

物性研だより

第37卷
第3号

1997年9月

目 次

物性研に着任して	瀧川 仁	1
物性研短期研究会報告		
○ 「物性研究における計算物理学—並列計算の現状と今後の展望—」	4	
世話人 高山 一, 塚田 捷, 押山 淳, 岡部 豊, 上田和夫, 今田正俊, 常行真司		
○ 「遍歴電子系として見たマグネタイト」	58	
世話人 白鳥紀一, 坂井信彦, 高橋 隆, 十倉好紀, 鈴木 勝, 千葉利信, 毛利信男		
物性研究所談話会	96	
物性研ニュース		
○ 東京大学物性研究所 助手公募	98	
○ 人事異動	100	
○ 1998年度日米科学協力事業「中性子散乱」研究計画の公募	101	
○ 第6回 I S S P国際シンポジウム 「高輝度放射光を利用した物性研究の最先端」開催迫る	102	
○ テクニカル・レポート 新刊リスト	105	
編集後記		

東 京 大 学 物 性 研 究 所

ISSN 0385-9843

物性研究所創立40周年記念行事のご案内

11月27日(木)～29日(土)

物性研究所は昭和32年に創立されて以来、今年で40周年を过えます。これを記念して以下のような記念行事が計画されています。このうちの研究室一般公開は、これまで5年おきに行われてきましたが、今回は、近い将来の柏キャンパスへの移転を控えて六本木キャンパスで行う最後の機会になります。ご関心のある方は是非お出で下さい。

連絡先電話番号 (03)3478-6811 内線5011

内容

1. 記念シンポジウム

「物性科学の焦点」

現在の物性における重要課題について、所内外の6人の第一線の研究者による

総合講演を中心とした討論を行うシンポジウム

会場 生産技術研究所第一会議室

日時 11月27日(木) 午前10時30分～午後5時30分

講演時間 50分(討論を含む)

プログラム

10:30-10:40	所長挨拶	安岡弘志 福山秀敏 (東大理)
10:40-11:30	強相関電子系 ドハース・ファンアルフエン効果から 見た重い電子系の物理 星食	大貫淳雄 (阪大理)
11:30-12:20	高温超伝導体及び関連物質の実験の最近 の話題から	高木英典 (物性研)
12:20-13:50	分子導体—「分子」がもたらす多様な物性 休憩	加藤礼三 (物性研)
13:50-14:40	半導体人工原子・分子 光制御された物質系の協力現象とその応用	樽本清悟 (NTT基礎研) 五神 真 (東大工)

2. 所内一般公開

研究室公開
各研究室が研究施設と研究内容、成果を公開します。

- 新物質科学研究部門
- 物理理論研究部門

- 先端領域研究部門
- 極限環境物性研究部門

- 先端分光研究部門
- 軌道放射物性研究施設

- 中性子散乱研究施設
- 物質設計評価施設

共通実験室

特別企画

特に興味をもっていただけるようなトピックスについて次のような特別企画展示を設けます。

- トンネル顕微鏡で見る原子
・体験するレーザー
- ・コンピュータで見る相転移
・ダイアモンドをつくる
・目で見る超流動・超伝導
・超強磁場と量子の世界

物性科学入門教室

物性研究所の所員が物性科学の最近の話題について非専門家にも分かり易い講演を行います。

11月28日(金) 13:30-14:30
「レーザーが開く極限の世界」 未元 鶴所員

11月29日(土) 13:30-14:30
「おらが村の電子達」 勝木信吾所員

—メソスコピック系の物理— 勝木信吾所員

科学映画 (ビデオ) 上映

物性研究とは何か、物性研究所とはどんな研究所なのかについてわかりやすく紹介した科学ビデオを随時上映します。また極限状態での現象を解説した「極限の世界」もあわせて上映します。

「極限の世界」上映時間／10:30
「物性研究所」上映時間／11:30
「物性研究所訪問」上映時間／15:00

日時 11月28日(金)、11月29日(土) 午前10時30分～午後4時

内容

物性研に着任して

瀧川 仁

この8月に10年余り住みなれたアメリカより帰国し、物性研での研究活動をスタートしました。今後しばらくは、これまでの研究の延長として、核磁気共鳴(NMR)を主な実験手段として強相関電子系が示す、超伝導、モット転移、スピニギャップ、量子臨界現象といった多彩な現象を解明していくたいと思っております。実は1978年から安岡研の大学院生として5年、技官として4年物性研おりましたので、久しぶりに古巣にもどったように感じています。勿論この間の物性科学の変貌ぶりは目ざましく、物性研のスタッフや活動内容も大きく変わりました。これからも柏移転を機に一層充実することと思いますが、私の研究室もその一員として、エキサイティングな研究が持続しそれによって所内外の方々と活発な交流が保てる場であるよう努力したいと思っております。

10年半に及ぶアメリカ滞在のうち最初の3年半をニューメキシコ州のロス・アラ莫斯国立研究所で、後の7年をニューヨーク州ヨークタウンハイツにあるIBMの研究所で過ごしました。初めてロス・アラ莫斯に来て、西部劇に出てきそうな岩と砂漠の景色を眺めたときは、大変なところに来てしまったと実感しました。私がロス・アラ莫斯の物性実験グループに加わったときは、NMRに必要な装置は殆んどなく、直ちに超伝導マグネットや測定機の仕様を決めたり発注したりする事を、同僚のChris Hammelと始めました。当時(1987年4月)は、高温超伝導体が発見された直後で、初期の重要な実験結果が色々なグループから次々と発表されるのを黙って眺めているのは、大変フラストレーティングでした。結局、装置が整って満足に実験ができるようになるまで約一年かかりましたが、この間他人の論文を注意深く読み、何が問題でどのような実験をすればよいかをじっくり考える機会を得たことは、後から考えればそう悪い経験ではなかったような気がします。

この時期ロス・アラ莫斯では毎夏、高温超伝導の理論ワークショップが聞かれ、多くの理論家が長期間滞在しており、この中にはNMRの結果に強い関心を持つ人もいました。これらの人々、特にMaurice Rice, Doug Scalapino, David Pines, Andy Millisといった優れた理論家とくり返し突っ込んだ議論ができたことは、ロス・アラ莫斯滞在の最大の収穫でした。これらの議論を通して多くの物理を学びましたが、又一方で、自分の実験結果の重要性を如何に正確に人に伝えるかということの大切さも痛感しました。言ってみれば当たり前のことですが、日本にいた自分には充分認識していなかったような気がします。論文を書くにあたっても、結果の意味するところや物理的な重要性を如何に分かりやすくしかも正確に書くかという点については、アメリカに来て色々な人から多くを学びました。

高温超伝導体のNMRの実験に関しては、磁場によって粉末試料を配向させる手法を他のグループに先がけて利用したことが利点となって、装置ができあがってからは、次々と面白い結果を得ることができました。この磁場による配向がはじめて成功した日、データをとり始めるように装置を

セットしてから夕食をとった後、再び実験室にもどってみて、あたかも単結晶から得られるようなシャープな共鳴スペクトルをみつけたときの感激は、今でも忘れられません。このようにしてロス・アラモスでは比較的短いながらも、大変充実した日々を送ることができました。

しかし、ロス・アラモスに来て2年もたつとロッキーの山とキャニオンが織り出す雄大な自然には魅惑されるものの、妻ともども都会の文化がすっかり恋しくなりました。こうして新しい職を探し始めましたが、名国のNMR実験家の高温超伝導体の研究に対する貢献が高く評価され、特にアメリカでは物性物理におけるNMRの重要性が見直されていたことが幸いして、まだこの分野の研究者のいなかったIBMのワトソン研究所で雇ってもらえることになりました。ここでもまた、実験装置をセットアップするのに1年近くを費しました。(幸いこの装置は今回物性研を持って帰ることができて、今後も使用できる予定です。)

しかし私がIBMに着任した直後から、研究所の体制が大きく変わり始めました。情報産業の目ざましい進歩に遅れをとったIBMの経営状態が悪化し、これに伴って研究所の物理科学部門の運営方針も大きく変わりました。従来はある分野をリードするような研究成果をあげていれば、会社の事業と直接係わりがなくても充分評価されていたのが、以後はそれだけでは不足で、何らかの形でIBMの事業に役立つ研究をすることが求められる様になったのです。このような状況で、アカデミックな研究を続けたい人の多くは、IBMを去っていきました。最近では経営状態はずっと好転していますが、研究所のこのような変化は元には戻らないようです。

私は着任してすぐということで、最初の3年程度はこのような応用研究への要求からまぬがれていましたが、人的なサポートは余りなく、装置のセットアップからデータをとるところまで、全て1人でやらざるを得ませんでした。又、実験結果についても、周囲に相談する人も殆どないので、専ら電子メールや電話で遠くの人々と議論するだけという、大変孤立した状況でした。反面、何か問題が生じても、大抵の場合自分自身で解決することを余儀なくされ、この結果、基礎的な文献を読み直したり、一見して説明のつかない実験データに対してもくり返しじっくり考える機会を与えられました。又、雑用と言えば、論文や研究予算申請のレフェリー程度のことしか無かったのも幸いでした。

IBMに来てしばらくは、高温超伝導体の実験を続けました。特にTc以下の結果から超伝導ギャップがd波対称性であるらしいという間接的な証拠がいくつか得られました。しかしこの問題に対しては、皆さんも御存知のようにこの直後、私と同じグループにいたTsueiとKirtleyによってSQUID顕微鏡を用いた決定的な実験がなされました。この後、興味の対象が、酸化バナジウムにおけるモット転移や、低次元量子 спин系にも広がっていきました。特に後者については、東大工学部の内田研究室から提供して頂いた新しい擬一次元反強磁性体から得られた結果が、最近の場の理論や数値計算の結果と見事な一致を示すことが分かりました。これらの研究テーマは今後も物性研で継続していく予定です。

私自身の研究に関しては、Bi系高温超伝導体に対するDavid Mitziとの共同研究以外、IBMの他のメンバーとの交流は殆ど無かったのですが、IBM滞在中の一番の収穫は、基礎科学の研究成果にもとづいて、実用的なデバイスが提案、開発されていく過程を、多少なりとも垣間見ることができたことでしょう。特に私のグループでは、Roger Kochを中心として、SQUIDの応用を中心として、各種の実用的な磁気センサーを開発していましたし、最近ではスピン偏極したトンネル素子を用いてメモリーやロジック素子を作る研究も盛んです。また、応用研究ではありませんが、従来の固体物理の枠組みに入らないテーマとして量子計算の実現があります。量子計算とは通常の計算機のように0と1の離散的な状態をベースにするのではなく、これらの量子力学的な重ね合わせに対して論理演算を行なおうという試みで、専ら理論的な研究がIBMで行われていました。極く最近、NMRを用いてこの最近のデモンストレーションが、スタンフォードのグループにより成功したことを探りました。よく知られているように、NMRでは適当なrfパルスを使ってスピンのup,downの状態を決まった位相で重ね合わせたコヒーレントな状態が作られるので、これは自然な試みと言えましょう。

私が物性研の大学院生だったころを振り返ってみると、基礎研究とテクノロジーのこのような係わりについてあまり知る機会がなかったような気がします。以前は、応用研究というと、何か勘に頼った経験的なものという偏見がありました。決してそうではなく基礎研究と同じように物理的な思考と解析に基づくべきもので、同じようにチャレンジングなものだということを知ることは、若い研究者や大学院生にとって重要なことだと思います。このためにも、優れた応用研究を行っている企業の研究者を招いてセミナーなど聞く機会を多くしてはどうでしょうか。これは、私自身、これまで応用と無縁の研究に終始し、あまりエンジニアリングの才能に欠けることを自覚しており、この反省という意味もあるのですが。

物性研に来て2週間経ちました。これからしばらくは、実験室の整備、装置の立ち上げに忙殺される日々が続くでしょうが、できるだけ早く実験が開始され、実験データをもとに色々な物理の問題を考える日が再び来ることを目指して努力したいと思っております。

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 — 並列計算の現状と今後の展望」

日時：6月9日(月) 13:00—11日(水) 16:00

場所：東京大学物性研究所Q棟講義室

世話人	塚田	捷	(東大・理)
	押山	淳	(筑波大・物理)
	岡部	豊	(都立大・理)
	上田	和夫	(東大・物性研)
	今田	正俊	(東大・物性研)
	常行	真司	(東大・物性研)
	高山	一	(東大・物性研)

物性研究所のスーパーコンピュータ全国共同利用はまる2年経過した。平成8年度の利用実績は前年の初年度に比べて大幅に増大し、繁忙期の昨年12月の利用率は、並列システムとしての上限に届くほどになっている。さらに、平成9年度前期の課題申請ポイント数は前年度同期より4割程度上回った。このような状況のもと、平成8年度における本システムによる研究成果を中心にして、物性研究における計算物理学の現状を討論し、今後を展望する目的で本研究会を開催した。

今後の運用を考える上で重要な方向の一つが、並列機である本システムの特徴を活かした、並列処理による大規模計算であろう。ここ数年の間に、大手計算機メーカーからつぎつぎと新しい並列計算機が発表され、ハードウェアの価格性能比が高いことから大学や国の大規模計算機に急速に普及し始めている。ところが並列プログラミングという「言語障壁」もあって、高速性と大容量メモリという並列計算機の能力を生かした大規模計算を行う研究者はごく限られているのが現状である。本研究会では特別セッション「並列計算の現状と今後の展望」を設け、最新の並列スーパーコンピュータ(VPP500, SR2201, SX4)による大規模並列計算の取り組み例を中心に、より大型の専用計算機CP-PACS(筑波大)、また、PCクラスターで構成する自前の並列計算システムについての講演、討論を行った。その結果、計算を大規模化していくには今後並列計算が不可避であること、急速に普及し始めた種々の並列計算機資源の有効利用を図ること、さらに、本システムにおいても、並列計算による研究を充実させていくことの重要性が多くの参加者に強く認識されたと考えている。

一般セッションでは、第一原理計算、強相関量子系、量子・古典スピン系の分野の研究成果が討

議された。分野ごとに出席者の入れ替わりがあったが、常に50名を超える参加者があり、活発な討論が展開された。

プログラム

() 内は討論を含む講演時間

6月9日（月）午後

量子スピン系

- 13:00～13:40 Matthias Troyer(物性研)(40分)
「Critical exponents of the quantum phase transition in a planar antiferromagnet」
- 13:40～14:00 中村統太（東北大工）(20分)
「フラストレーションのある1次元量子スピン系における負符号問題の解決」
- 14:00～14:20 飛田和男（埼玉大理）(20分)
「1次元ランダム反強磁性ハイゼンベルグにおけるボンド交替の効果」
- 14:20～14:40 今田正俊（物性研）(20分)
「スピン梯子模型の磁気的性質に対するわずかな非磁性不純物の効果と量子臨界現象」
- 14:40～15:00 *宮下精二，斎藤圭司（阪大理），H.De Raedt (Groningen大)，小林礼人（東大理），江崎ひろみ（東京工芸大工），花村榮一（東大工）(20分)
「量子ダイナミックスの直接数値シミュレーション」

休憩（30分）

古典スピン系他

- 15:30～15:50 *松原史卓（東北大工），白倉孝行（岩手大人社）(20分)
「クラスター熱浴モンテカルロ法による2次元スピングラスの研究」
- 15:50～16:10 *福島孝治(物性研)，川村 光(京都工織大工芸)，根本幸児(北大理) (20分)
「スピングラスにおけるカイラル転移（交換モンテカルロ法）」
- 16:10～16:30 岡部豊（都立大理）(20分)
「秩序形成ダイナミックスへの交換モンテカルロ法の応用」
- 16:30～16:50 伊庭幸人（統数研），菊池 誠（阪大理）(20分)
「拡張アンサンブルを利用したモンテカルロ法の応用」

- 16 : 50～17 : 10 *菊池 誠, 時田恵一郎 (阪大理), 伊庭幸人 (統数研) (20分)
「ヘテロポリマーの設計問題」
- 17 : 10～17 : 30 伊藤伸泰 (東大工) (20分)
「古典多体系シミュレーションの並列性」

6月10日 (火) 午前

第一原理計算

- 9 : 00～ 9 : 30 *小谷岳生, 赤井久純 (阪大理) (30分)
「最適化ポテンシャル法によるバンド計算, 正しい交換項および静的近似での相関項」
- 9 : 30～ 9 : 50 播磨尚朝 (阪大産研) (20分)
「大きい系の F L A P W 法による電子構造計算」
- 9 : 50～10 : 10 *星野公三, 下條冬樹, 宗尻修治, 仙田康浩 (広島大総合) (20分)
「第一原理および大規模分子動力学シミュレーションによる液体金属の研究」
- 10 : 10～10 : 30 *家富 洋, 長谷川 彰 (新潟大理), 菊池英明 (新潟大自然) (20分)
「超イオン伝導性発現に対する p-d 電子状態混合の役割」

休憩 (30分)

- 11 : 00～11 : 30 S.K. Jeong, *押山 淳 (筑波大物理) (30分)
「LDA 計算の表面への応用：水素化シリコン表面上での Si 飛来原子の特異な振舞い」
- 11 : 30～11 : 50 *赤木和人, 塚田 捷 (東大理) (20分)
「並列計算機を用いた「水／半導体界面」の第一原理分子動力学計算の試み」
- 11 : 50～12 : 10 *三宅 隆, 萩津 格, 常行真司 (物性研) (20分)
「シリコン結晶中水素不純物の量子状態の研究 — 第一原理経路積分分子動力学によるアプローチ — 」
- 12 : 10～12 : 30 *中村浩次, 早川和延 (北大触媒研), 小口多美夫 (広大理), 長谷川秀夫 (東京学芸大), 末岡和久, 武笠幸一 (北大工) (20分)
「Fe 薄膜間における交換力の第一原理計算」

6月10日(火) 午後

—— 特別セッション「並列計算」 ——

- 13 : 30～14 : 15 萩津 格 (物性研) (45分)
「VPP500, SR2201 による大規模第一原理分子動力学計算」
- 14 : 15～14 : 45 宮崎 剛 (金材技研) (30分)
「第一原理計算プログラムのNEC-SX 4 (共有メモリー) における並列化について」
- 14 : 45～15 : 15 杉野 修 (NEC基礎研) (30分)
「P C クラスター上で第一原理分子動力学法の並列化」
- 休 憇 (30分)
- 15 : 30～16 : 15 宇川 彰 (筑波大物理) (45分)
「CP - PACS 上でのlattice QCD 並列計算」
- 16 : 15～17 : 00 住吉光介 (理研) (45分)
「並列化効率の予測と評価について — VPP500における行列解法並列化の場合—」
- 17 : 00～17 : 30 藤堂眞治 (物性研) (30分)
「分散メモリ型並列コンピュータを用いた大規模転送行列の厳密対角化」

6月11日(水) 午前

強相関量子系 I

- 9 : 10～9 : 40 *黒木和彦, 青木秀夫 (東大理) (30分)
「スピン・ギャップのある強相関電子系の数値計算 —— 量子モンテ・カルロ及びDMRG」
- 9 : 40～10 : 00 柴田尚和 (物性研) (20分)
「一次元近藤格子模型の朝永ラッティンジャー液体としての性質」
- 10 : 00～10 : 30 *求 幸年, 今田正俊 (物性研) (30分)
「軌道縮退をもつハバード模型に対する量子モンテカルロ法によるアプローチ」

休 憇 (30分)

- 10 : 50～11 : 10 *小椎八重 航, 川村有毅**, 岡本敏史**, 井上順一郎**, 前川禎通,

石原純夫（東北大金研、名大工**) (20分)

「厳密対角化法によるマンガン酸化物の電子状態の計算」

11:10~11:30 *鈴木俊哉, 酒井 治, 清水幸弘（東北大理）(20分)

「多電子占有イオンにおける近藤効果と非フェルミ流体的性質」

11:30~11:50 *堀田貴嗣, 高田康民（物性研）(20分)

「ハバード・ホルスタイン模型の基底状態：厳密対角化法による研究」

11:50~12:10 *坂井 徹（姫路工大理), D. Poilblanc, D. J. Scalapino (UCSB)(20分)

「高温超伝導における電子格子相互作用の効果」

6月11日（水）午後

強相関量子系II

13:30~13:50 草部浩一（物性研）(20分)

「強相関電子系におけるスペクトルフロー解析」

13:50~14:10 江藤幹雄（慶大理工）(20分)

「量子ドット中の少数電子系における多体効果とクーロン振動」

14:10~14:30 *浅野健一, 安藤恒也（物性研）(20分)

「量子ホール効果領域におけるスピン分裂サイクロトロン共鳴」

14:30~14:50 K. Slevin (理研), 大槻東巳（上智大理工）(20分)

「Numerical study of universality of Anderson transition」

14:50~15:10 *高須昌子, 橋本昌人（金沢大理）(20分)

「ランダムポテンシャル中のヘリウムの量子モンテカルロシミュレーション」

15:10~15:30 *原田健自（京大工), 川島直輝（東邦大理）(20分)

「ハードコアボーズ系($S = 1/2XY$ モデル) の相転移の精密計算」

15:30~15:50 *飯高敏晃, 野村晋太郎, 平山秀樹, 趙新為, 青柳克信, 菅野卓雄（理研）

(20分)

「時間依存シュレーディンガー方程式による線形応答関数の計算法」

15:50~16:00 高山 一（物性研）

まとめ

Critical exponents of the quantum phase transition in a planar
antiferromagnet

ISSP, Univ. of Tokyo M. Troyer

M. Imada

K. Ueda

Instead of classical transitions controlled by temperature T a quantum phase transition between a symmetry broken phase with long-range Néel order and a quantum disordered state with a finite spin excitation gap may be realized at $T=0$ by controlling a parameter g to increase quantum fluctuations. Criticalities around such quantum phase transitions at $g=g_c$ may reflect inherent quantum dynamics of the system and yield unusual universality classes with rich physical phenomena.

We have used the continuous time quantum Monte Carlo loop algorithm [B.B. Beard and U.-J. Wiese, Phys. Rev. Lett. **77**, 5130 (1996)] to investigate one of the two quantum critical points in the CaV_4O_9 lattice, a $1/5$ -th depleted square lattice [M. Troyer, H. Kontani and K. Ueda, Phys. Rev. Lett. **76**, 3822 (1996)]. As the ratio of the two coupling constants $g=J_1/J_0$ is varied this lattice shows just such a quantum phase transition.

From the finite size scaling (FSS) behavior of the correlation length ξ we determine the critical point to be $g_c=0.939 \pm 0.001$. A FSS scaling analysis of the staggered structure factor and susceptibility then gives the correlation exponent η and the dynamic exponent z . Our estimate of $z=1.018 \pm 0.02$ is clearly compatible with predictions from the quantum nonlinear sigma model (QNL σ M). For the QNL σ M Lorentz invariance implies $z=1$.

The remaining exponents β and ν are best calculated from the magnetization m_s and the spin stiffness ρ_s on the ordered side. Good estimates for m_s and ρ_s can be obtained from the FSS equations of Hasenfratz-Niedermayer equations [P. Hasenfratz and F. Niedermayer, Z. Phys. B **92**, 91 (1993)]. Our results, listed in the table are indeed compatible with the 3D classical Heisenberg [$O(3)$] exponents predicted from the mapping to the QNL σ M. This supports the conjecture that the mapping to the QNL σ M is valid in planar quantum antiferromagnets. The Berry phase terms [F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **61**, 1029 (1988)] do not seem to be relevant.

Table 1 : Critical exponents β , ν , η and z , Listed are both the estimates without making any assumption for z , and the best estimate if Lorentz invariance($z = 1$) is assumed. For comparison the exponents of the 3D classical Heisenberg(O(3)) model are also listed.

model	ν	β	η	z
2 D QAFM	0.685 ± 0.035	0.345 ± 0.025	0.015 ± 0.020	1.018 ± 0.02
assumed $z = 1$	0.695 ± 0.030	0.345 ± 0.025	0.033 ± 0.005	1(assumption)
3 D O(3)	0.7048 ± 0.0030	0.3639 ± 0.0035	0.034 ± 0.034	—

フラストレーションのある1次元量子スピン系における負符号問題の解決

東北大工学部応用物理 中村 統太

近年, 低次元量子スピン系が実験的にも理論的にも興味を持たれている。特に, フラストレーションを含む二重スピン鎖モデルで記述されると考えられる物質群は非常に多い。従って, このモデルに対する有効な解析手段を開発する事は, 非常に意義深いものであるが, ここでは量子モンテカルロ法における負符号問題を完全に解決し, このモデルへ適用する事を可能としたのでこれを報告する。

負符号問題解決のポイントは宗久らによって提案されたrestructuring法[1]をスピン反転対称性を用いて改良する事だけである。つまり, 表現基底として次のものを考える。

$$v_1 = (|\uparrow,\uparrow\rangle + |\downarrow,\downarrow\rangle)/\sqrt{2}, \quad v_2 = (|\uparrow,\uparrow\rangle - |\downarrow,\downarrow\rangle)/\sqrt{2}, \\ v_3 = (|\uparrow,\downarrow\rangle + |\downarrow,\uparrow\rangle)/\sqrt{2}, \quad v_4 = (|\uparrow,\downarrow\rangle - |\downarrow,\uparrow\rangle)/\sqrt{2}.$$

ここで \uparrow と \downarrow の二つの固有状態を表す。これらの基底の直積で全系を張る。

Figure 1 によって表されるモデルに対してこの様な表現基底をとるだけで負符号問題は $-J_0-J_1+J_3 \geq 0$ の条件のもと完全に解決される事を, 解析的に証明した。[2]

この新しい表現基底を用いて, 以下のモデルに対して量子モンテカルロ計算を行なった。 $(J_0, J_1, J_2, J_3) = (0.2411, 0.2411, 1.0, 1.0)$, このモデルは, 次近接相互作用を持つ1次元量子スピン系でdimer-fluid転移点直上である。この点の近傍には非有機 spin-Peierls物質であるCuGeO₃が存在すると考えられている。計算結果をFig.2に示す。計算を行なったサイズはスピン数にして34, 他の如何なる方法においても計算不可能なサイズである。また, 矢印は実際にシミュレーションを行なった温度, その他はreweighting法で推定した。図を見ると, 負符号問題が無いため低温まで実に綺麗なデータが得られる事がわかる。従って, この方法によっておそらく初めて, フラストレーションのある低次元磁性体の, 直接実験と比較しうる意味ある理論データが得られることにな

る。

参考文献

- [1] T. Munehisa and Y. Munehisa, Phys. Rev. B **49**, 3347 (1994).
- [2] T. Nakamura, unpublished

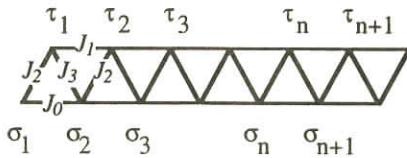


FIG. 1.

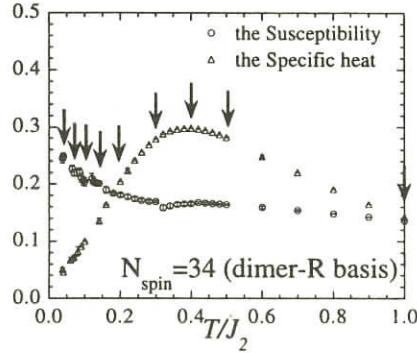


FIG. 2

1次元ランダム量子ハイゼンベルグモデルにおけるボンド交替の効果

埼玉大学理学部 飛田和男

スピン1/2の交替ボンド 1次元反強磁性ランダムハイゼンベルグモデル

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N 2J_i S_i S_{i+1}, \quad J_i = J(1 + (-1)^{i-1} u + \delta_i), \quad \delta_i \text{はランダム}$$

はボンド交替のないとき($u=0$)、ランダムシングレット相と呼ばれる基底状態を持つことが実空間繰り込み群の方法により知られている[1, 2]。この状態では、まず強いボンドで短距離のシングレット対が作られると、残されたスピンは遠くのスピンと実効的に反強磁性相互作用をすることで、各スピンはランダムに相手を見つけて様々な長さのシングレット対を作っていると考えられる。

このような系にボンド交替 u が生じたときにどうなるかについては、Hymanら[3]がやはり実空間繰り込み群の方法で研究している。彼らはこの系においてボンド交替がrelevantな摂動であり、基底状態は強くダイマー化した実効ハミルトニアンで記述される事を示した。このとき、一つ一つの実効ダイマーは多くのスピンを含む有限の大きさのランダムシングレット状態のセグメントと考えられる。そのためにエネルギーギャップの分布の変化がおきることやストリングオーダーが有限に残る事を示した。

ここでは、この系を密度行列繰り込み群[2, 4]の方法で取り扱い、エネルギーギャップの分布、

基底エネルギー、ストリングオーダー[3, 4]のu依存性を調べた。この計算は異なるサンプルに関する計算を容易に並列化する事ができる。この計算の結果、次の事が分かった。

1. エネルギーギャップの対数の期待値 $\ln \Delta$ は $1/u$ に比例する。これは Hyman らの結果と一致している。
2. ボンド交替によるエネルギーの利得を u^a とすると、 $a \sim 2.5 > 2$ であること。従って、規則系の場合[6]と異なり spin - Peierls instability は起きないと考えられる事。
3. String order は $u^{2\beta}$ ($\beta \sim 0.37$) のように振る舞う事が分かった。このことは Hyman らの $\beta = 2$ [3] とは大きく異なる。この違いの原因は Hyman らが一つ一つ実効ダイマー内での string 相関を考慮しなかったためではないかと考えられる。

参考文献

- [1] C. Dasgupta and S.-k. Ma: Phys. Rev. B **22** (1980) 1305; S.-k. Ma, C. Dasgupta and C. K. Hu, Phys. Rev. Lett. **43** (1979) 1434. 4) 3799; D. S. Fisher: Phys. Rev. B **50** (1994) 3799.
- [2] K. Hida: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 895; Errata J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 3412.
- [3] R. A. Hyman, K. Yang, R. N. Bhatt and S. M. Girvin: Phys. Rev. Lett. **76** (1996) 839.
- [4] S. R. White: Phys. Rev. Lett. **69** (1992) 2863; Phys. Rev. B **48** (1993) 10345.
- [5] K. Hida: Phys. Rev. B **45** (1992) 2207.
- [6] M. C. Cross and D. S. Fisher: Phys. Rev. B **19** (1979) 402.

Nonmagnetic Impurity Effects
on
Competition between Spin-Gap and Antiferromagnetism

Institute for Solid State Physics
M. Imada, Y. Iino, Y. Motome, N. Katoh and N. Furukawa

Nonmagnetic impurity effects on quantum spin systems with ladder - shape structure are studied. When a single nonmagnetic impurity is doped into a pure ladder system, it induces a spin - 1/2 local moment accompanied with a static antiferromagnetic correlation around it. We study finite but small concentration of impurities doped into ladder systems at temperatures relevant and accessible in Zn - doping experiments of ladder compounds such as SrCu_2O_3 . Exact diagonalization results as well as variational Monte Carlo results

show a substantial enhancement of antiferromagnetic correlations at small impurity doping¹⁾. Quantum Monte Carlo calculations indicate the following results²⁾. When impurities are regularly distributed, Curie - like susceptibility appears below a crossover concentration $x_c \sim 0.04$ in the temperature range of the order of 0.01J and 0.1 J with J being the exchange interaction whereas the specific heat has linear - temperature - dependence at low temperatures for the impurity concentration $x > x_c$. When impurities are distributed randomly, the Curie - like susceptibility is observed for all the cases of finite impurity doping even at $x > x_c$ in contrast with the regularly distributed impurities. The numerical results of a single ladder agree with the experimental results of ladder compounds in the following points: The doping concentration dependence of the Curie constants quantitatively agrees with each other. The coefficient of the linear specific heat γ , has the value $\gamma \sim 2/3J$ of the 1D Heisenberg chain. However, below the crossover concentration x_c , the numerical results indicate the absence of correlation between the local moments at different impurity sites in contrast to the strong correlation required for the appearance of the antiferromagnetic order at $x=0.01$ and $T \sim 10K$ observed in the experiments. To understand this discrepancy, effects of interladder coupling and three - dimensional effects were studied. Our conclusion is that, to reproduce the experimental results, the system even without the impurities must be rather close to the quantum critical point of the transition between the spin - gap and antiferromagnetic phases³⁾. At the critical point in the absence of the nonmagnetic impurity, the universality class of the transition may be governed by the 3D nonlinear sigma model⁴⁾. For the parameter value for this critical point, infinitesimally small amount of nonmagnetic impurity drives the system to the antiferromagnetically ordered state. We have developed a scaling theory to describe the critical exponents for this impurity - control transition³⁾. The quantum Monte Carlo results appear to be in agreement with this scaling theory. The experimental results can be understood from the interpretation that the critical behavior is governed by these critical exponents for the quantum critical point.

- 1) Y. Motome, N. Katoh, N. Furukawa and M. Imada: J. Phys. Soc. Jpn. 65 (1996) 1949.
- 2) Y. Iino and M. Imada: J. Phys. Soc. Jpn. 65 (1996) 3728.
- 3) M. Imada and Y. Iino: J. Phys. Soc. Jpn. 66 (1997) 568 .
- 4) M. Troyer, M. Imada and K. Ueda: J. Phys. Soc. Jpn. 66 (1997) to be published.

量子ダイナミックスの直接数値シミュレーション

阪 大 ・ 理 宮 下 精 二

阪 大 ・ 理 斎 藤 圭 司

Groningen University H. De Raedt

東 大 ・ 理 小 林 礼 人

東京工芸大・工 江 崎 ひろみ

東 大 ・ 工 花 村 栄 一

近年の微細加工技術の進歩や分子レベルでの構造の解析などによりミクロなレベルでの量子ダイナミックスが注目されて来ている。今回は、シュレディンガー方程式の直接数値的にシミュレーションを行なうことで、系の時間発展を具体的に観測し、それぞれの系の動的性質の特徴を明らかにする試みを報告する。

一般に時間に依存するパラメーターをもつシュレディンガー方程式の解法には時間発展方程式に指數積分の方法[1]を適用し、逐次的に解く方法を用いた。

量子ダイナミックスに関して関心を集めている問題の一つに準安定性をもつ量子系での緩和現象がある。この問題は量子トンネル現象の関係で多くの方法で研究されている。その最も典型的な例として逆磁場中に置かれた一軸的異方性をもつ磁性体の緩和現象があるが、その過程を真剣に考えるとどうしてもエネルギー緩和(散逸)の具体的な形が重要な役割をすることがわかる。エネルギー散逸過程を取り扱うためには、混合状態まで含めた密度行列を考えなくてはならない。しかし、今回は純量子的に取り扱える範囲に問題を限定しその範囲での量子ダイナミックスに起因する特徴的な性質を調べた。

具体的には、外部磁場が時間とともに変化する場合の状態の時間発展における非断熱遷移に起因する現象を報告する。ここでは、量子ゆらぎをもつ一軸的磁性体として横磁場イジング模型において非断熱遷移とトンネルギャップ、[2, 3]逐次的非断熱遷移と階段的磁化過程、[4]交流磁場に対する非自明共鳴[5]について報告した。それらの結論は z 成分がハミルトニアンと交換しない場合、たとえば、異方的XYモデルや格子との相互作用を考えた系[6]でも成り立つ。

ここまで純粹にシュレディンガー方程式で扱える系であるが物質系と相互作用している輻射場など、外場との相互作用が本質的な場合にはその効果を取り入れた扱いをする必要がある。微小共振器内の原子が外部より励起され光子を放出する現象に対するシミュレーションを紹介する。[7, 8] ここでは原子励起効果、格子の散逸効果を取り入れた密度行列時間発展方程式 $\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}[\mathcal{H}, \rho] + \Gamma_F \rho + \Gamma_A \rho$ によって物理量の平均的時間発展を求めた。さらに、放出光子の時間相関関数に関しては確率分布を扱う(つまり、各確率過程に関して平均した)密度関数の方法では個々のプロセス

に関する情報が落ちているので、この放出光子の時系列に関する研究にはLangevin方程式に相当する確率的シュレディンガー方程式(SSE)を導入した。この方法で、光子の放出の統計的性質を調べ、光子数を放出した後しばらくの間放出が抑制される効果で放出の頻度がポアソン分布からずれ上述の量子的特徴が現われることを明らかにした。

有限の温度で一般に散逸効果を力学系に取り込むことは難しいが、多くの緩和現象や熱伝導の問題など物理的な興味を多く含む分野でありこの問題に対しても有効な方法の開発を目指している。

References

- 1) M. Suzuki, J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 3015 (1992), M. Suzuki, Proc. Japan. Acad. Ser. B **69**, 161 (1993)
- 2) S. Miyashita, J. Phys. Soc. Jpn. **64**, 3207 (1995)
- 3) S. Miyashita, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 2734 (1996)
- 4) H. De Raedt, S. Miyashita, K. Saito, D. Garcia - Pablos, and N. Garcia, unpublished.
- 5) S. Miyashita, K. Saito, H. De Raedt, condmat - 9706276.
- 6) H. Kobayashi and S. Miyashita, 準備中.
- 7) H. Ezaki, S. Miyashita and E. Hanamura, Phys. Lett. A**203**, 403 (1995).
- 8) S. Miyashita, H. Ezaki and E. Hanamura, unpublised.

