

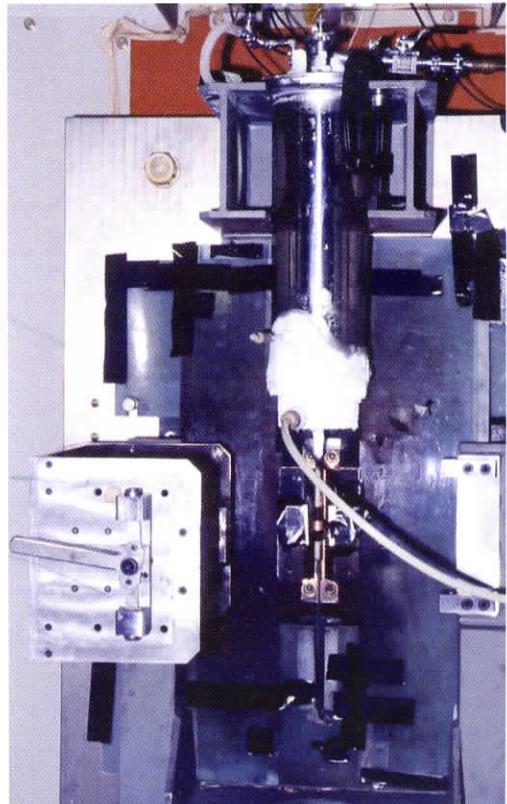
物性研だより

第42巻
第6号

2003年3月

1	物性研に着任して 杉野 修
目 次	物性研究所短期研究会報告
3	○強磁場下物性研究の現状と新展開—新しい基盤構築へ向けて
25	○物性研究における計算物理
69	物性研究所談話会
物性研ニュース	
73	○東京大学物性研究所の教官公募の通知
75	○テクニカル・レポート 新刊リスト
76	○物性研だより第42巻目録（第1号～第6号）

編集後記



液体ヘリウムクライオスタットを装着した
継型一巻きコイル法 超強磁場発生装置

東京大学物性研究所

ISSN 0385-9843

物性研に着任して

物性理論研究部門 杉野 修

昨年の12月1日付で物性理論研究部門に着任いたしました。11月までは茨城県つくば市にある日本電気(株)の基礎研究所に勤務しており、第一原理計算や分子動力学計算を用い物質科学の分野の研究を行ってきました。物性研では上記研究に加えて、共同利用施設（スーパーコンピュータ）の管理・運営を行ってゆきたいと思います。よろしくお願ひします。

物性研に来て強く感じたのは大学と民間企業の組織の違いが思ったより大きいということです。物性研では意思決定が民主的に行われ、所員会などで多くの事が審議を経て決まりますが、企業ではむしろ絶対君主制のように、トップダウン的に決まります。裁量権は組織の長に委ねられ、審議の過程が明らかにされることなく、スピード一にどんどん物事が決まって行きます。拙速になりやすいのも確かですが、逆に、権限を持った上司を説得できればやりたいことを即実行に移せる等の利点もあります。同僚の意向より上司の決断が優先されますし、前例や既得権益の重要性はあまり大きくありません。そういう会社に14年間どっぷり浸かって来ましたので、物性研で感じる違和感がどうしても拭い切れません。具体的には、「どうしてこんなことまで所員会で諮る必要があるのだろうか、所長が独断で決めればいいのに」と初めての所員会で思いましたし、いわゆる上司がいない状況でどの様に活動していったらよいのだろうかと考えたこともあります。もちろんどちらが良いかという話ではなく、それぞれに一長一短があることなのだろうと思います。ただ、研究という比較的長期間にわたって積み上げる活動にとっては、民主的手続きというバッファーがあった方が良いのだろうと感じています。

数年前にチタンシリサイド ($TiSi_2$) という物質の研究を行っていましたが、この時企業の意思決定の速さを身を以って体験しました。この物質はシリコン基板と金属の接触部に広く使われてきたものなのですが、微細化が進むにつれC54相と呼ばれる高抵抗相が現れ易くなるため接触抵抗が顕著に高くなってしまうことが判り問題となっていました。その問題をどうしたら克服できるかと事業所から持ちかけられ、相転移の性質を計算で調べるなどしばらく研究を積み上げていきました。ところが、ある日突然コバルトシリサイド ($CoSi_2$) の方が将来の微細化に向いているという判断がトップの方でなされました。ある技術的问题が解決の方向に向かったためとか特許の問題とかあったらしいのですが、その辺の事情は知られず、 $TiSi_2$ の研究は切り上げて $CoSi_2$ を研究しましょうという事になったわけです。 $TiSi_2$ もまだまだブレークスルーの余地はあるのではないかと思ったのですが、手のひらを返したように全社的に $CoSi_2$ に方向が転換されました。 $CoSi_2$ に方針転換するには、幸いにも純粹的な計算上の問題はあまり大きくなかったのですが、 $CoSi_2$ には相転移や結晶成長の問題は存在しないため、何を研究すれば開発に貢献できるかということに戻って検討を始めなければならず、頭を抱えてしまいました。

前職場では研究の意義が、物性を理解する事よりもむしろ開発に貢献できる様な新奇な物性特性の予測を行う、あるいは先進の高度シミュレーションを行ってスーパーコンピュータの売り上げに何らかの寄与をする、ということにあったと思っています。研究期間も基本的には2～3年ぐらいで、そ

ここで成果を認めてもらわないと延長は難しい環境でした。こちらではその辺の事情が少し異なるように思います。一般的に、まず物性を理解することが重要であり、物性予測は確固たる理解の上になされている様に思いますし、研究期間はずっと長く、開発への貢献はあったとしても10年以上の先の話をを考えている様に思えます。また、計算機資源をはじめとする研究環境は圧倒的に恵まれており、スケールの大きい研究をしないといけないというプレッシャーも感じます。これらの変化はひょっとしたら大学ずっと研究を続けられてきた方には些細なことのように思われるかもしれませんのが、私にとっては思いの他大きく感じられます。今までの研究スタイルをすぐに変えることはもちろんできませんが、この研究環境の変化を如何に自分にプラスになるように吸収していくかがこれからしばらく課せられた課題だと思っています。

色々な意味で物性研の環境は、今大きく変わろうとしている時期だと思います。大学の法人化に伴う組織的な変化だけでなく、世間では大学の役割・存在意義について議論がなされています。理論部門に目を移すと何人かの先生が定年退官されようとしており、その後若い先生が入って来ます。また私の専門分野に関しても、第一原理計算の完成度が増してパッケージ化されるに至っています。計算するだけなら誰でもできる時代が到来しようとしており、研究者には理論の本質的な発展が求められています。この激動の時期にあって新たな方向へ向かって模索しなければならないことはつらい面も多いと思いますが、やりがいがあることだと思います。そんな中で物性研に着任できたことは幸いなことだと思います。何年か後に振り返っても悔いが残らないように果敢に仕事をしていきたいと思いますので、何卒よろしくお願ひします。

物性研究所短期研究会

強磁場下物性研究の現状と新展開－新しい基盤構築へ向けて

日時 2002年10月8日(火) 10:50 開始

10月9日(水) 12:40 終了

場所 物性研究所 6F 大講義室

司会者 野尻 浩之
小林 典男
渡辺 和雄
金道 浩一
鈴木 直
高増 正
嶽山正二郎
太田 仁
青木 秀夫
三浦 登
長田 俊人
後藤 恒昭

近年、欧米では国家プロジェクトとしての大型強磁場施設の建設が進み、その科学研究への応用において世界的な競争激化の時代が到来している。従来我が国では東北大金研、物性研、阪大、物質・材料研究機構の四大強磁場施設を中心として世界最高水準の磁場発生技術と高精度の測定技術、活発な共同研究と共同利用を基盤として世界的に誇る成果を輩出してきたが、世代交代の時期を迎えて学術的にも利用体制、施設整備の上でも新たな全国的戦略の構築が強く求められている。例えば、中性子統合計画、既設、新設の放射光などを強磁場環境と組み合わせて斬新な研究手段を整備するなど世界にないユニークな研究展開を図るために議論が必要となっている。このような観点から、強磁場関連の研究者が一堂に会して、分野の垣根を越えて研究の現状を概括し、併せて将来構想を議論する場を持つために本研究会は企画された。また全国の強磁場物性関連研究者が結集した強磁場フォーラム結成総会も本研究会と併せて行われた。研究会においては、半導体、超伝導体、有機物質、磁性等広い分野で、強磁場と関連した最新のトピックスと強磁場研究の可能性についての話題を第一線の研究者に提供して頂くと共に、中性子、放射光、自由電子レーザーなどと強磁場の結合の可能性についても第一人者の方々にレビューをお願いした。強磁場技術などに関しては、厳選した報告のみを行い、これまでの枠を越えた参加者の顔ぶれからなる斬新な研究会となった。以下にプログラムと講演要旨を掲載する。また強磁場フォーラム設立総会の報告も併せて掲載する。

プログラム

10月8日(火)

10:50 提案者挨拶 野尻 浩之 (岡山大学)

セッションA 座長 野尻浩之

11:00~11:25 強磁場中における中性子散乱研究 松田 雅昌 (日本原子力研究所)

11:25~11:50 新規低次元量子スピン系化合物の強磁場磁化過程

吉村 一良 (京都大学)

11:50~12:10 強磁場下の放射光X線磁気散乱 勝又 紘一 (理化学研究所 播磨研究所)

12:10~12:30 高圧を中心とする最近の研究から 上床 美也 (物性研究所)

休憩

セッションB 座長 吉村 一良

14:00~14:25 強磁場中における高温超伝導体の研究

小林 典男 (東北大学)

14:25~14:50 希土類・ウラン化合物の強磁場物性 大貫 悅睦 (大阪大学)

14:50~15:15 42Tまでの強磁場中における高温超電導体のNMR

鄭 国慶 (大阪大学)

15:15~15:35 量子スピン系の低次元性と強磁場ESR

太田 仁 (神戸大学)

休憩

セッションC 座長 小林 典男

15:50~16:15 強磁場中における強相関電子物性の可能性

青木 秀夫 (東京大学)

16:15~16:40 強磁場磁気光学研究の展開 嶽山正二郎 (千葉大学)

16:40~17:00 強磁場中での遠赤外分光の新展開 小宮山 進 (東京大学)

17:00~17:20 強磁場中での磁性体の1次転移と量子核形成

押川 正毅 (東京工業大学)

17:20~17:40 パルス磁場国分寺の現状 野尻 浩之 (岡山大学)

18:00~懇親会 (於 カフェテリア)

10月9日（水）

セッションD

座長 嶽山正二郎

9:40～10:05

強磁場で展開した有機導体の新物性 村田 恵三（大阪市立大学）

10:05～10:30

自由電子レーザーの現状と強磁場下での実験

太田 俊明（東京大学）

10:30～10:55

強磁場磁化過程における磁化の量子化

戸塚 圭介（青山学院大）

休憩

セッションE

座長 太田 仁

11:05～11:30

モーゼ効果、磁気アルキメデス浮上分離、磁気対流制御と強磁場の魅力

北澤 宏一（科学技術振興事業団）

11:30～11:45

物性研超強磁場の現状

長田 俊人（物性研究所）

11:45～12:00

東北大学の現状

渡辺 和雄（東北大学）

12:00～12:15

大阪大学の現状

金道 浩一（大阪大学）

12:15～12:30

物・材機構の強磁場施設

木戸 義勇（物質材料研究機構）

閉会の挨拶

三浦 登（物性研究所）

休憩

14:00～17:00

強磁場フォーラム設立総会

強磁場中における中性子散乱研究

日本原子力研究所・先端基礎研究センター 松田 雅昌

強磁場は中性子散乱実験においても欠かすことの出来ない手段であり、数多くの研究がなされている。しかし、ビーム実験のためにマグネットをスプリットペア型にする必要があることと、さらにビーム強度をかけぐために出来るだけ大きな試料を使う必要があるため、最大磁場が限られているのが現状である。現在、世界の標準的な中性子散乱施設では、超伝導磁石を用いて、縦磁場～10T、横磁場～7Tの実験が可能である。また、ドイツのHahn - Meitner Institute (HMI) の中性子散乱施設では、縦磁場最大17Tまでの実験が行われている。一方、KEKではパルス中性子とパルスマグネットを組み合わせたユニークな中性子散乱研究が行われており、最高30T程度の磁場中での実験が実現している。

将来計画としては、HMIで縦磁場40Tの磁石を用いた新しい施設を計画中である。日本では大強度陽子加速器を用いた新しいパルス中性子源が建設中であり数年後には稼動し始める予定である。この施設では中性子束がKEKと比べて1000倍程度は強くなるため、これまで難しかった磁場中実験も容易になると期待される。また、中性子光学から磁場を用いて中性子を集光出来ることが予想されており、定常磁場では一定の波長の中性子しか集光出来ないが、パルス中性子とパルス磁場を組み合わせることにより、広い波長領域の中性子を同時に効率的に集光するという新しい方式も提唱されている。

