

日本物理学会誌

■ 格子欠陥により安定化する結晶：
ホウ素元素固体

BUTSURI

第67巻 第8号(通巻750号) ISSN 0029-0181

昭和30年6月13日 第3種郵便物認可

平成24年8月5日発行 毎月5日発行

2012 VOL. 67 NO.

8



口絵：今月号の記事から		545
巻頭言	PTEPの創刊	瀧川 仁 547
解説	格子欠陥により安定化する結晶：ホウ素元素固体	荻津 格 548
最近の研究から	かに星雲から観測されたガンマ線フレア	田中孝明, 内山泰伸 556
	連星中性子星合体からの重力波及びニュートリノ放射 	木内建太, 関口雄一郎 560
	ソフトマターにおける溶媒和効果	岡本隆一, 小貫 明 566
	強磁性金属絶縁体転移—完全スピン分極した電子系のパイエルス 転移— 	上田 寛, 中尾朗子, 中尾裕則, 太田幸則 571
	異波長二光子分光による反陽子ヘリウム の精密原子分光	堀 正樹, 早野龍五 575
	密度汎関数理論の発展—拡張された制限つき探索理論	樋口克彦, 樋口雅彦 580
JPSJの最近の注目論文から	4月の編集委員会より	安藤恒也 585
学界ニュース	第102回日本学士院賞：梶田隆章氏	荒船次郎 588
	第102回日本学士院賞：高柳邦夫氏	飯島澄男 588
	第52回東レ科学技術賞：山崎泰規氏	山崎敏光 588
ラ・トッカータ	ロスアラモス国立研究所奮闘記—新しいプルトニウム科学の幕開け—	安岡弘志 589
新著紹介		591
掲示板	■人事公募 ■学術的会合 ■その他	593
行事予定		599
会告	■2013年度の会費減額申込手続き(大学院学生・学部学生)のお願い ■2013年度の 論文誌等購読の変更手続きのお願い ■2012年7月1日付新入会者	601
本会記事	■日本物理学会理事・監事・代議員, 委員会委員, キャリア支援センター, 物理系学 術誌刊行センター, 等氏名表	604
本会関係欧文誌目次		610

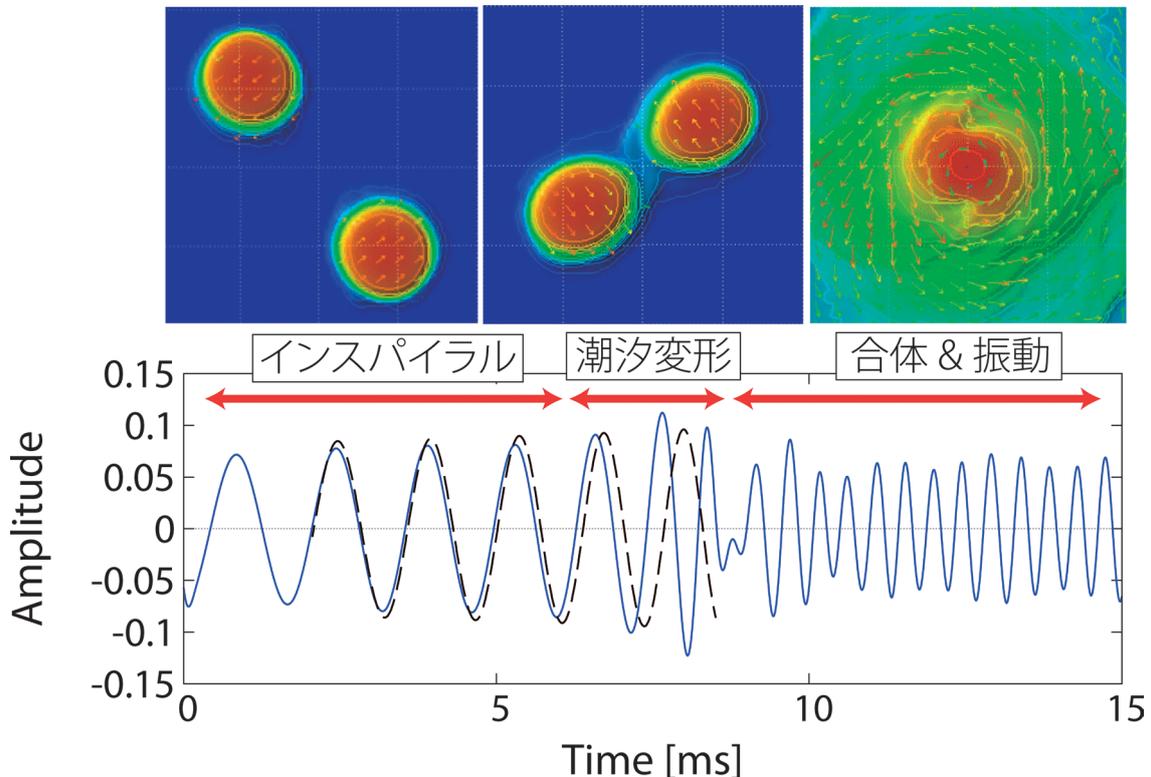
表紙の説明 米国カリフォルニア州デスバレー国立公園内のハーモニーボラックス精製所跡。1883年から1889年の間、ここで採掘/精製されたボラックスは、写真中のワゴンにより165マイル離れたカリフォルニア州モハベの貨物列車駅まで搬送された。ワゴンは9トンのボラックスと4,500リットルの水を搭載し18頭のムールと2頭の馬に引かれ、モハベまで約10日間かけて移動した。その模様は、あのレーガン元大統領も出演した「デスバレーの日々」という人気テレビ番組にも紹介され、また、洗濯洗剤商標名「20ムールチーム」として長く使われていることもあり(現在も存在)、米国人の間では広く知られている。ホウ素の物性については、本号に掲載されている荻津 格氏の「解説」記事を参照のこと。

Graphic Page		545
Editorial		
<i>The Launch of PTEP</i>	Masashi Takigawa	547
<hr/>		
Review		
<i>Crystal Stabilized by Defects: Elemental Boron</i>	Tadashi Ogitsu	548
Current Topics		
<i>On the Gamma-ray Flares from the Crab Nebula</i>	Takaaki Tanaka and Yasunobu Uchiyama	556
<i>Gravitational Waves and Neutrino Emissions from the Binary Neutron Star Mergers</i>	Kenta Kiuchi and Yuichiro Sekiguchi	560
<i>Solvation Effects in Soft Matter</i>	Ryuichi Okamoto and Akira Onuki	566
<i>Ferromagnetic Metal-Insulator Transition: Peierls Mechanism for Spinless Fermions</i>	Yutaka Ueda, Akiko Nakao, Hironori Nakao and Yukinori Ohta	571
<i>Sub-Doppler Two-Photon Laser Spectroscopy of Antiprotonic Helium</i>	Masaki Hori and Ryugo Hayano	575
<i>Progress of the Density Functional Theory—Extended Constrained-Search Theory—</i>	Katsuhiko Higuchi and Masahiko Higuchi	580
<hr/>		
JPSJ Selected Papers in the Latest Issue	Tsuneya Ando	585
Physics Community News		
<i>102nd Japan Academy Prize: Takaaki Kajita</i>		588
<i>102nd Japan Academy Prize: Kunio Takayanagi</i>		588
<i>52nd Toray Science and Technology Prize: Yasunori Yamazaki</i>		588
La Toccata		
<i>Strenuous Effort at Los Alamos National Laboratory—A New Horizon on Plutonium Science—</i>	Hiroshi Yasuoka	589
Book Reviews		591
<hr/>		
Notice Board		593
<hr/>		
JPS Announcements		601
JPS News		604

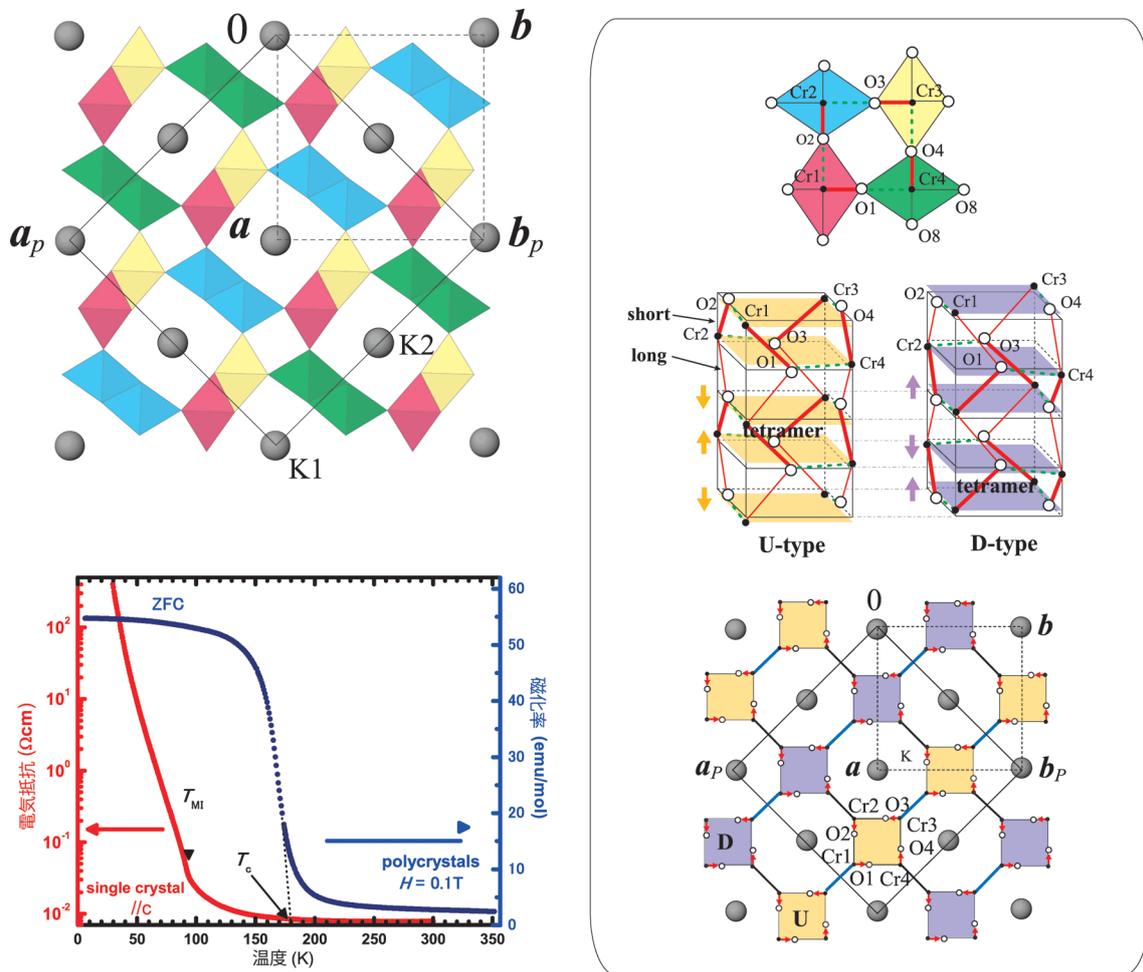
最近の研究から 「連星中性子星合体からの重力波及びニュートリノ放射」 p.560

日本の KAGRA, 米国の Advanced LIGO など, 次世代の重力波干渉計の建設が開始し, 重力波の直接観測の機運が高まりつつある. 連星中性子星合体は, これら地上型重力波干渉計の有望なターゲットの一つである. 連星中性子星合体からの重力波は, インスパイラル, 潮汐変形, そして合体・振動の3つのフェーズに大別することができる(口絵参照). インスパイラルフェーズの重力波は連星の軌道情報, 特に連星中性子星の質量の情報を含み, 潮汐変形からの重力波は中性子星の半径の情報を含む. また, 振動モードの解析により, 中性子星内部の情報を抜き出すことも可能である. このように, 連星中性子星合体からの重力波は中性子星の質量・半径や内部情報, 翻って中性子星物質の状態方程式や相転移の様相の新たな探索針となりえる.

観測された重力波から物理的情報を抽出する為には, 理論による波形予測が必須である. 特に, 中性子星内部状態の情報を含む, 潮汐変形及び合体・振動フェーズからの重力波の計算には, アインシュタイン方程式, 流体力学方程式, 輻射場の方程式を連立させながら数値的に解く必要がある. 数値相対論と呼ばれるこの研究分野において, 黎明期より日本は重要な役割を果たしてきた. 最近, 筆者らのグループは有限温度核密度状態方程式とニュートリノ冷却を取り入れた連星合体シミュレーションを世界で初めて行い, 放射重力波とニュートリノを定量的に見積もることに成功した. 我々の行った数値相対論シミュレーションによれば, 潮汐変形に伴う重力波スペクトルの変化から, 中性子星半径の情報を抜き出すことが可能である. また, 合体・振動からの重力波の振動数の時間変化を追跡することによって, 通常核物質とハイペロン物質を区別できる可能性を示した. 本稿では, 重力波と数値相対論について概観し, 連星中性子星合体の現実の様相に迫りつつあるこれら最新の研究成果を紹介する.



上図：連星中性子星合体における軌道面の密度場のコントア。
 下図：インスパイラル, 潮汐変形, 合体と振動の各段階で放出される重力波の波形. 黒線(破線)は中性子星を点粒子と近似した時の波形.



強磁性絶縁体はどのようにすれば実現されるだろうか。最近、上田らはクロムホランダイト $K_2Cr_8O_8$ (形式電荷 $Cr^{3.75+}$) が強磁性金属から絶縁体に転移することを見出した。放射光 X 線回折による構造解析によると強磁性金属-強磁性絶縁体転移に伴い構造が低対称化 ($I4/m \rightarrow P2_1/a$) し、4 種の非等価な Cr 鎖が生まれる。絶縁相では電荷分離・秩序が起きているようには見えず、 c 軸方向の結合交替により 4 本鎖内に生じた Cr の 4 量体 (tetramer) あたり一つの過剰電子が「弱く抱えられた」状態にある。これは第一原理計算から示唆される、Cr 鎖方向のパイエルス不安定性による絶縁化機構と矛盾しない。

PTEPの創刊

瀧川 仁 (刊行委員長)

刊行委員長を拝命してから、早いもので3年が経とうとしている。物理学会の刊行事業の今年最大のイベントは、Progress of Theoretical and Experimental Physics (PTEP) の創刊である。1946年以来日本の理論物理学の発展の舞台となってきた Progress of Theoretical Physics (PTP) が、PTEP と名称を変えて再生するに至った経緯については、これまで何度か学会誌で報告されている。^{1,2)}

PTEP 創刊の意義は大きく2点ある。第1に、新しい誌名に象徴されるように、これまで日本の学術誌に掲載される機会の少なかった高エネルギー・原子核実験の論文を、物理学会から積極的に刊行する姿勢を打ち出したことである。この分野では、日本の研究者や研究施設が世界的に重要な貢献を果たしているにもかかわらず、これまで日本の学術誌から研究成果が発信される機会が非常に少なかった。PTEP 創刊を機にこの状況が変わり、できるだけ多くの第1級のオリジナルな研究成果がPTEPに掲載されることを願う。その手始めとして、今年招待論文からなる特集企画が公開される予定である。計算科学特集の他に、J-PARC, RIBF, KEKB など日本の大型研究施設からの成果がまとめて紹介される。皆さんがこの学会誌を手にとられるころには、既にいくつかの論文が公開されているのではないかと想像する。

第2の意義は、PTEP を完全なオープン・アクセス・電子ジャーナルとして刊行する、つまりオンライン上で誰もが論文を無料で閲覧・ダウンロード・再利用できるようになる、という点である。学術誌の価格高騰に対する危機感と、公的財源を使った研究成果は公開されるべきであるという理念から、学術誌のオープン・アクセス化が叫ばれて久しい。物理分野でも昨年 AIP Advances と Physical Review X という2つのオープン・アクセス・電子ジャーナルが相次いで創刊されるなど、

大きな潮流となりつつある。特に注目されるのが、CERN が2007年に提唱した SCOAP³ という、高エネルギー物理の全ての論文をオープン・アクセス化しようという試みである。³⁾

これは一言で言うと、雑誌(論文)がオープン・アクセスとなれば、それまで大学などの図書館が支払っていた購読料が不要になるので、その分をまとめて収集し、出版社に刊行経費として供給(re-direct)することにより、出版社は購読料収入なしに刊行を維持できる、という仕組みである。理屈は単純であるが、多数の国を相手の交渉の困難さゆえに実現が危ぶまれた時期もあった。しかし次第に資金確保が進み、今年6月に関連出版社の競争入札を実現するところまでこぎつけた。PTEP もこれに対応すべく準備を進めているところである。しかし今後 SCOAP³ がどこまで長期的に安定な運営を維持できるのか、まだ予断を許さない。

一般にオープン・アクセス誌刊行に要する経費は、著者が掲載料として負担するのが原則である。しかし現状では著者負担のない有力な購読誌が多数存在するので、これでは良い論文を呼び込むのは難しい。研究者が自分の懐を痛めずに済む仕組みが必要である。SCOAP³ はその一例であるが、対象となるのは高エネルギー物理分野に限られる。オープン・アクセスの普及のためには、研究機関の共通経費のような財源から掲載料を支払う体制が浸透するよう、刊行サイドからの継続的な働きかけが必要である。

PTEP においては、著作権のあり方もこれまでと異なる。従来は掲載論文の著作権は出版者に属し、その利用に当たっては出版者の許可が必要であった。しかし研究者の立場からは、自分の論文が利用されることを歓迎こそすれ拒むことはないだろう。一方で、総説記事の執筆に当たって図やデータを引用する際に、いちいち利用許諾が必要となることを煩わしく感じた方も多

いであろう。Creative Commons License とはそのような観点から生まれた制度で、著作権は著者に帰属する一方、適切に引用さえすれば、誰でも許可なくコピー・再利用(場合によっては商業利用を含む)ができる。⁴⁾ PTEP を含めて殆どのオープン・アクセス誌ではこのライセンスが採用されている。

PTEP では論文の投稿受付から採否決定までの編集作業は物理学会で行うが、その後のデータ作成・オンライン公開は Oxford University Press (OUP) に委託する。物理学会としては海外出版機関との初めての本格的な提携となる。すべてを物理学会単独ではできないのか、と訝る方もおられるかも知れないが、新雑誌立ち上げのための技術的な整備に加えて、国際的な宣伝やトムソン・ロイターへの登録申請、SCOAP³ への対応など全てを物理学会だけで対処することにはリスクがともなう。強力なパートナーの役割は大きいというのが、PTEP 創刊に携わっている者の実感である。

物理学会のもう一つの学術誌 Journal of the Physical Society of Japan (JPSJ) は2010年のインパクト・ファクターが2.905と躍進を遂げたが、掲載論文分野の偏りや購読機関数の停滞など、依然として課題は残る。特に海外購読を拡大することは、雑誌の運営に携わる者にとっては重要なミッションである。このために刊行委員会では昨年8月に Institute of Physics (IOP) との提携を提案したが、これについては物性物理コミュニティから危惧する声が上がっている。現在物理学会では方策を検討中であり、近い将来に何らかの再提案が行えるものと考えている。

参考文献

- 1) 日本物理学会誌 **65** (2010) 857; 961—小特集: 物理学英文誌刊行の新体制 I, II.
- 2) 日本物理学会誌 **67** (2012) —小特集: スタートした新英文誌 PTEP.
- 3) <http://scoap3.org/>
- 4) <http://creativecommons.org/>

(2012年5月30日原稿受付)

格子欠陥により安定化する結晶：ホウ素元素固体

荻津 格 〈ローレンスリバモア国立研究所 7000 East Ave., L-415 Livermore, CA 94550, USA 〉

X線回折実験に基づくホウ素元素固体の結晶構造解析の研究報告によれば、常圧で熱力学的に安定であることが知られている β ホウ素の六方晶単位胞中には423の原子位置があり、そのうち約320が占有される。このうち23原子は126原子位置にはほぼ乱雑に配置される。最近の理論研究は、この不完全原子占有状態は化学結合数と価電子数の整合性を保つのに必要不可欠であること、また、不完全占有状態は、スピン氷などに特異な低温物性をもたらすことで知られている幾何学的フラストレーションを持つこと、などを明らかにした。本記事では、歴史的な背景を交え、ホウ素研究におけるごく最近の展開、熱力学の第三法則との関係、などを解説する。

1. 背景

比較的単純な電子配置を持つ元素、特に軽元素、の性質は現在においてはかなり理解が進んでいるとあって差し支えないであろう。膨大な量の研究に基づき、元素固体とその同素体の性質、熱力学的な安定性は様々な文献にまとめられている。¹⁻⁴⁾いくつかの元素はかなり複雑な結晶構造を伴う数々の同素体を持つことが知られているが、多くの場合には、常温（もしくは低温）常圧安定相は比熱と同素体間の相転移熱の測定結果などからその最安定相は確立している。存在する文献をしらみつぶしに調べると非常に興味深いことに気づく。5番目の元素であるホウ素の同素体—特に常圧高温で安定とされている β ホウ素—に関しては、実験から求められた競合相間の相対的な熱力学的安定性を与える量—相転移熱—などの値がデータベース上に存在しない。²⁾このことは、驚くべきことに、今日においても我々が生活する常温常圧条件下において真に安定なホウ素の相は実験的には確定してない、ということの意味する。この状況は、スーパーコンピュータを用いた計算科学技術、⁵⁻⁸⁾熱力学的物理量の測定技術、⁹⁾高圧実験技術、^{10,11)}などの進展によりごく最近になってようやく変わり始めた。

ホウ素は16種類もの同素体を持ち、この数は、硫黄について周期律表上で2番目に多い。⁴⁾これらのうち4種類の同素体の熱力学的に安定な温度圧力領域はある程度確立している。文献をさらに詳細に調べると、低压/常圧化での安定相と考えられている α 三方晶相と β 三方晶相の相境界位置(図1を参照¹⁰⁻¹²⁾)、^{5-7,13-19)}またT-50相(正方晶の単位胞に50原子を含む)の存在の可否、²⁰⁻³²⁾に関して、文献によってその主張に大きな食い違いがあることに気づく。

常圧において液体ホウ素は β 三方晶相に固化することが知られており、^{33,34)}この事実は、この相が融点(2,349ケルビン)近くの温度領域での熱力学的安定相であることを示す。この結晶は、正二十面体と、その三重融合体の組み合わせで構成された極端に複雑な結晶構造を持ち、この相が、焼き鈍しなどの方法により常圧下で他の結晶構造に相転移するという例は知られていない。過去の実験報告は1,400ケルビン程度以上では β 相が常圧下の安定相であることを示唆するが、³⁵⁻³⁸⁾残念ながらこれ以下の温度においては、定量的な熱力学的安定性の比較結果は存在しない。高い融

点、化学的活性化エネルギーの高さ、などが、精密な比熱測定や転移熱測定を困難にしていることが理由であると考えられる。

しかしながら、もし仮に β 相の結晶構造や電子構造が、その同定当初から明確に性格づけられていたのであれば事実上常圧下での全温度領域での安定相として受け入れられていたのではないかと思われる。1957年における空間群およびおおよその原子密度の同定³⁹⁾から、この系を他の元素固体と明らかに分け隔てる特異な構造的特徴、巨視的な量の欠陥—不完全占有状態と呼ばれる—の存在の同定⁴⁰⁻⁴²⁾まで、30年にわたってそのX線構造解析は続けられる。また、この極端に複雑かつ特異な構造のため、その電子構造はごく最近まで理論的には理解されていなかった。特に、30年もの年月を経て最終的にはその存在が確認されることになる巨視的な量の欠陥の存在は、⁴²⁾多くの研究者に、この系の低温における熱力学的安定性に疑問を持たせたと考えられる。^{*} β 相は不純物が少ない極限では非常に伝導度の低い⁴²⁾p型半導体の特性を持ち、⁴³⁾その光吸収励起遷移禁止帯幅は1.5 eV程度であることが知られている。^{42,44,45)}これは、 β 相が半導体的な閉殻電子構造を持つことを示唆する。

これに対し、1982年に報告された、強束縛近似による β 相結晶の電子構造計算の結果は、⁴⁶⁾不完全占有状態抜きでは β 結晶は閉殻電子構造をとらないことを明らかにする。格子間原子の導入による自己ドーピングが、 β ホウ素の閉殻電子構造構成に寄与する可能性はこの報告の後たびたび指摘されているが、^{16,17,47)}その推測が正しいことは2009年に荻津らにより明らかにされる。⁷⁾驚くべきことに、 β 相においては、価電子数と化学結合数の整合性は巨視的な数の格子欠陥により近似的に達成される。⁸⁾そして、欠陥は内部エネルギーを下げ β ホウ素を最安定なホウ素同素体にする。⁵⁻⁷⁾

さらに驚くべきことには、欠陥同士に働く相互作用と格

^{*}一般的には欠陥生成エネルギーは正の値を持ち、その熱平衡状態における存在は高温においてはエントロピーの自由エネルギーへの寄与によると説明される。また、低温において減少しない欠陥密度は、系が局所安定状態に凍り付いたためであると解釈される。 β ホウ素の欠陥生成エネルギーは負であり、巨視的な量の欠陥は低温でも熱平衡状態として存在できる。

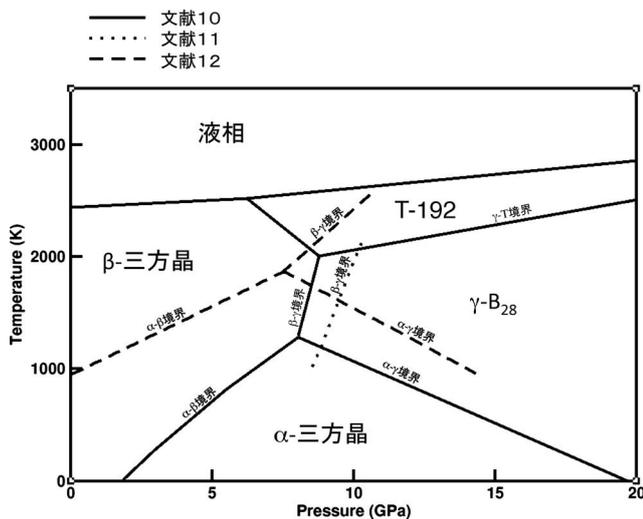


図1 最近の文献10-12に発表されたホウ素の相図。α三方晶が高圧低温、β三方晶が低圧(高温)、γ-B₂₈が高圧高温(1,000-2,000ケルビン)、T-192が高圧高温(γ-B₂₈より高温)、にそれぞれ現れる点ではおおむね一致しているが、相境界の位置はお互いになりにくい違う。文献10では常圧基底状態はβ三方晶となるが、文献12ではα三方晶が基底状態である。理論的には、後述の不完全占有状態をすべて含めた場合にはβ三方晶が基底状態とされる。⁵⁻⁷⁾

子構造の間に競合が存在し、その帰結として基底状態が残留エントロピーを持つことが明らかになる。⁸⁾ このように相互作用と格子構造の間に競合関係を持つ系は幾何学的フラストレーションを持つ系と呼ばれ、よく知られている物質として氷(常圧安定相であるIh相)⁴⁸⁻⁵³⁾ もしくはスピナイス⁵⁴⁻⁵⁶⁾ が挙げられる。ここでは、水素結合(氷)もしくはスピン磁気双極子間相互作用(スピナイス)などの相互作用が頂点を共有した四面体格子(氷とスピナイスに共通)と競合を起こす。Ih相の氷のプロトン配置が基底状態相として残留エントロピーを持つか否かという問題は、熱力学の第三法則の解釈に関わる重要問題とし、1930年代からごく最近まで研究が続いた。^{50-53, 57, 58)} 氷の基底状態が秩序相であることを示唆する実験結果は半世紀後の1980年代に提出されており、⁵⁷⁾ 理論的にもこれをサポートする報告が2005年に提出されている。⁵⁸⁾ 氷に期待された特異な物性に関する問題、特に残留エントロピーの問題、は解決されたと考えられるが、類似する問題—スピン氷—に引き継がれることになる。そこにおいては、準粒子としての磁気単極子実現の可能性、もしくは、量子スピン液体基底状態実現の可能性、などの非常に興味深い問題に発展し、その研究活動はますます活発になっているようだ。⁵⁹⁻⁶⁹⁾

ホウ素固体の物性には未だに多くの謎が残るが、この解説記事でできるだけ明確な説明を与えたい。以下、β三方晶の結晶構造とその不完全占有状態、不完全占有状態に現れる幾何学的フラストレーション、実験的に知られているβホウ素の異常な振る舞い、最後に熱力学の第三法則に関するまとめと今後の展望を述べる。なお、紙面の都合上、β相発見に関する歴史的背景、β相の熱力学的安定性に関する理解の歴史的発展、不完全占有状態が電子状態に与え

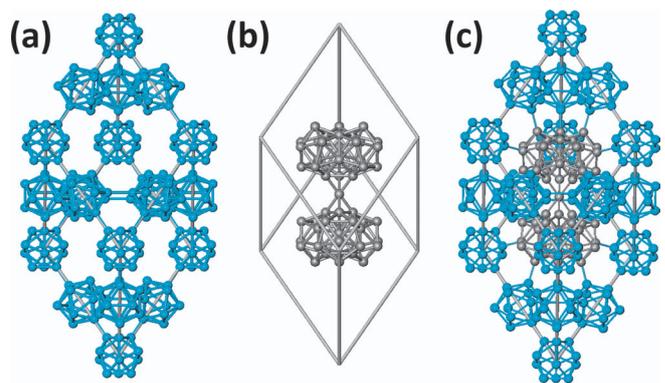


図2 正二十面体と三重融合正二十面体を用いたβ三方晶ホウ素結晶構造の説明。(a) 8つの正二十面体は三方晶単位胞の頂点に、12の正二十面体は三方晶単位胞の辺の中点に、それぞれ位置する。合計の正二十面体数は20、一つの単位胞内あたりの数は4に、それぞれなる。(b) 二つの三重融合正二十面体格子間原子が三方晶の単位胞の中心に位置する。(c) 正二十面体と融合正二十面体はそれぞれ化学結合で直接接続される。

ている影響に関しては固体物理の解説記事を参照されたい。¹⁴⁷⁾

2. β三方晶ホウ素の結晶構造

Donohueはこの結晶構造を以下のように表現している。⁴⁾ 「この構造は極端に複雑なホウ素元素間結合から構成される骨組みを持ち、しかしながら、いくらかの単純かつ美しい特徴も併せ持つ。そして、おそらくこの単純かつ美しい構造的特徴はケプラーに歓喜を与えたことであろう。」この文面は、ケプラーが16世紀に正五角形によって二次元空間を埋める方法を研究していた⁷⁰⁾ という事実に触発されたDonohueの想像に基づくと考えられる。

βホウ素結晶は20の正二十面体を三方晶の単位胞の外郭に持つ。このうち、8個は三方晶の頂点に配置され12個は辺の中間に位置する(図2の(a)を参照)。三方晶単位胞の中心に発生する大きな空所は二つの巨大なホウ素クラスターが一つの格子間原子により接続された構造体が占める(図2の(b)を参照)。それぞれの巨大クラスターは三個の正二十面体クラスターが融合した構造を持つ(三重融合正二十面体)。それぞれのクラスターの配向は、これらの構造体が二中心二電子化学結合により接続可能なように決まる(図2の(c)を参照)。様々な独立の実験から求められた格子定数は文献7に付属の参考資料にまとめられており、概ねよく一致している。ここでは参考までに一つの実験結果を挙げておく：格子定数 $a = 10.145(45)$ Å, 三方晶(菱面体)の頂点角 $\alpha = 65^\circ 17'(8)'$ 。⁷¹⁾ 融合正二十面体はカチオンの(電子を与えやすい)な性質を持つのに対し、^{47, 72)} 正二十面体構造はアニオンの(電子を受け取りやすい)に振る舞い^{31, 73)} 系の均衡をとる役割を果たす。

これまでに発見された6つの不完全占有結晶位置は三方晶の属する空間群であるR $\bar{3}m$ に属する⁴⁰⁻⁴²⁾ が、それぞれの結晶位置に対して対称操作により定義される複数の原子位置の一部のみが占有される。数々の実験の報告に絶対温

度 200 度程度の低温において輸送現象に異常が見られるが^{43, 44, 74-86)} X線回折実験はこれらの異常が不完全占有状態の秩序無秩序構造相転移によるものではないことを示唆する。⁷⁴⁾

不完全占有現象における興味深い話題は、2次元籠目格子との関係である。これは、ホウ素の熱力学的性質と低温

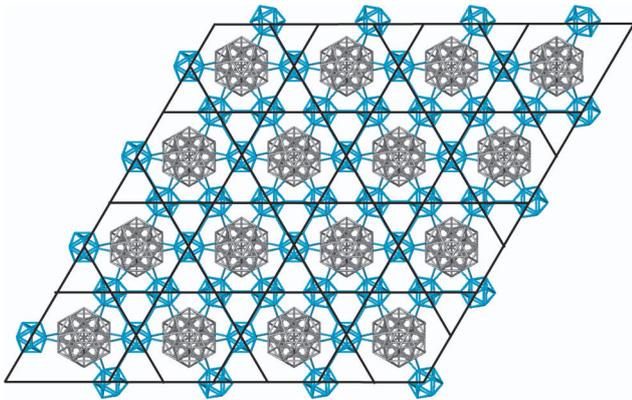


図3 三方晶単位胞中の $z=c/2$ の面に位置する正二十面体は籠目格子構造を構成する。その空胞は融合正二十面体により占められる。

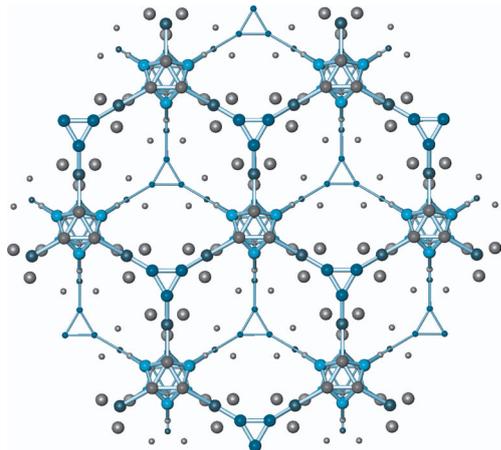


図4 原子欠損/格子間原子の二層拡張籠目格子における位置。詳細は文献8を参照。

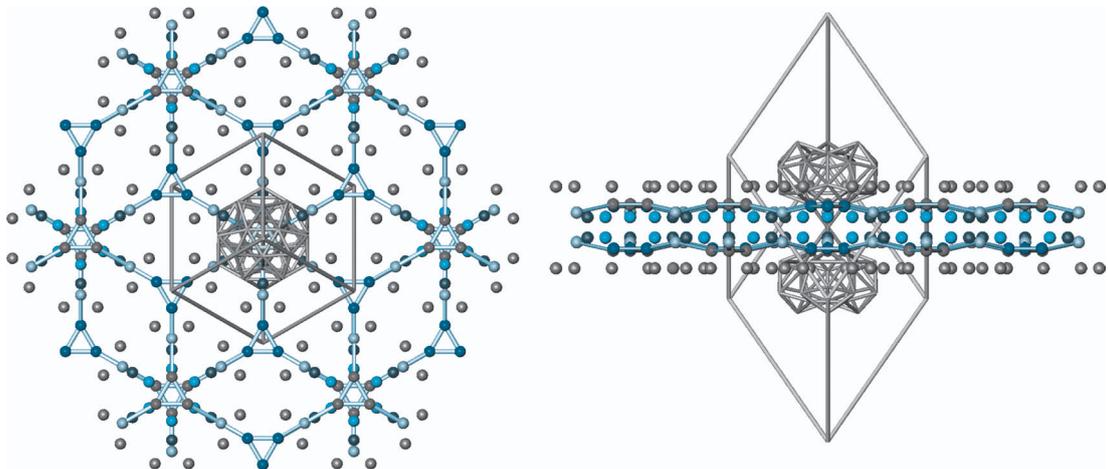


図5 擬二次元的不完全占有状態の構成する格子構造。三重融合正二十面体、三方晶単位胞を上から見たもの(左の図)と横から見たもの(右の図)。詳細は文献8を参照。

における輸送現象の異常な振る舞いを理解する上で重要な役割を果たす。1958年、FrankとKasperは三方晶結晶構造と籠目格子構造との間の密接な関係に気づく。^{87, 88)} 1977年、Hughesらは、この理由から β ホウ素の $z=c/2$ 面(c は三方晶単位胞の z 軸方向の長さ)に現れる正二十面体が籠目格子を構成することに気づいた(図3を参照)。⁸⁹⁾ この構造的特徴と輸送現象にみられる低温での異常な振る舞いとの関係は、2010年に明らかにされることになる。⁸⁾ ここでは、三方晶の構造的な特徴の帰結として、不完全占有格子位置は二層拡張籠目格子を構成することを指摘することにとどめる(図4および図5を参照)。⁸⁾

3. β 三方晶ホウ素にみられる幾何学的フラストレーション

はじめに幾何学的フラストレーションに関して簡単に説明しておく。一番よく知られている(もしくは理解しやすい)幾何学的フラストレーションを持つ系は三角格子上の反強磁性スピンイジング模型であろう。この系は上向きスピもしくは下向きスピを三角格子の格子点に配置し、最近接の格子点上のスピ間に反平行状態を好む相互作用(相互作用定数 $J>0$)を持つ。この系の一つの三角形に注目してみよう。この場合、最低エネルギーを与えるスピ配置は二つの反平行のスピが現れた場合である。また、二つの反平行スピを達成する配置は、上向き-上向き-下向き、下向き-下向き-上向き、などのように複数であることも明らかであろう。三角格子の格子サイズを大きくしていった場合、おのおのの三角形内に二つの反平行スピ(最安定解)を作る配置数は、格子サイズの関数として非常に早く増大することも想像に難くないのではなかろうか? 実際、1950年に、Wannier,^{90, 91)} Houtappel⁹²⁾ それから伏見と庄治⁹³⁾により、この系には、系の大きさの関数として指数関数的に増える基底状態配置が存在することが厳密に示されている。言い換えると、この系の基底状態には秩序が無く、巨視的な縮退数に相当するエントロピーを

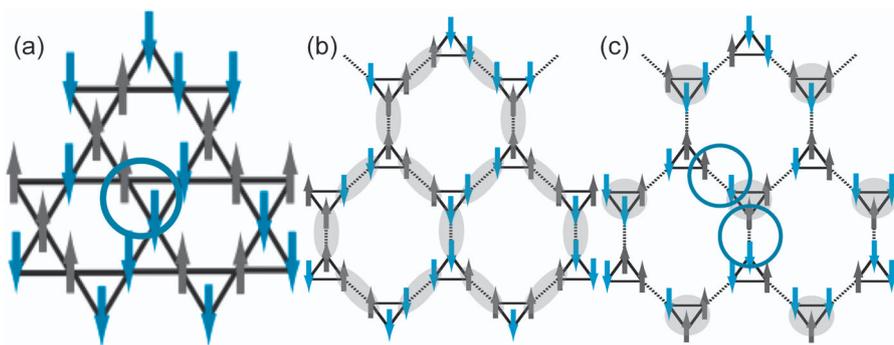


図6 (a) 籠目格子における反強磁性イジング模型の基底状態スピン配置の一つ。隣り合ったスピンは反平行を好むので(反強磁性)、おのおのの三角形に注目すると反平行スピン対の数が最大(2つ)となる“two-up, one-down”もしくは“two-down, one-up”のスピン配置が基底状態である。(b) 籠目格子上のスピン配置をそのまま拡張籠目格子にコピーする。三角形を一つおきにとり、そのスピン配置を反転させると(c)が得られる。このスピン配置が拡張籠目格子における反強磁性イジング模型の基底状態となることは次の事実から明らかである。1. それぞれの三角形内におけるスピン配置は基底状態の条件を満たしている(“two-up, one-down”もしくは“two-down, one-up”)。2. 隣り合った三角形間のスピン対はすべて反強磁性である(コピーしてからスピンを反転したため)。文献8より転載。

持つ。このような相互作用(反強磁性)と格子構造(三角格子)の間の競合を幾何学的フラストレーションと呼び、フラストレーションを持つことでよく知られた物質として氷⁵⁰⁻⁵³やスピンアイス⁵⁴⁻⁵⁶があげられる。スピンアイスという名前は、氷における水素原子配置とスピンアイスの名前で知られている $\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ ⁵⁵や $\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ ⁹⁴といった物質群におけるスピン配置の問題が等価なスピンイジング模型一頂点を共有した四面体格子上的強磁性イジング模型で表現できることに由来する。⁵⁵この模型は、その相互作用が最近接格子間に限られる場合に厳密に縮退した基底状態を持つ。これらの系は熱力学の第三法則(後述)との兼ね合いで長く注目を浴びてきたが、^{54,57,58}最近ではスピン量子液体や準粒子励起の帰結としての磁気単極子の実現などの可能性などが大いに注目を浴びているようである。⁵⁹⁻⁶⁹

2010年、荻津らは β ホウ素の不完全占有状態が擬二次元的な二層の格子構造からなり、それぞれの格子構造は拡張された籠目格子⁹⁵であることを明らかにした。⁸この格子構造一星形格子とも呼ばれる一は六角形の頂点に三角形を配置した構造を持つ(図4,5および、文献8の図1を参照)。この構造にみられる三角形をすべて同じ割合でその頂点がお互いに接するまで拡大すると籠目格子となる。前述の通り、三方晶と籠目格子の関係は1950年代後半にFrankとKasperにより指摘されており、^{87,88}それに触発され、三方晶結晶を用いた籠目格子上にスピンを持つ物質の磁性の研究が盛んになる。⁹⁶⁻¹⁰⁰これらの研究者がこの系に興味を持った主な理由は、籠目格子上のスピンはそのスピン間相互作用が反強磁性的な場合、すなわち反平行隣接スピン配置を好む場合、幾何学的なフラストレーションが発生し特異な磁性を示すことが知られていたためである。^{101,102}

この格子構造に関する発見が、前述の理論研究報告にみられた不完全占有状態の奇妙な振る舞い、すなわちそのイジング模型の基底状態が縮退しており長距離秩序を示さない理由、を理解する上で鍵となったことはいうまでもない。^{54,55,90,93,101}なお、 β ホウ素の欠陥同士の相互作用は反強磁性的になることが示されているが、その機構などの詳細は文献7および固体物理の解説記事を参照されたい。こ

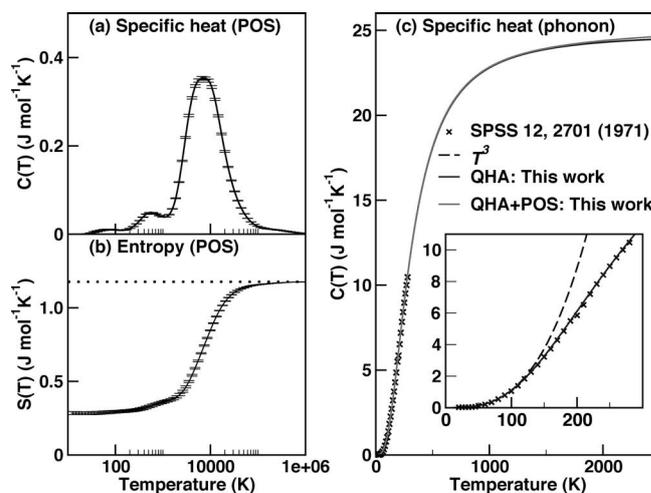


図7 不完全占有状態の配位熱容量(a)とエントロピー(b)。理論的に求められた熱容量一格子振動と配位熱容量の和—および対応する実験値。⁵⁶文献8より転載。

こでは、格子欠陥(占有/非占有)もスピン(up/down)も二値問題であり、等価な数学的な模型、すなわちイジング模型にマップできること、前者においては第一原理計算の結果にフィットすることにより相互作用パラメーターを容易に決められることを指摘しておく。

