

古くて新しい代数解析

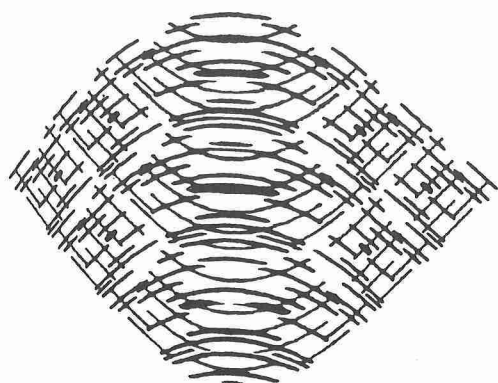
大 島 利 雄 (数学科)
oshima@ms.u-tokyo.ac.jp

私の研究分野は代数解析です。今世紀の解析学では関数解析を用いた位相的手法が発達しましたが、18-19世紀の数学のように、例えば解を具体的に求めてしまうというような代数と一体になった解析が代数解析です。1970年頃から佐藤幹夫氏を中心に日本で起こり、現在は世界的にその言葉が普及しました。私自身は、大きな対称性をもつ空間（等質空間）上の解析の研究を行っています。リー群が作用する空間で、特にローレンツ空間のような正とは限らない距離の入った簡約対称空間上には不変微分作用素系が存在しますが、その点スペクトルの決定等を行いました。この空間上の解析には Legendre 関数を多変数化した球関数が重要な役割を果たしますが、その一般化として、数理物理の言葉での完全積分可能量子系の Shrödinger 作用素のポテンシャルの決定問題を研究し、自然に楕円関数や三角関数のみが現れてくることが分かり感動しました。

最近はより特異な超幾何微分方程式系や関連する境界

値問題に興味を持っています。

$X=(x_{ij}), E=(\xi_{ij})$ を n 行 n 列の正方行列とすると、行列式の間の恒等式 $\det({}^t X E) = \det(X) \det(E)$ が成立します。この $\det(X)$ を行列の空間上の関数と見て量子化した式を19世紀末に Capelli が示しました。右辺の ξ_{ij} を $\partial/\partial x_{ij}$ に、左辺の行列の (i,j) 成分を $\sum_v x_{vi} \partial/\partial x_{vj} + (n-i) \delta_{ij}$ に置き換えた等式です（行列式の各項は列の順に積を計算して和を取ります）。この (i,j) - 成分は、行列の積の作用を無限小に表現したもの（リー環）になっています。 X, E を m 行 n 列の行列の場合に拡張した公式は線型代数の本に書いてありますが、それも量子化することができ、その行列式で与えられた微分方程式系がこの特異な超幾何微分方程式にあたることが分かりました。より一般化した「 ${}^t X E$ の行列の階数が2」というような条件は (X, E) - 空間の幾何学的集合を作りますが、その量子化（微分方程式系）やその解がどうなるか、ということは現在の私の大きな興味の一つです。



三体力の検証

酒 井 英 行 (物理学専攻)

sakai@phys.s.u-tokyo.ac.jp

「力」を知ることは物理学の最も重要な研究課題の一つである。最近になり原子核での三体力の研究が大いに進んだので報告する。

原子核の研究のごく初期 (1939年) のころから三体力 (多体力) の存在は議論されてきた。湯川の中間子論では、二つの核子 (陽子と中性子の総称) 間で中間子を交換することにより核力が作られる。これは二体力である。三体力は、荒っぽい言い方をすると、三つの核子の間で二つ以上の中間子が交換され、その力 (ポテンシャル) が三つの核子の座標 (運動量) を使ってしか書き下せないもの、である。三体力の中で最も大きな寄与をするのは、1957年に提唱された「藤田・宮沢型」とよばれるものである。これは3核子の中の一つの核子が、 Δ 粒子状態に励起し、残りの二つの核子とパイ中間子交換で結ばれている形をしている。