本講演では、磁場中における中性子散乱研究の最近の話題として、特に酸化物高温超伝導体の磁場中の振る舞いについて報告する。超伝導状態で磁場をかけると、vortex付近に磁気秩序が誘起されることが理論的に予想されており、これに関連したいくつかの中性子散乱実験が行われている。ホールドープ系 $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ のアンダードープ領域における静的磁気秩序については、零磁場中で存在していた非整合磁気秩序が磁場をかけることにより強められるという結果になっており、理論的予想と一致する。また、最適ドープ領域では零磁場中で磁気励起ギャップが存在するが、磁場をかけるとギャップ中に状態が生じることが実験的に報告されており、エネルギー scales の低い新たな磁気状態が vortex 付近に誘起されることに対応する。

我々はこれに関連して次の研究を行った。先ず $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ 低ドープ領域（非超伝導領域）における非整合磁気秩序が磁場中でどのように影響を受けるか調べた。上に述べたように、超伝導領域では、磁気散乱強度の増加が観測されたが、低ドープ領域では反対に磁気散乱強度が減少することがわかった。系統的な実験を行った結果、これは La_2CuO_4 で見られるような Dzyaloshinski - Moriya 相互作用による可能性が強いことがわかった。つまり、磁場中でスピンの回転が起こりスピン構造が変わるために、磁気強度が減少していると考えられる。これは、磁気秩序が短距離的になってしまってまだ磁気異方性が効いており、スピンの向きを決めるのに重要な役割を果たしていることを示している。この結果は間接的に超伝導相での磁気反射の増加が本質的なものであることを支持している。次に、電子ドープ系 $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ の超伝導相における磁場効果を調べた。しかし、この物質では磁場中の新たな磁気反射は観測されなかった。 $H_{\text{c}2}$ 以上の磁場をかけても変化が見られないことから、ホールドープ系と電子ドープ系では超伝導と磁性の関係が異なっているように思える。これは超伝導発現機構が磁性とどのように関わっているかとも結びついており、今後明らかにすべき問題である。

新規低次元量子スピン系化合物の強磁場磁化過程

京都大学大学院理学研究科 吉村 一良

遷移金属化合物におけるスピン・軌道・電荷の自由度に起因した新しい量子効果現象を示す物質探索等についての実験を行い、その物性を強磁場磁化過程の観点から調べた一連の研究結果について報告を行った。

K_4CdCl_6 型構造をもつ A'_3ABO_6 において、 A' 、 A 、 B にどのような金属元素が入りうるかを詳細に検討してこの構造の安定性について一般的な法則を明らかにし、様々な一次元磁性体・一次元導体（一次元金属）の探索することを目的に研究を行い以下の結果を得た。殊に、一次元強磁性鎖を作る三角格子において、初めて、部分無秩序反強磁性相（Partially Disordered Antiferromagnetic Phase）の存在を明らかにした。また、低温相がスピンフリーズ相であることを強磁場磁化過程によって明らかにした。

ナノチューブ化合物 $Na_2V_3O_7$ は、スピンギャップ的振る舞いを示し、低温で 1 割程度のスピンが生き残った磁化率を示すことが最近明らかになってきた。この系の強磁場磁化過程を詳細に観測することによって、この量子効果的現象に起因した 1/9 磁気プラトーが観測された。磁化は 50T 以上で更に増加の傾向を見せていてより強磁場での新たなプラトーも期待され、更に強磁場下での磁化測定が今後必要である。

立方晶 C15 b 型構造をもつ $YbInCu_4$ は、 $T_V=42K$ で一次の価数転移を示す。 $T > T_V$ （高温相）において Yb は 3 価 ($4f^{13}, J=7/2$) で局在的な磁性を示すのに対し、 $T < T_V$ （低温相）において Yb は 2.9 価となり、遍歴的なパウリ常磁性を示すフェルミ液体状態となる。この価数転移現象は $T < T_V$ （低温相）において強磁場を引加することによっても誘起される。また、高温相は低温相に比べて体積が約 0.5% 小さいため加圧により高温相はより安定になり、価数転移温度 T_V 低温側にシフトする。また、Yb サイトを Y で徐々に置換することによっても転移の性質を保ちながら T_V は低温側にシフトする。最近、我々は Yb を Y で 20% 置換した $T_V=15K$ の試料を用いて、加圧により価数転移が抑制される様子を最低温度 0.6K の磁化測定により詳細に調べた。その結果、0.8GPa 以上で価数転移が消失し、1.7K 以下で弱い強磁性相が出現することを発見した。価数転移はこの弱い強磁性相と上述のパウリ常磁性相との競合により起こっていると考えられ、この発見は転移機構の解明に重要な指針を与えるものである。また、Ce 化合物では、圧力によって磁気秩序が消失し、超伝導、非フェルミ液体等を示す量子臨界現象が数多く報告されているが、逆の圧力効果を示す Yb 化合物において圧力による磁気秩序の出現の例は僅かである。更に磁化測定から磁気秩序の種類まで特定した例としては初めてである。

以上典型的な数例について強磁場磁化測定の結果を報告し、低次元系・量子スピン系・フラストレーション系の立場から議論を行った。

強磁場下の放射光X線磁気散乱

SPring-8/理研 勝又 紘一

X線は電磁波の一種であり、磁性体中の磁気モーメントと相互作用して散乱されるので、中性子線を用いた測定と同じようにX線回折法により磁気構造を調べることが原理的に可能である。X線が中性子と比べて優れている点は、①空間分解能が1～2桁良い、②元素を選ばない（H, B, Cd, Gdなどを含む物質の中性子回折実験は困難）等であろう。

X線磁気散乱強度は通常の電荷による散乱強度と比べて極端に弱く、放射光X線源を用いた実験^[1]においても十分な信号強度が得られなかつたため、これまでには磁性原子の特定のエネルギー準位に入射X線のエネルギーを一致させて強度を増強させる「共鳴磁気散乱」実験が一般的であった。共鳴磁気散乱測定結果の解析には十分な注意が必要であり、共鳴条件にとらわれない直接的な散乱測定が望まれていた。

我々は、世界で最も輝度の高い高エネルギーX線を発生できるSPring-8のBL19LXUビームラインにおいて代表的な反強磁性体であるMnF₂について非共鳴X線磁気散乱実験を行い、以前に報告されていたもの^[1, 2]と比べて桁違いに強い磁気散乱信号の観測に成功し、非共鳴磁気散乱測定が実用的に行なえるようになった事を示した^[3]。

磁場中のX線、中性子線回折実験の主な狙いは、磁場中で誘起される磁気モーメントや格子がからんだ相転移現象の研究であろう。我々は既に、オックスフォードインスツルメンツ社製のスプリットペアー超伝導磁石を導入し世界最高の15テスラの磁場中の測定に成功している。また、阪大極限の金道氏との共同研究によりパルス磁場を建設し、更に強磁場領域でのX線磁気散乱測定を行う計画である。

[1] A. I. Goldman *et al.*; Phys. Rev. B **36**, 5609 (1987).

[2] T. Bruckel, *et al.*; Acta Cryst. A **49**, 679 (1993).

[3] K. Katsumata *et al.*; J. Phys.: Condens. Matter **14**, L619 (2002).

高压を中心とする最近の研究から

東京大学物性研究所　辺土　正人、上床　美也
横浜国立大学大学院工学研究院　梅原　出

近年、超高压下における物性研究が多くの研究室で行われるようになってきた。これに伴い、より低温、より強磁場下でのより高い圧力下での物性測定が要求されている。当研究室では、この要望にこたえるべく、より低温、高磁場下での測定可能な圧力装置として、低温で1.8GPaまで発生可能な超小型高圧セルを開発した。図1にその概観図を示す。外形は8.8mm ϕ で高さが約25mmである。この圧力セルを使用することにより、定常磁場での磁化と比熱測定が同じ圧力環境で測定することが可能となった。現在、より高圧を発生させるためにNiCrAl合金などを用いた圧力セルを開発中である。

本研究会の中心議題である超強磁場（パルス磁場）を組み合わせた高圧下での物性測定は、以下の二つの研究室との共同研究によりなされている。①大阪大学極限科学研究センターの金道浩一先生により、約1GPaまでの圧力下で磁化測定が¹⁾、②神戸大学分子フォトサイエンス研究センターの太田仁先生により0.3GPaまでの圧力下でのESR測定に成功している²⁾。強いパルス磁場を発生させるためには発生空間を狭くする必要があり、圧力容器の外径が制限される。このため、材料の持つ特性を最大限生かすための工夫が必要となる。圧力を発生させるための重要なポイントは容器の内外径比である。CuBe合金の場合、一般に内外径比1:4がベストとされている。我々はこの比をどこまで小さく出来るか検討した所、内外径

比1:3.26程度でもCuBe合金の限界圧力である2GPa程度の圧力が発生可能であることを明らかにした。今後、この比の圧力容器を用いることにより、パルス磁場中でのより高圧下の物性測定が可能となると思われるので、さらに共同研究を通して開発していきたい。

参考文献

- 1): T. Inoue *et al.*, Physica B, 294 - 295 (2001), 271 - 275.
- 2): H. Ohta *et al.*, Physica B 294 - 295 (2001) 624 - 629.

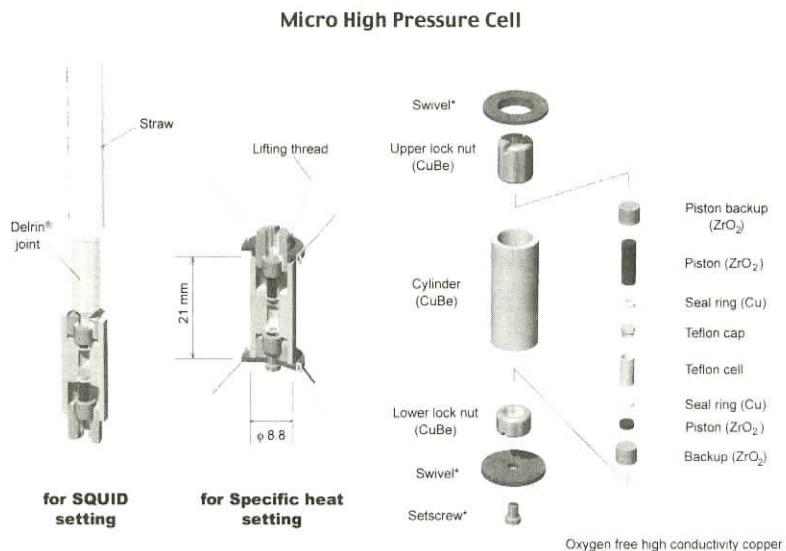


図1：比熱および磁化同時測定用マクロ圧力容器

強磁場における高温超伝導体の研究 －STS による $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ の渦糸の研究－

東北大学金属材料研究所 小林 典男、柴田 憲治、真木 一、西寄 照和、佐々木孝彦

我々は 6 年程前から $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ (YBCO) 非晶質単結晶の渦糸系の相転移について研究を行ってきた。高温超伝導体では、熱搖らぎのために高温でいわゆるアブリコソフ格子を組むことが出来ず、時間的・空間的に揺らいだ液体状態にあると考えられている。この液体状態は温度の降下によって固体化する。固体状態は、低磁場において準長距離秩序を持った Bragg glass 状態とピニングのために秩序を失った高磁場の vortex glass 状態に分けられる。Bragg glass 相から液体相への転移は 1 次相転移で vortex glass 相から液体相への転移は 2 次である。これらの相転移の起こる磁場領域は、異方性の大きさに依存し BSCCO では数 100 ガウス程度であるが、YBCO では数テスラから 30 テスラ程度であり、ちょうど東北大金研の定常強磁場の領域にある。

YBCO の磁束相図はわずかな酸素濃度の変化によって多彩に変化する。酸素欠損のほとんどない試料 $y \sim 7.0$ では、1 次相転移から 2 次相転移への臨界点は 30 テスラを超えるが、 T_c が最も高い最適濃度付近 $y = 6.92 - 6.96$ では 10 テスラ程度まで下がる。さらにアンダードープ試料 $y \sim 6.88$ では 1 次相転移はまったく観測されず、したがってこの試料の固体相はすべての磁場領域で配置が乱れた vortex glass 相になっていると考えられる。最近さらに、結晶欠陥の少ない試料で、 T_c 近傍の弱磁場領域で 1 次転移から 2 次転移に変わる下部臨界点が存在し、それ以下では 2 次と 1 次の逐次相転移が起こることが明らかにされた。さらに $y = 6.92$ の試料では臨界点の近くで、slush 相と呼ばれる新しい液体相が観測された。

YBCO の渦糸状態における電子状態を原子スケールで明らかにするために、走査トンネル顕微鏡を用いて観察を行った。図 1 に最適条件に近い酸素濃度を持つ試料の 1T の磁場中におけるトンネル伝導度のバイアス依存性を示す。2 種類のトンネル像が得られ、一方は、ゼロバイアスでも有限の伝導度が残っているが、コヒーレントピークを持つ超伝導ギャップを示す。もう一方は、コヒーレントピークが消失しギャップ内に束縛準位が形成されている。後者は、渦糸内のトンネル分光像に相当する。このようなトンネル分光像を 150 nm 四方にわたって観測し、マッピングした結果を図 2 に示す。渦糸像が観察され、歪んではいるが、6 回対称を持った格子を組んでいることがわかる。この歪んだ 6 回対称は温度を変えても代わらず、80 K まで観測される。それ以上の温度では渦糸は液体状態になっていると推測される。一方、3 T の磁場中では、低温では 6 回対称性が観測されるが 60 K では観測されない。この結果は、60 K では vortex glass 状態にあることを示す。

