

## 正標数の代数幾何

桂 利 行 (数理科学研究科)  
g30542@m-unix.cc.u-tokyo.ac.jp

専門は代数幾何学で、代数多様体の研究をおこなっている。代数多様体とは、簡単にいえば、多変数多項式何個かの共通零点の集合であり、代数幾何学ではそれが幾何学的な対象としてどのような構造をもつかを問題にする。この分野は数論とも関係が深く、有名な Fermat の予想 —  $n$  を 3 以上の整数とすると、 $x^n + y^n = z^n$ ,  $xyz \neq 0$  をみたすような整数  $x$ ,  $y$ ,  $z$  は存在しないだろうという予想 — も代数幾何の問題としてとらえることができる。350 年来のこの難問が楕円曲線を用いて A. Wiles によって解決されたことは記憶に新しい。

筆者の研究対象は多項式の係数が正標数の体にはいつているような代数多様体である。正標数というのは、1 をある決まった素数  $p$  個たすと 0 になるような世界である。そのような世界は、各素数  $p$  ごとに存在する。たとえば、標数 2 の世界では、 $1 + 1 = 0$  という計算が成立する。一見不自然に思える世界であるが、デジタルの世界であると考えれば理解しやすい。実際、符号理論とい

うものがあるが、これは主に標数 2 の世界であり、デジタル通信、コンパクトディスク、CD-ROM などにおける誤り訂正に実用化されている。

正標数の体上の代数幾何学が、この符号理論に応用できることを発見したのは Goppa で、1980 年代初頭のことであった。Goppa は、正標数の代数曲線を用いることによって、わかりやすく符号を構成する方法を示したのである。その後、Tsfasman 等は、Varshamov-Gilbert の限界式という最良にきわめて近いと信じられていた限界式を越えるような符号を正標数の代数曲線を用いて構成し、符号理論における代数幾何の重要性を示した。

筆者は、正標数の体上定義された代数曲面の単有理性、もちあげなどの現象の研究、楕円曲面の構造の研究、代数曲線のモジュライ空間の構造と多元環の類数との関係の解明などをおこなっている。符号理論にも興味をもっており、それも視野に入れた研究をおこなっている。

## 生体分子によるコンピュータのための 構成原理を目指して

萩 谷 昌 己 (情報科学専攻)  
hagiya@is.s.u-tokyo.ac.jp

私の従来よりの専門は、ソフトウェア、特に、プログラミング言語と、その基礎的な側面に関するものである。基礎的な側面としては、プログラムの正当性検証、プログラムの効率化手法 (特に意味的な側面にまで踏み込んだ変換手法)、さらに、そのベースになる定理の自動証明などに興味を持っている。

そのような専門とはかなり独立に、数年前からゲノム情報の分野に首を突っ込んでいる。日本では、科研費の重点領域研究の一つとして 1991 年からゲノム情報のプロジェクトが始まった。その流れは、去年始まったゲノムサイエンスの重点領域研究へと引き継がれている。私自

身は、当初はゲノム関連のデータベースに関する仕事を少ししていたのだが、やがて、遺伝子レベルの複雑な現象についての知識が増えるにつれて、生物の種々のシステムが、どのような構成原理に従ってその構成要素から作られているのか、ということに興味を持つようになった。

これは計算機屋としては自然な興味であり、たぶん、私がゲノム情報の分野に首を突っ込んだそもその理由でもあると考えられる。ハードウェアにしても、ソフトウェアにしても、人工的なシステムは種々の構成原理を駆使して作られている。それと同じような構成原理が生物のシステムにも存在するのか。その興味をもう一歩進

めると、そのような構成原理がどのようにして進化の過程で生じたのか。

いうまでもなく、計算機屋の中にも進化の過程に興味を持つ人々が現れ始め、遂に「人工生命」という分野を生み出すに至っている。しかし、どんなシステムでも、その構成要素の性質からは逃れられないだろう。生物の場合も、その構成要素である生体分子の性質を無視して語ることはできない。人工生命の研究は、現実の生物について語ろうとするとき、どうしても限界にぶち当たるはずである。従って、生物のシステムの構成原理を理解するためには、生体分子と現実の生物に関する研究が中心となるべきである。

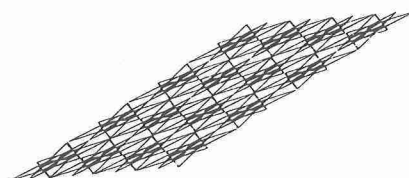
しかし、現実の生物を見ているだけで生物の構成原理はわかるのだろうか。生物学の研究においても、種々の人工的な変異を起こさせることは日常的に行われている。それを押し進めていくと、生物と同じ構成要素を用いて人工的なシステムを作ることにより、生物の構成要素や構成原理に関する知見を得ようとするアプローチが考えられる。実は、人工的なシステムを作ってみて、そこから構成要素や構成原理に関する知見を得ようとする研究は極めて一般的に行われている。例えば、脳の研究においても人工ニューラルネットワークやニューロチップの研究は盛んである。