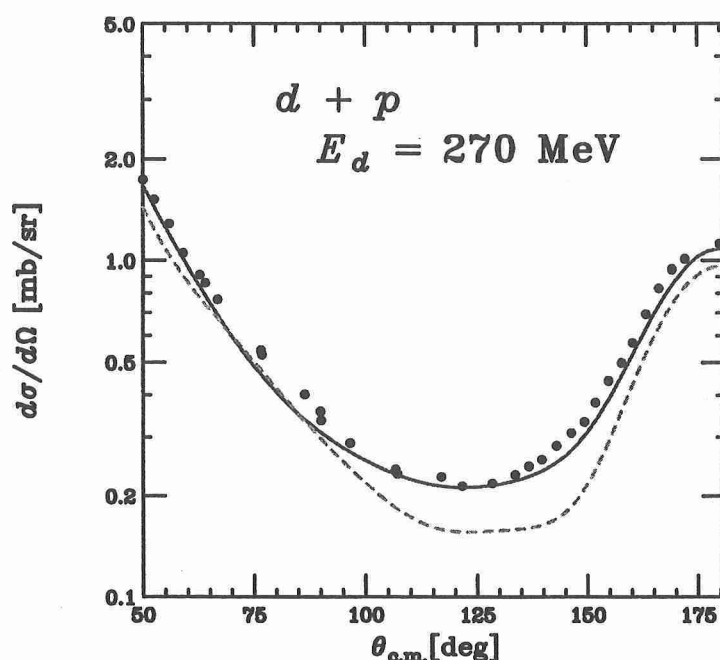
三体力の存在を明確に議論するためには、三体系 (三核子系) を厳密に取り扱うことができる理論が必要である。そのような理論が1960年に Faddeev により提唱された。この Faddeev 方程式に自由空間で得られた二体力を入力し、その計算結果と実験値を比較し、もし差があればそれは二体力以外の効果によるものと考えられる。そして理論的に予言された三体力がその差を説明できれば三体力が検証できたといえる。

Faddeev 理論計算の進展により、非束縛の三体系、

つまり散乱状態における三体力の効果を探することが最近になり可能になった。計算によると、比較的エネルギーの高い重陽子・陽子散乱 (dp 散乱と表す) の散乱断面積の小さくなる角度領域で、三体力の効果が増幅されて現れることが示された。ところがこの Faddeev 理論計算の計算精度に見合う精度で測定された実験結果はなかった。

我々は、dp 散乱を偏極ビームの偏極度校正の目的で測定していたが、この Faddeev 理論計算の存在を知り、より詳しく高精度測定を行った。因みに散乱断面積の精度は、2%以下の誤差 (系統+統計) である。図に結果を示した (一部分のみ)。縦軸は dp 散乱の散乱断面積、横軸は散乱角度である。実験値は黒丸。実線は Faddeev 理論計算で、二体力+三体力の場合で、破線は二体力だけの時である。三体力の導入で実験値をほぼ完全に再現するようになる。この結果から、三体力の存在が定量的に確認されたと言ってもよいであろう。尚、ここで用いられている三体力は、藤田・宮沢型の発展した現代版である。

我々はさらに偏極量の測定も行った。現在解析中であるが、このデータから三体力のより詳しい情報、例えばスピン依存性、などを得ることができると期待している。今後の発展が楽しみである。



電子の海のさざ波

長谷川 修 司 (物理学専攻)

shuji@surface.phys.s.u-tokyo.ac.jp

1986年度ノーベル物理学賞の対象となった走査トンネル顕微鏡 (scanning tunneling microscopy, STM) は、動作原理が従来の電子顕微鏡と全く異なるものでした。鋭く尖らせた金属針 (その最先端には1個の原子がくっついていますが) を試料物質の表面に極めて接近させ、接触させることなく表面に平行に走査させることによって、原子尺度で物質表面の凸凹を観察できる顕微鏡なのです。金属針と試料の間に電圧を印可したときに流れるトンネル電流が、両者の間隙の距離がわずかに変化しただけで極めて敏感に増減することを利用したもので、物質表面上に付着している原子1個でさえ、まるでパチンコ玉のようにはっきりと映し出すのです。原子1個1個を直接見るという人類2000年来の夢を実現した実験装置で、ノーベル賞受賞者らが作った第一号機は大英博物館に保存されているということです。現在では表面科学だけでなく、広範な科学・技術の分野で利用されています。

STM では、物質表面上での原子を直視できるだけでなく、最近では、物質表面での電子の波動関数をも直接見ることがわかってきました。STM 画像の信号のもとになっているトンネル電流は、金属針内の電子の波動関数の裾野と、試料物質内の電子の波動関数の裾野の重なりによって流れるわけですから、金属針を試料表面に平行に走査させることによって、表面での電子波動関数の分布が画像化できることになるのです。

