

物性研だより

第49巻
第2号

2009年7月

目次	1	平成20年度客員所員を経験して	妹尾 仁嗣
	3		春山 純志
	5		柴田 尚和
	7	物性研に着任して	野口 良史
	8		望月 敏光
	9		古府 麻衣子
	10	物性研を離れて	阿曾 尚文
	11		松田 真生
	12	外国人客員所員を経験して	Mike Zhitomirsky
		物性研究所国際ワークショップ・短期研究会	
	13	○ “Supercomputing in Solid State Physics 2009” (物性物理学における大規模計算2009)	
		ISSPワークショップ報告	
	17	○ 東大・KEKパルスチョッパー分光器とそのサイエンス	
19	物性研究所談話会		
20	物性研究所セミナー		
	物性研ニュース		
28	○ 人事異動		
29	○ 東京大学物性研究所教員公募について		
30	○ 出張依頼の廃止について		
	編集後記		



ISSPワークショップ参加者

東京大学物性研究所

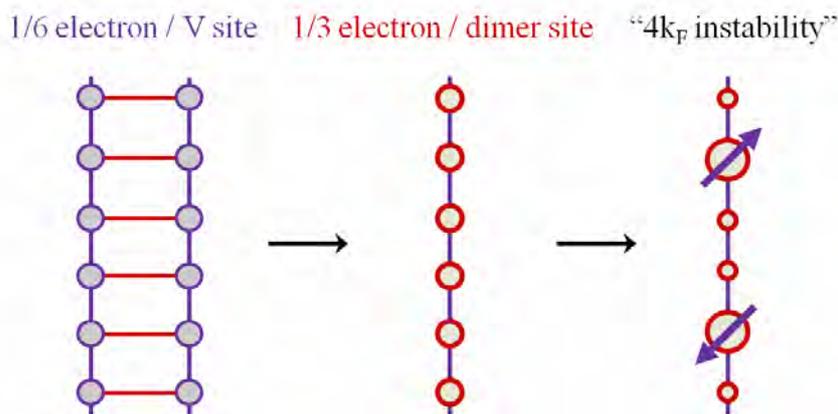
Copyright ©2009 Institute for Solid State Physics,
The University of Tokyo. All rights Reserved.

ISSN 0385-9843



います。とくに圧力の効果を第一原理計算とタイアップしてモデル化することは、電荷秩序相が抑制された先に超伝導相が現われることから興味深い問題と思われます。また、 $\text{Sr}_{1/3}\text{V}_2\text{O}_5$ での電荷秩序パターンや圧力下で見えている「新種の「悪魔の階段」現象」[9]のメカニズムはまだ手つかずです。

以上、簡単に研究の紹介をさせていただきました。最後に、客員所員となるきっかけを作っていただいた山内さん、磯部さん、そして上田寛先生、また私が研究所内をぶらぶらするのを忙しいなか相手をしていただいた上田研究室およびその他多くの物性研の方々にお礼申し上げます。4月に現所属に移りまして以前よりぐっと近くなりましたので、またお邪魔させてください。



図： $\text{Na}_{1/3}\text{V}_2\text{O}_5$ の電荷秩序パターンの模式図。V-Vダイマーを単位に置き換えると“ $4k_F$ CDW”と見なせる

- [1] H. Seo, S. Ishibashi, and Y. Otsuka, unpublished.
- [2] H. Seo and H. Fukuyama, *J. Phys. Soc. Jpn.* **67** (1998) 2602.
- [3] M. Isobe and Y. Ueda, *J. Phys. Soc. Jpn.* **65** (1996) 1178.
- [4] レビューとして 藤井保彦ら, *固体物理* **37** No.9 特集号 (2002) 627.
- [5] T. Yamauchi, Y. Ueda, and N. Môri, *Phys. Rev. Lett.* **89** (2002) 057002; H. Yamada and Y. Ueda, *J. Phys. Soc. Jpn.* **68** (1999) 2735.
- [6] M.-L. Doublet and M.-B. Lepetit, *Phys. Rev. B* **71** (2005) 075119.
- [7] M. Tsuchiizu, *J. Mag. Mag. Mat.* **310** (2007) e200.
- [8] M. Itoh *et al.*, *Phys. Rev. B* **74** (2006) 054434; I. Yamauchi *et al.*, *ibid.* **74** (2006) 104410; T. Suzuki *et al.*, *ibid.* **73** (2006) 224421.
- [9] T. Yamauchi *et al.*, *Phys. Rev. B* **75** (2007) 014437; H. Ueda *et al.*, unpublished.

平成 20 年度客員所員を経験して

「 NaV_2O_5 と $\text{Na}_{1/3}\text{V}_2\text{O}_5$ 」

理化学研究所 古崎物性理論研究室 妹尾 仁嗣

2008 年度前期に、上田寛先生にホストとなっただき、客員所員として月に 1 度ほど物性研に滞在させていただきました。物性研は、大学院時代の指導教官だった福山秀敏先生の所長着任とともに我々院生も本郷から移った際、博士課程最後の 1 年間（「六本木最後の年」です）を過ごし、またその後つくばでポストドクをしていた頃にも時おりお邪魔させていただいた、思い出深い研究所です。今年の 3 月まで日本原子力研究開発機構の放射光科学研究ユニット（SPRING-8 にあり、近隣の機関も含めこちらにも物性研 OB が大勢います。）に在籍しておりまして、兵庫県の人里離れたのんびりした暮らしのなか時たま関東に「戻って」くるのはちょうどよい気分転換でもあり、楽しませていただきました。実験研究者との交流が研究の礎となっている私のような理論家にとって、廊下を歩いていると知り合いの実験家にぶつかる物性研は、まさに理想的な環境でした。客員としての在籍時からすでに時間が経ってしまいましたが、物性研滞在をきっかけに始めた研究（の途中経過）[1]を簡単に紹介させていただきます。

そもそもなぜ理論屋である私が上田研の客員として滞在することになったかといいますと、その繋がりには私が大学院生の時に行った NaV_2O_5 の電荷秩序に関する研究[2]からでした（当時はまだ本郷にいました）。磯部-上田の JPSJ 論文[3]が 1996 年、また私たちの研究の直接のきっかけとなった安岡研や藤井研（どちらも当時物性研）の最初の一連の実験[4]が 1997-1998 年頃ですから、すでに 10 年以上も時が経っていますが、それ以後も上田研関係者のみならず、この物質を通じて知り合った研究者とは様々に交流をさせていただいています。その割には、この研究の後、特にここ数年は分子性導体の研究に重心が移っていて、遷移金属酸化物の研究にはあまり寄与できておらず「顔をつないでいる」だけといった感がありました。そこで客員所員をさせていただく話がありましてこれをきっかけに Vanadium 酸化物の電荷秩序現象に関する計算を再び手がける機会が「降ってきた」印象を持っています。

研究のターゲットとしたのは 2002 年の山内-上田-毛利の压力下超伝導の発見[5]で一躍注目を集めた $\text{Na}_{1/3}\text{V}_2\text{O}_5$ 、これまた低次元の電荷秩序系です。 NaV_2O_5 との共通点があるのかなのか、当初から興味を持っていて山内さんからも折に触れて実験の進捗状況を伺っていたのですが、結晶構造が（私にとっては）複雑な上に、第一原理計算の論文がなくフェルミ面近傍の有効モデルが立てられていないため、モデルから出発する理論屋には手を出したくても腰が引けていた感がありました。実際、客員所員になるにあたって下調べしてみてもやはりちゃんとした第一原理計算はなかったのですが、一方で類似物質の $\text{Sr}_{1/3}\text{V}_2\text{O}_5$ では量子化学計算を元にこの物質の電子状態は V サイトが形成する「結合ラダー系」と見なせるという提案[6]が数年前になされていました。そこで、Na 系もこれが当てはまるのか、まず産総研計算科学の石橋さんに第一原理計算によるバンド計算をお願いしました。ここでの第一原理計算は Na サイトの秩序・無秩序転移が 230K で起きることなどから工夫が必要でしたが（詳細は割愛します）、ともかく得られた結果に対して数値フィッティングによる強束縛モデルを作ると、やはり一種の結合ラダー系と見なせるという結論を得ました。また、これにさらに V サイト上のクーロン力を考慮したハバード型モデルに対して平均場近似を適用した計算を行い、実験で示唆されている電荷秩序パターンを再現することができました。このパターンはよく有機 1/4-filled 系で現われる単純な「Wigner 結晶型」のものではなく、梯子 (ladder) の「横木 (rung)」をダイマーとして捉えたさらなる有効モデルを考えた時の「足 (leg)」方向の “ $4k_F$ CDW” と理解できるもので、名大理の土射津さんによってすでに単純化したモデルを元に指摘されている[7]状態でした（図を参照）。我々の研究の売りとしてはさらに Na 秩序・無秩序の影響を定量的に扱えた点ですが、こちらは NMR 実験の結果[8]との比較などまだ問題点が残っていると感じています。また、現在は単純化した結合ラダーモデルに対する厳密対角化による数値計算も進めています。

以上がこれまでの進捗状況なのですが、おおまかにいうと、これまでの研究による提案を理論的にサポートできた、という段階です。しかし残された問題はまだまだあり、今後はこの研究を土台にいろいろな解析を進めていきたいと思って

客員所員を経験して

青山学院大学大学院理工学研究科機能物質創成コース 春山 純志

2008年4月より一年間家所長の研究室で客員所員としてお世話になりました。先生方、学生さん、スタッフの方々共に皆さん親切で、また素晴らしい設備もあって充実した研究活動が出来ました。予想どおり(?)あまり家先生にはお会いできませんでしたが、お世話になった皆様にまずは心よりお礼を申し上げたいと思います。特に秘書の川村さんにはいつもダラダラと下らない長話に付き合っていて頂いて感謝の言葉もありません。当初「予算がもらえて He も使い放題というだけの安易な気持ちで行くのならば飛ばすぞ」的な秋光先生の脅し(?)にめげずに通って良かったと思います。また、TX 開通以来随分と物性研も便利になったと感じてはいましたが、今回実際に定期的に電車通勤してみて本当に便利になったものだと感じました。ただし秋葉原での乗り換えとキャンパス駅でのバスの待ち時間が面倒でしたが(もっとも甘党の私はバスを待つ時間を利用してららぼーとの鯛焼き屋に通っていたので、実は貴重な時間でした)。その意味では、駅と大学の間にマイクロバスの定期便が特定の時間帯だけでもあるとなお便利であろうと感じました。

さてこの原稿の内容はフリーハンドだということは何を書こうか迷ったのだが、結局タイトルと全く関係のない、研究について思いつくままに書くことにした(ここから突然文体が変わってすみません)。私の専門分野は量子力学実験で、特に最近はカーボンナノチューブ(CNT)の量子物性、中でも超伝導にフォーカスして研究を行っている。炭素原子の sp^N 結合が形成する物質群は、グラフェン、グラファイト、ダイヤモンド、フラーレン、CNT など多種多様で非常に面白い。2004年にワイドバンドギャップの半導体(ある意味絶縁体)であるダイヤモンドにホウ素を高ドープすると $T_c = 10K$ オーダーの超伝導転移を起こすことが報告され、その翌年グラファイトの層間にカルシウムを挿入するとやはり $10K$ オーダーの超伝導転移が、2006年には多層CNTを電極で完全終端し全層通電すると $12K$ で超伝導が起きることを私のグループが報告し、1990年辺りからほとんど進展のなかった炭素系の超伝導が一気に開花した。1990年当時家先生、MITの Millie Dresselhaus 先生らがやられていたグラファイト超伝導の T_c は $1K$ 以下であったので、 T_c は突如一桁上がった訳である。さらに昨年私のグループからホウ素を微量ドープした単層CNTの高均一薄膜構造における $12K$ でのマイスナー効果が、 Cs_3C_{60} フラーレンクラスターへの圧力印加で $39K$ の超伝導が、各々報告され、この分野が益々発展を遂げようとしている。これらの一里塚として秋の物理学会で福山秀敏元物性研所長を提案者として「炭素系、及びその周辺少数キャリア系超伝導体の新展開」としてシンポジウムが開催されるので是非ご参照頂きたい。

