

物性研だより

第30卷
第6号

1991年3月

目 次

○ “手作り”の味	岡 與志男	1
○ 近くにありて思うもの	菅野 忠	3
○ 第2回 I S S P国際シンポジウム 「酸化物超伝導体の物理と化学」報告	安岡 弘志	6
物性研短期研究会報告		
○ 「転位のパイエルスボテンシャルと固体の強度」 世話人 奥田 重雄、竹内 伸、鈴木 敬愛		8
第8回物性専門委員会（第14期）議事録		
物性研究所談話会		
物性研ニュース		
○ 東京大学物性研究所 助手公募		27
○ 東京大学物性研究所 助手公募		29
○ 人事異動		31
○ 平成2年度 主要納入設備の紹介		32
○ テクニカル・レポート 新刊リスト		33
編集後記		

東京大学物性研究所

ISSN 0385-9843

“手作り”の味

京都大学教養部 岡 與志男

実に久し振りに、ヘリコプターのエンジン音を聞きながら、思えば十数年ぶりに物性研の玄関をくぐりました。かつてDCの学生の頃に約一ヶ月程、バナジウム硫化物の試料をもって安岡先生の研究室でNMRの仕事をやらせて頂きました。それ以来研究テーマもいろいろと変わったのですが、今回客員研究員として平成2年4月から9月までの半年間新物質開発部門に加えて頂きました。私の本来の仕事は化学の無機合成屋ですが、物性研では私共の処ではなかなか利用できない装置を使わせて貰えるという願ってもない機会ですので、“自家製手作り”的試料をもっていって測定することにしました。その手作り試料ですが、昔々に物性研でお世話になったときには、いわゆる“焼物”，すなわち乾式法で自動的にガスとの平衡状態にして合成した、いわば“何処にでもあるもの”でしたが、今度は少々“こだわり”的風味のある特産試料です。この風味をだすのに水熱釜（オートクレーブ）を利用します。材料はバナジウムと水とともに少々の調味料、釜の具合と匙加減で実際にいろいろに味付けされた物がでてきます。現在は、4価と5価の間のバナジウム化合物を扱っていますが、釜の蓋を開けると酸化物、酸水酸化物や水和物、また調味料によって各種の複合バナジウム酸化物がそれぞれ独自の色、艶、味をもって生成します。例えば、 V_2O_5 といえどもルチル型構造をとり金属-絶縁体転移でよく知られていますが、これは酸素ガスとの平衡状態の VO_2 の話で、水熱釜からは準安定相の $VO_2(A)$, $VO_2(B)$ がでてきます。また、層状、繊維状、板状化合物と実に多彩です。これらの試料で構造未知のものもいくつかありますが、比較的正体の分かったものについて、構造や相転移をX線回折によって調べることにしました。幸いお世話頂いている旧知の上田先生の研究室には、出力18kWの強力X線回折装置と低温試料台およびデータ処理システムが設置されていますので、利用させて貰うことにしました。上田先生をはじめ研究室の方、特に林さんの御協力を得て、慣れぬ装置を相手にいくつかの計画を立てて仕事を始めました。このことについては上田先生には多大な時間を割いてご尽力頂き、お礼の申し上げようもありません。計画のひとつは、 V_2O_5 類縁物質に特有の層状化合物の構造です。層状化合物をシート状にした試料のX線パターンでは通常の反射モードで 001 のピークしか観測されませんが、透過モードでは $hk1$ （とくに hko ）の情報が得られます。強力X線を利用して、できるだけ細くしたビームを透過させることでピーク分離した質の良いデータがとれました。まだ、解析しきれない部分もありますが、電子線回折の結果と合わせて、アルカリを含む水和層状バナジウム酸化物が単斜晶系をとることが分かりました。低温X線測定に関しては、まず最初に最近私共が構造解析した β -バナジウムプロンズと類似の構造をとる $H_2V_3O_8$ について行ってみました。電気抵抗と帶磁率から $H_2V_3O_8$ には110-140K付近に何か異常があることを認めています。低温X線測定からは、残念乍ら顕著な相転

移は見つかりませんでしたが、その温度領域で格子定数の温度変化に異常が見られました。この原因解明については今後の宿題です。もうひとつ面白い結果が出てきたのは $\text{VO}_2(\text{B})$ の低温X線測定です。 $\text{VO}_2(\text{B})$ は前に述べたように準安定相 VO_2 ですが、帶磁率が室温付近から100Kにかけてだらだらと下がります。これが果して磁気的規則化によるものか他の原因かを知りたかったのです。この低温X線測定はいろいろと苦労したのですが、得られた回折パターンをリートベルト解析することによって半分のバナジウムイオンがペアリングをおこして非磁性状態になって行くことが分かりました。このことは期間中に安岡先生に測定して頂いたNMRの結果と合致します。この $\text{VO}_2(\text{B})$ のX線測定での苦労話があるのです。試料は水熱合成されているのでc面に配向した板状です。なるべく配向性のない試料のほうが良いので、暇にまかせて1時間以上も乳鉢ですりつぶしました。どれくらい配向性がとれたかとX線測定してみると、なんと半分以上が $\text{VO}_2(\text{A})$ に転移しているではありませんか。 $\text{VO}_2(\text{A})$ と $\text{VO}_2(\text{B})$ の結晶構造の類似性から考えてこの相転移は結晶面の積層モードの変化で起こりうるのですが、メカノケミカルに進むとは少々驚きました。このおかげで直接粉碎ができなくなり、試行錯誤の末何とか別の方法で配向性を抑えることができました。このような仕事を、頂いた期間中に上田研究室の皆様の御協力を仰ぎながらこなして行きました。“手作り”試料も測定器にかけて味わってみると平凡な味や予期しない味がでて面白いのですが、なかなか味の本質や名人の味には迫れません。

始めに述べましたように、昔々に一度物性研にお世話になっています。そのときと較べて、物性研や生研の建物は殆ど変わっていませんが、十数年の間に周囲の様子が一変しているのに驚きました。京都の、大文字や比叡山が望める比較的のんびりした界隈で過ごしている者にとって、研究所内とは異質の活力が溢れた夜の六本木の異国のような雰囲気に圧倒されます。ある意味では日本の現在文化の中心地なのでしょうか、六本木から生まれたと言えば大抵のものは許されかつ主流になってしまいます。このような雰囲気の処に、トップレベルの研究所が位置しているということが世界でも珍しいのでしょう。私も、昼食時に上田先生や林さんにいろいろな場所に案内して貰って、ほんの少しだけ“異国風文化”を味わいました。本務の都合上、夏休みに詰めて滞在したのですが、猛暑、台風、水不足と騒がれる中、なんの障害もなく有意義に過ごさせて頂いたことに、武居先生を始め新物質開発部門の皆様、安岡先生また共同利用掛の方々にお礼申し上げます。また、この機会を利用して長らくお会いできなかった知人と旧交を暖められたのも、研究以外の大きな収穫です。

近くにありて思うもの

明治学院大学 菅野忠

1980年から十年間棲み慣れた、大都会のまっただ中になる六本木の物性研究所を離れ、そこから40km程の距離にある戸塚の、富士山を一望にできる丘陵地帯にある、明治学院大学横浜キャンパスに移って、早いもので9ヶ月が過ぎました。もっとも、夏休みの2か月ほどの間は物性研に出かけて装置を借用したりしましたし、物性研から4km位しか離れていない明治学院大学白金キャンパスに、二部（夜間部）の講義のために毎週通うついでに、物性研に立ち寄ったりしているので、物性研の事をふるさとのように懐かしく思う心境にはまだなっていません。そこで、「ふるさとは遠くにありて思うもの」とまではいかず、「近くにありて思うもの」という、標題になった次第です。

研究を進める上で何よりも変化したのは生活のペースで、一週間の半分以上が講義ないし学生実験と会議のために費やされるので、コマ切れになった残りの時間をパッチワークよろしく縫い合わせて、自分の仕事をやらなければならないことです。この状況は、予め想像できただけれども、実際に直面してみるとなかなか難しいことで、時間を有効に使う方法に早く習熟しなければならないと思っています。

物性研時代と比較して今一番戸惑っていることは、寒剤の入手が大変なことです。24時間いつでも蛇口をひねると出てくる液体窒素と、殆ど毎週当たり前のように供給される液体ヘリウム（この陰には液化室の方々の間断無い御努力があるのですが）に、一旦慣れてしまった身には、寒剤が舶來の高級酒のように見えてきます。実際、物性研ではミネラルウォーターのほぼ5分の1の値段で液体窒素が、約2倍の値段で液体ヘリウムが手に入るのに対し、私の所では液体窒素が二級酒並み、液体ヘリウムがスコッチ並みの値段に跳ね上がってしまいます。物性研究には寒剤が不可欠であり、物性研の寒剤が安いのは至極当然の事なのですが、研究費の乏しい私がむしろ高い寒剤で我慢しなければならないのは、何か不条理を感じさせるものがあります。そんなわけで、今の私にとって寒剤はそれこそ砂漠の水のように大事なもので、おまけに容赦なく蒸発していきます。低温の実験を短時間で効率よく行えるように態勢を整えて行かねばと考えています。