これらの結果は、マクロな測定から得られた相図と一致する。

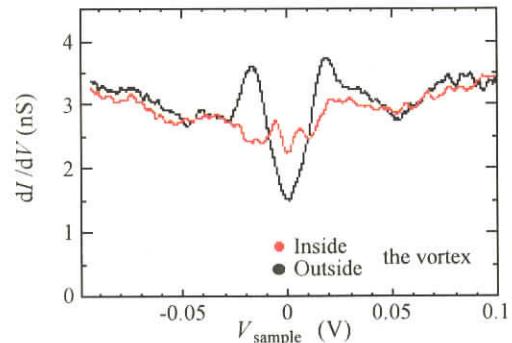


図 1. 2種類のトンネル伝導度

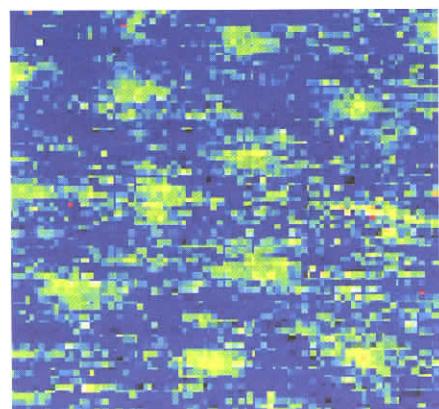


図 2. トンネル伝導度のマッピング

希土類・ウラン化合物の強磁場物性

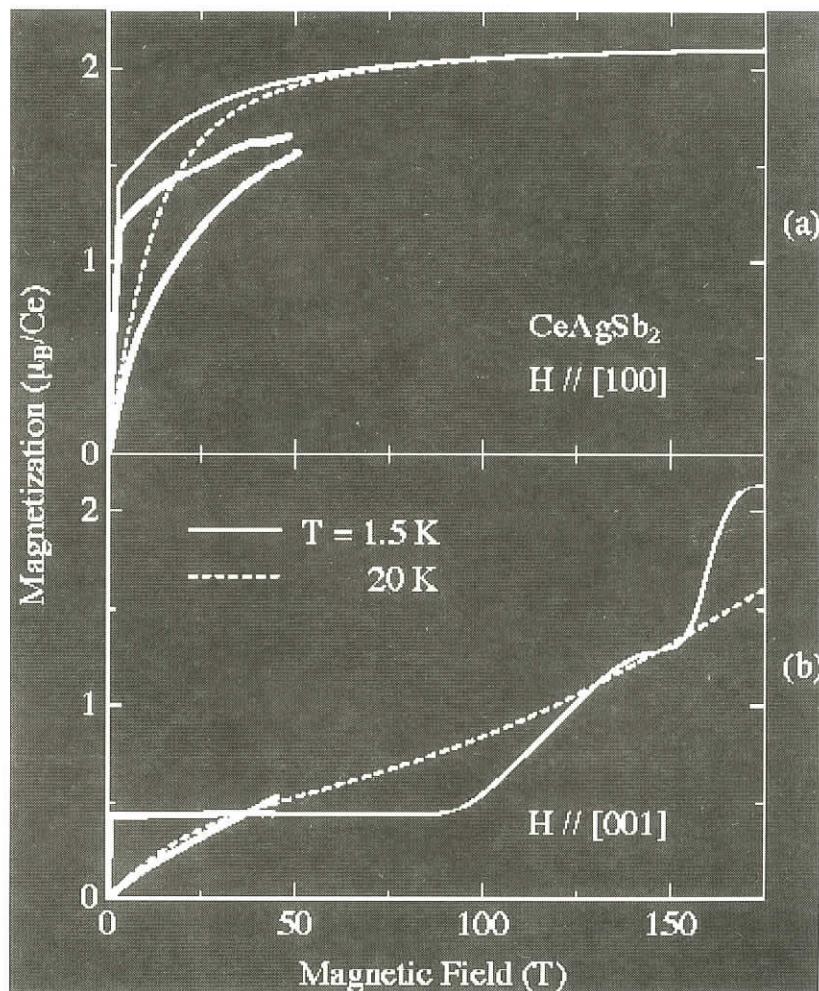
大阪大学 大貫 悅睦

我々のグループは希土類・ウラン化合物の強磁場磁化とドハース・ファンアルフェン効果の実験を通して、 f 電子の磁気モーメントと電子状態を研究している。これまで、 UPt_3 、 UPd_2Al_3 、 URu_2Si_2 、 CeRu_2Si_2 などの重い電子系や、磁場誘起強四極子秩序 PrCu_2 などを中心に研究してきた。ここでは、キュリー温度9.7Kの強磁性体 CeAgSb_2 の強磁性磁化を報告する。

中性子散乱から約 $0.4 \mu_B/\text{Ce}$ の磁気モーメントが正方晶の[001]方向（c軸）を向いていることが知られている。事実 $H \parallel [001]$ では $0.4 \mu_B/\text{Ce}$ の磁気モーメントを持つ磁化曲線を示す。一方、 $H \parallel [100]$ は図に示すように1.5 Kでは約3Tで磁化に折れまがりが見られ、まるで反強磁性体のような磁化曲線である。

我々はこの奇妙な磁化曲線を $4f$ 電子が局在していて、 $|J_z = \pm 1/2\rangle$ を基底状態におき、同時に [100] と [001] の両方に強磁性の交換相互作用（分子場）を考えて結晶場解析を行った。図の太い実線は1.5 Kと20 Kの磁化曲線であり、細線は理論曲線である。結晶場の $4f$ 準位の交差による効果で、 $H \parallel [001]$ でメタ磁性が起きることが 50T 以上で予想される。

本報告では CeAgSb_2 のフェルミ面は薄い筒状のフェルミ面を持つことも述べた。以上は杉山清寛、竹内徹也、荒木新吾、目時直人諸氏との共同研究である。



41Tまでの静磁場中における強相関電子系のNMR

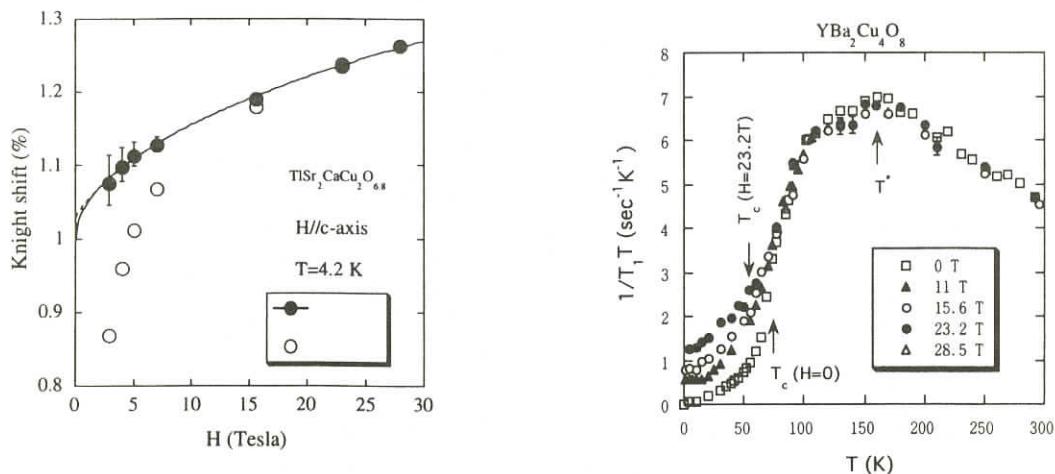
大阪大学基礎工学研究科 鄭 国慶

現在、ビッターマグネットの分解能などの問題を克服して世界各地で強磁場中における固体NMRが行われている。本講演ではこのタイプの磁石を用いた20T以上の強磁場中で行われた強相関電子系のNMRを概観する。

筆者らは数年前から米国立強磁場研究所で⁶³Cu及び¹⁷O-NMRによりd波超伝導体の渦糸周辺の電子状態や銅酸化物高温超伝導体の擬ギャップの磁場依存性を研究している。S波超伝導体では低励起の準粒子が直径 ξ 程度の渦糸中心（ボルテックス・コア）に局在することが良く知られている。これに対し、d波超伝導体のギャップにノードが存在するので、ノード方向では ξ が無限大になる。そのために、低励起の準粒子がコアの中からノード方向に沿って外にしみ出すことが考えられる。しかし、コア外の準粒子状態を分離して観察することは難しい。NMRは、その共鳴線ピークがコア外にある原子核からの信号でコア内の核は共鳴線の裾を形成するので、この問題の研究に適している。下左図はd波高温超伝導体のコア外におけるナイトシフト（スピンドル磁率）の磁場依存性を示している^[1]。 $0.7N_0(H/H_{c2})^{1/2}$ に比例する状態密度が観測され、準粒子状態がコア外に伸張していることが示された。

一方、擬ギャップの磁場依存性がキャリアのドープ量に敏感であることが明らかになった。過剰ドープ域では擬ギャップが磁場に強く依存し、超伝導ゆらぎによると考えられる^[2]。それに対し、不足ドープ域では擬ギャップが41Tまでの磁場に依存しない。下右図に結果の一部を示す^[3,4]。これらの結果は高温超伝導体の相図の理解に新しい知見を与えた^[4]。

他のグループが行った研究について二、三紹介する。UCLAのBrownとClarkは擬1次元系($TMTTF$)₂PF₆で¹³C-NMRを行い、19Tで系の基底状態が2量体から不整合に変わることを明らかにした。また、GrenobleのHorvaticらはCuGeO₃での⁶³Cu-NMRから、ソリトンの空間マップを作成することに成功した。両実験ともビッターマグネットの特性を最大限に活かしたものである。



- [1] G.-q. Zheng *et al*, Phys. Rev. Lett. 88, 077003 (2002);
- [2] G.-q. Zheng *et al*, Phys. Rev. Lett. 85, 405 (2000);
- [3] G.-q. Zheng *et al*, Phys. Rev. B60, R9947 (1999);
- [4] G.-q. Zheng *et al*, Physica C364-365, 213 (2001).

量子スピン系の低次元性と強磁場ESR

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター 太田 仁

強磁場を使った強磁場電子スピン共鳴（ESR）の測定は、その共鳴条件から必然的にミリ波、サブミリ波、THz光などいわゆる電磁波の高い周波数を使用することとなり、高周波 ESRと呼ばれることがある。強磁場ESRは、分解能の向上、線幅が極端に広い吸収の観測、反強磁性共鳴や直接遷移（スピニギャップ）の観測などいわゆるギャップを越えたESRの観測、磁気相転移磁場以上の高磁場相における ESR の観測などの利点を持ち、ここ10年ほど特に量子スピン系の研究に摘要され多くの成果があがってきた。特筆すべき点は、このような研究が特に日本を中心に発展したきたことである。これは、これまでの日本における強磁場研究の歴史及び蓄積と無関係ではない。国内における強磁場ESRの強磁場発生法は、主に超伝導磁石と非破壊パルス磁場で、物性研のシングルターンコイルを用いた例もあり、現状としてはより強磁場へと展開が進んでいる。

最近、強磁場ESRを用いた量子スピン系の研究の発展のひとつは、押川とAffleckによるスタッガード磁場を持つ一次元反強磁性鎖の ESR 理論および宮下らによる直接数値計算による ESR 理論であろう。このような理論的進展は、これまで定性的な議論に留まっていた強磁場ESR測定の温度依存性などのダイナミカルな振るまいを、定量的な議論に発展させ、その意義は大きい。例えば、押川とAffleck の場の量子論的アプローチによるESR理論は、これまで未解決であった非常によいS=1/2一次元系であるCu - benzoateにおけるESR線幅および共鳴磁場シフトの特異な温度磁場依存性をみごとに説明しただけでなく、この系におけるDzyaloshinsky - Moriya相互作用の見積に成功した。また、極低温で観測されるブリーザーモードも見事に説明した。さらに我々は、鎖間相互作用をちょうど打ち消した反強磁性鎖 BaCu₂(Si_{1-x}Ge_x)₂O₇ のESRの温度磁場（周波数）依存性も押川とAffleck理論でうまく説明できることを示し、現在ブリーザーモードの探索をすすめている。^[1]

装置的には希釈冷凍機温度でのESR測定が東北大金研で可能となったり、物性研において超強磁場におけるESR測定もすすめられている。我々は、物性研の上床らと共に、圧力下強磁場ESR装置の開発をおこなっている。圧力はまだ3.5 kbarに過ぎないが、低温における強磁場ESRによる圧力モニターとしてルビーが使用できることを示し、現在その較正表の作成をおこなっている。^[2]

今後の将来展望は、より強磁場およびより高圧と組み合わせた強磁場ESRの展開が考えられる。この時、強磁場ESRの高分解能特性を生かした応用が期待されるが、そのためには強磁場特にパルス強磁場のhomogeneityの向上を考慮する必要がある。この時、フロリダのハイブリッドマグネットに対抗しえない日本の現状を考えると、ロングパルス磁場の整備は検討に値する課題である。これまで強磁場ESRは、主に量子スピン系の研究で成果を上げてきたが、今後の応用としてはさらに化学や生物の研究への展開が考えられる。特に微量試料の測定が求められる生物研究への応用では、現状の強磁場ESRの感度は十分ではなく、大幅な感度向上が求められる。このためにファブリーペロ共振器の導入など既存技術の適用も重要であるが、例えば大道と長田が10 μgの2次元有機導体の量子振動の観測に使用したカンチレバーの利用など我々はまったく新しい方法による強磁場ESRの感度向上を開拓していきたい。最後にTHz領域で最近盛んとなっているチタンサファイアレーザーを用いたtime resolved THz spectroscopyと、磁場を組み合わせた強磁場ESRなど、時間分解測定への展開も今後重要だと考えられる。

[1] H. Ohta, K. Kawakami, Y. Inagaki, S. Okubo, T. Kunimoto and Z. Hiroi: Progress of Theoretical Physics Supplement **145** (2002) 95 - 100.

