

# 物性研だより

第46巻  
第4号

2007年1月

目次

1 研究室だより  
○ LIPPMAA研究室 . . . . . Mikk LIPPMAA

8 外国人客員所員を経験して  
Cun-Zheng NING  
10 Yuriy BUNKOV  
11 Carlos WEXLER

物性研究所短期研究会報告

13 ○ 水、氷、水素を基調とした高圧下での地球惑星科学と物性科学  
25 ○ ガラス転移の統一概念：諸理論の相互関係と実験的検証  
43 ○ 量子スピン系の物理  
72 ○ 新たな物性研究体制の構築

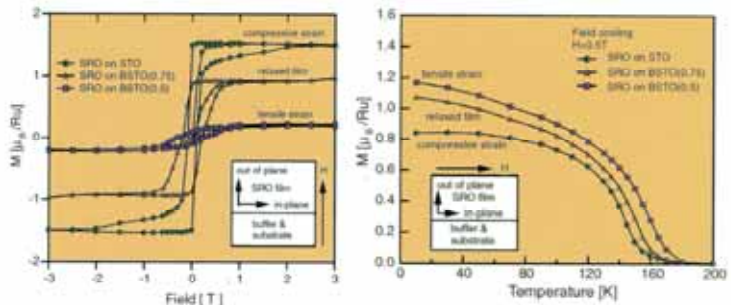
86 物性研究所談話会

物性研ニュース

88 ○ 人事異動  
89 ○ お知らせ  
90 ○ 物性研だより第46巻目録（第1号～第4号）

編集後記

SrRuO<sub>3</sub>の磁化率のエピタキシャル歪依存性。  
基板の面内格子定数を変化させることで圧縮歪状態、歪緩和状態、引っ張り歪状態のSrRuO<sub>3</sub>薄膜を成長できる。磁化容易軸は引っ張り歪状態では薄膜面内であるのに対し、圧縮歪状態では面直に回転する。さらに引っ張り歪は磁気秩序温度を約10%上昇させる。



東京大学物性研究所

ISSN 0385-9843



## Field-effect in oxides

Division of Nanoscale Science, Mikk LIPPMAA

### 1 Introduction

Transition metals offer a rich playground for a number of different areas of physics, from basic theory to applications. Even well-studied compounds that have seemingly simple structure, like the well-known perovskites  $\text{SrTiO}_3$  and  $\text{BaTiO}_3$ , still continue to baffle us, both in terms of a theoretical understanding and experimental control over the structure and properties of these materials. A good example of the challenges presented by oxides in general is provided by the family of superconducting cuprates. Despite being subjected to an unprecedented level of scrutiny over the past 20 years, the mechanism of superconductivity still remains unexplained. One of the reasons for these difficulties is the tight interplay between the electronic structure and minute changes in the crystal structure of oxides. Due to the compositional complexity, the dominating electronic phase is often determined by the microstructure of a sample, rather than the structural model that might be inferred from the chemical composition. Changes in microstructure, such as the formation of nanoscale grains, can alter the lattice spacing, which can alter metal-oxygen bond angles and defect formation, leading to band structure changes, and ultimately resulting in a material switching to a different ground state, e.g. an insulator instead of a superconductor, or a ferroelectric instead of a paraelectric, etc.

The work in this laboratory is directed at achieving a better control over oxides in the form of thin films. The basic idea is that in oxide heterostructures it is possible to tune one certain characteristic of a crystal more or less independently from others. We can, for example, change the lattice parameter by epitaxial strain, without changing the chemical composition. We can also change the density of charge carriers by field effect without altering the dopant concentration or the structure of a crystal. This approach will, hopefully, allow us to decouple the electronic and structural aspects of oxides and thus lead to a better understanding of these fascinating materials.

### 2 Advantages of Thin films

The properties of oxides can be probed in many different types of samples. A common approach is to strive for perfection in crystal quality and grow the best possible single crystals for detailed characterization. Single crystals, however, limit us to compositions and structures that are in or at least close to a thermodynamic equilibrium.

A complementary approach is to acknowledge that perfect crystals of complex oxides cannot be grown anyway, and to deposit thin films instead. Although the crystallinity of films is often lower than that of single crystals, films do offer a number of additional degrees of freedom for controlling the material properties. The biggest advantage of thin film growth is that the process is governed by the growth kinetics and it is therefore possible to impose an artificial nonequilibrium structure on a sample. Simple examples are epitaxial heterostructures, but more complex lattices can also be grown, e.g. nanostructure arrays, nanoscale composites, and even complete epitaxial device structures. [1,2]

Another advantage of thin films is the high speed at which samples can be grown. Typical thickness of an oxide film is measured in tens of nanometers and it is therefore perfectly feasible to grow several crystals in one day. Integration of many different thin film samples on a single substrate can push this number much higher. [3] This can be very useful, because it means that we can map the variation of material properties across sections of the phase space.

### 3 Crystal growth

Oxide thin films can be grown by many different techniques. For research purposes, physical vapor techniques like molecular beam epitaxy (MBE), sputtering, and laser ablation are usually preferred. Among these techniques, laser ablation, or laser-MBE, is used in our group because it is technically relatively simple yet extremely versatile in terms of materials and structures that can be grown. We can routinely achieve sub-monolayer deposition rate control and fabricate samples containing heterostructures, superlattices, nanodots or nanowires. The largest challenge is to achieve repeatable and accurate control of crystal composition, defect density, and grain structure.

The usual process parameters that we have at our disposal for controlling crystal growth are the growth temperature, growth rate, and chemical composition. Composition control can be done at two levels. On a rough scale, we ensure correct stoichiometry in the film by preparing a deposition target with the desired chemical composition. This will usually give us films that are within about a tenth of a percent of the desired composition and therefore possess the crystal structure and electronic phase that we desire.

In many complex oxides, however, this accuracy is not sufficient because we study materials that are close to electronic phase transitions, where the transport behavior is very sensitive to the density of carriers, or the average valence state of cations. One such material is  $\text{SrTiO}_3$ , where an insulating parent compound transforms into a semiconductor, metal, and even a superconductor at doping levels of  $10^{18}$  to  $10^{20} \text{ cm}^{-3}$ . It is thus clear that a much finer composition control is required than what is easily accessible by simple composition adjustment of deposition targets.

One way of achieving such control is to utilize the slightly element-selective nature of the laser ablation process. Specifically, by changing the fluence of the ablation laser, and thus the momentary heating of the evaporation target surface, we can fine-tune the cation composition in the growing film. This process is illustrated in Fig. 1(a), which shows a collection of x-ray diffraction patterns from a series of about 50 thin film samples grown at various ablation laser fluence levels. In all cases,  $\text{SrTiO}_3$  films were grown homoepitaxially on a  $\text{SrTiO}_3$  substrate. The substrate (200) diffraction peak is visible at an angle of  $46.5^\circ$ . It is obvious that the films, despite having the same nominal composition as the substrate, have significantly different lattice parameters from the substrate. This indicates that cation nonstoichiometry is present in the films, resulting in lattice parameters that deviate from the bulk value.

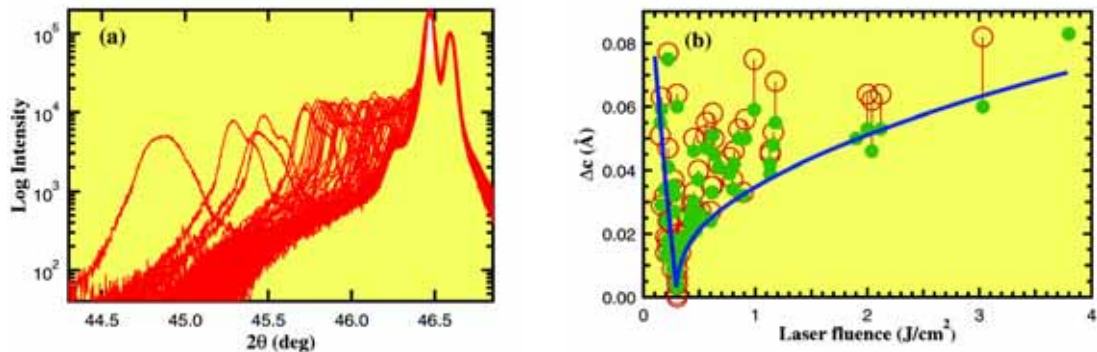


Figure 1: (a) X-ray diffraction patterns of a series of homoepitaxial  $\text{SrTiO}_3$  films, taken in the vicinity of the substrate (200) peak. The splitting of film peaks from the substrate peak shows that the lattice of the films is larger than in the substrate. (b) The lattice expansion is a strong function of the ablation laser fluence, and thus the cation stoichiometry. Blue lines are guides for the eye to illustrate the general tendency.

The deviation of the lattice parameter in the film is plotted as a function of ablation fluence in Fig. 1(b). The plot shows that below a critical fluence of about  $0.3 \text{ J/cm}^2$ , the lattice quickly expands. Careful analysis of TEM images has shown that this expansion is caused by the incorporation of extra Sr in the film, i.e. preferential evaporation of Sr

from the target at low fluence. At fluence values above  $0.3 \text{ J/cm}^2$ , evaporation favors Ti, and the films thus have a slight Ti excess. [4] This type of experiment can be used to answer the question of how the electronic properties of the  $\text{Sr}_{1+x}\text{Ti}_{1-x}\text{O}_3$  vary as a function of  $x$  for small deviations from the ideal stoichiometry.

Stoichiometry deviations obviously result in lattice parameter changes. The associated vacancies or other defects can also function as donors for carriers. In systems that are sensitive to small changes in carrier concentration, this means that composition variations always change both the band filling and the band width. In thin films, it is possible to decouple these two effects. By using epitaxial strain, we can alter the lattice parameter without changing the carrier density. In heterostructures, we can introduce carriers by charge transfer or by field effect, without changing the lattice parameter.

### 3.1 Strain control

The crystal lattices of many oxides can be viewed as stacks of two or more different types of atomic layers. Thin film growth offers a way of extending such layering by growing crystals one atomic layer at a time and thus opens a way to explore the properties of very thin heteroepitaxial layers that can behave quite differently from bulk materials. The electronic structure of interfacial layers can be influenced by a number of factors, many of which we have experimental control over. These factors include large compressive or tensile strains of several percent, which would be unreachable in bulk single crystals. Strain is imposed on thin layers due to a lattice constant mismatch between materials that are combined. The level of strain can thus be tuned by suitable materials selection or by tuning the compositions of interface layers. [5,6] Tuning strain in thin films has been shown to affect the type of magnetic ordering that is observed in manganites, change the critical temperature of high-temperature superconductors, turn paraelectric titanates into ferroelectrics, and generally affect the easy axis of magnetization and magnetic ordering temperatures in various oxides. Examples for  $\text{SrRuO}_3$  behavior under various levels of strain are shown in Fig. 2.

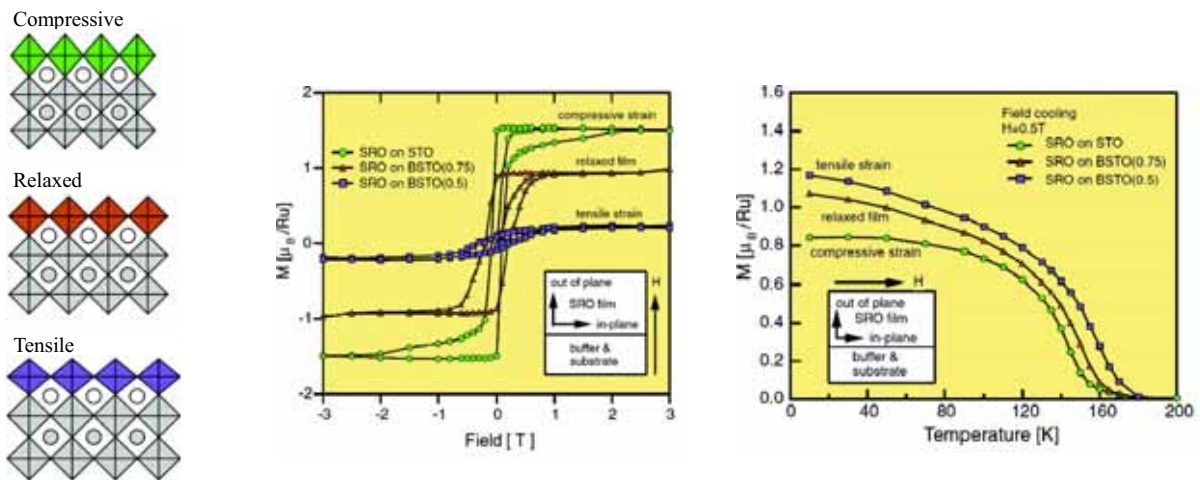


Figure 2: The influence of epitaxial strain on the magnetization of  $\text{SrRuO}_3$ . By changing the in-plane lattice parameter of the substrate, thin layers of  $\text{SrRuO}_3$  can be grown under compressive strain (green), relaxed state (brown) or under tensile strain (violet). The easy axis of magnetization can be seen to rotate into the film plane under tensile strain but orient parallel to the surface normal under compressive strain. Tensile strain also increases the magnetic ordering temperature by about 10%.

### 3.2 Charge transfer

Another important effect at interfaces is charge transfer between atomic layers. Redistribution of charge across an interface is a common feature in oxide heterostructures which contain elements that can assume more than one valence state. Charge redistribution can be directly observed by valence-band photoemission in, e.g. manganite thin films that are combined in heterostructures with Ti or Fe oxides. Variations of the valence band photoemission

spectra of  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$  films are shown in Fig. 3 [7,8] The surface layers of thin films can, obviously, be probed directly by photoemission spectroscopy. The advantage here, compared to bulk crystals, is that reasonably well-ordered surfaces can be prepared in situ, even for cubic materials that cannot be easily cleaved.

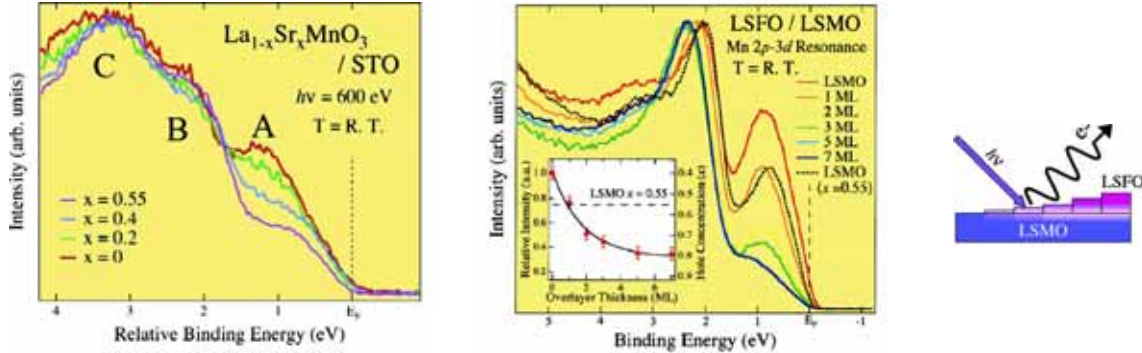


Figure 3: The left panel shows the valence band spectra of  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$  for various carrier doping levels  $x$ . Spectral feature A corresponds to the  $e_g$  levels of Mn, B corresponds to the  $t_{2g}$  levels, and C is the O 2p peak. The electron density drops in the  $e_g$  levels as the hole doping  $x$  increases. In a Mn/Fe heterostructure, the redistribution of charge can be monitored in the Mn oxide layer by measuring resonant 2p-3d Mn valence band spectra for various thicknesses of the Fe oxide capping layer. Only the  $e_g$  and  $t_{2g}$  spectral features are visible due to the resonant enhancement of the Mn emission. A cartoon of the measurement is shown on the right.

Measuring the electronic states of buried interfaces layers by photoemission is more difficult, but still possible when resonant excitation is used. By tuning the x-ray source to the 2p-3d resonance of an element in the buried layer, the emission intensity from that layer can be greatly enhanced, allowing valence band spectra to be measured for layers that are covered by a thin cap layer of up to a few unit cell thickness. For the  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$  /  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{FeO}_3$  system, we are therefore interested in the resonant energy of Mn, which is at around 644 eV[9] and of Fe, which is at around 710 eV.[10] The advantage of resonant spectroscopy is illustrated in Fig.3, where the valence band spectra of a Mn/Fe heterostructure are shown. A thick  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$  film was covered with a thin  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{FeO}_3$  layer and the transfer of charge between Mn and Fe was studied. Measurements of samples with a variable cover layer thickness showed that when  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$  is combined with  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{FeO}_3$ , electrons are transferred from the Mn to Fe within a distance of approximately three unit cells closest to the interface. Effectively, this means that the hole concentration  $x$  is significantly increased close to the interface on the Mn side. Indeed, the change is large enough to destroy the ferromagnetic phase of  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$  within a few unit cells of the interface, which would be bad news if the Mn oxide were used in a tunnel junction, for example.

While charge transfer at interfaces can be an advantage, in applications it is usually an undesirable effect, because it means that interface layers behave differently from what one might expect based on bulk material characterization data. Charge transfer effects often result in thin interfacial layers that are simply called dead layers and accepted as inevitable, particularly in applications like tunnel junctions. Recent work on measuring the valence band structure of thin surface and interface layer has opened a new path to correcting such unintended changes in electronic structure by compensating for charge transfer in each atomic layer by intentionally grading the chemical composition for each atomic layer in a heterostructure.

### 3.3 Field effect

The carrier density in an oxide can be modulated by chemical doping and by transfer of charge over short distances at heterointerfaces. A third method that can be used to modulate the doping level is field effect. Field-effect transistors are arguably the most successful electronic devices ever invented and form the basis for all modern

electronics. In oxides, field effect doping of materials offers a way to probe the electronic phase transitions without creating disorder and lattice parameter changes that inevitably accompanies chemical doping. Field-effect doping also allows material properties to be modulated repeatedly in a single structure, unlike other doping methods, where the dopant concentration is fixed during synthesis.

The basic tool of field-effect doping is a field-effect transistor (FET). A number of different device geometries can be used, but essentially the device has two electrodes, the source and the drain, that feed current into a channel. The conductivity of the channel is modulated by applying an electric field. The electric field can be applied by covering the channel with a ferroelectric film, as shown in Fig. 4 (a), or by constructing a parallel-plate capacitor and applying a bias voltage to the gate electrode, as shown in Fig. 5 (a). The advantage of using a ferroelectric material as the gate electrode is the ease with which very high electric fields can be obtained, without having to handle the problem of leak currents and breakdown phenomena that always affect dielectric gate insulator designs. The capacitor-type device illustrated in Fig. 5 (a) has the advantage that the gate bias can be changed continuously, unlike the ferroelectric, which can only be poled to a fixed polarization level of either sign.

The effectiveness of using a ferroelectric film to induce charge at an interface can be seen in Fig. 4 (b).[11] In this case, a Nb-doped SrTiO<sub>3</sub> film was covered with a ferroelectric layer of Pb(Zr,Ti)O<sub>3</sub>. The slightly underdoped Nb:SrTiO<sub>3</sub> film had a superconducting transition temperature of about 250 mK. The ferroelectric cover layer was polarized with either a positive or a negative bias of a conducting AFM tip, thereby inducing a charge at the top surface of the superconducting film. The *P+* polarity corresponds to a reduction of electron density in the superconductor, while *P-* corresponds to an increase of carrier density. As a result, the superconducting transition temperature of the Nb:SrTiO<sub>3</sub> film could be shifted by about 50 mK. If the sample temperature is held at 250 mK, it is possible to switch the film between normal and superconducting states.

An interesting potential application of this technique is the ability to draw superconducting shapes in the film with an AFM tip. The inset in Fig. 4 (b) shows a line of different polarity drawn on the sample surface. If the polarity is selected so that the red line corresponds to normal state, the structure could function as a Josephson junction. Drawing more complex shapes, like nanoscale dot or wire arrays would also be possible. The AFM can be used to erase and rewrite different patterns in the same sample.

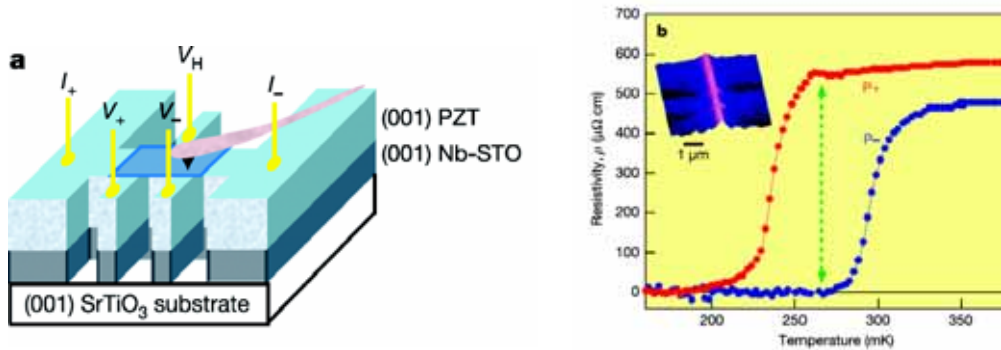


Figure 4: A Hall bar field-effect device (a), consisting of a superconducting Nb-doped SrTiO<sub>3</sub> film and a ferroelectric Pb(Zr,Ti)O<sub>3</sub> cap layer. The ferroelectric can be poled with a conducting AFM tip, inducing local shifts of the superconducting transition temperature (b).

A more traditional top-gate field effect transistor (FET) can be used to continuously vary the carrier density in the channel layer. Our current work is focused on using intrinsic SrTiO<sub>3</sub> substrates as the channel of the FET. Source and drain electrodes are patterned in the substrate surface and an epitaxial or amorphous gate insulator is deposited. The usual choice for the insulator layer in our devices is either CaHfO<sub>3</sub> or DyScO<sub>3</sub>. Both materials are wide-gap insulators with low leak currents. A gate field of up to about 8 MV/cm can be applied to the gate electrode,

corresponding to a sheet carrier density of  $5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ . Assuming a channel layer thickness of 10 nm, the carrier density induced by field effect in the active region of the transistor can be in the range of  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , which covers the region where an insulator-metal transition occurs in  $\text{SrTiO}_3$ .

This transition can indeed be seen in  $\text{SrTiO}_3$  devices, as shown in Fig. 5 (b). The crossover from an insulating into metallic state occurs at a critical gate bias of 1.3 V. All the gate bias curves cross at a single point at this bias. The transition from insulating to metallic state is even more obvious in a temperature dependence plot of the channel current, shown in Fig. 5 (c). The behavior of the device can be understood if we assume that the Fermi level of undoped  $\text{SrTiO}_3$  is close enough to the conduction band bottom for carriers to be thermally excited to the conduction band. Due to the low density of in-gap states, even a fairly small field-induced sheet carrier density can push the chemical potential in  $\text{SrTiO}_3$  higher, until it reaches the band edge and the devices switches to a metallic state. While the temperature dependence of channel conductivity has a thermally-activated shape in the insulating state and a negative slope in the metallic state, the critical bias value is determined only by the distance of the Fermi level from the band bottom and is thus independent of temperature.

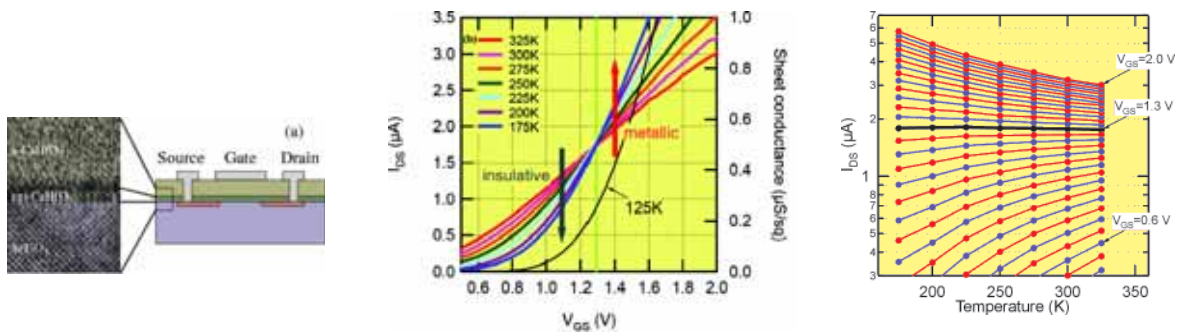


Figure 5: The basic top-gate field-effect transistor structure (a) using  $\text{SrTiO}_3$  as the substrate and channel material, metallic  $\text{LaTiO}_3$  /  $\text{SrTiO}_3$  films as source and drain electrodes, and  $\text{CaHfO}_3$  as the gate insulator. The insulator consists of a thin epitaxial layer and an amorphous cover layer. An insulator – metal transition occurs at a gate bias of 1.3 V (b). The temperature dependence of channel current at various gate bias levels clearly shows the transition to metallic state when the gate bias exceeds 1.3 V (c).

#### 4 Conclusion

Thin films, combined with fairly simple device fabrication tools, offer an interesting way to probe phase transitions in complex oxides. The active region that is probed by transport measurements in strained heterostructures or field-effect devices is usually very thin, on the order of a few nanometers. The next challenge for us is to integrate oxide nanostructures into these devices and attempt to probe the properties of oxides in structurally and electronically confined geometries.



Figure 6: Our research group in front of the ISSP building in October 2006.

## References

- [ 1 ] M. Lippmaa, K. Terai, N. Nakagawa, K. Shibuya, M. Kawasaki, and H. Koinuma, Proc. SPIE **4467**, 128 (2001).
- [ 2 ] N. Nakagawa, M. Lippmaa, K. Shibuya, H. Koinuma, and M. Kawasaki, Jpn. J. Appl. Phys. **41**, L302 (2002).
- [ 3 ] T. Ohnishi, D. Komiyama, T. Koida, S. Ohashi, C. Stauter, H. Koinuma, A. Ohtomo, M. Lippmaa, N. Nakagawa, M. Kawasaki, T. Kikuchi, and K. Omote, Appl. Phys. Lett. **79**, 535 (2001).
- [ 4 ] T. Ohnishi, M. Lippmaa, T. Yamamoto, S. Meguro, and H. Koinuma, Appl. Phys. Lett. **87**, 241919 (2005).
- [ 5 ] K. Terai, M. Lippmaa, P. Ahmet, T. Chikyow, T. Fujii, H. Koinuma, and M. Kawasaki, Appl. Phys. Lett. **80**, 4437 (2002).
- [ 6 ] K. Terai, M. Lippmaa, P. Ahmet, T. Chikyow, H. Koinuma, M. Ohtani, and M. Kawasaki, Appl. Surf. Sci. **223**, 183 (2004).
- [ 7 ] H. Kumigashira, K. Horiba, H. Ohguchi, D. Kobayashi, M. Oshima, N. Nakagawa, T. Ohnishi, M. Lippmaa, K. Ono, M. Kawasaki, and H. Koinuma, J. of Electron Spectroscopy and Related Phenomena **136**, 31 (2004).
- [ 8 ] H. Kumigashira, D. Kobayashi, R. Hashimoto, A. Chikamatsu, M. Oshima, N. Nakagawa, T. Ohnishi, M. Lippmaa, H. Wadati, A. Fujimori, K. Ono, M. Kawasaki, and H. Koinuma, Appl. Phys. Lett. **84**, 5353 (2004).
- [ 9 ] K. Horiba, H. Ohguchi, D. Kobayashi, H. Kumigashira, M. Oshima, N. Nakagawa, M. Lippmaa, K. Ono, M. Kawasaki, and H. Koinuma, J. Magn. Magn. Mat. **272-276**, 436 (2004).
- [10] H. Wadati, D. Kobayashi, A. Chikamatsu, R. Hashimoto, M. Takizawa, K. Horiba, H. Kumigashira, T. Mizokawa, A. Fujimori, M. Oshima, M. Lippmaa, M. Kawasaki, and H. Koinuma, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **144-147**, 877 (2005).
- [11] K. S. Takahashi, M. Gabay, D. Jaccard, K. Shibuya, T. Ohnishi, M. Lippmaa, and J.-M. Triscone, Nature **441**, 195 (2006).



# 外国人客員所員を経験して

Cun-Zheng NING

Visiting Professor from June 20 to September 20, 2006

Home institution: NASA Ames Research Center

As was originally planned, the themes of my research activities are around many-body physics of semiconductor nanostructures. My activities are summarized as follows:

## 1) Collaboration on the Mott transition in one-dimensional system

The Mott transition in an optically excited semiconductor has been one of the most important issues of many-body physics of semiconductors, especially for one-dimensional systems. It was a very opportune time and place to conduct research on this topic. Akiyama san's group has the cleanest quantum wire samples in the world with the best spectroscopic data obtained recently. They have for the first time measured both photoluminescence and absorption spectra simultaneously under the same conditions. Such clean spectroscopic data allow some of the very central issues of the Mott transition be analyzed in detail. I have spent a lot of time trying to understand the full implication of their recent data to the Mott transition. I had almost daily discussions with Akiyama san on this issue and on the understanding of their data. Together we have concluded the following on the Mott transition:

- a) The optical gain observed in their system is due to biexciton to exciton transition. This is the first observation of biexciton gain in a 1D system. This conclusion is based on the following features of the spectral data: i) the gain bandwidth is very narrow, corresponding to a dephasing time of more than 5 picosecond which is longer than the typical dephasing time in a plasma, excluding degenerate plasma as a source of gain; ii) optical gain occurs at a much lower density and when the photoluminescence spectrum still shows clear exciton and biexciton peaks; and iii) the gain occurs when the biexciton peak overtakes exciton peak in the PL as total pair density increases. The observation and understanding of such biexcitonic gain are significant in several ways: It shows for the first time that optical gain can occur in a 1D system before the Mott transition and it will allow much lower threshold quantum wire lasers be made than is achieved hitherto.
- b) The Mott transition occurs through several stages of coexistence between excitons, biexcitons, and free electron-hole plasma. We have identified four stages from free exciton gas, through biexcitons, to free plasma. These research results provide a more complete picture for the Mott transition and shed light on the nature of the Mott transitions in 1D system. We have plans of conducting more experimental investigations to fully establish a complete picture of the Mott transition.

The results of our collaboration are contained in a manuscript entitled "Biexciton gain and the Mott transition in GaAs quantum wires", authored by Hayamizu, Yoshita, Ning, Takahashi, Akiyama, Pfeiffer, and West and just submitted to Phys. Rev. Lett.

## 2) Investigation of the possibility of two-photon laser based on semiconductors

Together with Akiyama san we analyzed different possibilities of a semiconductor two-photon laser. We analyzed both intersubband transitions in semiconductor quantum wells and biexcitons in CuCl system. The very long phase coherence time of biexciton waves in CuCl provides a very appealing alternative to our original idea of using intersubband transitions. In addition, the large biexciton binding energy (of  $\sim 20$  meV in CuCl) allows enhanced degenerate two-photon process, while keeping the competing one-photon exciton process sufficiently detuned far off-resonance. But we realized that the published results by Gonokami's group on this system are not likely to lead to a

continuous-wave optical gain because of the pre-dominating absorption process. We also had discussions with Prof. Gonokami of Applied Physics Department, University of Tokyo. Our discussion led to a possibility of arranging samples and pumping beam configurations such that two-photon emission process is kept unchanged, while two-photon absorption process is inhibited or significantly weakened. Such scenario is likely to lead to a CW two-photon gain in CuCl. Currently we are still analyzing this scenario in more detail. Possible collaboration with Prof. Gonokami on this issue will be pursued.

### 3) Bandgap renormalization in 1D system

One of the well-known phenomena in semiconductor optics is the bandgap renormalization due to Coulomb interaction. So far theories and experiments have shown strikingly conflicting results: While experiments by Akiyama san's groups and others have shown almost no bandgap shrinkage up to a very high density, while all the theories so far have predicted continuous bandgap shrinkage starting from a very low density. This issue is also closely related to the Mott transition. After my extensive study of the existing literature in the field and extensive discussions with Akiyama san, we realized that the reason for such conflicting pictures between theories and experiments is because all the theories have used the total electron-hole pair density for the calculation of bandgap renormalization. We believe that such a use of the total density is not justified, since at very low density, majority of the total density is in the form of exciton gas or in the co-existence phase of excitons and biexcitons. They do not contribute to bandgap renormalization in the way as assumed in the current theories. This idea is the key in a possible resolution of this contradiction. Dr. Huai of Osaka University has conducted preliminary estimate based on our assumption and the results have show a much more consistent bandgap renormalization with experimental measurements. The work is still continuing on this issue in collaboration with Prof. Ogawa's group.

### 4) Interactions with other groups in Japan

In addition to my activities at ISSP described above, I also used this opportunity to interact with other groups in Japan. We had extensive interaction with Prof. Ogawa's group at Osaka University. Prof. Akiyama and I visited Osaka group and Dr. Ping Huai (Postdoc of the Osaka group on a joint Akiyama-Ogawa project) visited Akiyama san and me twice during my stay. Currently we are still continuing our collaboration on semiconductor quantum wire lasers. We have also visited Prof. Gonokami's group of the Applied Physics Department, University of Tokyo and had extensive discussions with him on the two-photon laser as mentioned above.

### 5) Talks and conferences

During my stay, I also participated in two international conferences on behalf of ISSP and gave following talks:

- b) Plenary talk entitled "Semiconductor Nanowires for Nanophotonics: Progress in Theory and Experiment", Conference on **Optical Properties of Condensed Matter**, Xiamen, China, August 4<sup>th</sup>-August 10<sup>th</sup>, 2006
- c) Invited talk entitled "Compound semiconductor nanowires as nanolasers" at **International Symposium on Compound Semiconductors**, Vancouver, Canada, August 13-August 17, 2006

In addition, I gave following talks at Akiyama group seminar

- d) Selected issues of many-body effects in semiconductors, August 26, 2006
- e) Semiconductor nanowire nanophotonics, September, 2006

**Acknowledgement:** First of all, I would like to thank the ISSP Director and his staff for arranging a very fruitful visit. I would like to thank in particular my host, Professor Akiyama for his readiness to discuss physics all the time and anytime. He has made my visit a very successful collaboration. I would also like to thank Kameda san of the ISSP-ILO for being very thoughtful and helpful with every thing from small to big. She is great! I also thank Bessho san and Kubo san for all the business related helps. They all together made my stay a very memorable one. I enjoyed it very much. I hope to maintain my relationship with all of them and with ISSP.

# 外国人客員所員を経験して

**Yuriy BUNKOV**  
**Directeur de Recherches**  
**Centre de Recherches sur les Très Basses Températures, CNRS**  
**Grenoble, France**

My participation in ISSP fundamental physics investigations started a few years ago, when Kubota laboratory decided to use the NMR method of Homogeneous Precession Domain (HPD) for studies of superfluid  $^3\text{He}$  in Aerogel under rotation. Why are these investigations so important, so that a physicist like me from the other side of the globe comes repeatedly to Kashiwa and leaves his own investigations for a time? The answer is simple: because ISSP has a unique installation, the nuclear demagnetization refrigerator on a fast rotating platform. Now we have three such platforms, in Helsinki, Manchester and Kashiwa. The rotation of superfluid  $^3\text{He}$  is very fundamental problem of macroscopic quantum physics. The coherent quantum state can not rotate at all. The same effect appears in superconductors, where role of rotation is played by magnetic field. The vacuum of our universe is also in a coherent quantum state. The rotation indeed can be performed with creation of topological defects (vortices, cosmic strings as well as other types of defects)

In Helsinki, where I have been taking part in investigations during last 25 years, starting from montage of the first rotating platform, we found and investigated, surely under rotation, about 15 different types of vortices in superfluid  $^3\text{He}$ , including vortex sheets and spin-mass vortex. Many of these vortices have been predicted, but for the cosmic strings in the Universe. And this is the main beauty of fundamental physics. One can study the properties of one system in full analogy with another which looks completely different. Manchester group studied the rotation of  $^3\text{He}$  in a slab geometry and found... the additional mechanism of vortex dissipation, which was explained by Volovik as an analogy of hypothetical mechanism of particles creation in the Universe. Particularly it is interesting that this mechanism can explain the fact that in our part of the Universe we can see only matter but not antimatter. It remains hypothesis for the Universe, but it is now reality for superfluid  $^3\text{He}$ !

ISSP platform can rotate at least a few times faster than others. It is really an extreme condition for superfluid  $^3\text{He}$ . We can study here the vortex types and the phase diagrams, which no one else has observed before. Furthermore, we can even put, inside  $^3\text{He}$ , Aerogel, a network of impurities, and see the effects of rotation. These studies have been performed in ISSP during last a few years.

My particular interest is the influence of mass rotation on another coherent quantum state, HPD. This is the magnetic coherent state, which manifests itself as the condensation of spin waves in a single quantum state. We have found it in  $^3\text{He-B}$  in 1984 in Kapitza institute, Moscow. The full collection of quantum phenomena, usual for superfluidity and superconductivity, was demonstrated, including Josephson effect on Spin Supercurrent. HPD has been used in Helsinki to investigate the transient processes at the acceleration of rotation, as well as the spin-mass vortex and its dynamics. Now in Kashiwa we suppose to use HPD for studying the transient processes at acceleration  $^3\text{He}$  in aerogel.

My three months visit to Kashiwa was organized to make these investigations. But, as usual in physics, the nice surprise can suddenly appear. In addition to the planned study, we have found a new magnetic coherent quantum state, now in A phase of  $^3\text{He}$ . This state was predicted by Volovik and me in 1993. Manchester group tried to observe it in a slab geometry, but unsuccessful. In our ISSP experiment we have used pressurized aerogel, which oriented the order parameter in a single direction, preferable for the observation of the new coherent state. This our discovery is very fundamental for physics of magnetic coherent states, as well as a new and fast developing field of applied physics.

# 外国人客員所員を経験して

**Carlos WEXLER**  
**Associate Professor of Physics**  
**University of Missouri**

My stay at the ISSP during the months of September to November of 2006 was hosted by Prof. M. Kohmoto. For about ten years I have been doing research in areas closely related to the quantum Hall effect (QHE), and have known of Prof. Kohmoto's extensive research in problems related to electron transport in incommensurate and quasiperiodic systems for about the same amount of time. In particular, Prof. Kohmoto's research has been key in understanding the effects of the crystalline structure in the QHE in connection to the elegant Hofstadter's problem and beautiful "Hofstadter's butterfly." In late 2005 I contacted Prof. Kohmoto and prepared an application for the visiting professorship for the 2006-2007 period and the application was accepted in early 2006. Upon my arrival in September 1<sup>st</sup>, we had a period of intense scientific discussions and many members of Kohmoto's group (Dr. Masatoshi Sato, Dr. Takahiro Aoyama, and Mr. Daijiro Tobe) gave short presentations of their research for my enlightenment. After that we focused on the problem of electronic spin transport. Given our common backgrounds in the QHE and the Hofstadter problem, we decided to consider the effects of spin-orbit coupling in the transport of electrons in systems with competing periods. Our efforts have uncovered a possible spin-induced delocalization in these systems and the results obtained so far were presented in an ISSP seminar last week (*Spin-orbit induced delocalization in quasiperiodic systems*). We have also submitted an abstract to the American Physical Society's March 2007 meeting (*Spinorbit coupling in quasiperiodic systems*, C. Wexler, D. Tobe, and M. Kohmoto) and we are working on a manuscript to be submitted to the Physical Review B. Overall, I gained significant experience in an area I had not previously worked directly, and have made new scientific contacts with whom I expect to keep collaborating in the future.

On a more personal level, I would like to thank the hospitality of all people here in the ISSP, but in particular of Ms. Akiko Kameda and Ms. Mihoko Kubo of the ILO, who worked hard to make our stay very pleasant. The accommodations (apartment) provided for myself and my family (my wife and 5 year old son) were excellent. Ms. Kameda also helped locate an Englishspeaking kindergarten/pre-school (almost) nearby (in Kita-Kashiwa) which proved very good for my son. We all had a wonderful experience in Japan; in fact, my son says he wants to come to live here!

I do have one negative comment to make, whose solution seems very easy, so I will provide it as well. The problem is that, while there is excellent science being done at the ISSP, it is not easy for a visitor to get a real sense of the research here because of difficulty in establishing contacts between the foreign visitors and local researchers. Conversely, I believe that the fraction of ISSP researchers who become aware of the visitors' research is also minimal due to the same lack of contact. I, for once, was not asked to give a single seminar based on my research background which I find very surprising and counterproductive (why not use the opportunity given by the presence of numerous visitors to get a broader vision of what is being done elsewhere?). Although some of the lack of interaction may be attributed to language issues, this is not a sufficient reason and a solution should be sought. In most institutions I visited, visitors are asked to give a seminar early-on after their arrival. This helps "break the

ice,” and facilitates further contacts. I believe that this should be instituted as an “unofficial policy” of the foreign visitors program: visitors should give a seminar upon arrival and the seminar should have plenty of time for informal discussions afterwards. Of course, “locals” should also give plenty of seminars for the benefit of the “visitors,” but this is done to a certain degree already, and it may be logistically difficult to implement on a wider scale given the large number of ISSP researchers.

