

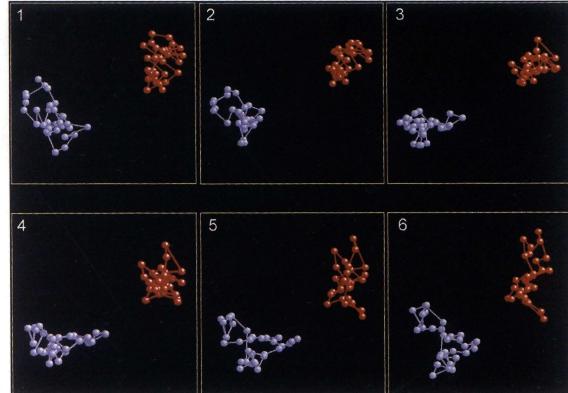
物性研だより

第40巻
第5号

2001年1月

目次

- 1 物性研に着任して 柴山充弘
7 固体中の水素と量子効果 常行真司
10 物性研究所研究会シリーズ「物性研究の展望」報告
○「物性理論研究のフロンティア」
32 物性研究所短期研究会報告
○「強磁場、高圧下における遷移金属化合物の磁性」
..... 世話人 高橋慶紀 後藤恒昭 毛利信男
深道和明 山田鉄二 和田裕文
45 物性研究所談話会
物性研ニュース
47 ○東京大学物性研究所の教官公募の通知
48 ○東京大学物性研究所の助手公募の通知
49 ○人事異動
50 ○テクニカル・レポート 新刊リスト
編集後記



「経路積分法でみた水素分子の原子核分布 常行研究室」

東京大学物性研究所

ISSN 0385-9843

物性研に着任して

中性子散乱研究施設 柴山充弘

1 はじめに

日本においては最近まで統計物理や物性物理をあまり深く勉強しなくとも高分子科学を学ぶことができる時代が続きました。もちろん、以前から高分子科学には醉歩統計があり、誘電体とのアナロジーに基づいた伸張高分子鎖を記述する逆ランジュバン関数があり、粘弾性関数における因果律と応答関数など、物性物理に通じる共通語が多くありました。久保亮五先生も処女作「ゴム弾性」(1946年)の中で「分子的物性論」[1]の対象として「ゴム」を掲げ、ゴム弾性を美しい統計力学で記述されています。また、排除体積の問題は古く、溶液論の拡張として難解な高分子溶液論が展開されもありました。しかし、こうした問題の多くは「高分子物理学」の名で示されるように、高分子特有の学問として位置づけられていたと思われます。ところが、1970年代になるとスケーリングや繰り込み群論、相転移、乱雑位相近似、パーコレーション、フラクタル、経路積分法、多重臨界点などの新しい手法、概念が次々に高分子物性の分野に押し寄せるようになってきました。それは世界の潮流として、多くの物性物理学者が高分子などのソフトマターの研究に進出してきたからです。残念ながら、こうした傾向は日本よりも欧米、特にフランスで著しくPierre G. de Gennes(1991年ノーベル物理学賞受賞)を旗手とするグループが高分子科学の教科書をどんどん塗り替えていきました[2]。その結果、ソフトマター、ソフトマテリアル、複雑系などと呼ばれる高分子、液晶、ミセルなどを対象とする物性物理学が発展しました。

私は、物理的視点からの高分子研究に興味を持ち、ブロック共重合体のミクロ相分離に関するスケール則、秩序一無秩序転移、高分子ブレンドの臨界現象、相分離の速度論における重水素化効果、高分子ゲルのゾルゲル転移とパーコレーション理論など、について研究してきました。このたびハードマター研究の一大拠点である物性研に着任したことを契機に、ハードマターで培われた美しい物理学を学ぶとともに、ソフトマターの面白さを広めることで、少しでも2つの分野の相互理解のお役に立つことができればと希望しています。物性研だよりに寄稿させていただいたこの機会に、最近もっとも力を入れている高分子ゲルの研究の一端をご紹介することで自己紹介の代わりとさせていただきます。

2 高分子ゲル

12月1日、2日の物性研一般公開に参加して、私の研究の紹介をする前に、高分子ゲルそのものについて

若干紙面を割く必要を感じましたので、蛇足かもしれませんのが少しばかり高分子ゲルについて述べたいと思います。

高分子ゲルは人類の歴史と共に人と深くかかわってきた物質で、ゼラチンや寒天などの多くの食材、にかわやうるなどの接着剤、塗料など、さまざまな用途に用いられてきました。人体の構成要素の多くもゲルでできています、たとえば目の組織、軟骨、膜、筋肉などはゲルと呼ぶことができます。感覚的な定義は別として、高分子ゲルの定義としては、図1に示すように、「3次元高分子網目が溶媒を吸って膨潤したもの」です。この「網目」は単に多くの高分子鎖を「架橋点」で繋ぐことにより形成されますが、架橋導入によって通常の高分子とは比べものにならないほど複雑性が付与されます。高分子自身、單一種からなることは稀で、一般には分子量の異なる分子の集まりであり、またモノマー(单量体)の結合様式やコモノマーという「異物」の存在、分子の枝分かれの有無・程度によって、物性が大きく変わります。ポリエチレン一つとっても、分岐の程度によって結晶性が異なり、高密度(HDPE)、低密度ポリエチレン(LDPE)、直鎖状低密度ポリエチレン(LLDPE)などに分類されます。高分子ゲルは、ただでさえ(少なくとも構造を定義する意味で)複雑な高分子に「架橋」という操作で途方もない数の自由度が与えられた物質なのです。高分子ゲルには架橋点間の分子量の分布、分子鎖のからみ合い、未架橋鎖、などの構造的・トポロジー的欠陥なども多く存在します。したがって、ハードマターで取り扱う規則正しく原子が並んだ結晶とは全く対極的な位置に存在する物質です。こうした理由からか、高分子ゲルはP. J. Flory(1974年ノーベル化学賞受賞)らの膨潤に関する熱力学的理論(1940年代)[3]などを除くと、全く理論の対象にならないような物質でした。

ゲルという「惑星」を覆う厚い雲を取り除いた先駆者一人として、田中豊一博士(故MIT教授;2000

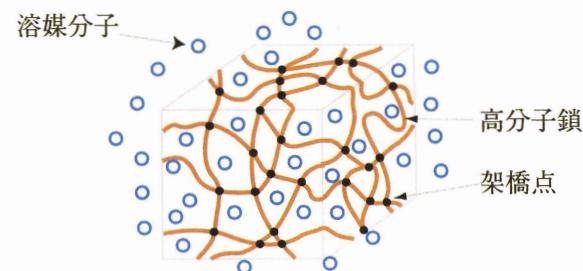


図1 高分子ゲルの模式図

年に急逝)の名を挙げないわけにはいきません。彼は、ゲルを複雑な網目ではなく連続体として捉え、弾性体に対する理論を応用することで協同拡散理論を展開し、ゲルの膨潤の速度式の提案、およびゲルからの準弾性光散乱の説明に成功しました(1973年)[4]。また、1978年には「ゲルの体積相転移(後述)」を発見し[5]、ゲルが物性物理学の対象であることを強く印象づけました。以来、この惑星の探査は真理探究と応用開発の両面で飛躍的に進んでいます。ゲル探索の第1ステージが軌道上からの観察による協同現象や体積相転移の発見とともに、第2ステージは惑星に着陸しておこなう、より精密な採取研究です。その一つが「不均一性」という結合性からくるゲル特有のもう一つの複雑性についての研究ということができます。

3 ゲルの不均一性

架橋導入によるゲルの不均一性とは、図2に示すように、濃度のみならず、トポロジー(絡み合い)、運動性、結合性、などのさまざまな空間不均一性を指します。高分子ゲルではこの「不均一性」のために、浸透圧などのように熱力学理論によって記述される性質と、散乱実験などによって評価される構造因子の熱力学的極限との対応は一意的ではありません。ゲルからの散乱は架橋により著しく増大します。その理由は、架橋導入により「静的不均一性」(凍結した濃度ゆらぎ)が発

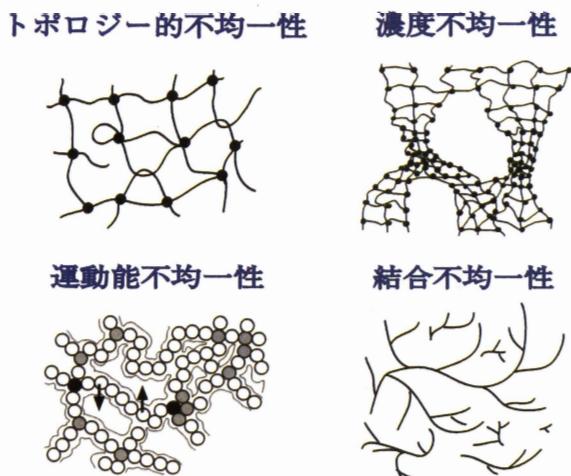


図2 高分子ゲルに存在するさまざまな不均一性

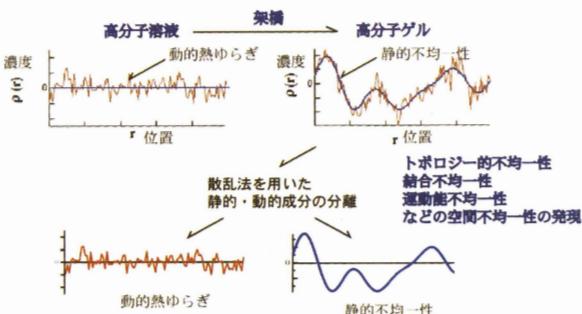


図3 高分子ゲルのゆらぎ分離

現し、それが動的熱ゆらぎに比べて甚大である場合が多いからです。私たちのグループは、図3に模式的に示すようにゲルを「動的熱ゆらぎ」と「静的不均一成分」との「2種のゆらぎからなる系」として捉え、分離することで、ゲル固有の複雑性を単純化・捨象化し、ゲルの静的・動的描像を統一的かつ系統的に特性化する研究を行ってきました[6]。Panyukovらの理論[7]によれば、動的熱ゆらぎ、および静的不均一性に対応するそれぞれの相関子(応答関数)、動的相関子 G_q 、静的相関子 C_q は

$$G_q \equiv \langle \rho_q \rho_{-q} \rangle = \frac{g_q}{1+wg_q}, C_q \equiv \overline{\rho_q^{\text{eq}} \rho_{-q}^{\text{eq}}} = \frac{v_q}{(1+wg_q)^2} \quad (1)$$

で表されます。ここで、 q は散乱ベクトル、 ρ_q 、 g_q 、 w はそれぞれモノマー密度(密度揺らぎ)のフーリエ成分、相互作用が存在しないときの網目中の部分鎖の応答関数、相互作用パラメーターです。また、 ρ_q^{eq} は平衡状態での ρ_q 、 v_q はランダム場 n_q の自己相関関数、 $v_q = \langle n_q n_{-q} \rangle_n$ です。さらに、 $\langle \cdot \rangle$ 、 $\overline{\cdot}$ はそれぞれ熱平均、アンサンブル平均を意味します。すると、系の応答関数 S_q は

$$S_q \equiv \overline{\langle \rho_q \rho_{-q} \rangle} = G_q + C_q, \quad (2)$$

すなわち、 G_q と C_q の和となります。 G_q は通常の非架橋系の応答関数にほぼ等しく、測定時の温度や濃度などに依存した関数ですが、 C_q はゲルに特有で、測定条件のみならず、ゲルを調製したときの環境に強く依存した関数です。この C_q の存在は、調製時の高分子の形態が架橋により凍結固定されるということを意味しています。

(1)式で示すような、時間平均とアンサンブル平均が異なる系は非エルゴード系と呼ばれ、ゲルもそうした非エルゴード系であると考えられています[8]。非エルゴード性の発現を端的に示す現象として、レーザースペックルがあります。レーザーのような高可干渉性の入射光を用いたゲルの光散乱実験では、図4に示すように、スペックルと呼ばれる、測定位置に依存した散乱散乱の激しい振動が観測されます。かつてスペックルは光散乱によるゲルの定量的解析を邪魔する一大要因でしたが、逆にスペックルがもつ情報を利用することで、濃度ゆらぎの G_q と C_q 成分への分離が可能と

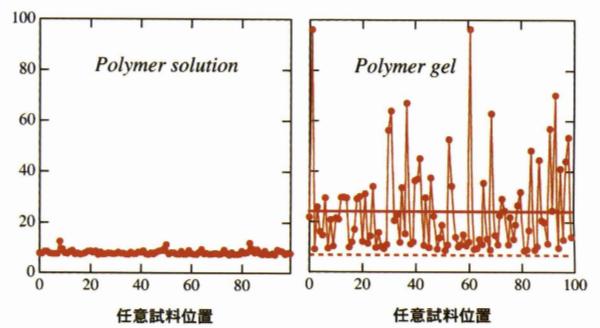


図4 光散乱スペックル。左;高分子溶液、右;高分子ゲル。ゲル化するとスペックルが発現する。丸は時間平均散乱強度(G_q に相当)、実線はアンサンブル平均散乱強度(G_q に相当)、破線は散乱強度の動的成分(G_q)。

なることが最近わかつてきました[9]。さらに、化学反応系に対してスペックルの時分割測定を行うことで、非接触的にゲル化点が決定できることがわかつてきました[10]。ゲル化点においては、大小さまざまなクラスターが自己相似的なサイズを保って存在します。このようなクラスターの存在により、ゲル化点近傍では散乱強度の時間緩和関数がべき乗関数になるということもわかつてきました[11]。このような性質(結合-非結合転移における臨界ダイナミックス)を利用して、ゲル化点の決定やゾル-ゲル転移点の決定が行えます[12]。このようにゲルにはさまざまな興味ある物理現象がみられますか、紙面の関係上、現在所属の中性子散乱研究施設の2次元位置敏感型小角中性子散乱装置(SANS-U)を用いた弱荷電性ゲルの微細構造と不均一性の研究についてと分子の結合性に由来する特徴的なゲルのダイナミックスについてのみ、もう少し詳しく紹介します。

4 体積相転移と不均一性

高分子ゲルには外界の温度やpHに敏感に応答し、「体積相転移」とよばれる不連続な膨潤や収縮挙動を示すゲルが存在します。我々は、33-50°C付近で、体積相転移を起こす弱荷電性高分子ゲル(N-イソプロピルアクリルアミド/アクリル酸共重合体ゲル;NIPA/Acゲル、モル分率でAcが4.6%存在)について、膨潤・収縮実験、熱解析、小角中性子散乱実験などを行いました。このゲルは温度により体積を変化させる温度敏感型ゲルで、疎水性相互作用とカウンターイオンの浸透圧の拮抗により、温度上昇に伴ってゲル網目の疎水性が増大し、膨潤状態から収縮状態へと不連続的に体積相転移を起こします。図5はその一例で、膨潤相と収縮相が共存している状態の写真です。一見、左右の膨潤・収縮相がいずれも均一であるかに見えますが、体積相転移温度以下で小角中性子散乱(SANS)実験を行ったところ、温度上昇につれて図6に示すようにSANS強度曲線に鋭いピークが現れることがわかりました。これにより、体積相転移近傍においては、ゲル内に強いフラストレーション状態が発現し、数10nmオーダーというミクロな次元での相分離、すなわちミクロ相分離(あるいはその前駆段階)が起こることがわかりました[13]。

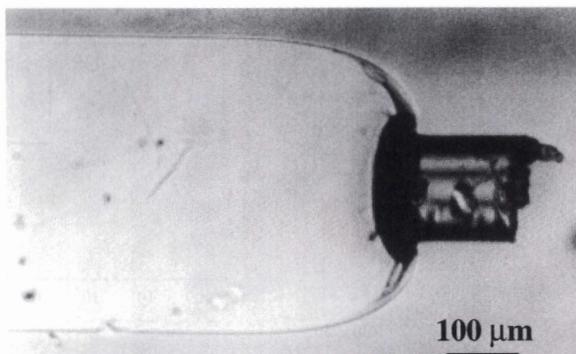


図5 膨潤、収縮二相共存状態にある温度敏感型高分子ゲル。左;膨潤相、右;収縮相

このミクロ相分離とゲル固有の不均一性の関係を明確にするため、上述の弱荷電ゲルを加熱、延伸した状態でSANS測定を行ってみました[14]。その結果を図7に示します。左列は未延伸状態での、右列は延伸比 $\lambda=1.26$ で縦方向に延伸したNIPA/Acゲルの散乱

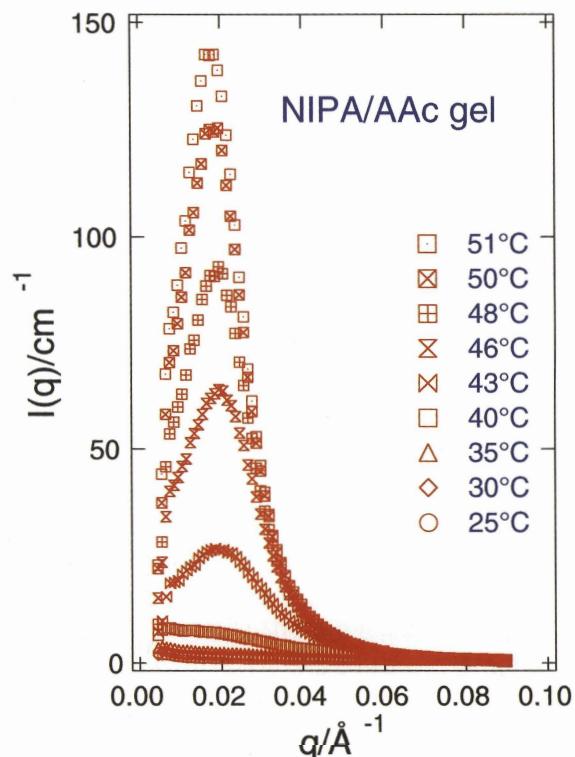


図6 温度敏感型高分子ゲルのSANS強度曲線の温度による変化。

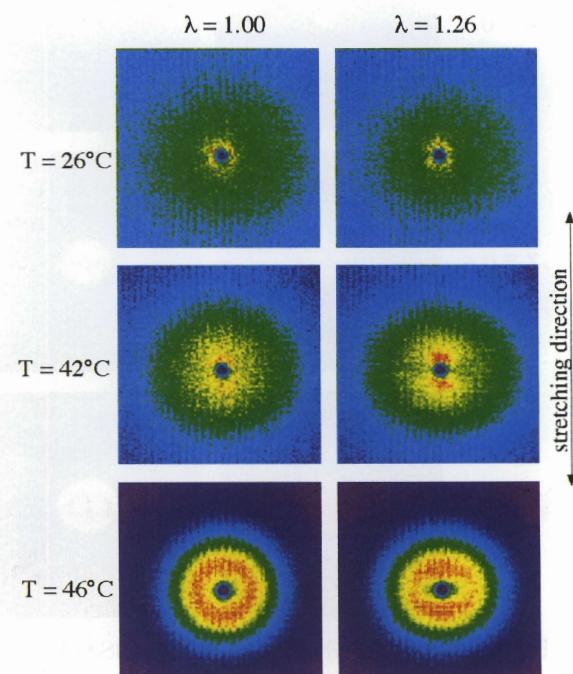


図7 温度敏感型高分子ゲルの2次元SANSパターンの温度による変化。左;未延伸ゲル、右;26%延伸ゲル

パターンを示しています。温度が26℃から42℃と上昇すると‘バタフライパターン’と呼ばれる異常散乱が出現しました。これは、不均一性の顕在化による散乱強度の増大を示すものですが、系が異方性であるため、散乱強度にも異方性が現れています。しかし、Babinetの散乱の「逆関係」原理によれば、上下に延伸した物体の散乱は左右に延びた散乱パターンのを与えるはずであり、実験結果はその逆を示しています。この矛盾は1980年代に指摘され、その理由が説明できなかったため、「異常」バタフライパターンと呼ばれていました。最近、この問題は「不均一性」の概念をもって初めて説明できることが、光散乱スペックルを併用した研究により示されました[15]。本研究においてもそれを検証することができましたが、さらに面白いことは、それよりわずか4℃の温度上昇で、ミクロ相分離(ドーナツ状の散乱極大)が発現し、延伸系ではそれに異方性が現れることが初めて示されました[14]。これらの2次元SANS強度曲線は「不均一性を考慮したPanyukov-Rabin散乱理論」[16]を用いることで定量的に解析でき、図8のように実験結果をうまく再現することができます。これは、ゲルにおけるミクロ相分離は動的熱ゆらぎのみならず、静的不均一性を強く反映していることを示唆しています。さらに、巨視的変形と微視的構造変化が対応し、アフィン変形的に構造変化が起こっていることがわかりました。

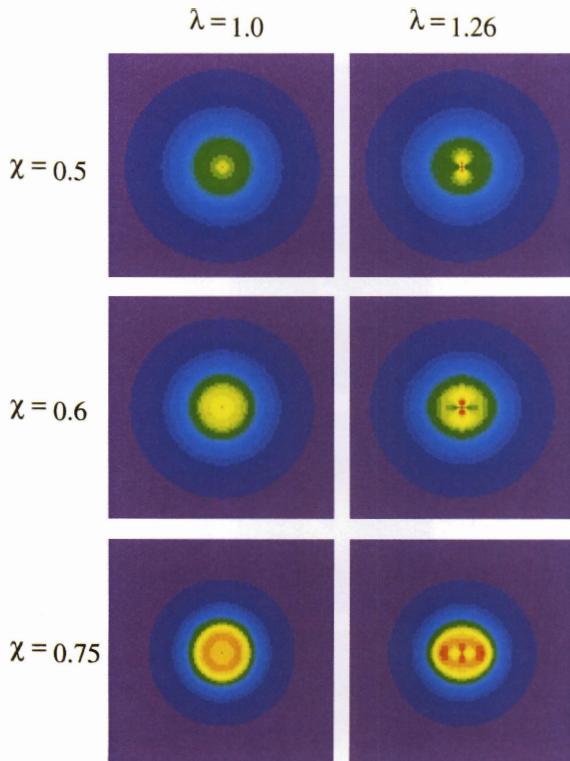


図8 温度敏感型高分子ゲルの2次元SANSパターンの温度による変化の理論予想。

左;未延伸ゲル、右;26%延伸ゲル。

χ は相互作用パラメーター

5 結合相関系としてのゲル

いままではゲルの不均一性を濃度ゆらぎの観点から紹介してきましたが、ゲルの最大の特徴はむしろ、その結合性にあると言えます。そしてその結合性は、静的性質より緩和現象などの動的性質に強く現れます。図4に示したスペックルの発現はその一つですが、このスペックルを利用することでゲル化点が正確に決定できることがわかつてきました。図9左下図はテトラメトキシシラン(TMOS)の脱水縮合反応によるシリカゲルの生成過程の様子を、光散乱でモニターした結果です。反応の経過に伴い、徐々に散乱強度 $\langle I \rangle_T$ は増大しますが、突然、ゲル化時間 $t=16.7\text{h}$ 付近で、散乱強度が急激に増大するとともにゆらぎの振幅が大きくなっています。これがゲル化点に相当し、この時間以降は系は非エルゴード系へと変わります。その変化の過程を動的光散乱法を用いて追跡すると、ゲル化点のみならず分子鎖のダイナミクスの変化の様子も時系列的に捉えることができます。

動的光散乱では、散乱強度 $I(\tau)$ に関する時間相関関数

$$g^{(2)}(\tau) = \frac{\langle I(0)I(\tau) \rangle}{\langle I(0) \rangle^2} \quad (3)$$

を評価し、それから粒子の拡散や、分子のダイナミクスに関する知見などを得ますが、ゲルの場合には、ゲル網目の協同拡散に関する情報が得られます。私たちはこの動的光散乱を時分割モードで測定することで、ゲル化に伴うダイナミックスの変化を詳細に検討しました。図9右図は上述のTMOSのゲル化過程の相関関数の時間変化を示したもので、最初は孤立したクラスターが存在するため、それらの並進拡散が観測され、それに対応する緩和が観測されます。ゲル化点近傍になると、クラスターの分布は自己相似的になるため相関関数はべき乗挙動をとるようになります($t \approx 16.7\text{h}$)。しかし、ゲル化点を過ぎると系全体にパーコレート(浸透)した無限ネットワーク(ゲル分)が出現するため、クラスターの並進拡散は凍結し、網目内の運動モード(協同拡散モード)が支配的になります。その結果、緩和時間は短時間側へと移行します。同時に、非エルゴード性の出現のため、図9左上図に示すように相関関数 $g^{(2)}(\tau)-1$ の初期振幅 σ_1^2 は大きく1より減衰します。こ

