

# 物性研だより

第36卷  
第4号

1996年11月

## 目 次

物性研を後にして	香取浩子	1
物性研に着任して	秋山英文	3
短期研究会報告		
○ 「物性研究における計算物理学の現状と今後の展望」		5
世話人	塚田 捷, 岡部 豊, 宮下精二, 樋渡保秋	
常行真司, 今田正俊, 上田和夫, 高山 一		
物性研究所談話会		60
物性研ニュース		
○ 人事異動		64
○ 平成 8 年度 後期短期研究会一覧		65
○ 平成 8 年度 後期外来研究員一覧		66
○ 平成 8 年度 後期スーパーコンピュータ共同利用採択課題一覧		91
○ 平成 9 年度 前期共同利用の公募について		94
○ テクニカル・レポート 新刊リスト		122

編集後記

東京大学物性研究所

ISSN 0385-9843

## 物性研を後にして

理化学研究所 香取浩子

物性研を後にして、1年が過ぎました。急な異動となってしまったためにご迷惑をおかけし、また、物性研在職中にお世話になった方々に御礼を申し上げずに異動してしまったことを、この場をお借りしてお詫び申し上げます。特に、後藤恒昭先生には、超強磁場部門においてはひとりでできない作業が数多くある私のようなものを採用して下さり、何から何までお力添えをいただいたにもかかわらず、後片付けをきちんと済ませぬうちに物性研を後にしてしまったことを申し訳なく思っております。

私が初めて物性研を訪れたのは、創立25周年記念の一般公開の時でした。まだ学部学生であった私は、それまでは大学の小規模な研究室しか知らなかっただけで、初めて訪れた「研究所」の独特な雰囲気に圧倒されました。「超」の領域における研究には、唯々、その規模の大きさに驚きました。もちろん、将来この設備を共同利用として使わせていただき、さらには物性研のスタッフのひとりとして研究に参加させていただければ、その当時は、考えてもみませんでした。

共同利用として物性研にお世話になったのは、大学院の修士課程に進学してからです。最初の頃は、ラウエ写真を撮らせてもらったり、ダイヤモンドカッターを使わせてもらったりと、所属していた大学にない設備を使わせていただくことが主でした。超強磁場部門の装置を使わせていただくようになったのは、博士課程に在籍するようになってからでした。その頃は、スタッフの方によってすでに準備が完了している装置に試料をセットし、教えてもらったりとおりに装置を使い、少しでもわからなくなると助けてもらっている利用者でした。今思えば、スタッフの方々にとってはとても手のかかる利用者であったと思います。学生時代に合計5年間程、共同利用として超強磁場部門に入りさせていただきましたが、超強磁場部門の装置と言っても、使わせてもらっているのは主として超伝導マグネットでした。博士課程後半の頃には非破壊型パルスマグネットや一巻きコイル直接放電法の装置も少し「触らせて」いただきました。しかし、いずれも「私には縁のない大きな装置」としか思っておりませんでした。

ですから、博士課程修了後に物性研で採用して下さると決まったときは、大変戸惑いました。研究職にポストを得ることが女性にとって特に難しい時代にもかかわらず採用していただけることにも感謝致しましたが、それと同時に、大学とは違った大掛かりな装置がある場所で、果たして私が勤まるのであろうかという不安もありました。特に、共同利用として入りさせてもらっていたために、スタッフの方が、どれだけの時間を共同利用の方のために割いているかということも想像できたからです。しかし、久々の女性の助手の採用ということで、「今後、物性研で女性が採用されるか否かはあなたの働きいかんにかかわっているわよ。」と大学の指導教官であり、また、物性研の女性の助手として大先輩でもある、お茶の水女子大学の伊藤厚子先生に励まされ、「何と

しても頑張らなければ」と思いました。

助手として着任するまではいろいろな不安がありましたが、いざ着任してみると、仕事をこなすのが精一杯で、悩む暇などありませんでした。超強磁場のスタッフの皆様は、私が女性ということで気を使って下さることもありました。けれども、まだ体力に自身のあった最初の頃は、女性だからと変に気を使っていただきたくないと思っていましたので、重い液体窒素のベッセルをひとりで頑張って運んでいました。しかし、30代に突入すると、だんだんと肉体労働がつらくなり、「重いものを運んでいる時ぐらい手伝ってくれないのかしら?」「私のことを女性だと思ってくれないのかしら。」と、わがままなことを少し考え始めたことも確かです。

物性研では、多くの共同利用の方と接する機会がありました。仕事の上では大変な面もありましたが、研究の視野が広がり、また多くのことを学ばせていただきました。私自身が共同利用として強磁場施設を使わせていただいた時、すぐ実験ができるような状態にいつもスタッフの方が装置を準備してくださっていたので、私自身がスタッフとなった以上、実験がすぐにできるような状態で共同利用の方をお待ちしようと常に心掛けていました。しかし、装置のトラブルはなぜか共同利用の方がいらしている時に多発し、せっかく遠方から実験に来ていただいたのに満足のいく実験ができなかったこともあります。本当に申し訳なかったと思っております。

物性研の中でも特に肉体労働が多い超強磁場部門での戦力としては、私はあまりに微力であったと思いますが、繊細な作業に関しては少しは自身がありましたので、そちらの面では努力しようと心掛けました。如何にバランスの良いピックアップコイルを作るかがデータのS/Nを大きく左右する一巻きコイル直接放電法での磁化測定では、一所懸命努力しました。少しは良いデータが測定できたのではないかと自分自身では思っております。今後さらに改良されていくことと思います。

物性研でのスタッフとしての5年間は、他のスタッフの皆様に助けていただかなければ、とてもやり通せなかっただと思います。共同利用の時代を含めると、物性研には10年間もお世話になったことになり、本当に感謝しております。私のような若輩者で、これほどまでに長く物性研で多くのことを学ばせていただいた人間は他にはいないのではないかと思っております。

最後になりましたが、三浦 登先生にはいろいろなアドバイスを頂きました。また、嶽山正二郎さん（現姫路工大）、高増 正さん（現金材技研）、野尻浩之さん（現東北大・金研）、東堂 栄さん、晴山 武さん、内田和人さんには大変お世話になりました。学生の方にもいろいろ助けていただきました。秘書の六車（現佐々木）紀子さんには、同じ女性として相談相手になっていただきました。常に私を助けてくださった超強磁場部門の皆様には、心より感謝しております。また、共同研究をさせていただいた多くの共同利用の方々にも、この場をお借りして御礼申し上げます。1995年4月からは、理化学研究所磁性研究室で、勝又紘一主任のもとで研究に従事しております。物性研で学ばせていただいたことを、これから的研究の上で、役立てていきたいと思っております。

## 物性研に着任して

秋山英文

平成8年6月1日付で物性研の先端分光研究部門に着任した。先端研助手から助教授への昇任で、生まれて初めて自分の研究室を作ることになった。喜びもさることながら、不安と焦りがいりまじっていろいろな思いが頭をめぐっている。そういえば、先端研助手着任の挨拶文で「30歳、独身です。趣味特技は云々……」と書いたら知らない人たちから電話がかかってきてテニスに誘われたことを思い出した。

研究内容は後述するが、研究という仕事は、まだ誰も見たりやったことのないことを発見したり発明する仕事だから難しいと思う。金を掘るようなもので、すでに金脈をみつけていたり、下調べができるれば、そこで金を掘り進めながら周辺の金脈を探すことができる。しかし最初は難しい。掘ってみてもそこに金はないかもしれない。人の堀りあとをあさるのではなきれない。でっかい金脈を見つけたい。やはり自分の経験とカンをたよりに未開地につるはしを当ててみるほかない。

先日わたしのところに小森先生が光変調器を借りに来られた。わたしが学生の時から知っている先生だったが改めて親近感を感じた。物性研のフランクな雰囲気を心地よく思った。ところが先日の物理学会のシンポジウムで小森先生の講演を聴いて度肝を抜かれた。超伝導とCDWを示すみごとな低温STSを初めて見て感激した。同時に、自分にもあんな仕事が出来るだろうかと、鬱状態に傾いた。

感激と言えば、プロレスで猪木やブル中野は30分1本勝負の間に必ず感動を与えてくれる。あの感動は「プロレスは本気の戦いじゃない」と言う一言では済まされない。ハードな練習中に選手が死んでしまった場面の描写がブル中野の本に書いてあったが胸を打った。オリンピックでも何でも一生懸命な姿は人に感動を与える。はたして自分の仕事も感動を他人に与えられるだろうかと思った。

現在、わたしのもとに修士1年の学生がひとりいる。先日彼から、自分を採ってくれた本心は何かと聞かれた。力仕事のための人足としてかどうか心配だったらしい。それは違う。力仕事ならわたし一人でもやる。うまい答えがいまでも見つからないが、一緒に一生懸命研究をして感動を分かち合いたいと思う。

さて、わたしは、博士課程の学生のときの約3年間、物性研のレーザーグループに共同利用に来てるので物性研には多少なじみがある。本郷の学生だったわたしにとって物性研は、レーザーの人たちも液化室や工作の方たちも職員も学生も含めてまさにプロ集団であった。そういう雰囲気の影響を大いに受けつつ、物性研で開発された新光源で、銅ハイライド結晶のピコ秒時間分解分光、非線形分光をやり、学位を修めた。その後、5年を駒場の先端研で過ごした。いろいろな半導体量子構造をつくる電気電子工学の分野の人たちと、今度は自分が光のプロとして仕事をし、特に、ガ

リウムヒ素量子細線構造の光物性研究をうまく進めることができた。

その間に、会社を含めて実に相当数の人が半導体結晶成長に携わり量子構造の研究をしていること、電気電子工学科のデバイス系の研究室のほとんどがMBEやMOCVDの装置を用いた研究をしていることなど知った。作った量子構造の電子状態はふつう電気伝導か光で評価する。作られている構造が非常に高度であるにも関わらず、光学評価で通常やられていることは昔ながらの発光スペクトル測定ばかりである現状に疑問を感じた。評価方法である以上、簡便さは重要であるが、レーザーやクライオスタッフがここまで進歩した今日、もっと気の利いた評価方法を提供できないかという思いを強く持った。それで量子構造評価のための顕微分光法と赤外分光法を物性研での研究テーマに选んだ。新量子構造の作製にフィードバックをかけられるような痒いところに手が届く光学評価を行い、優れた量子構造を創出すること、そしてそこから新しい物性を見いだす分光をやること、を目指して行こうと思っている。

## 物性研究所短期研究会報告

### 「物性研究における計算物理学の現状と今後の展望」

世話人	東 大・理	塙 田 捷
都立大・理	岡 部 豊	
阪 大・理	宮 下 精 二	
金沢大・理	樋 渡 保 秋	
東大・物性研	常 行 真 司	
東大・物性研	今 田 正 俊	
東大・物性研	上 田 和 夫	
東大・物性研	高 山 一	

平成 7 年 4 月に物性研究専用のスーパーコンピュータ、富士通VPP500、が物性研に導入され、その全国共同利用が一年経過した。この機会に、同スーパーコンピュータによる研究成果を中心として、計算物理による物性研究の現状を広く総括し、今後の展望を議論する目的で標記研究会が開催された。第一原理計算による物性研究から、強相関電子系、量子スピン系、さらに、巨視系・コンプレックス系における転移とダイナミックスまで、広範な分野の研究動向について世話人の間で検討し、プログラムを作成した。以下の報告にあるように、種々の計算手法を駆使した研究による問題解明がそれぞれの分野で進展し、また、計算手法そのものの開発研究において多くの成果が得られている。研究会参加者も延べ 130名を越え、活発な討論が展開された。

通常の研究成果に関する講演・討論に加えて、物性研スーパーコンピュータの共同利用のあり方について検討することも研究会の目的の一つとした。特別セッションの宇田、青柳両氏にはそれぞれ融合研と分子研のスーパーコンピュータの運用体制の紹介を含めた講演をしていただいた。また、物性研スーパーコンピュータ利用に関するアンケートも行った。残念ながら統計が取れるほどの回収率には至らなかったが、並列処理計算を行っているユーザーの数はまだ少ないようである。今後、並列処理の優先的支援や長時間・大容量ジョブ枠の増加等、本システムの特徴が活かせるような運用体制の確立が望まれる。

## プ ロ グ ラ ム

### 「物性研究における計算物理学の現状と今後の展望」

日 時 : 1996年5月27日(月) ~ 29日(水)

場 所 : 東京大学物性研究所 講義室

#### 5月27日 (月)

強相関系+電子系一般 I [13:00-14:50] 座長 上田和夫(東大・物性研)

今田正俊	東大・物性研	モット転移の数値的研究[30]
前川禎通	名大・工	モット絶縁体の励起状態[20]
青木秀夫	東大・理	強相関電子系の超伝導の量子モンテカルロ計算[2]
坂本晴美	筑波大・物理	一次元Hubbard模型における金属強磁性[20]
久保健	筑波大・物理	

休憩[14:50-15:10]

強相関系+電子系一般 II [15:10-16:35] 座長 久保健(筑波大・物理)

安藤恒也	東大・物性研	メゾスコピック系における量子輸送現象[20]
酒井治	東北大・理	量子ドット系に於ける強相関電子効果[15]
泉田涉	東北大・理	
清水幸弘	東北大・工	
柴田尚和	東大・物性研	近藤格子におけるフリーデル振動-DMRGによる研究
上田和夫	東大・物性研	-[15]
古賀幹人	東工大・理	不純物の内部構造に依存した近藤効果に対する数値繰り
斯波弘行	東工大・理	込み群法の応用[15]

休憩[16:35-16:45]

巨視系のダイナミックス [16:45-17:55] 座長 樋渡保秋(金沢大・理)

早川尚男	京大・人環	粉体流動層の計算機シミュレーションとその物理[20]
松本充弘	名大・工	液体相変化のシミュレーション[20]
巾崎潤子	東工大・総合理工	ケイ酸塩ガラスにおける「混合アルカリ効果」の機構

5月28日（火）

量子スピン系他 I [9:00-10:30]

宮下 精二 阪大・理

座長 岡本 清美（東工大・理）

飛田 和男 埼玉大・理

低次元系での量子ゆらぎとスピン秩序[20]  
ランダム一次元ハイゼンベルグモデルの密度行列くりこみ群による研究[20]

利根川 孝 神戸大・理

2種類の大きさのスピンから成る1次元量子スピン系[15]

高橋 實 東大・物性研

一次元強磁性体と反強磁性体の低温熱力学[15]

休憩[10:30-10:45]

量子スピン系他 II [10:45-12:20]

川島 直輝 東邦大・理

連続虚数時間量子クラスタモンテカルロ法[20]

Matthias Troyer 東大・物性研

Quantum Monte Carlo loop algorithm[20]

西野 友年 東北大・理

Time-Space上で考える密度行列繰り込み[20]

山中 雅則 東大・工

$S=2$ 量子スピン鎖における、隠れた秩序と相転移[15]

押川 正毅 British Columbia大

宮下 精二 阪大・理

昼食[12:20-13:30]

特別セッション [13:30-15:20]

J.-S.Wang Univ. Singapore

座長 岡部 豊（都立大・理）  
Random Sequential Adsorption: Series Expansions  
and Monte Carlo Simulation[30]

宇田 毅 融合研

融合研スーパーコンピュータによる最近の研究[30]

青柳 瞳 分子研

分子研スーパーコンピュータによる最近の研究[30]

休憩[15:20-15:40]

第一原理計算 I [15:40-18:00]

丸山 豊 東北大・金研

座長 常行真司（東大・物性研）  
混合基底第一原理計算によるマイクロクラスター構造体の研究[20]

小口 多美夫 広島大・理

磁性体の第一原理計算[20]

小谷 章雄 東大・物性研

dおよびf電子系の高エネルギー分光理論[20]

播磨 尚朝 阪府大・総合

FLAPW法による稀土類化合物のフェルミ面の研究[20]

吉田 博 阪大・産研

カルコパライライト型半導体の第一原理計算による価電子制御と物質設計[15]

小林 一昭 無機材研

第一原理分子動力学計算の並列化とその応用[15]

5月29日（水）

コンプレックス系 I [9:10-10:25]

座長 菊 池 誠（阪大・理）

福 島 孝 治	東大・物性研	レプリカモンテカルロ法によるスピングラスの研究[20]
高 山 一	東大・物性研	
川 村 光	京都工織大・工芸	超伝導セラミックスにおけるカイラル秩序[20]
松 原 史 阜	東北大・工	双極子相互作用を含む2次元強磁性体の環状相転移[20]
佐々木 淳哉	東北大・工	

休憩[10:25-10:40]

コンプレックス系 II [10:40-11:50]

座長 高 山 一（東大・物性研）

岡 部 豊	都立大・理	ユニバーサル有限サイズスケーリングとその応用[20]
菊 池 誠	阪大・理	
中 山 恒 義	北大・工	動的相関関数と強制振動子法[20]
山 縣 敦	都立大・理	3次元hard-sphere lattice gasのユニバーサリティ [15]

昼食[11:50-13:00]

第一原理計算 II [13:00-14:25]

座長 吉 田 博（阪大・産研）

塙 田 捷	東大・理	第一原理計算によるナノ構造の物性予測[30]
山 元 進	東大・工	現実的な固体系での量子モンテカルロ法の実際[20]
藤 原 毅 夫	東大・工	
押 山 淳	筑波大・物理	半導体エピタキシャル成長への局所密度近似によるアプローチ[20]

休憩[14:25-14:40]

第一原理計算 III [14:40-15:50]

座長 塙 田 捷（東大・理）

常 行 真 司	東大・物性研	圧力誘起構造変化の第一原理シミュレーション[20]
上 原 健太郎	金沢大・理	LAPW基底を用いた第一原理的分子動力学法—セレンium・クラスターへの応用[20]
斎 藤 晋	東工大・理	C <sub>70</sub> 超伝導体の設計[15]

## モット転移の数値的研究

東大物性研 今田正俊

強い電子相関によって生ずる、いわゆるモット絶縁体と金属の間の転移についての研究は、多様な金属絶縁体転移の研究の中にある、実験的にも理論的にも最近多くの関心を集めている。特にフィーリング制御型の連続転移の場合が銅酸化物高温超伝導体やその他の遷移金属化合物の系で見られる特異な物性を解き明かす鍵として注目されている。もともと、金属絶縁体転移は量子揺らぎを原因として生ずる、量子相転移である。この相転移がどのようなユニヴァーサリティクラス（普遍性クラス）によって記述されるのかは多様であり、特にこの転移が系の乱れを主たる原因として生ずるのか、電子相関によって生ずるのかといったメカニズムにも依存する。その中にあって、電子相関によって生ずるモット転移の普遍性クラスは現在強い関心を集めている。次元の大きな系では動的分子場による結果が正しい結果を与えるし、また次元の大きな極限では転移点の周辺で通常は磁気秩序が生じているので、転移の性格を論ずるのはそれ程困難なことではない。一方1次元系の場合はいくつもの厳密解が知られており、それらがすべて共通の普遍性クラスを与えるから、基本的な点は理解されていると考えてよい。最も大きな問題が2次元系の場合である。厳密解が得られないし、また（動的）分子場理論によって正しい結果が与えられるとも考えにくい。物性研のスーパーコンピュータを用いた最近の量子モンテカルロ計算によって、2次元のハバード模型のモット転移の性格が普通の金属絶縁体転移と異なっているという予想を支持する数値的な結果が得られた。この量子モンテカルロ計算では絶縁体側から金属絶縁体転移点に近づくという、従来と異なったアプローチをとり、絶縁体側では量子モンテカルロ計算でしばしば問題となる負符号問題が存在しないという利点を利用して、精度の高い結果が得られた。絶縁体側から一体のグリーン関数を計算し、局在長の発散の臨界指数から、相関長臨界指数 $\nu$ 見積もった結果、統計誤差の範囲で $\nu = 1/4$ が得られた。これは、動的臨界指数 $z$ が4であることも意味する。またこの臨界指数を金属側で従来から知られていた、電荷圧縮率の臨界指数や反強磁性相関長の臨界指数と比べて見ると、動的分子場の予測が破綻し、上部臨界次元より低い次元で成立と考えられるハイパースケーリングの予測と一致していることがわかる。また $z$ が4であることから、通常の金属絶縁体転移とは異なった特異さが導かれる。ドルーデ重みや縮退温度がドーピング濃度の2乗に比例するのはその1例である。2次元モット転移近傍の金属相が異常な性格を持つことはこの普遍性クラスから自然に理解される。通常の臨界現象の場合には転移のごく近傍での詳細な指数の差に普遍性クラスの有効性が限定される場合も多いのに対して、今の場合は臨界領域が広いことが数値的に示されている。今まで知られていなかつたタイプのこのモット転移の普遍性をみだす原因についての検討も進んでいる。

## モット絶縁体の励起状態

名大・工, 東北大・金研 前川禎通

三重大・教育 遠山貴巳

電子間相互作用を持つ1次元電子系では、スピンと電荷の分離が起こっている。そこでは、低エネルギー領域の励起状態は、スピン及び電荷の集団励起状態としてのスピノンとホロンにより記述される。我々は数値的厳密対角化法を用いて1次元tJモデルの励起状態を求めた。得られた結果は、1次元銅酸化物、SrCuO<sub>2</sub>、での角度分解光電子分光(ARPES)実験の結果と良い一致を示しており、スピノンとホロンに対する初めての定量的な解釈を与えるものであると考えられる。

1次元モット絶縁体であるSrCuO<sub>2</sub>の単結晶が東京大学工学部の内田研究室で合成された。<sup>\*</sup> この物質での反強磁性交換相互作用(J)は約0.2eVと評価されている。<sup>1, 2)</sup> また、この物質に対する共鳴光電子分光の実験より<sup>\*\*</sup>、基本的な電子構造は、他の銅酸化物高温超伝導体と同じであり、従って、電子の飛び移り積分(t)は約0.6eVと求められる。

ARPESの実験より、約1.2及び約0.3eVの分散を持つ2つのバンドが得られた。計算結果と対応させることにより、これらのバンドは、それぞれ、ホロン及びスピノンであることが明らかになった。一方、2次元モット絶縁体であるSr<sub>2</sub>CuO<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>では1次元系の低エネルギーに対応するバンドのみが観測され、<sup>3)</sup> 理論との比較より2次元系ではスピン・ポーラロン的な準粒子が励起状態を与えることが理解される。

\* N.Motoyama, H.Eisaki and S.Uchida

\*\* C.Kim, A.Y.Matsuura and Z.X.Shen

1) H.Yasuhara and Y.Tokura:unpublished.

2) N.Motoyama, H.Eisaki and S.Uchida: to be published in Phys. Rev. Lett.

3) B.O.Wells et al: Phys. Rev. Lett. 74, 964(1995).

量子モンテカルロ法による 2 次元  $d$ - $p$  模型の研究

東大・理 青木秀夫  
黒木和彦

様々な実験的・理論的研究から高温超伝導の本質は 2 次元  $\text{CuO}_2$  面にあり、その電子状態を忠実に表すのは  $d$ - $p$  模型

$$\mathcal{H} = t_{dp} \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (d_{i\sigma}^\dagger p_{j\sigma} + \text{h.c.}) + t_{pp} \sum_{\langle j,j' \rangle \sigma} (p_{j\sigma}^\dagger p_{j'\sigma} + \text{h.c.}) \\ + \Delta \varepsilon \sum_{j\sigma} n_{j\sigma}^p + U_d \sum_i n_{i1}^d n_{i1}^d$$

であると考えられる。この模型は 3 バンド模型であるが、いくつかの極限を考えることで有効的に単一バンド模型に写像する事ができる。現実の銅酸化物は電荷移動領域 ( $Ud > \Delta \varepsilon$ ) にあり、この場合、強相関の極限  $Ud \gg t_{dp}$ ,  $\Delta \varepsilon \gg t_{dp}$  を考え、かつ Zhang-Rice singlet を導入することにより有効的に  $t$ - $J$  模型で表されると考えられる。一方、モット・ハバード領域 ( $Ud < \Delta \varepsilon$ ) は  $\Delta \varepsilon \gg t_{dp}$  の極限で単一バンドのハバード模型に帰着する。

しかし、 $U_d$ ,  $\Delta \varepsilon$  が有限な  $d$ - $p$  模型と、極限である単一バンドの  $t$ - $J$  やハバード模型が、特に超伝導に関してつながっているのかは未解決の重要問題である。即ち、(i)  $d$ - $p$  模型の現実的なパラメーターは摂動領域にあるか、(ii) 摂動が良いとしても、有効的  $J/t$  は大きいか、(iii) 電荷移動領域とモットハバード領域とで定性的な差異があるか、といった問題がある。

そこで我々は量子モンテカルロ法を用いて  $d$ - $p$  模型における超伝導の可能性を探った。 $d$ - $p$  模型に対する量子モンテカルロ計算は過去にもあるが、今回は物性研スーパーコンピューターを大規模に駆使することにより、これまでにあまり調べられなかったようなパラメーター領域を調べるこ

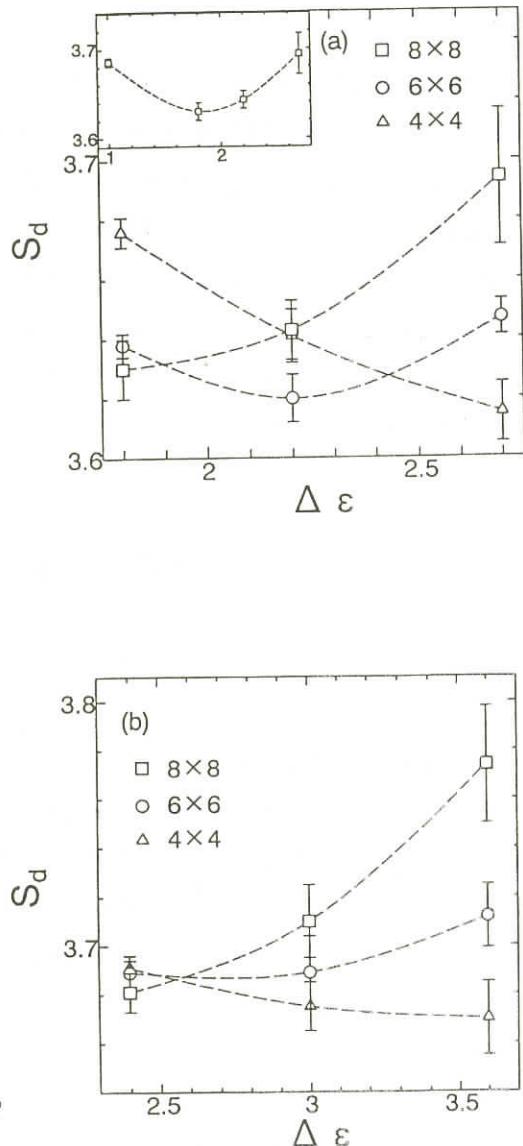


Fig. 1.  $d_{x^2-y^2}$  波超伝導相関関数を(a)電荷移動領域において  $Ud = 3.2$  に固定して、(b)モットハバード領域において  $Ud = 1.8$  に固定して、 $\Delta \varepsilon$  の関数としてプロットしたもの。18ホール/ $4 \times 4$  単位胞 ( $\Delta$ ),  $42/6 \times 6$  ( $\circ$ ),  $74/8 \times 8$  ( $\square$ )。(a)のインセットは  $8 \times 8$  の結果をより大きなスケールで描いたもの。

とが可能となった。すなわち、(a) 強相関 ( $U_d$ ,  $\Delta\varepsilon >$  反結合一本バンド幅) 領域を含み、(b) ドーピングが、実験的に超伝導が発現する  $\delta \sim 0.15$  付近で、(c) 基底状態(射影) 量子モンテカルロ法を用いて相関関数を計算し、その試料サイズ依存性(最大  $8 \times 8$  単位胞)から超伝導発現の可能性を調べた。1セットのパラメーターに対して要するCPU時間は数百時間にのぼる場合も多々あるので、上記の計算を、収束性の確認まで含めて行うには  $O(10000)$  K点の計算時間が不可欠であった。

電荷移動領域とモットハバード領域の双方において電子相関関数を計算した結果、そのどちらの領域においても、電子相関の効果が大きくなると(有効的な相互作用( $= \min\{U_d, \Delta\varepsilon\}$ )  $>$  反結合バンド幅),  $d_{x^2-y^2}$  波の超伝導相関関数が系のサイズとともに増大するという結果を得た(Fig. 1)。これは超伝導長距離秩序の兆候と解釈することができる。

興味深いのはこれらの兆候が電荷移動領域とモットハバードの両方の領域でみられ、両者の間に定性的な差異がないことである。特に後者の領域はその極限において単一バンドのハバード模型に帰着するので、今後、単一バンドハバード模型における超伝導発現の可能性も含めてより深く調べる必要があると考えられる。

### 一次元Hubbard Model における金属強磁性

筑波大物理 坂本 晴美  
久保 健

A. Mielke と H. Tasaki により一番下のバンドが平坦(flat)である特殊な多バンド系について、そのバンドが半分詰まる電子密度  $n = n_0$  (バンドについて half-filled) の時にクーロン相互作用  $U$  が  $U > 0$  であれば、基底状態はすべてのスピンの向きがそろう完全強磁性状態であることが厳密に証明されている[1][2][3]。さらに最近になって H. Tasaki はある格子を考えることで一番下のバンドの幅と  $U$  が有限であるときにも完全強磁性が出現することを厳密に示した[4]。ただし、このようにバンドが半分詰まった場合はブリルアン・ゾーン全域でギャップが開いているからこの系は絶縁体であると思われる。バンド幅が有限でありかつ  $n < n_0$  の系、つまり金属強磁性に対応する系では強磁性の出現が厳密に示された例は未だ存在しない。K. Pencらは Tasaki と同じモデルの一次元系を調べ、 $n < n_0$  において  $U$  が十分に大きいところでの effective Hamiltonian を導出し、それが ferromagnetic Heisenberg model になることを示した[6]。

我々は図 1 の様な電子の hopping を持つ一次元の Hubbard model を考えた。このモデルは 2 つのバンドを持ち、下の方のバンドの幅  $W$  は  $t \left[ \sqrt{16\alpha^2 + (\beta - 2)^2} - |\beta + 2| - 4 \right] / 2$  である。我々は  $\alpha$  と  $t$  をそれぞれ 2 と 1 に固定し、 $U$  とバンドの幅を決める  $\beta$  と  $n$  をパラメータとして ( $\beta$

$= 2$  で  $W = 0$  ) 基底状態のエネルギーと total spin  $S$  を密度行列繰り込み群の方法[5] を用い 32 サイトまで測定した。(境界条件は周期的とした。)

その結果電子密度が  $1/2 (= n_0)$  より低い金属状態においても  $U$  が十分に大きければ完全強磁性が出現する事がわかった。partially polarized states は出現しない。我々は常磁性状態 ( $S \approx 0$ ) から完全強磁性状態 ( $S = S_{\max}$ ) に変わる境界  $U_c$  を決めた。電子密度が  $1/2, 3/8, 1/4$  の場合について  $U_c$  のサイズ依存性を調べ 32 サイトくらいでサイズ依存性はかなり小さいことを確かめた。図 2 は 32 サイトの系での相図である。どの電子密度の場合も  $\beta$  の値が 2 からずれるにしたがって  $U_c$  が大きくなっている。また、電子数 ( $N_e$ ) が少なくなると強磁性の領域が広がっている。ただし、電子数が 2 個の場合を厳密対角化の方法で調べたところ  $U_c = \infty$  であった。我々はまた Hartree Fock 近似を用いて常磁性状態と完全強磁性状態の境界  $U_c$  を決めた。その結果も先の密度行列繰り込み群の方法を用いて得た結果と同様に電子密度が低くなるにつれて  $U_c$  が小さくなる結果が得られた。

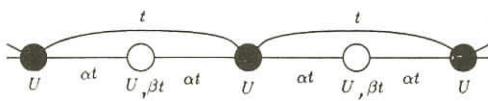


図 1 : 一次元格子と電子の hopping の様子。各サイトにはクーロンポテンシャル  $U$  があり、白丸のサイトには一体のポテンシャル  $\beta t$  がある。最隣接サイト間の hopping は  $at$ 、黒丸サイト間の hopping は  $t$  である。

## 参考文献

- [1] A. Mielke: J. Phys. A: Math. Gen. **24** (1991) L73; *ibid* **24** (1991) 3311; *ibid* **25** (1992) 4335.
- [2] H. Tasaki: Phys. Rev. Lett. **69** (1992) 1608.
- [3] A. Mielke and H. Tasaki: Commun. Math. Phys. **158** (1993) 341.
- [4] H. Tasaki: Phys. Rev. Lett. **75** (1995) 4678.
- [5] S. R. White: Phys. Rev. Lett. **69** (1992) 2863; S. R. White: Phys. Rev. B **48** (1993) 10345.
- [6] K. Penc, H. Shiba, F. Mila and T. Tsukagoshi: preprint (condmat/9603042).

