

# 物性研だより

第30卷  
第5号

1991年1月

## 目 次

○ 「物性研だより」発刊30周年に際して	守 谷 亨	1
○ 「物性研だより」創刊の頃	中 嶋 貞 雄	2
研究室だより		
○ 高田研究室	高 田 康 民	3
物性研短期研究会報告		
○ $10-10^3$ 多体系の特性		13
世話人 菅野 晓, 郷 信広, 山口 豪, 西岡英寿, 石井 靖		
第7回物性専門委員会(14期)議事録		27
物性研究所談話会		31
物性研ニュース		
○ 東京大学物性研究所 助手公募		35
○ 東京大学物性研究所 助手公募		37
○ 退官記念講演会		39
○ 人事異動		41
○ テクニカル・レポート 新刊リスト		42
編集後記		

東 京 大 学 物 性 研 究 所

ISSN 0385-9843

## 「物性研だより」発刊30周年に際して

守 谷 亨

物性研だよりは1981年6月に発刊されました。これは創立当初の忙繁状態が次第に落ちつき、スタッフも整って来た時機に、所内外の要望に応えて「物性研究者間の意思の疎通に役立てる」という主旨に添って始められたものです。「物性研究所だより」であると同時に「物性研究者だより」であるという当初からの考え方をここに再認識し、継承発展させたいものと思っています。

今改めて第1巻の頁をひろげてみると、物性研の在り方に対して所内外の研究者が、当時如何に強い関心を持ち、積極的に発言していたか想起されます。そして「物性研究所は我国の物性研究者が作ったもの、即ち我々（すべての物性研究者）の研究所である」という意識が行間に漂っているのを感じます。経済的に恵まれない時代の我国物性研究の拠点として、そしてまた全体の水準向上のための汽船車としての役割が物性研に課せられて居りました。

30年後の今日、物性物理学は大きく進展し、諸大学の設備も飛躍的に向上し、国際水準を抜くものも珍しくありません。研究者の世代交代も進み、その中心は物性研創立当初のことを直接には知らない世代に移っています。初期の物性研だよりが今や歴史的資料とみなされるのも当然のことでしょう。

全国共同利用研としての物性研のあるべき姿も時代と共に変わって来ています。創立30周年を契機に現在立案中の将来計画を進めるに当たっては、今後の物性研の在り方について広く所内外で議論する必要があると思います。既に物研連物性専門委員会、拡大物性委員会などで議論が開始されていますが、何卒たくさんの方々から忌憚のない御意見をお寄せいただきたいものと願っています。

このような時代の流れの中で、物性研究者間の情報交流の場として役立つことを目的とする「物性研だより」の果たすべき任務には依然として重要なものがあると思います。今後ともマンネリに墮することを自戒しつつ、時代に則してその機能を發揮して行くよう努力したいと考えております。この点についても御要望をお聞かせいただければ幸甚です。

## 「物性研だより」創刊の頃

中 嶋 貞 雄

物性研究所の木下所員から、「物性研だより」が第30巻になりますので何か寄稿して下さい、と依頼されたとき、内心思わず“え？”と戸惑った。その気配を電話の向う側でいち早く察知されたらしく、「中嶋先生は創刊当時の委員長でしたから」と木下さんが補足され、ああそうでした、とうやく納得した次第である。日頃、物性研だよりを通じて物性研の活動に接することを愉しみにしている私であるが、自分が初代の編集責任者であることは忘れていた。私ばかりでなく、多くの読者にとり、物性研だよりはいまや空氣か水のような存在になっているのではなかろうか？ 共同利用研究所としての物性研がその機能を順調に果たしつつある証拠といえる。

物性研共同利用掛が送って下さった創刊号コピーを手にし（私の手もとにあったオリジナルは退官の際に紛失）、当時の所内外の厳しい状況を現状と比較し、今昔の感にたえないである。

1961年1月に名大理学部から物性研に赴任した私は、早速「物性研だより」の企画・編集・刊行の責を負うこととなったが、この物性研だよりという名称自体、物性研図書委員会での議論の末に決まったものである。当時の物性研究所長武藤俊之助先生は、発刊の辞として“かねがね所外の方々より要望のあった「物性研だより」が発刊されることになって真に喜ばしいことである。こうした企ての必要を強く感じておられた方々の内には、しごれを切らしておられる面もあるかと推察するが……”と創刊号に書いておられる。さらに名称についても“さて本誌を名付けて「物性研だより」としたこととは仲々良い思いつきだと私は思っている。正にこれは友人間の「たより」のようなものである”と評価しておられる。

一方、当時物性研設立運動のリーダーのひとりであった久保亮五先生は、同じ創刊号のサロンの欄に寄稿され、「物性研だより」という名称は上意下達のひびきがあって面白くないとされながらも、“私が「物性研だより」の機能としていちばん大事だと思うことは、それが実際にそのような研究活動の一つのメディアムになることである。そのためには、物性研だよりが、上意下達の機関でもなく、また直訴箱でもなく、物性研を中心とした fcc 的機能を果すことが本質的である”と書いておられる。

部分的な引用で武藤、久保両先生の真意をつくしているとはいえないが、物性研創設直後の、所内外の厳しい空気を、若い読者にもいくらか感じとっていただければ幸いである。「物性研だより」は、そうした空気の中から誕生したのである。

## 研究室だより

### 高田研究室

高田康民

着任後5年が過ぎたと書く機会が与えられた。丁度自分の研究に一つの区切りが付いた時でもあり、今後の方針を考える上でも有用であるので、喜んで書くことにした。主にこの5年間（といっても着任後の最初の1年間は体調を崩していたこともあって1編の論文も書けませんでした。スミマセン。）の研究成果について要約しますが、研究室と言っても初めの3年間は全く私一人だけの研究室だったので、殆どが私の個人的な研究動機とその結果に関する記述ということになります。尚、最近の私の研究の中で大きな部分を占めてきたのが、物性研の甲元真人氏、東北大教養の安原洋氏、東大理学部の青木秀夫氏らとの共同研究であり、これらについても触れることにする。又、私の一次元電子系に関する研究では、助手の北孝文氏にいくつかの数値計算を手伝ってもらった。

ところで、物性研着任の前には東大理学部で2年余り、アメリカの2ヶ所で各2年余りの計6年余りを助手で過した。それぞれの場所では全く違う分野の研究を各指導教官の興味の持てる範囲内で行ってきた。（このように分野を変えたため同じシリーズの国際会議に3回以上出席したことはないように思います。）このようなやり方は各指導教官の物理を内面から理解するのに大変成功したが、もちろんこのやり方をとった実際的な理由はアメリカのポスドク制度にある。すなわちポスドクがまず認識していることは、新しい所に移った日が次の研究場所を探す始まりの日であるということで、指導教官の理解できる範囲で出来る限り早く成果をあげて信頼を得る（よい推薦状を貰う）必要がある。いずれにしても、このような経験によって私にとって全く新しい分野であっても、その分野の適当な人と一緒にやれば半年から長くても一年でそれなりの成果はあげられるとの自信を得たが、のことよりも恐らく私にとってより重要な財産はこれらの一流と言われる理論物理学者と比べて自分のどの能力が勝っている（或いは、少なくとも遜色がない）か、又、どの能力が明らかに劣っているかについてある程度の見極めがついたことである。

さて、物性研に着任して考えたことは、それまでの経験の反動として、まず何かをじっくりやること、その際、新しい定式化が必要なら多少数学的に走りすぎるとしてもそれをやること、計算については正確さと速さについては自信があるので、例えば摂動計算なら他の人が普通はやらない（やれない）ような項までも厭わないで考慮すること、選ぶテーマについては物性物理の基礎に根ざした容易に回答が得られそうもないことを中心に据えることにした。ただ、このようなことだけを長くやってはいられないで、これらに派生する小テーマについても隨時していくということにした。尚、私の研究室は物性研の昔の区分で言うと理論Ⅲに属するが、最近東工大に移られた斯波弘行氏によると理論Ⅲでは主に Formal Theory をやることになっていたそうである。着任当時は

このことを全く知らなかったが、5年たって振り返ってみると結果的には私はこの理論Ⅲの使命に忠実であったことになる。ただし実際は、もはや存在しないような区分名に縛られたようなことを続けたために時流に乗れず、恐らく物性研では前代未聞の、一度もどの様な形でも科研費を貰ったことのない貧乏研究室になっている。

前置きはこれ位にして研究成果について述べます。もちろん物性物理の未解決な大問題と言えば多体問題と言うことになる。これをどの切口で考えるかによって全く違う物理が出来てしまうのであるが、d-電子やf-電子の関与した狭いバンド（或いは Tight-Binding 近似で考えられるような電子）での電子相関はハバード模型、或いはそれに関連した様々な模型を通して研究されている。この時、バンド巾と電子相関Uの比が重要なパラメータとして登場し、これがバンド効果と多体効果のからみを決めることになる。しかし着任当時はこのような既によく知られた難問をやるよりは殆ど話題にならないがそれでも重要と思われる多体問題をやることにした。それは固体物理の教科書で Tight-Binding 近似と同列の Nearly-Free-Electron 近似で扱われる s-電子や p-電子でのバンド効果と多体効果のからみの問題である。この時、電子相関の大きさと比べるべき量は明らかにバンド巾ではなく、周期ポテンシャルの逆格子ベクトル成分、すなわちバンド・ギャップである。

さて、この問題の出発点は自由電子系であり、それにクーロン相関を入れると電子ガス模型の多体問題ということになる。そこでこの5年間、これを徹底してやったが、動的ないくつかの問題を除けば、ほぼ当初の目的は達成されたと考えている。すなわち変分法と摂動展開法を合成した「有効ポテンシャル展開（E P X）法」を開発することにより、リング型と梯子型の重要な項を全て取り込み、しかもパウリ排他則を満たすようにこれらに対する交換型ダイヤグラムも全て正確に扱うことが出来るようにした。この結果、相関エネルギー  $E_0$  に関して、その値が正確に出されていると言われているグリーン関数モンテカルロ（GFMC）法の結果と比べて、広い濃度領域（いわゆる  $r_s$  パラメータで10以下）で1%未満の違いで求まった他、スピンに依存した対相関関数、その Fourier 変換である静的形状因子、運動量分布関数  $n_k$ 、そのフェルミ面でのとびである繰り込み因子  $z$  などが正確に求められた。[1-3] 又、 $n_k$  が他の近似計算に比べていかに正確に求められているかを客観的に示すために、 $E_0$  と  $n_k$  の間で成り立つ新しい正確な関係式をファインマンの定理に基づいて導き出し [4]、私の計算した  $n_k$  がこの関係式をほぼ正確に満たすが、他のはそうならないことを明らかにした。[5]

