の中の微量の軽元素不純物の非破壊的検出が重要視されるに及んで、軟X線蛍光分析はにわかに脚光を浴びるに至った。しかし軽元素の蛍光の収量は極めて低く励起状態から基底状態への緩和はオージェ遷移によるものが大部分を占めることもまたよく知られたことである。しかし、照射光の強度が十分に高ければ $10^{-2} \sim 10^{-3}$ 程度の低い収量の現象でも測定にかかる理屈である。ここに高輝度軟X線・真空紫外線への期待がある。単に応用上の興味だけでなく、発光過程に含まれる電子素過程の研究も興味あるところである。従来軟X線発光スペクトルは、荷電粒子による刺戟によって得られていたが、これでは、発光現象の観測に重要な試料の低温化が達成できない。蛍光実験は低強度のため高分解能・高精度化は達成されていない。飯田氏によると、微量分析を目的としたシンクロトロン放射による蛍光実験は未だ報告された例がないと言う。飯田氏はこの実験を行うにあたっての技術上の諸問題を詳しく解説した。

佐川敬氏は固体表面解析の一手段である固体の光電子回折をとりあげた。光電子回折は内殻光電子または内殻のみが関与するオージェ電子の角度分解回折パターンの測定をするものである。使用される電子の運動エネルギーは約 300 eV 以上数 KeV 以下なので X 線励起が主になる。XPD は着目する原子から放出された球面電子波に対する回折現象であり、着目原子近傍の局所的な原子配置の決定に有力な手段である。XPD では放出電子のエネルギーが 300 eV 以下になると多重散乱効果が効いてきて LEED 並の複雑な解析が必要となって実用性が薄れるので、通常は一回散乱の計算で十分と考えられる上記エネルギー範囲の電子を検出する。現実の表面吸着系では着目原子のまわりに 50ないし 300 個程度のクラスターをとて一回散乱の計算を行い実測の回折パターンと比較する。この計算を行うにはまず表面吸着系原子配列のモデルの設定が必要である。こうして実測に合うモデルを探す。モデルが一義的かどうかという最終判断には他の色々の実験

結果と照合することが望ましい。佐川氏は以上的一般的解説の後に、 Cu(100)c(2×2)O吸着面と Ni(001)c(2×2)S吸着面についての解析を紹介した。とくにシンクロトロン放射を用いれば、 s または p 偏光を利用した測定が可能になるだけでなく、 in situ で同じ吸着面について ARUPS が可能であり、これらの複合測定の重要性が強調された。

固体表面にはバルクの電子状態とは別のいわゆる真性表面準位が存在しうる。勾坂康男氏はシンクロトロン放射を用いた角度分解光電子分光による半導体と金属の表面準位の研究の現状を紹介した。光電子分光による表面準位判定条件としては、(1) k_{\perp} に対する分散が小さいこと、つまり $k_{\parallel} = \text{一定}$ の条件で $h\nu$ を変えて束縛エネルギー E_B が変わらないこと、(2) 表面状態(吸着など)に敏感であること、(3) 表面準位は表面に投影されたバルクのバンド構造のギャップ内にあることなどが考えられる。しかし必ずしもこれらの条件に従わない表面準位もあるので、バルクのバンド構造や表面再配列原子構造等と比較した定量的議論が必要である。半導体では表面再配列の影響が第3層～4層にまで及んでいるが金属では Ir, Pt, Au, Mo, W(100) 表面のはかは再配列を示さず、しかもその影響は表面第一層に限られるなどのため研究が進んでいる。中でも Cu(111) と W(100) は詳細な研究がある。勾坂氏は膨大な資料を表にまとめ、そのデータに裏打ちされた現状の批判には傾聴に倣するものが多かった。勾坂氏が強く主張したことは、「シンクロトロン放射によって表面研究を行うのは有力であるが、常に well defined surface を用いよ」ということであった。

村田好正氏は、吸着表面および界面について述べた。表面の研究は興味ある物性を示す well defined surface をデザインして作ることや表面での反応などの動的過程を調べることが主題であり、このためには、光電子の角度依存性の測定ができるだけではなく、試料作成や試料交換ができる試料室を備えた装置が必要である。興味ある表面の例として Si(001) 表面に Cs や K などのアルカリ金属を飽和吸着させた系について一次元金属状態や被覆層プラズモンが紹介された。低温でのパイエルス転位等興味ある物性が期待される。

次いで村田氏は表面 EXAFS に言及した。Ni(100) 上に吸着した酸素の例について p(2×2) 構造や c(2×2) 構造表面での酸素吸着配置の議論や、この方法の限界について述べられた。吸収端に近い領域の XANES では、 shape resonance に相当する σ -resonance が見られたり、 π -resonance の強度が偏光に依存したりする。これより金属上に吸着した C-O や O-O など軽原子配置についての知見が得られる。光刺戟脱離も表面 EXAFS の検出機構として重要である。今後電子の光イオン化によるイオン脱離が検出できるようになれば吸着原子の励起準位や光化学反応等について有用な知見が得られよう。

菅滋正氏は相転移との関連について述べた。相転移に伴う電子状態の変化の研究は物性研究の上で広く興味が持たれている。電子状態の測定手段としては UPS あるいは XPS さらに光分光

などが有力であるが、偏光したシンクロトロン放射の利用価値ははかり知れない。最近では角度分解スピン偏極UPSに加えて逆光電子放出の手法も盛んに用いられている。相転移としては低次元物質における電荷密度波やバイエルス転移、あるいは金属一絶縁体転移などは角度分解光電子分光の恰好の対象である。強磁性体では試料温度を変えて角度分解スピン偏極UPSを行うことにより有限温度でのスピン交換相互作用やスピン偏極バンドについての貴重な情報が得られている。温度可変、高分解能($E/\Delta E > 1000$, $\Delta\theta < 1^\circ$)の測定が必要となると思われるが、既に重フェルミ粒子超伝導 UBe_{13} や UPt_3 で20K, $\Delta E \lesssim 0.13\text{eV}$ の測定によりフェルミ面直下の電子状態の特異性が明らかになるなど、この方面での研究は益々発展するものと思われる。このほか電子系や格子系を制御した相(超格子、表面界面、インターフェース)での研究が注目される。

(4) とくに興味のある物質

極紫外スペクトルを物質のサイドから捕えた話は、羽生隆昭、柿崎明人、井上恒一、邑瀬和生、三須明、張紀久夫、檜枝光太郎、十倉好紀、関一彦、柳下明、伊藤健二の各氏によって行われた。

羽生隆昭氏は、最近KEK-PFにおいて得られたアルカリ金属と稀土類金属のスペクトルを紹介した。アルカリ金属では、最浅p殻電子の吸収端に鋭いスパイク状のピークがあらわれ、その成因が内殻に突然発生した正孔を伝導電子が遮蔽するときの非弾性散乱に帰するいわゆるメイハン・ノジエ・ドドミニチス理論で説明できるとされてきた。この理論が正しいと、フェルミ端異常と呼ばれるこのスパイクはLi以外のすべてのアルカリ金属でみられる筈であり、事実その通りである。そうすると、アルカリ金属同志の合金においても事情は同じである筈である。このこともまたその通りであるのであるが、例外として、成分の一方の濃度が数%以下の稀薄合金のとき、その稀薄成分のフェルミ端異常が消失し、フェルミ端はエネルギーと共に直線的に変化する構造をもつことが報告されている。羽生らのグループはこのことが一般的にアルカリ金属合金で成立しているらしい事實を示した。この効果の理論的説明はなされていない。次に混合原子価状態であると報告されている CeO_2 の $4d \rightarrow 4f$ 吸収スペクトルを測定し、 CeO_2 が Ce^{4+} の状態であるように見えることを示した。但し、スペクトルには完全な $4f^0$ 初期状態をもつ La^{3+} のものとも若干異なり、今後の理論的取扱いが注目される。最後にLa化合物の $4d \rightarrow 4f$ 吸収に伴って生ずる多重項線の形状を詳しく測定し、線形状が非対称的であることを見出した。この原因はバッカグラウンドを形成する外殻遷移との弱い干渉効果によるものと考えられる。

柿崎明人氏はクラスター(原子集合体)に対するシンクロトロン放射の応用について報告した。原子が数個から数100個程度のクラスターは分子が固体へ移行していく過程を研究する上で重要な知見を与えるが、クラスターを作ることが難しいので、実験的研究は多くなかった。しかし、

最近、加熱した試料蒸気を稀ガスと共に取り出す方法により、原子数が数100以下のクラスターを大量に生成し、質量数の定まったクラスターの光学的性質を調べることが可能になった。柿崎氏は銅ハライドクラスターを例にとり、極紫外光によるイオン収量スペクトルの解析からクラスターの構造が固体結晶とは異なること、電子状態がクラスターの大きさと共に変化していく様子を確めることが出来ることを示し、シンクロトロン放射が今後クラスターの物性研究に重要な道具になることを示した。

井上恒一、邑瀬和生氏はアモルファス半導体の研究にシンクロトロン放射がどのように利用されているかについて述べた。アモルファス半導体の構造の研究はEXAFS、X線回折を観測して行われ、最近では試料温度を変化させてEXAFSをみると構造の中距離秩序を調べたり斜入射X線回折によって基板の影響を受けずに構造が調べられるようになった。一方電子状態の研究は、光電子スペクトル、光反射、光吸収スペクトルを測定することによって行われ、アモルファス物質特有の伝導帯の電子状態などが明らかになっている。今後は光結晶化などの現象が研究されていくであろうと思われる。

三須明氏はアルカリハライドの浅い内殻吸収スペクトルについて述べた。アルカリハライドはシンクロトロン放射が固体の分光研究に応用されたときに真先に取り上げられた物質で、内殻励起子のスペクトルがよく解析されている。三須氏はそれらについて説明したのち、三須氏のグループが田無のSOR施設やKEK・PFにおいて雑音信号と苦斗しながら、精力的に推進しているピエゾ反射スペクトルの測定結果とこれによって何がどこまで明らかにされたかについて詳述した。

張紀久夫氏は半導体の研究の現状をバルクの性質に関するものに限った上で詳しくサーベイしてくれた。豊富な資料と理論家としての鋭い洞察をもって、わかり易い話であった。まずエネルギー・バンド構造の実験的決定法として角度分解型光電子分光法によって得られる実験データとしてのエネルギー分布曲線から実際のエネルギー・バンドの分散曲線を描くためのいくつかの方法が紹介されその長所短所が示された。例としてGaAsやグラファイトがとりあげられた。また最近とみに盛んになってきている逆光電子放出の方法によって空の伝導体の構造をきめる方法が紹介された。このように実験的にエネルギー・バンドを定める方法を示した後、このエネルギー・バンドと理論的に計算されるバンド構造を比較する際の注意が述べられた。半導体の場合にとくに一電子像の適用限界までふみこんでみるべし、というのが主張である。素人にはよくわからなかつたかも知れないが、「Hartree-Fockを用いるのとX α 法の結果を用いるのとでは励起子状態の定式化は全く同様というわけにはゆかない」という主張をめぐって、ウソ or ホントの活発な議論がつづいた。

内殻励起スペクトルが、どのような情報を含むかについても解説された。表面とバルクの差、

いわゆるバンドの曲り、内殻励起子などについて調べることができる、EXAFSから光電子の脱出深度のエネルギー依存性がわかる。内殻励起子線に共鳴増大がある、等々の多体効果の概要が説明された。

檜枝光太郎氏は、生物固体に極紫外光を照射した場合の放射線効果について報告した。生物に放射線エネルギーが与えられると、最初に生ずる励起、イオン化された分子の質と量によって最終的に生ずる生物効果（死、発ガンなど）の量およびその原因となる主要な分子の量は変化する。このエネルギー吸収から生物効果誘発までの道筋の解明には特定元素の内殻電離とそれに伴う生物効果を知ることが必要である。現在酵母細胞、ヒト培養細胞、DNA分子などの生物試料についての研究が進んでおり、DNA分子の場合、照射エネルギーが約6.5 eVを境にして高エネルギー側で主要な分子損傷の量が増大することが明らかになった。今後は照射エネルギーを高くすると共にDNA主鎖切断の末端構造を分析し、タイプ分けして、生成効率の測定などより広範囲な測定を精度をあげて行う必要がある。

十倉好紀氏があげたシンクロトロン放射分光の課題は、(1)構成分子自身の光励起状態、(2)固体中の分子の光化学的性質、(3)固体特有の電子状態、バンド構造、励起子状態、(4)固体での光励起状態の緩和過程である。有機固体の特徴の一つとして構成分子自身の構造的・電子的異方性と分子間相互作用の異方性が考えられる。シンクロトロン放射の偏光特性は(1)～(4)のいずれの研究に対しても有力な武器となる。

現在種々の有機材料の開発が行われているが、この点から(3)に挙げた有機固体特有の電子状態のシンクロトロン放射分光の手法を十倉氏は総括した。これには(a)外場効果や変調分光法の利用、(b)偏光依存性、(c)対象物質の構造転移や化学修飾の利用などがあげられる。さらに励起状態については光子間の相関や光子と放出電子や放出イオンとの相関をとるコインシデンス法などが考えられる。

有機物のシンクロトロン放射分光の今後の問題としては、まず、新しい物質の研究が重要であり、そのためには標準的なシンクロトロン放射分光技術の大衆化が必要である。また、変調分光法を用いた光励起状態の緩和過程の研究なども興味ある課題である。

関一彦氏は有機物のUPSについて述べた。有機固体の表面は多くの場合活性が低く、金属、半導体、イオン結晶に比して清浄表面を得るための要請は余り厳しくない。しかし、有機物の多くは絶縁体のために試料の帶電子対策が要請される。そのため蒸着や溶液からのキャスティングによる薄膜試料が用いられる。角度分解測定のためには配向性蒸着薄膜やラングミュアー膜等が用いられ、更に最近ではAuの被覆膜や長波長光照射による単結晶を用いた光伝導の測定も行われている。

シンクロトロン放射を用いて得られた有機固体の光電子分光からいくつかの興味ある例を紹介

する。Zn-フタロシアニンでは $h\nu = 100 \text{ eV}$ 付近で Zn の 3d 準位からの光電子放出強度が著しく強くなり、この共鳴効果を用いて準位の同定ができた。アセチレン固体の CIS は真空準位の上に $3\sigma_\mu$ 空準位にもとづく伝導帯 DOS 構造や $2\sigma_\mu \rightarrow 1\pi_g$ 自動イオン化を示す。ARUPS の例としては長鎖化合物 $n-C_{36}H_{74}$ 配向蒸着膜の結果が紹介された。シンクロトロン放射の波長可変性とパルス性を活かして、パルスレーザーと組合せた 2 光子光電子放出の有機固体への応用なども考えられている。

柳下明氏は、原子の光電子分光について、(1)実験装置、(2)光電子部分断面積、(3)光電子の角度分布、(4)オージェ電子の角度分布、(5)内殻電子しきい値付近で起こる現象、(6)3d遷移金属原子の共鳴光電子放出の各問題をとりあげた。具体的には、Xe 5s, 5p の光電離部分断面積の実験結果と理論を比較し、多電子系における電子相関の重要性を指摘した。次に理論的に未解決の問題として、Xe 5s 光電子放出の角度分布が双極子近似で予想される非対称パラメーターから大幅にずれている実験結果を紹介した。さらに衝突後相互作用効果について総合的に説明した。

伊藤健二氏は分子の問題をとりあげた。真空紫外光が分子に吸収されると、直接電離や直接解離のほかに中間状態を経由する自動電離や前期解離が起こる。これまで光吸収断面積や全電離断面積などが測定されてきたが、伊藤氏は近年シンクロトロン放射の利用によって可能となった光電離の部分断面積、中性励起分子や電離などについて述べた。

光電離の部分断面積の測定法には、(1) CIS スペクトルの測定、(2)分子の電離によって生じるイオンからの発光の励起スペクトルの測定がある。後者は分解能は高いが発光しない電子状態を測定できない点に問題がある。(1)の例として CO の光電離部分断面積が示された。 $X^2\Sigma^+$ のスペクトルの $h\nu = 21 \sim 26 \text{ eV}$ におけるピークは shape resonance と考えられる。

伊藤氏は、次に分子の解離について H_2 , H_2^+ , O_2^+ の例をあげて詳しく説明した。電子状態、振動準位あるいは回転準位について系統的に解離過程を研究し、前期解離の機構や自動電離に関する知見が得られた。電離および解離に限らず、光衝撃すると発光が観測されるが、これを高い分解能で測定する必要がある。また、光電子分光において分子の回転や振動準位を分解できる精密測定が望まれる。

(5) 応用

北山豊樹氏はシンクロトロン放射の LSI 製作のためのリソグラフィ技術への応用について報告した。半導体ウェハ上にパターン転写する露光にシンクロトロン放射源からの軟 X 線を用いる方法は、従来の紫外線露光の波長制限による解像限界を取り除いただけでなく、通常の X 線源を使った露光に比べても光の平行性が良いこと、連続波長であるために回折の影響を小さくできること、さらに、短波長 X 線の除去が容易なためにより微細なパターン形成に適している。基板の材質、

パターンの材質などの研究のほかに軟X線領域で吸収係数の大きいSi樹脂レジスト開発などが行われ、現在よりも一桁以上高い転写処理速度が期待されている。一方、出来たパターンの検査技術修正技術の開発など今後に待つ所も多いが、シンクロトロン放射源の小型化、低ランニングコスト化の検討などの研究が急速に活発化しつつある。

青木貞雄氏は、X線顕微鏡、とくに生体試料を中心とした軟X線顕微鏡の開発状況について報告した。医療用レンドゲン撮影などに使われるX線は1Å以下で投影法や密着法による分解能は1~100μm程度であるが、軟X線領域では反射回折を利用した結像素子の開発により、X線顕微法が可能になりつつある。結像素子としては、ゾーンプレートあるいは鏡面を使うそれぞれの方法について研究が進んでおり、ゾーンプレートを用いたものでは500Åの分解能が得られている。また、これらの光学素子を利用した走査型X線顕微鏡、あるいはアンジュレータなどの高輝度光源を利用した密着X線顕微法などが開発されつつある。

追記

本研究会のくわしい報告書は別途に印刷した。

「擬一次元導体の物性」

世話人 福山 秀敏, 白川 英樹
石黒 武彦, 鹿児島誠一

表記の研究会が3日間にわたり開かれた。合計46の講演があり、この分野の活況、更には世界の研究の流れの中でも極めて高い位置にある日本の研究成果が改めて認識された。このテーマについての研究会が久し振りであったため、講演者と聞き手の間に新しい発展をめぐって活発な意見の交換があり過酷なスケジュールの割には疲れの少ない（個人差はあります）有益な集まりであった。まとめで中嶋先生が言われたように、来年、擬一次元導体関係の2つの国際会議を相次いで開催するにふさわしい状況が整いつつあるのであろう。具体的には、以下の講演要旨を御覧下さい。（文責 福山）

プ　ロ　グ　ラ　ム

日 時 昭和60年5月9日(木)～5月11日(土)
場 所 東京大学物性研究所旧棟1階講義室

5月9日(木)

13:30～15:25

「ENDOR法で見たポリアセチレン中のソリトンの波動関数」20分

黒田新一（電 総 研）

「ポリアセチレンにおけるソリトンダイナミクス」20分 溝口憲治, 久米 潔（都立大・理）

「パルスE S Rによる擬一次元系の研究——ポリアセチレンを例にして」20分

磯谷順一（図書館情報大）

「ポリアセチレンの荷電ソリトン」20分 田仲二朗（名大・理）

「トランス型ポリアセチレンのパルス光伝導」15分 信宮利昭（東工大）

「ウレタン置換型ポリジアセチレンの電気伝導性」20分 小高忠男（阪大・理）

15:25～15:40 休憩

15:40～17:40

「トランス・ポリアセチレンにおけるソリトンとフォノンの光学的性質」15分

伊藤浩之, 小野嘉之（東大・理）

「シースポリアセチレン型物質のポーラロン, バイポーラロンと格子振動」15分

寺井 章, 小野嘉之（東大・理）

「 ϕ^4 -リンクのブラウン運動と揺動散逸定理」15分 小形正男, 和田 靖（東大・理）

「一次元電子系における分数電荷状態」20分 小野嘉之, 大淵泰司, 寺井 章（東大・理）

「Self-Consistent Solutions for Quarter-Filled Su-Schrieffer-Heeger

Model」 15分

大淵泰司, 小野嘉之(東大・理)