[2] H. Ohta, T. Sakurai, S. Okubo, M. Saruhashi, T. Kunimoto, Y. Uwatoko and J. Akimitsu: J. Phys.: Condens. Matter **14** (2002) 1 - 4.

強磁場中における強相関電子物性の可能性

東京大学大学院理学系研究科 青木 秀夫

電子相関の物理において、強磁場をかけることによりどのような可能性が開けるかについて理論的にoverviewした。言い換えると、クーロン相互作用する2次元電子系に強磁場をかけると分数量子ホール効果が生じるが、相互作用する3次元系に強磁場をかけると何が期待できるだろうか。これについて以下を指摘した。

1. 3次元系における磁場誘起SDW

Noninteracting 3次元電子系に強磁場を斜めにかけると、Hofstadter butterflyに似たフラクタル的エネルギー・スペクトルが生じ得ることは越野等により示されているが、この実現手段の一つとして、3次元フェルミ面の不完全ネスティングから多体効果のために生じる磁場誘起 SDWを考えられる。これに要するのはは数十Tであり、一般に多重連結フェルミ面への磁場効果という観点からも興味深い。Density waveが発生していないとも、初めから単位胞が大きければ磁場効果は強まり、金属クラスターを吸収したゼオライトが一つの候補になり得よう。

2. 磁場による金属・絶縁体転移

グラファイトにおける40-50Tでの転移は長年議論されており、矢口・Singletonによる最近の実験があるが、理論的には、スピニ偏極相や絶縁相への転移には磁場中の多体効果（自己エネルギー補正）が本質的という高田・後藤による指摘がある。

3. 強磁場中の超伝導

フォノン媒介引力をもつ普通の超伝導体において、(H_{c2} よりずっと大きい) 強磁場ではランダウ量子化を反映して、 T_c が振動的に増大することは、Tesanovic や明楽等により指摘されており、Yakovenko、後藤・夏目により強結合領域でも議論されている。一方、電子間斥力からの超伝導（スピニや電荷揺らぎ媒介によるもので、高温超伝導での機構と思われる）が、強磁場中でどうなるかは、未知の問題である。本講では以下を挙げた：

- 磁場誘起トリプレット超伝導 三角格子など強磁性揺らぎの強い系に磁場をかけると、トリプレット対の d vector が \mathbf{B} と垂直のチャンネルが有利化する（有田等）。これは、超流動ヘリウム 3 の A_1 相同様 nonunitary 超伝導の一つであり、超流動ヘリウムのような多彩な相が電子系でも期待される一端となろう。
- 負の圧縮率に起因する p 波超伝導 ゼロ磁場中の電子気体は、dilute（運動エネルギーを相対的に弱く）すると圧縮率が負になり、この前後で p 波超伝導になると考えられている。負圧縮率状態は分数量子ホール系の 1/2 状態でも観測されており、この系列の 5/2 状態は p 波 BCS 状態の候補であり、磁場は負圧縮率を発生させる良い手段かもしれない。

4. 強相関電子系（高温超伝導体など）+強磁場 というのも勿論面白い物理を秘めているはずである。 [詳細は、<http://www-cms.phys.s.u-tokyo.ac.jp/Aoki/>上の関連サイトに貼付]

強磁場磁気光学の展開

千葉大学理学部 獨山正二郎

これから強磁場下で磁気光学物性を展開する上で、ヒントになるものとして、我々の研究室で最近展開している内容を紹介する。大きく分けると、1) 四光波混合やポンププローブファラデー回転、2) タイプII量子構造を利用した高密度励起状態実現と新物性ということになる。1) では、希薄磁性半導体量子井戸構造で実現する励起子分子に着目した。

特に、希薄磁性半導体は局在スピン系との交換相互作用により大きな内部磁場発生し、小さな外部磁場を用いても励起子や励起子分子のスピン状態に大きな影響をもたらすことができる。とくに、励起子分子は、水素分子とのアナロジーでどこまで議論できるかが興味あるところであるが、強磁場下では、励起子分子のスピン3重項状態がより安定になっても良いことが予測できる。励起子分子のスピン情報をより的確に得る方法として、時間積分及びスペクトル分解四光波混合測定が有効である。我々は、初めて円偏光によるスピン選択励起によって、励起子と3重項励起子分子との量子ビートを観測した。また、スペクトル分解でも3重項励起子を明確に観測することに成功した。励起子に電子あるいは正孔が付加した複合励起は荷電励起子となるが、これも、希薄磁性半導体量子構造で実現し、巨大ゼーマンを反映した特異な挙動をしめす。荷電励起子もスピン選択性が強く、そのスピン構造を反映した量子ビートを観測することに成功した。スピン選択四光波混合は時間分解非線形分光法の中でも、物質励起相を選択したかたちで実現し、その物性を強磁場下で展開するのに有用であることを示した。また、光励起で実現する磁気秩序とそのダイナミクスも磁場パラメータは重要となってくることは明白である。我々は、希薄磁性半導体で予測できた励起子磁気ポーラロンの光誘起強磁性配向とそのダイナミクス観測にも成功したのでその一例を示した。

今後、光励起で面白いと考えられるのは、光高密度励起状態での強磁場物性である。我々は、レーザー光の強度を利用するのではなく、量子構造の工夫により光溜め込みの高密度励起状態が実現でき、それを用いた強磁場光磁気物性の展開を提案する。その例として、ZnSe/BeTeタイプII実空間・間接型光遷移でみられる強い発光と、すでに観測したゼーマン分裂の励起密度依存性などを紹介した。これは、輝度が強い発光を観測することになるので、パルス強磁場での時間積算が少ない状況でも精密な測定が期待できる。

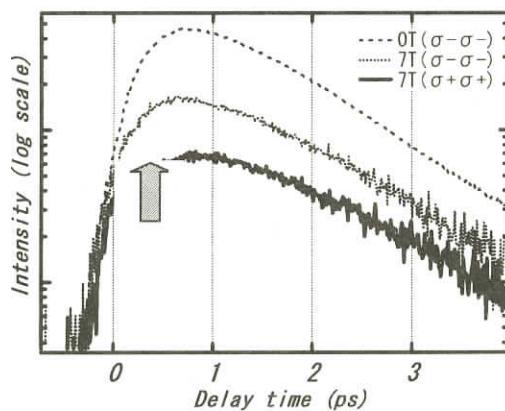


図 $(Cd,Mg)Te/CdTe/(Cd,Mn)Te$ 希薄磁性量子構造で実現した3重項励起子-励起子量子ビート。
1.4 K. $(\sigma+\sigma+)$ 励起による↑↑励起子励起により3重項励起子分子が励起できている証拠である。

強磁場での遠赤外分光の新展開

東京大学・総合文化 小宮山 進

電磁波の中で波長が数 $10\text{ }\mu\text{m}$ から1mmにかけてのTHz/GHz波帯域は、さまざまな物質のエネルギー・スペクトルに対応するため、固体物理・分子科学・電波天文学等の広い分野で分光測定のための極めて重要なスペクトル領域をなしている。特に、半導体量子構造では、人工的に生成される電子準位の多くがこの領域に対応するため、その研究は極めて重要である。ところが、この領域での研究は、可視・近赤外光領域に比べて実験技術的に難しい。その大きな理由の一つは、単一光子検出に迫るような感度の優れた検出器が存在しない点であった。

検出の難しさは、光子エネルギーが極めて小さく、可視・近赤外光に比べて千分の一程度（数ミリeV）に過ぎないことにあった。しかし幸運なことに、近年の半導体微細加工技術の進展おかげで、電荷に極めて敏感な单電子トランジスター（SET）と呼ばれる電子素子を様々な物質を利用して実現することが可能になった：SETを流れる電流は、素電荷(e)のわずか1%程度の電荷によってon-offし得る。そのために、THz/GHz光子を電荷に変換する何らかの励起機構をSET素子中に組み込めば、直ちに单一光子検出素子に変身するはずである。微細加工技術を用いて作成した半導体量子ドットによってアンテナと一体化したSETを形成することによって、実際にTHz/GHz電磁波の单一光子検出が実現する^[1-5]。素子には二種類あり、一方は比較的強い磁場（数テスラ）中に量子ドットを置いてドット内にサイクロトロン共鳴励起による電気分極を引き起こし、それをSETのon-offに利用する^[1-3]。他方は2つの並列量子ドットを用い、一方のドットからGHz光子吸収によって電子を一つ追い出してイオン化し、その電荷分布変化をSETのon-offに結びつける^[4,5]。いずれも、従来の検出器に比べて感度が数桁程度勝る。今後、アレー化や読み出し回路との一体化が進めば、今まで不可能だった様々な測定が可能になると期待される。

本研究は、O. Astafiev・V. Antonov・久津輪武史・川口康・平川一彦各氏の協力により行われたものです。また、科学技術振興事業団（JST）の戦略的基礎研究（CREST）の援助により行われました。

- [1] S.Komiyama *et al.*, Nature **403**, 405 (2000).
- [2] O.Astafiev *et al.*, Phys. Rev. B**62**, 16731(2000).
- [3] O.Astafiev, *et al.*, Phys. Rev B**65**, 85315(2002).
- [4] O.Astafiev, S.Komiyama and T.Kutsuwa, Appl. Phys. Lett.**79**, 1199 (2001).
- [5] O.Astafiev *et al.*, Applied Physics Letters **80**, 4250 (2002).

パルス磁場国分寺の現状

岡山大学理学部 野尻 浩之

パルス磁場は前世紀のはじめにさかのぼる長い歴史があるが、磁場を用いた研究の普及という観点でみれば、ここ10年間の変化は目覚ましい。最近、強磁場専門家の道具と思われていたパルス磁場においても、小型装置の導入が表のように増えている。磁場は物性の主役を担う電子の電荷とスピンの両方に作用するので、実に多様な研究が可能である。温度変化に加えて磁場変化の実験が可能になると、世界が一次元から二次元になるように研究の対象が広がる。パルス磁場のコンデンサ電源は、特注品であるので高価であるが、その基本回路は単純なLCR自由放電回路なので、多少の知識があれば自作可能である。このような小型パルス磁場装置は、強磁場研究のすそ野を広げ、大型施設利用の芽となる実験を行うだけでなく幾つかの重要な役割が期待される。第1は特定の分野に特化した装置によりピンポイントの世界トップを目指す事であり、例として固体のTHz-ESR分野などは高い実績がある。第2の役割は新しい開発、例えば中性子用繰り返し磁場などに代表される他の大型施設との組み合わせであり、大型施設が利用者サービスのために多忙で役割を果たせないこれらの分野で第5列としての役割が期待される。岡山大学で進めている携帯パルス磁場?強磁場サーカス計画は、SORや自由電子レーザーなどにおいて簡便に強磁場環境を整えられる最良の手段であり、新規分野開拓の先導者の役割を果たしている。第3の役割は教育効果あるいは人材育成への貢献であり、これは分野の長期にわたる活性化に不可欠である。このように小規模パルス磁場施設は大型施設とは異なる特色を生かして、強磁場研究の活性化に寄与しており、それに対して適切な振興策が必要である。

参考文献 固体物理37巻7号(2002) 465

場 所	エネルギー (電圧)	コイル 内直径 (mm)	スイッチ・ クローバー	可能な 実験	連絡先、ホームページ又はe-mail
秋田大学工学資源学部	100 kJ (5 kV)	15	I・なし	M, R, O	左近拓男, http://www.akita-u.ac.jp/kogaku/03/03_3/kikai.html
岡山大学理学部	90 kJ (5 kV)	16	S・あり	E, M, R, C, S, 3He	野尻浩之, http://www.physics.okayama-u.ac.jp/kotai/index_j.html
大阪府立大学工学研究科	46 kJ (3 kV)	18	S・あり	M, R, 3He	野口悟, noguchi@pe.osakafu-u.ac.jp
神戸大学理学部	100 kJ (3 kV)	17	S・なし	E, C	太田仁, http://extreme.phys.sci.kobe-u.ac.jp/
富山県立大学工学部	70 kJ (5 kV)	14	I・あり	M	福原忠, fukuhara@pu-toyama.ac.jp
広島大学先端物質 科学研究科				R	根岸寛, http://home.hiroshima-u.ac.jp/hnegishi/
福井大学遠赤外領域 開発研究センター	30 kJ (5 kV)	13	I・なし	E, M, R	光藤誠太郎, mitsudo@maxwell.apphy.fukui-u.ac.jp