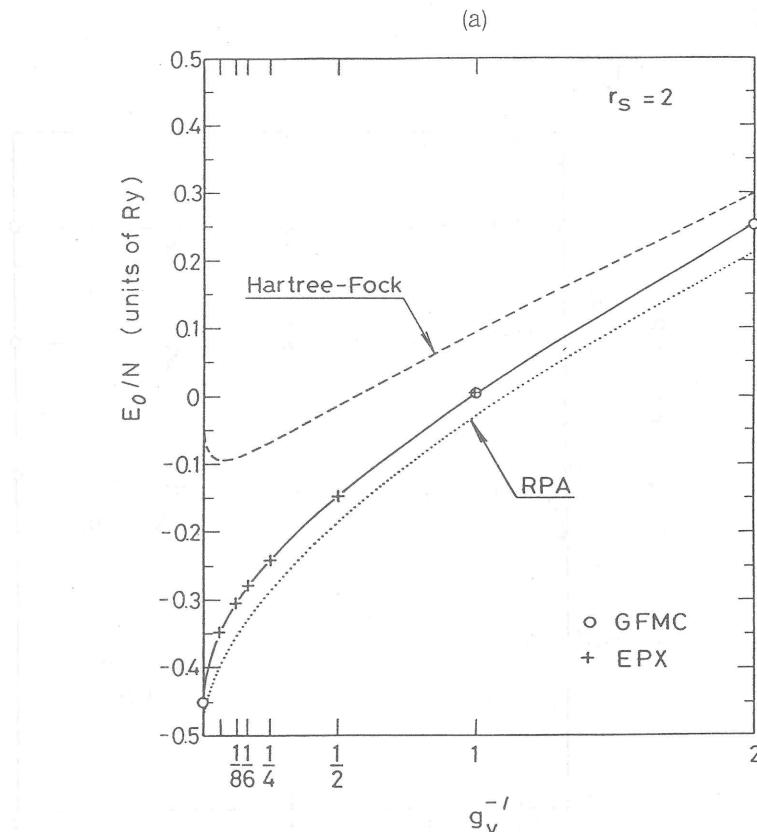
更に E P X 法を基底状態に対してだけでなく低励起状態をも取り扱えるように拡張し、フェルミ流体パラメータが第一原理から計算されるようにした。[6] 実際に千個以上の項を組織的に取り扱うことにより、圧縮率  $\chi$ 、スピン帯磁率  $\kappa$ 、有効質量  $m^*$ などを計算した。これらの値がどれくらい正確かを見積るために  $\chi$  の値を熱力学的に  $E_0$  を使って得られる  $\chi$  の値と比べてみた。その結果、 $r_s \leq 6$  の金属密度領域では、これら2つの  $\chi$  はほぼ一致し、計算が自己無撞着であることが確かめられた。 $\kappa$  については、これまで正しいと考えられていた  $\kappa$  は、実は RPA 近似の値に過ぎないこ

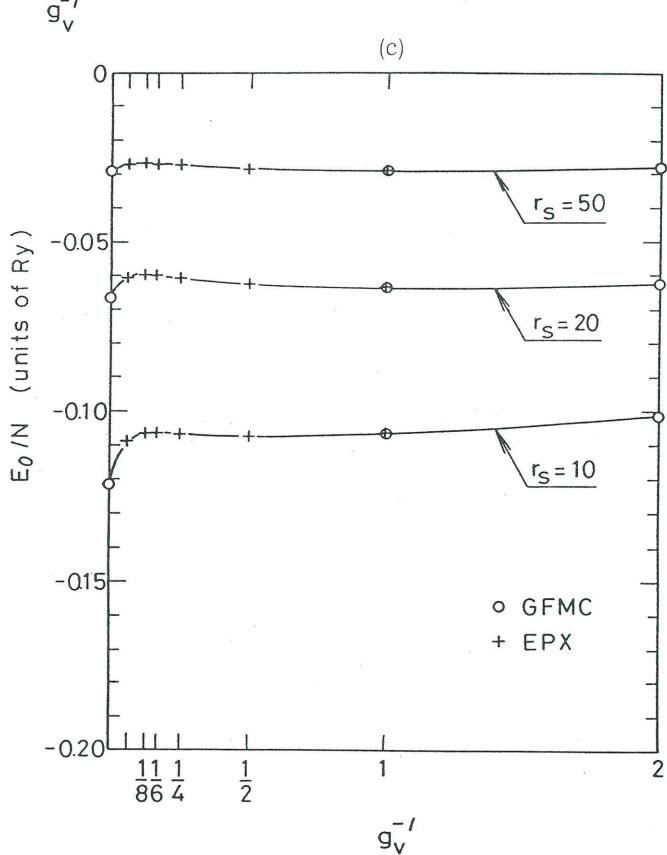
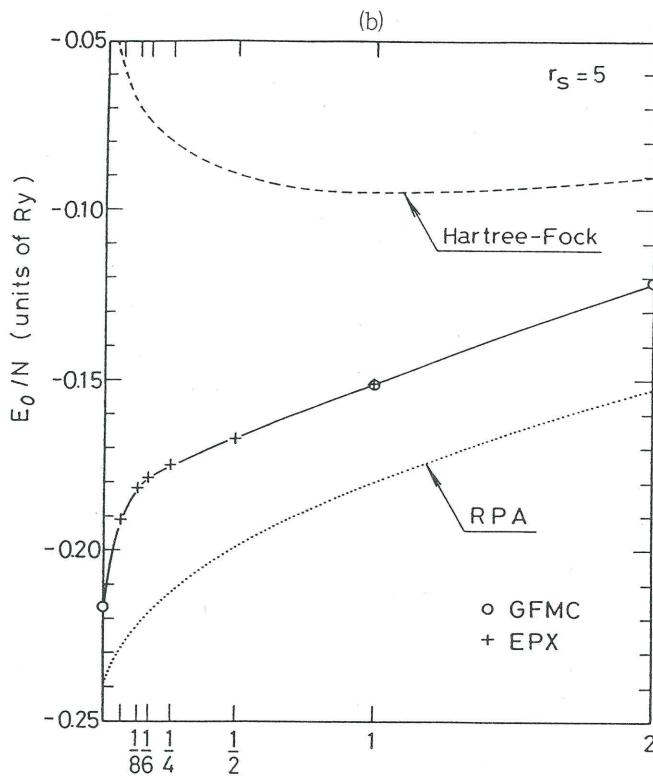
とを明確にし、正確な  $\kappa$  は金属密度領域ではもう少し小さいことを示した。又、 $m^*$ については、安原洋氏が明らかにしていたように少なくとも  $r_s \leq 6$  では相互作用のないときの値  $m$  より常に小さくなること（軽くなること）を確かめた。尚、半導体などで電子状態のレベル間隔はハートレー近似でのそれよりも多体効果を入れた計算の方が大きくなることが知られているが、これは電子ガスで  $m^*$  が  $m$  より軽くなる物理と同じである。

上述したような結果は、ほぼ解っていたことを計算力に任せて、より正確な値を導いてみせただけという見方もできるが、最近、電子ガス系に関連して自分ではとてもおもしろいと思う関係を見出した。[3] 図1(a)を見て頂きたい。これは全電子数  $N$  が  $r_s = 2$  という決まった状態で、一電子当りの基底状態での全エネルギー  $E_0/N$  を縮退半導体などでよくみられるような多谷系での谷縮退度  $g_v$  の関数としてリドベルグ(Ry)単位で書いたものである。スピン自由度も考えに入れると、これはいわば 1 つの準位当り  $2g_v$  個の縮重重度をもつ相互作用するパラ統計粒子の全エネルギーの振舞い

図1. 多谷電子ガス系の一電子当りの全エネルギーを Ry 単位で谷縮退度  $g_v$  の関数として書いたもの。

電子密度は  $r_s$  パラメータで指定され、(a)では 2, (b)では 5, (c)では 10, 20, 50について示してある。白丸の点は G F M C 法の結果、十字印の点は E P X 法の結果である。(両者は  $g_v = 1$  では一致する。) 破線と点線は相互作用の効果をそれぞれハートレー・フォック近似と R P A 近似で取り入れた結果である。尚、 $g_v = 1/2$  は強磁性状態、 $g_v = \infty$  は電荷ボーズ粒子系に対応する。





を示していることになる。図中で破線と点線は、相互作用の効果をそれぞれハートレー・フォック近似とRPA近似で取り入れた結果を示すものであり、白丸の点はGFMC法での結果で、 $g_v=1$ は通常の電子ガス系に対応するものであり、 $g_v=1/2$ は強磁性状態のそれであるが、 $g_v=\infty$ は電荷ボーズ粒子系の結果である。この白丸の3点を見ているだけでは気付かなかったが、これにEPX法による他の $g_v$ での値の点を十字印で記入してみると図の実線で示したようにこれらは1つの線上にきちんと乗ることがわかった。つまり、 $g_v$ が大きなフェルミ粒子系は少なくともエネルギーでみる限り、ボーズ系にかなり近い性質を持つと言えそうである。（フェルミオン・ボゾン変換）このことは他の $r_s$ でも同じで、図1(b)には、 $r_s=5$ の場合が、図1(c)ではもっと低密度の場合が描かれている。低密度系では、 $E_0/N$ はある $g_v$ で山をもち、それより $g_v$ が大きいと相関効果で $E_0$ が下がり、逆に $g_v$ がそれより小さいと交換効果で $E_0$ が下がることがわかる。いわば、この山の位置がボーズ粒子としての性格が強く出るか、フェルミ粒子のそれが強く出るかの分水嶺のようになっていると思われる。

ところで、電子ガス模型の精密な解明を当初の目的とした動機は先に述べた種類のバンド効果と多体効果のからみの問題の一環というだけでなく、他にも2つほどある。第一は、ここ20年間、局所密度汎関数法がバンド計算において中心的役割を果たしてきたが、この方法の根本的欠陥はいわゆる交換・相関ポテンシャルを決める処方箋をもっておらず、単に電子ガス模型での交換・相関エネルギーの値を使うことだけで多体効果を取り入れている点である。従って多体効果のどの部分がどれだけ取り入れられているのか、はなはだ不明確であり、多体効果の意味を明解にしたいと非常に真面目に思うならば、この方法によらない計算方法の開発がなされなければならない。電子ガス模型の多体問題の精密な解明はこの方向の第一歩と考えており、この点は志を同じくする安原洋氏と共同研究 [7] を始めたが、今後より一層の発展を期し、多体効果の素性がよくわかる、自己相互作用補正(SIC)などのいらないバンド計算法の開発を最終目標にしている。

第2の動機は、電子ガスの超伝導、[8-10]あるいはもう少し広く言うと、斥力起源のs-波超伝導[11]の問題に関連している。酸化物高温超伝導体の出現以降は斥力起源の超伝導と言っても、もはや余りインパクトは無いように見えるが、私がこれを問題にし始めたのは10年以上前であり、当時の日本でこんなことを言っても殆ど注目されなかった。（後述するが世界的に見ても私の提案に対するフォロー・アップが出たのは5年後である。又、ハバード模型に対する超伝導に比べればs-波超伝導が出易いにもかかわらず、電子ガス系の超伝導は殆ど注目されていない。）もともと私とて、電子ガスが超伝導になりうるなどとは夢にも考えていなかったが、ただ当時流行していた転移温度 $T_c$ を決めるマクミランの公式で、電子・格子相互作用に関連した定数 $\lambda$ をバンド計算などを駆使して大がかりに計算しているのに電子間クーロン斥力 $\mu^*$ を何も計算しないで単に0.1と置いて $T_c$ を議論する神経にはとてもついて行けなかった。そこで電子間クーロン斥力と電子・格子相互作

用を対等な立場で扱って、それをエリアシュバーグ方程式、あるいはそれを弱結合近似して求めたギャップ方程式の中に代入して自動的に  $\mu^*$  を決めながら  $T_c$  が得られるプログラムを作成した。これがうまく働くことは、n型にドープした SrTiO<sub>3</sub> の超伝導 [12] や、グラファイトにアルカリ金属をインターライトした化合物での超伝導 [13]において、これらの  $T_c$  をアジャスタブル・パラメータなしに再現できることから、チェックされている。

