

# 公 示

琉球大学大学院理工学研究科物質地球科学専攻(物理系)の学位論文発表会を下記のとおり開催します。

講 座	発表者氏名	論 文 題 目	日 時 ・ 場 所
物質情報学	金城 裕明	4-NH <sub>2</sub> C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> NHBiBr <sub>4</sub> ·H <sub>2</sub> O の相転移のNQRによる研究	日 時: 2月22日 9:00~9:30 場 所: 理114教室
物質情報学	譜久村 太一	ErCo <sub>3</sub> のメタ磁性転移のNMRによる研究	日 時: 2月22日 9:30~10:00 場 所: 理114教室
物質情報学	高江洲 義尚	希土類ラーベス相化合物Y <sub>1-x</sub> Gd <sub>x</sub> Co <sub>2</sub> の極端条件下の伝導	日 時: 2月22日 10:00~10:30 場 所: 理114教室
物質基礎学	島田 誠	Study on mesons and baryons for pentaquark	日 時: 2月22日 10:30~11:00 場 所: 理114教室
物質基礎学	松田 順	グラウバーの検索アルゴリズムとその一般化	日 時: 2月22日 11:00~11:30 場 所: 理114教室
物質情報学	知念 幸伸	ファージ葉緑体及びミトコンドリアゲノム塩基配列の1/f パワースペクトル	日 時: 2月22日 11:30~12:00 場 所: 理114教室
物質情報学	根間 幸美	老化スペクトルの物理学	日 時: 2月22日 13:00~13:30 場 所: 理114教室
物質基礎学	仲宗根 一成	分子動力学法による超イオン導電体 $\alpha$ -AgIの物性	日 時: 2月22日 13:30~14:00 場 所: 理114教室
物質情報学	菅原 徹	電場中におけるAgI イオン伝導 一分子動力学法による研究-	日 時: 2月22日 14:00~14:30 場 所: 理114教室

平成17年2月15日

理 工 学 研 究 科 長

宮 城 隼



# 4-NH<sub>2</sub>C<sub>5</sub>H<sub>4</sub>NHBiBr<sub>4</sub>・H<sub>2</sub>O の相転移の NQR による研究

琉球大学理理工学研究科 物質地球科学科専攻

金城 裕明

指導教官：二木治雄

ハロゲン化アンチモンやハロゲン化ビスマスは種々のアミン類と 1:1、1:2 等の組成の錯体を作ることが知られているが、芳香族アミンとの錯体に関する研究は比較的少ない。今回、我々は 4-アミノピリジニウムをカチオンとする 4-NH<sub>2</sub>C<sub>5</sub>H<sub>4</sub>NHBiBr<sub>4</sub>・H<sub>2</sub>O の Br について NQR による研究を行った。今回、測定に用いた結晶は黄色がかった針状の結晶で、適量の化合モル比の三ニ酸化ビスマスと 4-アミノピリジンを高濃度の臭化水素酸性溶液中で溶解、冷却することによって得られる。結晶は水和物の存在を除いては 4-NH<sub>2</sub>C<sub>5</sub>H<sub>4</sub>NHSbBr<sub>4</sub> と同じ単斜晶系に属している。スペースグループは  $C2/c$ ,  $a = 13.615\text{\AA}$ ,  $b = 13.984\text{\AA}$ ,  $c = 7.439\text{\AA}$ ,  $\beta = 119.09^\circ$  である。

超再生法による <sup>81</sup>Br NQR の共鳴線は、低温では、架橋および末端 Br に対して各々 2 本の共鳴線（末端： $\nu_1, \nu_2$  架橋： $\nu_3, \nu_4$ ）が存在する (Fig.1)。これに対して、架橋、末端 Br とも共鳴線は 274K 以上で消失するが、274K 付近から再び 1 本（架橋： $\nu_a$ , 末端： $\nu_b$ ）となって現れる。これは 1 次の相転移の存在を示す。DTA 測定でも 274K 付近に 1 次の相転移によると考えられる熱異常のピークを観測できた。この 274K での相転移には、カチオンの熱運動が関与していると考えられる。

結晶全体の熱運動を明らかにするために、<sup>81</sup>Br のパルス法 NQR によりスピン-格子緩和時間  $T_1$  を測定した。 $T_1$  の温度変化を Fig.2 に示す。<sup>81</sup>Br は 77K から 160K の範囲では熱振動に基づく運動をしているが、165K から 190K の温度領域ではリオリエンテーションによる緩和を示した。この 165K から 190K の温度範囲で縦軸  $\ln(T_1)$ 、横軸  $1/T$  曲線を取ることにより、その傾きからそれぞれの Br サイトでの活性化エネルギーが分かる。各共鳴線での活性化エネルギーは  $\nu_1$  で 18.4KJ/mol,  $\nu_2$  で 18.0KJ/mol,  $\nu_3$  で 24.5KJ/mol,  $\nu_4$  で 25.3KJ/mol であった。

<sup>81</sup>Br NQR のスピン-スピン緩和時間  $T_2$  の温度変化を Fig.3 に示す。 $T_2$  の値は低い温度領域でも比較的短く、温度を上げていくとなお一層短くなる。そのため、190K 以上で <sup>81</sup>Br NQR のエコー信号の検出が困難であったのはこの  $T_2$  が非常に短くなっているためだと考えられる。また、160K 以上の  $T_2$  の変化はちょうど  $T_1$  の変化に対応している。

Bi を Sb に置換した 4-NH<sub>2</sub>C<sub>5</sub>H<sub>4</sub>NHSbBr<sub>4</sub> の <sup>81</sup>Br NQR の  $T_1$  の温度変化を Fig.4 に示す。各共鳴線での活性化エネルギーは  $\nu'_1$  で 14.8KJ/mol,  $\nu'_2$  で 15.0KJ/mol,  $\nu'_3$  で 16.6KJ/mol,  $\nu'_4$  で 16.7KJ/mol であった。4-NH<sub>2</sub>C<sub>5</sub>H<sub>4</sub>NHSbBr<sub>4</sub> の相転移温度は 224K で、4-NH<sub>2</sub>C<sub>5</sub>H<sub>4</sub>NHBiBr<sub>4</sub> の相転移温度より低い。これに対応して、Sb に置換した試料の Br の活性化エネルギーは、Bi に置換した試料に比べて小さくなっていることが分かる。

Bi を Sb に置換した時の <sup>81</sup>Br NQR の  $T_2$  の温度変化を Fig.5 に示す。130K 以上の <sup>81</sup>Br の  $T_2$  の急激な変化は Fig.4 の  $T_1$  の変化に対応します。

Bi を Sb に置換した時の  $^{121}\text{Sb}$  NQR の  $T_1$  の温度変化を Fig.6 に示す。Sb は核スピン  $I = \frac{5}{2}$  のため  $T_1$  は核スピン  $I = \frac{3}{2}$  の  $^{81}\text{Br}$  のように単一の  $\exp$  タイプの式で表すことができず、2 つの  $\exp$  の和で記述される。各共鳴線での活性化エネルギーは  $\nu_{s1}$  で  $24.1\text{KJ/mol}$ ,  $\nu_{s2}$  で  $22.9\text{KJ/mol}$  で、 $^{81}\text{Br}$  の活性化エネルギーに比べてかなり大きな値を示している。