今回私有家研究室のご協力の下でやらせて頂いた研究もこれらの延長線上にあった。2006年の発見では、CNTが持つ一次元性(朝永ラッティンジャー液体(TLL)、パイエルス転移、電子状態密度の van Hove 特異点(VHS)、電荷揺らぎ etc.)は有限温度での超伝導の発現を著しく阻害するという理論にささやかな抵抗を試みたもので、CNTを同芯軸状に多層化した構造の両端を金属電極で完全終端し全層通電すると TLL が層間で静電結合しその強度が弱まる、その際に各層に内在していた短距離クーロン引力が全層にわたって長距離的に成長し超伝導転移を引き起こす、というものであった。多層で、かつ全層通電しないと超伝導は発現しない、これが私の得た結論であった。

しかしこのCNTという物質は非常にやっかいである。1991年に飯島先生により発見され、1997年デルフトの Dekker が1本のCNTをチャンネルとしたFETの開発に成功して以来、Nature、Science、PRLなどに量子物性に関する膨大な数の論文が掲載されてきたが、それらの再現性は?と問われると厳しいものがある。全く同じ条件で実験をやっても研究者間での再現性がない、あるいは同一の研究者でさえその再現性に苦しんできた、というのが実情である。その限りにおいてはこの研究「サイエンス」ではない。例えばCVD成長時もちょっとした真空の引き加減でCNTの質はたちまち激変してしまい、調整に職人芸的な技が必要になる。金属電極との再現性良いオーミック形成、カイラリティ制御もまた困難である。ましてや超伝導となると、高い再現性無くしてはなかなか人々に認知されない。2006年のこの発見はその意味で苦しいもので、再現性はなかなか上がらずUSO(嘘:未確認超伝導体)の領域から抜け出していなかった。

その要因の一つはキャリアドーピング機構が不明瞭であることにあったが、CNT へのキャリアドーピングの実験はホウ素、窒素、酸素など多く実施されてきたにも関わらず、実際に不純物が炭素原子を置換し活性化したという明確な報告はほとんど無く、これもまた大変な実験であった。そこで触媒の Fe/Co にあらかじめホウ素を制御して仕込みレーザー照射し、単層 CNT 成長時にこのホウ素が CNT の炭素六員環ネットワークに自動的に取り込まれることを期待し私は実験を行った。その結果が 2008 年に報告したマイスナー効果であった。この時、触媒にたった 4 原子%以上ホウ素を仕込むと単層 CNT が破壊されてしまうという重要な知見が得られた。実際に CNT に取り込まれる量はもっと少ないはずなので、これは CNT の持つトポジカルな対称性がいかに高く繊細でもろいものであるかを証明している。過去の実験がうまく行かなかったのは、どうやら不純物を入れ過ぎていた嫌いがある。さらに 4 原子%以下ではホウ素濃度が低い方が明確なマイスナー効果が高温で出現することもわかった。これはある特定の VHS へフェルミ準位が整合させ易いからであった。

さて客員期間中に、この薄膜構造に微小電極を形成し電気抵抗の落ちを確認すること、また、圧力を印加して転移温度の変化を観察すること、を試みた。かなり大変な実験であったが、家研 D3 であった物性研史上最高の(?) 天才プロボウラーの佐野さんの強力なご支援のお陰で 10K 近辺で電気抵抗が急激に 1/5 程も減少する特性をいくつかの試料で得る事が出来た。さらに、薄膜形成前の単層 CNT 集合体を個々の CNT に徹底的に超音波分散したものを集積化すると滑らかな紙状の膜 (バッキーペーパー) ができ、これに微小圧力を印加することで 8K から 19K まで転移温度が向上することも発見できた。両者とも、まだ問題を多く抱えているが、CNT の持つ利点、軽い (フォノン振動数・デバイ温度が高い)、細いチューブ構造 (直径方向対向原子間での sp^3 混成軌道・ $\sigma\pi$ 混成バンド形成、その $\sigma\pi$ 電子と動径方向フォノンとの強い電子格子結合)、VHS へのフェルミ準位の完全整合、などをうまく利用出来れば将来フラーレンクラスターや MgB_2 並の T_c は可能かもしれない。実際上記 T_c の 19K への向上も、バッキーペーパー中に存在する直径 0.6nm 程度の細い単層 CNT 集合体への圧力印加が関与している可能性がある。ただしもちろんこれはキャリアドーピングの制御性を格段に向上出来ればの話であるが、これまたかなりの難問である。入れ過ぎると壊れ、少なすぎると超伝導転移自体が発現しない。依然として USO から脱却できない訳で、CNT という物質は本当に困ったものである。

さて、やっかいな CNT から離れた時、最近の炭素系のトピックスとして「グラフェン」がある。単層 CNT を切っただけで開けば炭素六員環が形成する原子一個分の薄さの二次元シート「グラフェン」になる。元来この生成は難しいとされていたが、2004 年にマンチェスター大学の Geim のグループがスコッチテープに付けたグラファイトを数百回付け剥がして層を剥離し、最後にシリコン基板上にテープを押し付けるとそこにグラフェンが残るという驚くほど原始的な作成方法を発見して以来、この 3, 4 間に数百件の論文が出版され、Nature、PRL などにも 100 報近い論文が出て欧米ではフィーバーになっている。APS March meeting では CNT のセッションからグラフェンのセッションにドットと人が移り、いくら呼んでも未だに帰ってこない。寂しい限りである。しかしこの研究、微妙な側面があつて、昔から炭素系をやっている人は「今更なぜグラフェンに逆戻り?」と言い、化合物半導体二次元電子ガス系をやっている人は「結晶性など制御できるの?」と言う。Nature 関連誌の広報戦略に乗っけられているだけという話もある。ただうまくポイントを絞ればかなり面白い点も見えてくる分野ではある。その一つがエッジ (端) に局在する超高電子状態密度や強いスピンコヒーレンスで、 10^{12} cm^{-2} を軽く越える電子密度があるとも言われており、室温での異常量子ホール効果さえ報告されている。これをうまく活用できれば将来高温で超伝導転移が実現できるかもしれない。とにかく CNT が持っていた位置制御や電極コンタクトの問題などから解放されるだけでも朗報である。家研を始め、物性研でもこの研究を始められた先生方がいらっしゃるって聞いた。日本からも何か特異な現象が発見されることを期待したい。

最後になりますが、客員としての心残りは、夏休みは海外出張などで、後期は講義が多くて結局なかなか通えなくなったことでした。その代わりにうちの院生さん達は、装置が揃っていてかなりの頻度で使わせて頂けると嬉々として通わせて頂きました。この僅か 1 年の間にもキャンパス周辺に高層マンションなどが次々と立ち並び様変わりしました。何だか家賃も高そうですが、とにかく今後の物性研、柏の葉キャンパス、並びにららぽーととの鯛焼き屋さんの益々の発展を心よりお祈りする次第です。1 年間ありがとうございました。

物性研から始まった研究の日々

東北大学理学研究科 准教授 柴田 尚和

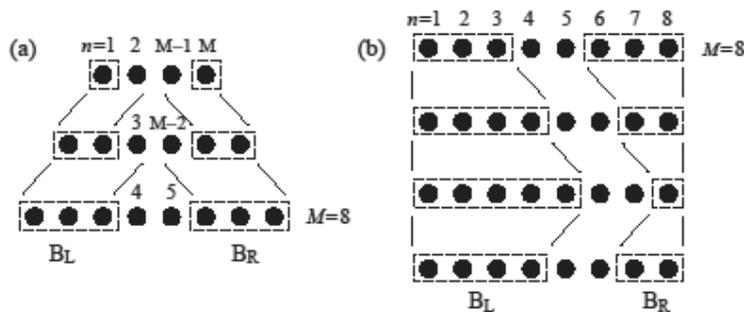
昨年の 10 月から半年の間、客員所員として月 2~3 回の頻度で物性研に来る機会を頂きました。受け入れて下さった常次先生をはじめとして多く方にお世話になり、充実した議論を長時間にわたり集中的に行うことができました。仙台から柏の物性研までは片道 3 時間以上の時間がかかりますが、柏に来るたびに、その時間を補う新しい刺激を得ることができ、物性研の方々の存在感を改めて感じる事ができた半年間でした。

私の物性研でのこのような体験は実は今回で 2 回目になります。最初の体験は今から 15 年ほど前、私が東京理科大学の大学院生で、博士課程への進学を決めた後の頃になります。恩師の石井力先生は、強相関電子系の分野の第一線で研究をされていた上田和夫先生の指導を受けることを私に勧め、六本木にあった物性研に留学研究員として通えるように手を尽してくれました。そして、私は理科大に籍を置いたまま物性研究の中心的存在であった六本木の物性研に通えることになったのです。当時、最寄り駅であった乃木坂の駅から気を引き締めて生産研究所の脇を通り物性研の建物まで歩いた記憶がありますが、私のような全くの外部の人間が第一線の研究所に通うことができる制度があることに感謝をしたことを覚えています。

今回、私が半年間、客員所員として研究をすることになったテーマは、従来の計算法では解析が困難であった量子多体系の基底状態を調べるというもので、フラストレーション等のために量子効果が強く現れ、平均場近似などの近似理論や通常の数値計算法では取り扱いが難しい系における新規物性の発見を目指したものです。このような系のなかでも特に量子効果が強く現れる量子一次元系は密度行列繰り込み群と呼ばれる計算手法が最も有効に適用できると考えられているのですが、この密度行列繰り込み群という計算手法について学ぶことを私に勧めてくださったのが、私が六本木の物性研に通っていた時の受け入れ所員であった上田和夫先生でした。密度行列繰り込み群の方法は 1992 年に S. White によって考案されたのですが[1]、私が学ぶことになったのはその 2 年後でしたので、国内でこの方法をよく知っていた方はまだほとんどおりませんでした。

このような状況の中で上田先生は、密度行列繰り込み群の方法についていち早く取り組んでおられた当時東北大学の西野友年先生を、今回の私のように半年ほどの間、定期的に物性研に招いて下さりました。私は西野先生から大きな刺激を受けながら多くのことを学ぶことができました。

その後、密度行列繰り込み群の方法は、一次元電子系やフラストレーションのある量子スピン系など量子モンテカルロ法では負符号問題が現れる系や、厳密対角化法では系の大きさに強い制約がかかる自由度が大きな系を中心に幅広く利用され、私も重い電子系の有効模型の一つである近藤格子模型について精力的に調べました[2]。



密度行列繰り込み群の概念図。●はスピンなどの各サイトの自由度を表す。(a) 系の両端の点線で囲ったブロックの自由度を制限し、新しい中心サイトの自由度を加えてブロックを拡張する。限られた自由度を用いて大きな系の基底状態などを表現するための方法。(b) 系の大きさを固定して、限られた自由度を用いて最も正確な基底状態を求めるための方法。最適化された変分関数を生成し、限られた基底の数で最も低いエネルギーをもつ状態を得ることができる。

密度行列繰り込み群という計算法は、図に示すように不要な自由度を消去しながら、系を大きくしていくという繰り込みという側面と、残された自由度を用いて最も正確な基底状態を求めるという変分法的側面の両方をもつ独特な計算法です。基底状態にほとんど影響を与えない状態だけを密度行列を利用して選択的に消去することから“密度行列繰り込み群”という名前が付いています。この計算法は、もともと量子一次元系の基底状態を求める方法として考案されたのですが、量子系のハミルトニアンを古典二次元系の転送行列に置き換えるアイデアが 1995 年に西野先生によって発表され [3]、古典二次元系の熱力学量も密度行列繰り込み群によって得ることができるようになりました。さらにその 2 年後には古典二次元系の転送行列を量子一次元系の量子転送行列に置き換えることで、量子一次元系の熱力学量が求められるようになり [4]、その翌年には量子一次元系の動的な局所相関関数までが計算できるようになりました [5]。このように、わずか数年の間で、基底状態から有限温度の熱力学量、動的相関関数までの計算が密度行列繰り込み群の応用により可能になったのですが、そのようなときに、当時はまだ高価であった計算機を自由に使える物性研の研究環境の中にあることができたことは私にとって大変幸運でした。

私が物性研の外に出て、すでに 10 年以上が過ぎていますが、私は今も物性研時代に学んだ計算法を活用して、量子ホール系や磁場中のグラフェンの分数量子ホール状態などの二次元量子系多体系の問題に取り組んでいます [6]。そして今回、物性研に再度客員として通うことで、リング交換相互作用を含むさらに複雑な問題に密度行列繰り込み群を適用して、その基底状態に含まれる不思議な物性を探索するという研究が始まりました。私にとって物性研は、まさに研究の原点になっています。

References

- [1] S. R. White : Phys. Rev. Lett. **69** (1992) 2863; Phys. Rev. B **48** (1993) 10345.
- [2] T. Nishino: J. Phys. Soc. Jpn. **64** (1995) 3598.
- [3] N. Shibata and K. Ueda : J. Phys.: Condens. Matter **11** (1999) R1.
- [4] X. Wang and T. Xiang : Phys. Rev. B **56** (1997) 5061; N. Shibata : J. Phys. Soc. Jpn. **66** (1997) 2221.
- [5] T. Mutou, N. Shibata, and K. Ueda : Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 4939.
- [6] N. Shibata : J. Phys. A : Math. Gen. **36** (2003) R381.