クラスター熱浴モンテカルロ法による2次元スピングラスの研究

東北大・工 松原史卓
岩手大・人社 白倉孝行

近年、モンテカルロ法の様々なアルゴリズムが提案されてきている。しかしそれらには一長一短があり複雑系に有効な多スピン反転法はない。最近、我々は複雑系で使える多スピン更新法(クラスター熱浴法(CHB法))を考案した。方法の要点は、ある決まった形のクラスター(スピン数N)に注目し、このクラスターの熱平衡スピン配置を実現することである。この問題はNが増えると急激に難しくなる。しかし、もしクラスターが幾つかの層に分割出来るなら、転送行列法の助けを借りて、スピン配列を層毎に順次決定していくことが出来る。この方法を使うと数百個のスピンのクラスターのスピン配置を一度に更新することが出来る。得られたスピン配置は以前のものと無関係になるため大きな揺らぎが入ってくる。このため複雑系にとくに有効である[1]。

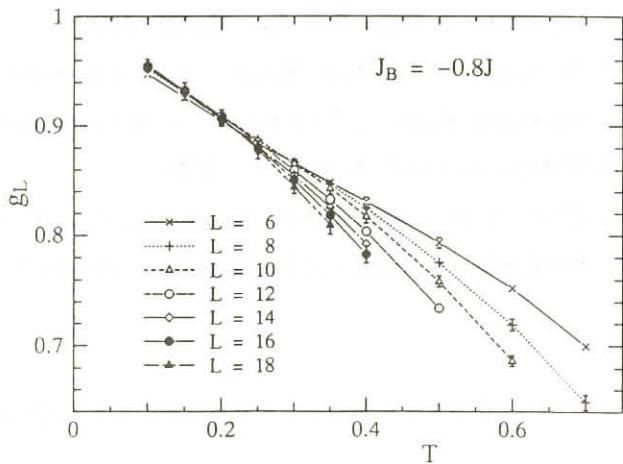
ここでは2次元スピングラスに対する応用について報告する。2次元イジングスピングラスは絶対零度相転移 $T_c = 0$ をすると信じられている。最近、我々は土Jイジングモデルの相転移を調べた結果 $T_c \neq 0$ を示唆する結果を得た[2]。しかし、物理量(とくに g_L)はかなりの高温から飽和し、

本当に相転移が有るか否かの判断は難しい。また、得られた転移温度 T_c はシミュレーションで到達できた温度より僅かに低い。そこで、今回は $L \times L$ の正方格子上の非対称 ($+J, -0.8J$) イジングモデルを考えた。理由は飽和温度がより低温になると考えられるからである。また、低温状態を調べるために C H B 法を用いた。図 1 に結果を示す。温度が下がってくると、異なる L の g_L は約 $0.2J$ で同じ値になり、その後揃って増加する。この振る舞いは 3 次元 $\pm J$ イジングモデル g_L と良く似ている。これを確かめるため有限サイズスケーリング解析を行った。結果はやはり $T_c \sim 0.2J$ を支持した。以上の結果は従来の定説に疑問を投げかけるものとして興味深い。

- [1] F. Matsubara, A. Sato, O. Koseki and T. Shirakura : Phys. Rev. Lett. **78**, 3237 (1997).
[2] T. Shirakura and F. Matsubara: J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 3138 (1996).

図 1) $L \times L$ の格子の Binder

パラメータ g_L



Chiral - Glass Ordering in Heisenberg Spin Glasses

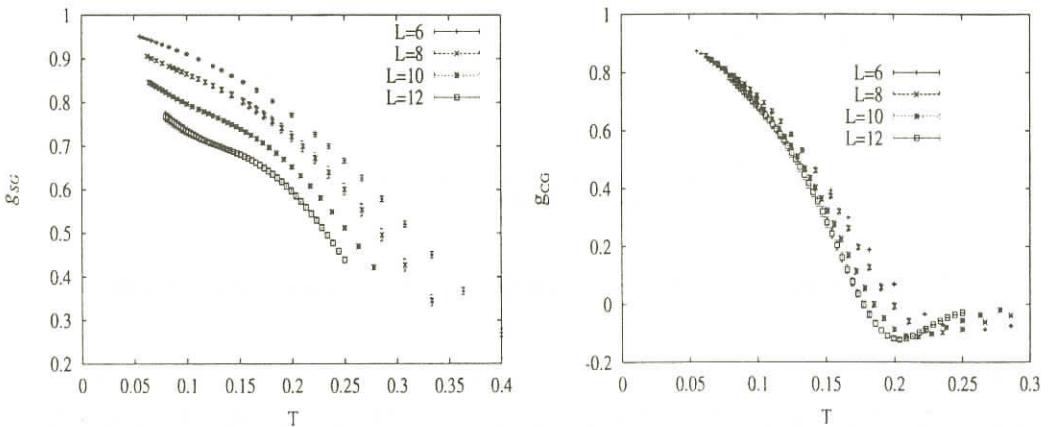
東大 物性研 福島 孝治

京都工織大工芸 川村 光

これまでのスピングラスの研究から、XY型やHeisenberg型のような連続自由度をもつスピングラス模型の下部臨界次元は3より大きいことが広く信じられている。一方実験的には第零近似的には異方性のない物質において、非線形帶磁率の発散等で特徴づけられるスピングラス平衡相転移の存在が確立している。この不整合性を説明するための描象は幾つか提唱されているが、まだ確定していない。その中で我々はカイラリティ機構について議論した。それは、スピノン秩序自身は形成されないが、連続スピノンの自由度の中でカイラリティ自由度のみがグラス的に凍結することが本質的な役割を果たしている。これまでに、3次元XYスピングラス模型において有限温度カイラルゲ

ラス転移が起きていることは数値的に示されている。

今回我々は、3次元Gaussian Heisenberg模型においてカイラリティの様子をモンテカルロ法で調べた。その際、交換法を用いることでより低温の研究が可能になった。下図にスピングラス秩序とカイラルグラス秩序に対するBinder Parameter(g_{SG} , g_{CG})を示す。相転移点ではその量はスケールレスになると考えられている。 g_{SG} はサイズとともに単調に減少していく、明らかに秩序は形成されていないことがわかるのに対して、カイラルグラス秩序は、 $T/J \sim 0.1$ あたりでサイズ依存性がなくなっていることがわかる。これは、カイラルグラス相転移がその温度あたりで起きていることを示唆している。また、有限サイズスケーリングを仮定した解析では、カイラルグラス転移温度 T_{CG} を0とするよりも、有限としたほうがもっともらしいことが定量的に示すことができる。 g_{SG} の振舞が $T/J \sim 0.1$ あたりでこし変化していることは、今回の計算ではじめてわかったことだが、これもカイラル秩序に伴うものと考えることができる。この結論を確立するためにはもう少し大きなサイズの計算が必要と考えている。



Binder parameterを温度の関数で書いた図。左図は、スピングラス秩序に対するBinder Parameter, 右図はカイラルグラス秩序に対するもの。

秩序形成ダイナミックスへの交換モンテカルロ法の応用

都立大理 岡 部 豊

スピノーダル分解の秩序形成は興味ある問題であるが、特に保存系の場合にはダイナミックスは遅くなり、後期過程のドメイン成長のべき指数の決定はむずかしい。本研究では、交換モンテカルロ法[1]を秩序形成ダイナミックスの問題に応用する。具体的には成長の非常に遅い保存系の3状

態ポツツモデルを扱い、低温へのクエンチの場合にも速いドメイン成長を得られることを示し、更にドメイン成長がべき則に従う場合には交換モンテカルロ法でべき指数を議論できることを示す。

2次元3状態ポツツモデルを $T=0.3T_c$ という十分低温にクエンチしたときのエネルギーの時間発展を図1に示す。エネルギーはドメイン境界の長さによるので、1粒子あたりの平衡エネルギーからのエネルギーの増分の逆数がドメインサイズを与えることになる。

図では、直接的なKawasakiダイナミックスに従うシミュレーション結果と交換モンテカルロ法を組み合わせた結果を比較してある。系のサイズは 256×256 であり、16のサンプル平均をとっている。交換モンテカルロ法では、温度きざみが $0.03T_c$ で16の異なる温度の系の間で交換を行っている。図から、交換モンテカルロ法を用いると急速な成長が得られることがわかる。

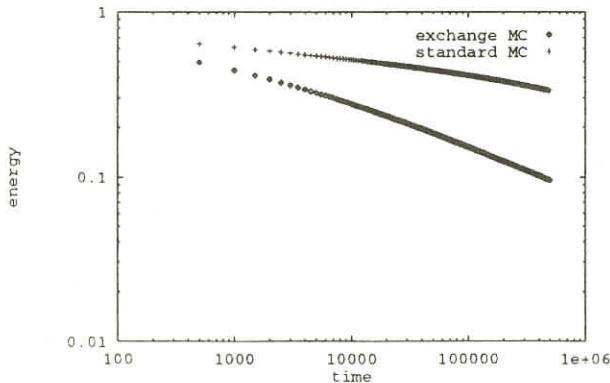


図1：低温($T=0.3T_c$)にクエンチした3状態ポツツモデルのエネルギーの時間発展

また、ダイナミックスについても、グラフの上では横軸をずらすと標準的なKawasakiダイナミックスの時間発展と重なることがわかる。すなわち、時間スケールを変えるだけで正しくKawasakiダイナミックスを実現していることになる。後期過程のドメインサイズの時間発展則 $\sim t^n$ のべき指数 n を評価するために、各時間における実効的べき指数 $d\ln E^{-1}/d\ln t$ を計算し、その外挿値から求めると、 $n=1/3$ であることが明瞭に示される。この $1/3$ 乗の成長則は直接的なシミュレーション[2]でかなり遠い値から外挿で求めた値と一致する。

交換モンテカルロ法による時間発展は単純ではないと一見考えられるのに、秩序形成過程のダイナミックスを実現できたのは、秩序形成過程においては転移点以下は絶対零度固定点のダイナミックスに従っていること、また、べき級数成長の場合には $\sim t^n$ の振幅がパクエンチする温度に依存しても重ね合わせたとき同じべき級数にとどまるためではないかと考えられる。

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

[2] C. Jeppesen and O. G. Mouritsen, Phys. Rev. B**47**, (1993) 14724.

拡張アンサンブルを利用したモンテカルロ法の応用

統計数理研究所 予測制御研究系 伊庭 幸人

大阪大学理学部 菊池 誠

マルチカノニカル法、交換法(MCMCMC、温度並列アニーリング法)など、本来対象となる分布を拡張ないし結合したアンサンブルをシミュレートする手法が数年来注目を集めている。講演では、これらの方の発展として、どのような手法がありうるかを議論した。

まず最初に考えられることは、エネルギーと温度だけでなく、別の軸について拡張されたアンサンブルを用いることで、何か面白いアルゴリズムができるかということである。講演者は、この方向でいくつかの試みを行ってきたが、今回は格子ポリマーにおいてself-avoidingnessをゆるめる方向に拡張したアンサンブルを用いることを提案した。格子ポリマーの場合、通常、self-avoiding条件はそれ以外の相互作用エネルギーとは別に付加される。この定式化のもとでマルチカノニカル法などを実装した場合、self-avoiding条件は高いエネルギー状態(高温)でもそのまま残るわけであるが、これは緩和の障害になり、場合によっては無限時間極限におけるエルゴード性の証明さえ困難にする。われわれはこの障害を除去するために、(1) 温度とself-avoiding条件のゆるめ方をそれぞれ少しずつ変えた一連の系同士の交換を考える、(2) 温度とself-avoiding条件の2方向への2次元的拡張を考える、の2つの方法を提案し、実装した。

次に考えられるのは、今まで興味が持たれながらも、緩和時間が長すぎるなどの理由で実用性がなかった方法を、拡張アンサンブルの考え方を利用して実用化するという路線である。この場合、しばしば、もともと計算したい対象自体が通常の熱平衡系での期待値ではないのに、さらに計算の便宜のためにアンサンブルを拡張することになる。今回は、あるダイナミクスのもとで特定の状態間を結ぶパスの全体に適当な重みを与えたものからなるアンサンブル(“時空間アンサンブル”)を考えた。このようなアンサンブルに対するモンテカルロ法はすでに存在する(たとえば[1])が、ここではマルチカノニカル的な技法による接近を試みた。具体的には、2次元強磁性イジング模型の2つの準安定状態の間を結ぶ最短パスの全体に対して、メトロポリスダイナミクスのもとでの実現確率を横軸とした状態密度をマルチカノニカル的な方法を用いて計算することを試みた。

[1] Zimmer,M.F., Phys. Rev. Lett., 75, p.1431 (1995)

ヘテロポリマーの設計問題

大阪大学大学院 理学研究科 菊 池 誠

統計数理研究所 予測制御研究系 伊 庭 幸 人

大阪大学大学院 理学研究科 時 田 恵一郎

本講演では蛋白質をはじめとする(ランダム)ヘテロポリマーを統計力学的に設計する問題について議論した。蛋白質は特定の折りたたみ構造を持ち、その構造が機能を決めている。これに関連して、アミノ酸配列が与えられたときにその蛋白質の基底状態配位を求めるという「折りたたみ問題」がよく知られている。蛋白質が特定の機能を持つということは、基底状態配位が一意に決まることを意味する。逆に、基底状態が縮退しているポリマーは特定の機能を果たすにはふさわしくないわけである。ランダムヘテロポリマーは フラストレーションの効果が強く、基底状態探索自体難しい問題として知られている。一方、人工酵素や分子機械の設計のように特定の機能を持つヘテロポリマーを作りたい場合がある。このときは、機能を発揮するための折りたたみ構造が先に与えられており、その構造を基底状態にもつモノマー配列を決めるという問題が設定される。すなわち「折りたたみ問題」の逆問題であり、「設計問題」と呼ばれる。上の議論から明らかな通り、与えられた構造は単に基底状態になっているだけでなく、唯一の基底状態でなくてはならない。

ナイーブに考えれば、あらゆるモノマー配列に関して「折れたたみ問題」を網羅的に解けば「設計問題」の解が得られるはずである。もちろん、これではあまりにも計算量が多くなってしまうので、現実的ではない。本講演では、設計問題を解く手法のひとつとして、ボルツマンマシンの学習方程式と類似の方法による設計の試みについて報告した。

我々の方法はKurosky & Deutschによって提案された設計指針に基づいている。これは、熱平衡状態での与えられた配位の実現確率を最大化するものである。すなわち、モノマー配列が変わると与えられた配位の実現確率が変化するので、適当に低温の条件下でこの実現確率が最大になるようなモノマー配列を求める。充分低温でこの確率が1に近づけば、問題の配位が唯一の基底状態になることが保証される。有限温度で確率を最大化するというこの指針は、温度を考慮しないShakhnovich & Gutinの方法に比べ、得られた解の安定性が保証されるという点で優れている(ちなみに、笹井は解のまわりの安定性を改めて考慮する試みを行なっている)

モデルとして格子上のHPモデルを用いる。このモデルではアミノ酸を大きく親水性と疎水性の二種にわけ、それ以上の区別をしない。従って、問題は上で述べた確率条件を満たす0,1の並びを発見するというものになる。これはニューラルネットでいうボルツマンマシンにパターンを覚えさせる問題とほとんど同じである。そこで、ボルツマンマシンで使われる学習方程式をこの問題に焼き直せば、モノマー配列を決めるための方程式が得られる。ちなみに、有限温度での設計方法としてこれまでに提案されているものとしては、前述のKurosky & DeutschによるものとSeno et al.

によるものがある。両者とも有限温度での自由エネルギーを求めて、simulated annealingによる最適化を行なう方法であり、違いは自由エネルギーの計算法にある。一方、我々の方法は、simulated annealingを用いず、学習方程式によって最急下降的に解を求めようとするという点と、自由エネルギーではなくエネルギーの熱平均を用いるという点で他の方法とは異なる。一般にはモンテカルロ法で自由エネルギーを求めるのはエネルギーを求めるのに比べて難しいと考えられているので、エネルギーを用いるほうが計算の面では有利と思われる。また、simulated annealingと最急下降を比べると、前者は充分にゆっくり温度を下げれば必ず解が見つかるのに対し、後者は初期値によって解に達しない可能性がある。逆により初期値をとれば最急下降のほうが素早く解を見つけると期待できる。その意味で、問題によって向き不向きが別れるかもしれない。

この方法を用いて、正方格子および三次元立方格子上のHPモデルについて計算を行ない、いくつかの実例では確かに解を見つけられることが確かめられた。

古典多体系シミュレーションの並列性

—— 計算物性理論における並列計算機とその効率 ——

東京大学工学系物理工学専攻 伊藤伸泰

スーパーコンピューターと呼ばれる計算機がどのようなものになるのかを模索して、1980年代後半には様々な計算機が現れた。そして、現在、スーパーコンピューターは、ベクトルパラレルアーキテクチャへと収束してきたように見える。その過程で、RISCはCISCに近付いてきた。簡単なプロセッサができるだけたくさんつないだ並列計算機よりは、高速なプロセッサをほどほど数つないだものの方が使いやすく経済的であるということが明らかとなった。現在、計算機のハードウェアがひとまず落ち着いた状況にある中でその活用が問題となっている。

物性計算と並列化

並列化とは、複数の計算機を使って一つの計算を実現することである。アルゴリズム論からすると、如何にして上手なmicro-taskingを実現するかが興味深い。しかし、実際の問題では、macro-taskingによる並列化の方が効率が良いことが多い。特に、trivial parallelization(あるいは、data parallelization)は、すべてのprocessorを効率100%で活用する無駄のない理想的な並列アルゴリズムである。

モンテカルロシミュレーション、分子動力学シミュレーションは、物性計算の重要な一分野である。こうした問題は並列処理が容易であり、ベクトルパラレル計算機が特に有効な問題である。例えば、動的臨界現象を調べた最近のイジングモンテカルロシミュレーションでは、同じ系に対して

異なる乱数を使うことにより、 10^4 ～ 10^6 回の独立なシミュレーションを行なっている[1, 2]。さらに、このシミュレーションアルゴリズムは、100%ベクトル化されている。

これらのことから、物性研究用の並列計算機は、trivial parallelizationによる並列処理に特に留意して運用するべきであろう。すなわち、少数のmulti-processor jobよりも多数のsingle-processor jobに重点をおくことが望ましいと考える。

物性計算の効率

個々の計算の効率が良くなっても、計算機は必ずしも有効に活用されているとは言えない。計算結果を無駄なく研究に反映させることが必要だからである。そもそもその研究結果が有用かどうかという根源的な問題の前に、計算物理としての効率を良くする余地はまだまだあるのではないだろうか。

物性研のVPPの様な計算機を使えば、一日にして $1000h \cdot GFLOPS$ の計算も可能ではある。それ故、膨大な無駄使いをする危険も大きい。そもそも効率の悪い計算を何百時間も行なうのは論外としても、(計算機の意味で)効率の良い計算をしていても慎重な研究を行なわないと折角のスーパーコンピュータ(とそれに関わるお金、人手)とを活かせなくなってしまう。

こうした無駄ができる限り防止するために、論文執筆および論文査読にあたっては、論文中で使用した計算資源がわかるように書かれているように留意すべきであろう。例えば、この図のこの点は、どういう計算をどういう計算機でどれだけ行なったかがわかるようにしておくのである。こうすることにより、その研究における資源の利用効率が見えるようになると同時に、将来、計算手法やアルゴリズム・計算機の研究に対しても有用な資料となるであろう。

[1] N. Ito, Physica A192(1993) 604, A196(1993) 591, Intern. J. Mod. Phys. C4(1993) 1131.

最適化ポテンシャル法によるバンド計算.

正しい交換項および静的近似でのRPA相関項を用いた計算

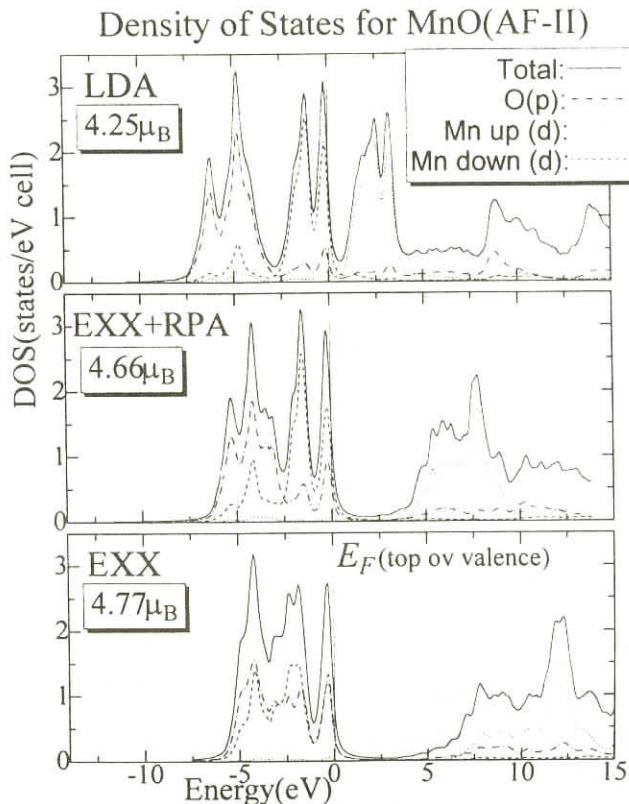
阪 大 理 小 谷 岳 生
赤 井 久 純

密度汎関数の枠組みにおける、Self-consistentな電子状態計算の新しい方法を開発した。ここでは、交換相関項には、LDAを一切用いず、正しい交換項(exact exchange)およびRPAの相関項を用いている。正しい交換項 E_x とは、Hartree-Fock(HF)法における交換項と同じ形をしたものである。与えられたlocalな一体有効ポテンシャル V_{eff} に対して、固有値および固有関数を求めることができるが、それを用いて、 E_x を計算することができる。ここでの E_x とは、このように

して、あくまで V_{eff} (もしくはそれと一対一に対応する電子密度)の汎関数として取り扱われるべきものである。RPAの相関項は、 $E_c^{\text{RPA}} = -i/2 \times \text{Tr}[\log(1-vD^0) + vD^0]$ と表わされる量である。ただし、 v はクーロン相互作用、 D^0 はLindhard誘電関数を表わす。 D^0 は、やはり固有値および固有関数を通じて、 V_{eff} の汎関数であり、したがって、また、 E_c^{RPA} は V_{eff} の汎関数として取り扱われる。解くべき方程式は、全エネルギー=運動エネルギー+クーロンエネルギー+nucleusからのポテンシャル項+ E_x + E_c^{RPA} を最小にするように V_{eff} を決定するというものとなる。計算途中において、 E_c^{RPA} の V_{eff} による汎関数微分を評価する際、Screened Coulomb相互作用について、instantな緩和を仮定する(静的近似)。ここでは、Antiferro-IIのMnOに対する結果を図に示す(いまだ予備的結果であり十分な収束のcheckはしていない)。本結果はEXX+RPAで示されている。参考のためLDAの結果およびEXX(E_x のみを用いて計算した結果)も同時に示してある。占有および非占有dバンド間の交換分裂等の、実験(XPSおよびBIS)との一致は非常に改善されていることがわかる。

参考文献

T. Kotani, PRL **74** 2989 (1995); T. Kotani and H. Akai, PRB **54** 16502 (1996); T. Kotani, submitted to PRL, available from <http://ann.phys.wani.osaka-u.ac.jp/kotani/pap/papers.html>.



大きい系のFLAPW法による電子構造計算

大阪大学・産業科学研究所 播 磨 尚 朝

計算機資源の性能向上に伴い、フルポテンシャルによるLAPW法(FLAPW法)の電子状態計算を多くの系について実行出来るようになった。これにより、比較的対称性のよい系に関してもフルポテンシャルの効果でフェルミ面などの物理量の実験との一致は改善する場合がある事が解ってきた。[1]

FLAPW法では、収束に必要な対角化すべき行列の大きさ(変分の基底関数の数)はほぼ価電子数に比例しており、系の価電子数の5倍が目安となっている。単位胞に10個の原子がある系では、価電子数は100個程度であり、従って行列サイズは500程度となる。現在、700程度までの行列計算を必要とする系のFLAPW計算は研究室のワークステーションで実行可能である。実際、最近計算を行った系の9割以上はワークステーションを用いた。しかし、いくつかの興味ある系はそれより大きい。最近、計算を行ったLaFe₄P₁₂[2], LuYb₃As₃[3], LaCu₆は単位胞中にそれぞれ17個、14個、28個の原子を持ち、価電子数は101個、208個、300個となり、実際の計算を行った行列サイズは1055, 959, 1105である。これらの系では物性研のVPP500を用いてk点あたり500秒から1500秒の演算時間を必要とする。電子構造計算ではいくつかのk点を用いてポテンシャルを収束させる繰り返し計算を行うが、このk点数は少なくとも8、多い場合は50位になるので、これらの系では1回の繰り返し計算が3時間から7時間となっている。従って、現状の並列化しないプログラムを用いては、これより大きい系の計算は難しい。

そこで、並列化によって高速化がどの程度期待出来るかを調べた。繰り返し計算では、1.立ち上がり、2.複数のk点による行列要素の生成と対角化、3.ポテンシャルの作成等の3段階の計算がある。以前は、全エネルギー計算も行っていたが、この計算は非常に多くの演算時間を必要とするので、通常は行っていない。系の対称性が低い場合は1と3に要する時間が増えるが、その場合はk点の数も増えるので、2に要する時間は、系の対称性によらず全体のほぼ9割を占めている。すなわち、k点による並列化の効果は大きいと期待出来るので、現在、並列化の作業を行っている。ただし、主記憶装置や2次記憶装置の容量の制限のために並列数は4程度が適当と予想している。さらに系が大きくなり、超格子等の計算を行う場合は、一つのk点での計算の並列化も必要となる。この場合、対角化より行列要素の生成の部分が演算数がはるかに多く、将来はこの部分の並列化も必要であると思われる。

[1] 最近の結果としてLaCu₂がある。 M. Abliz, P. Ahmet, D. Aoki, Y. Kimura, S.K.

Dahr, R. Settai, Y. Onuki and H. Harima; J. Phys. Soc. Jpn **66** (1997) 194.

[2] H. Harima; submitted to the Proceedings of the ICM '97, Cairns.

[3] H. Harima; in preparation.

第一原理および大規模分子動力学シミュレーションによる液体金属の研究

広大総合科 星野公三

下條冬樹

広大生物圏 宗尻修治

仙田康浩

高温・高圧下、特に臨界点近傍における液体金属の構造と電子状態の研究は、金属・非金属転移と関連して興味がある。本講演の目的は、(1)第一原理分子動力学シミュレーション法によるイオン配列と電子状態の相関の研究、および(2)並列計算による大規模分子動力学シミュレーションを用いた臨界点近傍の液体金属の構造の研究についての我々のグループの最近の研究について紹介することである。

(1) 第一原理分子動力学シミュレーション

液体金属は古典的粒子であるイオンと量子力学的粒子である電子とからなる2成分系である。イオン配列と電子状態は互いに強く相関を持つとともに、伝導電子の密度に依存する。この系を研究するには、各時刻におけるイオン配列と電子状態を同時に決めることができる第一原理分子動力学シミュレーション法が有効である。我々は飽和蒸気圧曲線および融解曲線に沿った液体Rbのイオン配列と電子状態の密度依存性について第一原理分子動力学法で調べ、多くの新しい知見を得た。計算した物理量は、動径分布関数、電子密度分布、状態密度、電気伝導度などである。下図に示すように、三重点近傍では電子密度分布が比較的均一であるが、高温・高圧下では、イオン配列の空間的ゆらぎの大きさを反映して、電子密度分布にも大きなゆらぎが見られ、電子状態が局在する傾向が見られる[1]。

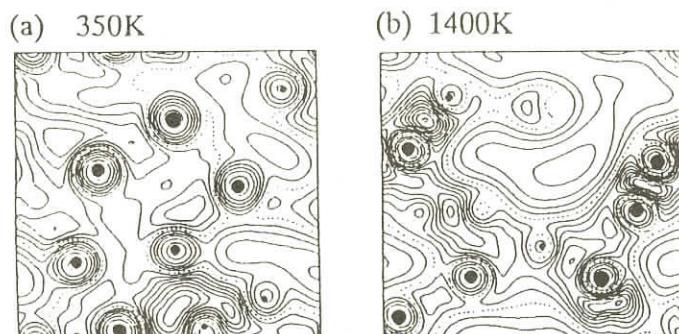


Fig. 1. Contour plots of the valence electron density distribution $\rho(r)$ at (a) 350 and (b) 1400 K. The contour lines are drawn in interval, 2×10^{-4} a.u. The dashed lines mean $\bar{\rho} = 1.5 \times 10^{-3}$ a.u. and 1×10^{-3} a.u. at 350 and 1400 K, respectively.

(2) 大規模分子動力学シミュレーション

臨界点近傍の液体金属の構造は、長波長の密度のゆらぎにより特徴づけられる。これを定量的に扱うには、大規模系のシミュレーションを行う必要がある。現在の第一原理分子動力学シミュレーションのアルゴリズムおよびコンピュータの性能では、大規模シミュレーションは困難である。そこで、我々は古典的分子動力学シミュレーションを、並列化アルゴリズム(粒子分割法)を用いて、100万個の粒子からなる大規模系に適用し、長距離相関を研究している。有効イオン間相互作用は積分方程式理論とシミュレーションを組み合わせた予測子・修正子法により、実験データから逆問題を解いて求めた[2]。講演では、臨界点近傍の液体Hgについての計算結果を示した。

本講演では、液体金属の構造と電子状態の研究において、第一原理分子動力学法および大規模古典的分子動力学法がいかに有効であるかを示した。今後の課題は、並列化などのアルゴリズムの改良により、計算時間を短縮し、多数の粒子系のシミュレーションを可能にすることにより、多様な体系の多様な物性を研究することである。そのためには高性能の並列計算機の利用が不可欠であり、物性研の計算機環境の更なる向上に期待したい。

- [1] Shimojo,F., Zempo,Y., Hoshino,K. and Watabe, M.:Phys.Rev. B52(1995)9320,
J.Non - Cryst.Solids 205 - 207(1996)893, Phys.Rev. B55(1997)5708 .
Hoshino,K. and Shimojo, F.:J.Phys.:Condens.Matter 8(1996) 9315.
- [2] Munejiri,S., Shimojo, F., Hoshino,K. and Watabe, M.: J.Phys. Soc.Jpn. 64(1995)344,
J.Non - Cryst. Solids 205 - 207(1996)278, J.Phys.:Condens.Matter 9(1997)3303.

超イオン伝導性発現に対するp-d電子状態混合の役割

新潟大・理 家 富 洋

長谷川 彰

新潟大・自然 菊 池 英 明

ハロゲン化物やカルコゲン化物の超イオン導電体において、 Li^+ や Na^+ に比較して大きいイオン半径をもつ Ag^+ がしばしば高速の可動イオンとなる実験事実は特異的である。これまで行われた超イオン導電性に関する研究は、大部分、固体構造論的なものであり、電子状態特性が深く関与するそのような基本的な課題に対して無力である。本研究の目的はバンド計算に基づく電子論的考察からそのような銀イオンの高速拡散機構にアプローチすることである。特にp電子から成る価電子帯をもつ母体副格子中における銀および銅イオン(d閉殻)とアルカリ金属イオン(sp閉殻)の閉殻構造の違いに着目し、超イオン伝導性発現に対するp-d状態混合の役割を明らかにする。

バンド計算の容易さから結晶対称性の高い逆萤石構造を基盤構造としてもつ超イオン導電体、

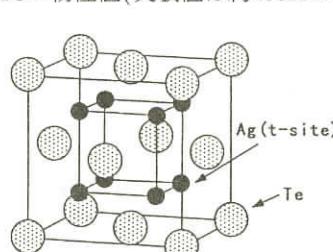
α -Ag₂Teを例に取り上げた[1]。逆萤石型構造の銀および銅テルライドならびに対応したアルカリ化合物に対して、線形化APW法を用いることにより、その電子状態の計算を広範囲に行った。着目する α -Ag₂Teについては、バンド理論が表1に示すように様々な実験値(格子定数、バンドギャップ、電子及びホールの実効質量)をほぼ定量的に説明できることを確認した。また電子状態密度についても計算と測定の結果はよい一致を示す。得られた知見を集約すると、1) 従来の予想に反し、価電子帯を構成するAgのd状態とTeのp状態との混合は弱い(dバンドを仮想的にシフトすることにより、状態混合の強弱を評価)、2) 伝導体帯はAgおよびTeのs状態から構成され、広がった状態にある、3) 銀テルライドの半導体的性質を再現するために、APW球の大きさを変的に決める(エネルギーを最小化する)ことが重要、などを明らかにした。知見1から、固体電解質を拡散するAgのd電子は孤立的に振る舞い、むしろ「弱いp-d混合」が超イオン伝導の本質的な発現機構と考えられる(銅テルライドでは反対にp-d混合が強いことを同様の計算で示した)。さらに種々のテルル化物における金属原子拡散の活性化エネルギーを逆萤石型構造Fm3m(基底状態)とF43m構造(遷移状態と仮定)とのエネルギー差(可動イオン1個当たり)から評価した。図1に結晶構造、表2に計算結果を示す。銀イオンが他のイオン種に比べて小さな活性化エネルギーをもつことが、理論的にも再現されることが分かる。

今後、可動イオンの移動を模擬した種々の仮想的な結晶構造を考え、電子状態とイオン・ダイナミクスとの相関を包括的にかつ定量的に明らかにすることを計画している。しかし、活性化エネルギーが計算精度に鋭敏に依存するため、また結晶対称性が大きく低下するために、取り扱うAPW基底の数が格段に増大する。そのような大規模計算を実行可能にするため、メモリーの効率的利用や並列計算化などのプログラム改良を行う。

[1] H. Kikuchi, H. Iyeotmi and A. Hasegawa, J. Phys.: Condensed Matter, in press.

