

## 東大40年の思い出

上村 洸（物理学教室）



2月8日に最終講義を終えて、退官をするという実感が漸く湧きはじめ、やっとこの原稿を書く気になりました。最終講義には、お忙しいところ多数の方々にお出いで頂きまして誠に有難うございました。特に物理学科3年生の皆さんからは、花束及び1月22日の「量子力学Ⅱ」の最終講義風景をアルバムにした写真集と額入りの写真を頂き、思ってもみなかった心温まる贈物に感動致しました。東大生活40年の最後を飾る素晴らしい思い出

となることでしょう。理学部、物理学教室、中間子科学研究センターの先生方、事務の皆様方には、大変お世話様になりまして有り難うございました。ここに厚く厚く御礼申し上げます。物理学教室の助手や大学院生の皆さんにも心より感謝申し上げます。

私は1950年に東大に入学致しました。丁度占領軍の指令でわが国の教育制度が改革されることになり、私が在学致しておりました旧教育制度の高等学校が廃止されて、新制度下の東京大学教養学部の理科一類で大学教育を受けることになりました。以来今日まで、延べにして五年有余の外国滞在の期間を除けば、東大理学部物理学教室で研究・教育生活を過ごしてきたこととなります。従いまして外国の研究生活以外には、東大本郷キャンパスでの生活に関する思い出がわたくしの研究者としての人生の殆どと言えましょう。この短い紙面ですべてその全部を語ることは出来ませんが、

最終講義で時間の制約があって十分に意を尽くしてお話できなかった私自身及び私の研究グループの研究のを中心に思い出を綴ってみたいと思います。

私が上村研に在籍した院生の皆さんと一緒に研究しました研究内容については、固体物理2月号(26巻 95-100頁)の特別記事に書きましたので、ここでは研究に取り組んだ考え方や背景について記してみましよう。なお、固体物理の記事にご関心をお持ちの方には別刷を差し上げますのでお申し出下さい。私は、1961年8月から1964年3月まで、アメリカ・ニュージャージー州マレーヒルにありますベル電話研究所(現在のAT&Tベル研)で研究所員として研究に取り組みましたが、当時のベル研にはトランジスターを発明したという自信が研究所内に満ち溢れ、私と同年代の若い研究者がこれからの物理は自分たちで作っていくのだと言う意気込みで活発に研究を進めているのに感動し、大いに学ぶところがありました。

帰国して1965年3月に私の研究室ができてから今日まで、院生諸君が研究テーマを選ぶときには、ベル研の経験を基に将来自分の名前が付くような研究の登山道を開拓するように示唆して参りました。最近の10年間は常時、院生が7、8人おり、上記の方針で全員が異なったテーマの登山道を切り開いて研究を致しておりましたから、私は一時にいろんな山々を相手にせねばならず大変ではありましたが、予期しない興味ある結果が次々に得られ、研究室全体がいつも活気に満ちて研究が進捗していくのを見るのは、誠に楽しいものでした。それに植村泰忠先生がご退官になるまでは植村研と、またご退官後は塚田捷先生、青木秀夫先生の研究室と一緒に研究活動を致しておりましたから、院生諸君は物性物理の広い分野にわたる発展を絶えず展望しながら各自の研究を位置づけることができ、広い視野を持って研究を進めることができ、大変プラスになったことと思います。

上村研に在籍した大学院生は、博士課程に進学した者25名、修士課程を修了して就職した者3名、

修士課程を修了して現在他研究室の博士課程に在学中の者2名、現在修士課程に在学中の者1名、合計31名であります。博士課程に進学して理学博士の学位を取得した者24名、修士を終了後就職し、理学博士の学位を取得した者1名であります。他に、一年以上の長期滞在の外国人post doc. が2名おりました。(1名英国、1名フランス)