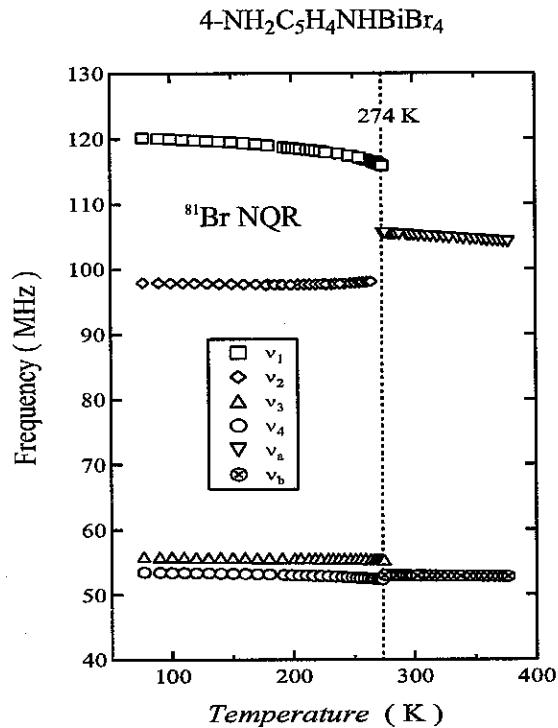


Fig.1

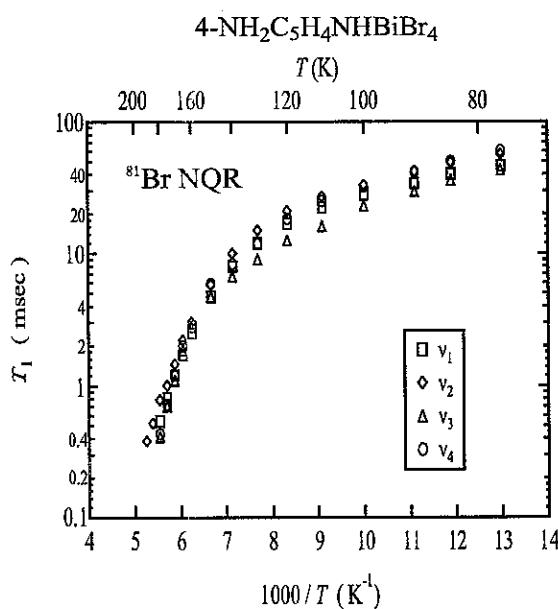


Fig.2

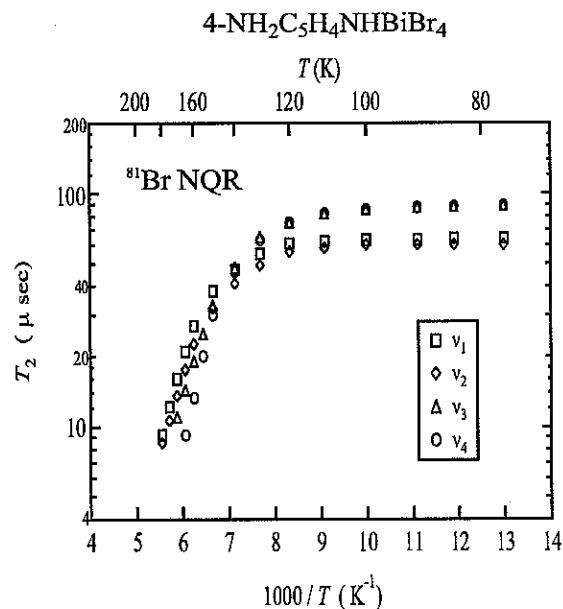


Fig.3

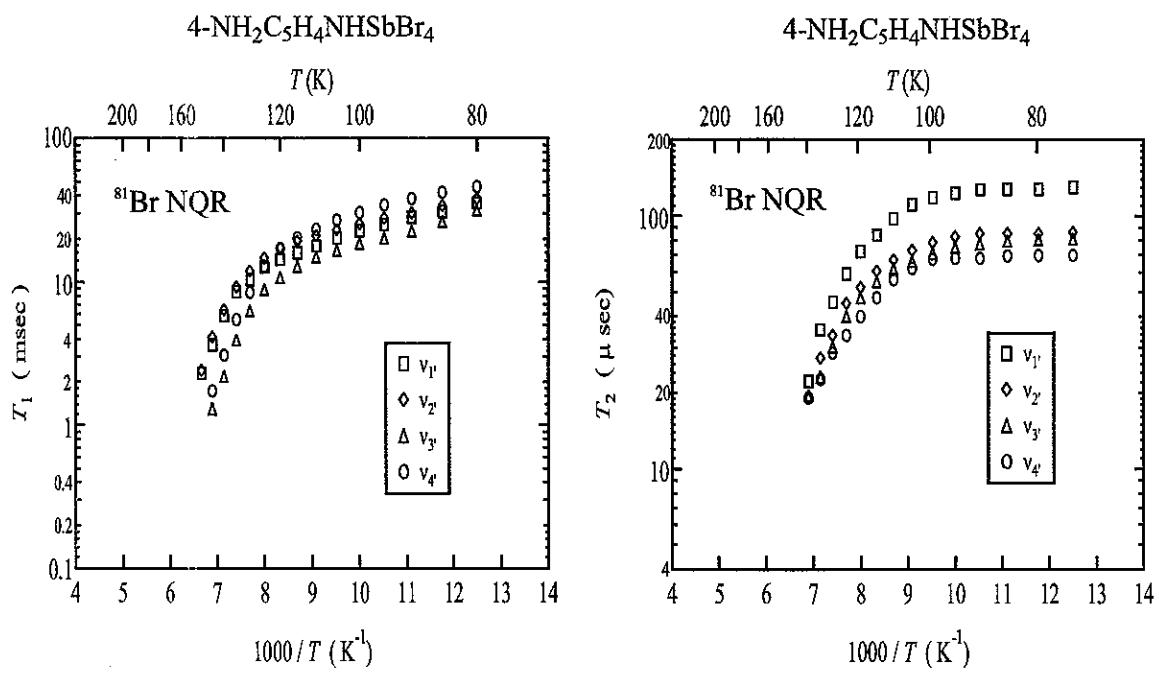


Fig.4

Fig.5

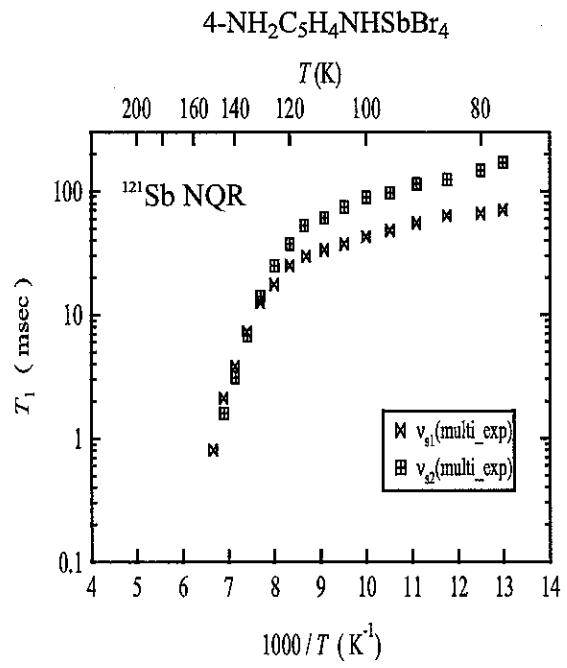


Fig.6

# ErCo<sub>3</sub> のメタ磁性転移のNMRによる研究

琉球大学理理工学研究科 物質地球科学専攻

譜久村太一

指導教官：二木治雄

金属間化合物 ErCo<sub>3</sub> は、図 1 の様に PuNi<sub>3</sub> 型で rhombohedral の結晶構造を有し、Er は 2 つのサイト (Er<sub>I</sub>, Er<sub>II</sub>) からなり、Co は 3 つのサイト (Co<sub>I</sub>, Co<sub>II</sub>, Co<sub>III</sub>) からなる。その構造は ErCo<sub>2</sub> と ErCo<sub>5</sub> の 2 つのタイプからなり、その比は 2:1 である (図 2)。Er<sub>I</sub>, Er<sub>II</sub> はそれぞれ ErCo<sub>5</sub> タイプと ErCo<sub>2</sub> タイプに属する。ErCo<sub>3</sub> は低温でフェリ磁性 ( $T_C=401\text{K}$ ) を示し、その磁気構造は C 軸方向に沿って Er と Co の磁気モーメントが反平行に並んでいる。ErCo<sub>3</sub> に外部磁場を C 軸に垂直にかけると、3T 以上で Er モーメントが磁場方向に傾き、メタ磁性転移を起こす。

ErCo<sub>3</sub> のフェリ磁性での磁気秩序を研究するために、Er を Y で置換した Er<sub>1-x</sub>Y<sub>x</sub>Co<sub>3</sub> ( $x=0, 0.1, 0.3, 0.5$ ) について <sup>59</sup>Co NMR を 4.2K で行った。試料は粉末試料を用い常温で外部磁場によってモーメントを磁化容易軸方向に揃えパラフィンで固めた。<sup>59</sup>Co NMR の磁場依存性を外部磁場が磁化容易軸に平行と垂直な場合について行い Co と Er のそれぞれのモーメントの方向を求めた。

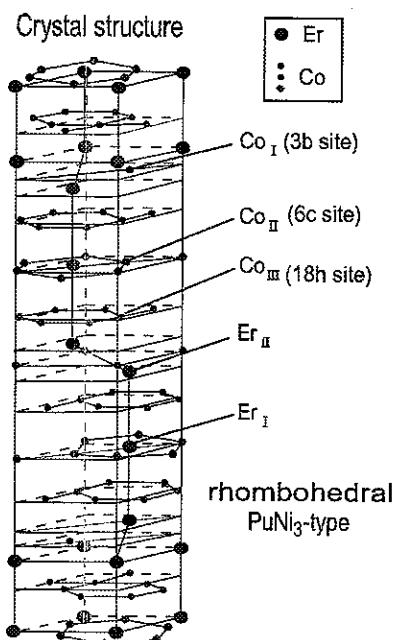


図1

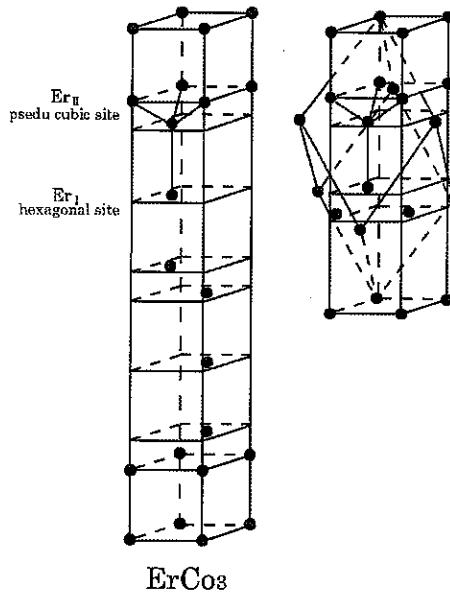


図2

- 1)  $x=0, 0.1$  では Er<sub>I</sub>, Er<sub>II</sub> サイトの Er モーメントは共に C 軸方向を向く (磁化容易軸//C 軸方向)。しかし、 $H \perp C$  軸のときは数テスラの磁場強度で Er<sub>II</sub> や Co のモーメントは磁場方向に傾く。
- 2)  $x=0.3$  では Er<sub>I</sub> サイトに選択的に Y が入るため、Er<sub>I</sub> と Er<sub>II</sub> の両サイト間の相互作用が弱まる。残っている Er<sub>I</sub> サイトのモーメントはほぼ C 軸方向を向くが、Er<sub>II</sub> のモーメントは C 軸より 66° 傾いた方向を向く。

3) 1), 2) の結果は、中性子回折の結果 ( $x = 0, 0.1, 0.3$ ) とも一致する。NMR の結果を図 3 に、中性子回折の結果を表 1 に示す。

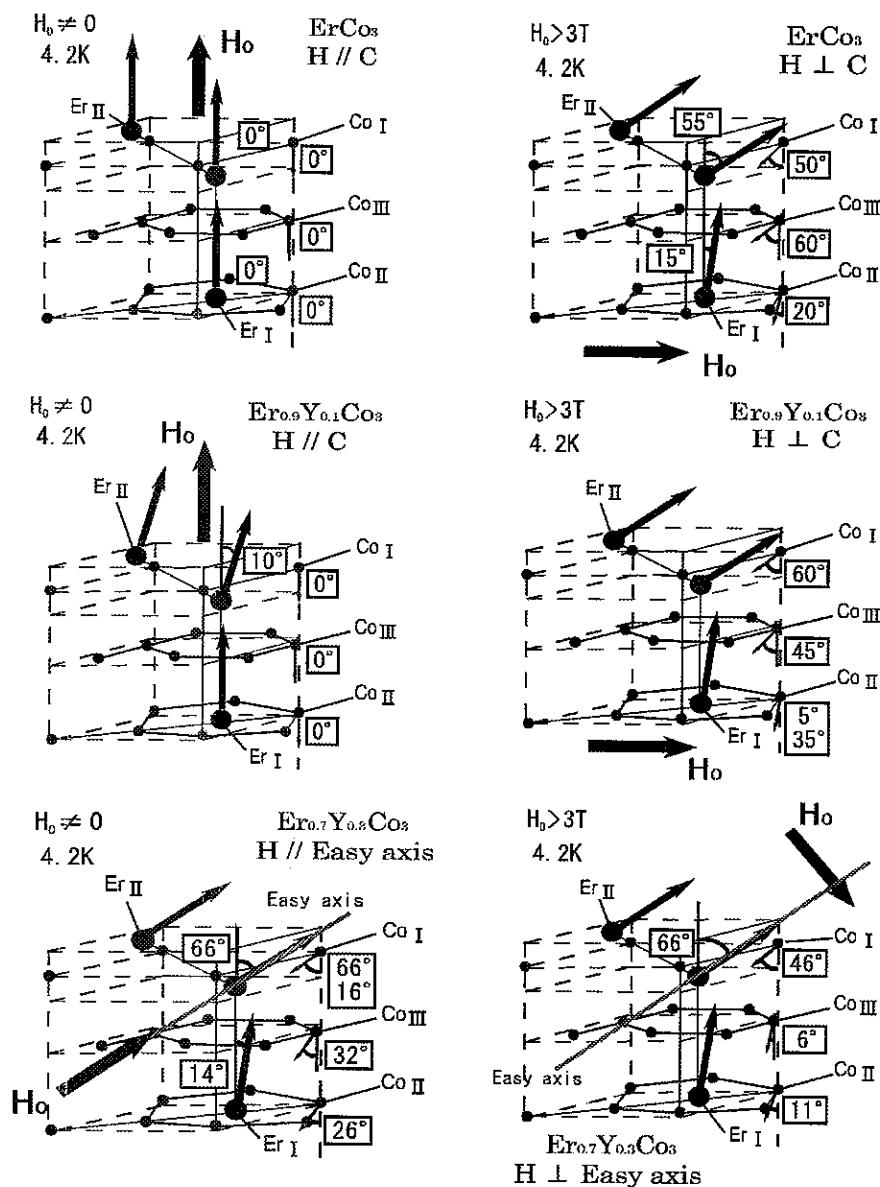


図3

	$x=0$ 転移前 ( $H=0\text{T}$ )	$x=0$ 転移後 ( $H>3\text{T}$ )	$x=0.1$ ( $H=0\text{T}$ )	$x=0.3$ ( $H=0\text{T}$ )
Er I	0°	15°		14°
Er II	0°	55°	10°	66°