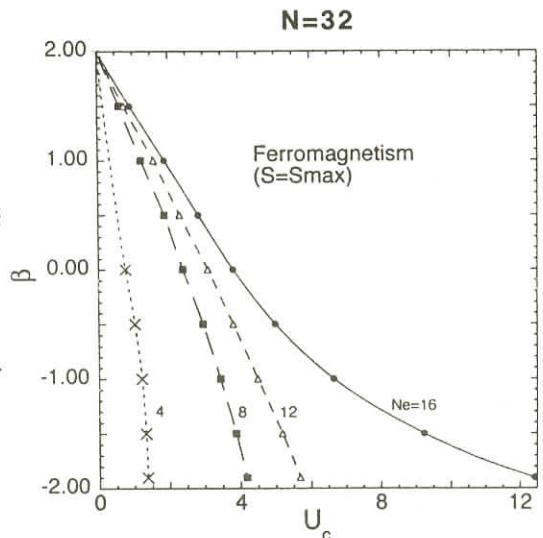


図 2 : 32 サイト系の相図 ( $N_e = 4, 8, 12, 16$ )。 $\alpha$  と  $t$  をそれぞれ 2 と 1 に固定した。したがって  $\beta = 2$  の時  $W = 0$ 。どの電子数においても  $\beta$  が 2 からずれるにしたがって  $U_c$  が大きくなっている。また、電子数が少くなるにつれて強磁性の領域が広がっている。

メゾスコピック系の量子輸送現象  
—アンチドット格子のカオスと電気伝導—

東大物性研 安藤恒也  
瓜生誠司  
中西毅  
NEC基礎研 石坂智

半導体超薄膜結晶成長技術と微細加工技術を組合せて作られる量子細線や量子ドットなどでは、平均自由行程が数十ミクロンと長いために、人工的に作られた量子構造自身による散乱が主となる。量子構造の大きさは1000 Å程度のサブミクロン領域にあり、電子の波長は300~500 Å程度であるため、電子の運動は古典論と量子論の中間的なものとなる。このため、電気伝導にカオス、さらには量子カオスが直接顔を出すことが期待される。

アンチドット格子は2次元系に周期的な強い斥力ポテンシャルを導入した人工格子の一つである。磁場中の周期系は、Hofstadterの蝶と呼ばれる、自己相似なフラクタル的エネルギースペクトルを持つことが知られている。これには非現実的な大きさの磁場が必要なため、現実の固体では観測不可能であり、人工格子であるアンチドット格子がその候補として注目されている。一方、アンチドット格子は古典的なカオスの研究の舞台となってきたシナイのビリヤードに他ならない。

アンチドット格子の電気伝導では、多くの興味深い現象が観測されている。それらは、(1)弱磁場でのホール効果の消失、(2)磁気抵抗の整合振動、(3)Aharonov-Bohm振動、(4)Altshuler-Aronov-Spivak振動、などである。これらの現象では電子の運動のカオス性が重要な役割を果たすことが明らかになってきた。特に、磁気抵抗の整合振動では、カオス軌道の中により拡散しやすい軌道が存在し、その位相空間の体積が古典的なサイクロトロン軌道半径とアンチドット格子の周期と整合性により周期的に変化するために起こると考えられる。また、Aharonov-Bohm振動は、各アンチドット格子の回りを運動する周期軌道の量子化と密接に関係している[1, 2]。さらに、Altshuler-Aronov-Spivak振動は、正方格子よりも三角格子ではっきりと観測されるが、これはアンチドットのポテンシャルのゆらぎが本質的であることがわかつてき[3]。これらの現象の統一像を求めて、現在研究を進めている。

参考文献

- 1 . S. Ishizaka, F. Nihey, K. Nakamura, J. Sone, and T. Ando, Phys. Rev. B **51** (1995) 9881; Jpn. J. Appl. Phys. **34** (1995) 4317.
- 2 . S. Uryu and T. Ando, Jpn. J. Appl. Phys. **34** (1995) 4295; Phys. Rev. B **53** (1996) 13613; Physica B (in press).
- 3 . T. Nakanishi and T. Ando, Physica B (in press); Phys. Rev. B (submitted for publication).

量子ドット系における強相関電子効果

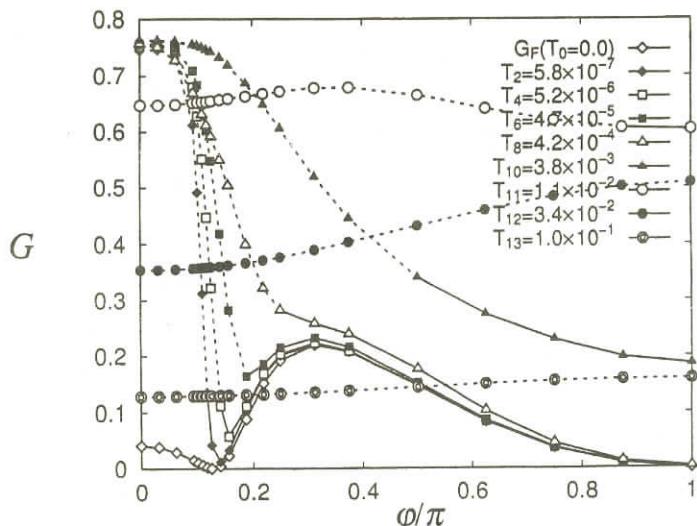
東北大理 酒井 治  
            泉田 渉  
東北大工 清水 幸弘

量子ドットでは電子間相互作用が重要な役割を果たすようになる。相互作用がトンネル現象にどのような効果を示すかは、とくに近藤問題との関連においても興味をもたれる。しかし、ドット内相互作用をきちんと取り入れ、トンネル現象を調べることは今まであまりおこなわれていない。本課題では相互作用の効果を明らかにするため、数値繰り込み群の方法を発展させトンネル電流を求めた。

量子ドットを介したトンネル効果において、ドット内相互作用により発生するスピントリニティ度も低温極限では近藤効果のため消失して、弾性的遷移によるコヒーレント過程のみとなるであろうと川畠<sup>1)</sup>により指摘された。低温から温度上昇につれスピントリニティ度が生き返り、非弾性的な過程が支配する領域に移行する。これら全領域について統一的な計算はまだ行なわれていない。明楽<sup>2)</sup>は二個のドットを含んだAharanov - Bohm(AB)回路のトンネル効果にドットのスピントリニティ度が影響を与える可能性を指摘した。最近、類似の回路においてAB効果が観測されている<sup>3)</sup>。明楽の計算は高温領域でのみ適用可能なものである。

我々は二ドット系において、低温の干渉性領域から非弾性遷移領域への移行につれ、AB効果がいかに現われるかを調べた<sup>4)</sup>。AB効果を求めるには波動関数の干渉性に注意を払う取り扱いが必要である。数値繰り込み群の方法では波動関数を直接求めているので、その点、比較的容易である。

図に様々な温度におけるトンネル電流の磁束 ( $\phi$ ) 依存性を示した。二つのドットは入れ替えに



ついて対称, また, リードも対称とするとドットの反対称軌道( $\circ$ -軌道)はリードとの混成に $\sin \phi$ の因子が付く。従って $\circ$ -軌道に対し  $\phi \sim 0$  では混成は極端に小さい。 $\phi$ 依存性は  $\pi$  に対して対称なので,  $0 \sim \pi$  の区間のみを示した。バンド幅をエネルギーの単位として混成幅( $\Delta$ )は 0.024, クーロン定数( $U$ )は 0.1, 局在順位( $\varepsilon_d$ )は -0.025 の場合である。厳密な絶対零度ではトンネル電流は  $\phi = 0$  でほぼ 0 となる。しかし, 実際は極めて低温( $T = 10^{-6}$ )でも  $\circ$ -チャネルにスピンが発生するため, トンネル電流は最大値をとっている。 $\phi$  の大きい領域ではこのスピン自由度は消失して干渉過程とした計算とほぼ等しい結果を与える。温度上昇につれ  $\phi$  依存性は緩やかになり, 高温ではほとんどの  $\phi$  に依存しなくなる。磁気励起の計算を参照すると  $\phi / \pi \sim 0.2$  附近の急激な変化は  $\circ$ -チャネルのスピン状態のクロスオーバーによる。このように  $\phi$  依存性において状態のクロスオーバーとともにトンネル電流の急激な変化の生じる可能性が示された。

- 1) A. Kawabata: J. Phys. Soc. Jpn. 60(1991)3222
- 2) H. Akera: Phys. Rev. B47 (1993)6835
- 3) A. Yacoby, et al.: Phys. Rev. Lett. 74(1995) 4047
- 4) W. Izumida, et al.: in preparation, および泉田 渉: 修士論文(1996)東北大学

#### 一次元近藤格子模型におけるフリーデル振動

東大物性研・東理大理 柴田尚和  
東大物性研 上田和夫  
東北大理 西野友年  
東理大理 石井力

一次元近藤格子模型の常磁性金属相を密度行列繰り込み群の方法を用いて調べた。近藤格子の常磁性金属相は, この模型の強磁性相や絶縁相と比べて, 良く理解されていない相である。この常磁性金属相は, 一次元の場合, 一般的な伝導電子濃度  $0 < n_c < 1$  において反強磁性的交換相互作用が小さい領域で現れる。一般に一次元の常磁性金属相においては, 強い量子ゆらぎによりフェルミ液体論は成立しない。代わって朝永ラッティンジャー液体が低エネルギー状態を記述するが, そのときでもフェルミ面の位置にはベキ異常が現れ, それによって囲まれる領域にはラッティンジャー総和則が適用される。一次元近藤格子の常磁性金属相においても他の強相関電子系と同様に朝永ラッティンジャー液体が低エネルギー状態を記述すると考えられる。しかし, このラッティンジャー総和則に伝導電子の数だけでなく局在スピンの数も含まれるかどうかという基本的な点において問題が存在する。

朝永ラッティンジャー液体の場合, 不純物ポテンシャルに対する応答としての電子密度の振動

(フリーデル振動) の周期は、電荷密度-電荷密度相関関数と同じフェルミ波数の二倍と四倍で与えられる。また、スピン密度の振動の周期はスピン-スピン相関関数に対応してフェルミ波数の二倍で与えられると考えられる。そこで我々は、このフリーデル振動を密度行列繰り込み群を用いて調べた。電荷密度とスピン密度のフリーデル振動の計算結果を図 1, 2 に示すが、このときの振動の周期は大きなフェルミ面 ( $k_F = \pi(1 + n_c)/2$ ) に対応し、ラッティンジャー総和則には伝導電子の数だけでなく局在スピンの数も含まれることを示している。

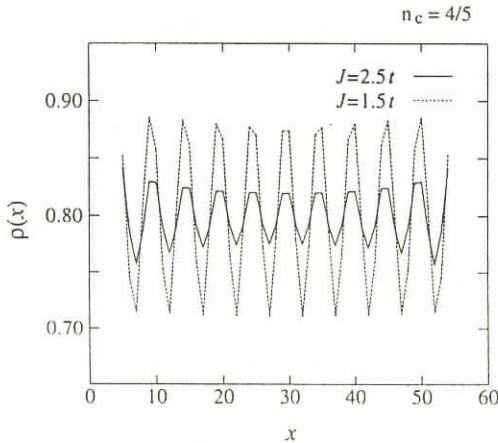


図 1

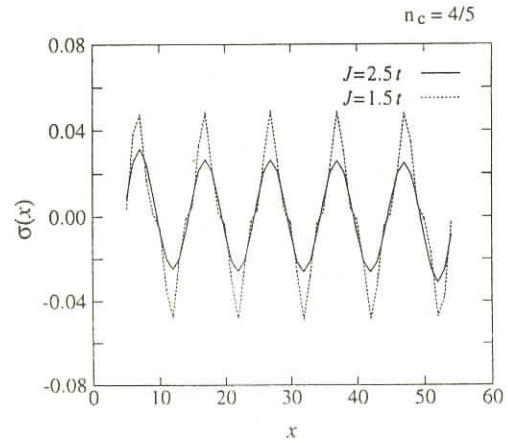


図 2

### 不純物の内部構造に依存した近藤効果に対する数値繰り込み群法の応用

東工大理 古賀幹人  
斯波弘行

$f$  電子系では軌道縮退の効果が重要であり、これが  $d$  電子系と異なる特徴の一つであると考えられる。特に、ウラン不純物による近藤効果では、ウランが複数の電子配置をもつためにフント結合を無視できない。ウラン不純物系に関するいくつかの実験報告によると、低温になるとともに帶磁率が発散するように見えるなど、フェルミ流体とは異なる振る舞いが観測された。現在、その原因の一つとして 2 チャンネル近藤効果の可能性が指摘されている。

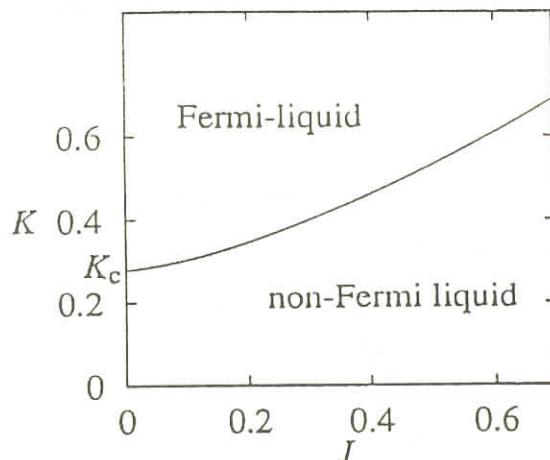
スピン軌道相互作用とフント結合が強い場合、局在電子状態の性質は、その電子数が奇数であるか偶数であるかによって異なる。結晶場がない場合、固有状態は全角運動量のモーメント  $J$  で表さ

れ、その大きさ  $J$  は、前者では半奇数、後者では整数になる。その多重項は結晶場によって分裂し、前者では二重項または四重項になり、後者では二重項の他に、一重項あるいは三重項も存在する。二重項を  $| \pm \rangle$  で表すと、前者には磁気的な結合  $(+|J_+|-)$  が存在し、これをクラマース二重項と呼ぶ。後者にはそのような結合はないが、四重極的な結合  $(+|J_+^2|-)$  が存在する。これを非クラマース二重項と呼ぶ。2 チャンネルの交換相互作用は後者の場合の四重極的な結合によるものである。局在電子状態を非クラマース二重項に限った場合は、低温でモーメントが残り、非フェルミ流体が安定になる。

われわれの課題は、現実的な系で非フェルミ流体の安定性を調べることである。特に、非クラマース二重項が局在電子の基底状態になる場合に注目し、その励起状態の効果が非フェルミ流体をどのように不安定にするかということを調べてきた。強相関の大きい極限である近藤モデルではその効果は結合定数と結晶場準位に取り込まれる。例えば、二重項と一重項からなる系で、前者だけによる有効交換相互作用に関する結合定数を  $J$ 、両者によるものを  $K$  とすると、繰り込みの安定な固定点の相図は下図（伝導バンド幅の半分をエネルギーの基準とし、局在電子状態の両者のエネルギー準位差は 0.3 に固定してある）のようになることがわかった。 $K$  が大きくなると局在電子の励起状態が近藤効果に効いてきて、 $K$  が  $J$  と同程度の大きさになると非フェルミ流体が不安定になる。

以上のように、近藤効果は不純物の原子構造に非常に敏感であり、 $f$  電子数が偶数の系ではフェルミ流体と非フェルミ流体の競合が起こることが期待される。

このような現実的な系を調べる場合、数値計算が大規模になる。その理由は、軌道縮退の自由度や結晶場効果による保存量の減少のために、計算に要するメモリー量が大きくなるからである。そのため、いくつかの制限をつけてモデルを簡単化している。しかし、将来計算機の性能が向上すれば、現実的な系をまともに扱うことができ、実験との比較も可能になる。



図：フェルミおよび非フェルミ流体の安定領域の相図

## 粉体流動層の計算機シミュレーションとその物理

京都大学人間・環境学研究科 早川 尚男

本講演では粉体流動層の計算機シミュレーションに対する新しい手法を紹介してその有効性を示した。

粉体流動層は粉体と気体などの第2流体が共存する混相系であり工業上多くの応用があるために従来、化学工学を中心とした分野で盛んに研究されてきた。最近、物理サイドからの粉の研究が盛んになるにつれて流動層の研究そのものも大きく様変わりしてきている。流動層の計算機シミュレーションそのものもそれほど古いものではない。従来の混相流モデルに基づくもの、離散要素法に基づくものなどがスタンダードなものとして取り上げられて来たが改めて物理サイドからこれらの手法を眺めてみると現象論的なパラメーターの決定が難しいばかりでなく流体の効果を過小評価しているきらいがある。従って粒子の存在が流体の場に及ぼす影響を見積もった信頼のおけるシミュレーションが必要とされている。

そこで我々は従来の方法に変わってサスペンションに対して用いられて成功したStokesian Dynamicsと呼ばれる手法を粉体流動層の問題に適用して新たに現象論的なパラメーターを導入せずに流動層のシミュレーションを行なった[1]。シミュレーションのモデルを作る上で鍵となるのがランダムなサスペンションの沈殿法則である。まず手始めに沈殿の理論を作り、高濃度では遅い沈殿速度という実験と定量的に一致する結果を得た[2]。その理論と矛盾しないシミュレーション法を行なったのがStokesian Dynamicsである。ただサスペンションの場合と異なるのは粒子の慣性を考慮して粒子間のハードコアによる衝突を採り入れた点である。その衝突の頻度を表す無次元パラメーターをコントロールすることで様々な興味深い結果を得た。

まず粒子がほぼ一次元的な細管に閉じ込められている場合には一様に粒子が分布した状態は不安定になり空隙が上方へ伝播することが観測される。これは実験的にスラグと呼ばれるものに対応しており理論解析も進んでいる。また横方向の広がりが充分ある容器の底に固定粒子を入れた場合にはリアルな気泡を再現した。気泡の出現には沈殿速度の差から最初にスラグ構造（つまり高濃度領域が流体の静止フレームで遅い沈殿をし、その結果粒子がクラスター化する）が出来、それがRayleigh - Taylor instabilityを起こすものであることがわかった。詳細は現在、解析中である。

### 参考文献

- [1] K.Ichiki and H.Hayakawa, Phys. Rev. E **52**, 658 (1995).
- [2] H.Hayakawa and K.Ichiki, Phys. Rev. E **51**, R3815 (1995).

## 複雑液体の非線形ダイナミクス－液体相変化のシミュレーション－

名大工 松本充弘

### 【はじめに】

複雑液体とは、高分子・コロイド・ミセル・液晶・ゲル・水素結合ネットワークなどメソスコピックなスケールや階層性を持つ液体で、基礎科学としても応用面からも重要な系である。我々は、こうした複雑液体の動的挙動－構造形成・揺らぎ・流動特性など－の解明を目的として、モデル系の大規模数値計算をすすめてきた。本稿では、これらのうち、ゲル・液体表面・核生成の3つの成果を報告する。

### 【ゲル化過程の動力学】<sup>1)</sup>

ゲル化過程は従来、パーコレーション理論などによる静的モデルでの解析が行なわれてきたが、実験的にはゲル化の進行と共に密度の不均一が現れるなどの興味深い現象が見つかっている。我々は、2次元格子上をブラウン運動する線形バネモデルを用いて、ゲル化の動力学シミュレーションを行い、構造の時間発展を追跡した。このモデルでは、バネの両端に結合基があり、結合基同士が拡散により同一格子点上にくるとある確率で結合するというので、結合確率は結合エネルギーに応じてMetropolisモンテカルロ法的に決定する。

鎖の密度が小さいときには転移は起こらないが、密度が大きくなってくると、連結したネットワークが全系を覆い尽くすようになり、重量平均分子量が発散しゲル化が起きる。図1にこの時の構造因子 $S(k)$ の時間変化を示した。時間の進行と共にピークの位置が低波数側にシフトするが、ある時間でピークの位置は固定され、ゲルの特徴的長さが変化しなくなることを表している。

これがゲルの構造不均一に対応するもの

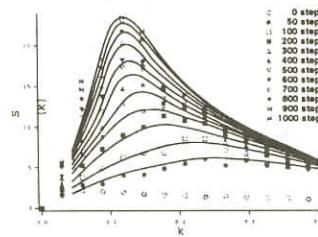


Fig.1 Structure factor during gelation process.

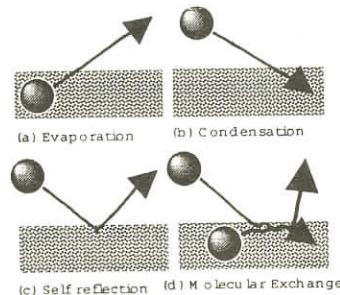


Fig.2 Elementary processes near liquid surface.

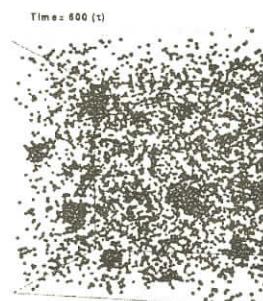


Fig.3 Snapshot of gas phase homogeneous nucleation process.

と思われる。

#### 【液体の蒸発凝縮過程】<sup>2)</sup>

界面系の輸送現象を流体力学的に扱うには、境界条件が重要になってくる。蒸気の凝縮過程では、気体領域は Boltzmann 方程式などによる解析が可能であるとして、液面と接触する部分において、物質輸送やエネルギー輸送がどのように行われるかを考えるには、もうひとつ下（ミクロ）のレベルでのメカニズムの理解が不可欠である。

我々は分子動力学法を用いて、液体表面付近の分子の動的挙動を調べ、図 2 に示すような素過程の存在を明らかにした。このことは、界面での蒸発凝縮を单分子化学反応として遷移状態理論などを適用してきたこれまでの取扱いが不十分であることを示すものである。凝縮係数  $\alpha$  (= 界面に衝突する蒸気流速に対する凝縮流速の割合) についての定量的な解析から、次のことが明らかとなつた：

- (1) 単純液体（アルゴン）でさえ、 $\alpha$  は 1 よりも小さい。
- (2) 会合性液体の  $\alpha$  は単純液体に比べてさらに小さい（=凝縮しにくい）。これは、主として分子交換のためで、メタノールなどでは分子交換は自己反射の数倍にものぼる。
- (3)  $\alpha$  は温度の上昇と共に単調減少する。特に、気液臨界温度近傍では、単純液体でさえ  $\alpha$  は 0.1 よりもさらに小さくなり、凝縮が遅くなる。これは、主として分子交換の増加による。

#### 【気相核生成過程】<sup>3)</sup>

バルク自由エネルギー差と界面張力（界面過剰自由エネルギー）から生じる自由エネルギー障壁を乗り越えて 1 次相転移が進行するとする核生成理論はよく知られているが、過飽和蒸気からの均一核生成過程は実験の困難さもあって理論の検証（臨界核の存在、定常状態近似の妥当性など）は十分に行なわれていない。

我々は、凝縮性蒸気分子と非凝縮性キャリアガス分子の混合系を急冷することにより、気相均一核生成の分子動力学シミュレーションを行い、核生成速度が従来の理論予測よりも 2 衍も大きいことを見出した。図 3 からもわかるように、生成されるクラスターは球形からひどく大きく変形しており、また内部温度も周囲の蒸気とは異なるなど、理論における種々の仮定の妥当性を検討することができた。

#### 【文 献】

- 1) T.Isogai, M.Do, submitted.
- 2) M.Matsumoto, K.Yasuoka, Y.Kataoka, *Thermal Sci. Eng.*, **3**, 27 (1995).
- 3) K.Yasuoka, M.Matsumoto, in preparation.

## アルカリケイ酸塩ガラスにおける「混合アルカリ効果」の機構

東工大総合理工 巾 崎 潤 子

### <はじめに>

我々は、分子動力学(MD)シミュレーションにより、Li<sub>2</sub>SiO<sub>3</sub>ガラスにおける混合アルカリ効果を再現し、van Hove関数の解析から、異種アルカリ金属イオンサイト間のジャンプ経路が、遮断されていることを証明した[1]。一方、Li<sub>2</sub>SiO<sub>3</sub>系のα緩和についての解析結果から、Liの緩和挙動を記述するには時間と空間の両方のフラクタル性を考慮する必要があることがわかった[2]。そこで、これらの系におけるジャンプ経路の可視化を試み、ジャンプの経路及びジャンプ運動のフラクタル次元解析を行い、ジャンプ運動の幾何学的な特性について検討した。

### <結果及び考察>

ガラス転移点近傍まで温度を上げてMDシミュレーションを行い、Li<sub>2</sub>SiO<sub>3</sub>系(800K)におけるLi<sup>+</sup>、K<sup>+</sup>の0.4psごとの平均座標を16psにわたって立体的に表示した。これらの経路は、局所的には低次元の構造をしているが、全体的には大きさの違うパーコレーションクラスターの集合体となっている。混合系での経路はLi<sup>+</sup>およびK<sup>+</sup>の経路に立体的に重なりがほとんどなく、相互に分断されている。単一塩と比較すると局所的な構造変化は比較的小さく、クラスター同士が離れている点が大きく異なっている。この経路中でのジャンプ運動には、(i)個々のアルカリ金属イオンの運動については、back-correlationが非常に大きい、(ii)複数の同種アルカリ金属イオンが連動してジャンプする例が多い、という特徴が見られた。

アルカリ金属イオンのジャンプ運動の軌跡のフラクタル次元、 $d_w$ を求めたところ、Li<sub>2</sub>SiO<sub>3</sub>系では、Li<sub>2</sub>SiO<sub>3</sub>、K<sub>2</sub>SiO<sub>3</sub>系よりこの値が大きかった。つまり、Li<sub>2</sub>SiO<sub>3</sub>系の方が個々のイオンのback-correlationが大きい。この結果は、経路の分断の結果として合理的である。しかし、単独ジャンプ機構ではジャンプの幾何学的相関係数と等しくなるはずのHaven ratioが、混合系で極大値を示すという実験結果には、一見矛盾している。Haven ratioは振動数依存のトレーサー及びバルクの拡散係数を用いて  $f_\sigma = \frac{D^t(0)}{D^b(0)}$  で定義される。

$$D^t(f) = \frac{1}{zN} \int_0^\infty dt e^{i2\pi ft} \left\langle \sum_{i=1}^N \nu_i(t) \cdot \nu_i(0) \right\rangle \quad (1)$$

$$D^b(f) = \frac{1}{zN} \int_0^\infty dt e^{i2\pi ft} \left\langle \sum_{i=1}^N \nu_i(t) \cdot \sum_{j=1}^N \nu_j(0) \right\rangle \quad (2)$$

ここで、 $z$ は次元、 $N$ は伝導イオンの個数である。各系でのバルクの速度自己相関関数を求めるトレーーサーの速度相関関数よりも振幅が大きいという、超イオン伝導体等に特徴的な挙動が見られた。また、混合系ではバルクの速度相関関数が、より振動的になっていることがわかった。つ

まり、混合の影響は協調運動の方に著しい。

同一方向に同時に動くイオン間の速度相関は、Haven ratioを小さくするので、アルカリケイ酸塩においても、運動ジャンプの拡散への寄与が、単一塩の方が大きいことを考慮すればHaven ratioの組成依存性を合理的に説明できる。また、このような連動ジャンプの関与する空間的な領域はかなり長距離になるので、運動に影響の大きいのは局所構造ではなく、クラスターとしての構造であろう。これに対して、単独ジャンプは近距離でのフラクトン次元に依存し、back-correlationが非常に大きいため、系の長時間挙動にはあまり寄与しないと考えられる。

従って、混合アルカリ効果には、ジャンプ経路のクラスター構造が分断されることによる同種イオンの連動ジャンプの寄与の減少が大きな役割をしている。

#### 参考文献

- [1] J. Habasaki, I. Okada and Y. Hiwatari, *J. Non - Cryst. Solids*, **183**, 12, (1995).
- [2] J. Habasaki, I. Okada and Y. Hiwatari, *Phys. Rev.*, **E52**, 2681, (1995).