As for my impressions of the science done at the ISSP: it seems quite excellent, indeed. The research done here is on par with the best institutions in the world. Being a theorist, I cannot say much about the laboratories, but the parts that affect me (computer support, networking, libraries, access to information and office space) are truly excellent. Secretarial staff was very competent and the students and postdocs I was fortunate to interact with were all very bright and selfmotivated.

Overall, I was very happily impressed with the ISSP and Japan in general. I had an excellent visit from the science point of view, and my family and I truly enjoyed the unique experience that a visit to Japan is. I would like to thank the ISSP for its hospitality, organization, and the generous financial support provided.

## 物性研究所短期研究会

# 水、氷、水素を基調とした高圧下での地球惑星科学と物性科学

日時：2006年10月24日(火)～10月25日(水)

会場：東京大学物性研究所中性子科学研究施設 山田ホール（東海村）

### 提案代表者

鍵 裕之 東京大学理学部 助教授

### その他の提案者

山室 修 東京大学物性研究所 助教授

八木 健彦 東京大学物性研究所 教授

青木 勝敏 原子力研究機構 研究主任

大谷 栄治 東北大学理学部 教授

入船 徹男 愛媛大学 地球深部ダイナミクス研究センター 教授

加倉井和久 原子力研究機構 主任研究員

本研究会は、水素・水をキーワードとして、高圧科学、地球科学・惑星科学、物性科学の接点を見いだしながら、新しい研究の切り口を探ることを目標に開催された。悪天候の中、広い分野にまたがる約 65 名の参加者を得ることができた。若手・中堅研究者が参加者の多くを占めたが、学部生からシニア研究者に至る年齢構成の広がりも特徴的であった。さらに日本原子力研究機構の協力を得て、一日目には J-PARC を、二日目には JRR-3 の見学も行った。水、氷、水素の本質を理解するためには、中性子散乱の実験が必須であること、そしてそのためには強力なパルス中性子線源に高温高圧といった特殊条件での測定が可能な装置を導入することが必要であることなども議論された。最後に、本研究会を開くにあたって、物性研中性子科学研究施設の皆様、原子力研究所の皆様にご協力をいただきましたことに厚く感謝申し上げます。

## プログラム

### 10月24日(火)

13:10-13:15 Opening 鍵 裕之 (東大)

座長：鍵 裕之

13:15-13:40 物性研中性子科学研究施設の概要と研究活動 廣田 和馬 (東大)

13:40-14:05 J-PARC 計画の概要と現状 藤井 保彦 (原子力機構)

14:05-14:30 クラスレート水和物の秩序化相転移とアモルファス化 —高圧研究への展開— 山室 修 (東大)

座長：山室 修

14:40-15:05 高圧下の水：中性子への期待 片山 芳則 (原子力機構)

15:05-15:30 氷結晶中の分子拡散 深澤 倫子 (明治大)

16:00-17:00 J-PARC 見学

18:00-20:00 懇親会

## 10月25日(水)

座長：奥地 拓生

- 9:00- 9:25 J-PARC におけるビームライン建設の現状 神山 崇 (KEK)  
9:25- 9:50 H<sub>2</sub>O ice の低温相転移のその場ラマン分光法による観察 吉村 幸浩 (防衛大)  
9:50-10:15 氷およびクラスレートハイドレートの強誘電性  
ー氷天体内部のプロトンの挙動ー 深澤 裕 (原子力機構)  
10:15-10:40 氷天体の内部流動 久保 友明 (九大)

座長：永井 隆哉

- 10:50-11:15 ガスハイドレートの高圧安定性と相互作用 平井 寿子 (筑波大)  
11:15-11:40 Theory and computation of hydrous minerals and melt under high pressure 土屋 卓久 (愛媛大)  
11:40-12:05 水素ハイドレートの速い分子拡散 ー固体の中の液体ー 奥地 拓生 (名古屋大)

座長：片山 芳則

- 13:10-13:35 メソポーラスシリカ内に吸着した水の構造とダイナミクス 大友 季哉 (KEK)  
13:35-14:00 不規則系水素系物質の中性子構造解析 鈴谷 賢太郎 (原子力機構)  
14:00-14:25 中性子非弾性散乱でみた液体 Se-Te 系の構造 千葉 文野 (慶応大)

座長：八木 健彦

- 14:35-15:00 Palm Cubic Anvil 圧力発生装置を用いた中性回折実験の試み 上床 美也 (東大)  
15:00-15:25 水素が鍵を握る金属水素化物の圧力誘起構造・電子転移 青木 勝敏 (原子力機構)  
15:25-15:40 Closing Address 八木 健彦 (東大)

16:00-17:00 原研三号炉見学



研究会での討論の様子



J-PARC 見学の様子

## 物性研中性子科学研究施設の概要と研究活動

東京大学物性研究所 廣田 和馬

東京大学物性研究所は全国共同利用研究所として 1957 年に設立され、我が国の物性物理学分野の研究設備・体制を国際的水準に高め、先端的な実験技術を開発してきた。中性子への取り組みはごく初期に遡るが、1969 年に中性子回折部門（3 所員）が増設され、日本原子力研究所 JRR-2 研究炉による共同利用研究によって本格化した。1990 年代に入り、JRR-3 が新世代の研究炉として整備されたことにあわせて、1993 年に中性子散乱研究施設（4 所員）として再編された。以後、東北大・京都大とともに 10 数台の分光器を全国共同利用に提供する体制が構築され、毎年 175 日間のビームタイム中に、250-300 の課題、約 5000 人・日の利用者が研究を行うという、物性研最大の全国共同利用プログラムとなった。2003 年には中性子科学研究施設（5 所員）に改組され、Spin-Echo 装置 iNSE・小角散乱装置 SANS-U・TOF 型分光器 AGNES そして 3 軸分光器群の高度化が実施された。すでにほぼ全ての装置が新世代の制御環境を備えるとともに、実効ビーム強度の増大や新しい試料環境の整備がなされ、測定の効率化とともに新しい研究領域への展開がはかれるようになってきている。一例を挙げれば、本施設の山室所員が管理する AGNES では、装置の全面的な再開発によって強度が 3 倍、ノイズレベルが 10 分の 1 になり、S/N 比にして実に 30 倍もの改善を実現した。これによって、以前では考えられなかった精度での実験研究が可能となった。講演では、中性子科学研究施設の概要を紹介するとともに、どのような研究成果が得られているのか、今後どのような方向へ発展させようとしているのかについて議論する。

## J-PARC 計画の概要と現状

日本原子力研究開発機構・量子ビーム応用研究部門 藤井 保彦

大強度陽子加速器施設 J-PARC (Japan Proton Accelerator Research Complex) は、文部省・科学技術庁統合のシンボルとして、平成 13 年度に高エネルギー加速器研究機構 KEK (当時の高エネ研) と日本原子力研究開発機構 JAEA (当時の原研) が共同で建設を開始した。当初 6 年計画であった第一期計画が 7 年間に変更されたものの、平成 19 年度施設完成に向けてほぼ予定通り建設は進んでおり、平成 18 年 10 月現在進捗率は約 70% である。いよいよ今年 12 月にはリニアック LINAC でのビーム試験が始まり、それから約 1 年後には 3GeV シンクロトロン RCS でのビーム試験、2 年後には物質生命実験施設 MLF で中性子とミュオンのファーストビームが得られる予定である (写真参照：ただし撮影は平成 18 年 2 月)。ほぼ同時期に 50GeV シンクロトロンにも陽子ビームが供給されビーム調整試験の後、順次ハドロン、ニュートリノ実験が開始される予定である (詳しくは <http://j-parc.jp/>)。





物質生命実験施設の建物は竣工し、内部では中性子およびミュオン線源の工事が急ピッチで進んでいるが、測定装置を設置するミュオンの4ビームポート、中性子の23ビームラインの整備も始まった。中性子実験装置については、平成14年度からすでに毎年装置提案を受け付け中性子実験装置計画検討委員会で審査しているが（ホームページ参照）、そのうち建設予算の見通しの付いている装置は、JAEA 2、KEK 2(～4)、競争的外部資金によるもの3、茨城県2、それにビームモニター/R&D用の1台である。

J-PARCは平成19年度で建設を終了し平成20年度から施設運用のフェーズに入る。そのため共同建設主体であるKEK, JAEAが、引き続き施設を共同で運営するための協定を締結し、平成18年2月にはこの運営を担う組織である「J-PARCセンター」（永宮センター長）を両機関の実組織として設置した。そしてセンター長の下に各種の委員会、ワーキンググループ等を設けて、運用に関わる諸問題（実験課題公募・審査の在り方、利用者受け入れ体制、インフラ整備等）を精力的に検討している。また、中性子・ミュオンの外部ユーザーの声を反映して、J-PARC/MLF利用者懇談会（仮称）の設立準備がされている。

## クラスレート水和物の秩序化相転移とアモルファス化 — 高圧研究への展開 —

東京大学物性研究所 山室 修

クラスレート水和物は、最近、海底に多量に埋蔵されているメタン水和物が未来の天然ガス資源になることや、地球温暖化の原因である二酸化炭素を海底固定するのに利用できることが分かり、急速に注目を集めている。しかし、そのような応用的興味だけでなく、クラスレート水和物は古くから重要な基礎物性研究の対象であった。クラスレート水和物が興味深いのは、ゲスト分子の配向無秩序とともに、ホストの水分子がいわゆる「氷の規則」を満たしながら配向無秩序していることである。

我々は、1980年代後半から希ガス水和物および多数の有機ゲスト分子（THF, TMO, EO, acetone など）のクラスレート水和物の熱容量、誘電率、中性子回折を測定し、水分子は氷と同様にガラス転移を経て凍結すること、ゲスト分子は低温まで量子力学的な回転運動をしていることを見いだした。また、六方晶水で行ったように、試料に水酸化カリウム（KOH）を不純物として0.1mol/dm<sup>3</sup>程度ドーピングすることにより、水分子の最配向運動を活性化し、秩序化相転移を引き起こすことに成功した。この相転移では、水分子とゲスト分子の両者が同時に配向秩序化する。

最近、結晶のクラスレート水和物を離れ、低温蒸着法で生成したアモルファス状態のクラスレート水和物を研究している。アモルファス水和物は、通常では溶けない溶質（例えば希ガス）の濃厚水溶液ガラスと考えることもでき、全く新しいタイプの水溶液（疎水性水溶液？）のガラス研究を可能にしている。これまでにAr, Xe, SF<sub>6</sub>, CD<sub>4</sub>のアモルファス水和物について、中性子回折からその局所構造を明らかにするとともに、非弾性散乱からアモルファス氷で見られた6meV以下の低エネルギー励起強度がゲスト濃度の増加あるいはゲスト分子サイズの増大とともに顕著に減少することを見いだした。研究会では、以上の結果の概略を解説するとともに、これまでの研究が高圧下において将来どのように発展しうるかについても述べたい。

## 高圧下の水：中性子への期待

日本原子力開発研究機構・量子ビーム応用研究部門 片山 芳則

水は我々にとって最も重要な液体であり、様々な面から研究がなされている。水は、また、普通の分子性液体とは違った特異な性質を持つことでも知られている。これは、水に水素結合による4配位のネットワーク構造が残っているためである。このような隙間の多い構造は加圧によって大きく変化すると考えられる。我々は液体（流体）の水のX線回折を、放射光施設SPring-8のBL14B1のキュービック型マルチアンビルプレスで約9GPaまで、BL04B1の川井型プレスを用いて約17GPaまで測定することに成功した。その結果、約4GPaまでに水分子の配位数は10程度へ急激に上昇し、剛体球で表されるような単純な液体の構造へと近づくことを見出した。

X線回折実験では、電子が1個しかない水素はほとんど回折に寄与しない。特に水では電荷移動によってさらに水素上の電子が少なくなっていると考えられる。そのため、酸素-酸素間の動径分布関数しか得ることができない。これは水の構造を考える上で最も重要な水素結合に関してほとんど情報が得られないことを意味する。これに対し中性子回折では、水素原子核が大きな散乱断面積を持つため、水素に関する情報を得ることができる。実際、6.5GPaまでの水の中性子回折実験の結果が最近報告された。本発表では、我々の放射光実験、最近報告された中性子実験、シミュレーションによる高圧下の水の構造研究などを紹介し、高温高圧下の水の中性子回折によって何がわかるのかを述べる。

## 氷結晶中の分子拡散

明治大学理工学部応用化学科 深澤 倫子

南極大陸は、氷床とよばれる巨大な氷の塊で覆われている。氷床は、降り積もった雪が圧縮されて出来た結晶であるため、数十万年の間に雪と共に堆積した様々な成分を貯えており、古環境についての貴重な情報源となる。例えば、氷床から掘削した氷試料に含まれる空気成分の組成分析により、産業革命以降の大気中の二酸化炭素濃度増加や、約 10 万年周期の氷期-間氷期サイクルに伴う大気組成の変動等、古環境に関する重要な知見が得られている。

ところが最近になって、古環境の指標となる空気分子が、長い時間をかけて氷床内部を拡散していることが明らかになった[1,2]。分子拡散は氷床中の空気分子の分布を変化させるため、掘削した氷試料から分析した空気成分の組成は正確な過去の大気組成を示していないことになる。氷床氷試料から、過去の大気組成の情報を正確に読み取るためには、分子拡散のメカニズムを解明し、その影響を把握しなくてはならない。

本研究では、分子動力学計算により、氷結晶中の分子拡散のメカニズムを、原子・分子レベルのミクロな視点から解き明かそうとする研究を進めてきた[3,4,5]。本講演では、この成果を中心に、氷結晶に取り込まれた気体分子の挙動と、この挙動に起因する氷の局所構造のダイナミクスについて議論する。

- [1] Tomoko Ikeda et al., *Geophys. Res. Lett.* 26 (1999) 91.
- [2] Tomoko Ikeda-Fukazawa et al., *J. Geophys. Res.* 106 (2001) 17799.
- [3] Tomoko Ikeda-Fukazawa et al., *J. Chem. Phys.* 117 (2002) 3886.
- [4] Tomoko Ikeda-Fukazawa et al., *Chem. Phys. Lett.* 385 (2004) 467.
- [5] Tomoko Ikeda-Fukazawa et al., *Molec. Sim.* 30 (2004) 973.

## J-PARC におけるビームライン建設の現状

高エネ機構・大強度陽子加速器計画推進部 神山 崇

加速器を用いたパルス中性子源は、1960 年代末に東北大原子核理学研究施設を初めとして電子加速器でスタートして以降、米国アルゴンヌ研究所や日本の高エネルギー物理学研究所（現 高エネルギー加速器研究機構）、英国のラザフォード・アップルトン研究所等で陽子加速器を用いた中性子源が発展、現在は次世代の大型施設が米国と英国、日本にほぼ同時期に建設されるというユニークな時期にある。講演では、高エネルギー加速器研究機構と日本原子力研究開発機構が共同開発している大強度陽子加速器（J-PARC）の物質・生命実験施設とそこに設置される中性子回折装置について述べる。

物質・生命実験施設には 23 本のビームポートに装置を設置できる。プロジェクトチームでは、施設完成の 2008 年を目指し、利用者が強く希望する装置の内から 10 台を選択し、その設計作業を行ってきた。一方、国内外からの装置提案も受け付けており、現在までに茨城県をはじめとした複数の提案がある。ここでは、早期の建設が期待される回折装置について紹介する。

### (1) 汎用全散乱装置(KEK)

非晶質、液体、結晶等の構造解析を行うための装置で、散乱構造因子を直接フーリエ変換して、モデルに依らない構造解析を精度良く行えるよう、非常に広範な波数空間  $Q=0.01\text{\AA}^{-1}\sim 100\text{\AA}^{-1}$  の測定を一挙に行う。最高分解能は  $\Delta d/d\sim 0.3\%$  程度。

### (2) 材料構造解析装置(茨城県)

多結晶試料の結晶構造解析を中心にナノ構造、局所構造解析、テキスチャ等の解析を行う装置。最高分解能  $\Delta d/d\sim 0.15\%$  である。0.5cc の試料であっても 5 分間の内に十分な統計のリートベルト解析が可能な回折データを得ることが可能である。

### (3) 超高分解能粉末回折装置(KEK)

ESRF や SPring-8 等の高輝度放射光粉末回折計で実現している分解能  $\Delta d/d = 0.03\%$  を実現する世界最高の分解能を持つ粉末回折装置。強度・分解能の点で高輝度放射光 X 線との相補性を真に実現できる。

### (4) 残留応力測定装置

中性子の透過性を利用して構造材料の内部の歪み分布を測定する装置である。1mm<sup>3</sup> のゲージボリューム(観測部位容量)を、10<sup>-4</sup>~10<sup>-5</sup> の歪み測定精度で、10 分間に測定が可能である。装置の構造は高圧下構造解析装置と共通する点も多い。

# H<sub>2</sub>O ice の低温相転移のその場ラマン分光法による観察

防衛大学校・応用化学科 吉村 幸浩

## 1. はじめに

良く知られているように H<sub>2</sub>O の相図は複雑で、現在までに準安定なものを含めて 15 種類以上もの異なる相があることが報告されている[1-4]。最近のトピックスの一つとして、氷 V と VI 相のそれぞれの秩序相として Salzmann らが新たに氷 XIII, XIV 相を発見したことが挙げられる[4]。準安定氷については、Mishima ら[5]による常圧氷 I<sub>h</sub>から高密度非晶質氷(HDA)への転移の発見により、H<sub>2</sub>O の非晶質氷には低密度非晶質氷(LDA)と合わせて少なくとも 2 種類が存在することになる。加えて大変興味深い事実は、温度 120-140K 付近においては、LDA と HDA の間で圧力変化により可逆に相転移することである[6]。これらの事実から、いわゆる(過冷却)水の低温異常性を液体-液体相転移仮説から説明する試みもある。[7]

このような背景にもとづき、我々は低温条件下での準安定氷を含めた氷の相の詳細についてまだまだ調べる余地があると考え研究を行った。ここでは、主としてその場ラマン分光法を用いて得られた結果のいくつかを紹介する。

## 2. 実験方法

その場高圧ラマンスペクトルは、顕微レーザーラマン分光光度計を用い、アルゴンイオンレーザー(514.5nm, 350mW)を励起光源として後方散乱法で測定した。圧力発生装置としていわゆる Mao-Bell type のダイヤモンドアンビルセルを使用した。

## 3. 結果の紹介

### 3-1 高圧氷 ice VII' & ice VIII の新しい構造転移?

氷 VIII 相を液体窒素温度程度の低温下で一気圧に回収すると、(おそらく 2-3GPa あたりで転移がおこり)オリジナルの氷 VIII とは少し構造の異なるものができる可能性が報告されている[8]。区別のために、この氷は VIII' 相と呼ばれている。

我々は、氷 VIII 相からいわゆる対称氷 X 相に転移するまでの間において、本当に安定な相であるのかに興味をもって実験を行った。ラマン分光法と放射光 X 線 (APS) を用いて、80K で約 20GPa まで加圧することによりその場測定を試みた。その結果、特に低振動ラマンスペクトルにおいて 10GPa で  $\nu_{T_2}A_{1g} + \nu_{T_{x,y}}E_g$  lattice mode が消失し、約 14GPa 付近で突然新たなバンドが出現する事を見出した。[9]またこれらは XRD の結果とも呼応していた。さらに、氷 VII' 相においても同様な変化が起こることを確認している。[10]

### 3-2 ice VII' から低密度アモルファス氷(LDA)への直接転移

先に Hemley ら[1]は低温で氷 I<sub>h</sub>から転移した HDA をそのまま加圧し続けていくと氷 VII' 相に転移することを発見した。ところで、もし温度を一定に保ちながらこの氷 VII' 相の圧力を抜いていくとどうなるのかには興味もたれる。氷 VII' 相のまま一気圧に回収できるのか、あるいは相転移が起きるのだろうか?もし、起きるとすると HDA 相に転移するのか、別の相なのか。

本研究では、温度を 135K に保ちながら氷 VII' 相から圧力を減圧していく過程のその場ラマンスペクトル変化を観察し、氷の相変化を調べた。得られた結果から転移した相は LDA であることが分かった。さらに、この相転移挙動は転移の過程で別の中間体ができるのではなく、氷 VII' と LDA の mixture ができ、かつ不連続に起こることから一次転移 like であることを示している。[11]

### 3-3 電解質水溶液中の氷の高圧相転移現象

常圧下で電解質水溶液を冷却して凍らせた場合、通常固溶体は形成せず、水素結合しやすい部分の水のみが結晶を形成し、塩を含む部分の水は氷とならずに氷から分離する。我々は、この電解質水溶液中の氷も同様に、加圧によりアモルファス状態になる可能性が高いと考えた。しかも電解質によって、バルクの氷のネットワーク構造自体もある程度破壊、あるいは乱されていると考えられるので、氷 I<sub>h</sub>から HDA に転移する場合の圧力よりも低い圧力で起きるのではないかと予想した。

本研究では、冷却により容易にガラス形成する電解質水溶液の 1 つである塩化リチウム水溶液と、それとは対照的に通常の冷却速度ではガラス化形成しにくい塩化カリウム水溶液中に形成されるそれぞれの氷について、液体窒素温度で約 1 GPa 程度まで加圧することにより、各試料水溶液中の氷の相変化を調べた。得られた結果は大変興味深く、塩の違いにより得られる結果が全く異なった。塩化リチウム水溶液中の氷の場合、低温で結晶化させて加圧した時に溶液中に生成した氷は、氷 I<sub>h</sub>から HDA への転移の場合と同様にアモルファス化することが分かったが、転移圧力が氷 I<sub>h</sub>から HDA へ転移するときの圧力の約半分である約 0.5GPa であった[12]。ところが、塩化カリウム水溶液中に形成される氷の場合は、0.8GPa 付近において氷 VII' に転移することが分かった[13]。

## 参考文献

- [1] R. J. Hemley, et al., *Nature*, **338**, 638 (1989).
- [2] C. Lobban, et al., *Nature*, **391**, 268 (1998).
- [3] T. Kawamoto, et al., *J. Chem. Phys.*, **120**, 5867 (2004).
- [4] C. G. Salzmann, et al., *Science*, **311**, 1758 (2006).
- [5] O. Mishima, et al., *Nature*, **310**, 393 (1984).
- [6] O. Mishima, *J. Chem. Phys.*, **100**, 5910 (1994).
- [7] O. Mishima, H. E. Stanley, *Nature*, **396**, 329 (1998).
- [8] J. M. Besson, et al., *Phys. Rev. B*, **55**, 11191 (1997).
- [9] Y. Yoshimura, et al., *J. Chem. Phys.*, **124**, 024502 (2006).
- [10] S. T. Stewart, et al., *Annual APS March Meeting 2004*.
- [11] Y. Yoshimura, et al., *Chem. Phys. Lett.*, **420**, 503 (2006).
- [12] Y. Yoshimura, H. Kanno, *J. Phys. Cond. Matt.*, **14**, 10671 (2002).
- [13] Y. Yoshimura, et al., *Chem. Phys. Lett.*, **400**, 511 (2004).

## 氷およびクラスレートハイドレートの強誘電性 — 氷天体内部のプロトンの挙動 —

原子力機構 深澤 裕

高圧下の氷結晶のプロトンは温度を下げると直ちに秩序化する。ところが、大気圧下における「通常」の氷のプロトンは、非常に低い温度においても、実験室の時間スケールでは無秩序な配置を維持する。何故なら、プロトンの秩序化は測定不可能なほど緩慢だからである。そこで、次の問題が研究者を魅了し続けてきた。即ち、強誘電性のプロトン秩序氷は氷の低温相として存在するのだからである。元来、この問題は固体物理学の分野で議論されていたが、最近、天文学の分野でも話題となった。それは、冥王星に強誘電体の氷が存在するか否かである。

本研究会では、強誘電体の氷が安定相であることを確実に示した構造的証拠を中性子回折の実験から示す。中性子の実験から、最も少ないレベルの不純物のドーピングによって最大の強誘電体の氷が発生することがわかった。この結果は、導入した不純物がプロトンの秩序化を実験室の時間スケールまで短縮させる触媒として作用していることを支持するものである。また、中性子回折実験の外挿は、普通の氷が天文学的時間スケールで強誘電体の氷に変化することを示す。従って、宇宙には強誘電体の氷が存在しており、それは惑星探査と天体観測で発見できると期待される。外惑星や衛星の一部、カイパーベルト、分子雲等に強誘電体の氷が存在するだろう。

冥王星について詳しく記述すると、天体表面の氷は温度が僅かに低すぎるが、天体内部の氷は強誘電体への変化に適する条件を有している。冥王星では天体内部の氷が流動により表面へ移動していることが指摘されており、かつ、相転移点より温度が上昇する可能性がほぼないので、冥王星の表面に存在する氷が強誘電体である可能性は高い。

## 氷天体の内部流動

九州大・理 久保 友明

近年、太陽系内のみならず、系外惑星の中にも氷を主成分とする「氷天体」が数多く存在することが明らかになってきた。その魅力は、人工衛星探査や各種観測によって明らかにされつつある氷天体の多様性である。氷の流動特性は大きさや密度と並んでその氷天体を特徴づける重要な物性であり、天体内部の熱輸送とダイナミクスを支配し、氷天体の進化、内部構造、内部海の有無、表面地形の多様性、潮汐力への力学的応答などを理解するうえで必要不可欠なパラメーターである。一般に、土星の氷衛星 *Iapetus*, *Rhea* や *Triton*, *Pluto* (冥王星) など半径が約 700km を超える (低密度) 氷天体では、その内部に氷の高圧相が存在できる条件が実現しており、*Ganymede*, *Calisto*, *Titan* など半径が 2500km に達するような氷天体の中心核では、*Ice VII* が存在する圧力に達している。また、*Uranus* (天王星) や *Neptune* (海王星) など太陽系内巨大氷惑星では厚い大気のために固体の氷は存在しないと考えられるが、系外惑星には天王星よりも小さいが地球の 5 倍ほどの質量を持つ *sub-Neptune-mass cool planets* が発見されており [1, 2]、ここでは *Ice VII* が主要なマントル

鉱物となっていると予想される。氷の高圧相の流動特性は、Poirier (1982) [3]に代表されるようにその重要性が以前から指摘されており、その後、ローレンスリバモア国立研の Durham らのグループが中心となって比較的高応力下、主に転位クリープ領域での Ice VI までのレオロジーが明らかにされた[4]。しかし、対流運動する氷天体内部の流動応力は極めて低い(0.1MPa 以下)とされており、そこでは別の流動機構が卓越する可能性が高い(図1)。

本発表では、最近 Ice I および Ice II で相次いで発見された低応力下で卓越する氷の流動機構[5-7]とその氷天体内部ダイナミクスへの意義[8-10]について、簡単にレビューする。余裕があれば、未だ全く明らかにされていない Ice VII のレオロジーに関して、Deformation DIA (D-DIA)高圧変形装置と X線回折もしくは中性子回折を組み合わせた塑性変形実験について、簡単に触れたい。

- [1] Beaulieu et al., Nature 439, 437 (2006)
- [2] Kerr, Science 311, 453 (2006)
- [3] Poirier, Nature 299, 683 (1982)
- [4] Durham et al., in Solar System Ices, 63-78 (1998)
- [5] Goldsby & Kohlstedt, Scr. Mater. 37, 1399 (1997)
- [6] Goldsby & Kohlstedt, J. Geophys. Res. 106, 11017 (2001)
- [7] Kubo et al., Science 311, 1267 (2006)
- [8] Pappalardo et al., Nature 391, 365 (1998)
- [9] McKinnon, Geophys. Res. Lett. 26, 951 (1999)
- [10] Sammonds, Science 311, 250 (2006)

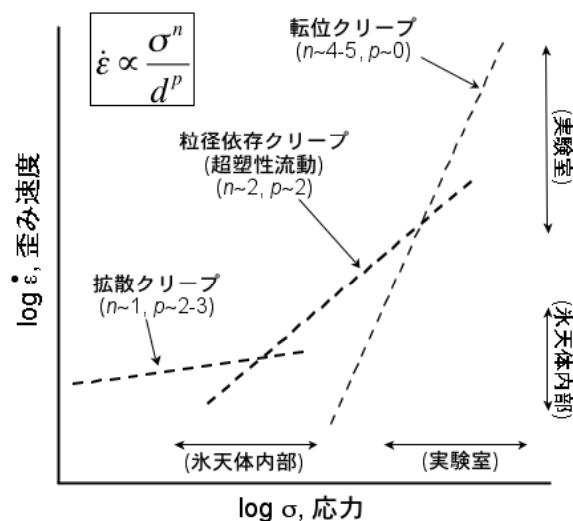


図1 氷の流動則に対する応力(σ)および結晶粒径(d)依存性

## ガスハイドレートの高圧安定性と相互作用

筑波大 地球進化 平井 寿子、町田 真一  
産総研 山本 佳孝、川村 太郎  
東大物性研 八木 健彦

ガスハイドレートは、水分子が水素結合で形成するケージ(ホストという)中に、ガス分子や原子(ゲストという)が内包されたクラスレートハイドレートと、氷の多形構造の隙間にゲストが侵入した filled ice 構造型のハイドレートがある。近年の高圧実験によって、さまざまなゲストのガスハイドレートの高圧相変化が明らかにされ、圧力とゲストサイズ依存のガスハイドレート相変化の概観が報告されている[1]。この中で、メタンハイドレート[2]と水素ハイドレートは際立った高圧安定性を示し、ホスト-ゲスト間の相互作用が安定性に寄与していることが予測される。我々の一連の研究では、メタンハイドレートに関しては、ラマン分光によって、メタン分子が高圧下で配向秩序化を起こし、これに誘引された相互作用が高圧安定性を保証していることを示した[3]。また、filled ice 構造型の水素ハイドレートに関しては、水分子の作るフレームワークと水素分子の間に相互作用が生じていることを見出した[4]。これらの分子間相互作用のほか、水素結合の対称化のような、水分子が作るフレームワーク自身の堅固化もガスハイドレートの高圧安定性に寄与する重要な要素と考えられる。現在、これらの相互作用は主に分光学的方法によって捕えられているが、中性子回折により水素の位置が直接求められれば、これらの議論はより明確になり、また、新しい物性研究が展開されると期待される。

- [1] H. Hirai et al., J. Phys. Chem. Solid, .65, 1555-1559 (2004).
- [2] H. Hirai et al., Phys. Rev. B, 68 [17], 172102-1-172102-4 (2003).
- [3] H. Hirai et al., Amer. Mineral., 91,826-830 (2006).
- [4] H. Hirai et al., J. Phys. Chem. B (2006) (in press).

# Theory and computation of hydrous minerals and melt under high pressure

愛媛大地球深部研 土屋 卓久

量子力学の基本原則から出発する第一原理計算法は、経験パラメータを一切用いないにもかかわらず様々な物質や化学結合に汎用的に適用可能なことから、特に実験が困難な極端条件下の物性研究において極めて有用な方法である。我々のグループでは、この第一原理電子状態シミュレーションの方法を用いて地球深部物質、含水ケイ酸塩、マグマ、などの高温高压物性に関する研究を行っている。その結果、これまでに主要マントル物質  $\text{SiO}_2$ ,  $(\text{Mg,Fe})\text{SiO}_3$ ,  $(\text{Mg,Fe})\text{O}$  の相平衡や熱弾性特性、高压含水鉱物  $\text{AlOOH}$ , phase D における高压水素結合状態などに関して成果が得られている。本発表で、これらの中から特定領域研究「高压中性子科学」に関係するものを紹介する。

## 水素ハイドレートの速い分子拡散 – 固体の中の液体 –

名古屋大学高等研究院 奥地 拓生

水素ハイドレートは  $\text{H}_2\text{O}$  と  $\text{H}_2$  の分子間化合物であり、この組合せに圧力を加えることにより合成される。それは大量の水素を吸収可能であり、また化学的にクリーンであるため、他の候補とも十分に競合しうる水素エネルギーの貯蔵物質として、将来が期待されている。さらに地球惑星科学の題材としては、太陽系外部の惑星・衛星をつくる“鉱物”として重要な物質である。しかし水素ハイドレートは常圧に置くと速やかに分解してしまうため、その詳しい性質の理解はあまり進んでいない。水素は  $\text{H}_2\text{O}$  分子がつくる格子の隙間にゲストとして取り込まれるが、このゲストの輸送に関する研究は特に遅れており、それが高压その場で測定された例はこれまでに存在しなかった。

我々は高压容器内でガスハイドレートを合成しながら、その場で同時に高分解能 NMR を行うことが可能な、新しい実験技術をつくってきた[1-4]。今回、構造が異なる三種の水素ハイドレート、つまり Type II クラスレート、filled-ice II、filled-ice Ic の各相について、この技術を応用して新たな結果を得ることができた。つまり超高压 NMR の手法によって、(1)非破壊で(2)試料を観察しながら(3)圧力を変化させつつ(4)定量、構造解析、分子運動解析を同時に行うことに成功した。NMR スペクトルは、化学シフトまたは緩和時間によって区別できる 3 つの成分 ( $\text{H}_2\text{O}$  中のプロトン、 $\text{H}_2$  気体、 $\text{H}_2$  ゲスト) から構成される。 $\text{H}_2$  気体と  $\text{H}_2$  ゲストはほぼ同じ化学シフトを持つが、互いに異なる緩和時間によって区別することができた。我々は 1 気圧から 4GPa までの複数圧力において、 $\text{H}_2$  ゲスト成分の緩和時間または磁場勾配を用いて、その拡散定数を測定した。いずれの結果も、格子中での水素の分子輸送は  $10^{-8}\text{cm}^2/\text{s}$  程度で、粘度の高い液体なみの値であり、固体中における拡散としては異常に速い値であることが示された。このような水素分子の速い拡散は、その合成・貯蔵・分解技術をつくる上で重要であるとともに、氷惑星・衛星の進化を考える上でも新しい示唆を与える。

本研究は、R.J. Hemley, H.K. Mao, J. Shu (Geophysical Laboratory, Carnegie Institution of Washington)、瀧川仁・八木健彦 (東京大学物性研究所) および J.A. Ripmeester, I.L. Moudrakovski (Steacie Institution of Molecular Sciences, National Research Council of Canada) との共同研究である。

[1] 奥地拓生, 高压力の科学と技術: 15, 324 (2005)

[2] Okuchi, T., et al., J. Chem. Phys. 122, 244509 (2005)

[3] Okuchi, T., et al., Rev. Sci. Instrum., 76, 026111 (2005)

[4] Okuchi, T. Phys. Earth Planet. Inter., 143, 611 (2004)

## メソポーラスシリカ内に吸着した水の構造とダイナミクス

高エネ機構 大友 季哉  
原子力機構 高田 慎一  
豊田中研 瀬戸山 徳彦、福島 喜章  
原子力機構 稲村 泰弘  
東大物性研 山室 修

層状シリケートであるカネマイトから合成された FSM16 (Folded Sheets Mesoporous materials) は、図 1 の写真の様に直径約 3nm の細孔が規則的に配列し、蜂の巣状の構造を形成している。特徴として、湿度変化によりその細孔内に水

分子が吸着・脱着することから、調湿材、水処理吸着材、溶剤回収材の用途に期待されている材料である。比表面積は  $1000\text{m}^2/\text{g}$  を越え、細孔容積は  $1\text{cc/g}$  にも達する。その細孔骨格はシリカガラスと同様に  $[\text{SiO}_4]$  ユニットがネットワーク状に結合しており、細孔内表面にはシラノール基 ( $-\text{Si}-\text{OH}$ ) が存在する。水蒸気圧を制御して FSM に水を吸着させると、図 1 の実線の様な吸着曲線が得られる。 $P/P_0=0.4$  (モノレイヤー層) 付近までは、シラノール基との水素結合により吸着し、 $P/P_0=0.5$  付近になると毛管凝集により急激に水分子が吸着し、フル充填されると考えられている。しかし、このような細孔内への水分子吸着機構及び細孔内吸着水の構造やダイナミクスの詳細は未だ解明されていないのが現状である。本研究では、まず図 1 等温吸着曲線の 2~7 に沿って FSM に水分子を吸着させ、中性子準弾性散乱装置 (AGNES) を用いて細孔内水分子の拡散係数を測定した。図 2 に吸着水量を考慮し、モノレイヤー層とそれ以降の水分子の運動を Jump Diffusion model を適用し解析した結果を示している。3 のモノレイヤー状態までの水の拡散係数は細孔表面から束縛 (シラノール基との水素結合) を受け、バルク水に対して約 3~4.5 倍遅くなっている。それ以降の水の拡散係数は急激に増大し、興味深いことにフル充填領域 (6,7) ではバルクの水の拡散係数に近い値になることがわかった。モノレイヤー層の水の FSM 細孔表面における構造に加え、FSM 骨格そのものの構造解析も開始した。骨格構造については、これまであまり着目されていないものの、静的構造因子  $S(Q)$  の First Sharp Diffraction Peak が、通常のシリカガラスと比較して高い  $Q$  領域にシフトしていることを中性子全散乱装置 (KENS-HIT) および中性子粉末回折装置 (JRR3M-HERMES) の実験で見出した。シリカガラスを高密度化した場合と同様の傾向である。中性子小角・広角散乱装置 (KENS-SWAN) により細孔が Hexagonal 配列していることによるブラッグ反射が観測されるが、コントラストマッチングにより細孔内に  $\text{H}_2\text{O}-\text{D}_2\text{O}$  溶液を吸着させることでブラッグ反射が消滅することを確認した。 $\text{H}_2\text{O}-\text{D}_2\text{O}$  溶液の密度が、 $1\text{ g/cc}$  程度であるならば、骨格構造の密度は  $2.4\text{ g/cc}$  程度と見積もられ、 $S(Q)$  のシフト量から見積もられる密度とはほぼ一致する。定量的な精度については検討を重ねる必要があり、ただちに高密度化しているとは言えないが、シリカ骨格自体もある意味で拘束下にあるために通常のシリカガラスとは異なる構造であることは十分に考えられる。

J-PARC では、高強度汎用全散乱装置により、小角領域から高角領域まで一挙に観測可能であり、骨格構造、水分子構造、細孔間相関まで一挙に観測可能である。とくに本実験のような in-situ 実験では、広い空間相関の同時観測は有効であると考えている。講演では、高強度汎用全散乱装置についても紹介する。

## 不規則系水素系物質の中性子構造解析

日本原子力研究開発機構 量子ビーム応用研究門 鈴谷 賢太郎

中性子散乱の最も優位な点の 1 つに、軽元素の (比) 干渉性散乱断面積が大きいこと、それ故にその位置を正確に捉えることができる点が挙げられる。特に今日のエネルギー材料あるいは生体物質における最も重要な元素の軽水素 (H) 原子を観察できる事は、X 線回折では (無理ではないが) 原理的に困難な事であり、中性子散乱の最大の特長のひとつとなっている。しかしながら、現実には H 原子と中性子の散乱過程に伴って生じる非弾性散乱効果と大きな非干渉性散乱 (バック・グラウンド) が、構造解析上多大な困難を引き起こすため、これまで H 原子を多量に含む結晶、溶液および非晶質系物質の中性子散乱による構造解析は中性子散乱の研究課題から注意深く避けられてきた。そうして、それを行うためには、多大な労力と予算が、重水素 (D) 置換された試料を用意することに費やされてきた。しかし今日、H 原子を多量に含む結晶、溶液および非晶質物質の構造解析には、科学的にも社会的にも要請の非常に高い重要な研究テーマが多数存在する。特に、X 線回折だけでは十分な解析が困難である生命現象の解明に不可欠なたんぱく質や核酸を含む溶液、新しい機能を有する非晶質高分子や液晶材料、そして水素エネルギー利用に関わる燃料電池、水素吸蔵物質などの水素系物質の原子レベルの構造解析に関わる研究者の中性子回折への期待は切実である。本発表では、上記の水素に関する困難を克服するための J-PARC 中性子回折装置設計における試み (水素系全散乱装置の提案)、新しいデータ解析法の提案 (null-H(D) $_2$ O 法)、や海外の水素系物質の研究状況や水素系に特化した全散乱装置の状況などについて報告する。

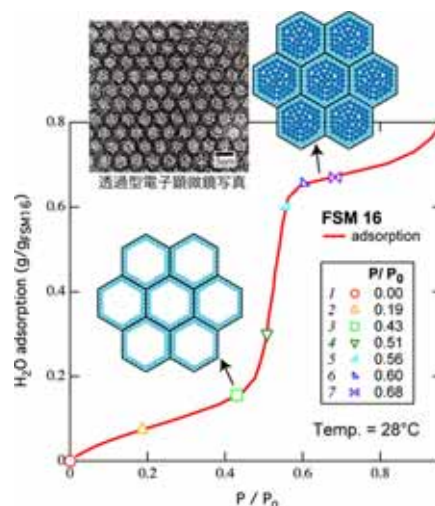


図1 FSM16 の TEM 写真、等温吸着曲線及び吸着過程の模式図 (モノレイヤー、フル充填状態)。縦軸:試料 1g 当たりの吸着量。横軸:比蒸気圧 (飽和蒸気圧  $P_0$ )。

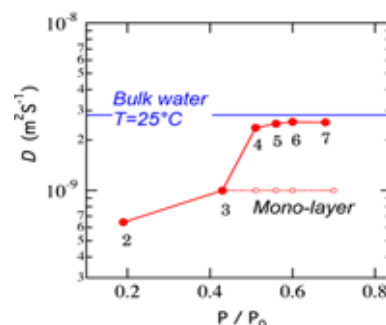


図2 各点 (図 1,2~7) の拡散係数の値。青実線はバルク水の拡散係数の値。

## 中性子非弾性散乱でみた液体 Se-Te 系の構造

慶大理工 千葉 文野  
京大院理 大政 義典、八尾 誠

セレンとテルルは、結晶相においては共に 2 配位鎖状の構造をとる半導体である。一方融点直上での液体セレンは  $10^5$  程度の原子から構成される高分子であり典型的な液体半導体であるのに対し、液体テルルは数原子程度の短い鎖分子で構成される液体金属である。両者で構成される液体混合系は、温度上昇に伴い半導体から金属へ転移し、その転移温度はセレン濃度が高いほど上昇する。本研究では、液体カルコゲン系の半導体 - 金属転移に起因するダイナミクスの変化を、中性子散乱測定によって、 $\sim \text{\AA}$  の空間スケール、 $\sim \text{ps}$  の時間スケールで明らかにすることを目指した。

実験は、英国、ラザフォード・アップルトン研究所の装置 MARI を用いて中性子散乱測定を行った。その結果、振動運動、拡散運動、単一粒子的運動、それぞれについて、半導体 - 金属転移に起因する変化を観測した。

また、半導体 - 金属転移に関する結果に加え、エネルギー - 波数空間における液体の光学的振動モードの振舞いについて、簡単なモデルによる解釈を行った。一般に、複雑液体やアモルファスの光学的振動モードのエネルギー - 波数空間における振舞いについて、定性的な解釈はこれまでに行われているが、定量的解釈は困難であることが多い。しかし、我々の系は半導体相では孤立鎖的であることが知られており、特に液体 Se についてはその静的・動的構造が実験・理論両面から多く研究されていて、定量的解釈を行うことができる可能性がある。実際、観測された結合伸縮モードの強度の波数依存性の特徴を、単純なモデルを仮定することで再現できることが分かった。同様の解析を液体  $\text{Te}_{50}\text{Se}_{50}$  の半導体相にも適用できることを示した。

## Palm Cubic Anvil 圧力発生装置を用いた中性回折実験の試み

東京大学物性研究所 小林 広貴、小枝 真仁、上床 美也  
琉球大学理学部 辺土 正人  
産業技術研究所 池田 伸一  
住友重機械 田渡 正史、高木 克啓

低温物性測定用に毛利教授(現:放送大学)により開発された Cubic Anvil 圧力発生装置[1]は、低温においてもより良い静水圧性を実現する装置として定評がある[1]。この装置の発生圧力は焼結ダイヤモンドを用いることにより約 11GPa まで可能であり、温度は約 1.8K 程度まで冷却できる。また、高温高圧物性研究においても、回折実験等に用いられ多くの成果をもたらしている。

我々は、最近、静水圧性および発生圧力を犠牲にせず、より低温に冷却可能な小型の圧力発生装置として図 1 に示されている様な、Palm Cubic Anvil 圧力発生装置を開発した。写真は作製したガイドブロックとスライディングブロックを組み合わせ、手のひらに乗せた写真である。ガイドブロックの外径は 80 mm  $\phi$ 、加圧方式はクランプ式とし、その時の全体の大きさは 108mm  $\phi$  (外形) x 175mm (高さ) となった。まず始めに、Bi と Te の圧力誘起構造相転移により室温における荷重に対する発生圧力をチェックした。図 2 に示されているように、室温において約 8GPa 程度の圧力発生が可能であり、その時の加重は約 80ton であった。また、低温における発生圧力は Pb の超伝導転移温度によりチェックした。最終的には  $^3\text{He}$  冷凍機を使用し、0.5K 程度での測定を目標としている。

講演では、この装置を中性子回折用圧力発生装置としての可能性について考察する。

[1]N.Mori et al.:High Pressure Research 24,225 (2004)



Fig.1 The palm cubic anvil cell.