表1. ErのMagnetic momentの方向

4)  $x=0.5$  では、中性子回折の実験結果がないため、容易軸は  $x=0.3$  と同じように C 軸より  $66^\circ$  傾いた方向を向いていると仮定した。 $x=0.5$  の NMR による実験結果を図 4 に示す。 $H_0//$  容易軸において、サイト II は常に決まった方向を向き、 $\theta=16^\circ$  と一意的に決定することができた。サイト III は多少のずれが生じたが、 $\theta=21^\circ$  と決定した。サイト I については、実験条件によって  $^{59}\text{Co}$  核の共鳴周波数がずれるため、方向を決定することはできなかったが、 $66^\circ$  と  $145^\circ$  の間に値を持つことが考えられる（図 3）。 $H \perp$  容易軸の場合は平行の場合と違って、3つすべての Co サイトで確定した値を示した。

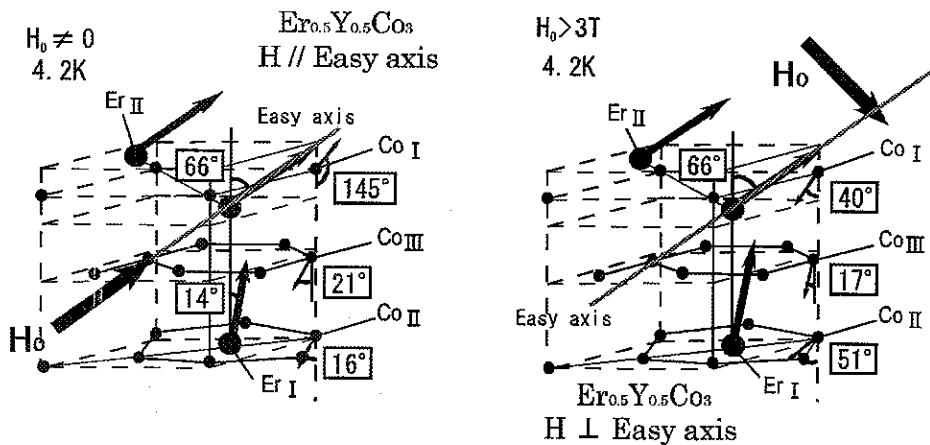


図 4

# 希土類ラーベス相化合物 $Y_{1-x}Gd_xCo_2$ の極端条件下の伝導

琉球大理 高江洲義尚

## Transport properties of Laves phase compounds $Y_{1-x}Gd_xCo_2$ under extreme condition

Fac. Sci., Univ. of the Ryukyus Y. Takaesu

希土類立方晶ラーベス相化合物  $GdCo_2$  は、キュリー温度 ( $T_C = 400$  K) 以下で  $Gd$ -4f 磁気モーメントと  $Co$ -3d 磁気モーメントが反平行に揃うフェリ磁性体である。一方、 $YCo_2$  は交換増強されたパウリ常磁性体で、70 T の外部磁場で常磁性-強磁性の遍歴電子メタ磁性転移を起こすことが知られている。 $GdCo_2$  の  $Gd$  を  $Y$  に置換した系  $Y_{1-x}Gd_xCo_2$  は、図 1 に示すように、 $0.3 < x \leq 1.0$  の組成領域でフェリ磁性相、 $0.12 < x \leq 0.3$  の組成領域で  $Gd$  4f 磁気モーメントのみがオーダーする強磁性相、 $x \leq 0.12$  で常磁性相であると報告してきた。しかしながら、強磁性相といわれている  $0.12 < x \leq 0.3$  の組成領域では、図 2(a) に示すように、正のマグネットレジスタンス (●印) を示し、一般の強磁性とは異なる振る舞いを示すことが確認されている。また、この組成領域では、図 2(b) に示すような、残留抵抗の急激な上昇も確認されている。このような電気抵抗の特異な振る舞いの発現機構を解明するため、 $B = 15$  T までの磁場および  $P = 10$  GPa までの圧力中で、電気抵抗率  $\rho$  を、2-300 K の温度で測定した。測定は、直流 4 端子法で行った。圧力中の測定は、2 GPa まではクランプ型ピストンシリンダー、10 GPa まではキューピックアンビルセルを用いて行った。

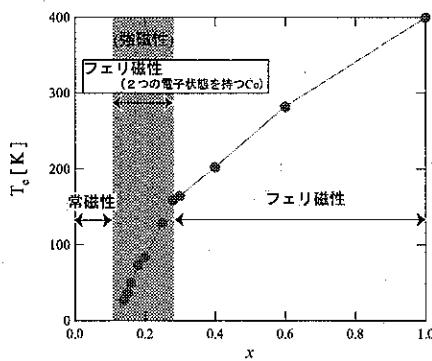


図 1  $Y_{1-x}Gd_xCo_2$  の磁気相図。

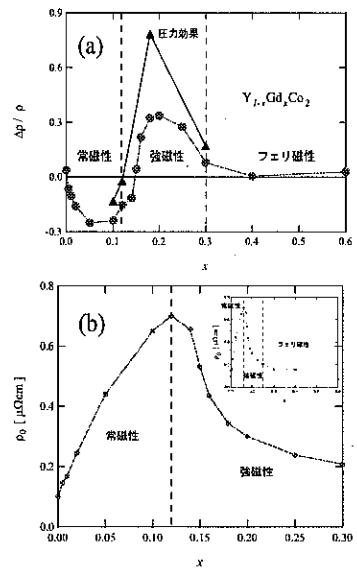


図 2 (a)  $T = 2$  K におけるマグネットレジスタンス  $\Delta\rho/\rho(0T)$  ( $\Delta\rho = \rho(15\text{ T}) - \rho(0\text{ T})$ ) と、圧力レジスタンス  $\Delta\rho/\rho(0\text{ GPa})$  ( $\Delta\rho = \rho(2\text{ GPa}) - \rho(0\text{ GPa})$ ) の濃度依存。(b)  $\rho_0$  の濃度依存。

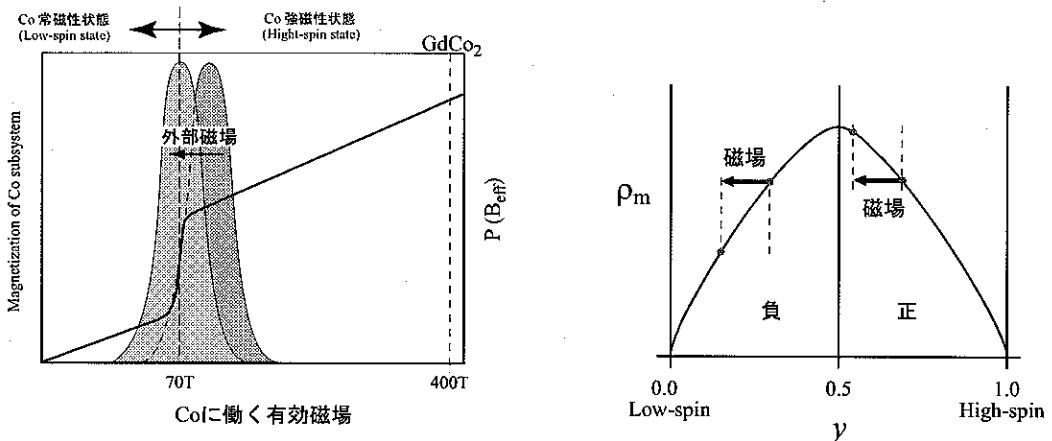


図3 Coに働く有効磁場分布の磁場による変化。外部磁場を加えるとCoに働く有効磁場が小さくなり、Low-spin状態のCoの割合が大きくなる。

図4  $\rho_m$  の  $y$  依存。

図2(a)は、 $T = 2\text{ K}$ における15 Tの磁場を加えた時のマグネットレジスタンスMR(MR={ $\rho(B, T) - \rho(0, T)$ }/ $\rho(0, T)$ )(●), 同じく $T = 2\text{ K}$ における2 GPaの圧力を加えた時の圧力レジスタンスPR(PR={ $\rho(P, T) - \rho(0, T)$ }/ $\rho(0, T)$ )(▲)を示す。MRもPRも $0.12 < x < 0.3$ の強磁性相で正の値,  $x \leq 0.12$ の常磁性相で負の値を示し磁場および圧力がこの組成の化合物の $\rho$ に対して同じ効果を与えることがわかる。

一般に $\text{RCO}_2$ 化合物の輸送特性には、Coの電子状態が大きく寄与していることから、これらの $\rho$ の振る舞いも、Coの電子状態に深く関わっていると考えられる。そこで我々は、以下のモデルを考えた。まず、 $x \leq 0.3$ の化合物では、GdがYに置換された結果Coサイトに働く交換磁場が、図3に示すようにCoのメタ磁性転移臨界磁場程度の大きさになっており、ある幅をもって分布していると考えられる。その結果、Coの状態として、

- Gdが周囲にあり、Gdから臨界磁場以上の局所磁場が働くため磁気モーメントを持つHigh-spin状態,
- Gdが周囲に無く、磁気モーメントを持たないLow-spin状態,

がある。そして、この2つの磁気状態がアトランダムに混合しているため3d磁気モーメントの散乱による電気抵抗率 $\rho_m$ が以下のノルドハイム則,

$$\rho_m \sim y(1-y), \quad (1)$$

で表されるとする。ここで $y$ はHigh-spin状態にあるCoの割合で。これはGd濃度 $x$ 、外部磁場 $B$ 及び圧力 $P$ によって変化する。図4に示すように、 $\rho_m$ は $y = 0.5$ で最大となり、 $y = 0$ (CoがすべてLow-spin状態)および $y = 1$ (CoがすべてHigh-spin状態)で最小となる。図2(b)に示した $x \leq 0.3$ の化合物の $\rho_0$ は、 $x$ の減少(即ち $y$ の減少)とともに増加し、 $x \approx 0.12$ で最大となった後減少している。この振る舞いは、図4の $\rho_m$ と、 $y = 0$ が $x = 0.0$ 、 $y = 0.5$ が $x = 0.12$ そして $y = 1$ が $x = 0.3$ に対応していて、ほぼ同じである。

次に、Coがこのような2つの磁気状態にある化合物に外部磁場 $B_a$ を加えた場合、Coに働く有効磁場 $B_{\text{eff}}$ は、 $B_{\text{eff}} = B_{\text{exc}} - B_a$ ( $B_{\text{exc}}$ : Gdのモーメントからの交換磁場)で表されるから、 $B_a$ を加えると $B_{\text{eff}}$ が小さ