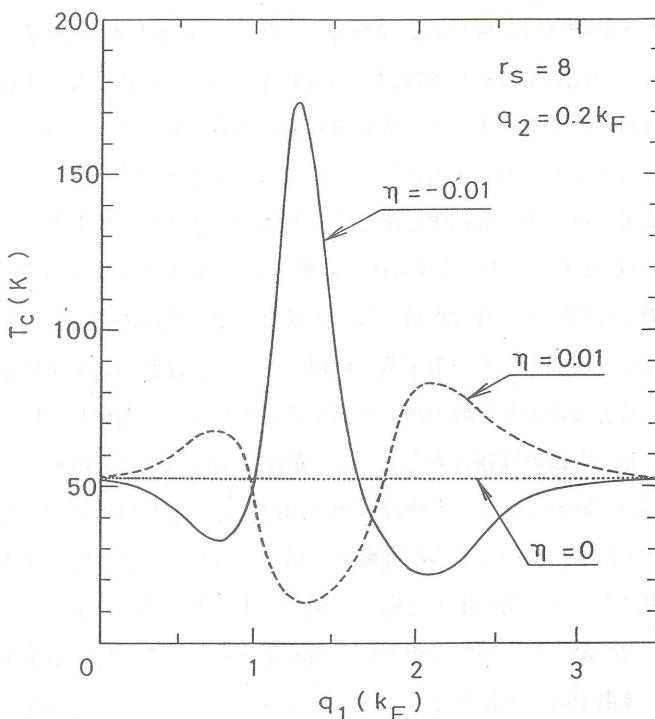
ところで、このプログラムで電子・格子相互作用がなくても電子密度が低いとき、 $T_c > 0$  になることを発見した。[8] 私にとって、これが電子ガスでの超伝導を問題にするようになったきっかけである。その後、アメリカで L. J. Sham 氏が電子間相互作用を RPA 近似で（つまり、バーテックス補正なしで）計算する限り、私の結論は正しいことを確かめてくれた。[14] しかし、同時に彼は2つのバーテックス補正を加えると超伝導は出なくなると言い、それが結論だとした。[15] 確かに通常のグリーン関数法を使っている限りはこれぐらいが計算の限界であるが、私は前述した EPX 法を超伝導が議論されるように拡張して50個余りのバーテックス補正を組織的に取り入れられるようにした。[9] その結果、微妙ではあるが、低電子密度の電子ガスは超伝導になると結論した。尤も、 $\kappa$  や  $\chi$ ,  $m^*$  の計算では千個ほどのバーテックス補正項を考えたのに比べれば50個というのはいかにも少ない。しかし、この差は  $\kappa$ ,  $\chi$ ,  $m^*$  ではフェルミ面上だけで計算すればよいのだが、 $T_c$  の計算では、フェルミ球全体で計算する必要があり、今の計算機の能力では千個のバーテックス補正を取り入れるのは難しいことに起因している。尚、50個の結果と千個のそれを  $\kappa$ ,  $\chi$ ,  $m^*$  などで比べてみると定量的な差は確かにあるが、定性的ふるまいは同じである。従って、 $T_c$  の値自身は変わるとともに恐らく電子ガスは超伝導になると言う結論自体は正しいと思われる。又、私の論文が出てしばらく後、Sham 氏は Errata を出して前の結論を否定して電子ガスは超伝導になりうるとしている。[16]

それから電子ガスはいかに超伝導になるかならないかの瀬戸際にいる系であるかを如実に示しているのが図2である。これはEPX法での  $T_c$  の計算で、裸のポテンシャルを通常のクーロン斥力  $V(q) = 4\pi e^2/q^2$  から少し変化させて、

$$V(q) = 4\pi e^2/q^2 + 4\pi e^2 \eta / [(q - q_1)^2 + q_2^2]$$

と取り、 $\eta = \pm 0.01$ ,  $q_2 = 0.2k_F$  としたとき、 $q_1$  の関数として  $T_c$  がどう変わるかを示したものである。 $\eta = 0$  は電子ガス系の結果であり、 $r_s = 8$  の密度では  $T_c$  は約50Kであるが、ほんの少しの  $V(q)$  の変化で、 $T_c$  は10K ぐらいから180K ぐらいまで変化しうることを示している。このような  $T_c$  の変化自体はフォノンを媒介とするような通常の（引力起源の）超伝導とは違う斥力起源の超伝導という概念をあらわに考えないと理解し難いものであるが、この変化の原因の説明は長くなるので原著 [11] に譲る。そこでは更に進んで、どうしてアルカリ金属では超伝導がみられないのかについても一つの説明がなされている。いずれにしても超伝導の  $T_c$  の計算は大変微妙なものである。従って、注意深く計算されたもの以外はほとんど信用できない。（私の見るところ、これまで銅酸化物超伝

図2. 電子間相互作用  $V(q)$  の変化にともなう超伝導転移温度  $T_c$  の変化の一例。  $V(q)$  がクーロン力  $4\pi e^2/q^2$  以外に、 $4\pi e^2 \eta / [(q-q_1)^2 + q_2^2]$  の項も付け加わった場合を考えている。電子密度は  $r_s=8$  に固定し、 $q_2=0.2k_F$  と取って、 $q_1$ を動かしたときの結果である。 $\eta=0$  は電子ガス系の結果であり、それからわずかに変化した  $\eta=\pm 0.01$  の結果を実線と破線で示している。



導体に対してなされている  $T_c$  の計算はほとんどこの範疇と思う。尚、図1の結果を超伝導の観点から眺めるのも興味がある。 $g_v=\infty$  は荷電ボーズ系であり、超伝導になっているのは確実であるが、超伝導相が  $(r_s-g_v)$  平面のどの領域に広がっているのか知りたいところである。この点については  $g_v=\infty$  からの展開理論を行うのが有効かも知れない。又、電子ガス ( $g_v=1$ ) が超伝導になると、その性質はボーズ系 ( $g_v=\infty$ ) のそれとどの様に違い、 $g_v$  の変化と共にどの様に変わっていくのか興味がある。これはある意味ではクーパー対からのバイポーラロンの超伝導への変化の問題と関連しそうである。これらは今後の課題である。

いずれにしても、電子ガスの超伝導の問題はいろいろな意味で私に深い影響を与えた。ひとつは10年以上もそのことを考えさせてくれ、又、困難な数値計算、解析計算に立ち向かう勇気を与えてくれた。しかし、それ以上に物事をきちんとやることの大切さを教えてくれた。もしギャップ方程式をきちんと解かず、 $\mu^*$ などを曖昧に導入していたらこのようなことは決して解らなかった。常識のワナは恐ろしいものであり、たとえ新しいことは出ないとは思ってもきちんと精密にやらないといけないと肝に命じている。とりわけ研究途上で困難点が多く出てきた時など、ある程度いい加減

にやって、それでも実験にあってはいるからいいなどという言い訳をしたい誘惑に駆られるが、そんな時はこの教訓を思い出している。

これまで私の主たる研究を述べてきたが、この他にも気分転換も兼ねてパートタイムの研究をいくつか行ってきたので、以下にそれらを列挙します。ひとつは表面物理に関連して、金属表面と原子の相互作用や、弾性・非弾性散乱係数の計算を考えました。前者は W. Kohn 氏と共に著で出しました。[17] (Evanescent 波に対するS-行列理論の構成) 後者は Kohn 氏、及び手紙上のやりとりだけでしたが、R. E. Peierls 氏と考えました。WKB 近似の改良 (いわゆる caustics のない準古典近似の問題) や、インスタンソンの問題もまじえて1年ほど色々やってみたのですが、なかなか難しくて他の2人の満足の行くような結果は出せず、共著にできませんでした。[18] (散乱問題に対する Schwinger の変分法と Kohn の変分法の合成) 次にEPX法を有限温度に拡張しました。

[19] ジャストロー関数を用いたような変分法は有限温度への拡張が困難だが、EPX法は非常にうまく自然に拡張される。これを一次元電子系に応用してスピン揺動の効果を計算した。[20] ただし、私の標準からすると大変少ない数の項しか考えられておらず、満足していない。定式化の更なる改良とも関連しており今後の課題と考えている。最後に甲元眞人氏と始めたエキゾチックな電子対による超伝導について触れておく。(絶縁体からの超伝導) これは広く言うと前述したようなエネルギー・ギャップと電子相關のからみの問題の一環であるが、これまで伝導帯の底の電子と価電子帯上部の正孔の間にクーロン力が働くと励起子相が出来るという話はよくあったが、もし仮にクーロン力でなく、引力が働くとどうなるかという問題を考えた。この時、電子・正孔間のペアではなく、価電子電子・伝導電子のペアになる。[21] このペアはクーパー対とは違う変わった性質を持つ。このような系が実際に合成されうるのかどうかと言う提案(2重鎖有機物)も含めて詳しく調べた。[22] 最近、価電子電子同士、及び伝導電子同士の斥力もきちんと入れて、CDW、SDWとの競合と言う新しい観点からもこの問題を考え始めた。これについては、青木秀夫氏及び彼の学生である黒木和彦氏が中心になってモンテカルロ法を主な手段として研究している。これらに関連して、通常のクーパー対でないような対が出来たときの磁気的性質も調べ、[23-25]マイスナー効果のない超伝導の可能性も示唆した。[25]

さて、今後のことであるが、これまでの研究の延長上にあるいくつかの問題については既に述べてきた。特に電子ガス系から見た多体効果とバンド効果のからみに興味があり、粘り強くやっていくつもりである。尚、EPX法をやっていて感じたことは、いわゆる Rayleigh-Schroedingerの摂動法がうまくいくような系については、EPX法は組織的に計算する大変よい方法だと解ったが、同時に Brillouin-Wigner の摂動法の方がよい結果を与える系、すなわち何らかの意味で縮退があるような系で、相互作用でそれを解こうと言う場合にはEPX法はあまりうまくいかない。例えば、ハバード模型でUがバンド巾より大きいときは、Uに比べれば一電子のレベルは縮退しているよう

なものであるが、この時、E P X法はあまりうまく働かない。磁場中の2次元電子系、ポーラロンの問題等も似たような側面がある。方法論として、このあたりを解決できれば多体問題へ多くの貢献が出来るものと考えて、既にいくつかの試みを始めた。この他、パートタイムでやるテーマは、例からもわかるように主な研究に密接に関連していることもあれば、全然そうでないこともあります、予測不能である。テーマの選択はほとんど外部からの摂動によっている。従って、読者の皆さんの中でも私の力が少しでも助けになるのではないかと思われる問題をお持ちの方は、分野によらずに気軽に声をお掛け下さい。何か新しいことが出来るかも知れません。

[参考文献]

1. Y. Takada, Phys. Rev. B35, 6923(1987)
2. Y. Takada, "Variational Theory of Electron Liquid", in Strongly Coupled Plasma Physics (Elsevier, Amsterdam, 1990), edited by S. Ichimaru, p.357.
3. Y. Takada, to appear in Phys. Rev. B43 (1991). [Tech. Rep. of ISSP Ser. A, No. 2271 (1990). ]
4. Y. Takada and T. Kita, to appear in J. Phys. Soc. Jpn. 60, No. 1(1991). [Tech. Rep. of ISSP Ser. A, No. 2365 (1990). ]
5. Y. Takada and H. Yasuhara, to appear in Phys. Rev. B43 (1991). [Tech. Rep. of ISSP Ser. A, No. 2272 (1990). ]
6. Y. Takada, to appear in Phys. Rev. B43 (1991). [Tech. Rep. of ISSP Ser. A, No. 2342 (1990). ]
7. H. Yasuhara and Y. Takada, submitted to Phys. Rev. B. [Tech. Rep. of ISSP Ser. A, No. 2343 (1990). ]
8. Y. Takada, J. Phys. Soc. Jpn. 45, 786 (1978).
9. Y. Takada, Phys. Rev. B37, 155 (1988).
10. 高田康民, 「固体物理」22巻, 949 (1987).
11. Y. Takada, Phys. Rev. B39, 11575 (1989).
12. Y. Takada, J. Phys. Soc. Jpn. 49, 1267 (1980).
13. Y. Takada, J. Phys. Soc. Jpn. 51, 63 (1982).
14. H. Rietschel and L. J. Sham, Phys. Rev. B28, 5100 (1983).
15. M. Grabowski and L. J. Sham, Phys. Rev. B29, 6132 (1984).
16. M. Grabowski and L. J. Sham, Phys. Rev. B37, 3726 (1988).
17. Y. Takada and W. Kohn, Phys. Rev. B37, 826 (1988).
18. Y. Takada, Phys. Rev. A38, 98 (1988).
19. Y. Takada and T. Kita, Phys. Rev. A42, 3242 (1990).

20. T. Kita and Y. Takada, Phys. Rev. A42, 3251 (1990).
21. M. Kohmoto and Y. Takada, J. Phys. Soc. Jpn.59, 1541 (1990).
22. Y. Takada and M. Kohmoto, Phys. Rev. B41, 8872 (1990).
23. T. Kita Phys. Rev. B40, 10816 (1989).
24. T. Kita, to appear in Phys. Rev. B43, (1991). [Tech. Rep. of ISSP Ser. A, No. 2351 (1990).]
25. Y. Takada to appear in Phys. Rev. B43, (1991). [Tech. Rep. of ISSP Ser. A, No. 2356 (1990).]