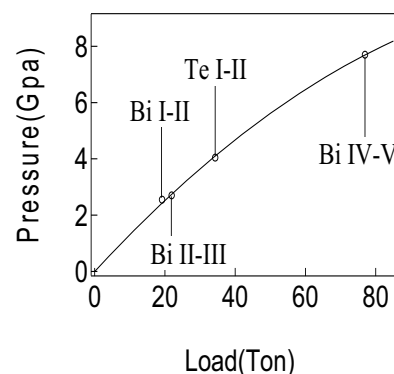


Fig.2 Load-Pressure curve at room temperature



## 水素が鍵を握る金属水素化物の圧力誘起構造・電子転移

日本原子力研究開発機構量子ビーム応用研究部門放射光ユニット 青木 勝敏

希土類金属 (La, Y) は水素化反応によって絶縁体に転移することが知られている。水素原子は hcp もしくは fcc 金属格子の四面体サイトをまず占有し (MH<sub>2</sub>)、次に八面体サイトを占有する (MH<sub>3</sub>)。金属-絶縁体 (M-I) 転移は 3 水素化物形成過程で起こり、バンドギャップ ~2eV の可視光領域で透明な絶縁体が生成する。3 水素化物の電子バンド構造計算による M-I 転移の機構解明研究は転移が発見された 1996 年以降、精力的に行なわれているが ~2eV のギャップ形成の由来については未だに議論があるようである。

高圧研究の目的は二つである。絶縁体である 3 水素化物を加圧し、金属格子の収縮あるいは構造転移に伴う光学ギャップを測定し、構造と電子状態の関係を系統的に調べることで、より高い圧力下で 3 水素化物のバンドギャップを閉じ、金属状態を実現することである。s(H)-d(Y) 混成によってギャップが開いて絶縁体になる、というバンド計算の結果から、高圧下でバンドオーバーラップによって出現する金属は水素の 1s 軌道がフェルミ面形成に関与した「1s 金属」として特徴付けられるであろう。

ダイヤモンドアンビルセル (DAC) を用いて、流体水素と金属の高圧反応による水素化物の合成と放射光 X 線回折による高圧結晶構造測定および光吸収測定による水素-金属結合状態と電子遷移状態の観測を、Sc、Y、La を対象に室温下、~50 GPa までの圧力領域で行なった。その中で、YH<sub>3</sub> は 10GPa 付近で hcp から fcc に向けての構造相転移を、さらに高圧 fcc 相は 23GPa でバンドギャップクロージャーを起すことが観測されている。想定外の現象として低圧 hcp 相 (<10GPa) と高圧 fcc 相 (20GPa<) の間に圧力幅 10GPa に渡って遷移相が観測されている。転移に伴う金属面の積層シークエンス変化が水素によってピン止めされ、その結果段階的に転移が進む新しい機構による転移であると推測している。また、加圧によって 2 水素化物が 1 水素化物と 3 水素化物に可逆的に分解する反応も観測されており、金属格子内での水素移動が容易に起こることが示唆されている。これらの高圧下で出現する電子転移、構造相転移、分解反応はいずれも水素が主役を担っており、機構解明には中性子回折による水素位置の決定が不可欠である。高圧中性子回折実験の環境整備が強く望まれる。

### 参考文献

- A. Ohmura et. al., Infrared spectroscopic study of the band-gap closure in YH<sub>3</sub> at high pressure, Phys. Rev. B, 73, 104105(2006).
- A. Machida et. al., X-ray diffraction investigation of the hexagonal-fcc structural transition in yttrium trihydride under hydrostatic pressure, Solid State Commun., 138, (2006)436.

## 物性研究所短期研究会

# ガラス転移の統一概念：諸理論の相互関係と実験的検証

日時：2006年11月20日(月)～11月22日(水)

会場：東京大学物性研究所本館講義室

提案代表者 小田垣 孝 (九州大学)  
共同提案者 片岡 幹雄 (奈良先端科学技術大学院大学)  
金谷 利治 (京都大学)  
川村 光 (大阪大学)  
笹井 理生 (名古屋大学)  
辛 埴 (東京大学)  
鈴木 徹 (東京海洋大学)  
高山 一 (東京大学)  
深尾 浩次 (京都工芸繊維大学)  
藤川 清三 (北海道大学)  
松井 淳 (九州大学)  
山室 修 (東京大学)

ガラス転移は、現在未解決の科学上の重要な課題の一つである。1980年代後半から1990年代にかけて実験の進歩とモード結合理論(MCT)によって牽引されたガラス転移研究は、21世紀になって第2の段階に入った。この5年間に開催されたガラス転移関係の国際会議は、例えば2001年(クレタ島)、2005年(リール)のInternational Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems(IDMRCS)、2002年、2006年(ピサ)のWorkshop on Non Equilibrium Phenomena in Supercooled Fluids, Glasses and Amorphous Materials (WNEP)、2002年(ローマ)、2004年(バンガロール)のUnifying Concepts in Glass Physics(UCGP)などを挙げることができる。これらの国際会議では、MCTからランドスケープへという流れが生まれてきた。

このような世界の動向の中で、我が国においても種々学会のシンポジウムの他に、様々の分野の研究者を招いた短期研究会を東京大学物性研究所の支援を得て過去2002年(「ガラス物性およびガラス転移研究の新展開」)および2004年(「極端非平衡系の物性とエネルギーランドスケープ」)に開催した。

今年度は、これらの2回の短期研究会を受けて、この2年間における各分野における成果と世界的な動向を共有するために、諸理論の相互関係と実験的検証を主題として、次の趣旨で短期研究会を開催することとした。

### 研究会の趣旨：

ガラス転移に関する研究における理論・実験の双方で残存する問題点を明確にすること、それらを参加者全員で共有することに主眼をおく。エネルギーランドスケープ描像をはじめとするガラス転移の諸理論の相互関係を整理し、最近の実験結果をもとに、具体的な検証可能性を検討する。

会議には、全国から様々な分野の研究者が延べ158名(初日52名、2日目67名、3日目39名)参加し、口頭発表31件、ポスター発表15件の講演が行われた。理論的枠組みの構築、実験手法の改善、実験対象の拡大などガラス転移の本質的な理解に向けて、我が国における研究が着実に発展していることが示された。また、各講演に対する議論が大変活発に行われ、新しいテーマが設定されるなど研究会として大きな成果があった。

## プログラム

11/20(月)

10:00～12:10 座長 松井 淳 (九州大学)

研究会の趣旨について (10分) 提案代表者 小田垣 孝 九州大学大学院理学研究院

20a-1 小田垣 孝 九州大学大学院理学研究院  
ガラス転移の自由エネルギーランドスケープ描像

20a-3 野寄 龍介 北海道大学大学院理学研究院  
ガラス転移にともなう誘電緩和 –主緩和過程と副緩和過程–

20-a4 松田 裕 筑波大学教理工物質科学研究科  
温度変調型 DSC を用いたリチウムホウ酸塩ガラス系の拡張指数型緩和の研究

20-a5 猿山 靖夫 京都工芸繊維大学高分子機能工学専攻  
温度変調法による高分子ガラスの熱容量と膨張率の同時測定

昼 休 み

13:30～15:00 座長 深尾 浩次 (京都工芸繊維大学)

20p-1 鈴木 徹 東京海洋大学食品生産科学科  
食品のガラス状態転移とその利用

20p-2 田中 大介 (独)農業生物資源研究所  
ガラス化による植物茎頂の保存

20p-3 蓑口あゆみ 北海道大学大学院理学研究院  
ガラス転移の分子ダイナミクスに見る生命現象の動的素過程

15:20～16:50 座長 野寄 龍介 (北海道大学)

20p-4 綿貫 竜太 横浜国立大学大学院工学研究院  
磁性イオン液体  $\text{bmim}[\text{FeCl}_4]$  の構造ガラス中におけるスピングラス

20p-5 田中 肇 東京大学生産技術研究所  
単一成分からなる分子性液体の液体・液体転移とそのキネティクス

20p-6 松本 正和 名古屋大学物質科学国際研究センター  
低密度水とは何か ～水の特異な物性の起源を探る～

17:10～19:10 座長 山室 修 (東京大学物性研究所)

20p-7 原田 慈久 独立行政法人理化学研究所  
軟 X 線分光で見る水の水素結合

20p-8 中川 洋 日本原子力研究開発機構  
非干渉性中性子非弾性散乱によるタンパク質ダイナミクスの水和効果

20p-9 笹井 理生 名古屋大学工学研究科  
蛋白質の動的転移と光シグナル受容

20p-10 高田 章 旭硝子株式会社中央研究所  
シリカガラスの局所構造変化に関する分子動力学シミュレーション

11/21(火)

10:00~12:00 座長 笹井 理生 (名古屋大学)

- 21a-1 村中 正 愛知工業大学基礎教育センター  
モデル分子の液体での長時間緩和
- 21a-2 鄭 誠虎 分子科学研究所  
Molecular-dynamics simulation study on the nature of glassy reorientational dynamics
- 21a-3 宮崎 州正 高知工科大学総合研究所ナノ創製センター  
過冷却液体における動的相関の微視的理論
- 21a-4 佐々 真一 東大院総合文化研究科  
特異摂動法によるガラス転移の理論

昼 休 み

13:00~15:00 座長 小田垣 孝 (九州大学)

- 21p-1 胡 曉 物質・材料研究機構  
超伝導磁束系のガラス状態
- 21p-2 吉野 元 大阪大学大学院理学研究科  
ガラス系のメソスコピックなスケールでの非線形応答
- 21p-3 川村 光 阪大理  
スピングラスとカイラリティ
- 21p-4 能川 知昭 北海道大学大学院工学研究科  
ランダム磁場 XY モデルにおけるガラス的な非平衡緩和のサイズスケーリング

ポスター発表 15:00~16:30 座長 藤川 清三 (北海道大学)

6:40~18:10 座長 川村 光 (大阪大学)

- 21p-5 小國 正晴 東京工業大学  
シリカゲル細孔中に閉じ込めた水のガラス転移挙動
- 21p-6 深尾 浩次 京都工芸繊維大学  
ラベルしたポリスチレン薄膜のガラス転移とダイナミクス
- 21p-7 松井 淳 九大物理  
分子動力学シミュレーションによるガラス転移近傍の協同再配置領域の考察

懇談会 18:30~20:30 於カフェテリア

国際会議開催に向けた話し合いと打合せ

11/22(水)

9:30~11:30 座長 金谷 利治 (京都大学化学研究所)

- 20a-2 高野 光則 早稲田大学理工学部物理学科  
アクトミオン分子モーターのエネルギー地形と動作機構
- 22a-1 古沢 浩 高知工科大学  
強相関カウンターイオン系の平均場方程式：相関場アプローチ
- 22a-2 山室 修 東京大学物性研究所  
イオン液体のガラス転移と低振動数ダイナミクス

22a-3 巾崎 潤子 東京工業大学  
イオン伝導性ガラスにおけるイオンダイナミクスの動的不均一性

11 : 50~12 : 50 座長 松井 淳 (九州大学)

22a-4 金谷 利治 京都大学化学研究所  
高分子薄膜のガラス転移—動的異方性と不均一性

22a-5 高山 一 東京大学物性研究所  
スピニングラス磁場中磁化の特異なスローダイナミックス

=====  
ポスター発表のリスト 15 件

PS-1 松下 勝義 NIMS  
ランダムに配置されたピン止め磁場中の磁壁運動

PS-2 金 鋼 分子科学研究所計算分子科学研究  
コロイド分散系における(電気)流体力学現象のシミュレーション

PS-3 赤石 暁 首都大学東京理工学研究科物理学  
bouncing ball orbits のあるビリヤード系の再帰時間分布

PS-4 鳴海 孝之 東北大学工学研究科ナノメカニクス  
分子動力学シミュレーションによる過冷却液体特性

PS-5 浴本 亨 九州大学大学院理学府凝縮系科学専攻  
自由エネルギーランドスケープ描像における、速い緩和と遅い緩和

PS-6 野村 祐喜 日本大学理工学研究科物理学専攻  
二次元二重交換モデルの基底状態におけるスピニングラス

PS-7 森下 徹也 産業技術総合研究所計算科学研究部門  
アモルファス及び過冷却液体 Si の構造変化：第一原理 MD による Si のポリアモルフィズムの解明

PS-8 田川 文隆 九州大学大学院理学府凝縮系科学専攻  
ガラス形成物質における非線形エネルギー応答と複素比熱

PS-9 川井 清司 独立行政法人食品総合研究所  
牛血清アルブミンのガラス転移に及ぼす水分含量の影響

PS-10 与那嶺 亮 東京大学物性研究所  
ビイミダゾール型金属錯体多孔質結晶内のウォーターナノチューブのダイナミクス

PS-11 染谷 武紀 東京大学物性研究所  
イオンゲルPMMA/EMITFSIのガラス転移とイオン拡散機構

PS-12 小西 隆士 東京大学生産技術研究所  
ガラス転移温度付近での結晶化挙動

PS-13 新谷 寛 東京大学生産技術研究所  
結晶的中距離秩序と動的不均一性の関連

PS-14 川崎 猛史 東京大学生産技術研究所  
コロイドガラスにおける動的不均一性

PS-15 渡辺 敬司 東京大学生産技術研究所  
駆動下 2 次粉粒体系の状態遷移

## ガラス転移の自由エネルギーランドスケープ描像

九大院理 小田垣 孝

自由エネルギーランドスケープ描像は、ガラス転移の動的および熱力学的特徴を統一的に説明する考え方として注目されている。まずこれまでの現象論に基づく結果を概観し、ついで密度汎関数理論を用いたランドスケープの構築およびその特徴について説明する。ガラス転移の本質論的な理解に向けて、遅い緩和・速い緩和がいかに理解されるかまた今後の方向性について考察を行う。

## ガラス転移にともなう誘電緩和 —主緩和過程と副緩和過程—

北大理 野寄 龍介

ガラス転移とは、結晶化といった明瞭な構造変化を伴うことなく液体が硬くなる現象である。液体—過冷却液体—ガラスという冷却過程で構造に大した変化はないが、粘性率のような動的パラメータは十数桁以上も変化する。極性物質では、このような動的側面は誘電緩和過程として研究することができる。とは言っても、誘電緩和周波数が何桁も変化するダイナミクスの全貌を直接観測できるようになったのは最近のことで、以前の研究では技術的にカバーしきれない測定周波数範囲を温度時間換算側で補った。ある周波数における誘電損失あるいは損失率の温度依存性を測定すると、温度の低下とともに複数の誘電異常(誘電緩和過程)が観測される。緩和過程には現れる順番に $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$ ・・・と記号をふっていった。その後、普遍的にかつ明瞭に観測される $\alpha$ 緩和過程は非アレニウス過程で、粘性率などに対応しているガラス転移に直接かかわっているものとわかった。それを主緩和過程と呼び、それより低温側(高周波側)に現れるアレニウス過程を副緩和過程と呼ぶようになった。初期の研究では応用上の重要性から高分子物質が多く取り上げられ、複数見つかった副緩和過程は分子内自由度と結び付けられることが多かった。その後、研究される物質数が飛躍的に増大し、単純な分子にも副緩和があるという傾向や内部自由度がない分子にも副緩和が観測されることもわかった。現在では、普遍的に存在する副緩和過程を JG  $\beta$ 過程(Johari と Goldstein の初期研究から)、それ以外を non-JG  $\beta$ 過程と区別することが多い。これらの分子論的起源であるが、主( $\alpha$ )過程は分子の協同運動で non-JG  $\beta$ 過程は分子内自由度という認識が一般的であると思われる。一方、JG  $\beta$ 過程については関与している分子の割合の議論も含めていくつかの提案があるが、 $\alpha$ 過程とともにガラス転移に本質的であるという最近の主張は注目される。

## 温度変調型 DSC を用いたリチウムホウ酸塩ガラス系の拡張指数型緩和の研究

筑波大数理物質科学研究科 松田 裕、布川 泰輝、池 祐治、小島 誠治

液体-ガラス転移現象における未解決な問題の 1 つとして、主緩和( $\alpha$ -緩和)の緩和関数が非指数関数となることがあげられる。経験的には、拡張型指数関数(Stretched exponential)、もしくは Kohlrausch-Williams-Watts(KWW) 関数と呼ばれる関数で、うまく再現できることが知られている。これは、緩和時間の分布と関連があると考えられるが、その起源についてはまだ明らかにはなっていない。本研究では、リチウムホウ酸塩ガラスの過冷却状態におけるガラス転移点近傍の熱緩和を温度変調型示差走査熱量計(MDSC)によって観測し、KWW 関数のパラメータである $\beta$ (KWW)の組成依存性を調べた。MDSC は 1993 年に実用化された比較的新しい実験手法である。通常の DSC で用いられるリニア昇温/降温の上にサイン型の温度波を重畳した昇温/降温プログラムが用いられる。温度変調に対する応答から動的感受率として、複素比熱容量を観測することができる。実験装置として、TA Instruments 社の DSC2920 を用いた。ベースとなるリニア昇温温度 1°C/min に対して、周期 100 秒・振幅 $\pm 1^\circ\text{C}$ のサイン波を重畳した。観測された複素比熱の実部と虚部の Cole-Cole プロットを行い、Havriliak-Negami(HN) 式で解析した(注：ここでは系に加える温度波の周波数を固定して、温度(緩和時間)を走査している)。実験結果は HN 式により、よく再現された。HN 式のパラメータから、 $\beta$ (KWW)の値を求め、その組成依存性を調べた。LiB-G では、添加するアルカリ金属の量に応じて、ホウ素の配位数が 3 から 4 に変化し、それに伴って構造単位が変化することが報告されている。LiB-G を構成するホウ素の配位数変化と $\beta$ (KWW)の間に明確な相関関係があることを見いだした。

## 温度変調法による高分子ガラスの熱容量と膨張率の同時測定

京工織大 猿山 靖夫、竹川 浩司、深尾 浩次

ガラス転移温度において、熱容量、膨張率が段階的に変化することはよく知られている。これらの量は、ガラス転移を特徴づけるスローダイナミックスのあらゆるモードに直接に関係していると考えられる。この点で、特定の応力と変形を結びつける弾性率、あるいは電気双極子の運動モードに注目する誘電率に比べて、より広範な運動を反映していると言える。従って、熱容量と膨張率の比較は、スローダイナミックスの研究に有用な情報を与えるものと期待されるが、異なる物性量の比較には、常に試料の熱履歴の同一性が問題になる。同時測定は、この問題に対する最も効果的な解決法である。本研究では、温度変調法を利用した熱容量と膨張率の同時測定装置を開発し、ポリスチレンのガラス転移に適用した。本報告では、エイジング効果に注目して、測定結果を示すことにしたい。

## ガラス化による植物茎頂の保存

(独)農業生物資源研究所 田中 大介

植物遺伝資源の長期保存法は、種子によるものが一般的である。それは、常温下において組織細胞がガラス状態にあるため管理状態さえ良ければ長期保存可能だからである。しかしながら、種子で保存できない植物は世界中に多く存在する。熱帯地域の植物の多くは種子が温度変化や乾燥に耐えられないため保存が難しく‘難貯蔵性種子’と呼ばれる。また、イモをはじめとした栄養繁殖性植物や、栄養繁殖でしか農業的優良形質を維持できない果樹類の長期保存法は、実際に樹木や作物を森や畑で栽培しなければならず保存が困難である。これらの遺伝資源に保存重要性の優先順位をつけた場合、世界で主に食べられているいくつかの作物種あるいは果樹類に絞られてしまう。未利用遺伝資源には、医薬品の成分になるような予想もつかない価値を持つものも含まれる。既存の植物細胞の超低温保存の研究では、液体窒素中に保存される植物材料の状態や細胞の生死と関連した形態的变化などについては、全く解析がおこなわれてこなかった。植物種を問わず高い生存率を維持できる保存法を開発するためには、細胞の液体窒素保存時の応答に関する基礎的知見を得た後、効率的に多くの種(あるいは、品種・系統)を保存できる普遍的で簡便な方法の設定をおこなうことが必須である。そこで、液体窒素中の-196℃で保存される植物茎頂の細胞微細構造変化を調べるため、ガラス化およびビーズガラス化法による超低温保存過程の段階別条件を変えて、超低温処理した茎頂を電子顕微鏡によって、超低温下における細胞の生存と微細構造ならびに細胞内の水の挙動について解析をおこなった。その結果、細胞内からの脱水が不十分な場合には、冷却中に細胞内に大きな氷晶が無数に形成され、細胞内に不可逆的な物理的傷害を引き起こしていることが分かった。一方、ガラス化溶液を適当な時間処理し生存率を高く保つと、原形質分離が起こり細胞内に小胞形成が認められるものの細胞内には全く氷晶は観察されないことから、細胞がガラス化していると考えられた。

## ガラス転移の分子ダイナミクスに見る生命現象の動的素過程

北大理 蓑口 あゆみ、野寄 龍介

生命の起源あるいはその存在の問題は、生命の存在を前提に議論することは出来ないもので、物理学や化学の問題である。つまり、単に生物を掘り下げていくのではない、分子レベルの物性物理学的あるいは化学的アプローチが必要である。糖、糖アルコール、アミノ酸、ヌクレオシド、脂質といった生命現象を支える基本分子、あるいはこれらの出発化合物の起源に対する化学的アプローチは長い歴史をもつ。最近ではこれらの地球外合成を示す研究成果が多い。一方、これまでの物理学的アプローチは、構造(リン脂質-水系の自己組織化など)や情報(ゲノム)を中心に行われてきた。しかし、生命現象は本質的に動的過程であり、そのダイナミクスの研究は、生命の起源あるいはその存在の問題を解明するために必要不可欠である。この場合、生命現象を支える基本分子が作る単純な系の分子ダイナミクスを調べることが重要である。なぜなら、基本分子のみが関わるダイナミクスは、生命現象の動的素過程という概念に結びつくからである。

糖アルコールと水の系は、生命の基盤らしさを失わない最も単純な系の一つである。その分子ダイナミクスを、主として超広帯域誘電分光法により多角的に研究した結果、糖アルコール・その相互混合系・水混合系のガラス転移に関わる分子ダイナミクスは、温度だけでなく分子量・平均分子量・水含有量などの異なるパラメーターで制御されることが分かつ

た。糖アルコール混合系におけるバルクと界面近傍における分子ダイナミクスの違いは、水分量や平均分子量の違いと統一的に理解することが出来、そのダイナミクスは、生物の様々な場面に取り込まれていると考えることが出来る。これは、生命が過冷却液体のガラス転移に関わる分子ダイナミクスを巧みに利用していることを示唆する。

## 単一成分からなる分子性液体の液体・液体転移とそのキネティクス

東大生研 田中 肇、栗田 玲

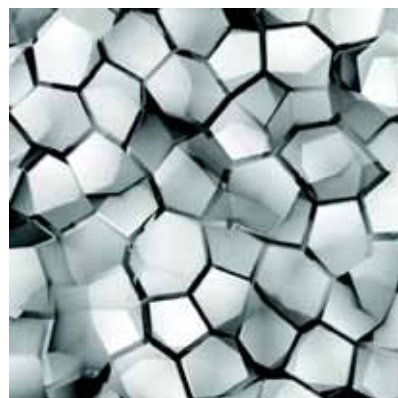
液体は、乱雑かつ一様な粒子配列をもつ、気体以外では唯一の物質の熱力学安定相であると考えられてきた。最近この常識に反し、単一原子または分子種からなる物質に、2 つ以上の液体状態が存在することを示唆する実験結果が報告されている。このような液体状態間の一次相転移は液体・液体相転移と呼ばれる。我々は、最近亜磷酸トリフェニル (TPP)、*n*-ブタノールといった単一分子種からなる有機液体において、分子性液体としては初めての液体・液体転移を発見した。さらに、実際に液体 I が液体 II に変化する過程を直接観察することに成功し、その転移様式に、核形成・成長様式とスピノーダル分解様式が存在することを見出した。前者の場合、液体 I の中に液体 II が小さな核として出現しそれが成長することで最終的に液体 I が全て液体 II になる。これに対し後者では、液体 I 全体が不安定化し、連続的に徐々に液体 II に変化する。ここでは、この興味深い現象についての最新情報を紹介するとともに、ガラス転移現象など液体における他の未解明現象との関係についても議論する予定である。

## 低密度水とは何か ～水の特異な物性の起源を探る～

名古屋大学物質科学国際研究センター 松本 正和

水は数多くの特異な物性を持つことで知られているが、近年の研究により、それらの多くは、水のネットワーク形成性に帰着することがわかってきた。我々は、ネットワーク性液体に特有な液液相転移、特に低密度液相に注目し、この相がどのような(中距離)秩序を持つのかを詳細に調べた。まず、フラグメント構造を定義した。その結果、結晶氷の構造がごく少数のフラグメントに分解できるのと同様に、低密度水の構造は、フラグメントの集合体に分解することができることがわかった。低密度水特有の様々な物性、あるいは常温の水の物性は、このフラグメントの集団の構造やトポロジーと結びつけられると考えられる。

右図には低密度水をフラグメントに分解したものを示す。フラグメントが排他的に空間を充填している様子がわかる。



## 軟X線分光で見る水の水素結合

理研 SPring-8A、広大 B、東大物性研 C 原田 慈久 A、徳島 高 A、高橋 修 B、宮嶋 良治 A、辛 埴 AC

軟 X 線吸収・発光分光は内殻励起を用いて元素選択的に価電子状態を見る手法であり、半導体や超伝導体など、主に固体試料の電子状態を元素弁別して見ることでできる手法として、光電子分光と相補的に用いられてきた。我々は、真空と相性の悪い溶液試料の軟 X 線吸収・発光分光を行えるシステムを SPring-8 理研専用ビームライン BL17 に構築し、水及び重水の電子状態の研究を行っている。O1s 内殻吸収・発光分光を水に適用すると、水素結合に敏感な O2p 電子状態の情報が得られる。O2p 軌道は水と周りの分子(水分子を含む)間の相互作用を最も強く反映する軌道であり、水の構造と密接に関連して水素結合の変化、溶質の水や水と界面の相互作用などの情報を与える。

2002 年に Guo らによって行われた水の測定[1] は、ランダムな水和の効果で水分子の占有軌道に幅がついたものとして説明されたが、我々の得た高分解能スペクトルでは、価電子トップの幅の狭い非結合性軌道が約 0.7eV 間隔で 2 つに



分裂し、液体の水の中に明確に異なる 2 つの環境があることが示された。温度依存性及び励起エネルギー依存性の結果から、これらは氷様の 4 配位の状態と、水素供与側の水素結合が切れた 2 ないし 3 配位の状態であることがわかった。さらに、水 1 分子あたりの平均水素結合数が見積もられ、3 よりも小さいという結果が得られた。

現在さらに結晶水、アモルファス氷へ適用するためのシステムを構築中である。

[1] J.-H. Guo, Y. Luo, A. Augustsson, J. -E. Rubensson, C. Sathe, H. Agren, H. Siegbahn, and J. Nordgren, Phys. Rev. Lett. 89, 137402 (2002).

## 非干渉性中性子非弾性散乱によるタンパク質ダイナミクスの水和効果

原子力機構 A、東大分生研 B、奈良先端大 C

中川 洋 A、城地 保昌 B、北尾 彰朗 B、柴田 薫 A、郷 信広 A、片岡 幹雄 A・C

タンパク質のダイナミクスは周りの水和環境に影響を受けることはよく知られている。本研究では、タンパク質ダイナミクスの特徴であるボソピークや動力学転移が水和とどのように関わっているのかを中性子非弾性散乱により調べた。極低温では 3~4meV にボソピークが観測され、ピーク位置は水和により高エネルギー側へシフトすることが分かった。ボソピーク近傍のスペクトルが示すタンパク質の低振動モードは調和振動的であり、ピークのシフトからそのばね定数は水和量が多いほど大きくなると言える。これは水素結合を介した水和水とタンパク質の相互作用によってタンパク質の低振動モードのエネルギー地形がより凸凹になったことに起因し、このことはシミュレーションからの理論的な予測 (Y.Joti et al., 2005) と一致する。一方、水和量が約 0.2(g water/g protein) 以上で 240K 付近において動力学転移が観測された。なぜ動力学転移が水和依存的に生じるのかを調べるために、中性子散乱の同位体効果を利用して水和水のダイナミクスを直接観測した。その結果、転移温度以下の低温では水和量に関係なくタンパク質と水分子の揺らぎの大きさはほぼ同じであった。また転移が生じない低い水和量の場合では転移温度以上でもやはりタンパク質とほぼ同じであった。一方、動力学転移が生じる時には同時に水和水の揺らぎが大きくなっていることが明らかになった。高い水和量で生じるタンパク質表面の水分子の特異的なダイナミクスが、タンパク質と水分子の界面に存在する水素結合ネットワークを介してタンパク質の振動モードと相互作用し、その結果動力学転移が生じると考えている。

## 蛋白質の動的転移と光シグナル受容

名古屋大学、計算理工学専攻 伊藤 一仁、笹井 理生

多くの蛋白質が 200K 前後でガラス転移を起こす。これは、200K 程度に温度が上昇することで蛋白質構造ゆらぎの低振動数・長波長モードに非調和的效果が顕著になり、実効的な弾性定数が小さくなるソフト化が生じる動的転移であると考えられている。同様な動的転移が常温での光吸収によっても生じる可能性を考えたい。蛋白質に付属した色素が光子を吸収して励起されると周囲の構造に無理が生じるが、この緊張は低振動数・長波長モードのソフト化によって緩和され自由エネルギーが低下する。さらに、ソフト化は色素と離れた場所の部分的アンフォールディングによって惹き起こされる可能性がある。こうして光シグナル受容が蛋白質中の離れた場所をアンフォールドするシナリオについて検討したい。

## シリカガラスの局所構造変化に関する分子動力学シミュレーション

旭硝子株式会社中央研究所 高田 章

シリカガラスのような四面体がネットワークを構成するガラスには密度異常、体積弾性率異常等の学術的にも工業的にも興味深い特性が多い。密度異常は温度上昇とともに膨張係数が負となる現象であり、体積弾性率異常は体積弾性率が温度上昇とともに増加し、圧力負荷とともに減少する現象であり、通常材料とは逆の振る舞いを示すことが知られている。最近開発した局所構造変化の解析手法 ('Structon Analysis' と呼ぶ) を用いて結晶及び非結晶体の中で起こっていると推定される構造変化の研究を行ったのでここに報告する。

## モデル分子の液体での長時間緩和

愛知工業大学 村中 正

stretch, bend, torsion の分子内の内部構造を持っている(DREIDING)100 原子分子のモデル分子を考え、その分子を 3,200 分子含んだモデルシステムの分子動力学シミュレーションを行った。体積一定のシミュレーションであり、以前に行った 20 原子分子のモデル分子と同じ密度 0.9g/mol としたため、一辺が約 20nm の立方体となる。以前は約 10nm にて行ったため、8 倍のシステムサイズで行っている。バルクのシミュレーションを行うため、周期境界条件を課しているため、分子が伸びきった際に、分子の一端が不自然に他端を動かしてしまう事を避けるためにシステムサイズを大きくした。

初期配置が出来上がってから、一定の温度 600K で緩和を待ってみると、1,000 万 steps(実時間 10ns)程度の時間を経て、平均的に丸まっていた分子構造が長く延びた構造へと変化した。これほどの長時間緩和は 20 原子分子 600K では見られない。非現実的ではあるが、密度を同一としたことにより、バラバラになっている 5 本の 20 原子分子が、1 本の 100 原子分子になったため、空間的には隙間が多くなっているはずである。にも関わらず緩和が遅くなっている。この点について御議論頂ければ、直鎖高分子によるガラスの遅い緩和の理解が深まると考えます。

## Molecular-dynamics simulation study on the nature of glassy reorientational dynamics

分子科学研究所 鄭 誠虎

過冷却液体のダイナミクスの特徴として、2 つの「decoupling」が知られている。1 つは(並進)拡散係数と粘性率の decoupling であり、breakdown of the Stokes-Einstein relation と呼ばれている。もう 1 つは「並進」拡散係数と「回転」拡散係数の decoupling であり、例えば代表的なガラス形成物質である OTP において、並進拡散係数に関しては Stokes-Einstein 則が( $T_g$  より高い)ある温度以下では破れているのに対し、回転拡散係数に関しては  $T_g$  近辺まで対応する関係式(the Stokes-Einstein-“Debye” relation と呼ばれている)が破れていないことが実験的に知られている。これらは過冷却液体のダイナミクスにおける「動的不均一性」と関連している事柄であり、現在活発な研究が行われているテーマである。本発表においては、過冷却状態における分子性液体のシミュレーション結果について論じ、回転運動に関する Stokes-Einstein-Debye relation は本当に破れていないのか? という問いに答えたいと考えている。また、回転運動の動的不均一性に着目した解析を行うことにより、(i) 動的不均一性(緩和時間の分布)の大きさはどの程度で、その温度依存性はどうか? (iii) 並進と回転運動における動的不均一性の相関はどれくらいあるのか? 等の問いにも答えたいと考えている。

## 過冷却液体における動的相関の微視的理論

高知工科大学 総合研究所、サクレイ フランス A、コロンビア大学 アメリカ B  
宮崎 州正、Giulio Biroli<sup>A</sup>, Jean-Phillipe Bouchaud<sup>A</sup>, David R. Reichman<sup>B</sup>

ガラス転移点近傍におけるスローダイナミクスの背後には、動的不均一性がある。それは一種の協同現象であり、特徴的な相関長が存在する筈である。しかし、動径分布関数のような静的構造を眺めても、協同現象を示唆するような異常は、どこにも見られない。つまり、この相関長は動的な起源を持つ筈である。動的相関長を観測するためには、動的な情報を空間で平均してしまう二体相関関数ではなく、高次の相関関数を見なくてはならない。これを、実験やシミュレーションで捕らえることができるようになったのは、90 年も後半になってからのことである。しかし、今日に到るまで、この相関長を説明する第一原理的な理論は存在しなかった。ガラス転移における代表的な第一原理理論は、モード結合理論(MCT)である。MCT は転移点より高温側での、二体相関関数に現れるスローダイナミクスをよく説明するが、理論の「平均場」的な性質上、相関長を説明することはできない、と思われてきた。しかし、素朴に考えてみても、スローダイナミクスを記述する理論が、スローダイナミクスの原因である協同現象を説明できない、というのはいかにも不自然である。我々は、MCT を拡張し、相関長を計算することに成功した。そして数値解析によって、相関長の成長則や、ベータ領域からアルファ緩和時間(構造緩和時間)にかけての、揺らぎのモルフォロジーの時間変化を定量的に予想した。これらの結果は、最近の数値計算が示唆している結論と矛盾しない。今回の講演では、研究の背景も含めて、本理論の成果と問題点について議論したい。

## 特異摂動法によるガラス転移の理論

東大院総合文化 佐々 真一、岩田 真実

特異摂動法とは、力学系理論で知られている漸近解析法のひとつであり、ゆっくり変化する自由度を同定し、その運動を記述する方法として知られている。私たちは、ガラス転移点近くでみられる時間相関関数の凍結や動的事象の協同的振る舞いを特異摂動法で解析してきた。具体的には、まず、もっとも簡単な近似で得られる時間相関関数の閉じた式を力学系だと考える、相関がない状態に対する線形安定性解析を行い、安定性の限界点をもとめ、そのまわりでゼロ固有関数の振幅に対する発展方程式を求める。得られた振幅方程式は、時間相関関数の凍結に対応するサドル接続分岐を示すことがわかる。ついで、サドル接続分岐のまわりの揺らぎの効果を見るために、経路積分表示をつくる。その解析においても、仮想時間を導入して、特異摂動法にもとづく計算を行い、動的事象の協同現象的振る舞いを特徴づける指数を具体的に計算する。全く新しいアプローチであるため、特異摂動法の考え方とガラス系への適用の仕方に重点をあてて講演する。詳細は、cond-mat/0605049, cond-mat/0609238 を参照。

