

# 物性理論研究部門の現状と将来

物性理論研究部門主任 高田 康民

## 1. はじめに

56年前、「物性に関する実験的研究及びこれに関連する理論的研究を行うため」に物性研は創立された。一見、理論軽視のようなこの設立目的の真意は糟谷忠雄先生の記事(物性研だより第47巻創立50周年記念号 p.12)に詳しく解説されている。当時、量子物性の基礎実験では我が国は欧米に立ち後れ、後進国のレベルであったので、比較的発展していた物性理論が先導して国際的に一流のレベルに押し上げ、重要な研究テーマを我が国から発信させようとの意図であった。その後、この目的の下、近藤問題の物理から始まる強相関係の理論と実験は世界を牽引するものになり、物性研の大きな特徴となっている。

このような出自の事情によって、当部門の評価や人事公募の際には、「実験家に魅力のある人」、「実験結果が読める人」等々、実験家をリードする理論家という側面が強く指摘されてきた。確かにこれはいつの時代でも正しい指摘というべきだが、それが具体的に意味することは時代とともに変化してきている。実際、1990年代以降、我が国の物性実験の状況は飛躍的に改善され、幾つもの分野で世界のトップグループになってきた。物性研の実験設備を見ても、ほとんどが国際的に一流のものであり、強磁場施設や LASOR センターに至っては世界一の性能をもつ装置が幾つもある。この半世紀前とは全く異なる状況下では、物性研における、あるいは、我が国における実験と理論の相互関係は変化せざるを得ないし、実際に変化している。それを踏まえて、それでは、その関係は今後どうあるべきなのだろうか。

## 2. 最近の状況

その理想像を考える前に、まず、当部門に所属する7研究室の最近の状況を簡単にとりまとめたので、それを紹介しておこう。なお、押川、常次、加藤の各所員は最近の物性研だより(それぞれ、52巻3号、同2号、49巻4号)でより詳しい研究室紹介を行っているので、それも参考にされたい。それから、これら7所員の他に物質設計評価施設・設計部に所属する川島、野口の両所員、および、計算物質科学研究センターに所属する藤堂特任教授も含む合計10名で物性研理論系グループが形成されている。(川島研究室の話題は物性研だより52巻4号に掲載されている。)このグループを核として、所員・助教の出席が義務化されている理論セミナーや学位論文発表会、学会講演発表会を開催してお互いの情報交換と討論の場としている他、年に4度の懇親会、年に1度で通算6回の滞在型国際ワークショップも開催して、外部への研究発信や共同研究強化の一環としている。そして、これら運営や研究に関わる意見交換・合意形成の場として理論系所員昼食会を月に1度開催している。ちなみに、このような理論系グループ内部のコミュニケーションや外部への情報発信を強化する仕組みは2000年秋に行われた物性研研究会シリーズにおける外部評価委員からの講評(物性研だより第40巻5号)に答える形で策定した行動計画(物性研だより第41巻1号)を具体化したものである。

**上田研:** ここ数年集中的に研究をしてきた振動する磁性イオンの近藤効果の問題がひと段落し、再び格子系の量子相転移の問題に取り組もうとしている。具体的にはチェッカーボード格子ハバード模型や、 $1/5$  周期的に欠損した正方格子のハバード模型などにおける量子相転移の特徴を調べている。

$1/4$  フィリングのチェッカーボード格子では、最近接ホッピング( $t_1$ )と次近接ホッピング( $t_2$ )がひとしい場合、強磁性が基底状態であることが厳密に示されているが、 $t_1$  と  $t_2$  の比を変えていくとさまざまな電荷、スピン秩序相が実現する。とくに  $t_1 < t_2$  のときは、実効的次元の低下と云う現象が見られるが、その量子臨界点近傍では奇周波数超伝導の可能性があることが明らかになった。

$\text{CaV}_4\text{O}_9$  はスピングャップを持つモット絶縁体として知られているが、層状構造を持ち磁性を担うバナジウムイオンは各層において  $1/5$  周期的に欠損した正方格子を形成している。この格子はバイパルタイト格子があるが、この格子上のハイ

