

物性研だより

第36卷
第5号

1997年1月

目 次

「第三世代物性研究所」柏新キャンパスで実現へ	安岡弘志	1
物性研を去って	村田好正	5
退所後のたよりー金研におけるサブミリ波E S R装置の現状を中心にー	野尻浩之	8
研究室だより		
○ 神谷研究室	神谷幸秀	9
第5回物性専門委員会（第16期）議事録		18
物性研短期研究会報告		
○ 「量子スピン系のギャップ形成とキャリアードーピング」	21	
世話人 上田和夫, 内野倉國光, 十倉好紀, 福山秀敏, 今田正俊		
上田 寛, 佐藤正俊, 高野幹夫		
○ 「表面局所物性」	70	
世話人 大門 寛, 川村隆明, 小森文夫, 笠井秀明, 須藤彰三		
○ 「陽電子スペクトロスコピーの最近の進展」	103	
世話人 兵頭俊夫, 小森文夫, 伊藤泰男, 末岡 修, 谷川庄一郎		
長谷川雅幸, 中川正治		
物性研究所談話会		145
物性研ニュース		
○ 人事異動	150	
○ テクニカル・レポート 新刊リスト	151	
編集後記		

東京大学物性研究所

ISSN 0385-9843

「第三世代物性研究所」柏新キャンパスで実現へ

所長 安岡 弘志

新聞報道等でご存じのとおり、11月18日、千葉県柏市の東京大学新キャンパス建設敷地で柏キャンパスの起工式が行われた。東京大学は、昨年度の第二次補正予算で柏キャンパス予定地36.6ヘクタールのうち11.6ヘクタールの土地と最初に移転が予定されている物性研究所の建物として床面積5,000m²分の予算を獲得し、それに伴う起工式である。これで、いよいよ念願の新キャンパス構想が実現に向けてスタートを切ったことになる。東京大学では平成4年6月の評議会で本郷、駒場、柏を軸としたいわゆる三極構造構想を内容とする「東京大学キャンパス計画の概要」を策定し、その中で、柏新キャンパスを成熟度の異なるディシプリンを配置し、多様性と融合により知的冒險を試み新しい学問領域の創設を目指す場として位置付けている。今回着工されるのは物性研究所の実験棟の一部であるが、計画では平成11年度末までに物性研究所、宇宙線研究所のほか、学内の気候システム研究センター、人工物工学研究センターなどの共同利用センター群の移転・整備を済ませることになっている。新キャンパス構想では残り25ヘクタールに基盤科学研究科、先端生命科学研究科、環境学研究科、国際協力学研究科等を新設する予定で、来年度概算要求に向けて実行アカデミックプランの策定を急いでいるところである。



柏新キャンパス／——取得済み、……予定地

写真＝柏市提供 平成8年4月撮影

「第三世代物性研究所」構想は折りに触れご紹介しているとおり、物性科学の国際的COEを柏キャンパスで実現するものである。その前提となる組織の改組が本年度認められ、既にソフト面での新しい研究体制がスタートしている。新しく発足した組織は、新物質科学部門、物性理論研究部門、先端領域研究部門、極限環境物性研究部門及び先端分光研究部門の5大部門と、中性子散乱研究施設、軌道放射物性研究施設及び物質設計評価施設の3附属施設により構成されている。当然の事ながら、それぞれの部門、施設は共同研究、共同利用をより効果的に実施できるように運営されると同時に21世紀に向けて新しい研究プロジェクトを展開していくことになる。

それぞれの部門及び施設の目標と当面の研究課題の概要は以下のとおりである。

1) 新物質科学部門

先端技術による物性測定と物質合成を基礎とした物質科学の総合的研究を推進する。当面の重要課題として、新しい遷移金属化合物（磁性体、超伝導体）、重い電子系、有機物質、非平衡物質などの開発と、それらが示す興味ある物性の発現の基本となる強相関電子系の多体効果の解明を目指す。

2) 物性理論研究部門

物質の示す磁性や超伝導などの多様な性質を、その構成元素の性質にまで遡って適切な理論モデルを構築し解明していく。例えば、強い電子相関と磁性、メゾスコピック系、電子構造の第1原理からの計算、量子ゆらぎと場の理論、高エネルギー分光等多様な研究が進められる。また、各実験グループと直接的協力関係を確立して、現実的な問題の解決や研究計画の立案に参加する。

3) 先端領域研究部門

固体物性の先端的研究領域について、10年前後のプロジェクトを設定して、先導的研究を行う。当面、特異なバンド構造を持つ人工超格子、超微細構造を持つ人工物質、固体表面や界面で発現する新物質相の伝導や磁性の研究及び固体表面上の原子原子移動過程を基礎物性科学の立場より研究する。さらに、表面物性と量子物性を融合させた新しい学問分野の創成も目指す。

4) 極限環境物性研究部門

超低温、超強磁場、超高圧などの極限環境下で発現する未知の物性を明らかにして、物質の持つ新しい機能を探る。研究対象として、極限環境下における量子スピン系、強相関系の磁性、有機伝導体、半導体低次元系、超伝導体などの伝導機構に関する研究を行う。さらに、これら極限環境を組み合わせた多重極限環境を実現し新しい物性の展開を図る。

5) 先端分光研究部門

極限レーザー、放射光、X線、中性子線などのエネルギー、強度の異なるビーム的性質を持つ分光手段を相補的に用いて新しい物性研究の展開を図る。研究対象としては現在注目されている物質群に対する先端的な分光研究に加え、内殻励起状態の動的性質、軟X線領域における非線形光学、固体における様々な励起状態の生成と緩和、化学結合状態の変化の解明や物質の構造的、

磁気的、電気的な変化に伴う固体内電子構造の解明を目指す。

6) 軌道放射物性研究施設

シンクロトロン軌道放射光を利用した真空紫外・軟X線領域での分光研究と第三世代高輝度光源の加速器・分光測定系の技術開発を推進する。具体的には、真空紫外・軟X線領域における固体分光、光電子分光と分光測定系の開発、シンクロトロン軌道放射光源としての電子ストーレジリングの基礎研究、新型高輝度光源の開発や電子ビームダイナミックスと干渉型シンクロトロン放射の特性研究などを行う。なお、東京大学で計画立案が進んでいる加速器科学研究所構想が実現すれば、この施設が高輝度光源関係の施設建設及び共同利用の中核的役割を果たすことになる。

7) 中性子散乱研究施設

中性子散乱法並びに偏極中性子解析法を用いた結晶構造、磁気構造、相転移の微視的機構などの物性研究や新しい中性子散乱法の開発研究を推進する。具体的には、中性子・X線散乱による凝縮体の相転移、中性子散乱によるソフトマテリアルの臨界現象、強相関電子系の磁気励起、フラストレーションを持つ磁性体の相転移や中性子散乱測定技術の開発研究等に取り組む。さらに、中性子散乱に関する日米協力事業の担当機関として、引き続きその運営及び発展に中心的役割を担っていく。

8) 物質設計評価施設（新設）

理論的な物質設計をもとに、先端的な物質合成、総合物性評価技術をサイクルとした新物性・新機能を持つ物質を開拓する研究を推進する。具体的には、スーパーコンピュータを駆使した新物質の理論的設計を行い、設計された物質の合成と物性評価を行い、その結果を理論的設計に反映させる。これらの過程を通して、興味ある電気的・磁気的性質を持つ新無機化合物の合成と物性の解明、高い転移温度を持つ有機超伝導体の開発や極限環境下での良質単結晶の育成と新技術の開発などを行う。

以上のような新研究体制を出来るだけ研究上支障のないように柏キャンパスへ移行していくことが、物性研究所にとって最大の課題となっている。学内的に柏新キャンパスをどのように利用するかの計画は、キャンパス計画室で検討され評議会で承認された「柏キャンパス整備に関する当面の方針」にしたがって土地利用計画が策定されている。それを、今回取得されている土地についての利用計画を第1図に示しておく。物性研究所は、当面は、基本的に三つの低層実験棟と一つの高層研究棟から構成されることになる。所内では三浦所員を委員長とする移転推進委員会と家所員を委員長とする建築小委員会が具体的な移転プランや建築の基本的設計について所内の意見をまとめ計画を練っている。この過程で、我々は移転計画を以下のような手順で進めようとしている。

まず、補正予算で予算化された5,000m²分としては、比較的特殊仕様で工期の長い建物、つまり

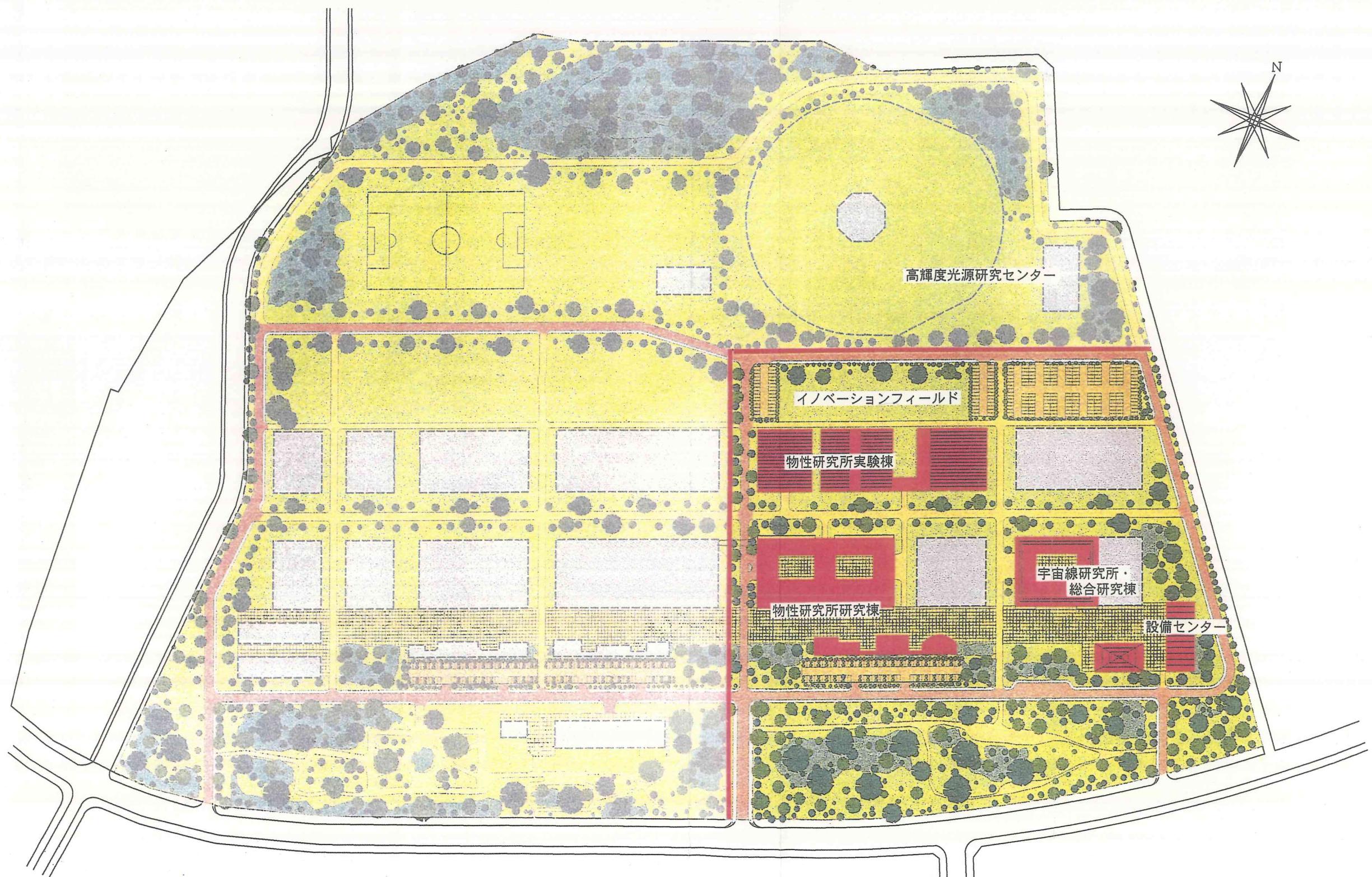
超強磁場施設を中心とした「極限環境実験棟」及び極限レーザ施設を中心とした「先端分光実験棟」を選んだ。これらに関しては、現在の二階建てC棟を充実し別棟として展開したもので、11月26日安全祈願が行われ現在建設が始まっている。第2図に各実験室、研究室の配置に関する詳細を示す。これに続いて、ヘリウム液化室を含む多重極限計画を遂行するための低温棟1,800m²の基本設計がほぼ完了し今年度中には着工の運びとなる。さらに、物性研究所の本館は地上6階地下1階の建物で、総床面積は24,500m²となる予定である。現在、基本設計者の生産技術研究所原教授、本部施設部、物性研究所の間で建築学的な立場、物性研究の立場からの詳細な検討がなされている。この検討が順調に進めば今年度中あるいは来年度早々に着工されるはずである。他の実験棟とは異なり、本館は3期の工期（軸1、軸2、仕上げ）で建設が進み平成11年度中には完成の予定である。したがって、物性研究所の移転完了は、順調に進めば、平成11年度後半か平成12年度始めといったところであろう。全体の建築計画の進み具合を第3図に示しておく。

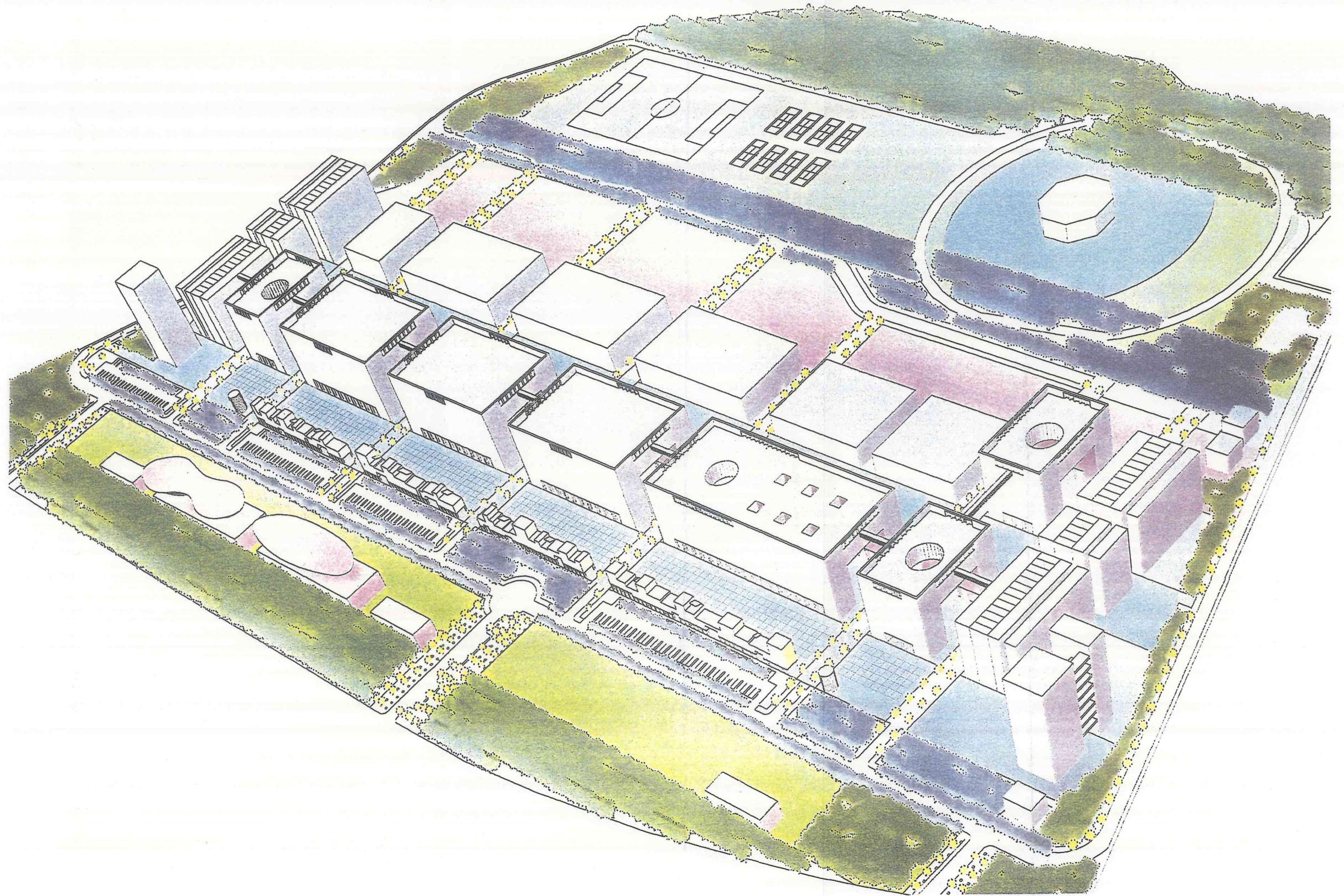
なお、高輝度光源計画に関しては、計画が認められれば、第1図に示されている物性研究所実験棟の北側に土地が取得され施設が建設されることになる。

以上のように、物性研究所の移転計画は、幾多の難問を抱えながらも、概ね順調にスタートしている。柏キャンパスでは、新しい構想での研究を展開するのみならず、現在の「国内共同利用研究所」として役割を充実すると共に、更に国際的なものに拡大し、いわゆる「国際共同研究所」の実現を目指している。これは柏キャンパスの東大としての理念の一つである国際性にも対応するもので、柏キャンパスに計画されている関連研究科、センターとも協力し、我が国のみならず世界の「物質科学の研究のメッカ」を創る意気込みで、この柏移転プロジェクトを成功させたいと考えている。

東京大学柏地区キャンパス計画施設配置図

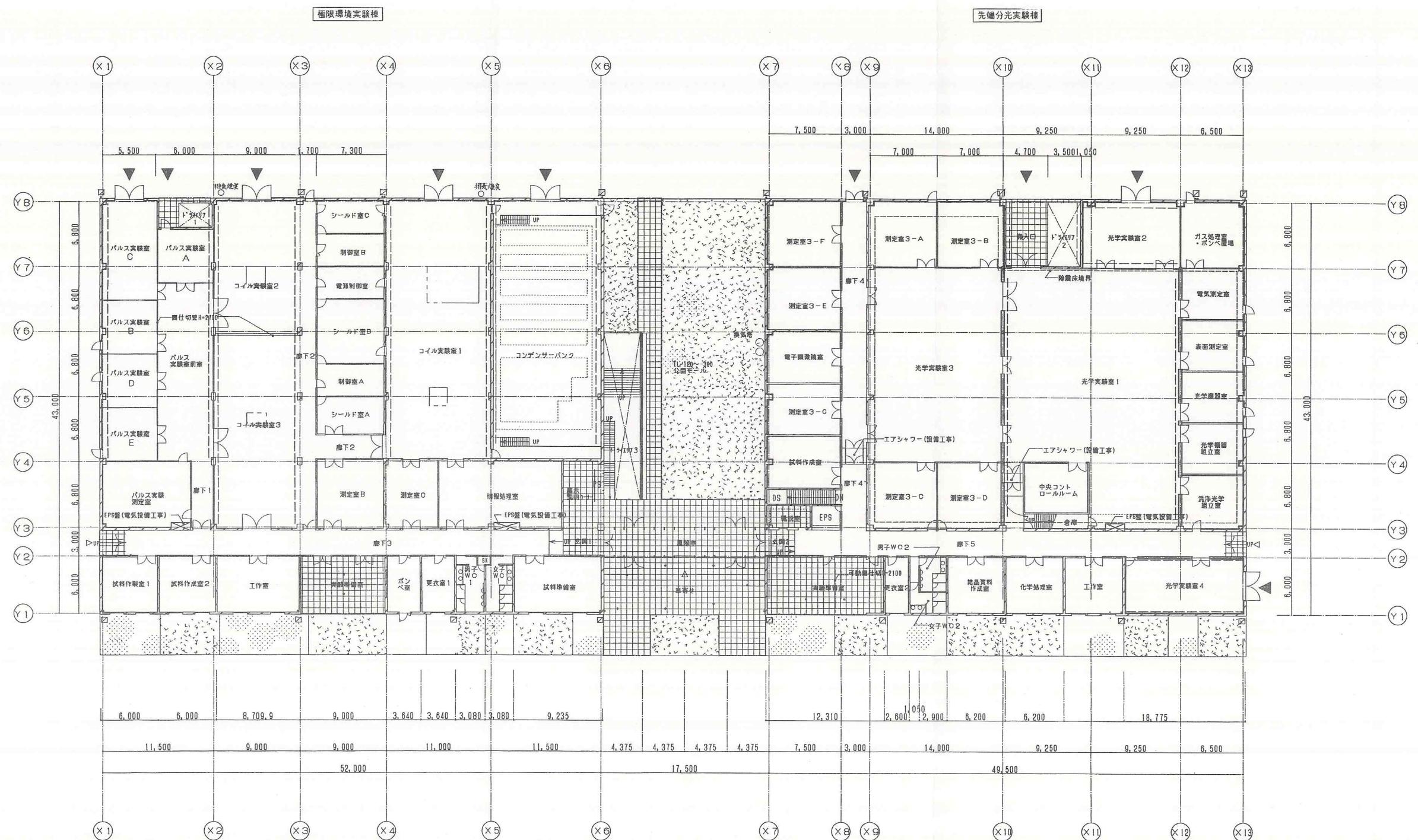
第1図





極限環境実験棟、先端分光実験棟の実験室、研究室の配置

第2図

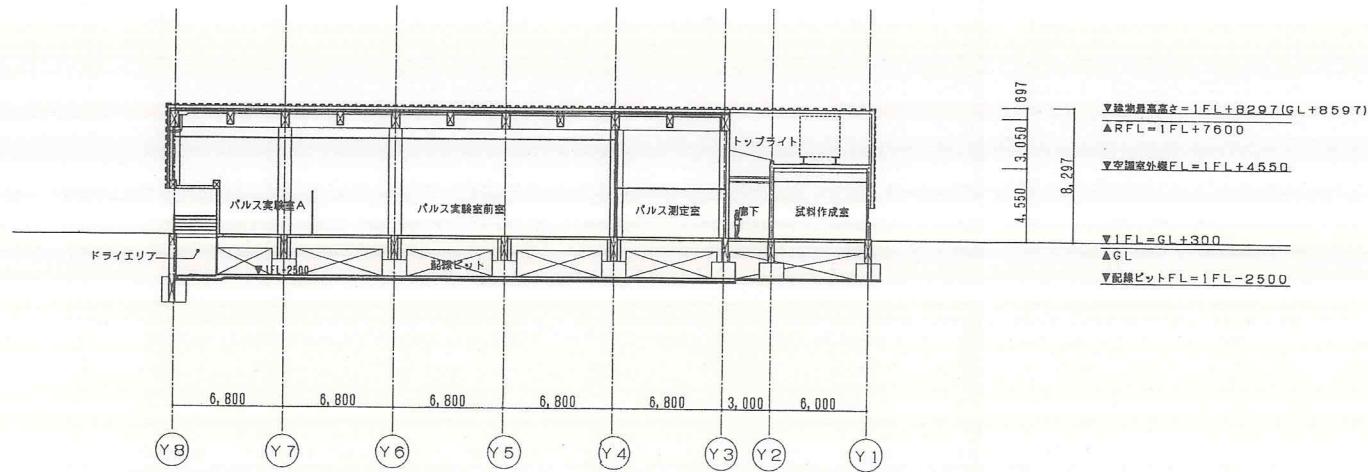


凡例

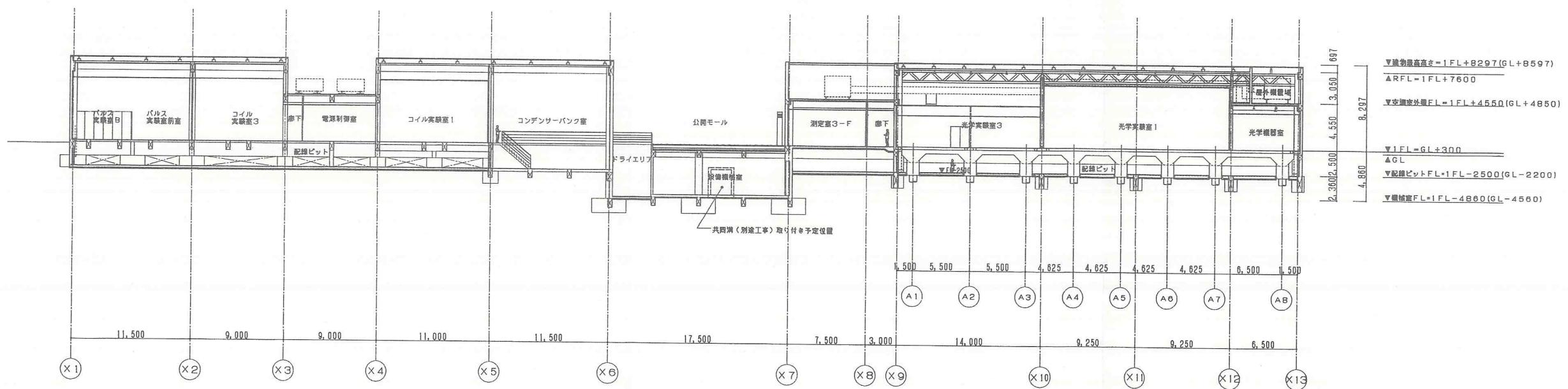
コンクリート壁	
軽鉄間仕切り壁	
一般出入口	
▼ 搬入口	地先境界ブロック
X-Yクレーン	植栽等外構工事(別途)
除振床	PC平板工事
防護箱(別途工事)	雨水樹600口たて通りに接続

* 基準1FLはGL+300とする。





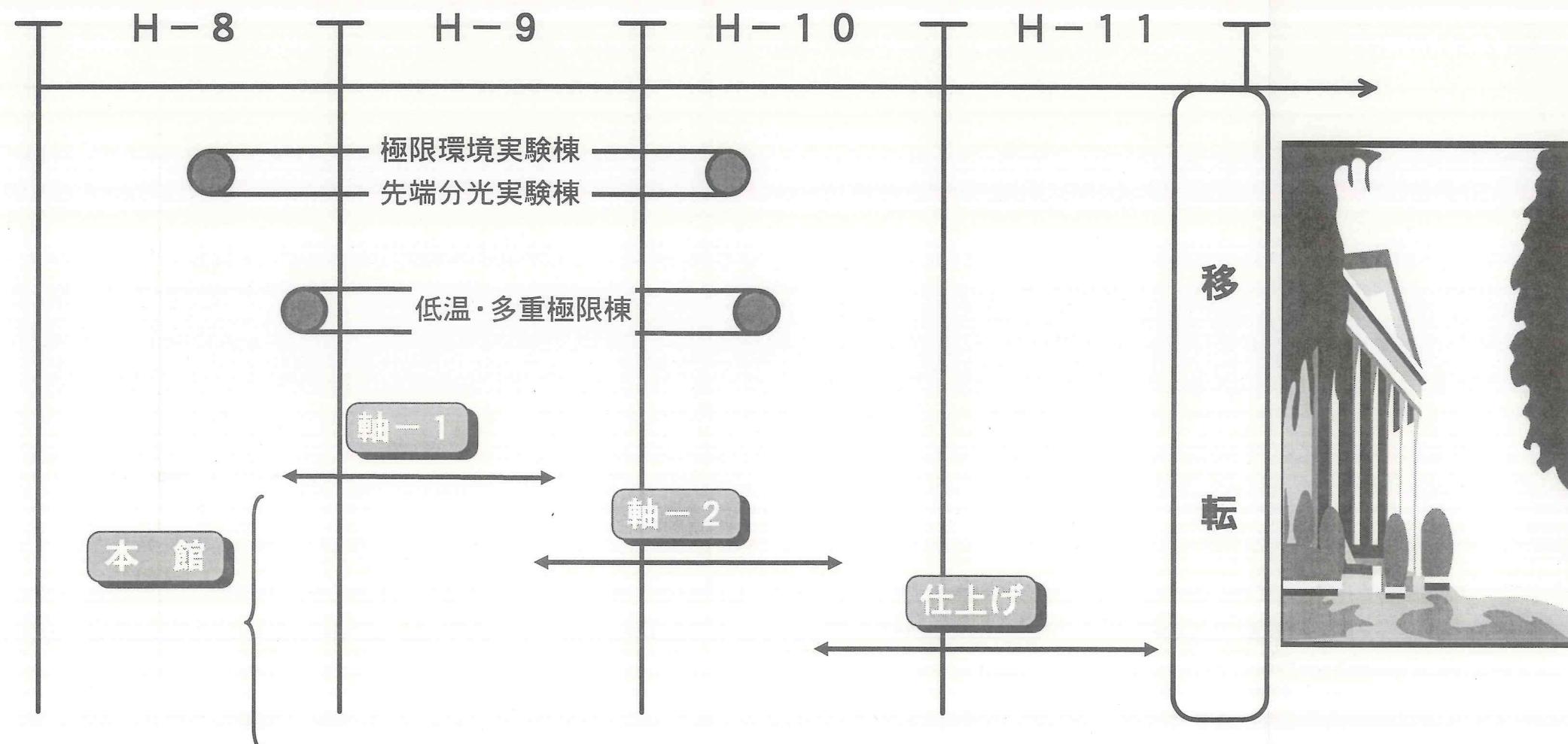
A-A' 断面図 (X1-X2間)



B-B' 斷面図 (Y5-Y6間)

第3図

物性研究所建設の年次計画



物性研を去って

電気通信大学自然科学系物理 村田好正

本年3月に物性研を停年退職して、あっという間に8カ月が過ぎてしまった。4月1日から電気通信大学で、1, 2年の学生を相手に物理の一般教育の講義と物理実験を担当している。また、物性研から移設した実験装置を早期に立ち上げた。そしてそれらを用いた表面物性の研究にも多くの時間を割くよう心がけている。そこで、物性研ではキャンパス問題、大学院問題などいろいろな雑用に振り回されることが多かったが、電通大ではひたすら大人しくして、雑用が近づいてこないようしている。そして東京大学の停年後も実験に精を出せるという幸せを満喫しようと心がけている。一般教育の大切さは増しているので、それをおろそかにする気はないが。

物性研での19年余の在任中には、自分の能力をはるかに超える研究成果を上げることができた。これは物性研という恵まれた研究所に在籍していたためで、素晴らしい所員に囲まれ、実りあるディスカッションが気楽に行えたこと、優秀で馬力のある研究室のスタッフと大学院生に恵まれたこと、所内、所外との実り豊かな共同研究、また研究を支えている物性研の職員のお陰でもあった。30年前に学習院大学に移り、自分の研究室を持つことができ、その機会に分子構造の研究を離れ、表面物性の研究を始めた。そのときに後追いの研究はしたくないと思い、当時発表論文がなかった低速電子の電子分光を始めることにした。そして低速電子の半球型エネルギー分析器を作ることから始めた。物性研に移ってからも同様に、しばらくは装置作りに専念した。そのためには優れた工作室が不可欠であった。幸いなことに物性研には優秀なスタッフがいる素晴らしい工作室があった。しかし残念なことに、私が描く理想の工作室とはベクトルの向きが異なっていた。早く実験の失敗ができるための工作室が私の理想であった。すなわち、思いついた実験を早く実行し、実験プランの欠陥を見いだし（失敗し）、すぐに改良できるよう、サポートしてくれる工作室である。そのためにはかなり強引に工作室の改変を行い、私にとって理想と思う方向に工作室は変わったと思う。しかし歪を作ってしまったし、恨みもかってしまった。

物性研の化学系の3所員（長倉、斎藤、本田先生）が近く同時に停年を迎えるので、物性研の化学系を表面物性に転換したいとの、3先生の御意向を受けて、また我が国の表面物性の拠点を作るため、学習院大学から物性研に20年前に移った。当時は物性研に表面物性の研究グループが無かつただけではなく、我が国の表面物性の研究は欧米に比べて大きく遅れていた。しかしこの20年の間に我が国の表面物性の研究のレベルは大きく向上し、世界に伍するところまできた。理論、凝縮系を含めた物性研の表面物性グループは、世界の一つの中核になっている。このように物性研が中核になれたのは、物性研が持つ良い研究環境のためである。この良い研究環境がますます発展するようにと願い、大学院問題、キャンパス問題に首を突っ込んでしまった。

大学院問題が突然浮上してきたのは有馬理学部長の時代で、運悪く私が理学系研究科の委員を4

月からすることになっていた矢先であった。大学院問題は物性研にとって重要な問題である。理学院構想がはっきりした理念のもとに実現するよう、研究所の立場から多く発言して、努力したつもりである。しかし法学部方式が急に現れ、理学部は法学部方式の線に沿って理学系大学院に転換してしまった。従って、それまでの努力は全く空しいものとなってしまった。

それに続いて、竹下内閣の地方分散政策により、物性研の転移問題が起こった。物性研、生産研、海洋研は都区外へ移転するように、そして理想とする研究所を建設するのに文部省は全面的に支援することであった。どういういきさつであったかは覚えていないが、これに首を突っ込む羽目になった。東京大学の本部は柏へ移転を希望した。平野総長時代に決めた柏取得の方針に沿って、物性研の移転を理由に、留保地のため取得が困難な柏を、この機会に東京大学が取得しようという考えであったと思う。しかし当時柏移転に積極的な姿勢を示したのは工学部の土木が中心になった大学院構想（多分、社会工学院と称したと思う）で、これは東南アジアの留学生のための土木、建築系の大学院を作るという構想であった。物性研にとっては全く縁の無い大学院である。現地を見に行つたが、JRの柏駅からの交通が不便な場所に物性研が移ったら、大学院問題がさらに深刻になり、また共同利用研としての機能が果たせるであろうかとの疑問を総長室にぶつけた。他のキャンパスを探せという返事であった。その結果が西国分寺の国鉄中央学園跡地への移転計画である。これには非常に多くの時間を費やし、努力をした。文化財保護法なども勉強した。かなりの線までいったように思っている。しかし消費税問題が中心になった都議選、参議院議員選の結果、西国分寺構想は雲散霧消してしまった。次に立川を提示したが、文部省は物性研の移転に消極的な姿勢を示した。これらの努力は大学院問題以上に無駄骨折りで、大変空しい思いをした。

そのうちにいったん消えていたと思えた移転問題が、都心キャンパス問題検討委員会の名のもとに再浮上してきた。今後は真綿で首を絞められるような感じで、柏移転へと向かってしまった。そこでは柏移転に必要な条件を提示し、大学院問題を最重要課題の一つとした。しかしそのうちに大学院問題は大学院問題懇談会での検討事項であるということで、私の手から離れた。さらに都心キャンパス問題検討委員会も開かれなくなった。これらのこと振り返ってみると、私のように雑用が苦手な者が行きがかり上それに首を突っ込み、一生懸命になると、碌なことはないという見本を示したことになる。空しい思いをただけである。空即是色！

一方、物性研を去る最後の2年間は雑用から逃れさせてもらった。その間に福谷克之君と共に考えたり、まとめたりしたことが大変実り多く、現在研究を進める上で大きな糧となっている。電子励起に伴うNO, CO分子の金属・合金表面からの脱離、これを単純なインパルスモデルで考えた脱離機構、特に脱離に至る中間の電子励起状態の性質、Pt(111)-Ge表面合金とそれに関連する表面系の物性、レーザー誘起脱離と超低速イオン散乱の関係、金属-半導体界面にデルタドープした水素原子の物性と動的挙動、金属上の半導体超薄膜の絶縁体・金属転移、金属／単結晶酸化膜／金属でのトンネル現象の研究を行っている。

これらの研究テーマのうち、表面合金および金属上の絶縁体超薄膜の物性を調べるために、夏休みを利用して、学術振興会の日独科学協力事業共同研究として、ベルリンの放射光施設であるBESSYで、2週間のマシンタイムを分けてもらい、光電子分光の測定をしてきた。2週間のマシンタイムという短い期間であり、直前の週末に測定用の真空チャンバーをビームラインに設置するところから始めたが、大変満足する実験結果が得られた。そのときの感想を述べさせてもらう。これは毎日夜中まで一緒に実験してくれた共同研究者（大学院生）のお陰でもあるが、第1週目の水曜日の夕方からマシンスタディーであったこともあり、この週末はクレーンが右往左往して、測定用のチャンバーの交換がいくつものビームラインで行われているのを見た。これこそ私が理想とした放射光の共同研究システムだと思った。既設の装置を使い、ただ試料を替えるだけでは、光った研究成果を挙げるのは困難である。また、表面物性の実験では既設の装置でよい場合もしばしば有るが、試料作成の段階で真空チャンバーが汚れるといやがられることも多く、これでは光った研究成果はでてこない。レンタカーを借りて装置を搬入し、あちこちで装置が設置されて行くのを見ていると、その施設が生きているとの感じを持ってくる。

物性研の柏転移がいよいよ具体的にスタートしたと聞く。新物性研究所として活気のある、スマートサイエンスとして光った研究所が一刻も早く出来ることを願っている。永い間お世話になりました。

退所後のことより

-金研におけるサブミリ波ESR装置の現状を中心に-

東北大金研 野尻 浩之

金研の本河研に移ってから96年末でもう1年半と二回目の冬を迎え仙台の雰囲気にも慣れてきた今日この頃です。物性研には91年の11月1日に超強磁場部門の助手として着任し、以後94年4月まで3年半お世話になりました。私事になりますが物性研に移った直後に長男が生まれ、でる直前には長女が生まれと公私ともに他事多難ながら、また多幸の時を過ごせたことは、三浦先生をはじめとした方々の様々な指導、援助のおかげと大変感謝しております。

仙台では、定常強磁場で従来からの装置の維持発展に務めるとともに、本河研究室では小さなパルス磁場を用いてサブミリ波ESRの開発に力を注いできました。このサブミリ波ESR装置は遠赤外レーザーを光源として（一部ガン発信器、後進行波管も使用）、最高周波数7 THz(約30meV)まで周波数を変化させることが可能で、磁場40T、温度も0.5-300Kとその温度、磁場、周波数範囲は世界で他に例を見ないものになっています。現在までにCuGeO₃のM相について1次元-3次元のクロスオーバーがあることを明らかにしたのをはじめ、不純物をドープしたスピンドイエラス系や二重交換系LaMnO₃の反強磁性共鳴など、従来のセンチ波ESRでは不可能な高周波の測定を行い、重要な情報を得てきました。試料作成技術の進歩により、交換相互作用の大きな酸化物の新物質が次々に作成される中で、高エネルギー化、高周波化が少し立ち後れていたESRもいよいよ臨戦態勢が整って、ピッチもあがって来たと思っております。研究室ではその他に磁化測定や磁気抵抗等の基本測定はもちろんの事、30T定常磁場を用いた希釈冷凍器温度でのド・ハース測定、ベクトルアナライザを用いたミリ波ESR、CR等の金研の特色を生かした装置の整備を進めており、徐々に稼働しつつあります。また金研では技術部の体制がきちんと確立され、装置制作、試料加工、評価などに非常に高いレベルの支援が受けられるので、研究や装置開発が大変スムーズにすすみます。これも歴史で培われた金研の底力の一部と、その一員として働くことに日々感謝しているところです。立場が変わったこともありますが、物性研のC棟にこもっていた頃に比べ、金研の内外とグループと互いに相補的に有用な共同研究が展開出来ていることも、研究室と私自身の活性化に役立っていると思います。最近お会いした方に多少色白になったと言われますが、電磁濃縮の煤がとれただけで皮膚の色が変わった訳ではありませんと申し上げて、近況報告を閉めさせていただきます。

研究室だより

神谷研究室

1. はじめに

神谷 幸秀

平成3年10月に高エネルギー物理学研究所・放射光実験施設(KEK・PF)から物性研のSOR施設(形式的には軌道放射物性部門)に着任して、はや5年が過ぎ去ってしまいました。この間、加速器グループの一員として果たすべきことは何かということを考えて仕事をしてきたつもりですが、(事務的なことを除くと)まったく研究室というものは意識することなくやってきたように思います。物性研での責務はSOR-RINGの維持改善と将来計画の推進であるということで、着任したら、これに専念するつもりでしたが、着任前は、いくら忙しいとはいってもKEK・PFほどは忙しくないであろうとたかをくくり、少しは「研究らしきこと」も出来るのではないかと甘く考えていました。しかし、実際、着任してみると、体力の衰えた40歳過ぎの者には、それは「はかない夢」であることがわかりました。SOR-RINGや将来計画に関連する開発研究を除くと、(構想というほど大仰なものではありませんが)温めていた研究の「妄想」は何一つ目の目を見ませんでしたし、今後もあります。[このようなことをある時、ある先生にばやきましたら、君のような年の者が、自分で研究しようと思うこと自体が間違っていると慰められたことを思い出します。]

KEK・PFでは、光源研究系のあるグループの責任者ということもあって、(ある時は事務屋、ある時は技術者、現場作業者、加速器運転員等々として)持てる時間の80パーセント以上をデューティにつぎ込んでいたように思いますが、それでも残りの20パーセント位は何とか自分の勉強や研究に使えていたように思います。しかし、物性研に着任後の3年間は、90パーセント以上がデューティであったような印象です。さらに石井先生の後を受けて施設長になってからは、100パーセントがデューティで費やされ、最早、加速器さえも忘れかけているのではないかという思いに駆られることもある今日この頃です。特に今は、施設長、計画推進に伴う仕事の他、VSX高輝度光源利用者懇談会の事務局、日本放射光学会の編集委員長、放射光学会の年会・合同シンポの準備等々、私の事務処理能力をはるかに超えた雑事に忙殺されています。[ちょっとでもいいから勉強する時間がほしい!] 先日、次期総長選の資料が送られてきましたが、その中に事務的または技術的な仕事に従事している教官には選挙権がないという趣旨の文章を見つけ、苦笑していました。事務的かつ技術的な仕事に従事していれば、いいのかな・・・。

しかし、このような事情は、多かれ少なかれ、我々の加速器グループの全員に当てはまることであり、特にSOR-RINGの共同利用が停止される平成9年4月以降は、グループ全員がほぼ100パーセントの時間を高輝度光源計画につぎ込むつもりでおります。我々がこの高輝度光源を建設して、その性能を達成すれば、何時か、必ず誰かが素晴らしいサイエンスのアウトプット

を出してくれるものと信じています。[もっとも加速器についても、何らかのアウトプットを出したいと思っておりますが・・・] 他の分野の研究者から見ると、他人のために働いて何がおもしろいのかと思われるかもしれません、我々には、正しいかどうかは別にして、計画を本当に推進している中核は、我々加速器屋であるという自負があります。ついでに申し上げると、いわゆるスマート・サイエンスをやっている研究者には、理解することは出来ないかもしれません、また、ある場合には、このことが感情的な反発を買う原因にもなっているのではないかとも思いますが、加速器計画のような大型のプロジェクトを実際にリードしていくのは、「事務的または技術的な研究者」であるということです。[ただし、加速器研究者=ここでいう事務的または技術的研究者ということではありませんので、誤解をなさいませんように・・・] さらに、言わせていただければ、「研究的な研究者」は・・・・ ちょっと話が逸れ始めましたので、やめますが、個人的にはそうであると確信しています。

とにかく、5年間、研究は二の次（三の次？）としてやってきましたので、研究室紹介に値するものがあるかどうかわかりませんが、それでも、この5年間を振り返ってみると、少しは「研究的なこと」もやってきたようにも思われますので、それをここに紹介させていただきます。現在の我々の関心事は、ほぼ100パーセント、高輝度光源計画の実現、この一点に尽きますが、ここでは開発研究を除き、多くを述べないことにします。また、神谷研究室ということではなく、何となく形作られている（外部も含めた）加速器グループについて紹介させていただきます。

[実を申し上げると、誰が神谷研究室に所属しているのか、正確に把握しておりません。] さらに、今年の3月に助教授として着任した中村典雄氏も加速器グループの一員ですので、同氏の仕事についても若干、紹介させていただきます。同氏が研究室紹介を書くときは、ご本人に何とかしていただくことにします・・・ なお、本文は、（いつものことですが）慌てて書いておりますので、読みにくい文章、間違った内容になっているのではないかと思いますが、ご容赦ください。（また、図、表は一切ありません。）

2. 同僚、高輝度光源加速器グループのことなど

加速器グループのことは、その活動の場が六本木キャンパスにないことから、物性研内部でもあまり理解されていないのではないかと思います。また、このグループは、ある閉じたグループではありませんので、特に外部機関に所属している方の中には、ご自身、グループに所属していると思っていない方もあるかと思います。この項では、グループとその回りにいる方々を紹介させていただき、合わせてグループの仕事内容にも若干、触れたいと思います。

現在のSOR施設の加速器関係のスタッフの構成は、私と中村典雄助教授、小関 忠助手、高木宏之助手、篠江憲治技官、工藤博文技官です。中村氏には、着任前から、この(平成8年)5月に出来上りました約400ページに及ぶ高輝度光源計画の「加速器の概念設計」の編集のま

め役をやっていただき、さらに着任早々から、小関氏とともに、徹夜で概算要求関係の資料作成を手伝っていただきました。現在は、計画で重要な軌道フィードバックの開発、ビーム不安定性の研究などに従事していますが、その他、加速器計画のほぼすべての打ち合わせに出席していただく等、これまでの私の仕事のある部分を担っていただいています。〔中村氏が着任したおかげで、なんとか倒れないで済みそうです。〕小関氏の現在の主な仕事は、計画の高周波(RF)加速及び電磁石に関する開発研究です。高木氏には、非線形効果が著しい高輝度光源リングのラティス(各種電磁石等の配列)の設計、ダイナミック・アバーチャ(非線形効果で決まる軌道の安定領域)の計算、制御の設計等を担っていただいています。〔加速器では、ラティスの設計計算は最も重要なものの一つです。〕篠江氏の現在の仕事の主なものは、SOR-RINGの維持・改善作業の他、シングルパス・モニタ(電子がある場所を一回だけ通過したとき、その位置を測定する装置)の開発と大電力RF加速空洞の熱歪計算などです。以上のようにグループの活動が将来計画にシフトしてきている中で、工藤氏には、これらの開発研究の補助の他、主としてSOR-RINGの運転・維持を実質的に担っていただいております。現在のSOR-RINGの共同利用が順調に行われているのは、ほとんど同氏の尽力によるものです。しかし、平成9年4月以降は、全面的に計画に参画していただくなっています。

ここで、約4年ほど前からSOR-RINGのオペレータの仕事をしていただいている原 洋子氏を忘れるわけにはいきません。以前、同氏は核研の電話のオペレータをしていましたが、今では、同氏がいなくてはSOR-RINGの運転を語れないほどになっています。〔工藤、原両氏なくしては、その他の人が将来計画にうつつをぬかしていることなど出来ない相談です。〕

また、もう一人忘れてはならない人として、元助手の大熊春夫氏(現在、理研)がいます。同氏は、私が物性研に着任した時、加速器グループの実質的な責任者として、SOR-RINGの維持・改善、将来計画等に同氏のマルチ・タレント性を遺憾なく発揮しておりました。また、同氏は、SOR施設の筑波分室が維持しているリボルバー型アンジュレータの建設に多大な貢献をした方ですが、現在は、完成間近いSPring-8の真空関係の責任者として、活躍しています。

将来計画を推進している高輝度光源加速器グループを語るとき、特に、次の方々のお名前を上げなければなりません。ライナックの設計をお願いしているKEK・PF入射器研究系の小林 仁教授、客員所員にもなっていただいたKEK・PF光源研究系の伊澤正陽助教授(RFの開発研究)、同じくPF光源研究系で、ラティス設計及び電磁石設計を担当している小林幸則氏、真空関係の設計を担当している堀洋一郎氏と瀧山陽一氏、制御関係及び建物設計を担当している佐藤佳裕氏、シンクロトンの設計をお願いしているKEK加速器部の飛山真理氏です。ここではお名前を上げませんが、以上の方々のほか、今までに何人かのKEKの方々に協力をしていただいております。また、かつて受託研究員であり、現在もラティスの設計等を手伝っていただいている日立造船(株)の長塚俊也氏、同様に受託研究員であった川崎重工(株)の横山 稔氏(現共同研究員)、

共同研究員である清水建設(株)の藤田 豊氏も忘れるわけにはいきません。さらに、かつていっしょに楽しく勉強させていただいた、SPring-8 の田中 均氏、安東愛之輔氏（現姫工大教授）、アンジュレータの設計を担当していただいた原研の佐々木茂美氏（現米国LBL研究員）のお名前を上げたいと思います。もっとお名前を上げたい方がたくさんおりますが、キリがありませんのでこの辺にしておきます。計画全般に話を広げると、さらに多くの方々のお名前を上げなければなりませんが、それは次の機会に譲ることとします。[上げるべき方のお名前をうっかり忘れていましたら、誠に申しわけございません。]

3. SOR-RINGと将来計画

思い出しますに、着任する前からSOR-RINGは歴史的にものすごく価値のある放射光リングであるということはわかつておりましたが、一応、世界の中でも最先端の放射光施設の一つであるKEK・PFから着任した私には、SOR-RINGの状況はものすごいものに映りました。何時であったかの記憶は既に定かではなくなってしましましたが、施設の建物の屋根が一部壊れて頭上注意となったり、大雨で屋根がプール状態になって漏水したり（テニス・ボールが3、4個、排水管に詰まっていたのが原因）、電源の素子が腐っていました、等々。また、リング自体も20年ものですので、その運転には名人芸が必要だったり（もっともこのことは最新の加速器でも必要ですが）、SOR-RINGの電子ビームの性質があまりよくわかっていなかったり（現在でも、完全にはわかつておりませんが）等々。このようにものすごいものではありましたが、皆といっしょに走り回って、結構、楽しくやってきたように思います。[教授として着任して、給与はちょっと増えましたが、走り回るのはKEK・PFの時と何等変わりませんでした。]

BPMシステムの開発と軌道パラメータ測定など

とにかく着任して、リングの中をビームがどのように走っているかわからないのは、何とも情けないと思い、また、将来計画の光源リングではビームのサイズが非常に小さいので、その位置を正確に制御することが大切であるということから、まずは将来計画用のビーム位置モニタ（BPM）の開発を兼ねて、BPMをリングに設置することから仕事を始めることにしました。そのために、リングの4箇所にあるトリプレット（ビームを収束させるための四極電磁石の三つ組みのこと）の真空チャンバーを、BPMの信号ピックアップ電極を組み込んだものに交換しようということになりました。このチャンバーとピックアップ電極の設計は篠江氏が主に担当しました。また、RF信号切り替え器と信号減衰器には、その当時としては新しいPINダイオードを採用したものを使うことにしました。また、回路設計はKEK・加速器部の家入氏にお願いし、BPMシステム全体の設計にはKEK・PFの桂共太郎助教授から助言と支援をいただきました。PINダイオードに関する試験は、その当時、KEK・PFにいた中村所員が担当しました。また、BPMの試験・較正は、篠江氏と私でKEK・PFにこもって行いました。真空チャンバーのリン

グへの組み込みは、加速器グループ全員で行いましたが、BPMシステム全体の設置・試験は、篠江氏が中心になって行いました。SOR-RINGのビームを用いて試験を行った結果、このシステムは、0.3~0.4ミクロンで電子ビームの位置を検出することが可能という、当初の予想を超えた性能を有していることがわかりました。（ちゃんと調べていないので、もしかしたら間違っているかもしれません）これは当時の世界最高の性能であった（今でも世界最高級の性能）と思っています。