## ガラス系のメソスコピックなスケールでの非線形応答

大阪大学大学院 理学研究科 吉野 元

ガラス状態は平衡状態ではないが、ガラス的な系は時間とともに「安定」になってゆく。これは例えば磁場や電場に対する線形応答を測定するエイジング効果の実験で、高分子ガラス、スピングラスその他で明らかにされてきた。周波数を固定した交流線形感受率は時間とともに小さくなり、系が摂動に対して「固く」なってゆくことを示している。エイジング効果自体は、通常のドメイン成長でも見られる、ごくありふれた非平衡緩和現象で、格段にガラス系に固有の現象ではない。一方、ガラス系では線形応答は、非常に遅いが「異常に大きい」（観測されやすい）とされ、その理由に興味を持たれている。また外場の強さに敏感で、**rejuvenation** と呼ばれる奇妙な現象を示す。マクロな物理量に見られるこうした異常の背後にある、メソスコピックなスケールでの物理に強い関心を持たれている。現象論的にはスピングラスでも構造ガラスである種の **droplet** 描像にもとづくスケール理論がマクロな現象を説明する上で一定の成功を収めている。しかし、そもそも **droplet** 励起のようなメソスケールでの異常な励起がどうして存在するのか、という基本的な問題は解かれていない。この講演ではメソスコピックなスケールにみられるガラス系特有の非線形応答について議論する。まず最近我々が行った、1段階のレプリカ対称性の破れを示す、構造ガラス、スピングラスの平均場模型 ( $p$ 体相互作用のスピンの有限サイズにおける非線形応答の解を議論する。次に実空間繰り込み群の解析に基づく、メソスケールでの非線形応答の解析を行った結果を議論する。前者は無限大次元、後者は1次元からのアプローチで対極的であるが、ともにメソスケールでの異常な非線形応答を予言する。関連する実験として、メソスコピックなスピングラスのサンプルにおける電気抵抗ノイズ測定について議論する。

本研究は Tommaso Rizzo 氏 (Inst. Enrico Fermi, Rome) との共同研究である。

## スピングラスとカイラリティ

阪大理 川村 光

スピングラスはランダムネスとフラストレーションで特徴付けられる磁性体であり、その秩序化はコンプレックス系の典型例として長く活発な研究が展開されてきた。スピングラスの「カイラリティ仮説」は、スピングラス磁性体の秩序化において、カイラリティと呼ばれるスピン構造の右・左を表す物理量が隠された秩序変数として本質的に重要な役割を果たしているとする描像である。講演では、スピングラス転移のカイラリティ仮説、および関連する実験データについて説明し、その当否を巡る最近の論争についても簡単に紹介したい。

## ランダム磁場XYモデルにおけるガラス的な非平衡緩和のサイズスケーリング

北大院工、北大院理<sup>A</sup>、阪大院理<sup>B</sup> 能川 知昭、根本 幸児<sup>A</sup>、吉野 元<sup>B</sup>

超伝導磁束格子や電荷密度波系においては、不純物や格子欠陥がもたらす乱れによって純粋系の持つ周期秩序が破壊されることがある。乱れが十分弱い場合に元の秩序を回復するか否かという問題は長く議論され続けてきた。弾性論に基づく解析的な研究によって、3次元系では Bragg glass と呼ばれる準長距離秩序相が有限の乱れでも存在することが示唆されているが、乱れによって駆動される転移の性質はほとんど理解されていない。

我々はこの転移を調べるため、ランダム磁場 XY モデルに基づく数値シミュレーションで非平衡緩和を解析した。この系はべきや指数関数では表せない、非常に遅いガラス的な緩和を示すため、べき的な臨界緩和をもとにした相転移の時間スケーリング解析が成り立たない。そこで我々は各時刻の相関関数から特性長の時間発展を計算し、時間のかわりに特性長をパラメータとしたスケーリングを考案し、これによって臨界現象が解析できることを実際に示した。それによると、シミュレーションを行った磁場の範囲内で臨界特異性は見られず、むしろゼロ磁場が臨界点であることを示唆する結果を得た。このことはランダム磁場を弱くしたときのコヒーレンス長の成長は従来考えられていたよりもずっと遅いことを意味している。

## シリカゲル細孔中に閉じ込めた水のガラス転移挙動

東工大院理工 小國 正晴

バルク水は容易に結晶化して氷になるために、そのガラス転移はどこで起こるかさえ未決定であり、今日も熱い議論を呼んでいる。典型的には 135K と 160K 付近の 2 つの可能性が指摘されている。本研究では、シリカゲル細孔内に閉じ込めた純水およびエチレングリコール水溶液のガラス転移挙動を断熱法熱測定により調べた。シリカゲルは吸湿性が非常に強く、水分子とシラノール基は非常に強い結合を形成するものと理解され勝ちである。しかし、本測定の結果、水は細孔中心部で水に特徴的な水素結合ネットワークを形成し、界面の水分子はランダムな配置状態にあることが示された。界面水は細孔径に依存して 110~130K で、内部水は 160K 付近でガラス転移することが示唆された。エチレングリコール水溶液では、水分子は中心部に集まって水素結合ネットワークを形成し、エチレングリコールは界面に押しやられ易いことが推論される。

## ラベルしたポリスチレン薄膜のガラス転移とダイナミクス

京工織大、Northwestern Univ.<sup>A</sup> 深尾 浩次、R. D. Priestley<sup>A</sup>

DR1 という色素でラベルしたポリスチレン (PS) 薄膜のガラス転移温度とダイナミクスを誘電緩和測定により調べた。この系では DR1 の回転運動が観測されるが、ガラス転移温度以上ではこの運動が高分子鎖のセグメント運動 ( $\alpha$ 過程) と強くカップルしているため、通常のポリスチレンの 65 倍程度の緩和強度を持った  $\alpha$ 過程が観測される。この DR1 でラベルしたポリスチレン (PS-DR1) に対して、まず、単層の薄膜を作製し、種々の膜厚に対するガラス転移温度、および  $\alpha$ 過程のダイナミクスを誘電緩和スペクトロスコピー法により調べた。次に、10nm 程度の膜厚の PS-DR1 の層と 300nm 程度の十分に厚い膜厚のラベルしていない PS 層から成る 2 層膜を作製し、その  $\alpha$ 過程のダイナミクスを同様に測定した。これにより、ラベルした層のみからのシグナルを取り出すことが可能である。ラベルした層を自由表面、または基板とラベルしていない PS のバルクな層との界面に挿入した場合と、ラベルした PS の単層の薄膜でのダイナミクスとを比較した。その結果、自由表面または基板との界面のいずれの場合も、 $\alpha$ 過程の緩和時間は平均としてはバルクの場合と同じであるが、その緩和時間の分布はブロードになっていることがわかった。これに対して、ラベルした PS の単層の薄膜では  $\alpha$ 過程の平均緩和時間の低下とその緩和時間分布のブロードニングがおこっている。当日はこれらの結果について報告する予定である。

## 分子動力学シミュレーションによるガラス転移近傍の協同再配置領域の考察

九大理 松井 淳

ガラス転移は秩序化を伴わないので、“純粋な” 固化といえる。固化の過程で、構造エントロピーが温度降下とともに連続的に減少してゆくのの特徴である。Adam-Gibbs によって、過冷却液体中の分子の構造緩和における協調性と構造エントロピーを関連づける概念が提唱された。概ね受け入れられているものの、協同再配置領域 (CRR) を実際に観測した報告はない。構造緩和が起こるために必要なサイズが転移点に近づくにつれて増大するのかを、(1) 拘束系の分子動力学シミュレーション、(2) 動的構造因子の計算結果、(3) 粒子のジャンプ拡散の待ち時間分布の結果から考察したい。

## アクトミオシン分子モーターのエネルギー地形と動作機構

早大理工 高野 光則

アクトミオシンは代表的な蛋白質分子モーターであり、1 分子計測によって、ミオシン分子が方向性を持ったブラウン運動的にアクチンフィラメント上を移動することが示された。移動はステップ状であり、ステップ幅はアクチンモノマーのサイズに等しく、1 回の ATP 加水分解で生じるステップ数(最大 5 ステップ)は確率分布することが分かった。本研究では、分子動力学計算によってアクトミオシンの挙動を観察し、1 分子計測で示された分子モーターの特徴を調べてみる。ミオシンとアクチンフィラメントとの間の分子間相互作用エネルギー地形にアクトミオシン分子モーターの動作機構を解く鍵があることを示す。一方、ミオシン分子の移動は ATP の加水分解が終了後しばらくたってから(ミリ秒オーダー)生じることが 1 分子計測で示されており、加水分解エネルギーが一時的に分子内部に蓄えられている可能性が議論されてきた。本研究では、ミオシン分子内の密度相関関数と密度応答関数の関係(揺動応答関係)を調べ、そこから求まる「有効温度」がクエンチ系では環境の温度よりも高くなることを示す。分子内でのエネルギー貯蔵機構がミオシンのガラスの性質から理解されうることを議論する。

## 強相関カウンターイオン系の平均場方程式：相関場アプローチ

高知工科大 古沢 浩

カウンターイオン(高分子電解質から解離した反対符号イオン)は、高分子電解質に静電的に引き寄せられるため空間的に不均一な分布をする。このカウンターイオン分布について、「Poisson-Boltzmann (PB) 方程式は、価数が 2 以上では有効でない。」という結論が長らく支持されてきた。

特に、カウンターイオンの価数が大きく高分子電解質の電荷密度が高い強相関係では、PB 近似は第 1 近似としてすら利用できないという見解が提出されて、数年が経過した[1]。ところが、この 2、3 年の間になされた一連の計算は、上述の共有認識に反して、近距離相関を適切に繰り込めば、PB 的な取り扱いにより計算機実験の結果をよく再現できることを示している[2]。そこで本講演では、以下の問いに答える理論を提出し、Weeks らの提唱する強相関方程式[2]を平均場近似の下で導出する。

問い 1 : なぜ、強相関域で平均場近似が成立するのか？

問い 2 : 何を実効的な相互作用ポテンシャルとして使用すべきか？

これまで強相関の定義すら、講演者も含めて正しく行っていなかった[1, 2, 3]。まず、その点から修正する。さらに、実効ポテンシャルの問題に答えるために、新たに相関場理論を構築し、問い 2 に答えることに成功した。本発表では、特に後者の事項に時間を割いて説明する。

[1] R. R. Netz, EPJE vol. 5, 557 (2001)

[2] Y. G. Chen and J. D. Weeks, PNAS vol. 103, 7560 (2006); C. D. Santangelo, PRE vol. 73, 041512 (2006); Y. Burak, D. Andelman, and H. Orland, PRE vol. 70, 016102 (2004).

[3] H. Frusawa, JPSJ vol. 73, 507 (2004).

## イオン伝導性ガラスにおけるイオンダイナミクスの動的不均一性

東工大 A, Naval Research Lab<sup>B</sup> 中崎 潤子 A, K.L. Ngai<sup>B</sup>

イオン伝導性ガラスにおいては、速いイオンと遅いイオンが共存した複雑なダイナミクスが見られる。この動的に不均一な挙動は分子性のガラス形成物質、コロイド系など多くの系と共通点を持つ。アルカリケイ酸塩( $\text{Li}_2\text{SiO}_3$ )におけるイオンの運動を分子動力学シミュレーション(MD)を用いて特徴付けた。ガラスにおけるイオンの拡散には、時空相関関数の自己部分に見られる長距離のテイル部分が主に寄与し、これにはイオンの協調運動が関わっている。イオンの軌跡についてのランダムウォークのフラクタル次元解析からは、平均二乗変位にみられるべき的な挙動が、ジャンプの後戻り運動によることがわかる。

イオンの訪れた位置を積算して得た密度分布に見られる動的不均一構造は、融体、ガラスの両方において、マルチフラクタル性を示す。では、個々のイオンはどのように運動するのだろうか？

図1に、700Kのガラス中の一つのLiイオンの変位の絶対値の時系列から得た運動の位相図(変位の微分の変位に対するプロット)を示す。このようなプロットでは、ランダムな運動は空間を埋め尽くし、振動的な運動は楕円になる。主成分解析により熱ノイズを除去することで、ジャンプ運動、局在化運動などの決定論的な面が明確になった。

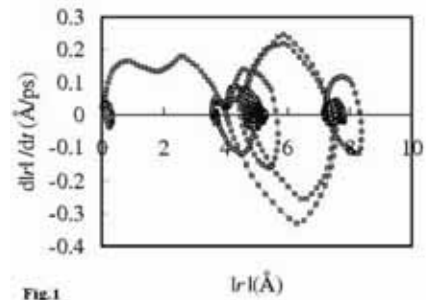


Fig.1

## ランダムに配置されたピン止め磁場中の磁壁運動

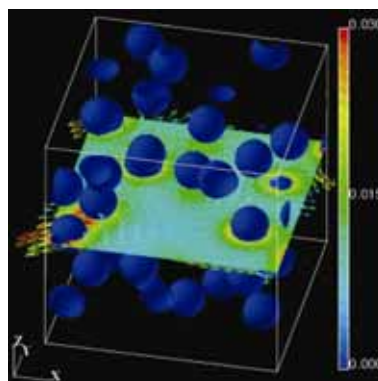
物質材料研究機構 松下 勝義

ランダムなピン止めポテンシャルの存在する媒質中の弾性体(弾性膜、ポリマーなど)の運動は古くからよく研究されている。磁壁の運動もそのような運動の一種と考えられているが、本当に弾性体モデルで記述される系かどうか Ising モデルでのモンテカルロシミュレーションにより調べられた以外はほとんど知られていない。本研究において我々は Heizenberg モデルに異方性により磁壁の運動をモンテカルロシミュレーション及び分子動力学シミュレーションを用いて調べた。その結果について本講演で報告する。

## コロイド分散系における(電気)流体力学現象のシミュレーション

分子研、九大工 A, 京大工 B 金 鋼、名嘉山 祥也 A, 山本 量一 B

コロイド分散系のレオロジーや荷電コロイド粒子の電気泳動などの電気流体力学現象を流体の Navier-Stokes 方程式や静電力学の Poisson 方程式などの基本方程式を極力近似を導入しないで計算するためのシミュレーションを開発した。適用例として、シア流下の懸濁液の流動と電気泳動現象のデモンストレーションを紹介したい。



## bouncing ball orbits のあるビリヤード系の再帰時間分布

首都大理工、立命館大理工<sup>A</sup> 赤石 暁、奥島 輝昭<sup>A</sup>、首藤 啓

多自由度ハミルトン系における遅い緩和(非指数緩和)の力学的起源を考える。過冷却液体などの多粒子系に見られる長時間の非指数緩和の動力学的な解釈を得るために、本研究では力学系理論の立場から、少数自由度力学系に見られるべき緩和、長時間相関の研究を、多自由度系へ応用することを目標とする。

少数自由度ハミルトン系においては、位相空間内の障壁によって長時間相関が生み出されることがよく研究されている。軌道が、規則的な運動に対応する KAM トーラスや中立安定な周期軌道族などの位相空間構造の近傍に長時間留まることにより、相関関数、再帰時間分布などの統計量は長時間領域でべき振る舞いを示す。そこで、このような長時間相関の自由度依存性を調べるために、bouncing ball orbits(ビリヤード系の中立周期軌道族)が存在する多体剛体粒子系における再帰時間分布の長時間領域での振る舞いに注目する。再帰時間分布は、位相空間のある領域から出た軌道が次にその領域に再帰するまでの時間の分布であり、力学系の動的性質を調べるための量としてよく研究されている。

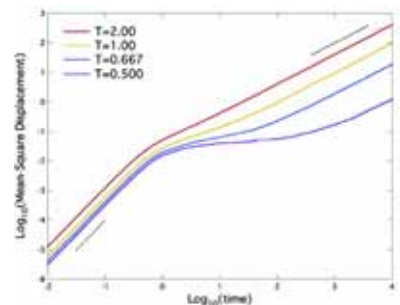
本稿では、2体ビリヤード系(箱の中の2つの剛体粒子)における再帰時間分布が長時間領域でべき分布  $P(T) \sim T^{-\gamma}$  となり、べき指数と粒子数との関係は  $\gamma = N+2$  となっていることを示す。さらに、再帰時間分布は再帰領域の取り方に依存していることも報告する。再帰領域を小さくすると、再帰時間分布はべき分布から指数分布に近づいていく。

## 分子動力学シミュレーションによる過冷却液体特性

東北大工学研究科<sup>A</sup>、東北大流体研<sup>B</sup> 鳴海 孝之<sup>A</sup>、徳山 道夫、寺田 弥生<sup>B</sup>

結晶化を避けて液体を冷却すると、過冷却液体状態を経てガラスへと変化する。ガラスは様々な場所で応用されている非常に有用な物質である。しかし、液体からガラスへの遷移メカニズムは理論的に完全に理解されているわけではない。また、ガラスは本質的に非平衡状態であり、現存するような平衡状態に対する理論で扱うのは困難が伴う。そのため本質的なブレイクスルーが期待される。

我々は過冷却液体状態を深く理解することによりガラス遷移メカニズムを理解することを目指す。そのために分子動力学シミュレーションを用いて2成分流体の過冷却液体状態を計算機上で実現させ、その様々な特性を調べた。本発表では、静的な物理量として圧力について、また動的な物理量として平均二乗変位と感受率について、これまでにシミュレーションで得られた結果をそれぞれ紹介する。



図：各温度における平均二乗変位

## 自由エネルギーランドスケープ描像における、速い緩和と遅い緩和

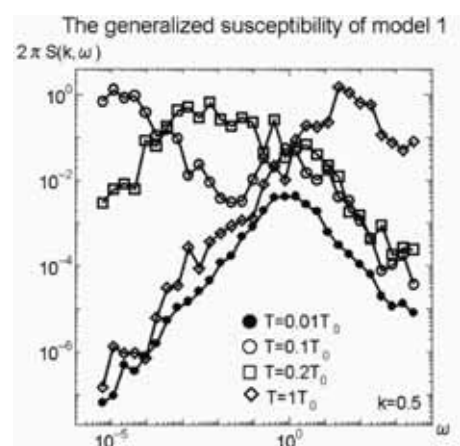
九大理 浴本 亨、小田垣 孝

液体-ガラス転移ではガラス転移温度 ( $T_g$ ) 付近で熱力学的な異常性及び、原子の速い運動と遅い運動が分離する動的異常性が観測されている。近年動的、熱力学的異常性を統一的に説明する描像として自由エネルギーランドスケープ (FEL) 描像が注目されている。

FEL 描像では高温では平坦だが、低温では多谷構造となるたくさんの極小をもつ自由エネルギーを考える。ガラス転移点は、系が一つのベイスンから観測時間内に抜け出せなくなる点として説明される。

Adam and Gibbs によって導入された協調緩和領域 (Cooperatively Rearranging Region : CRR) 程度に全ての自由度を射影し、FEL より導かれる時間依存性を時間依存するギンツブルグランダウ方程式 (TDGL) 型と仮定する。すると、緩和過程は CRR により張られる空間中での確率過程となる。

本研究では FEL の形を仮定し、確率過程を TDGL 型とした1次元トイモデルを解析する。この結果、速い緩和と遅い緩和はそれぞれベイスン内の振動、ベイスン間のジャンプ運動として説明出来る事を示す。

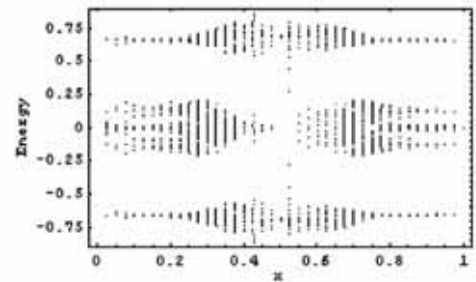


## 一次元二重交換模型の基底状態におけるスピングラス

日大理工 野村 祐喜、山中 雅則

二重交換模型は古くから盛んに研究されてきた。この模型の基底状態がスピングラス的であるという指摘は de Gennes の初期の論文において既に指摘されている。近年多くの文献でモンテカルロ法等により基底状態が調べられているが、スピングラス状態の詳細を扱った研究は少ない。

本研究では、このスピングラス状態を詳細に調べた。ここでは二重交換模型として、局在スピン間に交換相互作用を取り入れたものを扱う。また、最近接の飛び移り積分だけの模型の場合、多くのパラメータ領域でバンド構造が平坦バンドとなることが知られているため、本研究ではバンド構造の安定化のため次近接の飛び移り積分も導入した模型を考えた。基底状態は局在スピンの相対角の汎関数として与えられるが、共役勾配法を用いてこれを最適化し基底状態を求めた。基底状態において、伝導電子の部分はパイエルス不安定性のため飛び移り積分に自発的に変調を起こす。また、スピン部分はその変調を反映した変調構造をもつが、相対角のために巨視的に縮退している。また、スピン構造は多くの準安定状態をもち、スピングラス的となっている。共役勾配法における最適化変数の数と計算時間の関係等も考察を行った。



## アモルファス及び過冷却液体 Si の構造変化：第一原理 MD による Si のポリアモルフィズムの解明

産総研計算科学 森下 徹也

シリコンは水と共通な性質を多く持つ。どちらも常圧下の結晶では四面体構造から成るダイヤモンド型構造をとり、アモルファスや液体状態でもその四面体構造のネットワークが保持されている。また圧力増加に伴い融点が減少するため、液体の方が結晶より密度が高い。こうしたことから、水で議論されているポリアモルフィズムが Si にも適用できると思われる。我々は Si のポリアモルフィズムを第一原理分子動力学計算によって調べている。本講演では圧力変化に伴うアモルファス Si の LDA-HDA 転移、及び過冷却に伴う液体 Si の構造変化について報告する[1,2]。

通常のアモルファス Si (LDA)では、4 配位のネットワーク構造が形成されている。我々の計算で LDA を常温下で加圧したところ、12GPa 近傍で密度の急激な増加が起こり、LDA とは全く異なる性質を持つ高密度アモルファス相 (HDA) に転移した[1]。このアモルファス構造の配位数は約 5 で、水の HDA と非常に近い構造であることがわかった。高圧結晶相である  $\beta$ -tin 構造とも近い構造であり、半導体から金属化したと思われる。

常圧下の液体 Si の過冷却に伴う密度・構造変化も調べた。実験で過冷却できる温度領域は限られているため、これまでに密度や液体構造の温度変化について統一的な理解は確立されていなかった。しかしながら我々の計算によって、密度は 1200K で極大となることが明らかになり、局所的な四面体構造の回復が 1200K 以下で急速に進むことがわかった[2]。このような構造変化は、配位数の異常な温度変化をもたらすこともわかった。

[1] T. Morishita, Phys. Rev. Lett. 93, 055503 (2004).

[2] T. Morishita, Phys. Rev. Lett. 97, 165502 (2006).

## ガラス形成物質における非線形エネルギー応答と複素比熱

九大院理 田川 文隆、小田垣 孝

近年、ガラス転移点近傍の系の運動を特徴付ける方法として、系が自由エネルギーの多くの谷(ベイسن)から構成されるランドスケープ内を運動するという自由エネルギーランドスケープ描像に注目が集まっている。

我々は、過冷却液体での系の遅い運動の特徴を取り入れ、自由エネルギーランドスケープ内を系の代表点が確率的に運動する描像を提案した。これは、系の遅い運動をベイسن間の遷移として、マスター方程式で表し、速い運動をベイسنでの振動として表したものである。



本発表では、この描像を用い、振動する温度に対するエネルギー応答を記述し、1次・2次の応答を特徴付ける、1次複素比熱・2次複素比熱を提案する。さらに、ガラス転移点近傍での遅いダイナミクスの特徴を取り入れたモデルでの以下の結果を紹介する。

1. 1次・2次の複素比熱の振動数依存性から、ガラス転移温度  $T_g$ 、Vogel-Fulcher 温度  $T_0$  を決めることができる。
2. ベイスン間の遷移を特徴付ける、遷移行列の固有値  $\lambda$  の統計量  $\langle \lambda \rangle$ 、 $\langle \lambda^2 \rangle$ 、 $\langle \lambda^{-1} \rangle$  を1次複素比熱の振動数依存性から決めることができる。

## 牛血清アルブミンのガラス転移に及ぼす水分含量の影響

食総研、海洋大<sup>A</sup>、東工大<sup>B</sup> 川井 清司、鈴木 徹<sup>A</sup>、小國 正晴<sup>B</sup>

**【研究背景及び目的】** 水和タンパク質は冷却や乾燥によってガラス転移するが、ガラス転移に伴う外部応答(熱容量変化など)が非常に小さく、また広い温度範囲で起こる。そのため、水和タンパク質のガラス転移を明確に捉えることは困難とされてきた。これまでに演者らは、大容量の試料を用いた断熱型熱量計によるエンタルピー緩和速度 ( $dH/dt$ ) 測定を球状タンパク質である牛血清アルブミン (BSA) に適用することで、BSA 水溶液における複数のガラス転移や乾燥 BSA における 155K でのガラス転移を明らかにしてきた。これらの知見を深化するため、本研究では様々な水分含量に調製した BSA のガラス転移を調べ、既報の結果と比較することで、水和タンパク質における複数のガラス転移の要因を考察した。

**【方法】** 飽和塩によって相対湿度を調製したデシケータ内に BSA 乾燥粉末を保つことで、様々な水分含量の BSA 試料(約 0, 4.4, 10.9, 19.2, 30.0% w/w)を調製し、50~300K の温度範囲で  $dH/dt$  測定を行った。

**【結果及び考察】** 水分含量が約 0% の BSA にはガラス転移は認められなかったが、4.4% の BSA には 139K 付近にガラス転移が認められた。更に 10.9% の BSA には、90~270K の温度範囲において 2 つのガラス転移が、19.2% の BSA には 90K 以上の温度範囲において 3 つのガラス転移が見出された。水分含量が 30.0% に達すると、水の昇温結晶化及び融解が起こり、それらが 160K 以上の緩和挙動を覆い隠した。そこでこの試料を 200-220K でアニールし、結晶化の発熱を除くと、190K 付近にガラス転移を見出すことができた。以上の結果を既報の結果と併せて状態図として整理したところ、水和タンパク質のガラス転移は大きく 3 つの過程に分類されることが示唆された。これらのガラス転移過程は低温から、1.タンパク質と水素結合した水(水和水)、2.水和水近傍に位置するタンパク質の親水性側鎖、3.タンパク質の主鎖、によるものと考えられる。

## ペイミダゾール型金属錯体多孔質結晶内のウォーターナノチューブのダイナミクス

東大物性研、東理大理<sup>A</sup> 与那嶺 亮、山室 修、菊地 龍弥、大畑 雄希<sup>A</sup>、田所 誠<sup>A</sup>

ナノ空間に閉じ込められた水の挙動はバルクの水と異なる物性を示すことが知られている。表題物質では、ペイミダゾール型金属錯体である  $[\text{Co}(\text{H}_2\text{bim})_3]^{3+}$  とカルボン酸誘導体  $[\text{TMA}]^{3-}$  とで構成された多孔質結晶内に、擬一次元構造の水クラスターが存在する。この水をウォーターナノチューブ(以下 WNT)と呼ぶ。本研究では WNT のミクロなダイナミクスを明らかにする目的で、物性研の AGNES 分光器を用いて中性子散乱実験を行なった。全原子数のうち WNT の割合は 10%程度であるが、我々は非弾性散乱成分を差し引いて解析することで、少量の WNT の準弾性散乱成分を取り出すことに成功した。それをローレンツ関数でフィットし、半値半幅の運動量遷移依存性をジャンプ拡散モデルにより解析した。WNT の 268K での拡散係数は  $4.5 \times 10^{11} \text{ \AA}^2/\text{s}$  であり、バルク水(以下 BW)の  $1.0 \times 10^{11} \text{ \AA}^2/\text{s}$  に比べて明らかに大きくなっていることが分かった。さらに水分子の平均移動距離や滞在時間も BW より長くなることが分かった。これは擬一次元構造をとることで水素結合ネットワークが弱体化することに起因していると考えられる。

## イオンゲル PMMA/EMITFSI のガラス転移とイオン拡散機構

東大物性研、横国大工<sup>A</sup> 染谷 武紀、山室 修、菊地 龍弥、上木 岳士<sup>A</sup>、渡邊 正義<sup>A</sup>

イオンゲルはポリマーの網目構造の中にイオン液体が取り込まれたゲルである。このゲルは、従来の高分子固体電解質に比べて、非常に高いイオン伝導性を示すことが報告されている。今回我々は、アクリル樹脂 PMMA とイオン液体

EMITFSI から成るイオンゲルについて、東大物性研の AGNES 分光器を用いて中性子散乱実験を行い、ゲル中での EMITFSI の拡散運動、特に EMITFSI と PMMA の運動の相関について調べた。実験では、イオン液体濃度 0.78[mol/kg]、1.5[mol/kg] の 2 種類の組成のゲルについて、通常の試料と、EMITFSI の運動を見やすくするために PMMA を重水素置換した試料も測定した。また、比較のためにバルクの EMITFSI と PMMA も測定した。各試料におけるフィッティングにより求められた拡散係数や跳躍距離から、EMITFSI はバルク状態ではブラウン運動的な単純な拡散をしているが、ゲル網目のなかではゲル網目を作る安定なサイトの間をジャンプ拡散していることが分かった。ポスターでは、EMITFSI の拡散運動の組成依存性やガラス転移との関連についても述べる。

## ガラス転移温度付近での結晶化挙動

東大生産技術研究所 小西 隆士、田中 肇

通常、結晶成長速度は粘度に関する項と結晶の自由エネルギーに関する項の積により記述され、アニール温度がガラス転移温度に近づくにつれて結晶化速度は急激に遅くなり、通常はガラス転移温度以下ではまったく結晶化が進行しないと考えられている。しかし最近、小國らの研究グループは、ガラス転移温度直上で結晶化が促進されるという驚くべき現象を幾つかの物質について報告している[1]。

本発表では、我々は今までこのガラス転移温度直上での結晶促進が報告されているオルトターフェニル (OTP) やサロールを用いて、ガラス転移温度近傍及び以下での結晶成長速度を測定し、液体の比較的遅い緩和過程 (主に $\alpha$ 過程程度の時間スケール) とを詳細に比較している。特に、サロールについては結晶多形に着目し、実験を行っている。また、高分子物質を用いて、この現象への高分子性がどのように影響するのかについても触れていく予定である。

[1] M. Hatase et al., J. Non-Cryst. Solids, 333, 129 (2004) とその中での引用文献

## 結晶的中距離秩序と動的不均一性の関連

東大生産技術研究所 新谷 寛、田中 肇

過冷却液体中の動的不均一性の存在は、多くの実験やシミュレーションにより確認されており、それとガラス転移近傍での急激なスローダウンの関連も示唆されているが、その物理的な起源に関しては未だにはっきりとしたことは分かっていない。

これを明らかにするため、我々は結晶化からガラス化までを統一的に扱える 2 次元モデルを開発し、分子動力学シミュレーションを行った。その結果、過冷却液体中で結晶的な秩序を持った過渡的なクラスター (結晶的中距離秩序) が低温になるにつれ発達することを発見した。本発表では、この結晶的中距離秩序と動的不均一性との関連に関して得られた結果を紹介する予定である。

## コロイドガラスにおける動的不均一性

東大生産技術研究所 川崎 猛史、荒木 武昭、田中 肇

多分散コロイド系 (粒径に分散をもったコロイド系) では、体積分率の増大とともに、無秩序状態を維持したまま粒子の運動が凍結され、ガラス転移現象が引き起こされる。本研究では、計算機的手法 (Brownian Dynamics 法) を用いて、ガラス転移点近傍における、二次元コロイド粒子の構造・ダイナミクスを解析した。構造に関しては、六回対称性を測る秩序変数 (six fold bond-orientational order parameter) を計算した。これより、ガラス転移点近傍において、結晶的中距離秩序が形成されていることを見出した。また、ダイナミクスに関しては、ガラス転移現象の起源と考えられている動的不均一性を確認した。構造とダイナミクスを比較したところ、結晶的中距離秩序を形成している粒子は動きにくく、秩序の低い粒子は動きやすいという傾向を見出した。また、結晶的中距離秩序の空間分布と動的不均一の空間分布に関しても大いに相関が見られた。従って、ガラス転移点付近における、結晶的中距離秩序の存在は、動的不均一性の起源の一つであると考えられる。

## 駆動下 2 次元粉粒体系の状態遷移

東大生産技術研究所 渡辺 敬司、田中 肇

粉粒体系においては、粒子サイズが大きいため熱揺らぎの寄与がなく、また粒子間衝突が散逸を伴うために、外部からのエネルギー流入によって系の状態が変化する。このような系は非平衡物理のモデル系という観点から近年注目されているが、直接観察が容易であるという特徴から、状態間の遷移を調べるという目的に関して有用であると考えられる。

本研究では、振動によって駆動された 2 次元粉粒体系に着目した。この系は、振動の加速度や体積分率の変化によって固体的な状態と液体的な状態との間を遷移することが知られている。今回は粒径の異なる粒子を混合させることによって、結晶化に対するフラストレーションを導入した。その結果、構造は液体的でありながらダイナミクスが凍結したガラス的な状態が観測された。このような粒径分散に起因するガラス化はコロイド分散系について詳しく調べられており、そこで得られた知見が粉粒体系に対しても適用可能かどうかという観点から研究を行った。本発表ではさらに詳細について報告する。

# 物性研究所短期研究会

## 量子スピン系の物理

日時：2006年11月27日(月)～11月29日(水)

会場：東京大学物性研究所本館講義室

### 提案代表者

坂井 徹 日本原子力研究開発機構・研究主幹

### その他の提案者

高山 一 東京大学物性研究所・教授

瀧川 仁 東京大学物性研究所・教授

押川 正毅 東京大学物性研究所・教授

田中 秀数 東京工業大学大学院理工学研究科・教授

陰山 洋 京都大学大学院理学研究科・助教授

量子スピン系の研究は、長い伝統にも支えられて、これまでも多くの成果をあげており、今日でも新しいテーマの供給源として、さまざまな研究分野・領域の発展に貢献する大きなコミュニティを形成している。しかし、量子スピン系の研究者は日本物理学会でも複数の領域に混在しているため、なかなか全員が一堂に会して実験・理論両面から議論する機会が少ない。また、最近では多くの研究者が競争的外部資金プロジェクトのメンバーとして活躍し、コミュニティを活性化する一方、短期的に成果のあがる研究が偏重されて、長期的な視野に立つ研究が軽視されるため、現在のアクティビティが将来にわたって持続できるかどうか、疑問視する声もある。そこで、短期的な成果や研究資金の問題を度外視して、長期的視野に立ち、実験・理論両面にわたって新しいテーマを発掘したり、将来的な研究の方向性を探索することを目的として、本研究会は開催された。また、このコミュニティは他の社会と同様に世代交代の時期にさしかかっており、この重要な転機を乗り切って今後も発展し続けるために、ベテランと若手の間の世代を超えたコミュニケーションの場を作ること、この研究会の重要な目的であった。このような趣旨を多くの研究者に賛同していただいた結果、一般企業からの申込みも含む100名近い参加登録があり、研究会初日には120名を超える参加者があった。量子スピン系のコミュニティの現在のアクティビティの高さを繁栄して、3日間でのべ300名を超える参加者があり、物性研講義室が連日埋まる大盛況であった。

本研究会は、話題を提供する招待講演約30件、一般講演約20件、若手を中心とするポスターセッション約40件からなり、取り上げたテーマは、ナノ磁性・カイラル磁性・フラストレーション系・スピン液体・ボーズ-アインシュタイン凝縮・ハルデン系など多岐に渡る。各講演後のディスカッションを重視するアナウンスを徹底したことから、非常に活発な議論が展開され、研究会後半では若手も積極的に議論に参加するようになり、若手のコメンテーター育成にも役立ったと思われる。また、最近の発展著しいナノ磁性のセッションでは、実験研究者から、もっと明確な量子効果を予測し検証実験を提案するよう、理論研究者に要望が出され、将来の課題として提起された。さらにスピン液体やボーズ-アインシュタイン凝縮などのエキゾチックな現象を示す新物質を合成することの難しさから、実験・理論両面のニーズについてもっと頻りに情報交換をする場として、このような研究会を開くだけでなく、インターネットを使った情報交換ネットワークの構築が必要との見解も出された。この点については、量子スピン系のコミュニティのホームページ作成を現在検討中で、早急実現する必要があると考えられる。

本研究会のひとつの目標であった長期的な視野からの将来展望が達成されたかどうかは、2、3年後の短期的な成果から推し量ることはできないが、この会中にみられた活発なディスカッションから、ここでの議論を起点として、遠い将来に重要なブレークスルーをもたらす大発見につながるものと期待したい。また、もうひとつの目的であった世代を超えたコミュニケーションについては、70名以上が参加した懇親会や活発なポスターセッションなどにより、十分に達成されたものと信じる。この研究会で成長した若手の中から、2、3年後にさらにグレードアップした研究会を開催し、量子スピン系のコミュニティを活性化する有力な研究者が多数出てくることを願っている。

## プログラム

11月27日(月)

13:00 開会 坂井 徹 (原子力機構)

座長：高山 一 (東大物性研)

13:10-13:35 野尻 浩之 (東北大金研)

「ナノ分子磁性研究の動向と可能性」

13:35-14:00 宮下 精二 (東大理)

「単分子磁性体の量子ダイナミクスとエネルギーギャップ構造」

14:00-14:20 岸根 順一郎 (九工大工)

「結晶と磁性の **chirality** : 理論」

14:20-14:40 井上 克也 (広島大理)

「結晶と磁性の **chirality** : 分子性化合物」

14:40-15:00 秋光 純 (青学大理工)

「結晶と磁性の **chirality** : 無機化合物」

座長：田中 秀数 (東工大院理工)

15:20-15:45 上田 寛 (東大物性研)

「スピネル酸化物と電荷・軌道・スピン・格子結合現象」

15:45-16:10 前川 覚 (京大人環)

「スピン 1/2 量子かごめ格子磁性体のフラストレート磁性」

16:10-16:35 網代 芳民 (京大理)

「正方格子フラストレーション系の実験」

16:35-17:00 桃井 勉 (理研)

「強磁性揺らぎの強いフラストレート磁性体における量子スピン液体」

17:00-17:25 鳴海 康雄 (東大物性研)

「強磁場による量子スピンの研究」

ポスタープレビュー座長：戸塚 圭介 (京大基研)

17:30-19:00 ポスタープレビューA (各2分) +ポスターセッション

11月28日(火)

座長：前川 覚 (京大人環)

9:00- 9:15 山本 昌司 (北大理)

「1次元で観えた超ラマン核スピン-格子緩和過程」

9:15- 9:30 古川 裕次 (北大理)

「ナノスケール分子磁性体の NMR」

9:30- 9:45 寺尾 洸 (信州大理)

「量子スピン・クラスターにおけるスピン **Jahn-Teller** 効果」

9:45-10:10 益田 隆嗣 (横浜市大)

「量子スピンダイマー系のスピン・ダイナミクス」

10:10-10:25 真中 浩貴 (鹿児島大理工)

「新規フッ素化合物の作製と今後の研究方針」

10:25-10:40 矢ヶ崎 克馬 (琉球大理)

「新奇伝導機構「旅する2量体の伝導」」

- 座長：高橋 實（東大物性研）
- 11:00-11:25 宮原 慎（青学大理工）  
「2次元量子スピン系  $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ ,  $\text{Cs}_2\text{CuBr}_4$  の磁化プラトー」
- 11:25-11:50 和気 剛（東大物性研）  
「 $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$  における新しい高压相」
- 11:50-12:05 戸塚 圭介（京大基研）  
「Contracter-renormalization approach to unconventional phases in frustrated magnets」
- 12:05-12:20 加倉井 和久（原子力機構）  
「積層三角格子物質  $\text{LuFe}_2\text{O}_4$  の磁気秩序過程」

- 座長：網代 芳民（京大理）
- 13:10-13:35 鹿野田 一司（東大工）  
「三角格子有機モット絶縁体におけるスピン液体と超伝導」
- 13:35-14:00 南部 雄亮（京大理）  
「二次元三角格子反強磁性体  $\text{NiGa}_2\text{S}_4$  におけるスピンの無秩序な量子状態」
- 14:00-14:25 常次 宏一（東大物性研）  
「三角格子スピン系の理論－ ”スピン液体” とスピンネマティック相」
- 14:25-14:40 水崎 高浩（専修大）  
「2次元のフラストレートしたハバード模型の相図について」
- 14:40-15:05 川村 光（阪大理）  
「カイラリティを如何に観測するか？」

- 座長：坂井 徹（原子力機構）
- 15:25-15:50 田中 秀数（東工大院理工）  
「スピンドイマー系の量子相転移と磁気励起の実験」
- 15:50-16:15 松本 正茂（静岡大理）  
「スピンドイマー系の量子相転移と磁気励起の理論」
- 16:15-16:40 鈴木 隆史（東大物性研）  
「3次元格子系における超流動固体状態の探索」

- ポスタープレビュー座長：藤井 裕（福井大工）
- 16:40-18:10 ポスタープレビューB(各2分)+ポスターセッション
- 18:10-20:00 懇親会（物性研6階ラウンジ）

