

# 日本物理学会誌

- ホイスラー化合物熱電材料の実用化研究
- ヘリウム様原子におけるフントの第一規則の起源

**BUTSURI**

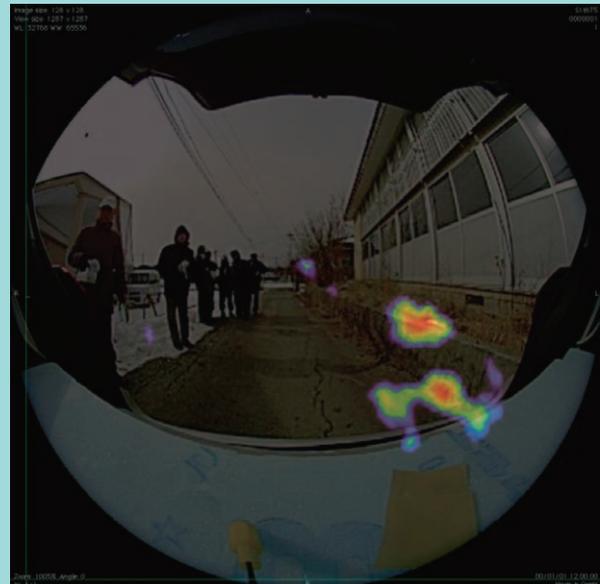
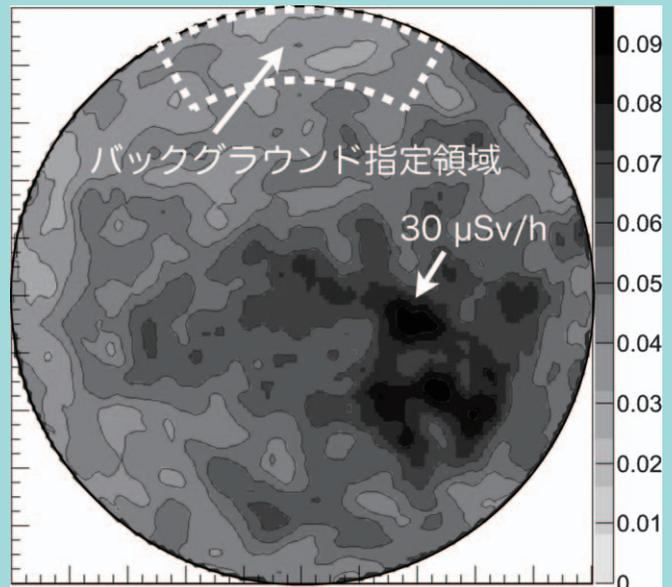
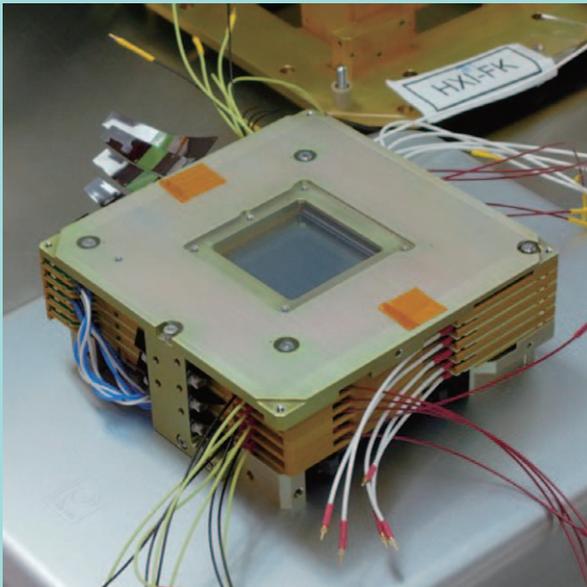
第68巻 第6号(通巻 762号) ISSN 0029-0181

昭和30年6月13日 第3種郵便物認可

平成25年6月5日発行 毎月5日発行

**2013 VOL. 68 NO.**

6

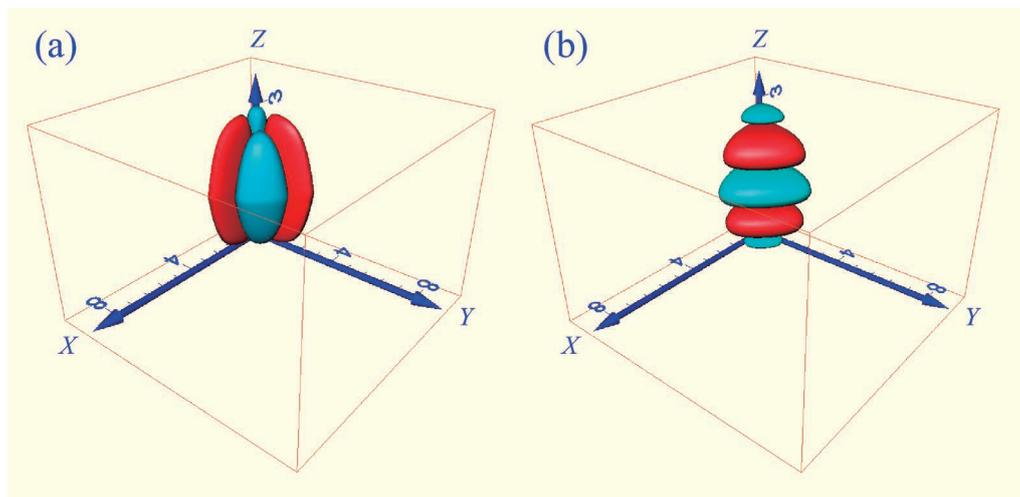


口絵：今月号の記事から		345
巻頭言	刊行委員会の課題	高野 宏 349
交流	ホイスラー化合物熱電材料の実用化研究—材料設計からモジュール開発まで—	西野洋一, 三上祐史 350
解説	ヘリウム様原子におけるフントの第一規則の起源 <b>口絵</b>	佐甲徳栄 358
最近の研究から	宇宙の大規模構造の新展開：原始揺らぎの非ガウス性は何をもたらすか？ <b>口絵</b>	西道啓博 366
	カリウムをドーピングしたグラファイトに無磁場下で出現するランダウ準位 <b>口絵</b>	近藤剛弘, 郭 東輝, 中村潤児 371
	高いスピンのゲージ理論による AdS/CFT 対応の理解に向けて	足田泰章 378
話題	コンプトンカメラで放射性物質の飛散状況を可視化する	高橋忠幸, 武田伸一郎, 渡辺 伸 382
JPSJの最近の注目論文から	2月の編集委員会より	安藤恒也 387
シリーズ「物理教育は今」	放射線を科学的に理解するための教育	鳥居寛之 390
ラ・トッカータ	ゴダード体験記	坂本貴紀 393
追悼	畏友高橋康博士を悼む	亀淵 迪 396
新著紹介		397
掲示板	■人事公募 ■学術的会合 ■その他	400
行事予定		403
会告	■2013年秋季大会の宿泊・交通等の案内 ■大会の宿泊手配業務等の業者依頼について(お知らせ) ■2013年秋季大会会場における託児室の設置について ■2013年秋季大会の参加登録・講演概要集購入のご案内(講演申込者以外の方への案内です) ■第8回日本物理学会若手奨励賞について ■第54回(平成25年度)東レ科学技術賞, 同・東レ科学技術研究助成, 第45回(2013年度)内藤記念科学振興賞, 第34回女性科学者に明るい未来をの会「猿橋賞」及び第5回(平成25年度)中谷賞の各受賞(研究助成は受領)候補者の推薦(賞は他薦, 研究助成はご本人の申請)について(募集) ■2014年~2015年開催 藤原セミナー募集のお知らせ ■2013年5月1日付新入会者	406
本会記事	■第69期副会長候補選挙の結果 ■第69期~70期代議員選挙の結果 ■第12回代議員懇談会報告 ■一般社団法人 日本物理学会 第93回定時総会 ■第68回年次大会 ■第68回年次大会の忘れ物	411
本会関係欧文誌目次		436

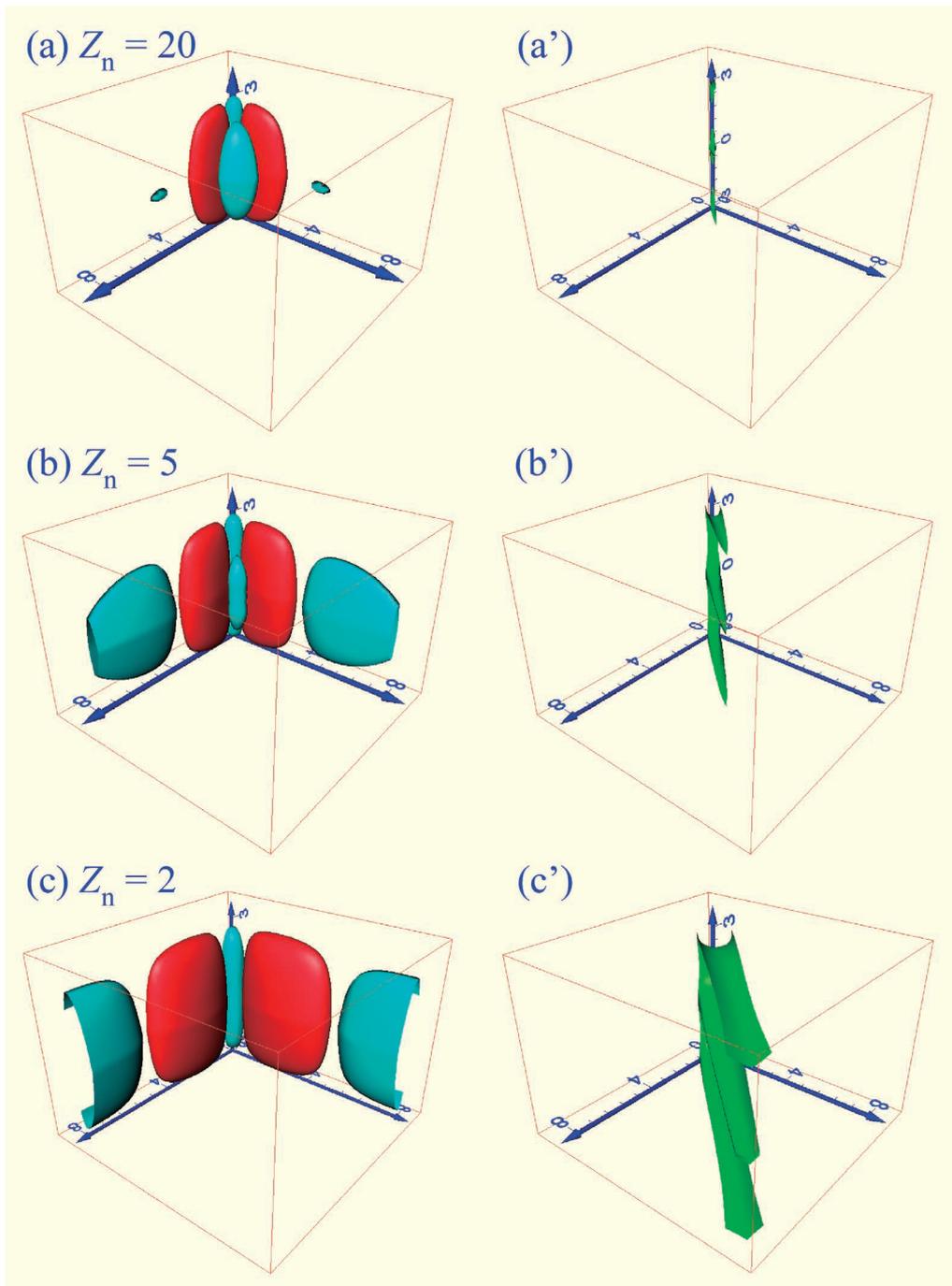
**表紙の説明** 左上は、「超広角コンプトンカメラ」の写真。Si両面ストリップ検出器2層, CdTe両面ストリップ検出器3層, 計5層の検出器から構成される。右上は、福島での実地試験で取得したデータに対し、放射性物質から放出されるガンマ線のエネルギーと合致するイベントを選択したのち、コンプトン散乱の運動学から求まるガンマ線の入射方向を天球に投影したものの(バックプロジェクション画像)。黒色がガンマ線の強度が高い方向を示し、実際に、矢印で示した場所に最大30マイクロSv/h(地上1cm)のホットスポットを確認した。空間線量は2-3マイクロSv/h程度。左下は、魚眼レンズを装着したデジタルカメラの可視光画像。右下は、可視光画像にガンマ線画像を重ねたもの。ガンマ線画像は、バックプロジェクション画像から集積の有意度を判定し、有意と認められる集積のみを表示した。赤色がより有意度が高い(強度が高い)場所を示す。詳細は本号に掲載されている高橋忠幸氏らの「話題」記事を参照のこと。

<b>Graphic Page</b>	<b>345</b>
<b>Editorial</b>	
<i>Tasks of Publication Committee</i>	Hiroshi Takano <b>349</b>
<hr/>	
<b>Reviews</b>	
<i>Practical Development of Heusler-Type Thermoelectric Materials: From Material Design to Module Fabrication</i>	Yoichi Nishino and Masashi Mikami <b>350</b>
<i>Origin of the First Hund Rule in He-like Atoms</i>	Tokuei Sako <b>358</b>
<b>Current Topics</b>	
<i>Effects of Primordial Non-Gaussianities on the Large Scale Structure Formation</i>	Takahiro Nishimichi <b>366</b>
<i>Landau Levels in Potassium-Doped Graphite under a Zero Magnetic Field</i>	Takahiro Kondo, Donghui Guo and Junji Nakamura <b>371</b>
<i>AdS/CFT Correspondence from Higher Spin Gauge Theories</i>	Yasuaki Hikida <b>378</b>
<i>Visualization of Radioactive Substances with an Ultra-Wide Angle Compton Camera</i>	Tadayuki Takahashi, Shin'ichiro Takeda and Shin Watanabe <b>382</b>
<hr/>	
<b>JPSJ Selected Papers in the Latest Issue</b>	Tsuneya Ando <b>387</b>
<b>Physics Education Today</b>	
<i>Education for Scientific Understanding of Radiation</i>	Hiroyuki A. Torii <b>390</b>
<b>La Toccata</b>	
<i>Postdoc story at NASA Goddard Space Flight Center</i>	Takanori Sakamoto <b>393</b>
<b>Obituary</b>	
<i>Obituary: Dr. Yasushi Takahashi</i>	Susumu Kamefuchi <b>396</b>
<b>Book Reviews</b>	<b>397</b>
<hr/>	
<b>Notice Board</b>	<b>400</b>
<hr/>	
<b>JPS Announcements</b>	<b>406</b>
<b>JPS News</b>	<b>411</b>

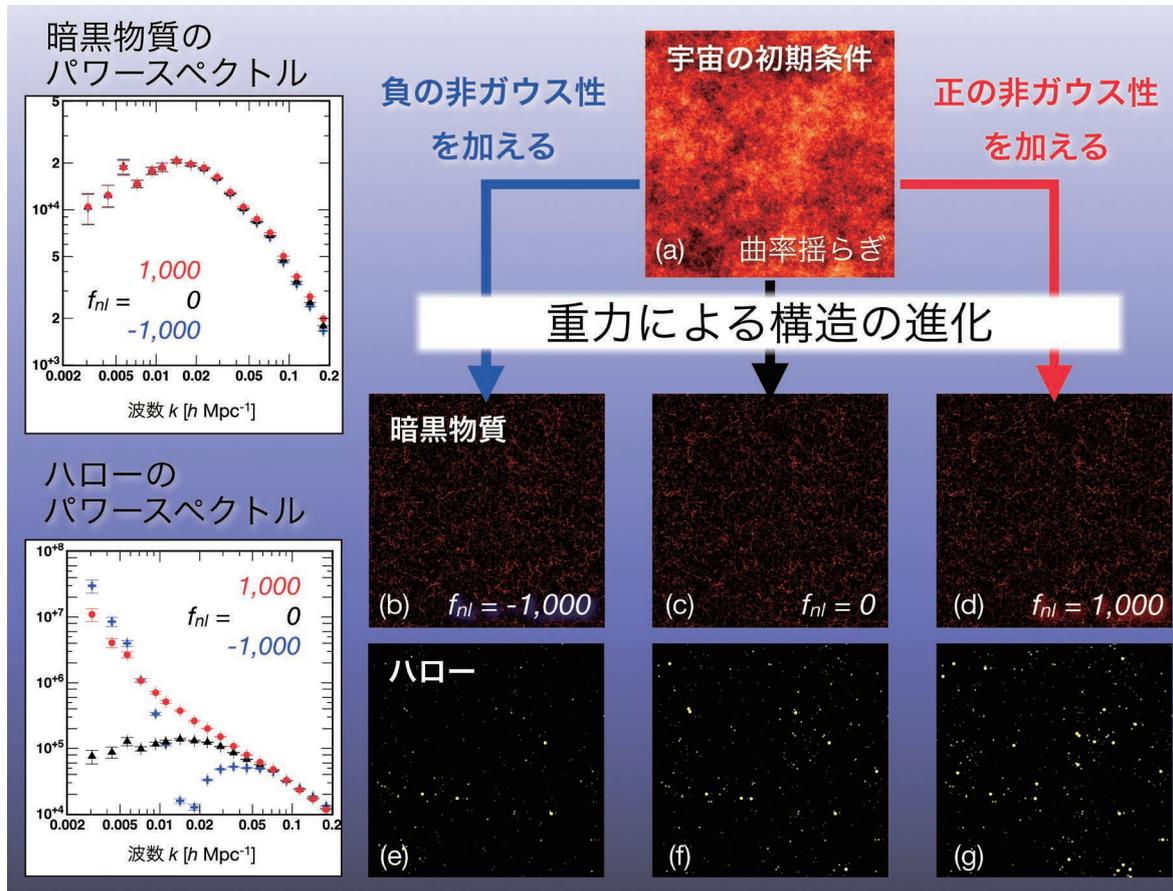
解説 「ヘリウム様原子におけるフントの第一規則の起源」 p.358



He 様原子の内部空間におけるフェルミ孔と共役フェルミ孔の空間分布. フントの第一規則は, 多電子のスピ状態に関する規則であり, 軌道配置が同じならばスピン多重度が最大の状態が最低エネルギーを持つ, ということを主張している. 2 次元 He 様原子モデルにおける波動関数の解析を通してその起源を探ると, 「一重項電子が来てはいけない場所 (共役フェルミ孔)」の存在がクローズアップされる. 図中 (a), (b) はそれぞれ,  $(1s)(2s)$  電子配置および  $(1s)(2p)$  電子配置における一重項の波動関数と三重項の波動関数の確率密度の差をプロットしたものであり, ブルーおよび赤色の曲面は, それぞれ一重項および三重項の確率密度が大きい領域を表す. ブルーの領域は, 所謂「三重項の電子が来てはいけない」通常のフェルミ孔の場所を表し, 赤色の領域は, 「一重項の電子が来てはいけない」場所である共役フェルミ孔を表している.

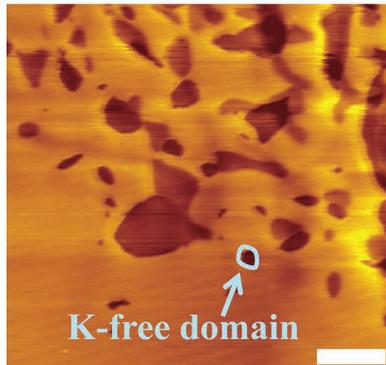


He 様原子の  $(1s)(2s)$  電子配置における一重項と三重項状態の確率密度の差の核電荷  $Z_n$  依存性：(a)  $Z_n = 20$ , (b)  $Z_n = 5$ , (c)  $Z_n = 2$ . 図中のブルーおよび赤色の曲面は、それぞれ一重項および三重項の確率密度が高い領域を表す。右列の (a'), (b'), (c') は核電荷  $Z_n$  でスケールされた電子間反発ポテンシャルの値が  $0.5 \text{ a.u.}$  の等エネルギー面を表す。核電荷が小さくなると電子間反発が相対的に強くなり、フェルミ孔の領域に元々存在する一重項電子が徐々に「押し出される」。押し出された一重項の確率密度は、フェルミ孔の近くに「一重項の電子が来てはいけない」共役フェルミ孔が存在するために、必然的に三重項状態よりも広い空間分布を持つ。これが、フントの第一規則の起源において鍵となる、「三重項状態は一重項状態よりもコンパクトな電子密度を持つ」理由を説明する。

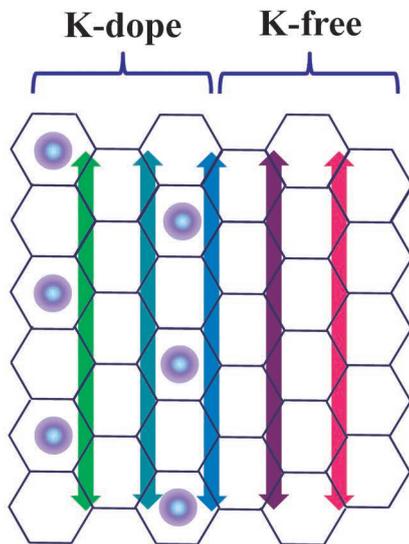
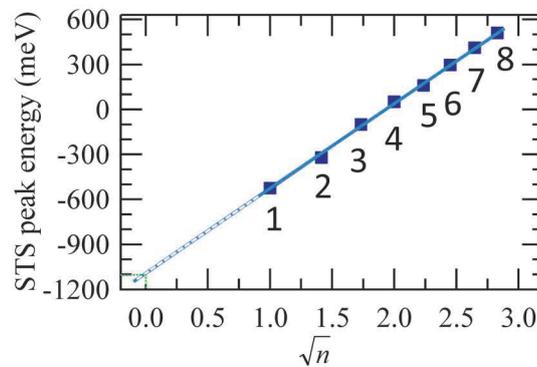
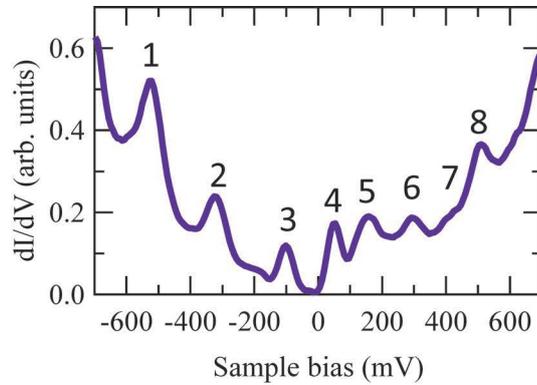
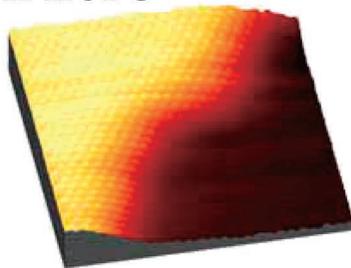


宇宙論的な N 体シミュレーションが描き出す、原始非ガウス性の有無に応じた宇宙大規模構造の様子。6 枚のパネル (b)~(g) は、宇宙初期の小さな揺らぎ (曲率揺らぎ) がガウス統計に従う場合 ( $f_{nl} = 0$ ) と、局所型と呼ばれる非ガウス性を持つ場合 ( $f_{nl} = \pm 1000$ ) に、暗黒物質の質量分布と「ハロー」と呼ばれる天体分布にどのような違いが出るかを示している。

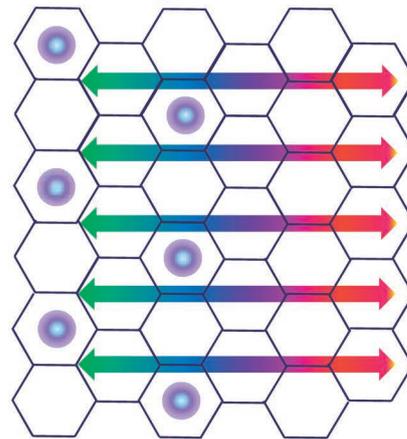
暗黒物質の質量分布については 3 つのケースの間に大きな差は見られないが、高密度領域で形成されるハローの分布には、原始非ガウス性が存在する場合に、宇宙の初期条件 (曲率揺らぎ) のパターン (a) が直接浮かび上がってくる (本文 4 節)。この効果は、揺らぎのパワースペクトル (2 点相関関数のフーリエ変換) によって定量化でき、小さい波数領域でのハローのパワースペクトルの急激の変化として現れる。このような、波数依存する暗黒物質とハロー・銀河のクラスタリングの違いは「距離依存バイアス」と呼ばれ、我々の宇宙の初期条件を探る重要な手がかりとなる。(詳細は本文参照)



**K-HOPG**



**Landau levels without magnetic field**



擬磁場発生を説明するドメインモデル. グラファイトの層間にカリウム原子がインターカレートした領域とフリーな領域との境界では、炭素のポテンシャルに勾配がある。このため、境界に沿ってポテンシャル等高線が形成され、ドメインの中央に向けてポテンシャルの勾配が形成される。電子はポテンシャル等高線に沿った動きをすることとなり磁場中での動きのように電子の運動が制御されたと考えられる。

## 刊行委員会の課題

高野 宏 (刊行委員長)

本年4月より刊行委員長を拝命しました。この原稿を書いている時点では、まだ刊行委員長ではありませんが、物理学会理事および刊行委員としての1年間の活動に基づいて、刊行委員会が取り組むべき課題について考えてみます。

刊行委員会は日本物理学会が刊行する様々な刊行物に関する審議をします。定期刊行物としては、日本物理学会誌、Journal of the Physical Society of Japan (JPSJ)、Progress of Theoretical and Experimental Physics (PTEP)、「大学の物理教育」誌があります。以下では、英文学術論文誌であるJPSJとPTEPについて考えていきます。2013年からは、Progress of Theoretical Physics (PTP)を刊行していた理論物理学刊行会の活動を日本物理学会が引き継ぎ、JPSJとPTEPという2つの英文学術論文誌を刊行していきます。これに伴い、第69期理事会には、安藤恒也JPSJ編集委員長に加え、坂井典佑PTEP編集委員長も理事として加わります。刊行委員会でも、委員長の他に副委員長を置き、それぞれがJPSJまたはPTEPを主に担当する体制をとります。

まずJPSJの電子版公開プラットフォームの問題についてご報告します。詳細な経緯は、4月号の巻頭言で安藤恒也JPSJ編集委員長が報告されています。第68期の物理学会理事会が、この問題およびJPSJの購読強化に関するワーキンググループを置きました。その報告書<sup>1)</sup>に基づき、アプリケーション・サービス・プロバイダーである米国Atypon社 (<http://www.atypon.com/>)の提供するLiteratum (<http://www.atypon.com/literatum/overview.php>)という電子版学術誌出版プラットフォームを利用するという当面の対応案を会員に提示し、意見を求めました。<sup>2)</sup>寄せられた会員の意見<sup>3)</sup>を受けて、1月の理事会でこの案を進めることを決定しました。<sup>4)</sup>

JPSJに関する刊行委員会の今年一番の課題は、2014年1月よりJPSJの電子版公開プラットフォームをAtypon

社のLiteratumに無事に移行することです。刊行委員会の下の小委員会としてJPSJシステム・ワーキンググループが置かれ、この原稿の執筆時点では、Atypon社の代理店との契約に向けて作業を進めています。Literatumは電子版学術誌出版プラットフォームとして最先端の機能をほとんど全て持っており、また、新しい機能の追加を無料で行っています。これらの機能を利用することにより、JPSJの電子版公開プラットフォームがより魅力的なものになると期待されます。しかし、多くの機能のどれをどのように利用するかについて検討するには多くの時間がかかることが予想され、2014年1月からの運用のためには、時間的余裕はあまりありません。

また、JPSJに関して前刊行委員長の瀧川仁氏が指摘した4つの問題点<sup>5)</sup>(1)掲載論文数がほとんど変化せず、分野に偏りがある、(2)機関購読数がほとんど変化せず、visibilityが低い、(3)財政基盤が科研費に依存している、(4)オンライン・システムの更新が必要である、のうち、新プラットフォーム移行で解決するのは(4)のみです。前述のワーキンググループの報告書<sup>1)</sup>でも、独立したプラットフォームを持つ場合には、(2)の問題に関して、大幅な購読拡大は困難なこと、(3)の問題に関して、科研費などの補助金なしでは収入不足であり、購読料の値上げを検討すべきことが指摘されています。プラットフォーム問題を慎重に検討していたため2013年は科研費を申請していません。JPSJの購読料の値上げを検討することが、2014年の科研費の申請を検討することがすぐに取り組むべき課題です。また、理事会案<sup>2,3)</sup>でも述べられているとおり、新プラットフォームでの運用を行いながら、中長期的にJPSJのあり方を議論・検討することが必要です。

PTEPは、誰もが無料で読むことのできるオープン・アクセス・電子ジャーナルとして創刊されました。2012年中に特集号4号を発行し、2013年1

月からはPTPの後継誌として順調に号を重ねています。購読料を取らないため、刊行経費には著者からの掲載料があてられますが、当然掲載料は高くなります。良い論文を投稿してもらうために、著者が直接掲載料を払わないですむように、瀧川前刊行委員長を中心に多くの努力がなされてきました。高エネルギー分野の論文のオープン・アクセス化を推進するSCOAP<sup>3</sup> (<http://scoap3.org/>)に、PTEPの編集作業以後の業務を委託しているOxford University Pressとともに入札し、採用されました。高エネルギー加速器研究機構には、日本物理学会に対し、掲載料免除を行うための経費の支援をしていただいています。理化学研究所仁科加速器研究センターには、所属の研究者が主たる貢献をしている論文の掲載料を機関として支払っていただいています。このような、著者自身の研究費からでなく、著者が所属する研究機関全体の経費から掲載料を支払ってもらうという、研究機関による支援をより拡大していくことが、PTEPを安定して刊行して行くために重要な課題です。

以上、刊行委員会として取り組むべき課題のいくつかについて書いてきました。これらの課題への取り組みを含め、刊行委員会としてJPSJ、PTEPの発展のために努力していきますので、会員の皆様のご理解とご支援をお願い申し上げます。

### 参考文献

- 1) 「JPSJ問題に関するワーキンググループ」報告書 ([http://www.jps.or.jp/members/files/20120912JPSJwg\\_rep.pdf](http://www.jps.or.jp/members/files/20120912JPSJwg_rep.pdf)).
- 2) JPSJ問題に関する会員の意向調査のお願い ([http://www.jps.or.jp/members/files/JPSJ\\_opinion.pdf](http://www.jps.or.jp/members/files/JPSJ_opinion.pdf); [http://www.jps.or.jp/members/files/opinion\\_saio.pdf](http://www.jps.or.jp/members/files/opinion_saio.pdf)).
- 3) 「JPSJ問題」についてのご意見御礼 (<http://www.jps.or.jp/members/files/opinionopen-jpsj.pdf>).
- 4) 第554回理事会報告 (<http://www.jps.or.jp/members/giji/554hokoku.pdf>).
- 5) 会員からの意見と刊行委員会の見解 ([http://www.jps.or.jp/members/files/20120308opinion\\_and\\_view\(final\).pdf](http://www.jps.or.jp/members/files/20120308opinion_and_view(final).pdf)).

(2013年3月18日原稿受付)

# ホイスラー化合物熱電材料の実用化研究 —材料設計からモジュール開発まで—

西野 洋一 (名古屋工業大学大学院工学研究科 466-8555 名古屋市昭和区御器所町)

三上 祐史 (産業技術総合研究所サステナブルマテリアル研究部門 463-8560 名古屋市守山区下志段味穴ヶ洞 2266-98)

熱電発電により、自動車の廃熱のように従来は利用が難しいとされてきた低品位の熱エネルギーによっても直接発電が可能である。熱電材料を実用化するには、熱電性能と電子構造との相関から発電効率を追求してだけでなく、熱電モジュールにおける素子の接合性や耐久性など重要な課題がある。本稿では、ホイスラー化合物熱電材料を取り上げ、擬ギャップ工学による材料設計から自動二輪車に搭載できる熱電モジュールの開発まで一貫して行ってきた実用化研究について紹介する。

## 1. はじめに

熱電発電は、熱電効果(ゼーバック効果)を利用して熱エネルギーを電気エネルギーに直接変換する技術であり、長寿命、メンテナンスフリーでしかも二酸化炭素を排出しないため、環境と共生するエネルギー変換として注目を集めている。とくに自動車や自動二輪車のような移動体に熱電発電システムを導入して廃熱を電力として回収することにより、走行中の発電機での発電負荷を低減して燃費の向上に寄与するとともに、温室効果ガスの削減や環境汚染物質の低減も期待できる。自動車への熱電発電応用に向けた実用化研究として、米国DOE(エネルギー省)主導のプロジェクトが進行しており、2018年の市場投入を目指して車載用熱電発電ユニットの研究開発が進められている。

熱電発電に用いる機能材料を熱電変換材料(熱電材料)という。固体の両端に温度差 $\Delta T$ を与えると、それに比例した電圧 $\Delta V$ (熱起電力)が発生する。このときの比例係数 $S = \Delta V / \Delta T$ をゼーバック係数という。熱電発電の場合、熱起電力は電池の起電力に対応し、電気抵抗率は電池の内部抵抗に対応するので、熱電材料としてはゼーバック係数 $S$ が大きく、電気抵抗率 $\rho$ が小さいことが必要である。このとき、出力因子 $P = S^2 \rho$ は熱電材料から取り出せる最大電力の指標である。さらに、熱電材料に温度差を与えたとき熱電変換に利用されない熱流を少なくするために、熱伝導率 $\kappa$ が小さくしなければならない。そのため、熱電材料としては次の性能指数 $Z$ が大きいことが必要である。

$$Z = \frac{S^2}{\rho \kappa} \quad (1)$$

これに絶対温度 $T$ を乗じた無次元性能指数 $ZT$ が熱電変換効率の指標となる。実用化されている熱電材料はほぼ $ZT = 1$ を満たしているため、 $ZT > 1$ が実用化の目安とされているが、そのような材料はそれほど多くはない。なぜなら、 $S$ 、 $\rho$ および $\kappa$ はすべて伝導電子濃度の関数であり、独立には制御できないからである。言い換えれば、熱電材料の開発には、 $S$ を大きくすると同時に、電気伝導と熱伝導について相反する特性を実現することが求められる。

一般に、熱電材料は特定の温度域で高い性能を示すため、

熱源温度に対応した材料を選択する必要がある。たとえば、移動体の内燃機関から排出される熱エネルギーを利用することを想定した場合には、エンジン燃焼部近傍の限られた領域では $700\text{--}800^\circ\text{C}$ と高温であり、熱電変換効率では有利であるが熱電発電ユニットの設置スペースは制限される。これに対して、マフラー部などの大部分の排気系統では走行中のエンジン回転数のときでも $200^\circ\text{C}$ 程度にしかならないが、比較的簡単な構造であるので設置性に優れている。マフラー部での利用を考えると、室温から $200^\circ\text{C}$ 程度の温度域で高い性能を示す熱電材料を選択しなければならない。また移動体以外でも、後者のように外界との温度差が小さい廃熱、つまり低品位の熱エネルギーについては、ランキンサイクル<sup>\*1</sup>などの一般的な熱機関に再利用することは難しいが、熱電発電では性能の高い熱電材料を用いれば十分に回収可能である。したがって、熱電発電によるエネルギー回収の有用性は、とくに $200^\circ\text{C}$ 以下の低温域で高いと言える。このような比較的低温域で優れた熱電特性を有する熱電材料として $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ が挙げられる。これはすでに実用化されている熱電材料の一つで、室温付近で $ZT = 1$ を示す。しかし、性能向上のためには希少金属のBiやTeのほか毒性の強い元素Seの添加が不可欠であるため、安全性やコストの点で問題がある。また、移動体では走行中に振動や衝撃があることから高い機械的耐久性が要求されるが、 $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ は機械的強度が低いという問題もある。そこで、 $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ に替わる熱電材料として $\text{Fe}_2\text{VAl}$ ホイスラー化合物に注目して<sup>1,2)</sup>自動二輪車への搭載を目的として熱電材料設計からモジュール開発まで一貫した実用化研究を推進してきた。

ホイスラー化合物は、ホイスラー(F. Heusler)の発見による $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ に代表されるように、元来は強磁性でない元素を組み合わせると強磁性を示すところに特徴がある。 $\text{Fe}_2\text{VAl}$ は、図1に示すように $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ と同じ化学組成比と結晶構造(ホイスラー構造)をもつのでホイスラー化合物と呼ばれている。しかし、 $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ とは異なり強磁性

\*1 蒸気タービンを用いて熱エネルギーを動力に変換する理論サイクルであり、さらに発電機を回すことで電力を得ることができる。

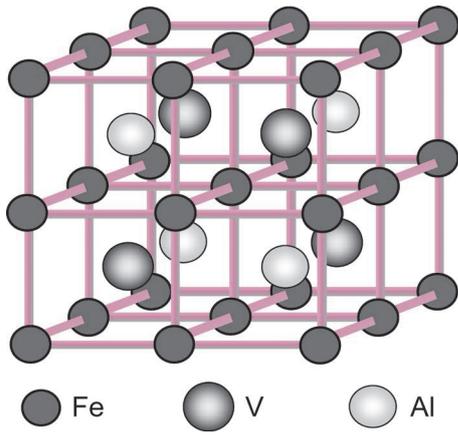


図1 ホイスラー化合物Fe<sub>2</sub>VAIのL2<sub>1</sub>型結晶構造。

の遷移金属を含むにもかかわらず、強磁性がまさに消失する境界にある。この合金の電気抵抗率は2 Kで30 μΩmにも達しており、半導体的な負の温度依存性を示すことが特徴である。<sup>3)</sup> また、バンド計算によればFe<sub>2</sub>VAIは典型的な擬ギャップ系である。<sup>4,5)</sup> 擬ギャップ系とは、バンドギャップが開いていないので厳密には金属であるが、フェルミ準位における状態密度がきわめて小さい物質群のことである。フェルミ準位における状態密度の落ち込みは、Biやグラファイトのような半金属に特徴的なバンド構造である。このように特異な電子構造をもつFe<sub>2</sub>VAIホイスラー化合物について、擬ギャップ工学に基づいて熱電材料設計を行うことにより、出力因子で比較する限りBi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>系を上回る発電性能を実現している。<sup>1,2)</sup> 残念ながら、Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>系と比べて熱伝導率が一桁も高いためにZT=1を満たすことは困難であるが、移動体における熱電発電では、熱源(排気系統)に影響しない適度な熱伝導特性を有する材料はむしろ都合がよく、しかも安全で資源性に優れており、走行中の振動や熱サイクルに対する耐久性を兼ね備えた材料が求められる。このような条件を満足するのがFe<sub>2</sub>VAI系熱電材料であり、実用化のためには、合金粉末の合成から素子成形さらにはデバイス化技術についても研究開発を行う必要がある。<sup>6)</sup> 本稿では、まずホイスラー化合物熱電材料について材料設計の方法と熱電性能の現状を明らかにし、研究開発の成果として得られた生産性の高い素子製造技術、熱電モジュールの高強度化に必要な電極接合技術および試作した熱電発電ユニットを自動二輪車に搭載して行った走行発電試験について紹介する。

## 2. ホイスラー化合物熱電材料の開発

### 2.1 擬ギャップ系ホイスラー化合物

Fe<sub>2</sub>VAIにおける半導体的な電気抵抗特性の原因を明らかにするために、バンド計算による電子構造の研究が精力的に行われてきた。図2は、バンド計算により得られた状態密度 $N(E)$ 曲線である。<sup>4)</sup> この電子構造の特徴として、エネルギー $E=0$ の両側に2つの状態密度のピークがあり、

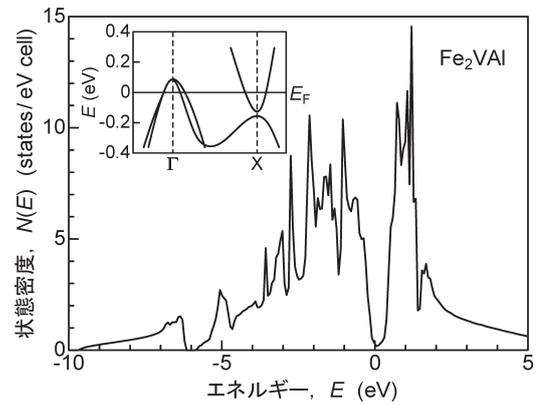


図2 ホイスラー化合物Fe<sub>2</sub>VAIの状態密度曲線。E=0のフェルミ準位において擬ギャップを形成している。挿入図はフェルミ準位(E<sub>F</sub>)近傍におけるバンド構造(E-k関係)である。

ちょうどE=0のフェルミ準位において状態密度が深く落ち込んでいる。ただし、わずかに状態密度を残しているため、通常のエネルギーギャップではなく擬ギャップである。Fe<sub>2</sub>VAIにおける擬ギャップは、s-pバンドとdバンドが強く混成することによって形成されることが知られている。<sup>4,5)</sup> 挿入図は、フェルミ準位付近のバンド構造(E-k関係)である。フェルミ準位E<sub>F</sub>において、Γ点には正孔ポケット、X点には電子ポケットが共存するが、どちらも非常に小さいため、キャリア数としてはきわめて少なくなっている。このような擬ギャップの存在は、核磁気共鳴(NMR),<sup>7)</sup> 光反射率,<sup>8)</sup> X線光電子分光<sup>9)</sup>の測定によって確認されている。これらの実験によれば、擬ギャップのエネルギー幅は0.1 eV程度とかなり小さいので、半導体や絶縁体のように電気抵抗が高くはならないはずである。したがって、Fe<sub>2</sub>VAIにおける低温側の電気抵抗の増大は、必ずしも擬ギャップの存在だけで説明できるわけではないので、詳細については文献10を参照していただきたい。

### 2.2 擬ギャップ工学による熱電材料設計

一般に、擬ギャップ系ではフェルミ準位における状態密度が小さく、また図2のように状態密度の立ち上がりも急峻になっている。このように鋭い状態密度のピークをもつ物質は、優れた熱電特性を示す可能性があることが指摘されている。<sup>11)</sup> モット(N. F. Mott)の理論によれば、ゼーベック係数Sは式(2)のように表される。<sup>12)</sup>

$$S = -\frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2 T}{e} \left\{ \frac{d \ln N(E)}{dE} \right\}_{E=E_F} \quad (2)$$

ここで、k<sub>B</sub>はボルツマン定数である。式(2)によれば、ゼーベック係数はフェルミ準位E<sub>F</sub>における状態密度N(E<sub>F</sub>)に反比例し、そのエネルギー勾配dN(E)/dEに比例する。このため、擬ギャップ内でフェルミ準位のエネルギー位置を最適化することによりゼーベック係数は増大する可能性がある。さらに、電気伝導率σは式(3)のように表される。

$$\sigma = \frac{1}{\rho} = \frac{e^2}{3} A_F v_F N(E_F) \quad (3)$$

ここで、A<sub>F</sub>とv<sub>F</sub>はそれぞれフェルミ面上の電子の平均自

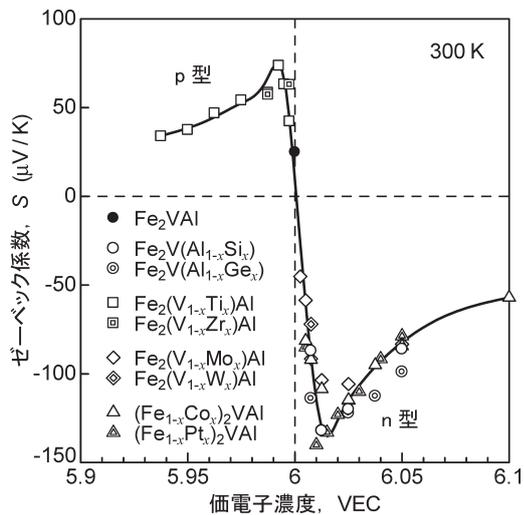


図3 各種元素で置換した $\text{Fe}_2\text{VAI}$ 系熱電材料におけるゼーベック係数の価電子濃度 (VEC) 依存性.  $\text{Fe}_2\text{VAI}$ はVEC=6である.

由行程とフェルミ速度である. 電気抵抗率 $\rho$ は $N(E_F)$ に反比例するので, フェルミ準位が擬ギャップの中心からシフトすると, ゼーベック係数が増大するとともに電気抵抗率も減少することになる.