学振の未来開拓事業のもとで始まった「分子コンピュータ」のプロジェクト（生物化学教室の横山先生、駒場の物理教室の陶山先生たちとの共同研究）は、生体分子を

用いて従来にないコンピュータ、特に、分子レベルの並列性を有するコンピュータを作ること为目标としている。しかし、以上のような流れの中で考えると、分子コンピュータの研究は、生体分子を用いて人工的なシステムを構築することにより、生体分子に対する新たな知見、特に、生体分子に対する種々の構成原理を得ようとしていると考えることもできる。もちろん、従来から数多く行われている生物に関する構成的な研究と異なるのは、「計算」をシステムの目的と捉え、生体分子をシステムの構成要素としている点である。

私が分子コンピュータの分野に出会ったのはゲノム情報のお蔭であるが、「これでやっと計算機屋に戻れた」という思いも強い。しかし、この仕事は明らかに、ソフト屋よりも、常に物理的な限界に挑戦しているハード屋の方が向いていると考えられる。私自身は、ソフトウェアよりもさらに抽象的な、ソフトウェアの仕様とか検証のための構成原理を研究して来たわけである。根源的な興味は同一にせよ、そのようなソフトウェアの構成原理と、生体分子によるコンピュータのための構成原理は、なかなか結び付くことはないだろう。ということは、当分、二足のわらじでやって行くしかないということかもしれない。

なお、上述の分子コンピュータのプロジェクトに関して詳しいことは、<http://ylab-gw.cs.uec.ac.jp/MCP/> や <ftp://nicosia.is.s.u-tokyo.ac.jp/pub/staff/hagiya/jsai97/jsai.ps> を参照していただきたい。



# 量子モンテカルロ法による原子核殻模型

大塚 孝 治 (物理学専攻)  
otsuka@phys.s.u-tokyo.ac.jp

水崎 高 浩 (物理学専攻)  
mizusaki@nt.phys.s.u-tokyo.ac.jp

原子核は多数の核子（陽子と中性子の総称）から成る多体系であるが、核子間の相互作用からその構造が決定できれば、大変すばらしい事である。この場合の核子間の相互作用は中間子を媒介にして伝わる強い相互作用であり、完全に分かっているという訳ではないが、かなりの程度まで理解は進んでいる。そこで、原子核構造論を展開し、例えば、ある原子核の基底状態のスピンの知りたい、波動関数を求めよう、という時の最大の障害は、核子どうしの相互作用は与えられたとしても、その力に従って多体系としての原子核がどういう状態になるか解く事ができる場合が限られている、という点にある。

ある核子に同じ原子核内の他の核子群から働く相互作用の内、他の核子群の側については平均化してしまっている成分があり、それらは平均ポテンシャルを形成する。これは、原子内の電子のように、原子核内での核子の運動に対して殻構造を与え、魔法数を生じる。ここまではハートリー・フォック計算などで大体出せるのであるが、ここから先、つまり平均ポテンシャルでは表わせない核子多体系のダイナミカルな構造の記述がこれまではかなり限られた原子核或いは状態に対してのみ可能であった。

最近、我々は本間道雄氏（会津大）と量子モンテカルロ対角化（Quantum Monte Carlo Diagonalization；略称 QMCD）法という多体問題の新しい方法論を提唱、発展させている。QMCD 法により、殻構造で決まる軌道上を互いに相互作用しながら動きまわる核子群の構造を、現実的な核子間相互作用を用いて、これまでの限界をはるかに越えて、解けるようになった。このような計算は原子核物理では殻模型計算と呼ばれているが、他の分野で configuration interaction (CI) と呼ばれるものと本質的に同じである。核子数の小さい原子核では多体系のハミルトニアン行列を直接対角化する事により、殻模型計算は従来より可能であったが、行列の次元の増大のため実際に実行可能な原子核は極めて限られていた。一方、我々の QMCD 法による計算では、ハミルトニアン行列の対角化を、多体系のダイナミクス及び対称性を用いて確率論的に生成された非常に少ない次元で行う。そこで、極めて効率的に近似の良い計算が行われ、徐々に粒子数を増やしてきているが、これまでの所、計算の限界は見えてきていない。また、多くの量子モンテカルロ計算と異なり、対角化のプロセスがあるために、負符号問題が全く起こらない、というメリットもある。

二つの例を示したい。一つは計算の有効性を確認するために厳密解が分かっている場合を敢えて解いたものである。図 1 に、スピンの J の中で一番低い状態のエネルギー

を  $E(J)$  とした時に、それらの差  $E(J) - E(J-2)$  を、 $^{48}\text{Cr}$  の原子核で偶数の J に対して示した。実験値、厳密解、そして我々の QMCD 計算値がほとんど完全に重なっている。ちなみに、厳密計算では約 200 万次元の行列を対角化したのであるが、QMCD 計算では、数百次元の行列を対角化して同じような結果を得ている。

もう一つの例は 28 という魔法数についてである。 $^{56}\text{Ni}$  の原子核では陽子数と中性子数がともに 28 であるが、それらは魔法数になっているのではないかと、この期待が何十年も前からあった。我々は約 11 億次元の直接対角化に相当する計算を数千次元で行い、波動関数中にそのような魔法数に対応する成分は約 50% しかなく、28 という魔法数は  $^{56}\text{Ni}$  原子核では成り立たない事を示した。波動関数に対するこのような解析も他の量子モンテカルロ計算では不可能或いは困難な事である。