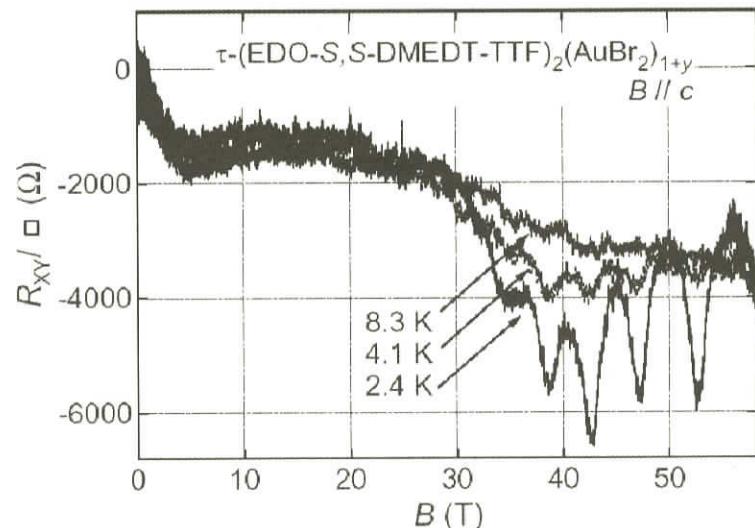
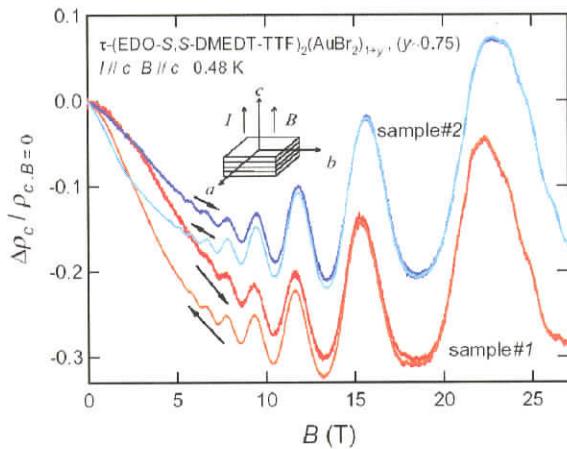
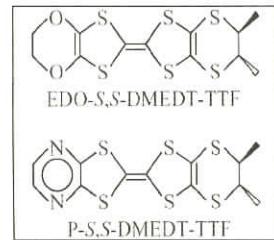
強磁場で展開した有機導体の新物性

大阪市立大学 理学研究科 村田 恵三

τ 型の有機伝導体は右図にあるようなドナーと AuBr_2 や I_3 などの線形アニオンからなる2次元有機導体である。2種のドナーを区別するため、我々は(OO)、(NN)と略称している。 $(\text{OO})_2(\text{AuBr}_2)_{1+y}$ や $(\text{NN})_2(\text{AuBr}_2)_{1+y}$ ($y=0.75 \sim 0.875$) の異方性は2次元面内と垂直方向の ρ の比にして、 $10^4 \sim 10^5$ である。これらの物質の電気抵抗の温度依存性は、室温から30Kまでは金属的、それ以下は抵抗が上昇し、He温度では室温と匹敵またはそれ以上の抵抗値を示す。この低温域では負の磁気抵抗、温度、磁場、磁場方向掃引による抵抗の強いヒステリシスがみられ、また、(NN)塩は12K以下反強磁性になるが、(OO)塩は揺らぎに留まっている。これらから磁性と伝導が密接に関連している系だと思われる。

低温の抵抗が高いにも係わらず、両塩とも Shubnikov de Haas 信号が観測された。右図が(OO)塩で我々が東北大金研で観測したものである¹。最後の振動はFermi面以下Landau準位を2個残すだけの量子極限に近い振動であることが分かり、Los Alamosのpulse強磁場で60TeslaまでのHall効果測定を試みた。右図で4.1 Kの測定が平坦なHall効果を示し、量子Hall効果なのか精査している。さらに低温にするともう一つの成分の振動が巨大になり、量子極限との共存の問題を考えなければならない。一方、(NN)塩では35Tesla以上で完全な絶縁体になり、両塩の僅かな違いが30Teslaを超える磁場では対照的に異なる新物性を示すことは、今後の強磁場物性を占う意味でも興味深い。

1) T. Konoike, K. Murata, H. Yoshino, T. Sasaki, Pavassiliou, Phys. Rev., to be published.



自由電子レーザーの現状と強磁場下での実験

東京大学大学院理学系研究科 太田 俊明

従来のレーザーが、原子、分子、固体に束縛された電子の状態間遷移を利用しているため、物質固有の限られた波長に制限されるのに対して、自由電子レーザーは利得物質が自由な電子であるために、レーザーの波長を自由に変えることができるという大きなメリットを持っている。

この自由電子レーザーは放射光科学の進展と共に急速に発展した光源である。基本的な原理は、電子を永久磁石の列（undulator）で繰り返し蛇行させて発生する擬干渉性放射光を種光とし、これを共振させてレーザー化するものである。

加速器研究者の多くがX線領域の自由電子レーザーの開発に関心あり、現在、Stanford, Hamburg の 2 力所で国家的プロジェクトとしてwater window 領域のXFELの開発が行われている。これに対して、赤外領域のFELは比較的に容易であり、しかも、小型、かつ、低コストで建設できることから、世界の数カ所 (Stanford, Vanderbilt, Jefferson Lab, FELIX (オランダ)、CLIO (フランス)、etc.)、我が国でも、大阪大学自由電子レーザー研究所、原子力研究所、東京理科大学野田キャンパス、最近では日本大学船橋キャンパスでも建設されている。

赤外自由電子レーザーの大きな特徴は、波長が可変、パルス光、強度が黒体放射より 4 – 5 行大きいこと、が挙げられる。ちなみに、東京理科大赤外自由電子レーザーセンターでは中赤外FELが建設されて、利用に供されている。これは、波長領域 $600 - 2000\text{cm}^{-1}$, 幅 $2\mu\text{s}$, 0.3Hz , ピークパワー $2 - 5\text{MW}$ のパルスであり、このパルスは数千のミクロパルス（幅 2ps 、間隔 100ps ）から成っている。更に、今年12月を目処にして遠赤外FEL[波長領域 $30 - 100\text{cm}^{-1}$]の立ち上げを行っている。

このような赤外FELの利用は、

- (1) 赤外時間分解分光(pump - probe)、
- (2) 分子の多光子解離、イオン化、反応の研究、
- (3) 同位体分離、
- (4) 赤外近接場顕微鏡、
- (5) 物質の創製(carbon nanotube等)、
- (6) 癌治療、医学利用（レーザーメス）などが挙げられる。

物性物理の立場からは、むしろ遠赤外FELの方が興味深い。特に強磁場の利用という観点からは、遠赤外FELと組み合わせたサイクロトロン共鳴が有効である。特に、半導体量子井戸において、可視光励起によって生じたキャリアの有効質量の測定やその緩和過程の研究が米国 Stanford, UCSB で精力的に行われている*）。遠赤外領域のFELは世界でも限られているが、多くの未開拓の分野を含んでおり、まだ、具体的な応用例はないが、遠赤外でのESRも系を選べば面白い展開が期待できるであろう。

*) J.Kono, Jpn. J. Appl. Phys. 41(2002) Suppl. 41 - 1, 76 - 87

強磁場磁化過程における磁化の量子化

青山学院大学理工学部 戸塚 圭介

従来（下部）臨界磁場より上側では、反強磁性体の磁気モーメントは磁場とともに滑らかに単調増加するものと考えられてきた¹。しかし、近年の強磁場発生技術や低次元磁性体の理論的理解の進歩により、多くの実例とともに、上のような理解が必ずしも正しくないことがわかつてきた。特に、有理数の磁化の所で磁化過程に平坦部が現れる「磁化プラトー」の現象は、考えている系の詳細にあまりよらない普遍的な性質も有しており、金属・絶縁体転移との類似性などといった理論的興味からも関心を集めている。この講演では、磁化プラトーの現段階での理論的理解について概説したい。

磁化プラトーの理論的な理解の仕方には大きく分けて4つの方法がある：

1. 1次元の弱結合現象論（『非古典的ソフトモード』、『格子の離散性』）
2. トポロジカルな性質に基づく議論
3. 強結合展開の方法（『特徴的なクラスター構造』）
4. 数値計算の方法

ここでは、(i) 次元によらない一般性があり、(ii) 磁気系の持つ（隠れた）粒子性を比較的理 解しやすいと考えられる3番目の『強結合展開の方法』について説明しよう。なお、1. や2. の方法について知りたい方は、日本語で書かれた解説（文献1）を参照されたい。強結合展開の方法では、まず考えている系の特徴的なクラスター構造に着目する。たとえば、梯子状の系や $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ 格子ならダイマー・ボンド、1/5-depleted 正方格子ならば、4つのスピンから成るプラケット構造、といった具合である。次にこのクラスター構造の中に、ダイマー・トリプレットのように『実効的な粒子』の役割を果たす自由度を見出す。このアプローチで最も大事なステップは、クラスター同士をつなぐ（生の）相互作用から、上で決定した実効的な粒子の間に働く『実効的な相互作用』を取り出すところにある。こうして取り出された粒子間相互作用は、一般的にいって元の（生の）相互作用とは大きく異なることもある。たとえば、 $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ 格子の系では、さまざまなタイプの長距離相互作用が存在する。詳しくは、解説（文献2）を参照されたい。強結合展開の方法では、磁化プラトーとは、「粒子の運動エネルギー」と「（実効的）斥力相互作用」の競合の結果、斥力が勝って、粒子が『結晶化』した状態と考えられる。どの磁化で、どのような結晶状態が実現するかは、(i) 磁化の値（電子系のフィーリングに対応する）、(ii) 実効的斥力相互作用の種類、(iii) 格子の形状、によって決まると考えて良い。大雑把にいって、格子と整合になるように粒子をばらまいた時に、斥力相互作用も最適化することができれば、そこでプラトーができる、ということになる。つまり、『実効的な粒子』と『格子との整合性』が強結合展開の方法における重要なキーワードとなる。なお、この『整合性』は先に触れたトポロジカルな性質に基づく議論でも重要な役割を果たす。

今後の展開としては、格子自由度と磁気自由度との結合によって新しい磁化プラトーが生じる可能性があるか、といった問題や、不純物などによって意図的に整合性を壊して乱れを導入するとどうなるか、といった問題があろう。

文献) 押川正毅、戸塚圭介、山中雅則、日本物理学会誌1999年10月号p.814 - 819.

陰山洋、宮原慎、日本物理学会誌2000年10月号p.786 - 790.

¹もちろん、強い異方性を持つイジング磁性体などでは、ステップ状の磁化過程が出現することは知られていたが。

物性研超強磁場の現状

東京大学物性研究所 長田 俊人

物性研超強磁場実験室は1999年4月に柏キャンパスに移転し、主要なパルス強磁場用電源設備（コンデンサーバンク）を全面的に更新することができた。現在は、新施設の整備が完了し、物性研究が開始された状況にある。

物性研超強磁場は、電磁濃縮法・一巻きコイル法といった世界的にも極めてユニークな100～600T級パルス超強磁場発生装置を保有しており、世界の強磁場物性研究コミュニティの中で、特に100T以上の超強磁場における極限物性の開拓を一身に担う使命があると自負している。従って今後は、従来の超強磁場発生技術の開発研究から、超強磁場を用いた極限物性の探索研究へと重点を移し、重要性の高い研究テーマに焦点を絞って取り組んでいく予定である。測定手法も研究テーマに合わせて、従来の光学的手法だけでなく、低温下での電気的・磁気的測定に対応させていく必要がある。講演ではこれに関連する以下の技術開発項目について現状を紹介した。

- ① 電磁濃縮法における Feedgap Compensator を用いた超強磁場発生技術
- ② 縦型一巻きコイル装置における低温装置の開発
- ③ 高周波バイアスを用いた電気伝導測定技術
- ④ 高周波透過法による電子輸送測定技術

多層ソレノイドコイルを用いた非破壊型の長時間パルス強磁場については、現在、強磁場パルスとしてはパルス幅10msでピーク値50T程度、大口径(30mm ϕ) の長時間パルスとしてはパルス幅140ms、ピーク値40T弱が実用となっている。このクラスの強磁場は共同利用が多く、またコミュニティ内で競合も多いため、磁場開発自体よりも計測手法の開拓と精密化あるいは簡便化を行うことで特長を持たせていきたいと考えている。講演では現在重点を置いているマイクロ計測技術の関連トピックスについて現状を紹介した。