ゼンベルグ模型ではダイマーシングレットやプラケットシングレットの相が現れ反強磁性相と競合することによって興味深い量子相転移現象を示す。我々はこの格子上の遍歴電子系が示すスピン自由度の秩序・無秩序転移、あるいはスピン液体相におけるモット転移などの量子相転移の研究をすすめている。

将来的には、これらの経験の蓄積の上で二次元的な強い三次元の遍歴電子系における量子相転移について知見が得られることを目指したいと考えている。

**高田研**：一般に、物質科学における第一原理計算は第一原理のハミルトニアン  $H_{FP}$  から出発して LDA などの既存近似手法でスパコンを駆使して遂行されるが、我々の視点は、(1)計算手法の根本的な開発、例えば LDA を越える交換相関エネルギー汎関数形や時間依存密度汎関数理論(TDDFT)での交換相関核  $f_{xc}(rt, r't')$  の探索・改良、に直接的に結びつく研究、(2)モデルハミルトニアンを通して確立されてきた物理概念、例えば不純物アンダーソン模型における近藤問題の物理やハバード模型におけるモット転移を  $H_{FP}$  から出発して直接的に検証し、新概念の発見を目指す研究、の2つである。

ところで、電子ガスに埋め込まれた 1 原子系はこれらいずれの視点からも大変に興味深い研究テーマであり、これを拡散モンテカルロ法で詳細に調べて新知見を得た。また、電子の自己エネルギー計算において、GW 近似を超える GW $\Gamma$ 法を開発し、低電子密度の電子ガス系における励起子不安定性や超臨界状態の液体金属で観測されている誘電不安定性を議論した。さらに、 $H_{FP}$  から直接的に朝永ラッティンジャー流体の物性解明を企てている。この他、超伝導転移温度  $T_c$  の第一原理からの計算手法を様々な角度から探索し、高温超伝導体の理論的および実験的探索に寄与するように努めている。

**押川研**：所員、多田靖啓助教および修士課程 3 名・博士課程 3 名の合計 6 名の大学院生が、それぞれ独自のテーマに取り組んでいる。これまでに外国人の留学生 2 名、博士研究員 2 名、客員所員 2 名(予定を含む)、他短期のビジター多数を受け入れ、大学院生も含め国際的な共同研究を推進している。物性理論・統計力学の研究には、モデルの数理的な研究に立脚して抽象的な概念を探求するものから、実験結果に触発されてその解釈からスタートするものまで幅広いスタイルがあるが、最終的には前者からも実験に対する予言、後者からも一般的な物理概念を抽出することが期待される。当研究室では、これらの異なるスタイルの研究を両立させ有機的に関連させることを目指している。最近の研究テーマの中で前者に相当するものとして、トポロジカル相とエンタングルメントスペクトル、 $p$  波超流動体の固有角運動量、離散対称性を持つ系の捻りに対する応答、などがあり、後者に相当するものとして、1 次元に閉じ込められた液体ヘリウムの超流動の動的理論、重い電子系における電荷秩序のモンテカルロ法による研究、人工超格子系における重い電子状態、などがある。今後は、特に強相関量子多体系におけるダイナミクスの問題に重点をおく予定である。実験グループはもちろん、所内外の大規模数値計算を専門とするグループとも協力を進めたい。

