

物性研だより

第39卷
第3号

1999年9月

目 次

物性研究所の14年間とその後	田中虔一	1
物性研に着任して	長谷川幸雄	9
物性研究所短期研究会報告		
○ 「物性研究における計算物理—新しいアルゴリズムと超大型計算」	12	
世話人 高山 一, 押山 淳, 前川禎通, 岡部 豊, 樋渡保秋,		
今田正俊, 常行真司, 藤堂眞治, 福島孝治		
物性研究所談話会		70
物性研ニュース		
○ 東京大学物性研究所 客員分野教授・助教授公募		74
○ 東京大学物性研究所 助手公募		76
○ 東京大学物性研究所 助教授又は教授公募		78
○ 東京大学物性研究所 助手公募		80
○ 人事異動		82
○ 2000年度日米科学協力事業「中性子散乱」研究計画の公募		84
○ テクニカル・レポート 新刊リスト		85
編集後記		

東京大学物性研究所

ISSN 0385-9843

「物性研究所の14年間とその後」

(埼玉工業大学・先端科学研究所) 田 中 虔 一

平成10年3月に物性研究所を停年退官し一年半になる。退官後、中国、廈門大学のState Key Laboratory for Physical Chemistry of Solid Surfaces（国家重点実験室）の招きで本年4月までの半年を廈門大学で過ごした。新しい共同研究を始めるよい機会と考え、e-mailであらかじめ意見交換をしながらテーマ等について相談を重ね、長期滞在VISAができるのを待って10月に出かけた。廈門市は真向かいに台湾が位置する場所で、海岸にでると目の前に有名な金門島が見える。従って、少し前までは海岸線一帯が立ち入り禁止であったが、今は立派な椰子並木のある観光道路に変わりつつある。大学のキャンパスはこのパームビーチ（私が勝手に付けた）まで続いており、台湾との関係が長期的に安定化しつつあるように思えた（李登輝の「国家と国家の関係発言」後は不明）。State Key Laboratory for Physical Chemistry of Solid Surfacesでは私が長期滞在すると言うのでわざわざ、机、本棚、パソコンを含め居室を新装し、トイレも専用に新しく整えてくれたのには、予想もしなかったことだけに恐縮してしまった。State Key Laboratory制度は中国政府の科学政策の一つとして約10年前に発足し、現在、154の研究施設が登録されているとのことである。そのうち、14の研究施設がA-ランクとして査定され、予算的に特別優遇されている。化学分野では廈門大学と南京大学の2研究施設がA-ランクに認定されており、予算的に相当優遇されている。今年はこの制度の10年目にあたり、各施設の再評価が行われるとのこと、9月までには廈門大学の施設もA-ランクとして継続できるかどうかが再評価されることになる。中国の科学政策についての興味深い記事が2編昨年のサイエンス誌に発表されている。中国の科学政策の中心にいる著者が書いたもので、それによると、中国の科学は明の時代までは世界の最先端にあったが次第に世界の進歩から遅れてしまったが、ようやく宇宙開発、原子力、加速器等のビッグサイエンスでは国際水準に追いついてきたがスマールサイエンスはまだ大きく遅れているとの認識で、どのようにして最先端科学に追いつくかが科学行政の重要な課題であることを述べている。State Key Laboratory制度もスマールサイエンスのレベルを上げるために設けられた制度であるが、さらに海外に流出した頭脳を呼び戻す制度を今年からスタートさせたことが記述されている。しかし、現状を見ると逆効果になる可能性が高く、目的達成はなかなか困難ではないかと思われる。わが国でも文部省は留学生10万人計画などといったスローガンを掲げて国際化を支援しているようであるが、中国の悩み（大学院生のトップ10%の90%が流出してしまうことである）を見ると、援助にならず足を引っ張っぱる政策ということになっているのではと心配になる。私はこの点を十分配慮し、廈門大学と共同研究を組めるような形での若手研究者の交流を推進することにした。廈門大学の化学科には蔡、田、万、張教授の4名のAcademicianがあり、電気化学、触媒、クラスター、

量子化学を中心としたState Key Laboratoryの固体表面物理化学の基礎を築いてきたが、現在の研究を支えているのは田、徐、袁等の40歳前後の優秀な若手教授である。廈門大学のState Key Laboratoryでは電気化学、触媒、クラスター、量子化学の研究者が互いの研究を発展させる共同研究をしており、中国の大学あるいは研究所では稀に見るこの大学の強みである。特にレーザーラマンを用いた電極表面の研究は独創性、レベルともに国際的に一流であり、大変良いグループと知り合うことになった。中国では超高真空を必要とする実験はまだ難しいのが、超純水の中では固体表面を清浄に保てるので、電気化学では実験条件を選ぶと清浄表面での実験が可能になる。物性研究所での実験の一つに、電位によって誘起される単結晶表面の構造再構成と電位による微粒子の晶癖変化が直接関連することを示した研究がある。電子顕微鏡用のAuメッシュを電極に使って電極上で成長する微粒子の晶癖を電子顕微鏡で調べるだけの実験であるが、魯大凌君の驚異的な努力によって、電位で歪の入った金属微粒子の成長を制御できることを発見していた。廈門大学のグループとはこの現象を中心に歪の入った金属微粒子やナノサイズ微粒子の生成と物性を中心とした共同研究をすることになった。一方、廈門大学のState Key Laboratoryでは超高真空を必要とする実験手法を自分達の表面研究に取り入れたいと考えており、表面科学の実験手法が自分達の表面研究にどのような将来性と発展性が期待できるかについて真剣な相談を受けることになった。限られた研究費を使って独自性を發揮できる研究をするにはどうしたら良いかと言う問題である。幸か不幸か、後で述べるように、私は物性研究所に移った当初、これに近い状況だったので、多少よいアドバイスができたように思う。「どこかでやっているので我々も」といった流行を追うスタイルの研究に研究費をつぎ込むことなく、発想において独自性のある研究ができる人材の養成が肝要であることを万所長に提言した。その近道として、固体表面の特異性を正しく捉えて基礎から研究している人との共同研究を前提に若手の研究者を送ることを薦めた。その結果、表面研究のエキスパートに育てたいと学位のある一人の若手の研究者を推薦してきたので九州大学の柄原浩教授とも相談し、その人を博士課程に大学院生として受け入れてもらうことが決まった。

さて、大変お世話になった廈門大学を離れるにあたり、私にできるお礼と言う事でNaturally and Artificially Controlled nano-meter Fabrication のWorkshopを開催することにした。ドイツのUlm大学のKolb教授と北海道大学の山岸皓彦教授が参加してくれることになり、北京、上海、南京から中国を代表する表面研究者に集まっていた大変面白いworkshopとなった。

埼玉工業大学に設立された先端科学研究所に専任教授として勤務することになり、平成11年4月に帰国した。埼玉工業大学は私にとって8番目の職場である。「埼玉工業大学にも研究を中心とした研究所を作りたい」との理事長の意向と厳しくなる私立大学をとりまく環境を考えて、新しい研究所の目的と機能をどうするかと言う難しい問題に忙しい日を送っている。これまでの大学の機能は言うまでもなく学部や大学院が受け入れた学生を対象とした閉じた制度であるが、大学を社会、特に地域社会に開かれた大学として機能させるためのセンターとしての機能を新しい研究所に期待

できる基本構想で、研究所の具体的な機構をまとめて理事会に提案し夏休みを迎えたところである。退官後の近況はこの程度にし、物性研究所の14年に焦点を戻すことにしておきたい。

私が物性研究所に赴任することになった直接の理由は物性研究所が極限物性部門の一つとして「表面物性」を決めたことによる。今日の表面研究の隆盛を見ると、20年以上前に極限物性部門の一つに表面物性をたてて「構造」「物性」「反応」の3つの視点から固体表面の研究を推進するとした基本構想は大変先見性のある計画であったと言える。このうちの「反応」を受け持つということで、1984年1月に北海道大学工学部から物性研究所に赴任した。しかし、物性研究所に移ることについては北海道大学の学科から、特に学長から強く慰留され迷った。公募人事で何故と疑問に思う人がいるであろうから、この間の事情を少し書き残すことにする。

表面物性の「反応」に関する人事公募（助教授）は物性研究所の事情で最初の公募で決めることができず再公募となった。その理由は知る由もないが再公募は2年程後であったと記憶している。私としては年齢のこともあって再公募に応募するつもりは全くなかったが公募締め切り近くになって再度応募してほしいと言われたが、正直なところ採用になるとは思っていなかったので周りには全く相談せずに再応募した。図らずも、村田さんから最終候補者になったとの連絡をもらい、しかるべき人に事情を話し相談したところ、ちょうど同じ頃に北海道大学の方も事情が大きく変化しており、講座の教授が4月から高専の校長に転出することがほぼ決まったところであった。私が出ると講座は空になってしまう状況になったのである。当時は助教授であった村田さん（表面物性主任）が急ぎ説明に来てくれたが、所長からは何の説明も無いようなところに行くより北海道大学に留まるようにと学科や学長から強く慰留されることになった。迷ったが再公募をした物性研究所の状況を考えて動く決心をした。

表面物性の「反応」に関する人事がどのように議論なされたかは知る由もないが、北海道大学の人達の助言は当たっていたようである。ともかく「表面物性」としての設備費は残っていないことは聞いていたが、研究所としても新任の予算を全く考えていないことが分かった。しかも、極限物性部門の所員は研究所の臨時の予算に申し込めないなど八方塞りの状況であった。実験室に予定されていた部屋は変電室のまま整備されずに放置され、もう一つの実験室も排気や暖房、冷房の設備もない窓がブロックで塞がれたままであった。私より後から赴任した所員の実験室が研究所の予算で整備されるのを所員会の報告で知って、表面物性の私の実験室はなぜ研究所で整備してもらえないのかと質問をして、ようやく整備されるといった有様であった。それでも一年後に変電室を実験室として使えるように改装してもらったが、もう一つの部屋は窓を塞いでいるブロックを取り除き暖房と冷房をいれて使えるようにするのに7年を要した。はじめの3年間はガラス細工で反応装置を自作するなど全く無駄に時を浪費することになった。その後14年間に、このようなひどい状態でスタートを余儀なくされた所員を見なかったのは幸いである。研究費のことでは村田さんもずいぶん心配してくれた。多くの財団からの援助と、事務におられた岩下さんが心配してくれたりして、4,

5年掛けて実験設備も少しづつ整ってきた。

物性研究所が表面物性の「反応」にどのような役割を期待したかは知らないが、私自身は動く以上はこれまでの触媒反応機構を中心とした研究を続けける気はなく、新しい研究を始めたいと考えていたが、新しいことを始めようとすると年齢的に残された時間は少なく、今から考えても最初の3年間を無駄にしたことが悔やまれるし、物性研究所に動いたことは失敗であったと思う時期がしばらく続いた。

研究費のことと言えば、村田さんが1987年から吉森昭夫先生を代表者としてスタートすることになった重点研究「表面新物質層」の計画班に私を加えてもらえるようにはかってくれて、3年を経てようやく物性研究所での新しい研究計画を実行できる見通しがたったのを思い出す。

物理と化学では研究の価値観や目的の立て方が全く異なる。退官講演でも述べたが、「どのような物理をするんですか?」と言う問をしばしば聞くが“どのような化学をするんですか?”といいう問はついぞ聞いたことが無い。化学にはこのような目的の立て方は無いのである。その理由は、化学には物理のように全ての研究者が共有できるような共通の価値観やテーマはないとして発展してきている。優れた化学者は個人の感性で自然現象を見ることによって、全体分節的に現象の中に新しい化学を見つける。あくまで自然現象が前提にある。このような自然観は生命現象を扱う生物化学ではより鮮明である。従って、化学で新しい研究をすることは、現象を見て考える自分の基本的発想を全く新しくすることである。実際問題として年齢的なことを考え、発想を変えることが可能だらうかと悩みながら、固体表面の反応を調べるために全体構想を考えた。当時は「表面は分からぬことが多いので研究する」といった理由が通じる時代であった。ともかく「反応」を調べるには真空、気相、液相でWell Defined表面を自在に扱える装置の開発が必要になる。しかし、当時は目的に適うような装置はなかったので装置の開発が先決であった。村田さんと共同し超高真空中から大気圧まで単結晶表面を自在に扱える装置の開発を行った。この装置で採用した新しい方式は予想どおり機能することが分かった。この装置の特徴は単に気相と超高真空中を直結した実験ができるだけでなく、当時の表面実験ではサンプルを交換するだけでも数時間を要したが、この装置ではサンプル交換が20分以内にでき著しく能率が上がるようになった。その後、重点研究の予算で気相から液相まで扱える装置をこの方式を基本に開発し、単結晶を使った電気化学の実験が可能になった。

さて、いまでも表面の研究者の殆どは「吸着の概念」で表面構造の変化から化学反応まで説明し理解できると考えている。物質によらず全ての表面に適用できる「吸着の概念」は表面現象を理解する上での指導理念となっている。しかし、論文を読み返しながら現象をもう一度考えているうちに「吸着の概念」は表面研究の発展を阻害している概念でもあるのではないかと思うようになった。Ag(110)表面の酸素吸着に伴う構造変化はその代表的な例である。Ag(110)表面は酸素が吸着するとp(nx1)の電子線回折像を与え、被覆率（表面のAg原子数に対する吸着酸素原子の比）が大きく

なるとnの値が 7, 6, ----, 3, 2 と変化することが1976年に見つかり、多くの研究者によって吸着した酸素原子の配列構造の変化あるいは吸着相の相転移として説明されてきた。吸着酸素の配列構造であるとすると、1つの構造から次の構造への変化は、わずかな数の酸素原子によって全ての吸着酸素原子が表面を移動し再配列することを意味している。適当な仮定を入れればいくらでも理論的に説明はできるがずいぶん奇妙な現象が起きるものだと気になっていた。1982年に走査型トンネル電子顕微鏡(STM)が世に出たのをきっかけに、数年後に物性研究所でも早速桜井さんが装置を自作し始めていた。当初はなかなか像が得られず、相当苦労していたが、これを横目で見ていてることがその後の実験のずいぶん参考になった。とにかくSTMの特徴は像が出ない間は何が原因で見えないのか見当がつかないことである。今では笑えることであるが、桜井さんとしては実験をしている学生が悪いのではないか？、装置の除振が悪いのでは？、部屋の位置か方角が悪いのでは？とどんどんエスカレートし、ついには研究所のある六本木が悪いとの結論になってしまった。さすがの桜井さんもすっかり弱気になっていたのであろう。私のところに来て表面の主任として物性研究所は場所が悪くて実験に向かないから所長に駒場に適切な場所を用意してくれるよう交渉してくれといってきた。自分の実験室の整備でさえ言い出せない自分に比べこの大胆な発想にはさすが桜井さんと奇妙な感心はしたもの困っていたら、どうしたわけか2, 3日したら桜井さんがご機嫌ですばらしいSTM像が見えたと興奮していた。1週間後にはすっかり本来の桜井さんに戻って「いつでも原子像が見えないようではSTMの装置とは言えないよ」と自身たっぷりになっていたので「1週間前には神主さんでも呼んで御払いでもしてもらいかねないみたいな様子だったよね」とひやかしたのを思い出す。このようなことがあって、STMが表面研究に与えるであろう大きなインパクトを考えるようになり、先に述べたAg(110)の系を共同研究しないかと桜井さんに申し入れた。当時は金属表面をSTMで調べるのは難しいと殆どの人は否定的であったが、桜井さんに装置の性能を自慢するには金属原子が見えないようではだめではないかと水を向け、予てから気になっていたAg(110)表面の奇妙な構造変化の話をすると、すぐに面白いから一緒にやろうと言うことになったが、まもなく桜井さんは東北大学に転出することになり物性研究所での実験は1週間ほどで終わってしまい、金属表面はSi(111)表面ほどやさしくないことが分かったていどであった。しかし、あきらめきれずにいると、桜井さんが東北大学に移って新しく作った装置が動き出しすばらしい像が出るようになったと言うので、Ag(110)表面の実験をもう一回やろうと申し入れたところ、すぐにやろうと言う事になった。谷口昌宏君（現在；北海道大学助手）が物性研究所でp(nx1)が現れる実験条件をあらかじめ調べてから1週間のマシンタイムをもらって東北大に実験に出かけた。数日で像が得られ、1991年の冬には見事にAg(110)清浄表面とその上に形成されるp(nx1)のSTM像を得ることに成功した。残念なことに、少し前にFritz Haber研究所のErtl等によって酸素が吸着するとp(2x1)構造を与えることが分かっているCu(110)表面でp(2x1)構造の生成過程を示す最初のSTM像を発表されてしまった。しかし私の興味はAg(110)でp(nx1)構造が変

化する機構であったので、 $p(2\times 1)$ 構造しか形成しないCu(110)との対比は非常に面白くなつた。 $p(2\times 1)$ 構造も $p(nx1)$ 構造も形成過程のSTM像は非常によく似ているが、これらは従来の酸素原子が吸着し配列するイメージとは全く異なつてゐることが分かった。このような実験を進めていくうちに、表面にしか存在できない「擬似化合物の生成と配列」と言ふ概念に到達した。特定の結晶表面で相互作用によって安定化するために、あたかも化合物のように一定の組成と構造を保つことができるが通常の化合物のように強い内部結合で形成されているわけではないので表面から取り出すことは難しい新しい物質群が存在するとする概念である。Ag(110)やCu(110)表面で説明するならば、(110)表面では相互作用によって(-Ag-O-)あるいは(-Cu-O-)といった一次元擬似化合物が安定化し、表面にこのような擬似化合物が増えたと自己秩序化し $p(nx1)$ や $p(2\times 1)$ 構造の形成することになる。この概念を吸着の概念と組み合わせると、Agとの反応でSi(111)上に形成される2次元物質の物性がその上に吸着するAg原子によって変化する現象として最近報告されている興味ある現象を理解できる。

しかし、新しい概念を展開しようとすると共同研究では難しく、どうしても自前のSTM装置をもたないとだめだと言うことになったが、これまでにも述べたように研究所は全く当てに出来ない。会計法違反の借金を覚悟で新しい装置を作ることにした。桜井さんの例を見ていたので、3階のような悪い環境でも金属原子像が見える装置を作ることにし、装置全体を天井から吊り下げることにした。当初は我々の実験室のような悪い環境では原子像は見えるはずがないと誰も相手にしなかつたが、助手の大川祐司君（現在；理化学研究所研究員）と大学院生で入ってきた松本祐司君（現在東京工業大学助手）ががんばってくれ、一年半後にはすばらしい原子像が得られるようになった。その結果、表面に擬似化合物の例がいくつも見つかり、新しい概念が正しいことが分かってきたので、さらに「擬似化合物の反応」を展開することになった。このようにして化学反応でAg(110)表面に規則的に $(Cu)_6$ クラスター(Ag_2 が3つ集まつたラフト構造の擬似物質)を生成できることを示し、さらに表面と針の間で化学移送反応を行うことで特定の場所に原子をのせる「アトムペインティング法」と名付けた方法を開発した。これらの実験事実から、STMの針先は実験中に変化し、針先の組成と構造が安定したところSTM像が得られると言う単純なことを忘れて、あたかも針先の構造が像を支配し色々な像が見えると錯覚している人達が多いのに驚く。実験温度がヘリウム温度のような低温である場合を除くと、実際に働いている針先はある条件で安定になつた状態であり、このことが初期の頃にSTM像がなかなかえられなかつた原因でもあると考えている。こんな単純な現象でも、理論に説得されやすい物理サイドの人達に針先が理論のように単純でないことを認めさせるのは難しいのには恐れ入つた。従つて、今でも「吸着とどう違うのか分からぬ」と言ふ人がいる。何事によらず概念の分からぬ人に理解してもらうのは難しいので「吸着の概念からこのような新規な物質を合成する発想ができますか？」と聞くことにしている。

停年3年前になってようやく借金もなくなり、村田さんの後の人事を議題として所員会で議論さ

れることになって、電子物性以外は価値が無いかのような考え方の人が多いのにここでは新しい物質やその物性を追求するような研究は出てこないだろうと失望すると同時に、表面物性の「反応」人事が再公募になったことを思い出さずにはいられなかった。実際、人事は研究の先を見て行うものである。業績の評価は誰にでも出来るのは過去のことであるからで、人事の難しさは将来を見なければならぬことである。このような視点で物性研究所では化学の人事をする能力が失われつつあるのではとの危惧しているが、的外れであれば幸いである。

最後に、停年を前にして振り返って見ると共同利用研究所でありながら、大型設備を除くと共同研究に役に立つ装置はあまり整備されていないようである。特に、私の研究室には余分な装置がなかったので装置を使った共同研究は非常に難しかった。逆に必要な設備のある他大学に行って共同実験をさせてもらうことが多かった。現役のときには共同利用の大切さを主張していた所員も、いざ自分が停年になると殆どの主要装置を持っていってしまうため、いつまでたっても共同利用の視点からは改善されないのが現状である。私が使ってきた装置は物性研究所から特別の支援を受けて作ったものではないが、5台の装置は全て表面物性の共同利用のために残すこととした。苦労しスタートした物性研究所で結局停年まで14年間を過ごすことになり、それなりの結果が出せたのはやはり物性研究所が日本の中では珍しく良い研究環境であったためであろう。これが停年まで7回も研究場所を変えた私の実感である。人が居心地が良いと感じる組織は生物の機能に驚くほど似ている。例えば既存の研究組織に人が入ると、侵入者は如何にして組織に溶け込むかであるし、組織は用心深く組織を壊さない範囲で異物を受け入れようとする。生物では個体がちがうと免疫機能が異なるのは当然であるが人間の組織も同様である。人が形成する組織も国や民族、さらに職種によって異なるのが当然であるが、これを当然と考えないと難しい事態になる。ところが、何の前提もなしにアメリカではこうだといった事例をあたかも論理的に正しいことのごとくそのまま一般化できることで錯覚し制度化していく国の行政や大学の運営を見ると、組織は免疫不適合で知らず知らずのうちに破壊してしまうのではとの不安を覚える。また、身体の一部が機能しなくなり機能の一部を外から導入して個体の生存を図るように、組織が機能低下を自覚すると、外部から機能、即ち人を導入することになるが適合性を誤ると大変な結果となる。今日、わが国の社会において銀行をはじめ多くの組織が音を立てて崩壊し始めている状況は誰の目にも明らかであるが、その崩壊の因果関係は必ずしも正しく分析されていないようである。物性研究所はわが国の大学では特異体質の組織であるが、このような特異体質の組織がわが国の大学にも存在できる事実は大いに評価されるべきと思う。しかし、私の在籍した14年間を見ただけでも、物性研究所の良い点と思われていた機能の崩壊が進行していることは確かである。具体的には物性研究所における「化学」に対する認識である。化学においては物性測定のための単なる試料つくりは研究ではない。もし、物性研究所がこのような考え方をするならば、組織は誤った免疫機能を持つようになり、化学として一流の人は来なくなるであろう。

－ 8 －

柏新キャンパスに移転した物性研究所が多様な機能を持つわが国を代表する高等研究所として発展することを心から期待する次第である。

「物性研に着任して」

先端領域研究部門 長谷川 幸雄

平成11年5月より物性研の先端領域研究部門に御世話になっております。宜しく御願いいたします。物性研には、大学院生時代(1985-91年)にも御世話になっておりまして、そのころから「物性研だより」には目を通すこともあり、特に離任の弁など先生方の苦労話等が書かれていて興味深く読んでいたのを覚えています。今回、着任の弁を書くように言われて、久しぶりに手にした「物性研だより」をペラペラとめくりながらそのころのことが懐かしく思われ、また自分がそれに文章を書く羽目になったということで感慨深く思う次第です。特に面白い話も書けませんので、とりあえず自分の経験だけ述べさせていただきます。

私自身、物性研において実質的に研究活動を始めて以来、「走査トンネル顕微鏡(STM)の開発とその応用」の研究に従事してきたことになると思います。大学院生のころにちょうどSTMが話題になりはじめ、在籍しておりました櫻井研究室でも櫻井先生や橋詰氏(現在日立基礎研)らがその開発を進めておりました。私もそれに参加して、当時はまだ珍しかったシリコン表面の原子像を苦労の末に撮ることができました。そのときの装置は既に現役は終えたようですが今でも小森先生の研究室に残っておりました。

博士課程の最終年度に櫻井先生が東北大学金属材料研究所に移られたので、私も残っていてもしょうがないだろうとのことで、半年間アメリカのベル研究所で研究させてもらう機会を得ました(1990年)。櫻井先生のアメリカでの研究室の卒業生であるKuk先生(現ソウル国立大学)のもとで、STMのバリエーションで界面を観察できるようにした顕微鏡であるパリスティック電子放射顕微鏡(BEEM)の開発に従事し、シリサイド・シリコン界面などの研究を行いました。私が滞在していたときのベル研は研究方針を応用分野へ転換する直前で、私が関連する表面科学の分野でも著名な研究者がまだ残っている頃でした。今考えると貴重な体験であったように思います。ちょうどその時に超伝導で既に名を成していた高木先生がベル研にいらしており、何度か話する機会を得ました。

帰国後は、研究室はすでに無かったものの、櫻井研究室の跡地を継承した小森先生や指導教官を引き受けさせていただいた高橋敏男先生の取り計らいのもとで、論文をまとめ無事博士号を取得できました(1991年)。博士取得後には、IBMのワトソン研究所に博士研究員として在籍し(1991-92年)、Avouris博士のもとでSTMを用いた金属針と半導体表面間の点接触における電気伝導に関する研究等を始めました。実験室のあった同じセクションには、ロスマラモスから瀧川先生が移って来られいろいろ御世話になりました。今回また物性研でもお目にかかることとなりました。IBMでの研究で非常に幸運であったことには、進めていた点接触の実験の副産物として表面での電子定