私が在籍していた物性研の十年は、いろいろな意味で物性研が変化して行った時代だったと思います。まず第一に変化したのは研究組織で、大部門制への移行が行なわれました。分子部門の木下研の助手として着任したと思ったのも束の間で、すぐに凝縮系物性部門の助手という肩書に変わってしまいました。それまでは、各部門に属する一人ずつの教授および助教授に助手がそれぞれ一人づくという、変形した講座制としての部門だったのが、各大部門に複数の教授及び助教授が属し、そのそれぞれに助手が一人ずつ大部門制に変わったわけです。発足時の大部門は、プロジェクト的研究活動を目的とする7つの重点研究グループと、重点研究グループの間にあって機動性を持

って物性研究を推進する目的で従来の研究室単位でまとめられた、実験および理論系の凝縮系物性部門および理論部門とに分かれていきました。私の場合は研究室の独立性の高い凝縮系物性部門に属していたので、研究組織が変わっても研究を進める上での違いを殆ど意識せずに済みました。しかし、物性研究の質を高めるためには、明確な目的意識を抱き巨額の予算と多数の人員を効率よく投入して、研究を進めて行くやり方もあることを学びました。これは物性研究が分野によっては既にかなり成熟していることの現れだと思われます。

第二に変化したのは人です。私の在籍した十年には物性研の25および30周年が含まれています。研究室の構成員は一般に20ないし25年を周期として交替しますから、ちょうどこの交代期に遭遇していたわけです。第一世代の先生方が御定年を迎えられ、代わりに新進気鋭の第二世代の先生方がいらっしゃる時期を、まさに眺める機会を得たことになります。御蔭で、物性研究にはいろいろな型の研究対象と方法があることを、居ながらにして学ぶことが出来ました。これは全くのところ、物性研究所に在籍させて頂いたために得られた財産の一つで、広い視野を通して物質を見直す上で貴重な財産となると思っております。

第三に変化したのは研究対象です。1986年の後半に銅酸化物の高温超伝導が報告され、世界中の物性研究者は一時高温超伝導の虜になってしまった感がありました。御他間に洩れず私も初めの頃は論文が手に入るたびに目を通したものでした。しかし、物理屋のフィーバー振りとは一線を画すように、化学屋の間では高温超伝導は常に一種冷やかな目で見られていたような感じがあります。これは、一度世に出てしまった物質には余り手をつけたくないという化学屋の業（ごう）のようなものが裏にあるように思えます。しかし、私にとって高温超伝導研究にいっときでも目を向けたことは大変良い経験になりました。

1984年から斎藤軍治先生（現京大教授）と御一緒に BEDT-TTF 錯体の研究をするようになったのですが、この一連の仕事の中で、今年の初めまで有機超伝導体として臨界温度が最も高かった κ -(BEDT-TTF)₂ [Cu(NCS)₂] (κ 塩) の発見に、この経験が役立ったように思います。 κ 塩は当時斎藤研の技官だった浦山初果氏（現姓森、超電導工学研究所）が1986年の暮れに初めて合成した有機物質で、彼女が 110~300K の範囲で伝導度を測定したところ、室温近くでは金属的、260K以下で半導体的な振舞いをすることがわかりました。そこで相転移があるかも知れないと思い、翌年 ESR を 4 K 迄測定したところ、案に相違して吸収強度つまり常磁性磁化率は温度に殆どよらず、吸収線幅も単調に変化するだけであることがわかりました。磁化率をもっと精密に測定するために、木下研で磁気天秤を用い 4 K で磁化曲線を描いたところ、低磁場で異常に大きい反磁性磁化を示した後、磁場の増大と共に徐々に反磁性磁化が減少し、磁場を減少させるとさらに常磁性側に磁化の値が向かう強いヒステリシスを示したのです。また磁場を反転させるときれいなヒストリシスループを描くことがわかりました。この結果を見てすぐにそれが非可逆第二種超伝導体の磁化曲線に酷似していることに気が付いたのは、高温超伝導の論文に不斷から目を通していった賜だと思っています。さ

らに超伝導性を確かめるために100Gと30kGとで磁場中冷却しながら磁化率を測ると、約10K以下でMeissner効果による強い反磁性磁化率を示すことがわかり、 κ 塩が有機超伝導体であることを確信しました。このときも、 κ 塩の磁化率測定の数カ月前に当時石川研の高畠敏郎博士（現広大助教授）と一緒に $Ba_2YCu_3O_{7-x}$ の磁化率を測定したことが良い指針となったことは間違ひありません。その後改めて κ 塩の伝導度を1.5Kまで計り直したところ、転移中間点で 10.4Kの臨界温度を持つことが確認されました。さらに κ 塩は、伝導度が 100~260Kで半導体的なのに拘らず、90K 以下では金属的な温度依存性を示すこともわかったのです。このような複雑な温度依存性を示しついには超伝導にもなる有機導体は、その後も次々に見つかっており、伝導度の測定はできるだけ低温まで行うべきであることを改めて痛感しました。

いろいろな思い出を遺した物性研を「近くにありて思う」につけ、木下先生をはじめ実に多くの方々の導きと励ましがあったことが思い起こされます。物性研は再び組織が改革されるやに聞き及んでいますが、物性研究のセンターとしての機能を、物性研がこれからも絶えず果して行き、私が得た以上の利得を今後も沢山の人達が受け続けられることを希って止みません。

第2回ISSP国際シンポジウム 「酸化物超伝導体の物理と化学」報告

安岡 弘志

第2回ISSP国際シンポジウム「酸化物超伝導体の物理と化学」の実施については、第1回ISSP国際シンポジウム「有機超伝導体の物理と化学」の成果および運営上の反省点を踏まえて平成元年後半より関係者で検討を開始した。正式の組織・実行委員会は平成元年12月に設立された。第1回の委員会（平成元年12月16日）では本シンポジウムを学術会議会議場で開催すること、招待講演を中心とした「若手研究者のための冬の学校」形式とする基本方針が承認された。次いで、国内外からの招待講演候補者の選考が行なわれ、第1次候補者が選定された。それら候補者への招待状を1月末頃発送し、その回答が2月中に出そろったのを受けて、3月6日に第2回の組織・実行委員会を開催した。プログラムを物質・物性・理論の3つのカテゴリーを軸に編成することとし、ファーストサーチュラーの原案が作成された。ファーストサーチュラーは6月に海外数十ヶ国を含む関係機関および個人宛に発送された。

9月末締切の時点で、121件の一般講演申し込みがあった。これらをもとにプログラム編成の会議を11月に行い、決定したプログラムを掲載したファイナルサーチュラーを11月に発送した。またアブストラクト集を作成した。

以上のような準備段階を経て、平成3年1月16日（水）から18日（金）にわたってシンポジウムが学術会議会議場において開催された。前日の15日（火）夕刻には、プレシデントホテルにおいて登録受付と簡単なレセプションが行なわれ約40名が歓談した。シンポジウムの参加者は最終的に258名を数えた。その内訳は、日本人247名、外国人11名（ただし国内滞在者4名を含む）であった。外国人の国別分布は、アメリカ合衆国5名、ドイツ1名、スイス2名、イギリス1名、インド1名、中国1名であった。ソビエト連邦から8名、イスラエルから1名の参加が予定されていたが、種々の理由により来日が実現しなかったのは残念であった。またアメリカ合衆国から招待講演者のひとりが直前に急病のため来日不可能となり急遽プログラムの変更を余儀なくされるというハプニングもあった。

シンポジウムの初日は、開会にあたって守谷物性研所長、引き継ぎ安岡組織委員長から歓迎の言葉が述べられた後、セッションに入った。まず高温超伝導の物質的側面に関する統一的な理解を目指す考え方に関する講演があり、次いで常伝導状態における輸送現象が電子状態についてどのような情報を与えているかという点に着目した講演が行なわれた。午後のポスターセッションでは36件の発表が行なわれ活発な討論が各ポスターの前で展開された。夕刻のセッションでは電子状態に関する理論の講演が行なわれ、高温超伝導物質において重要であると信じられている電子相関の効果を取り入れる上で違った立場に立つ2つの理論が紹介された。

2日目の午前は、電子状態を探るいろいろな実験的プローブを用いた研究が取り上げられ、光電子分光、光学測定、中性子散乱、核磁気共鳴を手段とする実験の最新の成果がそれぞれの専門家から報告された。午後のポスターセッションでは34件の発表が行なわれた。夕刻のセッションでは、まず新しい超伝導物質の探索に関する講演が行なわれた。銅酸化物ばかりでなくニオブ酸化物においても転移温度10K程度の超伝導が見いだされ、その結晶構造が明らかにされたことが発表され、注目を集めた。超薄膜作成の最新の成果が報告され、この分野の進展の早さに改めて驚かされた。さらに、高圧を用いた一連の実験結果に関する報告があり、圧力効果が高温超伝導の機構に関して重要な情報をもたらすものとの期待が寄せられた。

2日目のセッション終了後、プレシデントホテルにおいてシンポジウムのバンケットが開催され、約100名の参加を得て、和やかな歓談の一時を過ごした。席上、海外からの参加者を代表してイリノイ大学のギンスバーグ教授とスイス連邦工科大学のライス教授から謝辞が述べられた。