## 11月29日(水)

- 座長：太田 仁（神戸大理）
- 9:00- 9:25 菊池 彦光（福井大工）  
「ダイヤモンド鎖化合物アズライトの磁性（実験）」
- 9:25- 9:50 岡本 清美（東工大院理工）  
「ダイヤモンド型スピン鎖の磁氣的性質の理論—格子のフェリ性とフラストレーション」
- 9:50-10:05 飛田 和男（埼玉大理）  
「フラストレーションと量子性から生まれるフェリ磁性」
- 10:05-10:20 利根川 孝（福井工大機械）  
「 $\text{S}=2$  スピンと  $\text{S}=1$  スピンが反強磁的に交代した異方的1次元鎖の零磁場基底状態」

- 座長：川島 直輝（東大物性研）
- 10:40-10:55 胡 暁（物材機構）  
「新奇銅酸化物の軌道秩序と磁性の理論解析および物質設計」

- 10:55-11:10 柳沢 孝 (産総研)  
「2次元量子反強磁性体におけるインスタントン」
- 11:10-11:35 安田 千寿 (青学大理工)  
「不純物誘起反強磁性秩序：ボンダ希釈系における競合する二つの有効相互作用」
- 11:35-11:50 奥西 巧一 (新潟大自然)  
「Wilson 型実空間くりこみ群と量子スピン鎖の低エネルギー励起スペクトル」
- 11:50-12:15 坂井 徹 (原子力機構)  
「スピントラップの量子相転移」

座長：利根川 孝 (福井工大機械)

- 13:00-13:25 萩原 政幸 (阪大極限センター)  
「ハルデン系の物理と残された課題 (実験)」
- 13:25-13:50 野村 清英 (九州大理)  
「ハルデン系の物理と残された課題 (理論)」
- 13:50-14:15 松尾 晶 (東大物性研)  
「ナノ空間に配列した酸素分子鎖の強磁場磁化過程」
- 14:15-14:30 高野 健一 (豊田工大)  
「側鎖のある量子スピン鎖の基底状態」
- 14:30-14:45 田中 秋広 (物材機構)  
「高次元の AKLT 描像とその場の理論」

座長：瀧川 仁 (東大物性研)

- 15:05-15:30 太田 仁 (神戸大理)  
「量子スピン系の ESR による研究」
- 15:30-15:45 川股 隆行 (理研)  
「5本足スピン梯子格子系  $\text{La}_8\text{Cu}_7\text{O}_{19}$  とハルデンギャップ系  $\text{Y}_2\text{BaNiO}_5$  におけるスピンによる熱伝導」
- 15:45-16:00 光藤 誠太郎 (福井大遠赤センター)  
「スピントラダー化合物  $(\text{CPA})_2\text{CuBr}_4$  の高周波 ESR 測定」
- 16:00-16:15 藤井 裕 (福井大遠赤センター)  
「スピントラダー化合物  $(\text{CPA})_2\text{CuBr}_4$  の核磁気共鳴」
- 16:15-16:30 引原 俊哉 (北大理)  
「拡張された 4 体相互作用をもつ 2 本鎖梯子スピン系における双対変換」
- 16:30-16:45 松田 雅昌 (原子力機構)  
「偏極中性子を用いた  $\text{TbMnO}_3$  の磁気構造に関する研究」
- 16:45-17:00 小野田 雅重 (筑波大数理)  
「バナジウム酸化物系における量子スピン効果」

ポスターセッション

研究会期間中 (3 日間) 掲示。各 2 分間のプレビュートークあり。

ポスタープレビュー A

- A 1 : 木村 尚次郎 (阪大極限センター)  
「擬一次元コバルト化合物  $\text{BaCo}_2\text{V}_2\text{O}_8$  の強磁場磁性」
- A 2 : 柴崎 彬 (東大工)  
「擬 1 次元反強磁性ハイゼンベルグ模型における鎖間平均場近似とその改良」
- A 3 : 辻本 吉廣 (京大理)  
「二次元正方格子磁性体  $(\text{CuBr})\text{Sr}_2\text{Nb}_3\text{O}_{10}$  の磁性」
- A 4 : 藤田 敏之 (福井大遠赤センター)  
「 $\text{CuB}_2\text{O}_4$  の高周波 ESR」

- A 5 : 村島 隆浩 (九州大理)  
「量子スピン系における整合-非整合遷移」
- A 6 : 藤田 渉 (名古屋大理)  
「環状チアジラジカル結晶におけるスピギャップ状態」
- A 7 : 佐藤 正寛 (原子力機構)  
「磁場中のスピチューブにおけるベクトルカイラル秩序と朝永ラッティンジャー液体の共存」
- A 8 : 宮崎 寛 (岡山大理)  
「異方的  $S=2$  スピン鎖における  $1/2$  磁化プラトー」
- A 9 : 尾古 昌崇 (岡山大理)  
「エンタングルメントと一次元量子スピン系の基底状態」
- A10 : 柏木 隆成 (阪大極限センター)  
「ハルデン磁性体 NDMAP の磁気励起の角度依存性」
- A11 : 清水 健吾 (名古屋大理)  
「擬 1 次元ハイゼンベルグ磁性体  $\beta$ -BBDTA  $\cdot$  GaBr<sub>4</sub>」
- A12 : 安田 洋祐 (福井大工)  
「CuB<sub>2</sub>O<sub>4</sub> の逐次相転移と磁気相図」
- A13 : 高橋 正典 (大阪市大)  
「古典的な格子の自由度を含む量子スピン系の量子モンテカルロシミュレーション」
- A14 : 大久保 晋 (神戸大理)  
「 $S=1$  スピндаイマー系 Ba<sub>3</sub>Mn<sub>2</sub>O<sub>8</sub> の配向試料の強磁場 ESR」
- A15 : 藤澤 真士 (神戸大理)  
「 $S=1/2$  擬一次元反強磁性体 Cu<sub>2</sub>Cl<sub>4</sub>  $\cdot$  H<sub>8</sub>C<sub>4</sub>SO<sub>2</sub> の磁性研究」
- A16 : 礪部 正彦 (東大物性研)  
「 $S=1/2$  擬 1 次元磁性体 NaTiSi<sub>2</sub>O<sub>6</sub> の新奇な相転移」
- A17 : 大原 潤 (北大理)  
「銅 3 量体フェリ磁性鎖の磁気励起」
- A18 : 小濱 芳允 (東工大応用セラミクス研)  
「K<sub>11</sub>H[(VO)<sub>3</sub>(SbW<sub>9</sub>O<sub>33</sub>)<sub>2</sub>]  $\cdot$  27H<sub>2</sub>O と K<sub>12</sub>[(VO)<sub>3</sub>(BiW<sub>9</sub>O<sub>33</sub>)<sub>2</sub>]  $\cdot$  29H<sub>2</sub>O の極低温、高磁場下での熱容量」

#### ポスタープレビューB

- B 1 : 山口 明 (東大物性研)  
「ナノスケール単分子磁石の低温磁気測定」
- B 2 : 中村 祐一 (東大生産研)  
「素励起の分散関係の零点と相関長」
- B 3 : 肘井 敬吾 (東大理)  
「Distribution of non-trivial gapless points in single molecule magnets and dynamical driven systems」
- B 4 : 平野 嵩明 (東大工)  
「量子スピン系におけるトポロジカル秩序とエンタングルメントエントロピー」
- B 5 : 櫻井 敬博 (神戸大研究基盤セ)  
「1 GPa までの高圧下強磁場 ESR システムの開発とスピギャップ系への応用」
- B 6 : 大串 研也 (東大物性研)  
「オリビン型硫化物 Mn<sub>2</sub>AS<sub>4</sub>(A = Si, Ge) における多重臨界現象」
- B 7 : 松下 琢 (名古屋大理)  
「 $S=1$  カゴメ Heisenberg 反強磁性体 m-MPYNN  $\cdot$  BF<sub>4</sub> の磁化プラトー」
- B 8 : 黒江 晴彦 (上智大理工)  
「ラマン散乱で観測した TlCoCl<sub>3</sub> の磁気励起」
- B 9 : 日下部 晃平 (上智大理工)  
「ACuCl<sub>3</sub> のラマン散乱」
- B10 : 西野 晃徳 (東大生産研)  
「超可積分カイラルポッツ模型のイジング的スペクトルと付随する XXZ 型スピン鎖の L(sl<sub>2</sub>)対称性」



- B11 : 濱崎 智彰 (上智大理工)  
「一次元競合系  $\text{Rb}_2\text{Cu}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$  の高圧下磁化測定および磁気比熱の磁場変化」
- B12 : 小野 俊雄 (東工大院理工)  
「 $\text{S}=1/2$  スピンドイマー系  $\text{ND}_4\text{CuCl}_3$  の磁気弾性散乱」
- B13 : 森崎 梨恵子 (東工大院理工)  
「 $\text{S} = 1/2$  1 次元反強磁性体  $\text{KCuGaF}_6$  における磁場誘起ギャップと磁気励起」
- B14 : 何 長振 (東大物性研)  
「一次元スピン系  $\text{SrCo}_2\text{V}_2\text{O}_8$  の磁気挙動」
- B15 : 尾形 誠之 (東大物性研)  
「二次元磁性体  $(\text{CuX})\text{LaNb}_2\text{O}_7$  ( $\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}$ ) の NMR 測定」
- B16 : 松原 信一 (東大物性研)  
「 $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$  における新しい高磁場相」
- B17 : 真中 浩貴 (鹿児島大理工)  
「複合ハルデン鎖  $\text{IPA-CuCl}_3$  の  $g$  値の 3 次元可視化測定」
- B18 : 菅 誠一郎 (阪大工)  
「1 次元量子スピン系の磁場中 NMR 緩和率」

## Oral 11/27/P01

### ナノ分子磁性研究の動向と可能性

野尻 浩之 (東北大金研)

ナノ分子磁性体研究は、初期の高スピン磁石の合成とその物性探求は一段落し幾つかの新しい方向性に沿って研究の展開がなされている。本公演では最近のナノ分子磁性研究の流れと可能性を概観する。研究の動向としては、(1)多様なトポロジーにおける基底状態の量子性ならびに古典性、(2)コヒーレントなスピン操作、(3)磁気クラスターを連結して作られる高次構造の生成と物性、(4)高次構造における内部自由度、(5)理想的な低次元構造生成、(6)サイズ効果、(7)複合機能をもった磁性体、(8)スピン転移の制御、(9)伝導性の制御、(10)超構造作成などがあげられる。特に、物理的に未開拓の分野として興味深いのは、実時間の物理現象に関連したコヒーレントなスピン操作と3次元結晶では実現不可能な高次な構造を持った磁性体の実現であり、それらに関して幾つかの試みも報告する。

## Oral 11/27/P02

### 単分子磁性体の量子ダイナミクスとエネルギーギャップ構造

宮下 精二 (東大理)

単分子磁性体では磁場の掃引に関して、エネルギー準位の構造を反映して様々な動的磁化過程を示す。その機構の特徴や散逸効果などについて調べる。また、量子ダイナミクスで重要な役割をするエネルギーギャップの相互作用依存性を調べ、ギャップの起源やそのコントロールの方法についても考察する。さらに分子内の磁気相互作用によるフラストレーションのための新しいタイプの基底状態についても議論する。

## Oral 11/27/P03

### 結晶と磁性の chirality : 理論

岸根 順一郎 (九工大工)

カイラリティを巡る研究は、18 世紀前半のアラゴに始まってパスツールへと受け継がれ、結晶・分子のカイラリティについての化学的研究として進展してきた。その後の凝縮系物理・物質科学の進展により、カイラリティ自由度が液晶における分子配向や強相関電子系、スピングラスにおけるスピン相関といった様々な局面で重要な役割を果たすことが明らか

かになってきことは周知の事実である。カイラリティ研究を化学と物理の境界線上に位置づけると、「構造的カイラリティと磁気のカイラリティ」、「分子スケールでのカイラリティと結晶スケールでのカイラリティ」という対比が浮き彫りになるが、これらの関係には未解明の部分が多い。ここで取り上げるカイラル磁性体とは、マクロスケールでカイラルなスピントイストパターンが形成されることで結晶全体にわたってスピンカイラリティが発現する古典秩序状態(コレステリック液晶のスピン版)である。井上らによって合成された分子性カイラル磁性体では、カイラル分子を配位子とすることで結晶の構造的カイラリティが誘導され、これが引き金となって一方向に整列した DM 相互作用(フェロイックな DM 相互作用)が誘起される。最近の物性測定(磁化測定、中性子回折、X 線磁気散乱、非線形交流磁化)によって、一連の分子性カイラル磁性体におけるカイラル磁気構造の存在はほぼ確実となっている[1]。また、最近秋光らによって合成された無機系カイラル磁性体においても、カイラルなスピントイストパターンの可能性が報告されている[2]。カイラル磁性体が有する顕著な性質として、電気的カイラリティと磁気的カイラリティの協奏効果を利用してスピントイストパターン(スピン位相)を電場・磁場によって制御できる点が挙げられる。たとえば、基底状態でのカイラル磁気構造に対応するツイストパターンに位相変調を加えた場合、スピンカレントが誘起される。これを非線形交流磁化によって検出できる。スピンカレント誘導は理論のゲージ構造と深く関連している。これらの研究によって、カイラル磁性体が基礎的な物性研究としての深みだけでなく、スピンドバイスとしての可能性を秘めた物質群であることがはっきりしてきた。本講演では以下の点に的を絞り、カイラル磁性研究の現状を理論の立場から報告する。A. 結晶対称性とカイラル磁気構造 B. 準古典モデルとカイラルソリトン格子 C. ゲージ場とスピンカレント本研究は、アレキサンダー・オブチニコフ(ウラル州立大)・美藤正樹(九工大)・井上克也(広島大)・菊池耕一(首都大)・高阪勇輔(青学大)・秋光純(青学大)各氏を中心とする多数の方々との議論・共同研究に基づくものである。また、科研費基盤研究(A)『結晶と磁性の chirality』および若手研究(B)『新奇有機磁性体のカイラル磁気秩序と磁気光学効果』に基づくものである。

[1] J. Kishine, K. Inoue, and Y. Yoshida, PTP, Supplement No.159, p.82 (2005).

[2] Y. Kousaka, S. Yano, J. Kishine, Y. Yoshida, K. Inoue, and J. Akimitsu, J. Magn. Magn. Mater (印刷中).

## Oral 11/27/P04

### 結晶と磁性の chirality : 分子性化合物

井上 克也 (広島大理)

分子性キラル磁性体について、合成戦略、構造、基本的物性について紹介する。分子性磁性体では比較的容易に固体の構造設計が可能であり、透明でしかも光学特性についても、ある程度設計可能である。すなわち、磁性体の色、光学活性の大きさ、屈折率等が制御可能である。これらの光学物性は、キラル磁性体の持つ特殊な磁気光学効果に大きく影響を与える。また光学活性の大きさは、その磁気構造にも影響すると考えられる。今回はキラル構造を持つ分子性磁性体について焦点をしばり、その特徴、可能性について考察したい。

## Oral 11/27/P05

### 結晶と磁性の chirality : 無機化合物

秋光 純 (青学大理工)

一般的に螺旋磁性の右巻きと左巻きは縮退しており、右巻き(左巻き)のみの磁区を生成することは困難である。しかし、カイラルな結晶構造を持つ磁性体では Dzyaloshinskii-Moriya 相互作用により、右巻き(左巻き)のみの磁区を生成することが可能となり、カイラル螺旋磁気構造が実現する。無機化合物は分子性化合物と比較して結晶構造の制御が困難であるが、大型単結晶試料の育成が比較的容易であるため様々な物性測定が行えることが長所であろう。本発表では、いくつかの無機化合物を例に挙げ、カイラル螺旋磁性の可能性を理論と実験の両面から議論する。また、カイラル螺旋磁性を検出するための新たな物性測定手法についても提案したい。

Oral 11/27/P06

## スピネル酸化物と電荷・軌道・スピン・格子結合現象

上田 寛 (東大物性研)

スピネル酸化物  $AB_2O_4$  において B サイトは正四面体が頂点を共有したパイロクロア格子と呼ばれる 3 次元ネットワークを形成していて、B サイト磁性イオン間に反強磁性相互作用が働く場合の磁気秩序や電荷秩序に対し、強い幾何学的フラストレーションの舞台となる。また、高対称格子系での軌道縮退や格子不安定性などに起因する様々な相転移が期待できる。一方、物質系としてはよく知られた鉱物物質で、B サイトイオン二つあたり d 電子が 0 個から 10 個までの物質がそろっていて、d 電子数(スピン数)の違いによる系統的な研究ができる場を提供している。物性的にも超伝導から量子スピン系まで網羅している。一般に、低温まで自由度が縮退した状態が保持される場合は少なく、電荷・軌道・スピン・格子自由度の結合による相転移が観測される場合が多い。それらの転移は、自ら変身してフラストレーションや縮退を緩和する自己組織化と呼ぶに相応しい。

Oral 11/27/P07

## スピン 1/2 量子かごめ格子磁性体のフラストレート磁性

前川 寛 (京大人環)

$s=1/2$  の  $Cu^{2+}$  イオンがかごめ格子を形成している金属錯体化合物  $[Cu_3[tiymb]_2(CH_3CO_2)_6] \cdot H_{20}$  (略称 Cutitmb) は量子スピンかごめ格子磁性体のモデル物質と考えられ、磁化率、NMR、ESR、比熱、パルス高磁場磁化等の実験がなされている。交換相互作用の大きさなど相反する結果が得られており、また、特異な励起状態や準安定な状態の存在が示唆されている。理論的には  $J_1$ - $J_2$  モデルが提案されている。これらについてレビューし、考察する。

Oral 11/27/P08

## 正方格子フラストレーション系の実験

網代 芳民 (京大理)

二次元正方格子 Heisenberg 反強磁性体の研究は相転移の存否に関して多大なる関心が古くから寄せられて来たが、高温超伝導の発現機構との関連で 80 年代以降、特に  $S=1/2$  量子スピン系の研究が活発に行われている。低次元量子スピン系は次元性の低下と低スピン値を反映して強い量子揺らぎを示すが、相互作用のフラストレーション効果を加味することによって更に量子揺らぎを増強させることが出来る。量子効果とフラストレーション効果との相乗効果によってもたらされる新奇な磁気相の研究は三角格子系やカゴメ格子系で活発に行われているが、本講演では正方格子の対角方向に次近接相互作用が存在するいわゆる  $J_1$ - $J_2$  モデルに関する最近の実験研究について、特に京大グループによってイオン交換法を駆使して創製されている一連のモデル物質群の実験結果を紹介する。

Oral 11/27/P09

## 強磁性揺らぎの強いフラストレート磁性体における量子スピン液体

桃井 勉 (理研)

近年、固体  $He^3$  薄膜および  $(CuCl)LaNb_2O_7$  等の強磁性揺らぎの強いフラストレート反強磁性体において量子スピン液体状態が発見された。しかし、これまでの理論研究は、反強磁性相互作用の競合を持つフラストレート系が中心で、(多くの場合、反強磁性相互作用の性質からダイマーシングレット状態が現れる。)強磁性揺らぎの強いフラストレート系はこれまであまり調べられていない。

今回、フラストレーションを持つ強磁性体における量子的無秩序相の出現の可能性を明らかにするために、2 体の強磁

性相互作用が支配的な強磁性  $J_1$ - $J_2$  模型やリング交換模型を正方格子上で理論的に調べた。その結果、強磁性相の隣にスピン長距離秩序のない量子スピン液体相が現れる事を見つけた。さらに、この状態はスピンの 4 重極秩序を持つスピンネマティック状態という新奇な量子相であることを見出した。

Oral 11/27/P10

### 強磁場による量子スピンの研究

鳴海 康雄 (東大物性研)

量子スピン研究のはしりとなったハルデンギャップに関する研究は、近年では NDMAP などの磁場誘起磁気相転移へと興味に移りながら、現在でもその研究の裾野を広げている。歴史的な流れを振り返ると、本来の純粋な意味でのハルデン物質の研究に関しては、その全磁化過程を観測することができる唯一の物質として TMNIN が注目され、現在でも異方性のきわめて小さな理想的なハルデン物質であると認識されている。しかし、単結晶試料の合成が困難であった TMNIN では粉末試料による研究がほとんどであったこと、また、交換相互作用の大きさに対して十分な低温での実験が困難であったことなど、十分な議論に耐えうるだけの実験が行われてきたとは言えないと考えられる。最近、我々は単結晶試料を用いた極低温下での強磁場磁化測定を行い、単純なハルデン鎖では説明できない奇妙な振る舞いを観測したので、その実験結果について報告する。

Oral 11/28/A01

### 1 次元で観えた超ラマン核スピン-格子緩和過程

山本 昌司 (北大理)

交替スピン鎖、銅 3 量体 2 重鎖等、擬 1 次元フェリ磁性化合物における、核スピン-格子緩和の新しい理論、並びにその実験検証について紹介する。通常支配的な 2 マグノンいわゆるラマン過程を、より高次の多重マグノン散乱過程が凌駕して、ユニークな緩和率温度・磁場依存性が現われる様を、理論・実験両面から立証してゆく。

Oral 11/28/A02

### ナノスケール分子磁性体の NMR

古川 裕次 (北大理)

8 つの  $\text{Cr}^{3+}$  イオン ( $S=3/2$ ) がリングを形成する  $\text{Cr}_8$  クラスタは、Cr スピン間に反強磁性相互作用が存在するため基底状態が  $S=0$  のシングレット状態をとる。本講演では、その  $S=0$  の基底状態を持つ反強磁性リングクラスタ  $\text{Cr}_8$  のひとつの  $\text{Cr}^{3+}$  イオンを  $s=0$  の Cd に置換した  $\text{Cr}_7\text{Cd}$  クラスタを対象に、その置換に伴う磁気状態の変化を NMR により調べたので、その結果を報告する。

Oral 11/28/A03

### 量子スピン・クラスターにおけるスピン Jahn-Teller 効果

寺尾 洵 (信州大理)

スピン 1/2 から 5/2 までの、正三角形及び正四面体のクラスターについて、Heisenberg ハミルトニアンを基底状態を計算した。スピンの 3/2 より大きいときは Mathematica の行列計算を利用した。これに、スピン・変位結合の摂動が加わったとき、基底状態の縮退が除かれるかどうかを調べた。変位を静的に扱う断熱近似と、量子フォノンで動的に扱った場合では縮退の分裂についての結果が著しく異なる。スピン 1/2 の場合は、HFM2006、ICM2006 で既に報告した。今回は、スピンの大きい場合についての結果を追加する。

Oral 11/28/A04

### 量子スピンドイマー系のスピン・ダイナミクス

益田 隆嗣 (横浜市大)

$S=1/2$  の量子ダイマーは、多くのスピン・ギャップ系の基本構成要素として重要である。ダイマー単体はシンプルであるが、相互作用するダイマーはその幾何学的配置によって、スピン梯子、交替鎖、Shastry-Sutherland 格子など様々なスピン・ギャップ系に分類される。少し変わったところでは、強磁性ダイマーが 1 次元鎖を形成する複合ハルデン系もダイマー系の一種といえる。最近では、スピン・ギャップのエネルギーが実現可能な磁場スケールとマッチした物質が数多く報告されており、磁化プラトー、triplon のボーズ凝縮、フラストレーションによるボーズ凝縮の次元低下など、興味深い現象が観測されている。本講演では、これらのレビューを行うと共に、最近我々のグループで研究している複合ハルデン鎖 IPA-CuCl<sub>3</sub> のスピン・ダイナミクスや、交替磁場下における量子ダイマー物質 Cu<sub>2</sub>Fe<sub>2</sub>Ge<sub>4</sub>O<sub>13</sub> などの紹介を行う。

Oral 11/28/A05

### 新規フッ素化合物の作製と今後の研究方針

真中 浩貴 (鹿児島大理工)

これまでフッ素化合物は典型的な磁性体として数多くの研究が行われてきた。しかしながら作製の困難さから最近ではその進展はほとんど無い。そこでペロブスカイト構造に立ち戻って、2 重層状ペロブスカイト構造を持つ K<sub>3</sub>M<sub>2</sub>F<sub>7</sub>(M=Co,Ni,Cu) に注目して、物質合成をこの数年間行ってきた。最近、やっと物性測定が行える程度の粉末試料の作製に成功した。本講演ではこれまでの歴史的な背景もふまえつつ、各試料の特徴等を紹介する予定である。

Oral 11/28/A06

### 新奇伝導機構「旅する 2 量体の伝導」

矢ヶ崎 克馬 (琉球大理)

スピネル化合物 CuIr<sub>2</sub>S<sub>4</sub> は金属-絶縁体転移をし、通常の半導体ではないタイプの伝導に興味を持たれてきた。最近、この化合物の絶縁相では、2 量体が形成され、結晶構造は三斜晶形を取ることが判明し、かつ、強強度 X 線で照射すると、低温で正方晶に変形しかつ、伝導度が数桁上昇することが発見された。我々は、この奇妙な伝導機構の解明を目指して若干の研究を行った。(1) 電子状態を判別するために、S(硫黄)の一部をO(酸素)で置換した試料の転移点と伝導タイプを、置換しない試料と比較した。(2) ダイマーの結合エネルギーの大きさを評価するために、帯磁率を計算し、実験で得られている反磁性帯磁率と比較した。以上の結果、d $\gamma$ -s-p 軌道は結晶を保つボンドを形成し、転移とは直接関係ない。de 電子がダイマーを形成し、転移および伝導に関与する。その形成するエネルギーギャップは非常に大きく、ダイマーは熱励起されない。金属絶縁体転位は、「2 量体形成と協力し合うヤーンテラー効果」であり、伝導機構は、新奇な「旅する 2 量体の伝導」(traveling dimerconduction)であることを解明した。

Oral 11/28/A07

### 2 次元量子スピン系 SrCu<sub>2</sub>(BO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, Cs<sub>2</sub>CuBr<sub>4</sub> の磁化プラトー

宮原 慎 (青学大理工)

SrCu<sub>2</sub>(BO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> や Cs<sub>2</sub>CuBr<sub>4</sub> といった物質は 2 次元反強磁性物質であり、磁化曲線においてプラトーが観測されている。こうした物質の磁氣的性質は、直交ダイマー格子、歪んだ三角格子上のスピン-1/2 ハイゼンベルク模型でそれぞれ説明できると考えられている。これらの模型の磁場中での基底状態を厳密対角化などの手法を用いて計算し、各プラトーにおける基底状態の性質について考察した結果を示す。

Oral 11/28/A08

### SrCu<sub>2</sub>(BO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>における新しい高压相

和気 剛 (東大物性研)

SrCu<sub>2</sub>(BO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> は Cu<sup>2+</sup>(S=1/2)二量体を基調としたスピングャップ物質で、磁化プラトー等の興味深い磁性を示す。プラトー領域では二量体間のフラストレーションの効果により励起トリプレットが局在化し、それらが超構造を形成している。本系の磁性は二量体の幾何学的配列およびその相互作用の比が重要で、圧力を加え二量体間、内の相互作用を変化させることで新奇な相の出現が期待される。我々は高压下での磁性を明らかにするため角度回転型高压セルを用い角度分解 11B-NMR を行なった。c 軸と平行に磁場を印加した場合、常圧では核四重極相互作用により分裂した 1 組の信号が観測されるが、高压低温条件下でシフトの異なる 2 組の信号を観測した。また T=4K 以下では、それぞれが更に 2 組づつに分裂し、それぞれの一方はギャップ的な振る舞いで、もう一方はギャップレスな振る舞いであった。これは Cu-Cu 二量体について最低温でシングレットのペアとギャップレスのペアが空間的に整列した磁気秩序を起こしていることを意味している。またスピンは有限の自発磁化を持っていないことから、本系において加圧下で新奇な相が発現していると考えられる。

Oral 11/28/A09

### Contractor-renormalization approach to unconventional phases in frustrated magnets

戸塚 圭介 (京大基研)

最近、次近接相互作用、4 体交換相互作用などを含む磁性体で新しいタイプの相が出現することが数値的に予言されている。しかし、どのようなメカニズムでこのような新奇な相が出現するのか、従来から知られているネール秩序相などの相とどのような関係にあるのか、などについてはあまり理解が進んでいるとは言えない。このような系での新奇相の出現メカニズムに対して、統一かつ簡単な描像を与えるため、contracter renormalization 法と呼ばれる方法を用いて元の系を相互作用するボゾン系にマップし、有効モデルを構成した。これによると、さまざまな新奇相は、ボゾンの異方的な凝縮状態として理解され、一見全く異なるオーダーパラメータの間にもさまざまな関係があることがわかる。

Oral 11/28/A10

### 積層三角格子物質 LuFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> の磁気秩序過程

加倉井 和久 (原子力機構)

We report in this paper an anomalous magnetic ordering process in the charge ordered LuFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>. The neutron scattering experiments were performed on TAS-1 and TAS-2 instruments installed at JAEA-JRR-3. The following results are obtained: 1) Despite the triangular configuration a strong 2-D antiferromagnetic correlation with ferrimagnetic component in the double layer in the hexagonal plane develops to a 3-D order along the c-axis at T<sub>N</sub>=242K. 2)

At around 177K there is another characteristic temperature T<sub>f</sub>, where new type of broad magnetic peaks start to grow and at the same time the magnetic peaks already developed below T<sub>N</sub> also acquire finite line width, including the peaks due to the ferrimagnetic component. A strong hysteresis is observed at T<sub>f</sub>. 3) Field dependence of T<sub>f</sub> was investigated. Upon applying the field perpendicular to the layer plane, T<sub>f</sub> decreases and vanishes above 3T. The existence of the anomalous magnetic ground state will be demonstrated and the possible relation to the orbital degree of freedom will be discussed.

## Oral 11/28/P01

### 三角格子有機モット絶縁体におけるスピン液体と超伝導

鹿野田 一司 (東大工)

$k\text{-(ET)}_2\text{Cu}_2(\text{CN})_3$  は、層状構造を持つ擬 2 次元伝導体である。伝導層では、ET 分子 2 量体(ET)<sub>2</sub> が異方的三角格子を形成しているが、2 量体間の移動積分で見ると、正三角格子に極めて近い。この物質は、常圧下ではモット絶縁体であるが、少なくとも 30mK までは磁気秩序を示さない。磁化率の温度依存性から見積もられた反強磁性交換相互作用が 250K 程度であることを考えると、量子スピン液体状態と呼ぶべき状態にあると考えられる。研究会では、この状態について今までに得られている実験結果を概観するとともに、加圧によってスピン液体から生じる超伝導に関する研究についても報告する。

## Oral 11/28/P02

### 二次元三角格子反強磁性体 NiGa<sub>2</sub>S<sub>4</sub> におけるスピンの無秩序な量子状態

南部 雄亮 (京大理)

磁気秩序を抑えることによって低温で現れる新奇な量子状態の可能性から、幾何学的フラストレーションを持つ磁性体が注目されている。その中で、構造で最も基礎的なもののひとつとして三角格子反強磁性体がある。最近、我々は層状カルコゲナイド化合物 NiGa<sub>2</sub>S<sub>4</sub> が極めて二次元性の高い反強磁性相を持つ S=1 の三角格子スピン系であることを発見した。この物質では 80K 程度の反強磁性的相互作用にも関わらず、最低測定温度の 0.35K まで磁気的長距離秩序が存在せず、低温までスピンの無秩序な状態にあることが磁化率、比熱、中性子回折の結果から分かっている。また、短距離相関が発達する 10 K 以下において、比熱が温度の二乗に比例した振る舞いを示し、磁化率が低温でも有限に留まることから、二次元の S=1 のスピン系において何らかのコヒーレンスが存在することが明らかになってきた。本発表ではこの NiGa<sub>2</sub>S<sub>4</sub> とその不純物効果の実験結果について紹介する。

## Oral 11/28/P03

### 三角格子スピン系の理論—”スピン液体”とスピンネマティック相

常次 宏一 (東大物性研)

Wannier の反強磁性イジングスピン系の相転移の不在の証明や Anderson のハイゼンベルグスピン系における RVB 状態の提唱以来、三角格子はフラストレーション系の中心的な研究対象であって来た。最近の <sup>3</sup>He 薄膜、有機磁性体、Ni 化合物の実験データはスピン液体的な振る舞いを示している。本講演では三角格子スピン系の理論の簡単なレビューに続いて、非磁気的秩序の 1 つの可能性としてスピンネマティック相について議論する。

## Oral 11/28/P04

### 2次元のフラストレートしたハバード模型の相図について

水崎 高浩、<sup>1</sup>今田 正俊 (専修大、<sup>1</sup>東大院工)

経路積分繰り込み群法を用いて、2 次元正方格子上で次近接ホッピングを持つフラストレートしたハバード模型のハーフフィリングでの相図を、相互作用の強さ  $U$ 、フラストレーションの大きさ(次近接ホッピングの大きさ)  $t'$  をパラメータとする平面で明らかにした。長周期構造を含む 3 種類の反強磁性、金属相、量子スピン液体相が存在し、それらの相の間の境界を確定した。特に  $U$  が大きいときにダイマー秩序などが提案されていた領域は、実際には長周期の反強磁性相であり、一方、モット転移近傍のモット絶縁相に量子スピン液体相が存在することを、われわれの研究結果は初めて示した。また、経路積分繰り込み群法に量子数射影の方法を組み合わせることで、量子スピン液体相が運動量に関して縮退した相であり、スピン励起もギャップレスであることを示した。これらについて発表したい。

Oral 11/28/P05

### カイラリティを如何に観測するか？

川村 光 (阪大理)

カイラリティは、スピンの局所的な構造の右・左を表す量である。最近、様々な磁性体や超伝導体を舞台にカイラリティが引き起こす新奇な物理現象に興味を持たれている。講演では、多スピン量であるカイラリティを如何にして実験的に観測するかについて、最近の実験結果の紹介も交えて、お話したい。

Oral 11/28/P06

### スピндаイマー系の量子相転移と磁気励起の実験

田中 秀数 (東工大院理工)

反強磁性的交換相互作用で強く結合したスピン対(ダイマー)がダイマー間の交換相互作用で互いに結合した系はスピндаイマー系とよばれている。この系の基底状態は一般に有限の励起ギャップをもつ **singlet** 状態であるが、外部磁場の印加や圧力によって交換相互作用を変化させることによって、ギャップが閉じ、秩序状態への相転移が起こる。このような基底状態間の量子相転移はスピンの **triplet** 状態のソフト化、或はボース凝縮として捉えることができる。この量子相転移を  $\text{TlCuCl}_3$  と  $\text{KCuCl}_3$  において詳細に調べたので、その結果を報告する。今回は特に圧力下で起こる量子相転移を中心に話す予定である。また、これらのスピндаイマー系に少量の非磁性不純物をドーピングすると不對スピン間の有効交換相互作用によって磁気秩序が起こる。この有効交換相互作用はホストの系のギャップに強く依存する。これについても調べたので、その結果も合わせて報告する。

Oral 11/28/P07

### スピндаイマー系の量子相転移と磁気励起の理論

松本 正茂 (静岡大理)

近年の実験技術の進歩により、今まで観測不可能であった領域における物理が明らかにされようとしている。その典型的なものが強磁場であり、強磁場技術では日本が世界をリードしている。このような中、 $\text{TlCuCl}_3$  を中心として、強磁場で誘起される磁気秩序の研究が盛んに行われている。この物質では 2 つのスピンの強く結合してダイマー(1 重項-3 重項)を局所的に形成する。3 重項励起はダイマー間相互作用(3 次元的)によって結晶中を移動することができ、分散関係を持つスピン波として観測されている。弱磁場では励起にギャップを有するが、磁場を強くするとギャップは消失し、磁場誘起磁気秩序を起こす。マグノンのボーズ・アインシュタイン凝縮の考えからこの相転移が議論され、研究が盛んに行われている。本講演では、このような量子相転移と磁気励起についての理論を説明し、ダイマー系以外の関連する物質についても議論を行う。

Oral 11/28/P08

### 3次元格子系における超流動固体状態の探索

鈴木 隆史 (東大物性研)

近年、固体ヘリウム 4 に対して行われたねじれ振子の実験結果を受けて、超流動固体状態に対する研究に注目が集まっている。この超流動固体状態に対する理論的アプローチの一つとして、ハードコアボーズハバードモデルをスピン  $S=1/2$  の  $\text{XXZ}$  モデルにマップする方法がある。本講演では、 $S=1/2\text{XXZ}$  モデルを用いて調べられた超流動固体に対する研究結果を紹介する。さらに最近、我々が調べた面心立方格子で現れる超流動固体状態について紹介する。



## Oral 11/29/A01

### ダイヤモンド鎖化合物アズライトの磁性 (実験)

菊池 彦光 (福井大工)

ダイヤモンド鎖モデルの現実物質候補であるアズライト( $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ )に関する実験研究、特に 1/3 磁化プラトーの観測、磁化率、比熱、核磁気共鳴等の測定から得られた結果を講演する。

## Oral 11/29/A02

### ダイヤモンド型スピン鎖の磁氣的性質の理論—格子のフェリ性とフラストレーション

岡本 清美、利根川 孝<sup>1</sup> (東工大理工、<sup>1</sup>福井工大機械)

ダイヤモンド型スピン鎖では格子のフェリ性とフラストレーションの競合で磁氣的性質にいろいろと興味深い現象が見られる。この問題に関していろいろな手法を用いた結果を解説したい。

## Oral 11/29/A03

### フラストレーションと量子性から生まれるフェリ磁性

飛田 和男 (埼玉大理)

低次元量子フェリ磁性はこれまで、混合スピン系を中心に、相互作用にフラストレーションがなく Lieb-Mattis の定理から期待される基底状態磁化を持つ系を中心に調べられてきた。しかし、近年、フラストレーションが強い 1 次元量子スピン系でフェリ磁性を示す系の例がいくつか見つかってきた。このような系では、Lieb-Mattis 型のフェリ磁性と異なり自発磁化の値は必ずしも飽和磁化の簡単な有理数倍にならず、系のパラメータと共に連続的に変化することがある。講演では、このような例をいくつか取り上げ、それらに共通に見られる特徴を明らかにしたい。

## Oral 11/29/A04

### S=2 スピンと S=1 スピンが反強磁性的に交代した異方的 1 次元鎖の零磁場基底状態

利根川 孝 (福井工大機械)

最近錯体化学の分野で単 1 次元鎖磁石系として注目されている  $\text{Mn}^{3+}$ - $\text{Ni}^{2+}$ 系ヘテロ金属錯体化合物: $[\text{Mn}(\text{Cl}_4\text{sal tmen})\text{Ni}(\text{pao})_2(\text{bpy})](\text{PF}_6)$ を念頭において、「S=2 スピンと S'=1 スピンが反強磁性的に交代した異方的 1 次元鎖の零磁場基底状態」を、主として数値的方法を用いて議論する。 $\text{Mn}^{3+}$ イオン(S=2)、および、 $\text{Ni}^{2+}$ イオン(S'=1)に 1 軸性シングルイオン異方性エネルギーの存在を仮定し、交換相互作用定数に対する両異方性エネルギー定数の比を、それぞれ、 $D$ 、 $D'$ とする。 $D$  対  $D'$  平面上の基底状態相図には、 $D=D'=0$  のときのフェリ相以外に、6 種類の非磁性相が出現する。これらの基底状態相間の相境界線を、各種のレベルスペクトロスコピー法、現象論繰り込み法、基底状態のエネルギーの比較などによって計算する。

Oral 11/29/A05

## 新奇銅酸化物の軌道秩序と磁性の理論解析および物質設計

胡 暁 (物材機構)

最近合成された新規ペロブスカイト銅酸化物  $\text{Sr}_8\text{CaRe}_3\text{Cu}_4\text{O}_{24}$  は、モット絶縁体であり、高い磁気転移温度  $T_c=440\text{K}$  を示す。これは今までに知られていた銅酸化物強磁性体に比べて十倍以上に高い。私たちは、密度汎関数(LSDA+U)計算を行い、軌道秩序とフェリ磁性構造を明らかにした。密度汎関数法計算の結果に基づき、系の低エネルギーでの振る舞いを記述する磁性有効モデルとして 3 次元のスピン交替した量子スピン系を提唱し、量子モンテカルロ法により実験で観測された磁気転移温度、ゼロ温度磁化等を含む系の磁氣的振る舞いを定量的に説明することができた。次のステップとして、元素置換による新規磁性物質の理論設計を試みた。W や Mo で Re を置換すれば、スピナップチャンネルが金属的でスピンドウンチャンネルが絶縁的であるハーフメタル強磁性体になることが明らかになった。最近、置換元素やドーピングによって、マクロな磁性を持たないハーフメタル、いわゆるハーフメタル反強磁性も実現可能であるが分かった。

### 参考文献

- [1] E. Takayama-Muromachi et al. J. Solid State Chem. 175, 366 (2003).
- [2] X.-G. Wan, M. Kohno and X. Hu, Phys. Rev. Lett. 94, 087205 (2005).
- [3] M. Kohno, X.-G. Wan and X. Hu J. Phys. Soc. Jpn. Suppl. 74, 98 (2005).
- [4] X.-G. Wan, M. Kohno and X. Hu, Phys. Rev. Lett. 95, 146602 (2005).