物性研に着任して

物性理論研究部門 野口 良史

2009年4月1日付けで物性理論研究部門・杉野研究室の助教として着任いたしました野口良史と申します。私は2006年9月に横浜国立大学大学院工学研究科大野研究室で博士号を習得し、その後、物質・材料研究機構の計算科学センターで2年半ポスドクをしておりました。ここに移ってきてすでに2ヶ月以上がたち、人生で初めての電車（バス）通勤にもなれてきました。また物性研は学部生がいないせいでしょうか、普通の大学というよりは前職場の物質・材料研究機構と似た雰囲気を感じています。おそらくこれは、研究に集中することができる素晴らしい環境がここにはあると思うことなのだと思います。

私はこれまで励起状態を効率的にそして高精度に計算するための新しい第一原理計算手法の開発を行ってきました。そこでこの場をお借りしてこれまでの研究紹介をさせていただきたいと思います。現在、第一原理計算の多くは、密度汎関数理論の枠組みで行われているという現状があります。密度汎関数理論に基づくLDAやGGAは物質の基底状態を取り扱うことに大きな成功を収めてきた大変強力な第一原理計算手法です。しかし一方で、密度汎関数理論は変分原理を使用しているために励起状態に対してはその正当性が保証されないという問題も持っています。そのため励起状態の取り扱いには密度汎関数の枠組みを超えた新しい計算手法が必要になります。近年注目を集めていて、有効な第一原理計算手法が多体の摂動論に基づいたグリーン関数法です。私が院生になった当時、すでに1電子自己エネルギー演算子 Σ を1粒子グリーン関数 G と動的遮蔽クーロン相互作用 W の単純な積で表すGW近似(GWA)が結晶系のバンドギャップを正確に見積もることができる手法として注目されていました。またこのGWAを出発点として、電子-ホール 2 粒子グリーン関数に対するBethe-Salpeter方程式(BSE)を解くことで、エキシトンの効果を取り入れた光吸収スペクトルの高精度計算も行われ、成功を収めていました。しかしこれらの手法は主に欧米が中心に開発がすすめられていたように思います。また励起状態と一言で言っても、当然ながらこれらの他にもたくさんあります。そのため現在においても、励起状態を取り扱うことのできる第一原理計算手法の開発は大きな課題だと思います。

そこで私は、これまでの手法では取り扱うことのできなかつた（あるいは仮に取り扱えたとしても効率的ではなかつたり、低精度であつた） 2 電子励起過程を取り扱うことのできる計算手法の開発を行ってきました。ここで 2 電子励起過程と言いますのは、 N 電子系（基底状態）から 2 つの電子が放出されたり、取り付けられたりする過程でその終状態が $N\pm 2$ 電子系へと電子数を変化させる励起過程を指します。 2 電子励起の代表的なものとしてオージェスペクトルやダブルイオン化エネルギー（あるいはエレクトロンアフィニティ）スペクトルなどがあります。このような過程ではその終状態に 2 つのホール（あるいは電子）が存在しますのでホール（電子）間にはクーロン反発相互作用が働き、この相互作用が終状態に決定的な役割を果たします。とくに分子やクラスターなどの孤立系ではホール（電子）はその狭い領域に閉じ込められますのでこの時の相互作用は多重散乱として知られているような短距離のクーロン反発力になり、そのために 2 粒子グリーン関数を無限次までの梯子図形（図1：T行列）に展開する必要があります。私はこれまでに全電子GW+T行列プログラムを開発し、上記のような 2 電子励起エネルギースペクトルの計算を行ってきました。

物性研ではこれまでの研究を継続、発展させていくとともに実験家の方たちとも協力をしてやってきたいと思っております。まだまだ未熟者ではありますが何卒ご指導よろしくお願いたします。

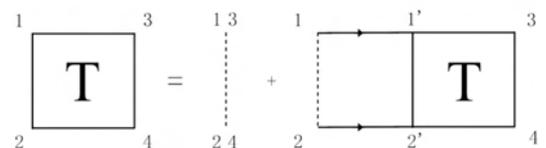


図1. 梯子図形 (T 行列)。点線は裸のクーロン相互作用、矢印を持った直線は1粒子グリーン関数を表している。

物性研に着任して

先端分光研究部門 望月 敏光

今年度の 4 月 1 日付けで先端分光研究部門・秋山研究室の助教として着任いたしました。よろしくお願い致します。物性研ではお世話になっている先生方は元より、学部や学会等で知り合った同年代の顔にも良く会い、物性研の組織としての巨大さを敷地の広さ以上に感じています。また研究に集中できる環境が整っており、適度に便利でありながら空気が都心よりも良いと感じます。周辺には状態の良い自転車道が数多く走っており、走り尽くすのに相当時間が掛かりそうです。

私は 3 月まで東京大学理学部の岡本研究室に在籍し、金属吸着で半導体へき開面に誘起される表面反転層 2 次元電子系における電気伝導を研究対象にしていました。インジウム砒素やインジウムアンチモンといった半導体を超高真空中でへき開し、平坦な表面を得た場合はその面が低温で絶縁化します。そこに金属を吸着すると、伝導電子系が誘起されます。真空表面に 100 分の 1 原子層からの低被覆率で吸着するだけで良いので吸着物質は自由に選べ、非常に多様な物質で電子系を誘起することができます。こうした吸着物質の自由度に加え、表面電子系では超伝導を始めとする、もし見つければ大発見になるような特異な輸送現象が期待されていました。このような魅力的な研究対象だったのですが、MOSFET やヘテロ構造などの中に作られた 2 次元系と異なり電気伝導測定の前例が無かったため、手探りで実験手法を作り上げる機会に恵まれました。インジウム砒素表面に銀を吸着した系に最初に手を付け、半導体表面での整数量子ホール効果の観測に成功しました。これは半導体へき開面に一様で、かつそこそこ移動度の高い 2 次元電子系が出来ていることを示し、またそれを精度良く測定出来ていることも示すものです。

次いで吸着物質を鉄に変えた系に手を付けました。こちらは鉄が持つスピンの自由度に起因した特異な磁気抵抗効果を期待したもので、当初は量子ホール強磁性を始めとする、磁性半導体で見られているような効果が観測されるのではないかと考えながら研究を進めていましたが、実際に得られたのは磁気抵抗効果の非常に小さな履歴現象でした。この履歴現象が何を意味しているのかを探るために、実験条件を変えて同一試料の抵抗を徹底的に測定していく事で、インジウム砒素表面に吸着した鉄がスピングラスと思われる特異な磁気秩序を作っており、そのスピン状態を表面 2 次元系の抵抗が検知していることを強く示唆するに足る結果を得ました。この研究は未だ磁化測定による検証が必要であり、鉄がどのような機構で磁気秩序を持つに至ったかも未解明です。鉄がインジウム砒素表面上でどう並んでいるかがその理解の入り口になるとされているものの、この研究の様に低温で吸着した場合どうなるかは知られていません。他の遷移金属を吸着した場合はまた別の磁気秩序が期待され、更に遷移金属以外の吸着物質でも興味深い結果が次々に得られつつあり、今後の進展が期待されます。

秋山研究室に着任後は、へき開再成長法を用いて作られる T 型量子細線を始めとした半導体低次元系の物性、その中でも強励起下での励起子ガスから電子正孔プラズマへのクロスオーバーを研究の中心にすることに致しました。着任前後の研究の間には、半導体のへき開面をそのまま試料として使い、そのマクロな平坦性が問われる珍しい実験であるという共通点があります。しかし解明していきたい物理は変わりましたし、電気伝導測定と光学測定では実験の考え方も違い、新鮮な気持ちで研究に臨んでいます。着任前後の異なる分野の研究の経験を共に活かして新たな研究を作り上げて行きたいと考えておりますので、ご指導ご鞭撻の程をよろしくお願い申し上げます。

物性研に着任して

中性子科学研究施設 古府 麻衣子

この度、4月1日付で中性子科学研究施設山室研究室に助教として着任した古府と申します。この場をお借りして、簡単に自己紹介をさせていただきたいと思います。まず、私の名字ですが、「古府(こふ)」と呼びます。私は大阪生まれ、大阪育ちですが、大阪でも非常に珍しい名字で、私の知るところ大阪でも親族しかいません。また、最近知ったのですが、富山県高岡市には「古府」という地名があり「古府小学校」という学校もあるそうです。金沢にも「古府」という地名があるそうですが、読み方は「こぶ」と濁るそうです。私の祖先のルーツは北陸にあるのかもしれませんが。また、名前は「麻衣子(まいこ)」と言います。この名前は日本では珍しくもなんともありませんが、アメリカ人に自己紹介すると、多くのひとは目を丸くします。それは男の子の名前としてポピュラーな「Michael」と発音がほぼ同じであるためです。このように、ひとくせある名前のおかげで、ひとと知り合いになりやすいのですが、何か悪さをすると簡単に特定されてしまうという問題もあります。

大阪の高校を卒業後、どこか違う場所に行ってみたいという考えから、仙台にある東北大学に入学し、大学院へと進学しました。博士課程の2年次からは、指導教官であった廣田和馬先生が物性研に転任されたため、受託学生として物性研で2年間を過ごさせて頂きました。その後、高エネルギー加速器研究機構(KEK)、米国バージニア大学でポストク生活を送りました。ポストクとなってからも、共同研究を通して結晶育成や諸測定のために物性研をたびたび訪れていたため、私にとって物性研は馴染みの深い場所です。学生時代には認識していませんでしたが、いろいろな大学や研究所を訪れるようになってから、物性研の研究設備がいかに充実しているか実感するようになりました。このような設備の整った研究所で研究活動を行えることを非常に嬉しく思っています。

私は、これまで中性子散乱という手法を用いて、無機固体結晶の磁性のダイナミクスに関する研究を行ってきました。具体的には、銅酸化物高温超伝導の磁気励起、量子スピンドイマー系物質の磁気励起と磁場誘起反強磁性磁気秩序、などです。一方、私が配属された山室研究室では、ガラスおよび過冷却液体、水・水溶液、イオン液体などの複雑系のダイナミクスに関する研究を行っており、これらは、これまで私が扱ってきた固体物理分野の物質とはかけ離れたものです。しかしながら、それらの現象には共通点があるのではないかと最近感じています。例えば、イオン液体はミクロスコピックに見ると、イオン部分と有機部分がドメイン構造を作っていると考えられています。一方、これまで私が研究してきた銅酸化物超伝導体ではホールとスピン(電荷)によるストライプ構造の存在が示唆されています。このように、マクロスコピックにはひとつの相である状態がミクロスコピックに見ると不均一である、という不思議な状態が一見全く別の物質で実現しており、非常に興味深いと感じています。また、ガラス転移が生じるメカニズムには局所安定構造と結晶的長距離安定構造のフラストレーションが関係すると考えられています。これらはスピン系のフラストレーションと類似していると思います。山室研究室で行っている研究は私にとって新しい分野ですが、何らかの共通点を見つけ楽しみながら研究を行っていきたいと思います。これまでの知見を生かして、ちょっと切り口の新しい研究が行えればと考えています。今までの自分を振り返ると、「現実的でない」「無理がある」と切り捨ててきた事が少なくなかったように思います。実現性を考える事は実験家にとって必要であると思いますが、何か新しいことを行うためには自分の中にある呪縛を解き放ちチャレンジングに向かって行くことも必要だと感じています。

基本的には私は茨城県東海村に常駐していますが、中性子のビームがシャットダウンしている間などには、柏でも研究活動を行おうと考えています。物性研でお会いした際には、宜しくお願い致します。最後に余談ですが、私は大阪出身であるにも関わらず、通常は関西弁が出ません。ただ、幾つかの性質は大阪人であることを示しているようで、派手な色の服が好きだったり、お好み焼き・たこ焼きを焼くのが得意だったりします。お好み焼き等を食べたいときには、一声かけてくだされば、馳せ参じる・・・かもしれません。生地を寝かす必要があるため、できれば前日までにご連絡いただければと思います。