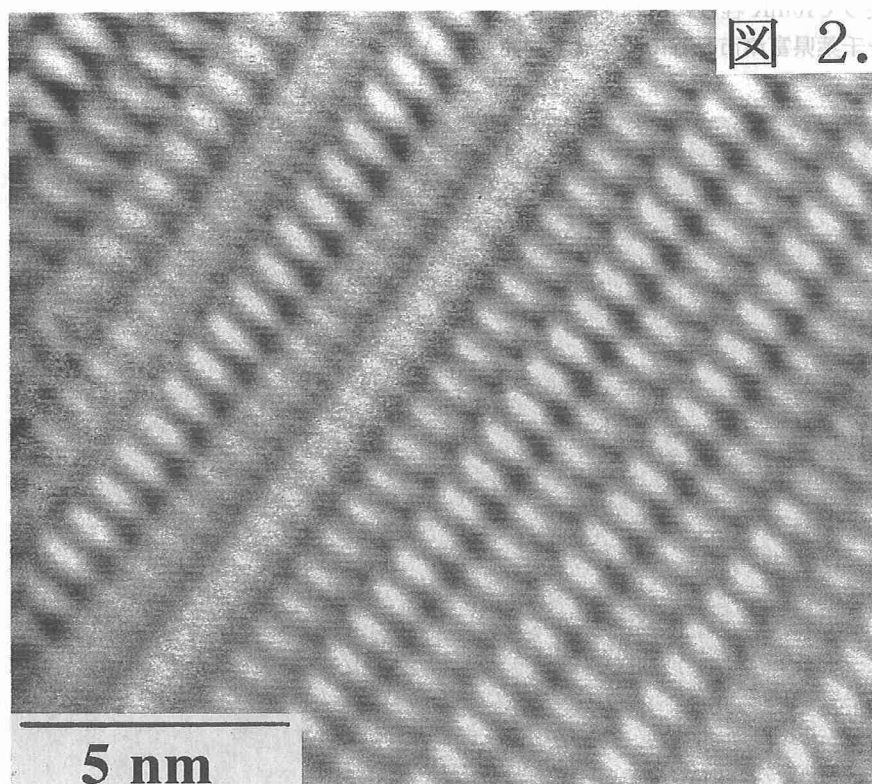
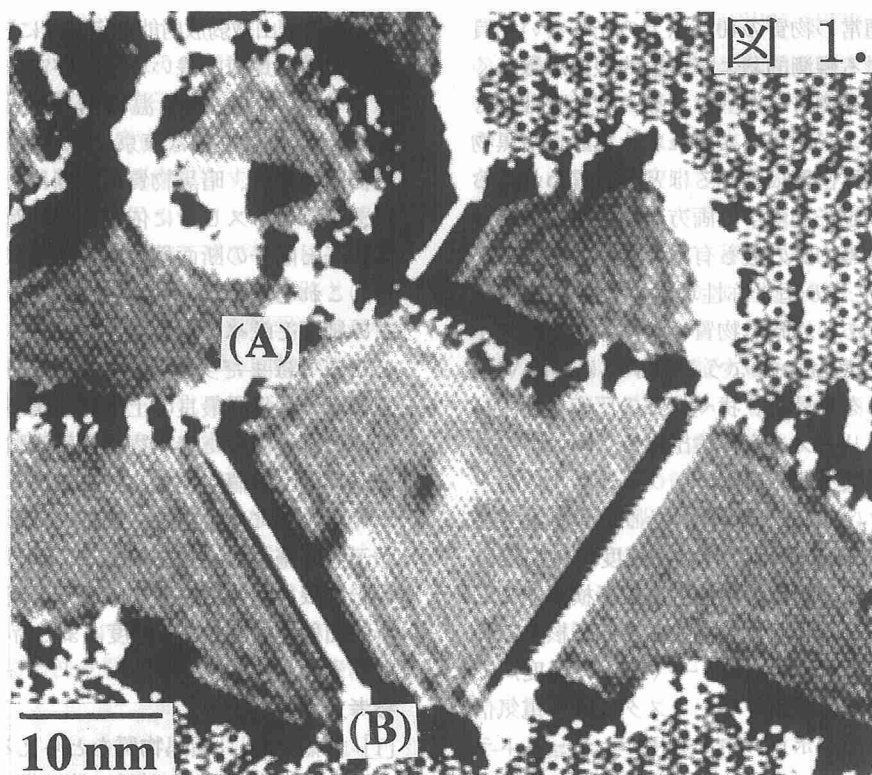
平成6年度の当理学系研究科研究基盤重点設備費によって導入された低温型 STM による観察例を紹介しましょう。

シリコン結晶の表面上に、銀原子を一原子層分だけ付着させると、銀原子がきれいに規則的に並び、その原子層内を電子が自由に動けるようになること (表面電子バンドの2次元自由電子系) が私たちの研究で明らかにされてきました。この表面を6 Kの低温に冷やしてSTMで観察すると、第1図のような画像がとれました。注意深く見ると非常に細かな規則的な点列に気がつくと思いますが、これらが規則的に並んだ銀原子に対応しています。しかし、その規則的な原子の並びを乱す境界が表面上に存在しています。(A)で示した原子ステップ端や(B)で示し