在波が観察できたことです。点接触実験の一環として金属・金属の点接触のデータもレファレンスとして必要であろうとのことで、比較的容易にできる金表面での実験を行ったところ、走査トンネル分光（STS）の手法を用いて偶然にもステップ端での振動パターンが観察され、これがその表面に局在する電子のステップ端における反射散乱による定在波であることが判りました。最初に見たときは何かのノイズかとも思ったのですが、走査トンネル分光（STS）では各エネルギー準位ごとのパターンを撮ることができるので適当なエネルギーで撮った振動パターンを比較するとその周期が変化していることが判明し、これは何かあると気が付きました。この研究はパリティ誌にも家先生の訳で紹介させていただいたのですが、私にとっては宝くじに当たったようなもので、その後の研究活動に於いて（おそらく物性研での採用に当たっても）大いにその恩恵を受けたのではないかと思います。

それにしてもいつも感心するのは、このAvouris博士の研究ぶりです。その後も2年に1度ぐらいの頻度で御邪魔しているのですが、私が行く前は、シリコン表面上でのアンモニアや酸素の吸着現象といった表面化学の研究、私が滞在しているころには、原子マニピュレーション、その後は、AFMを用いたパターニングによるクーロンプロッケードの研究、最近では、ナノチューブの電気伝導、と次々とテーマを変えており、しかもいずれも当該分野のトップを走る活躍です。しかしながら、研究室のサイズと言えば、助手相当の研究員と技官が1名ずつ、あとは数名の博士研究員という陣容で決して大きくはなく、また彼自身穏やかな人でそれほどアグレッシブに物事を進めるタイプでもないこともあります、アメリカ式スマールサイズの研究室がスタイルである物性研において私がこれから研究を進めるに於いて理想とした研究者・研究室の一つです。

IBMには1年半滞在したあとは、新設の京都大学工学部附属メゾ材料研究センター・酒井明先生のもとで、助手を2年間勤めました（1992-94年）。酒井先生も物性研・櫻井研究室で助手をされていた方で、その後東芝を経て京大に教授として移られたところでした。研究室の立ち上げということで、簡単な超高真空STMを作成しそれを使って微小トンネル接合間の静電容量の測定や局所仕事関数の測定などを進めたところで、東北大に移ることになりました。

東北大では金属材料研究所の櫻井先生のもとで4年半研究させていただきました（1994-99年）。その内容を列挙すれば、金属内包フラーんのクラスター化、局所仕事関数分布、MBE-STMによる量子ドットの表面構造、X線照射STMによる元素分析の試み、そしてBEEMによる界面微細加工ということになると思います。一応は上記のように体裁は整っているように見えるのですが、しかしながら正直に言いまして、金研ではあまり仕事がはからず、当初描いていた構想の10分の1も達成できなかつたのが実状でした。櫻井先生にはいろいろと支援していただき、また資金面でも櫻井先生やさきがけ研究の総括である吉森先生に大いに援助していただいたのですが、労多くして実らずの状態が続いたように思います。4年半経ったところでついに櫻井先生に追い出され、これからどうしようかと思ったときに、何と物性研で拾っていただきまして、今に至っている次第で

す。

このような経緯で研究を進めてきましたので、やはり今後もSTMを主たる手法としてナノスケール領域・構造での研究を進めていくことになると思います。まずは装置面での整備が急務であり、当面は低温・磁場中のSTM・原子間力顕微鏡（AFM）・超低温STM・MBEなどの立ち上げを考えており、さらにはX線照射STMにも新しい展望があれば推進していきたいと考えています。5年後にめどがついていればと思いますが、仙台での経験からも5年はすぐ経ってしまいますので、頑張らなければいけないでしょう。今は、それらを目標に、個々の物品の発注やら装置の図面書き、制御系の設計等をぼちぼちと進めております。金研でも一応は助教授でしたが（某広報には助手から昇任となっていましたが、正式には転任です。もっと多くの方から移ったときには「おめでとうございます」と言わされました），物性研でのように独立した研究室を持つことは無かったので、今、自分の判断で研究費でものが買えるのが妙に嬉しく感じられます。

物性研には学生として6年在籍しておりましたが、その後アメリカ1.5年、京都2年、仙台4.5年と転々とし、また縁あって物性研に戻ってくることが出来ました。しばらくは腰を落ちつけて研究をしたいと思います。うまく行った時期、そうでなかった時期といろいろありましたが、また私が研究を始めた地に戻り、さらに柏キャンパスの新しい場所で新たに研究をスタートできるのは、この上なく幸運なことだと思います。ただしもうあの宝くじ（1993年）は効かなくなってきたていると思いますので、また初心に帰って研究を進め、さらなる宝くじを当てるべく努力していく所存ですので、皆様方の御協力を賜れればと思っております。宜しく御願いいたします。

物性研究所短期研究会報告

「物性研究における計算物理 －新しいアルゴリズムと超大型計算」

日 時：平成11年6月14日～平成11年6月16日

会 場：東京大学物性研究所Q棟講義室

司会者	押 山 淳	(筑波大・物理)	前 川 稔 通	(東北大・金研)
	岡 部 豊	(都立大・理)	樋 渡 保 秋	(金沢大・理)
	今 田 正 俊	(東大・物性研)	常 行 真 司	(東大・物性研)
	福 島 孝 治	(東大・物性研)	藤 堂 真 治	(東大・物性研)
	高 山 一	(東大・物性研)		

最近、各研究室レベルの計算機環境も著しく向上し、相当な規模の数値計算は自前のワークステーションやパーソナルコンピュータで行なえるような状況になりつつあり、一方、計算物理学による物性研究の先端では、新たなアルゴリズムの開発や計算機資源を集中して行なう超大型計算などによる、新たな物性現象の発見や新物質設計を目指す研究が益々重要になっている。このような趨勢のなかで、物性研スーパーコンピュータシステムは所の柏キャンパス移転に合わせて現システムが更新される。更新後のシステム運用において、大規模計算による先端的な物性研究の支援がその最も重要な役割となることは必然なことと考えられる。

このような視点から、本研究会では、現システムによるこれまでの研究成果を総括するとともに、新しいアルゴリズムの開発やきわめて大規模な計算を進めている研究を中心にプログラムを構成した。平尾公彦氏の特別講演による物理化学領域における大規模計算の例や、物性物理領域の第一原理計算、強相関電子系、量子系のダイナミックス、さらに、量子系・古典系の統計力学のそれぞれの分野で進められている新しいアルゴリズムと大規模計算の現状が報告された。一般的な研究成果の発表も含めて40件の講演があり、分野ごとに参加者の入れ替わりがあったが、三日間で延べ185人の参加があり、多くの興味深い講演と活発な議論が展開された。

物性研スーパーコンピュータの現システムの使用状況をみても、前年度に比べて総ジョブ数は減少傾向にあるものの、1ジョブあたりのCPU時間は1.5倍に達しており、物性研究における大規模計算が浸透しつつある。更新後のシステムについても、計算物理分野のブレークスルーを目指す課題に対する支援のより充実について多くの参加者に了解いただけたと考えている。

プ ロ グ ラ ム

6月14日（月）

強相関電子系 1

13:00-13:30 求 幸年（東工大）

「軌道、格子のカップルした強相関電子系—マンガン酸化物モデルの大規模シミュレーション」

13:30-13:50 筒井 健二（東北大金研）

「ハバード模型に対する共鳴非弾性X線散乱スペクトル」

13:50-14:20 常次 宏一（筑波大物工）

「強相関電子系のダイナミックスの厳密対角化による研究」

休憩（30分）

量子化学と物性

14:50-15:30 平尾 公彦（東大工）

「理論化学における大規模計算の現状と将来の可能性」

15:30-16:00 常行 真司（東大物性研）

「第一原理計算で見る水素の量子効果」

休憩（20分）

量子系のダイナミックス 1

16:20-16:50 杉野 修、宮本 良之（NEC基礎研）

「実時間密度汎関数法を用いた電子イオン系のシミュレーション：光誘起欠陥形成、原子脱離、電気伝導への応用」

16:50-17:10 永野 粒一朗（新潟大自然）

「時間依存密度汎関数法のイオン衝突への応用」

17:10-17:30 渡辺 尚貴（東大理）

「波動関数の時間発展の高速で安定な計算法」

17:30-17:50 三浦 良雄（阪大工）

「水素-固体表面反応における高次元量子計算」

6月15日（火）

強相関電子系 2

9:00-9:30 遠山 貴己（東北大金研）

「銅酸化物高温超伝導体の電子状態とスピノ・電荷励起」

9:30-9:50 柴田 康雅（東北大金研）

「(La,Sr)₂CuO₄の電子状態と励起スペクトル」

9:50-10:10 浅井 美博（電総研）

「二次元ハバードモデルの基底状態の研究」

10:10-10:30 求 幸年, 古川 信夫（東工大理, 青学大理工）

「古典自由度と相互作用する電子系に対する新しいモンテカルロ法」

休憩（30分）

量子系のダイナミクス 2

11:00-11:30 島 弘幸, 中山 恒義（北大工）

「量子系における動的応答関数の高速アルゴリズム」

11:30-12:00 飯高 敏晃（理研）

「量子ダイナミクス法による（非）線形応答関数の計算とその応用」

12:00-12:30 宮下 精二, 齊藤 圭司（東大工）

「微小磁性体の磁化過程における非断熱遷移と緩和現象」

休憩（60分）

第一原理計算 1

13:30-14:00 土田 英二（東大情報基盤セ）

「有限要素法を用いた第一原理電子状態計算」

14:00-14:20 小口 多美夫（広大先端）

「繰返し法によるFLAPW電子状態計算」

14:20-14:40 吉田 博（阪大産研）

「第一原理計算による物質設計：予言と実験」

14:40-15:00 平井 國友（奈良医大医学）

「Fe/Cr人工格子の第一原理計算」

休憩（20分）

大規模 and/or 並列計算

15:20-15:50 藤堂 真治（東大物性研）

「連続虚時間ループアルゴリズムとランダム量子スピン系への応用」

15:50-16:20 伊藤 伸泰, 尾関 之康（東大工, 東工大理）

「極限シミュレーションと非平衡緩和法」

16:20-16:40 林 亮子（北陸先端科学技術大情報）

「フラーレン生成MDシミュレーションにおける並列化手法」

16:40-17:00 中田 寿穂, 羽田野 直道, 古川 信夫（青学大理工）

「パソコンを用いたクラスタ・コンピュータシステムの開発」

17:10-17:30 「物性研スーパーコンピュータシステム更新について」

6月16日（水）

第一原理計算 2

9:00-9:30 星野 公三（広大総合科学）

「液体Seの金属非金属転移」

9:30-9:50 仙田 康浩（広大生物圈）

「第一原理分子動力学法による液体アルカリ-鉛合金の研究」

9:50-10:10 下司 雅章（金沢大自然）

「高圧セレン単斜晶相の電子状態と構造相転移」

10:10-10:30 小田 竜樹（金沢大理）

「オーダーNタイトバインディング分子動力学計算とカーボン液体への適用」

休憩（20分）

古典巨視系

10:50-11:20 山本 量一（京大理）

「ガラス転移のメカニズム」

11:20-11:40 渕崎 員弘（九大理）

「過冷却液体での遅いダイナミクス：動的密度汎関数理論によるアプローチ」

11:40-12:00 磯部 雅晴（九大理）

「剛体円盤分子動力学シミュレーションにおける大規模計算と高速化の手法」

12:00-12:20 川村 光（京工織大工芸）

「ボルテックスグラス相の安定性と熱平衡シミュレーション」

休 憩（50分）

量子スピン系

13:10-13:30 坂井 徹 (姫路工大理)

「低次元磁性体の磁化過程」

13:30-13:50 飛田 和男 (埼玉大理)

「1次元準周期ハイゼンベルグモデルの基底状態」

13:50-14:10 陳 偉, 飛田 和男 (埼玉大理)

「ボンド交替と單一イオン異方性のある1次元S=1ハイゼンベルグ模型の相転移」

休憩 (10分)

古典スピン系他

14:20-14:50 福島 孝治 (東大物性研)

「拡張アンサンブル法を用いたランダムスピン系の数値計算」

14:50-15:10 尾関 之康, 伊藤 伸泰 (東工大理・東大工)

「非平衡緩和法によるスピングラス転移の解析」

15:10-15:30 川島 直輝 (都立大理)

「2次元スピングラスのドロップレット励起状態」

15:30-15:50 高山 一 (東大物性研)

「3次元イジングスピングラス模型のエイジング現象」

15:50-16:10 佐々木 志剛, 根本 幸児 (北大理)

「多層ランダムエネルギーモデルにおけるエイジング現象」

軌道・格子のカップルした強相関電子系
—マンガン酸化物モデルの大規模シミュレーション—

東工大理 求 幸 年
東大物性研 中 野 博 生
今 田 正 俊

二重交換模型は、巨大磁気抵抗を含むマンガン酸化物系の示す諸物性を理解する上で、古くから盛んに研究され、多くの成功を収めてきた。しかし、最近の精力的な実験によって、単純化された模型では理解の難しい側面が指摘されている。ハーフフィリングの絶縁相においては、電荷ギャップ、軌道・格子秩序の転移温度、磁気秩序の転移温度の間に特徴的なエネルギーの階層構造が見られる。また、低ドープ領域で c 軸方向への長周期構造の形成が観測されている。ドーピングによる金属絶縁体転移近傍の強磁性金属相では電荷応答に強いインコヒーレンスが現れる。

我々はこうした問題を理解する目的で、単純な模型では無視されていた e_g 軌道の二重縮退・電子間相互作用・電子格子相互作用を取り込んだ二重交換模型に基づく研究を行なった[1, 2]。低温でスピンが完全分極している状況下で、電子間相互作用や軌道自由度における量子揺らぎの効果まで取り入れて考察した。現実の系との対応を踏まえた二次元系を考え、量子モンテカルロ法および数值厳密対角化法を用いた計算を行なった。格子歪みは実験で示唆されている構造に基づいて分子場的に扱った。

まずハーフフィリングについて、電子間相互作用によって系は軌道長距離秩序をもつモット絶縁体になることを示した。電荷ギャップの相互作用依存性から強い量子揺らぎが示唆される。ここに格子歪みを導入して、電荷ギャップ・格子歪みによる安定化エネルギー・格子歪みの大きさを定量的に評価し、実験結果と比較を行なった。現実的なパラメタを用いた計算により、実験に見られるエネルギーの階層構造が定量的に再現されることを示した。その時の軌道秩序の構造についても議論した。これらの結果には、電子間相互作用と電子格子相互作用の両者の非線形な協調効果が不可欠であることを示した。

ドープした領域については、強い電子間相互作用の効果によって、電荷圧縮率と軌道相関が絶縁相へ向けて発散的に増大することを示した。このことは電荷ダイナミクスにおける強いインコヒーレンスを示唆する。実際に絶縁相近傍で光学伝導度の計算を行ない、広いエネルギー領域にわたるインコヒーレントなレスポンスが見られることを示した。次に、格子歪みを導入した場合に、絶縁相近傍に相分離領域が現れることを示した。この相分離は、格子歪みのない時に臨界的に増大した電荷圧縮率と、格子歪みの安定化エネルギーの強いドーピング依存性との協調的な効果と考えられる。この結果から、実験で見られる低ドープ領域での長周期構造を理解できる可能性を示した。

- [1] Y. Motome and M. Imada: J. Phys. Soc. Jpn. **68**, 16 (1999).; appear to Phys. Rev. B (preprint cond-mat/9903183).
- [2] H. Nakano, Y. Motome and M. Imada: J. Phys. Soc. Jpn. **68**(1999) 2178.

ハバード模型に対する共鳴非弾性X線散乱スペクトル

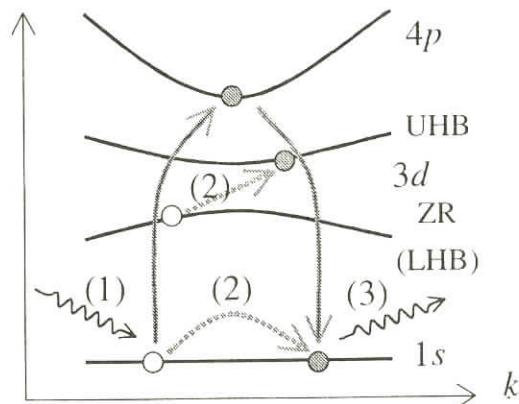
東北大金研 筒井健二
遠山貴己
前川禎通

銅酸化物高温超伝導物質は、その発見以来世界的規模で集中的に研究されてきた。本研究では電子状態を知るための新しい実験手段として共鳴非弾性X線散乱スペクトルに注目し、絶縁相におけるCuO₂面の電子状態がスペクトルにどのように反映するかを明らかにする。Cu *K*-edge共鳴非弾性X線散乱のプロセスは下図のようなものである。(1) 入射X線の吸収により、Cuの1s軌道の内殻電子が4p軌道に励起され、(3) 再び4p電子が1s軌道に戻ることにより散乱X線が放出される。(2) この過程の中間状態で3d電子に揺動が加わりフェルミ準位付近の電子が励起される。入射X線と散乱X線のエネルギーと運動量の変化量を測定することにより、3d電子系の励起の様子を調べることができる。

一方、二次元反強磁性体Sr₂CuO₂Cl₂に対する角度分解光電子分光により、反強磁性体に導入されたホールのスペクトル関数の測定が行われており、交換相互作用程度のバンド幅を持つスペクトルが観測されている。このいわゆるZhang-Rice singletバンドの分散及びスペクトル強度が、*t-J*模型に次近接格子間の飛び移りを含めた*t-t'-t''-J*模型によって再現されることが数値計算によって示されている。しかしながら、反強磁性体中の電子の運動を記述する上部ハバードバンドについては実験的にはあまり明らかになっていない。上述のCu *K*-edge共鳴非弾性X線散乱のプロセスを考えると、共鳴非弾性X線散乱スペクトルは、Zhang-Rice singletバンドと上部ハバードバンドの特徴が両方併せ持った形でが観測されると考えられる。キャリアーの長距離の飛び移り項は、上部ハバードバンドに対しても影響を及ぼしているはずであり、この情報が共鳴非弾性X線散乱スペクトルの波数依存性を調べることにより現れる可能性がある。

本研究では共鳴非弾性X線散乱スペクトルの計算を、内殻ホールの軌道を含めたハバード模型に対する数値的厳密対角化法を用いて行った。Cu *K*-edge共鳴非弾性X線散乱に対応するモデルを考え、3d電子系における長距離の飛び移りの効果が上部ハバードバンドを通してどのようにスペクトルに現れるかを調べた。その結果、この長距離の飛び移りの効果は、共鳴非弾性X線散乱スペクトルにより観測可能であることを見いだした。すなわち、共鳴非弾性X線散乱スペクトルにおいて

てそのスペクトル端が異方的な波数依存性を持ち、これが、上部ハバードバンドの分散に起因することが分かった。このスペクトルの特徴が将来実験で観測されることが期待される。



強相関電子系のダイナミックスの厳密対角化による研究

筑波大学物質工学系 常 次 宏 一

少数クラスターに対する厳密対角化の方法によって、2次元強相関電子系の1電子コヒーレンスと超伝導揺らぎの関係を調べた。2次元 $t-J$ モデルの厳密対角化により、1電子グリーン関数のスペクトル関数と d 波超伝導の動的相関関数を絶対零度で計算した。次近接および次々近接の1電子ホッピング t_1, t_2 を変化させて1電子レベルをコントロールした時、波数 $(\pi, 0)$ の1電子レベルがフェルミエネルギーに近いほど超伝導相関のコヒーレント部分が大きく増大することを見出した。さらにホールドーピングが非常に小さい時に実験で見つかっている深い $(\pi, 0)$ レベルが、1電子ホッピングのみならず d 波超伝導のペアポテンシャルの影響である可能性を指摘した。具体的に2次元 $t-J-Wd$ モデルを用いて厳密対角化の数値計算を行い、ドーピングが0の時に実際に $(\pi, 0)$ レベルが深くなっていることを確認し、さらにドーピングが大きくなっていく時に $(\pi, 0)$ レベルがフェルミエネルギーにピンされてしかも超伝導体で期待される2重ピーク構造を示す傾向があることを発見した。また、ペアポテンシャルの効果で $(\pi, 0)$ レベルが深くなっている時には、長距離1電子ホッピング t_1, t_2 をうまく調節することによって $(\pi, 0)$ レベルをフェルミエネルギーに近づけることができ、そのことによって超伝導相関をさらに発達させることができることを示した。

東大工 平尾公彦

1. 序

理論化学はいま大きく変わりつつある。分子理論と計算方法の目ざましい発展とコンピュータの進歩により、10年前とは比較にならないほど複雑な系の性質を高い信頼度で予測することができるようになってきた。研究対象にできる現象や系は大きく拡がり、新たな可能性がひらかれつつある。他の分野との交流や共同研究も盛んに行われている。この傾向は今後ますます加速され、理論化学はきわめて多岐にわたる応用分野、実験分野と関わっていくであろう。これからは化学諸現象の定性的理解による概念化と定式化が進められるとともに、定量的化学理論をもちいて自然そのものに大胆に切り込むことができるようになる。理論化学は化学の研究に方法的変革をもたらす手段となりつつある。理論に先導された物質設計や反応制御などが夢ではなく現実のものとなろうとしている。しかし、理論に先導された分子設計、反応制御、物質設計を現実のものにするには、理論化学を質的に一段と高いレベル、“化学の理論”の名にふさわしいレベルまで発展させねばならない。今後は理論研究ばかりでなく、実験研究との緊密な連携が必要となる。

2. 電子状態理論の開発

現在の電子状態理論は原子数約100からなる系を扱うことができる。物質設計と制御を行うには、さらに自由度が大きく複雑な系の分子計算や、ダイナミクス研究が必要になる。化学的に興味ある系を対象とするには、現在の分子理論の適用範囲を大幅に拡張する必要がある。オーダーN問題である。これが解決されれば、1000原子からなる系が理論化学の対象になる。生体関連分子、DNA、ナノチューブなど化学的に興味ある多くの系が分子物理化学の視野に入ってくる。このために私たちはさまざまな理論開発、アルゴリズム、ソフトウェア開発に取り組んでいる。高精度な*ab initio*理論の地位を確立しつつある多配置摂動論、Multireference Moeller - Plesset(MRMP) Method, CASSCF法の拡張するQuasi - Complete Active Space(QCAS)SCF法、基底関数の問題におけるExtended Basis Function Space(EBS)法、計算結果を化学者にじみの深い原子化結合法で表現するCAS Valence Bond(VB)法などの開発はこうした流れの一環である。

最近、私達は新しいアルゴリズムに基づく分子積分のプログラム、Sphericaを完成させた。Sphericaはsolid Spherical Gaussiansの分子積分を効率よく計算する。これまでもっとも高速であるといわれているGaussianプログラムと比較しても、10~100倍のスピードである。このSphericaを心臓部として大規模系を対象とする*ab initio*分子軌道法プログラムを作成している。

重い原子を含む系を研究する際には相対論的效果が重要になる。非相対論的なシュレディンガーファンクションを解くかわりに、ディラック方程式を解かねばならない。しかしディラック方程式は4成分spinorを基本としており計算は容易ではない。大規模系の相対論的效果を考慮するにはディラッ

ク方程式をそのまま解くのではなく、ある相対論的近似を導入する必要がある。私達はディラック方程式の持つsmall成分を消去することにより、RESC(relativistic elimination of small components)法とよぶ新しい相対論的電子状態理論を開発した。この方法は変分的に安定で、高次の相対論的效果を取り込むことができる。また、簡単に既存の非相対論的電子状態プログラムに組み込むことができ、どんな電子状態理論に対しても相対論的效果を考慮することが可能である。これまで幾つかの原子および分子にRESC法を適用し、その信頼性を確かめてきた。RESC法は基底状態に限らず、重い原子を含む系の励起状態の計算に対しても、効率的に精度の良い方法であることがわかった。今後さらに理論開発、特にspin-orbit項を考慮した理論を開発し、重い原子を含む分子の励起状態理論を開発する。

密度汎関数法(DFT)は、原子・分子系から生体高分子・結晶等の大規模系に至る広範囲な物質の電子状態を電子密度に基づく平均場ポテンシャルを用いて非線形方程式を解いて求める計算法である。比較的少ない計算量でab initio法に劣らぬ高精度な結果を与える。密度汎関数法は電子間の交換・相関の寄与を電子密度の汎関数として表現している。理論の信頼性は汎関数の妥当性にある。私たちは物理的基準をクリアする相関汎関数の開発にはじめて成功した。One-parameter Progressive(OP)相関汎関数である。OP汎関数は、すべての基本条件を満足する。

3. 応用研究

理論開発とともにさまざまな応用研究も展開している。主なテーマのみを列挙すると

- (1) Why Retinal is Used in Visual Sensations? (Excited State of Polyenes and Polyacenes, Retinal *cis-trans* Isomerization. etc)
- (2) Why Grass is Green and Blood is Red? (Porphyrin Chemistry, Control of Q-Bands. Fe(II)Porphyrin)
- (3) Why Gold Glitters with Yellow Color? (Heavy-Element Chemistry, Relativistic Effects, Spin-Orbit Effects)
- (4) Theoretical Study of Interfaces and Surfaces (Photodissociation of CH₄ on Pt(111), Pd(111), Ni(111) etc. MTG Process. No Decomposition over Zeolite and V₂O₅)
- (5) Transition Metal and Rare-Earth Chemistry (Activation of NH₃ and H₂O over transition metals, Anti-Aufbau principle, f-f Transitions) etc.