物性研を離れて

琉球大学理学部物質地球科学科 准教授 阿曾 尚文

(元東京大学物性研究所附属中性子科学研究施設 吉澤研究室 助教)

物性研を離れてはや 9 ヶ月となり、徐々に沖縄での生活にも慣れてきたように思います。先日はやばやと梅雨明けし、夏モード全開です。日中は強い日差しのため暑く感じますが日陰に入ると意外と涼しく、熱帯夜でも窓を開けると風があり、クーラーなしでも寝ることができます。また、強い太陽光線のため花の色も一段と鮮やかに感じられ、琉球大学の一見ジャングルかと思われる木々の緑もこれまた鮮やかです。雪を見ない冬を初めて過ごし、と言うより「冬のない冬」であって、心の中の 10 分の 1 位は旅行者気分がまだ残っているという贅沢な時間を過ごしています。

さて、私が物性研中性子に着任したのは 1999 年 4 月の事で六本木最後の年でした。この間 2008 年 9 月まで 9 年半もの長い間お世話になり、たくさんの方々と共同研究をする機会に恵まれたこととなります。ご存知のように茨城県東海村が勤務地である中性子の助手の身には六本木はあまり縁が無くほとんど出張しませんでした。2000 年になりますと柏移転後の整備や装置の立ち上げ等でかなりの頻度で東海と柏を往復したように思います。その後柏出張の頻度は減り、同世代の柏の助手（所教）の皆さんとの繋がりをもっと強固にしておけばよかったなどの反省があります。今振り返ると 2003 年 1 月に東海村で装置見学会を兼ねた 1 泊 2 日の助手会を開いたことが懐かしい思い出になっています。

私は 9 年半の物性研時代の中で 4 人の所員の先生に所属し、多方面な研究と様々な経験をさせて頂きました。代表的なもので加倉井先生とは $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ 、藤井先生とは NaV_2O_5 、廣田先生とは UGe_2 を、最後の吉澤先生とは CeRhIn_5 と CeRhSi_3 の中性子散乱研究を行い、年数を経るにつれ研究のアクティビティーが確実にあがってきたと実感しております。詳述しませんが、IMT から IRT 制度への転換の所産であります。後半の磁性と超伝導との研究では圧力の技術を修得でき、上床研究室の皆さんには大変お世話になりました。また、共同利用施設としての業務も十分にやると自己分析しております。装置関連で私が担当したのは希釈冷凍機の低温装置と装置責任者であった冷中性子三軸分光器 HER でした。前者で一番大きな成果は、榊原研究室との共同研究であった PrPb_3 の不整合反強四極子の観測であったと思います。後者においては、1 年 175 日間の原子炉運転中、装置のトラブルで分光器 HER が使用できないことはほとんどありませんでした。また、HER では強度が 10 倍以上となる集光アナライザーを新規に導入したり、分光器の非磁性化を行ったりと、原子炉停止期間でも装置開発を行う機会に恵まれ、多忙ではありましたが、装置作り・メンテナンスの勘所のようなものが培われたと思っています。また、藤井先生を中心に 2001 年に創立した「中性子科学会」の初代会計幹事の大役や 2003 年の年会の仕事を仰せつかり、かなりの時間と労力をつぎ込みました。当時は慣れず（本当は渋々）仕事をしましたが、最近各方面からワークショップや会議を沖縄でとの引き合いがあり、これらの経験も無駄ではなかったのだろうと思返すことができます。

さて、琉球大学では物理系のスタッフ 18 名の一人として研究および教育を行っています。文頭の挨拶では明るい話題を述べましたが、現状は地方の一国立大学で予算も人もないところでの新研究室の立ち上げを行っている状況です。ようやく 4 月に新 4 年生が 2 名研究室に入ってきて、部屋を掃除するところから始めてまだまだ研究できる環境にはありません。琉球大学には小型ながらヘリウム液化機もありますので、何とか希釈冷凍機による極低温での物性測定環境を整えたいと考えております。近くには、上床研究室の助手であった辺土正人氏等もおり、物理系の実験系スタッフと協力して、琉球大学として何か発信できるような研究をしたいとの思いを秘めております。

最後にお世話になったたくさんの方々にお礼を申し上げなければなりません。特に吉澤英樹先生、上床美也先生にはこの場を借りて厚くお礼を申し上げます。今後も、東海だけでなく柏においても研究会、共同利用等でお世話になることがあると思います。よろしくご指導ご鞭撻の程お願い致します。

物性研を離れて

熊本大学大学院自然科学研究科 准教授 松田 真生
(元東京大学物性研究所新物質科学研究部門 田島研究室 助教)

物性研究所を離れ 4 ヶ月が経ち、「物性研だより」に執筆する機会を戴きました。まず、在職中にたくさんの先生と職員の方々から頂きました、多大なるご指導とご支援に深くお礼申し上げます。

私が初めて物性研究所のお世話になったのは、まだ研究所が六本木キャンパスにあった頃でした。当時から、低分子からなる導電性・磁性物質の開発を行っており、その中で見いだされたジシアノ鉄フタロシアニンについて磁性・光学特性に関する実験を行う機会を頂けたのです。産まれてこのかた、ほとんど北海道を出たことのない私にとって、初めての他機関・研究施設に一人で数週間滞在するという経験は大変刺激的なものでした（決して六本木の街が刺激的だったと言うわけではありません）。スタッフはもちろん学生の方も含め、皆さんの表情からは「プロの研究者」という風格と誇りのようなものが溢れ出ており、外の喧噪からは考えられないほど研究に集中できる素晴らしい所だと思ったものです。学生時代に共同利用で滞在させて頂いた数週間の経験は、今でも忘れることのできない大変貴重なものでした。

そして、それから数年後、物性研究所が柏キャンパスに移転した翌年、幸いなことに PD として物性研究所で仕事をすることを戴きました。新しいキャンパスにはまだ建物もほとんどなく、宇宙線研究所も新領域基盤棟も現在の半分の大きさで、基盤棟の向こうは生命棟まで何もない非常にスッキリとした風景でした。一步研究所を出ると冬の晴れた日には富士山がはっきりと見え、また、野生動物も多く生息し、キジが悠然と歩いているキャンパスは、そこが首都圏であることすら忘れさせる、六本木とは別の意味で刺激的な環境だったと言えるでしょう。

その後、助手(助教)として約 5 年間、PD とあわせておよそ 8 年間物性研究所に所属させて頂きましたが、その間にキャンパスとその周辺の環境は劇的に変化しました。キャンパス内では新領域創成科学研究科の移転完了に伴い、若い学生さん達の活気あふれる雰囲気が変わり、立派な図書館に食堂も充実しています。また、キャンパス周辺ではつくばエクスプレスの開通と、大型のショッピングセンターをはじめとする多くの商業施設に加え高層マンションも建築され、窓から見える景色は日々急速に変化し、「国際キャンパス構想」に基づいた居(医)・食・住の充実により研究の捗る環境が整えられました。

私自身にとって物性研究所での 8 年間は、公私にわたりたくさんの思い出の詰まった時間です。上述の分子結晶の研究に関しては、所内の多くの所員・助教の先生達と共同でお仕事をさせて頂き、その成果のみならずご指導いただいたこと全てが大きな財産となっています。同時に、分子性物質(分子集合体)のもつ性質を研究する上で、薄膜を対象にすることを掲げた田島先生の挑戦とご一緒させて頂けたことは、他では得られ難い経験をする事ができたと言えます。この際にも、他研究室の所員・スタッフ・学生の方々から様々なことを教えて頂きました。こうした貴重な経験ができる様に、常にさりげなく私を導いて下さっていた田島先生には感謝の念が絶えません。同時に、研究所の皆様とは研究以外のところでも多くの楽しい時間を過ごさせて頂きました。新物質科学研究部門の皆様との楽しい飲み会はもちろん、新 M1 の学生さん達を中心となって運営してくれる所内恒例のビアパーティは年々盛り上がりを増し、ソフトボール大会やボウリング大会、やったこともないのに無謀にも参加したテニス大会、他の研究室の方々で行ったスキー旅行もとても楽しい思い出です。

さて、現在私は、熊本大学にて教育と研究に携わる機会を頂きました。久しぶりの「学部」の雰囲気は、研究所とは幾分違った刺激にあふれており、毎日の生活は非常に楽しく感じられます。故郷北海道からどんどん離れ、九州に住んでいることが不思議に感じることもあります。熊本は水も空気も食べ物も(お酒も?)とても美味しい良いところです。是非、熊本にお越しの機会がありましたらお立ち寄りください。早速、今秋は物理学会が熊本大学にて開催されますので、皆様にお会いできることを心よりお待ちしております。

最後に、物性研究所にてお世話になった皆様に、この場を借りて再度お礼申し上げます。また、今後も共同利用などで物性研究所の教職員の方々にはお世話になることが多々あると思いますが、どうぞ変わらぬご指導の程をよろしくお願い致します。

外国人客員所員を経験して

Visiting Professorship at the Institute for Solid State Physics, University of Tokyo

Mike Zhitomirsky

CEA, INAC, Service de Physique Statistique, Magnétisme et Supraconductivité,

17 avenue des Martyrs, F-38054 Grenoble, France

mike.zhitomirsky@cea.fr

I had a pleasure of being a visiting professor at the ISSP of The University of Tokyo during two months in the beginning of 2009. That was not my first visit to the ISSP and Japan. Fifteen years ago I spent two memorable years as a postdoc with Professor Kazuo Ueda at the nice old campus of ISSP in Roppongi area. Those years brought me a wonderful cultural experience and a lot of friends. That time was also fruitful in another aspect: during my second postdoc year I published 10 research articles, the kind of personal record I have not been able to repeat so far. I find, therefore, very useful to come from time to time to the ISSP in the search for new inspiration, problems, and friends.

This time I was a guest of Professor Hirokazu Tsunetsugu and his group. We have been fruitfully collaborating with Hirokazu Tsunetsugu over the past five years. My present visit gave us an opportunity to deepen our collaboration and to discuss more complicated and interesting problems in the Condensed Matter Physics. I hope that the results of our joint work will be published soon in scientific journals. Let me only mention here that we focused in our research on theoretical study of unusual magnetic materials with spin-tensor order parameters. The topic has recently attracted a lot of attention thanks to interesting experiments performed in Japan, in particular by Prof. Satoru Nakatsuji from ISSP.

From my first days in Kashiwa I was immersed into a friendly and nice atmosphere of Tsunetsugu's group. I want to emphasize here especially the everyday help and hospitality I received from Mrs. Mayumi Matsushita, group secretary, and from Dr. Kazumasa Hattori. If allowed, I would like to compare Hattori-san with the character played by Harvey Keitel in the motion picture "Pulp Fiction," who said: "... I solve problems." I can assure you that there were many problems: with computers, printers, presentations, bicycles and so on, which Hattori-san was solving for me with extreme efficiency and speed. I also want to mention generosity of Prof. Masaki Oshikawa, who helped to arrange a proper size bicycle for me, good sense of humor of Prof. Zenji Hiroi, who were making jokes each time we were meeting in the corridors, and deep scientific insights I received from Prof. Masashi Takigawa, who explained to me the essence of NMR technique. Last but not least Mrs. Akiko Kameda and Mrs. Mihoko Kubo, the staff of the International Liaison Office, helped me with administrative aspects of my stay. Thanks to all these people and many others, whose names I apologize for not mentioning here, my stay was enjoyable and productive from both scientific and social points of view.

I believe that most of the foreign visitors praise excellent working conditions at the ISSP. I want to join their chorus by mentioning a nice Library and a small but cute fitness room. The Library has a good collection of specialized and general interest scientific literature as well as English-speaking newspapers. Its extended opening hours are especially useful for guests from the opposite side of the Globe, who may want sometime to read at unexpected moments of the day or night. Creation of the fitness room was a very good idea on the part of the Institute's administration. Still I recollect a small summer swimming pool on the old campus, the facility which might be not so difficult to build again in cooperation with other Institutes at the Kashiwa campus.

To finish I had wonderful and very useful time. I will be always remembering a modest beauty of the Kashiwa-no-ha park, lively streets of Tokyo, blossoming of plum trees on Tsukuba mountain. I told these and other stories to my wife and son and hope to bring them sometime in future to Kashiwa.