#### 低次元系での量子ゆらぎとスピン秩序

大阪大学理学研究科 宮下精二  
渡部祐己  
京都大学人間・環境学研究科 路次美紀子  
黒田明義

低温でのスピン配位における量子ゆらぎの効果のありかたを、対角化法、量子モンテカルロ法などによって研究している。特に、相互作用による古典的安定状態が量子ゆらぎによって不安定化する現象として、いろいろなタイプの梯子格子の研究を行なった。特に、強磁性鎖+反強磁性ハイゼンベルクボンドからなる場合、基底状態で鎖方向に強磁性秩序がある古典基底状態が、反強磁性ハイゼンベルクボンドのシングレット状態化に伴い不安定化する相転移の様子をエネルギーギャップ(*J. Phys. Soc. Jpn.* 65 (1996) 883)や鎖方向の秩序の相関距離のサイズ依存性から詳しく調べた。また、有効秩序変数の方法でこの相転移が、2次元イジング模型のユニバーサリティクラスに属していることを示した。

また、量子ゆらぎによる強磁性-量子無秩序基底状態相転移の例として、競合系である三角、かごめ、 $\Delta$ 鎖格子上でのイジング的反強磁性ハイゼンベルク模型で基底状態の磁化のスピノの大きさの効果を調べた。スピノの大きさが $1/2$ の場合にはいずれの格子でも基底状態は磁化 $0$ の空間にあり、古典系でのフェリ秩序は消失しているのに対し、 $S \geq 1$ では異方性によって基底状態が磁化をもつ場合があることが発見された。

もう一つのゆらぎの源泉として伝導電子効果があるが、最近興味をもたれているフラットバンドをもつハバード模型や近藤格子模型での強磁性出現に関して量子モンテカルロ法や対角化法による研究を行なっている。特に、前者ではいわゆる長岡強磁性状態(1/2-filled-1)からフラットバンド強磁性状態(1/4-filled 田崎等)の間に規則的な完全強磁性状態があることが見出された。また、後者では、化学ポテンシャル一定の条件での有限温度の振舞いを示し、従来の粒子数一定の研究と相補的な情報を明らかにした。

さらに、ゆらぎによる興味深い現象として三角格子反強磁性XY的ハイゼンベルク模型の磁化過程についても古典系に関する研究成果を発表した。この系の基底状態は、いわゆるアンプレラ型であるが、有限温度ではエントロピー効果のため、新しいタイプの高磁場相の存在が予測されている(二国・斯波)が、その存在を古典モンテカルロ法で調べ、大まかな相図を求めた。また、高磁場相の特徴づけについても議論した。

### ランダムハイゼンベルグモデルの密度行列繰り込み群による研究

埼玉大理 飛田和男

密度行列繰り込み群(DMRG)法[1]は1次元量子系の低エネルギー状態を精度よく求める効率的な方法として、最近盛んに研究されている。ここでは、この方法を1次元ランダムハイゼンベルグモデル

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N 2J_i S_i S_{i+1}, \quad |S_i| = 1/2, \quad (1)$$

に適用し、スケーリング理論との比較を行った。

まず、分布

$$J_i = \begin{cases} J & \text{確率 } p, \\ J' & \text{確率 } 1-p. \end{cases} \quad (2)$$

によって与えられる1次元反強磁性ランダムハイゼンベルグモデルについて、エネルギーギャップの分布を調べた。この場合、スケーリング理論から予測されるとおりギャップの対数 $\ln \Delta$ の分布は $\ln(\Delta/\Delta_0)/\sqrt{N}$ ( $\Delta_0=\text{const.}$ )でよくスケールされることがわかった[2]。

次に、分布 
$$P(J_i) = \begin{cases} P_{AF}/\Delta J & J_{\min} \leq J_i \leq J_{\max} \\ P_F/\Delta J & -J_{\max} \leq J_i \leq -J_{\min} \end{cases} \quad (3)$$

(ここで $\Delta J = |J_{\max} - J_{\min}|$ ,  $P_{AF} + P_F = 1$ )で与えられる強磁性-反強磁性ランダムハイゼ

ンペルグモデルについてギャップの分布を調べた。この場合、強磁性ボンドが存在するため、基底状態はシングレットでない場合がある。従って、全スピンのz成分の異なる状態も含めて密度行列を構成する必要がある。このモデルでは、ギャップが $N^{-z}$ ( $z \approx 2.27$ )でスケールする事がスケーリング理論から予測されている[3]。DMRGによる計算結果は、反強磁性ボンドのみの場合の指数関数的振る舞いからのずれを示しているが、 $N$ の巾を正確に定めるには至っていない。これは、スケーリング理論でfixed distributionに近づく速さが極めて遅いため、数値計算の範囲では十分にfixed distributionに近付いていないためと考えられる。

さらに、今後、この方法を、スピニバイエルス系などで最近注目を集めているランダムネスによる長距離秩序のenhancementの問題[4,5]などに適用していく予定である。

#### 参考文献

- [1] S. R. White: Phys. Rev. Lett. **69** 2863 (1992); Phys. Rev. B**48** 10345 (1993).
- [2] K. Hida: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 895 and references therein.
- [3] E. Westerberg, A. Furusaki, M. Sigrist and P. A. Lee: Phys. Rev. Lett. **75** (1995) 4302.
- [4] H. Fukuyama, T. Tanimoto and M. Saito: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 1182.
- [5] Y. Motome, N. Kato, N. Furukawa and M. Imada: preprint (1996)

#### 2種類の大きさのスピンから成る1次元量子スピン系

神 戸 大 理	利根川 孝
神戸大國際文化	鎧 木 誠
阪 大 理	宮 下 精 二

大きさが $1/2$ のスピンと $1$ のスピンとが規則的に配列している1次元量子スピン系を考える。両スピンが交互に並んでいる系の例として、 $\text{NiCu}(\text{pba})(\text{H}_2\text{O})_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (pba=1,3-Propylenebis(oxamato))が現実に存在する。この系に対して、帯磁率の温度変化等の測定が行われ、スピン数が10個程度までの有限系に対する計算結果との比較が議論されている。この系の基底状態は有限な大きさの磁気モーメントを持つ状態(磁気的状態)であり、帯磁率は低温で発散する。

基底状態が磁気モーメントを持たない状態(非磁気的状態)である場合を調べることを目的として、本研究では、大きさが $1/2$ のスピンと $1$ のスピンとが2個づつ交互に並んでいる系を取り扱う。この系を記述するハミルトニアンを次のように書く:

$$\mathcal{H} = \sum_{\ell=1}^{N/4} (J_1 \vec{s}_{4\ell-3} \cdot \vec{s}_{4\ell-2} + J_2 \vec{s}_{4\ell-2} \cdot \vec{s}_{4\ell-1} + J_3 \vec{s}_{4\ell-1} \cdot \vec{s}_{4\ell} + J_2 \vec{s}_{4\ell} \cdot \vec{s}_{4\ell+1}) \quad (\vec{s}_{N+1} \equiv \vec{s}_1).$$

ここで、 $N$ (4の倍数とする)は全スピン数、 $\vec{S}_\ell$ は $\ell (=1, 2, 5, 6, \dots, N-3, N-2)$ 番目の格子点を占める大きさ $1/2$ のスピン演算子、 $\vec{S}_\ell$ は $\ell (=3, 4, 7, 8, \dots, N-1, N)$ 番目の格子点を占める大きさ $1$ のスピン演算子である。

1)  $J_1 = J_3 > 0, J_2 > 0$  で、 $J_1 \ll J_2$  の場合、系は最近接相互作用が $J_1$ である‘スピン- $1/2$ ’反強磁性鎖に相当し、また、2)  $J_1 = J_3 > 0, J_2 < 0$  で、 $J_1 \ll |J_2|$  の場合、系は最近接相互作用が $J_1$ である‘スピン- $3/2$ ’反強磁性鎖に相当する。従って、これらの場合、系の基底状態と励起状態との間にエネルギーギャップは存在しないと予想される。一方、3)  $J_1 < 0, J_2 = J_3 > 0$  で、 $|J_1| \gg J_2$  の場合は、系は最近接相互作用が $J_2$ である‘スピン- $1$ ’反強磁性鎖に相当し、基底状態と励起状態との間に有限な大きさのエネルギーギャップが存在すると予想される。有限系の対角化の方法を用いて計算した、 $N=4, 8$  の有限系に対する比熱の温度変化の低温での振る舞いは、これらの予想とコンシントである。

今後、量子モンテカルロ法、ランチョス法に基づいた有限系の対角化法、クラスター転送行列法等を用いて、系の基底状態、低エネルギー励起状態、有限温度での性質を調べる計画である。

### 一次元強磁性体と反強磁性体の低温熱力学

東大物性研 高 橋 實

長い間スピン $1/2$  反強磁性XXX鎖

$$\mathcal{H} = J \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} - 2h \sum_i S_i^z, \quad (1)$$

の帶磁率は温度の関数として低温で異常性はないと考えられてきた。しかし最近我々はこの系でつぎのような対数異常性があることを理論的に見いだした[1]。

$$\chi(T) \simeq \chi(0) \left( 1 + \frac{1}{2 \ln(T_0/T)} \right). \quad (2)$$

これは熱力学ベーテ仮説方程式の数値計算により確立され、実験的にもDMTzNC-TCNQ[2]とSr<sub>2</sub>CuO<sub>3</sub>[3]で確認された。磁場の関数として絶対零度の帶磁率はやはり対数的異常性があることが知られている。

$$m/h = \chi(h) \simeq \chi(0) \left( 1 + \frac{1}{2 \ln(\gamma/h)} \right). \quad (3)$$

我々はこの異常性を詳しく調べまたハバード模型やt-J模型でもこのような異常性があることを確かめた[4]。このような性質は一次元のスピンが半奇整数の場合の一般的性質と考えられる。スピンが整数の場合の研究報告は[5]で詳しく行なったのでここでは触れないことにする。

一方強磁性鎖は帶磁率 ( $\partial m / \partial h$ ) は低温で  $T^{-2}$  で発散する。これは古典系でもスピン 1/2 でもそうであり、一般的のスピンでも同じであろうと考えられる。ここで  $\partial^3 m / \partial h^3$  を我々は計算し、 $T^{-6}$  で発散することを発見した [6, 7]。このことは古典系であるか量子系であるかによらない磁化のスケーリング関数の存在を暗示している。最近このスケーリング関数の計算は量子ローターの問題と等価であることがわかり、詳しく計算された [8]。

$$\begin{aligned} \phi_M(g, 0) = & \frac{2}{3}g - \frac{44}{135}g^3 + \frac{752}{2835}g^5 - \frac{465704}{1913625}g^7 \\ & + \frac{356656}{1515591}g^9 - \frac{707126486624}{3016973334375}g^{11} + \frac{1126858624}{4736221875}g^{13} \\ & - \frac{5083735857217648}{20771861407171875}g^{15} + \dots \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \phi_M(g, 0) = & 1 - \frac{g^{-1/2}}{2} - \frac{g^{-3/2}}{128} - \frac{3g^{-2}}{512} - \frac{159g^{-5/2}}{32768} \\ & - \frac{297g^{-3}}{65536} - \frac{19805g^{-7/2}}{4194304} - \frac{91089g^{-4}}{16777216} - \frac{14668507g^{-9/2}}{2147483648} \\ & - \frac{20057205g^{-5}}{2147483648} - \frac{3794803731g^{-11/2}}{274877906944} - \dots \end{aligned} \quad (5)$$

## 参考文献

- [1] S.Eggert, I.Affleck and M.Takahashi, Phys. Rev. Lett. 73 332 - 335 (1994).
- [2] S.Takagi, H.Deguchi, K.Takeda, M.Mito and M.Takahashi: to appear in J. Phys. Soc. Jpn.
- [3] N.Motoyama, H. Esaki and S.Uchida, Phys. Rev. Lett. 76 3212 - 3215 (1996).
- [4] K.Kawano and M.Takahashi, J.Phys. Soc. Jpn. 64 4331 - 4344 (1995).
- [5] M.Takahashi and T.Sakai, Computational Physics as a New Frontier in Condensed Matter Research, Edited by H.Takayama et al (1995, The Physical Society of Japan)
- [6] H.Nakamura and M.Takahashi, J.Phys. Soc. Jpn 63, 2563 - 2571(1994).
- [7] H.Nakamura, N.Hatano and M.Takahashi, J.Phys. Soc. Jpn 64, 4142 - 4155 (1995).
- [8] M.Takahashi, H.Nakamura, and S.Sachdev, Phys. Rev. B54 744 - 747 (1996).

## 連続虚数時間量子クラスタモンテカルロ法

東邦大理 川島直輝

量子多体問題の数値解法は多くあるが、ファインマンの経路積分を鈴木・トロッター公式[1]を用いて離散化して計算する、いわゆる「世界線の方法」によるモンテカルロシミュレーションは、他の方法に比べて汎用性があり、また、モンテカルロ法であるから大きい系を扱えるという利点を持っている。しかし、(必ずしもこの方法に特有と言うわけではないが)問題点もあり、よく現れるものとして、1)不符号問題と、2)低温、臨界点近傍、または、稠密な離散化の場合などにみられる非常に長い自己相関時間がある。前者については多くの研究者が解決法を模索しているが、今のところ、決定的な解決のない難問である。自己相関時間に関連した困難は、不符号問題よりは深刻さの度合いが小さいせいか、比較的とりあげられることが少なかったが、近年、量子系の数値計算にも高い精度が要求されるにつれて、解決が望まれるようになってきた。

そこで、我々は、イジングモデルの場合に知られていた、分配関数の浸透系表現[2]を量子系の場合に一般化することにより、自己相関時間の小さいクラスタアルゴリズムを構成した[3]。最近、Beard と Wiese[4]が、このクラスタアルゴリズムの一種であるループアルゴリズムを連続虚数時間の表現のもとで行うというアイデアを提案した。このアイデアには、これまで常に特別な取り扱いが必要であった虚数時間離散化に伴う系統誤差のない計算が出来るという利点がある。我々の提案した一般の量子スピン系に対するクラスタアルゴリズム[3]の連続虚数時間極限を考えることにより、このアイデアを、以下の様に自然に一般の量子系にも応用することができる。

文献[3]などによれば、2スピン間相互作用を表す局所的なボルツマン演算子  $\hat{\rho} \equiv e^{-\Delta\tau \hat{H}_2}$  が  $\hat{\rho} = \sum_G v(G) \hat{\Delta}(G)$  の様に、グラフ  $G$  に関する和としてかけるとき、クラスタアルゴリズムを決定するグラフの割り当て確率は  $P(G | S) = v(G)/w(S)$  と求められる。ここで、 $\Delta\tau$  は  $\beta/(Trotter$  数)、 $w(S)$  は  $\hat{\rho}$  の行列要素である。 $\Delta\tau \rightarrow 0$  の極限をとると、ハミルトニアンが  $\hat{H} = -\sum_G a(G)$  と書いているとして、 $\hat{\rho} = \hat{I} + \Delta\tau \sum_G a(G) \hat{\Delta}(G)$  となるので、グラフ  $G$  の割り当て確率は次の様になる。

- 1) 状態の変化のない虚数時間区間での単位虚数時間あたりのグラフ割り当て確率は

$$\frac{dP(G | S)}{d\tau} = a(G), \quad (1)$$

- 2) 状態の変化している時刻における割り当て確率は

$$P(G | S) = a(G) / \sum_{G'}' a(G'). \quad (2)$$

ここで分母の和は状態  $S$  とつじつまのあったグラフについてだけの和をあらわす。

- [1] M.Suzuki, Prog. Theor. Phys. **56**: 1454 (1976).
- [2] P.W.Kasteleyn and C.M.Fortuin, J.Phys. Soc. Jpn. **26** (Suppl.):11(1969).
- [3] N.Kawashima, J.Stat. Phys. **82**: 131 (1996), and references cited therein.
- [4] B.B.Beard and U. - J. Wiese, preprint (cond - mat 9602164).

### 時空上で考えるDMRG

東北大理 西野友年  
阪大理 奥西巧一

e-mail:nishino@cmpt01.phys.tohoku.ac.jp

- I. 近年の経緯 : White によって確立された密度行列繰り込み群(DMRG)[1,2] は, 一次元量子系に対する精巧な実空間繰り込み群である。(注 : 最近になって, 同計算法は高速化された--- DMRG++とも呼ばれる[3]。) Ostlundは, DMRGを変分法として捕え, 熱力学極限で一次元量子系の基底状態及び励起エネルギーの運動量依存性を計算する方法を与えた[4]。
- II. 古典系へのDMRGの導入 : 一次元量子系の統計力学を考え, 量子状態の虚時間発展を経路積分で書き表わすと, 時間推進のオペレーター  $\exp(-\beta H)$  が二次元古典系のボルツマン重率として表わされる。(題名で「時空」と大げさに書いてある物の正体は, この  $1 + 1$  次元系の事である) 従って, DMRGをそのまま二次元古典系に持ち込む事が可能である[5]。
- III. 密度行列の一般化 : IIで古典系に持ち込まれたDMRGを解析すると, 密度行列が「切れ目に入った2次元系」に対応している事が分かる。より一般的には, ある勝手なサイズ・形状・境界条件を持った二次元古典系  $A$  が与えられた時, その系を曲線(又は直線)  $L$  に沿って切り開いて得られた系  $A'$  のボルツマン重率は,  $A$  の密度行列になっている[6]。従って, 二次元古典系をいくつかの部分に切りわけ, 各部分をDMRGの処方に従って繰り込む事が可能である。
- IV. 角転送行列繰り込み群 : Baxterは二次元古典系を四分割し, 各部分(Corner)を繰り込む処方を与えた[7]。Baxterの方法は, 熱力学極限でDMRGに等しい[8]。我々は, 両者を包含する繰り込み群処方を与えた。これが「角転送行列繰り込み群」の方法である[9]。
- V. 臨界指数の計算 : 角転送行列繰り込み群と有限サイズスケーリングを組み合わせる事によって, 二次元古典系の臨界指数を精密に求める事が可能である[9]。例えばイジング模型の場合, 算出された値は,  $\nu = 1.0006$ ,  $\eta = 0.2501$  で, 厳密解( $\nu = 1$ ,  $\eta = 0.25$ )と良く一致している[6]。

DMRGを二次元古典系から眺める事によって、同手法をよく深く理解する事ができる。

- [1] S.R. White, Phys. Rev. Lett. 69(1992) 2863.
- [2] S.R. White, Phys. Rev. B48(1993) 10345.
- [3] S.R. White: Preprint, cond - mat/9604129.
- [4] S.Ostlund and S.Rommer: Phys. Rev. Lett 75 (1995) 3537; cond - mat/9606213.
- [5] T.Nishino, J.Phys. Soc. Jpn. 64, No.10 (1995) 3598.
- [6] T.Nishino and K.Okunishi, Summer School Note (1996).
- [7] R.J.Baxter: J.Math.Phys.9 (1968) 650.
- [8] 奥西巧一：修士論文，大阪大学(1996).
- [9] T.Nishino and K.Okunishi, J.Phys. Soc. Jpn 65 (1996) 891.
- [10] T.Nishino, K.Okunishi and M.Kikuchi, Phys. Lett. A213 (1996) 69.

## S = 2 量子スピン鎖における隠れた秩序と相転移

東 大 ・ 工 山 中 雅 則  
British Columbia 大 押 川 正 育  
阪 大 ・ 理 宮 下 精 二

スピン 1 の Haldane 系[1]において、理論的には Affleck - Kennedy - Lieb - Tasaki [2] による Valence - Bond - Solid(VBS) 状態の考察が極めて重要な役割を果たした。Haldane は、スピン量子数の値に応じて、系統的に基底状態の性質が変化することを予想している。さらに、 $S > 1$  の場合、より複雑な構造を示唆する事実も存在する。このように、 $S > 1$  の系も興味深い研究対象である。

ここでは、スピン 2 のボンド交替模型を例にとり、VBS 状態による描像がスピン 1 以外の模型においても有効かどうかを、数値的手法（量子モンテカルロ法）に基づき調べた[9]。測定する物理量は generalized string correlation [3]

$$O_{string}^z(i, j; \theta) = \lim_{|i-j| \rightarrow \infty} \left\langle S_i^z \exp \left( i\theta \sum_{k=i}^{j-1} S_k^z \right) S_j^z \right\rangle \quad (1)$$

である。これは、 $\theta = 0$  の場合通常のネール相関関数に、 $\theta = \pi$  の場合整数スピンに対する string - order parameter に帰着する。さらに、整数スピンの系においては、隠れた  $Z_2 \times Z_2$  対称性の破れ[4] と関係している order parameter であり、 $S = 1$  の場合の den Nijs - Rommelse によ

るstring order parameter [5] の拡張となっている。

Affleck - Haldane [6] は、スピン S ボンド交替模型におけるdimerization転移を、場の理論を用いることで考察した。これは、ハミルトニアン

$$H = \sum_i \left[ (1 + \delta) \vec{S}_{2i-1} \cdot \vec{S}_{2i} + (1 - \delta) \vec{S}_{2i} \cdot \vec{S}_{2i+1} \right] \quad (2)$$

において、 $\delta (-1 < \delta < 1)$ の変化と共に、基底状態には(1) 2S+1 個のエネルギーギャップをもつ異なる相が現れ、(2) それぞれの相の間はエネルギーギャップの存在しない相転移点により区別される、ということが主な主張である[7]。

各相は、Valence - Bondの腕の数の違いにより特徴付けられる、というものがVBS状態による描像である[8]。これらの転移と隠れた対称性の破れとの関係、また、VBS描像におけるgeneralized string correlation のふるまいが議論された[3]。

スピン 2 の場合における、VBS 描像に基づく各相の基底状態の模式図と、隠れた対称性の破れとの関係をFig.1 に示す。これと、ボンド交替模型に対する計算機実験の結果は定性的に一致している。

次に、generalized string correlationについての結果( $\delta = 0.6$ )をFig.2 に示す。破線はFig.1 のVBS状態に対する(解析的な)期待値である。VBS 描像においては、それぞれの相は generalized string correlationの零点の個数により区別されるが、ボンド交替模型に対する計算機実験の結果は、VBS状態に対する結果と一致している。また、両者の零点も一致を示唆している。

以上の結果から、VBS状態による描像は、少なくともスピン 2 のボンド交替模型においては有効であると考えられる。また、それぞれの相は、隠れた $Z_2 \times Z_2$ 対称性の破れの概念により区別できる。

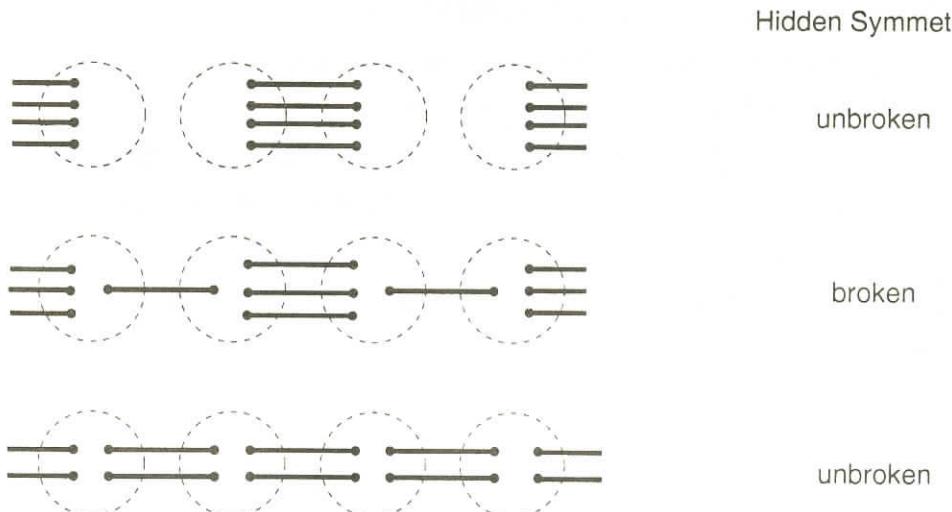


Fig. 1

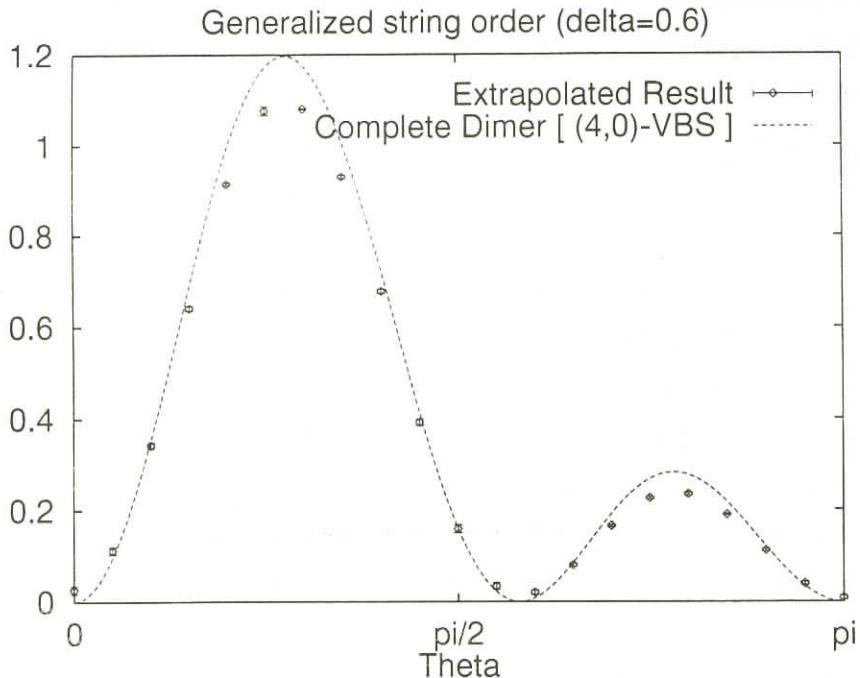


Fig. 2

### 参考文献

- [1] F.D.M.Haldane, Phys. Lett. **93A** 464 (1983); Phys. Rev. Lett. **50** 1153 (1983).
- [2] I.Affleck, T.Kennedy, E.H.Lieb, and H.Tasaki, Comm. Math. Phys. **115** 477(1989).
- [3] M.Oshikawa, J.Phys. Condens. Matter **4** 7469 (1992).
- [4] T.Kennedy and H.Tasaki, Phys. Rev. B**45** 304 (1992).
- [5] M den Nijs and K.Rommelse, Phys. Rev. B**40** 4709 (1989).
- [6] I.Affleck and F.D.M. Haldane, Phys. Rev. B**36** 5291 (1987).
- [7]  $S < 2$  の場合の文献は、ここでは省略します。特に  $S = 2$  の場合、転移点に関して数値的対角化により調べられている。T.Tonegawa, 日本物理学会1995年3月（神奈川大学）
- [8] I.Affleck and F.D.M. Haldane, unpublished.
- [9] M.Yamanaka, M.Oshikawa, and S.Miyashita, J.Phys. Soc. Jpn. **65** June, 1996 in press.

## アトムテクノロジー研究体スーパーコンピュータによる最近の研究例

J R C A T 宇田毅

1994年3月にアトムテクノロジー研究体(JRCAT)に導入されたスーパーコンピュータ・システムの構成を図1に示す。主な計算はベクトル並列計算機VPP500と超並列計算機CM5Eによって行われ、ファイルサーバーとしてのDEC10000と結果の画像表示を受け持つIRIS/ONYXが高速ネットワークによって結ばれている。VPP500は32個のベクトル・プロセッサからなり、ピーク性能は51GF、また主記憶容量は11GBである。一方、CM5Eは128個のノードで構成され、ピーク性能24GF、主記憶容量16GBである。

JRCAT理論グループに課せられたミッションは、望みの機能を持つ材料の計算機による創生を究極の目的とし、その過程での原子・分子の振る舞いを明らかにすることである。このような研究の効率的遂行を目指し、理論グループは図2に示したように、3つのサブ・グループに分けられている。半導体表面サブ・グループでは、表面構造(再構成、欠陥構造)、成長機構、表面反応、および、STM等による表面原子制御の解析を目的としている。計算法は平面波を基底関数にした密度汎関数理論の枠内での、いわゆる標準的第一原理計算法が用いられている。最近の研究例を以下に示す。

- ( i ) Si(111)-7x7表面の動的振る舞いの研究
- ( ii ) Si(001)表面の初期酸化過程の研究
- ( iii ) Si(001)表面でのホモエピタキシャル成長機構の解明
- ( iv ) Si(001)表面のC型欠陥構造モデルの提案

遷移金属化合物サブ・グループでは、巨大磁気抵抗効果で注目を集めているペロブスカイト型酸化物LaMO<sub>3</sub>(M:3d遷移金属)の電子状態の解明に焦点を絞っている。結晶構造の歪と電子密度汎関数における非局所効果(GGA近似)を考慮すると、軌道秩序(orbital ordering)が増長されることによりギャップは開く方向にあり、定性的ではあるが、ギャップの有無が上記一連の酸化物に対し、系統的に再現される。また、より定量的な議論を目指して、これらの物質では重要な強相関効果を取り入れる方法の開発も試みている。その第一歩として、LDA+U法による計算に着手した。具体的な研究例は以下の通りである。

- ( i ) LaVO<sub>3</sub>とYVO<sub>3</sub>について、軌道秩序が磁気構造におよぼす効果の研究
- ( ii ) LaMnO<sub>3</sub>に関し、結晶構造の歪が軌道秩序におよぼす効果の研究
- ( iii ) 新しいLDA+U法の開発
- ( iv ) 標準的第一原理計算法とLDA+U法による安定な結晶構造の計算

エキゾチック物質サブ・グループでは有機固体、ポリマーなど上記2サブ・グループに属さない複雑系の電子構造の解明をターゲットとする。これまでの研究例としては、

( i ) 伝導性有機物DCNQI-(Cu, Ag, Li)の電子構造の研究

( ii ) オリゴシランの光学的性質の計算

がある。

最後に、理論グループに共通なテーマとして、計算プログラムの拡張整備、新しい手法の開発がある(図2)。これらの問題に対しては、とくに研究者を指定せず、各サブ・グループの研究員が、随時対応することになっている。また、本プロジェクトは10年計画であるが、前期に関しては現在の体制で研究を進めていく予定である。

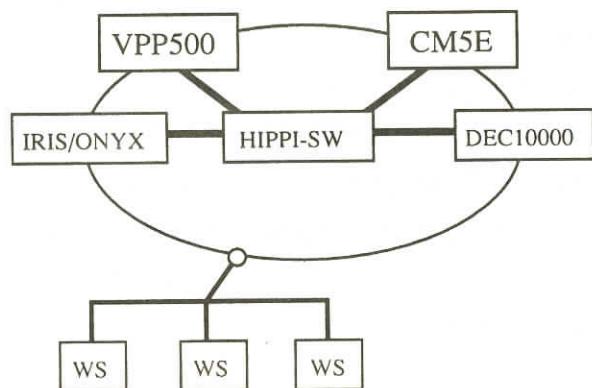


図1. スーパーコンピュータの構成

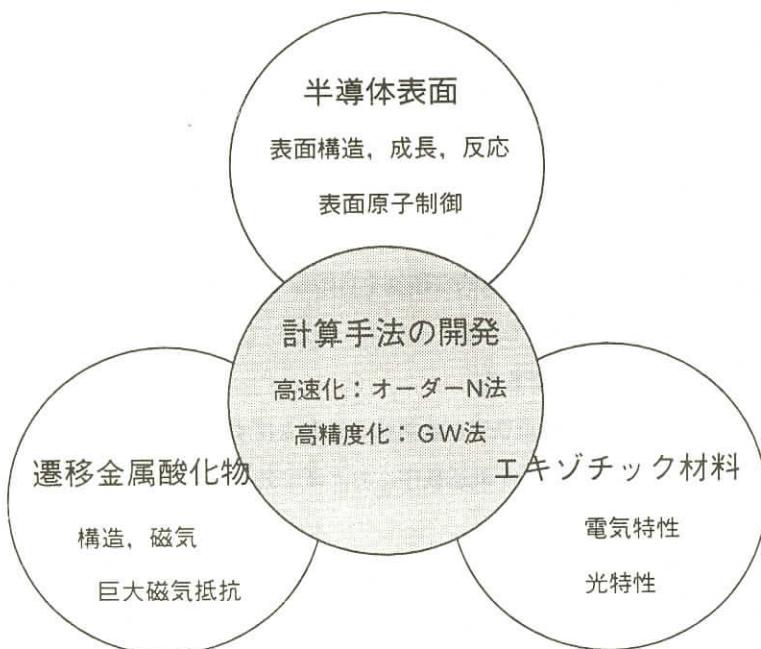


図2. 理論グループの構成

## 混合基底第一原理計算によるマイクロクラスター構造体の研究

東北大金研 丸 山 豊

大 野 かおる

川 添 良 幸

マイクロクラスターの物性や材料化を考える際には、単独のマイクロクラスターが持つ特性そのものをねらう立場から、2個、3個……アボガドロ数個のマイクロクラスターが示す特性をねらう立場に至るまでの、いわばマイクロクラスターという疑似原子を単位とした分子、薄膜、バルクといったアナロジーが使えることが分かる。ここではこれらを新たに“マイクロクラスター構造体”として統一的に捉えることにし、特にC<sub>60</sub>に代表されるフラーレンを単位とするマイクロクラスター構造体の研究報告を行った。

まずバルクのマイクロクラスター構造体として、C<sub>60</sub> fcc 結晶である。結晶格子中C<sub>60</sub>は室温で高速自由回転(10<sup>9</sup>/sec～)しているが、温度の低下(260K以下)と共に特定方位の回転だけが残り、回転秩序(orientational ordering)相転移をfcc相とsc相の間で示すことが知られている。この場合のクラスター間の相互作用、特に電子輸送現象はどの様な影響を受けているのか、非常に興味のある問題である。一つの例として、C<sub>60</sub>結晶の電気的性質（電気伝導度、誘電率）が上記の相転移点付近で不連続に変化する事が報告されているが、ほとんど研究がなされていない。そのため、ここでは対称性の幾つか異なるC<sub>60</sub>回転方位を仮定して、バンド構造を比較した。その結果、対称性の高い場合、X点で直接遷移型であったものが低い対称性の場合ではL-X点間の間接遷移型に変わることなど、バンドギャップの大きさと共に、C<sub>60</sub>回転方位によってバンド構造が変化することが初めて示された。

次には薄膜クラスター構造体として、Cu表面に单層吸着したC<sub>60</sub>とC<sub>70</sub>薄膜である。STM実験で観測された特異なナノ構造パターンと、そのバイアス電圧依存性に関するシミュレーションを行った。基板の影響は、分子間距離と吸着構造によって取り込まれているとし、実験で得られた像や基板との対称性等を考慮して、適当な吸着方位を仮定するなどした吸着モデルを用いた。計算から得られた電荷密度分布と実験との詳細な比較検討から、正(負)バイアス電圧で観測されたSTM像は五(六)員環付近に電荷分布を持つLUMO(HOMO)バンドに起因するものであることを明らかにした。STM像のパターンは、フラーレンの吸着方位と共にHOMO-LUMOギャップ付近の電子状態に強く依存しており、この特性を材料工学的に利用しようとするアイデアも生まれつつある。例えば、吸着したフラーレンを記録媒体としたナノスケール超高密度記録素子の可能性である。STMバイアス電圧による電子状態の違いに対応して情報を読み書きしたり、C<sub>60</sub>, C<sub>70</sub>をそれぞれ二進法の0,1と捉え、両者の配列をコントロールすることでもこれまでの記憶素子の1,000倍を越える記録密度が得られると期待される。

最後に、疑似原子の製造プロセスシミュレーションとしてフラーレンへの金属原子内包化の報告を行った。現在、生成方法や生成条件、内包原子の選択性などの結果をめぐって様々な議論が行われているところであるが、実際の応用に際しては安定性などの特性の面からC<sub>60</sub>に対する内包化が重要であり、これを積極的にコントロールすることが必要となる。計算ではプラズマ中におけるLi<sup>+</sup>とC<sub>60</sub>の間の反応に注目する。衝突によりC<sub>60</sub>に原子が直接入射し、内包する過程が内包化をコントロールするのに有利であると考えられるためである。結果としては、内包化の基本的プロセスであると考えられる直接入射内包過程を第一原理分子動力学を用いてシミュレートし、Li原子の内包化を確認すると共に安定位置に関する知見を得ることができた。実験的にはLi原子の場合6 eVからの内包化が報告されており、本研究の入射に要した運動エネルギー5 eVはこれを再現するものと考えられる。

### 磁性体の第一原理計算

広島 大理 小口 多美夫

ある物質で発現している磁性を第一原理から記述するためには、相対論（とくにスピン軌道相互作用）とスピン及び軌道の分極を同時に取り扱う必要がある。遷移金属及びその化合物の磁性に関する従来からの理解においては、磁性に関わるd電子の遍歴性（もしくは非局在性）から結晶場の影響により軌道分極は充分クエンチされているとみなされている。このため、極性遷移金属系に対する第一原理計算ではスピン分極を考慮した局所スピン密度近似が有効な成果を収めてきた。しかしながら、磁気異方性、カーエフェクトなどの磁気光学効果、磁気円二色性(MCD)等の測定が精密になされるようになり、これらの遷移金属系においても軌道分極の重要性があらためて認識され始めている。ここでは、遷移金属のTPt<sub>3</sub>(T=V, Cr, Mn, Fe, Co)をとりあげ、最近なされたMCDの測定[1]を理解するために行った第一原理計算によるスピン及び磁気モーメントの計算[2]及びMCDスペクトルの計算を報告する。

我々の理論アプローチは局在スピン密度近似の範囲での密度汎関数理論に基づいている。Kohn-Sham方程式は全電子のFLAPW法を用いてスピン軌道相互作用を除くすべての相対論的效果を含めてセルフコンシスティントに解かれる。収束した波動関数をさらに基底関数としてスピン軌道相互作用を含むフルの一体ハミルトニアンが解かれ、最終的に得られた波動関数からスピン及び軌道角運動量演算子の期待値が計算される。また、MCDスペクトルの計算は、PtサイトのL<sub>2,3</sub>吸収端、すなわち2pコア準位から価電子dホールへの選択則を考慮し、バンド計算から得られたPt-dホールの局所状態密度を用いて実行される。

計算されたPtサイトのスピン及び軌道磁気モーメントはMCDの測定からいわゆるS<sub>z</sub>およびL<sub>z</sub>総

和則を用いて求められた結果を定量的にもよく再現する。とくに、 $\text{CrPt}_3$ ではPtの軌道モーメントはスピノモーメントよりもわずかではあるが大きくなってしまっており、一方、 $\text{MnPt}_3$ では軌道モーメントはほとんど消失してしまっている。局所状態密度を解析することにより、次のシナリオにより磁気モーメントが決定されていることが明らかにされた。(1) 3dバンドはPtの5dバンドの上端近傍に位置し3d電子数に従い交換分裂した3dバンドをつめることにより遷移金属サイトのスピノ磁気モーメントが決まっている。(2) Ptサイトのスピノモーメントは5dバンドが3dバンドと混成することから発生し、とくに $\text{FePt}_3$ ,  $\text{CoPt}_3$ では下向きスピノバンドでの混成の増大からPtサイトに大きな正のスピノモーメントが生じている。(3) Ptサイトでは、大きなスピノ軌道相互作用のために、ほぼスピノモーメントに比例した軌道磁気モーメントが生じている。 $\text{CrPt}_3$ ではとくに、上向きスピノバンドでの混成の増大により負の軌道モーメントへ寄与を与えている。(4) 遷移金属サイトの軌道モーメントはスピノ軌道分裂した5dバンドとの混成の結果生まれており、d電子数が半数以下で通常は負の軌道磁気モーメントが期待される $\text{CrPt}_3$ のCrサイトでは、Ptとの混成のために逆に正となっている。

MCDスペクトルに関しては、上で述べたようにスピノ及び軌道磁気モーメントとともに理論は実験結果をよく説明していることからスペクトルの符号と強度はよく再現するであろうと期待され実際そうであるが、スペクトルの形状に関しても総じてよく再現しているといえる。とくに、 $\text{CrPt}_3$ の $L_3$ 吸収端で見られる非対称性の一致は興味深い。

## 参考文献

- [1] H.Maruyama, et al., Physica B, **208 & 209**, (1995) 787 ; H.Maruyama, et al., J. Mag. Magn. Mater., **140-144**, (1995) 43.
- [2] K.Iwashita, T.Oguchi and T.Jo, Phys. Rev. B1, in press.