私どもの理論グループは、物質に即した多電子系の量子論を普遍的な立場から導出することを、主な研究目標の一つに掲げて研究をして参りました。私が大学院時代に取り組んだ配位子場理論は、日本では恩師の小谷正雄先生が開拓され、小谷研先輩の菅野暁(東大物性研名誉教授)・田辺行人(東大工学部名誉教授)両先生(教科書「配位子場理論とその応用」の共著者)と一緒に発展させてきた理論で、固体や錯体中の遷移金属イオンの多電子状態を取り扱う理論体系です。自然界には磁性や色の特異な物性を示す遷移金属物質は極めて多く、私どもの理論は遷移金属化合物の多電子状態(多重項)を取り扱う一般論として、大いに重宝されてきました。特に、銅酸化物高温超伝導体が発見されるに至って、配位子場理論は益々重要性を増し、この点でヘモグロビン等の生物物質も含めて、早くから配位子場理論の重要性を見通しておられた小谷正雄先生の慧眼には感服致しております。

ところで1960年代の若い頃は、科学的な好奇心から物理学の常識に反する現象、奇妙な(エキゾチックな)現象にも興味をもって、帰納的な観点から登山道を切り開き、大いに物理の面白さを楽しみました。p型半導体のテルルのマグネチック・ブレイクスルーの現象が正確に解けることを見つけたこと等は、その最も良い例かも知れません。70年代から80年代に入りますと、物性物理は、物質科学、デバイス物理と三位一体となって新しい分野を切り開き、新物質を舞台に新しい物理学の概念・現象が次から次へと発見され、さらにはその新物質の物性を利用して、新しいデバイスが作られるということで、目ざましい発展を遂げて参

りました。85年、86年、87年のノーベル物理学賞のテーマとなりました、「量子ホール効果」、「走査トンネル顕微鏡」、「高温超伝導」は、いずれもこの三位一体の研究の成果と行うことができましよう。

このような物性理論の発展に応えるべく、私どもの理論グループでも80年代になりますと、新物質が登場したときにその電子構造や物性を計算し、さらには理論的に新物質を設計して、実験家に実際に物質作製を依頼できるように、物質の多電子系の量子状態を計算できる普遍的な方法論を構築する研究が盛んになりました。私どもの開発した方法論は幾つかありますが、問題は物質内での電子間相互作用を如何に取り扱うかにあり、その観点から大きく分けると、電子間相互作用が弱い場合と強い場合の二つになります。前者の方法論の代表的なものは密度汎関数法と呼ばれるもので、私どもの方法の一つは、例えば同じ炭素原子でもグラファイト、ベンゼン、ダイヤモンド等構成する物質が異なるごとに、炭素原子に対して異なった電子状態が得られるように、それぞれの物質の特徴を反映した量子状態を求めるものです。この方法論については、1985年にオランダの出版社から出版しました著書に、押山淳さん（前理学部助手（上村研）、現NEC基礎研究課長）・島信幸さん（前理学部助手（塚田研）、現姫路工大理学部助教授）と一緒に詳しく書きましたが、私どもは、この方法論を(1)ポリマーで初めて超伝導になった(SN)<sub>x</sub>、(2)グラファイトの層間にいろんな種類の原子、分子を挿入することにより作られ、これまでの物質が持っていなかったステージ構造の特徴を示す新しい金属物質群のグラファイト層間化合物、(3)二つの電荷密度波転移の特性を示す一次元金属NbSe<sub>3</sub>、(4)化合物半導体中の遷移金属不純物等の系に適用し、それぞれ電子状態を第一原理から自己無撞着に初めて計算することにより、各分野の登山口を開拓してきました。勿論後から多くの理論グループが追いかけて参り、登山は容易ではありませんでしたが、それぞれの

山の頂上を窮めることができました。特に、グラファイト層間化合物については、寿栄松宏仁先生らと一緒に物理分野で初めて、文部省から特別推進研究の科研費を頂き、日本におけるこの分野の研究を理論・実験両面から大いに進めることができ、アメリカ、ヨーロッパの研究者と手を携えて山頂に登ることができました。アメリカ物理学会では、1987年12月号の物理学会誌Physics Todayで日本の物理学における基礎研究の発展を紹介する特集号を企画し、グラファイト層間化合物も五つのテーマの一つに選ばれて、私がレビューをいたしました。