「ポリアセン型半導体の低温相と電子間相互作用の問題」 20分 木村 実, 青野茂行(金沢大・理)

「不整合電荷密度波のソリトン格子とエネルギーギャップ構造」 20分

町田一成(京大・理)

5月10日(金)

9:30 ~ 10:50

「 $K_{0.30} Mo O_3$ の電荷密度波の運動—電気的応答と構造変化」 20分

為ヶ井 強(東大・教養)

「ブルーブロンズの準安定状態」 15分

福田憲司, 三本木 孝(北大・理)

「 $K_{0.30} Mo O_3$ のスイッチング現象」 15分

前田京剛, 古山達雄, 田中昭二(東大・工)

「NbSe₃ の非線形電気伝導」 15分

伊土政幸(北大・理)

「NbSe₃ の低周波雑音」 15分

前田京剛, 内藤方夫, 田中昭二(東大・工)

10:50 ~ 11:05 ————— 休憩 —————

11:05 ~ 12:30

「不整合電荷密度波に関する計算機実験」 20分 松川 宏(北大・理), 高山 一(京大基研)

「鎖間結合した電荷密度波の不純物ピン止めと準安定状態」 20分 阿部修治(電総研)

「 $K_{0.30} Mo O_3$ の 100 K 付近における興味ある振舞い」 15分

堤 喜登美(東大・教養)

「NMRで見たブルーブロンズのCDW」 15分 野村一成, 久米 潔(都立大理), 佐藤正俊(分子研)

「ZrTe₃ の超伝導転移」 15分 中島博臣, 三本木 孝(北大・理)

12:30 ~ 13:30 ————— 昼食 —————

13:30 ~ 15:00

「(TaSe₄)₂Iについて」 30分

— X線・中性子回折 藤下豪司(物性研)

— 光散乱 水貝俊治(阪大理), 佐藤正俊(分子研), 栗原 進(物性研)

— 理論 栗原 進(物性研), 佐藤正俊(分子研), 水貝俊治(阪大理)

「陽電子消滅法, 光電子分光法による (TaSe₄)₂I の電子構造の研究」 15分

大竹和夫, 佐藤英一, 山本良一, 堂山昌男(東大工)

「無機鎖状半導体(NbSe₄)₂I の構造相転移」 15分 和泉 充(筑波大・物理)

「(MSe₄)_nI のラマン散乱と交流電気伝導」 15分 関根智幸(筑波大・物理)

「Nb₃Te₄ のCDW相転移」 15分 木内良成, 関根智幸(筑波大・物理), 吉崎亮造(筑波大・物工)

- 15:00 ~ 15:20 ————— 休憩 —————
- 15:20 ~ 16:35
- 「Mo O の結晶構造」15分 諸井 一利(東北大金研)
- 「擬一次元バナジウムブロンズ系での高密度ポーラロン」15分 長沢 博(筑波大・物理)
- 「一次元白金-ジメチルグリオキシム錯体の圧力誘起パイエルス転移の可能性」15分 城谷 一民(室蘭工大)
- 「分子性導体の結晶格子変調および電荷局在の様式」15分 小林 速男(東邦大・理)
- 「非接触電極を用いて測定した擬一次元導体の伝導度と誘電率」15分 久保田 弘(熊本大・工)

5月11日(土)

- 9:15 ~ 10:50
- 「(BEDT-TTF)₂I₃ の2つの超伝導」25分 村田 恵三(電総研)
- 「 β - (BEDT-TTF)₂I₃ の¹H-NMR」15分 真庭 豊(学習院大・理)
- 「BEDT-TTFポリハライドの超伝導と電子構造」15分 徳本 圓(電総研)
- 「BEDT-TTF錯体」20分 斎藤 軍治(物性研)
- 「BEDT-TTFのポリハライド錯体の結晶成長」20分 安西 弘行(電総研)
- 10:50 ~ 11:10 ————— 休憩 —————
- 11:10 ~ 12:25
- 「(TMTSF)₂PF₆ のSDW相」15分 高橋 利宏(学習院大・理)
- 「磁場誘起SDW」15分 山地 邦彦(電総研)
- 「(TMTSF)₂ClO₄ の強磁場磁気抵抗」5分 長田俊人, 三浦 登, 斎藤軍治(物性研)
- 「テルルを含むドナーと非対称なドナー」15分 菊地 耕一(都立大・理)
- 「一次元電子系の秩序状態に対する非磁性不純物効果」15分 鈴村 順三(東北大・理)
- 「周期ポテンシャル中の一次元電子系」15分 岡本 清美(東工大・理)
- 「まとめ」 中嶋 貞雄
- 「山田コンファレンス及びICSMについて」 鹿児島誠一(東大教養), 白川英樹(筑波大物質工)

ENDOR法で見たポリアセチレン中のソリトンの波動関数

電総研 黒田 新一

トランス型ポリアセチレンのソリトンは共役鎖上で波動関数にある拡りをもつことが予言されている。その具体的観測はソリトンの実在性に対する重要な検証の一つと言える。ポリアセチレンにおける不対電子の π 電子性はすでに証明されているが、この場合 ENDOR 法により不対 π 電

子と水素核スピンとの超微細相互作用を直接測定することにより波動関数が与えられる。

以前のENDOR測定ではソリトンの運動によるスペクトルの尖鋭化のため波動関数の確認には成功していなかった。¹⁾ われわれはトランス異性体をシス異性体中に10%含んだ延伸配向試料を極低温で測定することにより、運動による尖鋭化のないENDORスペクトルの観測に成功し、不对電子の波動関数が理論的予測にきわめて近いことを示した。²⁾ この測定では延伸配向試料による配向方向のスペクトルの選択的観測が有効な役割を果たした。高配向試料の導入によりさらに波動関数決定の精度向上が期待できる。

1. A. J. Heeger & J.R. Schrieffer: Solid State Commun. 48 (1983) 207.
2. S. Kuroda, H. Bando & H. Shirakawa: Solid State Commun. 52 (1984) 893.

ポリアセチレンにおけるソリトンダイナミクス

都立大理 溝口 売治, 久米 潔

トランスポリアセチレン中の中性ソリトンの運動を調べる目的でESRのスピン格子緩和率 T_1^{-1} 及び線巾(T_2^{*-1})を周波数5–24,000MHz, 温度200–340Kで測定した。 T_1^{-1} 及び線巾は共に一次元拡散運動に特有な周波数依存性

$$\alpha \sqrt{\frac{\tau_1}{D_{\parallel}}} \sqrt{\frac{1 + \sqrt{1 + \omega^2 \tau_1^2}}{2(1 + \omega^2 \tau_1^2)}}$$

を示した。これより一次元拡散 D_{\parallel} (室温で約 10^{13} s^{-1})が200–340Kでは、わずかに温度と共に早くなることが見い出された。又、低周波極限では T_1^{-1} と線巾の周波数に依存する部分($= T_1^{-1}$)はextreme narrowing条件で期待される関係 $T_1'^{-1} = 7/10 T_1^{-1}$ を満たすことから、線巾を動的な寄与($T_1'^{-1} + T_2'^{-1}$)と静的な寄与に分けることができた。静的な寄与は一次元拡散運動する中性ソリトンが時々 trapping site で長時間留まると考えることにより理解される。更に延伸配向試料の T_1^{-1} 及び線巾の異方性は合理的に上記の一次元拡散運動と trapping により説明できることを示した。

次に一次元拡散モデルを実際のポリアセチレンの系にあわせて拡張した。すなわち、有限長の一次元鎖での揺動スペクトルの計算を鎖端での完全反射を仮定して行った。結果は、 $\tau_1 \approx \ell^2 / D_{\parallel}$ では、三次元ホッピング(τ_1)による T_1^{-1} のleveling周波数は影響を受けず、多少の enhancementとして鎖端の効果が現れる。 $\tau_1 \gg \ell^2 / D_{\parallel}$ では $\omega \sim D_{\parallel} / \ell^2$ でlevelingが起り更に低周波側では三次元拡散運動で期待されるLorentzian的振舞に移行する。この結果と(CH)_xの分子量分布との比較から、観測された $T_1^{-1}(\omega)$ のlevelingが τ_1 に起因することが示された。

以上で、200K以上の中性ソリトンの振舞は明確になってきたが、200K以下の振舞は、Nechtschein等のNMR T_1 の結果もまだ解釈の点で再検討が必要であり、更に研究の余地があ

る。現在 ESR の周波数依存性の 200 K 以下の測定を進めている所である。

パルス ESR による擬一次元系の研究 — ポリアセチレンを例にして

図書館情報大 磯 谷 順 一

擬一次元系において重要な情報である鎖上の拡散係数と鎖間の hopping rate とは、時間領域の ESR レスポンスである緩和関数 (FID) から直接的に求められるが、現在のパルス装置の、dead time による制限がある。FID に相当するシグナルは CW-ESR のフーリエ変換によって簡単に得られるが、他の species や運動の異なる状態のシグナルが重なっている可能性がある場合には、この解析の適用には注意を要する。パルス ESR 法は T_1 , T_2 (それぞれマイクロ波周波数及び周波数 ~ 0 のスペクトル密度の情報を与える) を直接的に求める利点があり、 T_1 , T_2 の差を利用して運動の異なる状態のシグナルを分離することにも利用できる。ポリアセチレンの室温付近の ESR 線巾は酸素不純物に敏感であるが、酸素不純物のない試料に対応する線巾を求めるのに応用した。

ESR シグナルが不均一な広がりを示す場合には、 T_1 , T_2 の決定にはパルス法が不可欠となる。2 パルス法による Instantaneous Diffusion から求まる電子スピノの双極子一双極子相互作用の大きさとあわせて、トランスポリアセチレン中のソリトンが低温で運動が制限される機構の解明に有用である。

ポリアセチレンの荷電ソリトン

名大理・教養* 田仲二朗, 神谷幸司, 田中政志*

シスポリアセチレンを電子受容体または供与体でドープすると、骨格および電子構造が変化し、荷電ソリトンが注入され、トランス形になる。薄膜の吸収スペクトルは、この変化に伴って、バンド間遷移が減少し、mid gap バンドが段々と増加し、遂には飽和する。これは一つの荷電ソリトンがある大きさのドメインを持つことを意味する。

次に厚膜ポリアセチレンにヨウ素をドープし、反射スペクトルを全域について測定し、各種遷移を帰属した。主な遷移は、(1)エネルギー 0 の sliding mode, (2) $\sim 500 \text{ cm}^{-1}$ のピン止めモード、(3) 1380 cm^{-1} の振動モード、(4) $\sim 5000 \text{ cm}^{-1}$ の mid gap band (5) $\sim 15000 \text{ cm}^{-1}$ のバンド間遷移または I_5^- イオンの遷移である。(1)と(2)が同一鎖上で生じるかどうかは原理的疑問はあるが、一方ソリトン対ドーパント、イオンの位置関係は必ずしも一本の鎖の上では均質とはいえないから、共存するかもしれない。これらの遷移強度とドーピング量との関係から、(2), (3), (4)は荷電ソリトンに伴うものであることが示されたが、(1)のバンドは、荷電量 $n \sim 0.057$ より急激に強度を増し、これに対し(4)は減る。このドーピング量 ($\text{CHI}_y \sim 0.23$) で、一種の相転移 (荷電ソリ

トン相→特殊な金属相) がおこることが示された。これは最近 Heeger らが、Na をドープしたフィルムの ESR で、パウリ常磁性が、この濃度で急に出現するという報告と符合するものである。

トランク型ポリアセチレンのパルス光伝導

東工大工 信宮利昭, 佐々木康三, 竹添秀男, 福田敦夫

我々の研究室では連続光による trans- $(CH)_x$ の光伝導を測定してきたが、暗伝導に比べて光伝導が小さいことや応答速度が遅いことから(図 1)連続光では真の光伝導を見ていいく可能性がある。このことを確かめるためにパルス色素レーザー(590 nm, 10 ns)を用いて光伝導を測定した。基底状態を光励起すると生成した e-h ペアは $S^- - \bar{S}^+$ ペアに緩和すると考えられている。このとき外部電場が印加されれば電流が流れる。現在測定系に問題があるため、信頼性のあるデーターは得られていないが、パルス照射時にソリトン生成によると思われる電流を検出した(図 2)。パルス照射以後の電流はホッピングによるものか、熱によるものか、現在の所不明であるが、 $\log t$ と、 $\log I$ でプロットすると分散型伝導に見られるように直線に乗っている(図 3)。今後バンドギャップ以下のパルス光を照射した時の光伝導を測定し、光伝導の機構を調べる予定である。

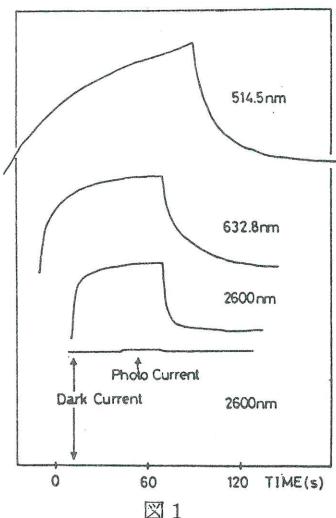


図 1

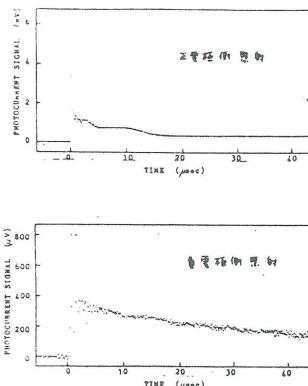


図 2

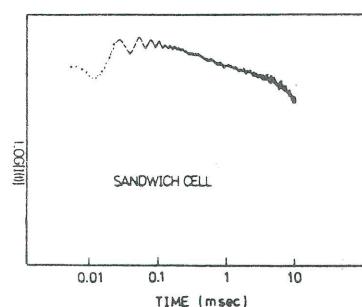


図 3

ウレタン置換型ポリデアセチレンの電気伝導性

大阪大学理学部 小高忠男

ウレタン置換型ポリデアセチレン誘導体 [poly (x ACMU); $\text{R}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}\text{R}_n-\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}\text{R}_n$: ただし $\text{R}=(\text{CH}_2)_x-\text{OCOCONH}-\text{CH}_2-\text{COO}(\text{CH}_2)_y-\text{CH}_3$] は溶媒可溶であり、また、固相重合によってポリマー単結晶が得られるので、これを擬一次元導体のモデル物質として選び、その電気伝導性に対する有限の鎖長、高次構造とその乱れ、一次元鎖の配向の影響などを調べた。

poly (x ACMU) CHCl_3 キャスト膜はよう素でデアセチレン残基当たり 1.5 mole 程度ドープすることが出来、伝導度 σ は 10^{-11} から $10^{-5} \text{ S cm}^{-1}$ に増加する。一方、見掛けの活性化エネルギー $-E_a$ はドープ量には殆ど依存しないが、温度に依存し、ある温度 T_c ($\sim 200 \text{ K}$) 以上では 0.6 ~ 1.5 eV 程度、また、それ以下の温度では約 0.01 ~ 0.03 eV 程度の値を示した。

分子量の異なる poly (3 BCMU) ($x = y = 3$) 試料について、ドープ量一定で比較すると σ は数平均分子量 M_n に正比例して増加し、活性化エネルギー E_a はその逆数に比例し、 $M_n=39,000$ で 1.05, $M_n \rightarrow \infty$ の極限で 0.44 eV 程度になった。

poly (4 BCMU) ($x = 4, y = 3$) 単結晶はキャスト膜に比べて 100 分の 1 程度しかドープ出来ず、伝導度 σ も $10^{-7} \text{ S cm}^{-1}$ 程度にしか達しないが、異方性を示し、分子鎖に沿った方向と分子鎖の積重なりの方向の伝導度の比 $\sigma_{//}/\sigma_{\perp}$ は約 6 であった。しかし E_a には顕著な差は認められなかった。

poly (3 BCMU) のキャスト膜を融点近傍で延伸すると、いわゆる配向函数 f にして 0.40 ~ 0.45 程度の配向膜が得られるが、ドープ量一定で比較すると、 $\sigma_{//}$ は f とともに増加するのに対して、 σ_{\perp} はほぼ一定に保たれ、異方性は約 3 ~ 4 程度になった。一方、配向度一定の膜では異方性はドープ量とともに 3 から 1.5 程度に減少することが分った。しかし、この場合も E_a には顕著な差は認められなかった。

トランス・ポリアセチレンにおけるソリトンとフォノンの光学的性質

東大・理 伊藤 浩之、小野 嘉之

我々は、以前にトランスポリアセチレン系をモデル化した Su-schrieffer-Heeger model の連続体近似である Takayama-Lin-Liu-Maki model を用いて Static solution (perfectly dimerized state, soliton state, etc.) まわりの時間依存性を持つ微少格子振動モード（線形モード）を断熱近似、Self-consistent に取り扱い、soliton の存在下に次のような 3 つの局在したモードが存在することを示した (Ref. 1)。

1. Goldstone mode $\omega_1 = 0$

2. Amplitude Oscillation mode $\omega_2 \simeq 0.85 \omega_0$
3. 3rd localized mode $\omega_3 \simeq 0.98 \omega_0$

ここで $\omega_1 \sim \omega_3$ は各モードの振動数で、 ω_0 はくりこまれた光学フォノン振動数である。また $\omega \gg \omega_0$ には、 非局在フォノンが存在する。これらの線形モードの構造は、 ソリトンの荷電によらない。

我々は、 model に電子・外場のカップリングを加えて、 オーダー・パラメタのレスポンスから Dynamical Conductivity を計算した(Ref. 2)。 Conductivity には、 電子遷移によるものと 線形モードを伴ったものの 2 つの寄与があり、 前者はソリトンの電荷によらない。一方、 後者は 中性ソリトンでは消え、 正、 負ソリトンで同じものとなる。また、 各モードのパリティに対しては ソリトン中心に対して奇関数のモードは赤外不活性であり、 偶関数モードのみ赤外活性である ことがわかった(局在モードでは Goldstone mode と 3rd localized mode が活性)。光吸収の 各寄与の強度比の計算の結果と実験データとの比較も試みた。ピークの位置については説明がつ くが、 強度については、 問題を残している。また我々は、 線形モードを量子化して Raman 散乱 の解析も行っている。完全に dimerize した状態での線形モードによる 1 次、 2 次の Raman 散乱 強度の入射光周波数依存性が計算できる。また、 ソリトンの場合については、 1 次の Raman 散乱 では、 ソリトンの中心に対して奇関数モードが活性であることがわかり、 局在モードでは、 Amplitude Oscillation mode が活性となる。

- Ref. 1. H. Ito, A. Terai, Y. Ono and Y. Wada: J. phys. Soc. Jpn. 53 (1984) 3520.
2. H. Ito and Y. Ono: ibid 54 (1985) 1194.