## d および f 電子系の高エネルギー分光理論

東大物性研 小 谷 章 雄

われわれのグループでは遷移金属化合物や希土類化合物の高エネルギー分光の理論研究を不純物アンダーソン模型やクラスター模型を用いて系統的に行っている。具体的には、(1) 軽い遷移金属酸化物のX線光電子分光(XPS)の系統的解析(魚住, 岡田), (2) X線発光分光(田中, 中沢, 田口, 魚住), (3) 銅酸化物のXPSの大きなフラスターによる解析(岡田), (4) 電子エネルギー損失分光(小笠原)の研究が進められている。

研究会では、主として(2)について紹介し、また(3)についても簡単に説明を行った。(2)のX線発光

分光の計算は、原子スペクトルを記述するCowanプログラムに対して固体に特有の原子間電子移動効果をとりいれ、さらにcoherentな2次光学過程の定式化にしたがって作られたプログラムを用いて行われている。また、Cowanプログラムを用いない以前のプログラムも必要に応じて併用している。まず、最近スエーデンで行われたCeO<sub>2</sub>のCe 3d - 4f共鳴励起に対する4f - 3d発光の実験データを理論解析することにより、内殻正孔が存在する時と存在しない時の両方について電荷移動励起状態に関する直接的な情報が得られることが示された。それによれば、内殻正孔が存在する場合にはそうでない場合に比べて、Ce4f - O2p間の混成相互作用強度が約60%減少する。このことを考慮することにより、これまで未解決であったCeO<sub>2</sub>の絶縁体エネルギーギャップの大きさを説明することにも成功した。次に、MnOとMnF<sub>2</sub>に対するMn3p - 1s発光の1s - 4p励起スペクトルの解析を行い、実験データとMn4pバンドのスピンに依存する状態密度の間の関係について検討した。その結果、Mn4p電子に対する内殻正孔ポテンシャルの効果やMn3p内殻正孔の寿命が終状態の多重項によって異なる効果が励起スペクトル構造に重要な影響を与えることが示された。(3)の研究については、銅酸化物のCu2pXPSにおいて、大きなクラスターを用いて初めて記述される内殻正孔に対する非局所遮蔽効果を、種々のCuとOのネットワークについてしらべている。一次元的ネットワークに関しては、最近観測されたSr<sub>2</sub>CuO<sub>3</sub>におけるCu2pXPSの実験データと計算結果の比較について紹介を行った。

### FLAPW法による稀土類化合物のフェルミ面の研究

阪府大・総合科 播 磨 尚 朝

スーパーコンピューターの普及にも助けられ、1980年代後半からフルポテンシャルによるLAPW法の計算が可能になってきた。当初は計算機資源の制約のために限られた系への適用にとどまっていたが、90年代に入りWSの普及にも助けられ、盛んに行われるようになってきた。我々のグループは、この間に当初のプログラムにスピン軌道相互作用を取り入れたり、LAPW基底関数の窓を複数個取れるように改良を重ね、主に稀土類化合物へ適用し、フェルミ面の形状など低温での物理量を実験と比較する事を通じて、重い電子系等の電子構造を明らかにしてきた。

空間的に局在している稀土類の4f電子が部分的に占有されると、MT球内の電荷分布は球対称から大きくずれる事は容易に想像する事が出来る。従って、磁気モーメントを持たない系でも、結晶の対称性が低ければ、フルポテンシャルの効果は大きいと期待出来る。しかしながら、最近の研究結果によると、単純な立方対称や六方対称を持つ結晶に対しても、フルポテンシャルの効果が顕著に見られる物質が多く、実験との一致もよくなる事が解った。NbSe<sub>2</sub><sup>1)</sup>, LaAg<sup>2)</sup>, LaCu<sub>2</sub><sup>3)</sup>等の物質である。NbSe<sub>2</sub>は稀土類化合物ではないが、これらの物質では価電子帯の電子軌道のパリ

ティとフェルミ面の近くに位置する比較的よく局在している電子軌道とのパリティが異なり、異種イオンに属する電子間の混成の効果が小さい事で共通性がある。この場合にはフェルミ面の形状にはお互いのイオンの相対的なエネルギー位置関係 - マーデルングポテンシャルが大きく影響する。これらの物質でMT近似が良くないのは、マーデルング定数を点電荷近似で求めているせいであると考えられる。複雑な結晶構造を持つLaCu<sub>6</sub>は、MT近似の計算では、実験との一致はあまりよくないが、価電子軌道が偶パリティである事から、フルポテンシャルの効果で改善が期待される。この計算は現在準備中である。

しかしながら、LaB<sub>6</sub>やLaSn<sub>3</sub>の様にf電子と価電子のパリティが同じ場合はフルポテンシャルの効果はあまり見られない。これは、非占有fバンドがフェルミ準位の近くにあり、混成効果でわずかながら占有するf電子の数を調節する事によってバンドの相対的な位置関係を決めているからと考えられる。いずれにしても、局所密度近似の与える非占有f準位がフェルミ準位に近すぎるせいで、これらの物質でのバンド計算の与えるフェルミ面と実験の一致はあまりよくないと考えられる。また、f電子を含む金属的なCe化合物では、狭いfバンドの中にフェルミ準位が位置するので、これらに関してもフルポテンシャルの効果はあまり見られない。

さて、最初に述べたように。フルポテンシャルは本来、MT球内の異方的な電荷分布を強く反映する事を期待していたのであるが、これに関する顕著な効果は今までのところ見い出されていない。最近、GGAによる計算で軌道秩序状態が実現しやすくなるという研究報告があり、現在これとの関連等を調べている。

- [1] R.Corcoran, P.Meeson, Y.Onuki, P-A. Probst, M.Springford, K.Takita, H.Harima, G.Y. Guo and B.L. Gyorffy; J.Phys. : Condens. Matter **6** (1994) 4479.
- [2] K.Motoki, R.Settai, N.Kimura, H.Toshima, T.Ebihara, H.Ikezawa, H.Sugawara, Y.Onuki and H.Harima; J.Phys. Jpn **64** (1995) 3328.
- [3] in preparation.

### 銅系カルコパイライト型半導体の第一原理計算による 価電子制御と物質設計

阪大産研 吉田 博

現実の物質はきわめて多くの複雑な要素が絡み合った複雑系であり、安易なモデルに基づいて、経験的なパラメータによって物質の個別性の起源を議論することには大きな無理がある。最近、半導体産業の隆盛による計算機能力の進歩と計算物理学的な手法の進歩により、物質の量子シミュレーションがかなり現実的な系についても可能になってきた。

本講演では、FLAPW 法による第一原理計算に基づいて、銅系カルコパイライト型半導体 ( $\text{CuInSe}_2$ ) 中の真性欠陥 (Cu や In の原子空孔, Cu や In のアンチサイト欠陥, Cu の格子間欠陥) の形成エネルギー ( $F \{ \mu_e, \mu_{\text{cu}}, \mu_{\text{in}}, \mu_{\text{se}} \}$ ) を、母体半導体における電子の化学ポテンシャル (フェルミレベル:  $\mu_e$ ) と原子の化学ポテンシャル ( $\mu_{\text{cu}}, \mu_{\text{in}}, \mu_{\text{se}}$ ) の 4 変数の関数として計算を行い、結晶成長条件が異なる場合の欠陥の出現機構や反応機構を予言した。(図 1)

これらの計算結果に基づいて、銅系カルコパイライト型半導体 ( $\text{CuInS}_2, \text{CuInSe}_2$ ) の p 型, n 型のドーパントの同時ドーピングによって異なる符号を持つドーパントを安定化させて、一種類のドーパンドではドーピングが難しいような系についても価電子制御が可能であることを示した。さらに、オージェ効果や 2 フォトンを用いた高効率太陽エネルギー変換のためのマテリアルデザインの実例を取り上げて議論した。これらを押し進めることによって、将来の新しい産業であるマテリアルデザインについて議論した。本講演は、山本哲也 (阪大院 D 2), S-H Wei, A. Zunger との共同研究に基づいている。

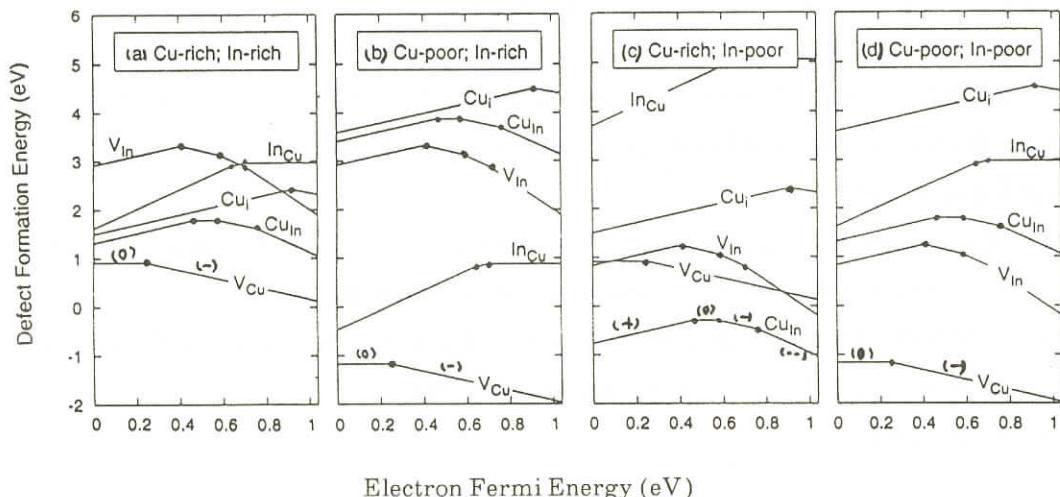


図 1 :  $\text{CuInSe}_2$  の真性欠陥の形成エネルギー

#### 参考文献

- 1) Influence of Intrinsic Defects on the Electronic Structure of Non-stoichiometric  $\text{CuInS}_2$  Chalcopyrite Semiconductors: T. Yamamoto and H. Katayama-Yoshida: Materials Science Forum, Vols. 196 - 201 (1995) 1667 - 1672.
- 2) The Electronic Structure of Non-stoichiometric  $\text{CuInS}_2$  and the Study of Defects Levels of  $\text{CuInS}_2$  with Chalcopyrite Structure: T. Yamamoto and H. Katayama-Yoshida: Proc.

- 10th Int. Conf. Ternary and Multinary Compounds, Stuttgart, Sept. 1995, in press.
- 3) Physics of Control of Conduction Type in CuInS<sub>2</sub> with Defect Chalcopyrite Structure:  
T.Yamamoto and H.Katayama - Yoshida: Jpn.J.Appl.Phys. 34 (1995) L1584.
  - 4) Electronic Structures and Effects of S Substitutions in CuIn(S<sub>0.875</sub>X<sub>0.125</sub>)<sub>2</sub> (X=O, N, P, C, Si or B) : T. Yamamoto and H.Katayama - Yoshida: Jpn.J.Appl. Phys. 35 (1996) L370.
  - 5) Electronic Structures of p - type doped CuInS<sub>2</sub>: Proceedings of MRS Symposium:  
T.Yamamoto and H.Katayama - Yoshida: to be published.
  - 6) 特許出願：中沢，山本哲也，吉田博（特願平8-14091）：カルコパイライト構造半導体およびそれを用いた光起電力装置

### 第一原理分子動力学計算プログラムの並列化とその応用

無機材研 小林一昭

新井正男

山本一雄

第一原理分子動力学計算プログラムに対し、東大物性研の共同利用ベクトル並列型スーパーコンピューターVPP500上で並列化を行い、以下の系についてその電子状態と安定構造探索の研究を行った。

- (1)  $\alpha$ -Sn/InSb(111)界面での電子状態計算を行い、常温では $\beta$ -Snが安定なのに対し、何故InSb界面上では $\alpha$ -Snが安定に成長できるかについて考察を行った[1][2]。ただしこの計算では構造の最適化は行っていない。
- (2) 更に、 $\alpha$ -Sn(n)/InSb(m)(110) ヘテロ界面で層の数n, mを変えることによる電子状態の変化についての計算を行っている。
- (3) 第一原理電子状態計算用のノルム保存型擬ポテンシャル[3][4]に関する、データベース(NCP S95)を構築中であり、既に水素からヨウ素までの希ガスを除くほとんどの元素についての擬ポテンシャルを用意した[5]。  
これを使って将来未知物質の探索を試みる。
- (4) 以上その他にもBCN系の計算、実空間第一原理分子動力学プログラムの開発とテスト、擬ポテンシャルデータベースをもとにした遷移金属とその合金、化合物（テストの意も含む）の電子状態計算などを精力的に行っている。

実際のVPP用並列化コードの開発では、第一原理電子状態計算手法は比較的並列化が容易であり、ブリュアンゾーンのk点に関するループを並列化するのが最も効率が良く、容易である。

この k 点に関する並列化を試み、8 P E 並列で1 P E の場合と比べて 5 から 6 倍以上の高速化が実現した。ただし k 点の並列化では扱う系が大きな場合には並列化できないという欠点がある。そこで系のバンド数に関するループの並列化を試み、現在開発途中であるが、一応 8 P E 並列で 4 から 5 倍程度の高速化が実現している。

(インターネットホームページ <http://www.nirim.go.jp/~kobayak> 参照)

## 参考文献

- [1] K.Yamamoto and K.Kobayashi, Phys. Rev. B53 4539(1996)
- [2] K.Yamamoto and K.Kobayashi, Surface Science, in press (1996)
- [3] G.B.Bachelet, D.R.Hamann and M.Schluter, Phys. Rev. B26, 4199(1982)
- [4] N.Troullier and J.L.Martins, Solid State Commun., 74, 13(1990);and Phys. Rev. B43, 1993 (1991)
- [5] K.Kobayashi, in proceedings of International Workshop on Computer Modeling and Simulation for Materials Design, 96 (1996)

## 交換モンテカルロ法によるスピングラスの研究

東大物性研 福島孝治  
高山一

スピングラスをはじめとするランダム系を理論的に調べる際に、2つの質的に異なる平均操作を行なう必要がある。一つはランダムネスに関するもので、もう一つは熱搖らぎに関する平均である。モンテカルロ法による解析では、特に2つ目の平均操作に特別な困難な点がある。一般に相転移に伴う遅い緩和現象には、一次転移の際の準安定状態間の遷移時間が指数関数的に増大するものと二次転移の際の相関長の発散に伴う臨界緩和がある。スピングラスは多数の準安定状態が存在する系であり、その臨界現象を調べるにはちょうど一次転移と二次転移の難点を合わせた状況になる。この状況を克服するモンテカルロ法(MC)として、最近提起されている交換法を用いたスピングラスの研究を報告する[1]。

交換法では、全く同じ相互作用を持つM個の複製系を考える。それぞれの系は異なる温度の熱浴と接している。つまり、系のハミルトニアンを $H$ とすると、我々の求めたい確率分布関数は、 $P_{\text{tot}}(\{X\}) = \prod_i^M \exp(-\beta_i H(X_i))$ となる。ここで $X_i$ と $\beta_i$ はそれぞれi番目の複製系の状態と逆温度を表す。この全系の確率分布を求めるために以下の2つの手続きを行なう。(1)各複製系をそれぞれの温度で通常のMCステップをする。(2)2つの複製系の状態( $X_m, X_n$ )を交換する。ただし、

交換する際のコスト関数は、 $\Delta = (\beta_n - \beta_m)(H(X_n) - H(X_m))$  で与えられる。このようにすれば、いつでも  $P_{\text{tot}}$  に関する詳細釣合は満たしている。手続き(2)によって各複製系はいつでも同じ温度で状態が更新されるのではなく、さまざまな熱浴に接することになる。その結果として、たとえ低温である準安定状態に捕まったとしても、高温に移動することでそこから容易に逃れることができる。

実際に 3 次元ジイジング模型に応用した結果を通常の MC 法と比較しながら示す。系のハミルトニアンは、 $H = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij}(\sigma_i \sigma_j + \tau_i \tau_j)$  で与えられ、秩序変数の分布関数  $P(q) = \frac{1}{t_{MCS}} \sum_{t=1}^{t_{MCS}} \delta\left(q - \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i(t) \tau_i(t)\right)$  と、その 2 次のモーメントを有限時間  $t$  で求めた量  $\langle q^2 \rangle(t) = \frac{1}{t} \sum_{t=1}^t \left( \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i(t) \tau_i(t) \right)^2$  を以下に示す。ここで  $N$  は系の大きさを表し、結果は  $N=16^3$ 、温度  $T=1.10 \sim T_c$  データである。通常の MC 法では乱数の異なる独立なシミュレーションを 32 回 ( $10^7$  MCS) 行い、その平均値を四角で表した。右図における線は、独立なシミュレーションの幾つかを表したものである。交換法では 10 回 ( $10^6$  MCS) 行なった平均値を丸印で表した。左図に示すとおり交換法で求めた秩序変数の分布関数は偶関数になっていることが確かめられる。また、このシミュレーションで偶関数の  $P_J(q)$  が得られていることから、その誤差棒はマークの大きさ程度になっている。通常の MC 法で求めた  $P_J(q)$  は対称でなく、しかも誤差棒も大きい。それぞれのシミュレーションで異なる準安定状態に捕まり、そこからの寄与しか得られていないと推測される。そのことは、右図の線を見ても明らかである。すなわち、 $\langle q^2 \rangle(t)$  が 0.35 と 0.10 近傍で時間に依らない傾向を見せているが、その値が左図の  $P(q)$  のピーク位置の自乗値に対応していることから、その準安定状態に捕まっていることを意味している。交換法では準安定状態に留まり続けることはなく、その効果によって通常の MC 法よりも早く物理量を収束させている。

[1] K. Hukushima and K. Nemoto: J. Phys. Soc. Jpn. 65 (1996) 1604.

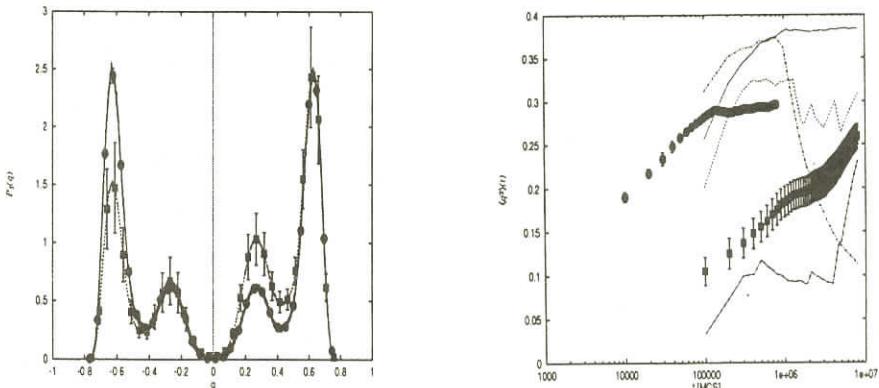


図 1：通常の MC 法と交換法で求めたあるサンプルについて秩序変数の分布関数  $P(q)$  (左図) と秩序変数の自乗の時間依存性  $\langle q^2 \rangle(t)$  (右図)。誤差棒は独立な run から評価したものである。

## Chiral Order in Spin Glasses and Superconducting Ceramics

Hikaru Kawamura and Mai Suan Li, Kyoto Institute of Technology

In the field of condensed matter and statistical physics, there has been a continual interest in the ordering phenomena of frustrated and/or random systems. In particular, if the system has a continuous internal symmetry as is the case of vector spin systems or superconductors, the ordered state often becomes *chiral* in which the *chirality*, representing the sense or the handedness of the nonlinear(or noncoplanar)ordered - state structures, plays an important role. We have been studying the nature of phase transitions and of ordered states of such chiral systems, including both I ) chiral - glass ordering of ceramic superconductors and II )chiral - glass and spin - glass orderings of vector spin glasses.<sup>1)</sup>

In this year's project, we have made calculations both on the subjects I ) and II ), with main emphasis on the subject I ). Below, we will briefly summarize our main findings obtained by our culations on "icho" this year for the subject I ). Preliminary calculations have also been made for the subject II ), in particular, the possible chiral - glass ordering in 3d Heisenberg spin glass.<sup>2)</sup> We are planning to perform further extensive calculations in the coming year.

Since the discovery of high -  $T_c$  superconductors, there has been a renewed interest in the ordering of ceramic or granular superconductors. It has been observed experimentally that these ceramic high -  $T_c$  superconductors often show glassy properties reminiscent of spin glasses, but their true origin still remains unclear. Now there accumulated a considerable amount of experimental evidence that high -  $T_c$  cuprate superconductors are 'anisotropic' or unconventional superconductors with the d - wave pairing symmetry.

Since ceramic superconductors are known to be successfully modeled by a weakly - coupled random Josephson network consisting of superconducting grains, such anisotropic nature of the superconducting order parameter is expected to have a profound effect on the ordering of ceramic cuprate superconductor through the appearance of the so - called "  $\pi$  junction" across which the Cooper pair acquires a phase shift of  $\pi$  . In fact, it has been realized that frustration effect inhernt to odd rings consisting of such  $\pi$  - junctions gives rise to spontaneous circulating supercurrent and orbital moment even in zero external field, which could cause a variety of interesting phenomena such as the paramagnetic Meissner effect.<sup>3)</sup>

One of the authors (H.K.) recently proposed, on the basis of a close analogy to the XY

spin glass,<sup>4)</sup> that such *d*-wave ceramic superconductors might exhibit a new type of equilibrium phase in zero magnetic field, called *a chiral-glass phase*, in which chirality (or flux) is ordered randomly with keeping the superconducting phase order disordered.<sup>5)</sup> In such chiral-glass state, only global  $Z_2$  time-reversal symmetry is spontaneous broken while  $U(1)$  gauge-symmetry is preserved. This suggestion has originally been made for the case of an infinite screening length,  $\lambda = \infty$ , where one can entirely neglect the screening effect (or fluctuations of gauge fields). In this case, the problem can be reduced to that of the *XY* spin glass where the previous numerical calculation strongly suggested the existence of a stable chiral-glass phase.

Natural question here is whether the chiral-glass phase exists as a true thermodynamic phase even in the presence of screening. Notice that this problem is highly nontrivial since the screening effect makes the otherwise long-ranged vortex-vortex interaction short-ranged. In fact, in the case of a vortex-glass ordering in applied fields, recent numerical calculation has indicated that the screening effect makes the otherwise stable vortex-glass phase unstable.<sup>6)</sup>

In order to get insight into this problem by numerical simulations, one needs to incorporate the dynamical gauge (magnetic) fields into the model. Thus, the resulting model looks like the 3d lattice gauge model with the spin-glass-type random couplings.<sup>7)</sup> This model has one additional parameter, the self-inductance  $L$ , which represents the magnitude of screening. The bare Josephson penetration length is equal to  $1/\sqrt{L}$  in units of lattice spacing.

To get equilibrium properties of this model is a rather tough task. We have made use of the "replica exchange method" recently proposed by Hukushima and Nemoto<sup>8)</sup> and also maximal use of "ichō". Owing to the combination of these two factors, we have succeeded (we hope) in obtaining fairly convincing results.<sup>9)</sup>

- 1) We have simulated several values of inductances including  $L = 1, 3, 5$  (most extensive calculation has been made for  $L = 1$ ), and found that there indeed exists a stable chiral-glass phase even in the presence of screening, in sharp contrast to the case of, e.g., a vortex glass.
- 2) The associated chiral-glass exponents are estimated to be  $\nu_{\text{CG}} = 1.3 \pm 0.2$  and  $\eta_{\text{CG}} = -0.2 \pm 0.2$ . These values are close to the values of the chiral-glass exponents of the 3d *XY* spin glass (corresponding to  $\lambda = \infty$  or  $L = 0$ ) and to the exponents of the 3d Ising spin glass. Like spin glasses, the nonlinear susceptibility exhibits a negative divergence at

the chiral - glass transition point.

- 3) The chiral - glass transition temperature decreases with increasing inductance and tends to zero above a critical value of the inductance.
- 4) In addition to these equilibrium calculations on the d - wave model, we performed some calculations also on the corresponding s - wave model.

In the attached figures, the temperature and size dependence of the Binder ratio for the chirality of the d - wave model(  $\pm J$  distribution of nearest neighbor bonds),  $g_{CG}$ , and its finite - size scaling plot are shown for the case of  $L=1$ .<sup>9)</sup>

Notice that such a new equilibrium phase in ceramic superconductors identified by the present simulation, *a chiral - glass state*, could be realized due to the anisotropic nature of the superconducting order parameter. It may be regarded as a remarkable *macroscopic* manifestation of the unconventional superconductivity, and its experimental test remains most interesting.

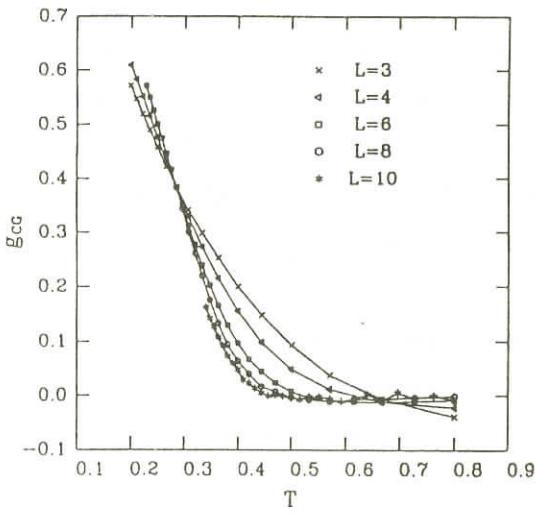


Fig.1 The temperature and size dependence of the Binder ratio for the chirality,  $g_{CG}$ , of the d - wave model on a  $L \times L \times L$  simple cubic lattice with free boundary conditions.

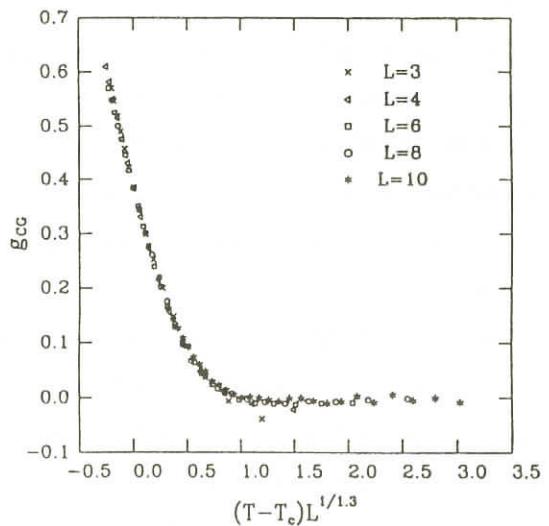


Fig.2 Finite - size scaling plot of the Binder ratio for the chirality,  $g_{CG}$ , with the chiral - glass correlation - length exponent  $\nu_{CG}=1.3$ .

## REFERENCES

- 1) Hikaru Kawamura: in *Computational Physics as a New Frontier in Condensed Matter Research*, Ed. H. Takayama, M. Tsukada, H. Shiba, F. Yonexawa, M. Imada and Y. Okabe, p.209, (The Physical Society of Japan 1995).
- 2) H. Kawamura: Phys. Rev. Letters **68** (1992) 3785; J. Phys. Soc. Jpn. **64** (1995) 26.
- 3) See, for example, M. Sigrist and T. M. Rice: Rev. Mod. Phys. **67** (1995) 503.
- 4) H. Kawamura: Phys. Rev. **B51** (1995) 12398; J. Rhys. Soc. Jpn. **61** (1992) 3062;  
H. Kawamura and M. Tanemura: J. Phys. Soc. Jpn. **60** (1991) 608; J. Phys. Soc. Jpn. **54** (1985) 4479; Phys. Rev. **B36** (1987) 7177.
- 5) H. Kawamura: J. Phys. Soc. Jpn. **64** (1995) 711.
- 6) H. S. Bokil and A. P. Young: Phys. Rev. Letters **74** (1995) 3021.
- 7) D. Dominguez, E. A. Jagla and C. A. Balseiro: Phys. Rev. Letters **72** (1994) 2773.
- 8) K. Hukushima and K. Nemoto: preprint.
- 9) H. Kawamura and M. S. Li: to appear in Phys. Rev. B (1996); in preparation.