た直線的な境界です。目を細めて見ると、これらの境界付近に縞模様が見えるでしょう。これは、上で述べた自由に動ける電子の波が境界で反射されるためにできる定在波なのです。防波堤にぶつかった水が水面上にさざ波を作るように、電子の海でもさざ波ができています。物理学の基礎として習う量子力学が教えるところの電子の波動性を直接見ていることになります。画像中央やや右上の小さな領域では、さざ波が同心状にひろがっており、まるで小さな池に蛙が飛び込んだときの波紋のようです。周囲の境界がポテンシャル障壁となって電子を反射し閉じ込めているわけで、まさに量子力学の演習問題を具現していることになります。

上に示した例は、電子が2次元的に自由に右往左往できる状態で見られるさざ波でした。それでは、電子が一方方向にしか動けない場合 (1次元自由電子系) ではどうなるのでしょうか? シリコン結晶表面上に、今度はインジウム原子を一原子層分だけ付着させると、インジウム原子が一方方向にだけ鎖状に並ぶことが知られています。電子はその原子鎖に沿う方向にしか動けません。このような試料を62 Kの低温に冷やしてSTM観察した結果が第2図です。右上がりのストライプが多数走っていますが、このストライプの各々の列が上述のインジウム原子の鎖一本一本に対応します。おもしろいことに、ストライプのほとんどの列には等間隔の縞模様が見えています。なかには、縞模様がよく見えない列もありますが。この縞模様こそが、ストライプに沿って動いている電子が作る定在波であり、1次元金属系に特有な電荷密度波と呼ばれているものです。細いパイプの中の水が波立ったら、多分このような縞模様になるのではないのでしょうか。インジウム原子鎖内の電子は隣の列にとび移れず、各々の列に沿ってしか動けないので、隣の列との間であまり連絡がなく、縞模様の位相が列間でずれている箇所も見られます。縞模様がよく見えない列は、さざ波が動いて定在波がゆらいでいるためだと解釈されています。

STM は、原子の世界を手にとるように見せてくれるだけでなく、原子の世界を自由に動き回っている電子の姿もまざまざと見せてくれます。



ボロメータによる暗黒物質の直接検出

蓑 輪 眞(物理学専攻・COE 研究拠点 初期宇宙研究センター)
minowa@phys.s.u-tokyo.ac.jp

我々の宇宙には通常の物質の10倍以上の光らない物質があることを示唆する観測的および理論的根拠が数多くある。この物質は暗黒物質（ダークマター）と呼ばれており、その正体はいまだ明らかにされていない。暗黒物質の総量は宇宙の臨界密度に達するほどとも言われており、宇宙物理学と素粒子物理学の両方にまたがる重要な問題である。現在暗黒物質の最も有力な候補として考えられているのが素粒子の超対称性理論の予言する粒子ニュートラリーノである。暗黒物質ニュートラリーノが通常の原子核と弾性散乱を行なうと原子核は10keV程度の反跳エネルギーを受ける。我々はこの反応を利用し暗黒物質ニュートラリーノを直接検出するために、ボロメータを開発し、実験を開始した。

我々のボロメータは20gのフッ化リチウム単結晶8個の吸収体とそれらに取り付けられた高感度抵抗温度計（サーミスタ）からなる極低温熱量計型粒子検出器である。ニュートラリーノと吸収体を構成する原子核との弾性散乱により付与されたエネルギー（10keV程度）で吸収体の温度が上昇し、それをサーミスタにより電気信号に変換するというのがボロメータを用いたニュートラリーノ検出の原理である。吸収体の比熱を小さくするために希釈冷凍機を使って10mK程度に冷却する。