このシステムを使って、SOR-RINGのビーム位置を測定してみると、数ミリ程度、軌道がずれていること、RF周波数（約120 MHz）が100 kHz程度ずれていること（リング一周の電子軌道の長さはRF周波数で決まります）などがわかりました。さらに、この改造作業に合わせて、トリプレットに補正コイルを巻いて、軌道位置の修正、基本的な軌道パラメータであるベータトロン関数を測定できるようにしました。また、このBPMシステムを使って、同様に基本的な軌道パラメータである分散関数も測定することが可能になりました。当初は、小関氏が作成したプログラムで軌道の補正を行ってきましたが、後には、現在の定常運転で使用しているようなオンラインで軌道を補正するシステム（軌道フィードバック・システム）の基本的なソフトウェアを中村所員（当時、KEK・PF）が作り上げました。このシステムのもつ性能も（世界のトップではないかもしれません）世界最高水準であることは間違ひありません。そのほか、外部からの振動や磁場による電子軌道への影響なども全員で測定器を持ち歩いて調べました。その結果、核研の電子シンクロトロンによる磁場変動で、（ミクロン程度ですが）軌道が振動していること、またそれを簡単なモデルで解釈することが出来ることなどがわかりました。

現在は、篠江氏を中心に、シングルパス・モニタの開発を、ビーム輸送ライン（ビーム入射ライン）及びSOR-RINGを用いて行っています。現段階でも、かなり良好な結果が得られていますので、将来計画でも同じ方式が使用できると考えています。また、中村所員と受託研究員であった横山氏が軌道フィードバック・システムの設計と開発研究を行っており、これについても見通しがついてきました。

イオン・トラッピング現象

先の新しい真空チャンバーには、もう一つ仕掛けがしてあり、イオン除去電極というものが組み込んでありました。[電子は負の電荷をもっていますので、電子ビーム軌道の回りにイオンや埃等が引き寄せられる現象が見られることがあります。このようにイオン等が引き寄せられて軌道に貯まつてくる現象をイオン・トラッピング現象といいます。]以前から、SOR-RINGではこの現象が見られると言われていましたし、確かに放射光モニタによるSOR-RINGのビーム像を眺めていると、この現象が起きているように思われましたので、イオン除去電極に電圧を加えれば、きっとビームの性質がよくなるであろうと考えました。しかし、実際に電圧を加えてみると、ちっとも良くならないどころか、かえって悪くなつたので、がっかりしてしまいました。

ところが、リングのチューン（電子がリングを一周する間に振動する回数）が以前から（何時頃からかわかりませんが）危険な和共鳴線と呼ばれる直ぐそばにセットされていましたので、約半年後にこれを修正してみたところ、低いビーム電流値でビームの寿命が大幅に延びるということがわきました。そこで、これならばと思い、電極に電圧を加えてみたところ、案の定、高いビーム電流値でも同じように電子ビームの寿命が延びてきました。〔寿命が延びたのは、イオンが除去され、電子のイオンとの衝突が減少したためです。〕このイオン・トラッピング現象は面白いテーマであるので、最近では、多くの人がこれについて研究しており、小難しい論文もあるようですが、（以前から論文をあまり読まないし、最近では論文を見ることもなくなりましたので、よく知りませんが）依然として、この現象を見てきたように理解している人は誰もいないのではないかと思います。これを何とか理解したいということが、冒頭に述べた「はかない夢」の一つとしてあります。

ビーム不安定性

SOR - RINGも他の放射光リングと同様、縦方向（進行方向）のビーム不安定性が起きており、それもかなり激しいものです。そこで、何とかその原因を究明し、これを取り除こうと試みてきました。このようなものの一つとして、昨年夏に行ったリング全周のビーム結合インピーダンスの測定が上げられます。カーブしている偏向部のチャンバーを含め、既設のリングで全周にわたって、このインピーダンスを測定した例は、多分、これが初めてではないかと思っております。しかしながら、この測定を小関氏といっしょにやっていた外国人大学院生の陳君が経済的理由で退学してしまったために、十分な解析がなされないまま、今日に至っています。

また、個人的には、KEK・PFの時代から、（縦方向の）ビーム不安定性が示すスペクトルの振る舞いに興味をもっていまして、これも「はかない夢」ではありますが、何とかそれを理解したいと考えております。ビーム電流が増加してきますと、ある電流値でビームが不安定になりますが、その不安定によるビームのスペクトル線は通常、1本（実際には、ビーム信号は周期的ですので、ある周波数範囲の中で1本）で、しかも時間的にはほぼ一定になります。しかし、更に電流が増えますと、スペクトル線が例えれば2本、3本となってきて、ついにはたくさんのスペクトル線が不規則に変動するようになります。このことから、直ちに、近年、いろいろな分野で流行っているテーマの場合と同じことが起こっていると予感されます。このビーム不安定性は、加速器の分野では重要なテーマの一つですので、これまでに精力的な研究がなされてきていて、その物理的理解（勿論、理解だけでは加速器には役に立ちませんが）は、相当、進んでいると考えられています。しかし、これらの解析は、不安定性の閾値の計算等、ほとんどが線形の範囲に限られています。そこで、有限振幅の解析、非線形解析やシュミレーションを行って、何とか上の現象を理解したいものと思っていますが、現状では、stable instability（定常的なスペクトルの場合）は加速器にとって安全だが、unstable instability（カオス的スペクトルの場合）に

は危険であるとか言って、言葉遊びでお茶をにごしているのが精いっぱいというところです。

ビーム不安定性の抑制

ある時、小関氏を中心として、ビームスクレーパー（ビームを削る棒のようなもの）を用いた加速器実験を行っていた際に、多分、この20年間、決して消えることがなかったであろう、縦方向ビーム不安定性が、ビームスクレーパーがある位置にすると突然、消滅してしまうことが発見されました。残念ながら、私自身は雑事にまけていて、これには全く関与していませんが、（少なくともSOR施設での）偉大な発見の一つに上げられるのではないかと思います。しかし、その後の加速器実験でもその原因は（推測はありますか）まだ、はっきりとはわかっていません。出来れば、SOR-RINGがシャットダウンするまでに、その原因を明らかにしたいとは思いますが、将来計画で忙しくなって、多分、できなくなるのではないかとも思っています。[他の分野では偶然でも偉大な発見をすれば、たとえその原因が分からなくてもノーベル賞ものですが・
・・・]

その他の加速器実験

光の色収差に相当するクロマティシティを測定して、比較的異常な値をもつということもわかりました。[これは電子を曲げる働きをもつ偏向電磁石の磁場に大きな非線形成分があることが原因でした。] また、SOR-RINGのビーム・ローディング（ビームのないときに比べてビームがあるときには、RF加速空洞の振る舞いが変化することをいう）についても詳しく調べ、その結果、以前よりもSOR-RINGのRFシステムがよく理解できるようになったと思っております。その他、私以外の人が参加して行った核研ESでの加速器実験、篠江氏が主として担当したリング真空間の大幅な改善、小関氏が中心となって行った500 MeV加速、最近、高木氏と東京理科大の大学院生の佐藤君が中心となって行ったRFの自動化運転等々、何やかやとやってきましたので、この5年間、少しずつですがSOR-RINGの性能は改善されてきていると思っております。

RF空洞の開発研究

これは、ここ約5年間、小関氏とKEK・PFの伊澤氏が中心となって行ってきたものです。[私がしたことは、あまり有益でない口出しをすることと、些かの経費をとってくることに寄与したことぐらいです。] この開発研究は、まず、空洞の設計計算から始め、モデル製作、そして実機モデルの製作と進んできました。この空洞の特長は、放射光リングのような加速器において、最もビーム不安定性を引き起こしやすい空洞内の高調波モードを空洞の両サイドに取り付けたSiCチャンバーで吸収するというものです。このため、それに必要なSiCチャンバーの開発や試験も合わせて行ってきました。これらの開発は順調に進み、既に、この空洞はKEK・PFのリングに設置されて、当初考えていた性能が達成されていることが確認されたのみならず、現にリングの運転に使用されるまでになっています。この世界初演のRF空洞の性能を実証して見せた

ということは、高く評価されてよいと思います。

また、高周波電力を空洞に導くためのRFカップラーの設計計算を、受託研究員であった長塚氏が精力的に行い、KEKのトリスタンで使用されているRFカップラーよりも特性の優れた設計が出来上りました。既に、この設計に基づいたRFカップラーの実機が先のRF空洞に組み込まれています。[これも間違いなく世界最高水準のものであると思っています。] なお、この開発研究に際して、(株)東芝から多大なご協力をいただきましたことをここに記したいと思います。

加速器グループは、上述の活動より、はるかに多くの時間を将来計画の設計につぎ込んでいますが、これらはなかなか「研究的なもの」とは見なされにくいこと、既に物性研だよりの紙面をかなり使ってしまったこともありますので、これまでとします。しかし、この項の最後に一言。

ちょうど2年前の12月に開催されました、SOR-RING20周年記念式典及び物性研短期研究会での諸先生、諸先輩のお話をうかがい、SOR-RINGは多数の方々の汗と涙の結晶であるということを改めて思い知らされました。このような歴史的記念碑であるSOR-RINGに携わっていることは、我々の名誉であるとともに、平成8年度末まで共同利用のための運転を全うすることは、我々の責務であるということをここに記させていただきたいと存じます。

4. 今後のこと

加速器グループ（または神谷研究室？）の今後の目標は、何はさておき、高輝度光源計画を実現するという一言に尽きます。私個人、ほとんどこの計画や雑事で忙殺されており、その日暮暮らしの生活をしているような状態ですので、今後のこととは言っても、「はかない夢」は無理なので、ほんの近未来のことについてしか述べることはできません。将来計画の開発研究に関しては、約一年をかけて、加速器主要装置の一つでもある電磁石（偏向電磁石及び四極電磁石）の実機モデルの製作・磁場測定、真空チャンバーの製作・試験を行うこと等を計画しています。さらに、「私設ゼミ」に迷い込んできた物理学科3年の原田健太郎君や測定系の辛所員等といっしょに、アンジュレータ用の準周期回折格子の開発を行うこと等も予定しています。[これは、佐々木茂美氏が考案した準周期アンジュレータから思いついたものです。なお、このアンジュレータの実証実験に、加速器グループはささやかながら関与しています。]

5. 謝 辞

最後になりましたが、思い返しますと、ふらふらしながらも、何とか5年間、ここまでやって来れたのは、数多くの方々のご指導・ご支援の賜であると深く感謝せんにはいられません。特に、私を物性研に招いて下さり、また1年半前までSOR施設と将来計画のために奮闘されてきました前施設長の石井先生、同僚でもあり、先輩でもある測定系の柿崎、辛両所員、そして測定系の

スタッフに感謝申し上げます。加速器デザイン・ノートや田無のSOR施設の事務を担当している秘書の小林洋子さん、VSX利用者懇談会などの事務を担当している秘書の神谷和美さんにも感謝いたします。また、終わりの方で誠に申しわけございませんが、物性の「ぶ」の字も知らないで物性研にやってきた異邦人の私をご指導下さいました竹内 伸前所長、安岡弘志現所長、物性研の所員の方々、事務部の方々に深く感謝いたします。さらに、最後の最後に、お名前は上げませんが、学内外の多くの放射光関係の研究者の方々、KEK・核研の方々、事務局の方々、会社の方々等々にお礼を申し上げます。

第16期物性専門委員会第5回委員会議事録

日 時：1996年4月8日（月） 13:00～16:00

場 所：日本学術会議第4部会議室

出席者：伊達宗行，長岡洋介，秋光 純，家 泰弘，池田宏信，石井武比古，石黒武彦，遠藤康夫，
興地斐男，川村 清，小林俊一，斯波弘行，菅 滋正，鈴木増雄，高橋利宏，竹内 伸，
中嶋貞雄，福山秀敏，藤田敏三，目片 守，安岡弘志

（出席者は下線）

報 告

1. 学術会議関係（伊達委員）

高速増殖炉「もんじゅ」の事故に学術会議としても重大な関心をもっている。このため、4月19日に動燃、原子力安全委員会を呼び公開討論会を開く。

2. 共同利用研報告

○物性研（安岡委員）

4月1日付けで安岡所長が就任した。

同じく4月1日より第3世代の物性研として、新研究体制（5大部門、1客員部門、3施設）に移行した。教授3名の増員（うち1名は助教授振替）があった。柏地区に平成8年度より建物の建設を開始し、平成11年度に移転を完了する予定である。加速器科学研究所センター（仮称）の高輝度光源については、平成9年度の概算要求を行なう。付帯設備を入れて総額260億円程度を考えている。4月に5名の所員の公募を予定している。

○基研（長岡委員）

4月1日付けで長岡所長が再任された。任期は1年の予定である。教授1名の公募を7月に行なう予定である。物性関係助教授の人事選考を行なった。

予算関係では、汎用計算機（レンタル料は2億円／年）が内示されている。平成9年度概算要求として、大部門制への移行計画を提出する予定である。

○高エネルギー研（池田委員）

中性子関係では、新冷中性子実験棟が建設中であり本年6月に完成する。放射光関係では、PFの高輝度化に関して平成7年度の補正予算が認められた。また、ARの運転経費の予算が内示された。さらに、平成9年度の概算要求としてARの専用化計画を提出する予定である。

3. 物性グループ（藤田委員）

グループの再登録を受け付けているが、今のところ前回の約5割程度しか集まっていないので、関係者の協力を頂きたい。

4. その他

○APCTP(Asia - Pacific Center of Theoretical Physics)（長岡委員）

APCTP が韓国のソウルに特殊法人として設立される予定である。センター長には C. N. Yang が就任する。日本には副所長を出すようにとの要望がきている。日本側の対応は高エネルギー研（代表者は菅原所長）があたるが、物性関係の委員は長岡、福山、安藤の3名である。2月に高エネルギー研で Planning Committee が開かれた。韓国は APCTP に対し数億円の資金を提供することになっているが、日本の拠出金については未定である。本年6月に韓国で開所記念 Conference が開かれる。

議 事

1. 物性研協議会委員の推薦について

現在の委員の任期（2年）が8月31日に切れるので、新委員候補者を5名推薦して欲しいとの依頼が物性研究所長の安岡委員からあり、選挙の結果次の5名を推薦することとした。

秋光 純　　遠藤康夫　　小林俊一　　斯波弘行　　藤田敏三

2. 新研究機構について

東大核研のつくば移転に伴う新研究機構の現状と進行状況について、高エネルギー研の池田委員より、平成9年4月の発足に向けて今まで7回の「文部省調査会」、9回の「新組織のための連絡協議会」が開かれた経過についての報告があった。種々議論があったが、物質科学関係の新研究所の名称については、連絡協議会で一つの案として提案されている「物質科学研究所」は「物性研究所」の名称と抵触するので、適当な形容詞を付するのが望ましい旨、全体会議で申し入れることとした。

3. 物性将来計画について

午前中に開かれた物性将来計画ワーキンググループ（委員長：興地）の報告があり、物性拠点計画案についてはワーキンググループ委員全員が原案を大筋において了承したことが述べられた。今後、物性専門委員会委員よりの修正等についての意見を4月末までに求め、拡大物性委員会出席者にも案を送付して字句の修正などを経た後、6月末に物性専門委としての最終版を作成し、その後次回の物研連（11月）で審議を受けて、対外報告として成案化される方向で作業を行なう

こととした。

これに関連して、秋光委員から、私学関係ではハイテクリサーチ構想が文部省で検討されているという事情にあり、デリケートな状況にあることに配慮してほしい旨の意見が出された。

4. 半導体国際会議について

IUPAP専門委員の渡辺氏より、上記国際会議を2000年に日本に招致することを検討しているが、もし誘致出来た場合には学術会議主催にしたいので協力を願いたい旨の要望があり、これを了承した。

5. 「大型ハドロン計画で展開する科学」ワークショップについて

池田委員より、上記ワークショップを学術会議主催で今年秋に開催する趣旨についての説明があり、これを了承した。

物性研究所短期研究会報告

「量子スピン系のギャップ形成とキャリアードーピング」

世話人	東京大学物性研究所 東京大学工学系研究科 東京大学工学系研究科 東京大学理学系研究科 東京大学物性研究所 東京大学物性研究所 名古屋大学理学部 京都大学化学研究所	上田和夫 内野倉國光 十倉好紀 福山秀敏 今田正俊 上田寛 佐藤正俊 高野幹夫
-----	--	--

銅酸化物超伝導体の低ドーピング領域におけるスピンギャップの発見は、シングレット相関の形成と超伝導発生のメカニズムの関連という問題を焦点として浮かび上がらせることになった。その後、SrCu₂O₃の梯子型スピン鎖、CaV₄O₉のプラケットRVBなどのスピンギャップを持つ系が相次いで発見された。最近では、Sr_{0.4}Ca_{13.6}Cu₂₄O_{41.84}で梯子型スピン鎖にキャリアーを注入することが可能となり、高圧下で実際に超伝導が起きることが確認された。これらの研究はわが国の実験、理論家を中心として展開されていて世界の研究をリードしている状況にある。

今回の短期研究会では、研究の最前線に立つ若手研究者による発表を中心にして活発な討論がなされた。その内容の詳細については以下の報告を見て頂くこととして、若手を中心とした今回の研究会が今後の研究の発展への糧となることを世話人一同信じて疑わない。

プログラム

11月5日（火）

はじめに

上田和夫（東大物性研）

座長 上田和夫

スピン梯子物質SrCu₂O₃の不純物置換効果：スピンギャップの消失と反強磁性秩序の出現

東正樹（京大化研）

不純物をドープしたスピンラダーSrCu₂O₃の比熱

野原実（東大物性研）

2本足梯子スピン系Sr(Cu_{1-x}Zn_x)₂O₃の磁気秩序

大杉茂樹（阪大基礎工）

スピンラダー系の不純物効果

飯野陽一郎（東大物性研）

SrCu_{2-x}Zn_xO₃の不純物置換効果

宮崎智彦(東大教養)

座長 今田正俊

Transport properties of doped spin gap systems

常次宏一(筑波大物工)

S=1/2ハイゼンベルグ梯子系の帯磁率, 核磁気緩和とスピニエコー

岸根順一郎(分子研)

スピン梯子系に於ける格子歪みの効果

谷本哲浩(東大理)

量子モンテカルロ法による2-, 3-leg Hubbard ladderの超伝導相関

黒木和彦(東大理)

1次元t-J模型, t-J ladder模型における拡張AB周期とスピニギャップ

草部浩一(東大物性研)

Nearly critical ground state of LaCuO_{2.5}

M. Troyer(東大物性研)

11月6日(水)

座長 上田 寛

LaCuO_{2.5}関連物質と新しい梯子化合物の探索

広井善二(京大化研)

ホールをドープした梯子型La_{1-x}Sr_xCuO_{2.5}の電子状態

溝川貴司(東大理)

梯子格子におけるスピニギャップと超伝導

上原正智(青学大理工)

NMR/NQR Studies on Spin Gaps in Ladder Compounds

熊谷健一(北大理)

of (VO)₂P₂O₇ and Sr_{14-x}A_xCu₂₄O₄₁(A=Ca, Y, and La)

座長 高野幹夫

Sr₁₄Cu₂₄O₄₁系におけるキャリヤドーピングとスピニギャップ

—電気抵抗, 熱電能, 帯磁率から見て—

小池洋二(東北大工)

梯子スピン系Sr₁₄Cu₂₄O₄₁のキャリヤードーピング

真岸孝一(阪大基礎工)

梯子系Sr_{14-x}Ca_xCu₂₄O₄₁におけるドープされた正孔の対形成

本山直樹(東大工)

高温超伝導体とスピン・ラダー系超伝導体の高圧下の磁気抵抗とホール効果

中西剛司(東大物性研)

座長 北岡良雄

CaV₄O₉のスピニギャップ —中性子散乱とNMR—

樹神克明(名大理)

CaV_nO_{2n+1}におけるスピニギャップと量子揺らぎ

紺谷浩(東大物性研)

CaV₄O₉における交換パラメータの評価

高野健一(豊田工大)

Effect of Orbital Order in Two-dimensional Spin Gap System for CaV₄O₉

CaV _n O _{2n+1} の磁性 一中性子散乱とESR—	加藤 信行 (東大物性研)
CaV _n O _{2n+1} のスピニギャップ (NMR)	原科 浩 (名大理)
	座長 大浜 哲夫 (東大物性研)
スピニ・パイエルス物質CuGeO ₃ の最近の話題	内野倉 國光
不純物をドープしたスピニ・パイエルス系のサブミリ波ESR	長谷 正司 (理研)
CuGeO ₃ 系のNMR	野尻 浩之 (東北大金研)
不純物をドープしたCuGeO ₃ のスピニ・パイエルス相と反強磁性相	伊藤 正行 (千葉大理)
	座長 笹子 佳孝 (東大工)
乱れたスピニパイエルス系における磁気励起	齋藤 雅子 (東大理)

11月 7日 (木)

スピニギャップ… 昨日、今日、明日…	座長 高木 英典
新しいスピニパイエルス物質NaV ₂ O ₅ および関連化合物	安岡 弘志 (東大物性研)
NaV ₂ O ₅ のスピニパイエルス転移 (NMR)	磯部 正彦 (東大物性研)
NaV ₂ O ₅ の磁気励起 一中性子散乱—	大浜 哲夫 (東大物性研)
	吉浜 知之 (東大物性研)
1次元SrCuO ₂ にフォトドープされた正孔の分散	座長 佐藤 正俊
Static and Mobile Vacancies in Spin Gap Systems	永崎 洋 (東大工)
まとめ	永長 直人 (東大工)
	福山 秀敏 (東大理)

スピニ子物質SrCu₂O₃の不純物置換効果：スピニギャップの消失と反強磁性秩序の出現

京大化研 東 正樹
藤城芳江
高野幹夫
東大物性研 野原実
高木英典
藤原直樹
安岡弘志
阪大基礎工 大杉茂樹
北岡良雄

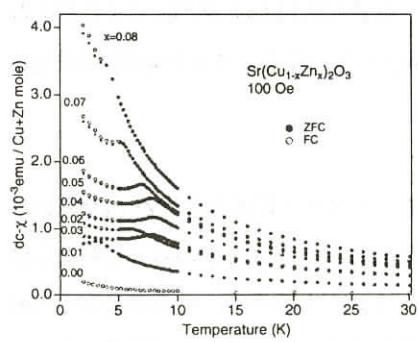
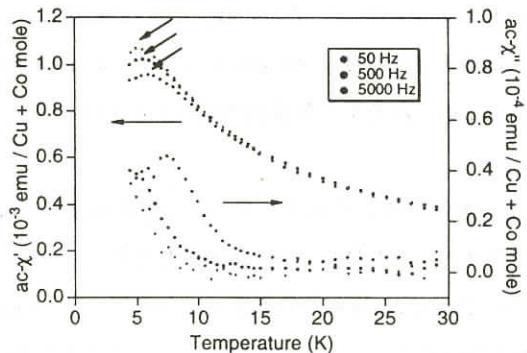
SrCu₂O₃, Sr₂Cu₃O₅はそれぞれ2本足, 3本足のスピニ1/2ハイゼンベルグ反強磁性梯子格子を持つ化合物で、我々はこれまでに帯磁率、NMR、μSR、中性子散乱の実験を通して前者が約400Kのスピニギャップを持つこと、それに対し後者はギャップレスで、52K以下で何らかの磁気秩序を持つことを明らかにしてきた。CuGeO₃の例に見られるようにこうしたスピニギャップを持つ系への不純物置換実験は大変興味深い。ここではSrCu₂O₃へのZn, Ni, Co置換、そしてSr₂Cu₃O₅へのZn置換の実験結果をまとめる。

梯子系の基底状態においてはスピニはシングレットペアを形成しており、Cu²⁺(スピニ1/2)を非磁性の元素で置換することでこのシングレットペアがこわされ、不純物一つあたり1 μ_Bの局在モーメントの発生が予想される。図1はSr(Cu_{1-x}Znx)₂O₃の磁場100Oe中の直流帯磁率の温度変化の様子で、予想される通り低温でキュリー的な帯磁率の増大が見られる。キュリー定数を見積もったところ、Zn一つあたりスピニ1/2局在モーメントが出現しているとした場合の70%になっていた。しかし、東大物性研安岡研の藤原によるNMRのナイトシフトも同じように低温で増大を見せており、これがスピニシングレットの切断による単純な局在モーメントによるものではなく、すべてのCuイオンが影響をうけ、少しずつモーメントを持つようになっていることが分かっている。また、ギャップレスのSr₂Cu₃O₅も同じようにZn置換量に伴って低温のキュリー項の増大が見られたが、こちらではその大きさはZn一つあたりスピニ1/2とした場合の30%程度であった。

さらに低温に目を向けると、反強磁性転移を示唆するカスプが見られる。これが反強磁性転移であることは東大物性研高木研の野原による比熱、阪大基礎工朝山研の大杉によるNQRの測定で確認された。比熱の温度変化を測定したところ、ノンドープの試料ではほぼT³に比例する振る舞いがみられた。これは大きなスピニギャップの存在を反映して磁気励起がゼロに近くなってしまい、格子比熱のみが観測されたとして理解できる。しかしながらZn置換した試料では転移点以上で温度に比例する磁気比熱が観測されている。これはギャップレスの一次元反強磁性体の特徴で、こうし

た結果をまとめると、わずか1%程度の不純物置換によって全てのCuイオンが影響を受けて小さなモーメントを持つ様になり、それらが一次元性を保ったまま相互作用して、5K程度の低温でわずかな3次元性のために反強磁的にオーダーしている様である。

ZnのかわりにNiを置換した試料でも同じ様な帯磁率の変化が観測された。酸素平面4配位されたNi²⁺はスピン0の低スピン状態をとっている。これに対し、Co置換した試料ではCo濃度1%以下で直流帯磁率が転移点(0.75%~5K, 1%~9K)以下で明確なヒステリシスを示し、さらにその転移点は交流帯磁率の周波数依存性を持ち、高周波数程高温にシフトするというスピングラス的な帯磁率温度依存性が観測された。

図1 : $\text{Sr}(\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x)_2\text{O}_3$ の直流帯磁率図2 : $\text{Sr}(\text{Cu}_{0.925}\text{Co}_{0.075})_2\text{O}_3$ の交流帯磁率

不純物をドープしたスピンドラーダー SrCu_2O_3 の比熱

東京大学物性研究所 野原 実

一色 真誠

高木 英典

京都大学化学研究所 東 正樹

藤城 芳江

高野 幹夫

量子スピンの梯子格子を有する物質群は、その新奇な磁性とキャリアドープにともなう超伝導の発現などの興味から、最近大きな注目を集めている。この研究で取り上げた SrCu_2O_3 は、S=1/2のハイゼンベルグスピンからなる2本足の梯子構造をもっている。この偶数本の足をもつ梯子格子は、短距離RVB状態にありスピン励起には有限のギャップが存在する。実際、帯磁率やNMRから、 SrCu_2O_3 は約400Kの大きさのギャップをもつことが確認されている。このようなスピンギャップを持つ系に対する微量な非磁性不純物の効果を、比熱の立場から検討した。測定は1.3Kから20K

までの温度範囲において、Znをドープした試料 $\text{Sr}(\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x)_2\text{O}_3$ について行った。

不純物をドープしていない試料 SrCu_2O_3 においては、大きなスピニギャップのために測定した温度域では熱励起されたスピニによる自由度は存在しない。このため比熱にはフォノンのみが寄与し、デバイの T^3 則に従った温度依存性を示している。Znをドープしていくと、8K以下の低温でラムダ型の異常が現れる。同じ温度で、帯磁率にも明確なキックが観測される。従って、この異常は反強磁性転移によるものであると結論できる。驚くべきことに、1%レベルの微量な非磁性不純物によって、スピニギャップを持った量子液体状態が長距離反強磁性秩序状態にとって代わられる。実際、 $x=0.01$ の試料においても約3Kにおいて転移がみられた。転移温度はZnの増加とともに高くなり、 $x=0.04$ において $T_N=8\text{K}$ の極大となる。 $x>0.04$ で T_N は減少していくが、これは通常の3次元反強磁性体にみられるような希釈効果によるものと考えられる。

T_N 以上の温度においてはキュリー的な磁性が観測されている。キュリー定数からはZn当たりほぼ1つの $S=1/2$ の自由なモーメントが誘起されているように解釈できる。しかしながら、比熱から求めた T_N におけるCu当たりの磁気エントロピーは、 $xk_B\ln 2$ よりもかなり小さく、この帯磁率を単純に自由な $S=1/2$ モーメントに起因したものとすることは出来ないであろう。さらに興味深いことに、 T_N 以上の比熱には温度に比例して増大する成分がみられ、スピニ励起がギャップレスになっていくことを示唆する。これらの結果は、スピニギャップを持つハルデン系への非磁性不純物の効果と対照的である。 Y_2BaNiO_5 にZnをドープすると、エントロピー $S=2xk_B\ln 2$ に対応するショットキー型の比熱が現れ、これは不純物によって誘起されたキュリー的な帯磁率と完全に対応している。

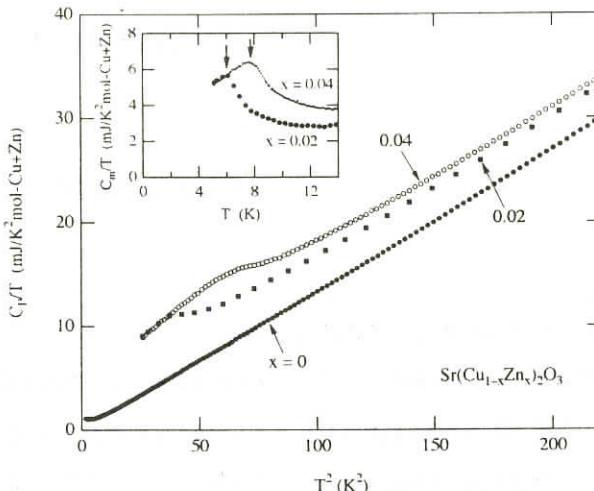


図 $\text{Sr}(\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x)_2\text{O}_3$ の比熱 C_p の温度依存性を C_p/T 対 T^2 で表示したもの。

挿入図は磁気比熱の温度依存性。

2本足スピニ子系Sr_{(Cu_{1-x}Zn_x)₂O₃}の磁気秩序

阪大基礎工, 科技団	大 杉 茂 樹
阪大基礎工	北 岡 良 雄
	朝 山 邦 輔
京大化研	東 正 樹
	藤 城 芳 江
	広 井 善 二
	高 野 幹 夫

SrCu₂O₃(Sr123)のCuをZnで置換することにより反強磁性長距離秩序が起こると東らは報告している。我々は、それがほんとうに長距離秩序であるかどうかを確認するために、Cuの核四重極共鳴(NQR)を行った。

図1は、Sr123のSrをLaで置換した3%までのCu-NQRスペクトルである。磁気秩序による超微細(内部)磁場を考慮に入れることなく、電場勾配の分布のみ考慮に入れた曲線でよく再現できる。一方、Zn置換の場合は、図2中で示すようにスペクトル線幅が大きく広がる。La置換の場合とは異なり磁気秩序による内部磁場を考慮に入れなければZn置換のスペクトル形状を再現できない。Zn付近のCuのみがモーメントを持つ場合にはLa置換の場合とさほど変わりのないスペクトル変化が予測される。2%のZn置換スペクトルでは11MHz付近にピークは存在せず、よって、ほぼ全てのCuがモーメントを持っていると考えられる。Zn間の中央付近は同程度のモーメントの大き

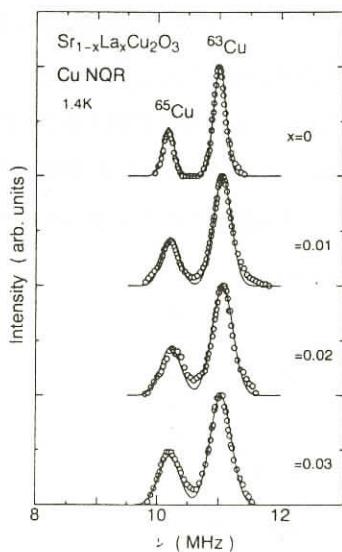


図1

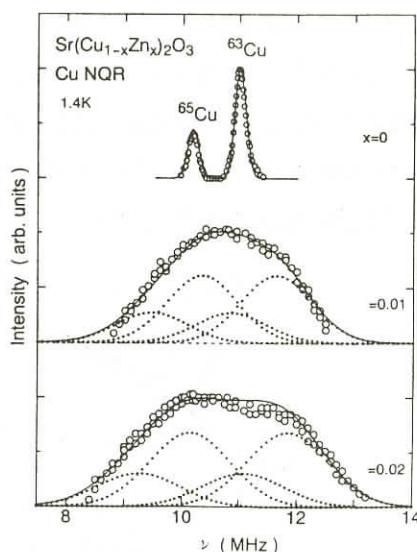


図2

さを持つと考え均一な内部磁場分布を仮定し、内部磁場はc軸方向もしくはそれに垂直であるとすると、それぞれ⁶³Cuと⁶⁵Cuは図2中の点曲線で示すように2つのラインに分離する。実曲線はそれらの総計で、よくスペクトルを再現している。分離幅から求めた内部磁場がc軸方向[5760e(1%), 7530e(2%)]と垂直方向[2880e(1%), 3770e(2%)]である場合の値は非常に小さい。Sr123の超微細磁場定数($A_{ab}=48\text{ kOe}/\mu_B$, $A_c=-120\text{ kOe}/\mu_B$)を使いモーメントの平均の大きさを求めるとき、 $0.01\mu_B$ 未満の小さな値であった[1% - ($\langle S \rangle_{ab}=0.0060\mu_B$, $\langle S \rangle_c=0.0048$), 2% - ($\langle S \rangle_{ab}=0.0079\mu_B$, $\langle S \rangle_c=0.0063$)]。

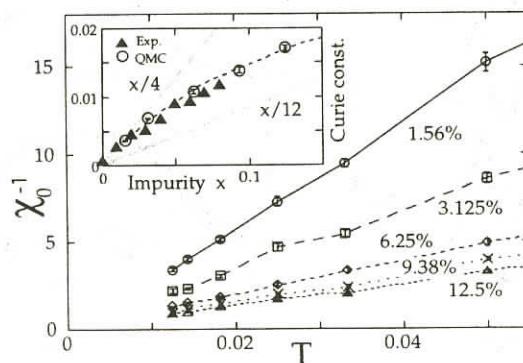
スピンドラード系の不純物効果

物性研究所 飯野陽一郎

今田正俊

最近のSr(Cu_{1-x}Zn_x)₂O₃に関する実験で、ごく微量(1%弱)Zn-イオンによってスピンドラード相が壊れ、反強磁性オーダーが生じる事が示唆されている。この事を念頭に置き、SrCu₂O₃の理論のモデルとして、はしご型にスピンドラードが並び、最近接スピンドラード間に反強磁性の相互作用を持つハイゼンベルグ模型を採用した。非磁性のZn-イオンをその中に導入された動かないホールとして扱うことでモデル化し、量子モンテカルロ法を用いてその性質を調べた。

その結果、不純物サイトの周りに反強磁性のスピンドラード相関が強く誘起されることがわかった。不純物濃度が低いときには、そのスピンドラード相関が局在してスピンドラード1/2としてふるまい、帶磁率は、不純物濃度に比例したキュリー定数のキュリー則に従う。しかし、系のバルクな性質を反映する比熱は、依然不純物の入らない場合の性質を示す。ところが、不純物濃度が高くなると不純物周りのスピンドラード相関が互いに重なることで相互作用するようになって非局在化し、系全体の性質もそれに伴って、ギャップのない1次元反強磁性ハイゼンベルグ系に特徴的なBonner-Fisher的な帶磁率の温度変化や、 T -linearな比熱の温度依存性が現われた。実際の系は不純物配置のランダム性のために、



不純物周りにスピン相関が局在、非局在した2つの場合の和として捉えることができ、前頁のような帶磁率が得られる。また不純物の間隔から、スピン相関の局在、非局在が決まると考えることでキュリー定数の濃度依存性の現象論的な表式が得られ、実験、量子モンテカルロの両方の結果に一致する結果を得た。

低濃度域と高濃度域のクロスオーバーは、実験に關係する10K程度の温度領域では、およそ5%程度の不純物濃度で起こる。また高濃度域では、反強磁性の帶磁率が1次元反強磁性ハイゼンベルグ系に較べると弱いながらも、低温で発散を示すことも分かった。このためオーダーが生じるかどうかという定量的な点は、今回の研究範囲内では否定的な結論となった。

SrCu_{2-x}Zn_xO₃の不純物置換効果

東大教養 宮崎智彦
小形正男
吉岡大二郎
東大物性研 M. Troyer
上田和夫

梯子型2本鎖に非磁性不純物を入れると低温で反強磁性が現れることが実験的に知られている。わずかな不純物でギャップが潰れて反強磁性が現れるが、高濃度側で再び反強磁性が抑制される。本研究では以下の2つの点に絞ってQMCによる数値計算をした。

- ・ 交替帶磁率の計算から実験的に得られている相図を理論的に説明
- ・ 帯磁率の濃度・温度依存性からSigrist/Furusakiの理論と比較

不純物の入った2本鎖は図1の通り切斷部分を含み、サイズは1000×2で不純物の入れかたも統計誤差が小さくなるように十分にとってある。交替帶磁率の結果は図2の通りで、1%不純物でもT=0で発散するように見え、3次元性を考慮すれば反強磁性長距離秩序が期待される。そこで3次元性を摂動として取り扱うことにより、平均場近似を採用し3次元の帶磁率χ_{3D}を以下のように決めた。

$$\chi_{3D} = \frac{\chi_{lad}}{1 - J_{3D}\chi_{lad}}, \quad J_{3D} = J_{3D}^0(1 - \delta)^2.$$

ここでJ_{3D}は3次元的なカプリングで、δを不純物濃度としている。反強磁性転移温度、T_nの決定方程式は分母=0 ($\chi_{lad}(T_n) = \frac{1}{J_{3D}}$) で決まる。これを適用して得た相図が図3で、ピークの位置が12.5%と実験の4%に比べて高濃度側にあるが定性的には実験事実を説明できている。切斷のない場合は高濃度側で反強磁性が押さえられていないことから、切斷効果が相図の説明には本質

的なことが分かる。

帯磁率と温度の積の濃度・温度依存性は図 4 の通りである。この図より 1 %では 1 不純物 1 スピントと考えて良い温度領域(50K~100K)が存在するが、5 %以上ではこの描像そのものが成立しない。

図 1



図 2

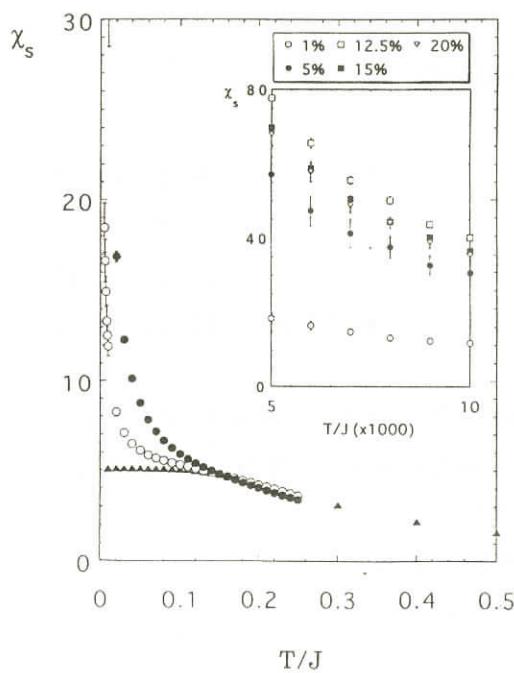


図 3

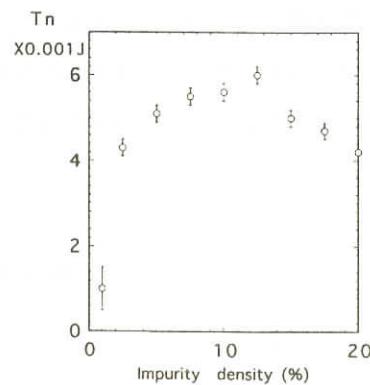
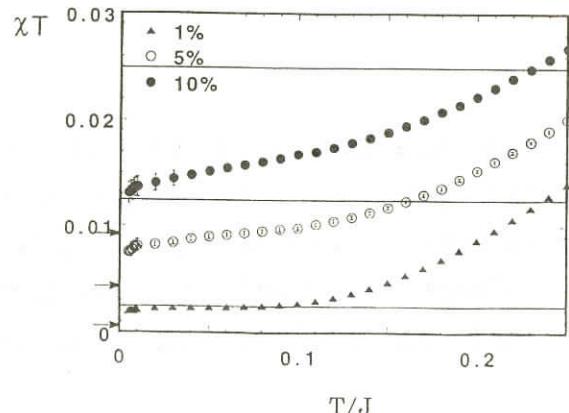


図 4



Transport properties of doped spin gap¹

筑波大学物理工学系 常 次 宏 一

梯子型構造を持つ量子スピン系はスピンギャップを示す典型的なシステムである。この系にホールを少量ドープした時にはホールは束縛対を作つて運動し、スピンギャップは有限のまま保たれる。その結果、電荷励起はgaplessであるが、スピン励起にはギャップのあるLuther-Emery液体状態が実現される。この場合の輸送現象を数値計算を用いて2重鎖梯子上のt-Jモデルについて研究した。

交流電気伝導度とホール係数を周波数 ω と温度 T の関数として有限対角化によって計算した。高温では電気伝導度は $1/\omega$ に比例するインコヒーレントな伝導を示す。ある温度で擬ギャップが開き低周波数領域のウェイトが減り、替わりに幅の狭いDrude的なコヒーレントピークが $\omega=0$ に現れる。この温度と擬ギャップの大きさはスピングャップの大きさとスケールしている。これは、ホールが束縛対を形成し始めて低エネルギー領域のダイナミックスがボゾンによって記述されることを示している。Drudeウェイトとインコヒーレント部分の温度依存性を解析してモット転移のスケーリング理論との比較を行なった。

ホール係数は高温で正でホール濃度の逆数に比例する。温度を下げるとともにホール係数は小さくなり負になる。スピングャップの温度以下のホール係数は、ハミルトニアンのパラメータによって異なる振舞いを示す。それらは、ホールの束縛対と束縛対をつくっていない孤立したホールの2種類のキャリアーを考えて、それらの易動度と濃度の温度変化を考えることによって定性的に説明できる。また絶対零度での高周波ホール係数のホール濃度依存性を調べることによって、強相関の影響がホール濃度の小さい極限で大きく現れていることが分かった。また2個の梯子を弱くつなげることによって、梯子間の相互作用の影響がホール係数にどのように現れるかを調べた。

[†]物性研究所 今田 正俊との共同研究

S=1/2ハイゼンベルグ梯子系の帯磁率、核磁気緩和とスピエンエコー

分子科学研究所 岸根 順一郎*

一連のS=1/2梯子系の静的帯磁率(χ)と核磁気緩和(T_1)は、スピングャップ形成を反映してともに低温でactivation型で死滅する。しかし、低エネルギー励起がS=1マグノンに支配されるという立場から導かれたTroyerらの表式[1]を使って実験データを分析すると、 χ と T_1 から見積もったactivation energy Δ_s, Δ_R は、例えばSrCu₂O₃の場合 $\Delta_s=420\text{K}$, $\Delta_R=700\text{K}$ というように、 $\Delta_s < \Delta_R$ であることが知られている。この理由を考えようというのが我々の初期の動機である。

岸根と福山は、この問題に対しShelton, Nersesyan, Tsvelik[2]によって定式化されたS=1/2ハイゼンベルグ梯子ハミルトニアンのMajorana Fermion表示を使ったアプローチを試みた[3]。Majorana Fermion励起の観点で見ると、S=1/2ハイゼンベルグ系には鎖間反強磁性相互作用 J_\perp に比例したmass m を持つ3重縮退したtriplet 励起に加えて、mass-3mを持つ縮退のないsinglet励起が潜んでいることがわかる。

励起の構造に加えて、 χ と T_1 が異なるスピン相関を拾うことに注意する必要がある。 χ は空間的に拡がったスピン相関と同じ重みで拾うのに対し、 T_1 は超微細相互作用の局所性のゆえに、局所的スピン相関（あるサイトの電子スピинが巡り巡って自分自身とcorrelateする過程）のみを拾

う。この事情を反映して, χ にはtriplet励起のbubbleのみが効くのに対し, T_1 にはtripletとsingletが両方絡んだbubbleも効いてくる。つまり, T_1 -processにはmassの重いsinglet励起が関与するため, 温度変化を無理やり单一のactivation energy Δ_R で合わせようすると, $\Delta_s < \Delta_R$ と見えてしまうのである。実際, SrCu_2O_3 を例にとった我々の理論計算は, single parameterであるmassを $m=440\text{ K}$ にとることにより, 広い温度領域で実験データをよく再現する[3]。また, triplet-singletクロスオーバ温度の見積もりから, 実験では $\Delta_R \lesssim 1.73\Delta_s \approx \sqrt{3}\Delta_s$ となって見えることが予想される。この結果は, 最近の伊藤, 安岡による実験データの整理[4]と良く符合する。

次に, スピンエコー崩壊率 T_{2G} を考える。 SrCu_2O_3 の T_{2G} が低温で飽和し, 非常に弱い温度依存を示すことが実験的に確認されているが[5], 系の相関長さが飽和するから T_{2G} も飽和するとの解釈がとられていた。

これに対して我々は T_{2G} の飽和をMajorana Fermionの対生成過程に帰する解釈を提案する。KK変換を想起すれば, T_{2G} -processは空間的に拡がったスピン相関の実部と結び付いているため, 虚部の高エネルギー側に重みがあればこれも拾う。このため, T_{2G} にはMajorana Fermionの対生成過程が寄与する。対生成過程からの T_{2G} への寄与は低温で飽和するので, T_{2G} の飽和が説明できることになる。

以上をまとめると次のようになる。

1. 実験で見られた χ と T_1 のactivation energyの食い違いは, 系の低エネルギー励起の構造及び両者が拾うスピン相関の違いを考慮すれば単に見かけ上のものに過ぎないことがわかる。実験データを单一のactivation energyで合わせようとするれば, $\Delta_R \lesssim 1.73\Delta_s \approx \sqrt{3}\Delta_s$ となって見える。
2. 低温での T_{2G} の飽和は, Majorana Fermion対生成過程からの寄与の飽和に帰することができる。

文 献

- [1] M.Troyer, H.Tsunetsugu, and D.Würtz: PRB **50** (1994)13515.
- [2] D.G.Shelton, A.A.Nersesyan, and A.M.Tsvelik: PRB **53** (1996)8521.
- [3] J.Kishine and H.Fukuyama: J.Phys.Soc.Jpn. (印刷中)
- [4] Y.Itoh and H.Yasuoka: submitted to J.Phys.Soc.Jpn.
- [5] K.Ishida et.al: PRB **53** (1996)2827.

* Kishine @ims.ac.jp

スピニ子系に於ける格子歪みの効果

東 大 理 谷 本 哲 浩
福 山 秀 敏

最近 $\text{NaV}_2\text{O}_5^{1)}$ という新しいスピニ・パイエルス転移物質が、物性研究所の上田寛らによって発見された。一方 Na を Ca に完全に置き換えた $\text{CaV}_2\text{O}_5^{2)}$ という物質はスピニ梯子系でスピニギャップを有する。どちらもスピニギャップを有する系であるがその起源は全く異なっている。

では今仮に $\text{Na}_{1-x}\text{Ca}_x\text{V}_2\text{O}_5$ という物質があるとしたらスピニパイエルスとスピニ梯子の移り変わりはどうなるだろうか。

我々はスピニ格子結合と鎖間交換相互作用がある 2 本のスピニ鎖に於けるスピニパイエルスの Dimerization とスピニ梯子一重項の競合問題を考察した。スピニ格子結合に比べ鎖間交換相互作用が大きくなればスピニ梯子一重項でスピニギャップが生ずるが、逆の場合にはスピニパイエルスの Dimerization が起こる。

具体的にはスピニパイエルスの Dimerization の基底状態のエネルギーを位相ハミルトニアンにより計算し、一方スピニ梯子一重項の基底状態のエネルギーを Majorana フェルミオン表示を用いて評価した。こうしてスピニ格子結合の大きさを縦軸、鎖間交換相互作用の大きさを横軸にとり、スピニパイエルスの Dimerization を組む状態とスピニ梯子一重項を組む状態の相図を得た。

Ca 置換によってスピニ格子結合の大きさは変わらず、鎖間交換相互作用の大きさが Ca の置換量に比例すると仮定すれば、臨界濃度はおよそ 3% となった。

但しこの近似はかなり粗いものであり、現実には乱れの影響についての考察が必要である。又、磁場の効果も興味深い。

参考文献

- [1] M. Isobe and Y. Ueda: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 1178.
- [2] H. Iwase, M. Isobe, Y. Ueda and H. Yasuoka: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 2397.

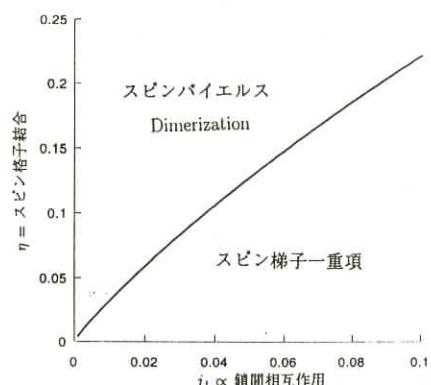


図 1. スピニパイエルスの Dimerization と
スピニ梯子一重項の相図

量子モンテカルロ法による2-, 3-leg Hubbard ladderの超伝導相関

東大・理 黒木和彦

木村敬

青木秀夫

最近、梯子型格子上の強相関系に対する関心が高まっている。これは、偶数本梯子ではスピニギャップが開き超伝導が期待でき、奇数梯子ではギャップが開かず超伝導が期待できない、という理論的予測に発している。銅酸化物における実験では、スピニギャップに対しては確かに二本梯子では開き、三本梯子では開かない¹⁾。また最近、二本梯子で高圧下で超伝導が観測された²⁾。

理論的に超伝導の可能性に関しては、2本梯子にキャリアーをドープした系の研究がなされてきた。梯子上の t - J 模型では有限系に対して密度行列繰り込み群(DMRG)を用いた計算で、 $J/t=1$ において超伝導相関が支配的になることが示されている³⁾。一方、2-leg Hubbard ladder(梯子上のHubbard模型)においては、 U/t が小さい極限での弱結合理論ではスピニギャップの効果により超伝導相関が支配的になることが示されている⁴⁻⁷⁾のに対し、数値結果は弱結合理論と整合していないように見える。即ち、DMRGによる $U/t=8$ の相関関数の計算では、超伝導相関と $4k_F$ 電荷密度波(CDW)相関関数の巾をかけると1になるというreciprocityが破れるという結果が得られている⁸⁾(t - J ladderでは近似的に満たされている)。また量子モンテカルロ計算でも比較的小さな U/t の値に対しても弱結合理論が予言する超伝導相関の増大はみられない⁹⁾。一方、山地らは $U=0$ のときの一体準位に注目し、結合バンドの最高占有レベルと反結合バンドの最低レベルが接近したときに超伝導相関の増大が得られることを指摘した¹⁰⁾。ただし、これは直接対角化の計算なので、サイズは6 rungまでに限られる。

我々はこれらの現状を踏まえて、42 rungまでの2-leg Hubbard ladderにおいて量子モンテカルロ法により超伝導相関を計算した¹¹⁾。その際に $U=0$ での結合バンドと反結合バンドの一体エネルギー準位の整列が結果に影響し、これらの準位が接近しているときは弱結合理論の結果と整合する結果を与えるが、準位がstaggerしていると超伝導相関の増大はないことが分かった。物理的には、有限系でスピニギャップの大きさより一体の準位間隔の方が大きくなってしまうと、有限サイズ効果が弱結合理論の予言する状況を覆ってしまう、と解釈できる。なお、山地らの計算では反結合バンドの最低準位(バンド端)がフェルミ準位に接近するときに超伝導相関の増大がみられたが、我々の結果では、フェルミ準位が反結合バンドの端である必要はないことが示される。

弱結合理論との整合性をより詳しくみるために相関関数の関数形も調べた。 $'U=0\text{のときの関数形} + \text{弱結合理論から予測される } 1/\sqrt{\gamma}$ という形を仮定し最小二乗fitしたところ、計算結果とい一致を得た。これは長距離で弱結合理論と整合していることを示している。

一方、奇数本梯子で本当に超伝導は期待できないのだろうか? 奇数本梯子ではスピニギャップ

は開かないが、正確には、Arrigoniによる3-leg Hubbard ladderに対する繰り込み群の計算¹²⁾が示すように、3つあるスピンモードのうち、一つは確かにギャップレスであるが、残りの二つにはギャップが開いている。我々¹³⁾とSchulz¹⁴⁾は独立にこの場合の相関関数を弱結合理論の範囲内で計算した。その結果、部分的にスピンギャップが開いていることを反映して、3-legの場合にも超伝導の（中央鎖と端の鎖にまたがる）ペア相関が支配的になることを示した。従って、複数のスピンモードが存在するときは、その中にギャップフルのものがあれば超伝導になり得る、ということになる。さらにこの弱結合結果が有限の U/t に対しても拡張されることを示すために、2-legの場合と同様に $U=0$ の一体準位に注意を払った量子モンテカルロ計算を行い、弱結合理論と整合する結果を得た¹⁵⁾。

- 1) K. Ishida *et al.*, Phys. Rev. B **53**, 2827 (1996).
- 2) M. Uehara *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn **65**, 2764 (1996).
- 3) C.A. Hayward *et al.*, Phys. Rev. Lett. **75**, 926 (1995).
- 4) M. Fabrizio, A. Parola, and E. Tossati, Phys. Rev. B **46**, 3159 (1992);
M. Fabrizio, Phys. Rev. B **48**, 15838 (1993).
- 5) H.J. Schulz, Phys. Rev. B **53**, R2959 (1996).
- 6) L. Balents and M.P.A. Fisher, Phys. Rev. B **53**, 12133 (1996).
- 7) N. Nagaosa and M. Oshikawa, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 2241 (1996).
- 8) R.M. Noack, S.R. White, and D.J. Scalapino, preprint (cond-mat/9601047).
- 9) Y. Asai, Phys. Rev. B **52**, 10390 (1995).
- 10) K. Yamaji and Y. Shimo, Physica C **222** 349 (1994); K. Yamaji, Y. Shimo, and T. Yanagisawa, *ibid* **235-240**, 2221 (1994).
- 11) K. Kuroki, T. Kimura, and H. Aoki, Phys. Rev. B, in press (cond-mat/9610038)
- 12) E. Arrigoni, Phys. Lett. A **215**, 91 (1996).
- 13) T. Kimura, K. Kuroki, and H. Aoki, Phys. Rev. B **54**, R9608 (1996).
- 14) H.J. Schulz, preprint (cond-mat/965075).
- 15) T. Kimura, K. Kuroki, and H. Aoki, preprint (cond-mat/9610200).