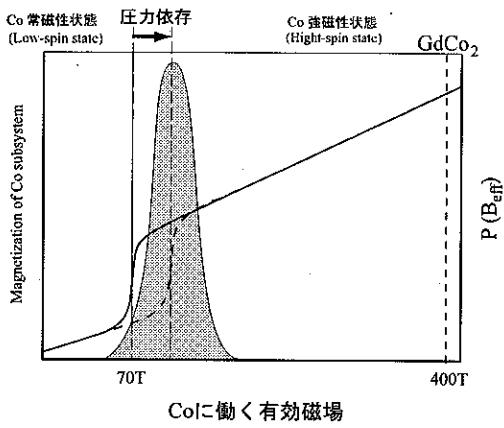


図 5 Co のメタ磁性転移臨界磁場の圧力による変化。圧力を加えると、Co の臨界磁場が上昇し Low-spin 状態の Co の割合が大きくなる。

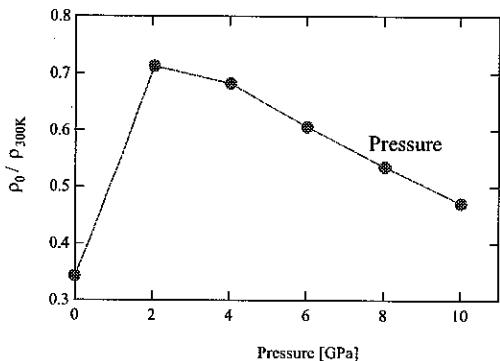


図 6  $x = 0.18$  の試料の圧力依存。

くなることになる。即ち図 3 に示すように Co に働く有効磁場の分布が低磁場側にシフトし、Low-spin 状態の Co が増加 ( $y$  が減少) することになる。一方、圧力を加えるとフェルミ準位近傍にある Co の 3d 電子状態密度 (DOS) のピーク幅が広がり、ピークの高さが小さくなることが考えられる。これは、図 5 に示すように Co の副格子のメタ磁性転移臨界磁場を上昇させ、Co の Low-spin 状態の割合が増加 ( $y$  が減少) することになる。圧力加えることと外部磁場を加えることは、同じ抵抗の変化を与える。

以上の議論から、磁場および圧力を加えると、 $y > 0.5$  の化合物では正、 $y < 0.5$  の化合物で負の MR および PR を示すことになる。実際、図 2(a) に示すように MR (0-15 T) および PR (0-2 GPa) とともに  $x > 0.12$  ( $y > 0.5$ ) の組成領域では正、 $x < 0.12$  ( $y < 0.5$ ) では負の値を示している。図 6 に、 $x = 0.18$  の化合物の  $T = 3$  K における PR の圧力依存を示す。 $x = 0.18$  の化合物は  $y > 0.5$  の組成領域にあり、圧力の増加とともに PR は増加し  $P \approx 2$  GPa で最大となる。その後、2 GPa をこえて加圧するとともに緩やかに減少している。これは、最初 Co が  $y > 0.5$  の状態にあったものが、圧力の増加とともに  $y$  が減少し  $P \approx 2$  GPa で  $y = 0.5$  となり、 $P > 2$  GPa では  $y < 0.5$  の状態になったためである。

これまで述べた通り、 $Y_{1-x}Gd_xCo_2$  の  $x \leq 0.3$  の組成領域の Co は、磁気モーメントを有する High-spin 状態および磁気モーメントを持たない Low-spin 状態の 2 つの磁気状態がアトランダムに分布した状態にあり、電気抵抗  $\rho_m$  は、この 2 つの磁気状態の割合によってノルドハイム則的な振る舞いを示す。そして電気抵抗に及ぼす磁場および圧力の効果は、Co の 2 つの磁気的状態の割合の磁場および圧力による変化として説明することができる。

## 『Study on mesons and baryons for penta quark』

修論発表者: 島田 誠

指導教官: 貢数 清孝

共同研究者: 八尋 正信, 上村 正康 (九州大学)

近年、ペントカクオーカーと呼ばれる新しいバリオンの発見が多くの研究者の注目を浴びている。通常の核子等のバリオンはクォーク3体、 $\pi$ 中間子等のメソンはクォーク2体系だと考えられている。しかし、このバリオンは $u, d, u, d, \bar{s}$ のクォーク5体系から成ると考えられおり、クォーク多体で構成されるバリオンの存在を示唆する極めて重要な発見である。しかし、このバリオンのスピン・パリティはまだ実験で確定されておらず、その崩壊幅が非常に狭いことの起源が明らかではない。そこで、本研究の最終的な目的はその新しいバリオンのスpin・パリティの決定や、崩壊幅が非常に狭いことの起源を現象論的なアプローチによって解明することである。

一般に、クォークの問題を扱うには第一原理計算である格子QCDがもっとも有力である。しかし、この手法では共鳴状態を正確に取り扱うことができない。そこで、我々は現象論的手法として定評のある構成子クォークモデルに注目する。構成子クォークモデルとはクォークが非対論的な閉じ込めポテンシャルとスピン依存相互作用によって束縛状態を作り、その束縛状態によってハドロンが構成されるとする現象論的なモデルである。この計算手法を用いることで、ハドロンの共鳴状態を取り扱えるようになる。しかし、第一原理計算でないためにハミルトニアンにあいまいさが残る。

本修士論文では、ペントカクオーカー・バリオンを扱うための第一歩として上記で述べたようなハミルトニアンのあいまいさを取り除くことを目的とする。そのためには、まずスピン、パリティ等の性質が実験でよくわかっているメソン(クォーク、反クォークの2体系:  $q\bar{q}$ )について調べる。さらに、クォーク3体系であるバリオン( $qqq$ )においても統一的に実験データを再現するようなハミルトニアンを決める。

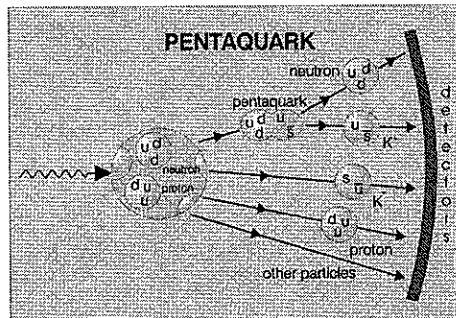


図1 The reaction used to produce the  $\Theta^+$  at Spring-8 and JLab.

そこで、肥山らによって提唱されたハミルトニアンに注目した。彼女らは、2004年の高知大学で開かれた秋の物理学会において、そのハミルトニアンを用いた解析の結果、ペンタクォーク・バリオンは存在しないと言う結論を発表している。このハミルトニアンは次のように与える。

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \sum_i^2 \frac{\mathbf{P}_i^2}{2m_i} - T_G + \sum_i^2 m_i + (V_C + V_S) \mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{F}_2 \\ V_C &= \frac{1}{2} K (\mathbf{X}_1 - \mathbf{X}_2)^2 + V_0, \\ V_S &= \frac{C_{SS}}{m_1 m_2} \exp \left[ -\frac{(\mathbf{X}_1 - \mathbf{X}_2)^2}{\beta^2} \right] \left( \frac{1}{4} - \hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2 \right)\end{aligned}$$

彼女らは、このハミルトニアンを用いた解析の結果、軽いバリオン ( $N, \Delta, \Omega^-, \Lambda, \Xi, \Xi^*, \Sigma, \Sigma^*$ ) についてはよくその質量を再現する結果を出している。だが、メソンについてはそのハミルトニアンを用いた解析結果を述べてはいない。そこで、軽いバリオンの質量をよく再現する彼女のパラメーターセットを用いて、メソンについてこのハミルトニアンの有用性を調べた。ここで、この問題を非常に厳密に解くために、九大グループが開発し、少数多体系の様々な問題の解決に成果をあげてきた”ガウス型基底関数を用いた組み換えチャネル結合変分法”を用いた。

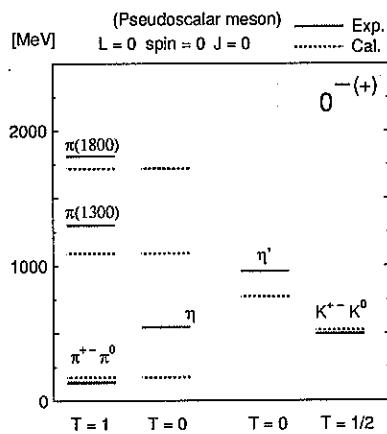


図 2 Mass spectrum of pseudoscalar meson. The solid lines are experimental data and the dash lines are results of the present calculation.

解析の結果、 $\rho, K$  等の基底状態のメソンはその質量をよく再現している。だが、主量子数  $n \geq 1$  のメソンや角運動量  $l \neq 0$  のメソンについてはその質量を上手く再現しないことがわかった。したがって、このハミルトニアンを用いてペントクォークの解析を行うには不十分であることがわかった。

## グローバーの検索アルゴリズムとその一般化

松田 順

指導教官：賀敷 清孝

コンピュータの小型化が進んでいる現在、それに伴い基本素子も小型化してきている。この現象が行き着く未来は、その基本素子が原子や分子のレベルに到達することを表している。そうなると、古典力学の応用である既存のコンピュータ原理では使えないなくなるだろう。それは、原子や分子レベルでは量子力学の法則に従わなければならないからである。

量子力学の法則に従うコンピュータ、つまり量子コンピュータの考えはファインマン (Feynman) から始まる。1982年物理学者ファインマンは量子力学を他のものに応用しようと試みた。しかし、量子コンピュータの並々ならぬ力が見えてきたのはドイチェ (Deutsch) による仕事が大きい。ドイチェは1985年に、ユニバーサル量子コンピュータと呼ばれる論文を発表した。これより量子コンピュータでどんな面白いことができるかが盛んに研究されるようになった。しかし、その研究はの多くは数学的なものが多く、アカデミックな内容だった。ところが、1994年にショア (Shor) が因数分解を効率よくできるアルゴリズムを考案したことにより状況が変わる。このことは量子コンピュータが実際応用上、有用なアルゴリズムを生み出す力を持っていることを示す事例であった。そして、1997年にグローバー (Grover) により検索アルゴリズムが発表され、今日に至る。

以下でグローバーの検索アルゴリズムの概要を説明していく。まず問題設定として、 $N$  個のファイルに 0 から  $N - 1$  までアドレス (名前) が付けられており、それがランダムに並んでいるデータベースがある。このようなデータベースの中からアドレスを指定することによって、できるだけ早くファイルと検索することを考える。古典コンピュータでは、1つ1つしらみつぶしに調べることに相当するので最大で  $N$  回の検索を必要とする。しかし、量子コンピュータを用いたグローバーの検索アルゴリズムでは最大  $\sqrt{N}$  回の検索ですむ。オリジナルのグローバーのアルゴリズムは、2つの選択的回転演算子を含んでおり、それぞれの位相は  $\pi$  である。これを  $\beta, \gamma$  とおくことで、一般化されたグローバーの検索アルゴリズムを考えていくことを目的としている。その結果  $\beta = \gamma = \cos^{-1}(1 - \frac{N}{2t})$  時、 $\frac{N}{4} \leq t \leq N$  の範囲において 1 回の検索で成功することがわかる。ここで  $t$  は検索したいファイルの個数である。