## 双極子相互作用を含む 2 次元強磁性体の環状相転移

東北大工 松原史卓  
佐々木淳哉

双極子相互作用は強磁性体の磁区形成の起源となる。しかし、双極子相互作用を含む磁性体モデルのモンテカルロ(MC)・シミュレーションは殆ど成されていない。理由は双極子相互作用の到達距離が長いため系が大きくなると計算時間が急激に増えることによる。ここではこの困難を克服するための一工夫と双極子相互作用によって実現される磁気秩序について述べる。次のハミルトニアンで記述される二次元強磁性体を考える。

$$H = -J \sum_{i>j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + D \sum_{i,j} \frac{1}{r_{ij}^3} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^2}) \quad (1)$$

ここで  $S_i$  は古典ハイゼンベルグスピン,  $r_{ij}$  はスピン間の位置ベクトルで有り、格子定数を単位にしている。また  $D/J = 0.1$  とし、格子は  $L \times L$  の正方格子で開放端とする。問題は双極子相互作用による有効場の計算である。ここでは、有効場を近くのスピン(第2最近接スピンまで)からのもの  $H_D^{(1)}$  と遠くのスピンからのもの  $H_D^{(2)}$  に分けて考える。 $H_D^{(1)}$  には各々のスピンの変化が大きく寄与する。従って、各スピンの変化を正しく計算する。しかし、 $H_D^{(2)}$  では多くのスピンの効果が

積算して初めて寄与する。従って、 $m$  MCステップ毎にこれを更新する( $m=5$ とした)。後者の計算では高速フーリエ変換(FFT)が使えるため、計算時間を大幅に短縮できる。また、この取り扱いによる誤差は比熱、帶磁率等の揺らぎに関する量を除いて殆ど問題にならないことが分かった。

シミュレーションの結果を図1に示す。格子サイズが小さいときには強磁性的であるが大きくなるとスピンの回転する構造（環状構造）が出現する。この構造が長距離秩序か否かを調べるために比熱Cと次式で定義される環状磁化 $M_\phi$ を求めた。

$$M_\phi = \left\langle \left| \left[ \frac{1}{N} \sum_i (S_i \times \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_c}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_c|}) \right]_z \right| \right\rangle, \quad (2)$$

ここで $z$ 方向は格子面と垂直な方向である。また、 $r_i$ 及び $r_c$ はそれぞれ、 $i$ スピンと格子中心の位置ベクトルである。図2に比熱の結果を示す。格子サイズと共に比熱のピークは鋭くなり相転移の存在を示唆している。図3に $M_\phi$ を示す。格子サイズが大きくなると $M_\phi$ は比熱のピーク温度点で急激に立ち上がり、またサイズ依存性も逆転する（高温では、 $L$ を大きくすると $M_\phi$ は小さくなるが、低温では逆に大きくなる）。このことは低温で $M_\phi$ で記述される長距離秩序が実現することを示している。有限サイズスケーリング解析を行い、この相転移が通常の2次相転移であることも分かった。

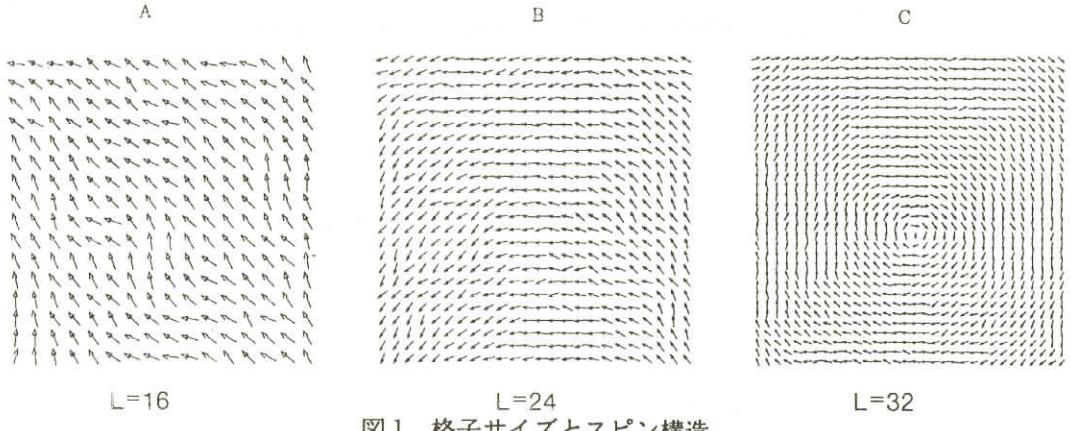


図1. 格子サイズとスピン構造。

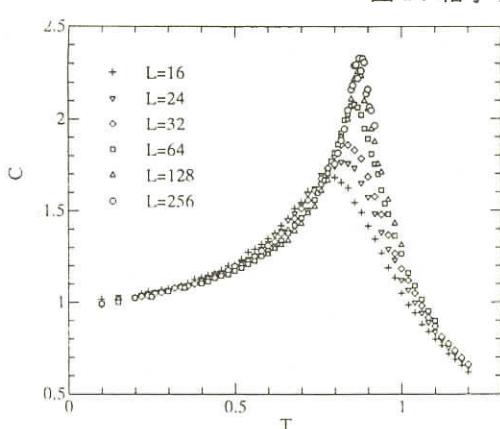


図2. 比熱の格子サイズ依存性。

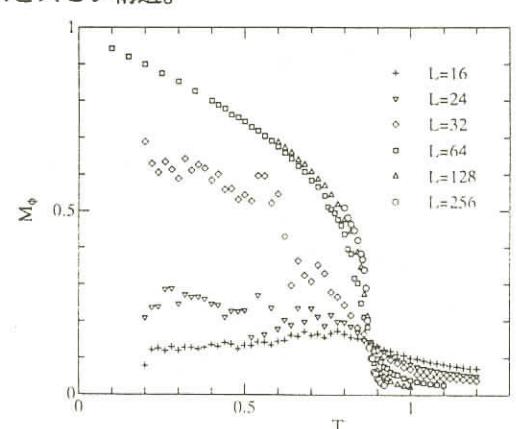


図3. 秩序パラメータ  $M_\phi$  の格子サイズ依存性。

## ユニバーサル有限サイズスケーリング関数とその応用

都立大理	岡 部	豊
阪 大 理	菊 池	誠

Hu *et al* [1] は、2次元のパーコレーション問題に関して、ユニバーサル有限サイズスケーリング関数を論じた。ユニバーサル有限サイズスケーリングの概念は、Privman & Fisher[2] により以前に指摘されていたが、具体的な計算はなかった。我々は、2次元イジングモデルを例に、Hu *et al* の議論を拡張して、種々の格子の有限サイズ系の臨界点近傍の状態方程式が2つのスケーリング振幅を選ぶことにより、ユニバーサルになること、さらに秩序パラメータの分布関数にこの考え方を拡張できることを示した。また、ユニバーサルスケーリング関数が境界条件に依存していることを示すと共に、それが表面効果と関連していることを議論した。

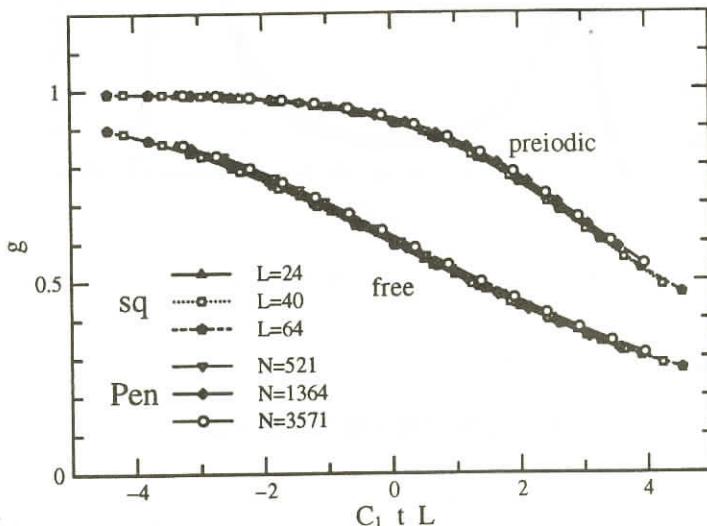


図1：Binderパラメータのユニバーサル有限サイズスケーリングプロット

格子として、正方格子と準格子であるペンローズ格子をとり、Binderパラメータの有限サイズスケーリングプロットが、スケーリング振幅  $C_1$  を選ぶことにより、1本の曲線上に乗ることを示したもののが、図1である。周期および自由境界条件のデータを比較してある。 $C_1$  は正方格子を1とし、ペンローズ格子の場合、 $0.86 \pm 0.02$  と選んである。また、図2は、異なった格子の磁場中の秩序パラメータの分布関数の有限サイズスケーリング関数が、2つのスケーリング振幅  $C_1, C_3$  を選ぶことにより、一つの曲線上に乗ることを示している。ここで、 $C_1$  は図1の場合と同じ値で、 $C_3$  は、正方格子の場合を1として  $0.95 \pm 0.02$  と選んである。それぞれの格子のそれぞれのサイズについて、 $C_1 t$  と  $C_3 h L^{1.875}$  が同じになるような温度、磁場のデータを比較してある。

なお、有限サイズスケーリング関数のスケーリング振幅とバルクの状態方程式を記述するスケーリング振幅に関係があることも指摘しておきたい。

- [1] C.-K. Hu, C.-Y. Lin, and J.-A. Chen, Phys. Rev. Lett. **75**, 193 (1995).
- [2] V. Privman and M.E. Fisher, Phys. Rev. B **30**, 322 (1984).

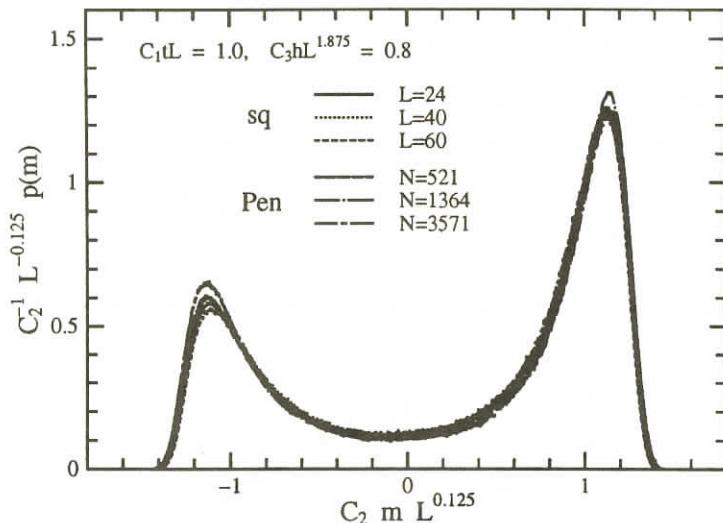


図2：秩序パラメータの分布関数のユニバーサル有限サイズスケーリングプロット

### 動的相関関数と強制振動子法

北大・工 中山 恒義

物性物理学において動的相関関数や線形応答関数の知見は、対称とする系の動的性質を研究する上で不可欠なものである。考えている系がより大規模かつ複雑になるにつれ動的相関関数や線形応答関数の計算は極めて困難になり、新しい原理に基づくアルゴリズムの開発が強く望まれている。動的相関関数の計算は原理的には固有関数を最初に求め、これを用いて物理量の時空間フーリエ変換を遂行することにより計算される。しかしこの正攻法では、(1)全エネルギー領域の固有関数の計算、(2)フーリエ変換という2段階の操作が入るため大きな系の計算ができないこと、また誤差が大きいことがネックとなり、大規模計算ができない。例えばチンチョス法のような従来の行列対角化の方法を使う限り、極めて長いCPU時間が必要となり、大きな行列を扱うことができない。このため連分数展開法やモンテカルロ法によるものが開発してきた。

研究会では、 $[10^7 \times 10^7]$ の行列で記述される大規模コンプレックス系の動的相関関数や線形応答

関数の計算のための新しい原理に基づくアルゴリズムについて発表した。発表では3次元アンダーソン転移の転移点近くでの電気伝導率 $\sigma(\omega)$ の $\omega$ 依存性の計算結果および3次元パーコレーション系の動的構造因子 $S(q, \omega)$ の結果について発表した。このアルゴリズムの基本的部分は、強制振動子法と呼ばれる新しい方法に基づいている。行列を直接対角化するのではなく、系に周期的外力を加え、応答する物理量を抽出する。求める相関関数に対応した外力の項を入れることにより古典系のみならず量子系にも適用できる。数値計算の主要な部分は、単に外力項を持つ運動方程式の時間発展を追うだけであるため、必要なメモリー・サイズは格子の自由度N(対応するダイナミカル・マトリックスは $N \times N$ )に比例する。さらに、運動方程式の積分は条件判断を伴わない単純な演算の繰り返しであることから、非常に高いベクトル化率を有し、また並列計算に最適である。

### 3次元hard-sphere lattice gas のユニバーサリティー

都立大理 山 縣 敦

固体の融解を調べるための模型としてhard-sphere lattice gasは提案された。1950年代のことである。その後の10年間に調べられたことは、系が相転移するか、相転移点、相転移の次数、相転移点での物理量の値、などで、方法は平均場近似、級数展開、転送行列法が使われた。1970年代は論文が見当たらない。1980年代の初め、臨界現象が調べられ、三角格子で厳密に解かれた。モンテカルロ法も適用された。(実はその前に実行されてはいたのだが、その結果は論文として公表されなかった。) 集中した研究はその時期に留まり、1990年代中期までぼつりぼつりと論文が発表されるだけであった。

このように歴史を振り返ってみるとふたつの重大なことに気づく。3次元系の臨界現象が全く調べられていないこと。(3次元系の臨界点は求められていた。) モンテカルロ法がほとんど使用されていないこと。(上で述べたモンテカルロ法による研究は正方格子上のもので一件しかない。) 3次元系の相転移と臨界現象の研究には、級数展開や転送行列法よりモンテカルロ法の方が適当である。

Hard-sphere lattice gasの原子は相互作用なく格子点を占有する。本研究では二つの原子が最近接に来られない場合をとりあげる。それは磁場中の反強磁性イジング模型と等価ではないけれども密接な関係がある。磁気相図において反強磁性相と無秩序相は臨界線で隔てられる。絶対零度での臨界線の接線の傾きが正だと系はリエントラント相転移する。つまり、磁場を絶対零度での臨界磁場より少し大きく固定して温度を高温から下げると、系は無秩序相、反強磁性相、無秩序相をとる。傾きが負ならば系は無秩序相のままである。このように傾きの正負で系のリエントラント相転移の有無を区別できる。ところでhard-sphere lattice gasの相転移点、すなわち臨界活動度と絶対零度での臨界線の接線の傾きとには関係式が存在する。したがって臨界活動度を求めればそれに

対応するイジング模型のリエントラント相転移の存在を議論できる。

リエントラント相転移の存在は格子に依存する。正方格子，三角格子，蜂の巣格子では無く，体心立方格子には有ることが確かめられている。単純立方格子については決定的な結論が下されていなかった。そこでわたくしは単純立方格子上のhard - sphere lattice gasをモンテカルロ・シミュレーションして臨界活動度を求めた。3次元のhard - sphere lattice gasにモンテカルロ法を適用したのはこれが最初である。リエントラント相転移が無いとわたくしは明確に結論付けることができた。

二副格子の場合，hard - sphere lattice gasの基底状態で，一方の副格子が完全に占有されもう一方が空という配位をとる。二つの副格子は対等であるから，この相転移は副格子の対称性の破れである。そしてそのユニバーサリティー・クラスはイジング模型のそれと期待できる。正方格子では，高精度にそれが確かめられている。わたくしは単純立方格子上のhard - sphere lattice gasの臨界指数を求めてユニバーサリティーを議論した。モンテカルロ・シミュレーションのデータを有限サイズ・スケーリングで解析して得られた臨界指数の値はイジング模型のそれと異なった。すなわち，3次元ではイジング・ユニバーサリティーに属さないと示唆される。この結果を確かめるために体心立方格子上のhard - sphere lattice gasの相転移と臨界現象を研究した。臨界指数の値は単純立方格子のそれと一致した。つまり，hard - sphere lattice gasの間ではユニバーサリティーが成立している。そしてそれはイジング・ユニバーサリティー・クラスとは異なると示唆する。

最近，わたくしと正反対の報告があった。すなわち3次元hard - sphere lattice gasはイジング・ユニバーサリティーであると結論している。わたしの結果が出た理由を，データ解析の際に有限サイズ・スケーリングの補正項を無視したこと，と指摘した。その報告では補正項としてイジング模型のものを使っている。本来，その補正項も求めるべきだ。しかし補正項を求めるには高精度なデータを必要とする。現在の計算機の性能では実現できないので，将来に残された重要な課題である。

## 参考文献

A.Yamagata, Physica A215(1995)511, A222 (1995) 119, A224 (1996) 677

## 第一原理計算によるナノ構造の物性予測

東 大 理 塚 田 捷

固体表面上の超構造・自己組織化構造、あるいは様々な籠型カーボン曲面など種々の人工ナノ構造に最近、大きな関心が集まっている。これらは従来研究されてきたメゾ構造と異なり、構成する原子種や原子数その幾何学的な配列など原子尺度の物質の個性が色濃く反映する点に大きな特色がある。

このような人工ナノ構造の形成機構、安定性、物性予測など、第一原理電子状態理論に期待される役割は大きい。本講演はここ数年来我々のグループで開発してきた計算物理方法論の概略、およびその応用例についていくつかのトピックスを紹介した。

はじめに原子プロキシティ場における非平衡／開放系の電子状態を第一原理から決定するためのリカージョン・伝達行列法の概略を述べた。この方法は我々のグループで考案・開発されたもので、強電界・強電流下での電子過程・原子過程の記述が可能である。その応用例として、表面間のコンタクト形成の原子尺度の描像を議論した。現象論的な仕事関数と現実のトンネルバリアのミクロ形状の関連、トンネル電流領域から弾動的電流域への移り変わりなどが紹介された。さらに探針による原子の引き抜き、移動機構などが解明され、原子制御の機構へのヒントが示された。

後半の話題は原子間力顕微鏡とくに摩擦力顕微鏡の機構に関するものである。簡単な現象論的な模型を用いたシミュレーションの結果から、探針内の原子および表面での接触領域での原子の力の分布によって、像がどのような影響を受けるかが解明された。また摩擦力顕微鏡のメカニズムが詳細に解析され、摩擦の素過程としてのStick-Slip過程の重要性が明かにされた。理論シミュレーションの結果は観察された摩擦力顕微鏡像のさまざまな特徴を良く再現することができる。

## 現実的な固体系での量子モンテカルロ法の実際

東 大 工 山 元 進  
藤 原 育 夫

モンテカルロを使って現実的な物質の電子構造を計算するには、現在、変分モンテカルロと拡散（またはグリーン関数）モンテカルロの2つの方法がある。変分モンテカルロによる方法は、変分エネルギーを評価するための積分を、試行波動関数の絶対値の自乗に従うような分布を持ったrandom walkerを生成することにより、モンテカルロで行う方法である。一般には、Slater行列式にJastrow因子をかけた形の試行波動関数が用いられる。通常のLDAに基づく計算などで仮定される。1 Slater行列式では、特にanti-parallelなどスピンを持つ電子同士のクーロン反発の効

果の取り込みが十分ではないと考えられるからである。

拡散モンテカルロは、波動関数をrandom walkerの分布密度として表わし、分布密度がハミルトニアンに従って虚時間方向に時間発展するようにrandom walkerを動かす方法である。この方法では、最終的に基底状態の波動関数がwalkerの分布密度として得られる。波動関数は定符号ではないのでFixed Node Approximationを用いて密度と解釈する。

その方法論からも分かるように、拡散モンテカルロの方が基底状態に近い波動関数が得られると言われている。両者の方法論はかなり異なる（変分法<→Power Method的な方法）が、どちらも物理量がモンテカルロ積分で求まる点では似ている。また、拡散モンテカルロの初期分布を得るためにには、変分モンテカルロと同じプロセスが必要である、という依存関係がある。

我々は、LDAに基づいて広く一般に行われている、exchange correlation potentialの近似的な取扱いを避けた計算を、様々な系で行いたいと考え、LDAを用いた計算から波動関数を受け取り量子モンテカルロを行うプログラムを作成することにした。既に、どちらのモンテカルロともSiやCなどで計算が行われているが、前述の依存関係があるので変分モンテカルロから始めることにした。

現在、ノルム保存型擬ポテンシャルを用い、ユニットセルに8個のSi, 32電子の計算をして検証中である。LDAの計算結果と比較するため、Jastrow factorをかけないで計算しているが、擬ポテンシャルの非局所部分の計算プログラムが完成していない。また、計算上の工夫として当然のことだが、ベルトループセッサを有効に使うために、同じ系を複数個（N個とする）並列にならべ、最内側のループインデックスがN個の系の上を走るインデックスになるようにしている。ベクトルレジスタ長に依るが、N～200以上が効果的である。

計算結果を見ると、両者で同じ計算をしているはずの量（運動エネルギーと擬ポテンシャルの局所部分）に関しては、 $32 * 400 * 500$ 個 ( $N = 400, 500$  steps) の標本点をとったときで、

L D A	モンテカルロ
運動エネルギー	3.219
擬ポテンシャル局所部分	- 2.547

となり、非常に良く一致している。

最後に、実際に固体でモンテカルロをしてみて感じたことを3点程述べる。(1) random walkerの座標は特に格子点に限らずに動くのに対し、波動関数は逆格子空間上で与えられている。そのため、各点での波動関数を評価する計算量が非常に多い。(2)擬ポテンシャルの非局所部分の計算は、もう一つ積分変数があるので、更に多大な計算量になる。(3)周期系なので、電子-電子相互作用、電子-イオン相互作用、共にEwaltの方法を用いて計算する必要がある。そのため、Ewalt sumのパラメータ、計算方法を吟味して、必要最低限の精度を確保するにとどめて高速に計算する必要がある。

## 半導体エピタキシャル成長への局所密度近似によるアプローチ

筑波大物理 押山淳

結晶成長現象を原子スケールで理解すること、すなわち成長現象を担う個々のミクロな原子素過程と、結晶のマクロな形態との因果関係をつきとめること、はひとつの大きなチャレンジであろう。半導体エピタキシャル成長の場合、個々の素過程とは、分子／原子の表面での吸着・離脱、表面での拡散、表面原子とのボンドの再構成、であり、そうした素過程がある種の非平衡な条件下で起きている。エナージェティクスと同時にキネティクスも重要である。

本講演ではこうした成長現象の理解につながるひとつのアプローチ、第一原理計算による原子素過程の解明の試みを紹介した。取り上げた例は、Si(100)面上でのファセットでのファセットの成因である[1]。エピタキシャル成長では、しばしば基板表面と異なるミラー指数をもつ面が出現する。典型的な例は(100)面上の {311} ファセットである。しかしながら(311)面の単位面積あたりの表面エネルギーは(100)面より高い。また一般的に云って、物体は表面積を少なくして（球状の形態で）安定化する傾向があるが、今の場合、全体の表面積と(100)面、(311)面のエネルギーを考慮しても、{311} ファセットが出現する理由にはならない。

このパズルを解く鍵は表面上に必ず存在する原子ステップではないか、と考えた。(100)面は有名なダイマー構造をしており、ステップ端が上方テラスのダイマー列に対して、平行か垂直かによって、2種類のタイプのステップが考えられる（それぞれA型、B型と称されている）。また何原子の落差でステップが形成されているかも重要である。密度汎関数法の局所密度近似によって、各原子ステップの微視的構造と相対的なステップ形成エネルギーを計算した。それによるとB型の2原子層ステップが最もエネルギー的に有利な構造であることが判明した。さらにテラス上での飛来原子の拡散経路と活性化エネルギーを計算した。それによると上方テラスからステップ端を降りるような拡散に対しては、活性化エネルギーがテラス上の拡散に比べて大きく増大することがわかった。このことより、エピタキシャル成長中にステップの進行が何らかの原因によりビン止めされると、その位置で2原子層B型ステップがバンチ（集積）することを意味している。そしてこの2原子層B型ステップがバンチした形態こそ、(311)面そのものである。すなわち {311} ファセットはステップのバンチングによって出現した、と考えられる。

さらに詳細にみていくと、2原子層B型ステップにも2種類の安定構造（双安定性）があることが判った。どちらがより安定かは雰囲気（原子の化学ポテンシャル）に依存する。この結果、雰囲気を変えることによって別の構造のステップを実現させ、そのステップがバンチングすることが考えられる。その場合のファセットの形態は {311} ではなく、{111} であることがわかった。この雰囲気の変化による異なるファセット面の出現はMBEの実験でも見つかっている。

[1] A.Oshiyama: PRL 74, 130 (1995).

## 圧力誘起構造変化の第一原理シミュレーション

東大物性研 常行真司

第一原理分子動力学法(First - Principles Molecular Dynamics method, 以下FPMD)は非経験的に、あるいは最小限の実験事実に基づき、物質の構造と電子状態を研究するための有力な手段である。しかしこれまでは格子定数を固定して内部原子座標の最適化を行うことしかできなかつたため、格子定数の決定は実験に頼るか、若しくは手で格子を変形させてそのエネルギー変化の様子を二次関数でフィットするなどの方法が取られてきた。これに対して、最近Wentzcovitchらは古典分子動力学法で使われていた圧力一定の方法論をFPMDに応用し、結晶の内部ストレスに応じて結晶格子が自発的に変形できるようにした[1]。またBernasconiらは格子変形につれて電子系の計算精度が変わってしまう問題を回避するため、電子の運動エネルギーを変形する方法を提案した[2]。こうして格子変形をともなう（未知の）構造相転移でさえFPMDにより取り扱うことが可能となつたわけである。われわれのグループではこのあたらしい手法をとりいれたFPMDプログラムを開発し、物性研のベクトル並列スーパーコンピュータVPP500むけの並列化を行つた。

このプログラムを用いて、われわれはまずグラファイトが圧力下で六方晶ダイヤモンドに変わる過程の動的シミュレーションを行つた[3]。さらに結晶構造化にともなつてこえなければならないポテンシャルエネルギー障壁の高さをしらべるため、多次元パラメータ空間のポテンシャル面の鞍点を自動的に探査する方法、Force - Inversion Techniqueを開発した[4]。この方法を用いてグラファイトから六方晶ダイヤモンドと立方晶ダイヤモンドへの転移のポテンシャル障壁とその圧力依存性を調べた結果、20GPa程度まで加圧した場合にはたしかに室温で転移が起きる程度にポテンシャル障壁が低くなること、またグラファイト面のスライドを許した場合には、立方晶ダイヤモンドへの転移の障壁の方がより低くなることがあきらかになった。

圧力一定のFPMDはこのように圧力による構造変化・相転移を直接取り扱えるだけでなく、格子定数やブラベー格子の対称性がわからない未知の結晶構造、仮想的な化合物の構造決定など、いわゆる物質設計にも有用である。

### 参考文献

- [1] R.M.Wentzcovitch, J.L.Martins and G.D. Price, *Phys. Rev. Lett.* 70, 3947 (1993).
- [2] M.Bernasconi, G.L.Chiarotti, P.Focher, S.Scandolo, E.Tosatti and M.Parrinello, *J. Chem. Solids*, 56, 501(1995).
- [3] グラファイト→ダイヤモンド転移の動的シミュレーションは、すでに他グループによる以下の報告がある。S.Scandolo et al., *Phys. Rev. Lett.*, 74, 4015 (1995).
- [4] Y.Tateyama, T.Ogitsu, K.Kusakabe and S.Tsuneyuki, submitted to *Phys. Rev. B*.

## LAPW基底を用いた第一原理的分子動力学法 — セレンウム・クラスターへの応用

金沢 大理 上原 健太郎  
 小田 竜樹 樋渡 保秋

我々は、 LAPW基底を用いた第一原理的分子動力学法を行い、 セレンウム・クラスターの安定構造とその電子状態を求めた。我々が用いた方法は、 局所密度汎関数法(LDA)による電子状態に LAPW(Linearized Augmented Plane Wave) 基底を用いたものである。原子位置の時間変化による波動関数の基底状態の予想値を外挿法によって推定し、 前処理付のSteepest Descent(SD)法によって基底状態への補正を行う方法を用いた。この方法は、 通常のCar-Parrinello法とは異なり、 各MDステップで系の状態がBorn-Oppenheimer面上を正確にトレースして行くようになっている。また、 タイムステップを古典系で用いられているものと同程度のスケールに取れることができ大きな利点である。力の計算にはYuらによる表式を用いたが、 これはLAPW基底が非直交基底であることから出てくるPulay力を取り入れた表式である。なお、 バンド計算部ではユニット・セルを大きく取ったことから、  $\Gamma$ 点のみの計算を行った。

計算は、  $Se_2$ ,  $Se_3$ ,  $Se_8$  の 3 つのクラスターのそれぞれについて安定構造が良く再現できるかを調べることを目的として行った。 $Se_2$ ,  $Se_3$ については、 1辺が20 Åの面心立方格子のスーパー・セルを用い、 カットオフ・エネルギーは 4 a.u.に設定した。 $Se_8$ については 1辺が30 Åの面心立方格子を用い、 カットオフ・エネルギーは同じく 4 a.u.に設定した。原子(イオン)の初期配置は適当に設定し、 そこからマイクロカノニカル・アンサンブルの分子動力学法を行った。(タイム・ステップは1.2 f.s.)。安定構造に落ち着かせるために、 運動方程式中に速度に比例する摩擦項を加えた。

表 1 結合距離  $l$ , 結合角  $\alpha$ , 2面角  $\gamma$ 

		$l$ [a.u.]	$\alpha$ [deg.]	$\gamma$ [deg.]
$Se_2$	present work	4.19		
	experiment <sup>a</sup>	4.10		
	other calc. <sup>b</sup>	4.16		
$Se_3$	present work	4.47	60.0	
	other calc. <sup>c</sup>	4.46	60.0	
$Se_8$	present work	4.37	108	99
	experiment <sup>d</sup>	4.414 $\pm$ 0.011	105.7 $\pm$ 1.6	101.3
	other calc. <sup>c</sup>	4.42	109	98

<sup>a</sup> American Institute of Physics Handbook(McGraw-Hill, New York, 1982).<sup>b</sup> Z.Q.Li, J.Z.Yu, and K.Ohno, Phys. Rev. B52, 1524(1995).<sup>c</sup> D.Hohl, R.O.Jones, Chem. Phys. Lett. 139, 540(1987).<sup>d</sup> P.Cherin, P.Unger, Acta Cryst. B28, 31(1972).