最終日の午前のセッションでは、まず高温超伝導に対する理論の現状を俯瞰する総合講演が行なわれた。続いて、電子状態計算に関する最新の発展について報告があった。また、高温超伝導に関連して提唱されている分数統計粒子の存在の理論的基礎とその実験的検証の試みに関する講演が行なわれた。午後のポスターセッションでは32件の発表が行なわれた。夕刻のセッションでは、高温超伝導体の電子状態に関する理論の紹介が行なわれた後、最後の講演として高温超伝導における超伝導ゆらぎなどの問題に関する最新の実験の報告が行なわれた。最後にプログラム委員長が簡潔なまとめを行い閉会した。

総合して、現在の物性物理・化学における最大の問題である本テーマに関して、世界の第一線の研究者の講演を、時間の余裕をとってじっくり聴くと同時に、自らの最新の研究成果を発表する機会を得たことは、とくに若手の研究者にとって非常に有意義なシンポジウムであった。講演後の質疑討論も活発で、サイエンスの上で実のある会議であったと評価できる。

なお、プロシーディングスの論文は会期中に集められ、できるだけ早期の出版を目指して現在作業が進められている。

物性研短期研究会

「転移のパイエルスボテンシャルと固体の強度」

世話人：筑波大・物質工 奥 田 重 雄

東 大・物性研 竹 内 伸

東 大・生産研 鈴 木 敬 愛

転位のパイエルスボテンシャルと結晶強度の問題は転位論の初期より、理論的には多くの原子の相関運動を取り扱う問題として、また実験的には結晶塑性の基礎的問題として研究がなされてきているが、困難な問題点あるいは相互の間での矛盾点が未解決のままになっていた。最近、理論的な計算方法の進歩や、種々の結晶の実験的研究の進展により、また種々の新物質の出現とも関連して固体の強度を定量的、統一的に理解しようとする試みがなされ始めている。例えば、結晶学的パラメータにより種々の結晶の強度を整理する試みはかなりの物質について成功しているが、著しいずれを示すものも多い。パイエルスボテンシャルの様な多くの原子の相関運動に関わる物理量の算出には従来の一体近似の手法とは異なる理論的取扱が必要であり、一方、実験的には高応力での変形応力から得られるパイエルスボテンシャルと低応力における緩和現象から求められるそれに一部の結晶では10倍以上の違いがある。このような問題を総合的に評価し、統一的な理解を得るために、理論計算や計算機実験の研究者を始めとして、塑性変形や超音波吸収、内部摩擦の実験および理論、また結晶としては金属、半導体、イオン結晶など、それぞれ得意とする分野を異にする研究者が研究方法、実験条件などについて立ち入った検討を進める必要がある。このような目的で上記短期研究会が平成2年12月10、11日の2日間物性研究所会議室において開催された。参加者は約30名で熱心な討論が行われ、大変有意義な研究会であった。もちろん今回の研究会では統一的な理解を得るには至らなかったが、標記研究テーマについての問題点をより明らかにでき、これから研究の進展上に資する所が大きかった。最後に御多忙中にもかかわらず快く講演をお引き受け下さった諸先生および討論に参加して下さった先生方、さらに研究会の準備と運営に御援助いただいた物性研事務部の方々に心から感謝します。

プログラム

日 時：平成2年12月10日（月）(9:30-18:00)

平成2年12月11日（火）(9:30-13:00)

場 所：東京大学物性研究所 第一会議室（2階）

12月10日（月）

あいさつ

奥田 重雄（筑波大・物質工）

1. パイエルスボテンシャルの理論

introduction

鈴木 敏愛（東大・生産研）

パイエルスモデルによるパイエルス応力の計算

大沢 一人（東大・理）

パイエルス応力の厳密解

石岡 俊也（神奈川大・理）

パイエルスボテンシャルへの一つの試み

- 拘束系の統計力学 -

宗像 豊哲（京大・工）

discussion

昼 食

2. パイエルスボテンシャルと内部摩擦

introduction

奥田 重雄（筑波大・物質工）

BCC金属の緩和ピーク

水林 博（筑波大・物質工）

FCC金属の緩和ピーク

紀 隆雄（広島大・微晶研）

イオン結晶の緩和ピーク

小泉 大一（明大・理工）

Peierls Stress in the Alkali Metals

M. O. K. Kirchner（パリ南大）

discussion

休憩

3. パイエルスボテンシャル—塑性変形の立場から—

introduction

竹内 伸（東大・物性研）

FCC金属

丸川健三郎（北大・工）

銅結晶の降伏応力について

北島 貞吉（熊本工大）

イオン結晶のパイエルス機構

片岡 俊彦（阪大・工）

氷の結晶塑性と転位の運動機構

本堂 武夫（北大・工）

半導体結晶のパイエルス機構

前田 康二（東大・工）

discussion

12月11日（火）

4. 転位芯とパイエルス応力の計算機シミュレーション

introduction

竹内 伸（東大・物性研）

BCC金属の転位の芯構造と塑性変形挙動

藏元 英一（九大・応力研）

FCC—特に希ガス固体のパイエルス応力

比企 能夫（茨城大・工）

HCP結晶の転位の芯構造と塑性変形挙動—I

沼倉 宏（京大・工）

H C P 結晶の転位の芯構造と塑性変形挙動－ II

五十嵐正晃（住友金属）

H C P 結晶の変形に関するコメント

箕西 靖秀（東北大・金研）

金属間化合物のパイエルス応力

山口 正治（京大・工）

イオン結晶のパイエルス応力

鈴木 敬愛（東大・生産研）

discussion

5. 総合討論

パイエルスポテンシャルの理論—Introduction

東大・生研 鈴木 敬愛

I. パイエルス・ポテンシャル／応力に関する理論（モデル）

Peierls potential/stress を理論的に考察するとき、様々なモデルが考えられるが、それらを最も簡単なものから並べると以下のようになる。

1) kink of string on a rigid potential (soliton)

2) kink of chain on a rigid potential (descretised soliton)

= Frenkel-Kontorova model

Monakata

3) dislocated double chain

4) Peierls-Nabarro model --- continuum slip plane

descrete slip plane

Ohsawa

5) full lattice model (screw)

Ishioka

詳細は、大沢、石岡、宗像の各氏によって論じられる。

なお、Peierls stressが、まっすぐな格子転位を絶対0度で動かすのに必要な応力とするならば、それは転位を含む格子の外場（外力）のもとにおける安定条件である。一方、Peierls potential は転位の位置（座標）を指定する方法が与えられて初めて意味のある概念であり、その最大勾配が上記の Peierls stress と一致するか否かは検討を要する。

II. パイエルス機構に関する理論的問題

実際の塑性変形や内部摩擦は多くの場合 kink pair formation の機構によって支配されるが、kink pair formation の頻度の計算は専ら string model--smooth kink model によって行われ、かつ line tension 近似が使われてきた。次のような点が当面の課題である。

(1) self stress による kink pair formation: 曲がって転位をまっすぐにする力は、本来転位自身の応力場(self stress) によるもので、line tensionは一つの近似である。Seeger [1] はbcc 金属の降伏応力の温度依存性に現れる hump を説明するものとして、低応力では kink-kink interaction (self stress による) が支配的になることを主張している。その妥当性は、

全応力範囲で self stressによる kink pair formation energy を計算することによって確かめられるべきである。

- (2) tunneling: 一体近似によらずに張力を持った弦が Peierls potentialを透過する確率が Hidaら [2] によって計算されている。イオン結晶の低温塑性のデータはほぼこの理論によってコンシスティントに説明できる [3] 。
- (3) inertial effect と kink 対の多重形成 [4] :kink pairを一つ作った後にkinetic energy の減衰が少なければ、もう一つ kink pairを作ることも可能である (kink対の多重形成)。bcc 金属の変形応力の超伝導遷移 ($\Delta \tau_{SN}$) はこの問題に関係しているものと思われる。
- (4) abrupt kink case [5] :共有結合性の強い半導体やセラミックスの降伏応力の温度依存性は一般に極めて急峻である。Peierls stress が大きく smooth kink model (したがって, string model) が適用できない場合の kink pair formationの energy および降伏応力の温度依存性を求めるることは今後の課題である。

[1] A. Seeger: Z. Metallkde. 72(1981) 369.

[2] S. Nakaya and K. Hida: J. Phys. Soc. Japan 55 (1986) 3768.

[3] 小泉大一, 鈴木敬愛: 日本物理学会講演 (1987春).

[4] 鈴木敬愛, 小泉大一: 日本物理学会講演 (1981秋).

[5] S. Takeuchi and T. Suzuki: Strength of Metals and Alloys, ed. by P. O. Kettunen et al. (Pergamon Press, 1989) p. 161.