選択的回転演変換  $R_f$ 、平均に関する反転変換  $D$  を用いてグローバーの演算子

$$U_G \equiv DR_f \quad (1)$$

を定義する。グローバー演算子  $U_G$  は一回作用させると検索したい状態の確率振幅を高める働きをするため、グローバーのアルゴリズムではこの働きを利用して、 $U_G$  を適度な回数作用させることで検索したい状態を観測するのに十分な確率振幅にしていくものである。ではこれより、等しい確率振幅を持つ初期状態に対し、 $U_G$  を  $k$  回作用させた状態を

$$U_G^k |\psi_0\rangle = a_k |z\rangle + \sum_{\substack{x=0 \\ x \neq z}}^{N-1} b_k |x\rangle \quad (2)$$

と書くことにすると、 $k = 1, 2, 3, \dots$  に対して

$$\begin{aligned} a_k &= \sin((2k+1)\theta) \\ b_k &= \frac{1}{\sqrt{N-1}} \cos((2k+1)\theta) \end{aligned} \quad (3)$$

が成り立つ。このことから、適切な  $k$  を用いることで高い確率で検索が成功することを示す。

次にグローバーの検索アルゴリズムの一般化を行う。基本的な状況は前述と同様で  $N = 2^n$  個のファイルから  $t$  個のファイルを検索する問題を考える。異なる点は、グローバー演算子  $U_G$  を構成している選択的回転変換  $R_f$  と平均に関する反転変換  $D$  を一般化するところである。それから一般化されたグローバーの演算子を

$$U_G^{\beta, \gamma} \equiv \hat{D} \hat{R}_f \quad (4)$$

と定義する。初期状態に  $k$  回作用させた状態を

$$(U_G^{\beta, \gamma})^k |\psi_0\rangle = \sum_{x \in A} a_k |x\rangle + \sum_{x \in B} b_k |x\rangle \quad (5)$$

書くことにすると、 $k = 1, 2, 3, \dots$  に対して

$$\begin{aligned} a_k &= \frac{(e^{i\beta} - 1)t + N}{N} e^{iy} a_{k-1} + \frac{(e^{i\beta} - 1)(N-t)}{N} b_{k-1} \\ b_k &= \frac{(e^{i\beta} - 1)t}{N} e^{iy} a_{k-1} + \frac{(e^{i\beta} - 1)(N-t) + N}{N} b_{k-1} \end{aligned} \quad (6)$$

が成り立つことがわかる。

この結果より、 $\frac{N}{4} \leq t \leq N$  の範囲において 1 回でファイル検索が成功することを示すことができる。

# ファージ、葉緑体、及びミトコンドリアゲノム DNA 塩基配列の $1/f$ パワースペクトル

知念幸伸

Supervisor E. Takushi

本研究の目的は、ファージ、葉緑体、及びミトコンドリアにおける DNA 塩基配列を、フーリエ変換することによって確認される長距離相関  $1/f^\alpha$  ノイズにより、塩基配列に潜むと思われる高次の遺伝言語を探ることである。

バクテリオファージは、細菌に寄生するウィルスで、地球上でも最も単純な生命体の一つで、遺伝子数が他の生物に比べて少なく、また増殖させて増やすことが簡単なことから、初期の分子生物学で研究されゲノムが解読され、モデル生物の一つとして用いられている。

葉緑体は緑色植物などの細胞内において、光合成を担う器官で、分裂によって増える。葉緑体には、130 kbp～20 kbp 程度の環状の DNA のほかに mRNA, tRNA、リボソームが存在している。葉緑体リボソームは 70S 型と呼ばれ、そのタンパク質合成は原核生物型である。このため葉緑体は、シアノバクテリアのような原核光合成生物が、細胞内に共生した結果生じたと考えられている。しかし実際どのようにして共生者が葉緑体という一つの細胞小器官に成り得たのかというはっきりとしたメカニズムは明らかにされてない。

ミトコンドリアとは、細胞内での ATP 生成に関わる器官で、細胞内のエネルギー工場であるミトコンドリアは、大きさがバクテリアと同程度であり、内部に環状 DNA を持つ点もバクテリアと同じであることから、かつて原始的な新核生物の細胞に寄生したバクテリアの子孫であると考えられている。そのゲノムは、15 kbp～17 kbp の環状 2 本鎖 DNA で、そこには、リボソーム RNA 遺伝子およびのタンパク質をコードする遺伝子が、トランスファー RNA 遺伝子に区切られるようにして、ほとんどすき間なく並んでいる。以上のような生体の DNA 塩基配列のパワースペクトルの共通点や相違点などを調べることにより、遺伝子の言語機構を探ることができると考えている。

塩基配列のパワースペクトルは、塩基配列を数値列に置換したものをフーリエ変換し 2 乗し、平均するとパワースペクトルが求まり、このパワースペクトルの低周波領域に、 $1/f^\alpha$  ノイズがあらわれる。DNA の全塩基配列より求められたパワースペクトルを縦軸にスペクトル強度、横軸に周波数を両対数に表すとき、高周波側の周波数  $1/3$  の部分に現れている鋭いピークはアミノ酸を指定するコドンの周期性によるもので、このパワースペクトルの特徴である。一方、低周波側は、直線に近似し、その勾配により  $1/f^\alpha$  ノイズの指數  $\alpha$  を決定する。ここで、ファージ If1、ホウライシダ葉緑体及び、ヒト・ミトコンドリアの  $\alpha$  は、

それぞれ、0.43、1.72 及び、0.52 となった。(Fig. 1-a, b, c)

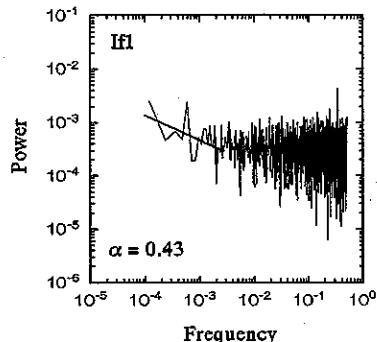


Fig. 1-a ファージ If1DNA 塩基配列のパワースペクトル

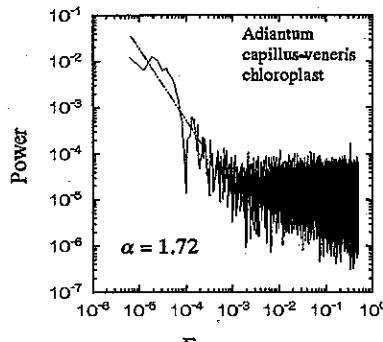


Fig. 1-b ホウライシダ葉緑体 DNA 塩基配列のパワースペクトル

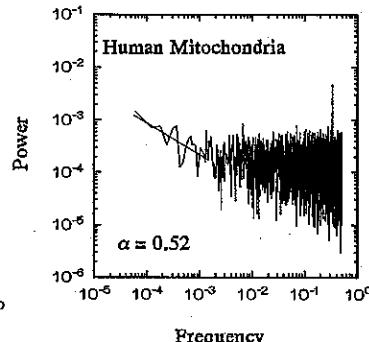


Fig. 1-c ヒト・ミトコンドリア DNA 塩基配列のパワースペクトル

また、ファージ、葉緑体、及びミトコンドリアにおいて、 $\alpha$ が塩基配列の長さに対してどのような依存性を持っているかを調べるために、塩基数の累積にたいする $\alpha$ の計算をすると、ヒト・ミトコンドリアにおいては、塩基数 1 90 及び 4 2 2 0 付近に $\alpha$ の大きな変化が見られる。その原因は明らかにされていないが、何らかの物理量の変化に対応しているものと考える(Fig. 2)。また、葉緑体やファージにおいても、 $\alpha$ の特徴的な振る舞いが見られた。

次に、ヒト・ミトコンドリアDNAを遺伝子に関係なく長さの等しい部分配列に、分割しそれぞれの配列についての $\alpha$ を計算した。分割された配列が長いほど $\alpha$ の値が大きくなる傾向があるということが分かる。さらに、タンパク質をコードする遺伝子長さの逆数とその配列のパワースペクトルにおける指数 $\alpha$ についても調べた。全塩基を表す $\Sigma$ を起点として整数 $m$ によって表される5つの関数による共同遺伝子の存在が示唆される。このような研究は、遺伝子間相互作用を探る新しい方法になりうるものと考えている。

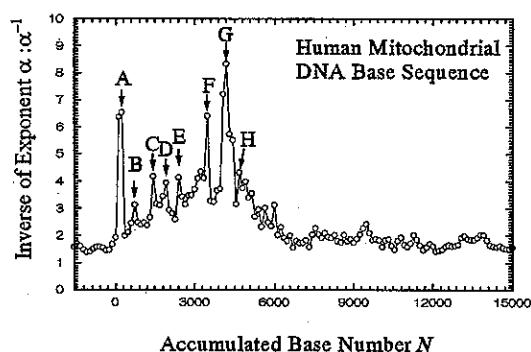


Fig. 2 塩基数の累積と指数 $\alpha$ の逆数 $\alpha^{-1}$

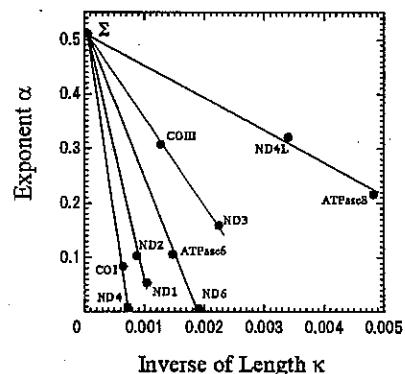


Fig. 3 The  $\lambda$  expressed as a function of the exponent  $\alpha$  formula  $\alpha_m = \lambda_m \kappa_m + 0.522$ , where, gradient  $\lambda_m = -61.7 m^{1.56}$ , inverse of gene length  $\kappa_m$  and integer  $m=1,2,3,4,5$ .