このボロメータを千葉県富津市金谷の防空壕トンネル

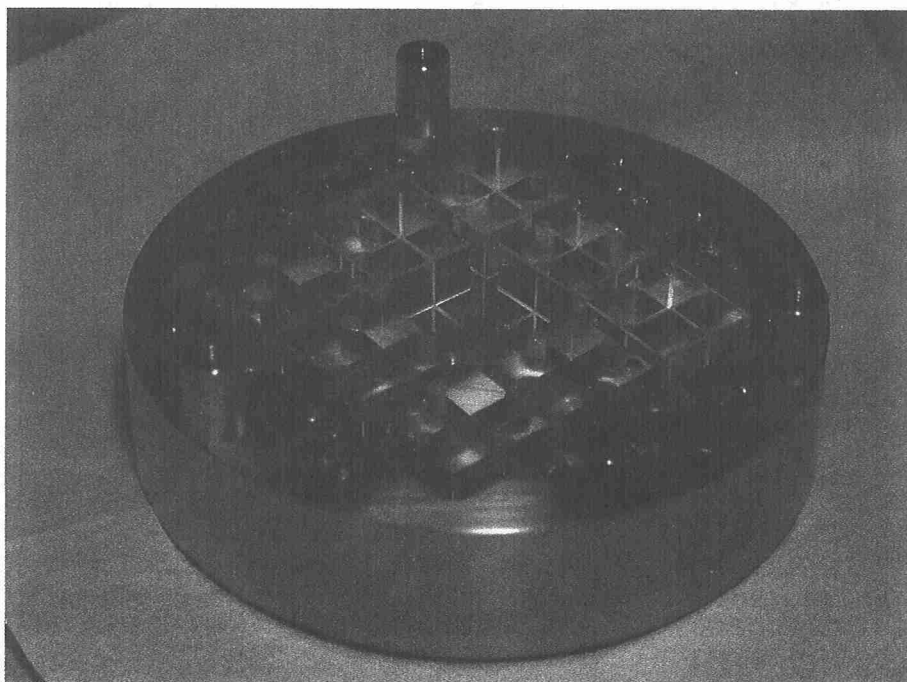
中にある鋸山微弱放射能測定施設に設置して測定を行なった。ここは比較的浅い場所で宇宙線の影響は完全には除き切れないが、極低温機器を使った新しい検出器のpilot runのためには東京に近く便利である。

測定の結果、暗黒物質の証拠はまだ見つかっていないが、それでもスピンに依存した相互作用をする暗黒物質素粒子と陽子の断面積に対する上限値を出すことができた。これをこれまでに発表されている世界の他のグループの結果と比較してみると、ニュートラリーノ質量の重いところではまだ少し及ばないが、5 GeV以下の軽い質量領域では世界最良の上限値を実現している。また、ボロメータを使った暗黒物質探索実験としては世界で初めて既存の上限値を越える結果を出している。

今年の秋には宇宙線の影響の極めて少ない神岡宇宙素粒子研究施設に装置を移設し、質量の大きい領域でも既存の制限を超える感度を実現し、超対称性理論の予言する断面積を検証できる感度にまで持っていく予定である。

参考文献

- [1] 蓑輪 眞、「暗黒物質をとらえる ― すぐそばにある未知の素粒子」、科学 第69巻（1999）472-478、岩波書店。



写真の説明

20gのフッ化リチウム単結晶8個の吸収体とそれらに取り付けられた高感度抵抗温度計（サーミスタ）からなる極低温熱量計型検出器。この全体が希釈冷凍機に入れられ絶対温度10mKに冷却される。

有機薄膜成長の精密制御

島田 敏 宏 (化学専攻)
shimada@chem.s.u-tokyo.ac.jp

小 間 篤 (化学専攻)
koma@chem.s.u-tokyo.ac.jp

有機色素の nm レベルの薄膜ヘテロ構造を作製することにより作られる有機電界発光素子 (発光ダイオード) は可塑性、大面積、発光波長の自由度などの特徴を有し、すでに実用化が始まっている。現在存在する素子には発光によるダメージを避けるためアモルファス薄膜が使われているが、構造を単結晶化することができれば、損失を減少させることによりレーザー発振や光導波路との結合が期待できる。また、有機物質は大きな光学非線形性を持つため光周波数変換や光集積回路への期待が高い。有機単結晶を微細な構造にパターン化することができれば導波路構造や光結晶効果による光・電子集積回路の作製に役立つはずである。しかし、有機物は化学的に脆弱なため GaAs や Si で行われているような単結晶の微細加工は困難であるとされてきた。例えば、写真蝕刻法は用いるフォトリソ樹脂よりも弱い物質に対しては適用することができない。そこで我々は、結晶成長過程の強い非線形性を用いる方法を開発した。図 1 は、表面で