シス・ポリアセチレン型物質のポーラロン、バイポーラロンと格子振動

東大・理 寺井 章、小野 嘉之

trans- $(CH)_x$ は基底状態が二重縮退しているため、 二相をつなぐ domain wall としてのソリトンが存在する。一方、 cis- $(CH)_x$ 、 Poly-para-phenylene、 Poly-pyrrole、 Poly-thiophene 等の物質では、 縮退がわずかにとけているため、 ソリトンは存在できず、 ポーラロン(P) 及びバイポーラロン(BP) が存在する。その中でも荷電 BP は spinless charge carrier として注目を集めている。そこで我々は、 Brazovskii と Kirova によって提唱されたモデルを用いて、 P や BP の存在下の格子振動モードを求め、 さらに、 フォノンによる光吸収強度の計算を行ったので、 その結果を報告する。

我々が用いた方法は、 ソリトンの場合（当研究会の伊藤・小野による報告を参照）とほぼ同じ であり、 ここでは省略する。数値計算の結果、 BP の場合、 confinement parameter γ の関数 として 5 ~ 6 ケの局在モードと多数の非局在モード ($\omega \geq \omega_0$, ω_0 は、 くりこまれた光学フォノン振動数) が得られた。振動数が零付近のモードは、 translational mode (Goldstone mode)

である。2番目の局在モードは、BPが2ヶのソリトンの束縛状態と見なしたときの2ソリトン間距離の伸縮モードに相当する。またPの場合にも γ の関数として5~6ヶの局在モードが得られた。

フォノンによる光吸収については、PやBPの中心について偶関数のフォノンは赤外不活性であることが示された。さらに、各モードによる吸収強度化については、Goldstone modeによる吸収が他のモードに比べて非常に強いことがわかった。

最後に実験との比較では、吸収強度の点で問題が残る。BKモデルで考慮されていない自由度をいかにして取り入れるかが、今後の問題である。

ϕ^4 -キンクのブラウン運動と揺動散逸定理

東大理 小形 正男, 和田 靖

熱平衡系におけるキンクのダイナミクスを調べる。キンク-フォノン相互作用によるキンクのブラウン運動は和田-Schriefferによって調べられたが、最近このブラウン運動に2つのメカニズムが共存していることがわかった。1つは、和田-Schriefferによるランダムウォーク的なブラウン運動である。熱励起されたフォノンがキンクにランダムに衝突し、その度にキンクの中心がシフトすることによってブラウン運動が起こる(図1)。もう一つのメカニズムは通常のブラウン運動である。この場合、粘性はキンク-フォノン衝突の際の運動量交換に起因する。

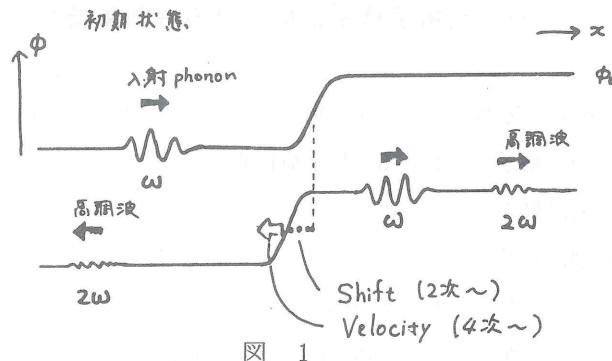


図 1

両者の関係は、キンクに対する揺動散逸定理を調べることによって明らかになった。まずキンクの中心座標 $X(t)$ を定義し、運動方程式を求める。次に $X(t)$ に関する第1種揺動散逸定理

$$D(\omega) = \int_0^\infty \langle \dot{X}(t) \dot{X}(0) \rangle e^{-i\omega t} dt = \langle \dot{X}(0) \dot{X}(0) \rangle / i\omega + \Gamma(\omega), \quad (1)$$

を森の公式に従って計算する。低温(T)、低振動数(ω)での結果を図2に示す。 $\omega \rightarrow 0$ 、 T 有限の長時間極限では、 $D(\omega=0) = k_B T/M\Gamma$ (M はキンク質量)となり、粘性 Γ によるブラウン運動が現れる。キンク-フォノン間の運動量交換がフォノン振幅の4乗に比例するので、

$\Gamma \equiv \Gamma(\omega=0)$ は T^2 に比例する。従って拡散係数 D は T^{-1} に比例する。一方有限の ω で $T \sim 0$ で

は、 $\Gamma(\omega) = \Gamma + i\omega A + \omega^2 \mathcal{Q}M/k_B T$ となっている。これを(1)式に代入して低温展開すると、 $\mathcal{Q}(\omega)$ の実部の最低次が T^2 に比例した \mathcal{Q} となる。この D はランダムウォーク的なブラウン運動の拡散係数であることがわかった。

$$t = \frac{k_B T}{M d^2 \omega_0^2}, \quad \mathcal{Q} = \frac{\omega}{\omega_0} \quad (t \ll 1, \mathcal{Q} \ll 1)$$

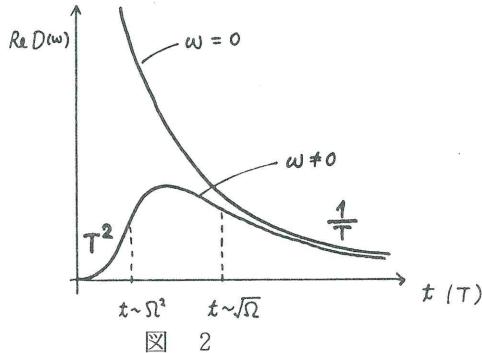


図 2

最後にポリアセチレンの場合を議論する。最近の研究でポリアセチレンのキンクーフォノン衝突に際し、キンクがシフトすることがわかつてきた。それ故 ϕ^4 系の場合と同様のブラウン運動を考えることができると思われる。NMR の T_1 の測定等から評価されるキンクの拡散係数が、上記の理論で説明することができるかどうか、今後の興味が持たれる。

一次元電子格子系における分数電荷状態

東大・理 小野嘉之, 大淵泰司, 寺井 章

Su-Schrieffer による数値計算以来、物性の分野だけでなく、素粒子物理の方でも注目を集めている、一次元電子格子系における分数電荷状態について簡単に review し、最近我々が行った、より詳しい数値計算の結果を報告する。review の部分については、ここでは省略する。

我々が行った数値計算は、Su-Schrieffer-Heeger 模型で、格子点の数が $N \approx 240$ 、電子数 $N_{el} \approx 160$ で約 $1/3$ つまつた電子バンドの場合であり、 N, N_{el} を少しずつ変化させて、余分な電子の数 $\delta_n = N_{el} - 2N/3$ がいろいろな値を取るときの最低エネルギー状態を求めるものである。一般に非整数となる δ_n 個の電子が空間のある領域に局在し、それとともに格子の歪みの非一様な部分が同じ場所に局在している状態がエネルギーの低い状態になる。Su-Schrieffer の仕事と異なる点は、サイズを 3 倍程大きくしたこと、周期的境界条件 (SS は自由端) を用いたこと、 $\delta_n = 0$ の場合との比較によって、局在励起 (ソリトン、ポーラロン等) の生成エネルギーの計算方法を提唱したこと、より広範囲の δ_n について計算したことである。 δ_n の大きさだけではなく、符号によっても生成エネルギーに差が現れることが指摘された。得られた格子変位のデータから、複素秩序変数の空間変化が導かれ、複素平面での軌跡が求められた。これは、将来解析的

な理論を考える場合に非常に役立つと思われる。

$\delta n = \pm \frac{2}{3}$, $\delta n = \pm \frac{1}{3}$ の場合には、異なる結合定数を用いた計算を、より大きな系 ($N \approx 480$, $N_{el} \approx 320$) で行い、生成エネルギー、局在状態の幅、電子の局在準位等の結合定数依存性を議論した。

[参考文献]

Y. Ono, Y. Ohfuti and A. Terai: J. Phys. Soc. Jpn. 54 (1985) # 7.

Self-Consistent Solutions for Quarter-Filled Su-Schrieffer-Heeger Model

東大・理 大淵 泰司, 小野 嘉之

TaS₃ 等の物質への応用が考えられる、整合度 $M = 4$ 、又はその近傍にある電子一格子系における“ソリトン”的持つ性質について報告する。

Su-Schrieffer-Heeger 模型を用いて、格子点の数 $N \approx 480$ 、電子数 $N_{el} \approx 120$ を与えた時の最低エネルギー状態を周期的境界条件の下で、断熱近似の範囲内で数値的に求めた。解は、excess number $\delta n \equiv N_e - \frac{1}{2}N$ ($\equiv 0, \pm \frac{1}{2}, \pm 1, \dots$)、及びスピン $s = 0, \frac{1}{2}$ によって区別される。基本的なソリトンは $(\delta n, s) = (\pm \frac{1}{2}, 0)$ を持つ phase kink, $(\delta n, s) = (\pm \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ を持つ amplitude kink, $(\delta n, s) = (0, \frac{1}{2})$ を持つ中性の kink の 3 種類である。但し、Fermi 面が、バンド中央にない為に、 δn の符号による差が生じている。スピンを持ったソリトンは、スピン密度を強く局在化させ、その為大きな生成エネルギーを持つ。一方スピンのないソリトンは midgap state をバンド端近傍に持ち、小さな生成エネルギーを持つ。他の状態は、 $\delta n, s$ を満たすような、十分離れたいくつかの phase kink と高々 1 個の amplitude kink の和として現れる。 $(\delta n, s) = (\pm 1, \frac{1}{2})$ に対しては、空間反転対称性を持った polaron 解が得られたが、その生成エネルギーを較べる限り、せいぜい準安定解であり、 $(\pm \frac{1}{2}, 0) = (\pm \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ の 2 つの kink にわかれた状態が安定と結論される。 $M = 2$ の時のような 2 つの kink の束縛状態が生じないのは、それぞれの kink の性質が、異なり過ぎる為と考えられる。

以上の結果から、 $M = 4$ のソリトンは、 $M = 3$ の場合と定性的に変わらないと結論される。

ポリアセン型半導体の低温相と電子間相互作用の問題

金大・理 木村 実, 青野 茂行

ポリアセン及びそれに同種の高分子は準一次元半導体で、そのギャップは小さいか、或いは殆ど 0 と考えられる。電子一格子相互作用によるパイエルス転移は弱く結合交替は起こりにくい。電子間相互作用による相関は、3 種の秩序相 — CDW, SDW, 超伝導 — に導く。価電子帯と

伝導帯とが関与する相互作用は、4個のパラメーターであらわされるが、これらの裸のパラメーターは著しい多体効果によって、くり込みをうける。このくり込みは、スケーリング則（くり込み群）に支配される。結果として、バンド間 transfer の相互作用パラメーターの正、負が低温相を決めるのに支配的な役割をもち、これが正のとき S DW、負のときは超伝導が強く C DW は弱い。転移点は相互作用パラメーターの2乗に比例し、BCS理論とは顕著に異なる。

〔参考文献〕

S. Kivelson and O. L. Chapman, Phys. Rev. B 28 (1983) 7236; M. Kimura and A. Mishima, Prog. Theor. Phys. 73 (1985) 822.

不整合電荷密度波のソリトン格子とエネルギー・ギャップ構造

京大・理 町田 一成, 中野 正浩

準一次元導体でよく見られる不整合電荷密度波 (ICDW) 状態との関連で、パイエルス状態でのエネルギー・ギャップの構造を理論的に考察した。

バンドに電子がほとんど半分、 $\frac{1}{3}$, $\frac{1}{4}$ だけ充ちている場合に、一次元 Fröhlich-Peierls モデルを分子場近似の範囲内で数値的に対角化した。不整合相に特徴的なオーダー・パラメータの高調波成分を正確にとり込んだ。得られた結果は次のとおりである。(1) 十分に $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{3}$, $\frac{1}{4}$ に近い ICDW 相ではシンク (ソリトン) が周期的に並んだ格子変形が安定になる。(2) そこでは、通常のパイエルスギャップの中にギャップ内状態が常に出現する。(3) 整合相に近づくに従ってその状態のバンド巾は狭くなり、波動関数は指数関数的に局在する。

以上の結論は、ロックイン転移直上の ICDW 系で極く一般的に観測されることが期待される。TaS₃ 等でエネルギー・ギャップを調べる実験を望む。

K_{0.30}MoO₃ の電荷密度波の運動 —電気的応答と構造変化—

東大教養 為ヶ井 強

典型的な一次元導体である K_{0.30}MoO₃ (モリブデンブルーブロンズ) は、180 K でパイエルス転移を起こし、それ以下の温度で電荷密度波 (CDW) の並進による非線形伝導が観測される。線形抵抗に見られる温度や電場によるヒステリシスは、CDW の多くの準安定状態の存在を示唆している。また、交替パルスに対する応答は、誘電体的分極の存在を示しており、パルスが切れた後にも、電気的緩和がわずかに見られる。この分極を持つ準安定状態が CDW の構造変化と密接な関係を持つことが、電場下の X 線回折により明らかになった。

CDW の構造は、電場によりヒステリシスを持って変化する。すなわち、CDW は一次元軸方向とは垂直な結合の一番弱い方向に電場の向きに応じて、逆向きに変形する。この変形はサンプ

ルに依存し、また、サンプルの一次元軸方向の場所により、大きさおよび方向が異なる。この変形は、サンプル内の電場の不均一が原因であると考えられる。実際、積極的に電場勾配をつけたサンプルにおいては、構造変化が必ず起こる。変形したCDWの構造は、不純物との相互作用により、電場が除かれた後にも記憶される。この変形に要する時間を、時分割X線回折により調べると、数ミリ秒程度であり、パルス応答で見られた誘電体的分極が逆転するのに要する時間に対応する。したがって、この変形したCDWの構造が、分極を持つ準安定状態の一つであると言える。

ブルーブロンズの準安定状態

北大・理 福田 憲司, 三本木 孝

ブルーブロンズに限らず、電荷密度波系のオーミック伝導度は温度、電場履歴に依存する。この現象は極めて多彩な様相を示すために、統一的理解には達していない。最近USCのグループは現象論的な描像を、電場履歴に関して提案した。要約すると、(1) threshold 電場 E_T をこえると、ある状態に入る。電場の符号を変えない限り、この状態は安定で、伝導度は電場に対して可逆的に依存する。(2)電場の符号を変えると、その向きに対する安定状態に向って緩和するが、 E_T 以下の電場の下では緩和は中断する。(3)緩和の速さを表す特性時間は温度 T 、電場 E に対して

$$\tau \propto \exp(1/TE)$$

の依存性を示す。

われわれは、77~91Kで微分抵抗を測定し

- (1) 安定状態に入るためには同一符号の電場を増減させる“訓練”が必要で、しかも安定状態でも E_T に近い領域ではある種の緩和がみられる。
- (2) 電場の符号を変えると、伝導度の緩和は最終的には安定状態から遠ざかる方向に生じ、 E_T に近い領域では逆方向の緩和が先行する。最終的緩和の特性時間は非常に長い($10^2 \sim 10^3$ sec)。ことを見出した。これらの定性的特徴が試料の冷却条件に依存するか否かは未だ不明である。

$K_{0.3}MoO_3$ のスイッチング現象

東大・工 前田 京剛, 古山 達雄, 田中 昭二

ブルーブロンズ $K_{0.3}MoO_3$ で観測されるCDWのデピンニングによる非線型伝導のしきい値電場 E_T の温度依存性は、他のCDW伝導体のそれと比較すると、異常であり、約60Kまでの測定によると、温度の減少と共に単調に減少してゆく。我々は、さらに低温まで、 E_T の温度依存性を追ったところ、 E_T は50K以上で、増加する傾向がある事を確認した。さらに、約30K以下では、数十~百V/cmといった、巨視的CDWのデピンニングとしては異常に大きなしきい値電場を持

つ、スイッチング現象を観測した。このスイッチングのしきい値電場は温度によらず、ほぼ一定である。

スイッチング現象について更なる知見を得るため、パルスに対する時間応答の観測を試みた結果以下の事がわかった。(1)スイッチングが起こるのに有限の時間遅れが存在する。この遅れ時間には分布がある。(2)時間遅れは、最も長くて $100\mu\text{sec}$ 程度であるが、高温・高電場程短くなつてゆく。(3)同じ条件(温度・電場)でも、スイッチングの起り方には何種類があり、ランダム性がある。時には、MHz程度の振動も起こる。

以上の現象は、NbSe₃、斜方晶TaS₃で観測されているスイッチング現象と酷似しており、おそらく同じ原因によるものと思われる。しかし、ブルーブロンズにおける大きなしきい値電場の原因については、現時点では、よくわかっておらず、検討中である。

NbSe₃ の非線形電気伝導

北大・理 伊土政幸

NbSe₃ の電荷密度波(CDW)状態における非線形伝導の特徴の1つに狭帯域ノイズの出現がある。このノイズはCDWの運動の様子を反映するものとして注目を集めてきた。今回は狭帯域ノイズが1種類という試料についてパルス応答を調べた。このような試料では、系の電気伝導は非線形領域で非常に大きな周期的変動を示すようになる。変動の周期はパルス幅に依存し、パルス幅を一定の値変化させると変動の数が1つだけ増減する。また、パルス電場印加中のCDWの変位は伝導度に現れる変動の数と共に離散的に増えてゆくことが分かった。これらのこととは、NbSe₃ ではパルス電場の印加後、CDWは位相のすべりをくり返しながら運動を始めること、この位相のすべりに関し結晶全体が1つのドメインであることを意味するものと考えられる。

NbSe₃ の低周波雑音

東大・工 前田京剛、内藤方夫、田中昭二

NbSe₃ の非線型伝導状態で観測される低周波(数Hz～数百KHz)雑音は以下の特徴を持っている。すなわち、雑音は、非線型伝導のしきい値電場直上で極大になり、各電場で $1/f$ スペクトルを持つ。この雑音は、CDWの運動がどれ程の領域にわたってコヒーレントかと言う事に関する情報を含んでおり、現象論的モデルによる解析結果は、試料内に $10^2 \sim 10^3$ 個程度の自由度しかない事を示している。¹⁾ このコヒーレント領域は何によって決められているかについて知見を得る為に、TaやZrを不純物としてドープした試料を作製し、同様の雑音の測定を行った。それらの結果は、以下の様にまとめられる。(1)雑音の電流依存性は、純粋な試料におけるそれと本質的に変わらない。(2)スペクトルにはいくつかの変化が見られた。第一に、“汚ない”試料程、ス

ペクトルの見かけの傾きは小さくなり、ほぼ 0.5 となる。第二に、『汚ない』試料程、高温で、低周波側に、周波数に依存しない部分が広がってくる。スペクトルに関するこれらの変化は、雑音が $1/f$ 雜音と、ローレンツスペクトルを与える生成一再結合雑音の二成分から成り立つと仮定し、高温程、或いは『汚ない』試料程、生成一再結合成分が相対的に増加すると考えると、系統的に整理ができる。この様な相関の種の変化が、具体的にどの様な運動に対応するかについては今のところ明らかでない。(3)コヒーレントな領域の大きさの評価に関しては、前項の事柄を考慮して、定量的な解析が改めて進行中である。

〔参考文献〕

- 1) A. Maeda, M. Naito and S. Tanaka ; J. Phy. Soc. Jpn. 54 № 5 (1984) に掲載予定。

不整合電荷密度波に対する計算機実験

北大理, 京大基研* 松川 宏, 高山 一*

NbSe_3 , TaS_3 , $\text{K}_{0.3}\text{MoO}_3$ 等の電荷密度波 (CDW) 相において、あるしきい電場 E_T 以上で急激に電気伝導度が増大する特異な非線型電気伝導現象が観測されている。これは E_T 以下で不純物等によってピン止めされた CDW が E_T 以上の電場ですべり運動を始める為と考えられ、同時に狭帯域及び広帯域雑音、記憶効果、履歴現象等も現れる。我々はこれらの現象を説明するため、古典的な一次元及び二次元の福山モデルに基づき計算機実験を行った。その結果、CDW の運動が過制動な領域では、系の次元性のみによって決定され不純物ポテンシャルの強さによらない電場に依存する電気伝導度 $\tilde{\sigma}(\varepsilon)$ (ε は E_T でスケールした電場, $\tilde{\sigma}(\varepsilon) = \sigma(\varepsilon)/\sigma(\varepsilon \rightarrow \infty)$) を得た。特に二次元系では、 $\tilde{\sigma} = 1 - 1/\varepsilon$ という簡単な表式によって表される。これは CDW が常に、 E_T において不純物から受ける力と同じ大きさの力を受けながら動く事を示している。又、高電場での $\tilde{\sigma}$ の振舞は一次元、二次元とも、それぞれ不純物ポテンシャルによる摂動展開によって得られる結果と一致する。他の物理量も含めたより詳しい解析は現在続行中である。

鎖間結合した電荷密度波の不純物ピン止めと準安定状態

電総研 阿部 修治

NbSe_3 をはじめとする一連の擬一次元物質において電荷密度波 (CDW) の運動によるとみられる非線形伝導等が観測されているが、通常、実験の解釈は CDW を堅固なものと考えその運動を一つの変数で表す現象論にたよることが多い。その原因は従来の微視的計算がほとんどの場合純粋の一次元系に対してのものであって理想化されすぎていたことによると思われる。今回われわれは鎖間結合による CDW の三次元的秩序を考慮に入れたモデルを理論的に研究した。計算さ

された断熱ポテンシャルは準安定状態を含んでおり、それらがCDWのピン止めおよびピン止めの外れに本質的に関わっていることが示され、また最近実験的に見出されている記憶効果をも定性的に説明するものであると考えられる。ピン止めされた状態に対して計算された応答関数は減衰調和振動子型であり、周波数に依存する伝導度の実験事実を説明する。

K_{0.30}MoO₃ の 100 K 付近における興味ある振舞い

東大・教養 堤 喜登美

K_{0.30}MoO₃ の三つの物理量の温度変化に着目した。特に、100 K 付近における挙動に注目した。今回着目した物理量は以下の三つである。

- (1) 電荷密度波をデピンニングするのに要する電場、すなわち、しきい電場 E_T。
- (2) しきい電場 E_T よりも十分に小さい電場のもとで測定された抵抗、すなわち、オーミック抵抗。
- (3) パイエルス転移に伴う衛星反射