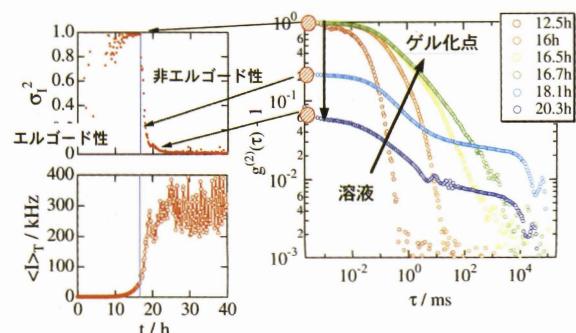


図9 化学反応によってゲル化していく系の散乱強度および相関関数の時間変化

うした特徴のそれがゲル化点を明確に示すから、逆に動的光散乱という非接触的な手法によりゲル化点が決定出来るわけです[12]。

この手法は化学反応によるゲル化系に限らず、モノマーや架橋剤濃度をいろいろと調製して得られるゲルにも適用できます。その一例を図10上図に示します。ここではゾルーゲル転移境界を上述の方法で決定した相図を表しています[17]。縦軸が架橋剤濃度、横軸が調製時のモノマー濃度です。図10下図はStanleyらによって提案されたサイトーポンドパーコレーションモデルでゾルーゲル境界がボンド確率およびサイト確率によって決まる事を示しています[18]。実験で得られた境界が理論とうまく対応していることがわかります。

こうしたゾルーゲル転移は、温度によって可逆的に変化する物理ゲルにおいても見られることがわかりました。図11はスライムの一種であるポリビニルアルコール(洗濯糊の成分)とコンゴーレッド(赤色色素)からなるゲルのゾルーゲル転移を示しています[12]。温度の昇降によって、スペックルの消滅・出現、相関関

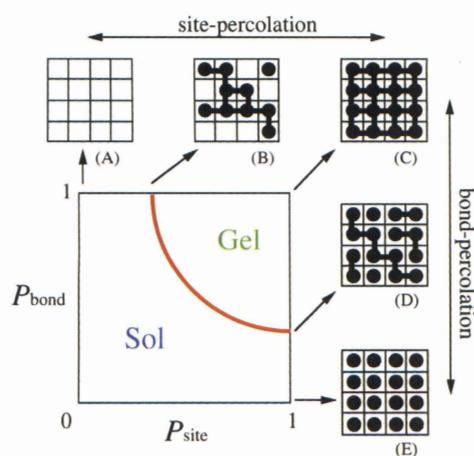
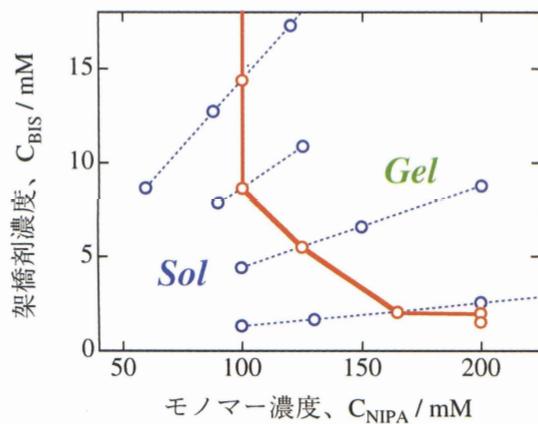


図10 (上)N-イソプロピルアクリラミドゲルのゾルーゲル相図。
(下)サイトーポンドパーコレーション論理によるゾルーゲル相図。

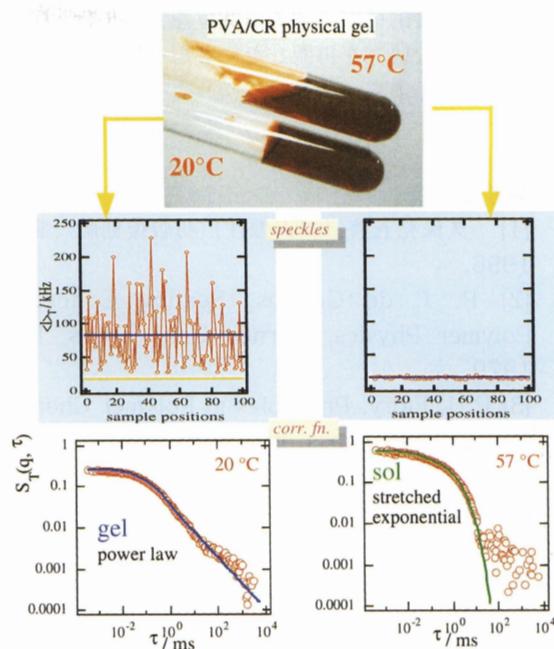


図11 ポリビニルアルコール/コンゴーレッド温度可逆ゲルのゾルーゲル転移(上)、スペックル(中)、相関関数(下)。

数の伸張指数関数化・べき乗化が可逆的に見られます。このように、ゲルを構成する分子の量的制御や温度や濃度などの環境因子の制御などによって、ゲルの動的性質は大きく変化します。こうした知見はゲルをアクチュエーターやセンサーとして用いる場合の、応答速度の制御などに非常に重要であり、分子の結合相関性とダイナミクスの関係が盛んに研究されています。

このような、ゲルの不均一性、ミクロな構造変化、ゾルーゲル転移などは、ゲルをアクチュエーター、ドラッグデリバリーシステム、センサーなどの設計・開発はもとより、生命活動におけるゲルの役割の解明に重要な知見を与えるものとして今後ますますの研究の発展が待たれています。

6 おわりに

身近にありながら、それでいて未だ興味の尽きない物質、高分子ゲル、を物理的な観点から紹介してきました。ゲルの魅力を少しでも読みとっていただければ幸いです。私は、2次元小角中性子散乱装置の共同利用の促進に尽力するとともに、このような高分子ゲルを「結合相関系」超分子と位置づけ、他の相関系とのアナロジーを模索し、ゲルの普遍性と特殊性についての研究を当面のテーマとしていきたいと考えています。

着任してからこの数ヶ月、所員や助手、技官、事務官の方々の暖かい援助と理解をいただきながらも、ソフトマター屋としての孤立性、東海と柏の勤務地二重性、研究と装置管理と教育という3軸上での最適化問題など、いまだに山積する問題を抱える毎日です。一日

も早く実質的に機能する研究室を立ち上げ、インタラクティブな研究を再開したいと思っています。よろしくお願いします。

参考文献

- [1] 久保亮五著、「ゴム弾性」(初版復刻版)、裳華房、1996.
- [2] P. J. de Gennes, Scaling Concepts in Polymer Physics, Cornell Univ. Press, Ithaca, 1979.
- [3] P. J. Flory, Principles in Polymer Chemistry, Cornell Univ. Press, Ithaca, 1953.
- [4] T. Tanaka, L. O. Hocker, G. Benedek, J. Chem. Phys., 59, 5151 (1973).
- [5] T. Tanaka, Phys. Rev. Lett., 40, 820 (1978).
- [6] M. Shibayama, Macromol. Chem. Phys., 199, 1 (1998).
- [7] S. Panyukov, Y. Rabin, Statistical Physics of Polymer Gels, Phys. Report, 269, 1, 1996.
- [8] P. N. Pusey, W. van Megen, Physica A, 157, 705 (1989).
- [9] M. Shibayama, Y. Fujikawa, S. Nomura, Macromolecules, 29, 6535 (1996).
- [10] T. Norisuye, M. Shibayama, S. Nomura, Polymer, 39, 2769 (1998).
- [11] J. E. Martin, J. Wilcoxon, Phys. Rev. Lett., 61, 373 (1988); T. Norisuye, M. Takeda, M. Shibayama, Macromolecules, 31 5316 (1998).
- [12] F. Ikkai, M. Shibayama, Phys. Rev. Lett., 82, 4946 (1999).
- [13] M. Shibayama, T. Tanaka, C. C. Han, J. Chem. Phys., 97, 6842 (1992).
- [14] M. Shibayama, K. Kawakubo, F. Ikkai, M. Imai, Macromolecules, 31, 2586 (1998).
- [15] C. Rouf, J. Basitide, J. M. Pujol, F. Schossele, J. P. Munch, Phys. Rev. Lett., 73, 830 (1994).
- [16] Y. Rabin, S. Panyukov, Macromolecules, 30 301 (1997).
- [17] M. Takeda, T. Norisuye, M. Shibayama, Macromolecules , 33, 2909 (2000).
- [18] A. Coniglio, H. E. Stanley, Phys. Rev. Lett., 42,518(1979).

固体中の水素と量子効果

物性理論研究部門 常行真司

1. はじめに

水素結合性誘電体、有機分子結晶といった固体中の水素原子、あるいは半導体や金属中の不純物水素原子の零点振動エネルギーは、多くの場合0.1eV程度にもなり、熱エネルギーやさまざまな活性障壁エネルギーにくらべて無視することができない。このことから予想されるように、(反)強誘電性相転移温度や水素原子の拡散係数といった水素原子のダイナミクスにかかる物理量には、顕著な量子効果(同位体効果)が観測される。また有機分子と遷移金属からなる固体では、分子に含まれる水素を重水素化することで微小な圧力(chemical pressure)を加えたのと同じ効果を生じさせて、電子相転移を制御できる例が知られている[1]。これは水素原子の量子的な広がりが、結晶の格子定数に影響をおよぼすためである。ほかにも、ほとんどの(微)生物は、体内の水素原子を重水素化すると生存できないと言われている。

このように固体中の水素原子による同位体効果の実例は数多く知られ、トンネル周波数や分布関数の量子的広がりの違いとして一応の説明がなされる一方、水素結合型(反)強誘電体の転移温度のように、トンネル現象が起きること自体に疑義が差し挟まれて別の説明が試みられ、決着がついていないものもある[2]。そこでわれわれは密度汎関数法に基づく非経験的な電子状態計算を使って、出来る限り定量的に、固体中で水素原子の量子効果がどのように現れるかを探ってきた。その結果は、量子効果が場合によっては「局在現象」として現われるという、一見常識に反するものであった。

2. 第一原理経路積分分子動力学法

この長い名前をもつ計算手法(First-Principles Path-Integral Molecular Dynamics Method、以下、FP-PIMD)が、われわれの「数値実験」装置である。プログラムの開発に携わったのは、荻津格氏(物性研助手、現在イリノイ大学)、三宅隆氏(当時物性研、JRCATを経て現在東工大)、ならびに常行研究室の面々である。原子核分布を経路積分法によって量子力学的に取り扱い、密度汎関数法に基づく第一原理電子状態計算によって各瞬間の原子間力を求めながら、分子動力学法によって効率的サンプリングを行うという、3つの計算手法を合体させたもので、D. MarxとM. Parrinelloによって世界初演が行われた[3]。経路積分を離散点で近似するために、1つの原子核が多数の擬原子核によって表されるので、たとえば水素分子のスナップショットは図1のようになる。通常の第一原理分子動力学法

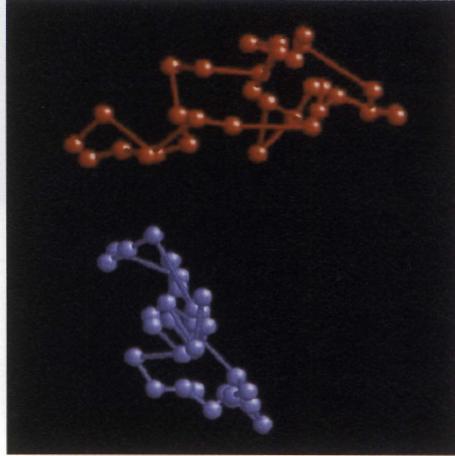


図1 経路積分法による水素分子のスナップショット。
2つの水素原子を色分けして描いた。

の数十倍という計算時間を要する手法であり、物性研の全国共同利用スーパーコンピュータシステムや筑波大学計算物理学センターのCP-PACSなど、プロジェクト申請によって無償で利用できる大規模システムがなければ実行は難しい。詳細は文献[3]か、物理学会誌の拙稿[4]を参照されたい。

3. 結晶シリコン中の不純物水素とミュオニウム

量子局在の一つは、結晶シリコン中のミュオニウム分布に見つかった。[5,4]

μ^+ と電子の束縛状態であるミュオニウムは、水素原子の軽い同位体(質量9分の1)として、固体中の不純物水素の分布やダイナミクスを調べるために使われてきた。とくにシリコン中の水素は半導体の不活性化(passivation)を引き起こすことから詳しい研究の対象となり、水素代替品であるミュオニウムの状態としては、格子間位置(Siのかごの中心にあたるTサイト)の正常ミュオニウム(Mu)と、Si-Siボンド間(B-Cサイト)の異常ミュオニウム(Mu^{*})のあることが、実験的に示唆されている。

第一原理電子状態計算に基づく研究は80年代末に精力的に行われ、Si-Siボンドが大きく押し広げられることによって、B-Cサイトがたしかに水素の最安定位置になることが示された。ところがもうひとつのTサイトの方は、水素の感じるポテンシャル面としては準安定点ですらなく、山の頂上にあたっていた[6]。正常ミュ

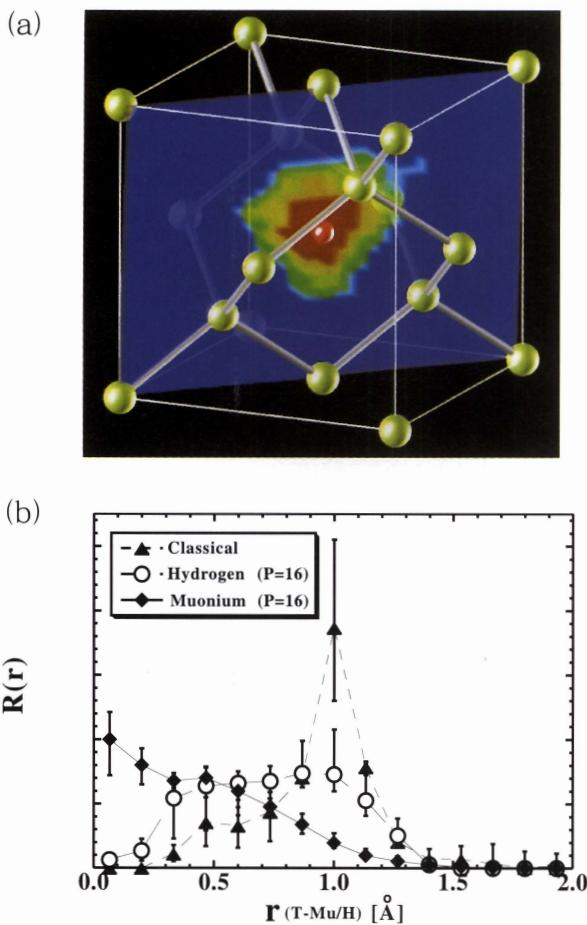


図2 (a)結晶シリコン中の正常ミュオニウム分布(断面図)と(b) Tサイト位置からの距離に対する古典水素、量子力学的水素、ならびにミュオニウムの分布関数[5]

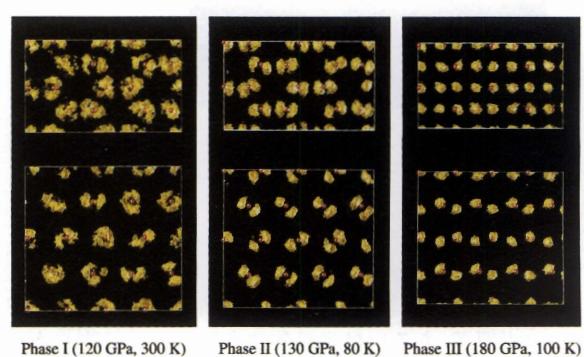
オニウムは、Tサイトを取り囲む準安定位置間の熱的ホッピングや量子力学的なゆらぎの結果、平均としてTサイトに分布するという可能性も考えられなくはないが、ミュオニウムをTサイトに固定して計算された超微細構造定数が実測値をよく説明することとは相容れない。

FP-PIMD法によれば、ミュオニウムは図2(a)のようにTサイトにピークをもって分布する。しかもその分布は、Tサイトからの距離に対する分布関数(図2(b))から明らかなように、Tサイトを取り囲む複数の準安定点への分布を重ね合わせたものと解釈することは困難である。分布関数が量子効果によってTサイトに収斂したように見えることから、われわれはこれを量子局在と呼んでいる。

4. 固体水素

もう一つの量子局在現象は、固体水素の超高压相で見つかった。^[7]

固体水素は過去60年以上にもわたって、固体物理学の重要な研究テーマであった。主要な興味は、木星の磁場の原因とも言われる超高压での金属化であるが、



Phase I (120 GPa, 300 K) Phase II (130 GPa, 80 K) Phase III (180 GPa, 100 K)

図3 FP-PIMD法で得られた固体水素の原子核分布(左からI相、II相、III相)[7]。hcp格子位置を赤い小球で表す。

100万気圧以上の超高压実験によって、金属化が起きる以前にも興味深い相転移現象が見つかっている^[6]。すなわち、圧力1-1.5 Mbarで室温付近(I相)にある水素は温度約100K以下で分子内振動数の不連続などを伴って低温相(II相、BSP相とも呼ばれる)に転移し、また圧力1.5 Mbar以上では顕著な赤外活性をもつ高圧相(III相)に転移する。特に、II相からIII相への転移圧力には明らかな同位体効果が観測されている。これは水素原子核の量子性の現われである。これら3つの相の結晶構造は、いくつかの予想はあるものの、明らかになっていない。

FP-PIMD法で得られた固体水素の原子核分布は図3のようなものであった。I相では各分子の結合中心がhcp格子を形成し、陽子の分布はほぼ球対称である。これは実験から予想されていた構造である。各分子は互いにほぼ無関係に自由回転している。II相では、分子の結合中心は依然としてhcp格子点に位置するが、分子配向に秩序が現われる(分子回転が制限される)。III相では、分子配向の秩序が一層顕著になると同時に、分子の結合中心がhcp格子点から離れる。

比較のため、陽子を古典的に扱ったシミュレーションを行ったところ、II相で量子シミュレーションとはまったく対称性の異なる結晶構造、すなわち分子配向秩序の無いI相に似た結晶構造が得られた。これは量子効果によって分子の回転運動が抑制されていたことを意味しており、やはり「量子局在」と呼ぶことのできる興味深い現象である。

5. 「量子局在」はなぜ起きたか?

結晶シリコン中のミュオニウムと固体水素のII相で見られた局在現象は、どのように説明できるだろうか。非常に直感的な説明を図4に試みた。

左側はx軸方向に2つの極小点をもつポテンシャル面が与えられたときに、古典系がどのように振る舞うかを模式的に描いたもの、右側は量子系である。ただし量子系では実際の系の多次元性に配慮して、紙面に垂直方向(y軸)のポテンシャル面の形状を描いた。

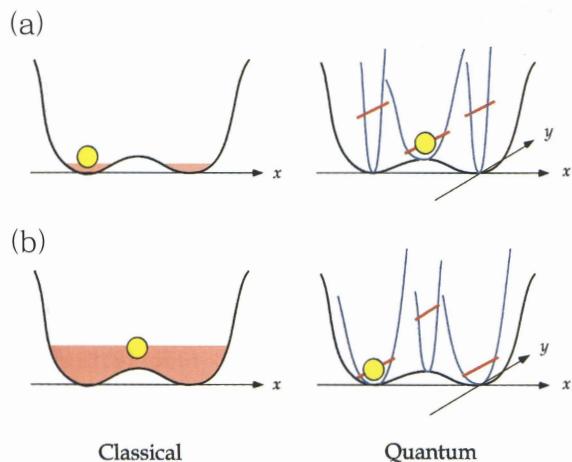


図4 量子局在現象の模式図。右図の赤いラインは、y軸方向の量子揺らぎに対する零点振動エネルギーレベルを表す。

図4(a)はシリコン中のミュオニウムに対応する。ポテンシャル極小点ではポテンシャル障壁位置にくらべてy軸方向のポテンシャル面の曲率が大きく、零点振動エネルギーの効果で見かけ上の安定位置が変わってしまう。シリコン骨格があると、かごの中心であるTサイトがもっとも広い空間であり、零点振動エネルギーの損が少ないことを表している。実際には3次元系であって、古典粒子は別の経路(隘路)を通ってポテンシャル極小点間を行き来できるのに対して、量子系は中央に分布するため、局在化したように見える。

一方図4(b)の軸は水素分子軸の回転角の2つの自由度に対応する。この場合には、ポテンシャル障壁でy軸方向の曲率が大きいため、零点振動エネルギーの効果で見かけの活性障壁が高くなり、閉じ込め(回転の凍結=局在化)が起きる。実際にポテンシャル面がこのような形状になっていることは、静的計算により確かめることができる。

6. おわりに

本稿では、われわれがFP-PIMD法を使って見いだした水素の量子効果について紹介した。量子効果による局在化は一見直感に反するように思われるが、ポテンシャル面の多次元性をきちんと考慮すれば合理的に説明することができる。単純であるだけに、おそらくは固体中の水素分布において普遍性の高い現象であろう。当然ながら水素のダイナミクスにも影響するはずで、金属表面に吸着した水素原子の拡散係数に見られる逆同位体効果などは、図6(b)によって説明できると考えている[8]。燃料電池の隔壁や生体膜での水素移動なども、同様の現象が起き得る舞台として期待されよう。

水素はあらゆる場所に遍在する重要な元素である。その量子効果に関する理解が、いずれは水素に関わる物性の制御につながってくれれば、たいへんうれしい。

本研究は日本学術振興会未来開拓学術研究推進事業の援助を受けて実施された。またシミュレーションの多くの部分は、物性研スーパー・コンピュータシステム共同利用プロジェクト、ならびに筑波大学計算物理学研究センター共同利用プロジェクトとして実施された。ここに謝意を表する。

参考文献

- [1] たとえば、加藤礼三、固体物理 **30** (1995) 269.
- [2] たとえば、日本結晶学会誌**40** (1998)「特集－水素結合における構造物性と機能」.
- [3] D. Marx and M. Parrinello, Z. Phys. **B95** (1994) 143; J. Chem. Phys. **104** (1996) 4077.
- [4] 三宅隆、常行真司、荻津格、日本物理学会誌 **54**(1999) 201.
- [5] T. Miyake, T. Ogitsu and S. Tsuneyuki, Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 1873; Phys. Rev. B60 (1999) 14197.
- [6] C.G Van de Walle, et al., Phys. Rev. B39 (1989) 10791.
- [7] H. Kitamura, S. Tsuneyuki, T. Ogitsu and T. Miyake, Nature **404** (2000) 259.
- [8] T. Miyake, K. Kusakabe and S. Tsuneyuki, Surface Sci. **363** (1996) 403 およびその参考文献.