# 老化スペクトルの物理学

## Physics of Ageing Spectra

根間幸美

Supervisor : E.Takushi

老化現象は生物に起こる身体の衰退減少であり、加齢に伴って疾病などの形で現れてくることが知られている。それは加齢に伴って増えていく死亡率の変化に現れており、個体の死への過程であることから、死亡率は老化のパターンを示すある種の指標になっている。

胸腺は、免疫系の中心的な働きをするT細胞の成熟と分化を担っている機関で、免疫系の監督機関である。その加齢に伴う重量変化は、他の臓器に比べ、早い時期に減少過程を示す。胸腺の重量変化は成長過程である若年期にピークをむかえ、40歳頃では10歳頃の10分の1ほどの重量に減少する(Fig.1)。免疫力もまた、胸腺重量と強い相関があるように加齢と共に減少していく。このように、免疫系の衰えは加齢過程で顕著であり、老化の物理学のよい指標になるものと思い、胸腺重量を老化の指標と仮定した。

本研究の目的はヒトの老化スペクトルを免疫の観点から考察し、簡単な物理の言葉で表現することである。老化の指標として胸腺重量の加齢変化を用いて、共役量と老化年齢を定義し、免疫系と密接な関係がある悪性新生物(がん)に対する老化のパターンを考察した。

共役量は死亡率  $N(t)$  と胸腺重量比  $M(t)$  の積と定義する。死亡率  $N(t)$  は一般的な死亡率を示す Heligman & Pollard によって提唱された HP モデルを採用した。共役量を以下に示す。

$$N(t) \times M(t) = \Delta L (\approx \text{const})$$
$$(\Delta L = 1.43 \times 10^{-3})$$

共役量  $\Delta L$  は  $5 \times 10^{-4}$  から  $2 \times 10^{-3}$  の範囲で一定となり  $1.43 \times 10^{-3}$  と見積もられた。

実験値  $M(t)$  は試行錯誤した結果、以下のような式に決定された。

$$M(t) = A \cdot t^B \cdot e^{-C}$$
$$A=10.8, B=0.73, C=0.095$$

また、老化年齢の速度を計算し、各悪性新生物(がん)についての特有の老化年齢の速度を示した。

老化年齢  $\tau$  は老化の度合いを示す物理量として次のように定義した。哺乳類の限界寿命推定式である Sacher の限界寿命  $\tau_0$  から老化のパラメータ  $\alpha$  と老化の指標として胸腺重量比の積の差と定義した。老化年齢  $\tau$  は以下の式で示す。

$$\log \tau = \tau_0 - \alpha M(t) / M_0$$

$\tau_0$  は Sacher の式より得られたヒトの限界寿命、 $M(t)$  は胸腺重量をあらわし、 $M_0$  は胸腺重量の最大値である。即ち  $M(t)/M_0$  は胸腺重量比である。また、 $\alpha$  は老化に関するパラメータである。ここで  $\tau_0$  は脳重量 1500 g、体重 60 kg より 95 歳と見積もられている。

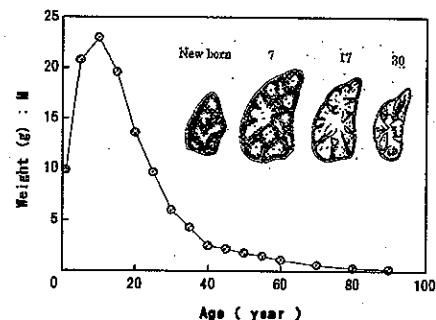


Fig.1. The time process for thymus weight ratio.

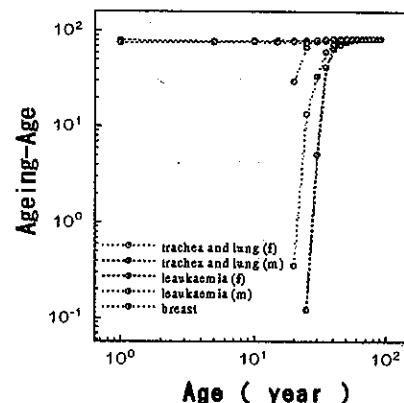


Fig.2. The ageing-age of malignant neoplasm for trachea and lung, leukaemia and breast.

老化年齢は実年齢 20 歳頃から急激な増加が見られ、40 歳ごろから老化年齢は 70 歳を超える。その後とても緩やかな増加過程が見られる (Fig.2)。この老化年齢に共役量  $\Delta L$  を代入し、以下に再定義する。

$$\log \tau = \tau_0 - \alpha \Delta L / N(t)$$

$\Delta L$  は共役量、 $N(t)$  は死亡率である。さらに、共役量  $\Delta L$  に  $1.43 \times 10^{-3}$  を代入し、死亡率  $N(t)$  に悪性新生物（がん）の死亡率を代入し、それぞれの悪性新生物（がん）について特有の老化年齢を求めた (Fig.3)。

また、老化年齢を微分することにより、老化年齢の速さを求めた。

$$v = \Delta \tau / \Delta t$$

老化年齢の速さは健康なヒトで約 25 歳頃にピークを持ち、その後単調に減少していく。悪性新生物についても同様に求め、特有の速さを求めた。ほとんどの悪性新生物で約 20 歳頃にピークをとり、その後単調に減少した。

また、胸腺重量のモデル化を試みた。ロジスティック方程式によりモデル化した胸腺重量の加齢変化を元に厚生労働省から公表されている 1950 年から 2002 年までの 19 年分の死亡率から、数値計算によって得られた共役量と老化年齢の比較を行った。

1950 年から 1970 の 5 年分の共役量の年齢別変化では 20 歳頃の共役量の増加がなくなり、全て年において、各年齢に対する共役量の値は減少傾向を示しており、1970 年以降の年の各年齢による共役量の変化は小さくなっている (Fig.4)。共役量の全年齢に対する平均値を年度別変化で見ると、1950 年から 1980 年の間は減少しており、1980 年以降では  $1.5 \times 10^{-3}$  程度の値をとりほとんど変化しない。

老化年齢の加齢変化は、成長過程を除く 10 歳以降で議論する。1950 年から 2002 年までの加齢に伴う老化年齢の変化は同様な変化過程を示す。老化年齢の値の変化は実年齢 10 歳頃で最小値をとり、その後 15 歳頃から 30 歳頃まで緩やかな増加を示し、その後、65 歳頃まで比例的に増加する。高齢域においてはほとんど変化しない。1950 年から 2002 年の経年変化を見ると年々、各年齢で老化年齢の値が小さくなっている傾向がある (Fig.5)。

以上により、老化年齢とその速さについて考察し、老化の原因の 1 つは免疫系を司る胸腺の急激な重量変化に起因するという、F.M.Burnet (1974) の仮説を定性的に示すことができ、胸腺重量の加齢変化は老化のよい指標になりうるということが示された。また、老化スペクトルは、社会環境（公衆衛生、医療技術、食料、気候変化、等々）との相互作用の指標になりうることを示唆している。

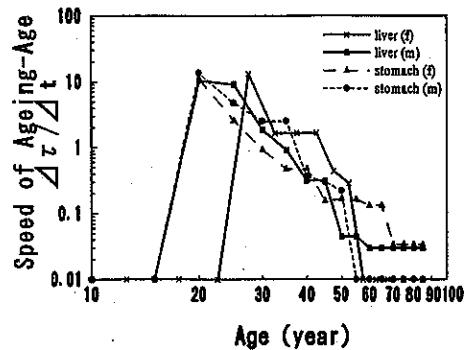


Fig.3. The speed of ageing-age for malignant neoplasm of liver and stomach.

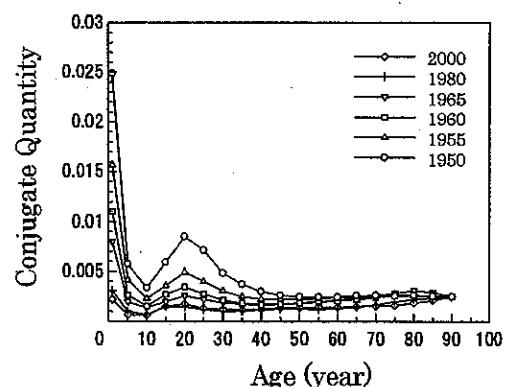


Fig.4. The conjugate quantity from 1950, 1955, 1960, 1965, 1975 and 2000.

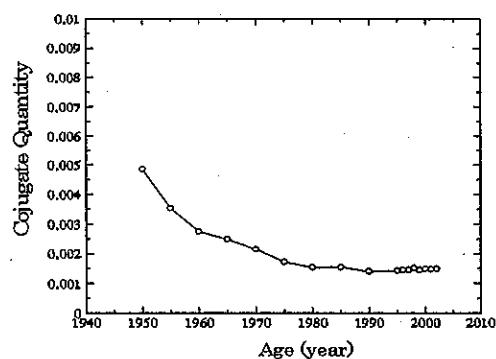


Fig.5. The average of conjugate quantity from 1950 to 2002.

# 分子動力学法による超イオン導電体 $\alpha$ -AgIの物性

琉球大学理工学研究科物質地球科学専攻

発表者: 仲宗根一成  
指導教官: 友寄友造

超イオン導電体 (superionic conductor, SIC) は、固体でありながら高いイオン伝導率を示す物質の総称である。AgIは典型的な超イオン導電体で、420 [K] から融点823 [K] の間で見られる $\alpha$ 相でその性質を示す。この相では $\text{Ag}^+$ イオンが担体となり、体心立方状の格子を組む $\text{I}^-$ イオンの間を移動する。今回、この $\alpha$ -AgIを対象として、分子動力学法 (Molecular Dynamics method) を用いた解析を行なった。

分子動力学法は系を構成する原子や分子についてニュートンの運動方程式を立て、それを数値計算で解く解析法である。今回は粒子数  $N = 864$  の系に周期境界条件を課して計算した。また、 $\alpha$ -AgIの相互作用ポテンシャルとして以下のモデルを用いた。

$$\phi_{ij}(r_{ij}) = \epsilon_{ij} \left( \frac{\sigma_i + \sigma_j}{r_{ij}} \right)^{n_{ij}} - \frac{7e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{a_{ij}^5}{r_{ij}^6} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2 f_{ij}^2 Z_i Z_j}{r_{ij}}$$

第1項から soft-core potential, van-der-Waals potential, coulomb potential である。このような条件の元で数値計算を行い、得られた時系列データに対して様々な解析を行なった。

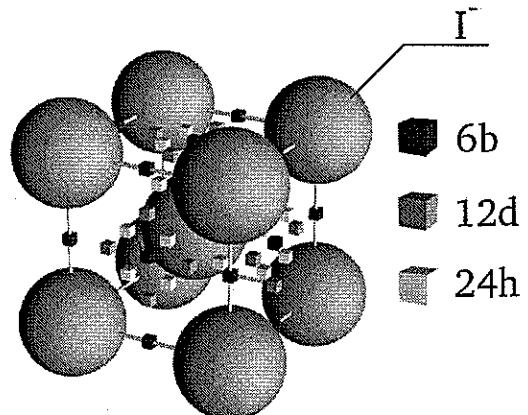


図 1:  $\alpha$ -AgI

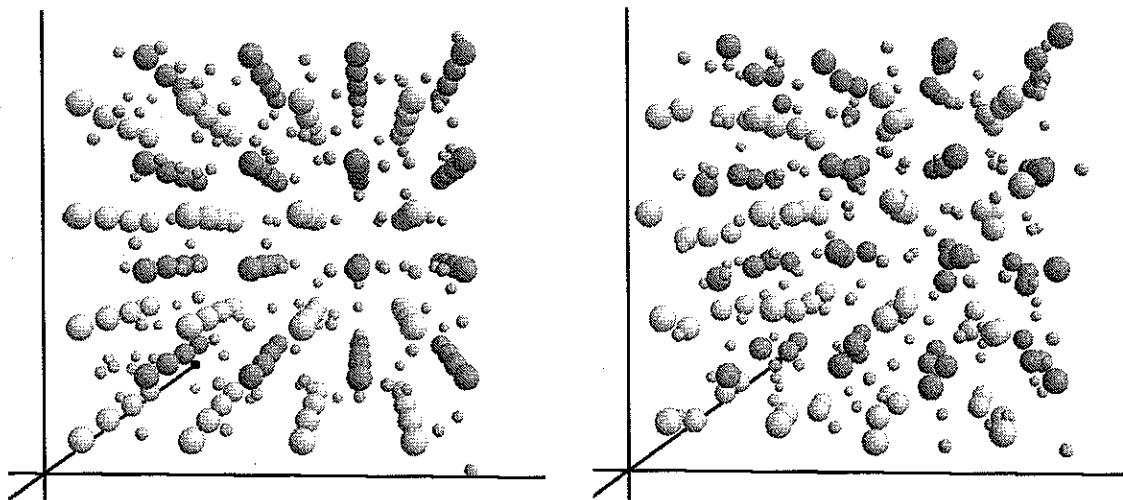


図 2:  $N=256$ ,  $T=500$  [K], 0 step

図 3:  $N=256$ ,  $T=500$  [K], 10000 step

図2、図3は得られた座標データを図にしたものである。10000 step 後の時点でも $\text{I}^-$ イオンの格子状態を確認することができる。

図4は、温度を600[K]に設定して数値計算した結果から得た平均2乗変位のグラフである。このグラフから、今回のシミュレーションが格子状態を保ったI<sup>-</sup>イオンの間を可動イオンAg<sup>+</sup>が拡散するという $\alpha$ -AgIの特性を再現していることが確認できた。その他、動径分布関数や速度相関関数を計算し、実験値や他のシミュレーションとの比較を行った。