パイエルスモデルによるパイエルス応力の計算

東大・理 大沢 一人

PeierlsとNabarro による Peierls potential/stress の計算の方法は、二つの半無限連続弾性体を非線形せん断バネで繋ぎ合わせ、そこ（すべり面）に転位を導入するものであったが、実際に計算を行う際には、無限小転位の連続分布が仮定された。このことは、連続体近似（非線形性は残して）に移行したこと意味しており、結晶格子の離散性はモデルそのものには含まれていない。したがって、転位を動かすのに必要な最小の力を Peierls stress τ_p と定義するなら、それは 0 になる。Misfit energy から Peierls potential/stress を求める方法の妥当性については検討を要する。

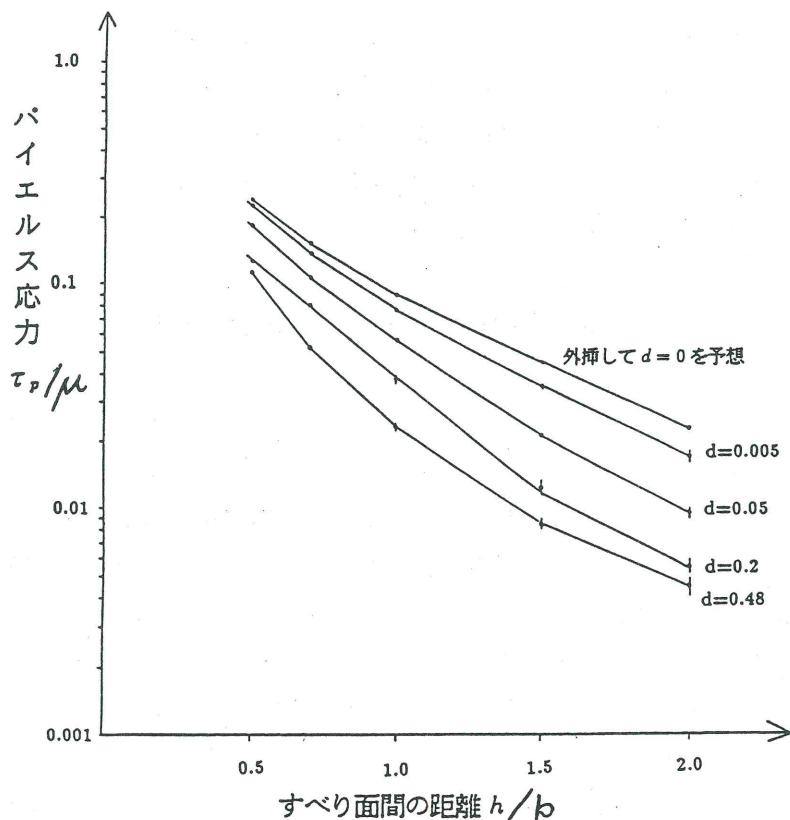
すべり面のところに格子の離散性を残したまま、外力 τ によって力学的安定性が破れる条件として τ_p を計算することを試みた。

まず、半無限連続弾性体の表面に力が作用するときの変位場を求める。つぎに、二つの半無限連

まず、半無限連続弾性体の表面に力が作用するときの変位場を求める。つぎに、二つの半無限連続弾性体が非線形（sinusoidal）せん断バネで結ばれていて転位を含むときの釣合構造を計算する。外力 τ を0から次第に増加させて行き、転位芯の所での原子の相対変位を見て行く。 τ が小さい時には線形応答を示すが、 τ が大きくなると急激に非線形的になり、ある限界値を越えると転位の移動が生じる。この限界値を τ_p と見なす。せん断バネの強さを弾性体のせん断弾性率 μ に合わせて決めれば、モデルを特徴づける変数は h/b （ h ：すべり面の面間隔、 b ：Burgers vectorの大きさ）だけである。 h/b の値を変えて計算すると τ_p/μ は図のようになる。ここで、 d はバネと連続弾性体の連結部分の幅（ b を単位とする）で、 $d=0$ における変位の発散を避けるために導入した量である。 d が小さいとき、

$$\tau_p/\mu \sim A \cdot \exp(-B \cdot h/b), \quad A \sim 0.7, \quad B \sim 2.0-2.5$$

を得る。塑性の実験から求まる種々の結晶の τ_p に対しては、 $A \sim 3$ 、 $B \sim 8$ であるから、計算結果は実験値よりかなり大きい τ_p をあたえるが、 h/b に対して指指数関数的関係を再現する点に意味がある。



パイエルス応力の厳密解

神奈川大・理 石 岡 俊 也

パイエルス応力は、沢山の原子の相互作用の結果定まる微妙な物理量であり、たとえ単純なモデルであっても、厳密解を知っておくことは、現実的な問題に立ち向かうときに参考になる。転位のモデルとして最も簡単な Frenkel-Kontrowa モデルについては、Kratochivil 等(1)が、2種類の放物線を滑らかに繋いで作った下地ポテンシャルに対して厳密解を求めている。彼等の解の特徴は、(i) 2種類の対称な原子配置のエネルギーの大小関係が、放物線のつなぎ目を変化させると、頻繁に変化すること、(ii) 2つのエネルギーが等しくなったとき、パイエルス応力がゼロとなること、の2点である。

筆者(2)は、らせん転位に関し、原子列間ポテンシャルとして上と同じように2種類の放物線を滑らかに繋いだものを仮定して、パイエルス応力の厳密解を得た。結果は、Frenkel-Kontrowa モデルの場合と本質的に同じであった。

厳密解からわかったことは、パイエルス応力が原子間力の非調和部分に非常に敏感であるということである。パイエルスルーナバロの簡単な式ですべての物質のパイエスティル応力がよく再現できるという Takayaoshi Suzuki 等の指摘と、この敏感性とがうまく折り合いがつくのか、今のところ、筆者にはよく分からぬ。

- (1) J. Kratochivil and V. L. Indenbom: Czecz. J. Phys. B13 (1963) 814. J. H. Weiner and W. T. Sanders: Phys. Rev. 134(1964) A1007.
(2) S. Ishioka: J. Phys. Soc. Jpn. 36(1974) 187, 1390.

パイエルスポテンシャルへの一つの試み

-拘束系の統計力学-

京大・工 宗 像 豊 哲

転位やキントを含む系の動力学の問題を、拘束をもつ多体系の問題に定式化して、この定式化を用いてパイエルスポテンシャルを議論した。この定式化はまた、遷移状態理論 (TST) にうまく適合し、キントのジャンプ率の理論予測を可能にする。計算機実験との比較を行うことにより、キントの拡散係数の温度依存性に対して、実験結果を再現する結果を得た。

パイエルスポтенシャルと内部摩擦 - Introduction

筑波大・物質工 奥 田 重 雄

Bordoni (1949)が加工した FCC 金属の内部摩擦を測定して、50~100K付近で安定な緩和ピークが生ずることを見出した。Seeger (1962)はこの緩和ピークの原因が転位がキント対を形成してパイエルスポтенシャルを乗りこえる緩和過程によるという機構を提唱して以来、これが広く認めら

れて来た。この機構から予想されるパイエルス応力は $10^{-3} \sim 10^{-4}$ μ 程度なのに対し、塑性変形の実験から推定されるマクロな変形応力は 10^{-5} μ 程度以下であることが当初から問題になったが、マクロな変形応力を決めているのは他の転位との相互作用であると解釈された。FCC金属の Bordoni ピークについては1960年代までに多くの研究がなされて少なくとも内部摩擦の研究の範囲内ではキンク対形成機構で説明でき、それ以外の機構では説明し難いことが確認され一応決着がついた形になっていた。しかしその後も、種々の形でこの機構を確認するための研究が主としてヨーロッパの研究者達によって続けられて來た。これは Bordoni ピークに対応する転位運動の非線形性、ミクロな変形開始との対応を確認したもので、少なくともミクロな変形と Bordoni ピークとは矛盾がないことを明らかにした。この結果、マクロな変形では転位の運動はパイエルスボテンシャルをすり抜けて一種の short circuit を通って起こっていると考えざるを得ないというのが現状である。

一方、試料の高純度化を含めて他の結晶型での研究が進むにつれて、特にBCC金属ではマクロな塑性変形がキンク対形成で説明でき、いわゆる Bordoni ピークもこれに対応して矛盾なく説明されることが明らかになった。この結果、本当に FCC 金属の Bordoni ピークが転位のキンク対形成に対応しているのかどうかということが再び問題になりつつある。

「BCC 金属の緩和ピーク」

筑波大・物質工 水 林 博

高純度試料 (RRR \gtrsim 数千) が得られるようになった W, Mo, Ta, Nb 及び Fe についてのデーターの蓄積が進められている。これらの金属における緩和ピークの様相は良く似ており、融点の 1/5 \sim 1/10, 1/数十及びより低温側に緩和ピークが現われ、高温側から γ , α , α' ピークと呼んでいる。 γ はらせん転位のキンク対形成、 α は非らせん転位のキンク対形成、 α' はらせん転位のキンク拡散に起因すると考えられており、他の実験手法による結果との整合性は良い。一方、 α 及び α' は複数個の成分緩和から成っていること、 γ の緩和過程の前指数項応力と共に大きく変化するらしいことが最近報告されており、これらは今後の興味深い研究課題である。

FCC 金属の緩和ピーク

広島大・理 紀 隆 雄

1949年に Bordoni が変形した面心立方金属で見出した低温域での緩和ピークは、その後結晶型の異なる金属でも見出され、その機構としては Seeger 等が提案したキンク対形成のモデルが一般的に受け入れられている。しかしこれによると面心立方金属の Bordoni ピークから評価されるパイエルス応力は 10^{-3} μ (剛性率) となり、変形実験から期待される値 10^{-5} μ と大きく異なる。

今回、99.999%アルミニウムの単結晶を僅かに変形して、複合振動子法により振巾に依存しない内部摩擦を 2 \sim 240K の温度範囲に亘って測定したところ、11K付近に新しい緩和ピークを見出した。

このピークの活性化エネルギーは約0.01eVで、これにキンク対形成のモデルを適用するとパイエルス応力は $10^{-5} \mu$ 程度になり、低温での降伏応力と矛盾しない。Bordoniピークの再検討を提起する。

イオン結晶の緩和ピーク

明大・理工 小 泉 大 一

代表的なイオン結晶にはNaCl型構造をとるものとCsCl型構造のものがある。塑性変形による転位の導入で、超音波吸収、低周波の内耗の温度依存性に緩和型ピークがあらわれる。このピークの温度はNaClの場合、10MHzで180Kと25Kである。塑性変形で得られている Peierls応力 $\tau_p = 10\text{ MPa}$ の値から計算されるキンク対形成エネルギーと緩和ピークの活性化エネルギーの比較から、高温のピークは塑性変形を律速している転位のキンク対形成によると考えられる。CsIでは10MHzで13K付近にピークが現れる。これをキンク対形成によるとすると $\tau_p = 0.2\text{ MPa}$ となる。塑性変形実験では $\tau_p < 0.2\text{ MPa}$ であり、2つの τ_p は矛盾しない結果を与える。

Peierls Stress in the Alkali Metals

Inst. de Sciences des Materiaux, Univ. Paris Sud

H. O. K. Kirchner

Deformation and internal friction experiments were conducted on the b.c.c. alkali metals Li, Na and K. Potassium stays b.c.c. at all temperatures, shows a rapid increase in c.r.s.s. below 20K, an activation volume of appr. $10b^3$ and in internal friction at 10KHz a γ -peak at 50K -- it behaves like a b.c.c. transition metals.