荻津らは籠目格子上の反強磁性イジング模型の任意の基底状態スピン配置が拡張籠目格子上の反強磁性イジング模型の基底状態に対応づけられることを示した(図6を参照)。⁸これは、 β ホウ素の不完全占有状態を表現する模型が幾何学的フラストレーションを持つ証拠と解釈してよいであろう。この模型は低温秩序相をもたず、全温度において乱雑な熱力学的安定状態を持つ。余談になるが、上記の基底状態の対応関係は荻津と求氏の議論に飛び入りで参加した宇田川氏により一晩で発見された。

文献7で用いられた β ホウ素のイジング模型は40もの独立な相互作用定数を持ち、また、格子構造も若干複雑になり、その熱力学的性質が上記の単純化された模型とどの程度相似するのか自明ではない。このため、荻津らはこの模型の熱力学的性質を熱交換モンテカルロ計算シミュレーション¹⁰³により調査した。⁸この結果と格子振動状態密度

の計算から求められた格子比熱の結果は図7に与えられる。このシミュレーションの温度範囲内では秩序相への相転移はみられず、全温度域で乱雑な原子占有配置をとることが確認された。

4. β ホウ素にみられる欠陥拡散と関連した特異な物性

Tsagareishviliらは広範の温度領域における β ホウ素の内耗実験の結果を報告している。⁷⁴⁾内耗実験とは、周期的に変形されたサンプルにみられる非弾性エネルギー損失の温度依存性から、例えば欠陥の拡散障壁などを見積もる方法である。この実験で観測された二つの損失ピーク、150ケルビンと530ケルビンに現れる、 β ホウ素の格子間原子や原子欠損の拡散によると解釈するのは適当であると思われる。WerheitとFranzは β ホウ素の光吸収特性が150ケルビンから180ケルビン程度の温度領域で劇的に変化すると報告している。⁸⁴⁾この温度より上の温度領域では、遷移禁止帯全域に多数の光吸収線がみられ、対応する非占有の電子状態が発生していることを示唆している。WerheitとFranzはこれらの奇妙な振る舞いは β ホウ素の欠陥拡散によるのではないかと推測している。

幾何学的フラストレーションの存在は、 β ホウ素の欠陥状態が巨視的な数の基底状態を持つことを意味するだけでなく、巨視的な数の低エネルギー励起状態を持つことも示す。巨視的な数の格子間ホウ素原子(もしくは原子欠損)が励起状態位置に拡散する帰結として電子励起遷移禁止帯内に巨視的な数の遷移状態を導入し光学的/電気的な性質が極端にかわると考えることは適当ではないであろうか? 実際、荻津らの第一原理計算結果は、欠陥が基底状態配置をとる場合には電子遷移禁止帯内に遷移状態は存在しないが、格子間原子を励起状態位置に移動することにより、多量の電子励起遷移状態が遷移禁止帯内に現れることを明らかにしている。⁷⁾

LoncとJacobsmeierは β ホウ素の磁気抵抗率の温度と磁場依存性を測定した。¹⁰⁴⁾その結果は以下のように奇妙なものである。低磁場での β ホウ素単結晶の磁気抵抗率は負の値を示すが、高磁場ではその値は正に変わる。一定の磁場のもとではその温度依存性は100ケルビン付近にピークを持つ。これに対し、多結晶を用いた実験では磁気抵抗率は常に正の値をとるが、そのピークは単結晶の場合とほぼ同じである。ZarebaとLubomiskaによれば、熱誘起電流の測定結果には117ケルビンと214ケルビンにピークが現れ、117ケルビンのピークは実験開始前の光照射の時間が十分に長い場合のみ観測される。⁷⁵⁾Geistは光誘起電気伝導度と光電子常磁性共鳴実験を行い、前者は低温と高温で振る舞いが異なると報告している。⁷⁹⁾価電子帯の上方0.23電子ボルト(遷移禁止帯中)に現れる状態の状態密度は三方晶単位胞あたり1程度にも匹敵する。Tavadzeらは誘電損失の実験を行い、ピークが213ケルビンに現れると報告し

た。⁸¹⁾Young, OliverとSlackはマイクロ波損失の温度および周波数依存性を測定し、100ケルビン付近でその値が急激に上昇すると報告している。⁷⁶⁾

Golikovaらは電気抵抗のArrhenius plotが200ケルビンでその傾きを明確に変えると報告している。¹⁰⁵⁾また、光誘起電流の振る舞いが200ケルビン以下とこれ以上で異なるとも報告している。Werheit, LauxとKuhlmannらは、光吸収とその緩和現象に関する詳細を報告している。⁴⁴⁾ここでは、これらの実験結果をもとに、500ケルビンから600ケルビンの間で観測された数々の物性異常の起源に関する議論を展開している。WerheitとWehmollerは、 β ホウ素の直流電気伝導度が不連続に変化することを明らかにし、これが欠陥の拡散によると示唆している。⁸⁶⁾WerheitとKummerは光吸収実験の結果から光吸収が欠陥原子配置を変える可能性を提案している。¹⁰⁶⁾

この他の報告されている物性異常を以下に挙げる。誘電関数とサンプルの形状から計算された値より大きな静電容量,^{107,108)}圧力下の β ホウ素の直流電気伝導度にもみられる転移点,¹⁰⁹⁾機械的性質にもみられる同位体効果,^{110,111)}ごく低温における比熱の上昇。¹¹²⁾

おそらく、その極端に複雑な結晶構造のためか、欠陥拡散機構を理論的に検証した例は一つしかない。⁸⁾荻津らは、様々な不完全占有原子位置の間の原子拡散障壁を第一原理計算手法により計算し、その結果、二つの低障壁拡散経路が存在することを明らかにした。200ケルビン以上でみられる遷移禁止帯内の光吸収は、格子間原子がエネルギーの高い配置を頻繁に訪れだすことの帰結とする解釈はもっともらしいが、揺るぎない結論に至るためには実験による検証が必要であろう。^{7,84)}

5. 熱力学の第三法則と β ホウ素の関係

熱力学の第三法則の原型は1906年にNernstにより提案された。ここでは、絶対零度におけるエントロピーは零もしくはそれ以上の定数とされ、その値が零となることは必然ではなかった。しかしながら、その後のPlanckなどによる理論研究を経て、絶対零度に向かってエントロピーは零に収束するという解釈が主流となるが、¹¹³⁾現在においても完全に統一された見解は存在しないようである。¹¹⁴⁾Linderによれば、熱力学第三法則には少なくとも四つの異なった形式が文献に現れるが、現象論的な視点からはどれも完全とはいえない。¹¹⁵⁾

1. Nernstによる熱の定理(はじめに提案されたもの):
$$\lim_{T \rightarrow 0} \Delta S(T) = 0$$
2. Planckによる第三法則: $\lim_{T \rightarrow 0} (S(T)/N) = 0$
3. G. N. Lewisによる第三法則: “すべての物質は正のエントロピーを持つ。しかし絶対零度におけるエントロピーは零となり得る。完全結晶の場合がそうである。”¹¹⁶⁾
4. 絶対零度の到達不可能性

Schwablは第三法則を1と4, それに加え, 正の定数であるエントロピーの値は体積や圧力などの条件にはよらないという制約, からなるとする.¹¹⁷⁾ Landsbergはこれとよく似た立場を取る.¹¹⁸⁾ GokcenとReddyは, 1を第三法則であるとし, 慣例として定数である零度のエントロピーを零とすることを提案している.¹¹⁹⁾ その理由は, 元素の同素体のエントロピーの温度依存性などの多くの実験結果において, 温度零に近づくと従ってこれらエントロピーが同じ値に収束することが知られているからである。Dagdaleはこれに似た立場を取る。¹²⁰⁾ Kaufmanは4が第三法則であるとし, これがどのように3に導かれるのかを議論する。¹²¹⁾ 興味深いことに, ここにあげた最近の文献のどれもPlanckの形式である2を第三法則とするという立場を取らない。これは, それ以前に現れる文献が2を第三法則としている場合が多いのと対照的である。^{113, 122)} しかしながら, 現実には2が第三法則であると考えられる研究者は大多数を占めるようでもある。例えば, Koxは2006年に以下のように述べている。¹¹⁴⁾ “現代においては, 量子論は絶対零度におけるエントロピーを零とする考え方の基礎となり, 第三法則もそれに則る, という考え方が多数を占めるようである。他の研究者たちは未だに絶対零度への到達不可能性という言葉にその立場を拘束する。しかしながら, このような立場の違いに関わらず, 熱力学の第三法則は他の熱力学の法則と比べると, 物理学の基本法則というよりは経験則的な性格を持つ, という一般的な合意があるようでもある。”

この解説の締めくくりとして以下を指摘する。GekkonとReddyは, 零度におけるエントロピーを零とするのは, 元素固体の様々な同素体のエントロピーが同一の値に収束するからであると述べているが,¹¹⁹⁾ β ホウ素がそのような同素体の一つとして考慮されたことはあったのであろうか? β ホウ素がホウ素の基底状態⁵⁻⁷⁾であるだけではなく, 巨視的な量の欠陥を低温における熱平衡状態として持ちえることが理解されたのは2009年であり,⁷⁾ この欠陥状態の基底状態が幾何学的フラストレーションにより縮退している可能性が指摘されたのは2010年のことである。⁸⁾ 前述の熱力学第三法則に関する文献が執筆された時点においてはこのような特別な場合がありえることは知られていなかったことは確かである。^{7, 8, 42)}

6. 今後の展開

ホウ素もしくはホウ素化合物はデバイスとして利用するのに役に立ちそうな様々な奇妙な性質を持つことが知られている。例えば, 誘電関数だけでは説明ができない大きな静電容量, 磁気抵抗, などがあげられる。不完全占有位置には磁性を持つ元素を容易に導入することができることも知られている。これはスピントロニクスデバイス利用への門を開くかも知れない。ホウ素を用いたナノ構造の研究も最近急進展を見せており,¹²³⁻¹⁴⁶⁾ そこでは数々の特異な性質を持つ低次元ナノ構造が理論的に提案されつつある。

多くの研究者を長年苦しめてきた複雑怪奇なホウ素の物性も, ひょっとすると, その理解が深まるにつれ, 逆に我々に多種多様なデバイス利用への選択肢を与えることになるかもしれない。しかしながら, 次の一步を進める前に, この物質の性質をもう少し正確に理解する必要があることも確かなようである。門は開かれ, 残っている障害の正体も理解されつつある。あとは, 注意深くこれらの障害を乗り越える方策を練ることにより機会是我々の前に現れるのではないだろうか?

長い研究の過程において多くの方に様々な助言をいただいた。以下名前を列挙する。北海道大学 水野誠司氏, 東京大学 求 幸年氏, 宇田川将文氏, 木村 薫氏, 福島孝治氏, 東京大学物性研究所 上田和夫氏, 藤堂眞治氏, 広島大学 山中昭司氏, 物質材料研究機構 森 孝雄氏, カナダDalhousie大学Mary Anne White氏, Anthony Cerqueira氏, スイス連邦工科大学ローザンヌ校Nicola Marzari氏, スイス連邦工科大学チューリッヒ校Manfred Sigrist氏, Matthias Troyer氏, オックスフォード大学Jonathan Yates氏, スペインUniversidad del Pais Vasco Ivo Souza氏, MPI Dresden Roderich Moessner氏, University of California Davis Giulia Galli氏, Francois Gygi氏, Leonardo Spanu氏, Lawrence Livermore National Laboratory Eric Schwegler氏, John Reed氏, 産業技術総合研究所 大谷 実氏。This work was performed under the auspices of the U.S. Department of Energy by Lawrence Livermore National Laboratory under Contract No. DE-AC52-07NA27344.

参考文献

- 1) B. Douglas: *Structure and Chemistry of Crystalline Solid* (Springer Science + Business Media, 2006).
- 2) M. W. Chase: *J. Phys. Chem. Ref. Data* **9** (1998).
- 3) D. A. Young: *Phase Diagrams of the Elements* (Univ. of California Press, Berkeley, Los Angeles, Oxford, 1991).
- 4) J. Donohue: *THE STRUCTURES OF THE ELEMENTS* (JOHN WILLEY & SONS, New York, London, Sydney, Toronto, 1974).
- 5) M. J. van Setten, M. A. Uijtewaald, G. A. de Wijs and R. A. de Groot: *J. Am. Chem. Soc.* **129** (2007) 2458.
- 6) M. Widom and M. Mihalkovic: *Phys. Rev. B* **77** (2008) 064113.
- 7) T. Ogitsu, F. Gygi, J. Reed, Y. Motome, E. Schwegler and G. Galli: *J. Am. Chem. Soc.* **131** (2009) 1903.
- 8) T. Ogitsu, F. Gygi, J. Reed, M. Udagawa, Y. Motome, E. Schwegler and G. Galli: *Phys. Rev. B* **81** (2010) 020102.
- 9) A. B. Cerqueira: MS Thesis, Dalhousie University, Canada (2011).
- 10) G. Parakhonskiy, N. Dubrovinskaia, E. Bykova, R. Wirth and L. Dubrovinsky: *Sci. Rep.* **1** (2011) 96.
- 11) A. R. Oganov, *et al.*: *Nature* **457** (2009) 863.
- 12) E. Y. Zarechnaya, *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **102** (2009) 185501.
- 13) K. Shirai, A. Masago and H. Katayama-Yoshida: *Phys. Stat. Sol. B* **244** (2007) 303.
- 14) S. L. Shang, Y. Wang, R. Arroyave and Z. K. Liu: *Phys. Rev. B* **75** (2007) 092101.
- 15) A. Masago, K. Shirai and H. Katayama-Yoshida: *Phys. Rev. B* **73** (2006) 104102.
- 16) E. D. Jemmis and D. Prasad: *J. Sol. Stat. Chem.* **179** (2006) 2768.
- 17) D. Prasad, M. M. Balakrishnarajan and E. D. Jemmis: *Phys. Rev. B* **72** (2005) 195102.
- 18) A. Masago, K. Shirai and H. Katayama-Yoshida: in *Physics of Semiconductors, Pts A and B*, ed. J. Menendez and C. G. Van De Walle (2005) Vol.

- 772, p. 87.
- 19) A. Masago, K. Shirai and H. Katayama-Yoshida: *Mol. Sim.* **30** (2004) 935.
 - 20) D. Li, Y. N. Xu and W. Y. Ching: *Phys. Rev. B* **45** (1992) 5895.
 - 21) S. Lee, D. M. Bylander, S. W. Kim and L. Kleinman: *Phys. Rev. B* **45** (1992) 3248.
 - 22) D. M. Bylander and L. Kleinman: *Phys. Rev. B* **43** (1991) 1487.
 - 23) D. M. Bylander, L. Kleinman and S. Lee: *Phys. Rev. B* **42** (1990) 1394.
 - 24) M. Vlasse, R. Naslain, J. S. Kasper and K. Ploog: *J. Sol. Stat. Chem.* **28** (1979) 289.
 - 25) G. Will and K. H. Kossobutzki: *J. Less-Comm. Met.* **47** (1976) 33.
 - 26) G. Will and K. H. Kossobutzki: *Z. Kristallogr.* **142** (1975) 384.
 - 27) G. Will and K. Ploog: *Nature* **251** (1974) 406.
 - 28) K. Ploog, H. Schmidt, E. Amberger, G. Will and K. H. Kossobutzki: *J. Less-Comm. Met.* **29** (1972) 161.
 - 29) E. Amberger and K. Ploog: *J. Less-Comm. Met.* **15** (1968) 240.
 - 30) J. L. Hoard, R. E. Hughes and D. E. Sands: *J. Am. Chem. Soc.* **80** (1958) 4507.
 - 31) H. C. Longuet-Higgins and M. D. Roberts: *Proc. R. Soc. A* **230** (1955) 110.
 - 32) J. L. Hoard, S. Geller and R. E. Hughes: *J. Am. Chem. Soc.* **73** (1951) 1892.
 - 33) F. H. Horn: *J. Appl. Phys.* **30** (1959) 1612.
 - 34) F. N. Tavazde, I. A. Bairamas, G. V. Tsagareli, K. P. Tsomaya and N. A. Zoidze: *Sov. Phys. Cryst., USSR* **9** (1965) 768.
 - 35) J. L. Hoard and A. E. Newkirk: *J. Am. Chem. Soc.* **82** (1960) 70.
 - 36) J. O. Carlsson: *J. Less-Comm. Met.* **70** (1980) 77.
 - 37) P. Runow: *J. Mat. Sci.* **7** (1972) 499.
 - 38) T. Machaladze: *Proc. Acad. Sci. Georgia, Chem. Ser.* **31** (2005) 331.
 - 39) D. E. Sands and J. L. Hoard: *J. Am. Chem. Soc.* **79** (1957) 5582.
 - 40) D. B. S. J. L. Hoard, C. H. L. Kennard and R. E. Hughes: *J. Sol. Stat. Chem.* **1** (1970) 268.
 - 41) B. Callmer: *Act. Cryst. B* **33** (1977) 951.
 - 42) G. A. Slack, C. I. Hejna, M. F. Garbaskas and J. S. Kasper: *J. Sol. Stat. Chem.* **76** (1988) 52.
 - 43) A. Szadkowski: *J. Less-Comm. Met.* **67** (1979) 551.
 - 44) H. Werheit, M. Laux and U. Kuhlmann: *Phy. Stat. Sol. B* **176** (1993) 415.
 - 45) O. A. Golikova: *Phys. Stat. Sol. A* **51** (1979) 11.
 - 46) D. W. Bullett: *J. Phys. C* **15** (1982) 415.
 - 47) E. D. Jemmis and M. M. Balakrishnarajan: *J. Am. Chem. Soc.* **123** (2001) 4324.
 - 48) E. H. Lieb: *Phys. Rev.* **162** (1967) 162.
 - 49) E. H. Lieb: *Phys. Rev. Lett.* **18** (1967) 692.
 - 50) W. F. Giaque and J. W. Stout: *J. Am. Chem. Soc.* **58** (1936) 1144.
 - 51) L. Pauling: *J. Am. Chem. Soc.* **57** (1935) 2680.
 - 52) W. F. Giaque and M. F. Ashley: *Phys. Rev.* **43** (1933) 81.
 - 53) J. D. Bernal and R. H. Fowler: *J. Chem. Phys.* **1** (1933) 515.
 - 54) S. T. Bramwell and M. J. P. Gingras: *Science* **294** (2001) 1495.
 - 55) M. J. Harris, S. T. Bramwell, D. F. McMorro, T. Zeiske and K. W. Godfrey: *Phys. Rev. Lett.* **79** (1997) 2554.
 - 56) P. W. Anderson: *Phys. Rev.* **102** (1956) 1008.
 - 57) Y. Tajima, T. Matsuo and H. Suga: *Nature* **299** (1982) 810.
 - 58) S. J. Singer, J. L. Kuo, T. K. Hirsch, C. Knight, L. Ojamae and M. L. Klein: *Phys. Rev. Lett.* **94** (2005) 135701.
 - 59) S. T. Bramwell, S. R. Giblin, S. Calder, R. Aldus, D. Prabhakaran and T. Fennell: *Nature* **461** (2009) 956.
 - 60) C. Castelnovo, R. Moessner and S. L. Sondhi: *Nature* **451** (2008) 42.
 - 61) S. R. Dunsiger, *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **107** (2011) 207207.
 - 62) T. Fennell, P. P. Deen, A. R. Wildes, K. Schmalzl, D. Prabhakaran, A. T. Boothroyd, R. J. Aldus, D. F. McMorro and S. T. Bramwell, *Science* **326** (2009) 415.
 - 63) J. S. Gardner, *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **82** (1999) 1012.
 - 64) M. Hermele, M. P. A. Fisher and L. Balents: *Phys. Rev. B* **69** (2004) 064404.
 - 65) T. Hiroshi, K. Hiroaki, J. S. Taku, W. L. Jeffrey, T. Yoshikazu, Y. Teruo and M. Kazuyuki: *J. Phys: Cond. Mat.* **24** (2012) 052201.
 - 66) P. A. McClarty, J. N. Cosman, A. G. D. Maestro and M. J. P. Gingras: *J. Phys.: Cond. Mat.* **23** (2011) 164216.
 - 67) K. A. Ross, L. Savary, B. D. Gaulin and L. Balents: *Phys. Rev. X* **1** (2011) 021002.
 - 68) R. R. P. Singh: *Physics* **4** (2011) 77.
 - 69) X.-G. Wen: *Phys. Rev. B* **65** (2002) 165113.
 - 70) J.-F. Sadoc and R. Mosseri: *Geometrical Frustration* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, UK, 1999).
 - 71) R. E. Hughes, C. H. L. Kennard, D. B. Sullenger, H. A. Weakliem, D. E. Sands and J. L. Hoard: *J. Am. Chem. Soc.* **85** (1963) 361.
 - 72) M. Tillard-Charbonnel, A. Manteghetti and C. Belin: *Inorg. Chem.* **39** (2000) 1684.
 - 73) A. R. Pitochelli and M. F. Hawthorne: *J. Am. Chem. Soc.* **82** (1960) 3228.
 - 74) G. V. Tsagareishvili, F. N. Tavadz, G. S. Darsavelidze and V. S. Metreveli: in *Boron*, ed. T. Niemyski (Polish Scientific Pub., Walsaw, Poland, 1968) p. 281.
 - 75) A. Zareba and A. Lubomirska: *Phys. Stat. Sol. B* **34** (1969) K41.
 - 76) J. D. Young, D. W. Oliver and G. A. Slack: *Appl. Phys. Lett.* **14** (1969) 301.
 - 77) H. Werheit: *Phys. Stat. Sol.* **39** (1970) 109.
 - 78) G. Gewinner, L. Kubler, J. J. Koulmann and A. Jaegle: *Phys. Stat. Sol. B* **59** (1973) 395.
 - 79) D. Geist: *Z. Naturforsch. A* **28** (1973) 953.
 - 80) C. D. Siems and D. Geist: *J. Less-Comm. Met.* **47** (1976) 79.
 - 81) F. N. Tavazde, R. A. Khachapuridze, G. S. Darsavelidze, G. V. Tsagareishvili and G. F. Tavazde: *J. Less-Comm. Met.* **67** (1979) 269.
 - 82) G. S. Darsavelidze, G. V. Tsagareishvili, M. A. Tsirlin, J. G. Nikuradze, O. A. Tsagareishvili, A. F. Zhigach and F. N. Tavazde: *J. Less-Comm. Met.* **67** (1979) 471.
 - 83) G. S. Darsavelidze, F. N. Tavazde, V. S. Metreveli, O. A. Tsagareishvili, R. A. Khachapuridze and I. G. Nikuradze: *J. Less-Comm. Met.* **82** (1981) 361.
 - 84) H. Werheit and R. Franz: *Phys. Stat. Sol. B* **125** (1984) 779.
 - 85) H. Werheit and R. Franz: *J. Less-Comm. Met.* **117** (1986) 163.
 - 86) H. Werheit and B. Wehmoller: *J. Sol. Stat. Chem.* **177** (2004) 556.
 - 87) F. C. Frank and J. S. Kasper: *Act. Cryst.* **12** (1959) 483.
 - 88) F. C. Frank and J. S. Kasper: *Act. Cryst.* **11** (1958) 184.
 - 89) R. E. Hughes, M. E. Leonowicz, J. T. Lemley and L. T. Tai: *J. Am. Chem. Soc.* **99** (1977) 5507.
 - 90) G. H. Wannier: *Phys. Rev.* **79** (1950) 357.
 - 91) G. H. Wannier: *Phys. Rev. B* **7** (1973) 5017.
 - 92) R. M. F. Houtappel: *Physica* **16** (1950) 425.
 - 93) K. Husimi and I. Syozi: *Prog. Theo. Phys.* **5** (1950) 177.
 - 94) C. R. Scullard and R. M. Ziff: *Phys. Rev. E* **73** (2006) 045102.
 - 95) M. E. Fisher: *Phys. Rev.* **113** (1959) 969.
 - 96) M. Takano, T. Shinjo and T. Takada: *J. Phys. Soc. Jpn.* **30** (1971) 1049.
 - 97) M. Takano, T. Shinjo, M. Kiyama and T. Takada: *J. Phys. Soc. Jpn.* **25** (1968) 902.
 - 98) M. Wolf and K. D. Schotte: *J. Phys. A* **21** (1988) 2195.
 - 99) V. Elser: *Phys. Rev. Lett.* **62** (1989) 2405.
 - 100) C. Broholm, G. Aeppli, G. P. Espinosa and A. S. Cooper: *Phys. Rev. Lett.* **65** (1990) 3173.
 - 101) I. Syozi: *Prog. Theo. Phys.* **6** (1951) 306.
 - 102) K. Kano and S. Naya: *Prog. Theo. Phys.* **10** (1953) 158.
 - 103) K. Hukushima and K. Nemoto: *J. Phys. Soc. Jpn.* **65** (1996) 1604.
 - 104) W. P. Lonc and V. P. Jacobsmeyer: in *Boron*, ed. G. K. Gaule (Plenum Press, 1965), p. 215.
 - 105) O. A. Golikova, M. M. Kazanin, S. Samatov and T. Khomidov: *Sov. Phys. Semicon.* **16** (1982) 479.
 - 106) H. Werheit and F. Kummer: in *16th International Symposium on Boron, Borides and Related Materials*, ed. T. Tanaka, **176** (2009) 012020.
 - 107) O. A. Tsagareishvili, L. S. Chkhartishvili and D. L. Gabunia: *Semiconductors* **43** (2009) 14.
 - 108) O. Tsagareishvili, D. Gabunia and L. Chkhartishvili: in *16th International Symposium on Boron, Borides and Related Materials*, ed. T. Tanaka, **176** (2009) 012021.
 - 109) D. M. Zhang, *et al.*: *J. Phys.-Condensed Matter* **19** (2007) 425216.
 - 110) D. Gabunia, O. Tsagareishvili, G. Darsavelidze, D. Lezhava, M. Antadze and L. Gabunia: *J. Sol. Stat. Chem.* **177** (2004) 600.
 - 111) D. Gabunia, O. Tsagareishvili, D. Lezhava, L. Gabunia, M. Antadze, G. Darsavelidze and T. Tanaka: *J. Sol. Stat. Chem.* **179** (2006) 2944.
 - 112) Q. L. Hu, T. Noda, H. Suzuki, T. Numazawa, O. Arai, T. Hirano, N. Nogi

and S. Tanaka: J. Appl. Phys. **90** (2001) 728.

113) M. Planck and A. Ogg: *Treatise on Thermodynamics (1905)* (Kessinger Pub., La Vergne, 1917) p. 272.

114) A. J. Cox: Stud. Hist. Phil. Mod. Phys. **37** (2006) 101.

115) B. Linder: *Thermodynamics and Introductory Statistical Mechanics* (John Wiley & Sons, New Jersey, 2004).

116) G. N. Lewis and M. Randall: *Thermodynamics and the Free Energy of Chemical Substances* (McGraw-Hill Book Company, New York and London, 1923).

117) F. Schwabl: *Statistical Mechanics* (Springer, Berlin, Germany, 2006).

118) P. T. Landsberg: Am. J. Phys. **65** (1997) 269.

119) N. A. Gokcen and R. G. Reddy: *Thermodynamics* (Plenum Pub., New York, 1996).

120) J. S. Dugdale: *Entropy and Its Physical Meaning* (Taylor & Francis, Philadelphia, PA, 1998).

121) M. Kaufman: *Principles of Thermodynamics* (Marcel Dekker, Basel, Switzerland, 2002).

122) E. Fermi: *Thermodynamics* (Dover Pub., New York, 1937).

123) S. Botti, A. Castro, N. N. Lathiotakis, X. Andrade and A. L. Marques: Phys. Chem. Chem. Phys. **11** (2009) 4523.

124) E. Iyyamperumal, F. Fang, A.-B. Posadas, C. Ahn, R. F. Klie, Y. Zhao, G. L. Haller and L. D. Pfefferle: J. Phys. Chem. C **113** (2009) 17661.

125) P. Jash and M. Trenary: J. Phys.: Conf. Ser. **176** (2009) 012011.

126) K. C. Lau and R. Pandey: J. Phys. Chem. B **112** (2008) 10217.

127) R. K. F. Lee, B. J. Cox and J. M. Hill: J. Phys. Chem. C **113** (2009) 19794.

128) G. Q. Li: Appl. Phys. Lett. **94** (2009) 193116.

129) M. Li, Y. Li, Z. Zhou, P. Shen and Z. Chen: Nano Lett. **9** (2009) 1944.

130) S. F. Li, L. Gao, X. G. Gong and Z. X. Guo: J. Phys. Chem. C **112** (2008) 13200.

131) S. Roy and M. Springborg: J. Phys. Chem. C **113** (2008) 81.

132) A. K. Singh, A. Sadrzadeh and B. I. Yakobson: Nano Lett. **8** (2008) 1314.

133) F.-Y. Tian and Y.-X. Wang: J. Chem. Phys. **129** (2008) 024903.

134) J. Wang, Y. Liu and Y.-C. Li: ChemPhysChem **10** (2009) 3119.

135) L. Chernozatonskii, P. Sorokin and B. Yakobson: JETP Lett. **87** (2008) 489.

136) K. C. Lau, R. Orlando and R. Pandey: J. Phys.: Cond. Matt. **21** (2009) 045304.

137) R. K. F. Lee, B. J. Cox and J. M. Hill: J. Phys. A **42** (2009) 065204.

138) H. Tang and S. Ismail-Beigi: Phys. Rev. Lett. **99** (2007) 115501.

139) H. Tang and S. Ismail-Beigi: Phys. Rev. B **80** (2009) 134113.

140) G. Wei, H. Yi-Bin, Z. Yu-Yang, D. Shi-Xuan and G. Hong-Jun: Chin. Phys. B **18** (2009) 2502.

141) R. R. Zope, T. Baruah, K. C. Lau, A. Y. Liu, M. R. Pederson and B. I. Dunlap: Phys. Rev. B **79** (2009) 161403.

142) K. C. Lau and R. Pandey: J. Phys. Chem. C **111** (2007) 2906.

143) Y. Ding, X. Yang and J. Ni: Appl. Phys. Lett. **93** (2008) 043107.

144) X. Yang, Y. Ding and J. Ni: Phys. Rev. B **77** (2008) 041402.

145) J. Miller: Phys. Today **60** (2007) 20.

146) E. S. Penev, S. Bhowmick, A. Sadrzadeh and B. I. Yakobson: Nano Lett. (2012).

147) 荻津 格: 固体物理 **47** (2012) 267.

著者紹介



荻津 格氏: 計算科学, 特に基礎科学と応用, 理論と実験の橋渡しとなるような研究に興味がある. ホウ素固体の研究のほか, 光触媒による水素発生機構の研究, フェムト秒パルスレーザーにより加熱されたナノ金属薄膜のダイナミクス, などを最近の研究課題としている.

(2012年2月16日原稿受付)

Crystal Stabilized by Defects: Elemental Boron

Tadashi Ogitsu

abstract: β -Rhombohedral boron is the thermodynamically stable allotrope of boron at ambient pressure and at near the melting temperature. X-ray diffraction analysis has shown that this crystal has 423 atomic positions in its hexagonal unit cell, and only 320 of them are occupied. More precisely, 23 out of 320 atoms are randomly located over the 126 atomic sites. Recently, a theoretical study has shown that the partial occupancy is necessary to form a closed shell electronic structure. Moreover, it was also shown that there exists a competition between the interaction and the lattice structure of partial occupancy leading to realization of geometrical frustration in elemental solid. In this article, we will discuss on the historical background of boron research, on the recent progress in understanding its unique property, and on its relation to the third law of thermodynamics.

日本物理学会誌 第67巻 第9号 (2012年9月号) 予定目次

口絵: 今月号の記事から

巻頭言

応用物理系英文ジャーナルの話題……………石原 宏

解説

RHICにおける強く相互作用するクォークグルーオンプラズマ

……………浜垣秀樹, 浅川正之

LHC加速器でせまる超高エネルギー宇宙

……………伊藤好孝, 塚 隆志

最近の研究から

薄いキラル液晶セルの秩序構造—液晶がつくるスカーミオン

格子……………福田順一

位相空間における磁化プラズマの2次元乱流解析……………龍野智哉

レーザー3次元アトムプローブによる半導体材料中の

ドーパント分布解析……………井上耕治, 清水康雄, 高見澤悠

非平衡系における相加性……………齊藤圭司

JPSJの最近の注目論文から 5月の編集委員会より

……………安藤恒也

学界ニュース

科学技術分野の文部科学大臣表彰

平成24年春の紫綬褒章: 石川哲也氏, 北岡良雄氏

談話室

黒田啓一氏と位置検出型光電子増倍管の開発研究

……………竹内富士雄, Sillou Daniel

学生優秀発表賞(領域2)の試み……………安藤 晃

追悼

外村 彰先生を偲んで……………長我部信行

新著紹介

かに星雲から観測されたガンマ線フレア

田中孝明* (Stanford大学 382 Via Pueblo Mall MC 4060, Stanford, CA 94305, USA)

内山泰伸 (SLAC 国立加速器研究所 2575 Sand Hill Road M/S 29, Menlo Park, CA 94025, USA)

フェルミ宇宙ガンマ線望遠鏡搭載の Large Area Telescope (LAT) によるガンマ線観測は、パルサーのガンマ線放射機構、超新星残骸における宇宙線加速、そしてダークマターの探索など多岐にわたる科学トピックについて新たな知見をもたらしている。LATによる最近の科学的成果のうち、特に高エネルギー宇宙物理のコミュニティを驚かせたものは、かに星雲と呼ばれるパルサー星雲で観測されたガンマ線フレアである。特に2011年4月に発生したフレアでは、ガンマ線強度が数時間という非常に短い時間スケールで1桁以上も増加した。この観測結果は、既成の粒子加速機構およびガンマ線放射機構では説明が困難であり、宇宙物理における新たな課題となっている。

1. はじめに

宇宙から飛来するガンマ線の観測は、様々な天体における高エネルギー現象や、その背後に働く物理過程を研究する上で、最も直接的な手段となる。近年の観測技術の発展により、ガンマ線が検出された天体数は飛躍的に増え、さらに天体の詳細なガンマ線画像も得ることができるようになった。特に、2008年6月に打ち上げられたフェルミ宇宙ガンマ線望遠鏡によって、GeV帯域の観測感度が劇的に向上し、パルサー、超新星残骸、ガンマ線バースト、ダークマター等に関する数々の科学的成果が発表されている。¹⁾ ここ数年の観測により、ガンマ線帯域における宇宙画像が一挙に明らかになりつつあると言える。

フェルミ衛星の主検出器である Large Area Telescope (LAT)²⁾ は、約20 MeVから300 GeVまでの高エネルギー光子を電子・陽電子対に変え、その飛跡とエネルギーを測定することで、もとの光子の到来方向とエネルギーを求める「対生成望遠鏡」である。電子・陽電子対の飛跡を捉えるトラッカー部には、これまでの検出器で用いられてきたスパークチェンバーでなく、シリコン・ストリップ検出器を採用している。これにより、過去の検出器と比較して、優れた角度分解能、広い視野、大きな有効面積などを持つことが可能になった。LATは米国、日本、イタリア、フランス、スウェーデンの5カ国によって国際共同開発されたが、特に、シリコン・ストリップ検出器の開発については、広島大をはじめとする日本のグループが大きな貢献を果たした。

LATは2.4 srという大きな視野を持ち、約3時間で全天をカバーする全天サーベイ観測を行っている。ガンマ線バーストなどの突発現象を捉えられることや、定常的な放射をする天体についても、天球上の全ての天体に対して深い観測データが得られるという利点がある。LATチーム内では、日本人グループがデータ解析においても活躍しており、LATチームの中心機関である米国のStanford大学およびSLAC国立加速器研究所に所属する筆者ら日本人研究者の他、広島大、東工大、早稲田大、宇宙航空研究開発機構、茨城大、東京大、名古屋大、京都大、青山学院大に所属す

る研究者・大学院生が精力的に活動している。

本稿では、最近のLATによる代表的な科学的成果として、かに星雲と呼ばれるパルサー星雲から発見されたガンマ線フレアについて紹介する。このガンマ線フレアでは、これまでに全く予想されていなかった数時間という短い時間スケールでのガンマ線増光が観測された。この発見は、粒子加速およびガンマ線放射に関するこれまでの描像を覆すものである。

2. パルサー星雲

かに星雲³⁾ (図1) は、西暦1054年に観測された超新星によって作られたパルサー (かにパルサー) が、その周囲に作る高エネルギー粒子の「泡」である。一般にパルサー星雲と呼ばれるシステムである。⁴⁾

パルサーと呼ばれる周期的な電磁波を発する天体は、1967年、当時大学院生であったJocelyn Bellとその指導教官Antony Hewishらによる電波観測で発見された (この発見によりAntony Hewishはノーベル物理学賞を受賞している)。パルサーの正体は、典型的に 10^{12} Gという非常に強い磁場を持ち、ミリ秒から秒程度の周期で高速回転する中性子星である。かに星雲中にあるかにパルサーの回転周期は33 msである。

高速回転するパルサーの強磁場下では、電子・陽電子対が大量に生成され、電子・陽電子プラズマが強力な磁場のもとパルサーと共回転している。しかし、回転速度は光速を超えることができないため、パルサーからの距離を R 、

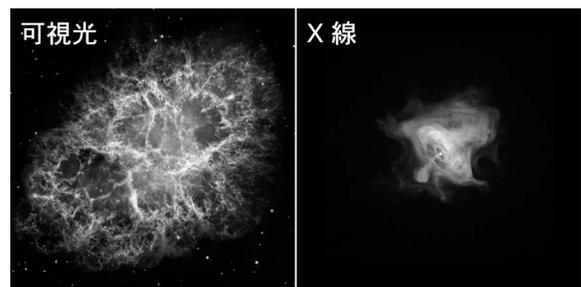


図1 Hubble宇宙望遠鏡によるかに星雲の可視光画像とChandra衛星によるX線画像 (NASA提供)。

* 現所属：京都大学大学院理学研究科 606-8502京都市左京区北白川追分町

パルサーの回転角速度を Ω とすると、 $R=c/\Omega$ を満たす光円柱と呼ばれる領域より外側では、パルサーと共回転できなくなる。かにパルサーの光円柱半径は $R\sim 10^8$ cm程度である。電子・陽電子プラズマは、光円柱を超えた領域においては、開いた磁力線に沿って、磁化したプラズマの風として吹き出すと考えられている。これをパルサー風と呼ぶ。

パルサーは、超新星爆発によって形成される。したがってパルサーの周囲は、通常、超新星爆発の噴出物で満たされている。パルサーから吹き出たパルサー風は、この噴出物と衝突することで、終端衝撃波を形成する。かにパルサーの場合、衝撃波はパルサーから0.1 pc ($1 \text{ pc} = 3 \times 10^{18} \text{ cm}$)程度の距離にある。パルサー風は、衝撃波の上流において、典型的に $\Gamma_{\text{wind}} \sim 10^6$ 程度のローレンツ因子を持っていると推定されている(ここで β を「パルサー風速度/光速」として $\Gamma_{\text{wind}} = 1/\sqrt{1-\beta^2}$ である)。衝撃波では、プラズマが熱化されるとともに、(おそらくフェルミ加速と呼ばれる機構により)電子・陽電子がさらに加速され、そのエネルギー分布は大まかにベキ関数型となる。加速された電子・陽電子からの放射が、パルサー星雲として観測される。以後、電子と陽電子の区別は問題にならないため、電子・陽電子をあわせて電子と記す。

かに星雲から観測されている放射のスペクトルを図2に示す。電波からX線そして数100 MeVのガンマ線に至る放射成分は、相対論的電子が磁場によって制動を受けた結果として放射されるシンクロトロン光によるものである。また、GeV以上の高エネルギーの帯域にはもう一つの放射成分があり、同じ電子が低エネルギーの種光子を逆コンプトン散乱によって叩き上げることによる放射である。かに星雲の場合、シンクロトロン放射の光度が非常に大きいため、シンクロトロン放射が主な種光子となる。電子のスペクトルが $dN/dE \propto E^{-p}$ とベキ型であるとき、シンクロトロンおよび逆コンプトン散乱の放射スペクトルも、ベキ型 $dN_\gamma/d\varepsilon \propto \varepsilon^{-\Gamma}$ となる。ここでスペクトルの光子指数は $\Gamma = (p+1)/2$ となる。

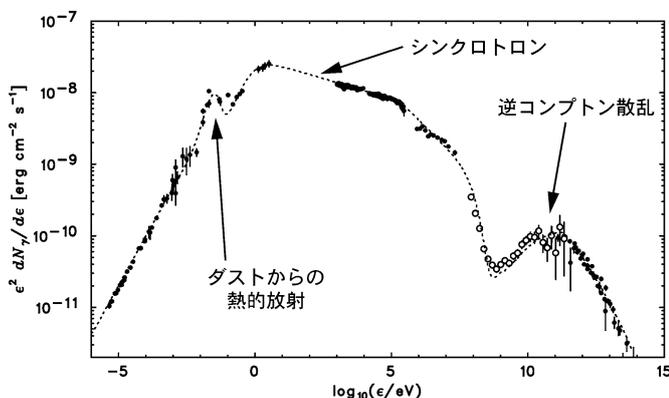


図2 かに星雲からの電波からTeVガンマ線に至る放射スペクトル。縦軸は、微分スペクトル $dN_\gamma/d\varepsilon$ に e^2 をかけた量。パルサー成分を除いたパルサー星雲からのフラックスをプロットしてある。白抜きのデータ点がLATによる測定結果。点線はMeyerら⁶⁾の計算によるモデル曲線。

シンクロトロンの放射パワー(P_{sy})と逆コンプトン散乱の放射パワー(P_{IC})の比は、磁場のエネルギー密度 $U_B (= B^2/8\pi)$ と種光子のエネルギー密度 U_{ph} を用いて $P_{\text{sy}}/P_{\text{IC}} = U_B/U_{\text{ph}}$ となる。⁷⁾ かに星雲の場合、逆コンプトン散乱の種光子は、主に、かに星雲自体のシンクロトロン放射であるため、 U_{ph} は既知である。したがって、シンクロトロン成分と逆コンプトン散乱成分の強度比から、 U_B そして磁場強度 B を推定することが可能である。このような方法で、かに星雲の磁場強度は、100-200 μG と求められている。

図2からわかるように、LATのカバーするエネルギー帯域は、かに星雲の場合、シンクロトロン放射が卓越する領域から、逆コンプトン散乱が卓越する領域に移り変わる帯域に対応する。シンクロトロン光子のエネルギーを ε_{sy} 、電子のエネルギーを E_e とすると、 $\varepsilon_{\text{sy}} \approx 160 (B/100 \mu\text{G}) (E_e/10 \text{ PeV})^2 \text{ MeV}$ と書ける。上で述べたように、かに星雲での磁場強度は100 μG 程度であるから、10 MeVを超えたエネルギーを持つシンクロトロン放射の検出は、電子がPeVを超えるエネルギーにまで加速されていることを示す。これほどの超高エネルギーの電子の存在が確認できる天体は、今のところ、かに星雲しか存在していない。

かにパルサーをはじめとするパルサーは、時間とともに回転周期が少しずつ長くなっている。かにパルサーの場合、周期 $P = 33 \text{ ms}$ に対して、その時間微分は $\dot{P} = 4.21 \times 10^{-13}$ である。パルサーを、半径10 km、質量 $1.4 M_\odot$ (M_\odot は太陽質量： $2 \times 10^{33} \text{ g}$)の様な球とみなすと、慣性モーメントは $I = 1.1 \times 10^{45} \text{ g cm}^2$ となるので、かにパルサーが単位時間あたりに失う回転エネルギー(スピンドアウン光度)は、 $L_{\text{spin}} = 4\pi I \dot{P} / P^3 = 5 \times 10^{38} \text{ erg s}^{-1}$ となる。ここで失われるエネルギーは、パルサー自身からの放射およびパルサー風で使われることになる。かに星雲からの放射の積分光度は $L = 1.3 \times 10^{38} \text{ erg s}^{-1}$ であるので、スピンドアウン光度が25%という実に高い効率でパルサー星雲からの放射に変換されていることになる。