- ① 小型ピエゾ素子を用いた精密角度回転技術
- ② AFM用カンチレバーを用いた精密磁気トルク測定技術
- ③ ストレインゲージを用いた精密磁歪測定技術

東北大学の強磁場マグネット現状

東北大学金属材料研究所 渡辺 和雄

東北大学金属材料研究所附属強磁場超伝導材料研究センターで建設が進められてきた無冷媒23Tハイブリッドマグネットは、図1のように金研強磁場センターに設置されて性能試験が行われている。外側の無冷媒大口径超伝導マグネットは360mmの室温ボア中心に6.0Tを発生させ、内側の大電力水冷マグネットと組み合わせて52mmの室温ボアに21.5Tの定常強磁場を発生できるところまで確認できた。21.5Tの励磁試験における温度上昇を解析したのち、無冷媒超伝導マグネットはさらに1.5Tのかさ上げにより7.5Tのバックアップ磁場として23Tの定格磁場発生の試験を行う予定である。

世界初の無冷媒ハイブリッドマグネットを用いて、磁気浮上実験が簡便に実施できるようになった。図2のようなYAGレーザー炉を無冷媒ハイブリッドマグネットに組み合わせて、無容器溶解の実験を開始している。反磁性物質の磁気浮上力と重力とバランスさせることで宇宙での無重力状態を地上で実現できる。無容器溶解での結晶成長は容器からの汚染や容器からの結晶核生成がなく理想的な成長が期待できる。我々は、無容器溶解の利点とともに磁場による配向効果を加味する目的で、パラフィンの磁気浮上による磁場配向微小球を開発している。磁場配向した微結晶作製が可能になるかもしれない。

概算要求が認められて、30Tの無冷媒ハイブリッドマグネットと19Tの無冷媒超伝導マグネットの建設を開始した。前者は金研の主力定常強磁場発生装置である30Tハイブリッドマグネットを無冷媒型の12T超伝導マグネットで置き換えることによって、世界的にユニークな液体ヘリウムを一切必要としない30Tハイブリッドマグネットとなる予定である。磁気浮上実験に威力を発揮するものと考えられる。後者の19T無冷媒超伝導マグネットは、現在の液体ヘリウム浸漬冷却型超伝導マグネットの4.2Kで18Tを越す超伝導マグネットになる計画である。汎用の超伝導マグネットは通常4.2Kでほとんど使用されていることを考えると、無冷媒で19Tを利用できる超伝導マグネットの価値は非常に高い。

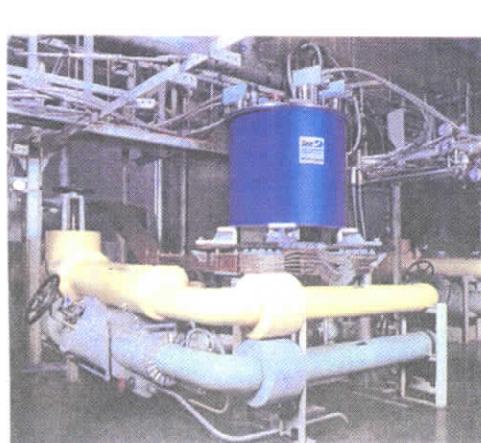


図1 無冷媒ハイブリッドマグネット

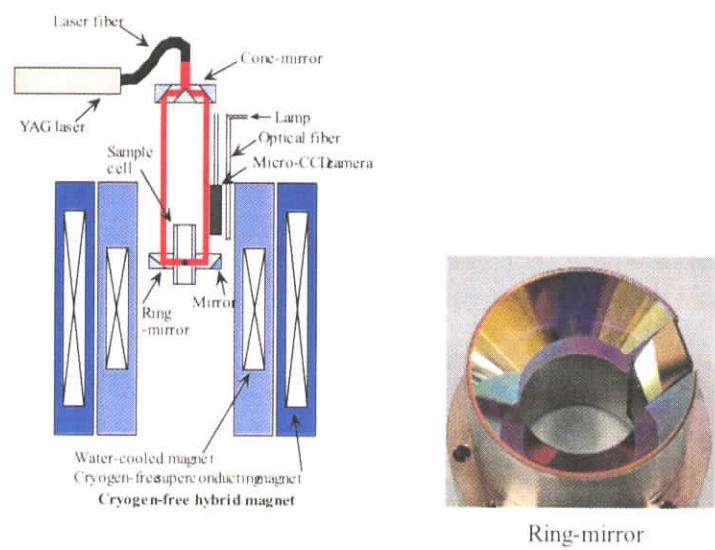
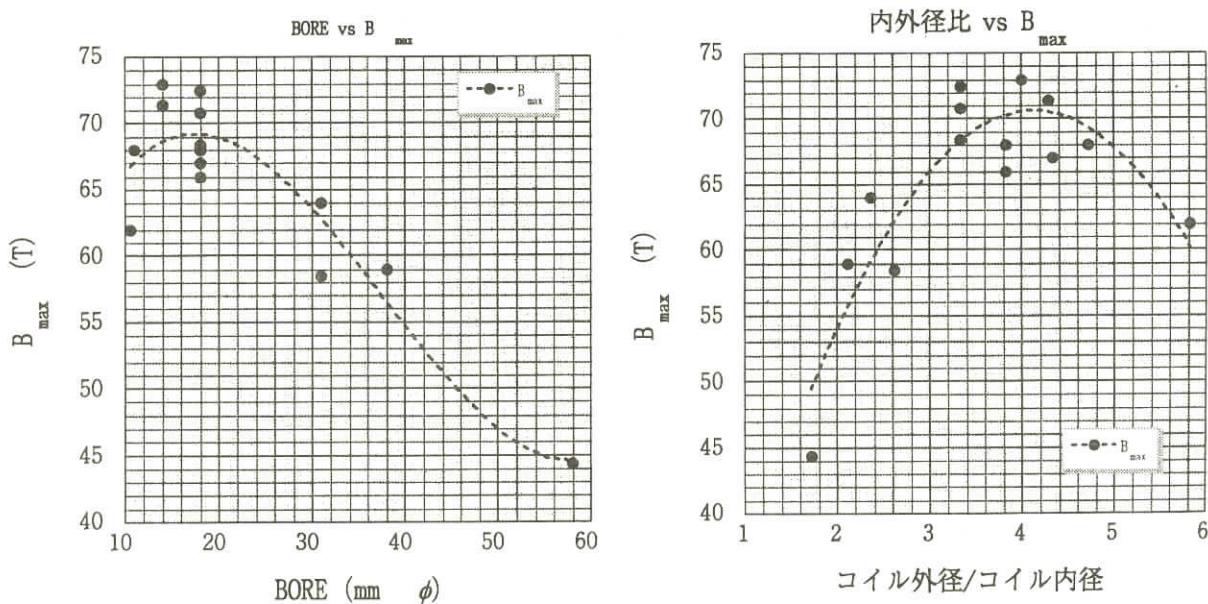


図2 磁気浮上用 YAG レーザー加熱装置

大阪大学の現状

大阪大学極限科学研究センター 金道 浩一

「阪大強磁場」では世界に先駆けて非破壊パルスマグネットによる80Tの磁場発生に成功した。100Tマグネットを目指した開発では、マグネットの多層化により少しだけ発生磁場が上昇するものの内側のコイルの補強が充分には出来ていないことが分かった。現段階で最も実績のある銅銀合金線（引っ張り強度：約900MPa、断面積：2mm×3mm）を用いたマグネットの最適化を行うために発生磁場のボアおよび層数依存性について調べたところ下図のような結果が得られた。まず左下の図に示す通り、発生磁場のボア依存性が得られた。全体の振る舞いとしては、ボアが小さければ発生磁場が上昇する傾向は直感的に理解できる。しかしながら、14~20mmをピークにそれ以下ではむしろ発生磁場が下降する傾向が見られている。この事はコイル線材のサイズによって決まる最適のボアが存在することを意味しており、新しく得られた知見である。また、発生磁場の層数依存性についての結果は右下図のように得られた。ここでは横軸に普遍性を持たせるため、コイルの内外径比を用いた。結果としては、内外径比が3~4辺りに極大を持つ傾向が見られる。この事から、コイルの内径を決定すれば、最適な外径も自動的に決まり、線材のサイズから層数も決定できることになる。この結果を以下のように考えれば、簡単なイメージを得ることが出来るのではないだろうか。つまり、内外径比が大きなコイルは太りすぎのコイルである。コイルの中でも外に近い部分は、応力に対する変位量が大きくて構わないが、内側のコイルは外側によって支えられているのであり、外側のコイルにとって問題の無い変位が内側にとっては致命的となるのである。この結果を基に、現在70Tの測定に用いているマグネットを見直してみると、偶然にも最適条件を充たしていることが分かり、安心して実験を行える根拠が出来た。さらに、100Tを目指すマグネットは、この80Tマグネットをベースとした内コイルと、これをスケール倍した規模の外コイルを並列に組み合わせて別電源で動かし、磁場を重ね合わせることで得られるのではないかとの考えに至っている。ただし、外側のコイルに要する電源規模は約10MJと考えられる。



強磁場フォーラム設立総会報告

10月9日、東京大学物性研究所において、強磁場フォーラム(The High Magnetic Field Forum of Japan)の設立総会が開催された。当フォーラムは、日本の幅広い強磁場研究者、ユーザーの交流と情報発信および将来へ向けた強磁場研究のあり方を議論する場としての強磁場コミュニティー形成の使命を担うべく設立され、幸いにも総会時点で120名を越える会員にご参加いただいている。

総会では、準備会からのこれまでの経過報告を受け、設立趣意書を採択し設立を確認した。また規約案も会の英語表記などに関して若干の字句修正後に承認された。その後、以下の幹事を選出した。
代表幹事 小林典男（東北大）、以下幹事 木戸義勇（物質材料研究機構）、後藤恒昭（物性研）、嶽山正二郎（千葉大）、金道浩一（大阪大）、村田恵三（大阪市大）、野尻浩之（岡山大）、網代芳民（九州大）。なお幹事会のもとで実務を行う事務局は、庶務担当幹事野尻浩之、小山佳一（東北大）、高増正（物質材料研究機構）、長田俊人（物性研）4名が幹事会より依嘱された。また将来計画は嶽山正二郎幹事が担当となり、強磁場に関するご意見ご要望等を広く寄せていただくよう依頼があった。

総会の最後には物性研の福山所長からのメッセージと、石本所員からのお祝いと激励の挨拶が寄せられた。石本所員からは日本の強磁場の総意を結集した強磁場に関する将来計画の策定のためにフォーラムが中心となって欲しいという期待が述べられた。

また嶽山正二郎幹事からは、強磁場をテーマに来年度基盤研究科研費企画調査を申請するので、ぜひ多くの方に加わって頂きたい旨要請がなされた。

フォーラムの活動としては研究会の開催や将来計画の議論を行うと共に、強磁場ユーザーにとって情報結節点の役割を担うことも重視している。具体的には、ホームページとメーリングリストにより各種研究会、国際会議の情報提供、施設の共同利用の案内、人事公募、ポスドク情報などを提供していく予定である。また技術指導や若手向けのスクールなども開催するので、大学院生の方も含めて多くの参加が期待されている。会登録の情報やフォーラムの詳細などに関しては、ホームページ
<http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/labs/extreme/himag-forum/> を参照されたい。

物性研究所短期研究会

物性研究における計算物理

日時 平成14年11月6日(水) 13:00~11月8日(金)

会場 東京大学柏キャンパス物性研究所本館6階講義室

世話人	寺倉 清之 (産総研)
	宮下 精二 (東大工)
	岡部 豊 (都立大理)
	川勝 年洋 (東北大理)
	上田 和夫 (物性研)
	今田 正俊 (物性研)
	高山 一 (物性研)

全国共同利用物性研スーパーコンピュータは Hitachi SR8000/60 と SGI Origin 2800/384 となるシステムに更新されて、5年レンタルの半分が経過した。システムの総 CPU 時間のほぼ50%が上位十数名のヘビーユーザで占められていること、ベクトル並列機 SR8000 とスカラー並列機 SGI2800 が計算のタイプによって使い分けられていることなど、ユーザの利用状況はほぼ定着したと言える。この機に、本システムによって得られた成果を中心にして、物性研究における計算物理の現状を総括し、今後の展望を探ることを主な目的として本研究会を開催した。特に、新しい計算手法と大規模計算とを合わせて初めて解析可能となるような種々の課題に関して議論を深めた。時間依存密度汎関数分子動力学法、強相関系や遷移金属表面への分子吸着に関する第一原理電子状態計算、経路積分繰り込み群法、非平衡緩和法、確率変動クラスターアルゴリズム、タンパク質の折り畳みや RNA 触媒反応に関する計算物理、等々であり、活発な討論がなされた。

昨今の計算機技術の進歩は目覚しく、個々の研究室の WS や PC、あるいはそれらをクラスタにしたシステムは相当な計算性能をもつに至っている。このような計算機環境における物性研究専用の本スーパーコンピュータシステムの役割について、本研究会ではパネルディスカッションを設け、検討した。そのための資料として、システムの利用状況や要望等について予めアンケートを行った。その結果、上記のヘビーユーザに限らず多くのユーザが、研究室の WS や PC では過大すぎる大規模計算を本システムで実行していることなどが明らかにされた。その詳細は、本報告パネルディスカッションの項を御覧頂きたい。