$\text{Fe}_2\text{VAI}$ におけるフェルミ準位を制御するには, 化学量論組成からずらす方法<sup>13-15)</sup>のほか, 元素部分置換の方法<sup>16-18)</sup>が有効であり, 後者の場合はホイスラー構造における置換元素のサイト選択性を利用することができる.<sup>1)</sup> そのため, 規則構造をあまり乱すことなく, 元素置換が可能である. とくに,  $\text{Fe}_2\text{VAI}$ のVサイトについては周期表でFeより左側の遷移元素で置換することができるが, たとえばTiやZrで部分置換すると, 総価電子数が減少するのでゼーベック係数は正の値を示す. 一方, Vより右側にある元素, たとえばMoやWで部分置換するとゼーベック係数は負の値になる. さらに, AlサイトについてはIVB属のSiやGeで置換することができるが, やはり電子の割合が増加してゼーベック係数は負の大きな値を示すようになる. このように置換元素によってゼーベック係数の正負の符号も変化するので, 熱電材料としてpn特性を制御することができる. 図3には, 各種元素で置換した $\text{Fe}_2\text{VAI}$ 系熱電材料のゼーベック係数をまとめてある.<sup>2)</sup> グラフの横軸は置換元素の組成ではなく, 価電子濃度 (VEC) でプロットしてあり, ベースの $\text{Fe}_2\text{VAI}$ ではVEC=6となる. その結果, VEC=6を中心として, ゼーベック係数の符号は正から負に急激に変化しており, 置換元素の種類によらずにすべてのデータがユニバーサルな1本の曲線にのっていることがわかる. このことから, 一連の $\text{Fe}_2\text{VAI}$ 系化合物は典型的な電子化合物であるといえる. なお, 電子化合物の電子濃度パラメータとしては $e/a$ がしばしば用いられるが,  $e/a$ とVECの相違についてはMizutani<sup>19)</sup>により詳細に論じられている.

これまで多くの研究者によって元素置換した $\text{Fe}_2\text{VAI}$ の研究が行われてきており, 図3と同様のSi置換<sup>20-22)</sup>やCo

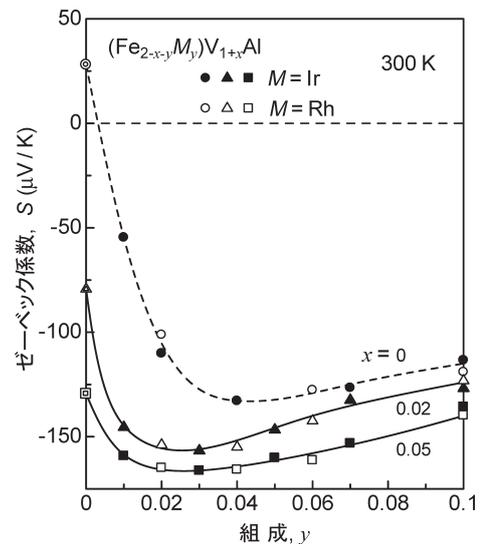


図4  $(\text{Fe}_{2-x-y}\text{M}_y)\text{V}_{1+x}\text{Al}$ 合金 ( $M=\text{Ir, Rh}$ ) におけるゼーベック係数の置換元素M組成依存性.

置換<sup>23)</sup>だけでなく, In置換,<sup>21)</sup> Sn置換,<sup>22)</sup> Nb置換<sup>24)</sup>などについて熱電特性の向上が確認されている. このほか, VEC=6のホイスラー化合物として $\text{Fe}_2\text{VGa}$ <sup>25)</sup>や $\text{Fe}_2\text{TiSn}$ <sup>26)</sup>についても, 化学量論組成からずらしたときに $\text{Fe}_2\text{VAI}$ ほどではないがゼーベック係数が増大することが報告されている.

### 2.3 非化学量論組成の効果を利用した材料設計

$\text{Fe}_2\text{VAI}$ において元素置換した場合, フェルミ準位 $E_F$ が剛体バンド的に変化するだけであるため, 熱電特性を飛躍的に向上させることは困難である. ところが,  $\text{Fe}_2\text{VAI}$ のFeとVを化学量論組成からわずかにずらすことにより, 擬ギャップ構造を大きく崩すことなく $E_F$ 近傍のバンド構造を変化させることができる. 実際, 化学量論組成からわずかにずらしても粉末X線回折による規則度にはほとんど影響はないが, スーパーセルを用いたバンド計算<sup>27)</sup>では, 組成ずれによってアンチサイトを占有した遷移金属のd状態が擬ギャップ内に出現することが予測されている. このような擬ギャップ内の状態密度変化のため, 非化学量論組成の合金に元素置換を行って $E_F$ を最適化することにより, 図3に示した化学量論組成をベースとする合金のゼーベック係数よりも増大する可能性がある.

非化学量論組成の効果を明らかにするために, 図4に $(\text{Fe}_{2-x-y}\text{M}_y)\text{V}_{1+x}\text{Al}$ 合金 ( $M=\text{Ir, Rh}$ ) のゼーベック係数Sを置換元素Mの組成yに対して整理した結果を示す.<sup>28)</sup> ここでの組成xとyはいずれも仕込み組成であるが, 化学分析による組成とのずれは0.2%以下である. 化学量論組成よりVリッチの合金 ( $x=0.02, 0.05$ ) に対してIrやRhで部分置換すると, 化学量論組成の合金 ( $x=0$ ) と比べてゼーベック係数の絶対値が大きくなっており, とくに $x=0.05, y=0.03$ の合金では $S=-170\mu\text{V/K}$ にも達している. また, IrとRhは同属元素であり, ゼーベック係数に対する元素置換の効果はほぼ一致している. したがって, 非化学量論

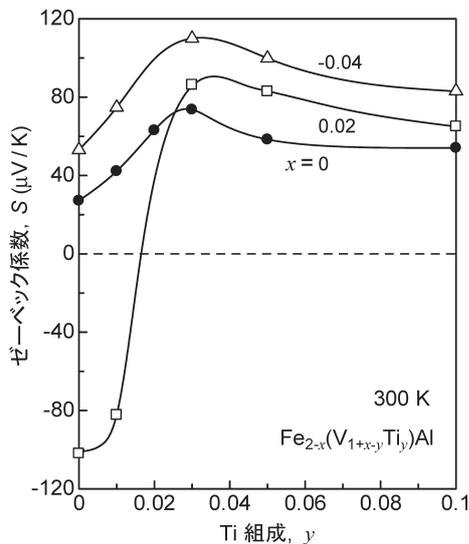


図5  $\text{Fe}_{2-x}(\text{V}_{1+x-y}\text{Ti}_y)\text{Al}$ 合金におけるゼーベック係数のTi組成依存性。

組成の効果により  $E_F$  近傍のバンド構造が変化し、さらに元素置換の効果により  $E_F$  が最適なエネルギー位置にシフトしていると考えられる。

一方、p型材料については、 $\text{Fe}_{2-x}(\text{V}_{1+x-y}\text{Ti}_y)\text{Al}$ 合金におけるゼーベック係数  $S$  のTi組成依存性を比較することにより、非化学量論組成の効果を検討した。<sup>29)</sup> 図5に示すように、Feリッチの合金 ( $x = -0.04$ ) のゼーベック係数はすべてのTi組成  $y$  において化学量論組成の合金 ( $x = 0$ ) やVリッチの合金 ( $x = 0.02$ ) を上回っており、 $y = 0.03$  において  $S = 110 \mu\text{V/K}$  に達している。また、Vリッチの合金では、Ti置換によりゼーベック係数は負から正へ急変しており、 $E_F$  における状態密度のエネルギー勾配の符号が反転したことを表している。つまり、ベースの  $\text{Fe}_{1.98}\text{V}_{1.02}\text{Al}$  ではバンド構造の変化により  $E_F$  が伝導帯側に位置しているが、Ti置換による価電子濃度の減少とともに擬ギャップの中心を通過して価電子帯側へシフトすると考えられる。

以上のように、化学量論組成の  $\text{Fe}_2\text{VAl}$  に元素置換した場合と比べて、非化学量論組成をベースとする合金ではゼーベック係数の絶対値は大幅に増大する。とくにn型性能の向上にはVリッチ合金に元素置換する方法が効果的であり、p型についてはFeリッチ合金をベースとする材料設計が有効である。非化学量論組成の合金におけるゼーベック係数増大の起源を明らかにするために、放射光を用いたX線光電子分光法による電子構造の研究が行われている。<sup>9,30)</sup> 高分解能の光電子分光による電子構造評価を取り入れた新しい研究手法が確立できれば、新規材料開発にかかる時間とコストを大幅に削減することを可能にするものと期待している。

#### 2.4 ホイスラー化合物熱電材料の発電性能

擬ギャップ工学により  $\text{Fe}_2\text{VAl}$  系化合物の熱電材料設計をすることにより、電気抵抗率が急激に減少するにもかかわらず、ゼーベック係数は敏感に増大する。これは擬ギャップ系の大きな特徴であり、熱電材料の観点から最も好都合な特性である。

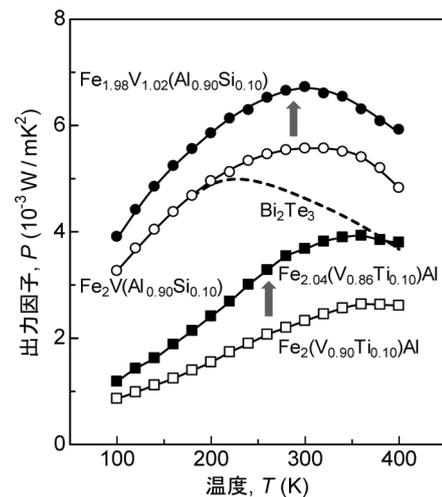


図6  $\text{Fe}_2\text{VAl}$ 系熱電材料における出力因子  $P = S^2/\rho$  の温度依存性。比較のために、 $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  の出力因子を破線で示してある。

ここで重要となる性能は出力因子であるので、図6に  $\text{Fe}_2\text{VAl}$  系熱電材料における出力因子  $P$  の温度依存性を示す。化学量論組成の  $\text{Fe}_2\text{VAl}$  の出力因子は  $10^{-4} \text{ W/mK}^2$  のオーダーで非常に小さい。<sup>1)</sup> ところが、Si置換合金のゼーベック係数は室温付近で  $-130 \mu\text{V/K}$  を示しており、n型熱電材料として  $P = 5.5 \times 10^{-3} \text{ W/mK}^2$  という大きな出力因子が得られている。 $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  系熱電材料でも  $P = 4 \sim 5 \times 10^{-3} \text{ W/mK}^2$  であるので、<sup>31)</sup> これを上回る大きさとなっている。さらに、非化学量論組成のVリッチ合金をベースとしてSi置換すると室温付近において  $P = 6.7 \times 10^{-3} \text{ W/mK}^2$  にも達しており、2.3節で明らかにしたように非化学量論組成の効果がきわめて有効であることがわかる。一方、Ti置換合金はp型となるが、図3に示したようにn型に比べるとゼーベック係数が大きくないため、出力因子は  $2.5 \times 10^{-3} \text{ W/mK}^2$  程度である。しかし、図5の結果に対応して、非化学量論組成のFeリッチ合金をベースとしてTi置換すると  $P = 3.9 \times 10^{-3} \text{ W/mK}^2$  となり、 $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  系に匹敵する出力因子が得られている。

熱電材料としての性能指数を大きくするには、ゼーベック係数と電気抵抗率に及ぼす影響を最小限に抑えたまま、さらに熱伝導率を下げる必要がある。そこで、価電子濃度を変えないように同属元素で置換した合金の熱伝導率を比較してみることにする。図7は、 $\text{Fe}_2\text{V}(\text{Al}_{1-x}\text{Si}_x)$  および  $\text{Fe}_2\text{V}(\text{Al}_{1-x}\text{Ge}_x)$  について室温で測定した熱伝導率  $\kappa$  の変化である。<sup>18)</sup> ベースの  $\text{Fe}_2\text{VAl}$  ( $x = 0$ ) の熱伝導率は約  $28 \text{ W/mK}$  であるので、コンスタンタン (Cu-Ni合金) より少し大きい程度である。両方の合金において置換量の増加とともに熱伝導率は減少しているが、Ge置換の方がより大きく減少しており、10%以上置換するとベースの半分以下の大きさになる。一般に、熱伝導率はフォノンの寄与  $\kappa_{\text{ph}}$  と電子の寄与  $\kappa_{\text{e}}$  の和で表される。金属の場合、熱伝導と電気伝導の両方の大部分を自由電子が担うので、電子成分  $\kappa_{\text{e}}$  は、ヴィーデマン・フランツ (Wiedemann-Franz) の法則

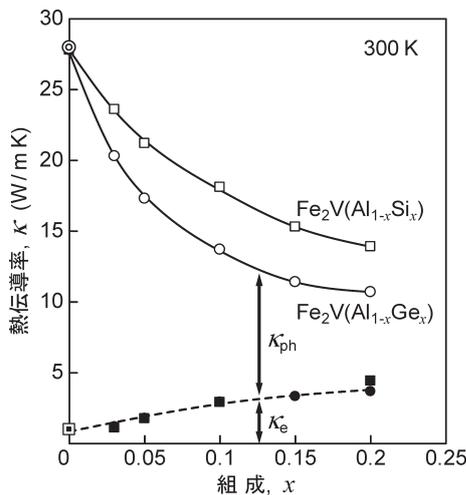


図7 Fe<sub>2</sub>VAlの熱伝導率に及ぼすSiおよびGe置換の影響. 熱伝導率 $\kappa$ は電子成分 $\kappa_e$ とフォノン成分 $\kappa_{ph}$ の和で表される.

( $\kappa_e = L_0 T / \rho$ ,  $L_0$ : ローレンツ数)を用いて電気抵抗率 $\rho$ から求めることができる. 図7において測定した熱伝導率 $\kappa$ と比較すると, 電子成分 $\kappa_e$ は小さくてフォノンによる熱伝導 $\kappa_{ph}$ が支配的であることがわかる. また, どちらの合金の電子成分も同じ程度であるので, Ge置換の方が格子熱伝導率は小さくなっており, フォノン散乱の影響が強いことがわかる. これは, 置換原子との質量偏差による格子振動の非調和相互作用に起因している.<sup>32)</sup> なお, 非化学量論組成のFe<sub>2</sub>VAlでは $\kappa = 20\text{--}25$  W/mKの範囲内にあるので,<sup>15)</sup> 元素置換した方が熱伝導率の低下は顕著である. したがって, 原子量の大きい元素で置換することにより性能指数は大きくなるが, Ge置換の場合でも室温における無次元性能指数は $ZT = 0.13$ 程度に留まっている. しかし, 2.3節で示したIr置換のように, より原子量の大きい元素で置換すると熱伝導率は $\kappa = 7$  W/mKまで低下しており, その結果, 室温で $ZT = 0.25$ という性能指数を達成している.<sup>28)</sup> 一方, W置換した焼結体では $\kappa = 5$  W/mK以下まで低減できることも示されており, この場合は $ZT = 0.2$ が得られている.<sup>33)</sup> さらに, Fe<sub>2</sub>VAl系熱電材料においてVと同族元素であるTaとの共置換についても研究が行われており, p型<sup>34)</sup>だけでなくn型<sup>35)</sup>についても熱伝導率低減に極めて有効であることが確認されている.

### 3. 自動二輪車搭載用熱電モジュールの開発

熱電モジュールは, p型素子とn型素子で温度勾配に対して発生する電圧の極性が異なることを利用し, 両素子を熱的には並列に, 電気的には直列に接続することで構成される. 一般的には, 1対のp-n対から発生できる電圧はmVオーダーであるため, 多数のp-n対を直列に接続することによってより大きな電圧が得られるように設計される. 新しく開発した熱電モジュールには, p型素子としてFe<sub>2</sub>V<sub>0.9</sub>Ti<sub>0.1</sub>Al, n型素子としてFe<sub>2</sub>VAl<sub>0.9</sub>Si<sub>0.1</sub>の焼結体を用いた. Fe<sub>2</sub>VAl系熱電材料の実用化は初めてであるので, バ

ルク材料の供給体制だけでなく, 熱電モジュールに必要な電極接合技術なども確立されていない. そこで, 粉末冶金法を用いたバルク体の作製を目的として, 合金粉末の合成や成形体の作製における量産化検討を行うとともに, 電極接合方法などモジュール技術についても検討し, 自動二輪車に搭載可能な熱電モジュールを開発した.<sup>6)</sup>

#### 3.1 メカニカルアロイングによる合金粉末の合成

Fe<sub>2</sub>VAl系化合物はホイスラー型規則構造を形成する場合にのみ高い熱電特性を示すため, 一般には長時間の規則化熱処理が必要である. 粉末冶金法を用いた場合には, わずか数分の焼結によりホイスラー構造が得られるため, 短時間で高い熱電特性を有する成形体を得られるという利点がある.<sup>36)</sup> しかし, 焼結に用いる合金粉末には組成が均質で微細に粉碎された粉末が必要である. そこで, 高エネルギー型の振動ボールミルが開発され, 粉末処理時間の短時間化を可能にした. 新たに開発した装置では, 遊星型ボールミルに比べて粉碎ボールに与える加速度を3倍程度高くすることができ, このように高い粉碎エネルギーを実現することにより, 原料となる金属粉末どうしの合金化に要する時間を大幅に短縮することができる. その結果, 遊星型ボールミルと同程度かそれ以下の粒子径の合金粉末が得られており, 実質的に50倍の処理速度を達成している.<sup>37)</sup>

#### 3.2 通電焼結法による素子成形

通電焼結法は, 通電による加熱と加圧成形を同時に行うため, 低温, 短時間で緻密な成形体を作製できる方法であるが, 一般には1回の焼結工程で1個の成形体しか作製することができない. そのため, 大型焼結体からの切り出し加工により素子を作製するのが通例である. そこで, 加圧軸の精度や炉内温度分布の均質性を向上させた通電焼結装置が新たに開発され, モジュールにそのまま使用できる素子形状の焼結体を複数個同時にニアネット成形<sup>\*2)</sup>することが可能になった.<sup>37)</sup> これにより, 焼結体の密度や熱電特性においてばらつきの少ない成形体(素子)を複数個同時に作製することができる. さらに, 粉末の焼結でニアネット成形体を得られるために切断加工は不要となり, 素子作製工程の短縮化を図るだけでなく, 材料歩留まりも飛躍的に向上している.

粉末冶金法により作製した焼結体では, 機械的な材料強度が高いという特徴がある. 実際, 同程度の結晶粒径のBi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>系焼結体を用いて3点曲げ試験により抗折強度を比較した結果, Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>系が80 MPaであるのに対して, Fe<sub>2</sub>VAl系は800 MPaと10倍も高い強度を示す.<sup>36)</sup> このような高強度の熱電材料を用いることにより, これまでになく高耐久性の熱電モジュールを構成できる. さらに, Fe<sub>2</sub>VAl系焼結体を空気中で加熱したときの重量増加を評価した結果, 600°Cまではほとんど酸化は進行しないことから, 熱的な安定性が高く耐酸化性に優れていることも実用化において

\*2 機械加工などの手間やコストを軽減するために, 最終製品に近い形状を得る成形法をいう.

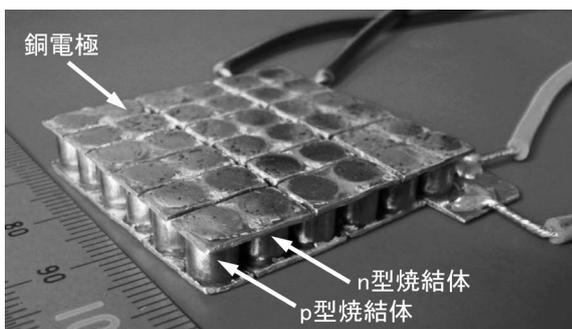


図8 直接接合法により作製した $\text{Fe}_2\text{VAI}$ 系熱電モジュール. 18対のp-n対から構成される.

有利である. 一方,  $\text{Fe}_2\text{VAI}$ 系は熱伝導率が比較的高いためにエネルギー変換効率が低いことが問題であるが, 粉末冶金法を用いて結晶粒を微細化することにより, 熱伝導率を抑制した焼結体材料を作製することができる.<sup>36)</sup>

### 3.3 電極との直接接合

熱電モジュールの作製において, 電極との接合技術の開発は, 熱電材料の特性を引き出して高い出力を得るために重要な課題である. とくに, 常に振動や衝撃にさらされる自動二輪車のマフラーへの装着を想定していることから, 強度の高い接合が必要とされる. 熱電モジュールでは, 熱電材料と電極間の接合に接合材が用いられることが多いが, 接合材は基本的に低融点材料であり, 必然的に接合部の耐熱性や強度が低下する. そこで,  $\text{Fe}_2\text{VAI}$ 焼結体と銅電極との直接接合について検討した結果, 加圧下で加熱することによって接触界面に拡散層が形成され, 良好な接合が得られることが確認できた. セン断強度試験により評価した接合強度は100 MPa程度であり, はんだなどの接合材を用いた一般的な接合に比べて数倍以上の強度を有する. 図8は, この接合方法により作製した熱電モジュールであり, 18対のp-n対からなる.<sup>37)</sup> このモジュールは直径5 mmで高さ5 mmの素子で構成され, 大きさがおよそ $35 \times 35 \text{ mm}^2$ であるが, このような比較的大面積においてもすべての素子と電極間で良好な接合が得られている.

図8と同様の熱電モジュールについて発電試験を行った結果を図9に示す. ここでは, 自動車のマフラー部を想定して表面温度 $100\text{--}300^\circ\text{C}$ のホットプレート上に設置して片方を加熱し, 他方を $20^\circ\text{C}$ の水冷ヒートシンクにより冷却しているが, 高温側が $300^\circ\text{C}$ の場合の無負荷時の起電力は $0.6 \text{ V}$ であり, 最高出力は $2.8 \text{ W}$ である. また,  $I\text{-}V$ 特性から求めたモジュールの内部抵抗は $34 \text{ m}\Omega$ であり, かなり低く抑えられている.  $\text{Fe}_2\text{VAI}$ 系合金は数 $\mu\Omega\text{m}$ オーダーの低い電気抵抗率を有する材料であり, 素子そのものの電気抵抗が小さいため, 相対的に接合界面での電気抵抗による影響を大きく受ける. しかし, 熱電モジュールの内部抵抗は $\text{Fe}_2\text{VAI}$ 焼結体の電気抵抗率から求めた値とほぼ同程度であり, 電極接合界面での電気抵抗が十分に抑えられている. このように電極との接合方法として直接接合が利用できる

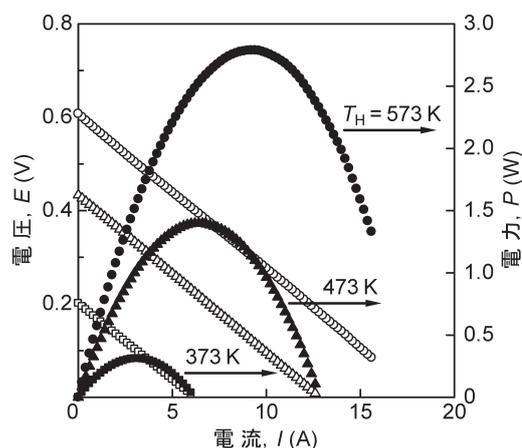


図9  $\text{Fe}_2\text{VAI}$ 系熱電モジュールの発電特性. 表面温度 $T_H=100\text{--}300^\circ\text{C}$ のホットプレートと $20^\circ\text{C}$ の水冷ヒートシンクで温度差を付与した.

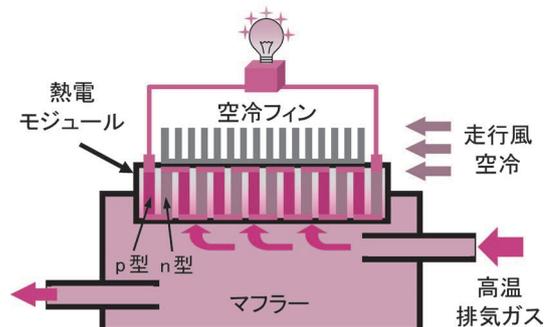
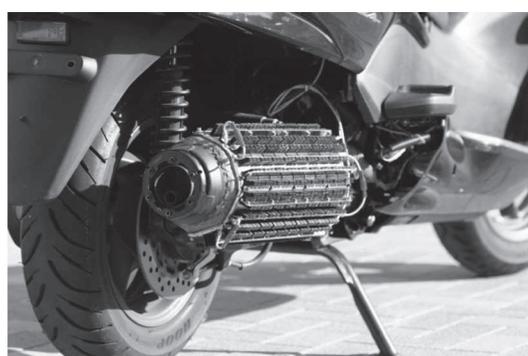


図10 熱電発電ユニットを装着した自動二輪車のマフラー(上)および熱電発電ユニットの概略図(下).

ことも $\text{Fe}_2\text{VAI}$ 系熱電材料の大きなメリットであり, 機械的な接合強度が高いだけでなく, 電気的にも良好な接合が得られる方法であるので, 信頼性の高い熱電モジュールを作製することができる.

### 3.4 熱電発電ユニットの実車発電試験

走行発電試験は, 比較的電力消費量の高いビッグスクータタイプの自動二輪車に熱電発電ユニットを搭載して行った. 図10のように, 18対のp-n対からなる熱電モジュールを直列に接続してユニットとした発電装置をマフラーに取り付けている. この熱電発電ユニットでは, マフラーの排熱と自動二輪車走行時の向かい風を利用した空冷効果により温度差を得る機構となっている. そのため, 空冷用のフィンが露出しており, 装置内部に熱電モジュールが配置されている. このように空冷効果を利用して温度差を得る

仕組みとすることにより、熱電発電ユニットを構成する部品としては熱電モジュールと空冷フィンおよび配線のみとなり、比較的簡単な構造にできることが特徴である。

熱電発電ユニットを搭載した自動二輪車の走行試験では、時速 60 km/h の走行時に 7 V-10 W の出力が安定的に得られることを確認している。<sup>6)</sup> 得られた電力を用いて、LED ライトの点灯だけでなく、電装品への電力供給も行うことができる。この発電量は、モジュール発電試験結果やマフラー部の温度などを考慮するとそれほど大きくはない。この原因は Fe<sub>2</sub>VAl 系熱電材料の熱伝導率が比較的高いため、熱電モジュールに十分な温度差を与えられていないことによると考えられる。最近では、排気量の大きな車両を用い、冷却側には水冷機構を導入して同様の熱電発電ユニットを搭載した走行発電試験が行われており、最大で 60 W 程度の発電量が得られている。<sup>38)</sup> 自動車や自動二輪車への熱電発電の応用の最終目標は、発電機の代替というレベルの発電量にまで引き上げることであるが、第一段階としては発電機と併用できる補助電源としての利用が現実的である。今後はより詳細な熱解析を行い、熱電発電ユニットの最適化設計が必要であると考えている。

移動体ではエンジンの回転や走行中の振動など機械的な衝撃が大きく、そのため従来の Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 系熱電材料では素子の破損などにより不具合を生じることが問題となっていた。今回開発した熱電発電ユニットについては、実車走行試験により 6,000 km 以上走行した後も破損することなく安定して動作することを確認している。このように高い耐久性を実証することができたので、将来的には、自動二輪車だけでなく自動車や飛行機を含めて内燃機関を有するすべての移動体に熱電発電ユニットを搭載できる可能性がある。

#### 4. おわりに

一般にホイスラー化合物の多くは金属であり、熱電材料としてはゼーベック係数が低すぎるという問題がある。ところが、フェルミ準位に擬ギャップをもつホイスラー化合物 Fe<sub>2</sub>VAl について、擬ギャップ工学に基づいてサイト選択性を利用する元素置換の方法でフェルミ準位を制御することにより、100-180  $\mu$ V/K という大きなゼーベック係数と金属並みに低い電気抵抗率を同時に実現することができる。Fe<sub>2</sub>VAl 系合金と競合する熱電材料は Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 系であり、これは室温から 100°C 付近の低温度域で最も高い熱電性能を示し、エネルギー変換効率も高いことが知られている。一方、Fe<sub>2</sub>VAl 系は熱伝導率が高いために変換効率では劣るものの、出力因子を評価指標とした発電性能は Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 系よりも高い。これは両材料に同じ温度差を与えた場合には、Fe<sub>2</sub>VAl 系がより大きな電力を発生できることを意味している。移動体のように膨大な廃熱が持続的に発生する状況では、発電性能が高い材料を用いる方が有利であると考えられる。また、発電性能が高いことは高出力密度化に寄与するので、熱電発電システムの小型化が可能であり、とく

に Fe<sub>2</sub>VAl 系は Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 系に比べて材料密度が低いために重量あたりの出力が大きく、さらに軽量化にも有利である。

一般に熱電材料の実用化のためには無次元性能指数で  $ZT > 1$  が必須条件とされているが、Fe<sub>2</sub>VAl 系熱電材料についてはそのレベルには達していないのが現状である。しかし、車載用の熱電発電システムを実現するには、熱電材料の発電効率が高いことだけではなく、耐熱性や耐久性も兼ね備えた材料を用いる必要がある。たとえば Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 系は融点や酸化性が低く、大気中では 250°C 程度から酸化による材料劣化が始まるため、材料を不活性雰囲気中で封入するか、材料の温度が 250°C を下回るような熱設計が必要となる。これに対して、Fe<sub>2</sub>VAl 系では耐熱性に優れることから上限温度を 600°C 程度まで許容することが可能であり、一般的な走行状態に対して熱設計を最適化することができる。さらに、Fe<sub>2</sub>VAl 系熱電モジュールは、材料そのものの耐熱性だけでなく、接合材を用いない直接接合によるモジュール化により高い耐熱性を実現している。その結果、通常の走行状態でも熱電モジュールが十分に高い性能を発揮する温度となる熱設計が可能である。また、自動二輪車は熱電モジュールにとって比較的苛酷な環境であるが、そのような状況下でも破損することなく動作し続けたことは、高い信頼性を実証するものである。今後は、熱電発電ユニットにおける熱源との密着性および放冷効果を高めることにより、発電量を増大させて電源としての有用性を向上させることが重要な課題である。

自動二輪車搭載用熱電モジュールの開発は、経済産業省地域新生コンソーシアム研究開発事業（総括研究代表者：西野洋一）において行われたものであり、関係各位に謝意を表する次第である。

#### 参考文献

- 1) 西野洋一：まてりあ **44** (2005) 648.
- 2) Y. Nishino: *The Science of Complex Alloy Phases*, ed. T. B. Massalski and P. E. A. Turch (TMS, 2005) p. 325.
- 3) Y. Nishino, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **79** (1997) 1909.
- 4) G. Y. Guo, *et al.*: J. Phys.: Condens. Matter **10** (1998) L119.
- 5) D. J. Singh and I. I. Mazin: Phys. Rev. B **57** (1998) 14352.
- 6) 西野洋一, 三上祐史: 金属 **79** (2009) 231.
- 7) C. S. Lue and J. H. Ross, Jr.: Phys. Rev. B **58** (1998) 9763.
- 8) H. Okamura, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **84** (2000) 3674.
- 9) K. Soda, *et al.*: Phys. Rev. B **71** (2005) 245112.
- 10) Y. Nishino, *et al.*: Phys. Rev. B **71** (2005) 094425.
- 11) G. D. Mahan and J. O. Sofo: Proc. Natl. Acad. Sci. USA **93** (1996) 7436.
- 12) N. F. Mott and H. Jones: *The Theory of the Properties of Metals* (Clarendon Press, 1936).
- 13) Y. Nishino, *et al.*: Phys. Rev. B **63** (2001) 233303.
- 14) Y. Hanada, *et al.*: J. Alloys Compd. **329** (2001) 63.
- 15) C. S. Lue and Y.-K. Kuo: Phys. Rev. B **66** (2002) 085121.
- 16) 加藤英晃, 他: 日本金属学会誌 **65** (2001) 652.
- 17) 松浦 仁, 他: 日本金属学会誌 **66** (2002) 767.
- 18) Y. Nishino, *et al.*: Phys. Rev. B **74** (2006) 115115.
- 19) U. Mizutani: *Hume-Rothery Rules for Structurally Complex Alloy Phases* (CRC Press, 2011) p. 249.
- 20) C. S. Lue, *et al.*: Phys. Rev. B **75** (2007) 064204.
- 21) M. Vasundhara, *et al.*: Phys. Rev. B **77** (2008) 224415.
- 22) E. J. Skoug, *et al.*: J. Electron. Mater. **38** (2009) 1221.

- 23) W. Lu, *et al.*: *J. Alloys Compd.* **484** (2009) 812.
- 24) C. S. Lue, *et al.*: *Phys. Rev. B* **78** (2008) 165117.
- 25) C. S. Lue, *et al.*: *J. Phys.: Condens. Matter* **16** (2004) 4283.
- 26) C. S. Lue and Y.-K. Kuo: *J. Appl. Phys.* **96** (2004) 2681.
- 27) S. Fujii, *et al.*: *J. Phys. Soc. Jpn.* **72** (2003) 698.
- 28) 杉浦隆寛, 西野洋一: 日本金属学会誌 **73** (2009) 846.
- 29) 三大寺悠介, 他: 粉体および粉末冶金 **57** (2010) 207.
- 30) K. Soda, *et al.*: *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **184** (2011) 236.
- 31) H. Scherrer and S. Scherrer: *CRC Handbook of Thermoelectrics*, ed. D. M. Rowe (CRC Press, 1995) p. 211.
- 32) P. G. Klemens: *Proc. Phys. Soc., London, Sect. A* **68** (1955) 1113.
- 33) M. Mikami, *et al.*: *J. Appl. Phys.* **111** (2012) 093710.
- 34) 森 知之, 他: 日本金属学会誌 **72** (2008) 593.
- 35) Y. Terazawa, *et al.*: *J. Electron. Mater.* **41** (2012) 1348.
- 36) M. Mikami, *et al.*: *J. Alloys Compd.* **461** (2008) 423.
- 37) M. Mikami, *et al.*: *J. Electron. Mater.* **38** (2009) 1121.
- 38) 内山直樹, 他: 『熱電変換技術の基礎と応用—クリーンなエネルギー社会を目指して—』(シーエムシー出版, 2011) p. 220.

### 非会員著者の紹介

西野洋一氏: 1983年名古屋大学大学院博士課程修了。1986年名古屋工業大学助手, 同助教授, ケンブリッジ大学客員研究員を経て2003年より名古屋工業大学大学院教授。専門は材料物性工学。

三上祐史氏: 2003年大阪大学大学院博士課程修了。同年JST-CREST研究員, JSPS特別研究員を経て2005年産業技術総合研究所研究員, 2011年より同主任研究員。専門は電気電子材料工学。

(2012年11月20日原稿受付)

## Practical Development of Heusler-Type Thermoelectric

### Materials: From Material Design to Module Fabrication

Yoichi Nishino and Masashi Mikami

abstract: Thermoelectric power generation has received attention as regeneration systems for low-temperature waste heat produced by motor vehicles. Practical application of thermoelectric materials requires not only the improvement in thermoelectric performance in reference to the electronic structure but also the fabrication of durable thermoelectric modules. In the article, we review the development of the Heusler-type thermoelectric materials by pseudogap engineering and the fabrication of thermoelectric modules designed for a motorcycle.

## 日本物理学会誌 第68巻 第7号 (2013年7月号) 予定目次

口絵: 今月号の記事から

巻頭言

男女共同参画推進の先に……………嘉規香織  
解説

M2 ブレーンと ABJM 模型……………今村洋介  
原子炉によるニュートリノ混合角  $\theta_{13}$  の測定

……………川崎健夫, 石塚正基, 古田久敬, 松原綱之

最近の研究から

頑強な量子ゲート~複合量子ゲート~

……………坂東将光, 市川 翼, 近藤 康, 中原幹夫

ガラス転移とジャミング転移を分離する……………池田昌司

JPSJの最近の注目論文から 3月の編集委員会より

……………安藤恒也

学会報告

第68回年次大会シンポジウムの報告……………領域委員会

シリーズ「物理教育は今」

Walter Lewin先生の公開授業—ネット配信される大学の授業—  
……………峰 真如, 木村 元

学界ニュース

第103回恩賜賞・日本学士院賞: 十倉好紀氏……………永長直人

ラ・トッカータ

パウル・キーンレ (Paul Kienle) 教授の思い出……………山崎敏光  
談話室

石油の可採/枯渇年数は減るべきなのか?……………中村 聡  
追悼

吉森昭夫先生を偲んで……………馬越健次

新著紹介

# ヘリウム様原子におけるフントの第一規則の起源

佐甲 徳 栄 (日本大学理工学部一般教育物理教室 274-8501 船橋市習志野台7-24-1)

前期量子論の時代に、フントによって経験的に導かれたフントの規則は、同じ軌道配置を持ちスピンの異なる一群の状態間のエネルギー順序を予測する三つの規則であり、原子構造を理解するための基本法則として、物理・化学を専攻する者ならば、学部の講義において、一度は必ず触れることのある法則である。一方、この規則が成り立つ起源については、数十年に及ぶ議論の歴史にもかかわらず、未だ統一した見解が得られていない。本稿では、例外が少なく、原子のみならず、分子や量子ドットについても成り立つことが知られている第一規則に着目し、これまでの歴史を振り返りつつ、この規則の起源について、著者の最近の研究結果に基づいた解説を行う。

## 1. 歴史背景とこれまでに分かっていること

### 1.1 “伝統的解釈”から“less screening”まで

フントの第一規則は、多電子のスピンの状態に関する規則であり、軌道配置が同じならばスピン多重度が最大の状態が最低エネルギーを持つ、ということを中心としている。例えば、最も単純なHeの一電子励起状態を例として考えると、<sup>\*1</sup> Heの2個の電子のうち一つの電子は1s軌道を占め、もう一方の電子は外側の軌道、例えば2s, 2p, 3s, …, を占有する。この外側の軌道をnlと表すと、与えられた電子配置(1s)(nl)に対して、二電子のスピンの反平行な一重項状態(1s)(nl)<sup>1</sup>Lと平行な三重項状態(1s)(nl)<sup>3</sup>Lが存在し、フントの第一規則によると、スピン多重度が大きい三重項状態の方が低いエネルギーを持つことになる。実際に、非相対論シュレディンガー方程式の範囲で計算したHeの励起状態のエネルギー準位構造(図1)を見てみると、全ての電子配置において、三重項状態は点線で結ばれた一重項状態よりも低いエネルギー値を持ち、確かにフントの第一規則が成り立っていることが分かる。では何故、三重項の方が一重項よりも低いエネルギーを持つのだろうか。この間に、著者なりに答えるのが本稿の目的である。<sup>\*2</sup>

まず、これまでの議論の歴史を振り返ってみると、フント以降、スピン多重度の違いによるエネルギーの序列に統一的な解釈を与えたのは、1929年のスレーターの論文<sup>1)</sup>である。その内容を、He様原子<sup>\*3</sup>の(1s)(nl)配置の場合について要約すると以下ようになる。まず、一重項および三重項状態の軌道部分の波動関数は、単一スレーター行列式による近似の範囲で、次のように表される：

$$\Psi^\pm(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{1s}(\mathbf{r}_1)\psi_{nl}(\mathbf{r}_2) \pm \psi_{nl}(\mathbf{r}_1)\psi_{1s}(\mathbf{r}_2)]. \quad (1)$$

対称関数が一重項、反対称関数が三重項状態に対応するのはご承知の通りである。<sup>\*4</sup> これらの一重項状態と三重項状態の波動関数を用いて、核電荷Z<sub>n</sub>を持つHe様原子のハミルトニアン<sup>\*5</sup>：

$$\mathcal{H}_Z = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^2 \frac{Z_n}{|\mathbf{r}_i|} + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \quad (2)$$

の期待値を計算すると次のことが分かる。まず、式(2)右辺第一項の運動エネルギー演算子と第二項の原子核電子引力ポテンシャルの期待値(以下これを「一電子エネルギー」と呼ぶ)は、一重項・三重項状態間で完全に同じになる。<sup>\*6</sup> よって、一重項と三重項状態のエネルギーの違いを生み出すのは、式(2)右辺の第三項で表される電子間反発ポテンシャルの期待値であることになる。よって、三重項状態が一重項よりも低いエネルギーを持つ理由は、エネルギーを増大させるこの電子間反発が、三重項状態では一重項よりも小さいから、ということになる。この「三重項状態の方が電子間反発が小さい」という主張は直感的にも分かりやすい。というのも、三重項状態では二つの電子は同じスピンを持っているため、パウリ原理によって、二つの電子は同じ場所に来ることができない。すなわち三重項状態の波動関数は、 $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$ となる位置にフェルミ孔を持つ。一方、スピンの異なる一重項状態はこの位置に波動関数の空孔を持たない。よって、このフェルミ孔が存在する位置( $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$ )で電子間反発ポテンシャルが発散することから、三重項の電子はこの発散を原理的に避けることができるために、一重項よりも低いエネルギーを持つ。これが現在でもフント規則が成り立つ理由としてしばしば語られることがある「伝

<sup>\*1</sup> フントの規則は元々は基底状態の電子配置に対して導かれた規則であるが、1929年のスレーターの論文以降、対象とする電子状態に対して「独立粒子モデルに基づく電子配置」という見方が良い描像を与える場合には、励起状態の場合にもしばしば適用される。

<sup>\*2</sup> ここで、一点あえて注意をさせて頂きたいのは、電子スピン同士のダイレクトな磁気相互作用は無関係である、という点である。個々の電子は磁気モーメントを持った微小な磁石であるため、磁石同士が引き付け合ったり、反発したりする相互作用は勿論存在する。そしてそのような相互作用は、相対論効果としてハミルトニアンに現れる。一方、磁性研究に携わる方にとっては常識であるが、このようなダイレクトな磁気相互作用は、原子内のクーロン相互作用を比較して、数千〜数万倍程度も小さいことが知られている。実際に、相対論効果を含んでいるはずのHeの実測のエネルギーを、非相対論の結果である図1に重ねると、この図のエネルギー・スケールでは、両者は完全に一致する。

<sup>\*3</sup> 電子数が二個の原子および原子イオン(例えば、Li<sup>+</sup>、Be<sup>2+</sup>、等)のことをHe様原子と呼ぶ。

<sup>\*4</sup> 以下本稿では、スピンの依存しない非相対論のハミルトニアンの範囲で議論をし、かつ二電子系のみを扱うため、スピン部分の波動関数については明示しない。

<sup>\*5</sup> 以下本稿では、一貫して原子単位系(a.u.)を用いる。これは、電子の静止質量m<sub>e</sub>、電気素量e、換算プランク定数ħ、およびボーア半径a<sub>0</sub> ≡ 4πε<sub>0</sub>ħ<sup>2</sup>/(m<sub>e</sub>e<sup>2</sup>)を全て1とする単位系であり、式(2)のように原子・分子系のハミルトニアンが簡潔に表される。本稿でのエネルギーの1単位はE<sub>h</sub> ≡ ħ<sup>2</sup>/(m<sub>e</sub>a<sub>0</sub><sup>2</sup>)であり、1 a.u.のエネルギーは約27.21 eVである。

<sup>\*6</sup> これは、式(1)の一重項および三重項の波動関数からそれぞれ電子密度を計算すると、両者が一致することからも分かる。これを確認するためには、式(1)の波動関数Ψ<sup>±</sup>のそれぞれについて、ノルムの自乗をとり、片方の電子座標 $\mathbf{r}_1$ または $\mathbf{r}_2$ のどちらから積分すればよい。

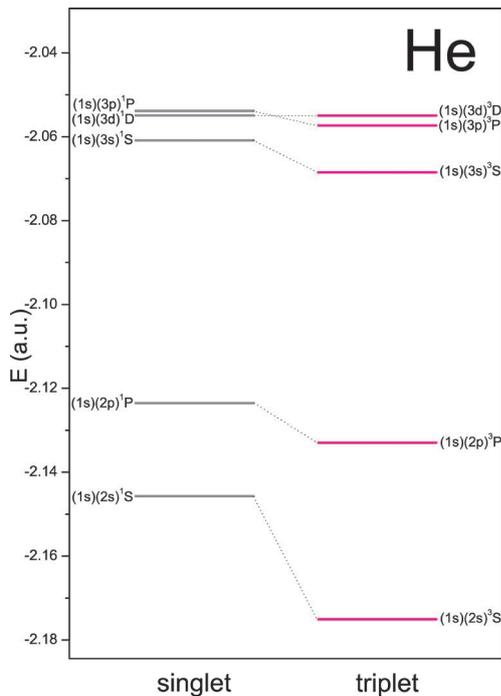


図1 Heの一電子励起状態のエネルギー準位構造。(1s)<sup>2</sup>1S基底状態は遙か下方に位置するため、この図では表示されていない。フント則が成り立つ一重項・三重項状態のペアが点線で結ばれている。

統的解釈」である。

スレーターの後、三十年間以上の間、この伝統的解釈に疑問は呈されなかった。実用的な電子計算機が生まれたのは1960年代であったことから、当時は解析的な考察に頼る他はなかったためと思われる。1964年、デイビッドソン(E. Davidson)によって、Heの一電子励起状態について初めての電子状態計算が行われた。<sup>2)</sup> 結果は驚くべきことに、電子間反発ポテンシャルの期待値は、一重項状態よりも三重項状態の方が大きいことを示していた。伝統的解釈では、「三重項状態の方が電子間反発が小さい」ことがフント則が成り立つ理由であるから、デイビッドソンの計算は伝統的解釈の根拠に真っ向から対立する結果を示したことになる。では何故、三重項状態は一重項状態よりも低いエネルギーを持つことができるのか。実は、三重項状態は一重項状態よりも、「原子核電子引力ポテンシャルによるエネルギー低下が大きい」のである。すなわち、三重項状態は一重項よりも、負の値を持つ原子核電子引力ポテンシャルの絶対値が十分大きいために、電子間反発のエネルギー増加を打ち消して、さらに全エネルギーも低下させるのである。