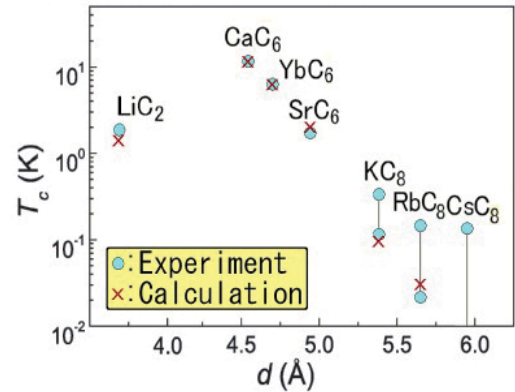


図1. グラファイト層間化合物の超伝導転移温度。実験結果は我々の第一原理計算でよく再現される。

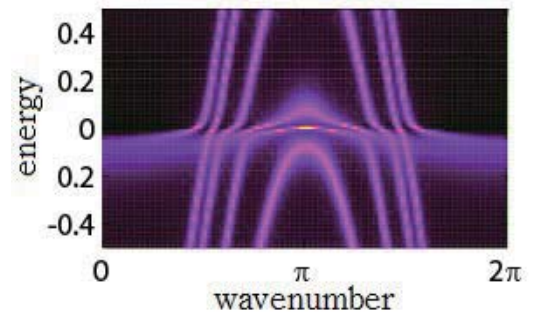


図2. 超格子中の重い電子の分散関係。

**常次研：**現在、研究室には所員と服部一匡助教に加えて、博士研究員の佐藤年裕氏と大学院生 2 名(博士課程の Hao Zhang 君と修士課程の山崎将希君)が在籍している。現在の研究テーマは、フラストレートした電子系と重い電子系の電子状態、磁性、および超伝導を中心としている。最近では、三角格子ハバード模型のモット臨界終点における電気伝導度の臨界指数が熱力学的な秩序変数である二重占有のものと異なることを示した(図3)。今後展開するテーマとしては、強相関係における量子ダイナミクス、非平衡現象を計画している。さらにこのテーマと関係して、異なる種類の秩序が共存する場合の集団励起の織り成す新しい空間構造やダイナミクスに興味をもっており、重要で興味深い系の1つとして強磁性超伝導の研究を開始した。

**甲元研：**多体系においては、相互作用によって種々の興味深い性質が現れる。例えば、磁場中グラフェンの示す量子ホール効果は、最近の代表的な例である。また、トポロジカル絶縁体のように量子論特有のトポロジカルな長距離相関により、ギャップレス表面状態のような新しい性質が現れる場合もある。このような比較的最近発見された現象では、摂動論的な発想を基礎とした固体物理の伝統的な手法による理論的な説明は必ずしも成功しない例が多い。例えば、量子ホール効果においては非摂動的な場の理論が大きな成果を挙げている。場の理論を含めた非摂動的な手法を開発しながら、上記のような物性理論における基本的な問題の解明を目的とする。

**杉野研：**当研究室では、物質をスーパーコンピュータ上で数値的に再現させるという第一原理計算手法を用いて物性研究を行っている。研究対象は、炭素系物質から金属酸化物系、固体(結晶や格子欠陥)から液体、さらに、表面・界面系に及ぶ。特に、エネルギー変換の物質科学という切り口から、燃料電池の電極・水溶液界面の動力学シミュレーションを京コンピュータで行い、燃料電池過程の解明や白金代替の可能性探索など行っている。また、時間依存密度汎関数法や二粒子グリーン関数法を用いて、計算対象を励起状態に拡張するための研究に力を入れている。今後ますます計算の高精度化、シミュレーションの大規模・長時間化の必要性が高まり、従来の枠組みを超える新たな手法の構築の必要性が出てくるものと考えている。本研究室では、テンソル・ネットワーク解析や多体摂動論にもとづく新たな高精度第一原理計算の開発に注力する。また、スーパーコンピュータがますます分散処理化する現状にかんがみ、通信量を最小化するアルゴリズムの研究を行い、大規模・長時間化を目指す。これらの研究は、より広範な物性現象の理解と予測につながる研究になるものと考えている。