このように、多体問題の解が対角化により数値的に求められる範囲が格段に広がろうとしている。この方法は原子核のみならず量子ドットなどの物性領域の問題にも適用可能なものと考えられる。数値計算の側面からは、この方法はパラレル計算機に非常に適しており、パラレル計算機の進歩による、今後の大きな発展も期待される。

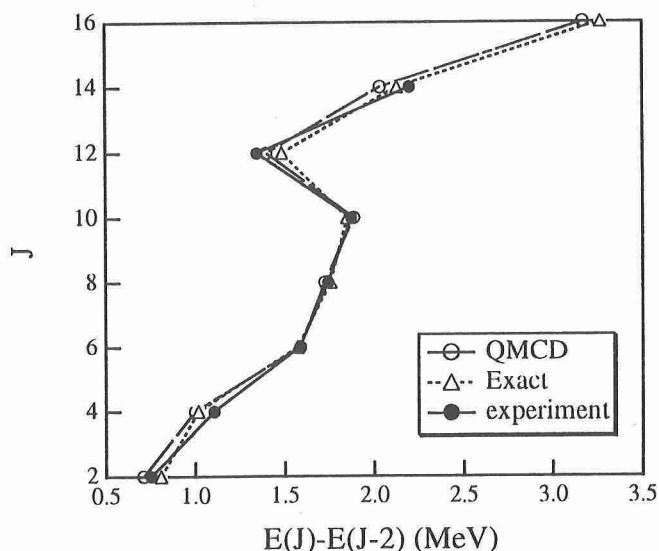


図 1  $^{48}\text{Cr}$  の原子核で、スピンの J の中で一番低い状態のエネルギーを  $E(J)$  とした時の、それらの差  $E(J) - E(J-2)$  を偶数の J に対して示したプロット。実験値（黒丸及び実線）、厳密解（三角及び点線）、そして我々の QMCD 計算値（白丸及び破線）が示されている。

# 低次元で相互作用する電子

青木 秀夫 (物理学専攻)

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

物性物理学の理論では、原子や電子の多数の集合の性質を調べる。特に粒子間には相互作用があるので、その中には超伝導や超流動といった「巨視的な量子現象」も含まれる。このような系をどんどん薄くして、2次元平面内に閉じこめたら何が起きるだろうか。また、面に閉じこめるかわりに細長く（1次元に）して、その幅が原子数個分にしたら何が起きるだろうか。さらには、全体の大きさそのものを小さくして、しまいには数少ない電子しか含まれない程（メゾスコピック系）にしたら何が起きるだろうか。特に、このような系で粒子間相互作用のせいで面白い量子効果がおきるだろうか。これが「低次元多体系」の物理である。新物質合成や半導体加工の進歩のおかげで、このような2次元系（層状物質や半導体の界面）、1次元系（鎖状物質や量子細線）、0次元系（クラスターや量子ドット）は、かなり人の意のままに作れるようになってきており、新奇な現象がさまざま見いだされている。

低次元にして電子の自由度を奪っていくと、電子は何故に大人しくなるのではなく却って活発な現象を示してくれるのだろうか。それは正に量子効果であり、もっと詳しく云うと、不確定性と電子間相互作用との絡み合いの効果といえよう。そもそも量子力学の出発点となった水素原子では、電子が陽子の引力により束縛されようとすると零点振動が邪魔をする、という競争の問題であった。その意味で、自由度を減らすと量子効果がさらに個性的に現れるのに不思議はない。

一つの例は、クーロン斥力相互作用をしている2次元電子系に強磁場（超伝導磁石で発生できる程度の）をかけた場合で、基底状態は、素励起が分数電荷となる量子液体となり、分数量子ホール効果という現象がおきる。これも或る意味で巨視的な量子現象である。最近では、これを複合粒子（磁束の貼りついた電子、2次元空間で許され、場の理論としてはChern-Simonsゲージ場の理論）で解釈することもなされている。物性物理の便利な点は、「空間次元が偶数のときに特異なことが起きる」、といったような場の理論の予言を半導体などで実現できることであろう。酸化物高温超伝導体も層状物質であるという点で、本質は2次元酸化銅面であろうと思われる。

次に1次元の系にはどんなものがあるだろうか。高温超伝導体と似た銅酸化物に、1次元状の梯子が並んだ面を含む結晶構造をもつ一連の物質（図1(a)）がある。このような梯子の上で電子間相互作用を考えると面白い、という理論的予言があり、実際昨年、2本梯子銅酸化物において実験的にも超伝導が我国で報告されて梯子が一

層注目された。これは、低次元系では量子スピン液体（スピン自由度に関する零点振動によりスピン秩序が壊れた状態）と超伝導に関連するのではないか、というアイデアに由来している。特に、1本スピン鎖に対するHaldane問題と同様、偶数本梯子は量子スピン液体で超伝導化し得るが奇数本梯子はそうではない、と予想されていた。

我々は最近三本梯子（図1(b)）を考え、意外にも三本（奇数本）でも超伝導になり得ることを見出した。これは、相互作用が弱い場合の朝永・ラッティンジャーのボゾン化による繰り込み群の方法と強い場合の量子モンテカルロ計算の両方で示されるが、前者からは、特定の超伝導クーパー対（鎖間にまたがるもの）が発達する機構があることを見てとることができる。これは、本数をさらに増やして2次元の極限がどうなるかのヒントを与える、という意味もあろう。