スレーターの考察においては、式(1)のように、一重項・三重項状態で全く同じ一電子軌道の組 $\psi_{1s}$ および $\psi_{nl}$ が用いられているから、原子核電子引力ポテンシャルは両者で同じ値を持ってしまう。フントの規則の前提条件として、「同じ電子配置を持つ」一重項・三重項状態を考えるのだから、この前提仮定は一見もっともらしいようにも思える。しかし実際には、デイビッドソンが示したように、一重項状態と三重項状態で別々に一電子軌道を最適化すると、両

者の軌道は全く同じではなく、軌道の広がり異なるのである。三重項状態は、外側の軌道 $\psi_{nl}$ が一重項の場合よりもより核付近に分布するために、全体としてコンパクトな電子密度分布を持ち、その結果、原子核電子引力ポテンシャルによる位置エネルギーの低下によって、全体のエネルギーが低くなる。そしてこのとき、三重項状態の場合の方が一重項の場合よりも二電子間の平均距離が近くなるために、電子間反発が大きくなるのである。デイビッドソン以降、様々な系について、ハートリーフォック近似を超えたより高精度での電子状態計算が行われた。特に、2005年の本誌に掲載された記事「フントの規則の起源は何か？」<sup>3)</sup>にある通り、東北大金属材料研究所のグループは拡散量子モンテカルロ法に基づく非常に信頼性の高い計算を行い、Heよりも電子数の多い他の原子についても、「原子核電子引力ポテンシャルによる位置エネルギーの低下によって、スピン多重度が大きい状態は多重度が小さい状態よりも低いエネルギーを持つ」という理解が、正しいことを示している。<sup>4,5)</sup>

デイビッドソン以降の一連の議論において特に着目を浴びたのが、所謂ピリアル定理である。ピリアル定理そのものによって、フント則が導かれるわけではないが、スレーターに基づく伝統的解釈からの脱却の過程で歴史的に重要な役割を演じているので、この議論に少し触れておこう。良く知られている通り、ハミルトニアンが運動エネルギー $T$ とクーロンポテンシャル $V$ (一体力および二体力のどちらからでもよいし、その和でもよい)の和で表される場合には、その期待値に対して、一重項および三重項状態それぞれについて、次の式が成り立つ：

$$\langle T \rangle = -\frac{1}{2} \langle V \rangle. \quad (3)$$

この式(3)より、一重項・三重項状態のエネルギー差 ${}^1E - {}^3E$ は、運動エネルギー演算子の期待値の差、 $-(\langle T \rangle_1 - \langle T \rangle_3)$ として表されることになる。一方、運動エネルギー演算子は一電子演算子であるから、その期待値は電子密度分布のみによって決定される(脚注6参照)。よって、一重項と三重項でエネルギーが異なるということは、両者の電子密度分布が異なる、ということであり、それはすなわち、両者の一電子軌道が異なる、ということの意味している。つまり、ピリアル定理が成り立つことを出発点とするならば、一重項と三重項について全く同じ一電子軌道を用いたスレーターの議論は、「初めから間違っていた」という言い方も可能かもしれない。<sup>\*7</sup> 但し、ここで注意を

<sup>\*7</sup> この「スレーターは初めから間違っていた」という表現は、70年代にピリアル定理の重要性を指摘し、フント則の起源について重要な貢献をしたカトリエル氏(J. Katriel)の言葉である。著者は共同研究者を通じてカトリエル氏とメールで議論をしたことがあるが、その中でこのように述べておられた。歴史上の重大スレーターの議論が否定された70年代当時の議論の熱気が伝わってくる表現である。但し、「フントの規則が成り立つ」ということを与件とすれば、ピリアル定理によって、三重項状態は一重項状態よりもコンパクトな電子密度分布を持つことが導かれるのだが、逆にピリアル定理からフントの規則が演繹されるわけではない。

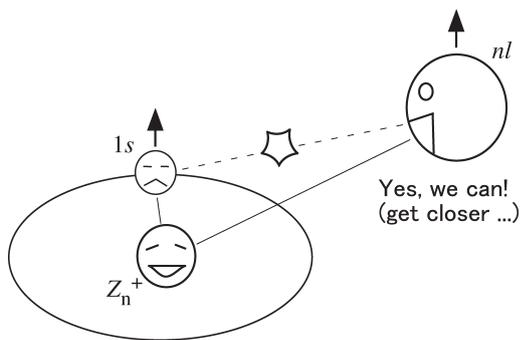


図2 He様原子における“less screening”モデルの概念図。1s電子は外側の $nl$ 電子に対して、核電荷を遮蔽する。三重項状態の場合には、二電子間にフェルミ孔が存在することによって、二電子角度が一重項の場合よりも大きくなり、その結果、この遮蔽が弱く (less screening) なる。

していただきたいのは、ビリアル定理そのものは、各スピン状態に対して運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの関係の規定するものであり、異なるスピン状態間のエネルギーの大小について示唆を与えるものではない、ということである。すなわち、「何故三重項状態は一重項状態よりもコンパクトな電子密度分布をもち、それゆえ原子核電子引力ポテンシャルの低下によって、一重項状態よりも低いエネルギーを持つのか」を明らかにするためには、二つの電子の振舞いが一重項と三重項の場合とどのように異なるのかを、より具体的に議論する必要がある。

この問題に真正面から取り組んだのがボイド (R. Boyd) とクールソン (C. Coulson) である。ボイドが1984年のNatureにまとめた論文<sup>6)</sup>を書いているので、その内容を簡単に紹介しよう。ここでボイドは、“less screening”という斬新なアイデアを用いて、二電子系の三重項状態は何故一重項状態よりもコンパクトな電子密度分布を持つのかについて答えている。このアイデアを模式的に表したものを図2に示す。Heの二つの電子は核に近い1s電子と外側の $nl$ 電子とから成るが、外側の電子から核電荷を見たときに、内側の1s電子はこの核電荷を遮蔽するものとして働く。三重項状態と一重項状態の決定的な違いは、三重項はフェルミ孔を持つが、一重項は持たないことである。三重項状態の場合にはこのフェルミ孔の存在によって、図2の二つの電子の間に、これらの電子が同時に来てはいけない場所が存在する。よって、三重項状態は一重項状態よりも、二電子角度 $\angle e-a-e$ が平均的に大きくなる。<sup>\*8</sup>すると、三重項は一重項の場合よりも、1s電子による核電荷の遮蔽が弱くなり、外側の電子はより核に近づくことができる。これが、“less screening”モデルによる説明の概要である。

このNatureの論文では、He原子のみならず、He原子と同じ電子配置を持ち、核電荷が異なる「He様原子」についても考察がなされている。He様原子においても、「原子核電子引力ポテンシャルの絶対値は、一重項状態よりも三重

項状態の方が大きい (すなわち、三重項状態は一重項状態よりもコンパクトな電子密度分布を持つ)」ということは全ての核電荷 $Z_n$ について成り立っている。一方、電子間反発については、少々事情が複雑になっている。まず核電荷 $Z_n$ がHeに近い場合 (例えば $Z_n=3$ ) には、Heと同様に、三重項の方が一重項よりも大きい期待値を持つ。一方 $Z_n$ が大きくなると、元々の伝統的解釈の場合と同様に、三重項の方が電子間反発の期待値は小さくなるのである。これをボイドは次のように解釈している。まず、 $Z_n$ が大きくなると、強力な核引力によって電子雲は全体として核付近に収縮する。すると、電子間の距離が近くなるため、角度相関が強くなる、というのである。つまり、電子間の距離が近くなると、電子間反発により電子はお互い避けようとし、極端な話、一方の電子は相手の電子を避けるために、核の反対側へ回り込もうとする。そしてこの効果は、電子雲がコンパクトな三重項状態の方がより顕著である。そうすると、三重項状態の電子間反発は、一重項の場合よりも確かに小さくなりそうである。余談であるが、著者の共同研究者の一人が偶然ボイド氏の友人でもあるため、フントの規則の起源について、ボイド氏とメールでやり取りをしたことがある。その際ボイド氏は、この“less screening”のアイデアを思いついたとき「宝くじに当たったような気分になった」と述べておられた。ボイドの「見てきたような説明」は魅力的だが、本当にこれでよいのだろうか。

ボイドの説明に対する疑問点としてすぐに気付くことは、核電荷が大きい場合に角度相関が大きくなること<sup>\*9</sup>の理由である。 $Z_n$ が大きくなると、電子雲が収縮するのは事実であるが、すぐ後の式(4)でみるように、 $Z_n$ でスケールした座標空間で見ると、 $Z_n$ に反比例して、電子間反発ポテンシャルは実効的に小さくなる。よって「 $Z_n$ が大きくなると電子同士がより強く避けあう」というのは正しくない。また最近、複素座標法で有名なモワセイエフ (N. Moiseyev) のグループがボイドの解釈に疑問を呈する論文を書いている。<sup>7)</sup> その内容を要約すると、以下ようになる。ボイドの論点によると、三重項状態が一重項状態よりもコンパクトな電子密度分布を持つ原因は、二電子角度 $\angle e-a-e$ の大きさの違いによる。すなわち、三重項状態の方が $\angle e-a-e$ が大きいため、核電荷の遮蔽が弱くなり電子雲が収縮する。一方、一重項・三重項状態間で、このような角度による違いがあるならば、これらの状態を電子状態計算で再現するためには、角運動量が大きい関数を基底関数に含める必要があるはずである。<sup>\*10</sup>しかし、実際モワセイエフらが示したように、これらの高次の関数を入れなくても、一重項と三重項のエネルギー差は、計算によって再現できるのである。

では、“less screening”モデルが正しくないとするならば、

<sup>\*8</sup> Heを構成する三つの粒子：二つの電子と原子核 ( $a$  粒子) はある瞬間に一つの平面を定義する。この平面上における原子核を中心とする二電子間の角度 $\angle e-a-e$ を本稿では二電子角度と呼ぶ。

<sup>\*9</sup> 軌道角運動量が零ではない状態についてはこれ自体は正しい。

<sup>\*10</sup> 例えば、全角運動量が零のS状態の計算においても、一電子軌道を展開する基底関数としては、 $p$ 関数や $d$ 関数が必要になるはずである。

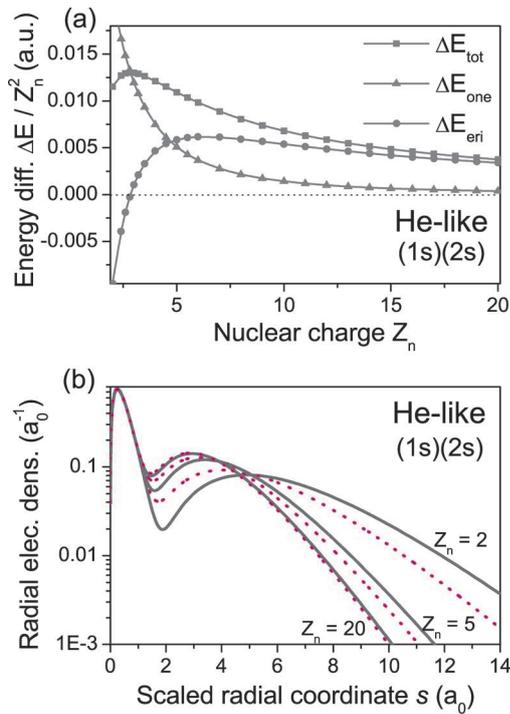


図3 (a) He様原子の(1s)(2s)電子配置における一重項状態と三重項状態のエネルギー差。四角、三角、丸印はそれぞれ、全エネルギー、一電子エネルギー、電子間反発エネルギーの差を表す。(b) He様原子( $Z_n=2, 5, 20$ )の(1s)(2s)電子配置の電子密度分布。実線は一重項、点線は三重項状態を表す。核電荷 $Z_n$ が異なる場合の分布を同じ空間尺度で比較するために、横軸の動径座標は $Z_n$ でスケールしてある(式(4)参照)。

三重項状態は如何にして、一重項状態よりもコンパクトな電子密度分布を持つのだろうか。その解答を次章で解説する前に、次節でHe様原子について明らかにされていることをもう少し詳しくまとめておこう。

## 1.2 He様原子における核電荷依存性の詳細

前節の“less screening”モデルの説明において、He様原子の核電荷依存性についてふれたが、後の議論のために、これを少々詳しく解説し、合わせて、これまでの研究において何が明らかにされていないかをまとめておこう。

まず、式(2)のハミルトニアンにおいて、核電荷 $Z_n$ による依存性を見やすくするために、 $Z_n$ でスケールした座標： $\mathbf{s}_i \equiv Z_n \mathbf{r}_i$  ( $i=1, 2$ )を導入する。式(2)のハミルトニアンをこの座標を用いて書き換えると、

$$\mathcal{H}_Z / Z_n^2 = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 \nabla_{\mathbf{s}_i}^2 - \sum_{i=1}^2 \frac{1}{|\mathbf{s}_i|} + \frac{1}{Z_n} \frac{1}{|\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2|}, \quad (4)$$

のようになる。式(4)は次のように読むことができる。ハミルトニアンを $Z_n^2$ で割ると、一電子部分は $Z_n$ に依存しなくなり、全ての $Z_n$ について共通となる。一方、電子間反発ポテンシャルの部分は、係数 $1/Z_n$ がかかるため、 $Z_n$ が大きくなると実効的に小さくなる。これらを念頭においた上で、He様原子の(1s)(2s)の場合について、一重項状態と三重項状態のエネルギー差の $Z_n$ 依存性(図3(a))を見てみよう。図3(a)では、一重項・三重項状態間の全エネルギー差 $\Delta E_{\text{tot}} \equiv {}^1E - {}^3E$ と、その一電子エネルギーおよび電子間反発エネルギーの内訳、 $\Delta E_{\text{one}}$ および $\Delta E_{\text{eri}}$ をプロット

している。定義より、 $\Delta E_{\text{tot}} = \Delta E_{\text{one}} + \Delta E_{\text{eri}}$ である。

図3は、簡単のため著者が2次元ヘリウムモデル<sup>\*11</sup>を用いて計算した結果を示している。この2次元ヘリウムモデルを用いても、通常の3次元Heとほぼ同様の結果が得られる。図3(a)の $Z_n=20$ の場合を見ると、 $\Delta E_{\text{tot}} = \Delta E_{\text{eri}}$ および $\Delta E_{\text{one}} = 0$ となっており、一重項・三重項状態間のエネルギー差の殆どは、電子間反発の期待値の差に由来することが分かる。すなわち、核電荷が大きい場合には、両者のエネルギー差の原因を電子間反発に求める「スレーターの解釈」が成り立っている、という言い方も可能である。<sup>\*12</sup>一方、 $Z_n$ が小さくなると、電子間反発の寄与 $\Delta E_{\text{eri}}$ は小さくなり、代わりに一電子エネルギーの寄与 $\Delta E_{\text{one}}$ が増大する( $5 \leq Z_n \leq 10$ )。さらに $Z_n$ が小さくなると、 $\Delta E_{\text{eri}}$ は零に近づき、ついには値が正から負に変わる。すなわち、デイビッドソンが示したように、三重項状態の方が電子間反発が大きくなる。

このとき、電子密度分布がどうなっているのかを示したのが図3(b)である。図3(b)では、電子密度を、 $Z_n$ でスケールした動径座標 $s = Z_n r$ の関数としてプロットしている。一重項状態が灰色の実線、三重項状態が赤色の点線である。また、両者の電子密度の僅かな差を強調するために、縦軸は対数で表示してある。まず、核電荷が大きい $Z_n=20$ の場合には、一重項と三重項の電子密度分布は、対数表示にも関わらず殆ど重なっていることが分かる。電子密度がほぼ同じということは、一電子エネルギーが同じになることを意味しており(脚注6参照)、このため、図3(a)に示さ

<sup>\*11</sup> 通常のHeは勿論3次元空間に存在するため、式(2)において $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$  ( $i=1, 2$ )であるが、本稿で用いる2次元Heモデルでは、 $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i)$ である。2次元モデルを用いる本質的な理由は何もないが、次章で述べる内部空間での確率密度の抽出が容易になるという理由でこれを用いている。この2次元Heモデルから得られるエネルギー準位は、フントの規則を満たすだけでなく、3次元の場合の特徴を全て再現する。特に、図1の一重項に見られる(1s)(3d)<sup>1</sup>Dと(1s)(3p)<sup>1</sup>Pの微細な準位の逆転も再現していることから、この2次元モデルによる解析でも、この本質はつかめるのではないかと考えている。ご関心をお持ちの方は、引用文献8のFig. 1をご覧ください。

<sup>\*12</sup> この「核電荷が大きい場合にはスレーターの解釈が正しい」という言い方について少し補足しておこう。図3(a)の $Z_n=20$ の場合には確かに $\Delta E_{\text{one}} = 0$ であるが、この一電子エネルギーの寄与を運動エネルギーと原子核電子引力ポテンシャルに分割すると、運動エネルギーの寄与は負、核引力ポテンシャルの寄与は正となり、両者がほぼ打ち消し合うために、零に近い値となっていることが知られている。そしてこのとき、原子核電子引力ポテンシャルの正の寄与は電子間反発の寄与 $\Delta E_{\text{eri}}$ よりも大きくなるため、「フント則の起源を電子間反発に求めるスレーターの解釈は、 $Z_n$ が大きい場合でも間違っている」という言い方を好む人々もいる(脚注7のカトリエル氏もこの一人である)。一方、一重項・三重項状態間で原子核電子引力ポテンシャルの期待値が大きく異なるのであれば、両者の電子密度も大きく異なることが期待されるが、実はそうはなっていない。図3(b)の $Z_n=20$ の場合に示されるように、核電荷が大きい場合には、両者の電子密度分布は僅かな違いを示すのみである( $Z_n$ が大きい場合には、電子間反発ポテンシャルの絶対値そのものが小さくなるため、この電子密度分布の僅かな違いによる原子核電子引力ポテンシャルの期待値の差は $\Delta E_{\text{eri}}$ よりも大きくなっているのである)。よって本稿では、電子密度分布の差が小さい場合には一電子エネルギーの寄与 $\Delta E_{\text{one}}$ も小さいことから、「 $Z_n$ が大きい場合にはスレーターの描像が成り立つ」という言い方を便宜的に採用する。以上は、フント則の起源の本質に関する議論ではなく、言い方の問題であるので、本稿ではこれ以上深入りしない。この詳細については、最近の文献<sup>9)</sup>をご覧ください。

れる通り、確かに一電子エネルギーの寄与 $\Delta E_{\text{one}}$ は零に近くなっている。核電荷が小さくなると、図3(a)の $Z_n=5$ の場合に示されるように、一重項・三重項状態間で電子密度に有意な違いが現れ、それに伴い、 $\Delta E_{\text{one}}$ の寄与も大きくなる。 $Z_n$ が更に小さくなると、両者の電子密度の差は顕著になり、 $\Delta E_{\text{one}}$ と $\Delta E_{\text{en}}$ の寄与の大小が逆転するだけでなく、 $\Delta E_{\text{en}}$ の符号まで変化する。この $Z_n$ が小さい領域においては、フント則の起源は、もはやスレーターの解釈とは大きく離れたものになる。

以上がHe様原子の核電荷依存性に関するこれまでの知見のまとめであるが、そこで残された二つの疑問を本稿の後半で説明していく。まず、三重項状態は一重項状態よりも、コンパクトな電子密度分布を持ち、それゆえ原子核電子引力ポテンシャルの絶対値が大きくなるのであるが、この「三重項は何故一重項よりもコンパクトな電子密度分布を持つのか」を明らかにするのが第一点。そして、電子間反発は、核電荷 $Z_n$ が大きい場合には三重項状態の方が小さい値を持ち、 $Z_n$ が小さくなると一重項状態の方が小さくなる。この理由を明らかにするのが第二点である。これらを説明する上で鍵となるのは「共役フェルミ孔 (conjugate Fermi hole)」という概念である。通常のフェルミ孔は、良く知られているように、スピンのそろった三重項の電子が同じ場所に来ないことを主張しており、スピンの反平行な一重項の電子については何も制約をかけていない。ところが、実は一重項の場合にも、二つの電子が近づいたとき、両者が「来てはいけない場所」が存在するのである。

## 2. 共役フェルミ孔の存在とフント則の起源

まず、単一スレーター行列式近似における二電子系の一重項・三重項状態の軌道部分の式(1)から出発しよう。序章で述べたように、電子間反発が存在する通常の場合に、一重項・三重項状態についてそれぞれ一電子軌道を最適化すると、両者は完全に同じものではなく、三重項状態の軌道は一重項よりもコンパクトになる。そのメカニズムを知りたいわけであるが、まず電子間反発が完全に無視できる $Z_n = \infty$ の極限を考え、一重項と三重項状態が式(1)のように厳密に同じ軌道の組で表される場合について波動関数の詳細を調べる。すると、電子間反発が一重項・三重項状態の波動関数に及ぼす影響の違いが見えてくる。

反対称関数 $\Psi^-$ で表される三重項状態において、電子座標 $\mathbf{r}_1$ および $\mathbf{r}_2$ を等しいとおくと、式(1)右辺の第一項と第二項が丁度打ち消しあうため、波動関数の振幅は零になる。よって、二電子の座標空間において、 $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$ となる領域の近傍では三重項の確率密度は非常に小さくなる。これが所謂フェルミ孔が存在する理由であり、量子力学を勉強したものならば誰でも知っている話である。一重項状態の方はどうかというと、式(1)の通り対称関数であるため、三重項の場合のような「打ち消し合い」は起こらないように見える。実際、 $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$ のときは少なくとも起こらない。一方、

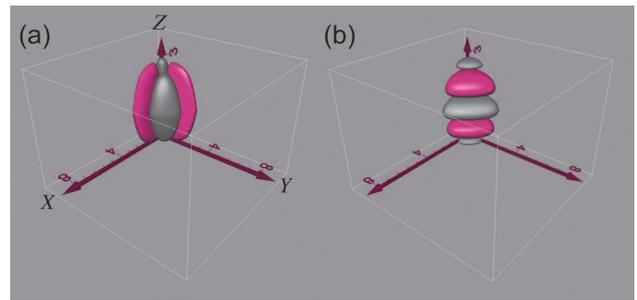


図4 He様原子の内部空間におけるフェルミ孔と共役フェルミ孔。左および右はそれぞれ、 $(1s)(2s)$  および  $(1s)(2p)$  の場合を表す。XおよびY軸は核電荷でスケールされた電子1および2の動径座標 $s_1$ および $s_2$ を表し、Z軸は2電子の相対角 $\phi_-$  ( $-\pi \leq \phi_- \leq \pi$ )を表す。(フルカラー口絵参照)

繰り返し述べているように、同じ軌道の組をシェアしている波動関数 $\Psi^+$ および $\Psi^-$ は同じ電子密度分布を与えるのだから、三重項の波動関数 $\Psi^-$ が二電子の座標空間で空孔を持っているならば、一重項の波動関数 $\Psi^+$ もどこかに「穴」があいていないと辻褃が合わないのである。

具体的に二電子の座標空間のどの位置にこのような「一重項状態の空孔」があるのかをまず見ておこう。図4(a)は2次元He様原子モデルの $(1s)(2s)$ の電子配置の場合、(b)は $(1s)(2p)$ の場合について、フェルミ孔と「一重項状態の空孔」をプロットしたものである。この3次元プロットの座標軸は次のようになっている。まず二電子の内部空間は三個の変数で記述される。電子1および2の $Z_n$ でスケールされた動径座標(式(4)参照)、 $s_1 \equiv |s_1|$ および $s_2 \equiv |s_2|$ 、そして、相対角 $\phi_- \equiv (\phi_1 - \phi_2)/2$ である。<sup>\*13</sup>  $\phi_-$ の定義域は、 $-\pi \leq \phi_- \leq \pi$ である。この $\phi_-$ と双対な角度が $\phi_+ \equiv (\phi_1 + \phi_2)/2$ であり、2電子全体の角運動量に共役な角度変数を表す。これらの3個の変数を、それぞれ、 $s_1$ をX軸、 $s_2$ をY軸、 $\phi_-$ をZ軸に対応させて、式(1)の一重項の波動関数 $\Psi^+$ と三重項の波動関数 $\Psi^-$ の確率密度<sup>\*14</sup>の差をプロットしたものが、図4の曲面である。灰色および赤色の曲面は、それぞれ一重項および三重項の確率密度が大きい領域を表す。<sup>\*15</sup> 一重項・三重項状態の波動関数 $\Psi^\pm$ は、一電子の空間に射影すると同じ電子密度を与えるが、二電子の内部座標空間( $s_1, s_2, \phi_-$ )でみると、両者は局所的に異なる。灰色の領域は、 $|\Psi^+|^2 > |\Psi^-|^2$ となる領域であり、所謂「三重項の電子が来てはいけない」通常のフェルミ孔の場所を表している。一方、赤色で描かれた領域は、 $|\Psi^+|^2 < |\Psi^-|^2$ となる領域であり、反対に「一重項の電子が来てはいけない場所」を表している。そしてこれらの領域は、互いにすぐ近くにある。

図4の見方に慣れていただくために、いくつか補足説明

<sup>\*13</sup>  $\phi_i$  ( $i=1, 2$ ) は電子1および2の2次元極座標による角度(原点は原子核)を表す。この相対角の定義では、係数1/2が登場しているが、これは単に数式の処理上の都合である。

<sup>\*14</sup> 内部座標空間における確率密度は、 $\Psi^+$ および $\Psi^-$ のノルムの自乗を $\phi_+$ で積分することによって得られる(詳細は原著論文<sup>8)</sup>を参照)。

<sup>\*15</sup> これらの曲面は確率密度の絶対値が0.001となる等密度面を描いている。確率密度の値を変えれば曲面が占める領域の大きさは変化するが、トポロジカルな構造は同じである。

をしたい。まず、 $(1s)(2s)$  の場合には、角度変数を表す  $Z$  軸方向に構造を持たず、 $(1s)(2p)$  の場合には構造を持つ。これは、 $(1s)(2s)$  は角運動量零の状態であり、 $(1s)(2p)$  は角運動量を持っていることから予想できる。二つの電子座標が一致する（すなわち電子間反発が発散する）のは、 $s_1=s_2$  かつ  $\phi_-=0, \pm\pi$  の場合であるから、この図では  $X=Y$  かつ  $Z=0, \pm\pi$  の場所がそれに対応する。実際、 $(1s)(2p)$  の場合を見ていただくと、確かに  $Z=0, \pm\pi$  を中心としてフェルミ孔の灰色の領域が存在している。一方、先ほどから「一重項の電子が来てはいけない場所」と呼んでいる赤色の領域は、そこから少しだけずれた場所にある。では、何故このような赤色の領域が存在するのだろうか。 $(1s)(2s)$  の場合について、これを詳しく説明しよう。図5にHe様原子の零次の  $1s$  および  $2s$  の軌道（水素様原子の  $1s$  および  $2s$  軌道）の確率振幅の2乗を動径座標の関数としてプロットしたものを示す。良く知られているように、 $1s$  軌道は節を持たないが、 $2s$  軌道は節を持つ。図5に矢印で示すように、 $1s$  軌道と  $2s$  軌道が空間的に重なる領域において、この  $2s$  の節点を挟んだ任意の2点  $s_A$  および  $s_B$  をとる。そして、これらの2点を、式(1)の波動関数  $\Psi^\pm$  の電子1および2の座標に代入したもの、

$$\Psi^\pm(s_A, s_B) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{1s}(s_A)\psi_{2s}(s_B) \pm \psi_{2s}(s_A)\psi_{1s}(s_B)], \quad (5)$$

を考える。<sup>\*16</sup> 先ほど述べたように、 $s_A$  と  $s_B$  は  $2s$  軌道の節点を挟むため、式(5)右辺の  $\psi_{2s}(s_A)$  と  $\psi_{2s}(s_B)$  は異符号を持つ。このため、一重項の場合には、右辺第一項と第二項が打ち消しあう。<sup>\*17</sup> 一方このとき、三重項の波動関数  $\Psi^-$  の場合には、右辺第二項の前に元々マイナスがあるため、 $\psi_{2s}$  軌道の符号の変化をキャンセルする。よって、第一項と第二項は同符号で足しあわされるため、確率振幅は一重項状態よりも必ず大きくなる。この一重項状態に見られる空孔を、著者らは共役フェルミ孔と名付けた。通常のフェルミ孔と同様にパウリ原理に起因<sup>\*18</sup> し、かつ三重項とペアになる一重項状態における波動関数の空孔だからである。

通常のフェルミ孔と共役フェルミ孔の違いをまとめておこう。まず、フェルミ孔および共役フェルミ孔の両方とも、二つの軌道  $\psi_a$  および  $\psi_b$  が空間的に重なる領域に存在する。もし、軌道の重なりがなかったとすると、両者のスピンのどちらを向いても、一重項・三重項状態間でエネルギーに違いは生じない。この「重なり領域」において、三重項の波動関数は電子座標が一致する場所 ( $\mathbf{r}_1=\mathbf{r}_2$ ) の近傍に

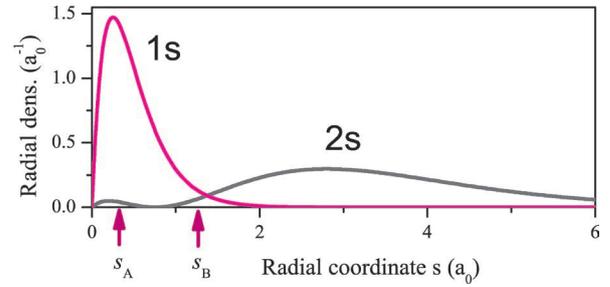


図5 2次元水素様原子の  $1s$  および  $2s$  軌道の動径確率密度プロット。  $2s$  軌道の節点を挟んだ近傍の任意2点 ( $s_A, s_B$ ) の組が二電子の内部空間における共役フェルミ孔の位置を与える。

フェルミ孔を持ち、一重項の波動関数は、二つの電子座標の値が互いに近いものの一致しない領域 ( $\mathbf{r}_1 \neq \mathbf{r}_2$ ) に共役フェルミ孔を持つ。先の定義から分かるように、共役フェルミ孔が存在するためには、少なくとも片方の軌道に節が必要である。一方、通常のフェルミ孔には一見そのような制約はないため、読者の方々は、三重項とペアになる一重項においては、本当にいつも共役フェルミ孔が存在するのか、という疑問をお持ちになるかもしれない。しかし、そもそも三重項状態が存在する電子配置においては、二つの軌道は必ず異なる必要があるため、二つの軌道が直交するためには、少なくとも一つは節が存在することになり、共役フェルミ孔の存在が保障されるのである。

フントの規則の起源を説明するために必要な登場物をもう一つ導入しよう。それは内部空間における電子間反発ポテンシャルである。電子間反発ポテンシャルは、その定義から、フェルミ孔が存在する領域 ( $\mathbf{r}_1=\mathbf{r}_2$ ) で発散し、式(4)で示されるように、核電荷  $Z_n$  が大きいほど実効的に小さくなる。図4で示されるように、フェルミ孔が定義される領域には、三重項の電子の確率密度は勿論存在しないが、一重項の電子の密度は存在する。よって、核電荷が大きい極限から出発し、どんどん核電荷  $Z_n$  を小さくしていくと、フェルミ孔近傍に存在する一重項の確率密度を、電子間反発ポテンシャルが「押し出す」ことになる。この様子を表したものが図6である。図6(a), (b), (c) では、それぞれ  $Z_n=20, 5, 2$  の場合について、 $(1s)(2s)$  電子配置の一重項と三重項の確率密度の差を内部空間 ( $s_1, s_2, \phi_-$ ) でプロットしている。<sup>\*19</sup> 図4と同様に、灰色の領域は一重項の確率密度が大きい領域、赤色は反対に三重項の確率密度が大きい領域を表す。これらの図の横にある (a'), (b'), (c') は、それぞれ、対応する核電荷  $Z_n$  の場合に、式(4)の電子間反発ポテンシャル  $(1/Z_n)(1/|\mathbf{s}_1-\mathbf{r}_2|)$  が  $0.5$  a.u. となる等エネルギー曲面をプロットしたものである。<sup>\*20</sup>

まず、図6の  $Z_n=20$  の場合をみると、確率密度分布の差のプロット (図6(a)) は、電子間反発がない場合 ( $Z_n=\infty$ )

<sup>\*16</sup>  $1s$  および  $2s$  軌道は角度座標への依存性がないため、スカラー量の  $s_A$  および  $s_B$  のみを変数として記している。

<sup>\*17</sup> 完全な打ち消しあい、 $|\Psi^+|^2=0$ 、が起こるのは ( $s_A, s_B$ ) の僅かな部分集合の場合であるが、少なくとも第一項と第二項は異符号で足しあわされるため、 $|\Psi^+|^2$  は  $|\Psi^-|^2$  と比べて非常に小さくなる。

<sup>\*18</sup> パウリ原理により、フェルミ粒子である電子の波動関数はスピンも含めて反対称化される。このとき、二電子のスピン部分の波動関数は、一重項は反対称、三重項は対称関数であるため、空間部分の波動関数は、式(1)のように一重項状態は対称、三重項状態は反対称関数となる。この意味で、スピンの異なる一重項状態の空孔も、パウリ原理に基づくといえる。

<sup>\*19</sup> 確率密度は完全CI法によって求めた高精度の波動関数から得られたものである。

<sup>\*20</sup> “ $0.5$  a.u.” という値は、核電荷が異なる場合に違いが良く見えるように恣意的に選んでいる。これらの局面の近傍では、電子間反発エネルギーが高くなるため、電子はこれらの領域を避けようとする。

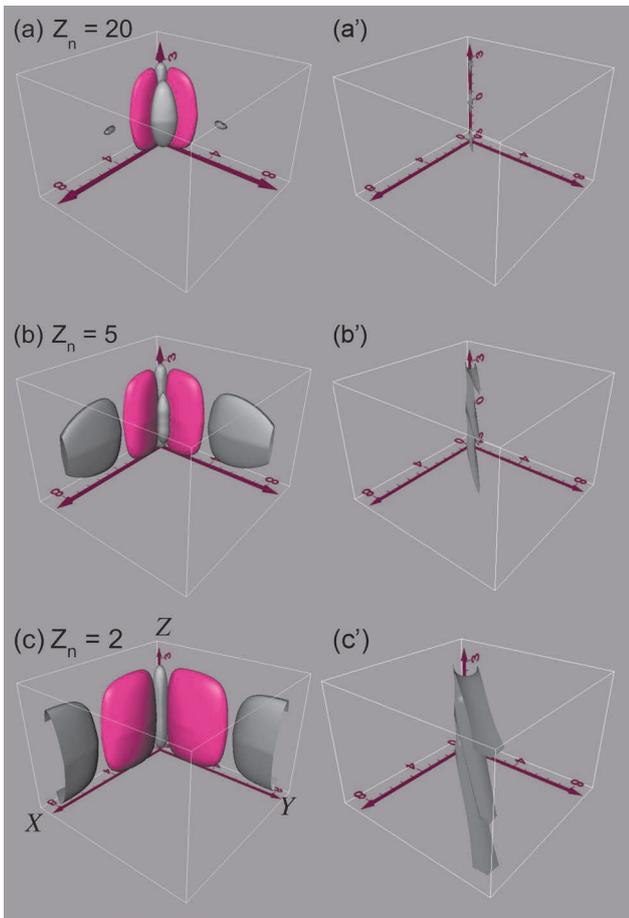


図6 He様原子の(1s)(2s)電子配置における一重項と三重項状態の確率密度の差: (a)  $Z_n = 20$ , (b)  $Z_n = 5$ , (c)  $Z_n = 2$ . 図中の灰色および赤色は、それぞれ一重項および三重項の確率密度が高い領域を表す。(a'), (b'), (c')は核電荷  $Z_n$  でスケールされた電子間反発ポテンシャル(式(4)参照):  $(1/Z_n)(1/s_1 - s_2)$  の値が0.5 a.u. の等エネルギー面を表す。(フルカラー口絵参照)

の図4(a)と極めて類似していることが分かる。これは、その右の電子間反発ポテンシャルのプロット(図6(a'))が示すように、電子間反発が極めて弱いため、確率密度分布は電子間反発の影響をあまり受けない。図6(a)を詳しく見ていただくと、灰色の「かけら」がXおよびY軸に沿って存在するのが分かると思う。これが電子反発によってフェルミ孔から押し出された一重項の確率密度である。この  $Z_n$  が大きい場合においては、微小な電子反発ポテンシャルの「柱」がフェルミ孔を打ち抜く。フェルミ孔の領域には三重項電子の確率密度は存在せず、一重項電子の確率密度が存在するため、必然的に一重項の電子間反発は大きくなる。一方、わずかながらも押し出された一重項電子の確率密度の「かけら」は、動径座標  $s_1$  または  $s_2$  が大きい領域に分布するため、この分だけ核引力ポテンシャルの位置エネルギーが増大する。核電荷が小さくなると、電子間反発ポテンシャルの「三つの柱」が大きくなり、灰色の一重項の確率密度の有意な部分がフェルミ孔の領域から押し出される。これを示したのが図6(b)および(b')である。こうなると、一重項と三重項では、確率密度の動径分布が有意に異なるため、図3(a)で見たように、両者の一電子エネルギー

ギーの差  $\Delta E_{\text{one}}$  が大きくなる。核電荷がさらに小さくなると、一重項の確率密度のかなりの部分がフェルミ孔から押し出され、 $s_1$  または  $s_2$  が大きい領域に移動する。これらの押し出された確率密度は、電子間反発ポテンシャルの柱から離れているため、一重項の電子間反発エネルギーは、ついには三重項よりも小さくなる。これが図3(a)において、 $\Delta E_{\text{en}}$  の符号が正から負に変化する理由である。

以上から、フントの第一規則の起源は次のように簡単にまとめることができる。まず、核電荷が大きい極限において、二電子の内部空間に、零次の一電子軌道の組  $(\psi_{1s}, \psi_{nl})$  で決定される、フェルミ孔と共役フェルミ孔が定義されている。通常のフェルミ孔の場所には三重項の電子は確率密度を持たないが、一重項の電子は有意な確率密度を持つ。その代わりに一重項の電子は、フェルミ孔の近くにある共役フェルミ孔の場所には確率密度を持たない。核電荷が無限大の極限から小さくなっていくと、電子間反発ポテンシャルが、フェルミ孔の領域に元々存在する一重項電子の確率密度を徐々に「押し出す」。押し出された一重項の確率密度は、フェルミ孔の近くに「一重項電子が来てはいけない場所(共役フェルミ孔)」が存在するために、より遠くに飛ばされる。その結果、一重項状態の電子密度は三重項よりも広い分布を持つ。言い換えれば、三重項状態は一重項よりもコンパクトな電子密度分布を持つことになる。もう少し簡潔に言うと、一重項状態は、共役フェルミ孔という「排除体積」を持つために、電子間反発が少しでも存在すれば、その電子分布は必然的に三重項よりも広がるのである。歴史的には、ボイドは「何故三重項の電子密度分布は一重項よりも収縮するのか」という問題設定を行ったが、実際には、「三重項が収縮する」のではなく、「一重項が膨張する」という方が、より真実に近い。そして、遠くに飛ばされた一重項電子の確率密度は電子間反発ポテンシャルが発散する位置から離れているために、核電荷が小さくなるに従い、一重項の電子間反発ポテンシャルの期待値はどんどん小さくなり、ついには三重項よりも小さくなるのである。

### 3. あとがき

本稿の最後に、関連する研究の展望を記してみたい。本稿は、He様原子の一電子励起状態について、フントの第一規則の起源を解説したものである。言い換えれば、第二・第三規則については全く触れていない。特に第二規則については、研究例も少なく、今後の研究展開が待たれているところである。また、He様原子についても、実は「二電子励起状態」においては、第一規則が破れる場合があることが知られている。縮重した軌道(2p, 3p, 3d, ...)に二つの電子が入る場合がこれに該当する。これについては、フント則が成り立つ前提条件である、「同じ軌道配置とは何か」という問題が関係していると思われる。縮重した軌道への電子の入り方は複数あり、それによって、本稿で扱ったような単一の一重項・三重項のペアだけでなく、角運動

量の合成によって三個以上の状態が生じ得る。そのとき、生じた全ての状態を「同じ軌道配置」と呼ぶかどうか。これについては、重心運動の分離が可能であり、それゆえ電子状態のより詳細な帰属が可能な量子ドット<sup>10)</sup>について、最近著者が解析を行っているので、機会があればまたご紹介したい。

また本稿で導入した「共役フェルミ孔」の概念は、原子以外の系にも適用できると思われる。例えば、分子系における化学反応の際に、「電子がどのように動くのか」ということを理解するために役立つかもしれない。従来知られているように三重項の電子対が同じ場所に来ないだけでなく、一重項の電子対も、お互いが接近したときに「来てはいけない場所」が存在する。あるいは、著者は門外漢であるが、フェルミ粒子の集まりである原子核の構造の理解に、何らかの寄与ができるかもしれない。さらに、本稿で取り上げたフントの規則のような歴史的かつ基本的な物理法則が成り立つ由来を、改めて現代的な視点で見直してみるのも面白いと思う。その結果、思わず「宝くじに当たる」ようなことがあるかもしれない。もちろん、宝くじのシステムと同様、当たる確率は決して大きくはないかもしれないが、少なくとも基本的な物理法則に関する理解は深まり、それによって、担当する授業の内容は豊かになるものと思われる。

#### 参考文献

- 1) J. C. Slater: Phys. Rev. **34** (1929) 1293.
- 2) E. R. Davidson: J. Chem. Phys. **41** (1964) 656; *ibid.* **42** (1965) 4199.
- 3) 本郷研太, 小山田隆行, 川添良幸, 安原 洋: 日本物理学会誌 **60** (2005) 799.
- 4) K. Hongo, R. Maezono, Y. Kawazoe, H. Yasuhara, M. D. Towler and R. J. Needs: J. Chem. Phys. **121** (2004) 7144.
- 5) T. Oyamada, K. Hongo, Y. Kawazoe and H. Yasuhara: J. Chem. Phys. **133** (2010) 164113.
- 6) R. J. Boyd: Nature **310** (1984) 480.
- 7) Y. Sajeev, M. Sindelka and N. Moiseyev: J. Chem. Phys. **128** (2008) 061101.

- 8) T. Sako, J. Paldus, A. Ichimura and G. H. F. Diercksen: Phys. Rev. A **83** (2011) 032511.
- 9) T. Sako, J. Paldus, A. Ichimura and G. H. F. Diercksen: J. Phys. B **45** (2012) 235001.
- 10) T. Sako, J. Paldus and G. H. F. Diercksen: Phys. Rev. A **81** (2010) 022501.

#### 著者紹介



佐甲徳栄氏：専門は原子分子物理学、光物質科学。ここ数年は、特に量子ドットや強電磁場中に置かれた原子・分子等、非クーロン場中における多電子問題に関心を持っている。

(2012年12月1日原稿受付)

#### Origin of the First Hund Rule in He-Like Atoms

##### Tokuei Sako

abstract: Empirically derived Hund's rules of pre-quantum-mechanics era that predict the ordering of the energy levels possessing different spin and orbital angular momentum quantum numbers proved to be almost universally valid for atomic and molecular systems. Yet, despite the history of a long standing debate the search for various aspects of their origin persists. With a brief survey of the historical studies related to the subject, this paper explores the origin of Hund's multiplicity rule focusing on the helium-like atoms that represent an ideal system providing a direct fundamental insight into the structure of the internal part of the fully-correlated wave functions. An examination of their probability density distributions indeed reveals the existence of a region in the internal space which we refer to as *conjugate Fermi hole*. In this region the singlet wave function has a smaller probability density than the corresponding triplet one, in contrast to a genuine Fermi hole in which case the triplet has a smaller density than the singlet. Thanks to the presence of this conjugate Fermi hole, the singlet probability density has to migrate far away from the nucleus, rationalizing thus a broader electron density distribution and smaller nuclear attraction and electron repulsion energies of the singlet state than is the case for the corresponding triplet state.