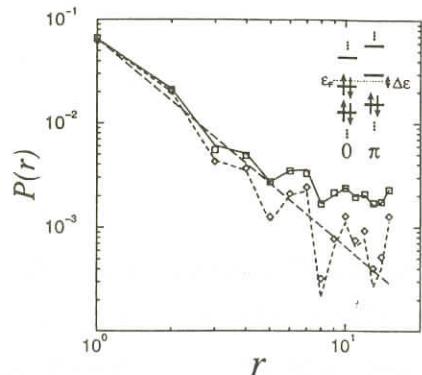


図1. 2-leg Hubbard ladderの超伝導相関を実空間でプロットした結果。30-rung で52電子。 $U=1$ の結果を $t_{\perp}=0.98$ (□) と $t_{\perp}=1.03$ (◇) に対して示した。破線は $U=0$ の結果であり、直線は $1/r^2$ をあらわす。実線は本文中に書いた関数形でのfitである。インセットには $U=0$ における結合バンドと反結合バンドの準位の関係を模式的に示した。

1 次元 t -J 模型, t -J ladder 模型における拡張AB周期とスピンギャップ[†]

東大・物性研 草部 浩一

東大・理 有田 亮太郎

黒木 和彦

青木 秀夫

Ladder模型などのスピン励起にギャップが存在するスピン系にホールドープした場合の伝導特性, 特に超伝導が注目されている。1次元(擬1次元)系では, 超伝導相関の発達を朝永-Luttinger流体論を用いて考察することが多いが, ここでは, 超伝導の必要条件である2電子束縛状態の出現を我々が最近提案した拡張AB周期決定法¹により調べることで, スpinギャップのある場合, ない場合の差異が見い出せるか否かを考察した。

TL流体論では, スpin SU(2)対称性がある場合には, 相関関数の巾が電荷自由度を特徴付ける K_ρ のみで支配され, $K_\rho = 1$ の点が超伝導相境界を与える。一方, Cooper pairingを特徴付けるとされる異常磁束量子化は有限系では $K_\rho = 1$ の点で必ずしも生じないことが知られている。しかし, spectral flowを拡張周期で決定すると, 例えば1次元 t -J 模型では $K_\rho = 1$ の点で拡張周期の変化が系統的に生じていることが分かった。² 同様にして等方的な t -J ladder 模型の拡張AB周期(図.1)を決定したところ, 以下のような結論を得た。但し, 以下では電子数を N , 拡張周期は相互作用のない場合での値 $N_a \Phi_0$ を 1 として測る。(N_a は1次元方向の系の長さ, Φ_0 は磁束量子。)

i) 1次元 t -J 模型 (スpinギャップなし) :

normal相での1/2周期からsuper相での1/4周期に $K_\rho = 1$ 近傍で変化する。但し, $J=0$ ($U=\infty$ Hubbard 模型)の場合には周期1。

ii) t -J ladder 模型, $2 < N < N_a/2$ (スpinギャップなし) : normal相での1/2周期からsuper相での1/4周期に $K_\rho = 1$ 近傍で変化する。但し, $J=0$ ($U=\infty$ Hubbard ladder)の場合には1/2周期。

iii) t -J ladder 模型, $N=N_a/2$: 拡張周期は, Φ_0 に固定されている。

iv) t -J ladder 模型, $N_a/2 < N < N_a$ (スpinギャップあり) : normal相からsuper

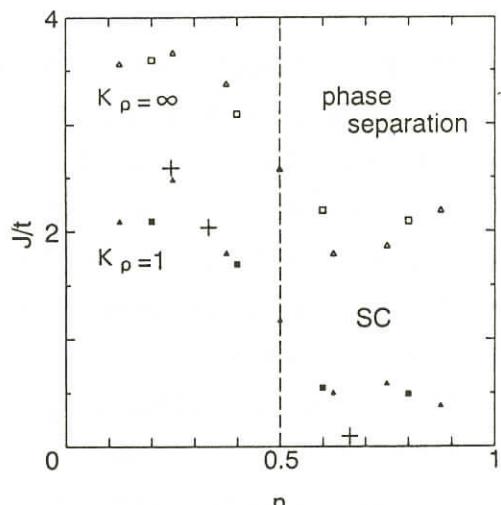


図.1 t -J ladder 模型の予想される相図。TL理論から得られた $K_\rho = 1$ の点 (■はHayward and Poilblanc,³ ▲はSano⁴による)の近傍で, spectral flowにgapが生じ(+で示した), $2 < N < N_a$ では拡張AB周期の変化を生じる。

相にかけて1/2周期となっている。但し、 $K_\rho = 1$ を与える J_c よりもかなり小さい J_c において spectral flow に gap opening (レベルの乗り移り) が観測された。 $J=0$ ($U=\infty$ Hubbard ladder) の場合には1/2周期である。

但し、この様な拡張周期の特徴が一般に強相関模型で現れるかは今後の課題である。

参考文献

- 1) K. Kusakabe and H. Aoki, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 2772 (1996).
- 2) R. Arita, K. Kusakabe, K. Kuroki and H. Aoki, preprint (cond-mat 10199).
- 3) C.A. Hayward and D. Poilblanc, Phys. Rev. B **53**, 11721 (1996).
- 4) K. Sano, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 1146 (1996).

Nearly critical ground state of LaCuO_{2.5}

東大物性研 M. Troyer

Magnetic susceptibility measurements of the coupled ladder compound LaCuO_{2.5} show spin-gap features with a large spin gap [Z.Hiroi and M.Takano, Nature **377**, 41 (1995)]. NMR [S.Matsumoto *et al.*, Phys. Rev. B **53**, 11942(1996)] and μ SR measurements [R.Kadono *et al.*, preprint] show indications for a long range ordered ground state (LRO).

We have simulated the coupled ladder system by Quantum Monte Carlo (QMC). Using a continuous time cluster algorithm [B.B.Beard and U.-J. Wiese, preprint] we can simulate spin systems with 8000 spins without any problems.

At a critical ratio of the interladder to intraladder coupling $(J'/J)_c \approx 0.12$ we find a quantum phase transition between a Néel ordered and a disordered state. At criticality the uniform susceptibility behaves as $\chi(T) = aT^2$ with a universal prefactor. The experimentally detected Néel temperature of 110K is found at $(J'/J)_c \approx 0.13$, very close to the quantum critical point.

This fact leads to the following explanation for the experimental data. At high temperatures the spins are free, showing a Curie-like susceptibility. At temperatures of the order of the intra-ladder coupling $J \approx 1300$ K short range correlations develop in the ladders. The susceptibility shows a steep pseudo-gap like drop, similar to uncoupled ladders.

At temperatures below the inter-ladder coupling the properties of the ground state can finally be seen. For small couplings, below the critical value, there is an exponential decay caused by the spin gap. At criticality $\chi(T) = aT^2$ and in the nearly critical ordered phase

$\chi(T) = \chi_0 + aT^2$, with a very small χ_0 .

The measured susceptibility data shows a steep drop, and then at low temperatures a Curie - like divergence caused by impurity spins. As our theoretical investigations show, the steep drop in the susceptibility is caused by the pseudo - gap of the ladders. In order to probe for the existence of a real gap, the low - T asymptotic form below $J' \approx 140\text{K}$ is needed. But there the experimental data is dominated by the impurity contributions. We show that the data can be fitted well by a sum of a Curie - Weiss term for the impurity and the $\chi_0 + aT^2$ form for a nearly critical ordered system. Thus we have shown that the measured susceptibility data is consistent with the nearly critical ordered ground state that was observed in magnetic resonance measurements.

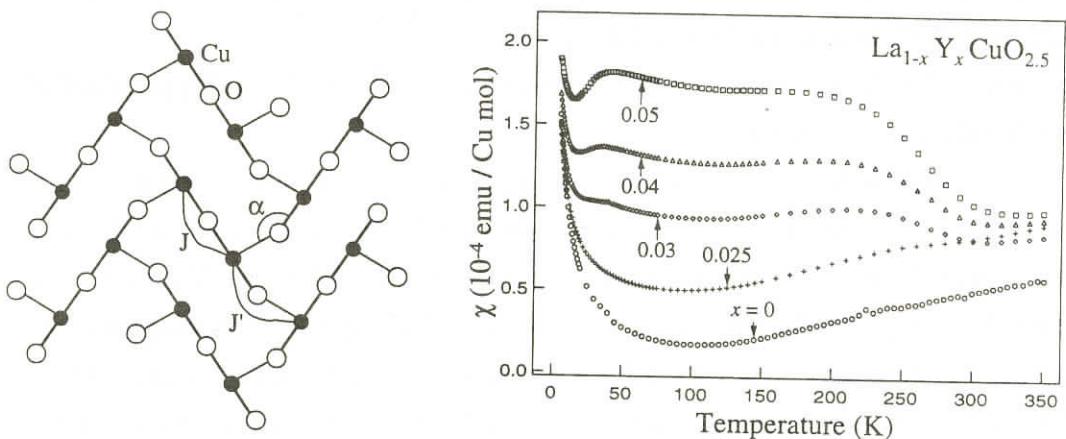
As a conclusion we find that magnetic resonance measurements are better than susceptibility measurements in detecting spin gaps, as they do not suffer so much from impurity effects.

LaCuO_{2.5} 関連物質と新しい梯子化合物の探索

京大化研 広井 善二

LaCuO_{2.5}は、比較的強い3次元性を示す梯子化合物である。発見当初、その静帯磁率が明確な熱活性型の温度依存性を示し、低温での正味の帯磁率の値が非常に小さいことから、SrCu₂O₃と同様なスピニ液体状態が実現されていると考えられたが、その後のNMR, μ SR実験から、120K以下で長距離磁気秩序を示すことが明らかとなった。下左図に結晶構造の模式図を示す。梯子の軸は紙面に垂直で、一つの梯子内の2つの銅イオンのスピン間には大きな反強磁性相互作用Jがあると考えられる。一方、一つの梯子の端の酸素イオンは、隣の梯子の銅イオンの頂点酸素となっており、これを介した、比較的弱い超交換相互作用J'が存在する。NormandやTroyerらによる計算の結果では、J'は反強磁性的でJ'/J=0.12と見積もられている。彼らは、この値がスピニ液体状態とネール秩序の間の量子臨界点に近いことから、一見矛盾する、帯磁率のギャップ的な振る舞いと長距離磁気秩序の存在を説明できるとしている。一方、最近溝川は、XPS測定の解析から、J'は強磁性的で、J'/J<0.1としている。J'の符号は、銅-酸素-銅の結合角 α に強く依存すると予想される。 α が180度の時は、銅のd_{x2-y2}軌道は梯子間で直交するので強磁性的で、 α が小さくなると反強磁性的な相互作用に移行していくと考えられる。LaCuO_{2.5}の実際の角度は152度である。ここで興味深い実験は、Laサイトの元素置換によって α を調整することである。もし、J'が強磁性的なら、 α を大きくすると、梯子間相互作用がより大きくなり、一方、J'が反強磁性的なら逆の傾向が

現れると期待される。実際にYを5%置換すると、 α は約3度大きくなり、この時、右下図に示すように、ネール温度が300Kまで上昇し、同時に弱強磁性が現れる。この事実は、間接的に、もとのLaCuO_{2.5}でのJ'が強磁性的であったことを示している。一方、Laを全てNdやPrで置き換えることが可能で、この時、 α は小さくなる傾向を示し、系がより1次元的になっていることが予想される。適当な元素置換によって、J'/Jを調整することにより、量子臨界点を越えてスピン液体状態へ移行できれば、非常に興味深い。また、RCuO_{2.5}(R=La, Nd, Pr)は、Sr置換によって梯子上のホール量を調整できる系であるが、ドープした時に現れる金属状態については、未だ良く分からぬ点が多い。スピン梯子の物性と梯子間相互作用の効果、及び、ドープしたホールの挙動を調べる上で面白い系である。



ホールをドープした梯子型La_{1-x}Sr_xCuO_{2.5}の電子状態

東大理 溝川貴司

大友啓次

藤森淳

京大化研 小林齊也

広井善二

高野幹夫

ドープされたスピンラダー系として注目されている La_{1-x}Sr_xCuO_{2.5} [1]の電子状態を光電子分光、X線吸収分光を用いて調べた。多結晶の試料を超高真空中でやすりがけすることにより清浄表面を得た。X線吸収分光の測定は高エネ研PFのBL-2Bにて、全電子収量法により行った。価電子帯の光電子スペクトル、O1s吸収端のX線吸収スペクトルでは、ドーピングとともに母体のギャッ

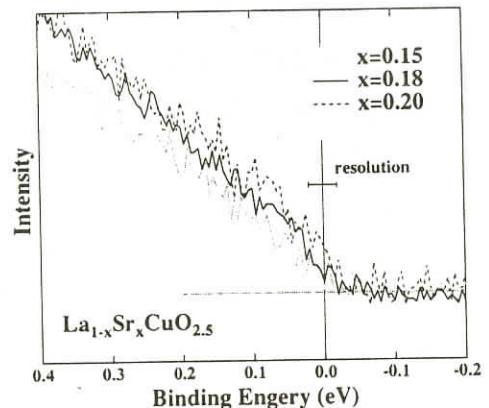
プロ中にスペクトル強度が移っていく様子が観測されるが、このドーピングによるスペクトルの変化は $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ のそれに類似している[2,3]。

$\text{Cu}2p$ 内殻の光電子スペクトルのクラスター・モデルによる解析から、 $\text{LaCuO}_{2.5}$ の電荷移動エネルギーが $\Delta = 1.0 \text{ eV}$ と見積もられ、これは La_2CuO_4 とほぼ同じ値である。この電子状態を記述するパラメーターを入力としてモデル Hartree - Fock 計算を行った結果、 $\text{LaCuO}_{2.5}$ では梯子内の Cu スピン間の超交換相互作用は反強磁性的で 125 meV 程度であるのに対して、梯子間では強磁性的で 10 meV 程度であることが示唆された。さらに、Cu - O - Cu の結合角が 180° から小さくなっていくにつれて、この梯子間の相互作用が小さくなしていくことが予測された。

フェルミ準位近傍の光電子スペクトルでは、 $x = 0.20$ でフェルミエッジが観測されたが、フェルミ準位でのスペクトル強度は $\text{La}_{1.8}\text{Sr}_{0.2}\text{CuO}_4$ よりも抑えられている。 $x = 0.18$ では明確なフェルミエッジは観測されず、上図にあるように擬ギャップを持つようなスペクトルが得られた。 $x = 0.15$ ではこのフェルミ準位近傍の構造は消失している。フェルミ準位が擬ギャップの中央に位置していると仮定すれば、 $x = 0.18$ での擬ギャップの大きさは 60 meV 程度と見積もられ、これは $J/2$ 程度の大きさである。Troyer, Tsunetsugu, and Rice によって t -J ラダーモデルで得られているギャップの大きさ ($2J/3$) に近い値となっており[4]、フェルミ準位近傍のスペクトルは梯子型の構造に由来するものである可能性を示唆している。

参考文献

- [1] Z. Hiroi and M. Takano, Nature **377**, 41 (1995).
- [2] C. T. Chen et al., Phys. Rev. Lett. **66**, 104 (1991).
- [3] A. Ino et al., unpublished.
- [4] M. Troyer, H. Tsunetsugu, and T. M. Rice, Phys. Rev. B **53**, 251 (1996).



図： $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{2.5}$ のフェルミ準位近傍の光電子スペクトル

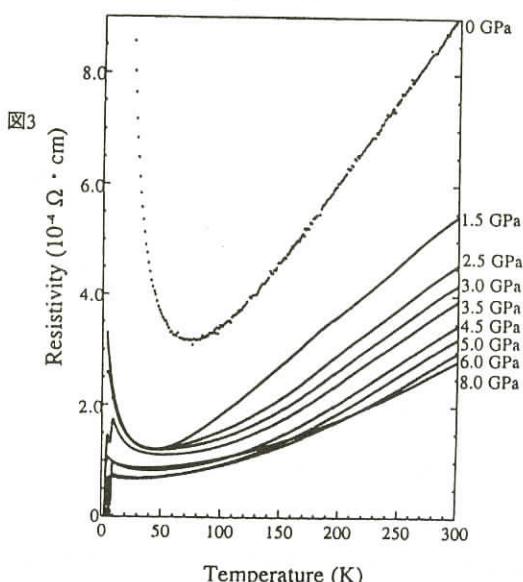
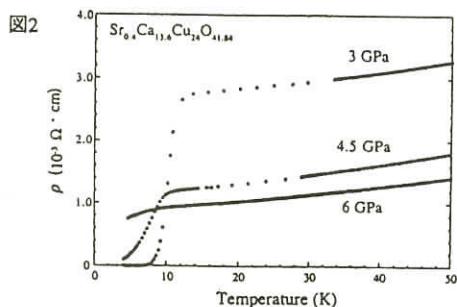
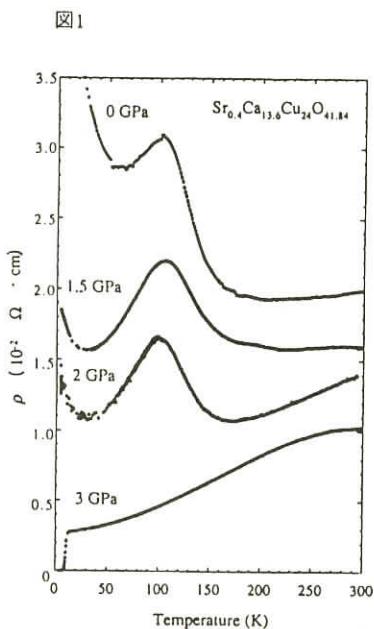
梯子格子におけるスピニギャップと超伝導

青学大理工 上原政智
秋光純

梯子型格子とは2本のS=1/2ハイゼンベルグ鎖が梯子状に並んだ構造をしており、丁度一次元と二元を結ぶ中間的な構造である。梯子型格子は高温超伝導体の候補物質として最近盛んに研究されている。

梯子型格子を持つ構造として(Sr,Ca)₁₄Cu₂₄O₄₁という物質が存在する。この物質は2本足の梯子型格子から成る層、(Sr,Ca)層及び一次元のチェーンから成る層が積層した構造をもっている。初めに我々は理論で予想されているスピニギャップの存在を確認するために Sr₁₄Cu₂₄O₄₁組成の単結晶試料に対して非弾性中性子散乱の実験を行った。この実験からQ=(hk1/2)の位置で420Kのスピニギャップが存在することを確認した。京大化研の東らも同様の実験を粉末試料で行い、同じ様な結果を得ている。

またこの物質は組成式から明らかなようにCuの形式価数は2ではなく2.25である。つまり予めキャ



リアーがドープされている系である。しかしながら電気抵抗の温度変化は半導体的であって超伝導は観測されない。以前からこの系ではCaの量を多くすると電気伝導性がよくなることが知られていた。しかしながら酸素1気圧中で合成できるCaの固溶限界の試料 $\text{Sr}_4\text{Ca}_{10}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ でも室温での電気抵抗値は $10^{-3} (\Omega \cdot \text{cm})$ 程度まで下がるもの金属的伝導を示さない。我々はHIP炉を用いた $P(\text{O}_2)=400\text{atm}$ の高圧酸素下における合成を試み $\text{Sr}_{0.4}\text{Ca}_{13.6}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41.84}$ までの試料の合成に成功した。この試料の電気抵抗の振舞いは150K程度までは金属的な伝導を示すが、プロードなピークを示した後、60K以下では半導体的に上昇してしまう。我々はこの試料にたいして圧力下での電気抵抗の温度変化の測定を行った。その結果を図1に示す。3GPaまで加圧すると金属的となり12Kで超伝導転移を示す。ゼロ抵抗は9Kである。図2に3GPa以上に加圧したときの電気抵抗の温度変化を示す。4.5GPaまで加圧すると $T_c(\text{onset})$ は9Kまでさがる。さらに6GPaまで加圧すると4.2Kまで超伝導転移は観測することはできなかった。

図3に $\text{Sr}_{2.5}\text{Ca}_{11.5}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ 単結晶試料のladderに平行な方向の電気抵抗率の温度変化を示す。Ca量が少ないと反映して $\text{Sr}_{0.4}\text{Ca}_{13.6}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41.84}$ よりも超伝導が最適化される圧力は高く4.5GPaである。4.5GPaでの室温での電気抵抗率の値は $3.5 \times 10^{-4} (\Omega \cdot \text{cm})$ である。これは $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ $x=0.15$ とほぼ同じ値である。また常伝導状態の振舞いは加圧とともに T -linearなものから T^n に変化してゆくことが観測された。

NMR/NQR Studies on Spin Gaps in Ladder Compounds of $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$
and $\text{Sr}_{14-x}\text{A}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ ($\text{A}=\text{Ca}, \text{Y}, \text{and La}$)

K. Kumagai, S. Tsuji, Y. Furukawa, M. Kato*, and Y. Koike*

Department of Physics, Graduated School of Science, Hokkaido University, Sapporo 060,
Japan,

*Department of Applied Physics, Faculty of Engineering, Tohoku University, Sendai
980-77, Japan

In order to obtain insights into the physics of the high - T_c superconductivity, we have investigated the spin ladder system of $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$, which forms a CuO_2 chain, a Cu_2O_3 ladder and Sr layer. Carrier doping effects on spin dynamics of the ladder and the chain sites in $\text{Sr}_{14-x}\text{A}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ ($\text{A}=\text{Ca}, \text{Y}$ and La) are investigated by Cu - NMR and NQR.

The energy gaps in the spin excitation spectra (spin gap) are confirmed to be $\Delta=140\text{K}$ for the CuO_2 chain and $\Delta=470\text{K}$ for the Cu_2O_3 ladder site of $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$. As shown in Fig. 1, the

spin gap for the chain site does not change with Ca, Y(up to $x=3$) and La(up to $x=1$) substitutions for Sr in $\text{Sr}_{14-x}\text{A}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$. On the other hand, the spin gap for the ladder increases with the Y^{3+} - and La^{3+} -substitutions for Sr^{2+} , and decreases with increasing x for the Ca^{2+} -substitution. The spin gap for the ladder seems to collapse around $x \sim 13$ of the Ca-substitution. Hole-doping effects on the spin gaps for the ladder configuration are discussed in terms of magnon and hole-depairing excitations for the spin $S = 1/2$ ladder.

In addition to the Cu ladder system, ^{31}P -NMR is employed to study low energy spin excitations in both $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$ and $\text{VO}(\text{HPO}_4)0.5\text{H}_2\text{O}$, in which $\text{V}^{4+}(S=1/2)$ ions have a ladder configuration and dimer one, respectively. The spin gaps of an order of $30 \sim 75\text{K}$ are confirmed. Figure 2 shows the distinct difference of the T -dependence of $(T_1 T \cdot K)^{-1}$ between the two systems, namely, the T -independent behavior in the dimer system, and the large decrease below temperatures of the order of the spin gap in the ladder system. The result indicates that a spin gap is independent of wave vector q for the dimer system, while the q -dependent spin gap for the ladder system results that $\text{Im } \chi(q=Q)$ decreases more rapidly than $\text{Im } \chi(q=0)$ with decreasing temperature below $T < \Delta(60\text{K})$.

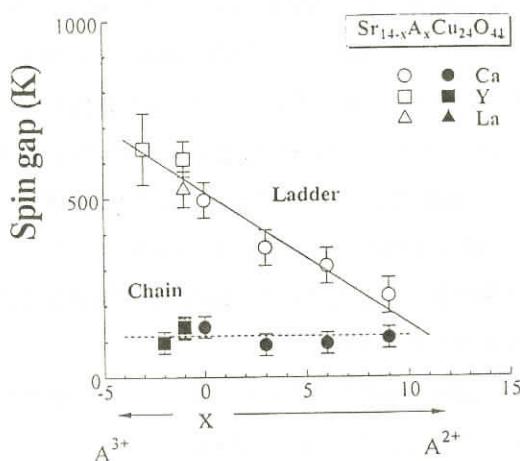


Fig. 1. x -dependence of spin gaps in $\text{Sr}_{14-x}\text{A}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ ($\text{A}=\text{Sr}, \text{Y}$ and La).

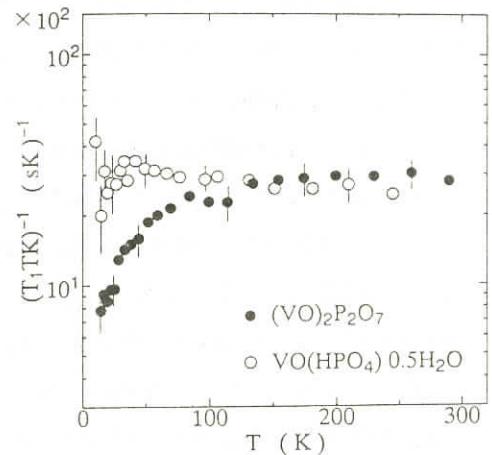


Fig. 2. Temperature dependences of $1/(T_1 T \cdot K)$ in $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$ and $\text{VO}(\text{HPO}_4)0.5\text{H}_2\text{O}$.

Sr₁₄Cu₂₄O₄₁系におけるキャリヤードーピングとスピニギャップ

-電気抵抗、熱電能、帯磁率から見て-

東北大工 小池洋二
加藤雅恒
野地尚
塩田和教
足立匡

通称二本足梯子格子と呼ばれるCu₂O₃面と一次元的なCuO₂鎖から成るSr_{14-x}A_xCu₂₄O₄₁系(A=Ca,Ba,Y,La)について、電気抵抗、熱電能、帯磁率の測定から以下のことがわかった。

①A=Caの場合、xの増加につれて伝導性がよくなり、x=6-8で金属-絶縁体転移が起きる。^{1, 2)}
A=Y, Laの場合、X=5-6ですべてのCuは+2価になり、梯子にも鎖にもホールがいなくなる。
②bond-valence-sumsの計算から、x=0では梯子にも少量のホールが居るがほとんどのホールは鎖に居て局在しており、Ca置換によってホールは鎖から梯子に移動することがわかった。これは、③で述べる帯磁率の結果とも矛盾しない。すなわち、この系の伝導は梯子が担っていると結論できた。²⁾

③Ca置換とBa置換の実験により、x=0で80K付近に観測される帯磁率のプロードなピークは鎖のスピニギャップ形成によるものであることがわかった。^{1, 2)} 帯磁率から求めた鎖のスピニギャップの大きさは、NMRのT₁から求めたものとほぼ一致する。³⁾ 梯子のスピニギャップ形成によるピークは700K以上の高温に在ると推測される。⁴⁾ また、Y置換やLa置換によってスピニ数が増加し、鎖内のスピニ間相互作用は反強磁性的なものから強磁性的なものに変化し、鎖のスピニギャップは消え、x=5-6では長距離秩序（鎖内強磁性、鎖間反強磁性）が出現することがわかった。すなわち、下図のようなスピニ構造をもっていると結論できた。したがって、鎖内では最隣接相互作用が強磁性的で、第二隣接相互作用が反強磁性的であると推測される。^{5, 6)}

④CuサイトをNiやZnで部分置換したが、Sr(Cu_{1-x}Znx)₂O₃で観測されているような反強磁性的な長距離秩序は現れなかった。NiやZnは梯子ではなく鎖に入った可能性がある。

⑤電気抵抗率ρをdln ρ / d(1/T)対Tプロットすると、ピークとディップが観測された。前者は梯子のホールのオーダリングあるいは局在と、後者は鎖のスピニギャップ形成と関係付けられるかもしれない。

参考文献

- 1) M. Kato, H. Chizawa, Y. Koike, T. Noji and Y. Saito, Physica C235-240 (1994) 1327.
- 2) M. Kato, K. Shiota and Y. Koike, Physica C258 (1996) 284.
- 3) S. Tsuji, K. Kumagai, M. Kato and Y. Koike, J. Phys. Soc. Jpn. 65 No.11 (1996).

- 4) M. Kato, K. Shiota, S. Ikeda, Y. Maeno, T. Fujita and Y. Koike, Physica C**263** (1996) 482.
- 5) M. Kato, T. Adachi and Y. Koike, Physica C**265** (1996) 107.
- 6) M. Kato, K. Shiota, T. Adachi and Y. Koike, Czech. J. Phys. **46** (1996) S5, 2701.

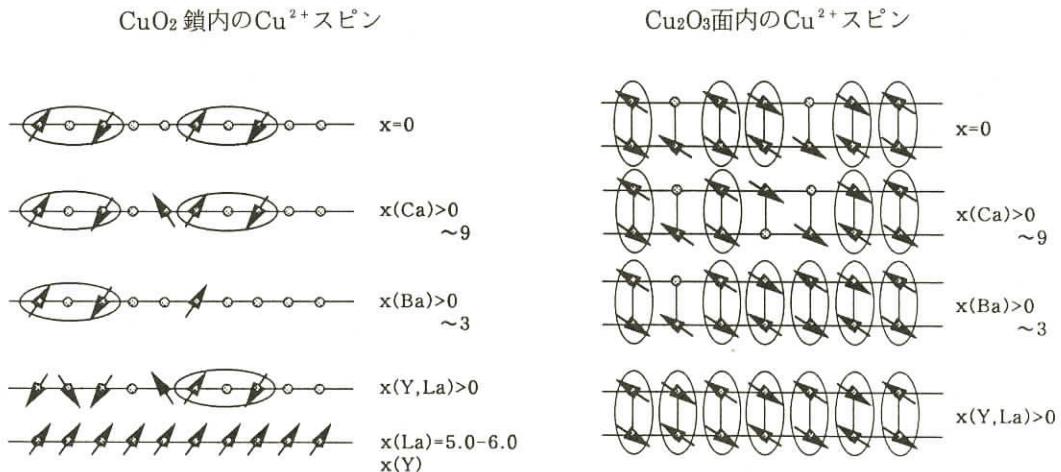


図. $\text{Sr}_{14-x}\text{A}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ (A=Ca, Ba, Y, La)における CuO_2 鎖内と Cu_2O_3 面内のスピン構造。
▲はスピン(Cu^{2+}), ○はホール(Cu^{3+}), (●)はスピン一重項ペアを表す。

梯子スピン系 $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ のキャリアドーピング

—結晶 $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ ($x=9, 11.5$)の ^{63}Cu NMRによる研究—

阪大基礎工, 科技団	真 岸 孝 一
阪大基礎工	松 本 真 治
	石 田 憲 二
	北 岡 良 雄
	朝 山 邦 輔
青学大理工	上 原 政 智
	永 田 貴 志
	秋 光 純

$\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ は、構造内に二本足梯子格子および一次元鎖を含んでおり、SrサイトをCa原子で置換すると二本足梯子格子内にホールが注入されることが知られている。二本足梯子格子の

基底状態はスピン一重項でスピンギャップが存在し、ホールの注入によって超伝導が出現することが理論的に示唆されており、また、最近では実験的にも確認されて非常に注目を集めている。

我々は、単結晶 $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ ($x=9, 11.5$) の ^{63}Cu NMR ($H \sim 11\text{T}$, $H \parallel b$)から、梯子格子へのキャリアードーピングに対するスピンギャップの大きさの変化等について調べている。

図1に、NMR線巾の温度変化を示す。 $T \sim 90\text{K}$ 付近のピークは、帯磁率にも見られるように、鎖サイトのスピンの一重項形成に起因しているものと思われる。一方、 $T \sim 60\text{K}$ 付近から降温につれて線巾が急激に広がり始める。低温での半値全巾が約1kOeにも達することから、梯子格子内のスピンが寄与しているものと考えられる。また、挿入図に示すように、その温度付近で、核スピニスピン緩和率($1/T_2$)が発散する傾向にある。これは、ホールの局在に伴ってホール近傍にスピンが生じ、そのスピンのゆらぎのslowing downによるものと思われる。すなわち、この温度付近($T \equiv T_{localization}$)で梯子格子内のホールの局在化が起こっているものと考えられる。

図2に、ナイトシフト($K_s \propto T^{-1/2} \exp(-\Delta_{K.S.}/T)$)および核スピニスピン緩和率($1/T_1 \propto \exp(-\Delta_1/T_1/T)$)から評価したスピンギャップの大きさの x 依存性を示す。両者には定量的な違い($\Delta_1/T_1/\Delta_{K.S.} \sim 1.7 - 1.8$)があるものの、定性的にはSrサイトのCa置換によってスピンギャップの大きさが急激に減少することが分かる。しかし、Ca置換量の多い領域ではその割合が小さく、超伝導が出現する領域においてスpinギャップが有限に残っている可能性もあり、非常に興味深い。

また、電気抵抗($I \parallel a$)の振舞いは、降温に伴って T -linearな金属的から半導体的に変化していくが、 $T \sim \Delta_{K.S.}$ 付近で T -linear 則からズレはじめ、また、 $T \sim T_{localization}$ 付近から抵抗率が急激に上昇しており、輸送現象の振舞いとスpinギャップやホールの局在化とが深く関係している。

今後は、 $\text{Sr}_{2.5}\text{Ca}_{11.5}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ において圧力下($\leq 2\text{GPa}$)での実験を行い、超伝導の出現直前のスpinギャップの有無等の磁気的性質について調べ、さらに、より高圧下での実験の開発もあわせて行っていく予定である。

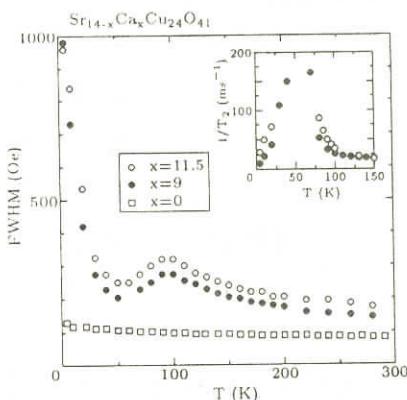


図1. NMR 線巾および $1/T_2$ の温度変化

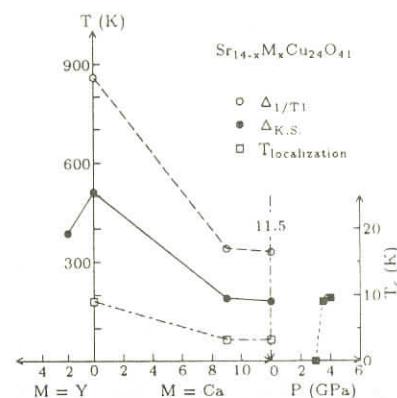


図2. スpinギャップの大きさの x 依存性

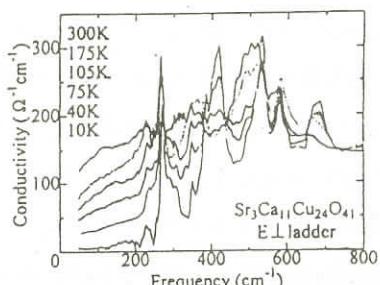
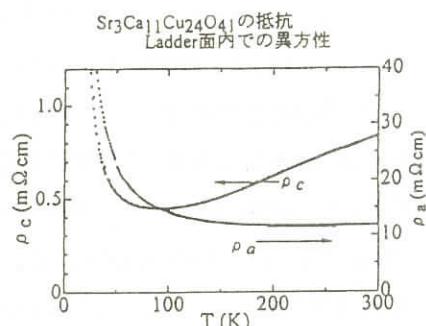
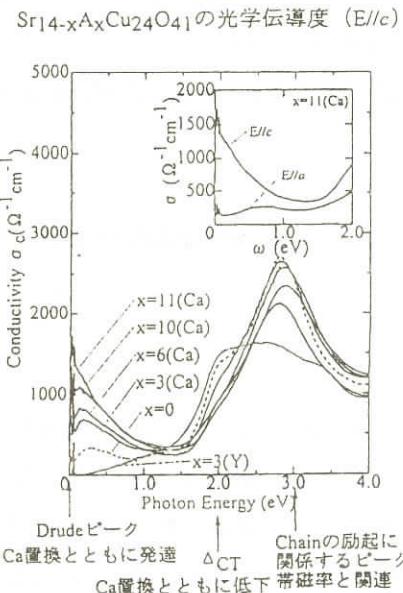
梯子系Sr_{14-x}Ca_xCu₂₄O₄₁におけるドープされた正孔の対形成

東大・工 本山直樹
長船辰昭
永崎洋
内田慎一

2本足梯子系は、基底状態にスピニギャップを持ち、また、この系にキャリアを注入することにより超伝導の発現が示唆されている。Sr₁₄Cu₂₄O₄₁は、正孔を注入された2本足のCu₂O₃梯子と辺共有のCuO₂鎖を持ち、また、SrをCaで置換することにより梯子に正孔を注入できる系である。上原らは、このCa置換された系($x(\text{Ca})=13.6$)で、高圧下においてTc=12Kの超伝導を観測した¹⁾。本研究では、銅酸化物高温超伝導体との比較の意味でも興味深いこの系の輸送特性、具体的には、電気抵抗、光学伝導度を単結晶を用いて測定した。

SrをCaで置換していくことにより、系の抵抗率は減少していく。また、光学スペクトルの測定では、2.0 eVにあるCT励起によるピークから、低エネルギーのDrudeピークへとスペクトル強度が移動していく。この系のCT Gapの大きさやスペクトル強度の移動の大きさ(～t)が高温超伝導体と同程度であることから、これは梯子サイトのホール量が増大した結果であることがわかる。

もっとも電気伝導のよいサンプルであるx(Ca)=11の抵抗率は、梯子に平行な方向(/c)で～100K以上の温度で正の温度依存性の金属的伝導を示し、大きさは室温で800 $\mu\Omega\text{cm}$ 程度である。これは高温超伝導体におけるLSC($x=0.12$)と同程度の抵抗値である。また、梯子面内で梯子に垂直な方向(/a)では、梯子に平行な方向(/c)に比べて1桁以上大きく、室温以下で絶縁体的な電気伝導を示す。また、光学伝導度の測定では、梯子に平行な方向では低エネルギーにDrudeピークを持つが、垂



直な方向ではそれがない。このことは、系の1次元性を強く示唆する。また、梯子に垂直な方向の伝導度では、 400cm^{-1} (500K)程度のPseudo Gapが観測された。この起因としては、梯子の電気伝導に寄与しているのが正孔対であり、梯子間のホッピングの際にはこれをこわして飛ばなければならず、このときに必要なエネルギー(Charge Gap Energy)がPseudo Gapとして表れているものと思われる。

これらの結果から、梯子の電気伝導は正孔対が担っている可能性がある。また、この系の梯子面内の異方性は、高温超伝導体の面内・面間の異方性と同様の振る舞いを示しており、この系の1次元性が示唆される。

- 1) M. Uehara et al., J. Phys. Soc. Jpn., **65**, 2764 (1996).

高温超伝導体とスピノン・ラダー系超伝導体の高圧下の磁気抵抗とホール効果

東大・物性研 中西剛司
毛利信男

スピノンギャップの存在が、理論の予測どおりに2本足ラダー物質で実験的に確認されて以来[1]、もう一つの予測である超伝導の有無を確認するためにドープされた2本足ラダー物質、とくにSr_{14-x}Ca_xCu₂₄O_{41+δ}系についての研究が精力的に行われてきた。ごく最近われわれは、青学大秋光教授グループと共同でSr_{0.4}Ca_{13.6}Cu₂₄O_{41.81}が高圧下(3.0~4.5GPa)で超伝導($T_C \sim 12\text{K}$)になることを見出した[2,3]。今回報告したのは、それに引き続いて行った電気抵抗率、ホール効果、磁気抵抗の2.0GPaまでの結果である[4]。

電気抵抗の温度依存性から、100K付近に見られたhumpは圧力で低温側にシフトし、また、このhumpの温度 T_{\max} と超伝導転移温度 T_C の圧力効果は、 $d\ln T_{\max}/dP \sim d\ln T_C/dP$ となって、humpの原因がNbSe₃[5]のようにCDWの可能性があることを指摘した。ホール係数 R_H の圧力からは、 $dR_H(77\text{K})/dP > 0$, $dR_H(200\text{K})/dP < 0$ となっており、低温側と高温側で電子構造が異なっていることを示している。また、 $dR_H(200\text{K})/dP \sim -2.7\%/\text{GPa}$ であり、hole-dopedの高温超伝導体(HTSC)の場合の $\sim -10\%/\text{GPa}$ に比べて小さいこともわかった。さらに、100K以下で正の磁気抵抗(磁場の2乗に比例し、Kohler ruleを満たさない)が現れることがわかった。また、この磁気抵抗の温度依存性が、1次元のラダーに対する帶磁率の式[6]を使って、 $\Delta\rho/\rho_0 = 1 - \chi(T) = 1 - \alpha T^{-1/2} \exp(-\Delta/T)$, $\Delta = 91.5\text{K}$ の形でfitできることを見出した。これは、100K付近からmobile carrierがspin-singlet状態に落ち込みはじめ、その磁場に対する応答として磁気抵抗が現れ、その状態数は低温にいくほど増えて磁気抵抗も大きくなると考えることができる。この考察が正しいなら、mobile carrierのpairingのpre-formationがすでに100K付近で起こっていることになり、なん

らかの条件を見出せばこの物質が100K付近で超伝導になる可能性があることを示唆する。このラダー系を1次元のdoped spin-gap系と考え、HTSCに見られるpseudo-gapをspin-gapと考えれば、HTSCを2次元のdoped spin-gap系と考えることができる。この立場で、HTSCに見られる磁気抵抗を、under-doped YBCO($T_C \sim 60\text{K}$)の場合[7]について考察してみた。その結果、NMRから求められたspin帯磁率の温度依存性の実験結果[8]を使って、狭い温度範囲であるが、 $\Delta\rho/\rho_0 = 1 - \chi(T)$ と書けることがわかった。さらに $\chi(T) = \alpha \exp(-\Delta/T)$, $\Delta \sim 110\text{K}$ となってちょうど2次元の帯磁率の式になっていることもわかった。

現在単結晶を使った実験を行っており、また高圧下でのNQR測定も計画しており、この磁気抵抗がdoped spin-gap系に特有のものでspin-singlet状態に起因するのかどうか確かめているところである。

この研究は、日大文理の高橋博樹先生、青学大理工の永田貴志氏、上原正智氏、秋光純先生、NTT基礎研の木下恭一氏との共同研究である。また、これらの実験結果について有益な議論をしていただいた、東大物性研の紺谷浩氏、今田正俊先生、筑波大物工の常次宏一先生に感謝します。

参考文献

- [1] E.Dagotto and T.M.Rice, Science 271 (1996) 618.
- [2] M.Uehara, T.Nagata, J.Akimitsu, H.Takahashi, N.Môri and K.Kinoshita, J. Phys. Soc. Jpn. 65 (1996) 2764.
- [3] H.Takahashi, N.Môri, T.Nakanishi, T.Nagata, M.Uehara, J.Akimitsu and K.Kinoshita,to be published in proceedings of ICPTM - 96.
- [4] T.Nakanishi, N.Môri, H.Takahashi, T.Nagata, M.Uehara, J.Akimitsu and K.Kinoshita, submitted to Solid State Commun.
- [5] M.N.Reguerio, J.-M.Mignot and D.Castello, Europhys. Lett. 18 (1992) 53.
- [6] M.Troyer, H.Tsunetsugu and D.Würtz, Phys. Rev. B50 (1994) 13515.
- [7] J.M.Harris, Y.F.Yan, P.Matl, N.P.Ong, P.W.Anderson, T.Kimura and K.Kitazawa, Phys. Rev. Lett. 75 (1995) 1391.
- [8] M.Takigawa, A.P.Reyes, P.C.Hammel, J.D.Thompson, R.H.Heffner, Z.Fisk and K.C.Ott, Phys. Rev. B43 (1991) 247.