最後に、最も低次元化の0次元（狭い点状）に閉じこめたらどうだろうか。実際、半導体で2次元電子系が電子が数個しか含まない程小さな（数百ナノメートル程度の）領域に閉じ込めることは実験的に実現されて量子ドットと呼ばれており、人工的な原子として最近注目を集めている。上で例に出した水素原子では、位置と運動量の兼合いの問題であった。それでは何らかの理由で、電子の位置座標自身が初めから大きな不確定性（零点振動）をもつような電子複数個をもつ量子ドットが実現できたらどんなことが起きるだろうか。実は、量子ドットを分数量子ホール系と同じく強磁場中に置くと、サイクロトロン運動の量子化のために、このような位置座標の不確定性が生じる。強磁場をかけたときに興味深いのは、基底状態が、原子核の殻構造を思い出させるような「魔法数」と呼ばれる特定の全角運動量を取り、これが正に強磁場中で零点振動をもつ波動関数の対称性と深く関わっているからである。

つまり、強磁場下の量子ドット中の電子は、回転しながら量子零点振動している一定の配置（「電子分子」）として捉えることができ、魔法数も斥力相互作用に支配された波動関数の対称性が、パウリ原理により群論的に規制される効果と理解できる。普通の分子では、原子核に束縛された電子達の挙動が問題になり、核が重いために「Born-Oppenheimer近似」から出発して云々、という流れになるのとは対照的に、核は存在しないのに電子が‘自発的に’分子的な配置を組む訳である。このように、メゾスコピック系の電子は新たな「分子物理」とも云えるカテゴリーを生む可能性があり、さらに量子ドットを2枚重ねた2重量子ドットにすると、魔法数が光学吸収