### 応用物理 第82巻 第6号(2013年6月号) 予定目次

特集：有機エレクトロニクス

巻頭言：新たな市場開拓に向けた有機エレクトロニクス分野への期待……………谷口彬雄  
 総合報告：実用化ステージを迎えた有機光エレクトロニクス：第3世代有機エレクトロルミネッセンス材料の登場……………安達千波矢  
 解説  
 有機トランジスタの物理と今後の課題……………竹谷純一  
 次世代光源としての高性能有機ELデバイスの現状と今後の課題……………笹部久宏, 城戸淳二

有機太陽電池のためのバンドギャップサイエンス……………平本昌宏  
 最近の展望  
 SHGを用いた有機エレクトロニクスデバイスのキャリヤダイナミクス解析……………岩本光正, 間中孝彰  
 有機半導体の印刷製造技術……………長谷川達生  
 有機薄膜界面の評価技術の進展……………石井久夫  
 基礎講座：エピタキシャル技術がもたらすLEDの高性能化……………成川幸男

# 宇宙の大規模構造の新展開：原始揺らぎの非ガウス性は 何をもたらすか？

西道啓博 (東京大学国際高等研究所カブリ数物連携宇宙研究機構 277-8583 柏市柏の葉5-1-5)

標準的な宇宙モデルにおける大きな仮定の一つに、「ガウス統計に従う原始揺らぎ」が挙げられる。この仮定は現在までの観測と概ね整合的である一方で、初期宇宙を記述する様々なモデルは次世代観測で検出可能な非ガウス性を予言する。本稿では、原始非ガウス性の存在下での宇宙大規模構造の進化に関する最近の理論の進展について紹介する。宇宙の物質の分布と銀河の空間分布の関係である「銀河バイアス」に現れる距離依存性の測定を通じて、須山・山口不等式のテストが可能となり、宇宙の揺らぎの起源が単一成分か、複数成分由来のスカラー場なのか区別ができることを示す。

## 1. はじめに

無数の銀河が織り成す3次元空間分布は銀河団、フィラメント、そしてボイドと呼ばれるネットワーク状の大規模構造として知られる。その起源は宇宙極初期に起きたとされる指数関数的加速膨張、いわゆるインフレーションにまで遡る。この膨張を引き起こしたスカラー場(インフラトン)のミクロなスケールの量子揺らぎが、急激な膨張によりマクロなスケールに引き伸ばされ、重力不安定性による成長を経て現在の姿を獲得した。これが宇宙の揺らぎの進化の最も単純なシナリオである。しかしながら、インフレーション機構そのものは未だ現象論の域を出ず、より本質的な理解を得るには理論、観測双方の進展を待たねばならない。

宇宙の原始揺らぎの統計的性質は、まさにインフラトンの性質そのものである。これを特徴づける要素として従来議論されてきたのは、揺らぎのパワースペクトルであった。<sup>\*1</sup> これは、フーリエ空間での揺らぎの2乗期待値であり、揺らぎの大きさと距離依存性の2つにより特徴づけられる。これらは宇宙マイクロ波背景放射(CMB)の観測から非常に高い精度で測定されているが、この測定結果こそがインフレーション理論を支持する最大の観測的証拠と言ってよい。これに加えて、近年にわかに注目されるようになってきたのが、揺らぎの非ガウス性である。<sup>1)</sup> インフラトンの量子揺らぎに宇宙の揺らぎの起源を求めると、揺らぎの非ガウス性はその非線形相互作用を通じて生み出されるため、これを測定することでインフレーションのダイナミクスより直接的なテストとなる。<sup>\*2</sup>

これまで、揺らぎのガウス性のテストには、主にCMBの温度揺らぎが用いられてきた。<sup>2)</sup> 現在までの観測データは概ねガウス揺らぎと整合的である。これを受けて、宇宙の大規模構造の理論研究は長い間ガウス初期条件のもとで進められてきた。この仮定を外して微小な非ガウス性の存在を許したとき、大規模構造に対する我々の理解はどれだけ変更を迫られるであろうか？ 逆に言えば、大規模構造

は原始非ガウス性を探る上で有効なプローブに成り得るであろうか？ 本稿では最新の理論研究<sup>3)</sup>を紹介し、将来観測から検証可能なインフレーション機構の性質について解説する。

## 2. 局所型非ガウス模型

「非ガウス揺らぎ」と一口に言っても、あらゆる形の揺らぎが考えられる。非ガウス性の最も単純な指標は、フーリエ空間の3点相関であるバイスペクトルであろう。バイスペクトルは波数ベクトルが作る3角形の関数として表され、どのような形状の3角形において大きな値を持つのかに応じて異なる揺らぎ生成模型を大別できる。インフレーション期に地平線<sup>\*3</sup>を超える大スケールでの非線形相互作用を通じて生まれる非ガウス性は、一般に局所型と呼ばれる形に帰着することが知られている。この場合には1辺が他の2辺と比べて極端に短いような、「潰れた」形の3角形に特徴が現れるが、本稿ではこの種類の非ガウス性に注目する。<sup>\*4</sup>

局所型の非ガウス性は、揺らぎに単一成分しか存在しない場合、物質優勢期の曲率揺らぎ $\zeta$ と呼ばれる計量揺らぎを補助ガウス場 $\chi$ を使って空間座標 $\mathbf{x}$ において

$$\zeta(\mathbf{x}) = \chi(\mathbf{x}) + \frac{3}{5} f_{\text{nl}} \chi^2(\mathbf{x}) + \frac{9}{25} g_{\text{nl}} \chi^3(\mathbf{x}) + \dots, \quad (1)$$

と局所的に展開した形で書かれる。曲率揺らぎ $\zeta$ は直接の観測量ではないが、観測可能な様々な揺らぎを生み出す種となっており、揺らぎが線形段階にある限りは波数 $\mathbf{k}$ 毎に独立に別の揺らぎへと遷移する。<sup>\*5</sup> CMBの温度揺らぎであれば光子の、宇宙の大規模構造であれば物質の遷移関数を乗ずればよい。物質の密度揺らぎ $\delta_m$ と曲率揺らぎ $\zeta$ は大スケールではポアソン方程式により関係づけられるため、

$$\delta_{m,\mathbf{k}} = \mathcal{M}_m(k) \zeta_{\mathbf{k}} \propto k^2 \zeta_{\mathbf{k}}, \quad (2)$$

によって結ばれる( $\mathcal{M}_m$ は密度揺らぎへの遷移関数)。この波数依存性の違いが後に重要になってくる。

<sup>\*1</sup> ガウス統計に従う場の統計的性質は、パワースペクトルだけで記述される。真空の量子揺らぎを種とした、非線形相互作用のない揺らぎ生成模型では完全にガウス統計に従う。

<sup>\*2</sup> もちろん、インフレーションに代わる揺らぎ生成シナリオの正当性を見極める上でも重要なのは間違いない。

<sup>\*3</sup> 光速にその時刻の宇宙年齢を乗じて得られる距離。

<sup>\*4</sup> それ以外にも、例えばインフラトンに非線形微分相互作用が存在する場合には正3角形においてシグナルが最大となる。

<sup>\*5</sup> 曲率揺らぎ以外に、等曲率揺らぎという独立な成分も存在し得る。これが存在するとした場合にも、本稿の議論は極めて容易に拡張できる。

表1 非ガウス性の大きさを表す係数と多点統計量の関係。  $\chi_i$  は  $\chi(\mathbf{x}_i)$  を、平均操作  $\langle \dots \rangle_c$  はアンサンブル平均を、そして  $n$  perms. は足  $\mathbf{x}_i$  に対する  $n$  項の置換項を表す。

点数	係数	型
3点	$(3/5) f_{nl}$	$\langle \chi_1 \chi_2 \chi_3^2 \rangle_c + 2$ perms.
4点	$(9/25) g_{nl}$ $(1/4) \tau_{nl}$	$\langle \chi_1 \chi_2 \chi_3 \chi_4^3 \rangle_c + 3$ perms. $\langle \chi_1 \chi_2 \chi_3^2 \chi_4^2 \rangle_c + 5$ perms.

式(1)に戻ると、2次の結合定数  $f_{nl}$  は非ガウス性を特徴づける最低次のパラメタである。このパラメタは、同時に先述の潰れた3角形におけるバイスペクトルの係数でもある。同様に、3次の係数  $g_{nl}$  は4点統計の係数である。しかし、4点統計は  $g_{nl}$  に比例する寄与だけではなく、新たなパラメタ  $\tau_{nl}$  で書かれる別の項が存在する(表1を参照)。この係数は式(1)の模型では  $\tau_{nl} = (36/25) f_{nl}^2$  と計算できるが、より一般の場合にはこれらの間には一種の整合性関係

$$\tau_{nl} \geq \frac{36}{25} f_{nl}^2, \quad (3)$$

が知られている(須山・山口不等式)<sup>4)</sup>。式(1)のように単一のガウス揺らぎ  $\chi$  のみが曲率揺らぎに寄与する場合と違い、複数の成分を持つ模型では左辺の方が大きくなる。これは、3点と4点統計の同時測定により、単一成分のインフレーション模型を一挙に棄却できる可能性を示している。

現状では、これまでのCMBの観測から、例えば  $f_{nl} = 20 \pm 42$ ,  $\tau_{nl}/10^4 = -7.6 \pm 8.7$ ,  $g_{nl}/10^5 = -1.9 \pm 6.4$  という具合に制限がついており、ガウス揺らぎと整合的である(いずれも  $1-\sigma$  レベル)<sup>5)</sup>。曲率揺らぎが高々  $\mathcal{O}(10^{-5})$  であることを考えると、既に  $|f_{nl} \chi^2|/|\chi| \sim \mathcal{O}(0.1\%)$  程度 of 非ガウス性は棄却されているという訳だ。我々の宇宙の初期条件はこれほどまでに良くガウス統計に従うのである。今後の観測によりパラメタの決定精度の向上が見込まれるが、まずはゼロでない有意な非ガウス性のシグナルを捕らえること、その後、例えば上記の整合性関係を利用することで、模型毎の議論ではなく、インフレーションの物理のより本質的な理解を促進することが期待される。本稿では、特にこの須山・山口不等式を大規模構造レベルでどのような形で検証し得るのかについても注目して読み進めていただきたい。

### 3. 大規模構造と銀河バイアス

さて、宇宙の大規模構造に目を向けると、観測された非ガウス性をそのまま原始ガウス性と見なすわけにはいかない。構造の非線形な重力進化によって「後天的な」非ガウス性が生み出されるためだ。更に、我々が観測するのは密度揺らぎそのものではなく、光の形で我々が観測可能な銀河であることが話をややこしくさせる。銀河の離散的分布は、背景にある隠れた物質(=バリオン<sup>\*6)</sup>と暗黒物質)の連続的な密度場と密接に結びついていると期待される。定性的には、主に暗黒物質が作る重力ポテンシャルの底にバ

<sup>\*6</sup> ここでは原子など我々に馴染みある通常の物質をバリオンと呼ぶ。

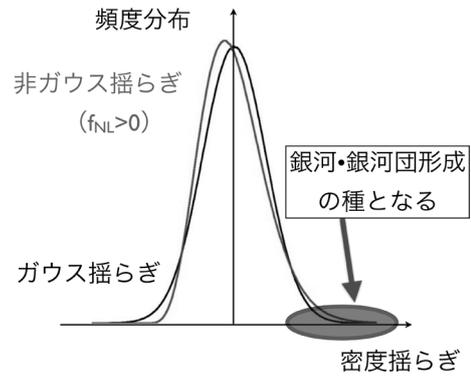


図1 ガウス分布及び  $f_{nl}$  型の非ガウス分布。この例では左右対称なガウス分布と比べて非ガウス分布は正の歪度を示しており、分布の相対的な変化は高密度、低密度の極限で大きくなる。また、銀河の材料は初期条件における高密度領域に付随しているものと期待される。

リオンがかき集められ、ある程度高密度になった後に重力以外のバリオンの相互作用によって銀河が形成されたと考えられる。しかし、密度揺らぎと銀河分布との関係、いわゆる銀河バイアスを第一原理的に導くことは難しい。厳密に言えば、このバイアスの問題を解決しない限り銀河分布から宇宙論的情報を引き出せない。<sup>\*7</sup> 巨視的に見れば銀河の揺らぎ  $\delta_g$  は物質の揺らぎ  $\delta_m$  をトレースすると期待して、大スケールにおいて両者の間に線形関係を仮定し、2つの揺らぎの大きさの比:

$$b \equiv \delta_g / \delta_m = \sqrt{P_g / P_m} \equiv \sqrt{\langle \delta_g^2 \rangle / \langle \delta_m^2 \rangle}, \quad (4)$$

のことを単にバイアスと呼ぶことが多い ( $P_g, P_m$  はそれぞれ銀河と物質のポワースペクトル)。

ところが、最近になってバイアスの存在がむしろ新たな情報を提供する可能性が指摘された。これは以下のような簡単な考察から理解できる。 $f_{nl}$  型の非ガウス性を考えよう。式(1)を見ると  $f_{nl}$  に比例した補正項は低、高密度極限で大きい<sup>\*8)</sup>(図1)。初期条件に遡ると、銀河の材料の大半は高密度領域に行き着くと推定できるが、これはまさに非ガウス性の影響を受けやすい領域だ。銀河バイアスという大規模構造観測に内在された機構により高密度領域のみを選び取ることで、原始非ガウス性に関する情報が増幅されるのだ。

この効果は「揺らぎの歪度に対するハローの質量関数の応答」と言える。ここでハローとは、主に暗黒物質が作る重力的に束縛された高密度領域のことで、その質量関数とは、ハローの質量毎の空間的数密度を指し、これは大規模構造を特徴づける基本的な量の1つである。銀河バイアスの解決には、ハローの質量関数の理解が重要な一歩と言える。

質量関数を導くために、質量  $M$  と対応する距離スケール  $R = (3M/4\pi\rho)^{1/3}$  で均した線形段階の揺らぎ  $\delta_R$  を考えよう。<sup>\*9)</sup> ハローの形成は明らかに非線形過程であるが、線形

<sup>\*7</sup> 実際には、もっともらしいバイアス関係を仮定したり、パラメトリックに取り扱うことで解析が行われている。

<sup>\*8</sup> より正確には、曲率揺らぎの絶対値が大きいところ。

<sup>\*9</sup>  $\rho$  は宇宙の平均密度。

段階の揺らぎの大きさを見れば将来いつどんな大きさのハローができるかは大体察しがつく。ここでは、線形臨界密度揺らぎ  $\delta_c(z)$  を定義し、 $\delta_R$  がこの値に達すると赤方偏移  $z^{*10}$  で質量  $M(R)$  のハローができると考えよう。揺らぎの標準偏差  $\sigma_R \equiv \sqrt{\langle \delta_R^2 \rangle}$  と、臨界密度との比  $\nu_R(z) \equiv \delta_c(z)/\sigma_R$  を取ると、質量  $M$  のハローが時刻  $z$  においてどれだけ珍しいかを示す指標となる。実は、ガウス初期条件の場合には質量関数は時刻に依らず  $\nu_R(z)$  だけでよく決まることが知られている（質量関数の普遍性）。

原始非ガウス性の質量関数への影響は2000年頃から精力的に調べられ始めた。<sup>6)</sup> この場合、質量関数の普遍性は多少破れ、 $\nu_R$  への依存性に加えて  $\delta_R$  の歪度  $\langle \delta_R^3 \rangle$  の効果が入ってくる。その結果、 $f_{nl}$  型の初期条件に対しては、銀河団サイズの大きいハローほど質量関数が大きく影響を受けることが分かってきた。これは図1において重いハローほどより希少な高密度領域を元に形成されることから納得できる。

宇宙全体の空間平均量であるハローの質量関数が原始揺らぎの非ガウス性に対して感度を持つことは分かったが、ハローの空間分布の非一様性についてはどうだろうか？ 無数のハローが形作るネットワーク状の複雑なパターンは、単に数密度の平均値だけを見るよりも遥かに豊かな情報を有すると期待できる。以後は単純に銀河 $\leftrightarrow$ ハローと読み替え、そのパワースペクトルに注目して議論を進めていこう。

#### 4. 距離依存バイアス

$f_{nl}$  型の非ガウス性と、バイアスの両者が働くことで、ハローの空間分布に非自明な効果が現れることに初めて気づいたのは Dalal らであった。<sup>7)</sup> 彼らは非ガウス初期条件からN体計算を行い、銀河団サイズのハローの分布を調査した。彼らが測定したハローのパワースペクトルは、大スケール ( $\sim 1 h^{-1} \text{Gpc}$  以上<sup>\*11)</sup>) においてガウス初期条件の元では見られない波数依存性の異常を示していた。

図2に最新のN体計算<sup>8)</sup> から彼らの結果を再現した。左図は、物質、ハローのパワースペクトル（上、中）と、これらの間のバイアス（下）を示す。各パネルには5つの異なる  $f_{nl}$  の値に対する結果が同時に描かれている。まず、上パネルには  $f_{nl}$  の影響はほとんど見られない。これは、非ガウス性が3点統計以上の効果であり、2点統計であるパワースペクトルは線形レベルでは影響を受けないことから理解できる。ところが、中央のハローの結果は全く違った様相を示している。波数  $k \sim 0.01 h \text{Mpc}^{-1}$  未満のところでは  $f_{nl}$  の値に応じて波数依存性が大きく異なる。その結果、式(4)で定義されるバイアスは、波数に対して強く依存する ( $f_{nl}=0$  の時はほとんど定数)。この効果は、「距離依存バ

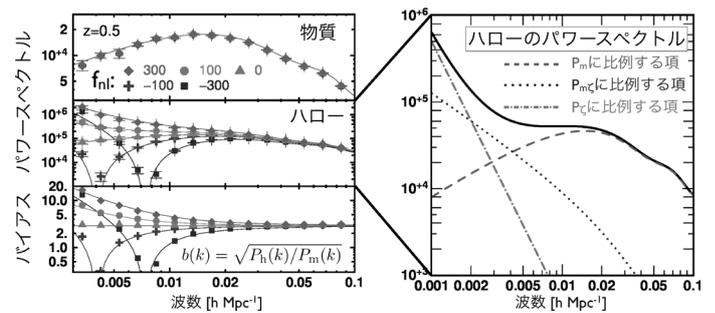


図2 左: N体計算から測定された距離依存バイアスの一例。<sup>8)</sup> 上から、物質、ハローのパワースペクトル、両者の間のバイアスを示す。異なる記号は異なる  $f_{nl}$  を持ったN体計算の結果、実線は式(8)の解析的模型。右: 式(8)の3項それぞれのハローパワースペクトルへの寄与。<sup>3)</sup>

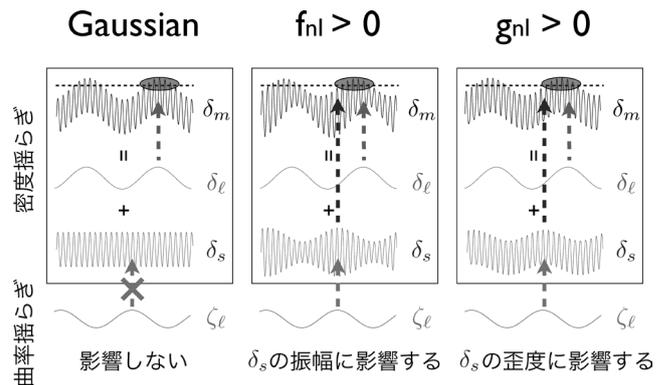


図3 ピーク・背景分離によるハローの数密度揺らぎの計算の概念図。  $\delta_m$  が水平破線を超えた領域にハローが形成される。非ガウス性が存在する場合には、ハローが集まる領域（楕円で囲まれた部分）が間接的に曲率揺らぎの影響を受ける。

イアス」として知られるようになり、次世代観測から宇宙の初期条件を探る上で最も有力なプローブと目されている。

波数に依存するバイアス、 $b(k)$  は以下のように解釈できる。ハローと物質の揺らぎの間に、波数依存性を許した線形関係、 $\delta_{h,k} = b(k)\delta_{m,k}$  を仮定し、逆フーリエ変換すると、

$$\delta_h(\mathbf{x}) = \int \tilde{b}(\mathbf{l}(\mathbf{y}-\mathbf{x})) \delta_m(\mathbf{y}) d^3\mathbf{y}, \quad (5)$$

となる（畳み込み定理）。ここで  $\tilde{b}$  は  $b$  の逆フーリエ変換で、 $b(k)$  が定数の時にはデルタ関数となる。これはつまり、バイアスに  $k$  依存性があると、ハローの密度揺らぎがその地点  $\mathbf{x}$  での物質の密度揺らぎだけでは決まらず、別の地点  $\mathbf{y}$  での揺らぎにも影響されること、すなわちバイアスの非局所性を意味する。では、何がハローの空間分布に非局所性を与えるのであろうか？ もう少し詳しく考察を進めよう。

ここではピーク・背景分離と呼ばれる手法を用いる。まず、図3に示した通り、密度揺らぎ  $\delta_m$  を長波長モード  $\delta_\ell$  と短波長モード  $\delta_s$  の和に分解しよう。前者を今興味のある宇宙論的大スケールの揺らぎ、後者をハローの大きさ程度の小スケールの揺らぎとし、前節の  $\delta_R$  を  $\delta_s$  と読み替える。図で水平方向は空間座標<sup>\*12)</sup>を示しており、縦軸方向が揺

<sup>\*10</sup> 時刻の指標として、光が我々に届くまでに受ける赤方偏移を用いる。  
<sup>\*11</sup>  $\text{Gpc} = 10^9 \text{pc}$ ,  $\text{Mpc} = 10^6 \text{pc}$  (パーセク) は年周視差により定められた距離の単位で、 $1 \text{pc}$  は約  $3 \times 10^{16} \text{m}$ 。また、 $h = H/(100 \text{km/s/Mpc})$  は無次元ハッブル定数。

<sup>\*12</sup> 厳密に言えばラグランジュ空間 (= 初期条件) を考えており、揺らぎは線形段階にあるとする。ハロー形成の運命は初期条件で既に決まっている。

らぎを表す。前節同様、密度揺らぎ  $\delta_m$  が水平破線で示された臨界密度  $\delta_c$  を超えた地点にハローができるとしよう。

ガウス初期条件の場合、定義から2つの異なるスケールの揺らぎは無相関である(図3左)。このときハローの形成が盛んな領域(図の楕円部)と  $\delta_c$  の極大値とが同期するため、ハローの数密度揺らぎ  $\delta_h$  は  $\delta_c$  に応答する。ガウス初期条件の場合には、 $\delta_c$  を介さずに曲率揺らぎ  $\zeta$  がハローの形成に入り込む余地はない。ここに非ガウス性の影響を加えてみよう。 $f_{nl}$  があると、長・短波長モード間に相関が生まれる(中)。 $\delta_s$  の振幅は曲率揺らぎの長波長成分  $\zeta_l$  に比例して場所毎に変更される。振幅が増幅された場所ではハローの形成が促進され、逆に振幅が小さい場所では抑制される。このお陰で、ハローの空間分布は本来見えないはずの曲率揺らぎに左右される。図からは、 $\delta_c$  のピークから少し離れた場所にハローがたくさん形成されることが読み取れるであろう。詳細は次節に譲るが、この効果は  $g_{nl}$  型の非ガウス性の場合にも見られる(右)。

この結果は、 $\delta_c, \zeta_l$  も小さいとして線形解析すれば

$$\delta_h(\mathbf{x}) = b_m \delta_m(\mathbf{x}) + b_c \zeta(\mathbf{x}), \quad (6)$$

という形にまとめられる。ここで、添字  $l$  は省いたが、逆に言えばこの式は十分大きいスケールでのみ成り立つ。係数  $b_m, b_c$  は質量関数の微分で与えられ、後者は  $f_{nl}$  に比例する。曲率揺らぎ  $\zeta$  に非ガウス性を仕込んでおくと、ハローの密度揺らぎが直接目には見えない原始の場  $\zeta$  に陽に依存するようになる、という訳だ。これがまさに先述の「バイアスの非局所性」の起源である。式(2)で議論したように、 $\zeta$  と  $\delta_m$  は大スケールで  $k^2$  だけ冪が異なる。従って、大スケールでは  $\zeta$  からの寄与が卓越し、これが波数に依存するバイアスとして  $N$  体計算の結果に現れたのだ。また、式(4)で単に  $b$  として定義したバイアスは、 $b_m$  と  $b_c$  という起源の異なる2つのバイアスを合わせたものと考えれば良い。

## 5. 複数成分を持つ場、高次結合への拡張

ここまでの  $f_{nl}$  型の原始非ガウス性の存在下での議論をより一般的なものに拡張しよう。<sup>3)</sup> 以下、著者が行った研究に基づき、多成分スカラー場によるインフレーション模型を念頭に置いた、複数の独立成分から成る原始揺らぎへの拡張を試みる。複数の独立な補助ガウス場  $\chi_n$  ( $n=1, 2, \dots, N$ ) を用意し、曲率揺らぎ  $\zeta$  に対して  $\chi_n$  が寄与する割合を  $\alpha_n$  (ただし、 $\sum_n \alpha_n = 1$ ) とする。また、一般性を保つため、我々はこれらの場の間に2次以上のあらゆる次数の非線形結合  $K_{nl}^{(i_1, \dots, i_N)} \prod_n \chi_n^{i_n}(\mathbf{x})$  を許し、曲率揺らぎ  $\zeta$  に加えておく。この模型は結合定数  $K_{nl}^{(i_1, \dots, i_N)}$  及び振幅  $\alpha_n$  をパラメータとして含み、これらを調整することで広範な模型群をカバーすることができる。

前節の議論を拡張し、それぞれの独立成分について長波長-短波長に分解して計算を進めると、結局は線形レベルでハローの数密度揺らぎは

$$\delta_h(\mathbf{x}) = b_m \delta_m(\mathbf{x}) + \sum_n b_{\chi_n} \chi_n(\mathbf{x}), \quad (7)$$

という形に落ち着く。原始非ガウス性  $K_{nl}^{(i_1, \dots, i_N)}$  の効果はバイアス係数  $b_{\chi_n}$  に現れ、これを通して原始揺らぎ  $\chi_n$  の痕跡がハローの空間分布に直接刻み込まれるということだ。単一成分しかない場合には、 $\chi_1 = \zeta$  から結合の次数に依らず式(6)を回復する。ただし、結果は同じでも結合の次数に応じて  $\zeta$  依存性の起源が異なることに注意したい。図3の議論を思い出すと、 $f_{nl}$  型の場合には短波長モード  $\delta_s$  の分散が場所毎に変わることがこの効果の起源だった。一方で、3次の  $g_{nl}$  型の結合がある場合には、図3右に示したように、分散ではなく歪度が  $\zeta_l$  の影響で局所的に変化する。より一般には、 $N$  次の結合由来の非ガウス性は、 $N$  次のキムラントを経由して、ハローの密度揺らぎに曲率揺らぎからの寄与を与える。このようにして、独立な場の数や結合の次数に依らず、原始非ガウス性の存在が宇宙の揺らぎの種となった曲率揺らぎ(さらにはその大本となっているガウス場  $\chi_n$ ) の痕跡をハローの分布に直接描き出すことが分かった。

## 6. 観測から何が測定できるか?

ここまで来れば容易くハローのパワースペクトルを計算できる。フーリエ空間で式(7)の2乗期待値を取ることで、

$$P_h(k) = b_m^2 P_m(k) + 2r_{MF} b_m b_c P_{m\zeta}(k) + b_c^2 P_\zeta(k), \quad (8)$$

となる。ここで式(7)に現れた係数を

$$b_c \equiv \sqrt{\frac{\sum_n \alpha_n b_{\chi_n}^2}{\sum_n \alpha_n b_{\chi_n}^2}}, \quad r_{MF} \equiv \frac{\sum_n \alpha_n b_{\chi_n}}{\sqrt{\sum_n \alpha_n b_{\chi_n}^2}} \quad (9)$$

と再定義し、3つの寄与の和の形にまとめておいた(図2右)。3項は全く異なる波数依存性を持つため、観測されたパワースペクトルを分解して、それぞれの項の大きさを評価することができる。これらの項は以下のような意味を持つ。

- ・  $P_m$  項: 背景の物質分布をトレースする寄与で、ガウス初期条件の時はこの項しか存在しない。ハローの質量に応じて係数  $b_m$  の大きさが変化する。
  - ・  $P_\zeta$  項: 原始非ガウス性によりハローの分布が隠れた曲率揺らぎの場  $\zeta$  に陽に依存することで生まれた項。パラメータ  $b_c$  は非ガウス性の大きさを反映する。
  - ・  $P_{m\zeta}$  項: 上記2つの共相関。パラメータ  $b_m, b_c$  に加えて、パラメータ  $r_{MF}$  がその大小や符号をコントロールする。
- さて、パラメータ  $r_{MF}$  及び  $b_c$  についてももう少し深く考察を進めよう。まず  $r_{MF}$  だが、その定義(9)から絶対値は必ず1以下である(Cauchy-Schwarzの不等式)。面白いことに、この不等式は上で述べた須山・山口不等式(3)の高次の場合への拡張となっており、観測から直接測定可能なパラメータ  $r_{MF}$  によって等号の成否をテストできる。より具体的には、 $r_{MF}$  の違いは図4のような形で現れる。左は単一の

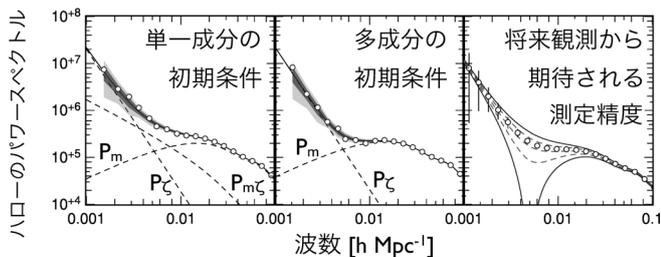


図4 単一自由度の初期条件(左)と複数自由度の初期条件(中)に基づくハローのパワースペクトルの違い。左図と中央図はN体計算(丸印)と式(8)の予言(実線)を示し、破線は式(8)の3つの項それぞれの寄与を表す。右図は将来観測から期待される測定精度の一例(誤差棒)。赤方偏移1において質量  $5 \times 10^{13} h^{-1} M_{\odot}$  程度のハローに住む数密度  $10^{-4} h^3 \text{Mpc}^{-3}$  の銀河を想定し、体積  $100 h^{-3} \text{Gpc}^3$  に及ぶサーベイを仮定。線は異なる  $r_{\text{MF}}$  の値に対する理論予言(上から、 $r_{\text{MF}} = 1, 0.5, 0, -0.5, -1$ )で、2本の実線は単一成分の、3本の破線は複数成分の場合。<sup>3)</sup>

( $r_{\text{MF}} = 1$ )、中央は複数の( $r_{\text{MF}} = 0$ )自由度を持つ初期条件のもとでのハローパワースペクトルを示す。いずれの場合も実線で示された式(8)は丸印のN体計算の結果をよく説明しているが、 $r_{\text{MF}} = 0$ の中央図では  $P_{\text{mc}}$  項が無い場合、大スケールに向かうと左図と比べて急激に  $P_{\text{h}}(k)$  の傾きが変化する。このように  $r_{\text{MF}}$  は距離依存バイアスの「形」を決めるパラメータになっており、右図ではその値を様々に変えた場合の理論予測と将来観測から期待されるパワースペクトルの測定精度を示している。

これまでの考察は、 $r_{\text{MF}}$  の測定を通じてモデルの詳細に依らずに一自由度と多自由度のインフレーションモデルを見分けられる可能性を示している。逆に、パワースペクトルの形状は場の数に関する情報しか有していない、とネガティブな見方ができるかもしれない。もう一つのパラメータ  $b_{\zeta}$  は非ガウス性の「大きさ」を反映した量になっているが、果たしてこれがどのような非線形結合に由来するのかわからない。実は複数の種族の銀河を観測することで低次の模型( $f_{\text{nl}}$ 型)を高次の模型と見分けることが可能になる。図5はシミュレーションから測定された  $b_{\zeta}(b_{\text{m}} - 1)$  で規格化したものをバイアスの大きさ  $b_{\text{m}}$  の関数として書いたものである。記号は様々な時刻において同定した様々な質量を持つハローの解析結果を示し、単純な質量関数を仮定した場合の理論予言を線で示した。縦軸の値に注目すると、左図の  $f_{\text{nl}}$  型の模型ではほぼ一定値になる一方で、右図の  $g_{\text{nl}}$  型の場合はバイアス  $b_{\text{m}}$  に対する強い依存性が見取れる。左右のパネルとも、この関係は時刻にほとんど依存しない。

2つの違いは距離依存バイアスの異なる起源から来ている。以前の議論を振り返ると、 $f_{\text{nl}}$  型の場合には短波長モードの分散が、 $g_{\text{nl}}$  型の場合はその歪度が、それぞれ長波長モードの影響を受けて場所毎に変化することがこの起源であった。ハローの数密度はほぼ  $n_{\text{R}} = \delta_{\zeta}/\sigma_{\text{R}}$  だけで決まり(質量関数の普遍性)、 $\delta_{\zeta}$  による底上げ効果 ( $b_{\text{m}}$ ) と分散  $\sigma_{\text{R}}$  の変化 ( $b_{\zeta}$ ) は共に  $n_{\text{R}}$  を通じて現れる。よって、 $f_{\text{nl}}$  型の場合には2つのパラメータの間に関係が付き、 $b_{\zeta}/(b_{\text{m}} - 1)$  という組み合わせがハローの質量と時間に対して近似的に定数と

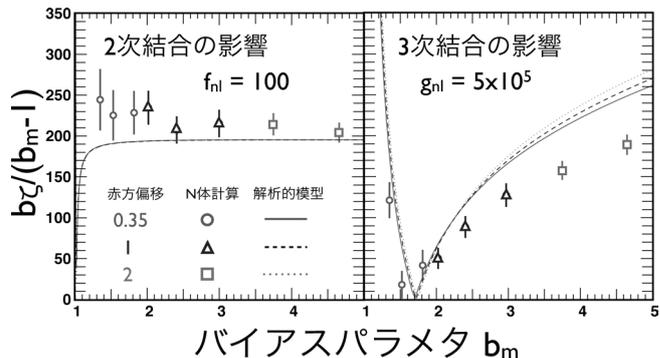


図5 バイアスパラメータ間の整合性関係。2次 ( $f_{\text{nl}}$  型) と3次 ( $g_{\text{nl}}$  型) の非ガウス初期条件の場合の結果をそれぞれ左図及び右図に示す。横軸は通常のバイアスパラメータ  $b_{\text{m}}$  を、縦軸は  $(b_{\text{m}} - 1)$  で規格化された距離依存バイアスの大きさ  $b_{\zeta}$  を示す。異なる記号はN体計算により異なる時刻(赤方偏移)において同定された様々な質量を持つハローを用いた測定結果で、線は対応する赤方偏移での理論予言。<sup>3)</sup>

なる。一方で、3次以上の高次の非ガウス性の場合にはこのような関係は存在しない。このバイアスパラメータ間の一種の整合性関係を利用することで、図5のようなダイアグラム上に複数の種族の銀河の解析結果をプロットし、それらの  $y$  座標の値に有為な違いが見つかれば  $f_{\text{nl}}$  型模型を棄却できる。このテストは様々な赤方偏移における様々な種族の銀河(あるいは銀河団)の解析結果を単純に並べるだけで可能であるため、複数の将来計画の存在はまさに好都合である。

## 7. まとめと残された理論的課題

本稿では、局所型の非ガウス原始揺らぎから出発する大規模構造の形成シナリオを調査し、形成されるハローの空間分布について議論した。面白いことに、曲率揺らぎの段階で非ガウス性を入れておくと、現在の宇宙では直接見えないはずの  $\zeta$  がハローの空間分布を通して現れることが分かった。この特徴を用いてパワースペクトルからバイアスの形状を決めるパラメータ  $r_{\text{MF}}$  及び非ガウス性の大きさ  $b_{\zeta}$  を測定することでそれぞれ、「我々の初期条件は単一成分か複数成分か?」、「非ガウス性は2次結合由来か? 高次由来か?」といった興味深い問いに答えられる可能性を指摘した。

赤方偏移1付近から先の深宇宙を、全天にわたって探査するような野心的な観測計画が実現するであろう次世代に備えて、進展が望まれる理論的課題を列挙して本稿の締めくくりとしたい。本稿では銀河とハローを同一視したが、場合によってはこの違いが問題になるかもしれない。例えば、銀河がある特殊な合体・進化史を持つハローを選び好んで生息すると、非ガウス性の見え方が違ってくることが指摘されており、大きな系統誤差の要因に成りうる。<sup>9)</sup> 次に、多点統計の理論整備も重要であろう。ここで紹介した解析は2点統計レベルの予言に留まっているが、非ガウス性を特徴づける最低次の統計量が3点統計であることから分かるように、多点統計が原始非ガウス性をテストする

上でより重要な情報を提供してくれることは間違いない。<sup>\*13</sup>

次世代観測からより多くの情報を引き出す下地を整えるべく、理論研究は着々と進展を見せている。大規模構造という現在の宇宙の姿は、CMBの観測から見えるものとは違った初期宇宙の新たな一面を映し出してくれるかもしれない。

#### 参考文献

- 1) 向山信治：日本物理学会誌 **67** (2012) 85.
- 2) 日影千秋：日本物理学会誌 **67** (2012) 108.
- 3) T. Nishimichi: JCAP **1208** (2012) 037.
- 4) T. Suyama and M. Yamaguchi: Phys. Rev. D **77** (2008) 023505.
- 5) C. Hikage and T. Matsubara: arXiv: 1207.1183; Mon. Not. R. Astron. Soc. **425** (2012) 2187.
- 6) S. Matarrese, L. Verde and R. Jimenez: Astrophys. J. **541** (2000) 10.
- 7) N. Dalal, O. Doré, D. Huterer and A. Shirokov: Phys. Rev. D **77** (2008) 123514.
- 8) T. Nishimichi, A. Taruya, K. Koyama and C. Sabiu: JCAP **1007** (2010) 002.
- 9) B. Reid, L. Verde, K. Dolag, S. Matarrese and L. Moscardini: JCAP **1007** (2010) 013.

<sup>\*13</sup>  $f_m$  型の模型については既にその有効性が示されている。<sup>8)</sup>

#### 非会員著者の紹介

西道啓博氏： 専門は観測的宇宙論。特に、ダークエネルギー、インフレーションのテストのための、宇宙の大規模構造の理論構築。

(2012年11月15日原稿受付)

### Effects of Primordial Non-Gaussianities on the Large Scale Structure Formation

Takahiro Nishimichi

abstract: Primordial non-Gaussianities, if detected in next-generation observational projects, can be a smoking gun to understand the inflationary physics. We focus on the large scale structure formation in the presence of primordial non-Gaussianities, and explain some recent theoretical progress. We show that measurements of the scale-dependent bias between the spatial distribution of galaxies and the underlying matter density field open a unique opportunity to test the Suyama-Yamaguchi inequality, which allows us to distinguish the generation mechanisms of cosmic fluctuations based on a single-component scalar field from models with multiple fields.

## 最近の研究から

# カリウムをドーピングしたグラファイトに無磁場下で出現するランダウ準位

近藤 剛弘 <筑波大学数理物質系 305-8573 つくば市天王台1-1-1 >  
郭 東輝 <筑波大学数理物質系 305-8573 つくば市天王台1-1-1 >  
中村 潤児 <筑波大学数理物質系 305-8573 つくば市天王台1-1-1 >

グラフェンのキャリアは質量ゼロのディラック・フェルミオンであり、磁場中で相対論的なランダウ準位を示すことが知られている。一方、我々は外部磁場をかけなくても、カリウムをドーピングしたグラファイト表面に、質量ゼロのディラック・フェルミオン特有のランダウ準位が生じることを極低温走査トンネル分光 (STS) 計測で発見した。この実験結果とランダウ準位の発現メカニズムの可能性を述べる。

## 1. はじめに

グラフェンは炭素原子が蜂の巣格子状に並んだ2次元の単原子層の物質である。それぞれの炭素原子は  $sp^2$  混成軌道で隣接炭素原子と結合しており平面構造を形成している。混成軌道を形成しない炭素の  $2p_z$  軌道の電子が  $\pi$  共役系と呼ばれる共鳴安定化した  $\pi$  バンドを形成し、電気伝導を担っている。グラフェンの K, K' 点周りの  $\pi$  バンドの分散関係は自由電子とは異なり近似的に波数の一次式で表されるため、グラフェンの電子の速度は波数にかかわらず常に一定となる。この線形の分散関係が、グラフェンにおける

様々な特異な電子物性の要因である。<sup>1)</sup> グラフェンのフェルミ準位付近の電子状態は質量ゼロの粒子であるニュートリノと同じワイル方程式で記述されることが知られている。<sup>2-4)</sup> この方程式がディラック方程式で静止質量をゼロにした場合に相当するために、グラフェンのキャリアはディラック・フェルミオンと呼ばれており、K 点や K' 点における線形バンドが交差する点がディラック点と呼ばれている。<sup>1, 5-7)</sup>

ディラック・フェルミオンは磁場中で特異な量子準位を形成することが知られている。一般に磁場中の荷電粒子は速度と垂直なローレンツ力を受けるために円運動 (サイクロトロン運動) をする。量子力学ではこの円運動が量子化

本記事の長さは通常の「最近の研究から」欄記事の規程を超過しておりますが、会誌編集委員会の判断によりこのまま掲載しています。

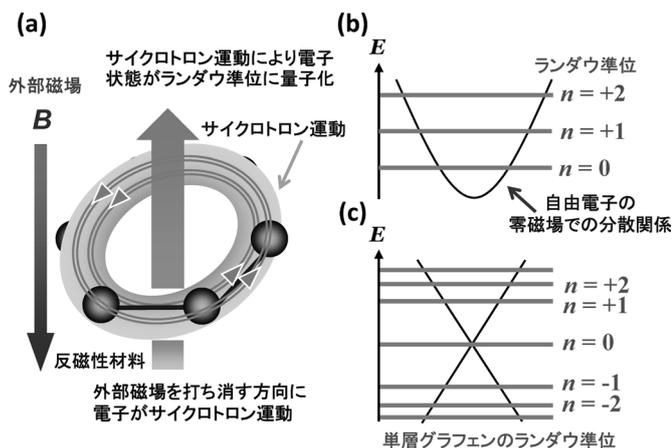


図1 (a) 反磁性材料に垂直に磁場を印加した際に現れるランダウ準位の概念図。(b) 自由電子の零磁場での分散関係とランダウ準位の概念図。(c) 単層グラフェンのディラック点付近のバンド図とランダウ準位の概念図。

され、ランダウ準位という離散的なエネルギー準位に電子状態が分裂する。通常の2次元自由電子における外部磁場  $B$  のもとでのランダウ準位は次のようになる。

$$E_n = \hbar\omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1)$$

ここで  $\omega_c = eB/m$  はサイクロトロン振動数であり、 $\hbar$  はプランク定数、 $e$  は電気素量、 $m$  は電子の質量、 $n$  はランダウ準位のラベル (0以上の整数) である。一方、グラフェンに垂直に磁場を印加した場合に出現するランダウ準位は次のように表される。<sup>1,2,6-8)</sup>

$$E_n = \text{sgn}(n) \sqrt{2\hbar v_F e B |n|}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2)$$

$\text{sgn}(n)$  は  $n$  が正なら  $+1$ 、負なら  $-1$ 、0なら  $0$  を返す関数である。正と負の両方にランダウ準位が存在し、ディラック点に現れる  $n=0$  のランダウ準位は磁場によらず常にエネルギーが0になるという特徴がある。また、隣り合うランダウ準位の間隔が、自由電子では  $Bn$  に比例するのに対し、ディラック・フェルミオンでは  $\sqrt{B|n|}$  に比例するという特徴がある。この特徴のためにグラフェンでは外部印加磁場を弱くしてもランダウ準位の間隔がなかなか狭まらず、ランダウ量子化を反映して出現する特異な量子ホール効果が室温でも観測できることが知られている。<sup>9,10)</sup> なお、グラフェン2枚で構成される物質であるバイレイヤーグラフェンでは  $B\sqrt{n(n+1)}$  に比例し、キャリアが“質量ゼロでないディラック・フェルミオン (massive Dirac Fermions)” と呼ばれているため、区別を明確にするために単層グラフェンで見られるディラック・フェルミオンの方は“質量ゼロのディラック・フェルミオン (massless Dirac Fermions)” とも呼ばれている。<sup>8)</sup>

最近、我々は外部磁場をかけなくても、カリウムをドーブしたグラファイト表面に質量ゼロのディラック・フェルミオン特有のランダウ準位が生じることを極低温走査トンネル分光 (STS) 計測により見出した。<sup>11)</sup> 観測されたランダウ準位は251 Tもの高磁場をグラフェンに垂直に印加し

た場合の応答に対応するものであった。質量ゼロのディラック・フェルミオン特有のランダウ準位の出現は、カリウムをドーブしたグラファイト試料にグラフェンの性質が現れたことを示している。

無磁場下でランダウ準位が出現する現象はこれまでに、Pt(111) 表面上に成長したグラフェンに現れる歪んだグラフェンナノバブル<sup>12)</sup> や、Ru(0001) 表面上のグラフェンの歪んだグラフェンナノバブル<sup>13)</sup> や、グラファイトの歪構造<sup>14)</sup> SiC上にCVD成長したグラフェンの歪構造<sup>15)</sup> におけるSTS計測により報告されているが、いずれも特異的な歪によって生じた擬磁場によって形成されるランダウ準位<sup>16)</sup> として解釈されている。我々が見出したランダウ準位の発生個所にはそのような歪が存在していないため、ランダウ準位形成の起源は歪以外にもあると考えられる。そこで我々は、観測したランダウ準位の発生要因は最隣接炭素原子間のホッピングの摂動によって生じたベクトルポテンシャルによるものと考え、カリウムのないドメインの境界部分における炭素のオンサイトポテンシャルの勾配に起因するとしてドメインモデルを筑波大学の岡田晋准教授と共同で新たに提案した。<sup>11)</sup> 本記事ではこれらの内容を具体的に紹介する。