22 June, 2009
Grenoble

物性研究所国際ワークショップ・短期研究会

“Supercomputing in Solid State Physics 2009” (物性物理学における大規模計算2009)

日時：2009年2月16日(月)～2009年2月19日(木)

場所：東京大学物性研究所本館6F大講義室

提案者：川島 直輝 (東大物性研)
野口 博司 (東大物性研)
杉野 修 (東大物性研)
鈴木 隆史 (東大物性研)
富田 裕介 (東大物性研)
吉本 芳英 (東大物性研)
常行 真司 (東大 理)

標記の国際研究会を2009年2月16日(月)から2月19日(木)の4日間に渡って開催した。物性研究所は1995年から全国共同利用スーパーコンピュータの運用を行っているが、これによって上がった成果について、年に1度、短期研究会として利用報告会を兼ねた研究会を開催している。この会合は小規模ながら、物性研スパコンのヘビーユーザを中心に国内研究者が招待され、実質的に日本の計算物性物理学の主な担い手が集う機会となっている。2008年度末は2005年春に更新された現システムにとって運用4年の終了にあたり、現有システムによって得られる成果が最も充実している時期にあたる。この機会に、通例国内会議として開催される研究会を拡大し、国際的に活躍顕著な研究者を海外からも招き、国際ワークショップとして開催したのが標記の研究会である。この研究会では、物性研究所スパコン共同利用の成果を中心に現在の計算物性物理学における技術的な重要課題、および物性物理学上の中心的課題を概観し、この分野のブレイクスルーにつなげることが目的であった。話題は、拡張アンサンブル法、ダイアグラム展開モンテカルロ法、テンソル積変分法などの新しい方法論の発展とそのフラストレート系・量子系への適用、第一原理電子状態計算と量子モンテカルロ法の組み合わせ、水溶液中での金属表面反応の第一原理計算、ソフトマター、光格子中の冷却原子系、計算宇宙論など多岐にわたるものであった。海外からの12名を含む合計40名の講演者を招待し、このほかポスター講演は46件であった。最終日を除いて連日85名程度の出席者があり、述べ参加者数は311名(うち外国人49名)であった。

主な講演だけを紹介してもかなりの分量になるが、あえていくつかをあげてみる。W. J. Briels 教授(Twente U.)はソフトマターのような複雑系のシミュレーションにおいてどのように最小限必要な自由度に限定した疎視化モデルを構成するかについて論じた。Marcus Muller 教授(Geor-August U.)はブロックコポリマーの構造形成の数値シミュレーションを紹介された。吉田直紀博士(数物連携機構)は宇宙の形成過程に関する最近の大規模計算について講演し、密度分布に見られるスケーリング則など興味深い結果について紹介された。D. P. Landau 教授(U. Georgia)は、単純ではあるが未解明の問題の多い、格子変形とカップルしたイジングモデルについて、従来の予想とは異なるドメイン成長則を示唆する計算結果を紹介した。Matthias Scheffler 教授(MPI, Berlin)は触媒反応における律速段階に対する第一原理計算からのアプローチの精度を高める手法について論じた。また、M. Troyer 教授(ETH)は、強相関電子系研究において、平均場近似に虚数時間方向の揺らぎを取り入れることで、近年大きな成功を収めている動的平均場近似について、計算に必要な量子力学的不純物問題の数値ソルバの開発について紹介した。S. Trebst 博士(UCSB)は、相互作用する非可換 anyon 系を考察し、とくに、1次元フィボナッチ鎖上で定義された anyon 系にみられる集団励起状態がどのような新奇な物性をもたらしかを解説した。今田教授(東大工)は第一原理計算によって高いエネルギースケールを扱い、その結果を低いエネルギースケールをあつかう強相関電子系の手法によって解析する down-folding によって、定量的な物性予測を行う試

みについて解説した。この他の講演についても、アブストラクト集が以下の URL からダウンロード可能であるので参照されたい。

URL: <http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/public/scissp/>

また、期間中の 17 日(火)に次世代スパコンに対する計算物性科学コミュニティの取り組みに関する議論を行うためのセッションも設けられ、計算物性科学連絡会幹事会を中心に進められている分野別中核機関に対する提案取りまとめ作業などについて紹介された。

本ワークショップの開催にあたっては、理論系研究室の秘書、学生、PD、助教、国際交流室スタッフの皆さん、経理課、共同利用係、総務係をはじめとする事務部スタッフの皆さんに大変お世話になりました。感謝いたします。また、この研究会は物性研だけでなく、GCOE「未来を拓く物理学結集教育研究拠点」からも資金的な援助を頂きました。

プログラム

Feb. 16 (Mon)

- 10:00-12:10 Morning Session
- 10:00-10:10 Opening address
- 10:10-10:50 W. J. Briels (*Twente*)
Coarse grain simulations of soft matter
- 10:50-11:20 T. Deguchi (*Ochanomizu*)
Universality in the diffusion of knotted ring polymers in solution via Brownian dynamics
- 11:20-11:50 N. Ito (*Tokyo*)
Statistical Physics with Exaflops Computer
- 11:50-12:10 K. Michielsen (*EMBD Belgium*)
Simulation of three-dimensional photonic nanostructures on the IBM BlueGene/P
- 13:30-19:00 Afternoon Session
- 13:30-14:10 M. Muller (*Göttingen*)
Structure formation in diblock copolymer materials
- 14:10-14:30 S. Yasuda (*Kyoto*)
Hybrid simulation of MD and CFD for the behaviours of a supercooled polymer melt between two parallel plates
- 14:30-14:50 H. Noguchi (*ISSP*)
Deformation of red blood cells and vesicles in flows
- 14:50-15:20 coffee break
- 15:20-16:00 N. Yoshida (*IPMU*)
Supercomputing in Cosmology
- 16:00-16:30 S. Takada (*Kyoto*)
Multiscale simulations for biomolecular systems
- 16:30-16:50 S. Watanabe (*Tokyo*)
The nature of the quantum critical point of the first-order valence transition
- 16:50-19:00 poster I (Odd number)

Feb. 17 (Tue)

- 9:00-12:10 Morning Session
- 9:00- 9:40 D. P. Landau (*Georgia*)
Monte Carlo simulations of the compressible Ising model
- 9:40-10:10 K. Hukushima (*Tokyo*)
Phase transition in random graph coloring problems
- 10:10-10:30 coffee break
- 10:30-11:10 U. H. E. Hansmann (*Michigan Tech*)
Computer Experiments of Folding and Interaction
- 11:10-11:30 A. Ishii (*Tottori*)
Computational study for growth of GaN on graphite as 3D growth on 2D material
- 11:30-11:50 T. Kotani (*Tottori*)
Re-examination of half-metallic ferromagnetism for doped LaMnO₃ in quasiparticle self-consistent *GW* method
- 11:50-12:10 T. Sakai (*JAEA/SPring-8*)
Quantum Phase Transitions in the Spin Nanotube
- 13:30-16:50 Afternoon Session
- 13:30-14:00 T. Tohyama (*Kyoto*)
Dynamical DMRG study of one-dimensional Hubbard-Holstein model
- 14:00-14:30 M. Imada (*Tokyo*)
Electronic Structure Calculation of Real Strongly Correlated Materials
- 14:30-15:00 A. Koga (*Kyoto*)
Supersolid state in fermionic optical lattice systems
- 15:00-15:20 coffee break
- 15:20-16:00 M. Scheffler (*FHI-Berlin*)
Improving the efficiency and accuracy of ab initio statistical mechanics by “degree of rate control” analysis
- 16:00-16:30 Y. Morikawa (*Osaka*)
First-principles molecular dynamics simulations of chemical reactions at electrode surfaces
- 16:30-16:50 T. Oguchi (*Hiroshima*)
First-principles calculation for light-element hydrogen-storage materials
- 17:00-18:00 Open Discussion on 10 Peta Flops Supercomputer
- 18:10-20:00 banquet

Feb. 18 (Wed)

- 9:00-12:10 Morning Session
- 9:00- 9:40 M. Troyer (*ETH*)
Continuous time QMC solvers for quantum impurity problems
- 9:40-10:10 S. Todo (*Tokyo*)
Low-energy Properties of Frustrated Ising Magnets with Competing Exchange and Dipole Interactions
- 10:10-10:30 coffee break
- 10:30-11:10 J. Ihm (*Seoul*)
Hydrogen-metal interaction on the carbon-based matrix in hydrogen storage systems

- 11:10-11:40 S. Trebst (*Santa Barbara*)
Interacting anyons in topological quantum liquids: Things golden
- 11:40-12:10 H. de Raedt (*Groningen*)
Quantum Spin Dynamics on the IBM BlueGene/P
- 13:30-19:00 Afternoon Session
- 13:30-14:00 Nic Shannon (*U. Bristol*)
First numerical evidence for a U(1) liquid phase in a 3D quantum dimer model
- 14:00-14:20 N. Kawashima (*ISSP*)
Simulation of Boson Systems
- 14:20-14:25 M. Troyer (*ETH*)
Validating a quantum simulator: do ultra-cold atomic gases live up to their promise?
- 14:25-14:45 K. Harada (*Kyoto*)
Quantum Monte Carlo simulations of quantum $S = 1$ spin models with bi-quadratic interactions
- 14:45-15:05 S. Miyashita (*Tokyo*)
Dynamical properties of spin-crossover phase transition
- 15:05-15:30 coffee break
- 15:30-16:10 Z. Fang (*Beijin*)
Anomalous Hall, Spin Hall, and Topological Insulators Studied from First-principles Calculations
- 16:10-16:30 T. Oda (*Kanazawa*)
Magnetic anisotropy and its finite electric field effect in the nanostructures of Fe-Pt system
- 16:30-16:50 K. Fuchizaki (*Ehime*)
The generalized Ewald method in action
- 16:50-19:00 poster II (Even number)

Feb. 19 (Thu)

- 9:00-12:40 Morning Session
- 9:00- 9:40 A. Sandvik (*Boston*)
Valence-bond solid transitions in two-dimensional quantum antiferromagnets
- 9:40-10:10 A. Oshiyama (*Tokyo*)
Real-space density-functional-theory scheme and its application to large systems
- 10:10-10:30 K. Watanabe (*TUS*)
Laser-Driven Molecular Dissociation: Time-Dependent Density Functional Theory and Molecular Dynamics Simulations
- 10:30-10:50 S. Tsuneyuki (*Tokyo*)
Theoretical study of a strain-induced nanostructure at N/Cu(001) surface
- 10:50-11:10 coffee break
- 11:10-11:40 H. Akai (*Osaka*)
Order- N full potential KKR method and its application to layered systems
- 11:40-12:10 Y. Kawazoe (*Tohoku*)
Quality Assurance of the First Principles Calculation
- 12:10-12:30 O. Sugino (*ISSP*)
A first-principles molecular dynamics approach to metal-water interfaces and electrochemical reactions
- 12:30-12:40 Closing

ISSP ワークショップ

東大・KEKパルスチョッパー分光器とそのサイエンス

日時：2009年3月18日(水) 10:00~17:45

場所：東京大学物性研究所本館 6 F 大講義室

提案者：佐藤 卓（東大物性研）

2009年3月18日(水)に物性研究所 A 棟 6 階講義室において ISSP ワークショップ「東大・KEK パルスチョッパー分光器とそのサイエンス」が開催された。現在我が国においては世界最高クラスの核破砕型パルス中性子源 J-PARC/MLF が完成を迎え、これまでにない大強度・高効率での中性子散乱実験が可能になりつつある。この好機に更なる中性子科学のフロンティア開拓を目指すべく、我々物性研究所中性子科学研究施設では高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所と共同で J-PARC/MLF BL12 ビームラインにチョッパー型中性子非弾性散乱分光器の建設を開始した。本ワークショップは、この分光器の設計性能を広くコミュニティーに開示し、さらにそこで期待される新しいサイエンス展開を積極的に議論して頂く事を目的として開催された。

ワークショップでは中性子分光器建設および物質科学の最先端研究者 17 名の講演が行われ、一般参加も含め学内外から 46 名の参加を得た。ワークショップは午前の分光器目標性能の議論から始まり、午後には広い分野における本分光器の活躍の可能性が活発に議論された。物質科学全般（ガラス・液体等から超伝導・磁性等にいたる非常に広い研究分野）において、比較的若手の講演者による未解決課題の説明およびその中性子散乱によるアプローチの紹介があり、さらにはそれらに対する参加者からのコメントや提案が積極的になされた。このような議論から本分光器で最初にチャレンジすべき課題がクリアになったことは本ワークショップの大きな成果である。