物性研究所研究会シリーズ 「物性理論研究のフロンティア」

日時 平成12年11月28日(火)～30日(木)
場所 東京大学物性研究所大講義室(6階A632室)

司会者 安藤 恒也 (物性研)
上田 和夫 (物性研)

物性研究所の研究会シリーズ「物性理論研究のフロンティア」が開催されました。研究会シリーズではこれまでの短期研究会とは多少異なり、数人の先生方にご出席をお願いするとともに、物性研究所の研究活動について多少の評価を交えたコメントをお願いしております。物性理論研究のフロンティアもこの研究会シリーズの一環として理論部門で企画いたしました。

この研究会では、物性研究所の理論部門の所員、評価委員の方、それ以外の数人の方に、物性物理学の最先端の話題についてさまざまな話題について、主に理論的観点からこれまでの研究成果を概観するとともに将来を展望した講演をお願いしました。

以下にプログラムと講演要旨を報告いたします。

11月28日(火)

13:20	挨拶	物性研 所長
13:30	量子計算機	東工大理工 細谷 晓夫
14:00	乱れによって誘起された長距離秩序	物性研 福山 秀敏
14:30	ランダムスピニ系に固有な相転移とダイナミクス	物性研 高山 一
15:00	メソスコピック系の電気伝導	物性研 安藤 恒也

15:30 - 16:00 休憩

16:00	フラーレン・ナノチューブ融合系の電子構造と物性	東工大理工 斎藤 晋
16:30	微小磁性体の量子ダイナミクスと散逸効果	東大工 宮下 精二
17:00	高エネルギー一分光理論	物性研 小谷 章雄
17:30	固体中での水素の量子効果	物性研 常行 真司

11月29日(水)

9:30	ボーズ・アインシュタイン凝縮	東工大理工 上田 正仁
10:00	第一原理計算と表面物理	東大理 塚田 捷

10:30 - 10:50 休憩

10:50	物性物理におけるゲージ理論	東大工 永長 直人
11:20	相関の強い電子系の超伝導	京大理 山田 耕作
11:50	強磁性と超伝導の競合	物性研 今田 正俊

12:20 - 13:30 昼食

13:30	光誘起相転移理論の現状と展望	阪大理 小川 哲生
14:00	共鳴X線散乱とマンガン酸化物の軌道秩序	東北大金研 前川 穎通
14:30	一次元のp-波超伝導	物性研 甲元 真人
15:00	多電子系の動的応答	物性研 高田 康民

15:30 - 16:00 休憩

16:00	厳密に解ける模型の最近の発展	東大理	和達 三樹
16:30	熱力学 Bethe 仮説方程式の簡単化	物性研	高橋 實
17:00	フラストレーションの強い量子スピン系の最近の発展	物性研	上田 和夫
17:45 – 19:30 懇親会			

11月30日(木)

9:30	量子輸送理論に関する考察	学習院大理	川畠 有郷
10:00	固体での弾性相互作用と相転移ダイナミクス	京大理	小貫 明
10:30 – 11:00 休憩			
11:00	第一原理電子状態計算の最近の2例：遷移金属酸化物と超臨界水	融合研	寺倉 清之
11:30	理論は、物質探索に役立つか？	青学理工	秋光 純
12:00	閉会		

量子計算機

東京工業大学大学院理工学研究科 細谷 晓夫

量子計算機は、重ね合わせの原理に基づいて並列計算を行うチューリングマシンである[1]。万能量子計算機[2]のための論理ゲートは1ビットのユニタリー変換と2ビットの制御NOTである。後者は制御ビットが $|0\rangle$ の時には標的ビットは遷移をおこさないが、制御ビットが $|1\rangle$ のときはNOTゲートとして働く。制御NOTゲートは、入力が重ね合わせ状態のときは、エンタングルメントを作り、実はこのエンタングルメントこそが量子並列計算とも言える。量子計算では、はじめに簡単に用意できる積による状態を量子回路の入力に準備する。つぎにあるプログラムされたユニタリー変換をゲートによって次々に行い、重ね合わせの中に望ましい状態を含んでいるものを出力する。その出力を観測をして、望ましい状態に波束の収縮をさせて、そこに書き込まれている情報を読みとる。確率的に誤りも起こるが、検算をしてそれを排除する。従って、それが古典計算機に比べて有利に働く問題は、計算するのは大変だが検算が容易である種類の問題(NP)であろう。

現在までのところ、発見された主な量子計算アルゴリズムは、ショアによる大きな数の素因数分解の多項式時間のアルゴリズム[3]と、グローバーによるデーター検索の平方根時間のアルゴリズムである[4]。量子計算機の実現にたいする最大の問題はデコヒーレンスであろう。しかし、最近、誤りをソフトウェアのレベルで訂正する研究が急速に発展している[5]。実験的にもいくつかのグループが、量子計算機のゲートについて成果を発表するようになってきていている[6][7]。さらに、緩和時間の長い核スピンを電子的にコントロールするデバイスも提案されているので、実現に向けた機運は高まりつつある[8]。

ごく最近の展開として、特に幾何学的量子計算のパラダイムを挙げたい。それは、基底状態に縮退のある系について、外力を操作して非可換的なベリ一位相変換を行うことにより量子計算を行うものであり、トポロジカルな面を考慮すればデコヒーレンスに対して原理的に堅牢であると期待されている[9]。デバイスに適したものかもしれないし[7]、プログラム的に自然かもしれない。ただし、計算能力としては標準モデルと等価であろう。

- [1] D. Deutsch, Proc. Roy. Soc. London Ser.A, 40096 (1985).
- [2] A. Barenco et al., Phys. Rev. A 52, 3457 (1995).
- [3] P.W. Shor, in Proceeding of the 35th Annual Symposium on Foundation of Computer Science, IEEE Computer Society Press, Los Alamitos, CA, pp. 116-123 (1994).
- [4] L.K. Grover, Phys. Rev. Lett. 79, 325 (1997).
- [5] D.P. DiVincenzo and P.W. Shor, Phys. Rev. Lett. 77, 3260 (1996).

- [6] J.I. Cirac and P. Zoller, Phys. Rev. Lett. **74**, 4091 (1995) .
- [7] Y. Nakamura, Yu.A. Pshkin and J.S. Tsai, Nature **389**, 786(1999).
- [8] B.E. Kane, NATURE **393**, 133 (1998).
- [9] P. Zanardi and M. Rasetti, Phys. Lett. A **264**, 94 (1999); A. Ekert, M. Ericsson and P. Hayden, quant-ph/0004015; M. Freedman, M. Larsen and Z. Wang quant-ph/0001108.

乱れによって誘起された長距離秩序

東京大学物性研究所 福山 秀敏

初期の磁気的測定で既に示唆され、後の中性子散乱実験で明確にされた、乱れたスピニペイエルス系、 CuGeO_3 、における結合交替と反強磁性の共存については位相ハミルトニアンによる理論的モデル [J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 1182] が提案された。本講演では、この共存状態に対するその後の研究、特に励起スペクトルに現れる Dual な構造 [M. Saito and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. **66** (1997) 3259]、等について紹介し、更に発現機構をより良く理解するために、最近行っているフェルミオン系による研究に言及した。

スピニペイエルス系の本質は、格子の変位とスピニの間の自己無撞着な結合にあるが、まずこれを忘れ、超交換相互作用に乱れがある場合の XY モデルを Jordan-Wigner 変換すると、Transfer Integral に乱れのある 1 次系の問題となる。これに対する、Berezinsky のダイヤグラム法を用いた松尾の最近の仕事を紹介し、「共存状態」の起源は「Random Transfer における $E = 0$ の状態密度の発散」にあることを指摘。しかし、この Berezinsky の方法が適応できるのは乱れが弱い場合であり、励起スペクトルにおける Dual な構造は説明できない。一方、乱れの効果が強く、加えて、格子変位との結合にも着目した状況は、齋藤によって考察されており、その場合には必ず、 $E = 0$ に束縛状態が出現する。従つて、この場合には励起スペクトルには自然に Dual な構造が出現する。現実の系における、結晶学的及び磁気的 3 次元性、反強磁性状態の磁気異方性等をも考慮することにより、様々な理論的可能性が期待される。工夫された実験により新しい側面も見出されよう。

ランダムスピニ系に固有な相転移とダイナミクス

東京大学物性研究所 高山 一

当研究室では、不均一な系に固有な物性現象について、主に計算物理的手法を用いて研究を進めている。競合ランダム系（スピングラス等）とランダム量子スピニ系が二つの主要研究テーマであり、それぞれから最近の研究成果を一つ取り上げ、報告する。

スピニペイエルス物質 CuGeO_3 の磁性原子 Cu を Mg や Zn の非磁性原子で置換すると、その基底状態は、量子的非磁性状態から反強磁性 (AF) 長距離秩序状態に転移することが実験的に見出されている。この非磁性不純物誘起 AF 秩序は、鎖内ボンド交替相互作用と鎖間相互作用をもつ $S = 1/2$ 二次元 AF ハイゼンベルグ模型（非磁性基底状態をもつ）の希釈化に伴う現象と捉え、「連続時間ループアルゴリズム量子モンテカルロ法」による解析を行ったところ、わずかな（1 ~ 2%）スピニの希釈による AF 秩序の出現が確かめられた。さらに、局所スタッガード磁化率や AF 相関を調べ、この基底状態転移では、取り去られたスピニとシングレット対を形成していたスピニが有効スピニとして残り、これら有効スピニが AF 秩序を担っていることを明らかにした。

スピングラス (SG) は、その複雑な自由エネルギー構造を反映した種々のエイジング現象を示す。最近伊藤らは、イジング SG 物質 $\text{Fe}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{TiO}_3$ のゼロ磁場冷却 (ZFC) 磁化過程において、その冷却過程は共通にして磁場印加後の昇温過程を何通りか変えて実験を行ったところ、昇温過程が異なっても、誘起磁化が等しければ SG 状態そのものが等しいと見なせるような ZFC 磁化の振舞いを見出した。我々は実験に沿ったエイジング過程のシミュレーションを三次元イジング EA 模型について行い、実験と同

じ現象が再現されるとともに、誘起磁化とそのときの SG 秩序のドメイン平均サイズとが一対一対応しており、さらに、このドメインサイズの成長則が理論模型と現実の SG とで定量的にもほぼ一致することを検証した。これは、現実の SG 物質のエイジング過程においても、実験時間(分、時間)内でのスピニ配置の変化は高々 10nm 程度のスケールでしかないことを意味する。

メソスコピック系の電気伝導 – アンチドット格子のカオスと量子効果

東京大学物性研究所 安藤 恒也

半導体ヘテロ構造の 2 次元系に微細加工を行うことにより、周期的なポテンシャル変調が加わった人工結晶をつくることができるようになった。とくに、ほぼ円形の強い斥力ポテンシャルが加わった系をアンチドット格子と呼ぶ。アンチドットの典型的な大きさは直径が $d > 1000 \text{ \AA}$ 、周期は $a \gtrsim 2000 \text{ \AA}$ 、電子のフェルミ波長は $\lambda_F \sim 500 \text{ \AA}$ 程度であり、電子の運動が古典的な領域から、量子効果が利き始めた半古典的な領域へと広く変化させることができる。2 次元電子の平均自由行程は $\Lambda \sim 100 \mu\text{m}$ と非常に長いために、電子はアンチドット格子中をほぼ完全にパリスティックな運動をすると考えてよい。この講演では磁場中でのアンチドット格子の輸送現象に関するこれまでの研究の成果について、おもに理論的な視点から概観することを試みた [1,2]。

弱磁場で観測される整合ピークの起源として、古典的なサイクロトロン軌道が整数個のアンチドットを周回する条件として得られるピン止め軌道が提案されていた。しかし、理論的考察と系統的なシミュレーションの結果、磁気フォーカシング効果により隣り合うドットで次々と散乱されて拡散運動する拡散軌道が重要な役割を演じることを明らかにした。また、整合ピークには低温で量子的なアハラノフ-ボーム振動が観測されるが、その起源がアンチドットを周回する周期軌道の量子化準位であることを、状態密度や電気抵抗の数値計算と半古典周期軌道理論を併用して示すことができた。これは周期軌道の存在と消滅が、量子振動の存在と密接に関係することから裏付けられた。さらに、現実のアンチドット格子にはアンチドットの大きさのゆらぎがあり、それにより電子状態が局在すること、さらに局在効果自身が磁束により、量子振動することなどを明らかにし、最近の実験結果を説明することができた。

[1] T. Ando, S. Uryu, S. Ishizaka, and T. Nakanishi, Chaos, Solitons & Fractals **8**, 1057 (1997).

[2] T. Ando and S. Uryu, J. Electronic Materials, **29**, 557 (2000).

フラーレン・ナノチューブ融合系の電子構造と物性

東京工業大学大学院理工学研究科 斎藤 晋

1990 年の固体 C_{60} の発見は、グラファイト、ダイヤモンドに次ぐ新たな炭素結晶の発見として、非常に意義深いことであった。籠状構造の C_{60} は、同様な構造を持つ C_{70} 、 C_{84} 等とともにフラーレンと総称され、 sp^2 炭素からなる新物質として、高温超伝導、分子強磁性など、多様な物性発現の舞台として注目され、その研究が進められてきた。グラファイトが 2 次元 sp^2 炭素ネットワークからなるのに対し、フラーレンは 0 次元ネットワークからなる系であり、次元性の異なる系である。この異次元性に新奇物性発現の起源があるとも言えよう。このことから、1991 年の 1 次元ネットワーク物質であるナノチューブの発見は、やはり異なる次元性を持つ新炭素結晶の発見として、フラーレン発見に匹敵するものであったことが分かる。

これらフラーレンとナノチューブの研究領域は、両者の生成段階に共通のプロセスがあり、また、用いる研究手法にも共通するものが多いことから、一つの領域としてその展開がなされてきた。他方、上述の様に両者は次元性という、物性発現の基本部分で異なる系でもあった。しかるに、最近、多様なフラーレン列を内包したナノチューブ系の大量合成が成し遂げられた。両者の融合した系が、新しい物質群として登場してきたわけで、その物性研究が待たれている。

このフラーレン・ナノチューブ融合系の代表とも言える、 C_{60} 列を内包した(10,10)ナノチューブ系の電子構造について、既に我々はタイトバインディング法を用いて研究し、報告している[1]。この(10,10)ナノチューブは、いわゆる armchair 型の光学異方性を持たない系であり、金属的電子構造を持つチューブの代表として知られている。最近この系に対して、密度汎関数法を用いてその電子構造を、エネルギー論も含めより詳細に研究した[2]。その結果、金属的伝導を、ナノチューブ起源のバンド上のキャリアのみならず、 C_{60} 起源のバンド上のキャリアも担う、複合伝導系であることが判明した。さらなるキャリアドープ系も含め、今後その伝導特性の測定に興味が持たれる。

- [1] S. Saito and S. Okada, Proc. 3rd Symp. Atomic-scale Surf. Interface Dynamics (March 1999, Fukuoka), p. 307.
- [2] S. Okada, S. Saito, and A. Oshiyama, to be published.

ナノスケール分子磁性体における量子ダイナミックスと散逸現象

東京大学大学院工学系研究科 宮下 精二

最近興味を持たれているナノスケール分子磁性体における量子ヒステリシス現象を、量子ダイナミックスにおける非断熱遷移として捉えその特徴を研究してきている。実際、低温での系の実効的な自由度が小さいためエネルギーレベルは離散的な構造を持つ。レベル交差のところにはいわゆる反発レベル交差の構造ができ、その領域を通過するように外部パラメーター（今の場合、磁場）を掃引すると、掃引速度に応じて準位間の遷移が起こる。この現象が、量子ヒステリシスの最も基本的機構であると考えられるが、実際の実験状況では、系は必ず外部からの揺動にさらされ、散逸的な振る舞いをする。そのような中でどのように量子ダイナミックスの特徴が現れるかについて調べている。

まず、反発レベル交差でのエネルギーギャップが非常に小さいときはたとえ外場を一定にしても、環境からの揺動のため系はランダムな反発レベル交差を繰り返す。このような場合に磁化の初期緩和が単純な指数関数的なものではなく、時間の平方根を肩に持つストレッチト指数関数になることを、量子ランジエバン方程式を用いて示した。

また、反発レベル交差でのエネルギーギャップが大きいときは、系はほぼ断熱的に振る舞うが、掃引中の熱の流入のため磁化過程にプラトーが現れることも見いだした（磁気フェーン効果）。このように、環境からの散逸効果の中にも、量子ダイナミックスの特徴が現れることがわかつてきた。

このような局所磁化の運動は必ずしもナノスケール分子磁性体に限らずギャップスピニ系で不均一構造によって誘起される磁化も同様に振る舞うことがわかつてきており、将来これらのダイナミックスを利用して新しいスピニ物性が開かれることを期待する。

高エネルギー分光理論

東京大学物性研究所 小谷 章雄

高エネルギー分光は X 線を光源とする光学物性を指し、放射光の利用によって実験が飛躍的に進展したことに歩調を合わせて、理論研究も発展した。本講演ではまず、f および d 電子系の高エネルギー分光理論の発展の歴史的な経緯から始めて、最近のわれわれの研究について紹介した。これらの系の高エネルギー分光の理論解析において、これまで盛んに用いられ、成果をあげてきたモデルに不純物アンダーソン模型がある。約四半世紀前に、豊沢と筆者が提案したもので、元来のアンダーソン模型に内殻電子状態と内殻正孔ポテンシャルの効果を加え、La 金属の X 線光電子分光 (XPS) 等を解析した。その後、この模型は多くの人達が改良し、混合原子価 Ce 化合物や遷移金属化合物の XPS などの解析において、大きな成果をあげた。筆者達も長年この模型の改良と応用を行ってきたが、その中で最近もっとも中心的な課題としているものは、共鳴 X 線発光分光 (RXES) の理論である。RXES は XPS などと比べて信号の強度が小さいので、輝度の高い光源が不可欠であり、そのため実験は長い間遅れをとつ

ていたが、ここ5,6年間で爆発的な進展を見せている。筆者達は10年以上前から、将来の高輝度光源の出現を予測して、不純物アンダーソン模型によるRXESの理論計算を始めた。計算は種々の希土類化合物や遷移金属化合物に対して、RXESが電荷移動励起、多重項励起、結晶場励起などの電子励起の重要な情報を提供することを予言した。また、 La_2CuO_4 のRXESの偏光依存性は電子状態の対称性を強く反映することが示されたが、この予測は数年後に実験で確かめられた。RXESの偏光依存性は、その後実験の分解能が高められ、 TiO_2 を始めとする遷移金属化合物に対して、実験と理論の両方で系統的研究が行われている。この種の理論研究は今後の高輝度光源による実験の進展にあわせて、さらに大きな発展が期待される。

固体中の水素の量子効果

東京大学物性研究所 常行 真司

水素原子は質量が軽いため、固体中の分布を考える際には原子核の量子効果を無視することが出来ない。水素結合型誘電体や水素吸蔵合金、有機分子金属錯体などは、水素の量子効果によって顕著な同位体効果が観測される例である。我々は原子間力を密度汎関数法によって計算しながら、核の量子力学的な分布を経路積分を使ってサンプリングする手法である、第一原理経路積分分子動力学法の開発と応用を行ってきた。

本講演では固体水素超高压相のシミュレーションを中心に、我々がこの手法を使って見いだした量子効果による局在現象について報告した。これは、固体水素中の水素分子が量子効果によって回転を止めたり[1]、あるいは結晶シリコン中の不純物水素／ミュオニウムがポテンシャル面の不安定点に局在する現象である[2]。一見直感に反するようだが、2次元以上のポテンシャル面（たとえば水素分子の2つの回転方位角）の構造を考えれば容易に理解できる現象であり、金属表面に吸着した水素原子の拡散係数に見られる逆同位体効果[3]とも関連が深い。固体中の水素分布においては普遍性の高い現象であると考えられる。

- [1] H. Kitamura, S. Tsuneyuki, T. Ogitsu and T. Miyake, Nature **404**, 259-262 (2000).
- [2] T. Miyake, T. Ogitsu and S. Tsuneyuki, Phys. Rev. Lett. **81**, 1873-1876 (1998).
- [3] T. Miyake, K. Kusakabe and S. Tsuneyuki, Surface Sci. **363**, 403-408 (1996) およびその参考文献.

レーザー冷却された中性原子気体のボース・AINシュタイン凝縮

東京工業大学大学院理工学研究科 上田 正仁

レーザー冷却技術を使って中性原子気体をボース・AINシュタイン凝縮(BEC)させることに、我が国を含む世界中のグループが次々と成功している。これらの実験に刺激されて、原子物理学、低温物理学、量子光学、統計力学等のさまざまな分野の研究者が互いの分野のアイデアや技法を融合・発展させつつ、非常に学際的な研究領域を形成しつつある。講演では、レーザー冷却されたBECの魅力は何か、液体ヘリウムの物理と何が違うのか、また、BECの相転移のダイナミックス、内部自由度を持ったBEC、および、引力相互作用をするBECに関する最近の話題について紹介する。

第一原理計算と表面

東京大学大学院理学系研究科 塚田 捷

第一原理計算とは、実験的な知見を用いずに量子力学によって電子状態をもとめ、これから原子間力を決定し、構造、反応、生成機構、動的過程、電子的・磁気的・光学的・力学的・熱的など様々な物性を理論的に記述・予言する計算のことである。凝集系では密度汎関数法が有効で標準的な方法であるが、特に固体表面では構造の自由度が極めて大きく、第一原理計算は実験研究と並ぶ表面研究の重要なアプローチである。本講演では表面やナノ構造系の計算法としての、第一原理計算の最近の展開を概観し、具体例として水のプロトンリレー解離、および非接触原子間力顕微鏡像の理論シミュレーションについて紹介した。ナノ構造は必然的に原子数の大きい大規模計算を必要とする。この場合にはオーダ N の性質をみたす新たな計算手法が要求され、基底を用いない実空間有限要素法が極めて強力な方法となり得る。一方、ナノ構造の量子輸送現象を記述するには非平衡開放系への拡張が要求されるが、このため第一原理リカージョン伝達行列法およびリップマンシュヴィンガー法が開発された。

我々は Si(001) 表面における水分子クラスタの吸着状態と解離現象を、第一原理分子動力学法による計算を行って明らかにした。意外な発見は、水素原子が水分子間をリレーされ、最終的に 1 個の水分子が解離して基板 Si に吸着する「プロトンリレー型解離機構」である。次に第一原理計算に基づく非接触原子間力顕微鏡 (nc-AFM) 像とフォース分光の理論シミュレーション法の開発結果について報告した。カンチレバーの共鳴周波数シフトと探針表面間相互作用力の高さ依存性 (フォースカーブ) の関係を明らかにし、振動エネルギーの散逸を表面上の原子過程に基づき理解するなど、カンチレバーの動力学と探針・表面間の微視的相互作用の関連について成果が得られはじめた。

Gauge Theory in Condensed Matter Physics

東京大学大学院工学系研究科 永長 直人

The gauge theoretical structure has become more and more useful and universal in condensed matter physics especially in the strongly correlated electronic systems. The basic reason is that the dynamical and/or geometrical frustration plays the most important role in the physics of strongly correlated systems. In this talk, I give a review on its idea and applications in condensed matter physics including

- [1] topological theory applied to quantum Hall systems
- [2] non-Abelian theory applied to high Tc cuprates
- [3] spin glass and geometrically frustrated spin systems
- [4] spin-orbit interaction and anomalous Hall effect

相関の強い電子系の超伝導

京都大学大学院理学研究科 山田 耕作

銅酸化物高温超伝導体の発見以来、相関の強い電子系の超伝導の機構が重要な理論的課題として活発に研究されてきた。電気抵抗には電子格子相互作用の影響は見えず、電子間のクーロン反発力自体が主たる相互作用であることを示している。

結局、大切な相互作用はオンサイトの電子相関 U である。この相互作用が繰り込まれた準粒子を形成しフェルミ液体を形成する。同時に、この準粒子間に働く相互作用は電子相間に由来するが運動量に依存する。この運動量依存性を対称性によって分類した時もっとも強い引力をもたらす対称性の超伝導が実現することになる。

このようなシナリオを実現するために d-P 模型やハバード模型を用いて転移温度が計算され、その超伝導の機構が明らかにされてきた。今日、内外の研究者の努力によって U に関する摂動や Fluctuation Exchange (FLEX) 近似を用いて次ぎの物質で妥当な T_c が得られている。

- [1] 銅酸化物の低ドープ側を除くホールドープの全領域。電子ドープ領域。
- [2] 銅酸化物の低ドープ領域で見られる Pseudogap 現象は FLEX に超伝導揺らぎをいれる T-matrix 近似を合わせて用いることで説明できる。
- [3] 有機超伝導体 κ -BEDT-TTF の超伝導も摂動や FLEX で説明できる。
- [4] Sr_2RuO_4 のスピン三重項の超伝導も U の摂動計算で説明できそうである。

以上の理論は今後、重い電子系をはじめ、相関の強い多数の電子系の超伝導の機構をミクロなハミルトニアンに基づいて研究することを可能にするものであり、将来が楽しみである。

強磁性と超伝導の競合

東京大学物性研究所 今田 正俊

強磁性ゆらぎがある場合の奇 parity の超伝導についてはいくつもの実験的、理論的な研究がある。しかし、強磁性ゆらぎの果たす役割については、反強磁性ゆらぎと d 波超伝導の関係ほどには考察が進んでいない。我々は強磁性ゆらぎと超伝導の間の基本的な関係を探る目的で、軌道縮重のある 1 次元の 2 バンド模型を考察してこの問題を調べた [1-3]。2 つの軌道をもつ系では一般に強いフント則が働いて、軌道間の電子に強磁性的なカップリングが生じる。この強磁性カップリングが二重交換メカニズムによって、強磁性への傾向を生み出す。一方この強磁性ゆらぎは、サイト間の電子に生ずる超交換相互作用と競合することがある。この系は 1 次元といえども、フントカップリングの大きさと超交換相互作用の大きさの関係、キャリア濃度、2 つの軌道のエネルギーレベル（化学ポテンシャル）をパラメタとして、大変多彩な相を持つことがわかった。密度行列繰り込み群を用いた計算の結果、反強磁性（あるいは一重項形成）への傾向はキャリアドーピングとともにキャリアによって誘起された強磁性モーメントにともなう強磁性ポーラロンと共に存して、興味ある動的な空間不均一構造を示す。ポーラロンの存在のために一様帶磁率は顕著な増大を示す。2 つの軌道のレベルが一致している時には、キャリアのドープされたモット絶縁体では一重項超伝導ペアリングの傾向が優勢であるが、レベル差のある場合は電荷秩序への傾向を示す。一方強磁性ポーラロンは超交換相互作用を極めて小さくできる時にのみ、一重項のバックグラウンドを凌駕して、強磁性ゆらぎが支配する相を形成する。このとき反強磁性ゆらぎと一重項超伝導の関係と違って、強磁性ゆらぎは奇 parity 超伝導の傾向を抑制することはない。しかし強磁性の出現は常伝導状態ですでに良い金属状態を実現しているため、三重項超伝導への不安定性は弱く、高臨界温度の超伝導を生み出すメカニズムとはなりにくいことがわかる。

- [1] B. Ammon and M. Imada: Phys. Rev. Lett. **85**, (2000) 1056.
- [2] B. Ammon and M. Imada: J. Phys. Soc. Jpn. **69**, (2000) 1946.
- [3] B. Ammon and M. Imada: J. Phys. Soc. Jpn. **70**, (2001) in press.