## 物性研短期研究会

### 10-10<sup>3</sup> 多体系の特性

開催期日：平成2年11月13日(火), 14日(水)

場 所：東京大学物性研究所講義室

世話人：郷 信広(京大理), 西岡英寿(甲南大理), 石井 靖(東大物性研)

山口 豪(静大工), 菅野 晓(姫工大理)

10-10<sup>3</sup> 個の粒子を含む系として, ④マイクロクラスター, ⑤重い電子核, ⑥蛋白質などの生体分子, を考え, このような異種の系に共通に見られる特性として, ①構造のゆらぎ, ②量子的性質(Shell effect)と古典的性質の共存, の2つを特に取上げる。(⑦については差し当り①のみ)。このように一見関係のないように見える系で, 共通の物理を基盤とする性質があらわれることは興味深く, この研究会を企画する動機になった。

生体分子系については郷が, 原子核系については西岡が, マイクロクラスター系については他の提案者が原案を作成した。これら3つの系の中で, 原子核が最もよく調べられているが, 生体分子系との橋渡しのためにはマイクロクラスター系の物性研究者が音頭をとるのが適当と思われたので, そのような研究者の1つの據点である物性研に研究会を提案することにした。

研究会は核物理, 生体物理, マイクロクラスター物理と化学分野の研究者約50名が出席して開かれた。はじめ, 異なる分野の研究者の間で, 言葉がうまく通じるかどうかが心配されたが, かなり丁寧な導入部をつけてもらったお陰でこの心配はなくなった。しかし話の内容は先端的なもので, 十分な理解が進むためには更に多くの時間が必要であろう。異なる分野の話から多くの新しい知識を仕入れることができたのは, この研究会のおおきな収穫であった。

### プログラム

11月13日(火)

[I] 序論(13:00-14:00)

- |                          |             |
|--------------------------|-------------|
| 1) マイクロクラスターにみられる特性(20分) | 菅野 晓(姫工大理)  |
| 2) 生体分子にみられる特性(20分)      | 郷 信広(京大理)   |
| 3) 重い原子核にみられる特性(20分)     | 西岡 英寿(甲南大理) |

[II] マイクロクラスターの構造揺動 (14:00-15:00)

- 1) 実験 高柳 邦夫 (東工大総理工)  
2) 理論 澤田 信一 (日電基礎研)

休憩 (15:00-15:15)

[II] マイクロクラスターの構造揺動 (続) (15:15-15:45)

- 3) Arクラスターの全体振動と相変化 尾崎 裕 (国立環境研)  
近藤 保 (東大理)

[III] 蛋白質の構造揺動 (15:45-17:45)

- 1) harmonicな側面 -基準振動解析- 木寺 詔紀 (蛋白工学研)  
2) anharmonicな側面 -Multiple Substate- 郷 信広 (京大理)  
3) hole-burningによる低振動数モードとsubstates 栗田 厚 (阪大理)  
4) NMRによる揺らぎの観測 永山 国昭 (日本電子)

11月14日 (水)

[IV] 重い原子核の構造揺動とshell効果 (9:00-10:30)

- 1) 4重極変形の量子揺らぎと熱的揺らぎ 松柳 研一 (京大理)  
2) T D H F の周期解と準古典的量子化 大西 直毅 (東大教養)  
3) 原子核の相互作用するボソン模型と殻構造 大塚 孝治 (東大理)

休憩 (10:30-10:45)

[V] アルカリ金属、貴金属クラスターのshell効果 (10:45-12:05)

- 1) 金属クラスターにおけるスーパーシェル構造 西岡 英寿 (甲南大理)  
2) 巨視的性質と微視的性質 (20分) 石井 靖 (東大物性研)  
3) 貴金属クラスターの電子状態 大西 檜平 (日電基礎研)

昼食 (12:05-13:20)

[V] アルカリ金属、貴金属クラスターのshell効果 (続) (13:20-14:20)

- 4) 2価クラスターイオンの分裂 交久瀬五雄 (阪大理)  
5) 分裂におけるshell効果 中村 正人 (青野プロジェクト)

[VI] クラスターの電子状態に関する話題 (14:20-15:20)

- 1) クラスターの電子過程 塚田 捷 (東大理)  
2) 遷移金属クラスター 藤間 信久, 山口 豪 (静大工)

休憩 (15:20-15:30)

[VI] クラスターの電子状態に関する話題（続）(15:35-17:25)

3) 2元合金クラスター

茅 幸二（慶應大理工）

4) 半導体クラスター

実験（C クラスター）

阿知波洋次（都立大理）

理論

里子 允敏（日大文理）

C<sub>60</sub>の構造安定性（20分）

斎藤 晋（日電基礎研）

[VII] まとめ (17:25-17:30)

マイクロクラスターにみられる特性

姫工大・理 菅 野 暉

大きく見て二つの特性が考えられる：

(1) 巨視的性質と微視的性質の共存,

(2) 構造のゆらぎ。

(1)については核物理の分野でよく知られている核分裂に対応して、クラスター分裂をあげることができる。ここでは巨視的な液滴模型で理解できる性質と量子的な殻効果が効いている性質とが共存している（14日午後に予定されている交久瀬、中村の話）。また、クラスターが大きくなるときに現われる大きな周期をもった魔法数の問題もこの特性に関係している（14日午前に予定されている西岡、石井の話。）最近、実験が進んできた小さなクラスターにおけるプラズモン励起と一粒子励起の問題もこの特性に関連して重要である。

(2)については飯島ら、および高柳らによる電子顕微鏡観察がある。理論側からは、固相、液相、中間相の問題、異なる構造間のゆらぎの問題、などが提出されているが未解決のものが多い。ゆらぎと反応性との関係などもわかっていない。一方、タンパク質分子などでは、かたい巨大分子の時代（1965-1975）を経て、平均位置のまわりのゆらぎと反応性の関係などが論じられるようになっている（13日午後に予定されている郷、木寺、栗田、永山の話）。核物理では振動、回転の間の移り変わりの問題などよく調べられている。

マイクロクラスターでは原子核とはことなって、構成粒子の種類が多いこと、粒子数に制限がないことなどのため、その特性に原子核で見られない多様性が期待できる。

生体分子にみられる特性

京大・理 郷 信 広

生体高分子、特に蛋白質は情報を持った高分子で、その情報によって定まる特異的立体構造を持

つ。蛋白質のダイナミックスは、電子伝達とか化学反応とか陽に電子状態の絡む側面を除けば、ほぼ古典力学で記述できる。立体構造のダイナミックスには、一見矛盾するような線形な（固体的な）側面と非線形な（液体的な）側面とが共存している。即ち、ダイナミックスを支配するポテンシャル面は極めて複雑な形をしており、スビングラスに見られるような階層的な極小構造を持っているにもかかわらず、同時に多くの物性が、その調和性を仮定して説明し得る。これは、蛋白質が実は極めて特異な状態に有ることを示していると同時に、一般に複雑な系と言われる系と共通な側面も持っていることを意味する。この特異な新しい状態を明確に理解することは、物理学に豊富な新しい概念を持ち込むことになるであろうし、しかも、蛋白質分子の機能発現の仕組みの解明に不可欠と考えられる。

## 重い原子核に見られる特性

甲南大・理 西 岡 英 寿

### 1. シェル構造

核子は自分自身の間の相互作用からつくられる平均場をほぼ自由に運動していると見なすことができ、単粒子レベルエネルギーに規則的な飛びを持つシェル構造を持つ。金属クラスターでは、電子速度が光速度の1/100で相対論効果は無視できる。従って原子核で重要なスピン軌道ポテンシャルは無視できる。

### 2. 対相互作用

原子核では、核子間に強い短距離引力が働き、角運動量0の核子対をつくる。金属クラスターの場合も表面音子を媒介として電子間に引力が働くという予測がある。

### 3. 振動モード（巨大共鳴）

原子核では様々なモードの振動が観測されている。それらはすべて $N^{-1/3}$ に比例して共鳴エネルギーが変化する（Nは粒子数）。一方金属クラスターのE1共鳴エネルギーはNによらない。

## マイクロクラスターの構造揺動

東工大・総理工 高 柳 邦 夫

マイクロクラスターの構造揺動とは、飯島が金の微粒子を電子顕微鏡観察した際に見出した現象で、金微粒子の構造が通常の面心立方構造(fcc)から多重双晶粒子(MTP)へと激しく変化し、あたかも液滴のように流動的な変化を呈する事をさす。また、液滴様の構造変化は微粒子だけに特徴的な新しい相、“準固相”的存在を示唆するのではないかと注目された。我々は、超高真空の高分解能電子顕微鏡を使って、金や鉛さらに、錫微粒子で、構造揺動と粒子サイズまた温度依存性に

について詳しく検討してきた。

その結果、金微粒子については、直径 2 nm 以上の粒子では室温では構造変化ではなく粒子方位の変化だけがみられるが、温度が上昇(550°C以上)すると飯島らが見出したと同様な構造揺動が生じることを見出し、構造揺動は熱力学的現象であることを結論した。さらに、粒子サイズが 1 nm 以下の小さい微粒子になると、室温でも原子の配置が激しく(1/30秒の程度で)変化する構造揺動が起こることを見出し、固相と液相の相境界に固液共存の状態が現れる可能性に検討の余地が残された。

鉛微粒子について検討したところ、金と類似の振舞いが認められた。直径 10 nm 程の鉛微粒子の融点は融点降下により 180°C に低下するが、融点近傍で粒子が固相と液相を相変化することが見出された。相変化の頻度は秒あるいは数十秒間隔でまちまちであるが、固相と液相間の中間状態(相転移過程)の振舞いと考えている。

以上の観察から、液相温度より少し低いところで構造揺動が激しく起こることは、微粒子に特徴的な熱力学的現象であると結論出来るが、その際には、微粒子はエネルギーの低い原子配置構造から高いものへと色々な励起状態を変化している。すると、微粒子の構造揺動は、種々の原子配置についてのエネルギー準位ダイアグラムと異なる配置間を移動する活性化エネルギーによって特徴づけられるであろう。実際、共有結合のゲルマニウム微粒子では 2 nm の大きさでもやは構造揺動は起こらず、また、室温での方位揺動も起こらない。温度が高くなったときには、単に、表面の原子だけが動いて構造変化するだけである。

錫の微粒子では、錫が室温以上では体心立方構造、以下ではダイヤモンド構造をとるという特徴をもつため、金やゲルマニウムとは違った振舞いが観察された。これは、追試の余地が残されているが(1990. 秋、物理学会発表)、液相からして、アモルファス的構造が現れることである。さらに温度が低いところでは、体心立方の結晶構造を持つ。このアモルファス的構造は大きな微粒子では認められないことから、小さい粒子で表面エネルギーの相対的割合が大きくなるためと考えられるが、有限サイズのクラスターでアモルファスが結晶相より安定になることは興味深い。

以上纏めると、金微粒子の構造揺動は固相粒子の熱力学的現象である。液相と固相共存(準固相?)を示唆する振舞いが鉛微粒子でみられた。錫微粒子では、アモルファス構造の固相粒子が形成された。

### マイクロクラスターの構造揺動

日電・基礎研 澤 田 信 一

電子顕微鏡で観測された金の微粒子の構造揺動の原因を、多体効果を含むモデルポテンシャルを用いて説明することを試みた。微粒子はそれがポテンシャルエネルギーの谷(極小点)に対応する数多くの異なった構造(安定構造または準安定構造)をとりうる。それらの谷の間を熱的揺ら

ぎによって遍歴することが、構造揺動の原因だと考えられる。このことをまず原子数6個の場合について、分子動力学によって示した。次に実験で観測されている原子数55個の場合を調べた。この場合正二十面体と立方八面体の構造が観測されているが、これらの間の遷移の確率を遷移状態理論により計算した。その結果立方八面体の方の寿命が短か過ぎて、観測を説明できないことがわかった。しかし、クラスターの帶電を仮定すれば、立方八面体構造が安定化し観測を説明できることがわかった。このように、原子数55個の場合は帶電したクラスターの熱的揺らぎで構造揺動が説明できるが、帶電したクラスターの安定性という別の問題を含んでいる。