第一原理計算で見る水素の量子効果

東大物性研 常行真司

任意の原子配置で原子間に働く力を精度良く求めることができる、密度汎関数法に基づく第一原理電子状態計算、 $3N$ 次元（ N はたとえば原子数）の量子系を $3NP$ 次元（ P は虚時間方向の離散点数）の古典系にマップする経路積分法、古典系のカノニカル分布を効率よくサンプリングする（温度一定の）分子動力学法、これら3つの方法を同時にもちいて原子核の量子効果まで考慮した構造シミュレーションを行う手法が、第一原理経路積分分子動力学法である[1]。この方法は並列記述性が高く、超並列計算機に適した手法である。水素結合型誘電体や生体物質、水素移動とともに化学反応などの研究手法として応用が期待されるが、ここでは結晶シリコン中の不純物水素／ミュオニウム（Mu）および固体水素のシミュレーション結果を紹介する。

過去の μ SR実験から、シリコン中のMuはある確率でシリコンのかごの中心であるTサイトに分布すると考えられているが、これはTサイトがポテンシャル面の極大点であるというこれまでの理論計算結果と矛盾する。第一原理経路積分分子動力学法を用いたシミュレーションによれば、Hの $1/9$ の質量をもつMuは核の量子効果により、ポテンシャル面の極大点であるにもかかわらずTサイトで最大の分布密度を示す。これは μ SR実験の結果を初めて合理的に説明する理論計算結果である。一方Hは古典粒子に近い振る舞いを示し、Tサイトから離れたエネルギー極小点の近傍に分布する。このように高々9倍の質量差が明白な分布の違いを生み出すのはたいへん興味深い[2]。

固体水素は60年以上にもわたって実験・理論研究の対象となってきた。低温での金属化は実験的には未確認であるが、これまでに明らかになってきた150GPa前後のI～III相の相変化は、原子核の量子効果の舞台として興味深い。われわれは第一原理経路積分分子動力学法を用いてはじめてこれら3つの相のシミュレーションを行い、それぞれ特徴的な原子核分布を得た。とくにII相、III相では、顕著な量子効果により、古典分子動力学法によるシミュレーションとは異なる分布となることが示された[3]。

上記のシミュレーション結果には様々な形で原子核の量子効果が現れている。一つは原子核分布の量子的広がり、2つ目は量子効果による分布関数の対称性の変化、そして3つ目は一見常識に反するような量子効果による「局在化」である。これらは軽い原子核を含む系に普遍的な現象と考えられる。

- [1] D. Marx & M. Parrinello, Z. Phys. B95, 143 (1994); J. Chem. Phys. **104**, 4077 (1996).
- [2] T. Miyake, T. Ogitsu and S. Tsuneyuki, Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 1873-1876; Phys. Rev. B, in press.
- [3] H. Kitamura, S. Tsuneyuki, T. Ogitsu and T. Miyake, submitted.

実時間密度汎関数法を用いた電子イオン系のシミュレーション

光誘起欠陥形成、原子脱離、電気伝導への応用

NEC基礎研究所 杉 野 修

宮 本 良 之

近年フェムト秒レーザーを用いた実験技術が発展し、電子励起後の超高速化学反応が注目を浴びている。この現象を理解するためには励起電子とイオンのダイナミックスを明らかにする必要がある。電子イオン系をシミュレートするための方法として、イオン系及び電子系のダイナミックスをそれぞれNewton方程式、time-dependent Schrödinger方程式（あるいはtime-dependent Kohn-Sham方程式）で記述し、時間発展させる手法がある。この手法は各イオンが古典的に振る舞い、電子の非断熱遷移が頻繁に起こらない場合に有効であり、幅広い適用範囲が期待される。ところが、この時間発展の方程式は非線型性が強く数値的に不安定であるため、従来の方法を用いると数値発散に直面するため長時間のシミュレーションは困難であった。そこで、我々は、(1)電子系の自己無撞着ポテンシャル $V(r,t)$ を $t+dt$ に補外する際に時間反転対称性を保つ、(2) $V(r,t)$ を計算結果に影響を与えない範囲内で平滑化する、(3)波動関数のユニタリ性を保つために鈴木・Trotter法を用いる等のテクニックを用いた。この結果、カリウムクラスター等の数値的に困難な系でも数万ステップ($\sim 1\text{ psec}$)安定にシミュレーションを継続することが可能になった[1]。この方法の応用として我々は(a)Si(111)表面からの水素脱離、(b)GaAs中のSi-H複合欠陥の光解離、(c)仮想Al鎖の電気伝導度の計算を行った。(a),(b)に対しては光により電子が占有軌道から非占有軌道へ瞬時に遷移すると仮定し、その後の電子イオンダイナミックスの計算を行った。(a)の場合、励起後は（励起）断熱ポテンシャル面に沿って反応が進み、数fsec後に非断熱遷移が起こる。ところが小さなクラスターで系を近似してシミュレーションを行ったところ非断熱遷移が起きず、H原子は励起断熱ポテンシャル面に沿ってそのまま解離することがわかった。このことはクラスターでこの系を近似して議論する従来の考え方に対する根本的な修正を迫るものである[2]。(b)GaAs中のSi-H複合欠陥は、Si-Hの反結合状態に励起されると励起断熱ポテンシャル面に沿ってHが解離する。これはsupercellの大きさによらず起きることがわかった。多くの系で数fsecで速やかに非断熱遷移が起きるのに対し、この系は例外的にそれが起きない例外的な系である。この結果は、レーザー光を用いた実験とconsistentである[3]。(c)時間に依存したベクトルポテンシャルを用いることにより周期系に一様電場をかけることができる。Alを直線的に並べた仮想的な系に対して電流電圧曲線が計算できることがわかった。

[1] O. Sugino and Y. Miyamoto; PRB **59**, 2579 (1999)

[2] Y. Miyamoto and O. Sugino; submitted to PRB rapid communication

[3] Y. Miyamoto, O. Sugino, and Y. Mochizuki; submitted to APL

時間依存密度汎関数法のイオン衝突への応用

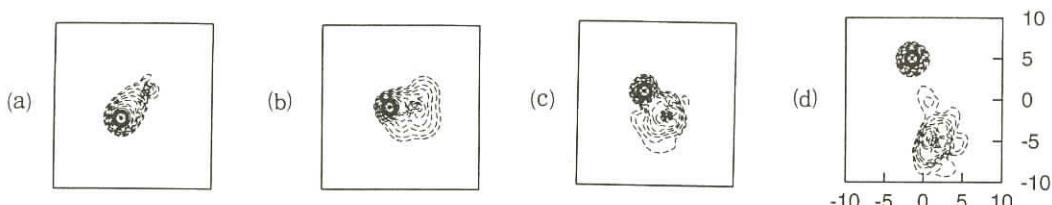
新潟大学大学院自然科学研究科 永野 粒一朗

多価イオンと原子の衝突において起こる多電子移行過程は電子多体系のダイナミクスの理解という点の外に空孔原子（又は空孔イオン）の生成等応用面においても興味深い話題である。この反応の理論的記述はこれまで主に現象論的模型である古典障壁模型によってなされている。本研究では時間依存密度汎関数法を用い、平均場理論の範囲内で多電子移行過程の電子の微視的運動を記述し且つ実験値の定量的予言が可能な理論の構築を目指すものである。時間依存密度汎関数法は、多電子物理系の非経験的計算に用いられる密度汎関数法を多電子の動的過程を記述するために拡張した理論であり、これまで原子や分子、あるいは C_{60} や金属クラスターの光吸収現象の理論的記述に成功を収めている。今回私は衝突エネルギー20~3200keVの領域において $Ar + Ar^{8+}$ 衝突の計算を行った。衝突過程の計算は3次元実空間を等間隔のメッシュで差分化し実空間発展形式で解いた。時間依存Kohn-Sham方程式における電子-イオン相互作用はTroullier-Martinsの方法（文献1）による擬ポテンシャルを用い、交換相関ポテンシャルはPerdew-Zungerの論文（文献2）のものを選択した。図は、 $E_{lab}=400$ keV衝突の反応平面における電子密度分布が時間発展する様子を等高線により(a)~(d)という時間順序で示している。終状態(d)は、入射 Ar^{8+} イオンに移行した電子が高励起状態にあることを示している。電子移行断面積はLuddeらが（文献3）で示したフォーマリズムに基づき計算し、実験結果とある程度の一致が見られた。今後の課題として、Kohn-Sham方程式における交換相関ポテンシャルの問題点である自己相互作用について補正を行った場合の計算や、移行反応後の標的及び入射粒子の内部状態についての分析、イオンと表面との反応の計算等を行いたい。

文献 1 Troullier N and Martins J L 1991 Phys. Rev. B **43** 1993

2 Perdew J and Zunger A 1981 Phys. Rev. B **23** 5048

3 Ludde H J and Dreizler R M 1983 J. Phys. B **16** 3973



波動関数の時間発展の高速で安定な計算法「実空間時間発展法」

東 大 理 渡 辺 尚 貴
塙 田 捷

実空間時間発展法の定式

時間依存 Schrödinger 方程式の解を鈴木の指数積展開法で計算する。

$$\psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \exp\left[-i\frac{\Delta t}{2}V(\mathbf{r}, t + \frac{3}{4}\Delta t)\right] \exp\left[i\Delta t\frac{\Delta}{2}\right] \exp\left[-i\frac{\Delta t}{2}V(\mathbf{r}, t + \frac{1}{4}\Delta t)\right] \psi(\mathbf{r}, t)$$

ラプラシアンに含まれる 2 階微分の指数は Ceyley 形式で近似する。

$$\exp\left[i\Delta t\frac{\partial_x^2}{2}\right] \simeq \frac{1 + i\Delta t\partial_x^2/4}{1 - i\Delta t\partial_x^2/4}$$

これを実空間の差分法で計算する。必要な計算量は格子点の数に比例した程度であり、ユニタリな演算なので、長時間に渡る時間発展を高速に追跡することが可能になる。

接着演算子の導入

並列計算機で計算するため 2 階微分 ∂_x^2 の表現行列をブロック対角な行列 $\partial_{x\text{bd}}^2$ とその残りの行列 $\partial_{x\text{ad}}^2$ の和に分解し、2 階微分の指数を指数積展開する。

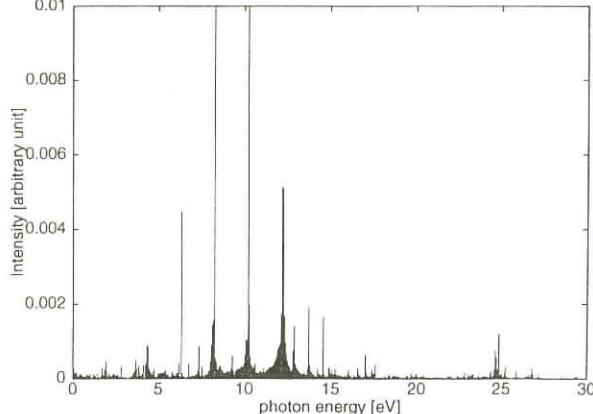
$$\exp\left[\frac{i\Delta t}{2}\partial_x^2\right] = \exp\left[\frac{i\Delta t}{4}\partial_{x\text{ad}}^2\right] \exp\left[\frac{i\Delta t}{2}\partial_{x\text{bd}}^2\right] \exp\left[\frac{i\Delta t}{4}\partial_{x\text{ad}}^2\right]$$

これで並列計算機で効率良く計算することが可能になる。この $\partial_{x\text{ad}}^2$ を接着演算子と呼ぶ。

水素原子中の電子の光励起

実空間時間発展法で水素原子内電子の強レーザー光に対する応答を計算した。電子の振動が生じる散乱光のスペクトル(図)を計算できるだけの長時間に渡る応答を追跡することができた。

実空間時間発展法を用いることで、摂動論や励起状態の情報無しで系の応答を計算することができる。



水素-固体表面反応における高次元量子計算

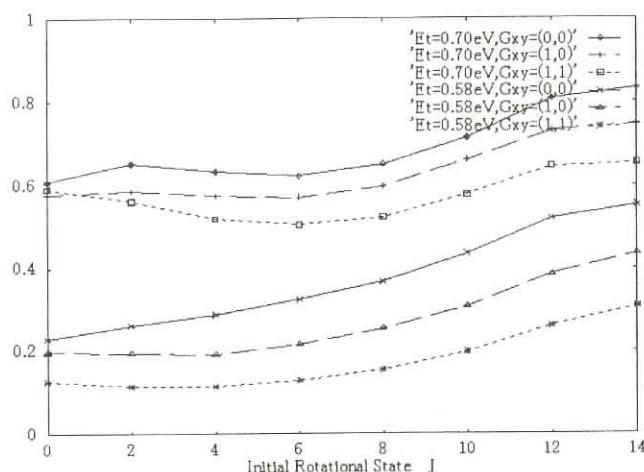
阪 大 工 三 浦 良 雄

笠 井 秀 明

W. A. Dino

和歌山高専 興 地 斐 男

水素-固体表面反応は、分子結合の切断や原子・表面間の結合形成など、自然界のあらゆる動的現象に見られる基本的な素過程を含んでおり、そのメカニズムの微視的立場からの解明は物性物理における最も重要な研究課題の一つとなっている。近年、水素分子の固体表面への解離吸着反応や会合脱離反応においては、水素分子の並進運動だけでなく振動や回転といった内部自由度が大きな効果をもたらすことが明らかになってきた。さらに、表面の周期構造を反映するコルゲーションのため、水素分子の表面垂直方向の運動だけでなく、表面平行方向の運動の効果も重要であるという認識が高まっている。そこで本研究では、水素分子のCu(100)表面への解離吸着反応における、分子の回転運動と分子の表面平行方向の運動のカップリング効果について調べるために、高次元の量子論的動力学計算を行った。その結果を、図に示す。図は、D₂分子のCu(100)表面への解離吸着確率を入射分子の回転状態(J)の関数として表したもので、吸着確率のJ依存性を入射分子の並進エネルギーの表面垂直成分(E_t)と、表面平行方向の運動量(G_{xy})をそれぞれ変化させてプロットしている。ここで、G_{xy}=(0,0), (1,1), (1,0)とは入射分子の運動量の表面平行成分の向きを表し、G_{xy}=(0,0)は垂直入射、G_{xy}=(1,0), (1,1)はそれぞれCu(100)表面の正方格子のX軸方向、対角線方向を表している。図から、吸着確率が入射分子の回転量子数(J)に対して非単調な依存性を示していることが見て取れる。比較的Jが小さな領域で見られるJの増加に伴う吸着確率の減少は、いわゆる水素分子のステアリング効果の現れである。またJが比較的大きな領域で吸着確率が



Jの増加関数になっているのは、回転(R)から並進(T)へのエネルギー移動の効果の現れである。このような回転運動に起因する2つの効果の競合によって、吸着確率のJ依存性は決定されるわけであるが、我々の計算結果はその2つの効果の優位性が分子のもつ表面平行方向の運動量の大きさによって変化することを示している。すなわち、 $E_t = 0.58\text{eV}$, 0.7eV のいずれの結果に対しても、分子の表面平行方向の運動量が増加するにつれて吸着確率は減少している。表面平行方向の運動量の増加に伴う吸着確率の減少は、表面平行方向の運動量が、分子の周期ポテンシャルの低い部分に沿った運動を妨げるためであると考えられる。

銅酸化物高温超伝導体の電子状態とスピン・電荷励起

東北大金研 遠山貴己

高温超伝導は二次元反強磁性モット絶縁体にキャリヤをドープすることで実現される。高温超伝導体の著しい特色は、ドープ量の少ない領域において超伝導状態と同じd波対称性を持ったギャップ構造(擬ギャップ)が常伝導状態でも現れているという点にある。擬ギャップ現象を含めた電子状態を解明する有力な手段に角度分解光電子分光法がある。そのスペクトルは、最も基本的な物理量であるスペクトル関数に関係している。ギャップのd波対称性を反映して運動量が $(\pi, 0)$ および $(0, \pi)$ の近傍ではいくつかの異常が現れているが、特にキャリヤのドープ量が減少するにつれて 0.2eV 程度のエネルギー領域でスペクトルがブロードになっていく現象は電子状態との関係から非常に注目されている。最近の角度分解光電子分光の結果は、そのブロードなスペクトルがキャリヤのない反強磁性絶縁体物質から見られていること、さらに $(\pi/2, \pi/2)$ から $(\pi, 0)$ に向かって分散を描くと絶縁体でも超伝導体と同じd波的な分散が得られることを示している。したがって、絶縁体における電子状態を正確に理解することが高温超伝導の機構解明にとって不可欠である。

本研究では、高温超伝導体の角度分解光電子分光スペクトルと電子状態を理解することを目的として、拡張 t - J 模型を採用し、有限サイズのクラスター(16~20サイト)に対する数値的厳密対角化法(ランチョス法)を用いてスペクトル関数や動的スピン相関関数・電荷相関関数を調べた。

t - J 模型に第二、第三近接間のホッピング項を加えることで、絶縁体におけるd波的な分散とブロードなスペクトルが得られる。そのとき、運動量 $(\pi, 0)$ を持つ準粒子のまわりのスピン相関は、長距離相関が強く抑制されたスピン液体的な振る舞いを示す。これは、反強磁性的な長距離相関が強い $(\pi/2, \pi/2)$ での振る舞いとは異なっている。 $(\pi, 0)$ の準粒子エネルギーは $(\pi/2, \pi/2)$ のそれに比べて約 0.2eV 高くその結果スピン系の振る舞いが大きく変化するのである。スピン液体的な振る舞いに加えて、 $(\pi, 0)$ ではスピンと電荷のダイナミクスが分離しているように見える。したがって、 $(\pi, 0)$ 付近の振る舞いはd波RVB理論で記述できそうである。キャリヤをドープ

しても ドープ量が少ない限り ($\pi, 0$) のスペクトルはブロードのままであり、実験結果と良く対応している。絶縁体での結果との対比から擬ギャップ現象にはスピン液体的な性質が関与していることが示唆される。

本研究は、柴田康雅、前川禎通（東北大金研）、永長直人（東大工）、Z.X.Shen（Stanford大）の各氏との共同研究である。

(La,Sr)₂CuO₄ の電子状態と励起スペクトル

東北大金研 柴田康雅
永井進
遠山貴己
前川禎通

我々は高温超伝導体の電子状態を解き明かし、その機構を解明すべく、理論的な側面から研究を行っている。高温超伝導体は共通してCuO₂面を持っており、このCuO₂面が超伝導の舞台になっている。ゆえに、高温超伝導の機構を解明するにはCuO₂面の電子状態を詳細に理解する必要がある。

近年、高温超伝導体の一つであるLa_{1.6-x}Nd_{0.4}Sr_xCuO₄(LNSC)のx=0.125において、低温正方晶(LTT)構造のもとで電荷秩序や非整合反強磁性長距離秩序が見つかっている。この電荷およびスピン秩序は、電荷が一列に並び、それをはさんで反強磁性的なスピンのドメインが存在し、隣接したドメイン同士は互いに反位相になっているという、ストライプ構造を仮定することにより説明されている。また、この時、超伝導転移温度(T_c)が異常に低下することが知られている。La_{2-x}Sr_xCuO₄(LSC)においてもx=0.12付近で、非整合反強磁性長距離秩序が見つかっている。構造解析からは低温斜方晶(LTO)構造の中にLTT構造の揺らぎが存在していることが報告されており、また、LNSCと同様な T_c の異常も観測されている。したがって、LSCの電子状態に対しても、上記のストライプが重要な役割を果たしていると考えられる。

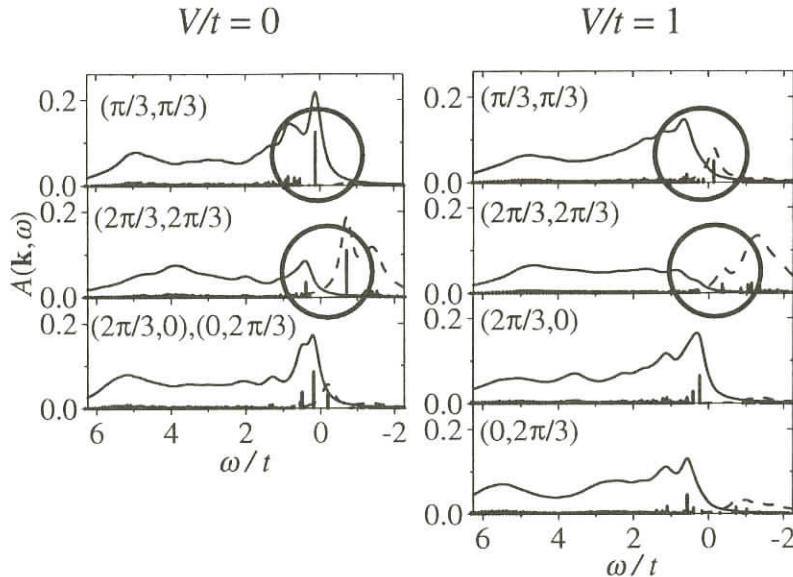
ストライプが起源と思われる電子状態の異常が、いくつかの実験で報告されている。なかでも、井野らによる角度分解光電子分光実験はLSCの電子状態とBi₂Sr₂CaCu₂O_{8+d}(Bi2212)の電子状態との著しい違いを明らかにした[1]。それは、アンダードープ領域において、Bi2212では(1,1)方向のスペクトルに明らかなピークが存在するのに対して、LSCではピーク構造が観測されないということである。本研究の目的は、この実験事実とストライプの関連を調べることを足がかりにして、LSCの電子状態を明らかにすることである。

我々は、CuO₂面の電子状態を記述するために従来から用いられてきた模型に、ストライプ構造を安定化させるポテンシャルを新たに加えた。これは、LTT構造のゆらぎに起因した系の異方性

を表現している。このような模型において、一粒子励起スペクトルや光学伝導度やスピン相関関数、pair相関関数などの物理量を数値計算した。一例として、18サイト2ホールのクラスターに対する一粒子励起スペクトルの結果を図に示す。Vはストライプを安定化させるポテンシャルである。V/t=1で基底状態はストライプ構造となっており、(1,1)方向のフェルミ準位近傍（丸印の部分）の準粒子スペクトルは強く抑えられている。これは実験結果において、(1,1)方向にピークがないということと一致する。このほかの計算結果も、実験事実を良く説明しており、アンダードープ領域のLSCの電子状態がストライプと密接に関係していることが明らかになった。なお、本稿の内容は参考文献(2)に掲載されている。

参考文献 :

- (1) A.Ino, C.Kim, T.Mizokawa, Z.-X.Shen, A.Fujimori, M.Takaba, K.Tamasaku, H.Eisaki and S.Uchida, J. Phys. Soc. Jpn., **68**, 1496 (1999)
- (2) T.Tohyama, S.Nagai, Y.Shibata and S.Maekawa, Phys. Rev. Lett., **82**, 4910 (1999)



二次元ハバードモデルの基底状態の研究

電総研 浅井美博

ドープされた二次元ハバードモデルの基底状態を量子モンテカルロ法を用いて計算しようとする
と負符号問題が発生し統計誤差が著しく増大する為信頼できる結果を得る事は難しい。未だに基底

状態の全容が理解されたとは言い難い。最近我々は負符号問題の対処法としてadaptive sampling量子モンテカルロ法(ASQMC)と呼ぶ方法を提唱した[1]。この方法はZhang, Carlson, Gubernatis(ZCG)等のconstrained pathモンテカルロ法(CP法)[2]に刺激を受けて考案されたものであるが彼等の方法とは異なり拘束条件(constrained path条件)を課さない。つまり彼等の方法が大局的な拘束条件を課すFahy, Hamman(FH)法[3]に比べて精度においても更に有効なのは彼等が採用したアップデート法自体が負符号をあまり発生させていない為である。我々は拡散モンテカルロ法に類似した彼等のアップデート法を通常の補助場法で実現する方法を提案した。この方法はCP法では根本的に不可避な精度の良くないmixed estimator $\langle \psi_{trial}|A|\phi_{exact} \rangle$ やその改良版を用いて測定が可能になった事により彼等のアップデート法を用いるよりむしろ精度が良い結果を与える。拘束条件を課さないが負符号の発生比率は減少している[1]。ASQMC法はサンプリング及び測定を行う虚時間に依存して重み関数を変化させており、測定はRe-weighting関数が1となる特定の虚時間でのみ行っているため(例えばMixed estimator法の場合は $l=L; L=\tau/\Delta\tau$) Re-weightingファクターによる偏差の増大は起こらない。図1に 4×4 ハバードモデルの $U/t=12$, $\rho=14/16$ の時のエネルギーの虚時間(τ)依存性を示す。通常の補助場法を用いた場合は既に $\tau=1.25$ 以上で偏差が著しく増大してしまうが、ASQMC法を用いればオーバーフローが発生しない限り大きな τ を用いる事が可能であり、 $\tau=7 \sim 8$ で統計誤差範囲内で正確な基底状態のエネルギーに収束する。同様に、 6×6 格子(開殻系, $U/t=4$)のあるバンド構造を持つ場合において[4]、少なくとも $\tau=20$ まで計算が可能である事を確認している。この場合では $\tau=3$ 程度で基底状態エネルギーに収束する。この速い収束性は、試行関数の対称性と低励起状態の対称性が異なる事に依る。いくつかの場合において自己相関関数を計算し、シリアル相関が無い事も確認した。ASQMC法で得られたサンプルは統計的に独立であり、見積もった分散を真の分散として採用できる。この方法を用いて二次元ハバードモデルの基底状態を計算している。[4] 計算は $6 \times 6 \sim 12 \times 12$ クラスターに対して行った。着目したのは非相互作用系が既に平坦なバンド分散を示す場合であり、有限系の最高被占レベル(HOL)と最低非占レベル(LUL)のエネルギー差がゼロに近い場合である。この場合(1)超伝導相関関数の長距離部分の U/t による増大($U=0$ およびuncorrelated partに対しての双方)。(2)スピンギャップ的なスピン相関の距離依存性。(3)運動量分布関数のd波平均場理論との類似。(4)スピン相関関数 $S(q)=\int d\omega S(q,\omega)$ での非整合ピークと整合ピークの共存等の特徴的な結果を得たが、これらはいずれもd波超伝導基底状態及び銅酸化物の磁性に関する実験結果と矛盾しない。

[1] Y. Asai, cond-mat/9904255.

[2] S. Zhang, J. Carlson, and J.E. Gubernatis, Phys. Rev. B **55**, 7464 (1997).

[3] S.B. Fahy and D.R. Hamman, Phys. Rev. B **43**, 765 (1991).

[4] Y. Asai, cond-mat/9904310.