光誘起相転移理論の現状と展望

大阪大学大学院理学研究科物理学専攻 小川 哲生

光誘起相転移は、熱平衡相転移とは異なる非平衡相転移の一種で、二重の意味が含まれている：(1) 光励起状態「を経由して」或る相から別の相に転移する現象と、(2) 光励起状態「において」生じうる様々な相とその間の競合現象。いずれも、熱エネルギーよりもはるかに高いエネルギーを光から受け取った物質系が、エネルギーを散逸しつつ、相互作用や相関効果によって協力的に、光照射前と異なる新しい状態（相）に変化していく動的過程に興味がもたれている。また、光を連続的に照射することによってエネルギーを溜め込み、「光誘起ドメイン注入」による準安定相を形成する過程も光誘起相転移

の一種である。従来の熱平衡相転移研究と異なる点は、物質の励起状態（熱エネルギーよりも高い励起状態）が相転移に重要な役割を担っている点、よって励起状態からの緩和やエネルギー散逸が絡んでいる点、相転移が開始して完了するまでの間の時間空間変化が興味の対象になっている点などがあげられる。

(1)に関して、光励起状態を経由して生じる相転移現象の初期過程においては、「ドミノ倒し」による光誘起核生成 [1] が考えられ、それがどのような条件下で生じうるのか、また、その時間発展過程はどのようなものが理解されつつある。対象物質としては、有機電荷移動錯体、スピンドロスオーバー錯体、ポリジアセチレン結晶などがある。準安定相から絶対安定相への散逸過程だけでなく、絶対安定相から準安定相へのきわめて非線形な光誘起ダイナミクスも観測されている [2]。

たった1カ所（1単位胞や1分子）の構造が光誘起変化するだけで、結晶全体にその効果が伝播拡大していく動態がドミノ倒しであるが、このような巨大非線形性は、個々の単位胞の性質と単位胞間の相互作用との微妙なバランスの上で出現している。1次元局在電子-格子モデル [1] を用い、断熱極限と透熱極限の双方で、短距離的で中間結合強度の相互作用の場合に（強すぎても弱すぎてもドミノ倒しは起こらない）、光誘起ドミノ倒しによる大域的転移が生じうることがわかっている。前者は「決定論的ドミノ倒し」、後者は「確率的ドミノ倒し」と呼ばれ、定性的に異なる [3]。エネルギー散逸が極めて遅い場合には、ドミノ倒しの加速度運動（インフレーション）なども生じる [4]。

(2)に関しては、多励起子系の問題が古いながら今でも関心のあるものである。最近の CaB_6 の高温強磁性によって、励起子絶縁体 (excitonic insulator) 相への関心が再燃しているほか、相変わらず励起子ボーズ-アインシュタイン凝縮 (BEC) 相やその超流動性への興味は尽きない。励起子絶縁体相と励起子 BEC 相との間のクロスオーバーや、励起子 Mott 転移近傍での非線形光学応答などが最近の話題である。励起子は寿命が有限である不安定粒子であるが、この不安定性を考慮に入れた相分離過程の研究も始まった [5]。

光誘起相転移の応用面のポテンシャルティは大きいが、非平衡状態での「相」とは何か？熱平衡相転移と本質的に異なる現象は何か？などの基礎的問題も残されている。量子統計性と多体相関と非平衡性と非線形応答とが絡まり合い、しかも非常に多自由度の対象を相手にするこの分野では、小さな系の微視的理論だけからではなかなかその本質に迫れない。「良い」現象論の構築にも、並行した努力を払いたい。

- [1] K. Koshino and T. Ogawa, Phys. Rev. B **58**, 14804 (1998); J. Korean Phys. Soc. **34**, S21 (1999).
- [2] Y. Ogawa, et al., Phys. Rev. Lett. **84**, 3181 (2000); K. Koshino and T. Ogawa, J. Phys. Soc. Jpn. **68**, 2164 (1999).
- [3] K. Koshino and T. Ogawa, J. Phys. Chem. Solids **60**, 1915 (1999).
- [4] V. V. Mykhaylovskyy, V. I. Sugakov, K. Koshino, and T. Ogawa, Solid State Commun. **113**, 321 (1999).
- [5] A. Ishikawa, T. Ogawa, and V. I. Sugakov, preprint.

共鳴X線散乱とマンガン酸化物の軌道秩序

東北大学金属材料研究所 前川 穎通

多くの遷移金属酸化物金属酸化物は電子間のクーロン相互作用が強い、いわゆる強相関電子系である。そこでは電子の持つ内部自由度であるスピン、電荷及び軌道が独立な自由度として振る舞い、各自由度の秩序状態がお互いに競合する。そしてその結果、様々な量子現象が現れる。

スピンの秩序及び電荷の秩序は中性子散乱や電子線散乱を用いて直接に観測される。一方、軌道の秩序については特別な場合を除いて直接的な観測方法が無く、いわゆる隠れた自由度として取り扱われてきた。しかし、Mn酸化物に見られる巨大磁気抵抗効果の理解には軌道の自由度が無視できないことから、Mnイオンでの $3d$ 電子のもつ軌道の直接観測が望まれていた。1998年にMurakami達は放射光施設から得られる強いX線を用いて共鳴X線散乱による $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{1.5}\text{MnO}_4$ での軌道秩序の観測はじめ

て成功した。それ以後、共鳴X線散乱は軌道秩序の観測方法としてその有用性を増している。さらに共鳴非弾性X線散乱では、軌道秩序に伴う励起状態の研究が可能である。ここではMn酸化物を取り上げ、共鳴X線散乱による軌道秩序の観測原理と軌道の示す様々な物理現象、及び共鳴非弾性X線散乱の今後の方向について議論する。

一次元のp-波超伝導

東京大学物性研究所 甲元 真人

超伝導体では電子が対になって凝縮している。この時対になっている電子のスピンはシングレットとトリプレットの可能性がある。しかしながらほとんどの超伝導体ではスピンシングレットの電子対が形成されている。よく知られているトリプレットの超伝導体としては（実際は電荷を運ばない超流動）³Heがよく知られている。

ここでは準一次元におけるスピントリプレット（p-波）超伝導の発現機構を提案する[1]。まずフォノンによる電子相互作用を考えるが、準一次元系においてはそれとともにフェルミ面の形から誘起される反強磁性ゆらぎによる相互作用を考慮する必要がある。BCS理論によりこの二つの相互作用を考慮して解析した結果、反強磁性相互作用が主になる場合は超伝導は起らないが、一方フォノン相互作用が主になる場合は超伝導が起る。この時もっとも重要な点はこの機構で起る超伝導は常にスピントリプレットであるということである。

準一次元有機電導体(TMTSF)X、梯子系(Sr,Ca)CuO、層状物質SrRuOなどの超伝導が本発現機構によるスピントリプレットp-波超伝導である可能性がある。

[1] M. Kohmoto and M. Sato, cond-mat/0001331

多電子系の動的応答

東京大学物性研究所 高田 康民

多電子系の自己エネルギー $\Sigma(\mathbf{p},\omega)$ を得る理論的な枠組みとして、自己エネルギー改訂演算子理論がある。この理論では、正確な $\Sigma(\mathbf{p},\omega)$ をその不動点とする演算子 \mathcal{F} の存在が明らかにされたが、その定義に汎関数微分を含むため、そのままでは具体的な答えが得られない。しかし、今回、 \mathcal{F} において中心的な役割を担うバーテックス関数 Γ に対して、よいグリーン関数の汎関数形が決められた。この際、時間に依存する密度汎関数理論において鍵になる量である動的交換相関因子 $f_{xc}(q,\omega)$ を用いている。これは乱雑位相近似(RPA)はもちろん、いわゆるGW近似を遥かに超える計算の処方箋を与えるものである。

この方法の応用として、金属密度領域の電子ガスの動的性質を調べた。まず、1電子スペクトル関数 $A(\mathbf{p},\omega)$ には準粒子に対応する比較的狭いピークの他にブロードなピークが見られた。これは約30年前にRPAに基づく計算でHedinとLundqvistが予言していた“プラズマロン”（準粒子と実励起されたプラズモンの結合系）であるが、RPAの計算に比べてピーク幅がずっと広くなっただけでなく、ピーク位置の顕著な低エネルギーシフトが見られる。このシフトは準粒子とプラズモンの引力的結合を示すものである。また、動的構造因子 $S(\mathbf{q},\omega)$ においても、RPAの結果とは違って、プラズモンの大きなランダウ・ダンピングと共に電子正孔対の強い励起子多重散乱効果によるブロードなピークが $|\mathbf{q}|$ が中間的な大きさの時に見られた。今後、固体結晶中の価電子系にこの方法を適用して、バンド効果と相關効果の競合系における動的性質の研究から、より新しい物理概念を引き出す所存である。

厳密に解ける模型の最近の発展

東京大学大学院理学系研究科物理学専攻 和達 三樹

戸田格子や KdV 方程式などのソリトン方程式は、逆散乱法によって、その初期値問題を解くことができる。また、散乱データ空間で作用一角変数を選ぶことができて、ソリトン系は完全積分可能なハミルトニアン系であることが証明される。逆散乱法の量子論への拡張を量子逆散乱法という。この拡張によって(1+1)次元の量子系と2次元古典統計力学模型が同じ形に定式化され、物理学における厳密に解ける模型(可解模型)を統一的視点から研究できることになった。可解性の十分条件である Yang-Baxter 関係式を解くことにより、臨界点から離れた状態においても可解な模型を系統的に構成できる。これらの発展をまとめるとともに、量子転送行列法[1]、フェルミオン的定式化[2]、可積分境界条件[3]、長距離相互作用する量子粒子系[4]、1次元デルタ関数気体の統計力学[5]などについて議論する。

- [1] J. Suzuki, T. Nagao and M. Wadati, Int. J. Mod. Phys. B **6**, 1119 (1992).
- [2] Y. Umeno, M. Shiroishi and M. Wadati, J. Phys. Soc. Jpn. **67**, 1930 (1998); 2242 (1998).
- [3] H. Fan, M. Wadati and X. M. Wang, Phys. Rev. B **61**, 3450 (2000).
- [4] K. Hikami and M. Wadati, J. Phys. Soc. Jpn. **62**, 3864 (1993). H. Ujino and M. Wadati, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 653 (1996). A. Nishino, H. Ujino, Y. Komori and M. Wadati, Nacl. Phys. B **571**, 632 (2000).
- [5] G. Kato and M. Wadati, Phys. Rev. E (in press) and preprint (2000).

熱力学ベーテ仮説方程式の簡単化

東京大学物性研究所 高橋 實

一次元の厳密に解ける模型での熱力学ベーテ仮説方程式は一般に多数の未知関数を含む連立非線型積分方程式である。 $|\Delta| \geq 1$ でのXXZ模型についてはGaudin-Takahashi方程式が知られていてこれは無限個の未知関数を持っているが、これを1個の未知関数を持つ積分方程式に簡単化できるので報告する。

$$\mathcal{H}(J, \Delta, h) = -J \sum_{l=1}^N S_l^x S_{l+1}^x + S_l^y S_{l+1}^y + \Delta(S_l^z S_{l+1}^z - \frac{1}{4}) - 2h \sum_{l=1}^N S_l^z, \quad h \geq 0,$$

に対して熱力学ベーテ仮説方程式は

$$\begin{aligned} \ln \eta_1(x) &= \frac{2\pi J \sinh \phi}{T\phi} \mathbf{s}(x) + \mathbf{s} * \ln(1 + \eta_2(x)), \\ \ln \eta_n(x) &= \mathbf{s} * \ln(1 + \eta_{n-1}(x))(1 + \eta_{n+1}(x)), \\ \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln \eta_n}{n} &= \frac{2h}{T}, \end{aligned}$$

ここで

$$\Delta = \cosh \phi, Q \equiv \pi/\phi, \mathbf{s}(x) = \frac{1}{4} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}\left(\frac{\pi(x-2nQ)}{2}\right), \mathbf{s} * f(x) \equiv \int_{-Q}^Q \mathbf{s}(x-y) f(y) dy.$$

1サイト当たりの自由エネルギーは

$$f = \frac{2J\pi \sinh \phi}{\phi} \int_{-Q}^Q \mathbf{a}_1(x) \mathbf{s}(x) dx - T \int_{-Q}^Q \mathbf{s}(x) \ln(1 + \eta_1(x)) dx, \quad \mathbf{a}_1(x) \equiv \frac{\phi \sinh \phi / (2\pi)}{\cosh \phi - \cos(\phi x)},$$

で与えられた。これに対して新しい方程式は

$$\begin{aligned} u(x) &= 2 \cosh\left(\frac{h}{T}\right) + \oint_C \frac{\phi}{2} \left(\cot \frac{\phi}{2} [x-y-2i] \exp\left[-\frac{2\pi J \sinh \phi}{T\phi} \mathbf{a}_1(y+i)\right] \right. \\ &\quad \left. + \cot \frac{\phi}{2} [x-y+2i] \exp\left[-\frac{2\pi J \sinh \phi}{T\phi} \mathbf{a}_1(y-i)\right] \right) \frac{1}{u(y)} \frac{dy}{2\pi i}, \end{aligned}$$

であり、自由エネルギーは

$$f = -T \ln u(0),$$

で与えられる。経路 C は 0 を反時計まわりにまわる閉曲線である。

- [1] Minoru Takahashi, Thermodynamics of One-Dimensional Solvable Models, Cambridge University Press (1999).
- [2] M. Takahashi, Simplification of thermodynamic Bethe-ansatz equations, preprint (cond-mat/0010486), ISSP Technical Report A3579.

フラストレーションの強い量子スピン系の最近の発展

東京大学物性研究所 上田 和夫

最近、重い電子系の超伝導や銅酸化物高温超伝導の機構が臨界領域におけるスピンの揺らぎによるものであるとの考え方方が次第に支配的になるにつれ、量子相転移とその臨界揺らぎについての関心が高まっている。量子相転移の雑型は、フラストレーションのある磁性体における秩序無秩序転移であるが、最近の物質合成の進展にともない種々の磁性体の量子相転移が活発に研究されている。ここでは、我々のグループで理論的研究が推進されている二つの例について報告する。

[1] 直交ダイマー系 $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$

この物質は層状構造を持つが、各層において Cu^{2+} の持つスピン $1/2$ がダイマーを構成し、さらにそれが互いに直交するように並んでいる。この構造は約 20 年前に考えられた Shastry-Sutherland 模型に等価であり、厳密な基底状態を持つ。基底状態からの素励起はトリプレット励起であるが、その運動エネルギーは極めて小さいのに反し、二つのトリプレットの間には強い斥力が働く。このため、この物質を磁化させるとある値のところで、トリプレットの液体・固体転移が起き、磁化プラトーを生じる。また、 $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ は層間の相互作用を考えても、ダイマー状態が厳密な基底状態であることが示された。

[2] $S=1$ パイロクロア系におけるスピン誘起 Jahn-Teller 歪み

正四面体が頂点を共有して三次元のネットワークを形成しているパイロクロア構造は典型的なフラストレーション系として古くから注目されている。我々は、 $S=1$ のハイゼンベルグ模型を考察した。一次元の Valence Bond Solid のアイディアを援用し、 $S=1$ のスピンを二個の $S=1/2$ の合成と考える。この時各四面体には $S=1/2$ のスピン 4 個が属することになるが、その基底状態は、二個のシングレットが縮退した E 表現になっている。全系の基底状態を議論するにはこの縮退が如何にしてとけるかが問題となるが、この二重縮退は E 表現の格子歪みと結合し、スピンによって誘起される Jahn-Teller 効果があることが示される。そこで期待される歪みは、 ZnV_2O_4 で実際観測されている構造相転移を説明している。

量子輸送理論に関する考察

学習院大学理学部 川畠 有郷

電子輸送の基礎理論には、久保理論とランダウアーの理論がある。久保理論では、電子は電場によって加速されるという描像をとるが、量子細線等における量子輸送によく応用されるランダウアーの理論では、電場は明確な形では現れない。しかし、量子細線の場合、細線の両端に付けた電極（電子だめ）間に電位差があるからには、電極間に電場があるはずであり、それが、電子の運動にも関係しているはずである。この問題を考察した結果、次のような結論を得た。

1. 電場は、細線中での電荷の中性が保たれれば、電子だめの内部の領域で、細線と電子だめの間にあら。ただし、一般には電荷の中性は成り立たず、電場は、二つの電子だめの間の部分の細線中にも存在する。

2. 結局、ランダウアー理論は、電子は電場によって加速される、という久保理論の描像の別の表現であることがわかった。
3. ただし、ランダウアーによる4端子測定によって試料固有の抵抗が測れるという理論は正しくないことがわかった。
4. 電子だめの電子による遮蔽のために細線の電気的中性が破れている場合には、細線中にポテンシャル障壁があると、非線形伝導（整流作用）が起こる可能性があることを指摘した。

固体での弾性相互作用と相転移ダイナミクス

京都大学大学院理学研究科 小貫 明

二元合金や構造相転移における pattern 形成や、非線型弾性による中間状態形成（ドメインピニング）などに対する GL 理論と計算機実験による解析を示した。特に、Jahn-Teller 効果による構造相転移では、GL 自由エネルギーの3次の項があると、秩序相と無秩序相が混在する中間状態が出現する。ここでは不純物がなくても中間状態がガラス的に存在する。このことは一般的であり多くの実例がある。またガラス化の問題においても非線型弾性を考慮すると、ガラス的準安定状態が自発的に出現すると思われる。

- [1] A. Onuki, J. Phys. Soc. Jpn. **68**, 5 (1999).
- [2] A. Onuki and H. Nishimori, Phys. Rev. B **43**, 13649 (1991); A. Onuki and A. Furukawa, Phys. Rev. Lett. to be published (2001).
- [3] A. Onuki, *Phase Transition Dynamics*, (Cambridge University Press, 2001).

第一原理電子状態計算の最近の2例：遷移金属酸化物と超臨界水

産業技術融合領域研究所 寺倉 清之

第一原理電子状態計算の基礎的な方法論としては、1) 電子、2) 励起状態、3) 高効率計算、などが重要課題となっている。一方、その方法の応用としては、典型的な凝縮系物理の問題から、物理化学、生体などへと広がりを見せている。本講演では、凝縮系物理への応用として遷移金属酸化物、物理化学への応用として超臨界水についての研究の内容を紹介した。

ここでは密度汎関数法に基づく第一原理電子状態計算を考えており、現時点での利用可能な近似では、強相関電子系を扱う際に問題が生じことがある。これまでの経験から、金属系であれば殆どの場合にうまく扱えるが、絶縁体では正しく基底状態が再現されないなどの問題が生じることがある。具体的な問題として Sr_2RuO_4 と $\text{Ca}_{2-x}\text{Sr}_x\text{RuO}_4$ について議論した。

1. Sr_2RuO_4 : バンド計算と de Haas van Alphen 効果から得られている Fermi 面と角度分解光電子分光で得られたものが食い違っているとされていたが、表面再構成を考慮するとこの食い違いが解消することを示した。
2. $\text{Ca}_{2-x}\text{Sr}_x\text{RuO}_4$ の相図 : RuO_6 の回転と正方晶変形がこの系の磁気相図を決定していることを示し、その理由を明らかにした。

超臨界水については、それが有害化学物質（ダイオキシンや PCB）の分解や、無触媒の化学反応促進などの観点から注目されていることを指摘し、まずは、超臨界水そのものの基本的性質の解明を目指したシミュレーションの結果を紹介した。水は非常に分極しやすい分子であり、電子状態を基礎としたシミュレーションが必須である。

理論は物質探索に役立つか？

青山学院大学理工学部 秋光 純

まず、最初に「理論」の立場と「物質探索」の立場の違いについて述べ、理論家の suggestion により始めた物質探索の種々のケースについて述べた。

1. はじめに、従来の CuO_2 面を持つ物質で、より高い T_c を持つ超伝導体の可能性について議論した。探索の指針としては、「前川プロット」に基づき、いかにして ΔV （頂点と CuO_2 面内にホールを入れたときのマーデルングエネルギーの差）が大きい物質を作成するかについて論じた。
2. 2番目に、広井・高野により初めて合成された $\text{Ln}_{1-x}\text{A}_x\text{Cu}_1\text{O}_{2.5}$ ($\text{Ln}:\text{La,Nd,Pr}$; $\text{A}:\text{Ca,Sr}$) をいかにして超伝導化するかについて議論した。これは上田らの「超伝導化するためには、量子臨界点により近づける必要がある」というアイディアに基づいている。
3. 最後に、最近、今田によって提唱されている、バンドの flat 化をいかに実現するか、具体的には Lieb モデルの超伝導化の可能性について論じた。

物性理論研究部門講評

シンポジウム「物性理論研究のフロンティア」を垣間見て

理化学研究所 小林 俊一

物性研とのつきあいは、阪大院生の頃からであるから 40 年近くに及ぶ。東海道線を 8 時間もかけて通い、近角研の炉を使わせてもらったり、守谷研で強磁性希土類の T_1 の計算の手ほどきをしてもらったりして、大いに恩義を感じている。30 余年前に東大に移ってからは距離が近くなった割には研究上のつきあいがむしろ薄くなつたのは奇妙だ。

今回、シンポジウムに出席した上で評価をするようにとの依頼を受け、ごく一部しか出席できないと固辞したが、それでもという強いお誘いに、軽率にも引き受けた。結局、拝聴できた講演は 10 編（全 24 編中）、そのうち物性研研究者のものは 4 編（10 編中）に過ぎず、おそれたとおり目を閉じたまま象のしっぽにさわつたようなことになった。加えて、研究現場を離れてすでに 2 年を超えていたため何が問題なのかもよくわからない。そうはいっても報告書は書かないわけにはいかない。

物性研の理論といえばもちろん日本の物性理論を代表する集団である。質のみならず、量においても他の追随を許さない最大勢力であったし、今後もあり続けると信じる。しかし、今回のシンポを拝聴していささかの危惧を感じたことも事実である。なんであるかというと、拝聴した 10 編の講演の中で質疑応答が活発であったのは、どちらかというと物性研以外の講演者の発表についてであったことである。もちろん質疑応答の多寡がそのまま評価につながるとはいわない。それでも、内容の濃い話、文句を付けたくなるような話、新しさが十分な話などには質疑応答が多いことは事実だろう。

さて、福山氏の「乱れによって誘起された長距離秩序」は CuGeO_3 において 2 量体化と反強磁性という両立しない相が、非磁性成分の Ge を Si で一部置換して乱れを導入すると両立するようになるという実験結果を説明するもので、大変おもしろかった。次の高山氏の「ランダムスピン系に固有な相転移とダイナミクス」で取り上げられた三題の一つが福山氏のものと同じ物質だった。しかしモデルは全く異なり、高山氏は置換されるのは磁性サイトである Cu であるとしてランダムスピンの範疇で扱っている。変なのは、この場がご両人の初めての討論の場だったようだということだ。研究所内のコミュニケーションの問題なのか、所長の多忙のせいなのか、あるいは演出だったのか。あの二つの話題はスピングラスのエイジングとカオスメモリー効果で、これらもまだすっきりわかつたという話ではない。安藤氏の「メゾスコピック系の電気伝導」はタイトルほどに広い話ではなく、アンチドット格子の磁場依存性だった。伝導に見られるいわゆるコメントシャレートピークの原因についての論争にきれいに終止符を打ったものだ。今田氏は「強磁性と超伝導の競合」という話をされた。計算機シミュレーションというものはどれでもそうだが、頭と尾だけあって間が見えないから、ご無理ごもっともというしかない。こう並べてみると、それぞれにおもしろく大切な話題であるのは事実だが、どうもわざと驚くようのがない。聞けなかった講演のなかに「驚く」ようなのが沢山あったことを期待する。

物性研以外の話はレビュー的なものが多く楽しめた。（間違っていないとすればではあるが）京大の山田氏が酸化物超伝導が分かってしまったと宣言したのにはちょっと驚いた。

「物性研究の展望」という冊子で、すでに行われた極限環境物性、先端分光、先端領域の 3 部門の評価の講評を拝見したが、なかなか厳しいご意見であった。特に、これらは実験部門であるため、共同利用と自前の研究の両立の難しさについて述べられたのが目立つたが、理論ではこのことは問題ではないのだろうか。

