

合に関与しない原子は陽に扱わない, ii) 独立変数は回転し得る 2 面角のみ, iii) 相互作用として, Lenard-Jones 相互作用, 静電相互作用, 水素結合, S-S 結合を考える。iv) 溶媒の効果は考慮しない。この力学系におけるエネルギー極小の点を求め, その点で運動エネルギーと位置エネルギーについての H 行列と F 行列を計算し, 両方の行列を同時に対角化することにより, 規準振動モードを求めた。得られた規準振動モードの特徴は以下のとおりである。

- (1) 振動数分布の区間は, $5 \text{ cm}^{-1} \sim 670 \text{ cm}^{-1}$ で 120 cm^{-1} 以下に約 70% のモードが存在する。
- (2) 各モードは振動数の大きさによって特徴が異なる。
 - i) 高振動モードでは, 運動は局在化している。
 - ii) 低振動モードでは, 運動は分子全体に拡がっていて, しかも, 原子の動きのベクトルの空間的变化は連続的である。又, 熱平衡における原子の平均二乗変位への寄与が大きい。

2. カオスの中の秩序運動

吉 武 伸 之

乱流発生に対する quadratic model のように一次元差分系は, 力学系の新しい性質の発見や理解に役立つ。quadratic model の nonchaos から chaos への転移や chaos の発達は, 周期軌道の発生の仕方と強く結びついていると考えられる。

quadratic model やその直線近似したテント変換は, Sharkovskii の順序によって, 不連続な一次元差分系である β 変換は Takahashi 順序によって, 周期軌道の発生の仕方は, 支配されている。

そこで, 安定な 2 周期軌道から chaos へ転移し, Sharkovskii や Takahashi 順序とは別の順序をもった一次元差分系について, chaos の発達やパワースペクトラムの変化をその順序による周期軌道の発生と関連させて調べた。

周期軌道の中で最後に消えるタイプの周期軌道を minimal orbit というが, この一次元差分系においては, 不変密度・自己相関関数・パワースペクトラムの変化から次のことが期待される。

- (1) カオスの発達の仕方は, 周期軌道の発生の仕方とその周期軌道の性質による。即ち, 順序関係と minimal orbit のタイプに支配されている。
- (2) 転移点支傍において, 2 周期を除いた最小の周期の minimal orbit の近傍に相似性が成

り立つ。

3. 高分子におけるくりこみ群

柴田博史

よく混ざる高分子鎖溶液においては、高分子鎖どうしが互いに退け合うようになっている。その性質は、実験によりどんな高分子鎖の状態にあろうとも生き残ってくる。つまり、非常に長い高分子鎖ならば、その鎖が何分の1になろうとも不変な量が存在するという事実より、その系においては、いわゆる臨界現象と対応がつく事が予想されます。

臨界点近傍での振る舞いは、くりこみ群の手法を使ってうまく記述できる事より、高分子鎖系でも、くりこみ群の手法を適用する事が、de Gennes, J. des Cloiseaux, Oono, Ohta. らによって進められてきているが、これを確かめるとともに、実験をどの程度良く再現するかを検討してみた。

4. 低温トンネル効果による分子励起状態の スペクトル測定

千葉玲一

30 Å程度の絶縁層を両側から金属ではさんでトンネル接合を作ると、一方の電極の電子は絶縁層にあるポテンシャル障壁よりも低いエネルギー状態にあっても、他方の電極へある確率で透過することができる。

トンネル効果と呼ばれるこのような現象において、この電子は、ほとんどの場合エネルギーの損失を伴わずに透過するが、トンネル障壁(トンネルバリア)内でエネルギーのやりとりを伴った非弾性過程をとる確率があり、それがトンネル素子の電流、電圧特性の微細構造として現れる。

それで、このトンネルバリアに有機分子を吸着させておくとこの分子の振動モードとトンネル過程の電子が相互作用をするため、非弾性トンネリング(インエラスティックトンネリング)を通して、その分子振動を観測することができる。

この分子振動は、50 meV ~ 500 meV (400 ~ 4000 cm⁻¹) に当るものである。