プログラム

午前：計画概要と装置の詳細

- 10:00 はじめに-東大 KEK パルスチョッパー分光器計画と原子炉中性子-
東京大学物性研究所 附属中性子科学研究施設 施設長 吉澤 英樹
- 10:15 KEK 側の J-PARC 分光器計画と東大との合同建設について
高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 副所長 池田 進
- 10:30 物性研究所非弾性散乱分光器計画におけるサイエンスと合同計画
東京大学物性研究所 附属中性子科学研究施設 佐藤 卓
- 10:50 J-PARC 非弾性散乱装置の紹介 -AMATERAS を中心に-
J-PARC センター 中島 健次
- 11:10 J-PARC 非弾性散乱装置の紹介 -四季-
J-PARC センター 梶本 亮一

- 11:30 高分解能チョッパー分光器計画におけるサイエンス
高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 伊藤 晋一
- 11:50 高分解能チョッパー分光器の建設状況
高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 横尾 哲也
- 12:10-13:15 昼食
- 午後：合同計画で期待されるサイエンス
- 13:15 ガラス、液体、束縛空間のサイエンス
東京大学物性研究所 附属中性子科学研究施設 山室 修
- 13:40 高分解能チョッパー分光器を使う分子分光
北海道大学工学研究科 加美山 隆
- 14:05 高対称強相関 f 電子系の高次多極子ダイナミクス
茨城大学理工学研究科 桑原 慶太郎
- 14:30 遷移金属酸化物の軌道秩序相における励起
東北大学理学研究科 岩佐 和晃
- 14:55 キュービックアンビル圧力装置を用いた高压下中性子回折
東京大学物性研究所 上床 美也
- 15:20 coffee break
- 15:30 中性子非弾性散乱における電荷励起成分について -理論的考察-
山形大学理学部 富田 憲一
- 15:55 磁性半導体における中性子非弾性散乱の可能性
筑波大学物質系 黒田 眞司
- 16:20 遍歴電子系の新物質開発と中性子非弾性散乱
東京大学物性研究所 大串 研也
- 16:45 低次元フラストレート系と中性子散乱
京都大学理学研究科 陰山 洋
- 17:10 J-PARC 中性子スペクトロスコープ研究に期待する事
国際高等研究所 遠藤 康夫
- 17:35 まとめ
高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 所長 下村 理
- 17:40 まとめ
東京大学物性研究所 所長 家 泰弘

物性研究所談話会

日時：2009年5月28日(木) 午後4時～

場所：物性研究所本館6階 大講義室(A632)

講師：小林 洋平

所属：物性研究所 先端分光研究部門

題目：次世代レーザーテクノロジーと光科学

要旨：

レーザーは理化学実験に広く用いられているのは周知のとおりであるが、レーザーテクノロジーにおいて約10年前に大きな進歩があったのはあまり知られていない。それまでは、スペクトル純度の高い光（狭帯域レーザー）の追及とパルス幅の短い光（広帯域レーザー）とは対極の技術として別個に発展してきた。応用分野もそれぞれ違う方向を向いていた（例えばレーザー冷却と超高速物理現象など）。2000年にそれぞれの良いところ取りをした融合テクノロジーが登場し、時間、周波数それぞれの分野で大きな変革をもたらした。この技術を端的に表すと、光位相制御と光周波数コムとなる。これからまもなく時間領域ではアト秒パルスが発生し、周波数領域では光原子時計が登場した。講演ではこのテクノロジーを紹介するとともに、これからの光科学への波及効果について未来予想図を述べる。

日時：2009年5月28日(木) 午後4時～

場所：物性研究所本館6階 大講義室 (A632)

講師：松田 康弘

所属：物性研究所 国際超強磁場科学研究施設

題目：強磁場電子状態をスペクトロスコープで探る - ラジオ波から硬X線まで

要旨：

磁場は電子の軌道運動やスピンを介して物性を変化させ、特に強い磁場の下では顕著な量子現象がしばしば観測される。このとき、電子状態を理解するには、分光学的手法（スペクトロスコープ）が有用な研究手段の1つである。前半では、100テスラを超える破壊型パルス超強磁場を用いて過去に行った、磁性半導体 InMnAs のサイクロトロン共鳴など、いくつかの研究例を簡単に紹介し、今後の超強磁場研究の展開・可能性について述べる。また後半では、最近 SPring-8 で行っているユーロピウム磁性体の価数揺動現象の研究を中心に、50テスラ非破壊型ミニマグネットを用いた強磁場X線内殻分光の研究成果について紹介する。価数選別した X 線磁気円二色性スペクトルが、伝導電子と f 電子の混成の強さをみる良い微視的プローブである可能性について議論する。

日時：2009年7月2日(木) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 大講義室 (A632)

講師：Frederic Mila

所属：EPFL/物性研究所

題目：Spin liquids and exotic phases of Mott insulators (モット絶縁体におけるスピン液体とエキゾチックな量子相)

要旨：

The proposal that doping a spin liquid might lead to superconductivity has been one of the main motivations to explore exotic phases of Mott insulators.

In this talk, I will discuss some of the recent successes in the identification of such phases, with emphasis on the properties of two systems in strong magnetic field.

First, I will review the properties of $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$, a system that exhibits a remarkable series of magnetization plateaux on the way to polarization, and I will discuss the current status of the identification of these phases as high-commensurability Mott-insulating phases of effective hard-core bosons.

Then I will turn to $\text{BaCuSi}_2\text{O}_6$, a compound also known as *Han purple*, and I will show that frustration leads to a dimensional reduction where every second layer constitutes a highly unconventional 2D gas of hard-core bosons.

物性研究所セミナー

標題：理論インフォーマルセミナー：Microscopic Theory of Electronic Nematic Phase in Ruthenates

日時：2009年4月6日(月) 午後1時30分～午後2時30分

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Hae-Young Kee

所属：Department of Physics, University of Toronto

要旨：

It was proposed that the electronic nematic phase characterized by broken rotational symmetry is responsible for the metamagnetic transitions and anisotropic transport observed in $\text{Sr}_3\text{Ru}_2\text{O}_7$.

In this talk, I will first review recent experimental and theoretical developments on the bilayer ruthenates and the nature of nematic phase. I will then present a microscopic mechanism of the electronic nematic order, and discuss its experimental consequences and other competing orders.

標題：理論インフォーマルセミナー：Mott transition between a spin-liquid insulator and a metal in three dimensions

日時：2009年4月7日(火) 午後1時30分～午後2時30分

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Yong Baek Kim

所属：Department of Physics, University of Toronto

要旨：

We present a theory of continuous Mott metal-insulator transition between a Fermi liquid metal and a quantum spin liquid insulator in three dimensions. Various thermodynamic and transport properties near the quantum critical point are studied. We discuss applications to the physics of three dimensional spin liquid insulator $\text{Na}_4\text{Ir}_3\text{O}_8$ which exhibits a pressure-tuned transition into a metallic state.

標題：理論インフォーマルセミナー：Ultracold atomic Fermi gases from the Bethe ansatz perspective: phase transitions and Luttinger liquid signature

日時：2009年4月10日(金) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Xi-Wen Guan

所属：Theoretical Physics, Research School of Physical Sciences and Engineering, Australian National University

要旨：

The Bethe Ansatz is an important tool in low-dimensional quantum many-body physics. Exact results for solvable models with δ -function interactions are highly desirable in understanding strong correlation effects, molecular superfluids and phase transitions in 1D interacting ultracold atomic fermions with multiple hyperfine states. In first talk, we discuss in detail analytical results for the ground state energy, magnetic critical fields, phase diagrams and thermodynamics of spin-1/2 ultracold atomic fermions throughout the whole interaction regime. The signature of paired states and the universality class of quantum phase transitions, finite-size corrections and finite temperature corrections to the free energy are investigated.

We also discuss the nature of paired states, trions, and quantum phase transitions in 1D attractive atomic fermions with three hyperfine levels. We find that a smooth phase transition from a trionic phase into a pairing phase occurs as the highest hyperfine level separates from the two lower energy levels. In contrast, there is a smooth phase transition from the trionic phase into a normal Fermi liquid as the lowest level separates from the two higher levels.

標題：理論インフォーマルセミナー：First numerical evidence for a U(1) liquid phase in a 3D quantum dimer model

日時：2009年4月15日(水) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Nic Shannon

所属：University of Bristol / University of Tokyo

要旨：

Recently, it has been suggested that in the quantum dimer model on a bipartite lattice in 3D, a U(1) liquid extends for a finite range of parameters bordering the quantum-critical "Rokhsar-Kivelson" (RK) point [1,2]. Such a quantum liquid phase would have extremely interesting properties, including a new form of effective electromagnetism, and deconfined fractional excitations.

Here we present the results of an extensive numerical study of the quantum dimer model on a diamond lattice, using variational and Green's function Monte Carlo simulation techniques. Our results confirm explicitly the existence of the three phases conjectured for this model --- a 16-sublattice ordered "R state" with cubic symmetry, a set of isolated states and, separating them, a U(1) liquid phase terminating at the RK point. Notably, in the liquid phase, we are able to reproduce the finite size energy spectra predicted by the corresponding U(1) gauge theory.

References:

[1] R. Moessner and S.L. Sondhi, Phys. Rev. B 68, 184512 (2003).

[2] D.L. Bergman, G.A. Fiete, and L. Balents, Phys. Rev. B 73, 134402 (2006).

標題：理論セミナー：超伝導体のトポロジカルな性質について

日時：2009年4月17日(金) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：佐藤 昌利

所属：東京大学 物性研究所

要旨：

超伝導体のトポロジカルな性質について議論する。 整数量子ホール状態では、バルクで定義されるトポロジカル数とエッジに作られるギャップレスモードの間に密接な関係がある。本講演では、整数量子ホール状態と超伝導状態のアナロジーを基にして、ゼロエネルギーアンドレーフ束縛状態をギャップレスエッジ状態の一種としてそのトポロジカルな性質を議論する。

まず、バルクで定義されるトポロジカル数をつかい、アンドレーフ束縛状態の存在条件を導いたのち、 Z_2 トポロジカル数と呼ばれる最近導入された新しいトポロジカル数を使い、常伝導状態のフェルミ面のトポロジーとゼロエネルギーアンドレーフ束縛状態の関係を議論する[1]。また、(時間があれば)、空間反転対称性の破れた超伝導体のトポロジカルな性質についても報告したい[2,3]。

[1] M.Sato, arXiv:0806.0426

[2] M.Sato, Phys. Rev. B73, 214502 (2006)

[3] M.Sato and S. Fujimoto, Phys. Rev. B79, 094504 (2009)

標題：理論インフォーマルセミナー：Controlled quantum coherence in scalable superconducting structures

日時：2009年4月20日(月) 午後1時30分～午後2時30分

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Alexandre Zagoskin

所属：Department of Physics, Loughborough University

要旨：

Behind the hype of nanotechnologies and quantum computing, there is a very real and very solid progress in our understanding of quantum physics of small artificial devices, and our ability to design, fabricate and manipulate them in a quantum regime. In particular, this applies to the structures based on superconducting qubits, where coherent superpositions of macroscopically distinct states (which involve up to 10^5 - 10^6 single-particle states per qubit, like in flux qubits) are realized. The research in this field, not limited to quantum computing, will bring us both the true understanding of the quantum-classical transition and the ability to control and use it.