Li and Na on the other hand, do not show a γ -peak in their b.c.c. phase, no increase in the c.r.s.s. and activation volumes of 10^*4b^3 . One concludes that these metals, which transform to f.c.c./h.c.p. at low temperatures, must have a low Peierls potential in their b.c.c. phase.

パイエルス・ポテンシャルー塑性変形の立場から—

東大・物性研 竹内 誠 伸

単結晶の塑性変形の実験から得られるパイエルス・ポテンシャルに関する情報には、(1)低温の降伏応力を絶対零度に外挿することによるパイエルス応力、(2)高温の変形の熱活性化解析によるキンクの自己エネルギー（および移動のエネルギー）の2種類がある。

(1)に関する実験的な問題点には、(a) 降伏応力がパイエルス機構で支配されているか否かの判定法、(b) 内部応力（固溶原子と転位の相互作用）の効果、(c) 転位運動の量子効果、(d) 降伏応力の定義の曖昧さ、などがあることを指摘した。

(2) 高温におけるパイエルス機構による塑性変形は、パイエルス・ポテンシャルの大きさに応じて (a) smooth kink regime と (b) abrupt kink regime の 2 種類に分類されることを示し、それについて理論的に導出される表式について論じた。(a) の場合には、低応力および高応力の極限で活性化エネルギーの応力依存性が特徴的な関数形になることを示し、(b) については、さらに kink-kink collision の起こる場合と起こらない場合の 2 通りがあり、それについて活性化エネルギーの内容が異なるが、この 2 つの場合を実験的に区別することが困難であることについて述べた。

FCC 金属のパイエルス・ポテンシャル

北大・工 丸川 健三郎

- (1) 純銅単結晶について綿密な降伏応力測定を行った。まず、初転位密度が適度に低い ($5 \times 10^3 \sim 5 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$) 試料では、降伏応力が初転位密度に依存しないことを示し、つぎに、このような試料について、降伏応力の温度依存性を求めた。この結果に基づいてパイエルス応力の推定を行い、その値として $4.5 \times 10^{-6} \text{ G}$ (G は剛性率) を得た。この値は BCC 金属に比べて約 3 衡低い。
- (2) FCC 金属におけるらせん転位の芯構造について理論的考察を行い、Twist 構造の存在可能性を検討した。転位の拡張幅が狭い金属、たとえばアルミニウムでは、Twist 構造が安定に存在し得ることを示した。

銅結晶の降伏

熊本工大 北島 貞吉

よく焼鈍された銅結晶の降伏は、初期転位密度 ρ_0 との関連で多くの研究がなされた。しかし $\rho_0 = 10^2 \sim 10^4 / \text{cm}^2$ の結晶では、予想に反して降伏応力は $\rho_0^{1/2}$ と直線関係にはなく、 ρ_0 依存性は小さいことが知られている。我々は、 $\rho_0 = 10^2 \sim 10^3 / \text{cm}^2$ の高完全度銅結晶で降伏様相を追求した。その結果を述べる。

- (1) 焼鈍銅結晶の転位線（焼鈍転位とよぶ）は、高密度の巨大ジョグを含む。故に一枚のすべり面上にある転位線の長さは、 ρ_0 から期待される転位線の長さ（転位網の節間距離）より短かい。
- (2) 焼鈍転位は、そのままの状態では降伏時の転位増殖をまかぬ転位源にはならない。
- (3) 焼鈍転位の運動開始応力は、剪断応力で 1 g/mm^2 と降伏応力 ($\sim 10 \text{ g/mm}^2$) またはそれ以上の高応力範囲に分布する。結晶表面に顔を出し、大きな剪断応力をうけ、刃状成分が強いと、優先的に長距離を運動する。そして最初の表面と角度をなす自由表面に到達するとジョグを結晶外に放出し、みずからは同一すべり面上の長い表面転位線に変換される。これが低応力下で転位を増殖出来るようになり、降伏が起る。この転位源の形成は焼鈍転位運動の熱活性化過程によって起る。
- (4) (2)の結果から、転位運動に対する抵抗力は、単純な Peierls 力のみではなく、巨大ジョグの運

動に対する Peierls 力が重要であることが示されている。さらにまた(3)の表面転位源の形成には、結晶表面による転位の鏡像力が重要な役割を演じている。

イオン結晶のパイエルス機構

阪大・工 片 岡 俊 彦

イオン結晶の低温における降伏応力は、NaCl型アルカリハライド、銀ハライド、金属酸化物や、CsCl型アルカリハライドについて系統的に調べられている。中でも、高純度の結晶についての解析結果は、その変形が1次、2次すべり系とともにパイエルス機構に従っていることを示している。降伏応力の温度依存性は $T^{4/5}$ プロットで整理することができる。また、その外挿値から求めたパイエルス応力と剛性率の比、 τ_p/μ は $0.4 \sim 5.1 \times 10^{-3}$ であるが、 τ_p の大きいものほどその値が大きくなる傾向にあり、このことは同じ結晶構造をもつ物質のなかでもパイエルスボテンシャルの形が構成イオンの種類によって系統的に変化しているものと考えられる。15K以下の極低温では、共通して熱活性化過程が通常のアレニウス式に従わないという異常が現れるが、その原因は転位と弱い相互作用をする。微量不順物による活性化エネルギーの揺らぎに起因している。

氷の結晶塑性と転位の運動機構

北大・工 本 堂 武 夫

氷の結晶塑性の著しい特徴は、底面すべりが卓越して生ずるという点にあるが、転位の運動速度は逆に底面よりもプリズム面の方が約5倍大きい。この一見矛盾した現象は、底面上の積層欠陥エネルギーが非常に低いために、a 転位が底面上で幅広く拡張していると考えることによって良く説明される。また、H-L理論で計算される転位の速度は、実測よりも約5桁小さい。現時点では、Whitworthのモデル（第2パイエルス・ボテンシャルを無視して、氷特有の点障害-プロトンのランダム配置に起因する障害-のみを考えるモデル）がほぼ良い結果を与えることを述べた。

半導体結晶のパイエルス機構

東大・工 前 田 康 二

半導体結晶では一般にキンクはアラブトであると考えられ、その結果キンクの感じる第2種パイエルスボテンシャルは無視できない大きさを持ち、転位の運動は、最小キンク対の発生、安定キンク対の核形成、キンクの拡散運動、の3つのプロセスを繰り返して進行すると推定される。転位線が十分長いと転位速度が転位長に依存しなくなることが知られており、これは反対符号のキンクが互いに衝突しながら転位線が進むためであると従来は解釈されている。しかしこのキンク衝突モデルでは、転位速度の前指数因子が実験値より数桁小さく、また最近見いだされた間欠負荷効果（応力負荷を短時間で中断すると転位が進まなくなる現象）を全く説明することができないことが

ら、キンクの平均自由行程はキンク衝突ではなく、geometrical kinkや何らかの点障害の間隔で決まっていると考えるべきである。GaAsなど半導体で観察される照射促進転位すべり効果の機構を明らかにするため、間欠負荷効果に対する照射効果を調べた結果、促進効果は最小キンク対の生成過程で起こっているとの結論に達し、キンクの拡散障壁が従来言われているほど高いものでないことを定量的に示した。

転位芯とパイエルス応力の計算機シミュレーション—Introduction

東大・物性研 竹内伸

転位に関する計算機シミュレーションにはいくつかの段階があり、それらを分けて論じた。

- (1) 結晶のモデル化：従来行われて来た2体力、多体力による半経験的原子間ポテンシャル、強結合近似に基づくバンド構造エネルギーの見積りの手法などを要約し、モデルが満たすべき最低条件が格子の安定性、格子定数、いくつかの弾性定数であり、さらにフォノン分散関係、原子空孔形成エネルギーの再現等が考慮されている現状について述べた。
- (2) 転位芯構造の計算：問題点として、得られる転位芯構造が初期条件に依存するので、複数の安定構造の存在を見逃がす可能性があること、転位芯構造の表現法と解釈について論じた。
- (3) パイエルス応力：問題点として、低パイエルス応力の見積りの精度、non-glide stress, non-glide strain の効果の存在について論じた。
- (4) パイエルス・ポテンシャル：力学的に非平衡な状態のエネルギーを求めるこの原理的困難について述べた。
- (5) キンクおよびキンク対形成過程：キンクの計算には大きなサイズのモデルが必要なので、キンクエネルギーやキンク対の鞍部点エネルギーを精度よく求めることはかなり困難であり、キンク対形成の熱活性化過程をシミュレーションすることは現在の計算機の能力では不可能に近い事情について述べた。