CaV₄O₉のスピニギャップ

—中性子散乱とNMR—

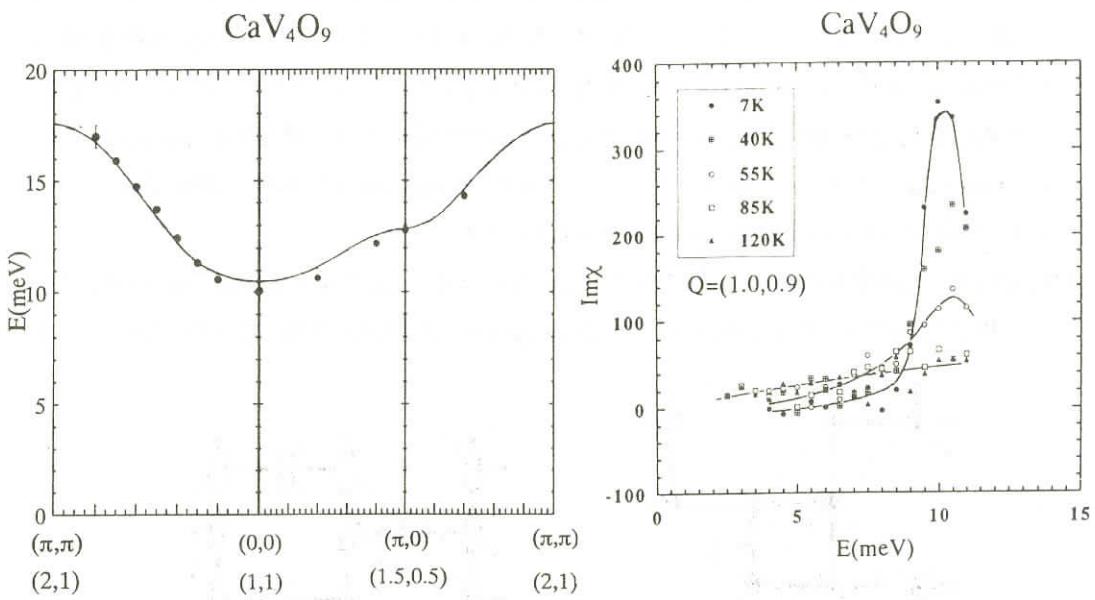
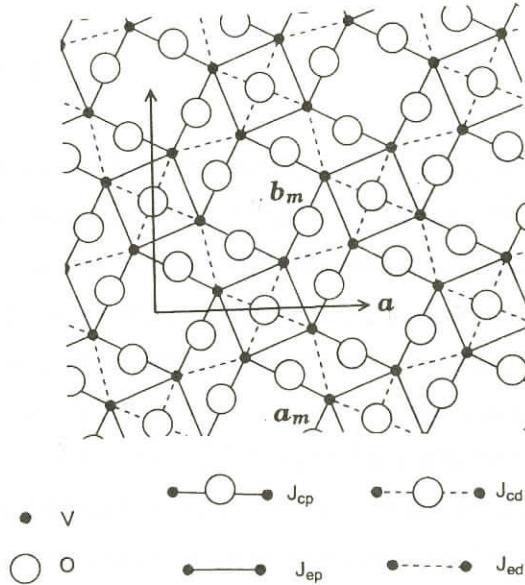
名 大 理 樹 神 克 明
原 科 浩
佐々木 寿
小 林 義 明
谷 口 聰
佐 藤 正 俊
東大物性研 森 貴 慶
加倉井 和 久
西 正 和

CaV₄O₉はスピニギャップを有する初の2次元スピニ系である。我々はこの系のスピニギャップ形成の起源を知る目的で、単結晶を用いた中性子非弾性散乱実験を行った。その結果の解析においてV⁴⁺に1個だけ存在するd電子がxy軌道にあると考え、その場合のV原子間の必要な交換相互作用Jとして図1のVO面に示された4種類を考慮した(d電子が他のd軌道に存在する場合には後述の実験結果を矛盾なく説明することはできない)。

図2にtriplet excitationのa*-b*平面内におけるdispersionをdotで示す。dispersionの底はQ=(1,1)付近にあり、そのギャップ値は約10meVである。この値は帯磁率から見積もられたそれと一致する。また磁気的なBrillouin zoneは結晶格子のそれの $\sqrt{2} \times \sqrt{2}$ 倍になっている。dispersion curveと散乱強度のQ-依存性の双方を最もよく説明するこの系のスピニギャップ状態の物理描像は、“J_{cp}で構成されるplaquette (J_c-plaquette) のsinglet状態が、J_{ep}, J_{ed}, J_{cd}を通した相互作用によって同位相に連なった2次元RVB状態”と言い表すことができる。図2の実線は、この描像に立ってJ_{ep}, J_{ed}, J_{cd}に関する2次の摂動によって得られたdispersion curveである(J_{cp}=14.73, J_{cd}=1.25, J_{ep}=J_{ed}=5.76meV)。

図3にdispersionの底付近のQ-pointにおける磁気励起スペクトル χ ”(E)の温度依存性を示す。温度の下降とともに、約100Kからスペクトルにへこみが観測され始める。この温度は帯磁率がピークを持つ温度T₀と一致する。すなわちT₀からスピニギャップ形成が始まることがわかる。また温度の下降とともにギャップの値は変化しないが、ピークの巾が減少することによってギャップが形成されていく。さらに低エネルギー域のスペクトルの温度依存性から、NMR 1/T₁TはT₀よりずっと低温でピークを持つと考えられる。この帯磁率と1/T₁Tの温度依存性の違いは、スペクトルの巾の温度依存性を考慮した簡単なモデルから理解できる。このモデルを使えば、銅酸化物でみられる帯磁率と1/T₁Tの温度依存性の違いについても理解できる。

さらに我々は単結晶を用いてNMRの測定を行った。低温における $1/T_1T$ の温度依存性から見積もられるギャップの値は約10meVであり、帯磁率や中性子散乱から見積もられたそれと一致した。



CaV_nO_{2n+1} におけるスピンギャップと量子揺らぎ

東大物性研 紺 谷 浩

M. Troyer

M.E. Zhitomirsky

上田和夫

CaV_nO_{2n+1} ($n = 2, 3, 4$) は V- 原子上にスピン 1/2が存在する 2 次元スピン系であり, $1/(n+1)$ の周期的欠損を持つ正方格子ハイゼンベルグ模型と見做すことができる。最近, CaV_nO_{2n+1} の良質な結晶が作成され, それらの基底状態の大変興味深い性質が実験的に明らかにされた。例えば CaV₄O₉ では, 2 次元物質であるにも関わらず $\Delta g \sim 100$ K 程度のスピンギャップが存在することが発見された。一方 CaV₃O₇ は, $T_N = 23$ K という比較的低温で磁気秩序示すが, その時の磁気秩序は Néel order ではなく, stripe order と呼ばれるユニークなものである。また, この物質は staggered moment の異なるサイトが混在するという大変珍しいスピン系であり興味深い。我々のグループではこの 2 つの物質に関する理論研究を行ない, 以下のような結果を得た。

(1) CaV₄O₉: 結晶構造は図 1 のようであり, coupling constants J_p, J_d, J' はともに正であると考えられる。始めに次近接相互作用 J' が 0 で, フラストレーションがない場合を考察する。スピン波理論や摂動計算による考察や, また大規模なモンテカルロ・シミュレーションにより, $J_p = J_d, J' = 0$ の時にはこの系は Néel order を示し, 実験で観測されているスピンギャップ状態は現れないことを理解した。その一方で, $J_p = J_d$ のときでも, $J' \gtrsim 0.1$ 程度の次近接相互作用が存在すれば, スpinギャップ状態が実現することがわかった。この時のスpinギャップ状態は, 近接相互作用で結ばれた plaquette がスpin 1 重項を組みつつ, 隣接する plaquette との resonate によりエネルギーを得るという, いわば Plaquette - RVB (P - RVB) state と呼ばれるべき新しい種類の disordered state であることがわかった。

(2) CaV₃O₇: 結晶構造は図 2 のようであり, coupling constants J, J' ともに正であると考えられる。中性子実験では, 図 2 に描かれたような stripe phase が観測されていて, J' によるフラスト

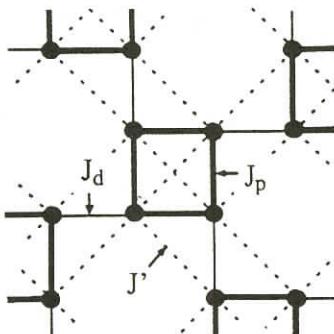


図 1

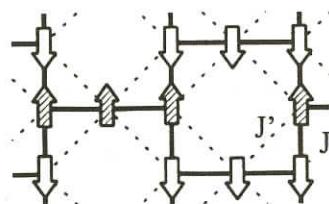


図 2

レーションの影響が無視できないことが伺える。興味深いことに、古典的には、 $J'/J > 1/4$ の場合にはnon-collinear状態が基底状態であり、図2のstripe phaseは古典的には不安定状態である。故にこのスピン系は、古典的不安定状態が量子揺らぎの効果で安定化され、基底状態となっているという、大変面白い系であるといえる。我々は、修正スピン波理論をこの系に適用し、解析を行なった。その結果、 $J' > 0.69J'$ という条件下で実際に stripe phase が安定化されることを理解した。また、中性子実験との比較により、 $J' \sim J'$ であると予想される。

CaV₄O₉における交換パラメータの評価

豊田工業大学材料開発系 高野 健一

CaV₄O₉は、スピン・ギャップを持つことが実験的に確認された2次元スピン系として興味深い物質である。この系を2次元ハイゼンベルグ模型として記述し、バナジウムサイトのスピン間に可能な交換相互作用として4種類を考える。これらの交換パラメータには、最近接でプラケットに属するもの J_e とプラケット間を結ぶもの J'_e があり、次近接では同様に J_c と J'_c がある。これらの大さによって、スピン・ギャップの起源がプラケットに局在したシングレットによるものか強いフラストレーションによるものかが決まる。

われわれは以下の方法[1]を導入し、4つの交換パラメータを帯磁率の温度依存性から決定した。この方法は、最近のESRの実験(Taniguchi et al.)によって得られたg値、 $g=1.96$ 、と矛盾しないように実行することができる。決定の方法は3段階からなっている。

(1) 帯磁率の実験データから出発して、 $x=T_0/T$ ($T_0 = 700$ Kとする) のベキ級数の形に実験式を求

める。すなわち、 $\chi^{\text{EXP}} = \frac{C}{T} \left[1 + \sum_{m=1}^{\infty} A_m x^m \right]$ の形にしたときの係数 $\{A_m\}$ を決定する。この

とき、 $\phi_0^{\text{EXP}} = (T/C) \chi^{\text{EXP}}$ 、 $\phi_m^{\text{EXP}} = (\phi_{m-1}^{\text{EXP}} - A_{m-1}) / x$ によって実験データを変換し、 ϕ_m^{EXP} を

$x \rightarrow 0$ へ外挿した値がちょうど A_m を与えることを用いる。

(2) 4つの交換パラメータを含む2次元ハイゼンベルグ方程式から出発して、高温展開を実行する。

帯磁率を $\chi^{\text{HTE}} = \frac{C}{T} \left[1 + \sum_{m=1}^{\infty} F_m x^m \right]$ の形にしたときの係数 $\{F_m\}$ を4つの交換パラメータの関

数として求める。

(3) $\{A_m\}$ と $\{F_m\}$ を比較し、両者が可能な限り一致するように交換パラメータの値を求める。

実際には $D = \sqrt{\frac{1}{3} \sum_{m=1}^3 (F_m - A_m)^2}$ を最小化して決める。

この結果, $J_e \approx 480\text{K}$, $J'_e \approx 530\text{K}$, $J_c \approx 580\text{K}$, $J'_c \approx 540\text{K}$ を得た。このとき $D \approx 0.11$ であった。これら 4 種類の交換パラメータの値はすべて同程度なので、強いフラストレーションがスピン・ギャップの形成に寄与していることがわかる。

この方法では係数 $[A_m]$ は理論とほとんど無関係に実験だけから決まるので、以前行った方法[2]とは異なっている。正方格子にこの方法を適用して、求めた交換パラメータの誤差が数パーセント以下であることを確認している。ただし、今回の結果は D の値が大きいので実験の精度の検討やハイゼンベルグ模型の適否などさらに考察が必要である。

- [1] K. Takano and K. Sano: preprint (cond-mat/9609073).
- [2] K. Sano and K. Takano: J. Phys. Soc. Jpn. **65** - 1 (1996) 46.

Effect of Orbital Order in Two-dimensional

Spin Gap System for CaV_4O_9

東大物性研 加藤信行
今田正俊

Magnetic properties of two-dimensional spin gap system for CaV_4O_9 have been studied theoretically with the assumption that a non-degenerate orbital such as the d_{xy} orbital on V atom is occupied. However, recent neutron inelastic scattering experiments are inconsistent with the above theoretical results. Experimentally, the wave number which shows the lowest energy excitation is $(0, 0)$, while (π, π) or incommensurate wave number is obtained as the lowest point in some theoretical results. Secondly, if the shape of the dispersion is reproduced, a strong anisotropy of the spin exchange coupling between V atoms appears, which is difficult to understand from the previous assumption.

In order to understand these problems, we consider an alternative model of the spin gap formation. We investigate effects of the orbital order for d_{xz} and d_{yz} orbitals where the strength of spin exchange coupling between V atoms depends on the configuration of the occupied d orbital on the V atoms. We consider the super exchange coupling between the nearest neighbor V atoms and between the next nearest neighbor V atoms. In the first case, the angle of V-O-V is almost right angle. Then the super exchange coupling works relevantly through the p_z orbital on the oxygen when the d electron localizes at d_{xz} orbital on V atom and the other d electron localizes at d_{yz} orbital on the other V atom. However, the super exchange coupling may be relatively small when the both d electrons are occupied at

the same orbital on each V atom. Because the transfer integral of p_z orbital of oxygen and d orbital which does not extend to the oxygen is rather small due to the symmetry of the wavefunction of these orbitals. In the second case, the structure of V-O-V is almost straight line. Then the super exchange coupling works dominantly when the d electrons localize at the same orbitals which extend to the oxygen. The important point is that this effect causes the anisotropy of the spin exchange coupling. Although the Jahn-Teller distortion or tilting of the pyramid structure lifts the degeneracy of the atomic energy level of d_{xz} and d_{yz} orbitals, we neglect this effect within this study. Then we consider several models with the possible patterns of the orbital order. In this study, we discuss one choice of the models. The pattern of the orbital is that the occupied d orbital of the nearest neighbor V atom is always alternated.

In our model, the temperature dependence of the uniform magnetic susceptibility in experiments is reproduced by the exact diagonalization in the region of 0~700K. The origin of the spin gap is ascribed to the four-site singlet which is not necessarily the same as the originally proposed plaquette singlet. The lowest energy excitations of the triplet states within the second-order perturbation are ($\pi, 0$) and ($0, \pi$) since there are bonding and anti-bonding triplet dispersions, which is inconsistent with the experimental results. The wave number dependence of the triplet dispersion depends on the pattern of the orbital order. Therefore, the effect of orbital order may be relevant in understanding the magnetic properties of CaV₄O₉.

CaV_nO_{2n+1}の磁性-中性子散乱と ESR -

名 大 理 原 科 浩
樹 神 克 明
谷 口 聰
佐 藤 正 俊
東大物性研 加倉井 和 久
西 正 和

CaV_nO_{2n+1}(n=2,3,4)はedge連結のVO₅ピラミッド層がスタッツした構造をもつ。各々のVは4価であり、スピン1/2をもっている。面内の構造はnによって異なり、それぞれ興味ある磁性を示す。そのうちCaV₄O₉はスピンギャップをもつ初の2次元系であることがわかっている。そのスビ

ンギャップの研究は、銅酸化物高温超伝導体で観測されているいわゆるスピンギャップ異常の物理的描像を描くまでの手がかりとなると考えている。一方 CaV_3O_7 は約23Kで磁気秩序をもち、その秩序相はメタ磁性的挙動を示す。これらの物質群における磁気的性質を理解するために中性子散乱およびE S Rによる研究を行った。

図1に粉末中性子散乱実験によって決定した CaV_3O_7 の磁気構造の面内オーダーパターンを示す。面間は反強磁的に配列している。Vスピン間の交換相互作用として、ピラミッドのcornerを共有するV間に働く J_c とedgeを共有するV間に働く J_e の2つだけを考えた古典的Heisenberg模型からはこの構造は得られない。実験から決定された磁気構造は、この系が量子スピン系であることを反映しているようだ大変興味深い。

図2にXバンドE S R分光計で観測されたg-factorの異方性を CaV_4O_9 について示す（ θ はc軸と磁場のなす角）。面内に磁場をかけた場合はほとんど異方性を示さない。 CaV_3O_7 のg-factorは CaV_4O_9 のそれと絶対値・異方性ともに同じである。この結果は CaV_3O_7 と CaV_4O_9 のVのd電子がおそらく同じ軌道を占めていることを意味しており、その軌道は CaV_4O_9 の中性子非弾性散乱実験の解析から $3d_{xy}$ -likeであると考えられる。

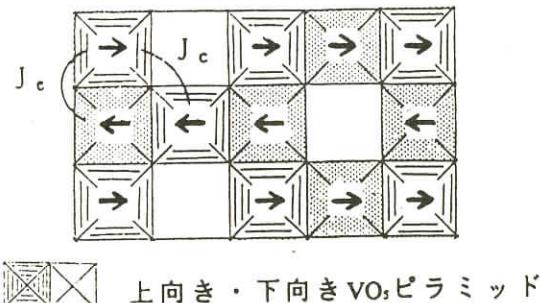


図1

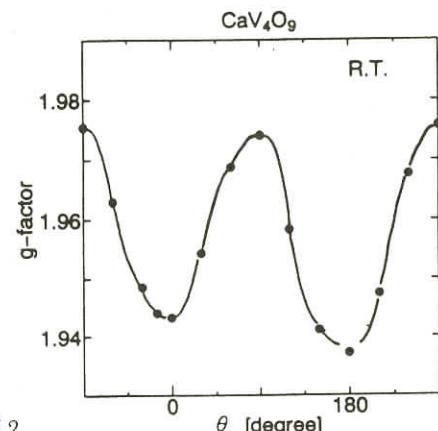


図2

$\text{CaV}_{n} \text{O}_{2n+1}$ のスピンギャップ(NMR)

東大物性研 大浜哲夫
伊藤 豊*
岩瀬秀夫
安岡弘志

スピンギャップ物質の基底状態と有限温度における励起スペクトルの様子を明らかにするために、

^{51}V -NMR法による注意深い研究をおこなっている。主たる実験的課題として次なる二つの目標を掲げている；[1]幾何学的に複雑な超交換相互作用ネットワークを記述するスピンハミルトニアンを定量化すること、[2]むしろ定性的なスピンハミルトニアンの描像の下に、現象の追及としてクロスオーバーのダイナミックスを捕えること、である。

まず、[1]については、二本脚スピン梯子系として CaV_2O_5 と MgV_2O_5 、欠損した2次元格子系として CaV_4O_9 、二量体スピン系として CsV_2O_5 と Cu_2PO_4 そしてスピンパーサイエルス系として NaV_2O_5 等を取り上げV、Cu、P及びNa核のNMR研究を行っている。

配向した粉末試料の CaV_2O_5 、 CaV_4O_9 と NaV_2O_5 に対するV核NMRスペクトルの詳細な解析から、 VO_5 ピラミッドの頂点酸素方向が主軸であり且つV(4価)イオンの基底状態の空間波動関数がd_{xy}的であることを実証した。この結果は、分子論的に超交換相互作用の経路を決定しスピンハミルトニアンを定量化する上で重要な情報になる。また、V核スピン格子緩和時間T₁とナイトシフトの温度変化の測定結果から、それぞれの観測量に現われるスピンギャップの大きさに大きな違いがあることを示した。この事実は、CuやNiを含む他の二本脚スピン梯子系とハルデンスピン物質においても観測されており、スピンギャップ系に普遍的に共通な特徴的励起状態の存在を暗示している。

次に[2]のクロスオーバーの研究として、非磁性不純物をドープしたときのスピンギャップ状態のクロスオーバーを探求している。特に、Tiをドープした CaV_2O_5 のV核のNMR研究を行った。まず、バルクな静的一様帶磁率の測定においてTiドープと共に低温側に大きなupturnが成長することを観測し、単純なキュリー則にのらないことを発見した。また、Ti20%の高濃度試料に対し比較的シャープなV核NMR信号を観測し、そのナイトシフトの回復からホストサイトがギャップレス状態になっているように見えることを発見した。更に、低温側でT₁が飽和する傾向を観測し、このことから直接緩和過程の出現が推測される。この飽和気味のT₁と回復したナイトシフトとは互いに整合な関係にある。しかしながら、実際クロスオーバーによってcriticalなホストの状態が実現したのかどうかは詳細な組成変化を慎重に吟味してから結論付けたい。また、何らかの磁気的秩序状態が示唆されているZnドープSrCu₂O₃系との違いを明らかにすることは今後の課題である。

* 文責

スピニ・パイエルス物質CuGeO₃の最近の話題

理化学研究所磁性研究室 長 谷 正 司

スピニ・パイエルス物質CuGeO₃の2つの話題に関してまとめる。

(1) 鎮内第2近接交換相互作用の存在?

最近CuGeO₃において、鎮内第2近接交換相互作用が重要な役割を果たしているのではないかという考えが、いくつかのグループによって指摘されている「[1, 2]」。この考えの起因になったのは、帯磁率の温度依存性が、 $S=1/2$ の1次元反強磁性体の理論曲線（Bonner - Fisher曲線）とは定量的に一致しないということである[3]。最近発見された第2の無機スピニ・パイエルス物質NaV₂O₅[4]や、いくつかの有機スピニ・パイエルス物質の帯磁率は、Bonner - Fisher曲線と一致するので、これらの物質とは際だった違いを示している。この実験と理論とのずれの原因に関しては、いくつかの考えが提案されているが、その1つが、1次元鎖（c軸に平行）において、反強磁性第1近接交換相互作用に加えて、反強磁性第2近接交換相互作用を考慮したモデルである。実際このモデルは、帯磁率の実験結果をかなりよく再現出来る。

帯磁率以外でも、磁気励起の分散関係[1,5]、ラマン散乱に見られる磁気励起の連続帶によると思われる200cm⁻¹付近の幅の広い散乱[6]、圧力効果の実験結果[7]が、上記のモデルで説明出来るかも知れないと考えられている。

このモデルが、CuGeO₃において成立している可能性は高いが、まだ確定したとは言えない。今後更なる研究が必要と思われる。

(2) M相に関する研究

スピニ・パイエルス系では、低温・高磁場でM相と呼ばれる、何らかの格子変形を持った相が存在する。最近の研究で、この相においてソリトン格子が存在することが分かった。X線散乱の実験では、M相において、incommensurateな位置にピークが現れ、かつ3次のharmonicも観測された[8]。これは、ソリトン格子から予想される結果と一致する。一方、もう1つの候補であるsine波的な格子変形が存在するというモデルとは一致しない。この実験以外にも、NMRにおいてスペクトラの形から、ソリトン格子であるという報告もある[9]。

- [1] G. Castilla et al., Phys. Rev. Lett. 75, 1823 (1995) .
- [2] J. Riera and A. Dobry, Phys. Rev. B51, 16098 (1995) .
- [3] M. Hase et al., Phys. Rev. Lett. 70, 3651 (1993) .
- [4] M. Isobe and Y. Ueda, J. Phys. Soc. Jpn. 65, 1178 (1996) .
- [5] J. Riera and S. Koval, Phys. Rev. B53, 770 (1996) .
- [6] V. N. Muthukumare et al., preprint.
- [7] B. Buchner et al., Phys. Rev. Lett. 77, 1624 (1996) .

- [8] V. Kiryukhin et al., Phys. Rev. Lett. 76, 4608 (1996) .
- [9] Y. Fagot - Revurat et al., Phys. Rev. Lett. 77, 1861 (1996) .

不純物をドープしたスピニペルス系のサブミリ波ESR

東北大金研 野尻 浩之

スピニペルス物質CuGeO₃に少量の不純物をドープすると格子のdimerizationと反強磁性スタガードモーメントが両方存在するような新しい磁気秩序相(以下SAFと呼ぶ)が存在することが判り、注目を集めている。この系の磁場温度相図を磁化測定や比熱で調べた結果では、低磁場でSP相とSAF相が温度低下により逐次相転移する。一方ギャップ以上の磁場をかけると高温ではM相が存在し、温度を下げるとき明瞭な比熱のピークを伴い別の相(以下MAFと呼ぶ)に転移する。M, MAF, SAFの各相は格子変形も磁気モーメントも存在する点は共通である。SAF相は磁気励起にギャップがある点で区別されるとしても、それぞれの相の違いがなにかという事は全く未解明の問題である。この問題はpureな系のM相をどう理解するかにも関係する大事な点である。このような観点からESRと磁化測定を手段にして研究を進めている。

M相の磁気共鳴についてはSP相との相境界で2つの信号が共存することが神戸大の太田らにより以前報告され、SP - Mの相転移で格子変形が変化し、結晶場を介してg値が変化する結果と説明されてきた。今回、M相のより高磁場側を30Tまで測定したところ、M相での磁気共鳴モードはSP相とほぼ同じg値を持ち、かつ原点を切らない(ゼロ磁場でゼロ周波数とならない)事が判明した。ESRで見る異方性にはg値の異方性と秩序相で出てくる異方性ギャップの二つがあり、前者は周波数 - 磁場プロットにおける傾きを、後者は原点からのずれに対応する。今回のESRの実験結果は、M相が3次元の磁気秩序をもった相であることを示している。もちろん磁気秩序といっても単純ではなく、格子変形はIncommensurateであることが最近のX線の結果により判っているので、交替に並んでいる磁気モーメントとの周期との折り合いをどうつけるのかという問題がある。この点に関しては、現在までの理論で取り入れられてない、スピニのXY成分と交換相互作用の分布を取り入れる事が大事だと思われる。なぜなら異方性が強くない場合は古典的にはスピニフロップ状態に対応しており、S_zのみを考えている理論とはイメージが異なる。M相で3次元秩序が生ずる原因是、3つある。まず第1はこの系では鎖内の交換相互作用がSPギャップに比べ大きいので、2粒子的なtriplet励起あるいはキンクソリトンではなく、テールを引いた壁の厚いソリトンが生じて互いに重なりやすい。さらに鎖間相互作用が大きいので重なりが生じると鎖間の秩序も発生する。またスピニペルス状態では格子変形は3次元なので磁気格子結合を通して磁気秩序も3次元になることをうながす。この意味では乱れたスピニペルス系の反強磁性は、SP磁気秩序状態へのド-

プであり、一方ラダーやHaldaneは常磁性状態へのドープであり、impurityの寄与は異なることも理解出来ると思われる。

CuGeO₃系のNMR

千葉大里 伊藤正行

1992年に長谷達[1]によって発見されたCuGeO₃は、約14K(=T_{sp})でスピンドイエルス転移を起こすことはよく知られている。この系のスピンドイエル転移の機構については、格子変形が明瞭に観測されており、従来の理論の枠組みの中で理解できると考えられるが、①フォノンのソフト化が観測されていない、②uniform相での帯磁率がS=1/2のBonner-Fisher曲線と合わない、③スピンドイナミクスが理解されていない、などまだ未解明の問題が残されている。これらの中で、②と③の問題に関して我々のグループが行ってきたNMRの研究結果について報告した。②の問題については、最近、鎖内の第2近接相互作用の重要性が指摘されており、これを考慮する上で重要なCu²⁺の電子状態とcovalent効果を調べた。Cu²⁺の波動関数はほぼtetragonalな対称性をもち、結晶場のパラメーターを含めその電子状態を決定し[2-4]、さらに、¹⁷O核のNMRから酸素の2s軌道の非占有率を求めた[4]。これらの結果は、交換相互作用に関して重要な情報を提供すると思われる。③のスピンドイナミクスを調べる上で、NMRの核スピンドイエルス緩和率1/T₁と核スピンドイエルス緩和率1/T_{2G}は、低エネルギー磁気励起スペクトルを非常に敏感に反映する優れたプローブであることはよく知られている。ここ数年間に、S=1/2の1次元ハイゼンベルグモデルの核磁気緩和の理論的研究は著しく進展し、1/T₁と1/T_{2G}を定量的に議論できるようになってきた。特に、Sachdev[5]は、Schultz[6]が解析的に得た動的スピンドイエルス緩和率を用いて、1/T₁と1/T_{2G}の低温極限での関数形を導出し、低温極限ではq=πのモードが核磁気緩和を支配することを示した。さらに、Sandvik[7]は、量子モンテカルロシミュレーションを用いて有限温度での温度変化を計算し、その結果、超微細相互作用のq依存性によってもその振る舞いが異なり、1/T₁と1/T_{2G}にはq=π以外にq=0のモードも重要なことを明らかにした点は、重要な進展である。これらの理論的研究をもとに、CuGeO₃の1/T₁と1/T_{2G}のuniform相での温度変化の実験結果について議論した。特に、量子モンテカルロシミュレーションの結果との比較から、明らかに、CuGeO₃のスピンドイナミクスはS=1/2の1次元ハイゼンベルグモデルでは理解できないことを示した[8]。この原因として、鎖内の第2近接相互作用と鎖間相互作用の寄与が重要であると考えられ、今後、これらの相互作用を考慮した核磁気緩和の理論研究の進展が望まれる。一方、スピンドイエルス相での1/T₁と1/T_{2G}は、低エネルギースペクトルにギャップが開くことによってT_{sp}以下では減少する[2,8]。特に、1/T₁は、低温極限では24Kのエネルギーギャップに対応した熱活性型の温度変化をしめすが、T_{sp}直下から4.2Kまでの温度領域ではむしろべき乗の温度変化を示し、pseudofermion近似

でEhrenfreund達[9]によって計算された理論的な温度変化とは全く異なる。この特徴的なスピン・パイエルス相における $1/T_1$ の温度変化は、 $1/T_{2G}$ を含め理論的に理解されていないのが現状である。

- [1] M. Hase, I. Terasaki, and K. Uchinokura, Phys. Rev. Lett. **70**, 3651 (1993).
- [2] M. Itoh, S. Hirashima, and K. Motoya, Phys. Rev. B **52**, 12749 (1995).
- [3] M. Itoh, M. Sugahara, T. Yamauchi, and Y. Ueda, Phys. Rev. B **53**, 11606 (1996).
- [4] M. Itoh, M. Sugahara, S. Hirashima, T. Yamauchi, and Y. Ueda, Physica C **263**, 486 (1996).
- [5] S. Sachdev, Phys. Rev. B **50**, 13006 (1994).
- [6] H. J. Schulz, Phys. Rev. B **34**, 6372 (1986).
- [7] A. W. Sandvik Phys. Rev. B **52**, R9831 (1995).
- [8] M. Itoh, M. Sugahara, T. Yamauchi, and Y. Ueda, Phys. Rev. B **54**, R9631 (1996).
- [9] E. Ehrenfreund and L. S. Smith, Phys. Rev. B **16**, 1870 (1977).

不純物をドープしたCuGeO₃のスピン・パイエルス相と反強磁性相

東京大学工学部 笹子佳孝

無機物質ではじめてのスピン・パイエルス物質CuGeO₃が発見されて以来、この物質の研究が盛んに行なわれてきている。特に有機スピン・パイエルス物質の場合と異なり、不純物置換効果の研究が行なえる意義が大きい。我々は、CuGeO₃のCuサイトをZnで置換した単結晶試料を作製し、帯磁率測定、中性子散乱の実験を行なった。作製したサンプルはZn濃度、0.42, 0.91, 2.1, 3.2, 4.7%である。以前から、不純物置換によってスピン・パイエルス転移温度が減少していくこと、そしてスピン・パイエルス転移温度よりも低温で反強磁性転移が起こることが知られていた。我々の帯磁率の測定からは従来報告されていたのと同様に、Znドープ量の増大に伴うスピン・パイエルス転移の消失と、反強磁性転移の発現が観測された。中性子散乱の実験では、スピン・パイエルス転移に伴う格子のdimerizationによる長周期ピークに対応する $\left(\frac{1}{2}, 6, \frac{1}{2}\right)$ と反強磁性転移に伴う長周期ピークに対応する $\left(0, 1, \frac{1}{2}\right)$ の二つのピークの温度変化を調べた。その結果、作製したサンプルではZn濃度4.7%を除き低温の反強磁性相で両方の長周期ピークが装置のresolution limitの線幅で観測された。この結果は不純物濃度の広い範囲において反強磁性長距離秩序と格子のdimerizationの長距離秩序が低温で共存することを意味している。これら二つの秩序は従来は排他的であると考えられていたのでたいへん意外な結果である。図1にZn濃度0.9%のサンプルで観測した両方の長周期ピーク強度の温度変化を示す。反強磁性転移に伴い、格子のdimerization

は減少してはいるが有限にとどまっていることがわかる。

また中性子散乱では磁気励起も調べた。Znドープされたサンプルではpureのサンプルでも観測されるエネルギー・ギャップをもつスピン・パイエルスモードと反強磁性秩序に伴う反強磁性モードの両方が観測された。スピン・パイエルスモードはZn置換量の増大に伴って特にzone center

$(0, 1, \frac{1}{2})$ 付近でダンピングが生じ、

またギャップの大きさも小さくなることが確認された。反強磁性モードはZn置換量3.2%のサンプルで観測されたが、 $(0, 1, \frac{1}{2})$ 付近でだけはっきりと観測されることが確認された。

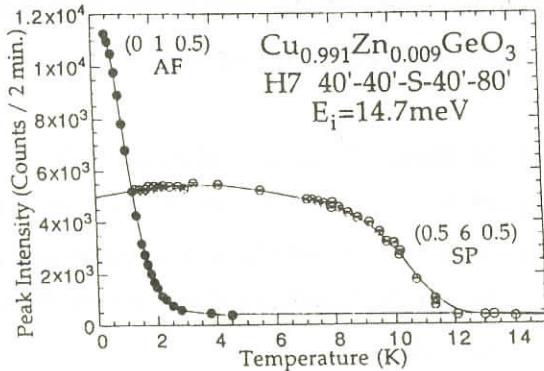


図1 $\text{Cu}_{0.991}\text{Zn}_{0.009}\text{GeO}_3$ の超周期ピーク強度の温度変化

乱れたスピンパイエルス系における磁気励起

東大理 齋藤雅子
福山秀敏

スピンパイエルス系の基底状態では、格子の歪み(dimerization)が起こって、系全体がスピンsingletとなっている。ここに不純物を入れると、singlet状態は壊れて、スピンモーメントが出る。理論的考察から、このスピンモーメントは、大きさは変化するものの反強磁性の長距離秩序を持ち、またこの時、格子の歪み方も、長距離秩序を保つことがわかる(図1)[1]。この乱れたスピンパイエルス系での2種の長距離秩序の共存は、実験的にも複数のCuGeO₃不純物置換系で確認されている。

このような基底状態を持つ系の磁気励起について考察すると、

A. 交替スピンモーメントの存在による反強磁性スピン波。

B. singlet状態が不完全ながら残っていることによるtriplet励起。

の2つの励起のあることが分かる。今回は、この2つを別々に、Aは、図1(b)の基底状態からのスピン波の計算、Bは、位相ハミルトニアンの観点から、それぞれT=0で解析的に求めた。

その結果を図2に示す。Aのスピン波は波数 π の近傍でギャップレスで線形に立ち上がる。このモードは、不純物が多く、スピンモーメントが大きいほど傾きが大きくなり、スペクトラルウェイトは、 π 近傍だけで非常に大きくなっている。乱れの効果は、波数 π のところでは、スピンのモーメントの秩序が長距離であるため効かず、波数 π からずれると、モードが幅を持つ形で表れる。

Bのモードでは、ギャップがあるがこれは純粋な系よりも小さく、さらに波数 π 近傍では乱れの効果が強く効いて、モードが広がることになる。乱れの効果はAの場合と逆であるが、これは、Aのスピン波が系全体秩序を反映した励起であるのに対し、Bのtriplet励起は秩序によらない励起であることによる。こうした乱れたスピンパイエルス系での磁気励起は実験でもCuGe_{1-x}Si_xO₃ [2], Cu_{1-x}Zn_xGeO₃ [3]で調べられており、理論的定性的結果はこれらの実験と一致している。今回は、モードA, Bを独立に扱ったが、今後は、両者を統一的に扱ってスペクトラルウェイトが2つのモード間でどう変化するのか、その波数、不純物濃度依存性についても議論したい。

格子の歪み

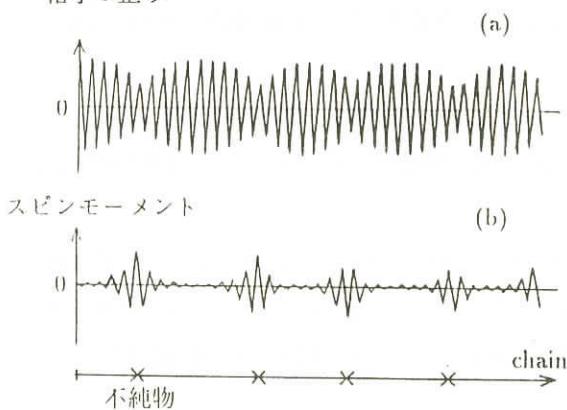


図1 格子の歪みとスピンの磁気モーメントの空間変化

励起エネルギー

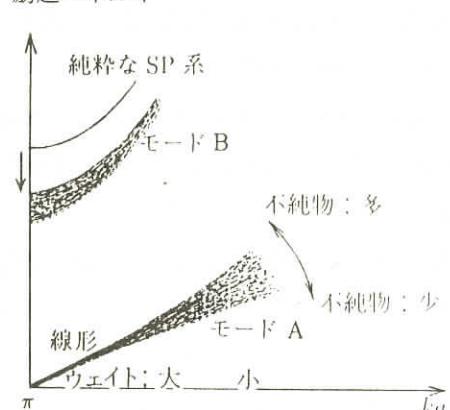


図2 磁気励起モードの概念図

参考文献

- [1] H.Fukuyama, T.Tanimoto and M. Saito: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 1182
- [2] L.P. Regnault, J.P. Renard, G. Dhalenne and A. Revcolevschi: Europhys.Lett. **32** (1995) 579.
- [3] M.C. Martin, M. Hase, K. Hirota, G. Shirane, Y. Sasago, N. Koide and K. Uchinokura: reprint.

新しいスピニルス物質 NaV_2O_5 および関連化合物

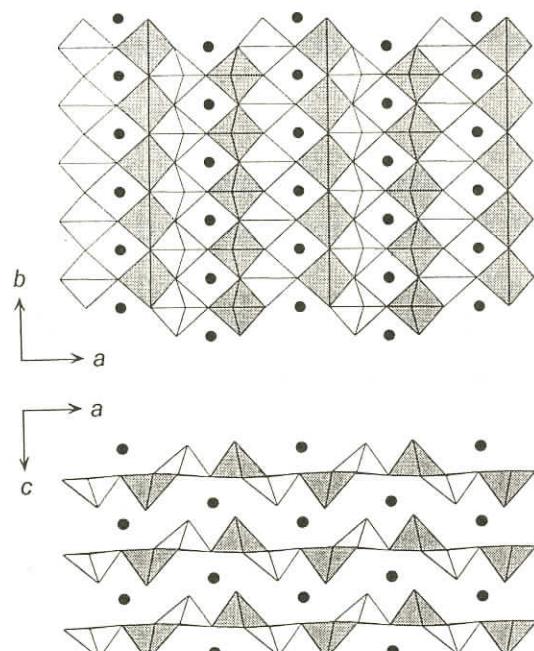
東大・物性研 磯部正彦
上田 寛

我々は、バナジウム酸化物(M -V-O系)において、量子スピニルス物質の探索、研究を行っている。

新しいスピニルス物質 NaV_2O_5 は、層状構造で面内は、 $\text{VO}_5(\text{V}^{4+}\text{O}_5)$:灰色、 V^{5+}O_5 :白)が稜または角共有し、層間に、 Na^+ (黒丸)が挿入されてる。構造的に V^{4+} が酸素を介して、1次元鎖を形成していると考えられる(図)。帯磁率は1次元的な構造を反映して、350K付近に緩やかなピークをもち、35K以下では、スピニルス転移に伴い、急激に減少する。35K以上ではS=1/2 1次元Heisenbergモデルの理論曲線(Bonner - Fisher)とよく一致する。また他の実験(単結晶X線回折、NMR、中性子散乱)からも、35Kでの構造相転移、低温でのスピニルス基底状態が確認された。

NaV_2O_5 には、 $\text{Na} = 0.82 \sim 1.0$ の不定比性があり、 Na を欠損させると、 a, b 軸はほとんど変化がないが、 c 軸(層間)が短くなる。 Na を欠損させるということは、 V^{4+} のチェーンに V^{5+} を導入することになる。欠損に伴い、スピニルス転移は抑えられ、帯磁率は急激な減少はなくなり、低温部でのCurie項が大きくなる。

また NaV_2O_5 の単結晶育成において、 NaVO_3 をフランクスにしたフランクス法で、今のところ2~5mm程度の短冊状の単結晶を得ている。関連物質として、 CaV_2O_5 は NaV_2O_5 と類似構造で、構造と帯磁率より、スピニルスラダー系の可能性がある。この他 γ - LiV_2O_5 は V^{4+} の擬1次元系、 CsV_2O_5 は V^{4+} のダイマー系と考えられる。 MV_2O_5 (M=アルカリ、アルカリ土類金属)において、 V^{4+}O_5 の結合様式により、いろいろな構造をとり、構造を反映した多彩な磁性を示し、興味深い。これら一連の化合物を比較、研究していくことで新しい物理が生まれてくることを期待している。



NaV_2O_5 結晶構造

NaV₂O₅のスピン-パイエルス転移(NMR)

東大物性研 大浜哲夫
安岡弘志

最近, バナジウム酸化物NaV₂O₅において, $T_{sp} \sim 35\text{K}$ という高い温度でスピン-パイエルス転移が起きることが報告された[1][2]。この系について, 磁場中配向した粉末試料を用いたNMR測定の結果を報告する。NMRによる研究の興味は次のような点にある。1) スpin-パイエルス転移が結晶構造, スpin帯磁率, 軌道帯磁率にどう反映されるか。2) Vの価数および波動関数の状態はどうなっているか, また, 系は1次元的に振舞うか。3) スpin-パイエルス相のスpin励起はどんな性質か。

まず, NaサイトのNMR [3]については, 磁場掃引スペクトルから, 室温では全て結晶学的に等価であったNaサイトが, T_{sp} 以下での温度で複数の非等価なサイトに分裂することが明らかになり, 構造相転移が確認された。NMRシフトの温度依存は, 低温で正の一定値になり, 基底状態でスピシングレットになっていることを裏付けている。また, $K-\chi$ プロットによる解析から, T_{sp} 近傍で軌道帯磁率が顕著に変化していることが明らかになった。

VサイトのNMRについては, T_{sp} 以上の温度で, 緩和率の異なる2種類の信号が観測され, 結晶構造から示唆されている4価と5価のVイオンが存在していることと矛盾しない結果が得られた。4価的なサイトの電場勾配は, CaV₂O₅, CaV₄O₉といったVO₅ピラミッドを持つ系と共に, ほぼピラミッドの頂点方向が主軸となっている。この結果から, 基底状態のd電子の波動関数は近似的にxyであることがわかった。また, この系の振舞いが1次元的かどうかは重要な問題であり, ダイナミクスの面からこの点を明らかにするために, T_1 , T_2 の測定を行っているが, 明確な結果はまだ得られておらず, 今後の課題である。

スpin-パイエルス相のスpinギャップについては, 低温の帶磁率の温度依存は, alternateした1次元スpin鎖として解析でき, 98Kのギャップを与える。また, Vサイトの T_1 からは, 108Kというほぼ一致するギャップが得られた。

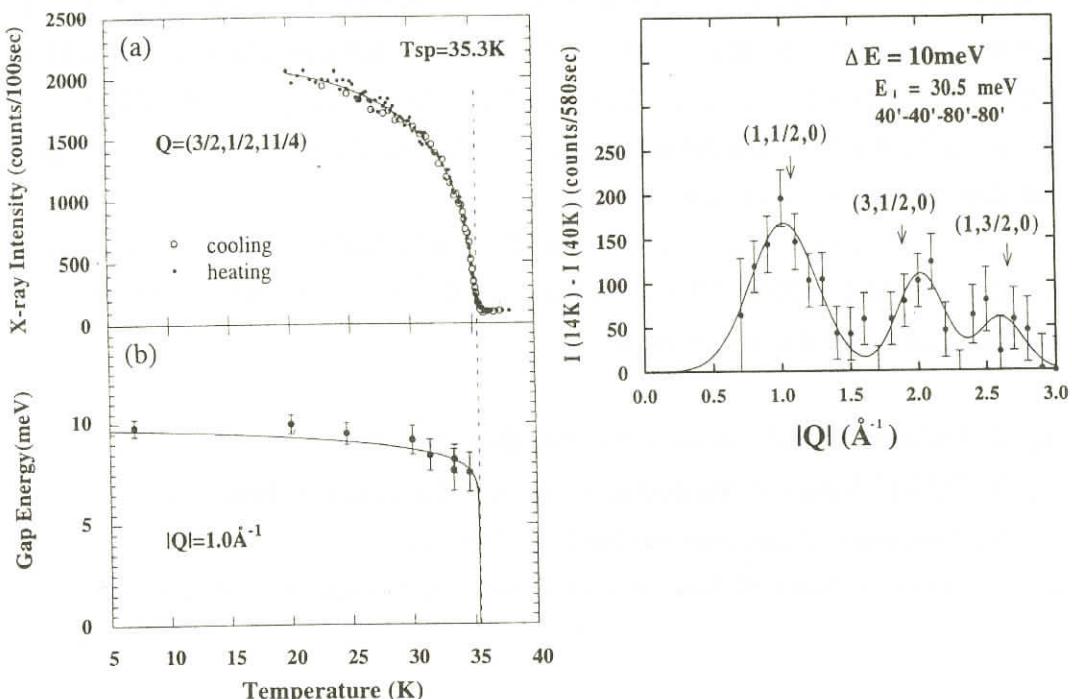
- [1] M. Isobe and Y. Ueda: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 1178.
- [2] Y. Fujii, H. Nakao, T. Yoshihama, M. Nishi, K. Nakajima, K. Kakurai, M. Isobe, Y. Ueda and H. Sawa: submitted to Phys. Rev. Lett.
- [3] T. Ohama, M. Isobe, H. Yasuoka and Y. Ueda: submitted to J. Phys. Soc. Jpn.

NaV₂O₅の磁気励起一中性子散乱一

東大物性研 吉浜知之
西正和
中島健次
加倉井和久
藤井保彦
磯部正彦
上田寛

我々は原研改3号炉に設置してある物性研所有の熱中性子3軸分光器(PONTA 5G)において、12.7gの α' -NaV₂O₅粉末試料を用いて、その磁気励起を測定した。

図1(a)は、X線回折実験によって得られた超格子反射強度の温度依存性(藤井、中尾、澤による)であり、転移温度は、 $T_{sp}=35.3K$ と決められた。図1(b)は、中性子散乱実験において散乱ベクトル(Q)を 1.0\AA^{-1} に固定したエネルギー位置を示したものである。温度を下降させ T_{sp} 以下の格子の歪んだ相に入ると、一重項と三重項の縮退が解けて励起エネルギーにギャップが現れる、というスピンパイエルス物質の特徴がよく現れている。ここで、



ギャップの大きさを、 $\Delta(T=0K)=9.8\text{meV}$ であると評価した。

また、図2は遷移エネルギーを10meVに固定したスキャンでの、14Kと40Kとの強度の差である。この結果から $|Q| \approx 1.0\text{\AA}^{-1}$, 2.0\AA^{-1} に磁気的ゾーン・センターがあることが示唆される。純粋な一次元鎖であれば、 $|Q| = 0.87\text{\AA}^{-1}$, 2.61\AA^{-1} にピークを持つ非対称なプロファイルが現れる筈であり、実験結果はa軸間に鎖間反強磁性相関があることを示している。 T_{sp} 以上で帝磁率がBonner - Fisher曲線によくのことから良い一次元性を期待していたが、そのことと比較すると興味深い。

なお、 α' -NaV₂O₅では、 $2\Delta(T=0K)/k_B T_{sp} \approx 6.44$ であり、従来のspin-Peierls物質ではBCS的な値(3.53)に非常に近かったことと対比させると、(例えば、CuGeO₃では3.50)異常に大きい。何らかの微視的な機構がギャップ形成を助長しているためと考えており、今後、単結晶試料を用いたより詳細な研究を行ないたい。

また、Naを1%欠損させると、転移温度が $T_{sp} \approx 25K$ と大きく低下し、更に、格子歪みの長距離秩序の形成が阻害されている、という最近の興味深いX線回折実験の結果(中尾、大和田、藤井による)を踏まえ、Na1%欠損系で中性子散乱実験を計画している。

1次元SrCuO₂にフォトドープされた正孔の分散

東京大学 工学系研究科 永崎洋

本山直樹

内田慎一

Stanford University Changyoung Kim

Zhixun Shen

三重大学教育学部 遠山貴巳

名古屋大学工学部 前川禎通

1次元CuO鎖を持つ銅酸化物は、2000K以上に及ぶ鎖内の超交換相互作用を持つにもかかわらず、その反強磁性転移温度は10K以下に抑えられており、理想的なS=1/2一次元ハイゼンベルグ系としてみなすことができる。このような系にキャリアが注入された場合、理論的にはキャリアの電荷の自由度とスピンの自由度が分離し、それぞれホロン、スピノンと呼ばれる独立な素励起として振る舞うことが予想されている。本研究は一次元銅酸化物SrCuO₂の角度分解型光電子分光を行うことにより、S=1/2一次元ハイゼンベルグ系にフォトドープされた正孔の分散を実験的に決定した。図1にその結果を示す。頂点を第一ブリュアンゾーンの中点である 0.5π に持ち、この点から Γ 点($k=0$)、あるいはX点($k=\pi$)に向けてより深い結合エネルギー側に移動するバンドが存在して

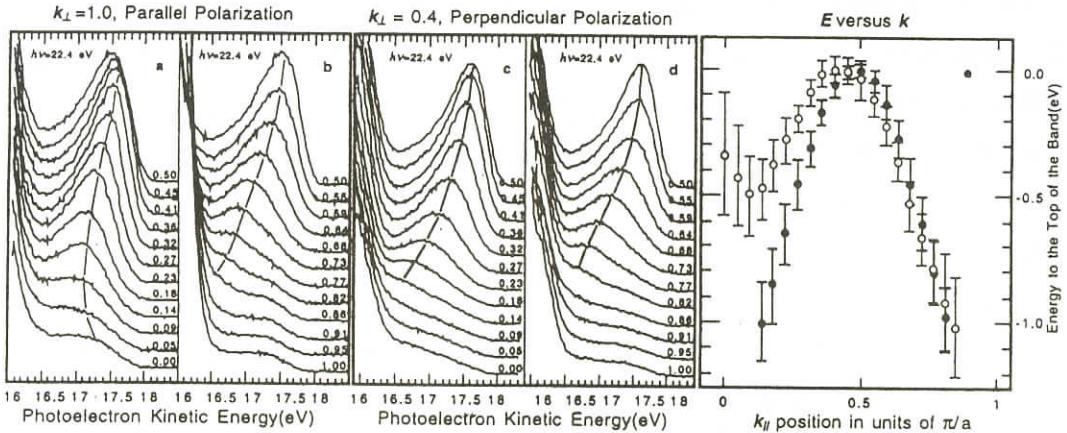


図 1 SrCuO_2 の角度分解型光電子分光スペクトル

いるのが見て取れる。さらに Γ 点から 0.5π に至る領域では、入射光の偏光方向を変化させると 2 本のバンドが存在していることがわかる。この結果を分散関係として示したのが図 1e である。

この実験結果は以下のように考えることができる。すなわち、1 次元系ではフォトドープされた正孔は、スピノン、ホロンの 2 つの素励起に分離する。その 2 つの素励起に対応するバンドが、それぞれ $\pi/2$ に頂点をもち、 $\pi/2 \times J$ 、 $2t$ の巾を持つ 2 本のバンドとして観測される。実際、

図 2 に示す厳密対角化の手法を用いた計算結果は、実験結果が 1 次元 $S=1/2$ 量子スピン系の特徴を捉えていることを強く示唆している。この計算は帯磁率測定や中赤外吸収測定といった実験的に求められた J の値、約 0.2 eV を用いて行っているが、 Γ 点から 0.5π に至る領域における光電子分光の結果を定量的にもよく再現している。 t の値に関しては、直接他の実験結果と比較する事は現在のところできないが、 $t/J=3$ という両パラメータの比は、銅酸化物の有効ハミルトンを計算する上で最も一般的に用いられている値である。以上のことから、今回得られた実験結果は、定量的、定性的にも、1 次元系特有のスピン-電荷状態を実験的に明確にとらえたものと結論づける事ができよう。

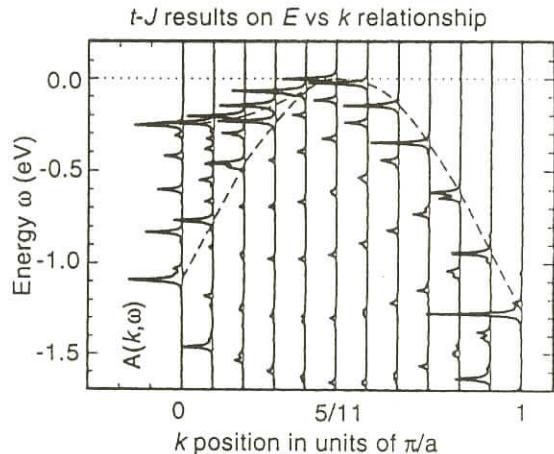


図 2. 厳密対角化法に基づく光電子分光スペクトルの計算結果

Static and Mobile Vacancies in Spin Gap Systems

東大・工学部 永長直人

I will discuss the role of mobile holes and static Zn impurities in the underdoped cuprates with spin gap.

- (1) It is shown that the nonmagnetic impurities doped to the spin liquid with spin gap causes nonperturbative topological disorder and the system is described by the nonlinear σ model with random Berry phases. The classical nature of the staggered moment is enhanced by the topological decoherence, which results in the antiferromagnetic long range ordering.
- (2) The mobile holes in the underdoped cuprates are described by the SU(2) gauge theory, where the two species of the slave bosons are introduced. It is shown that the confinement problem is closely related to the insulator - superconductor transition.
- (3) When the mobile holes are present, the nonmagnetic impurities causes the residual resistivity. The magnitude of this residual resistivity is strongly correlated with the formation or screening of the localized spin moment. I proposed this as the new type of the Kondo effect in the spin - charge separated state where the correlation in the conduction electrons play significant roles.

My collaborators are P.A. Lee, H. Fukuyama, A. Furusaki, M. Sigrist, X.G. Wen, and T.K. Ng.

11月29日（金）9:20～15:00

1. 石田 浩 (日本大学文理学部) 半無限結晶表面の電子状態
 2. 難波秀利 (立命館大学理工学部) 1次元性表面の研究
 3. 重田諭吉 (横浜市立大学理学部) 走査型顕微鏡による元素分析の可能性
 4. 栄原 浩 (九州大学工学部) 表面での秩序化－核形成と成長－
 5. 増田 茂 (東京大学教養学部) 準安定原子と固体表面の相互作用

10:35 休憩

10:55 再開

（神戸市立図書館） 次々にノルマ化された書類の相手先用

T.K.Ng.

(2) The mobile holes in the underdoped cuprates are described by the $SU(2)$ gauge theory, where the two species of the slave bosons are introduced. It is shown that the confinement problem is closely related to the insulator-superconductor transition.

(3) When the mobile holes are present, the nonmagnetic impurities causes the residual resistivity. The magnitude of this residual resistivity is strongly correlated with the formation or screening of the localized spin moment. I proposed this as the new type of the Kondo effect in the spin-charge separated state where the correlation in the conduction electrons play significant roles.