でも観測可能になり、電子分子も立体分子になる(図2)ことが最近分かった。スピン自由度まで考えると、全スピンと魔法数が連動しているという特異な「フント則」

が存在することなども分かる。

このように、電子相関と低次元性の相乗効果は新奇的な効果を秘めているように思われる。

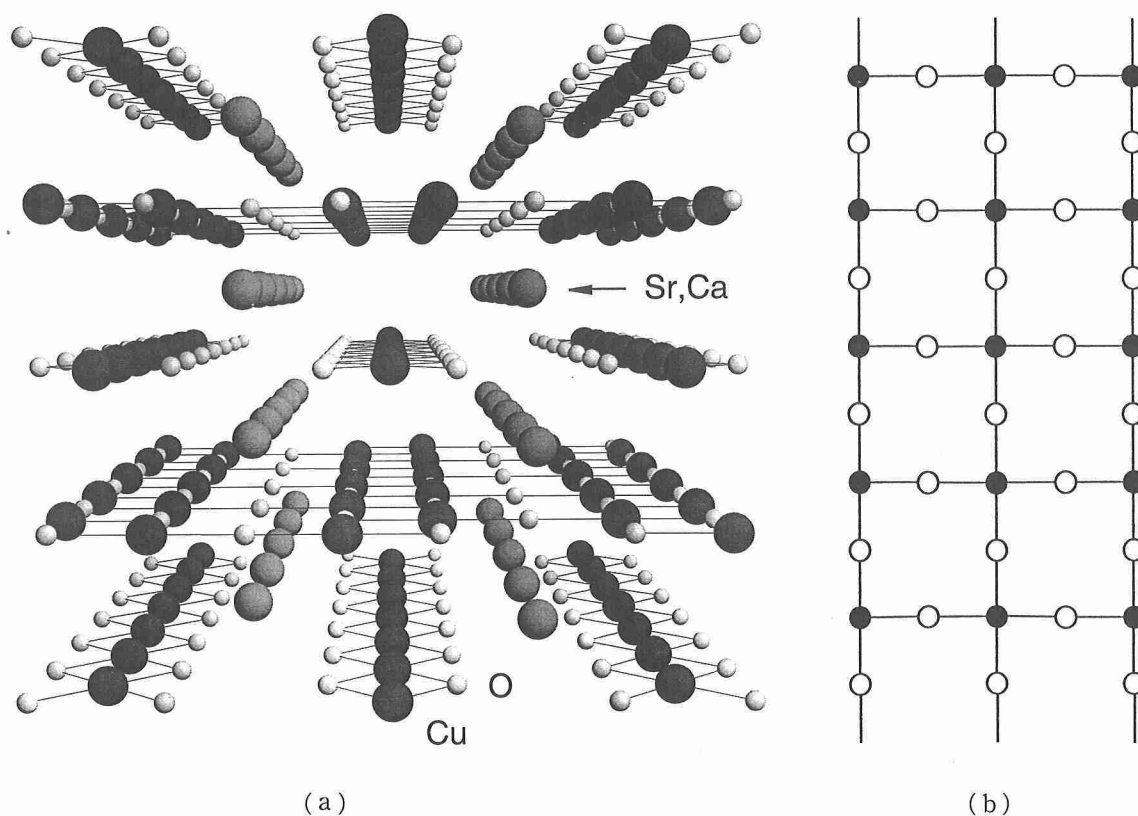


図1 (a) 1次元状の梯子が並んだ面を含む結晶構造をもつ銅酸化物の例。  
(b) 三本梯子の概念図。黒丸は銅、白丸は酸素。

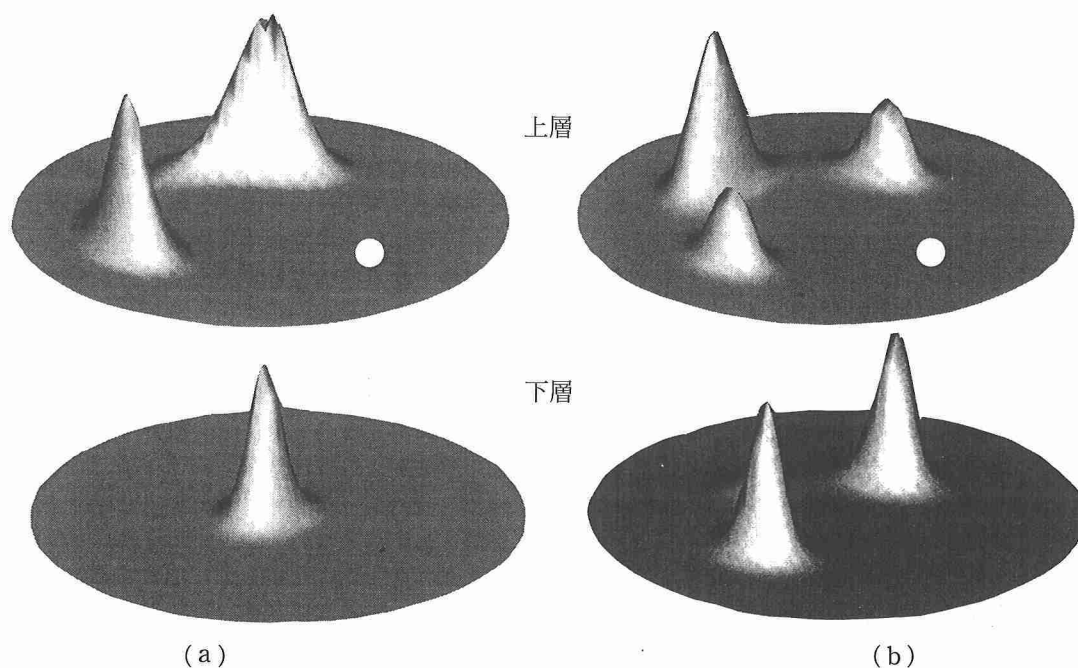


図2 強磁場中の2重量子ドットの、魔法数角運動量をもつ「立体電子分子」状態の例。1つの電子を或る点(白丸)に固定した時の他の3電子の確率分布のプロットから、磁場の値に応じて(a)や(b)の配置をとることを示す。



# 超新星1987 A の星周物質と大質量星の進化

鈴木 知 治 (天文学専攻)

suzuki@astron.s.u-tokyo.ac.jp

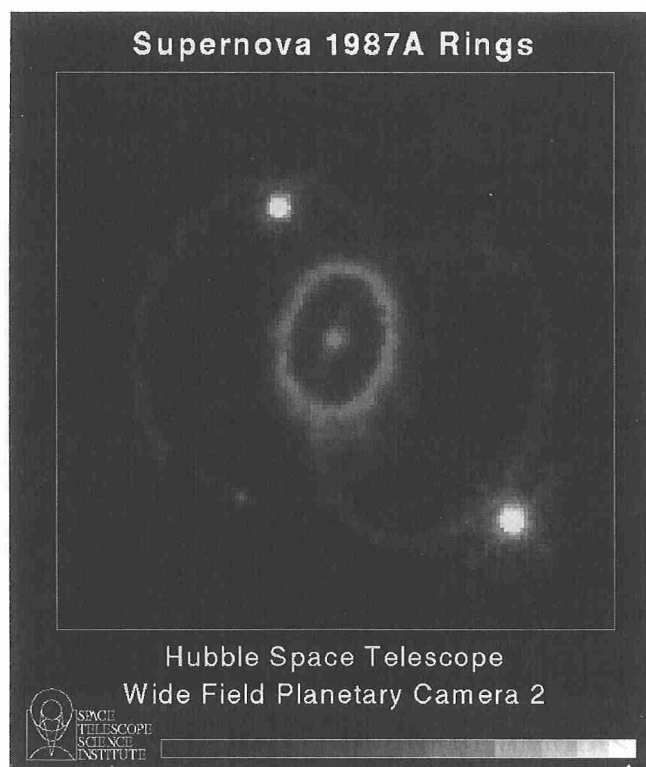
明るく輝く超新星の周りを取り囲む3本の輪 (写真)  
: ハッブル宇宙望遠鏡がとらえたこの写真を御覧になった方も多いであろう。

超新星は、質量が太陽の10倍以上もある大質量星が、その一生の最後に起こす大爆発である。また「輪」は、星を取り巻くように分布しているガス「星周物質」の一部である。このような大質量星は、巨星と呼ばれる段階に入ると、その表面から自らのガスを吹き出すようになる。その量は1年当たり太陽質量の1000万分の1から100万分の1程度である。このガスは星の周りを取り巻くように分布するため、星周物質と呼ばれる。この写真の「輪」は、星周物質の中でも特に密度の高い部分であるものと考えられる。しかし、どのようにして「輪」のような分布が形成されたのかという問題については、まだはっきりとしたことは明らかになっていない。