の分子濃度と成長速度の関係を表す模式図である。物質の組み合わせと温度で定まるある臨界濃度が存在し、そこで成長速度が急速に立ち上がることが熱力学的考察から導かれる。真空中で同じ分子のビームを同条件で照射しても、基板物質が違くと成長速度が異なり、条件を選べば片方の基板だけに薄膜成長が起こさせることができる (図の矢印)。これは基板表面と有機分子の間の広義のファンデアワールス力が基板によって異なることが原因である。これを実証するため、格子定数の異なるアルカリハロイドのパターンを写真蝕刻法により作製し (図 2)、格子整合性の違いからもたらされる分子・基板安定化エネルギーの差を利用して、機能性有機色素結晶の微細構造を作製することができた (Appl.Phys.Lett.74, 941(1999))。現在、パルス分子線を用いて kinetics を制御することにより原理的には粒界をなくした単結晶微細構造を作製できるようになっている。

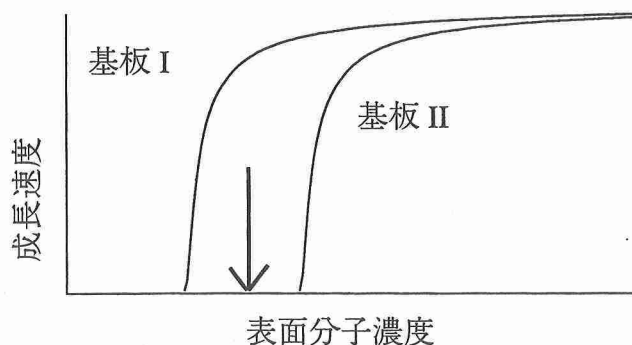


図 1

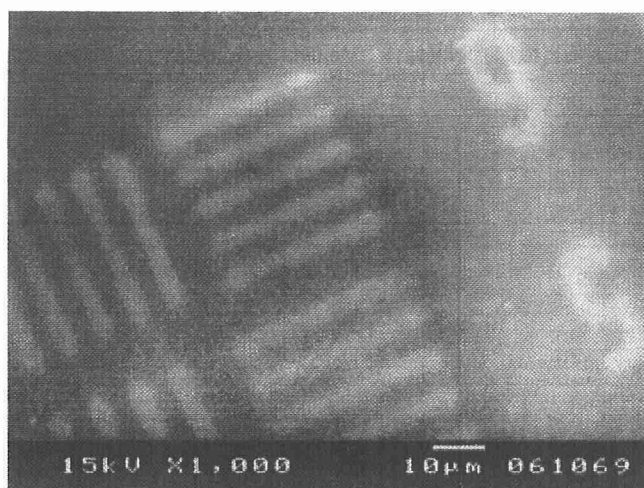


図 2

有機化学反応の解析—予測における量子力学計算の利用

中 村 正 治 (化学専攻)
masaharu@chem.s.u-tokyo.ac.jp

中 村 栄 一 (化学専攻)
nakamura@chem.s.u-tokyo.ac.jp

研究対象の化合物に対して種々の化学計算を行ない、分子構造や電子状態に関する情報を得ることが、多くの実験化学系研究室では行なわれている。これら化学計算手法の中で量子力学計算は、遷移金属原子を含む殆どすべての原子について安定構造や不安定構造、励起状態の計算が可能であること、また遷移構造などポテンシャルエネルギー表面上の安定構造ではない重要な定常点を求めた場合にも相当に高い信頼性が期待できる等の利点を有する。一方、大規模かつ高精度な量子力学計算の実行にはかなり大きな計算機資源が必要であることも事実で、このため実験化学者にとって取りつきにくいものとなってきた。近年のコンピューター科学の進展に伴い実験室でも重原子20個程度の系に対し、信頼性の高い量子力学計算が行えるようになり、複雑な溶液系を取り扱う有機合成の局面でも大規模な量子力学計算が活躍可能となりつつある。

我々の研究室では有機金属試薬の不飽和化合物に対する付加反応について実験研究を行い、高反応性、高選択性を示す有機金属試薬の開発を行っている。この開発過程で大規模量子力学計算による遷移構造、および反応経

路の検討を行った数例を下図に示す。いずれの検討例も、これまで反応機構的な理解が十分でないために官能基、位置、立体選択性発現の要因を明確にすることのできないまま研究を進めていたものである。実際に自分達の手でこれらの反応に対して大規模分子軌道計算を用い、遷移構造の最適化を始めとする反応経路に関する検討を行なったところ、いくつかの重要な知見を得ることができ、今後の反応開発の指針が明確なものとなった。

問題点の本質を抽出した適当なモデル化により理論的に信頼性の高い計算手法が、実験研究の研究対象としている反応の理解、予測に役立つことは、今や明らかである。計算機の能力は現在でも日々向上し続けており、かつその上で走る化学計算ソフトもますます洗練されて来ている。このような現状を踏まえると、今回紹介したような大規模な量子力学計算が、近い将来反応機構の解明および種々の選択性の予測のために各実験者によって日常的に用いられるであろうことも想像に難くない。