### Ar クラスターの全体振動と相転移

国立環境研 尾崎 裕 東大・理 近藤 保

十個～千個の分子からなるクラスターは凝縮相に比べて分子数が有限であることが特徴的である。クラスターの相転移現象にもこの影響が現れ、固体状態のクラスターの温度をあげていくと液体になるまでに中間状態として固相と液相の混在した状態があることがアルゴンクラスターの分子動力学計算から予想されている。このような中間状態の存在はアルゴンクラスター中にベンゼン分子を挿入し、そのスペクトルを測定する実験によっても支持されている。一方、このような相転移を分子の動きから見るとクラスター全体の変形を引き起こす低周波数の大振幅振動が関与すると考えられる。また、このような低周波数振動はクラスターの分裂や反応性とも深くかかわるものである。我々はこのような変形振動の代表例であるブリージング振動についてアルゴンクラスターを例にとりその周期のクラスターサイズ依存性を求めた。また捻れ振動についてもその周期や形状依存性を調べた。

### タンパク質の構造揺動

#### 1) harmonicな側面 - 基準振動解析 -

蛋白工学研 木寺詔紀

タンパク質は20種類のアミノ酸がある特定の配列で重合した線状高分子である。その配列は、配列→静的構造→動的構造→生理機能という形で実現される情報を担っている。ここでは静的構造から振動解析によって予測される構造揺動のharmonicな側面を見る。興味の対象は数 $\text{cm}^{-1}$ から数百 $\text{cm}^{-1}$ 程度までの系全体にわたる協同的な揺動であり、結合長、結合角を凍結した内部座標系の基準振動解析をポテンシャル曲面の二次微分から得た。例として約2千原子からなるLysozymeを用いた。全体の構造揺動は約 $30\text{cm}^{-1}$ 以下の低振動モードでほとんど説明され、最低振動モードは機能と密接な係わりを持つ運動状態を表している。その描像はX線結晶解析による

Debye-Waller 因子の quasi-harmonic 近似との比較で、静的な分布に関しては十分に精度がある事が確かめられた。

### Anharmonicな側面 -Multiple Substate -

京大・理郷 信広

蛋白質の立体構造のダイナミックスを支配するポテンシャル面は、階層的な極小構造を持つ。これは多くの実験が明確に示している。例えば、多くの蛋白質は、200K以下に冷やすと、準安定なガラス状態に陥る。このガラス状態に関する実験的研究をまず紹介した。次に、講演者の研究室に於ける計算機シミュレーションによる研究を紹介した。この方法によっても、実験的に示されていたポテンシャル面の階層的極小構造が示され、更にそのようなエネルギー構造をもたらす立体構造上の仕組みが明らかにされた。

### ホールバーニングによる蛋白質の低振動数モードと substates

阪大・理栗田 厚

色素蛋白質中のポルフィリンなどの発色団を探針として用い、それにホールバーニングを行なうことにより、発色団のまわりの蛋白質の物性を調べた。Zn置換ミオグロビンの可視域の吸収帯に温度2Kにおいてレーザー光を照射し、永続的ホールをあけた。ホールスペクトルは、鋭いゼロフォノン線とフォノンサイドバンドから成っており、フォノンサイドバンドの形状は、蛋白質の低振動数のモードの状態密度と、電子励起と振動モードとの結合強度を反映している。実験結果と計算機シミュレーションの結果との比較を行なった。ホールのあく機構は、光励起によって蛋白質の conformational substates 間の遷移が起こるためと考えられる。ホール生成後、温度を上げてホールが消えて行く過程から substates 間のバリヤーの高さ V の分布を求めた結果、分布関数は  $V^{-1/2}$  に比例する非常に広い分布を示し、低温において蛋白質はガラス的な性質を持つことがわかった。

### NMR による 摆らぎの観測

日電・生体計測研 永山国昭

NMRは局所的プローブであり、分子の動的性質、平均構造の両者を局所的かつ選択的に観る手段を提供する。蛋白質ではこれ等のNMRの性質が100%利用でき、特に天然存在比の小さい<sup>13</sup>C、<sup>15</sup>Nの同位体ラベルで高度の情報選択測定が行われて来た。揆らぎも  $10^{-12}$ 秒から  $10^{-6}$ 秒程度の範囲を緩和解析でカバーでき、計算機実験の真偽を高い精度で実証出来る最も有力な手段となってい

る。しかし、この特長を実現するには蛋白質の全体回転のブラウン運動を抑え、かつ水素核磁化の速いスピントリップルを抑えるなければならない。そのためには局所プローブとして重水素核をラベルし、固体状態の動的NMR測定を行うのが最も理にかなっている。この方向での実験が行われている。しかし、<sup>2</sup>H固体NMRは蛋白質の揺らぎの全体像を得るには大変ラベル化に手間がかかる。次善の策として高分解能核<sup>13</sup>Cをラベルし、溶液状態での測定も行われて来た。この方法で得た蛋白質内のアミノ酸側鎖の揺らぎが、計算機実験と比較された。

#### 4 重極変形の量子揺らぎと熱的揺らぎ

京大・理 松 柳 研 一

Hartree-Fockポテンシャルの極小点が複数個あり、それらの間の量子力学的又は熱力学的揺らぎが問題となる現象は原子核構造論においても中心的な位置を占めている。

①内部構造の量子的・熱的ゆらぎと②巨視的性質と微視的性質の共存に注目しつつ有限多体系に共通する特性を探るという観点からみて興味あるいくつかの話題を、最近の原子核構造研究の中から選んでレビューした。

最初に、極小点が2個の場合の典型例として変形共存現象を、3～4個の特徴ある極小点が同一エネルギー領域に共存する典型例として<sup>152</sup>Dy原子核の巨大変形状態から通常変形状態への遷移を議論した。続いて、多数の極小点をまたがる大振幅集団運動の極限として核分裂過程をとりあげ、そのダイナミックスを研究する際の理論的困難がどこにあるかについて議論した。

原子核構造論においては、これ迄主として低励起エネルギー領域の量子スペクトルを研究してきたので、4重極変形の大きな量子揺らぎが本質的であった。最近になり、準位密度の非常に高い高励起状態における集団運動の研究が可能となり、複数のHartree-Fock極小点の間の熱力学的な構造揺動が議論されるようになってきた。この場合、孤立系としての原子核には熱浴は存在しないから、変形パラメタ( $\beta$ ,  $\gamma$ )に関するアンサンブルを考えることの物理的意味が問題となる。その微視的解釈、特に、量子揺らぎとの区別と両者の関係は今後の重要な課題になると思われる。

#### TDHFの周期解と準古典的量子化

(ある原子核のモデルより)

東大・教養 大 西 直 育

原子核のbulkを特徴づける最も重要な性質として飽和性(結合エネルギーの飽和性と密度の飽和性)があり、フェルミ粒子系の一般的な性質と核力にハード・コアがあることで説明されている。このような量子流体で、自由度は形の変形に残されていると考えられ、A. Bohrの集団運動模型は

このような性質をもとに考えられていた。

一方、核内での核子間の残留相互作用は弱められることとパウリ原理から自由平均行路が長く単一粒子モードが比較的よいモードとなり殻模型が成立する。平均場を作る有効相互作用が多体力になっていることは bulk の性質の反映と考えられる。

单一粒子運動は平均場に依って規定されていて、平均場は占有されている単一粒子密度に依存している。準古典理論（T D H F）による集団運動の記述はそのような様相を取り入れるものとして有効である。原子核の回転を記述するクランキング模型や振動を取り扱う R P A 理論は T D H F 理論で基礎づけられる。T D H F は非線形理論で量子化には周期解を用意し、一般化されたボア・ゾンマフェルトの条件を使う。

古典的な非対称ゴマでは周期解が得られる。これに習ってワブリング模型で量子化を試みた、副物として非可積分位相が現れた。この位相を作用と考えて、T D H F の周期解を求める新しい手法を見つけた。

### 原子核の相互作用するボゾン模型と殻構造

東大・理 大塚 孝治

原子核の基本的な運動様式として核子多体系の集団運動があり、振動や回転のスペクトルとして現れる。原子核は、マイクロクラスターと同様に、粒子数の少ない多体系なので、様々な興味ある現象が見られる。例えば、振動と回転の間の変化を「相転移」と見た時、それは粒子数の関数として大変ゆっくりと進行し、相転移の途中の状況を示す原子核の数が大変多い。このような4重極集団運動を統一的に記述するものとして、相互作用するボゾン模型(Interacting Boson Model; 略称 I B M)がある。I B Mでは、 $J^\pi=0^+$  の s ボゾンと、 $J^\pi=2^+$  の d ボゾンが考えられ、その数の和、つまり全ボゾン数が保存されるのが第1の特徴である。第2の特徴はボゾン間の2体の相互作用によって様々な型の集団運動が得られることである。実際、I B Mのハミルトニアンの固有状態が数値計算によらずに解析的に得られる場合が3つあり、表面の振動、軸対称楕円体の回転、及び軸対称不安定な回転に対応する。一方、中間的な場合もハミルトニアンのパラメーターの値を上記の3つの極限の中間にとることによって得られる。s 及び d ボゾンは、各々、 $J^\pi=0^+$  及び  $J^\pi=2^+$  のコヒーレントな核子対の運動を表わすと考えられ、それらの対は B C S 理論のクーパー対に対応づけられる。つまり、原子核の4重極集団運動は2種類のクーパー対の様々な組合せで起こり、I B Mはそれをシミュレートしているという描像である。マイクロクラスターと関係づけられる話題としては、有限ボゾン数の I B Mでは起こらない3軸非対称変形の可能性が指摘できる。

## 金属クラスターにおけるスーパーシェル構造

甲南大・理 西 岡 英 寿

金属原子内では電子は離散的レベルに決まった数だけ縮退しており、シェル構造をつくる。一方非常に多くの原子が集まつたマクロな金属内では伝導電子は連結状態にあり、バンド構造をつくる。その中間の有限個の原子から成るマイクロクラスターでは、どのような電子状態の移り変わりがあるか興味深い。 $10^2$  原子数までの金属クラスターでは、実験で魔法数（シェルが閉じる伝導電子数）が確認されている。原子数が更に大きくなり状態間のエネルギーギャップがなくなっても、シェル構造はレベル密度の規則的な振動として観測される。理論計算では、更に原子数を $10^3$ 以上にあげるとシェルの個々の振動を包含する大きなうねりの構造が予言される。これをスーパーシェル構造と言う。半古典的には、球形ポテンシャル内の三角形的閉軌道と四角形的閉軌道に付随する振幅の干渉効果と解釈される。

## 巨視的性質と微視的性質

東大・物性研 石 井 靖

電子状態の量子化による殻効果にはクラスターの形の情報が盛り込まれている。クラスターのサイズを大きくしていった時、殻効果はしだいに見えにくくなつてついにはバルクの連続スペクトルに至るのであろうが（実際その過程自身大変興味深いが）、クラスターの形の情報は依然として様々な観測量のバルクの値からのズレに反映されている。ここでは (1) 基底状態（全エネルギー）、(2) 一粒子スペクトル（イオン化エネルギーと電子親和力）、(3) 二粒子スペクトル（電子-正孔対励起とプラズモン共鳴吸収）にクラスターの形の情報がどのように現れるか考察した。基底状態の全エネルギーについてはバルク固体の凝集エネルギーに対する補正として表面エネルギーや高次の補正項があるが、たとえば結晶面（ファセット）が定義できるようなサイズになれば表面エネルギーの面依存性を通して形の効果が見られる。またイオン化エネルギーについては、球形金属クラスター（半径 R）に対してバルク金属の仕事関数からのズレが  $3e^2/8R$  で与えられるが、 $3/8$  の係数はクラスターの形によって変化する。二粒子スペクトルはプラズモンのような集団励起が有限系の中でどのようにつくられていくかという意味で大変興味深い。再び球形金属クラスター（微粒子）に対しては表面プラズマ振動としてバルクのプラズマ振動数の  $1/\sqrt{3}$  のところに吸収がみられる期待されるが、この  $1/\sqrt{3}$  の因子は系の反電場係数からくるものでやはりクラスターの形により変化すると考えられる。