Oral 11/29/A06

## 2 次元量子反強磁性体におけるインスタントン

柳沢 孝 (産総研)

2 次元反強磁性体は連続極限をとると (2+1)次元非線型シグマモデルにマップされる。2 次元の非線型シグマモデルにおけるインスタントン解は Fateev らによって調べられ、インスタントン間に対数的な相互作用が働くことが示されている。これは正負の電荷の粒子間に対数的な相互作用が働くクーロンガスモデルと等価である。ここでは、インスタントン解の時間依存性を考察する。インスタントンとアンチインスタントンの位置を表わす変数が時間に依存する時の運動方程式を考察すると、インスタントン対の間の距離が時間に依存して振動することがわかる。

Oral 11/29/A07

## 不純物誘起反強磁性秩序：ボンド希釈系における競合する二つの有効相互作用

安田 千寿 (青学大理工)

量子揺らぎのためスピンギャップを伴う非磁性な基底状態を有する擬低次元反強磁性体、例えば、スピン・パイエルス物質やハルデン物質に不純物をドーピングすると、反強磁性長距離秩序(AFLRO)が誘起される。これは、非磁性状態を担うスピン一重項対を不純物が壊すことにより不純物のまわりに磁気モーメント(有効スピン)が誘起し、それらがまわりの一重項対を媒介して相関することにより生じる秩序と理解される。本講演では、ボンド交替鎖が二次元的に結合した反強磁性ハイゼンベルク模型の非磁性状態における「サイト希釈」と「ボンド希釈」の効果の違いに着目する。例えば、サイト希釈すると無限小の希釈濃度で AFLRO が誘起するのに対し、ボンド希釈系では、ある有限の濃度まで誘起されない。本講演では、その違いが有効スピン間に働く二つの有効相互作用の競合のメカニズムにより理解できることを示し、今も実験・理論両面で研究が続く「不純物誘起反強磁性秩序」の魅力の一端を紹介したい。

Oral 11/29/A08

### Wilson 型実空間くりこみ群と量子スピン鎖の 低エネルギー励起スペクトル

奥西 巧一 (新潟大自然)

1次元量子系で密度行列くりこみ群(DMRG)が成功を納めているので、実空間くりこみ群は信頼性のある手法というイメージが定着しているが、DMRG以前は全くそうではなかった。ブロックスピン変換などの手法は、1次元量子系では定性的も誤った結果をだすことも多かった。一方、近藤問題に用いられたWilsonのくりこみ群は、様々な不純物問題で精度よく低エネルギー励起を計算する手法として威力を発揮している。また、DMRGと異なりギャップレスの系で有効である。そこで、DMRGはひとまず離れて、不純物問題のWilsonくりこみ群を改良すれば、むしろ1次元量子系でも信頼できる正統派実空間くりこみ群が作れるのではないかと考え、ここでは、不純物問題Wilsonくりこみ群を再考/拡張し、ギャップレス領域のXXZ鎖へ適応した場合の結果と、その解釈について発表する。

Oral 11/29/A09

### スピントラップの量子相転移

坂井 徹 (原子力機構)

3本鎖スピントラップはスピントラップが存在しないことが知られているが、これを鎖間方向にも周期的につないだ3本鎖スピントラップではスピントラップが存在する。この両者をつなぐ量子相転移について、数値的に解析した結果を報告し、今後の進展を議論する。

Oral 11/29/P01

### ハルデン系の物理と残された課題 (実験)

萩原 政幸 (阪大極限センター)

1983年のハルデン予想以来、実験理論両面で非常に精力的な研究がなされてきて、一次元反強磁性体の物理に関しては大方の理解が進んでいる。しかしながら、ハルデンギャップを磁場や圧力でつぶした後の磁場誘起相に関しては現在も研究が進められている。このような状況の中、ハルデン系(ボンド交替系も含む)においてこれまでの研究を概観した後、講演者が現在進めている研究を紹介し残された課題に関して参加者と共に議論したい。

Oral 11/29/P02

### ハルデン系の物理と残された課題 (理論)

野村 清英 (九州大理)

ハルデン系の理論的側面についてレビューする。とくに  $S=1$  bilinear-biquadratic (BLBQ) スピン鎖には、AKLT, Takhtajan-Babujan, Uimin-Lai-Sutherland など厳密解がある。厳密解の周辺での物理現象について繰り込み群、レベルスペクトロスコーピー、整合-非整合遷移などにより理解が進んできたので紹介する。

Oral 11/29/P03

### ナノ空間に配列した酸素分子鎖の強磁場磁化過程

松尾 晶 (東大物性研)

ナノ・サイズのチャンネルを持つ多孔性配位高分子に、等核二原子分子に限れば唯一磁性を示す酸素分子(スピン 1)を物理吸着させることで酸素分子鎖を作り、その低次元物質の磁性を調べている。多孔性配位高分子は、金属錯体の 2 次元シートと、それを連結する架橋分子から成っている。たとえば架橋分子を替えることでチャンネルの間口の大きさを変えることができる。典型的な多孔性配位高分子は通称 CPL-1 と呼ばれ、その細孔のサイズは  $4\text{\AA} \times 6\text{\AA}$  であり、酸素分子は約 160K 以下で吸着し、一つのチャンネル内に 2 列で並ぶ。つまり酸素分子のラダー構造が形成されていることになる。ラダー構造を作る酸素分子鎖は目的どおり低次元磁性体のような振る舞いを示した。他にも幾つかの多孔性配位高分子に酸素分子を吸着させその磁性を調べている。

Oral 11/29/P04

### 側鎖のある量子スピン鎖の基底状態

高野 健一 (豊田工大)

側鎖のある量子スピン鎖にはいろいろなバリエーションがあり、いろいろな基底状態が期待できる。実際の物質で発見される期待もある。しかし、まだ十分な研究は成されておらず、簡単な場合から研究を始める意義がある。ここでは、スピン鎖の 1 つおきのサイトに、側鎖として 1 つのスピンが付属しており、フェリ磁性にならない場合を調べる。まず、1 次元混合量子スピン系に対する非線形シグマ模型の方法を側鎖がある場合に拡張する。これによって、基底状態の相図の概略を求める。数値的対角化の方法によっても相図を求めて比較する。結果は、側鎖との交換相互作用の強さなどに応じて、ギャップのある 2 つの相が見いだされた。各相の特徴を検討する。

Oral 11/29/P05

### 高次元の AKLT 描像とその場の理論

田中 秋広 (物材機構)

VBS 描像(AKLT 描像)は一次元量子スピン鎖の物理を理解する上で欠かせない。またこれは非線形 $\sigma$  模型や共形場による場の理論的記述とも良く対応が取れており、両者は 80 年代から 90 年代にかけてのハルデインギャップ周辺の物理の進展に中心的な役割を担った。近年、二次元、三次元における量子スピン液体やスピン系の量子臨界現象に関連して再びこの二つのアプローチが頻出するようになった。新しいタイプの量子相転移とされる Senthil 等による deconfined criticality はこのような動きの一例である。本講演では、このような高次元量子スピン系における AKLT 描像を記述するのに適した場の理論的な枠組みを、我々の最近の研究(PRL95 (2005) 036402, PRB 2006 inpress、等)をもとに提起し、四角格子系、ハニカム格子系、フラストレートしたラダー系などに適用する。さらに近年注目されているトポロジカル秩序について、この枠組から議論を試みる。

Oral 11/29/P06

### 量子スピン系の ESR による研究

太田 仁 (神戸大理)

マグノンの BEC、磁化プラトー、フラストレーション系、ハルデン系など量子スピン系の研究において強磁場 ESR は大きな役割を果たしてきた。そこでこのような系の強磁場 ESR 測定を概観し、残された問題について議論したい。

## Oral 11/29/P07

### 5 本足スピン梯子格子系 $\text{La}_8\text{Cu}_7\text{O}_{19}$ とハルデンギャップ系 $\text{Y}_2\text{BaNiO}_5$ におけるスピンによる熱伝導

川股 隆行<sup>1</sup>、小池 洋二<sup>2</sup>、宮島 祐一<sup>2</sup>、野地 尚<sup>2</sup>、工藤 一貴<sup>3</sup>、小林 典男<sup>3</sup>(<sup>1</sup>理研、<sup>2</sup>東北大工、<sup>3</sup>東北大金研)

様々な低次元量子スピン系の物質において、スピンによる大きな熱伝導が観測され、注目されている。たとえば、スピン量子数  $S=1/2$  の 1 次元スピン鎖を持つ  $\text{Sr}_2\text{CuO}_3$  や 2 本足スピン梯子格子をもつ  $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$  では、大きなスピンによる熱伝導が報告されている。しかし、梯子の足数が多い場合や  $S$  が整数であるハルデンギャップ系における報告例はほとんどない。そのため、5 本足スピン梯子格子系  $\text{La}_8\text{Cu}_7\text{O}_{19}$  とハルデンギャップ系  $\text{Y}_2\text{BaNiO}_5$  において、熱伝導を測定した。

その結果、 $\text{La}_8\text{Cu}_7\text{O}_{19}$  においては、スピンによる熱伝導は観測されなかった。その理由は、梯子の足数の効果よりも梯子格子間に大きな相互作用が存在するためと考えられる。一方、 $\text{Y}_2\text{BaNiO}_5$  においては、大きなスピンによる熱伝導が観測された。 $S=1/2$  の系と同様に、スピン鎖内の交換相互作用に比例して熱伝導が増大している可能性がある。

## Oral 11/29/P08

### スピンラダー化合物 $(\text{CPA})_2\text{CuBr}_4$ の高周波 ESR 測定

光藤 誠太郎 (福井大遠赤セ)

$(\text{CPA})_2\text{CuBr}_4$  は ladder 方向の相互作用の方が rung 方向よりも強い初めての  $S=1/2$  反強磁性スピンラダーモデル化合物とされている。また、NMR 測定から朝永-Luttinger 液体 (TLL) で記述されるプロトンの緩和率のべき的振る舞いや磁化測定から低温でギャップを持つことが報告されている。上記のように、二足ラダー系の特徴を示す一方、我々の高周波 ESR 測定からは Cu-benzoate の Breather モードに類似した振る舞いも観測された。講演では、これまでの研究結果とともに、一次元系の磁場誘起ギャップと  $(\text{CPA})_2\text{CuBr}_4$  で観測された特異な ESR スペクトルの振る舞いについて比較しながら報告を行う。

## Oral 11/29/P09

### スピンラダー化合物 $(\text{CPA})_2\text{CuBr}_4$ の核磁気共鳴

藤井 裕 (福井大遠赤セ)

$(\text{CPA})_2\text{CuBr}_4$  は ladder 方向の相互作用の方が rung 方向よりも強い初めての  $S=1/2$  強磁性スピンラダーモデル化合物とされている。ladder 方向の相互作用が強いために相互作用の大きさに比べてスピニングャップの大きさ (約 2 K) が小さくなり、磁場印加によって磁場誘起臨界状態の振る舞いを調べるのに適している。我々はこれまで 0.4 K までの温度域で、約 8 T までの臨界磁場領域において、朝永-Luttinger 液体 (TLL) で記述されるプロトンの緩和率のべき的振る舞いを観測した。また、最近の ESR 測定から Cu-benzoate の Breather モードに類似した振る舞いも観測され、注目されている。講演では、これまでの研究結果とともに、TLL 領域よりも低温で緩和率が急激に減少する振る舞いについて、ほかのギャップ系での観測結果と比較して述べる予定である。

## Oral 11/29/P10

### 拡張された 4 体相互作用をもつ 2 本鎖梯子スピン系における双対変換

引原 俊哉 (北大理)

拡張された 4 体相互作用をもつ 2 本鎖梯子スピン系について議論する。我々はこれまでに、この系において、スピン自由度とカイラリティ自由度を入れ替える双対変換が成り立つことを示している [T. Hikihara, T. Momoi, and X. Hu, Phys. Rev. Lett. 90, 087204 (2003)]. 今回我々は、この系において、もう一つの新しい双対変換が成り立つことを発見

したので、それについて報告する。また、それら二つの双対変換から導かれる、様々な秩序パラメータ間の双対性、および、モデル・パラメータ空間における双対変換の構造について述べる。さらに、その結果の適用例として、4 スピン循環相互作用をもつ 2 本鎖梯子系の基底状態磁場相図について議論する。

Oral 11/29/P11

### 偏極中性子を用いた $\text{TbMnO}_3$ の磁気構造に関する研究

松田 雅昌、梶本 亮一、武田 全康、加倉井 和久、三井 由佳利<sup>1</sup>、吉澤 英樹<sup>1</sup>、木村 剛<sup>2</sup>、十倉 好紀<sup>3</sup>  
(原子力機構、<sup>1</sup>東大物性研、<sup>2</sup>BeII 研、<sup>3</sup>東大工)

$\text{TbMnO}_3$  は低温で強誘電性と反強磁性が共存するマルチフェロイック物質の一種である。これまでの研究によると、 $T_N=42\text{K}$  で SDW 秩序(コリニア構造)を示し、 $T_c=28\text{K}$  以下で楕円スパイラルスピン構造を示すことが示されている。また、強誘電性は  $T_c$  以下で発達する。

偏極中性子は磁性体中の磁気モーメントの方向を詳細に調べるのに有用である。特に、最近開発が進んでいる三次元偏極中性子解析法を用いることにより、スパイラルスピン構造に関する詳細な情報を得ることが出来る。我々は、三次元偏極中性子解析法を用いて  $\text{TbMnO}_3$  の磁気構造を詳細に調べた。その結果、磁気構造が  $T_c$  以下で徐々に SDW 構造(容易軸は  $b$  軸、イジング的)からスパイラル構造(容易面は  $bc$  軸、XY 的)に転移すること( $c$  成分が温度減少とともに徐々に増加する)、楕円スパイラル構造の主軸が温度減少とともに  $b$  軸から回転すること等を示した。

Oral 11/29/P12

### バナジウム酸化物系における量子スピン効果

小野田 雅重 (筑波大数理)

バナジウム酸化物系は量子効果の強く現れる物質を数多く有する。結晶構造の精密決定および種々の物性測定を通して得られた最近の成果を簡潔にまとめ、今後解明されるべき実験的、理論的問題をより多く含む系を紹介する：1) スピネル格子  $\text{MV}_2\text{O}_4$  の擬 4 量体モデルと同様に、三角格子  $\text{MVO}_2$  の常磁性相に対して擬 3 量体モデルを提案し、軌道秩序問題を含めながら低温秩序相への転移機構を検討する。2) ラダー格子間にジグザグ型相互作用が働かうるトレリス格子  $\text{M}_x\text{V}_2\text{O}_5$  におけるラング上 2 量体および 1 次元交替鎖型 2 量体、並びに関連格子  $\text{MV}_n\text{O}_{2n+1}$  における強磁性( $n = 1$ )、反強磁性相( $n = 3$ )等の秩序相について考察する。3) 量子スピン効果を示す物質の中には、結晶構造や電子間相互作用に応じて 2 次電池や熱電変換等の機能を有するものがある。それらの中から  $\text{M}_{1+x}\text{V}_3\text{O}_8$  および複合結晶型  $\text{Cu}_x\text{V}_4\text{O}_{11}$  の性質について紹介する。

A1

### 擬一次元コバルト化合物 $\text{BaCo}_2\text{V}_2\text{O}_8$ の強磁場磁性

木村 尚次郎 (阪大極限センター)

$\text{BaCo}_2\text{V}_2\text{O}_8$  は  $\text{CO}^{2+}$  が磁性を担う擬一次元反強磁性体で、零磁場では  $5.4\text{K}$  で長距離秩序することが知られているが、磁場を加えると磁場誘起による秩序-無秩序転移を示す。すなわち磁化容易軸である  $c$  軸方向に磁場を加えると  $4\text{T}$  付近で磁気転移が生じるが、この転移磁場以上で磁気秩序が消失することが最近の  $1.8\text{K}$  までの比熱測定で示された。我々はこの転移の機構に関して知見を得るため、 $55\text{T}$  のパルス磁場を用いた強磁場磁化と ESR 測定を行ったのでその結果について発表する。測定結果は秩序-無秩序転移が  $S=1/2\text{XXXZ}$  反強磁性鎖の量子相転移と関係していることを示唆した。

A2

### 擬 1 次元反強磁性ハイゼンベルグ模型における鎖間平均場近似とその改良

柴崎 彬 (東大工)

擬 1 次元反強磁性体は、弱い鎖間相互作用の効果により、低温で長距離秩序を示すことが知られている。安田らにより、臨界温度の鎖間相互作用依存性が、スピンの大きさによらない繰り込まれた配位数を用いた鎖間平均場近似で、定量的にもよく記述されることが数値計算によって発見された。

そこで、我々は臨界温度と異なる温度領域である絶対零度において、loopcluster 量子モンテカルロ法を用いた解析を行った。その結果、基底状態における自発磁化の大きさの鎖間相互作用依存性についても繰り込まれた配位数を用いた鎖間平均場近似により定量的に記述されることが発見された。さらに、平均場近似自体の改良としてペーテ型の平均場近似(鎖間ペーテ近似)をこの系に対して試み、ワイス型の平均場近似と同様の結果を得た(誤差は 75%改善)。

講演ではこの新しいペーテ型の近似をランダムネスのあるスピン系に適用した結果についても紹介したい。

A3

### 二次元正方格子磁性体(CuBr)Sr<sub>2</sub>Nb<sub>3</sub>O<sub>10</sub>の磁性

辻本 吉廣 (京大理)

低温合成法の一つであるイオン交換反応は、通常の固相反応では形成し得ない構造を持った新しい磁性体を合理的に創り出すことができる。今回、母体である三層の Dion-Jacobson 型層状ペロフスカイト RbSr<sub>2</sub>Nb<sub>3</sub>O<sub>10</sub>CuBr<sub>2</sub> をイオン交換することによって、二次元正方格子を持つ(CuBr)Sr<sub>2</sub>Nb<sub>3</sub>O<sub>10</sub>を新たに合成し、その帯磁率、磁化、比熱、 $\mu$ SR、中性子回折の測定を行った。ゼロ磁場下の比熱測定では、9.1K と 7.3K に逐次相転移を示す異常が見られ、低温側の相転移は磁気相転移であることが磁化率、 $\mu$ SR の結果より示唆される。さらに興味深いことに、強磁場磁化測定で 1/3 プラトーで観測された。これは二次元正方格子反強磁性体にとって予期し得ない特異な現象である。

A4

### CuB<sub>2</sub>O<sub>4</sub>の高周波 ESR

藤田 敏之 (福井大遠赤センター)

CuB<sub>2</sub>O<sub>4</sub> は、低温で逐次相転移を示す物質であり、反対称性交換相互作用がその磁性に重要な役割を果たしている。 $T_N = 21K$  で弱強磁性転移、さらに  $T^* = 10K$  で不整合カイラル螺旋磁性へと転移する。また  $T^*$  近傍では  $B//a$  の磁化率に異常が現れ、カイラルソリトン格子モデルによる説明がなされている。我々はこの物質における逐次相転移現象の理解とカイラル磁性体に特有な現象の発見を目指し ESR 測定を行っている。温度 2K の螺旋磁性相において、既に報告されている常磁性共鳴と新たに約 180GHz のゼロ磁場ギャップを有する 2 つの ESR モードを観測した。これら 2 つの ESR モードは、結晶学的に異なる 2 つの非等価な銅サイトにおける常磁性共鳴と螺旋磁性共鳴であると考えている。講演は、解析の結果得られる交換相互作用の大きさを結晶構造と磁気相図と比較しながら議論を進める予定である。

A5

### 量子スピン系における整合-非整合遷移

村島 隆浩 (九州大理)

量子スピン系においてしばしばフラストレーションの効果により、非整合な無秩序状態という特殊な状態が現れる。これは通常の相関関数を調べると、指数関数的に減衰しかつ変調波数の振動がかかった形としてとらえられる。場の理論的な考察から相関関数と動的な相関関数との関係が見出されるが、さらに低励起のエネルギースペクトルとの関係も見出せる。したがってエネルギースペクトルの振舞いを調べることにより、相関関数の振舞いの予測がある程度可能である。私と野村氏(九大)による研究[1-3]において、エッジ状態を用いた簡便な方法により整合-非整合遷移を調べ、変調波数及び

相関長の振舞いについて、直接相関関数を計算したもの[4]と consistent な結果を得た。その一連の研究成果について講演する。

[1] Nomura and Murashima, J. Phys. Soc. Jpn. Suppl., Vol. 74, p. 42, 2005.

[2] Murashima and Nomura, Phys. Rev. B, Vol. 73, p. 214431, 2006.

[3] Murashima and Nomura, J. Phys. Cond. Matt., to be appeared.

[4] Schollwock et al, Phys. Rev. B, Vol. 53, p. 3304, 1996.

## A6

### 環状チアジラジカル結晶におけるスピギャップ状態

藤田 渉 (名古屋大理)

環状チアジラジカル誘導体は興味深い磁気ならびに伝導挙動、構造相転移等を示すことから主に化学の分野で最近注目を集めている。我々はスピン角運動量量子数  $S = 1/2$  を有する磁性分子カチオン  $\text{BBDTA}^+$ が、対アニオンの種類や結晶化条件によって、二量体、2足並びに3足スピンラダー、鎖状、二次正方格子といった磁気ネットワーク構造を形成し、反強磁性転移、強磁性相転移、**spin-Peierls** 転移など多彩な磁気挙動を示すことを見出している。この物質群は多次元磁気ネットワークを有する量子スピン系を提供するものと期待している。

本発表では3次元ネットワーク構造を形成していながら、反磁性基底状態を有する  $\text{BBDTA}^+$ 塩結晶の構造と磁気的性質について紹介する予定である。

## A7

### 磁場中のスピチューブにおけるベクトルカイラル秩序と朝永ラッティンジャー液体の共存

佐藤 正寛 (原子力機構)

有限本の反強磁性鎖が結合したスピンラダーモデルで記述される磁性体は数多く存在し多くの実験理論研究が成されてきた。今日ではスピンラダーの基本的性質は非常に良く理解されている。スピン  $z$  軸周りの  $U(1)$ 対称性と並進対称性をもつギャップのあるスピンラダーの一般的特徴の1つとして「 $z$  軸方向に磁場を印加してギャップをつぶすと対称性の破れがない朝永ラッティンジャー液体相が現れる」ということが知られている。我々は、3本鎖スピンラダーの自然な拡張であるスピチューブ(端の2本鎖の間にも反強磁性結合を加えて周期境界条件を課したラダー)を低エネルギー有効理論の方法に基づいて解析した。その結果、スピチューブにおいては(スピンラダー系とは対照的に)磁場誘起朝永ラッティンジャー液体相の中にベクトルカイラル秩序が隠れていることが分かった。このカイラル秩序は鎖間方向のパリティ対称性の破れを伴う。

[1] M. S and T. Sakai, cond-mat/0611549 (accepted to PRB).

[2] M. S, cond-mat/0612165.

## A8

### 異方的 $S=2$ スピン鎖における $1/2$ 磁化プラトー

宮崎 寛 (岡山大理)

一次元量子反強磁性体では強い量子ゆらぎのために量子系特有の現象がしばしば発現する。強磁場中で、スピギャップが誘起され、磁化曲線に平坦な領域が現れる磁化プラトーの問題は低次元量子スピン系における典型的な量子ゆらぎの問題の一つで、実験、理論の両面から精力的に研究がなされている。

私たちは、磁場中における **single-ion** 型異方性をもつ  $S=2XXZ$  量子スピン鎖の基底状態をレベルスペクトロスコピー



の方法を用いて調べ、相図を決定した。飽和磁化の半分の値を持つ場合の相図は、gap を持つ 2 つの相、Large-D 相、magnetizedVBS 相、と gapless の no-plateau 相から成り立つことが分かった。この結果は、 $S=2$  スピン鎖で  $1/2$  磁化プラトーが出現するという、Oshikawa-Yamanaka-Affleck のプラトー出現条件と整合する。

## A9

### エンタングルメントと一次元量子スピン系の基底状態

尾古 昌崇 (岡山大理)

量子エンタングルメントは量子情報などの分野で注目されている量子力学特有の性質である。最近、この性質を物性分野、特に量子スピン系の研究に生かす試みが行われつつある。

本研究では、量子情報分野などで用いられている「フォン・ノイマンエントロピー」を導入し、その振る舞いから低次元量子スピン系の基底状態についての情報を引き出したい。今回は一次元  $XXZ$  スピン鎖についてこの量を厳密対角化によって計算し、次近接相互作用や異方性エネルギーにどの様に依存するかを調べた。講演ではそれらの結果から得られる情報について議論する。

## A10

### ハルデン磁性体 NDMAP の磁気励起の角度依存性

柏木 隆成 (阪大極限センター)

$S=1$  擬一次元ハイゼンベルグ反強磁性体の NDMAP (化学式:  $Ni(C_5H_{14}N_2)_2N_3PF_6$ ) では、ニッケルイオン( $Ni^{2+}$ ,  $S=1$ ) がアジド基を介して  $c$  軸方向に鎖を形成する。また  $Ni$  イオンは窒素に囲まれた八面体を作り、この八面体の主軸が  $c$  軸に対して約  $16^\circ$  傾いた 2 種類の鎖が結晶中に存在する。そのため、この二種類の鎖に対して同時に結晶場の主軸と外部磁場を平行にすることは出来ない。この結晶構造を反映した興味深い実験結果として、 $c$  軸から約  $16^\circ$  傾けて磁場をかけた中性子散乱の実験がある。それによると、それぞれの鎖ごとに異なる磁場で磁気秩序化することが報告されている。本研究では、結晶軸と外部磁場の関係が磁気励起にどのように反映されるかを調べるために、磁気励起の角度依存性について超伝導マグネットを用いた ESR で測定したのでその結果について報告する。

## A11

### 擬 1 次元ハイゼンベルグ磁性体 $\beta$ -BBDTA $\cdot$ GaBr<sub>4</sub>

清水 健吾 (名古屋大理)

$\beta$ -BBDTA  $\cdot$  GaBr<sub>4</sub> は現実物質の中でも等方的な  $S=1/2$  スピンを持つ有機磁性体であり、 $ab$  面内に 2 種類の 1 次元鎖 (Chain I, Chain II) が交互に配置する結晶構造をもつ。我々はこの磁性体の磁気的な性質を調べるため、磁化率、磁化および磁場中の比熱の測定を行った。2K 以上の磁化率は鎖内に相互作用  $2J_1=-197K$  (Chain I) が働く 1 次元反強磁性ハイゼンベルグ鎖と  $2J_2=8.7K$  (Chain II) が働く 1 次元強磁性ハイゼンベルグ鎖の単純な和として説明できる。 $J_1$  は 100K のオーダーを持つので、温度 10K 以下の低温では反強磁性鎖の磁性への寄与は強磁性鎖に比べ無視できるほど小さい。また強磁性鎖 (Chain II) 間に働く相互作用  $2zJ'=0.29K$  による強磁性転移が温度 0.4K において観測された。比熱は擬 1 次元 Heisenberg 強磁性体の理論計算と定量的な一致を示すことがわかった。従ってこの磁性体はハイゼンベルグモデルの理想的なモデル物質であるといえる。この相の不純物効果についても報告する。

A12

### CuB<sub>2</sub>O<sub>4</sub> の逐次相転移と磁気相図

安田 洋祐 (福井大工)

CuB<sub>2</sub>O<sub>4</sub> は逐次相転移を起こす磁性体である。ゼロ磁場中で温度を下げていくと、 $T_N=21\text{K}$  で常磁性相から整合相である弱強磁性相に相転移を起こす。さらに、 $T^*=9.5\text{K}$  でスピンの c 軸方向に螺旋をまいた不整合なヘリカル相へと二度目の相転移が起こる。これらの転移点は磁場をかける結晶軸の方向とその強さによって変化する。また、 $T^*$  近傍において、ソリトン格子の存在も確認されている。そして、近年、新たな基底状態の存在が報告され、その背後の物理について関心が持たれている。このような様々な相転移が観測されている CuB<sub>2</sub>O<sub>4</sub> のスピンドイナミクスに関する情報を得るために、我々は CuB<sub>2</sub>O<sub>4</sub> の単結晶試料を用いて <sup>11</sup>B-NMR 実験を行っている。新たな情報として、ESR 実験において磁場を約 4T 程 c 軸方向に印加したとき、およそ 5-6K で強誘電転移らしき振舞いをしているという報告がなされた。この相転移を NMR 実験から観測し、その結果について報告する。

A13

### 古典的な格子の自由度を含む量子スピン系の量子モンテカルロシミュレーション

高橋 正典 (大阪市大)

スピンパイエルズ転移には長い研究の歴史があるが、その臨界現象を研究した例は少ない。私たちは、SSE モンテカルロ法に改良を加えることにより、量子スピンが古典的な格子と結合した系を量子モンテカルロで取り扱う方法を開発した。この方法を擬一次元スピン・格子系に適用して、有限温度相図を作成するとともに、格子相関関数の有限サイズスケールリング解析を行い、この系が Blume-Capel モデル (Blume-Emery-Griffiths モデルの特別な形) と同じユニバーサルティクラスに属することがわかった。最近では動的臨界指数の解析を進めているので、計算が間に合えば報告したい。この研究は荒金覚 (大阪市立大学卒業、古野電気)、寺井章 (大阪市立大学)、加藤岳生 (東大物性研) との共同研究である。

A14

### S=1 スピンドイマー系 Ba<sub>3</sub>Mn<sub>2</sub>O<sub>8</sub> の配向試料の強磁場 ESR

大久保 晋 (神戸大分子フォトサイエンスセンター)

TlCuCl<sub>3</sub> に代表される磁場中磁気秩序化に大変注目が集まっている。これらの系では  $S=1/2$  がダイマーを形成している。我々は  $S=1$  のダイマー系における磁場中磁気秩序の観測を狙って Mn ダイマー物質を調べた。Ba<sub>3</sub>Mn<sub>2</sub>O<sub>8</sub> は磁性を担う Mn<sup>5+</sup> イオン ( $S=1$ ) 間の反強磁性的な相互作用により  $S=1$  のダイマーを形成するダイマー系である。結晶構造から Mn<sup>5+</sup> イオンが c 面内に三角格子を形成した構造をもつ。基底状態と励起状態間にはエネルギーギャップが存在し、磁化測定から  $E_{\text{gap}}=12.2\text{K}$  と見積もられている。我々はこれまでに粉末試料の強磁場 ESR を行ない、線幅の磁場依存性がギャップが潰れる磁場より強磁場でほぼ一定になることを見い出している。しかし、粉末試料を用いているので g 値の分布と吸収線幅を明瞭に分離することができない。今回、磁場中配向試料を作成し吸収線幅の磁場中依存性の測定を試みた結果を報告する予定である。

A15

### S=1/2 擬一次元反強磁性体 Cu<sub>2</sub>Cl<sub>4</sub> · H<sub>8</sub>C<sub>4</sub>SO<sub>2</sub> の磁性研究

藤澤 真士 (神戸大理)

擬一次元反強磁性体 Cu<sub>2</sub>Cl<sub>4</sub> · H<sub>8</sub>C<sub>4</sub>SO<sub>2</sub> はスピンギャップを持ち、磁場を印加することによって磁場誘起相転移を示す。希釈冷凍機を用いた磁化測定や、強磁場 ESR 測定などにより、本物質の低次元性や、ジャロシンスキー守谷の相互作用の寄与が明らかになってきたので、その結果を報告する。

A16

### S=1/2 擬 1 次元磁性体 NaTiSi<sub>2</sub>O<sub>6</sub> の新奇な相転移

磯部 正彦 (東大物性研)

S=1/2 1 次元磁性体において、これまでに多くの研究報告がある。近年、CuGeO<sub>3</sub> に代表されるスピン・パイエルズ転移は、実験、理論ともに精力的に研究された。我々は、S=1/2 擬 1 次元磁性体 NaTiSi<sub>2</sub>O<sub>6</sub> において、およそ 210K で、格子変形とともに、スピンスグレットになる相転移を発見した。当初、この相転移もスピン・パイエルズ転移ではないかと考えられたが、研究が進むにつれ、一見、スピン・パイエルズ転移に似ているが、軌道の自由度が重要な役割を果たしているということがわかってきた。この相転移は、S=1/2 擬 1 次元磁性体において、軌道の自由度が存在する場合の新奇な相転移ではないかと考えている。

A17

### 銅 3 量体フェリ磁性鎖の磁気励起

大原 潤 (北大理)

A<sub>3</sub>Cu<sub>3</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>4</sub> (A = Ca, Sr) に代表される標題物質は、幾何学構造起因の低次元フェリ磁性体として注目されており、理論サイド、実験サイド双方から盛んに研究されている。基底状態に関しては、(S,s)=(1,1/2)フェリ磁性鎖との類似がすでに指摘されており[1]、励起状態まで含めた両物質の比較は非常に興味深い。特に励起機構に関しては、幾何学的構造の差異が顔を出してくることが予想される。我々は、スピン波理論、量子モンテカルロ法を用いて、基底状態におけるスピン配位、不純物効果、さらには磁気的な励起構造などの詳細を解析する。本講演では、1-1/2 フェリ磁性鎖との比較を通して標題物質特有の性質を明らかにしてゆく。

[1] K. Takano, K. Kubo, H. Sakamoto, J. Phys.: Condens. Matter 8(1996) 6405

A18

### K<sub>11</sub>H[(VO)<sub>3</sub>(SbW<sub>9</sub>O<sub>33</sub>)<sub>2</sub>]・27H<sub>2</sub>O と K<sub>12</sub>[(VO)<sub>3</sub>(BiW<sub>9</sub>O<sub>33</sub>)<sub>2</sub>]・29H<sub>2</sub>O の極低温、高磁場下での熱容量

小濱 芳允 (東工大応用セラミックス研)

我々のグループでは最近、V<sup>4+</sup>(S=1/2)が三角形を構成している化合物 K<sub>11</sub>H[(VO)<sub>3</sub>(SbW<sub>9</sub>O<sub>33</sub>)<sub>2</sub>]・27H<sub>2</sub>O (化合物 1) および K<sub>12</sub>[(VO)<sub>3</sub>(BiW<sub>9</sub>O<sub>33</sub>)<sub>2</sub>]・29H<sub>2</sub>O (化合物 2) を合成し、Magnetization Step Method (MST) 測定により、化合物 1 の基底状態は二つの二重項であり、化合物 2 の基底状態は一つの二重項で構成されていると考えていた。しかし今回の熱容量測定により、いずれの化合物も基底状態は一つの二重項で構成されていることを支持する結果を得た。また、スピン間に Dzyaloshinskii-Moriya (DM) 相互作用が働いていることも、本測定から確かめた。これらの結果について詳しく報告する。

B1

### ナノスケール単分子磁石の低温磁気測定

山口 明 (東大物性研)

低温で高スピンの基底状態をとる Mn, Fe, Ni などの多核遷移金属錯体では、分子 1 個の性質に起因して磁化曲線にヒステリシスを示すものがあり、単一分子磁石 (Single Molecule Magnet) と呼ばれている。我々のグループでは、Mn<sub>4</sub> 核、Mn<sub>18</sub> 核、Ni<sub>4</sub> 核などの多岐に渡る物質群に対して、極低温温度領域の磁化測定 (交流帯磁率、静磁化測定) を行いその性質を明らかにしてきた。結晶内で分子間の相互作用が弱く理想的な SMM として存在する Mn<sub>4</sub> 核錯体、逆に単分子磁石間の相互作用により低温で反強磁性にオーダーする Mn<sub>4</sub> 核錯体などの低温における磁気挙動について報告する。

## B2

### 素励起の分散関係の零点と相関長

中村 祐一 (東大生産研)

素励起の分散関係の零点の虚部と相関長逆数が等しいことを、厳密に解ける模型(ハバード模型[1]、 $S=1/2XYZ$  模型[2])について確認した。厳密に解けない模型において、複素運動量空間の分散関係の零点を効率良く探すための手法として、運動量演算子に定虚数ベクトルポテンシャル( $ig$ )を付加し、量子系を非エルミート化する手法[3]を紹介する。 $g$ を増やすことにより、基底状態と励起状態間のエネルギーギャップが潰れ、基底エネルギーが複素化する点  $g_c$  を求める。この点  $g_c$  は複素運動量空間内の零点の虚部を与える。有限系において  $g_c$  を求め、無限系に外挿することにより相関長逆数を比較的精度よく得られることを、次近接相互作用のあるハイゼンベルグ鎖について示す。

[1] Y. Nakamura and N. Hatano, in preparation.

[2] K. Okunishi, Y. Akutsu, N. Akutsu and T. Yamamoto, Phys. Rev. B 64(2001) 104432.

[3] Y. Nakamura and N. Hatano, Physica B 378-380 (2006) 292, J. Phys. Soc.Jpn. 75 (2006) 114001.

## B3

### Distribution of non-trivial gapless points in single molecule magnets and dynamical driven systems

肘井 敬吾 (東大理)

近年、実験技術の進歩に伴い一つの分子の磁性を測定できるようになっている。 $Fe_8(S=10)$ において **tunnelsplitting** が横磁場の下で振動することが観測された。これは、**Kramers** の縮退によるものではない非自明な縮退によるものである。この現象は、量子位相(**Berry phase**)の干渉効果であると理解されている。これに対し、我々は対称性に基づく考察から、この現象が二次の異方性を持つ単分子磁石の場合には一般的に起こることを示したので報告する。また、時間に依存する交流磁場を印加した場合、**Floquet** 演算子の固有値(**Floquet energy**)が縮退し、ダイナミクスが抑制される現象が起こることが知られている。この問題についても、固有値の非自明な縮退という観点からの考察を行なう。

## B4

### 量子スピン系におけるトポロジカル秩序とエンタングルメントエントロピー

平野 嵩明 (東大工)

近年、古典的秩序変数でうまく特徴付けられず、量子性が重要である量子液体をトポロジカルな秩序相として区別する試みが行われている。一方で近年量子情報物理の分野で定義されたエンタングルメントエントロピーが量子液体の大局的な特徴付けに有用であることがわかってきた。この量はバルクな系での量であるにもかかわらず、境界が存在するときのエッジ状態の有無と直接関係しており、エッジ状態の有無に対応して非自明な値をとる。本研究では  $S=1/2$  二量体スピン鎖及び **Haldane** スピン系である  $S=1$  **XXZ** スピン鎖のエンタングルメントエントロピーを数値的に計算し様々な相を調べた。また **AKLT** モデルの基底状態である **VBS** 状態に対して拡張した転送行列の方法を用いてエンタングルメントエントロピーについて議論した。

B5

## 1 GPa までの高圧下強磁場 ESR システムの開発とスピギャップ系への応用

櫻井 敬博 (神戸大研究基盤セ)

磁場中で Bose-Einstein 凝縮を生ずるスピギャップ系  $\text{TlCuCl}_3$ 、 $\text{KCuCl}_3$  においてはその圧力効果にも大変注目が集まっている。我々はこれまでに 1GPa 程度までの圧力下で強磁場 ESR 測定が可能なシステムを開発し、また 0.75 GPa 程度までの圧力範囲に関しては 0.01 GPa 程度の精度で較正可能な ESR 独自の圧力較正方法を確立した。同システムを用いて  $\text{KCuCl}_3$  の圧力下強磁場 ESR を 0.73GPa までの圧力範囲、16 T までの磁場範囲で行った。その結果、基底一重項から励起三重項への直接遷移を観測し、圧力に伴ってスピギャップが減少することを直接的に観測することに成功した。特に 0.73 GPa においては、常圧下で 630 GHz 程度であったギャップが 220 GHz 程度にまで減少し、また励起三重項の  $S_z = -1$  ブランチが基底状態と交わる磁場 ( $-8\text{T}$ ) 以上で BEC を生じていることを示唆する結果が得られた。講演ではこれらの詳細について報告する。

B6

## オリビン型硫化物 $\text{Mn}_2\text{AS}_4$ (A = Si, Ge) における多重臨界現象

大串 研也 (東大物性研)

新奇磁性物質  $\text{Mn}_2\text{AS}_4$  (A = Si, Ge) のスピフロップ磁場は、相競合 (フラストレーション) の帰結として異常な温度変化を示す。その結果、従来物質では見られない多重臨界点が磁場-温度相図に現れる。この相図と磁気対称性を用いた議論により、系の新奇な磁性  $-2\text{K}$  程度の狭い温度領域で観測される弱強磁性  $-$  が理解できる。

K. Ohgushi, and Y. Ueda, Phys. Rev. Lett. 95, 217202 (2005).

B7

## S=1 カゴメ Heisenberg 反強磁性体 $\text{m-MPYNN} \cdot \text{BF}_4$ の磁化プラトー

松下 琢 (名古屋大理)

有機磁性体  $\text{m-MPYNN} \cdot \text{BF}_4$  においては 2 つの  $S=1/2$  ラジカルスピが 20K 以下で強磁的に結合し、 $S=1$  ダイマーによる 2 次元カゴメ格子が形成される。ダイマー間相互作用は約 3K で反強磁性的なためフラストレートしており、零磁場では約 0.2K のスピギャップを持つ非磁性基底状態が観測される。この量子的な基底状態についてしらべるため、我々は Faraday 法による磁化測定と、磁化の微分値にあたる交流帯磁率の磁場中測定をおこない、この磁性体が 0.1K 近傍では飽和磁化の 1/2、3/4 にあたる磁化でプラトーを持つことを明らかにした。このプラトーは磁場中の基底状態を反映したものと考えられるが、カゴメ格子の単位格子を考えた場合では説明できず、より大きなサイズの基本格子を持つ基底状態の存在と次近接相互作用などの長距離の相互作用の寄与を示唆している。

B8

## ラマン散乱で観測した $\text{TlCoCl}_3$ の磁気励起

黒江 晴彦 (上智大理工)

斜方晶歪を持つ擬一次元 Ising 反強磁性体  $\text{TlCoCl}_3$  の低温、磁場下でのラマン散乱測定を行った。反強磁性相では  $2\text{J}$  ( $= 118.5 \text{ cm}^{-1}$ ) 付近に磁場依存性を持つ複数のラマン・ピークが観測された。これらのピークは中性子散乱でも観測されている、擬一次元 Ising 鎖特有の磁気励起 (domain wall pair excitations, DWPEs) を観測したものであり、反強磁性相で生じた内部磁場によって量子化された DWPEs を観測しているものである。ラマン・スペクトルの解析より、この物質の再隣接、第二隣接交換相互作用を求めた。詳細は発表時に詳しく議論する。尚、この研究は宇内克成、大沢明、関根智幸 (上智大理工) 西脇洋一 (東京女子医大物理)、加藤徹也 (千葉大教育) との共同研究である。

B9

### ACuCl<sub>3</sub>のラマン散乱

日下部 晃平 (上智大理工)

量子スピンドイマー系物質 ACuCl<sub>3</sub> (A = Tl, K) では反強磁性ダイマーが三次元的に結合している。ダイマー間の相互作用によって、シングレット基底状態と、励起トリプレット状態との間にスピギャップ ( $\Delta$  ( $\Delta = 5.5 \text{ cm}^{-1}$  for A = Tl,  $22 \text{ cm}^{-1}$  for A = K)) を持つ。我々は非磁性不純物 Mg をドーブし、ダイマーを壊した時と、ダイマーを壊さずに A イオン置換した時の、二次の磁気ラマン散乱の系統的な変化を観測した。磁気ラマン散乱スペクトルの立ち上がるエネルギーがスピギャップエネルギーの二倍に相当する。講演では磁気ラマン散乱により求めた  $\text{TlCu}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Cl}_3$ 、 $\text{Tl}_{1-y}\text{K}_y\text{CuCl}_3$  の、エネルギーギャップのドーブ量依存性と、磁気ラマン散乱スペクトルの温度、磁場依存性の詳細を報告する。

B10

### 超可積分カイラルポッツ模型のイジング的スペクトルと付随する XXZ 型スピン鎖の $L(\mathfrak{sl}_2)$ 対称性

西野 晃徳 (東大生産研)

超可積分カイラルポッツ (SCP) 模型に現れるイジング的スペクトル[1]と、それと可換な転送行列を持つ XXZ 型スピン鎖 (冪零 Bazhanov-Stroganov (NBS) 模型[2]) のエネルギー縮退空間の対応について報告する[3]。まず NBS 模型がある部分空間でループ代数  $L(\mathfrak{sl}_2)$  の対称性を持つことを示す。次にこの対称性による縮退空間を特徴付ける Drinfeld 多項式を計算し、これが SCP 多項式[1]と等しいことを見る。この事実は NBS 模型の縮退空間と SCP 模型のイジング的スペクトルを与える部分空間との対応を示唆している。(出口哲生氏との共同研究)

[1] Baxter, J. Stat. Phys. 57 (1989) 1.