以上の成果の一部は、本学のインテリジェント・モデリング・ラボラトリーのプロジェクトの一部として得られたものである。

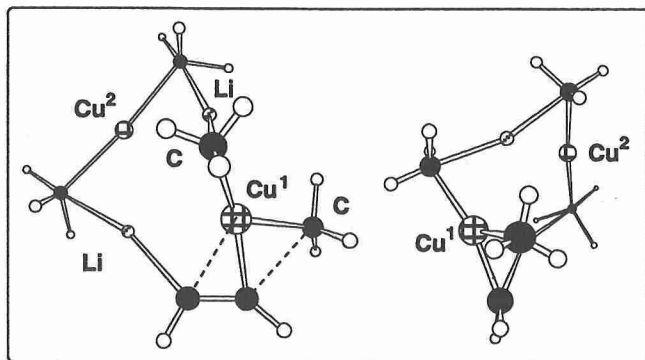


図1：密度汎関数法による有機銅アート錯体 $(\text{Me}_2\text{CuLi})_2$ のアセチレンに対する付加反応の遷移構造

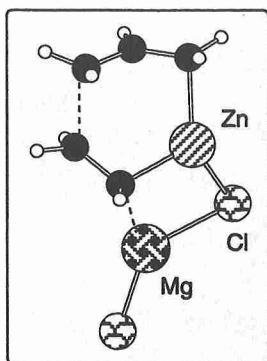


図2：密度汎関数法によるビニルマグネシウム試薬に対するアリル亜鉛試薬の付加反応の遷移構造

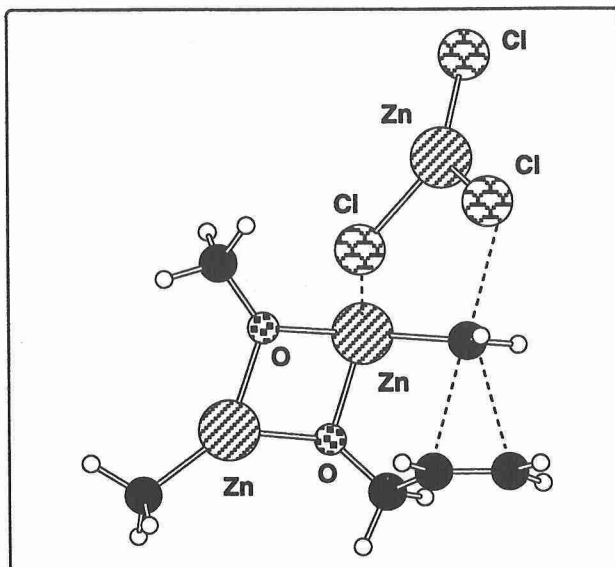


図 3：密度汎関数法による亜鉛カルベノイドのアリルアルコールへの付加反応 (Simons-Smith 反応) の遷移構造 (ルイス酸による活性化)

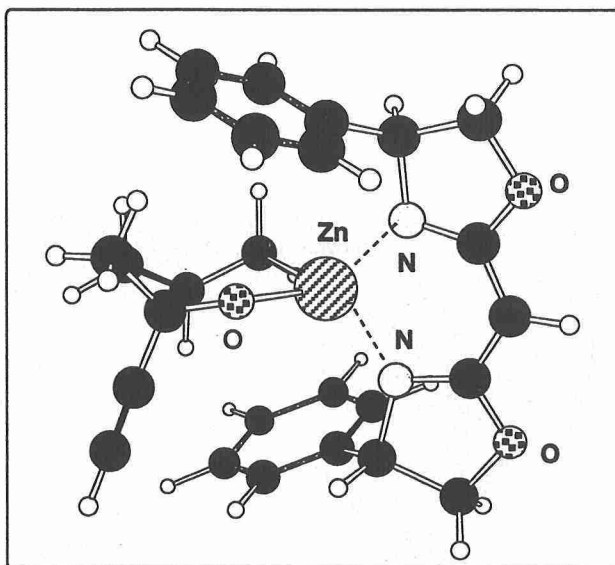


図 4：ab initio 計算による光学活性アリル亜鉛試薬のアセチレンケトンに対する付加反応の遷移構造

惑星表面の高速衝突現象

杉 田 精 司 (地球惑星物理学専攻)
sugita@geoph.s.u-tokyo.ac.jp

筆者は惑星表面での衝突現象、その中でも特に衝突蒸発現象を中心テーマにして研究を行っている。衝突蒸発現象は、惑星大気の起源や惑星表層環境の進化を理解する上で非常に重要な物理現象である。また、現在計画進行中である日本の月・惑星探査によって得られるデータの解釈にも非常に重要な役割を果たすことが期待されている。しかし技術的困難さから、衝突蒸発現象の実験的研究はこれまであまりなされてこなかった。高速衝突による蒸発現象の観測の困難さは、現象が非常に短時間で終了してしまうことと多くの物理過程が複雑に絡み合っ