## 2. カリウムをドーブしたグラファイト

カリウムがグラファイト層間に侵入 (インターカレート) した試料はアルカリ金属-グラファイト層間化合物 (Alkali metal-Graphite Intercalation Compounds, GICs) と呼ばれる物質の一種であり、長年にわたり基礎的な物性から応用に至るまで幅広く研究が行われてきている。<sup>17)</sup> カリウムはグラフェン層間において単原子層を形成し、グラフェンとカリウム単原子層を順番に繰り返した層状化合物である  $\text{KC}_8$  を形成する。カリウム量が少ない場合はカリウム単原子層間に挟まれるグラフェン層の数が増加し、ステージ構造と呼ばれる構造を持つ GICs を形成する。<sup>17)</sup> また、この場合にはカリウムの層は完全な単原子層を作らずに Daumas-Herold ドメインと呼ばれるドメインを形成することが多く、このドメインによってステージ構造が形成されることが知られている。<sup>18,19)</sup> いずれの場合もカリウム原子からグラファイトの  $\pi^*$  バンドとインターレイヤーバンドと呼ばれるバンドに電荷移動が起こることが知られている。<sup>17,20-23)</sup> GICs は層間の相互作用が層内の原子間の相互作用に比べて弱く、各炭素層の  $\pi$  共役構造は保たれている。<sup>17)</sup> 実際、 $\text{KC}_8$  の層間のカップリングは弱く、最近の  $\text{KC}_8$  での角度分解光電子分光計測では、 $\pi$  バンドと  $\pi^*$  バンドの線形分散関係が K 点近傍で観察されるという報告がなされている。<sup>24)</sup> 同報告では、観測された線形分散関係はグラフェンのディラック・フェルミオンによるものであるとされている。<sup>24)</sup> アルカリ金属がグラファイトにインターカレートしたことでグラフェンの性質が出現する結果は興味深く、局所電子状態や構造がどのようになっているのか

に興味を持たれるところである。我々はこのような背景からカリウムをドーブ（グラファイト層間に部分的にインターカレート）したグラファイト（K-HOPG）を作成し、局所電子状態や表面の原子構造を極低温走査トンネル顕微鏡（STM）を用いて原子レベルで観察した。

我々が今回測定に用いたK-HOPG試料と測定手法について簡単に述べる。まず、高配向性熱分解グラファイト（HOPG）と呼ばれるグラファイト基板（ZYA grade, PGX 04, Panasonic）を大気中で劈開した後、超高真空中で900 Kに加熱することで脱ガスを行い清浄なグラファイト基板を得た。その後、室温に保った清浄HOPGにカリウム原子を真空蒸着させ、室温で1時間放置した後に5分間 $800 \pm 30$  Kでアニールを行った。HOPG上に真空蒸着したカリウム原子は193 K以上の温度では自然にグラファイトの内部にインターカレートすることが知られており、<sup>25)</sup> 表面のカリウム原子は500 K付近で脱離することが知られている。<sup>26)</sup> 実際に我々は昇温脱離計測により表面からカリウムが500 Kで脱離することを観察しており、<sup>27)</sup> ラザフォード後方散乱計測により、800 Kのアニール処理をした後の試料の内部にはカリウム原子がドーブされていることを確認している。<sup>11)</sup> 作成した試料は液体ヘリウムを用いて4.6 Kに冷却し、STM及びSTS測定を行った。STMは株式会社ユニソクのUSM-1500を用い、STM探針にはPt/Irを用いた。ロックイン検波法により $dI/dV$ 信号を取得することでSTSスペクトルを取得した。

### 3. カリウムフリードメインの形成

K-HOPG表面の典型的なSTM像を図2aに示す。清浄なHOPGでは出現しない不規則な境界を持つ形の比較的暗い領域が多数あることがわかる。明るい領域と暗い領域の境界部分を原子分解能で観察したSTM像が図2bである。境界部分全体に規則的な間隔で連続的に並んだ輝点があることがわかる。図中のA-E間のラインプロファイル（図2c）の解析から、炭素原子に由来する連続した周期的な凹凸が輝点を構成しており、これが境界領域においても存在することが明らかとなった。このため、図2aの明暗のコントラストは、グラファイトの最表面グラフェン層の幾何学的な高さの違いを反映した部分であることが示唆される。しかしながら、一般的にSTM像は原子構造だけではなく、局所電子状態密度も強く反映して像のコントラストが形成されることが知られており、<sup>28)</sup> コントラストが本当に高さの違いに対応しているとは限らない。そこで我々はラインプロファイルの凹凸間距離などを基にSTM像を解析し、測定された高さの校正を行った（STM像は2次元投影像であるため、グラフェンシートが曲がって高さに違いが生じている場合には面内の炭素原子同士の距離が縮んだようなSTM像として見えることを利用し、様々な歪を仮定し高さの校正を行った）<sup>11)</sup>（図2c右軸）。この結果、図2bのSTM像で明るく観察された部分は、暗く観察される部分

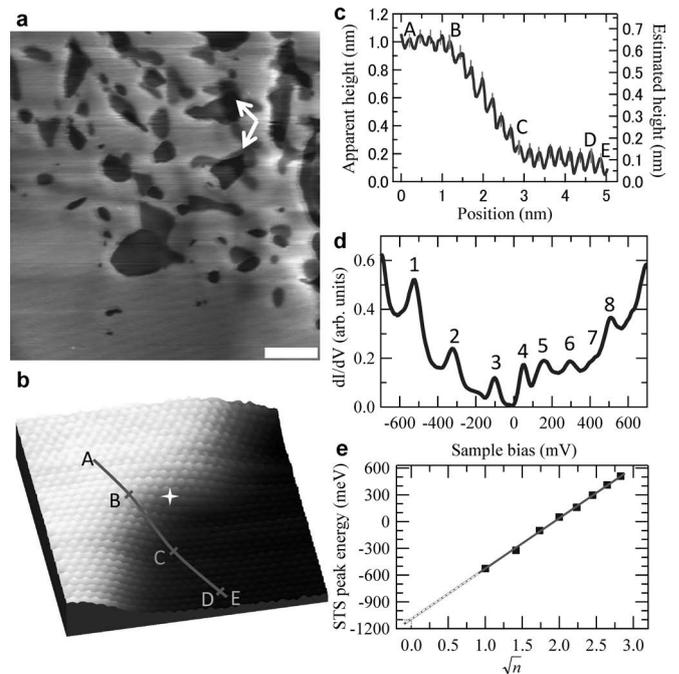


図2 (a) STMトポグラフィー像（定電流モードで測定した像）（試料バイアス $V_s = -100$  mV, トンネル電流 $I_t = 2.0$  nA,  $315 \times 336$  nm<sup>2</sup>）。スケールバーの長さは53 nmである。(b) K-HOPGの明るい領域と暗い領域の境界部分で測定したSTMトポグラフィー像（ $V_s = -100$  mV,  $I_t = 320$  pA,  $6.28 \times 6.72$  nm<sup>2</sup>）。(c) bで示したA-E間のラインプロファイル。(d) bの十字印の場所で測定したSTSスペクトル。(e) STSピークエネルギー位置をピークの順番の $n$ の平方根： $\sqrt{n}$ でスケールした結果。エラーバーはそれぞれの点で $\pm 20$  meV以下である。（フルカラー口絵参照。）

に対して0.53–0.60 nm程度高いということがわかった。同様にして他の領域についても解析をした結果、暗い領域は高さが0.2–0.6 nm、広さが8.0–60 nm程度の分布を持っていることがわかった。また、局所電子状態密度の大きさに直接影響を与える試料バイアス条件を $-300$ から $+300$  mVの範囲で変えても、STM像のコントラストは変化をせずに同様のSTM像が観測されることもわかった。以上の結果から、STM像の明暗のコントラストは局所電子状態密度の違いを反映した結果ではなく、幾何学的な高さの違いに由来したものであり、最表面のグラフェン層が無傷で且つ高さの違いを持った領域を作っている結果を示したものであることが明らかとなった。

図2aと類似した模様のSTM像はリチウム原子をグラファイト（HOPG）にインターカレートさせた試料のSTM測定でも報告されており、部分的にリチウムがインターカレートしていない領域がSTM像の暗い部分を構成しているとして解釈されている。<sup>29)</sup> グラフェンレイヤー間の距離は、アルカリ原子がインターカレートすると大きくなることが知られており、<sup>17)</sup> 上述の我々の原子分解能でのSTM像の解析結果で定量的に明らかとなった明暗領域での高さの違いや、K-HOPG内部にはカリウムがドーブされているという前節で記載したラザフォード後方散乱計測の結果を合わせて判断すると、図2aのSTM像中の明るい部分はカリウムがインターカレートしている部分に対応し、暗い部分はカリウムが下層に存在しない“カリウムフリー”のドメイ

ンがある部分に対応すると考えられる。この描像は後で述べる STS 結果や第一原理密度汎関数計算 (DFT) 結果とも矛盾せずに一致することがわかっており、K-HOPG 表面はカリウムフリーの谷構造を持つドメインが不均一に分布している表面であることが明らかとなった。

図 2a の矢印で示すように暗い領域の中をみると、さらに暗い領域が存在する箇所があり、不規則な形を形成している。これらの領域はカリウムフリーのドメインがより深い層にも存在している部分であると考えられる。表面上の様々な場所で取得した STM 像を解析した結果、このような暗い領域の重なった部分は頻繁に観測され、ドメイン同士が重なる傾向にあることがわかった。<sup>11)</sup> これはインターカレートしたカリウムが電荷移動を起こしたために  $K^{\delta+}$  となり、電子を供与されたカリウムの直上と直下の炭素が負に帯電し、両者の間で静電的な相互作用が生じて安定化するために、層状構造が局所的に形成される結果を反映して起きた重なりであると考えられる。なお、図 2a のような STM 像は測定開始時から観測されており、測定の際の探針のスキャンが引き起こした特異な現象によって形成した構造であるといった可能性は排除できる。また、4.6 K で同じ場所を何度も測定していると、探針のスキャンの影響なのかカリウムの熱拡散によるものかはわからないが、STM 像中に見られる暗い領域の境界部分の構造が数時間をかけてゆっくりと変化する興味深い様子が観測されているが、<sup>11)</sup> 本筋と離れるので割愛する。

#### 4. 無磁場下で K-HOPG に出現するディラック・フェルミオン特有のランダウ準位

図 2b の十字印の位置において STS 測定を行った結果を図 2d に示す。この図の縦軸の  $dI/dV$  は測定位置における局所電子状態密度に対応しており、試料バイアス 0 V がフェルミエネルギー、正バイアスが非占有準位、負バイアスが占有準位に対応している。<sup>28)</sup> スペクトルには 8 つのピークが試料バイアス  $-700$  mV から  $+700$  mV の間に現れている。これらの量子化された準位は 1 節で述べたような 2 次元物質に垂直な磁場をかけた場合に生じるランダウ準位と類似している。もしランダウ準位であるとする、式 (1) や式 (2) で示したようにピークのエネルギー間隔とランダウ準位のラベル  $n$  との間に線形関係が成り立つことになる。具体的には、2 次元電子ガスのランダウ準位の場合はエネルギー間隔が  $n$  に比例し、単原子層グラフェンの場合は  $\sqrt{n}$  に比例し、バイレイヤーグラフェンの場合は  $\sqrt{n(n+1)}$  に比例する。<sup>8)</sup> これらの全ての可能性を図 2d で見られたピークのエネルギー間隔に対して検証した結果、左から 1 つ目の STS ピーク ( $-525.5$  mV) を  $n=1$  とし、且つエネルギー間隔を  $\sqrt{n}$  でスケールした場合に、図 2e で示したような最も良い線形関係となるフィッティング結果 (Pearson's  $r$  is 0.9993) が得られることがわかった。すなわち式 (2) で表される単原子層グラフェンのランダウ準位が、K-HOPG に

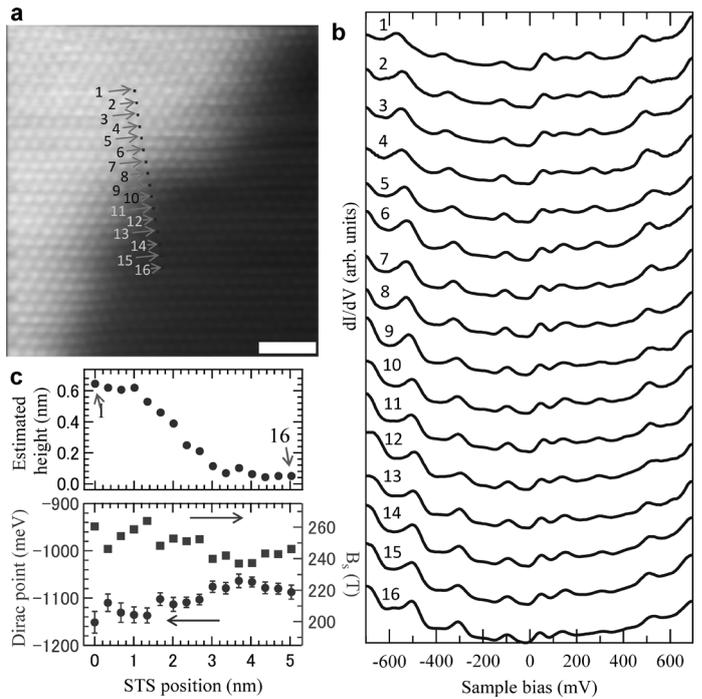


図 3 (a) STM トポグラフィー像 ( $V_s = -100$  mV,  $I_t = 320$  pA,  $6.28 \times 6.72$  nm<sup>2</sup>). スケールバーの長さは 1.1 nm である。(b) a の各番号の位置で測定した STS スペクトル。(c) 上のパネル: STS 測定を行った位置の高さ (校正後の値)、下のパネル: STS スペクトルの解析から得られた各位置におけるディラック点 (左軸) と擬磁場  $B_z$  の大きさ (右軸)。

おいて無磁場下にもかかわらず現れることがわかった。単原子層グラフェンの特徴が出現することは  $KC_8$  での角度分解光電子分光の報告<sup>24)</sup> と一致しており、層間のカップリングが無視できるほど弱くなっていることが示唆される。

図 2e の直線を外挿して  $n=0$  のランダウ準位であるディラック点のエネルギーを見積もると、 $-1.11$  eV であることがわかった。フェルミ準位よりも負にディラック点がシフトしているのは、カリウム原子から炭素層に電荷移動が起きたことで解釈できる。たとえば、 $KC_8$  の角度分解光電子分光測定ではディラック点が  $-1.35$  eV シフトすることが報告されている。<sup>24)</sup> また、SiC 上のグラフェンにカリウムを吸着させた系では、ディラック点がカリウム蒸着量とともに負にシフトしていき、 $-0.7$  eV シフトした場合にはユニットセル当たり 0.035 e の電子がグラフェンにドーブされているとして解釈されている。<sup>30)</sup> 図 2e の直線の外挿から得られたディラック点  $-1.11$  eV は、 $KC_8$  の  $-1.35$  eV に近い値であり、我々の測定した K-HOPG の表面付近ではカリウムの原子密度が高いことが示唆される。このことは STM 像において支配的に観察される明るい領域が、カリウム原子がインターカレートしている領域であるということを裏付ける結果となっている。

質量ゼロのディラック・フェルミオン特有のランダウ準位は図 2 の場所以外でも様々な暗い領域のふちの近くで頻繁に観測された。<sup>11)</sup> 図 3 は図 2 の領域の場合について、STS スペクトルの場所依存性を計測した結果である。全てのスペクトルが図 2d (図 3b の No. 8) と同じ特徴を示して

おり、明るい領域と暗い領域の両方において量子化された準位が現れている。また、どの STS 結果も図 2e と同様に  $\sqrt{n}$  でのスケールが最も良い線形関係となるフィッティング結果をもたらした。すなわちどの点においても質量ゼロのディラック・フェルミオン特有のランダウ準位が現れていることがわかった。図 2e と同様に外挿から見積もったディラック点の位置を図 3c に示す。ディラック点は暗い領域では  $-1.08$  eV、明るい領域では  $-1.14$  eV であり、明るい領域と暗い領域との間で  $60$  meV の差があることがわかった。すなわち、明るい領域のディラック点は暗い領域よりも低いエネルギーにシフトしていることがわかった。このようなディラック点の違いは、境界付近における  $K^{\delta+}$  がインターカレートした部分のポテンシャルと  $K^{\delta+}$  がフリーな部分のポテンシャルの差に相当すると考えられる。 $K^{\delta+}$  がインターカレートした領域では、局所的に高い密度となった電子によって  $K^{\delta+}$  のクーロンポテンシャルがスクリーニングされるスクリーニング効果<sup>31)</sup> が起きており、この結果  $60$  meV という小さいポテンシャルの違いのみが境界付近におけるポテンシャルの差として現れていると考えられる。ランダウ準位はこのポテンシャルを感じていることになる。

図 2d の STS スペクトルには、ランダウ準位のピーク以外にも放物線状のバックグラウンドがあり、清浄グラファイトで観測される  $\pi$  と  $\pi^*$  バンドの裾部分のようにフェルミ準位 ( $E=0$ ) を最小値とした対称性の良い形をしている。これは軸を  $(dI/dV)/(I/V)$  に変化させても残るため、計測上のバックグラウンドではなく、局所電子状態密度に含まれる本質的なバックグラウンドである。このバックグラウンドは  $\pm 63$  meV で特徴的な変化が見られないため、エレクトロン-フォノンカップリングが介在するトンネル電流コンダクタンスの増加<sup>32)</sup> では解釈できない。この放物線のバックグラウンドはカリウムフリーのドメインや、サブサーフェスのグラファイト層の  $\pi$  と  $\pi^*$  バンドを反映したものであると考えられる。実際、K-HOPG 表面ではバンドギャップや、清浄グラファイトでの STS スペクトルと同様の形の放物線など、異なるタイプの STS スペクトルが場所に応じて観測されており、暗い領域の中心部分付近では放物線形状のスペクトルが、境界部分から遠く離れた明るい領域ではバンドギャップを持つスペクトルが頻繁に観測されることがわかっている。<sup>11)</sup> これらの様々な STS スペクトルの形状は、測定位置に依存しており測定順番には依存していないため、STM 探針の変形などといった計測上の問題ではない。バックグラウンドで現れている  $\pi$  と  $\pi^*$  バンドの放物線形状はフェルミ準位に最小値があり、ディラック点が大きくシフトしているランダウ準位の場合とは対照的である点が興味深い。この不均一な特徴は、グラファイトの電子状態が  $K^{\delta+}$  によって局所的に大きく変調されていることを意味している。

## 5. 擬磁場形成の起源

一般的に、ランダウ準位は外部磁場に対する応答として形成される電子準位である。我々の計測では K-HOPG において外部磁場を印加していないにもかかわらずランダウ準位が出現している (図 2, 3)。図 2e の直線の傾きを、式 (2) を用いて解析すると、今回観測されたランダウ準位がどのくらいの外部磁場  $B$  の応答に相当するかを見積もることができる。この結果、フェルミ速度をグラフェンの値<sup>1)</sup> の  $1.0 \times 10^6$  m s<sup>-1</sup> と仮定すると磁場の値は  $251$  T と見積もられることがわかった。同様にして図 3b のスペクトルを解析して  $B$  の場所依存性を見積もった結果、図 3c の右軸に  $B_s$  として示す通り、 $236$  から  $264$  T の値を示すことがわかった。これらの磁場の値は、外部からの定常的な印加磁場として達成できる世界最高磁場の値が米国立強磁場研究所の  $45$  T であること<sup>33,34)</sup> を考えると、この値よりもさらに 5 倍以上大きな強磁場であることがわかる。図 3c にあるとおり、 $B_s$  が大きいときにディラック点が深くなる傾向があるが、これはランダウ準位が観測される K-HOPG 上の他の場所での STS 解析結果でも同様の傾向であった。<sup>11)</sup> ドープ量が多い箇所 (ポテンシャルが低いカリウムのインターカレートした領域) が高い磁場を与えていることを示唆している。

理論計算では、強結合近似においてグラフェンを構成する 1 つの炭素原子とその最隣接の 3 つの炭素原子との間のホッピングが非等価になると擬磁場が発生することが示されている。<sup>35-40)</sup> 具体的には、炭素間の混成軌道への摂動が実効的なゲージ場のベクトルポテンシャルをもたらし、このゲージ場が擬磁場をもたらすとされている。また、炭素間のホッピングの摂動は、グラフェンの屈曲や特異的な歪などの構造の不規則性があると生じることが理論的に提示されている。<sup>35-40)</sup> したがって、外部磁場を印加していない K-HOPG 表面で観測されたランダウ準位は、このような炭素原子間のホッピングの非等価性由来する擬磁場によって引き起こされたと考えられる。炭素原子間のホッピングの非等価性をもたらした起源に関しては次の 2 つのモデルが考えられる。i) “K-HOPG 表面の歪や凹凸による炭素原子間のホッピングの非等価性”、ii) “カリウムフリーのドメインのふちにおけるオンサイトポテンシャルの勾配に起因する炭素原子間のホッピングの非等価性”の 2 つである。

これらの 2 つのモデルを検証するために、我々は筑波大学の岡田晋准教授とともにカリウムが部分的にインターカレートしたバイレイヤーグラフェンの DFT 計算を行った。<sup>11)</sup> 計算により得られた安定構造 (図 4) を解析したところ、カリウムフリーの部分とカリウムがインターカレートした部分のグラフェン層間の距離はそれぞれ  $0.344$  nm と  $0.558$  nm と見積もられ、グラファイト ( $0.335$  nm) 及び  $KC_8$  ( $0.535$  nm) における炭素層間距離の報告値<sup>17)</sup> とよく一致することがわかった。しかしながら、計算された各部

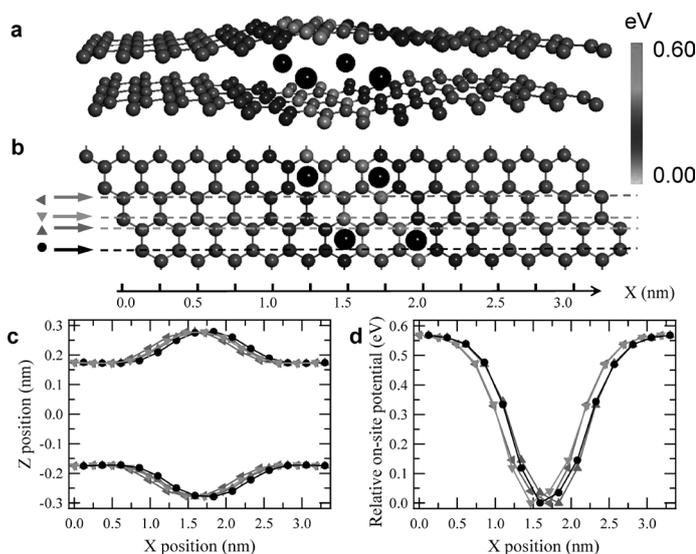


図4 DFT計算で得られたカリウムドーパレイヤーグラフェンの安定構造。(a)鳥瞰図、(b)上面図、(c)炭素原子位置の空間分布(グラフェンの垂直方向Z軸とX軸に対する分布)、(d)炭素のオンサイトポテンシャル分布(最小エネルギーを0 eVとして表示)、(c)と(d)のプロットは、プロットと同じ色(凡例)の矢印が(b)において示す破線に沿ったそれぞれの炭素原子の結果をX位置の関数として示している。

分の高さの差は0.21 nmであり、図2で示したSTM像の解析から見積もった高さの違いである0.53 nmよりも小さいことがわかった。見積もられる高さの違いは、図2で高さを観測した領域が3節で述べたカリウムフリーのドメインが重なる領域に対応しており高くなっていると考えられることで説明がつく。いずれにせよDFT計算においてもグラフェンが曲がってカリウムフリーのドメインが窪みを作ることが示され、ナノサイズの谷構造(ナノバレー)が表面上にできることがわかった。これは白金表面のグラフェンで観測されている0.3-2.0 nmの高さのナノサイズのグラフェンの泡構造(ナノバブル)<sup>12)</sup>とナノサイズのドメインという特徴の観点で類似した特徴といえる。このため、グラフェンのナノバブルで観測されたランダウ準位の場合と同様に、<sup>12)</sup> グラフェンのナノバレーのふちの部分にできる歪が構造の不規則性由来する炭素原子間のホッピングの非等価性をもたらす、<sup>35-40)</sup> ランダウ準位を生成した可能性が考えられる。しかしながら、報告されているナノバブルの場合には非常に大きい曲率の頂点構造があるのに対して、K-HOPGの場合は図2で示したようにグラフェンは緩やかに曲がっているに過ぎない。ナノバブルでは、ランダウ準位を引き起こす擬磁場の大きさが300 Tと報告されており、<sup>12)</sup> 我々のK-HOPGにおけるナノバレーで見積もられた251 Tと大きな違いはない。つまり、図2のようなK-HOPG表面におけるグラフェンの緩やかな曲がった構造だけでは251 Tもの強い擬磁場の発生を説明することはできない。また、擬磁場の要因になりうる歪構造は、不均一な剪断歪(non-uniform shear strain)などの特異的な歪に限られることが報告されており、<sup>37)</sup> 歪があれば擬磁場が生じるわけでもない。このため、我々はドメインのふちにおける

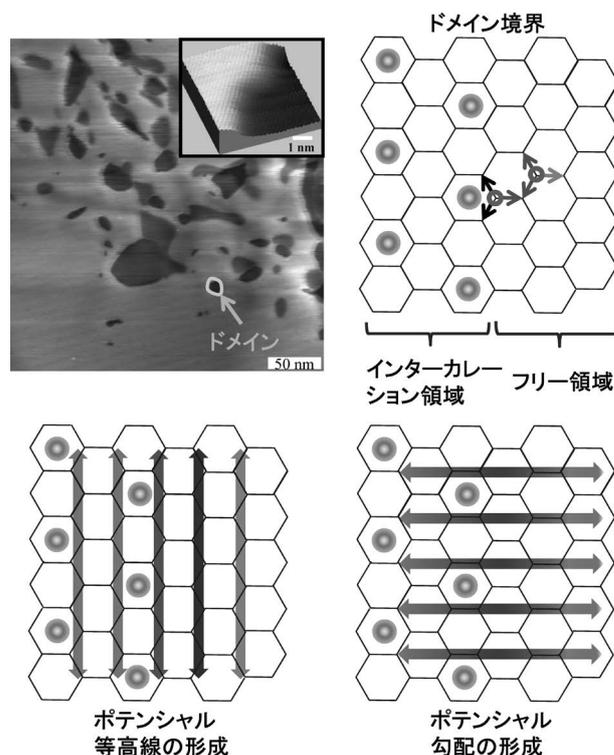


図5 擬磁場発生を説明するドメインモデル。グラファイトの層間にカリウム原子がインターカレートした領域とフリーな領域との境界では、炭素のポテンシャルに勾配がある。このため、境界に沿ってポテンシャル等高線が形成され、ドメインの中央に向けてポテンシャルの勾配が形成される。電子はポテンシャル等高線に沿った動きをすることとなり磁場中での動きのように電子の運動が制御されたと考えられる。(フルカラー口絵参照。)

オンサイトポテンシャルの勾配が炭素原子間のホッピングの非等価性をもたらす擬磁場を引き起こしたとする新しいモデルを提案するに至った。

DFT計算の結果によると、カリウムがインターカレートした領域とカリウムフリーの領域の間では図4dに示すように炭素原子のオンサイトポテンシャルには0.6 eVのエネルギー差が生じている。また、ポテンシャルの勾配がグラフェンの傾斜に沿う形で形成されている。したがって、ドメイン境界を模式的に図5のように見た場合、境界に沿ってポテンシャル等高線が形成され、この方向の炭素原子間の間ではホッピングが等しくなる。一方、ドメインの中央に向けた方向にはポテンシャルの勾配が形成されるため、炭素原子間のホッピングは非等価となる。つまり、炭素原子のオンサイトポテンシャルの不均一性が、各炭素原子間でのホッピングを非等価にすることになる。このようなドメインのふちがもたらす炭素原子間のホッピングの非等価性はPt上のグラフェンナノバブルと似た特徴を持つともいえる。すなわち、ナノバブルのふちに沿ったホッピングは等価であり、ナノバブルの頂点に向けた方向のホッピングが非等価となっているのである。以上のように、我々は高磁場の応答に対応するランダウ準位が、K-HOPG表面のカリウムフリーのドメイン境界部分において発生した理由として、炭素のオンサイトポテンシャルの勾配による寄与が含まれている可能性が高いと考えている。なお、

実際は時計回り，反時計回りの双方にサイクロトロン運動をする電子が存在しており，互いに磁場を打ち消しあうために外部に強磁場は発生していないと考えている。

## 6. まとめと今後の展望

カリウムをドーブしたグラファイト表面において観測された，無磁場下で出現する質量ゼロのディラック・フェルミオン特有のランダウ準位について，我々が提唱した擬磁場発生モデル（ドメインモデル）とともに紹介をした。擬磁場発生のメカニズムが明らかになれば，意図的に擬磁場を制御することが可能となり，グラファイト表面に新しい物性を発現させることが期待できる。

グラファイトは広大な2次元の $\pi$ 共役系を構築しており，フェルミ準位近傍に電子状態密度が少なく，化学的に安定であることが知られている。しかしながら，今回のK-HOPG表面のように $\pi$ 共役系に擾乱が生じると電子状態が大幅に変化するため，グラファイトは様々な新しい物性を発現させる可能性を持った興味深い物質といえる。我々はこれまでも，グラファイトに点欠陥を導入した場合，<sup>41)</sup>窒素原子をドーブした場合，<sup>42)</sup>単原子層白金クラスターを接合させた場合<sup>43)</sup>の全ての場合において，隣接する炭素原子上において $\pi$ 共役系の崩れに起因する局在化した非結合性の炭素の $p_z$ 軌道が形成することをSTS観測により見出ししてきた。この準位は本質的にはグラフェンのzigzagエッジに現れるエッジ状態<sup>44)</sup>と同じ電子準位であるが，準位が発生する炭素原子の配位している原子などの環境によって出現するエネルギー位置が異なる点が興味深い。この局在準位は $\pi$ 共役系と共存しているため，電子状態における連続状態と離散状態の接合問題として捉えることもできる。実際，我々はグラファイトの欠陥部近傍などに出現する局在準位が，周囲の $\pi$ 共役系へ非等方的に伝搬している状況をSTSにより観測しており，このような接合問題を目の当たりにしてきている。<sup>41)</sup>このような炭素の局在化した非結合性の $p_z$ 準位が，今回のランダウ準位の出現も含めて $\pi$ 共役系炭素の様々な物性や触媒特性などの化学的性質に影響を与えると考えられる。しかし，我々の知る限りメカニズムはほとんどわかっておらず，今後の発展が期待される。

本研究は筑波大学数理工学系 岡田晋准教授，数理工学系科学研究科 町田考洋氏，岩竹啓吾氏との共同で行ったものであり，深く感謝を申し上げます。研究内容について議論をいただきました筑波大学数理工学系 初貝安弘教授に感謝を申し上げます。ラザフォード後方散乱計測でサポートをいただきました筑波大学数理工学系 工藤博教授，関場大一郎講師および筑波大学研究基盤総合センター応用加速器部門 石井聡氏に感謝を申し上げます。この研究は独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)のプロジェクトの一環として行われました。

## 参考文献

- 1) A. H. Castro Neto, *et al.*: Rev. Mod. Phys. **81** (2009) 109.
- 2) J. W. McClure: Phys. Rev. **104** (1956) 666.
- 3) J. C. Slonczewski and P. R. Weiss: Phys. Rev. **109** (1958) 272.
- 4) N. H. Shon and T. Ando: J. Phys. Soc. Jpn. **67** (1998) 2421.
- 5) 安藤恒也: 表面科学 **29** (2008) 296.
- 6) 初貝安弘，青木秀夫: 固体物理 **45** (2010) 457.
- 7) 越野幹人: 炭素 **243** (2010) 104.
- 8) G. Li and E. Y. Andrei: Nat. Phys. **3** (2007) 623.
- 9) K. S. Novoselov, *et al.*: Nature **438** (2005) 197.
- 10) Y. Zhang, *et al.*: Nature **438** (2005) 201.
- 11) D. Guo, *et al.*: Nat. Commun. **3** (2012) 1068.
- 12) N. Levy, *et al.*: Science **329** (2010) 544.
- 13) J. Lu, *et al.*: Nat. Commun. **3** (2012) 823.
- 14) H. Yan, *et al.*: Phys. Rev. B **85** (2012) 035422.
- 15) N. C. Yeh, *et al.*: Surf. Sci. **605** (2011) 1649.
- 16) F. Guinea, *et al.*: Nat. Phys. **6** (2010) 33.
- 17) M. S. Dresselhaus and G. Dresselhaus: Adv. Phys. **51** (2002) 1.
- 18) R. Nishitani, *et al.*: Phys. Rev. B **27** (1983) 6572.
- 19) S. E. Ulloa and G. Kirczenow: Phys. Rev. Lett. **55** (1985) 218.
- 20) T. Fauster, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **51** (1983) 430.
- 21) T. Takahashi, *et al.*: Synthetic Met. **12** (1985) 239.
- 22) Z. H. Pan, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **106** (2011) 187002.
- 23) T. Inoshita, *et al.*: Phys. Soc. Jpn. **43** (1977) 1237.
- 24) A. Gruneis, *et al.*: Phys. Rev. B **80** (2009) 075431.
- 25) M. Caragiu and S. Finberg: J. Phys. Condens. Matter **17** (2005) R995.
- 26) P. Sjovald and B. Kasemo: Sur. Sci. **290** (1993) 55.
- 27) 新川慶太郎: 筑波大学大学院数理工学系科学研究科修士論文 (2012).
- 28) J. Tersoff and D. R. Hamann: Phys. Rev. B **31** (1985) 805.
- 29) H. P. Lang, *et al.*: Phys. Rev. B **45** (1992) 1829.
- 30) T. Ohta, *et al.*: Science **313** (2006) 951.
- 31) M. Ono, *et al.*: Appl. Surf. Sci. **256** (2009) 469.
- 32) Y. Zhang, *et al.*: Nat. Phys. **4** (2008) 627.
- 33) <http://www.magnet.fsu.edu/>
- 34) パルス磁場では東大物性研で電磁濃縮法により600 Tの超高磁場が実現している: A. Miyata, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **107** (2011) 207203.
- 35) F. Guinea, *et al.*: Phys. Rev. B **81** (2010) 035408.
- 36) M. A. H. Vozmediano, *et al.*: Phys. Rep. **496** (2010) 109.
- 37) F. Guinea, *et al.*: Nat. Phys. **6** (2010) 30.
- 38) E. A. Kim and A. H. C. Neto: Europhys. Lett. **84** (2008) 57007.
- 39) F. Guinea, *et al.*: Phys. Rev. B **77** (2008) 205421.
- 40) M. M. Fogler, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **101** (2008) 226804.
- 41) T. Kondo, *et al.*: Phys. Rev. B **82** (2010) 153414.
- 42) T. Kondo, *et al.*: Phys. Rev. B **86** (2012) 035436.
- 43) T. Kondo, *et al.*: Phys. Rev. B **80** (2009) 233408.
- 44) M. Fujita, *et al.*: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 1920.

## 非会員著者の紹介

郭 東輝氏: 1978年中国吉林省生まれ。2001年中国吉林大物理卒。2007年中国科学院物理研究所博士課程修了後，現在筑波大学数理工学系博士研究員。専門は凝縮系物理学，表面科学。

中村潤児氏: 1957年札幌生まれ。1983年北海道大学工学部合成化学工学科卒。1988年北海道大学理学研究科化学専攻博士課程修了後，インディアナ大学およびワシントン大学博士研究員，筑波大講師，助教授を経て，現在筑波大学数理工学系教授。専門は表面化学，触媒化学。1992年触媒学会奨励賞受賞。

(2013年2月1日原稿受付)

## Landau Levels in Potassium-Doped Graphite under a Zero Magnetic Field

Takahiro Kondo, Donghui Guo and Junji Nakamura

abstract: The charge carriers in graphene are massless Dirac fermions and exhibit a relativistic Landau-level quantization in a magnetic field. Recently, we have observed that the Landau levels of massless Dirac fermions are generated on a potassium-doped graphite surface without applying external magnetic field. The results and the origin of the Landau levels generation are described.

# 高いスピンのゲージ理論による AdS/CFT 対応の理解に向けて

足田 泰章 (慶應義塾大学日吉物理学教室 223-8521 横浜市港北区日吉 4-1-1 )

重力理論はスピン2のゲージ理論として記述されるが、この理論を高いスピンの場を含むように拡張することができる。高いスピンのゲージ理論は、超弦理論のおもちゃ模型として取り扱うことができ、最近重力/ゲージ対応の最も有名な例である AdS/CFT 対応への応用の観点で注目を集めている。本稿では、高いスピンのゲージ理論を簡単に紹介し、AdS/CFT 対応の理解にどのように役立つのか説明したい。

## 1. はじめに

世の中には4種類の力が存在することが知られている。電磁気力、弱い力、強い力、そして重力である。重力以外の3種類の力はいくつかよく理解されているが、重力だけはいまだに分かっていない部分が多い。特に、宇宙初期やブラックホール内部などでは一般相対論による記述が悪くなり、量子論的な効果を取り入れる必要が生じてくる。ところが、一般的な量子重力の理論は様々な問題点を含んでおり、今のところ量子重力を矛盾なく記述する理論の候補としては、超弦理論しか存在していない。重力以外の3種類の力はすべて「点粒子」による理論で記述できるが、超弦理論では「ひも」を基本的な物体として取り扱う。例えば、ブラックホールの中心には時空の特異点があると言われている。もし点粒子の理論であれば、その特異な点に吸い込まれてしまい、その後どうなってしまうのか誰にも分からない。ところがひもは、図1のようにそのまま素通りできるため、

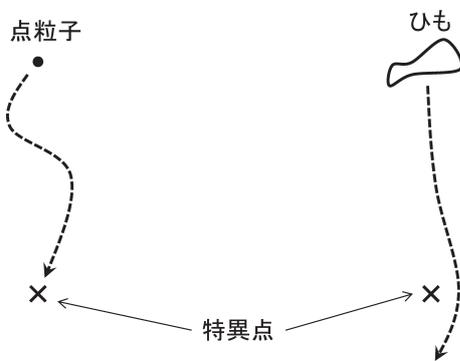


図1 一般の場の理論の構成要素である点粒子は、時空の特異点に吸い込まれてしまうことがあり、そこで理論が破たんしてしまう。超弦理論では輪ゴムのような形をしたひもが構成要素となっており、ひもはその特有の大きさにより特異点をすり抜けることができる。

一般に超弦理論ではそのような問題は起きないと信じられている。超弦理論は低エネルギー極限で古典重力理論に帰着するため、その極限での振る舞いはよく理解されている。ところが、ひもの理論特有な効果はこの極限を超えたところで現れ、さらにその領域における超弦理論の取り扱い是非常に困難なことが知られている。そのため、実際のところどのようにして重力理論の問題点が解消されているのかよく分かっていない。

超弦理論における最近の大きな発展として、マルダセナ (J. Maldacena) による AdS/CFT 対応の提唱がある。<sup>1)</sup> この提唱によると、反ド・ジッター (Anti-de Sitter; AdS) 空間上の超弦理論が、ある重力を含まない低次元のゲージ理論と対応している。このゲージ理論はスケール不変性を拡張した共形対称性を持っており、共形場理論 (Conformal Field Theory; CFT) となっている。この対応を利用すると、重力理論をより定義されているゲージ理論によって記述することが可能になる。この対応が提唱されてすでに15年近くたち、特に超弦理論が古典重力理論に帰着する極限では、対応の検証と応用の両方の面でかなりの発展がなされてきている。ところがこの極限から離れた領域では、いまだによく理解されているとは言い難いのが現状である。その原因の一つには、超弦理論の難しさがあると思われる。そこで、ひもの理論特有な性質を引き継いでいながら、より取り扱い易い理論を利用して、定性的な理解を得たい。そのような理論の候補として、高いスピンのゲージ理論があげられる (図2参照)。重力理論はスピン2のゲージ理論で記述することができるが、そのスピン2の場を一般のスピン2の場に拡張した理論となっている。超弦理論のかわりに高いスピンのゲージ理論を利用することで、AdS/CFT 対応の理解をより深いものにしたというのがこの研究の目的である。

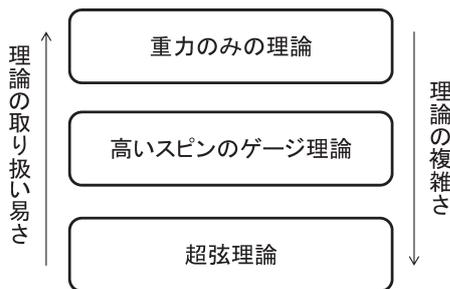


図2 高いスピンのゲージ理論は超弦理論ほど解析が難解でなく、重力のみの理論よりも構造が複雑である。そこで、高いスピンのゲージ理論を利用して、超弦理論の定性的な理解を得たい。

## 2. 高いスピンのゲージ理論

ゲージ理論として最もよく知られているのは、電磁気力の理論であると思う。この理論は、スピン1のゲージ場の理論となっている。また、重力の理論もゲージ理論の一種であり、スピン2のゲージ場で記述できる。高いスピンのゲージ理論は、これらのよく知られた低いスピンのゲージ場の理論を、高いスピンの場を含むように自然な形で拡張することによって得られる。

スピン1のゲージ理論である電磁気力の理論は、ベクトルポテンシャル  $A_\mu$  によって記述することができる。添え字は時空の方向を表しており、時間方向が  $\mu=0$  で空間方向が  $\mu=1, 2, 3$  となっている。ここで、ベクトルポテンシャルを

$$\delta A_\mu(x) = \partial_\mu \Lambda(x) \quad (1)$$

のように、局所的に変換させることにする。ゲージ理論は、このような局所的なゲージ変換で理論が不変になるように要請することで構成できる。一方、スピン2のゲージ理論である重力理論は、時空の計量  $g_{\mu\nu}$  によって記述することができる。ここで、 $g_{\mu\nu}$  には添え字が二つあり対称化されている。添え字が二つあることと、重力理論がスピン2の理論であることが対応している。ゲージ変換は線形近似のもとで

$$\delta g_{\mu\nu}(x) = \partial_\mu \xi_\nu(x) + \partial_\nu \xi_\mu(x) \quad (2)$$

で与えられる。これは一般相対論の言葉でいえば、一般座標変換に対応している。

これらスピン1とスピン2のゲージ理論は、次のようにして自然に一般のスピン  $s$  の理論に拡張することができる。スピン  $s$  の場を用意するためには、添え字を  $s$  個持つような場  $\phi_{\mu_1\mu_2\dots\mu_s}$  を用意してやればよい。ここでは、添え字について完全対称化した場合のみを考える。スピン  $(s-1)$  のパラメータ  $\epsilon_{\mu_1\dots\mu_{s-1}}$  を導入して、理論が線形近似のもとで局所的なゲージ変換

$$\delta \phi_{\mu_1\mu_2\dots\mu_s}(x) = \partial_{(\mu_1} \epsilon_{\mu_2\dots\mu_s)}(x) \quad (3)$$

で不変であるとする。ここで括弧は、括弧の中の添え字を完全対称化することを意味している。実際  $s=1, 2$  の場合を考えれば、先ほどの低いスピンの例を再現することが分かる。ここでは線形近似を考えているが、これは相互作用を無視して自由場の理論を取り扱っていることに対応する。高いスピンのゲージ理論でも、自由場の理論は比較的簡単に構成することができる。<sup>2)</sup> 特に、低いスピンの知られている理論をゲージ変換 (3) を持つように拡張しようとする、理論が唯一に定まってしまう。

ところが、自由場を超えた理論を構成しようすると、非常に難しいことが知られている。低いスピンの保存量としては運動量やエネルギーなどがあるが、これらの量が保存するように要請すると理論が縛りを受ける。その上で高いスピンの対称性を理論に要請すると、さらに縛りがきつくなってしまい、一般には自由な理論しか許されなくなってしまう。実際ある程度一般的な仮定の下で、高いスピンの対称性があると自由な理論しか存在しないという定理もある。<sup>3)</sup> 非自明な高いスピンのゲージ理論としてヴァシリエフ (Vasiliev) 理論が有名であるが、<sup>4)</sup> この理論は反ド・ジッター空間など曲がった空間上で定義することと、スピン  $s=2, 3, \dots, \infty$  の無限個の場を導入することで仮定を逃

れている。ただし、ヴァシリエフ理論は運動方程式しか知られておらず、その運動方程式を導くような作用は今のところ見つかっていない。そのため古典論しか取り扱うことができず、量子論的な効果を取り入れることは今のところできない。