[2] Bazhanov and Stroganov, J. Stat. Phys. 59 (1990) 799.

[3] Nishino and Deguchi, Phys. Lett. A356 (2006) 366.

B11

### 一次元競合系 $\text{Rb}_2\text{Cu}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$ の高圧下磁化測定および磁気比熱の磁場変化

濱崎 智彰 (上智大理工)

強磁性の第一近接交換相互作用 ( $J_1$ ) と反強磁性の第二近接交換相互作用 ( $J_2$ ) が競合した一次元量子スピン系  $\text{Rb}_2\text{Cu}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$  について、これまでに多結晶試料の高圧下での帯磁率・磁化測定と、DMRG と厳密対角化の計算結果と比較から、加圧により基底状態が転移する臨界値 ( $\alpha = -0.258$ ) に近づくことを明らかにした。今回の発表では、小型圧力セルを用いた高圧下での 18T までの磁化測定を行い、飽和磁場の磁場変化について磁化計算の結果と比較することにより、基底状態が臨界値に近づく傾向にあること。また、磁場下での比熱測定から磁気比熱の磁場変化を見積もり、DMRG 計算と比較した結果について発表する予定である。特に、磁気比熱の磁場変化の比較については、現在の測定温度範囲では F-AF 鎖と AF-F 鎖の両方で実験結果を説明できることから、より低温等での測定や単結晶を用いたが研究が必要とされている。この研究は、上智大理工の赤木暢、黒江晴彦、桑原英樹、関根智幸、物材機構の長谷正司、分子研の前島展也、埼玉大理の才賀裕太、東大物性研の上床美也との共同研究である。

## B12

### S=1/2 スピンドイマー系 $\text{ND}_4\text{CuCl}_3$ の磁気弾性散乱

小野 俊雄 (東工大院理工)

S=1/2 スピンドイマー系  $\text{NH}_4\text{CuCl}_3$  は磁化過程において飽和磁化の 1/4 と 3/4 に磁化プラトーを持つ物質である。この磁化プラトーは、b-軸方向にユニットセルが 2 倍になる構造相転移によって、ダイマーが 4 種類の非等価なサイトとなることに起因する。一方で、各磁場中における磁気構造はまだ解明されていない課題である。今回は、原子力機構で行った  $\text{ND}_4\text{CuCl}_3$  の磁気弾性散乱の結果を報告する。磁気ブラッグ点は臨界磁場以上の磁場中の  $\text{TlCuCl}_3$  と同様に(室温構造をユニットとしたときの)h が整数、1 が奇数の点で観測されたが、それら以外の特徴的な磁気ブラッグ点は発見できなかった。講演ではデータから予測される磁気構造について議論する。

## B13

### S=1/2 1次元反強磁性体 $\text{KCuGaF}_6$ における磁場誘起ギャップと磁気励起

森崎 梨恵子 (東工大院理工)

$\text{KCuGaF}_6$  は単斜晶で  $\text{Cu}^{2+}$  と  $\text{Ga}^{3+}$  がパイロクロア型格子を形成している。 $\text{Ga}^{3+}$  が非磁性であるため、隣接する  $\text{Cu}^{2+}$  間の交換相互作用は一次元的な性質を有している。 $\text{KCuGaF}_6$  はその結晶構造から、交替 g テンソルや Dzyaloshinsky-Moriya 相互作用の存在が許される。このため、外部磁場を加えるとこれに垂直な交替磁場が有効的に生じる。この交替磁場は帯磁率の測定により実験的に観測される。また、交替磁場の存在により磁場のべきで発達する磁場誘起ギャップが比熱測定において観測される。この様な現象は、S=1/2 ハイゼンベルグ型反強磁性体  $\text{Cu benzoate}$  や希土類化合物  $\text{Yb}_4\text{As}_3$  において以前から知られている。さらに我々は、この  $\text{KCuGaF}_6$  について強磁場 ESR 測定を行い、ESR スペクトルの温度変化や周波数の共鳴磁場依存性を調べた。そして、 $\text{KCuGaF}_6$  が非線形励起の代表的なモデルである量子 Sine-Gordon(SG) モデルで描くことができ、磁場誘起ギャップが SG モデルにおけるブリーザー励起に対応することを見いだした。また、その他に観測された高次のブリーザー励起やスピノン励起についての解析結果についても述べる。

## B14

### 一次元スピン系 $\text{SrCo}_2\text{V}_2\text{O}_8$ の磁気挙動

何 長振 (東大物性研)

近年、一次元量子スピン磁性体の探索が注目を浴びており、興味深い磁性現象が擬 1 次元スピン鎖の化合物に見られている。最近、我々は一次元スピン鎖の結晶構造を持つ  $\text{SrCo}_2\text{V}_2\text{O}_8$  を見つけた。粉末サンプルは固相反応で、単結晶はフラックスを用いて徐冷法で獲得した。磁化率、磁化および比熱測定から磁気挙動を調べた。磁化率データから  $\text{SrCo}_2\text{V}_2\text{O}_8$  は Ising キヤント反強磁性の振る舞いを示され、3K と 5K の付近に 2 つの相転移を示唆されている。又、磁化データから臨界磁場 4T と 7T はそれぞれ c-軸に平行と垂直にける場合、磁場誘起相転移が見られる。低温磁化率と比熱データに基づいた磁気相図から磁場誘起相転移はスピフロップではなく、両者共に反強磁性-常磁性相転移であることが分かった。講演では  $\text{SrCo}_2\text{V}_2\text{O}_8$  の基底状態と磁場誘起相転移について詳細に報告する。

## B15

### 二次元磁性体 $(\text{CuX})\text{LaNb}_2\text{O}_7$ (X=Cl, Br) の NMR 測定

尾形 誠之 (東大物性研)

イオン交換法により合成された  $(\text{CuX})\text{LaNb}_2\text{O}_7$  (X=Cl, Br) は Cu の配置が正方格子に近い構造をとる二次元磁性体である。基底状態は X=Cl のときはスピン一重項状態、Br のときは collinear order となる。特に  $(\text{CuCl})\text{LaNb}_2\text{O}_7$  で見られる

スピンギャップは、磁化曲線から決まる臨界磁場(10 T)と中性子、比熱、帯磁率、NQR 等から見積もられたギャップの大きさ(23-27K)に大きな食い違いがあり、その磁気励起に関して興味を持たれている。しかしながらこの物質に関しては、正確な結晶構造が未だ定かではなく、Cu の d 電子軌道状態や exchange path 等を決定することが先決である。我々は磁場配向試料を用いた NMR 測定を行い、各原子核サイトの電場勾配、内部磁場等を見積もった。これらの結果から、構造の正方格子からのゆがみ、d 電子の軌道状態、可能な exchange path 等に関して議論する。

## B16

### SrCu<sub>2</sub>(BO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> における新しい高磁場相

松原 信一 (東大物性研)

フラストレートした Shastry-Sutherland 格子(直交 2 次元ダイマー)スピン系 SrCu<sub>2</sub>(BO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> は、飽和磁化の 1/8、1/4、1/3 においてトリプレットの局在化(結晶化)を伴う磁化プラトーを示すことで知られている。1/8 プラトー相の高磁場端(約 28 テスラ)と 1/4 プラトーの低磁場端(約 34 テスラ)の間では磁化が連続的に変化しており、この領域でのスピン構造が磁場とともにどのように変化するかは大変興味ある問題である。最近我々は 1/8 プラトー相より高磁場の 31 テスラまでの磁場においてホウ素核の NMR 実験を行い、トリプレットの超構造がこの中間磁場領域でも残っていることを見出した。本発表では、NMR スペクトルの解析結果に基づき、SrCu<sub>2</sub>(BO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> の温度磁場相図や、スピン構造について議論する。

## B17

### 複合ハルデン鎖 IPA-CuCl<sub>3</sub> の g 値の 3 次元可視化測定

真中 浩貴 (鹿児島大理工)

最近では既製品による測定装置の発達により、極限環境を除けば、若い実験家は装置開発をする機会も、動機も稀薄になっていると感じています。それではいつまでもルーティンワークのような研究しか生まれません。将来、ブレークスルー的な研究をもたらす事を期待し、本申請者は、最近、ESR 装置に利用できる 2 軸ゴニオメータの開発に取りかかっています。まだ道半ばですが、室温での IPA-CuCl<sub>3</sub> の g 値空間分布の測定結果を紹介し、その意義を説明したいと思っています。そして他の実験家への装置開発の重要性も伝えたいと思っています。その中から、いずれ極限環境のように、さらに進化した物理のステージが生まれ、新しい研究が生まれると本申請者は期待しています。

## B18

### 1 次元量子スピン系の磁場中 NMR 緩和率

菅 誠一郎 (阪大工)

ギャップを持つ 1 次元量子スピン系の特徴は、磁場中でギャップが閉じた場合の NMR 緩和率  $1/T_1$  の温度低下に伴う発散の冪に現れることが指摘されて以来、様々な系で冪の磁場依存性を調べるための研究が行われてきた。しかし、 $1/T_1$  の温度依存性は温度の冪以外の因子にも現れるため、実験結果を解析するためには  $1/T_1$  の磁場・温度依存性に関する詳しい計算結果が必要となる。本研究では 1 成分朝永・ラッティンジャー流体における  $1/T_1$  の磁場・温度依存性のユニバーサルな振る舞いを求め、温度依存性が冪発散の因子にのみ現れる条件などを得た。結果をハルデン系、 $S=1/2$  スピンラダー系などに適用し、実験との対応を議論する。



## 物性研究所短期研究会

# 新たな物性研究体制の構築

日時：2006年12月7日(木)～12月8日(金)

会場：東京大学物性研究所本館講義室

提案代表者 佐藤 正俊 (名大・理)

2006年6月に当時の物性委員長として、物性研究分野が抱える諸問題を研究者コミュニティが率直に討論する場を作るために標記研究会を提案し、12月7-8日に開催させていただいた。そこでは、大学の法人化や学会の改編によって研究環境が大きく変化する中、現場の物性研究者が漠然と抱いていた懸案事項を整理し、新たな研究体制を構築するための意見交換がなされた。

プログラムは、(1)共同利用研究所の役割・将来像に関する内部、外部双方の意見交換、(2)物性研究のための適正な資金配分、(3)新生学会の方向・機能とそれとの公式なつながりがなくなった物性委員会の役割、(4)その他の課題、に大別される。それらについての討論内容を概観して研究会報告とし、詳しくは各話題提供者の要旨をごらんいただくようお願いする。

まず、東大物性研究所の所長から、これまでの物性研の歩みと現在の環境条件についての話があり、その将来像については、実験・理論の得意分野のグループの育成、さらには国際的共同利用研への改革が謳われた。柿崎所員は、ここ5年では共同利用人数は増加傾向にあり、柏移転や法人化によって変わったこともないことを報告した。このような状況は、共同利用研が一大学の付置研究所として見過ごされてはならないことを示している。中性子施設の共同利用の現状を説明した廣田氏は、原子力機構の施設であるJ-PARCへ貢献するとともに定常炉に重きをおき、中性子分野の若手育成方策の工夫を行うことを述べた。一方、京大基研の沿革や将来について述べた早川氏は、滞在型の国際研究会構想を中心に述べながら、そのために克服すべき問題点を整理した。

菅氏は、放射光の利用を行う立場から、基礎研究分野からの施設利用の問題点を指摘した。使用料金が一般課題利用者には高すぎることも大きな問題である。高畠氏、後藤氏は物性研への期待をこめて今後の発奮を促し、総国分寺としての役割の維持、さらに利用しやすい共同利用体制を備えることを要望した。

物性研究のための資金の適正配分の観点から、家氏は基盤的校費と競争的資金の双方の重要性がアピールされながらも、金にまつわる不祥事等の影響で研究費維持のための防戦に回らざるを得なかったことを述べている。氏が言うように物性分野では良い芽を育てる水撒き(ばら撒きにはあたらない)が必要なものにも拘わらずである。さらに、物性研究拠点整備計画は、(とくに矢ヶ崎氏が強調しているように)小規模研究グループの衰えが問題な今、新たな重要視点になりつつあることを指摘した。矢ヶ崎氏は、さらに研究資金の配分法の問題点が教育全体に深刻な悪影響をもたらすことにも懸念を示した。平島氏は、PDを取り巻く環境に関するアンケート結果をもとに、その問題点の認識を共通のものにした。

新生学会が改編され、物性委員会との関係もなくなったことは上記のとおりであるが、その学会の役割と機能について十倉氏が話された。物性研究拠点整備計画について、種々の問いかけがあったように今後も非公式団体としての物性委員会に対して、現場の声を聞いていただき、ことにあたるよう望みたい。この点では、物性委員会としても多くのコミュニティメンバーの意見を反映した客観的な意見を提出できる体制を常時整えておくことが重要である。秋光氏も、学会の役割および物性委員会とのつながりについて重要性を強調した。佐藤は、このような物性委員会をとりまく環境の変化を考慮して、物性委員会に規約を制定し新たな組織としたこと、さらには果たすべき役割についての考えを明らかにした。現物性委員長である倉本氏はさらに、法人化に伴って現れた大学間の利益相反、格差拡大等の問題にどう立ち向かうかが問われていることを述べた。

次期物理学会会長でもある鹿児島氏は、春と秋の物理学会の改革についてアンケート結果をもとに議論した。しかし、現時点でその開催方法に大きな変化がどうしても必要であるとの感触は強くなかったように感じる。

JPSJの現状と問題点については、斯波編集委員長からの報告があった。種々の努力により大きな改善があったことは皆が認めるところであるが、投稿数が伸び悩む現状については、今後も一段の意識改革が望まれる。

最後に芳賀氏と四竈氏より大洗センターの現状についての報告があり、コミュニティからの支援が重要であることが強調された。

以上のように、いずれも即決の困難な課題が詳しく報告され、真剣に討論された。第一に、それらの課題が集まった多くのキーパースンの共通認識になったことを大きな成果と考えている。また、出来ればこれらの議論をまとめあげ、今後の方策を導く土台としての役割を果たさせたいと考えている。

## プ ロ グ ラ ム

### 12月7日(木)

#### 1. (共同利用研究所について)

物性研の現状と将来像：	上田 和夫 (物性研所長)	10:00-10:30
基礎物理学研究所の現状と問題点：	早川 尚男 (京大基研)	10:30-10:50
物性研共同利用 (移転と法人化後)：	柿崎 明人 (物性研)	10:50-11:05
大型設備の共同利用 (中性子実験)：	廣田 和馬 (物性研)	11:05-11:20
討 論		11:20-12:20

外部から

Spring-8：	菅 滋正 (阪大基礎工)	13:30-13:45
外側からの意見・要望：	高畠 敏郎 (広大)	13:45-14:00
	後藤 輝孝 (新潟大)	14:00-14:15
討 論		14:15-15:15

#### 2. (物性研究のための資金、その他)

COE その他の大型資金時代と物性研究資金：	家 泰弘 (物性研)	15:45-16:05
小規模研究室における研究と多様性の確保：	矢ヶ崎 克馬 (琉球大)	16:05-16:25
PD 問題の現状：アンケート結果の報告：	平島 大 (名大)	16:25-16:45
討 論		16:45-17:45

(懇 親 会)

### 12月8日(金)

#### 3. (新生学術会議)

機能と役割、物性コミュニティに望むこと：	十倉 好紀 (東大)	9:00- 9:30
	北原 和夫 (ICU)	9:30- 9:50 欠席
学術会議と物性コミュニティ双方から：	秋光 純 (青学大)	9:50-10:10
討 論		10:10-11:20

#### 4. 物性コミュニティとしての物性委員会の役割：

	佐藤 正俊 (名大)	12:50-13:05
	倉本 義夫 (東北大)	13:05-13:20
討 論		13:20-13:50

#### 5. 春、秋物理学会－物性領域発表に関する改革：

	鹿児島 誠一 (東大)	14:10-14:35
討 論		14:35-15:05
JPSJ について：	斯波 弘行 (JPSJ 編集委員長)	15:05-15:25
討 論		15:25-15:55

#### 6. 大洗施設と超ウラン化合物研究

	芳賀 芳範 (原子力機構)	16:10-16:25
	四竈 樹男 (金研)	16:25-16:40

#### 7. その他

16:40-17:00

## 物性研の現状と将来像

東京大学物性研究所長 上田 和夫

物性研は来年創立 50 周年を迎える。半世紀の歩みを振り返り、その将来を考えるよすがとしたい。

物性研究所は、「物性物理学の総合的かつ系統的な研究を行い、それによってわが国の学問の水準を高め工業技術の発展に貢献する」ことを目的とする全国共同利用研として、1957 年 3 月 31 日東京大学に設置された。その設立は 1956 年 4 月に出された日本学術会議の勧告にもとづいている。勧告によれば、物性研究所は「物性物理学のうち、固体物理学を中心とする分野においてその基礎的研究を高度の総合性をもって行うに足る十分な近代的設備を整えた中央の研究機関であることが望まれる。ここにおいて物性の研究を強力に推進するとともに、全国の研究者がその設備を利用してその研究を徹底的に遂行することを積極的に援助」すべきであることを謳っている。設立から 6 年をかけて客員 1 部門を含む 22 部門が整備され、軌道放射物性研究施設が附置された。この建設期からそれを用いた研究が遂行された期間を物性研の第一世代と呼んでいる。

1980 年には研究所の全面的な改組が行われ、それまでの小部門制を改め大部門制をとって研究を進める体制が整備された。それからの 15 年間は物性研の第二世代と呼ばれるが、そこでは、超強磁場、極限レーザー、表面物性、超低温、超高压など研究を支える技術開発の重要性が強調された。1995 年には外部評価が実施され、柏移転を視野に入れた改組が実施された。新物質科学、物性理論、先端領域、極限環境物性、先端分光からなる 5 大研究部門と軌道放射、中性子散乱に加え、新たに導入されたスーパーコンピュータを擁する物質設計評価施設が加わり、3 施設からなる体制が整備された。柏キャンパスの建設が始まった 1996 年から現在までを第三世代と呼んでいる。

2000 年に完了した柏移転以降 2004 年には国立大学の法人化が実施された。法人化のもとでは総長のイニシアチブが強化される一方、大学附置研における全国共同利用の位置付けが明瞭でなくなり、また予算縮減の圧力のもとで物性研は将来像を模索している。

物性研の組織原理として、(1)物性物理学の基礎を成す実験・理論で世界トップレベルのグループを維持する。(2)得意分野や重点的に展開する分野を育成する。(3)大規模物性科学は施設として研究を推進する。(4)物質科学の展開に必須の化学グループの重要性、を挙げることができる。これに対応して、将来計画の考え方としては、物性科学研究の基礎的体力とも言うべき実験・理論の両輪を整備しつつ得意分野のグループ、設備を育成強化し、それを全国共同利用に供することになる。こうした活動を競争的資金を活用しながら展開し、全国共同利用研から国際共同利用研に脱皮することを目指すことが目標である。

昨年度実施した国際的外部評価の答申を基礎に、第 2 期中期目標・中期計画の議論をにらんで、これから 1、2 年かけて将来計画を策定することになる。コミュニティーの皆様のご鞭撻、ご協力を切に願います。

## 基礎物理学研究所の現状と問題点

京都大学基礎物理学研究所 早川 尚男

基礎物理学研究所は 1953 年に全国初の共同利用研究所として発足し、全国に先駆けて所員の任期制を導入し、伝統的な分野の理論物理の研究はもとより天体核物理や生物物理等の新しい分野の創成等にも大きな役割を果たしてきた。1990 年には広島大学理論物理学研究所と合併したのを期に英語名称を Yukawa Institute for Theoretical Physics とし、世界中から物理学全分野を網羅する理論研究の拠点であると同時に多くの内外の研究集会を開く場として認知されている。その一方で 2002 年には小規模研究所として他研究機関との合併を促されたり、COE プログラムが各大学で走中で多くの国際会議が乱立し、更に物性研や高エネルギー研、宇宙研等の多くの専門家を集めた大規模研究所が存在する中でその存在意義が問われるようになってきた。

そうした動きを受けて 5 年程度おきに自己評価、外部評価を受けてその勧告に従い徐々に基礎物理学研究所もその特徴を変えつつある。今回の講演では 2005 年 11 月に行われた外部評価の概要と提言、それに対する基研の対策を紹介する。外部評価書の提言でも強く勧められたことはその場で共同研究も可能になる滞在型国際研究集会を現行の年 1 回から年 3 回にすることである。これについての予算とサポートスタッフの獲得のために「クォーク・ハドロン科学の理論研究の新たな展開を目指す国際共同研究プログラム」を提出しており、現在財務省で審議中である。この研究計画が採択された暁には年 3 回の滞在型研究会の実施が可能になるだけでなく、サポートスタッフとしてハドロン物理の教授等が増員できる可能性がある。その他、統計動力学分野の恒久化やプロジェクトマネージャーや研究助手公募の話題を紹介する。

その一方で冒頭に述べた様に多くの問題が基礎物理学研究所を取り巻いている。本講演では特に（外部評価でも問題になった）物性分野の運営体制の問題点や、新分野をどのように盛り立てていくべきなのかについて問題提起を行う。また任期制に伴う問題や建物の改修問題、そもそも長期滞在型研究会に誰が参加し、誰がサポートをするのかという問題についても議論する。また、基礎物理学研究所が研究の場を提供するだけでなく、如何に所員が研究成果を挙げていくのかについても触れていく。

## 物性研究所の共同利用 － 移転と法人化後 －

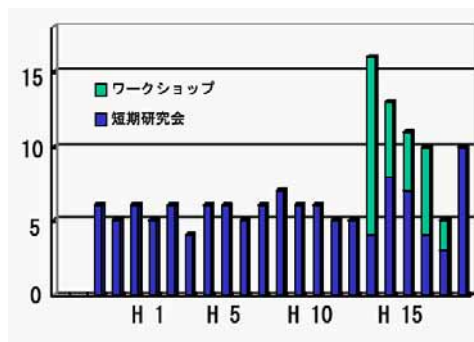
物性研究所 柿崎 明人

物性研究所は、物質科学研究のための大型研究設備や特徴ある実験装置を設置して先端的物性研究を行うと共に、研究設備を全国の物性研究者の共同利用に供して、物性研究の拠点としての役割をはたしてきている。物性研の共同利用には、実験設備の利用を中心とする施設利用と所外研究者との共同研究や研究会開催による情報交換を推進させるという 2 つの側面があり、この原則は 50 年前の研究所の設立当初から変わっていない。

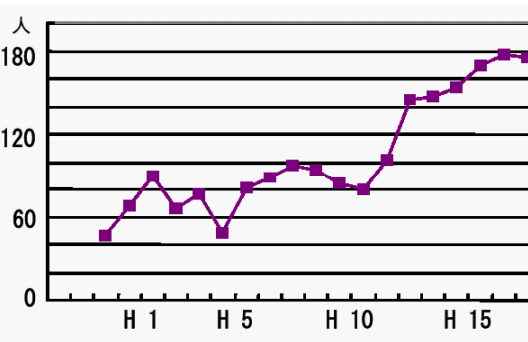
柏移転を機に、物性研は研究組織を改組すると共に、従来の受け身的な施設利用の改善、能動的な共同研究の推進を目指してきた。現在、物性研は 5 部門、4 施設から成り、共同利用者数は、スパコン、中性子の施設利用を除いても年間約 1500 名である。最近の 5 年間をみると、共同利用の件数、人数とも増加傾向にあり、平成 10-11 年の柏移転や平成 16 年度の大学法人化によってもそれは変わっていない。むしろ、共同利用経費の充実によってワークショップやミニシンポジウムの開催、嘱託研究員が増加している。移転時に較べて共同利用全体に占める嘱託研究員の割合が減っているのは、共同研究の比重が増えたことによると考えられる。

ここ数年、物性研では、リサーチフェローや研究機関研究員など、国内外の若手研究者の短期採用枠を設けたり、外国人客員所員を招聘する制度を拡大させ、物質科学研究者の育成と国際的研究拠点にむけた環境整備も行っている。一方、物性研の共同利用に関して従来から指摘されている研究成果報告の形骸化や長期留学研究員制度の効果的運用の促進など、解決すべき問題点もある。物性研が先導的研究拠点として共同利用を健全に発展させていくためには、全国の物性研究コミュニティとの連携が不可欠である。

短気研究会等の開催件数



嘱託研究員の数



## 大型設備の共同利用（中性子散乱実験）

東京大学物性研究所 廣田 和馬

東京大学物性研究所では 1960 年より日本原子力研究所の研究用原子炉で中性子散乱の全国共同利用を開始した。1969 年には 3 所員による中性子回折部門が増設され、1980 年の中性子回折物性部門への再編、1993 年の中性子散乱研究施設の新設、2003 年の中性子科学研究施設への改組を経て今日に至っている。5 所員により、磁性・強相関・結晶構造などの伝統的な固体物理学に加えて、準結晶・ガラス・ソフトマターを含む広い研究分野をカバーしている。

本施設は東大柏キャンパスから 100km ほど北にある茨城県東海村を本拠とし、研究者 10 名、技術職員 3 名、事務職員 9 名で構成されている。日本原子力研究開発機構の JRR-3 研究炉の 9 台の実験装置を維持管理し、全国共同利用研究にあたるとともに、施設独自の研究および大学院生の教育を展開している。9 台の装置に加えて、東北大学理学部 1 台、

東北大学金属材料研究所 2 台、京都大学原子炉実験所 2 台が大学の装置として設置されているが、共同利用という側面では一体となって運営にあたっている。共同利用の受付・審査などは施設が独自で行っており、年 1 回の公募に対し 300 課題ほどの申請がある。審査は 14 名の実験審査委員と各課題 2 名の査読者によって行われ、各装置責任者の技術審査を加えて採択が判断される。採択結果は所外委員 9 名所内委員 7 名からなる施設運営員会で承認される。このうち採択は 70%、課題採択（初期マシンタイム配分 0）は 20%、不採択は 10%となっている。年間 175 日のビームタイムがあるが、およそ年間 5000 人日の利用がある。申請課題の 3 分の 2 は磁性・強相関・結晶構造などのハードマター分野で、残りのほとんどがガラス・ソフトマターとなっていて、共同利用研究が幅広い分野で行われていることが分かる。申請課題数は、1991 年に JRR-3 が稼働して現代的な中性子実験設備が整ったことにより 10 倍程度に急増したが、ここ 5 年ではほぼ同数で推移している。旅費は、日本原子力研究所での大学への窓口を東大原子力総合センターが担って来たことを反映し、東大原子力専攻と物性研共同利用の両方を用いているが、現在は各実験課題について 1~2 名の旅費支給をするのが限界となっている。

物性研では、1980 年に締結され現在は 2014 年まで延長されている日米科学技術包括協定に基づき、米国エネルギー省と文部科学省の間で 1982 年から行われている日米科学技術協力「中性子散乱」に原子力機構とともに日本側の基幹研究施設として参加している。物性研はブルックヘブン国立研究所に 3 軸分光器を設置するとともに多くの研究者を米国に派遣し、これまでに 355 編の論文が出版されている。オークリッジ国立研究所との日米協力の成果は 92 編の論文となっている。国際共同研究は第 3 世代物性研の主要な目標の一つであり、中性子施設でも日米協力を中心に、新たな国際共同研究、とくにアジア・オセアニア諸国との連携を深めるために、定期的な国際セミナーや招聘研究を行っている。

現在、大型陽子加速器 J-PARC を用いた新しいパルス中性子源が JRR-3 のすぐ近くに建設中である。2008 年には中性子ビームの供給が開始される予定となっている。加速器および中性子散乱実験装置が完全に稼働するには、その後もある程度の期間が必要とされると思われるが、近い将来、時間平均強度で肩を並べる定常中性子源とパルス中性子源の 2 つを利用できる体制ができあがる。中性子の特性上、パルスのもつ時間構造を利用した測定によって定常炉では困難であった分野での研究が可能になることが期待される。物性研としては、JRR-3 に研究と共同利用の軸足をおきながらも、可能な範囲で J-PARC の建造に貢献している。また、物性研独自の分光器をもつことも計画しており、基本となる建設プランの作成もすでに完了している。

物性研中性子科学研究施設は、中性子源をもつ研究機関とは別の、国内外の中性子を用いた基礎研究を中心とした共同利用研究施設・教育機関としての役割を果たしていきたい。

## 共同利用研究所について 大型研究設備を利用する研究外部から：SPring-8 放射光の利用に関して

大阪大学大学院基礎工学研究科 菅 滋正

まず我が国における放射光研究、中でも SPring-8 計画・建設・利用研究の経緯を振り返り今後、東京大学物性研究所を含む研究機関がどのような研究戦略で発展を図るべきかを考えたい。放射光分野では日本放射光学会が 1988 年に、当時 40 代から 50 代前半の研究者の手で発足し、その後、大型 X 線光源建設を目指して、多くの研究者が計画推進に努力し、1993 年には SPring-8 利用者懇談会が発足し、原研・理研・高輝度光科学研究センターからなる共同チームと連携して SPring-8 計画の具体化と計測系の建設に一体となって協力してきた。当初 4 本のビームラインの建設から始まり現在では 54 本のビームラインでの実験が行われている。

当初科学技術庁路線に沿った計画であったために、当時の文部省の全国大学共同利用の概念とは大きく異なる形での、組織・予算・利用形態が採用され、その後幾ばくかの変遷を経ながら、現在の組織・利用形態へと発展している。

この間、諸外国の大型放射光施設と比べて、真空内に封止した挿入光源の開発や、きわめて安定な放射光ビームの供給、さらには欧米の放射光施設では構想すらされなかった軟 X 線域での利用など、SPring-8 での研究は世界をリードする分野が少なくない。

一方で、その予算形態や組織上の問題点から、諸外国の施設がほぼビームラインを最大限建設して利用しているのに対して、SPring-8 ではまだ十数本の建設未完了ビームラインを残しており、その建設予算の手当が困難であるとの残念な状況が続いている。応募課題は増加の一方で、採択ビームタイムは平均でも 60-70%、ビームラインによっては 25%を下回るケースも出ている。

特に戦略活用プログラムに対する課題採択率が 70%以上、産業利用の課題採択率が 60%程度であるのに対して、基礎研究の課題採択率はいくつもの分野で 50%を下回る状況になっており、

利用戦略の見直しが要請されるようになってきている。

このような状況でさらに一般課題の利用者は、旅費滞在費の自己負担に加えて、消耗品の使用量を負担しなければならず、またビーム採択率の低さ故に大学院生の研究テーマとして SPring-8 放射光利用研究を行うことが困難になっている研究グループが少なくない。

このようなこれまで世界をリードしてきた放射光基礎研究の困難さを SPring-8 において如何に克服するか議論が必要と考えられる。それがまた我が国の共同利用の在るべき姿に反映されることを望みたい。

## 物性研への地方からの要望

広島大学 大学院先端物質科学研究科、先進機能物質研究センター 高島 敏郎

### はじめに

物性コミュニティと物性研究所が双方向的に良い刺激を与え合って、両者が発展するために、「物性研への地方からの要望」を述べます。私自身は 1984 年 4 月から 4 年間、物性研の石川征靖所員のもとで助手として希土類化合物や超伝導銅酸化物を研究し、その後広島大学に職を得てからも物性研に大変お世話になっています。特に、物質設計評価施設、新物質科学部門、極限環境物性部門、中性子科学研究施設、軌道放射物性研究施設の方々との共同研究により、希土類やウランを母体とする金属間化合物、カゴ状化合物について多くの成果を挙げることが出来ました。さらに、物性研で博士を取得した 3 名をポスドクとして受け入れたのに続いて、助手もお迎えしました。この様な個人的な共同利用・共同研究と交流の経験から次のような問題を提起します。

### 要望と問題提起 I 一般論

- 物性研の所員と事務部職員は物性コミュニティの中核であるとの自覚を持っているか？  
新しい潮流を作ろうとしているか、 Phys. Rev. Lett. を出せば良しとしていないか
- 物性研究ネットワークの「国分寺」や「中・小規模の拠点」と物性研の連携は進んでいるか？  
地方に足を運んで、宣伝したり議論しているか？  
地方大学の客員教員となって、全国の学生に刺激を与えているか？  
(KEK の組織的活動との比較)
- 世界、特にアジアの拠点との連携は進んでいるか？
- 人事交流では北海道から沖縄までに目が届いているか？  
物性研の博士取得者、助手、所員をどんどん地方へ
- コミュニティを代表して大型予算（特定領域研究など）を申請しているか？

### 要望と問題提起 II 共同利用関連

- 次期中期計画の策定で共同利用に関する部分は共同利用施設専門委員会で審議して欲しい。  
共同利用の制度や予算配分を見直すには良い機会（事務部との共同が大切）
- 事務部物性研担当は共同利用をよく理解しているか？  
例：宿舍利用費支払いで「釣銭の無いように」は古い。
- 共同研究者や各種委員が所員の出身研究室周辺に偏っていないか？
- 開発された新手法や装置が地方に普及されているか？
- 委員会や研究会開催日程は土日や休日も含めて欲しい。平日の授業を休講すると、教育に支障が出るだけでなく、学生からの評価も下がる。
- 「物性研だより」には生の声が少ない。多くの頁を占めるシンポジウムの発表要旨はホームページに掲載すればよい。  
代わりに、例えば、新任教員や停年を迎えた教職員の挨拶、博士論文題目などはどうか。
- キャンパス内部にコンビニエンスストアと朝食を取れる施設が欲しい。
- 6 階の講義室前には、湯茶の用意ができる常設テーブルがあれば便利。  
廊下の電気コンセントの上にある立派な絵は別の場所に移して、そこにテーブルを常設。

## 共同研究所について – 外部からの意見要望について

新潟大学 大学院自然科学研究科 後藤 輝孝

### はじめに

日本の経済は世界のナンバーワンと言われるまでに成長し、経済大国としての絶頂期を経験し、1992年のバブル経済の崩壊に至った。これ以後、日本は産業技術だけではなく基礎研究の分野でも欧米に肩を並べるようになり、独創性に基づく国際研究競争に参入できるようになった。1996年になり科学技術基本法が制定され、競争的研究資金の飛躍的増加によって基礎研究をめぐる環境も飛躍的に改善されてきたと言える。実験装置を入手できない貧困の状況は次第に改善されてきた。日本の研究環境が全体として貧困であった時代から、2005年度からは国立大学法人が充足し、大学独自の取り組みによる研究環境の改善が進行している現在とでは、総国分寺としての物性研究所の役割も変化してきていると考えられる。

### 新潟大学物質量子科学研究センター

次に、地方大学の一つである新潟大学の物性研究の状況にも触れたい。2000年に日本学術会議日本学術会議物理学研究連絡員会から出された対外報告「物性研究拠点整備計画の具体化に向けて」において、物性研究所は「総国分寺」として位置づけられた。新潟大学も全国18物性研究拠点すなわち「国分寺」として位置づけられたことは、新潟大学におけるその後の拠点整備の重要な指針となった。2002年度補正予算によって懸案のヘリウム液化機の設置が認められ、2004年には法人化した新潟大学独自の判断に基づき学内設置した物質量子科学研究センターにおいて、液体ヘリウムの安定供給体制を確立した。これによって新潟大学での物性研究が大きく加速されたと実感している。たとえば、低温超音波計測によるシリコン結晶中の原子空孔の観測、水素吸蔵合金を用いた水素センサーの開発など物性研究が基礎となった貴重な成果が生まれて来ている。もちろん十分とは言えないまでも、地域の大学での物性研究拠点の整備は進んでいると言える。

### 物性研究所への要望

物性研究所は物性研究コミュニティの「総国分寺」としての役割が期待されている。物性実験の立場からは、卓越した物性実験を推進する拠点としての物性研究所を望みたい。物性研究は元来小さいグループでの個性的な研究が基本となっている。この意味で、全国の大学・地域での研究拠点の整備が重要であり、そこで生まれた独創的な研究成果や新しいアイデアを物性研究所の卓越した研究設備の共同利用に繋げることが是非とも必要である。具体的には強磁場、高圧、超低温などの多重極限の実験や原子炉を用いた中性子散乱などの実験が考えられる。物性研究所の実験設備は、現時点でも世界の第一級の水準であるが、今後とも世界トップ水準の実験を遂行するには、困難な道ではあるが開発研究を進める必要がある。美しい物理を語るエレガントな論文も極めて重要な成果であるが、独創的な実験手法の開発研究の論文も正当に評価する必要がある。もう一つ重要であるのは、物性研究所が全国物性研究コミュニティの総国分寺として中心的な位置にあり続けることを望みたい。個性的独創的な研究を推進するのは人的交流が不可欠であり、これまで作り上げてきた共同利用、客員研究員、短期研究会、滞在型など全国共同利用体制をさらに発展させることが望まれる。

## COE その他の大型資金時代と物性研究資金

物性研 家 泰弘

上記のタイトルは世話人から与えられたものである。ご依頼の意図に沿った話ができるかどうか自信はないが、競争的資金、特に科学研究費補助金をめぐる最近の動きについて報告する。科学技術基本計画に基づき、1期(5年)ごとに20~25兆円という科学技術関連予算の重点投資がなされている。なかでも競争的資金というカテゴリーのものは過去10年間に大幅に増額され約4,700億円(H18)に達している。科研費はその内の約40%を占め1,900億である。第1期基本計画のスタート時点(H8)の約1,000億からほぼ倍増している。一方、この間に省庁再編、funding agencyの独立法人化、国立大学の法人化など研究環境や予算措置に大きな影響を及ぼすさまざまな動きがあった。