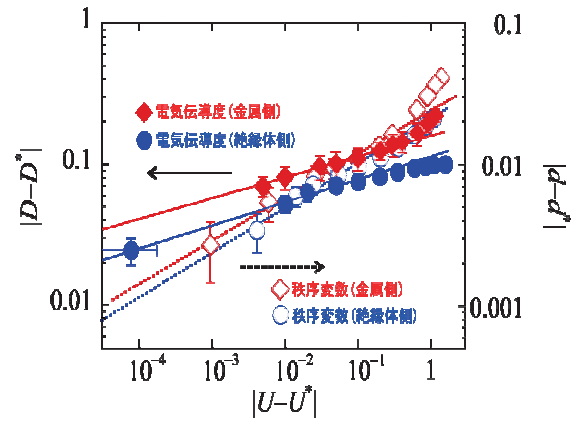


図3. 三角格子ハバード模型のモット臨界終点における電気伝導度の臨界指数。

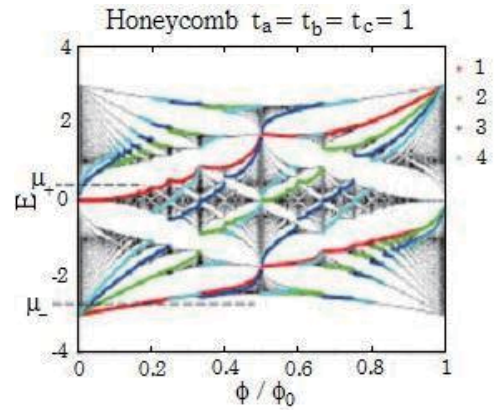


図4. ハニカム格子での磁束とエネルギーの関係。数字はHall 伝導度を表す。

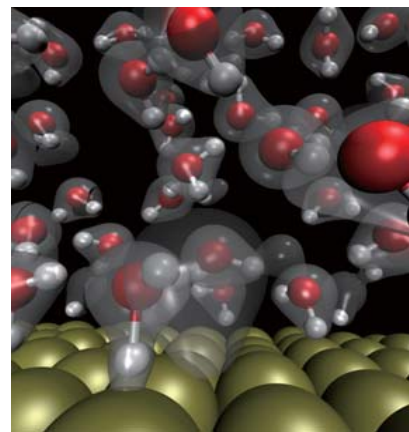


図5. 白金・水溶液界面における燃料電池過程のシミュレーション。

加藤研：2004年に物性研究所に赴任して研究活動を開始してから10年になる。この間、メゾスコピック系の理論を中心として、量子ドットの伝導特性、超伝導接合の理論、電子の動的輸送問題などについて理論研究を展開してきた。日仏研究交流事業などの採択を通してフランスと研究交流を立ち上げ、現在は量子ドットを用いた単一電子の「量子光学」的実験について解析を行っている。昨年度に阪野壘さんが着任して以降、近藤効果の励起状態に関する精度の高い理論の構築を重点目標に設定し、研究を行っている。一方でメゾスコピック系以外にも、分子性導体やリラクサー誘電体などの研究を共同研究者と共に行っている。また最近では、同じ物性研内の理論系グループおよび実験部門のスタッフとも議論を行っており、その一部は共同研究として共著論文をまとめることができた。今後ともメゾスコピック系の物理の理論研究を軸としながらも、物性研内のスタッフとの議論を大事にし、分野にとらわれることなく広く物性研究に貢献していきたいと考えている。また、スーパーコンピュータ関連のプロジェクトに物性研の所員として関わりながら、数値計算手法開発や既存の数値計算ソフトの普及などにも努めたい。

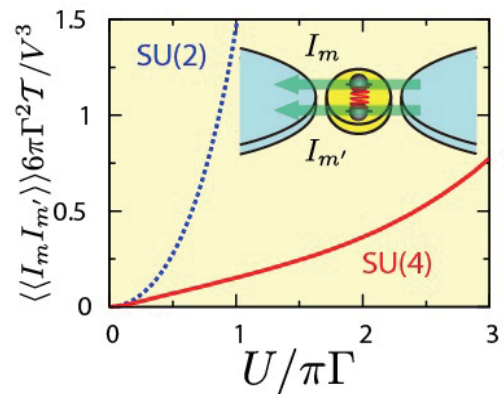


図6. SU(N)近藤効果の非平衡電流相関。



図7. 理論系グループの懇親会から。

### 3. 今後の方向

3年前、実験系の2所員も加えてワーキンググループを組織して、理論系グループの将来計画、とりわけ、次のような3点を討議した。それは、(1)2016年迄に退職する3所員の後任人事とも関連して、近い将来に重要になりそうな研究テーマ・分野、(2)計算物理プロパーな所員の適正数、および、次世代スパコンやCMSI、元素戦略プロジェクト、共同利用スパコンの運営などを通じた計算物質科学コミュニティへのコミット具合、(3)物性研において理論のあるべき役割や実験との関係、である。