しきい電場 E_T の温度依存性において、100 K が注目を浴びた理由は、Dumas 等によって E_T が 100 K 付近で最大値を示すというデータが報告されたことである。しかし、我々がこのデータに疑問を抱き、微分抵抗及びパルス法を用いて、E_T の温度依存性を測定してみると、E_T は 100 K 付近で最大値を示さず、温度の減少と共に単調に減少するという結論が得られ、E_T の温度依存性における 100 K 付近のミステリーは解決された。

K_{0.30}MoO₃ のオーミック抵抗は、40 K から 170 K という広範囲の温度領域において温度履歴を示す。また、電場履歴も観測される。精密な測定を行っても、温度履歴は 100 K 付近で何ら異常を示さないが、電場履歴は試料を昇温させながら測定すると、100 K 付近で消失してしまう。このことは、100 K 付近が K_{0.30}MoO₃ のターニングポイントのひとであることを示している。

100 K 付近が、K_{0.30}MoO₃ のターニングポイントであるということを裏づけるデータが、最近の Fleming 等の X 線回折の実験においても得られている。彼らの報告によると、試料にしきい電場 E_T の 3 倍の電場をかけて冷却し、電場を除去したのち、衛星反射の半値巾を測定すると半値巾が 100 K 以下で急激に増加するということである。

NMR で見たブルーブロンズの CDW

都立大・理 野村 一成、久米 潔
分子研 佐藤 正俊

CDW 系での NMR 測定は、CDW にともなう結晶中の電場勾配の変調を、電気 4 重極相互作用により、直接観測することが可能であるため、CDW の静的構造及び動的振子舞いの両面を

研究する上で非常に有効な方法である。この意味で Rb ブループロンズは最も適した系の 1つである。

Rb_{0.30}MoO₃ 単結晶で、Rb NMR 中央線 ($-1/2 \rightarrow 1/2$) の温度変化を測定した。高温域で比較的幅の狭い単一の NMR スペクトルは、T_c (~ 180 K) 以下の温度で幅が広がり、両端に非対称な山を持つ特徴的な構造を示す。この NMR 線は、Incommensurate な CDW 存在下での二次の電気 4 重極相互作用の空間的変調を考えることにより理解される。またスペクトルの両端の山の間隔は CDW の振幅に相当するが、この温度変化は、パイエルス転移の平均場理論 (BCS 理論) で良く説明される。

一方、100 K 以下の温度域では、CDW は Commensurate 相へ転移するという報告があるが、我々の試料でも、中性子回折により CDW の波数ベクトルとして、Commensurate に非常に近い値 ($\delta_b \sim 0.75 b^*$) が得られた。しかし、NMR スペクトルは、100 K 以下の領域でも、Incommensurate CDW を指示しており、100 K 近傍で、スペクトルの変化も見られないことも合わせて Incommensurate - Commensurate 転移が無いことが結論される。

また CDW の運動を調べるため、試料に電流を流した状態での NMR 測定 (77 K) を行った。予備的な結果では、電流が小さいとき ($\sim 2 A/cm^2$) には、電流 0 の場合と同様の NMR スペクトルを示し、CDW 状態に変化が無いことを示している。一方、電流が大きいとき ($\sim 25 A/cm^2$) には、NMR スペクトルの特徴的構造が消失し、CDW がスライディングを起こしている可能性を示唆している。

ZrTe₃ の超伝導転移

北大・理 中島 博臣、三本木 孝

ZrTe₃ は、単位胞内に 2 つの三角柱を持ち、その意味では、トリカルコゲナイトの中で最も簡単な構造を示す。しかし、単位胞内の三角柱の配列は、ZrSe₃ とは異なっている。(B型)。また室温から ($1/6, 1/2, 0$) の超格子反射も観測されるなど、みかけよりは複雑である。室温における電気伝導度¹⁾は $10^{-4} \Omega cm$ の程度で、伝導度の比 σ_b / σ_a はほとんど 1 に等しい。63 K で伝導度、ホール係数、弾性率²⁾に異常が現れ、電子線回折³⁾によると、($1/4, 0, 1/3$) の超格子反射が 63 K 以下で観測される。より低温まで伝導度は温度の低下と共に増加する。約 2 K で超伝導になりマイスナー反磁性が観測される。

Montgomery 法で抵抗転移を測定すると、(試料により) 転移領域で抵抗の増加が現れ、その割合は測定電流の減少とともに増加する。一つの単結晶から細長い試料を切り出し、通常の四端子法で抵抗率の温度変化を測定し、(1) ρ_b は残留抵抗値から狭い温度帯で 0 になるのに対し、(2) ρ_a は高温から減少していることがわかった。超伝導ゆらぎ、第 2 相の存在、の両面から解析し

ているが結論はまだ得られていない。

[参考文献]

- 1) Takahashi et al. J. Physique C 44, 1733 (1983).
- 2) Takahashi et al. SSC 49, 1031 (1984).
- 3) Eaglesham et al. J. Phys. C 17, L 697 (1984).

(TaSe₄)₂Iについて——X線・中性子回折

物性研・分子研*・BNL** 藤下 豪司, 佐藤 正俊*
星埜 祐男, 佐藤 昭一, S.M.Shapiro**

擬一次元導体 (TaSe₄)₂I は $T_c \approx 260$ K で相転移し, 低温相で非線形伝導を示す。我々は, (NbSe₄)₂I が $T_c \approx 210$ K で同様の相転移を示すことを見出した。

我々は X 線回折により C DW 存在の証拠となる超格子反射を見出した。超格子反射は (TaSe₄)₂I では Bragg 反射から ($\pm 0.05, \pm 0.05, \pm 0.085$) 離れた所に, (NbSe₄)₂I では ($\pm 0.065, \pm 0.065, \pm 0.159$) 離れた所に現れる。 $(h00), (hh0), (001)$ 基本反射のまわりの超格子反射の強度分布を測定した結果, 化学式 $Ta^{4+} Ta^{5+} 4 (Se_2)^{2-} I^-$ からは $2k_F = C^*$ が予想されるが, 実際に凍結しているフォノンは C 面内に分極した $\vec{q} = (0.05, 0.05, 0.085)$ の TA モードであることを明らかにした。また ℓ が整数の近傍に余分な散漫散乱が観測された。

動的性質を知るため, (TaSe₄)₂I の中性子非弾性散乱実験を行った。C 面内に分極した $\vec{q} = (0.05, 0.05, 0.085)$ 方向の TA モードの分散関係が, Γ 点近傍では直線から下にずれるスパーン状の異常を示すことが見出された。 $\vec{q} = (0.05, 0.05, 0.085)$ におけるこのモードは T_c よりはるか上の温度では under damp だが, T_c 近傍では over damp になり, T_c 以下で再び under damp になる。この結果とラマン散乱の結果から, Γ 点近傍の TO フォノンに現れる Kohn 异常モードのソフト化が, TO-TA 相互作用により TA モードの凝縮を引き起こすと考えられる。一方 C 軸方向に分極し [110] 方向に進む TA モードが異常に低い (ゾーン境界で 0.7 meV) ことが見出されたが, このモードが先に述べた余分な散漫散乱の原因であると考えられる。なお, 中性子散乱実験は日米科学技術協力事業協定に基き, BNL の HFBR を用いて行われた。

(TaSe₄)₂Iについて——光散乱

阪大・理 水貝俊治
分子研 佐藤正俊
物性研 栗原進

電荷密度波相転移を起こす一次元伝導体 (MSe₄)₂I (M=Ta, Nb) の格子振動をラマン散乱に

より測定した。この実験から 3 つの全対称的なモードが相転移に関係した異常を示すことがわかった。このことからこの物質の相転移に関して以下のモデルを提案する。この物質は正常相においても MSe_4 の回転による 2 次的な周期性のため M-M 間距離の 4 倍の周期を持つ。このため、Brillouin Zone が $\frac{1}{4}$ に折り返され、Kohn 異常の TO モードが元来同じブランチ上にあった 1 つの TA モード及び 2 つの TO モードと相互作用する。その強い TO-TA 相互作用の結果 TA モードが先に凍結して相転移を引き起こす。ラマン散乱で観測したモードは Kohn 異常 TO モードからくる振幅モード及びそれと相互作用している 2 つの TO モードであり、半値幅の温度変化の理論との良い一致及び 2 つの異なる方法により求めた位相モードの有効質量の一致もこのことを支持している。

(TaSe_4)₂ I について——理 論

物 性 研 栗 原 進
分 子 研 佐 藤 正 俊
阪大・理 水 貝 俊 治

93cm^{-1} 付近のラマンスペクトルは CDW の振巾一位相非線型相互作用¹⁾を用いて理解できるが、構造相転移に際して凍結するのはこのモード (TO) ではなく、はるかに低エネルギー ($\sim 4\text{cm}^{-1}$) の TA モードである。これら 2 つのフォノンモードは、263 K の相転移をめぐって、互いに深く関連している事が予想される。この関連を見るために、TA, TO フォノンが共に電子系と Fröhlich 型の相互作用する系を考えこれを RPA で調べた。その結果、次の事が判明した。

- (1) TA-TO coupled mode は、TA, TO が単独の場合よりも必ず高温でソフト化する。
- (2) 凍結する変位パターンは、TA 的な性格が支配的である (スペクトル強度比 $\text{TA}/\text{TO} = \lambda_{TA} \omega_{TO}/\lambda_{TO} \omega_{TA} \sim 10$)。
- (3) TA フォノンのスペクトル強度の振動数・温度依存性は、藤下らの中性子散乱データの振舞いと良く一致する。

以上から、この物質では、TO, TA フォノンの電子を媒介とする相互作用が重要であり、前者の CDW 巾モードスペクトルと後者の変位凍結がこのような機構によって同時に理解できる事が示された。

[参考文献]

1. S. Kurihara : J. Phys. Jpn. 48 (1980) 1821.
2. H. Fujishita, M. Sato and S. Hoshino : private communication.

陽電子消滅法、光電子分光法による $(\text{TaSe}_4)_2\text{I}$ の電子構造の研究

東大・工 大竹 和夫, 佐藤 英一, 山本 良一, 堂山 昌男

$(\text{TaSe}_4)_2\text{I}$ は, 263KでCDW転移を起こす典型的な擬一次元導体である。従来, 精力的に研究されてきた, NbSe_3 などの擬一次元物質と比べて, 大きな単結晶が得られることから, 今までにはできなかったり (例えば, 中性子散乱), 不明瞭だった (例えば, 電極端子の付け方) 実験が確実に行える。

CDWの発生には, 伝導帯の電子構造, 特に, フェルミ面の形状が大きな影響を与えるが, 電子輸送現象についての研究に比べ, 直接, 電子構造を調べた研究は少ない。我々は, この比較的大きな単結晶ができる $(\text{TaSe}_4)_2\text{I}$ の電子構造を, 陽電子消滅角相関法と光電子分光法によって調べた。その結果,

- (1) 陽電子消滅角相関法より, フェルミ面の形状を測定し, フェルミ波数 $K_F = 0.35 \text{ \AA}^{-1}$ の平面的なフェルミ面の存在を観測した。
- (2) 光電子分光法により, 光電子エネルギー分布曲線, 僮電子帯での $\text{Ta } 5d$ バンドと $\text{Se } 4p$ バンドとの混成状態, CDW発生による伝導帯, 僮電子帯の変化を測定した。

無機鎖状半導体 $(\text{NbSe}_4)_3\text{I}$ の構造相転移

筑波大・物理 和 泉 充

$(\text{NbSe}_4)_3\text{I}$ は 274.2 K で構造相転移を示すが, 低温相では超格子反射, あるいは衛星反射は観測されず, Γ 点 ($q = 0$) のフォノンの凍結による二次相転移と考えられてきた。この物質の相転移についての我々の一連の研究を報告した。

(1) 直流電気伝導度

室温の比抵抗は $1.4 \Omega \text{ cm}$ と半導体的であり, ホール係数の測定から伝導電子密度は $\sim 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ である。相転移に伴い T_c 以下で活性化型伝導を示すが, 活性化エネルギーの値は試料に依存する。

(2) 遠赤外フォノンスペクトル

試料を 100 本程度ならべて測定する事により, $40 - 400 \text{ cm}^{-1}$ の範囲での反射スペクトルを得た。高温相で A_{2u} モードが観測され, 低温相では A モード及び E モードが新たに出現する。また, ラマン散乱では低温相で全対象ソフトモードが観測されるが, 遠赤外反射測定では観測されない。

(3) 低温 X 線構造解析 (30 K での原子変位パターンの測定)

液体ヘリウム用の連続フロー型クライオスタットを装着した 4 軸回折計により 297 K 及び 30 K で構造解析を行った。X 線回折の選択則を低温相でまず決定し, 低温相は $P4$, $P\bar{4}$ または

$P4/m$ であるとの予測を行い解析を行った。297 Kでは、空間群 $P4/mnc$ に対して収束を見、Meerschaut 達の決定した構造を確認した。30 Kでは $P\bar{4}$ に対して収束を得、低温相の原子位置を決定した。それによると沃素原子は殆ど変位せず、Nb 及び Se 原子が C 軸方向に大きな変位を示す。a - b 面内での各原子の変位は小さい事がわかった。

以上から支配的に凍結しているモードは B_{1u} モードであり、反強誘電的な変位を行う事が明らかになってきた。

(MSe₄)_nI のラマン散乱と交流電気伝導

筑波大物理 関根智幸

(MSe₄)_nI (M=Nb, Ta; n=2, 3, 10/3) は、n=2, 10/3 のとき、CDW を示し、n=3 のとき、CDW を伴わない構造相転移を示す興味ある物質群である。この物質群のうち、(NbSe₄)₃I, (TaSe₄)₂I, (NbSe₄)_{10/3}I のラマン散乱と、(NbSe₄)_{10/3}I の交流電気伝導を報告する。(NbSe₄)₃I のラマン散乱¹⁾では、低温相で全対称なソフトモード (7 K の時 82 cm⁻¹) を観測できた。このモードは、59 cm⁻¹ のモードと 180 K 付近で anti-crossing を起こす。以上の事は、この物質の構造相転移は変位型である事を明確に示している。(TaSe₄)₂I では、CDW 相で 90 cm⁻¹ に振幅モードと思われるラマンピークが観測できる。²⁾ このピークは Tc に近づくにつれ、高周波数側にずれ、線巾は非常に大きくなる。この振舞は KCP の振幅モード³⁾ と良く類似している。又、線巾の温度変化は、振幅モードと位相モードの相互作用を取り入れた理論⁴⁾ と良く一致する。(NbSe₄)_{10/3}I でも同様な振舞をする振幅モードが約 100 cm⁻¹ に観測できる。この物質群では、振幅モードの以上の様な振舞は、共通しているので、統一的に理解する事が大切と思われる。又、(NbSe₄)_{10/3}I で 10 Hz ~ 7 MHz の交流電気伝導を測定した。Tc = 286 K での電気伝導の異常は 1 MHz 以上で小さくなるが、7 MHz でも残っている。MX₃ に比べて、低周波数で電気伝導の異常が小さくなる事より、CDW の pinning 周波数は MX₃ より小さい事が分る。誘電率も測定してみると、Tc で鮮明な立ち上がりがあり、約 270 K でピークを持つ。これは、threshold 電場が最小になった温度に対応している。

[参考文献]

- 1) T. Sekine et al.; Solid State Commun. 52, 379 (1984).
- 2) T. Sekine et al.; Solid State Commun. 53, 767 (1985).
- 3) E. F. Steigmeier et al.; Solid State Commun. 17, 1447 (1975).
- 4) S. Kurihara; J. Phys. Soc. Jpn. 48, 1821 (1980).

Nb₃Te₄ の C D W 相 転 移

筑波大・物理・物工* 木内 良成, 関根 智幸, 吉崎 亮造*

Nb₃Te₄ は, 六方晶系 P6₃/m の構造をしており, C 軸方向に Nb のジグザグ chain をもっている。すでに電気抵抗の測定などによって, 110 K, 40 K 付近に異常が確認されている。我々の電気抵抗の測定において 110 K 付近の異常は温度変化に対してヒステリシスが生じていることがわかった。このことは, この相転移が一次であることを示している。また, これらの 2 つの抵抗異常の大きさ, 及び転移温度には試料依存性がみられる。

この 2 つの抵抗異常は Nb₃Te₄ が擬一次元導体であることから C D W 相転移であることが予想された。我々は四軸ゴニオメーターを用いた X 線回折を行い, 110 K 以下で超格子反射を確認した。格子周期に対して整合は波数 ($\frac{1}{3}$, $\frac{1}{3}$, $\frac{3}{7}$) の周期的な歪が生じていることがわかった。この結果は電子線回折の結果と一致する。また冷却の速度により, 超格子反射の強度が変わる。このことは低温相がドメイン構造を形成していることを示している。

次に室温より液体ヘリウム温度付近にまでわたって帯磁率を測定した。105 K と 40 K 付近に小さなピークがあり, 低温になるにしたがって増大し, 20 K 以下で不純物によると考えられる急激な増大がある。105 K と 40 K 付近の小さなピークは, 相転移にともなってフェルミ面が消失したことによる伝導電子の減少を示唆していると思われる。

Mo の 結 晶 構 造

東北大金研 請 井 一 利

Mo₆S₆Br₂ 作成中, 興味深い電子線回折パターンを示す物質を見出した。発光分光分析の結果はその物質が MoO₂ である事を示している。

MoO₂ は以前から結晶構造解析がなされているが, 我々が 4 軸型単結晶 X 線回折計を用いて測定した単位胞の格子定数は B. G. Brandt 達のそれと一致する。X 線回折強度を用いた構造解析の結果も大筋では Brandt 達のそれと一致する。しかし Brandt 達の結果では Mo 原子の作る鎖状構造で Mo 原子が一定の位置を占めるのに対し, 我々の結果は 2 種類の Mo のうち 1 種類の Mo 原子が鎖上の 2 つの位置を確率的に占める事を示している。

制限視野の電子線回折パターンは $\ell = n + \frac{1}{2}$ の散漫散乱のシートが存在し, シート上に $a^*/2$, $b^*/2$, $c^*/2$ の逆格子単位胞をもつ超格子反射が存在する。超格子反射は C 軸方向に 2 つに分裂し, 高調波は認められない。

この超格子反射の位置および分裂は, C 軸方向 (Mo 鎖の方向) に基本格子の 2 倍 11.2 Å の波長をもった波があり, それが更に 158 Å の波長で正弦波的に変調されている事を示している。超格子反射の強度の比較的強いこと, およびその分裂の方向から, この波は鎖上の Mo 原子の占める

位置によって生ずると考えている。

擬一次元バナジウムブロンズ系での高密ポーラロン

筑波大物理 長沢 博

擬一次元導体と考えられる β - $M_xV_2O_5$ 系では、バナジウムイオンは酸素により八面体的にかこまれて、且つその酸素を共有するため b 軸方向にジグザグ鎖を作っている。このとき V-V 間の原子間隔は約 3.1 Å で Goodenough が現象論的に決定した V イオンが金属バンドを作る臨界値 2.9 Å より大きいためにバナジウムの d 電子は局在的な性質を強くもちスモールポーラロンを形成すると考えられる。

この系で 3d 電子が高密度になるとどのような状態が実現するかを明らかにすることを目的として研究を行っている。

擬一次元系で高密度に 3d 電子が存在する β - $C_{x_0}V_2O_5$ ($x > 0.48$) にみられる特異な現象として以下の 2 つがあげられる。

- (1) 一次元軸に垂直な面内で波数 (0, 19, 0, 0.14) であらわされる長距離秩序
- (2) 共鳴線シフト = $\alpha_0 + \frac{C_0}{T}$ ($\alpha_0, C_0 > 0$) で与えられる ^{51}V 核の NMR 共鳴線

又、三次元として、高密度に 3d 電子が存在する系としてスピネル相 LiV_2O_4 での問題点として、

- (1) ^{51}V , 7Li 核の NMR より得られた微視的な磁化率 $\chi \sim \frac{C}{T}$ とほぼキュリー則にのり、キュリ定数 C も $V^{3.5+}$ で期待される有効磁子数にほぼ一致すること。
- (2) 電気伝導度が $10^4 \Omega^{-1}cm^{-1}$ 以上と大きく、金属的な温度変化を示し、又低温 ($T < 60$ K) で電気伝導度が高温側からの外そう値よりもより大きな enhance された値をとることを示した。