3. フェルミ衛星LATによるかに星雲の観測

かに星雲はPeVまでの粒子加速の証拠のある唯一の天体である。100 MeV付近まで達するシンクロトロン放射のテイル部(図2; $\varepsilon \sim 10\text{-}100 \text{ MeV}$)は、その極限的な電子加速を反映しているが、これまで十分な観測データが得られていなかった。フェルミ衛星主検出器LATは、過去の観測より1桁以上高い精度で、この鍵となる帯域を観測することができる。

2008年8月に始まったLATによる観測で、実際に今までにない精度でシンクロトロン放射スペクトルを測定することに成功したが、さらに予想をしなかった驚くべき現象をも明らかにした。かに星雲のガンマ線フラックスが短い時間の間に急激に増加するフレアが2009年2月、2010年9月、そして2011年4月の計3回見られたのである。⁸⁾ また、イタリアのガンマ線観測衛星AGILEも、同様のフレアを

検出していることがわかった。⁹⁾ これらのフレアは、数日から10日程度の間続き、その間、ガンマ線フラックスが、通常時の数倍から数10倍にまで増加した。これらのフレアの前後で、秒角を切る高角度分解能のX線衛星Chandraによるパルサー近傍の画像を比較したが、特に変化は見られていない。

図3は、最も激しいフラックス増加の見られた2011年4月のフレア時の光度曲線である。この図からわかるように、このフレアは約9日間続き、光度曲線上には、2つのピーク構造が見られた。それぞれのピークの立ち上がりを指数関数でフィット(図3の黒色の実線)し、増光の時間スケールを求めると、 4.0 ± 1.0 hours および 7.0 ± 1.6 hours となる。これは、図1に示したX線帯域におけるかに星雲の大きさが4光年程度であることを考えると、非常に短い時間スケールである。

観測データを、かにパルサーのパルス位相ごとに分けて解析することで、パルサーからの放射が時間変動しているのではなく、パルサー星雲からの放射が変動していることがわかった。さらに、各エネルギーにおけるフラックス変

動を調べたところ、かに星雲からの放射の2成分のうち、逆コンプトン散乱成分ではなく、シンクロトン成分のフラックスが増減していることがわかった。

図3上部で定義した1から11の各時間帯におけるガンマ線スペクトルを、図4に示す。これらのスペクトルでは、パルサーの寄与、および、逆コンプトン散乱による高エネルギー成分の寄与は差し引いてある。フレアに伴い、400 MeV程度にピークを持つ、新たなスペクトル成分が出現していることがわかる。この成分を $dN_\gamma/d\varepsilon \propto \varepsilon^{-1} \exp(-\varepsilon/\varepsilon_c)$ という関数でフィットしたところ、カットオフエネルギー ε_c はファクター2程度しか変化しないが、積分フラックスは1桁以上も変化していることがわかった。

4. かに星雲のガンマ線フレアが提示する謎

かに星雲のガンマ線フレアは、宇宙物理学に新しい謎をもたらしている。LATによる測定が示したように、フレアのガンマ線スペクトルのピークは $\varepsilon_{\text{peak}} \sim 400$ MeVにも達し(図4)、今までの理論モデルでは説明できない。理論的には、微細構造定数 α_F と電子の静止質量エネルギー $m_e c^2$ で与えられるガンマ線エネルギー

$$\varepsilon_* = \frac{9}{4} \alpha_F^{-1} m_e c^2 \approx 160 \text{ MeV} \quad (1)$$

以下にスペクトルのカットオフがあると考えられてきたが、フレアの観測はこの理論限界を一見、破っているのである。式(1)は、シンクロトン放射による電子の冷却時間と電子の「ジャイロ半径/光速」を等値して得られる。⁷⁾ 宇宙プラズマ中での超高エネルギー粒子の加速機構としてフェルミ加速¹⁰⁾が標準となっているが、 $\varepsilon_{\text{peak}} > \varepsilon_*$ の条件は電子がジャイロ1周回する前に放射によりエネルギーを失うことを意味し、磁場の乱れによる散乱を基礎とするフェルミ加速理論と相容れない。また電場 E による直接加速を考える

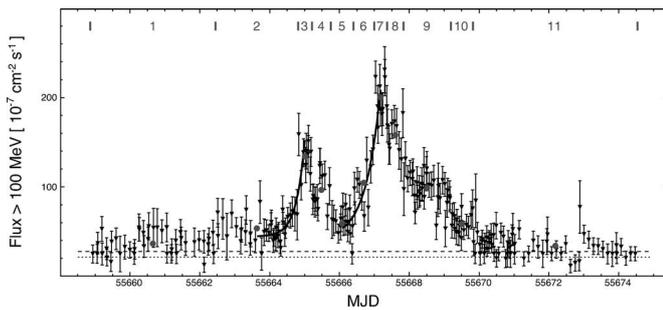


図3 2011年4月のフレア時のかに星雲のガンマ線光度曲線(>100 MeV)。⁸⁾ 横軸は修正ユリウス通日。点線はパルサーと逆コンプトン散乱成分の寄与。破線は、それに通常時のシンクロトン成分の寄与を加えたもの。

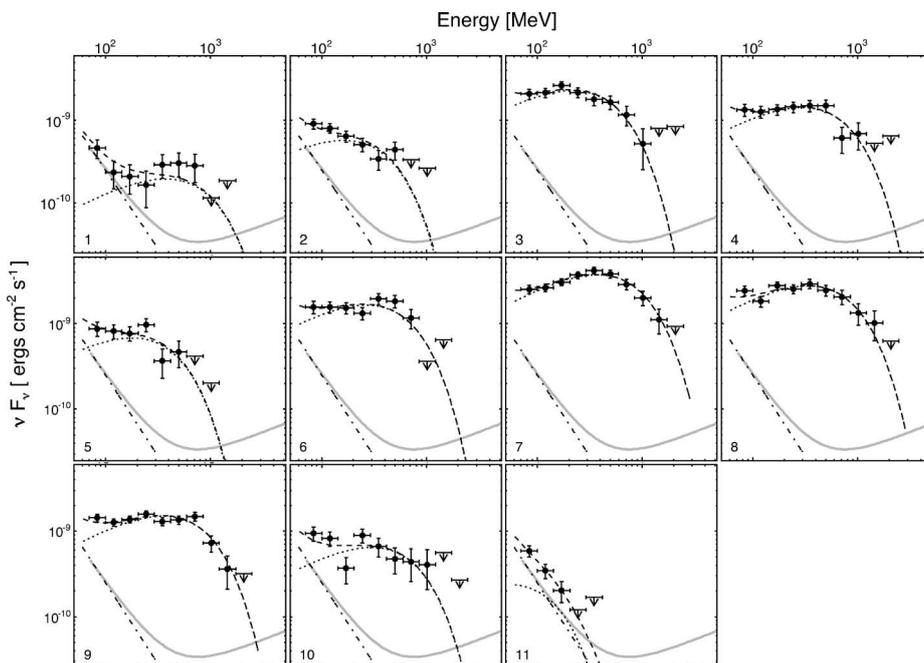


図4 2011年4月のフレアにおけるガンマ線スペクトルの発展。⁸⁾ 点線がフィットにより求めたフレア成分のスペクトル。一点鎖線が通常時のシンクロトン成分のスペクトルで、破線がフレア成分とシンクロトン定常成分の和。灰色のカーブは、通常時のシンクロトン成分と逆コンプトン散乱成分の和。各パネル左下に示した番号は、図3の上部に示した1から11の時間帯に対応する。

場合は、理論限界は $\epsilon_* = 160(E/B_{\perp})$ MeV になる。ここで B_{\perp} は電子の運動方向に垂直な磁場の成分である。高い伝導性を持つ宇宙プラズマでは一般的に $E < B$ が成立するため、やはり式(1)が限界を与えることになる。

もうひとつの問題は放射領域の大きさである。2011年4月のフレア時のガンマ線増光の時間スケールは $t_d < 8$ hours であり、因果律の議論から放射領域の大きさは $L < ct_d \sim 3 \times 10^{-4}$ pc となる。かに星雲の大きさは数 pc であり、また粒子加速の現場と考えられている終端衝撃波はパルサーから約 0.1 pc の距離にあり、それらに比べてガンマ線フレアの放射領域が非常に小さいことになる。それにも関わらず、等方放射を仮定するとスピンドウン光度の1%程度に相当する $L_{\gamma, \text{iso}} \sim 4 \times 10^{36}$ erg s⁻¹ のガンマ線光度を示す。このようなエネルギーの局所的な集中はパルサーに近ければ可能かもしれないが、フレアにパルス成分がないことから、放射領域は少なくとも光円柱の外側である。星雲中にこのような高いガンマ線放射率を持つコンパクトな領域が存在するのだろうか？

5. 提案されているモデル

かに星雲のガンマ線フレア現象の発見は高エネルギー宇宙物理のコミュニティに驚きを与え、関連する理論研究者を刺激し、発見から1年余の間に多くのモデルが提唱されている。ここではそのうち代表的なものについて議論する。

まず考えられる可能性は、放射領域となっているプラズマ流が比較的大きなローレンツ因子 ($\Gamma_{\text{flow}} > 2$) を持っていることである。¹¹⁾ その場合、相対論的ビーミングによって式(1)の ϵ_* は最大 $2\Gamma_{\text{flow}}$ 倍されるため、LATの観測結果を理論限界に収めることができる。また、(見かけ上の)高いガンマ線放射率も相対論的ビーミングによる増幅で理解できるだろう。フレアが示す激しい時間変動はビーミング因子 $\delta = \Gamma_{\text{flow}}^{-1} (1 - \beta \cos \theta)^{-1}$ (ここで θ はプラズマ運動方向と視線方向との間のなす角) の変動が主因と考えられる。LATが2011年4月に捉えたフレアのスペクトル変動の様子はビーミング因子の変動から期待される振る舞い¹²⁾と合致している。ハッブル望遠鏡、チャンドラX線衛星での高角度分解能観測で、 $\beta \sim 0.5$ 程度のプラズマ運動が終端衝撃波の付近で観測されているが、¹³⁾ このモデルに必要なローレンツ因子には及ばない。しかし最近の相対論的磁気流体力学シミュレーションの結果から、アーチ状の終端衝撃波に沿って $\Gamma_{\text{flow}} \sim 5$ に達する流れが存在する可能性が示されている。¹⁴⁾ シンクロトロン放射テイル部のガンマ線 ($\epsilon > 10$ MeV) を放射する電子は極めて冷却時間が短く、電子加速が行われる終端衝撃波の近傍が放射領域となり、この帯域で相対論的ビーミングの効果が顕著に現れることは自然である。しかし、具体的にどのような機序でビーミング因子の変動が起きるのかは不明である。

パルサー風の終端衝撃波では「磁気再結合」が起こることが期待されており、これに着目したモデルも提案されて

いる。¹⁵⁾ 粒子を加速する電場の強度が磁場の強さを上回っていけば、 $\epsilon_{\text{peak}} < \epsilon_*$ を満たしLATの観測結果を説明しうる。一般的に宇宙プラズマではそのような状態は不安定であるが、磁気再結合に伴って一時的に実現する可能性はある。Uzdensky, Ceruttiらは、再結合領域を横断する超高エネルギー電子を考え、電子が電場で加速されるとともに、 $E > B$ の状態にある再結合領域の中心にフォーカスされることを示した。¹⁵⁾ 再結合領域は線形加速器として機能し、超高エネルギー電子のビームが自然発生する。数光日の領域にわたる数ミリガウスの磁場の再結合を仮定すれば、フレアを説明しうる PeV エネルギーの電子が加速できる。Uzdenskyらのモデルを検証する方策は、PIC (Particle-in-Cell) シミュレーションを用いて再結合領域の電磁場構造や粒子加速を自己無撞着な形で調べることであろう。電子のエネルギーが極めて高いため、Jaroschekと星野が行ったような放射による反力をも取り入れたシミュレーションが必要となる。¹⁶⁾

6. おわりに

本稿で紹介した「かに星雲」からのガンマ線フレアは、高エネルギー宇宙物理学における2011年のホットトピックであり、高速回転する中性子星が作り出す相対論的アウトフローの研究に一石を投じるものであった。たとえば、Astronomy Magazineはスペースシャトルの退役などとともにこの発見を“Top 10 Space Stories of 2011”に選出している。すでに多くの理論モデルが提案されており、今後はガンマ線フレアの多波長観測を通してそれらを検証することになる。またPICシミュレーションなどによって理論モデルを検証することも重要である。

宇宙のあらゆる天体の中で、今のところ、かに星雲が最高エネルギー (PeV) の粒子を作り出している。しかし地球にはその1万倍以上のエネルギーを持つ宇宙線が到来しており、宇宙のどこかでは「かに星雲」を凌駕する加速器もあるはずである。超高エネルギー粒子の加速現象を理解する上で、かに星雲の研究が重要な基礎を与えてくれるだろう。

図2にプロットしたX線データに関しては、前田良知、染谷謙太郎、神頭知美の各氏から「すざく」衛星によるデータをいただいた。また、本稿の内容について、釜江常好、牧島一夫、片岡 淳、浅野勝晃、谷津陽一、榎戸輝場の各氏から有益なコメントをいただいた。ここに深く感謝する。

参考文献

- 1) 釜江常好, 田島宏康, 深沢泰司: 日本物理学会誌 **65** (2010) 163.
- 2) B. Atwood, *et al.*: *Astrophys. J.* **697** (2009) 1071.
- 3) J. J. Hester: *Annual Review of Astron. Astrophys.* **46** (2008) 127.
- 4) B. M. Gaensler and P. O. Slane: *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* **44** (2006) 17.
- 5) かに星雲は、その空間的広がりから短期変動はしないと考えられてきた。それゆえ、X線帯域においては検出器の較正用の標準光源として用いられてきた。しかし、最近になって年の時間スケールでのX線フラックスの変動が報告されている。C. A. Wilson-Hodge, *et al.*: *Astro-*

- phys. J. **727** (2011) L40.
- 6) M. Meyer, D. Horns, H. S. Zechlin: *Astron. Astrophys.* **523** (2010) A2.
- 7) 高橋忠幸, 内山泰伸, 牧島一夫: *日本物理学会誌* **65** (2010) 707.
- 8) R. Buehler, *et al.*: *Astrophys. J.* **749** (2012) 26; A. A. Abdo, *et al.*: *Science* **331** (2011) 739.
- 9) M. Tavani, *et al.*: *Science* **331** (2011) 736.
- 10) 星野真弘, 天野孝伸: *日本物理学会誌* **64** (2009) 421.
- 11) S. S. Komisarov and M. Lyutikov: *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **414** (2011) 2017.
- 12) K. R. Lind and R. D. Blandford: *Astrophys. J.* **295** (1985) 358.
- 13) J. J. Hester, *et al.*: *Astrophys. J.* **577** (2002) 49.
- 14) N. F. Camus, *et al.*: *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **400** (2009) 1241.
- 15) D. Uzdensky, B. Cerutti and M. Begelman: *Astrophys. J.* **737** (2011) L40; B. Cerutti, D. Uzdensky and M. Begelman: *ibid.* **746** (2012) 148.
- 16) C. H. Jaroschek and M. Hoshino: *Phys. Rev. Lett.* **103** (2009) 075002.

(2012年2月15日原稿受付)

On the Gamma-ray Flares from the Crab Nebula

Takaaki Tanaka and Yasunobu Uchiyama

abstract: The Large Area Telescope (LAT) onboard the Fermi Gamma-ray Space Telescope continues to produce important results on various astrophysical topics in the high-energy gamma-ray domain from tens of MeV up to hundreds of GeV. The discovery of gamma-ray flares from the Crab Nebula is one of the most exciting results obtained recently with the LAT. The flaring spectral component is arguably of synchrotron origin and its spectrum measured during the flare in 2011 April peaks around 400 MeV, which contradicts with a fundamental theoretical limit. The LAT observations pose a new challenge in the field of high-energy astrophysics.

最近の研究から

連星中性子星合体からの重力波及びニュートリノ放射

木内建太 <京都大学基礎物理学研究所 606-8503 京都市左京区北白川追分町 >

関口雄一郎 <京都大学基礎物理学研究所 606-8503 京都市左京区北白川追分町 >

連星中性子星合体は、KAGRA, LIGO, VIRGOなどの地上型重力波干渉計の重要なターゲットである。連星合体からの重力波の観測によって中性子星内部、特にその状態方程式を直接検証できるという点で物理的に興味深い。本稿では、連星中性子星発見と重力波研究を概観するとともに、数値相対論の目覚ましい発展により明らかにされつつある連星中性子星合体の様相を最新の結果と併せて紹介する。さらにニュートリノとの同時観測の可能性とガンマ線バーストとの関連性について言及し、今後の展望を述べる。

1. はじめに

アインシュタインが重力波の存在を予言してから、ほぼ一世紀が過ぎた。1974年にハルスとテイラーによって発見された連星パルサー PSR1913+16 が示す公転周期の減少は、重力波の存在を間接的に証明した。¹⁾ 現在、世界各地の地上型重力波干渉計は稼働中、もしくはより感度の良い次世代干渉計へアップグレード中である。特に、日本のKAGRA^{*1}の建設が本年より開始し、重力波直接観測の機運が高まりつつある。数多く存在する重力波源の中でも、連星中性子星の合体は最も有望である。^{*2} 合体時には重力波のみならず、ニュートリノが大量に放射される。この2つの信号は、中性子物質の状態方程式や相転移の様相への新たな探索針となり得るため、その理論予測は喫緊の課題である。

このような背景の下、数値相対論という手法に基づいた一般相対性理論の効果を取り入れた連星中性子星合体の理

論研究は、1990年代から始まり、2000年に初めての数値相対論シミュレーションが行われた。²⁾ 現在までに世界中の研究グループにより、様々な研究が精力的に行われている。^{3,4)} 最近、筆者らのグループは有限温度核物質状態方程式とニュートリノ冷却を取り入れた連星合体シミュレーションを世界で初めて行った。本稿では、重力波、数値相対論について概観しつつ、近年明らかにされつつある連星中性子星合体の様相を最新の研究成果を基に紹介する。^{*3}

2. 重力波と数値相対論

強い重力場を記述するアインシュタイン方程式は双曲型方程式である。一方、我々に馴染み深いニュートン重力は楕円型方程式に従う。この違いが意味するところは、重力には波として伝搬する成分が本来含まれるが、重力の弱い場所では非常に振幅が小さく、その存在に気付きにくいということである。これが重力波である。振幅の大きな重力波は、重いものが加速度運動した時に生成される。重力波は物質との相互作用が小さいため、電磁波に比べて透過性

^{*1} LCGT (Largescale Cryogenic Gravitational wave Telescope) の愛称としてKAGRAが決定したので本稿ではこれを用いる。

^{*2} KAGRAでは、理想的な状況においては約9億光年離れた遠方宇宙までの観測が可能であり、年間数イベント程度が期待される。

^{*3} 最近の包括的なレビューとして文献5をあげておく。

が高い。つまり、波源の情報をより直接的に我々に届ける情報媒体と成り得る。例えば、電磁波では覗くことのできなかった星の深部や、ブラックホールや中性子星が誕生する現場が観測される可能性がある。

観測された重力波の波形から、波源が持つ物理情報を抽出するためには予め波形を理論的に求めておく必要がある。観測可能な振幅の大きな重力波を生成するような天体現象は、典型的に 10^{15} g/cm^3 を超える高密度状態と約 10^{11} 度以上の高温状態が実現され、激しい時間変動を伴う。物理過程を簡略化する近似や、解析的な手法は破綻し、数値モデル化が現在では唯一の手法となる。数値相対論とは、アインシュタイン方程式、相対論的流体力学及びニュートリノ輻射場の運動方程式を連立させつつ数値的に解き、ブラックホールや中性子星形成などの強重力場の天体現象を第一原理的に解き明かすことを目的とした研究分野である。

数値相対論研究の黎明期には様々な問題が存在したが、下記にまとめるブレイクスルーの積み重ねにより、現在までに原理的な問題は概ね解決されており、現実的な問題設定の下で長時間安定にシミュレーションが可能となっている。^{*4}

初期値問題としての定式化：アインシュタイン方程式は時間空間が入り混じった共変的な形で書かれているため、数値シミュレーションを実行するためには時空を空間と時間に分解する必要がある。Arnowitらによる、重力場の正準形式に関する研究において提唱された定式化 (ADM 形式) では、⁷⁾ ある空間的超曲面を導入し、アインシュタイン方程式をこの超曲面方向とそれに垂直な方向へ射影することによって時間発展方程式と拘束条件式に分解する。^{*5}

数値相対論の初期にはこの定式化は有用であると考えられていたが、実際に計算を行うと数値誤差による拘束条件式の破れが単調増加し、最終的には破綻をきたすことが明らかとなった。この問題の解決策を提案したのが柴田と中村である。⁸⁾ 彼らの解析によると、ADM 形式には拘束条件の破れが時間的に単調増加する非物理的なモードが存在する。柴田らは、空間的超曲面の計量の空間微分に相当する新しい変数を導入し、さらに拘束条件式を用いて発展方程式を書き換えることで、長時間安定に発展可能な定式化 (BSSN 形式) を行った。^{*6}

座標条件：一般相対性理論の一般共変性に起因した問題として、シミュレーションの際に時間軸と空間軸を設定する必要がある。^{*7} この自由度を利用して、ブラックホール特異点を回避する時間軸、連星系における慣性系の引きず

りを解消する空間軸の設定方法が初期段階より研究されてきた。⁷⁾ 現在では少ない計算量でこれらの特性を備える座標条件が開発されている。⁴⁾

一般相対論の数値流体力学：多くの天体現象では一般に衝撃波が発生する。この際、物理量が不連続となる面の数値的取り扱いが必要となる。バレンシア大学のグループを中心に、非相対論的流体で開発された高精度衝撃波捕獲法を相対論的流体に適用する定式化が開発されてきた。¹⁰⁾ 近年では、相対論的磁気流体方程式¹¹⁾ や相対論的輻射流体方程式¹²⁾ の数値解法も盛んに研究されている。

ブラックホールの取り扱い：適当な座標条件を選ぶことによって、ブラックホール時空を短時間発展することは可能になったが、長時間安定にブラックホール時空を発展させることは数値相対論における大問題であった。2005年、Pretorius は、ブラックホール内部に現れる特異点を数値的に切り取る技巧的な手法を開発し、世界で初めて連星ブラックホール合体シミュレーションを成功させた。¹³⁾ その後、BSSN 形式を基礎にして、ブラックホール内部で発散しない巧妙な変数と座標条件を取る BSSN-puncture 法が提案された。¹⁴⁾ 現在では、長時間安定にブラックホール時空を発展させることは比較的容易となっている。

物理素過程：現実的な問題設定においては、様々な物理的素過程を考慮する必要がある。具体的には、強い相互作用で記述された高密度核物質理論に基づく有限温度状態方程式、弱い相互作用に基づく電子捕獲反応、ニュートリノ生成・散乱などを取り入れなければならない。数値相対論分野における物理素過程の組み込みは非相対論分野に比べて大きく遅れていたが、本稿の執筆者の一人である関口は、これらを取り込みつつニュートリノ輸送を近似的に扱う一般相対論的漏れ出し法を開発し、その実用性を示している。¹⁵⁾

3. 連星中性子星合体と中性子物質の状態方程式

本節では、連星中性子星合体を概観するとともに、なぜそれが興味深いのかについて解説する。

連星中性子星は、重力波放出により軌道エネルギーと軌道角運動量を失い、徐々に軌道距離を縮めながら進化する。観測により決定されている連星系の物理量と重力波放出の式から、公転周期の減少が一般相対論に基づいて予想できる。1974年にハルスとテイラーにより発見された PSR1913+16 は、2つのパルサーからなる連星系であり、¹⁾ その軌道パラメーターと個々の質量が高い精度で決定されている。公転周期の減少の理論値と観測値が 0.2% 程度の精度で一致し、これによって重力波の存在が間接的に証明された。¹⁶⁾

現在までに、観測された連星中性子星及びその候補は 10 組であり、その内 6 組は宇宙年齢内に合体すると予想されている。^{*8} 現在稼働中もしくは建設中の地上型重力波干渉計は、連星中性子星合体の最後の 3 分間に放出される重

^{*8} PSR1913+16 は合体までに 3 億年かかると見積もられている。

^{*4} 瓜生、谷口、ググニョンらによる、連星中性子星の平衡形状の計算手法の確立も重要なポイントである。⁶⁾

^{*5} 共変的電磁場の方程式から 4 組のマクスウェル方程式を導くことに対応する。ガウスの法則及びモノポール無し条件が拘束条件式である。

^{*6} 後に同等な定式化を発表した Baumgarte と Shapiro⁹⁾ と併せて、Baumgarte-Shapiro-Shibata-Nakamura (BSSN) 形式と呼ばれており、世界の数値相対論研究グループが採用する標準的手法となっている。

^{*7} これは (絶対時空における) デカルト座標や極座標などの座標系の選び方の自由度とは異なり、時空多様体における時間軸と空間軸の設定の問題である。

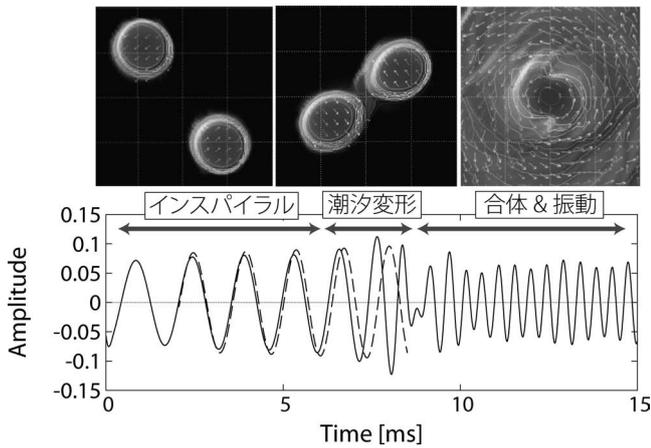


図1 連星中性子星合体の各フェイズと重力波波形. コントラクト図(フルカラー口絵参照)は中性子星の密度等高面の赤道面における進化を表す. 破線はポストニュートン近似に基づく重力波波形を表す.

重力波を観測するように設計されている. 以下ではその最後の3分間の描像についてまとめる.

インスパイラル: 連星間距離が中性子星の半径に比べて十分に大きい段階では, 互いの星を点粒子として近似することができる(図1左図). この場合の重力波は, 相対運動の速度が光速より十分小さい近似(ポストニュートン近似)の下で, 連星の運動方程式を展開し, 解くことにより精度良く予想される. 観測では, ポストニュートン近似による高精度の理論波形と観測データの相関を取ることで, 重力波を検出する. 重要な点は, この段階の重力波から連星の質量の情報を読み取ることができることである.

潮汐変形: 続いて, 重力波放出により軌道距離が段々縮むと中性子星が有限の大きさを持つことが無視できなくなる. 互いの星の重力と自己重力により潮汐力の効果が表れ, 星が変形する(図1中図). この段階の重力波波形は質点近似からずれるため, 星が有限の大きさである情報, 即ち中性子星の半径の情報が含まれる.

合体・振動: 最終的に連星は合体に至るがその後の運命は連星の総質量によって決まる.

比較的軽い連星の場合, 合体後高速回転する高温の“重い”中性子星^{*9}が過渡的に形成される. 合体時の衝撃波加熱と圧縮により温度は約 10^{11} 度までに上昇する. また, 合体時に軌道角運動量を持ちこむため, 典型的に中心回転周期が1ミリ秒という高速回転をしながら激しく振動する(図1右図). その後, 角運動量と内部エネルギーをそれぞれ重力波とニュートリノの放出によって徐々に失いながら進化し, 自己重力を支え切れなくなった時点でブラックホールに崩壊する. この段階の重力波は, 重い中性子星の振動モードで特徴づけられる(図2左上図及び右図). このモードは星の内部物質の状態と密接に関連するため, 振動モードの解析により内部の情報を読み取れる可能性がある.

比較的重い連星の場合, 合体後直ちにブラックホールに

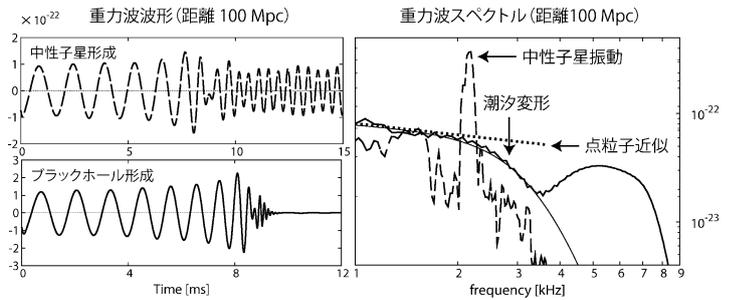


図2 中性子星形成(左上図)とブラックホール形成(左下図)の場合の重力波波形及びフーリエスペクトル(右図). スペクトル図中には, ポストニュートン近似(点粒子近似)における重力波スペクトル及び(1)式によるフィッティング(細線)も示してある.

崩壊する. ブラックホールへの崩壊に伴い重力波の振幅は急速に減衰する(図2左下図). このブラックホール形成を特徴づける臨界質量 M_{thr} は球対称中性子星の最大質量 M_{max} と $M_{\text{thr}} = M_{\text{max}} + \Delta M_{\text{rot}} + \Delta M_{\text{th}}$ の形で関係づく. 但し, $\Delta M_{\text{rot}}, \Delta M_{\text{th}}$ は高速回転と熱的圧力による寄与であり, これまでの先行研究から $O(0.1) \times M_{\text{max}}$ で与えられることが分かっている.²⁰⁾ この場合, 中性子星の最大質量に制限を与えることができる.

中性子星の質量・半径や最大質量, 振動モードといった情報は, 中性子物質の状態方程式と密接に結びついている. 即ち, 連星中性子星合体からの重力波を解析することによって, その情報を読み取ることができるのである.

静的・球対称・零温度の仮定の下で中性子星の平衡形状を求めると, 質量と半径の関係が得られるが, その関係は中性子物質の状態方程式と一対一に対応する.¹⁷⁾ つまり, 多数の連星合体から質量と半径を決めることができれば, 中性子星物質の状態方程式を再構築することが可能となる.¹⁸⁾ また, 各状態方程式に対応して最大質量が決まるため, 重力波からブラックホール形成の有無を特定できれば, 状態方程式に制限を与えることができる.^{*10} 最大質量は, 状態方程式の高密度領域での性質を反映するが, 核密度を大きく超える物質の状態はよく理解されていない.

中性子星内部では, 陽子や中性子といった通常の核子に代わり, ハイペロン, メソン凝縮, クォークといったエキゾチックな相が現れるという理論モデルが数多く存在するが, 地上実験での検証はほぼ不可能である. 一方, 連星中性子星合体の過程では核密度を大きく超える状況が実現するため, その重力波による観測は核密度を大きく超える物質の性質を探る「窓」となっているのである.

4. 研究成果

以下の節では, 潮汐変形フェイズと, 合体・振動フェイズに着目し, 我々の最新の研究結果を解説する.^{21, 22)} シミュレーションを行った連星中性子星モデルの一覧を表1に記す.

*9 球対称・零温度の中性子星の最大質量より重いことを意味する.

*10 最近, 太陽の約2倍の質量の中性子星が見つかり, 状態方程式に対する強い制限が課された.¹⁹⁾

表1 状態方程式、モデルと臨界質量。質量は太陽質量 ($\approx 2 \times 10^{33}$ g) を単位とする。APR, SLy, FPS の場合、モデルの数字は、総質量-質量比を表す。通常核物質、ハイペロンの場合、全て等質量の連星であり、数字は各星の質量を表す。

潮汐変形 (4.1節)		
EOS	モデル (総質量-質量比)	M_{thr}
APR ²⁴⁾	A2.9-0.8, A2.9-0.9, A2.9-1	≈ 2.9
SLy ²⁵⁾	S2.8-1, S2.9-1, S3-1	≈ 2.7
FPS ²⁶⁾	F2.6-0.8, F2.6-1, F2.7-0.8	≈ 2.5
中性子星振動 (4.2節)		
EOS	モデル (各質量)	M_{thr}
通常核物質 ²⁷⁾	S135, S15, S16	≥ 3.2
ハイペロン物質 ²⁸⁾	H135, H15	≥ 3

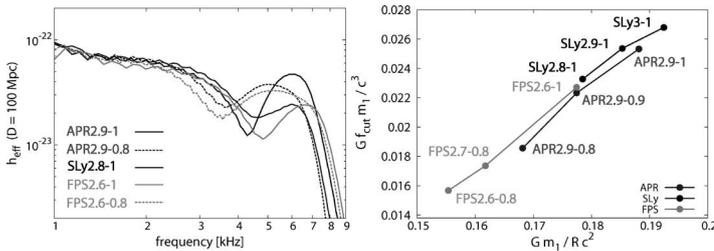


図3 左図：重力波フーリエスペクトル，右図： f_{cut} のコンパクトネス依存性。

4.1 潮汐変形

中性子星形成とブラックホール形成の場合の典型的な重力波の波形とスペクトルを図2に示す。前節で述べたように、インスパイラルでは点粒子近似に従うので、初期重力波波形及びスペクトルの低周波数領域はポストニュートン近似と良く一致する(図2右図中の点線)。一方、潮汐変形フェイズでは、ポストニュートン近似からのずれが顕著になる。このずれはブラックホール形成の場合に特に明確にみられる。^{*11}我々は、スペクトルを

$$h(f) = f^{-1/6} \frac{h_0}{1 + \exp[(f - f_{\text{cut}})/\Delta f]} \quad (1)$$

の関数形でフィットした解析を行い、 f_{cut} によって潮汐変形が良く特徴づけられることを明らかにした。

図3左図に様々な状態方程式の場合の重力波スペクトルを示す。これから、潮汐変形を特徴づける f_{cut} は定量的にモデルに依存することが分かる。重力波は四重極の時間変化から生成されるので、連星の時に最も効率よく放出される。 f_{cut} は連星的な形状が失われ、また潮汐力など有限サイズの影響によって連星系が“早く落ちる”ことによるものと解釈することができる。

この段階の重力波から、半径の情報を抽出するために、 f_{cut} と星の質量 m_1 と半径 R から定義されるコンパクトネス $C = Gm_1/c^2R$ の関係を精査した。但し、 G と c は重力定数と光速である。図3右図に示されるこの関係は f_{cut} とコンパクトネスの間に強い正の相関があることを明確に示してい

^{*11} 重い中性子星が形成される場合にはその振動モードが混ざってしまう(図2参照)。

る。筆者らはこの相関関係が連星のモデル、即ち連星の質量や状態方程式に依存せず成立していることを発見した。

この結果は非常に重要であり、観測された重力波から星の半径を決定できる可能性を示唆している。先に述べた通り、中性子星質量はインスパイラルの重力波の解析から精度良く決定されることに注意されたい。一方、潮汐変形に起因する重力波の解析から中性子星の半径を決めることが可能である。従って、連星中性子星合体からの重力波が多数観測されれば、質量-半径関係から状態方程式を再構築するという逆問題が解ける可能性がある。

4.2 中性子星振動

前章で述べた通り、高温・高速回転中性子星が誕生する場合、大量のニュートリノが放出されるので、高密度物質の状態方程式(強い相互作用)、ニュートリノ素過程(弱い相互作用)を組み入れた上でアインシュタイン方程式を数値的に解かねばならない。

筆者らのグループは、独自に開発した数値相対論のコードをもとに、¹⁵⁾通常核物質の有限温度状態方程式を採用し、ニュートリノ素過程を考慮した、現実的な連星系の合体シミュレーションを世界で初めて行った。²²⁾さらに、中性子星の内部コアで出現が期待される Λ ハイペロンを含んだ状態方程式におけるシミュレーションを行い、²³⁾両者の結果を踏まえて、中性子星連星の合体過程と放出される重力波及びニュートリノの様相を明らかにした。

現在までに観測されている連星中性子星の個々の質量は、太陽質量($\approx 2 \times 10^{33}$ g)の1.35-1.4倍の範囲に集中している。¹⁷⁾つまり、観測される典型的な連星中性子星は総質量が太陽質量の2.7倍程度と予想される。この“標準的な”連星の場合、通常核物質モデルのみならず、最大質量が小さいハイペロン物質モデルの場合でも、合体後、高速回転と熱エネルギーによって支えられる、高温の“重い”中性子星がまずはじめに誕生することが分かった。^{*12}

通常核物質モデルの場合、この効果は顕著で合体から2-3秒の間にはブラックホールへ崩壊しないと見積もられる。この間、 $L_{\nu} \sim 10^{53}$ erg/sのニュートリノが放射され続け、中性子星は重力波放出及びニュートリノ冷却の“長い”時間スケール^{*13}で準定常的に進化する。

ハイペロン物質モデルの場合も、合体後ニュートリノと重力波を放出しながら進化する。しかし、ハイペロンの存在のため、進化の具合が通常核物質と比べて定性的に異なる：重力波放出により角運動量を失うと、星は収縮し中心密度が増加し、それに伴ってハイペロンの存在比も上昇する。一般に、ハイペロン相のような通常核物質以外の“エキゾチック相”が出現すると通常核物質の場合に比べて圧力は低くなる。そのため、収縮→ハイペロン存在比増大→圧力減少→収縮という正のフィードバック機構が働く

^{*12} 零温度の場合と比べて、最大質量は20-30%増加するため、臨界質量が実効的に高くなり、ブラックホールへの直接崩壊が回避される。

^{*13} ダイナミカルタイムスケールより十分長いという意味である。

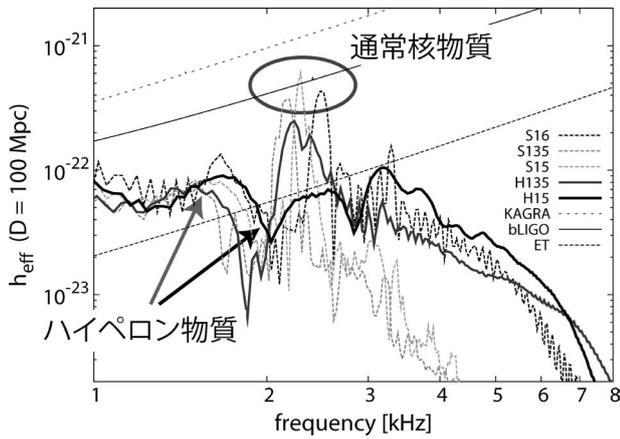


図4 中性子星振動の場合の重力波スペクトル。通常核物質は顕著なピークを持つのにに対し、ハイペロン物質には幅を持った構造が現れる。斜めに走る曲線はKAGRA, Broadband LIGO (bLIGO), Einstein-Telescope (ET) の感度曲線を示す。²⁹⁾ 連星中性子星までの距離を100 Mpc (1 pc ≈ 3.26 光年) に仮定している。

ことになり、中性子星は“短い”時間スケールで収縮する。

図4に計算された重力波のスペクトルを示す。図3のスペクトルとの比較からも容易に分かるように、中性子星形成とブラックホール形成は重力波によって明確に区別することができる(図2参照)。前述したように、インスパイラルの重力波の解析から連星の質量が分かるので、ブラックホール形成の臨界質量に制限がつき、その帰結として中性物質の状態方程式に制限がつくことになる。

さらに、この研究成果で特に興味深いのは、ハイペロンの出現の有無を重力波観測によって制限しうることである。図4の2-4 kHzの間に見えるピークは合体後誕生した中性子星の振動による重力波に対応するが、通常核物質は代表的な周波数に鋭いピークを持つのにに対し、ハイペロン物質は幅を持った構造になっている。この違いは図5に示す重力波周波数の時間進化を見るとさらに明確になる。

通常核物質の場合、スペクトルが鋭いピークを持つことから予想できるように、重力波周波数は時間に依存せず一定となる。^{*14} 一方、ハイペロン物質の場合、周波数は時間とともに高くなっていく。その結果、時間積分として与えられるスペクトルは幅を持った構造となる。

では、なぜ通常核物質の場合の周波数は変化せず、ハイペロン物質では変化するのか？ これは、先に説明した通り重い中性子星の進化が異なることに起因する。即ち、通常核物質では、重力波及びニュートリノ放射の“長い”時間スケールで準定常的に進化するので、一定の振動数を持った重力波を放出するのに対し、ハイペロン物質では、上述の正のフィードバック機構により、中性子星は“短い”時間スケールで収縮し、それが重力波振動数の時間変化として現れるためである。仮に、重力波周波数の時間進化が観測できれば、ハイペロン相あるいはエキゾチック相の有無を観測的に検証できることになる。

^{*14} この進化の様子は連星の質量に依存しないことを注意しておく。

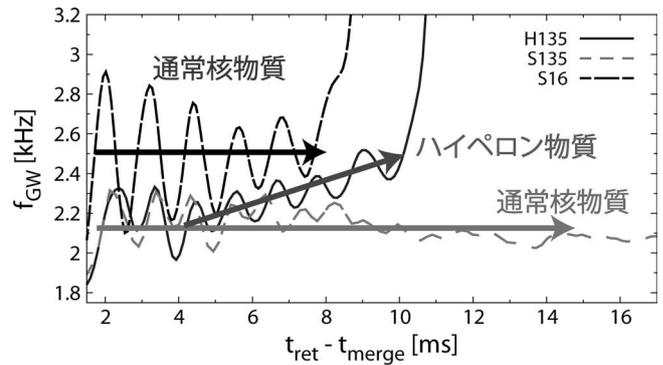


図5 重力波周波数の時間進化。通常核物質の場合、振動数はほぼ時間変化しないのに対し、ハイペロン物質は高周波数へ時間変化する。矢印は各々の場合の中心値を示す。

4.3 今後の展望

最後に今後の展望を述べる。中性子星が持つ熱エネルギーと放射されるニュートリノ光度から、その寿命 ΔT は2-3秒程度と見積もられる。^{*15} この値と、20-30 MeV程度である平均ニュートリノエネルギー ϵ_{ν} から、^{*16} ハイパーカミオカンデによるニュートリノの観測個数は、 σ を観測器の散乱断面積として $\sigma \Delta T L_{\nu} / 4\pi D^2 \epsilon_{\nu}$ で与えられる。但し、 D は波源までの距離である。仮に合体イベントが1,500万光年以内の近傍で起これば、ハイパーカミオカンデによって10イベント以上の検出が期待される。この距離では、次世代検出器による重力波との同時観測も可能である。重力波とニュートリノの同時観測による中性子星状態方程式への更なる制限可能性に関しては研究が進んでおらず、今後進めていくべき課題である。

また、中性子星連星合体はショートガンマ線バースト^{*17}の駆動源であるという理論仮説³¹⁾が幅広く受け入れられている。重力波とショートガンマ線バーストの同時観測は、この理論仮説の検証を可能にする。さらに、重力波をトリガーとしてショートガンマ線バーストを待ち構えて観測する、ショートガンマ線バーストの観測によって重力波の到来方向や発生時刻に制限をつけ、より効率的に重力波を観測する、といったことも可能となる。これはショートガンマ線バーストに限らず、連星合体からの電磁波放射を用いても期待されることである。従って、今後は、連星中性子星合体から、ショートガンマ線バーストを含め、どのような電磁波が放射される可能性があるのか、という観点からも精力的に研究を行っていく必要がある。

上記に述べたように、今後は、ニュートリノ輸送や磁場の組み込みといった、より詳細なモデル化に研究は進んでゆくと予想される。前者に関して、本研究ではニュートリ

^{*15} 中性子星は熱エネルギーと遠心力で支えられている。

^{*16} ハイパーカミオカンデなどでは電子反ニュートリノを観測する。超新星爆発から放出されるニュートリノの階層性は異なり、連星中性子星合体では電子反ニュートリノの光度が最も高い。

^{*17} ガンマ線バーストは宇宙最大規模の爆発現象であり、継続時間の短いショートガンマ線バーストでは、数秒以下の間に 10^{48} erg以上のエネルギーが主にガンマ線として放出される。³⁰⁾

ノの取り扱いとして「漏れ出し法」と呼ばれる近似手法を用いたが、定量的な議論のためには、より詳細なニュートリノ輸送方程式を解くことが必要となる。現在、モーメント法に基づく一般相対論的ニュートリノ輸送コードの開発が京都大学のグループで進行中である。後者については、磁気流体不安定モードの波長を分解するために高解像度数値計算が必要不可欠となる。また、磁気流体不安定性とニュートリノの放射に起因する対流不安定との関連なども探査すべき問題である。いずれの問題に対しても、スーパーコンピュータ「京」を使用した高解像度のシミュレーションが予定されている。

5. 終わりに

近年の数値相対論の目覚ましい発展により、物理素過程を考慮した詳細な数値モデル化が可能になりつつある。本稿では、柴田 大氏、久徳浩太郎氏、谷口敬介氏との共同研究に基づいて、筆者らのグループが推し進めている連星中性子星合体の数値相対論シミュレーションに焦点を当てて研究結果を紹介させて頂いた。シミュレーションは国立天文台 CfCA の NEC SX-9 及び Cray XT-4、京都大学基礎物理学研究所の Hitachi SR-16000 を用いて行われた。

本稿で述べたように連星中性子星合体の様相は徐々に明らかになりつつある。重力波直接観測の報告が近い将来、我々の耳に届くことを願いながら筆をおくことにする。

参考文献

- 1) R. A. Hulse and J. H. Taylor: *Astrophys. J.* **195** (1975) L51.
- 2) M. Shibata and K. Uryu: *Phys. Rev. D* **61** (2000) 064001.
- 3) 柴田 大: 『一般相対論の世界を探索: 重力波と数値相対論』(東京大学出版会, 2007).
- 4) T. W. Baumgarte and S. L. Shapiro: *Numerical Relativity; Solving Einstein's Equations on the Computer* (Cambridge Univ. Press, 2010).
- 5) M. D. Duez: *Class. Quant. Grav.* **27** (2010) 114002.
- 6) K. Uryu, M. Shibata and Y. Eriguchi: *Phys. Rev. D* **62** (2000) 104015; K. Taniguchi and E.ourgoulhon: *ibid.* **66** (2002) 104019.
- 7) R. Arnowit, S. Deser and C. W. Misner: in *Gravitation: Introduction to Current Research*, ed. L. Witten (John Wiley and Sons, 1962) p. 227; J. W.