超弦理論にも様々なスピンを持つ状態が存在している。超弦理論における状態はひもの振動からくるが、低い振動モードは低いスピンの状態と対応し、高い振動モードは高いスピンの状態と対応する。特に、高い振動モードからくる状態はひもの理論特有な状態であるため、その性質を調べることは非常に重要である。ただし、高いスピンの状態は一般に大きな質量を持っており、上で紹介した質量のない高いスピンのゲージ場の理論とは直接対応しない。そこで、超弦理論における状態の質量がゼロになるような極限をとることによって、高いスピンのゲージ理論と関連づけられると信じられている。

### 3. AdS/CFT 対応

AdS/CFT 対応の例のうち最も有名なものは、5次元の AdS 空間 (と別の5次元空間との直積空間) 上の超弦理論と4次元の  $U(N)$  ゲージ理論との対応である。電磁気力の場合にはベクトルポテンシャル  $A_\mu$  が  $U(1)$  リー代数に値をとるが、 $U(N)$  ゲージ理論は  $U(1)$  を  $U(N)$  に置き換えることで得られる。これらの理論にはそれぞれ主に二つのパラメータが存在し、片方の理論が解析できるパラメータ領域にあるときは、もう片方の理論は解析困難なパラメータ領域にある。この特徴は、超弦理論がからんだ AdS/CFT 対応のその他の例でも共通なものとなっている。

超弦理論のパラメータの一つは、点粒子ではなくひものであることの効果を表す弦の固有長さ  $l_{\text{string}}$  で、超弦理論における状態の質量はその逆数に比例している。AdS 空間の特徴的な長さである AdS 半径を  $l_{\text{AdS}}$  とすると、 $l_{\text{string}}/l_{\text{AdS}} \ll 1$  のときにひもの効果が無視でき重力理論に帰着する。もう一つのパラメータは、超弦理論における量子効果に関する弦の結合定数  $g_{\text{string}}$  で、この定数が小さい場合には古典論を用いることができる。一方  $U(N)$  ゲージ理論では、ゲージ群のランク  $N$  とゲージ理論の結合定数  $g_{\text{gauge}}$  がパラメータとなっている。ランク  $N$  が大きい場合には、 $\lambda = g_{\text{gauge}}^2 N$  のように組み合わせるのが便利である。AdS/CFT 対応の辞書によると、 $1/N$  補正が超弦理論の量子補正に対応し、 $1/\lambda$  の効果がひものであることの効果に対応する。パラメータの対応は図3にまとめてある。この対応によると、ゲージ理論が強結合で解析が困難な領域を、古典重力理論を用いて解析できることになる。例えば、クォーク・グルーオン・プラズマの粘性に関する研究において、かなりの成功を収めている。<sup>5)</sup> ところが、摂動論で解析できる領域が対応していないことは、AdS/CFT 対応の理解を妨げる原因の一つとなっている。

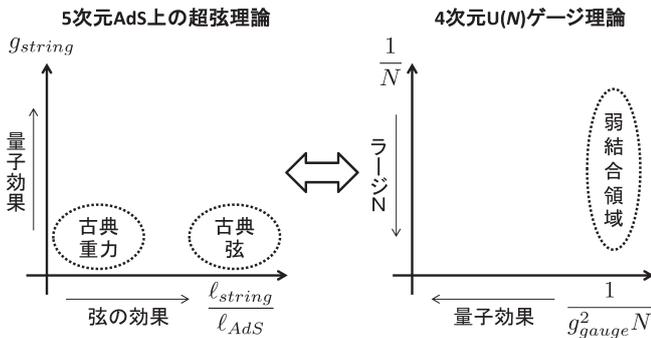


図3 AdS/CFT対応におけるパラメータの対応。ここでは、5次元AdS空間上の超弦理論と4次元U(N)ゲージ理論との対応を例にあげた。超弦理論には弦の特徴的な長さ $\ell_{string}$ と結合定数 $g_{string}$ の二つのパラメータが存在する。U(N)ゲージ理論では、それぞれ結合定数の逆数 $1/(g_{gauge}^2 N)$ とゲージ群のランクの逆数 $1/N$ に対応している。

### 3.1 初期の研究

超弦理論の高いスピンの状態は $1/\ell_{string}$ に比例する質量を持っているため、 $\ell_{string}$ の大きな極限は高いスピンのゲージ理論と関連していると期待できる。一方AdS/CFT対応のパラメータ対応によると、高いスピンのゲージ理論の古典論は、ある場の理論のラージ $N$ かつ弱結合領域と対応すると考えられる。実際クレバノフ (I. R. Klebanov) とポリヤコフ (A. M. Polyakov) によって、高いスピンのゲージ理論の非自明な例である4次元のヴァシリエフ理論が、3次元の $O(N)$ ベクトル模型のラージ $N$ 極限と対応するという提案がなされた。<sup>6)</sup> このような、高いスピンのゲージ理論がからむAdS/CFT対応を解析することによって、超弦理論がからむAdS/CFT対応のうちひもの理論であることによる効果が検証できると期待されている。

4次元のヴァシリエフ理論と3次元の $O(N)$ ベクトル模型との対応は、次のように理解することができる。ヴァシリエフ理論にはスピン $s$ の場がそれぞれ一つずつ含まれている。<sup>4)</sup> 一方 $O(N)$ ベクトル模型は、相互作用項を無視した極限では

$$S = \int d^3x \sum_{\mu=0}^2 \sum_{a=1}^N \partial_\mu h^a \partial_\mu h^a \quad (4)$$

の作用で与えられる。今時空が3次元なので $\mu=0, 1, 2$ とし、実スカラー場 $h^a$  ( $a=1, 2, \dots, N$ ) は群 $O(N)$ に関してベクトル表現で変換するとする。ここで $O(N)$ 変換で不変な演算子は、全微分の寄与を除くと

$$\mathcal{J}^{(s)} = \sum_{a=1}^N h^a \partial^s h^a + \dots \quad (5)$$

のように書くことができる。スピンを一つ固定すると演算子は一種類のみ構成できる。この演算子は高いスピンの対称性に対応する保存カレントとなっており、重力理論の高いスピンのゲージ場と一対一対応している。

クレバノフとポリヤコフによる提案はすごく興味深いものではあったが、長い間さらなる進展は成されてこなかった。このことは、超弦理論よりはましとは言え、ヴァシリエフ理論がまだ非常に難解であることに原因があると思わ

れる。ところが、数年前に当時ハーバードにいた若い研究者であるジオンビ (S. Giombi) とイン (X. Yin) が、実際にヴァシリエフ理論を解析することによって、 $O(N)$ ベクトル模型の情報を対応する重力理論から再現することに成功した。<sup>7)</sup> このことは、クレバノフとポリヤコフによる提案の強い証拠となるとともに、数多くの研究者が再びこの高いスピンのゲージ理論とそれを用いたAdS/CFT対応に興味を持つきっかけを与えることとなった。

### 3.2 最近の進展

最近数多くの研究者が、高いスピンのゲージ理論とそのAdS/CFT対応との関係を研究するようになってきたため、様々な面が明らかになってきた。特に、高いスピンの対称性によるきつい縛りのおかげで、対応が成り立っていることが明らかになってきている。<sup>8)</sup> ここでは、最近の発展の中でも、低次元の対応に関する研究に注目してみたいと思う。具体的には、ガバディエル (M. R. Gaberdiel) とゴパクマー (R. Gopakumar) によって提案された3次元のヴァシリエフ理論と2次元模型との対応に注目する。<sup>9)</sup> この次元の対応は、高次元の対応に比べて取り扱い易く、より深い解析が可能となっている。

4次元以上では、高いスピンのゲージ理論を解析しようとすると、ヴァシリエフ理論を真面目に解析する必要がある。ところが3次元では、より簡単なチャーン・サイモンズ (Chern-Simons) 理論による記述を用いることができる。そのため、高いスピンのゲージ理論特有の情報を引き出すことが比較的たやすい。例えば、高いスピンの電荷を持ったブラックホール解を構成することができ、さらに高いスピンのゲージ変換によってホライズンや特異点を消せることが示されている。<sup>10)</sup> この事実は、ひもの理論における特異点解消と関連していると考えられている。

3次元のヴァシリエフ理論は、高いスピンのゲージ場のみでなく質量を持つ物質場も含んでおり、その質量は一つのパラメータ $\kappa$ に依存している。<sup>4)</sup> ガバディエルとゴパクマーによって、この理論のボソン部分が

$$\frac{SU(N)_k \otimes SU(N)_1}{SU(N)_{k+1}} \quad (6)$$

のコセット模型と対応すると主張された。<sup>9)</sup> このようなコセット模型は、荒っぽく言うと分子の群多様体を分母で割ることによって得られる。パラメータ $N$ は先ほどの $O(N)$ ベクトル模型の $N$ と同じような意味を持ち、有効的な自由度が $N$ ぐらいであることに対応している。また、一般的なAdS/CFT対応と同様に、 $1/N$ が重力の結合定数と対応している。したがって、ヴァシリエフ理論の古典論と比較する場合は、 $N \rightarrow \infty$ の極限をとる必要がある。添え字の $k$ は結合定数の逆数に対応しており、 $k \rightarrow \infty$ が弱結合領域にあたる。ここで二つのパラメータ $k, N$ を組み合わせると

$$N, k \rightarrow \infty, \quad \kappa = \frac{N}{N+k} : \text{有限} \quad (7)$$

の極限をとり、 $\kappa$ をヴァシリエフ理論に含まれる物質場の

質量のパラメータと同一視することにする。この低次元の対応では、対称性やスペクトルの比較など詳細な解析を行うことができ、すでに数多くの強い証拠があげられている。今回は式(7)のような極限を考えたが、有限の $k, N$ でも対応が成り立つと期待できる。式(6)のコセット模型は可解模型であるため、有限の $k, N$ での解析が可能である。一方、ヴァシリエフ理論の量子化の方法はいまだ知られていないため、この対応は重力の量子化について興味深い示唆を与えるのではないかと期待されている。

ところで、この対応は超弦理論とどのような関係にあるのだろうか。超弦理論では超対称性が重要となっている。超対称性とはボソンとフェルミオンを入れ替える対称性のことであり、量子効果が取り扱やすくなるという利点がある。超弦理論との関係を見るためには、まず対応を超対称性が含まれるように拡張する必要がある。もともとの3次元のヴァシリエフ理論は超対称性を持つ理論であった。<sup>4)</sup> 私たちは、この超重力理論が

$$\frac{\text{SU}(N+1)_k \otimes \text{SO}(2N)_1}{\text{SU}(N)_{k+1} \otimes \text{U}(1)_{N(N+1)(N+k+1)}} \quad (8)$$

の式(7)で与えられる極限と対応すると主張した。<sup>11)</sup> ひもの住む空間は射影空間  $\mathbf{CP}^N$

$$\frac{\text{SU}(N+1)}{\text{SU}(N) \times \text{U}(1)} \quad (9)$$

で与えられ、 $\text{SO}(2N)_1$ は超対称ペアのフェルミオンを記述する。私たちによる対応の主張もすでに、対称性やスペクトルの比較などによってほぼ正しいと考えられている。また、超対称性のおかげで量子効果が抑えられており、超対称性を導入することで対応が証明できるようになる可能性を示唆した。現在私たちの研究グループは、この研究をさらに進化させることによって、超弦理論との関係を明らかにしようと試みている。

#### 4. おわりに

高いスピンのゲージ理論とそれを利用したAdS/CFT対応に関する最近の発展について紹介した。重力理論はスピン2のゲージ理論であるが、高いスピンを持つゲージ場の理論に拡張することができる。高いスピンのゲージ理論の最も有名な例として、ヴァシリエフ理論がある。<sup>4)</sup> 4次元のヴァシリエフ理論は3次元の $O(N)$ ベクトル模型(4)と対応し、<sup>6)</sup> 3次元のヴァシリエフ理論は2次元模型(6)と対応する<sup>9)</sup>ことが主張されている。これらの対応は、その後の研究により数多くの証拠があげられ、少なくともある

極限ではほぼ正しいと考えられている。特に、高いスピンの対称性のおかげで理論が強い制限を受け、そのおかげで対応が成り立っていることが明らかになってきている。<sup>8)</sup>

高いスピンのゲージ理論は、超弦理論のおもちゃ模型としても取り扱うことができる。特に、3次元重力理論におけるブラックホール特異点解消について、興味深い示唆を与えている。<sup>10)</sup> さらに、定性的な類似性のみでなくより定量的な関係性も期待でき、高いスピンの対称性が超弦理論において隠れた形で存在していると考えられることもできる。本稿で紹介してきたAdS/CFT対応は、今のところ超弦理論がからんだAdS/CFT対応とどのように関係しているのか分かっていない。高いスピンの対称性は理論にきつい縛りを与えるため、高いスピンのゲージ理論と超弦理論との関係性を明らかにすることが、超弦理論やAdS/CFT対応の理解の手助けになるはずである。

最後に、共同研究者であるT. Creutzig氏とP. B. Ronne氏に深く感謝します。

#### 参考文献

- 1) J. M. Maldacena: *Adv. Theor. Math. Phys.* **2** (1998) 231.
- 2) C. Fronsdal: *Phys. Rev. D* **18** (1978) 3624.
- 3) S. R. Coleman and J. Mandula: *Phys. Rev.* **159** (1967) 1251.
- 4) M. A. Vasiliev: *The Many Faces of the Superworld*, ed. M. A. Shifman, pp. 533–610 [hep-th/9910096].
- 5) 夏梅 誠: *日本物理学会誌* **62** (2007) 689.
- 6) I. R. Klebanov and A. M. Polyakov: *Phys. Lett. B* **550** (2002) 213.
- 7) S. Giombi and X. Yin: *JHEP* **1009** (2010) 115.
- 8) J. Maldacena and A. Zhiboedov: arXiv: 1112.1016 [hep-th]; arXiv: 1204.3882 [hep-th].
- 9) M. R. Gaberdiel and R. Gopakumar: *Phys. Rev. D* **83** (2011) 066007.
- 10) M. Ammon, M. Gutperle, P. Kraus and E. Perlmutter: arXiv: 1208.5182 [hep-th].
- 11) T. Creutzig, Y. Hikida and P. B. Ronne: *JHEP* **1202** (2012) 109.

(2013年2月25日原稿受付)

#### AdS/CFT Correspondence from Higher Spin Gauge Theories

Yasuaki Hikida

abstract: Gravity theory is a gauge theory of spin 2 field, and it can be extended to gauge theories with higher spin fields. Higher spin gauge theories can be treated as toy models of superstring theory. Recently they have attracted a lot of attention mainly due to the application to the AdS/CFT correspondence, which is an example of gravity/gauge correspondence. Here we would like to introduce higher spin gauge theories and explain how these theories are useful to understand the AdS/CFT correspondence.

# コンプトンカメラで放射性物質の飛散状況を可視化する

高橋 忠幸

〈宇宙航空研究開発機構・宇宙科学研究所 252-5210 相模原市中央区由野台3-1-1 〉

武田伸一郎

〈宇宙航空研究開発機構・宇宙科学研究所 252-5210 相模原市中央区由野台3-1-1 〉

渡辺 伸

〈宇宙航空研究開発機構・宇宙科学研究所 252-5210 相模原市中央区由野台3-1-1 〉

2011年3月に東北地方を襲った大地震によって福島第一原子力発電所から放出された放射性物質が、国民生活に大きな影響を与えており、効率の良い除染が我が国の喫緊の課題となっている。われわれは、次期X線衛星ASTRO-Hのために開発を行ってきたSi/CdTeコンプトンカメラの技術を応用し、超広角コンプトンカメラと呼ばれるガンマ線カメラを急遽作り上げた。現地において、放射性物質中の原子核が崩壊して安定な原子核になる過程で放出されるガンマ線のイメージング実験を行い、その源となっている放射性物質の分布を知ることができることを示した。

## 1. はじめに

2011年3月11日に発生した東日本大震災は、我が国に大きな傷跡を残した。大地震によって福島第一原子力発電所から放出された放射性物質が、国民生活に大きな影響を与えている。この放射性物質を、いかにして除去するかが、我が国にとって重要な課題である。

原子力発電所の事故により、ヨウ素 $^{131}\text{I}$ やセシウム $^{134}\text{Cs}$ 、セシウム $^{137}\text{Cs}$ などの放射性物質を含んだ塵が広範囲に飛来した。<sup>1)</sup>放射性物質中の原子核が崩壊して安定な原子核になる過程で放出されるガンマ線の強度が高いと体に悪い影響を及ぼす可能性がある。したがって、早急に放射性物質を含んだ塵を取り除くこと、つまり、除染が必要である。そのためには、放射性物質がどこにあるかを知る必要がある。線量計を持って地面をくまなく探してもよいが、もし、 $^{137}\text{Cs}$ などから直接放射されるガンマ線を見ることができれば、その源となっている放射性物質の場所も知ることができる。それが、ガンマ線カメラを用いた可視化の試みである。

われわれのグループは、硬X線やガンマ線と呼ばれる領域で新しい天文学を切り拓くことをめざし、20年前から大気球実験や、「すざく」衛星、そして次のX線天文衛星ASTRO-H<sup>2)</sup>を舞台にして、高感度ガンマ線センサーの開発を行ってきた。震災が起これば、セシウムからの放射線が多くの人々の生活に影響を与えている事実を知るにつれ、われわれが開発してきた半導体を用いた検出器で何とか役に立てないかと思っていた矢先、東京電力から「宇宙でX線を観測する技術で、放射線の強いところ、弱いところはどこか、広範囲にわたって一度に見分けることができないでしょうか」という問い合わせがあり、宇宙観測のために開発していたガンマ線のイメージング技術をこの国難に役立てることとなった。

## 2. 求められている事

何とか、できることで貢献しようと決意はしたものの、実際には、現場はどのような空間線量なのか、どのようなエネルギーのガンマ線が飛んでいるのか、そしてホットスポットがどのように観測されるのか見当もつかない状況であった。われわれ自身が現地での状況を知らないままでは、ガンマ線イメージング用にわれわれが開発している「コンプトンカメラ」がそもそも機能するのかすらも判断できなかったのである。そこで、2011年夏より、関係諸機関の許可を得、週末に、線量計や簡単なガンマ線検出器を持って現地に出かけることとなった。その結果、公開されているような強度の空間線量の場所があること、またそこでは、地上5cmで空間線量の10倍程度の線量を示すホットスポットが確かに存在することを知り、 $^{134}\text{Cs}$ や $^{137}\text{Cs}$ から直接放出されるエネルギーの決まったガンマ線の他、それらのガンマ線が周囲の地面や建物で散乱して低いエネルギーに変わって出て来たガンマ線が多くを占めることも観測できたのである。そして、われわれのコンプトンカメラであれば、放射性物質の場所を見つけることが十分可能で、役に立てそうであることも分かった。

現地に出かけて測定を行った結果、ガンマ線カメラに求められている性能は

1.  $^{134}\text{Cs}$ や $^{137}\text{Cs}$ から放出されるエネルギーの決まった核ガンマ線を識別するための必要なエネルギー分解能(3%( $\Delta E/E$ )程度)。
2. 効率の良い除染を行うためには、除染の前後で撮像を行い識別されたホットスポットが本当に取り除かれたかどうかを知ることが必要である。そのための周囲一帯のホットスポットのマップを効率よく作成するための十分広い視野。
3. 1メートル先であれば10-20センチメートル、また、10メートル先の1-2メートル程度のホットスポットを識別することが可能な角度分解能。
4. 環境バックグラウンドが0.5から数 $\mu\text{Sv/h}$ の状況で、レベルの増加に寄与しているホットスポットを識別できる感度を有すること。実際には、バックグラウンドの強度に応じて検出できるホットスポットの強度が決まってしまうので注意が必要であり、数分から数10分程度で周囲全体のホットスポットのマップが作れるような感度を有すること。

と識別し、こうした条件を満たすガンマ線カメラを急遽作って現地に持ち込むこととした。

$^{134}\text{Cs}$  や  $^{137}\text{Cs}$  から直接放出される核ガンマ線のエネルギーは 600 キロ電子ボルトから 800 キロ電子ボルトの範囲である。エネルギーが高いため、遮蔽をしたり、コリメータを作るのが難しい。医療などでよく用いられるガンマ線の可視化の方法にピンホールカメラがある。この手法では、小さな孔の開いた鉛製の遮へい板をセンサー前方に配置し、ガンマ線の入射方向とセンサー上の位置とを一対一に対応付けることでイメージングが行われる。単位時間に測定可能なガンマ線のフラックスはその孔の大きさによって決まる。また、孔を通過しないガンマ線が画像バックグラウンドになるため、遮蔽として数センチ厚の鉛でセンサーをとりかこむ必要がある。

一方、このエネルギー領域で主要な反応であるコンプトン散乱を積極的に用いて入射ガンマ線の方向を知り、可視化を行う技術がコンプトンカメラである。コンプトンカメラはコンプトン運動学を使って入射ガンマ線の方向を知ることができる。特に入射するガンマ線のエネルギーが決まっている場合には、その条件も使うことができるため、厚く、重い遮蔽で囲まらずに高い感度を実現することができる。コリメータやピンホールなどを用いることなくイメージを取得できるコンプトンカメラは、医療や、非破壊検査、またガンマ線モニター測定、またセキュリティなどにおいて非常に有望な技術であると考えられている。

### 3. Si/CdTe コンプトンカメラ

コンプトンカメラは、1970 年代に提唱された。いちはやく宇宙環境で使用されたのが、NASA CGRO 衛星コンプトン (COMPTEL) ガンマ線望遠鏡 (1991-2000) である。当時、コンプトンはガンマ線帯域において優れた感度で宇宙天体観測を行ったが、サイズ 2 m、総重量 1.5 トンの巨大なシステムで、地上用途へと展開するのは不可能であった。その後、半導体検出器やガス検出器の著しい発展を背景として、様々な次世代コンプトンカメラが提案されている。

われわれのグループは、15 年ほど前からシリコン (Si) とテルル化カドミウム (CdTe) 半導体のイメージング素子を組み合わせた Si/CdTe コンプトンカメラを提案、開発を進めてきた。<sup>3-5)</sup> 数 100 ミクロンの優れた位置分解能、半値全幅 (FWHM) で数 keV の高いエネルギー分解能、そして数マイクロ秒という高い時間分解能をあわせ持つような Si と CdTe の半導体イメージング素子を作ることができれば、それらを組み合わせることで、非常にコンパクトで、角度分解能 (画像の細かさ) の優れたカメラが実現するからである。

コンプトンカメラは、装置内部で起こった「コンプトン散乱」のプロセスを記録し、そのエネルギー・位置情報とコンプトン散乱の運動学から導かれる式から、ガンマ線の入射方向を求めるカメラである。Si/CdTe コンプトンカメラの概念図を図 1(左) に示す。ここでは Si は主に散乱体として機能し、CdTe は吸収体として機能する。コンプトン

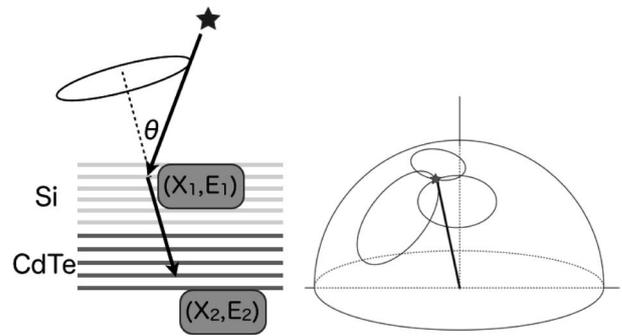


図 1 (左) Si/CdTe コンプトンカメラの原理。入射したガンマ線は Si のイメージング素子で散乱され、CdTe のイメージング素子で吸収される。それぞれで測定したエネルギーと反応位置から、コンプトン運動学を用いてガンマ線の入射方向に制限を加える。(右) ガンマ線は散乱を起こした位置からみて角度  $\theta$  の方向から飛来する。したがって、複数のガンマ線の情報を用いることで、ガンマ線源の位置を知ることができる。この解析方法をバックプロジェクション法と呼ぶ。

散乱の位置 ( $X_1$ ) と反跳電子の運動エネルギー ( $E_1$ )、散乱されたガンマ線の吸収位置 ( $X_2$ ) とエネルギー ( $E_2$ ) を計測すると、

$$E_{\text{in}} = E_1 + E_2, \quad (1)$$

$$\cos \theta = 1 - m_e c^2 \left( \frac{1}{E_2} - \frac{1}{E_1 + E_2} \right), \quad (2)$$

のコンプトン散乱の運動学を使うことで、 $\theta$  を計算することができる。1 つのガンマ線に対して、入射方向は  $X_1$  を頂点として作った円錐の表面に制限され、天球上の円環として描かれる。複数のガンマ線を計測し、円環を重ね合わせることで、ガンマ線源の位置を特定できることになる (図 1(右))。半導体検出器により、優れたエネルギー分解能と位置分解能との実現が可能で、これらは式 (1), (2) でも示されるように、イメージング能力に重要な役割を果たす。Si 半導体は原子番号が 14 と小さいためコンプトン散乱を起こす確率が光電吸収に比べて高く、また、ドップラーブロードニング効果<sup>6)</sup>の影響が小さいという利点がある。この効果は、コンプトン散乱が、式 (1), (2) で仮定されているように自由電子ではなく、原子核に束縛されていることに起因する不定性で、これがコンプトンカメラによる角度分解能の限界を決定する。

CdTe 半導体は、NaI(Tl) シンチレータと同等のガンマ線阻止能力を持つ、新しい半導体検出器である。Ge 半導体と異なり、ほぼ室温での動作が可能であることも特徴である。CdTe 半導体は、素子内で発生した電子・正孔対を集めきるのが難しく、高いエネルギー分解能を持った検出器の実現は困難とされていた。われわれは、これまでに、数 10 keV のエネルギーのガンマ線に対して、1 keV (半値全幅 FWHM) を切るような、エネルギー分解能の極めて高い半導体素子の開発に成功し、イメージングが可能な撮像素子を実現した。<sup>7,8)</sup> これが、Si/CdTe コンプトンカメラの実現の鍵となっている。

#### 4. 超広角コンプトンカメラ

日本の次期X線衛星ASTRO-Hは2015年度の打ち上げに向けて、現在開発中である。ASTRO-Hは2台の軟X線望遠鏡とそれらの焦点面検出器であるマイクロカロリメータとX線CCDの他、2台の硬X線望遠鏡のための硬X線イメージング検出器(HXI)、そして、軟ガンマ線検出器(SGD)を搭載する。<sup>2)</sup> SGDは天体からやってくる微弱なガンマ線信号を検知するために、32層のSi検出器と8層のCdTe検出器を積層した、多層型のSi/CdTeコンプトンカメラである。<sup>9)</sup> われわれは、ASTRO-H衛星に搭載することをめざして、Si/CdTeコンプトンカメラを提案し、様々な試作機でその性能を試験してきた。実際、SiとCdTeの両面ストリップ検出器(図2)を組み合わせたものでは、662 keVのガンマ線に対して2.5から4°程度の角度分解能(FWHM)\*<sup>1)</sup>を実現している。<sup>5)</sup>

東京電力からの依頼を受けた段階で、前述した要求性能を満たし、持ち運びにも耐えるものは存在しなかった。ASTRO-Hはちょうど詳細設計の段階になっていて、そこで使われるコンプトンカメラの設計図はできており、部分的な試作もはじまっていたが、そのまま現地に持っていくことは技術的にも難しく、新たに専用機を試作することになった。そして、急速、ASTRO-HのHXIの構造(5層のセンサー)<sup>10)</sup>をそのまま使い、500 keV以上のガンマ線に対する感度を向上させるために使用する250ミクロンピッチのSiとCdTeの両面ストリップ検出器をそれぞれを2枚と3枚(HXIは4枚と1枚)に変更、さらに読み出しのアナログLSIをSGD用の広帯域タイプに変更したハイブリッド型の検出器を組み上げた。

図3に福島での実証実験用に製作したコンプトンカメラの写真を示す。2層のSi検出器と3層のCdTe検出器から構成されている。各層を数mm間隔で積層することにより、コンプトン散乱したガンマ線が層間の隙間から逃げにくい構造となっており、結果として、カメラの正面から80度離れた位置から入射するガンマ線であっても、検出効率の低下は20%程度である。このような超広角の視野は、現地で放射線物質の分布の可視化を行うときに、極めて有効であることから、われわれは、この試作機を「超広角コンプトンカメラ」と呼ぶことにした。

製作した超広角コンプトンカメラは、市販の車載用冷却ボックスに入れ、マイナス5°Cに冷却した状態で測定を行った。冷却ボックス前方には、小型の魚眼レンズを装着したデジタルカメラを取り付け、可視光画像とガンマ線画像を重ね合わせることで、放射性物質の分布を視覚的にとらえることができるようにした。魚眼レンズを採用したのは、コンプトンカメラの広角撮像能力を十分に生かすためである。

\*<sup>1)</sup> 実際のガンマ線源の方向と、天球に描いた円環との最小離角分布の半値全幅(FWHM)。線源が円環の内側にある時を正、外側にある時を負で定義する。

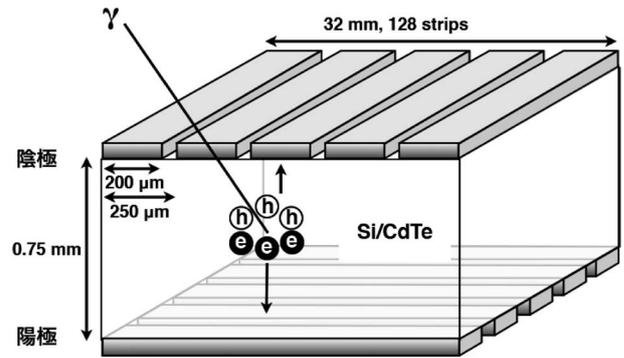


図2 両面ストリップ検出器ではSiやCdTe半導体素子の両面に数100ミクロンの幅の電極を形成する。陽極面と陰極面とで電極の向きを直交させ、それぞれから同時に読み出すことで、反応したガンマ線のエネルギーと反応箇所を知ることができる。



図3 試作した超広角コンプトンカメラの写真。(左) SiとCdTeのイメージャーをそれぞれ、2層と3層積み重ねた検出器。本カメラのために開発された読み出し用の低雑音多チャンネルLSIにはADCが組み込まれており、検出器の信号はデジタル信号に変換された上で出力される。(右) 冷却用の可搬型冷蔵庫と2台用意したコンプトンカメラ。冷蔵庫の外側に超広角レンズをつけた小型デジタルカメラを装着した。

#### 5. 放射性物質の分布の可視化実証試験

「超広角コンプトンカメラ」による放射性物質の撮像実証試験は、2012年2月11日、福島県飯舘村において、われわれ宇宙航空研究開発機構と日本原子力研究開発機構、東京電力株式会社との共同で実施された。<sup>11)</sup>

図4に、超広角コンプトンカメラによって取得されたスペクトルを示す。複数のラインを検出していることが分かる。<sup>134</sup>Csからの605 keV、796 keV、802 keVと<sup>137</sup>Csからの662 keVのそれぞれのラインに対して、図中に示したエネルギーウインドウを設定し、このウインドウに含まれない事象は棄却する。569 keVのラインは連続成分の混入が大きいため、ここでは使用していない。

コンプトン散乱の運動学より計算した散乱角 $\theta$ と、光子の散乱方向ベクトルから、イベントを天球の円環へと投影する過程をバックプロジェクション(逆投影)と呼ぶ。カウント保存のために、円環は積分値が1となるように規格化する。複数のイベントを検出し天球に円環を重ね合わせていくことで、放射性物質の方向を特定する(図1(右))。一つの円環は、到来方向の確率密度と見なすことができ、最終的にホットスポットの可視化に至るまでには統計的な処理を必要とする。

ここで、最初の散乱でガンマ線が電子に与えたエネルギーを測定する検出器と散乱されたガンマ線のエネルギーを測定する検出器で測定したエネルギーの和が、検出器のエ

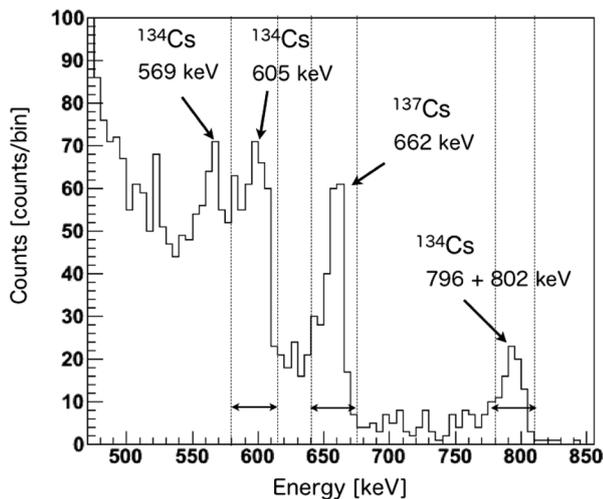


図4 現地で取得したガンマ線スペクトル。

エネルギー分解能の範囲で、対象とするガンマ線のエネルギーと等しい事象を選んで画像を再構成することが重要である。放射性物質から放出されるエネルギーの決まったガンマ線が地面や建物でコンプトン散乱されると、エネルギーの低いガンマ線となる広い分布を持ったエネルギースペクトルとなる。放射性物質からのガンマ線が直接検出器に飛んで来たガンマ線をできるだけ選択するようにエネルギー範囲をしぼって画像を作ることで、高いシグナル/バックグラウンド比の画像を得ることができる。

検出したガンマ線一つ一つについてコンプトン運動学を解いて求められる円環を重ね合わせていくと画像に濃淡が生まれる。今回試作を行った超広角コンプトンカメラでは、点線源を観測した場合にイメージの広がり(点拡がり関数(Point Spread Function))は広い裾野成分を持つ。そのため、放射性物質の集積が作り出すイメージの定量化のためには、この裾野成分を考慮した解析が必要である。

図5(左)に飯館村における観測において、計717事象から得られたコンプトン円環を重ね合わせて得たバックプロジェクションの図を示す。われわれは、画像上に、信号の混入が無いバックグラウンド領域を定め、バックグラウンド領域の単位ビンあたりの強度分布の平均値(オフセット値)と分散を求め、画像全体からオフセットを差し引いた上で、バックグラウンド領域の分散の値から有意度を判定した。図5(右)が、バックプロジェクション画像の等高線の上に、スレッシュホールドを分散値の5倍とした有意度マップを重ねたものである。バックプロジェクション画像の濃い部分が、有意度マップ上でも高い有意度で表示されていることが分かる一方、有意度マップに表示されないバックプロジェクション画像の濃淡は、有意な集積とは判定されなかった場所になる。図6に、この有意度マップ(ガンマ線の強度分布)を、同時に取得した魚眼レンズをつけたデジタルカメラの画像と重ねた図を示す。飯館村における観測では、原子力機構の協力により、GPS受信機付きサーベイメータでマッピング観測を行い、超広角コンプトンカメ

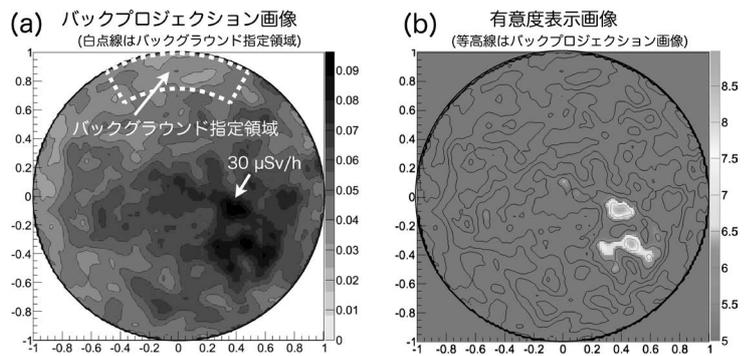


図5 飯館村における可視化実験の結果。(左)コンプトン運動学を用い、バックプロジェクション法によって得られた強度分布。(右)左図に有意度マップを重ねた図。図中の円は中心からの視野角を示す。

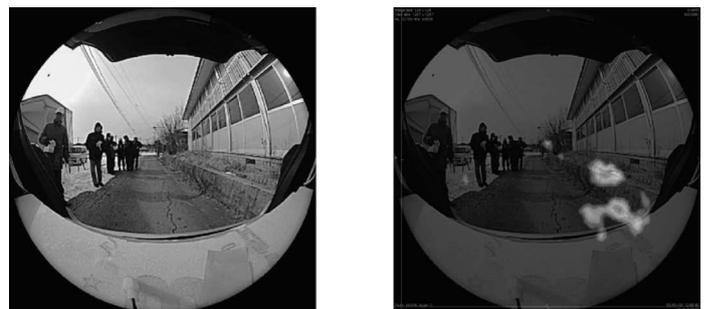


図6 左は魚眼レンズを付けたカメラ、右は超広角コンプトンカメラで撮影した画像。 $^{134}\text{Cs}$ 、 $^{137}\text{Cs}$ から直接放出される605、662、796、802 keVから再構成されたガンマ線の強度(フラックス)分布。分布の中心に向かうほど強度が高い。サーベイメータの測定では中心の場所で地上1 cmの強度が約 $30 \mu\text{Sv/h}$ 、またカメラの付近における環境バックグラウンドは約 $3 \mu\text{Sv/h}$ であった。

ラで得られた強度分布とコンシステントであることを確認した。<sup>11)</sup>

除染作業に超広角コンプトンカメラを資するためには、得られたイメージから、放射性物質の強度分布( $\text{Bq}/\text{cm}^2$ )を正確に定量化するアルゴリズムの確立が急務である。現在、現地等における較正実験の他、現地の状況を模擬したモンテカルロシミュレーションのコードの開発が進められている。また、複数の観測を組み合わせることで、原理的には、放射性物質までの距離を求めることが可能であり、現在そのアルゴリズムの開発も進めている。

## 6. おわりに

われわれは、独自に開発を行ったSi/CdTeコンプトンカメラを用い、福島県飯館村において、ガンマ線可視化装置の実証を行った。今後の除染作業において、超広角コンプトンカメラのコンセプトを最大限に生かすためには、感度を数倍から10倍程度向上させて、試作機が数10分かけて撮像しているような場所で数分以内で画像化することが必要である。また、住宅の周囲ばかりではなく、山林などにおいて使うことを求められているために、持ち運びが容易なように数kg程度の重量におさえること、さらに、除染作業による操作を容易にすることが、今後の課題であることも学んだ。現在、こうした課題を解決するためにより

高感度なカメラを作る計画が進められている。

今回試作した「超広角コンプトンカメラ」は、エネルギー分解能の優れたCdTe半導体を用いた検出器技術と極めて高度な実装技術が鍵となって実現した。これは、本研究室のこれまでの大学院生、アクロラド社、三菱重工業名古屋誘導推進システム製作所ほか、多くの方々の協力を得て進められてきた。また、シリコン検出器や読み出し用のアナログLSIは名古屋大学の田島との、また、スペースワイヤに基づくデータ収集装置は大阪大学の能町との共同研究の成果がこめられている。

#### 参考文献

1) <http://radioactivity.nsr.go.jp>

- 2) T. Takahashi, *et al.*: Proc. SPIE **8443** (2012) 8443 1Z-1; Proc. SPIE **7732** (2010) 77320Z.
- 3) T. Takahashi, *et al.*: New Astron. Rev. **48** (2004) 309; Proc. SPIE **4851** (2003) 1228.
- 4) S. Watanabe, *et al.*: IEEE Trans. Nucl. Sci. **52** (2005) 2045.
- 5) S. Takeda, *et al.*: IEEE Trans. Nucl. Sci. **56** (2009) 783; *ibid.* **59** (2012) 70; Phys. Procedia **37** (2012) 859.
- 6) A. Zoglauer and G. Kanbach: Proc. SPIE **4851** (2003) 1302.
- 7) 高橋忠幸, 中澤知洋: 日本物理学会誌 **59** (2004) 26.
- 8) 渡辺 伸, 佐藤悟朗, 高橋忠幸: 放射線 **36** (2010) 59.
- 9) H. Tajima, *et al.*: Proc. SPIE **7732** (2010) 773216; S. Watanabe, *et al.*: Proc. SPIE **8443** (2012) 844326.
- 10) M. Kokubun, *et al.*: Proc. SPIE **7011** (2008) 70110R-1.
- 11) JAXA 記者発表 ([http://www.jaxa.jp/press/2012/03/20120329\\_compton-j.html](http://www.jaxa.jp/press/2012/03/20120329_compton-j.html))

(2012年12月2日原稿受付)

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2013年1月に掲載可となったものの中から2013年2月の編集委員会が選んだ“Papers of Editors' Choice” (JPSJ注目論文)を以下に紹介します。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ため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。論文は掲載から約1年間は無料公開しています。また、関連した話題についての解説やコメントがJPSJホームページの「News and Comments」覧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深い論文を「注目論文」としてこの欄で紹介したいと思っています。物理学会会員からのJPSJへの自信作の投稿を期待します。

### 光で作られた隠れた準安定相

強い可視光で固体を光励起すると相転移が誘起されることが知られている。これを光誘起相転移と呼び、近年、精力的な研究がなされている。さて、通常の熱励起では、全ての低エネルギーの準粒子(格子振動、スピン波、等)の励起を通じて、新しい物質相への相転移が誘起される。これに対して、光励起では、電子系が共鳴的に励起される。つまり、光励起と固体中の相互作用を上手に組み合わせれば、熱励起では到達できない準安定相に到達できる可能性がある。

プルシャンブルー類似体 ( $A_xM[Fe(CN)_6]_y \cdot zH_2O$ : Aはアルカリ金属, Mは遷移金属)は、図1に示すようなジャングリング構造を形成する。この物質系は、古くは顔料(プルシャンブルー)、最近では、エレクトロクロミズム, Cs除去剤, 二次電池正極材料の有力候補として注目を浴びている。この物質系の特徴は、ゲストであるアルカリ金属イオンの量を電気化学的に制御できることである。中でも、コバルトプルシャンブルー類似体は顕著な相転移を示す。 $Na_{0.15}Co[Fe(CN)_6]_{0.71} \cdot 5.8H_2O$  薄膜 (NCF71) は、温度上昇とともに210 K付近で、薄膜の色が紫から赤に変化する。この色変化は、(1) FeサイトからCoサイトへ協力的な電

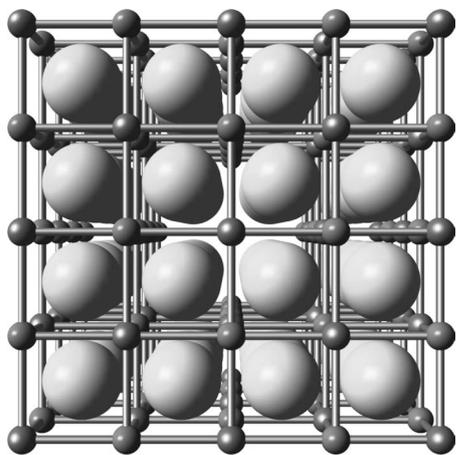


図1 プルシャンブルー類似体の模式図。シアノ基(棒)に架橋された遷移金属(小さな球)がホスト格子を形成する。このホスト格子の空隙をゲストであるアルカリ金属イオン(大きな球)が占有する。

荷移動(電荷移動相転移)と、(2)低スピン  $Co^{3+}$  から高スピン  $Co^{2+}$  へのスピン転移、によるものである。しかしながら、 $Na_{0.79}Co[Fe(CN)_6]_{0.90} \cdot 2.9H_2O$  薄膜 (NCF90) では、この電荷移動相転移は消失する。これは、NCF90薄膜ではCo周りの配位場が強いため、高スピン  $Co^{2+}$  が不安定化したためである。

最近、筑波大学数理物質系のメンバーを中心とする研究グループは、温度では相転移を示さないNCF90薄膜をフェムト秒レーザーで光励起を行い、Coの価数状態の時間発展を調べた。その結果、電荷移動状態である  $Co^{2+}$  の寿命が32 nsと極端に長いことを見出した。このような長寿命は、準安定状態の形成を強く示唆している。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2013年3月号に掲載された。

実験はフォトンファクトリーのNW14Aビームラインで行われた。NCF90薄膜のCoのK吸収端付近の時間分解X

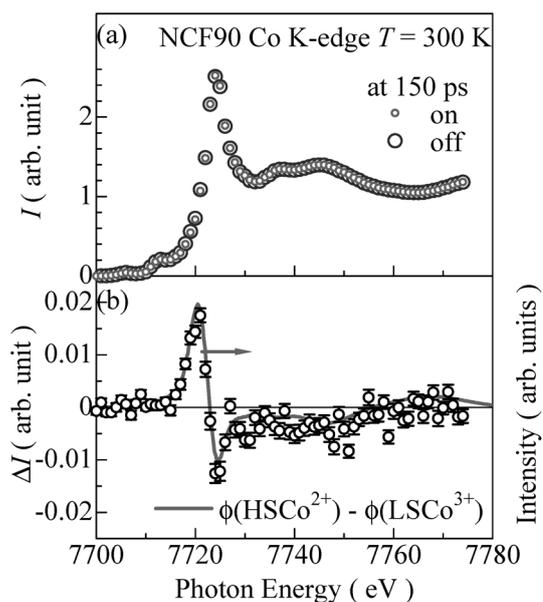


図2 (a) 光励起あり (on) となし (off) の条件におけるCoのK吸収端付近のX線吸収スペクトル。(b) 差分X線吸収スペクトル (○)。実線は、高スピン  $Co^{2+}$  のX線吸収スペクトル ( $\phi(HSCo^{2+})$ ) と低スピン  $Co^{3+}$  のX線吸収スペクトル ( $\phi(LSCo^{3+})$ ) との差分X線吸収スペクトル。