なお、アンケートの作成から集計までを本研究会の所外世話人の方々に行って頂いた。ここに厚く御礼を申し上げます。

(文責 高山)

プログラム

11月6日

13:00～はじめに；今田（東大物性研）

座長：今田 正俊（東大物性研）

13:10～13:40 杉野 修（N E C 基礎研）

Time Dependent Density Functional Molecular Dynamics Simulations

13:45～14:00 乙部 智仁（筑波大物理）

強光子場中における原子分子の微視的計算

14:00～14:15 粕田 浩義（広大先端物質）

NiO(001)表面の磁性と電子状態

14:15～14:35 白井 光雲（阪大産研）

第一原理計算によるアモルファスシリコンの欠陥制御の研究

14:35～14:55 石井 晃（鳥取大工）

GaN(0001)のホモ／ヘテロエピタキシャル成長の第一原理計算

14:55～15:15 田仲由喜夫（名大工）

磁場下における銅酸化物超伝導体の準粒子干渉効果の理論

15:15～15:30 岸 正人、初貝 安弘（東大工）

Anderson局在に対する電子相関の効果の密度行列繰り込み群による研究

15:30～15:50 休憩

座長：藤堂 貞治（東大工・物工）

15:50～16:10 安田 千寿（物質・材料研）

擬二次元ハイゼンベルク反強磁性体における量子効果

16:10～16:30 飛田 和男（埼玉大理）

密度行列繰り込み群を用いた1次元ランダム量子スピン系の磁化過程の研究

16:30～16:50 原田 健自（京大情報）

Neel and Spin - Peierls ground states of two - dimensional SU(N) quantum antiferromagnets

16:50～17:05 伊藤 良行、中村 統太（東北大工）

d次元量子系のdynamicsを実現する量子モンテカルロ法

17:05～17:35 宮下 精二（東大工）

Dynamics of Quantum Spin Systems

11月7日

座長：福島 孝治（東大総合文化）

9:00～ 9:30 高山 一（東大物性研）

Aging Phenomena in Spin Glasses

9:35～ 9:55 尾関 之康（東工大理）

Mixed Phase Initialization による一次相転移の非平衡緩和解析

- 9:55～10:15 中村 統太（東北大工）
非平衡緩和法によるスピングラス研究
- 10:15～10:30 今川 大輔（阪大理）
異方性のある3次元ハンゼンベルクスピングラスの磁場中相転移
- 10:30～10:45 山本 剛生（東北大工）
3次元XYスピングラスのスピングラス転移とその性質

10:45～11:00 休憩

- 11:00～11:30 F. Aryasetiawan（産総研）
First - Principles Approach for Strongly Correlated Systems
- 11:35～11:50 石井 史之（広大先端物質）
Ce系絶縁体の局在長と熱起電力の第一原理計算
- 11:50～12:10 小林 一昭・新井 正男（物質・材料研）
第一原理計算による異方的圧縮下におけるLiBCの格子異常
- 12:10～13:30 昼休み

座長：寺倉 清之（産総研）

- 13:30～14:00 相沢 秀昭（物質・材料研）
First Principles Study of Co and No Adsorption at Transition Metal Surfaces
- 14:05～14:25 平井 國友（奈良医大物理）
金属人工格子の電子構造とスピンドル密度波
- 14:25～14:40 小山 聖史（鳥取大工）
第一原理分子動力学によるSi(001)-2×3-Ag表面の研究
- 14:40～15:10 渡邊 聰（東大工）
電場印加系に対する第一原理計算－電界電子放出を中心に

15:15～15:35 休憩

座長：平島 大（名大理）

- 15:35～15:55 求 幸年、古川 信夫（科技団ERATO-SSS）
O(N)モンテカルロ法による二重交換系の臨界現象の研究
- 15:55～16:15 古賀 昌久（阪大工）
ハバード模型における軌道縮退の効果
- 16:15～16:30 大橋 琢磨（阪大工）
周期アンダーソンモデルにおける伝導電子間相互作用の効果
- 16:30～16:50 坂井 徹（東北大理）
数値対角化を基礎とする低次元系の量子相転移の研究
- 16:50～17:50 パネルディスカッション
パネラー 宮下、岡部、寺倉、川勝、高山

18:00～懇親会

11月 8 日

座長：杉野 修 (NEC 基礎研)

- 9:30～10:00 安藤 恒也 (東工大理)
ナノチューブにおける輸送現象
- 10:05～10:20 丸山 正憲 (新潟大自然科学)
第一原理電子状態計算による磁気的ナノグラファイトの可能性
- 10:20～10:35 西館 数芽 (岩手大工)
LiMnO₂、カーボンナノチューブ、CdS、アルカリハライド系の電子状態計算
- 10:35～10:55 三宅 隆 (東工大理)
炭素系物質の構造特性と電子状態
- 10:55～11:15 草部 浩一 (新潟大自然科学)
量子ドットを介した超伝導接合系の数値解析
- 11:15～11:35 平島 大 (名大理)
量子粒子の固定 (ゼロ点振動の効果)
- 11:35～12:40 昼休み
座長：高山 一 (東大物性研)
- 12:40～13:10 岡本 祐幸 (分子研)
タンパク質折り畳みの計算物理学
- 13:15～13:45 Mauro Boero (筑波大物理)
Catalytic Role of Metal Ions in the Cleavage of RNA: a Car - Parrinello Molecular Dynamics Pointof View
- 13:50～14:20 富田 裕介、岡部 豊 (都立大理)
確率変動クラスターアルゴリズムとその応用
- 14:25～14:45 藤堂 真治 (東大工)
基底状態ループアルゴリズム
- 14:45～15:05 今田 正俊 (東大物性研)
Path Integral Renormalization Group Method
- 15:05～15:15 高山 一 (東大物性研)
まとめ

Time - dependent density - functional molecular dynamics simulations

NEC 基礎研 杉野 修

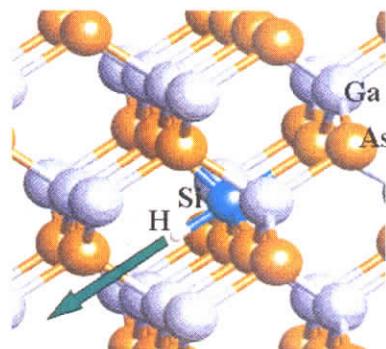
電子およびイオン（原子核）が絡んだ過渡的ダイナミックスが近年注目を浴びており^[1]、これを原子スケールで第一原理的に理解することが重要な課題となっている。この問題を扱うために我々は、イオンを古典的に扱い、電子間相互作用を時間依存密度汎関数理論（Time - Dependent Density Functional Theory; TDDFT）に基づき取り扱う TDDFT - MD 法を開発してきた^[2]。本報告書では、この計算法といくつかの計算結果について述べる。

TDDFT - MD 法：凝縮系の様な自由度の大きい系では、Landau - Zener 流の断熱ポテンシャル面に基づいたアプローチよりも、電子とイオンの運動を直接解く方が有利である。もちろん電子・イオン系の Schoedinger 方程式をそのまま解くことはできないが、(1) イオンの自由度を古典的に、(2) 電子とイオン間の相互作用を平均場で、(3) 電子間相互作用を TDDFT で、扱うことにより計算が可能な形になる^[3]。

計算例：この方法で光励起後のサブピコ秒に渡るダイナミックスが計算できる。図は GaAs 中の Si - H 欠陥を光励起した後の水素原子の運動を示したもので、励起後 10 - 20 fs 程度の短時間で水素は容易に脱離する^[4]。この他、Si 表面や carbon nanotube も同様にして simulation が可能であり、それぞれ特有の動的振る舞いを示すことがわかった。

現在、TDDFT - MD は非断熱遷移が顕著になった後の扱いに問題があるが、それを克服するための新たな計算法を開発中である。Tight - binding 法を用いたテスト計算では良好な結果を得ている。

1. 例えば、C. Cah, U. Bovensiepen, C. Frischkorn, and M. Wolf; Physical Review Letters, 89, 107402 (2002) を参照されたい。
2. 宮本良之、杉野修；固体物理 35, 947 (2000)。
3. O. Sugino and Y. Miyamoto; Physical Review B 59, 2579 (1999).
4. Y. Miyamoto, O. Sugino, and Y. Mochizuki; Applied Physics Letters, 75, 2915 (1999).



強光子場中における原子分子のトンネルイオン化の微視的計算

筑波大数物 乙部 智仁

強光子場中における原子・分子のトンネルイオン化過程の理論的記述はこれまで様々な形で試みられてきた。特に原子に対しては ADK 理論や KFR 理論が一定の成功を収めており、分子のイオン化過程への応用も試みられている。しかし最近 O₂ 分子のトンネルイオン化率が、ほぼ等しいイオン化ポテンシャルを持つ Xe に比べて大きく抑制される事が観測されたが、これまでの手法では再現出来ていない。我々は密度汎関数法の基礎方程式である Kohn - Sham 方程式を実空間法で解く事により、強光子場中の原子・分子のトンネルイオン化過程の非経験的な記述を試みている。その第一ステッ

として、静電場中のトンネルイオン化率の計算を行った。まず静電場中にある原子・分子の自己無撞着なポテンシャルを計算する。次に原子・分子の外側に吸収ポテンシャルを設置し、ガモフ状態にある各電子軌道の一粒子エネルギーと波動関数を求める。この固有値の虚部からトンネルイオン化率が得られ、波動関数からは電子が流れ出て行く様子を知る事が出来る。今回我々は Xe と O₂ の静電場中のトンネルイオン化率の計算を行った。その結果イオン化ポテンシャルがほぼ等しいにもかかわらず Xe に比べ O₂ のイオン化率が約 1 オーダー小さくなるという実験結果を再現することが出来た。また O₂ 分子に於いて、分子の対称軸と電場方向のなす角度によるイオン化率の変化が非常に大きいことが分かった。また全く違うアプローチとして束縛電子の波動関数がポテンシャル障壁を透過する様子を実時間法を用いて計算した。そしてこの二つの計算法によるイオン化率の計算結果が一致することを確認した。

NiO(001)表面の磁性と電子状態

広大先端物質 杠田 浩義、小口多美夫

交換力顕微鏡など走査プローブ技術によって、表面スピント原子スケールで観測することが可能となりつつある。我々は、反強磁性絶縁体として良く知られている NiO の(001) 表面に対して第一原理電子状態計算を行った。計算は局所スピント密度近似の範囲内で密度汎関数理論に基づいて、Full - Potential Linear Augmented Plane Wave 法を用いた。計算に用いたモデルは、バルク格子定数の計算値 4.084 Å で積層した周期スラブである。

まず、NiO(001) 清浄表面に対する計算を行った。バルク中での O は対称性からスピントモーメントはゼロだが、表面付近の O サイトには表面層で 0.07 μ_B、第二層に 0.05 μ_B のスピントモーメントが誘起されている。これは Ni-d e_g 状態と強く混成した O-p(z) 状態によって生じたもので、表面 O サイトのスピント密度分布には p(z) 的な特徴がよく顕われている。それに対して、Ni サイトのスピントモーメントは表面でも 1.18 μ_B の大きさで、バルクに対する計算値 1.16 μ_B と比較して大きくは変化していない。また、表面でもバンドギャップは維持されているがバルク中での値よりも小さくなっている。これは、表面層では隣接する O イオン数が減少しているために Ni-d(3z²-r²) 状態のエネルギーが低下しているためである。

次に、Fe 原子を磁性体プローブとして NiO(001) 表面上における交換力の計算を行った。表面 Ni サイト上で、Fe プローブの高さを NiO(001) 面間距離の 1.0 倍から 1.5 倍の距離で変化させた場合には、Fe にはたらく交換力は 0.2 nN から 0.5 nN の大きさであり、測定することが可能な大きさである。さらに同様の計算をスピントが誘起された表面 O サイト上で行った場合にも、Fe には 0.1 nN から 0.2 nN の交換力がはたらく結果が得られた。これらの計算結果から、Ni スピントだけでなく表面でスピントが誘起された O サイト付近にも交換力によるスピント像が観測されることが期待される。

Study of Defects in Amorphous Silicon by First - Principles Molecular Dynamics Simulations

阪大産研 白井 光雲

After success of valence control of amorphous silicon (a-Si) by hydrogenation, a problem of the light-induced degradation, the so-called Staebler-Wronski (SW) effect, has been as a major obstacle for commercial use of a-Si. Although numerous studies were accumulated, there was virtually no significant improvement in this problem more than 20 years. Very recently, a remarkable technique to overcome this problem has been proposed by Prof. Kobayashi et al.^[1]. In this method, a-Si is immersed in a cyanide solution, in some cases, with help of electrical biases. This simple treatment yields a surprising effect on suppression of the light-induced degradation. So far, no microscopic theory exists. We have studied theoretically the microscopic mechanism of the effect of the CN treatment by ab-initio molecular dynamical simulations. In our simulations, a CN pair was introduced in the vicinity of a Si dangling bond in a-Si. Initially, a CN pair forms the triple bond, which form is common in molecules. The C site terminates the dangling bond, as a H atom does in a-Si:H. But, in fact, CN incorporation resulted in more than just the termination of dangling bonds. On the course of time, this triple bond was converted to the single bond. In addition, we found another metastable double bond. The characteristics of these bonding forms are summarized in Ref.^[2]. In the single bond case, the N atom has bonds to the nearest neighbour Si atoms, and for this reason, the fraction of four-fold coordinated Si atoms is increased. We think that this increase in the connectivity of tetrahedrally-coordinated random network is responsible to suppression of the SW effect in CN treated a-Si. On the basis of this result, we design the nanoscale structure of a-Si to avoid coordination defects. This was not achieved by introducing single-species dopant, such as H, C, F, etc, alone. Pairing different species is important.