## 貴金属クラスターの電子構造

日電・基礎研 大 西 楢 平

貴金属クラスターの shell 構造を理解するために、fcc 構造と正20面体構造の  $\text{Ag}_{13}$ ,  $\text{Au}_{13}$  クラスターを密度汎関数法でノルム保存擬ポテンシャルを用いた LCAO 法によって計算した結果を紹介した。どちらの構造も HOMO, LUMO が  $6s$  軌道 ( $\text{Ag}$  は  $5s$ ) からなっており、それを一中心の軌道としてみなおすと、それぞれ  $d$  軌道が配位子場分裂したような  $t_{2g}$  と  $e_g$  (fcc),  $d$  軌道の  $h_g$  と  $s$  軌道の  $a_g$  (icosahedron) であり shell 効果が顕著に現れていることと、正20面体のほうがエネルギー的にも安定であることを確かめた。

## 2価クラスターイオンの分裂

阪大・理 交久瀬 五 雄

ここでは原子核の核分裂に相当する 2 価クラスターの分裂について述べる。取り扱ったクラスターは銀の 2 価クラスター  $(\text{Ag})_n^{++}$  である。

分裂スペクトルは次のような特徴をもっていた。

- 1) サイズ 3 または 9 に分裂する確率が大きい (殻効果)。
- 2) 偶数原子からなる親クラスターの分裂パターンでは、2 つの奇数原子の 1 価クラスターに分裂する確率の方が、2 つの偶数原子のクラスターに分裂する確率より大きい (奇一偶変化)。これはバレンス電子のペアリングエネルギーのためである。
- 3) 親クラスターのサイズが大きくなるにしたがって symmetric な分裂の確率が大きくなっている。
- 4) 親クラスターのサイズに関係なく分裂反応がみられた。

最近 Saunders と Brechignac がそれぞれ金とナトリウムの 2 価クラスターの分裂でよく似た結果を得ている。

## 多価イオンクラスターの分裂における殻効果

新技術事業団青野原子制御表面プロジェクト 中 村 正 人

最近アルカリ金属や貴金属の多価イオンクラスターの分裂や蒸発が実験的に観測されており、それぞれ原子核における核分裂や中性子蒸発との類似性が指摘されている。ここでは殻効果がクラスター分裂にどのような影響を与えるかを報告した。クラスターの分裂過程では、殻効果を取り入れることによって液滴モデルにもとづくポテンシャル面が大きく書き換えられてしまう。このうち遷移状態付近のポテンシャル面の性質は生成物の殻効果に大きく支配されており、その結果として分

裂生成物が魔法数となるものができるやすい。このようなことから分裂に及ぼす殻効果が静的には重要となる。一方、分裂の動力学的な扱いには統計モデルが有効であると考えられている。最近交久瀬らによって銀の二価イオンクラスター分裂における生成物分布が観測されたが、これには殻効果による反応熱の変動と終状態の統計性の両方を反映しているものと考えられる。

### マイクロクラスターの電子過程

東大・理 塚 田 捷

表面に担持されたクラスターの電子過程は、クラスターの現実的な応用を考える際に最も重要な問題となるであろう。ここではいわゆるメゾスコピック系の問題と違って、クーロンブロッケード効果が無視できなくなり、このことはむしろ超微細系に特徴的な興味ある現象を引き起す。本講演ではこの一例として、金属基板を覆う酸化膜上に担持された超微粒子おS T S (STM探針によるトンネル分光)で見出されS E T (単電子トンネル現象)の数値解析と、これを基にした考察を述べる。S E Tは電子の粒子性と波動性とが同時に現れる、観測問題ともかかわる興味ある現象であるが、実験結果は素朴な現象論によるシミュレーションで再現できる。これはトンネル事象間の時間間隔が、トンネル時間より長くまた事象間の相関が無視できることを意味する。超微粒子の電荷が誘電媒質など環境系と結合するとき、階段型スペクトルがどのように変化するか、クラスターS T SとS E Tとの関係などを議論した。

### 遷移金属マイクロクラスターの電子状態

静大・工 藤 間 信 久, 山 口 豪

強磁性遷移金属Ni, Co, Fe, および反強磁性遷移金属Mnについて、原子数4から19程度のマイクロクラスターの電子状態をスピニ分極D V-X $\alpha$ -LCAO法を用いて計算した。

強磁性遷移金属クラスターの価電子準位は、Cuクラスターと同様、最高被占有準位付近に密に分布する3d電子準位と殻構造に近い構造をもつ4s電子準位から成る。4s電子準位の殻構造により、クラスター全体の不对電子数すなわち磁気モーメントに階段状のサイズ依存性が現れる。殻模型と3d電子準位を用いた、不对電子数の簡単なシミュレーションにより、第一原理的な理論計算の結果をほぼ再現することができる。

Mnマイクロクラスターの価電子準位は、ほぼ半分満たされた3d電子準位とそのまわりに分布する4s電子準位から成る。実験で観測された、殻模型と類似の間隔をもつ魔法数については、4s電子準位の殻構造と最高被占有準位のキャラクターによりその起源が説明できる。

## 2 元合金クラスターと殻構造

慶應大・理工 茅 幸二

单一成分クラスターに比べて2成分以上からなるクラスターは、成分比という変数を持つため物質設計にいろいろな可能性を与える。異成分の混合による物性の変化は、单一成分クラスターの電子、幾何学的構造を変化させる事に起因するため、混合前のクラスターの魔法数がそのまま混合後も保存されるとは限らない。 $\text{Li}_n\text{Na}_m$  のように2つの類似した元素の混合では、魔法数が保存されている。我々はA1-C, A1-Bイオンクラスターについてその安定性を調べた。A1は3つの価電子を持ち、その陰イオンは集合数13で閉殻電子構造となり、さらに最密充填構造としての安定性も加わり、きわめて高い安定性を持つ。しかし、価電子数、原子半径の異なる炭素原子の混入により  $\text{Al}_{13}^-$  の安定性を破壊し、魔法数を消失させる。A1と同族のBは1個の混入ではA1の魔法数を保存するが、2個以上では原子半径の違いが幾何構造に影響し、魔法数を他の場所に移す事が見い出された。

## 炭素クラスター

都立大・理 阿知波 洋次

### 1. 炭素クラスターの特徴

炭素や珪素などIV族に属する半導体クラスターの最も特徴的なものとしてその化学結合様式があげられよう。これらのクラスターでは共有結合がおもな働きをしており、それ故これらのクラスターに特徴的な性質が生まれている。たとえば、炭素クラスターの例ではこれまでの研究から直線状、環状、球状、巻貝状など多様なクラスター構造の存在が示唆されている。こうした構造上の特質は電子状態をはじめとするクラスターの性質にきわめて強く反映し、ここでは金属クラスター等で見い出されている“魔法数”的世界とは全く異なっている。

### 2. サッカーボール様分子 $\text{C}_{60}$

炭素クラスターでとりわけきわだった特徴を与えるものとして炭素60量体のクラスターが固体として安定に単離され大きな注目を浴びている。このクラスターの発見ははじめビーム実験の結果をもとに考えられた後に、きわめて簡単にかつ大量に作製する方法が見い出されている。今後急速に種々の性質が解明されると同時に、きわめて広範囲の研究領域で発展が予想されている。

### 3. 直線状および環状炭素クラスター

粒子数が数ヶから30ヶ程度までの炭素クラスターについては従来よりいくつかの実験結果が報告されている。筆者らは負イオンクラスターの光脱離実験、光解離実験、金属表面への衝突実験などの結果をもとにクラスターの内部温度と安定構造の関係を検討した。これまでの結果から内

部温度が高い場合には  $n=15-16$  ぐらいまで直線構造が支配的であるが、内部温度の低下とともに 10量体以上では環状構造が支配的になることが明らかになった。

### 半導体微粒子の構造と電子状態

日大・文理 里子允敏

半導体の構造については種々の計算がある。そのなかには、3体力まで取り入れたステリンジャー・ウエバーポテンシャルや、超微粒子表面のダングリングボンド数を取り入れたチェリコフスキーポテンシャルがある。しかし、それらのポテンシャルは、複雑で、物理的な意味も明らかでない。そこで、電子状態を考慮した tight-binding モデルにより、Si, C超微粒子の構造を調べた。Si超微粒子の構造は粒子数が少ないとときには、隣接数が少ないため  $sp^2$ 混成軌道を反映した構造をとり、粒子数が増すにつれ  $sp^3$ 混成軌道を反映した構造をとることが分かる。一方、Cクラスターは粒子数が少ないととき、 $sp$ 混成軌道による、直線構造が安定であり、粒子数の増加とともに  $sp^2$ 混成軌道による平面グラファイトのような構造が安定となる。SiとCクラスターの違いは、Cの昇位エネルギー( $E_p - E_s$ )がSiに比べて大きいため、 $sp^3$ 混成がエネルギー的に安定でないためと解釈できる。

### 正20面体型クラスター $C_{60}$ 及び $C_{60}X$ の電子状態

日電・基礎研 斎藤晋

$C_{60}$ クラスターは非常に安定なクラスターで、サッカーボール構造をとることが予測されている。そして、その中空構造は中に各種の原子を捕獲できるものと期待されており、種々の異なった性質を持つサッカーボールの積み重ねによる新物質の生成の可能性が検討されている。そこで、 $C_{60}$ 及び原子を捕獲した $C_{60}X$ クラスター( $X=K, Na, O, Cl, Si$ )の電子状態をLCAO-X $\alpha$ 法を用いて計算し、 $C_{60}$ の安定性と、ドーピングによる電子状態の変化を調べた。その結果、 $C_{60}$ は完全に満たされた最高被占軌道と最低空軌道との間にエネルギーギャップを持つことが確認された。また、Na, K等のアルカリ金属原子は $C_{60}$ に電子を供給すること、O原子の2p軌道やCl原子の3p軌道は $C_{60}$ のギャップ中に現れ、励起エネルギーを変化させること、Si原子の3p軌道は $C_{60}$ のt<sub>1u</sub>軌道と分子軌道を構成しクラスター全体に広がることなどの結果が得られた。

## 第7回物性専門委員会（14期）議事録

日 時： 1990年6月28日（木）13:35～17:00

出席者：	伊達宗行	飯泉仁	石井武比古	遠藤裕久
	糟谷忠雄	勝木渥	川村清	久保亮五
	小林俊一	佐藤清雄	恒藤敏彦	豊沢豊
	長岡洋介	中嶋貞雄	藤田敏三	丸山瑛一
	守谷亨	山田銹二	禪素英	

### 議 事

1. 前回議事録を修正の上確認した。
2. 学術会議報告（中嶋）

#### 1) 第4部会関連

- 科技庁大型放射光施設に関する4部の報告は4月の4部会で最終案がまとまり、運審に報告され、科技庁と文部省に提出された。
- 大型国際協力に関して、原則をうち出して作業をすすめるべきとの久保物研連委員長から会長への申し入れがなされたが、7月5日の夏の4部会（大津、竜谷大）で4部会としての最終案がまとまり、4部会報告となった。ただし、学術会議全体として、これをどう取り扱うかは、流動的で予測できる段階ではない。
- 国際対応に関する実態調査は現在とりまとめ中で、後継者養成問題とともに10月部会で報告されるものと思う。

#### 2) 学術会議総会（4月総会）

- IGBP（地球圏生物圏国際共同研究計画）推進の勧告がなされた。
- 学術会議の横浜市のみなとみらい用地への移転が確認された。
- 南ア連邦からの入国者のビザの問題：諸外国から厳しい意見が寄せられており会長と外務省の間で折衝がつづけられているが、外務省から正式のレスポンスはない。物研連に関連するところでは、93年に日本で開くことが予定されているIUPAP総会ができなくなるおそれも出ている。
- 学術会議主催の国際会議：92年度は物理関係の国際会議はない。93年度については提出締切が今年暮れである。