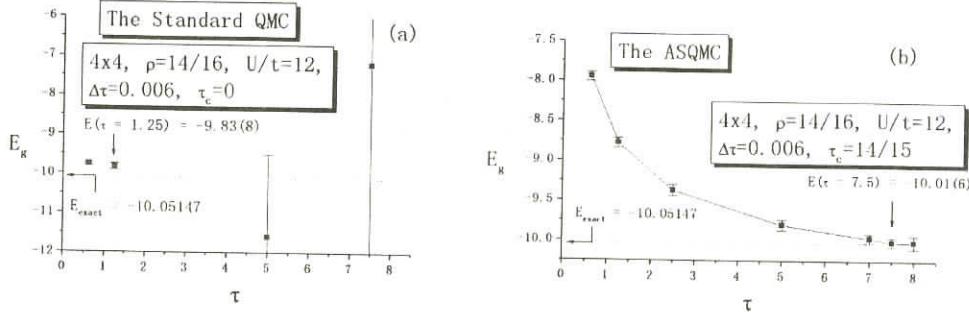


図1：エネルギーの虚時間 τ 依存性。 4×4 , $U/t=12$, $\rho=14/16$ 。(a)は通常の補助場法の場合, (b)はASQMC 法の場合

古典自由度と相互作用する電子系に対する新しいモンテカルロ法

東工大 求 幸 年
青学大理工 古川信夫

古典的な自由度と相互作用する電子模型は、様々な現実の系に適用できる。例えば、局在スピンを古典的に取り扱った二重交換模型は、マンガン酸化物系における強磁性金属相、強磁性・常磁性転移および巨大磁気抵抗などの理解に大きな役割を果たしてきた。解析的手法に加えて、最近では古典自由度の配置に関してモンテカルロサンプリングを行なう数値的な手法が用いられ、新たな知見が得られている[1,2]。しかしこの方法では、電子系のハミルトニアンを数値対角化する部分でハミルトニアンの行列次元の3乗に比例した計算時間がかかるため、大きなサイズの系には適用できない。そのために、現実の系との比較の上で最も興味のある3次元系においては有限サイズスケーリング等の系統的な研究は行われていない。

ここでは、この従来の方法における対角化の部分を、状態密度に対する直交多項式によるモーメント展開で置き換える新しい方法を提案した。この方法の利点は大きく分けて二つある。一つは、状態密度のモーメント展開にかかる計算時間が、ハミルトニアンの行列次元の2乗に比例した計算時間で済むことである。展開にはChebyshev多項式を用いた[3]。もう一つの利点は、モーメント展開が各基底に関して完全に独立に行なえるために、並列計算が可能であることである。これらにより計算時間が大幅に短縮される。

この新しいアルゴリズムを二重交換模型に適用し、その有効性を示した。この方法では、計算時間がモーメント展開の次数の上限値に比例する。そのため、展開次数を小さく取ることが計算時間の短縮に重要である。モンテカルロサンプリングに重要な有効作用および電子密度などの物理量に

ついて、それらの誤差が展開次数の上限値に対して指数関数的に小さくなることを示した。低温ではその誤差の減り方が遅くなり、同じ精度を保つには展開次数の上限値を温度に反比例して大きく取る必要がある。しかし、熱揺らぎの効果があるために、ある程度の誤差は乱数発生のばらつきと見なすことができる。実際の物理量の計算結果から、物理的に興味のある温度範囲では上限値を温度によらず数十程度の値で固定して良いことを示した。

最後に、ここで提案した新しいアルゴリズムのベンチマークの結果を示した。例えば二重交換模型で $6 \times 6 \times 6$ について 1,000 モンテカルロステップ計算する場合に、従来の方法では 10 日以上かかる[4]ところを、数時間で実行可能である[5]。これにより、3 次元系でのサイズスケーリングまで含めた議論や、格子歪みまで考慮した系、あるいは表面の効果など、今後様々な場合について研究を進めていく。

- [1] For a recent review see, N. Furukawa, in *Physics of Manganites*, edited by T. Kaplan and S. Mahanti (Plenum Publishing, New York, 1999), also available at cond-mat/9812066.
- [2] Yunoki *et al.*, Phys. Rev. Lett. **80**, 845 (1998).; Yunoki *et al.*, Phys. Rev. Lett. **81**, 5612 (1998).
- [3] L. W. Wang, Phys. Rev. B **49**, 10154 (1994).; R. N. Silver and H. Röder, Int. J. Mod. Phys. C **5**, 735 (1994).
- [4] α 21164 (533MHz)による。
- [5] 東大計算機センター SR2201(64PE)による。

量子系における動的応答関数の高速アルゴリズム

北大院工 島 弘 幸
中山 恒 義

大規模行列の固有値問題を解くための有効な計算法の一つに、強制振動子法がある[1]。その基本的なアイデアは、行列の固有値問題をある種の格子振動問題に対応づけ、強制振動による共鳴を利用して時間発展追跡計算を行うことで、初めに与えられた行列の固有値・固有ベクトルを求めようとしたものである。この計算法によれば、 $N \times N$ 行列で記述される系の固有値・固有ベクトルを求めるのに必要なメモリ容量と計算時間がそれぞれ N および N^2 に比例するため、直接対角化法では計算が困難な巨大規模行列 ($N \sim 10^7$) を取り扱うことができる。

本研究ではこの強制振動子法を拡張し、量子系応答関数に対する新しい数値計算アルゴリズムを開発した[2]。このアルゴリズムは計算プログラムの大部分が Schrödinger 方程式の時間発展計算

で構成されるため、プログラムのベクトル化が容易であるほか、並列処理に極めて適している。さらに、久保公式で記述される線形応答関数一般に広く適用可能であるため、不規則電子系や量子スピン系など様々な量子系の動的性質を調べることができる。

計算法の適用例として、発表では3次元アンダーソン転移点近傍における交流電気伝導度 $\sigma(\omega)$ の計算結果を示した。転移点の十分近くでは $\sigma(\omega) \propto \omega^{1/3}$ が成り立つことが理論的に予測されているが、これを数値的に実現するには系のサイズを十分大きく取る必要がある。私たちが開発した方法は大規模計算を得意とするほか、低振動数領域の計算に特に有効であるため、先の $\omega^{1/3}$ 則を ω について2桁以上の広い範囲にわたって実現することができた。

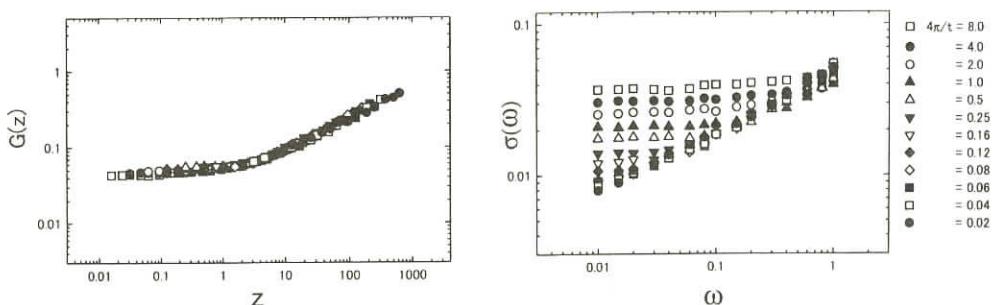
さらに発表では、動的臨界指数 $\sigma(\omega) \propto \omega^\delta$ を高速かつ高精度に求めるための新しい解析法：有限時間スケーリング解析について述べた[3]。これは本計算法による伝導度の計算結果 $\sigma(\omega, t)$ が、スケーリング関数 $G(z)$ を用いて次のように表せる用いている。

$$\sigma(\omega, t) \propto t^{-\delta} G(\omega t), \quad G(z) = \begin{cases} z^\delta & : z \gg 1 \\ \text{const} & : z \ll 1 \end{cases}$$

ここで t は、Schrödinger方程式を時間発展させるときの時間である。

図1に様々な t の値に対する $\sigma(\omega, t)$ の計算結果を、図2にはそれらをスケーリング関数 $G(z)$ にプロットした結果を示す。3つのuniversality class (orthogonal, unitary, symplectic)のそれぞれについて δ を求めた結果、その全てについて $\delta = 0.34 \pm 0.01$ (unitaryのみ ± 0.02)という値を得た。

- [1] T. Nakayama, in *Computational Physics as a New Frontier in Condensed Matter Research*, edited by H. Takayama *et al.* (The physical Society of Japan, Tokyo, 1995), p.21.
- [2] T. Nakayama and H. Shima, Phys. Rev. E **58**, 3984 (1998).
- [3] H. Shima and T. Nakayama, J. Phys. Soc. Jpn. **67**, 2189 (1998).



量子ダイナミクス法による（非）線形応答関数の計算とその応用

理 研 飯 高 敏 晃

1990年代の計算固体物理学、計算機材料科学における最も画期的な出来事は、量子力学的電子状態の Order(N) 計算法の発展である。これらの計算法では、電子エネルギー、全エネルギー、力などを系の原子数 N に比例した記憶容量と計算量で量子力学的に計算できる。Order(N) 計算法は、 N の 3 乗の計算量が必要な従来の行列対角化の方法では扱えなかったナノ微結晶のような非常に大きな系の量子的なエネルギー最小状態の計算を可能にし、計算固体物理学の適用範囲を各種の実用的问题にまで飛躍的に広げたのである。そこで、われわれは、線形応答関数などを計算するための新しいオーダー N 計算法を 2 種類提案した[1,2]。これらの計算法は、従来のエネルギー最小状態を求めるための Order(N) 計算法とは違って、エネルギー最小状態の系が与えられたとき、外界からの刺激にどう応答するかを求めるための計算法である。どちらも、時間依存シュレーディンガ方程式の数値解法[3]、ランダムベクトルによる対角和の計算法を利用しておらず、ベクトル並列型スーパーコンピュータによる計算に非常に適している。第 1 の計算法「粒子源法」[1]は、静的応答($\omega = 0$) に適しており、大きな非周期系の輸送係数に応用され成功している[4]。第 2 の計算法「射影法」[2]は、動的応答($\omega \neq 0$) に適している。この 2 つの計算法は、他のオーダー N 計算法とちがって波動関数の局在性を利用しないので、微結晶のサイズ効果[5]のように波動関数の大域的な干渉性により起こる現象を取り扱うことができる。さらに、これらの計算方法は非線形応答関数の計算法に拡張される[6]。共同研究者としてあるいは助言者としてこの研究を応援してくださった、伊藤正樹、戎崎俊一、村山美佐緒、黒川義元、島弘幸、野村晋太郎、趙新為、平山秀樹、青柳克信、菅野卓雄、光武亜代理、岡本祐幸、田中宏志、中山恒義、鈴木増雄、大槻義彦（以上敬称略）のみなさんに感謝いたします。

- [1] T. Iitaka, High performance computing in RIKEN 1995, 241 (1996). (eprint:physics /9802021)
- [2] T. Iitaka et al., Phys. Rev. E56, 1222 (1997); T. Iitaka, Phys. Rev. E56, 7318 (1997).
- [3] T. Iitaka, Phys. Rev. E49, 4684 (1994); 飯高敏晃著、「量子ダイナミクス入門」、丸善 (1994).
- [4] H. Tanaka, Phys. Rev. B57, 2168 (1998); H. Tanaka and M. Itoh, Phys. Rev. Lett. 81, 3727 (1998).
- [5] S. Nomura et al., Phys. Rev. B56, 4348 (1997); Phys. Rev. B59, 10309 (1999).
- [6] T. Iitaka and T. Ebisuzaki, Microelectronic Eng., 47, 321 (1999); Phys. Rev. E60, (in press).

微小磁性体の磁化過程における非断熱遷移と緩和現象

東大工 宮下精二
齊藤圭司

緩和現象の一般的な性質を明らかにすることは、統計物理において重要な問題の1つである。

Dropletモデルでは緩和時間は、局所的な状態がエネルギー障壁 ΔE を超えるのに必要な臨界核が生成されるに要する時間として与えられる。ある温度 T においては、このようなプロセスが確率 $p = p_0 \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_B T}\right)$ で起こると期待される（Arrhenius則）。この機構では緩和時間は温度の減少につれて指数関数的に増大し、 $T=0$ で発散する。しかしながら、多くの実験で緩和時間はある温度 T_0 で頭打ちになるという事実が報告されている。この温度 T_0 以下では熱エネルギーはエネルギー障壁を超えるのには使われないにもかかわらず、緩和時間は増加しない。それゆえ熱以外の別の緩和機構を見つける必要がてくる。エネルギー障壁の分布が見かけ上の頭打ちした緩和時間を与えているということも指摘されているが[3]、多くの場合量子力学的側面も重要な役割を果たすと期待される。それゆえ量子トンネルによる緩和率の計算をWKB型計算で求められたりする[4]。しかし一般に磁性体では有効ポテンシャルを秩序変数の関数としてどのように決定するかが難しい。

我々は与えられたHamiltonianで時間駆動する量子状態のダイナミックスを Schrödinger方程式を数値的に解くことで調べる。数値的に大自由度系を扱うのは難しいので、ここでは少数自由度系を扱うが、少数系とは言え時間発展の中で何が実際に変化しているかを見ることができるという意味で大きな意味がある。

純粋な量子力学的時間発展においては、全エネルギーは保存し緩和は起こらない。エネルギー変化を伴った状態の変化を調べるためにには散逸の機構を導入する必要がある。我々は緩和過程を調べるために様々な方法を導入することになるが、その前にもっと基礎的な量子力学におけるエネルギー変化過程について研究することにする。そのために我々は有限速度をもって変化する磁場の下にある系を考える。もしその速度が無限少であれば、断熱定理から系は基底状態に常にとどまっている。この状態は磁化のトンネルに相当している。しかし有限速度 $c = \frac{dH}{dt}$ で磁場を変えれば、非断熱遷移が起り磁化は部分的にしか変わらない。この非断熱遷移過程はLandau-Zener-Stückelberg(LZS)遷移と呼ばれている[5,6,7]。十分大きい磁場のもとで各々のレベルが磁化 m と m' をもつ2準位系の場合、状態はある磁場で交差する。一般に準位の非交差は準位間の相互作用によって作られる。いまエネルギーギャップを ΔE とする。系の状態が初期に状態 m にあり、磁場が有限の速度 c で掃引されるとき、系の状態が m の状態にとどまる確率は、

$$\bar{p} = \exp\left(-\frac{\pi(\Delta E)^2}{2(|m - m'|)c}\right), \quad (1)$$

で与えられる。それゆえトンネル確率は $1 - \bar{p}$ とできる。この確率は次の章で見るように磁化の変化から見積もることが出来る。

我々はナノスケール磁性体のダイナミックスを非断熱遷移の観点で研究した。このような小さな系ではエネルギーレベルの離散性が重要な役割を果たし、掃引磁場に対する応答磁化をみると階段状の磁化過程が観測される [8, 9, 10, 11, 12, 13, 14]。この階段は準位間の非交差点における量子力学的遷移として説明される。系が初期状態においてだいたい磁化 $m_0 \approx -S$ をもつ基底状態にあり、外磁場が負から正に掃引されるときを考える。磁場が大きくなっていくと m_0 の状態は磁化 $S, S-1, \dots, 0$ を持つレベルに次々と交差していく。それぞれの非交差準位点で非断熱遷移が起こる。こうして共鳴トンネルは非断熱遷移の観点から極めて自然に説明されるのである [18, 19, 20, 21]。

この階段磁化曲線は例えば掃引速度 c を持つ外磁場のある横磁場Ising系、で容易に観測することが出来る。純粋な量子力学的時間発展の下では、 i 番目の非交差準位点で観測される磁化の変化 $\Delta M_i \equiv M_i - M_{i-1}$ と非断熱遷移確率 $\{p_i\}$ との間には $\Delta M_i = \prod_{n=1}^{i-1} (1-p_n) \{[m_0(1-p_i) + m_i p_i] - m_0\}$ の関係がある。ここで M_i は i 番目の非交差準位点から $i+1$ 番目の非交差準位点の間に観測される磁化であり m_i は i 番目のレベルの磁化である。この関係を使うと、すべての非断熱遷移確率 $\{p_i\}$ とエネルギーギャップを観測される磁化から求めることができる。

しかしながら実際の実験においては、磁性体はエネルギースケールが低いので熱的な環境を無視することは出来ない。比較的高温のときでは熱支援共鳴トンネル (Thermally assisted resonant tunneling) と呼ばれる磁化曲線における強い温度依存性が観測されている [10]。十分低い温度においては、磁化過程は温度依存性がなくなり階段状磁化が観測されるが [14]、実験データに純粋な量子力学のシナリオを適用すると、一貫した無矛盾な遷移確率は得ることが出来ない [21]。

このような理由から熱浴と接触した系の性質を研究していく。我々は散逸的環境におかれた量子力学を研究するためのモデルを導入する。無限個のbosonと相互作用する系を考え、系と熱浴との弱相互作用極限と熱浴の変数の短い相関関数を仮定することにより、次のような量子マスター方程式を導出することが出来る [22]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} &= -i[\mathcal{H}, \rho(t)] - \lambda \left([X, R\rho(t)] + [X, R\rho(t)]^\dagger \right), \\ \langle \bar{k}|R|\bar{m}\rangle &= \zeta \left(\frac{E_{\bar{k}} - E_{\bar{m}}}{\hbar} \right) n_\beta(E_{\bar{k}} - E_{\bar{m}}) \langle \bar{k}|X|\bar{m}\rangle, \\ \zeta(\omega) &= I(\omega) - I(-\omega), \quad \text{and} \quad n_\beta(\omega) = \frac{1}{e^{\beta\omega} - 1}. \end{aligned} \tag{2}$$

ここで β は逆温度 $1/T$ であり、 \hbar は 1 にとってある。 $|\bar{k}\rangle$ と $|\bar{m}\rangle$ はそれぞれ固有値 $E_{\bar{k}}$ と $E_{\bar{m}}$ をもつ \mathcal{H} の固有状態である。 $I(\omega)$ は熱浴のスペクトル密度であり、今のは Ohmic 型 $I(\omega) = I_0 \omega$ を使用する。もっと現実的な低温実験に即した熱浴としては、核スピニからのダイポール

相互作用や、super-Ohmic型の熱浴の効果を考えることができるが、ここでは熱浴の詳細よらない普遍的な性質のみをみたいので、詳細には立ち入らずOhmic熱浴のみだけを考えることとする。 X は無限個のbosonで構成される熱浴と相互作用する系の演算子である。ここでは $X = \frac{1}{2}(S_x + S_z)$ とする。

我々は $S=10$ のスピン系のモデルとして $\mathcal{H} = -DS_z^2 + \Gamma S_x - H_{\text{ext}}(t)S_z$ を考える。ここで外磁場は $H_{\text{ext}} = ct - H_0$ のように一定速度 c で掃引される。 $c = 0, T \ll 1$ の場合、初期状態と基底状態の間にポテンシャル障壁がない場合、かなり早い緩和が見られることが確認できる。 $c \neq 0$ のとき、この散逸のある量子力学系で、散逸のない純粋な量子力学系のときのような階段状磁化過程を見ることが出来る。この階段状磁化過程のこと我々は「見かけ上の非断熱遷移」と呼ぶことにする。

我々は散逸のあるときの磁化曲線から純粋な量子力学的遷移確率を見積もり、それからエネルギーギャップを計算する方法を提案する。この方法で計算される非断熱遷移確率を \tilde{p}_i と書くと、磁化の変化と非断熱遷移確率との間には、

$$\Delta M_i = \prod_{n=1}^{i-1} (1 - \tilde{p}_n) \{ [m_0(1 - \tilde{p}_i) + m_1 \tilde{p}_i] - m_0 \}, \quad (3)$$

の関係があることが見出される。さらにLZS公式から、非断熱遷移公式はエネルギーギャップと関係づけられることから、磁性体のエネルギー構造が散逸のある場合でも磁化曲線から与えられる。この関係を用いることにより我々は Perenboomらの実験データに対して、矛盾のない非断熱遷移確率を見出すことに成功した。今後、掃引速度 c での磁化変化の情報を使って、Mn₁₂ や Fe₈ のエネルギーギャップ $\{\Delta E_i\}$ を調べている。

参考文献

- [1] J. S. Langer, Ann. Phys. **41**, 108 (1967), **54** 258, (1969)
- [2] P. A. Rikvold, H. Tomita, S. Miyashita, and S. W. Sides, Phys. Rev. E **49**, 5080 (1994)
- [3] B. Barbara and W. Wernsdorfer, Curr. Opn. Sol. **2**, 220 (1997).
- [4] E. M. Chudovsky and L. Gunther, Phys. Rev. Lett. **60**, 661 (1988).
- [5] L. Landau, Phys. Z. Sowjetunion **2**, 46 (1932).
- [6] C. Zener, Proc. R. Soc. London, Ser. A **137**, 696 (1932).
- [7] E. C. G. Stückelberg, Helv. Phys. Acta **5**, 369 (1932).
- [8] J. R. Friedman and M. P. Sarachik, T. Tejada and R. Ziolo, Phys. Rev. Lett. **76**, 3830 (1996).
- [9] L. Thomas, F. Lionti, R. Ballou, D. Gatteschi, R. Sessoli and B. Barbara, Nature **383**, 145 (1996).
- [10] J. M. Hernandez, X. X. Zhang, F. Luis, and T. Tejada, J. R. Friedman, M. P.

- Sarachik and R. Ziolo, Phys. Rev. B **55**, 5858 (1997).
- [11] L. Thomas et al., Nature **383**, 145 (1996).
- [12] F. Lioni, L. Thomas, R. Ballou, Barbara, A. Sulpice, R. Sessoli and Gatteschi, J. Appl. Phys. **81**, 4608 (1997).
- [13] C. Sangregorio, T. Ohm, C. Paulsen, R. Sessoli, D. Gatteschi, Phys. Rev. Lett. **78**, 4645 (1997).
- [14] J. A. A. J. Perenboom, J. S. Brooks, and S. Hill, and T. Hathaway, and N. S. Dalal, Phys. Rev. B 330 (1998).
- [15] H. Grabert, P. Schramm, and G. Ingold, Phys. **3**, 115 (1988).
- [16] S. Miyashita, K. Saito, and H. De Raedt, Phys. Rev. Lett. **80**, 1525 (1998).
- [17] S. Miyashita, BUTSURI **53**, 259 (1998).
- [18] S. Miyashita, J. Phys. Soc. Jpn. **64**, 3207 (1995).
- [19] S. Miyashita, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 2734 (1996).
- [20] H. De Raedt, S. Miyashita, K. Saito, D. Garcia - Pablos, and N. Garcia, Phys. Rev. B, **56** 11761 (1997).
- [21] K. Saito, Miyashita, and H. De Raedt, unpublished, cond - mat/9904323.
- [22] K. Saito, S. Takesue, S. Miyashita, unpublished, cond - mat/9810069.

有限要素法を用いた第一原理電子状態計算

東大情基セ 土田英二

密度汎関数法に基づく電子状態計算は経験的なパラメータを使わずに色々な物理量を正確に計算することができるため、第一原理計算・Car - Parrinello 法などと呼ばれ近年広く使われているが、方法論の面ではまだ色々と改善の余地がある。

本研究では、工学の分野で広く使われている有限要素法に対していくつか改良を加えることにより、理想的な特長を持った、大規模な電子状態計算に最適の計算方法となることを示した。有限要素法ではこれまで、最大でも二原子程度の非常に小さい系しか扱われてこなかったが、本研究で実用的にすることことができた。

初期の段階では主に全電子計算を中心として適用し、原子核付近で指数的に解像度を上げることにより、有限要素法が FLAPW 法などと並ぶ有力な計算法になりうることを示した [1]。

その後はより大規模な系を目標として擬ポテンシャルを用い、また並列計算機と相性の良いスプライン基底関数・曲線座標系・マルチグリッド法などの技法を採用した。これらの組合せにより、

1024台の超並列計算機上でも高い性能を維持することが確認された。又、計算量を系のサイズに比例する程度で押さえる、オーダーN法への適用も行い、非常に有望な結果を得た [2, 3]。最近の計算機が大規模並列の傾向にあることを考えると、この方法は現在の平面波に基づく方法より有利であると考えられる。

最近は、上述の有限要素法を利用し、応用を中心に研究を進めている。具体的な研究例としてはシリコン表面上に水素や水が吸着した系の振る舞いを、振動数解析や構造最適化、分子動力学などによって調べている。また、水やメタノールのような水素結合性液体の性質を主に分子動力学によって研究している [4]。いずれも、実験値が存在する部分については非常に良い一致を示しており、精度は高いと考えられる。実験的に観測が難しい部分について現在解析を進めている。どちらも今は比較的穏やかな条件下での振る舞いを研究しているが、いずれ表面上や液体中での、反応を伴うような複雑な現象を対象にしたいと考えている。

- [1] E. Tsuchida and M. Tsukada, "Electronic-structure calculations based on the finite-element method", Phys. Rev. B **52**, pp.5573-5578 (1995).
- [2] E. Tsuchida and M. Tsukada, "Adaptive finite-element method for electronic-structure calculations", Phys. Rev. B **54**, pp.7602-7605 (1996).
- [3] E. Tsuchida and M. Tsukada, "Large-Scale Electronic-Structure Calculations Based on the Adaptive Finite-Element Method", J. Phys. Soc. Jpn. **67**, pp.3844-3858 (1998).
- [4] E. Tsuchida, Y. Kanada, and M. Tsukada, "Density-Functional Study of Liquid Methanol", submitted.