星が超新星として光り始めた瞬間、非常に強い紫外線が放射される。星周物質は、この紫外線を吸収し、再び紫外線や可視光を放射する。特に密度の高い部分が、この場合の「輪」のように見えるわけであるが、「輪」以外の部分も真空ではなく、ガスが存在すると予想される。その密度や量について教えてくれそうなのが、X線の観測である。超新星爆発によって、その星を構成していた

大部分のガスは周囲の空間へ膨張していく。この時の先端の速度は、秒速1万キロメートルにもなっており、この物質と星周物質の衝突によって衝撃波が発生する。この衝撃波によって、ガスの温度は1億度を越え、X線を放射する。X線天文衛星が行なった観測から、「輪」の位置より内側は、平均密度として1cc当たり数十個程度の原子が存在するくらい必要であることが明らかになった。一方、電波観測によって、外側へ広がっていく衝撃波の位置と速度を知ることができるが、この速度は予想より遥かに高かった。この速度を実現するためには、「輪」の内側の密度はX線の観測から求められた値よりかなり小さく、1cc当たり1個よりも少なくなければならないことが分ってきた。以上のことは、この超新星の星周物質は球対称ではなく、輪の存在する面に密度が高く、輪の対称軸方向に密度が低いような分布をしていると考え、うまく説明できるようである。

このように、超新星1987Aの周囲の様子は出現後10年経った今でも、次々と新しくかつ面白い観測が報告されている。今後も、いくつかの大型地上望遠鏡、観測衛星が稼働する予定であり、超新星1987Aに限らず、他の超新星についても星周物質の分布やその進化を知る手掛りが得られることを期待している。



写真説明：超新星1987Aと3本の輪

中心の明るく輝く球が超新星1987Aで、現在も周囲へ膨張を続けている。中央の太い輪は超新星が存在する同じ面上に、上下の2本の輪はその面とは異なる面上にあると考えられている。

(Space Telescope Science Institute, Press Release No. STScI-PR94-22)

## 二次イオン質量分析計 (SIMS) による隕石の微小領域分析

比屋根 肇 (地球惑星物理学専攻)

hiyagon@geoph.s.u-tokyo.ac.jp

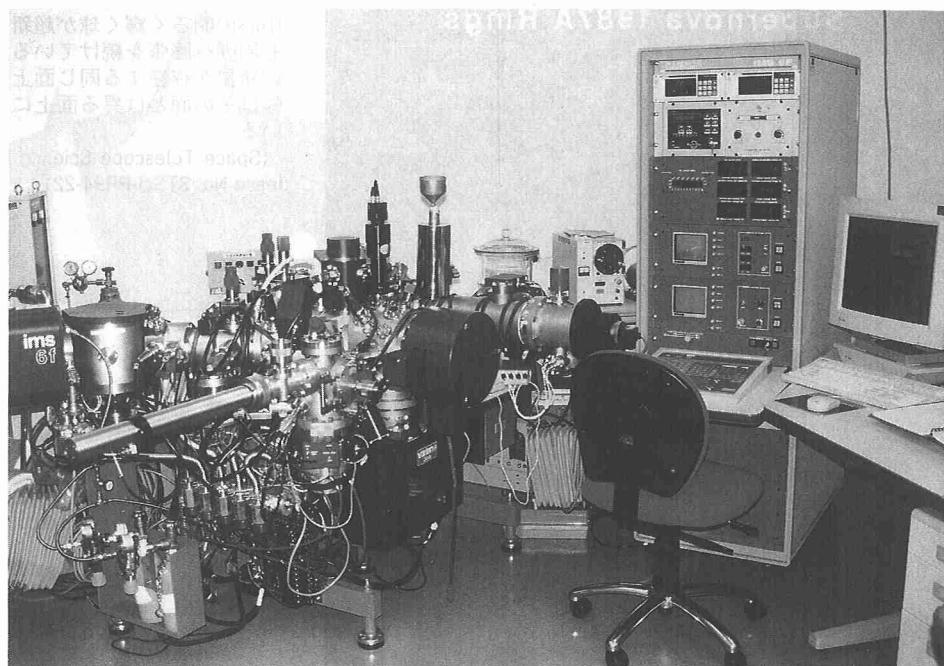
1995年3月、地球惑星科学の分野におけるさまざまな応用を目的として地球惑星物理学教室に二次イオン質量分析計 (SIMS) が設置された (写真参照)。現在、隕石中の酸素、炭素、窒素の同位体分析、微量元素の分析などを中心に威力を発揮し始めている。

SIMS の原理は、 $O_2^+$ 、 $O^-$ 、 $Cs^+$  などの一次イオンを試料に当て、スパッタリングにより試料表面から飛び出してくる二次イオンを加速して質量分析をおこなうものである。試料表面がそのままイオン源になるため感度が良く、多くの元素について微量分析や同位体分析が可能である。一次イオンビームを絞ることにより、数ミクロン領域の局所分析ができる。また、試料表面からの二次イオン像をとったり (二次元分析)、スパッタリングにより試料が削られていくことを利用して試料の深さ方向の元素分布を測定することも可能である。(ただし、SIMS には、分析手法の核心である二次イオンの生成過程に不明の点が多いという重大な欠点があり、必ず比較のための標準物質が必要である。)