その結果、まず、(1)に関しては、(i)量子計算、量子情報、量子計算機などの数値アルゴリズムも含めた情報理論分野、(ii)新超伝導体、マルチフェロイック、スピン電荷格子複合系、冷却原子ガス系、フラストレートスピン系、量子臨界現象などの強相関係のフロンティア、(iii)ナノ系や量子ドット系、トポロジカル絶縁体、スピントロニクスやスピンホール効果などを考えた非平衡輸送現象や非平衡量子ダイナミクス、(iv)生体分子を含む物質機能探索と多階層モデリング(マルチスケール計算・階層間接続)の分野で、量子系と古典系さらに連続体を結ぶ手法、ナノ・メゾ接続、疎視化モデルの大規模シミュレーションによるソフトマター研究、(v)大規模並列計算による多体問題・統計物理の新展開を図るもので、第一原理ハミルトニアンに含まれる情報を包括的に汲み取る様々な数値方法論の進化、などが列挙された。

これらの項目は後に挙げたほど大規模数値計算の必要性が高くなると同時に、より長く将来にわたる研究といえる。これから想像すると、従来の物性理論の状況では計算物理プロパーな理論家の割合はあまり高くはないとしても、将来はその割合はずっと増加しそうである。従って、(2)の計算物理プロパーな所員適正数は理論系グループ全体の半分で5という結論が得られた。そして、必要であれば特任教員を増やすことでコミュニティに対する責任も十分に果たせるものと考えた。

上の2点とは異なり、(3)についてははっきりとした結論が得られなかった。確かに理論の役割として、(i)大所高所か

ら所内外の実験グループに新研究課題や新現象を提示し、物性研究の新たな潮流をつくりだす、(ii)理論の応用から物質機能探索に資する、(iii)実験グループとの緊密な連携の下で共同して実験の中から新現象や普遍性のある優れた問題を発見する、などがすぐに挙げられる。しかし、理論所員全員がこれらすべての役割を果たせるわけではないので、各所員の得意分野をうまく組み合わせて理論系グループ全体としてこれらの役割をカバーしていることが理想である。

一方、これまでの半世紀にわたる所内外の研究体制の発展は、物性研の理論家に求められる役割にも変化をもたらしているだろう。最近では実験家が大型科研費プロジェクト等で近い分野の理論家との議論の機会が増えている上、理論家を科研費のプロジェクト研究員、物性研の客員所員・客員研究員・特任研究員等として自分の研究室で直接雇用することも可能になっている。このような状況下で物性研の理論家が所内の実験研究に貢献するためには、既存の枠組みを超えた新しい方向性を提示することがますます必要になっている。そのためには、まず、所員自身が世界をリードする高度に独創的で求心力のある研究を遂行する（あるいは、少なくともその能力が十分にあることを示す）必要がある。とりわけ、理論の場合、大型施設を使う実験とは異なり、物性研でしか出来ない研究というものはないので、高度に独創的で求心力のある研究がない限り、物性研が研究情報の交換・発信拠点にもなり得ず、全国的・国際的な共同研究・共同利用研究所ともいえなくなる。

このように考えると、2016年頃の新所員の公募に際しては、研究分野というよりは求心力のあるシニアの研究者を選ぶのが一つの選択肢といえる。もしシニアではなく若手を選ぶ場合、高い研究能力は当然としても、物性研の理論所員の役割を果たすにふさわしい人柄かどうかとも考慮の対象にするということも考えられる。さらに、このような個人の問題とするだけでなく、同時に、理論系グループをはじめとした物性研全体で傑出した理論家を育て上げるような何らかの具体的な方策や仕組みを作ることも望まれる。