繰返し法によるFLAPW電子状態計算

広大先端物質 小 口 多美夫

FLAPW法は電子状態計算手法の中でも精度の高い手法の一つとして認められているが、計算量が基本的に電子数（もしくは原子数）の3乗に比例することに起因して単位胞に多くの原子を含む系ではその利用が限られている現状である。我々は、以前より最急降下法や共役勾配法等の繰返し法によるFLAPW電子状態計算手法の開発を行ってきた。

共役勾配法はある変数空間で定義された関数の最小化を実現するアルゴリズムを与える。密度汎関数法による電子状態計算の場合、系の全エネルギーは基底状態の波動関数に関して最小をとるので、共役勾配法を適応できることになる。共役勾配法の数理的解説については、Numerical Recipesの教科書[1] がある。

共役勾配法はこれまで平面波基底関数を用いた（主として擬ポテンシャル法の）電子状態計算において用いられてきた。これは、最小化する空間の自由度が平面波展開の係数だけであるので、定式化が容易であり、また、実際の計算例においてもその有効性が報告されている[2,3]。しかしながら、LAPW法の場合、セルフコンシスティントな繰り返しの過程において、平面波を補強するマフィンティン球内の球面波関数が変化していくので、全エネルギーの最小化をこの自由度を含めて単純に書き下すことは困難である。一方、共役勾配法をある与えられた一体のポテンシャルに対しての固有解を求めるための対角化法の代替であると考えると、そのポテンシャルに対する球面波は固定であるので簡単に適応が可能となる。

ここでは、そのような対角化法の代替としての共役勾配法及び最急降下法の応用を試みる。擬ポテンシャル法での類似のアルゴリズム[4,5]が提案されている。

FLAPW法でも擬ポテンシャル法に類似して（ただし、LAPW基底は直交系ではないので重なり積分が付加的に存在するが）ある試行係数 C_{ni} に対して残差（residue） R_{ni} を定義することができる。

$$R_{ni} = - \sum_{n'} [H_{nn'} C_{n'i} - S_{nn'} C_{n'i} \varepsilon_i] \quad (1)$$

ここで、 ε_i はこの試行係数に対するハミルトニアンの期待値で

$$\varepsilon_i = \sum_{n,n'} C_{ni}^* H_{nn'} C_{n'i} \quad (2)$$

と与えられる。擬ポテンシャル法の時と同じ様に逆格子ベクトルの大きな係数に対する誤差の評価は、エネルギー最小化として残差そのものを用いるよりも前処理を含めることにより収束を速めることができる。また、この残差には他の状態との直交化が考慮されていないので、既に求められている状態との直交した空間での残差を求めることにより、バンド毎の最急降下法または共役勾配法が実現できる。

いくつかの応用例では、共役勾配法を用いると、対角化法と同程度の計算時間と1/10程度の主記憶容量で精度の高い解が得られることが示された。しかしながら、現在のアルゴリズムでは計算量が電子数（もしくは原子数）の3乗に比例することに変わりがなく、今後、根本的な手法、アルゴリズムの検討が望まれる。

参考文献

- [1] WH. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, and B.P. Flannery, "numerical Recipes", (Cambridge University Press, 1992).
- [2] M.P. Teter, M.C. Payne, and D.C. Allan, Phys. Rev. B **40** (1989) 12255.
- [3] M.C. Payne, et al., Rev. Mod. Phys. **64** (1993) 1045.
- [4] D.M. Bylander et al., Phys. Rev. B **42** (1990) 1394.

- [5] G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B **49** (1994) 14251.

第一原理計算による物質設計：予言と実験

阪大産研 吉田 博

地球上には100種類以上の原子が存在し、アボガドロ数個の原子から構成される現実物質(Real Material)は、組み合わせを考えただけでも気が遠くなるような種類の多様性をもっている。しかも、物質科学はエネルギー問題や環境問題などの現実世界における最重要課題の問題解決の力を握っており、一つの新機能材料が発見されたときの科学技術にたいするインパクトの大きさを想像すると、来世紀においても、その重要性はますます増大すると考えられる。このような状況の中で、高次機能や環境調和性を持った新しい半導体の物質創製が大きくクローズアップされている。その中でも特に、従来からの実験主体の試行錯誤的な新物質創製に加えて、実験に頼らず理論的な手法により物性予測や物質設計を行い、これらに立脚して効率的な物質開発を可能にしようという物質設計の気運が盛り上りきっている(1-2)。コンピュータと計算物理学的手法の大きな進歩があり、原子番号だけを入力パラメータにして多様な系についての物性を予測したり、実験データを説明することができるようになってきた。実験で決められる少数の経験的パラメータを含むモデル(模型)計算と比較して、第一原理計算は、世の中に存在しない物質や新物質について、電子状態や物性を定量的に予言できる唯一の理論的枠組みといつても良い。現時点でも、第一原理計算による物性予測と考え抜いた独創的なアイデアを併用することにより、プロトタイプの物質設計が可能となりつつある。講演では、筆者らのグループで進めている半導体における第一原理計算に基づいた物質設計に関する研究の具体例として高効率太陽電池材料であるCuInSe₂やワイドギャップ半導体であるGaN, ZnO, ZnSe, AlN, Diamondのアクセプターとドナーの同時ドーピング法による価電子制御に関する物質設計を例にとりあげ、理論的な予言(3-10)が後に実験でどのように検証されたかという比較を通して、第一原理からの物質設計の現状と問題点を議論し、将来への展望を明らかにした。本研究は山本哲也氏(現:高知工科大学)との共同研究に基づいています。

- (1) 半導体における第一原理計算からの物質設計、吉田博、西松毅、山本哲也、織田望、日本金属学会誌「まりあ」Vol.38, No.2 (1999) pp.134.
- (2) 半導体材料設計支援システムの概念設計と開発、蒲原譲司、溝口理一郎、吉田博、情報処理学会第57回(平成10年後期)全国大会講演論文集 pp.451-452, 1998.
- (3) 低抵抗CuInS₂の製造法(JP H09-011763, JP H09-121136, JP97-02829, and JP H09-239839)
- (4) 水素化アモルファスカーボンを用いた単結晶ダイヤモンドの合成法(JP H7-188030, 米国特

許USP 08/671,946, and 欧州共同体特許EPC 96110397.5 (EP 0 752 487 A1).

- (5) 低抵抗 p 型 GaN の結晶の製造方法 (JP H8 - 258054).
- (6) 高濃度にドーピングした ZnSe の結晶の製造方法 (欧洲共同体特許EPC 97113248.5 - 1270 (EP 0 823 498 A1)) JPH10 - 53497, 米国特許USP 08/908,307).
- (7) 低抵抗 p 型 AlN の製造法 (JP H10 - 208612 and submitted USP and EPC)
- (8) 低抵抗 p 型 ZnO の製造方法 (JP H10 - 287966).
- (9) 低抵抗 n 型ダイヤモンドの製造方法 (JP H9 - 050106, JP H10 - 208611).
- (10) 抵抗が低い n 型又は p 型金属シリコンの製造方法 (JP H9 - 223304)

Fe/Cr人工格子の第一原理計算

奈良医大物理 平井國友

FeとCrが層状に積み重なったFe/Cr人工格子では、Fe層内は強磁性的であるが、隣合うFe層の磁化はCr層の厚さによって平行になったり反平行になったりする。このFe層間の磁気結合はおおむね2原子層の周期で振動するが、このような層間磁気結合の振動とCr層の磁気秩序との間には密接な関係があると考えられる。また、Cr特有の性質であるスピン密度波(Spin Density Wave = SDW)との関係も興味深い。そこで、Fe/Cr人工格子の電子構造を第一原理から計算し、層間磁気結合の振動の起源およびCr層でのSDW秩序出現の可能性を調べる。

計算はKKR法、局所スピン密度汎関数(LSD)近似による、界面構造のない完全に層状のFe/Cr人工格子に対する計算である。隣合うFe層間で磁化が平行に結合する場合は、数原子層のFe層の上に最大20原子層程度のCr層を積んだ構造を単位胞とし、反平行に結合する場合には、単位胞を2倍にして計算を行う。磁化が反平行および平行な場合での1原子当たりの全エネルギーを計算し、その差から層間磁気結合を評価する。この計算は単位胞に最大48個の原子を含み、かなりの大規模計算となる。また、微妙なエネルギー差を議論するために、かなりの精度が要求される。

計算の結果、層間磁気結合はCr層の磁気秩序のCr層内での整合性によって左右されること、このため、Cr層の厚さが奇数原子層であるか偶数原子層であるかが重要であることが分かった。これは、Fe層とCr層の界面でそれぞれの磁気モーメントが逆向きに強く結合し、その影響がCr層内部に及んでゆくからである。たとえば、反強磁性秩序は奇数原子層ではFe層間で磁化が平行、偶数原子層ではFe層間で磁化が反平行であれば不整合を生じず、エネルギー的に有利となる。一方、SDW秩序は奇数原子層ではFe層間で磁化が反平行、偶数原子層ではFe層間で磁化が平行であれば不整合を生じない。ただし、このSDW秩序はCr層にその半周期分が収まるものである。このように、層間磁気結合の2原子層の周期の振動はCr層の磁気秩序の整合性を考えれば容易に理解でき

る。Cr層の磁気秩序については、Cr層の厚さがそれほど大きくなれば、反強磁性の方がSDWよりも安定、Cr層の厚さが20原子層程度まで大きくなると、SDWの方が反強磁性よりも安定という結果が得られた。SDWの波数はCr層の厚さによって変わり、22原子層の厚さでほぼ純粋CrのSDWの波数に相当するので、この結果は納得のゆくものである。Cr層の磁気秩序が反強磁性からSDWに変わるととき、Cr層の厚さの偶奇とFe層間の磁化の結合の対応が逆になり、層間磁気結合の2原子層の周期の振動に位相のずれが生じる。この位相のずれは実験的にも観測されており、SDW秩序の出現を示唆している。このように、Fe/Cr人工格子に対する第一原理計算は層間磁気結合の実験結果をよく説明している[1]。

[1] K. Hirai: Phys. Rev. B **59**, R6612 (1999).

連続虚時間ループアルゴリズムとランダム量子スピン系への応用

東大物性研 藤 堂 真 治

局所的なスピン状態更新に基づく従来の量子モンテカルロ法（世界線法）では、臨界点の近傍や極低温において、スピン配位の自己相関時間が非常に長くなってしまうという困難（いわゆる critical slowing down）が知られている。近年、 $S=1/2$ XXZ 模型に対し非常に有力なクラスターアルゴリズム（ループアルゴリズム）が提唱された[1]。さらに、ループアルゴリズムでは、連続虚時間（トロッター数無限の極限）で直接シミュレーションできることが示され、従来よりも遥かに低温かつ巨大な系の扱いが可能となった。

我々は、このアルゴリズムの任意の S を持つ系への拡張を行なった[2]。この一般化されたアルゴリズムでは、長さ S のスピンは、 $2S$ 個の $S=1/2$ スピンに変換されシミュレーションが実行される。この変換の際に生じる余分の自由度は、虚時間方向に適当な境界条件を課すことにより取り除かれる。我々は、この一般化されたアルゴリズムを用いて、 $S=1$ および 2 の反強磁性ハイゼンベルグ鎖のハルデンギャップをそれぞれ $\Delta(S=1)=0.41048(6)$ 、 $\Delta(S=2)=0.08916(5)$ と評価した。さらに並列化を行ない、Hitachi SR-2201 の 256 プロセッサを用いることにより、 $\Delta(S=3)=0.01002(4)$ を得た(図1)。

この方法は、ボンドの強さがランダムな系[2]などにも応用可能である。我々は、二次元のランダム希釈ハイゼンベルグ模型の基底状態相転移を解析し、・臨界濃度 p は S の値によらず、古典的なパーコレーション閾値に等しい・一方、臨界濃度における量子相転移の臨界指数は S の値に依存しており、非ユニバーサルであることを見い出した(図2)[3]。

参考文献:

[1] H. G. Evertz, in Numerical Methods for Lattice Quantum Many-Body Problems

(Frontier in Physics), ed. by D.J. Scalapino (Perseus, Reading, 1999), and references therein.

- [2] S. Todo, K. Kato, and H. Takayama, in Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics XI, ed. by D. P. Landau and H.-B. Schuetter (Springer Verlag, Heidelberg, Berlin, 1999), p. 57; S. Todo and K. Kato, in preparation.
- [3] K. Kato, S. Todo, K. Harada, N. Kawashima, S. Miyashita, and H. Takayama, preprint (cond-mat/9905379).

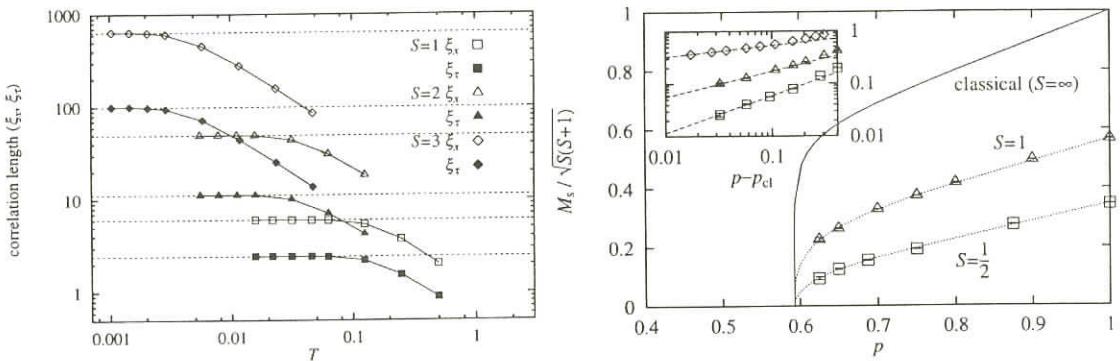


図 1 : $S=1, 2, 3$ の反強磁性ハイゼンベルグ鎖の実空間、および虚時間方向の相関長の温度依存性。
低温における虚時間方向の相関長の逆数がハルデンギャップを与える。

図 2 : 二次元希釈反強磁性ハイゼンベルグ模型における基底状態のスタッガード磁化の磁性原子濃度 p 依存性。

極限シミュレーションと非平衡緩和法

東大工 伊藤伸泰

東工大理 尾関之康

1980年代以降、物性研究の主要な手段の一つとなった計算機シミュレーションの成長は今日なお衰えを見せず、21世紀初頭の研究・開発を牽引する勢いである。イジング模型のシミュレーションは、その歴史と重要性から、計算物理学の進展をはかるよい指標となろう。1950年代の終り以来、そのスピード・シミュレーション規模は、4年で10倍の割合で成長している（文献[1]の図1参照）。現在、大型シミュレーションと呼ばれる規模は、延べで 10^{17} 自由度（スピニ）程度以上の研究である。

物理の常ではあるが、計算機シミュレーションも簡単な方法が一番といえよう。シミュレーション

ン規模が大きくなればなるほど、簡単な方法の重要性が増してくる。どんなに複雑なアルゴリズム、解析手法でもプログラムを書きさえすればシミュレーションはできる。しかし複雑になればなるほど系統誤差の余地が大きくなるため、できるだけ簡単な方法が望ましい。

非平衡緩和法（文献[1]およびその引用文献参照）は系の相や相転移・臨界現象を調べる簡便な解析方法として提唱され、研究・応用されてきた。強磁性転移・カイラル転移ほかの秩序変数がはっきりしている問題では際立った成功を収め、スピングラス相、KT相ほかのエキゾティックな相への応用でも成果を挙げている。また量子系での有効性も示されている。

非平衡緩和法では、非平衡な初期状態から熱平衡状態への緩和過程を調べ、相や臨界現象を調べる。非平衡緩和関数は系の大きさへの依存性が弱く、臨界点も含めて熱力学的極限での振舞いを容易に評価できる。このためシミュレーションから解析結果に至る過程が、他の諸解析手法と比べ、著しく短い。

これまで主に秩序変数やエネルギーの非平衡緩和過程とその応用を研究してきたが、今回、揺らぎの非平衡緩和過程とその応用とについて調べた結果を報告した。揺らぎの非平衡緩和過程を調べることにより、秩序変数やエネルギーの非平衡緩和過程からだけでは評価できない臨界指数を得られる可能性は、動的有限系スケーリング仮説（鈴木スケーリング）[2]に基づいた非平衡緩和過程の解析[3]に示唆されており、最近、研究が進められている[4,5]。以下では揺らぎ（2次のモーメント）の非平衡緩和を調べることにより、動的臨界指数も含めて、すべての臨界指数が得る方法を提唱する。

時刻 t での磁化、エネルギーを $m(t)$, $e(t)$ と書き、各時刻での平均値を $\langle \cdot \rangle$ で表すとし、以下の緩和関数を考える：

$$f_m(t) = \langle m(t) \rangle \quad (1)$$

$$f_{mm}(t) = N \left[\frac{\langle m^2(t) \rangle}{\langle m(t) \rangle^2} - 1 \right] \quad (2)$$

$$f_{me}(t) = N \left[\frac{\langle m(t)e(t) \rangle}{\langle m(t) \rangle \langle e(t) \rangle} - 1 \right] \quad (3)$$

$$f_{ee}(t) = N \left[\frac{\langle e^2(t) \rangle}{\langle e(t) \rangle^2} - 1 \right] \quad (4)$$

ここで、 N は系の自由度の数である。臨界点で $t \rightarrow \infty$ での漸近形は、巾関数となると期待される。漸近形の指数を、

$$f_m(t) = t^{-\lambda_m}, f_{mm}(t) = t^{\lambda_{mm}}, f_{me}(t) = t^{\lambda_{me}}, f_{ee}(t) = t^{\lambda_{ee}} \quad (5)$$

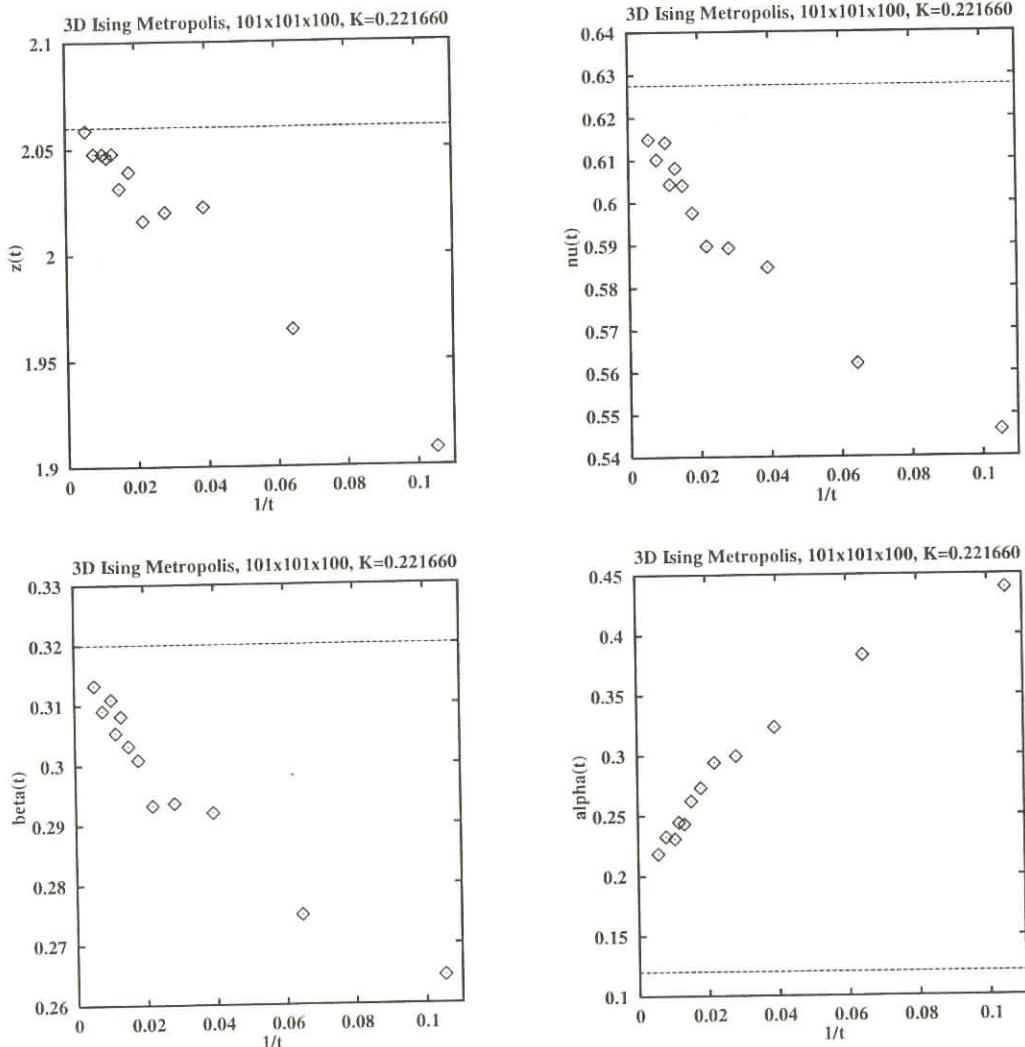
と定義する。鈴木スケーリング

$$f(\epsilon, h, L, t) = L^{-d} \bar{f}(\epsilon L^{y_T}, h L^{y_H}, t L^{-z}) \quad (6)$$

を使うと、これらの臨界指数から通常の臨界指数が、

$$z = \frac{z}{\lambda_{mm}}, \nu = \frac{\lambda_{mm}}{d\lambda_{me}}, \beta = \frac{\lambda_m}{\lambda_{me}}, \alpha = \frac{\lambda_{ee}}{\lambda_{me}} \quad (7)$$

と得られる。



図：3次元強磁性イジング模型のほぼ臨界点での局所指数とその外挿の様子。

計算機シミュレーションによりこれらの緩和関数を評価し、対数微分を使って臨界指数を評価し、 $1/t \rightarrow 0$ に外挿を試みた。2次元および3次元強磁性イジング模型を使った。その結果（3次元の結果を図に示す）、 z, β, ν の値の外挿値は妥当である一方、 α の値には系統誤差が見られる。この

誤差は $t \rightarrow \infty$ での補正項の振舞いに依ると考えられる。

本研究の一部は、小川京太（東工大理）、福島孝治（東大物性研）両氏との共同研究である。また、東京大学物性研究所の計算機、富士通 VPP550/40 を使い、科研費 10740186 の補助を受けている。研究にあたって有益な示唆を頂いた岡部豊（都立大理）氏に感謝する。

参考文献

- [1] 伊藤伸泰, 尾関之康, 野々村禎彦: 日本物理学会誌 **54** p.336 (1999).
- [2] M. Suzuki: Phys. Lett. **A58** p.435 (1976), Prog. Theor. Phys. **58** p.1142 (1977).
- [3] N..Ito: Physica **A192** p.604 (1993), **A196** p.591 (1993).
- [4] A. Jaster, J. Mainville, L. Schülke and B. Zheng: cond-mat/9808131.
- [5] 岡部豊, 金田和久, 菊池誠: 日本物理学会第54会年会講演 28pXE4(1999).

フラーレン生成MDシミュレーションにおける並列化手法

北陸先端科学技術大情報 林 亮子

金沢大 理, 現在エプソンソフト開発センター株式会社 田 中 健 児

北陸先端科学技術大情報 堀 口 進

金沢大 理 樋 渡 保 秋

1985年に発見されたフラーレン分子は興味深い物質であり、さらに有用な新素材の可能性から注目されている。しかしその生成過程は未だに良くわかっていない。本研究では、フラーレン生成の基となるカーボンクラスター生成の古典分子動力学法シミュレーションを行なう。クラスター分布を調べるために大規模シミュレーションを実行する必要があるために、分子動力学法を多数プロセッサ要素(PE)を持つ並列計算機T3E(128PE, PE は 300MHz の DECchip 21164)上に実装し、並列化効率を調べたので報告する。

これまでの古典分子動力学法によるフラーレン生成過程の研究では、丸山らが60個の炭素原子からなるクラスターを完全なC₆₀に緩和している[1]。本研究では丸山らが使用したTersoff型ポテンシャルを用いる。このポテンシャルは、力の切断を行なう短距離相互作用である。同じポテンシャルを用いた田中の研究により、数密度は1.0nm⁻³程度がクラスター生成に適していると予想している[2]。この密度は、分子動力学法で扱う系としては非常に小さい。

分子動力学法の並列化手法はこれまで良く研究されており、本研究では効率の良い並列化手法であるドメイン分割法を使用する。図1にドメイン分割法の概要を示す。ドメイン分割法は力の切断距離の大きさに空間を分割した「セル」を使用し、セルをまとめた「ドメイン」を単位としてPEに割り当てるにより、計算量と通信時間を削減することができる。実装には、FORTRAN90

にメッセージ通信インターフェースMPIを併用し、SPMD型処理を行なった。

図2は今回の実装結果として得られたスケーラビリティ(使用PE数を増加すると問題サイズをどれだけ大きくできるかを表す指標)である。ここではPEあたりの原子の個数を同程度とし、使用PE数を増加した場合は同時にシミュレーションで扱う原子数を増加して処理時間を計測した。このとき、理想的には使用PE数が増加しても処理時間は変わらずに、グラフ中で水平の直線となる。今回の実装では、使用PE数が増加すると、全体として処理時間はゆるやかに増加している。図2から、10PEを使用すると処理時間は2倍程度になるが、系のサイズを10倍にできることがわかる。

今後はさらなる高速化を目的として低密度の気体に適したドメイン分割法の実装法およびドメイン分割法の改善法を検討し、大規模シミュレーションを実行する予定である。

[1] 丸山、山口、「フラーレン生成過程の分子動力学(第2報、完全なC₆₀へのアニーリング)」、日本機械学会論文誌(B編), 63巻611号, pp.2405 - 2412, (1997)。

[2] 田中健児、「カーボンクラスターの気相からの成長の分子動力学」金沢大学修士論文、平成11年。

図1：ドメイン分割法の概要

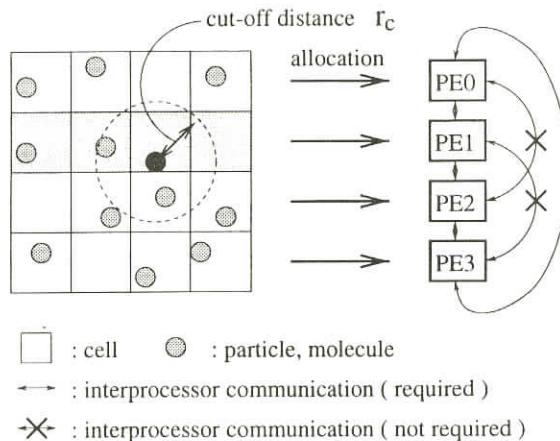
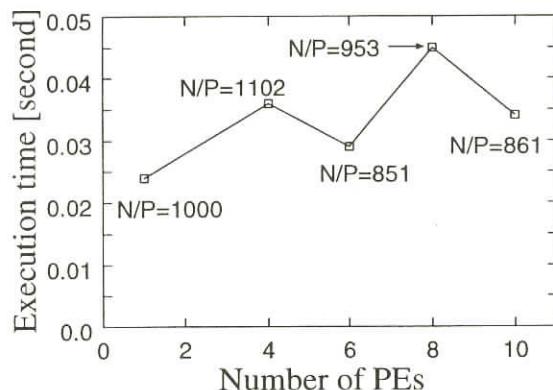


図2：スケーラビリティ(密度1.0nm⁻³, 3000K)



パソコンを用いたクラスタ・コンピュータシステムの開発

青学大理工 中田寿穂
羽田野直道
古川信夫
久保健

It's now possible for a small research group to assemble a fast parallel computer at a reasonable price. Aoyama Plus (**Aoyama**-Gakuin University PC Cluster System) [1] is a project to produce a system of off-the-shelf clustered workstations based on commodity PC-class hardware, a high-bandwidth internal network and the royalty-free base Linux distributions (GNU Debian/Linux [2]). Because of the volume production, commercial personal computers today offer much better price/performance than individual nodes of MPP's. In addition, switching HUB (100base-TX) will provide cheap, high-bandwidth communication.