物性量	計算値	実験値
$a(\text{\AA})$	6.80	6.58
$E_g(\text{eV})$	0.2	0.1
m_e^*/m_o	0.039	0.050-0.069
m_h^*/m_o	1.3-2.1	1.0-2.0

表1: α -Ag₂Teの物性値(実験値は約400Kのもの)

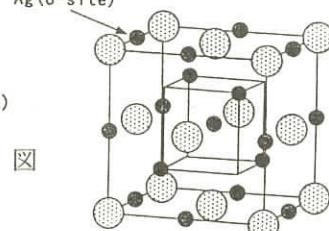


Fm3m

図1: 結晶構造

物質	計算値	実験値
Ag ₂ T	0.153	0.1-0.2
Cu ₂ Te	0.197	—
Li ₂ Te	0.251	—
Na ₂ Te	0.335	—
K ₂ Te	0.357	—

表2: イオン拡散の活性化エネルギー(eV)



F43m

L D A計算の表面への応用：水素化シリコン表面上でのSi飛来原子の特異な振舞い

筑波大学物理学系 Sukmin Jeong
押山 淳

密度汎関数法に基づく第一原理計算は様々な対象について精力的に行われてきた。半導体表面の構造と電子状態、さらには半導体エピタキシャル成長の原子素過程の解明に向けた計算は、第一原理計算のひとつの重要な応用例といえよう。最近我々は、水素化シリコン上でのSi飛来原子(adatom)の興味深い振る舞いを、局所密度近似(Local Density Approximation: LDA)計算で見いだした。本研究会ではその一部を報告した。数値計算に用いたコードは、N E C基礎研究所、筑波大学物理学系において開発してきた、ベクトルマシン用にチューンアップされたものである。従って本計算は並列計算ではない(最近開発された並列計算用コードのパフォーマンスについては本研究会の杉野修氏の報告を参照されたい)。計算法は原子核、殻電子をノルム保存擬ポテンシャルでシミュレートし、価電子同士の相互作用は密度汎関数法の局所密度近似で取り扱い、電子の自由度、原子核の自由度についての全エネルギー最小化は共役勾配法を用いたものである。

Siは現在の半導体テクノロジーを支える根幹物質である。その基板上での様々なエピタキシャル成長によって多くの微細構造が形成されている。

エピタキシャル成長の際には多くの場合、意図的にあるいは意図せずに水素原子が導入される。従って水素で覆われたSi表面上での飛来原子の振る舞いが重要である。実際水素を導入することによって、エピタキシャル成長後の薄膜のモフォロジーは大きく変化する。今回のL D A計算によって明らかになったことは第一に、水素化 Si(100)表面上に飛来したSi原子は基板に吸着している H 原子を置換して、直接に基板Si原子とボンドを形成し、置換された H 原子は飛来原子とボンドを形成することである。驚くべきことに、この置換吸着反応にはエネルギー障壁が存在しない。これは水素原子の小ささとIV族原子の共有結合性の高さ、の 2 点から解釈し得る。この無障壁置換吸着は水素原子がエピタキシャル成長におけるサーファクタントとして働くことを示唆している。第二に、飛来Si原子の拡散機構について報告した。水素被覆率が 1 よりもはるかに小さい段階で、拡散の活性化エネルギーは、清浄表面の場合に比べて増大することがわかった。これは水素化した基板Siダイマーが拡散のバリケードとして働くためである。また被覆率が 1 の場合は、飛来Si原子の拡散は、複雑な水素との結合形成、解離反応を伴うものであることがわかった。また水素の被覆率が 1 を越えると、拡散障壁が飛躍的に増大することがわかった。これらの結果と成長薄膜のモフォロジーとの関連は非常に興味深く、研究会でも議論された。

(並列計算機を用いた)
「水／半導体界面」の第一原理分子動力学計算の試み

東 大 理 赤 木 和 人
塚 田 捷

分子の吸着した半導体表面の第一原理的な取り扱いは近年その数を増し、解離吸着・化学反応の初期過程など、種々の興味深い結果を与えてきている。一方、我々の身の周りには「ウェットな界面」も多く、同じ分子が吸着していても「ドライな界面」との差異はそれ自体が面白い問題であり、半導体デバイスの製造プロセスなど応用としても重要である。だが、「ウェットな界面」を第一原理的にストレートに扱えば計算量が膨大になるためこの分野はまだ発展途上であり、工夫の余地も多い。そのひとつの試行形として、我々は既存の第一原理計算法に対する拡張の形でのアプローチを試みている。

近年、計算化学の世界でも溶液系での第一原理計算が活発に試みられるようになり、構造のある極性分子からなる水のような液体中の化学反応の取り扱いが、エネルギー勾配法に基づいて議論されるようになっている。中でも、天能らは液体を原子種毎の2体相関関数で記述し、これを溶液中に掘ったキャビティー中の第一原理系(MCSCF)と、部分電荷の誘起を通してセルフコンシスタンントに結び付けるという方法で定量的な議論ができるフォーマリズムを提案した[1]。

そこで用いられている液体論による記述は、平田ら(1981)がRISM方程式とHNC近似を組み合わせて導き出した球対称のフォーマリズムであるが、より大きく複雑な形をした分子を取り扱うべく他のいくつかの方法も提案されており(Beglov 1996他)，これらを手掛りにして平面的な界面における記述を考える。

他方、液体部分を全て第一原理的に扱う必要のないことは予見されており、吸着第1層目の分子は量子論的に取り扱う必要性があるが第3層から外は古典的な取り扱いでよいことが水素終端シリコン上での水の吸着の計算から示唆されている[2]。そこで、表面第2層までの水は第一原理系として、それより外の水は第一原理的系に対するセルフコンシスタンントな場として扱う方針をとることにすると次のような計算の概略が得られる。

1. 表面を記述するスラブと、その上の2層程度の水は第一原理的に取り扱い、まず真空中で電子状態を計算して各原子上の電荷を求める。
2. その結果をもとに、液体論に基づき外側の液体の水を記述する2体相関関数群を3次元メッシュ上で反復法を用いて数値的に解く。
3. 得られた相関関数から第一原理系の各原子にポテンシャルを作り、その条件下で電子状態を計算して各原子上の部分電荷を求める。
4. 2と3をセルフコンシスタンントになるまで繰り返し、力を計算して原子を動かす。

この方法を用いれば、既存の第一原理計算プログラムに対して、パッケージを追加する形で実装できる利点があり、計算の収束性や時間発展の可能性、追加部分の並列実装などを現在検討している。

参考文献

- [1] S.Ten-no, F.Hirata and S.Kato, J. Chem. Phys., **100**, 7443 (1994)
- [2] C.P.Ursenbach and G.A.Voth, J. Chem. Phys., **103**, 7569 (1995)

シリコン結晶中水素不純物の量子状態の研究 —第一原理経路積分分子動力学法によるアプローチ —

東京大学物性研究所 三宅 隆
荻津 格
常行 真司

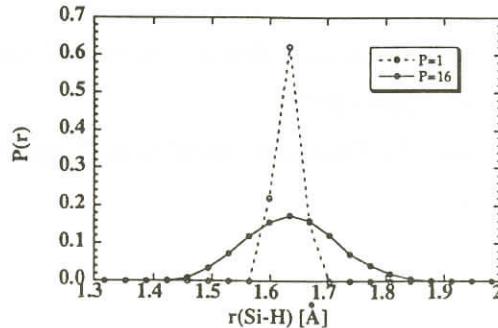
シリコン結晶中の水素不純物は、不動態化の原因として応用上重要な問題である。実験的に水素原子の観測が困難なため、第一原理的手法による物性予測が重要な位置を占めており、断熱ポテンシャル面の概形や、いくつかの原子配置に対する電子状態などが明らかにされてきた。しかしながら、水素原子の軽さに起因した量子効果が低温で重要になると予想され、安定状態ですら未解明な部分が多い。水素不純物の量子状態を調べるために、第一原理計算に核の量子性を考慮したミュレーションが必要になるが、その一つの方法として近年開発された第一原理経路積分分子動力学法[1]が挙げられる。この方法では、全ての核が同等に量子的に表現される。そのため、不純物の各位置に対して周りの格子を固定したり、逆に完全に緩和させる近似を越えた取り扱いになっている。

最安定状態と考えられている水素原子のBC状態のミュレーションを行なった。温度50Kに対して核を古典的に扱った通常の第一原理分子動力学計算と核を量子的に取り扱った上記の計算結果を比較すると、核の量子性のためシリコンと水素の距離の分布関数が大きく広がる様子が見える(図)。この量子系に対するミュレーションでは、ファインマン経路を表す離散点数が16と少ないため量子効果を過小評価しており、実際にはさらに分布が広がることが期待される。ただし、経験ポテンシャルで見積もった範囲では、そのずれは古典系と量子系の結果の差異に比べて小さかった。

近年、水素原子の軽い同位体とみなせるミュオニウム(質量は水素原子の約1/9)を用いた実験が高感度の測定手段として精力的に行なわれているが、ここでは水素原子よりさらに強くなる量子効果が注目されている。この量子状態を取り扱うためには、広い原子配置空間でエネルギー面を正確に記述する高精度な第一原理計算や、強い量子効果を表現する多数の離散点が必要で、計算が非常に大規模になる。そのため、多重並列化など大規模計算に向けた準備が必要と考えられるが、それ

は今後の課題である。

[1] D.Marx and M.Parrinello, Z. Phys. B95, 143 (1994).



Fe薄膜間に働く交換力の第一原理計算

北大触媒セ 中村浩次
広大理 小口多美夫
東京学芸大教 長谷川秀夫
北大工 末岡和久
北大触媒セ 早川和延

北大工, CREST「スピニと計測」研究チーム(JST) 武笠幸一

原子レベルで表面の磁性を観察する手段として、走査トンネル電子顕微鏡(STM)や原子間力顕微鏡(AFM)を基にした方法が期待される。我々はAFMを拡張した交換相互作用力顕微鏡(EFM)¹⁾の開発を目指し、以下の検討を行った。これは探針・試料間に働く交換相互作用力を利用するもので、現在、実験技術開発に先立ち、力の大きさを評価する目的で、局所密度近似とFLAPW法を用いた第一原理計算から探針・試料間に働く交換相互作用の評価を進めている。その第一ステップとして、探針・試料系を、2枚の3原子層からなるbcc Fe(001)薄膜表面を接近させた薄膜・薄膜系のモデルで検討した。ここで、薄膜表面の原子が他方の薄膜表面における原子の空隙に位置する場合についてまず計算を試みた。

図1に、全エネルギーおよび薄膜間に働く交換相互作用エネルギーの薄膜間距離依存性の結果を示す²⁾。横軸の薄膜間距離dはバルクFeの格子定数a(=2.83 Å)で規格化した値で、d/a=0.5はバルクにおける層間距離に相当する。薄膜間距離d/aが0.5から大きくなるとP(スピニが平行)およびAP(スピニが反平行)とも全エネルギーが大きくなる。EPとEAPの差である交換相互作用エネルギーE_{ex}が正の値を示し、両薄膜の磁化方向が平行な場合の方が安定である。また、d/a=0.5~0.8

と1.2~1.6で交換相互作用エネルギーのピークが見られる。このエネルギーに起因する交換相互作用力は $d/a=0.5\sim0.8$ の領域で $10^{-9}N$ のオーダーで、 $d/a=1.2\sim1.6$ の領域では $10^{-10}N$ であることがわかった。現在のAFMの力の測定感度が $10^{-12}N\sim10^{-13}N$ であることから、交換相互作用力の測定が可能であることがわかった。

参考文献

- 1) K. Mukasa, H. Hasegawa, Y. Tazuke, K. Sueoka, M. Sasaki, and K. Hayakawa, Jpn. J. Appl. Phys. 33, 2692-2695 (1994).
- 2) K. Nakamura, H. Hasegawa, T. Oguchi, K. Sueoka, K. Hayakawa, and K. Mukasa, submitted to Phys. Rev. B.

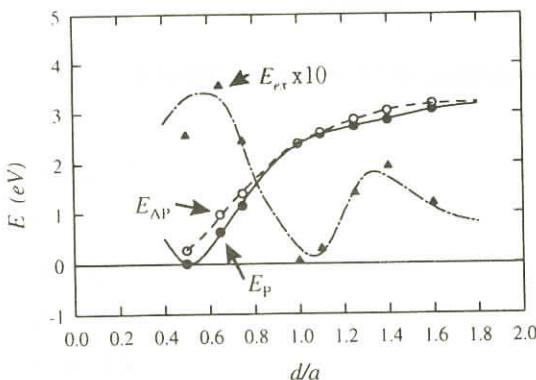


Fig.1. Total energies in the P (EP:filled circles) and AP (EAP:open circles) configurations, and the exchange energies defined by $E_{ex}=EAP-EP$ (triangles) as a function of the film-film separation d/a , where a is the lattice constant of bulk Fe. The reference energy for EP and EAP is the total energy for the P configuration at $d/a=0.5$.

「VPP500, SR2201による大規模第一原理分子動力学計算」

東京大学物性研究所 荻 津 格

第一原理計算手法は、実験値などの経験パラメーターを用いずに物質の電子状態や構造を計算でき、原理的には適当な元素の組合せのみを入力として安定な(結晶)構造と電子状態を求めることが可能である。このため、物質設計支援のための道具としての重要性が認識されている。しかしながら、

今のところそのような試みが真に成功したといえる例は数少ない。その一つ理由として、計算機の能力の不足から、1)扱える原子数が十分ではない、2)原子座標の配置空間内を広範に調べる必要があるが(一種の大域的最小値問題)，それが可能なだけのCPU時間を確保することができない，といったことがあげられる。これらの問題を解決するためには、方法論そのものを改善することも重要であるが、大きな数値演算能力と大きなメモリー空間を持ちうる分散メモリ型並列計算機を有効利用する技術の確立も重要である。そこで、第一原理計算プログラムを、1)ベクトル並列計算機 Fujitsu VPP500上で、VPP fortranという並列言語を用いた並列化及び並列最適化、2)超並列計算機 Hitachi SR2201上でremote DMAを用いて並列化及び並列最適化、をそれぞれ試みた。どちらの場合も、配列の分割方法は同じで、バンドインデクスによる並列化を基本としている。両者の違いは、VPPでは、VPP fortranという並列言語によって並列プログラムを作成しているが、SRではremote DMAというメッセージパッキングライブラリを利用していることである。このため、SRの方が並列最適化の自由度は高くなるがそれと同時に、性能を引き出すための知識と技術が要求される。現状では、VPP fortranによる並列最適化はほぼ終了しているが、SRに関しては、転送アルゴリズムの大枠だけ最適化されている。その結果、数十プロセッサー程度までであれば、同じ分割方法で同程度の並列効率が得られることが分かった。今後は、SRに関しては、以下の点を改善することにより、より高い並列効率を引き出す努力をしたい。

- ・大きな配列(電子密度)のglobal sumは転置転送アルゴリズムを用いる。
- ・少ないデータ量(シュミット直交化中のglobal sum)の転送では、tcw再利用型を用いる。
- ・バリア同期の利用をやめて、shuttleアルゴリズムにする。

また、多次元並列化などにより、より多くのプロセッサーを高い効率で利用する新しい並列化アルゴリズムの開発にも挑戦したい。

なお、VPP fortranにおける並列最適化技術に関しては、

<http://strider.issp.u-tokyo.ac.jp/~ogitsu>

で公開中。また、SRにおける並列化に関しては、東京大学大型計算機センターのセンターニュース9月号に掲載される予定。

第一原理計算プログラムのNEC-SX4(共有メモリー)における並列化について

金材技研 宮崎剛

昨年3月に導入された金属材料技術研究所の材料数値シミュレータ(NEC-SX4:20CPU、主記憶8ギガバイト(共有メモリー))を用いて行われている並列計算について報告を行った。特に、富士通のVPP500(分散メモリー)用に並列化された第一原理電子状態計算のコードを、SX4に移植し

たときに具体的に行った作業について報告した。今回報告した並列化は指示行をユーザーが加えることによって行っている。SX4の場合、副プログラムの引き数に入っている変数は、全プロセッサが参照できる共通データとなっている。そのために、work配列として副プログラムに渡される変数を使用プロセッサ台数分だけ用意し(配列の次元を1つ加える)、プロセッサによるDOループを加えるといった、コードの書き換えが何箇所が必要であった。ただし、これらの作業は並列化対象の部分だけ行えばいい。また、並列化効率がVPPとSX4で異なるところがいくつかあったために、並列計算を行っている部分が異なっているところがいくつか存在する。

計算効率については、テストとして二つの系を行った。一つは、 $\beta - (\text{CH}_3)_4\text{N}[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$ という有機固体で単位格子内に原子を102個含む。もう一つはSi(100)4x8表面で原子を324個含む系である。時間のかかる部分は二つの系でかなり異なっている。前者は、1, 8, 20CPUで、それぞれ1.336, 7.498, 14.635GFLOPSという結果を得た。後者では、1.297, 9.207, 19.869 GFLOPSとなっている。ただし、これらは計算を始めるための前処理を含んだデータである。並列化すべき部分で実経過時間を比較すると、8, 20CPUを使うと、前者でそれぞれ6.2倍, 11.6倍、後者では、7.3倍, 15.9倍の並列化効率となっている。今回テストとして行った系は、両者とも20CPUで計算を行うには少し小さな系(使用メモリーも両者とも2ギガバイト以内)である。両者とも8CPU程度で計算を行う際には、十分な並列化効率が得られていると考えている。(もちろん、まだ改善の余地(私の努力不足の部分)は残っている。)

まとめると、SX4固有の問題(本文では省略したが、講演で述べた)がいくつか存在するが、SX4においてもかなり有効な並列計算が可能であることを示したつもりである。特に共有メモリーということによる、メモリーの節約が可能なこと、プログラムの繁雑さを少なくできることなどの利点は、ごく普通の一般ユーザーである私にとって助かることが多かった。また、VPPとの比較では、1CPUの速さはカタログ性能以上の速さの差を示した。ただし、並列化効率は今のところVPPよりも悪くなっている。原因は私個人の努力不足もあるが、並列計算の立ち上がりの遅さなどの問題もあると考えている。この部分に関しては、今後の改善を望んでいる。

PCクラスター上での第一原理分子動力学計算の並列化

N E C 基礎研究所 杉 野 修

宮 本 良 之

飯 島 智 德

N E C 情報システムズ 金 澤 英 寿

齐 藤 峰 雄

[始めに] …パソコン(PC)の性能が飛躍的に向上し、ネットワーク網も太く快適になってきた今日、それらを活用して大規模計算をしたいというのは自然な発想であろう。現在、数値計算に適したPC一台の性能は実測で100-300MFlops、しかも値段は100万円を大きく下回っている。1000万円で数十台揃えればベクトル機を凌ぐ性能が得られる勘定になる。これは、小規模研究所や投資効率を重視する私企業だけでなく24時間マシンを専有したい研究グループにも大変魅力的なものである。この状況下、大衆機として普及しているWindowsNT搭載のDEC α パソコンをfast Etherでつなげたクラスターを試作し、実際の第一原理計算でどの程度のパフォーマンスが得られるかを調べることは重要な意義がある。

さて、PCクラスターは超並列機と異なり、超大規模計算を実現する道具ではないことは強調しなければならない。fast Ether等の既存のネットワークを使う限り通信速度(12.5MByte/s)は超並列機(300-400MByte/s)の数十分の1であるので、多数のCPUを用いた計算を行うと完全に通信律速になってしまうからである。ところが一方、カーラ・パリネロ法に代表される平面波基底擬ポテンシャル第一原理計算はそもそも並列化に適した計算法であり、数十CPUクラスの中規模計算までなら、かなりのパフォーマンスが期待できる。

[結果] …表1は、アモルファスカーボンの電子状態計算を用いて並列化効率を実測した結果である。計算には64原子からなる立方体のスーパーセル、ガンマ点のみを用いている。並列化のアルゴリズムとしては最も標準的なものを採用している。すなわちFFT及びnon-local擬ポテンシャルの計算部分は各バンド毎に分散処理をし、規格直交化は一度波動関数をg-vectorの大きさによってプロセッサー間で再分配してから行うというものである。表1の、「重複計算」はoverlap matrixからラグランジュ未定定数を決定する演算と電荷密度からポテンシャルを決定する演算からなる。

表からは、8CPUになると効率は半分ぐらいに落ちてしまうように読みとれるが、8倍のメモリーサイズを最大限に利用してFFT等における重複した計算をなくすと、並列化効率は向上して見かけ上70%程度になる。通常の計算は4点程度のk-vectorを用いて計算するが、k-vectorに関する並列化効率はほぼ1なので、この結果は $8 \times 4 = 32$ CPUで見かけの効率70%が得られることを意味する。(また、もし絶縁体物質にのみ提要できる従来の規格直交ルーチンを用いると「重複

計算」は数分の1に経るのでさらに並列化効率は向上する。)

[結論] …20-30台ぐらいまでならかなりの並列化効率を維持でき、ベクトル機並の性能を得ることが可能である。

表1 PCクラスターを用いた第一原理計算における並列化効率

	分散処理	重複計算	通信時間	合計	
1 CPU				106.5s	
4 CPU	24.0s	10.5s	2.7s	37.2s	並列化効率72%
8 CPU	12.0s	10.5s	4.1s	26.6s	並列化効率50%

CP - PACS上でのlattice QCD 並列計算

筑波大学・物理学系 宇川 彰

QCD(量子色力学)とは素粒子の強い相互作用の基礎理論であり、スピン1/2のクォーク場とスピン1のグルオン場を基本自由度として構成されている。QCDは漸近自由性、即ち短距離では有効結合定数が対数的にゼロに近付き、逆に長距離では、結合が強くなる性質を持つ。このために、ハドロンの低エネルギーでの力学を解析的に解くことは極めて困難であり、それに代わって虚数時間Feynman経路積分に基づく時空格子上のQCDの定式化、即ちlattice QCDに、モンテ・カルロ数值シミュレーションを適用する方法が有効な研究手段となっている。

CP - PACS(Computational Physics with Parallel Array Computer System)は、計算物理学の諸テーマ、中でもlattice QCDへの応用を中心課題の一つとして、筑波大学計算物理学研究センターに於いて1992年から5年間をかけて開発製作された分散メモリ型超並列計算機である。演算ノード2048個とI/Oノード128個が $8 \times 17 \times 16$ の三次元ハイパークロスバースイッチにより結合されている。各演算ノードには、クロック周波数150MHz・64bitデータに対する演算性能300MFLOPSのカスタムRISCプロセッサと64MByteのDRAMメモリが搭載されており、システム全体で、ピーク性能614GFLOPS・主記憶容量128GByteを持つ。各I/OノードにはRAID-5規格の分散磁気ディスクが結合されており、その総容量は1058GByteである。

並列計算から見たときのlattice QCDシミュレーションの特徴は、4次元時空格子を3次元演算ノード配列に自然にマップすることができ、近接ノード間のデータ交換が通信のほとんどを占めること、各演算ノードでの計算は、クォーク伝播関数の計算に必要な線形連立方程式の解を中心とする、大次元複素ベクトルに対するベクトル計算が主要な部分であることなどである。

通常のRISCプロセッサは、cacheメモリ容量を越えるような大次元データに対しては演算性能が極端に劣化する。CP - PACSのノードプロセッサは、浮動小数点レジスタ128本を備え、これら

をslide window機構とpreload/postsore命令を組み合わせて使用することにより、性能劣化の原因である主記憶からCPUへのメモリレイテンシの問題を解決し、さらにソフトウェアパイプラインングの手法により、RISCプロセッサでありながら効率の良いベクトル計算機能を実現している。

一方ノード間通信の高速化のためには、ピーク性能300MByte/secの通信スループットに加え、OSによるオーバーヘッドを避けるために、直接ユーザメモリ領域間でデータ通信を行なうremode DMA方式を実装し、これにより約3μsecという小さな起動レイテンシを持つ。

以上を始めとする設計上の配慮によりCP-PACSは、lattice QCD計算に対してピーク値に対する実効性能が50%という高性能を発揮している。CP-PACSは1996年4月に1024ノードで運用を開始し、同9月には2048ノードへの拡張が終了した。1996年7月からはlattice QCDに於けるquench近似でのハドロン質量精密計算・動的クォークを含む近似なし計算のテストなどが実行されており、現在物理成果が出始めている段階である。

CP-PACSについて計算物理学研究センターのホームページ

<http://www.rccp.tsukuba.ac.jp>

及び下記の参考文献に詳細な解説がある。

【参考文献】

情報処理学会誌第37巻1号特集：計算物理学と超並列計算機 - CP-PACS計画 -

並列化効率の予測と評価について

—— VPP500における行列解法並列化の場合 ——

理化学研究所計算科学研究室 住吉光介

戎崎俊一

最近になってベクトル並列型スーパーコンピュータが利用可能な状況になり、より大規模な問題を扱う事が可能になってきた。こうした並列計算機を用いる上ではそのアーキテクチャーに向いたアルゴリズムを採用しピーク性能を最大限引き出す努力が必要となってくる。研究会では理化学研究所の富士通VPP500/28を用いてブロック三重対角行列の直接解法を並列化して高速化チューニングを試みた例を通じて並列化の予測や評価の実際について報告した。

数値シミュレーションを行う上で線型方程式系を解く必要が生ずる場合は多い。ここでは係数行列がブロック三重対角型になっている場合を考える。楕円型偏微分方程式の差分近似から導かれる方程式系がその一例であるが、天体物理学分野における輻射輸送方程式を解く際にもブロック三重対角行列がしばしばあらわれる。現実的な輻射輸送問題においてはブロック行列が密でサイズも大きくブロック行列のならびも大きい場合が多く、大規模な計算能力を要するため既存のスーパーコ

ンピュータを使った場合でも問題の規模が限られてしまう場合が多かった。

我々は並列化のアルゴリズムとして巡回縮約法[1]を採用しこの問題のベクトル並列化を行った。この方法は密であるブロック行列を解く部分はベクトル化向きの解法アルゴリズムを採用し、ブロックが三重対角に並んでいる部分は巡回縮約法により並列化するというもので、ベクトル並列計算機に向いた手法になっている。我々はVPP500/28上で巡回縮約法によるベクトル並列コードを開発しその素性能を測定して、ブロック三重対角行列のブロック行列のサイズN、ブロック行列の数M、プロセッサー数NPEの依存性について調べる事により、扱う事ができる最大の問題規模や高性能を發揮するために最適な行列サイズの条件について調べた。この際、並列アルゴリズムに基づいて並列効率を理論的に計算しておき、実測値と比較する事により、期待される並列性能が達成されているかについても調べた。[2]ちなみにVPP500/28のピーク性能は単体(NPE=1)で1.6Gflops、最大(NPE=28)で44.8Gflopsである。

測定の結果、まず単体性能ではベクトル性能を生かしN=512程度で1.4Gflopsであった。並列化の第一歩はベクトルチューニングをとことん行って単体性能を可能なかぎりあげておくことである。次に並列性能ではプロセッサー数を増やして行った時、性能はほぼ比例して上がっており、NPE=16、N=512で14Gflopsに達し、理論的な並列効率による予測値とも良く一致した。特にプロセッサー数とブロック行列の数の間の依存性もよく再現し、高性能を発揮するための最適な行列サイズの理論的条件が実際に成り立っている事を明らかにした。これらの条件を満たした上でVPP500/28での最大性能としてはNPE=28、N=352、M=1023で31Gflopsが達成された。

こうした並列コード開発や高速化チューニングを通じて分かったのは、並列化を行う上では計算機特性にあったアルゴリズムを採用し、そのアルゴリズムによる並列化効率の理論的予測を行ったうえで、コードの実測性能が計算機ピーク性能や理論的並列化効率を達成しているかどうかを逐一比較しチェックしていくことが必要不可欠ということである。並列型スーパーコンピュータの性能をフルに生かしきって実際の物理現象の大規模計算を行うにはそうした努力が重要であると思う。

- [1] D. V. Anderson, A. R. Fry, R. Gruber and A. Roy: Computers in Physics, Vol. 3, No. 2, pp. 33-41 (1989).
- [2] K. Sumiyoshi and T. Ebisuzaki: Performance of the parallel solution of block-tridiagonal linear system on Fujitsu VPP500, (1997), submitted to Parallel Computing.

分散メモリ型並列コンピュータを用いた大規模転送行列の厳密対角化

東大物性研 藤 堂 真 治

古典スピン系の転送行列(もしくは、量子スピン系のハミルトニアン)の厳密対角化の手法は、物性物理における非常に有効な数値的研究手段の一つである。厳密対角化の方法は、モンテカルロ法などと比較すると、統計誤差がない、臨界緩和現象が見られない等の利点を持ち、二次元古典系、絶対零度の一次元量子系などの数値的研究においては、最も精密な結果を与える場合も多い。一方で、必要とする計算量、メモリ容量が系のサイズに対して指数的に増加するという致命的な欠点を持つ。特に、扱える系のサイズは、計算機のメモリ容量により制約される。

現在、最大級のスーパーコンピュータは、数十Gバイトから数百Gバイト程度のメモリ容量を持つが、それらは全て「分散メモリ型並列コンピュータ」であり、今後もその傾向が続くことに疑いの余地はない。この状況を鑑み、これら分散メモリ型並列コンピュータ上での厳密対角化を試みた。具体的には、二次元正方格子上のイジング模型(格子ガス模型)、および最近接のハードコア相互作用を持つ格子気体の転送行列の厳密対角化を、富士通VPP500、および日立SR-2201上で行ない、その性能を評価した。

厳密対角化で最もコストがかかるのは、状態ベクトルと転送行列の積の計算である。図1にこのベクトルと行列の積のスピード(積の計算一回あたりにかかる経過時間の逆数)を示す(上: VPP500、下: SR-2201)。いずれの場合も、系のサイズが小さい場合には、並列化に伴なう転送のオーバーヘッドのため、1プロセッサのみを用いた場合よりも性能は低下するが、系のサイズが大きい場合には、ほぼプロセッサ台数倍の性能が出ていることが読みとれる。すなわち、1024台のプロセッサを用いると、系のサイズが10(状態空間の大きさは1024倍)大きな系を扱えるが、その経過時間はほとんど変化しない。この計算で扱った最大の系のサイズは34、すなわち、転送行列の次元はおよそ $10^{10} \times 10^{10}$ 状態ベクトル一本の大きさは128Gバイトである。

また、ハードコア相互作用をもつ格子気体の場合には、転送行列の要素のうち、かなりのものが恒等的に零となるため、さらに大きな系を扱うことができる[1, 2]。しかし、並列化により各プロセッサの計算量にばらつきが生じるため、その並列化効率は理論的には最大でもおよそ 61.8% にとどまる。系のサイズが十分大きな場合(最大47)には、ほぼこの最大並列化効率を実現することができる。

参考文献

- [1] S. Todo and M. Suzuki: *Int. J. Mod. Phys.*, C7, 811 (1996)
- [2] S. Todo: preprint (cond-mat/9703176).