#### 3. 物性研報告（守谷）

- 中性子回折：改3号炉外の冷中性子関連設備が3年計画で認められた。なお、改3号炉は今年秋から炉室内稼動開始、来年度より共同利用がはじまる。
- 将来計画委員会の報告書がまとまり、関係者に送付された。広く意見を聞き、所としての

最終案をまとめたい。

○移転問題は周囲の状況をみながら検討している。

#### 4. 物性研連（石井）

○物性研SORは将来計画の一環として位置づけられており、競争相手がありしかも規模の大きいことから、ハードウェアと、それを使っての物性研究の可能性を論じた冊子を製作中である。

○中型計画については放射光学会の特別委員会が全国の計画のサーベイを行っており、年内に中間報告を発表し、今年度末には最終報告が出せるよう作業中である。

#### 5. 基研報告（長岡）

○広大理論研との合併が実現した。固有部門9（旧基研5、理論研4）と外国人客員部門1（旧基研）からなる。合併にともない、外国人客員部門の時限がとれた。

○新しい基研の日本語名称はこれまでどおりだが、英語名はYukawa Institute for Theoretical Physics となった。なお、キャンパスが分かれているので、必要により「基研北白川」、「基研宇治」と区別する。

○将来計画に関するアンケートを関係者に配布し集計されたが、これに基づく議論を秋に行いたい。

○物性関係の部門が物性論部門と非線形物理部門の2部門だけなので、これから物性関係の部門増を優先して要求していきたい。

○理論研との合併にともない改築をしたいが、土地問題は前途多難である。

#### 6. 物性研協議会委員選挙結果（長岡）

○物性研としては60才未満の候補者を推薦してほしいという意向があり、60才以上の方は被選挙権がないものと了解した。また本委員会席上で投票すべきところ、機会がなかったので郵便投票とした。結果は、以下の5氏であった。

遠藤康夫、櫛田孝司、都福仁、立木昌、川路紳路

#### 7. 物理学会理事との懇談会（石井）

○物研連と物理学会との協力関係のあり方を議論するため、物研連委員長から物理学会会長へ物理学の研究・教育の動向調査に関する協力依頼があったのを機会に、標記懇談会を開いた。具体的には、日本の物理学の研究・教育の将来予測、研究の未来への期待、国際協力の実状について議論した。なぜ、そのようなことに物理学会が関与しなくてはならないのか、という質問も出たが、必要性や意義が認められるので、理事会で協力の進め方について前向きに考えることにした。

#### 8. 物性委員会報告（長岡）

○大学院動向調査の結果は、長岡、上村、小林でとりまとめた。MCの院生の数は増加ぎみ

であるが、DC院生の数は、ここ数年、ほとんど変わっていないという結果がでた。これについて、議論が行われ、次のような意見がでた。

- ・大学院生が減っているということを耳にするが數の上では、あたっていない。入試の競争率は下がっているだろう。
- ・水増ししても定員まではとるということがありそうだ。
- ・ベストの院生がDCに残っているというわけではない。
- ・大学は、企業が優秀な学生を引っ張るといっているが、企業も人数を確保できずに困っているという実状にある。

○物性将来計画を討議してもらうため、秋の分科会（岐阜大学）の際に物性委員会の主催で物性グループ懇談会を開く。

その他、推薦制や、大学院入学の弾力化の実状についても若干のコメントがあった。

#### 協議事項

##### 1. 次期研連委員の選出方法について

「物性グループとの関係をどうするか」、「欠員を使って、他のグループに推薦を委託しているが、それをどうするか」ということを中心に考えてほしいとの委員長発言があり、次のような意見が出た。

○地方の研究者との一体感という意味では、研究グループの推薦があった方がよい。

○多角的な推薦母体があった方がよい。

○応物と2名ぐらいずつ相互のり入れしてはどうか。

##### 2. 物性将来計画

物性将来計画WGの糟谷氏より、同氏が地方の研究者の意見を聞くために行った、私的なアンケート調査の結果についての報告があった。このアンケートの性格や結果の取扱いについて議論されたが、秋の物理学会分科会で本題の議論をすることとした。

##### 3. SSCについて

まず、伊達委員長より、SSC計画の概要について、以下のような説明があった。

名 称：ロナルド・レーガン高エネルギー物理研究所

場 所：テキサス州ダラス

投 資 額：1兆2千億円、うち $\frac{1}{4}$ は日本の負担が期待されている。また、外国の負担額は $\frac{1}{3}$ をこえない、という条件がついている。

協力関係：「フル・パートナーシップ」という形容が使われ、設計、建設、運営の全段階での協力が求められている。

8月末までの日本からの解答が要求されているが、学問以外の観点からの議論が先行している。

これに基づき、以下のような議論が行われた。

- 政策決定の mechanism が確立されていないところへこの問題が出てきた。
- 将来の加速器計画については、I U P A P の中の委員会でも議論されているなど研究者の申し合せもあり、全世界的協力でやるべきものだが、「アメリカの栄光」や「アメリカ科学の優位性」を主張する S S C が、そのような真の国際的に開かれた研究計画たりうるか。
- 1兆2千億円は建設費であって、1つの実験に500億円かかるというようなものにのめりこんでは、日本の将来によくないことが起こらないか。
- 問題も予算も文部省にとっては大きすぎる。特別の予算枠が必要。
- われわれに迷惑がかからなければそれでよいという考え方もあるし、定員削減分がそちらにまわされたりするなど物性将来計画に支障が出たりということは十分懸念されるという考えもある。
- 当初の建設費予想8千億円が1兆2千億に拡張したいきさつもあるので、machin studyその他基礎資料を専門家に示すべきである。
- 政治がからむ問題にわれわれがどう対処すべきか、物研連できちんと議論すべきである。
- P.W. Anderson の S S C は物理をダメにしてしまうという意見は傾聴に値する。
- 日本の中では3年間を無為に過ごしたが、これは、学者にものを言わせまいとする政府の態度にも原因がある。
- 日米のフル・パートナーシップというなら、テキサス州でなくカリフォルニアに建設するとか、日本の附置研を作るなどを考えるべきだが、米国には、そういう考えはあるのだろうか。
- 日本の高エネルギー研究者が他の計画を一切放棄するなら、これでもよい。
- 研究者としてはわれわれがすべて納得してからやってほしい。特に、日本の研究者の調査なしに8月までに回答しろというのは無謀きわまる。
- 国際協力というが、日米以外の各国との協力がはっきりしていない。

以上

## 物性研究所談話会

日 時 1990年10月25日(木)午後4時～5時

場 所 物性研究所Q棟1階講義室

講 師 白根 元 氏

(所属) (ブルクヘブン国立研究所)

題 目 BNLにおける最近の high T<sub>c</sub> の研究

要 旨 :

白根元博士は10月8日より1ヶ月東北大理に滞在しておられます。

この機会に講演をお願いいたしました。

日 時 1990年10月29日(月)午後4時～5時

場 所 物性研究所Q棟1階講義室

講 師 Dr. V. Sechovsky チャールズ大学 チェコスロバキア

(所属) Department of Metal Physics. Charles University

題 目 Magnetism in light-actinide intermetallic systems

要 旨 :

The specific ingredients in intermetallic systems containing U, Np or Pu are the 5f electrons which can contribute, on one hand, to the metallic bonding and, on the other hand, to the formation of magnetic moments. The character of 5f states ranges from itinerant to nearly localized depending on the kind of the actinide atom and its surrounding.

Related investigations of magnetic and related electronic properties of isostructural series of UT<sub>2</sub>, UT<sub>3</sub>, UX<sub>3</sub> and UTX have revealed a variety of magnetic phenomena ranging from weak paramagnetism to various types of magnetic ordering. The observed systematics of ground-state properties will be discussed with respect to the development of the electronic structure related to the expected variations of the 5f-ligand hybridization.

日 時 1990年11月5日(月)午後4時～5時

場 所 物性研究所Q棟1階講義室

講 師 Prof. Dr. E. Kaldus

(所属) ETHチューリッヒ

題 目 Structural and Physical Properties of Single and Double-Chain Y-Ba-Cu-O Phases

要 旨 :

Kaldis氏はYBCOの1-2-4相をはじめ試料合成を精力的に行ない、興味ある物性の研究を行っています。氏はISTECの招きで来日されましたので、この機会に講演をお願いしました。

日 時 1990年11月13日(火)午後4時～5時

場 所 物性研究所A棟2階輪講室

講 師 James L. Smith

(所属) Los Alamos National Laboratory

題 目 Measurement of the De Haas van Alphen Effect in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.97}$  Using Megagause Fields

要 旨 :

Magnetization Measurements have been performed on field aligned YBCO powder in fields peaking at 100 T with temperatures from 2.35 to 4k. At least two dHvA Frequencies have been observed.

YBCOのdHvAのお話に関連して、ロスアラモス国立研究所における、超強磁場を用いた研究についてのお話も伺えるものと思います。

日 時 1990年11月14日(水)午後4時～5時

場 所 物性研究所A棟2階輪講室

講 師 Dr. C. M. Varma

(所属) (AT & T Bell Labs.)

題 目 Marginal Fermi-Liquid State and the High Tc Superconductors

要 旨 :

Essentially all the anomalous experimental properties of the high Tc materials, in the normal as well as the superconducting state, can be quantitatively understood from a single hypothesis about the excitation spectrum. The hypothesis is that the characteristic low energy scale is the temperature itself. This leads to a description of these materials as marginal Fermi-liquids.

日 時 1990年11月19日(月)午後4時～5時

場 所 物性研究所Q棟1階講義室

講 師 Prof Olli V. Lounasmaa ヘルシンキ工科大学、フィンランド

(所属) Low Temperature Laboratory, Helsinki University of Technology

題　　目　　Nuclear magnetic ordering in copper and silver at nano- and picokelvin temperatures

要　　旨：

Recent experiments on spontaneous nuclear magnetic ordering in copper and silver are reviewed. In copper, below the critical magnetic field  $B_c=0.25\text{mT}$ , early susceptibility measurements revealed three antiferromagnetic phases at temperatures below  $T_c=60\text{nK}$ . Later, the spin structures were characterized by neutron diffraction experiments: the low-and high-field phases show an anti-ferromagnetic Bragg peak with indices(100), while another( $0\frac{2}{3}\frac{2}{3}$ ) reflection was found at intermediate fields. The phase diagram and the ordered spin structures of copper have been calculated as well; the results are in excellent agreement with experiments. In silver, the spin-spin interactions are dominated by exchange forces, which make this metal an ideal model for a spin- $\frac{1}{2}$  Heisenberg system in an fcc lattice. Experimentally,  $B_c=100\mu\text{T}$  and antiferromagnetic ordering has been found by susceptibility measurements at  $T_c=560\text{pK}$ , the lowest temperature ever produced. The field vs. entropy diagram of silver, showing a single ordered phase, has also been constructed. By rapid field reversal, the nuclei have been cooled to negative temperatures, -4.3nK, as well; a ferromagnetic tendency for ordering was observed.

日　　時　　1990年11月26日(月)午後4時～5時

場　　所　　物性研究所A棟2階輪講室

講　　師　　Oliver Portugall

(所属)　　Universität Braunschweig

題　　目　　Magneto-Spectroscopy on Fe-based HgSe

要　　旨：

Among the growing number of transition metal doped II-VI semiconductors Hg(Fe)Se plays an outstanding role. In the zero-gap band structure of the host material the  $\text{Fe}^{2+}$  ( $3d^6$ )-state is located 210 meV above the conduction band edge, thus acting as a resonant donor. For sufficiently high concentrations this leads to a pinning of the Fermi energy.

Simultaneously a large enhancement of the electron mobility occurs, which is ascribed to the coexistence of both occupied and unoccupied donor states of the Fermi surface.

A number of experimental investigations including magneto-transport, magnetization and magneto-optical measurements have been performed on this system.