ところで、理論家の側から物質を設計出来るのかと言う質問をよく受けます。答えは勿論yesです。色々な方法論がありますが、私どもの理論グループが提唱し、実験家が作ってブームになったものに、超薄膜の半導体超格子があります。このような物質設計では、設計した構造が他のものに比べて安定であることを示すために、全エネルギーを計算することが必要になります。銅酸化物高温超伝導体が発見された直後には、私どももこの方法論を適用して、反強磁性絶縁体相と常磁性金属相のいずれがエネルギーが低いかの計算をしました。

しかし銅酸化物の場合には、電子間相互作用が強いので、上記の方法だけではフェルミ面付近の状態を正確に導出する事ができません。そこで遷移金属に万能な配位子場理論とドッキングさせる必要があります。遷移金属不純物の場合にはこのドッキングは比較的容易でしたが、周期ポテンシャルが存在する銅酸化物高温超伝導体の場合にはなかなか難しく、現在クラスター近似で基底状態を正確に求める段階に達したところです。

話は変わりますが、私は1970年代に、シリコンや、ゲルマニウムの半導体中にP、Sb、Asのドナー不純物をドーピングしていくときに、電子状態が絶縁体相から金属相に転移する現象に興味を持って、電子状態の研究をはじめました。この不純物系では、電子が不純物間をとび歩くエネルギーに

比べて、二つの電子が同じ不純物にきたときのクーロン反撥のエネルギーのほうが、不純物の濃度が薄い絶縁体相では大きいのです。私は、このような電子間相互作用と不純物配列の不規則性が絡み合った系の多電子状態を取り扱う理論体系を作りたいと考えました。理学部広報22巻3号に掲載されてますように、1974年に縁あってこの分野の大家であるMott先生（Sir Nevill Mott, 非晶質半導体の理論研究で1977年ノーベル物理学賞受賞）の招きで、ケンブリッジ大学Cavendish研究所に約1年間滞在し、Mott先生をはじめ研究所の物性理論及び実験の研究者と一緒にいくつかのテーマについて共同研究を致しました。キャンベンディッシュ研究所は、キャンベンディッシュ公爵の寄付により、Maxwellが創立した物理学教室です。二代目所長のRayleigh公爵から六代目所長のMott卿に至るまで、全員がノーベル物理学賞受賞者という大変に伝統ある教室で、ベル研とはまた異なった雰囲気のある素晴らしい研究及び教育環境をもった研究所でした。Mott先生は素晴らしい物理的センスを身につけられた碩学で、同時に大変教養豊かな人格者で、一年間一緒に仕事をして実に多くのことを学びました。理論家であるにも拘らず、頭の中には実験データが無尽蔵にinputされているのに驚きました。先生とはいまもって親しくお付き合いでき、大変光栄に存じております。

閑話休題、Mott先生と一年間不純物状態について研究をしたことにより、不規則系の多電子問題を取り扱う理論体系の処方箋を構想することができました。帰国後延べ7人の助手・院生の皆さんと一緒に理論を作り上げ、Mott先生のお奨めによってこの理論を教科書に纏めて出版することになりました。青木秀夫先生のご協力で2次元不規則系も含めた電子論の教科書を1989年の終わりにオックスフォード出版社から出版することができましたのは、私にとって大きな喜びでした。