- York, Jr.: in *Sources of Gravitational Radiation*, ed. L. L. Smarr (Cambridge Univ. Press, 1979) p. 83.
- 8) M. Shibata and T. Nakamura: *Phys. Rev. D* **52** (1995) 5428.
- 9) T. W. Baumgarte and S. L. Shapiro: *Phys. Rev. D* **59** (1999) 024007.
- 10) J. M. Martí and E. Müller: *Living Rev. Relativity* **6** (2003) 7; J. A. Font: *ibid.* **11** (2008) 7.
- 11) L. Anton, *et al.*: *Astrophys. J. Suppl.* **188** (2010) 1.
- 12) M. Shibata, *et al.*: *Prog. Theor. Phys.* **125** (2011) 1255.
- 13) F. Pretorius: *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 121101.
- 14) M. Campanelli, *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **96** (2006) 111101; J. G. Baker, *et al.*: *ibid.* **96** (2006) 111102.
- 15) Y. Sekiguchi: *Prog. Theor. Phys.* **124** (2010) 331.
- 16) J. M. Weisberg and J. H. Taylor: *ASP Conf. Ser.* **328** (2005) 25.
- 17) J. M. Lattimer and M. Parakash: *Phys. Rep.* **442** (2007) 109.
- 18) L. Lindblom: *Astrophys. J.* **398** (1992) 569.
- 19) P. Demorest, *et al.*: *Nature* **467** (2010) 1081.
- 20) K. Hotokezaka, *et al.*: *Phys. Rev. D* **83** (2011) 124008.
- 21) K. Kiuchi, *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **104** (2010) 141101.
- 22) Y. Sekiguchi, *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **107** (2011) 051102.
- 23) Y. Sekiguchi, *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **107** (2011) 211101.
- 24) A. Akmal, *et al.*: *Phys. Rev. C* **58** (1998) 1804.
- 25) F. Douchin and P. Haensel: *Astron. Astrophys.* **380** (2001) 151.
- 26) B. Friedman and V. R. Pandharipande: *Nuc. Phys. A* **361** (1981) 502.
- 27) H. Shen, *et al.*: *Nucl. Phys. A* **637** (1998) 435.
- 28) H. Shen, *et al.*: *Astrophys. J. Suppl.* **197** (2011) 20.
- 29) T. Accadia, *et al.*: *Class. Quantum Grav.* **28** (2011) 025005; K. Kuroda, *et al.*: *ibid.* **27** (2010) 084004; M. Punturo, *et al.*: *ibid.* **27** (2010) 194002.
- 30) E. Nakar: *Phys. Rep.* **442** (2007) 166.
- 31) R. B. P. Narayan and T. Piran: *Astrophys. J.* **395** (1992) L83.

(2012年2月17日原稿受付)

Gravitational Waves and Neutrino Emissions from the Binary Neutron Star Mergers

Kenta Kiuchi and Yuichiro Sekiguchi

abstract: Coalescence of binary neutron stars is a main target of the ground-based gravitational observatory such as KAGRA and important target for the multimessenger astronomy. If gravitational waves and neutrinos from mergers of binary neutron star, it would be possible to probe the nuclear matter inside neutron stars. In this report, we would like to overview the discovery of the binary neutron star and the research for the gravitational wave and introduce our latest research based on Numerical Relativity.

応用物理 第81巻 第8号(2012年8月号) 予定目次

特集: 国際化時代の応用物理

巻頭言: 学会の国際展開: 応用物理 80 周年を迎えて
小長井 誠
 寄稿
 Building a dynamic, interactive global community of material
 researchers to address the challenges of the 21st century
 J. J. De Yoreo
 新しい価値は「つなぐ」ことから生まれる 中村道治
 「応用物理」創刊 80 周年に寄せて 安西祐一郎
 学会の協同と連携: 国際化時代の日本物理学会と応用物理学会
 家 泰弘

解説
 ナノテクノロジー時代の国際標準 一村信吾
 光格子時計の発明と展開 香取秀俊
 研究紹介
 面発光レーザーの 35 年 伊賀健一
 開発者が語る, 今だから話せる CD-R 開発秘話 石黒 隆
 HEMT の開発を振り返る 三村高志
 科学技術研究への提言: 垂直磁気記録の体験から 岩崎俊一
 基礎講座: 次世代光ディスク (BDXL) の記録および読み出しの
 方法 島野 健

ソフトマターにおける溶媒和効果

岡本隆一* (京都大学大学院理学研究科 606-8502 京都市左京区北白川追分町)
 小貫 明 (京都大学大学院理学研究科 606-8502 京都市左京区北白川追分町)

生体物質、コロイド等のソフトマター、濡れ現象等においてイオンは重要な役割を果たす。本稿ではメソスケールからマクロスケールの現象に及ぼすイオンの水和効果の重要性に焦点を当てる。イオンの溶媒和自由エネルギーは水中と有機溶媒中で大きく異なり、多くの場合その差はイオン一個あたり数十 $k_B T$ にもなる。そのため水-有機溶媒混合溶液を含むような系においては少量のイオンが大きな効果をもたらす。本稿では特に水和効果が誘起する相分離現象、及びコロイド粒子間の強い引力相互作用に関する最近の著者らの研究について解説する。

1. はじめに

水などの高い電気的極性を持つ溶媒中の混入物(特にイオン)の水和効果は化学物理の主要な研究対象である。物理学でも重要な概念であるはずだが認識は不十分である。例えば水を含んだ混合溶液においては、イオンは水分子と他の分子と選択的に相互作用し数十 $k_B T$ のエネルギーの損得がある。このようなイオンと溶媒との強い選択的な相互作用(選択的溶媒和)により、少量のイオンが系の性質を劇的に変化させる。例えば最近、 D_2O と 3-methylpyridine 混合溶液に親水性カチオンと疎水性アニオンからなる塩(NaBPh₄)を少量加えると、メソスケールの構造が形成されることが発見された。¹⁾ また、水を含む溶液、タンパク質、膜系、高分子電解質など、多くのソフトマター、あるいは生体物質においては、イオンが重要な役割を担っていると考えられており、静電相互作用の観点からはこれまでも多くの研究がなされてきた。しかし、従来の研究ではイオンの水和効果は考慮されておらず、メソスケールからマクロスケールの現象における水和効果は最近になり研究が始まった。²⁾ 本稿では混合溶液に少量のイオンを添加した場合の相転移現象に関する最近の著者らの研究を紹介する。³⁻⁵⁾ 主な結果は、(1)イオンがない場合の相分離領域からはるかに離れた条件下(温度、組成)における少量塩が誘起する相分離、(2)コロイド表面における塩が誘起する濡れによる強いコロイド間引力である。

2. イオンの溶媒和自由エネルギー

通常イオンのような荷電を持った粒子は、有機溶媒などの誘電率が低い溶媒よりも、水のような誘電率の高い極性溶媒の中に存在した方が自由エネルギー的に安定である。これはイオンと極性溶媒分子(電気双極子)との相互作用によるものである。このことを簡単に見るために、まずイオンの溶媒和自由エネルギーの古典的な表式(ボルン公式)を紹介する。⁶⁾ この理論では、溶媒を誘電率 ϵ の一様な媒質と考え、イオン1個あたりの溶媒和自由エネルギー(溶媒和化学ポテンシャル) μ_{sol}^{Bom} が球形電荷による静電場のエネルギー $\int d\mathbf{r} \epsilon E^2 / 8\pi$ により与えられるとする。すなわち半

径 a_{ion} の電荷 Ze を持つイオンまわりの電場は $E = Ze/er^2$ ($r > a_{ion}$) なので、

$$\frac{\mu_{sol}^{Bom}}{k_B T} = \frac{4\pi}{k_B T} \int_{a_{ion}}^{\infty} dr r^2 \frac{\epsilon}{8\pi} \left(\frac{Ze}{er^2} \right)^2 = \frac{Z^2 \ell_B}{2a_{ion}} \quad (2.1)$$

となり、誘電率 ϵ に反比例している。ここで $\ell_B = e^2/k_B T \epsilon$ は Bjerrum 長と呼ばれ、300 K の水では約 7 Å である。半径が 1 Å のオーダーの1価イオンを考えると、誘電率が水の1/4の溶媒と水とでは μ_{sol}^{Bom} は約 10 $k_B T$ も異なることになる。このボルン公式においては、イオンまわりの水和殻の形成(図1)、非線形誘電効果は無視されている。また混合溶媒の場合、イオンまわりに誘電率の高い成分が引き寄せられる効果も無視されている。従ってボルン公式は定性的意味しかない。また疎水性イオンには適応外である。

混合溶媒が相分離して二相共存状態にあり、一方の相(α 相)は極性が高く、もう一方(β 相)は低いとする。ここにイオンを入れた場合の両相における溶媒和化学ポテンシャル $\mu_{sol}^{\alpha}, \mu_{sol}^{\beta}$ の差

$$\Delta\mu_{sol} = \mu_{sol}^{\beta} - \mu_{sol}^{\alpha} \quad (2.2)$$

は Gibbs transfer free energy と呼ばれる(文献では1モルあたりで計算されているが、本稿では1イオンあたりの量とする)。ボルンの公式(2.1)からも示唆されるように、水-有機溶媒混合系においては $|\Delta\mu_{sol}|$ は $k_B T$ よりも遥かに大きくなる。例えば300 Kの水-ニトロベンゼン系における実験⁷⁾ から $\Delta\mu_{sol}/k_B T$ は Na^+ で 13.6, K^+ で 10.6, Br^- で 11.3, I^- で 7.46 である。さらに Ca^{2+} で 27.1 である。ただし α 相は

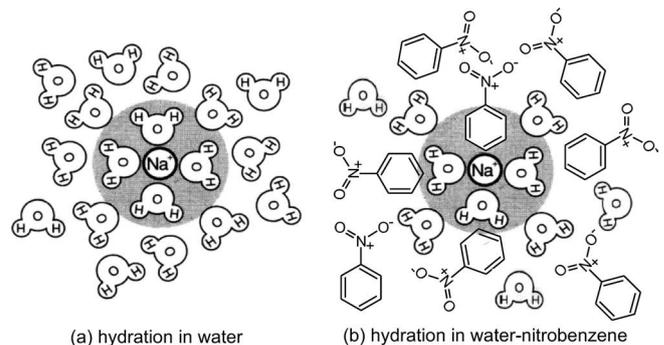


図1 (a) 水中における水和殻と (b) 水-ニトロベンゼン混合溶媒中における水和殻。文献2より転載。

* 現所属：京都大学福井謙一記念研究センター 606-8103 京都市左京区高野西開町 34-4

水が多い相とする。また BPh_4^- イオン (tetraphenylborate) はボロニオンが4個のベンゼン環の中心に包まれているため高い疎水性を有しており、 $\Delta\mu_{\text{sol}}/k_B T$ は負で -15 ぐらいである。以下で見るように混合溶液系においては、溶媒和エネルギーの非常に大きな成分依存性ゆえに少量のイオン添加が相転移に大きな影響を与える。また2相平衡が成り立つと、 $\Delta\mu_{\text{sol}}$ の存在のため各イオン種の濃度の違いと静電ポテンシャル差が生ずる。後者はガルバーニ電位差と呼ばれる。

3. 塩が誘起する相分離

水-ニトロベンゼンのような混合溶液に塩を少量添加した場合の相分離について、簡単なランダウ自由エネルギーに基づいて議論する。まずは問題を単純化して、電荷を持たない溶質が一方の溶媒成分に対して強い親和性を持つ場合を考える。溶媒の第一成分の体積分率を ϕ 、溶質の数密度を n とする。非圧縮性を仮定し、また溶質分子の体積は無視する。溶媒の第一、第二成分の分子サイズが等しいとすると、第二成分の体積分率は $1-\phi$ となる。溶媒組成 ϕ に依存した溶媒和化学ポテンシャルを、簡単のため ϕ に関して線形であると仮定して

$$\mu_{\text{sol}}(\phi) = \mu_{\text{sol}}^0 - k_B T g \phi \quad (3.3)$$

とする。ここで μ_{sol}^0 は溶媒第二成分における溶媒和化学ポテンシャルで、定数とする。無次元パラメータ g が溶質と溶媒第一成分の強い親和性を表し、 $g \gg 1$ とする。トータルの自由エネルギー密度 $f_{\text{tot}}(\phi, n)$ は、

$$f_{\text{tot}}(\phi, n) = f(\phi) + k_B T n \{ \ln(\lambda^3 n) - g \phi \}. \quad (3.4)$$

とする。溶質がない場合の自由エネルギー $f(\phi)$ には

$$\frac{f(\phi) v_0}{k_B T} = \phi \ln \phi + (1-\phi) \ln(1-\phi) + \chi \phi(1-\phi) \quad (3.5)$$

を採用する。ここで $v_0 = a_0^3$ は溶媒分子の体積 (a_0 は数 Å オーダーの長さ)、無次元の相互作用パラメータ χ は温度に対応するパラメータで、溶質がない場合には臨界温度は $\chi = 2$ に対応する。式(3.4)で $k_B T n \ln(\lambda^3 n)$ は溶質の並進エントロピー項で、 λ は熱的ド・ブroy波長である。

さて、モデル(3.4)に基づいて、平均組成 $\bar{\phi}$ と平均溶質濃度 \bar{n} 固定の条件下

$$\bar{n} = \int d\mathbf{r} n/V, \quad \bar{\phi} = \int d\mathbf{r} \phi/V \quad (3.6)$$

における二相共存状態を考える。ここで V は系の体積である。溶媒の第一成分が多い相を α 相、少ない相を β 相と呼ぶことにする。また以下では下付きの α と β はそれぞれの相における物理量を表すこととする。例えば溶媒の第一成分が水である場合には、 ϕ_α は α 相における水の体積分率を表す。相平衡の条件は、浸透圧および各成分の化学ポテンシャルが両相で等しいことである。まず溶質の化学ポテンシャル $\mu = \partial f_{\text{tot}} / \partial n$ に対する条件から、

$$n_\alpha / n_\beta = e^{g(\phi_\alpha - \phi_\beta)} \quad (3.7)$$

が得られる。溶媒の第一成分と第二成分の化学ポテンシャルに対する条件は、非圧縮極限においては、化学ポテンシャルの差 $h = \partial f_{\text{tot}} / \partial \phi$ が両相で等しいという条件になる：

$$h = f'(\phi_\alpha) - k_B T g n_\alpha = f'(\phi_\beta) - k_B T g n_\beta. \quad (3.8)$$

また浸透圧の条件は、グランドポテンシャル密度 $\omega = f_{\text{tot}} - h\phi - \mu n$ が両相で等しいという条件になる。この条件式から $\mu = k_B T [\ln(\lambda^3 n_\alpha) - g\phi_\alpha + 1] = k_B T [\ln(\lambda^3 n_\beta) - g\phi_\beta + 1]$ を消去すれば、

$$f(\phi_\alpha) - h\phi_\alpha - k_B T n_\alpha = f(\phi_\beta) - h\phi_\beta - k_B T n_\beta \quad (3.9)$$

となる。また α 相の体積比を γ_α とすると (すなわち α 相の体積は $\gamma_\alpha V$)、式(3.6)は

$$\begin{aligned} \gamma_\alpha &= (\bar{\phi} - \phi_\beta) / \Delta\phi \\ &= (\bar{n} - n_\beta) / \Delta n \end{aligned} \quad (3.10)$$

となる。ただし $\Delta\phi = \phi_\alpha - \phi_\beta$ 、 $\Delta n = n_\alpha - n_\beta$ とした。

ここで界面についても簡単に述べておく。相分離が起こると α 相と β 相を隔てる界面ができる。そこでは ϕ, n は連続的に変化すると考えられる。そのような界面は勾配自由エネルギー密度 $f_{\text{grad}} = (k_B T C / 2) |\nabla\phi|^2$ を式(3.4)に付け加えることによって、通常のギンツブルク-ランダウモデルの要領で記述できる。⁴⁾ ここで C は長さの逆数の次元を持ち、 a_0^{-1} のオーダーである。また壁に接触している場合の前駆濡れ転移も通常のカン-ランダウモデルと同様に予言さ

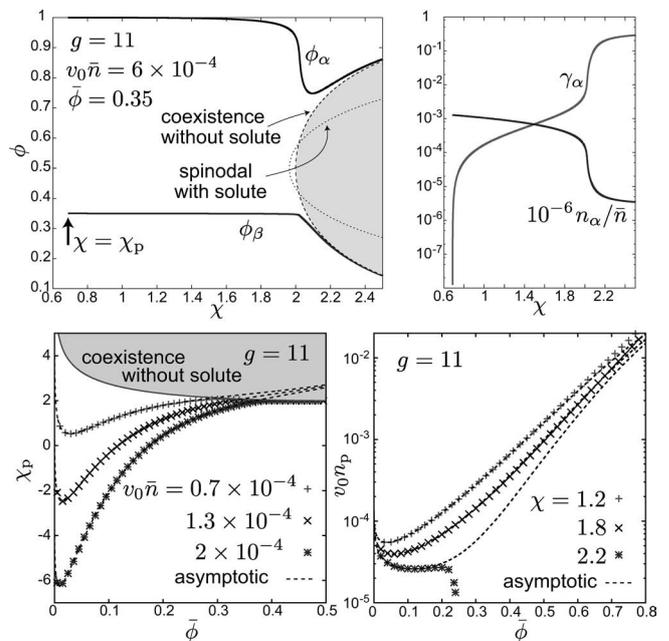


図2 水-有機溶媒混合系に、強い親水性を持つ溶質を少量加えた場合の相分離の様子。上段には $g=11$, $10^4 v_0 \bar{n} = 6$, $\bar{\phi} = 0.35$ とし、溶媒組成 ϕ_α, ϕ_β vs. χ (左上)、そして α 相の体積比 γ_α 、溶質濃度 n_α vs. χ (右上) をプロットした。下段には $g=11$ とした場合の $\chi_p(\bar{\phi}, \bar{n})$ (左下) および $n_p(\bar{\phi}, \chi)$ (右下) をプロットした。左下(右下)の図で破線は近似式(3.12) [(3.13)]を表す。文献4より転載。

れる.^{4,8)}

3.1 数値計算および近似解

上に挙げた式(3.7)–(3.10)を解けば、与えられた $\chi, \bar{\phi}, \bar{n}$, g に対する二相共存状態 $\phi_\alpha, \phi_\beta, n_\alpha, n_\beta, \gamma_\alpha$ が決定される。方程式は厳密には解けないのでまずは数値解を図2に示す。図2上段では $g=11, v_0\bar{n}=6 \times 10^{-4}, \bar{\phi}=0.35$ と固定して χ を変化させた場合の相分離の様子である。上段の図に見られるように $\chi_p(\bar{\phi}, \bar{n}) < \chi \leq 2$ のところで

$$\phi_\alpha \cong 1, \quad n_\alpha \gg n_\beta = e^{-g\Delta\phi} n_\alpha \quad (3.11)$$

という解が存在する(左上図には溶質がない場合の共存線も示した。これからわかるように溶質がない場合には $\chi < 2$ では相分離しない)。またこの解では $\phi_\beta \cong \bar{\phi}$ となっている。右上図に示したように、 χ が小さくなる(温度が高くなる)につれて α 相の体積比 γ_α は小さくなり、 $\chi = \chi_p$ でゼロとなり、 $\chi < \chi_p$ では一相状態となる。図2下段左には $10^4 v_0 \bar{n} = 0.7, 1.3, 2$ の場合について χ_p をプロットした。これを見ると χ_p は $\bar{\phi} \cong 0.01$ 付近に極小を持つことがわかる。このことから、平均組成 $\bar{\phi}$ がある程度小さい場合の方が溶質によって相分離が誘起され易いということがわかる。

一方で $\bar{\phi}$ と χ を固定して \bar{n} を増加させた場合、 $\chi < 2$ であってもある臨界濃度 $n_p(\bar{\phi}, \chi)$ を超えると相分離が引き起こされる($\bar{n} = n_p$ で $\gamma_\alpha = 0$ となる)。図2右下に $\chi = 1.2, 1.8, 2.2$ の場合について n_p を示した。ここでも $\bar{\phi} \leq 0.1$ に極小があり、平均組成 $\bar{\phi}$ がある程度小さい方が相分離が起こり易いことがわかる。また $\chi = 2.2, 0.249 < \bar{\phi} < 0.751$ では溶質がなくても相分離するため $n_p = 0$ となる。

式(3.11)を満たす解は近似的に構成することができる。⁴⁾ 頁数の都合上、ここでは χ_p と n_p の近似表式を挙げるにとどめる。この理論の要点は式(3.11)が成り立つことから、式(3.9)において $f(\phi_\alpha) \sim (1 - \phi_\alpha) \ln(1 - \phi_\alpha)$ とできること、そして式(3.8)において $-Tgn_\beta$ を無視できることである。この近似の結果として、

$$\chi_p \cong [-\ln \bar{\phi} - v_0 \bar{n} e^{g(1-\bar{\phi})}] / (1 - \bar{\phi})^2, \quad (3.12)$$

$$n_p \cong e^{-g(1-\bar{\phi})} G(\bar{\phi}) / k_B T \quad (3.13)$$

が得られる。ここで $G(\phi) = -(k_B T / v_0) [\ln \phi + \chi(1 - \phi)^2]$ と定義した。図2左下と右下にはそれぞれ式(3.12)と(3.13)を破線でプロットした。左下図では $\bar{\phi} \leq 0.3$ では近似解と数値計算の結果は良く一致している。溶媒組成 $\bar{\phi}$ が大きいくところでは式(3.11)が成り立たなくなるため近似解が正しくなくなる。右下図では $\chi = 1.2, 1.8$ では近似解と数値計算の結果は良く一致しているが、 $\chi = 2.2$ では $\bar{\phi} > 0.249$ で $n_p = 0$ となるのが近似解では記述できていない。

3.2 電場を考慮した場合

ここまでは溶質が電荷を持たないと仮定してきた。しかし溶質がイオンの場合には電場を考慮しなければならない。カチオンおよびアニオンの数密度をそれぞれ n_1, n_2 として、対応する溶媒和化学ポテンシャルを $\mu_i^{\text{sol}}(\phi) = \mu_{i0}^{\text{sol}} - k_B T g_i \phi$

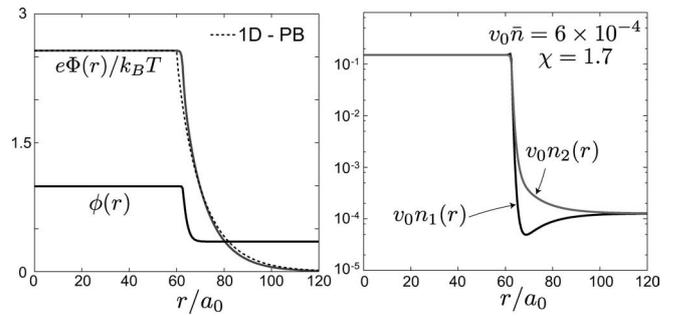


図3 球対称のシミュレーションにより求めた静電ポテンシャル $\Phi(r)$ 、水の体積分率 $\phi(r)$ (左図)および、イオン密度 $n_1(r)$ と $n_2(r)$ (右図)。左図の静電ポテンシャルは一次元非線形Poisson-Boltzmann方程式の解(点線)とよく一致している。文献4より転載。

($i=1, 2$)とすると、モデル式(3.4)は以下のように拡張できる⁹⁾：

$$\frac{F}{k_B T} = \int d\mathbf{r} \left[\frac{f(\phi)}{k_B T} + \frac{C}{2} |\nabla\phi|^2 + \sum_{i=1,2} n_i [\ln(n_i \lambda_i^3) - g_i \phi] + \frac{\epsilon |\nabla\Phi|^2}{8\pi k_B T} \right]. \quad (3.14)$$

ここで Φ は静電ポテンシャルで、ポアソン方程式 $-\nabla \cdot \epsilon \nabla \Phi = 4\pi e(n_1 - n_2)$ を満たす。平衡状態では自由エネルギーが溶媒と溶質の平均密度固定 $\bar{\phi} = \int d\mathbf{r} \phi / V, \bar{n} / 2 = \int d\mathbf{r} n_i / V$ の条件下で最小になる。導出は省略するが、マクロな相分離の熱平衡状態においては、対応関係

$$g = (g_1 + g_2) / 2, \quad n = n_1 + n_2 \quad (3.15)$$

の下で式(3.7)–(3.10)が成立する。⁴⁾ イオンの電荷の効果は $g_1 \neq g_2$ の場合に相分離界面付近の電気二重層として表れる(勿論荷電コロイドや荷電壁がある場合には、その表面付近においても荷電の効果は重要である)。図3では $g_1 = 15, g_2 = 7$ として、球対称のシミュレーションを行った。システムサイズ(容器の半径)は $600a_0$ とした。その他のパラメータは $\chi = 1.7, \bar{\phi} = 0.35, v_0 \bar{n} = 6 \times 10^{-4}$ とした。図3左には横軸を動径方向 r にとって溶媒組成 ϕ と静電ポテンシャルを示した。イオンがない場合は $\chi < 2$ では一相状態であるが、イオンの親水性によって相分離が起こり α 相のドロップレットができており、 $r \cong 60a_0$ あたりに界面が形成されている。界面付近では静電ポテンシャルが変化しており α 相と β 相で電位差が生じていることもわかる(ガルバーニ電位差)。図3右にはカチオンとアニオンの密度分布を示した。界面から離れたところでは電気的に中性 $n_1 = n_2$ となるが、界面付近では両者の値が食い違っていることがわかる(電気二重層)。ここでみたような電気二重層やガルバーニ電位差は、各イオンの溶媒和化学ポテンシャルが異なる場合($g_1 \neq g_2$)に生じる。

4. 混合溶媒中における荷電コロイド間相互作用

前章までは混合溶媒に少量の塩を入れた場合の相分離現象について議論した。では混合溶媒中にコロイド粒子のよ

うな数十 nm～数 μm 程度の大きさの物質を入れた場合、それらの間の相互作用は塩によってどのような影響を受けるであろうか。以下では前節で述べた相分離現象がコロイド表面で起こることにより、混合溶媒中における荷電コロイド間に強い引力相互作用が働くことをみる。

単成分溶媒中における荷電コロイド間相互作用は、ファンデルワールス引力と静電斥力の和になる（この理論は、提唱した4人、Derjaguin, Landau, Verwey, Overbeekの頭文字をとってDLVO理論と呼ばれている^{10, 11)}）。静電気力はコロイド表面の電荷密度や溶媒中の塩濃度が変わればその強さ、到達距離が変わる。したがって多数のコロイド粒子がある場合、マクロな相（凝集、分散、結晶化など）は、表面電荷密度や塩濃度によってコントロールされる。

一方混合溶媒中では、上記二種類の力に加えて新たな相互作用が生じる。混合溶媒中においては通常コロイド表面はどちらか一方の成分に対してより親和性を持つために、コロイド周囲では溶媒組成が不均一になる。コロイド粒子同士が近づくと、不均一な領域が重なり合うために相互作用が生じるのである。このような相互作用は同種表面間では引力になり、特に相分離臨界点近くでは強く、長距離に及ぶ。実験的には、相分離共存線近くの一相領域においてコロイド粒子が凝集することが観察されている。¹²⁾ 凝集現象は必ずしも臨界点に近くないところでも観察されており、そのメカニズムは未だ明らかではない。

混合溶媒のモデルには式(3.14)を採用する。コロイド表面の寄与は

$$F_s = k_B T \int dS [\gamma\phi + f_d] \quad (4.16)$$

とし、全自由エネルギーを $F = F_{\text{sol}} + F_s$ とした。^{3, 5)} ここで、 $\gamma\phi$ はコロイド表面と溶媒との選択的な相互作用、そして f_d はコロイド表面のイオン解離の自由度による自由エネルギーで、 $f_d = \sigma_0 \{ \alpha \ln \alpha + (1-\alpha) \ln (1-\alpha) + (\Delta_0 - \Delta_1 \phi) \}$ とした。ただし σ_0 はコロイド表面の解離基の密度、 α はコロイド表面のイオン解離度で0から1の値を取る。そして $k_B T (\Delta_0 - \Delta_1 \phi)$ はコロイド表面のイオンの溶媒和自由エネルギーで、 $\Delta_1 \gg 1$ とする。このモデルについて幾つかコメントをしておく（詳細は該当論文を参照して頂きたい⁵⁾）。

(1) コロイド粒子間のファンデルワールス引力は上記モデルからは独立した物理的起源から生じる。したがってコロイド粒子間に働く力は、上記モデルにより計算される力とファンデルワールス引力との単純な和になる。(2) 平衡条件 (F の極小条件) の一つとしてコロイド表面におけるローカルな解離平衡の式 (質量作用の法則) が導かれる。ただし解離係数はコロイド表面における水の濃度に依存しており ($\propto \exp[(\Delta_1 + g_1)\phi]$)、水の濃度が高ければ解離度 α が大きくなる。(3) 静電ポテンシャル $U = e\Phi/k_B T$ と溶媒組成の平均からのずれ $\delta\phi = \phi - \bar{\phi}$ が小さい場合には F を $\delta\phi$ と $\delta n_i = n_i - \bar{n}$ に関して二次まで展開できる。この場合には、相互作用ポテンシャルを解析的に計算できて、DLVO ポテ

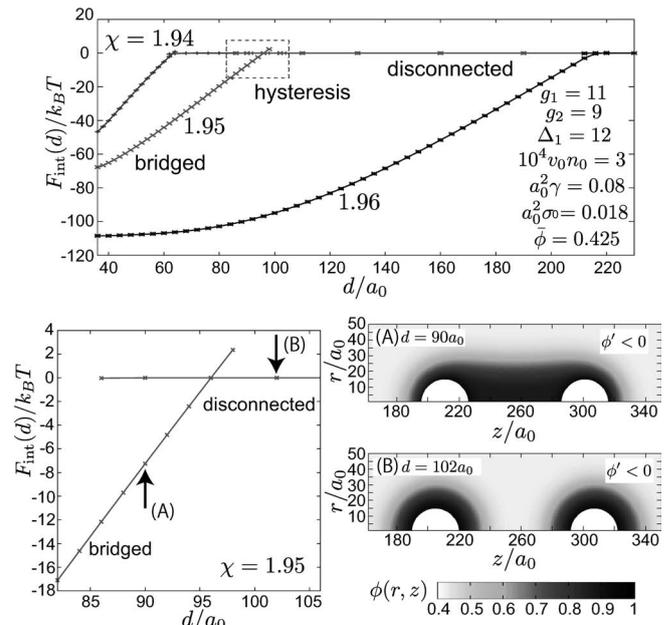


図4 荷電コロイド2粒子系のシミュレーション結果。荷電コロイド2粒子間相互作用エネルギー F_{int} vs. 粒子間隔 d (上段) および、荷電コロイドまわりの水の体積分率 ϕ のプロファイル (右下)。コロイド間距離 d に応じて、コロイド表面の濡れ層が連結 (bridge) した状態と連結していない (disconnected) 状態があり、それらは一次転移する。上図の破線の四角で囲んだヒステリシス部分を左下に拡大表示し、右下の ϕ のプロファイル図に対応する点を矢印で示している。文献5より転載。

ンシャルを溶媒組成不均一性も含むように一般化した公式が得られる。

上記モデルに基づいて軸対称の数値計算を行い、荷電コロイド2粒子間の相互作用ポテンシャル $F_{\text{int}}(d)$ を計算した (図4)。各粒子間隔 d に対して自由エネルギーを最小化するイオン分布、溶媒組成分布、コロイド表面の解離度を計算し、そのときの自由エネルギーを相互作用ポテンシャル $F_{\text{int}}(d)$ と定義している。溶媒のパラメータ値は、イオンなしならば一相状態になるが、イオン添加によって前節の相分離が起こるように選んである。図4右下に示した溶媒組成 ϕ のプロファイルからわかるように、コロイド表面に水が多い相 (α 相) が形成される (コロイド表面を濡らす)。コロイド間距離が小さい場合にはこれらの濡れ層が連結 (bridged) して粒子間に強い引力が働く (図4右下の (A))。一方コロイド間距離が十分大きいときにはこれらの濡れ層は連結せず (disconnected)、粒子間の力は小さい (図4右下の (B))。図4左下に示したようにコロイド間距離を変化させていくと、一つのコロイド間距離に対して連結状態と非連結状態が共に自由エネルギー極小状態に対応するような領域がみられる (ヒステリシス)。真の熱平衡状態は自由エネルギーが小さい方の状態なので、連結状態と非連結状態は、それぞれの自由エネルギーが等しいところで移り変わる。移り変わる場所では相互作用エネルギー (自由エネルギー) の粒子間隔に対する傾きが不連続なので一次転移である。連結していない状態では、 $\chi = 1.94, 1.95, 1.96$ 全ての場合において粒子間の力は弱く、 F_{int} がほ

ほぼゼロになっていることが図4上段から読み取れる。

5. おわりに

本稿ではイオンの水和効果に関わるメソスケールからマクロスケールにおける現象に関する著者らの理論的研究、(1)少量イオン添加が誘起する混合溶液の相分離現象、(2)イオンが誘起するコロイド表面の濡れによる強いコロイド間引力、の二つについて解説した。コロイド相互作用に関しては、我々の研究は2体間相互作用にとどまっており、実際のコロイド系の凝集現象に関しては未だ解らない部分が多い。また本研究においてはコロイドの運動が準静的(コロイドの運動が溶媒の緩和に比べて十分遅い)であることを仮定している。しかし実際の緩和過程においては溶媒の緩和や流体効果によってここで紹介したコロイド間引力からのずれが生じるはずである。このような多体系や動力学の問題に対するコンピュータシミュレーションを中心とした研究が今後の課題となる。混合溶液中のコロイド凝集に関する実験は数多いが、溶媒和効果という観点から調べたものはまだないと思われる。このような実験的研究の進展にも期待したい。またコロイド表面の濡れがコロイド間相互作用に大きな影響を与えることからわかるように、より基本的な問題として濡れ(転移)における溶媒和効果・電荷効果は重要である。固体電極での化学反応における溶媒和効果、蛋白質表面での溶媒和効果の重要性は言及にとどめる。

一方で混合溶液に親水性のカチオンと疎水性のアニオンから構成される塩を添加した場合、全く異なった相転移現象が見られる。^{1,13)} D₂Oと3-methylpyridine混合溶液にNaBPh₄を加えると、秩序相において多重ラメラ(オニオン)構造が形成される。また一相状態における中性子小角散乱実験から得られる構造因子が有限波数にピークを持つ。さらにはこのような溶媒に荷電コロイドを入れた場合、相互作用エネルギーが粒子間隔に関して振動減衰することが理論的に予想されている。⁵⁾このような系のメソスケール~マクロスケールの振る舞いは未知であり、数値的、実験的研究が待たれる。

選択的相互作用は高分子・コロイドなどのソフトマターで著しい。例えば水-油系に選択的高分子や選択的コロイドを混入した場合などが挙げられる。さらにポリマーブレンドなどの二成分混合系において、一方の成分のみが水と

水素結合をする場合には、選択的水素結合が重要である。即ち微量な水が相分離を引き起こす。¹⁴⁾イオンに限らず強い選択性を持った物質は微量であっても系の振る舞いを劇的に変化させる。このような効果を積極的にとらえる視点に立った研究の進展に期待したい。

参考文献

- 1) K. Sadakane, A. Onuki, K. Nishida, S. Koizumi and H. Seto: Phys. Rev. Lett. **103** (2009) 167803; 貞包浩一朗, 瀬戸秀紀: 日本物理学会誌 **65** (2010) 349.
- 2) A. Onuki, R. Okamoto and T. Araki: Bull. Chem. Soc. Jpn. **84** (2011) 569; A. Onuki and R. Okamoto: Curr. Opin. Colloid In. **16** (2011) 525.
- 3) R. Okamoto and A. Onuki: J. Chem. Phys. **131** (2009) 094905.
- 4) R. Okamoto and A. Onuki: Phys. Rev. E **82** (2010) 051501.
- 5) R. Okamoto and A. Onuki: Phys. Rev. E **84** (2011) 051401.
- 6) M. Born: Z. Phys. **1** (1920) 45.
- 7) L. Q. Hung: J. Electroanal. Chem. Interfacial Electrochem. **115** (1980) 159.
- 8) J. Cahn: J. Chem. Phys. **66** (1977) 3667.
- 9) A. Onuki: Phys. Rev. E **73** (2006) 021506.
- 10) B. V. Derjaguin and L. D. Landau: Acta Physicochim. (USSR) **14** (1941) 633.
- 11) E. J. W. Verwey and J. Th. G. Overbeek: *Theory of the Stability of Lyophobic Colloids* (Elsevier, Amsterdam, 1948).
- 12) D. Beysens and D. Estève: Phys. Rev. Lett. **54** (1985) 2123.
- 13) T. Araki and A. Onuki: J. Phys.: Condens. Matter **21** (2009) 424116.
- 14) T. Hashimoto, M. Itakura and N. Shimidzu: J. Chem. Phys. **85** (1986) 6773.

(2012年2月26日原稿受付)

Solvation Effects in Soft Matter

Ryuichi Okamoto and Akira Onuki

abstract: The electrostatic interaction among charged objects such as ions, charged colloids, and polyelectrolytes have been studied extensively in soft matter physics. However, the solvation effect has not yet been adequately accounted for. In mixtures of water and an organic solvent (oil), the solvation chemical potential of an ion strongly depends on the local composition. We have examined the phase behavior of water-oil mixtures with a small amount of salt on the basis of a Ginzburg-Landau model, where we take into account the selective solvation among ions and solvent molecules. With hydrophilic ions added, the selective solvation can stabilize water-rich domains enriched with ions in a wide temperature-composition region where the mixture would be in-one phase states without ions. We have furthermore studied the effective interaction among colloids in mixture solvents with ions. The colloid surfaces can easily be covered by a water-rich wetting layer induced by selective solvation. Bridging of the wetting layers produces a strong attractive interaction.

強磁性金属絶縁体転移—完全スピン分極した電子系のパイエルズ転移—

上田 寛

〈東京大学物性研究所 277-8581 柏市柏の葉 5-1-5 〉

中尾 朗子

〈総合科学研究機構東海事業センター 319-1106 茨城県那珂郡東海村白方 162-1 〉

中尾 裕則

〈高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 305-0801 つくば市大穂 1-1 〉

太田 幸則

〈千葉大学大学院理学研究科 263-8522 千葉市稲毛区弥生町 1-33 〉

一般に、強磁性体の多くは金属伝導を示すのに対し、絶縁体の多くは反強磁性体である。しかしながら、キュリー温度 180 K の強磁性金属であるクロムホランダイト $K_2Cr_8O_{16}$ は、驚くことに、95 K で強磁性のまま絶縁体に転移する。これは初めて観測された強磁性金属-強磁性絶縁体転移である。X線結晶構造解析と密度汎関数理論に基づく電子構造計算により、この金属絶縁体転移がパイエルズ機構で起こることを明らかにした。

1. はじめに

金属絶縁体転移は、動き回っていた電子が突然局在化するという電子状態における最も劇的な変化で、古くから今に至るまで物性物理の中心的課題である。これまで金属絶縁体転移を示す多くの酸化物が見出されている。最も有名なのは V_2O_3 で、電子相関に起因するモット転移の典型例と言われている。¹⁾ 混合原子価を持つバナジウム酸化物の多くやペロフスカイト型マンガノ化物も金属絶縁体転移を示すが、これらの場合は電荷分離・電荷秩序を伴っている。²⁾ 他に、一次元電子系における金属絶縁体転移として、反強磁性秩序に伴うバンドの折り返しによりギャップが開いて絶縁化する場合やパイエルズ転移が挙げられる。³⁾ パイエルズ転移の場合、絶縁体相では格子の2量体化に伴いスピン-重項対を形成するのが一般的である。このように、多くの金属絶縁体転移が観測されているが、磁気相互作用は反強磁性で、絶縁体相の基底状態は反強磁性秩序か非磁性スピン-重項状態であり、強磁性のものはない。ここで紹介するクロムホランダイト $K_2Cr_8O_{16}$ は、強磁性を維持したまま金属から絶縁体に転移する。これは初めて観測された強磁性金属から強磁性絶縁体への転移である。

$K_2Cr_8O_{16}$ はホランダイトと呼ばれる鉱物の一種で、その

構造は、トンネルを持つ Cr_8O_{16} 骨格とトンネル内を占める K^+ イオンより構成され (図1挿入図参照)、 Cr_8O_{16} 骨格では CrO_6 八面体が稜を共有して作るジグザグ鎖が頂点酸素を共有して連結している。室温では正方晶 $I4/m$ 構造をとり、K, Cr, O の結晶学的サイト数はそれぞれ 1, 1, 2 である。 K^+ イオンは電子を Cr_8O_{16} 骨格に供与するため、Cr イオンは形式電荷 $Cr^{3.75+}$ ($Cr^{3+}:Cr^{4+}=1:3$) となり、すなわち4個の Cr^{4+} に対し1個の余分な電子 (過剰電子) を持つ。従って、ホランダイトは一般的には金属伝導が期待されるが、その場合、温度低下とともに過剰電子の局在化、すなわち電荷分離・電荷秩序を伴った金属絶縁体転移が期待できる。仮に電荷秩序が起こる場合、1:3の割合の3価イオンと4価イオンを互いに近づかないように三角形を基本単位とするジグザグ鎖に配することは難しく、また、同様にスピンの反強磁性配列も難しいという幾何学的フラストレーションの問題も内在する。

本稿では、 $K_2Cr_8O_{16}$ がこのような幾何学的フラストレーションを避け、自身が持つ結晶構造および電子構造の特徴を生かして電荷分離・電荷秩序することなく過剰電子を局在させ、強磁性を維持したまま絶縁化するという誠に巧みな自然現象について報告する。

2. 強磁性金属絶縁体転移と構造変化

$K_2Cr_8O_{16}$ は高压下 (約 7 GPa) でしか合成できない。我々は $K_2Cr_2O_7$ をフラックスとして高压下での $K_2Cr_8O_{16}$ 単結晶の育成に成功した。⁴⁾ その単結晶を用いて c 軸 (トンネル方向) に沿って測定した電気抵抗と粉末試料を用いて測定した磁化率を図1に示す。⁴⁾ $K_2Cr_8O_{16}$ は $T_c=180$ K で強磁性に転移し、低温での磁化測定からは $2Cr^{3+}(d^3)+6Cr^{4+}(d^2)$ のフル磁気モーメントに対応する $18\mu_B/8Cr$ の磁化が観測される。磁化曲線にはほとんどヒステリシスが見られず、軟磁性体である。⁴⁾ 一方、電気抵抗は T_c で磁気抵抗を示す以外目立った変化はなく、 $T_{MI}=95$ K でわずかの飛びを示した後急激に増加し絶縁体に転移する。室温付近での電気抵抗は金属的温度依存性を示すが、 T_{MI} から 250 K の間でも負の温度依存 (熱活性型ではない) を持ち典型的な金属

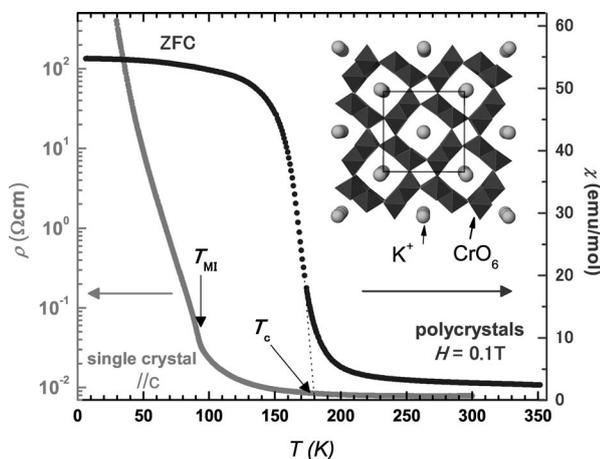


図1 $K_2Cr_8O_{16}$ の電気抵抗と磁化率の温度変化。挿入図は c 軸方向から見た結晶構造。 $K_2Cr_8O_{16}$ は $T_c=180$ K で強磁性に転移し、 $T_{MI}=95$ K で強磁性を維持したまま金属から絶縁体に転移する。

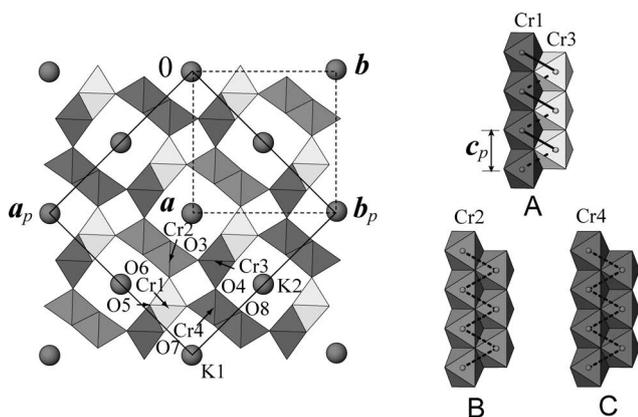


図2 低温強磁性絶縁体相の結晶構造(単斜晶 $P112_1/a$)と3種類のジグザグ鎖。(フルカラー口絵参照.)