さて、隕石は、太陽、地球、他の惑星などが生まれるもととなった原始太陽系星雲の「化石」だと思われやすい。地球など大きな天体は現在でも火成活動が続いているが、隕石の母天体は小さいため太陽系の歴史の

ごく初期に活動を終えており、隕石はその当時の情報を保持しているのである。したがって、隕石を調べることでにより原始太陽系星雲に関するさまざまな情報を得ることができる。

隕石を構成する鉱物粒子などの中に種々の同位体異常が見つかるが、そのいくつかは太陽系内で作れないもので、プレソーラー粒子と呼ばれている。つまり、太陽系形成以前に超新星爆発などの核反応で作られたものが生き残っているというわけである。炭素質隕石などに含まれる CAI (カルシウム、アルミニウムに富んだ 1cm 程度までの大きさの白い塊) に存在する酸素の同位体異常 (質量数16の酸素の存在度が地球のものに比べて 4-5% 多い) も有名である。しかし、その起源がプレソーラー粒子によるものなのか、原始太陽系における何らかのプロセスで生じたものなのか、今のところわかっていない。こういった問題を解明するためには、数十ミクロンサイズの鉱物ごとに酸素同位体組成や他の元素の同位体異常を調べる必要がある。その際 SIMS は不可欠の分析装置である。現在、酸素同位体比に関して プラスマイナス 0.2-0.3% の精度での分析に成功している。今後の隕石学、惑星科学の発展に大きな貢献ができるのではないかと期待している。



図：二次イオン質量分析計 (カメカ社 ims-6f) の外観

## 5 炭素結合型フラーレン金属錯体の合成

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

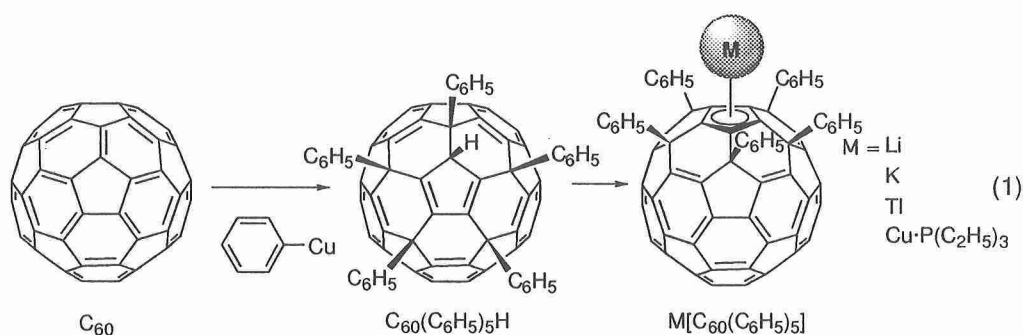
$C_{60}$  に代表されるサッカーボール型炭素クラスター分子フラーレンは  $\pi$  電子のネットワークが球面状に展開した特異な構造から多くの科学者の注目を集めている。我々は、その特異な電子構造、適度な大きさ、および三次元的な空間の広がり、機能性有機金属錯体の基盤構造として適していると考え、新しいフラーレン配位子の開発を目指してフラーレンの化学修飾の研究に着手した。その結果、式 1 に示したように  $C_{60}$  と有機銅反応剤 ( $C_6H_5Cu$ ) の反応により、5 つのベンゼン環が  $C_{60}$  の 1 つの 5 員環の廻りを取り囲むように位置選択的に連続付加したフラーレン誘導体  $C_{60}(C_6H_5)_5H$  が定量的な収率で得られることを見つけた。5 つのベンゼン環によって取り囲まれた 5 員環は、5 炭素結合型金属錯体の前駆体となるシクロペンタジエンと呼ばれる特殊な構造を有している。この化合物は空気中でも安定なオレンジ色の固体である。

シクロペンタジエン型 5 重付加体  $C_{60}(C_6H_5)_5H$  は  $LiOC(CH_3)_3$ 、 $KOC(CH_3)_3$ 、 $TiOC_2H_5$ 、 $Cu[OC(CH_3)_3][P(C_2H_5)_3]$ 、などの金属アルコキシドとの反応により脱プロトン化を受け、対応する 5 炭素結合型金属錯体  $Li[C_{60}(C_6H_5)_5]$ 、 $K[C_{60}(C_6H_5)_5]$ 、 $Tl[C_{60}(C_6H_5)_5]$ 、 $Cu[C_{60}(C_6H_5)_5][P(C_2H_5)_3]$  などに変換される。これらの錯

体のうちタリウム錯体については、X線結晶構造解析に成功し、その特徴的な構造が明らかになった。タリウム原子は 5 つのベンゼン環によって形成された空洞の中に奥深く入り込み、 $C_{60}$  由来の 5 つの炭素原子とほぼ等価に結合している。5 つのベンゼン環はプロペラ状にねじれて配置し、分子全体がほぼ  $C_5$  対称になっている。 $C_{60}$  の球状構造を反映して、ベンゼン環が結合している 5 つの  $sp^3$  炭素が、タリウムに結合した 5 つの炭素原子が規定する平面から著しくずれているのもこの化合物大きな特徴である。