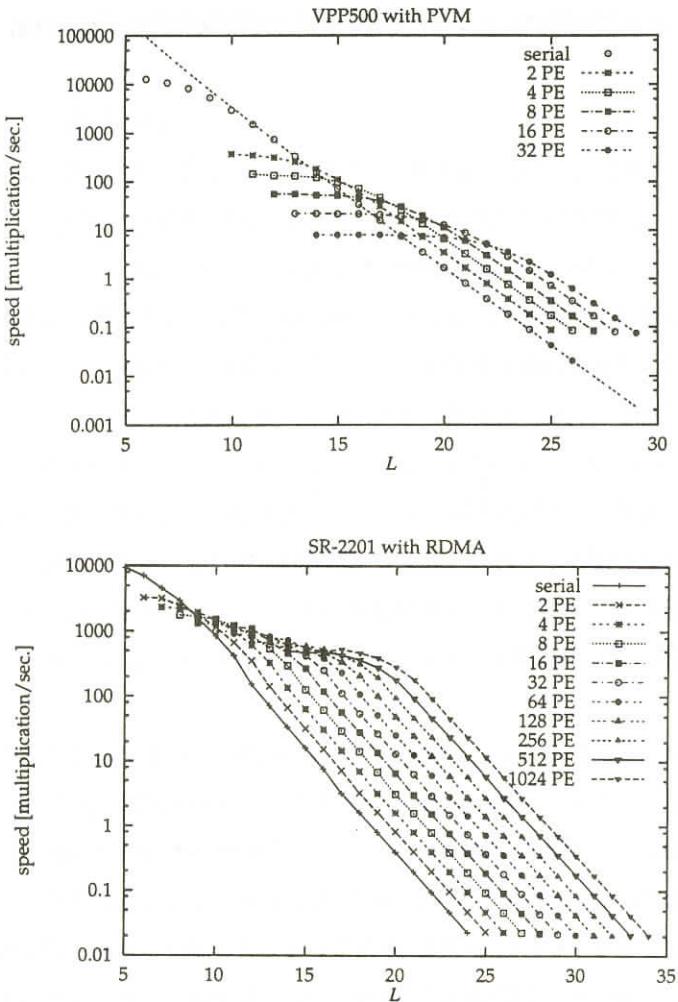


図 1

スピン・ギャップのある一次元系における数値計算

—量子モンテ・カルロ及びDMRG

東大・理 黒木和彦
青木秀夫
木村敬
有田亮太郎

我々は最近、2本鎖および3本鎖のハバード梯子模型、並びに第2隣接サイト間にもホッピングを持つ一次元ハバード模型($t - t' - U$ 模型)を調べた。

2本鎖のハバード梯子は、弱結合理論によるとスピン・ギャップが開き、キャリアーをドープすると超伝導相関が支配的になる。我々は有限系に対して量子モンテ・カルロ(QMC)計算を行い、 $U>0$ において確かに超伝導相関が増大することを見いたした。

一方、3本鎖は奇数本鎖なのでスピン・ギャップは開かず、超伝導にもならないと予想される。しかし、弱結合理論によると、スピン・ギャップの開いたモードと開かないモードが混在している。そこで、我々は種々の相関関数をBosonizationにより計算した。その結果、意外にも超伝導相関が支配的になることがわかった。また、このことは2本鎖の場合と同様にQMC計算でも確認できた。

$t-t'-U$ 模型もトポロジカルには一種の「梯子」と見なすことができる。実際、この模型の一体のバンドは二重井戸のようになっており、フェルミ準位近傍でバンドを線形化してしまう弱結合理論の範囲内では2本鎖梯子と同じである。ただしhalf-filledにおいては、梯子と違って二次のウムクラップ散乱がないために相互作用が小さいうちは絶縁体化しない。その結果、有限の U/t で超伝導・絶縁体転移がおこる。我々はQMCを用いて超伝導相関関数を計算し、また密度行列繰り込み群(DMRG)により電荷ギャップ(図1(a))を計算した結果、この転移が $U/t \sim 3$ の付近にあることを見いたした。

さらにDMRGを用いて $t-t'-U$ 模型のhalf-filledとquarter-filledにおけるスピン・ギャップも計算した(図1(b))。その結果、half-filledで $|t'| \sim t$ のときには $0.1t$ のオーダーの比較的大きなスピン・ギャップが開くが、half-filledでもそれ以外の t' のとき、およびquarter-filledではスピン・ギャップは極めて小さくなることがわかった。

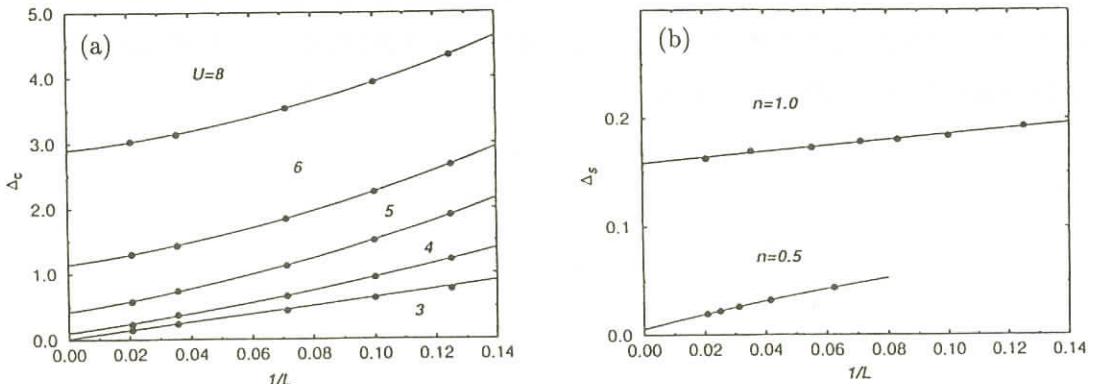


図1：(a) DMRGによって求めた $t-t'-U$ 模型のhalf-filledにおける電荷ギャップをサイズの逆数の関数としてプロット。 $t=1, t'=-0.8$ 。

(b) $t-t'-U$ 模型のhalf-filledとquarter-filledにおけるスピン・ギャップ。 $t=1, t'=-0.8, U=8$ 。

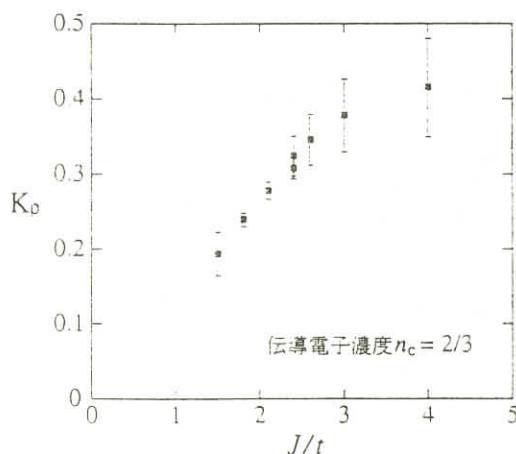
一次元近藤格子模型における朝永 - ラッティンジャー液体としての性質

東大物性研 柴田尚和

Univ. of Oxford A. Tsvelik

東大物性研 上田和夫

近藤格子模型は、重い電子系の最も単純な理論的模型として知られている。一次元の場合、この模型の常磁性金属相はハーフフィリングから外れた伝導電子濃度で伝導電子と局在スピンの間の交換相互作用が小さい場合に実現する。この相におけるスピニギャップとチャージギャップを密度行列繰り込み群の方法によって調べるとそれぞれがバルク極限で確かにゼロになる。このことはこの相が朝永 - ラッティンジャー液体のユニバーサリティークラスに属することを示唆する。この朝永 - ラッティンジャー液体を最も特徴付けるものが相関関数の臨界指数 K_ρ である。そこで、この相の臨界指数 K_ρ を求める試みを試みた。一般に相関関数の臨界指数は不純物ポテンシャルによって生じる空間的に振動しながら減衰するフリーデル振動の漸近的な減衰指数と関係がある。そのことを利用して、端の存在によって自然に発生するフリーデル振動を密度行列繰り込み群によって調べ K_ρ を求めた。その結果(伝導電子濃度 $n_c=2/3$ の場合)を図1に示す。特徴的なことは、 K_ρ は常に $1/2$ より小さいことである。交換相互作用 J が大きい極限では電荷の自由度は相互作用のないスピニレスフェルミオンによって表現されるため K_ρ は $1/2$ となるが、そこから J を小さくしていくと K_ρ は単調に小さくなる。($J=2.4t$ における不連続性は強磁性相から常磁性相への転移を反映している。)このように K_ρ が小さくなる理由は、 J を小さくすると伝導電子間に働く有効相互作用が長距離になることに加え、局在スピンのもつエネルギースケールが小さくなることにより有効相互作用の遅延効果も強くなるためと考えられる。

図1 一次元近藤格子模型の常磁性金属相における相関関数の臨界指数 K_ρ

軌道縮退をもつハーバード模型に対する量子モンテカルロ法によるアプローチ

東大物性研 求 幸 年
今 田 正 俊

d電子系・f電子系化合物の示す物性の多様さには、強い電子相関のもとで電子軌道の自由度はしばしば重要な役割を果たしている。この問題に対する理論的なアプローチの一つとして、軌道縮退をもつハーバード模型を考察する。ハミルトニアンは次の形で与えられる。

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{i,j} \sum_{\nu,\nu'} \sum_{\sigma} t_{ij}^{\nu\nu'} (c_{i\nu\sigma}^\dagger c_{j\nu'\sigma} + \text{h.c.}) + \sum_i \sum_{\nu \leq \nu'} \sum_{\sigma \leq \sigma'} (1 - \delta_{\nu\nu'} \delta_{\sigma\sigma'}) U_{\nu\nu'} n_{i\nu\sigma} n_{i\nu'\sigma'} \\ & - \sum_i \sum_{\nu \neq \nu'} \sum_{\sigma\sigma'} \frac{J_{\nu\nu'}}{2} (c_{i\nu\sigma}^\dagger c_{i\nu'\sigma'} c_{i\nu'\sigma'}^\dagger c_{i\nu'\sigma} + c_{i\nu\sigma}^\dagger c_{i\nu'\sigma'} c_{i\nu'\sigma'}^\dagger c_{i\nu'\sigma}) + \sum_i \sum_{\nu} \varepsilon_{\nu} n_{i\nu}. \quad (1) \end{aligned}$$

ここで、 $i, j = 1 \dots N_S$ はサイト、 $\nu, \nu' = 1 \dots N_D$ は軌道、 $\sigma, \sigma' = \uparrow, \downarrow$ はスピンを表す。

最近我々は、この模型に対して任意の軌道縮退度および任意の空間次元で適用できる量子モンテカルロ法の枠組みを、補助場法を用いて構築した[1]。本講演では、この手法について詳細に説明した。また、この方法の特に有用な点として、負符号問題が全く現われないような変数領域が存在することを指摘した。そこでは、新たに系に加わった軌道の自由度に関する対称性を用いることにより、従来の単一バンド模型における負符号問題回避の条件を拡張・一般化することが出来た。具体的にこの条件は、a) $n_e = N_D$ 、b) $\varepsilon_{\nu} = -\varepsilon_{\bar{\nu}}$ 、c) $J_{\nu\nu'} = \delta_{\nu\nu'}$ 、d) $t_{ij}^{\nu\nu'} = (-1)^{|R_{ij}| - 1} t_{ij}^{\bar{\nu}\bar{\nu}'}$ とかける(ここで $\bar{\nu} \equiv N_D - \nu + 1$)。これらの条件下で、金属絶縁体転移および磁気・軌道の秩序・無秩序転移を詳細に議論できることを示した。

講演では、我々の方法の適用例として、二重縮退した軌道をもつ模型について議論した。我々の調べた模型は、式(1)において、 $N_D = 2$ 、ホッピングを最近接サイト間で $-t\delta_{\nu\nu'}$ 、次近接サイト間で $(-1)^{\nu} t' \delta_{\nu\nu'}$ 、それ以外は 0 とし、 $U_{\nu\nu'} = U$ 、 $\varepsilon_{\nu} = (-1)^{\nu} \varepsilon$ としたものである。bipartiteな格子上でハーフフィリングを考えるかぎり、量子モンテカルロ法における負符号問題は全く生じない[1]。

現実の物質においては、軌道分裂は圧力効果の一部に対応すると考えられる。また次近接ホッピングは、化合物の組成変化によるバンド構造の変化、または圧力効果の一部に対応すると考えられる。

本講演では、パラメタとして $U/t = 2$ 、 $J/t = 0.5$ と選んで、一次元系の基底状態の計算結果について議論した。スピンおよび擬スピンの相関関数、運動量分布関数などの計算結果から、 ε および t' の変化に対して相転移が見られた。そこでは、 $\varepsilon = 0$ または $t' = 0$ における反強磁性的なスピン相関をもつ高スピンモット絶縁相から、両パラメタの変化に対して自己ドーピングが生じ、ネスティングに変化が生じる。それに伴って、軌道の自由度に長距離秩序が見られた。さらに、バンド幅程度の大きな ε に関しては、系がバンド絶縁体へと相転移する様子も調べることが出来た。

これまでの計算では、転移点の決定あるいは臨界性質の議論までは至っていない。今後、より詳細な研究を進めていく必要がある。また、さらなる課題として、d電子系化合物等における圧力や組成変化による様々な相転移と本研究の結果との対応も考えていく。

[1] Y.Motome and M.Imada, to appear in J. Phys. Soc. Jpn.

厳密対角化法によるマンガン酸化物の電子状態の計算

東北大金研	小椎八重	航
名 大 工	河 村 有 毅	
	岡 本 敏 史	
	井 上 順一郎	
東北大金研	前 川 稔 通	
	石 原 純 夫	

ペロフスカイト型マンガン酸化物に巨大な磁気抵抗効果が発見されて以来、応用面で期待される大きな工業的価値を追い風に、様々な組成をもつマンガン酸化物が作成され、その物性が調べられている。しかしこの系のもつ魅力は、応用面での興味に尽くされるものではなく、キャリアドープされたモット絶縁体の示す電子物性という深遠な物理にある。

銅酸化物の電子状態が調べられたときの様に、絶縁相からの出発が一つの立場としてあり得るだろう。こうしてマンガン酸化物を眺めたとき、電子が電荷とスピンに加えてもう一つの自由度を持つことに気付く。軌道の自由度である。 LaMnO_3 や PrMnO_3 では、マンガニオンは3価の価数をもち4個の3d電子をもつ。その電子は、3つの t_{2g} 軌道に1つずつ詰まり、もう1つの電子は2つの e_g 軌道のうち「どちらかに」入る。この「どちらかに」入るという自由度が、この系に軌道の自由度を導く。

我々は、強い電子相関および軌道の自由度をキーワードに、マンガン酸化物におけるスピンと軌道の絡み合いを厳密対角化法を用いて調べた。用いた模型は、石原等(*Physica C 263*, 130 (1996); *Phys. Rev. B 55*, 8280 (1997).)が導いたものである。その結果、この系におけるスピンと軌道の絡み合いは、反強磁性的超交換相互作用と軌道の自由度が導く強磁性的なスピン間相互作用の競争として特徴づけられ、様々な磁気構造を出現させていることが解った。また、同じ立場を貫き50%ドープした系の電荷配列相におけるスピンと軌道の絡み合いについても調べた。ここでスピンと軌道の絡み合いは、反強磁性的超交換相互作用と軌道の自由度により彩られた二重交換相互作用の競争として特徴づけられ、やはり様々な磁気構造が現れる。こうした競争と多様な磁気構造出現の様子は、大雑把に言って、強磁性状態のすぐ隣にA型反強磁性状態が位置し、反強磁性的超交換

相互作用が強くなっていくに従い C 型や G 型の磁気構造が次々に安定化されていくというものである。50% ドープした系の電荷配列相では、磁化過程についても調べた。軌道はスピンとまったく対等に振る舞う。この系のスピン構造は軌道構造と結びついており、磁場に応答したスピン構造の変化は軌道構造の変化をともなう。このスピンと軌道の絡み合いが、この系の磁化過程を特徴的なものにしている。スピン構造の変化である磁化過程は、また、軌道構造の変化なのである。スピンと軌道の絡み合いは、ペロフスキイト型マンガン酸化物を構成する希土類イオンやアルカリ土類イオンの置換、つまり平均イオン半径を変えることでコントロールできるものと思われる。このイオン半径と、計算で現れた一連の磁気構造との関連が見出されるかどうか興味あるところである。結晶中の軌道構造の変化は、格子と無関係ではなく、格子の歪みを誘発する。磁場によるスピン構造の変化にともなう軌道構造の変化は、結晶の歪みを引き起こすだろう。一般に酸化物磁性体の磁歪が大きいことは、本研究の結果を通してみると、自然なことのように思える。

多電子占有イオンにおける近藤効果と非フェルミ流体的性質

東北大学理学研究科物理第二専攻 鈴木俊哉
東北大学理学部物理学科 酒井治
東北大学工学部応用物理学科 清水幸弘

1. はじめに

1990年代に入ってから、ウラン系の金属化合物の中に低温領域で非フェルミ流体(NFL)的振舞を示すものが発見されてきている。 $\text{Th}_{1-x}\text{U}_x\text{Ru}_2\text{Si}_2$ は比熱の γ 係数や帶磁率に $-\ln T$ の形の発散が観測され、同時に電気抵抗が温度降下と共に対数的に減少する。¹⁾ この物質は希薄な系でもNFL的振舞を示すので、1サイト問題として理解できると予想される。

2. これまでの2チャンネル近藤効果の理論的研究

1993年にCoxにより結晶場中のf電子系が2チャンネル近藤モデル(TCKM)にマップできる可能性が指摘されて以来²⁾、このモデルは精力的に研究されている。³⁾ これに先んじてTCKMの熱力学量はベーテ仮説法による厳密解が得られており、帶磁率および γ 係数に $-\ln T$ の形の発散が存在することが既に知られていた。⁴⁾ このことはウラン系のNFL的振舞をTCKMで説明できる可能性を示している。しかし、数値くりこみ群(NRG)を用いてTCKMの物理量を実際に計算すると、通常は電気抵抗は温度降下につれて増大し、この点で実験と一致しない。

3. 拡張2チャンネルアンダーソンモデル

この問題に関して我々が考えたモデルは、2チャンネルアンダーソンモデルに交換相互作用する局在スピンを加えたものである。このモデルの熱力学量と動的励起をNRGによって計算すると、

電気抵抗は温度降下と共に減少し、同時に帶磁率に $-\ln T$ の形の発散を示す。低温の極限では電気抵抗は $T^{1/2}$ の依存性を示すが、これより高温側ではむしろ対数的な温度依存性を示し、定性的に実験と一致することがわかった(図1)。⁵⁾

4. おわりに

この研究で我々が提案したモデルは、定性的には $\text{Th}_{1-x}\text{U}_x\text{Ru}_2\text{Si}_2$ の希薄系の性質と一致しているが、現実のf電子系のモデル化として妥当なものであるかどうかはっきりしていない。この点について、フント結合を導入したアンダーソンモデルを結晶場中において、Schrieffer-Wolff近似を用いずにとりあつかった場合にどのような固定点構造を示すかについてもNRGによって研究を行っている。⁶⁾

- 1) H. Amitsuka and T. Sakakibara : J. Phys. Soc. Jpn. **63** (1994) 736.
- 2) D.L. Cox Physica B **186-188** (1993) 312.
- 3) M. Koga and H. Shiba : J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 3007 ; H. Kusunose and K. Miyake : J. Phys. Soc. Jpn. **66** (1997) 1180.
- 4) P. B. Wiegmann and A. M. Tsvelick : Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **38** (1983) 489
- 5) O. Sakai, S. Suzuki, Y. Shimizu, H. Kusunose and K. Miyake : Solid State Commun. **99** (1996) 461 ; S. Suzuki, O. Sakai, Y. Shimizu : cond-mat/9706241, to be published in Solid State Commun.
- 6) O. Sakai, S. Suzuki and Y. Shimizu : Solid State Commun. **101** (1997) 791.

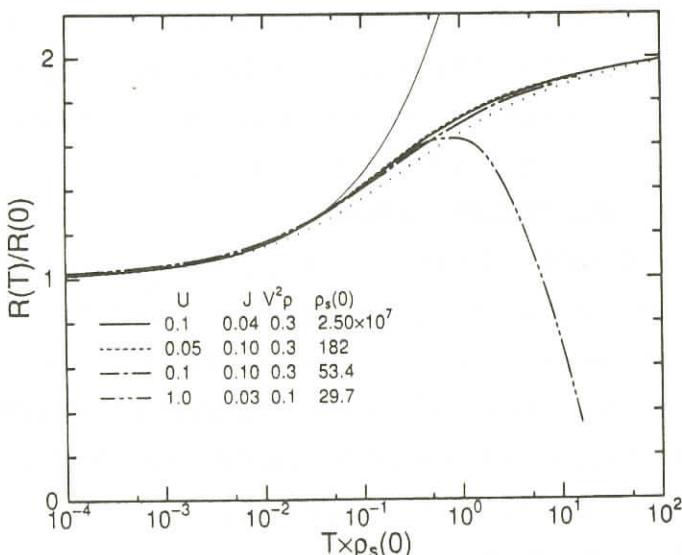


図1 拡張2チャンネルアンダーソンモデルの電気抵抗

ハバード・ホルスタイン模型の基底状態：厳密対角化法による研究

東京大学物性研究所 堀田貴嗣
高田康民

フラーレンや BEDT-TTF 塩などの分子性電荷移動錯体は、30Kを越える比較的高い超伝導転移温度を有することで近年注目を浴びている。これらの物質は、幅の狭い伝導電子バンドが半分まで満たされていることや電子相関が強いこと、そして高エネルギーの局所的格子振動が電子と強く結合していることで特徴づけられ、理論的には、短距離クーロン斥力と局在した光学フォノンが媒介する電子間引力とを統合的に扱うハバード・ホルスタイン(HH)模型によって良く記述される。

ところで、このHH模型における超伝導を議論する際、電子のホッピングエネルギー t とフォノンのエネルギー ω について、 $\omega \ll t$ の断熱極限および $\omega \gg t$ の逆断熱極限という2通りの極限を考えることができる。前者は BCSおよびエリアシュバーグ理論が前提とする極限であり、そこでの超伝導は良く理解されているが、分子性電荷移動錯体においては ω が t より大きくなっているため、逆断熱極限からのアプローチが妥当だと考えられる。しかしこの場合、格子歪みの影響が電子の波動関数の変形に跳ね返る効果、すなわちバーテックス補正の取り扱いが難しいことに加えて、クーロン相互作用と電子格子相互作用を同等に考慮しなければならないことが、従来のグリーン関数法に基づく超伝導の議論を困難にしている。

そこで我々は、この逆断熱・強相関・強電子格子相互作用の領域における超伝導を理解する手がかりを得るために、2および4サイトHHモデルのハーフフィリングにおける基底状態の波動関数を厳密対角化法によって詳細に解析した。なお電子・フォノン結合系のハミルトニアンを数値対角化する際、本来無限個必要なサイト当たりのフォノン波動関数の基底の数を有限な値 N_{ph} に制限するのだが、強結合と見做せる領域において数値的に信頼できる結果を得るには、 N_{ph} を10のオーダーに取らなければならない。そのためサイト数の増加と共に対角化は非常に困難になり、4サイトが限度になる。また、相互作用のない場合に基底状態が縮退しないようにするために、4サイト鎖に対しては反周期境界条件を課した。

さて、2および4サイトHHモデルに対する数値対角化の結果、オンサイトクーロン斥力を U_{ee} 、最近接サイト間のクーロン斥力を V 、フォノンが媒介する電子間引力を U_{ph} とすると、 $U_{ph}/\omega \gg 1$ の強結合領域において、 $U_{ee}=2U_{ph}$ および $V=0$ 近傍、すなわち $|U_{ee}-2U_{ph}| \leq t$ および $V \leq t$ の場合には、ポーラロン(格子歪みを纏った電子)が殆んど自由に振舞う金属的な基底状態(ポーラロン液体状態)が出現することがわかった。それ以外の場合は、 $U_{ee}>2U_{ph}+zV$ か $U_{ee}<2U_{ph}+zV$ かに応じて(z は配位数)、スピンドensity波または電荷密度波状態が基底状態となる。

このポーラロン液体状態が現れる理由は、フォノンに媒介される電子間引力が短距離クーロン斥力によって殆んど打ち消され、残った遅延相互作用も電子のポーラロンへの変形、すなわちバー

テックス補正の効果としてその大部分が取り込まれるため、ポーラロンが殆んど自由に振舞う状況が生じるからである。そして残ったポーラロン間相互作用によってポーラロンのクーパー対が形成され、超伝導が出現することが期待される。実際、ポーラロン液体状態に対しては、超伝導感受率が電荷およびスピン感受率より大きくなっていることが2および4サイトHHモデルにおいて示され、これは超伝導の出現を強く示唆する。さらに、tに関する摂動展開理論に基づいて導出されたポーラロン液体状態に対する有効ハミルトニアンにハートリー・フォック・ゴルコフ近似を適用することによって超伝導を議論することができ、ギャップ方程式を解いて得られた超伝導転移温度は分子性電荷移動錯体におけるそれと同程度になる。

高温超伝導体における電子格子相互作用の効果

姫路工大理 坂井 徹

Université Paul Sabatier(Toulouse, France) D. Poilblanc

University of California Santa Barbara(USA) D. J. Scalapino

銅酸化物高温超伝導体のような強相関電子系において、格子振動は電子格子相互作用により電子やホールと結合してポーラロンを形成し、キャリアーの有効質量を増加させる。そして、結合が強い場合には、このポーラロンが、self-localizationを起こして、CDWやSDW等の静的秩序をもたらす。^[1]一方、BCS理論として知られるように、電子格子相互作用は、クーパー対形成のための電子間引力をもたらす効果も持っている。これまでの多くの研究により、銅酸化物高温超伝導体の超伝導発現機構においては、クーパー対形成のためのホール間引力の主な起源は、電子格子相互作用ではなく、強い反強磁性的な電子相関であるというシナリオが有力視されている。しかし、そのような場合でも、電子格子相互作用が超伝導をサポートしている可能性はある。それでは、実際の銅酸化物高温超伝導体では、電子格子相互作用は超伝導を助長しているのか、抑制しているのか？この問題を考えるために、CuO₂面の酸素の格子振動とホールの結合を取り入れた、二次元正方形格子のt-Jモデル(t-J-Holsteinモデル)を、有限クラスターの数値対角化により解析した。^[2]

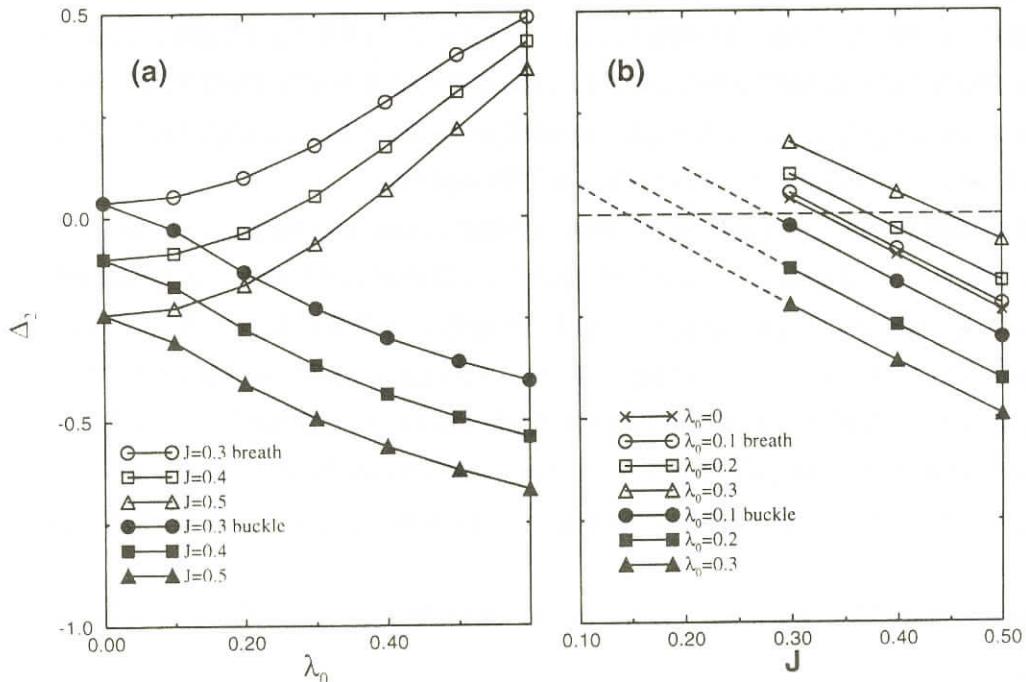
CuO₂面内の酸素の格子振動の振動モードのうち、面内のCu-Cuボンドの方向のモード(breathing mode)と、面に垂直なモードを考える。とくに、面に垂直なモードは、酸素イオンの平衡点が、Cu面上にある場合は、変位に対して2次の相互作用となるため、無視し得る効果となってしまうが、この平衡点がCu面から少しずれている場合は、1次の効果として生き残る。このような、いわゆるbuckling構造は、YBa₂Cu₃O_{6+x}に見られ、この振動モードはbuckling modeと呼ばれている。この二つのモードの格子振動をダイナミカルなフォノンとしてモデルに取り入れ、それぞれ独立に扱い、結果を比較する。フォノン(ボーズ粒子)の自由度を適当にtruncateする近

似を用いて、Cuイオン8サイト(0イオン16サイト)のクラスターを数値対角化で解析した。

現実の高温超伝導体に即したパラメータ領域 $0.3 < J < 0.6$ ($t=1$)における、絶対零度におけるホール対の束縛エネルギー Δ_2 の(a)電子格子結合定数 λ_0 依存性、及び(b)J依存性を図に示す。図から、breathing modeは上記のホール対の束縛状態を不安定化するのに対し、buckling modeは安定化することがわかる。また、breathing modeは、超伝導を抑制すると考えられるポーラロンのself-localizationを起こしやすいのに対し、buckling modeは、あまり顕著なself-localizationをもたらさないという結果も得られた。これより、breathing modeは超伝導を抑制する一方、buckling modeは超伝導をサポートする可能性があると考えられる。

参考文献

- [1] D. Poilblanc, T. Sakai, D. J. Scalapino and W. Hanke, Europhys. Lett. **34**, 367 (1996).
- [2] T. Sakai, D. Poilblanc and D. J. Scalapino, Phys. Rev. B **55**, 8445 (1997).



強相関電子系におけるスペクトルフロー解析

東大・物性研 草 部 浩 一

系のパラメータの変化による断熱変化を追跡するスペクトルフロー解析は、様々な応用がなされてきた。特に束縛状態の形成、或いは超伝導現象のフロー解析を考察しよう。超伝導リングに現れる異常磁束量子化現象は、磁束に対する基底状態フローの極小点を捉える方法として、一種のフロー解析と考えられる。しかし、この方法は密度行列に非対角長距離秩序が存在するときには証明されているが、有限サイズ効果があり、また1次元ではそもそも成立しない場合があることも知られている。一方、状態間レベル交差を超えて、 $N_a\Phi_0$ 範囲で連続的にフロー曲線を得ると、例えば1次元ハバード模型ではその周期が束縛状態形成と同時に半減するということが厳密に示された。
[1] (Φ_0 は磁束量子、 N_a はリング方向のサイズ) この拡張A B周期がなぜ半減するか、また一般的強相関模型でどの様に振る舞うかを調べた。

可解な1次元ハバード模型では、フロー解析を厳密に行うことができる。
[2] 基底状態は、斥力相互作用に対しては実のラピディティ(k_j)、引力相互作用に対しては $k - \lambda$ string(複素解)により記述されることが知られている。Φの増加とともに、ラピディティは複素平面上で運動していくが、その振る舞いは実解と複素解で定性的に異なる。(図1はその模式図) 弱相関極限ではラピディティは $\pi/2$ において散乱されると見なせるが、特に複素解はあたかもUmklapp散乱されるように振る舞い、結果として引力が導入されると拡張A B周期が半減する。

一般の非可解模型に対しては各Φの値で固有値・固有関数をPower methodで求め、フローを連続的に追跡する方法を用いた。
[3] これ以外の方法では大規模強相関系の拡張フロー解析は困難と考えられる。幾つかの1次元(擬1次元)模型での結果は、興味深いことに、Tomonaga-Luttinger(TL)流体論で得られている相図上において、常伝導から超伝導、相分離と変化するに従って、およそ超伝導領域内のある点において拡張周期が半減するという現象を捉えた。但し、少なくともTL流体において超伝導相境界を持つときは、拡張周期は $N_a\Phi_0/2$ から $N_a\Phi_0/4$ へと変わっている。また、こうした拡張周期の半減がそもそも一般の模型で生じるか否かの確定的な議論はまだない。

この研究は東大理学部の青木秀夫氏、有田亮太郎氏、黒木和彦氏との共同研究に基づいたものであります。

参考文献

- 1) K. Kusakabe and H. Aoki, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 2772 (1996).
- 2) K. Kusakabe, to be published in J. Phys. Soc. Jpn.
- 3) R. Arita, K. Kusakabe, K. Kuroki and H. Aoki, to be published in J. Phys. Soc. Jpn.

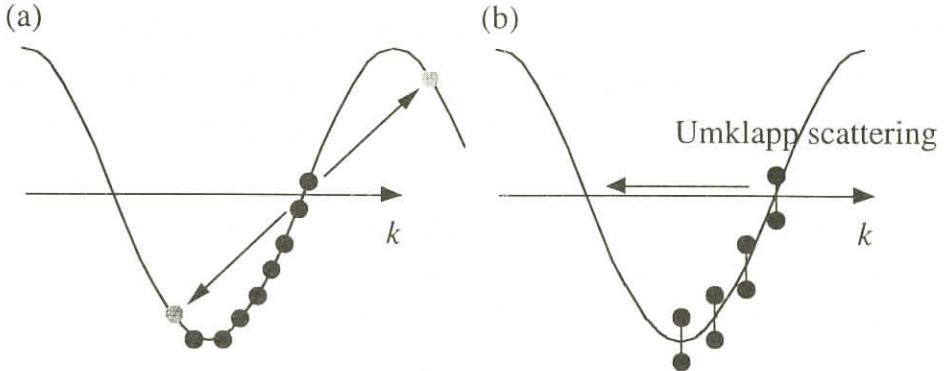


図. 1 1次元ハバード模型におけるラピディティの磁束依存性。

- (a) 斥力に対しては、2つの k_j (丸で表わしたのは、 $\cos k_j$)が $\pi/2$ において散乱されるように運動するが、周期は $N\alpha\Phi_0$ のままである。
- (b) 引力に対しては、 $k \cdot \lambda$ string が Umklapp 散乱されるように振る舞って、周期の半減が起こる。

量子ドット中の少数電子系における多体効果とクーロン振動

慶大理工 江 藤 幹 雄

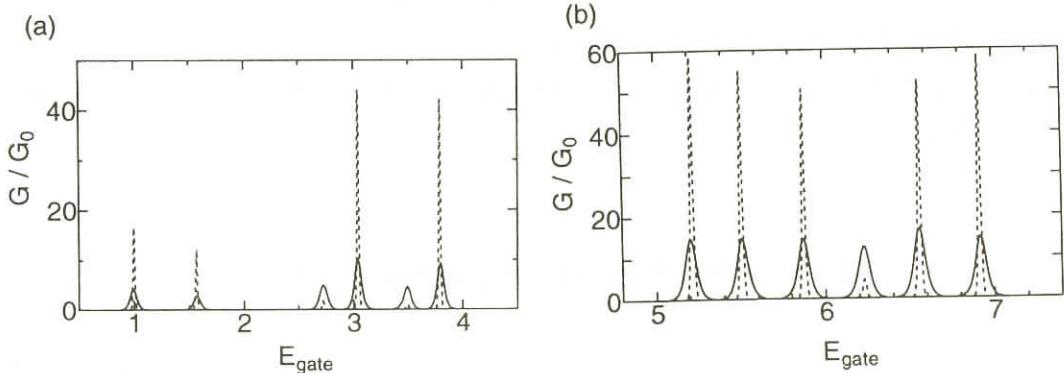
最近の半導体微細加工技術によって、フェルミ波長と同程度の0次元系(量子ドット)が作製可能となった。そのような系では1電子準位の離散性と電子間相互作用の両者が重要となり、前者を反映した「殻構造」がクーロン振動の実験で観測された[1, 2]。本研究では、2次元放物線型のポテンシャルに閉じこめられた少数電子を考え、多体状態を厳密対角化の方法を用いて計算する。さらにクーロン振動のピーク位置と高さを磁場の関数として求め、実験結果と比較をした。

ピーク位置(量子ドットを通る電気伝導度のピークでの化学ポテンシャルの値)は、 N 個の電子の基底状態のエネルギーを E_N とする時、 $\mu_N = E_N - E_{N-1}$ で与えられる。(1)弱磁場領域では、 μ_N の磁場依存性に1電子準位分布の「殻構造」が現れること、準位交差近傍では交換相互作用によって基底状態が高スピンになること(フント則)、が分かった。これらは実験結果[1]と半定量的な一致を示した[3]。(2)高磁場領域では多体効果がより重要になる。その時、相関効果によって基底状態が変化し、それが μ_N の磁場依存性にカスプ構造を作ることを示した[3]。そのカスプ構造は最近の実験でも観測された[2]。

次にピークの高さ(電気伝導度の値)を計算するために、(i)基底状態だけでなく、低励起状態のエネルギーと波動関数を求め、(ii)量子ドットと電極間の電子の遷移をトンネル・ハミルトニアン

で表し、その最低次の範囲で電気伝導度を計算した。また (iii) 系の異方性や anharmonicity の効果を摂動で取り入れて、いくつかのピークで観測された異常な温度依存性 [2] の解明を試みた [4]。計算結果を下図に示す。(a)は 1 番目から 6 番目のピークで、系の異方性のために 3 番目、5 番目のピークが低温(破線)よりも高温(実線)で高くなっている。(b)は 7 番目から 12 番目のピークを anharmonicity を入れて計算した結果である。10 番目のピークの異常性は、 $N=9, 10$ の基底状態がそれぞれ $S=3/2, 0$ の全スピンを持ち、低温で選択則が働くためである。

- [1] Tarucha et al.: Phys. Rev. Lett. **77** (1996) 3613.
- [2] L.P.Kouwenhoven: 私信.
- [3] M. Eto: Jpn. J. Appl. Phys. **36** (1997) Part 1, No. 6 B.
- [4] M. Eto: J. Phys. Soc. Jpn. **66** (1997) No. 8.