とは言いがたい。しかしながら、レーザー光電子分光実験から、 T_M 以下でフェルミ面に小さなギャップが開き95 Kで確かに金属から絶縁体に転移することが証明された。この金属絶縁体転移に際し磁化率にほとんど変化がなく、磁気的には強磁性を維持したまま金属から絶縁体に変化する。

多くの混合原子価物質での金属絶縁体転移は電荷分離・電荷秩序を伴っているが、 $K_2Cr_8O_{16}$ の場合にも Cr^{3+} と Cr^{4+} への電荷分離・電荷秩序が起こりうるのかという興味を持たれる。電荷分離・電荷秩序の有無をはじめ金属絶縁体転移の機構を解明するため、単結晶を用いた放射光X線回折実験を行い、構造相転移を観測するとともに低温相の構造を決定した。^{5,6)} $T_M=95$ K以下で超格子反射が観測され、強度の温度変化から2次の相転移であることが示唆される。⁶⁾ 低温強磁性絶縁体相の構造は単斜晶 $P112_1/a$ で、図2に示す。単位格子は元の格子の $\sqrt{2}a \times \sqrt{2}b \times c$ となり、K, Cr, Oの結晶学的サイト数はそれぞれ2,4 (Cr1-Cr4), 8 (O1-O8)と増える。ジグザグ鎖は、結合交替を持つCr1とCr3よりなるジグザグ鎖Aと結合交替を持たないCr2よりなるジグザグ鎖B, Cr4よりなるジグザグ鎖Cの3種類あり、ジグザグ鎖Aとジグザグ鎖Bで囲まれたトンネルとジグザグ鎖Aとジグザグ鎖Cで囲まれたトンネルが a 軸方向に縞状に並んでいる(図2)。一方、ルチル構造に似たカラムに着目すると、すべてCr1, Cr2, Cr3, Cr4よりなる鎖(4本鎖カラム)できている(図2)。Crサイトは4つあるが、それぞれの CrO_6 八面体のCr-O距離の平均値はほとんど同じで、電荷分離・電荷秩序を示す証拠はない。

代わりに、図3に示すように4本鎖カラムにおいて特徴的な格子歪が観測される。強磁性金属相の正方晶 $I4/m$ 構造では、4本鎖カラムを構成するCr, O原子はすべて c 軸に垂直なミラー面 (m) 上にある、すなわち、 c 軸方向に沿ってのCr-O距離は等しいのに対し(図3(a))、低温強磁性絶縁体相では、これらCr, O原子はミラー面から c 軸方向に沿って変位し、Cr-O距離に結合交替が起きている(図3(b))。これは、4本鎖カラムにおける lattice-dimerization を意味し、しかも lattice-dimerization には単位格子の上半分

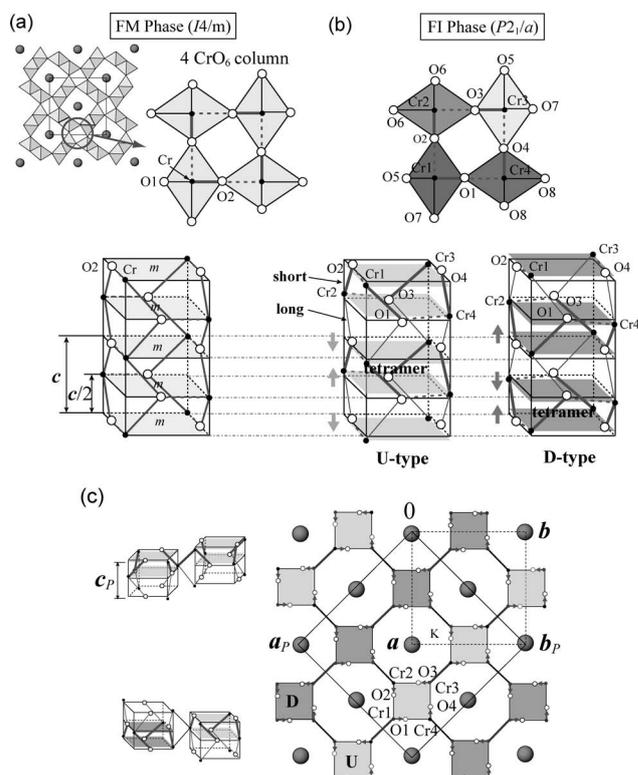


図3 (a) 強磁性金属 (FM) 相の構造および CrO_6 4本鎖カラム構造。(b) 強磁性絶縁体 (FI) 相での CrO_6 4本鎖カラム構造。FI相ではCr-Oの結合交替 (lattice-dimerization) が観測される。(c) 異なる lattice-dimerization を持つ CrO_6 4本鎖カラム (U-type と D-type) の空間的配列。(フルカラー口絵参照.)

で短いCr-O距離となるU型と下半分で短いCr-O距離となるD型の2種類があり、それらは図3(c)に示すように縞状に並んでいる。ここで、U型とU型(D型とD型)を結ぶのがジグザグ鎖Aで、従って、Cr-Cr結合交替を持つことになる。一方、U型とD型を結ぶのはジグザグ鎖Bあるいはジグザグ鎖Cで、この場合、Cr-Cr距離は等しい。

3. 低温相の電子構造

観測された格子歪が何を意味するのか、金属絶縁体転移の起源を明らかにするため、ハバード型の斥力相互作用 U を考慮した局所密度近似 (LDA+ U) や一般化勾配近似 (GGA+ U) を用いてこの系の電子構造計算を行った。^{5,7)} その結果、高温強磁性金属相での結晶構造を用いた計算では、(1) $3d$ 電子が完全にスピンの極少数スピバンドに大きなギャップが開いたいわゆるハーフメタルである、(2) 多数スピバンドの状態密度にはフェルミ面近傍に鋭い谷がありほとんど擬ギャップ的な状態が実現している、従って、(3) ほんの少しの格子歪により結晶の対称性が落ちれば運動エネルギーの利得を得てバンドギャップが開くことが予想される、等が示された。さらに、低温絶縁体相での結晶構造を用いて電子構造計算を行うと、図4に示すように、実際ギャップが開いた絶縁体が発現することが分かった。Cr酸化物で通例仮定される $U=2-3$ eVの値を用いて計算すると、バンドギャップは0.03-0.13 eV程度開き、これは最近のレーザー光電子分光による実験値、約

40 meV と良く整合している。

高温構造を用いた計算でも低温構造を用いた計算でも、系の基底状態は価電子 (3d 電子) が完全にスピン分極した強磁性である。強磁性の起源は、良く知られた CrO₂ の強磁性と同様、二重交換相互作用によると考えられる。すなわち、Cr の 3d_{xy} 軌道に1個の電子がほぼ局在し、残りの電子が頂点酸素の 2p_z 軌道と強く混成した非局在的な 3d_{yz}, 3d_{zx} 軌道に存在している。低温相におけるバンドギャップの大きさ (約 0.1 eV) は、バンド幅 (約 2 eV) よりずっと小さく、強磁性の二重交換機構に重要な影響は与えない。

各軌道に射影した部分状態密度の計算結果から、頂点酸素を経由したジグザグ鎖間の結合がジグザグ鎖内の結合よりずっと大きいことが分かる。すなわち、フェルミ準位近傍の電子状態は二つのジグザグ鎖をつなぐ頂点酸素の 2p_z 軌道と強く混成した Cr の 3d_{yz} と 3d_{zx} 軌道からもっばらできている (図 4(b)-(d))。これは、この系がいわゆる負の電荷移動エネルギーを持った状況にあることの反映である。従って、この系の電子状態は、第ゼロ近似としては、頂点酸素で強く結合した4本の Cr-O 鎖 (4本鎖カラム) の1次元電子系と見なすことができる。⁵⁾

4. パイエルス機構による金属絶縁体転移

4本鎖カラムの擬1次元的電子構造は、強磁性金属相で計算したフェルミ面によっても確認できる。すなわち、図 4(e) に示すように、ネスティングベクトル $Q_z = 2\pi/c$ の明確にネストしたフェルミ面が現れる。このことから、金属絶縁体転移の起源として極めて自然にパイエルス機構が帰結される。これは、強磁性絶縁体相で観測される上述した結晶構造の変化と整合している。すなわち、この Q_z に対応する c 軸方向の格子変形 (lattice-dimerization) が生じ、フェルミ準位のところにバンドギャップが開く。格子変形 (lattice-dimerization) は単位胞内で起こるので単位胞が c 軸方向に2倍に広がることはないが、 ab 面内では $\sqrt{2}a \times \sqrt{2}b$ の単位胞の拡張に導く。

4本鎖からなる1次元カラム構造の存在は、この物質の Cr の平均価数が Cr^{3.75+} の状況でパイエルス転移が起こることと整合するのだろうか。この平均価数 Cr^{3.75+} は、Cr⁴⁺ (3d²) の背景の上に4個の Cr あたり1個の余分な電子がいることを意味しているが、これは一見パイエルス歪みにとって都合が良い状況には見えない。しかしながら、4本鎖カラムの擬1次元的電子系を考えると、完全スピン分極した Cr の4本鎖では全部で12本ある 3d t_{2g} バンドのうちフェルミ準位近傍に4本のバンドが存在し、ちょうど上から3本までのバンドが空で、4番目のバンドが電子でフルに占有されている状況にある。歪みのない高温相では、3番目と4番目のバンドがバンド端で繋がっているが、パイエルス歪みはこの間でバンドの繋がりを切り、ギャップを開け、系を絶縁化する。つまり、4個の Cr 原子当たり過剰電子が1個という状況は、4本鎖を単位とする1次元電

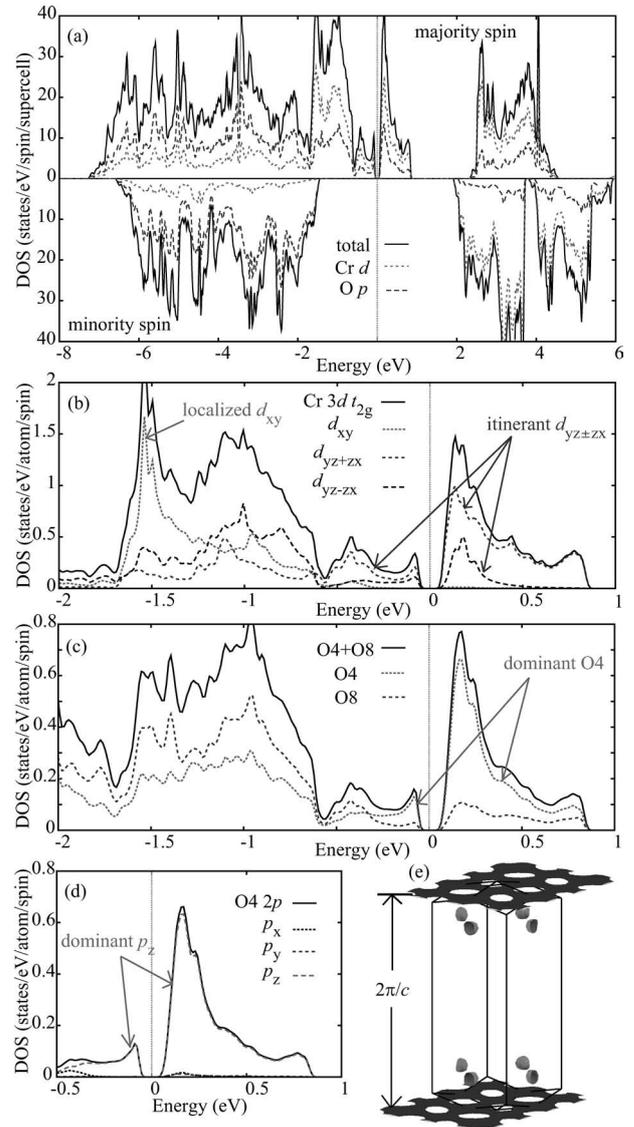


図 4 K₂Cr₈O₁₆ の強磁性絶縁体相における状態密度の計算結果。⁵⁾ GGA + U (U = 3 eV) を用いた。(a) 広いエネルギー領域でのスピン分極した状態密度。(b) Cr4 の多数スピンバンドの部分状態密度の t_{2g} 軌道成分。(c) O4 と O8 の多数スピンバンドの部分状態密度。(d) O4 の多数スピンバンドの部分状態密度の各軌道成分。(e) 強磁性金属相でのフェルミ面 (U = 2.9 eV)。

子系にとっては、パイエルス転移に好都合となっている。実空間でこれを見直せば、図 3(b) に示すように、4本鎖カラムにおいて格子変形 (lattice-dimerization) が生じ、過剰電子が局在する。この場合、4本鎖カラムを単位とする擬1次元電子系のため、4個の Cr⁴⁺ イオンに余分の電子1個が弱く局在することになる。すなわち Cr の4量体 (tetramer) が形成される。1個の Cr⁴⁺ イオンに余分の電子が局在すれば Cr³⁺ となり電荷分離・電荷秩序が起こることになるが、4個の Cr⁴⁺ イオンで1個の余分の電子を共有すると Cr の平均価数は変わらず Cr^{3.75+} で、電荷分離・電荷秩序は起こらない。これは構造解析の結果と一致している。

孤立した Cr-O 4本鎖カラム構造に対するタイトバインディング近似でのバンド計算は、この状況を良く説明する。すなわち、Cr の 3d_{yz+zx} と 3d_{yz-zx} 軌道およびこれらと π 結合でつながる頂点酸素の 2p_z 軌道を取り入れた計算は、GGA

+ U の計算で求められた上4本の $3d t_{2g}$ バンドを良く再現する。従って、この系のフェルミ準位近傍のバンド構造は、実は驚くほど単純である。実際、強磁性絶縁体相で観測されるCr-Oの結合交替の効果をホッピングパラメータの交替として取り入れればバンドにギャップが開き、系は絶縁化する。平均価数が $\text{Cr}^{3.75+}$ であることと4本鎖の1次元カラム構造とはこのように完全に整合し、電荷秩序などとは無関係にこの系にパイエルス不安定性を導くのである。⁵⁾

価電子が完全にスピン分極した系においてパイエルス不安定性のため金属絶縁体転移が起こるといのは、極めて珍しい現象である。パイエルス転移は、通常、結合交替によりバレンスバンドが形成され電子がスピンスिंगレットを組むことに対応しており、従って、上向きスピンと下向きスピン両方の存在を必要とする。しかしこの系では、フェルミ面近傍の片側スピンだけがパイエルス不安定性を持ち、バンドエネルギー(電子系の運動エネルギー)を得るようにバンドギャップが開くことで金属絶縁体転移が生じている。すなわち、この系の金属絶縁体転移は、完全にスピン分極した電子系(spinless fermions)における、スピン自由度が役割を果たさない極めてユニークなパイエルス転移の実現であると言える。⁵⁾

5. $\text{K}_2\text{M}_8\text{O}_{16}$ ($M=\text{Ti, V, Cr, Mn}$) について

$3d$ 遷移金属ホランダイト酸化物 $\text{K}_2\text{M}_8\text{O}_{16}$ ($M=\text{Ti, V, Cr, Mn}$)は共通の構造を持つので、バンド充填に対する電子相関効果の系統的研究を可能にする。 M イオンは $M^{3.75+}$ ($M^{3+}:M^{4+}=1:3$)の混合原子価を持つ、すなわち、4個の M^{4+} に対し1個の過剰電子を持つ。バンド充填量が少なく、従って電子相関が弱いと考えられる $\text{K}_2\text{Ti}_8\text{O}_{16}$ では過剰電子は局在化せず、低温までパウリ常磁性金属である。⁸⁾ $\text{K}_2\text{V}_8\text{O}_{16}$ では過剰電子がVイオンに局在化し、電荷分離・電荷秩序を伴った金属絶縁体転移を示す。⁹⁾この場合、通常の電荷秩序では不安定と思われる V^{3+} と V^{4+} がそれぞれ直線状に並んだ電荷秩序を示す。¹⁰⁾これは、 V^{3+} と V^{4+} が直線状に並ぶことにより、スピン-重項 $\text{V}^{4+}-\text{V}^{4+}$ 対や $\text{V}^{3+}-\text{V}^{3+}$ 対形成を可能にし、それによりエネルギーの利得があるためと理解できる。さらにバンド充填量が増えた $\text{K}_2\text{Cr}_8\text{O}_{16}$ では電荷分離・電荷秩序の傾向は増すが、ジグザグ鎖に $\text{Cr}^{3+}:\text{Cr}^{4+}=1:3$ を配列する電荷秩序フラストレーションや安定に存在する雰囲気 Cr^{3+} と Cr^{4+} では非常に異なるという化学的理由などにより、1個の過剰電子が1個の Cr^{4+} イオンに局在するすなわち電荷分離・電荷秩序が困難となる。しかしながら、4本鎖カラムを1次元電子系とする結晶構造的特徴と4個の Cr^{4+} ($3d^2$)あたり1個の余分な電子がいる電子構造的特徴の整合性から、電荷分離・電荷秩序を伴わないで、パイエルス機構により過剰電子が局在できる。これはある種の自己組織化と言える。Mn系は、 $\text{K}_{16}\text{Mn}_8\text{O}_{16}$ のK欠損物質しか合成できず、この場合、余分の電子はK空格子点近傍のMnに捕縛され、結果 Mn^{3+}

となり局在する。

6. まとめ

ホランダイト型遷移金属酸化物 $\text{K}_2\text{Cr}_8\text{O}_{16}$ の強磁性金属絶縁体転移における構造変化を明らかにした。低温強磁性絶縁体相では、4本鎖の1次元カラム構造に格子変形(lattice-dimerization)が起こり、異なる格子変形を持つ4本鎖カラムが ab 面内でストライプ状に並ぶ。観測された構造データを用いて第一原理電子状態計算を行った結果、この物質を形成する自然な1次元ブロックである4本鎖カラム構造よりなる擬1次元電子系がパイエルス転移を引き起こし、結果、過剰電子は4個の Cr^{4+} イオンによって共有され(Cr の4量体化)、系を絶縁化しているという機構が明らかになった。絶縁化しても強磁性は不変である。すなわち、過剰電子は4個の Cr^{4+} イオンに弱く局在するため開くバンドギャップはバンド幅に比して非常に小さく、二重交換相互作用による強磁性は不変に保たれる。このように、大変珍しい強磁性絶縁体物質は、実は完全スピン分極した電子系でのパイエルス不安定性による金属絶縁体転移の結果生じていることが分かった。これは大変珍しい現象である。我々の結果はまた、ホランダイトやそれに類似するトンネル構造を持った物質群では、ジグザグ鎖をつなぐ頂点酸素を経由した結合がジグザグ鎖内の結合より大きくなり得ることを示しており、こうした物質群におけるこれまでの解釈に変更を迫るものである。

本研究を行うにあたって、合成と物性測定では長谷川邦洋氏(物性研)、磯部正彦氏(物性研)に、構造測定では八巻佑樹氏(東北大)、村上洋一氏(KEK)に、電子構造計算では鳥山達矢氏(千葉大)、小西健久氏(千葉大)に協力いただきました。深く感謝いたします。

参考文献

- 1) N. F. Mott: *METAL-INSULATOR TRANSITIONS* (Taylor & Francis Ltd., New York, 1974).
- 2) M. Marezio, D. B. MaWhan, P. D. Derniel and J. P. Remeika: *Phys. Rev. Lett.* **28** (1972) 1390; C. N. R. Rao and B. Raveau: *Colossal Magnetoresistance, Charge Ordering and Related Properties of Manganese Oxides* (World Scientific, Singapore, 1998).
- 3) 鹿兒島誠一:『低次元導体』(裳華房, 2000).
- 4) K. Hasegawa, M. Isobe, T. Yamauchi, H. Ueda, J. Yamaura, H. Gotou, T. Yagi, H. Sato and Y. Ueda: *Phys. Rev. Lett.* **103** (2009) 146403.
- 5) T. Toriyama, A. Nakao, Y. Yamaki, H. Nakao, Y. Murakami, K. Hasegawa, M. Isobe, Y. Ueda, A. V. Ushakov, D. I. Khomskii, S. V. Streltsov, T. Konishi and Y. Ohta: *Phys. Rev. Lett.* **107** (2011) 266402.
- 6) A. Nakao, Y. Yamaki, H. Nakao, Y. Murakami, K. Hasegawa, M. Isobe and Y. Ueda: *J. Phys. Soc. Jpn.* **81** (2012) 054710.
- 7) M. Sakamaki, T. Konishi and Y. Ohta: *Phys. Rev. B* **80** (2009) 024416; *ibid.* **82** (2010) 099903(E).
- 8) M. Isobe, S. Koishi, S. Yamazaki, J. Yamaura, H. Gotou, T. Yagi and Y. Ueda: *J. Phys. Soc. Jpn.* **78** (2009) 114713.
- 9) M. Isobe, S. Koishi, N. Kouno, J. Yamaura, T. Yamauchi, H. Ueda, H. Gotou, T. Yagi and Y. Ueda: *J. Phys. Soc. Jpn.* **75** (2006) 073801.
- 10) A. C. Komarek, M. Isobe, J. Hemberger, D. Meier, T. Lorenz, D. Trots, A. Cervellino, M. T. Fernandez-Diaz, Y. Ueda and M. Braden: *Phys. Rev. Lett.* **107** (2011) 027201.

(2012年2月24日原稿受付)

Ferromagnetic Metal-Insulator Transition: Peierls

Mechanism for Spinless Fermions

Yutaka Ueda, Akiko Nakao, Hironori Nakao and Yukinori Ohta

abstract: Ferromagnetism usually goes hand in hand with metallicity, whereas insulators are in general antiferromagnetic. Surprisingly, however, chromium hollandite $K_2Cr_8O_{16}$, which is a ferromagnetic metal with Curie temperature of 180 K, undergoes a phase transition into an

insulator at 95 K, without changing its ferromagnetism. This is the first observation of the ferromagnetic metal to ferromagnetic insulator transition. Using the X-ray structural analyses and first-principles electronic structure calculations, we clarified that this metal-insulator transition is due to the Peierls mechanism where the spin degrees of freedom play no role.

最近の研究から

異波長二光子分光による反陽子ヘリウムの精密原子分光

堀 正樹 (マックスプランク量子光学研究所 Hans Kopfermann Strasse 1, D-85748 Garching, Germany)

早野 龍五 (東京大学大学院理学系研究科 113-0033 東京都文京区本郷7-3-1)

反陽子ヘリウム原子に、二本の対向するレーザー光線を照射して反陽子の非線形な遷移をおこす二光子分光実験を行った。反陽子の仮想準位を実準位の近くに配置して遷移確率を上げ、共鳴線のドップラー幅を減少させて遷移周波数を $(2.3\text{--}5) \times 10^{-9}$ の精度で測定した。量子電磁力学計算と比較することで反陽子・電子質量比を 1836.152674(23) と決定した。反陽子と陽子の電荷と質量は 7×10^{-10} の不確かさで一致した。

1. はじめに

準安定反陽子ヘリウム ($\bar{p}\text{He}^+$) は、He 原子核のまわりを基底状態の電子と、高い主量子数 $n \sim 38$ と軌道角運動量子数 $l \sim n+1 \sim 38$ を持つ反陽子がまわる三体系のリユードベリ原子である。^{1,2)} この原子の遷移エネルギーをレーザー分光で精密に測ることによって、反陽子と電子の質量比 $M_{\bar{p}}/m_e$ を求めて、陽子・電子質量比 M_p/m_e と等価か検証することができる。通常、精密分光を行うにあたり実験データの分解能と精度を制限するものは、原子の熱運動によって引き起こされるスペクトル線のドップラー幅である。^{2,3)} 最近 CERN の ASACUSA 実験グループは、 $\bar{p}\text{He}^+$ に対向する二本のレーザー光線を照射して、深紫外の遷移波長 139.8 nm, 193.0 nm, および 197.0 nm を持つような、三つの反陽子の非線形二光子遷移を励起することにはじめて成功した。これにより、ドップラー幅を大幅に減少させて鋭い分光スペクトルを測定して、原子の遷移周波数を $(2.3\text{--}5) \times 10^{-9}$ の精度で求めることに成功した。²⁾ この結果を三体系の量子電磁力学 (QED) 計算⁴⁾ と比較することで、 $M_{\bar{p}}/m_e = 1836.1526736(23)$ と決定したが、これは同程度の精度で知られている陽子の値 M_p/m_e と一致した。本稿では、この実験について報告する。

あらゆる物理法則の基本的な性質として、電荷 (C) と空間 (P) と時間 (T) を同時に反転させても不変であると考えられている。¹⁾ 理論的には、(1) 重力の無い平坦な空間において、(2) 相互作用が局所的で、(3) ローレンツ対称性が成立し、(4) ラグラジアンがエルミートな場の量子

論は、CPT 対称性を保つことが証明されている (CPT 定理)。一方、仮に CPT 対称性を破るような場の理論があった場合、それはローレンツ対称性も同時に破ることも知られている (グリンバーク定理)。このように非常に強固に見える CPT 対称性の帰結として、反粒子は粒子と同じ質量と、符号が逆で絶対値が同じ電荷を持つ。陽子と反陽子のように、多数のグルーオンとクォークが強い相互作用によって束縛されている複合粒子も、全く同じ質量を持つ ($M_{\bar{p}} = M_p$) ことが示唆される。

一方、陽子・電子質量比 M_p/m_e は現代物理学における無次元の基本定数の一つである。標準理論のもとで安定な粒子のうち、最も基本的なバリオンとレプトンの質量比であり、高い実験精度で測定できるからである。現在、 M_p/m_e を最高精度で決定しているのは、ドイツ GSI 研究所とマインツ大学が行った水素様炭素イオン $^{12}\text{C}^{5+}$ をペニングトラップ中に捕獲した実験である。⁵⁾ この研究ではイオンが一樣ソレノイド磁場中で運動する際のサイクロトロン周波数 ν_c と、イオン中の電子がスピン反転する周波数 ν_s の比を計測した。得られた値 ν_c/ν_s を、QED 計算で求めたイオンの磁気能率の理論値 g で割り算することによって、 $M_p/m_e = 1836.1526733(14)$ と決定した。

M_p/m_e は他の様々な物理定数を求める際に用いられる。例えば、電磁相互作用の強さを表す微細構造定数 α を決定する方法として、レーザー冷却法を用いて Rb や Cs 原子を磁気光学トラップ中で捕捉した後、原子から放出される光子の周波数と、原子の反跳エネルギーを精密に測定

するものがある。⁶⁾ この実験結果と M_p/m_e 、イオンの質量、リュードベリ定数 R などの値から、 α を決定できる。なお、こうした物理定数を 9-10 桁以上の精度で求める場合、どのような実験的手法を用いようとも、複雑な QED 計算との比較が不可欠になる。⁶⁾

近年のレーザー分光技術の進歩によって、例えば水素の 1s-2s 遷移周波数は $\nu_{1s-2s} = 2466061413187035(10)$ Hz と決定されている。⁷⁾ Al^+ イオンの $^1\text{S}_0-^3\text{P}_0$ 遷移周波数については精度として 8.6×10^{-18} が得られているが、これは国際単位 (SI) 系の「秒」の定義である Cs のマイクロ波遷移周波数の決定精度 3×10^{-16} を上回っている。⁸⁾ こうしたレーザー技術を利用して、反陽子を含む原子の遷移周波数を測定して M_p/m_e の値を決定できないだろうか。そうすれば、陽子の値 M_p/m_e と本当に等価なのか検証できるはずである。

多くの反陽子原子は生成後 1 ps 以内に強い相互作用によって反陽子が原子核に吸収されて消滅してしまうため、高精度レーザー分光はできない。¹⁾ しかし $\bar{p}\text{He}^+$ の場合に限り、密度の高いヘリウム標的中でも数 μs の異常に長い寿命を持つ。その理由は、(1) リュードベリ軌道を占有する反陽子と原子核の波束の重なりが少ない、(2) 標的中の普通のヘリウム原子との衝突においては、1s 状態にある電子が反陽子を守る、(3) 電子の束縛エネルギーが 25 eV と大きいので、オーグメント過程で電子が放出されにくい、などの偶然が重なるためである。長寿命の $\bar{p}\text{He}^+$ を大量に生成するのが割合に容易なため、現時点でレーザー分光が行える唯一の反陽子原子となっている。また遷移周波数が $\nu = 1-2$ PHz 程度と高いため、 $\bar{p}\text{He}^+$ の寿命 τ が短くても、原理的にはイオントラップのサイクロトロン周波数と同程度の分解能 $\sim (2\pi\nu\tau)^{-1}$ が実現できるはずである。

2. 反陽子ヘリウムのサブドップラー二光子遷移

さて、 $\bar{p}\text{He}^+$ の遷移周波数は深紫外から赤外領域にわたって分布するが、最新の三体計算により 1×10^{-9} の精度で求められている。⁴⁾ 計算には特殊相対論補正や QED 補正で大きさが $m_e c^2 \alpha^6 / h$ 程度のものが含まれている。ここで c は光速、 h はプランク定数を表す。一方、従来のレーザー分光実験では、ドップラー幅の影響により実験精度が $10^{-7}-10^{-8}$ 程度に留まっていた。これは $\bar{p}\text{He}^+$ 原子が標的中で不規則な熱運動をするため、個々の原子から見たレーザーの周波数がドップラー偏移をおこすことに起因する。その結果、共鳴線は $\approx \nu \sqrt{8kT \log 2 / Mc^2}$ だけ広がってしまうが、ここで k はボルツマン定数、 T は温度、 M は原子の質量を表す。

二光子分光は、ドップラー幅をこえて精度を向上させる一つの方法である。例えば水素の 1s-2s 分光実験では、水素原子に二本の対向するレーザー光線を照射する。⁶⁾ レーザーの周波数を 1s-2s 遷移エネルギーの半分に調整すると、水素原子は対向する二個の光子を同時に吸収して励起する。この場合、光子は原子に対して吸収の前で運動量変化を与えないため、一次のドップラー幅は打ち消されて線幅の狭い共鳴線が観測される。だがこの手法をそのまま $\bar{p}\text{He}^+$ に適用するのは難しい。反陽子のように質量の大きい粒子が、非線形な二光子遷移をおこす確率は極めて低いため、強度が GW/cm^2 以上のレーザー光線でも照射しない限り、遷移がおきる前に原子が消滅してしまうのである。³⁾

本研究²⁾ では、この問題を次のように克服した。二光子遷移では、反陽子は仮想準位 (virtual state) と呼ばれる中間状態を経由して親準位から娘準位へ遷移する、と捉えることができる。「仮想」と呼ばれるゆえに、原子の本来の実準位 (real state) では無く、レーザー光線との相互作用によって一時的に生まれる準位だからである。二本のレーザー

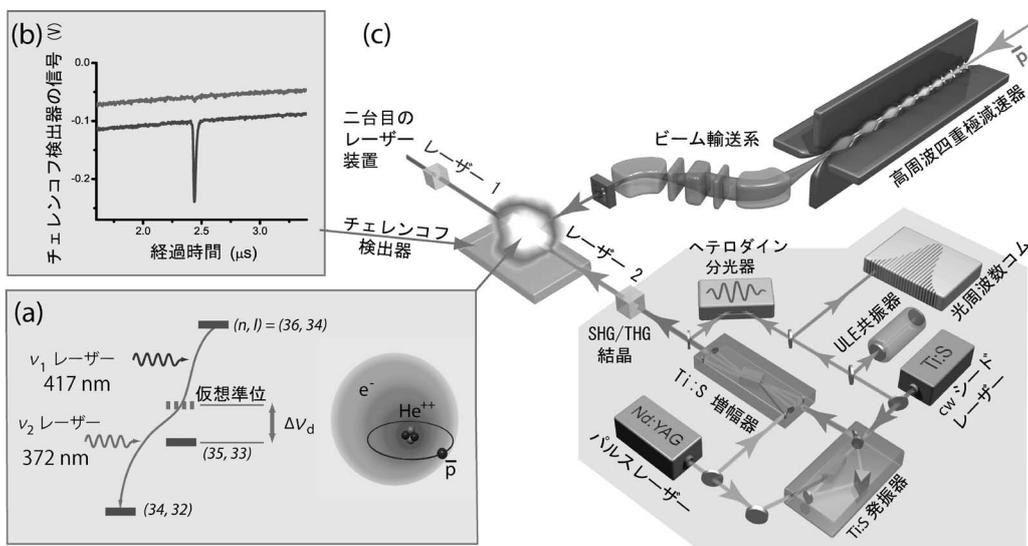


図1 (a) 二光子遷移 $(n, l) = (36, 34) \rightarrow (34, 32)$ に伴う $\bar{p}\text{He}^+$ 原子のエネルギー準位の一部、(b) 対向する二本のレーザー光線に $\bar{p}\text{He}^+$ に照射して二光子遷移を励起した際の、チェレンコフ検出器の信号 (濃い実線)。片方のレーザーの光周波数を共鳴条件から 500 MHz ずらした際の信号 (薄い実線)、(c) 実験装置の概念図。文献2より。

の周波数 ν_1 と ν_2 を調整して仮想準位を実準位 ($n-1, l-1$) の近く (例えば図1(a) 中で $\Delta\nu_d < 10$ GHz 以内) に持ってくると、両者の波束の重なりが大きくなり、 $p\text{He}^+$ の二光子遷移 ($n, l \rightarrow n-2, l-2$) の場合は遷移確率が約 10^5 倍になる。この時、あくまでも反陽子は準位 (n, l) から ($n-2, l-2$) へ直接遷移するのであって、($n-1, l-1$) を占有する反陽子の個数に変化はおこらない。つまり ($n-1, l-1$) は遷移確率を上げる寄与をするだけである。その結果、ドップラー幅は $|v_1 - v_2| / (v_1 + v_2)$ だけ減少する。^{2,3)}

実験では親準位 (n, l) として、反陽子が数 μs の間 He 原子核と接触せず、円形の軌道をまわり続けるものを選んだ。一方、娘準位 ($n-2, l-2$) は数 ns 以内に電子をオーグメント放出して反陽子ヘリウムイオン (二体系, $p\text{He}^{2+}$) に至るような短寿命なものである。この $p\text{He}^{2+}$ は、He 原子と衝突すると消滅する。その際に放出されるパイ中間子を、標的を囲むチェレンコフ検出器で捉えた。その結果、二本のレーザー光と $p\text{He}^+$ が共鳴すると、図1(b) のように反陽子が消滅する頻度に鋭いピークが現れた。

3. 実験装置

さて $p\text{He}^+$ の二光子遷移を励起するには、強度が MW 級でスペクトル純度が高く、位相ノイズの少ないレーザーを用いることが不可欠である。光ノイズが大きい場合、二光子と $p\text{He}^+$ の間のコヒーレンスが壊れて遷移がおきにくくなるからである。そのために、パルス幅 30-100 ns のチタンサファイアレーザー (図1(c)) を二台開発した。⁹⁾ まずフェムト秒光コムを使って、出力波長 728-940 nm の連続発振 (cw) 型レーザーの光周波数を 10^{-10} の精度で測定した。次に、この出力光をリング型チタンサファイア増幅器に注入して、強度を 1 MW までパルス増幅した。この際、光学結晶中で急激な屈折率の変化がおこるため、レーザーの周波数が最大数十 MHz 変調されてしまう。この「チャープ現象」は、深刻な系統誤差の原因となる。我々は、増幅前後の光の瞬間的な周波数をヘテロダイン分光器で測定して、電気光学素子で補正した。その結果、MW 級のレーザーとしては最高の分解能 6 MHz を実現したが、これは以前の $p\text{He}^+$ 単光子分光実験に使用した注入同期型 cw パルス色素レーザー¹⁰⁾ に比べて十倍の改善にあたる。試しに Cs 原子の 6s-8s 二光子遷移の周波数を測定したところ、レーザーは 1.4×10^{-9} より高い精度を持つことが確認できた。⁹⁾

なお $p\text{He}^+$ が He 原子と衝突すると二光子遷移が緩和してしまうので、実験では $p\text{He}^+$ を低密度 (温度 $T = 15$ K, 密度 $P = 0.8-3$ mb) の He ガス中で合成した。CERN の反陽子減速器 (AD) は円周 188 m のシンクロトロンであるが、運動エネルギー 5.3 MeV の反陽子 3×10^7 個を、幅 100 ns のパルスビームとして 100 秒に一発射出する。この反陽子を全長 3 m の高周波四重極減速器¹¹⁾ を通過させて 70 keV まで減

速した。さらに、減速器の出口に接続された磁気分析ビームラインを使って、反陽子を He 標的まで輸送して $p\text{He}^+$ を合成した。その 2-8 μs 後に、エネルギー密度が 1 mJ/cm^2 で、対向する二本のレーザー光線を照射して分光を行った。²⁾

4. 実験結果

図1(b) に示すチェレンコフ検出器の信号波形は、時刻 $t=0$ に生成した $p^4\text{He}^+$ (^4He 同位体を含む $p\text{He}^+$) が、約 4 μs の平均寿命で消滅する様子を表している。二本のレーザーの波長を 417 nm と 372 nm に調整して、仮想準位を実準位 (35, 33) から $\Delta\nu_d = 6$ GHz だけ離れたところへ配置することで、遷移波長 197 nm の二光子遷移 (36, 34) \rightarrow (34, 32) を共鳴脱励起させた。すると、スペクトル上の $t = 2.4 \mu\text{s}$ にピークが現れた。試しに 417 nm のレーザーを二光子共鳴条件から 0.5 GHz だけずらしたところ、信号は消えた (図1(b) の淡い実線)。これはピークの正体が、反陽子の非線形な二光子遷移によるもので、バックグラウンドとなるような単光子遷移の成分は、ほとんど含まれていないことを示している。²⁾

図2(b) に、二光子遷移周波数を中心に 417 nm のレーザーを -1 GHz から 1 GHz の範囲で掃引して測定したピークの強度を示す。サブドップラー二光子遷移の効果で、200 MHz の幅を持った鋭い共鳴線が現れた。従来の広いドップラー幅を持った単光子共鳴線 (36, 34) \rightarrow (35, 33) (図2(a)) と比べると、分解能が一桁改善している。約 500 MHz の間隔を持つ二本のピークは、電子スピンと反陽子の軌道角運動量の相互作用で生ずる微細構造である。さらに、反陽子と電子のスピン・スピン相互作用によって、図2(b) の矢印の位置に四本の超微細構造が現れるが、間隔が不均一なため、共鳴線の形状は左右非対称になる。

次に、 $p^4\text{He}^+$ に波長 296 nm と 264 nm のレーザーを照射して、遷移波長 139.8 nm の二光子遷移 (33, 32) \rightarrow (31, 30) を測定した (図2(c))。また $p^3\text{He}^+$ についても、410 nm と 364 nm のレーザーを使って遷移波長 193.0 nm の遷移

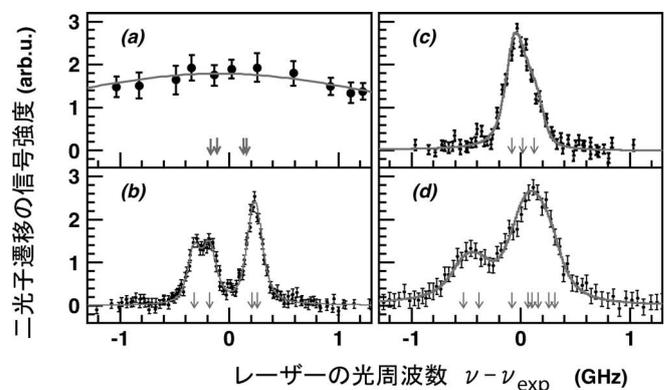


図2 (a) 従来の単光子分光法で測定した $p^4\text{He}^+$ の共鳴線 ($n, l = (36, 34) \rightarrow (35, 33)$). (b) 二光子遷移 (36, 34) \rightarrow (34, 32) の共鳴スペクトル。ドップラー幅が大幅に減少して鋭いピークが観測された。 (c), (d) $p^4\text{He}^+$ および $p^3\text{He}^+$ の二光子遷移 (33, 32) \rightarrow (31, 30) と (35, 33) \rightarrow (33, 31) のスペクトル。超微細構造の位置を矢印で示した。文献2より。

(35, 33) → (33, 31) を共鳴脱励起させた。この同位体中では、電子・ ^3He 原子核・反陽子の三者間でスピン・スピン相互作用がはたらくため、超微細構造は八本に増える。

測定したスペクトルに、数値計算で求めた共鳴線の形状(図2の実線)をフィットして、遷移周波数の実験値 ν_{exp} を求めた。計算には $\bar{p}\text{He}^+$ が持つ磁気副準位間の二光子遷移、パワー緩和、ドップラー幅、レーザー光線の空間分布やパルス形状、チャープ、ACシュタルク効果、超微細構造の影響を含めた。