BCC金属の転位の芯構造と塑性変形挙動

九大・応力研 蔵元英一

BCC金属(Fe, Mo, Nb, Ta等)の単結晶の降伏強度の温度依存性を詳細に調べてみると、単調な曲線ではなく、中間温度域に上に凸の領域(hump)が存在することが分かる。合金化(例えばFe-Ni, Fe-Si)によってこのhumpの位置は低温側にシフトする。又すべり面は基本的には(110)面である。これはらせん転位の芯構造が非分極型であることを示している。d-電子論に基づいたポテンシャルを用いた計算機シミュレーションではこの型が安定があることが示された。humpの移動に関してはキンク対形成エネルギーに関するシミュレーションがモデル結晶中のらせん転位に対して行われなければならない。

FCC-特に希ガス固体のパイエルス応力

茨城大・工 比 企 能 夫

FCC構造をもつ結晶のパイエルス応力は非常に小さいと考えられ、その値を計算機シミュレーションより求めるには種々の困難が伴う。その主なものとして、適切な原子間ポテンシャルの採用がある。その点、希ガス固体では、ほぼ満足なものとして Lennard-Jonesポテンシャルが用いられるので有利である。他の問題点としては、有限結晶モデルの採用による表面効果がある。これは特に小さいパイエルス応力の場合に重要となる。

この研究では、これ等の点を考慮して、希ガス固体 (Ne, Ar, Kr, Xe) について、第3隣接原子までのL-Jポテンシャルを用い、360～1400原子を含む表面条件をコントロールしたモデル結晶中のらせん転位のパイエルス応力 τ_p の計算を molecular dynamics 法で行なった。計算は最初に導入した転位による安定原子位置の決定 (initial relaxation) に続き、一様な応力を結晶に加えたときの転位位置の追跡 (dynamical relaxation) を行う。前者では Stacking fault エネルギーの計算、後者では結晶のもつ運動エネルギーの追跡も同時に行う。

得られた結果としては、すべての結晶について $\tau_p/\mu = (5.7 \pm 0.6) \times 10^{-4}$ (μ はずれ弾性率) が得られ、これから Ne～Xe に対して、 $\tau_p = 0.3 \sim 1 \text{ MPa}$ の値が得られた。

HCP結晶の転位の芯構造と塑性変形挙動—I

京大・工 沼 倉 宏

HCP金属は多彩な塑性変形挙動を示す、主すべり系である⟨a⟩すべり、二次すべり系の⟨a+c⟩すべりは共に、Mg, Coなどと Ti, Zr などの二つのグループでそれぞれ異なる面で起こる。変形を律速している転位の character も各々の系に特有で、臨界応力の絶対値、温度依存性もそれぞれに大きく異なっている。

このようなすべり面の違いや各すべり系における転位の運動機構を解明するために、これまで計算機シミュレーションによる研究がいくつか行なわれている。⟨a⟩ 転位のすべり面は、柱面と底面の積層欠陥エネルギーの大小で決まっていることを示す計算結果が報告されているが、転位の芯構造も、積層欠陥の存在とその安定性に支配される。計算された芯構造と転位の応力下での振舞いのシミュレーションの結果は、実在の金属のすべり挙動を定性的には説明することができ、HCP金属の塑性の理解に有用な知見を与えていている。

HCP結晶の転位の芯構造と塑性変形挙動-II

住友金属 五十嵐 正 晃

HCP金属の主すべり系は底面・柱面何れかの a 型転位対; 1/3 {1120} であるが、その選択は従来のモデルでは十分に理解されていなかった。そこで HCP 金属の c/a 軸比を再現した Finnis-

Sinclair型の原子間多ポテンシャルを開発し、計算機シミュレーションによって元素個々の転位芯構造を解析した。その結果、まず底面上ではどの元素にてもショックレーの部分転位への分解により安定な積層欠陥が存在するが、柱面上には幾何学的に保証された安定な欠陥は存在せず、元素によって $1/3 \{1120\} \rightarrow 1/6 \{112x\} + 1/6 \{112\}$ ($x:0 \sim 1$) の分解により転位芯エネルギー、バイエルス応力を評価すると、底面に拡張した転位芯構造が c/a 軸比の低下に伴って相対的に安定化し、柱面すべりが優先することが示唆された。Beは最小の c/a 軸比を有するが底面すべりに対するバイエルス応力が小さく例外的に底面すべりを示すことが明らかとなった。

HCP 結晶の変形に関するコメント： HCP結晶中の $\{11\bar{2}1\}$ 双晶の形成機構

東北大・金研 箕 西 靖 秀

FCCやBCC金属では限られた変形条件下でないと変形双晶は起こり得ないのに対し、HCP金属では辺り変形と共に殆ど常に容易に変形双晶が起こる。従って、立方晶金属と異なり HCP金属の強度、特に変形を考える場合、辺り変形は勿論のこと変形双晶を抜きにして考える事は出来ない。ここでは、 $\{11\bar{2}1\}$ 双晶について、コンピューター・シミュレーションと透過電顕観察結果から示唆される新しい双晶形成の機構について述べる。シミュレーションによる $1/3<1123>$ 即ち $c+a$ 刃状転位はほぼエネルギーの等しい二種の芯構造を持つ。一つは $b=c+a$ が $\{11\bar{2}1\}$ 及び $\{11\bar{2}\bar{1}\}$ 双晶転位に分解した結果形成される二種の微双晶を含む構造(A)を持ち、他は2本の $1/6<1123>$ 部分転位に分解した構造(B)を持つ。 c 軸引張りに対応する応力下ではA構造中の $\{11\bar{2}1\}$ 微双晶は厚さと長さを増す。 c 軸圧縮応力下ではAはBに構造を変えた後に辺る。Bは応力の向きに関係なく辺るだけで双晶を生じない。今、一本の転位がAまたはB構造を持つ部分から成るものとする。応力を負荷するとBの部分は $\{11\bar{2}2\}$ 面上をそのまま辺るがAの部分は $\{11\bar{2}1\}$ 双晶に成る。これら両面の面間角はTiで 14.7° で、転位が $\{11\bar{2}1\}$ 面上を辺るにつれて双晶面から離れたレベルに達する。この過程を繰り返せば双晶は厚みを増す。Tiを c 軸圧縮すると主として $\{11\bar{2}1\}$ 双晶で変形し、その内部には $\{11\bar{2}1\}$ 双晶が形成される。透過電顕観察によると $\{11\bar{2}1\}$ 双晶内に多数の面欠陥が観察され、傾斜実験の結果これらの欠陥は上記の機構で形成された薄い $\{11\bar{2}1\}$ 双晶であることが確認された。

金属間化合物のバイエルス応力

京大・工 山 口 正 治

純金属や単なる合金には期待すべくもない数々の特性を秘めた新しい材料として、金属間化合物が注目されている。塑性の面からみれば、 Ni_3Al に代表される Li_2 型化合物や $\beta CuZn$ に見られる強度の逆温度依存性など、その最たるものであろう。このような実用上重要な塑性上の特質を持つ金属間化合物の場合はもちろんのこと、機能的性質が注目されている化合物の場合にも実用化への道

を切り開くための 1 つの道程として、その塑性挙動を明らかにすることがしばしば重要となる。このような物質の塑性を考える上で基本となる規則格子中の転位や面欠陥の構造とエネルギー、転位のペイエルス応力等について、最近行われた atomisticな立場からの研究について述べ、これらの研究の成果によって金属間化合物の塑性におけるどのような問題が明らかにされ、又、どのような問題が新たに提起されたかについて考察した。

イオン結晶のペイエルス応力

東大・生研 鈴木 敬愛

イオン結晶の転位の芯構造や Peierls stress の計算は、NaCl 型結晶の {110} edgeについてのみ行われている。Hoagland et al. [1] は、原子間力として Coulomb 力と最近接異種イオン間の Born-Mayer 型反撥力のみを考慮し、flexible boundary method によって KCL の Peierls stress を計算し、10-30MPaを得ている。Puls のグループ [2,3] は、第二近接イオン間の反撥力と van der Waals 力も考慮し、“breathing shell model” と呼ばれる方法によってイオンの分極を計算に入れて MgO, NaCl 等の転位芯構造、Peierls stress を計算している。この計算は、現在のところ最も精密な計算であろう。Peierls stress としてほぼ実験に近い値を得ており、また、NaCl 中の {110} 転位が拡張しないことを示した。

塑性の実験からは、種々のイオン結晶の Peierls stress が決定されている。NaCl 型結晶でのすべり面の選択——NaCl, MgOなどでは {110} 面が、AgCl では {111} 面が、PbS では {110} 面が主すべり面となることや、CsBr, CsI の極めて低い Peierls stress 等を理解するために NaCl 型結晶の {110} 刃状転位以外の転位の芯構造と Peierls stress の計算機シミュレーションが行われなければならない。

NaCl 構造の {110} 刃状転位以外の転位についての計算機シミュレーションが極めて困難な理由は、Coulomb 力が long range なためである。転位の方向に平行な串ダンゴ・モデルを使うとすると、異符号のイオンが交互に並んでいる串ダンゴの間の相互作用は比較的 short range (といっても金属の場合よりはなお long range) になる。NaCl 構造の {110} 刃状転位の場合がこれである。しかし、同符号のイオンからなる串ダンゴの間の相互作用は $1/r$ よりはるかに long range になってしまふので、串ダンゴ・モデルによる計算は实际上不可能に近い。NaCl 構造の {110} らせん転位も、{100} 転位も、{111} 転位も、CsCl 構造の <001> {110} 転位の場合でも、それぞれの転位に平行な串ダンゴは同符号のイオンからなる。したがって、串ダンゴ・モデルによらない計算方法が工夫されねばならない。

[1] R.G. Hoagland, J.P. Hirth and P.C. Gehlen: Phil. Mag. 34 (1976) 413.