分子性導体の結晶格子変調および電荷局在の様式

東邦大・理 小林 速男

BEDT-TTF と呼ばれる multi-sulfur π -donor molecule が新しいタイプの分子性電導体の一つの発展方向を示していると言う事はかなり以前から知られていた。しかし所謂「分子設計」から物理的興味の対象となりうる系に至る途中の過程は評価する事が難しい要素が多い。このような観点から現在我々が調べつつある BMDT-TTF (MT), BMDT-TTF (ET), BPDT-TTF (PT) やそれと類似分子であるがアクセプターとして働く $M(dmit)_2$ の構成する数多くの分子性電導体について示した。現在の分子設計の主流は「多次元性導入」という処にあるので多次元性を示す分子性電導体の代表である MT のつくる ClO_4 , PF_6 塩の構造を示し多次元的分子性電導体結晶で起こりうる電荷分離、ウィグナー格子について論じた。

一方、多次元化と逆に一次元性の強い電導体内に出現する CDW の研究例として $K_{1.75} [Pt(CN)_4] \cdot 1.5H_2O$ の場合を紹介した。KCP と異なりこの結晶は鎖方向から見ると三角格子をなしており CDW の成長の際そのとるべき位相に正方格子をなす KCP に見られない複雑な要因がある。それがこれまでのこの化合物の物性の解釈の混乱の原因と思われる。

非接触電極を用いて測定した擬一次元導体の伝導率と誘電率

熊本大・工 久保田 弘

非接触電極を用いた比抵抗の測定法は、一般に比抵抗の高い領域で有効である。また電界の方向を簡単に選べる利点もある。擬一次元導体のようにパイエルス転移温度以下で急激に比抵抗が増す物質に対してこの測定法を適用することで、伝導測定の様々な不確定性を取り除き、四端子法測定の結果を補えるものと期待される。

今回の測定に用いた方法は、絶縁された電極間に試料をはさんで容量を形成し、これに印加した交流電圧の振幅と位相の変化より、試料の並列抵抗の寄与と容量の寄与を分離、検出するものである。

この方法を TTF-TCNQ に適用した結果、

- (1) 従来観測されている 58K, 53K, 49K, 38K, 各温度での変化がこの方法によって確認された。
- (2) 新たに、26K, 22K, 19K の各温度に、伝導率と誘電率の折れ曲がりが観測された。
- (3) 一次元軸方向の 26K から 19K における伝導率の温度依存性より求めた活性化エネルギーはこの温度域で変化がなく、その大きさは 120K 程である。

$\beta - (BEDT-TTF)_2I_3$ の 2 つの超伝導

電総研 村田 恵三

表題の物質は 2 つ目の常圧下有機超伝導体であり,¹⁾ その T_c や H_{c2} は TMTSF 塩のそれらに類似しているかに見えた。²⁾ しかし温度一圧力相図を調べたところ、第 1 図のように圧力上昇と共に T_c は最初下るもの、³⁾ 1 kbar を越えると不連続に T_c は 7 ~ 8 K に上昇するという驚くべき結果を得、^{4), 5)} TMTSF 塩との対照は明確になった。遅れて届くソ連情報によればソ連でも似た相図を得たことが判った。⁶⁾

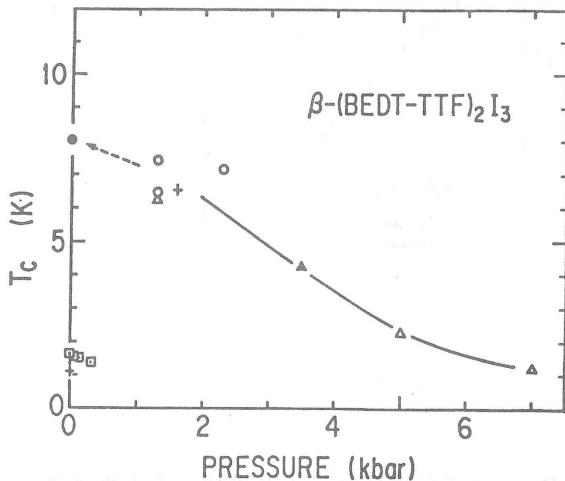
この相図の興味深い点は高い T_c の出現もさることながら、圧力除去後も high T_c state が残ること。⁷⁾ ひとつの物質に 2 つの超伝導が存在する点であり、もし 1 kbar 以上で共存するなら Singlet 超伝導ではない⁸⁾ という夢を持たせる点にもある。

超伝導の性質： i) high T_c state では H_{c2} は温度下降と共に直線的に増大するとすると 0K

で20 Tesla // a, b, 2Tesla // c* と極めて高く,⁹⁾ Paramagnetic limit を越えている。ii) low Tc state では 1.8 Tesla // a, b, 0.08 Tesla // c* となっており, high Tc - state の方が異方性が減少しているかに見える。Hc₂ を $\xi_{GL}(0)$ に換算すると high Tc state では $\xi_{GL}(0) // c^* \lesssim$ 格子間隔となり⁹⁾ $\xi_{GL}(0) // c^* \ll$ 格子間隔となって Hc₂ // a がさらに大きくなれないと思われる。iii) よう素をドープしたり,¹⁰⁾ 抜いたり,¹¹⁾ 熱サイクル¹²⁾ あるいは圧力除去の試料が欠陥ストレスがあるにも拘らず比較的高い Tc を与えること⁷⁾ は、不純物に強い超伝導であるを示唆し、この超伝導はそれらをむしろ "Soft pressure"⁽⁴⁾ として好むように見える。

〔参考文献〕

- 1) Yagubskii 他; JETP Lett (ロシア版, 以下同じ), 39 (1984) 15,
- 2) 徳本他, JPSJ 54 (1985) 869,
- 3) Azevedo; Mol Cryst & Liq. Cryst. 119 (1985),
- 4) 村田他, JPSJ 54 (1985) 1236,
- 5) 村田他, JPSJ 54 (1985) No 6,
- 6) Laukhin JETP Lett 41 (1985) 68,
- 7) 徳本他 SSC; to be published,
- 8) 福山先生との議論。
- 9) 村田他, 論文準備中,
- 10) Yagubskii 40 (1984) 387, 但しこれは β 型ではない。
- 11) Medyanov JETP Lett 41 (1985) 146,
- 12) Ginodman JETP Lett 41 (1985) 41.



第1図、超伝導 Tc - 圧力相図, ●は圧力除去後の Tc⁷⁾, □は ref 3)による

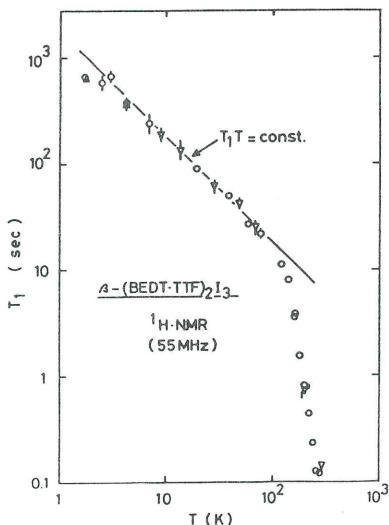
$\beta - (\text{BEDT} \cdot \text{TTF})_2 \text{I}_3$ の $^1\text{H} \cdot \text{NMR}$

学習院大・理 真庭 豊

最近、電総研のグループによって表題の物質に 2 つの超伝導相が存在することが見い出された：“高い超伝導相”(常圧において Tc ~ 8 K) と “低い超伝導相”(Tc ~ 1.1 K)。高い超伝導相の Tc は圧力の増大とともに急激に低下する。同一の振舞いが (TMTSF)₂ X 系においても見い出

されている。

我々は上述の2つの超伝導の起源と圧力と超伝導の関係に興味を持ち¹H-NMRの実験を進めている。今回は静磁場1.3TにおけるT₁の温度、圧力依存性および線巾の温度依存性を報告する。図は常圧におけるT₁の温度依存性を示す。80K以下でコリンハの関係T₁T=一定が成立する。よって80K～2.5Kにおいてフェルミ面状態密度N(E_F)は10%程度以下で一定と考えられる。100K以上ではBEDTTTF分子の外側エチレンの運動によって支配される。同一の運動はNMRの線巾の先鋭化として観測された。温度を下げるとき～210Kで線巾が広がりはじめる。これはJ.M.Williams等によって報告されている不整合超格子の出現に対応するものと思われる。T₁に与える圧力の効果が小さいことが見い出された、いまのところ、2つの超伝導相の起源に関連した明確な違いは見い出されていない。圧力・温度サイクルを数回経験した試料の超格子出現温度が190Kと低下しているように見えるが、更に実験を重ね事実を確認する必要がある。本実験は高橋利宏助教授、川村弘樹君、齊藤軍治助教授との協同実験である。



BEDT-TTFポリハライドの超伝導と電子構造

電総研 德 本 圓

β -(BEDT-TTF)₂I₃は(TMTSF)₂ClO₄に次いで2番目に発見された常圧有機超伝導体である。我々はこの物質中のI₃⁻アニオンをポリハライド(XYZ)⁻(X, Y, Z=I, Br, Cl, F)で置換することにより結晶格子を縮ませ、圧力下で発見されたような高いT_c(7～8K)を持つ超伝導状態を常圧下で実現しようという目的で、ポリハライド塩の研究を進めている。実際にはアニオンの置換は単なる効果以上のバラエティを提供しつつある。今回はI₃, I₂Br, IBr₂塩に対する結果をI₃に対する温度圧力相図と比較し両者の相関を議論する。

BEDT-TTFのポリハライド錯体の結晶成長

電総研 安西弘行

有機金属研究の一環として (BEDT-TTF) - ポリハライド錯体の結晶成長に至るまでの経過を述べる。

この研究は TTF-TCNQ で始まった。TTF-TCNQ 錯体の結晶は拡散法で育成されたが、その時にドナーとアクセプターの仕込量と得られた結晶の大きさとの間に関係のあることを知った。また TMTTF-TCNQ の結晶成長では溶媒の影響の大きいことを痛切に感じた。

これらの結果が電解法の結晶成長セルの試作に大きな影響を与えていた。また電解法では拡散法とは異なった溶媒効果のあることに気付き、再び溶媒の影響を調べなければならなくなつた。このような積み重ねの結果 Bu_4Ni_3 と BEDT-TTF から溶媒として C_6H_5Cl を使用して電解により $(BEDT-TTF)_2I_3$ の良質な結晶を得ることができた。現在、さらに新しいポリハライド錯体の結晶を育成中である。

$(TMTSF)_2PF_6$ の SDW 相

学習院大・理 高橋利宏

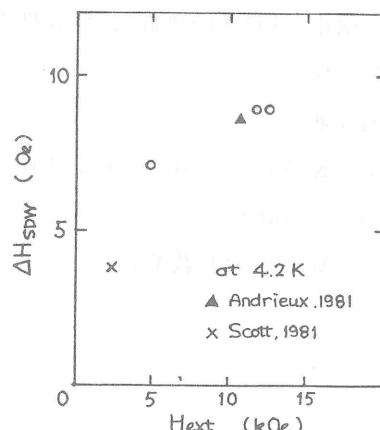
標題の物質は、最初の有機超伝導体として、発見以来、精力的な研究がなされてきた。その超伝導状態については、「異方的 BCS 超伝導体」としての解釈に収束しつつあるようと思える。

しかし、1) T_c の圧力依存性、2) 不純物効果、3) 当初、超伝導ゆらぎの証拠とされた金属相でのさまざまの異常など、不明な点が多い。これらは、第二の秩序「SDW」との関連において考察されるべきであろう。

SDW 相については、明らかになっている点が極めて少ない。その振巾は、 μ_B の 1% 程度とも 10% 程度とも言われ、波数も知られていない。さらに、ダイナミクスに関する知見はまったくない。SDW 相の解明は、この系の低温電子状態を理解する上で極めて重要である。

SDW 振巾についての知見は、 1H -NMR の線巾の増加の解析から得られる。このための測定を開始したところ、線巾の増分が外部磁場によって大きく変化することがわかった。(図 1) ここで ΔH_{SDW} は、観測された線巾から、核の双極子巾を差し引いたもので、4.2 K の結果である。

この原因として、(1) SDW 振巾自体が外部磁場依存性を持つ、(2) H_{flip} との関連、(3) スピン系のダイナミクス、等が考えられる。(1)は、比較的低



磁場であることから、又、(2)は、局所磁場を観測していることから、ともに考えにくい。(3)のダイナミクスとしては、(i)スピン波励起、(ii)運動する S DW の可能性、等があげられるが、実験結果を説明できるかどうかは明らかでない。

一方、S DW 相での NMR 緩和も、転移点以下の広い温度域でスピンのゆらぎの存在を暗示しており、今後の詳細な検討が必要である。

磁 場 誘 起 S DW

電総研 山地邦彦

(TMTSF)₂X 塩の磁場誘起 S DW を解明するために、異方的二次元 Hubbard モデルにより絶対 0 度の磁場下の S DW 状態を変分的定式化を使って調べた。磁場 H の電子軌道運動への作用を含めた S DW 状態の系のエネルギー E_{SDW} の計算の仕方および E_{SDW} が S DW ギャップ近傍にできる閉軌道の量子化のため低下する理由について既に報告した [1]。今回 S DW の波数ベクトル \mathbf{Q} およびギャップ・パラメーター M を変分パラメーターとして E_{SDW} の最小値を数値計算により組織的に調べた。二次元強結合バンドの弱い方の共鳴エネルギー t_b が $t_{b,cr}$ ($H=0$ のときいわゆる最適ベクトル $(2k_F, \pi/b)$ の S DW が存在し得るための上限の t_b の値) よりも大きい時、 \mathbf{Q} と M の三次元空間に正常状態のエネルギー E_n よりも低い E_{SDW} の極小点が沢山現れ、これらを H の関数としてプロットすると、本当の最小は次々と異なる極小の曲線を乗移る、最低部分をつなぐだ曲線で表される。各極小状態では S DW ギャップより下のブリルアン・ゾーンは満たされ、S DW ギャップの上にできた磁気量子準位（実は狭いバンドをなす）が整数個一杯に満たされている。この整数 N_{QL} により各極小状態、従ってそれがなす subphase が特定できる。高い値から H を下げると共に N_{QL} が 0 から始まり、1, 2, 3, …… と大きい整数値の subphase に次々と一次相転移を行う。H 対 t_b の平面に subphase の相図を計算した。(TMTSF)₂X 塩の磁化、Hall 抵抗および磁気抵抗の異常が、この subphase 間の相転移の結果として定性的に非常によく理解できる。磁化、帶磁率の増加分、Hall 抵抗値等は 2 のオーダーの数ファクターの違いで計算値と測定値は一致する [2]。

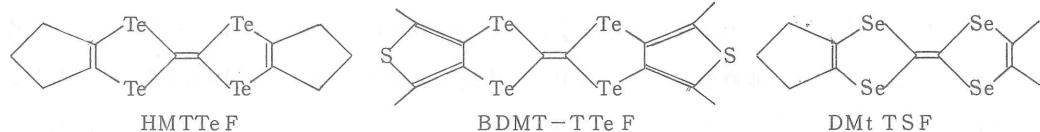
〔参考文献〕

- [1] K. Yamaji, Mol. Cryst. Liq. Cryst. 119 (1985) 105; J. Phys. Soc. Jpn. 54 (1985) 1034.
- [2] K. Yamaji, Proc. of Intl. Los Alamos Workshop SYNMETALS III (Synthetic Metals に掲載予定)。

テルルを含むドナーと非対称なドナー

都立大・理 菊地耕一

我々は、次の3つのドナーの錯体の構造や物性を調べたので報告する。



(I) テルルを含むドナーの錯体

Teのファンデルワールス半径や誘電率は、SやSeに比べて大きいので、Teを含むドナーの錯体の電気伝導度は大きくなることが期待できる。右に錯体の電気伝導度を示したが、 $(\text{HMTSF})_3(\text{PF}_6)_2(\text{C}_6\text{H}_5\text{Cl})_3$ の電気伝導度が $10^{-5} (\Omega\text{cm})^+$ 以下なので、Teを含むことにより、電気伝導度が大きくなることがわかった。また、SがSeを含むドナーでは、すべて絶縁体なっていたTCNQ F_4 錯体がTeを含むドナーにおいては、かなり大きな電気伝導度を示すことは注目すべきことである。 $(\text{HMTTeF})_4(\text{PF}_6)_2$ に関しては、結晶構造解析を行った。その結果、¹⁾ $(\text{HMTSF})_3(\text{PF}_6)_2(\text{C}_6\text{H}_5\text{Cl})_3$ とよく似たカラム構造をしていることがわかった。まだ、実験例が少ないので断定は下せないが、SやSeをTeに変えても、構造はあまり変化しないのではないかと考えられる。

(II) 非対称なドナーの錯体

DMtTSFのラジカル塩に関して、電気伝導度、反射スペクトル、結晶構造を調べた。その結果、 $(\text{TMTSF})_2\text{X}$ 塩とよく似ていることがわかった。しかし、アニオンによる違いは、 $(\text{TMTSF})_2\text{X}$ に比べて大きい。たとえば、 ReO_4 塩では、結晶構造が²⁾他の塩と異なり、アニオンも常温ですでにorderしている。ところで、ラジカル塩に関しては、ドナーが非対称である効果は表れないが、TCNQ錯体における電気伝導度の極大が、かなり broadになった。これは、ドナーの向きによるdisorderのためとも考られるが、さらに詳しい研究が必要である。

1) K. Kikuchi et al. Chem. Lett. 1985, 419.

2) K. Kikuchi et al. Chem. Lett. 1984, 1885.

【室温における電気伝導度】

	$\text{V}_{RT}/(\Omega\text{cm})^{-1}$
$(\text{HMTTeF})_x\text{ClO}_4$	0.03
$(\text{HMTTeF})_4(\text{PF}_6)_2$	6
$\text{HMTTeF}-\text{TCNQ}$	500
$\text{HMTTeF}-\text{TCNQF}_4^*$	0.30
$\text{BDMMTTeF}-\text{TCNQF}_4^*$	1.40

(*粉末試料で測定)

一次元電子系の秩序状態に対する不純物効果

東北大・理 鈴村順三

有機及び無機化合物の中で擬一次元超伝導体が多く見つかり、これらの物質に対する非磁性不

純物の強い影響が注目されている。この原因は低次元系に特徴的なアンダーソン局在であると考えられる。局在と相互作用の競合について特に一次元系では、電荷密度及びスピン密度の揺らぎを位相変数で記述する事により調べる事ができる。局在はこれらの位相のピン止めと考える事ができ、相互作用はピン止めされた位相のまわりの量子的な揺らぎに寄与する。¹⁾一般的な相互作用について調べると、不純物がない系で実現する電荷密度波状態のみならず超伝導状態でも弱い引力の場合は局在する。¹⁾又、トリプレット超伝導状態よりシングレット超伝導状態の方が局在の影響を強く受ける事実が具体的な extender Hubbard モデルでも現れる。²⁾一方、擬一次元系では鎖間電荷移動の果たす役割が重要になる。移動エネルギーが小さい場合は BCS 電子対の鎖間移動が起り、擬一次元超伝導状態が可能になる²⁾と同時に局在に対しても好ましくなる。この場合両者の競合が生じ、もし鎖方向の局在の長さが超伝導秩序数の相関距離より短くなれば局在が起こると考えられる。

[参考文献]

- 1) Y. Suzumura and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. 52 (1983) 2870; and ibid. 53 (1984) 3918.
- 2) Y. Suzumura, J. Phys. Soc. Jpn. 54 (1985) No. 6 and No. 7.