得られた安定構造の結合距離、結合角、2面角を表1に示す。Se<sub>2</sub>については結合距離が実験値よりわずかに大きく出ているが、これはLDAを用いた計算に見られる一般的な傾向である。Se<sub>3</sub>については2等辺三角形のC<sub>2h</sub>構造と正三角形のD<sub>3h</sub>構造の二つの安定構造が存在することが分かれているが、この計算ではD<sub>3h</sub>構造が得られた。Se<sub>8</sub>の計算では、良く知られた王冠状のリング構造が得られたが、結合距離の実験値よりも少し小さな値を示している。しかし、この実験値は $\alpha$ -monoclinic結晶中の値であるので、我々が行ったような孤立系にはほとんど近い計算では、結合距離が実験値より小さく出るのは妥当であると思われる。

## C<sub>70</sub> 超伝導体の設計

東工大・理 斎 藤 晋

これまでに、C<sub>70</sub>, C<sub>76</sub>, C<sub>84</sub>をはじめとするC<sub>60</sub>より大きいフラーレンがマクロな量、グラファイトのアーケ放電などでできる「煤」より単離・精製され、現在もそのバリエーションを増しつつある。これら大きなフラーレンは、C<sub>60</sub>クラスター同様、新奇な固体結晶を組み上げる新物質構成単位として、物性物理学上、注目すべき系である。特に、大きなフラーレンを用いた超伝導体が合成されれば、この分野での大きなブレークスルーとなろう。すなわち、C<sub>60</sub>における高温超伝導発現機構に大きな制限を課し、その解明に大きく貢献すると同時に、フラーレン超伝導体の探索に新しい次元を加えることになるからである。

他方、電子構造計算に基づく物性研究の特色として、その定量性に基づく物質設計が可能になりつつある、ということが挙げられる。実際、C<sub>60</sub>超伝導体の研究において超伝導相の同定とより高い転移温度を持つ系の予測に成功している。本研究では、まず、構造異性体もなく、かつ、研究素材として純度の高い資料の入手が容易になりつつあるC<sub>70</sub>を用いた超伝導体の設計を試みた。

C<sub>70</sub>は、C<sub>60</sub>同様、最高被占状態と最低空状態間に十分なエネルギーギャップが開き、しかも、低い方の3状態がほぼ同じエネルギーを持って疑似縮退していることが、密度汎関数法の計算から示されている。このため、固体C<sub>70</sub>では、その3状態が、固体C<sub>60</sub>同様6電子を収容できる伝導帯を構成するものと予測される。このことから、アルカリ金属をC<sub>60</sub>あたり3原子ドープしたA<sub>3</sub>C<sub>60</sub>同様、A<sub>3</sub>C<sub>70</sub>が合成されれば、アルカリからフラーレンへの電荷移動により半分だけ電子に占有された伝導帯を持つ「金属」、ひいては超伝導体となる可能性が考えられる。

固体C<sub>70</sub>の結晶は、低温では、六方最密充填構造を基本格子として持ち、さらに、各フラーレンの方向秩序による超構造を持つことが知られている。そこで、この配向超構造を持つ固体C<sub>70</sub>の電子構造を、密度汎関数法によるバンド構造を良く再現するタイトバインディング法を用いて計算したところ、予測通り、C<sub>70</sub>あたり6電子収容可能な孤立した伝導帯を持つことが示された[1]。

そこで、配向秩序を保った $A_3C_{70}$ を実現するアルカリ金属として、どの元素を選択するのが良いかが次の問題となる。 $A_3C_{60}$ では、アルカリイオンの大きさがその系の合成可能性を左右していた。すなわち、広い8面体型格子と狭い4面体型格子間位置に、それぞれフィットする元素がベストであった。（4面体位置に対して）大きすぎては格子を不安定化させる。逆に小さすぎては、複数個のイオンが入り込んだり（8面体位置、 $Na_6C_{60}$ ）、 $C_{60}$ の配向秩序を破壊する（4面体位置、 $Li_2CsC_{60}$ ）。結局、固体 $C_{70}$ の格子間位置のサイズから、 $Na_2CsC_{70}$ が $A_3C_{70}$ を実現する最良の候補であることが判明した。

- [1] S.Saito and M.L.Cohen, Solid State Commun. (in press).

## 物性研究所談話会

日 時 1996年9月2日(月)午後1時30分～2時30分  
場 所 物性研究所Q棟1階講義室  
講 師 Dr. A.M.Tsvelik  
(所属) (Oxford University)  
題 目 Coherence-Incoherence Transition between Fermi and Luttinger Liquids  
要 旨

We study a system consistent of an infinite array of Luttinger liquid chains with a small single particle hopping,  $t_{\perp}$ .

No matter how strong the interactions are,  $t_{\perp}$  always drives the system to a phase transition at low T. However, the nature of the state of  $T > T_c$  depends on the interaction strength and the coordination number of the arrays, D. It is shown that at low D it is easier to stabilize the Luttinger liquid at  $T > T_c$ .

日 時 1996年9月6日(金)午後1時30分～2時30分  
場 所 物性研究所Q棟1階講義室  
講 師 Prof. Michael Steiner  
(所属) (Hahn Meitner Institute, Berlin)  
題 目 Ultra Low Temperature Neutron Scattering Study  
—nuclear magnetism and new fields—  
要 旨

Steiner 教授は1980年頃から中性子と物質中の核のスピンに依存する散乱強度に着目し、ミリケルビン温度領域以下の超低温中性子散乱実験を推進してきた。ヘルシンキ工科大学及びRisø研究所との共同で進めてきたCu, Agなどの核磁気秩序状態の観測の最近の話題に加え、今後を展望した超低温中性子散乱実験についてお話しeidtadku。

日 時 1996年9月17日(火)午前11時～12時  
場 所 物性研究所Q棟1階講義室  
講 師 Prof. Frank Steglich  
(所属) (ダルムショタット工科大学)  
題 目 Are Heavy-Fermion Metals Fermi Liquids?

## 要 旨

CeCu<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>の超伝導など重い電子系で重要な仕事をされてきたSteglich教授が日独セミナー（9月18日～21日）に出席するために来日されます。この機会に上記のテーマで談話会を開催致しますのでご出席下さい。

日 時 1996年 9月20日 (金) 午後 1時30分～2時30分

場 所 物性研究所Q棟 1階講義室

講 師 Dr. Stephen Hayden

(所属) (H.H. Wills Physics Laboratory, Univ. of Bristol)

題 目 High Energy Magnetic Excitations in YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6+x</sub> and La<sub>2-x</sub>Sr<sub>x</sub>CuO<sub>4</sub>

## 要 旨

Inelastic neutron scattering experiments performed at the ISIS spallation source have shown the existence of strong high-frequency magnetic fluctuations in the cuprate superconducting systems La<sub>2-x</sub>Sr<sub>x</sub>CuO<sub>4</sub> and YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6+x</sub>, both for superconducting and insulating compositions. I will discuss our recent experiments: We have made absolute measurements of the magnetic response in YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6.15</sub> over the energy range 30 to 250 meV, throughout the Brillouin zone. Our measurements allow the identification of optic and acoustic modes and the estimation of intra- and inter-layer exchange coupling.

In the La<sub>2-x</sub>Sr<sub>x</sub>CuO<sub>4</sub> system, we have made a comparative study on insulating and superconducting compositions. Doping causes results in dramatic redistribution of the spectral weight and yields a low energy scale.

日 時 1996年 9月24日 (火) 午後 1時30分～2時30分

場 所 物性研究所A棟 2階輪講室

講 師 Prof. Johannes Zittartz

(所属) (Institute for Theoretical Physics, Koln Univ.)

題 目 1-dim. Fermion Model with Tendency to Superconductivity

## 要 旨

A 1-dimensional fermion model depending on two independent interaction parameters is formulated and solved exactly by Bethe Ansatz. The Hamiltonian of the model contains the Hubbard interaction and correlated hopping as well as pair hopping terms. The density-density and pair correlations are calculated which manifest superconducting properties in certain regimes of the phase diagram.

日 時 1996年9月24日(火)午後3時30分～5時  
場 所 物性研究所A棟2階輪講室  
講 師 Prof. P. Varga  
(所属) Institut für Allgemeine Physik, Technische Universität, A - 1040 Wien, Austria  
題 目 CHEMICAL ORDERING ON ALLOY-SURFACES DETERMINED BY STM  
要 旨

Chemical information with spatial atomic resolution from multicomponent metal surfaces have been achieved by STM with constant current imaging. This offers the possibility to find out the local chemical structure of alloy surfaces. Different forms of chemical ordering have been observed on surfaces with different crystallographic orientation of  $Pt_xNi_{1-x}$ ,  $Pt_xRh_{1-x}$  and  $Pt_xCo_{1-x}$  single crystals. Examples of surfaces without chemical ordering [PtRh(100)] and surfaces with local short range ordering [PtNi(111), PtCo(111)] as well as long range chemical ordering [PtCo(100)] will be presented. By comparing measured constant current corrugation with ab initio calculations of electronic density of states a possible explanation for the contrast mechanism will be discussed.

日 時 1996年10月14日(月)午後1時30分～2時30分  
場 所 物性研究所Q棟1階講義室  
講 師 Prof. Werner-Hanke  
(所属) (Univ. of Würzburg)  
題 目 Low-Energy Excitations of Single-and Three-Band Hubbard-Models: Theory Versus Experiment  
要 旨

This talk summarizes recent, in particular, Quantum-Monte-Carlo and diagrammatic calculations of single-and two-particle electronic excitations of Hubbard models. Salient features of recent photoemission data such as a normal state excitation gap and its doping dependence are shown to be reproduced and intimately related to spin-wave like excitations in the underdoped regime.

日 時 1996年10月18日(金)午後1時30分～2時30分  
場 所 物性研究所A棟2階輪講室  
講 師 Dr. G.S. Boebinger  
(所属) (Bell Laboratories, Lucent Technologies)  
題 目 Contrasting Low-Temperature Normal-State Resistivities of High-*T<sub>c</sub>*  
Cuprates

#### 要 旨

The superconducting phase of the high-*T<sub>c</sub>* cuprates obscures the low-temperature limiting behavior of the unusual normal-state resistivity. With the use of a 62 tesla pulsed magnetic field, we suppress the superconductivity in LaSrCuO and Bi-2201 single crystals and measure the normal-state resistivity down to helium-3 temperatures. In LaSrCuO, we find that the normal state in-plane and c-axis resistivities both cross from insulating to metallic behavior at optimum doping, the carrier concentration which corresponds to maximum superconducting *T<sub>c</sub>*. Furthermore, we find that the insulating behavior in the high-*T<sub>c</sub>* cuprates is unusual: the resistivity diverges as the logarithm of temperature and occurs in samples with ( $k_F l$ ) as large as 10. Finally, in a particularly clean Bi-2201 sample ( $k_F l \sim 42$ ) we have found contrasting metallic in-plane resistivity and diverging (insulating) c-axis resistivity which extends to very low temperatures ( $T/T_c \sim 0.05$ ). Although these phenomena are not yet understood, several proposed explanations will be critically reviewed, including the role of electron-electron interactions, pseudo-gap formation, and the predicted behaviors of marginal Fermi liquids and 2D Luttinger liquids.

## 人 事 異 動

### 事 務 部

(転 出)

所 属	職・氏名	発令日	備 考
経理課	経理掛長 万 平 忠 志	8.10.1	施設部企画課総務掛長へ
総務課	図書掛 林 玲 子	8.10.1	社会科学研究所図書掛長へ

(採用・転入)

所 属	職・氏名	発令日	備 考
経理課	経理掛長 桶 谷 文 紀	8.10.1	附属農場会計掛契約主任から
総務課	図書掛 花 岡 幸 大	8.10.1	採 用

## 平成 8 年度後期短期研究会一覧

○印は提案代表者

研究会名	開催期日	参加予定人員	提案者
量子スピン系のギャップ形成とキャリアドーピング	11月5日 ↓ 11月7日 (3日間) 13:30～	80名	○上田和夫(東大・物性研) 内野倉國光(東大・工) 十倉好紀(東大・工) 福山秀敏(東大・理) 今田正俊(東大・物性研) 上田寛(東大・物性研) 佐藤正俊(名大・理) 高野幹夫(京大・化研)
表面局所物性	11月28日 ↓ 11月29日 (2日間) 10:00～	70名	○大門寛(阪大・基礎工) 川村隆明(山梨大・教育) 小森文夫(東大・物性研) 笠井秀明(阪大・工) 須藤彰三(東北大・理)
陽電子スペクトロスコピーの最近の進展	12月2日 ↓ 12月3日 (2日間) 9:30～	50名	○兵頭俊夫(東大・総合) 小森文夫(東大・物性研) 伊藤泰男(東大・原総セ) 松岡修(山口大・工) 谷川庄一郎(筑波大・物工) 長谷川雅幸(東北大・金研) 中沢正治(東大・工)
低次元フェルミ流体系の物理	12月4日 ↓ 12月6日 (3日間) 13:30～	70名	○三宅和正(阪大・基礎工) 石本英彦(東大・物性研) 家泰弘(東大・物性研) 福山寛(筑波大・物理) 河野公俊(東大・物性研)
高輝度放射光利用研究の発展	3月6日 ↓ 3月7日 (2日間) 10:00～	80名	○太田俊明(東大・理) 小杉信博(分子研) 尾嶋正治(東大・工) 小谷章雄(東大・物性研) 柿崎明人(東大・物性研)

## 平成 8 年度 後期外来研究員一覧

### 嘱託研究員

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関係 所員
岡山大 (理) 教 授	原田 劍	10/1~3/31 上記期間中 (3泊4日・2回)	磁性体の光学的性質の理論的研究	小 谷
山口大 (工) 教 授	相原 正樹	"	光励起された電子正孔系の巨視的 量子現象	"
山口大 (教 育) 助 教 授	岡田 耕三	"	d および f 電子系の高エネルギー 分光理論	"
阪 大 (理) 教 授	大貫 悅 瞳	10/1~3/31 上記期間中 (2泊3日・2回)	Ce及びU化合物の超伝導	上 田 (和)
東理大 (理) 教 授	石井 力	10/1~3/31 上記期間中 (週・1日)	異方的近藤格子の基底状態	"
東 大 (工) 講 師	初貝 安弘	"	ネットワーク及び数式処理を含む計算機 環境の物性理論における応用	甲 元
学習院大 (理) 助 手	高麗 徹	"	くりこみ群の方法による強相関電 子系の研究	"
北教大 教 授	高柳 滋	10/16~10/21 12/11~12/16 2/12~ 2/17	多重極限環境下での物性研究	毛 利
島根大 (教 育) 助 教 授	秋重 幸邦	10/2 ~10/7 11/13~11/18 1/22~ 1/27	低温、高圧下での酸化物強誘電体 の物性	"
東京電機大 (工) 教 授	小川 信二	10/1~3/31 上記期間中 (月・1日)	ヘビーフェルミオン系の物質合成 と物性研究	"
日 大 (文 理) 専任講師	高橋 博樹	10/1~3/31 上記期間中 (週・3日)	多重極限下の物性測定装置の開発	"
北海道東海大 教 授	四方周輔	10/28~11/7 12/16~12/26	多重極限下における輸送現象測定 技術開発	"

## 嘱託研究員

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関係 所員
筑波大 (理) 助 手	菊池 彦光	10/29~10/31 11/26~11/28	低次元磁性体の低温・強磁場下における磁化過程	後 藤
山口大 (理) 教 授	繁岡 透	11/11~11/15 12/9 ~12/13 2/17~ 2/21	希土類化合物の強磁場・高圧下における磁気的振舞	"
阪 大 (理) 教 授	河原崎 修三	10/7 ~10/11 11/25~12/7 2/3 ~ 2/15	高エネルギー分解能三軸型分光器による重い電子系の研究	吉 沢
東北大 (理) 助 手	武田 全康	10/1~3/31 上記期間中 (1泊2日・3回)	偏極中性子を用いた磁性研究のための装置開発	松 下
群馬大 (工) 助 教 授	平井 光博	"	生体物質の構造研究に関する中性子分光器の応用開発	"
広島大 (総合) 助 手	瀬戸 秀紀	"	高圧力下での高分子物質の構造研究に向けての圧力セルの開発	"
群馬大 (工) 助 教 授	武田 定	"	分子性結晶の構造解析を目指した中性子分光器の改良	"
東 大 (核研) 助 手	武藤 正文	10/1~3/31 上記期間中 (日帰り・4回)	高輝度光源計画における加速器電磁石の設計	神 谷
阪 大 (産研科) 教 授	磯山 悟朗	10/1~3/31 上記期間中 (1泊2日・4回)	アンジュレータの基本設計	"
高エネ研 教 授	近藤 健次郎	10/1~3/31 上記期間中 (日帰り・6回)	高輝度光源計画における放射線安全管理に関する研究	"
高エネ研 教 授	春日俊夫	10/1~3/31 上記期間中 (日帰り・3回)	光源度光源計画における加速器モニタリング・システムに関する研究	"
高エネ研 教 授	小林 仁	10/1~3/31 上記期間中 (日帰り・6回)	高輝度光源計画におけるライナックの設計研究	"
高エネ研 助 教 授	設楽 哲夫	10/1~3/31 上記期間中 (日帰り・4回)	高輝度光源計画の低速陽電子利用に関する加速器の研究	"

## 嘱託研究員

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関係 所員
高エネ研 助 手	小林 幸 則	10/1~3/31 上記期間中 (日帰り・6回)	高輝度光源リングのラティス設計 および色収差補正に関する研究	神 谷
高エネ研 助 手	堀 洋一郎	10/1~3/31 上記期間中 (日帰り・4回)	高輝度光源計画の加速器における 真空システムの設計	"
高エネ研 助 手	飛山 真理	"	電子入射器(高輝度光源計画)の 設計	"
高エネ研 助 手	家入 孝夫	"	ビーム設計システムの開発研究	"
高エネ研 技 官	佐藤 佳裕	10/1~3/31 上記期間中 (日帰り・6回)	高輝度光源計画におけるコントロ ールシステムの設計計画	"
理 研 先任研究員	大熊 春夫	10/1~3/31 上記期間中 (1泊2日・2回)	放射光光源における挿入型光源の 研究	"
東北大 (理) 助 教 授	須藤 彰三	10/1~3/31 上記期間中 (日帰り・3回)	スピニ偏極電子源の開発	柿崎
東北大 (科計研) 助 教 授	上田 潔	"	高輝度光源を利用する原子・分子 分光実験設備の基本設計	"
群馬大 (教 育) 教 授	菅原 英直	"	高輝度光源を利用するコインシデ ンス分光実験装置の基本設計	"
群馬大 (教 育) 助 教 授	奥沢 誠	10/1~3/31 上記期間中 (日帰り・4回)	"	"
阪大 (基礎工) 助 教 授	大門 寛	10/1~3/31 上記期間中 (1泊2日・4回)	二次元表示型スピニ分解光電子エ ネルギー分析器の開発	"
学習院大 (理) 助 手	藤井 純	10/1~3/31 上記期間中 (日帰り・4回)	スピニ偏極電子源の開発	"
高エネ研 助 教 授	柳下 明	"	高輝度光源を利用する原子分光実 験設備の基本設計	"

## 嘱託研究員

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関係 所員
分子研 教 授	小 杉 信 博	10/1~3/31 上記期間中 (日帰り・3回)	高輝度光源を利用する分子分光実験設備の基本設計	柿 崎
東北大 (科計研) 助 教 授	柳 原 美 廣	"	高輝度光源を用いた軟X線発光の研究	辛
分子研 助 手	木 村 真 一	10/1~3/31 上記期間中 (1泊2日・4回)	強相関系物質の共鳴逆光電子分光の研究	"

## 一 般

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関係 所員
東北大 (理) 助 手	高 木 滋	11/11~11/16 12/9 ~12/14	f電子系化合物の強磁場NMR	安 岡
東北大 (理) M. C. 2	小 林 宏 至	11/11~11/16 12/9 ~12/14	"	"
東北大 (金研) 助 教 授	高 梨 弘 穀	11/18~11/22 2/3 ~ 2/5	CuCoスパッタ合金膜の微細構造と 磁気抵抗	"
東北大 (工) D. C. 3	菅 原 貴 彦	"	"	"
埼玉大 (教育) 教 授	津 田 俊 信	10/1~3/31 上記期間中 (週・1日)	酸化物高温超伝導体およびその関連物質の核磁気共鳴	"
阪 大 (基礎工) 教 授	那 須 三 郎	12/2 ~12/6 12/16~12/20	鉄中侵入型不純物元素の電子状態	"
阪 大 (基礎工) D. C. 2	樋野村 徹	"	"	"
徳島大 (工) 助 教 授	大 野 隆	10/27~11/4	高温超伝導体 $Y_{1-x}Pr_x Ba_2Cu_3O_7$ の Cu-NQR	"

## 一 般

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関係 所員
東京医大 講 師	大 岩 潔	11/18~11/22 12/9 ~12/13	ハーフメタルのNMR	安 岡
国際超電導産業 技術研究センター 超電導工学研 主任研究員	町 敬 人	10/1~3/31 上記期間中 (週・2日)	NMR による酸化物高温超電導体の 研究	"
国際超電導産業 技術研究センター 超電導工学研 究員	菊 地 淳	"	"	"
電 通 大 教 授	野 上 隆	10/1~3/31 上記期間中 (週・3回)	有機強磁性体の探索と極低温物性	石 川
金 沢 大 (理) 助 教 授	堤 喜登美	10/1~3/31 上記期間中 (4泊5日・1回)	多元金属間化合物超伝導体の磁性	"
金 沢 大 (理) 助 教 授	堤 喜登美	10/1~3/31 上記期間中 (4泊5日・1回)	多元金属間化合物超伝導体の合成 と評価	上 田 (寛)
阪 大 (理) 教 授	武 居 文 彦	10/21~10/25 11/18~11/22	貴金属酸化物の結晶育成と電気的 性質	"
山 口 大 (工) 助 教 授	中 山 則 昭	12/9~12/13	Li-Mn-Ni-O系複合酸化物の構造と 磁性	"
千 葉 大 (理) 助 教 授	澤 博	10/1~3/31 上記期間中 (週・2日)	分子性伝導体の合成及び低温構造 の研究	加 藤
千 葉 大 (自然) M. C. 1	並 木 義 雄	"	"	"
東京商船大 助 教 授	和 泉 充	10/1~3/31 上記期間中 (週・1日)	高導電性L B膜開発をめざしたT F系電荷移動塩の作成	"
東京商船大 助 手	大 貫 等	"	"	"
東京商船大 M. C. 1	永 田 正 明	"	"	"

## 一般

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関係 所員
慶 應 大 (理 工) 非常勤講師	岩 澤 尚 子	10/1~3/31 上記期間中 (週・1日)	有機分子間相互作用の設計とその評価	加 藤
東 大 (工 ) 教 授	十 倉 好 紀	10/1~3/31 上記期間中 (月・4日)	$\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_4$ の高温ホール係数	高 木
東 大 (工 ) 助 手	勝 藤 拓 郎	"	"	"
東 大 (工 ) M. C. 1	田 邊 隆 哉	"	"	"
東 大 (工 ) 講 師	大久保 達 也	10/1~3/31 上記期間中 (週・1日)	ゼオライト単結晶の育成	"
京 大 (化 研) 助 手	東 正 樹	10/7~10/9 11/5~11/7	量子スピン梯子物質の比熱測定による不純物効果の研究	"
京 大 (化 研) 教 授	高 野 幹 夫	11/18~11/20	"	"
京 大 (理 ) M. C. 1	奥 村 誠	10/21~10/23	"	"
北 大 (理 ) 講 師	内 藤 俊 雄	12/1~12/5	Pd(dmit) <sub>2</sub> /キヌクリジニウム塩の電子構造と電気物性	田 島
明治学院大 教 授	菅 野 忠	10/1~3/31 上記期間中 (月・2日)	有機結晶の磁性	"
北陸先端大 助 手	土 家 琢 磨	12/11~12/14 3/5~3/8	タイプ-II超格子における励起子分子の研究	安 藤
仙台電波高専 講 師	鈴 木 達 夫	10/23~10/25 12/24~12/26	強磁場下における半導体量子細線中の非平衡電流分布の解明	"
島 根 大 (教 育) 教 授	神志那 良 雄	12/19~12/21 2/27~3/1	無機化合物蛍光体の光学的性質	小 谷

## 一般

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関係 所員
阪府立大 (工) 助手	田 中 智	10/1~3/31 上記期間中 (5泊6日・1回)	内殻励起下での格子緩和	小 谷
姫工大 (理) 助手	坂 井 徹	2/17~2/21 3/17~3/21	低次元磁性体の理論的研究	高 橋 (實)
東北大 (理) 助手	西 野 友 年	11/5~11/7 12/9~12/11	密度行列繰り込み群による二次元 量子系の研究	上 田 (和)
北大 (理) 教 授	三本木 孝	10/1~3/31 上記期間中 (2泊3日・1回)	有機錯体中の双晶境界のダイナミクス	高 山
岩手大 (人文社会) 助 教 授	白 倉 孝 行	1/8~ 1/10	二次元イジングスピングラスの相 転移	"
東 大 (工) 学振特別研究員	山 中 雅 則	10/1~3/31 上記期間中 (週・1日)	強相関電子系におけるランダムネスの効果	甲 元
東工大 (総合理工) 助 手	神 藤 欣 一	"	半導体結晶中の格子欠陥の電子状 態の計算	常 行
北大 (理) 教 授	山 岸 眞 彦	10/24~10/25	自己集積型粘土のXPS分析	田 中
北見工大 (工) 助 教 授	射 水 雄 三	12/24~12/26	銀および銅単結晶表面上の酸素種 の反応性に関する研究	"
東北大 (情報科学) 助 教 授	佐々木 一 夫	11/25~11/28 1/27~1/30	金属表面に形成される秩序構造の 解析	"
東北大 (科計研) 教 授	楠 勲	11/13~11/15 1/22~1/24	Si表面の炭化反応機構の研究	"
山梨大 (教 育) 教 授	川 村 隆 明	10/1~3/31 上記期間中 (日帰り・6回)	結晶表面の局所原子配列	"
東邦大 (理) 教 授	梶 田 晃 示	10/1~3/31 上記期間中 (月・2日)	有機伝導体 $\alpha$ -(BEDT-TSeF) <sub>2</sub> I <sub>3</sub> の 高磁場電流磁気効果	家

## 一般

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関係 所員
東邦大 (理) D.C.1	田嶋尚也	10/1~3/31 上記期間中 (月・2日)	有機伝導体 $\alpha$ -(BEDT-TSeF) <sub>2</sub> I <sub>3</sub> の 高磁場電流磁気効果	家
九大 (理) 助教授	矢山英樹	10/3~10/7 12/5~12/9	ヘリウム液面上の擬1次元電子系	河野
北大 (理) 教 授	野村一成	10/1~3/31 上記期間中 (6泊7日・1回)	銅酸化物超伝導体の磁場中STM による研究	小森
北大 (理) 助 手	市村晃一	"	"	"
北大 (理) D.C.2	鈴木宏治	"	"	"
宇都宮大 (工) 助教授	江川千佳司	10/18 11/22 12/13	表面局所構造と反応性に関する研 究	"
東京学芸大 助教授	金沢育三	10/1~2/10 上記期間中 (週・1日)	低速陽電子ビームによる表面研究	"
東京学芸大 M.C.2	田代睦	"	"	"
阪大 (基礎工) 助教授	大門寛	11/27~11/30 1/7~1/11	二次元電子分析器の角度分解能の 向上	"
鳥取大 (工) 助教授	石井晃	11/18~11/23 12/16~12/21	ポジトロニウムを用いた表面分光 法の開発	"
東北大 (金研) 助教授	野尻浩之	10/7~10/10	交替ボンド系ハルデン物質のファ ラデー回転による磁化過程の研究	三浦
東大 (総合文化) 教 授	鹿児島誠一	10/1~3/31 上記期間中 (週・3日)	有機低次元導体の強磁場下の物性	"
東大 (総合文化) 助 手	長谷川達生	"	"	"

## 一般

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関 係 所 員
東 大 (総合文化) D. C. 3	花 咲 徳 亮	10/1~3/31 上記期間中 (週・3日)	有機低次元導体の強磁場下の物性	三 浦
東 大 (総合文化) D. C. 3	斎 藤 裕	"	"	"
東 大 (総合文化) D. C. 3	山 口 智 弘	"	"	"
山 梨 大 (教 育) 助 教 授	渡 辺 勝 儀	1/27~1/30 2/22~2/25	超強磁場下におけるZnTe結晶及び ZnTe系量子井戸の磁気光学スペク トルの測定	"
阪 大 (理) 教 授	大 山 忠 司	10/1~3/31 上記期間中 (2泊3日・1回)	SiCに関する磁気光共鳴吸収の研 究	"
阪 大 (理) D. C. 1	佐 藤 和 郎	"	"	"
阪 大 (工) 教 授	濱 口 智 尋	10/1~3/31 上記期間中 (2泊3日・2回)	超強磁場下における(GaAs) <sub>n</sub> / (AlAs) <sub>n</sub> 短周期超格子の赤外サイ クロトロン共鳴に関する研究	"
阪 大 (工) 講 師	森 伸 也	"	"	"
阪 大 (低温セ) 助 手	百瀬 英毅	"	"	"
阪 大 (工) D. C. 2	尾 迫 伸 一	"	"	"
山 口 大 (工) 教 授	田 口 常 正	11/25~11/28	ワイドギャップ半導体材料の磁気 光吸収分光	"
山 口 大 (工) 助 手	山 田 陽 一	"	"	"
山 口 大 (工) 助 教 授	荻 原 千 聰	10/7~10/9 11/20~11/22	アモルファスシリコン系バンド端 変調構造膜の磁場中における光吸 収の研究	"

## 一般

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関係 所員
九州工業大 (情 報) 教 授	小 寺 信 夫	12/18~12/25	超強磁場における量子井戸内 InGaAsのサイクロトロン共鳴	三 浦
九州工業大 (情 報) 助 手	田 中 公 一	"	"	"
国際超電導産業 技術研究センター 超電導工学研 主任研究員	中 尾 公 一	10/1~3/31 上記期間中 (週・1日)	パルス強磁場による高温超電導体 の $B_{c2}$ 測定	"
旭川医科大 講 師	本 間 龍 也	11/5~11/18	$Y_{1-x}Ca_xBa_2Cu_3O_6$ 系での超伝導転 移温度とホール係数の圧力依存性	毛 利
東北大 (理) 助 手	小 林 寿 夫	11/25~11/29 12/16~12/20	$Sr_3Fe_2O_7$ -における高圧下の物性 研究	"
東北大 (理) M. C. 1	吉 良 昌 久	"	"	"
電通大 D. C. 3	石 田 進	10/1~3/31 上記期間中 (週・1日)	高圧下における $Fe_3O_4$ の物性測定	"
東 大 (工) 教 授	十 倉 好 紀	10/1~3/31 上記期間中 (月・4日)	高圧下におけるチタン酸化物の物 性	"
東 大 (理) D. C. 1	田 口 康二郎	"	"	"
琉球大 (理) 教 授	矢ヶ崎 克 馬	11/4~11/12	$Ce_{1-x}La_xRu_2$ の $T_c$ および $Hc_2$ の 圧力効果	"
琉球大 (理) 助 手	仲 間 隆 男	"	"	"
琉球大 (理) M. C. 1	小 濱 俊 郎	"	"	"
北陸先端大 助 教 授	岩 佐 義 宏	11/5~11/10	フラーレン超伝導体の高圧効果	"

## 一般

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関係 所員
北陸先端大 D. C. 1	下 田 英 雄	11/5~11/10	フラーレン超伝導体の高压効果	毛 利
北海道東海大 M. C. 1	後 藤 英 夫	10/28~11/7 12/16~12/26	多重極限下における輸送現象測定 技術開発	"
東京電機大 M. C. 1	星 野 克 政	10/1~3/31 上記期間中 (週・4日)	ヘビーフェルミオン系物質の合成 と物性研究	"
青山学院大 (理 工) M. C. 1	柴 田 陽 一	10/1~3/31 上記期間中 (週・2日)	高圧下における新超伝導体の探索	"
青山学院大 (理 工) M. C. 1	永 田 貴 志	10/1~3/31 上記期間中 (月・5日)	梯子型超伝導体Sr <sub>14</sub> Cu <sub>24</sub> O <sub>41</sub> の高 圧下の物性	"
長崎総科大 教 授	浅 海 勝 征	12/17~12/20	非線形光学結晶の応力効果	"
群馬高専 助 教 授	渡 辺 直 寛	10/1~3/31 上記期間中 (6泊7日・1回)	高温超伝導体に於ける輸送現象の 一軸圧依存性	"
北 大 (理) 助 手	天 谷 健 一	"	重い電子系化合物の強磁場・圧力 下での磁気物性	後 藤
北 大 (理) D. C. 3	松 平 和 之	"	"	"
北 大 (理) D. C. 2	田 山 孝	"	"	"
東北大 (工) 教 授	深 道 和 明	10/21~10/25	Y-Feスピングラスアモルファス合 金の強磁場磁性	"
東北大 (工) M. C. 2	斎 藤 秀 和	"	"	"
東北大 (工) D. C. 3	藤 田 麻 哉	11/11~11/15	Lu系ベーラス相メタ磁性化合物の 低温磁性	"

## 一般

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関係 所員
東北大 (工) M. C. 1	横山 剛	11/11~11/15	Lu系ペーラス相メタ磁性化合物の低温磁性	後藤
埼玉大 (理) 教 授	宮本芳子	10/1~3/31 上記期間中 (1泊2日・6回)	低温におけるマグネタイト(Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> )物性	"
埼玉大 (理工) 研究 生	鈴木成己	"	"	"
東工大 (理) 助 教 授	田中秀数	11/18~11/22	二重スピン鎖を有する磁性体の強磁場磁化過程	"
お茶大 (理) 教 授	伊藤厚子	10/1~3/31 上記期間中 (日帰り・14回)	ランダム磁性体の磁化測定	"
お茶大 (人間文化) D. C. 3	深谷敦子	10/1~3/31 上記期間中 (日帰り・14回)	ランダム磁性体の磁化測定	"
お茶大 (人間文化) D. C. 3	邸乃力	"	"	"
横浜国大 (工) 教 授	山口益弘	9/1~9/14 11/1~11/14 2/1~2/14	希土類一遷移元素金属間化合物の高磁場磁化の研究	"
九大 (理) 助 教 授	網代芳民	10/1~3/31 上記期間中 (4泊5日・2回)	低次元量子スピン系の磁場中相転移	"
福井大 (工) D. C. 2	浅野貴行	"	"	"
福井大 (工) M. C. 2	稻垣祐次	"	"	"
京大 (理) 助 教 授	吉村一良	12/9~12/16	新規Yb-Cu系化合物の強磁場磁化過程	"
京大 (理) D. C. 2	陰山洋	"	"	"