My collaborators are P.A. Lee, H. Fukuyama, A. Furusaki, M. Sigrist, X.G. Wen, and

分解光電子分光計算と角度分解逆電子分光計算を行って、実験との比較などにより、量子井戸状態など金属超薄膜でよく見られる構造の研究をあげたい。我々の研究室では過去数年にいくつかの角度分解光電子分光のスペクトルの計算を行ってきており、特にコバルト表面の銅薄膜と銅表面上のコバルト薄膜で、逆光電子スペクトルを計算して実験[2]と比較することを比較的最近行ったので、以下に紹介する。[3]

銅表面上のコバルト薄膜については、銅表面がフェルミ準位より上でバンドギャップがあることから、期待通りの量子井戸状態が実験と動搖に計算で再現される。しかし、コバルト表面上では、フェルミ順位より上あたりはdバンドであり、バンドギャップがあるわけではないが、実験的には量子井戸状態とおぼしきピークが逆光電子分光スペクトルに見られる。そこで、計算で確認してみたところ、全くピークは確認されず、何らかのメカニズムを別に仮定しないと実験で観測されているピークは再現できない。少なくともこの計算で文献[2]の提案する界面での電子波の反射にCu/Co(100)系の量子井戸の起源を求める考え方には大きな疑問が示された。

研究の実行段階では銅とコバルト以外の組み合わせについて、実験の状況とも合わせ角度分解光電子分光を計算していく。また、銅とコバルトの場合について、第一原理分子動力学計算を行って、電子状態の確認をしてみると共により精密なポテンシャルの生成にも勧める。

- [1] A.Ishii, K.Yamada, T.Aisaka and T.Kraft, Phys.Rev. B51 (1995) 12498
- [2] J.E.Ortega, F.J.Himpel, G.J.Mankey and R.F.Willis, Phys. Rev. B47(1993) 1540
- [3] A.Ishii, T.Aisaka and K.Yamada, Surface Science 357 - 358(1996) 331

二次元電子分光による局所構造、電子状態、スピニの研究

大阪大学基礎工学部 大門 寛

二次元光電子分光の手法を用いて、新奇な表面の原子構造、電子構造、スピニ構造を測定し、物性発現のメカニズムを解明することを目的とする。

1. 原子構造の解析には、これまで用いてきたXPS光電子回折、ホログラフィーの手法を用いる。この際、励起光に高輝度光源を用い、ミラーで収束させることにより、ミクロンオーダーの局所構造解析ができるようにしたい。
2. 電子構造の解析には、二次元的なUPSを行い、状態密度やバンド分散、バンドの異方性や対称性、特にフェルミ面付近の電子状態を詳しく調べる。表面の物性（輸送現象や相転移、ネスティング）と電子状態の関連を明らかにする。これには、現在作製中のエネルギー分解能を高めた分析器を早急に立ち上げる必要がある。
3. スピニ構造の解析は、円偏光光電子の二次元角度分布を測定することにより行う。表面では、

バルクと大きく異なるキュリー温度、巨大磁気抵抗、反強磁性的結合など、興味ある磁性が発現している。円偏光光電子は、ある条件でスピンを揃えることができ、その光電子回折パターンの円二色性を測定することにより、各原子のスピンの向きと大きさを調べることができるはずである。これにより、表面磁性を原子レベルで解析する事を目指す。

表面のスピン相関

山梨大学工学部 鳥養映子

表面スピン計測への関心は、原子分解能の超高密度磁気メモリー、スピンデバイス、量子的スピン演算素子など、次世代機能性物質探索への期待と相俟って、急速に高まっている。スピン偏極STM(SPSTM)の原理実験成功の相次ぐ報告は、原子分解能のスピン計測実現への期待を大きく膨らませてくれた。しかし、強磁性を除く多くの表面状態の磁性に、局所的なスピン選択電子交換に対して安定な基底状態がはたして存在するだろうか。

遷移金属表面磁性の偏極低速電子線回折(SPLEED)、偏極電子捕獲(ECS)、角度分解偏極光電子分光(SPARES)、内部変換メスバウア分光(CEMS)、表面磁気光学カーエフェクト(SMOKE)等の実験研究は、表面の磁気秩序状態が、観測の時空相関の尺度が異なれば多様な側面を見せること、すなわち表面特有のスピンのゆらぎが存在することを示唆した。

表面固有のスピン現象を理解するためには、表面第一原子層のみに感度を持ち、スピンの時空相関を広範囲にわたり観測可能な新しい表面スピン計測の方法が必要である。そこで、我々は、それぞれ特有の観測の時空尺度を持つ、

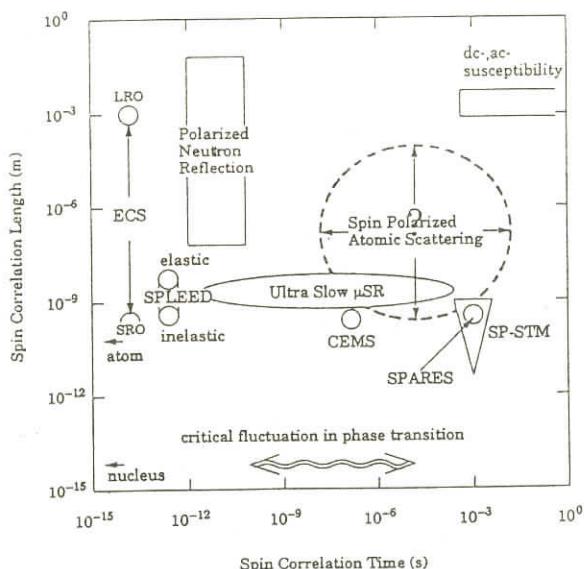
次の新しい観測手段により、表面上におけるスピン相関の解明に取り組む。

1. dynamic probe: スピン偏極原子

線散乱法

2. static probe: 超低速ミュオൺスピ
ン緩和法

前者は、原子と表面の動的散乱過程における交換相互作用のスピン非対称性を通じて物質最表面のスピン相関を研究しようという全く新しい試みである。スピンと運動エネルギー(0 - 10keV)を自在に制御できる



ユニークな偏極原子プローブ（スピニン偏極原子線）を用いて、動的共鳴電荷移行のスピンおよびエネルギー依存性を解明する。

後者は、東京大学中間子科学研究所が高エネルギー物理学研究所に初めて建設した熱エネルギー・ミュオンビームを物質表面にとめて、表面原子層からの μ SR緩和信号の取りだしを目指すものである。10⁻⁴から10⁻¹³sの広い時間相関を連続的に検出できるので、臨界現象の解明に有力な手段である。

表面スピン制御への期待に刺激されて、近年、種々の表面スピン計測手段が開発されている。これらの中から特徴的な表面スピンの微視的観測手段を、観測の時間相関と空間相関という座標の上で比較して示す。

波長可変SHG法による反応中の表面電子準位の観察

北陸先端大・材料 水谷五郎

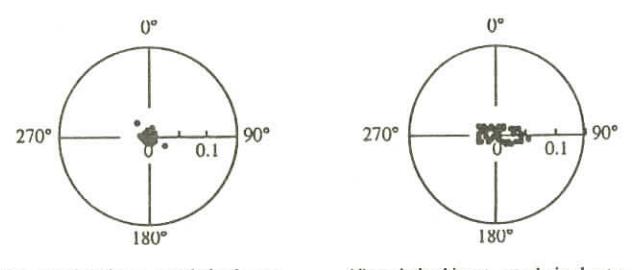
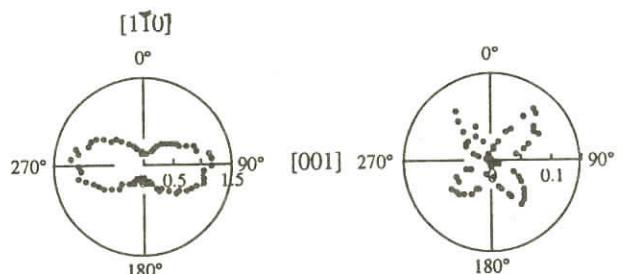
①反応中表面の表面電子状態の変化を光第二高調波発生(SHG)法で観察し、その表面構造、電子状態、触媒活性等の相関を探る。表面SH顕微像を得て、空間的状態変化とともに「表面反応の原動力」を探る。触媒等表面に「反応場」と名づけるべきものがあるか、を探る。

②金属層形成を、SHG法によっ

て見える表面電子状態を通して観察する。代表的で金属の表面層形成中の電子が、自由電子的か束縛電子的かを、特に界面と垂直方向の電子運動の観点から決定する。

③金属表面固有の強い光学的非線形効果の起源を探る。表面超構造等と非線形効果の関係を明かにし、高い非線形効果をもつ表面を開拓することにより開拓する表面オプトエレクトロニクスの基礎の足掛かりとする。

次に、特に①に関連した研究



の現状を紹介する。

図は、水分解光触媒TiO₂(110)の空気中におけるSH光強度の方位角依存性である。きれいなパターンの起源は、TiO₂(110)面のTiとその列にのっかったBridging OxygenによるTi-O-Ti-O-chainの非線形効果と考えられる。このパターンに寄与しているのは非線形感受率 $\chi^{(2)}_{S113}$, $\chi^{(2)}_{S322}$, $\chi^{(2)}_{S333}$ である。ここで添字1, 2, 3はそれぞれ[001], [110], [110]方向を表す。3つの非線形感受率の寄与は、それぞれ図(b), (d), および(a)の0度付近で単独にピックアップできる。これらはそれぞれ異なった方向に分極ができるプロセスに対応しており、これによりTi-O-chainの中の電子の応答の情報がわかる。更に、入射波長掃引によるそれぞれのプロセスに共鳴する表面電子状態分離、紫外光による触媒活性を励起後の変化、水分子吸着後の変化より、触媒現象過程の表面電子状態という観点からの追跡が可能である。この時間分解シグナル、および二次元像の観察による解析の準備を進めている。

またこの手法を金属初期吸着界面にも適用し、金属吸着初期界面における表面電子状態の変化、およびそこで観察される高い非線形感受率の起源を解明する。

HREELS-STMによる表面局所構造の電子状態の研究

東北大大学院理学研究科 須藤 彰三

我々のグループでは、表面の局所構造、表面に吸着したナノスケール構造やクラスターの物性、特に、それらの電子励起に興味を持ち研究を行っている。このような系では、構造を決定しながら物性を測定する必要がある。そこで、振動状態と電子状態を感度良く測定するための高分解能電子エネルギー損失分光器(HREELS)とそれらの構造を観察するための走査トンネル顕微鏡(STM)を備えた複合測定装置(HREELS-STM)を開発してきた。この研究会では、はじめにSi(111)-(7x7)およびSi(100)-(2x1)表面に吸着したカーボン60(C₆₀)を例として、この装置の有効性を示す。つぎに、現在この複合測定装置の改良すべき問題とそれによって得られる表面局所物性を議論したい。

Si(111)-(7x7)表面に吸着した1MLのカーボンC₆₀は、10~20nm²の領域で局所的にオーダーした格子を形成することがSTMにより観察される。Si基板を600Kに加熱した場合でも、その表面構造に顕著な変化は観測されない。しかし、HREELSにより、同じ試料でエネルギー損失を測定すると、600Kでは、C₆₀の4個の赤外活性なモードのうち二重結合の関与する振動モードがソフト化していることが観測される。これらの観測から、C₆₀がこの温度で、安定な位置に移動しSi原子との共有結合性を強めていると結論できる。

一方、この系の1100Kに加熱した後のHREELSのスペクトルは、600Kの場合と著しくなる。

C_{60} のケージが壊れていると考えられるが、STM像には、はっきりと C_{60} のケージが観察される。その C_{60} のケージ間隔は平均 9.4Åで、バルクの間隔 10.0Å より縮んでいる。さらに、HREELSのスペクトルは、 C_{60} 結晶の可視または紫外光レーザー照射後の赤外吸収スペクトルにほぼ一致している。この結果は、熱を加える効果と光照射が C_{60} ケージに同様の変化をもたらすことを示し、さらに、 C_{60} ケージ間の共有結合あるいはポリマー化の可能性を示唆する。このような反応性は、Si(111)-(7x7)およびSi(100)-(2x1)表面では大きく異なってくる。

このHREELS-STMの複合測定では、HREELSの電子ビームは $1 \times 5 \text{ mm}^2$ 程度の拡がりをもち、マクロな領域の情報を与える。しかし、STMのミクロな情報を取り込むことにより、ミクロな表面の局所構造の物性が抜き出せることを振動状態を例に示した。現在、HREELSの入射電子エネルギーは 0 ~ 250eV であり、電子準位の共鳴励起が測定可能である。しかし、損失エネルギーの測定範囲は 0 ~ 1.2eV であり直接、電子励起の情報を得ることはできない。この測定エネルギー範囲を 0 ~ 20eV に拡張することにより、プラズマ振動やバンド間励起の測定が可能になっている。

表面電子準位が作る二次元電子系の物性

東京大学大学院理学系研究科物理学教室 長谷川 修 司

シリコンの表面は、表面科学の最も重要な研究対象であり、膨大な知識が蓄積されない。清浄表面は当然として、単原子層程度の異種原子を吸着させた時に形成される「吸着表面超構造」も300種類以上知られており、おののの表面について原子配列や電子状態などが詳しく研究されている。しかし、このような表面特有の構造が実際にどんな特異な物性を示すのか?という観点からの研究は非常に少ない。これぞ「表面物性」研究の真骨頂であるはずだが、表面構造の解析と状態分析だけでも手ごわいため、物性測定まで手がまわらない、というのが現状のようだ。

私たちは、これらのシリコン表面上の様々な吸着表面超構造を利用し、表面上の僅か一原子層程度の原子配列の変化が表面電気伝導にどんな影響を与えるのか、という素朴な疑問から出発して研究を続けている。思い起こせば、半導体の表面電気伝導の問題は、現代的な表面物理研究の端緒となつたトランジスタ発明の時代から続く古いテーマであったはずだが、近年の「原子スケールでの構造・状態解析」の研究という流行の影に隠されてしまつてある感がある。このテーマはむしろ、表面の原子配列構造には「無縁」なデバイス物理やメソスコピック物理の研究の中心テーマになつていった。そこで、今こそ、私たちは、原子尺度での構造と電子輸送特性を関連づけることによって、半導体表面物理学の健全な姿を取り戻したいと考えている、と誇張して言えなくもない。実際、私たちは、従来、表面電気伝導と言えば、表面空間電荷層を通るものだけを意味したが、それとは別に、表面超構造に由来する表面電子準位が作る二次元バンドを通る電気伝導も存在することを見

いだし、原子配列構造と電気特性が密接に関連する具体例を示すことができた。このタイプの伝導は、言わば表面最上原子層だけに局在した生来的に二次元的な電子系によるものである。だから、ヘテロ接合界面などに形成された空間電荷層による従来の二次元電子ガス系と異なる物性を示すことが期待できると考えている。

吸着分子の電子励起状態

理 研 宗 像 利 明

[1] 序

光励起に伴う表面吸着分子の化学過程は、表面科学としての重要性のみならず、表面加工の基礎過程として重要性が高まっている。表面での光励起反応は、吸着分子の中性電子励起状態や負イオン状態を経由して進行すると考えられている。しかし、これらの状態についての分光情報は殆ど知れていない。また、寿命も全く知られていない。この現状において、吸着分子の電子励起状態の分光測定を行うことは、表面の光反応ダイナミクスを解明する上で不可欠であると考えられる。ここでは、電子励起状態を測定する方法として、2光子光電子分光法に注目する。2光子光電子分光法では、レーザー光照射で吸着分子の励起状態を生成し、さらに、もう一つの光子で励起準位からの光電子放出を誘起する。この方法は、気相分子の励起準位の分光法として一般的である。しかし、表面においては、励起準位の寿命が数～数百fsと極端に短いために励起・イオン化の効率が低く測定に多くの困難が生じる。このため、表面での2光子光電子分光の測定例は金属の鏡像準位や、半導体の表面準位といった比較的寿命の長い励起準位に限られていて、吸着分子については報告例は非常に少ない。

[2] 研究計画

これまでに、Cu(111)面に吸着したNO分子の2光子光電子分光を行ってきた。その中で、特に、スペクトル線幅が興味深い性質を示しているように思われる。実験的には、励起状態、負イオン状態ともに0.2eV程度の線幅を示し、分子内振動かと思われる微細構造も観測されている。逆光電子分光などでは負イオン状態の幅は0.6eV以上と見積もられており、また、励起状態が金属の伝導体の中に埋もれていることを考えると、2光子光電子光で得られた幅は非常に狭いものに思われる。一方、電子励起状態の寿命は10fs前後と考えられることが多いが、寿命だけを考えるならスペクトル線幅はより狭いことも考えられる。そこで、電子分光の高分解能化を図ることで、電子励起状態の自然幅を測定することをめざすとともに、フェムト秒レーザーを光源とすることで励起状態の時間的振る舞いを実時間でとらえることを試みる。フェム秒レーザーと高分解能電子分光の組み合わせでは、時間分解能とエネルギー分解能の極限の測定が可能である。また、吸着分子の中性励起状

態と負イオン状態とは電子の数が1個違うだけであるが、両者の差には分子内での電子相関、表面による荷電粒子の安定化など重要な因子が含まれていて興味深い。測定対象としては、金属に吸着したNO分子の電子励起状態に注目するが、ベンゼンなど比較的大きい分子も興味深い。また、2光子光電子分光法では、レーザー光の偏光特性を利用して関与する準位の対称性を決定できることも利点である。これらの測定から得られる結果を光脱離の結果などと比較検討することで、表面における光化学反応の動的過程を解明する事を目指す。

UVSORにおける光電子顕微鏡実験（表面磁性の研究に向けて）

分子科学研究所UVSOR 木下 豊彦

最近我々は分子科学研究所UVSOR施設において放射光を利用した光電子顕微鏡実験¹⁾を開始した。光電子顕微鏡には光のビームサイズを絞ってサンプルの場所を少しずつ変えながら光電子信号を測定する手法^{2,3)}と、ビームの大きさは数mm ϕ のままで電子レンズによって光電子の像を拡大する手法⁴⁾がある。また、それぞれの手法について、出てきた光電子すべてを集める場合と、光電子のエネルギー分解をする場合がある。残念ながらUVSORの現状のビームラインでは光のサイズを μm オーダーまで絞り、なおかつ光電子分光に充分な強度を保つことは難しい。そこでわれわれは、光電子のエネルギー分析が行えかつ電子レンズで観測を行う方法を採用した。装置本体は市販のもの(FISONS社製、ESCALAB220i-XL)を用い、UVSORのビームラインにつなげることによって実験を行っている。通常のX線管も備えており、オフラインでの測定も可能である。この方式ではビームサイズを絞る方式よりもはるかに広い範囲で光エネルギーを変えられるメリットがあり、いろいろなサンプルのいろいろな電子状態についての測定が可能になることが期待できる。位置の分解能は通常の電子顕微鏡などには及ばないが、数 μm から数十 μm のオーダーであり、その微小領域からの光電子スペクトルの測定が可能である。また、サンプル表面のelement specific imagingを行うことも可能である。この位置分解能は非常に大きなドメインサイズ程度であるが、ほとんどの光電子分光実験が表面全領域からの信号を平均化して測定していることに比べると、いろいろと違った情報を得る可能性を秘めている。

現在微小サンプルからの光電子スペクトル測定、レーザーアニールによって局所的に加熱された表面の観察など、いくつかの研究を計画しているが、そのうちの一つとして表面磁性の研究に取り組みたいと考えている。強磁性体表面に現われる磁区ドメインの大きさはちょうど我々の装置の位置分解能に適した大きさであり、外部磁場を加えることなく表面磁性を担う電子状態の情報が得られることが期待される。円偏光放射光を利用したときに現われる磁気円2色性をつかって磁区ドメインの観察をした例^{5,6)}は有名であるが、我々は直線偏光や通常のX線管からの光でも磁区観察が

行える可能性^{7,8)}を示した。磁気 2 色性は反強磁性体にも応用が可能であること、UVSORでも現在円偏光ビームラインの建設が進んでいる⁹⁾ことなどから、今後いろいろな吸着表面や温度を変えながらの測定を行っていく予定である。

- 1) For example, B.P.Tonner et al., J.Electron Spectrosc. Relat. Phenom. 75(1995)309.
- 2) C.Kunz and J. Voss, Presenius J. Anal. Chem. 353(1995)494.
- 3) U.Johansson et al., Rev. Sci. Instrum. 66(1995)1398.
- 4) K.Holldack and M.Grunze, Analytica Chemica Acta 297(1994)125.
- 5) J.Stöhr et al., Science 259(1993)658.
- 6) C.M.Schneider et al., Appl. Phys. Lett. 63(1993)2432.
- 7) F.U.Hillebrecht et al., Phys. Rev. Lett. 75(1995)2224.
- 8) 木下他, 日本物理学会1996年秋の分科会講演2pD9.
- 9) M.Kamada et al., Rev. Sci. Instrum. 66(1995)1537.

表面偏析と仕事関数

京都大学工学部附属メゾ材料研究センター 酒井 明

金属 A の表面を金属 B が被覆している場合には、膜厚が 1 原子層の場合にも、表面の仕事関数は金属 B の仕事関数になる。被覆率が 1 よりも小さい場合には、問題は金属表面への異種金属の吸着として扱われ、この時の仕事関数の変化は、定性的には地下金属と吸着金属の間の電荷移動によって決定されると考えられる。吸着原子の電気陰性度が大きければ、地下から吸着子に電子が移動して表面双極子は大きくなり、仕事関数は増大する。電気陰性度の小さな吸着子の場合には仕事関数は減少する。

表面偏析の場合には、仕事関数はどのように変化するのであろうか？合金表面の実用的な重要性にもかかわらず、この問題は系統的には調べられておらず、基本的な問題が未解決のまま残されている。(1)被覆率が小さい場合には、偏析系は吸着系と同様に扱われる(topping model)ことが多い。このモデルでは、仕事関数の変化は地下原子と偏析原子との間の電子移動によって説明されるが、仕事関数の増減は電気陰性度の大小とは必ずしも一致していない[1]。偏析系が吸着系と同等に見なし得るかどうかについては、より多くの系でのデータの蓄積が必要であると思われる。(2)仕事関数が表面層だけで決定されるとすると、偏析系の仕事関数は表面組成と同じ組成のバルク合金の仕事関数に一致すると考えられる。しかしながらバルク合金の仕事関数の組成依存性もまたほとんど知られていないため、この問題については手がかりが非常に乏しい。NiCu偏析系の理論計算[2]に依れば、NiCu合金の仕事関数はNiとCuの仕事関数をほぼ直線的に内挿した値となっているが、

AgAu系では直線関係からのずれが報告されている[3]。

我々の研究室では、合金の電界放射エミッタを用いて偏析系の仕事関数を調べる研究を行っており、これまでにNiAu,NiCu,TiCuエミッタに対する測定を行っている。NiAuエミッタの実験では加熱による仕事関数の低下が観測されており、これはAuの（非平衡）表面偏析によって説明される[4]。NiCuエミッタでは、加熱により仕事関数は低下するものの、実験結果はまだ明確なものでない。Ti上のCu偏析では仕事関数の低下が報告されているが[5]、TiエミッタにCuを蒸着した実験では仕事関数の低下は認められていない。

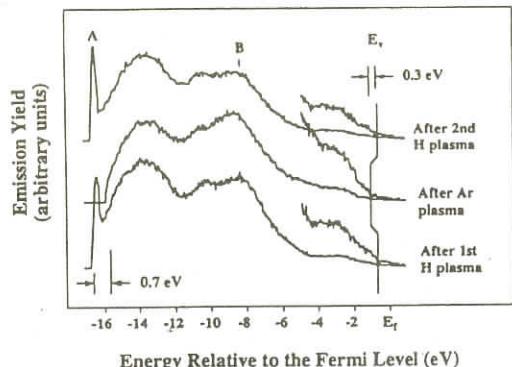
電界放射エミッタは加熱と電界蒸発によって偏析層を生成・除去できる利点があり、仕事関数の精度は高くはないものの、表面偏析と仕事関数の関係を系統的に調べる研究には適した手法であると言うことができる。

- [1] D.R.Baer, C.W.Hubbard, and R.L.Gordon, J.Vac. Sci. Technol. A10, 2391 (1992).
- [2] A.V.Ruban et al., Phys. Rev. B49, 11383(1994).
- [3] S.C.Fain, Jr. and J.M.McDavid, Phys. Rev. B9, 5099(1974).
- [4] T.Nakane et al., submitted to J.Vac. Sci. Technol.
- [5] M.Yoshitake and K.Yoshihara, J.Vac. Sci. Technol. A13, 2407(1995).

高温ダイヤモンド表面の負性電子親和力のその場観察

東北大学科学計測研究所 高 桑 雄 二

最近、薄膜成長やエッチングなどの表面反応を「その場」観察できる多くの表面解析法が開発され、表面反応の動的素過程の解明のみならず、表面反応制御にも利用されている。その中でRHEED強度振動法と光反射法(SPA/RDS)は、ガス雰囲気中の高温の基板表面を簡単な実験設備で容易に観察できるので、広く用いられている。我々はこれらに加えて、ガスソースMBEによるSi結晶成長をUPSで「その場」観察する手法を開発した[1]。この「その場」観察UPS法では、Si成長中の表面状態を価電子帯の光電子スペクトルを用いて調べるものである。そして、シンクロトロン放射光を用いて励起光エネルギーを大きくすることで、内殻準位を用いて組成や化学結合状態の解析をより直接的に行うことも可能となる。



本研究では、この「その場」観察UPS法を、負性電子親和力(NEA)を示すために高効率の電子源として期待されているダイヤモンド表面に適用する。ダイヤモンド表面をNEAとするためには、GaAsやSiにおけるような低仕事関数の金属を蒸着することを必要としない。しかし、下図に示すように、NEAの出現はダイヤモンド表面の水素吸着状態に強く存在する[2]。その起因については、まだ解明されていない。

プラズマ法によるダイヤモンド薄膜の気相成長中に、基板に負バイアスを加えると、ダイヤモンドの核形成と成長が著しく促進されることが報告されている[3]。この促進効果は、ダイヤモンド表面から電子放出が起きているためではないかと考えられている。水素で希釈したメタンを用いた気相成長において、ダイヤモンド成長表面は水素で覆われているので[4]、上のことからNEAによる電子放出も可能と思われる。この電子放出に結び付いた成長促進は、ダイヤモンド成長において大変に重要なことと考えられるが、その起因についてはプラズマ中での現象なので、まだ、殆ど解明されていない。そして、これまでのダイヤモンド表面のNEAの研究が全て室温で行われ、高温かつガス雰囲気下でのダイヤモンド表面の電子状態については全く調べられていない。

そのため、高温ダイヤモンド表面のNEAを「その場」観察UPS法で調べ、NEA出現と表面状態、そして、電子放出効率を解明することを本研究課題とした。

引用文献

- [1] Y.Takakuwa et al., OPTOELECTRONICS - Devices and Technologies 11(1996)3.
- [2] J.van der Weide and J.Nemanichi, Appl. Phys. Lett. 62(1993)1878.
- [3] L.S.Lee et al., Appl. Phys. Lett. 67(1995) 1555.
- [4] T.Nishimori et al., J.Vac. Sci. Technol. 13(1995)2781.

スペクトルマッピングによるトンネル発光像と局所物性

九州工業大学情報工学部 西谷 龍介

梅野 剛

東北大学金研 細谷 厚生

局所物性の研究手法として局所領域の光学特性を測定することは、非占有状態の情報が得られること、エネルギー分解能が高いこと、種々のエネルギー励起、緩和過程の情報を含むことなどの点で有意義である。

ナノメータスケールでの局所光学特性を測定するには、空間分解能の点で、現時点ではSTMを用いたトンネル発光測定が最も優れている。この手法を局所物性研究で有効に活用していくためには、第一に、単にナノメータスケールで位置を指定して、励起スペクトル、発光スペクトルなどの

を測定ができるだけでなく、これらのスペクトルの2次元空間マッピング測定ができることが、局所幾何構造と電子状態の詳細な検討を行う上で不可欠である。第二に、これらの光学測定やSTS測定も含めて、種々の物性量測定も並行して測定できること、第三に、これらの物性測定を幾何学構造と詳細に対応させて検討するためには、これらの物性量がSTM像と同時に測定できることが重要である。

我々は、現在以上の条件を満たすようにトンネル発光像測定装置を自作し、これにより、トンネル発光スペクトルの2次元空間マッピング測定、STS測定、STM像測定の三つの方法の同時測定を可能にしている。これらの測定により、発光スペクトル分解発光像やCITS像を測定できている。現在、蒸着により作製した金薄膜において、直径5から20nmの金微粒子に対して以上の測定を行い、発光スペクトルに依存した発光像を測定している。これによれば、600から660nmの発光では微粒子構造とよく対応した発光分布が得られるが、680から880nmの発光ではそれとは異なる発光像（分布）が得られている。このことは、異なる幾何学構造のスケールに依存した発光モードが存在していることを示唆している。この発光は薄膜の深さ方向の構造や微粒子間の接触条件にも依存すると考えられ、この現象の機構の解明は今後の研究をまたねばならないが、ナノメータスケールでスペクトルに依存した発光分布が測定できたことは、今後の局所光学物性研究の進展にこの方法が有力であることを示している。他の物性測定として、発光測定とSTS測定の同時測定も行い、発光強度と局所電子状態密度の比較も行った。理由は明らかではないが、発光が弱い局所領域の電子状態密度がフェルミ準位付近で低いという相関を得た。

今後、これらのナノメータスケール局所物性量のマッピング測定により、半導体微粒子、マイクロクラスターなどナノスケール量子系の電子状態、および配列構造に依存した電子状態など、幾何学構造およびスケールに依存した電子状態の研究の進展が期待できる。

エネルギーフィルター型RHEED・AESによる表面構造の研究

名古屋大学大学院工学研究科量子工学専攻 堀尾吉巳

これまで、エネルギーフィルター型RHEED装置の開発、及びそれを用いた半導体結晶表面の研究を行ってきた。それによって、従来のロッキング曲線と非弾性散乱成分を除去したロッキング曲線の違いを明らかにし、表面プラズモン損失を考慮した動力学的計算手法による解析も行ってきた。また、反射回折電子や菊池線のエネルギー損失スペクトルを測定することにより、その損失機構を調べてきた。

今後の研究としては、エネルギーフィルター型RHEEDの利便性を生かしたテーマとして次の2点を考えている。エネルギーフィルター型RHEEDはバックグランド強度を抑えることができる

ため、高いコントラストのパターン観察が可能である。従って、表面の構造相転移や表面モホロジーに関連するディヒューズな強度分布に注目した研究を進めたいと考えている。他は、MBE成長中のRHEED強度振動は成長モニターとして現在広く用いられている手法であるが、その振動の物理について十分理解されていないものと思われる。特にオフプラグ条件下の弱い回折電子強度にはかなりバックグランド強度も含まれているものと考えられ、解釈を困難なものとしている。そこで、非弾性散乱成分を除去した場合の強度振動特性と従来のものとの違いに注目し、強度振動の物理にアプローチしたいと考えている。

さらに興味のあるテーマとして、次に挙げるものがある。RHEEDの電子線により、試料表面からは2次電子や特性X線が放出されている。以前、オージェ電子強度の入射条件依存性を調べ、その情報から表面構造に関する知見が得られるものと考え、研究に取り組んだ経験がある。その際、オージェ電子強度の異常な振る舞いを捕らえることはできたが、その実験結果の解釈については運動学的計算の範囲に留まり、詳細な解明は残されたままであった。現在、このような現象について、結晶内の詳細な動力学的波動場計算の立場から解釈できるかどうか研究を進めており、補助的な表面構造の解析手段としての活用を目指している。

以上が現在考えている今後の研究の展望であるが、いづれにせよ、新たな実験装置の必要性は極めて深刻なものである。

エピタキシャル成長における欠陥の役割

山梨大教育 川村 隆明

量子デバイスなどの作成技術として分子線エピタキシー(MBE)を始めとするエピタキシャル成長法が広く使われている。またSiなどの表面に酸化膜を成長させたり、化学反応を利用した表面エッチャングなども量子デバイスなど作製の基礎として研究が行われている。エピタキシャル成長における重要な点は、原子1個の動きと原子配列をいかに制御するかであり、これはとりも直さずステップ、キング、原子欠損(vacancy)などの欠陥をいかに制御するかである。欠陥の役割はヘテロエピタキシーにおいてはさらに複雑になるが重要性は変わらない。われわれは広い意味での表面における成長を原子レベルで理解するのに、欠陥と、その動的過程にとくに注目して、半導体を主な対象として、シミュレーションを使った研究を行っている[1,2]。

今後の主な課題は、

- 1) 欠陥のひとつである位相境界(out-of-phase boundary)が成長に対して行う役割を明らかにする。成長では一般的に均一には起こらない。したがって、ドメイン境界や位相境界などが生じる。この位相境界が2次元層状成長を促進する場合と3次元成長を引き起こす場合がある。こ

れは位相境界と成長原子との性質に依存するが、うまく制御することによって、必要な原子配列をつくることができるはずである。例としてSi(111)面上のホモエピタキシャル成長における位相境界の解析を現在行っている[3]。

- 2) 位置選択的な化学反応の利用。これまで、一つの例としてわれわれはGaAsおよびSiの2次元層状エッチングを調べた。AsBr₃をエッチャントとしてGaAsをエッチングする場合、Gaで終端したステップでの選択的エッチングが行なわれていると考えられるデータが得られている[4]。このような位置選択的な化学反応を利用した成長の原子レベルでの過程の解析は、平坦性の高い表面や、必要な原子配列をつくる上の基礎として必要である。
- 3) ヘテロエピタキシャル成長のシミュレーション法の開発。これまでホモエピキシャル成長について、現実的な大きさの系を取り扱えるシミュレーション法として、モンテカルロ法が開発され、広く使われてきた。しかし、ヘテロエピタキシャル成長についてのモンテカルロ法は、1次元の簡単なモデルなどに限られている。われわれは主な困難である格子不整合をうまく扱うことができるアルゴリズムを考えたので、これを用いたシミュレーション法の開発を行おうとしている。この方法は2つ以上の異なる層が成長する場合に使うことができるはずなので、エピタキシャル成長だけでなく、表面酸化などにも利用できるものと考えられる。

われわれのシミュレーションは、比較的マクロな(～1 μm程度)大きさをもつ位相境界などの動きから、Si(100)面上のダイマー及びその欠陥のような原子レベルのミクロなものまで解析できるものである。また、このシミュレーションは秩序-無秩序転移などの表面での現象にも応用できる。[5]。実験と相補的に使うことができ、とくに実験的に動的解析が難しい場合において有力な方法である。

文献 :

- [1] T.Kawamura, Prog. Surface Sci. 44(1993)67.
- [2] T.Yokotuka, M.R.Wilby, D.D.Vvedensky, T.Kawamura, K.Fukutani and S.Ino, Appl. Phys. Lett. 62(1993)1673.
- [3] H.Hibino and T.Ogino, Appl. Phys. Lett. 67(1995)915.
- [4] T.Kaneko, P.Smilauer, B.A. Joyce, T.Kawamura and D.D. Vvedensky, Phys. Rev. Lett. 74(1995) 3289 - 3292.
- [5] J.M. McCoy, P.A.Maksym and T.Kawamura, Surf. Sci. 257(1991)353.

豊田工業大学大学院工学研究科 吉村 雅満

表面における欠陥は、ステップ、点欠陥、不純物などさまざまなタイプがあるが、これらはいずれも、表面反応やエピタキシーにおいて重要なサイトとなっている。これまでにシリコン表面のステップ端の電子構造についてトンネル分光法(STS)により調べ、局所的な電子移動に関する知見を得ており、なぜステップ端に原子が取り込まれやすいか等を明らかにした。

現在興味を持っていることは、人工的に欠陥を作り出し、これらの集団としての振舞いを原子レベルで明らかにすることである。一つの具体例を示すと、図のように、水素吸着表面をアニールすると、シランなどの脱離により表面のシリコン原子がエッチングされる。このとき、結晶の回復過程が同時に進行している。しかし、表面シリコン原子の動くエネルギーは十分あるが、同時に形成されるエッチングの副生生物が大きな欠陥として表面に残るため、これらが一時的に欠陥領域を閉じめることになる。このとき、欠陥が再配列しシリコン密度の小さな準安定なSi(001)-c(4x4)構造を形成する。同様の構造がホモエピタキシなど結晶成長中に出現することはきわめて興味深い。一方、欠陥領域の制御により特異な表面構造を創製することにも大変興味を持っている。

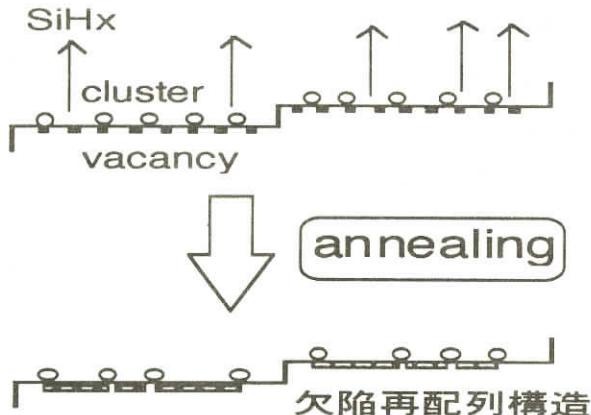
そこでこれらの研究としては、

1. 欠陥再配列の形成メカニズム（水素の脱離プロセスを含む）
2. 欠陥表面の特性－安定性、反応性、原子構造、電子構造

などについて広く深く追及していく、欠陥表面のもつポテンシャルを十分に引き出したいなどに

について広く深く追及していく、欠陥表面のもつポテンシャルを十分に引き出したいと考えている。

研究手法としては局所構造分析に威力を発するトンネル顕微鏡／分光法をメインに考えている。



水素終端によるSi(111) 上でのCuの成長過程の制御

大阪電気通信大学エレクトロニクス基礎研究所 安江常夫

固体表面上での結晶成長過程については、現在までに数多くの研究がなされてきた。特に半導体表面上での金属薄膜形成に関しては、様々な再配列構造が出現することから勢力的に研究がなされており、現在でもその勢いは衰えていない。また近年サーフアクタントを用いた結晶成長過程の制御に関する研究がなされている。本研究ではそのうち特に水素を用いた場合について論じてみたい。その理由としては、水素は最も単純な元素であること、取り扱いが容易なこと、形成された薄膜の特性にはあまり影響を及ぼさないことが予想されることなどが挙げられる。すなわち応用的な側面から見たときに、使いやすいと言うことが重要なポイントになる。しかし水素自身を検出する方法が限られているため、水素により結晶成長過程の制御が可能なことはわかっても、その基礎的な過程はあまり論じられていないようと思われる。ここでは今までに我々の研究室において得られたCu/Si(111)に対する水素終端効果について述べ、今後何をねらって研究を進めるべきかについて考えてみる。

これまでに行った研究から明らかとなったことをまとめると以下のようになる。

1. 室温基板上では水素終端効果はあまり顕著でない。
2. 基板温度が上昇すると、islandが形成され温度と共に高さが増す。
3. islandと共に“5x5”構造も形成され、温度と共にその面積が増大する。

こう言った現象が起こる理由として考えられることは、CuとSiの反応性が高いために、Cuのあるサイト上で滞在時間により成長過程が決まると言うことである。つまり室温基板上では滞在時間がある程度長いため、水素とCuの置換が起こりやすくなり、清浄表面上とあまり大きく違わない成長形態をとる。一方基板温度が上昇すると表面拡散が支配的となり、核発生頻度が低下するためislandの形成が起こる。温度が上昇すれば核密度が低下するためislandは高くなることが説明できる。“5x5”構造の形成については、水素の熱脱離と関連があると考えられる。このように水素終端の効果は、表面上のダンギングボンドを潰すことによる表面拡散の変化という形で表れている。これをうまく使えば表面拡散を制御することにより、例えば表面上に微細構造を形成することが可能かもしれない。すなわち表題の成長過程の制御とは、表面拡散の制御と言うことになる。

以上のように水素終端により結晶成長過程、あるいは表面拡散の制御の可能性があることはわかったが、薄膜形成時には水素はどこにいってしまうのかが問題となる。Cuと完全に置換して脱離してしまうのか、界面に相変わらず存在し続けているのか、あるいは薄膜中に取り込まれているのか？これを明らかにしない限り水素の果たす役割を完全に解明できたとは言い切れないと思われる。そこでERDAを用いた水素の深さ方向分析を行いたいと考えている。我々の実験装置では高分解能でエネルギースペクトルを得ることができるので、今までに行われてきたERDAとは比較

にならないほど高い深さ方向分解能で水素の検出ができる可能性がある。しかし検出に際していくつかの問題点があるので、発表ではこれらの問題点に関しても議論をする予定である。

fcc鉄薄膜の表面状態と反応性

宇都宮大学工学部応用化学科 江川 千佳司

これまでの表面研究は、主に単結晶を切断してできる表面に限定されてきている。これに対して、下地にfcc構造の金属単結晶表面を用いて形成されるfcc鉄薄膜の表面物性は、地下の格子定数によって大きく変化することが理論的に予想されている(I)。特に、フェルミ準位近傍の電子状態密度の増減は、表面磁性から表面反応に至る表面現象を系統的に調べる上で格好の題材である。これまでに、高温で安定な鉄のfcc構造に近い格子定数をもつCu単結晶表面における鉄薄膜の研究が活発に進められている。我々は、さらに格子定数の大きなRh(100)表面に形成されるfcc鉄薄膜を取り組み、層ごとに異なる表面状態を明らかにしてきた。とりわけ、下地のRhとの相互作用が大きな1層目では、フェルミ準位近傍の電子状態密度の消失に伴う特異な吸着状態が現われる。これは、簡単な水素やCO分子の吸着エネルギーの減少をもたらし、エチレン分子の水素化を容易にしている。このため、bcc構造の鉄単結晶表面では観測されないエタン分子の生成の確認などの反応性に関する所定の成果を得てきた。

本研究で取り組む表面磁性の化学と物理では、金属単結晶表面に成長する磁性薄膜の表面構造、電子状態、表面磁性などの表面物性と密接に結びついた吸着過程、表面反応を調べることを目的としている。この磁性薄膜の表面物性の制御には、表面局所構造と関連した表面電子状態を明らかにすることが重要である。

このため、表面磁性の化学と物理の研究として次のことに取り組む。

- 1) STMを用いた薄膜成長過程における表面局所構造の観察を行い、下地金属基板の温度及び蒸着速度の制御によって、吸着原子の拡散速度を変化させて得られる薄膜の成長構造を詳しく検討する。
- 2) 表面局所構造に対応した表面磁気異方性を、カーポロードの装置を用いて測定し、表面電子状態との関連を検討する。
- 3) これらの表面研究によって明らかにされた磁性薄膜の表面物性と、表面における吸着過程、反応との関連を調べることにより、表面の反応活性発現機構を明らかにする。

(1) D.Bagayoko and J.Callaway, Phys. Rev. B28 (1983)5419.

STM探針から表面への化学反応による原子移動

東大物性研 大川祐司
田中虔一

STM探針を用いたアトムマニピュレーションについては今までいくつかの報告があるが、それらの多くは探針と標的原子の間の物理的な相互作用を利用したものである。それに対し、以下に示すように、探針と表面との間で化学反応を伴ったような原子移動が起こる過程も存在する。

タンゲステンの探針を用いて銅の表面をしばらく走査した後、Ag(110)表面を酸素雰囲気中で走査すると、[001]方向のAg-O added rowの他に、[110]方向の一次元鎖の生成が観察された。これは、探針上に付着していたCuが気相中の酸素と反応してできたCu-O鎖に帰属される。さらに、Ag-OとCO₃のドメインが共存したAg(110)面を、Cuが付着した探針を用いて走査すると、まずCO₃のドメインが選択的に反応し、Cu-O鎖ができることがわかった。ところが、Cu原子の供給をSTM探針ではなく蒸着によって行うと、反応順序は全く逆になり、Ag-Oが選択的に反応してCu-O鎖ができる。このことは両者の反応機構が異なっていることを示しているが、その機構についてはまだ明らかになっていない。また、探針から表面へ頻繁に原子移動が起きている間でも、STM像自体は安定して得られている。このことは、原子移動が起きている場所とトンネル電流が流れている場所が異なっていることを示唆している。

このような、STM探針と表面との間の原子移動は、ナノメータースケールで制御された表面の作成手段の一つとして期待されるが、その機構にはまだ未解明の問題が多くあり、今後の研究が待たれるところである。

個々の表面原子の運動とメゾスコピック構造ダイナミクス

京都大学大学院理学研究科 有賀哲也

走査トンネル顕微鏡(STM)の発達により、結晶成長など非平衡条件下において、きわめて多様な形態を有するメゾスコピック・サイズの構造が形成されることが明らかになってきた[1]。これらメゾスコピック構造がどのような原子レベルの機構によって生成し、振る舞うかをすることは、物質の成り立ちを正しく理解するためにきわめて重要である。しかし、現実には、新奇なメゾスコピック形態が観察されるとそれに応じて、必ずしも正当な裏付けのない「原子レベルの機構」が生産される、という状況が続いている。それらの「機構」は確かに観察された現象を説明するものであるが、実のところ、それと同様のもっともらしさで現象を説明しうる多くの機構の中から、任意に選ばれた一つであることも少なくない。系を構成する個々の原子の運動に関して、拡散・クラス

ター形成などの運動論的・エネルギー論的パラメータを定量的に明らかにしない限り、その「原子レベルの機構」に関する議論の多くは不毛でしかあり得ないだろう。

一方、STMが個々の原子を識別可能である以上、適切な方法によって、個々の原子の運動を決定する運動論的・エネルギー論的パラメータを決定することが可能である。実際、既にその具体的な方法論についての検討が、少數ではあるがいくつかのグループによって進められている。我々は、共有結合性半導体にくらべて構造の単純な金属の表面に焦点を絞り、ホモ/ヘテロピタクシャル成長に関連した原子レベルの運動論的・エネルギー論的パラメータを決定するために、方法論の開発と応用を進めつつある。

また、これに関連して、「表面合金」に関する実験的研究を進める。ここで言う表面合金とは、1)固体表面に形成される合金相であり、2)2次元的に展がった構造を有するが、3)組成・原子配列などに関して対応する3次元合金相が存在しない、という特徴を有する新しい物質系である。例えば、我々はPd(100)-p(2×2)p4g-AlPd₃の原子配列を最近決定した[2]。この表面合金は、パルクAlPd系からの類推では説明できない価電子構造を有し、特異な化学的性質を示す。同様な表面合金はいくつか知られているが、磁性・伝導体などの物性研究についてはほとんど手つかずの状況である。今後、重要な物質系に育つ可能性があるものと考え、系統的な研究を行いたいと考えている。

- [1] 例えは、H.Röder et al., Nature 366, 141[1993]; T.Michely et al., Phys. Rev. Lett. 70, 39 53(1993).
- [2] H.Onishi, H.Sakama, T.Aruga, A.Kawazu, and Y.Iwasawa, to be published.