シクロペンタジエン型  $C_{60}(C_6H_5)_5H$  および  $Tl[C_{60}(C_6H_5)_5]$  の紫外—可視吸収スペクトルは紫外領域で  $C_{60}$  に匹敵する強い吸収体を与え、可視領域の吸収もかなり長波長まで延びており、 $C_{60}$  コアに残された 50  $\pi$  電子系  $C_{50}$  ポリオレフィン部位が、 $C_{60}$  に似た電子的特性を有することが示唆される。

本研究は  $C_{60}$  に対する有機銅試薬の 5 重付加反応の意外な発見に始まった。その後の実験結果により、5 炭素結合型フラーレン金属錯体が外界との電子のやり取りをしたり、光によって電子状態を制御できるなどの特殊な機能を備えていることが示されている。触媒や材料などの分野における応用を目指してさらに研究を進めたい。





# イオン結合性物質のヘテロ成長とその薄膜・表面物性

齊 木 幸一朗 (化学専攻)

saiki@chem.s.u-tokyo.ac.jp

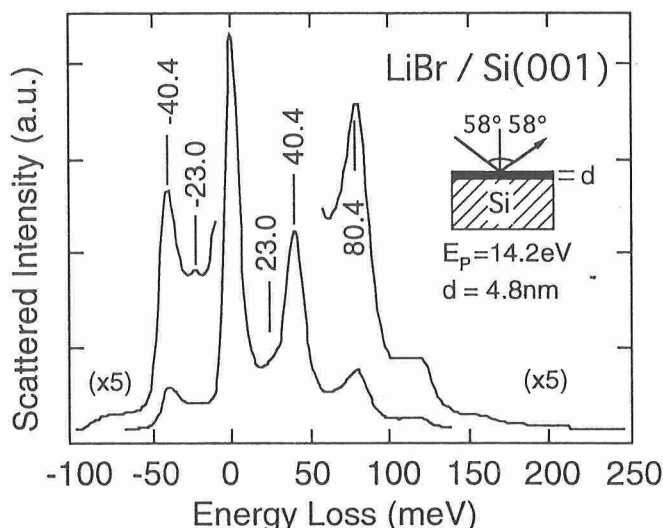
アルカリハライド、アルカリ土類ハライドに代表されるイオン結晶の薄膜成長の様相は、シリコン、ガリウム砒素などの共有結合性半導体とはかなり異なっている。その一番大きな特徴は、分子状で昇華したイオン結晶分子は結晶基板上での表面拡散エネルギーが小さく、室温程度の「低温」でも下地基板との軸を揃えたエピタキシャル成長が可能なことである。同時に、基板物質と異なる物質が成長するヘテロ成長において、許容される格子不整合が半導体の数%に比して数十%まで緩和されることである。

われわれのグループではイオン結晶相互のヘテロ成長に加え、良質の単結晶基板が容易に得られる半導体基板上へのアルカリハライドの成長過程を追究し、そのヘテロ成長条件を探索してきた。その結果、Si 上には LiBr が、GaAs 上には NaCl が平坦に成長することを見出した。アルカリハライド間ではヘテロ成長が可能であるので任意のアルカリハライドがシリコン、ガリウム砒素上に成長できる。このようなヘテロ構造の作製は以下の新たな研究へと発展している。

その一つは、上記のヘテロ構造を用いれば表面分析手法が帯電の影響なく適用できるため、絶縁性のアルカリ

ハライドの表面研究が可能となったことである。図は Si 上に成長した膜厚 4.8nm の LiBr 薄膜の表面フォノンポラリトン（電子線により作られる電場と格子振動の連成波）スペクトルである。40meV の整数倍のエネルギー位置に表面モードが、また 23meV に界面モードが現われている。これらの励起エネルギーの膜厚依存性は従来理論的には予測されていたが、このヘテロ構造を用いることにより実験的に初めて明かになった。

イオン結晶/半導体ヘテロ構造は、新たな機能性表面調製への道を拓く可能性がある。イオン結晶表面は二次電子放出係数が半導体や金属に比べて格段に大きい。これは電子親和力が極めて小さいことに由来するが、上記ヘテロ接合はより大きな二次電子放出係数を示すことが期待される。一方、岩塩型構造結晶の(111)面は正あるいは負イオンのみからなる極性面であり、特異な物性の発現が予測されているがエネルギー的に不安定である。最近、われわれは複合ヘテロ構造の作製によって、半導体極性面上に岩塩型構造物質の(111)平坦面を得る手掛かりを掴んだ。現在、より安定な極性面の実現に向けて種々の物質、基板に対して鋭意研究をおこなっている。



図説明

Si(001)基板上に単結晶成長したLiBr薄膜(膜厚4.8nm)の電子線エネルギー損失スペクトル。Fuchs-Kliwerモードと呼ばれる表面フォノンポラリトンによるピークが現われている。膜厚をさらに薄くしていくと、表面モードは高エネルギー側に、界面モードは低エネルギー側に移動する。その振る舞いは巨視的な誘電理論により説明されるが、数nm以下の超薄膜領域では微視的な理論が必要となる。