既に述べましたように、不純物半導体の絶縁体相では電子の飛び移り効果に対して電子間相互作

用の効果が大きく、理論的な取扱いが難しくなりますが、私どもの方法ではまず飛び移り効果を対角化し、そのあとで配置間相互作用により電子間相互作用を取り入れていくことになります。電子間相互作用が強いと、基底状態とは異なる電子配置を多数考慮せねばならず、計算が大変になります。この過程で量子化学の理論の分野で取り扱われている方法論（MCSCF法とよぶ）を利用しますと、計算が比較的簡単に済み、しかも物理的描像を明確に捕らえることが出来ます。当時修士課程にいました江藤幹雄君（現在学振P.D. 特別研究員）とMCSCF法を初めて物性理論の分野に導入し、竹森直さん（現筑波大理工工学系講師）と開発した計算機実験のモデルに基づいて絶縁体相の多電子状態を求めることができました。また磁化率、電子比熱を計算し、その異常な振舞いを説明することができましたが、この研究は佐々木亘、小林俊一、池畑誠一郎三先生の実験研究室が教室にあって、実験データを提供して頂き、また絶えず有益な御教示を頂いたことによって完成できたもので、三先生には厚く御礼申し上げます。

私どもはこの方法論を、やはり電子間相互作用が強い高温超伝導体に適用し、最も簡単なホール及び電子をドープした銅酸化物の系に対する相図を第一原理の立場から明らかにすることが出来ました。私どもの結果では、超伝導相ではホールは頂点酸素の効果でCuの $d_{z^2}$ 軌道に、また電子はCuの4s軌道に入り、いずれの場合にもフント結合（原子内交換相互作用）が本質的な役割を演じております。また私どもは、この基底状態を基にして、ホール効果、電気抵抗等常伝導相の物理量も計算し、実験とのよい一致を得ております。これからも、実験データがあればどんどん私どもの計算結果と比較していきたいと、新しい実験データが報告されるのを楽しみに待っているところです。高温超伝導の研究では、私の居室の両隣に和田靖先生と十倉好紀先生がおられ、毎日有益な討論をすることができて、大きなプラスとなりました。

さて既にお気付きのように、ここに登場した物質群は、いずれも層状か、2次元、1次元の低次元物質であります。他方、私どもは今日半導体なしには生きていけないと云っていいほど、半導体に依存していますが、その半導体物質もデバイス側からの要求によりナノメートル・スケールのような超微小サイズとなり、そのような微小スケールでの物理現象の研究が盛んになって参りました。事実、物性物理・物質科学・デバイス三位一体の研究の最近の傾向の一つとして「reduced dimensionality」を挙げることができましょう。私どものグループも、いち早く「reduced dimensionality」の極限の零次元の物質に関心を持ちました。そして零次元の物質といわれる準結晶や、原子が多数集まったマイクロ・クラスターに注目し、電子間相互作用が弱いときの方法論を適用してこれらの零次元物質の電子状態を预言すべく、研究を進めてきました。準結晶は結晶では許されない五回対称をもち、従って並進対称性を持ちませんが、では何故五回対称を持つ正二十面体が、現実の物質で存在するのでしょうか。私どもは、物理学の常識に反するこの事実に興味をもち、正二十面体出現の条件を第一原理から明らかにしたいと考えました。その観点から周期律表Ⅲb族の行を眺めますと、固体のホウ素（半導体）が正二十面体構造を持つのにに対し、次の列のアルミニウムが面心立方構造を持った金属となることに興味を持ち、両者の電子状態を第一原理から計算し、その違いを解明することにより、正二十面体構造の出現条件を明らかにできると考えました。このような考え方で畠山哲夫君（現在学振P. D. 特別研究員）が計算を行い、見事にその出現条件を明らかにしました。なお、準結晶の重点領域研究では、二宮敏行先生に大変お世話になりました。

さて、原子を集めると分子ができますが、原子の数が増していくとあるところで固体になる筈です。それでは「幾つの原子が集まったら固体になるのか」という質問をよく受けますが、それに答えるためには、第一原理の方法論に頼らざるを得