[2] C.H. Woo and M.P. Puls: Phil. Mag. 35(1977) 727.

[3] M.P. Puls and C.B. So: phys. stat. sol. (b) 98 (1980) 87.

第8回物性専門委員会（第14期）議事録

日 時： 1990年10月31日（水）13:30～17:00

出席者：	伊達宗行	安藤正海	石井武比古	遠藤裕久
	糟谷忠雄	勝木渥	金森順一郎	上村洸
	川村清	久保亮五	小林俊一	鈴木増雄
	豊沢豊	長岡洋介	中嶋貞雄	守谷亨
	山田安定	禅素英		

議事に先立ち、前回議事録を確認した。

〔報告事項〕

1. 学術会議報告（中嶋）

○総会関係

- ・南アビザ問題について、かねてより ICSU が日本政府の方針を批判してきたが、本年10月1日以降研究者への規制が解除されることになった。

○運審関係

- ・来春の総会（今期最後の総会）は5月21日～31日の間に開かれ、2月連合部会は3月6日に開かれることになった。
- ・各部会から2名ずつ選出された委員で構成された将来計画委員会が発足した。
今後、移転問題や国際対応について議論する。
- ・物研連等からの「大型放射光施設に関する申し入れ」が報告書となった。この申し入れは、effective にはたらいていたという近藤会長の発言があった。
- ・SSC に関する物研連の見解の案文について運審メンバーに説明したところ、多くの質問がでたので、10月の物研連で十分討議すると答えておいた。
- ・第15期登録学術団体の審査に対する異議申し立てがなされたが、推薦委員会決定どおりとすることとした。
- ・「国際対応に関する小委員会報告」は外部から利用しやすいように作り直すことになった。
- ・研究者養成問題については、長期的視野から問題になることがらにかぎって審議することとした。
- ・化学研連がNMR装置の設置の有無が各大学の施設の充実度の尺度になるという考えを出したが、これは、文部省で注意を惹いている。

2. 物性研報告（守谷、補足－山田（安）、石井）

○物性研を中心とする3号炉に設置された中性子回折装置共同利用の公募について：原研改3号

炉の共同利用研究が1991年度から発足するが、これに関連して、窓口は物性研の他、金研、原子力研究総合センター（原総センター）の3つあるが、1991年度から、実質的に統一して公募した。外来研究員等委員会で議論してもらうが、公募を年1回にするなどの手続き上の手直しが必要である。

○S R 関係：物性研がかねてから整備をすすめてきた高エネ研P F リングのB L - 18の固体表面研究用電子分光装置を1991年4月より共同利用実験に提供することになった。物性研は、実験のお世話と、物性研で備えてきた設備のメンテナンスのみを行うこととし、公募受付・審査、旅費支給、宿舎の世話、消耗品費の負担は高エネ研で行うことになった。

○Supercomputerを次の概算要求の主要項目にしたいので、物研連の支持をお願いしたい。

○転出所員が4名あったが2名の後任が決定し、残りは選考中である。

3. 基研報告（長岡）

○広大理論研との合併にともない共同利用旅費の増額があったので、新しい使い方を検討中である。

○国際交流についても、新しい企画を検討中である Santa Barbara の I T P との協力も1990年から始める。

○理論研との合併後の運営方式、人事、大学院、任期性については、現在は「暫定措置」で運用中であるが、このままではすまないので、永続的な制度を検討中である。たとえば、宇宙分野の研究者から大学院生をとれるようにという要望が出るなど、旧来の基研のやり方を手直しだるべきであるという意見も出ている。

4. 物性委員会（長岡）

○岐阜の分科会の期間中に「拡大物性委員会（あるいは「物性グループ懇談会」）」を開き物性将来計画について議論した。50名を上回る出席があったが参加者の平均年令がやや高いという印象をもった。報告は、事務局報に出す。

○今年度末に物性グループの登録をしなおし、100人委員の選出にうつる。

5. ワーキンググループ（WG）報告（伊達、糟谷）

○前期の報告の follow upを行った。中性子関係は、原子炉もパルスも一応前期の要望が実現された。S R は西播磨以外は、不透明である。今後、読みやすい報告書を短くまとめて出したい。

6. 研究教育調査小委員会報告（長岡）

○前期物研連で設置が決まった標記委員会に物性専門委員会からは小林俊一、長岡洋介の2名が出ている。研究環境、後継者養成問題（大学院問題）を中心に危機的状況の調査を行いたい。まずは、既存データを集めて分析したい。

〔審議事項〕

1. 物性研各種委員会委員について

共同利用施設専門委員会委員については百人委員に選出を依頼することとし、この場で人事選考協議会委員を選出したい旨長岡委員より提案があり、これを了承した。無記名投票の結果、下記の2名を物性研に推薦することとなった。

理論 高山 一

実験 小松原 武美

2. 物性研 supercomputer について

守谷所長の説明および物性研作成の資料にもとづき free discussion をおこなった。

- ・(Q) 物性研のいろいろな要求の中での位置づけについて知りたい。→ (A)かねてより要求していた中性子関係は、実験設備が動きだし、残る「施設」の要求は実験設備の設置完了後、強力に推進したい。当面の要求は、この supercomouterと新物質開発計画の設置と人員、客員部門（極限物性および新物質開発）である。
- ・計算物性物理の研究者は増えており、supercomouter の需要は急増している。中堅の研究者は他分野の研究所などの supercomouterを使わせてもらう等苦心しているが窮状にあり、物性専用のものを是非ほしい。置くとしたら、物性研以外にはない。
- ・いいチャンスだから是非協力したい。

以上のような議論ののち、翌日の物研連で支持を求めることとし、運審等での議論の準備は物性研で行うこととした。

3. 科研費分科細目の改定について

守谷委員より、科研費分科細目を増やす見通しがあること、原子核専門委員会と物理学一般専門委員会は細目増を考えていないので、物性の関係の細目増は要求すれば通る可能性のあることが報告された。分割の方法については、いろいろな議論があったが、

(A)

固体物性 I (光物性、半導体等)

固体物性 II (磁性、金属、低温等)

物性一般 (基礎理論を含む)

(B)

固体物理

電子物性

物性一般

の2案がまとまり、出席委員の意見分布を求めたところ(A)案を好ましいとする委員14名、(B)案を好ましいとする委員 9 名であった。この議論過程を考慮して、守谷委員が物性専門委員会の希望を伝えることとなった。

4. S S C 問題

久保物研連委員長のまとめた「見解（案）」について、以下のような議論が出た。

- ・政治決着を警戒する必要がある。
- ・「見解」の最後の「要約」の(1)を見ると物研連は基本的にはSSCを支持すると言いつているようだが、これでよいのか。
- ・この部分が一人歩きしたら困るのではないか。

以上のような議論ののち、翌日の物研連で「見解（案）」について議論を継続することとした。

5. 次期物研連について

今期と同じ手続きで委員を選出することとした。

以 上

物性研究所談話会

日 時 1991年1月14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. O. Gunnarsson

Max-Planck Institut (Stuttgart, Germany)

題 目 Chemical Shift and Line Shapes of Cu 2p Core Spectra for Monovalent,
Divalent and Trivalent Cu Compounds

要 旨: Gunnarsson氏は密度汎関数法の基礎理論や光電子分光の理論で顕著な業績をあげてこ
られました。この度、ISSPシンポジウム出席のため来日されますので、現在議論
の盛んな銅化合物についての内殻励起スペクトルについて話していただきます。

日 時 1991年3月4日(月)午後4時～5時

場 所 物性研究所Q棟1階講義室

講 師 小森 文夫所員(表面物性)

(所属)

題 目 微小トンネル接合と超伝導臨界面抵抗

要 旨 微小トンネル接合では、接合の静電容量が小さいために、帶電エネルギーが測定温度
と同程度になり、これに伴うトンネル特性の異常が観測されている。また、ジョセフ
ソン接合がこのように小さくなると、ジョセフソン結合のエネルギーと帶電エネルギー
が同程度となり、巨視的量子効果、DCジョセフソン効果の阻害などの興味深い現
象が現れる。この微小ジョセフソン接合について、今まで行なってきたグラニュラー
な膜での結果について述べる。また、これらの問題の定量的研究のために最近開始し
た、 $100 \times 100 \text{ nm}^2$ 以下の接合面積をもつ微小接合の電子ビームリソグラフィを用いた
作製と、その低温でのトンネル特性について紹介する。