線吸収分光を行ったところ、光励起により高スピン  $\text{Co}^{2+}$  が形成されていることが分かった (図2)。形成された高スピン  $\text{Co}^{2+}$  の濃度 (0.007/Co) は励起光子密度 (0.005/Co) と同程度であった。高スピン  $\text{Co}^{2+}$  の立ち上がり時間が装置分解能 (100 ps) 以下であり、寿命は32 nsであった。筑波大学数理物質系を含む研究グループは、過去に、NCF90 薄膜の格子定数の時間発展を報告 [Y. Fukuyama, *et al.*: Applied Physics Express 3 (2010) 016601] している。それによると、フェムト秒レーザーで光励起を行うと格子定数はわずか (0.05%) 増大する。格子定数増大の立ち上がり時間は装置分解能以下 (100 ps) で、寿命は少なくとも1 ns以上である。これらの実験結果より、準安定状態とは、『格子が一様に広がった低濃度の高スピン  $\text{Co}^{2+}$  不純物が存在する状態』であることが明らかになった。

本研究では、第三世代放射光 X 線光源とフェムト秒可視光レーザーシステムを同期させることにより、隠れた準安定相に関する手がかりを得ることができた。しかしながら、まだ X 線パルスの幅が100 ps と広いため、その内側の時間で何が起きているかを知ることができない。次世代光源である X 線自由電子レーザー (SACLA) やエネルギー回収型線形加速器 (ERL) を使えば、この「不可知」の時間領域における相転移ダイナミクスが明らかになるであろう。

## 原論文

Photoinduced Phase Transition into a Hidden Phase in Cobalt Hexacyanoferrate as Investigated by Time-Resolved X-ray Absorption Fine Structure

Y. Moritomo, H. Kamioka, T. Shibata, S. Nozawa, T. Sato and S. Adachi: J. Phys. Soc. Jpn. 82 (2013) 033601.

(情報提供: 守友 浩 (筑波大学数理物質系)  
 上岡隼人 (筑波大学数理物質系)  
 足立伸一 (KEK 物質構造研究所))

## 磁気相関の次元性の制御による量子臨界点へのアプローチ

電気伝導を担う電子の有効質量が自由電子に比べ数百倍も重くなる「重い電子系」は、有効質量の増大に伴いエネルギースケールが非常に小さくなるため、絶対零度近傍の量子臨界領域の研究に適した系である。重い電子系では理論的に磁気相関の大きさが変化することによって系の基底状態が磁気秩序状態から常磁性状態に連続的に変化する「Doniach の相図」(図1(a)) という特徴的な相図が知られている。この時、絶対零度での二次相転移点は量子臨界点と呼ばれ、エネルギースケールの小さい重い電子系では、圧力や、磁場、元素置換といった制御パラメーターによって量子臨界点が現れることが知られている。加えて反強磁性量子臨界点近傍では、極低温まで磁気相関が発達し続けることにより通常の金属状態とは異なる振る舞いや、量子ゆらぎを媒介とした非従来型の超伝導の出現など、興味深い現象が観測されており、多くの研究者によって精力的な

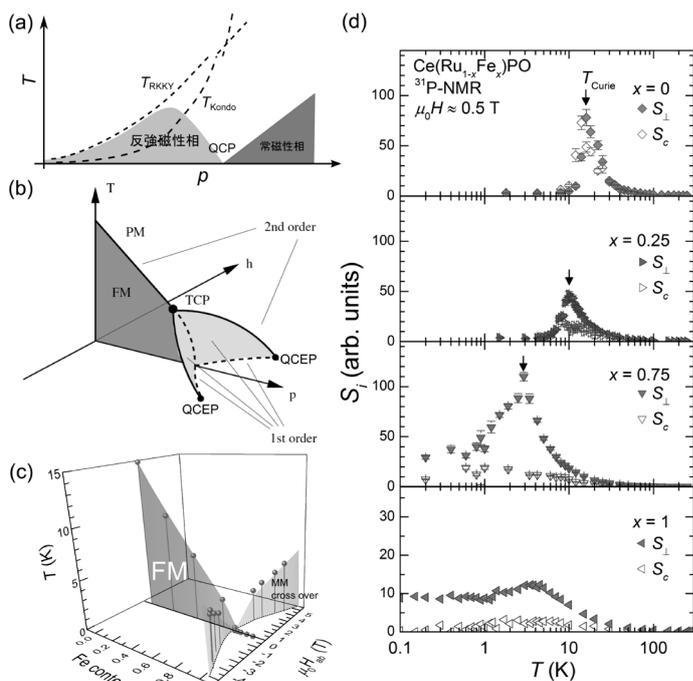


図1 (a) 「Doniach の相図」。縦軸は温度  $T$ 、横軸は制御パラメーター  $p$ 。磁気秩序状態を安定化させる  $T_{\text{RKKY}}$  と常磁性状態を安定化させる  $T_{\text{Kondo}}$  の大小で基底状態が決まる。多くの反強磁性物質の場合、制御パラメーターを変化させると反強磁性転移が2次相転移のまま抑制され、量子臨界点 (QCP) が現れる。(b) 理論的に提案されている強磁性量子臨界点近傍の三次元温度  $T$ -磁場  $h$ -制御パラメーター  $p$  相図。三重境界点 (TCP) を境に常磁性 (PM)-強磁性 (FM) 転移の次数が二次から一次に変わり、有限磁場中の量子臨界終点 (QCEP) につながる。(c)  $\text{Ce}(\text{Ru}_{1-x}\text{Fe}_x)\text{PO}$  の三次元温度  $T$ -内磁場  $H_{\text{ab}}$ -Fe 置換量  $x$  相図。Fe 置換により強磁性相 (FM) が抑制され量子臨界点が見られる。また、量子臨界点より  $x$  が大きい領域ではメタ磁性 (MM) クロスオーバーが起こる。(d) 核スピン-格子緩和率  $1/T_1$  から見積もった  $ab$  面、 $c$  軸方向の磁気ゆらぎ (それぞれ  $S_{\perp}$ ,  $S_{\parallel}$ ) の Fe 置換量依存性。CeRuPO ( $x=0$ ) で等方的だった磁気ゆらぎの異方性 ( $S_{\perp}/S_{\parallel}$ ) が Fe 置換に伴い急激に大きくなり、二次元的になっている。

研究が続いている。

一方、強磁性量子臨界現象の報告例は少ないが、反強磁性の場合と異なる相図が理論研究から提案されている (図1(b))。主な特徴は次の2つである：(1) 制御パラメーターを変化させ強磁性転移温度を減少させると転移の次数が二次から一次に変わり、量子臨界点は存在しない。(2) 強磁性が消えた常磁性相において一次の磁場誘起強磁性転移 (メタ磁性転移) が現れる。このような相図は  $\text{UGe}_2$  や  $\text{ZrZn}_2$  などのいくつかの強磁性物質で実験的にも確認されており、強磁性量子臨界点近傍の固有の相図と考えられていた。

最近になり、京都大学と慶応大学のメンバーからなる研究グループは層状構造を持つ重い電子系強磁性体  $\text{CeRuPO}$  に着目し、Ru サイトを Fe で置換することにより強磁性転移を抑制させ強磁性量子臨界点の存在を明らかにするとともに  $\text{Ce}(\text{Ru}_{1-x}\text{Fe}_x)\text{PO}$  の相図を作成した。得られた相図 (図1(c)) は従来の強磁性量子臨界相図と大きく異なる特徴を持っており、この強磁性量子臨界点の起源にも興味が集まっていた。

同研究グループは、 $\text{Ce}(\text{Ru}_{1-x}\text{Fe}_x)\text{PO}$  をより詳細に実験・解析し、磁気励起の磁場方向・Fe 置換量依存性を調べ

た。その結果、スピン空間における磁気ゆらぎの次元性や波数空間における磁気相関の次元性がFe置換により秩序相側の三次元から二次元に変化することにより強磁性転移が抑制され、強磁性量子臨界点が現れることを明らかにした(図1(c)参照)。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2013年3月号に掲載された。

本論文では、磁気相関の次元性という従来の「Doniachの相図」にはなかった制御パラメータを変化させることで、従来の強磁性量子臨界相図と大きく異なる相図が得られることを示した。これは、制御パラメータの豊富さや

量子臨界相図の多様性を示唆しており、今後の量子臨界現象の研究に新たな指針を与えると期待される。

#### 原論文

Ferromagnetic Quantum Critical Point Induced by Tuning the Magnetic Dimensionality of the Heavy-Fermion Iron Oxypnictide  $Ce(Ru_{1-x}Fe_x)PO$

S. Kitagawa, K. Ishida, T. Nakamura, M. Matoba and Y. Kamihara: J. Phys. Soc. Jpn. **82** (2013) 033704.

〈情報提供：北川俊作(京都大学大学院理学研究科)

石田憲二(京都大学大学院理学研究科)〉

### 『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. 19-1 (3月15日発行) 目次

宿題のすすめ……………嘉規香織  
**講義室**  
 学部の講義についての疑問・要望への返事……………清水 明  
 日本数学会教育委員会「大学生数学基本調査」について  
 —記述式入試の大切さが再認識された調査—……………真島秀行  
**教育報告**  
 総合入試と学習サポート……………竹山幸作, 前田展希  
 大学教養課程での放射線講義の取り組み……………鳥居寛之  
 中学生および大学生の電流と電圧理解に関する調査結果  
 ………………平島由美子, 市川裕介  
 物理教育における数値の丸め方の扱い……………大多喜重明, 長井清香

医学部における物理教育の現状……………高須雄一  
 若者の未来につながる物理普及活動を目指して  
 —物理プレチャレンジを例に—……………原田 勲  
**海外の動向**  
 韓国の高校物理教育視察報告……………山崎敏昭  
**図書室**  
 『科学をどう教えるか』……………笠 耐  
 『ヒッグス粒子の見つけ方』……………並木雅俊  
**教育に関する一言**……………山田弘明/覧具博義/森 篤史/北原和夫  
**開催情報**  
**編集後記**

# 放射線を科学的に理解するための教育

鳥居寛之 (東京大学教養学部・大学院総合文化研究科 153-8902 東京都目黒区駒場3-8-1)

## 1. はじめに

東日本大震災は我々の価値観をも大きく変える未曾有の災害だった。さらに追い討ちをかけるように原発事故が起り、被災地域はもとより、全国に影響を及ぼすこととなってしまった。放射線に関する知識不足から多くの人々が混乱し、様々な不確かな、あるいは間違った情報が飛び交っていた。事故後に安全発言を繰り返した政府への不信だけでなく、見解がばらついた科学者に対する信頼も凋落し、世の中の不安感が未だに尾を引いている。放射線への恐怖心から、あるいは「安全」な食品を求めて、福島のみならず東京を離れ、なかには海外に子どもを疎開させた親さえいる。そんななか、私は実験核物理・原子物理学を専門とする物理学者として、学生に対する教育の必要性を感じ、講義活動に奔走した。放射線を理解するには、物理・化学・生命科学・医学・工学など様々な分野の知識が必要となり、全てを網羅することが難しい。それは事故以来メディアに登場した専門家が様々な分野にわたったことから窺える。自身も講演会で様々な分野の専門家と知り合い、勉強を重ねた。一人の科学者・教育者として考え、行動した軌跡と体験を振り返り、そこで感じた様々な思いをここに綴りたい。

## 2. 原発事故と直後の混乱

2011年3月11日の揺れは東京でも大きなものであった。かつて神戸市の高校に通った者として、震源地からの情報不足にはいやな予感がしていたが、翌朝になって東北沿岸の悲惨な被害状況が明らかになる。皆が想像を絶する津波災害のテレビ映像に愕然とさせられていた矢先、福島第一原子力発電所の危機が伝えられ、ほどなくして水素爆発。その後の危機的状況と国じゅうの混乱は、各自がそれぞれの体験として記憶しておられることだろう。被災地や事故原発周辺地域の方々の苦勞に比べるべくもないが、遠く離れた首都

東京の日常風景も、金町浄水場から基準を超える放射性ヨウ素が検出されるやいなやペットボトルが売り切れたり、計画停電で列車運行が影響を受けたりした。辺り一帯が真っ暗の闇になった都会のマンションから、皮膚にもあのとほほ美しい星空を仰ぎ見たことはなかった。

テレビでは原発の構造の解説がなされ、マイクロシールドという聞き慣れない単位に人々が苦勞している矢先、今度はテラベクレルが登場し、多くは理解不能に陥った。放射線と放射能、放射性物質といった用語の混同は、むしろ年配世代に顕著だったように思う。

事故後の、時々刻々と固唾を呑む原発の推移状況のなかで、実験核物理の出身でありながら、原子炉のしくみすら知らなかった自分に気づき、慌てて勉強した。科学者として、知っているはずの核分裂反応の応用面に全く目を向けていなかったことを反省したが、原子力工学と原子核物理学との分野間の断絶が根底の問題としてあることを、後のシンポジウム<sup>1)</sup>で知ることになる。この問題は、震災後に核物理研究者によって様々な研究会などで議論されている。

核物理のメイリングリストでは原発事故直後から原発の状況や対処法などについて玉石混淆の様々な意見が流れる一方、簡易型の放射線計測器を開発しようといった建設的な議論もみられた。ツイッターやウェブページで原発の解説や放射線の知識を発信した専門家も多く、中には十数万人のフォロワーを集め有名になった方もいらっしゃる。<sup>2)</sup> 後には、研究者が力を結集して、福島周辺で土壌を採取して核種分析し、放射性物質による汚染実態を調査する<sup>3)</sup>などの貢献活動が随所に見られるようになった。

## 3. 放射線講義と書籍出版

原発事故1週間後の3月18日、東京大学では前日の工学部に引き続き、駒場キャンパスでも講堂で原子力工学科

の教員による放射線・放射能の勉強会が開かれた。内容は放射線や放射能とは何か、ニュースに出てくる単位の説明といった基礎知識だったが、会場は学生や教職員ら数百人で溢れていた。しかし、皆が一番聞きたいはずの、原発の状況とこれから起きるかもしれないシナリオについての質問は、箱口令でも出ているかのように封印された。

その日、初年次活動で知り合いだった2年生学生から、放射線について講義をして欲しいと提案されたことがきっかけとなった。それなりの科学的知識を与えるためには1回のセミナーなどでは不十分なので、有志学生を集めて、(いまどきは珍しい)自主講義を立ち上げることにした。自分なら原子核や放射線物理学はよく知っているし、学部時代より生物学科に通って放射線生物学を履修するなど、放射線が生体に及ぼす影響もある程度学んでいたから、ここは私の出番だという思いが背中を押した。一人の教員として個人ベースで始めたものである。

教養学部の物理教員には実験系は原子物理や物性などで、およそ原子力や放射線に詳しい人は見当たらない。素粒子物理・原子核物理の研究者も多数いるが、いずれも理論家であり、シールドなどという単位は聞いたこともないという。これには驚いたが、考えてみればこんな実用単位は放射線取扱の現場に直接関係のない人が知る由もなからう。むしろ、生命科学や化学の研究者のほうがなじみがあった。非密封トレーサーを使って実験する人は案外多い。私は講義に向けて、放射線物理学や放射線生物学、原子核物理学などの教科書を何冊も勉強し直し、またウェブページなどで新たな知識を得ながら準備を進めた。また、4月26日(折しもチェルノブイリ事故25周年の節目の日)には教員・院生向けの「放射線に関する講演・討論会」を開き、教員らに知識を提供するとともに、自身の理解が生物学の研究者からみておかしくないことを確認した。このと

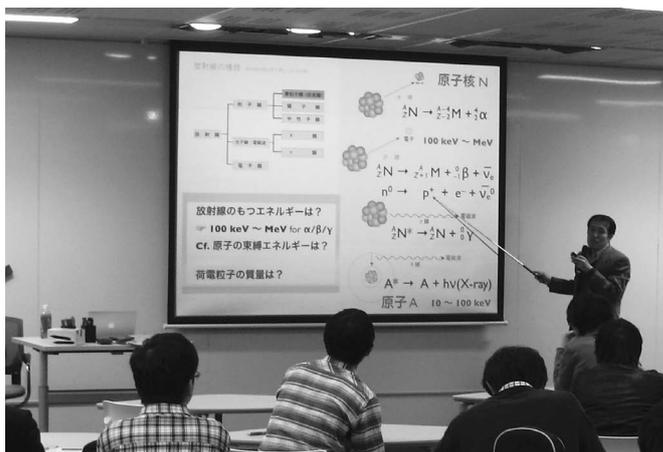


図1 放射線物理学のスライド例と講義風景。



図2 放射線生物学の講義で放射能の食品基準の説明に聞き入る学生たち。

き、環境放射化学の専門家が同じ建物にいることを初めて知った。若き研究者の小豆川氏で、4月上旬に福島第一原発正門前まで行って採取した土壌を分析しているという。

自主講義「放射線学」は5月から6月にかけて全6回、および最後に討論会を設けた。夏学期のカリキュラムはとうの昔に決まっていたため、急遽の開講で単位など出るべくもないが、チラシやツイッターなどでの宣伝の結果、初回到40名（うち1・2年生は28名）が集まった。毎週ごとに分野の違う内容に合わせてスライドを作成するのは大変であったが、それだけやりがいも感じた。後半は受講者が半減したが、これは基本的なことが分かれば満足したということかもしれない。一方で、ポスター掲示などを見て参加してきた外部一般人は毎回5名が最後まで熱心に聴講していた。

これを発展させて冬学期には、主題科目テーマ講義「放射線を科学的に理解する」として正式に開講した。教養学部の放射線取扱主任者を務める渡邊

教授（生命環境応答学）、先述の小豆川助教（環境分析化学）と3人で協力し、単にオムニバス形式に留まらない分野横断型の講義を目指した。例えば、放射線と物質の相互作用は放射線測定 of 原理に繋がる一方、生体のDNA損傷と密接に関係しているし、荷電粒子が停止直前でエネルギー付与が最大になる性質はがんの粒子線治療に利用されている。原子核物理学で理解される核種の崩壊（壊変）は放射化学の要の知識だし、放射性セシウムの除染や内部被曝評価にはセシウム元素の化学的・生物学的性質の理解が必要となる。これらの基本的内容に加えて、医学部・工学部・農学部からもゲスト講師を招き、放射線医療や農作物への影響も話してもらった。80名を超える初回受講者のうち半数が最後まで真剣に受講し、授業の評判も高かった。

このテーマ講義をまとめる形で、書籍『放射線を科学的に理解する』<sup>4)</sup>を執筆した。原発や放射線に関する書籍は特に原発事故後、巷にあまり溢れているが、多くは大衆向けの入門書に留

まっているし、なかには科学的でない偏った記述が散見されるものもある。一方で、放射線物理学などの専門書はその分野の研究者や学生以外には難しすぎて、広く普及することはとても期待できない。入門書と専門書とのレベルギャップを埋めるべく、本書は大学の理系1年生（あるいは理系の素養のある一般の方々）が読める難易度とし、福島事故後の現状を踏まえて様々な側面から放射線について記述した。大学講義のほかに、高校生向けの講座や一般市民向け講演会で話した数々の経験から、会場で聞かれた疑問・質問に答える形で巻末にQ&Aを設けている。なお、講義スライドはネット上で一般公開しているので、書籍と併せてご活用頂きたい。<sup>5)</sup>

翌2012年度の冬学期には、テーマ講義の2年目として、除染や廃棄物処理の専門家、更には、リスクコミュニケーションについて考えるために文系の科学技術社会論の教員も、ゲスト講師に迎え、より実践的なシリーズを展開し、やはり好評であった。文系の学生も5名ほど履修したのが特徴的である。掲げた2枚の写真はそれぞれ物理と生物の回の講義風景である。

#### 4. 多分野のセミナーで勉強と交流

講義に前後して、自分自身、様々な分野のセミナーやシンポジウムに出席して勉強を重ねた。注釈欄にリストを掲げる。<sup>6)</sup> 生物学・医学やリスク学の研究者、放射線防護学の専門家とも知り合い、意見交換ができた。なかでも、京都大学で開かれた研究会「原子力・生物学と物理」<sup>7)</sup>は電力会社や福島市の担当者、事故調査委員会委員長、物理学者、生物学者、小中高大の教育者、福島からの避難者を含む一般市民と、幅広い豪華参加者を集め、異文化交流できた貴重な機会であった。また、2012年3月に東京大学教養学部で博報堂や時事通信社とタイアップしたプロジェクト<sup>8)</sup>では、学生を被災地に派遣して震災がれき処理問題を考えた。広域処理に断固反対して受け入れ自治体に遠方から意見する人の中には、福島から避難して放射線への恐怖がトラウ

まのようになっている方々がいるという。現地で支援する専門家からそう聞いて、事故の罪深さを改めて感じた。

## 5. 放射線の影響を理解するために

放射線の人体影響については、様々な議論がある。それをもって低線量被曝の影響はよく分かっていない、とされるが、生命科学の進展は目覚ましく、詳しく研究されている事例も多い。ただ、がんのメカニズムが解明されていない以上、疫学調査に頼らざるを得ず、統計学的限界により結論が出せない部分ももちろん多い。医学的疫学調査をもとにした勧告が出されているが、それに対する批判もあり、別の調査結果や事例をもとに危険性を説く意見、広島・長崎やチェルノブイリの隠された真実を暴くとするテレビ番組などを見るたびに、真実は何なのか、自分の立ち位置がぶれそうで、長いこと悩んだ。

世の中の侃々諤々たる議論とは裏腹に、講義の受講学生は至って冷静というか、素直に教員の言うことを受け止めているのだが、原爆や冷戦時代の核実験になじみのない世代だからだろうか。むしろ自主講義に参加していた一般聴講者のなかに、ことさらに危険性を問うてくる人がいた。

科学者として何を信じ、何を発信すべきなのか。物理学者としては、白黒つかないトランスサイエンスと呼ばれる問題への対処法には慣れておらず、戸惑いつつも、科学に対する自分の考え方を大きく見詰め直す機会となった。学術会議や学会で放射線生物学や放射線防護学の専門家らの講演を聞き、意見交換しながら、科学で分かっていること、まだ議論のあることについて自分なりに整理をつけていった。放射線に詳しい分野の物理学者は、多くが原子核や素粒子といった高エネルギー物理学の実験研究者だと思われるが、そのなかで放射線生物学の知識を持っている人は非常に少ない。自分で納得するには、物理学者だけで議論していても当然だめで、様々な分野の専門家と直接話す必要がある。

放射線防護の考え方は複雑で、第一原理から科学的に全てが決まると思い

がちな物理学者にはどうもなじみにくい側面があろう。特に、シーベルトは物理学的な吸収線量に、生物学的効果比を加味した等価線量、またはそれに臓器ごとの係数をかけて積算した実効線量であるが、低線量領域でのがんの影響について議論があるなか、無用の被曝はなるべく避けるという防護の考え方に基づいて人為的に定めた線量であって、ある意味でひとつの目安に過ぎない。そのことを納得していないと、線量は予防にのみ使い、既に起きてしまった被曝に対するリスク評価に使うべきものではないとする国際放射線防護委員会(ICRP)の説明は理解しがたいものとなる。一般人には、低線量で生物学的影響が実際に起きるかどうかは確率でしか分からないという統計学的議論も、その確率をどう理解して行動すればいいのか、判断に困る要因となっている。

放射線は多分野にまたがる反面、分野の狭間にあってマイナーな学問と捉えられがちだ。例えば医学部の教育のなかでも、医師免許国家試験と無関係な放射線治療分野について興味を持つ学生は稀少なので、多くはあまり理解しないまま卒業してしまうのだそうだ。自身の体験として、震災前に胸部CTスキャンを撮ることになったが、画像撮影専門のクリニックで問診した若い女医が線量についての私の質問に答えられず、「通常のレントゲン検査と同程度」というまるで間違った答えを返されて驚愕した。スキャンは様々な角度からX線撮影して3次元データを構築するものであって、レントゲン検査に比べて150倍ほどの被曝量があるのである。さらには、放射線技師が口にした線量値も、900 mSvという驚くべき誤った数値であった。<sup>9)</sup>

これからは日本でも、放射線を物理学、生命科学の両面から理解する人材の育成に力を注ぐ必要がある。特に、がんの放射線医療に必要な不可欠にも関わらず米国に比べて有資格者が一桁少なく、圧倒的に不足している医学物理士の育成問題は緊急の課題であろう。

## 6. リスクコミュニケーション

今回の原発事故では、放射線の影響

についてリスクをどのように伝えるかという難しい課題が浮き彫りになった。テーマ講義で素晴らしい授業をされた東大病院放射線科の先生などは、政府や原発業界とは何の関係もないにも関わらず、安全だという発言があげつらわれ、御用学者としてネットで散々に非難を受けてしまった。線量を考えれば、放射線そのものによる影響よりも、それを不安視することによる食生活の乱れや運動不足、ストレスなどの健康影響の方がよほど大きいということ。を医者として大変懸念された上での発言だったのだが、その本意がうまく伝わらないと嘆いていらした。常に患者の死のリスクと向き合い、判断を迫られるなかでは、様々なリスクを天秤にかけて考える必要がある。それを専門家として判断して示すべきとの信念なのだが、一方で、同じ放射線科医でも、リスクについては科学的事実を示した上で、判断は個々の患者や市民に委ねるべきと考える医師もいる。市民(患者)は自分で意思決定できる反面、自己責任という重い負担を負うことにもなる。放射線の「専門家」がどう市民と向き合うべきか、難しい課題である。ただ、自戒を込めて思うには、科学者は自分の知識を世に広めようとするあまり、踏み込みすぎるきらいがあるように思う。2012年3月の物理学会ではいくつかのセッションで科学者の社会的責任について議論されたが、<sup>10)</sup> 科学における共通認識としての科学的事実をきちんと社会に伝えることが我々の役割なのであろう。伝え方も、知識を教授するという態度だと上から目線と取られ、信頼してもらえないという意見があった。市民に寄り添いながら粘り強く伝えていく努力が大切で、「安全」と「安心」の許容レベルをどう決めるのかについては、「社会」の合意形成と市民ひとりひとりの判断に任せるという姿勢が必要なかもしれない。

## 7. 科学者の連携と教育の重要性

放射線の関わる分野は広範囲にわたり、一人の「専門家」で全てを理解・把握することは不可能だし、事故後の

諸問題には特定分野だけではとても対応しきれない。物理学・生命科学・医学・社会科学を含めた総合的な科学者の連携と発信が求められている。物理学者も、自分の専門の範囲内だけで議論するのではなく、生物学を学んだり、他分野の人の意見を聞いたり、視野を広げて考えてみることをお勧めしたい。

また、これからは、一般市民に対しても粘り強く説明していく姿勢と、学生に対する多角的内容の教育プログラムの構築が必要だと感じている。原発事故そのものについては物理学でも議論されているが、今後の教育について、もっと学者間の議論があっているのではないかと思う。核物理分野と領域1の原子・分子、放射線物理分野との連携も必要だ。これまで過去30年以上にわたって、我が国では系統立った放射線教育がほとんどなされてこなかった。高校の物理Ⅱに選択単元があっても履修者はごくわずかだし、大学で学ぶ機会も極めて限られている。私の学生時代を振り返っても、物理学科ですら放射線に関する講義はなかった。学生たちの潜在的関心が高い今、学科を問わず全ての学生を対象にした放射線科学の教育機会が必要だと痛感して

いる。知識を持つ教員の皆さんが協力して、それぞれの大学で取り組みがなされることを期待したい。ここにご紹介した東京大学教養学部での事例がその参考になり、スライドや書籍<sup>4,5)</sup>が教育上の共通の資産となれば幸いです。

#### 注釈・参考文献

- 1) 日本物理学会主催「物理学者から見た原子力利用とエネルギー問題」(立教大学, 2011年6月10日)。
- 2) 原発事故後からネットで情報発信した方の例: 東京大学付属病院放射線科, 中川恵一准教授ほか team\_nakagawa; 東京大学大学院理学系研究科, 早野龍五教授; 高エネルギー加速器研究機構, 野尻美保子教授。
- 3) 文部科学省「東京電力株式会社福島第一原子力発電所の事故に伴い放出された放射性物質の分布状況等に関する調査研究結果について」(2012年3月13日報道発表)。
- 4) 鳥居寛之, 小豆川勝見, 渡辺雄一郎著, 中川恵一執筆協力: 『放射線を科学的に理解する—基礎からわかる東大教養の講義』(丸善出版, 2012)。<sup>\*</sup>
- 5) 放射線の講義スライドのネット公開: <http://radphys4.c.u-tokyo.ac.jp/~torii/lecture/>
- 6) 別項に挙げた以外に, 理化学研究所原子物理セミナー「低線量放射線の生体への影響」(2011年6月6日); 日本学術会議緊急講演会「放射線を正しく恐れる」(2011年7月1日); 東大病院講演「チェルノブイリから福島を学ぶ」(2011年10月28日); 日本アイソトープ協会勉強会「ICRPを読み解く—第2回—」(学生会館, 2012年2月13日); 東京大学大学院
- 7) 京都大学基研主導研究会2012「原子力・生物学と物理」(2012年8月8日~10日, プレ・コンファレンス8月7日)。
- 8) 東京大学, 博報堂, 時事通信社, 特別協力: 環境省「災害廃棄物処理を考えるプロジェクト」(2012年3月)。
- 9) 30 mSvを30 cmにわたってスライスしながら撮影したという意味で, Dose Length Product = 900 mSv cm という意味だったようだ。
- 10) 日本物理学会第67回年次大会シンポジウム, 物理と社会「福島原発事故から1年: これまでとこれから」・「科学者の役割とは何か: 不確実性の中での科学と社会」・「福島原発事故と物理学者の社会的責任」(関西学院大学, 2012年3月)。

<sup>\*</sup> 編集委員会注: 本号「新著紹介」欄に書評記事あり。

(2013年1月16日原稿受付)

## ゴダード体験記

坂本貴紀 (青学大理工)

私は2004年3月に博士号を東工大で取得後、その年の9月からアメリカのNASAゴダードスペースフライトセンター(Goddard Space Flight Center; 以降ゴダード)で約8年間ポスドクとして働いた。私の場合は幸運な事に8年間通して、Swift衛星プロジェクトの研究員という身分で自分のやりたい研究に専念できた。一方で、プロジェクトの予算が途絶え、厳しい境遇に陥ったり、他のプロジェクトの仕事をする必要に迫られた同僚なども多く見て

きた。また、私生活においては、アメリカでの妻との新婚生活、2人の子供の出産など、様々な経験をした。私のアメリカで体験したポスドク研究者の状況や生活環境を述べる事で、海外にてポスドクを過ごしたいと考えている若手読者の役に少しでも立てればと思い、本誌への執筆を許諾した。個人的な主観を述べる事が多くなると思うが、ご了承いただきたい。

それでは、どのようにしてゴダードで仕事をする事になったのかという事

## ラ・トッカータ

から始めたい。研究職希望だった私は博士課程後期3年目の院生が行うように、博士研究をまとめるのに忙しい時期に時間を裂いて、学振の博士研究員の公募書類を書き、提出するが採択されなかった。そして、博士論文の執筆がピークを迎えていた時期に、指導教官やアメリカの共同研究者の方々の勧めでNASAのポスドク公募<sup>\*1</sup>に応募し、2004年の5月か6月に採択の通知がFedexのパッケージでNational Re-

<sup>\*1</sup> 当時はNRCがNASAポスドクプログラムのコントラクターとなっていたが、2006年にコントラクターがNRCからORAUに変わり、NPPと名称が変わった。現在もORAUがコントラクターでNPPは続いており、年3回applicationを受け付けている。くわしくは<http://nasa.orau.org/postdoc/>を見ていただきたい。

search Council (NRC) から届き、非常に喜んだのを今でも覚えている。しかし、その後は9月に渡航するための準備と12月の結婚式の準備が重なってしまう事となり、結婚式の準備は妻に任せっきりになってしまった(という事で結婚する前から妻には頭が上がらなかった)。アメリカで仕事をするため、ビザを入手する必要があるが、NRCのInternational officeの方のすばらしいサポートのおかげで、大きな問題もなくJ-1ビザが発行され、また、航空チケットも用意され、9月の終わりに単身で渡航した。妻は10年間働いた会社を翌年の3月に辞め、4月にアメリカに来てくれた。こうして、公私共々アメリカでの新生活がスタートした。

ゴダードはアメリカ、メリーランド州のグリーンベルトという町に位置する、NASAの一研究所である。敷地内には30近い建物があり、地球物理、宇宙物理、太陽物理、そして惑星科学などの研究や装置開発に携わる約1万人の研究者や技術者が主に働いている。<sup>\*2</sup> 不定期に行われるopen houseの日を除くと、ゴダードに入構するには職員でも例外なく入構バッジが必要で、妻でもバッジを持っていないと入れない(ただし、職員の子供はバッジなしで入れた)。キャンパス内には研究や開発のための施設以外にも、カフェテリア、託児所、レクリエーションセンター、あまり整備されていないサッカー場やメインキャンパスの外ではあるがソフトボール場や天文台もある。Goddard Employees Welfare Association (GEWA) に属する50近いクラブがあり、職員の課外活動の場を提供している。ちなみに私はGEWAのサッカークラブに属しており、ゴダードのリーグ戦に参加していた。所属していたサッカーチームのメンバーたちと戦ったゴダードリーグは、ゴダードでの忘れられない思い出のひとつである。

ゴダードで働きだして最初に驚く事は、朝9時には出勤し、午後5-6時には家に帰り、家族と夕食をともにする

人が多い事である。仕事後に同僚などとお酒を飲みに行く事はたまにはあったが、日本に比べると頻度は圧倒的に少ない。ゲストが来た時のもてなしや送別会なども昼ご飯の時に設定される事が多い。夜遅くまで働き、様々なイベントが夜に行われる日本とは働き方が違う事を痛感させられた。私のように家族がいると午後5-6時にはオフィスを出て、家族との時間を大切にするアメリカでの研究スタイルの方が家族と仕事のバランスを取りやすく、妻の育児に対するストレスも軽減できていたように思う。

私がゴダードで働いていた時にひとつ決めていた事に、昼ご飯をゴダードの同僚と一緒に食べるという事がある。4-5人のアメリカ人と英語が堪能でアメリカ生活の長いドイツ人ポスドクと昼ご飯を一緒に食べていたが、昼食時の話題はNASAの事だけでなく、アメリカの政治や家族の事など多岐にわたっていた。当初は話している内容の半分も理解できず、会話にもほとんどついていけなかった。当然、自分の意見もほとんど言えず、自分から話題を振る事もできなかった。しかし、分からないながらも昼食の輪に参加していた事で、同僚とはいち早く仲良くなれたし、家族ぐるみで付き合える同僚もできた。また、仕事においても「こいつとはコミュニケーションをとれる」という印象を与えられたようで、気軽に話しかけてくれる同僚も多かった。海外で研究をする上でコミュニケーションというのは大きな壁のひとつだと思う。私は昼食を同僚とともにするという些細な事を毎日続ける事でこの困難を突破できたように思う。

ゴダードには約1万人の研究者や技術者が働いているという事は前にも述べたが、その内NASAの正規職員は3分の1にしか満たない。残りの3分の2はコントラクターと呼ばれる人達である。コントラクターはゴダードにオフィスを持ち、100%の時間をゴダードで過ごしていても、NASAではない所属と身分を持っており、給料はその所属先から支払われる事になる。NPPもNASAのポスドク制度ではあるが、Oak Ridge Associated Universities

(ORAU) という機関の所属で、表向きはORAUから給料が支払われる形になる。私はNPPの任期が終わった後は、University of Maryland, Baltimore County (UMBC) の Research Associate という州立大学の研究員という身分になったので、給料体系や健康保険などはメリーランド州の職員と同じものが適用された。しかし、コントラクターの給料の大元はNASA関係のプロジェクトから出ている。そして、コントラクターは基本的に1年契約(毎年更新)で、給料の大元となっているプロジェクトの予算がなくなったら、契約が切られても本人は文句が言えない(契約時にそういう内容の書類にサインをするので)。

そこで、コントラクターの問題となってくるのは、自分の関わっていたプロジェクトに予算がつかなくなった時である。我々のような高エネルギー天体の観測を研究のメインテーマとしている研究者は人工衛星による観測が不可欠である。衛星が打ち上がって間もない期間は新しい観測データが次々と出てきて、NASA内での評判も良いため予算は安定しているのであるが、打ち上がってから3年や4年目になると、新しい結果はだいたい出尽くしてしまい、“新しい”衛星としてのインパクトが薄れてくる。また、衛星の運用延長をNASAに申請するには、2年に1回行われるNASA Senior Reviewを受ける必要がある、そのレビューで評価の悪い衛星は予算が減らされたり、衛星の運用延長が認められなかったりする。一緒に昼ご飯を食べていたコントラクターの同僚が関わっていたヨーロッパのガンマ線観測衛星のNASAとしてのサポートの延長が認められないという事が起こった。彼はその衛星の米国側のサポートメンバーとして自分の給料を賄っていたが、予算が認められなくなったため、3つの他のプロジェクトに参加する事により自分の給料を工面する事となった。僕がゴダードを去る前には、彼は自分の給料の100%をもはや工面できなくなっており、ゴダードに週4日しか出勤しないという事を始めていた。その他にもNASAの衛星についているゲスト向け

<sup>\*2</sup> <http://www.nasa.gov/centers/goddard/home/index.html>; [http://en.wikipedia.org/wiki/Goddard\\_Space\\_Flight\\_Center](http://en.wikipedia.org/wiki/Goddard_Space_Flight_Center)

の予算 (Guest Investigator Program や Astrophysics Data Analysis Program) や National Science Foundation (NSF) の予算などの競争的資金で自分の給料を賄っているコントラクターもゴダードには大勢いる。これらの人は競争的資金の獲得に失敗すると自分の職が危なくなるため、一年中、多くの提案書を書くはめになり自分の研究に集中できず、つらい境遇に陥りやすい。

話を一変して、ゴダードでの生活について述べていきたい。住む場所であるが、当初の考え方が甘かった事が治安である。ゴダードのすぐ近くにアパートがいくつかあるが、ゴダード周辺の治安はあまり良くない。私は最初、ゴダードに一番近いアパートで年間契約をしたが、そのアパートの駐車場で車上荒らしにあったという話やアパートの敷地内でパトカー4-5台に囲まれて手錠をかけられている若者を目撃したりと良い心地はしなかった。特に家族がいる場合は、安易に住む場所を決めずに、しっかりと周辺の治安情報を集めた方が良い。

私は妻との新婚生活をアメリカで始める事になったが、妻はアメリカに来た事がなかったため、当然周りに友人はいない、家族や親族もいない環境での新生活となった。実際、アメリカに来てからの最初の数ヶ月は、妻はやる事がなく家で日本から持ってきたドラマのDVDを繰り返し見たり、近くのスーパーマーケット内を何も買わずぶらぶらしたりという生活をしており、妻の弟が心配してアメリカに来た事もあった。このままではいけないと思い、私は妻にボランティアをするように勧めた。インターネットでスミソニアン航空宇宙博物館でのボランティアの募集を見つけ、半分強制的に応募させ、採用してもらえた。妻は現在でも飛行機や宇宙などに全く興味を持っていないが、航空宇宙博物館でのボランティアは楽しかったようで、一緒にボランティアをしていた人と仲良くなり、アメリカ人と英語でコミュニケーションをとる事にも自信ができたようだった。この事を期に、妻のアメリカでの生活がだんだん充実してきて、私自身

安心した。家族とともに渡航する場合は、家族は知り合いがなく、何も分からない環境下に置かれるので、家族の言動には十分注意し、できるだけサポートをしてあげる必要があるように思う。

最後にアメリカでの出産や子育てについて述べたい。幸いにも我々の場合は最初に訪問した産婦人科の先生との相性が良く、2人の娘両方ともその先生にみていただいた。アメリカの病院は分業しており、主治医の先生は小さなオフィスに出勤し、患者の問診を主にする。超音波検査を主治医に行うように言われたら、主治医のいるオフィスには設備がないためできず、そのような検査を専門に行っている機関に行き、検査を受ける必要がある。当然、主治医のオフィスで子供を取り上げる事はできず、実際の出産はしっかりと設備のある大きな病院で行われる。我々の場合は車で20分程度の場所にある病院となった。1人目の娘の時は午前2:30頃に妻の陣痛が始まり、私は仕事上、突発天体発見のアラートで夜中叩き起こされるのに慣れてはいたが、この時間に苦しい声をあげる妻をのせて、車で夜中に病院に行くのはさすがに辛かった。アメリカでは無痛分娩が主流で、妻も無痛分娩で2人の娘を出産した。ありがたい事にその費用は全て保険でカバーされた。また、入院の期間も出産してから2日間である。この期間は保険会社が出産における入院費用をカバーする期間で決まっており、母体に大きな問題がない限り、出産後2日で退院させられ、我々も例外ではなかった。私の妻の場合は出産後も至って元気で、2日で窮屈な病院を退院できたのが逆によかった印象を持った。また、出産に掛かった費用のほとんど全てが、保険でカバーされ、我々が出産に関して払ったのは病院の施設利用費に相当する\$200だけだった。

上の娘が3歳になった時に上の娘を Greenbelt Nursery School (GNS<sup>\*3</sup>) に入園させた。我々は上の娘とは家中では、

<sup>\*3</sup> 学校は午前中で終わるので、日本でいう所の保育園に相当すると思う。

日本語でしかコミュニケーションを取っていなかったのが、娘にとっては初めて英語だけの環境にさらされる事となった。最初こそ、学校へ行くのに手間取ったが、GNSのすばらしい先生と子供の驚くべき順応力のおかげで、数ヶ月もすると喜んで学校に行くようになった。また、GNSでは両親が先生達のアシストをする月謝が安くなるcoop(コアープと発音する)という制度があり、月謝が安くなるという理由だけでなく、子供たちの様子も実際に見る事ができるという理由から我々はcoopを選んだ。このcoopのdutyは月に3回程度まわって来て、学校が始まる30分前に学校に行き、開園準備の手伝いに始まり、園児が来たら園児と一緒に遊んだり、絵本を読んであげたり、スナックタイムの準備をしたり、そして最後は教室のそうじで終わるといふヘビーな仕事で、朝8:30から昼の12時まで学校に拘束される。2人目が産まれてからは妻がcoopする事ができなくなり、私が全てのcoopを行っていた。そこで感じたのが、アメリカ人の父親が多くcoopに参加していた事である。日本に帰ってきて分かったが、日本の幼稚園の「父」母参観で父親が参加している家族は非常に少ない。アメリカでは父親は積極的にこのような園のdutyや行事に参加をする。この事は是非日本人がアメリカ人に学んで欲しい事ではある。

書きたい事をだらだらと書いたため、海外でポストドク生活を送りたいと考えている方の参考になったかは疑わしいが、私の体験談から何かを感じ取っていただければ幸いである。私は博士号取得後すぐに、海外でのポストドクを経験できて、仕事においても、生活においても大きく成長でき、大変良かったと思っている。この体験談でも述べたように海外で仕事や生活をする上での様々な大変な側面を見たり、経験したりしたが、海外での経験は明らかに私にとってプラスであった。機会があれば、是非海外に長期間滞在し、日本の研究現場や生活環境との違いを体験してみたいかがだろうか。

(2013年2月15日原稿受付)

## 畏友高橋康博士を悼む

亀淵 迪\*

Ward-高橋の恒等式で知られるカナダ Alberta 大学名誉教授高橋康博士は去る2月12日 Edmonton において逝去された。行年88。

大阪の生まれであるが台湾・本州を転々、戦争末期、電波科学専門学校（東海大の前身）に入学。初代校長がかの仁科芳雄博士で、教授陣には理研仁科研の人々が顔を揃え、生徒たちに研究最前線の雰囲気を与える。とくに武谷（三男）先生の中間子論の話に感銘を受け、自らもその道に進もうと決意。彼の勧めに従い、その盟友坂田（昌一）教授の居る名大物理学科へと進む。

1950年春、3年生（旧制の最終学年）になった高橋氏は卒論を書くためにE研（素粒子論研究室）に入ってくる。実はその前年から私もE研に属しており、ここで初めて氏と親しく言葉を交すこととなる。以来六十有余年、両者の交友・協働が続く。共著論文も各地で十数篇書いた。

1953年、氏は武者修行を志してか海外へ。Rochester, Ottawa に各1年、Iowa City に2年、1957年にはアイルランドのDublin Institute for Advanced Studies (DIAS) に移り、ここで後に教授となる。1968年 Alberta 大学（在Edmonton）に転じ、退職後も同地に留まり今日に至った。