物性研の理論部門は、望む望まないに拘わらず、日本のみならず世界に冠たるべしというきつい運命を担っているのだから、頑張ってもらわなければ困る。なによりもこの立派な建物に恥じない活躍を切望する。外野席からながら大いに応援するつもりである。中途半端な講評、平にご容赦願いたい。

「物性理論研究部門」講評

青山学院大学理工学部 秋光 純

「物性理論研究部門」の研究評価の講評を頼まれて引き受けたわけであるが、考えてみるとこれほど難しいことはない。その一番の理由は、他の実験部門、例えば「極限環境物性研究部門」その他の部門は、ある程度組織をどのように整えるか（例えば共同利用体制をどのようにするか）どのような装置を設備するかにより、その人の個人的能力とは一応別に（広い意味でそれも個人の能力であるが）一定の仕事ができる面があるが、（逆にいえば外からよいテーマが転がり込んでくる可能性もあるが、）理論の場合は、徹頭徹尾「個人の能力・資質」が問われていることであり、おそらく理論では「やってみたら思わぬ結果が出た」というタナボタ式の結果は得にくいだろうと思われる。従って、理論部門に関しては、組織をどのようにするかはあまり問題ではなく、最初から最後まで「人」が問われていることは間違いない。その点、「教育」という逃げ道（?）のある学部教師とは異なり、研究所の教授は、これから65歳までどのようにして研究のレベルを保つていけるのかが大きな課題である。更にいえば物性研究所の一部の理論の先生方が、理論の人は閑（?）だという誤解のもと、研究以外に多くの時間をとられている（ように筆者には見える）のは、大変残念である。（ただし、所長は別です！）

研究会の印象

残念ながら一番肝心な1日目の講演会は出席できなかったが2、3日目の講演は大変楽しむことができた。えてして、実験家は各論にこだわりすぎ、「志」が感じられない話が多いが、理論の先生方の話の方がむしろそのようなものが感じられ、楽しかった。「評価」など眼中になく、悠然と「我が道」を行く先生もおられ、これはこれで面白かった。（しかし、一般論としては、理論の成果はそれがすばらしいものであっても、一般の人には分りにくいことはみとめるが、何とかして目に見えるような形でアピールしてもらいたいものである。このことは、素粒子の理論家が常にやっていることではあるまいか。）

全体の講評

こんなことは言わずもがなのことであるが、物理家の力量はいかに大きなよいテーマをつかむかということにあるだろう。しかし、これは「言うは易く行うは難し」でその塩梅が難しい。あまり大きすぎるテーマだと先が見えず、ノイローゼになりかねないし、小さな問題をちょこちょこやっていては、皆にバカにされるのが落ちである。その点で所員の先生方の業績を拝見すると、多くの所員は息の長い大きな問題と、そのときどきの単発的な仕事をうまく組み合わせておられるのには感心した。しかし、「バランスをとり過ぎる」とこれはこれで大変危険な面もあることは言うまでもない。

分野別にみても、現代の物性物理の王道をほぼカバーしており、例えば強相関系の物理にしても各所員が異なった立場からアプローチし、論争（?）しており、これはこれで大変結構なことである。物性研究所という立場からしてもう少し「実験結果が読める理論家」がいてもよいよう思うが、全体のバランスから言えば、こんなものかもしれない。ただ、欲を言えば既成の概念にしばられないような形やぶりの理論家が一人くらいいてもよさそうな気がする。筆者は「複雑系の物理」というのは実体がはつきりせず、嫌いであるが、長いスタンスでみるとこの分野で、生物まで含めた広い視野を持った「理論家」を育てる必要があるように思われるがいかがであろうか。

物性研理論部門：研究室単位のことと部門としてのこと

産業技術融合領域研究所 寺倉 清之

平成12年11月28日から30日にわたって行われた研究会「物性理論研究のフロンティア」に出席して、多くの興味深い講演を聞く機会を持った。物性研の理論部門の研究活動についての評価も、この研究会出席の目的の一つではあったが、久しぶりにゆっくりと古巣の物性研の研究会に出席して、学術的にレベルの高い講演を聞くことが楽しかった。私が物性研に所属していたころに、物性研を去った方から、「去ってから改めて眺めてみると、物性研の人材の豊富さ、レベルの高さが思い知らされる。」と

いうようなことを何度も聞いたことがある。研究会に出席しながら、自分は丁度今、そのようなことを感じているのだろうという思いがあった。福山所長まで加えて、理論部門に10名の精鋭が若い同僚を携えて研究しているというのは、いかにも壯觀である。これは、世界中を探してもそうは例がないだろう。物性研理論部門の所員の講演は、いわば「real experts」による仕事の話であった。質問や討論の時間もいれて、1人当たりたったの30分の講演であるから、研究の全容が理解できる訳ではないが、その後、最近の5年間の活動をまとめたメモを各所員からいただき、それも読んでみて、個々の所員の活動のレベルが高いことに感服させられた。

さて、こうしたやや定性的な感想を述べていたのではお役目を果たすことにならない。もう少し意味のありそうなことを書かないといけないという義務感から、以下にいくつかのことを書かせていただくこととした。

1. 研究の専門性、先端性、開拓性、広がり、将来の方向

上に述べたように、理論部門の所員の研究はまさに専門家の仕事として高いレベルにあると位置づけることができると思われる。このことと同義ではないが、研究の先端性という観点からも、十分に先端的であるだろう。時流に乗ったトピックスばかりではなく、それぞれの課題における「きわめつけ」のような仕事は、長い時間スケールで眺めれば非常に重要であり、そのような仕事がいくつか見受けられる。それでは、理論部門という組織全体を考えた場合、物性物理における開拓性、広がりという観点からはどうかと考えると、議論の余地はあるように思われる。開拓性、広がりと関係するが、物性研究の将来の方向についての検討ということも、理論部門としての取り組みが要求されるだろう。将来を切り開くという骨太の指導的役割を期待したい。

2. 社会との関係

研究と社会の関係という観点についても多少考えることがあった。こんなことを考えるのは、私が工業技術院というようなところに、かれこれ7年足らずも足を突っ込んでいるということにもよるが、必ずしもそれだけではない。7年はあつという間に過ぎたのではあるが、結構長い年月でもある。自然科学の負の寄与が一層強調されるようになり、若い人の物理離れが加速し、研究の上でもいくつかのうねりがやってきたのである。総じて云えば、研究活動と社会の関連を考えることが、段々と重要になってきていると思っている。勿論、物性研の理論部門での講演において、世の中のなにがしに役に立つというような宣伝文句が飛び交うようなことを期待してはいない。しかし、研究の内容、目的が世の中のなにがしかとどのような関連があるのでというような話をする人が居てもいいのではないかという気がしたのである。それも研究の広がりの一側面であろう。

ここで観点を変えて、組織的ないくつかの側面を考えてみることとした。

3. 理論研究室と実験研究室の相互作用

理論部門が物性研において期待される役割の一つは、実験研究室との相互作用であろう。事情を簡単化するために、敢えて物性研内の実験室に限ることにする。研究の方向を示唆するというような大所高所の役割から、具体的な研究遂行における協力まで、いろいろのレベルの相互作用があるだろう。この点に関しては、いつでも十分ということはあり得ないとしても、かなりの程度の相互作用が進められているようである。特に強相関系の研究では、理論部門の層の厚さも反映して、非常に密接な連携が進められている。また、高圧や表面の研究においては、ある程度の協力関係が存在している。

4. 理論部門内での相互作用

自分の所属する組織が、独立行政法人化に伴って大幅な組織の改編が行われ、従来の研究所（電総研、融合研、物質研など）がなくなり、約55個の研究ユニットが平成13年4月1日からスタートすることになる。新しい組織での運営の基本方針を決める際には、以下のようなことを考えるべきだという主張をしてきた。55個の研究ユニットが存在することが、お互いに関連のない55個の研究ユニットの活動になるのか、お互いの相互作用がポジティブなフィードバック効果となって、1個の研究ユニットの55倍以上の活動になるのか、あるいは、お互いの重なりが大きいため、あるいは足の引っ張り合いのために、1個の研究ユニットの55倍以下の活動にしかならないのかということである。理論部門には10という少なくない数の研究室があるから、これと同じような考え方で組織としての意義を考え

ることは、今後の方針の検討の際には意味があるのではないかと思われる。すでに述べたことではあるが、個々の研究室の活動は大変レベルの高いものである。しかし、物性研究所の理論部門としての研究展開に関する議論は必ずしも十分ではないのではなかろうか。個性の強い研究者の集まりの中で、このような議論はなかなか困難であることは十分承知しているが。

5. 共同利用研究所における理論部門

もう一つ物性研の持つ特性からくる問題は、共同利用研究所であることが、理論部門の研究活動に活かされているか、あるいは逆に、理論部門の研究活動が共同利用研究所であるということにどれほど貢献をしているかという観点である。これが具体的に何を意味するのかということはそれほど自明ではないが、一つの考え方としては、ある分野の研究を進める上で、物性研の理論部門の所員は共同利用研であることの特性を活かして、外部の研究者までをも巻き込んで研究の展開を図るということである。

更に進めると、物性研においては、物性物理の主要なテーマ毎に外部までまきこんだ研究グループを組織し、その中核となる研究者を張り付ける体制をとるという欲張った考えに至る。勿論、現実にそうなっているところがある。もしもこれがうまくいけば、外部への発展になるし、所員の守備範囲の重複を減らしても研究の厚みを確保できることになる。

評価をするという義務感から、敢えていくつかの感想めいたことを云わせていただいた。ここしばらくは、物性研の理論部門の陣容には大きい変化がなかったが、これから数年間にはかなりの人の入れ替えが生じるはずである。これは研究所の移転よりも、もっと本質的に重要なことである。研究所の発展と衰亡は、この機会を如何に活かすかによっている。協力して、広い立場からよく検討され、積極的な対応がなされることを期待したい。

物性研のユニークな建物に、最初はかなりの違和感を持ったが、研究会に出席しているうちに、六本木でのせかせかした雰囲気とは違ったある種のゆとりを感じるようになった。このことが、今後の研究そのものにも影響を与えるかも知れないと思っている。当方の勝手な都合から云えば、物性研がつくばからは自動車で30-40分の場所になったということを大変ありがたいことと思っている。

理論部門の現状と将来について

学習院大学理学部 川畑 有郷

所員の講演の内容は、所員の最近の研究の一部であろう。少なくとも、ある所員については、他にも色々と面白い研究を行っていることは知っている。従って、講演だけから所員の研究活動を評価するのはなかなか難しいのであるが、全体の印象は、まあまあというところであろう。しかし、欲を言えばきりがないが、やや無難な所でまとめている研究が多く印象がある。例えば、新しく発見された物質の性質を説明する理論がいくつかあり、今までには見られなかった現象を説明する事はいいのだが、本質的に新しいものは少なく、知られているものの拡張又は組み合わせで説明出来るもので、単に複雑になっているだけのものも少なくない（これは、最近の物性理論一般に言える事だが）。巨人の松井が不調になると、評論家が「球を追いかけて打っている。これではヒットになんてホームランは出ない」というが、狙い澄ました一発（少なくともそれをねらっている）のように見えるものがなかったのは物足りない。超伝導にせよ、近藤効果にせよ、本当に新しい現象が解明されるのには30-40年かかっている。新しい物質が出るたびに反応していたのではホームランは望めないと思うのだが。本当に重要な現象は、物質の種類にあまりよらないはずである（この意味で、「物質探索は物理学の発展に役に立つか？」という疑問を投げかけたくなる）。

もう一つ感じたのは、所員の研究内容に、個人の中でも全体としてももう少し幅があつてもいいのではないか、という点である。いくつかの研究は同じようで、いかにもこの人らしい、という個性が感じられる研究が少なかったように思う。ただし、すべての所員がこのような研究を行っているわけではなく、苦節30年の電子ガスの理論などもあったのは健全と言えよう（その威力はまだ未知数ではあるが）。

今後、新しい所員を採用する場合には、もっと対象分野を広くとるのがいいのではないか。ある分野の人を探ってみたが、うまくいかなかったからといって、その分野は金輪際採らない、ということはすべきではないだろう。優れた人というのは滅多にいない人であり、滅多にいない人がそう大勢いるはずがないのだから、一部の人でも超一流の成果をあげれば、物性研の名声は世界にとどろくはずである。当たり外れは世の常で、それを恐れず大胆な人事をしてほしい。この点に関連して、所員の流動性がやや少ないと感じる。物性研ほど研究環境の良いところは少ないだろうが、一流の所に行くのではなく、自分がいる所が一流なのだ、という気概を見せてほしい。

1990年代に入ってから、少なくとも80年代に比べると、世界的に物性理論は低調であると思う。この突破口は、ぜひ物性研から出してほしいと願っている。

最後に、所長に助手がいないとは気が付かなかったが、所長も強力な戦力であるので、何とかする必要がある。

物性研理論部門に対する提案

京都大学大学院理学研究科 山田 耕作

11月末に私たちとともに物性研の理論部門の全所員が自らの研究を紹介された。それぞれに興味のあるお話をあった。結果としてみると、わが国や世界の物性物理の現状を強く反映したものであったと思う。それゆえ、物性研の理論部門だけを取り上げて絶対的に評価することもできないし、相対的にも評価できないと思う。物性研の現状は我々日本や世界の物性理論の現状に他ならない。

そのような目で見た時、物性研の理論の所員の方々はそれぞれに最大限の努力をされていると思う。統計力学の深みの有る研究から難しいダイナミックスの研究、応用にもつながる微小な系の研究、難しい電子相関系の理論が様々な角度から研究されていることが分かった。運悪く分野の曲がり角で新しいテーマを模索中の所員もあるようにも見えたが、それは当然有り得ることであり今後の発展に期待したい。

物性研を評価し、批判するもっとも有効な方法は批判する人が研究の手本を示すことである。「面白い研究をしてください」と言ってもやって見せなければ「物性物理も面白い問題がなくなりました」と言われるだけである。それゆえ、物性物理の発展は物性研内と外部の人との協力と相互の批判を通じて行なわれるものであると思う。わたしの関係した分野では率直な議論が行なわれ、夜遅くまでパネルディスカッションをしたことを思い出す。福山所長を始め、物性研の理論の方々には幾年にもわたる議論に気長に付き合っていただき、非常に刺激されたことが多かった。時には「ちっとも計算が進んでいないのではないか」とお叱りと激励を受けたりした。「少し変わりましたね」とか自分でも意識しない変化を指摘されたりした。いわば胸を借りると言うような交流は私たちにとっては大変有意義であった。このようなことが物性研の側から見てわずらわしいだけであったかもしれないが、少なくとも若い人には見解の多様性と個人個人の判断を促す上で意義があるのではないかと思う。私は30年以上前、初めて参加した学会で近藤効果の束縛状態をめぐる激しい議論で圧倒された。権威有る先生方が「大人げもなく」議論されていたからである。極めて真剣な論争であり、学問の厳しさを実感した。それゆえ、何よりも、今後も物性研の方々と外部との率直な付き合いを御願いしたい。

以上が御願いしたい主な点であるが、以下、我々物性研以外の研究者にも通じる我が国の物性理論全体の問題点と思われるものを指摘したい。

第1に我々50代はもちろん40歳以上の世代に牽引力がなくなっていることである。物性物理の再生のためには若い人の自由な研究活動を保証し自覚を促すことが必要である。物性研を例にとると所員に助手を所属させるのではなく自由にどの所員とも、助手同士でも共同研究をさせてはどうだろうか。所員は助手よりもむしろ、学生を指導し、学生と共同研究するのが望ましい。

第2に物性研も含めてゆっくり大きな研究ができる態勢が必要である。すぐに成果を求めるような最近の動きは、冒険的なテーマへの挑戦を妨げ好ましくない。物性研の所員の方に望みたいのはこれから学問の方向を示すことである。1970年ごろ、わたしが助手だった頃、所員から物性研は共同利用

とともにピークを出す義務があると言われた。全国の手本となるようなピークとなる研究を目指すべきだと言うことであった。現在から考えるとこれは物性研だけではなく全ての研究者の目標であろう。研究とは不思議なものでピークを目指してもそのような研究に成功するとは限らないが、何時か苦労は別の形で生かされるのである。「並みの」テーマはやめてエヴェレストを目指していただきたいと思う。登頂はできないかもしれないがヒマラヤに行かなければエヴェレストには登れない。頂上を目指さなければ登頂はできない。

第3は10人の理論の所員を始め、物性研には多数の理論家がおられる。主として物性研の問題であるが、理論の所員の主たる分野をできるだけ決めるべきではないだろうか。昔は理論I, II, IIIと言うのが有ったが別に半導体や磁性の理論部門があり、専門化していた。例えば、現在も物性研で継承して欲しい分野の1つは重い電子系も含めたバンド計算の研究室である。募集にあたって分野を決めた方が、人事に入る前の分野に関する展望や必要性の議論が活発になる。また、同じ分野の人は物性研に一人しかいないとすると外部との交流が盛んになる。できるだけ分野の重なる人を少なくした方が責任の所在もはっきりする。その代わり、幅を広げ多様な分野の理論家を持つのがよいように思う。また、物性研内部で実験・理論を閉じた形にしようとするのは必要もないし、逆に外部との交流をおろそかにする可能性がある。

「物性理論研究のフロンティア」に出席して

東北大金属材料研究所 前川 穎通

物性研の研究活動に対する評価を含めた研究会シリーズの一つ「物性理論研究のフロンティア」に評議員として出席し、かつ講演もするように、というお誘いを受け、11月28日～30日の3日間物性研に滞在させていただきました。研究会ではロビーでのディスカッションも重要ですが、今回は「講評」を「物性研だより」に書くようにという指示を受けたこともあり、ロビーでの活動は控えて講演を聞かせていただきました。物性理論のほぼ全分野の研究の現状をその第一線の研究者より聞くことができ、非常に良い機会を与えていただいたことに感謝しています。また、この3日間、私自身大変心地好い気分にさせていただきました。自分の言葉が通じる心地好さです。おそらく、これだけ多くの物性理論家を抱えている研究集団は世界中で物性研だけではないでしょうか。自分の不慣れな問題にぶつかれば、いつでも隣にその専門家がおり、そのドアをノックするだけで何らかの情報が得られる場所は物性研を除いては無いと思います。私の感じた心地好さは自分と同じ言葉を使う仲間と一緒にいるという一種の安心感です。私の所属する金属材料研究所は私のような物性理論を専門にする者からゴルフクラブに商品化される材料の開発に関わる研究者まで、非常に広いスペクトルになっています。そのため、研究所内で自分の研究を理解してもらうためにはまず共通の言葉を捜すことから始める必要があります。しかし、今回の研究会ではその心配は全くなく、こちらの独り言まで理解してもらえるアットホームな印象を持ちました。

このようなアットホームな印象はこの研究会だけでなく物性研全体の持つ強みであり、それが全国共同利用研究所として物性研究者の支持を受けている理由の一つだと思います。しかし、物性研のこのようないわば単一民族の強みは弱みにも成り得る心配もあるのではないかでしょうか。常に違った価値観の意見を取り入れる柔軟性が大切だと思います。今回の研究会では物性研の方の講演は分野を究めようとする内容、外部の方の講演は分野開拓型の内容という一般的な印象を受けました。どちらも大切なことは今さら言うまでもありませんが、両者のバランスをとれば、日本の物性研究の未来は明るいと思います。

今回の研究会では実験家の方の講演者への質問やコメントが大変有用であったように思います。特に著名な実験の先生からの「なぜそんな計算をやるのですか?」等々の質問は理論家にとって最も本質をついたものであると言えると思いました。物性物理は「物」を2つも含んだ言葉であり、いかに物質との対応が大切であるか、を言い得ていると思います。物性理論は実験との対応がなければ空論になってしまいます(逆もまた真であると信じています)。

しかし、少し残念であったのは、このような目的を得た質問は外部の研究者からであったということです。物性研研究会シリーズについて所長が「物性研だより」に“実験と理論の融合には特に注意を払う”と書いておられましたが、少なくとも今回の研究会ではこの点が今後の検討課題として残ったのではないかでしょうか。私個人の勝手な意見を許していただけるなら、物性研が理論家だけを集めて理論部門を作っていることに抵抗を感じてしまいます。実験と理論の融合のためにはオフィスの配置や組織の形にも十分配慮する必要があるように思います。

最後に物性研への私の希望を述べさせていただきたいと思います。日本の物性理論がこれからもますます発展していくためには外国の研究者に門戸を拡げていくことが必須だと考えています。違った価値観を持った人達と毎日議論を重ねていくことが大切であり、そのためにはお客様ではなく同僚としての外国人研究者が常に隣のオフィスにいること、そして、昼食やコーヒーと一緒にとりながら議論できる環境を作っていくことが大切であると思います。幸い、物性研では外国人客員研究員のポストを概算要求しておられると聞いています。是非とも実現してほしいものです。それとともに、助手席、所員席も外国人研究員を受け入れるために利用すればより多様性のある研究所になると思いますが、いかがでしょうか。ご参考までに、私の属する金属材料研究所では幸いにも外国人客員研究員のポストがあり有効に利用しています。また、助手席や助教授席を必要に応じて外国人研究者の採用に利用しています。もちろん言葉の問題等でマイナス面も無いとは言えませんが、研究に多様性を加えるという点を考えればこのマイナス面を十分に補えるものであると思います。

物性研が物性研究の真の COE として、是非外国人研究員へ大きく門戸を開いていただくよう希望します。

物性研究所理論部門研究会印象記

東京大学大学院工学系研究科 宮下 精二

物性研究所理論部門の評価を兼ねた物性理論フロンティア研究会に出席し、また各所員の方の最近5年間の研究業績概要を拝見した印象を述べたいと思います。

まず最初に、研究会の形でこのような機会を持たれたことは、各所員の方の発表の時間が限られたとはいえ、物性研の研究者がいかに広く研究分野を有機的に網羅しているかを示し、また相対的な立場もよくわかるため大変よかったです。また、シンポジウムに多くの院生が出席していたことは、物性研が活気を持って研究を進めている証拠と思いました。学生からもっと発言があればもっと素晴らしいと思いました。

物性研は日本の物性研究の中心であり、そこで研究は各分野で指導的な立場にあることが責務であると思います。長年じっくり時間をかけて研究を大成し、そこから新しい展開を発信していくのが理想的だと思います。多くの所員が世界的なレビューを書くなど、その意味では非常な活性期にあると思います。内容に関しては、詳しく触れられませんが、たとえば計算物理の分野に関しては、物性研究所電子計算機センター設立以来、物性研究における計算機事情は非常に好転し、国内の計算物理学の活性化をもたらすのに大きな貢献をしていると思います。また、その中心となる物性研では計算物理ならではの特徴を活かした研究、特に第一原理計算、強相関系・量子スピン系モデル計算、複雑系シミュレーションなどにおいて素晴らしい成果が得られています。特に、相互作用が不均一な系でいかに系を平衡状態に緩和させるかに関して開発された交換モンテカルロ法はスピングラスの問題に留まらず、タンパク質の折り畳み問題などの研究にも重要な寄与を与えています。大規模な量子モンテカルロ法の実行が可能になり、量子相転移、量子磁化過程や量子パーコレーションの臨界現象などの解明に大きな威力を發揮し、この分野では世界を圧倒しているように思います。また、密度行列繰り込み群の方法の系統的発展や、経路積分繰り込み群法の開発など、非摂動的情報が重要な強相関系・量子スピン系で世界的に先端的・指導的研究が行われています。また、第一原理電子状態の計算に基づいた分子動力学の計算も迫力があります。特に、固体中での水素原子核の量子効果の発見など、極限状態の物性解明に非常に将来性を感じます。また、メゾスコピックな系での電子状態における古典軌道の影響の研究や、固体電子

状態の理論を精密化した自己エネルギー改訂演算子理論、X線分光の理論的研究など、長年の研究成果であり、我が国のオリジナルな業績として素晴らしいと感じました。さらに、超伝導に関してもいろいろな新しいタイプの機構についてのそれぞれの立場からのアプローチが紹介され、またドーピングによってもたらされる種々の効果も議論されるなど分野の興隆を感じました。多体相互作用系の物性の基礎を与える相互作用系の厳密な性質に関する基礎的研究として熱力学ベーテ仮説方程式に関する一連の仕事はひとつのまとめた話として高く評価されるべきであると思いました。このような基礎的なタイプの研究の存在は、他の研究者の物理への意識の上でも重要であると思います。