遷移周波数 ν_{exp} の不確かさ σ_{exp} は、種々の統計的および系統的な不確かさ σ_{stat} と σ_{sys} の平方和として評価した。例えば、共鳴線 (36, 34) → (34, 32) (図2(b)) のデータに伴う統計的不確かさは $\sigma_{\text{stat}} \sim 3$ MHz だった。系統的な不確かさとしては、まず $\bar{p}^4\text{He}^+$ が標的中の He 原子と衝突する際に、そのポテンシャルが変形するため共鳴線の位置が 0.1–1 MHz だけ偏移することが量子化学計算¹²⁾ から予想された。試しに標的の数密度を 1×10^{18} から $3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ まで増やしたところ、予想通り、統計的不確かさ (3 MHz) の範囲内で有意な偏移は見られなかった。一方、外磁場によるゼーマンシフト、レーザーのチャープの測定の不確かさ、共鳴線の形状を計算する不確かさなどは 0.5–1 MHz 以下だった。

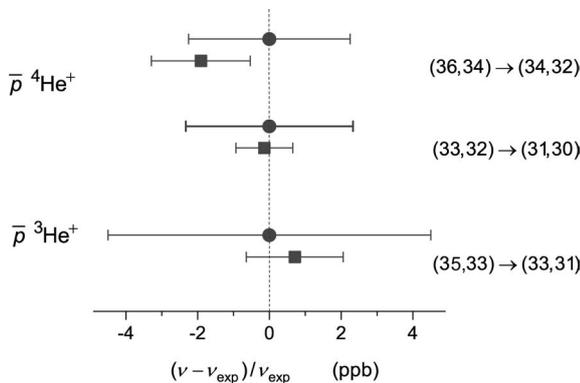


図3 二光子遷移周波数の実験値(丸)と計算値(四角)。文献2より。

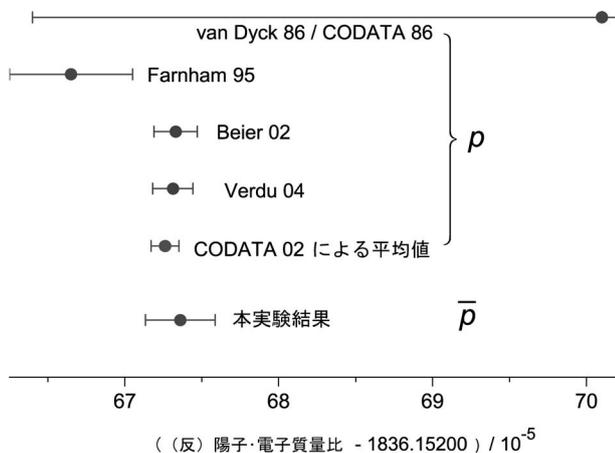


図4 本実験で決定した反陽子・電子質量比と、過去の実験から求められた陽子・電子質量比の比較。文献2より。

レーザー光線の強い電場が $\bar{p}\text{He}^+$ に作用すると、遷移周波数は $(\Omega_1 - \Omega_2) / \Delta\nu_d$ に比例する形で偏移する。このACシュタルク効果は、大きな誤差の原因となり得る。³⁾ ここで Ω_1 と Ω_2 は、親準位と仮想準位、および娘準位と仮想準位間のレーザー遷移の速度を示すラビ周波数である。我々は、二本のレーザー光線の強度を調整して、 $\Omega_1 - \Omega_2$ となるような実験条件でシュタルク効果を小さくした。さらにレーザーの周波数を調整して、仮想準位と実準位の位置関係を交互に $\pm \Delta\nu_d$ と逆転させて測定を行い、平均をとることでシュタルク偏移を 0.5 MHz の精度で打ち消すことに成功した。²⁾

こうして得られた遷移周波数の実験値 ν_{exp} と、コロボフ (Korobov) による QED 計算値 ν_{th} を比較したところ、 $(2.3-5) \times 10^{-9}$ の精度で一致した(図3)。両者の差 $\nu_{\text{th}} - \nu_{\text{exp}}$ は、以前行った単光子レーザー分光実験¹⁰⁾ の時に比べて、1/5~1/10 まで縮んでいる。理論値 ν_{th} の不確かさは 1 MHz 程度であるが、これは主に $m_e c^2 \alpha^6 / h$ より高い次数を持った QED 補正の計算が困難で、まだ厳密に評価できていないことに起因する。この計算には、科学技術データ委員会 (CODATA) が 2002 年に推奨した物理定数のうち、 ^3He や ^4He 原子核と電子の質量比、ボーア半径、リュードベリ定数などを用いた。⁵⁾ また、 ^4He と ^3He 原子核の荷電半径は 1.6757(26) fm と 1.9448(137) fm であるが、それらが電子軌道に及ぼす影響のせいで、測定した三つの遷移周波数 ν_{th} は 4–7 MHz 程度、偏移した。一方、反陽子の電荷半径による影響は数百 kHz 以下と小さいが、これは軌道角運動量子数 l の大きい反陽子と He 原子核の波束の重なりが小さいからである。

試しに計算で使う反陽子・電子質量比 $M_{\bar{p}}/m_e$ の値を、CODATA2002 が推奨する M_p/m_e の値から 10^{-9} だけ増やしてみると、 ν_{th} は 2.3–2.8 MHz だけ増えた。⁴⁾ 三つの遷移について、実験値と理論値が一番よく一致する(つまり、 $|\nu_{\text{th}} - \nu_{\text{exp}}| / \sigma_{\text{stat}}$ が最小になるような) $M_{\bar{p}}/m_e$ の値を最小二乗法で求めたところ、1836.1526736(23) と決定できた。この実験の不確かさ 2.3×10^{-6} には、統計的不確かさ 1.8×10^{-6} 、系統的な不確かさ 1.2×10^{-6} 、および理論計算の不確かさ 1.0×10^{-6} が含まれている。この結果は他の実験グループによって決定された陽子の値 M_p/m_e ^{5, 13–15)} と 10^{-9} の精度で一致している(図4)。一方、CPT 対称性が成立していると

表1 $\bar{p}\text{He}^+$ 原子の遷移周波数の実験値(括弧内の値は実験の不確かさ、統計的不確かさ、および系統的な不確かさ)ならびに、コロボフ (Korobov) による計算値(括弧内の値は QED 補正、および数値計算の不確かさ)。

二光子遷移 (n, l) → (n-2, l-2)	遷移周波数 (MHz)	
	実験値	Korobov ³⁾
$\bar{p}^4\text{He}^+$		
(36, 34) → (34, 32)	1522107062 (4) (3) (2)	1522107058.9 (2.1) (0.3)
(33, 32) → (31, 30)	2145054858 (5) (5) (2)	2145054857.9 (1.6) (0.3)
$\bar{p}^3\text{He}^+$		
(35, 33) → (33, 31)	1553643100 (7) (7) (3)	1553643100.7 (2.2) (0.2)

仮定した上で、本実験結果とCODATA2002が推奨する陽子の原子質量 $1.00727646677(10)$ uを組み合わせることで、電子の質量を $0.0005485799091(7)$ uと決定できた。この $p\text{He}^+$ 実験の結果は、最新のCODATA2010に反映され、電子質量を決定する元データの一つになっている。

1992年、ヒューズ (Hughes) とドイチュ (Deutsch) は反陽子と陽子の質量と電荷の相対的な差 $\delta_Q = |Q_p + Q_{\bar{p}}|/Q_p$, $\delta_M = |M_p - M_{\bar{p}}|/M_p$ が 2×10^{-5} 以下であると主張した。^{16,17)}これは、反陽子原子のX線分光実験で求めた遷移エネルギー(これは $Q_p^2 M_p$ に比例する)と、ペニングトラップ中に捕獲された反陽子のサイクロトロン周波数($Q_{\bar{p}}/M$ に比例する)の測定を組み合わせ得られた結果である。我々は、同様の解析を $p\text{He}^+$ の実験結果に適用することで、この限界を4桁改善した。まず、反陽子の質量と電荷 δ_M と δ_Q と、遷移周波数の計算値 ν_{th} の間には、 $\delta_M \kappa_M + \delta_Q \kappa_Q < |\nu_{\text{exp}} - \nu_{\text{th}}|/\nu_{\text{exp}}$ という線形な関係がある。ここで、 κ_M と κ_Q は係数で、それぞれ2.3-2.8および2.7-3.4程度である。三つの二光子遷移について平均した $|\nu_{\text{exp}} - \nu_{\text{th}}|/\nu_{\text{exp}}$ の値は、実験と計算の不確かさを考慮すると $\sim(8 \pm 15) \times 10^{-10}$ 程度であった。一方、ハーバード大学を中心とするTRAP実験^{17,18)}の結果から $(Q_{\bar{p}}/M_{\bar{p}})/(Q_p/M_p) + 1 = 1.6(9) \times 10^{-10}$ 、即ち $\delta_Q \sim \delta_M$ と結論づけられる。この二つの実験結果を組み合わせると、陽子と反陽子の電荷と質量の相対的な差は、90%の信頼水準で 7×10^{-10} 以下であることがわかる。

5. おわりに

二光子レーザー分光法の開発によって、共鳴線のドップラー幅の問題が克服され、 $p\text{He}^+$ の実験精度をさらに高める道が開けた。精度をあと数倍改善すれば、反陽子・電子質量比を、陽子・電子質量比より高い精度で決定できるはずである。将来的にはQED計算は $m_e c^2 \alpha^8 / h$ の補正項を評価できる見込みであり、遷移周波数の精度が現在の十倍の 1×10^{-10} 程度に達すると期待される。

本実験は、堀と早野の他、マックスプランク量子光学研究所のA・ソテル (A. Soter)、東大理学部D・バルナ (D. Barna)、A・ダックス (A. Dax)、オーストリア・シュテファンマイア研究所のS・フリードリヒ (S. Friedreich)、B・

ユハース (B. Juhász)、T・パスク (T. Pask)、E・ヴィドマン (E. Widmann)、ハンガリー・ウィグナー研究所のD・ホルバート (D. Horvath)、イタリア・ブレシア大学のL・ヴェントゥレリ (L. Venturelli)、N・ズルロ (N. Zurlo)によって行われた。

参考文献

- 1) R. S. Hayano, *et al.*: Rep. Prog. Phys. **70** (2007) 1995.
- 2) M. Hori, *et al.*: Nature **475** (2011) 484.
- 3) M. Hori and V. I. Korobov: Phys. Rev. A **81** (2010) 062508.
- 4) V. I. Korobov: Phys. Rev. A **77** (2008) 042506.
- 5) T. Beier, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **88** (2002) 011603.
- 6) P. J. Mohr and B. N. Taylor: Rev. Mod. Phys. **77** (2005) 1.
- 7) C. G. Parthey, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **107** (2011) 203001.
- 8) C. W. Chou, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **104** (2010) 070802.
- 9) M. Hori and A. Dax: Opt. Lett. **34** (2009) 1273.
- 10) M. Hori, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **96** (2006) 243401.
- 11) M. Hori, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **91** (2003) 123401; *ibid.* **87** (2001) 093401.
- 12) D. Bakalov, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **84** (2000) 235.
- 13) R. S. Van Dyck Jr., *et al.*: Bull. Am. Phys. Soc. **31** (1986) 244.
- 14) D. L. Farnham, R. S. Van Dyck, Jr. and P. B. Schwinberg: Phys. Rev. Lett. **75** (1995) 3598.
- 15) J. Verdú, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **92** (2004) 093002.
- 16) R. J. Hughes, B. I. Deutch: Phys. Rev. Lett. **69** (1992) 578.
- 17) Particle Data Group: J. Phys. G **37** (2010) 075021.
- 18) G. Gabrielse, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **82** (1999) 3198.
- 19) J. K. Thompson, S. Rainville and D. E. Pritchard: Nature **430** (2004) 58.

(2012年3月11日原稿受付)

Sub-Doppler Two-Photon Laser Spectroscopy of Antiprotonic Helium

Masaki Hori and Ryugo Hayano

abstract: Antiprotonic helium atoms were irradiated with two counter-propagating laser beams, thereby exciting some non-linear two-photon transitions of the antiproton. The transition probability was enhanced by placing a virtual intermediate state of the antiproton close to a real state. This partially canceled the Doppler broadening of the laser resonance caused by the thermal motion of the atoms. The resulting narrow spectral lines allowed us to measure the transition frequencies with fractional precisions of 2.3-5 parts in 10^9 . By comparing the results with QED calculations, we derived the antiproton-to-electron mass ratio as 1836.1526736(23). The antiproton charges and masses agreed with those of the proton to a precision of 7×10^{-10} .

密度汎関数理論の発展—拡張された制限つき探索理論—

樋口克彦 〈広島大学先端物質科学研究科 739-8530 広島市鏡山1-3-1 〉
 樋口雅彦 〈信州大学理学部 390-8621 松本市旭3-1-1 〉

密度汎関数理論のホーエンベルグ・コーンの定理には、基底状態を決める物理量（基本変数）の選択に対する任意性（自由度）がある。この任意性を利用して、基本変数として電子密度よりも多くの情報を有した物理量を系に応じて選択することが可能である。このような一般化を実現したのが拡張された制限つき探索理論である。拡張された制限つき探索理論は、電子密度以外の物理量も再現可能であるという利点がある一方で、それが実用上機能するためには、通常密度汎関数理論と同様に交換相関エネルギー汎関数の近似形の開発が不可欠である。本稿では、拡張された制限つき探索理論のアイデア、利点、課題、そしてその対処法について解説する。

1. はじめに

われわれが日常接する固体や液体などの凝縮系は、通常アボガドロ数のオーダーの原子により構成されている。凝縮系の示す性質、例えば超伝導性や磁性といった様々な性質は、構成する電子と原子核が複雑に絡み合った結果あらわれる。多数の電子と原子核がどのような環境のときにどのように絡み合い、その結果、凝縮系としてどのような性質を示すのか、凝縮系の諸物性を理解するとは、こう言った電子と原子核の絡み合った多体問題をいかにして解くかということに他ならない。

通常、このような大きな自由度の系の多体問題は、それを表すハミルトニアンをモデル化するなど単純化するところから出発し、系の性質を定性的あるいは半定量的に説明しようとする方法がとられることが多い。しかしながら近年の計算機および計算技術の発展に伴い、凝縮系をモデル化せずにありのまま取り扱おうとする手法が実行可能になってきた。このような手法が物性論における「第一原理計算」と呼ばれている手法である。¹⁾

第一原理計算手法の一つとして、計算機および計算技術を駆使して直接多体のシュレディンガー方程式を解くやり方がある。拡散モンテカルロ法や配置間相互作用法、トランスコリレーテッド法などに代表されるいわゆる波動関数理論である。¹⁾ これらは、系のすべての情報を包含した波動関数を直接求めるものであり、まさに第一原理計算手法の王道的な方法であろう。しかしながら、莫大な計算資源を必要とすることが多く、計算機の発展に負うところが大きいのも確かである。

その一方で、多体問題を見かけ上、一体問題に還元する第一原理計算手法も存在する。もし凝縮系の中の一粒子の感じる局所ポテンシャルが適切に用意できたならば、多体問題は取り扱いが比較的容易な一体問題に還元できるというアイデアである。このアイデアに対する巧妙かつ具体的な処方箋が、1964年、1965年にW. Kohnらによって示された。^{2,3)} これが「密度汎関数理論 (Density Functional Theory, 以降DFTと略す)」である。DFTは近年最も利用されている第一原理計算手法の一つであり、計算機の発展とともに適用物質は凝縮系全般にわたっている。¹⁾

DFTにおける一体の有効ポテンシャルはコーン・シャムポテンシャルと呼ばれ、その中でも多体効果を押し込めた部分は「交換相関ポテンシャル」と呼ばれている。DFTを基礎とした第一原理計算の良し悪しは、いかに適切に交換相関ポテンシャルを工夫するかにかかっている。

交換相関ポテンシャルの開発の歴史は、DFTが提案された際にKohn自身が提案した「局所密度近似 (Local Density Approximation; LDA)」に始まる。³⁾ それ以降の発展は、J. P. Perdewによる「Jacob's ladder」(旧約聖書の創世記にある地上世界と天上世界をつなぐ梯子)の例えがあるように、⁴⁾ 天上世界(化学的精度の実現した世界、第一原理計算のゴール)を目指し、現在も種々の近似形が提案され試行されている状況である。あまたある近似の中でも、特にPerdewらによる電子密度の空間的な勾配の効果であらわに取り込んだ近似(一般化された密度勾配近似を出発点とする一連の近似)は、簡便な形を有していることもあって多種の凝縮系で成功を収めてきており、特筆すべきものである。⁵⁾

それでは、DFTにおける交換相関ポテンシャルを成熟させる方向(Jacob's ladder)で、凝縮系の諸物性はすべて説明あるいは予言が可能となるであろうか。答えはノーである。Jacob's ladderを登った先に第一原理計算手法の一つのゴールがあるのは確かであるが、凝縮系の「様々な物理量」の説明あるいは予言を目標とした場合には、このルートではゴールは見えてこない。DFTは系の基底状態の電子密度と基底エネルギーの再現は保証しているが、その他の物理量に関しては予言能力がないのである。⁶⁾ DFTには予言できる物理量に限界があるということである。

このDFTの原理的な限界を超えるために、再現を保証する物理量が電子密度以外にも広がった第一原理計算手法を構築しようとするのは自然な流れであろう。本稿で紹介する「拡張された制限つき探索理論 (Extended Constrained-Search Theory, 以降ECS理論と略す)」はまさに「様々な物理量」を第一原理的に予言するためにDFTを一般化した理論である。⁷⁻¹¹⁾ 以下、ECS理論の詳細を説明していこう。

2. 密度汎関数理論の一般化へ向けての二つの課題

「様々な物理量」を再現するための方法として、どのようなものが有望かを考えてみよう。DFTではホーエンベルグ・コーンの定理 (HK 定理) により、電子密度 $\rho(\mathbf{r})$ が基底状態を決める物理量 (基本変数) であることが示され、それを利用してコーン・シャムポテンシャルを有する一粒子方程式 (コーン・シャム方程式, KS 方程式) が導かれている。^{2,3)} このKS 方程式の解を用いれば、基底状態の $\rho(\mathbf{r})$ および基底エネルギーの再現ができる。^{2,3)} これら以外の物理量 X (例えばスピン密度 $m(\mathbf{r})$ など) の基底状態での値は、原理的には $\rho(\mathbf{r})$ の汎関数 $X[\rho]$ として与えられる。しかし、この汎関数は極めて複雑になると思われ、またその具体的な表式も知られていない。それゆえ基底状態の $\rho(\mathbf{r})$ および基底エネルギー以外の物理量に関しては、それを基本変数に加える方針、すなわち $\rho(\mathbf{r})$ と同等にその物理量を再現する方法論の開発を目指す方が有望と思われる。このような方向でDFTを一般化したのがECS理論である。⁷⁻¹¹⁾

上述のDFTの一般化を実現するためには、二つの課題がある。一つ目の課題は、系に応じて「様々な物理量」を基本変数に選択できるようにHK定理を拡張し、それを利用して一粒子方程式を導出することである (図1)。これについては3章で説明する。

ECS理論の一粒子方程式には通常DFTと同様に多体効果押し込めた交換相関ポテンシャルが含まれる。ECS理論を具体的な凝縮系へ適用するためには、この交換相関ポテンシャルの近似形が必要不可欠である。後述するが、交換相関ポテンシャルは交換相関エネルギー汎関数と呼ばれる量を基本変数で汎関数微分した形で定義される。二つ目の課題とは、この交換相関エネルギー汎関数の近似形を開発することである (図1)。

新しい密度汎関数理論を開発するとは、単にHK定理の拡張とそれを利用した一粒子方程式の導出だけでなく、交換相関エネルギー汎関数の近似形を開発することがセットになっていることを強調しておきたい (図1)。この両者は、新しい理論を構築する際の両輪であり、特に後者については扱いやすいものを開発しなければ理論は機能しない。ECS理論ではこの交換相関エネルギー汎関数を、 $\rho(\mathbf{r})$ と電子密度以外の物理量の両方を使って表すことができると



図1 理論開発の両輪。

いう利点がある。交換相関エネルギー汎関数を電子密度のみで表そうとすると上述したような複雑な汎関数形 $X[\rho]$ が入らざるを得ないが、同等な基本変数とした場合には、扱いやすい近似形の創意工夫が期待できるのである。4章および5章では、ECS理論における交換相関エネルギー汎関数の近似形の開発例を紹介する。

3. 拡張された制限つき探索理論

スカラーポテンシャル $v_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ が外部から印加された系を考えよう。この系のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{W} + \int v_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \hat{\rho}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (1)$$

で与えられる。ここで、 \hat{T} , \hat{W} , $\hat{\rho}(\mathbf{r})$ はそれぞれ運動エネルギー、電子間相互作用エネルギー、電子密度の演算子である。オリジナルのDFTではこのようなハミルトニアンで表される系を扱い、 v 表示可能な電子密度¹²⁾に対してHK定理が成り立つことが示されている。²⁾ これを N 表示可能な電子密度¹³⁾に拡張したのがM. Levyによる制限つき探索理論である。¹⁴⁾ さらにLevyの理論を、任意の物理量を基本変数に選択できるように拡張したものがECS理論である。⁷⁻¹¹⁾ ECS理論における普遍汎関数は、Levyの理論を拡張して次のように定義されている。⁷⁾

$$F[\rho, X] = \text{Min}_{\Psi \rightarrow (\rho, X)} \langle \Psi | \hat{T} + \hat{W} | \Psi \rangle \quad (2)$$

ここで X は、系に応じて選択された物理量を表す。右辺はあらかじめ決められた N 表示可能な $\rho(\mathbf{r})$ と X の組 (ρ, X) を生む反対称波動関数の集合の中で、運動エネルギーと電子間相互作用エネルギーの和の期待値が最小値となるような波動関数を探索することを意味している。このようにして $\rho(\mathbf{r})$ と X に対して決まる最小値が $F[\rho, X]$ である。通常のLevyの理論と比べ波動関数の探索の範囲が、同じ $\rho(\mathbf{r})$ と X を生む波動関数の集合に細分化されていることが特徴である。⁷⁾ ここで、右辺の最小値は必ず存在すると仮定しておく。¹⁵⁾ この普遍汎関数を用いると、基本変数を $\rho(\mathbf{r})$ と X とした拡張されたHK定理を証明することができる。⁷⁾

次に通常のLevyの理論と同様に相互作用の無い参照系を導入して、参照系の運動エネルギー汎関数を

$$T_s[\rho, X] = \text{Min}_{\Phi \rightarrow (\rho, X)} \langle \Phi | \hat{T} | \Phi \rangle \quad (3)$$

と定義する。ここで右辺は、 (ρ, X) を生む単一のスレーター行列式 Φ の集合の中で、運動エネルギーの期待値が最小値になるような Φ を探索することを意味している。右辺の最小値は必ず存在すること、さらに参照系における (ρ, X) の集合が N 表示可能な (ρ, X) の集合に等しいことを仮定しておく。¹⁵⁾ $T_s[\rho, X]$ を用いて、 $F[\rho, X]$ を次のように分解する。

$$F[\rho, X] = T_s[\rho, X] + U[\rho] + E_{xc}[\rho, X] \quad (4)$$

ここで $U[\rho]$ は古典的なクーロン相互作用のエネルギーである。また $E_{xc}[\rho, \mathbf{X}]$ は (4)式により定義される ECS 理論の交換相関エネルギー汎関数である。拡張された HK 定理 ($\rho(\mathbf{r})$ と \mathbf{X} に関する変分原理) を実行すると、ECS 理論の一粒子方程式が得られる。 $\mathbf{X}=\mathbf{X}(\mathbf{r})$ とかける物理量の場合、ECS 理論の一粒子方程式は

$$-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \phi_k(\mathbf{r}) + \lambda(\mathbf{r}) \phi_k(\mathbf{r}) + \int \boldsymbol{\mu}(\mathbf{r}') \cdot \frac{\delta \mathbf{X}(\mathbf{r}')}{\delta \phi_k^*(\mathbf{r})} d\mathbf{r}' = \varepsilon_k \phi_k(\mathbf{r}) \quad (5)$$

となる。⁷⁾ ここで、 $\lambda(\mathbf{r})$ と $\boldsymbol{\mu}(\mathbf{r})$ は ECS 理論における一体の有効ポテンシャルで、 $E_{xc}[\rho, \mathbf{X}]$ を用いて次のように与えられる。

$$\lambda(\mathbf{r}) = v_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \int \frac{e^2 \rho_0(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' + \left. \frac{\delta E_{xc}[\rho, \mathbf{X}]}{\delta \rho(\mathbf{r})} \right|_{\substack{\rho=\rho_0 \\ \mathbf{X}=\mathbf{X}_0}} \quad (6)$$

$$\boldsymbol{\mu}(\mathbf{r}) = \left. \frac{\delta E_{xc}[\rho, \mathbf{X}]}{\delta \mathbf{X}(\mathbf{r})} \right|_{\substack{\rho=\rho_0 \\ \mathbf{X}=\mathbf{X}_0}} \quad (7)$$

ここで (6)式の右辺第三項目と (7)式の右辺が ECS 理論における交換相関ポテンシャルである。(5)式は通常の DFT における KS 方程式に比べ、 $\mathbf{X}(\mathbf{r})$ を誘起する有効ポテンシャル ((5)式の第三項目) が付加された形をしている。通常の DFT と同様に、この一粒子方程式を自己無撞着に解くことで基底状態の基本変数 $\rho_0(\mathbf{r})$ と $\mathbf{X}_0(\mathbf{r})$ を得ることができる。

ECS 理論の有効性は、次のようにして確認されている。物理量 \mathbf{X} として、 $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ を選んだとき、ECS 理論の一粒子方程式 ((5)式) はすぐさまスピン密度汎関数理論 (Spin-Density Functional Theory; SDFT)^{16,17)} の KS 方程式に帰着する⁸⁾ (図2)。同様に、 \mathbf{X} として常磁性電流密度 $\mathbf{j}_p(\mathbf{r})$ を選ぶと、ECS 理論の一粒子方程式は電流密度汎関数理論 (Current-Density Functional Theory; CDFT)¹⁸⁻²⁰⁾ の KS 方程式になることが確認できる。⁸⁾ さらに強相関電子系などでしばしば用いられる LDA+ U ^{21,22)} も、 \mathbf{X} として局在軌道の占有行列 n^σ (一次簡約化密度行列の一部分) を取ると、ECS 理論から導かれることがわかっている。⁸⁾ また KS 方程式とハートレー・フォック方程式のそれぞれの利点をあわせたハイブリッド法²³⁾ と呼ばれる方法も、 \mathbf{X} として交換エネルギー汎関数 E_x を選ぶことで導かれる。⁸⁾ 以上のよう、ECS 理論は従来の様々なタイプの密度汎関数理論を

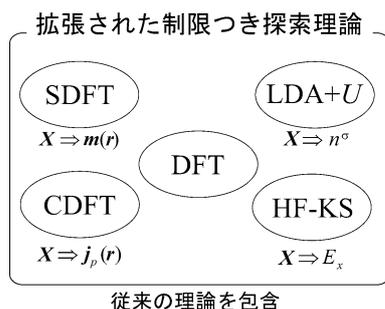


図2 拡張された制限つき探索理論の有効性。

包含していることが確認され (図2)、新しい有効理論を構築する際の良い基盤となることが期待される。^{7,8)}

4. 交換相関エネルギー汎関数の開発

2章で述べたように、ECS 理論のような新しい理論の開発における両輪のもう一つは、通常の DFT と同様に、交換相関エネルギー汎関数 $E_{xc}[\rho, \mathbf{X}]$ をいかに与えるかである (図1)。1章でも述べたが通常の DFT においては、提唱されてから数多くの近似的汎関数が考え出されてきている。通常の DFT における交換相関エネルギー汎関数の開発の歴史は長く、その手法を $E_{xc}[\rho, \mathbf{X}]$ の開発にも利用するのは賢明である。DFT における交換相関エネルギー汎関数の開発手法には、以下で述べる主要な二つがある。

(A) 交換相関エネルギー汎関数は、結合定数積分を施した交換相関ホールを用いて厳密に表すことができる。この厳密な表式を出発点として、そこに含まれる関数を近似する方法がある。例えば、結合定数積分を施した交換相関ホールを一様電子ガスの結果に置き換える LDA,³⁾ 重み付け密度近似、平均密度近似²⁸⁻³¹⁾ などである。

(B) 交換相関エネルギー汎関数が満たす厳密な関係式³²⁻³⁴⁾ を導いておき、それらを満たすように近似形を開発する方法がある。つまり、厳密な関係式を近似形に対する必要条件として用いる方法である。例えば、1章で紹介した Perdew らによる PW91,²⁴⁾ PBE,²⁵⁾ PBEsol,²⁶⁾ またモーメント展開近似^{35,36)} ではこの方法により近似形を開発している。

上記の DFT の場合と同様の戦略で、ECS 理論の交換相関エネルギー汎関数の開発が進められている。(A) に関する結合定数積分を用いた厳密な表式は既に示され、それを基礎に、LDA などの表式も提案されている。⁹⁾ さらに (B) に関しても、ヴァイリアル定理、電子座標の均一および不均一スケールリング、断熱接続などを用いて、既に多くの関係式が導かれている。^{9-11,37)} 例えば、交換エネルギー汎関数 $E_x[\rho, \mathbf{X}]$ 、および相関エネルギー汎関数 $E_c[\rho, \mathbf{X}]$ が満たす関係式として

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \frac{dE_c[\rho_\lambda, \mathbf{X}_\lambda]}{d\lambda} = 2 \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \frac{E_c[\rho_\lambda, \mathbf{X}_\lambda]}{\lambda} \quad (8)$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{\lambda} \frac{dE_c[\rho_\lambda, \mathbf{X}_\lambda]}{d\lambda} = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \frac{E_c[\rho_\lambda, \mathbf{X}_\lambda]}{\lambda^2} \quad (9)$$

$$\frac{E_c[\rho_\lambda, \mathbf{X}_\lambda]}{\lambda} \leq \frac{dE_c[\rho_\lambda, \mathbf{X}_\lambda]}{d\lambda} \quad (10)$$

が、電子座標の均一スケールリングと断熱接続の手法を用いて導びかれている。¹¹⁾ ここで $\rho_\lambda(\mathbf{r})$ と \mathbf{X}_λ は、電子座標を均一にスケールリングするという変換 (電子座標 \mathbf{r}_i を $\lambda \mathbf{r}_i$ とする) を施した後の基本変数である。³⁸⁾ このような関係式は、 \mathbf{X} として $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ や $\mathbf{j}_p(\mathbf{r})$ を選べばそれぞれ SDFT や CDFT の交換相関エネルギー汎関数の満たすべき関係式となる。もちろん \mathbf{X} に対する依存性をなくした式は DFT における交換相関エネルギー汎関数に対する関係式となる。

次章で ECS 理論の一適用例と見なせる CDFT (図 2) の交換相関エネルギー汎関数の近似形を戦略 (B) に従って開発した例を紹介する。

5. Vorticity 展開近似

CDFT の交換相関汎関数に関しては戦略 (A) に沿って開発された CDFT-LDA がある。^{18, 19, 39, 40)} しかし、それを固体や磁場下量子ドットに適用した場合、CDFT-LDA では軌道電流の効果が十分に記述できないことが指摘されている。^{41, 42)} 本章では、戦略 (B) に沿って開発された Vorticity 展開近似について説明する。

CDFT の交換相関エネルギー汎関数が満たすべき関係式は、電子座標の均一および不均一スケールリング、ビリアル定理、断熱接続、ゲージ不変性を用いて求められている。^{9-11, 18, 19, 40, 43-45)} 最近、われわれが開発した Vorticity 展開近似 (VEA)⁴⁶⁾ では、まずゲージ不変性より交換相関エネルギー汎関数が Vorticity $\mathbf{v}(\mathbf{r}) (= \nabla \times \{ \mathbf{j}_p(\mathbf{r}) / \rho(\mathbf{r}) \})$ を介して $\mathbf{j}_p(\mathbf{r})$ に依存することを示し、そのことを用いて交換相関エネルギー汎関数を $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ について展開する。次に合計 19 個の関係式を満たすように、その展開係数 (一般に $\rho(\mathbf{r})$ の汎関数) を決める。このようにして、次式に示すような固体に適用可能な交換エネルギー汎関数 $E_x[\rho, \mathbf{v}]$ および相関エネルギー汎関数 $E_c[\rho, \mathbf{v}]$ の近似形 (原子単位) を提案した。⁴⁶⁾

$$\bar{E}_x[\rho, \mathbf{v}] = E_x[\rho] + \bar{D}_x \int |\mathbf{v}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \quad (11)$$

$$\bar{E}_c[\rho, \mathbf{v}] = E_c[\rho] + \bar{C}_0 \int \frac{e^{-\bar{\alpha}\rho(\mathbf{r})} \rho(\mathbf{r})^3}{|\rho(\mathbf{r}) - \bar{\delta}|^3} |\mathbf{v}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \quad (12)$$

ここで、 $E_x[\rho]$ と $E_c[\rho]$ は例えば PBE,^{25, 26)} AM05²⁷⁾ などの DFT における交換相関エネルギー汎関数である。(11) および (12) 式で与えられる近似形を VEA と呼んでいる。(11) と (12) 式中の定数 \bar{D}_x , \bar{C}_0 , $\bar{\alpha}$ および $\bar{\delta}$ の値は、一様極限で交換相関エネルギーの値を再現するように決定されている。⁴⁶⁾ 具体的には、高田らによる一様磁場下の一様電子液体の交換相関エネルギー⁴⁷⁾ を再現するように決定されている。

VEA における交換相関ポテンシャルは、(11) および (12) 式を $\rho(\mathbf{r})$ または $\mathbf{j}_p(\mathbf{r})$ で汎関数微分することで得られ、具体的な形も既に求められている。⁴⁸⁾ これら VEA の交換相関ポテンシャルを一粒子方程式の有効ポテンシャルに用いることで、CDFT による電子構造計算が可能になっている。

VEA は導出のために用いた 19 個の関係式以外にも、交換相関エネルギー汎関数が多い関係式を満たすことが確認されている。例えば、PBE の開発で重要な役割を果たした相関エネルギー汎関数の漸近的境界条件を、従来の局所密度近似 (CDFT-LDA) は満たさないが VEA は満たす (表 1 の一番目の関係式)。⁴⁵⁾ これまでに知られている 60 個の関係式で VEA の評価した結果¹¹⁾ を表 1 に示した (紙面の都合上、結果の一部を掲載)。VEA は 77% の関係式を満た

表 1 厳密な関係式による VEA および CDFT-LDA の評価 (一部)。表中の記号 $\rho_{\lambda}^x, \mathbf{j}_{\rho_{\lambda}^x}$ は電子の x 座標を λ 倍するという変換後の基本変数、記号 $\rho_{\lambda}^{xy}, \mathbf{j}_{\rho_{\lambda}^{xy}}$ は電子の x, y 座標をそれぞれ λ, λ^{-1} 倍するという変換後の基本変数を表す。⁴⁰⁾

厳密な関係式	CDFT-LDA	VEA
$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} E_c[\rho_{\lambda}^x, \mathbf{j}_{\rho_{\lambda}^x}] = \text{const}$	No	Yes
$\lim_{\lambda \rightarrow 0} E_c[\rho_{\lambda}^x, \mathbf{j}_{\rho_{\lambda}^x}] = 0$	Yes	Yes
$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \lambda^{-1} E_c[\rho_{\lambda}^x, \mathbf{j}_{\rho_{\lambda}^x}] = 0$	No	Yes
$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \lambda^{-2} E_c[\rho_{\lambda}^x, \mathbf{j}_{\rho_{\lambda}^x}] = \text{const}$	No	Yes
$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} E_c[\rho_{\lambda}^{xy}, \mathbf{j}_{\rho_{\lambda}^{xy}}] = 0$	No	Yes
$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \lambda E_c[\rho_{\lambda}^{xy}, \mathbf{j}_{\rho_{\lambda}^{xy}}] = 0$	No	Yes
$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \lambda^2 E_c[\rho_{\lambda}^{xy}, \mathbf{j}_{\rho_{\lambda}^{xy}}] = \text{const}$	No	Yes
$\lim_{\lambda \rightarrow 0} E_c[\rho_{\lambda}^{xy}, \mathbf{j}_{\rho_{\lambda}^{xy}}] = 0$	No	No
$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \lambda^{-1} E_c[\rho_{\lambda}^{xy}, \mathbf{j}_{\rho_{\lambda}^{xy}}] = 0$	No	No
$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \lambda^{-2} E_c[\rho_{\lambda}^{xy}, \mathbf{j}_{\rho_{\lambda}^{xy}}] = \text{const}$	No	No
Eq. (8)	No	Yes
Eq. (9)	Yes	Yes
Eq. (10)	No	Yes

すのに対し、従来の CDFT-LDA はわずか 12% であることが明らかになっている。より多くの条件を満足していることから、VEA が CDFT-LDA の難点を改善すると期待できる。現在、VEA の有効性を数値的に検証中である。

6. まとめ

本稿では、DFT の一般化である ECS 理論を紹介した。ECS 理論では、系に応じて様々な物理量を基本変数に選ぶことが可能である。ECS 理論は従来の様々な DFT の発展形 (SDFT, CDFT, LDA+U 法, HF-KS 法) を包含し、新しい密度汎関数理論の基盤を与えると期待される。実際に、縮退のある系や、⁴⁹⁾ 磁場の印加された系や、⁵⁰⁾ 磁場下超伝導体や、⁵¹⁾ Lieb 流⁵²⁾ の Legendre 変換を用いた書き換え理論や、⁵³⁾ さらに対密度汎関数理論⁵⁴⁻⁵⁹⁾ などが、発展してきている。

また、理論開発の両輪の一つとして、ECS 理論における交換相関エネルギー汎関数の開発の現状を紹介した。交換相関エネルギー汎関数の開発は、通常の DFT でも今なお盛んに改良が加えられているホットエリアである。⁶⁰⁾ ECS 理論およびそこから生まれた個々の理論においても、交換相関エネルギー汎関数の開発の重要性が増すと考えられる。

参考文献

- 赤井久純, 白井光雲編著: 『密度汎関数法の発展—マテリアルデザインへの応用—』(シュプリンガー・ジャパン, 2011)。丸善より再販予定。
- P. Hohenberg and W. Kohn: Phys. Rev. **136** (1964) B864.
- W. Kohn and L. J. Sham: Phys. Rev. **140** (1965) A1133.
- 詳しくは J. P. Perdew and K. Schmidt: in *Density Functional Theory and Its Application to Materials*, ed. V. Van Doren, C. Van Alsenoy and P. Geerlings (AIP, Melville, NY, 2001)。
- Perdew らによる代表的な近似 (文献 25) は、Web of Science によれば、2012 年 3 月の時点で被引用回数が 2 万を超えている。また、J. Chem. Theory Comput. の 2009 年 4 月号 (Volume 5, Issue 4) は彼に関する special issue 号となっている。
- 有限温度に理論を拡張したとしても、熱平衡状態の電子密度とグラウンドポテンシャルが予言できるのみである。

- 7) M. Higuchi and K. Higuchi: Phys. Rev. B **69** (2004) 035113.
 8) K. Higuchi and M. Higuchi: Phys. Rev. B **69** (2004) 165118.
 9) K. Higuchi and M. Higuchi: Phys. Rev. B **71** (2005) 035116.
 10) K. Higuchi and M. Higuchi: Phys. Rev. A **79** (2009) 022113.
 11) M. Higuchi and K. Higuchi: Phys. Rev. A **81** (2010) 042505.
 12) あるポテンシャルに対する基底状態における電子密度のこと.
 13) 反対称波動関数から与えられる電子密度のこと.
 14) M. Levy: Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **76** (1979) 6062.
 15) この仮定は従来のDFTの発展形(SDFT, CDFT, LDA+U, etc.)でも導入されている. この仮定の正しさを数学的に議論し解明することはもちろん大切であるが, DFTの発展形で行われているように, 実際に数値計算をして問題点の有無あるいは軽重を具体的に検証していくのも一つの方法と思われる. ECS理論においても, この問題については具体的なXに応じて証明または検証が必要である.
 16) U. von Barth and L. Hedin: J. Phys. C **5** (1972) 1629.
 17) M. M. Pant and A. K. Rajagopal: Solid State Commun. **10** (1972) 1157.
 18) G. Vignale and M. Rasolt: Phys. Rev. Lett. **59** (1987) 2360.
 19) G. Vignale and M. Rasolt: Phys. Rev. B **37** (1988) 10685.
 20) M. Higuchi and A. Hasegawa: J. Phys. Soc. Jpn. **66** (1997) 149; *ibid.* **67** (1998) 2037.
 21) A. I. Liechtenstein, V. I. Anisimov and J. Zaanen: Phys. Rev. B **52** (1995) 5467.
 22) V. I. Anisimov, J. Zaanen and O. K. Andersen: Phys. Rev. B **44** (1991) 943.
 23) R. G. Parr and W. Yang: *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules* (Oxford Univ. Press, New York, 1989) Chap. 8.4, and references therein.
 24) J. P. Perdew: in *Electronic Structure of Solids '91*, ed. P. Ziesche and H. Eschrig (Akademie Verlag, Berlin, 1991) p. 11.
 25) J. P. Perdew, K. Burke and M. Ernzerhof: Phys. Rev. Lett. **77** (1996) 3865.
 26) J. P. Perdew, A. Ruzsinszky, G. I. Csonka, O. A. Vydrov, G. E. Scuseria, L. A. Constantin, X. Zhou and K. Burke: Phys. Rev. Lett. **100** (2008) 136406; *ibid.* **102** (2009) 039902(E).
 27) R. Armiento and A. E. Mattsson: Phys. Rev. B **72** (2005) 085108; *ibid.* **79** (2009) 155101.
 28) O. Gunnarsson and P. Johansson: Int. J. Quantum Chem. **10** (1976) 307.
 29) O. Gunnarsson, M. Jonson and B. I. Lundqvist: Solid State Commun. **24** (1977) 765; Phys. Rev. B **20** (1979) 3136.
 30) O. Gunnarsson and R. O. Jones: Phys. Scr. **21** (1980) 394.
 31) J. A. Alonso and L. A. Girifalco: Solid State Commun. **24** (1977) 135; Phys. Rev. B **17** (1978) 3735.
 32) M. Levy and J. P. Perdew: Phys. Rev. A **32** (1985) 2010.
 33) M. Levy: Int. J. Quantum Chem. S **23** (1989) 617.
 34) A. Görling and M. Levy: Phys. Rev. A **45** (1992) 1509.
 35) S. Liu and R. G. Parr: Phys. Rev. A **53** (1996) 2211.
 36) S. Liu, Á. Nagy and R. G. Parr: Phys. Rev. A **59** (1999) 1131.
 37) Á. Nagy: Int. J. Quantum Chem. **106** (2006) 1043.
 38) 例えば, 均一スケール後の電子密度 $\rho_\lambda(\mathbf{r})$ は $\lambda^3 \rho(\lambda \mathbf{r})$ となる. 従って, $\lambda \rightarrow 0$ は低密度極限, $\lambda \rightarrow \infty$ は高密度極限を意味する.
 39) P. Skudlarski and G. Vignale: Phys. Rev. B **47** (1993) 16647.
 40) M. Higuchi and K. Higuchi: Phys. Rev. B **65** (2002) 195122.
 41) H. Ebert, M. Baccocchetti and E. K. U. Gross: Europhys. Lett. **40** (1997) 545.
 42) H. Saarikoski, E. Räsänen, S. Siljamäki, A. Harju, M. J. Puska and R. M. Nieminen: Phys. Rev. B **67** (2003) 205327.
 43) S. Erhard and E. K. U. Gross: Phys. Rev. A **53** (1996) R5.
 44) S. Liu: Phys. Rev. A **54** (1996) 1328.
 45) M. Higuchi and K. Higuchi: Phys. Rev. B **75** (2007) 195114.
 46) K. Higuchi and M. Higuchi: Phys. Rev. B **74** (2006) 195122; *ibid.* **75** (2007) 159902(E).
 47) Y. Takada and H. Goto: J. Phys.: Condens. Matter **10** (1998) 11315.
 48) K. Higuchi and M. Higuchi: J. Phys. Soc. Jpn. **80** (2011) SA123.
 49) Á. Nagy, S. Liu and L. Bartolotti: J. Chem. Phys. **122** (2005) 134107.
 50) S. Rohra and A. Görling: Phys. Rev. Lett. **97** (2006) 013005.
 51) K. Higuchi, K. Koide, T. Imanishi and M. Higuchi: Int. J. Quantum Chem. in press.
 52) E. H. Lieb: Int. J. Quantum Chem. **24** (1983) 243.
 53) P. W. Ayers and P. Fuentealba: Phys. Rev. A **80** (2009) 032510.
 54) M. Higuchi and K. Higuchi: Phys. Rev. A **75** (2007) 042510.
 55) M. Higuchi and K. Higuchi: Phys. Rev. B **78** (2008) 125101.
 56) K. Higuchi and M. Higuchi: J. Phys.: Condens. Matter **21** (2009) 064206.
 57) K. Higuchi and M. Higuchi: Phys. Rev. B **82** (2010) 155135.
 58) M. Higuchi and K. Higuchi: Phys. Rev. A **84** (2011) 044502.
 59) K. Higuchi and M. Higuchi: Phys. Rev. A **85** (2012) 062508.
 60) 例えば, Proc. 14th Int. Density Functional Theory Conf.; Int. J. Quantum Chem. (2012).