ません。しかし従来の方法論では14個の原子の集合程度までしか計算できませんでした。杉野修君（現N E C基礎研究所員）とリチウム分子について従来の計算結果を眺めてみると、電子密度が原子の隙間の空間で大きくなって楕円体状に広がっていることに気がつきました。つまりこの高電子密度の状態が原子を糊づけにして分子を作ると考えたわけです。そこでこの楕円体状の高電子密度の領域を、素粒子論のグルオンになぞらえて「glue bond」と呼びました。このglue bondを表す楕円体関数を変分関数に選び、エネルギーが最小になるように変分を行いますと、原子の数が60程度の分子（マイクロ・クラスターと呼ぶ）まで計算できるようになりました。その結果、リチウムの場合には26個のマイクロ・クラスターで分子から固体に変わることが分かりました。また原子核の場合と同様に、マイクロ・クラスターでもマジック・ナンバーの存在することがカリフォルニア大バークレー校のKnight先生らの実験で分かっておりましたが、その第一原理からの根拠づけも行うことができました。ところでこの論文を書きました後、たまたまバークレーで高温超伝導の講演を致しましたときに、Knight先生にお目にかかる機会があり、私どものマイクロ・クラスターの論文についてコメントを頂きました。論文では、はじめglue bondをmetallic bondと呼んでおりましたが、Knight先生から新しい方法論の重要な論文だから、もっと魅力的な名前にしなさいと言われ、討論の結果glue bondと名づけることにしました。確かに効果は絶大で、私どもの論文はPhysical Review Letters (1990年)に掲載されたのですが、NATUREが大々的に宣伝をしてくれましたし、コメントも多くの方々から頂戴しまし

た。マイクロ・クラスターや準結晶等零次元物質の研究は、単に物性物理や原子・分子の分野に限られたものではなく、最近サッカー・ボールの形状をしたC<sub>60</sub>が宇宙空間で星間物質として見つかっておりますし、また五回対称の物質は球状ウイル

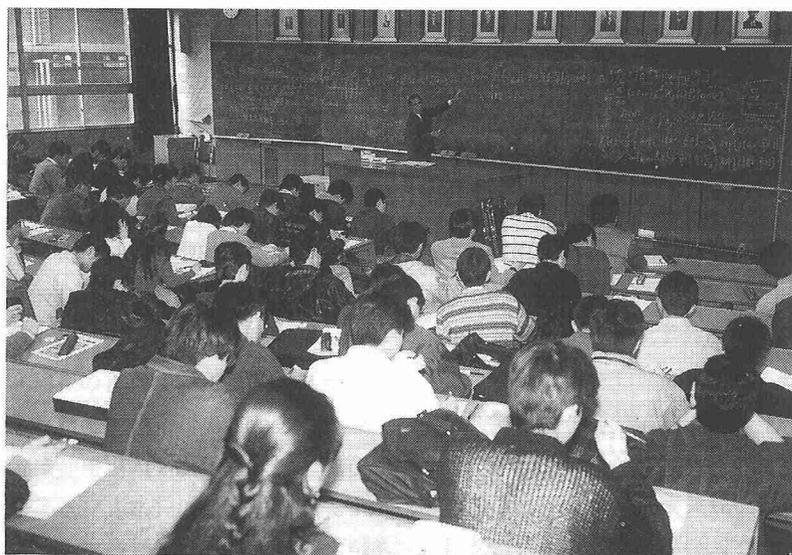
スで多く見られます。五回対称の存在は、結晶という秩序構造の中に無秩序性が入り込むことになり、またマイクロ・クラスターではエネルギーのほぼ等しい異なった形状の異性体が存在する可能性があるということで、零次元の物質はカオスの可能性を秘めた、機能性（flexibility）のある物質ということができます。従って外から何か摂動が加われば、容易に相転移の振舞いを起こさせることが期待でき、学問上からも非常に興味をもたらると共に、応用上からも将来重要な物質になることでしょう。生物物質に五回対称の現れるのも、上記のことと関連があるのかなと考えたりもしています。かような意味で、零次元物質は私ども科学者に夢を見させる物質です。また高温超伝導についても、室温で超伝導になる物質を開発するのは人類の夢です（必ず実現することでしょう）、真空管からトランジスターに変わったと同様に生活面の必需性からいっても、これから益々研究が盛んになることと思います。

以上、私どものグループの研究成果を思い出しながら、物性物理のこれからの発展に思いを馳せてみました。素晴らしい研究をされた研究室OB及び現役の研究者の皆さんに心から感謝申し上げます。また、私はこの2年間中間子科学研究セン