表面励起の局所性と非局所性について

東京大学物性研究所 常行真司

表面現象(励起)を局所性と非局所性という観点で分類してみよう(図1)。現象の素過程はそのいずれかに帰属させられるとしても、表面現象のうちでもっとも面白く複雑でかつ実り多い部分、たとえば触媒反応や結晶成長などは、局所現象と非局所現象のあいだでエネルギーと物質が移動するプロセスとしてとらえるべきであろう。そのとき重要と思われるのが時間スケールの競合である。典型的な表面現象の時間スケール(図2)は実に広範に分布するだけでなく、おたがいに重なりがあり、われわれはそれらの競合の結果を見ているわけである。これが気相反応と比較した表面現象のおもしろさであり、また実験的・理論的解析を困難にする一因であろう。

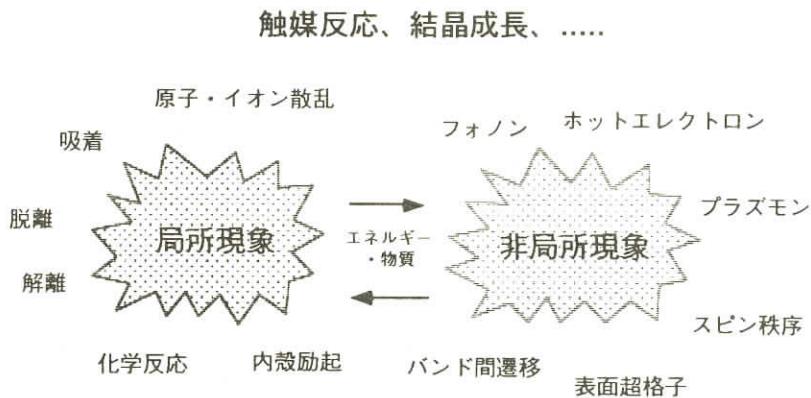


図 1 : 局所現象と非局所現象

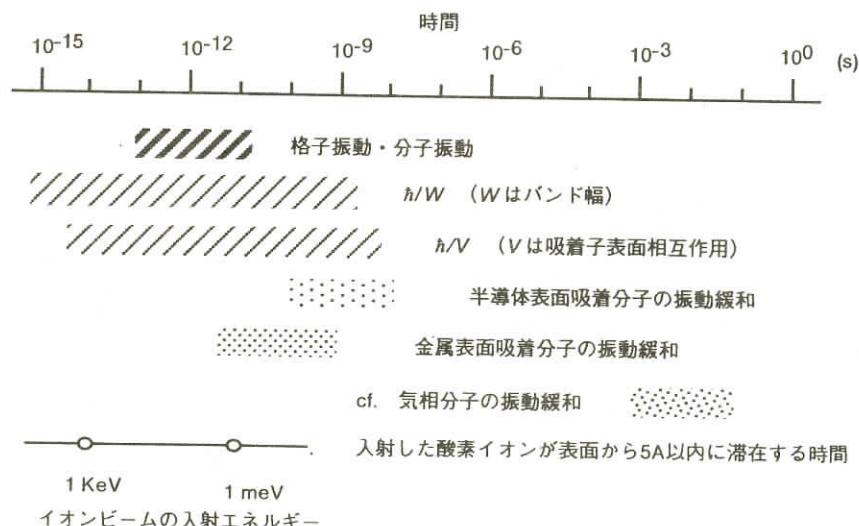


図 2 : 時間スケールの競合

表面電子状態の変調と電子移動、スピニン状態、反応過程の相関：準安定原子による研究

九州工業大学 西垣 敏

内藤 正路

石川高専 山田健二

1. 表面電子状態の変調

表面電子状態自体は、 $E(k_{\parallel})$ 、 $N(E)$ という形で(photoemission)、また($r_i; \sim E_F$)という形で(STS)よく分かるようになってきた。しかし、表面電子状態と表面構造、また表面電子状態と吸着、反応のダイナミックスの間の関係を理解するには、その表面電子状態を何らかの方法で変調させてその効果を見ることが重要な方向である。

具体的には、水素による表面修飾が共有結合化という形で表面電子状態を局在的なものに変調するならば、基板表面の原子構造にもその上の吸着やmigrationにも大きな影響となって現れるであろう。アルカリなど単純金属による修飾が、表面電子状態をその吸着原子まわりに限って変調させるのかそれとも非局所的に変調させるかの理解は難しい。しかしそれによって吸着・解離・反応など電子移行に誘導される表面プロセスの理解が違ってくる。酸素吸着はイオン化という形で電子状態を場所的にエネルギー的にも局在化させる。そのまわりでの外来原子分子との相互作用ダイナミクスが局所的に本当にどうなっているのかの記述はまだである。

2. 準安定原子で何を見るか

励起準安定原子やイオンの入射によって表面にはホールの励起状態が持ち込まれる。我々はこれへの表面電子系の応答を、その結果としての電子放出を通して見る(MDS法)。He*原子を用いる場合、その脱励起チャネルに依存して放出スペクトルが $N(z_m; E)$ であったり、 $N(z_i; E)$ の自己convolution、或いは $N(z_m; E_F)$ を反映する。いずれにしても近づいた準安定原子まわりの局所電子状態密度が抽出される。ここで z_m 、 z_i は脱励起を起こす準安定原子、イオンの位置である。

我々は今まで半導体表面上のアルカリ金属吸着、酸素吸着系における表面局所電子状態の変化、表面から外来酸素への電子移行、酸素の吸着状態をこのMDS法で研究してきた。測定に r_{\parallel} 方向分解能のない弱点を今後STSとの併用で補えば、局所電子分光の特色を生かして、表面での局所電子構造と表面ダイナミクスの相関を明らかにできると思う。

3. 表面電子スピニン状態

吸着による表面修飾が表面電子スピニン状態へ及ぼす効果は更に微妙であろうが、その測定は低次元磁性系の理解にとって重要である。STMでは $m(r_i; E_F)$ の形でスピニン密度が測定されるが、スピニン偏極He*原子を使うMDSでは $m(z_m; E)$ が測定される。現在は3d遷移金属表面自体の、或いはその超薄膜の $m(r; E)$ を知ることから始める段階であるが、その後それらの表面が異種原

子で修飾されたときの局所スピン密度の変化、またその時の磁気秩序を明らかにして行く必要がある。

4. 方法と対象

- ①[MDSによる]：表面電子状態変化と電子移行、吸着・反応プロセスの間の関係を明らかにする。
- ②[準安定原子とイオンの散乱による]：脱励起確率の入射He^{*}のスピン方向依存性からスピン密度を、また放出電子スピン分析、イオン散乱での放出光の偏光分析の方向も考慮して、表面局所電子スピン密度を解析する。
- ③[STM/STSとイオン散乱による]：特に基板も含めた表面の構造変化、表面での原子移動ダイナミックスを追跡して、サーファクタント効果の電子論を明確にする。

半無限結晶表面の電子状態

日大文理・物理 石田 浩

最近、カーナリネロ法的な電子状態の計算方法が普及して、多くの清浄・吸着表面の原子構造が第一原理から決定されるようになった。この際、3次元の対称性を回復するために、本来“半無限”的な固体表面は、10-20層の“薄膜”で近似される。この近似は、局所的な電子密度分布で決まる全エネルギー計算（従って原子構造、振動解析）には有効だが、多くの問題には適用できない。例えば

- (1) LEED、光電子分光、トンネル電流など、散乱状態の波動関数が必要な時、
- (2) 表面SHG、表面プラズモンなど“半無限”という系の対称性、あるいは境界条件が本質的な時、
- (3) 金属では、フェルミ面効果、“表面電気抵抗”，電子-格子相互作用など、フェルミ準位を挟んだ連続的な電子励起スペクトルが必要な時、
- (4) 基底状態に限っても、ショットキー表面状態や、吸着子による共鳴順位の幅や中心に関する正確な情報が欲しい時、

である。今後、表面物理の重心がより動的諸過程に移るにつれて、真に“半無限”表面の電子状態を計算する必要は増すであろう。経験的ポテンシャルを用いる通常のLKKR法を除くと、現在、セルフコンシスティントに半無限表面の電子状態計算ができるは、世界でも僅かなグループである（日本は多分0）。これらは(1)ダイソン方程式からグリーン関数を計算、(2)エムベッティング法でグリーン関数を計算、(3)LKKRでポテンシャルをセルフコンシスティントに計算に分けられ、更に(1)は[擬ポテンシャル+LCAO基底]、局在LMTO基底がある。この内、(2)のFLAPW版と(1)のLCAO版以外は、一電子ポテンシャル計算の際、多少の近似がある。最近、筆者は上の(2)と（非

局所) 擬ポテンシャルを組み合わせた計算プログラムを作っているので、薄膜近似に比べて計算の難しい点など、途中結果を報告します。例として、低温ではon-top, 室温では置換型の吸着構造になるAl(111)面上の1/3層のカリウム吸着系を取り上げる。

1次元表面量子物性の研究

立命館大学理工学部物理学科 難波秀利

これまでの表面研究の大部分は、平坦な試料表面をターゲットとして進められており、2次元の表面科学として発展してきた。それに対して、高ミラー指数面である単結晶ステップ表面では、ある結晶方向に沿った異方性の強いステップなどの原子配列が得られる。また、ステップが関与した分子の化学吸着、結晶成長などから考えると、異種原子を選択性良くステップ端に吸着させて、新しい1次元性の表面原子配列を創れる可能性がある。われわれがこれまでに行ってきたNi(7911)などのステップ表面の放射光励起の角度分解紫外光電子分光の実験から、清浄面上のステップ端には新しい電子状態が現れており、その分散関係から、ステップ配列に対応して1次元的な特性を示していることがわかつてきた。すなわち、ステップ配列が表面にできることにより、平坦表面上の2次元の表面電子状態に、1次元的な境界条件が発生して、ステップ端に局在化した新しい電子状態が発現していると考えられる。そこで、ステップ表面など、異方性の強い原子配列を現す、および、創り出せる表面を研究のターゲットとすることにより、1次元性の金属、磁性、量子構造、反応基板など、これまでの2次元の表面研究に基づきながらも一線を画せるような1次元の表面研究の可能性について議論する。

走査型顕微鏡による元素分析の可能性

横浜市立大学理学部 重田諭吉

【研究の目的】

シリコン表面上の吸着系に対し、光励起による非平衡状態の走査トンネル電子分光(STS)を測定し、ナノスケールの局所表面状態の知見を深めると共に、走査型トンネル顕微鏡(STM)の弱点とも言える表面における吸着種の同定への応用を試みる。

【具体的なテーマと研究内容の概要】

(i) 局所表面光起電力(Surface Photovoltage : SPV)の測定

これまでのSTS測定は、試料-探針間にかける電位差のみの測定であったが、光照射を行う

ことで励起状態の測定が可能となり、表面電子状態のより詳細な知見が得られる。

(ii) 局所(原子レベル)元素同定を目指した吸着系への応用

吸着系では元素により励起状態が異なることから吸着種の元素同定が可能となると予想される。実際、基礎的な報告としてHamersら[J.Vac. Sci. Technol. A8, 3524(1989);Phys. Rev. Lett. 70, 2471(1993)]はSi(111)-7x7, (111)-H, (100)-2x1の表面に対し、He-Neレーザー照射による表面光起電力(Surface Photovoltage:SPV)の局所測定から表面状態の違い、および酸素吸着サイトにおけるSPVの著しい変化を実証している。したがって、各種吸着系に対し、STM像とSPV(光励起STS像)の測定を行い基礎データを取ることで、これまでSTMでは出来なかった吸着元素の判別が可能となる可能性がある。また、各種吸着系の励起状態が解明されることで、表面における光化学反応の指針となるデータが蓄積出来ると考えている。

表面での秩序化・核形成と成長

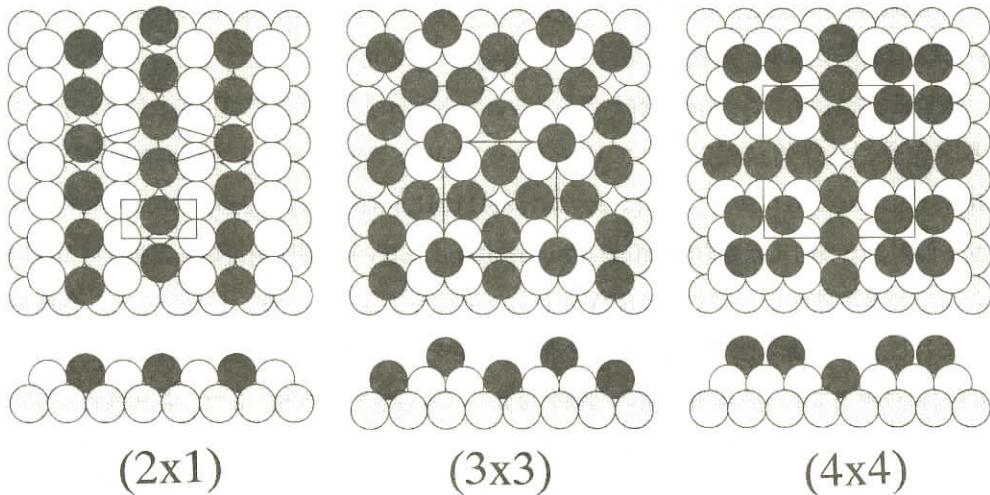
九州大学工学部 栄原 浩

走査トンネル顕微鏡(STM)の発達によって、表面での種々の構造変化を原子レベルで調べることができるようになってきた。構造相転移、ホモエピタキシャル成長、ヘテロエピタキシャル成長、表面化合物の形成と秩序化、リストラ型吸着構造の被覆率による構造変化、表面再構成構造の形成とその伝搬など。

これらの研究を実行する上で重要なのは、構造がよくわかっている系を選ぶことである。単結晶表面では異種原子・分子が吸着したときにも一般に秩序構造をとることが多いので、低速電子回折(LEED)が威力を発揮する。

以下のテーマを我々は計画している。

- (1) Cu(001)にリチウム原子を付けたときに被覆率の増加とともに、表面構造は2x1→3x3→4x4と変わる。これらの構造はテンソルLEEDによって下図のように決定された。2x1構造の形成過程、2x1から3x3への変換過程、3x3から4x4への変化、4x4構造にさらにリチウムが付くとどうなるか。
- (2) Si(111)7x7単位格子の形成過程を原子レベルで明らかにしたい。共有結合性結晶なので再構成構造を形成するときに、結合を1個1個切断しまた新たに形成しなければならない。このアトムプロセスを調べる。
- (3) Si(111)7x7表面にシリコン原子を付けて、基板の7x7単位格子がどのようなメカニズムで壊れて正常な結合に変わらのかを調べたい。



準安定原子と固体表面の相互作用

東大院総合 増田 茂

準安定原子電子分光 (MAES) は、 $\text{He}^*(1s^1 2s^1, 2^3S)$ などの準安定原子を固体表面に衝突させたとき、表面から放出された電子をエネルギー分析する方法である。準安定原子による電子放出過程は表面最外層で選択的に起こるので、この領域で生じる様々な物理的・化学的過程を鋭敏に捉えることができる。MAESによる表面研究は1970年代に始まり、以下の観点から発展してきた[1]。

1. Deexcitation processes.

- (a) Resonance ionization + Auger neutralization vs. Penning ionization.
- (b) $\text{He}^*(2^1S) \rightarrow \text{He}^*(2^3S)$ conversion.
- (c) Negative ion formation such as $\text{He}^*(1s^1 2s^2, ^2S)$.
- (d) Spin - dependent emission processes usung $\text{He}^*(1s \uparrow 2s \uparrow)$ and $\text{He}^*(1s \downarrow 2s \downarrow)$.

2. Electronic states localized at the outermost surface layer.

- (a) Surface states and adsorbate states.
- (b) Spatial electron distributions.
- (c) Molecular orientations and chemical reactions.
- (d) Many - electron effects.

3. Other.

- (a) Metastable electron emission microscopy (MEEM).

重点領域研究では、以下の 2 点の課題に取り組みたい。

- (1) MAESにおける電子放出角依存性からどのような情報が得られるか？

(2) 極低温における単純な気体分子から有機金属錯体の吸着状態

特に, $Mn(C_5H_5)_2$ 等の開殻メタロセン分子は中心金属の種類によって様々なスピニ状態をとること、水素をメチル基に置き換えることによってhigh - spin 錯体からlow - spin錯体に変わることなどの特徴をもち、理想的な局在スピニ系とみなすことができる。このような錯体分子を固体表面に吸着させると、錯体分子の配位子場が変化する、基板から錯体分子へ（あるいは逆の）部分的な電子移動が起こる等の効果が期待されるので、この系は局在スピニ表面電子相互作用の観点から興味深いものと思われる。

[1] Y.Harada, S.Masuda, and H.Ozaki, Chem. Rev. to be published.

冷多価イオンと固体表面の相互作用

神戸大学理学部 桜井 誠

多価イオンは大きなポテンシャルエネルギーをもつことが最大の特徴であり、例えば、ウランの裸イオン(U^{92+})では800keVにも達する。多価イオンが固体表面に入射すると、電子遷移によってポテンシャルエネルギーが解放されることになるが、その過程で2次電子・オージェ電子放出、X線放射、2次イオンなどの粒子放出、および表面近傍の構造変化がおこる。これらの現象は多価イオンのもつポテンシャルエネルギーが大きいほど、つまり重元素の電離が極限まで運んだ“超多価イオン”において顕著になる。

この超多価イオンを安定に、かつ照射実験に利用可能な程度に供給し得るイオン源が最近開発された。これはElectron Beam Ion Trap(EBIT)と呼ばれ、強磁場中で $1000A/cm^2$ 以上の電流密度に圧縮された高エネルギー(10~100keV程度)の電子ビームを用いて、イオントラップに捉えられたイオンを繰り返し電離させることにより、多価イオンを生成・蓄積するものである。この装置は元来は、イオントラップ中に蓄積されている多価イオンが放出するX線などを精密に観測して、分光学的手法により多価イオンの電子構造などの基本的性質を研究するために開発されたものであるが、トラップ中の多価イオンをEBIT外に取り出す機能を持っているため、原子・分子や固体との衝突実験にも利用することが可能となっている。わが国では、平成5~7年度に重点領域研究「多価イオン原子物理学」が実施され、世界最高性能のEBITが電気通信大学に建設された。現在、EBIT中の多価イオンからのX線放射の観測などの物理実験と並行して、EBITから引き出された多価イオンを固体などに照射する実験に必要な、イオンの輸送系を建設中である。

研究会では、上記EBITの概要と、諸外国における“多価イオンと表面”研究の現状についてお話しする予定である。

塩素水素吸着Si(111)表面からの脱離機構

東京大学物性研究所 小森文夫

シリコン表面からの脱離機構や表面の安定性を調べる目的で、塩素や水素が吸着したSi(111)7x7表面における光刺激脱離、置換反応の実験を行った。

1) 塩素吸着Si表面に、紫外光を照射するとシリコンがエッティングされることが知られている。

この機構を調べた。熱励起を伴わない強度と6nsecのパルス幅を持つ紫外、可視、赤外レーザー光を用いたこの研究の結論は、

1. 基板シリコンの光吸収により電子やホールが励起され、その熱い電子またはホールが脱離をひきおこしている。バンドギャップよりも小さなエネルギーの光の場合には、表面の準位を光が励起している。
2. 脱離するシリコンは、表面上で多塩化物となっているものだけである。光照射より、单塩化物は脱離も表面上の移動もしない。
3. 脱離して真空に放出されるものは、 SiCl_2 である。
4. 多塩化アドアトムSiが脱離後に残った塩素終端表面の構造は、光照射やさらなる塩素被曝に対して安定な7x7構造である。

2) 室温附近で水素を飽和吸着させたSi表面の構造は、400°C程度にアニールした塩素吸着表面と類似しているが、この系では光エッティングが起こらないことが知られている。そこで、どのような光過程があるかを調べた。1)と同様の光を用いたこの研究の結論は、

1. 紫外光を照射すると多水素化シリコンから水素が解離し、单水素化シリコンとなる。しかし、可視光では解離が起きない。
2. その機構は、熱い電子またはホールによる多重励起である。

3) 1)でできた安定面を活性化して、さらに新しい表面を作製したり、その安定性を調べるために、塩素水素置換反応を調べた。塩素飽和表面を原子状水素にさらした実験の結果、表面の塩素はすべて水素に置換されると結論できる。

4) 3)と同じ目的で、塩素飽和表面から電子刺激脱離を行った。エネルギー1keVの電子を約6mC/mm²照射することにより、ほぼ完全に表面から塩素を放出させることができた。この表面がどのような構造となるかを調べている。

表面の安定性や原子移動を伴う現象の機構を理解するためには、理論や計算物理のさらなる発展が望まれる。実験からは、原子移動や電子状態に関する定量的なデーターを提供できるように、今後以下のような研究を行いたい。

- 1) 原子移動前後の表面や光照射中の表面を走査トンネル顕微鏡で観察する。
- 2) 表面電子状態の情報を得るために他の複数の分光手法による測定を行う。

さらに、このような研究を通じてできた表面の低温物性、光物性、磁性などを調べたい。

コインシデンス分光法による電子励起に起因する表面ダイナミックスの研究

分子研究者 間瀬一彦
 共同研究者 永園充
 田中慎一郎
 宇理須恒雄

序

電子遷移に起因する脱離(DIET)の研究は、30年以上前から広く研究されているが、電子励起から電子的緩和を経て脱離に到る過程の詳細が解明された例はほとんどない。我々の研究の最終目的は、強力な研究手段を開発して、脱離機構の詳細、競合する脱励起過程、脱離確率を左右する因子などを解明することである。これまで我々は、電子のエネルギーを選別しイオンの質量も選別して、電子とイオンを同時に検出する手法(電子-イオン・コインシデンス分光法、図1)の開発を行ない、内殻電子励起に起因するイオン脱離を研究してきた。電子-イオン・コインシデンス分光法は、電子励起状態を選別してイオン収量を測定するという特色を持つ。本研究会ではこれまでの代表的研究例を紹介するとともに、将来の展望を述べる。

研究1. O_{1s}電子励起に起因する凝縮H₂O

からのH⁺脱離

凝縮H₂O表面のO(KVV)オージェ電子エネルギー領域において電子-イオン・コインシデンス測定を行ない、オージェ過程を経由してH⁺が脱離する、O-H結合性軌道に空孔が生じる場合にイオン脱離確率が増大する、などを明らかにした。また、 $h\nu = 534\text{eV}$ の光でO_{1s}から4a₁へ共鳴励起すると、スペクテーター型オージェ過程によって1電子2正孔状態が生成するためにH⁺

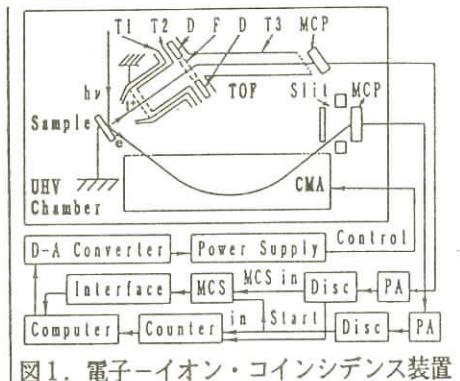


図1. 電子-イオン・コインシデンス装置

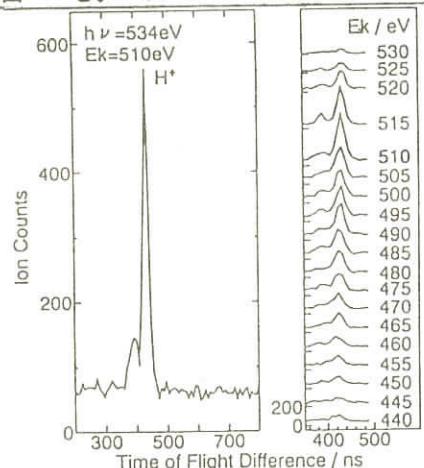


図2. 凝縮H₂Oの共鳴オージェ電子-光イオン・コインシデンススペクトル

の脱離確率が著しく増大することを見出した(図2)。さらに、Si(001)上に解離吸着したH₂Oでは、深い価電子準位に2正孔が生じるときH⁺収量が増大することを確認した。

研究例2. 光電子励起状態を選別したイオン脱離の研究

光電子-光イオン・コインシデンス分光法を用いて、凝縮SiF₃CH₂CH₂Si(CH₃)₃表面からのイオン脱離を研究し、SiF₃-側のSi 2pを励起した場合の主なイオン脱離種はF⁺であるのに対し、-Si(CH₃)₃側のSi 2pを励起した場合にはH⁺のみが脱離することを明らかにした。また、凝縮Si(CH₃)₄についてもC 1sとSi 2pを励起した場合の比較研究を行なった。

将来の展望 真空紫外光、軟X線によって誘起される表面のダイナミックスは未開拓の領域である。我々はこの分野にブレークスルーをもたらすため、X線銃、稀ガス共鳴線、放射光を励起源として用いて以下の研究を行なう。

A) 高分解能、高感度の電子-イオン・コインシデンス分光法の開発とイオン脱離の研究

電子のエネルギー分解能を高めることによりイオン脱離に寄与する中間励起状態に関する詳細を明らかにする。

B) 光電子-オージェ電子・コインシデンス分光法の開発と特殊なオージェ過程の研究

カスケードオージェ、ダブルオージェ過程などダイナミックスに深く関連する特殊なオージェ過程を研究する。

C) 電子-蛍光・コインシデンス分光法の開発と励起中性分子脱離の研究

電子と励起分子からの蛍光のコインシデンス測定を行なうことにより、励起中性分子脱離の詳細を研究する。

D) パルスX線励起-多光子イオン化法の開発と中性分子脱離の研究

パルスX線源を開発し、多光子イオン化法と組合わせて、電子励起に起因する中性分子脱離を研究する。

E) 電子-イオン・コインシデンス分光法を利用した表面分析装置の開発

電子-イオン・コインシデンス分光法を利用して軽元素の吸着サイトを特定する新しい表面分析法を開発する。

吸着ポテンシャルエネルギー面とダイナミクスの制御

理化学研究所 吉信淳
川合真紀

1. はじめに

物質の出入りが伴う自然界の現象をミクロなレベルでながめてみると、表面動的過程(吸着、

拡散, 反応, 脱離など) が普遍的に含まれている。ここでは, 吸着原子・分子の基底状態・安定吸着状態だけでなく, 励起状態・非平衡吸着状態を考察することになる。吸着粒子がまわりの環境(表面, 他の吸着粒子など)との間でエネルギーをやりとりするに従い, 吸着粒子はさまざまな励起状態(すなわち, 電子的, 分子内振動, 束縛回転および束縛並進運動など)を行き来するからである。また, 局所領域で物質を操作・デザインする際, 吸着粒子と表面との間のポテンシャルエネルギー面の理解が不可欠となる。さらに, 表面局所物性ではミクロな領域で伝導性, 磁性, 反応性などを研究することになるが, 素過程の理解や原子分子の操作技術を確立する上で上記2つの分野と密接に結び付いている。

2. 研究の背景

われわれは, 表面振動分光や走査型トンネル顕微鏡(STM)を用いて金属表面上の吸着分子の動的挙動について研究してきた。例えば, CO/Ni(100)において, 吸着ポテンシャルエネルギー面を実験的に記述したり[1], 吸着過程で飛来分子がエネルギー散逸する間, 吸着分子と直接/間接的に相互作用することを明らかにした[2]。また, Pt(111)におけるCO酸化反応では酸素原子の励起が不可欠であることを提案した[3]。STMを用いてPd(110)上のベンゼン分子を観察し, 表面拡散・超構造形成過程に関する知見を得た[4]。これらの実績を生かし, 以下のような研究を新たに展開したいと考えている。

3. 研究内容

(1) 吸着ポテンシャルエネルギー面の詳細

吸着ポテンシャル極小付近の曲率や非調和性に関する情報を得るために, 低エネルギーの表面振動分光(具体的には電子エネルギー損失分光, He非弾性散乱分光など)で束縛モードの基準振動およびその倍音について調べる。吸着サイト間のエネルギー障壁は, 温度可変の低温STMにより原子分子のミクロな動きを直接観察したり, 不活性ガスビームによる衝突誘起過程から情報を得る。

(2) 吸着原子・分子のダイナミクスの制御

エネルギー/運動量が規定された不活性ガスビームによる衝突誘起表面過程(吸着サイトの移動, 吸着状態の変化など)を研究する。エネルギー/運動量の移動から, 多次元ポテンシャルエネルギー面に関する情報が得られよう。また, 局所プロープ法により, 表面における原子・分子の付加・移動・脱離や局所的な電子刺激反応を試みる。さらに, 超短パルスレーザーによって単一モードのフォノンを生成し, 表面原子・分子をコヒーレントに制御し, 特定の反応を誘起することを試みたい。

[1] J.Yoshinobu and M.Kawai, Surf. Sci., 363(1996)105.

[2] M.Kawai and J.Yoshinobu, Surf. Sci., 368(1996)239.

[3] J.Yoshinobu and M.Kawai, J.Chem. Phys., 130(1995)3220.

[4] J.Yoshinobu, H.Tanaka, T.Kawai, M.Kawai, Phys. Rev., B53(1995)7492.

超薄膜表面上での光化学

分子科学研究所 松 本 吉 泰

光による励起がどのような機構で起こるとも、表面光化学の過程において電子励起状態が関与していることにかわりはない。したがって、熱的に誘起される表面反応に比べて新奇な反応パスが光照射によって得られるという点にのみ表面光化学の意義があるのではなく、吸着種と表面との相互作用を新たな視点から見る場を提供するという点に光化学研究のより重要な意義があると言える。例えば、我々はPt(111)表面上に物理吸着したメタンの紫外光解離の研究を通して、メタンの基底状態の電子配置ではメタン表面と弱く相互作用するが、励起状態の電子配置では表面の電子状態と強く混成しており、これらの状態間の光遷移の結果、解離が起きるというモデルを提唱した[1, 2]。また、吸着種の電子励起状態を直接観測する手段として多光子光電子分光を行なっている[3]。

表面に吸着した分子の電子状態を考える上でのもっとも興味深く、また、難しい点は、もともと孤立した電子系（局在系）であった気相の分子が連続スペクトルを持っている半無限に広がった電子系（非局在系）を持つ表面とどのように相互作用するかという点である。この相互作用を解きほぐす一つのアプローチとしてナノ構造を持った表面に吸着した分子を光電子分光や光化学の観点から研究することを提案する。ここでナノ構造とは金属や半導体の超薄膜やクラスターを意味する。例えば半導体の量子井戸を持った超格子ではバルク表面に比べてその電子状態のスペクトルはより離散的になる。そこで、吸着種の非占有軌道へのホット電子の移動というもっとも代表的な光励起機構を考えると、このような超格子構造を持った表面ではホット電子のエネルギー緩和はより遅くなり、また、得られる電子温度も高くなることが予想される。したがって、光誘起過程がより高効率で起き、その緩和の様子や電子の移動速度の実時間測定がより容易になることが期待される。また、レーザー光の位相を積極的に用いることによりホット電子の制御の手がかりもつかめる可能性がある。このように、従来から行われてきた単結晶の清浄表面のみならず、新たな電子構造を持つ表面を用意し、その上に吸着した分子の電子状態をプローブすることにより、吸着種と表面との相互作用の研究（表面での化学結合論）の新たな展開が期待される。

1 K.Watanabe, K.Sawabe, and Y.Matsumoto, *Phys. Rev. Lett.*, **76**, 1751(1996).

2 Y.Matsumoto, Y.A.Gruzdkov, K.Watanabe, and K.Sawabe, *J. Chem. Phys.*, **105**, 4775 (1996).

3 I.Kinoshita, T.Anaxawa, and Y.Matsumoto, *Chem. Phys. Lett.*, **229**, 445(1996).

陽電子スペクトロスコピーの最近の進展

世話人	東大・総合	兵頭俊夫
	東大・物性研	小森文夫
	東大・原総セ	伊藤泰男
	山口大・工	末岡修
	筑波大・物工	谷川庄一郎
	東北大・金研	長谷川雅幸
東大・工	中沢正治	

陽電子は、実用化されている唯一の反粒子プローブであり、電子構造特にフェルミ面の研究、低濃度高温下での格子欠陥その場測定手段として広く用いられてきた。最近になり、(1)格子欠陥に対する超高感度性の再認識、(2)物質中のポジトロニウム消滅特性の理解の進展、(3)可変エネルギー低速陽電子ビーム技術の発達などにより、陽電子スペクトロスコピーを用いた研究が新たな展開を始めている。

本研究会では、2日間にわたり、このような陽電子を利用する物性および原子分子研究の最近の成果が発表され、今後の研究の方向を含めた活発な討論が行われた。(1)に関しては、陽電子寿命の精密測定に基づいて、様々な格子欠陥の微視的な描像が議論され、(2)に関しては、結晶中のポジトロニウムの量子状態についての理論実験両面からの成果が発表された。また、(3)に関しては、アイソトープを用いた陽電子ビームでの研究や、我が国で稼働し始めた大強度低速陽電子ビーム施設での成果、さらに大規模な施設の建設計画などが紹介された。今後、本研究会を契機として、陽電子スペクトロスコピーによる電子構造や格子欠陥の物性研究に大きな発展を期待したい。

プログラム

『陽電子スペクトロスコピーの最近の進展』

日 時：1996年12月2日(月) 9:20～17:20

12月3日(火) 9:20～15:20

場 所：東京大学物性研究所Q棟会議室

12月2日(月)

9:20 開会の挨拶 兵頭俊夫（東京大総合文化）

[9:30 - 10:50] 座長 蔵元英一(九州大応力研)

- 1) Positron 2D - ACAR Study of Perfect Crystals and Vacancies in Si,
Diamond and Ge:(I) Experiments 千葉利信・赤羽隆史(無機材研)
長谷川雅幸・河裾厚男・唐政(東北大金研)
 - 2) Positron 2D - ACAR Study of Perfect Crystals and Vacancies in Si,
Diamond and Ge:(II) First Principles Calculations
..... 唐政・長谷川雅幸(東北大金研)
千葉利信(無機材研)
齊藤峯雄(NEC)
山口貞衛(東北大金研)
 - 3) 有機伝導体における陽電子消滅 γ 線 2 次元角度相関 石橋章司(電総研)
 - 4) アルカリハライド中の非局在ポジトロニウムの波動関数
..... 永井康介・兵頭俊夫(東京大学総合文化)
- 休憩 10:50 - 11:10
- [11:50 - 11:10] 座長 千葉利信(無機材研)
 - 5) ポジトロニウム化合物の陽電子・電子状態 齊藤史郎(電気通信大物理)
 - 6) Experiments in Search of Positronium Compounds
..... Lester D. Hulett, Jr.(Oak Ridge National Laboratory)
 - 7) 高分子フィルム中でのオルソポジトロニウムの移動
..... 岡本健一(山口大工)
 - 8) 固体内空隙への物質充填と陽電子消滅 村上英興(東京学芸大教育)
- 昼休み 12:30 - 14:00
- [14:00 - 15:40] 座長 長谷川雅幸(東北大金研)
 - 9) 規則合金中の点欠陥と陽電子寿命スペクトロスコピー
..... 白井泰治(大阪大工材料物性)
 - 10) 低温照射された金属(Fe, Fe-alloy etc) の陽電子消滅寿命測定法による研究
..... 蔵元英一(九州大応力研)
 - 11) Ni 中の格子欠陥の陽電子消滅寿命測定法による研究
..... 上之康一郎・大村雅一(九州大総合理工)
堤哲男・竹中稔・蔵元英一(九州大応力研)
 - 12) 陽電子, ESRおよび光吸収でとらえる石英ガラス中の欠陥
..... 真安正明・田畠誠・長谷川雅幸(東北大金研)
藤浪真紀(新日鐵^株先端技研)

山口貞衛 (東北大金研)

- 13) 酸化物微粒子表面の常磁性中心とポジトロニウムとの相互作用
.....齋藤晴雄・兵頭俊雄 (東京大総合文化)
〔 16:00 - 17:20 〕 座長 末岡 修 (山口大工)
- 14) 陽電子を含む原子課程 五十嵐明則 (理研原子物理)
- 15) 陽電子および電子の複雑気体分子による散乱 浜田 亮 (山口大理)
.....末岡 修 (山口大工)
季村峯生 (山口大医療短期大学部)
- 16) 低速陽電子消滅法による高ドーズ酸素イオン注入Siウェハーの欠陥挙動の研究
.....藤浪真紀 (新日鐵(株)先端技研)
- 17) 低速陽電子ビーム法による金属人工格子の研究
.....金沢育三・村重祐介・田代睦・大滝英一・岩本 哲 (東京学芸大教育)
.....小森文夫 (東京大物性研)
.....伊藤泰男 (東京大原総セ)

12月3日(火)

〔9:20 - 10:20〕 座長 岡本健一 (山口大工)

- 18) On the Unstable o-Ps States in Low Molecular Weight Organic Solids
.....Hamdy F.M. Mohamed・伊藤泰男 (東京大原総セ)
- 19) ポジトロニウム形成におけるOreモデルとspurモデルの統一的な理解の試み
.....伊藤泰男 (東京大原総セ)
- 20) イオン照射された金属材料中の欠陥形成の陽電子による研究
.....岩井岳夫 (東京大原総セ)
.....関村直人・与那嶺真一 (東京大工学系)

10:20 - 10:30 休憩

〔10:30 - 11:50〕 座長 伊藤泰男 (東京大原総セ)

- 21) SiO₂表面からのポジトロニウム放出
.....長嶋泰之・森中康弘・兵頭俊夫 (東京大総合文化)
.....栗原俊一 (高エネルギー物理研)
- 22) 陽電子消滅励起オージェ電子分光による固体最表面分析
.....大平俊行・鈴木良一・三角智久 (電 総 研)
- 23) 陽電子誘起イオン脱離装置の開発
.....田代 瞳・小泉知也・金沢育三 (東京学芸大教育)

- 小森文夫（東京大物性研）
福谷克之（東京大生産技術研）
伊藤泰男（東京大原総）
村田好正（電気通信大）
- 24) 原研高崎における研究開発の現状岡田漱平・平裾厚男（原研高崎研）
- 11:50 - 13:20 昼休み
- [13:20 - 15:20] 座長 田川精一（大阪大産研）
- 25) P F低速陽電子ビームライン現状と専用加速器による新P F低速陽電子源計画
.....栗原俊一（高エネルギー物理研）
- 26) イオンビームを用いた低速陽電子ビーム発生の高強度化
—固体ターゲットから流体ターゲットへ
.....伊東芳子・野崎正・彭治林・下坂琢也（理研）
伊東泰男（東京大原総セ）
- 27) 阪大産研における低速陽電子ビーム開発の現状
.....誉田義英・前川雅樹・木村徳雄・古澤孝弘・西嶋茂宏・田川精一（大阪大産研）
- 28) 電総研高強度低速陽電子ビームラインの現状
.....鈴木良一・大平俊行・三角智久（電総研）
- 29) 東京大学の高輝度光源計画神谷幸秀（東京大物性研）
- 30) 東京大学の高輝度光源計画に付随する陽電子実験室計画
.....伊藤泰男（東京大原総セ）
神谷幸秀・小森文夫（同物性研）
中沢正治（同工）
七尾進（同生産研）
兵頭俊夫・長嶋泰之・齋藤晴雄（同総合文化）
他

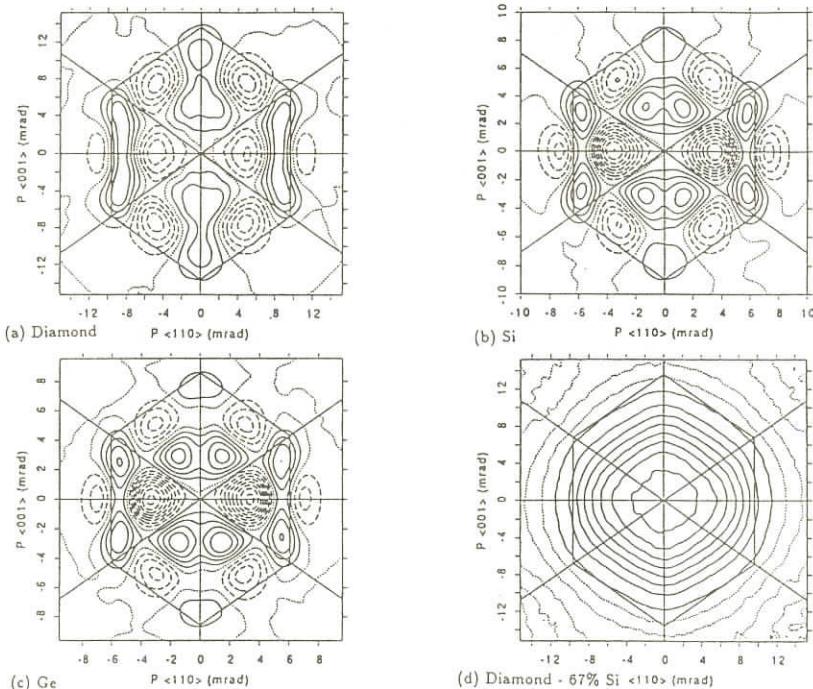
Positron 2D-ACAR Study of Perfect Crystals and Vacancies in Si,
Diamond and Ge: (I) Experiments

無 機 材 研 千 葉 利 信
赤 羽 隆 史
東 北 大 金 研 長 谷 川 雅 幸
河 裕 厚 男
唐 政

標題に関連して、我々はこれ迄、元素- 及び化合物半導体での 2 D - ACAR の違い,¹⁾ や、 Si 中の原子複空孔²⁾ 等を調べてきた。この間、幾つかのダイアモンドの測定をしたが、最近ようやく、陽電子の欠陥捕捉のない試料（住友電工製 II_a 型）が得られたので、これと Si, Ge の比較をする。

ダイアモンドの卓越した結合強度は、共有電荷分布が二つの山になっている³⁾ ためとの事であるが、これが、 2 D - ACAR にどのような反映されるかを議論したい。

下図に、(a)Diamond, (b) Si, (c)Ge の 2 D - ACAR 異方性 (格子定数で規格化), と(d)Diamond の 2 D - ACAR から、Si の異方性を打ち消す分 (67 %) だけ、 Si の 2 D - ACAR を差し引いたものを示す。



- (1) T.Chiba, T.Akahane: Proc. ICPA - 8 (World Sci., 1989), p.674.
- (2) M.Hasegawa, T.Chiba, A.Kawasuso, T.Akahane, M.Suezawa, S.Yamaguchi K.Sumino: Mat. Sci. Forum 196 - 201 (1995) 1481.
- (3) M.T.Yin, M.L.Cohen: Phys. Rev. B24 (1981) 6121.

Positron 2D-ACAR Study of Perfect Crystals and Vacancies in Si, Diamond
and Ge: (II) Theory

Z.Tang^a, M.Hasegawa^a, T.Chiba^b, M.Saito^c, S.Yamaguchi^a

^a*Institute for Materials Research, Tohoku University,*

^b*National Institute for Research in Inorganic Materials,*

^c*NEC Infomatec Systems, Ltd.*

Positron 2D - ACAR distributions in elemental semiconductors: Si,diamond and Ge, are studied by use of first - principles molecular - dynamics calculation based on the two - component density - functional theory. The electron - positron correlation effect in the 2D - ACAR is investigated within the frame of local - density - approximation(LDA) and generalized - gradient - approximation(GGA).

For perfect crystals, the calculated 2D - ACAR distributions along different projection directions show significant anisotropies(Fig. 1 (a) and (b) , for example), which are well consistent with the present experiments. The 2D - ACAR of positrons trapped by monovacancies in diamond and divacancies in Si are simulated by using a 64 - site supercell. The results after geometry optimization can well reproduce our experiments and show small anisotropies relative to the symmetries of defects(Fig. 1(c) and (d)). The analyses based on the present experiments and calculations indicate that the 2D - ACAR is an effective tool to provide microscopic information on vacancy - type defects.

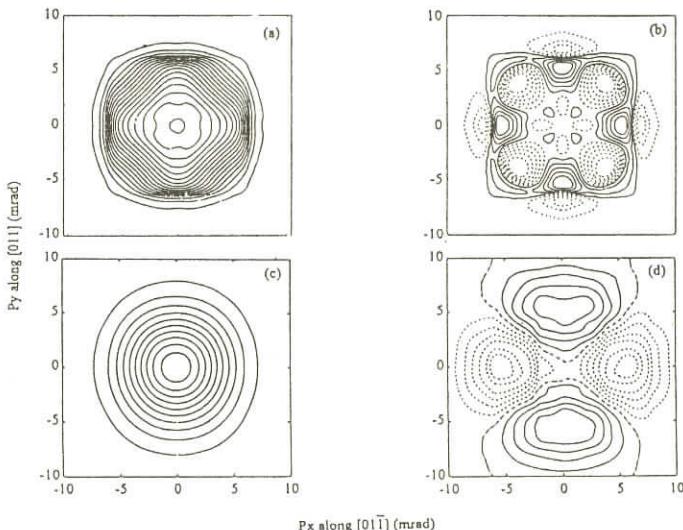


Fig. 1. The calculated positron 2D - ACAR distributions(LDA) in the perfect crystal (a) and aligned divacancies V_2^- ([111]axis) of Si (c) . Their anisotropies are shown in (b) and (d) , respectively. Solid(dashed) lines indicate positive(negative).

有機伝導体における陽電子消滅 γ 線 2 次元角度相関

電 総 研 石 橋 章 司

陽電子消滅 γ 線 2 次元角度相関法は、電子運動量分布の測定手法であり、特に金属（単体および合金）のフェルミ面の計測に用いられ、多くの有益な情報を提供してきた。最近では有機伝導体にも応用されたが、これらの物質は結晶単位胞に多くの原子を含み、全電子運動量分布およびそのモジュレーションに対するフェルミ面構造の強度が小さいため、測定データからフェルミ面構造を引き出すことは必ずしも容易でなく、理論計算との比較検討を必要としている。

本研究では、TTF-TCNQ, (BEDT-TTF)₂Cu(NCS)₂, (BEDT-TTF)₂Cu[N(CN)₂]Brにおける陽電子消滅 γ 線 2 次元角度相関スペクトルの理論シミュレーションを以下の手順で行ない既存の実験結果[1-3]と比較した。

これらの結晶では構成分子は分子単体の性質を強く残していると仮定し（分子結晶においては妥当と考えられる）、まず Gaussian94 プログラムを用いて各構成分子について分子軌道計算を行なった。ドナー-アニオン間の電荷移動を考慮して結晶中で陽電子の感じるポテンシャルを計算し、差分法により波動方程式を解き陽電子波動関数を求めた。各分子軌道ごとの電子波動関数と陽電子波動関数の積を計算し高速フーリエ変換により 2 光子運動量分布を求めた。軌道についての和をとり 1 軸に沿って積分することにより 2 次元角度相関スペクトルを得た。実験および理論スペクトルとも大きな構造は見られており、比較を容易にするために非等方成分を抽出した。

シミュレーションの結果は実験結果に良い一致をした。フェルミ面構造が全電子運動量分布（の異方性）にどれくらい寄与するかを調べるために、フェルミ面構造をぼかしたスペクトルも計算した。TTF-TCNQ では、1 次元的なフェルミ面を反映して両スペクトル（の異方性）に差異が見られたが、他の 2 物質ではフェルミ面構造の有無は異方性にほとんど影響を与えたかった。これは、TTF-TCNQ と BEDT-TTF 塩における陽電子分布の差異に起因すると解釈される。すなわち、シミュレーション結果では、前者では陽電子が伝導に寄与している TCNQ 分子近傍に分布しているのに対し、後者では伝導に寄与する BEDT-TTF 分子の中央部にほとんど分布を示していない。TTF-TCNQ においてフェルミ面に起因する構造が実験スペクトルに確認された。

LCW 署名込みスペクトルの計算及び実験結果との比較検討が今後の課題である。

本研究は工業技術院情報計算センターの計算機施設を用いて行われた。TTF-TCNQ における研究はジュネーブ大学の Manuel 博士、Hoffmann 博士およびリソ国立研究所の Bechgaard 教授との共同研究である。

[1] Ishibashi *et al.* Phys. Rev. B in press.

[2] Chan *et al.* Phys. Rev. B 50(1994) 10393.

[3] Jean *et al.* Physica C 221(1994) 399.

アルカリハライド中の非局在ポジトロニウムの波動関数

Wave Function of Delocalized Ps in Alkali Halide

東京大総合文化 永井康介

兵頭俊夫

多くの絶縁性結晶に陽電子を入射するポジトロニウム(Ps)が生成される。特に, SiO_2 , H_2O , MgF_2 , 低温におけるいくつかのアルカリハライド[1]中では, Psは非局在状態(Bloch-state)にある。

非局在Psの主な研究手段は, 2光子角相関測定である。2光子角相関法は消滅する電子・陽電子対の運動量分布を測定するので, 励起子の場合のようなエネルギーバンドの測定とは異なり, Psの波動関数の情報を得ることができる。2光子角相関における非局在Psの自己消滅成分は, $p=0$ 付近の鋭いピーク(センターピーク)と, 結晶の逆格子点に対応した位置のサテライトピークからなる。センター及びサテライトピークの強度比を測定することによって, Ps波動関数のoverlap amplitudeのフリーエ変換を直接得ることができる。

Kasai, Fujiwara[2]は, 低温において非局在Psが存在するアルカリハライドKI, NaIの1次元角相関測定を行い, 奇数指数の逆格子に対応するサテライトピークが見えないことを指摘した。また, 他のアルカリハライドに対しても同様の結果が得られている。これは, X線回折強度の場合と異なり, 最外殻軌道が異なる場合も, Psが陽イオンと陰イオンを区別しないことを示唆し, 大変興味深い。最近, Zhang, Song[3]はF⁻中心の計算等に用いられているextended-ion法を用いて, KCl, NaCl, NaFに対するピーク強度比を計算し, このCrystallographic effectを説明した。

我々は, アルカリハライド中の非局在Ps波動関数の, この特異な振る舞いをさらに定量的に理解するため, 微妙な構造に敏感な2次元角相関装置を行って, KIおよびKC1のピーク強度比の測定を行った。図1にKIの2次元角相関, 表1にピーク強度比を示す。その結果, [2]では観測されなかったKIの奇数指数のピークを初めて観測した。また, 1次元角相関では測定不可能であった(220)に対応するピークが, (200)ピークと分離して測定されたが, KI, KC1共に非常に弱く, サテライトピークは実質(200)だけであることがわかった。表2には, [3]の計算と比較するために, KC1の1次元のピーク強度比を示す。[3]の計算は奇数指数のピークがないことは説明しているが, (200)に対応するピーク強度が実験より2倍ほど強いことがわかる。

このようなPs波動関数の特徴が何に由来するかを探るため, 簡単な計算を2種類行った。一方は, Hodges等[4]が SiO_2 , H_2O に対するピーク強度の計算に用いたのと同様の方法で, Psの電子と結晶中の電子の波動関数を直交化することによりPs波動関数を求めた。この計算は, 定性的だが SiO_2 , H_2O の場合は実験をよく説明している。もう一方は, 逆に交換相互作用を無視しクーロン相互作用のみを入れたHamiltonianを考え, 摂動論で波動関数を計算した。この方法は, Boev等

[5]がアルカリハライド中のPsの有効質量等を計算するのに用いられている。これらの結果（表1を参照）から、奇数指数が弱いことは直交化によってほぼ説明できるが、強(200)ピークを説明するにはクーロン相互作用が必要であること、しかし、定量的にピーク強度を求めるには、[3]で用いられた計算以上のことをする必要があることがわかった。

- [1] Kasai et al. : J.Phys. Soc. Japan **57**(1988)329.
- [2] Kasai, Fujiwara : J.Phys.Soc. Japan **51**(1982)3077.
- [3] Zhang, Song : J.Phys. Cond. Matter **6**(1994)9173.
- [4] Hodges et al. : Canad. J.Phys. **50**(1972)103.
- [5] Boev, Arcefiev : Phys. Stat. Sol. B**125**(1984)619.

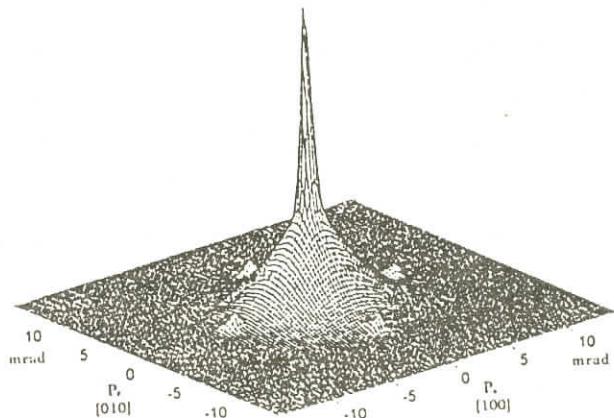


図1：KIの2次元角相関

$(G_x, G_y)/(2\pi/a)$		(0, 0)	(1, 1)	(2, 0)	(2, 2)	(3, 1)
KC1	実験	79 %	0 %	21 %	0 %	0 %
	理論(*)	91 %	0.2 %	7.6 %	1.4 %	0.1 %
	理論(**)	57 %	5.0 %	37 %	1.4 %	0 %
KI	実験	75 %	1.6 %	22 %	0.6 %	0.8 %
	理論(*)	92 %	0.8 %	5.7 %	0.9 %	0.4 %
	理論(**)	14 %	57 %	28 %	1.3 %	0 %

表1：ピーク強度比。理論(*) 理論(**) は、それぞれ直交化による計算、クーロン相互作用による摂動計算を示す。

$G_x/(2\pi/a)$		0	1	2	3
KC1	実験	89 %	0 %	11 %	0 %
	理論	81 %	0 %	19 %	0 %

表2：KC1の1次元のピーク強度比。理論はZhang, Songによる計算[3]を示す。

電通大自然科学系列 齊藤 史郎

陽電子は物質中で消滅する過程に原子分子との束縛状態であるポジトロニウム化合物を形成し、化合物内で消滅するものがある。しかし、このポジトロニウム化合物の性質はほとんどわかつてはない。ポジトロニウム化合物の性質の理論的研究の課題としては以下の3つが考えられる。

1. 化合物の安定性
2. 化合物内陽電子消滅の機構、その消滅速度の理論計算
3. 化合物内での陽電子及び電子の分布状態

これらに対して次のような理論的研究を行っている。

化合物内陽電子消滅：信頼できる化合物内陽電子消滅速度を計算するためには、陽電子-電子間距離をあらわに含む波動関数を扱う必要がある。この方法としてはHylleraas型計算がある。しかし、多体系のHylleraas型計算は事実上困難であるために、PsHなどの少数多体系でしか行われていない。そのため現在までに、多体系でも陽電子-電子間距離をあらわに含む波動関数を扱える対相関理論の開発を行っている。対相関理論とは、対象にしているN体系をN(N-1)/2個の対に分割し、その中の1つの対が残りの(N-2)体系がつくる平均場中を運動するものと考える理論である。したがって、この理論では陽電子-電子対、つまりポジトロニウムが残りの系による平均場中を運動しているという描像を記述することとなる。この方法を用いてPsHの基底状態(2S)の消滅速度の計算を行っており、高精度のHylleraas型計算のおよそ80%を得ることが出来ている。これにより、この方法では多体系でも同程度の消滅速度を計算できることが期待できる。ハロゲン化ポジトロニウムなどの大きい系への適用は、現在のところコンピュータプログラムの作成中でありその完成待ちの状態である。

表1. Ps結合エネルギー(in eV)

方 法	PsH	PsLi	PsF	PsCl	PsBr	PsI
HF	-1.17	-3.41	1.60	0.71	0.18	-0.43
VP2	-0.12	-2.19	2.25	1.63	1.25	0.55
CCP ^a	0.70					
QMC			1.98±0.17	1.91±0.16	1.14±0.11	
Hylleraas	1.060					
実 験	1.1±0.2		2.9±0.5	2.0±0.5		

^acomplete coupled pair method

化合物の安定性：対相関理論の最も簡単な近似法である2次のvariational perturbation法(VP2)により、PsH, PsLi, PsF, PsCl, PsBr, PsIの基底状態($^2\cdot ^1S$)の相関効果を考慮したPs結合エネルギーの計算を行っている。ただし、この場合には陽電子-電子間距離をあらわに含んでいない部分波展開型関数を用いている。この結果、ハロゲン化ポジトロニウムのPs結合エネルギーは量子Monte Carlo(QMC), 実験の見積もりに比較的良好く一致した結果を得た。また、PsIに関してはHartree-Fock(HF)計算では負の値であるが、VP2による相関効果の考慮により正の値となり、実験事実と矛盾のない結果を得ることが出来た。

陽電子・電子状態：ポジトロニウム化合物の波動関数の計算は比較的多く行われているが、陽電子・電子の分布状態の解析などは最も簡単な系であるPsHに対してもほとんど行われてはいない。そこで、最近PsHのHylleraas型波動関数を用いて陽電子及び電子の分布状態の解析の試みを行っている。これによりPsHの中で陽電子はポジトロニウムを形成し、PsHは水素原子とポジトロニウム原子とが結合した二原子分子的描像を持っていることがわかった。このことにより、現在は原子価結合法(Ore型, Heitler-London型波動関数)によるPsHの分子的描像のより詳細な解明を行っている。

高分子フィルム中のオルソポジトロニウムの移動

山口大学工学部機能材料工学科 岡本 健一

近年、オルソポジトロニウム(o-Ps)をプローブとした高分子膜の自由体積の評価が盛んに行われている。しかし、o-Psの寿命 τ_3 及び強度 I_3 がどのような自由体積を反映しているのかは明らかではない。 τ_3 及び I_3 から高分子膜の自由体積に関する正確な情報を得るために、陽電子からo-Psが生成し、自由体積孔にトラップされるまでの過程を解明する必要がある。本研究では、o-Psの移動に関する知見を得るために、クエンチャーを添加した高分子膜の陽電子消滅特性を調べた。

調べた高分子膜及びクエンチャーの化学構造をFig.1に示す。クエンチングの速度定数Kから、クエンチングがo-Psが移動する距離の目安として、根平均二乗距離 $x (= \sqrt{6 D \tau_3})$ を計算した。各系でのk, DP_sおよびx値をTable1に示す。xの意味は、生成した場所を原点とした半径xの球の外側で消滅するo-Psの割合が32%である。この球内にある自由体積孔N_hの数を、Bondi法で見積もった自由体積分率V_Fと τ_3 から見積もった空孔径から計算しTable2に示す。

高分子膜中のDP_sは $(1\sim 3) \times 10^{-6} \text{ cm}^2 \text{s}^{-1}$ で、高分子の種類にあまり依存しなかった。この値は直系0.1nmの粒子の拡散係数としては小さすぎ、o-Psの移動はガス分子の拡散とは異なる。o-Psが消滅するまでに数個の自由体積孔を渡り歩いていると考えられる。o-Psは質量が著しく

小さく、自由体積孔中のゼロエネルギーは熱エネルギーよりも著しく大きいので、大きな孔から小さな孔への移動が起こり難い。 o-Ps は、比較的短時間の間に小さな孔から大きな孔と移動し、より大きなサイズの孔が隣にないような孔にトラップされ、ピックオフ消滅するまでそこですごすと考えられる。従って τ_3 から評価する自由体積孔のサイズは、 o-Ps がより安定に存在できる大きなサイズに重みの付いた平均サイズであると考えられる。

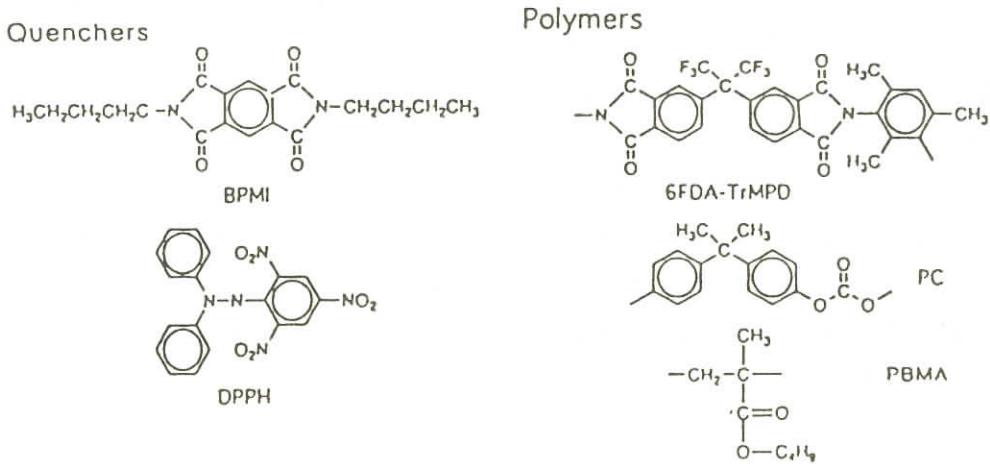


Table 1 Quenching rate constant, k, diffusion coefficient of o-Ps, DPs, and average migration kistance, x, of o-Ps in polymer films at 298 K.