分子力学法は系のミクロな情報が得られるという特徴がある。AgIの可動イオンAg<sup>+</sup>は中性子回折の実験から主に四面体サイト(Tetrahedron-site, TH-site)に平均的に存在していることがわかっているが、今回、シミュレーションによるミクロな情報からAg<sup>+</sup>がサイト内に滞在する時間の頻度を解析した(図5)。この結果からもAg<sup>+</sup>が短時間でサイトを遷移していることがわかる。

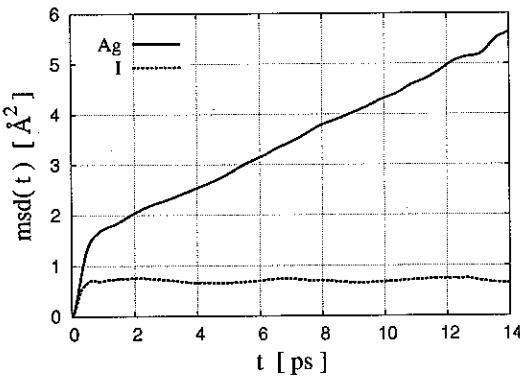


図4: 平均2乗変位( $T = 600\text{[K]}$ )

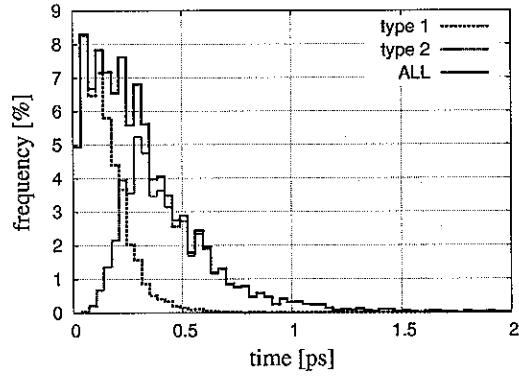


図5: 滞在時間( $T = 600\text{[K]}$ )

さらに、今回これらの解析結果を元にモデルポテンシャルのパラメータ決定を試みた。モデルポテンシャルに含まれるパラメータが多いことから、探索法としてMarkov chain Monte Carlo method (MCMC method) を用いた。

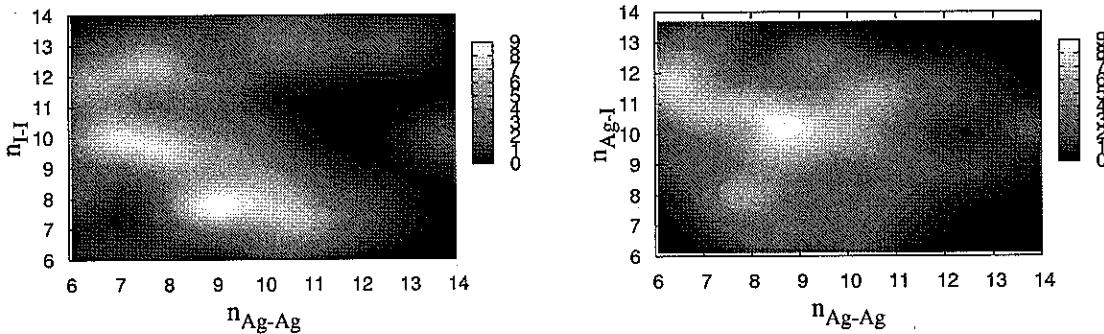


図6: サンプリング密度の例

これらの結果は、超イオン導電体の性質が通常考えられるようなポテンシャルのバランスによって表われることを示唆する。また、モデルポテンシャルの検証法として分子力学法が非常に有効な方法であることが確認できた。

# 電場中におけるAgIのイオン伝導

- 分子動力学法による研究 -

発表者：菅原 徹 指導教官：細谷 将彦

## Introduction

固体の電気伝導は、ほとんどが電子の移動によって起こるが、物質の中には、イオンの移動によって起こるものがある。そのなかでも、イオン伝導率が  $10^{-3} \Omega^{-1}m^{-1}$  以上の固体を超イオン導電体と呼んでいる。今回取り扱うヨウ化銀 (AgI) は典型的な超イオン導電体である。

固体 AgI は  $\alpha$  相 (体心立方平均構造),  $\beta$  相 (Wurzite 構造),  $\gamma$  相 (Zincblend 構造) の 3 つの相が知られている。 $\alpha$  相は 420 K 以上, 823 K 以下の温度で実現し,  $1.0 \sim 3.0 \times 10^2 \Omega^{-1}m^{-1}$  程度の比較的大きなイオン伝導率を示す。 $\text{Ag}^+$  は  $\text{I}^-$  が造る結晶構造の隙間を縫って液体的に移動する。420 K 以下では通常  $\beta$  相が実現するが、場合によっては  $\beta$  相と  $\gamma$  相が共存する。(単独の  $\gamma$  相を実験的に作り出すことは難しい。) Fig.1 は  $\alpha$  相の単位格子を表わす。

体心立方格子をなす  $\text{I}^-$  に対して  $\text{Ag}^+$  は Fig.1 の 6b, 12d, 24h などの位置に平均的に分布する。 $\beta$  相や  $\gamma$  相では、電気伝導率は非常に小さい値を示し、イオン伝導はほとんど起こらないと考えられている。

本研究では、コンピュータ上に AgI の平衡系及び非平衡系を設定し、分子動力学を用いて系の時間発展を追及した。さらにシミュレートした系での AgI の振舞いを解析した。特に今回は、非平衡系で得られた物性値とそれらの実験値を比較し、我々のシミュレーションがどの程度現実の AgI を再現できたかを検討した。

## Molecular dynamics method

計算手法として分子動力学法を用いた。初期配置と粒子数について、 $\alpha$  相の  $\text{I}^-$  は体心立方構造であり、 $a$  を  $\alpha$  相の格子定数 ( $5.08 \text{ \AA}$ ) とすると、セルの一辺の長さ  $L$  に対し、単位胞を  $n$  個並べるとして、 $L = na$ ,  $\text{I}^-$  の粒子数  $N_I$  は  $N_I = 2n^3$  となる。また、 $\text{Ag}^+$  の粒子数は  $N_I$  と同数であり、初期配置は 12d サイトの内 2 サイトに、一様乱数を用いて配置する。粒子の初期速度は Maxwell distribution に従うように正規乱数を用いて決める。採用した対ポテンシャルは以下に示す (パラメータは省略)。

$$\phi_{ij}(r) = \epsilon_{ij} \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{n_{ij}} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} - \frac{W_{ij}}{r_{ij}^6}$$

その他に、周期境界条件、数値積分は Verlet の方法、クーロン相互作用は Ewald 法で近似を行なった。プログラムは自己開発である。

## Results and Discussion

最初に AgI の 560 K ( $\alpha$  相) の平衡系のシミュレーションの結果、 $\text{I}^-$  が周期的な体心構造を形成し、その隙間を  $\text{Ag}^+$  が液体的に移動することが確認できた。

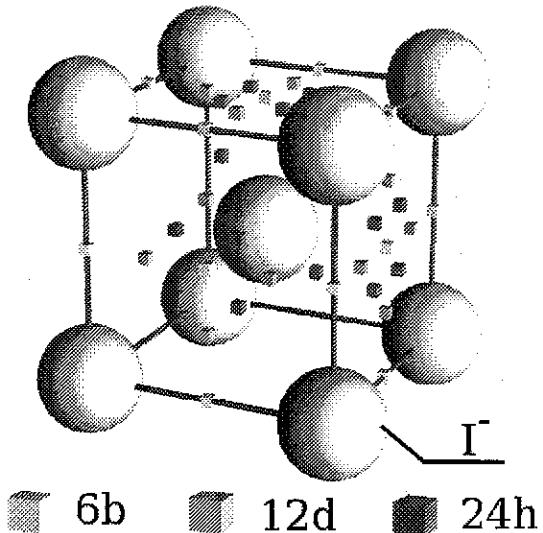


Fig. 1 The unit cell of  $\alpha$ -AgI  
■ 6b ■ 12d ■ 24h

Fig. 2, Fig. 3 は、その解析結果の一部である。Fig. 2 は、動径分布関数( $G(r)$ )である。 $\text{Ag}^+$  は  $\text{I}^-$  より液体的であることが確認できた。Fig. 3 は、 $\text{Ag}^+$ ,  $\text{I}^-$  の平均 2 乗変位を表している。その時間が十分大きい（ここでは  $t > 1.0 \text{ ps}$ ）ときの傾きは、拡散係数に比例する。 $\text{I}^-$  が一定の位置に留まり、 $\text{Ag}^+$  が大きく拡散していることがわかる。

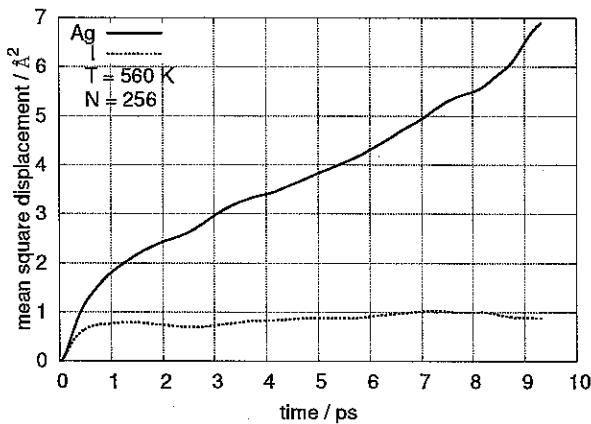


Fig. 3 Mean square displacement of particles.