ARK, our new Beowulf-style [3] parallel computer system, consists of

- 138 Pentium II (350 MHz) processors (69 dual-CPU nodes),
- 18 Gbytes of memory,
- 100 Gbytes of RAID disk,
- an interconnection network,
- a backup device (DDS3 DAT drive).

Each node cost less than 95,000 yen.

This price/performance advantage is increased if the ARK can be used for both tasks traditionally run on PC workstations and large memorys, long CPU time.

We will also report performance of physical simulations on the system.

[1] URL: [http://www.phys.aoyama.ac.jp/~aoyama+/-](http://www.phys.aoyama.ac.jp/~aoyama+/)

[2] URL: [http://www.debian.org/-](http://www.debian.org/)

[3] URL: <http://beowulf.gsfc.nasa.gov/software/software.html>

液体Seの金属非金属転移

広大総合 星野公三

下條冬樹

住友化学筑波研 善甫康成

結晶Seは無限に長い2配位らせん鎖が規則的に配列した構造を持つ半導体である。融解すると、三重点近傍の液体Seは約 10^5 個の原子からなる非常に長い鎖からなり、半導体的性質を示すが、温度・圧力を増加させると臨界点付近で金属的になり、さらに臨界点を迂回して気体側では絶縁体になる。この半導体→金属→絶縁体転移の微視的機構を液体の構造と電子状態にもとづいて解明することが本研究の目的である。

本研究では第一原理分子動力学シミュレーション法を用いた。波動関数を平面波基底で展開し、交換・相関ポテンシャルにはGGAを用い、ウルトラソフト擬ポテンシャルを採用した。気体側の計算ではスピン分極も考慮した計算を行った。次の2つの場合について計算を行った。

(1) 圧力がほぼ一定で、半導体領域から金属領域まで温度を上昇させた場合[1]

T=870, 1170, 1770Kの3つの状態についてシミュレーションを実行した。870Kでは、状態密度のフェルミ準位付近に深いdipがあり、半導体的であるが、温度の増加とともに、dipが浅くなり臨界点近傍の1770Kでは消失し金属化した。

一方、構造に関しては、動径分布関数の第1ピークが金属状態でも鋭いままで、鎖構造が残存していることを示すが、第1ピークと第2ピークの間の谷間が温度上昇にともなって浅くなり、鎖間相関の増加を意味する。

得られた構造と電子状態の解析から、半導体・金属転移の微視的機構が次のように明らかになった。すなわち、温度上昇により鎖間の相互作用による鎖の切断、再配列がおこり、その結果、鎖の長さが短くなる。短い鎖の端に波動関数の大きな振幅を持つ状態はちょうどフェルミ準位付近のエネルギーをもつので、dipを埋めて金属化をもたらす。

(2) 臨界点の高温側で密度(圧力)を減少させた場合[2]

気体Seは2原子分子Se₂からなり、スピン分極を持つ。密度 $\rho=1.0, 2.0\text{g/cm}^3$ の2つの状態についてシミュレーションを実行した。その結果、 $\rho=2.0$ では状態密度のフェルミ準位近傍のdipはあまり深くないが、 $\rho=1.0$ では深くなり、Se₂分子のエネルギー準位が現れることがわかった。また、構造に関しても、 $\rho=1.0$ の場合には動径分布関数の第1ピークがSe₂分子の原子間距離に対応する位置に鋭く現れ、 $\rho=2.0$ では、Se₂のピークとSe鎖のピークの重ね合わせの形になることがわかった。すなわち、 $\rho=2.0$ ではSe鎖が主として存在し、多少Se₂が混じっている状態であり、 $\rho=1.0$ ではほとんどがSe₂からなり絶縁体になっていることが明らかになった。

(1998) 1199; K. Hoshino and F. Shimojo: *ibid* **10** (1998) 11429.

[2] F. Shimojo, K. Hoshino and Y. Zempo: in preparation.

第一原理分子動力学法による液体アルカリ-鉛合金の研究

広大生物圏 仙田 康浩

広大総合 下條 冬樹

星野 公三

アルカリ金属-鉛 (Pb) の合金は化合物を形成することが知られており, NaPb, KPb結晶化合物はPb原子からなる四面体構造 (Zintlイオン) を含んだ特徴的な構造を持つ。20年来この液体合金に関する実験が精力的に行われ、熱力学的量や電気抵抗の組成依存性が特異な振る舞いを示すことや、中性子散乱による構造因子の観測結果から次のような可能性が予言された[1]。(1)液体合金中に結晶化合物で見られるようなZintlイオンが生き残り、アルカリ金属原子からPb原子へ価電子が移動する。(2)アルカリ金属原子のサイズが大きい程、液体中のZintlイオンは安定に存在する。これらの指摘を検証するために、液体中のZintlイオンや他の化学的構造物の存在を想定した理論的解析や、それらの構造物をモデルにした古典的分子動力学法などの理論的研究が行われた。しかし、依然としてそれらの構造物の有無すら明らかではなく、また、電子状態についての情報は、電気抵抗の実験結果や結晶化合物のバンド計算結果からの類推のみに頼る他なかった。そこで我々は第一原理分子動力学法をこれらの液体合金に適用し、そのイオン構造と電子状態について調べた[3,4]。

計算では断熱近似、フローズン・コア近似 (擬ボテンシャル法)、局所密度近似を用いた。電子状態の計算には密度汎関数法を用い、エネルギー汎関数を共役勾配法で最小化することにより、電子基底状態を得た。更に、イオンに働く力を求め、それを用いて古典的分子動力学シミュレーションによりイオン配置を更新する。以上の過程を繰り返すことにより、イオンの運動を追跡する。物理系には、周期的境界条件を課し、立方体セル (スーパーセル) に合計100個のイオンを配置した。

得られたイオン配列と電子状態から以下のようない結論を得た。(1)液体Na-Pb合金の場合、Zintlイオンは乱れた構造をもち、四面体構造のクラスターとして安定ではない。液体K-Pb合金では局所的に四面体構造が見られた。(2)アルカリ金属のサイズが大きくなると、Pb原子同士が凝集する傾向が強くなる。(3)特に、K原子の豊富な液体K_{0.8}Pb_{0.2}合金では化合物結晶で見られるような四面体構造が安定に存在している。幅が広くなったためと考えられる。Pb原子の四面体構造の形成はアルカリ金属原子の価電子がPb原子へ移動することと深く関連している。我々はこのことを検証するために価電子移動量を独自に定義して定性的な評価を行った。その結果、アルカリ原

子から一部の価電子がPb原子に移動するが、アルカリ原子の周りにも価電子が十分に残っていることがわかった。空間的に伝導電子が広がっている金属的性質と、一部の価電子がPb原子に局在したイオン的性質を併せ持ち、その中でZintlイオンは乱れた構造をもつことが明らかになった。

参考文献

- [1] van der Lugt W 1996 *J. Phys.: Condens. Matter* **8** 6115
- [2] Senda Y, Shimojo F and Hoshino K 1999 *J. Phys.: Condense. Matter* **11** 2199
- [3] Senda Y, Shimojo F and Hoshino K 1999 *J. Phys.: Condense. Matter* **11** 5245

セレン単斜晶相の電子状態と構造相転移

金沢大里 下司雅章
小田竜樹
樋渡保秋

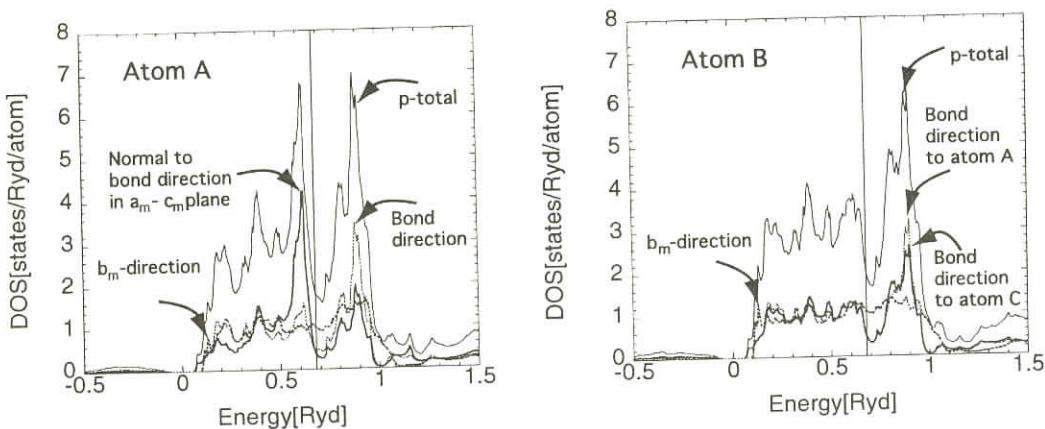
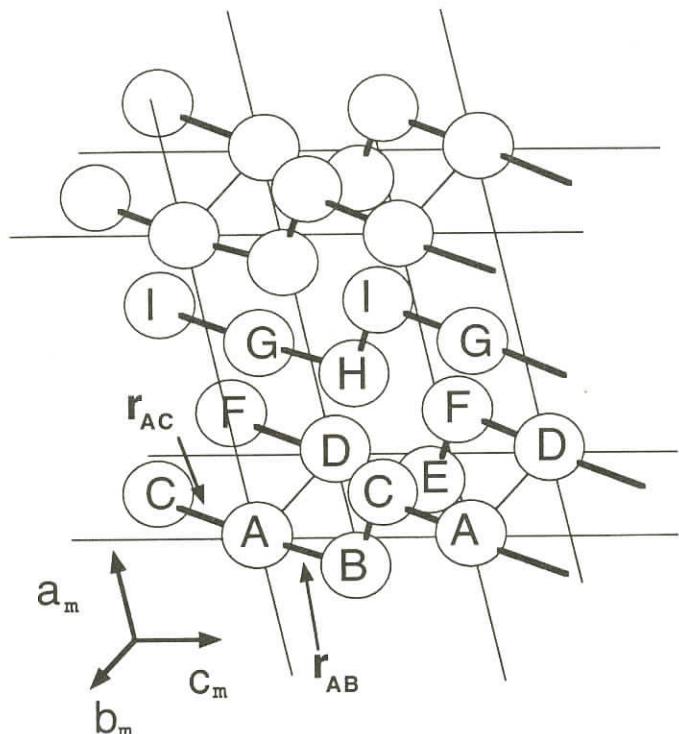
セレンは高圧にしていくにしたがい、構造相転移をすることが知られている。trigonal相を出発として圧力を加えていった場合、その次に現れる構造は赤浜ら[1]は中間相としており構造は不明としているが、大政らによってこの構造はmonoclinic相(M-I相)であることが報告されている[2]。我々はM-I相に対して第一原理計算を行った。この相を調べることにより、trigonal相からどのように転移したのか、その時どのように電子状態が関わっているかに着目して計算を行った。計算方法はFLAPW法を用いた。

バンド図を調べてみると、実空間で b_m 軸に対応する方向に大きな分散を持った3本のバンドがFermi levelを横切っている。原子Aと原子Bの対称性の異なる種類の原子が存在するが、それぞれの部分電子状態密度を調べた。原子A(図2)は $a_m - c_m$ 面内でボンドに垂直な方向に、lone-pair(LP)軌道のエネルギー領域に鋭いピークを持っている。 b_m 軸方向の状態密度は、Fermi levelのところで状態を持っている。原子B(図3)は原子AにあったLP軌道のピークは存在しない。Fermi level以下の状態はどの方向もほとんど同じ状態を持っていることから、 b_m 軸方向にも結合が存在しており、層状構造ができていると考えられる。以上のバンド図と状態密度の図から、 b_m 軸方向に電気伝導性が現れているが、実験ではこの相は半導体である。これは弱い超格子構造を無視したためであると考えられる。M-I相の原子位置とtrigonal相の原子位置を比較することにより、この転移のプロセスについて推定することができた。すなわち、trigonal相を形成している3回螺旋鎖が臨界点に来ると $a_m - c_m$ 平面内に畳み込まれる。結果的には原子AでLP軌道が生き残っているが、原子BはLP軌道が消滅してしまう。trigonal相からM-I相への転移のエネルギー barrierをTotal energyでみると0.6eVくらいであるが、近似的なGibbs' free energyで見積もると、

もっと小さいものになった。そしてこの転移は圧力に対して、敏感であることも分かった。

[1] Y. Akahama, M. Kobayashi and H. Kawamura, Phys. Rev. B.56 (1997) 5027.

[2] Y. Ohmasa, I. Yamamoto, M. Yao and H. Endo, J. Phys. Soc. Jpn. 64 (1995) 4766



金沢大理 小田竜樹

荒井誠明

三浦正春

樋渡保秋

フェルミ演算子展開を用いてオーダー N タイトバインディング(TB)分子動力学(MD)法[1]を開発している。現段階では、実用性のある分子動力学計算が実際に可能であるかどうかを検討中である。特に今回オーダー N 化に伴って導入されたパラメーターについてカーボン液体を例に2配位原子と3配位原子が混合しているような状態(密度 1.8g/cm^3 、温度 6000K)において、動径分布関数の計算を行なった。陽に電子系の状態を含むTBエネルギーは、TBハミルトニアン \mathcal{H} の固有値をフェルミ準位まで加えることで得られる。つまり、 $E_{\text{tb}} = 2 \sum_i \varepsilon_i f_i$ である。通常固有値である ε_i をTBハミルトニアンを対角化することにより求めるため、計算量がシステムサイズの3乗($\mathcal{O}(N^3)$ と書く)に比例する。これをTBの基底を用いて $\{\varphi_{\ell\alpha}\}$ を用いて $E_{\text{tb}} = 2 \sum_{\ell\alpha} \sum_{\ell'\alpha'} \langle \varphi_{\ell\alpha} | \mathcal{H} | \varphi_{\ell'\alpha'} \rangle \langle \varphi_{\ell'\alpha'} | f(\mathcal{H}) | \varphi_{\ell\alpha} \rangle$ と書き直すことができる。後半の行列要素については、TBハミルトニアンを演算子として含んだフェルミ分布関数をチェビシェフ多項式で展開することで計算を実行する。遠く離れたサイト間の行列要素を十分小さいとして無視することで近似的に物理量が計算され、必要な計算量は $\mathcal{O}(N)$ となる。ここで導入されたパラメーターは、フェルミ分布のボケ幅 $\Delta\varepsilon$ 、チェビシェフ多項式での展開次数 n_{pl} 、行列要素を無視するサイト間の距離 R_{cut} などがある。これらは、適用する系や求めたい物理量の精度などによって決められるべきものであり、これまでにも採用するパラメーターの目安が与えられてきた。我々は、実際に液体の動径分布関数を計算することでパラメーターによりどの程度の違いが表れるか、計算を行ない調べた。図は、 $\Delta\varepsilon$ に対する変化を見たものであり、 $n_{\text{pl}} = 1.5W/\Delta\varepsilon$ (W はTBハミルトニアンのエネルギー幅)、 $R_{\text{cut}} = 0.55\text{ nm}$ 、64原子系での計算である。 $\Delta\varepsilon$ を可能な限り大きくすることで計算量を節約できるが、物理量にそれだけ誤差を与えるようになる。図のような物理量は、 $\Delta\varepsilon$ 有限の対角化法においてもほぼ同様の結果である。この他の物理量についても現在検討中である。

参考文献

- [1] S. Goedecker and M. Teter:
Phys. Rev. B. 51 (1995) 9455.

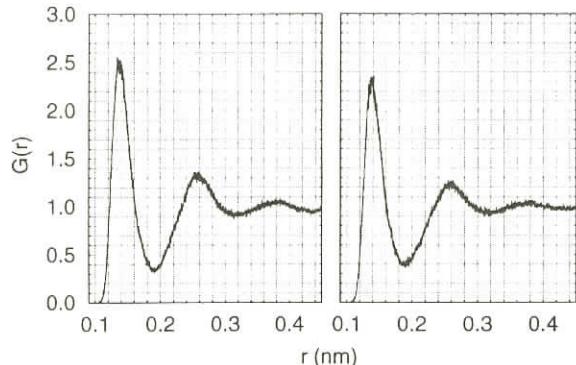


図1：カーボン液体(密度 1.8g/cm^3 、温度 6000K)の動径分布関数。左は $\Delta\varepsilon = 0.6\text{eV}$ の場合で、右は 1.0eV の場合。

ガラス転移のメカニズム

京 大 理 山 本 量 一
小 貫 明

動的不均一性という新しい概念を導入し、過冷却・ガラス状物質の動的性質やレオロジーを理解しようと試みた。具体的には1)分子動力学シミュレーション（2次元、及び3次元ソフトコア粒子の大小2成分混合物）によってガラス転移近傍における動的不均一性を可視化し[1]、2)そのキャラクタライズを行なうことにより臨界揺らぎと非常に似た構造を持つことを見出した[1,4]。図1に不均一性の様子を示す。3)さらにこの動的不均一性の流動に対する応答を明らかにして、ガラス転移近傍液体のダイナミクス（構造緩和時間 τ_α ）やレオロジー（粘性率 η ）を決定する時間スケールと動的不均一性の空間的な広がりを特徴づける相関長 ξ との間に以下のような動的スケーリング則が成立することを明らかにした[2-4]。

$$\eta(T, \dot{\gamma}) \propto \tau_\alpha(T, \dot{\gamma}) \propto \xi^z \quad [z \simeq 4 \text{ in 2D and } z \simeq 2 \text{ in 3D}] \quad (1)$$

また、4)過冷却液体の非線形粘性率が以式に従うことを見出した[2-4]。

$$\eta(T, \dot{\gamma}) = \eta(T, 0) / [1 + \tau_\eta(T, 0) \dot{\gamma}], \quad \tau_\eta(T, 0) = \text{const.} \tau_\alpha(T, 0) \quad (2)$$

さらに5)3次元過冷却液体中での1粒子の拡散運動に注目し、「液体がガラス状態に近づくにしたがって自己拡散係数がStokes-Einstein則 ($D = k_B T / 2\pi\sigma\eta$) より何桁も大きくなる」という現象が動的不均一性によって引き起こされていることを明らかにした[5]。

構造化ガラスにおける動的不均一性は空間的に固定されたものではなく、ゆっくりと移動している。これがスピングラスと大きく異なる点である。

- [1] R. Yamamoto and A. Onuki, *it J. Phys. Soc. Jpn.* **66**, 2545 (1997).
- [2] R. Yamamoto and A. Onuki, *Europhys. Lett.* **40**, 61 (1997).
- [3] A. Onuki and R. Yamamoto, *J. Non-Cryst. Solids* **235-237**, 34 (1998).
- [4] R. Yamamoto and A. Onuki, *Phys. Rev. E* **58**, 3515 (1998).
- [5] R. Yamamoto and A. Onuki, *it Phys. Rev. Lett.* **81**, 4915 (1998).

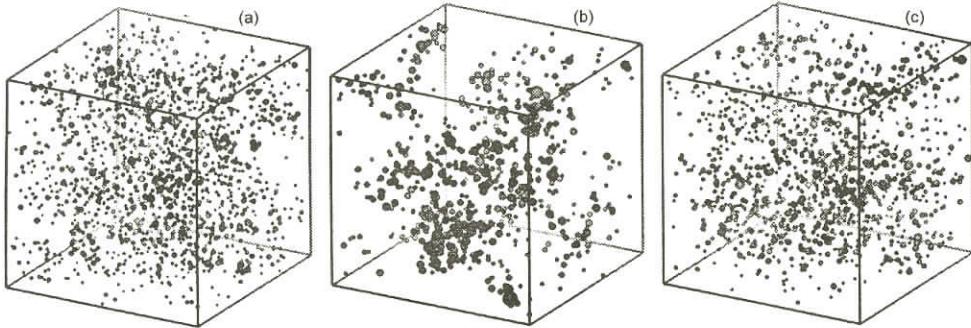


図 1: Mobile particles of the species 1 with a time interval $t = \tau_\alpha$ at $T = 0.473$ (a) and $T = 0.267$ (b) and with $t = 10\tau_\alpha$ at $T = 0.267$ (c). The radii of the spheres are $|\Delta\mathbf{r}_j(t)|/\sqrt{\langle(\Delta\mathbf{r}(t))^2\rangle}$ and the centers are at $\frac{1}{2}[\mathbf{r}_j(t_0) + \mathbf{r}_j(t_0 + t)]$. The system linear dimension is $L = 23.2$. The darkness of the spheres represents the depth in the 3D space.

過冷却液体での遅いダイナミクス：動的密度汎関数理論によるアプローチ

九大物理 淳 崎 員 弘

過冷却液体の緩和過程は大きく分けて二つの過程からなる。一つは周りの流体粒子によるケージ効果がその律速過程となる β 過程、更に後期にはこのケージからの粒子の脱出がその支配的な緩和機構となる α 過程である。この両過程での特徴的な緩和の時間スケールに充分な差がある場合前者までの緩和過程は所謂理想化されたモード結合理論によって良く記述される。しかし後者の過程までは守備範囲に含まれない。これは理想化されたモード結合理論の熱揺らぎの効果を含まないいわば平均場的な性格による。その後運動量密度による粒子カレントを取り入れて後者の活性化過程が含まれるようにモード結合理論は拡張されたがこの目論見はうまくいっているとはい難い[1]。

この点を乗り越えるには臨界現象や相分離の一連のスローダイナミクスの記述を思い起こしてみればよい。そこで出発点はTDGLやCahn - Hilliardのいわば mesoscopic な運動方程式であった。過冷却液体に対するこのような mesoscopic な記述に動的密度汎関数理論がある[2]。これから流体粒子の密度分布の確率密度汎関数の Fokker - Planck 型の時間発展式が得られる。これまでこれを密度分布に対する Langevin 方程式に直して解く努力が払われて来たが発展途中での数値的不安定性により最も興味がある低温(高密度)側での解が得られないでいた。この点を近似的ではあるが格子ガス模型にマップする[3]ことで回避しこの運動方程式が緩和の初期過程では密度揺らぎの非線形結合によるケージ効果を記述するだけでなく後期での活性化過程をも再現出来ることを明かにした(詳しくは[4]を参照されたい)。mesoscopic な運動を扱っている点を強調しておき

たい。即ち粗視化のスケールをうまく選ぶことにより microscopicな運動を見ずに β 緩和から後の遅い緩和だけを追跡出来る。これは図の平均自乗変位の時間変化の様子からも明かであろう。

最後にテクニカルな点に関して。上述の格子ガス模型はVPP上で(1PE当たり)約99%のベクトル化率で実装されている。しかし間接アドレッシングを多用しているため実際の実行速度は手元の WS(HP C - 180 SPECfp95 18.7)のそれの約9.7倍(VPP500), 11.1倍(VPP700)のパフォーマンスしか得られない。従って最も手軽に且つ効率よく統計精度を向上させるには配置空間上の様々な点を初期状態にした所謂トリヴィアルパラレル方式を採用すれば良い。これにより液体状態ではほぼ PE数に比例した効率が得られる。ただし緩和の状態をある種の秩序変数の値で判定しているため過冷が進むと緩和の初期状態依存性が顕著になり、従って各PEのロードバランスが悪化し並列化的効果は出ない。実際クロスオーバー点からのクリティカリティが10%をきる過冷状態ではこの様な並列化は实际上workせず専ら計算はシングルPEで行った。尚、クリティカリティが2%のところでは結晶化を起こす場合が現れこのような並列化は原理的に不可能であることも分かった。現在は複雑液体をターゲットにした新しい計算手法を確立すべく液体に的を絞ったコードを開発中である。

参考文献

- [1] 例えば最も最近のものとして J. Phys.: Condens. Matter bf **11** (1999).
- [2] T. Munakata: J. Phys. Soc. Jpn. **43**(1977) 1723; B. Bagchi: Physica A **145** (1987) 273; K. Kawasaki: Physica A **208** (1994) 35.
- [3] K. Fuchizaki and K. Kawasaki: Physica A **266**(1999) 400.
- [4] K. Fuchizaki and K. Kawasaki: J. Phys. Soc. Jpn. **67**(1998) 1505; *ibid.* 2158.

