

# 先達からのお便り

## 私の研究履歴

京都大学名教授；足立裕彦

今から15年前京都大学を定年退職した。その後少しの間、研究プロジェクトの研究員や他大学の客員教授を務めたが、本格的な教育・研究活動から離れて久しい。現役当時思っていたことの記憶も薄れてきているので、後輩の皆様にか役に立つことを申し上げることも心許ない。先達からの便りという話にはふさわしくないが、私の研究歴とその当時の状況や思っていたことなどをふりかえってお話しさせていただくことにする。

学生時代は京都大学理学部化学教室で過ごした。所属したのは無機化学研究室で、分子線を用いた気体分子衝突の研究、固体表面の構造解析、固体の質量分析などの実験が研究内容であった。私自身は分子線グループでアルカリ原子と希ガス原子との弾性衝突の断面積の測定をテーマとして研究を始めた。しかし実験を行い勉強しているうちに、この技術を使えば気体反応の素過程を調べることができることに気が付いた。この問題は化学の最も基本的なテーマであり、指導教授と相談して「交差分子線による気体反応の素過程の解明」をその後の研究テーマとした。この研究を行うのは当時では多くの技術的な問題があり、大学院に入ってからこれらを克服するため、分子線に関して、量子論による粒子衝突論、古典論的気体運動論を勉強した。この実験を行うため真空技術、金属工作、ガラス工作などの技巧をそれぞれの技官の方から工作場に入り浸って学んだ。

研究室では毎週雑誌会があり、それぞれ興味深い論文を見つけて発表する機会が廻ってきた。博士課程の先輩からそのために30編の論文を読み、その研究をよく理解してから発表することを勧められた。実際に何編の論文を読んだかよくは覚えていないが、年何回か自分の番が来る度に多くの論文を勉強したことが思い出される。修士課程では交差分子線装置を作製中であつたので、その予備実験をまとめて修士論文にした。博士課程に進学して装置を完成させ、研究を続けるつもりでいたが、指導教授には技術的に大変困難であるということでよく理解してもらえず進学を断念した。それから20年余りたった1986年にD. R. Herschbachが交差分子線による気体反応の素過程の研究でノーベル化学賞を受賞している。

修士課程を修了し就職先をさがしたが、結局大阪大学工学部の助手に採用された。所属は原子力工学科の新しく出来た核燃料工学講座で、研究室のテーマは高速増殖炉の核燃料を開発することであつた。当時の日本では多目的利用の高速増殖炉の開発の機運が高まっていた。製鉄に利用できる高温炉

の燃料ということで酸化物に替わる高融点で高伝導の燃料物質を探索するための研究が行われていた。その物質として炭化物、窒化物、硫化物などの侵入型化合物が考えられ、自分自身のテーマとしてはウランやトリウムなどのアクチニドリン化物を取り上げて研究に取り組んだ。

これらの物質の組成や性質など基本的なこともよくわからないが多かったので、まず化合物の生成条件やメカニズムを調べることにした。生成方法としてリンの蒸気とウランやトリウムの粉末との直接反応を考えその生成装置を作り、また反応のメカニズムを調べるためには示差熱法、熱重量法を用いた。さらに生成物の物性として電気抵抗やねじり天秤によるファラデー法で磁化率を測定した。これらの実験は当時まだ市販の装置が十分でなく、ほとんどが自作の手作り装置で行った。これらの実験を行いその考察を行ったが、これら化合物の性質を説明するにはその電子構造を明らかにすることが必要と考えた。そのためエネルギーバンド理論を用いることにした。

ウランのような重元素では相対論効果(非相対論誤差)が大きく相対論による計算が必要になる。その当時は精度よい理論計算の手法もなく、相対論効果を摂動論で取り入れた半経験的なタイト・バインディング法で計算を行った。当時大阪大学に初めて全国共同利用の大型計算機が導入された。大型計算機といっても、機械語で書かれたプログラムやデータを紙テープにパンチして入力するマシーンであつた。それでも当時は $10 \times 10$ の行列の対角化の計算が簡単にできるので感激したものである。

遷移金属の侵入型化合物の場合、金属d軌道と非金属のp軌道との相互作用で価電子状態が決まるが、侵入型のウラン化合物の場合はそれに局在的なf軌道が重なり電子構造は大変複雑になることがわかった。そこまでの研究結果をまとめて、「アクチニドリン化物の生成とその電子構造に関する研究」というタイトルで博士論文を書いた。しかしこれらの化合物の性質を正しく理解するには、正確な相対論による理論計算が必要であつた。当時米国ノースウェスタン大学材料工学教室のJ. T. Waber教授が初めて相対論による原子構造計算を成功していた。そこで相対論の電子構造理論を学ぶことが必要と思ひ連絡を取ったところすぐにも来てよいという返事をもらい、博士研究員として米国へ留学した。

相対論の電子構造計算のプログラムを開発しようと思ひ米国に渡つたのであるが、当時金属表面へ化学吸着した分子の光電子スペクトルが観測され、世界では物性物理の大きなトピックスになっていて、その理論解析が行われようとしていた。Waber教授は相対論プログラムの開発も良いが、固体表面の化学吸着を計算できるプログラム開発も重要であると提案され、そちらを選ぶことにした。その時ノースウェスタン大学の物理学教室のD. E. Ellis博士が、Discrete variational (DV)  $X\alpha$ 法という計算手法を開発し結晶のバンド計算に成功していた。これを固体表面の電子構造計算へ応用しようということで、私の部屋にいた材料教室の博士研究員F. W. Averillとプログラム開発を始めていた。私は彼らと