周期ポテンシャル中の一次元電子

東工大・理 岡 本 清 美

バンドが満たされた状態にある一次元電子系では、電子間相互作用がなければ系は $T = 0$ で絶縁体で k_F の CDW が形成されていると解釈できる。一方、電子間相互作用があれば系は他の状態にある可能性がある。この問題を位相ハミルトニアンを用いて調べた。

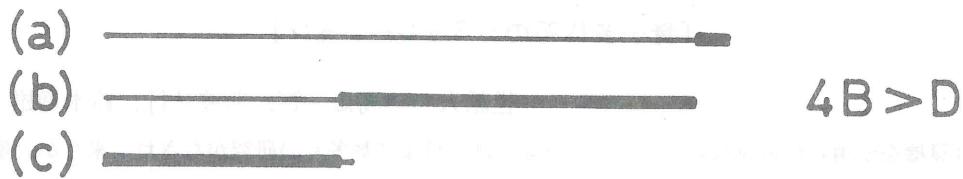
電子間相互作用として g_1'' , g_1^1 , g_2 , g_3^1 をとる。 $g_1^1 > 0$ の場合 CDW と LSDW の競争がおこると予想されるので、 $\tilde{\alpha} = \tilde{g}_1'' - 2\tilde{g}_2 = 1$ とおき、簡単化したハミルトニアンとして

$$H = \int dx \left\{ \frac{v_F}{4\pi} (1 - \tilde{g}_1'') (\nabla\phi)^2 + \pi v_F (1 + \tilde{g}_1'') M^2 + B \cos 2\phi - D \cos \phi \right\}$$

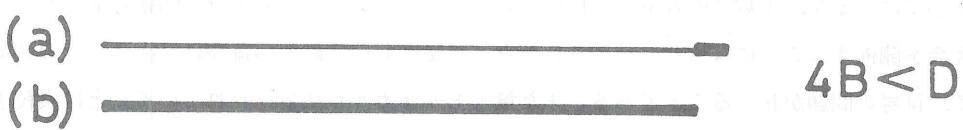
を考えた。 $B \propto \tilde{g}_1^1$, $D \propto \tilde{V}$, $\tilde{g} = g / 2\pi v_F$, $[\phi(x), M(x')] = i\delta(x-x')$, V は周期ポテンシャルの強さである。非調和項に対しては SCHA を用いた。 ϕ の平衡値を ϕ_s , $\tilde{\phi} \equiv \phi - \phi_s$ とするとき、(a) $\langle \tilde{\phi}^2 \rangle = \infty$ のとき秩序なし, (b) $\langle \tilde{\phi}^2 \rangle < \infty$, $\phi_s = 0$ のとき CDW, (c) $\langle \tilde{\phi}^2 \rangle < \infty$, $0 < \phi_s < \frac{\pi}{2}$ のとき CDW と LSDW の mixed state, (d) $\langle \tilde{\phi}^2 \rangle < \infty$, $\phi_s = \frac{\pi}{2}$ のとき LSDW である。図は対応する解の存在範囲を示し、太線は最もエネルギーの低い解である。

$4B \geq D$ は $\tilde{g}_1^1 \geq V$ と等価であり、また常に $g_c < 0$ である。今の場合、(d) の LSDW は実現されない。

3.4. 4B>D



$4B > D$



$4B < D$

$$-1 \quad g_c \quad 0 \quad \frac{15}{17} \quad 1 \quad \tilde{g}_1^{\prime \prime}$$

图 3.4. 4B>D

图 3.4. 4B<D

图 3.4. 4B=D

由图 3.4 可知， $4B > D$ 时， $\tilde{g}_1^{\prime \prime}$ 在 g_c 与 $\frac{15}{17}$ 之间； $4B < D$ 时， $\tilde{g}_1^{\prime \prime}$ 在 g_c 与 $\frac{15}{17}$ 之间； $4B = D$ 时， $\tilde{g}_1^{\prime \prime}$ 在 g_c 与 $\frac{15}{17}$ 之间。故 $\tilde{g}_1^{\prime \prime}$ 在 g_c 与 $\frac{15}{17}$ 之间。

物性研究所短期研究会

「量子多体系のシミュレーション」

世話人 高橋 實, 斯波弘行, 鈴木増雄

計算機を使用した古典系のシミュレーションは今まで数多くの研究がなされて來たが, 量子多体系のシミュレーションは最近ようやく盛んになって來たところである。量子モンテカルロ法が中心ではあるが, 小数系の厳密な対角化の方法も重要である。このような問題意識のもとで本研究会を開催することになった。量子モンテカルロ法において最大の難問は二次元以上の系において, 符号の問題が起こることである。また量子モルタル法で行われていることは素粒子論での格子ゲージ理論とも密接な関連がある。研究会で扱われた主な対象は一次元スピン系, 二次元三角格子系, 周期アンダーソン模型等であった。会議では2日間にわたって白熱した議論が行われた。

以下実際に行われたプログラムと講演者による講演要旨を紹介する。

プログラム

日 時 昭和60年5月20日(月)～5月21日(火)

場 所 東京大学物性研究所 旧棟1階講義室

5月20日(月)

前 半 座 長 別 役 広(物性研)

13:00～13:05 はじめに

13:05～14:00 量子モンテカルロ法及び量子伝送行列法の一般的考察 鈴木増雄(東大理)

14:00～14:50 径路積分モンテカルロ法の二次元電子ガス, 液体⁴He等への応用

高橋 實, 今田正俊(物性研)

14:50～15:15 量子系の擬局在性とスーパーコンピュータに寄せる期待 松田博嗣(九大理)

15:15～15:30 休憩

後 半 座 長 桂 重俊(東北大工)

15:30～16:00 転送行列法による一次元量子スピン系の研究 別役 広, 橋田光史(原研)

16:00～16:30 一次元量子スピン鎖のスピン相関関数 久保 健(筑波大物)

16:30～16:50 量子スピン系に対する転送行列法 都築俊夫(東北大理)

16:50～17:20 一次元ハイゼンベルグ強磁性モデルのT=0近傍における数値計算

山田貢己, 高橋 實(物性研)

17:20～17:50 量子スピン系のモンテカルロシミュレーション

本間重雄(名大工), 松田博嗣(九大理)

— decoupled cell method —

荻田直史(理研)

5月21日(火)

前半 座長 小口武彦(東工大理)

9:00 ~ 9:30 新しい量子モンテカルロ法の提案とその二次元量子スピン系への応用
(Thermo field Monte Carlo method)

鈴木増雄, 宮下精二, 高須昌子(東大理)

9:30 ~ 10:10 ①三次元量子ハイゼンベルグ系のモンテカルロシミュレーション

②一, 二, 三次元Transverse Ising modelのMCシミュレーション

永井旺二郎(神戸大理)

10:10 ~ 10:40 SK Ising spin glassでの横磁場による量子効果

石井廣湖, 山本哲也(大阪市大理)

10:40 ~ 10:50 —————休憩————

後半 座長 高橋 實(物性研)

10:50 ~ 11:20 二次元三角反強磁性量子ハイゼンベルグ横型のモンテカルロシミュレーション
高須昌子, 宮下精二, 鈴木増雄(東大理)

11:20 ~ 12:10 ①三角格子のハイゼンベルグ及びXY模型の数値的研究(西森秀穎)

②大規模行列の数値的対角化における諸問題(田口善弘)

③面立方格子の反強磁性Heisenberg モデル(小口武彦)

小口武彦, 西森秀穎, 田口善弘(東工大理)

12:10 ~ 13:30 —————昼休み————

前半 座長 高田 慧(京大基研)

13:30 ~ 14:20 格子ゲージ理論のシミュレーション 小柳義夫(筑波大電子情報)

14:20 ~ 14:50 一次元電子系の量子モンテカルロシミュレーション

永長直人, 滝本淳一(物性研)

14:50 ~ 15:10 一次元電子系における反強磁性電荷密度波転移 滝本淳一(物性研)

15:10 ~ 15:25 —————休憩————

後半 座長 久保 健(筑波大物)

15:25 ~ 15:45 一次元周期アンダーソン模型の熱力学 佐宗哲郎, 清野 豊(東北大理)

15:45 ~ 16:00 周期的アンダーソン模型への量子モンテカルロ法の応用 斯波弘行(物性研)

16:00 ~ 16:30 相互作用する一次元電子系におけるアンダーソン局在と非局在

佐宗哲郎 (東北大 理)

16:30 ~ 17:00 一次元フェルミ粒子系の転送行列法による計算

横田光史, 別役 広 (原研)

「量子モンテカルロ法及び量子伝送行列法の一般的考察」

東大・理 鈴木 増雄

1976年に量子スピン系の、等価定理¹⁾に基づく量子モンテカルロ法が提案され,¹⁾具体的に実行されて²⁾以来、急速に世界各国で行われるようになった。ここでは、その方法の収束の問題³⁾⁴⁾を議論し、クラスター・モンテカルロ法に拡張した¹⁾⁻⁴⁾ときのクラスターサイズmとトロッターサイズnとの関数としてのm-nの近似の精度を議論した。

また、今回、全く新しい「温度場の量子モンテカルロ法と量子伝送行列法」を提案し⁵⁾⁶⁾その有用性を説明し、sign問題も解決出来る可能性があることを示した。具体的に、鈴木、宮下、高須の報告を参照。

[参考文献]

1. M. Suzuki, Prog. theor. Phys. 56 (1976), 1454.
2. M. Suzuki, S. Miyashita and A. Kuroda, Prog. Theor. Phys. 58 (1977), 1377.
3. M. Suzuki, Transfer-Matrix Method and Monte Carlo Simulation in Quantum Spin Systems (Phys. Rev. B31 (1985) 2957–2965).
4. M. Suzuki Decomposition Formulae of Exponential Operators and Lie Exponentials with Some Applications to Quantum Mechanics and Statistical Physics.
5. M. Suzuki, Phys. Lett., A.
6. M. Suzuki, J. Stat. Phys.

径路積分モンテカルロ法の二次元電子ガス、液体⁴He等への応用

物性研 高橋 實, 今田正俊

量子系のシミュレーションとしては古い歴史をさかのぼれば以下のようなものがあげられる。

I Jastrow型の波動関数に対するモンテカルロシミュレーション ('65年頃 Mc Millan)

II グリーン関数モンテカルロ法 ('62年頃 Kalos)

III 径路積分モンテカルロ法 ('67年頃 Fosdick – Jordan)

IV スピング $\frac{1}{2}$ ハイゼンベルグ模型のモンテカルロシミュレーション ('62年頃 Handscomb)

IとIIは基底状態のみを扱う理論であるが、IIIは有限温度を扱うことが出来る。我々はIIIの方法

に沿って量子多体系を扱う方法を発展させた。ボーズ統計に従う粒子に対しては置換モンテカルロ法、フェルミ統計に従う粒子に対しは行列式法が有効であることがわかった。また計算は複雑になるが、高次補正を導入したほうが収束が早くなることもわかった。

32個の⁴He 原子が Lennard-Jones ポテンシャルで相互作用をしているとして計算した結果は圧力、内部エネルギー、動径分布関数等が実験と大変に良い一致を示した。現在のところ 4°K 以上の計算であるが、将来はもっと低温の計算も行う予定である。

二次元電子系については Wigner 結晶の融解の問題を扱い phase diagram をほぼ決定することが出来た。くわしくは参考文献 1 を参照されたい。

径路積分モンテカルロ法は量子力学の多くの問題に適用可能であると思われるが困難な点も残っている。特に低温でのフェルミ粒子系の符号問題²⁾にどのように対処するか、動的相関関数をどのように計算するかという問題に良い解決法が見つかれば量子系のシュミレーションはさらに適用範囲が拡張されるものと思われる。

[参考文献]

1. J. Phys. Soc. Jpn. 53 (1984) 963, 3765, 3770, 3871.
2. J. Phys. Soc. Jpn. 53 (1984) 2861.

量子系の擬局在性とスーパーコンピュータに寄せる期待

九大・理 松田博嗣

格子点上のスピニ系は粒子系、磁性体など、諸物質の包括的モデルであるに留まらず、集団生物学においても自己複製をする要素の空間構造や進化を追求するモデルとして有用である。

平衡状態でのスピニ系の配位をモンテカルロ法で求めるには、配位の分布がカノニカル分布のそれと一致するような配位空間上のマルコフ鎖を定義し、その時間発展をコンピューターで追尾すればよい。ここにおいて、相互作用が最近接格子点間の場合、古典系では各スピニの反転確率はそれぞれの最近接スピニの配位のみで定まる。量子系ではこの反転確率は厳密には全スピニ配位に依存するが、温度が余り低くないときは、注目するスピニの適当な近傍の配位のみに依存して近似的に与えられると考えられるので、近傍系での固有値問題を解くことにより求めた反転確率を用いて、古典系同様にモンテカルロ法を行うことが出来る。このような擬局在性は、強結合モデルにおける 1 電子グリーン関数についてその正当性の証明がある。¹⁾ 擬局在性を利用すると、結局各格子点の状態は近傍の情報のみで時間発展することになるので、各格子点ごとに演算装置をもって並列的に時間発展させ得るスーパーコンピュータの使用が可能になれば、研究の飛躍的な発展が期待される。

[文献] 1. H. Matsuda : Prog. Theor. Phys. Suppl. No. 36 (1966), 97.

M. Goda : Prog. Theor. Phys. 69 (1983), 1396.

転送行列法による一次元量子スピン系の研究

原研 別役 広, 横田光史

一次元量子スピン系から Suzuki-Trotter 変換によって得られるチェス盤状の構造をもつ二
次元イジングスピン系を数値的転送行列法を用いて詳しく調べた。

$S = \frac{1}{2}$ の系についてチェス盤状分解 (C B D) と実空間分解 (R S D) の二つの古典表示の収
敛性を比較した。熱力学的量の収敛の速さは二つの表示で同じである。スピン相関関数の速さは
異なり、R S D のスピン相関関数は C B D のよりはるかに収敛が速い。 $1/m^2$ の外挿を行うこと
により $m \rightarrow \infty$ の極限値を正確に求めることができる。得られた極限値は正しい値と完全に一致す
る。とくに一次元 X Y 模型のエネルギーは極低温を除いて厳密解に小数点以下 5 術迄一致する
という驚くべき結果が得られている。

$S = 1$ の系について強磁性および反強磁性ハイゼンベルグ模型で異方性定数の値を変えてエネ
ルギーと比熱の計算を行った。 $S = 1$ の場合も R S D のスピン相関関数は C B D に比べて収敛が
速い。R S D から求めた比熱は Blöte の結果と良く一致する。CsNiF₃ は 3 K 以上で容易面をも
つ一次元強磁性的ハイゼンベルグ磁性体と考えて良い。交換相互作用・異方性定数の値を CsNi
F₃ に等しくなるように選んで比熱の磁場依存性を調べ Ramirez と Wolb の比熱の実験結果と比
較した。これ迄ソリトン励起によるものとされていた温度一定下における比熱の磁場依存性に見
られる丸いピークを良く再現する。この結果から考えて CsNiF₃ 中のソリトン励起の妥当性につ
いて再考する必要があるように思われる。

以上に示したように転送行列法は、Suzuki-Trotter 公式と組み合わせて用いることにより
量子系の熱力学的諸量を数値的に求める上で強力な手段であることが分る。

一次元量子スピン系のスピン相関関数

筑波大物理 久保 健, 高田 慧, 坂口俊文

ここで考える一次元スピン鎖のハミルトニアンは

$H = -\frac{1}{S^2} \sum_i [S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \Delta S_i^z S_{i+1}^z] + \frac{D}{S^2} \sum_i S_i^{z^2}$ である ($S = \frac{1}{2}$ の場合 D の
項はない)。

我々は S_i^x の相関関数 $\langle S_i^x S_{i+r}^x \rangle$ 及びカノニカル相関関数 $\int_0^\beta \langle S_i^x(\tau) S_{i+r}^x \rangle d\tau$ を計算し、そ
の低温に於ける振舞いから臨界指数を評価し報告した。鈴木によって提唱されたトロッタ近似を
用い実空間方向の転送行列によって計算した。n トロッタ分割によって得られた温度 β^{-1} の相関
関数 $G_n(r, \beta)$ は $G_n(r, \beta) = C_n(\beta) \cdot \exp[-r/\xi_n(\beta)]$ の形で表される ($r \gtrsim \xi_n(\beta)$)。

$n = 6, 7, 8$ ($S = \frac{1}{2}$) 及び $n = 3, 4, 5$ ($S = 1$) に対して $C_n(\beta)$, $\xi_n(\beta)$ とカノニカル相関関数の和である面内帶磁率 $\chi_n(\beta)$ を求めた。トロッタ近似は $n = \infty$ の近傍で n^{-2} のベキ級数で表されるので n^{-4} までの式を当てはめる事によって $n = \infty$ の値を推定した。この外挿値を用い $r = -d\ln\chi/d\ln\beta$ を求めた。臨界指数を求めるにはなるべく低温のデータを使わねばならぬ一方低温では近似が悪くなるので外挿値の精度が落ちるという問題がある。 $S = \frac{1}{2}$, $\Delta \geq 0$ の領域でデータを注意深く調べると r は $\beta = 2 \sim 4$ の領域で極小値を持つ事が観測された。極小値の低温側は近似の悪くなる領域と考え、この温度の r と ν を臨界指数と考える。一方 α は極大を示すのでこの値を探る。この ν と α より $\eta = \alpha/\nu$ を定める。この様にして得られた $\Delta = 0$ で $\nu = 1.01$, $r = 1.53$, $\eta = 1.52$ となり正確な値と非常に良い一致を示す。 $-0.75 \leq \Delta < 0.5$ の領域で $\nu = 1.00 \pm 0.01$, η は Luther-Peschel の値と良い一致を示す。 $|\Delta| \approx 1$ では近似の収束が悪くなるので未だ充分正確な値は得られていないが、 η の結果は Luther-Peschel の結果と矛盾しない様に思われる。 $S = 1$ の場合未だ充分解析が進んでいないがほぼ全域で $\nu \approx 1.1$ $\Delta \geq -0.4$ で r はほぼ 2 に近い値を取る。 η は $\Delta = 0$ で $\eta \approx 1.16$ で Δ の減少関数である。 $\eta = \frac{1}{4}$ となる Δ は $\Delta \leq -0.6$ であり他の方法による結果と較べ大きい。 $S = 1$ の結果は充分低温側を調べていない様に思われる所以一層精しい解析が必要である。

量子スピン系に対する転送積分法

東北大・理 都 築 俊 夫

有限の Trotter 数 M で近似した Suzuki-Trotter 公式によって状態和を計算し、量子効果を調べようとするとき、通常モンテカルロ法が使われる。別役氏の数値的転送行列法は計算法の良い改良である。しかしメモリー数の制約や計算時間の経済的制限などのため、スピン $S = \frac{1}{2}$ の場合で $M = 8$ 程度が実際上の上限となっている。このため定量的に信頼できる結果は $T > |2JS^2|$ の温度領域に未だ留まっている ($2J$: 交換相互作用)。

ソリトンなどの非線形励起の役割を調べようとすると、ひとけた低温まで定量的に信頼できる値を得なければならない。特殊な目的を言わずとも量子効果の定量的検討のためには上述の温度領域ではまことに不十分である。

改善のポイントは数々あると思うが、次の二点が基本的であろう。(1) 有限 M Trotter 変換後の系がもつ対称性を取り込む。(2) Trotter 公式を用いる際の基本クラスターを大きくする。一次元系の場合、クラスター中の格子点の数を N_s とすれば、 $M \cdot (N_s - 1)$ が同じならば温度の関数としての大域的振舞はほぼ同じである。上記(1)は転送行列のサイズを小さくし、メモリーを節約する。XYスピン鎖 ($S = \frac{1}{2}$) を例にとると、対スピンクラスターで $M = 8$ の結果は、三スピンクラスターで $M = 4$ で再現でき、 (12×12) の行列の最大固有値を求める問題になっている。常に熱力学極限であることは言うまでもない。

数学的手段としては、上記対称性を代数関数で表現する。スピンをコヒーレント状態表示するのは一つの方法である。詳細は下記文献参照。

T. Tsuzuki, Prog. Theor. Phys. 73 (1985), No. 6.

一次元ハイゼンベルグ強磁性モデルの $T = 0$ 近傍における数値計算

物性研 山田貢己, 高橋 實

スピン $\frac{1}{2}$ の一次元ハイゼンベルグ・モデルの熱力学は、Bethe 仮説によって、無限個の非線形な連立積分方程式に帰着される。しかしながら、等方的な強磁場性モデルは、低温の極限においては、解析的に解けていない問題が多い。

異方性が、 $A = \cos \frac{\pi}{n}$ (n :整数) で表される場合は、解かなければならない未知関数の数や積分方程式の数が有限個となり、($(n - 1)$ 個で済む。) 数値計算は比較的簡単になる。そこでなるべく大きい n の値を持つときの物理量を計算し、それを $n \rightarrow \infty$ ($A \rightarrow 1$) に外挿することによって、等方的な強磁性モデルの物理量を計算した。