標題：三角格子磁性金属 PdCrO_2 のフラストレート磁性と異常 Hall 効果

日時：2009年4月20日(月) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第2セミナー室 (A612)

講師：高津 浩

所属：京都大学理学研究科

要旨：

幾何学的にフラストレートした磁性体では、結晶構造の幾何学的特徴のために、局所的なスピンの安定配置が系全体では同時に実現できない。このためスピンの熱的な揺らぎが抑えられる低温領域において様々な特異現象が期待される。特にフラストレートした局在スピンを持つ導電体においては、従来のスピン-軌道相互作用に基づく異常 Hall 効果に加えて、「スピンの幾何学性」に起因する新奇な異常 Hall 効果の発現の可能性が議論され、注目を集めている。私達は、フラストレート格子の中で最も基本的といえる「二次元三角格子」が、フラストレート・スピンと伝導電子の相互作用を研究するうえで最もシンプルな舞台と考え、三角格子磁性体の中でも珍しく電気伝導性を持つ PdCrO_2 に着目して研究を進めてきた。 PdCrO_2 は、磁性を担う Cr^{3+} ($S=3/2$) の三角格子と導電性を担う Pd^{1+} の三角格子が交互に積層した結晶構造を持ち、 $T_N \sim 38 \text{ K}$ で 120 度構造の反強磁性秩序を起こす連続スピンの系である。最近、私達は約 1 年間にわたる試行錯誤を経て、この物質の単結晶育成に成功した。そして、それらの単結晶を用いて Hall 抵抗や磁化の測定を行った結果、 T_N より十分低温において、Hall 抵抗が従来の異常 Hall 効果では説明できない磁場や磁化に対して非線形な振る舞いを見出した。更に、その非線形性が現れ始める 20K 近傍には、磁化率や比熱の磁気成分にも異常があることも分かった。このことは、磁気秩序相内でのスピン配置の変化に伴う新奇な Hall 効果の出現の可能性を示唆している。発表では、Hall 係数の詳細な磁場・温度依存性に加え、磁化率や磁気抵抗の測定結果についても紹介する。また、 PdCrO_2 の粉末中性子回折や、導電性を持たない同構造のマルチフェロイック磁性体 CuCrO_2 の粉末中性子回折等の結果から考えられる磁気構造をベースに、 PdCrO_2 で観測した異常な Hall 効果について議論を行う。

標題：理論インフォーマルセミナー：High accuracy modelling for surface science

日時：2009年4月24日(金) 午後1時30分～午後2時30分

場所：物性研究所本館6階 第3セミナー室 (A613)

講師：Prof. M. J. Gillan

所属：London Centre for Nanotechnology, University College London, UK

要旨：

Computer modelling is widely used to study surface processes, such as the adsorption and chemical reaction of molecules. This kind of modelling is usually based on electronic-structure techniques, and the technique of density functional theory (DFT) is very widely used. However, the quantitative accuracy of DFT is often not very good. The seminar will describe our recent efforts to achieve greater accuracy, using both quantum Monte Carlo and quantum chemistry techniques. These more accurate methods will be illustrated with recent calculations of the surface formation energy of MgO and LiH, and the adsorption energy of water on graphite.

標題：理論セミナー：d,f 電子系における内因性および外因性ホール効果：軌道自由度の役割

日時：2009年5月8日(金) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：紺谷 浩

所属：名古屋大学、東京大学物性研究所

要旨：

軌道自由度を有する d,f 電子系では、伝導電子が軌道角運動量に由来する一種の Aharonov-Bohm 位相を獲得するため、顕著なスピンホール効果や異常ホール効果が発現することが最近わかってきた。本講演ではブロッホ波動関数の曲率に係する内因性ホール効果と、不純物散乱に由来する外因性ホール効果（スキュー散乱およびサイドジャンプ）の両方を解析し、軌道自由度の重要性を明らかにする。さらにスピン（異常）ホール効果の符号および絶対値と、スピン軌道偏極率との関係を議論する。

標題：理論セミナー：双極子相互作用するボース・アインシュタイン凝縮体

日時：2009年5月15日(金) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：川口 由紀

所属：東京大学 大学院理学系研究科 物理学専攻

要旨：

冷却原子のボース・アインシュタイン凝縮体(BEC)における磁気双極子相互作用の効果について講演する。原子気体 BEC の特徴の一つは、系に特徴的なエネルギーが 0.1nK から 10 μ K の約 5 桁にわたって階層構造になっており、注目したい物理に焦点を絞って研究することが可能であるという点である。磁気双極子相互作用は其中で最も弱い相互作用であるが、近年では Cr 原子や Rb 原子を用いることで双極子相互作用に焦点をあて、異方的長距離相互作用するという新たな性質をもつ凝縮体を研究できるようになってきた。

本講演では、まず、スピン自由度を持った BEC において、非常に弱い磁気双極子相互作用によりスピントクスチャーが形成されることを説明する。トクスチャー形成の起源は強磁性体中の磁区構造形成と同じであるが、BEC の持つスピン・ゲージ対称性のためにトクスチャーに伴って超流動流が出現するという点が新しい[1]。次に、強い双極子相互作用による異方的な BEC の崩壊現象について説明する。我々は Stuttgart 大学の実験グループとの共同研究により、観測された崩壊現象をフィッティングパラメータなく数値的に再現し、長距離相互作用する BEC においても平均場近似が有効であることを初めて示した。さらに、異方的な崩壊に伴って量子渦輪が形成されることがわかった[2]。

[1] Y. Kawaguchi, H. Saito, and M. Ueda, Phys. Rev. Lett. 96, 080405 (2006).

[2] T. Lahaye, et. al., Phys. Rev. Lett. 101, 080401 (2008).

標題：新物質セミナー：Quantum Criticality, Kondo Effect, and Fermi Surfaces

日時：2009年5月19日(火) 午前11時～午後0時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Prof. Qimiao Si

所属：Rice University

要旨：

Quantum criticality describes the collective fluctuations of matter undergoing a continuous phase transition at zero temperature.

In this talk, I will discuss some recent developments on quantum criticality in strongly correlated electron systems, with attention paid to the prototype case of magnetic heavy fermion metals.

Studies in recent years here have illustrated the general notion of quantum criticality beyond the orthodox theory of order-parameter fluctuations. I will discuss the underlying physics of critical destruction of Kondo effect, as it appears in the local quantum criticality. This new class of quantum critical point has important implications on the nature of Fermi surfaces, both across the quantum critical point and inside the proximate phases.

Experimental results relevant to dynamical scaling, multiple energy scales, and Fermi surfaces will be addressed.

標題：理論セミナー：グリーン関数法による励起状態の全電子第一原理計算

日時：2009年5月22日(金) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：野口 良史

所属：東京大学物性研究所

要旨：

密度汎関数理論の枠組みを超え、多体の摂動論に基づいたグリーン関数法は、現実の物質の励起状態を正確にしかも効率よく取り扱うことができる非常に有効な手法である。特に、一電子自己エネルギー演算子 Σ を1粒子グリーン関数 G と無限次までのリング図形によって展開された動的遮蔽クーロン相互作用 W の積で表す GW 近似 (GWA) は、第一イオン化ポテンシャルや電子親和力などに代表される1粒子励起エネルギースペクトルの計算に用いられ、広く成功を収めている[1]。

本研究では2粒子励起過程を取り扱うことのできる新たな第一原理計算手法として、上述の GWA を出発点に選び、電子-電子 (あるいはホール-ホール) 2粒子グリーン関数を評価する $GW+T$ 行列プログラムを開発した。この手法では、 T 行列 (梯子近似) により無限次までの梯子図形に展開された2粒子グリーン関数を評価する。そのため2粒子間の短距離電子相関を正確に取り扱うことが可能であり、2つの電子 (あるいはホール) が生成される2粒子励起過程の終状態を高精度に決定することができる[2]。

本講演では、 $GW+T$ 行列プログラムの応用例としてダブルイオン化エネルギーやオージェスペクトルの計算結果を紹介する。またもう一つの2粒子励起過程の取り扱いとして、最近取り組んでいる電子-ホールの2粒子グリーン関数に対する Bethe-Salpeter 方程式を解くことで励起子の影響を取り入れた光吸収スペクトルの計算についても議論する予定である。

[1] Y. Noguchi, *et. al.*, J. Chem. Phys., 129, 104104 (2008).

[2] Y. Noguchi, *et. al.*, Phys. Rev. B, 77, 035132 (2008).

標題：理論セミナー：ジョセフソン振動数 $2|e|V/h$ の意味とスピン渦に基づく超伝導理論

日時：2009年5月29日(金) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：小泉 裕康

所属：筑波大学 数理物質科学研究科 物性・分子工学専攻

要旨：

本講演では、交流ジョセフソン振動数 $2|e|V/h$ の通常のものとは違う解釈を提案する。すなわち、今までの理論では絶縁層を荷電粒子が通過する時に獲得するアハロノフ・ボーム位相の寄与を考慮しておらず、それを考慮すると、この振動数 $2|e|V/h$ はトンネル粒子の電荷が $2e$ でなく、 e であることを表していると解釈できる。この驚くべき新解釈の帰結として、現在の永久電流生成機構が再考されねばならないと考えられる。

また、本講演では、この新解釈に適合するモデルとして、“スピン渦生成に基づく超伝導理論”を紹介する。そして、この理論を用いて、銅酸化物超伝導体で観測されている“ π -junction”的 SQUID 振動パターンや砂時計型磁気励起スペクトル等の説明を試みる。

標題：理論インフォーマルセミナー：開放型量子ドットにおける非平衡電流：多電子散乱状態の厳密解を用いた解析

日時：2009年6月1日(月) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：西野 晃徳

所属：東京大学生産技術研究所

要旨：

相互作用共鳴準位模型と呼ばれる開放型量子ドットに対して、厳密な多電子散乱状態を構成し、これを用いて、系に有限の電位差を与えたときの電流（非平衡電流）を解析的に計算した[1]。この模型は近年、微細加工技術の発達により、実験的にも大変活発に研究されているメゾスコピック系の一つをモデル化したものである。本研究ではこの系を開放量子系として扱い、ドット付近に電子間相互作用が存在する状況で、多電子散乱状態の厳密解を得た。この散乱状態の注目すべき点は、自由電子平面波として入射される状態から、ドットでの散乱により、多体束縛状態が現れることである。この多電子散乱状態は、厳密解の手法としてよく知られるペーテ仮説法[2,3]では構成できない新しい解である。また、入射される電子は、フェルミ分布で特徴づけられる左右の電子溜において十分熱平衡化されているとして、有限バイアス下での非平衡電流を解析的に計算した。得られた電流電圧特性は、相互作用に関する摂動計算[4,5]、数値計算[6]の結果と定性的に一致した。

[1] A. Nishino, T. Imamura and N. Hatano, Phys. Rev. Lett. 102 (2009) 146803.

[2] V. M. Filyov and P. B. Wiegmann, Phys. Lett. A 76 (1980) 283.

[3] P. Mehta and N. Andrei, Phys. Rev. Lett. 96 (2006) 216802.

[4] B. Doyon, Phys. Rev. Lett. 99 (2007) 076806.

[5] A. Golub, Phys. Rev. B 76 (2007) 193307.

[6] E. Boulat and H. Saleur and P. Schmitteckert, Phys. Rev. Lett. 101 (2008) 140601.

標題：新物質セミナー：Chiral and Quadrupolar Correlation in Quantum Entangled Spin Ice

日時：2009年6月11日(木) 午前11時～午後0時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：小野田 繁樹

所属：理化学研究所 物性理論研究室

要旨：

Nontrivial quantum-mechanical effects in frustrated magnets on the pyrochlore lattice with non-Kramers rare-earth ions are studied theoretically [1]. A new realistic quantum pseudospin-1/2 model is derived microscopically by considering the anisotropic superexchange interaction in the presence of the LS coupling and the trigonal crystal field for the Pr^{3+} ion. It is shown that in the basis of the local ground non-Kramers doublet for the $\langle 111 \rangle$ -Ising moment, the nearest-neighbor interaction becomes ferromagnetic, providing a new source of magnetic frustration and spin-ice like behaviors [2] distinct from the magnetic dipolar interaction. It also includes appreciable pseudospin nonconserving terms associated with quadrupole-quadrupole interaction. Then, the doubly degenerate scalar-chiral and/or quadrupolar states mainly comprised of spin-ice configurations become the ground states of the tetrahedral cluster. Exact diagonalization study of the cube containing the 16 sites has revealed a step-like feature in the magnetization curve along the $\langle 111 \rangle$ direction in agreement with experiments in $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ [3], as well as quadrupole correlation coupled to the lattice distortion. The possible relevance to $\text{Pr}_2\text{Sn}_2\text{O}_7$ [4] and $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ [3] is discussed.

REFERENCES

[1] S. Onoda and Y. Tanaka, unpublished.

[2] S. T. Bramwell and M. J. P. Gingras, Science 294, 1495 (2001).

[3] Y. Machida, S. Nakatsuji, S. Onoda, T. Tayama, and T. Sakakibara, unpublished.

[4] H. D. Zhou et al., Phys. Rev. Lett. 101, 227204 (2008).