それぞれに、世界のリーダーのみなさんのお話は印象的で興味深くうかがいましたが、お互いに関連する対象を扱っていると思われる場合にも、あまり議論がかみ合っていないむしろ互いに「あとのやり方はああだ」といったふうに棲み分けている感じがありました。また、傍目にはなんとなく自分一人でやっているという感じをもつ発表もあり、折角同じところで研究をしているメリットを活かしきれていないような印象を持ちました。各所員がそれぞれの分野の権威になってしまっているので、ある程度しかたがないと思いますが、棲み分け的な状況を解消するアットホームな議論の場をもつことが必要ではないかとの印象を持ちました。それぞれ各人の方法での整合性をもつことはもちろんのことですが、全く異なる方法論でも、関連する対象を扱う場合互いの関連をもつとつこんで議論すると、物性研独自の新しい理論体系が生まれるのではないかと思います。一般的にいって物性研究は固体電子論・磁性はじめ高分子・生体さらには複雑系・社会現象論まで幅広い範囲を意味すると思います。物性研の現状はほぼ第一のカテゴリーに属しているようにみえます。しかし、このことは現在の物性研のカラーであり、総花的な配置よりむしろ積極的に捉えるべきだと思います。この集中性を活かすためには互いにもっと積極的な意味で議論し交流を進められればと感じました。個々の研究を詳しくみれば、それぞれ違っていると思いますが、上のような意味ではそれぞれ非常に近いですから、相手の理論の中で自分の理論の位置づけをするなど、同じ所で研究に専念する利点を十分活かしてほしいと思います。そのような十分な相互議論のもとで、もし必要なら重複分野の整理などの自己評価も自ずから明らかになると思います。上にも述べたように物性研は日本の物性の中心地で、理想的な研究場所であってほしいと思います。研究所は研究所でいろいろ忙しいことはわかりますが、なるべく雑用を軽減し研究自身（研究会でなく）に打ち込める環境となる意識と努力をされることを希望します。新しい建物になり、人間間の散乱断面積が非常に小さくなつたようですが、緻密な相互研究協力によって、物性研の独自の新しい気風が生まれ、ますます世界に冠たる発信点としてのご活躍されることを期待します。

物性研究所短期研究会

「強磁場、高圧下における遷移金属化合物の磁性」

日時 2000年12月14日(木)～12月15日(金)

場所 東京大学物性研究所大講議室(6階A632室)

司会人○高橋慶紀	(姫工大理)
後藤恒昭	(東大物性研)
深道和明	(東北大院工)
山田鉄二	(信州大理)
毛利信男	(東大物性研)
和田裕文	(京大院工)

遷移金属化合物の示す遍歴電子磁性の研究は、近年における試料作成技術の向上と、強磁場、高圧の極限環境下における各種の測定技術の飛躍的な発展に支えられ、実験的に著しい進展をみせている。良質な遷移金属化合物の試料を用いた高精度の測定が、温度、磁場、圧力を組み合わせた広範囲な実験条件下において行なわれ、多くの興味深いデータが得られている。また理論的にも、従来のスピンのゆらぎにつけ加え、量子ゆらぎの効果の重要性の指摘や、バンド計算法の改良や精度の向上があり、今後の新たな展開が期待されている。

このような状況を背景に、この分野の研究を今後さらに発展させるために、研究の現状を把握し問題点を整理し、今後の進むべき方向を探ることを目的に短期研究会が開催された。充分な講演時間をとったこともあり、両日にわたり活発な討論や意見交換が行なわれた。

プログラム

12月14日(木)

10:30 開会	姫工大理 高橋慶紀
10:35 d および f 電子近藤絶縁体における多体効果、スピン揺らぎ、磁場効果	埼玉大理 佐宗哲郎
11:05 遍歴電子磁性体の磁気秩序状態における状態方程式	姫工大理 高橋慶紀
11:35 銅化合物 Bi_2CuO_4 , Li_2CuO_4 の電子状態と磁性	岡山理大 望月和子
12:05 パイライト型 3d カルコゲナイト混晶のメタ磁性	阪大院理 赤井久純
12:35-13:30 昼食	
13:30 $\text{La}(\text{Fe}_{1-x}\text{M}_x)_{13}$ ($\text{M}=\text{Al}, \text{Si}$) 化合物の強磁場・高圧中における相転移	東北大院工 藤田麻哉
14:00 RCO_2 ($\text{R}=\text{希土類}$) の純良単結晶育成と物性	都立大院理 菅原 仁
14:30 遍歴電子メタ磁性体 $\text{Lu}(\text{Co}_{1-x}\text{Ga}_x)_2$ の磁気弾性効果と 1 次磁気相転移	慶應大理工 田島圭介
15:00 $\text{Lu}(\text{CoAl})_2$ および $\text{Lu}(\text{CoGa})_2$ ラーベス相メタ磁性化合物の磁気状態図	東北大院工 深道和明
15:15-15:30 休憩	
15:30 Fe_2P の 1 次転移と反メタ磁性転移	信州大理 山田鉄二
16:00 $(\text{Fe}_{1-x}\text{Ru}_x)_2\text{P}$ の異常磁性	埼玉大理 上床美也
16:30 遍歴電子系 $\text{Mn}_{2-x}\text{Co}_x\text{Sb}$ における反強磁性—フェリ磁性転移：磁場および圧力効果	東大物性研 後藤恒昭
17:00 Mn を中心とした金属間化合物の高圧下の磁性	岡山大理 小野文久
17:30 CeFe_2 の磁性と伝導に及ぼす置換効果と圧力効果	広大総合科学 藤井博信
18:00 MnAs 及び CrAs における格子定数と磁性	東北学院大工 井門秀秋
18:15-20:00 懇親会	

12月15日(金)

9:30	Electronic structures and optical spectra of super-doped Si:Mn systems	大阪市大工 E. Kulatov
10:00	第一原理計算によるスピン機能材料の設計	阪大院理 白井正文
10:30	LDA+U 法による f 電子系の遍歴電子状態の再考	阪大産研 播磨尚朝
	11:00-11:10 休憩	
11:10	DyMn ₂ Ge ₂ の磁性と磁気熱量効果	京大院工 和田裕文
11:40	CrTe の圧力誘起磁気相転移	阪大極限センター 石塚 守
12:10	高圧下 FeS の金属相	東北大院理 小林寿夫
	12:40-13:40 昼食	
13:40	マンガン酸化物の「圧力」効果 - 構造物性からのアプローチ -	名大理工総研 守友 浩
14:10	マグネリ相バナジウム酸化物の高圧下輸送現象	東大低温センター 浦野千春
14:40	Fe ₂ VAl 系化合物の磁性と電気伝導性	島根大総合理工 西郡至誠
15:10	閉会	東大物性研 後藤恒昭

d および f 電子近藤絶縁体における多体効果、スピン揺らぎ、磁場効果

埼玉大理 佐宗哲郎

近藤絶縁体とは、電子相関効果の強いバンド絶縁体の意味である。典型的には YbB₁₂, Ce₃Bi₄Pt₃などの希土類化合物に見られ、分散の弱い 4f バンドが伝導バンドと混成してバンドギャップが開いており、その下まで偶数個の電子が詰まっているためにバンド絶縁体となっている。ギャップが開くためには結晶構造が立方晶などの単純なものである必要があり、4f 準位が複数本の伝導バンドと交差していれば、ギャップとはならない。これらの基本的な特徴は、バンド計算で求められるはずのものであり、多くの近藤絶縁体では実際にバンド計算によりギャップが開いているか、または、開きうる構造をしている。(YbB₁₂などのように、LDA 近似の悪さ等のために、半金属になってしまっている場合がある。) 4f 電子間には強いクーロン反発力 U が働くが、磁気秩序等を起こさない限りは、Anderson 模型に対する Landau のフェルミ液体論と同様にして、 $U = 0$ から $U \gg \Delta$ (Δ は 4f 準位の幅) まで連続的に接続しており、ギャップ等の繰込みを生ずるのみと考えられる。このことから、上に述べたことは、4f 電子系だけでなく、U の弱い d 電子系でも、状況が類似であれば同様に起こり、違いは U の大きさとそれに伴うくり込みの程度の違いだけであると考えられる。その例として FeSi が上げられ、再び盛んに研究されるようになった。

上のような説明は、例えば、Aeppli と Fisk のレビュー [1] にも書かれている。この文献は、「近藤絶縁体」という名称を広めたことと、そのために「近藤効果」という側面が強調されすぎ、それを 3d 電子系の FeSi にまで拡張して適用したために、やや誤解されて引用されることがあるようだが、上記のように、まったく穏当な説明をしていることを注意しておきたい。

本講演では、FeSi の物性が実際に上記のような考え方で定量的に説明できること [2-4]、その際、強相関ではないが多体効果が重要であること、YbB₁₂ と磁場誘起絶縁体-金属転移 [5,6] も含めて類似点が多いこと、「多体効果」と「スピン揺らぎの効果」とは同じ効果の取り扱いによる違いに過ぎないこと [7-9]、などについて説明する。

- [1] G. Aeppli and Z. Fisk: Comments on Cond. Mat. Phys. **16** (1992) 155.
- [2] K. Urasaki and T. Saso: Phys. Rev. **B58** (1998) 15528.
- [3] K. Urasaki and T. Saso: J. Phys. Soc. Jpn. **68** (1999) 3477.
- [4] T. Saso: to appear in Proc. 25th Intnl. Conf. on Semiconductors (2001).
- [5] T. Saso: J. Phys. Soc. Jpn. **66** (1997) 1175.
- [6] T. Saso and M. Itoh: Phys. Rev. **B53** (1996) 6877.
- [7] T. Saso: J. Phys. Soc. Jpn. **68** (1999) 3941.
- [8] T. Saso: to appear in J. Phys. Soc. Jpn. **69** (2000) No.12.
- [9] T. Saso: to appear in J. Phys. Cond. Matter (Letter) (2001).

遍歴電子磁性体の磁気秩序状態における状態方程式

姫工大理 高橋慶紀、坂井 徹

弱い遍歴電子磁性体の磁気秩序状態の磁化の温度変化や磁場依存性を記述する状態方程式は、Stoner-Wohlfarth 理論によれば次のような簡単な式、 $M^2(H, T) = M^2(0, 0)(1 - T^2/T_c^2) + 2\chi_0 H/M(H, T)$ によって記述される。一方 SCR 理論によれば、磁化 M の温度依存性について、低温では M^2 は T^2 に比例して減少し、また臨界温度近傍では $(T_c^{4/3} - T^{4/3})$ の依存性を示すことが導かれているが、定性的な議論にとどまり実験との定量的な比較についての議論はほとんどなされていない。実験で得られる温度依存性から磁性体に関するどのような情報が得られるかについても詳しい考察はなされていない。この理由は、磁気秩序状態を系の対称性を考慮にいれながら取り扱う理論が未だ不満足な状況にあったことに起因するものである。

昨年の秋の物理学会で、磁気秩序状態を取り扱う場合の理論の困難は、スピンの熱的な横ゆらぎの振幅を一様磁化の逆数の関数と考えたとき、その解析性が重要であり、単に常磁性状態で用いた関数形をそのまま流用することは許されないことを指摘した。また、スピン波が存在する影響を具体的に取り入れることにより望ましいふるまいが得られることについても示した。この考えにしたがって T_c 以下の温度における磁化の温度、磁場依存性を決定するための方程式を実際に導くことができる。この方程式を解いて得られた解から、次のようなことがわかる。1) M^2 と自由エネルギーの 4 次の展開係数は密接に関係しながら温度変化する。低温では、両方とも T^2 にしたがって減少し、臨界温度近傍についても両者は同様な温度依存性を示す。2) 低温における T^2 の温度依存性 [1] の係数からスピンのゆらぎのパラメータの値を評価することができ、実際にこのようにして得られた値は既存の値とよい一致を示す。3) 低温の T^2 の温度依存性の係数の磁場依存性を導くことができ、これは $\text{Pt}_{1-x}\text{Ni}_x$ の実験 [2] とよい一致を示す。4) 秩序状態の定量的な解析に際し、種々の温度依存性についてその適用範囲を充分考慮に入れることが極めて重要である。

このように、遍歴磁性体の磁気状態方程式は当初考えられていたものより、はるかに複雑な温度、磁場依存性を示す。つまり、Arrott プロットの直線性からの微妙なずれが重要であり、これを問題にすることにより、磁性体に関する有用な情報を取り出せる可能性がある。

- [1] ZrZn_2 について 4 次の展開係数の温度依存性が評価されている; E. P. Wohlfarth and P. F. de Chatel: *Physica* (1970) **48** 477.
- [2] J. Beille: 博士論文 1975

銅化合物 Bi_2CuO_4 の電子状態と磁性

岡山理科大 望月和子

我々は以前から複雑かつ興味ある結晶構造をもつ銅酸化物 Bi_2CuO_4 について局在電子系の立場から磁気相図、磁気励起、 g 因子および磁気異方性などの研究を進めてきた。この物質は超伝導体ではないが $T_N = 42$ K 以下で反強磁性体となる。結晶構造は正方晶系に属し、銅原子は擬体心構造をつくり、各銅をとりまく 4 つの酸素 (c 面内) からなる CuO_4 が単位となって c 軸方向にジグザグに積み重なり、 c 面内では隣あう 2 つの CuO_4 が Bi 原子を介してつながっている。各銅の周りの 4 つの酸素が作る四辺形の向きは結晶軸から少し傾いていて、その傾きが体心を占める銅と角を占める銅の周りで僅かに異なるため、結晶の単位胞は擬体心格子を c 軸方向に 2 つ重ねたものとなり、この単位胞には 4 つの銅が含まれている。

最近、さらにこの物質の電子状態と磁性を遍歴電子の立場から議論する目的で、第 1 原理バンド計算を行なった。手法は FLAPW 法で交換相関項に対しては LDA の近似、さらに LDA+U の近似を用い、両近似によって得られた結果を比較検討する。

LDA 近似によるバンド計算の結果では、非磁性状態の状態密度は 2 つの部分に分かれている。即ち、低エネルギー側に位置する銅の d 軌道と酸素の p 軌道が混成した bonding バンドと antibonding バンドがひとつづきに拡がった部分と、0.4 eV のギャップを隔てて高エネルギー側に位置する巾の狭い antibonding バンドからできている。Fermi level は巾の狭い antibonding バンドを横切っていて、この

バンドは半分だけ電子によって占められている。即ち、非磁性状態は金属的で、各銅は1つのホールをもつ。ただし、このホールは銅原子の上に局在しているのでなく、d-p混成のため酸素の上にも拡がっている。反強磁性状態（体心と角の銅のスピンが反平行）では、バンドは Fermi level のところにギャップ（0.34 eV）を生じ絶縁体になっている。LDA+U の近似による計算によれば、Uの効果によってギャップが増加し銅のモーメントが増す。バンドの全体的な描像は異なった結晶構造にもかかわらず、以前に我々が行なった Li_2CuO_4 のバンドと類似している。

パイライト型 3d カルコゲナイト混晶のメタ磁性

阪大院理 赤井久純

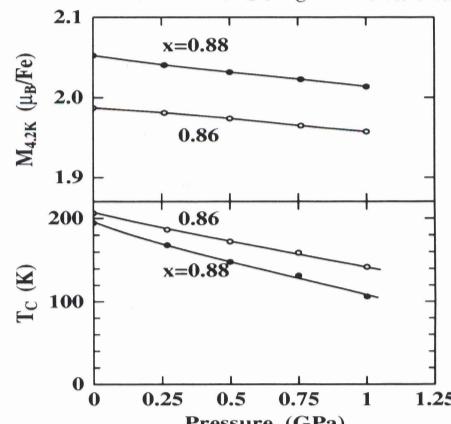
パイライト型カルコゲナイト MX_2 ($\text{M}=3\text{d}$ 遷移金属, $\text{X}=\text{S}, \text{Se}$) は d 電子数とカルコゲン原子を変化させることによって、様々な電気、磁気的状態を示す。これらの物質群の実験的性質の詳細は 70 年代後半に小川らによって精力的に研究され、d 電子数と U/W を軸にした平面上でよく整理されることが知られている。一方、理論的な理解はハバード模型に基づく一般的な議論はなされてきたものの、電子状態の精密な計算に基づく研究は、典型的な場合を除いてあまりなされていない。ここでは、 $\text{A}_{1-x}\text{B}_x(\text{S}_{1-y}\text{Se}_y)_2$ で表せる混晶について電子状態を計算した結果について報告する。計算の方法は KKR-CPA-LDA による第一原理計算である。ただし、格子定数については実験値を用いている。これは KKR-CPA がマフィンティン近似を用いており、パイライト構造の平衡格子定数を決めるためには膨大な数の空球を必要とするからである。得られた結果は、以下の通りに要約することができる。

- $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{S}_2$ については $x=0$ で非磁性絶縁体、 $x=1$ で金属強磁性体。
- $\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x\text{S}_2$ については $x=0.2$ 付近で強磁性・非磁性金属転移があり、その周辺でメタ磁性が発生する。これは実験を良く説明している。
- $\text{Co}(\text{S}_{1-y}\text{Se}_y)_2$ については $x=0.35$ 付近でやはり強磁性・非磁性金属転移があり、その周辺でメタ磁性が発生する。これは実験を良く説明している。
- $\text{Fe}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}\text{S}_2$ は d 電子数は CoS_2 と同じであるにもかかわらず実験的には $\text{Fe}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}\text{S}_2$ は常磁性絶縁体、 CoS_2 は強磁性金属である。計算の結果は非磁性金属となり、実験事実を説明することはできない。
- 以上のことから、LDA の計算は金属相でのパイライト型 3d カルコゲナイトのふるまいを正しく記述しているように思える。
- モット絶縁体を記述し得ないことは当然であるが、 $\text{Fe}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}\text{S}_2$ の常磁性絶縁体相の記述が出来ないことについては、Co と Ni の実質的な軌道エネルギー差（Co の占有・非占有エネルギー差）が LDA で考慮できないほど大きいのかもしれない。また、軌道分極の可能性もある。

$\text{La}(\text{Fe}_x\text{M}_{1-x})_{13}$ ($\text{M}=\text{Al}, \text{Si}$) 化合物の強磁场・高压下における相転移

東北大院工、東大物性研^A 藤田麻哉、深道和明、三田村裕幸^A、後藤恒昭^A

はじめに: $\text{La}(\text{Fe}_x\text{M}_{1-x})_{13}$ 化合物は $\text{M}=\text{Si}$ の場合、 $0.86 \leq x \leq 1$ においてキュリー温度 T_C で1次相転移を生じ、 T_C 以上において磁場の印加に伴い常磁性から強磁性への遍歴電子メタ磁性転移を示す。本系の遍歴電子メタ磁性転移の特徴は、転移に伴い誘起される磁気モーメントが $1.5\mu_B$ 程度の大きな値であり、また、転移に伴う磁気体積効果が顕著な事である。一方、 $\text{M}=\text{Al}$ の場合 $0.6 \leq x \leq 0.86$ の範囲では強磁性を示すが、より Fe 高濃度側の $0.865 \leq x \leq 1$ において反強磁性相が出現し強磁场の印加に伴い磁場誘起相転移を示す。また、相境界の $x=0.862$ 近傍では温度誘起の強磁性一反強磁性が観測



されるが、熱膨張測定には、両相の磁気モーメントの大きさの変化を反映した体積変化が観測される。これらの特異な磁気相転移を示す系において、印加磁場・圧力を同時に変化させ、転移に及ぼす磁気体積効果およびスピンの揺らぎの影響について明らかにすることが本研究の目的である。

結果: 右図に $\text{La}(\text{Fe}_x\text{Si}_{1-x})_{13}$ の磁化およびキュリー温度の圧力に対する変化を示す。いずれの組成とも、磁化およびキュリー温度とともに負の圧力変化を示す。磁化の圧力係数 $x = 0.86$ および $x = 0.88$ でそれぞれ $-\partial \ln M / \partial P = 0.015$ および $0.019 (\text{GPa}^{-1})$ 程度であるが、キュリー温度の場合はそれぞれ $-\partial \ln T_C / \partial P = 0.31$ および $0.48 (\text{GPa}^{-1})$ と大きく、特に $x = 0.88$ では T_C が 1 GPa 当たり約 95 K の減少を示す。すなわち、圧力印加は強磁性および常磁性状態を隔てるエネルギー障壁に大きく影響する事がわかる。また、 T_C における磁化の変化量と T_C の圧力変化の関係はスピンの揺らぎの性質を考慮する事により説明される事がわかった。一方、M=Al 系においては、 $x = 0.85$ の強磁性を示す試料が 0.2 GPa 程度の比較的弱い圧力印加に対し、基底状態が反強磁性に変化する事が見出され、また、0.2 GPa 以下の圧力中では温度誘起の強磁性一反強磁性転移が観測された。すなわち、本組成において強磁性一反強磁性のエネルギー状態が非常に近接していることがわかる。

RCO₂ (R=希土類) の純良単結晶育成と物性

都立大院理、阪大院理^A、東北大院理^B、新潟大院理^C
菅原仁、井上修、西垣語人、樋口洋介、青木勇二、佐藤英行、辻土正人^A、摂待力生^A、大貫惇睦^A、
樋口雅彦^B、長谷川彰^C

YCo₂ などの 3d 電子系化合物で観測される常磁性状態からのメタ磁性的異常は、主に Co の 3d バンドがつくる、フェルミエネルギー直下に位置した、急峻な状態密度が、強磁場によりバンド分極し、強磁性が発生する、いわゆる遍歴電子メタ磁性として理解されている。一方、CeRu₂Si₂ をはじめとする、いくつかの f 電子系化合物においても類似した振舞が報告されており、CeRu₂Si₂ では、ドハース・ファンアルフェン (dHvA) 効果測定の結果と、輸送効果及び磁化測定の結果に矛盾が存在することから、その起源について興味が持たれている。これらの 3d, 4f あるいは 5f 電子系で見られるメタ磁性異常を系統的に研究することは、各々の発現機構を理解する上で重要です。

dHvA 効果や Hall 効果の測定は、電子状態を明らかにする有力な実験手段であるにも関わらず、これまでに 3d 電子系化合物のメタ磁性研究では行われていない。それは、RCO₂ は包晶化合物のため、純良な単結晶育成が困難であったことがその理由の一つである。また、YCo₂ のメタ磁性転移磁場は約 70T と、この磁場領域での実験は容易ではないことが上げられる。本研究ではさまざまな単結晶育成技術を駆使し、RCO₂(R=Y, Ce, Gd, Dy, Er) の良質単結晶育成に成功した。CeCo₂ については、dHvA 効果の測定に成功し、バンド計算との比較から、Ce の 4f 電子は遍歴していることが明らかとなった。他の RCO₂ については、ホール効果測定から正常ホール係数を見積もり、YCo₂ の値と RCO₂(R=Gd, Dy, Er) の磁気秩序状態での値は大きく異なることが明らかとなった。つまり、YCo₂ のメタ磁性転移において電子状態が大きく変化することが明らかとなった。

遍歴電子メタ磁性体 Lu(CoGa)₂ の磁気弾性効果と 1 次磁気相転移

慶應大理工、東北大院工^A 田島圭介、林 孝起、齋藤秀和^A、深道和明^A
遍歴電子メタ磁性体である Laves 相化合物 Lu(Co_{1-x}Ga_x)₂ の磁気弾性効果を、温度および磁場を変化させて X 線回折によって調べた結果を報告した。 $x = 0.10 \sim 0.15$ の組成範囲では体積変化の温度依存は磁化の 2 乗に比例し、共通の磁気体積結合定数によって表された。 $x > 0.11$ では、 T_c における磁気相転移は 2 次転移であったが、 $x = 0.10$ の試料では T_c において 1 次相転移が観測され、立方晶から正方晶へ転移した。この試料では T_c 以上でゆるやかなメタ磁性転移が観測されているが、X 線回折で磁化過程をみると、格子定数が不連続に変化していて、この転移も 1 次相転移であることがわかった。これらの結果は、Lu(CoGa)₂ 系の磁性が、スピンゆらぎを考慮した遍歴電子メタ磁性の理論によってよく説明されることを示している。また、この系の磁気体積結合定数の値を局在電子系や弱強磁性体、インバー合金と比較すると、局在電子系よりは 1 枠以上大きく、弱強磁性とインバー合金よりは小さいことがわかった。メタ磁性転移に伴う磁気体積結合定数の値は磁場とともに変化し、常磁性領域における値

は強磁性領域の値の約2倍となった。ここで観測された Lu(CoGa)₂ 系の温度および磁場によって誘起される1次相転移は、共存領域が広く、また、ヒステリシスがほとんど見られないという特徴を有する。

Lu(Co_{1-x}Al_x)₂ および Lu(Co_{1-x}Ga_x)₂ ラーベス相メタ磁性化合物の磁気相図

東北大院工 深道和明、横山 剛、斎藤秀和¹

メタ磁性転移などの急激な物性変化の研究においては試料の吟味が特に重要である。遍歴電子系メタ磁性転移において最も研究されているのがラーベス相化合物である。しかしながら、研究者によりデータにばらつきが見られる。Lu(Co_{1-x}Al_x)₂ および Lu(Co_{1-x}Ga_x)₂ においては $x = 0.1$ 付近で強磁性が出現するが、磁性の組成依存性急峻であり、そのことと関連して、熱処理による組成の均一化が重要になる。すなわち、従来のほとんどの研究における熱処理が不適切であったために、X線的に単相であっても組成に揺らぎが存在するために、同じ化合物系であっても種々の異なる結果が報告されていた。本研究では組成の均一化に配慮した熱処理を行い、種々の物性を測定し、磁気相図を含めて妥当な結果が得られた。上記の化合物系において従来の熱処理条件、例えば、1020 K、100 hr の処理では不十分で、結晶粒表面近傍と芯では Al 濃度が異なるために、結晶学的には単相でも磁気的には2相になるために奇妙な磁化曲線が得られてしまう。丹念な組成分析と磁気分析によると 1270 K、170 hr の熱処理で組成は均一化されることが明らかになった。このような良質の試料を用いて得られたメタ磁性転移磁場、磁化率最大を示す温度、低温比熱係数など種々の物性値は従来の値と異なる。今回の新しいデータを用いて作成されたメタ磁性転移に関する磁気相図は守谷によって提唱された磁気相図と良い対応を示す。また、磁気体積効果を含めて、メタ磁性転移に関する種々の現象が山田の理論で良く説明される。

Fe₂P のキュリー点での1次転移と反メタ磁性転移

信州大理 山田錆二

六方晶化合物 Fe₂P は約 200 K のキュリー点で1次転移するの強磁性体である。この化合物では Fe が2つのサイト (3f サイト (Fe_I) と 3g サイト (Fe_{II}) を占め、それぞれ原子あたり約 1 μ_B および 2 μ_B の磁気モーメントをもつ。また、キュリー温度の圧力変化が異常に大きく、高圧では反強磁性に転移することが知られている [1]。Ishida [2] らは、その電子構造を計算し、ほぼ実験と一致した磁気モーメントを得ている。我々は、LMTO-ASA での固定スピニモーメント法により、磁気エネルギーを自発磁化の関数として求めた。また、この化合物の磁化の温度変化を説明するため、スピニ振らぎを取り入れた模型を提唱する。各サイトの磁気エネルギーを Landau 展開し、更に、これらの磁気モーメントの間に相互作用が働いているとした模型である。この模型で、スピニ振らぎを取り入れた磁性が議論できる。固定スピニモーメント法で計算されたエネルギーから、上記自由エネルギーの係数を評価すると、Fe_I の磁気モーメントは、Fe_{II} の磁気モーメントの有効磁場によりメタ磁性転移を起こしていることがわかる。T_C に近づくと Fe_{II} からの有効磁場が小さくなり、Fe_I の磁気モーメントが反メタ磁性転移を起こし、常磁性となる。その結果、Fe_{II} 自体も Fe_I から受ける有効磁場がなくなり磁気モーメントを消失する。このため、キュリー温度で1次転移が起きる。このように、Fe₂P の T_C での1次転移は、Fe_I の反メタ磁性転移によるものと結論される。

[1] H. Fujii et al: J. Phys. Soc. Jpn **43** (1977) 41, **57** (1988) 2143.