て解析を難しくしていることによる。そのため多くの物理量を短時間に正確に観測する方法が必要となる。そこで導入したのが高速発光分光光学である。高速衝突の際に発生する衝突蒸気は、非常に高温になるため強い熱輻射を発生する。ただし、熱輻射と言っても気相輻射なので黒体輻射にはならず、原子の輝線や分子の発光バンドが光ることになる。これらの発光スペクトルは黒体輻射に比べると解析もずっと複雑であるが、逆に非常に多くの情報を与えてくれる。一つの観測スペクトルから、発光している衝突蒸気の温度、化学組成、光学的厚さなどが一気に分かる。

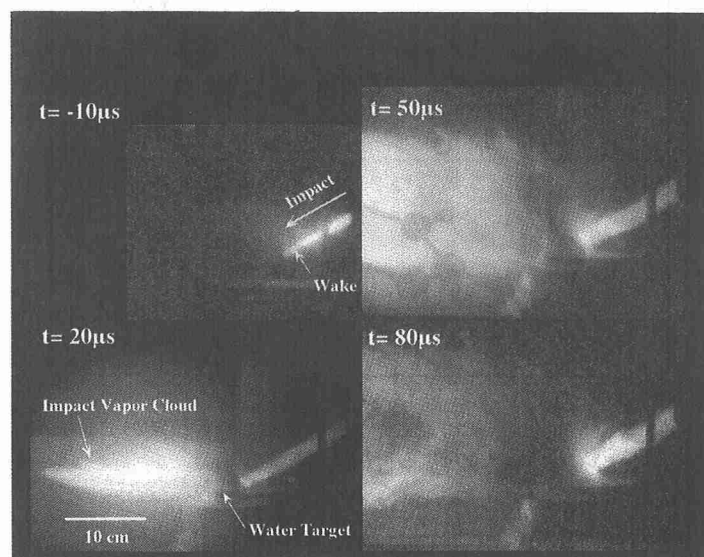
現在のところ、発光分光光学の手法を使って衝突蒸気が定量解析できることの実証が終わり、2、3の応用を試みたという段階である。その応用例の一つは、ジェット現象という物理現象であった。この現象はこれまでに多くの研究がなされ、比較的良好に理解されていると考えら

れてきた。しかし、分光観測の結果は従来の理論的枠組みでほぼ完全に無視されてきた粘性加熱過程が重要であることを強く示唆していた。また、別の実験例では、高速微小破片の大気による摩擦加熱というやはり従来の理論的研究ではほとんど注目されてこなかった物理過程が、大気を持つ惑星での衝突蒸気雲の形成に重要な役割を果たした可能性が高いことが明らかになった。これらの実験例は、発光分光光学の手法が衝突現象の物理的理解を飛躍的に高める潜在力を持っていることを示唆している。

目下行っている実験では、炭素質隕石が窒素に富む地球型惑星大気に高速突入したとき、衝突蒸気中にどんな有機分子が形成されるかを調べている。衝突蒸気は非常に高温になるため、複雑な有機分子の生成は期待されない。しかし、瞬間的にいろいろな酸化還元状態を取り得る上、速やかに冷却するので、単純で活性度の高い有機分子を大量に生成する可能性がある。このような反応は、生命誕生に必要な有機分子の供給プロセスとして非常に大きな役割を果たした可能性がある。

参考文献：

- [1] 杉田精司、衝突閃光の高度分光光学、*日本惑星科学会誌、遊星人*、9、77-88、1999.
- [2] Sugita, S. *et. al.*, Spectroscopic Measurements of Vapor Clouds due to Oblique Impacts. *J. Geophys. Res.*, 103, 19, 427-19, 441, 1998.



実験室内での高速衝突現象の高速写真。衝突後、衝突蒸気雲が激しい発光を伴って膨張しつつ飛び去っていくのが見える。この例では、直径7.7mmのポリカーボネートの弾丸を速度6.1km/sで101torrのアルゴン大気の中に置いた液体の水の標的に衝突させている。衝突の瞬間を基点とした時間 t が図中に表示している。