量子ホール系におけるスピン分裂サイクロトロン共鳴

東大・物性研 浅野 建一

安藤 恒也

二種類の異なるサイクロトロン振動数を持った電子から構成される系では、コーンの定理が成立せず、電子間相互作用の効果がサイクロトロン共鳴のスペクトルに現れる。我々は、2成分系の例として、上向きスピンの電子と下向きスピンの電子が異なるサイクロトロン振動数を持っている強磁場下2次元電子系のサイクロトロン共鳴を数値的に調べた。具体的には、少数電子系(電子数2~8)において系のハミルトニアンを数値的に対角化して全ての可能な始状態および終状態を求め、これから久保公式を用いて系の動的電気伝導率を計算する方法をとった。また、比較対象のために、2モードの近似(一般化された単一モード近似)を用いた計算も合わせて行った。

非常に低い占有率($\nu \lesssim 1/4$)では、得られたスペクトルは結合した二つのモードとして捕らえる

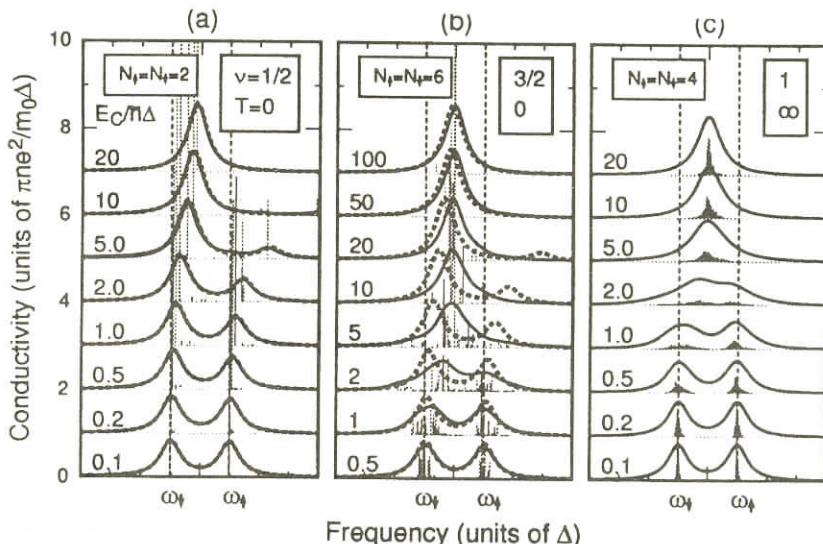
ことが出来て、一般化された单一モード近似が非常に良い近似を与える。電子間相互作用を強くしてゆくと、高周波側のピークがより高周波側にはじかれ、強度が小さくなる。つまりモード間反撥の振る舞いを示す。

占有率や温度を増加させると、スペクトルに一般化された单一モード近似からのずれが認められるようになる。特に、 $\nu \geq 3/2$ 或いは $k_B T \gtrsim 0.1 E_C$ (E_C : 典型的なクーロンエネルギー) の領域ではそのずれが顕著である。この領域ではスペクトルは非常に多くのデルタ関数から成り立っているが、十分に大きな幅をつけると、二つのピークの構造を持っており、多くの場合、運動による先鋭化に似た振る舞いを示す。即ち、電子間相互作用を強くしてゆくと二つのピークが合流して一本の鋭いピークになる。

ただし、上向きスピンまたは下向きスピンのランダウ準位がほとんど詰まっている場合は例外で、この場合、スペクトルはモード間反撥の振る舞いを示す。しかし、一般化された单一モード近似の枠組みでは、この場合モード間の結合はないはずであり、単純な2つのモードの結合という見方ではこの振る舞いを説明することは出来ない。特に、上向きスピンが詰まっている場合には、低周波側のピークがより低周波側に弾かれるという、通常とは逆のモード間反撥の振る舞いがみられる。

参考文献

- [1] K. Asano and T. Ando: J. Phys. Soc. Jpn **65** (1996) 1191.
- [2] K. Asano and T. Ando: 23th ICPS, 1996 conference proceedings pp.2515.



スペクトルの相互作用の強さに対する依存性。厳密対角化の計算の結果はヒストグラムとローレンツィアンで幅を持たせた実線とで描かれている。一般化された单一モード近似の結果は点線で示されている。

Numerical study of universality of Anderson transition

理 研 K. Slevin
上智大理工 大 楓 東 己

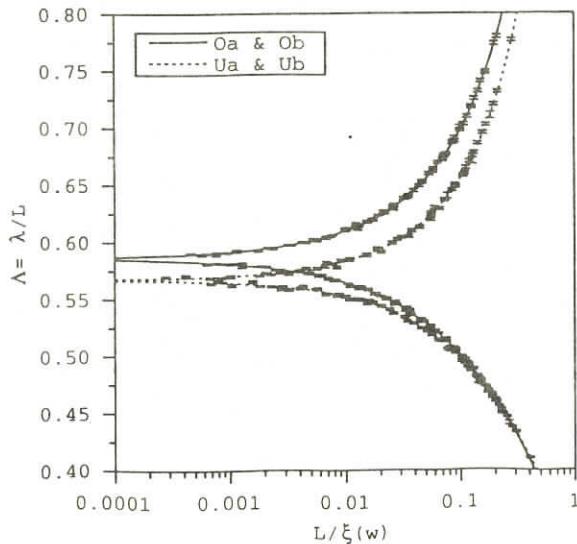
We report a finite size scaling study of the Anderson transition. Published numerical calculations could not distinguish the critical behaviour of systems with time reversal symmetry (orthogonal universality class) from those without it (unitary universality class) within the statistical errors. The full use of the VPP has now made it possible to distinguish the two universality classes. Different scaling functions (Fig. 1) and different values for the critical exponent have been obtained. Thus, the discrepancy between the predictions of field theory and the results of numerical studies has been reconciled. The values of the critical exponent for the localization length are estimated to be 1.59 ± 0.03 and 1.43 ± 0.04 for the orthogonal and unitary universality classes respectively.

The critical conductance distribution at the Anderson transition has also been investigated and different universal distributions for the orthogonal and unitary classes have been found.

Reference: K. Slevin and T. Ohtsuki: Phys. Rev. Lett. vol. 78 (1997) 4083.

Fig. 1

The scaling curves for the orthogonal (solid line) and unitary (dotted line) universality classes.



ランダムポテンシャル中のヘリウムの量子モンテカルロ・シミュレーション

金沢大学理学部 高須昌子
橋本昌人

モデルと方法

ランダム媒質中のヘリウムは最近、実験の方面からも注目を集めている[1]。我々は次のようなモデルを研究した。

$$H = H_k + H_c + H_p \quad (1)$$

$$H_k = -\frac{t}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (b_i^+ b_j + b_j^+ b_i), \quad H_c = \frac{U}{2} \sum n_i(n_i - 1), \quad H_p = -\sum_i (\mu + \delta_i) n_i \quad (2)$$

ここで、 $\langle ij \rangle$ は2次元正方格子上のサイトである。 $n_i = b_i^+ b_i$ 。 t はtransfer energy, U はon-siteのクーロン反発エネルギー, μ は化学ポテンシャル, δ_i はランダムポテンシャルである。鈴木-トロッタ公式を用いて、3次元の古典系に変換し、量子モンテカルロ計算を行なう。この系はボゾン系であり、符号問題は出現しない。

結果と考察

超流動密度および粒子密度を計算すると、

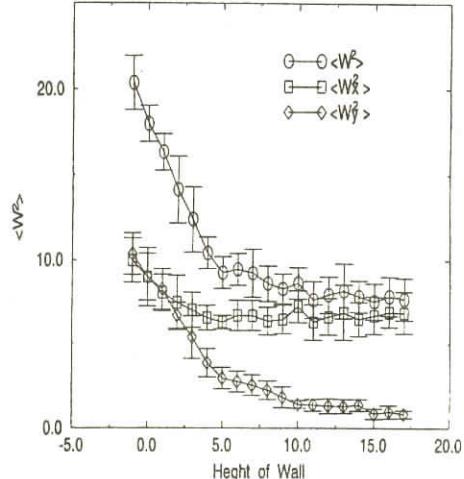
1次元の場合のモデル[2]と比較して、ボーズガラスになりにくことがわかる。

ランダムなポテンシャルの片側に、ポテンシャルの壁を置いた場合の、超流動成分は図のようになる。横軸は壁の高さ P 、縦軸は winding number, $t=1, V=2, \beta=4, U=0.8$ である。壁と垂直な方向 y の winding number は、壁のために減少するが、かなり P が大きい所でも有限の値を持つ。これはトンネル効果のためである。壁と平行な x 方向の winding number も、壁の影響により下がる。

我々は、さらに、管の中のヘリウムなど、制限された空間内でのシミュレーションを今後研究する予定である。

References

- [1] M. Chan, N. Mulders and J. Reppy, Physics Today, 8 (1997) 30.
- [2] N. Hatano, J. Phys. Soc. Jpn, 64 (1995) 152.



ハードコアボーズ系 ($S=1/2$ XYモデル) の相転移の精密計算

京大工原田健自
東邦大理川島直輝

Dingらの行った大規模量子モンテカルロシミュレーション[1]では、相関距離や感受率の計算結果から、このモデルの相転移がKosterlitz-Thouless(KT)転移であると報告されている。しかし、相関距離や感受率から相転移がKT転移か通常の二次相転移であるかを判別することは技術的にむずかしく明確な結論を導くことは困難である。

そこで我々は転移がKT転移であるとするとUniversal Jump等の特徴的な振る舞いを示すはずである helicity modulusを計算しこのモデルの相転移を調べた。

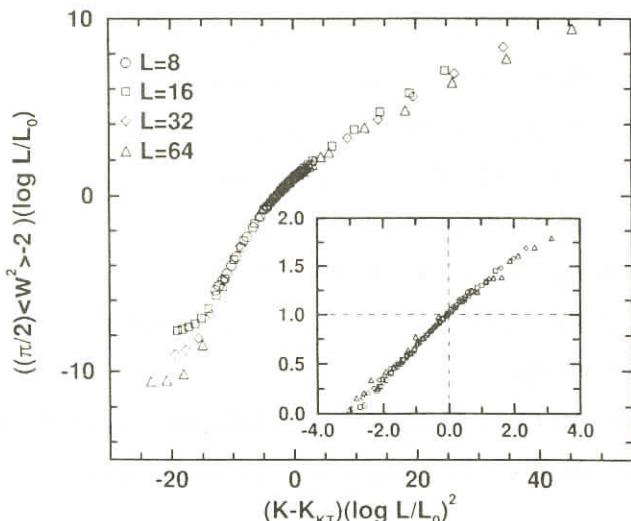
ワインディングナンバーの二乗平均として helicity modulusを計算できるが、従来の量子モンテカルロ法ではワインディングナンバーのサンプリングにエルゴート性や緩和時間などの問題がある。そのため、我々はクラスターモンテカルロ法の一環であるループアルゴリズム [2] をもついて数値実験をおこなった。この結果、 helicity modulusを低温でも精度よく計算することができた。

KT転移を仮定したときに予想される helicity modulusのサイズ依存性はKosterlitzの繰り込み群方程式の解に基づいて導かれるが、これは通常の有限サイズスケーリングで仮定される形とは相容れないものである。

図に示すように、我々の計算結果は、この予想される依存性によくあい、特にスケーリング関数の $K=K_c$ での値が 1 になる、という予想が再現された。このことはハードコアボーズ系($S=1/2$ XY モデル)の相転移がKT転移であると考えなければ説明できず、我々の計算の結果相転移の性質が疑いのないものとなった。

- [1] H.-Q. Ding and
M. Makivic, Phys. Rev.
B 42 (1990) 6827

[2] H.G. Evertz, M. Marcu
and G. Lana, Phys. Rev.
Lett. 70, 875 (1993);
N. Kawashima, J. Stat.
Phys. 82, 131 (1996), and
references cited therein.



「数値量子ダイナミクス」による線形応答関数のオーダーN計算法

理化学研究所 飯高敏晃
 野村晋太郎
 平山秀樹
 趙新為
 青柳克信
 菅野卓雄

任意のポテンシャル中の相互作用しない電子の線形応答関数を、実時間実空間差分化したシューレーディンガー方程式の数値解 [1] を利用して、基底の数Nに比例する($O(N)$)の計算量で計算するアルゴリズム [2] を紹介した。このアルゴリズムは、 $O(N^3)$ の計算量を必要とする行列対角化の方法に比べて、はるかに大きな系の線形応答関数を求めることができる。また、最近提案された他の $O(N)$ アルゴリズム [3] と比較しても1桁以上大きな系の計算が可能だ。

図1にスーパーセル内に32,768個の原子を含むSi結晶(bulk)の $\text{Im } \varepsilon_{xx}(\omega)$ を示す。2,097,152個の位置基底を用いて、分解能50meVで計算した。図2に、水素終端シリコン微結晶の光学吸収係数をこのアルゴリズムで計算した際 [4] の系の大きさと計算時間の関係を示す。計算量が $O(N)$ になっていることが読み取れる。

- [1] T.Iitaka, Phys. Rev. E**49**, 4684 (1994); 「量子ダイナミクス入門」, 飯高, (丸善, 1994)
- [2] T.Iitaka, S.Nomura, H.Hirayama, X.W.Zhao, Y.Aoyagi, T.Sugano, Phys. Rev. E**56**, 1222 (1997). (<http://espero.riken.go.jp/>).
- [3] L.W.Wang and A.Zunger, Phys. Rev. Lett. **73**, 1039 (1994).
- [4] S.Nomura et al., (to appear in Phys. Rev. B).

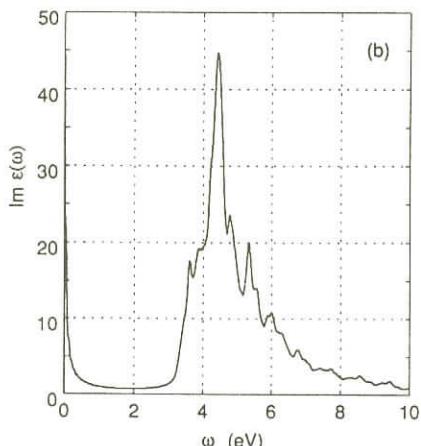


図1：スーパーセル内に32,768個の原子を含むSi結晶(bulk)の $\text{Im } \varepsilon_{xx}(\omega)$ 。

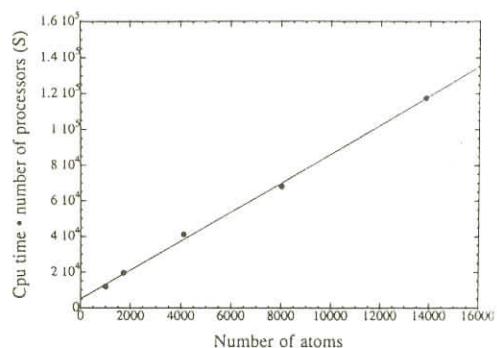


図2：系の大きさと計算時間の関係

「遍歴電子系としてみたマグネタイト」

世話人 白鳥 紀一(九大・理)

坂井 信彦(姫工大・理)

高橋 隆(東北大・理)

十倉 好紀(東大・工)

鈴木 勝(電通大)

千葉 利信(無機材研)

毛利 信男(東大・物性研)

最近の物性物理、中でも磁性と伝導性に関する研究はコンピュータの著しい発展もあって、実験と理論との定量的な比較までかなり可能になってきた。しかし、マグネタイトの研究では有名なVerwey転移に関して、古くから多くの研究がなされてきたが、その金属-非金属転移現象について未だ不明な点が多い。その原因にはFeの価数や磁気状態を局在モデルの立場で現象論的に記述でき、磁性に関してはかなりの点で理解が可能と思われ、あえて遍歴モデルで考察しようという雰囲気がなかったためである。しかしながら、3d遷移金属を含む化合物において本質的に磁性を担う電子と伝導を担う電子が同一である点が重要で、磁性と伝導性は統一的に理解されねばならない。酸化物高温超伝導体が発見され、あらためて、磁性と伝導性とをいかに統一的に理解できるかが問われている。バンド幅の狭いd電子の挙動は相関効果を無視するわけにはいかない。この機会にマグネタイトを遍歴電子系と見てその本質にどこまで迫れるか、非常に興味のあるテーマと思われる。尚、この研究会はマグネタイトを長年研究してきた近角聰信先生のご発案によることをここに報告します。

プ ロ グ ラ ム

「遍歴電子系としてみたマグネタイト」

日 時 : 6月16日(月), 17日(火)

場 所 : 東京大学物性研究所Q棟講義室

6月16日(月)

10:00 はじめに 毛利 信男(物性研)

座長 毛利 信男(物性研)

マグネタイト低温変態研究のこれまで(10分) 白鳥 紀一(九大理)

10:15 1. 運動量空間の電子の分布

Electronic Structure, using High-Resolution Photoemission (35分)

A.Chainani(東北大理)

陽電子消滅 γ 線角度相関による電子とスピンの分布(35分)

千葉 利信(無機材研)

磁気コンプトンプロファイル(35分) 坂井 信彦(姫路工大理)

12:00 (昼食・休憩)

13:30 2. バンド構造 座長 十倉 好紀(東大工)

バンド構造の計算(50分) 柳瀬 章

14:20 3. 実空間の電子の分布 座長 坂井 信彦(姫路工大理)

X線回折(25分) 奥寺 浩樹(名工大)

短波長X線回折(25分) 岡村富士夫(無機材研)

15:10 (休憩)

15:30 4. 光学吸収と輸送現象 座長 鈴木 勝(電通大物理)

光物性(30分) 朴 成基(東大工)

異常ホール効果と磁気抵抗(30分) 東堂 栄(物性研)

16:30 5. 歴史を振り返って 座長 白鳥 紀一(九大理)

マグネタイト低温相の結晶構造

-その誤解、正解、難解そして未解のことごと- (30分)

近角 聰信

6月17日 (火)

9 : 10	6. 電荷の揺らぎ	座長 高橋 隆 (東北大理)
	吸收端近傍のX線異常散乱 (35分)	佐々木 聰 (東工大工)
	X線共鳴磁気散乱 (35分)	河田 洋 (高エネ研)

10 : 20 (休憩)

10 : 30	7. 格子の揺らぎ	座長 柳瀬 章
	超音波の圧力効果 (30分)	鈴木 勝 (電通大物理)
	メスバウアー効果 (30分)	中村 真一 (帝京大理)
	中性子散漫散乱 (40分)	白鳥 紀一 (九大理)

12 : 10 (昼食・休憩)

13 : 30	8. 関連した物質	座長 千葉 利信 (無機材研)
	LuFe ₂ O ₄ (25分)	池田 直 (早大理)
	SrFeO ₃ (25分)	高野 幹夫 (京大化研)
	Yb ₄ As ₃ (25分)	鈴木 孝 (東北大理)
	LiMn ₂ O ₄ (25分)	島川 祐一 (NEC基礎研)
	KMnO ₂ (25分)	佐藤 博彦 (東工大)

15 : 35 (休憩)

15 : 50	9. もう少し広い視野で	座長 毛利 信男 (物性研)
	遷移金属酸化物の電荷整列と金属絶縁体転移 (40分)	十倉 好紀 (東大工)

おわりに 白鳥 紀一 (九大理)

17 : 00 (終了)

(括弧内の時間は討論時間を含む)

マグネタイト高温相の研究略史

九 大 理 白 鳥 紀 一

はじめに

下の年表は、マグネタイトの低温変態の研究を高温相の電子状態にはば限定して振り返ったものである。何が重要かについては人によって意見が異なるだろうから、個人的なものというべきかも知れない。80年代後半からの蓄積が本研究会となったが、これが次の発展の基となることを希望している。

比熱異常：R.W.Miller, 1929.

1930 電気伝導の異常：岡村, 1932.

1940

Fe^{2+} , Fe^{3+} のorder-disorderモデル：E.J.Verwey, 1947.

(局在電子の拡散による伝導のイメージ)

1950

frustration の指摘：P.W.Anderson, 1956.

(秩序相のVerweyモデルの検証：W.C.Hamilton, 1958, 誤報)

1960

核磁気緩和の測定と解析：溝口 et al., 1966. (電荷の揺らぎは 10^{12}Hz)

圧縮による高温相の安定化：G.A.Samara, 1968.

(運動エネルギーの重要性。cf.N.F.Mott, 1967)

低温相のVerweyモデルの崩壊：山田 et al., 1968, その他。

1970

低温相のゼーベック効果の構造敏感性と高温相の鈍感性：

A.J.M.Kuipers et al., 1976, など。

C_{44} の顕著な低下：木野, 1976.

立方対称磁気異方性の異常：阿部 et al., 1976.

中性子散漫散乱：S.M.Shapiro et al., 1976.

(格子の揺らぎは 10^{12}Hz)

低温相の核磁気共鳴 - Fe位置の点対称：溝口, 1978.

変態点のアイソトープ効果：E.I.Terukov et al., 1979.

1980

低温相の構造解析：飯泉 et al., 1982. (未完。セーメントの差は検出されず。)

バンドの計算：柳瀬 et al., 1982..

μ^+ の内部磁場の250Kでの分裂：C.Boekema et al., 1986.

(揺らぎの早さは 10^7Hz)

1990

本研究会

precursors

Fe₃O₄の高分解能光電子分光

Electronic structure of Fe₃O₄ using High-Resolution Photoemission Spectroscopy

Inst. Plasma Res. A.Chainani

東北大院理 高 橋 隆

東大物性研 東 堂 栄

The electronic structure of Fe₃O₄ across the charge - ordering Verwey transition ($T_v \sim 122K$) is systematically investigated as a function of temperature (100 - 300K), using high - resolution photoemission spectroscopy¹. The photoemission spectrum of Fe₃O₄ shows a clear gap in the occupied single particle density of states (DOS) for the charge - ordered semiconducting phase below T_v (Fig.1). The gap is abruptly closed at T_v , with spectral changes over very large energy scales(2eV) compared to the gap value(140meV)and the transition temperature($122K \sim 10meV$). The DOS at the Fermi level increases monotonically as a function of temperature in the metallic phase, up to 300K(Fig.2). This indicates that the DOS is also affected by short range order, which is also known to influence transport properties. The gap value is consistent with first principles electronic structure calculations² and the temperature dependence of the increase in the relative DOS at and near the Fermi level is quantitatively consistent with recent optical conductivity studies.³

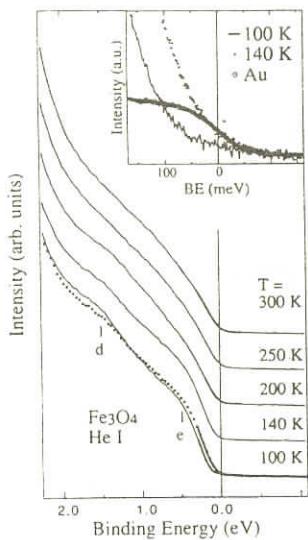


Fig. 1

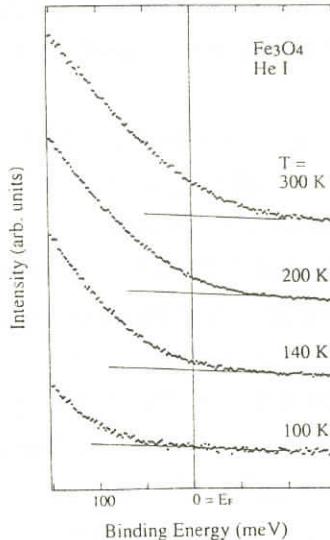


Fig. 2

[1] A.Chainani, T.Yokoya, T.Morimoto, T.Takahashi, and S.Todo, Phys. Rev. B51, 17976(1995).

[2] V.I.Anisimov, I.S. Elfimov, N.Hamada, and K.Terakura, Phys. Rev. B54, 4387(1996).

[3] Y.Tokura, private communications.

陽電子消滅ガンマ線角度相関によるマグネタイトの運動量空間での電子とスピンの分布

無機材研 千葉利信
 Geneve 大 A. A. Manuel
 ENEA, Italy M. Biasini
 阪府大 柳瀬 章
 無機材研 赤羽 隆史

陽電子消滅 2 次元角度相関法は結晶中の電子-陽電子対の運動量分布の或る方向への射影を求める方法である。この際、陽電子は結晶に 1 個で、消滅時には結晶と熱平衡にあり、その運動量は電子の運動量に比べて十分小さい。また、陽電子は正電荷を持ち原子核に反撲され、内殻電子とは重なりが小さく、主に外殻電子と消滅するので、対の運動量はほぼ外殻電子の運動量である。ここでは、マグネタイトの Fermi 面を探す試みと、スピン分布、3 次元運動量分布について報告する。

1. Fermi 面

最近のバンド計算⁽¹⁾によると、高温相の少数スピン B - サイト d ε バンドが 2 つの hole 面と 1 つの電子面からなる Fermi 面を持つ。陽電子消滅で得られるのはバンド電子の良い量子数である結晶運動量 k ではなく、実運動量 p であるので、とり得る逆格子ベクトル G_1 だけの不定性がある ($p = k + G_1$)。従って、得られた実運動量分布を凡ゆる $-G_1$ だけ平行移動して primitive Brillouin zone に畳み込めば、 K についての分布が得られる。この操作は発案者に因んで LCW folding⁽²⁾ と呼ばれている。今回は、M-I 転移点 (125K) を挟んで、115K と 135K で、射影方向 $<100>$ 、各々、総カウント数 4.6×10^8 と 4.6×10^8 の高精度測定を行なった。LCW 分布では、1 点約 10^6 カウントとなり、0.1 % の精度がある。運動量分解能は primitive Brillouin zone の幅 : 0.54 a.u. に対し $1.0 \times 1.3 \text{ mrad}^2 = 0.14 \times 0.18$ (a.u.)² である。図 1 に、結晶運動量分布を示す。驚くべきことに、測定結果は、金属相、絶縁相共にバンド計算の逆の分布を示している。電子-陽電子の Coulomb 相関は定性的には、

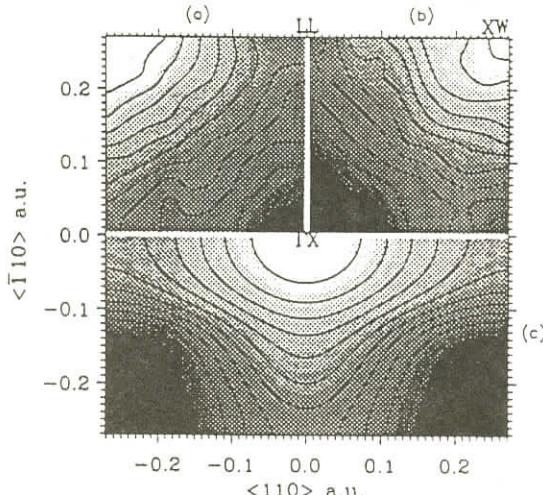


図 1 Fe_3O_4 の結晶運動量空間分布
 $<100>$ 射影。白 : 高、黒 : 低。
 (a) 金属相(135K)。高低差 : 1.08%
 (b) 絶縁相(125K)。高低差 : 1.27%
 (c) バンド計算の Fermi 面を測定分解能でぼかしたもの。高低差 : 1/48 → 1%

Fermi面のすぐ内側の電子が一番影響を受け、消滅確率が増し、結果として、(電子-電子相関がFermi breakを弱めるのとは対照的) Fermi breakを深めると考えられ、単純金属では実験的にも確かめられている。また、陽電子が原子空孔等の欠陥に捕捉されることがあるが、この場合は、低運動量分布が増え、結晶運動量空間でも、零点付近の分布に山を作り、 Γ 点中心に偽の電子面をもたらす事になる。これは今回の結果とは逆であり、違いを説明できない。陽電子の波動関数による何らかの変調がこの食違いの原因かも知れないが、それを確かめるには、陽電子の波動関数をもバンド計算し、電子-陽電子対の運動量分布を求める必要があろう。

2. スピン偏極測定

β 崩壊するR I線源からの陽電子線はパリティ非保存のため進行方向にスピン偏極している。角相関測定はスピンが反平行の陽電子-電子対の 2γ 消滅を測定するので、強磁性または、フェリ磁性の試料を陽電子線に平行及び、反平行に磁化して測定すれば、スピンに依存した運動量分布が得られる。図2(a)は3方位の1次元角度相関測定から再構成された運動量空間(p-space)での3次元スピン分布⁽³⁾である。図2(b)はFe3d状態をLCAO-MO(原子軌道線形結合による分子軌道)法で近似して解析した結果⁽⁴⁾である。陽電子消滅角相関測定は相対測定

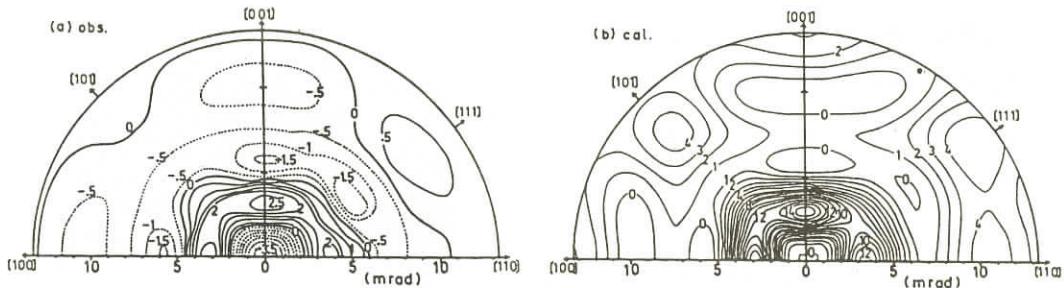


図2 Fe₃O₄の(010)と(110)面上での3次元スピン運動量分布。単位は $10^{-3}(\text{a.u.})^{-3}$ 。

(a)測定, (b)LCAO - MO 計算。

なので、運動量空間でのスピン分布の相対的な変化を表している。図2(a)は、net spin=0になるように規格化されている。

図に見られる構造はFe 3d軌道の異方性とligandのO2s, 2pとの共有結合(anti-bonding)性によるものである。(o-site: Fe d γ - 10% O p σ - 0.3% O s σ , Fe d ε - 4% O p π ; t-site: Fe d ε - 1% O p σ , Fe d γ - 3% O p π)。最近2次元角相関で174K(高温相)の再測定⁽⁵⁾をしたが、図2(a)と大きい違いはない。

3. 3次元運動量分布測定

近年特に医療診断の分野で目覚しく発展したCT(computed tomography)の手法⁽⁶⁾を適用すれば、幾つかの射影2次元データから3次元の分布を再構成できる。陽電子消滅法の場合にも、

3次元Fourier変換・逆変換に基づいたRadon変換による幾つかの方法が考察されている。

マグネタイト単結晶 {110} 内面
 <100>方向から<110>方向まで、5度毎に合計19点の2次元角度相関測定を行い、円筒座標系でのFourier-Bessel変換によって、3次元運動量分布を再構成した。図3に3次元分布の異方性を、(010)と(110)面上の等高線図として示す。結果は、運動量空間でのスピン分布(図2)とかなり異なっている。これは、非磁性で、trigonalな場にある酸素の異方性の寄与が大きいと考えられる。現在、酸素2s, 2pの寄与を考慮し、運動量空間でのスピン分布と電子運動量分布を同時にfitするLCAO-MO解析を行なっているが、或る程度の結果を得つつある。

マグネタイトの陽電子消滅角相関測定に関しては、ほぼやり尽くした感がある。バンド計算等の第一原理からの理論を待ち望んでいる。

これらの測定に用いられた試料を提供して頂いた九大の白鳥先生、東大物性研の東堂さん、無機材研の木村氏に感謝します。

参考文献

- (1) 柳瀬 章：本研究会。
- (2) D.G.Lock, V.H.Crisp and R.N. West: J.Phys. F3 (1973)571.
- (3) P.E.Mijnarends and R.M. Singru: Appl.Phys. 4 (1974)303.
- (4) T.Chiba: J.Chem.Phys. 64 (1976)1182.
- (5) T.Chiba and A.A.Manuel: Proc. Int. Workshop on the Use of Ultra - Short Wavelength Photons and γ -rays for High - Precision, High - Resolution Analysis of Electronic States of Solids(ed. F.P.Okamura and J.R.Schneider, HASYLAB - DESY, Hamburg, 1996)p.169.
- (6) R.A.Crowther, D.J.DeRosier and A.Klug: Proc. Roy. Soc. London A317 (1970)319.