(2011年10月12日原稿受付)

Progress of the Density Functional Theory —Extended Constrained-Search Theory—

Katsuhiko Higuchi and Masahiko Higuchi

abstract: The Hohenberg-Kohn theorem of the density functional theory (DFT) has the arbitrariness of choosing basic variables that determine the ground-state properties. By means of this arbitrariness, we can choose as basic variables the physical quantities that have more information than the electron density. Such a generalization of the density functional theory is realized by the extended constrained-search (ECS) theory. While the ECS theory has a significant advantage in guaranteeing the reproduction of physical quantities other than the electron density, the developments of the approximate form of the exchange-correlation energy functional are indispensable in order to make the theory work well in practice. In this article, we present the idea and merits of the ECS theory, and mention the problems and their coping strategies.

第68期 (2012年3月24日~2013年3月31日) 理事・監事

会 長	家 泰弘	副会長(次期会長)	斯波 弘行
庶 務 理 事	伊藤好孝・嘉規香織・高野 宏・田村裕和・千葉順成・松川 宏・三沢和彦 本林 透		
会 計 理 事	千葉順成(兼任)・野崎光昭・播磨尚朝・松川 宏(兼任)		
会誌編集委員長	旭 耕一郎	JPSJ編集委員長	安藤恒也
監 事	鹿兒島誠一・渡邊靖志	刊行委員長	瀧川 仁

安藤恒也 (JPSJ編集委員長)

日本物理学会が発行している Journal of the Physical Society of Japan (JPSJ) の論文で2012年3月に掲載可となったものの中から2012年4月の編集委員会を選んだ“Papers of Editors' Choice” (JPSJ注目論文) を以下に紹介します。

この紹介記事は国内の新聞社の科学部、科学雑誌の編集部に電子メールで送っている「紹介文」をこの欄のために少し書き直したものです。専門外の読者を想定し、「何が問題で、何が明らかになったのか」を中心にした読み物であるので、参考文献などはなるべく省いています。なお、図に関しては、原図はカラーのものでもモノクロで印刷しているので不鮮明になる場合がありますが、その場合は、物理学会のホームページの「JPSJ注目論文」にカラー版を載せていますので、そちらをご覧ください。

もっと詳しく知りたいと思う読者は、末尾に挙げる論文掲載誌、または、JPSJのホームページの「Editors' Choice」の欄から掲載論文を見ることができます(2010年8月号以降に掲載されたものは、掲載から約1年間は無料公開)。また、関連した話題についての解説やコメントがホームページの「News and Comments」欄に掲載される場合もありますので、合わせてご覧ください。

JPSJ編集委員会では物理学のあらゆる分野の興味ある優れた論文を「注目論文」としてこの欄で紹介したいと思います。物理学会会員からのJPSJへの自信作の投稿を期待します。

分子状イリジウム鎖の化学結合切断で現れる超伝導

三角格子やパイロクロア格子などの幾何学的フラストレーションを有する系では、しばしば分子状のクラスターが形成される。例えば、三角格子バナジウム酸化物 LiVO_2 における正三角形の V_3 クラスターである。このようなクラスター形成の背景には、軌道秩序や軌道密度波の物理があると考えられている。それでは、化学置換や圧力によって分子状クラスターを融解すると、どのような電子物性が現れるであろうか。

最近、岡山大学大学院自然科学研究科の研究グループは、三角格子イリジウムカルコゲナイド IrTe_2 に形成された Ir 直鎖の分子状クラスターが、わずかに3%の Pt ドープによって融解すること、すなわち Ir 直鎖の化学結合が切断される

ことを見出した。面白いことに、化学結合を切断すると直ちに臨界温度 3.1 K の超伝導が現れる。この成果は、日本物理学会が発行する英文誌 Journal of the Physical Society of Japan (JPSJ) の2012年5月号に掲載された。

IrTe_2 は、Irの三角格子からなる層状化合物で、常磁性金属である。室温では三方晶構造で、250 Kで単斜晶構造に相転移する。この時、結晶の b 軸方向に Ir 直鎖の分子状クラスターが形成され、正三角形から二等辺三角形への格子変形が生じる。Ptをドーピングすると構造相転移温度が低下し、3.5%のドーピングで三方晶構造が安定化、すなわち Ir 直鎖の化学結合が切断される。ここで臨界温度 3.1 K の超伝導が発現する。さらに Pt をドーピングすると超伝導は消失する。この結果は電子相図としてまとめられている。

同研究グループは、 IrTe_2 と三角格子チタン酸化物 NaTiO_2 の類似性を指摘している。両者とも、三方晶から単斜晶へ相転移し、直鎖の分子状クラスターが形成される。 NaTiO_2 におけるクラスターの形成はチタンイオンの軌道秩序に起因することが理論的に指摘されている。 IrTe_2 におけるクラスターの形成もイリジウムイオンの軌道秩序による可能性がある。もし、そうであるならば、分子状クラスターの融解、すなわち化学結合の切断で現れた IrTe_2 の超伝導は、軌道揺らぎに媒介されたものかもしれない。

原論文

Superconductivity Induced by Bond Breaking in the Triangular Lattice of IrTe_2

S. Pyon, K. Kudo and M. Nohara: J. Phys. Soc. Jpn. **81** (2012) 053701.

〈情報提供〉 卞 舜生 (岡山大学大学院自然科学研究科)

工藤一貴 (岡山大学大学院自然科学研究科)

野原 実 (岡山大学大学院自然科学研究科)

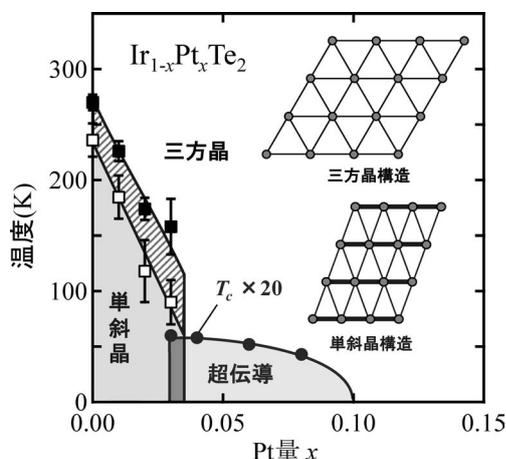


図1 $\text{Ir}_{1-x}\text{Pt}_x\text{Te}_2$ の物性相図。黒四角、白四角はそれぞれ昇温時、降温時における構造相転移温度 T_c 、丸は超伝導転移温度 T_c^0 である (T_c は20倍に拡大している)。挿入図は三方晶、単斜晶における Ir 三角格子の模式図であり、太線は Ir 直鎖の分子状クラスターを表す。

重い電子はどこで、どのようにして生まれるのか？

強相関 f 電子系物質と呼ばれる Ce などの希土類化合物などでは、しばしば電子の静止質量より 100 倍以上大きい有効質量を持つ伝導電子が見出されている。このような重い電子が形成されるメカニズムとして近藤効果が重要だと考えられている。近藤効果は、希薄磁性合金の電気抵抗が温度の低下とともに減少した後、再び $-\log T$ に比例して上昇し、さらに低温では一定となる現象である。LaRu₂Si₂ の La 元素を少量 Ce に置き換えることによって同様な振る舞いが観測される。希土類は s, p, d 電子以外に f 電子を持つ元素である。室温近傍の温度では、 f 電子は局在磁気モーメントを持ち、あたかも局在した電子のように振る舞う。最低温では近藤効果により近藤一重項と呼ばれる伝導電子と f 電子がお互いに結合した状態が形成される。

図 1(a) に示すように La を Ce で 100% 置き換えると、CeRu₂Si₂ という強相関 f 電子化合物が形成され、その物質では重い電子が観測されている。どこの Ce 濃度から、伝導電子は重くなっているのか？ そもそも、La 元素 1 個

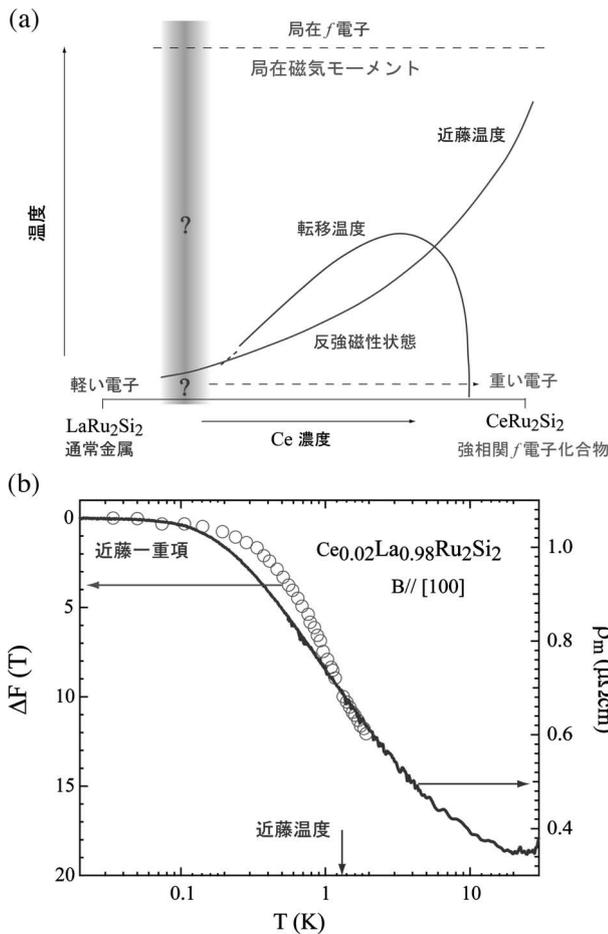


図 1 (a) $Ce_xLa_{1-x}Ru_2Si_2$ の Ce 濃度-温度相図の概要 (b) 左軸：ド・ハース-ファン・アルフェン効果信号周波数の温度変化。周波数変化 $\Delta F(T)$ は最低温における周波数の値を基準とし、下向きを正の方向に取っている。信号はホール面から生じているので、温度降下に伴う周波数の減少はホール面が小さくなっていることを示している。右軸：磁気散乱による電気抵抗率 ρ_m の温度依存。

を Ce で置き換えた場合には、すでに、重い電子ができていたのだろうか？ また、近藤効果はどのような役割を果たしているか？ これらを明らかにするためには、近藤効果の強さの目安となる近藤温度よりも高い温度から、近藤一重項が形成される低い温度までの伝導電子状態の変化を連続的に観測する必要がある。実際には、元素 1 個だけの違いの寄与を観測することは不可能なので、ある程度濃度を増加させる必要があるが、あまり、多くしすぎると、今度は磁性元素間の相互作用の効果が効いてきて、純粋な近藤効果の寄与を見ることができない。したがって、置換量をできるだけ少なくし、非常にわずかな電子状態の変化を精密に測定する必要がある。

ド・ハース-ファン・アルフェン効果は物質中の伝導電子の状態を極めて精密に調べる手段であり、この目的のために使用できる唯一無二の手段である。しかし、その測定のためには数 K 以下の低温と強磁場が必要である。したがって、温度とともに電子状態がどのように変化をするか、また、近藤効果はその変化にどのように寄与しているかを観測するためには、近藤温度が数 K 程度以下であることが必要である。一方、磁場は近藤効果を抑制する効果があり、近藤温度が低いと近藤効果の寄与が見えなくなってしまう。このため、近藤効果を示す希薄合金に関する膨大な数の研究が行われてきたが、これまで、伝導電子状態の温度変化を直接観測する測定は成功していなかった。

東北大学、物質・材料研究機構のグループは、LaRu₂Si₂ の La を 2%Ce に置き換えた合金において、ド・ハース-ファン・アルフェン効果の振動の周波数の温度変化を精密に測定した。周波数はフェルミ面の大きさに対応し、その変化から伝導電子数の変化を推定できる。図 1(b) に示すように周波数は電気抵抗変化とほぼ対応した連続的な変化をしていることが見出された。この変化から温度の降下に伴い、伝導電子数が次第に増加していることが示された。また、信号強度の温度変化の解析から、有効質量が温度の降下とともに次第に増加し、近藤一重項が形成される最低温度では、有効質量は LaRu₂Si₂ の有効質量の約 2.5 倍になっていることが見出された。この有効質量の大きさは CeRu₂Si₂ で観測される重い電子の有効質量の約 2% である。この結果は近藤温度よりも十分高い温度領域では局在していた f 電子が温度の降下とともに近藤効果によって次第に遍歴的となり、十分低い温度では遍歴する重い電子となっていることを示している。この観測の成功は、これまで開発した実験・解析方法により伝導電子数のわずかな変化を見積もることが可能になったこと、また、(1) この濃度では、Ce 元素同士の相互作用の効果が効いてはいない、(2) 近藤温度が適度に小さい、(3) この合金では、結晶のある方向 (磁化困難軸方向) へ磁場を加えた場合には磁場の近藤効果への影響がほとんどない、など観測に必須な条件を幸運にも満たしていることを最大限に利用したことによる。この成果は日本物理学会が発行する英文誌 Journal of Phys-

ical Society of Japan (JPSJ) の2012年5月号に掲載された。

この結果は、本研究で用いた試料のみならず、一般的に近藤効果が重要な働きをしている希薄合金では、低温で遍歴する重い電子が形成されていることを示唆する。Ceなどの磁性元素の濃度を増やしていくと、磁性元素同士の相互作用により、磁気秩序が発達する。図1(a)の相図に示すように本合金の場合では、反強磁性状態となった後、さらにCe濃度を増やすと磁気秩序がなくなり常磁性状態となる。磁気秩序の2次の相転移が絶対零度で消えるところは量子臨界点と呼ばれており、その近傍における電子状態、とくに f 電子は局在しているか、遍歴しているか、の解明は重要な課題となっている。本研究結果は磁気秩序状態で

も多くの場合 f 電子は遍歴的であることを示唆しており、単に希薄合金の電子状態のみならず、量子臨界点近傍および強相関 f 電子系物質の電子状態の理解の進展に重要な貢献をすると期待される。

原論文

How Are Heavy and Itinerant Electrons Born in a Dilute Kondo Alloy?

Y. Matsumoto, T. Terashima, S. Uji, N. Kimura and H. Aoki: J. Phys. Soc. Jpn. **81** (2012) 054703.

〈情報提供：青木晴善(東北大学大学院理学研究科)
松本裕司(日本原子力研究開発機構先端基礎研究所)〉

『大学の物理教育』誌定期購読のすすめ

『大学の物理教育』は、年3回(3月、7月、11月)発行で年間購読料(個人)は1,000円です。購読ご希望の方は、お電話(03-3816-6201)またはFax(03-3816-6208)でご連絡下さい。

また、本誌ホームページのURLは次の通りですので、どうぞご覧下さい。

<http://www.jps.or.jp/book/kyoikushi/>

『大学の物理教育』編集委員会

Vol. 18-2 (7月15日発行) 目次

物理学は積み上げ型の学問ではない?.....三沢和彦	科学教育とキャリア.....田代直幸
講義室	物理学を学んだ人材と社会.....横山広美
ニュートリノは光速を超えていない.....齋藤嘉夫	教育実践
ラドン検出器を用いた放射線教育—教材開発と実践—	物理授業でのノートの作成とその教育的効果
.....中島 朋, 三明康郎樋口勝一, 溝邊和成
法律の適用のための物理の知識—限界旋回速度と危険運転	カルチャーショックを感じずにインタラクティブな物理の授業
致死傷罪—.....那須 修	に進むこと.....ハル・マイケル
キュリー夫人の幻の実験授業とガリレオの指.....吉祥瑞枝	海外の動向
実験室	中学校理科教員養成用物理カリキュラムの改善点を探る
鉄棒を登っていくリング—回転する達成円環磁石の上昇下降	一日米比較研究で明らかになったことから.....土佐幸子
現象—.....夏目雄平	教育に関する一言笠 潤平/山田弘明
物理教育シンポジウム	開催情報
大学の理数系教育と社会との接続.....三沢和彦, 田中忠芳	寄贈書リスト
産業界が期待する理数系学生—外村博士にみるイノベーション	編集後記
人材—.....内田史彦	

第102回日本学士院賞： 梶田隆章氏

荒船次郎*◇

梶田隆章氏（現在、東京大学宇宙線研究所長）が日本学士院賞の受賞者に決定された。これは誠に喜ばしいニュースだった。

賞の対象となった業績は「大気ニュートリノ振動の発見」である。大気ニュートリノとは、宇宙から来る宇宙線が地球大気と衝突するときに発生するニュートリノだ（註）。宇宙線が空気原子核と衝突して中間子を生成し、それが崩壊すると、ニュートリノを発生する。ニュートリノは1930年にパウリが存在を予言して以来、観測はされて来たものの謎の多い粒子で、殊にニュートリノの質量の有無は長い間、大きな謎だった。

梶田氏は岐阜県神岡鉱山の地下に1983年に完成したカミオカンデと1996年にその大型化が完成したスーパーカミオカンデを用いて、大気ニュートリノの種類、エネルギー、方向を精密に測定した。大気で作られるニュートリノにはミューニュートリノと電子ニュートリノの2種類があるが、梶田氏らはまず筑波KEKの加速器実験でミューニュートリノと電子ニュートリノを明確に識別する方法を確立し、それをもとにカミオカンデで、大気からのミューニュートリノの割合が理論値より異常に少ないことを発見した。この発見は重大なことなので、当時、梶田氏に何度も実験解析について質問をした思い出もあるが、梶田氏の回答はいつも親切で明快だった。更に、大型のスーパーカミオカンデを使って、電子ニュートリノに異常は無く、下向きのミューニュートリノにも異常は無いこと、しかし、「地球の裏側から上向きに来るミューニュートリノは異常に少ないこと」を発見した。これは、ミューニュートリノが地球の半径規模の距離を飛ぶ間に種類が変わるという「ニュートリノ振動」の発見であった。そしてこの振動はニュートリノに質量が無いと起き得ない現象であることか

ら、「ニュートリノに質量が有る」こと、そしてニュートリノの種類は大きく混合していること、の世界初の発見となった。ニュートリノのきわめて小さな質量と大きな混合の発見は標準模型を超えた未知の物理の謎を探る重要な第一歩であり大発見だった。この研究で中心的役割を果たした梶田氏が1998年の国際会議でこの発見を発表すると、物理学者たちから祝福の拍手が長く鳴り止まず、あたかも名演奏を終えた音楽家への感激の拍手の時のように長い拍手だった。この発見とそして今回の受賞はひとしお嬉しくおめでたいと感じる次第である。

（註）ちなみに、宇宙線がHessにより発見されてから今年で100年目、大気ニュートリノが三宅三郎らによりインドの金鉱で、またReinesらにより南ア連邦の金鉱で、初観測されてからは47年目になる。

（2012年5月16日原稿受付）

第102回日本学士院賞： 高柳邦夫氏

飯島澄男*〈名城大〉

東京工業大学大学院理工学研究科教授（2012年3月退任）高柳邦夫氏が2012年度日本学士院賞を受賞された。受賞理由は「超高真空電子顕微鏡によるナノ構造の研究」で、物質表面原子構造解明のため超高真空電子顕微鏡を世界に先駆けて建設し、表面構造研究の主流である低速電子回折法の限界を凌駕する高速電子回折（TED）法を開発した。これにより、清浄表面をもつシリコン（111）表面の7×7再配列構造を決定し1983年にDAS（Dimer Adatom Stacking fault）モデルを提案した。従来の（111）表面では49個のダングリングが必要であったが、DASモデルでは19個に減少したため、構造がより安定化すると考えられている。12個のadatomの存在はSTMの観察から知られていたが、dimer原子や積層欠陥な

* 兼務先：産総研ナノチューブ応用研究センター、NEC

ど詳細な構造は高柳氏の電子回折によってはじめて明らかにされ、20年にわたる問題が解決された。高柳氏は超高真空電子顕微鏡に走査トンネル顕微鏡を組み込み、金の量子細線の電気伝導度を測定することに成功している。一列の金原子からなるワイヤーの電気伝導度は $2e^2/h$ となり、2列の金原子ワイヤーでは $2e^2/h$ の2倍になることを観測し電気伝導度が量子化されることを実証した。さらに高柳氏は金ナノチューブの存在を実験的に観察し、カーボンナノチューブと同じような螺旋型のコイル状チューブ構造を見出している。

詳しくは、<http://www.japan-acad.go.jp/japanese/news/2012/031201.html> をご覧ください。

（2012年5月23日原稿受付）

第52回東レ科学技術賞： 山崎泰規氏

山崎敏光*◇

東大総合文化研究科特任教授で理学研究所上席研究員である山崎泰規氏は、このたび、第52回東レ科学技術賞を受賞されました。受賞題目は「エキゾチックなビームによる原子物理学と反物質科学の開発的研究」です。山崎氏は優秀なグループを率いて、反水素原子の合成と分光という未開拓の分野に挑戦し、この十年の間に目覚ましい研究成果を挙げ、今回の受賞に輝きました。その装置は昨年8月号の会誌の表紙を飾っています。

反水素原子をその素材である反陽子と陽電子から創り出すことは容易なことではありません。セルンで反陽子蓄積リングが発明され、運動量の揃った、エネルギーの低い反陽子ビームが供給されるようになった前世紀末、この研究に挑戦するグループが現れるようになりました。しかし、セルンは巨費を要するLHC計画のためには、周辺の派生的な計画はすべて停止するという方針に傾きました。私どもは、LHC

* 東京大学名誉教授

* 東京大学名誉教授

に比べてほんの僅かな経費で何処にもない新しい科学が生み出せるこの「宝物」をシャットダウンする愚を指摘し、結果として、反水素の合成と分光に用途を限った反陽子減速器AD (Antiproton Decelerator) が誕生することになりました。山崎泰規氏の反水素グループは早野龍五氏の反水素ヘリウム原子グループとともに、こうして誕生したADの一翼であるASACUSAプロジェクトを担うことになったのです。

2000年にADが稼働開始、三つの国際的グループの競争が始まりました。先行する二つのグループが似たような方法で反水素原子を作り、その1s-2s遷移のレーザー分光を意図しているのに対し、山崎氏は、逆ヘルムホルツコ

イルでつくる軸対称不均一カスプ磁場の中心で反水素を合成し、スピン偏極した原子を外に取り出し、1s基底状態の超微細構造(HFS)をマイクロ波分光で測定するという壮大なストラテジーを立てたところがユニークです。水素原子のHFSは、陽子の磁気モーメントの空間分布をBohr-Weisskopf効果で写し出すもので、Rabi, Ramsey以来の最も基本的で最も精度の高い物理量です。にもかかわらず、その理論的予想は乏しい。スピנקライシスと呼ばれたように、核子のクオーク・グルオン構造が良くはわかっていないからです。私見によれば、反水素原子のHFSを精密に決定し、それを水素原子のそれと比較してCPT(荷電・パリティ

イ・時間反転)対称性を探ることは、反水素原子の1s-2s分光を行うよりも、はるかに興味深い。それで、山崎グループの研究の進展に注目しておりました。不均一磁場中に反水素原子を生成し閉じ込める実験に成功したことは、スピン偏極した反水素原子のビームを取り出し、精密分光に資する道程の第一歩です。また、このような研究がさらに発展すれば、やがて反重力の検証実験に道を拓くことにもなるでしょう。山崎氏の受賞を喜ぶとともに、山崎グループの健闘をたたえ、今後の発展を期待します。

(2012年5月9日原稿受付)

ラ・トッカータ

ロスアラモス国立研究所奮闘記 —新しいプルトニウム科学の幕開け—

安岡弘志 〈原子力機構〉

十数年間にわたって研究現場から離れていた私が、幸いにも2010年11月から約1年間米国ロスアラモス研究所(LANL)においてSeaborg Scholarという名誉ある立場で研究に没頭出来る機会を得た。これは、その折の奮闘記である。

ご存知の方も多いと思うが、SeaborgとはPuを最初に発見したGlenn T. Seaborgのことである。LANL内に彼にちなんで“G. T. Seaborg Institute for Transactinium Science”という組織があり、米国でのプルトニウム科学の戦略的研究の中心として活動している。私はその“Scholar”として招聘されたわけであるが、実際の研究場所は“MPA-Condensed Matter and Magnet Science”という古くから固体物理、特に磁性や超伝導の研究を行っているグループであった。そこには、旧式であるが、私の専門である核磁気共鳴(NMR)の測定装置が3台設置されており、それらを使いながらPu化合物

を中心とした研究を行ってきた。

ロスアラモスに着いて研究所に採用される前にまず“ドラッグテスト”(尿検査)を受けなければならなかった。当然のことながら陰性であったが、結果が出るまでに4~5日かかりその後、入所のための研修を受け、結局晴れて研究所の一員として身分証(バッジ)をもらえたのは一週間後であった。このバッジを持って初めて研究所建物の中に入ることが出来たが、実際実験を始めるまでには、更なる難関が待ち受けていた。まず、オフィス内でコンピュータをVisitor's Networkに繋いでインターネットにアクセスすることは比較的早く出来たが、実験室に入り装置の電源を入れることはご法度であった。これを解禁するにはいくつかの教習を受け、それぞれに付属するテストで80点以上を採らなければいけないというわけである。私の実験のためには、一般実験の教習のほか電気、ガス、冷媒、計算機、化学薬品、放射性物質取

り扱い等の専門的な教習を受けなければならなかった。それぞれは大体1日コースで、ホワイトロックというロスアラモスから車で20分位の町にある教習センター(Training Center)に出向いて朝から午後2時~3時頃まで講義や実地教習を受けその後試験を受けるというものであった。幸い、テキストが素晴らしく良く出来ていて助かったが、それでも化学薬品の試験は80点に達せず追試験を受ける羽目になった(私は亀の甲が大嫌い)。このほかにも、研究生活上の安全やマナーに関する教習もあり、こちらは大変であった。例えば、セクハラに関して、男女数人が職場で会話をしているビデオを5分間位見たうえで、20数問の質問が出され、それがセクハラに当たるか、当たるとすればどう処理するか等の答えを選ばせるものであった。これも、語学力の貧弱さもさることながら、我々との感覚の差もあり見事落第で追試験をうける羽目になった。何十年ぶりかに、必死に授業と試験をこなし(今から思えば、この年でよく頑張ったと懐かしいが)約1か月半後の12月中頃に実験室で装置に電源を入れて動作の確認に入ることが出来た。

NMRの実験室は長らく誰も使って

いなかったため、荒れ放題で装置の配線も支離滅裂、どの線がどこに行っているか分からない、長いケーブルを無造作に引き回している（これは私の性に合わない）という状態であった。結局、全配線をまず撤去して最適の配線にやりかえる作業を数週間かけて行った。お蔭で、NMR装置の雑音がかなり減少し信号のS/N比も2,3倍に向上して何とか自分の気に入った実験室が出来上がった。

さて、長らく研究現場から離れていた私が新天地で何を研究テーマにするかは大問題であった。まず、自分の能力（長きにわたるブランクから蘇られるか？）及びLANLでのNMR装置の能力が未知数であったので、日本を出発する前は何も具体的に決めずに渡米してしまった。また、受け入れ側でも、まさか私が実験するとは思っていなかったらしく、何の指示も出されていなかった。

上述のように、教習も終わり装置も、出来るだけ手を尽くして、自分の手足のように動く状態になった段階で、まず取り上げたテーマが、いわゆる重い電子系の形成要因の一つである、f電子と伝導電子との混成によるコヒーレント状態がいかに崩壊していくかを微視的に明らかにしてみようというものであった。（従来、コヒーレント状態の形成過程を研究してみたい欲望があったが、これには名案が浮かばず今回は逆から攻めてみようと考えた訳である）。この問題は、古くから議論されている“Kondo Hole”とつながるもので理論的にも興味を持たれていた。具体的には、典型的な重い電子系超伝導体であるCeCoIn₅を取り上げ、CeサイトをLaで置換することによりこの重い電子系がどのように（空間的にどの位の範囲で、どの位のダイナミクスを持って）崩壊していくかを、(Ce-In)面内のInサイトの核四重極共鳴(NQR)のスペクトルと緩和時間を測定して明らかにしようともくろんだ。単結晶試料は、この道の達人であるZ. Fiskにお願いし1, 2, 3, 5%Laを置換した単結晶を用意してもらった。In核のNQRのスペクトルは、予想通りLa置換の環境効果でInスペクトルに幾つ

かのサテライト構造が見られ、その解析よりLaの周り約20 Åの範囲でコヒーレント状態が崩れていることが分かった。これが、いわゆる“Kondo Hole”の長さのスケールである。しかしながら、この実験はあくまでも系の電荷応答を見たもので、やはりスピン応答とそのダイナミクスを明らかにしなければならない。そのためにはIn-NMRの詳細なスペクトルと緩和時間の測定が必要となりその準備に取り掛かった。

実は、この実験を準備中に、ふと「マテヨ、この実験は何もここ(LANL)でやらなくても他の場所で、また、俺がやらなくても出来る実験である。俺がやるべきことは、ここでしか出来ないしかも自分の長年の夢(約15年前の²³⁵U-NMRの発見に続いて、²³⁹PuのNMR信号を発見すること)を実現する事ではないか!」との思いに至った。そこで丁度、同僚のE. BauerがPuCoIn₅という新しい超伝導体が発見していたので、そのIn核のNQRの実験を計画した。Pu化合物の超伝導体は、同じくLANLで2002年に発見されたPuCoGa₅ ($T_c = 18.5$ K)が有名であるが、この新物質は兄弟分で T_c は2.3 Kである。なお、ここで超ウラン化合物を物性研究として扱える研究機関は、LANL、ドイツ、カールスルーエにあるヨーロッパ超ウラン研究所(EITU)及び東海村の日本原子力研究開発機構の3か所のみであることを指摘しておく。中でも、LANLはUやPu化合物のNMRによる研究にも歴史があり、強い放射性を持つこれらの化合物の取り扱いには豊富な経験とノウハウを持っている。さらに、研究所内の化学のグループの強力なサポートが得られてPu化合物の研究場所としては上記3研究機関の中で最適である。

さて、話を本題に戻すが、PuCoIn₅の単結晶試料で実験を行いIn核のNQR信号観測に成功して、電場勾配の大きさや核磁気緩和時間の温度依存性を詳細に測定し、この物質が他のPu化合物超伝導体と同様にスピンゆらぎを媒介とした異方的超伝導体であることを明らかにした。その他、PuIn₃等のPu化合物の磁性や超伝導に関する実験を幾つか行ったが、いずれもい

わゆるリガンドサイトでのNMRやNQRを使っており極めて間接的で、何だかすっきりしない気持ちにとらわれていた。ここは、やはりPuサイトそのものでのNMRをやらねばと決心し、また、Seaborg Instituteからの要請もあり、Pu-NMRの探索に乗り出した。そもそも、一般にアクチノイド原子サイトでのNMRは、強い超微細相互作用のため共鳴シフトが大きく、かつ、核磁気緩和時間が短いため観測が極めて困難とされていた。そこで、化学屋さんの協力を得て純良のPuO₂を用意してもらい、広い範囲の磁場掃引を行うことで信号の探索を行った。PuO₂を選んだ理由はこの物質ではPuが4価の電子状態をとりほぼ非磁性であるために緩和時間が長く観測が可能であろうと睨んだためである。原子力機構、先端基礎研究センターの研究者である中堂君やLANLのポスドクのG. Koutoulakis君の協力を得ながら幸いにも、世界で初めて²³⁹Pu-NMRの観測に成功した。最初に観測された信号が本当に²³⁹Puによるものかどうかについては慎重な検討を行い、かつ共鳴スペクトルがPuの酸素配位数に依存するなどの貴重な知見を得る等の過程を経て最終的に自信を持って世に公表した次第である（これには、隠れたエピソードもあるが紙面の関係で述べることは出来ないのが残念である）。いずれにしても、この成果は論文としてScience誌に投稿したところ、即受理され2012年5月18日に掲載された。¹⁾ また、この発見は物理の分野のみならず錯体化学や世界中で問題になっている核廃棄物であるPuの長期保存に関して、新しい研究手段を提供するものとして原子力科学の分野でも注目され、日、米双方でプレス発表がなされた。新しいプルトニウム科学の幕開けである。

さてタイトルの「奮闘記」であるが、ふと家内に「俺はロスアラモスで何か奮闘したか?」と口走ると即「それは、山火事で避難命令が出て1週間逃避行をしたことでしょうか?」と言われた。なるほど、研究面では最高の環境を得ることが出来、まさに人生の楽園であったので何も「奮闘」した覚えがないが2011年6月26日に始まった山火事



図1 Los Alamos 近郊の山火事。2011年6月26日夕刻住んでいたアパートより撮影。前方に見える建物は研究所の一部である。

(Las Conchas Wild Fire) で27日に突然ロスアラモスの町に避難命令が出て、あわてて身の回りの品を車に詰め込み、行列の中を崖を下ってアルバカーキの町まで逃げた。その後、一週間アルバカーキ周辺やサンタフェのホテルを渡

り歩き、毎日インターネットでチェックしながら避難解除を待った。一週間後に町に戻ることが出来たがしばらく焦げ臭い空気に悩まされた。幸い町や研究所は火災から免れしばらくして研究所も再開された。この逃避行の間、

家内や丁度日本から修行に来た(28日アルバカーキ到着)中堂君を守るのに「奮闘」したことになるであろう。山火事の写真を添付しておく(図1)。

編集委員会からは、日米の研究体制の違いや、私がなぜ1年間もフルタイムで実験三昧の日々を送れたか、などについて書くことを要請されていたが紙面が尽きてしまった。ただ、最後に言うべきことは、科学者を年齢で差別する我が国の研究・教育体制は考え直す時期に来ているということである。

最後になったが、このような機会を持たれたことに対し関係各位に深く感謝する次第である。

参考文献

- 1) H. Yasuoka, G. Koutroulakis, H. Chudo, S. Richmond, D. K. Veirs, A. I. Smith, E. D. Bauer, J. D. Thompson, G. D. Jarvinen and D. L. Clark: Science 336 (2012) 901.

(2012年4月9日原稿受付)

日本磁気学会編, 佐久間昭正著

磁性の電子論

共立出版, 東京, 2010, vii+343p, 22×16 cm, 本体5,000円(マグネティクス・ライブラリー2) [大学院向]

ISBN 978-4-320-03469-3

赤井久純 (阪大院理)



過去、磁性理論に関する和書は幾冊かの名著がある。例えば、金森順次郎

「磁性」(培風館), 芳田 圭「磁性」(朝倉書店), 守谷 亨「磁性物理学」(朝倉書店)などは磁性を勉強あるいは研究するものにとって座右の書である。これらの書物は実際に磁性理論を創り上げ、世界をリードする磁性理論の黄金時代を築きあげた人たちによる、自身の成果に基づく教科書である。そのため、それぞれが強い個性を持っており、一見、易しそうに見えて(特に金森順次郎の教科書), 良く読むと極めて難解である。結局、関連する論文等を読みこなしながら, なんとか消化して, ようやく自分自身の理解にたどり

新著紹介

つかなければ中々ものにすることができない。と、磁性理論の勉強を始める大学院の学生には常々そのように言っている。

しかし、佐久間氏の教科書はこの常識を少し覆すものである。この教科書は磁場中の電子の運動から始まって、一応標準的なスタイルはとりつつも、徐々に高度な内容へと進み、多体論的アプローチやスピン揺らぎの理論、第一原理計算にいたるまでが網羅されている。決して大部とは言えないこの一冊の教科書に、一体、これだけの内容を理解できる形でまとめあげることができるのだろうかと心配になるが、不思議なことに初学者にも明快に理解できるように書かれている。また、固体電子論の基礎と銘打った付録がついており、これを学んだだけでもこの教科書や固体電子論・磁性に関する論文を読むのに十分な下地を得ることができる。おそらく、著者自身がかつて磁性理

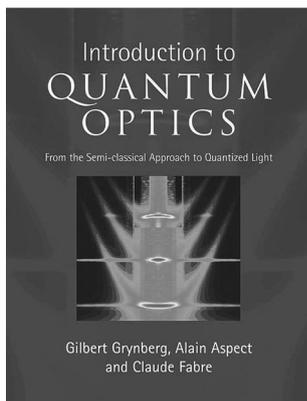
論を学び苦勞した経験をもとに、先達の仕事を新たな視点からみなおしつつ、自身の新しいアイデアを盛り込み、これを教科書としてまとめあげられた成果ではないかと想像する。

最初に挙げた古典的な教科書には多くは取り上げられていない内容で本書に取り上げられている話題は、実効的交換相互作用や第一原理電子状態計算であり、1980年以降進展が著しい視点である。多分、最近の大学院学生に

G. Grynberg, A. Aspect and C. Fabre

Introduction to Quantum Optics; From the Semi-classical Approach to Quantized Light

Cambridge Univ. Press, New York, 2010, xxix + 665p, 26 × 20 cm, £45.00 [大学院・学部向]
ISBN 978-0-521-55112-0



本書はフランスの著名な3名の研究者による最新の量子光学の入門書である。飛躍的な発展を続けている量子光学分野をバランス良く学ぶための現時点で最良の書であろう。

物質と電磁場の相互作用を量子論により記述するとき、原理的に3つの方法がありうる。物質のみを量子論により取り扱うか、電磁場のみを量子論で取り扱うか、あるいは、物質も電磁場も量子論で扱うかである。1つめの処方箋は、半古典(semi-classical)論と呼ばれており、非常に多くの光学現象を正しく記述できることが知られている。例えば、レーザーの動作や光電効果も、物質のみを量子化すれば、電磁場をマクスウェル方程式に従う古典的な波動として扱っても、説明することが可能である。

本書の特徴の1つめは、半古典論に

とってはこちらの方がなじみ深いかもしれないが、その背後にある磁性の標準理論を良く知って臨まなければ、「学んで思わざれば則ちくらし」になりかねない。その意味で、バランスよく構成された本教科書は磁性理論をはじめようとする大学院学生や、磁性理論を専門とはしない研究者にも強く推薦できる好著である。

(2012年3月12日原稿受付)

平野 琢也 (学習院大理)

紙幅を割いていることである。本書は三部構成となっており、第1部が半古典論、第2部が光の量子論、そして第3部では、これらの応用として、非線形光学とレーザー冷却が紹介されている。光を量子化して取り扱うことにより半古典論よりも広い範囲の現象を説明できるわけであるが、著者たちは、だからといって、半古典論を忘れても良いという印象を与えたくないと述べている。半古典論も間違いなく役に立つもので、ちょうど、惑星の運動を記述するのに量子論を用いないのと同様に、光の量子論を必要としない光学現象も多い。そうすると、どのような場合に光の量子論が必要であり、あるいは有益であるのかという感覚を養うことが重要になる。本書はまさにそのよ

T. Imae, T. Kanaya, M. Furusaka and N. Torikai, ed.

Neutrons in Soft Matter

Wiley, New Jersey, 2011, x + 654p, 24 × 17 cm, \$149.95 [専門・大学院向]
ISBN 978-0-470-40252-8

遠藤 仁 (原子力機構)

今年はチャドウィックの中性子の発見から、ちょうど80年である。その後、フェルミらがウラン235を用いて核分裂連鎖反応を制御することに成功し、「原子力」の利用につながったことを

うな感覚を養うことを意図して構成されている。

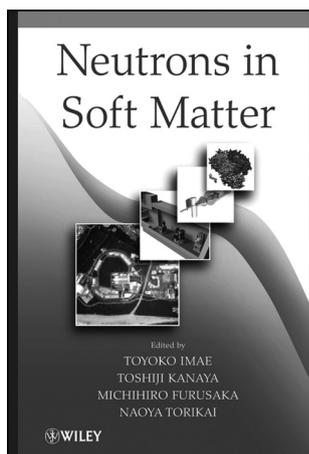
2つめの特徴は、章(Chapter)と多数の補足(complement)から成り立っていることである。この形式により、本質的な部分を短時間で学びたい読者は章だけを読み、必要に応じて補足を参照するという読み方が可能である。補足の内容は、例えば第1部では、フエブリーペロー共振器やガウスビーム光学など実験を行う場合には必須となる知識や、半古典論による光電効果の説明などである。

本書の特徴の3つめは、第一線の研究者により、多数の重要なテーマについて、基礎から説き起こし、その本質に迫ることを目指した解説が展開されていることである。著者の一人であるAspectはベルの不等式の実験的な検証により非常に著名であるが、本書ではもちろん、エンタングルした光子対やベルの不等式について、基礎から実際の実験まで説明されている。量子情報については、Philippe Grangierが量子暗号や量子コンピュータを解説した補足を書いている。

本書の対象は電磁気学と量子力学が既習の学部上級生以上である。この本は元々フランス語で出版されたテキストを拡張して英語版にしたもので(著者の一人Grynbergは英語版の準備中に逝去された)、Ecole PolytechniqueやEcole Normale Supérieure等で実践されているフランスの高等教育の一端を垣間見ることができるという点でも本書は興味深い。

(2012年4月6日原稿受付)

考えると、科学の歩んだ道程に様々な思いを巡らせることになるのだが、一方、熱・冷中性子が物質の原子レベルでの構造とダイナミクスを研究する上でX線と並ぶ極めて強力なプローブで



あることが物性研究において直ちに認識され、既に前世紀半ばには「中性子散乱」という分野が確立されるに至った。当初、固体物性の研究に用いられることが主であった中性子散乱は、中性子源と回折・分光装置の発展と共に、近年では生体・コロイド物質に代表されるソフトマターの研究においても強力な手法として多く用いられるようになっていく。

本書は、中性子散乱を用いて「ソフトマター」の物性研究を行っている第

一線の研究者たちのアンソロジーであり、中性子散乱を様々な角度(実験・理論・装置)から俯瞰することができる内容となっている。読者対象として、実際に中性子散乱を用いてソフトマターを研究している大学院生以上を想定しており、小角散乱・反射率・時間飛行法を用いた非弾性分光装置・中性子スピンエコー分光器・イメージングなどの回折計・分光器・分析装置が、ソフトマターの構造とダイナミクスに関する最新の研究成果と共に紹介されているので、これらの装置や測定原理について詳しく知りたい方々にとって良い教科書となるであろう。更にはJ-PARC等の中性子源に関する詳細な記述もあり、根源から原理を知りたい人の欲求も満たしてくれる。難を言えば、章節別に著者が異なることによる一連の読み物としての不整合(原理原則が繰り返し出てきたり、理論が導入無しに突然現れたり等)の為、読んでいて少々フラストレーションを感じる部分もあり、初学者向けの教科書としては使い難いかもしれない。しかしな

がら、同じことを述べてはいても著者それぞれの表現は微妙に異なり、自然科学の研究とはいえ、やはり個性の発露として研究成果が有るのだと妙に納得した。(個人的には冒頭のMezeiの概論は簡潔で素晴らしいと思った。)

中性子が、物質の固い柔らかいを問わず、その本質と多様性を微視的な視点から解き明かす為の極めて強力な道具であることを、本書は鮮やかに示している。(もちろん中性子散乱は万能の実験手法ではないが。)専門家やソフトマターを他の手法で研究している物性研究者は勿論、散乱法を研究手段に用いている全ての物性研究者に読んで頂けたらと思う。