Polymers /Quencher	k [M ⁻¹ ns ⁻¹]	DPS x 10 ⁶ [cm ² s ⁻¹]	x [nm]
6 EDA - TrMPD/BPMI	0.31	1.0	1.5
6 EDA - TrMPD/DPPH	0.77	1.6	1.9
PC/BPMI	0.81	2.6	2.4
PC/DPPH	0.85	1.8	2.0
PBMA/BPMI	0.65	2.0	2.1

D = k / (4π R* L), R*: 0.36 nm (BPMI), 0.58 nm (DPPH)

$$x = \sqrt{(6 D \tau_3)},$$

τ_3 : 3.7ns(6EDA - rMPD), 2.1ns(PC), 2.4ns(PBMA)

Table 2 Estimated values of average distance between free volume holes in polymer films

Polymers	V _F	V _h , ps [nm ³]	N _h
6 EDA - TrMPD	0.182	0.273	14
PC	0.165	0.100	74
PBMA	0.163	0.133	48

$$V_F = (V_T - V_0)/V_T, \quad N_h = (V_F/V_{hps})(4/3 \pi x^3).$$

固体内空隙への物質充填と陽電子消滅

東京学芸大・教育 村上英興

1. はじめに

結晶質固体、非晶質固体いづれにも、ミクロンサイズからナノメートルサイズまでの大きさの空隙を持つものが数多くある。これらの空隙は様々な物質を吸収し、ある場合には触媒として作用することが良く知られている。近年では、ナノメートルサイズの空隙に作った充填物質が今までにならない新しい物性を発現させることが見出され、物理・化学の基礎からの興味はもちろん、新素材開発が期待から、充電填物質の物性研究が盛んである。

本研究では、空隙に物質充填し、陽電子がどのように消滅するか、いかなる物性が明らかになるかを明らかにすることを目的としている。

2. 充填物質の陽電子消滅

以下に、今までに行ってきた物質充填と陽電子消滅の研究結果の例を挙げる。陽電子が、空隙を充填した物質中で消滅しそのため充填物質の物性研究に適していることが示されている。

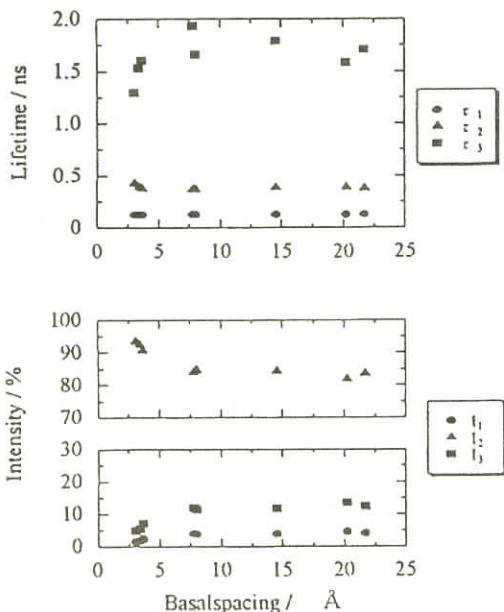


Fig. 1 層状構造を持つモンモリロナイトにアルキルアンモニウムを吸収させた場合の、層間距離と陽電子寿命、および寿命強度との関係

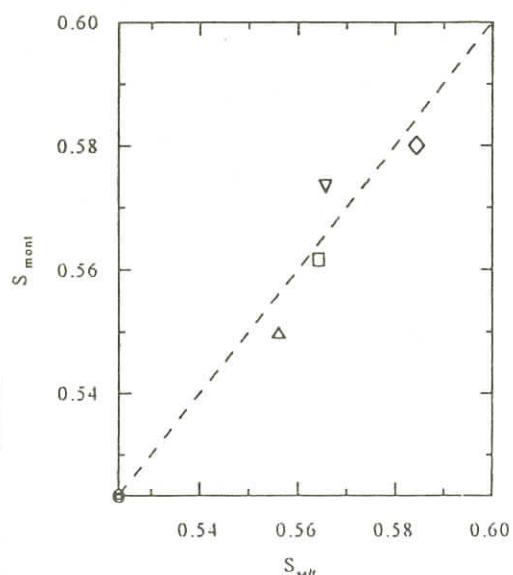


Fig. 2 モンモリロナイト-アルキルアンモニウム化合物とアルキルアンモニウム塩でのドッブラー拡がり S パラメーターの相関

研究は、International Christian Univ. M.Sano, S.Hashimoto, Kumamoto Univ. K.Ichimura および Tokyo Gakugei Univ. J.Sasaki, S.Yamamoto らの共同による。

規則合金中の点欠陥と陽電子寿命スペクトロスコピー

大阪大学工学部 白井泰治

長周期規則構造をもつ結晶中の格子欠陥研究に対しても、陽電子消滅は極めて有効な研究手段であり、規則構造中の結晶格子欠陥の実態が次第に明かにされつつある。最近のこの分野の進展を、以下のトピックスにそって紹介する。

(1) 規則構造中の点欠陥と陽電子

規則構造中の点欠陥としては、空格子点、格子間原子のほかに不正原子（他の元素があるべき格子点を占める異種原子）がある。陽電子は空孔に捕獲されるが、不正原子や格子原子には捕獲されないと考えてよい。陽電子は規則構造中の空孔型欠陥の情報を選択的に抽出する。

(2) 高温熱平衡原子空孔

これまでに熱平衡原子空孔濃度の変化が陽電子消滅寿命で直接観測された規則合金として、 Cu_3Au , CuZn , Au_3Cd , Fe_3Al , Ni_3Al , TiAl がある。これらの合金においては、熱平衡原子空孔に陽電子が捕獲されることによる陽電子寿命の急激な増大と、高温での陽電子寿命の飽和現象が観測され、実効的空孔形成エンタルピーが求められている。

CuZn 合金 ($T_c = 741\text{K}$ 以下ではB2型規則構造を、それ以上ではBCC構造をもつ) では、すでに370K付近から熱平衡空孔による寿命の顕著な増加が見られる。このしきい温度と融点(1150K)との比(0.32)を考え合わせれば、純金属の場合（通常0.6程度）に比べると驚くべき低温である。一方 T_c 近傍で、規則・不規則変態に伴う空孔周囲の環境変化による陽電子寿命の変化が見られる。この結果は陽電子消滅によって、規則合金の異なるサイトに位置する原子空孔を識別可能であることを実験的に示している。

(3) 化学量論組成からのズレに起因する構造欠陥

陽電子寿命法を用いると、ある規則合金の化学量論組成からのズレが、置換型の不正原子によるのか、それとも原子空孔によるのかを、容易に識別することが可能である。例えば、前項で挙げたすべての規則合金は化学量論組成からのズレによる原子空孔を持たない。すなわち化学量論組成からのズレは、すべて置換型の不正原子によって補償されている。なぜなら、もし組成的な原子空孔が存在すれば、すべての陽電子はそのような構造空孔（熱平衡空孔に比べれば、その濃度は桁違いに高い）に捕獲された室温でも長い陽電子寿命を持ち、したがって熱平衡空孔による温度変化は観測されないからである。同様に、電子線照射や急冷材と焼鈍材との陽電子寿命の差を調べても、容易に化学量論組成からのズレによる原子空孔の有無を知ることができる。筆者の知るかぎり、陽電子消滅法で化学量論組成からのズレによる原子空孔の存在が確認されているのは、 NiAl のみである。ただし、 FeAl , CoSi_2 , Co_2Si 等、徐冷してもなかなか高温度での欠陥が抜け切らず、両者の中間的な性格を持つと推測される化合物もある。詳細は今後の研究で明かに

されるであろう。

(4) 過剰空孔の移動と二次欠陥の形成

規則合金中の原子拡散機構についてはまだ不明な点が多い、高温からの急冷や高エネルギー粒子の低温照射によって結晶中に導入された過剰空孔（熱平衡量に対し）は、移動可能な温度になると、準安定な空孔集合体を経て二次欠陥となり、さらに温度をあげると最終的には消滅する。このプロセスに陽電子寿命測定を適用することによって、空孔の移動温度はもとより、微小空孔集合体の形態・安定性や各種二次欠陥の核形成・成長過程を知ることができ、拡散機構の解明にも重要な手掛かりを与える。陽電子消滅法で、規則合金中の点欠陥の回復挙動を捕らえた研究には、 $TiAl$, Ti_3Al , $CoSi_2$, Ni_3Al , Fe_3Al , Ni_2Sb 等が挙げられる。

以上述べてきたように、規則合金中の空孔およびその集合体の研究に対して陽電子消滅法は有效地に利用れつつある。しかし、通常の寿命測定法を用いる限り、大多数の規則合金のように溶接困難な材料の高温熱平衡測定は極めて困難である。簡便に各種物質の高温熱平衡測定を可能にするために、新しい陽電子ビーム寿命測定システムが試作されている。今後、規則合金中の点欠陥についても基礎的理解が格段に深まることが期待される。

低温照射された金属(Fe, Fe-alloy etc)の陽電子消滅寿命測定法による研究

九大応力研 蔵元英一

1. 序

金属中の照射欠陥は一般に非常に動き易く、その基本特性を調べるには低温照射、低温測定を行なうのが理想である。ここでは主として陽電子消滅寿命測定法により、照射されたFc, Ni、および点欠陥に加えて転位の挙動をも明らかにするための変形されたNiなどに対して調べた結果について述べる。低温照射で導入できる欠陥量は、通常、電子線照射、中性子照射ともに多くても100appm前後であるので不純物との相互作用を迎えて純粋に欠陥の特性を抽出するには、不純物量を1appmレベルまで低下する必要がある。鉄の場合には残留抵抗比が3000以上、Snock Peakが消失するレベルというのがほぼこれに対応する。これを達成する一つの方法は高純度の水素中で浮遊帶溶融精製を行ない、最後に真空焼鈍により水素を除去することである。

このような試料に導入された欠陥を陽電子消滅寿命測定により調べる利点は、陽電子は欠陥サイトに選択的に捕獲されてその場所の情報、直後には電子密度に関する情報を与えることである。正しくは、陽電子の種々の欠陥サイトにおける基底状態エネルギーが、マトリックス中よりも低いことが陽電子が捕獲される条件であるが、すべての欠陥、欠陥集合体に関して明らかになって

いる訳ではない。欠陥・合金元素集合体、析出物なども含めてむしろ今後の課題である方が多い。基底状態エネルギーとともにそこにおける陽電子寿命が重要であり、実験で直接得られるのはこの値である。結晶中の陽電子の寿命で基準になるのはマトリックスにおける値と単一原子空孔における値である。単一原子空孔よりも寿命が長くなるのは空孔が3次元集合体、すなわちマイクロポリトを形成した時であり、これまでに最も良く研究されてきている。マトリックスと単一原子空孔の間に存在する寿命、いわゆる、中間寿命を示すものが種々あることが次第に明らかになってきており、互いに寿命が接近しているなど困難な点も多く、今後さらに詳細な研究が必要な領域である。空孔集合体でもcollapsed structureのもの、転位、転位と空孔の複合体、析出物など多くがこの中間寿命を示すが、陽電子消滅測定法がpositron spectroscopyとして確立するためにはこの領域の進歩が不可欠である。

実験のみならず、最近は計算機シミュレーションの技術に大きな進歩が見られ、両方の比較検討によりさらなる躍進が期待される状況になってきた。計算機シミュレーションには、大きく分けて、2つの段階がある。欠陥構造をモデル結晶中に再現することと、すなわち格子緩和と、そこにおける陽電子の寿命、基底状態のエネルギーを計算することである。前者はできるだけ大きなモデル結晶中で、多体ポテンシャルを用いて十分な緩和を行ない、後者は原子の波動関数の重ね合わせ法により行なわれるが、原子番号の小さいSiなどの物質では最近は第一原理計算も行なわれるようになった。

2. 実験結果および考察

図1, 2にそれぞれ純鉄に対して低温電子線照射(京大原子炉ライナック, 28MeV, $4 \times 10^{18} e/cm^2$, 77K), 低温中性子照射(京大原子炉KUR - LTL, $1 \times 10^{17} n/cm^2$, 25K)を行なった後、100Kにて

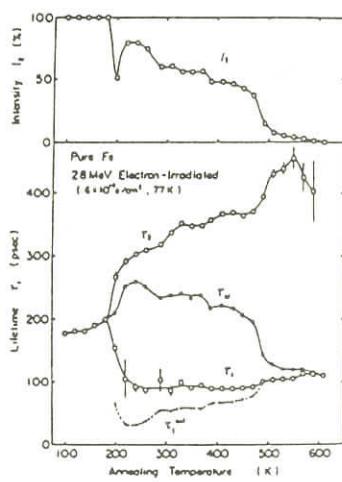


図1 電子線照射された鉄の陽電子消滅寿命測定

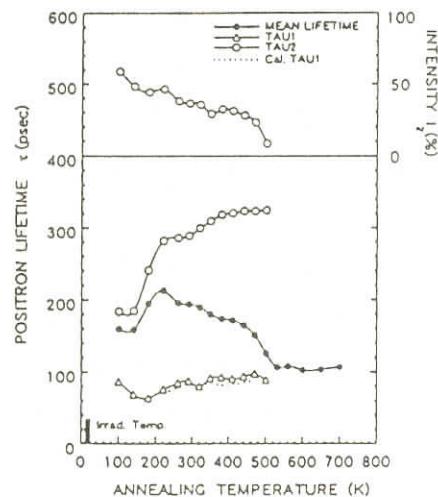


図2 中性子照射された鉄の陽電子消滅寿命測定

陽電子消滅寿命測定を行なった結果を等時焼鈍温度に対してプロットした結果を示す。電子線照射においては、照射された状態では陽電子はすべて原子空孔に捕獲されて175-180psec程度の単一寿命を示す。電子のエネルギーが高いので自由欠陥のみならず、カスケード状に形成される成分も少しは存在すると考えられるが、ほぼ単一原子空孔における寿命における寿命である。200Kを越すと空孔が移動集合を起こし、マイクロボイドを形成するので陽電子寿命は単調に伸びるのが観察される。空孔のシンク（格子間原子集合体）への移動があるので長寿命成分の強度は減少する。一方、中性子照射された鉄では、欠陥量が少ないため、始めから2成分に分かれている。長寿命成分は180psecと電子線照射同様ほぼ単一原子空孔における寿命である。このことは重要な意味を持っている。すなわち、カスケード内では空孔は集合体を未だ形成していないことを示している。最近はカスケード形成の計算機シミュレーションが盛んに行なわれているが、カスケード内での欠陥集合過程に関する実験情報は貴重である。空孔の移動集合によるマイクロボイド形成、すなわち、長寿命成分の出現は160K付近から見られる。これはカスケード内の空孔の間の距離が非常に近いことを示している。

Ni中の格子欠陥の陽電子消滅寿命測定法による研究

九大総理工 上之 康一郎
大村 雅一
九大応力研 堤 哲男
竹中 稔
蔵元 英一

【目的】

陽電子消滅寿命測定法は、結晶中の欠陥、特に空孔タイプの欠陥のミクロ情報を得る上で非常に有効な手段である。中でも空孔に関しては、陽電子寿命の変化と計算機による寿命計算結果との比較から、その移動温度やマイクロボイド等の空孔集合体の大きさまでよくわかっている。一方、積層欠陥エネルギーの低い面心立方金属では、その空孔集合体がマイクロボイドのようにopen structureを持つものではなく、転位ループや積層欠陥四面体などのcollapsed structureを持つものになりやすい。このような欠陥に捕獲された陽電子の寿命は、単一原子空孔と完全結晶の間の中間寿命を示すと考えられる。しかしながら、そのような欠陥における寿命の計算はほとんど行われておらず、欠陥構造と陽電子寿命の関係は現在でもよくわかってはいない。このような欠陥と寿命の対応関係がわかると、マイクロボイドと陽電子寿命の対応関係を加えて、欠陥スペクトルスコピーとしての陽電子消滅寿命測定法が更に発展するものと期待される。本研究では、純Niに低温

で電子線、及び中性子照射を行って欠陥を導入し、陽電子寿命測定、寿命計算を行い、面心立方金属中における陽電子の捕獲サイトに関する情報を得ることを目的としている。

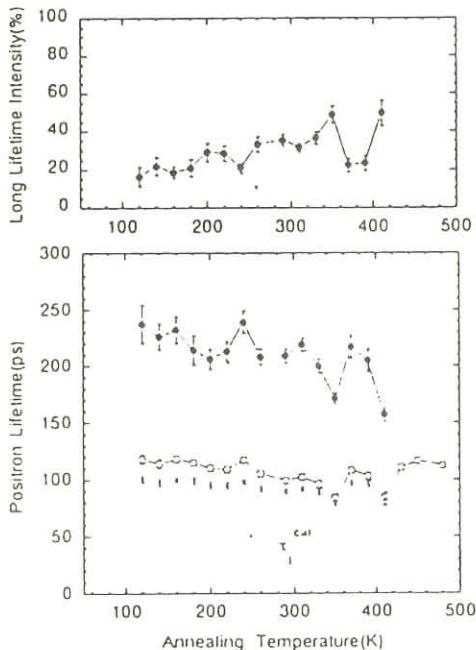
【研究方法】

純Niに液体窒素温度(77K)において28MeV, 2.5MeVのエネルギーで電子線照射を行い原子空孔等の欠陥を導入した後、100K～500K付近まで20K間隔で20分間の等時焼鈍を行い、各温度ごとに温度100Kで陽電子寿命測定を行った。また、中性子照射による欠陥の導入も行い同様の測定を行った。また、寿命計算は考えられる色々な欠陥についてGaoらのポテンシャルを用いて格子緩和を行い、欠陥構造を再現したうえで、PuskaとNieminenの方法に沿って陽電子の寿命計算を行った。

【結果】

28MeV電子線照射されたNiの陽電子寿命変化

図は28MeV, $4 \times 10^{22} e^- / m^2$ 照射を行った試料の測定結果を解析した結果である。横軸は焼鈍温度、下の図の縦軸は陽電子の寿命、上の図の縦軸は寿命の第二成分の強度を示している。310K付近から第二成分の寿命が短くなり始める。これはこの温度付近から空孔の長距離移動が始まりcollapsed structureをもつ空孔集合体が形成されたために寿命が短くなるものと考えられる。その後、昇温にしたがって長い寿命を示す欠陥の割合が少なくなるために、第二成分の寿命は次第に短くなり、480Kで完全結晶の寿命となってほぼ完全に回復した。また、他の測定結果と寿命計算の結果についても述べる。



陽電子, ESRおよび光吸収でとらえた石英ガラス中の欠陥

東北大金研 真安正明
田畠 誠
長谷川 雅幸
新日鉄(株)先端技研 藤浪真紀
東北大金研 山口貞衛

【はじめに】

石英ガラス中に不純物として含まれるOH基が欠陥の形成と回復挙動に重要な働きをしていることがよく知られている。今回はこのOH基濃度の異なる試料について標題の実験を行った。さて、照射試料の陽電子寿命スペクトルは3成分に分解されることを以前に報告したが（短寿命成分 τ_1 （～0.2ns : p-PsおよびType-1欠陥）・中寿命成分 τ_2 （～0.5ns : Type-2欠陥）・長寿命成分 τ_3 （～1.6ns : o-Psのピックオフ消滅）），今回は特に短寿命成分 τ_1 に寄与する欠陥について注目する。

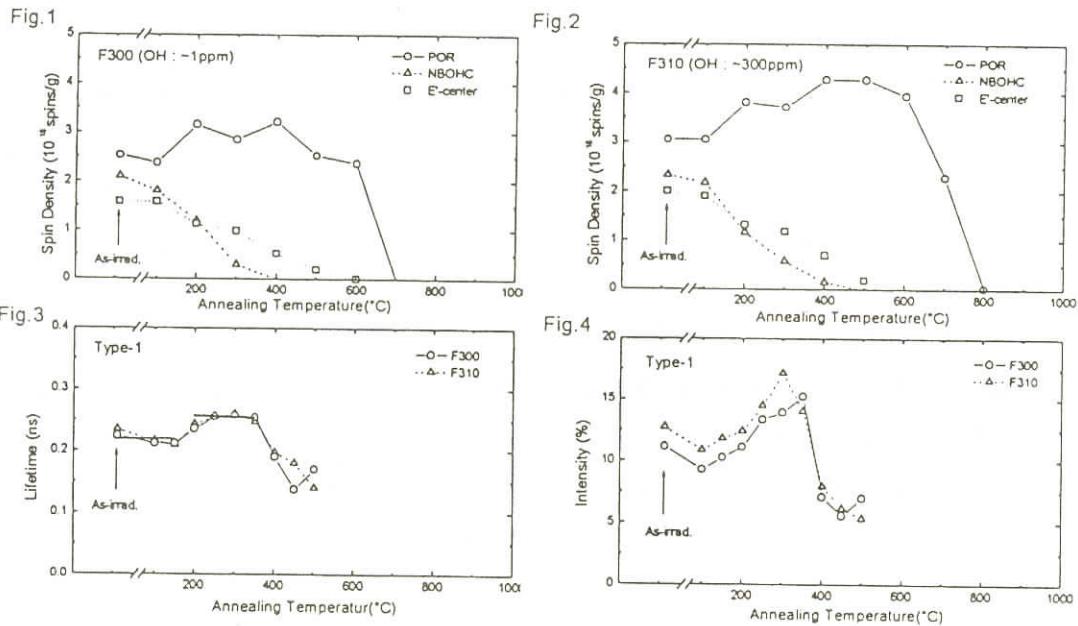
【方法】

高純度合成石英（信越石英, Suprasil-F300(OH～1ppm), F310(OH～300ppm), Viosil(OH～700ppm)を中性子照射($3.5 \times 10^{17} n/cm^2$, 150°C以下)し, 陽電子寿命, ESR, 光吸収測定を行った。

【結果】

ESR測定によって求めたSuprasil-F300とF310の各照射欠陥の回復挙動をFig.1, Fig.2に示す。E'-centerおよび非架橋酸素ホールセンター(NBOHC)欠陥濃度（スピニ密度）は焼鈍温度と共に減少し, 500°C～600°Cで完全回復した。一方, 過酸化ラジカル(POR)は, 烧鈍温度と共に400°C付近まで増加しその後急激に回復した。OH基濃度の違いによってスピニ密度とPORの回復温度に差異が認められる。PORの完全回復温度はF300では約700°C, 一方, F310では約800°Cである。OH基の少ないF300では, 照射後およびその後の焼鈍過程を通じてこれら3種類の欠陥濃度のいずれも, OH基の多いF310のそれより2～3割少ない。

陽電子寿命測定から得られた τ_1 はp-Ps寿命値(125ps; 寿命強度 $I_3/3$)とType-1の欠陥寿命値(τ_{type1})との平均であると仮定し, τ_{type1} とその寿命強度 I_{type1} (= $I_1 - I_3/3$)を求めた結果をFig.3, Fig.4に示す。Fig.3より寿命値が200°C～400°Cで伸びていることから, Type 1は1種類だけの欠陥でなく少なくとも2種類の欠陥が寄与すると考えられる。Fig.4よりType-1欠陥の寿命強度は焼鈍温度とともに300°C付近まで増加し, 400°Cで急激に回復する。この完全回復温度はE'-centerやNBOHCのものとよく似ている。光吸収の結果を含め陽電子を捕獲する欠陥について議論する予定である。



酸化物微粒子表面の常磁性中心とポジトロニウムとの相互作用

東京大学大学院総合文化研究科相関基礎（物理）

斎藤 晴雄

兵頭 俊夫

酸化物微粒子に陽電子を入射すると、多くの場合、微粒子間にポジトロニウムが生成する。最近、Dauwe ら[1](Al₂O₃, MgO)や、我々[2](SiO₂)により、このポジトロニウムと、照射で生成する微粒子表面の不対電子が、スピン交換反応をおこすことが報告された。

この現象は、2つの面で興味深い。ひとつは、ポジトロニウム反応研究の新しい場としての面である。これまでの、ポジトロニウムのスピン交換反応の研究は、固体、液体中や、特定の気体中で行われてきた。微粒子表面でのスピン交換反応を調べることは、従来行われていない条件での実験であるため、スピン交換の研究に新しい知見を与えることが期待される。

もう一つの面は、不対電子プローブとしてのポジトロニウムの利用という側面である。不対電子は、ESRや磁化率測定によって検出するのが普通であるが、これらの方法では、バルクと表面は区別されない。一方、微粒子間のポジトロニウムは、微粒子との衝突を繰り返しながら、微粒子表面をサンプリングするため、表面 sensitive である。この特徴を生かせば、ポジトロニウムを表面

不対電子に対する新しいプローブとして用いることができるはずである。

我々はこれまでに、アイソトープからの陽電子の照射下で、シリカエアロゲル表面に常磁性中心が生じ、ポジトロニウムとスピントン交換反応すること、室温にもどすと常磁性中心がアニールされてなくなること[2]、また、紫外光でも、同様の現象が見られることなどを報告した。

今回は、熱処理したシリカエアロゲルと、他種のシリカ微粒子に、低圧水銀灯(254nm)による紫外光照射を行った実験について報告する。

200Cで2時間ベークしたシリカエアロゲルに、30Kで紫外光照射を行った際の、寿命スペクトルの変化を図1に示す。照射により不対電子が微粒子表面に生成し、ポジトロニウムとスピントン交換反応している。一方、シリカエアロゲルを800Cで2時間ベークしたサンプルで、同様の実験を行うと、変化が全く見られなかった。また、加水分解法で作られたシリカ超微粒子(Cab-O-Sil)も、変化が見られないことがわかった。

200Cで2時間ベークしたシリカエアロゲルを、30Kで紫外光で照射し、ESRスペクトルを測定した。

結果を図2に示す。これは、 $\cdot\text{CH}_2\text{OD}$ のESRスペクトル[3]とほぼ同じ形をしている。

シリカエアロゲルは、微粒子ネットワークを成長させた後、オートクレーブでメタノールをのぞくことによって作られる。



このため、表面に $-\text{OCH}_3$ が存在する。また、高温でベークすると $-\text{OCH}_3$ がとれることが知られている[4]。

したがって、図2は、 $\text{OCH}_2\cdot$ ラジカルを表していると考えられる。また、800Cでベークしたシリカエアロゲルと、メタノールを使わずに作られたCab-O-Silで、紫外線の効果が見られないのは、 $-\text{OCH}_3$ が表面に存在しないからだと考えられる。

以上より、シリカエアロゲル(200Cbaked)に紫外光照射すると、 $-\text{OCH}_3$ のHがとれて $-\text{OCH}_2\cdot$ ラジカルができる、これとポジトロニウムがスピントン交換をすること、表面に $-\text{OCH}_3$ のないシリカ

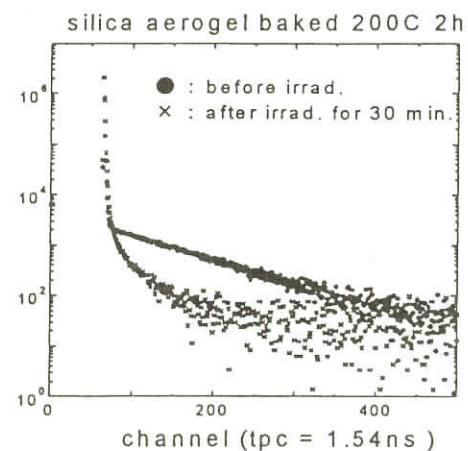


図1 紫外光照射による寿命スペクトルの変化

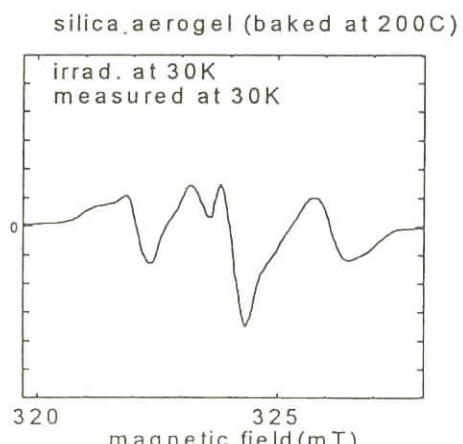


図2 ESRスペクトル

微粒子では、今回使った紫外光では表面に不対電子ができないことがわかった。

現在、このラジカルと、ポジトロニウムのスピントスルーパスを求める実験を進めている。また、別の照射法で、 SiO_2 に intrinsic な常磁性中心を生成させ、陽電子の測定と ESR の測定を同時にを行う準備を進めている。

- [1] C Dauwe and Mbungu-Tsumbu, Phys. Rev. B**45**(1992).
- [2] H.Saito et. al., Phys. Rev. B**52**(1995)689.
- [3] P.J.Sullivan et. al., J.Am. Chem. Soc. **85**(1963)384.
- [4] G.E.Walrafen et. al., J.Chem. Phys. **85**(1986)771.

陽電子を含む原子過程

理 研 五十嵐 明 則

反陽子や陽電子といった、反粒子入射体と原子の衝突実験の最近の急速な進歩に呼応した、理論計算の発展が望まれている。反粒子を含む問題は、電子や原子核だけでは実現できない同程度の質量をもった粒子が複雑に相互作用し合い組み替えを行う物理系を提供し、新しい理論手法の開発が要求される。粒子と反粒子の原子による衝突の比較は、衝突機構を明らかにする上でも良い題材である。

今回は、原子系における電子や陽子の役割を陽電子に置き換えた場合の、理論的扱いや物理の相似点を示すとともに、陽電子と原子の散乱の理論側の最近の現状について報告する。

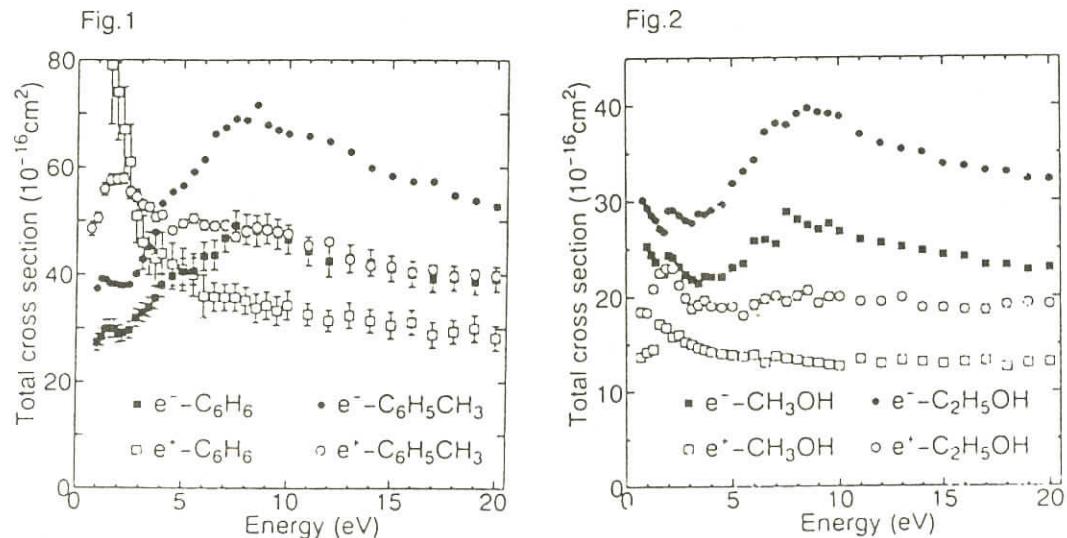
陽電子および電子の複雑気体分子による散乱

山口大学理学部 浜田亮
工学部 末岡修
医療短期大学部 季村峰生

我々は弱い強度の陽電子ビームを利用して気体原子分子との散乱の研究を行なっている。 e^+ ビームにする前の RI²²Naからのすべての陽電子からの信号を 1 つの検出器 PM に入れる飛行時間法(TOF 法)を採用しているためにパルス回路系の処理時間がネックになって線源強度を強くすることができない。これを補うためにはモダレータの効率を向上させることが必要である。

精力的に行なっている第 1 の研究は、陽電子および電子の複雑気体分子による散乱全段面積の測定実験である。実はこの実験は電子散乱の方が主であり、反応性プラズマに関する研究として注目

されているものである。そこで相互作用をより物理的に追求するために陽電子散乱のデータが役立つのであるが、未だそこまで解析が十分には進んでいない。最近測定された気体分子は、 SiH_4 HCOOH , CH_3COOH , C_6H_6 , $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3$, SF_6 , CH_3OH , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ などである。 C_6H_6 と $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3$ の低エネルギー領域での実験データをFig. 1に、 CH_3OH と $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ の低エネルギー領域での実験データをFig. 2に示す。



今後の計画としては、将来の超LSIの研究に必要なC-F系およびハロゲン気体に対する電子・陽電子散乱実験を遂行していく予定である。

第2のテーマは、輸送磁場の強さを変えてみかけの全断面積を測定し、測定値の磁場依存性からの微分断面積の見積りである。この方法は前方散乱の補正計算を発展させたもので、前方散乱性の強い気体でないと十分な精度が得られないという欠点があるが、弱いビームでも実験ができるということの他に、従来の方法では測定が困難であった低角度の微分断面積も測定できるという利点もある。これまでに H_2O や NH_3 のような極性分子で実験しており、理論計算の結果や他の電子散乱の測定データとの比較検討を行なっている。

さらに現在開発が進んでいる強力な陽電子線源が得られれば、この分野での研究項目では次のような研究を目指すことができる。(1)全断面積の精密測定、(2)貴重（作りにくい）気体(C_{60} , H原子, イオンビームなど)に対する全断面積の測定、(3)非弾性散乱断面積の測定（しきい値問題）、(4)Ps形成断面積の測定、(5)解離断面積の測定、(6)解離ラジカル分子による散乱実験。ただし、我々は強力なビームに対しては現在我々が用いている方法を適応するのではなく、むしろ通常の方法で測定することになる。

低速陽電子消滅法による高ドーズ酸素イオン注入Siウェハーの欠陥挙動の研究

新日本製鐵先端技術研究所 藤浪真紀

1. はじめに

これまで酸素をイオン注入したSiウェハーにおいてその回復挙動が他のイオンと異なることを低速陽電子消滅法により明らかにしてきた。酸素注入量が $2 \times 10^{15}/\text{cm}^2$ の場合、800°CアニールでもS parameterはSiバルクの値に戻らず、非常に小さな値（バルク値を1とすれば最小値で0.93）を示す。これは数百°Cで酸素が空孔と結合した複合体を形成し、800°Cアニールでは空孔を含んだ酸素クラスターを形成し、それが陽電子の捕獲サイトになっているためと考えている。本報告では、より高注入量、かつ高温度でアニールした場合それらの欠陥がどのように変するのかを調べることを目的とした。

2. 実験

試料は酸素イオン($2 \times 10^{17}/\text{cm}^2$, 180keV)をCZ-Siにイオン注入し、700°Cから1000°Cまでは窒素中で1時間アニールした。各試料についてS parameterの陽電子エネルギー依存性を室温で測定した。また一部について断面電子顕微鏡(XTEM)観察を試みた。

3. 結果と考察 Fig. 1に各試料のS parameterの陽電子エネルギー依存性を示した。

as-implanted試料……表層100nm以下の領域はボイド形成により非常に大きなS parameterを与える。注入領域は多量の酸素注入により照射ままの試料においてもS parameterは結晶Siの値および非晶質Siの値(両者はほぼ同一の値である)よりもかなり小さい値(0.95)を示した。700-800°C試料……表層100nm以下の領域のS parameterはさらに増大し、ボイドの成長が起こっていると考えられる。一方、注入領域におけるS parameterは低下傾向にあった。

900-1000°C試料……表層のS parameterはバルク値に近づき单なる空孔型の欠陥は消失する。一方、酸素の平均注入深さ(R_p)以下の表面層でS parameterはさらに低下し極小値(0.90)となった。この温度領域は酸素析出前と考えられ、酸素はクラスター状態を形成していると推定している。

発表当日は、電顕の結果と対応させながら、本試料系において陽電子が検出し

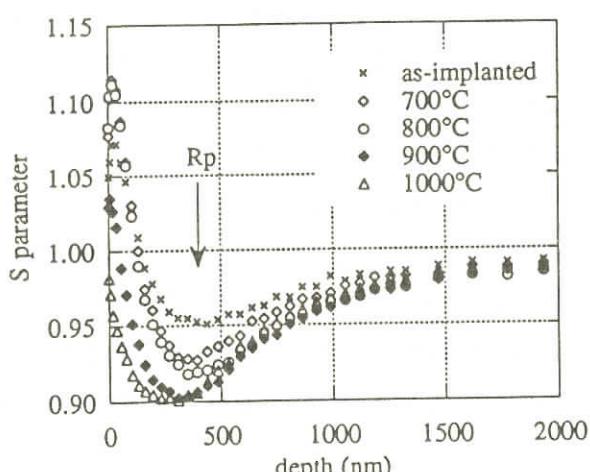


Fig.1 酸素イオン注入($180\text{keV}, 2 \times 10^{17}\text{O}^+/\text{cm}^2$)Si ウェハーをアニール($700 - 1100^\circ\text{C}$, 1hr, 窒素中)した試料の陽電子データ

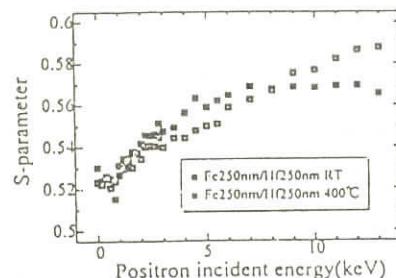
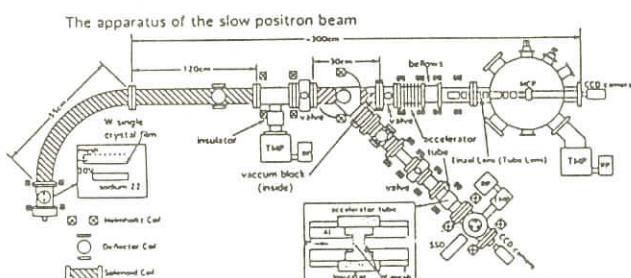
低速陽電子ビーム法による金属人工格子の研究

東京学芸大学 金沢育三
 村重祐介
 田代睦
 小泉知也
 大滝英一
 岩本哲
 東京大学物性研究所 小森文夫
 東京大学原子力総合センター 伊藤泰男

金属多層膜Fe/Hfは近年軟磁性材料として注目されており、高密度磁気記録ヘッド等への利用が非常に期待されている。このような磁気特性を示すには、Fe結晶粒の柱状的成長を抑制しナノスケールという非常に微細なものにしなければならない。またこの多層膜は焼鈍することによって800K付近で、固相反応を起こし、非晶質化する特性を持っている。しかし、磁気ヘッドは極めて高温になるため結晶構造の熱安定性を高める研究が必要である。

過去我々は、様々な金属多層膜の固相反応について研究してきたが、多層膜中に含まれる膨大な欠陥及び、界面の乱れが固相反応を大きく促進しているものと考えられる。今回、基板温度等の条件を変え、結晶成長方向や欠陥の量を制御した試料を作成し測定を行った。

測定は低速陽電子ビームを試料に入射させ、得られるスペクトルからS-parameterを算出し、深さ方向の欠陥分布について調査した。陽電子源には～5mCiの²²Naのβ⁺崩壊を利用し、UHVで、2000度アニーリングした1μmタンゲステン単結晶膜の減速材によって、単色化し、低速陽電子ビームを得た。ビーム強度は～10⁴sec⁻¹である。陽電子の輸送は、ソレノイドコイルやヘルムホルツコインを用いた磁場で行い、accelerator tubeで、最大13keVまで加速を行い試料に入射した。下図はビームラインと測定結果である。詳細は講演時発表する。



On the Unstable o-Ps States in Low Molecular Weight Organic Solids

Hamdy F. M. Mohamed and Yasuo Ito

RCNST, The University of Tokyo, Tokai, Ibaraki 319-11

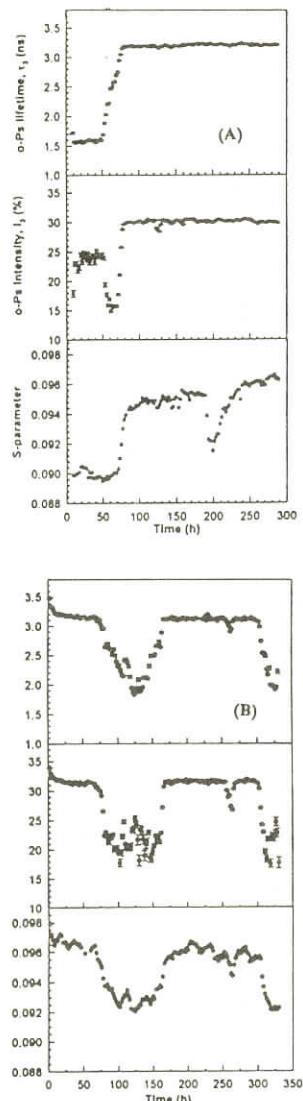
In the previous work[1] we showed that the temperature dependence of several low molecular weight organic solids show two different *o*-Ps states. In one state both τ_3 and I_3 change smoothly from the liquid values as if to indicate the existence of a kind of supercooled state. Another is the state with short lifetime (1-1.5 ns) and low intensity.

The positron annihilation lifetime (PAL) and Doppler broadened annihilation radiation (DBAR) were measured more extensively for n-hexane by keeping the sample temperature at 20 and 130 K and measuring PAL and DBAR as a function of time.

At 20 K τ_3 was in the second state until 50 h and then it came to the first state within 20 h and leveled off. I_3 showed the same trend except in the region from 50 to 70 h where it decreased and suddenly increased to the first state. (V-shape) The S-parameter showed the same trend as τ_3 except it dropped after 75 h and then another V shape appeared in the region 180-240 h as shown in Fig. (1A).

At 130 K τ_3 , I_3 , and S-parameter show oscillations between the first and the second states of o-Ps state almost at the same time as shown in Fig. (1B).

The interpretation of the oscillation between the two states is not clear. Probably the o-Ps states are not stable and are easily affected by the state of molecular aggregation. It is also probable that something like charge-up effect as a result of accumulated positive charge or irradiation effect by positrons is involved.



Figure(1):
The o-Ps parameters as a function of time for nhexane (A) at 20K and (B) at 130K.

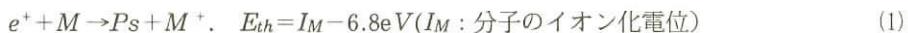
Reference

- [1] Y. Ito, H.F.M. Mohamed, and M. Shiotani, J.Phys.Chem. 100, 14161(1996).

ポジトロニウム形成におけるOre モデルとspur モデルの統一的な理解の試み

東京大学原子力研究総合センター 伊藤泰男

ポジトロニウムの形成について 2 つの異なったモデルが提起されている。一つは Ore モデルと呼ばれるもので、陽電子が原子・分子から電子を一つ引き抜いて結合すると考える。通常、引き抜くべき電子の結合エネルギーはポジトロニウムの結合エネルギーより大きいから、この反応はある閾エネルギー E_{th} 以下では起こらず、epi-thermal 反応である。



もう一つのモデル（スパー モデル）では、陽電子が物質を減速していく過程でつくるイオン化・励起の密度の高い領域（スパー）の中で結局は停止し、その中にある“叩き出された”電子(excess electron) と結合すると考える。



下付 m は物質中の状態であることを示しており、これら粒子のエネルギー準位に依存して一定の閾値が存在し得るが、Ore モデルよりは小さいエネルギーで起きる。

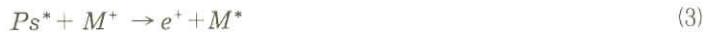
これらのモデルは長い間論争的となってきたが、取り扱う物質と状態によって見解が異なっており、普遍的な理解が形成されていない。第 3 の考え方として “comprehensive model” と主張するものがあるが、これは 2 つの対立するモデルが両方ともあり得るとするナイーブなもので、対立をアウェーベンしたことにはなっていない。私も、これまで有機物の液体・固体でポジトロニウム形成実験を行ってきてスパー モデルを好んで採用してきたが、なぜスパー モデルなのか（或いは、何故 Ore モデルでないのか）が分からずもどかしさが残っていた。最近、両者を統一的に理解することが出来そうなアイデアを得たので、本研究会でご披露して批判を仰ぎたい。

スパー モデルでは、陽電子が止まる寸前に作るスパー（最終スパー）にスポットライトが照らされる。放射線化学の常識では、高エネルギーの陽電子（電子も同じことだが）の LET(Linear Energy Transfer) は小さいが、1 keV 以下になると LET が 20 - 50 eV/nm にも上昇する。換算すれば、1 nm ごとに 1-2 のイオン化を起こすことになるので、excess electron の密度は極めて高い。モル濃度で云えば 1-10 mol/dm³ にもなるが、これは翻って、親イオン M^+ の濃度も同じくらい高いことを意味する。このようなスパーを特に blob と呼ぶ。このことが第 1 のポイントである。

第 2 のポイントは、Ore モデル、スパー モデルとも、結局はこの同じ最終スパー の中で起こることである。これは最終スパー が作られ始めるのは、 e^+ が 1 keV 程度以下に達してからであること、Ore モデルは 10 eV 付近の e^+ が関与すること、（エネルギー的及び時間的に）その後スパー モデルの領域に入ること、などから自明である。

以上のことから、Ore モデル的に生成した Ps は、数 mol/dm³ の親イオン M^+ の海の中に放り込まれることになる。この Ps は生成時には最大 6.8 eV までにわたる高い運動エネルギーを持っている

(ホットアトム) から非常に動きやすく、容易に



のように酸化される（電子移動が起こる）に違いない。

以上の考察によって、Oreモデル、スパーモデルともに起こりえるが、凝集状態ではOreモデルによるPsは裸にされてしまうので、最終的にはスパーモデルの側面のみが観測にかかりやすくなる。この考えによれば、何故気体ではOreモデルが優勢なのかも説明できるし、超微粉末のような不均一系ではOreモデルのPsが生き延びられることも予言出来る。また、スパーの構造とその中の反応のパラメータが適当に選ばれれば、OreモデルのPsとスパーモデルのPsが一定の割合で見られることも主張出来る。最近注目されている、液体中での2つのポジトロニウム状態は、この視点から考えることが出来るかも知れない。

イオン照射された金属材料中の欠陥形成の陽電子による研究

東京大学原子力研究総合センター

岩井岳夫

東京大学大学院工学系研究科システム量子工学専攻

関村直人

与那嶺真一

原子力材料の照射損傷過程において、中性子が構成原子と弾性衝突する過程で生成する空孔およびその3次元的な集合体（マイクロボイド）の挙動は、材料のマクロな性質変化を理解する上で本質的に重要である。陽電子消滅法はその空孔や空孔集合体の検出に極めて高い感度を有しているため、これらの挙動理解に非常に有用な検出手段として応用されている。また、イオン照射は中性子照射に比べ短期間でより制御された照射条件を作り出すことができるという利点を有し、照射損傷過程の基礎的な研究に幅広く利用されている。ここではイオン照射法と陽電子消滅法を組み合わせた照射損傷研究の例として、軽水炉圧力容器剛材の照射脆化の機構に関する研究、およびバナジウムの空孔型欠陥生成に関する研究を紹介する。

軽水炉圧力容器鋼材の中性子照射脆化は、軽水炉の寿命を左右する重要な現象であるが、その機構は複雑で、十分に解明されているとはいえない。本研究では組成を単純化したモデル合金に対してイオン照射を用い、照射欠陥生成に及ぼす化学成分の効果を調べた。試料として鉄をベースに炭素、銅、ニッケル含有量を変えたモデル合金を用い、東大原総センター重照射研究設備(HIT)にて3 MeVのニッケルイオンを563Kで照射した。筑波大学物質工学系谷川研究室の低速陽電子測定装置にて単色の陽電子を照射後の試料に注入し、ドップラー拡がりのSパラメータを注入陽電子エネルギーの関数として測定した。照射量の増大とともにSパラメータは増加し、照射による空孔型欠陥の蓄積が示された。さらにこのカーブをVEPFIT¹⁾でフィッティング解析し、欠陥サイズに

対応する S_d （欠陥で対消滅したときの S パラメータ）と、欠陥数密度に比例する捕獲速度から、生成した空孔集合体のサイズ、数密度を推定した。 S_d/S_b (S_b : バルク消滅したときの S パラメータ) の値から、各試料中の欠陥は 10 個以下の空孔の集合体と推定される。また銅の添加は個々の欠陥体積を減少させ、捕獲速度を大きく増加させることが見出され、この効果は銅-空孔複合体の形成によると考えられる。

低放射化、良好な耐スエリング性から核融合炉第一壁構造体の候補材料として期待されているバナジウム合金の照射損傷を理解する上で、空孔型欠陥の形成過程とカスケード損傷過程との関連付け、さらには微小クラスターの検出手法の高度化が重要である。ここでは純バナジウムに対して、イオン質量を変化させたイオン照射と弥生炉による高速中性子照射を行い、損傷が表面近傍にのみ導入されるイオン照射材に対する Conventional な陽電子寿命測定の適用性、および陽電子消滅法により検出される欠陥のサイズや濃度の照射条件依存性を検討した。室温で 1 MeV のプロトン、ヘリウム、窒素イオンを照射し、 ^{22}Na のカプトン線源を用いて陽電子寿命測定を行った結果、質量の異なる 3 種類のイオンを照射した純バナジウムの空孔型欠陥は、いずれも単一空孔あるいは複空孔程度の大きさであり、この程度の質量・エネルギーのイオンではカスケードから直接大きいマイクロボイドは形成されないことが示された。また長寿命成分の相対強度は、損傷領域がより深いプロトン照射よりも、表面近傍に集中してより多くの空孔を生成する窒素イオン照射の方が大きかった。弥生炉での高速中性子照射の場合はイオン照射の場合より空孔集合体のサイズが大きかったが、照射中の 100°C 程度の温度上昇による空孔の移動・集合の可能性を示している。

- 1) A. Van Veen et al., Proc. 4th International Workshop on Slow Positron Beams for Solids and Surfaces, (1990).