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

中性子回折物性部門 助手 1名

2. 研究内容

本部門では原研研究用原子炉2号炉および3号炉に設置された中性子分光器群の運転・管理を行ない、同時に3号炉実験利用棟（ガイドホール）に新装置群の建設を進めている。今回公募の助手にはこれらの装置群の管理・建設に参画し、本部門の将来計画の遂行の一翼を担うことが期待される。

なお、とくに中性子回折の経験の有無は問わないが、冷中性子をもちいた新しい分野の研究に意欲のある人を求める。

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4月30日（火）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

中性子回折物性部門 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3年1月30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

極限物性部門表面物性 助手 1名

2. 研究内容

本部門表面物性では、固体表面の構造、物性、および反応性について研究を進めている。今回公募の助手には、主として小森所員と協力し、極低温STM/STSなどの新しい手法・装置の開発により、表面の電子状態の動的性質の研究を行うことが期待される。そのために、とくに表面物性の研究の経験は問わないが、表面の新しい分野の研究開発に意欲のある人を求める。

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5月31日（金）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

極限物性部門 表面物性 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3年1月30日

東京大学物性研究所長

守 谷 亨

人事異動

(退職)

所 属	職・氏名	発令日	異動内容
附属軌道放射物性研究施設	技官 久谷昌之	3. 1.31	辞職
中性子回折物性部門	助手 原田三男	3. 2.28	"

(休職等)

所 属	職・氏名	発令日	異動内容
極限物性部門 極限レーザー	助手 内藤研象	3. 2.17	休職期間更新 (3.5.16まで)

(転入・採用)

所 属	職・氏名	発令日	異動内容
極限物性部門 表面物性	助教授 小森文夫	3. 1. 1	東京大学助手理学部より
理論部門	助手 古川信夫	"	採用
中性子回折物性部門	助教授 加倉井和夫	3. 3. 1	東北大学助手理学部より

(昇任)

所 属	職・氏名	発令日	異動内容
極限物性部門 超低温物性	教授 石本英彦	3. 3. 1	助教授より
凝縮系物性部門	" 石川征靖	"	"
理論部門	" 高橋實	"	"
"	助教授 高橋慶紀	"	助手より

平成 2 年度 主要納入設備の紹介

- ◇ 原研 3 号炉実験利用棟 C 1 - 2 冷中性子ガイド管に 2 次元位置測定小角散乱装置
物質の高次構造（たとえば蛋白質など生体高分子の集合形態、超伝導体の磁束格子構造など）を研究するため前方散乱を測定する装置
2 次元カウンターで、散乱パターンを同時計測する。同時に、中・高角の散乱も測定できるよう補助計測系が付属している。
- ◇ 原研 3 号炉実験利用棟 C 1 - 3 冷中性子ガイド管に高分解能後方散乱装置
中性子光学の展開をめざし、Si 完全結晶による干渉計、およびこれを利用した極低角散乱測定装置。ピュゾ結晶駆動装置により 1×10^{-2} 秒の角度精度を実現する。
- ◇ 強力型全自动 X 線回折装置
本装置は、定格出力 18kW (60kV, 300mA) の回転対陰極型 X 線発生装置とゴニオメータおよび制御部より構成されていて、粉末 X 線回折を全自动で測定できるものである。制御部には 32 ビットワークステーションが採用され、測定と同時に高速データ処理・解析が可能である。また、JCPDS 検索による定性分析や、リートベルト解析による精密構造解析ができる。現在、平成元年度購入の試料低温装置および平成 2 年度購入の試料高温装置により、8 K から 1500°C の範囲で粉末 X 線回折実験が可能で、試料のキャラクタリゼーションや構造解析、相転移等の研究に使われている。
- ◇ NMR 用超伝導マグネットシステム
オックスフォード社製の最高磁場 12 テスラの NMR 用超伝導マグネットが凝縮系物性部門、安岡研究室に設置された。性能は均一が $10^{-5}/\text{Ce}$ 、サンプル空間の内径 6 cm、測定温度範囲は 113 K より 300 K まである。パルス法 NMR 測定装置と組み合わせ、高磁場中のナイトシフトや緩和時間の温度依存性の測定に用いられている。

Technical Report of ISSP新刊リスト

Ser. A

- No. 2366 Optimum Adsorption Sites and Electronic Structure of Alkali-Adsorbed Si (001) Surfaces. by K. Kobayashi, K. Terakura and S. Blügel.
- No. 2367 High-Field Magneto-Optical Study of Type-II GaAs/AlAs Short Period Superlattices. by Satoshi Sasaki, Noboru Miura and Yoshiji Horikoshi.
- No. 2368 Effects of Oxygen Stoichiometry and Zn(Al) Substitution on Low Temperature Specific Heat Anomaly of $\text{Ba}_2\text{YCu}_3\text{O}_y$ System. by Y. Nakazawa, J. Takeya and M. Ishikawa.
- No. 2369 Perturbation Theory and Singularities in Two-Dimensional Hubbard Model at Low Electron Density. by Hidetoshi Fukuyama, Osamu Narikiyo and Yasumasa Hasegawa.
- No. 2370 Structure of a High-Order Icosahedral Approximant Phase in Mg-Ga-Al-Zn System. by Keiichi Edagawa, Kunio Suzuki, Masaki Ichihara, Shin Takeuchi, Akihiko Kamiya and Uichiro Mizutani.
- No. 2371 Neutron Scattering Study of Magnetic Successive Phase Transitions in RbNiCl_3 . by Yasuaki Oohara, Hiroaki Kadokawa and Katsunori Iio.
- No. 2372 Anomalous Optical Conductivity in the Normal State of High T_c Oxides. by Tōru Moriya and Yoshinori Takahashi.
- No. 2373 Magnetic Phase Diagram of Bcc³He. by Hiroshi Fukuyama, Tsuneo Fukuda, Tohru Okamoto, Hikota Akimoto, Hidehiko Ishimoto and Shinji Ogawa.
- No. 2374 Anomalous Temperature Dependence of the Effective Mass in n-PbTe. by Hiroyuki Yokoi, Shojiro Takeyama, Noboru Miura and Günther Bauer.

- No. 2375 Universal Transport Anomaly in 1-2-3 Systems with Reduced Carrier Density.
by Tsuyoshi Tamegai and Yasuhiro Iye.
- No. 2376 Magnetization Curve and Correlation Function of Haldane-Gap Antiferromagnet
in Strong Magnetic Field. by Minoru Takahashi and Tōru Sakai.
- No. 2377 Conductance Fluctuations in Quantum Wires. by Hiroyuki Tamura and Tsuneya Ando.
- No. 2378 Mesoscopics and Superconductivity. by Hidetoshi Fukuyama and Hideo Yoshioka.
- No. 2379 Experimental Studies of Electronic Transport in Quasicrystals. by Kaoru Kimura
and Shin Takeuchi.
- No. 2380 Possible Superdiamagnetism or Superconducting Embryos Below 137 K in a
Perovskite LaVO_3 . by N. Shirakawa and M. Ishikawa.
- No. 2381 Atomic Charge Distribution in Diamond-Like Amorphous Carbon. by Sándor Kugler
and Gábor Náray-Szabó.
- No. 2382 Magnetoresistance in Quantum Wires-Boundary Roughness Scatterintg-. by Hiroshi
Akera and Tsuneya Ando.
- No. 2383 Electronic Structure and Transport of Quasicrystals. by Takeo Fujiwara and
Hirokazu Tsunetsugu.
- No. 2384 Metal-Silicate-Water Reaction under High Pressure II - Partition of Fe, Ni and
Co between Metal and Silicate. by Toshihiro Suzuki, Syun-iti Akimoto and
Takehiko Yagi.
- No. 2385 High Field Magnetization of Pseudobinary Compounds $\text{Y}(\text{Fe, Co, Ni})_3$. by Tsuneaki
Goto, Masuhiro Yamaguchi, Tatsuya Kobayashi and Isao Yamamoto.
- No. 2386 High-Field Magnetization of the Hydrides Based on Psudobinary Compounds $\text{Y}(\text{Fe,$

Co, Ni₃. by Masuhiro Yamaguchi, Tatsuya Kobayashi, Isao Yamamoto and Tsuneaki Goto.

No. 2387 Magnetic Properties of Co-Y Amorphous Alloys Prepared by Milling. by K. Fukamichi, T. Goto, T. Fukunaga and K. Suzuki.

Ser. B

No. 0025 Characteristics of the Synchrotron Radiation Sources of BSRL. by Jianwu Wu, Caitu Shi, Mengmei Ren and Dingchang Xian.

編 集 後 記

今回は、客員所員として活躍して頂いた岡先生と、菅野元助手に記事を寄せて頂きました。また、本年1月に開催した第2回のISSP国際シンポジウムの報告、短期研究会の報告、物性専門委員会の議事録が載っています。ISSP国際シンポジウムは2回目を無事に終え、すでに第3回の企画（固体表面の原子・分子のダイナミックス）が進められています。これまでの経験を活かして充実したものにしていこうとしていますので、ご支援をお願いする次第です。

今年度は、本誌も30巻を迎えたので、創刊以来本号までの目次総覧を別冊にまとめました。何かのお役にたてば幸いです。

次号の原稿締切は4月10日です。

木 下 實
渡 部 俊太郎