日 時 1990年12月10日(月)午後4時～5時  
場 所 物性研究所Q棟1階講義室  
講 師 Prof. G. Eska  
(所属) バイロイト大学(ドイツ)  
題 目 NMR in Metals below 1 millikelvin  
要 旨:

NMR on METALLIC SAMPLES BELOW 1 mK

At very low temperatures high spin polarization is achieved even in low magnetic field. This causes the noticeable action of the nonlinear terms in the Bloch equation which is proportional to the polarization and the strength of the dipolar-and Rk-interaction between the nuclei. At the same time a complicated spin dynamics occurs especially for samples of more than one spin species, like Cu, Tl, and AuIn<sub>2</sub>. Experimental results obtained on these metals are compared with computer simulated NMR spectra (within the frame of the molecular field approximation). Many details of Cu and AuIn<sub>2</sub> spectra would be in accordance with this model, but none of the NMR features of Tl can be explained without dramatic change in the Rk-interaction at low T. These features are also not in agreement with spinwaves bound to impurities.

## 物性研ニュース

### 東京大学物性研究所の助手公募の通知

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

#### 1. 研究部門名等及び公募人員数

軌道放射物性部門 助手 1名

#### 2. 研究内容

本研究所は、田無の原子核研究所内に、0.38GeV 電子ストーリジングとそれに付設の分光・光電子分光実験装置をもち、全国共同利用実験に提供している。また、筑波の高エネルギー物理学研究所内に研究施設分室をもち、フォトンファクトリ・リングに新設された3基の光電子分光実験ステーションを高エネルギー物理学研究所と協同で管理している。今回公募の助手には、田無の実験設備と共同利用実験の管理、それによる光物性研究および筑波の光電子分光実験ステーションの整備とそれを用いた光物性研究を強力に推進する意欲ある人を希望する。

#### 3. 応募資格

修士課程修了、またはこれと同等以上の能力をもつ人。

#### 4. 任期

5年以内を原則とする。

#### 5. 公募締切

平成3年2月2日（土）必着

#### 6. 就任時期

決定後なるべく早い時期を希望する。

#### 7. 提出書類

##### (イ) 推薦の場合

- 推薦書（健康に関する所見を含む）
- 履歴書（略歴で結構です）
- 主要業績リスト（必ずタイプすること）
- 主要論文5編以内の別刷

##### (ロ) 応募の場合

- 履歴書
- 業績リスト（必ずタイプすること）
- 主要論文5編以内の別刷

○所属の長または指導教官等の本人についての意見書（宛先へ直送のこと）

○健康診断書

8. 宛 先

〒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 (3478)6811 内線 5004, 5022

9. 注意事項

軌道放射物性部門 助手応募書類在中、又は意見書在中の旨を朱書きし、書留で郵送のこと。

10. 選考方法

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

平成2年10月31日

東京大学物性研究所長

守 谷 亨

## 東京大学物性研究所の助手公募の通知

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

### 1. 研究部門名等及び公募人員数

理論部門 小谷研究室 助手 1名

### 2. 研究内容

固体分光の理論、特に高エネルギー分光理論に強い関心のある方。

### 3. 応募資格

修士課程修了、またはこれと同等以上の能力をもつ人。

### 4. 任期

5年以内を原則とする。

### 5. 公募締切

平成3年2月20日（水）必着

### 6. 就任時期

決定後なるべく早い時期を希望する。

### 7. 提出書類

#### （イ）推薦の場合

○推薦書（健康に関する所見を含む）

○履歴書（略歴で結構です）

○業績リスト（必ずタイプすること）

○主要論文の別刷

#### （ロ）応募の場合

○履歴書

○業績リスト（必ずタイプすること）

○主要論文の別刷

○所属の長または指導教官等の本人についての意見書（宛先へ直送のこと）

○健康診断書

### 8. 宛先

〒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(3478)6811 内線 5004, 5022

### 9. 注意事項

理論部門小谷研究室 助手応募書類在中、又は意見書在中の旨を朱書し、書留で郵送のこと。

10. 選考方法

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

平成2年12月1日

東京大学物性研究所長

守 谷 亨

本年3月東京大学物性研究所をご退官される先生の記念講演会を以下のとおり開催致しますので、ご来聴くださいますようご案内申し上げます。

また、講演会終了後、先生を囲んでの記念パーティーを計画しておりますので、ご参加頂ければ幸いです。

物性研究所

## 退官記念講演会

日 時 平成3年3月15日（金） 13:30～16:30

場 所 東京大学生産技術研究所 第1会議室（3階）

○ あ い さ つ

○ 守 谷 亨 「局在・遍歴・スピニンゆらぎ—磁性理論の変遷」

業績紹介 福山秀敏

○ 小川信二 「低温磁性の実験35年を顧みて」

業績紹介 石本英彦

## 記念パーティー

開宴時間 記念講演会終了後（16時30分頃から）

場 所 物性研究所第1会議室（2階 上記講演会会場の真下です）

## 東京大学麻布キャンパス（物性研究所・生産技術研究所）

場所 東京都港区六本木 7 丁目22番 1号

電話 (03)3478-6811



地下鉄（千代田線） 「乃木坂駅」下車 4分

地下鉄（日比谷線） 「六本木駅」下車 7分

◎印 地下鉄出入口

## 人 事 異 動

(休 職)

所 属	職・氏名	発令日	異動内容
極限物性部門 表面物性	助手 山田太郎	2.12.16	休職 (3.12.15まで)

(配置換)

所 属	職・氏名	発令日	異動内容
理論部門	教授 小谷章雄	2.11.1	東北大学教授理学部より

(復 職)

所 属	職・氏名	発令日	異動内容
新物質開発部門	技官 小池正義	2.12.25	復職

(採 用)

所 属	職・氏名	発令日	異動内容
総務課 庶務掛	事務官 天野和子	2.12.1	採用

## Technical Report of ISSP 新刊リスト

Ser. A

- No. 2341 Appearance of a Maximum of T<sub>c</sub> and a Large Negative dT<sub>c</sub>/dP in the Superconducting Tl-Ba-Ca-Cu-O Compounds under Pressure. by Nobuo Mori, Hiroki Takahashi, Yuich Shimakawa, Takashi Manako and Yoshimi Kubo.
- No. 2342 Quasi-Particle Properties of the Electron Gas at Metallic Densities in the Effective-Potential Expansion Method. by Yasutami Takada.
- No. 2343 New Analysis of Self-Energy and Proposal of an Improved Exchange and Correlation Potensial for Band Calculation. by Hiroshi Yasuhara and Yasutami Takada.
- No. 2344 Small-Angle X-ray Scattering Stusdies of Mg-AT(D)P-induced Hexamer to Dimer Dissociation in the Reconstituted  $\alpha_3\beta_3$  Complex of ATP Synthase from Thermophilic Bacterium PS3. by Mitsuo Harada, Yuji Ito, Mamoru Sato, Osamu Aono, Shigeo Ohta and Yasuo Kagawa.
- No. 2345 Potassium-Induced Reconctruction of Ag(001). by Michio Okada, Hiroshi Tochihara and Yoshitada Murata.
- No. 2346 Non-Fermi Liquid State in Two-Dimensional Hubbard Model. by Hidetoshi Fukuyama, Osamu Narikiyo and Yasumasa Hasegawa.
- No. 2347 Temperature Dependence of Potassium Adsorption on Ag(001). by Michio Okada, Hiroshi Tochihara and Yoshitada Murata.
- No. 2348 Growth, Structure and Properties of La<sub>2-x</sub>Sr<sub>x</sub>NiO<sub>4</sub> (x=0 to 0.3) Single Crystals. by Wen-Jye Jang and Humihiko Takei.
- No. 2349 Multi-Dimensional Hydrodynamic Simulation Code for X-Ray Laser. by T. Yabe, T. Aoki, T. Ishikawa, P. Y. Wang, Y. Kadota and F. Ikeda.

- No. 2350 Universality Class of Magnetic Phase Transition in the Triangular Lattice Antiferromagnet  $\text{CsMnI}_3$ . by Hiroaki Kadowaki, Toshiya Inami, Yoshitami Ajiro, Kenji Nakajima and Yasuo Endoh.
- No. 2351 Magnetic Properties of the Charged Anderson-Brinkman-Model State: Absence of  $H_{c1}$ . by Takafumi Kita.
- No. 2352 Anyons on a Torus: Braid Group, Aharonov-Bohm Period and Numerical Study. by Yasuhiro Hatsugai, Mahito Kohmoto and Yong-Shi Wu.
- No. 2353 Light Transparent Phase Formed by Room Temperature Compression of Graphite. by Wataru Utsumi and Takehiko Yagi.
- No. 2354 Practical Measurement of Diffusion Constants in Sintered Zirconias by Using Light Scattering Method. by Tohru Suemoto and Haruo Arashi.
- No. 2355 Electronic Band Structure of  $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ . by Tamio Oguchi, Taizo Sasaki and Kiyoyuki Terakura.
- No. 2356 Meissner Effect and Oscillatory Penetration of a Magnetic Field from the Pairing of Valence and Conduction Electrons. by Yasutami Takada.
- No. 2357 Superconductivity near Charge Transfer Instability in  $\text{CuO}_2$  Structure. by Akiharu Miyanaga, Yasumasa Hasegawa and Hidetoshi Fukuyama.
- No. 2358 Magneto-Tunneling Spectroscopy of GaAs-ALGaAs Double Barrier Tunneling Devices in Pulsed High Magnetic Fields up to 40T. by Noboru Miura, Kohji Yamada, Norihiko Kamata, Toshihito Osada and Lawrence Eaves.
- No. 2359 Neutron Depolarization Studies on Reentrant Spin Glass AuFe Alloy. by Setsuo Mitsuda, Hideki Yoshizawa, Tsukasa Watanabe, Shinichi Itoh, Yasuo Endoh and Isabelle Mirebeau.

- No. 2360 Observation of Nuclear Resonance of Cu in  $Pb_2Sr_2Y_{1-x}Ca_xCu_3O_{8+\delta}$  with  $x=0$  and 0.5. by Masaaki Yoshikawa, Kazuyoshi Yoshimura, Takashi Imai, Yutaka Ueda, Hiroshi Yasuoka and Koji Kosuge.
- No. 2361 Nuclear Spin-lattice Relaxation and Knight Shift in  $YBa_2Cu_4O_8$ . by Takao Machi, Izumi Tomono, Takayuki Miyatake, Naoki Koshizuka, Shoji Tanaka, Takashi Imai and Hiroshi Yasuoka.
- No. 2362 S=1 Antiferromagnetic Heisenberg Chain in a Magnetic Field. by Tôru Sakai and Minoru Takahashi.
- No. 2363 Commensurability Effect of Magnetoresistance Anisotropy in a Quasi-One-Dimensional Conductor Tetramethyltetraselenafulvalenium Perchlorata,  $(TMTSF)_2ClO_4$ . by Toshihito Osada, Atsushi Kawasumi, Seiichi Kagoshima, Noboru Miura and Gunji Saito.
- No. 2364 Weak Resonant Photoemission from Shallow Core Lecels in RbF. by Makoto Okusawa, Kazuo Soda, Tamiko Mori and Takehiko Ishii.
- No. 2365 New Self-Consistency Relation between the Correlation Energy and the Momentum Distribution Function with Application to the One-Dimensional Hubbard Model. by Yasutami Takada and Takafumi Kita.

## 編 集 後 記

新年明けましておめでとうございます。本年最初の「物性研だより」をお送りいたします。「物性研だより」も今年度で30周年を迎えることができ、今回はそれを記念して、現所長の守谷先生に巻頭を飾っていただきました。さらに、創刊時の編集委員長であられた中嶋先生より原稿をお寄せいただきました。私などは全くの新米の読者で、これまで創刊時の御苦労など知るよしもなかったのですが、創刊当時の研究所内外のピリピリした雰囲気が伝わってきます。30年前の初心に立ちかえり、今後の編集活動の規範としたいと思います。

なお、次号の原稿締切は2月10日です。

内 海 渉

木 下 實

