

るが、従来の励起線は固有吸収端が短波長側にあるものにはしか利用できない。レーザー光によつて既に GaP の多音子過程によるスペクトルが測定されているが、従来不可能であつた物質について多くの実験ができることになる。

(吉 永 記)

〔教養部物理教室〕

渡 辺 研 究 室

結晶解析には数値計算が切り離せない。計算を能率よく行うために結晶屋は早くから各種の図表、ノモグラフその他を工夫してきた。又、云はば単能の計算機とも云う可きものも試みられ、例えば坪井忠二博士の考案されたフーリエ級数の求解機のようなもの、又それを電氣的に行うものなども工夫されてきた。この様な器械の中で目だつて有効であつたのは、Pepinsky の作った X-RAC と云う名で呼ばれた二次元のアナログ計算機である。著者も 1951-1953 年の 2 年間同教授の研究室に過してこの器械を使わせて貰つた。筆者の帰つた後日本から 1.0 名近くの結晶屋がこの器械に世話になつたわけである。この器械は二次元の等高線として結晶内電子密度分布（又は同様な式で表はされる関数值）を与えるが、次第に複雑な結晶を扱う様になつて三次元の解析が必要となり残念乍らこの器械はさほど有効ではなくなつた。

話は前にさかのぼるが、戦後、日比谷に SCAP の図書館が開設されてアメリカ文けんが読める様になつて、研究室の者が代り合つて夜行で上京し、夢中になつて筆写やマイクロフィルムにおさめて帰つた時代がある。この時 Pauling と Schomaker が結晶解析や電子線回折に会計計算機を使用しているのを知り幸い武田薬品工業に同じ種類の器械があり、多少の時間を使わして貰えたので大崎健二君や岡谷美治君などがこれのお世話になることができた。筆者の滞米時代にはアメリカでも電子計算機がようやく実用化されてきて、学会などでの報告が行われはじめた時代である。帰国後、大阪でも電子計算機をほしいと思

渡辺研究室

つても国産品はなく、輸入品で当時の金額で1,000万円以上で、事実上不可能であつた。そのころ三菱電機の研究所にBendix G 15が入り、これも同社の好意で笹田義夫君や真崎規夫君などが使わして頂いた。

昭和36年、阪大に日本電気のNEAC2203が入ることになり、その半年前位から同社玉川工場の同一の器械を使わして貰うことができる様になつた。われわれも大に元気を出すことができ、プログラムをつくり、大崎健次君、真崎規夫君、小泉日出雄君などが、これも夜行で上京し、プログラムを器械に入れるが最初の内には器械がストップして仕舞う、プログラムのミスのためである。1000語近い命令のステップを予め何度も何度も照合して絶対まちがいないと思つたものでも通らない。しかし与えられた時間は容赦なく終つてしまつて帰らなければならない。帰りの汽車の中でようよう僅かなミスを発見する。しかし、その次に使わして貰うには2~3週間待たなければならぬ。会社としては恐らく最大限の好意を示してくれたのにかかわらず、悔めしくさえ思えたものである。

さて近頃は、国産の電子計算機も優秀なそして大型のものが次第に使える様になりつつある。これからの人達は、FORTRANとかALGOLとか又はそれと同等のcompilerが使える様になるので、器械語でプログラムする、そして器械の異なる度にその器械語の文法を勉強する必要は次第になくなるであろう。器械語でプログラムをつくるにはいろいろのコツがある様で上手につくればmachine time がたちまち $\frac{1}{2}$ にも $\frac{1}{5}$ にもなる様である。そのためプログラミングはそれ自身興味深々たるものがあるらしく、傍で見ていると、解析結果を目的としているのかプログラムをつくることを目的としているのか見分けのつかないことがある。現にアメリカでの話であるが、優秀な結晶学者の内数人がいつの間にか本職のプログラマーに変つている。

日本の大型電子計算機の導入はアメリカに比べて少くとも5年おくらせている。しかもこの5年間の進歩は目まぐるしいものがある。このおくれは結晶学に限らず、多量の数値計算を含むすべての研究に云えることであつて、早急に取りもどさなければならない。

現在、われわれの研究室では遷移金属のアリル錯体の結晶解析(鳥居晃君)

を行つている。この錯体は立体特異高分子合成の触媒であり、中心金属の原子価が零で、アリル基の非局在 π 電子との相互作用で結合していると考えられている。なお、小橋正善君と共同でこの物質のX線吸収端の微細構造を測定し、電子状態をも研究する予定である。 (渡辺得之助記)

排気式の熱電子かガスイオン型のX線管を使用しCauchyisかJohann型の彎曲結晶X線分光器にてX線スペクトル(発射, 吸収)の微細構造を研究している。使用結晶は主として水晶で、その反射面は(110), (100), (130)を用い、その曲率半径は20 cmか50 cmである。現在迄のところ軟X線域は計画中で $1 \sim 2 \text{ \AA}$ の波長範囲について種々の資料について研究している。

Co-Ni(Fe-Co)等の電着合金のCoおよびNi K吸収端(Fe, Co K edge.)の微細構造は非常に類似している。これは問題の原子の最近接原子の配置は全く同じであるので、吸収スペクトルの微細構造についての所謂(SrC)的な沢田の理論から考えられることである。この種の実験を更に適当な資料について行い、沢田理論が適切かどうかを確かめたいと考えている。

化学結合の吸収端構造に及ぼす影響も面白い問題である。例えば鉄族共有化合物の吸収端近傍に原子の $1s \rightarrow 4p$ に相当する鋭い線状の吸収線が観察されることがある。すなわち化学、磁気的なデータから $4p$ 軌道が空位である dsp^2 sd^3 配位の種々の化合物にみられる。この種の実験結果についてはすでに一部発表してある。

一方発射スペクトルの研究では、スペクトルの形状は対称の形(Lorentz型)をなしているが、 $3d$ 電子が閉殻になつていない鉄族化合物等にて K_{α_1, α_2} 線の非対称性が観測されている。すなわちその度合は $3d$ の不对電子の数に関係あるといわれ磁気モーメントの実験値とうまく対応づけられている。しかしこの非対称性と $3d$ 不对電子との関係を否定する立場の研究者もあり、何分にも適当な実験データも少ないので定説が確立されていない。私のところで現在鉄族元素の化合物の K_{α_1, α_2} 線を螢光X線分光によつて研究している。

(小橋記)