SiO_2 表面からのポジトロニウム放出

東大総合文化 長嶋泰之
森中康弘
兵頭俊夫
高工研 栗原俊一

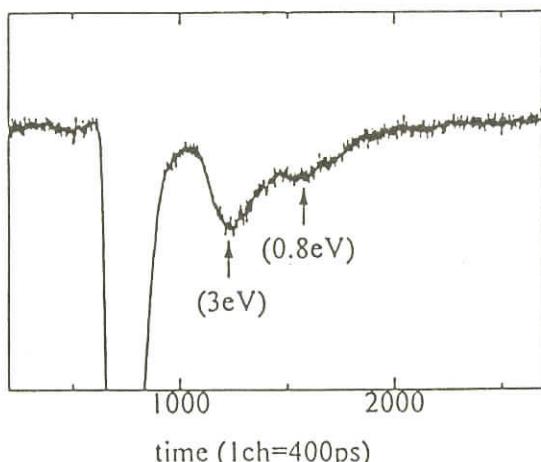
SiO_2 表面に陽電子を入射すると、表面からポジトロニウムが放出されるが、その際の放出エネルギーが、シリカエアロジェルを用いた 2 光子角相関測定[1]、および SiO_2 単結晶表面からのポジトロニウムの飛行時間(TOF)測定[2]によって求められている。

陽電子をシリカエアロジェルに入射すると、一部はポジトロニウムを形成し、シリカ微粒子間の空隙に飛び出す。空隙内で自己消滅したパラポジトロニウムの運動量分布は、2 光子角相関法で測

定可能である。パラポジトロニウムは寿命が短いため、自己消滅までにはエネルギーをほとんど失わないと考えられるで、得られる運動量分布から、 SiO_2 表面からのポジトロニウムの放出エネルギーを見積もることができる。この方法によって得られた放出エネルギーは、0.8eVである。^[1]。一方、Sferlazzoら^[2]は、低速陽電子ビームを SiO_2 単結晶に入射し、表面から放出されるポジトロニウムのエネルギーをTOF法で測定した。彼らの用いたビームは連続ビームである。これを、中央に穴の空いたMCPを通して試料に入射し、発生する2次電子でstart信号を生成する。stop信号には、試料表面から飛び出したポジトロニウムがMCP表面でpickoff消滅する際に発生した γ 線を、シンチレータで検出したものを用いる。これによって得られたポジトロニウムの放出エネルギーは、3.27eVである。

我々は、この2つの実験の食い違いを調べるために、高エネルギー研究所の高強度陽電子ビームを用いて、 SiO_2 単結晶表面から放出されるポジトロニウムのエネルギーを、飛行時間測定によって求める実験を行っている。ビームは、Sferlazzoらのものとは異なり、半値幅25nsのパルス状で、発生時刻は電子ライナックからの信号から得られる。一方、stop信号は、試料表面を飛び出したオルソポジトロニウムが真空中で自己消滅した際に生じる γ 線を、鉛スリットを通して検出する。TOFスペクトルは、ライナックからの信号をトリガーにして、高速デジタルオシロスコープで測定した。

試料表面と検出器のスリットの距離を135mmにして得られたTOFスペクトルを、下図に示す。このスペクトルには、0.8eVと3eVに相当する2つのピークが認められる。このことは、 SiO_2 表面からのポジトロニウム放出には、2つの機構が存在することを意味する。その一つは、 SiO_2 内部で生成されたポジトロニウムが表面から放出されたもの、もう一つは、試料表面で陽電子が電子を捕らえてポジトロニウムとして放出したものであると考えられる。現在、これらの機構と2つのピークとの対応関係を検討中である。



- [1] Y.Nagashima, M.Kakimoto,
T.Hyodo, K.Fujiwara,
A.Ichimura, T.C hany,
J.D eng, T.Akahane, T.Chiba,
K.Suzuki, B.T.A. McKee, and
A.T.Stewart, Phys. Rev. A52
(1995) 258.

- [2] P.Sferlazzo, S.Berko, and
K.F.Canter, Phys. Rev. B35
(1987) 5315.

陽電子消滅励起オージェ電子分光による固体最表面分析

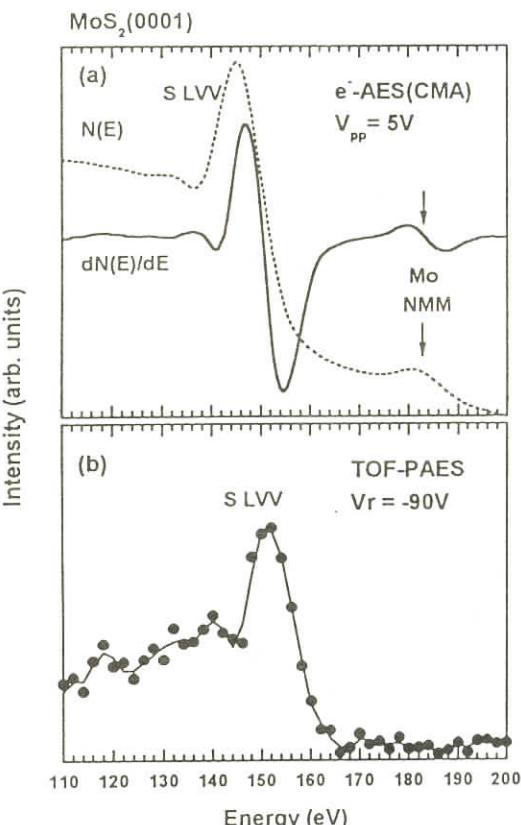
電 総 研 大 平 俊 行

鈴 木 良 一

三 角 智 久

陽電子消滅励起オージェ電子分光法(PAES)は、電子や光によって励起するオージェ電子分光と比較して、1)表面最表層のみに敏感、2)オージェピーク周辺に二次電子によるパックグラウンドが全くない、という特徴がある。よって、PAESは表面最表層に限った元素分析および化学結合状態分析を行うことができる。しかし、通常の放射性同位元素を陽電子線源に用いる装置では、ビーム強度が弱いため、エネルギー分解能のよいスペクトルを充分な統計精度を測定することは難しい。

電総研では、電子線形加速器を用いて発生した高強度 ($\sim 10^8 e^+/\text{sec}$) の低速陽電子ビームを用い、飛行時間(TOF) 法により高分解能、高計数率の両立を目指した陽電子消滅励起オージェ電子分光装置を開発している。この装置では、チョッパー、バンチャーを用いて発生した10nsec幅の陽電子パルスを試料表面に入射し、放出されるオージェ電子を 1 m 離れたマイクロチャンネルプレート(MCP) 検出器に到達するまでの飛行時間を測定することによりエネルギーの分析を行う。TOF 法では、エネルギー分解能は入射陽電子のパルス幅によって制限され、分析エネルギーが高いほど分解能が悪くなる。そこで、試料と検出器の間の長さ 60 cm の飛行管に減速電位をかけることにより、検出効率を落とすことなく分解能を向上させていく。図(b)は、この装置を用いて測定した $\text{MoS}_2(0001)$ からの S-LVV オージェスペクトルである。このスペクトルは、試料に対して -90V の減速電位を飛行管に印加して測定したものである。図(a)には、比較のために市販の円筒鏡型分光器(CMA)を用いた電子ビーム励起によるオージェ電子スペクトルを示した。図(a)の微分スペクトルの測定は、変調電圧 $V_{pp}=5\text{ V}$ で行った。150 eV 付近の主ピークの幅は両者ともほぼ同じであることから、TOF-PAESスペクトルでは 5 eV 以下の分解能が得られていると思われる。現在、この TOF-PAES 装置を用いて Si の LVV オージェピーク形状を調べている。



陽電子誘起イオン脱離装置の開発

東京学芸大学 田代 瞳

小泉知也

金沢育三

東京大学物性研究所 小森文夫

東京大学生産技術研究所 福谷克之

東京大学原子力総合センター 伊藤泰男

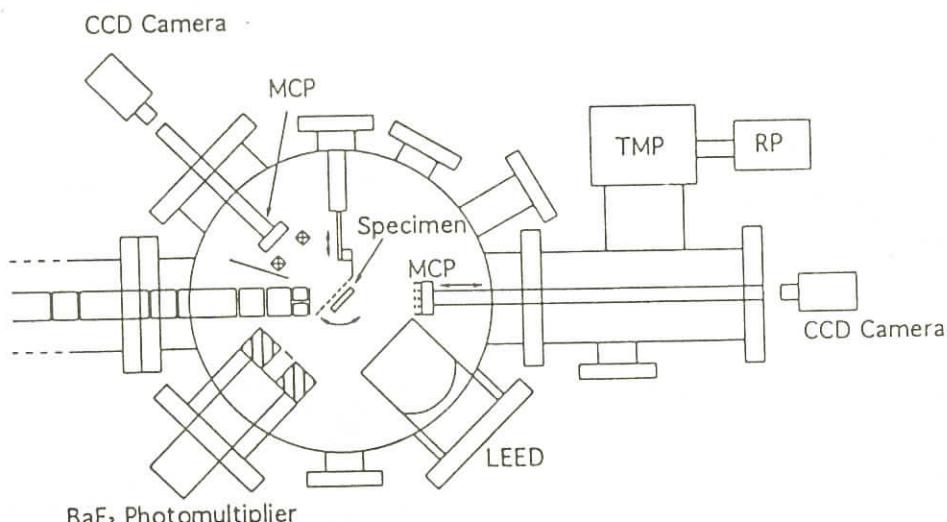
電気通信大学 村田好正

我々は、表面に吸着している原子や分子、イオンについて、表面に敏感性を有する陽電子との物理現象を研究したいと考えている。そのため、現在東大物性研において低速陽電子ビームラインを製作し、陽電子誘起イオン脱離装置の開発を進めている。

この装置は、陽電子ビーム発生部、陽電子輸送系、陽電子誘起イオン脱離装置チャンバー内の測定系から構成されている。

陽電子ビームの発生は $\sim 5 \text{ mCi}$ の ^{22}Na の β^+ 崩壊を利用する。そこから得られる白色の陽電子は、 2000°C でアニーリングされた $1 \mu\text{m}$ タンゲステン単結晶膜の減速材に入射する。そこで熱化し、減速材表面に拡散してきた陽電子を、メッシュと 30V の電位差をかけ低速陽電子ビームとして引き出す。得られるビーム強度は $\sim 10^4 \text{ sec}^{-1}$ である。

陽電子の輸送は、ソレノイドコイルやヘルムホルツコイルを用いた磁場によるものと、静電レンズを用いた電場によるものに分けられる。測定チャンバーの直前までは磁場輸送である。磁場輸送



ラインの後端付近で 5 段の加速管により陽電子を数 keV 程度まで加速することができる。静電レンズは 3 段のAINソュエルレンズを使用し、試料部に至っている。また、将来測定チャンバーの超高真空を実現するため、ビームラインに直径 1 cm、長さ 4 cm のブロックを挿入して差動排気を行う。以上の条件で、4 keV に加速された陽電子を試料部まで良好に輸送できることを MCP により確認している。

測定チャンバーは下図のようになっている。BaF₂シンチレーターにより吸着イオンの結合電子との消滅 γ 線をスタート信号、脱離したイオンを MCP またはチャンネルトロンでストップ信号としてとらえ、飛行時間の測定を行う。現段階では、陽電子を 2 keV に加速し、試料部の電位を 500 V に上げ脱離したイオンと再放出した陽電子 MCP により計測した。この時 S/N 比は ~5.7 となり、飛行時間測定が十分測定可能であることを示している。より実験の信頼性を高めるために、将来的にはより高強度でエネルギー広がりの小さいビームが必要不可欠である。

原研高崎における研究開発の現状

日本原子力研究所 高崎研究所（原研高崎） 岡田 漱平
河裾 厚男

1. 研究開発の概要

原研高崎では、毎秒 10^{10} 個以上 (10 mm ϕ ビームを基準) という世界最高強度の単色陽電子ビームを発生させ、既存施設のイオンビームとの複合利用を中心とした材料・バイオ研究の推進及び基礎物理学・化学の新しい展開をねらうポジトロン利用研究施設（ポジトロンファクトリー）計画について設計研究を進めている。この計画に関連して行っている研究開発の内容は以下の通りである。

(1) ポジトロンファクトリーの設計研究

- ①高出力電子リニアック、ビームライン、建家の基本設計
- ②ターゲット系（コンバータ、モデレータ）の技術開発（計算、実験）

(2) ポジトロンビーム技術開発

- ①高速 (1 MeV) 短パルス (100 ps) 陽電子ビーム形成技術の開発
- ②静電場輸送低速陽電子ビームラインの開発

(3) ポジトロン利用技術開発

- ①イオン加速器による陽電子内部線源法の開発と利用
 - ②陽電子消滅法による物性研究（イオンビーム誘起構造変化の解析を中心として）
- 以上のうち、(1), (2)の①, (3)の①については先頃開かれた理研シンポジウムで発表を行った。

(2)の②は、新しい試みによる低速陽電子ビームラインで、本年10月にファーストビームを観測したが、実用化はもうすこし先になる見込みである。本稿では、(3)の②について最近のトピックスを述べる。

2. 陽電子消滅法による物性研究

シリコン中の水素と原子空孔との相互作用は、工業的にも物性論的にも重要である。そこで、積極的に水素と欠陥とを導入するために、6 MeVの水素イオンをシリコン（リン添加）に注入した。図1は、水素注入シリコンの陽電子寿命 (τ_2) を焼純温度の関数としてプロットしたものである。比較のために行った3 MeV電子線照射では、陽電子寿命は焼純温度とともに段階的に増加することがわかる。これは、照射によって生成した複空孔や、空孔とリン原子の対のような寸法の小さな欠陥が昇温により移動して結合し、より熱的に安定な四重空孔や六重空孔が生成することを示している。しかし、水素イオン照射では、陽電子寿命は低温域で一度減少した後に増加し、再び減少と増加を繰り返すことがわかる。この結果は、水素イオン照射とその後の熱処理によって電子線照射の場合とは異なる構造変化が誘起されることを示している。すなわち、単一空孔や複空孔に存在する不対電子が水素原子により終端され、各種の空孔-水素複合体が形成されていく過程を反映していると考えられる。

このほか、電子線照射したSiCの陽電子寿命測定で、育成時に導入されるものと同じく、1500 °Cという高温まで消滅しない、Si空孔と窒素不純物との対と思われる欠陥の存在を見出し、またSi-Ge合金の陽電子寿命と組成比との相関で、格子定数の変化から予想される陽電子寿命変化からはずれる特異点の存在を見出すなど、いくつかの研究結果が得られている。研究会では、これらに關しても時間があれば発表する予定である。

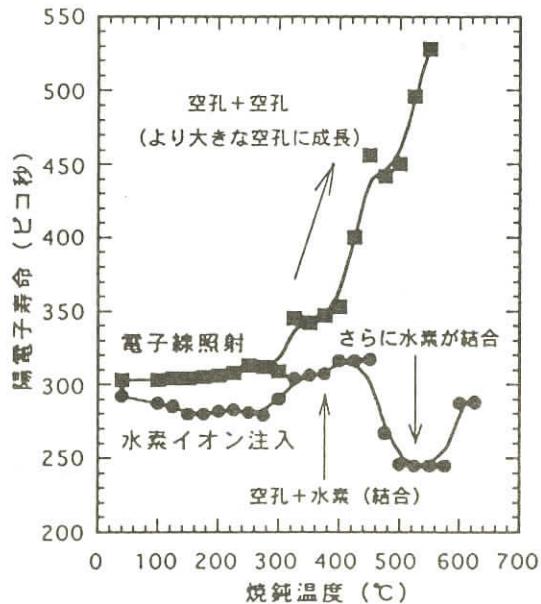


図3 6 MeV水素イオン及び3 MeV電子線照射したシリコンに対して得られた陽電子寿命の焼純温度依存性

PF低速陽電子ビームライン現状と専用加速器による新PF低速陽電子源計画

高エネルギー物理学研究所・放射光実験施設 栗原俊一

低速陽電子に対する関心は固体表面その他あらゆる分野で高まっている。しかし陽電子の持つ数々の利点を発揮するためには電子に比べて唯一の欠点である強度が低い点を克服しなければならない。特に現状では通常の実験室での放射性同位元素の強度の上限から低速陽電子として利用できる強度は高々 10^6 個/秒程度である。

加速器を用いた低速陽電子源は高強度の低速陽電子源として適している。低速陽電子ビームライン(Slow-Positron Facility)は固体物理のさまざまな分野への利用を目的として高エネルギー物理学研究所・放射光実験施設の2.5GeV電子LINACを1次ビーム源として1991年度から建設された。低速陽電子源は1次ビームライン、陽電子発生のためのコンパートナー・モデレーター部、低速陽電子輸送路、および関連するその他の付帯施設よりなる。この施設では既に定常的に1次ビーム 2 kW 入力時 $10^6\text{ e}^+/\text{s}$ 台を1994年より達成しており、加速器の最大電力 30 kW 時には $2 \times 10^6\text{ e}^+/\text{s}$ の強度が期待できる。この装置は1994年から一部共同利用にも開放され、既にいくつかの実験課題が採択され、実験が開始されている。その成果の一部はこの研究会において別に発表されている。

ここでは、この施設の最近の話題をいくつか紹介し、この施設の現状を明らかにするとともに今後の目指すところを概観してみる。

現在、低速陽電子ビームラインには実験ポートが5つあり、再放出顕微鏡、Ps-TOF実験、Surface-2D ACAR、透過型陽電子顕微鏡、5光子消滅実験といった実験装置が設置され、あるいは立ち上げ途中である。これらに各種のエネルギー、パルス幅の低速陽電子ビームを供給するために、現在までに40keVまでの陽電子加速、各実験ポートへの低速陽電子供給のためのビームスイッチシステムのテスト、直流化テストを終えている。

低速陽電子用のビームタイムは現在のところ週平均2日各8時間で計16時間、時間帯は深夜1時より朝9時までである。一方、高エネルギー実験はトリスタン計画の後、Bファクトリー計画を開始した。これは現有2.5GeVリニアックの8GeVへの改造およびリングへのビームダクトの改造を含む大規模なものである。これによりわれわれの低速陽電子ビームラインはその陽電子発生部がBファクトリー用ビームラインと干渉することとなった。昨年11月の時点ではBファクトリー用ビームラインの一部修正で乗り越えられると考えていたが、高エネルギー側の要求が予想を超えて理不尽であった。結局、昨年12月に現在の場所からの移転が検討されるようになってきた。移転場所は今より南に移り、Bファクトリー用J-LinacのArc部の一角に低速陽電子発生用チャンバーを移設することとなった。

1次ビームは加速器の1.5GeV程度の部分から分岐して得ることを当初は想定していた。Bファクトリー用J-Linacを倍の繰り返しで運転し、電子ビームの半分のパルスをパルスマグネットを

用いて分岐して低速陽電子発生用チャンバーに導くことが検討された。しかし、Bファクトリー計画の実験が開始された後は現在のようなリングへのビームの入射待ちに低速陽電子実験を行うという形はほとんど不可能な連続入射の形態をとることが明らかになってきたこと等から低速陽電子専用加速器の所有が検討されるようになってきた。

1990年に建設された各種試験用加速器Test LinacがやはりBファクトリー計画により、その実験サイトへの立ち入りが施設の関係から不可能となることが明らかとなつたため、この試験用加速器を低速陽電子発生専用専用加速器として使用するために移設する案が浮上してきた。この新しいサイトに専用加速器を伴つた新しい実験施設を来る12月16日のシャットダウンから来年(1997年)9月末までの間に構築し、10月より新しい低速陽電子実験施設として復活する。

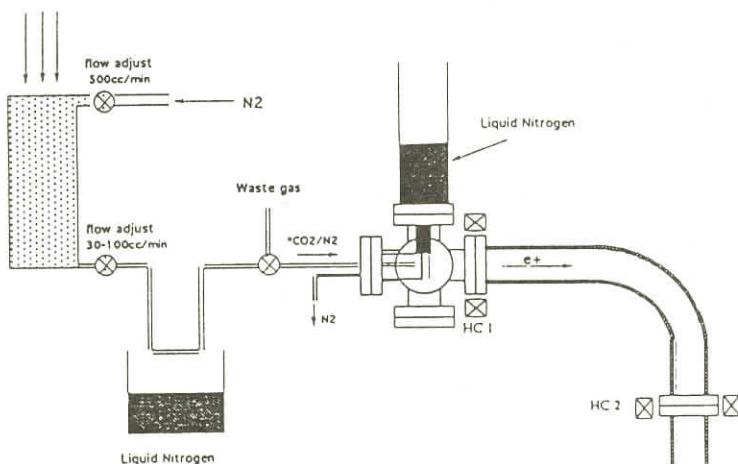
イオンビームを用いた低速陽電子ビーム発生の高強度化

—固体ターゲットから流体ターゲットへ—

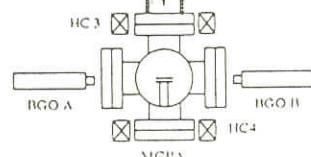
理 研 伊 東 芳 子
野 崎 正
Z. L. Peng
下 坂 琢 也
東大原総セ 伊 藤 泰 男

AVFサイクロトロンを用いて短寿命 β +崩壊性同位元素を作り、放出される陽電子を減速して高強度スピン偏極低速陽電子ビームを得ることを目的としている。これまで、プロトン、デュートロン、アルファービームを用いて種々の固体ターゲットからの陽電子ビーム強度を比較し、いくつかのターゲットで計算値とほぼ一致する結果が得られている¹⁾。スピン偏極陽電子ビームを得るためにには更に高強度が要求され、ビームを利用する際にも検出器等の放射線損傷も考えられ、また、ビーム径を小さく絞る際のターゲットの融解も考慮し、それらを解決する方法として流体ターゲットに取り組んでいる。プロトンビームで窒素ガスを照射し、¹¹C(半減期20分)を放射線バックグラウンドのないところまで移送し、冷却部にトラップしたのち、減速してビームとして取り出す方法では約一桁高い強度が得られる見通しである(図参照)。流体ターゲットから得られる核種は¹¹Cの他に水のプロトン照射による¹³N(10分)および、窒素ガスのデュートロン照射による¹⁵O(2分)が挙げられるが、¹⁸Oを含む水をプロトンビームで照射して¹⁸Fを得る方法は有望と考えられるので比較検討を行っている。

Proton Beam



Gas Target System



1) Y. Itoh et al. : Appl. Sci. 85, 165, 1995.

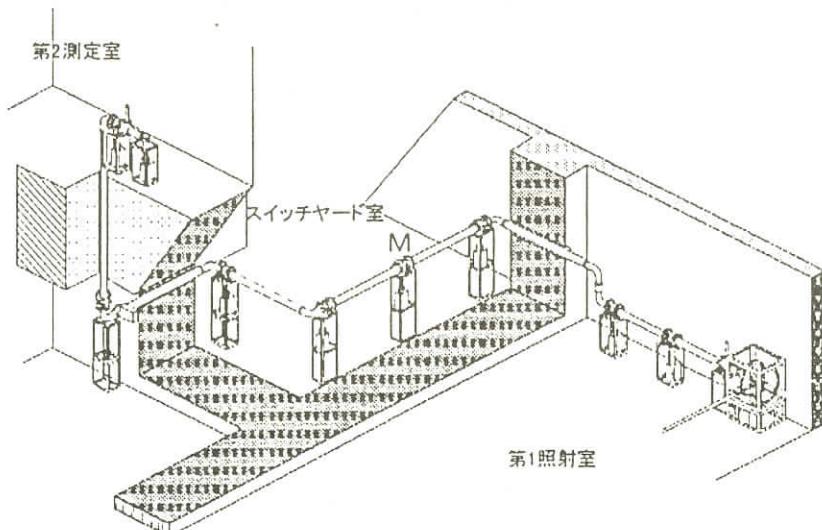
Y. Itoh et al. : Appl. Sur. Sci. in press. (SLOPOS - 7 Unterageri, Switzerland, 1996)

阪大産研における低速陽電子ビーム開発の現状

阪大産研 誉田義英
前川雅樹
木村徳雄
古澤孝弘
西嶋茂宏
田川精一

阪大産研における電子ライナックを用いた低速陽電子源で生成される陽電子ビームの利用研究としては、消滅 γ 線のドップラー幅の測定、ファインビーム化による陽電子回折、パンチビームによる陽電子寿命測定、及び他の量ビームとの複合実験等を考えている。低速陽電子のビームラインを下図に示す。陽電子ビームの利用形態の中で、まずファインビーム化を行うために、磁場輸送系からの引出し、および輝度増強を行うことが必要である。このための陽電子ビームを磁場輸送系から

の引出し、静電レンズを使って集束させる実験は、図のMに続く部分で最初に行った。この後、磁場輸送系を延長しB1の第2測定室内で磁場から切り離し、静電レンズによる集束、透過型輝度強化実験を行った。透過型の輝度強化実験を最初に行った理由は、構造が単純であることから単にビームの微細化だけでなく、輸送された陽電子のエネルギーを揃える手段としても利用できるためである。現在反射型のものについても組み立てを行っており、単結晶のタングステンフォイルを用いた輝度強化実験も行う予定である。これとは別に、固体希ガス等を用いたリモデレーターを開発するための冷凍機も準備中であり、極低温での実験も予定している。これらの輝度増強実験に関しては、部屋の都合上すべて陽電子の測定室となる第2測定室で行う予定である。陽電子の短パルス化に関しては通常の陽電子寿命測定と、パルスあたりの陽電子数を増やし、物質と陽電子の相互作用、特にポジトロニウムの挙動を時間的に調べるために、レーザーと同期させる実験も現在準備中である。通常の短パルス化では電子ライナックで生成されたパルス陽電子ビームを、DCC化した方が良い。現状ではこの部分を別途設置するための空間的なスペースが無いため、この部分をスイッチヤード室の陽電子輸送用配管内に挿入することにしている。このため、実際の測定を行う部屋までDCビームを輸送しなければならず、そのままではエネルギーが変化してしまい、陽電子の位置が変化し、更にパルス化の時に問題となるため、DC化部以降の真空配管内にパイプを挿入し、これにDC化部から陽電子を引出す時に与える電位差を与え、陽電子の輸送エネルギーを保ったままで輸送する予定である。ドップラー幅を測定する実験ではこのまま利用可能だが、寿命測定を行うためにこれを短パルス化する。短パルス化は最初はファンクションジェネレーターを用いて行う予定である。またDC化せずに短パルス化し、パルスあたりの陽電子数を増やすことも現在検討中である。



電総研高強度低速陽電子ビームラインの現状

電 総 研 鈴 木 良 一

大 平 俊 行

三 角 智 久

電総研では、これまで、電子リニアックによって発生した高強度の低速陽電子ビームの極短パルス化に成功するとともに、入射エネルギー可変陽電子寿命測定や飛行時間型陽電子消滅励起オージェ電子分光飛行時間測定などの測定技術を開発し、その利用技術に関する研究を進めてきている。現在、以下のような項目について研究を行っている。

高強度低速陽電子ビームの発生・制御技術

最近、長期間使用時のタンダステンモデレータの劣化が観測され、現在、モデレータの劣化の機構の解明に取り組んでいる。また、電子ビームの入射時に出る高エネルギーの二次電子がビームラインの先端まで到達し、陽電子消滅励起オージェ電子分光などにおいてマイクロチャンネルプレートに悪影響を及ぼしていることが最近明らかになった。そのほか、低速陽電子ビームを効率的に発生するための電子リニアックや計測装置の制御、コンバータ・モデレータ・ビームラインの改良などを行っている。

超低速高強度陽電子ビームの開発

陽電子ビームによる各種測定法を実用化するには、陽電子ビームの量だけでなく、質、特にエネルギーの単色性の高いビームが必要である。そこで、ビームの強度を落とさずに低速陽電子の速度を減速する超低速陽電子ビームラインの開発を行っており、現在、ビームラインがほぼ完成し、今後、超低速化の実験を行う予定である。

入射エネルギー可変陽電子寿命測定

現在、入射エネルギー可変陽電子寿命測定の高度化とその利用に関する研究を行っており、最近、200eVの陽電子の入射エネルギーの陽電子寿命測定が可能になり、従来より表面近傍の陽電子寿命測定が可能になった。また、各種試料について陽電子寿命測定を行っており、薄膜や表面近傍の格子欠陥や、陽電子寿命測定と消滅ガンマ線ドップラー広がり測定において不純物が関与している場合の関係について明らかになってきた。

飛行時間型陽電子消滅励起オージェ電子分光

短パルス陽電子ビームを用いた高分解能型の陽電子消滅励起オージェ電子分光装置の開発を行っており、最近、減速フライトチューブを加えた新しい陽電子オージェ装置を試作し、超高真空中で電子ビームによるオージェ電子分光と同程度の分解能でオージェピークの観測が可能になった。

(これについては、大平らにより本研究会で発表の予定)

東京大学の高輝度光源計画

東大物性研 神 谷 幸 秀

現在、東京大学で計画しているVUV(真空紫外線)・軟X線用第3世代高輝度光源の概要とその進捗状況について報告する。この高輝度光源は、完成の暁には、世界最高レベルの性能をもつ全国共同利用の放射光施設として、国内外の多数の研究者によって利用されることが期待されているものである。この施設は、東京大学の全学的支援の下に新設予定の「加速器科学研究中心」または「高輝度光源研究センター」によって柏新キャンパスに建設され、その後の管理・運営も同センターによって行われることになっている。

施設の中核的な装置である加速器は、入射器(ライナック[線形加速器],シンクロトロン)と光源リングから構成されている。この施設の定常運転時では、光源リングに電子または陽電子を入射する頻度とそれに要する時間は、一日数回(3回程度)で2, 3時間以内と見積もられているので、低速陽電子利用のために、ライナックを一日20時間以上、運転することが可能である。現在案では、利用できる最大ビームパワーは約13.6kWである。

以下に高輝度光源計画の概略を示す。

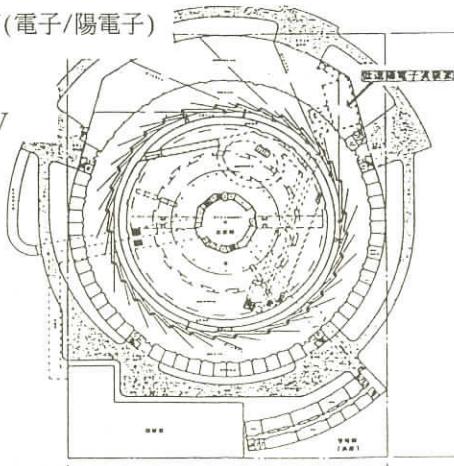
光源リングの性能

電子／陽電子エネルギー	2.0GeV
ビーム・エミッタンス	約5 nm · rad
挿入光源のタイプ	直線、円偏光及び可変偏光アンジュレータ マルチポール・ウィグラー(X線用)
利用可能な光子エネルギー	数eV～数keVまで(アンジュレータ) 約20keVまで(偏向電磁石)
ビームライン数	14本(アンジュレータ用) 16本(偏向電磁石用)
実験ステーション数	約50基
放 射 光 輝 度	最大 10^{20} photons/s/mm ² /mrad ² /0.1% b.w. 以上
エネルギー分解能	最大約 10^5

施設の規模

光 源 棟	建物直径、約200m
建 設 費	約170億円弱<建物・付帯設備を除く>
建 設 期 間	約4年
運 転 経 費	約30億円弱<ビームライン増設費を含む>
電 力	約10MW

加速器（ライナック，シンクロトロン，光源リング）

ライナックのエネルギー	約300MeV(電子/陽電子)	
ライナックの長さ	約70m 弱	
シンクロトロンのエネルギー	最大 2 GeV	
シンクロトロンの周長	約100m弱	
光源リングの周長	約400m弱	

東京大学の高輝度光源計画に付随する陽電子実験室計画

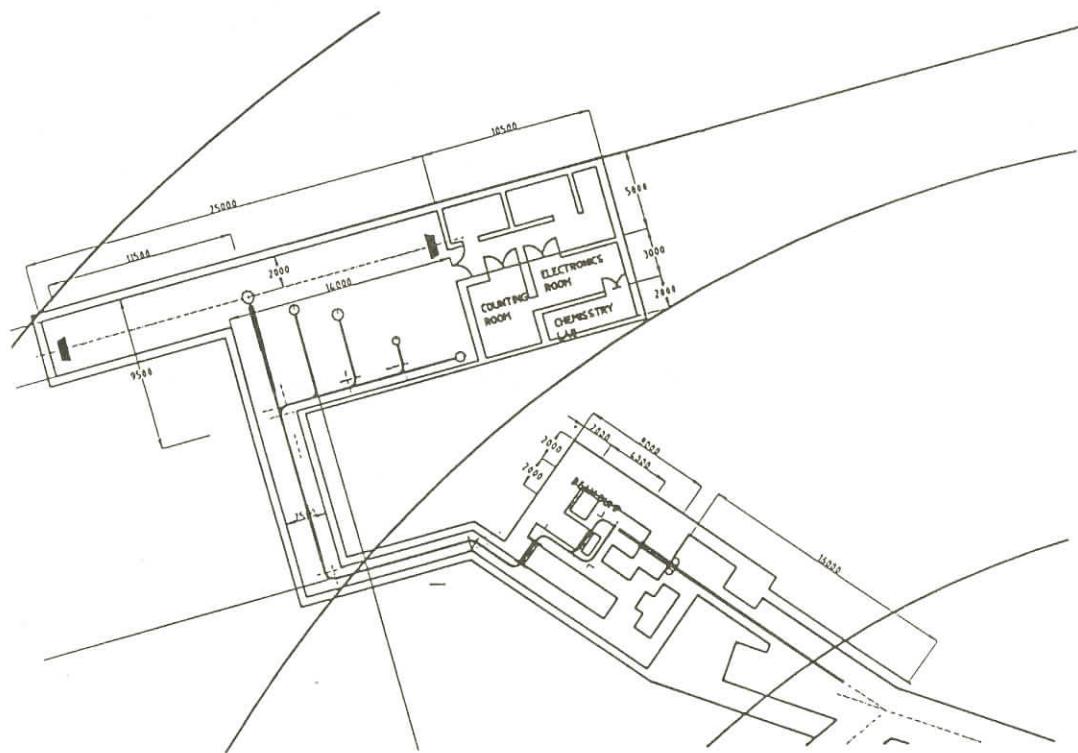
東京大原総セ	伊藤泰男
東京大物性研	神谷幸秀
	小森文夫
東京大工学部	中沢正治
東京大生産研	七尾進
東京大総合文化	兵頭俊夫
	長嶋泰之
	斎藤晴雄
	他

東京大学柏新キャンパスに建設予定の高輝度光源施設の一角に陽電子実験室を建設する計画が進んでいる。これはシンクロトロン入射器の電子線リニアック（最大エネルギー：300MeV，最高出力時エネルギー：240MeV，最高出力13.8kW）が光源リングに電子を供給していない空き時間を利用して低速陽電子ビームを発生させて研究を行うものである。低速陽電子ビーム強度は～ 10^9 e/sの程度が見込まれる。

陽電子発生室は電子線リニアックと同じ地下にあるが、1.5m掘り下げて1階との間に4.5mの遮蔽を施すとともに、周囲を2mのコンクリートで囲う。また照射室内は気密構造として照射中に発生する放射能を外部に出さない。陽電子ビームラインはほぼ25mのソレノイド・ヘルムホルツコイ

ルで実験室に導かれるが、途中でDC化が行われる。実験室ではいくつかのポートに分岐して、ps短パルス化陽電子ビームによる高度化寿命測定、二次元角相関測定、ns短パルス化ビームによる表面研究、高単色化ビームによる化学研究などが行われる他、1本の陽電子ビームラインを1階に立ち上げて放射光と同時照射が行える。

研究会ではたたき台としての設計素案を報告する。予定される研究計画に照らされてご議論いただきたい。



物性研究所談話会

日 時 1996年11月29日(金) 午後4時～5時
場 所 物性研究所 A棟2階輪講室
講 師 Professor G.Bastard
(所属) (Laboratoire de Physique Ecole Normale Supérieure, Paris)
題 目 Energy levels in quantum dots
要 旨

We report on the calculations of energy levels for electrons, holes, excitons (X), bi-excitons (X_2) and charged excitons (X^- , X^+) complexes in Ga(In)As/GaAs quantum dots. The shape of the dots is modelled by cones or hemispherical or cylindrical caps floating on a 2D wetting layer. The one particle eigenstates have been obtained either by variational calculations or by a numerical diagonalisation of the hamiltonian inside the basis formed by the eigenstates of a free particle moving in a large cylinder enclosing the structure. Piezo-electric fields were not taken into account. The energies of the exciton complexes were also evaluated either by variational calculations or using the numerical one particle eigenstates together with a first and second order perturbative evaluation of the coulombic terms between the one particle states which are bound in the dots. We find that the exciton correlation energy is rather large (25 meV) in actual InAs dots (10 nm basis radius, 1.2 nm height) while those of the charged excitons are either small (2 meV) for X^+ or negative for X^- . The reverse situation is found in Ga(In)As/GaAs hemispherical caps where the X^- is bound while the X^+ is found unbound. The bi-exciton is weakly bound (1 meV) as a result of the large energy separation between the one particle states. We have also evaluated the evolution of the lowest lying recombination line of dots containing up to 5 electrons or holes prior to illumination.

日 時 1996年12月2日(月) 午後1時30分～2時30分
場 所 物性研究所 A棟2階輪講室
講 師 Prof. H.v. Löhneysen
(所属) (Physikalisches Institut, Universität Karlsruhe)
題 目 NON-FERMI LIQUID BEHAVIOR OF HEAVY-FERMION SYSTEMS AT A MAGNETIC INSTABILITY

The competition between on-site moment compensation by the Kondo effect and long-range RKKY interaction between localized magnetic moments leads to either a nonmagnetic or a magnetically ordered groundstate in heavy-fermion systems. Even in the case of no magnetic order short-range dynamic intersite correlations are observed. Yet, most heavy-fermion systems can be described at very low temperatures T within the framework of Fermi-liquid (FL) theory with, however, a very large effective mass m^* derived from the huge linear specific-heat coefficient $\gamma=C/T$ and a correspondingly large Pauli susceptibility χ , both being only weakly dependent on temperature. The electrical resistivity of Fermi liquids exhibits a contribution $\Delta\rho=AT^2$ arising from particle-particle collisions.

Deviations from FL behavior have been found recently in several heavy-fermion systems. This non-FL behavior may have different microscopic origins such as the single-ion quadrupolar Kondo effect which was suggested to be effective in $\text{U}_{0.2}\text{Y}_{0.8}\text{Pd}_3$, a distribution of Kondo temperatures, or a collective effect caused by incipient antiferromagnetic order. Here we focus on the latter scenario which is exemplified by CeCu_6 when alloyed with Au. Long-range incommensurate antiferromagnetism is observed in $\text{CeCu}_{6-x}\text{Au}_x$ for $x > 0.1$, with the Néel temperature T_N increasing linearly with x , reaching 2.3K for $x=1$. For $x=0.1$ where $T_N=0$, marked deviations from FL behavior are found, e.g. the specific heat C depends on T as $C/T \sim -\ln(T/T_0)$, the magnetic susceptibility as $\chi \sim 1 - \alpha/\sqrt{T}$, and the T -dependent part of the electrical resistivity as $\Delta\rho \sim T$.

It is suggested that low-energy spin excitations are at the origin of these anomalies, which occur at a zero-temperature quantum phase transition. Large magnetic fields B restore FL behavior. Detailed measurements of the specific heat and electrical resistivity show that the low- T range of FL behavior extends towards higher T with increasing B , with the crossover temperature T_{cr} varying roughly $\sim B$. Apart from changing the Au concentration x , the transition can be tuned by applying pressure p to antiferromagnetic samples with $x > 0.1$. For $x=0.3$, $T_N \rightarrow 0$ at $p_c \approx 8\text{kbar}$ and non-FL behavior is observed in the specific heat for this critical pressure. For $x=0.2$, where we observe a logarithmic divergence of C/T , $p_c \approx 4\text{kbar}$ and for $p=6.9\text{kbar}$ we recover FL behavior. On the other hand, non-FL behavior cannot be induced by a magnetic field at the antiferromagnetic-paramagnetic transition for $x=0.2$, as low-lying spin excitations are frozen out.

Another interesting non-FL system is $\text{UCu}_{5-x}\text{Pd}_x$. Non-FL behavior in the low-temperature specific heat was reported for $x=1$ and 1.5, with spin-glass ordering

occurring below $\sim 0.2\text{K}$ for $x=1$. This suggests the proximity to magnetic order, indeed UCu_5 orders antiferromagnetically. On the other hand, a remarkable single-ion(q -independent) scaling was observed in the dynamic structure factor of inelastic neutron scattering ($1\text{meV} < h\omega < 25\text{meV}$) for intermediate temperatures $12\text{K} < T < 300\text{K}$. Kondo disorder was invoked in particular for this system.

日 時 1996年12月3日(火) 午後4時～5時

場 所 物性研究所 A棟2階輪講室

講 師 Prof. Trevor Hicks

(所属) (モナシュ大学)

題 目 THREE EXPERIMENTS WITH NEUTRON POLARISATION ANALYSIS

要 旨

Analysis of the polarisation of the scattered neutron beam is useful in a number of aspects of magnetism. Three will be described and illustrated with recent experiments. They are,

1. The separation of diffuse magnetic scattering from diffuse nuclear scattering in disordered systems. The magnetic and nuclear diffuse cross sections have no recognisable features which can otherwise distinguish them. The Co-Mn alloy system has composition range between ferromagnetism and antiferromagnetism in which there is no long range magnetic order. We have established that the magnetic diffuse scattering is so small that there cannot be any local moments.
2. The determination of moment direction and the elimination of otherwise possible magnetic structures. Fe_2MnSi is ferromagnetic but at low temperatures acquires an antiferromagnetic component. We show that this component is orthogonal to the ferromagnetic direction and that no chiral component is involved.
3. The separation crystal field transitions from other events in neutron spectroscopy. We have measured the crystal field transitions in PrAl_3 by pulsing the spin flipper and measuring in PA mode. Not only does this obviate the need for a companion experiment on a closely similar non magnetic compound to eliminate other sources of scattering like phonons, but it cleanly separates out the broadened magnetic quasielastic scattering.

日 時 1996年12月4日(水) 午後1時30分～2時30分

場 所 物性研究所 A棟2階輪講室

講 師 Prof. H.-J. Mikeska

(所属) (Theoretical Physics, University of Hannover)

題 目 Order and Disorder in Spin Ladder

要 旨

Spin ladders formed from two antiferromagnetically interacting chains of spins $S=1/2$ are characterized by an energy gap finite spin correlation length. In this talk, the relations between these systems and other quantum spin models with an energy gap, such as Haldane - , Majumdar - Ghosh - and spin dimer chains, will be discussed with the result that the hidden order of the Haldane chain is also found in spin ladders. A new theoretical approach using exact matrix product ground states will be described which shows that all these gapped systems are in the same quantum phase. Finally numerical and analytical results on the effect of nonmagnetic impurities and of free edges in the regular spin ladder and discuss their influence on ordering.

日 時 1996年12月16日(月) 午後1時半～2時半

場 所 物性研究所Q棟1階講義室

講 師 真木和美氏

(所属) 南カリフォルニア大学

題 目 Aspects of d -wave superconductivity

要 旨

After a brief introduction on d -wave superconductivity in HTSC, I will discuss 2 topics. 1. Zn - substitution in Cu - O₂ plane has dramatic effects; the rapid suppression of T_c and the rapid increase of the residual density of states, which are accounted for by a model with impurities in the unitarity limit. 2. d -wave superconductor in a magnetic field exhibits a number of surprising behaviors. Here we limit ourselves for $B//c$ and discuss the vortex state for $B \cong H_{c2}$ and $B \ll H_{c2}$.

日 時 1996年12月17日(火) 午後1時半～2時半

場 所 物性研究所Q棟1階講義室

講 師 Dr. G. A. Thomas

(所属) Bell Laboratories, Lucent Technologies

Murray Hill, NJ 07974 - 0636

題 目 The Mott transition: a tribute to Sir Neville

要 旨

A brief overview of a few experiments on the metal - insulator transition gives an indication of Mott's profound influence on condensed matter physics. We will look at the motion of electrons as they condense into a liquid, as they hop in a random potential and as they vibrate in an unstable crystal.

人 事 異 動

1. 研究部

(採用・転入等)

所 属	職・氏名	発令日	備 考
附属中性子散乱研究施設	助手 武末尚久	8.11.1	採用
先端分光研究部門	助手 吉田正裕	8.12.16	生産技術研究所技官から
極限環境物性研究部門	助手 竹下直	9.1.1	採用

(配置換)

所 属	職・氏名	発令日	備 考
新物質科学研究部門	技官 瀧谷孝	8.11.1	附属中性子散乱研究施設へ

(併 任)

所 属	職・氏名	発令日	備 考
(客員部門) 先端分光研究部門	教授 堂免一成	8.11.1	本務: 東京工業大学資源化学研究所 教授 (9.3.31まで)

Technical Report of ISSP 新刊リスト

Ser. A

- No. 3192 ^{23}Na NMR Study of Spin-Peierls Transition in NaV_2O_5 , by Tetsuo Ohama, Masahiko Isobe, Hiroshi Yasuoka and Yutaka Ueda.
- No. 3193 Pseudo Spin-Gap in Single-Layer High-Tc Cu Oxide $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+\delta}$, by Yutaka Itoh, Takato Machi, Atsushi Fukuoka, Keiichi Tanabe and Hiroshi Yasuoka.
- No. 3194 ^{51}V NMR Study of Spin Gap in CaV_4O_9 , by Tetsuo Ohama, Hiroshi Yasuoka, Masahiko Isobe and Yutaka Ueda.
- No. 3195 Roles of $4f$ - $5d$ Exchange Interactions in Magnetic Circular X-Ray Dichroism at the Rare-Earth $L_{2,3}$ -Edges, by Hirochi Matsuyama, Isao Harada and Akio Kotani.
- No. 3196 Spin Fluctuation-Induced Superconductivity in Two and Three Dimensional Systems, by Satoshi Nakamura, Toru Moriya and Kazuo Ueda.
- No. 3197 Anomalous Spin Dynamics in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ($x=0.13$ and 0.18) Studied by ^{63}Cu Nuclear Spin-Lattice Relaxation, by Yutaka Itoh, Masahiro Matsumura and Hideki Yamagata.
- No. 3198 Low-Temperature Magnetic Properties of $(\text{RE})_3\text{Pd}_{20}\text{Si}_6$ ($\text{RE}=\text{La}$ to Yb), by Jiro Kitagawa, Naoya Takeda and Masayasu Ishikawa.
- No. 3199 New Stishovite-like Phase of Silica Formed by Hydrostatic Compression of Cristobalite, by Masaaki Yamakata and Takehiko Yagi.
- No. 3200 Magnetic Properties in the Normal State of $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$ Observed by ^{61}Ni and ^{11}B NMR, by Kenji Ikushima, Hiroshi Yasuoka, Akira Ohno, Hidenori Takagi, R.J. Cava J.J. Krajewski and W.F. Peck, Jr.
- No. 3201 Ground State Properties of the Two-Dimensional t - J Model, by Masanori Kohno.
- No. 3202 Tunable Parity Effect in Coupled Superconducting Single-Electron Transistors, by Shingo Katsumoto and Mitsuru Kimura.

- No. 3203 Interrelation between Dynamical and Static Spin-Gaps in Quantum Spin Systems, by Yutaka Itoh and Hiroshi Yasaoka.
- No. 3204 Boltzmann Conductivity of a Carbon Nanotube in Magnetic Fields, by Takuji Seri and Tsuneya Ando.
- No. 3205 Magnetic and Transport Properties of Dense Kondo Systems, CeTSb₂ (T=Ni, Cu, Pd and Ag), by Yuji Muro, Naoya Takeda and Masayasu Ishikawa.
- No. 3206 Correlations in One-Dimensional Disordered Electronic Systems with Interaction, by Masanori Yamanaka and Mahito Kohmoto.
- No. 3207 Spin-Resolved Photoemission of Valence Band Satellites of Ni, by Akito Kakizaki, Kanta Ono, Kenichi Tanaka, Kenya Shimada and Takeshi Sendohda.
- No. 3208 Resonant Enhancement of Valence Band Satellites of Ni; A Spin-Resolved Photoemission Study, by K. Ono, A. Kakizaki, K. Tanaka, K. Shimada, Y. Saitoh and T. Sendohda.
- No. 3209 Magnetoresistance in a Superconducting Single-Electron Transistor with Multiple Connected Coulomb Island, by Hideki Sato, Mitsuru Kimura and Shingo Katsumoto.
- No. 3210 Neutron Scattering Study of BaCo_{0.82}Ni_{0.18}S₂, by Shin-ichi Shamoto, Katsuaki Kodama, Hiroshi Harashina, Masatoshi Sato and Kazuhisa Kakurai.
- No. 3211 Observation of Non-Linear Effects in a Quasi-One-Dimensional Antiferromagnet: Magnetic Excitations in CsVCl₃, by Toshiya Inami, Kazuhisa Kakurai and Hidekazu Tanaka.
- No. 3212 Study of Spin-Gap Formation in Quasi-Two-Dimensional S=1/2 System CaV₄O₉: Neutron Scattering and NMR, by K. Kodama, H. Harashina, H. Sasaki, Y. Kobayashi, M. Kasai S. Taniguchi, Y. Yasui, M. Sato, K. Kakurai, T. Mori and M. Nishi.
- No. 3213 Neutron Scattering Study of Oxygen Doping Effects on La₂NiO_{4.11} and La₂NiO_{4.125}, by K. Nakajima, Y. Endoh, S. Hosoya, J. Wada, D. Welz, H.-M. Mayer, H.-A. Graf and M. Steiner.

編 集 後 記

物性研だよりの1月号をお届けいたします。

今年の冬は例年に比べて温かく、やっと冬らしくなってきました。

物性研では、11月に柏の新キャンパスに建設される極限環境と先端分光の実験棟の起工式と安全祈願祭が行なわれました。私共は安全祈願祭に出席し、物性研の柏への移転を強く実感いたしました。詳細は今月号の所長の文章をご覧ください。この場を借りて、お忙しい中、原稿をお寄せいただいた方々に心から感謝いたします。

なお、次号の原稿締切りは2月10日です。

所属又は住所変更の場合等は事務部共同利用掛まで連絡願います。

後 藤 恒 昭

上 田 和 夫