## 一般

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関係 所員
京 大 (理) M. C. 1	酒 井 宏 典	12/9~12/16	新規Yb-Cu系化合物の強磁場磁化過程	後 藤
京 大 (工) 助 教 授	和 田 裕 文	12/12~12/13	磁場誘起価数転移を示すEu化合物の強磁場磁歪	"
京 大 (工) D. C. 3	今 井 英 人	11/18~11/22	"	"
京 大 (工) M. C. 1	光 田 曜 弘	"	"	"
岡 山 大 (工) 助 手	中 西 真	12/9~12/16	遍歴電子反強磁性体V <sub>5</sub> S <sub>8</sub> , V <sub>5</sub> Se <sub>8</sub> の強磁場磁化過程	"
熊 本 大 (工) 教 授	巨 海 玄 道	12/15~12/18	ホウ素炭化物超伝導体の強磁場下における磁化, 磁歪測定	"
熊 本 大 (自然科学) D. C. 1	石 井 貴 幸	12/15~12/21	"	"
熊 本 大 (理) M. C. 1	澤 村 智 美	"	"	"
東北学院大 (工) 教 授	鹿 又 武	12/2~12/4	多重極限環境下における鉄族金属間化合物の磁気特性	"
東北学院大 (工) M. C. 1	佐 藤 健 一	12/2~12/7	"	"
東京医科大 助 手	飯 島 正 徳	11/5~11/8 12/2~12/6	ホイスラー型金属間化合物の高磁場における磁化と輸送現象	"
東 大 (総合文化) 助 教 授	和 田 信 雄	10/1~3/31 上記期間中 (週・2日)	超低温での2次元 <sup>3</sup> He フェルミ縮退の比熱	石 本
神奈川工科大 非常勤講師	鳥 塚 潔	10/1~3/31 上記期間中 (週・4日)	極低温超音波実験用トランステューサーの開発	"

## 一般

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関係 所員
北大 (理) 教 授	藤野清志	11/21~11/25	高温高圧下におけるガーネット-ペロブスカイト相変態の解明	八木
北大 (理) D. C. 3	宮島延吉	11/21~12/5	"	"
室蘭工大 教 授	城谷一民	10/28~11/7 12/16~12/26	ZrRuX(X=Ge, Sb)の高圧合成と電子物性	"
室蘭工大 M. C. 1	金野雄次	"	"	"
東北大 (理) 教 授	大谷栄治	10/1~3/31 上記期間中 (4泊5日・2回)	超高压高温における金属鉄-珪酸塩間の反応と元素分配	"
東北大 (理) 学振特別研究員	鈴木昭夫	"	"	"
東北大 (理) M. C. 1	浜畠美規	"	"	"
東北大 (金研) 教 授	庄野安彦	10/14 11/25	MnOの圧力誘起相転移	"
東北大 (金研) 助 手	阿藤敏行	10/14~10/18 11/25~11/29	"	"
東北大 (理) M. C. 2	野口雄一	"	"	"
千葉大 (理) 助 教 授	澤 博	10/1~3/31 上記期間中 (週・3日)	分子性伝導体dmit系の高圧下での結晶構造の研究	"
千葉大 (自然科学) M. C. 1	並木義雄	10/1~3/31 上記期間中 (週・2日)	"	"
東大 (生産研) 教 授	七尾 進	10/1~3/31 上記期間中 (月・1日)	準結晶合金の超高压下における挙動	"

## 一般

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関係 所員
東 大 (生産研) 助 手	渡 辺 康 裕	10/1~3/31 上記期間中 (月・3日)	準結晶合金の超高压下における挙動	八 木
東 大 (工) M. C. 2	吉 見 学	10/1~3/31 上記期間中 (月・12日)	"	"
阪 大 (理) D. C. 2	和 田 直 予	11/11~11/18 2/3~2/10	金属化Xeと鉄の合金の可能性: 地球大気のXe存在度への応用	"
阪 大 (理) 教 授	松 田 准 一	"	"	"
愛 媛 大 (理) 教 授	入 舟 徹 男	12/1~12/6 3/1~3/6	超高压下でのケイ酸塩多成分系の相平衡	"
愛 媛 大 (理 工) D. C. 1	黒 田 幸 治	12/1~12/8 3/1~3/8	"	"
愛 媛 大 (理 工) M. C. 1	久 保 範 典	"	"	"
北陸先端大 助 教 授	岩 佐 義 宏	12/5~12/10	高圧合成法による炭素ナノネットワークの研究	"
北陸先端大 M. C. 2	川 口 実佐紀	"	"	"
学習院大 (理) 助 手	鈴 木 敏 弘	10/1~3/31 上記期間中 (週・1日)	高圧高温下におけるケイ酸塩鉱物の融解と元素分配	"
上越教育大 助 教 授	定 本 嘉 郎	10/1~3/31 上記期間中 (1泊2日・2回)	レーザーと磁化プラズマの相互作用	黒 田
東 海 大 (理) D. C. 2	織 茂 聰	10/1~3/31 上記期間中 (週・5日)	軟X線レーザーの基礎過程に関する研究	"
東 大 (理) 教 授	長 澤 信 方	10/1~3/31 上記期間中 (週・2日)	半導体における励起子の統計現象の研究	末 元

## 一般

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関係 所員
岡山大 (理) 教 授	中 村 快 三	11/25~11/30	$\beta\text{-ZnP}_2$ の共鳴二次発光 — 温度依存 —	末 元
岡山大 (理) 助 教 授	有 本 收	"	"	"
岡山大 (理) M. C. 2	三 木 大 知	11/25~11/30	"	"
東理大 (基礎工) 教 授	高 野 幸 男	10/1~3/31 上記期間中 (週・2日)	半導体中の伝導電子の散乱に関する研究	"
東理大 (基礎工) M. C. 2	丸 山 将 一	10/1~3/31 上記期間中 (週・5日)	半導体中の伝導電子の散乱に関する研究	"
長崎総科大 教 授	浅 海 勝 征	3/10~3/13	非線形光学結晶の応力効果	"
東 大 (工) 教 授	井 野 博 滿	10/1~3/31 上記期間中 (週・2日)	Sm化合物の作成	物 質 開発室
東 大 (工) D. C. 3	安 達 弘 通	"	"	"
東 大 (生産研) 助 手	渡 辺 康 裕	10/1~3/31 上記期間中 (月・5日)	希土類・遷移金属合金のX線磁気効果	"
東京学芸大 助 教 授	金 沢 育 三	10/1~2/10 上記期間中 (月・1日)	準結晶の作成	"
東京学芸大 M. C. 2	濱 田 栄 作	10/1~2/10 上記期間中 (月・2日)	"	"
東 大 (工) 教 授	井 野 博 滿	10/1~3/31 上記期間中 (週・2日)	Sm化合物の磁化測定	電磁気 測定室
東 大 (工) D. C. 3	安 達 弘 通	"	"	"

## 一般

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関係 所員
名工大 (工) 助教授	坂 本 功	12/12~12/14 2/12~2/14	U及びYb化合物のドハース・ファンアルフェン効果	電磁気測定室
広島大 (理) 教 授	高 富 敏 郎	11/11~11/15 12/16~12/20	近藤半導体の磁気抵抗と磁化	"
広島大 (理) 非常勤講師	加 藤 健 一	11/11~11/15 12/16~12/20	"	"
広島大 (理) M. C. 2	小 林 克 志	"	"	"
九大 (理) 教 授	白 鳥 紀 一	11/13~11/16 12/11~12/14	(Eu, Sr)S の磁化測定	"
九大 (理) M. C. 1	伊 藤 康 博	11/13~11/16 12/11~12/14	"	"
富山県立大 (工) 助教授	横 道 治 男	10/1~3/31 上記期間中 (3泊4日・2回)	電子スピン共鳴法によるヘテロフーラーゲンの電子状態に関する研究	"
富山県立大 (工) M. C. 2	翁 輝 雄	11/25~11/28 1/27~1/30	"	"
いわき明星大 (理工) 教 授	吉 田 喜 孝	10/14~10/16	希土類炭化物の磁気物性探索	"
龍谷大 (理工) 助教授	西 原 弘 訓	10/1~3/31 上記期間中 (5泊6日・1回)	高温超伝導体における磁気的雑音の研究	"
長野高専 教 授	藤 原 勝 幸	11/5~11/7	金属水素化物GdT <sub>2</sub> Hyの磁性	"
東 大 (工) 教 授	前 田 康 二	10/1~3/31 上記期間中 (週・1日)	結晶欠陥運動の原子レベルその場観察	電子顕微鏡室
長崎大 (教養) 教 授	岩 永 浩	12/9~12/13 2/17~2/21	チッ化ケイ素ウィスカーの微構造	"

## 一般

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関係 所員
九大 (理) 助手	渕崎 員弘	12/9~12/21	テトラハライド系の圧力誘起非晶質化	藤井
名大 (工) M. C. 2	百瀬 陽	10/1~3/31 上記期間中 (2泊3日・2回)	環状ポリ(2-ビニルピリジン)の単離とそのキャラクタリゼーション	松下
高千穂商科大 教 授	勝木 涼	10/7~3/31 上記期間中 (週・2日)	日本物性物理学史	外来委
日大 (理工) 教 授	西尾 成子	10/1~3/31 上記期間中 (週・1日)	"	"
日大 (理工) 専任講師	植松 英穂	10/1~3/31 上記期間中 (週・1日)	"	"

## S O R

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関係 所員
立命館大 (理工) 教 授	S-1 山田 廣成	10/14~10/18 11/5~11/8	マシン・スタディ	SOR
立命館大 (理工) 特別研究員	陳 基忠	10/14~10/18 11/5~11/8	"	"
立命館大 (理工) D. C. 1	坂井 一郎	10/14~10/18 11/5~11/8	"	"
東大 (工) 教 授	I-1 十倉 好紀	10/21~10/25	層状ニッケル酸化物の真空紫外反射分光	"
東大 (工) 助 手	勝藤 拓郎	"	"	"
東大 (工) M. C. 2	桜井 康平	"	"	"

## S O R

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関係 所員
東 大 ( 工 ) M. C. 2	山 本 貴 一	10/21~10/25	層状ニッケル酸化物の真空紫外反射分光	S O R
東 大 ( 工 ) M. C. 1	田 邊 隆 哉	"	"	"
東 大 ( 工 ) M. C. 1	齊 藤 英 治	"	"	"
東 大 ( 理 ) D. C. 3	山 口 伸 也	"	"	"
東 大 ( 理 ) D. C. 2	沖 本 洋 一	"	"	"
東 大 ( 理 ) D. C. 1	朴 成 基	"	"	"
東 大 ( 理 ) D. C. 1	石 川 忠 彦	"	"	"
東 大 ( 理 ) D. C. 1	田 口 康二郎	"	"	"
名 大 ( 工 ) 教 授	I - 2 水 谷 宇一郎	10/27~10/29	$(Fe_{1-x}V_x)_3Al$ の反射率測定	"
名 大 ( 工 ) 助 教 授	曾 田 一 雄	10/27~11/2	"	"
名 大 ( 工 ) M. C. 2	早 崎 誠	"	"	"
名 工 大 ( 工 ) D. C. 2	加 藤 雅 章	"	"	"
横 浜 国 大 ( 工 ) 教 授	I - 3 栗 田 進	11/11~11/22	熱処理したアナターゼ $TiO_2$ 単結晶の光学的性質に関する研究	"

## S O R

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関係 所員
横浜国大 (工) 助 手	関 谷 隆 夫	11/11~11/22	熱処理したアナターゼTiO <sub>2</sub> 単結晶の光学的性質に関する研究	S O R
横浜国大 (工) D. C. 3	穂 坂 紀 子	"	"	"
横浜国大 (工) D. C. 1	篠 原 才 司	"	"	"
横浜国大 (工) M. C. 2	廣 野 貴 啓	"	"	"
横浜国大 (工) M. C. 1	五十嵐 麻 や	"	"	"
横浜国大 (工) M. C. 1	大 池 智 之	"	"	"
琉球大 (教 育) 教 授	I - 4 江 尻 有 郷	12/2~12/7	セシウムハライド光電子Total yield の温度依存性	"
琉球大 (教 育) 研 究 生	INTHANONTE TEERAPHON	"	"	"
琉球大 (理) M. C. 2	新 垣 邦 宏	"	"	"
立教大 (理) 教 授	I - 5 窪 田 信 三	12/9~12/13 12/16~12/20	CsI, CsI(Te) のシンチレータ発光 機構の研究	"
立教大 (理) M. C. 1	横 澤 琢	"	"	"
東北大 (科計研) 助 手	I - 6 佐 多 教 子	2/9~2/22	酸化物ペロブスカイトのプロトン 吸蔵と電子構造の研究	"
東北大 (理) D. C. 1	八 木 良太郎	2/17~3/1	"	"

## S O R

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関 係 所 員
東北大 (理) M. C. 2	佐藤方樹	2/2~2/8	酸化物ペロブスカイトのプロトン吸蔵と電子構造の研究	S O R
東北大 (理) M. C. 2	松田宏人	"	"	"
東北大 (電通研) 助 教 授	I-7 庭野道夫	3/10~3/21	低誘電率絶縁膜の光学特性に関する研究	"
東北大 (工) D. C. 1	庄子大生	"	"	"
新潟大 (理) 教 授	II-2 樺田昭次	11/1~11/8	光電子分光による銅カルコゲン化合物の電子状態の研究	"
新潟大 (自然科学) M. C. 2	斎藤天	"	"	"
新潟大 (自然科学) M. C. 1	飯田大士	"	"	"
群馬大 (教育) 助 教 授	II-4 奥沢誠	11/24~12/7	YbInCu <sub>4</sub> におけるYb内殻準位線の光電子放出実験	"
群馬大 (教育) M. C. 2	釜田重徳	11/24~11/29 12/1~12/6	"	"
群馬大 (教育) M. C. 2	佐々木由香	11/25~11/30 12/2~12/7	"	"
群馬大 (教育) M. C. 1	糸井勇人	11/24~11/29 12/1~12/6	"	"
群馬大 (教育) M. C. 1	田村明美	11/25~11/30 12/2~12/7	"	"
広島大 (理) 助 手	II-5 佐藤仁	12/6~12/21	クロム化合物の電子状態の研究	"

## S O R

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関係 所員
広島大 (理) 教 授	谷 口 雅 樹	12/6~12/21	クロム化合物の電子状態の研究	S O R
呉工業高専 助 教 授	植 田 義 文	"	"	"
広島大 (放射科学セ) 助 手	島 田 賢 也	"	"	"
広島大 (理) M. C. 2	仙 波 伸 也	"	"	"
広島大 (理) M. C. 1	奥 田 裕 之	"	"	"
岡山大 (理) 教 授	II-6 岩 見 基 弘	2/9~2/22	SiC 極性面の光電子分光法による評価	"
岡山大 (理) 助 教 授	日 下 征 彦	"	"	"
岡山大 (理) 助 手	平 井 正 明	"	"	"
岡山大 (自然科学) D. C. 2	直 本 保	"	"	"
岡山大 (自然科学) D. C. 2	王 金 良	"	"	"
岡山大 (理) M. C. 1	斎 藤 多恵子	"	"	"
東北大 (科計研) 助 教 授	II-7 服 部 武 志	3/9~3/15	共鳴光電子分光によるP型-SrTiO <sub>3</sub> , SrZrO <sub>3</sub> , SrCeO <sub>3</sub> の電子状態の研究	"
東北大 (科計研) 助 手	佐 多 教 子	"	"	"

## S O R

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関係 所員
東京理科大 M. C. 2	樋 口 透	3/9~3/15	共鳴光電子分光によるP型-SrTiO <sub>3</sub> , SrZrO <sub>3</sub> , SrCeO <sub>3</sub> の電子状態の研究	S O R
東北大 (電通研) 助 教 授	III-1 庭 野 道 夫	11/11~11/16 11/18~11/22	放射光励起薄膜形成の研究	"
琉球大 (工) 助 教 授	前 濱 剛 廣	10/1~3/31 上記期間中 (5泊6日・2回)	"	"
東北大 (工) D. C. 1	庄 子 大 生	11/10~11/22 2/17~2/28	"	"
琉球大 (工) M. C. 1	前 里 哲 貴	10/1~3/31 上記期間中 (13泊14日・2回)	"	"
東北大 (工) M. C. 1	篠 原 正 典	11/10~11/22 2/17~2/28	"	"
阪 大 (基礎工) 助 教 授	IV-1 大 門 寛	10/1~3/31 上記期間中 (4泊5日・2回)	遷移金属化合物, 半導体表面, 高温超伝導体の二次元光電子分光	"
阪 大 (基礎工) 教 授	菅 滋 正	10/1~3/31 上記期間中 (2泊3日・2回)	"	"
阪 大 (基礎工) D. C. 3	奥 田 太 一	10/1~3/31 上記期間中 (4泊5日・2回)	"	"
阪 大 (基礎工) D. C. 2	中 辻 寛	10/1~3/31 上記期間中 (27泊28日・1回)	"	"
阪 大 (基礎工) M. C. 2	沖 宏 幸	"	"	"
阪 大 (基礎工) M. C. 1	小 嗣 真 人	10/1~3/31 上記期間中 (41泊42日・2回)	"	"
阪 大 (基礎工) M. C. 1	古 畑 武 夫	10/1~3/31 上記期間中 (27泊28日・1回)	"	"

## S O R

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関係 所員
国際基督教大 (教養) 講 師	V-1 高 倉 かほる	11/11~3/21 上記期間中 (8週間)	放射光紫外線の利用による生命誕生の分子機構	S O R
立教大 (理) 教 授	檜 枝 光太郎	"	"	"
立教大 (理) M. C. 1	富 田 雅 典	"	"	"
立教大 (理) M. C. 1	檜 枝 美和子	"	"	"
東海大 (工) 助 教 授	伊 藤 敦	"	"	"
高工研 助 教 授	小 林 克 己	10/1~3/31 上記期間中 (4泊5日・2回)	"	"
高工研 助 手	宇佐美 徳 子	"	"	"
大阪府大 (附属研) 講 師	恵 恒 雄	10/1~3/31 上記期間中 (5泊6日・2回)	"	"
大阪府大 (附属研) 助 教 授	藤 田 慎 一	"	"	"
東海大 (医) 講 師	前 沢 博	11/11~3/21 上記期間中 (8週間)	"	"
国際基督教大 (教養) 教 授	石 川 光 男	"	"	"
国際基督教大 M. C. 2	千 田 哲 史	"	"	"
神奈川大 (総理研) 客員研究員	峯 岸 安津子	"	"	"

S O R

所 属	氏 名	期 間	研 究 題 目	関係 所員
基 生 研 助 教 授	渡 辺 正 勝	10/1~3/31 上記期間中 (3泊4日・1回)	放射光紫外線の利用による生命誕生の分子機構	S O R
筑 波 大 (生物科学) D. C. 3	松 永 茂	10/1~3/31 上記期間中 (4泊5日・1回)	"	"
日本原研 研 究 員	横 谷 明 徳	10/1~3/31 上記期間中 (3泊4日・2回)	"	"

## 平成 8 年度 後期スーパーコンピュータ共同利用採択課題一覧

所 属	代 表 者	研 究 課 題 名
阪大・産業科学研究助 手	大久保 忠 勝	分子動力学法によるエレクトロマイグレーションの解析
広島市立大・情報科学助教授	岩 松 雅 夫	ナノ空間に閉じ込められた不均一液体の構造
阪大・産業科学研究助 手	中 田 芳 幸	強磁性窒化物 Fe16N2 の構造と磁性の研究
理研・基礎科学特別研究員	飯 高 敏 晃	巨大エルミート行列の実時間グリーン関数の新数值解法
北海道工業大・教養教 授	梯 祥 郎	複雑な磁気構造を示す遍歴電子磁性体の分子動力学理論
東 大 ・ 工 学振特別研究員	山 中 雅 則	1次元量子スピン系の励起状態
東 大 ・ 工 学振特別研究員	山 中 雅 則	遷移金属化合物における量子輸送現象
科技庁・無機材研主任研究官	小 林 一 昭	第一原理計算による新物質の設計及び探索
明 大 ・ 理 工 教 授	円 谷 和 雄	シリコンクラスターの電子状態の解析Ⅱ
明 大 ・ 理 工 教 授	円 谷 和 雄	第一原理分子動力学による硬質材料の設計Ⅱ
九 大 ・ 理 助 手	渕 崎 員 弘	複雑凝縮系の動力学
東工大・理 助 手	野 村 清 英	Haldane 予想に対するレベルスペクトロスコピーの応用 3
東工大・理 助 手	野 村 清 英	1次元 t-J 模型での相分離
新潟大・自然科学助教授	矢 花 一 浩	実空間・実時間での密度汎関数法によるクラスターの構造と励起
東大・物性研 教 授	上 田 和 夫	重い電子系の数値的研究
北 大 ・ 理 助教授	根 本 幸 児	2次元イジングスピングラスのモード解析
阪 大 ・ 基 础 工 教 授	張 紀久夫	走査型近接場光学顕微鏡の非局所応答理論
東 大 ・ 物 性 研 助 手	堀 田 貴 瞬	ハバード・ホルスタイン模型の基底および低励起状態の厳密対角化による研究
早 大 ・ 理 工 助教授	宗 田 孝 之	Ⅲ族窒化物の電子構造とフォノン構造の研究
山 口 大 ・ 工 技術職員	志 村 俊 也	熱電材料の電子状態
広島大・総合科学助 手	下 條 冬 樹	高圧下の液体ルビジウムの第一原理シミュレーション
仙 台 電 波 高 専 ・ 電 子 制 御 ・ 講 師	鈴 木 達 夫	強磁場下の半導体量子細線のエッジ状態
新潟大・自然科学助教授	田 仲 由 喜 夫	d波超伝導体の界面状態と磁束状態

所 属	代 表 者	研 究 課 題 名
神戸大・発達科学 助教授	蛇名邦禎	臨界現象研究のための空間変調モンテカルロ法の開発
北大・工 助教授	西口規彦	半導体ナノスケール構造における電子-格子相互作用
北大・工 助教授	明楽浩史	半導体量子構造における電子状態
大阪府立大・工 助教授	加藤勝	水素結合分子結晶の相転移における同位元素効果
岡山大・工 教 授	東辻浩夫	強結合クーロンおよびクーロン類似系の分子動力学法によるシミュレーション
東大・物性研 COE研究員	藤堂真治	ユニバーサルなハードコア特異性の数値的研究
京大・基研 助教授	古崎昭	ディラックフェルミオンのアンダーソン局在
阪大・工 助教授	笠井秀明	固体表面上での動的量子過程のモデル計算
新潟大・理 助教授	家富洋	固体電解物質における電子状態と超イオン伝導機構
上智大・理工 助教授	大槻東巳	相互作用する2電子系のアンダーソン局在における磁場効果
東大・物性研 教 授	安藤恒也	カーボンナノチューブの電子構造、量子輸送現象
慶大・理工 教 授	椎木一夫	メゾスコピックな系における金属人工格子の第一原理計算
東大・物性研 助 手	福島孝治	現実に近いスピングラス模型の数値的研究
東大・物性研 助教授	常行真司	経路積分第一原理分子動力学法を用いた固体中水素の量子状態の研究
阪大・工 教 授	広瀬喜久治	S TO基底分子軌道法を用いた密度汎関数理論に基づく第一原理シミュレーションプログラムの開発
東工大・理 教 授	大村能弘	アルカリ金属におけるプラズモン分散異常
京大・理 助 手	藤本聰	d-p模型に基づく高温超伝導体の転移温度の解析
大阪市立大・工 教 授	中村勝弘	メゾスコピック系の量子輸送と量子カオス
大阪市立大・工 助教授	小川哲生	輻射場とジョセフソン接合の量子ダイナミクス
東京理科大・理工 教 授	守谷亨	スピニゆらぎによる超伝導-d-pモデルによる数値計算
名大・工 教 授	前川禎通	強相関電子系の電子状態と励起スペクトルの研究
岡山大・理 教 授	町田一成	強磁場下での低次元有機伝導体の理論的研究
東北大・工 教 授	宮本明	密度汎関数法によるマイクロポーラスクリスタル中の金属種の電子状態と触媒機能に関する研究
東大・工 講 師	伊藤伸泰	±Jイジングモデルの強磁性相転移の臨界現象

所 属	代 表 者	研 究 課 題 名
徳島大・工 助手	森 篤 史	剛体球系の固液界面および結晶成長の分子動力学シミュレー ション
山形大・工 助手	香 田 智 則	剛体棒状分子系における液晶状態の計算機シミュレーション
東大・物性研 助手	草 部 浩 一	拡張A B周期による強相関電子系の異常金属相、超伝導相の 解析
北大・触媒化学セ 教 授	早 川 和 延	交換相互作用力顕微鏡における探針-試料表面間の交換相互作 用力の第一原理計算
東大・理 助教授	青 木 秀 夫	二次元および梯子型格子上のハバード模型における超伝導
都工芸繊維大・工芸 教 授	川 村 光	スピングラスと超伝導セラミックスのカイラル秩序化
東大・理 教 授	塚 田 捷	第一原理電子状態によるナノ構造の物性予測
東大・物性研 教 授	高 山 一	スピングラス問題の数値的研究
阪大・理 教 授	宮 下 精 二	空間構造を持つ格子での量子ゆらぎとスピニ秩序

東大物性研共第 1 号  
平成 8 年 10 月 23 日

## 関係各研究機関の長 殿

東京大学物性研究所長

安 岡 弘 志 (公印省略)

### 平成 9 年度前期共同利用の公募について (通知)

このことについて、下記のとおり公募しますので、貴機関の研究者にこの旨周知くださるとともに、申請に当たっては遗漏のないようよろしくお取り計らい願います。

なお、本研究所では、平成 8 年度に物質設計評価施設を設置したことにより、これまでの共通実験室の共同利用を廃止し、新たに物質合成・評価設備の共同利用の公募を行います。

また、軌道放射物性研究施設の共同利用の公募については、SOR-RING の諸設備の老朽化等に伴い停止することにします。

#### 〔停止・廃止となるもの〕

- ・軌道放射物性研究施設の共同利用
- ・共通実験室の共同利用

#### 〔新設となるもの〕

- ・物質合成・評価設備の共同利用 (公募の詳細については、11~12 ページ参照)

#### 記

##### 1 公募事項 (添付の要項参照)

- (1) 留学研究員 (平成 9 年 4 月～平成 9 年 9 月実施分)
- (2) 共同利用(一般、スーパーコンピュータ、物質合成・評価設備)  
(平成 9 年 4 月～平成 9 年 9 月実施分)
- (3) 共同利用 (中性子) (平成 9 年 4 月～平成 10 年 3 月実施分)
- (4) 短期研究会 (平成 9 年 4 月～平成 9 年 9 月実施分)

##### 2 申請資格

国公私立大学及び国公立研究機関の教員、研究者及びこれに準ずる者。

### 3 申請方法

- (1) 共同利用については、外来研究員申請書を提出すること。

ただし、中性子散乱研究施設、スーパーコンピュータ及び物質合成・評価設備の共同利用については、申請方法が異なるので6~12ページを参照の上、申請すること。

- (2) 短期研究会については、提案代表者から短期研究会申請書を提出すること。

### 4 申請期限

(1) 中性子の共同利用 平成8年11月30日（土）必着

(2) その他の共同利用 平成8年12月20日（金）必着

### 5 申込先

〒106 東京都港区六本木7丁目22番1号  
東京大学物性研究所 総務課共同利用掛  
電話(03)3478-6811 内線5031, 5032

### 6 審査

研究課題の採否、所要経費の査定等は共同利用施設専門委員会において行い、教授会で決定する。

### 7 採否の判定

平成9年3月中旬

### 8 研究報告

共同利用研究（共同利用及び留学研究員）については、一期(半年)毎に実施報告書（所定の様式によること）を提出のこと。

また、共同利用研究によって得た成果の論文の別刷2部を、総務課共同利用掛あて提出のこと。

### 9 宿泊施設

(1) 東京大学物性研究所共同利用研究員宿泊施設が利用できる。

(2) 中性子散乱研究施設の共同利用については、東京大学物性研究所附属中性子散乱研究施設共同利用研究員宿泊施設が利用できる。

### 10 学生教育研究災害傷害保険の加入

大学院学生は『学生教育研究災害傷害保険』に加入されるようご配慮願いたい。

## 外 来 研 究 員 に つ い て

物性研究所においては、共同利用研究業務として、全国物性研究者の研究遂行に資するため、各種研究員制度が設けられています。これらの研究員の公募は、半年毎に行っております。外来研究員制度は、個々の申請を検討の上、実行されておりますが、特別な事情のある場合を除いて、あらかじめ共同利用施設専門委員会の了承を得る建前をとっておりますので、下記ご参照の上、期日までに応募されるようお願いします。

その他、外来研究員制度の内容あるいは利用する設備等に関してお分かりにならないことがあれば、外来研究員等委員会委員長 後藤 恒昭（内線5121）までご連絡ください。

「留学研究員」又は「共同利用」に申請される場合は、事前に必ず利用される研究室等の教官と打ち合わせの上、申請書を提出してください。

なお、「一般の共同利用」の場合は、一研究課題に許される修士課程の学生数は一名を原則とします（なお、修士課程の学生とは申請時点で修士課程在籍であること）。

申請書用紙は、別紙の様式をコピーして使用してください。

### 記

#### 1 各種外来研究員

##### (1) 嘴 託 研 究 員

- ① 所外研究者に本研究所の研究計画及び共同研究計画の遂行上必要な研究を委嘱することを目的としています。
- ② 嘴託研究員の委嘱は、本研究所所員の申請に基づいて、研究計画等を検討の上、決定します。

##### (2) 留 学 研 究 員

- ① 大学、官庁、その他の公的研究機関に在籍する若い研究者に、留学の便宜を提供することを目的とした制度です。
- ② 資格としては、助手ないし大学院博士課程程度の研究歴に相当する方を対象としています。
- ③ 研究は所員の指導の下で行います。大学院学生の場合、原則として指導教官を嘱託研究員に委嘱します。

- ④ 申請は、別紙（様式1）の申請書を提出してください。

##### (3) 共 同 利 用

- 一般の共同利用
  - ① 所外研究者が研究の必要上、本研究所の施設を利用したい場合、その便宜を提供できるようにしております。

② 一般の共同利用は、「共同研究」と「施設利用」の二つの形態に分けられます。「共同研究」と「施設利用」では採択率、充足率が異なる場合があります。

また、「共同研究」、「施設利用」それぞれに、1年以内に研究を集中して遂行する「短期集中型」の利用形態が設けられています。「短期集中型」を希望して認められた場合は充足率を高くしますが、その後しばらくの期間、共同利用を見合せていただくことがあります。

③ 申請は、別紙（様式2）の申請書を提出してください。

- 中性子散乱研究施設の共同利用（6ページ参照）
- スーパーコンピュータの共同利用（8ページ参照）
- 物質合成・評価設備の共同利用（11ページ参照）

## 2 採否決定

上記各種外来研究員受入れの可否は、共同利用施設専門委員会において、申請された研究計画、研究歴及び所内諸条件を審査検討し、教授会で決定します。

採択された共同利用研究の中で、放射線施設を利用される方には、「外来研究員等の放射線管理内規」に従って、別紙（様式7）の「放射線業務従事承認書」を提出していただきます。

## 3 実施報告書

留学研究員及び共同利用で来所の方には、一期（半年）ごとに終了後30日以内に別紙（共同研究及び短期集中型の施設利用は様式5、一般的施設利用及び留学研究員は様式6）による外来研究員実施報告書を提出していただきます。

## 4 別刷の提出

外来研究員として来所されて行われた研究に関する論文の別刷2部を必ず総務課共同利用掛に提出してください。

また、論文を発表される場合、謝辞の所に東京大学物性研究所の共同利用による旨の文章を入れていただくことを希望します。英文の場合の参考として、次のような例文をあげておきます。

(例1) This work was carried out under the Visiting Researcher's Program of the Institute for Solid State Physics, the University of Tokyo.