自由エネルギーの計算結果を温度に対して log-log プロットすると、その傾きは、 $T \rightarrow 0$ について、はっきりと 1.5 に近づいていることがわかる。これは、比熱の臨界指数が $\alpha = -\frac{1}{2}$ であることを示している。さらに、自由エネルギーを $T^{1.5}$ で割ったものを \sqrt{T} のべきで展開し、数値計算によって得られた数値を代入し、最小自乗法で展開係数を求めるとき、0 次項の係数はスピン波理論によって得られる値と 5 術の一一致を見た。

帯磁率に関しても、自由エネルギーと同じように、上記の取り扱いをすると、臨界指数は $\gamma = 2$ であり、帯磁率 χ の $1/T^2$ の係数はスピン $\frac{1}{2}$ の古典的ハイゼンベルグモデルの結果と 0.03 % の誤差で一致していることを示すことができた。

“量子スピン系のモンテカルロシミュレーション”

名大・工 本間重雄, 九大・理 松田博嗣, 理研 萩田直史

モンテカルロシミュレーション (MC) により多体系の熱力学量を求める際に重要な量は、状態間の遷移確率 W のみである。これさえ求まればメトロポリス法により MC が実行出来る。量 W は遷移に関与する状態のボルツマン因子の比でえられるから、古典系にしろ量子系にしろ、このボルツマン因子を求めることが問題になる。

これは系のハミルトニアンの固有値問題を解く事に帰着されるが、多体系では実行不可能である。

我々の提案した decoupled cell method (DCM)¹⁾ は、全系の固有値問題を解く代わりに、遷移に関与する格子点 l を中心とした適当な大きさの cell (decoupled cell) を取り出し、この

cell の固有値問題を解くことにより DC のボルツマン因子を求め W を求める。この W を全系の W に対する近似値として用い、MC を実行する。DC の size を大きくすれば W は厳密解に近付くから MC による実験精度は向上する事が期待される。

DCM の有効性を検討するために、厳密解が知られている一次元 XY 模型にこの方法を適用し 内部エネルギー、感受率、相関関数等について、精度の高い結果を得た。

[参考文献]

1. S. Homma, H. Matsuda and N. Ogita, Prog. theor. Phys. 72 (1984) 1245.

新しい量子モンテカルロ法の提案とその二次元量子スピン 系への応用 (Thermo field Monte Carlo Method)

東大・理 鈴木増雄、宮下精二、高須昌子

鈴木によって提案された有限温度の場の量子論によるモンテカルロ法を簡単なモデルで具体的に実行しその有用性を示した。この方法はすでに鈴木によって提案され、色々な問題に応用されている。トロッター公式を用いたモンテカルロ法と相補的なものであり、次の特徴を持つ。

有限温度の場の状態 $|O(\beta)\rangle$ は任意の完全系 $\{ |S\rangle \}$ に対して

$$|O(\beta)\rangle = \frac{1}{Z^{1/2}} e^{-\frac{\beta}{2} \mathcal{H}} \sum_S |S\rangle |\tilde{S}\rangle \quad (1)$$

の形に表せることが示されているので、ここではモンテカルロ法に便利な S^z を対角化する表示をとる。ハミルトニアンを対角化する表示でなくこのスピン表示で(1)が書けることがモンテカルロ法を行う上で本質的である。(1)の状態 $|O(\beta)\rangle$ を確率的に実現する過程を用いて決められた数のサンプルによってこの状態を近似的に評価し、それによっていろいろな物理量の期待値

$$\langle A \rangle = \langle O(\beta) | A | O(\beta) \rangle \quad (2)$$

を求める事ができる。また(1)で $\exp(-\frac{1}{2} \beta \mathcal{H})$ を次々とかけていくことで温度の違う系での平均が一度に求められることもこの方法の特徴である。この方法により、 2×2 の強磁性、反強磁性及び三角格子反強磁性、Spin $1/2$ ハイゼンベルク模型のエネルギー、磁化率を求め、厳密な解とよく一致することを確めた。

[参考文献]

1. M. Suzuki, Thermo Field Monte Carlo and Transfer-Matrix Methods in Quantum Systems. (Phys. Lett. A)
2. M. Suzuki, Thermo Field Dynamics of Quantum Spin Systems. (J. Stat. Phys.)
3. M. Suzuki Quantum Fluctuation, Thermo Field Dynamics and Quantum Monte Carlo Method. "Progress in Quantum Field Theory" edited by H. Ezawa and S. Kamefuchi (North-Holland Pub.) 1985.

三次元量子スピン系のモンテカルロシミュレーション*

神戸大・理 永 井 旺二郎

1. ハイゼンベルグモデル

Suzuki - Miyashita - Kuroda 及び Cullen - Landau の方法を用いて $H = - J \sum_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - H \sum_i S_i^z$ ($S = 1/2$) の系の計算を行った。一次元系で $H = 0$ については Cullen - Landau の精しい計算があるが、ここでは $H \neq 0$ について行った。計算結果は厳密解とよく一致している。（XY モデルのとき）種々の Algorithm があるが、Zigzag 法でよい結果が得られる。この方法では Path が $(2m-1)C_m^d$ 個ある。三次元の場合、Trotter size $m=2$ の場合しか行っていないが比熱帶磁率とも $kT/J \approx 0.85$ でピークを示し、相転移の存在を示唆している。

2. Transverse - Ising モデル

$H = - J \sum_{i,j} \sigma_i^z \sigma_j^z - H \sum_i \sigma_i^x$ の系の計算を Suzuki の方法を用いて行った。Trotter 方向の相互作用が実軸方向の相互作用より遙かに大きいので、Trotter 軸上のスピン群をクラスターとした多重スピンフリップを行う必要がある。即ち各モンテカルロステップで 2^m 個の状態の中から 1 つを選び出す。ここでは $m=12$ についての計算を行った。普通は計算時間が 2^m に比例するが、それが m に比例するように Algorithm を工夫した。計算結果は一次元系については厳密解とよく一致している。三次元系についても計算を行い、T-H 相図を計算した。

〔参考文献〕

1. M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. 56, 1454 (1976).
2. M. Suzuki, S. Miyashita and A. Kuroda, Prog. Theor. Phys. 58, 701 (1977).
3. J. J. Cullen and D. P. Landau, Phys. Rev. B27, 297 (1983).
4. A. Wiesler, Phys. Lett. A 89, 359 (1982).

S.K Ising Spin Glass での横磁場による量子効果

大阪市大・理 石井廣湖、山本哲也

Sher rington - Kirkpatrick (SK) モデルでは、イジングスピンが、分散 J/\sqrt{N} の正規分布に従うランダムな相互作用 J_{ij} で結合する。この系には転移温度 T_c があり、 T_c 以下では自由エネルギーは、スピンの位相空間で e^{-N} 程度の数多くの局所平衡を有することが明らかにされている。

横磁場 A のもとでの系のハミルトニアンは、

$$H = - \sum_{(ij)} J_{ij} \sigma_{iz} - A \sum_i \sigma_{ix}.$$

* ICM '85 (San Francisco, 8月) で講演予定

第一項はスピングラス凍結を引き起こすのに対し、第二項は非対角でスピノー重項形成（一体運動）を表し、スピノン凍結を妨げる。我々は最近、摂動計算により、SKモデルの特質としてどんな Δ でも、結局 $T \rightarrow 0$ ではスピングラス凍結が生ずるであろうことを結論した。この系をモンテカルロシミュレーション（MCS）で調べる。Hの二つの項は非可換であるので、鈴木-Trotter公式によりTrotter次元の加わったイジングスピノン系 $\{\sigma_{jk}\}$ に変換し、Metropolisの方法でMCSを行った。 $\Delta = J$ の場合をTrotter方向の格子数 $n = 3 \sim 15$ で $N = 80$ の系で、MCステップ数 10^3 で行った。エネルギーはバラつきが少なく、高温側では正しく出る。しかし低温で n が小さいため負に大きく出過ぎ、その結果比熱はまだ正しく出せていない。 $q = (1/N) \sum_j < \sum_k \sigma_{jk} / n >^2$ で定義された秩序パラメーターの温度変化のMCSから $T_c \sim 0.7 \tilde{J}$ が結論でき、摂動計算の結果と大体の一一致を得た。 q や帯磁率 x は、初期値や n の直、サンプルによっても値のバラつきが大きいが、これはMCステップ数 T_{MC} が十分大きくなれば生ずるスピングラスに特有の現象であろうと思われる。即、初期状態から辿れる位相空間内の領域が、少数の局所平衡領域に限られ、初期条件、サンプル毎に異なった領域を見ており、 q や x がスピノン配向に敏感な量であるためその領域依存性がMCS値のバラつきとして現れたと思われる。この見方では、エネルギー値にバラつきの少ないのは、どの局所平衡領域でもエネルギーが概略等しい為と解釈される。この点を明らかにさせるには、この系でMackenzie-Young¹⁾が行ったような T_{MC} 依存性を調べる必要があると思われる。 Δ が大きい時の T_c をMCSで調べる問題は、このような理由でまだ未解決である。

〔参考文献〕 1. N. D. Mackenzie and A. P. Young, J. Phys. C 16 (1983) 5321.

二次元三角格子反強磁性ハイゼンベルクモデルのモンテカルロシミュレーション

東大・理 高須昌子、宮下精二、鈴木増雄

P. W. Anderson によって、基底状態が resonating valence bond 状態であると提唱されて以来数々の議論がなされてきた、二次元三角格子上の反強磁性量子ハイゼンベルクモデルを、モンテカルロシミュレーションの方法で研究する。鈴木-Trotterの公式を用いて、クラスターはスピノン4つのものを、間をあけないで平面にしきつめる。Monte Carlo flips は、global flip, local flip 及び loop flip の3種類をとれば、原理的に無限大の時間をかけて全ての configuration をつくすことが示される。

我々は $2 \times 2 \times 4$ 格子（4はTrotter方向）に関して、シミュレーションによりエネルギー、比熱、帯磁率、負ボルツマン因子の割合を求めて、厳密な計算と比較し、よく一致することを確かめた。

さらに、 $6 \times 6 \times 8$ 格子に関してシミュレーションを行った。低温では負符号問題があつて

精度よく物理量を求めるのは困難であるが、エネルギーに関しては、非常に低い温度で求めることが可能、Imada Ansatz も成立しているように見える。また、 $\langle M^2 \rangle$ の温度依存性から、温度を下げる時 triplet 状態から singlet 状態に落ち込んでいく様子を定性的に見ることが可能。さらに大きな系の計算、および folding method を使った時の改良の程度に関しては、今後、調べていく予定である。

〔文献〕

1. M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. 56 (1976), 1454.
2. M. Suzuki, S. miyashita and A. Kuroda, Prog. Theor. Phys. 58 (1977) 1377.

三角格子上のハイゼンベルク及びXY模型の数値的研究

東工大・理 小口武彦、西森秀穂、田口善弘

三角格子上の反強磁性的なハイゼンベルク模型及びXY模型（スピン $\frac{1}{2}$ ）の基底状態を行列の対角化の方法によって調べ、基底エネルギー、オーダーパラメータ等についての知見を得た。スピン数21までの有限系の数値的に厳密な対角化を実行しAndersonの railroad trestle 法により無限系の性質を推定するという手順で得られた結果は次の通りである。N Jを単位とした基底エネルギーはハイゼンベルク模型では-1.05、XY模型では-0.74でこれらはいずれもスピン波理論や変分法ですでに得られた値を支持しており、Marland-Bettsによる有限系の計算（N=12まで）の解析方法に疑問を投げかけている。三つの副格子ごとの長距離秩序はハイゼンベルク模型では存在せずXY模型では存在する。さらにAndersonのResonating Valence Bondの状態は十分大きい系では正しい基底状態ではなさそうである。今後はこの手法をスピングラスの問題や有限温度の性質の計算に応用していく計画である。

大規模行列の数値的対角化に於ける諸問題

東工大・理 小口武彦、西森秀穂、田口善弘

大規模行列を数値的に対角化する際の主な問題点としては、所要メモリーとCPU-TIME の幾何級数的増大が挙げられる。我々は、この2点について、以下の様な対策を講じた。まず、メモリー対策としては、大規模行列=疎行列という一般的な性質を最大限に活用する為、ノンゼロ要素のみを記憶すれば済む方法、即ち、固有値についてはランチヨス法、固有ベクトルについては、CG法を用いた逆反復法を用いることとした。これにより、固有値では35万次元（N=21）固有ベクトルでは、18万次元（N=20）までの数値的処理に成功した。更に、CPU-TIME についても、ベクトル化により、iteration 1回当たり、30倍の高速化（対スカラー演算比）を達成し、また、ランチヨス法では、最低固有値のみを求めればよいという要請を用いて、部分的三重

対角化（全次元数に対し10%以下の iteration）での収束を実現、ベクトルも、逆反復法の活用により、数回の iteration で収束させることに成功した。

面心立方格子の反強磁性 Heisenberg 模型

東工大・理 小口武彦、西森秀穂、田口善弘

最近接相互作用が反強磁性の三角格子の古典ハイゼンベルグ(H)模型の基底状態は120°構造である。これを三次元格子に拡張して面心立方格子の反強磁性を考える。面心立方格子は4つの部分格子に分かれ、各部分格子のスピンをそれぞれ $\vec{S}_a, \vec{S}_b, \vec{S}_c, \vec{S}_d$ とする、古典H模型でエネルギーの極小を求める。

$\vec{S}_a(\theta, \phi), \vec{S}_b(\theta, \pi), \vec{S}_c(\pi-\theta, \varphi), \vec{S}_d(\pi-\theta, \varphi+\pi)$ となる、 θ, φ はそれぞれ天頂角、方位角で、任意の値でよい。この縮退は量子H模型でどうなるかがこの研究の目的である。

研究の詳細は別の機会で述べることとして、ここでは方法の概略と結果のみを書く、方法は古典H模型で満足するスピンの向きの中で、 θ はパラメータとして残し、 $\varphi = \pi/2$ とする。各スピニはそれぞれの向きを量子化軸として、スピン波の調和近似でハミルトニアンを対角化する。得られた基底状態のエネルギーは

$$\begin{aligned} Eg &= -4|J|S^2N + 4|J|S \sum_k \{ -P_k + \sqrt{P_k^2 - Q_k^2} \} \\ P_k &= 1 + \cos^2 \theta C_x C_y + \frac{1}{2} \sin^2 \theta (C_x C_z - C_y C_z) \\ |Q_k| &= \{ \sin^4 \theta (C_x C_y + \frac{1}{2} C_y C_z - \frac{1}{2} C_x C_z)^2 + \cos^2 \theta (C_x C_z + C_y C_z)^2 \}^{1/2} \\ Ci &= \cos \frac{1}{2} k_i \quad i = x, y, z \end{aligned}$$

$P_k, |Q_k|$ は Brillouin Zone の原点を移して x, y に関して対称の形にすることができる。 Σ_k を実行して、 Eg は $\theta = 0$ (colinear spin configuration) が極小、 $\theta = \pi/2$ (一平面十字構造) が準極小、 $\theta = 54.74^\circ$ (各スピンが正四面体の中心から各頂点に向う構造) が極大となる。Eg の値は、 $S = 1/2$ のとき $N = 20$ までの正確な値を外挿したものとかなりよく一致している。

今後の問題は、第1に φ もパラメータとして考える。第2は磁場により、縮退、スピンフロップの変化を考える。第3は第2近接相互作用が反強磁性の場合(8部分格子)を考える。

格子ゲージ理論のシミュレーション

筑波大・電子情報 小柳義夫

量子多体系の代表例の一つである、格子ゲージ理論のモンテカルロ・シミュレーションについて論じた。場の理論の場合は、空間・時間の格子化は近似であり、 a (格子間隔) $\rightarrow 0$ の極限が物理的な意味をもつ。この点が多くの物性論のシミュレーションと異なる。

基本となるアルゴリズムは、経路積分であり、時間の虚数化によって、Lorentz 距離が対称

的な $x^2 + y^2 + z^2 + t^2$ の形をとる。ゲージ系の作用も、正定値となり、統計力学との対応関係が明示的になる。フェルミオン場 (quark) については、作用が時間内の 1 階微分のため, doubling の問題があるが、通常はカイラル対称性を破る Wilson の作用が用いられる。また反交換性のために大次元の行列の行列式が必要になるが、通常はこれを 1 とおく quenched 近似を取り入れる。これはクォークの仮想対生成を無視することに対応している。

現在のところ、我々は $8^3 \times 16$ や $12^3 \times 24$ 格子上の計算を行っているが、スーパーコンピュータで 20 ~ 200 時間を要する。これからハドロン (π , ρ , p , A 等) の質量、形状因子などが求められつつある。未知のグルオニウム、エギゾチックについての予言も可能になるであろう。

行列式の効果を正しく取り入れた、いわゆる dynamical fermion の分析が今後の課題である。

一次元電子系の量子モンテカルロシミュレーション

東大物性研 永長直人 分子研 滝本淳一

Hirsch らにより改良された、一次元電子系に対する量子モンテカルロ法の有効性と限界を評価し、その上で Modified Hubbard Model の相転移（中性 - イオン性転移）のシミュレーションを行った。求めたいものとしては、(1) 基底状態に関する諸量（エネルギー、電荷分布、スピントリート等）、(2) 相転移に関する性質（秩序変数の値、転移の次数等）、(3) 相関関数、(4) 励起スペクトル、(5) 熱力学的諸量、が挙げられるが、これらの計算の際に現れる困難とその解決法を中心と報告した。特に重要なのは、絶対零度、無限大へ接近する方法であり、カノニカル分布とグランドカノニカル分布の相違、境界条件 (Winding number)、 $4n - 1$ 則などに注意せねばならない事を述べた。有限系対角化法、プロジェクター法との比較で、各方法の有効性についてもコメントした。

一次元電子系における反強磁性 - 電荷密度波転移

分子研 滝本淳一

一次元電子系の基底状態を有限系を厳密に解くことにより調べた。サイト数 = 電子数 ($\equiv N$) の場合、全ての対称性を用いても $N = 12$ で約 1 万次元の行列になり、ほぼ限界に達する。この 1 万次元の行列の最底固有値と固有ベクトルは、coordinate relaxation 法を用いると FACOM M360 で約 2 ~ 4 分で求まる。この方法はモンテカルロ法に比べ、精度が高い、小さな系に対しては速い、基底状態・低励起状態を取り出して調べられる、相互作用が強くても良い等の利点がある（もちろん有限温度ができない、小さな系に限られる等の弱点がある）。

扱ったモデルは次のようなものである：

$$H = -T \sum_{\ell, \sigma} [a_{\ell\sigma}^\dagger a_{\ell+1\sigma} + h. c.] + U \sum_\ell n_\ell^\uparrow n_\ell^\downarrow + V \sum_\ell n_\ell n_{\ell+1} - \frac{A}{2} \sum_\ell (-1)^\ell n_\ell$$

計算の結果基底状態としては A F 相（スピントリ起にギャップがなく、従ってスピントリ関数が巾で減少すると考えられる相）と C DW 相（スピントリ起にギャップがある相）が現れることがわかった。 $\Delta = 0$ の場合 A F - C DW 転移はほぼ $U = 2V$ で起こる。また Δ の値に依らず、 $V/T \lesssim 3 \sim 4$ では転移は連続転移であり、これより V が大きくなると不連続転移になることもわかった。

一次元周期アンダーソン模型の熱力学

東北大・理 佐宗哲郎、清野 豊

最近大きな話題となっている「重いフェルミオン系」（しかもそれが超伝導を示す場合さえある）を記述する最も簡単なモデルとして、一次元周期アンダーソン模型の持つ性質を明らかにすることが望まれている。ここでは、量子モンテカルロ法として、高橋・今田の方法を適用した結果について報告する。

軌道縮退は無いとし、tight-binding 近似を用い、システムサイズ $N = 8$ 、c 電子の重なり積分を 1 とする。c-f 混成 $V = 1$ 、f-f クーロン反発 $U = 0 \sim 4$ 、f レベル $E_f = -1$ 、温度 $T = 0.1 \sim 4$ 、Trotter size M は計算時間の制限から今のところ $M \leq 4$ である。 $M = 8$ のデータは未だ収束が良くない。 V を 0.5 以下、または U を 4 以上とすると、シミュレーション中に電子が空間的に動かなくなってしまう。 $V = 1$ 、 $U \leq 4$ の範囲で言えることは、 $T < 1$ での比熱及び反強磁性磁気構造因子の増大である。 M を大きくして低温で信頼できるデータを出す必要があるが上の結果は、今のモデル及びパラメータでは近藤効果がおこる前に磁気秩序が勝ってしまう傾向を示しているように思われる。オーダーしない Fermi liquid 状態を得るには、軌道縮退を入れるか、系の次元を増やすかが必要と思われる。しかし一方、オーダーしても、ある程度近藤効果との競合が計算で得られれば、それはそれとして面白いと考えられる。