これまで順風に乗って伸びを示してきた競争的資金であるが、最近では財政収支改善を優先する政府の方針や、研究費をめぐる不祥事や研究費の過度の集中に対する批判などが逆風となって、予算の伸びは停滞傾向にある。

科学技術・学術審議会学術分科会研究費部会では、学術研究活動を支える研究費に関して、基盤的経費と競争的資金によるデュアルサポートの必要性、研究者の自由な発想の基づく学術研究を支える科学研究費補助金の重要性、をアピールしている。しかしながら、特に本年は一連の不祥事等の影響で防戦に回らざるを得なかったのが実情である。科研費に関

する平成 19 年度概算要求では、学術振興会への更なる移管、間接経費を措置する研究種目の拡充、若手支援策、電子システム化の推進、審査・評価体制の充実、等が盛り込まれている。新規応募の採択率は現在 25%を下回る程度であるが、これを 30%台に乗せることが本筋である。政策決定者が抱く「ばらまき」という印象をいかに打破するかが課題である。(私は「ばらまき」ではなく、「水撒き」であるという言い方をしている。つまり良い芽が育ってくる土壤に水遣いを絶やさないと重要だという意味であるが・・・)

「物性研究拠点整備計画」は第 17 期の学術会議物理学研究連絡委員会の対外報告として出され、その後、18・19 期に「物性研究拠点整備計画の具体化にむけて」という報告が物性専門委員会で取りまとめられた。いくつかの大学での概算要求に多少の援護となったかと思うが、国分寺構想の本来のスピリットである拠点整備とそれを利用した共同研究を担保する予算措置の獲得にまでは至っていない。その間に、国立大学法人化や COE21 などの動きがあって、拠点整備計画の議論は脇に置かれた感がある。しかしながら、法人化等によって小規模研究グループの研究環境の劣化が起りつつある現在、拠点整備計画には新たな意味があるものと考えられる。新生学術会議の物一分科会と物性グループが連携して議論を進めるのが適当と思われる。

## 小規模研究室における研究と多様性の確保

琉球大学 理 矢ヶ崎 克馬

(1) はじめに 国立大学の法人化と機を一にして急速に進行し始めた事態の一つに、小規模研究室の研究資金確保が難しくなり、研究の維持が懸念されることがあげられる。今まで、基盤校費として保障されていた最低限の教育研究費が、必要経費からはずされ、資金配分の原理が「競争と評価」に切り替えられたことによる。今まで維持されてきた小規模研究室の教育研究資金の確保が、新制度で困難になる事態は、今まで確保されてきた「研究多様性」が破壊される危機と結びついている。小規模研究室の危機はそのまま研究多様性の危機なのである。小規模研究室の現状を報告するとともに、なぜ多様性を確保しなければならないかという問題を、基本に立ち返って教育と研究の両側面から論じてみる。

(2) 小規模研究室の現状 琉球大学理学部を例にとって現状を紹介する。法人化以前は物理の実験系の教員は、1 人当たりの可処分予算は、教育研究費約 50~70 万円+旅費 17 万円という予算状況であったが、H15 年度には、教育研究費と旅費を合わせて 33 万円という状態にまで激減している。文科省の科学技術白書によれば、国公立大学の理学部の 1 人当たり平均研究費(運営費交付金+外部資金+人件費)は、約 3,200 万円、それに対して琉球大学理学部は約 1,500 万円。実に半額にも及ばない。研究条件の格差は歴然としている。全国の地方大学は大同小異、予算状態に大差は無い。

### (3) 多様性の確保はなぜ必要か

- ① (アカデミックな機関としての研究) 客観的外界が多様である。研究は必然的に多様である必要がある。認知された領域だけが興味あり価値のある対象では無い。
- ② (地球を破壊し掛けている人類の立場) 地球と共存して持続できる人類社会のためには、地球の特性を選択的に取捨してのでは破綻は経験済み。将来が成り立たない。
- ③ (日本の科学技術政策的課題) 将来の水準を維持したのなら、多様性は必須。
- ④ (アカデミックな教育) 個を尊重し人格を認めるならば、民族の自決権を尊重し平和を望むならば、多様性の尊重は大前提。真理は全人類・万国の共通基盤。真理の客観的把握を。
- ⑤ (全面的人格と独立した研究者の育成) 知の営みを行い、心躍る学習を実施するのが独立した民主人を育成する基本。(基本的人権の中身) 科学的で正確な知識を持ち、客観的に物事を見知ることができ、自分で判断でき、自分で結論を出すことのできる人間。(独立した研究者の要素) 自由な発想、研究対象の選定、研究手段の決定、データ収集と解析能力、総合的考察のできる研究者。これらは、偏った価値観のもとでは決して育成できない。

(4) アカデミックな立場で、多様性を尊重できる評価の目を 科学技術政策的に多様性を重視する評価基準を。

(過度の資金集中は評価の目の偏りを示すもの)

(5) 中小規模研究者は自己主張を：独自性の確認、研究の意義の再確認、多様性を支える気概を。情報網を確保して、研究協力を。柔軟組織の集団的共同研究ネットワークを。

(6) 研究資金：多すぎと欠乏の是正 (史上空前の大企業の大もうけとワーキングプア) 「カネの集中でノーベル賞が生まれるか」「多様性破壊して人類が生き延びられるか」

- ① コミュニティーは自主的な研究網を。アカデミックはアカデミックに判断できる立場の確保を。
- ② 適切な基盤経費の基準的配布を。
- ③ 適切な競争的資金の体制を。



## PD 問題についてのアンケート調査結果の報告

名大理 平島 大

短期研究会に先立って、研究会における議論の材料とするために新旧の物性グループ事務局によって PD 問題に関するアンケート調査が行われた。物性グループに属する約 190 グループにアンケートをお願いし、49 グループから回答をいただいた。

アンケートでは、

0. 過去 5 年間の博士学位取得人数

1. 過去 5 年間の PD 雇用の有無

PD 雇用の経験がある場合、 資金、雇用期間、PD としての雇用回数  
雇用終了後の進路

2. PD 応募者あるいは候補者の人数など

3. PD 問題についての自由回答

4. (科学技術振興調査費による) テニユアトラック制度についての意見を調査した。

回答していただいた 49 グループでは、5 年間に 134 名が学位を取得し、106 名の PD を雇用している。1 名以上の PD を雇用したことがあるグループは 49 グループ中、36 グループであった。

雇用資金については、学振による PD (特別研究員) の数が近年減少しており、それを補充するように科研費による雇用が増加している。また、各大学・機関の経費 (運営交付金など) による雇用もかなりの割合を占めている。PD の総数はここ 5 年間では顕著な変化はない (単調に増加していることはない)。

雇用終了後の進路や公募の際の応募者数などからは、物性グループにおいて PD がきわめて過剰となり危機的な状況にあることを示す結果は得られていない。おそらくは、他の分野に比べればまだ問題は危機的ではない可能性が高い。しかしながら、このアンケートのデータ数が少なく全体の状況を正確に反映したものとなっていない可能性もある。事実、自由回答欄に寄せられた意見には深刻な PD 問題の存在を指摘するものが多かった。学位取得者あるいは PD に対してアカデミックポスト以外の就職を促すための環境作り (ネットワーク作り) を進めるべきであるという意見が多かった。

今回の調査では、雇用された PD についてのみの調査を行ったが、今後各グループにおける学位取得者の進路調査なども行い、より広範囲の PD 問題の実態の把握に努める必要もあるかもしれない。なお、アンケート調査結果の詳細は、物性グループウェブページに掲載する予定である。

## 学術会議の機能と役割

東大・工 十倉 好紀

新体制学術会議 (SCJ) の機能と役割について述べ、物性コミュニティとの連携のあり方を議論いただいた。

2005 年 (第 19 期) に SCJ は声明「日本の科学技術政策の要諦」を発表し、2050 年までの、国家的目標に対する科学技術政策の貢献と在り方についての考えを表明した。現 20 期 SCJ のミッションはこれを具現化することから始まる。SCJ は第 20 期にいたるときに、会員制度改革を行い、SCJ 自ら会員 (約 210 名) を選考し、また、この 1 年をかけて、会員と等位の立場で活動を行う連携会員 (約 1900 名) を co-optation の考えで選出した。また、部も 7 部制から 3 部制へ変更、副会長を 3 名として、幹事会も設置して、審議・意思決定の迅速化を図っている。

物理学委員会 (第 3 部に設置) の関係する常設分科会として、「物性・一般」、[素粒子・原子核]、「天文・宇宙」物理学各分科会、および国際対応として IUPAP、IAU 分科会がある。物性コミュニティとの関連が深いのは、「物・一」分科会 (伊藤早苗委員長、家幹事、五神幹事、十倉副委員長) であり、30 名の連携会員の同分科会への参加を得て、今期の主たる審議課題として、「基盤的研究活動に資する物・一研究拠点の整備構想について」を検討し始めている。

SCJ の意思表出の例として、第 19 期における声明「新分野創成に資する光科学研究の強化との方策について」や要望「国立大学の大学法人化にともなう大学附置全国共同利用研究所・施設の課題」を取り上げ、SCJ からの意思表出の重要性と事後効果追跡の必要性を述べた。

この点に関して、従来の物研連からの報告「物性研究拠点整備計画」(1996) と「物性研究拠点整備計画の具体化に向けて」(2000) の事後効果、および各種の教育研究拠点形成プログラムが進行するなかでのこの計画の現在の意義と必要

性について、会場からの意見を伺った。

また、各種の要望を含む意志表出の前提として、従来の物性科学基礎研究のイノベーションに対する圧倒的寄与の実績を強調し、10年の先（第3,4期科学技術基本計画）までを展望した、物性・一般物理学の基盤的研究による promise を、整理して分かりやすく提示することが必要との、私見を述べた。

## 学術会議と物性コミュニティ双方から — 学術会議の歴史を述べて現状を考える —

青山学院大学理工学部 秋光 純

最近、学術会議が大きく様変わりし、20期からは学術会議会員の選考方法に関して co-optation という方法が取られ、形式的には下部組織（我々のグループでは物理学研究連絡会）との関係がなくなることに決定した。それに応じて今回、我々は組織の建て直しを余儀なくされている。

ここで学術会議の歴史を振り返って、学術会議の果たしてきた役割および今後の展望について述べた。

### 日本学術会議の歴史

良く知られているように、日本学術会議は1949年1月に発足した。会員は業績によって認定され、直接選挙により選ばれ、総理大臣が任命するという形になっていた。しかし1950年11月、第一期が終わる頃から政府の学術会議に対する態度が微妙に変化してきた。その一番大きな原因は、戦後の激動期の後に生じた世論の分裂である。しかし、その間、学術会議が果たした役割も大きく、多くの研究所が設立された（表1参照）。

このような世論の分裂を受けて学術会議に政治的な動きが強まり、核兵器廃絶アピール、大学管理法に反対する声明、原子力研究3原則等が打ち出された。これに対して政府は、1967年学術審議会を発足させ、学術会議の予算は大幅に減少するに至った。さらに、1983年学術会議法が改正され、学術会議の会員は学協会が推薦し、学術会議が選ぶというように改められた。さらに2004年4月に至って、学術会議法を改正する法律が成立し、2005年10月から、学術会議の第20期が発足した。それによると会員は、完全に co-optation により選出され、1. 学術会議は陳情団体ではなく、ロビーイングはしない。2. 特定の研究分野に水を引かない。3. 分野別委員会はなくす等の決定がなされた。

以上が簡単な学術会議の歴史である。ここでは問題提起として、

1. 物性委員会として学術会議に何を期待するか
2. どのように学術会議と物性委員会を繋げるか

という大きな問題がある。これらの問題については、多くの議論がなされたが、一朝一夕に解決できる問題でもないので、これらの問題を持続的に討論し、今後の我々の活動に期待したい。

表1 研究所設立の例、勧告と実現の年

	勧告	実現		勧告	実現
原子核研究所	1953	1955	プラズマ物理研	1959	1961
放射線基礎医学研	1954	1957	宇宙科学研究所	1962	宇宙航空研 1964
物性研究所	1956	1957			宇宙科学研 1981
天体物理の振興	1956	岡山天体物理観測所 1960	素粒子研究所	1964	高エネルギー研 1971
海洋総合研究所	1958	1962	分子科学研究所	1965	1981
数理解析研究所	1958	1963	放射光総合研究所	1974	1991

### 物性コミュニティとしての物性委員会の役割

名大・理 佐藤 正俊

新生学術会議の誕生に伴って物性委員会と学術会議とのつながりが消え、物性委員会は非公式の団体となった。このような状況下で今後、これが物性研究者コミュニティの意思を科学行政に反映させていくためには、その意思を正しく集約

し、官製組織とは異なった立場からの建設的意見をタイムリーに提出できる態勢を常時整えておくことが重要である。そのために、従来の物性百人委員会を物性委員会に改組して規約を制定し、物性分野の発展のための意見調整やそれに基づいた提言を行う会とした。具体的には、物性分野の研究者間の連絡、意見交換、集約、提言、各種組織（例えば、日本学術会議）との連絡、全国共同利用機関の各種委員の推薦（物性研共同利用施設専門委員会委員、人事協議会委員、京大基研運営委員、共同利用委員、他）、その他、物性分野の発展に寄与する活動を行おうとするものである。

物性委員会には物性委員長、事務局（長）、幹事 20 名、監査人 2 名をおき、幹事は物性委員の選挙で選出され物性委員長および事務局と協力して運営にあたる。監査人は事務局交替（3 年ごと）の次の学会時に開かれる拡大物性委員会で監査報告を行う。

平成 18 年 10 月からのそれらのメンバーは委員長：倉本義夫、事務局長：村上洋一、幹事：佐藤正俊、高島敏郎、北岡良雄、大貫惇睦、後藤輝孝、巨海玄道、三宅和正、秋光純、前川禎通、上田和夫、福山秀敏、前野悦輝、矢ヶ崎克馬、坪田誠、鈴木順三、宮下精二、小田垣孝、高橋隆、押山孝、川上則雄となっている。

物性委員会の課題は、コミュニティの意思の集約と、それに基づいた行動・提言を必要に応じて行うことで、具体的には例えば以下のような観点に対する意思集約や態勢整備が求められよう。○競争的資金の適正配分に関する物性研究者の考え方、○大学附置の全国共同利用研究所に対する支援や要望、○物性分野以外のコミュニティとの連絡機能の形成、○草の根組織、小規模グループに対する考慮、○従来からの提言にあった物性研究拠点計画に対する今後の対応○JPSJ の活性化を目指した物性コミュニティとしての努力、○春と秋の物理学会における発表形式の改善、たとえば学会プログラム編成、シンポジウムのあり方○ PD 問題への積極的対応、提言等。

今後、物性委員会が周囲から信頼されその機能を果たしていくためには、○物性研究者の多くに加入を呼びかけ、コミュニティ全体の意見が集約できる組織体となること、○物性研をはじめとした共同利用研の活動に対する支援および学術会議に対する意見・要望等を有効かつ敏速に行える態勢作りを怠らぬこと、研究資金の配分等に関して決定を行う機関や委員会に現場の声を正確に伝える道筋を構築すること、等が必要で、そのための定期的会合が最も重要なものとする。そのうえで学術会議等にはコミュニティの意思の尊重を要望する。

このほか、大学附置の全国共同利用研究所に対しての具体的な支援策や要望、研究資金の適正な配分、小規模科学に関する配慮、等について議論した。

## 物性委員会の可能性

東北大・理 倉本 義夫(物性委員会委員長)

学術会議の再編により、物理学研究連絡会議（物研連）は 2005 年秋に廃止された。これに伴って、物研連の下部組織としての物性百人委員会もその性格を変化させた。2006 年 3 月の物理学会年次大会における拡大物性委員会で、この変化への対応を議論し、物性コミュニティとしては、研究者の草の根組織を「物性委員会」という名称で基本的に存続させることに決めた。この決定を受けて、2006 年 10 月から東北大学が名古屋大学から事務局を引き継いでいる。メンバーは倉本義夫(委員長)、村上洋一(事務局長)、石原純夫、岩佐和晃(事務局幹事)である。

物性グループが関与した主な提言を振り返ってみると以下のようなものがある。

- \* 物性研究拠点整備計画(1996、2000：学術会議対外報告、物研連報告)。
- \* 研究分野を横断する滞在型共同研究推進(2005：物研連報告、2007：基礎物理学研究所の概算要求)。
- \* JPSJ の発展に向けて(2005.1：物性グループ有志の声明)。

これらの提言は一定の成果をあげているので、引き続き必要な状況に対してコミュニティとしての提言をしていきたい。

最近の国内外情勢の共通する重要な変化として、研究から教育への予算投入シフトが挙げられる。例えば米国はアジアの台頭と自国の教育水準低下に対して危機感を強めているが、米国科学アカデミーの 2006 年 2 月の提言書のなかでは、競争相手として中国とインドが繰り返言及されているのに対して、日本への言及はほとんどない。日本は最早強力な競争相手とは見られていないことを自覚し、真剣に再興を図るべきである。一方、国立大学法人化による変化として物性コミュニティにとって重要なことは、まず全国共同利用研究機関の制度変更がある。大学の共同利用研究所の変化は、COE 申請などで同一大学の他部局と連携する必要により、所属大学への帰属性強化としても現れている。法人化はその他にも、競争的環境の格段の強まりをもたらしている。これに伴い法人間の利益相反、実験施設整備状況の格差拡大、地方大学の厳しい状況などが生み出されている。これらを包括する根源的な問題として高等教育の全体的向上をどう図るかがある。物性委員会の任務としては、この実情を視野に入れた上でのコミュニティの意見集約と行動が最も基本的である。そのためには、物性研究の将来像に関するある程度の共有化が必要であろう。共同利用研究所へコミットする直接の

パイプは、委員の推薦である。このポジションについては、ほとんど物研連に推薦を依頼された部分を引き継いでおり、190 程度あるグループの投票によって被推薦者を決めている。草の根の意見を反映する数少ない機会であるが、現状は投票総数が少なすぎる。また、大型施設の利用改善にコミットすること、各種規模のバランスを生かした研究教育体制構築に寄与すること、物理学会の年会・分科会の改革への協力、JPSJ の強化・発展への協力、若手研究者の育成にコミットすることなど、対処すべき課題は山積している。

物性委員会は物性物理学全般をカバーすることを目標にしているが、現状では、分野に偏りが無いとはいえない。また、より専門的なコミュニティとの連携も図っていくべきである。このような恒常的活動の展開は、年会と分科会における拡大物性委員会だけでは不足である。今回のような研究会の開催も含め、事務局と幹事 20 人によるリーダーシップをある程度発揮して行動していきたい。とはいえ、何分にも非力なゆえ、コミュニティの強力なサポートをお願いするしだいである。

## 物理学会大会の物性領域発表に関する改革

東大・総合 鹿児島 誠一

2006 年 9 月 23 日-26 日に千葉大学で開かれた日本物理学会 2006 年秋季大会で実施したアンケート結果の概略を報告する。アンケート調査の目的は、領域制が発足以来 7 年の間、本質的な見直しはなされていないので、物性関係の領域制を中心として大会開催法に関する会員の意見を聞くことである。

回答数は 953 であるが 71%は年齢 40 歳代までの人の回答である。アンケート結果を一言で言えば、まずまず満足度が高い。これは、比較的若手の回答が多数を占めたからかもしれない。注目すべきは 50 歳代の回答であり、他の年齢層に比べて満足度が低い。国際会議の出席回数や招待講演の経験が豊富だからであろう。以下に重要と思われる事項について、結果の概略を述べる。(詳細は物理学会誌に掲載予定)。

- (1) シンポジウムについて：シンポジウムは肯定的に捉えられているが、個別意見としては、テーマ決定が安易であることに対する批判もある。
- (2) 領域制について：50 歳代の反応は目立っており、現状の番号制ではなく適当な名称をつけることを希望する意見が多い。数としては多くはないが、キーワード設定、重複などに関する不満は挙げられている。
- (3) 領域合同運営について：概ね合同運営に肯定的である。また合同シンポジウム等を通して実際に合同運営ができているという回答も多い。しかし、実際に運営上の難しさを認識している人も少なからずいる。50 歳代はここでも反応が違う。肯定的意見が少なくなり、領域制の趣旨に反するという意見が増加している。
- (4) 領域レビューセッションについて：概ね好意的に受け取られている。同時に会場の問題を挙げている人が少なからずいる。この設問では 20 歳代の期待感の高さが目立つ。
- (5) オーガナイズドセッションについて：これが何であるかが理解されなかったようである。肯定的意見はあるが、同時にシンポジウムがそれに対応しているから現状でよい、一般講演の質が下がるという懸念の指摘もある。

今回のアンケートの結果、概ね現状の学会に満足している保守的な参加者像が浮かび上がってくる。しかし、50 歳代の反応は特異的であり、学会参加者の平均的意見と異なっている。現実の多数派参加者の希望を満たすことと、先導性、指導性を発揮することとのバランス感覚が求められる。

## JPSJ の現状と日本の物性研究

日本物理学会 斯波 弘行

この講演では JPSJ の最近の数年間の状況をレビューする。

JPSJ は学術誌の出版、閲読などの形態が電子的手段に移行している状況を踏まえ、急ピッチで改革を進めた。

- (1) 創刊号からの全論文の電子版の完成 (2005 年 7 月)
- (2) 閲読を電子メールとウェブ中心にした。
- (3) 閲読過程に常に注意し、よい論文を早く出版
- (4) 編集委員会企画の「招待論文」「特集」を出版

(5) 「注目論文」をメディアや「会誌」に配信

などの努力をしている。その結果、電子版論文のダウンロード数は順調に伸びている。JPSJ には現在よりもずっと厳しい環境で優れた研究をしてきた先輩たちの成果が詰まっているのである。

しかし、論文の投稿数は伸びていない。これは何を意味するのであろうか？JPSJ の改革が足りないことを示しているのか？それとも、現代の日本の研究者の姿勢に問題があるのか？

## 超ウラン化合物研究の現状と成果 (2003-) 原子力機構・東北大金研大洗の共同研究

日本原子力研究開発機構 先端基礎研究センター 芳賀 芳範

Th, Pa, U, と続くアクチノイド元素は、5f 殻が満たされて行く系列であるが、その挙動は 4f 殻を持つ希土類とは大きく異なっている。下図は、希土類及びアクチノイド単体金属の平均原子半径である。希土類ではいくつかの例外を除いて 3 価が安定であり、原子番号とともに半径はゆっくり減少する。Th から Np までの軽アクチノイドでは電子数を増やすとともに急激に半径が減少し、一方 Am 以降の重アクチノイドでは希土類と同様の大きさに戻る。このことは軽アクチノイドの 5f 電子は遍歴状態にあり、Pu を経て Am に至って局在に戻る、と解釈されている。ちょうど中間にある Pu 単体金属は温度・圧力とともに大きな熱膨張を伴う多数の構造相転移を繰り返す異常な金属として知られている。また最近では PuCoGa<sub>5</sub> の「高温」超伝導が発見され、超ウラン化合物への関心が高まっている。

一方、アクチノイド元素は原子力と密接に関係し、核燃料・RI としての規制を受けているため、Np 以降の超ウラン元素は限られた施設のみでしか取り扱うことはできない。原子力機構と東北大金研はマクロ量の超ウラン元素を取り扱える施設であり、両者の協力により、国内では初めてのアクチノイド低温物性研究が 2003 年にスタートした。これまでに PuRhGa<sub>5</sub> の異方的超伝導や NpO<sub>2</sub> の多極性秩序の研究など多くの成果が上がり研究は順調に進展している。また、大阪大学、SPring8 や原子力機構 JRR-3 でも、超ウランを扱う体制が急速に整い、大洗地区の外でも少量の Np を使った実験が可能になってきている。原子力を取り巻く社会情勢が厳しくなる中で、このような基礎研究はもはや単独の施設での実現は難しい。原子力機構・金研の密接な連携はもちろん、内外の理解と協力が今後の研究継続に不可欠である。

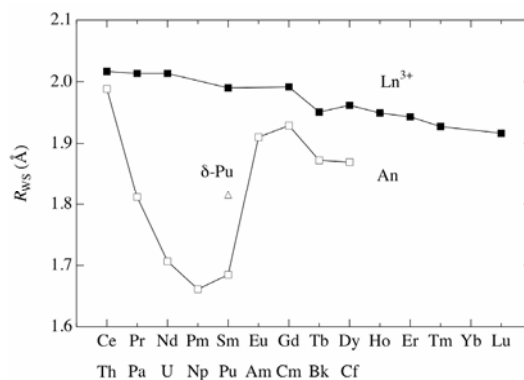


図 希土類及びアクチノイド単体金属の原子半径。Los Alamos Science 26 (2000)

## 大洗施設と超ウラン化合物研究 全国共同利用施設としての東北大学金属材料研究所量子エネルギー材料科学 国際研究センタ(大洗センター)の現状について

東北大学金属材料研究所 四竈 樹男

東北大学金属材料研究所附属量子エネルギー材料国際研究センター(大洗センター)は現 JAEA 大洗に設置された材料試験炉(JMTR)の大学関連の全国共同利用をお世話することを目的として昭和 44 年に JAEA 大洗敷地内に設置された。大学、公立の研究機関の教職員(一部研究協力者として民間からの応募による共同研究員と受託研究員)および大学院学生が、原子力材料やアクチノイド元素に関する独創的・先端的な学術研究を遂行するための国内唯一の共同利用センターである。金研原子力関連部門との密接な連携の下に、研究遂行に必要なハードとソフトを開発・整備し提供している。例えば、原子炉の照射温度・中性子フルエンスを高精度に制御可能な多段多分割キャプセルを用いた材料照射技術、炉内その場計装技術、透過電子顕微鏡でも観察困難な極微小欠陥を評価するためのナノ分析評価技術、純良なアクチノイド単結晶

の育成と物性評価技術などは世界最先端の技術として国の内外で高く評価されている。このようなハードとソフトの整備・高度化による利用希望者数の増加、および応募資格者の近隣の原子力機構や物材機構への拡充等により、共同利用者数は平成 12 年度までの約 2000 人・日からさらに増加し、とくに 16、17 年度は 3200 人・日と過去最高の数字を記録した。このような共同利用で得られた独創的・先端的な研究成果の報告のために毎年 2 月末までに研究経過報告書を提出してもらい、またその成果を踏まえての次年度研究提案を行う場として毎年 8 月下旬に研究会を開催している。共同利用公募はほぼ毎年 11-12 月にかけて行われる。

本センターが担う全国共同利用の分野は、原子炉、放射性同位元素を利用した特徴的な研究分野であり、利用者の多くは特定の複数研究分野に分類することができる。それぞれの分野において、本センターは国内における結节点的な機能を果たしており、各分野で先導的な役割を果たしてきている。特定の研究分野について、本センターの共同利用者は国内の大学関連、国立研究機関関連の研究組織をほぼ網羅する形となっている。個々の研究者、大学規模の小型の研究組織からは全体像を把握しにくい大型設備群、およびそれらの複雑な管理機構と、幅広い分散を持つ大学の個々の研究興味とを有機的に結びつけ、大学における特徴的な研究を推進するのが本センターの主要業務である。ホットラボ、ナノ構造解析設備群などの固有の特徴的な設備群(ハードウェア)と、長年にわたり培われた JAEA との人間関係、信頼関係(ソフトウェア)がこの困難な主要業務遂行の要であり本センターの誇る特徴である。

代表的な研究分野としては

- a. 軽水炉構造材料における損傷評価
  - b. 核融合炉材料を含む次世代原子力システム材料における照射効果
  - c. アクチナイド物性学
  - d. アクチナイドバックエンド化学
  - e. 同位元素による年代測定
- などが挙げられる。

# 物性研究所談話会

日時：2006年10月25日(水) 午後4時～5時

場所：物性研究所本館6階 大講義室(A632)

講師：常次 宏一

(東京大学 物性研究所)

題目：三角格子系のスピンネマティック相

要旨：

中辻たちによって発見されたNiGa<sub>2</sub>S<sub>4</sub>は、Weiss温度が-80Kであるが、1.8Kの低温まで磁気長距離秩序を示さない。ところが、比熱や帯磁率の実験データは反強磁性秩序状態に類似した振る舞いを示す。

これらの実験結果の多くが、スピンネマティック状態によって説明できることを提唱したが、理論の詳細を紹介する。

さらに、最近計算しているスピンネマティック状態の磁場効果やスピンドYNAMIXSに関する結果についても述べる。

日時：2006年10月30日(月) 午後3時～4時

場所：物性研究所本館6階 大講義室(A632)

講師：Prof. P. H. M. van Loosdrecht

(University of Groningen, The Netherlands)

題目：Low dimensionality in transition metal oxides.

要旨：

The transition metal oxides display an impressive variety in their physical properties, originating from the interplay between crystal field and Hund's rule couplings in combination with the interactions with and between the charge, lattice, spin, and orbital degrees of freedom. Famous examples are the cuprate high temperature superconductors and mixed valence compounds like magnetite and many vanadates. Charge ordering phenomena, low dimensional quantum magnetism, and superconductivity are but a few of the intriguing phenomena observed in the transition metal oxides. This presentation will highlight some specific examples, focusing on the charge ordering and non-linear charge transport in beta-sodiumvanadate, and the unusual spin-Peierls route in the titaniumoxyhalides.

日時：2006年11月2日(木) 午後4時～5時

場所：物性研究所本館6階 大講義室(A632)

講師：Prof. Martin Wolf

(Freie Universität Berlin Institut für Experimental physik)

題目：Femtosecond time-resolved photoemission studies of electron dynamics and coherent phonons in solids

要旨：

Many properties of solids (e. g. the electrical conductivity) are governed by elementary excitations and relaxation due to electron-electron or electron-phonon scattering. The dynamics of these processes occur on a femtosecond (fs) time scale and can be probed directly by time-resolved photoemission spectroscopy. In our experiments the time evolution of the electron distribution function following optical excitation (50 fs, 1.5 eV) is monitored by 6 eV fs laser pulses. This provides access to both occupied and unoccupied states around the Fermi level [1].

This talk addresses recent studies of electron and coherent phonon dynamics in several materials exhibiting different aspects of electronic correlation. For the ferromagnetic Gd(0001) surface the ultrafast drop of the spin polarization observed by magneto-optics is attributed electron-magnon scattering [2].

In the Mott insulator TaS<sub>2</sub> electronic excitation induces an ultrafast insulator to metal transition and subsequently pronounced oscillations of the spectral function due to a coherent phonon mode [3].

Finally, first results of electron cooling in a high T<sub>c</sub> superconductor (BiSCO) will be discussed.

日時：2006年12月20日(水) 午後2時～3時

場所：物性研究所本館6階 大講義室(A632)

講師：Prof. Federico Rosei

(INRS-EMT, Univ. du Quebec, ISSP)

題目：Ge/Si ヘテロエピタキシャルナノ構造の化学組成マッピングと安定性

要旨：

In heteroepitaxy, the strain energy caused by the lattice mismatch competes with kinetic processes to form nanostructured films [1,2].

Ge on Si is a model system with 4.2% lattice mismatch that follows the Stranski-Krastanov growth mode: after wetting the surface up to a critical thickness of 3-5 monolayers, it is not favorable to grow layer by layer and a roughening transition to 3D islands is observed. In this system Ge/Si intermixing has been shown to be significant, as it alters the composition and overall properties of the as grown Quantum Dots (QDs) [3].

Here I describe Ge-Si intermixing from individual islands measured in situ using X-Ray Photoemission Electron Microscopy [4,5].

Using Ge/Si as a test system, we have developed a technique which allows to map the chemical concentration of individual Ge(Si) nanostructures with a lateral resolution of 25 nm [6].

Finally, I will describe Scanning Tunnelling Microscopy and Low Energy Electron Microscopy results related to the positioning and stability of Ge/Si nanostructures [7,8].

#### References

- [1] F. Rosei, R. Rosei, Surf. Sci. 500, 395 (2002).
- [2] F. Rosei, J. Phys. Cond. Matt. 16, S1373 (2004).
- [3] F. Boscherini, G. Capellini, L. Di Gaspare, F. Rosei et al., Appl. Phys. Lett. 76, 682 (2000).
- [4] F. Ratto, F. Rosei et al., Appl. Phys. Lett. 84, 4526 (2004).
- [5] F. Ratto, F. Rosei et al., J. Appl. Phys. 97, 043516 (2005).
- [6] F. Ratto, A. Locatelli, S. Fontana, S. Kharrazi, S. Ashtaputre, S. K. Kulkarni, S. Heun and F. Rosei, Small 2, 401 (2006).
- [7] A. Sgarlata, P. D. Szkutnik, A. Balzarotti, N. Motta, F. Rosei, Appl. Phys. Lett. 83, 4002 (2003).
- [8] F. Ratto, A. Locatelli, S. Fontana, S. Kharrazi, S. Ashtaputre, S. K. Kulkarni, S. Heun and F. Rosei, Phys. Rev. Lett. 96, 096193 (2006).



# 人 事 異 動

## 【研究部門等】

○ 平成 18 年 9 月 30 日付け

(辞 職)

氏 名	所 属	職 名	異 動 内 容
大 道 英 二	極限環境物性研究部門	助 手	神戸大学理学部助教授へ
辺 土 正 人	極限環境物性研究部門	助 手	琉球大学理学部助教授へ

○ 平成 18 年 11 月 1 日付け

(採 用)

氏 名	所 属	職 名	異 動 内 容
高 橋 一 志	新物質科学研究部門	助 手	自然科学研究機構分子科学研究所助手から
遠 藤 仁	附属中性子科学研究施設	助 手	日本学術振興会特別研究員から
岡 本 佳比古	附属物質設計評価施設	助 手	理化学研究所基礎科学特別研究員から

○ 平成 18 年 11 月 30 日付け

(辞 職)

氏 名	所 属	職 名	異 動 内 容
井 澤 公 一	新物質科学研究部門	助 手	東京工業大学大学院理工学研究科助教授へ

○ 平成 18 年 12 月 1 日付け

(配置換)

氏 名	所 属	職 名	異 動 内 容
松 田 巖	附属軌道放射物性研究施設	助 教 授	東京大学大学院理学系研究科助手から

## 【事 務 部】

○ 平成 18 年 12 月 23 日付け

(任期满了)

氏 名	所 属	職 名	異 動 内 容
野 村 かおる	物性研担当課	総 務 係	育児休業代員 (平成18年2月20日～)

○ 平成 18 年 12 月 24 日付け

(職務復帰)

氏 名	所 属	職 名	異 動 内 容
濱 田 真実子	物性研担当課	総務係主任	育児休業 (平成18年2月19日～)

○ 平成 19 年 1 月 1 日付け

(事務部内異動)

氏 名	所 属	職 名	異 動 内 容
三 浦 勝 正	人事・労務グループ	人事チーム	物性研担当課総務係から

# お 知 ら せ

---

## 物性研・元教職員及び元学生の方々へ、アスベストに関する健康相談について

---

東京大学では、平成 18 年 11 月 17 日に施設系技術職員が中皮腫を発症したことについて、記者発表を行い、併せて本学におけるアスベスト対策の実施状況を報告し、退職した教職員についても特殊健康診断や保健指導を実施することとしてお知らせしているところです。

([http://www.u-tokyo.ac.jp/public/public01\\_181117\\_j.html](http://www.u-tokyo.ac.jp/public/public01_181117_j.html))

物性研究所においては、柏移転前の六本木時代（昭和 35 年～平成 11 年）に日常的にアスベストを使用して実験を行ったり、施設内の建築資材や実験機器の中にもアスベストがかなり使用されていた時期があります。中皮腫の潜伏期間は 40 年とも 50 年とも言われておりますので、元教職員及び元学生の方で、健康に心配な方は下記の健康相談窓口にご一報くださるようお願いいたします。

なお、物性研究所安全衛生管理室あて、ご連絡いただいても対応いたしますので、特殊健康診断や保健指導を希望する方、遠慮なくお問い合わせくださるようお願いいたします。

相談窓口：東京大学環境安全本部 担当 河原、山本

電話：03（5841）1052

Fax：03（5841）1053

東京大学物性研究所安全衛生管理室 担当 大澤

電話：04（7136）3586

Fax：04（7136）3216

## 物性研だより第 46 巻目録 (第 1 号～第 4 号)

### 第 46 第 1 号 2006 年 4 月

メゾスコピック系物理学の理論研究：優秀な実験家とともに	江藤 幹雄	1
外国人客員所員を経験して	Yong-Shi WU	3
ワンフレーズフィジックス	関川 太郎	5
物性研究所短期研究会報告		
○次世代ナノ・エレクトロニクスのための電子状態計算の基礎理論		9
物性研究所談話会		41
物性研ニュース		
○人事異動		42
○東京大学物性研究所教員公募の通知		48
○平成 18 年度前期短期研究会一覧		53
○平成 18 年度前期外来研究員一覧		54
○平成 18 年度前期スーパーコンピュータ共同利用採択課題一覧		64
○平成 18 年度中性子回析装置共同利用採択課題一覧		68
○平成 18 年度後期共同利用の公募について (通知)		81
○平成 17 年度外部資金の受入れについて		82
○第 51 回物性若手夏の学校		83
編集後記		

### 第 46 巻第 2 号 2006 年 7 月

量子ドットを含む系のコヒーレント伝導	勝本 信吾	1
物性研での研究について	渡辺 真仁	2
外国人客員所員を経験して		13
	Ara SEDRAKYAN	
	Christoph JANOWITZ	
物性研究所短期研究会報告		
○有機物質のナノ電子物性		15
○特異物性発現を担うフォノンの研究における新展開		51
物性研究所談話会		69
物性研ニュース		
○人事異動		71
○東京大学物性研究所教員公募の通知		72

### 第 46 巻第 3 号 2006 年 10 月

「国際物性研究拠点：強磁場コラボラトリーの形成」について	金道 浩一	1
------------------------------	-------	---

物性研究所国際ワークショップ・シンポジウム報告	6
○Computational Approaches to Quantum Critical Phenomena	6
物性研究所談話会	30
物性研ニュース	
○人事異動	32
○東京大学物性研究所教員公募のご案内	33
○東京大学物性研究所客員教授(助教授)公募のご案内	35
○2007年度日米協力「中性子散乱」研究計画公募のご案内	37
○平成18年度後期短期研究会一覧	38
○平成18年度後期外来研究員一覧	39
○平成18年度後期スーパーコンピュータ共同利用採択課題一覧	50
○平成19年度前期共同利用公募のご案内	52
○平成18年度外部資金の受入れについて	53
印刷不鮮明についてのお詫びと訂正	54
編集後記	

## 第46巻第4号 2007年1月

### 研究室だより

○LIPPMAA研究室	Mikk LIPPMAA	1
外国人客員所員を経験して		8
	Cun-Zheng NING	
	Yuriy BUNKOV	
	Carlos WEXLER	

### 物性研究所短期研究会報告

○水、氷、水素を基調とした高圧下での地球惑星科学と物性科学	13
○ガラス転移の統一概念：諸理論の相互関係と実験的検証	25
○量子スピン系の物理	43
○新たな物性研究体制の構築	72
物性研究所談話会	86
物性研ニュース	
○人事異動	88
○お知らせ	89
○物性研だより第46巻目録（第1号～第4号）	90

### 編集後記

## 編 集 後 記

2007 年になりました。今年は暖冬と言われておりますが、関西出身の私にとりましては、今年の柏の冬も随分寒く感じております。11 月末に、ららぽーと柏の葉がオープンし、柏キャンパス周辺も、大分華やかになりました。週末は交通渋滞を引き起こすこともあり、少々厄介な面もありますが、商業施設が近くにできることは、この地域の様々なものを活性化させてくれると思います。

さて、本号では、Lippmaa 所員に、研究室だよりの執筆をお願いしました。酸化物の薄膜化により、成長条件を変えることで様々な物性を制御できる例が、実際の実験結果と合わせて数多く記されており、他分野の方でも分かりやすい、読み応えのある記事になっています。また、3名の外国人客員所員の先生方には、物性研での滞在記を執筆して頂きました。Wexler 先生からご指摘頂いたコメントは、今後のために有用かと思われます。また、沢山の短期研究会の報告書も掲載させて頂いています。どの研究会も活発な議論が成されていたことが感じ取れると思いますので、ぜひ、ご一読頂ければと思います。

今号で、初めて物性研だよりの編集を担当させて頂きましたが、共同利用係の関さんには、大変お世話になりました。お陰様で無事に発刊することができました。この場を借りてお礼申し上げます。最後に、本年も皆様にとって幸せ多き年となることを心より願っております。

木 村 崇