氏の業績リストには百数十篇の論文が並び、場の理論とその広汎な一素粒子・物性から脳科学にも及ぶ一応用が論じてある。ここではしかし、氏の名前を高からしめた恒等式の成立過程について一言しておく。

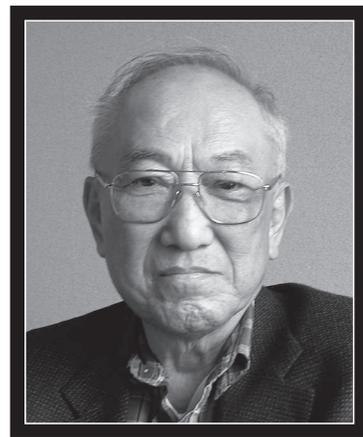
Iowa 大の Post-Doc だったとき、教授の J. M. Jauch が示唆した問題は“QED の繰り込み定数のすべては有限

ではないと G. Källén (1952) が主張しているが、その原因を明らかにせよ”であった。実際 Källén の論文は式の羅列であり、結論への論理的道筋が全く不明確であった。しかし2年間の努力にも拘らず、所期の解決には至らなかった。ただその過程で Ward の恒等式の一般化に相当する関係式が得られたのであった。南部（陽一郎）氏の助言に従い、一般化の部分だけを纏めて *Nuovo Cimento* に送り（1957）、氏はヨーロッパへと旅立った。

Ward-高橋の恒等式は QED のゲージ不変性に起因するグリーン関数間の関係式であり、その成立は予想されてはいたが、厳密な証明がなかった。実際 Dublin に着いて間もなく、氏は R. Stora から一通の手紙を受け取る：“いわゆる Yennie trouble のため、私たちは厳密な証明を阻まれていた”とあった。これに対する氏のコメントは“そんなことなど全く知らなかったので、自分には何の trouble もなかった”とか。Ward-高橋の恒等式はその後氏自身および他の人々によってさらに一般の場合に拡張される。こうした式のことを氏は (generalized) Ward relation(s) と呼んでいた。

欧米での経験が深まるにつれ、氏は徐々に自らの学風を確立してゆく。Dublin での11年はその意味で正しく決定的であった。

当時の DIAS には古典物理学の権威である老教授 J. L. Synge (所長) と C. Lanczos が居た。毎週月・水・金の午前にはお茶の会と稱して皆が図書室に集まり、二人を囲んで議論や雑談にふけるのであった。若輩にとってこれは貴重な修業の場であり、私も半年間その恩恵に浴した。とくに Synge は毎回のように新しいアイデアを持ち出し、



“これは思いついたばかりで、まだ tidy up してないのだが”と前置きし、議論を始めるのであった。アイデアを整理し綺麗な形に纏めることは、それを考え出すことと同程度に重要なのだ、との教えがここにあった。高橋氏の論文が理路整然として明晰であり、式が簡明で分かり易いのは、この教訓のお蔭であったろう。老教授たちからはまた古典物理学の真髓、とくにその整序性について徹底的に教え込まれた筈であり、これが氏の古典的教養の基盤となる。このように氏は、古き良きヨーロッパで鍛えられた先達たちから多くを学び、自らの成長の糧として行った Edmonton でそれが開花する。

他方氏はまた、物理の様々な分野の、十数冊にも及ぶ教科書の著者でもあった。それらが広く世に受け入れられたのも、論文同様に明晰だったからであろう。ただ“量子力学の教科書だけは自分には書けない”との一言が印象に残る。形式と解釈の二重性が古典的整序性を損ねると感じたからであろうか。

氏についての憶いは尽きないが、紙幅は尽きた。寸心・西田幾多郎は後輩哲学者の死を悼み、ゲーテの詩を訳して墓石の背面に刻した。これに倣い私も、名訳として知られる寸心訳を、長きにわたる友情への感謝と告別の言葉として手向けたい：“見はるかす山々の頂 梢には風も動かず鳥も鳴かず までしばし やがて汝も休はん”。

\* 筑波大名誉教授

B. Schutz 著, 江里口良治, 二間瀬敏史訳

## 第2版 シュッツ 相対論入門; ハードカバー版

丸善, 東京, 2010, x+529p, 22×16 cm, 本体7,600円 [専門~学部向]

ISBN 978-4-621-08309-3

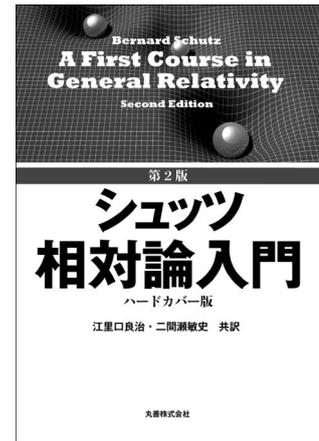
早田次郎 (京大院理)

本書の「まえがき」にある「第3版では重力の量子化の章を含めることになるだろう」という記述からは、現在も研究の第一線にいる研究者から未来の研究者への贈り物という印象を受ける。

私がシュッツ教授の名前を最初に知ったのは、「物理学における幾何学的方法」に出会った大学3年の時であった。当時はまだ和訳はなかったが、その数学的記述の美しさに魅了されて夢中で読んだ記憶がある。大学院に入って初版「相対論入門」の和訳を見つけたときはシュッツ教授の著作ということですぐに買って読んだ。前作を読んでいたため、数学的な記述の仕方に戸惑いは無く、むしろランダウの「場の古典論」より馴染みやすく感じた。私の相対論の知識は全てこの教科書から得たものである。

あれから四半世紀が過ぎ、私自身も重力波や宇宙論の研究を生業としてきた。私がそれなりに研究者として生きてこられたのも、このシュッツ教授の教科書のおかげである。翻訳の労をと

られた江里口教授と二間瀬教授にも感謝している。大学院卒業から現在まで、私自身、研究者として相対論の発展をリアルタイムで目にしてきた。特に宇宙論の発展には目覚ましいものがあった。そして、重力波観測は、今まさに佳境を迎えようとしている。今回の第2版の和訳はタイムリーとしか言いようが無い。この書評を書くにあたり、大学院の頃買ったポロボロの本を引っ張りだして比較してみた。前半部分に大きな違いは無い。予備知識を必要とすることもなく特殊相対性理論の幾何学と物理学が身に付く。その延長として自然に一般相対論が習得できるようになっている。章末の演習問題は、諸概念を理解するために有益である。後半の重力波、ブラックホールの章には新しい節が加わっている。宇宙論の章は最近のノーベル賞受賞テーマである加速膨張宇宙の観測も取り入れ、完全に新しくなっている。ありがたいことに全ての章で文献が更新されている。また、よく読むと学生がつまりそうなところで丁寧な説明が加わっている。



後半は、著者の専門の重力波の視点からの記述が(重力波の章以外でも)多く見受けられる。近い将来重力波が発見されれば、間違いなくノーベル賞の対象となることを思うと、この教科書で重力波を初歩から理解しておくことは無駄ではなからう。

第2版「相対論入門」は、もともとのエレガントな数学的記述と物理のバランスの良さそのままに、最新の観測や研究の動向まで加えることで、一般相対性理論を深く学びたいと思う学部学生には最高の入門書となった。もちろん、重力を専門としない研究者が、忘れてしまった昔の知識をよび返す、あるいは最近の相対論分野の発展を知るためにも本書は有用である。

(2013年1月9日原稿受付)

松田博嗣, 恒藤敏彦, 松原武生, 村尾 剛, 米沢富美子

## 物性I; 物質の構造と性質

岩波書店, 東京, 2011, xii+481p, 22×16 cm, 本体7,200円 (新装版現代の物理学の基礎6)

[専門・大学院向]

ISBN 978-4-00-029806-3

中嶋貞雄, 豊沢 豊, 阿部龍蔵

## 物性II; 素励起の物理

岩波書店, 東京, 2012, xiii+378p, 22×16 cm, 本体6,800円 (新装版現代の物理学の基礎7)

[専門・大学院向]

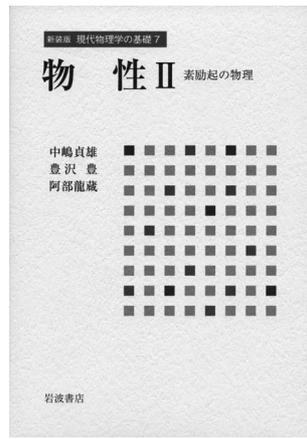
ISBN 978-4-00-029807-0

塚田 捷 (東北大WPI-AIMR)

名著の評判が高かった湯川秀樹監修「現代物理学の基礎」シリーズ(岩波書店)が、最近、新装版として再刊行されたことは喜ばしいことである。このシリーズは1972年刊行、1978年に増

補されたので、30数年ぶりの再出版である。旧版と内容は同じであるが、初刊本でタイトルページ裏にあった章毎の担当著者リストが今回の新装版ではなくなっている。シリーズ第6巻「物

性I」では物質の構造と電子状態を中心に、第7巻「物性II」では固体中の素励起を中心に、物性物理の基礎的コンセプトを丁寧に解説している。あまりにも多様な凝縮系の構造と物性について、各論のばらばらな羅列ではなく一貫した視点から統一像を提示するのは至難のことだが、本書はこの試みに成功したよい例といえよう。「物性I」では物質の構造と電子状態を中心に、両者の深い関係をどのように理解できるか?という観点から基礎的コンセプトの省察とともに、丁寧な解説を試みている。「物性II」ではフォノン、エキシトン、フェルミ液体を中心に素励起の概念と性質や、その理論的な記述法を概説するとともに、相転移との関係、



素励起間の相互作用と減衰など、物性物理学の理解に本質的な素励起という概念を、その具体的な例を用いて共通性と差異とを解説している。多体系を扱うための標準的な理論手法について、過不足ない丁寧な説明が施されているのもありがたい。

この本が刊行された1970年代は、物性物理学の骨格が出来上がった時期にあっているため、題材はその時点までに完成した物性物理学の基本に限られており、そのことがかえって物性物理学の基礎を語るにふさわしい状況を作っている。たとえば「物性I」でとりあげた事項は、原子の電子構造、磁

性の起源、水素分子結晶、水素高圧状態、量子液体Heの超流動現象、金属のバンド状態と結晶構造、超伝導、金属磁性、分子結晶、半導体、希薄磁性、乱れた系などである。ただし、78年版では72年以降の発展を踏まえて、 $\text{He}^3$ の超流動相、半導体の局在軌道描像、近藤効果、ランダム系のコヒーレントポテンシャル法(CPA)などの事項を新たに加えている。「物性I」の第2,3章においては、水素からなる系に注目し水素分子からその結晶へ、さらに高圧下での金属状態へと話題を移し、最も簡単な水素原子系においても、環境によって全く異なる相になるという

展開は興味深い。次いで、電子数が2に増えたHe系では、著しい量子効果により超流動状態が出現することが述べられる。読者は、電子数が一つ増えただけで、水素系とはまったく異なる物質状態が現れることに印象づけられるであろう。

ところで、1980年代以降になると新たな物質や現象の発見や、理論の進歩があいつぎ、物性物理学においても劇的な変貌が起こり始めたことはよく知られている。例えば、高温超伝導、量子ホール効果、STMやAFM、フラーレンやCNT、トポロジカルインシュレータなどである。実験手法も格段に進歩するが、密度汎関数法などの第一原理計算法の確立、巨大計算を可能とする計算機の長足の進歩などもある。この「物性I, II」では、当然のことながら、そのような物性物理の最近の展開は反映されていないのであるが、それがこの本の価値を減じるものではない。この本で書かれた基礎基本を十分に理解することにより、これら最近の物性物理学の展開の真の意義をよりよく理解できるものとなる。

(2013年1月10日原稿受付)

M. Shifman

### Advanced Topics in Quantum Field Theory; A Lecture Course

Cambridge Univ. Press, New York, 2012, xvii + 622p, 25 × 19 cm, \$80.00 [専門・大学院向]

ISBN 978-0-521-19084-8

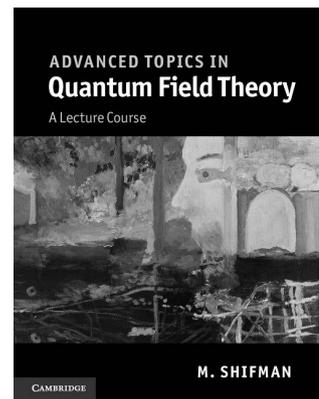
坂井典佑\* (慶應大日吉物理)

本書は、Advanced Topics というタイトルが示す通り、我が国の多くの大学院の通常の講義で扱う範囲を超えた題材を扱う場の量子論の現代的教科書である。ゲージ理論と超対称性が本書の中心的な道具であり、非摂動的な量子効果とそこで活躍するソリトンとが生き生きと取り扱われている。

米国の大学院での場の理論の講義は通常、3段階に分かれているとのこと、場の理論I・IIでは相対論的量子力学・正準量子化から始めて、ゲージ理論の基礎と繰り込み群までを含んでい

る。これらについては多くの優れた教科書がある。一方、より高度な現代的内容を含む場の理論IIIは研究の最前線に近く、これに対応した教科書は少ない。

本書はミネソタ大学での20年余りの著者の場の理論IIIの講義内容をまとめたものである。著者はこれらのトピックスのエキスパートであり、オリジナルな内容が随所に散りばめられた興味深い教科書となっている。たとえばソリトン方程式の解法についても、簡単な力学系の類推を用いて、キルク解のパラメーターが1個だけ生じる理由を解き明かすなど良く工夫されている。



アメリカ、特にミネソタ大学の大学院の講義の雰囲気そのまま伝わってくるように感じた。

内容的には、著者が得意とするソリトンとそれをめぐる量子効果について、特に丁寧に解説されている。たとえばアノマリーとの関係、ソリトンの量子効果や繰り込み、フェルミオン電荷の分数化といった興味深い話題も取り上

\* 現所属：物理系学術誌刊行センター

げている。図も適切に配置されており、ソリトンの理解に大いに役立つ。

本書は、場の量子論の基本的事項の知識を前提にしているの、最初に手に入るための場の理論の教科書ではない。これから研究の最前線に向かう人たちが手がかりとするにふさわしい本である。ソリトン、量子効果、超対称性といった場の量子論の現代的な話題に関心を持つ大学院生や研究者が座右に置くことよいのではないだろうか。

第1部では、最初にゲージ理論の簡単なまとめを置き、キルク(ドメイン・ウォール)から始めて、ポータックス、モノポールとスキルミオン、さらにインスタントンへと至っている。さらにソリトンを駆使して、低次元と4次元での閉じ込めに関して得られている場の理論的な知見の有用な解説を与えている。これらは場の理論の初歩の知識さえあれば、計算も追える丁寧な解説となっている。

第2部では超対称性を初歩から解説し、そこで得られた量子効果の知見をコンパクトにまとめている。著者自身の寄与も多く、この解説も有用である。

最後に超対称理論でのソリトンを簡単にまとめている。ただし、超対称理論での非摂動効果の大きな成果のひとつである、サイバーク・ウィッテンの厳密解は残念ながら本書の範囲外である。

(2013年1月13日原稿受付)

鳥居寛之、小豆川勝見、渡辺雄一郎著、中川恵一執筆協力

## 放射線を科学的に理解する；基礎からわかる東大教養の講義\*

丸善出版、東京、2012、xiii+237p、21×15 cm、本体2,500円〔一般向〕

ISBN 978-4-621-08597-4

村田次郎 (立教大理)

福島第一原子力発電所の事故に際して、少なからぬ物理学会員諸氏が専門を超えた知識に基づく判断を求められ、困惑された経験をお持ちと思う。放射線関連分野の研究者でも、原子炉の工学的知識は勿論のこと、通常は非密封線源の扱いは縁遠く、ましてや内部被曝の評価に至っては「難しいが無視できる」の一言で済ませてきた方が大多数であろう。書評者自身も、大学での放射線管理業務にあたってきたものの今回の事故の報に接し、大慌てで実効線量係数や等価線量・実効線量の考え方を勉強し直したことを正直に告白する。職業的に放射線に関わる研究者ですらこの状況であることを考えると、放射線に縁遠い分野の方々や日の浅い学生諸君は、物理学研究者であることで区別なく同等の期待をかけられ、その責任の重さに大いに当惑されたことと思う。

本書は、かような社会状況に対して身に付けておくべき知識と考え方を共有することを目的として書かれている。その元となったのは、反陽子原子等の研究者で、読者同様放射線そのものについては非専門家である著者の一人が東大教養学部で放射線に関する自主講義を立ち上げ、それを発展させた正課

授業の記録である。講義が複数の担当教員により運用されたことを反映して、本書も各担当者が関連するトピックスを取り上げ社会的に関心が高まった話題の紹介に多くを割いている。このため、タイトルから連想される一般教本というよりは原発事故後の行動に際しての対策本という性格が強い。

内容を並べると、放射線入門、放射線物理学、原子核物理学・原子力工学、線量評価法、放射線計測学、環境放射化学、放射線生物学、放射線医学、植物栄養学・土壌肥料学、放射線防護学、放射線の利用・加速器科学、そして長めのQ&Aとなっている。本書は一般の方の指南書の役割も十分に果たせるよう、東大の講義録とは思えぬ平易なものとなっている。しかしながら、本書の特長は、単なる易しさを売りにした入門書とは異なり周辺分野の各専門家が自分の専門分野の観点から見た放射線について執筆していることであろう。そのため、読者は自身の知識が浅い分野の章について、なるほどそういうことだったか、と思う部分を見出すに違いない。例えば「検出限界は測定誤差の3倍として示すルールが一般的である」などの明快な記述は、議論の定量化に大いに役立つであろう。

もっとも、本書はその性格上、全体を通した体系化はあまりされておらず、



内容のトーンも章によって、或いは章内でもまちまちである。放射線からは関係の薄い専門知識を深く追いついた部分も散見される。したがって、著者らの意図はさておき、本書は体系立てて「放射線学」を勉強するための教科書ではないと考える方がよい。

本書は、読み手の得手不得手なるべく解消すべく、有益と思える情報をピックアップするために利用するのがよい。原発事故後の様々な活動や社会混乱を反映した「今、必要な知識」が凝縮した資料として優れていると言えるだろう。

(2013年2月28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。

\* 編集委員会注：本号「シリーズ「物理教育は今」」欄に関連記事あり。

## 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/keijiban.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: [keijiban\\_jps.or.jp](mailto:keijiban_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)

### ■理化学研究所研究員

1. 研究員、特別研究員又はテクニカルスタッフ1名
2. テラヘルツ量子素子研究チーム
3. 半導体材料を用いたテラヘルツレーザー発光素子の開発。JST\_産学共創基礎基盤研究「THz量子カスケードレーザーの動作高温化と周波数拡大に関する研究」を進める方を募集。
4. 決定後早期
5. 単年度契約の任期制。評価によりJST産学共創基礎基盤研究プロジェクト終了(2015年3月31日)迄更新可。
6. 研究員・特別研究員：博士号取得者、テクニカルスタッフ：理工系大学修士課程卒業生
7. ○履歴書(写真貼付、e-mail) ○研究業績一覧 ○現職の所属長を含む推薦

書1通(現職の所属長から推薦書をもたらるのが困難な場合は、第3者による推薦書)

8. 適任者が見つかり次第
9. 519-1399 仙台市青葉区荒巻字青葉理化学研究所テラヘルツ量子素子研究チーム 平山秀樹 電話 022-228-2041 [hirayama\\_riken.jp](mailto:hirayama_riken.jp)
10. 簡易書留又は書留にて送付。提出書類は理化学研究所個人情報保護規程に則り厳重に管理し、採用審査の用途に限り使用。

### ■京都大学大学院理学研究科物理学・宇宙物理学専攻助教

1. 助教1名
2. 物理学第二分野・素粒子論研究室
3. 素粒子論
4. 決定後早期
5. なし
7. ○履歴書(着任可能時期を明記) ○研究業績概要 ○研究業績リスト ○主要論文別刷5編以内各2部(コピー可) ○研究計画
8. 2013年6月24日(月)必着
9. ①606-8502 京都市左京区北白川追分町 京都大学大学院理学研究科物理学・宇宙物理学専攻物理学第二教室 鶴 剛  
②川合 光 電話075-753-3834 [hkawai\\_gauge.scphys.kyoto-u.ac.jp](mailto:hkawai_gauge.scphys.kyoto-u.ac.jp),  
畑 浩之 電話075-753-3878 [hata\\_gauge.scphys.kyoto-u.ac.jp](mailto:hata_gauge.scphys.kyoto-u.ac.jp)
10. 封筒に「素粒子論助教応募書類」と朱書き簡易書留で送付。応募書類不返却。

### ■分子科学研究所教員

- [1]
1. 教授又は准教授1名
  2. 光分子科学研究領域光分子科学第三研究部門
  3. 紫外・軟X線領域の放射光を利用した分子科学研究に新機軸を拓く実験研究者。
  4. できる限り早期
  5. なし
  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) ○研究構想(A4、2頁以内) ○業績リスト(所定様式、HP参照) ○主要論文10編以内の別刷又はプレプリント各2部(特に重要な論文3編に印)
  8. 2013年7月10日(水)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 [r7113\\_orion.ac.jp](http://www.ims.ac.jp)

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>)。

### [II]

1. 准教授1名
  2. 極端紫外光研究施設光物性測定器開発研究部門
  3. 放射光を用いた固体・表面の電子構造研究と研究手法の高度化に意欲のある研究者。当該施設の光電子分光装置等の光物性測定器群の運転維持管理と共同利用に関する業務を分担。
- 4, 5, 8, 9, 10は [I] に同じ。
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) ○研究構想(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(特に重要な論文3編に印)

### [III]

1. 助教1名
  2. 理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門
  3. ナノ物質及び凝縮相における光励起ダイナミクスの解明と新奇な動的機能を持った物質設計への展開に意欲的に取り組む理論研究者。当該研究部門の信定克幸准教授と協力して研究を行う。
- 4, 8, 9, 10は [I] に同じ。
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

### ■慶應義塾大学理工学部教員

#### [1]

1. 専任講師又は助教1名
2. 物理学科・基礎理工学専攻(物理学分野)
3. 低温物理学実験。白濱圭也教授と協力して、mK及びμK領域における超流動ヘリウムの新奇量子物性に関する研究に取り組んで頂く。低温実験の経験がある方が望ましいが、これまでの専門分野は問わない。着任後は学部1～3年生の実験・演習を担当し、学部4

年生・大学院生の指導にも協力頂く。

- 2014年4月1日
- なし
- 博士号取得者が着任時迄の取得見込者
- 履歴書(教育歴・e-mailアドレス記入) ○希望職位 ○業績リスト(原著論文, 解説, 国際・国内学会発表, その他に分類) ○研究業績概要(1,500字以内, 共同研究等の場合には応募者の寄与を明記) ○主要論文別刷5編以内(コピー可, 共著の場合は研究内容・執筆の分担に関するメモ添付) ○競争的資金獲得状況 ○着任後の研究計画と教育に対する抱負(1,500字以内) ○推薦書1通, 又は照会可能者2名の氏名, 所属, 連絡先(e-mailアドレス含)
- 2013年8月2日(金)必着
- ①223-8522横浜市港北区日吉3-14-1慶應義塾大学理工学部物理学科 高野宏  
②同上 takano rk.phys.keio.ac.jp 電話045-566-1685 Fax 045-566-1672
- 封筒に「低温物理学実験応募書類在中」と朱書き簡易書留で送付。応募書類不返却。5年を目処に成果を上げて転出することが望ましい。

#### [II]

- 准教授又は専任講師1名
- 2, 4, 5, 7, 8, 9は [I] に同じ。
- 原子核物理学の理論。理論研究室に所属し, 他の分野の人とも協力できる方。学部・大学院における教育を担当し, 学部・大学院の運営にも積極的に協力頂ける方。
- 博士号取得者。
- 封筒に「原子核物理学理論応募書類在中」と朱書き簡易書留で送付。応募書類不返却。

## 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48回化合物新磁性材料研究会「L10型FeNi規則合金」

主催 日本磁気学会  
日時 2013年6月7日(金)  
場所 東京大学本郷キャンパス化学本館3階講義室(113-8654東京都文京区本郷7-3-1)

内容 クリーンエネルギー社会の実現に向けて, 希少金属を使わない高性能磁石への期待が高まっている。その一つとして最近話題となっているL10型FeNi規則合金を本研究会で取り上げる。材料作成, 物性評価, 理論計算の各方面の最新情報を紹介すると共に, 相互の議論を通じて機能設計への指針を模索することを目的とする。講演者(敬称略): 小嶋隆幸(東北大), 三浦良雄(東北大), 酒巻真粧子(KEK), 大槻 匠(JASRI), 松下正史(愛媛大), 林 靖(デンソー)

参加費 無料

申込 当日受付

連絡先 679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都1-1-1 SPring-8/JASRI 利用研究促進部門 小嗣 真人 電話 0791-58-0833 kotsugi spring8.or.jp

### ■第26回タンデム加速器及びその周辺技術の研究会

主催 山形大学高感度加速器質量分析センター  
日時 2013年7月5日(金)~6日(土)  
場所 ホテルキャッスル山形(990-0031山形市十日町4-2-7 電話023-631-3311)  
内容 本研究会は, タンデム加速器を中心とした静電加速器施設における技術者・研究者の現場レベルからの話題提供を通じて, 参加者相互の情報交換を図り, 関連研究の発展に資することを目的として行われる。

参加費 2,000円, 学生1,000円

申込 <http://www.yu-ams.jp/tandem26/> より

連絡先 第26回タンデム加速器及びその周辺技術の研究会事務局山形大学高感度加速器質量分析センター 電話023-695-6226 Fax 023-695-6227 ams.sci.kj.yamagata-u.ac.jp <http://www.yu-ams.jp/>

### ■新物質とスペクトロスコーピーで切り開く超伝導研究

主催 東北大学金属材料研究所  
日時 2013年7月23日(火)~25日(木)  
場所 東北大学金属材料研究所講堂(980-8577仙台市青葉区片平2-1-1 電話022-215-2138)

内容 スピン・電荷・軌道の電子自由度と格子振動の競争・競合が織りなす多彩な物性, 特に高温超伝導現象とそれに密接に関わる量子状態を, 先端光源等を活用したスペクトロスコーピーによって如何に解明し, 新しい研究に発展させるかという議論を集中して行う。講演は全て英語による招待講演で, 海外からの招待講演者も複数予定している。

定員 150名

参加費 無料

申込 メールにて

参加申込締切 2013年7月12日(金)

連絡先 980-8577仙台市青葉区片平2-1-1 ワークショップ実行委員会 hightc imr.tohoku.ac.jp <http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hightc/>

### ■第45回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム

主催 フラーレン・ナノチューブ・グラフェン学会  
日時 2013年8月5日(月)~7日(水)  
場所 大阪大学豊中キャンパス大阪大学会館(560-0043豊中市待兼山町1-13 電話06-6850-5977)

内容 フラーレン, カーボンナノチューブ, ナノパーティクル, グラフェン等の化学, 物理, 材料, 工学, 応用・実用等の研究発表

定員 400名

参加費 10,000円, 学生5,000円(何れも要旨集付)

発表申込・予稿原稿締切 2013年6月14日(金)

連絡先 113-8656東京都文京区本郷7-3-1 東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻丸山研究室フラーレン・ナノチューブ・グラフェン学会事務局 電話/Fax 03-3830-4848 fntg.photon.t.u-tokyo.ac.jp

その他 参加は当日受付

### ■講演会「ナノ炭素材料」

主催 日本化学会関東支部  
日時 2013年8月21日(水)10:00~17:20  
場所 日本化学会7階ホール(101-8307東京都千代田区神田駿河台1-5)  
内容 本講演会では, ナノ炭素材料について炭素原子の結合様式に着目し, 結合様式の違いがもたらす様々な物性を紹介すると共に, 材料科学の新展開を展望する。プログラム: 前田 優(東京学芸大) ナノカーボンの分子変換(仮), 片浦弘道(産総研) 単層カーボンナノチューブの

分離と応用：金属・半導体分離から精密構造分離まで(仮)、京谷 隆(東北大) 鋳型炭素—構造制御と機能—、渡邊 修(東レ) 2層カーボンナノチューブ透明導電フィルムとその応用展開について、笹川崇男(東京工業大) ナノテク新炭素素材「ダイヤモンド」の機能開拓、大澤映二(ナノ炭素研) 爆轟法ナノダイヤモンドの再発見：3 nm 一次結晶粒子の単離・精製・確認など

定員 110名(先着順)

参加費 10,000円, 学生1,000円

連絡先 101-8307東京都千代田区神田駿河台1-5 日本化学会関東支部講演会係  
電話03-3292-6163 Fax 03-3292-6318  
kanto\_chemistry.or.jp http://kanto.chemistry.or.jp/

### ■ The 6-th Asian Summer School and Symposium on Laser-Plasma Acceleration

主催 日本原子力研究開発機構

日時 2013年9月3日(火)~6日(金)

場所 日本原子力研究開発機構関西光科学研究 研究所(木津川市梅美台8-1-7 電話 0774-71-3000)

内容 Kansai Photon Science Institute of the Japan Atomic Energy Agency jointly with the International Science and Technology Centre, under the aegis of the Asian Intense Laser Network, would like to invite you to participate in The 6-th Asian Summer School and Symposium on Laser-Plasma Acceleration and Radiation (ASSS-6), to be held as a Satellite Meeting of IFSA2013 (<http://www.ifsai3.org/index.html>). The Asian Summer School and Symposium on Laser-Plasma Acceleration and Radiation (ASSS-6) will be held from September 3 to September 6, 2013 at Kansai Photon Science Institute, Kyoto, Japan.

定員 50名

参加費 無料

参加申込締切 2013年8月3日(土)

連絡先 619-0215 木津川市梅美台8-1-7 日本原子力研究開発機構関西光科学研究 所 電話0774-71-3000 <http://www.wapr.kansai.jaea.go.jp/joint/index.html>

### ■ Summer School 数理解物理2013「量子場の数理解」

主催 緒方芳子, 小嶋 泉, 河東泰之

日時 2013年9月28日(土)~30日(月)

場所 東京大学大学院数理解科学研究所大講義室(153-8914東京都目黒区駒場3-8-1)

内容 新井朝雄(北大数学) 相対論的量子

電磁力学の数理解, 河東泰之(東大数理解) 共形場理論と作用素環, 原 隆(九大数理解) 構成的場の量子論—古典的な問題の紹介, 廣島文生(九大数理解) 非相対論的量子場とギブス測度

定員 200名

参加費 3,000円

参加申込締切 2013年9月10日(火)

連絡先 <http://www.ms.u-tokyo.ac.jp/~yasuyuki/mp2013.htm>

### ■第34回 TeX Users Group 年次大会

主催 TUG 2013 実行委員会

日時 2013年10月23日(水)~26日(土)

場所 東京大学大学院数理解科学研究所(153-8914東京都目黒区駒場3-8-1 電話03-5465-7001), 10月25日は印刷博物館(112-8531東京都文京区水道1-3-3 トッパン小石川ビル) 他

内容 TeXに関する国際会議。TeX Users Groupが開く34回目の年次大会で日本初開催。海外・国内のTeXエンジン, マクロの最新の開発状況の報告や描画関係パッケージについての発表を予定。一ユーザーとしてのTipsの発表等歓迎(講演募集中)。

参加費 20,000円(7月15日迄は早期割引15,000円), 学生7,000円

申込 Webフォームでの事前申込を非常に強く推奨

講演申込締切 2013年7月15日(月)

原稿提出締切 2013年9月9日(月)

参加申込締切 2013年9月22日(日), 早期割引: 2013年7月15日(月)

連絡先 TUG 2013 実行委員 [tug2013-jp@tug.org](mailto:tug2013-jp@tug.org) <http://tug.org/tug2013/jp>

### ■第12回国際シンポジウム「物質の起源と銀河の進化」(OMEG12)

主催 高エネルギー加速器研究機構

共催 国立天文台, 東京大学, 筑波大学, 理化学研究所, 大阪大学, 東北大学

後援 日本万国博覧会記念基金助成金, 新学術領域「実験と観測で解き明かす中性子星の核物質」

日時 2013年11月18日(月)~21日(木)

場所 つくば国際会議場(305-0032つくば市竹園2-20-3 電話029-861-0001)

内容 宇宙における元素合成過程, 恒星及び銀河の化学進化について, 原子核物理, 天文学, 宇宙物理, 宇宙科学, 宇宙化学等の関連分野の研究者が一堂に会して, 互に行われている研究の進捗状況について報告・議論。中性子過剰核による重元素合成過程と中性子星の核物質を焦点

に, 特別セッションを企画。

定員 150名

参加費 15,000円, 学生10,000円

講演申込及び予稿集締切 2013年8月15日(木)

連絡先 OMEG12 実行委員会事務局(KEK 内) 電話/Fax 048-462-8112 [omeg12@kek.jp](mailto:omeg12@kek.jp)

その他 詳細は<http://kekmb.kek.jp/omeg12> 参照。

### ■ International Symposium on Single Biomolecule Analysis 2013

主催 内閣府最先端研究開発支援FIRSTプログラム川合プロジェクト

日時 2013年11月21日(木)~22日(金)

場所 ハイアットリージェンシー京都(605-0941京都市東山区三十三間堂廻り644-2)

内容 講演者: Mark Akeson (UCSC), Yoshinobu Baba (Nagoya Univ.), Cees Dekker (Delft Univ. of Technology), Massimiliano Di Ventra (USCD), Patrick S. Doyle (MIT), Stephen C. Jacobson (Indiana Univ.), Tomoji Kawai (Osaka Univ.), Takehiko Kitamori (The Univ. of Tokyo), Christopher A. Maher (WUSTL), Amit Meller (Boston Univ.), Kana Shimizu (AIST), Jonas O. Tegenfeldt (Lund Univ.), Stephen Turner (Pacific Biosciences, Inc.), Akira Watanabe (Kyoto Univ.)

定員 300名

参加費 無料

申込 HPより

連絡先 567-0047茨木市美穂ヶ丘8-1 大阪大学内FIRST川合プロジェクト支援事務室 電話06-6879-4787 [kawaiproject@imu.sanken.osaka-u.ac.jp](mailto:kawaiproject@imu.sanken.osaka-u.ac.jp) <http://square.umin.ac.jp/isba2013>

### 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

■ 2013年度公益財団法人住友財団助成公募

[基礎科学研究助成]

研究課題 理学(数学, 物理学, 化学, 生物学)の各分野及び複数分野の基礎研究で萌芽的なもの(各分野における工学の基礎となるもの含む).

応募資格 若手研究者

助成内容 1億7,000万円(1件当たり最大500万円), 約90件, 2013年11月から1年間(6カ月間を限度として延長可).

[環境研究助成]

研究課題 一般研究: 環境に関する研究(分野不問), 課題研究: 持続可能な社会への着実な転換を可能にする方策に関する研究.

応募資格 研究者の所属が営利企業(兼務含)の場合には応募不可

助成内容 一般研究: 9,000万円(1件当たり最大500万円), 約50件, 2013年11月から1年間(6カ月間を限度として延長可). 課題研究: 2,000万円(1件当たり最大1,000万円), 2件(予定), 2013年11月から2年間.

応募締切 e-mail: 2013年6月20日(木), 郵

送: 2013年6月28日(金)  
連絡先 105-0012東京都港区芝大門1-12-16 住友芝大門ビル2号館 住友財団(担当: 廣芝) 電話03-5473-0161  
Fax 03-5473-8471 sumitomo-found@msj.biglobe.ne.jp http://www.sumitomo.or.jp/  
その他 財団HPから申請書をダウンロードし必要事項を記入の上, e-mailと郵送の両方で送付.

■平成25年度(第3回)RIEC Award受賞候補者募集

対象 電気情報通信に関連する, 広い意味での電気工学, 電子工学, 情報工学, 通信工学各分野の大きな賞の受賞経験のない, 将来性の高い若手研究者. 関連分野で将来的な発展が期待できる顕著な研究業績をあげた者. 2013年4月1日現在45歳以下.

授賞内容 賞状, 賞牌及び副賞として賞金20万円を原則毎年度1名に贈呈.

応募方法 封筒に「RIEC Award申請書類在中」と朱書き指定必要書類を指定期日迄に送付. 候補者の推薦は他薦のみ, 必要書類はhttp://www.riec.tohoku.ac.jp/riecaward/

よりダウンロード. 提出先は「980-8577 仙台市青葉区片平2-1-1 東北大学電気通信研究所内 (財)電気通信工学振興会 RIEC Award授賞委員会」

応募締切 2013年7月26日(金)必着

問合せ先 980-8577 仙台市青葉区片平2-1-1 電気通信研究所庶務係 電話022-217-5420 Fax 022-217-5426

shomu riec.tohoku.ac.jp

その他 東北大学電気・情報東京フォーラム(2013年11月21日開催予定)にて授賞式を予定.

■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.)

6月ユーザ名 : 13Jun

パスワード: Donald635

7月ユーザ名 : 13Jul

パスワード: James430

## 行事予定

[詳しくは表中の右欄記載の会誌各巻号の揭示板欄(\*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
2013年			
6/2~7	The 19th Int. Conf. on Solid State Ionics	京都市	67-12
6/3~21	第7回物性研究所国際ワークショップ&シンポジウム(EQPCM2013)	柏市(千葉)	68-5
6/7	第48回化合物新磁性材料研究会「L10型FeNi規則合金」	東京	68-6
6/19~21	固体中におけるディラック電子系物理の新展開	京都市	68-4
6/24~27	第8回微粒子磁性国際会議	Perpignan(フランス)	67-12
7/5~6	第26回タンデム加速器及びその周辺技術の研究会	山形市	68-6
7/9~11	第55回表面科学基礎講座	東京	68-5
7/11~12	第16回超イオン導電体物性研究会	日立市(茨城)	68-5
7/14~19	第12回アジア太平洋物理会議(APPC12)	千葉市	68-2
7/23~25	新物質とスペクトロスコープで切り開く超伝導研究	仙台市	68-6
8/1~6	量子液体・量子個体に関する国際シンポジウム(QFS2013)	松江市	68-1
8/3~5	第11回ESR夏の学校	大阪市	68-5
8/5~7	第45回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム	豊中市(大阪)	68-6
8/5~9	2013年強相関電子系国際会議(SCES2013)	東京	67-12
8/12~16	第58回物性若手夏の学校	高島市(滋賀)	68-5
8/21	講演会「ナノ炭素材料」	東京	68-6
9/3~6	The 6-th Asian Summer School and Symposium on Laser-Plasma Acceleration	木津川市(京都)	68-6
9/9~13	The 5th Int. Conf. on Recent Progress in Graphene Research 2013	東京	68-3
9/9~13	The 15th Int. Conf. on Ion Sources	千葉市	68-4
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

開催月日	名 称	開 催 地	会誌巻号または世話人
2013年 9/23~27	第9回プラズマ応用科学国際シンポジウム (ISAPS '13)	Istanbul (Turkey)	68-3
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
9/28~30	Summer School 数理物理 2013「量子場の数理」	東京	68-6
10/23~26	第34回Tex Users Group年次大会	東京	68-6
11/18~21	第12回国際シンポジウム「物質の起源と銀河の進化」(OMEG12)	つくば市(茨城)	68-6
11/21~22	Int. Symp. on Single Biomolecule Analysis 2013	京都市	68-6
2014年 3/27~30	日本物理学会第69回年次大会 (東海大学)	平塚市(神奈川)	日本物理学会
9/18~21	日本物理学会2014年秋季大会 (佐賀大学) (素粒子, 宇宙線, 宇宙物理)	佐賀市	日本物理学会
10/14~18	日本物理学会2014年秋季大会 (ハワイ) (核物理)	ハワイ島	日本物理学会 ・アメリカ物 理学会合同
11/2~6	The 7th Int. Symp. on Surface Science	松江市	68-4

## 編集後記

法人化以後からだったと思いますが、国立大学の大学教員の職務の中に、教育と研究に加えて、地域貢献が入ってきました。工学系の教員は地域の企業の技術指導や共同研究を通して地域産業に直接寄与できます。また、医療系や教員養成系の教員は以前より地域の医療や教育を支えています。しかし、物理学など基礎科学系の教員においては、地域貢献は難しい職務となります。地域貢献の内容が拡大していき、それにあたっていた教員が過負荷になってきますと、難しいからといってしないわけにもいかなくなります。できそうなことを引き受けていくしかありません。

できそうな地域貢献として、近隣の小学校から依頼される理科実験のイベントを引き受けています。最初はどのように対応してよいかわからず相当悩みました。最大の悩みは対象相手の人数です。多いときには300人くらいになりますが、大学側の担当人員は2名程度です。次に学年です。たいいてい小学校1年生から6年生まで全学年が混ざっています。追い打ちをかけるのが依頼内容です。話や演示実験だけでなく、子どもたちにも工作や実験をさせてほしい、という依頼です。小学1年生に何がさせられるだろうか。怪我でもさせたら大変です。どうになってしまうのか大変心配だったのですが、実際行ってみますとそれほどではありませんでした。私が解決した問題は、300人規模で工作ないしは実験をさせることのできる題材を見つけることぐらいでした。300人規模のイベントも、市販の分光シートと紙コップを使って白色光を分光さ

せるという簡単な工作を伴った観測(?)をさせることで可能になりました。そのほかの問題は、小学校のPTAの方々が見事に解決してくれました。人数の多さは保護者を動員して対応できるようにしていただきました。工作に必要な事前の下準備も全てPTAで行っていただけました。低学年生もいるという問題に対しては、子どもたちの登校班組織を利用して高学年生が低学年生の指導をする形態を整えていただけました。田舎の小学校ですので校区が広く、また子どもたちの居住地もまばらです。そのため、高学年生が低学年生を引率して登校する習慣となっています。この組織を利用したのです。結局、PTAがイベントを主体的に運営していて、私はその中に「ゲスト」のような形で入り込むだけでよかったです。

「ゲスト」と考えると、私の役割は何でしょう。当然、小学校の先生の代わりにやることではありません。あくまで、物理学の研究者としての役割を果たすことが必要でしょう。その立場からすると、工作や実験で物珍しい体験をさせることも必要なのでしょうが、体験したことによいような意味があるのかを説明することも重要になります。干渉を用いて白色光からいろいろな色の光を分離する原理を説明します。低学年生には全く理解されません。高学年の児童もまずはわからない。ただ理解されたのは、「変なおじさんが楽しそうに理屈の説明をしている」という現象のみです。理屈がわかる。生じていることの原因を探ることができる。そして、いい大人になってもそのことを楽しむことができる。私の様子を見て、子どもたちがこのように感じられ

るようでしたら、役割は果たせたと考えることにしました。

物理学会誌の編集においても、読者の知りたい内容をわかりやすく提供する努力に加えて、いかに楽しくその研究に取り組んでいるかを伝える努力も重要かと思います。小学校での理科イベントと同列な扱いは乱暴ではありますが、たとえ内容はよくわからなくてもその研究のすばらしさ、奥深さは伝わるのではないのでしょうか。

山本隆夫 <

## 編集委員

宮下 精二(委員長), 森川 雅博,  
有田亮太郎, 井岡 邦仁, 石岡 邦江,  
板橋 健太, 伊藤 克司, 岡田 邦宏,  
沖本 洋一, 角野 秀一, 片沼伊佐夫,  
加藤 岳生, 小島智恵子, 佐藤 丈,  
鈴木 陽子, 関 和彦, 竹内 幸子,  
常定 芳基, 西野 晃徳, 野口 博司,  
長谷川太郎, 平山 博之, 藤山 茂樹,  
古川はづき, 目良 裕, 山本 隆夫,  
多田 司

## (支部委員)

朝日 孝尚, 石井 史之, 奥西 巧一,  
岸田 英夫, 酒井 彰, 仲野 英司,  
野村 清英, 松井 広志, 水野 義之,  
山崎 祐司

## 新著紹介小委員会委員

多田 司(委員長), 雨宮 高久,  
大江純一郎, 桂 法称, 加藤 進,  
小芦 雅斗, 合田 義弘, 竹延 大志,  
中川 賢一, 平野 哲文, 宮原ひろ子,  
村山 能宏, 吉越 貴紀, 渡邊 紳一

第 69 期 (2013 年 3 月 31 日~2014 年 3 月 31 日) 理事・監事

会 長	斯波 弘行	副会長 (次期会長)	兵頭 俊夫		
庶務理事	石田 憲二・伊藤 好孝・柴田 利明・田村 裕和・松川 宏・三沢 和彦・本林 透 森 初果				
会計理事	川村 光・柴田 利明(兼任)・野崎 光昭・松川 宏(兼任)				
会誌編集委員長	宮下 精二	JPSJ 編集委員長	安藤 恒也	PTEP 編集委員長	坂井 典佑
刊行委員長	高野 宏	監 事	藤井 保彦・渡邊 靖志		

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 68 巻 第 6 号 (平成 25 年 6 月 5 日発行) 通巻 762 号

©日本物理学会 2013

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 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.