[2] S. Ishida et al.: J. Phys. F **17** (1987) 475.

(Fe_{1-x}Ru_x)₂P の異常磁性

埼玉大理、私立城北高^A、東大物性研^B、東北大金研^C、広大総科^D

上床美也、小坂昌史、大木武夫^A、加倉井和久^B、西正和^B、小野寺秀也^C、藤井博信^D

3d 遷移金属と P の化合物 M₂P は M が Mn, Fe, Co, Ni … と変わることにより低温では強磁性から反強磁性、高温では C-W 常磁性からパウリ常磁性といったバラエティに富んだ磁性を示す [1]。これらの化合物は、6つの P で M が囲まれたテトラヘドロサイト I と 5つの P で M が囲まれたピラミダル

¹現：電総研

サイト II を持ち、これらの 2 つのサイトの重ね合わせでの違いで C_{22} 型の六方晶構造 ($P62n$) か C_{22} 型の斜方晶構造 (Pma) をとる。これらの中で $M=Fe$ 、すなわち Fe_2P は $T_c = 209$ K で一次相転移を示す反強磁性体に近い強磁性体である事が報告されている [2]。磁化測定より $T = 4.2$ K での飽和磁化は $\sigma_s \simeq 2.92\mu_B/mol$ であるが、高温での帶磁率は $T = 600$ K までキュリーワイス則に従わず、 $T > 600$ K 以上で求められた有効ボア磁子は、 $4.8\mu_B/mol$ であり σ_s に較べ 2 倍ほど大きく、 Fe_2P は 3d 遍歴電子強磁性体と考えられている。

本研究では、この特異な磁性の起源を明らかにする事を目的とし、 Fe_2P の Fe と電子構造が同じであると思われる Ru で Fe を置換した系 $(Fe_{1-x}Ru_x)_2P$ について磁化測定、電気抵抗、磁気抵抗、メスバウアー効果及び中性子回折等を測定した。

$(Fe_{1-x}Ru_x)_2P$ は $0 < x < 0.07$ で六方晶構造を $0.08 < x < 1.0$ で斜方晶構造を示し、その体積は、 $x < 0.07$ まではほぼ一定であるが、 $0.08 < x < 1.0$ で x と共に膨張する。磁気的には Fe_2P の Fe を Ru で数% 置換 ($x = 0.02$) しただけで、反強磁性が容易に安定となり、更に Ru を増加すると、反強磁性転移温度 T_N は Ru 濃度と共に徐々に低くなる。さらに $x = 0.07$ 付近で結晶構造が六方晶から斜方晶構造に変化すると、再び強磁性が安定となり、強磁性転移温度 T_C は x と共に徐々に減少する。

$(Fe_{0.98}Ru_{0.02})_2P$ の反強磁性磁気構造を調べたところ、波数ベクトル $\mathbf{q}=(0.06, 0.0)$ の長周期反強磁性構造を示し、その反強磁性転移温度は、磁気散乱ピークの温度依存性より $T_N = 140$ K であった。これは磁化測定から求めた $T_N = 135$ K と一致する。一方、 Fe_2P を 17 kbar 以上加圧すると、反強磁性相が出現する。このとき波数ベクトルは、 $\mathbf{q} = 0.14\tau$ 及び 0.07τ 、であり、 Fe_2P で現れる高圧下での反強磁性相も長周期反強磁性構造を持つ。

メスバウアー効果の研究の結果、Fe と置換された Ru はサイト II を優先的に占めながら置換される。さらに、内部磁場の Ru 濃度依存性より、サイト II が局在的であり、サイト I が遍歴的な振る舞いをすることが明らかになった。

以上の結果より、 Fe_2P の特異な振る舞いは、サイト II の局在的な Fe 原子がその主な原因となっているとして理解できる。

[1] T. Hokabe, Journal of Science of the Hiroshima University, Series A, Vol.42, No.1, April 1978.

[2] H. Fujii, T. Hokabe, E. Eguchi, H. Fujiwara, T. Okamoto: J. Phys. Soc. Jpn. **51** (1982) 14-41.

遍歴電子系 $Mn_{2-x}Co_xSb$ における反強磁性-フェリ磁性転移- 磁場および圧力効果 -

東大物性研 後藤恒昭、M. I. Bartashevich

Cu_2Sb 型の結晶構造を持つ Mn_2Sb は $T_C = 550$ K のフェリ磁性体である。Mn のサイトの一部を Co などの遷移金属元素で置換すると基底状態は反強磁性状態に変化し、温度を上げるとフェリ磁性状態に一次転移する。本研究では、単結晶 $Mn_{2-x}Co_xSb$ の超強磁場、高圧下における磁気的な振る舞いが報告された。

磁気的な測定から、反強磁性状態発現の臨界濃度は $x_c = 0.17$ と判明した。反強磁性 (AF) 状態に強磁場を加えると、フェリ磁性 (FR) 状態にメタ磁性転移する。転移磁場 B_c は x と共に上昇する。温度を上げると 150 K 以下では、 B_c は T^2 に比例した減少を示す。この B_c の振る舞いは、メタ磁性転移に伴って生じる電子状態の変化に由来している。熱力学的な関係式から求められた AF-FR 転移に伴う電子比熱係数の変化と AF 状態における電子比熱係数から FR 状態における電子比熱 (約 40 mJ/mol K²) が見積もられた。 $x > 0.17$ のフェリ状態における電子比熱は非常に大きく、大きなスピニラギの存在を示唆する。

磁場中におけるフェリ磁性状態の安定性を調べるために、 $Mn_{1.7}Co_{0.3}Sb$ の磁化過程が 120 T の超強磁場中で測定された。強磁性状態への転移は観測されず、フェリ磁性状態は超強磁場中でも安定であることが分かる。強磁性状態の発現にはさらに高い磁場が必要である。

高圧下において、 $T = 4.2$ K の強磁場磁化過程が測定された。いずれの試料もメタ磁性転移磁場は圧力の増加と共に減少する。この結果は、圧力の増加と共に AF 状態が不安定化し、FR 状態が安定化することを示している。また、FR 状態における磁化の値は 12 Kbar の高圧を加えても全く変化しないという、不思議な現象が観測された。この結果は、小さな磁気モーメントを持つ副格子の圧力効果が、大き

いモーメントを持つ副格子に比べて2倍程大きいために、磁化の変化が互いに打ち消されるために生じることを示唆する。

Mnを中心とした金属間化合物の高圧下の磁性

岡山大理、阪大極限センター^A、東北学院大工^B 小野文久、藤井宣年、石塚守^A、遠藤将一^A
鹿又武^B

Cu₂Sb型化合物であるMn₂Sbはフェリ磁性を示すが、この物質のMnの一部を微量のCrで置換した系は低温で反強磁性を示す。この系について高圧下の磁化測定を行った。低温で、Cr濃度、磁場、圧力により、反強磁性からフェリ磁性までの間に3段階の磁化を持つ状態があることがわかり、圧力によりそれぞれの状態から別の段階へ転移すること、およびフェリ磁性の磁化は遍歴電子的に圧力と共に減少することがわかった。さらにMn_{II}サイトをすべて非磁性原子Zn、Ga、Geで置き換えたり、さらにZnをGeで置き換えた物質、MnZnSb、MnGaGe、MnAlGeは純粋な強磁性を示すが、これらについても磁化、キュリ一点の圧力効果を調べた。低温における磁化は圧力によりやはり減少し、逆にキュリ一点は大きく上昇することがわかった。これらは磁気モーメントは遍歴電子的に発生しており、キュリ一点はRKKY的に決まるところで説明される。またこれらの化合物は層状構造で磁気モーメントを持つMn原子層間に2つの非磁性層がはさまり、磁気的に2次元的であると言われるが、2次元性!!の特徴は見られていなかった。しかし、キュリ一点付近の臨界現象を測定した結果、自発磁化の温度変化にのみ2次元性が現れた。磁性原子配列が2次元的である化合物として、Fe₂P型結晶構造をとるMnRhP、MnRhAsがある。MnRhPは強磁性を示すが、MnRhAsは温度により低温側から反強磁性_I、キャント磁性、反強磁性_{II}、常磁性と複雑な磁性を示す。MnRhPについてキュリ一点のまわりの臨界現象を調べた結果、2次元的な性質は自発磁化の温度変化にも見られなかった。磁気的な相互作用は3次元的であることがわかった。これはc面内のMn-Mn原子間距離とc方向のMn-Mn間距離の差が、MnZnSbのように大きくなく、わずかしか差がないということから理解できる。しかし、この物質の磁気モーメントは局在的であり、MnZnSbなどとは異なっているにもかかわらず、キュリ一点は圧力により大きく上昇した。MnRhAsについては低温で見られた反強磁性_Iは5GPaの圧力で強磁性へと圧力誘起強磁性転移することがわかった。

CeFe₂の磁性と伝導に及ぼす置換効果と圧力効果

広大総合科学、埼玉大理^A 藤井博信、福田秀孝、上床美也^A

CeFe₂は、RFe₂のファミリーの中できわめてユニークな磁性を示す。つまり、強磁性であるにもかかわらず、低温で反強磁性的スピンの揺らぎが発達しており、キュリー温度はT_c=230K、および鉄1個当たりの磁気モーメントがM_s=1.2μ_Bと、RFe₂の中でそれぞれ、最も低いT_c、最も小さなM_s値を示す。この起源を探るのが本研究の目的である。(1)まず、CeFe₂のFeサイトをCoで置換した系、CeサイトをScで置換した系について磁性と伝導現象の研究を行った。その結果、いずれの系とも、置換によって格子定数は単調に減少するが、Co置換系では反強磁性が安定化する一方、Sc置換系では強磁性が安定化した。これは、Co置換によって原子間隔が減少すると、Ce4f-電子とFe3d-電子との混成効果が増強され、それが反強磁性を安定化させる。一方、Sc置換系では、Ce原子数の減少が原子間隔の減少よりも強く作用して、混成効果を弱め、強磁性を安定化すると考えられる。では、(2)実際に圧力を作用すると、混成効果が増強され、反強磁性のスピンの揺らぎが発展するにちがいない。実験結果は、立方晶であるにもかかわらず、<111>方向に磁場を作用させると、飽和磁化は、8kbarの圧力下で約1/4にまで減少する一方、<110>方向に磁場を作用すると飽和磁化はほとんど圧力降下を示さない。<100>方向ではそれらの中間的な変化を示した。この極めて異常な振る舞いは、立方結晶における磁気異方性の増強ではまったく説明できない。現在、その起源を探るために、高圧下での中性子回折実験を計画している。多分、高圧下での異方的4f-3d混成効果による異方的な反強磁性スピン揺らぎの発達に起源していると予想している。

MnAs 及び CrAs における格子定数と磁性

東北学院大工 井門秀秋

Cr と Mn の monopnictide(M を Cr 又は Mn として、MP,MAs,MSb,MBi を指す) は 6 方晶 NiAs 型か、または斜方晶 MnP 型の結晶構造をとり、M=Mn の場合は概ね強磁性、M=Cr の場合は、CrP(パウリパラ的) を除いて概ね反強磁性 (CrAs は double spiral) である。Mn 又は Cr 原子当たりの磁気モーメントを、これらの結晶の a 軸の長さに対してプロットすると明瞭な相関関係がある。このプロットより、MnAs および CrAs の付近で、それぞれ、 a 軸の減少により急激な磁気モーメントの減少及び消滅があることが想像される。本研究では、これらの点を更に調べるために、MnAs に対しては $Mn_{1-x}Ti_xAs$ を作成し、CrAs に対しては $CrAs_{1-x}P_x$ を作成する事によって a 軸を短縮し、磁性や結晶構造を調べた。前者の実験では、 $x = 0.6$ と 0.7 の間、 a 軸長でいえば 3.65 \AA 付近で約 $3.2 \mu_B$ の Mn の磁気モーメントが急激に消滅することが分かった。一方 CrAs が大きな a 軸方向の自発磁歪 (6.5% - これは異常に大) により $T_n = 265 \text{ K}$ (一次転移), $1.7 \mu_B/\text{Cr}$ の double spiral の磁気状態を維持しているのに対し、 $CrAs_{0.9}P_{0.1}$ は $T = 4.2 \text{ K}$ でも磁気的オーダーはなく遍歴電子の常磁性的状態になっている事が分かった。これらの結果は、要点を見失わないために実験結果に及ぼす他の重要因子を考えからはずしたと言え、MnAs と CrAs は、結晶の a 軸の縮小に対して極めて敏感に磁気状態 (モーメント、オーダー) を消失する様な臨界的な状態にあるといえる。これらの化合物の c 軸方向の磁性原子間距離は d 軌道直径に比べて十分に短いので、この方向では常に itinerant であるが、 c 面内 (a 軸方向) では、磁性原子間距離がかなりながい (MnAs で約 3.73 \AA , MnSb で約 4.12 \AA) ので d-d bond の状態を急変 (従って磁気発生条件を破壊) させる様な臨界的な距離があることを示唆している。

Electronic structures and optical spectra of super-doped Si:Mn systems

E. Kulatov, H. Nakayama, H. Ohta

The electronic structure calculations of super-doped Si:Mn systems have performed by using the *ab initio* tight-binding linear muffin-tin orbitals method (TB-LMTO). The substitutional and interstitial dopings of Mn are considered, and the concentration ranges from 1.5 % to 12.5 % of Mn. We have found that a magnetic phase is the ground state of Si:Mn at all concentrations considered. Stability of the anti- or ferromagnetic phases are examined via total energy calculations. Conductivity tensor is studied using the relativistic LMTO method. Our results show fairly high Kerr and Faraday rotations in the infrared and visible regions for Si:Mn. Calculated optical and magneto-optical spectra are analyzed in terms of the spin and site components of the conductivity tensor.

第一原理計算によるスピン機能材料の設計

阪大院基礎工 白井正文

閃亜鉛鉱型構造をもつ III-V 族化合物半導体をベースとした希薄磁性半導体 $(In,Mn)As$, $(Ga,Mn)As$ が、分子線エピタキシーを用いて作製され、強磁性を示すことが見出された。その強磁性の起源に関しては、キャリア (正孔) を媒介として Mn^{2+} イオン上の局在スピン間にはたらく有効交換相互作用と、 Mn^{2+} イオンと Mn^{3+} イオン上のスピン間にはたらく二重交換相互作用が提唱されている。その後、III-V 族希薄磁性半導体に関する実験的及び理論的な知見は着実に蓄積されてきたが、その強磁性転移温度は $(Ga,Mn)As$ において観測されている約 120 K が最高値である。III-V 族希薄磁性半導体をスピン機能材料として応用する見地からすると、室温で強磁性を示す磁性半導体の探索が必要であり、講演では、そのための物質設計の指針を与える。

一般に、希薄磁性半導体では、添加された遷移金属原子の濃度が高いほど、遷移金属スピン間にはたらく磁気相互作用が強くなることが期待される。そこで、遷移金属原子添加の高濃度の極限である閃亜鉛鉱型構造の遷移金属アルセナイトの電子状態を計算し、その強磁性と反強磁性状態における全エネルギーを比較することにより、遷移金属スpin間にはたらく磁気相互作用を調べた。その結果、閃亜鉛鉱型 VAs, CrAs, MnAs において、強磁性状態が最も安定であることが明らかになった。この結果は、閃亜

鉛型構造の隣接 V, Cr, Mn 原子間に、強磁的な交換相互作用がはたらいていることを示唆している。さらに、強磁性状態と反強磁性状態の全エネルギーの差は、閃亜鉛鉱型 CrAs において最も大きく、隣接 Cr 原子間に強い強磁的相互作用がはたらいていることが期待される。実際、分子線エピタキシーを用いて GaAs 基板上に成長させた閃亜鉛鉱型 CrAs 薄膜が、室温で強磁性を示すことが報告されている[1]。電子状態の第一原理計算によると、閃亜鉛鉱型 CrAs はハーフ・メタリックであり、この物質を用いた超格子構造において、巨大なトンネル磁気抵抗効果をはじめとする顕著なスピン関連現象が実現する可能性がある。

[1] H. Akinaga, T. Manago and M. Shirai: Jpn. J. Appl. Phys. **39** (2000) L1118.

LDA+U 法による f 電子系の遍歴電子状態の再考

阪大産研 播磨尚朝

重い電子系として研究されている f 電子系化合物の中には、CeRu₂Si₂ の様に磁場中でメタ磁性を示すものがあるが、そこでは f 電子が遍歴的電子状態から局在的電子状態へ移り変わっていると考えられている。この様な移り変わりを記述するには、局在的電子状態と遍歴的電子状態を同時に記述する必要があり、部分的に HF 的な取り扱いを取り入れた LDA+U 法は有用な方法であると考えられる。[1] しかし、スピン軌道相互作用が不可欠な f 電子系に LDA+U 法を適用するには、系が非磁性の状態の場合であっても、密度行列のスピンに関する非対角成分が必要である。すなわち、文献 1 の密度行列 $n_{m,m'}^{\sigma}$ は $n_{m,m'}^{\sigma,\sigma'}$ と置き換えられる。[2] この場合、最も簡単な表式として、遮蔽されたクーロン相互作用 U をパラメーターにして

$$V_{mm'}^{\sigma\sigma'} = U \left(\frac{1}{2} - n_{m',m}^{\sigma',\sigma} \right).$$

が通常の LDA のポテンシャルに加わる。

この方法を用いて一重項基底状態の Pr, Sm, U 化合物、またいかかの価数搖動物質に対して計算を行った。最初に Pr や Sm の局在の一重項基底状態を表わすことができることを確かめた。[2] 価数搖動状態（遍歴電子状態）にある Ce 化合物の場合は、多くの場合に U の効果はバンド幅を広げるよう働くがフェルミ面の形状は LDA 計算と大きくは変わらない。ただし、今のは強磁場の極限では f 電子は局在モーメントを持つ解が得られるので、この方法を用いて f 電子系のメタ磁性転移を記述できると期待される。また、UAI₃ の様に LDA 計算と全く異なるフェルミ面を与える場合もある。いずれにしても、 U の大きさは結果に大きく影響しないが、重い希土類等では LDA が与える f 準位と HF 的な取り扱いをした f 準位とは異なるようであり、 f 準位が結果に大きく影響する場合がある。

[1] V.I. Anisimov, F. Aryasetiawan and A.I. Lichtenstein: J. Phys.: Condens. Matter **9** (1997) 767.

[2] H. Harima: *Proceedings ICM2000* (2000) Recife, Brazil.

DyMn₂Ge₂ の磁性と磁気熱量効果

京大院工 和田裕文

磁性体に磁場を加えるとエントロピーは減少する。また、断熱状態で磁場を下げるとき温度が低下する。このような性質は磁気熱量効果と呼ばれる。磁気熱量効果は磁気冷凍技術にも利用され、材料開発の立場から見ても重要であるだけでなく、磁性など基本的な物性に対しても有益な情報を与えてくれる。ここでは DyMn₂Ge₂ についての磁気熱量効果の研究結果を紹介する。

DyMn₂Ge₂ は Dy と Mn が磁気モーメントを持ち、基底状態はフェリ磁性である。35K でフェリ磁性から中間相へ転移し、さらに 40K で Dy モーメントが無秩序になり Mn のみの反強磁性になることが知られている。中間相の磁気構造はまだ確定していないが、中性子回折によって c 軸方向に 3 倍周期の構造を持っていることがわかっている。一方、4.2K で磁場をかけると 7T 付近でフェリ磁性から別の磁気構造にメタ磁性転移することも報告されている。この高磁場相についてはよくわかっていないが、同種のメタ磁性転移は GdMn₂Ge₂ や TbMn₂Ge₂ でも確認されている。私たちは今回、単結晶を用いて精密化測定をおこなった。その結果、

- フェリ磁性から高磁場相へのメタ磁性転移は 34Kまで観測される。それ以上の温度ではゼロ磁場で中間相になりメタ磁性は現れない。また中間相の磁化曲線は 34Kまでの高磁場相の磁化曲線と一致する。このことは中間相と高磁場相が本質的に同じであることを示している。
- 磁場によるフェリ磁性から高磁場相への相転移では正のエントロピー変化が観測された。すなわち高磁場相の方が高エントロピー状態にある。これは次のように解釈される。基底状態であるフェリ磁性は Mn-Dy の反強磁性相互作用によって安定化されており、磁場は Mn の感じる磁場を減少させるのでフェリ磁性は不安定させる。そのためメタ磁性が起こると基本的に Mn 副格子は反強磁性的な配列を取り Dy が強磁性的な配列をとる(多少のキャントはあるが)ものと考えられる。その結果、Mn から Dy にかかる分子場も減少するので Dy 副格子のエントロピーが増大する。
- 断熱温度変化の最大値は 2T で 5K 程度、5T で 7.5K 程度の大きさを持つ。この化合物の特徴は比較的低磁場で大きな磁気熱量効果を示すことである。

ということが明らかになった。

CrTe の圧力誘起磁気相転移

阪大極限センター、東北学院大工^A 石塚 守、遠藤将一、鹿又 武^A

CrTe は NiAs 型結晶構造を持つ強磁性体で、磁気体積効果が非常に大きな物質として知られている [1]。キュリー温度 T_C (常圧で約 350 K) は圧力と共に急激に減少するため高圧下での磁気相転移に期待が持たれ、1970 年代に高圧下 ESR や高圧下中性子回折実験が行われた [2]。そこで結果は 3.5 GPa で強磁性が消失することであったが、使われた試料が Cr₃Te₄ であった可能性や当時の実験精度などを考えるとその結果には議論の余地がある。われわれは、CrTe の高圧下の磁性を明らかにするために、良質の試料を用いてさらに高い圧力範囲での磁化(率)測定を行った。Fig. 1 にその結果を示す。5 GPa までは T_C は圧力とともに減少し、6.5 GPa 以上では強磁性的な振る舞いは消失する。高圧・低温 X 線回折実験からこの圧力・温度域では構造変化はない。 T_C や飽和磁化に関する CrTe_{1-x}Se_x との類似性やバンド計算の結果 [3] から高圧相は反強磁性と予想される。

[1] S. Ohta et al.: J. Phys. Condens. Matter **5** (1993) 2759.