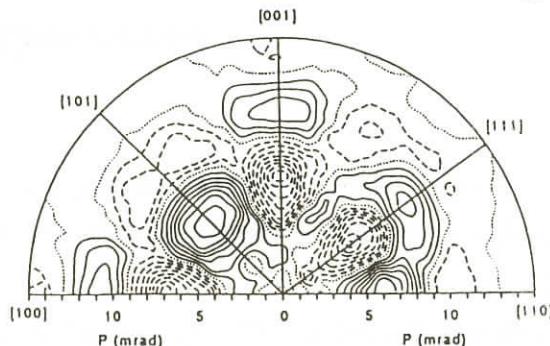


図3 Fe₃O₄の3次元運動量分布の(010)および(110)面上の異方性。
 等高線の実線：正、点線：零、破線：負。

マグネタイトの電子状態

柳瀬 章

マグネタイト Fe_3O_4 の電子状態を FLAPW 法を用いて、局所密度近似により行った。結晶構造は高温相の面心立方格子で、空間群 $Fd3m$ を持つスピネル型にとっている。単位胞には 2 分子 14 個の原子を含んでいる。

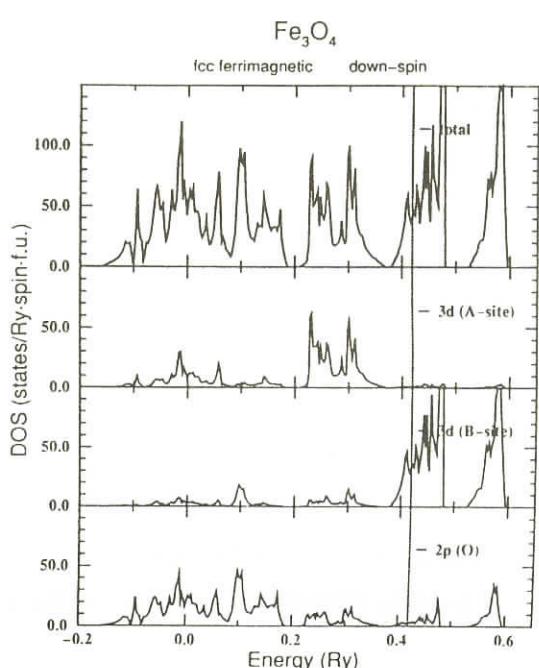
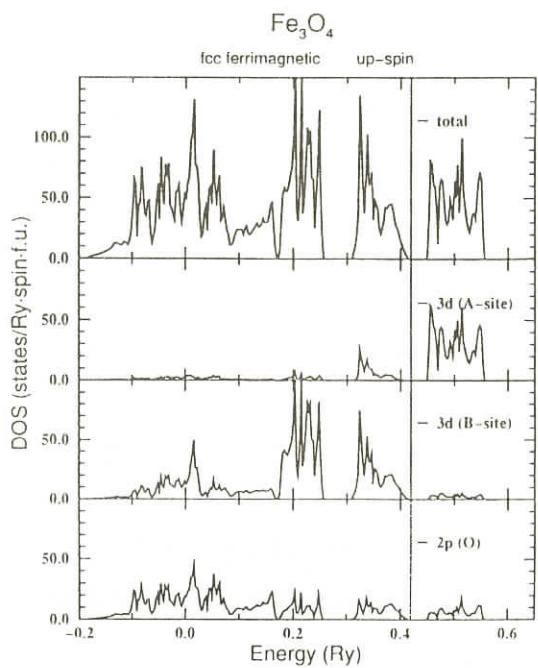
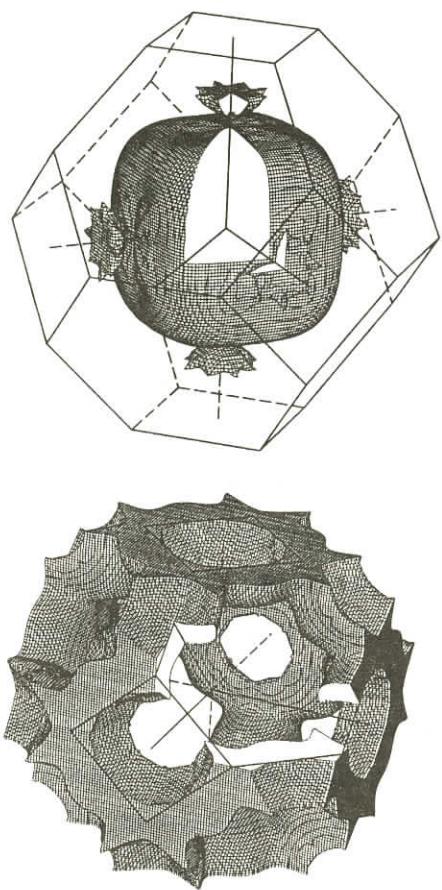
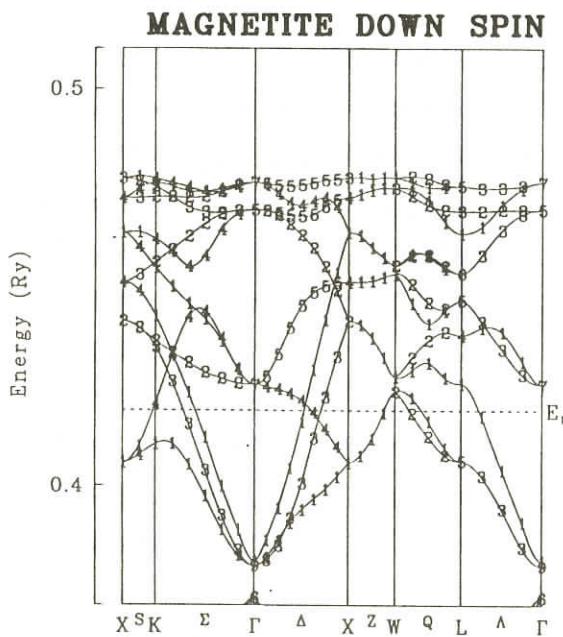
状態密度の図に示すように Up-spin band はエネルギーの低い方から、酸素の p バンド、B サイトの d バンド、A サイトの d バンドの順になり、B サイトのバンドまでつまって、A サイトのバンドは空いている。Down-spin band では A サイトのバンドが下で、B サイトのバンドが上になり、そこに単位胞あたり 2 個、1 分子あたり 1 個分の電子がつまっている。これは A サイトが $5 \mu_B$ をもって下を向き、B サイトが $5 \mu_B$ 、 $4 \mu_B$ を半々に持って上を向いているイオン結晶モデルと対応している。しかし状態密度の図に示しているように、p バンドと d バンドは強い混成を示し、共有結合性を強く持った物質であることをこの計算結果は示している。計算された電荷分布は X 線解析で求められたものとよく対応している。

この Down-spin の B サイトのバンドの部分がエネルギー軸を広げて示してある。下から 3 枚のバンドがフェルミ面を持っている。第 1 バンドは W 点を中心とした小さな(0.01)ホール面を持っている。第 2 バンドはブリルアーンゾーンのエッジにそったホール面で大きさは 0.235 である。第 3 バンドは Γ 点を中心としたさいころ状の電子面と Δ 軸を中心としたレンズ状の電子面からなっている。その大きさは 0.245 である。この 3 枚のバンドを占めている電子はほとんど B サイトの $d\epsilon$ でよく極在している。

図に示したフェルミ面は二つの特徴を持っている。その一つは電子面とホール面が鋭いポイントでつながっていることである。これはこの物質が持っている 2 種類の対称面で電子面をもつ 3 番目のバンドと、ホール面を持つ 2 番目のバンドが偶然縮退を持っていることの反映である。このような構造は対称面を消すような結晶の変形に対する不安定性をあたえる。立方対称の持つ 2 種類 9 枚の対称面を消すためには三斜晶的に歪まなければならない。

もう一つの特徴はさいころ状の電子面が持つ平面に近い面の間隔が丁度 $2\pi/\alpha$ になっていることである。これは面心の周期を消すような変形に対しての不安定性をあたえる。フェルミ面を持つバンドが B サイトの $d\epsilon$ であることから、周期を壊す変形は B サイトの位置の移動で起きることが予想される。

この物質の低温変態の原因をこれらの不安定性に起因をすると結論するためには電子格子相互作用の安定的な見積りをしなければならない。今回の研究会での成果を生かしてより詳しい計算を行いたいと考えている。



単結晶X線回折法による電子密度分布の観測と、温度、組織の違いによる電子密度分布の変化

名古屋工業大学セラミック研究施設 奥寺 浩樹

単結晶X線回折強度データによる結晶構造の精密化では、通常は各原子位置の周りにイオン化状態に応じた球対称的な電子密度分布を仮定し、それに原子の熱振動パラメータを組み合わせて結晶構造のモデルを作るので、測定精度が充分高ければイオン化の状態や最外殻電子雲の変形等について直接検討する事ができる。定比組成試料^[1]についての観測強度($3^\circ < 2\theta < 100^\circ$, 1/4球中の137の独立反射: $R_{int}=0.97\%$)を使い、調和型非等方性熱振動パラメータを導入した精密化に際し、低角側の観測強度を順次省いていくと酸素原子の座標の計算値はA席から離れる方向に移動するが、これは最外殻電子密度の重心がA席方向シフトしていることを示している。精密化後の差フーリエ合成図に見られる残差のうち、A席の周囲の残差は熱振動に非調和性を導入すると消えてしまうが、この場合でもB席の周囲の正の残差(B-O, B-B間)は依然として残る。特に、B-O間の残差は低角側の観測強度を省くと明らかに小さくなる為、外殻電子雲の変形を反映していると考えられる。B-B間の正の残差は低角側の観測強度を省いても残る。外殻電子からの寄与を協調したX-X変形密度分布図^[2]には、A-O間にについて π , σ -結合、B-O間にについて σ -結合に対応すると思われる電子密度が見られ、中性子回折実験の結果^[3]と調和的である。しかし、この分布図上ではB席間の σ^* -, π^* -結合に対応する電子密度^[4]は明確ではなかった。尚、マキシマムエントロピー法(MEM)を用いたプログラムMEED^[5]で求めた電子密度($\rho_{MEM} \cdot F_{obs}$)には上記金属間結合軌道に対応するような弱い電子密度の高まりが見られたが、モデル電子密度との差($\Delta \rho_{MEM} = \rho_{MEM} \cdot F_{obs} - \rho_{MEM} \cdot F_{calc}$)の分布は差フーリエ合成の結果と同じであり、これらは消えてしまう。

天然試料($(Fe^{3+})_{2.049} Fe^{2+}_{0.913} Mn_{0.004} Mg_{0.002} Ti_{0.001} \square_{0.032} O_4$; \square : vacant site)を用いて126~773Kの温度領域について構造パラメータの変化を検討したところ、126K及び約600K以上での酸素原子座標の増加と、630KでのB席原子の熱振動楕円体の主軸の交換が観測された^[6]。約600K以上での酸素原子座標の増加は高温域でA席に電流担体が生じるという報告と調和的である。B席原子の平均二乗変位量(msd)は低温側で[111]に著しく大きいが、これは[111]に沿ったB席の分裂では説明できなかった。定比組成試料及び二つの鉄欠損試料($Fe_{2.97}O_4$, $Fe_{2.95}O_4$; 後者ではVerwey転移が観測されない)についての構造精密化により、鉄の欠損はB席に濃集する事と、欠損量が増加するに従いB席原子のmsdの異方性が減少することが示された^[7]。この事は、msdの著しい異方性と、おそらくは電流担体の存在による電子-フォノン相互作用との関係、あるいは Fe^{2+} と Fe^{3+} のカップリングによるB副格子の歪の存在との関係を伺わせる。

B席を占めるイオンを Fe^{2+} と Fe^{3+} とに区別できると判定した上で、B-O間距離の観測値から計算した各原子間距離 $R(^{v+}Fe^{3+}-O) = 2.033(7)$, $R(^{v+}Fe^{2+}-O) = 2.084(\text{\AA})$ を他の結晶中での観測

値と比較すると、前者はほぼ一致し、後者は明らかに小さい (e.g. $R(\text{Fe}^{3+} - \text{O})_{\alpha-\text{Fe}_2\text{O}_3} = 2.03(1)$ [8], $R(\text{Fe}^{2+} - \text{O})_{\gamma-\text{Fe}_2\text{SiO}_4} = 2.138(1)$ [9] (Å))。後者は電子の遍歴性に因るとしても、B席の Fe^{3+} が他の結晶中におけるそれと同様な状態で存在する可能性は残るだろう。

References

- [1] Kimura S. & Kitamura K., J.Am. Ceram. Soc., **75** (1992)1440 - 1446.
- [2] Coppens P. & Becker P.J., in International Tables for Crystallography vol. C, 627 - 645.
- [3] Rakhecha V.C. & Satya Murthy N.S., J.Phys. **C11** (1978) 4389 - 4404.
- [4] Sherman D.M., Phys. Chem. Minerals, **14** (1987)355 - 363.
- [5] Kumazawa S., Kubota Y., Takata M., Sakata M. & Ishibashi Y., J. Appl. Cryst., **26** (1993)453.
- [6] Okudera H., Kihara K. & Matsumoto T., Acta Cryst., **B52** (1996)450 - 457.
- [7] Okudera H., Z.Krist.(in press).
- [8] Greaves C., J. Solid State Chem., **49** (1983)325 - 333.
- [9] Yamanaka T., Phys. Chem. Minerals, **13** (1986)227 - 232.

Fe_3O_4 の電子密度分布

理学電機X線研究所 木野幸浩
上野剛
佐藤昭一
無機材研 岡村富士夫
奈良女子大物理 山本一樹

[1] はじめに

マグネタイト : $(\text{Fe}^{3+})_{8a}[\text{Fe}^{2+}\text{Fe}^{3+}]_{16d}\text{O}_4$ の電気伝導や磁気の興味深い性質は 8 面体の位置の $\text{Fe}^{3+}(3d^5)$ と Fe^{2+} イオン ($3d^6:5D_4$ の 3 縮退状態) が原因である。1 次相転位 (124K) の結晶の変形はきわめて小さい物理的性質は大きく変化する。転位に伴って twin が発生し、低温相の結晶構造の正確な決定を難しくしている。

低温相の構造の研究は、代表的には、Hamilton [1], Shirane et al. [2], 飯泉ら [3, 4], 藤井 - 山田 [5] が中性子回折、X線回折実験を Toombs ら [6] と 飯田ら [7] が行っている。近角先生ら [8, 9] の電子線と電子顕微鏡の twin の成長観察も有名である。これらの研究は 1970 年代に集中している。角館らの高圧下の電気伝導の温度変化 [10] や田中らのメスバウア効果 [11] の研究など、 Fe_3O_4 には転移に関する良い研究が多数ある。 Fe_3O_4 の一連の研究は山田 [12] の Δ_5 -phonons model の理論でひとまず一息いれる状態になっていた。

[2] X線回折実験

Hamilton や奥寺[13]によると室温の結晶構造の U - パラメータは大きく、惰性的な C_{44} の以上[14]もある。(石田, 毛利らは、高压下で C_{11} と C_{44} の研究を前進させている。)したがって、室温でも転位に関係する影響があると考えられるので、 Fe_3O_4 の結晶空間の電子密度分布を求め、電子雲の拡がりから結晶構造をみる方法をとった[15]。

実験は現在、世界に 1 台しかない最も短波長の WKA - X(0.208992 Å)を使った。特徴は波長が短いため高角反射の数が多く測定できることや吸収がきわめて小さくサンプルの内部へ入って反射されるため、表面粗さなどの影響がなく、測定精度が高いことである。解析ソフトにはマキシマムエントロピー法(MEM)を使った[16]。電子状態にエントロピー max の手法をとりいれて最もあいまいな解が最も安定なエネルギーの低い状況を出現させてるので Fe_3O_4 にはうってつけと思われる。

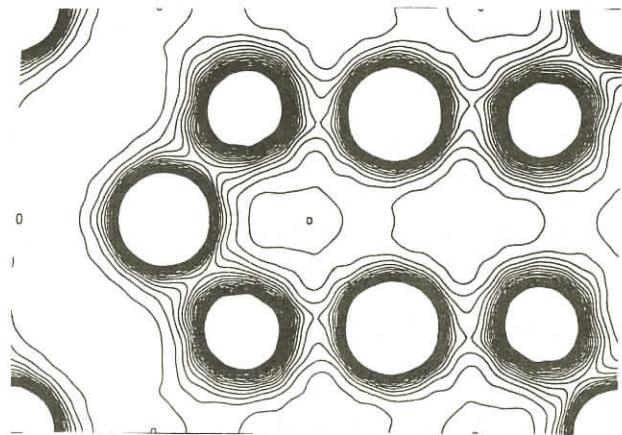


図 1 ; (110)面の電子密度分布

[3] 電子密度分布

1 図は(110)面の電子密度分布である。等高線の間隔は $0.15e/\text{\AA}^3$ で描き、赤い色は A-site, 緑色は B-site の Fe^{3+} イオンを表し、青は酸素である。A-site の Fe^{3+} の中心近傍の電子密度分布は等方的であるが、酸素の方向に向かう部分は共有結合を作つて高く連なつてゐる。4 面体の $[\text{Fe}^{3+} - \text{O}]$ の間の距離は 1.89\AA である。

B-site の $[\text{Fe}^{2+} \cdot \text{Fe}^{3+} - \text{O}]$ の距離は 2.05\AA である。B-site の $\text{Fe}^{2+}, \text{Fe}^{3+}$ の電子密度分布はやや異方的であるが、酸素の方向を向いている電子密度分布は A-site の場合と比較して低く、イオン結合的である。図から、(100)の主軸方向の $[\text{O} - \text{Fe}^{2+} (\text{あるいは} \text{Fe}^{3+}) - \text{O}]$ を結ぶ線は傾いてゐるのがわかる。これは 4 面体が膨張してて、 Fe^{3+} と酸素を結ぶ線上で酸素が遠ざかる方向へ押しやられているために起こつてゐる。シフト量を、傾きがないと仮定して線を引き(110)方向のシフトでとつてみると 0.09\AA になる。これは U - パラメータの値の約 2 倍近い大きいシフトを示すことになる。

$[\text{Fe}^{3+}_{\text{A}} - \text{O} - \text{Fe}^{2+}(\text{Fe}^{3+})_{\text{B}}]$ の磁気交換相互作用の角度は 125.3 度とされていたが、 122.8 ± 0.2 度が得られ、理論上は若干の補正を必要とする。また、図の左側にある A-site の 3 ケの Fe^{3+} イ

オンの間に電子密度分布の薄い帯が見え、A - Aの磁気相互作用は弱く、電気伝導にはならない様子がよく理解できる。

[4] 3 d電子の電子密度分布

MEMの解析手法で Fe_3O_4 の構造因子からFeの内殻の電子数をもつAr原子の構造因子を差し引くと、3 d電子を含む外殻電子だけからなる電子密度分布が描ける。この方法はWeiss and De - Marco[16]が1958年に鉄属遷移金属のFeとCrの3 d電子の数をX線反射強度の測定から求めるために使った。図2は(100)面のA-siteだけが現れる面の電子密度分布で図3はその外殻電子密度の分布である。

図の等高線は、図2は $0.15\text{e}/\text{A}^3$ 、図3はより密に $0.1\text{e}/\text{A}^3$ で描いてある。 Fe^{3+} と酸素は同じ位置にある。A-siteの Fe^{3+} のセンターの非常に近くに4方向に鋭いピークがある。

これは酸素と酸素の間の方向を向いているエネルギー順位の低いd_{yz}軌道で、角度成分で代表させたd($3z^2 - r^2$)、d($x^2 - y^2$)である。A-siteの Fe^{3+} の中心から 0.33\AA の位置に局在して現れている。酸素の位置は電子を全部差し引かれたために不明確である。

d_z軌道d(yz), d(xy), d(xz)は酸素の方向の斜め上と下の方向を向いているから、この面内にはないが、大きく広がっているためFeイオンの中心近くに裾だけが(100)面に残りXの字のようになって見えている。周辺に薄く広がっている電子密度は、すぐ上と下の面の酸素とB-siteのFeのイオンが(100)面へ広がっている部分である。

図4と図5はz方向のz = 25/200へシフトさせた面の電子密度分布と外殻電子の電子密度分布である。等高線は図2と図3と同じである。この面はB-siteと酸素だけが現れる面である。図

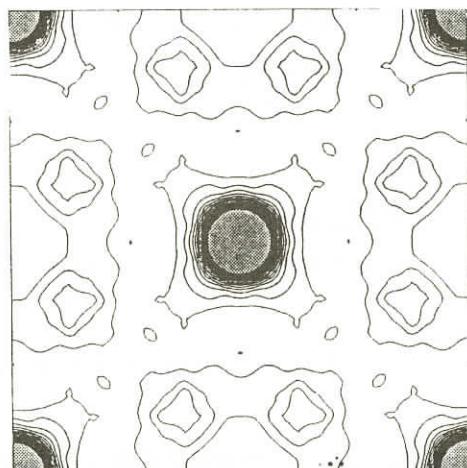


図2 ; (100) 面の電子密度分布

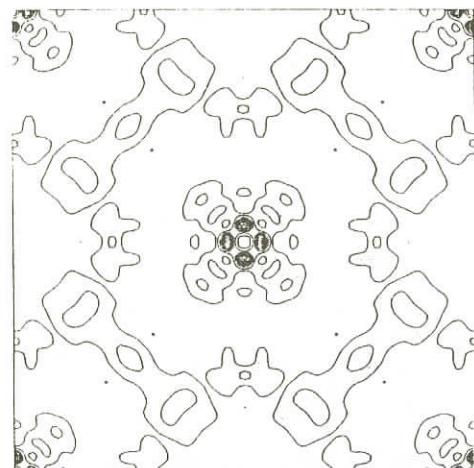


図3 ; (100) 面外殻電子密度分布

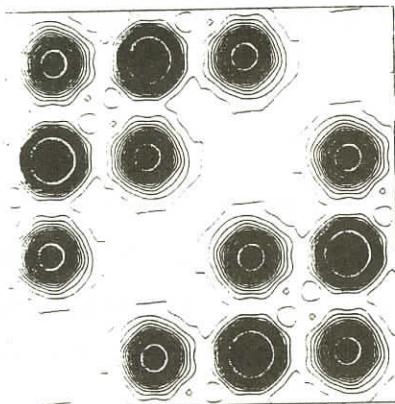


図4 ; (100), $z=25/200$ 面の電子密度分布

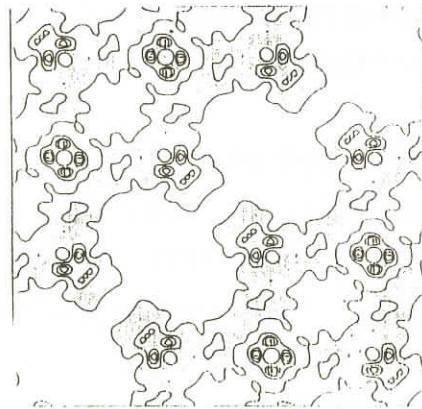


図5 ; (100), $z=25/200$ 面外殻電子密度分布

4の内殻電子の大きい方がB-siteの Fe^{+2} (あるいは Fe^{3+})で、小さい方が酸素である。対角線上に電子密度の薄い部分があり、この対角線の位置の上と下の面にA-siteの Fe^{3+} が交互に並んでいる。

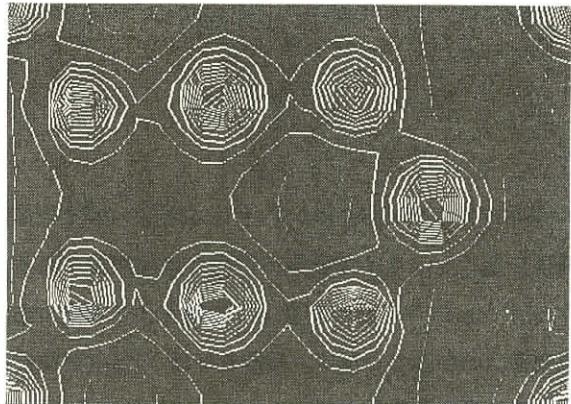
図5のB-siteの Fe^{+2} (あるいは Fe^{3+})では、中心から 0.27\AA のセンターに近い位置の4方向にd軌道が見えている。これは、酸素の方向を向いているエネルギーが高い順位の d_{γ} 軌道の $d(3z^2 - r^2)$, $d(x^2 - y^2)$ である。酸素は小さい丸が残っていて位置が分かるが、酸素から対角線の位置にあるA-siteの方向を向いて二つのピークとA-siteの方向へ伸びている電子密度がある。これらは、それぞれ、酸素の $p\pi$ とA-siteの Fe^{3+} の $d\varepsilon$ である。さらに、B-siteのd軌道をよくみると傾いているのが分かる。

図6は室温の格子定数とイオン半径のデータを使って、分子設計のソフトウェアで描いた Fe_3O_4 の(110)面[17]である。A, B-siteは図1の位置に対応させてある。B-siteのひずみは Fe_3O_4 の本質とよく分かり、この傾きのために立方晶でとればd軌道が残っているように観測される。

[5] 結論

- 1) Wの特性X線を使って Fe_3O_4 単結晶の室温の4軸回折実験を行った。
- 2) ソフトはMEMを使った。電子密度のエントロピーmaxを条件にとるため最もstableな電子を仮定するから Fe_3O_4 にはむいている。
- 3) (110)面, (100)面の結晶格子を電子密度分布で観測した。A-siteの共有結合とB-siteのイオン結合の状況が見えた。
- 4) 外殻電子だけの電子密度分布を求めた。A-siteの Fe^{3+} は $d\varepsilon$ 軌道を酸素の方向へ広がって伸びしており、 $d\gamma$ 軌道は 0.33\AA の位置に局在している。B-siteのd軌道はすべて 0.27\AA の位置に局在している。

- 5) 室温でも大きいひずみをもつており、原因は4面体で膨張していて、酸素が約0.1 ÅシフトしているためにB-siteがねじれるようにひずんでいる。結晶全体で見れば電子密度は局所的で、大変異方的である。
- 6) A-siteのd軌道は立方晶の対称性をもち、格d軌道の局在性は分離しているが、B-siteのd軌道は立方晶からは傾いた方向を向き、各d軌道は中心近傍に局在しているため重なっているように見える。



参考文献

- [1] Hamilton W.C.;Acta. Cryst., 18.1965 and others
- [2] Shirane G., Chikazumi S., Akimitu S., Chiba J., Matui K., and Fujii Y.;J.Phys. Soc. J.39, 1975 and others.
- [3, 4] Iizumi M., T.F.Koetzle, ShiraneG., Chikaxumi S., Matui J., and Todo S.; Acta. Cryst. B38 1982. Iizumi M.;AIP Conf. Proc.53 1979.
- [5] Fujii Y., Shirane G.and Yamada Y.;Phys. Rev. B 11 1974.
- [6] N.C.Toombs and H.P.Rooksby;Acta. Cryst. 4 1951.
- [7] Iida S., yamamoto M. and Umemura S.;AIP Conf. Proc.18 1973.
- [8, 9] 代表的に、近角聰信；日本物理学会誌 38, 1983, p770. を挙げる。
- [10] Kakudate Y., Mori N.and Kino Y.; J.of Magnetism and Magnetic Materials 12, No1, 1979.
- [11] Tanaka M., SiratoriK. and KimizukaN.; J.Phys. Jpn. 53, 1984.
- [12] Yamada Y.; AIP Conf. Proc.24, 1975
- [13] Okudera H.;private communication
- [14] Siratori K.and Kino Y;J.of Magnetism and Magnetic Materials, 20,1980
- [15] 固体物理 31, No7, 1996 及び 7th Int. Cnonf. of Ferrite 1996.
- [16] 扱田誠；日本物理学会誌 48, 2, 1993
- [17] R.J.Weiss and J.J.DeMarco;Rev.Modern Phys. 30, 59,1958.
- [18] 東京理科大 黒田先生のご好意による。

Fe₃O₄結晶のVerwey転移と光スペクトル

東 大 工 朴 成 基

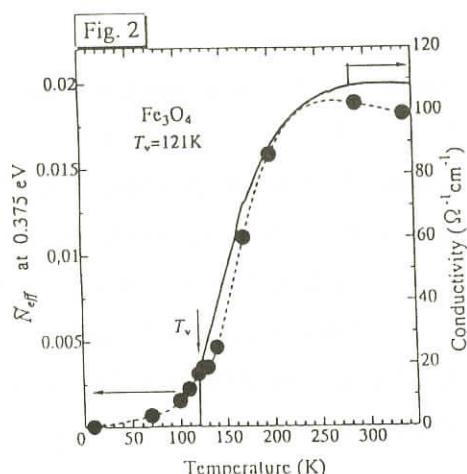
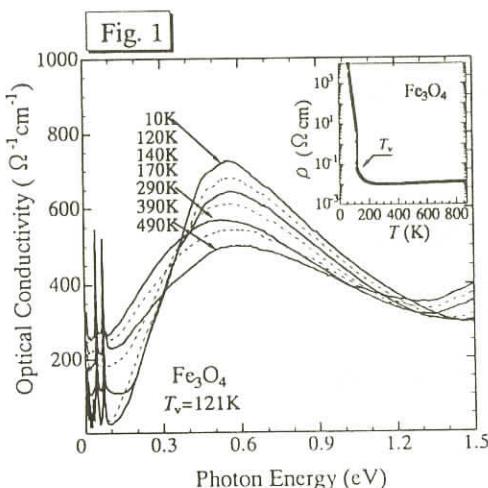
石 川 忠 彦

東大工, JRCAT 十 倉 好 紀

マグネタイト(Fe₃O₄)は、T_v=121K近辺(図1のインセット)でVerwey転移と呼ばれる一次相転移を起こし、そこで抵抗の急激な増加が見られる。この現象はスピネル構造のB-サイトのFe³⁺イオンとFe²⁺イオンがT_v以下で整列する現象であると言われているが、現在までも具体的な発現機構は分かっていない。今回我々は、FZ法で作成したマグネタイトの単結晶を用いて電荷整列相の電子構造の変化を調べるために反射率の温度依存性(10K - 490K)を0.005 - 36 eVまでのエネルギー領域で測定を行った。

図1には、反射率スペクトルからK-K変換で求められた光学伝導度スペクトルの温度依存性を示した。0.6eV近傍のスペクトル構造はB-サイトにおけるFe-イオンの3d軌道内の遷移に起因すると考えられ、温度下げにつれて大きく増加している。また、温度を290Kから下げていくと0.4eV以下のスペクトル強度が大きく減少して、140K(>T_v)では電荷キャップがほとんど開いてしまい、最低温(10K)ではその大きさが~0.138eVである。そして、ギャップ内にわずかに残ったスペクトル強度はT_v以下で消失している。0.1eV以下の領域の大きな2本のピークは典型的なスピネル構造の光学フォノンピークである。

図2では、光学スペクトルから積分して求められた鉄イオン一個あたり有効電子数(N_{eff})の変化分と電気伝導率(σ)を示した。290Kから温度を下げて行くとT_vより高い温度での有効電子数の減少が非常に大きく、T_v以下の変化はごくわずかで電気伝導率と類似な振舞いを見せていることが分かる。この結果はT_vより高い温度においても電荷整列のゆらぎが存在し擬ギャップが開いていることを示唆している。



異常ホール効果と磁気抵抗

東大物性研 東 堂 栄
九 大 理 白 鳥 紀 一
無機材研 木 村 茂 行

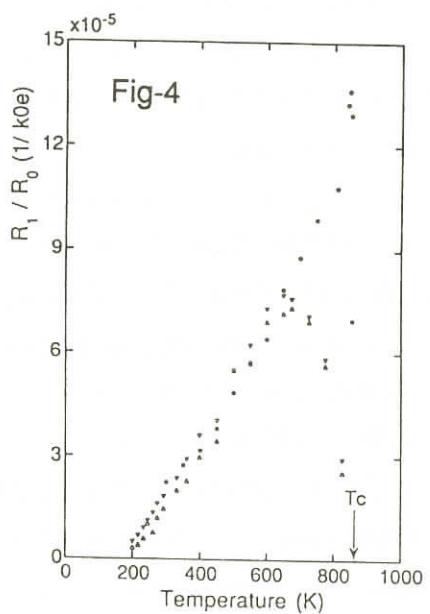
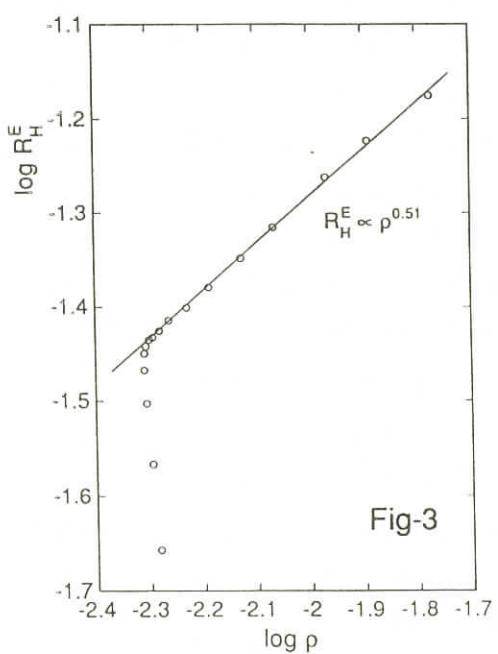
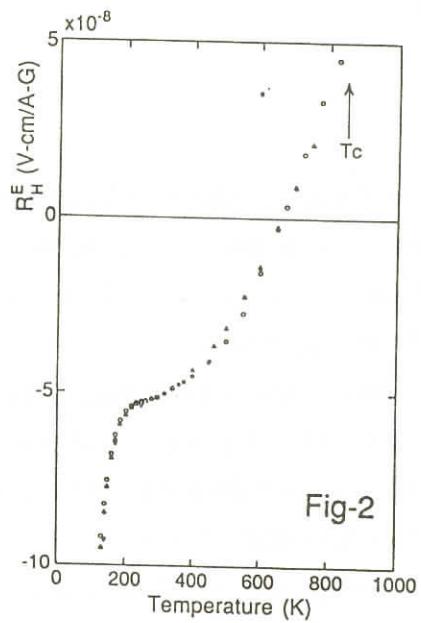
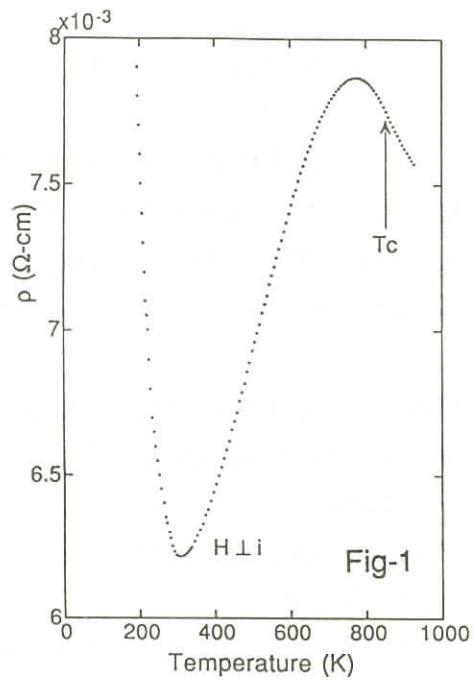
マグネタイト高温相の広い温度範囲で輸送現象を測定した。試料は(110)面の薄板で、面内の(111)方向に電流を流し、(112)軸の周で磁場を回転した。酸化度の異なる3種類の試料を用いたが、Verwey点（トイキオメトリーからずれると下がる）と室温付近の抵抗極小の温度（同じく上がる）以外は差がなかった。

200Kから940Kまでの電気抵抗を図1に示す。温度上昇に伴い、抵抗は低温から減少して室温付近に極小を持った後増大し、780K付近に極大を示す。磁気キュリー点では、ほとんど異常がない。780K以上での半導体的な振る舞いは、新しいキャリヤーの出現を示唆する。これはWuらのゼーベック効果の測定、中村らのメスバウラー効果、奥寺のX線回折の実験と一致し、以下述べるように、伝導電子がBサイトのみならずAサイトにも現れたものと思われる。

図2は異常ホール係数の温度変化である。異常ホール係数と正常ホール係数は、ホール電圧の外部磁場依存性(10kOe以上27kOeまで)を直線で近似する通常の方法で分離した。異常ホール係数は室温で負で、温度が下がると絶対値が急激に増加する。また温度が上がると絶対値は減少し、650K付近で符号を変える。これに対し正常ホール係数は、全温度範囲で負である。室温以下では温度の低下とともに絶対値が増加する傾向を示すが、室温以下では誤差の範囲で変化しないように見える。マグネタイトがフェリー磁性体であることを考えると、キャリヤーのスピンが符号を決める異常ホール効果はAサイトとBサイトで逆の寄与をするはずであり、高温で異常ホール係数が符号を変えることはAサイトも輸送現象に関与するという上記の推論と矛盾しない。

磁気抵抗は10~27kOeの外部磁場中で磁場に比例して減少する。現象論的には、この係数は M_x に比例するはずである。ここでMは磁化、xは高磁場磁化率である。両者を測定して実際に比較すると、650K以下で磁気抵抗の磁場係数は M_x に比例するが、それ以上では比例しない。(図4) これも650K以上の温度で新しいキャリヤーが発生することを示唆している。総じて、室温以上の輸送現象は、遍歴的なキャリヤーを想定して説明することができる。

室温以下の、異常ホール係数を電気抵抗に対してlog-logプロットすることにより、250K以下の温度領域で異常ホール係数が抵抗の1/2乗に比例することが確認された。(図3) この指数はKarplus-Luttingerの現象論: 2とは全く異なり、通常の遍歴的なキャリヤーによる輸送現象としては理解できない。キャリヤーの移動度あるいは濃度が温度変化していることを示唆している。



マグネタイトの低温相の結晶構造 —その誤解、正解、難解そして未解のことごと—

江戸川大学、東大名誉教授 近角聰信

マグネタイトはスピネル構造を持つフェリ磁性体で、その分子式は化学的には、 Fe_3O_4 (= $\text{Fe}^{2+}\text{O} \cdot \text{Fe}^{3+}\text{O}_3$)と書けるが、結晶の中での分布に即して書くと、 $\text{Fe}^{3+}\text{O} \cdot (\text{Fe}^{2+}, \text{Fe}^{3+})\text{O}_3$ となる。この中で()に囲まれた格子点はB格子点と呼ばれ、ここに Fe^{2+} と Fe^{3+} とが混在しているため、両種のイオンの間に電子のホッピングを生じ、そのため酸化物としては異例に大きい電気伝導を示す。しかし、低温に冷やすと、突然約1桁ほど電気伝導が減少することがVerwey¹⁾によって発見された。この温度をフェルヴェ一点といい、Tvと印す。当時はTvは119Kであったが、試料の質が向上するにつれて、125Kにまで上昇し、電気抵抗の跳びも2桁にまで増えた。Verweyは、B格子点で混在していた(Fe^{2+} と Fe^{3+} とがこの温度以下で、B格子点上で規則配列すると考え、c面上一層毎に Fe^{2+} と Fe^{3+} とが配列するいわゆるVerwey orderを提案した¹⁾。この低温相の結晶構造がこの配列に合う斜方晶系に属するというX線の実験²⁾もあり、またこの配列を直接検証する中性子回折の実験³⁾もあって、この規則配列はその後、20年間も信じられていた。