標題：理論セミナー：2次元融解転移における不均一性とダイナミクス

日時：2009年6月12日(金) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：芝 隼人

所属：東京大学物性研究所

要旨：

2次元粒子系における融解現象においては、低次元系特有のゆらぎの増大により連続転移(2回の Kosterlitz-Thouless 転移)が起こるという見方が、古くから有力である。本講演では (a) 空間不均一性 (b) 密度場の役割 (c) 動的な性質、などこれまで焦点を当てられてこなかった側面を明らかにする[1]。

具体的には、Hexatic 相と呼ばれる結晶-液体間の中間状態において、構造の長距離臨界ゆらぎが、長距離の密度ゆらぎと結びついた形で観察される。この密度ゆらぎは、低温相である結晶状態での不均一な欠陥励起から連続的かつ散漫に成長してくるものであり、中間状態を初めて予言した Nelson らによる理論の前提とは異なる寄与を含む。またこの臨界ゆらぎの時間発展は遅く、密度場の中間散乱関数の長波長成分に反映される。

結晶相において、粒子の動く領域と動かない領域が長距離にわたり不均一に生ずることも明らかになった(動的不均一性)。これは結晶化が阻害、運動が緩慢化された構造ガラス系と共通の性質である。ガラス系ではその起源は未だ不明であるが、結晶の場合には欠陥領域の拡散運動が起源となっている。

時間が許せば、粒径多分散性を加えることによって実現される多結晶状態の、剪断下でのダイナミクスについての最近の結果も紹介する。

[1] H. Shiba, A. Onuki, and T. Araki, to be published in Europhys. Lett. (preprint arXiv:0808.1453).

標題：新物質セミナー：High field transport and torque magnetometry in Fe arsenides

日時：2009年6月25日(木) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Dr. Luis Balicas

所属：ISSP; National High Magnetic Field Laboratory, U.S.A.

要旨：

Here, we report an overview of the phase diagram of single layered and double layered Fe arsenide superconductors at high magnetic fields [1]. Systematic magnetotransport measurements of polycrystalline $\text{SmFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ at different doping levels confirm the upward curvature of the upper critical magnetic field H_{c2} (T) as a function of temperature T defining the phase boundary between the superconducting and metallic states for crystallites having their ab-plane oriented nearly perpendicular to the magnetic field [1]. We further show from measurements on single crystals that this feature, which was interpreted in terms of the co-existence of two superconducting gaps, seems to be ubiquitous among both series of single and double layered materials [1,2]. In all compounds explored by us the zero temperature upper critical field $H_{c2}(0)$, estimated either through the Ginzburg-Landau or the Werthamer-Helfand-Hohenberg single gap theories, strongly surpasses the weak coupling Pauli paramagnetic limiting field. This clearly suggests the strong coupling nature of the superconducting state and possibly the importance of magnetic correlations for these materials. Our transport measurements indicate that the superconducting anisotropy, as estimated through the ratio of upper critical fields $\gamma_H = H_{c2}^{ab}/H_{c2}^c$ is relatively modest when compared to that of the high- T_c cuprates, but in several cases we found it to be temperature dependent [1,2]. However, we show that a proper description of the angular dependence of the magnetic torque in $\text{SmFeAsO}_{0.8}\text{F}_{0.2}$ and $\text{SmFeAsO}_{0.9}\text{F}_{0.1}$ single crystals requires, i) a proper procedure to subtract the superimposed magnetic signal and ii) the introduction of a term describing the anisotropy in penetration depth γ_λ which we found to be considerably larger than γ_H and strongly temperature dependent [3,4]. Both observations suggest a multi-gap pairing scenario. Finally, our preliminary estimations of the irreversibility field H_m (T), separating the vortex-solid from the vortex-liquid phase in $\text{SmFeAsO}_{0.9}\text{F}_{0.1}$ single crystals from torque magnetometry, indicates that it is well described by the melting

of a vortex lattice in a moderately anisotropic uniaxial superconductor. Although a proper description of the vortex pinning force in the irreversible region requires the inclusion of a term describing superconducting fluctuations which is more common to the cuprates [1,4].

- [1] Y. J. Jo, J. Jaroszynski, A. Yamamoto, A. Gurevich, S. C. Riggs, G. S. Boebinger, D. Larbalestier, H. H. Wen, N. D. Zhigadlo, S. Katrych, Z. Bukowski, J. Karpinski, R. H. Liu, H. Chen, X. H. Chen, L. Balicas, *Physica C* 469, 566 (2009)
- [2] J. Jaroszynski, F. Hunte, L. Balicas, Youn-jung Jo, I. Raičević, A. Gurevich, D. C. Larbalestier, F. F. Balakirev, L. Fang, P. Cheng, Y. Jia, and H. H. Wen, *Phys. Rev. B* 78, 174523 (2008); A. Yamamoto, J. Jaroszynski, C. Tarantini, L. Balicas, J. Jiang, A. Gurevich, D. C. Larbalestier, R. Jin, A. S. Sefat, M. A. McGuire, B. C. Sales, D. K. Christen, and D. Mandrus, *Appl. Phys. Lett.* 94, 062511 (2009)
- [3] L. Balicas, A. Gurevich, Y. J. Jo, J. Jaroszynski, D. C. Larbalestier, R. H. Liu, H. Chen, X. H. Chen, N. D. Zhigadlo, S. Katrych, Z. Bukow, arXiv:0809.4223 (2008)
- [4] L. Balicas et al., (unpublished)

標題：理論インフォーマルセミナー：Thermodynamics of ferromagnetic superconductors with spin-triplet electron pairing

日時：2009年6月30日(火) 午後3時～午後4時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Prof. Dimo I. Uzunov

所属：ISSP, Bulgarian Academy of Sciences

要旨：

We present a general thermodynamic theory that describes phases and phase transitions of ferromagnetic superconductors with spin-triplet electron Cooper pairing. The theory is based on extended Ginzburg-Landau expansion in powers of superconducting and ferromagnetic order parameters. We propose a simple form for the dependence of theory parameters on the pressure that allows correct theoretical outline of the temperature-pressure phase diagram for which at low temperatures a stable phase of coexistence of p-wave superconductivity and itinerant ferromagnetism appears. We demonstrate that the theory is in an agreement with the experimental data for some intermetallic compounds that are experimentally proven to be itinerant ferromagnetic exhibiting spin-triplet superconductivity. Some basic features of quantum phase transitions in such systems are explained and clarified. We propose to group the spin-triplet ferromagnetic superconductors in two different types of thermodynamic behavior, on the basis of quantitative criterion deduced from the present theory and the analysis of experimental data.

人 事 異 動

【研究部門等】

○ 平成 21 年 5 月 1 日付け

(採用)

氏 名	所 属	職 名	異 動 内 容
芝 隼 人	附属物質設計評価施設	助 教	京都大学大学院理学研究科 物理学宇宙物理学専攻博士課程から

○ 平成 21 年 6 月 1 日付け

(採用)

氏 名	所 属	職 名	異 動 内 容
高 橋 竜 太	ナノスケール物性研究部門	助 教	メリーランド大学リサーチアソシエイトから

【事 務 部】

○ 平成 21 年 7 月 1 日付け

(転出)

氏 名	所 属	職 名	異 動 内 容
細 島 靖 久	経理担当課予算・決算係	主 任	独立行政法人国立文化財機構 事務局財務課係長(予算・主計担当)へ
安 田 真 徳	給与・施設グループ 施設管理チーム	主 任	大学共同利用機関法人自然科学研究機構 国立天文台施設課保全管理係主任へ

(転入)

氏 名	所 属	職 名	異 動 内 容
高 橋 直 久	経理担当課(経理担当)	専門職員	独立行政法人国立文化財機構 東京文化財研究所管理部管理室企画渉外係長から
西 野 真 理	給与・施設グループ 施設管理チーム	係 員	独立行政法人国立青少年教育振興機構 財務部経理課施設管理室施設整備係から

(部内異動)

氏 名	所 属	職 名	異 動 内 容
山 口 貴 弘	人事・労務グループ 労務・安全管理チーム	主 任	人事・労務グループ 労務・安全管理チーム専門職員へ

東京大学物性研究所教員公募について

下記により准教授の公募をいたします。適任者の推薦、希望者の応募をお願いいたします。

記

1. 研究部門名及び公募人員数

附属中性子科学研究施設 准教授 1名

当施設は日本原子力研究開発機構研究用原子炉(JRR-3)を用いた中性子散乱実験の全国共同利用研究施設であり、J-PARCにおいても中性子非弾性散乱分光器建設を KEK と共同で推進している。そのため本施設は茨城県東海村に設置されており、主たる勤務地は同設置場所となる。

2. 研究内容

パルス中性子源も含む多様な中性子散乱装置を駆使して強相関電子系の研究を強力に推進するとともに、中性子散乱実験法の開発研究に意欲のある若手研究者を希望する。なお本所は全国共同利用研究所であるため、共同利用実験および日米協力事業に関する業務を分担して頂く。

3. 任 期

以下の場合を除き任期はない。

着任後、満55歳に達した年度の翌年度初めに任期制となる。

なお、任期制の詳細については以下の書類提出先にお尋ねください。

4. 公募締切

平成21年10月30日(金)必着

5. 就任時期

平成22年4月1日以降、なるべく早い時期を希望する。

6. 提出書類

(イ) 推薦の場合

- 推薦書(健康に関する所見を含む)
- 履歴書(略歴で可)
- 業績リスト(特に重要な論文に○印をつけること)
- 主要論文の別刷(5編以内、コピー可)
- 研究業績の概要(2000字程度)
- 研究計画書(2000字程度)

(ロ) 応募の場合

- 履歴書
- 業績リスト(特に重要な論文に○印をつけること)
- 主要論文の別刷(5編以内、コピー可)
- 研究業績の概要(2000字程度)
- 研究計画書(2000字程度)
- 所属長・指導教員等による応募者本人に関する意見書(健康に関する所見を含み、作成者から書類提出先へ直送)

7. 書類提出先

〒277-8581 千葉県柏市柏の葉5-1-5
東京大学柏地区人事・労務グループ人事チーム
電話 04(7136)3205 e-mail jinji@kj.u-tokyo.ac.jp

8. 本件に関する問い合わせ先

東京大学物性研究所附属中性子科学研究施設 教授 柴山 充弘
電話 04(7136)3418 e-mail sibayama@issp.u-tokyo.ac.jp

9. 注意事項

「中性子科学研究施設准教授応募書類在中」、または「意見書在中」の旨を朱書し、郵送の場合は書留で郵送のこと。

10. 選考方法

東京大学物性研究所教授会で審査決定いたします。ただし、適任者のない場合は、決定を保留いたします。

11. その他

お送りいただいた応募書類等は返却いたしませんので、ご了解の上お申込み下さい。また、履歴書は本応募の用途に限り使用し、個人情報とは正当な理由なく第三者への開示、譲渡及び貸与することは一切ありません。

平成21年7月16日

東京大学物性研究所長
家 泰 弘

平成 21 年 7 月 1 日

東京大学物性研究所共同利用研究員 各位

東京大学物性研究所共同利用係

出張依頼の廃止について（通知）

このことについて、平成 21 年 10 月（平成 21 年度後期共同利用採択者）以降、下記のとおり取り扱いを変更いたしますのでお知らせいたします。

記

○ 共同利用に係る出張依頼書送付の廃止

共同利用研究員に採択された研究者が、共同利用のため物性研究所に来所される場合、出張依頼書の送付は行いませんのでご注意ください。本取り扱いに差し支えがある場合は、お手数ですが下記問い合わせ先までご連絡願います。

なお、共同利用以外（委員会等）の出張依頼については、従前どおりの取り扱いといたします。

問い合わせ先

〒277-8581 千葉県柏市柏の葉 5-1-5

東京大学物性研究所共同利用係

電 話 04-7136-3599、3484

メール kyodo@kj.u-tokyo.ac.jp

編集後記

梅雨明けからいよいよ夏本番という時期に「物性研だより」をお届けします。本号では、平成 20 年度客員所員として物性研に滞在された先生方と、転出・着任された助教の方から記事を頂きました。物性研での研究生生活を経験された皆さんの記事を拝見しますと、物性研の恵まれた研究環境と実験設備はもとより、所員や職員の方々の熱意とサポートがあつての充実した研究活動であつたという印象を受けました。私自身は物性研究所に着任して 3 年目となりましたが、数多くの共同利用実験に立ち会う機会に恵まれ、まさに全国共同利用拠点である物性研究所を実感しております。これからは、新たに着任された助教の方とともに物性研を盛り上げて行きたいと考えていますので、どうぞよろしく願いいたします。

また本号では、短期研究会報告、ISSP ワークショップ、物性研究所談話会に関する報告も掲載しておりますので是非ご一読ください。

松 林 和 幸