(2012年4月6日原稿受付)

本欄では物理に関する新著を中心に、隠れた良書や学会員にとって有意義な本などを紹介していきます。紹介書籍の表紙画像につきましては、出版社の許可を得られたもののみ掲載しております。



掲示板

毎月1日締切(17:00必着)、翌月号掲載。但し1月号、2月号は前々月の20日締切。修正等をお願いする場合があります。締切日よりなるべくお早目にお申込み下さい。書式は<http://www.jps.or.jp/book/kejiban.html>にありますので、それに従ってお申込み下さい。webからのお申込みができない場合は、e-mail: kejiban@jps.or.jpへお送り下さい。必ず Fax 03-3816-6208へも原稿をお送り下さい。Faxがありませんと、掲載できない場合がございます。HP掲載をご希望される場合は、上記URLの「2. ホームページ掲載」をご参照下さい。本欄の各項目の内容につきましては、本会は関与致しかねますのでご了解下さい。

人事公募

人事公募の標準書式(1件500字以内)

1. 公募人員(職名, 人数)
2. 所属部門, 講座, 研究室等
3. 専門分野, 仕事の内容(1行17字で7行以内)
4. 着任時期(西暦年月日)
5. 任期
6. 応募資格
7. 提出書類(書類名の前に○印をつけ簡潔に, 1行17字で6行以内)
8. 公募締切(西暦年月日, 曜日)
9. ①書類送付先(郵便番号, 住所, 所属, 担当者名) ②問合せ先(郵便番号, 住所, 所属, 担当者名, 電話, Fax, e-mail等, 必要と思われるもの。①と同じ場合は省略)
10. その他(1行17字で5行以内)

■国際教養大学数学専任教員

1. 准教授, 助教, 又は講師1名
2. 国際教養学部基盤教育
3. 数学関連科目の担当。英語による教授(代数学, 教養数学, 統計学, 微積分学, コンピューター関連科目等)。学生のアカデミック・アドバイザー。
4. 2013年4月1日

5. 最長3年の任期付契約(更新可能性有, テニユア制度有)
6. 数学又は関連する分野における博士号取得者, 又は同等の研究歴を有する者。大学院, 大学等において上記科目の教育研究経験, 及び関連する実務経験を有する者。英語による授業運営及び業務が遂行できる英語力を有すること。
7. ○全て英語で提出 ○履歴書(A4, e-mail記入) ○研究業績目録 ○今後の研究計画と教育への抱負 ○主要な研究業績3点 ○推薦状2通
8. 2012年8月15日(水)
9. ①010-1292 秋田市雄和椿川字奥椿岱 国際教養大学 Mathematics Position Search Committee
②教務課 電話018-886-5900 Fax 018-886-5910 positionaiu0809@aiu.ac.jp
10. 詳細は <http://www.aiu.ac.jp/japanese/recruit/index.html> 参照。

■首都大学東京理工学研究科教員

[I]

1. 准教授1名
2. 物理学専攻原子核理論
3. 広い意味の原子核理論(核子多体系、ハドロン)の研究を行うと共に、学部・大学院の教育と研究指導にあたる。
4. 2013年1月1日
5. 5年(更新有, 准教授としての任用期間は15年以内)
6. 大学院博士後期課程の教育・研究指導を担当できる方
7. ○履歴書(様式有) ○研究業績リスト ○主要論文別刷・コピー5編以内各1部 ○研究業績概要(研究, 教育, 外部資金, 社会貢献含. 約2,000字) ○採用後の活動計画(研究, 教育, 社会貢献含. 約2,000字) ○照会可能者2名の氏名, 連絡先 ○履歴書様式は http://www.houjin.tmu.ac.jp/recruit_teacher/tmu.html から取得可(他は様式不問)
8. 2012年8月20日(月)必着
9. ①192-0397八王子市南大沢1-1 首都大学東京総務部人事課人事制度係
②公募全般: 同上 電話042-677-1111(内線1028) kyoinsaiyo_jmj.tmu.ac.jp, 専門分野: 物理学専攻 政井邦昭 電話042-677-2502 info-apnp_phys.se.tmu.ac.jp
10. 封筒に「教員公募書類(物理・原子核理論)在中」と朱書き送付。本学はダイバーシティに配慮しており, 女性の積極的な応募を歓迎。

[II]

1. 教授又は准教授1名
2. 物理学専攻
3. 広い意味での物性実験。既存研究室とは異なる新しい分野について, 助教と組んで研究室を立ち上げる。学部・大学院の教育及び研究指導にあたる。
4. 2013年4月1日
- 5, 6, 8, 9は [I] に同じ。
7. ○履歴書(様式有) ○研究業績リスト ○主要論文別刷・コピー5編以内各1部 ○研究業績(約2,000字) ○活動計画(約2,000字) ○照会可能者2名の氏名, 連絡先 ○履歴書様式は http://www.houjin.tmu.ac.jp/recruit_teacher/tmu.html から取得(他は様式不問)
10. 封筒に「教員公募書類(物理・物性実験)在中」と朱書き送付。本学はダイバーシティに配慮しており, 女性の積極的な応募を歓迎。

■高エネルギー加速器研究機構教員

[I]

1. 教授1名(公募番号:素核研12-4)
2. 素粒子原子核研究所
3. 素粒子原子核研究所は, CERN・LHC加速器における国際共同実験アトラスを推進。この研究グループに所属し, シリコン飛跡検出器のアップグレード計画を策定し推進する上で, 指導的役割を果たす。
4. 採用後早期
5. なし
7. ○履歴書 ○研究歴 ○発表論文リスト ○着任後の抱負 ○推薦書又は参考意見書
8. 2012年8月31日(金)17時必着
9. ①305-0801つくば市大穂1-1 高エネルギー加速器研究機構総務部人事労務課人事第一係
②素粒子原子核研究所 徳宿克夫 電話029-879-6077 katsuo.tokushuku.kek.jp
10. 封筒に「教員公募関係」「公募番号」を朱書き郵送の場合は書留で送付。書類選考の面接を行う。

[II]

1. 教授1名(公募番号:素核研12-9)
- 2, 4, 5, 7, 8, 9①, 10は [I] に同じ。
3. KEK理論センターに所属し, 広い意味の素粒子現象論の研究と教育活動において指導的役割を果たす。特に本研究所の共同利用に協力して理論と実験の連携を主導。
9. ②素粒子原子核研究所 北澤良久 電話029-864-5399 kitazawa.post.kek.jp

[III]

1. 助教1名(公募番号:素核研12-8)
- 2, 4, 5, 7, 8, 9①, 10は [I] に同じ。
3. Belle IIグループに所属し, Belle II実験における計算機システム環境の開発・運用及び実験の遂行・データ解析に従事。
9. ②素粒子原子核研究所 堺井義秀 電話029-864-5335 yoshihide.sakai.kek.jp

[IV]

1. 助教1名(公募番号:素核研12-7)
- 2, 4, 5, 7, 8, 9①, 10は [I] に同じ。
3. エレクトロニクスシステムグループに所属し, 半導体検出器及び集積回路開発に当たると共に, 関連設備維持に従事。
9. ②素粒子原子核研究所 新井康夫 電話029-879-6211 yasuo.arai.kek.jp

[V]

1. 助教1名(公募番号:素核研12-6)
- 2, 4, 5, 7, 8, 9①, 10は [I] に同じ。
3. ミューオン研究グループに所属し, J-PARCでのミューオン電子転換実験研究に従事。
9. ②素粒子原子核研究所 齊藤直人 電話029-864-5417 nsaito.post.kek.jp

■愛媛大学大学院理工学研究科教員

[I]

1. 准教授1名
2. 環境機能科学専攻分子科学講座固体物理化学研究室
3. 広義の実験系物理化学; 物理化学系の研究指導, 講義・実習等。
4. 2013年4月1日
5. なし
6. 上記専門分野で優れた実績を有する博士号取得者
7. ○履歴書(写真貼付, 賞罰, 所属学会含) ○研究業績リスト(原著論文, 総説, 著書, 特許, 研究費取得状況, その他) ○主要論文別刷5編(コピー可) ○今迄の研究概要(A4, 2枚以内) ○教育及び研究に関する抱負(各A4, 2枚以内) ○照会可能者2名の氏名, 連絡先
8. 2012年8月31日(金)必着
9. ①790-8577松山市文京町2-5 愛媛大学大学院理工学研究科(理学系)人事委員会 佐藤成一
②固体物理化学研究室 内藤俊雄 電話089-927-9604 tnaito.ehime-u.ac.jp
10. 封筒に「化学教員応募書類在中」と朱書き簡易書留で送付。応募書類は本人のみに使用し原則不返却。選考過程で講演をお願いし, 面接することがある(旅費応募者負担)。本学では男女共同参画を推進している。

[II]

1. 准教授又は助教1名
2. 環境機能科学専攻無機化学研究室
3. 実験系の無機化学又はその関連分野; 研究指導又は研究指導補助, 無機化学系の実験及び講義・演習。
- 4, 7, 8, 9①, 10は [I] に同じ。
5. 准教授はなし。助教は5年, 再任可。
6. 博士号取得者が着任迄の取得見込者
9. ②無機化学研究室 高橋亮治 電話089-927-9597 rtaka.ehime-u.ac.jp

■物質・材料機構MANA 研究員

[I]

1. 研究員1名

2. ナノスケール材料部門無機ナノ構造ユニット半導体ナノ構造物質グループ
3. 半導体ナノ構造体の成長技術, 構造・物性評価. Si系ナノ構造体を利用した新規太陽電池材料の開発と評価. 機能性半導体ナノ構造を利用した次世代トランジスタ材料及び高容量Liイオン電池電極材料の開発.
4. 2012年11月1日以降
5. なし(定年制研究員)
6. 博士号取得者(取得見込者含). 半導体ナノ構造体の成長技術, 構造・物性評価に関する経験を有すること.
7. 規定の応募用紙, 詳細は<http://www.nims.go.jp/employment/index.html>参照.
8. 2012年8月31日(金)必着
9. 305-0047つくば市千現1-2-1 物質・材料機構人材開発室 nims-recruit.nims.go.jp

II

1. 研究員1名
2. ナノスケール材料部門超分子ユニット超分子グループ
3. 有機化学, 超分子化学, コロイド界面化学. 分子間相互作用を利用した超分子或いは超分子と無機材料・バイオ材料とのハイブリッドを主体とした新機能ナノ材料の開発. 同時に, 超分子を起点とした化学, 物理, 生物学の境界領域における新分野の開拓.
- 4, 5, 7, 8, 9は [I] に同じ.
6. 博士号取得者(取得見込者含). 有機化学, 超分子化学, コロイド界面化学の何れかの経験を持つことが望ましいが, 新分野開発を目的とする為, 物理学や生物学等の異分野を専門とする者の意欲的な応募も考慮する.

■東北大学金属材料研究所助教

1. 助教1名
2. 材料照射工学研究部門
3. 照射損傷の基礎学理や広い意味での原子力関連材料の研究を, ミクロ・ナノ構造や照射欠陥の先端的解析手法(例えば, 電子顕微鏡, 3次元アトムプローブ, 陽電子消滅法等)の特徴を持って, 意欲的に取り組める方. 研究は主として金属材料研究所附属量子エネルギー材料科学国際研究センター(大洗)にて行う. 今迄の専門分野不問.
4. 決定後早期
5. 7年, 審査により再任1回3年可
6. 博士号取得者, 又は2013年3月迄の取得見込者
7. ○履歴書(写真貼付) ○研究業績リ

- スト(原著論文, 国際会議プロシーディングス, 著書・解説, 招待講演, その他に分類) ○主要論文別刷5編(コピー可) ○今迄の研究業績概要と今後の研究展望(約2,000字) ○推薦書又は照会可能者2名の氏名, 連絡先
8. 2012年8月31日(金)必着
 9. ①311-1313茨城県東茨城郡大洗町成田 東北大学金属材料研究所 永井康介
②同上 電話029-267-3181 Fax 029-267-4947 nagai.imr.tohoku.ac.jp
 10. 封筒に「材料照射工学研究部門 助教 応募書類」と朱書き書留で送付.

■近畿大学理工学部教員

1. 講師又は准教授1名
2. 理学科物理学コース
3. 物性物理学(低温, 磁性, 結晶, 金属, 半導体等の分野の実験系), 物理学実験等の専門科目と基礎物理学及び演習等の学部の基礎科目.
4. 2013年4月1日
5. なし
6. 博士の学位を有し, 心身健康で, 教育・研究に熱心に取り組む大学院の担当もできる方. 大学の管理・運営に対して十分な能力と熱意のある方.
7. ○履歴書(写真貼付, 所定様式) ○研究業績集計表(所定様式) ○研究業績書(所定様式又は任意書式) ○今迄の研究概要(A4, 2,000字以内) ○主要論文別刷5編(コピー可) ○今後の教育・研究に対する抱負(A4, 2,000字以内) ○推薦書(自薦可)又は複数の照会可能者の連絡先 ○本人の連絡先(電話, e-mail)
8. 2012年8月31日(金)必着
9. 577-8502東大阪市小若江3-4-1 近畿大学理工学部理学科物理学コース 日下部俊男 電話06-6721-2332(内線4356) Fax 06-6723-2721 kusakabe.phys.kindai.ac.jp
10. 封筒に「教員応募書類在中」と朱書き簡易書留で送付. 提出書類原則不返却. 詳細は<http://www.kindai.ac.jp/about/saiyo/>参照.

■分子科学研究所助教

1. 助教1名
2. 光分子科学研究領域光分子科学第二研究部門
3. 光と物質の相互作用の観測と制御に意欲的に取り組む実験研究者. 当該研究部門の大森賢治教授と協力して研究を

行う.

4. できる限り早期
5. 6年を目途に転出を推奨
6. 修士課程修了者又は同等以上の学力を有する者
7. ○推薦書(自薦は不要) ○履歴書(所定様式, HP参照) ○研究業績概要(A4, 2頁以内) ○業績リスト(所定様式, HP参照) ○主要論文5編以内の別刷又はプレプリント各2部
8. 2012年9月10日(月)消印有効
9. 444-8585岡崎市明大寺町字西郷中38自然科学研究機構岡崎統合事務センター総務課人事係 電話0564-55-7113
10. 詳細は<http://www.ims.ac.jp/jinji/index.cgi>参照. 当研究所は男女雇用機会均等法を遵守し男女共同参画に取り組んでいる(<http://www.ims.ac.jp/jinji/sankaku.html>).

■立命館大学理工学部教員

[I]

1. 助教1名
2. 物理科学科
3. 素粒子論の研究. 学部の演習及び講義科目, 大学院生の指導等.
4. 2013年4月1日
5. 2013年4月1日~2018年3月31日, 再任不可
6. 着任迄に博士号を有し, 上記の専門分野の優れた研究業績がある方.
7. ○履歴書(A4, 様式1及び2-1) ○教育研究業績書(A4, 様式2-2) ○主要論文別刷約5編(コピー可) ○研究業績概要(A4, 約1,000字) ○今後の研究計画(A4, 約1,000字) ○教育に対する抱負(A4, 約1,000字) ○照会可能者2名の氏名, 連絡先(電話, e-mail等) ○最終学位証明書(学位授与証明書等)
8. 2012年9月14日(金)必着
9. ①525-8577草津市野路東1-1-1 立命館大学理工学部物理科学科 今田 真
②同学科 菅原祐二 電話077-561-5852 ysugawa.se.ritsumeai.ac.jp
10. 応募書式はhttp://www.ritsumeai.jp/job/detail179_j.htmlよりダウンロード. 封筒に「物理科学科助教(理論系) 応募書類」と朱書き書留で送付. 応募書類不返却.

[II]

1. 任期制講師又は助教4名
- 2, 4, 8, 9①は [I] に同じ.
3. 実験物理学. 実験・講義を担当. (1) 任期制講師: 実験工房, 物理学実験の

運営・管理。(2)助教:メゾスコピック物理,放射光物理,ソフトマター物理の当該教員と協力し,研究を推進.

- 5年,再任不可
- ①博士号取得者,取得見込の方.②私立大学における教育・研究を理解し,熱意を持って取り組まれる方.
- 履歴書 ○教育研究業績書 ○主要論文別刷5編(コピー可) ○希望任用職名(併願の場合は順位を付す) ○研究業績概要 ○今後の研究計画 ○教育に対する抱負 ○照会可能者2名の氏名,連絡先 ○最終学位証明書
- ②立命館大学理工学部物理科学科 深尾浩次 電話077-561-2720 kfukao@se.ritsume.ac.jp
- 封筒に「物理科学科教員(任期制講師・助教)応募書類」と朱書き書留で送付.公募内容,書類の様式等,詳細はhttp://www.ritsume.ac.jp/job/detail179_j.htmlで必ず確認.

■静岡大学教育学部物理学担当教員

1. 講師又は助教1名
2. 理科教育講座
3. 実験物理(天文学・惑星科学・地球物理学・気象学等の分野含).学部・大学院の物理学関係(地学分野含)の講義・実験.卒業研究・修士課程で実験指導可能な方.
4. 2013年4月1日
5. なし
6. 博士課程修了(見込)又は同等学力を有す方
7. ○履歴書(市販用紙可, e-mail付記,写真貼付) ○業績リスト(別紙書式) ○主要論文別刷5編以内(コピー可) ○研究業績概要(A4,1枚以内) ○「今後の研究の抱負」と「教育学部における教育の抱負」(A4各1枚程度) ○大学の卒業証明書と成績証明書,及び大学院修了証明書又は在学証明書と成績証明書 ○照会可能者2名の氏名,連絡先(住所,電話, e-mail)
8. 2012年9月14日(金)必着
9. ①422-8529静岡市駿河区大谷836 静岡大学教育学部長
②碓 寛 電話054-238-4620 edhikar@ipc.shizuoka.ac.jp
10. 別紙書式は<http://www.ed.shizuoka.ac.jp/434/>参照.封筒に「物理学担当教員応募書類在中」と朱書き簡易書留で送付.書類不返却.

■東京大学物性研究所助教

1. 助教1名
2. 附属国際超強磁場科学研究施設松田研究室
3. 嶽山研究室と連携し,破壊型パルスマグネットを用いて,100Tから1,000T領域の超強磁場における磁性体や半導体,超伝導体の研究を行う.測定技術開発,新規分野開拓への意欲,物理的に比較的広い分野に興味を持つ方を希望.強磁場実験経験は不問だが,固体物理学の実験的研究に携わってきた方が望ましい.
4. 決定後早期
5. 5年,1回を限度に再任可
6. 修士課程修了又は同等以上の能力者
7. ○履歴書(略歴可) ○業績リスト(主要論文に○印) ○主要論文別刷約3編(コピー可) ○研究業績概要(約2,000字) ○研究計画書(約2,000字) ○推薦の場合は推薦書,応募の場合は指導教員等の意見書(作成者から直送)
8. 2012年9月28日(金)
9. ①277-8581柏市柏の葉5-1-5東京大学物性研究所総務係 電話04-7136-3207
②松田康弘 電話04-7136-5329 ymatsuda@issp.u-tokyo.ac.jp
10. 封筒に「国際超強磁場科学研究施設松田研究室助教応募書類在中」又は「意見書在中」と朱書き書留で送付.応募書類不返却.履歴書は本応募の用途のみに使用.個人情報に正当な理由なく第三者への開示,譲渡及び貸与しない.

■理化学研究所播磨研究所主任研究員

1. 主任研究員2名
2. 放射光科学総合研究センター
3. 先端光源開発部門,利用技術開拓研究部門.研究室を主宰する他,種々の活動を通して理化学研究所の研究運営に参画.
4. 2013年4月1日以降早期
5. 常勤,60歳定年
6. 大型施設において,プロジェクトを推進するリーダーに相応しい実力と研究実績をもつ方.国籍不問.
7. ○英文で提出(詳細はhttp://www.riken.jp/r-world/info/recruit/k120930_e_rsc.htmlを参照.)
8. 2012年9月30日(日)
9. 679-5148兵庫県佐用郡佐用町光都1-1-1 理化学研究所播磨研究所 高田昌樹 電話0791-58-2942 Fax 0791-

58-2717 takatama@spring8.or.jp

10. 提出書類原則不返却.

■福岡工業大学教員

1. 准教授又は助教1名
2. 工学部知能機械工学科
3. 物性物理(実験系),担当科目は機械物理実験,物理学I等物理関連科目,卒業研究.
4. 2013年4月1日
5. なし
6. 専門分野で研究業績があり,博士号取得者か着任時迄の取得見込者.教育経験がある方が望ましい.
7. ○履歴書(学歴,職歴,資格,社会活動,写真貼付) ○研究業績リスト(著書,査読付論文,紀要等) ○主要論文別刷又はコピー ○今迄の研究概要と今後の研究計画(約1,000字) ○教育に対する抱負(約1,000字)
8. 2012年10月9日(火)
9. ①811-0295福岡市東区和白東3-30-1 福岡工業大学教務課 本行義洋
②工学部知能機械工学科 仙波卓弥 電話092-606-4107 senba_fit.ac.jp
10. 本学では助教も独立した研究室を持ち,研究費も配分される.

■京都大学工学研究科教授

1. 教授1~2名
2. 電子工学専攻電子物理工学講座
3. 量子,光,分子,スピン,プラズマエレクトロニクス,イオン工学,先進プロセス,ナノテクノロジー等の先端分野.
4. 2013年4月以降
6. 博士号を有し,上記分野で優れた実績を有する方
7. ○履歴書(写真貼付) ○学会及び社会における活動 ○研究業績リスト(学術雑誌掲載論文,国際会議プロシーディングス(査読有),国際会議発表(招待/一般講演を区別),著書,特許等,その他に分類し,本人名に下線) ○主要論文別刷約10編 ○研究業績概要(A4,5枚以内) ○研究費導入実績 ○研究に関する方針・抱負(A4,3-5枚) ○教育に関する方針・抱負(A4,3-5枚) ○照会可能者4名(内2名は海外)の氏名,連絡先 ○上記「研究業績概要」,「研究に関する方針・抱負」は日本語版及び英語版を作成 ○印刷物と電子データ(CD)を簡易書留又は宅配便で送付
8. 2012年10月15日(月)消印有効
9. 615-8510京都市西京区京都大学桂 京

都大学大学院工学研究科電子工学専攻
木本恒暢 電話075-383-2300
chair-denshi kucee.kyoto-u.ac.jp

10. 詳細は<http://www.ee.t.kyoto-u.ac.jp/>参照

■カナリア株式会社技術者

1. 技術職3名
2. 開発技術部門
3. ロボティクス技術を応用したりリモート撮影製品の開発・製作。
4. 応相談
6. 電気・機械・IT技術全般に興味のある方。
7. ○履歴書(写真貼付) ○職務経歴書
8. 通年採用の為なし
9. okada canaria-net.co.jp
10. 選考通過者のみ1週間程度で連絡。詳細は(製品)<http://www.canaria-net.co.jp/>、(採用)<http://www.canaria-net.co.jp/recruit/index.html>参照。

学術的会合

学術的会合の標準様式(1件500字以内)

掲載されている例を参考にして、次の項目中、必要なものを簡潔に作成して下さい:
○会合名 ○主催 ○日時(西暦年月日、曜日) ○場所(会場名の後に括弧して郵便番号、住所、電話) ○内容(1行18字で12行以内) ○定員 ○参加費(物理学会員、学生の参加費) ○申込締切(講演、参加、抄録、原稿提出の別を明記) ○連絡先(郵便番号、住所、所属、担当者名、電話、Fax、e-mail等) ○その他(1行18字で5行以内)

■第19回高校課題研究フォーラム

主催 日本セラミックス協会
協賛 日本物理学会、他
日時 2012年8月27日(月)
場所 東京工業大学大岡山キャンパス南7号館2階(152-8550東京都目黒区大岡山2-12-1)
内容 セラミックを題材とした高校で出来る課題研究例を提供し、講義と実習で課題研究について考える。
定員 30名
参加費 3,000円
申込 e-mailで氏名・勤務先・連絡先住所・電話・参加費送金予定を連絡
参加申込締切 2012年8月24日(金)、但し定員になり次第締切
連絡先 169-0073 東京都新宿区百人町2-22-17 日本セラミックス協会総務グループ教育委員会担当 阿部善弘 電話

03-3362-5231 Fax 03-3362-5714
cersj-kyouiku cersj.org http://www.ceramic.or.jp/ikyoku/kadai_kenkyu_forum.html

その他 参加費振込先:三菱東京UFJ銀行
新宿中央支店(普)3935016 公益社団法人日本セラミックス協会

■プラズマシミュレータシンポジウム2012

主催 核融合科学研究所数値実験研究プロジェクト
日時 2012年9月11日(火)~12日(水)
場所 核融合科学研究所(509-5292土岐市下石町322-6 電話0572-58-2541)
内容 「数値実験研究プロジェクト共同研究」の報告会として、スーパーコンピュータ「プラズマシミュレータ」を利用して得られた最新の研究成果の報告とその議論を行う一方、プラズマ・核融合分野はもとより関連分野の最前線で活躍する研究者を招待講演者として招き、最新の研究トピックスについて紹介する。スーパーコンピュータの能力向上に伴う今後の展望について議論を行う。

定員 特になし
参加費 無料(懇親会費別)
参加申込締切 当日受付可
講演申込締切等 <http://www.nsrp.nifs.ac.jp/sympo2012/>参照
連絡先 核融合科学研究所プラズマシミュレータシンポジウム2012実行委員会(総務:三浦英昭、受付担当:鶴飼三枝子)
pss2012 nifs.ac.jp <http://www.nsrp.nifs.ac.jp/sympo2012/>

■神先生白寿記念特別講演会

主催 日本学術振興会マイクロビームアナリシス第141委員会
協賛 日本物理学会
日時 2012年9月27日(木)
場所 名古屋大学工学部三号館2F321講義室(464-8603名古屋市中千種区不老町)
内容 学振141委員会の初代委員長であり、日本の電子顕微鏡発展に大きく貢献された榊米一郎先生の100歳を記念して、電子顕微鏡発展の歴史から最新の技術に関する講演会を開催する。
定員 150名
参加費 無料
申込 下記連絡先に懇親会参加の有無と併せ連絡
懇親会参加者参加申込締切 2012年9月20日(木)
連絡先 480-1192長久手市横道41-1 (株)

豊田中央研究所分析研究部ナノ解析研究室 堂前和彦 電話0561-71-7971 Fax 0561-63-6448 sakaki100 jsp141.surf.nuqe.nagoya-u.ac.jp <http://jsp141.surf.nuqe.nagoya-u.ac.jp/>

■第17回久保記念シンポジウム「ゆらぎのなかの構造」

主催 久保記念シンポジウム組織委員会
日時 2012年10月6日(土)
場所 学士会館320号室(東京都千代田区神田錦町3-28 電話03-3292-5936)
内容 竹内一将(東大理)界面成長の普遍ゆらぎ:「目で見る」ランダム行列理論の統計則、水野大介(九大)揺動散逸定理を破る非平衡揺らぎの時空間構造、永尾太郎(名大)多元数理、昨年度久保亮五記念賞受賞者)直交多項式に關係したランダム行列アンサンブル
定員 100名
参加費 無料
連絡先 東京都渋谷区南平台15-15今井ビル6F 井上科学振興財団 電話03-3477-2738 inoue01 inoue-zaidan.or.jp、久保記念シンポジウム組織委員会 田崎晴明(学習院大理)、樽茶清悟(東大工)、宮下精二(東大理) <http://www.gakushuin.ac.jp/~881791/ks/17/>

その他 シンポジウムに引き続き第16回(2012年度)久保亮五記念賞贈呈式を開催。

■第4回MLFシンポジウム・茨城県ビームライン平成23年度成果報告会

主催 J-PARCセンター(JAEA/KEK)、日本原子力研究開発機構、高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所、総合科学研究機構(CROSS)、茨城県
日時 2012年10月10日(水)~11日(木)
場所 日本科学未来館(135-0064東京都江東区青海2-3-6 電話03-3570-9151)
内容 J-PARC物質生命科学実験施設MLFの装置群の現状を報告すると共に、これらの利用研究や装置開発の成果を紹介し、今後の展開に向けた議論を図る事を目的とする。特に今年度は、MLFシンポジウムと茨城県ビームライン成果報告会との合同開催とし、幅広く施設・ユーザー間相互理解・交流を促進する事により、MLFの更なる発展的な運用に繋げる事を旨とする。
参加費 無料
口頭発表講演申込締切 2012年9月3日(月)
ポスター発表講演申込締切 2012年9月10日(月)

参加事前申込締切 2012年9月30日(日)
連絡先 MLFシンポジウム事務局
MLFsympo ml.j-parc.jp <http://j-parc.jp/MatLife/ja/meetings/MLFsympo/index.html>

■日本希土類学会第30回講演会・30周年記念国際シンポジウム

主催 日本希土類学会
協賛 日本物理学会
日時 2012年11月7日(水)15:00~9日(金)15:15
場所 沖縄ハーバービューホテルクラウンプラザ(那覇市泉崎2-46)
内容 講演会:長谷川靖哉(北大院工), 加藤泰浩(東大院工), 岡部 徹(東大生研), 国際シンポジウム: John E. Greedan (McMaster Univ., Canada), Junji Inanaga (Kyusyu Univ., Japan), Miki Hasegawa (Aoyama Gakuin Univ., Japan), Chun-Hua Yan (Peking Univ., China), Zhaomin Hou (Riken, Japan), Taek-Soo Kim (KITECH, Republic of Korea). ポスターセッション

定員 未定
参加費 <http://www.kidorui.org/lecture.html> 参照.

発表申込締切 2012年9月28日(金)
参加申込締切 2012年10月12日(金)
連絡先 565-0871 吹田市山田丘2-1 大阪大学大学院工学研究科応用化学専攻内日本希土類学会事務局 電話06-6879-7352 Fax 06-6879-7354 kidorui chem.eng.osaka-u.ac.jp

その他 懇親会: 11月8日18:00より同ホテルにて(会費は参加申込締切迄に払込の場合7,000円, 当日9,000円).

■第27回量子情報技術研究会

主催 電子情報通信学会量子情報技術時限研究専門委員会
日時 2012年11月27日(火)~28日(水)
場所 慶應義塾大学日吉キャンパス来往舎シンポジウムスペース(223-8521横浜市港北区日吉4-1-1)
内容 量子情報, 量子計算, 量子暗号など広く量子情報技術に関わる理論的研究, 実験的研究, 計算機科学的研究, 数学的

研究, 及びその他関連分野(申込状況により査読あり).

定員 150名

参加費 事前振込: 一般5,000円, 学生1,000円. 当日払い: 一般6,000円, 学生2,000円. 懇親会費別途

申込 <http://staff.aist.go.jp/s-kawabata/qit/> より
口頭講演申込締切 2012年10月12日(金)
ポスター講演申込締切 2012年10月26日(金)

原稿提出申込締切 2012年11月5日(月)
参加申込締切 2012年11月9日(金)

連絡先 223-8522横浜市港北区日吉3-14-1 慶應義塾大学理工学部物理情報工学科 山本直樹 電話045-566-1830 Fax 045-566-1587 yamamoto appi.keio.ac.jp

■The 16th Asia Pacific Symposium on Intelligent and Evolutionary Systems

主催 IES2012実行委員会
協賛 日本物理学会, 他
日時 2012年12月12日(水)~14日(金)
場所 京都市関西セミナーハウス(606-8134京都市左京区一乗寺竹ノ内町23)

内容 進化計算・最適化問題を中心としてインテリジェントシステム及び経済社会システムの物理的アプローチに関する内容を取扱う. 参加者30~40名の規模で研究発表と意見交換を実施. 1997年からオーストラリア, 日本, 韓国等で毎年開催しており, 今年度は16回目にあたる国際シンポジウム.

定員 30~40名
参加費 30,000円
講演アブストラクト(A4, 2頁)提出締切 2012年8月31日(金)

原稿(A4, 6~10頁)提出締切2012年10月15日(月)

連絡先 606-8501京都市左京区吉田本町京都大学大学院情報学研究所 佐藤彰洋 電話/Fax 075-753-5515 ies2012.secretariat@amech.amp.i.kyoto-u.ac.jp <http://www.i.kyoto-u.ac.jp/IES2012/>

その他 講演発表申込時に提出される講演アブストラクトに基づき発表の可否に関する審査を行う.

その他

助成公募の標準様式(1件500字以内)

○名称 ○対象(1行18字で7行以内)
○助成内容 ○応募方法(1行18字で4行以内) ○応募締切(西暦年月日, 曜日)
○詳細問合せ先(郵便番号, 住所, 所属, 担当者名, 電話, Fax, e-mail等)

その他 ○標題 ○内容 ○連絡先

■第7回凝縮系科学賞候補者募集

対象 広い意味での凝縮系科学の研究に従事する若い研究者(2012年12月末日現在, 博士学位取得後8年以内の者). 原則として実験系・理論系各1名(該当者が無い場合には見送ることがある).

顕彰 賞状, 盾及び賞金20万円
推薦方法 自薦又は他薦
推薦締切 2012年8月31日(金)
提出先及び問合せ先 名古屋大学理学研究科物理学教室 寺崎一郎 電話052-789-5255 terra cc.nagoya-u.ac.jp

その他 推薦者は候補者についての書類(○略歴 ○全業績リスト ○研究業績概要(A4, 2枚以内) ○主要論文別刷3編以内 ○他薦の場合には推薦書 ○書式自由)をe-mailで送付. 運営委員: 北岡良雄(委員長), 秋光純, 鹿野田一司, 福山秀敏, 寺倉清之, 寺崎一郎, 永長直人, 三宅和正, 宮野健次郎. 詳細は <http://prize.condmat.net/> 参照.

■会員専用ページ: ユーザ名とパスワード

本会 web site (<http://www.jps.or.jp/>) の会員専用ページには, 各種変更届, 刊行委員会報告, 過去の大会プログラム等の情報を掲載しています. アクセスするためのユーザ名とパスワード(今月と来月分)は次の通りです. (英数字は半角入力, 大文字小文字は区別されます.)

8月 ユーザ名 : 12Aug
パスワード: Zernike800
9月 ユーザ名 : 12Sep
パスワード: Leggett662

行事予定

[詳しくは表中の右欄記載の会誌各巻号の掲示板欄(*印は会告欄)をご参照下さい.]

開催月日	名 称	開 催 地	会誌巻号または世話人
2012年			
8/6	科研費新学術領域研究「半導体における動的相関電子系の光科学」公開フォーラム —光科学の新しい可能性に挑戦する—	東京	67-7
8/6~8	第18回(2012年)結晶工学スクール	東京	67-6
8/6~10	第57回物性若手夏の学校	岐阜市	67-5
8/16~18	平成24年度末踏科学サマー道場「材料科学・生命科学を変革するソフトマテリアル, その研究の最前線」	葉山町(神奈川)	67-7
8/20~25	The 20th Int. IUPAP Conf. on Few-Body Problems in Physics	福岡市	67-3
8/26	国際シンポジウム「科学の不定性と社会~いま, 法廷では..?~」	東京	67-7
8/26~31	第21回ヤーン・テラー効果に関する国際会議	つくば市(茨城)	67-3
8/27	第19回高校課題研究フォーラム	東京	67-8
8/30~31	第69回熱測定講習会「初心者のための熱分析の基礎と応用」	京都市	67-7
8/30~9/1	第2回「超低速ミュオン顕微鏡が拓く物質・生命・素粒子科学のフロンティア」領域 会議	札幌市	67-7
9/3~7	19th WIEN2k WORKSHOP	東京	67-3
9/3~7	第21回コンピューテーショナル・マテリアルズ・デザイン(CMD)ワークショップ	豊中市(大阪)	67-6
9/4~5	第28回分析電子顕微鏡討論会	千葉市	67-6
9/5~8	フレキシブル・プリントド・エレクトロニクス国際会議2012(ICFPE2012)	東京	67-2
9/7~9	Summer School 数理物理2012「結び目の数理と物理」	東京	67-5
9/10~12	第15回XAFS討論会	鳥取市	67-7
9/10~13	Principles and Application of Control for Quantum Systems	東京	67-6
9/11~12	プラズマシミュレータシンポジウム2012	土岐市(岐阜)	67-8
9/11~14	日本物理学会2012年秋季大会(京産大)(素粒子, 核物理, 宇宙線, 宇宙物理)	京都市	日本物理学会
9/18~21	日本物理学会2012年秋季大会(横浜国大)(主として物性)	横浜市	日本物理学会
9/20~21	第3回社会人のための表面科学ベーシック講座	東京	67-7
9/21~22	第22回格子欠陥フォーラム・励起ナノプロセス研究会合同シンポジウム「材料科学 のための欠陥制御・評価」	三浦市(神奈川)	67-7
9/23~28	IUMRS-ICEM2012シンポジウムD-5「先進計算材料科学・工学 Advanced Computa- tional Materials Science and Engineering」	横浜市	67-3
9/24~28	14th Int. Conf. on Vibrations at Surfaces	神戸市	67-3
9/27	榊先生白寿記念特別講演会	名古屋市	67-8
10/6	第17回久保記念シンポジウム「ゆらぎのなかの構造」	東京	67-8
10/10~11	第4回MLFシンポジウム・茨城県ビームライン平成23年度成果報告会	東京	67-8
10/14~18	Conf. on Computational Physics 2012	神戸市	67-7
10/21~25	第25回固体内原子衝突に関する国際会議	京都市	66-10
11/7~9	日本希土類学会第30回講演会・30周年記念国際シンポジウム	那覇市	67-8
11/27~28	第27回量子情報技術研究会	横浜市	67-8
12/3~5	第25回国際超電導シンポジウム(ISS2012)	東京	67-6
12/3~8	The 4th Int. Symp. on Slow Dynamics in Complex Systems—頑張ろう東北—	仙台市	67-5
12/12~14	The 16th Asia Pacific Symp. on Intelligent and Evolutionary Systems	京都市	67-8
2013年			
3/26~29	日本物理学会第68回年次大会(広島大)	東広島市(広島)	日本物理学会
9/20~23	日本物理学会2013年秋季大会(高知大)(素粒子, 核物理, 宇宙線, 宇宙物理)	高知市	日本物理学会
9/25~28	日本物理学会2013年秋季大会(徳島大)(主として物性)	徳島市	日本物理学会

編集後記

4月から学会誌の素粒子(理論)分野の編集委員を前任者の杉本茂樹さんから引き継ぎました。まだ2回しか編集委員会に参加していませんが、もう編集後記を引き受

けることになってしまいました。順番を苗字のアイウエオ順で決めるときはこうなるパターンが多いのですが、とにかく編集委員としてこれまでの印象を書きつらねてみます。一読者としての私は、学会誌が届くとパラパラとページをめくり、面白そうな

記事があれば読む、目につく記事が無いときは編集後記のみ読んで積んでおくという(典型的な?)読者でした。こういう人が編集後記を書いて、それを読む人がいることを想像することは恐ろしいことですから、編集委員になったからといっても

相変わらず積ん読者のままでしたが、5月の編集委員会に参加しました。学会の事務局は新橋から湯島に移転したばかりです。東京タワー付近からスカイツリーの方向に引っ越したことになります。新事務局の近くには湯島天神があり、編集会議当日にはお祭りが開かれていました。会議中にお囃子の音が飛び込んできて、(会議を抜け出したくなるような)いい天気でした。

編集委員会では、これまでの記事の進行状況の報告、解説記事の提案とその決定、表紙の図柄の選択等の議事がきばきと進んでいきました。ただ議事数が多いのでそれなりに時間はかかります。進行状況については、完成までに随分時間がかかっている原稿もいくつかあります。執筆されている方も忙しい中随分努力して、また編集委員も大分苦労して掲載までに至っているなと思いました。執筆者と担当編集委員の努力には頭が下がります。現状では完成原稿の数は出版数に比べ不足傾向であり、ページ数が足りず厚さが薄い号もあります。(この後記が載っている号も薄いのではないかと思います。)原稿は主に閲読者のコメントを基に書き直されるのですが、最近では非専門分野の副担当となった編集委員がわかりやすさの観点から示唆を与えること

が行われることになりました。編集委員は各分野の専門家ですので、自分の専門分野についての読みやすさについてなかなか判断ができないところがあるかと思います。この副担当により、編集委員の中で読みやすさのための改善点についてのノウハウが共有されて行けば、今後記事がより読みやすくなっていくのではないのでしょうか。

また何々100年という企画も進行していました。自分の専門分野ではまだ50年に達していないものが多いな、米谷-Scherk-Schwarzは2014年で40年、Belavin-Polyakov-Zamolodchikov、Green-Schwarzも30年、Seiberg-Wittenは20年か、(まてよ2014年はブラジルワールドカップだ)と思っていると、突然自分の記事の提案の番になり、慌てて説明しました。各分野での提案を聞いていると、なるほど面白そうだと思うものもあり、もう少し説明してほしいなものもあり、これでは自説だけの内容になってしまうのではという印象を受けるものもあり、様々ですが、各分野の最近の話題が聞けてためになります。会議終了後は疲れたので祭りも見ずにすぐ帰りました。

編集委員として(年会費に見合うだけの)読みごたえがある記事を多く残しているように今後提案して行きたいと思いま

す。何か素粒子理論の分野で面白い話題がある方は私まで御一報下さい。

伊藤克司 <

編集委員

旭 耕一郎(委員長)、 宮下 精二、
有田亮太郎、板橋 健太、伊藤 克司、
遠藤 仁、小川 了、北島 昌史、
小島智恵子、佐藤 丈、佐藤 実、
島野 亮、鈴木 陽子、竹内 幸子、
田中 秋広、谷本 久典、田村 忠久、
樽家 篤史、西野 晃徳、長谷川太郎、
平山 博之、藤谷 洋平、藤山 茂樹、
古川はづき、古川 勝、宮本 良之、
加藤 岳生

(支部委員)

朝日 孝尚、石井 史之、奥西 巧一、
岸田 英夫、久保木一浩、酒井 彰、
仲野 英司、野村 清英、松井 広志、
水野 義之

新著紹介小委員会委員

加藤 岳生(委員長)、 雨宮 高久、
木村 元、榊田 創、柴田 絢也、
竹延 大志、多田 司、多田 朋史、
中川 賢一、村山 能宏、森川 雅博、
矢向謙太郎、吉越 貴紀、渡邊 紳一

本誌を複製される方に (Notice about photocopying)

(参照: 本誌 47 (1992) 4 号会告)

本誌に掲載された著作物を複製したい方は、(社)日本複製権センターと包括複製許諾契約を締結されている企業の方でない限り、日本物理学会が複製権等の行使の委託をしている次の団体から許諾を受けて下さい。

(In order to photocopy any work from this publication, you or your organization must obtain permission from the following organization which has been delegated for copyright clearance by the copyright owner of this publication.)

〒107-0052 東京都港区赤坂 9-6-41 乃木坂ビル 3F
一般社団法人学術著作権協会
電話 03-3475-5618 Fax 03-3475-5619 info jaacc.jp

アメリカ合衆国における複製については、下記 CCC
に連絡して下さい。

Copyright Clearance Center, Inc.
222 Rosewood Drive, Danvers, MA 01923 USA
Phone 1-978-750-8400 Fax 1-978-646-8600

なお、著作物の転載・翻訳のような、複製以外の許諾は、直接日本物理学会へご連絡下さい。

日本物理学会誌 第67巻 第8号 (平成24年8月5日発行) 通巻750号

©日本物理学会 2012

Butsuri

発行者 〒113-0034 東京都文京区湯島 2-31-22 湯島アーバンビル 8F

白 勢 祐 次 郎

印刷所 〒169-0075 東京都新宿区高田馬場 3-8-8

株式会社 国際文献印刷社

発行所 〒113-0034 東京都文京区湯島 2-31-22 湯島アーバンビル 8F

一般社団法人 日本物理学会

電話 03-3816-6201 Fax 03-3816-6208

郵便振替 00120-4-167544 定価 1部2,400円 年額25,000円

本誌に掲載された寄稿等の著作権は一般社団法人日本物理学会が所有しています。