ところが、山田ら⁴⁾は電子線回折によって、c軸に沿って半整数の指数を持つ多くの余分のスポットを発見した。同様な結果が中性子回折によっても得られ、これがイオンの変位によるものであることが分った⁵⁾。電子回折と同様に観察された電顕像によって、双晶構造の存在が明らかになり、結晶形は斜方晶系ではなく、稜面体晶系に属することが分った⁶⁾。これは嘗て否定された粉末回折⁷⁾の結果を支持するものであった。この結果、新しくVerwey orderに代るc-cモデルが提案され、中性子回折によって支持されたかに見えた⁸⁾が、これは多重反射による回折であることが分り、Verwey orderを支持した中性子回折³⁾も否定され、新しく提案されたA Bモデルとともにすべて否定されてしまった⁹⁾。他方、NMRの実験から、吸収線が複雑な電荷状態の存在を示しており¹⁰⁾、それを説明する複雑な電荷分布も提案された¹¹⁾が、これに対する回折実験は行われていない。

さて、半整数の指数の原因と詳細な結晶構造についての中性子回折による研究の結果、双晶からの予想通り結晶の歪みは稜面体的であり、そのため、c軸は-a軸の方向に0.23°ほど傾いており、b軸に沿っては格子は2cの周期で振動的に変位していることが分った¹²⁾。この振動的な変位が半整数指数の回折の原因であり、Tvより高温で観察される Δ_5 格子横振動モードが凝縮したものと解釈された¹³⁾。更に、アルミ・リングで焼ばめをして、単一相化した試料¹⁴⁾についての中性子回折が行われ、この振動に伴う各イオンの変位が明らかにされた¹⁵⁾。

この稜面体歪みや Δ_5 モードの格子変形の原因是、稜面体的に歪んだB格子点にある Fe^{2+} イオンのd ε 軌道電子の2重縮退によって生じる軌道磁気モーメントがLS相互作用によってエネルギーを下げる一種のヤーン・テラー効果であると考えられる。この軌道磁気モーメントはスピン磁気モー

メントと平行であるから、低温相では飽和磁化が増加することが予想されるが、実際は、0.1%ほど減少することが観察された¹⁶⁾。また、低温相の結晶磁気異方性定数のうちKa, KbおよびKuはアレニウス型の温度変化を示すが、これもこの機構で説明できる。また、高次の異方性定数から計算した立方晶の異方性定数K₁は、高温での立方晶のK₁の温度変化の外挿線上にあるが、高温からT_vに近付くにつれてK₁は大きく+側に増加する。その値の外挿線からのはずれをΔK₁とすると、1/ΔK₁はT=81Kで零になるように温度変化する¹⁷⁾。また、<111>方向の弾性定数C₄₄もT_v以上で異常な温度変化をし、その正常値からのずれをΔC₄₄とすると、1/ΔC₄₄も、やはりT=81Kで零になるように温度変化する¹⁸⁾。これらの現象はいずれも異常なFe²⁺イオンの振舞いで説明出来る。この外、ME効果（磁気電気分極効果）も別の双晶を生じ、様々な興味ある現象を呈するが、未解決の問題も多く残されている。これについては文献19を参照されたい。また13Kで磁化¹⁶⁾、結晶磁気異方性¹⁷⁾C₄₄²⁰⁾、比熱²¹⁾などに異常な温度変化が見られるがこれも未解決の問題である。

最後に、このようなマグネタイト低温相の格子の不安定性の原因是、A格子点に無理にFe³⁺イオンが入っていることによる格子の歪みにあることを指摘しておきたい。この物質のu-パラメーターは0.379で、その正常値3/8=0.375からのずれの割合は1%程度で、低温相の稜面体歪みの1.3%やΔ₅モードの1%と同程度である。この考えの証拠として、O²⁻をより大きいイオン半径を持つS²⁺に置き換えたグレギート(greigite)と呼ばれる硫化物は、u-パラメーターが正常値に近く、低温まで変態はなく、抵抗率も10⁻⁸Ωmと金属的な値を保ち続けている²²⁾。

終わりに、この話題についての解説²³⁻²⁴⁾を挙げておく。

文 献

- 1) E.J.Verwey, P.W.Haayman and F.C.Romeijn:J.Chem.Phys. **15** (1947) 181.
- 2) S.C.Abrahams and B.A. Calhoun:Acta Cryst. **6** (1953) 105 ; 8 (1955) 257.
- 3) W.C.Hamilton:Phys. Rev. **110** (1948) 1050.
- 4) T.Yamada, K.Suzuki and S.Chikazumi:Appl.Phys. Lett. **13** (1968) 172.
- 5) J.Samuelsen, E.J.Bleeker, L.Dobrzynskiand T.Riste:J.Appl.Phys. **39** (1968) 1114;Kjeller Report KR - 122 (1969).
- 6) S.Chikazumi, K.Chiba, K.Suzuki and T.Yamada: Ferrites, Proc.Int. Conf. (Univ. Tokyo Press, 1971)p.595.
- 7) N.C.Tombs and H.P.Rooksby:Acta Cryst. **4** 474 (1951);H.P.Rooksby and B.T.M.Willis:Acta Cryst. **6** (1953) 565.
- 8) S.Chikazumi, K.Chiba, M.Matsui, J.Akimitsu and S.Todo:Proc. Int. Conf. Mag., Moscow (Pub. House "Nauka ", Moscow, 1974) I (1) p.137
- 9) G.Shirane, S.Chikazumi, J.Akimitsu, K.Chiba, M.Matsui and Y.Fujii: J.Phys. Soc.

- Japan **39** (1975) 949.
- 10) M.Mizoguchi:J.Phys. Soc. Japan **44** (1978) 1501.
 - 11) M.Mizoguchi:J.Phys. Soc. Japan **44** (1978) 1512.
 - 12) Y.Fujii, G.Shirane and Y.Yamada:Phys. Rev. B11 (1975) 2036.
 - 13) Y.Yamada:AIP Conf. Proc. No. **24** (1975) 79.
 - 14) M.Matsui, S.Todo and S.Chikazumi:J.Phys. Soc. Japan **42** (1977)
 - 15) M.Iizumi, T.F.Koetizle, G.Shirane, S.Chikazumi, M.Matsui and S.Todo: Acta Cryst. B**38** (1982) 2121.
 - 16) M.Matsui, S.Todo and S.Chikazumi: J.Phys. Soc. Japan **43** (1977) 47.
 - 17) K.Abe, Y.Miyamoto and S.Chikazumi: J.Phys. Soc. Japan **41** (1976) 1894.
 - 18) K.Siratori and Y.Kino: J.Mag. Mag. Mat. **20** (1980) 87.
 - 19) 宮本芳子: 固体物理 **26** (1991) 211.
 - 20) Y.Kino:private communication.
 - 21) S.Todo and S.Chikazumi: J.Phys. Soc. Japan **43** (1977) 1091.
 - 22) H.Nozaki:J.Appl. Phys. 51 (1980) 486.
 - 23) S.Chikazumi: AIP Conf. Proc. No. **29** (1975) 382.
 - 24) 白鳥紀一: 電気伝導性酸化物 (津田, 那須, 藤森, 白鳥著 物性科学選書, 講華房) § 5.8.

吸収端近傍でのX線異常散乱

東工大応セ研 佐々木 晴

豊田丈紫

物質構造研 田中雅彦

Fe原子のK吸収端XANES吸収スペクトルには, Fe²⁺, Fe³⁺イオン間で約5eVの化学シフトが存在する。X線吸収データから求めたX線異常散乱因子の実部f'によれば, Fe²⁺, Fe³⁺イオン間でX線散乱能に大きな差が現れる¹⁾。

この結果は, 構造精密化ルーティンでX線回折強度データから決定されたf'値と一致している²⁾。f'値のエネルギー依存性をマグネタイト単結晶のA, Bサイトについて図1に示す。吸収端近傍ではFe²⁺とFe³⁺が1:1に入っているBサイトのf'値が, Fe³⁺のみのAサイトより小さく, 吸収データからの結果と合う。ただし, 精密化から求めた両サイト間でのf'の差は標準偏差と同程度大きい。

原子価差コントラスト法¹⁾でマグネタイト結晶の低温での電荷秩序を研究した。Verwey転移温

度($T_v \approx 123K$)以上の比熱異常領域で、電子線・中性子線回折で報告された特徴的な散漫散乱が、X線散乱からも観察された³⁾。 Fe^{2+} , Fe^{3+} 間で $f' = 1.6$ の差がつく X 線($\lambda = 1.7421 \text{ \AA}$)を選び、PF, BL-10A の 4 軸回折計で測定した結果、 $T = 130\text{K}$ での 440 測定出端[110]*に散漫散乱ストリークが出現した。散漫散乱ストリークの形状や出現する方向は、電子線や中性子線の結果と似ているが必ずしも一致していない。中性子解析からは、酸素原子がひずんだ分子ボーラロンモデルが提案されている。今回の X 線 Huang 散乱解析からは、 Fe^{2+} -, Fe^{3+} イオン対が B サイトの連結する[110] 方向に存在する局所構造が示唆されている。

マグネタイトの Fe イオン間での電子ホッピングは T_v 以下で凍結され電荷秩序状態になっている。今回、単結晶を用い、 $T = 102\text{K}$, $\lambda = 1.7421 \text{ \AA}$ での 3 次元強度データの収集に成功した。2 波長法を用い、現在構造解析中である。図 2 に、常温相では出現しない Fe^{2+} -, Fe^{3+} 規則配列に起因する回折ピークを示す。図中の超過反射は cubic 常温相の指数で表すと、043.5 と 044.5 になる。

- 1) S. Sasaki : Rev. Sci. Instrum. 66, 1573 - 1576 (1995);
- 2) 豊田・佐々木・田中 : 日本放射光学会年会(東京大学), pp.55 (1997);
- 3) T. Toyoda, S. Sasaki, and M. Tanaka : Jpn. J. Appl. Phys. 36, 2247 - 2252 (1997).

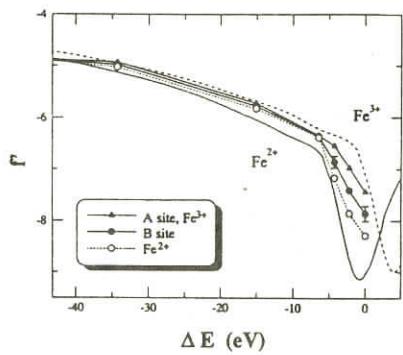


図 1 単結晶 X 線回折データから求めた f' 値。
実線と破線は吸収データより得られた実験値。

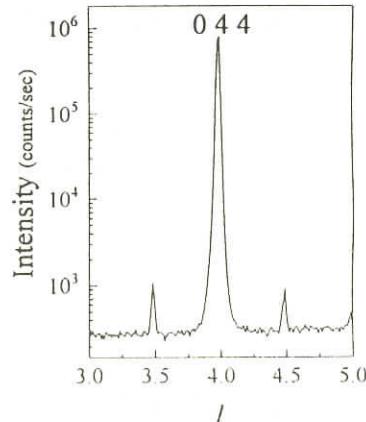


図 2 102K で観察された超過反射。

マグネタイトからのX線共鳴磁気散乱（サイト分離）

高エネルギー加速器研究機構—物質構造科学研究所 河田 洋

N E C 基礎研究所 小林 憲司

茨城医療大 森 浩一

共鳴散乱振幅（電荷散乱、磁気散乱を問わず）は、その着目する原子（イオン）の電子状態を強く反映したスペクトルを有する。即ち、電荷散乱の共鳴項はケミカルシフトから電荷の状態を、磁気散乱の共鳴項は磁気的な状態に関する知見を与える。残念ながら、現在進めている鉄K-吸収端では、前者の電荷の状態は明確に議論できるが、後者の磁気的な状態に関してはその終状態が4p成分であるため最も興味のある3d状態の直接的な議論は出来ない。しかし本研究会のタイトルである「遍歴電子系」の磁気的状態を指し示す実験的なデータを将来に於いて提供出来る可能性を秘めている。我々は室温相におけるマグネタイトの四面体位置(Td)と八面体位置(Oh)の鉄イオンサイトを分離した共鳴散乱振幅（電荷散乱、磁気散乱の両方ともに）をいくつかの反射指数の共鳴磁気散乱のスペクトルから決定したのでそれを報告する。

測定した反射指数は(4,4,0)(4,4,4)(6,2,0)(6,6,2)であり、その構造因子は、

$$F_{440} = 2f(Td) + 4f(Oh) + 7.919f(O) \quad F_{444} = 2f(Td) - 4f(Oh) - 7.879f(O)$$

$$F_{620} = 2f(Td) + 0.0604f(O) \quad F_{662} = i[4f(Oh) - 7.919f(O)]$$

これらのDAFSデータからサイトを分離した電荷散乱の共鳴散乱振幅(f' , f'')を決定し、共鳴磁気散乱のデータからサイト分離した磁気散乱の共鳴散乱振幅($f^{m'}$, $f^{m''}$)を決定する。その結果を図1(a), (b)に示す。先ず(f' , f'')では顕著なプリエッジピークはTdサイトが支配的であること、またOh, Tdサイトの平均価数が+2.5, +3を反映してTdサイトでは2.5eV程度高エネルギー側にシフトし、さらにOhサイトのメインピークには肩が見られその原因是+2価, +3価の局所的な価数に由来するものと考えられる。一方($f^{m'}$, $f^{m''}$)では、同様にプリエッジピークの構造はTdサイトが支配的であり、メインピークの構造はOhサイトの $f^{m''}$ が符号を変化させているのに対して、Tdサイトのそれは符号の変化は見られない。これらの結果は半定量的に以前に報告した定在波法を用いて決定したYIGのサイト分離の結果と一致している。当日はそれぞれのスペクトルの導出法を含めて報告する。

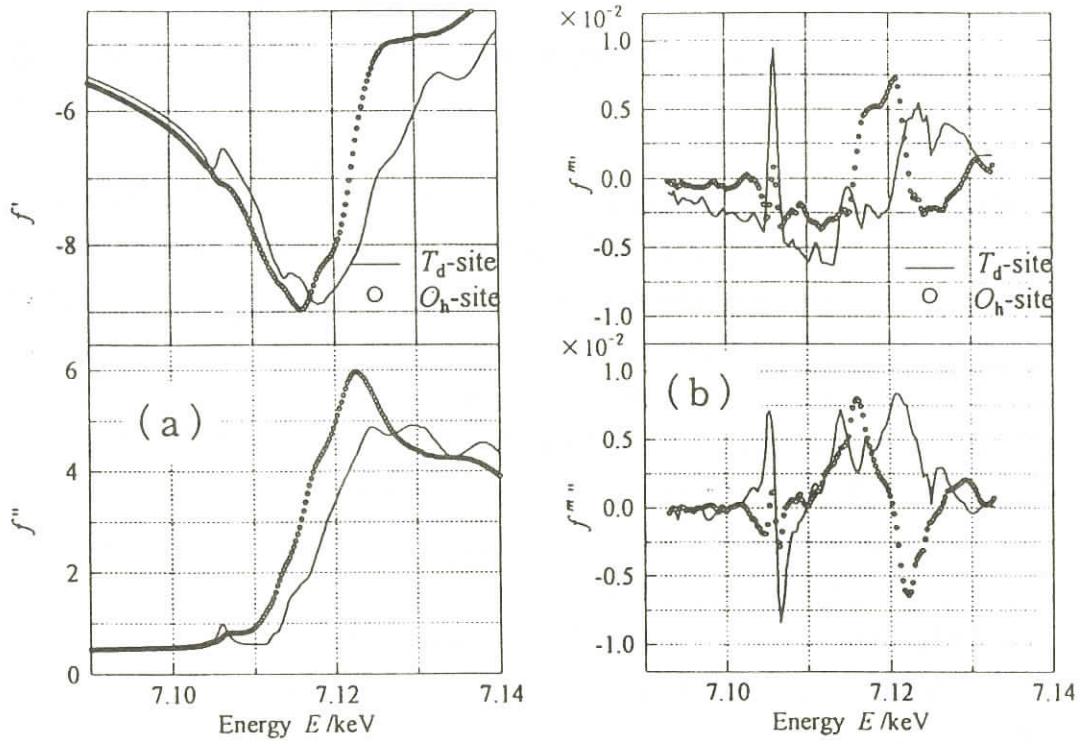


図1 (a) DAFSデータから求めたTd(実線), Oh(○)サイトの共鳴散乱因子(f' , f'')。
(b) 共鳴磁気散乱から求めたTd(実線), Oh(○)サイトの共鳴磁気散乱因子($f^{m'}$, $f^{m''}$)。

超音波の圧力効果

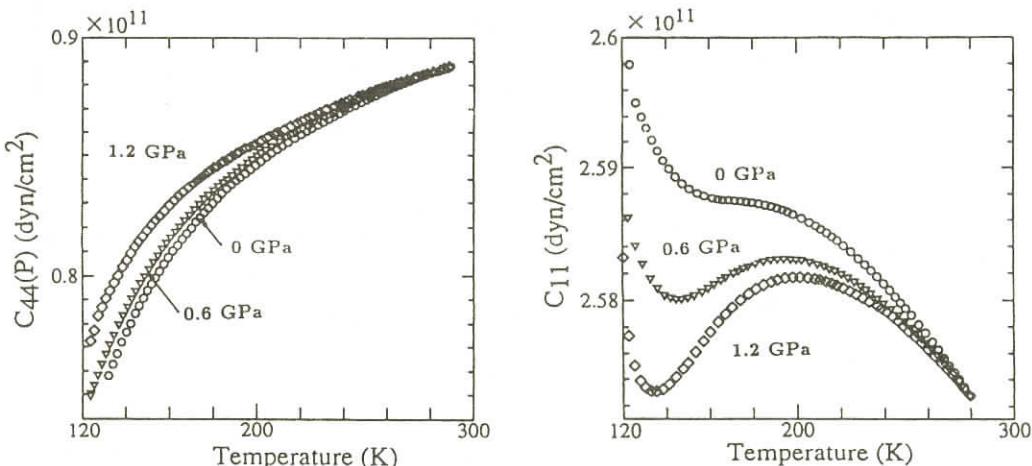
電通大	石田	進
鈴木	勝	
東大物性研	東堂	栄
毛利信男		
九大理	白鳥紀一	

マグネタイトの高温相には、およそ250K以下の温度で中性子の散漫散乱をはじめ多くの異常が現われる。その中で、磁気異方性定数の異常 ΔK_1 および弾性定数の異常 ΔC_{44} は、Weiss温度 $\theta \sim 80\text{K}$ のCurie - Weiss則に従うと報告されている¹。この異常については、[001]方向に磁気異方性をもち、[110]方向に伸び[110]方向に縮んでいるユニットが高温相に存在することで定性的に説明さ

れる²。一方、静水圧下ではVerwey温度 T_v は低下するとともに高温相の電気伝導率の増加が観測されている³。電気伝導率が大きな圧力依存性を示すことから弾性定数の異常に関する歪みのユニットが圧力下でどのように変化し、その変化とVerwey転移との関係が興味を持たれる。そこで、われわれは高圧下で超音波測定を行うことにより、弾性定数の異常の圧力依存性を求めた。

静水圧下での弾性定数 C_{44} および C_{11} の測定結果を下図に示した。(絶対値は280Kで大気圧下の測定と一致するようにシフトされている。) 測定の結果、(1)静水圧を加えることで、 C_{44} の異常は抑制されるのに対し、 C_{11} の異常は増加すること、(2)圧力変化の温度依存性は、(C_{11} の T_v の直上を除いて) C_{44} と C_{11} ともにWeiss温度 $\theta \sim 90$ KのCurie-Weiss則で良く表わせること、が明らかになった。

300K程度の高温までCurie-Weiss則に従うことは、中性子の散漫散乱等の異常が観測される250Kよりも高温においても歪みのユニットが存在することを明確に示している。また、マグネタイトの圧力効果は超音波で観測した歪みのユニットという視点から見ると、圧力により単にユニットの数が変化するということではなく、ユニット自体の変形が大きく変化することである。



[参考文献]

1. S. Chikazumi, AIP Conf. Proc. **29** (1975) 382.
2. K. Siratori and Y. Kino, J. Magn. Magn. Mat. **20** (1980) 87.
3. Y. Kakudate, N. Mori and Y. Kino, J. Magn. Magn. Mat. **12** (1979) 22.

マグネタイト高温相のメスバウアーフィル

帝京大理工 中村真一
お茶大理 田中翠
東大物性研 東堂栄
九大理 白鳥紀一

マグネタイト高温相のメスバウアースペクトルは、Aサイト、BサイトFeに相当する2種のスペクトルからなる。Bサイトスペクトルの半値幅がAサイトスペクトルに比べて大きく、特に室温以下で顕著になることが特徴である。これをBサイトに共存する Fe^{2+} 、 Fe^{3+} 間のエレクトロンホッピングによるとする解釈がなされたこともあった。しかし、その後、幅広の原因が四重極子相互作用と磁気双極子相互作用によるとする報告もあり、他の実験結果とも相まって、ホッピングモデルは否定されている。

我々は、良質の単結晶を用いてFe核の超微細構造の温度変化を精密に求ることで、Feの電子状態を調べるアプローチを行っている。試料は、(110)面出した円盤状(直径8 mm, 厚さ約80mm)のものを用い、面内の[001]、[111]、および[110]の3軸中の一つの軸に外部磁場($\leq 15\text{kOe}$)を印加して測定を行った。これにより、内部磁場と電場勾配とがなす角が一義に決まるため、メ

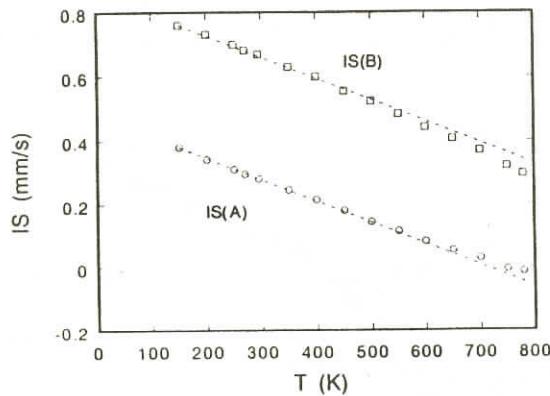


Fig. 1 アイソマーシフトの温度変化

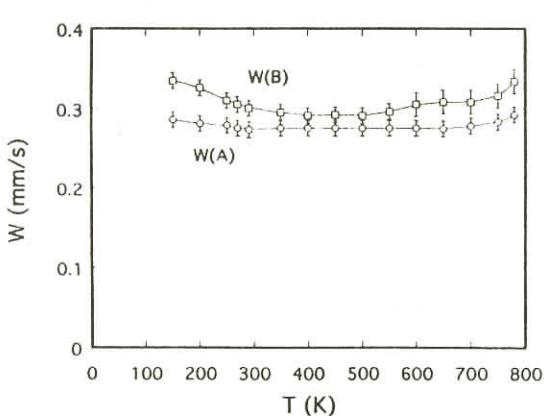


Fig. 2 半値幅の温度変化

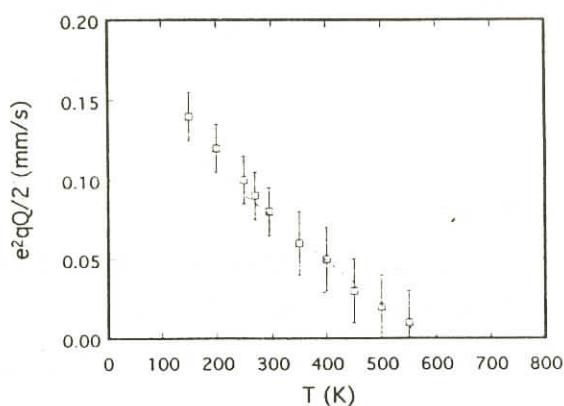


Fig. 3 Bサイト $e^2 qQ/2$ の温度変化

スパウアーパラメーター（内部磁場，アイソマーシフト，半値幅，四重極子分裂，双極子磁場）を正確に決定することができる。参考として，同一試料の粉末スペクトルの測定も行った。

内部磁場(H_{h})とアイソマーシフト(IS)の大きさや，Bサイトの四重極子分裂($e^2 q Q/2$)が小さいことからは，Aサイト，BサイトFeが，それぞれ，あたかも丸い Fe^{3+} ， $\text{Fe}^{2.5+}$ イオンであるかのように見える。しかし， H_{h} 以外のパラメーターからは遍歴性を示唆する振る舞いが見られる。Fig. 1には，アイソマーシフト(IS)の温度変化を示す。500～600K以上で，直線関係からわざかにそれ，AサイトとBサイトの値の差が小さくなっている。このことは，400K以上で，AサイトFeも電気伝導に寄与するという輸送現象結果と対応する。Fig. 2, Fig. 3には，それぞれ半値幅(W)，Bサイトの $e^2 q Q/2$ の温度変化を示す。Bサイトの W は，四重極子相互作用と磁気双極子相互作用を引き去った後でもなお幅広である。Bサイトの W ， $e^2 q Q/2$ は，250～300K以下から急増傾向にあり，BサイトFeの電子状態が変化していることを示す。このことは，250K以下でポーラロンが形成されるという輸送現象や中性子散乱， μ SRの結果と対応している。Bサイトの $e^2 q Q/2$ ，双極子磁場(H_{dip})の大きさは，共にイオンモデルから計算される値の1/3程度である。イオン的でないことを示すとともに，両者の間に何らかの相関関係があることを示唆する。

中性子散漫散乱

九 大 理	白 鳥 紀 一
原 研	石 井 慶 信
	森 井 幸 生
	船 橋 達
物 性 研	東 堂 栄
阪 府 大	柳 瀬 章

マグнетイト高温相に現れる散漫散乱については電子線¹⁾や中性子^{2, 3)}の報告があり，電荷の揺らぎと結合した格子歪み：ポーラロンによるものと考えられている。我々は，ポーラロンの構造について情報を得ることを目的として，実験を行った。

図1に，(001)と(011)面内の散乱強度の等高線図を示す。一見して，Γ点からX点に向かってのびる横波と，ほぼX線を中心とした縦波があることが判る。しかし，前者は(800)など4の倍数の逆格子点のBrillouin zoneに，後者はそれ以外のzoneに強く現れる。特に，(100)軸上には後者は現れない。これらの特徴はポーラロンの構造が，局所的な点対称ではなく，結晶全体の対称性を反映していることを示唆する。そこで，スピネル型の結晶のphononによってこの散漫散乱を解釈する。

$$\text{散漫散乱の強度は, } I(\mathbf{s}) = \sum_{\text{polarons}} |\sum_{\lambda} \sum_j A(\lambda, \mathbf{q}) \times F(\mathbf{s}, j) \times \mathbf{s} \cdot \mathbf{e}(\lambda, \mathbf{q}, j)|^2$$

で与えられる。ここで s は散乱ベクトル, λ と q は phonon のモードと波数ベクトル, j は単位格子中の原子を示す。 A はポーラロン中の phonon の振幅, F は構造因子で, e は原子の変位方向の単位ベクトルである。X点を例にとると, 表1に示すように phonon は対称性によって 4 つに分類される。このうち X_2 は横波だけであるから, X_1 は(100)軸上に強度を持つから, 排除される。残る 2 つの中, X_4 には縦波は酸素にしかなくて強度変化を説明できない。結局ポーラロンを作っている phonon は X 点では X_3 に属し, 縦波のモードは図2のようになっているはずである。

このように, ポーラロンの構造が結晶全体の対称性を反映していることは, これが大きなポーラロンであることを示すものと思われる。

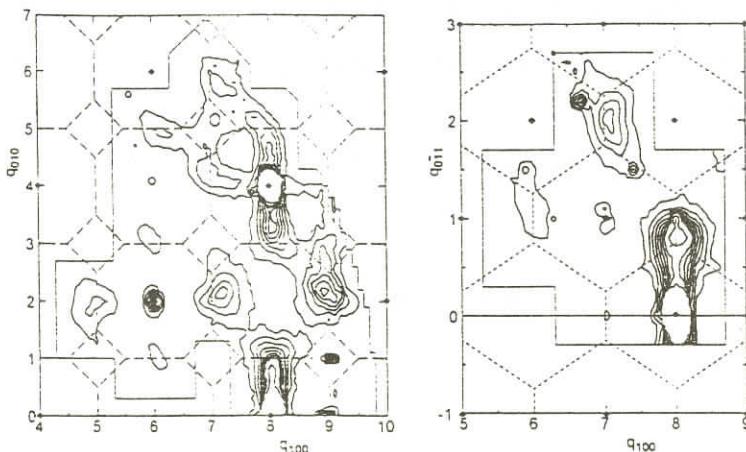


図1 散漫散乱強度の等高線図

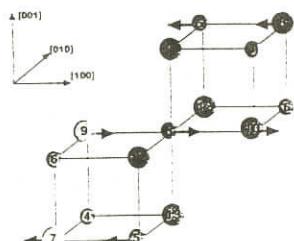


表1 X点の phonon の分類

	A		B		O		Total	
	L	T	L	T	L	T	L	T
1	2	0	2	2	4	4	8	6
2	0	0	0	2	0	4	0	6
3	0	2	2	2	2	4	4	8
4	0	2	0	2	2	4	2	8
	2	4	4	8	8	16	14	28

図2 X線の縦波モード

- 1) K. Chiba, K. Suzuki and S. Chikazumi: J. Phys. Soc. Jpn. **39** (1975) 839.
- 2) S. M. Shapiro, M. Iizumi and G. Shirane: Phys. Rev. B**14** (1976) 200.
- 3) Y. Yamada, N. Wakabayashi and R. M. Nicklow: Phys. Rev. B**21** (1980) 4642.

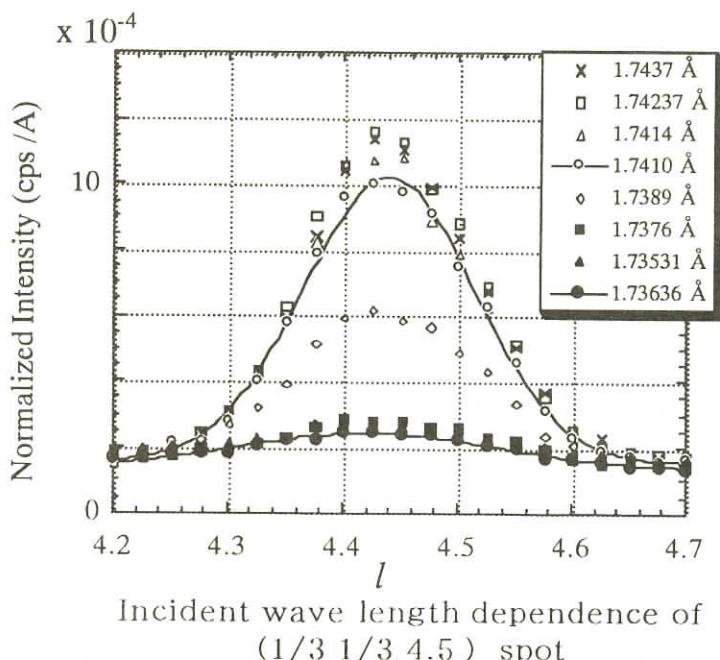
RFe₂O₄の電荷秩序と電荷のフラストレーション

早大理工総研	池田直
早大理工	納土晋一郎
早大理工総研	山田安定
早大理工	近桂一郎
東工大	佐々木聰

RFe₂O₄(R=Y, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu)は、鉄イオン、希土類イオン、酸素イオン各々が構成する三角格子が層状に積み重なった層状三角格子構造をしている。高温の結晶構造はR3mである。電気的性質は、Fe-O-Fe間のbond angleが120度であるために電子の局在性が良く、絶縁体としてふるまう。高温の電気伝導は、Fe²⁺とFe³⁺間のホッピング型の電子移動により実現する。

この電荷の中性を考えると、Fe²⁺とFe³⁺はそれぞれ-および+の電荷としてふるまう。この静電エネルギーを起源とし、各々のイオンは互いに三角格子上で隣接する。このとき、イジング二次元三角格子反強磁性体のスピン配置と同様に、電荷の配列に関してエネルギーの縮退が起こり、電荷配列が一意的に定め得なくなる。これは電荷フラストレーションと呼びうる状態である。

一般にフラストレーションが存在する系では、フラストレーションの起源となる相互作用は抑制され、長距離秩序は出現しない。しかし系の配置のエネルギーの縮退度が極めて大きいため、より



小さな相互作用によって縮退が破れ、秩序状態が出現することが期待される。

事実 RFe_2O_4 では電荷の秩序配列が出現する。 RFe_2O_4 では、格子歪みや鉄スピン間の超交換相互作用といった静電エネルギーと異なる相互作用が支配的となり、電荷の秩序配列が三角格子上に出現すると考えている。

今まで RF_2O_4 の電荷秩序は、中性子回折や磁場中メスバウアー効果による実験から推定してきた。我々は電荷秩序の存在を、より直接的な観測により確かめることを目的とし、高エネルギー物理学研究所の放射光実験施設を用いて、 $LuFe_2O_4$ の単結晶について異常分散効果を利用するX線回折実験を行った。

X線の波長は、鉄原子のK殻吸収端近傍を選んだ。 Fe^{2+} と Fe^{3+} の原子散乱因子がこの波長領域で異なるため、鉄イオンの秩序配列が存在すれば、X線の回折反射強度が入射X線波長に対し変化する。

室温において超格子回折点(1/3, 1/3, 4.5)をc*軸方向に横切った場合の反射強度(1/3, 1/3, 1)の、入射X線波長依存性を図に示す。入射波長を吸収端付近で1.736 Åから1.741 Åまで変化させた場合、回折強度は約8倍変化し、この反射と同程度の回折角を持つブレーグ反射強度に比べて大きな変化をする。これは、ab面内で Fe^{2+} と Fe^{3+} が、結晶単位格子の三倍の周期で秩序配列していることを示す。

これは今まで主張してきた電荷秩序構造を支持する。

SrFeO₃, CaFeO₃, Sr₂LaFe₃O₉

京大化研 高野幹夫

川崎修嗣

鉄を含む酸化物は数多く知られている。そのほとんど Fe^{2+} あるいは Fe^{3+} を含むものであるが、希に Fe^{4+} を含むものがある。 $SrFeO_3$ と $CaFeO_3$ が典型的である。¹⁾また、 $Sr_2LaFe_3O_9$ などには Fe^{3+} と Fe^{4+} が共に含まれている。ここに挙げた三種のものは、いずれもペロブスカイト型構造をとる（ただし、他の構造をとる例— $BaFeO_3$ など—が無いというわけではない）。

酸素八面体中の Fe^{4+} イオンは、高スピン状態- $t^3 e^1$ -にある。 Mn^{3+} とその点では同じであるが、 $(FeO_6)^{-8}$ 八面体の電荷移動エネルギーは、大きな負の値(-3eV)をとる²⁾。すなわち、 $Fe^{4+}(O_6)^{-12}$ というより、 $Fe^{3+}(O_6)^{-11}(t^3 e^2 L)$ に近い。そのような $(FeO_6)^{-8}$ 八面体は、ヤーンテラー歪みを示さない。 $SrFeO_3$ は極低温まで立方晶のまま留まる。

$CaFeO_3$ は、 $GdFeO_3$ 型に歪んだままである。 $Fe-O-Fe$ 結合は150度程度に折れ曲がっているので、 $SrFeO_3$ に比べるとバンド幅が狭い。この差は、 $SrFeO_3$ が金属状態を保ち続けるに対し、

CaFeO_3 は290Kで金属一半導体二次転移（図1左）を起こすというかたちで現れる³⁾。転移後のメスバウアースペクトルの温度変化は、形式的な価数が $(4-\delta)^+$ と $(4+\delta)^+$ である二種類のFeイオンが生まれ（価数不均化）、低温ほど差（ δ 値）が大きくなつてやがて飽和することを示す。図1右に示す4Kでのスペクトル中のアイソマーシフトと内部磁場の二成分間の差は、これらを Fe^{3+} と Fe^{5+} （つまり $\delta=1$ ）とみなしてもよいほどの大きさである。

形式的な価数の連続性は、固溶体 $\text{Ca}_{1-x}\text{Sr}_x\text{FeO}_3$ にもみられる。すなわち、4Kでのメスバウアーパラメーターの二成分間の差は、Sr濃度が高くなるにつれ連続的に小さくなる。図1右にみられる SrFeO_3 の単成分スペクトルは、その連続的な変化の行き着く先に相当する。

$\text{Sr}_2\text{LaFe}_3\text{O}_9$ のは、220Kを境に、常磁性平均価数状態から反強磁性価数不均化・秩序分布状態に一次転移する。低温相で共存するのは、組成から考えられる1:2の割合の Fe^{3+} と Fe^{4+} ではなく、2:1の比の、やはり Fe^{3+} と Fe^{5+} である^{4), 5)}。

これらの価数不均化状態は、Co置換により溶ける。 $\text{CaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$ と $\text{Sr}_2\text{La}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_3\text{O}_9$ はいずれも、それぞれ固有のCo濃度で、一種類のFeイオンのみ存在する状態に転移する。そして、その状態は強磁性金属である³⁾。Co置換は、 Co^{4+} が低スピノン状態(t^5)に近いことから FeO_3 格子中のe電子数を減らす（酸素ホール濃度を高める）意味をもつと考えている。

これらを一括りにすると、 Δ_{gap}/W （ギャップ/バンド幅）が小さくなるにつれ、基底状態の性格が、絶縁性反強磁性価数不均化・秩序分布型(CaFeO_3 , $\text{Sr}_2\text{LaFe}_3\text{O}_9$)→金属的反強磁性価数均一型(SrFeO_3 :ただし、最近接相互作用は強磁性的である)→金属的強磁性価数均一型($\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$: $x=0.5$ で $T_c=340\text{K}$ に達する。他に、 $\text{CaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$, $\text{Sr}_2\text{La}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_3\text{O}_9$)のように逐次変化していく、といえそうである³⁾。

高スピノンd⁴状態のよく知られた面白いさは、ヤーンテラー効果にある。しかし、 Fe^{4+} にはそれはない。いわば、金属イオンの位置にあやしげさがあるのではなく、酸素イオンにそれが移されていて、その結果として Mn^{3+} とは質的に異なる相転移を示すようになると考えることができる。 CaFeO_3 の価数不均化状態では、八面体が交互に伸縮するbreathing modeが凍結されているはずであるが、実験的な確認に手間取っている。酸素イオンの変位が、非常に小さいためであろう。

この仕事は、藤森淳（東大・理）、武田保雄（三重大・工）、菅野了次（神大・理）、足立祐彦（京大・工）、その他の各氏にお世話になりながら行われたものである。

[参考文献]

- 1) M. Takano *et al.* : Mat. Res. Bull., **12** (1977) 923.
- 2) A.E.Bocquet *et al.* : Phys. Rev. B **45** (1992) 1561.
- 3) S. Kawasaki *et al.* : in preparation.
- 4) M.Takano *et al.* : J. Solid State Chem. **39** (1981) 39.