(例2) This work was carried out by the joint research in the Institute for Solid State Physics, the University of Tokyo.

(例3) This work was performed using facilities of the Institute for Solid State Physics, the University of Tokyo.

## 5 経 費

旅費、滞在費及び研究に要する経費は、個々の申請に基づいて共同利用施設専門委員会で査定  
・審査し、教授会の決定に基づき共同利用施設運営費から支出します。

## 6 そ の 他

- (1) 予算の支出、諸施設の利用、設備の管理等については、関係する所員の指示に従ってください。
- (2) 申請書は、必ず別紙様式のものを使用してください。

## 中性子散乱研究施設の共同利用について

(1) 中性子散乱研究施設の共同利用は、通年公募方式によって行われている。

申請期限：平成 8 年 11 月 30 日（土）必着

(2) 申請用紙は下記あて請求し、必要事項を記入の上、同施設あて締切り期日までに 8 部（7 部は複写でも可）提出すること。

〒319-11 茨城県那珂郡東海村白方106-1

東京大学物性研究所附属中性子散乱研究施設

TEL (029) 287-8900

FAX (029) 283-3922

(3) 申請された研究課題は、中性子散乱研究施設運営委員会の審査を経て、教授会で決定された後、結果を実験責任者あて通知する。

(4) 研究課題の申請は、原則として上記のとおり年 1 回であるが、特に緊急を要する課題が生じた時は、その理由を付して、上記中性子散乱研究施設運営委員会委員長あて隨時申請することができる。

(5) 実験終了後、所定の様式で成果報告書を提出することが求められる。

(6) 受付課題の種類

中性子散乱装置の共同利用研究課題として次の 2 種類の課題を受け付ける。

a) 一般課題

b) 装置グループ I M T \* (Instrument and Maintenance Team) 課題

\* I M T 課題については、第(10), (11)項を参照のこと。

\* I M T 課題を申請する方は、申請書を施設まで請求してください。。

(7) 共同利用に供される中性子散乱実験設備については、申請用紙の添付資料「改造 3 号炉中性子散乱実験設備の概要」を参照してください。

(8) 一般課題の採択手順

- 1) 装置グループ（IMT）による課題の技術的検討
- 2) 3人のレフリーによる課題の学問的内容の審査
- 3) 実験審査委員会\*\*（NSPAC）による審議を経て、上部委員会に提案される。

\*\*実験審査委員会（NSPAC）は中性子散乱装置の共同利用研究課題の審査実務を分担する組織で中性子散乱研究施設運営委員会の下部機構である。

(9) 課題採択スケジュール

- |        |                              |
|--------|------------------------------|
| 10月中旬  | 公募の手引き配付                     |
| 11月30日 | 公募の締切り                       |
| 12月中旬  | IMTによる技術的審査、IMT間での意見交換       |
| 12月下旬  | 課題申請書とIMTの技術的コメントを3人のレフリーに配付 |
| 1月中旬   | レフリーの判定報告の締切り                |
| 1月下旬   | 実験審査委員会（NSPAC）で審査            |
| 2月上旬   | 運営委員会の審議決定                   |

(10) 装置グループ（IMT）について

JRR-3の中性子散乱装置群の維持・管理に責任を持つ組織として装置グループIMTが編成されている。IMTの任務と権利等は以下のとおりである。

- 1) IMTに割り当てられるマシンタイム（比率P）の内容
  - i ) 分光器の調整
  - ii ) 分光法開発、試料環境等附属装置の開発
  - iii ) 試料のチェック
  - iv ) テスト実験及び緊急課題の遂行
  - v ) 教育
- 2) IMTメンバーは上記 1) に記された項目について、所属する装置グループのマシンタイムを使用することができる。
- 3) IMTメンバーの任務
  - i ) 分光器の調整、整備
  - ii ) 試料のチェック
  - iii ) 一般利用者の実験の援助

(II) マシンタイムの配分

(1 - P) : 一般課題に割り当てるマシンタイムの比率。装置責任者・IMTメンバーも含めて、各研究者が各自の研究計画に基づき申請書を提出し、実験審査委員会(NSPAC)及び運営委員会の審議により決定される。

(P) : IMTに割り当てるマシンタイム。

なお、比率(P)の値は各IMTの申請に対し、実験審査委員会(NSPAC)及び運営委員会で審査して年度毎に決定される。

## スーパーコンピュータの共同利用について

物性研究所では、物性物理学の研究のための共同利用スーパーコンピュータを運用しています。他の計算機センターではできないような大規模計算による研究プロジェクトや先端的な計算手法の開発などに重点を置いて運用しており、利用課題の審査に際しても、研究プロジェクトの目的、その計画と方法、特色を重視します。

### 1 利用課金

利用課金は差し当たり所外利用者からは徴収しませんが、予算の関係上場合によっては、消耗品等を何らかの方法で負担していただくことがあります。

### 2 申請課題クラス

課題申請は、電子計算機CPU時間等によって以下のクラスA, B, C, D, Eに分けて受け付けますが、このうち年2回の締め切りとなるB, C及びEを優先します。全く異なる課題を平行して行う場合は、同一の研究者が複数の課題を行うことになりますが、類似した課題は一つにまとめるようにしてください。

A（小型）：申請利用金額が400Kポイント以下の課題。

各月の末日が締切りで翌々月の1日から年度末まで利用できます。本クラスへの申請は一学期ごとに1回だけとします。また、A以外のクラスすでに利用している研究代表者（グループ）の申請は受け付けません。

B（一般）：申請利用金額が3000Kポイント以下の課題。

一般の共同利用申請期限と同時（前期は12月20日、後期は6月下旬）に締め切り、それぞれ4月1日、10月1日から年度末まで利用できます。なお、本クラスを複数申請される場合には、本クラスの申請課題の総ポイント数は、一研究代表者（グループ）当たり5000Kポイント以下とします。

C（重点）：研究計画が具体的であり（研究課題が絞り込まれている、準備的計算が十分なされている、など）、かつ、物性物理学の発展に寄与する重要な研究課題に対して計算時間を重点的に支援するためのクラスです。申請利用金額に制限はありません。

一般の共同利用申請期限と同時（前期は12月20日、後期は6月下旬）に締め切り、それぞれ4月1日、10月1日から年度末まで利用できます。

D（緊急）：Cクラス相当の課題で、特に研究の進捗が著しく、緊急の計算を要するもののためのクラスです。申請利用金額に制限はありません。

随時受け付け、B 及び C による利用が可能となる次の 4 月 1 日又は 10 月 1 日の前日までの期間利用できます。

E (大規模プロジェクト) : C クラス相当の課題が複数個からなる大規模共同研究のためのクラスです。申請利用金額に制限はありません。本プロジェクトの提案については、物性研計算機室、若しくはスーパーコンピュータ共同利用委員会委員にご相談ください。

### 3 課題申請の手続き

利用を希望するときは、以下の手続きによりスーパーコンピュータ共同利用課題申請を行ってください。複数の研究課題で申請する場合には、研究課題ごとに手続きを行ってください。

- (1) 電子メールを使って計算機システムへの登録情報を送ってください。そのために、まず、「Subject:info」とした空のメールを

touroku@issp.u-tokyo.ac.jp

に送ってください。折り返し当研究所のスーパーコンピュータシステムに関する情報と登録情報の送付方法がメールで送られてきますので、指示に従ってください。

なお、同じ内容は物性研の www ホームページ (<http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/labs/center>) で見ることもできます。

- (2) 上記の手続きとは別に、所定の申込書（紙にプリントアウトしたもの）に記入・捺印し、下記に送付してください。申請方法その他についての問い合わせも受け付けます。

〒106 東京都港区六本木 7 丁目22番 1号

東京大学物性研究所 電子計算機室

電話(03)3478-6811 内線5942

- (3) 申込書のフォーマットは、「Subject:stylefile」とした空のメールを

touroku@issp.u-tokyo.ac.jp

に送ると、折り返し LaTeX のスタイルファイル及びサンプルとして送られてきます。

申込書のフォーマットは、anonymous ftp により入手することもできます。

ftp site:ftp.issp.u-tokyo.ac.jp

directory:/pub/shinsei/

file:

class-A.ps, class-B.ps, class-C.ps, class-D.ps

各申請課題クラスの申込書です。

LaTeXをご利用にならない方は、上記のファイルをプリントアウトしてご利用ください。

#### ISSP-application-set

LaTeXのスタイルファイルとサンプルです。このファイルは電子メールにより入手できるものと同じです。

### 4 採否決定

プロジェクト課題の採否、利用金額の割り当ては、スーパーコンピュータ共同利用委員会の審査を経て、教授会で決定します。

### 5 利用

所外から電話公衆網又はインターネットを経由したネットワークによってスーパーコンピュータを利用することができます。また、利用が許可された期間中は、物性研究所電子計算機室がオープンしているかぎり、隨時来所利用されてもかまいません。(旅費は支給されません。)

### 6 利用報告書

次年度初めに利用報告書をスーパーコンピュータ共同利用委員会委員長あて提出していただきます。書式は別途連絡します。

### 7 研究成果の出版

スーパーコンピュータの共同利用による研究の成果が出版される場合には、必ず「物性研究所スーパーコンピュータを利用した。」旨を論文中に明記し、また、その別刷1部を物性研究所電子計算機室あて送付してください。

(例1) The authors thank the Supercomputer Center, Institute for Solid State Physics, University of Tokyo for the facilities and the use of the FACOM VPP500.

(例2) The computation in this work has been done using the facilities of the Supercomputer Center, Institute for Solid State Physics, University of Tokyo.

## 物質合成・評価設備の共同利用について

平成 8 年度から新たに設置された物質設計評価施設の物質合成・評価部では、下記の 6 実験室及び各種合成・評価設備を、全国共同利用として運営しています。利用を希望される方は下記の要領で申し込んでください。お分かりにならなれば物質合成・評価設備共同利用委員会委員長 上田 寛（内線5731）までご連絡ください。

### 1 利用実験室と設備

実験室	利 用 設 備
物質合成室	ブリッジマン炉（～1800℃）、引き上げ炉（～2000℃）、四槽円型帯域溶融炉（高圧型）、四槽円型帯域溶融炉（真空型）、ハロゲンランプ F Z 炉、キセノンランプ F Z 炉、アーク溶解炉、精密ダイヤモンドカッター、フラックス炉、ドクターヒップ（高圧ガス処理装置）
化学分析室	SEM-E PMA、ICP-AES、電子天秤 4 台（0.1 mg～240g）、純水製造装置、化学処理室（016号室）
X 線測定室	粉末X線回折装置（封管型）、粉末X線回折装置（回転対陰極型）、ラウエカメラ、ワイセンベルグカメラ、単結晶四軸回折装置（封管型）、単結晶四軸回折装置（回転対陰極型）、極低温単結晶イメージングプレート回折装置（回転対陰極型）
電子顕微鏡室	300kV高分解能電子顕微鏡、分析電子顕微鏡（200kV）
電磁気測定室	15テスラ超伝導磁石、振動式磁力計、2テスラ電磁石、光交流比熱測定装置、16テスラ高均一超伝導磁石*
光学測定室	ラマン分光装置、エキシマーレーザー、フーリエ赤外分光器（含顕微鏡ユニット）、近赤外～紫外分光器（含顕微鏡ユニット）*

\* : 立ち上げ中

### 2 申請課題クラスと申請手続き

利用課題の申請は以下の三つのクラスに分かれます。申請に当たっては、それぞれのクラスに該当する申請書（コピーでも可）をご使用ください。

#### (1) 研究提案型課題申請（P-クラス）

利用者が物質合成・評価部の設備を利用しての独創的な研究を提案し、本施設のスタッフと協力して、比較的長期にわたって遂行する研究の申請。旅費や設備の利用時間等について、優先的便宜が図られます。申請は一期（半年）ごとに受け付けます。

申請に当たっては、物質合成・評価設備共同利用申請書（様式 3）と外来研究員申請書（様

式 2) 「物質設計評価施設希望実験室名」欄には、上記 1 のうち利用希望実験室名を記入する。により申し込んでください。

(2) 一般課題申請 (G - クラス)

従来の一般的な共同利用で、共同研究と施設利用を含み、所外研究者が研究の必要上、本設備を利用したい場合の便宜を提供するものです。申請は一期（半年）ごとに受け付けます。

申請に当たっては、外来研究員申請書（様式 2）（「物質設計評価施設希望実験室名」欄には、上記 1 のうち利用希望実験室名を記入する。）により申し込んでください。

(3) 緊急課題申請 (U - クラス)

研究の進捗上、緊急に本設備の利用を必要とする課題。申請は随時受け付けます。その際、緊急性を明示して、外来研究員申請書（様式 2）（「物質設計評価施設希望実験室名」欄には、上記 1 のうち利用希望実験室名を記入する。）により申し込んでください。

3 申込み先 〒106 東京都港区六本木 7 丁目22番 1号

東京大学物性研究所 総務課共同利用掛  
電話 (03)3478-6811 内線 5031, 5032

4 申込み期限 平成 8 年12月20日（金）必着

5 採否決定

申請課題は物質合成・評価設備共同利用委員会の審査を経て、教授会で決定します。

6 実施報告書

一期(半年)ごとに、終了後30日以内に様式 5 の実施報告書を物質合成・評価 設備共同利用委員会委員長あて提出していただきます。なお、「5 研究実施経過」については、利用機器、利用手段・方法に加え、感想・要望も記入してください。

7 研究成果の出版

物質合成・評価設備の共同利用による研究の成果が出版される場合には、必ず「物性研究所物質合成・評価設備を利用した。」旨を論文中に明記し、また、その別刷 1 部を物性研究所物質合成・評価設備共同利用委員会委員長あてに送付してください。

(例 1) The authors thank the Materials Design and Characterization Laboratory,

Institute for Solid State Physics, University of Tokyo for the facilities.

(例 2) This work was performed using facilities of the Materials Design and

Characterization Laboratory, Institute for Solid State Physics, University of Tokyo.

## 短期研究会について

短期研究会は、物性研究上興味深い特定のテーマについて全国の研究者が1～3日間程度研究会を開き、集中的に討議するもので、提案代表者は内容、規模等について関係研究者と十分検討の上、申請してください。

### 記

#### 1 申 請 方 法

提案代表者は別紙申請書（様式4）を提出してください。

なお、提案者の中に、本研究所所員が1名以上必要です。

#### 2 提案理由の説明

提案代表者は、内容、規模等について共同利用施設専門委員会で説明していただきます。

#### 3 採 否 決 定

共同利用施設専門委員会の審議を経て、教授会で決定します。

#### 4 絏 費

共同利用施設専門委員会で査定・審査し、教授会の決定に基づき共同利用施設運営費から支出します。（1件当たりの申請金額については、60万円程度を目安としてください。）

#### 5 報 告 書

提案代表者は、研究会終了後速やかに「物性研だより」に掲載する研究会報告書を提出してください。執筆に関する要領は別にお知らせします。

## 共同利用施設専門委員会委員

大野公一	東北大(理)	榎敏明	東工大(理)
西嶋光昭	京大(理)	遠藤康夫	東北大(理)
君嶋義英	横浜国大(工)	倉本義夫	東北大(理)
本河光博	東北大(金材研)	斯波弘行	東工大(理)
秋光純	青山学院大(理工)	梶田晃示	東邦大(理)
福山秀敏	東大(理)	鈴木治彦	金沢大(理)
石黒武彦	京大(理)	菅滋正	大阪大(基礎工)
藤井博信	広島大(総合)	大貫惇睦	大阪大(理)
山田耕作	京大(理)	宮下精二	大阪大(理)
下村理	高エネルギー物理学研究所	壽榮松宏仁	東大(理)
小杉信博	分子科学研究所	その他物性研究所所員	

## 外来研究員等の放射線管理内規

(昭和57.7.21制定)

放射線障害予防規程第44条第3項に定める外来研究員等の放射線管理については以下のとおりとする。

### 1. 六本木地区

- (1) 物性研究所放射線管理室（以下「管理室」という。）は、外来研究員等の共同利用申込が承認された時に、その所属する大学又は事業所に対し「物性研究所の放射線施設を利用する外来研究員等の派遣についての了解事項」及び「放射線業務従事承認書」を送付する。
- (2) 外来研究員等は、放射線取扱いに先立って「放射線業務従事承認書」を管理室に提出するものとする。
- (3) 本所の放射線施設及び放射線発生装置等を初めて利用する外来研究員等に対し、当該施設の放射線管理責任者は、放射線取扱いの開始前に放射線発生装置あるいは放射性物質等の安全取扱い、立入記録の記入等についての教育訓練を実施する。
- (4) 放射線管理責任者は、外来研究員等について、フィルムバッジ等の着用の有無を確認し、それ等を持たない場合は、個人被曝線量計を貸与し被曝線量当量を測定し記録するものとする。

### 2. 日本原子力研究所内（東海村）－中性子散乱研究施設

中性子散乱研究施設を利用する外来研究員等は、日本原子力研究所で定める放射線管理上の所要手続きをしなければならない。

### 3. 高エネルギー物理学研究所内設置の軌道放射物性研究施設分室を利用する外来研究員等は、高エネルギー物理学研究所で定める放射線管理上の所要手続きをしなければならない。

## 物性研究所の放射線施設を利用する 外来研究員等の派遣についての了解事項

1. 外来研究員等及び所属機関の責任者は、物性研究所の放射線施設の利用に際して、以下の事項を承諾するものとする。
  2. 外来研究員等は、本所放射線障害予防規程及び当該放射線施設の管理内規に従う。
  3. 外来研究員等が利用する放射線施設等に係る管理責任（放射線発生装置、放射性物質の安全取扱い、管理区域等の線量当量の測定等の管理）は、物性研究所にあるが、「放射性同位元素等による放射線障害の防止に関する法律」等で定める放射線業務従事者としての認可及び個人管理は、外来研究員等の所属機関の責任において行う。  
放射線業務従事者としての認可及び個人管理とは、
    - (1) 教育訓練（物性研究所における放射線発生装置等の安全取扱いに係る教育訓練は除く）の受講
    - (2) 血液検査などの健康管理
    - (3) 個人被曝線量当量の測定
    - (4) 放射線業務に従事することの可否の判定
4. 放射線業務に従事する外来研究員等は、所属機関の放射線取扱主任者及び管理責任者が認める放射線業務従事承認書を、物性研究所放射線管理室に提出する。
5. 個人被曝線量計（フィルムバッジ等）は、原則として所属機関より持参し、着装して放射線業務に従事するものとする。  
但し、個人被曝線量計のない場合は、当該施設又は放射線管理室が貸与する。

## 外来研究員（留学研究員）申請書

No.

平成 年 月 日

東京大学物性研究所長 殿

所 属 \_\_\_\_\_

職名又は学年 \_\_\_\_\_

ふりがな  
氏 名 \_\_\_\_\_ @

級号俸 級 号俸

級号俸発令年月日 ( 年 月 日 )

申請者の連絡先 電話 内線

FAX \_\_\_\_\_

下記研究計画により留学研究員として貴研究所で研究したいので申請します。

研究題目

研究目的

○研究予定期間 平成 年 月 日 ~ 平成 年 月 日

○研究の実施計画（使用装置・方法等詳細に）

○放射線業務に従事することの有無 有 • 無 (○で囲むこと)

希望部門・研究室名 ( 部門 研究室 )

他の研究室又は実験室へ共同利用を同時に申請していますか してない している  
申請している場合の研究室又は実験室名 ( )

※ 本様式をコピーして使用する場合は、A4版両面コピーとしてください。

※ 採択された共同利用研究の中で、放射線施設を利用される方には、「外来研究員等の放射線管理内規」に従って、「放射線業務従事承認書」（様式7）を提出していただきます。

① 宿泊を必要としない申請者（日帰り）

月　　日　～	月　　日	(　週・月　　日　)
月　　日　～	月　　日	(　週・月　　日　)
月　　日　～	月　　日	(　週・月　　日　)

② 宿泊を必要とする申請者

月　　日　～	月　　日(　泊　　日)	月　　日　～	月　　日(　泊　　日)
月　　日　～	月　　日(　泊　　日)	月　　日　～	月　　日(　泊　　日)
月　　日　～	月　　日(　泊　　日)	月　　日　～	月　　日(　泊　　日)

物性研宿泊施設     原子核研宿泊施設     その他

③ この共同利用の際、貴所属機関から、鉄道賃、日当、宿泊料が支給されますか。

される     されない

利用頻度 : ① 新規    ② 過去5年間何回位利用していますか ( 回 )

略歴（大学院学生は学歴を記入すること）

上記のとおり、申請者が貴研究所において研究に従事することを承諾します。

平成　　年　　月　　日

申請者の所属長職・氏名

印

## 外来研究員（共同利用）申請書

No.

平成 年 月 日

東京大学物性研究所長 殿

所 属 \_\_\_\_\_

職名又は学年 \_\_\_\_\_

ふりがな  
氏 名 \_\_\_\_\_

印

級号俸発令年月日（ 年 月 日） 級 号俸

申請者の連絡先 電話 \_\_\_\_\_ 内線 \_\_\_\_\_

FAX \_\_\_\_\_

下記研究計画により外来研究員として貴研究所で研究したいので申請します。

研究題目（グループで研究する場合は代表者名を記入すること）  
\_\_\_\_\_研究目的（グループで研究する場合は代表者のみ記入すること）  
\_\_\_\_\_○研究の実施計画（使用装置・方法等詳細に）（グループで研究する場合は代表者のみ記入すること）  
\_\_\_\_\_○短期集中型を希望する場合は期間（原則として1年以内）を明記してください  
平成 年 月 日 ~ 平成 年 月 日

○共同研究・施設利用を希望する（○で囲むこと）

○放射線業務に従事することの有無 有・無（○で囲むこと）

○希望部門・研究室名（ 部門 研究室）  
○物質設計評価施設 希望実験室名（ ）他の研究室又は実験室へ共同利用を同時に申請していますか □してない □している  
申請している場合の研究室又は実験室名（ ）

※ 本様式をコピーして使用する場合は、A4版両面コピーとしてください。

※ 採択された共同利用研究の中で、放射線施設を利用される方には、「外来研究員等の放射線管理内規」従って、「放射線業務従事承認書」（様式7）を提出していただきます。

① 宿泊を必要としない申請者（日帰り）

月　　日～　　月　　日　　(　週・月　　日　)

月　　日～　　月　　日　　(　週・月　　日　)

月　　日～　　月　　日　　(　週・月　　日　)

② 宿泊を必要とする申請者

月　　日～　　月　　日（　泊　　日）　　月　　日～　　月　　日（　泊　　日）

月　　日～　　月　　日（　泊　　日）　　月　　日～　　月　　日（　泊　　日）

月　　日～　　月　　日（　泊　　日）　　月　　日～　　月　　日（　泊　　日）

物性研宿泊施設       原子核研宿泊施設       その他

③ この共同利用の際、貴所属機関から、鉄道賃、日当、宿泊料が支給されますか。

される       されない

利用頻度： ① 新規      ② 過去5年間何回位利用していますか（　回　）

略歴（大学院学生は学歴を記入すること）

上記のとおり、申請者が貴研究所において研究に従事することを承諾します。

平成　　年　　月　　日

申請者の所属長職・氏名

印

## 物質合成・評価施設共同利用申請書（P-クラス）

申請代表者所属・職・氏名
申請研究課題
使用希望実験室 (複数可) (1) 物質合成室 (2) 化学分析室 (3) X線測定室 (4) 電子顕微鏡室 (5) 電磁気測定室 (6) 光学測定室
(研究の目的・背景、実験計画・方法・利用機器等について記入してください)
(裏面使用可)

※ 本様式をコピーして使用する場合は、A4版としてください。

## 短 期 研 究 会 申 請 書

平成 年 月 日

東京大学物性研究所長 殿

提案代表者

所 属

職 名

氏 名

㊞

連絡先 電 話 内線

F A X

下記のとおり短期研究会の開催を提案したいので申請します。

記

1 研究会の名称

2 提案理由

理由書は、400字以上600字まで（A4版横書き）とし、提案理由及び研究会内容がよくわかるように記載してください。

特に物性研で開催することの必要性や意義を明記してください。

3 開催期間

平成 年 月 日 ～ 平成 年 月 日 ( 日間)

開始時間 \_\_\_\_\_ :

4 参加予定者数 約 名

5 希望事項 (○で囲む)

予稿集 : 有 • 無 その他希望事項

公開 • 非公開

6 その他 (代表者以外の提案者)

所属機関・職名を記入のこと

7 旅費の支給を必要とする者

	氏 名	所 属	職 名
1			
2			
3			
4			
5			
6			
7			
8			
9			
10			
11			
12			
13			
14			
15			
16			
17			
18			
19			
20			

様式 4 - 3

8 その他主要参加者

	氏名	所属	職名
1			
2			
3			
4			
5			
6			
7			
8			
9			
10			
11			
12			
13			
14			
15			
16			
17			
18			
19			
20			
21			
22			
23			
24			
25			

※ 本様式をコピーして使用する場合は、A4版としてください。

平成 年 月 日

外 来 研 究 員 共 同 研 究 実 施 報 告 書  
施 設 利 用 (短 期 集 中 型)

東京大学物性研究所長 殿

所 属

職 名

氏 名

㊞

下記のとおり貴研究所の施設を利用しましたので、報告します。

記

1 研究題目

2 利用期間 平成 年 月 日 ~ 平成 年 月 日

3 利用研究室又は  
実験室名 \_\_\_\_\_

4 共同研究者氏名及び所属・職名

氏 名	職 名	所 属 名	備 考

5 研究実施経過（利用機器、利用手段・方法、成果、約 1,000字（A4版横書き））

※ 物質合成・評価設備の共同利用の場合は、感想・要望も併せて記入してください。

6 成果の公表の方法（投稿予定の論文のタイトル、雑誌名など。短期集中型の場合は終了時のみ）

注 意

(1) グループ研究の場合、代表者が記入のこと。

(2) 各期終了後30日以内に提出すること。

※ 本様式をコピーして使用する場合は、A4版としてください。

平成 年 月 日

外 来 研 究 員 施 設 利 用 実 施 報 告 書  
留 学 研 究 員

東京大学物性研究所長 殿

所 属

職 名

氏 名

㊞

下記のとおり貴研究所の施設を利用しましたので、報告します。

記

1 研究題目

2 利用期間 平成 年 月 日 ~ 平成 年 月 日

3 利用研究室又は  
実験室名 \_\_\_\_\_

4 共同研究者氏名及び所属・職名

氏 名	職 名	所 属 名	備 考

5 研究実施経過（利用機器、利用手段・方法、成果、約 400字（A4版横書き））

注 意

- (1) グループ研究の場合、代表者が記入のこと。
- (2) 各期終了後30日以内に提出すること。

※ 本様式をコピーして使用する場合は、A4版としてください。

平成 年 月 日

## 放射線業務従事承認書

東京大学物性研究所長 殿

機関名

所在地

放射線取扱主任者名 ㊞

所属機関代表者名 ㊞

当機関は、「物性研究所の放射線施設を利用する外来研究員等の派遣についての了解事項」を承諾して、下記の者が貴研究所において放射線業務に従事することを承認しましたので、よろしくお願ひします。

なお、下記の者については、当機関において放射線障害防止法、あるいは人事院規則(10-5)等の法規に基づいて放射線業務従事者として管理が行われていることを証明します。

記

氏名	年令	身分	所属学科・部課等	年現在の合計被曝線量当量(mSv)	過去1年間の被曝線量当量(mSv)
放射線業務従事期間			年 月 日から 年 月 日まで		
物性研究所利用施設					

(注) この承認書の有効期間は、年度末までです。

※ 本様式をコピーして使用する場合は、A4版としてください。

## Technical Report of ISSP 新刊リスト

### Ser. A

- No. 3174 Current and Charge Distrubutions of the Fractional Quantum Hall Liquies with Edges, by Jun'ichi Shiraishi, Yshai Auishai and Mahito Kohmoto.
- No. 3175 Vertex Operators of the  $q$ -Virasoro Algebra; Defining Relations, Adjoint Actions and Four Point Functions, by Hidetoshi Awata, Harunobu Kubo, Yoshifumi Morita, Satoru Odake and Junichi Shiraishi.
- No. 3176 A Level-One Representation of the Quantum Affine Superalgebra  $U_q(\mathfrak{sl}(M+1|N+1))$ , by Kazuhiro Kimura, Jun'ichi Shiraishi and Jun Uchiyama.
- No. 3177 Observation of the Surface 4f State of CePd<sub>7</sub> by Means of the Resonant-inverse-photoemission Study at the Ce 4d Absorption Edge, by K. Kanai, Y. Tezuka, M. Fujisawa, Y. Harada, S. Shin, G. Schmerber, J. P. Kappler, J. C. Parlebas and A. Kotani.
- No. 3178 Bandwidth-Control Induced Insulator-Metal Transition in  $\text{Pr}_{0.65}(\text{Ca}_{1-y}\text{Sr}_y)_{0.35}\text{MnO}_3$  and  $\text{Pr}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ , by H. Yoshizawa, R. Kajimoto, H. Kawano, Y. Tomioka and Y. Tokura.
- No. 3179 Production of Megagauss Fields and their Application to Solid State Physics, by N. Miura, H. Nojiri, T. Takamasu, K. Uchida, S. Todo, T. Haruyama, Y. Shimamoto, Y. Imanaka, H. Kunitatsu, H. Nakagawa and H. Arimoto.
- No. 3180 Quasiperiodic Modulated-Spring Model, by H. Hiramoto and Mahito Kohmoto.

- No. 3181 *4d* Resonant Inelastic X-Ray Scattering in Gadolinium, by J.-J. Gallet, J.-M. Mariot, C. F. Hague, F. Sirotti, M. Nakazawa, H. Ogasawara and A. Kotani.
- No. 3182 Theory of X-Ray Absorption and Resonant X-Ray Emission Spectra, by Akio Kotani.
- No. 3183 *4d* Resonant Inelastic X-Ray Scattering in Gadolinium, by J.-J. Gallet, J.-M. Mariot, C. F. Hague, F. Sirotti, M. Nakazawa, H. Ogasawara and A. Kotani.
- No. 3184 Unconventional Superconductivity in the Hubbard-Holstein Model, by Takashi Hotta and Yasutami Takada.
- No. 3185 Explanation of the Anomalous Istop Effect in Superconducting Alkali-Metal-Doped Fullerenes, by Yasutami Takada.
- No. 3186 Detection of Pairing Correlation in the Two-Dimensional Hubbard Model, by Kazuhiko Kuroki, Hideo Aoki, Takashi Hotta and Yasutami Takada.
- No. 3187 Quantum Transition between an Antiferromagnetic Mott Insulator and  $d_{x^2-y^2}$  Superconductor in Two Dimensions, by Fakher F. Assaad, Masatoshi Imada and Douglas J. Scalapino.
- No. 3188 Constans-Pressure First-Principles Studies on the Transition States of the Graphite-Diamonds Transformation under Pressure, by Yoshitaka Tateyama, Tadashi Ogitsu, Koichi Kusakabe and Shinji Tsuneyuki.
- No. 3189 Long-Ranged Interacting Quantum Spin Chain with Exact Dimer State, by Hiroki Nakano and Minoru Takahashi.

- No. 3190 Site Identification of Protons in SrTiO<sub>3</sub>:  
Mechanism for Large Protonic Conduction, by N.  
Sata, K. Hiramoto, M. Ishigame, S. Hosoya, N.  
Niimura and S. Shin.
- No. 3191 Thermal Neutron Spin Echo Three-Axis  
Spectrometer with  $\mu$ eV Resolution, by C.M.E.  
Zeyen, K. Kakurai, M. Nishi, N. Nakajima,  
T. Sakaguchi, Y. Kawamura, S. Watanabe, M.  
Berneron, K. Sasaki and Y. Endoh.

## 編 集 後 記

物性研だよりの11月号をお届けいたします。

あっという間に夏が過ぎてもう秋になりました。

研究の合間につい部屋の窓から秋らしい青空を期待するのは、最近雨の降る日が多いからでしょうか。

編集後記を書いている今日、早くも北海道から初雪のたよりが届きました。今月号の物性研だよりも是非ご一読ください。また、お忙しい中原稿をお寄せ下さった方々に心から感謝いたします。

なお、次号の原稿締切りは12月10日です。

所属又は住所変更の場合等は事務部共同利用掛まで連絡願います。

白 石 潤 一

上 田 和 夫