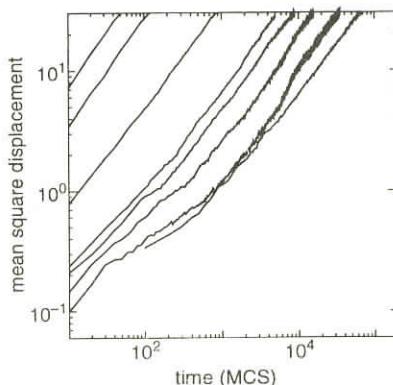


図1：剛体球液体中の平均自乗変位の時間変化の様子を示したプレリミナリな結果。カーブは左上からそれぞれ充填率が0.256, 0.312, 0.390, 0.440, 0.452, 0.463, 0.474, 0.485の場合(クロスオーバー点は0.490)。平衡結晶化点0.43を越えて過冷されると β 緩和が現れる。

剛体円盤分子動力学シミュレーションにおける大規模計算と高速化の手法

九大理 磯部雅晴

講演では, Event - Driven法による剛体円盤系の分子動力学シミュレーションの単純かつ汎用な高速アルゴリズムを紹介した。また,これまでの高速化の手法に関する簡単なレビューをふまえて,開発したアルゴリズムとの計算量の解析と比較, 実際のシミュレーションによる効率性, 他の系への適用範囲を述べた。なお, 講演内容の詳細は物性研究に掲載されている[1]。

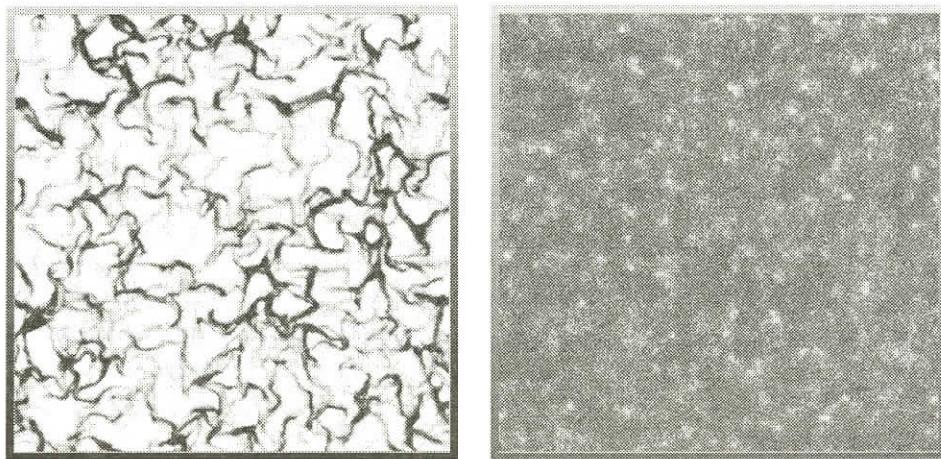
剛体円盤系の高速化のポイントは未来に起こるイベントのキューを考慮して, そのデータ構造をいかにうまく取り扱うかである。今回は, Rapaport系列の戦略とは異なる戦略を基にしたアルゴリズムを提案した。それは, Form et al.(1993)によってTSDMDの短距離相互作用する系において開発されたExclusive Particle Grid Methodに着目したもので, このアイデアを剛体円盤系のEDMDに適用しその拡張をした。また, 非平衡系への適用として, Dynamical Upper Time Cut-offを開発した。Cell - Crossing Eventを考えるRapaport系列のアルゴリズムに比べると開発者のアルゴリズムは, 通常のTSDMDでよく使われている高速化の手法, Linked - Cell MethodとNeighbor Listの概念を拡張したものである。

開発したアルゴリズムの1イベント当たりの計算量は, 粒子数Nに対して $\log N$ 程度であり, その係数も旧来の最も速いといわれているアルゴリズムより小さい。実際に, 2500粒子系のシミュレーションを行い, Alpha500互換機で(1999年6月現在)約460 Million Collision Events/CPU Hourの計算速度を実現した。これは, 既存の文献で公表されている効率と比べても十分速く, 効率は約30倍であり高い効率を実現できていることが確認できた。また, メモリ使用量に関しても過去の文献の記述よりも少ない。今回開発したアルゴリズムを基にして, 高速データ探索で使われるハッシュ法を応用して改良を試みた結果, 無限空間系への拡張が可能であることを示した。以上のことより, このアルゴリズムはアルゴリズムの評価の基準である, 単純性, 効率性, 汎用性の3つを満足することがわかった。

実際に非弾性剛体円盤の自由冷却過程の大規模計算シミュレーションした結果を示す。初期に空間的に一様であった粒子の分布が不安定化し, 散逸粒子群がひも状のクラスター化や渦構造を起こす様子がはっきりとわかり興味深い。

参考文献

- [1] 磯部雅晴: 物性研究1999年4月号 (Vol.72 No.1) 21.



図：非弾性剛体円盤系の自由冷却過程のスナップショット。粒子数 $N=1,000,000$, 衝突回数 $C/N=100$, 粒子占有率 $\nu=0.20$ (左), $\nu=0.75$ (右), 反発係数 $r=0.9$, 周期境界条件。

ボルテックス相の安定性と熱平衡シミュレーション

京都工芸繊維大 工芸 川 村 光

磁場中の第2種超伝導体のボルテックス秩序の問題は Abrikosov 以来の古典的な問題であるが, 高温超伝導体では熱揺らぎの効果が顕著なためその磁場中相図の問題は nontrivial であり, 近年理論実験両面から活発に研究されている。ランダムな点状欠陥を有する磁場中の第2種超伝導体に対して M.P.A. Fisher らによって提唱された新しいタイプの熱平衡秩序相がボルテックスグラス相である[1]。この相では, ボルテックスが点状欠陥によってピン止めされ, クーパー対の波動関数の位相が空間的にはランダムに, しかし時間的には凍結したような状態になっている。ボルテックスグラス相は線形抵抗が零になる真の超伝導状態であり, 線形抵抗が有限に残る高温側のボルテックス液体相と2次の相転移によって隔てられていると考えられている。

この理論的な予想を確認するため, これまでいくつかの数値シミュレーションが行われてきたが, 热平衡秩序相と相転移の有無やその性格を調べるという観点からは, 信頼できる解析はゲージグラスモデルと呼ばれる極度に簡単化されたモデルに基づいた計算にほぼ限られてきた[2,3]。ただしゲージグラスモデルは空間的に等方的なモデルで, 系を磁場が貫いていない等のいくつかの重大な簡単化が行われており, その性質が現実のボルテックスグラス秩序を本当に表しているかどうかは必ずしも明らかではない。

今回, ゲージグラスモデルのいくつかの欠点を改善した新たなモデルに基づいた大規模な熱平衡シミュレーションを行い, 3次元ボルテックスグラス秩序の安定性に関する詳細な解析を行っ

た[4]。その結果,

- 1) スクリーニングが無視できる第2種の極限ではボルテックスグラス相が安定に存在するが、実際の超伝導体では必ず存在するスクリーニング効果が最終的にはボルテックスグラス相を不安定化する,
 - 2) スクリーニングが無視できる極限での有限温度転移, およびスクリーニングが有る場合の絶対零度転移はともに2次の相転移であり, かつそこでのスケーリングは等方的である,
 - 3) 転移に伴う臨界指数は, 以前ゲージグラスモデルについて求められた値と相当異なっており, 実際のボルテックスグラス転移はゲージグラスモデルとは異なったユニバーサリティクラスに属している可能性が高い,
- などが, 明らかになった。

文 献

1. M.P.A. Fisher, Phys. Rev. Lett. **62**, 1415 (1989); D. S. Fisher, M.P.A. Fisher and D.A. Huse, Phys. Rev. B **43**, 130 (1991).
2. D.A. Huse and H.S. Seung, Phys. Rev. B **42**, R1059 (1990); J. D. Reger, T.A. Tokuyasu, A.P. Young and M.P.A. Fisher, Phys. Rev. B **44**, 7147 (1991).
3. H. S. Bokil and A.P. Young, Phys. Rev. Lett. **74**, 3021 (1995); C. Wengel and A.P. Young, Phys. Rev. B **54**, R6869 (1996); B **56**, 5918 (1997); J. Kisker and H. Rieger, Phys. Rev. B **58**, R8873 (1998).
4. H. Kawamura, submitted.

低次元磁性体の磁化過程

姫路工大理 坂井 徹

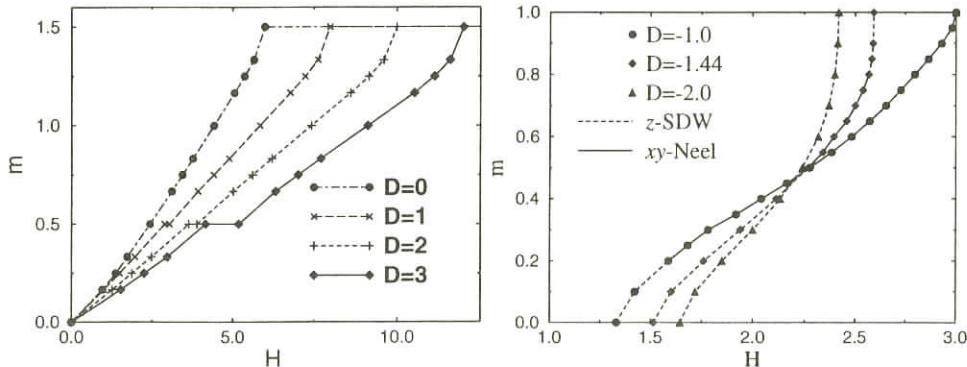
低次元, とくに一次元ハイゼンベルグ反強磁性体の磁化過程に見られる量子現象について, 有限系の数値対角化とサイズスケーリングにより解析した。まず, 最近注目されている, 磁場中で誘起されるスピニギャップによる, 磁化曲線のプラトーの可能性について, スピン3/2の系を調べた。その結果, スpin3/2の反強磁性鎖は, シングルイオン異方性Dが臨界値0.93より大きい場合は, 磁化1/2のところでプラトーが生じることがわかった。いくつかの異方性Dの値に対して計算された, 絶対零度の磁化曲線を図1に示す。異方性が十分大きい場合には, 確かに磁化1/2のところにプラトーが現れることがわかる。

次に, 次に, 同様の異方性が負の値をとる, つまり磁化容易軸を持つような反強磁性鎖のスピ

ンフロップと呼ばれる相転移について調べた。このような系は、古典系や高次元系では、ある臨界磁場で磁化のジャンプを伴う一次相転移であることが知られているが、一次元系の場合だけは、強い量子効果のために、磁化曲線は連続となり、二次相転移が二度起きることがわかった。この二つの相転移の間には、磁場に平行なincommensurate SDWに相当する相(z -SDW)が現れ、二つ目の転移後に、普通のスピニフロップと同様の磁場に垂直なネール秩序に相当する相(xy-Neel)が実現する。いくつかの負のDの値を持つスピニ1の反強磁性鎖の磁化曲線を図2に示す。図2からわかるように、第二の相転移点では、磁化曲線にはとくに異常が見られないことが確かめられた。

参考文献

- [1] T. Sakai and M. Takahashi, Phys. Rev. B **57** (1998) R3201.
- [2] T. Sakai and M. Takahashi, Phys. Rev. B **57** (1998) R8091.
- [3] T. Sakai, Phys. Rev. B **58** (1998) 6268.
- [4] T. Sakai, Phys. Rev. B **60** to appear.



左図 異方的スピニ3/2反強磁性鎖の磁化曲線($D>0$).

右図 異方的スピニ1反強磁性鎖の磁化曲線($D<0$).

1 次元準周期ハイゼンベルグモデルの基底状態

埼玉大理 飛田和男

交換相互作用が準周期的に変化する1次元磁性体については、XYモデルのように自由フェルミオンに帰着できる場合には多くの研究があるが[1,2]、ハイゼンベルグモデルのように多体効果が重要になる系に対する研究はこれまであまり行われていない。ここでは、 $S=1/2$ の反強磁性ハイゼンベルグモデルにおいて、交換相互作用にフィボナッチ的変調がある場合について、密度行列繰り込み群によって低エネルギースペクトルを調べた。

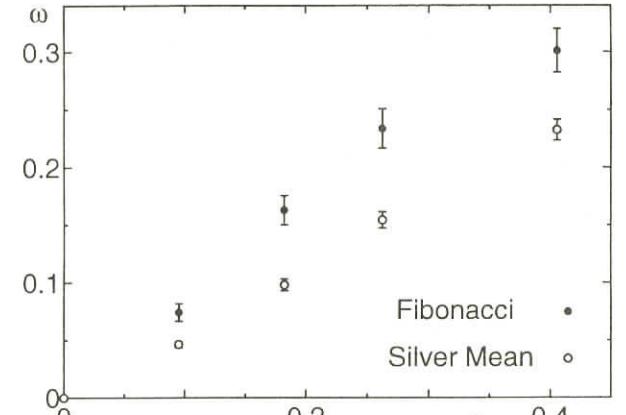
有限系の計算は無限長のフィボナッチ列の長さ $N-1$ の部分列（ N 種ある）を取り出し、ハミルトニアン

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N-1} 2J_{\alpha_i} S_i S_{i+1}, \quad (J_{\alpha_i} > 0), \quad (1)$$

で、交換相互作用 J_{α_i} がその部分列に応じ J_A または J_B の値をとるとしてエネルギーギャップ Δ を計算した。すべての部分列についての Δ の分布を調べた結果、平均値 $\langle \ln(1/\Delta) \rangle$ 、分散 $\sigma[\ln(\Delta)]$ のサイズ依存性から、エネルギーギャップ分布はnon-universalな指数 ω を用いて

$$P(\ln\Delta)d\ln\Delta = N^{-\omega} f(N^{-\omega}\ln\Delta)d\ln\Delta, \quad (2)$$

で与えられる分布をすることが分かった。この型の分布は、ランダム量子スピン系でのランダムシングレット相[3]やrelevantな非周期性を持つXYモデル[2]など、非周期的変調がrelevantになるスピン系において特徴的な分布であり、Fibonacci的XYモデルのような有限の動的臨界指数を持つ臨界的な振舞いとは大きく異なる。Vidalら[4]のボゾン化による議論と考え合わせると、XYモデルではmarginalだったFibonacci的変調がこの系では多体効果のためにrelevantになっていると考えられる。同様な結果は $a \rightarrow aab, b \rightarrow a$ という規則で生成されるSilver mean chainでも得られた。なお、本研究の詳細は文献[5]を参照されたい。



フィボナッチハイゼンベルグモデルとSilver meanハイゼンベルグモデルの ω 。 $r \equiv \text{Max} \{J_B/J_A, J_A/J_B\}$

参考文献

- [1] H. Hiramoto and M. Kohmoto: Int. J. Mod. Phys. B **35** (1987) 1020及びその参考文献
- [2] J. Hermisson: cond - mat/9808238.
- [3] D. S. Fisher: Phys. Rev. B **50** (1994) 3799
- [4] J. Vidal, D. Mouhanna and T. Giamarchi: cond - mat/9905080
- [5] K. Hida: cond - mat/9907115

ボンド交替と单一イオン異方性のある1次元S=1ハイゼンベルグ模型の相転移

埼玉大理 陳 健

飛田和男

$S=1$ の1次元ハイゼンベルグ模型においてハルデン状態を壊す機構として、ボンド交替と单一イオン異方性の効果が知られているが、この2つが共存する場合の臨界現象についてはあまり調べられていない。ここではこの2つが共存する1次元 $S=1$ ハイゼンベルグ模型の基底状態の相図及び臨界点上でのLuttinger liquid parameter K やエネルギーギャップの臨界指数 ν を数値的に求めた。モデルのハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \sum_{l=1}^N \{1 - (-1)^l \delta\} \mathbf{S}_l \mathbf{S}_{l+1} + D \sum_{l=1}^N (S_l^z)^2, \quad (1)$$

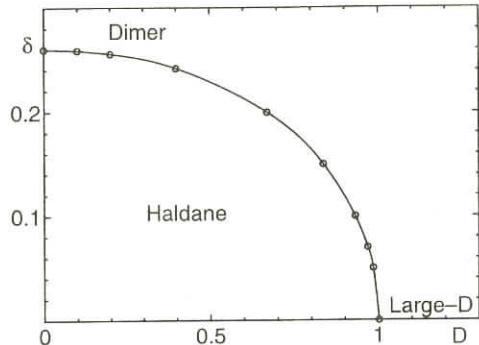
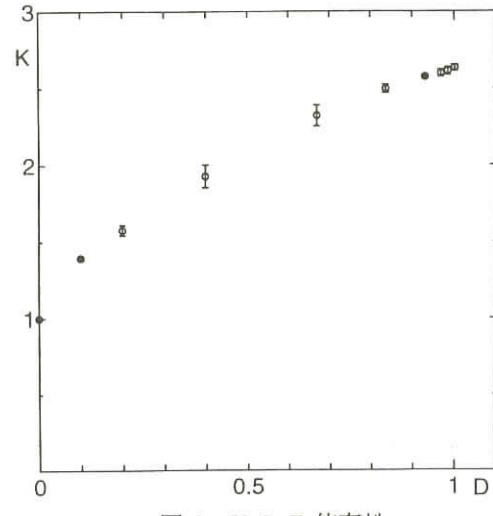


図 1: 基底状態相図

図 2: K の D 依存性

で与えられる。ここで、 δ はボンド交替であり、 D は单一イオン異方性である[1]。まず、twisted boundary condition[2]の方法を用いて厳密対角化で相境界を精度よく求めた。図1はこのモデル

の相図であり、dimer相とlarge- D 相の間には相転移が存在しない。このモデルの転移点上で、基底エネルギーのサイズ依存性からconformal charge c を求めたところほぼ1に近く、この転移はGaussianモデルで記述する事ができると期待される。転移点の近傍の低エネルギーの振る舞いはdouble sine-Gordonモデルで表される。そこで共形場理論とlevel spectroscopy法を用いて数値的に得られた励起スペクトルからLuttinger liquid parameter K とエネルギーギャップの臨界指数 ν を計算した。 K の D 依存性は図2のようになることが分かった。 $D \gtrsim 0.4$ では、 $K > 2$ なので素励起の間の相互作用が引力的であり、逆に $D \lesssim 0.4$ のとき、斥力的になることが分かった。

参考文献

- [1] T. Tonegawa, T. Nakao and M. Kaburagi: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 3317.
- [2] A. Kitazawa and K. Nomura: J. Phys. Soc. Jpn. **66** (1997) 3944.

拡張アンサンブル法を用いたランダム спин系の数値計算

東大物性研 福島孝治

スピングラスや高分子に代表される複雑な位相空間構造を持つ系では共通して、「遅い緩和の問題」が存在する。これは系の緩和時間が異常に遅くなる現象で、実験的に観測されている。この問題は平衡計算を行う数値計算にとって、大きな障害となる。この問題を解決するために、マルチカノニカル法、シミュレーテッドテンパリング法、交換法等の拡張アンサンブル法と呼ばれる一連の方法群が提案されている。そこでは興味あるカノニカル分布に、エネルギー等のマクロな変数に関する重みを附加した分布系や、温度等の外部パラメータに関する複数のカノニカル分布の合体系をシミュレートする。重要な点は、拡張された分布が緩和の速くなる要素を含んでいることである。エネルギーに対しての拡張では高エネルギー状態、温度の拡張では高温度状態がそれに対応する。

最近の拡張アンサンブルの進展は、調べたい系特有の物理量あるいはパラメータに関する拡張空間を導入することや複数のパラメータへの拡張等様々な試みがなされている。また、モンテカルロ法において発展してきたこれらの方法は分子動力学法へも盛んに応用されている。ここでは、スピニ系におけるドメイン壁自由エネルギーを計算するためのある一つの拡張系を提案する。

ドメイン壁自由エネルギーは、調べたい系に共役な境界条件とそれをひねった境界条件のもとでの自由エネルギー差のことで、相転移温度でちょうどスケール依存性がなくなることが期待され、臨界現象の解析に有力な方法である。我々の方法の基礎は、境界条件自身もモンテカルロ法で状態更新される動的変数と考えることで、興味ある自由エネルギー差が境界条件の頻度比で表されることである。我々は交換法を用い、温度と境界での相互作用の強さを変える空間での拡張アンサンブルを導入した[1]。

この方法を4次元イジングスピングラス模型に応用し、転移点を精度よく評価した。また、ドメイン壁自由エネルギーの性質から、低温相における剛性指数とドメイン壁のフラクタル次元を評価することができた。さらに我々は3次元系にも適用し、有限温度スピングラス相転移の存在を示し、また低温相において硬い秩序相が実現していることを示唆する結果を得た。

[1] K. Hukushima, to be published in Phys. Rev. E, (cond-mat/9903391).

非平衡緩和法によるスピングラス転移の解析

東工大理 尾 関 之 康

東大工 伊 藤 伸 泰

相互作用がランダムなスピングラス系の平衡シミュレーションは、フラストレーションによる遅い緩和とランダムネスの平均操作の手間のため、平衡状態の確認が難しく、解析可能なサイズが極端に小さくなり、物理的な結論を得るのが難しくなる。非平衡緩和法は、秩序化した状態からの秩序変数の非平衡緩和をシミュレートし、二次相転移を解析する方法で、統計平均はMCステップの時間平均ではなく、独立なサンプリングで行なう。系の平衡化から解放されるので、スピン数がこれまでの数十倍以上の格子を容易に解析でき、MCステップは動的性質が判る程度の小ステップで十分になり、高精度な結果を効率良く実現する。

スピングラス転移を非平衡緩和法で解析する場合、初期状態の選択と非平衡緩和を調べる物理量が問題となる。決定的な解答は未だ得られていないが、ここではクローン相関と呼ばれる量で解析を試みた。スピングラスという非常に興味深い系での解析の試みとして、また秩序状態がはっきりしない系への応用例としての意義を有する。適当な初期状態から時間 t 経過した時の格子点 i のスピンの値を $S_i(t)$ とする。待ち時間 t_w に達したところで $S_i(t_w)$ と同じ状態を持つ系をもう一つ作り（元の系の状態の複製），以後、独立に時間発展させる。複製を作つてから t 経った時の格子点 i のスピンの値を $S_i^{(1)}(t), S_i^{(2)}(t)$ として、クローン相関関数は、 $Q(t, t_w) \equiv [\langle S_i^{(1)}(t) S_i^{(2)}(t) \rangle]$ と定義される。

$\pm J$ イジングモデルで 127^3 程度までの立方格子について、クローン相関を系統的に調べた。これは、最新の平衡シミュレーションでも、最大サイズは 30^3 程度なのと比べるとかなり大きい。必要に応じて、数十から数千のボンド配位について平均をとる。低温で待ち時間を変えて緩和関数の t_w 依存性を調べた結果を図に示す。 t_w 程度の時間でクロスオーバーがあり、その手前では t_w に依存した幕緩和が見え、その時間を越えると t_w に依らない一定の幕緩和に漸近している。つまりクローン相関はスピングラス相でも 0 に緩和して行き、スピングラス秩序変数には漸近しない。

この性質は秩序の存在が明らかな四次元でも観測され、スピングラス相の秩序構造に由来するものと考えられる。高温側ではこの関数は指数緩和に漸近するので、指数緩和と幂緩和の境界からスピングラス転移温度を評価することができる。さらに、臨界温度では相関時間が発散するので、クローン相関の振舞いを記述する時間のスケールは、待ち時間 t_w と観測時間 t になり、 $Q(t, t_w) = t_w^{-\lambda} g(t/t_w)$ のようなスケーリング関係式が確認された。この関係は、スピングラス転移を確認する助けとなる。初期状態と緩和関数には検討の余地が残るが、今後のスピングラス模型の解析に非平衡緩和法が重要な役割を果たすことが期待できる。

2 次元スピングラスのドロップレット励起状態

都立大理 川島直輝

2 次元スピングラスにおけるゼロ温度臨界現象に対して、ドロップレット的な励起がどのように関与しているかを明らかにするために、ボンド分布が対称ガウス分布である場合の 2 次元エドワーズ・アンダーソンモデルのゼロ温度における性質を調べた。その結果、ドロップレット励起エネルギーが、通常の温度臨界指数 $y_T = 1/\nu$ によってスケールされることが分かった。ここでの温度臨界指数は自由エネルギーの特異部分が

$$F(T, L) = \tilde{F}\left(TL^{y_T}, HL^{y_T + \frac{d}{2}}\right)$$

というスケーリング形であらわされることによって定義される。この式は通常の有限サイズスケーリング形を単純に $T_c = 0$ の場合にあてはめたのち、 $T = 0, H = 0$ における全磁気モーメントが $L^{d/2}$ に比例することを用いて導かれる。

y_T の評価するための試みとして最初のものは、 $y_T = -\theta_S$ を利用するものであった。 θ_S は剛性指数である。 $y_T = -\theta_S$ の根拠は、多くの場合 domain wall エネルギーが自由エネルギーの特異部分と同じスケーリング形をもつことが知られていることである。これが上述の 2 次元スピングラス系についても正しいことを仮定すると、 $y_T = -\theta_S$ でなければならない。同じ結果を導く他のさまざまな議論も知られている。いずれにせよ、直接評価されたものは、 θ_S であって、 $\theta_S \sim -0.28$ 程度になることが数値計算によって知られている。一方、 y_T を直接評価すると、異なる値になることが指摘された[1]。それによると $y_T \sim 0.48$ である。

ドロップレット描像によれば、 y_T はドロップレット的な励起のエネルギーを特徴づける指数 θ_D の絶対値に等しくなくてはならない。しかし、一方で、ドロップレット的な励起と、domain wall 的な励起が異なるサイズ依存性をもつことは考えにくいことである。

そこで我々は、強制的にドロップレットを励起するような境界条件を課して、直接ドロップレット励起エネルギーを計算することで、 θ_D を測定した。この結果 $\theta_D \sim 0.48$ となり、ドロップレット

描像は正しいが、そこでは、domain wall 的な励起とドロップレット的な励起のエネルギーが異なるスケールをもつという不思議な状況が実現していることが分かった。

[1] N.Kawashima and M. Suzuki, J. Phys. A: Math. Gen. **25** (1992) 1055;

N.Kawashima, H. Hatano and M. Suzuki, J. Phys. A: Math. Gen. **25** (1992) 4985.