ターのセンター長として、永嶺謙忠先生を初め研究センターの実験グループとも一緒に高温超伝導、特に磁性に関する研究を行って参りました。客員助教授の斎藤理一郎先生（前理学部助手（上村研）、現電通大助教授）、上村研助手の松野俊一君と一緒に予言しました超伝導と磁気相関の共存や、 $\text{CuO}_x$ の頂上酸素の効果に関連した現象が実験的に見つかり、これからの解析・検討を楽しみにしているところです。定年直前に素晴らしい実験グループと一緒に研究ができて幸せに思っております。

上記のようにみてきますと、物性物理はこれからも物理学や理学の他の分野、物質科学、工学と強い相互作用をしながら、分野間の壁を低くするようにして益々発展していくことと確信しております。学生の皆さんには、常日頃研究は「パイオニアで真打たれ」と申しておりますが、これからも皆さんが旺盛な開拓精神で新しい登山道を切り開き山頂を窮められて、独創性に富んだ素晴らしい研究が理学部より数多くであることを期待しております。

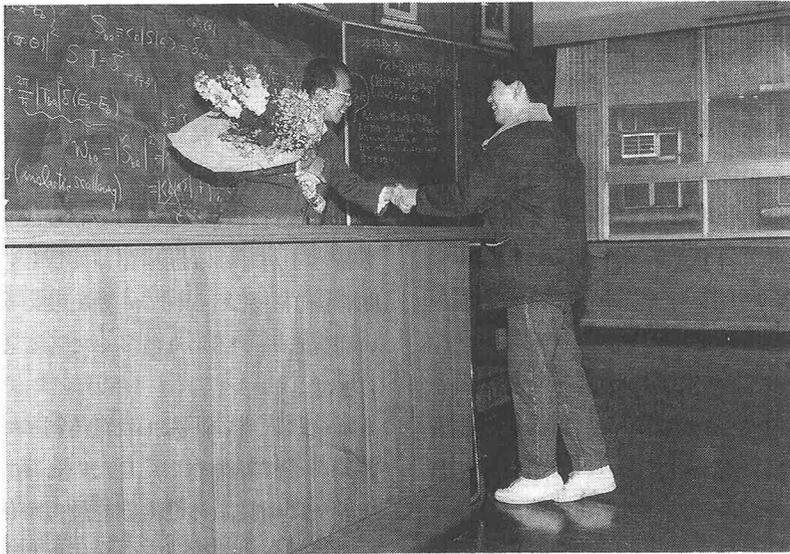
最後に大学の研究・教育体制について一言私の希望を述べて締めくくりたいと存じます。私は、加藤一郎総長、林健太郎総長の時代に3年間、総長を室長とする改革室の室員として、東京大学の



講義風景（物理学科3年「量子力学Ⅱ」最終の講義）  
（物理3年 鈴木清詞君撮影）

研究・教育体制の将来計画の立案に取り組んで参りました。また理学部では、その構想の始めから理学院構想に関与致して参りました。林総長の時代に構想された総合大学院、理学部教授会の下にできた小委員会で構想された計算理学研究教育・国際センター、理学院計画で構想された広域理学院、いずれも分野間の壁が低くなる自然科学の学問分野の発展の傾向を先取りする先駆的な構想であったと思います。また、私が基幹理学院小委員会の委員長であったときに、生物科学、地球科学関連

教室から出された生物科学大専攻、地球科学大専攻の構想は思い出に残る漸新な構想であったと思います。この他、現在最も緊急な課題は、研究環境の劣悪化を如何に解決するかという問題のような気がいたします。理学部中央化構想が教授会で決議されてから既に4年が経過しました。これらの課題について皆さんのご努力で近い将来に素晴らしい登山道が開かれればよいかと願っております。本当に長い間色々有難うございました。理学部のご発展を心からお祈り申し上げます。



物理学科3年生大庭哲郎君より花束を受取る  
(物理3年 鈴木清詞君撮影)