[2] B. L. Andron et al.: Sov. Phys. JETP **49** (1979) 151.

[3] M. Takagaki et al.: J. Phys. Soc. Jpn. **67** (1998) 1014.

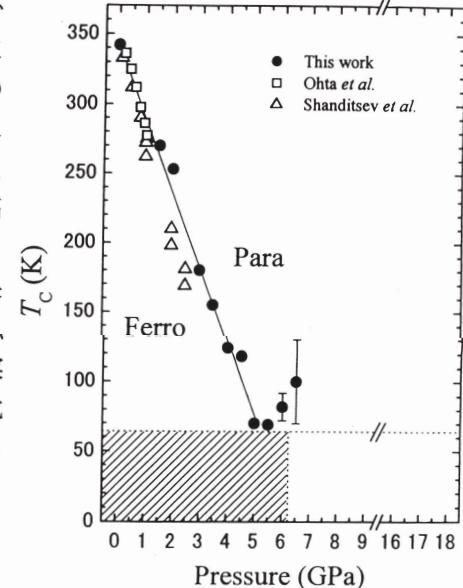


Fig. 1. CrTe の磁気相図

高圧下 FeS の金属相

東北大理 小林寿夫、上村孝

一般に 3d 遷移金属モノカルコゲナイトにおいてはその共有結合性より、遷移金属 d 軌道と配位子 p 軌道との混成効果が酸化物よりも大きい。従って、加圧による結合状態及びバンド幅の変化による基底状態の変化が注目される。その中で NiS は、結晶の対称性を変えずに金属-非金属転移 ($T_t \sim 260$ K) を示すことから多くの研究が行われてきている。一方、FeS は常圧下で六方晶 *troilite* ($P\bar{6}2c$) 構造を取る反強磁性半導体 ($T_N=589$ K) である。室温圧力下 X 線回折及びメスバウア一分光測定により 3.5, 6.5 GPa に構造相転移を伴う Fe の電子状態の変化があることが分かっている [1, 2]。最近、我々は高圧下電気伝導の温度依存性よりこれら構造相転移に伴い半導体-金属-半導体と転移することを発見した [3]。しかし、低温での結晶構造と電気的性質の関係は全く研究が行なわれていない。また、3.5 GPa の相転移は圧力誘起非金属-金属転移としても大変興味ある。

そこで、多結晶 FeS 試料 ($a = 5.965(2)$, $c = 11.757(2)$ Å) を用いた 17K での高圧下 X 線回折測定 (SPring-8, BL10XU) を行った。その結果、室温圧力下と同様に加圧とともに *troilite*-正方晶

MnP 型 (*Pnma*) – monoclinic(*P2₁/a*) と構造相転移することが分かった。さらに、*troilite* 構造内の 2.7GPa で格子定数の圧力依存性に異常があることを見出した。一方、圧力下電気伝導測定（物性研、定圧加重キュウピック・アンビル）から、3GPa 以上の低温では金属的な電気抵抗率, $\rho(T)$, の温度依存性を示す結果が得られた。従って、17K, $P_c=2.7\text{GPa}$ での相転移は構造相転移を伴わない電子相関を原因とする FeS の金属化であり、さらに 4.5GPa で高圧力相の MnP 型金属状態へと転移する。

troilite 型 FeS 金属相における低温での $\rho(T)$ は $\rho(T) = \rho_0 + AT^2$ の温度依存性に従い、Fermi 液体的な振る舞いを示している。解析から得られた ρ_0 と A はともに P_c に向かって発散する傾向を示している。しかし、 P_c 近傍での $\rho(T)$ の絶対値は 0.5mΩcm 以上と大きな値を示していて、Fermi 液体であるための条件, $k_B T > \hbar\tau$ (準粒子の減衰率), を満足していないように思える。この結果は、FeS 非金属一金属転移近傍での金属相の伝導機構にはコヒーレント部分だけでなくインコヒーレントな成分も重要な役割を演じていると考えられる。

- [1] H.E. King Jr and C.T. Prewitt: *Acta Cryst. B* **38** (1982) 1877.
- [2] H. Kobayashi, et al.: *J. Phys. Condens. Matter* **9** (1997) 515.
- [3] H. Kobayashi, et al.: *Phys. Rev. B* in press.

マンガン酸化物の「圧力」効果 – 構造物性からのアプローチ –

名大理工総研 守友 浩

「構造物性」とは、結晶構造（酸素位置・結合角・軌道状態）の観点からから、強相関電子系の物性を理解し、物理・機能性を抽出しようとするものである。この研究背景には、JRR-3M に設置された粉末中性子回折装置（HERMES）や、近年稼動し始めた SPring-8 等の超強力放射光施設の粉末 X 線回折装置（BL02B2）により、酸素位置までを含めた構造解析が容易になってきた経緯がある。

我々は、こうした構造物性の立場から、マンガン酸化物の「化学圧力」効果、「静水圧」効果を調べてきた。その結果、マンガン酸化物の「圧力」効果は、一電子バンド幅の制御という側面以外に軌道の安定性制御という側面を持つことが明らかになった。こうした描像で、層状マンガン酸化物の磁気構造 [1] や立方マンガン酸化物の電荷整列転移 [2] の「圧力」効果を理解することができた。特に、我々は、高輝度の放射光 X 線光源と DAC を組み合わせることにより、圧力下での層状マンガン酸化物 $\text{La}_{2-2x}\text{Sr}_{1+2x}\text{Mn}_2\text{O}_7$ ($x = 0.48$) の酸素位置を決定した [3]。こうした構造パラメーターより、マンガン酸化物の e_g 軌道の安定性と圧力誘起絶縁体金属転移の関係を解明することができた。その後、圧力による軌道状態の変化 [4] は、高田らの MEM/Rietveld 法により、実験的に確認された。

「化学圧力」に比べて、「静水圧」は、clean な摂動であり、系に disorder を導入しない利点を持っている。したがって、より精密な物理を展開できる可能性がある。さらに、「静水圧」を用いることにより、「化学圧力」では到達できないような物質パラメーターを実現できる。今後、構造物性からのアプローチを「静水圧」に適用し、圧力下での精密物性を展開してゆきたい。

- [1] T. AKimoto, et al: *Phys. Rev. B* **59** (1999) R14156.
- [2] A. Machida, et al.: *Phys. Rev. B* **62** (2000) 80.
- [3] Y. Moritomo, et al.: *Phys. Rev. B* **62** (2000) 17.
- [4] M. Takata, et al: unpublished.

マグネリ相バナジウム酸化物の高圧下輸送現象

東大低温センター、東大物性研 ^A 浦野千春、朝光敦、竹下直 ^A、毛利信男 ^A

マグネリ相バナジウム酸化物 $\text{V}_n\text{O}_{2n-1}$ ($n \geq 3$) は、金属絶縁体転移の研究においてよく調べられている V_2O_3 と VO_2 の間に位置する相であり、複雑な相転移を示す。 $\text{V}_n\text{O}_{2n-1}$ は高温では金属的な電気伝導を示し、帶磁率は Curie-Weiss 的な温度変化を示す。 $\text{V}_n\text{O}_{2n-1}$ ($n \neq 7$) は低温で構造相転移を伴った金属絶縁体転移を示し、それより低温で反強磁性転移を示すことが報告されている [1]。 $\text{V}_n\text{O}_{2n-1}$ の結晶構造は擬ルチル構造と呼ばれ、ルチル構造の VO_2 と結晶構造上関連が深い [2]。 $\text{V}_n\text{O}_{2n-1}$ におけるバナ

ジウム一個あたりの電子数は 1 個と 2 個の間であるため、三重に縮退したバナジウムの t_{2g} 軌道が VO_2 の場合と同様に最低エネルギーの非縮退軌道とエネルギーの高い二重縮退の軌道に分裂していると仮定すれば軌道縮退が問題となり得る。何等かの方法により上で述べた $\text{V}_n\text{O}_{2n-1}$ における構造相転移を伴う金属絶縁体転移を抑えることが出来れば、電荷・スピン・軌道の自由度が複雑に絡み合った興味深い金属相が出現する可能性がある。

本研究では圧力により V_5O_9 の金属絶縁体転移を抑えることを試みた。 V_5O_9 の絶縁体相は $P=3.5 \text{ GPa}$ 付近で消失する。高圧金属相における電気抵抗率 $\rho(T)$ の温度変化は 50 K 付近に肩を持った上に凸の曲線となっている。最低温付近の $\rho(T)$ を残留抵抗 ρ_0 と温度の 2 乗に比例した項 AT^2 の和でフィットすると ρ_0 および A は 8 GPa で特異的に大きくなっている。 T^2 の比例係数 A の大きさは $1 \mu\Omega\text{cm K}^{-2}$ 程度という通常の金属と比較して 5 枠から 7 枠程度大きい値となっており、準粒子の有効質量が増大していることが期待される。

- [1] S. Kachi, K. Kosuge, and H. Okinaka: J. Solid State Chem **6** (1973) 258.
- [2] H. Horiuchi, N. Morimoto, and M. Tokonami: J. Solid State Chem **17** (1976) 407.

Fe₂VAl 系化合物の磁性と電気伝導性

島根大総合理工 西郡 至誠

ホイスラー型結晶構造を持つ Fe₂VAl は、 $-T$ に比例した電気抵抗率や大きな負の磁気抵抗など特異な電気伝導性によって注目されている。しかし、試料の作製方法、熱処理方法などで磁性、電気伝導性に違いが出るという問題があり、それが本質的な物性を理解する妨げになっている。そこで我々は、Fe₂VAl の多結晶試料、単結晶試料、Al 濃度を変化した単結晶試料を作製し、電気抵抗率、磁化、比熱、NMR スペクトルなどを測定することにより研究を行った。試料の組成は EPMA によって確認した。

Fe₂VAl の多結晶と単結晶の磁化を比較すると、単結晶の磁化は多結晶の 1/4 程度しかなく、多結晶で見られた低温での強磁性成分が消失していた。この事は多結晶中に磁気的な不純物が多く存在する事を意味している。ミクロに磁性を調べる NMR では ⁵¹V 核と ²⁷Al 核で見たナイトシフトが温度変化しないことから、大部分の Fe は非磁性で磁化には不純物が寄与しているという結果を得た。この磁気的不純物は V が入るべきサイトに Fe が入り込む事によって Fe 濃度の高い部分 (=モーメントの大きい部分) が出来るという Fe クラスターの存在によるものと考えられる。単結晶の電気抵抗率は多結晶と比べ絶対値は小さくなるものの、低温に向けて同様に $-T$ で増大した。これは、半導体的振舞いがこの物質の本質で、一部で言っていた様にクラスターが重要な役割を果たすのではない事を示している。また、単結晶の磁気抵抗効果は磁化が小さくなった事に対応して小さくなっており、磁気抵抗の原因が Fe クラスターである事も判明した。

Fe₂VAl の本質的な性質を調べる上で Fe クラスターの除去と同等に重要と考えられるのが、Al の組成である。Al は Fe, V に比べて融点が低いため試料作製時に蒸発し易い。Al 濃度の 9% 減少した試料を作製して調べたところ、半導体的な Fe₂VAl に比べて絶対値が 2 枠も小さく、金属的な試料が得られた。この変化は V 濃度を同程度変化したときに比べ顕著で、キャリア数の変化が一因と考えられる。このキャリアドープの効果に関しては Mg, Si 等で Al を置換した試料で明らかにする必要がある。いづれにしても Fe₂VAl の本質を調べる上で、Fe クラスター量、Al 濃度を制御することが重要である。

物性研究所談話会

日時: 2000年10月27日(金) 午後1時30分～2時30分

場所: 物性研究所研究本館6階A615室

講師: Dr.Hari Manoharan

所属: IBM Research Division,Almaden Research Center

題目: Quantum Mirages:Manipulating Electrons with Atoms

要旨:

Image projection relies on classical wave mechanics and the use of natural or engineered structures such as lenses or resonant cavities. Well-known examples include the bending of light to create mirages in the atmosphere, and the focusing of sound by whispering galleries.

In this talk I will survey our recent observations of "quantum mirages" in focusing devices of order 10 nanometers in size, built by assembling structures out of individual atoms. Our experiments rely on atom manipulation techniques and scanning tunneling microscopy at low temperatures. We have directly imaged the spin perturbations due to isolated magnetic moments on a metal surface. The detection of this localized magnetism can then be utilized in a type of teleportation experiment, in which the spectroscopic signature of an atom is sampled and projected to a remote location by means of a surrounding sea of electrons confined in an engineered nanostructure.

The quantum mirage thus cast by a single magnetic atom can be coherently refocused at a distinct point where it is detected as a phantom atom around which the electronic structure mimics that of the real atom. Once materialized, this phantom can interact with real matter in intriguing ways. We have also been developing a novel communication method based on this effect.

日時: 2000年11月 9日(木)午後1時30分～2時30分

場所: 物性研究所研究本館6階A615室

講師: Prof.Isaac F.Silvera

所属: Lyman Laboratory of Physics, Harvard University,Cambridge MA USA

題目: The Importance of Ortho–Para Species in the High Pressure Hydrogens

要旨:

It is well established that the single molecule ortho–para states of hydrogen remain valid in the low pressure solid. I show that on theoretical grounds the concept of ortho–para states for molecules in a solid should remain valid at megabar pressures until the Wigner–Huntington dissociative transition to the atomic solid is reached. This results in a continuous number of pressure–temperature phase lines depending on ortho concentration. An estimate of the density dependence of the mixing of para states into ortho states is given along with a general discussion of conversion rates. NMR experiments in a diamond anvil cell have confirmed this picture at modest pressures. Experimental techniques and results will be discussed.

日時: 2000年11月16日(木)午後4時～5時

場所: 物性研究所A615号室

講師: 芝内孝禎

所属: IBM Thomas J.Watson Research Center

題目: Closing the pseudogap by Zeeman splitting in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+y}$ at high magnetic fields

要旨:

Interlayer (c-axis) resistivity of $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+y}$ superconductors is used to probe the low-energy density-of-states(DOS) depletion due to the pseudogap whose connection to superconductivity has been a major puzzle. Measurements up to 60 Tesla reveal that a field

that restores DOS to its ungapped state shows strikingly different temperature and doping dependencies from the characteristic fields of the superconducting state. The pseudogap closing field and the pseudogap temperature T^* evaluated independently are related through a simple Zeeman energy scaling. These findings indicate a predominant role of spins over the orbital effects in the formation of the pseudogap.

日時: 2000年11月17日(金) 午後2時30分～3時30分

場所: 物性研究所6階A615号室

講師: Prof. Sergey K. Nemirovskii

所属: Institute for Thermophysics, Lavrentyeva, 1, 630090 Novosibirsk, Russia

題目: On Stochastic Dynamics of Vortex Filament

要旨:

Stochastic dynamics of a vortex filament subjected random agitation is investigated by analytical and numerical methods. The correlations function of a random stirring force is supposed to be delta-correlated in time with spatial distributions of various types. We study three kinds of random stirring. The first one is a thermal noise stemming from the one acting on underline Bose-condensate field. As expected that case results in a thermal equilibrium state. The second type of langevin force is the so called large-scale stirring force when the spacial part of the correlations function is concentrated at large distances comparable with size of the loop. In the result a essentially nonequilibrium state with the flux of the curvature in space of scales. We also study the power-like correlation function of the random force. Besides of purely academic interest that case is of importance for it models the reconnection processes.

日時: 2000年11月20日(月) 午後1時30分～2時30分

場所: 物性研究所研究本館6階A615室

講師: 北田韶彦

所属: 早稲田大学理工学部物質開発工学科 数理科学プロジェクト研究所

題目: dendrite の topology

要旨:

dendrite には数学的定義があります。単純閉曲線を含まない Peano 連続体 (局所連結で連結な compact 集合) を dendrite といいます。general topology の hyper space 論と離散力学理論 (自己相似論) とともにとづいて dendrite の位相構造について考えます。特に、dendrite 上の不動点定理について考えます。

日時: 2000年12月5日(火) 午前10時～

場所: 物性研究所附属中性子散乱研究施設山田ホール (茨城県那珂郡東海村白方106-1)

講師: Dr. Jean-Michel KIAT

所属: フランス国立科学研究所主任研究員, Ecole Centrale Paris

題目: Diffraction Diffusion Studies of Polar Order in Ferroelectric Relaxor Perovskites

要旨:

An overview of the work on ferroelectrics and relaxors, stressing attention on high resolution (conventional and synchrotron) X-ray and neutron diffraction/diffusion results.

東京大学物性研究所の教官公募の通知

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

1. 研究部門名及び公募人員数

附属軌道放射物性研究施設 教授 1名

2. 研究内容

本研究所では、附属軌道放射物性研究施設を中心にして、全国共同利用を目指した東京大学の真空紫外線・軟X線高輝度光源計画を推進している。また、同研究施設筑波分室では、高エネルギー加速器研究機構・物質構造科学研究所内のフォトンファクターに設置した3基の実験ステーションを管理・運営し、全国共同利用に供している。今回の公募では、本研究施設の施設長としてその管理・運営にあたり、東京大学高輝度光源計画の中心的推進者となる研究者を求める。専門分野としては、放射光を用いた物性研究において指導的役割を果たす研究者の応募を期待する。

3. 公募締切

平成13年1月31日（水）必着

4. 就任時期

決定後なるべく早い時期を希望する。

5. 提出書類

(イ) 推薦の場合:

- 推薦書（健康に関する所見を含む）
- 履歴書（略歴で結構です）
- 業績リスト（必ずタイプし、特に重要な論文に○印をつけること）
- 主要論文の別刷（5編以内）
- 研究業績の概要（2000字程度）
- 研究計画書（2000字程度）

(ロ) 応募の場合:

- 履歴書（略歴で結構です）
- 業績リスト（必ずタイプし、特に重要な論文に○印をつけること）
- 主要論文の別刷（5編以内）
- 研究業績の概要（2000字程度）
- 研究計画書（2000字程度）
- 健康診断書
- 所属の長などによる本人に関する意見書（宛先へ直送）

6. ①書類提出先

〒277-8581 千葉県柏市柏の葉5丁目1番5号
東京大学物性研究所 総務課人事掛
電話 0471 (36) 3205
e-mail: jinji-kakari@issp.u-tokyo.ac.jp

②問い合わせ先

東京大学物性研究所 物性理論研究部門 教授 小谷章雄
電話 0471 (36) 3260
e-mail: kotani@issp.u-tokyo.ac.jp

7. 注意事項

附属軌道放射物性研究施設教授応募書類在中、又は意見書在中の旨を朱書きし、
郵送の場合は書留で郵送のこと。

8. 選考方法

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

平成12年11月27日

東京大学物性研究所長
福山秀敏

東京大学物性研究所の助手公募の通知

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

1. 研究部門名等及び公募人員数

物性理論研究部門 今田研究室 助手 1名

2. 研究内容

物性理論。強相関電子系の理論あるいは量子計算物理学ないし第一原理計算などの研究領域で新たな分野の開拓や新手法の開発に意欲のある方を希望する。

3. 応募資格

修士課程修了、又はこれと同等以上の能力をもつ人。

4. 任期

内規により5年を原則とする。

この内規は、大学の教員等の任期に関する法律（平成9年法律第82号）に基づくものではありません。

5. 公募締切

平成13年1月31日（水）必着

6. 就任時期

決定後なるべく早い時期を希望する。

7. 提出書類

(イ) 推薦の場合:

- 推薦書（健康に関する所見を含む）
- 履歴書（略歴で良い）
- 業績論文リスト（必ずタイプし、特に重要な論文に○印をつけること）
- 主要論文の別刷（5編程度）

(ロ) 応募の場合:

- 履歴書（略歴で良い）
- 業績論文リスト（必ずタイプし、特に重要な論文に○印をつけること）
- 主要論文の別刷（5編程度）
- 所属の長又は指導教官等の本人についての意見書（宛先へ直送）
- 健康診断書

8. ①書類提出先

〒277-8581 千葉県柏市柏の葉5丁目1番5号
東京大学物性研究所 総務課人事掛
電話 0471 (36) 3205
e-mail: jinji-kakari@issp.u-tokyo.ac.jp

②問い合わせ先

東京大学物性研究所 物性理論研究部門 教授 今田正俊
電話 0471 (36) 3275
e-mail: imada@issp.u-tokyo.ac.jp

9. 注意事項

「物性理論研究部門（今田研究室）助手応募書類在中」、又は意見書在中の旨を朱書きし、郵送の場合は書留とすること。

10. 選考方法

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

平成12年11月22日

東京大学物性研究所長
福山秀敏

人事異動

【研究部門等】

○ 平成12年11月1日付け

(採用)

氏名	所属	職名	異動内容
浅見俊夫	附属中性子散乱研究施設	技官	新規採用

○ 平成12年12月3日付け

(辞職)

氏名	所属	職名	異動内容
田崎哲郎	極限環境物性研究部門	技官	辞職

○ 平成13年1月1日付け

(転出)

氏名	所属	職名	異動内容
長谷川正	新物質科学研究所	助手	東北大学金属材料研究所助教授へ昇任

Technical Report of ISSP 新刊リスト

Ser. A

- No. 3570** Doped Two Orbital Chains with Strong Hund's Rule Couplings - Ferromagnetism, Spin Gap, Singlet and Triplet Pairings, by Beat Ammon and Masatoshi Imada.
- No. 3571** Novel Structures Near $\nu = 9/2$ in Short-period Lateral Superlattices, by Akira Endo and Yasuhiro Iye.
- No. 3572** Selective Resonance Effect of the Folded Longitudinal Phonon Modes in the Raman Spectra of *SiC*, by T. Tomita, S. Saito, M. Baba, M. Hundhausen, Suemoto and S. Nakashima.
- No. 3573** Theory of Polarization Dependence in Resonant X-ray Emission Spectroscopy of *Ce* Compounds, by Makoto Nakazawa, Haruhiko Ogasawara and Akio Kotani.
- No. 3574** Zhang-Rice Singlet State Formation by Oxygen 1s Resonant X-ray Emission in Edge-Sharing Copper-Oxide Systems, by Kozo Okada and Akio Kotani.
- No. 3575** Electronic Structure Investigation of *CeB₆* by Means of Soft X-ray Scattering, by M. Magnuson, S. M. Butorin, J. H. Guo, A. Agui, J. Nordgren, H. Ogasawara, A. Kotani, T. Takahashi and S. Kunii.
- No. 3576** Ultrahigh-Resolution Photoemission Spectroscopy of Simple Metals : Direct Observation of Superconducting Gap and Phonon-Induced Fine Structures, by Takayuki Kiss, Takayoshi Yokoya, Ashish Chainani and Shik Shin.
- No. 3577** Aging of the Zero-Field-Cooled Magnetization in Ising Spin Glasses : Experiment and Numerical Simulation, by Lorenzo W. Bernardi, Hajime Yoshino, Koji Hukushima, Hajime Takayama, Aya Tobo and Atsuko Ito.
- No. 3578** Classical Correlation-Length Exponent in Non-Universal Quantum Phase Transition of Diluted Heisenberg Antiferromagnet, by Chitoshi Yasuda, Syngue Todo, Kenji Harada, Naoki Kawashima, Seiji Miyashita and Hajime Takayama.
- No. 3579** Simplification of Thermodynamic Bethe-Ansatz Equations, by Minoru Takahashi.
- No. 3580** Resonant X-Ray Emission from Gas-Phase *TiCl₄*, by C. F. Hague, M. Tronc, Y. Yanagida, A. Kotani, J. H. Guo and C. Såthe.

編 集 後 記

明けましておめでとうございます。ここ柏では、強風にさらされながらも冬の快晴が続いています。物性研の周囲では、新領域創成科学研究所の建物の建設が急ピッチで進み、キャンパスの輪郭が見え始めてきました。昨年には移転後の装置の立ち上げ、一般公開などのお披露目行事も無事一段落しました。今年は研究に専念するとともに、新しい物性研の成果を世に問う年であろうかと思います。10月には柏で初めてのISSP国際シンポジウムが強相関電子系をテーマに開かれます。皆様との活発な交流を期待しています。

今回のトピックスは、昨年物性研中性子散乱施設に着任された柴山所員と、常行所員にお願いしました。どうぞお楽しみください。

瀧川 仁