非平衡系としては  $\text{AgI}$  に電場をかける実験をシミュレートした。Fig. 4 は、結晶に対する各電場の方向による電場の大きさと電流密度の関係を示す。得られた、イオン伝導率を以下に示す。

Tab.1 Ionic conductivity obtained in this calculation at 560 K

calculation value	direction
$6.137 \times 10^2 \Omega^{-1}\text{m}^{-1}$	[1 0 0]
$2.937 \times 10^2 \Omega^{-1}\text{m}^{-1}$	[1 1 0]
$3.639 \times 10^2 \Omega^{-1}\text{m}^{-1}$	[1 1 1]

Tab.1 で示した計算値はその実験値 ( $3.00 \times 10^2 \Omega^{-1}\text{m}^{-1}$ , 500 K) と比較して十分近い値である。また、イオン伝導率の Arrhenius plot から得られた Activation energy は  $E_a = 0.06050 \text{ eV}$  である。これは、実験値  $e_a = 0.048 \text{ eV}$  と比べて十分近い値である。

## Conclusions

平衡系では、 $\text{I}^-$  の周期的な体心構造の隙間を  $\text{Ag}^+$  が液体的に移動することが確認できた。また、イオン伝導率やそれの Arrhenius plot から得られた Activation energy は、実験値に近い値が得られた。以上のことより、平衡系、非平衡系両者において  $\alpha\text{-AgI}$  をほぼ再現できた。今後は、さらに総合的に  $\text{AgI}$  を再現する系を開発するとともに、他の物理量も解析していく予定である。

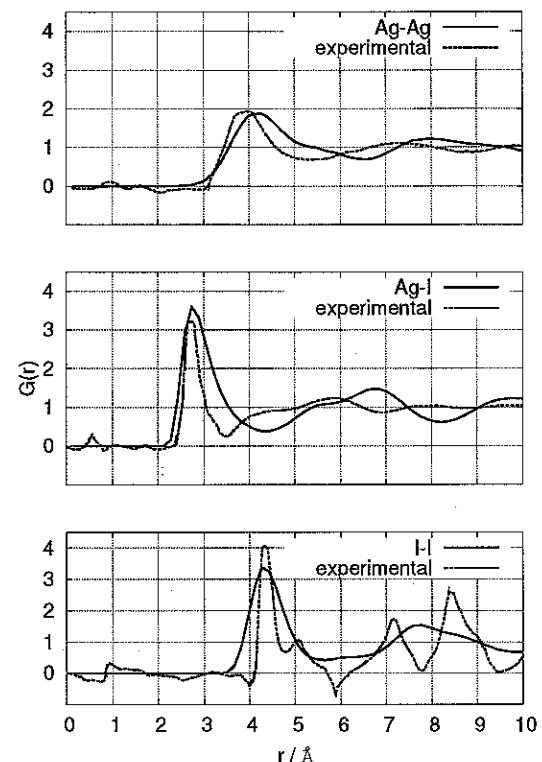


Fig. 2 Radial distribution functions. Solid lines, present results; Broken line shows experimental data of Y. Tsuchiya, S. Tamaki and Y. Waseda (1979).

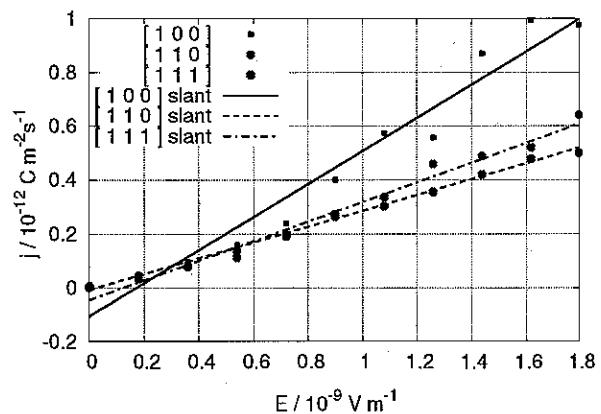


Fig. 4 Voltage-current characteristics

# 公示

琉球大学大学院理工学研究科海洋環境学  
 (物理系) 専攻の学位論文発表会を下記のとおり開催します。

## 発表者名及び論文題目

講 座	発表者氏名	論 文 題 目	日 時
海洋環境学	内間 清晴	Magnetic and transport properties of $Y_{1-x}Er_xT_2$ ( $T=Co,Fe$ )	日 時： 2月24日(木) 9:30～10:00 場 所： 理313教室

平成 17 年 2 月 17 日

理工学研究科長

宮 城 隼 夫



# Magnetic and transport properties of $Y_{1-x}Er_xT_2$ (T=Co, Fe)

内 間 清 晴

希土類遷移金属化合物  $RCo_2$  は、Cubic ラーベス相結晶構造をもち R が非磁性の Y、Lu、Sc においても Co の 3d 電子スピンは揺動状態にある。このため、この  $RCo_2$  化合物は磁場、圧力及び温度の外部パラメータ、交換磁場及び希土類の種類等の内部パラメータの作用により様々な磁気的性質を示すためこれまで多くの研究がなされてきた。本研究では、R=Er の  $ErCo_2$  および Er を Y で置換し、Co サイトに働く交換磁場の大きさを変化させた系  $Y_{1-x}Er_xCo_2$  について電気抵抗率、熱電能の測定を行い、これらの系の局在 4f 電子と遍歴 3d 電子の相互作用および磁気的状態がどのように変化するかを調べた。 $ErCo_2$  は  $T_C \approx 32$  K でヒステリシスを伴ったフェリ磁性—常磁性の 1 次転移を起こすことが知られている。これは、Er の 4 f 局在モーメントからの交換磁場による 3 d 遍歴電子のメタ磁性転移として説明される。図 1 に電気抵抗率の温度依存を示す。 $x = 1.0 \sim 0.7$  の化合物においては、磁気転移点において不連続な変化が観測された。 $x = 0.6 \sim 0.55$  の化合物では、Er と Co の磁気転移温度の分裂が観測された。 $x < 0.5$  では、Co の磁気的配列は確認されなかった。 $x < 0.3$  では、Er と Co の磁気配列は確認されなかった。図 2 に電気抵抗率の測定から求めた磁気転移温度  $T_C$  の Er 濃度  $x$  に対する変化依存を示す。 $x$  の減少と共に  $T_C$  は減少し、 $x = 0.6$  で Er と Co の  $T_C$  がそれぞれ 15.3K と 11.4K に分裂した。また、 $x \approx 0.5$  で Co の磁気配列が消失すると考えられる。

$ErCo_2$  とゼロ磁場中ですでに Er と Co の磁気転移温度が分裂している  $Y_{0.4}Er_{0.6}Co_2$  を中心に、15 Tまでの強磁場中で電気抵抗および熱電能を測定した。その結果、 $ErCo_2$  の磁気転移が、磁場の増加に伴い Er と Co の磁気転移温度に分裂した。これは、外部磁場が加わることにより、転移温度以上でも Er の磁気モーメントが磁場により揃えられることで、臨界磁場以上の交換磁場が Co サイトに作用するからである。図 3 に  $ErCo_2$  の磁気転移温度  $T_C$  の磁場依存を示す。Er より Co の転移温度が高く、Er と Co の磁気転移温度は共に磁場の増加と共に増加している。図 4 に  $Y_{0.4}Er_{0.6}Co_2$  の磁気転移温度  $T_C$  の磁場依存を示す。Er の磁気転移温度は 5 Tまでは磁場の増加とともに増加しその後一定の値をとる。一方、Co の磁気転移温度は 4 Tまでは磁場とともに増加するが、その後減少して 7 Tあたりで消失している。これは、外部磁場が 4T 以上になると、Co に働く有効磁場が減少し、7T 以上では臨界磁場より小さくなるためである。

これらの測定結果より、 $ErCo_2$  の Co に働く交換磁場、Co がメタ磁性転移をおこす臨界磁場、及び Co が磁気秩序を示さなくなる Er 臨界濃度を得ることができた。さらに、Co を Fe に代えた  $Y_{1-x}Er_xFe_2$  の磁気的及び伝導的特性についての知見も得た。

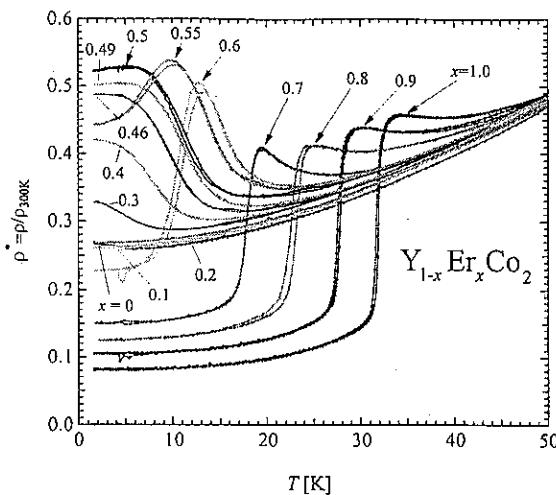


図1  $\text{Y}_{1-x}\text{Er}_x\text{Co}_2$  の電気抵抗率の温度依存.

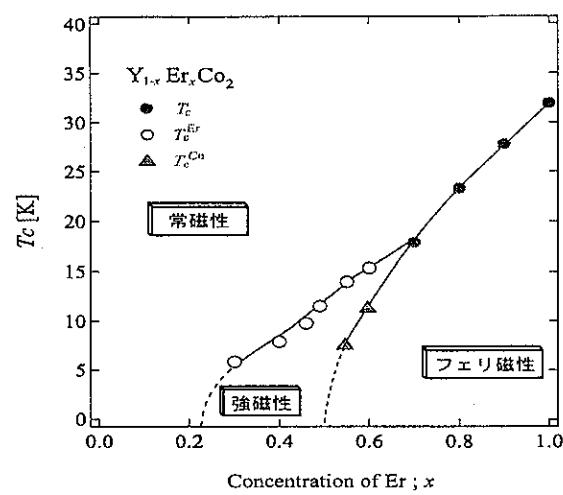


図2:  $\text{Y}_{1-x}\text{Er}_x\text{Co}_2$  の転移温度の Er 濃度依存.

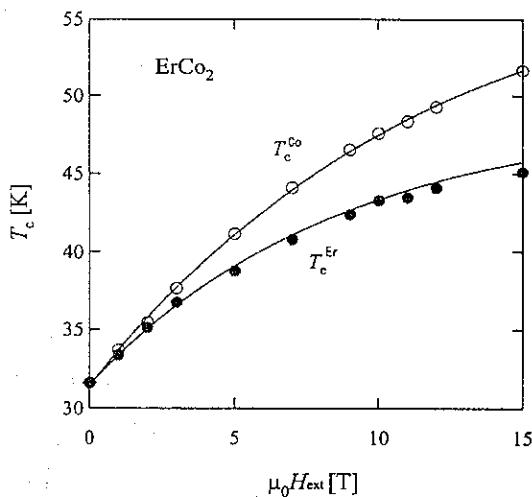


図3:  $\text{ErCo}_2$  の転移温度の磁場依存.

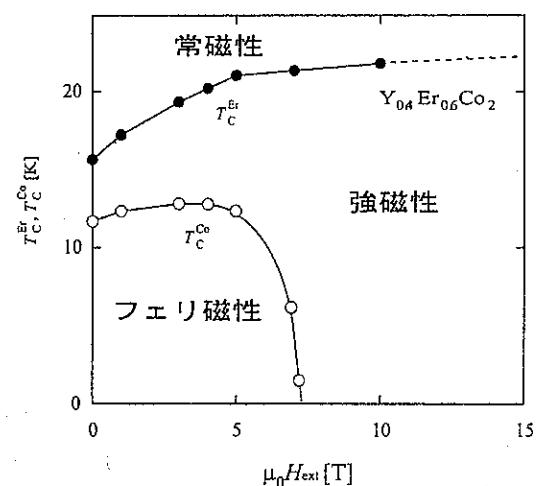


図4:  $\text{Y}_{0.4}\text{Er}_{0.6}\text{Co}_2$  の転移温度の磁場依存.