3次元イジングスピングラス模型のエイジング現象

東大物性研 高山一
吉野元
小森達雄

スピングラス(SG)が高温からSG転移温度以下に急冷された後に平衡状態に向かう過程で観測されるエイジング現象は、現実のSG物質における秩序相の本質を探る有力な手段として最近盛んに研究されている。SG相に対する液滴模型に基づく理論では、各温度Tにおける平衡状態は唯一組(Γ 状態とその時間反転状態 $\bar{\Gamma}$)だけ存在するとし、定温エイジング過程は、 Γ 状態に対応するドメインが熱活性化過程によって成長する過程と捉える。 Γ 状態の領域内に生じるサイズLの($\bar{\Gamma}$ -)液滴励起に伴う自由エネルギー増 F_L 、その反転に要する特徴的な時間スケール $\tau(L)$ (あるいはその逆関数 $L(\tau)$)、および、エイジング過程で急冷後の時刻(待ち時間)tでの平均ドメインサイズ $R(t)$ $-L(\tau)$ と同じ関数で与えられるとする一に対して時間空間スケール則を現象論的に導入し、これらの量を用いて諸物理量の振舞いを予測する。例えば、時刻tと $t+\tau$ 間のスピン自己相関関数 $C(\tau; t)$ は、準平衡領域と呼ばれる時間域 $t \gg \tau$ において

$$1 - C(\tau; t) \sim \frac{T\tilde{\rho}(0)}{\theta\Upsilon} \left[1 - \left(\frac{L_0}{L(\tau)} \right)^\theta \right] + \frac{c_1\tilde{\rho}(0)T}{\Upsilon(L(\tau)/L_0)^\theta} \left(\frac{L(\tau)}{R(t_w)} \right)^{d-\theta} + \dots, \quad (1)$$

で与えられる。ここで、定数Tと指数 θ は上記 F_L の代表的な値をスケールするもの($F_L^{\text{typ}} \sim \Upsilon(L/L_0)^\theta$) L_0 は長さの単位スケール、また、 $\tilde{\rho}(0)$ は F_L の規格化された分布関数の $F_L/F_L^{\text{typ}} = 0$ での値である。

以上の液滴理論のスケーリング予測を検証する目的で、我々は三次元ガウス分布イジングEA模型($T_c \approx 0.95$)におけるエイジング現象についてモンテカルロ法による詳細なシミュレーションを行い、これまでに以下の結果を得ている[1]。

1. $R(t)$ の成長はべき乗則($\sim t^{1/z}$)に従い、その指数は $1/z \approx 0.17T$ の温度依存性を示す。
2. 1スピンあたりのエネルギー緩和は液滴理論から導かれるスケーリング表式 $e_T(t) -$

$$e_T^{\text{eq}} \sim \Upsilon(R(t)/L_0)^{\theta-d} \text{ を満たす } (\theta \approx 0.2, d = 3)。$$

3. $1 - C(\tau ; t)$ は、結果1, 2項から導かれる因子 $(L_0/L(\tau))^{\theta}$ に対する近似式 $(L_0/L(\tau))^{\theta} \sim 1 - (\theta/z) \ln(\tau/\tau_0)$ を代入した式(1)とよく一致する (τ_0 時間の単位スケール)。すなわち、 $1 - C(\tau ; t)$ は τ にのみ依存する項と τ/t にのみ依存する項に分けることができ、それぞれ式(1)の第1, 2項の特徴をよく再現する。

以上、エイジング過程における基本的な長さスケール $R(t)$ の成長則は液滴理論で導入されたもの(対数関数則)と一致しないが、 $R(t)$ や $L(\tau)$ で記述されるスケーリング表式(1)などはシミュレーション結果とよく一致している。式(1)は、準平衡領域では近似的ではあるがよい精度で成立する遙動散逸定理を用いて磁化率に読み直すことができる。それとこれまでの実験結果を比較すると、 $R(t)$ の成長則とスケーリング表式についての事情はほぼ同様である。 $R(t)$ の具体的な成長則は系を観測する時間スケールによって異なるが、液滴理論のスケーリング的考察はより広い時間領域で成立すると結論される。

- 1) T. Komori, H. Yoshino and H. Takayama: preprints cond-mat/9904143, 9908078.

多層ランダムエネルギーモデルにおけるスローダイナミックス

北大理 佐々木 志剛
根本 幸児

近年スピングラスのスローダイナミックスに関して、次のような興味深い実験が行われている。この実験では、ある温度 T での動的感受率の長時間緩和を測定中に、温度を $T \rightarrow T - \Delta T$ に変化させることによって摂動を加え、この摂動がその後の長時間緩和に及ぼす影響について調べられている。そして特に $\Delta T > 0$ の場合、摂動を加えた後でも、摂動を加える前に緩和がどこまで進んでいたかという履歴を覚えている、メモリー効果が観測される。

このようなスピングラスの持つ性質を定性的に説明できる、現象論的なモデルとして、多層ランダムエネルギーモデルがある。理論的な解析が比較的容易で、緩和時間の発散とそれに伴う相転移を示すモデルとしてランダムエネルギーモデルがあるが、多層ランダムエネルギーモデルとは、これが何層にも重なった階層的構造を持つモデルである。そして上の層ほど転移温度は高くなっている、温度を下げると上の層から順々に相転移を起こす。このモデルにおいて、ある温度 T での系の長時間緩和に最も大きな影響を与えるのは、温度を T まで下げた時に一番最後に相転移を起こした層であると考えられる。なぜなら、それより低い層ではまだ相転移を起こしていないため短時間のうちに熱平衡に達し、それより高い層では温度 T がその層での転移温度よりかなり低いため、緩和がほとんど進まないからである。今後この層を M 層と呼ぶ。ここで、実験と同様に温度を

$T \rightarrow T - \Delta T$ に変化させることを考える。すると長時間緩和を支配する層は下に移り、 M 層での緩和はほとんど進まない。そして温度を T に戻すと、再び M 層が長時間緩和を支配し、摂動を加える前の系の履歴を思い出す。

このシナリオが本当に成り立つかどうかを確かめるため、この多層ランダムエネルギーモデルに対して磁化を導入し、前述の実験と同様のシミュレーションを行った。その結果が図1である。縦軸は動的感受率の虚部で、 t_1 と t_3 での温度が T 、 t_2 での温度が $T - \Delta T$ である。また図2は、図1の t_1 と t_3 の部分だけを抜き取ったものと、摂動を加えていない $t_2 = 0$ のデータを比較したものである。 t_1 と t_3 の接続部分を除けば両者が良く一致しており、上述のメモリー効果が確かめられた。

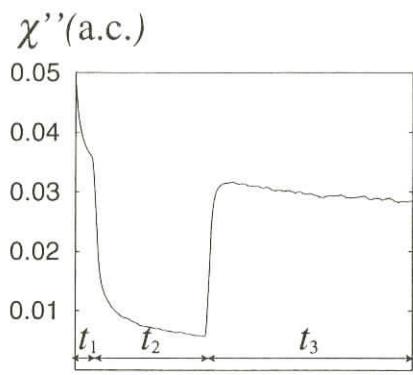


図 1

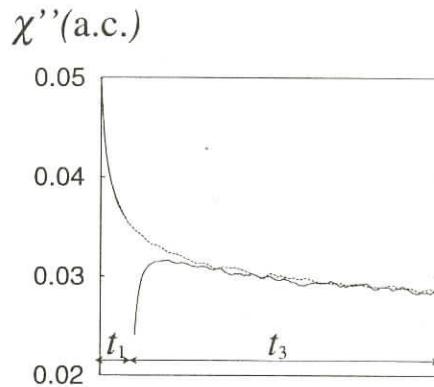


図 2

物性研究所談話会

日 時 1999年8月5日(木) 午後1時30分～2時30分
場 所 物性研究所 A棟5階講義室
講 師 Dr.Kevin Kelly
(所属) (Institute for Materials Research, Tohoku University and Department of Physics, Pennsylvania State University)
題 目 Investigating the Electronic Properties of Carbon Nanostructures with Scanning Tunneling Microscopy
要 旨

Utilizing the scanning tunneling microscope, the electronic and structural properties of a variety of carbon based nanostructures have been explored. Among these, threefold electron scattering (Friedel oscillations) on graphite generated by vacancies and adsorbates was imaged using C₆₀-functionalized STM tips. By comparing a simple theoretical model to the experimental results, it is possible to identify the exact location of the defect in the graphite lattice. From this model, it is also possible to qualitatively identify the bonding strength of adsorbates on the graphite surface. It will also be shown that only at cryogenic temperatures is it possible to observe this phenomenon with a bare metal STM tip. In addition to graphite, monolayers of disulfide derivatized fullerenes were also probed with the STM. The self-assembling and electronic properties of these molecules were investigated and compared to those of n-alkanethiols. Lastly, recent STM investigations of functionalized single-walled carbon nanotubes will be discussed. Images of fluorinated and butylated nanotubes will be presented along with a discussion of the differences between graphite and nanotube adsorbates.

日 時 1999年 8月25日(水) 午後 1時30分～
場 所 物性研究所 Q棟 1階講義室
講 師 Dr. Robert A. Wolkow
(所属) カナダ国立研究機構分子科学研究所 主任研究員
題 目 Controlled Molecular Adsorption on Si : Laying a Foundation for Molecular Devices

要 旨

Our understanding of and control over molecular adsorption on silicon has advanced very significantly in the last several years. It is now possible to provide a microscopic picture of structure and bonding in covalently attached molecule-silicon surface systems. This detailed understanding of adsorbate-surface structures was entirely lacking when the first wave of for molecular devices crested roughly 20 years ago. While many ideas for molecule-scale devices have been put forward in the past, the tools - both synthetic and analytical-to pursue those ideas did not exist.

Now, the control necessary to begin exploring ways to incorporate organic function into existing technologies or, eventually, to make new molecule-scale devices is within reach. Modeling methods have emerged that effectively extend the resolution of STM to see the details of adsorbed molecule structure and bonding. Conformations created in stereospecific processes have for the first time been elucidated on a crystalline silicon surface. Significant advances have been made in visualizing transient species that play an integral role in adsorption dynamics. In the next several years it is now realistic to expect structures and concepts dreamed about for decades to begin to be realized.

日 時 1999年 8月31日(火) 午後 1時30分～ 3時
場 所 物性研究所 Q棟 1階講義室
講 師 Prof. David C.Johnston
(所属) Ames Laboratory and Department of Physics and Astronomy Iowa State University
題 目 Thermodynamics of Spin-1/2 Antiferromagnetic Uniform and Alternating-Exchange Heisenberg Chains and Spin Ladders

要 旨

Combined theoretical and experimental studies of the specific heat $C(T)$ and magnetic

susceptibility χ (T) of spin-1/2 antiferromagnetic uniform and alternating-exchange Heisenberg chains and spin ladders have been carried out. The ultimate goals of this work are to establish reliable and accurate theoretical predictions for these thermodynamic properties of these systems, and then to apply these results to model the properties of appropriate compounds. The theoretical parts of this work include very accurate Bethe ansatz calculations of $C(T)$ and $\chi(T)$ of the uniform chain, for which the influences of logarithmic corrections are precisely evaluated. We also carried out Quantum Monte Carlo (QMC) and Transfer-Matrix density-matrix Renormalization Group (TMRG) calculations of $\chi(T)$ for the alternating-exchange chain. Accurate analytical fits were obtained to all these results, which should prove useful for modeling experimental data for many diverse compounds. The theoretical results are applied to model the thermal and magnetic properties of and determine the exchange constants in NaV_2O_5 , which exhibits a spin dimerization transition, and to determine the exchange constants in the two-leg ladder compounds SrCu_2O_3 , $\text{LaCu}_2\text{O}_{2.5}$ and CaV_2O_5 and in the three-leg ladder compound $\text{Sr}_2\text{Cu}_3\text{O}_5$.

日 時 1999年9月3日(金) 午前11時～12時

場 所 物性研究所 Q棟1階講義室

講 師 Dr. C. Geibel

(所属) (Max Planck Institute)

題 目 The stoichiometry control in CeCu_2Si_2 and CeNi_2Ge_2 : The key issue?

要 旨

The observation of Non-Fermi-Liquid behavior and unconventional superconductivity in Ce-compounds upon tuning them by pressure or doping through a quantum critical point is presently attracting considerable attention. In CeCu_2Si_2 and CeNi_2Ge_2 , such effects can already be observed at $p = 0$ kbar and without doping, making these compounds the best candidates for the investigation of these phenomena. However, the proximity to a critical point renders these compounds extremely sensitive to deviation from stoichiometry. I shall present the current state of our research on the superconductivity, the magnetism and the interaction between both phenomena in these two compounds.

日 時 1999年9月8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. Markus J Steiner
(所属) (Cavendish Laboratory, Cambridge University)
題 目 Superconductivity in Heavy Fermion Systems at the Border of Magnetic Order
要 旨

In many heavy fermion compounds, a quantum phase transition from a magnetically ordered to a paramagnetic state can be induced by the application of relatively low (under 30kbar) hydrostatic pressure. In the vicinity of this transition, some compounds exhibit a non-conventional superconducting phase which is thought to be due to pairing via magnetic (spin) fluctuations. In the normal state, these materials show non-Fermi liquid exponents of key physical quantities as resistivity and susceptibility. Recent experimental results from materials studied in our group (CeIn_3 , CeNi_2Ge_2) will be presented, focusing on transport measurements which reveal a strong deviation of the resistivity exponent expected from Fermi liquid theory ($\rho = A + T^x$ with $x=2$). Instead, values of x of 1.5 and almost 1 are observed. Also, the measurement setup, especially purpose-built adiabatic demagnetisation refrigerators and their performance will be discussed.

日 時 1999年9月9日(木) 午後1時30分～2時30分
場 所 物性研究所 Q棟1階講義室
講 師 Prof. Bruno Lüthi
(所属) (フランクフルト大学)
題 目 Charge ordering and elastic constants
要 旨

Lüthi 教授はフランクフルト大学の物性物理の教授で、強相関電子系、量子スピン系などについて、超音波を用いた実験を中心に活躍されている。また、最近フランクフルト大学に強磁場施設を建設しパルス磁場中における超音波実験を開始している。今回、強相関電子系国際会議で来日された機会に NaV_2O_5 , $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ や Fe_3O_4 の電荷秩序と弾性定数に現れる異常について話をしていただく。

東京大学物性研究所の客員分野教授・助教授公募の通知

本研究所客員分野において下記のとおり教授（併任）・助教授（併任）の公募をいたします。

1. 公募人員

研究分野 A	教 授 1名	F : 助教授 1名
B	教 授 1名	G : 教 授 1名
C	助教授 1名	H : 教 授 1名
D	教 授 1名	I : 助教授 1名
E	助教授 1名	

2. 期 間

A C H : 平成12年4月1日～平成12年9月30日（前期）

B D I : 平成12年10月1日～平成13年3月31日（後期）

E F G : 平成12年4月1日～平成13年3月31日（通年）

3. 研究分野

A : S T M技術による表面研究

B : 表面における動的現象等の理論的研究

C : 多重極限環境下におけるYb系化合物の強相関電子系の研究

D : 量子液体・気体における量子渦の研究

E : 超短パルス紫外光の発生、增幅及びその特性評価

F : 超短パルス光の発生、波長変換及びその特性評価。半導体、誘電体及び有機物質における超高速現象の研究

G : 高輝度光源計画におけるビームラインの設計・開発研究

H, I : 冷中性子散乱装置を用いた高分子物性の研究

4. 研究条件

- (1) 研究室の共用、その他可能な範囲で研究上の便宜を計る。
- (2) 研究費及び本研究所との間の往復旅費、滞在費を支給する。
- (3) なるべく多くの時間を本研究所における研究活動にあてること。

5. 公募締切

平成11年11月26日(金)(必着)

6. 提出書類

- (イ) 推薦の場合

- 推薦書（本人の本研究所における研究計画に関する記述を含む）
- 履歴書
- 業績リスト（必ずタイプすること）ほか出来れば主要論文の別刷
- (口) 応募の場合
 - 履歴書
 - 業績リスト（必ずタイプすること）ほか出来れば主要論文の別刷
 - 所属の長などによる本人についての意見書（宛先へ直送）
 - 研究計画書（本研究所滞在可能期間の推定を含む）

7. 宛先及び問い合わせ先

〒106-8666 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

8. 注意事項

- (1) 応募に際しては本研究所所員とあらかじめ連絡をとること。
- (2) 客員の応募分野を明記し、教授又は助教授応募書類在中、或いは意見書在中の旨を朱書し、書留で郵送のこと。

9. 選考方法

東京大学物性研究所人事選考協議会での審議に基づき、物性研究所教授会で決定する。

平成11年8月25日

東京大学物性研究所長

福山秀敏

東京大学物性研究所の助手公募の通知

下記により助手の公募をいたします。適任者の推薦、希望者の応募をお願いいたします。

1. 研究部門名等及び公募人員数

物性理論研究部門 高橋(實)研究室 助手1名

2. 研究内容

磁性理論及び統計力学の研究。厳密な手法又は計算物理的手法のどちらかに意欲のある若手研究者を希望する。

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人。

4. 任期

内規により5年を原則とする。

この内規は、大学の教員等の任期に関する法律（平成9年法律第82号）に基づくものではありません。

5. 公募締切

平成11年10月29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）
- 業績論文リスト（必ずタイプし、特に重要な論文に○印をつけること）
- 主要論文の別刷

(ロ) 応募の場合

- 履歴書
- 業績論文リスト（必ずタイプし、特に重要な論文に○印をつけること）
- 主要論文の別刷
- 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）
- 健康診断書

8. 書類提出先

〒106-8666 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

物性理論研究部門（高橋（實）研究室）助手応募書類在中、又は意見書在中の旨を朱書し、
郵送の場合は書留とすること。

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11年7月30日

東京大学物性研究所長

福山秀敏

東京大学物性研究所の教官公募の通知

下記により助教授または教授の公募をいたします。適任者の推薦、希望者の応募をお願いいたします。

1. 研究部門名等及び公募人員数

附属中性子散乱研究施設 助教授または教授 1名

当施設は日本原子力研究所研究用原子炉(JRR-3M)を用いた中性子散乱実験の全国共同利用研究施設であり、茨城県東海村に設置されている。そのため主たる勤務地は同設置場所である。

2. 研究内容

中性子散乱を用いたソフトマテリアルの物性研究を中心になって強力に推進し、かつ同実験法の開発研究にも意欲のある30~40歳代の研究者を希望する。なお、本所は全国共同利用研究所であるため、共同利用実験に関する業務（実験設備の維持管理改良、共同利用者の実験支援など）を分担していただく。また、本所は日米科学技術協力事業「中性子散乱」の実施機関であるため、これに関連する業務もある。

3. 公募締切

平成11年11月1日（月）必着

4. 就任時期

決定後なるべく早い時期を希望する。

5. 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（略歴で結構です）
- 業績リスト（必ずタイプし、特に重要な論文に○印をつけること）
- 主要論文の別刷（5編以内）
- 研究業績の概要（2000字程度）
- 研究計画書（2000字程度）

(ロ) 応募の場合

- 履歴書
- 業績リスト（必ずタイプし、特に重要な論文に○印をつけること）
- 主要論文の別刷（5編以内）
- 研究業績の概要（2000字程度）

- 研究計画書（2000字程度）
- 健康診断書
- 所属の長などによる本人に関する意見書（宛先へ直送）

6. 書類提出先

〒106-8666 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

7. 本件に関する問い合わせ先

〒319-1106 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長
藤井保彦
電話 029(287)8901 フックス 029(283)3922

8. 注意事項

附属中性子散乱研究施設助教授（教授）応募書類在中、又は意見書在中の旨を朱書し、郵送の場合は書留で郵送のこと。

9. 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11年7月30日

東京大学物性研究所長

福山秀敏

東京大学物性研究所の助手公募の通知

下記により助手の公募をいたします。適任者の推薦、希望者の応募をお願いいたします。

1. 研究部門名等及び公募人員数

附属物質設計評価施設 助手 1 名

2. 研究内容

新しい低次元量子スピン系および強相関電子系物質の開発。当研究室では銅酸化物を中心として遷移金属酸化物を対象に新物質探索を行っている。固体物理の視点を持って、固体化学的な手法により、物質合成、評価、物性測定を積極的に行う意欲のある若手研究者を希望する。

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人。

4. 任期

内規により 5 年を原則とする。

この内規は、大学の教員等の任期に関する法律（平成 9 年法律第 82 号）に基づくものではありません。

5. 公募締切

平成 11 年 11 月 17 日（水）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）
- 業績論文リスト（必ずタイプし、特に重要な論文に○印をつけること）
- 主要論文の別刷
- 研究業績の概要（1,000 字以内）

(ロ) 応募の場合

- 履歴書
- 業績論文リスト（必ずタイプし、特に重要な論文に○印をつけること）
- 主要論文の別刷
- 研究業績の概要（1,000 字以内）

○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）

○健康診断書

8. 書類提出先

〒106-8666 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

附属物質設計評価施設助手応募書類在中、又は意見書在中の旨を朱書し、郵送の場合は書留とすること。

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11年7月30日

東京大学物性研究所長

福山秀敏

人 事 異 動

1. 研究部門等

(採用)

所 属	職・氏名	発令日	備 考
物性理論研究部門 (常行研)	助手 赤木和人	11. 9. 1	
附属軌道放射物性研究施設	助手 奥田太一	11. 9. 1	

(配置換)

所 属	職・氏名	発令日	備 考
先端領域研究部門 (勝本研)	助手 小林研介	11. 8. 16	大学院理学系研究科助手から

(命・柏分室勤務)

所 属	職・氏名	発令日	備 考
極限環境物性研究部門	助手 柄木良友	11. 8. 1	

2. 事務部

(臨時の任用)

所 属	職・氏名	発令日	備 考
総務課庶務掛	事務官 野本優子	11. 9. 1	平成12年3月31日まで

(辞職)

所 属	職・氏名	発令日	備 考
総務課庶務掛	事務官 七邊信重	11. 7. 31	

2000年度日米科学協力事業「中性子散乱」研究計画の公募

2000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ひいたします。

記

1. 応募資格：全国国公私立大学、研究所所属の研究者
2. 提案様式：所定の提案書とコピー2部（用紙は提出先に請求してください）
3. 提案書類送付先：
〒319-1106 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：1999年11月30日（火）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2000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所(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。
(含大学院博士課程学生)
 - 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（東北大金研）

加倉井和久（東大物性研・BNL担当幹事） 片野進（原研）

吉澤英樹（東大物性研・ORNL担当幹事） 松岡秀樹（京大工）

新井正敏（高エネルギー加速器研究機構） 山田和芳（京大化研）

Technical Report of ISSP 新刊リスト

Ser. A

- No. 3484** Strong Non-Ohmicity in the Vertical Transport in Multilayered Quantum Hall Systems, by Minoru Kawamura, Akira Endo, Shingo Katsumoto and Yasuhiro Iye.
- No. 3485** Crossover Phenomena in the One-Dimensional $SU(4)$ Spin-Orbit Model under Magnetic Fields, by Yasufumi Yamashita, Naokazu Shibata and Kazuo Ueda.
- No. 3486** Anisotropy and Magnetism of High Temperature Oxides Superconductors, by Jacques Friedel and Mahito Kohmoto.
- No. 3487** Magnetic Flux Configuration in Mesoscopic Superconductor Probed by Scanning Tunneling Spectroscopy, by Maxim Zalalutdinov, Hiroyuki Fujioka, Yoshiaki Hashimoto, Shingo Katsumoto and Yasuhiro Iye.
- No. 3488** Local and Nonlocal Excitations in Cu $4p-1s$ Resonant X-Ray Emision Spectra of Nd_2CuO_4 , by Tsuyoshi Idé and Akio Kotani.
- No. 3489** Quantum Phase Transition of Randomly-Diluted Heisenberg Antiferromagnet on a Square Lattice, by Kihoshi Kato, Synge Todo, Kenji Harada, Naoki Kawashima, Seiji Miyashita and Hajime Takayama.
- No. 3490** Numerical Study on Aging Dynamics in the 3D Ising Spin-Glass Model. I. Energy Relaxation and Domain Coarsening, by Tatsuo Komori, Hajime Yoshino and Hajime Takayama.
- No. 3491** Transverse Resistance in Two-Dimensional Electron Gas in Oblique Lateral Superlattice, by Mayumi Kato, Akira Endo, Shigo Katsumoto and Yasuhiro Iye.
- No. 3492** Domain-Wall Free-Energy of Spin Glass Models: Numerical Method and Boundary Conditions, by Koji Fukushima.
- No. 3493** Ti-O Hybridization Effect for Ferroelectric Phase Transition of $BaTiO_3$, by Tohru Higuchi, Takeyo Tsukamoto, Kunihiko Oka, Takayoshi Yokoya, Yasuhisa Tezuka and Shik Shin.

- No. 3494** Hole-State and Defect Structure of Proton Conductor $SrTiO_3$ Observed by High-Resolution X-Ray Absorption Spectroscopy, by T. Higuchi, T. Tsukamoto, N. Sata, M. Ishigame, K. Kobayashi, S. Yamaguchi, Y. Ishiwata, T. Yokoya, M. Fujisawa and S. Shin.
- No. 3495** Observation of the Crystal Field Splitting and the On-Site Coulomb Energy of $La_xSr_{1-x}TiO_3$ by Means of the Resonant Soft X-Ray Emission Spectroscopy, by T. Higuchi, T. Tsukamoto, M. Watanabe, M. M. Grush, T. A. Callcott, R. C. Pereta, D. L. Ederer, Y. Tokura, Y. Harada, Y. Tezuka and S. Shin.
- No. 3496** Variable Range Hopping Conduction in Bulk Samples Composed of Single-Walled Carbon Nanotubes, by Yositaka Yoshida and Isamu Oguro.
- No. 3497** Superstructures at Magnetization Plateaus in $SrCu_2(BO_3)_2$, by Shin Miyahara and Kazuo Ueda.

編 集 後 記

物性研だよりの9月号をお届けいたします。

本号では、図らずも先端領域研究部門表面物性グループの新旧の所員から原稿をいただきました。田中虔一名誉教授の「物性研究所の14年間とその後」では、表面「反応」グループのスタート時のご苦労やその後の展開・発展が述べられております。更に、物性研における「化学」の位置付けなど、たいへん骨のある御意見をいただきました。長谷川幸雄所員の「物性研に着任して」では、今までの研究歴と物性研での新展開について書いていただきました。

物性研では秋から冬にかけて、六本木から柏への移転に関連して、研究会など様々な行事が続きます。それらの情報は本号を含めて、「物性研だより」で皆様にお知らせしていきたいと思います。

なお、次号の原稿締切りは10月8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。

吉 信 淳
今 田 正 俊