周期的アンダーソン模型への量子モンテカルロ法の応用

物性研 斯波 弘行

ある種の Ce 化合物、U 化合物で高密度近藤状態が実現することが観測され、その理論的解明へ向けて様々な努力がなされている。ここでは single-orbital の一次元周期アンダーソン模型に対して量子モンテカルロ法を適用して今まで著者が得ている結果を紹介した。計算はサイト数 = 12、電子数 = 24 に対して行い、伝導電子の全バンド巾 = 4 という単位で、f 電子間のクーロンエネルギー = 4、sf 混成 = 1、という場合についてシミュレーションを実行した。測定量としては、s、f 各電子のスピントリ率、電荷感受率の波数依存性、温度依存性を主として見た。高温域で f 電子が局在スピントリ率が見られる。温度の低下と共に反強磁性的スピントリの発達していく様子を示している。低温では高密度近藤状態ではなく、RKKY 相互作用が支配的

状況が実現している様に思われる。この結果を足掛かりに高密度近藤状態の解明へ向けてひき続き努力したいと考えている。

相互作用する一次元電子系におけるアンダーソン局在と非局在

東北大・理 佐宗 哲郎

相互作用のない一次元電子系は、わずかのランダムネスでも（特殊な例外を除いて）必ずアンダーソン局在する。相互作用している現実の系でアンダーソン局在がどう変化するかは、理論面からも実験面からも興味深い、とくに、電子間に引力が働くとき、超伝導と局在の競合を調べることは興味深い。

ここでは、相互作用する一次元電子系をボゾン表示し、さらに位相変数表示したX Y類似のハミルトニアンにランダムネスを導入したモデルについての結果、とくに、電子間引力に由来する量子的ゆらぎの増加によって、位相の不純物によるピン止めがはずれ、局在から非局在へ転移する現象について、量子モンテカルロ法によって調べた結果を報告する¹⁾。結果は、ランダムネスの小さいときは、鈴村・福山の理論と矛盾しないが、ランダムネスを増すと大きくはずれてくる。しかし、局在・非局在転移の近傍では、システム・サイズまたはランダムネスについての平均操作の精度（サンプルの数）が結果に影響していて、さらに計算を拡張する必要がある。

〔文献〕 1. T. Saso, Y. Suzumura and H. Fukuyama, Proc. Int. Conf. Low Temp. Physics. (North-Holland, 1984)

一次元フェルミ粒子系の転送行列法による計算

原研 横田光史、別役 広

$H = -t \sum_i (C_i^\dagger C_{i+1} + C_{i+1}^\dagger C_i) + v \sum_i n_i n_{i+1}$ で記述される一次元フェルミ粒子系に対する分配関数は、Trotter方向の大きさ m の近似で $Z_m = \text{Tr} (\frac{\pi}{\hbar} e^{-\frac{\beta H_k}{m}})^m$ ($H = H - \frac{\mu}{2t} \sum_i (n_i + n_{i+1})$, $\hbar = \sum_k \hbar_k$) となる。この系に対して数値的に正確な転送行列法を使い、さらに $\frac{1}{m^2}$ の外挿を行うことによって $m \rightarrow \infty$ のエネルギー、相関関数などを求めた。half-filled band の $\frac{v}{2t} = 1$ で基底状態が金属-絶縁体転移を起こすとされているが、実際に粒子数のゆらぎをみると $\frac{v}{2t} > 1.0$ と $\frac{v}{2t} < 1.0$ では低温での振舞に明らかな違いがある。以上の計算は β が大きくなる低温では誤差が大きくなっていく。

他方、Projector法を用いると系の基底状態について、転送行列法を用いて数値計算することができる。たとえばエネルギーに対して $e^{-4\beta E} = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\langle \Psi | e^{-(\beta + 4\beta)H} | \chi \rangle}{\langle \Psi | e^{-\beta H} | \chi \rangle}$ (E は基底エネルギー, $|\Psi\rangle$, $|\chi\rangle$ は基底状態と直交しないような任意の状態) という式を用いて、 $e^{-\beta H} \simeq (\prod_k e^{-\frac{\beta H_k}{m}})^m$ と近似すると、 $m \rightarrow \infty$ の値は、 $(\frac{\beta}{m})^2$ の外挿から求まる。実際の計算では、 β は十分大きい有限値とする。

この方法により求めた相関関数は、Lanczos の方法で求められているものとよく一致する。

物性研究所談話会

日 時 1985年5月13日(月)午後4時～5時

場 所 物性研究所旧棟1階 講義室

講 師 青野正和氏

(所属) (無機材質研究所)

題 目 イオン散乱による表面構造解析とイオン一表面電子交換

要 旨：

イオンと固体表面との電子交換は、基礎的にも応用上も巾広い重要性をもっているにもかかわらず、今だに不明な点が多い。本講演では、 He^+ と表面との電子交換の機構を明らかにするために筆者と共同研究者が最近おこなった $\text{He}^+(1s)$, $\text{He}^0(1s^2)$, $\text{He}^*(1s2s)$ を入射ビームとする三次元角度分解イオン散乱分光に関する研究について述べる。さらに、上の研究に基づいて、 He^+ のような希ガスイオンと Li^+ のようなアルカリイオンとは表面での散乱の立場から見てどのように異なるかを論じ、 Li^+ イオンの散乱を用いて表面の構造解析を行った二、三の例を示す。

日 時 1985年5月27日(月)午後4時～5時

場 所 物性研究所旧棟1階 講義室

講 師 毛利信男氏

(所属) (物性研究所超高压部門)

題 目 固体内電子間相互作用と高圧効果

要 旨：

固体の物性は固体内電子の様々な相互作用を反映し、多種多様な様相を呈している。ここでは固体内電子の挙動がその物質の異常な電気伝導性と磁性に反映している2～3の典型的物質(NiS_2 , Cr合金, 3d遷移金属合金)について高圧下の実験で得られた結果を示し、超高压下の物性研究の意義について述べたい。

日 時 1985年6月10日(月)午後4時～4時30分

場 所 物性研究所旧棟1階 講義室

講 師 石本英彦氏

(所属) (物性研超低温物性)

題 目 固体 ${}^3\text{He}$ の核磁性

要 旨：

H C P 相およびB C C 相固体³He におけるヘリウム核スピンの磁化測定の結果と核スピン間の相互作用について述べる。

日 時 1985年6月10日(月)午後4時30分～5時
場 所 物性研究所旧棟1階 講義室
講 師 舛 本 泰 章 氏
(所属) (物性研極限レーザー)
題 目 光吸収で見る半導体量子井戸中の励起子の収縮
要 旨：

水素原子を一次元井戸型ポテンシャルに入れ、井戸厚をボーア半径程度にすると、波動関数はどう変化するのであろうか？

このような基本的な量子力学の問題を実験的に調べる事が一次元井戸中の水素原子の代わりにその極めて良い類似物である半導体量子井戸中のワニア励起子をもつてくる事により可能である。実験には、井戸厚が30 Å から 254 Å にわたる GaAs - AlAs 量子井戸を用い、光吸収により励起子がもつ振動子強度を井戸厚の関数として調べた。励起子の振動子強度は電子と正孔の波動関数の重なりの二乗に直接比例しており、励起子の波動関数のミクロなプローブとなるからである。実験結果は、井戸厚の減少と共に励起子の振動子強度は大きく増加しており、品田・菅野の公式を一般化した変分モデル計算とつきあわせる事により、励起子の波動関数が急激に収縮していく様子を、ほぼ完全にとらえている。

物性研ニュース

東京大学物性研究所の教官公募の通知

下記により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) 研究部門名および公募人員数

中性子回折物性部門 教授 1 名

(2) 研究分野および内容

本部門では、平川、星埜、伊藤、吉沢の4所員を中心とする研究グループが、現在は主に原研 J R R - 2 に設置してある実験設備を用いて、中性子散乱による物性研究を行っており、同時に原研の新原子炉計画に合わせて、新しい設備の建設と研究施設の新設を計画中である。これに加え、本所は日米協力事業「中性子散乱」の国内における実施機関として日米協力研究を推進している。平川所員は昭和60年度末、星埜所員は昭和61年度末に停年退官の予定である。

本公募は、本所における中性子散乱による物性研究を強力に推進する人材を求めるものである。また昭和62年度からは、上記日米協力研究の推進に中心的役割りを果して頂くことを期待している。

(3) 公募締切

昭和60年8月3日（土）（必着）

(4) 就任時期

昭和61年度中のなるべく早い時期を希望する。

(5) 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）
- 5編程度の主要論文の別刷、研究計画書（2,000字以内）

(ロ) 応募の場合

- 履歴書
- 業績リスト（必ずタイプすること）
- 5編程度の主要論文の別刷、研究計画書（2,000字以内）
- 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

(6) 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
電話 03 (478) 6811 内線 5004, 5022

(7) 注意事項

中性子回折物性部門教授応募書類在中、又は意見書在中の旨を表記し、書留で郵送のこと。

(8) 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

豊 沢 豊

東京大学物性研究所の教官公募の通知

下記により教官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) 研究部門名および公募人員数

極限物性部門超高压 助教授 1名

(2) 研究分野および内容

物性研究所では、毛利・秋本の2所員を中心とするグループが、超高压下の物性研究を、低温から高温までの広い温度領域で、X線回折、光学測定、電気的測定、磁気的測定、熱的測定、等の手法を用いておこなっている。秋本所員は昭和61年3月末停年退官の予定である。

本公募の助教授は、超高压下の物性研究を指向し、就任後、現在、低温超高压研究室を建設中の毛利教授と相補的な関係ができるることを期待している。また、極限条件下の物性研究の特質をよく理解し、超高压高温実験技術面での先端的領域の開拓にも意欲的であることが望ましい。

(3) 公募締切

昭和60年9月14日（土）（必着）

(4) 就任時期

決定後なるべく早い時期を希望する。

(5) 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）

○5編程度の主要論文の別刷、研究計画書（2,000字以内）

(口) 応募の場合

○履歴書

○業績リスト（必ずタイプすること）

○5編程度の主要論文の別刷、研究計画書（2,000字以内）

○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

(6) 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

電話 03(478)6811 内線 5004, 5022

(7) 注意事項

極限物性部門超高压助教授応募書類在中、又は意見書在中の旨を表記し、書留で郵送のこと。

(8) 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

豊 沢 豊

東京大学物性研究所の教官公募の通知

下記により教官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) 研究部門名および公募人員数

極限物性部門超低温物性 助教授 1名

(2) 研究分野および内容

物性研究所超低温物性グループでは、現在永野、小川、生嶋、石本の4所員が中心となって2段核断熱消磁装置、1段核断熱消磁装置、および大型希釈冷凍装置を用いて超低温での物性研究を行っている。

永野所員は昭和61年3月末に停年退官の予定である。本公募では上記装置を用い、現所員と協力して超低温における物性研究を強力に推進し、新しい分野の開拓に意欲をもつ人材を求める。なお超低温での実験の経験を有することが望ましい。

(3) 公募締切

昭和60年9月14日（土）（必着）

(4) 就任時期

昭和61年4月1日以後なるべく早い時期を希望する。

(5) 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）
- 5編程度の主要論文の別刷、研究計画書（2,000字以内）

(ロ) 応募の場合

- 履歴書
- 業績リスト（必ずタイプすること）
- 5編程度の主要論文の別刷、研究計画書（2,000字以内）
- 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

(6) 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
電話 03(478)6811 内線5004, 5022

(7) 注意事項

極限物性部門超低温物性助教授応募書類在中、又は意見書在中の旨を表記し、書留で郵送のこと。

(8) 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

豊 沢 豊

人 事 異 動

発令年月日	氏 名	異 動 事 項	現（旧）官 職
60.4.1	荻野瑠子	掛主任（庶務掛）に昇任	（共通実験室工作室）
”	高橋忠	掛主任（人事掛）に昇任	（人事掛）
”	島田綾子	掛主任（工作室）に昇任	（庶務掛）
60.5.1	大川房義	北海道大学理学部助教授に昇任	（理論部門助手）
60.5.31	浅海勝征	辞職	（極限物性部門 超高压教務職員）

昭和60年度 前期短期研究会予定

研究会名	開催期日	参加予定人員	提案者
擬二次元電子の 励起状態と緩和 過程	7月15日 7月16日 (2日間)		○後藤武生(東北大・理) 三浦登(東大・物性研) 長沢信方(東大・理) 張紀久夫(阪大・基礎工) 仁科雄一郎(東北大・金研)
		50名	

○印は提案代表者

Technical Report of ISSP 新刊リスト

Ser. A.

- No. 1508 Band Structure of Ag_2F . by Noriaki Hamada, Sachio Ido, Koichi Kitazawa and Shoji Tanaka.
- No. 1509 A Simple Model for Superconductor-Semiconductor Transition. by Daijiro Yoshioka and Hidetoshi Fukuyama.
- No. 1510 Photoemission Study of the Existence of a Valence-Band Satellite in Fe. by Hiroo Kato, Takehiko Ishii, Shigeru Masuda, Yoshiya Harada, Takaya Miyano, Tadahiro Komeda, Masaru Onchi and Yasuo Sakisaka.
- No. 1511 Many-Body Effects on the Luminescence Spectrum of Modulation-Dopped Quantum Wells. by Gerrit E. W. Bauer and Tsuneya Ando.
- No. 1512 Finite-Temperature Surface Properties of Itinerant-Electron Ferromagnets, by Hideo Hasegawa.
- No. 1513 Magneto-Transport Study of d-f Interaction in EuSe in High Magnetic Fields. by Kohji Yamada and Noboru Miura.
- No. 1514 Resonant Photoemission in Transition Metal Bromides. by Akito Kakizaki, Tatsuya Miya, Kenzo Naito, Isao Fukui, Hidenao Sugawara, Ichiro Nagakura and Takehiko Ishii.
- No. 1515 Electric and Magnetic Properties of a Neutral Radical, 2-Cyano-10-methyl-5-phenazinyl by Kunio Awaga, Tadashi Sugano and Minoru Kinoshita.
- No. 1516 Localization and Superconductivity. by Hidetoshi Fukuyama.

- No. 1517 Weak Itinerant Ferromagnetism in Weakly Localized Regime. by Hidetoshi Fukuyama.
- No. 1518 Line Width of Inter-Subband Absorption in Inversion Layers: Scattering from Charged Ions. by Tsuneya Ando.
- No. 1519 Subband in Space-Charge Layers on Narrow Gap Semiconductors: Validity of Semiclassical Approximation. by Tsuneya Ando.
- No. 1520 Superconductivity in Kondo Lattices. by Fusayoshi J. Ohkawa.
- No. 1521 Electronic Structures of U_3P_4 and U_3As_4 Studied by Synchrotron Radiation Photoemission Spectroscopy. by Shigemasa Suga, Masaki Yamamoto, Kazuo Soda, Tamiko Mori, Shigeru Takagi, Norio Niitsuma, Takashi Suzuki and Tadao Kasuya.
- No. 1522 Resonant Photoemission Studies of Mixed Valence Sm_3Se_4 . by Shigemasa Suga, Masaki Yamamoto, Masaki Taniguchi, Masami Fujisawa, Akira Ochiai, Takashi Suzuki and Tadao Kasuya.
- No. 1523 Photoabsorption and Photoreflection Spectroscopy on Solid Materials, by Takehiko Ishii.
- No. 1524 Polarized Reflectance Spectra of the Organic Conductors: α - and β -modifications of Di{ bis (ethylenedithiolo) tetrathiafulvalene } triiodide, $(BEDT-TTF)_2I_3$. by Tadashi Sugano, Katsumi Yamada, Gunzi Saito and Minoru Kinoshita.
- No. 1525 Gap States in Hydrogenated Amorphous Silicon: The Trapped Hole Centres (The A Centres). by Kazuo Morigaki, Hisashi Takenaka, Izumi Hirabayashi and Mihoko Yoshida.
- No. 1526 Time-Resolved Optically Detected Magnetic Resonance of Conduction Band Tail Electrons and A-Centres in Hydrogenated Amorphous Silicon. by Hisashi Takenaka and Kazuo Morigaki.
- No. 1527 Orbital Antiferromagnetism in CeB_6 . by Fusayoshi J. Ohkawa.
- No. 1528 Localization and Superconductivity. by Sadamichi Maekawa, Hiromichi Ebisawa and Hidetoshi Fukuyama.

- No. 1529 Localization and Interaction in One-Dimensional Electron Systems.
by Tetsuro Saso, Yoshikazu Suzumura and Hidetoshi Fukuyama.
- No. 1530 Localization Induced Strong Spin Fluctuations and Superconductivity.
by Hidetoshi Fukuyama.
- No. 1531 Spin Fluctuations and Magnetoresistance in Dirty Metals. by Hidetoshi Fukuyama.
- No. 1532 Direct Experimental Observation of Two-Dimensional Shrinkage of the Exciton Wavefunction in Quantum Wells. by Yasuaki Masumoto, Mitsuru Matsuura, Seigo Tarucha and Hiroshi Okamoto.
- No. 1533 Longitudinal Magnetophonon Resonance in n-Type InP in Ohmic and Hot Electron Region. by Hiroyuki Taki, Katsuki Oshiden, Eiji Ohta, Makoto Sakata, Shoji Yamada, Takashi Fukui and Noboru Miura.
- No. 1534 Superconducting Properties of Amorphous $\text{Si}_{1-x}\text{Au}_x$ near Metal-Insulator Transition. by Takao Furubayashi, Nobuhiko Nishida, Masaaki Yamaguchi, Kazuo Morigaki and Hidehiko Ishimoto.
- No. 1535 Simple Monitoring System for Single Subpicosecond Laser Pulses Using SH Spatial Autocorrelation Method and CCD Image Sensor. by Yuzo Ishida, Tatsuo Yajima and Akira Watanabe.
- No. 1536 Superconductivity of $\text{Ge}_{1-x}\text{Au}_x$ Alloy Films. by Masaaki Yamaguchi, Nobuhiko Nishida, Kazuo Morigaki and Hidehiko Ishimoto.
- No. 1537 Interaction Effects in Anderson Localization, by Hidetoshi Fukuyama.
- No. 1538 Localization in Strong Magnetic Fields and Quantum Hall Effect.
by Tsuneya Ando.
- No. 1539 High-Temperature Magnetic Susceptibility of CuCl_2 -Intercalated Graphite. by Hironori Nishihara, Isamu Oguro, Masatsugu Suzuki, Kei-ichi Koga and Hiroshi Yasuoka.
- No. 1540 Magnetization of hcp Solid ^3He . by Yasumasa Takano, Nobuhiko Nishida, Yu-ichi Miura, Hidehiko Ishimoto, Shinji Ogawa, Toru Hata and Toyoichiro Shigi.

No. 1541 Spin - $\frac{1}{2}$ One-Dimensional Heisenberg Ferromagnet at Low-Temperature.
by Minoru Takahashi and Miki Yamada.

物性研究所夏期講座「物質合成と物性科学」

下記のように、最新の物性研での研究を中心に、所員が講義をいたします。程度は学部3年生以上的一般向けのものです。

[日 時] 1985年7月15日(月) 10:00 ~ 18:00

16日(火) 9:30 ~ 12:00

[場 所] 東京大学生産技術研究所 第1会議室(Q棟3階)

(物性研A棟の向いの建物)

[講 義]

7月15日(月)

10:10 ~ 12:15 安藤 恒也 「半導体超格子の物理」

13:30 ~ 15:35 平川金四郎 「磁性体の合成と磁性物理学」

15:55 ~ 18:00 斎藤 軍治 「有機超伝導体」

7月16日(火)

9:30 ~ 11:35 秋本 俊一 「高圧下の物性と地球の内部」

内容についてのお問い合わせは下記へ

電話 03(478)6811 内線5813(寺井)

編 集 後 記

去年のような猛暑や大雪もなく、今年は季節が正常に移って行くようです。六月も普通に梅雨入りをした様子です。今号では超高圧の毛利先生と化学分析室の大道寺さんに寄稿していただきました。また三つの短期研究会報告も掲載されることになりました。編集部では皆様の御意見をお待ちしています。次号の原稿の締切りは8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

高 橋 實

石 川 征 靖