5) P. D. Battle *et al.* : J. solid State Chem. **84** (1990) 271.

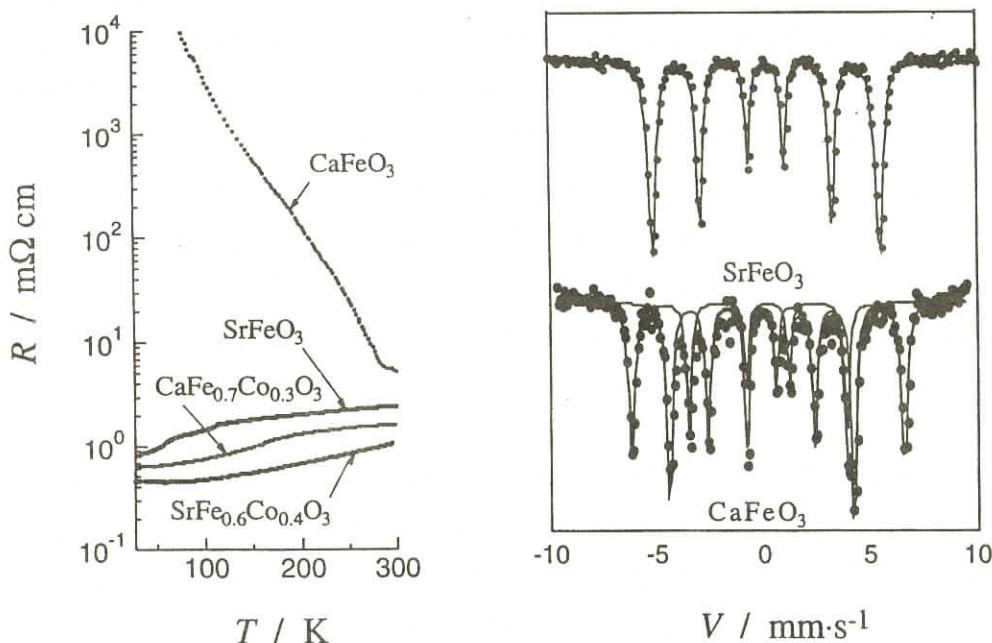


図1 抵抗の温度変化（左）と4 Kでのメスバウアースペクトル（右）

LiMn_2O_4 スピネルの構造、磁気、輸送特性

N E C 基礎研究所

島川祐一

N E C 材料開発センター

沼田達治

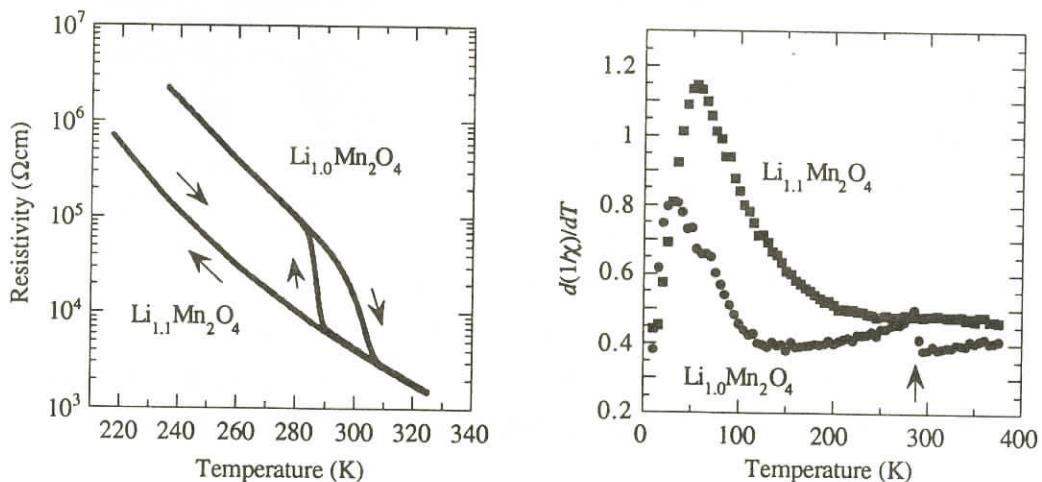
田淵順次

LiMn_2O_4 スピネルは LiNiO_2 や LiCoO_2 と共に高性能Liイオン2次電池の正極として有望視されている材料である。しかしながら、電池性能の観点では充放電サイクルの繰り返しによる容量の劣化が大きな問題であり、実用化の妨げとなっていた。これに対し、最近、Liを過剰にした組成でスピネルを合成することにより、サイクル特性が著しく改善されることが明らかにされ¹⁾、実用化への大きな進展を見ることになった。

一方、基礎物性にまで遡ると LiMn_2O_4 スピネルは結晶構造や磁気・輸送特性に関して極めて興味深い研究対象である。Mnイオンはスピネル構造のBサイトを占め、 Mn^{3+} と Mn^{4+} を1:1に含む混合原子価となっている。 Mn^{3+} はJahn-Tellerイオンであることから、格子と磁性や輸送特性との相関も期待される。実際、Li過剰組成材料による電池特性の向上も結晶格子の安定性と関

連しているのではないかと考えられている。

本研究では定比組成 LiMn_2O_4 及びLi過剰組成材料のスピネルを合成し、その構造、磁気及び輸送特性の評価を行った²⁾。定比組成スピネルでは、室温付近で立方晶からの歪みによる構造相転移が観測される^{3, 4)}。この温度において、下図に示すように電気抵抗と磁化率にも異常が見い出された。特に低対称相への構造相転移に伴う電気抵抗の急激な変化は、マグнетタイトとして知られている Fe_3O_4 スピネルのVerwey転移と多くの共通点を見いだすことができる。Li過剰組成のスピネルでは、構造相転移が抑えられ、磁気輸送特性にも異常が見られない。常磁性有効磁気モーメントから見積もられるスピネル中のMnイオンの平均原子価は、過剰Li組成で合成した材料で大きくなっている、Jahn-Tellerイオンである Mn^{3+} の比率の低下が構造相転移を抑えられていると思われる。



[参考文献]

- 1) R. J. Gummow *et al.*, Solid State Ionics **69** (1994) 69.
- 2) Y. Shimakawa *et al.*, J. Solid State Chem. (1997) (in press).
- 3) A. Yamada *et al.*, Mater. Res. Bull. **30**(1995) 715.
- 4) 及川健一, 神山 崇, 他 日本物理学会1997年年会。

トンネル構造を持つ混合原子価マンガン酸化物の電子輸送現象と磁性

東工大理工 佐藤博彦

山浦淳一

榎敏明

京大人間環境 山本直一

マンガンは、様々な酸化状態が安定であるため、混合原子価状態をもつ酸化物が多数存在する。さらに、これらの中には層状構造やトンネル構造などの特異な構造を持つものが多い。我々は、このような構造の特異性を活かして、混合原子価に由来する様々な物性を制御することを目標として研究を行っている。

今回報告する物性 $K_{1.5}Mn_{80}O_{16}$ は、図 1 に示すような hollandite 型構造を持つ。この構造は、陵共有の MnO_6 八面体を基本とし、図のような「 2×2 型」のトンネルを含んでいる。トンネル内のサイトのうち $3/4$ は、 K^+ イオンにより占有されているが、少なくとも室温では、これらのサイトは秩序化していない。カリウムからマンガンへの電荷移動の結果、マンガンは $Mn^{4+} : Mn^{3+} = 6.5 : 1.5$ の混合原子価状態をとっていると考えられる。電気伝導度は図 2 に示すように、室温付近ではバッチによらずに $E_A/K_B = 1000\text{K}$ の活性化型となっている。一方、対応する温度領域で熱電能は温度によらずほぼ一定値 $-100\mu\text{V/K}$

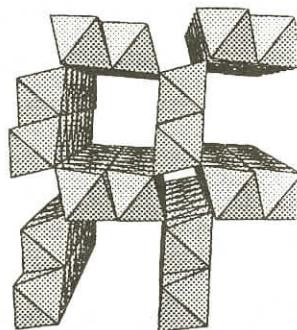


図 1 hollandite 型構造

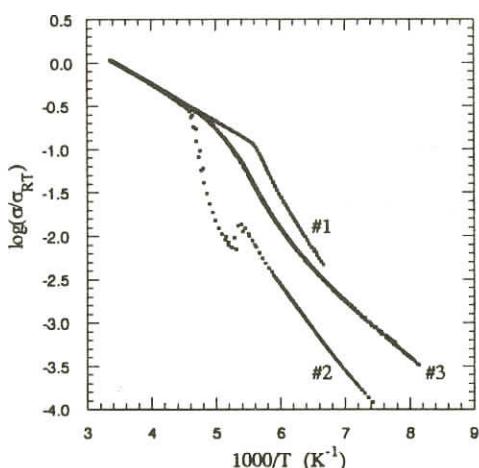


図 2 電気伝導度の温度依存性

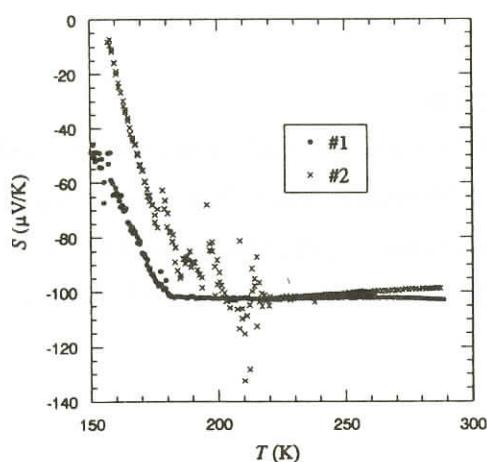


図 3 热電能の温度依存性

を持つ(図3)。これらの結果から、室温付近での電気伝導はスマールポーラロンのホッピングにより生じているものと考えられる。また、図から明らかなように、この物質は低温(175K~215K)で、電気伝導度の減少を伴う相転移を示す。これは、低温で何らかの電荷秩序化が生じたためと考えられる。なお、この相転移は大きなバッチ依存を示している。バッチの違いがトンネル内のカリウムの存在状態の違いに由来するものであるとすると、マンガンの電荷の秩序化はトンネル内のカリウマイオンの状態の影響を強く受けていると考えられる。一方、磁化率の測定結果から、この物質は、上に挙げた相転移 T_1 の他に、2つの磁気相転移 T_2 (52K), T_3 (20K)を示すことが明らかになった。温度領域 $T_3 < T < T_2$ では弱強磁性(飽和磁化の0.3%程度)が発生し、 $T < T_3$ では再び消える。さらに、磁化率の異方性の測定結果から、 $T < T_3$ ではらせん磁性が生じていることが示唆される。 $T_3 < T < T_2$ における弱強磁性の起源については明らかでないが、らせん磁性と電荷秩序状態の共存により生じている可能性がある。

遷移金属酸化物の電荷整列相転移と金属一絶縁体転移

東大・工 十倉好紀

Verwey転移と類似の特徴、すなわち電荷整列とそれに関連した金属一絶縁体(M1)転移を示す、遷移金属酸化物最近の研究について、レビューを行った。同じFe酸化物では、ペロブスカイト型物質 $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{FeO}_3$ ($x = 2/3$)の例をとり、形式電荷が Fe^{3+} と Fe^{5+} の規則配列が(111)面ごとに3倍周期で発達すると同時に、反強磁性転移とM1転移が起こることを紹介した。

また、擬2次元系での例として、 $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_4$ での電荷整列(電荷・スピニストライプ構造)相転移における輸送特性の変化と電荷励起およびスピニ励起のスペクトロスコピーの例をまとめた。

これらの例に加えて、最近大きな関心を集めている、巨大磁気抵抗酸化物(Mn酸化物ペロブスカイト)の電荷・軌道整列と磁場による電荷整列状態の融解現象について、レビューを行った。バンド幅とフィーリングの制御により、電荷整列状態と強磁性金属状態の競合がどのように起こるかを、実例を挙げて紹介した。また、最近の、光・X線照射、電場印加による電荷整列状態の相制御の試みについて述べた。

最後に、3d電子系での、電荷整列相、あるいはM1転移における、軌道整列効果の一般的な重要性を指摘した。

物性研短期研究会「遍歴電子系としてみたマグネタイト」参加者コメント

東京大学名誉教授 飯田修一

研究会では多くの活発な討論が行われたが、その際行ったコメントを報告に加えて戴ければ幸いである。なお1981年7月13, 14日物性研短期研究会「マグネタイトの低温相」が開催され、世話人は飯田・近角・山田（安）・白鳥・水島・溝口（森）であって、飯田が代表、白鳥が幹事、Opening Talkは近角で、今回の世話人と講演者との重複は白鳥に加えて毛利であった。その間16年の歳月が経過して居り、誠に感無量のものがある。

さて、単結晶中性子線実験に現れるDiffuse Scattering(DS)の原因としての格子歪みの広がりに関して、白鳥・柳瀬(B)と山田(A)の間で問題となった。格子歪みの内容、例えば構造とか、位置とか、方向とかに就いては実験結果内容の詳細な解釈の問題であり、又研究会では深刻な意見の相違にならなかったと理解するので、本コメントでは考えない。問題の内容は、(A): Fe^{3+} を安定イオンと考えて Fe^{2+} 上にある余分の電子が熱励起により主として最近接の Fe^{3+} 上へ移動する事を念頭に置いて、数イオン間隔といった比較的短距離の Fe^{2+} と Fe^{3+} の短範囲規則配列クラスター発生に伴う格子歪みの位置の、結晶内での空間的な揺動に起因する散乱として、DSを解釈する立場、と、(B):そうではなく、こうした電子位置の揺動とそれに伴う局在ポーラロン的な結晶歪みの揺動因子が関係してはいるが、明瞭なPhononとしての周期性を持ち、立場により結晶全体をその領域とする格子歪み揺動の近似が成立する散乱として理解する立場、との論争であり、研究会では決着しなかったと理解する。なお良質のイオン結晶でも 10^6 cm^{-2} 以上、従って、 $10 \mu\text{m}$ 以下の距離に線状格子欠陥が存在すると考えねばならない事も重要と判断する。筆者は数年以前は(A)の立場に近い理解をもっていたが、結合体系物理学の最近の発展の結果として、EPR問題を解決し、波動・粒子二重性の解明に成功した結果、格子欠陥を媒介とするイオン移動の場合でも、前者に後者を加えた考え方となり、まして電子移動では強く後者の立場に近づいて居る事を指摘する。EPR問題の場合、考えている粒子（電子、光子）は発射の瞬間に既にDetectorの存在を知っており、Detectorを含む全体系のハミルトニアン(Delayed Choiceでは無いとして)の解の一つである波動関数のモードに乗って、発射はRetarded Mode、検出はAdvanced Modeで行われると結論された。現在問題の、結晶内の電子位置移動などの現象は遙かに小さい体系の課題であり同一の考えが適用される。お隣に Fe^{3+} イオンがあり、自分が Fe^{2+} であって、余分の電子があるからというだけではなく、全結晶がその状況を知っていて、現在のModeから、位置交換をした新しいModeの状況に全ハミルトニアンの解としての時間変化Modeを使って移行するというか、変化していく。その変化それ自身がModeである。従ってドミノ方式というよりも長距離に亘り一齊同位相での相関した位置移動と考えて良い。空格子点利用のイオン移動の場合には、ド・ブロイ波的な考え方で同様なモードが存在し、(B)の因子を無視してはならないと考えるが、質量に大きい差があり、量子効果

モードに局在性近似が適用出来て、結果としてその場合にはリング拡散等の多等連携モードを加えた上で(A)の近似もなお有効と判断する。以上の推定は、フェライトの磁場中冷却効果磁気異方性の等温緩和実験で、イオン位置に依存した高温の短範囲規則配列効果の場合にはその緩和時間定数の分布が比較的狭く単純であるが、低温の電子による短範囲規則配列効果の場合には、その分布が非常に広く且つ連続的で、桁数で変わる状況であるという実験結果とも一致する。結晶全体としては表面からストカスティックな熱擾乱を受けているが、それは表面からの熱伝導の常識で推定される範囲に在り、マイナーであり、熱擾乱の本体は内部構造だけから決定・形成出来る圧倒的多数の熱運動モードの励起であると推定され、それらは(B)型式の近似が最も有効である。なお波動関数は時空間の歪み相当の実在であって、電子そのものは 0.01 \AA といった小さいサイズであると考える事が許されるが、粒子間の相互作用の実体は媒達論的相互作用が真理である結果として波動関数が担って居り、高エネルギー実験等では問題となる小さいサイズの電子の存在は無視し、時空間に広がる波動関数の姿で現象を理解して差し支えないと判断して居る。勿論中性子線が巨視的な大きさの波束を持つと考える事も必然で、同一の枠組みの下にある。筆者のコメントは従って(B)を支持するものであるが、 $\text{Fe}^{2+}-\text{Fe}^{3+}$ 短範囲規則配列の課題は、同様な価数揺動を伴う磁性化合物の現象の中では、(A)的性格が最も高いと経験的に推定して居る対象であって、従って疑問の余地の無い形での実験的検証が望まれる。

物性研究所談話会

日 時 1997年7月23日(水) 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. J. C. Parlebas

(所属) (IPCMS - GEMME, Louis Pasteur Univ.)

題 目 Calculation of 3s Photoemission Spectra of Vanadium on Graphite

要 旨

A few years ago, a satellite structure in the vanadium 3s-XPS spectrum of V clusters upon graphite was observed and attributed to the presence of magnetic moments on the V surface. Here, we present calculations of these spectra using a cluster model which takes into account intraatomic d - d and d -core electron correlation and hybridization between V- d and graphite- π states. When the V-graphite distance is increased from 1.5 to 2.0 Å the system undergoes a low-high spin transition which is clearly evidenced in the evolution of the XPS line shape. Although direct comparison with experiment is difficult, our study suggests that the observed satellite is due to core hole screening rather than a magnetic moment on the V atom.

日 時 1997年9月16日(火) 午後4時～5時

場 所 物性研究所Q棟1階講義室

講 師 Dr. Markus Donath

(所属) (Max-Planck Institut für Plasmaphysik)

題 目 Magnetic Surface States in Thin-Film Systems:

Studies with Spin-Resolved Inverse Photoemission

要 旨

Two-dimensional electronic states confined at the surface of a ferromagnetic material play an important role for understanding surface magnetic properties on a microscopic scale. Partially occupied, exchange-split surface states reflect the imbalance between majority and minority electrons right at the surface. Totally occupied or empty surface states also carry magnetic information via hybridization with the truly magnetic states. Their study provides important test data for any detailed theory. Spin-resolved inverse

photoemission is employed to detect empty surface states in magnetic thin-film systems. Fe/Cu(001) will be discussed as an example of a ferromagnet with itinerant moments, Gd/W(110) as an example of a localized ferromagnet.

日 時 1997年9月29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 吉 信 淳 氏

(所属) (東京大学物性研究所・先端領域)

題 目 吸着ポテンシャルエネルギー一面と表面動的過程

要 旨

遷移金属表面における分子の吸着ポテンシャルエネルギー一面の詳細が、表面分光法などの進歩により、実験的に明らかになりつつある。更に、吸着エネルギーが散逸される過程において、入射粒子が表面上で様々な相互作用や反応を起こすことがわかつてきた。

本講演では、最近の我々の研究 [CO/Ni(100)など]を中心いて、吸着エネルギー、吸着サイト間のエネルギー差、ポテンシャル極小点の曲率、サイト間のエネルギー障壁に関する実験的研究を紹介する。また、吸着エネルギーの散逸／移動に伴い、過渡的な表面移動、吸着サイトのミキシング、吸着誘起反応、吸着誘起脱離など、従来のLangmuir-Hinshelwood型やEley-Rideal型の表面反応の範疇に入りにくい現象についても言及したい。

東京大学物性研究所助手公募の通知

下記のとおり教官の公募をいたしますので、適任者の推薦、希望者の応募をお願いいたします。

1. 研究部門名等及び公募人員数

先端領域研究部門 吉信研究室 助手 1名

2. 研究内容

固体表面におけるダイナミクスおよび物性の実験的研究。金属、半導体、絶縁体などの固体表面上における原子・分子の動的挙動（振動、拡散、エネルギー散逸過程、素反応など）および原子レベルでデザインされた低次元構造物の物性を、表面分光・局所プローブ法などを用いて意欲的に研究する人を希望する。経験の有無は問わない。

3. 応募資格

修士課程修了、又はこれと同等以上の能力をもつ者。

4. 任期

内規により5年を原則とする。

5. 公募締切

平成9年11月14日（金）必着

6. 就任時期

決定後なるべく早い時期を希望する。

7. 提出書類

(イ) 推薦の場合

- 推薦書（健康に関する所見を含む）
- 履歴書（略歴で良い）
- 業績リスト（必ずタイプすること）
- 主要論文の別刷（5編以内）

(ロ) 応募の場合

- 履歴書
- 業績リスト（必ずタイプすること）
- 主要論文別刷（5編以内）
- 所属の長又は指導教官等の本人についての意見書（宛先へ直送のこと）
- 健康診断書

8. 宛先

〒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 総務課人事掛 電話 03(3478)6811 内線 5022, 5004

9. 注意事項

先端領域研究部門吉信研究室助手応募書類在中、又は意見書在中の旨を朱書し、書留で郵送のこと。

10. 選考方法

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

平成9年7月28日

東京大学物性研究所長

安岡弘志

人 事 異 動

研究部

(昇 任)

所 属	職 ・ 氏 名	発令日	備 考
新物質科学研究部門	教 授 八木 健彦	9. 9. 1	同部門助教授から
物性理論研究部門	教 授 今田 正俊	"	"
附属中性子散乱研究施設	教 授 加倉井 和久	"	同施設助教授から
附属物質設計評価施設	教 授 上田 寛	"	"

1998年度日米科学協力事業「中性子散乱」研究計画の公募

1998年度の日米科学技術協力事業「中性子散乱」に関する日本側提案の研究計画を下記のとおり公募します。

本国際協力研究事業は、文部省特別事業として1981年から実施しています。申請に先立って下記関係委員会委員とお打ち合わせの上申請くださるようお願いいたします。

記

1. 応募資格：全国国公私立大学、研究所所属の研究者（含大学院博士課程学生）
2. 提案様式：所定の提案書（用紙は提出先に請求してください）とコピー2部
3. 提案書類送付先：〒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

藤井保彦

電話 029(287)8901, FAX 029(283)3922

4. 応募締切：1997年11月30日(日)までに必着

5. 課題の審査及び審査結果の通知：

日米協力「中性子散乱」研究計画委員会及び日米合同研究委員会で審査され、結果は1998年3月頃通知します。

6. 参考説明：

- i 採択された研究計画で派遣される人数は、オークリッジ国立研究(ORNL)4名、ブルックヘブン国立研究所(BNL)8名程度となる見込みです。派遣期間は4～6週間程度です。
- ii 現在BNLの高中性子束原子炉HFBRは運転停止中ですが、ORNLやNIST(National Institute of Standard and Technology, 米国商務省管轄の20MW原子炉)を利用したBNL研究者との共同研究を実施しているので、例年通りBNL向けの研究課題を受け付けます。ただし、状況の変化が予想されるので、申請前に委員長（藤井保彦；3. 書類送付先と同一）に問い合わせてください。
- iii この協力研究の実施方法について不明な点は、研究計画委員会委員長、各担当幹事、最寄りの委員にお問い合わせください。また、各設備に関しても上記の委員にお問い合わせください。
- iv 研究計画委員会の本年度の委員は次の8名です。

藤井保彦（東大物性研・委員長）	遠藤康夫（東北大理）
加倉井和久（東大物性研・BNL担当幹事）	壽栄松宏仁（東大理）
河原崎修三（阪大理・ORNL担当幹事）	片野進（原研）
池田宏信（高エネルギー加速器研究機構）	山岡仁史（京大工）

第6回 ISSP国際シンポジウム

「高輝度放射光を利用した物性研究の最先端」の開催について

第6回 I S S P国際シンポジウム組織委員会 柿崎明人
神谷幸秀

物性研究所では、物性基礎研究における国際協力の重要性を考え、定期的に物性科学の重要なテーマをとりあげ国際シンポジウムを主催している。1989年に第1回物性研究所国際シンポジウム(ISSP International Symposium)を「有機超伝導体の物理と化学」を主題として開催して以来、「酸化物超伝導体の物理と化学」(1991年),「固体表面における動的過程」(1992年),「強磁場の最前線」(1993年),「レーザー物理と分光学の最前線」(1995年)に関するシンポジウムが開催され、それぞれの分野の世界の第一線で活躍している主要な研究者が多数出席し、物性科学の最先端の研究成果について大変活発な議論が行われ、大きな成果をあげている。今回は、「高輝度放射光を利用した物性研究の最先端」をメインテーマとし、1997年10月27日(月)～30日(木)の期間、東京大学六本木キャンパスにおいて開催する予定で、準備を進めている。

放射光は、遠赤外線からX線までの広い波長領域をカバーする連続光源として物性研究のさまざまな分野で活発に利用され、その研究分野は物質の光学的性質に関する研究にとどまらず、磁性、超伝導、量子物性などの広い範囲に拡がっている。最近では、従来よりも1000倍以上の高い輝度を持つ高輝度放射光専用の施設の建設が世界各地で進み、高輝度放射光を利用した最先端の物性実験が試みられ、優れた研究成果もはじめている。今回は、高輝度放射光の特徴を生かした最先端の研究に焦点をしづらり議論する予定である。具体的なテーマは、(1)高分解能光電子分光、(2)スピン分解光電子分光、(3)磁気円および線二色性分光、(4)光電子回折とホログラフィ、(5)軟X線発光分光、(6)コインシデンス分光、(7)多重および共鳴光励起、(8)軟X線光電子顕微鏡、である。高輝度挿入光源と分光光学の最近の進展についても取り上げる。

物性研究所では、東京大学の高輝度光源施設建設設計画の中心となって活動しており、高輝度放射光を利用した最先端の物性研究について議論することにより、この分野の研究の発展の将来を見通す機会ともしたいとも考えている。なお、このシンポジウムは、東大シンポジウムと文部省国際シンポジウム(COE)から助成を受けて開催される。

以下に、予定している招待講演者と講演題目を紹介する。

N. Brookes (Grenoble, France)

Study of magnetism using circular polarized soft X-ray

C. T. Chen (Hsinchu, Taiwan)

- New scientific program at the SRR
R. Claessen (Saarbrücken, Germany)
Quasi - particle dispersions and Fermi surface mapping
A. Fujimori(Tokyo, Japan)
Photoelectron spectroscopy of correlated electron systems
T. Gog(Upton, U.S.A.)
Multi - energy X - ray holography with atomic resolution
F. M. F. de Groot(Groningen, The Netherlands)
Recent developments in theoretical analyses of resonant X - ray emission and resonant X - ray photoemission
M. Grunze(Heidelberg, Germany)
Characterization of organic materials by NEXAFS spectroscopy
P.D.Johnson (New York, U.S.A.)
Spin - resolved photoemission
A.Kakizaki (Tsukuba, Japan)
Valence band structure of ferromagnetic Ni observed by spin - and angle - resolved photoemission
N. Kosugi (Okazaki, Japan)
Molecular spectroscopy
Y. Kamiya (Tokyo, Japan)
A new high - brilliance light source of University of Tokyo
A. Kotani (Tokyo, Japan)
Theory of X - ray emission spectra in *f* and *d* electron systems
K. Nasu (Tsukuba, Japan)
Separation dynamics of the resonant secondary x - ray radiation into incoherent luminescence and coherent Raman scattering in wide gap insulators
S. - J. Oh (Seoul, Korea)
New activities in PLS
T.Ohta (Tokyo, Japan)
New opportunities in spectrochemistry
R. C. C. Perera (Berkeley, U.S.A.)
Resonant inelastic scattering in localized solid system by soft X - ray fluorescence

spectroscopy

J. E. Rubensson (Uppsala, Sweden)

Soft X - ray emission spectroscopy

S. Shin(Tokyo, Japan)

Soft X - ray emission spectroscopy

S. Suga(Osaka, Japan)

Magnetic dichroism in core absorption and photoemission

T. Takahasi (Sendai, Japan)

High - resolution angle - resolved photoemission study of Ce - and U - based heavy fermion compounds

M. Taniguchi (Hiroshima, Japan)

Photoemission and inverse photoemission of semiconductors

B. P. Tonner (Wisconsin, U.S.A.)

Spectra - microscopic study using synchrotron radiation

J. H. Underwood (Berkeley, U.S.A.)

High resolution, high flux, user friendly, VLS beamline at ALS for 100 - 2000eV region

Technical Report of ISSP 新刊リスト

Ser. A

- No. 3277 Adiabatic Connection between the RVB State and the Ground State of the Half Filled Periodic Anderson Model, by Keiko Kimura, Yasuhiro Hatugai and Mahito Kohmoto.
- No. 3278 Monte-Carlo Calculations for the Design of Mott Scattering Spin-Polarimeters, by Shan Qiao and Akito Kakizaki.
- No. 3279 Thermodynamics of the Anisotropic Heisenberg Chain Calculated by the Density Matrix Renormalization Group Methods, by Naokazu Shibata.
- No. 3280 Molecular Conductors with Two-Chain Orbitals, by H. Tajima, J. Shiraishi and M. Kohmoto.
- No. 3281 Raman vs. Rayleigh Scattering in the Soft X-ray Region, by Eiichi Hanamura, Hidekatsu Suzura, Akane Agui and Shik Shin.
- No. 3282 Correlation Satellite Driven by Reduced Dimensionality, by O. Rader, E. Vescovo, M. Wuttig, D. D. Sarma, S. Blugel, F. J. Himpsel, A. Kimura, K. S. An, T. Mizokawa, A. Fujimori, C. Carbone.
- No. 3283 Charge and Spin Structures of a $d_{x^2-y^2}$ Superconductor in the Proximity of an Antiferromagnetic Mott Insulator, by Fakher F. Assaard, Masatoshi Imada and Douglas J. Scalapino.
- No. 3284 Raman, Infrared and Optical Spectra of the Spin-Peierls Compounds NaV_2O_5 , by S. A. Golubchik, M. Isono, A. N. Ivlev, B. N., Mavrin, M. N. Popova, A. B. Sushkov, Y. Ueda and A. N. Vasil'ev.

- No. 3285 The *d* Orbital Character in the Spin-Peierls System NaV₂O₅, by Tetsuo Ohama, Hiroshi Yasuoka, Masahiko Isobe and Yutaka Ueda.
- No. 3286 A New Compact Electron Spin Polarimeter with a High Efficiency, by Shan Qiao, Akio Kimura, Ayumi Harasawa, M. Sawada, J.-G. Chung and Akito Kakizaki.
- No. 3287 Resonant Valence-to-Core X-Ray Fluorescence Spectroscopy on PrO₂, by S. M. Butorin, L.-C. Duda, J. -H. Guo, N. Wassdahl, J. Nordgren, M. Nakazawa and A. Kotani.

編 集 後 記

物性研だよりの9月号をお届けいたします。

子供の頃から毎年、夏休みに入る直前には無限の時間が用意されているような気がしてあれもやろうこの本も読もうと思いつつ、気がつくと8月末になってなんとも言えない気分で呆然とすることの繰り返でした。今まさに例年どおりの寂寥感を味わっているところです。8月半ばには、代々木のオリンピック記念施設を利用して開かれている中学生のための科学教室の参加者100名あまりが見学に訪れました。彼ら彼女らにとって印象に残る夏のイベントの一つになったでしょうか。

なお、次号の原稿締め切りは10月9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ご連絡願います。

家 泰 弘
毛 利 信 男