[1] H. Kobayashi, et. al., Solid State Commun. (in press).

[2] Y. Yamazaki, K. Shirai, H. Katayama-Yoshida, submitted to Appl. Phys. Lett.

銅酸化物超伝導体における準粒子干渉効果の理論

名大工 田仲由喜夫
トリエステ理論物理センター 土浦 宏紀
東京大学 小形 正男
産総研 細谷 聰
神奈川大学 田沼 慶忠
名古屋大学大学院工学研究科 伊藤 博介、井上順一郎

(1) 銅酸化物超伝導体の磁束芯の電子状態

銅酸化物超伝導体の磁束芯では準粒子干渉効果に起因するゼロ電圧での共鳴ピークがまったく観測されていない。この理由として(1)コアのサイズが小さいこと(2)反強磁性が磁束芯で形成されること(3)スタガードフラックス状態などが提案されているが銅酸化物超伝導体のバルクの状態を再現できるモデルで計算した例はこれまでになかった。我々はGutzwiller近似を拡張した方法を用いてバルクの反強磁性相を適切に見積もれる計算法を用いて磁束芯の電子状態の計算を行った。この計算では局所的にGutzwiller因子を決めないといけないので膨大な数値計算を必要とする。その結果以下のようないくつかの結論を得た。

- [1] 最適ドープ以下のアンダードープでは磁束芯のまわりに反強磁性相が現れる。
- [2] コアの中の状態密度が大きく減少してゼロ電圧での共鳴ピークが消失するのは反強磁性の出現というよりはコアが小さくなっているためである。実際反強磁性を考慮しない計算を行ってこの事実を確かめた。
- [3] 最適ドープ以下の領域ではスタガードフラックス電流も存在する。

以上の計算結果はこれまであった理論を整理するだけでなく銅酸化物超伝導体の磁束のSTS実験をかなり微視的に説明したもので意義がある。

(2) 銅酸化物超伝導体におけるドップラー効果

銅酸化物超伝導体のトンネル効果においては準粒子の感じる符号変化によってゼロ電圧に共鳴ピークがえられることがしられている。我々はこの問題と関連した問題を長年研究して多くの成果をあげてきたが磁場応答に関してはまだ未解明な部分がかなりある。97年に提案されたFogelstromの理論では磁場を印画するとゼロ電圧のピークは分裂する。この理論では少しの磁場で必ず分裂することになるが実際の実験とはそれではあわない。実験によっては分裂を示さないデータも数多くある。私たちは接合における透過率の重要性とフェルミ速度がきわめて異方的になる効果を適切にとりいれることを行った。特にフェルミ速度の異方性をとりいれるために格子モデルを用いた計算を久保公式を用いて行った。ゼロバイアスピーク分裂が引き起こされるのに必要な有限磁場が存在すること、またはその値はアンダードープ領域 低透過率極限では非常に大きくなることも示された。このような成果は実験で観測されている磁場応答の特徴を定性的に説明する。

- [1] Y.Tanaka *et al*, J. Phys. Soc. Jpn. Vol. 71 271 (2002)
- [2] Y.Tanaka *et al*, J. Phys. Soc. Jpn. Vol. 71 2005 - 2009 (2002)
- [3] H. Tsuchiura *et. al.* Phys. Rev. Lett.

Anderson 局在に対する電子相関の効果の密度行列繰り込み群による研究

東大工 岸 正人、初貝 安弘

ランダムネスと電子相関の共存による効果は非常に興味深い問題であるが、その両方を同時に扱うことは数値的にも困難であるために未だに多くの問題が残されている。今回、我々はランダム系に拡張された密度行列繰り込み群 (DMRG) [1] を用いてランダムネスと電子相関の共存による効果を調べた。ランダム系（非一様な系）に拡張されたDMRGは従来のDMRGよりも計算量は大きくなるが、従来のDMRGと同様に基底状態や低励起状態の情報を精度良く計算できる手法である。この手法を用いることにより、系の電場応答を計算した。電場応答は系が金属か絶縁体かを判定する基本的特性である[2]。

我々が今回扱ったモデルは最近接相互作用 V を持つ1次元の乱れたスピニレスフェルミオン系であり、そのハミルトニアン H_E は、

$$H_E = -t \sum_{i=1}^{L-1} (c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i) + V \sum_{i=1}^{L-1} n_i n_{i+1} + \sum_{i=1}^L \epsilon_i c_i^\dagger c_i - E \sum_{i=1}^L \left(i - \frac{L}{2} \right) n_i \quad (1)$$

と書かれる。ここで、 L は系の長さで、 ϵ_i はランダムポテンシャルをあらわし、 $-W/2$ から $W/2$ までの値をランダムに取る。電場 E の効果は第4項目にポテンシャル項として現れる。また、今回はハーフフィリングの系を考える。

電場に対する応答として電気分極 P と電気感受率 χ はそれぞれ、

$$P = -\frac{1}{L} \frac{\partial E_0}{\partial E} = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \left(i - \frac{L}{2} \right) \langle n_i \rangle_E \quad \chi = \frac{\partial P}{\partial E} \Big|_{E=0} = -\frac{1}{L} \frac{\partial^2 E_0}{\partial E^2} \Big|_{E=0} \quad (2)$$

で定義される。ここで、 $E_0 = \langle H_E \rangle_E$ は基底状態のエネルギーであり。 $\langle n_i \rangle_E$ は i サイトの電荷密度の期待値である。

まず、ランダムネスがない系に電場をかけ分極 P を計算した（図1）。 $V=1.0$ の金属的な時には P は滑らかな曲線となるが、 $V=6.0$ の系がモット絶縁体の領域では P にステップ状の振る舞いが見られた。このステップの前後での各サイトごとの電荷分布を表したのが図2であり、ステップのところでキンク対が発生していることがわかる。つまり、キンクを作るエネルギーよりもキンク間の電子が移動することによるエネルギー利得の方が上まわり、キンクが発生したと考えられる。次に $V=0$ でランダムネスがある場合についても P を計算した。この場合にも P にステップ状の振る舞いが見られた。この時のステップはアンダーソン局在により局在した一粒子状態のエネルギー間の準位交差によって引き起こされていると考えられ、電荷分布を調べることによりその事が確認された。

次に電気感受率 χ に注目する。 χ の系の大きさ L に対する振る舞いは系が金属的か絶縁体かで異なり、 L を増加した時に、系が金属的である時には χ は発散的に振る舞うのに対して、系が絶縁体である時には χ はある値に収束すると期待される。引力的相互作用 ($V < 0$) が働く領域で、有限のランダムネスで金属絶縁体転移が起こることが示唆されており[3-6]、この領域について調べた。 $\ln \chi$ の平均値を計算し、1パラメータスケーリングから局在長を見積もった（図3）。 $V=0$ の時には $W=0$ で局在長が発散しているのに対し、 $V=-1.4$ の金属相が期待される領域では $W \sim 0$ で局在長が発散し、金属絶縁体転移が起こっていることがわかる。

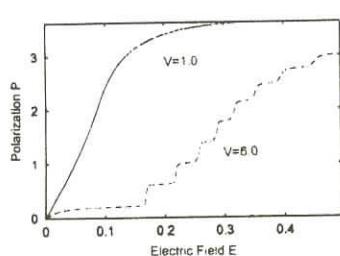


図1: $W=0$ での電場に対する分極の変化。 $V=1.0, 6.0, L=30$

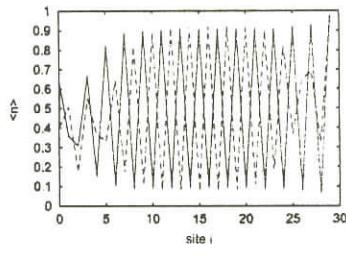


図2: ステップの生じる電場強度を E_c として、 $E=E_c \pm 0$ における各サイトでの電子密度

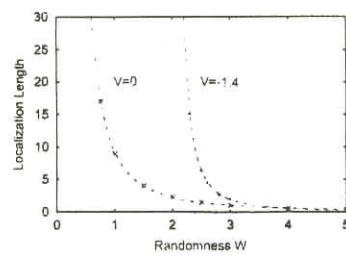


図3: W に対する局在長の変化。 $V=0, -1.4$

- [1] K. Hida, J. Phys. Soc. Jpn **65**, 895 (1996).
- [2] C. Aebischer, D. Baeriswyl and R. M. Noack, Phys. Rev. Lett. **86**, 468 (2001).
- [3] T. Chui and J. W. Bray, Phys. Rev B **16**, 1329 (1977).
- [4] Y. Suzumura and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. **52**, 2870 (1983).
- [5] T. Giamarchi and H. J. Schulz, Phys. Rev. B **37**, 325 (1988).
- [6] P. Schmitteckert *et al.*, Phys. Rev. Lett. **80**, 560 (1998).

擬二次元ハイゼンベルグ反強磁性体における量子効果

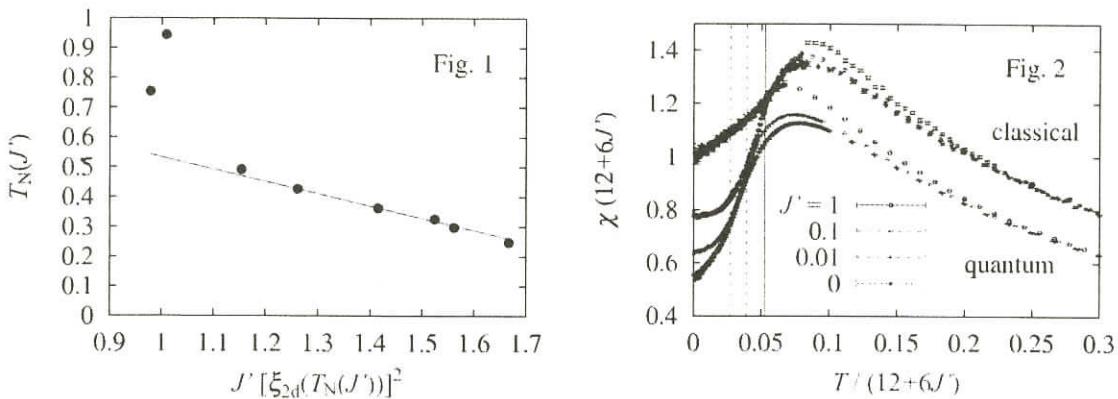
物質・材料研	安田 千寿
東大工	藤堂 真治
東大総合文化	福島 孝治
ETH zürich	Fabien Alet
東大物性研	高山 一

$S=1/2$ の二次元量子反強磁性ハイゼンベルグ模型 (AFH) で表される系は絶対零度でネール状態にあるが、有限温度では長距離秩序を持たない。一方、面間相互作用をもつ三次元系では、系はあるネール温度 T_N 以下でネール状態にある。それでは、面間相互作用の強さ J' を小さくしていった時、極めて弱い面間相互作用をもつ擬二次元系ではどのように二次元系に近づいていくのだろうか？本研究では、連続虚時間ループアルゴリズムの量子モンテカルロ法を使った三次元 AFH の大規模数値シミュレーションを行うことにより、 T_N の J' 依存性や T_N 以下における量子揺らぎの役割を詳細に調べた。また、古典系におけるクラスターアルゴリズムのモンテカルロ計算を行うことにより、直接、古典系と量子系の比較を行った。本研究は、典型的な擬二次元 AFH 磁性体 $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ 等の実験結果の詳細な検討にもつながる。

二次元系においてサイズ $L^2=512^2$ まで、三次元系において $L^3=96^3$ までの計算を行い、 T_N は相関長の有限サイズスケーリング解析より評価した。ここで、相関長の臨界指数は三次元古典ハイゼンベルグ系の値 $\nu=0.71$ に固定している。Fig.1 に T_N と J' 、二次元系の相関長 $\xi_{2d}(T)$ の関係を示す。実験データの解析等に経験的に使われている関係式 $T_N \propto J'[\xi_{2d}(T_N)]^2$ が J' の小さい ($J'[\xi_{2d}(T_N)]^2$ の大きい) 領域で成立していないことが分かる。これは、 $\xi_{2d}(T) = C(T)\exp(a/2T)$ の指數部が J' と

打ち消しあい、 $C(T)$ が T_N の値を決めているためである。ここでは、Fig.1から J' の小さな領域で $C(T) \approx C(0)(1 - cT)$ であることが分かる。 T_N の評価には、さらに、面間の短距離相関が重要と考えている。

一様帯磁率 $\chi(T)$ は T_N （Fig.2の縦線）以下の温度で量子系特有のふるまいを示すことが分かる。トポジカルな効果を消すために $12 + 6J'$ で規格化した $\chi(T)$ をFig.2に示す。 $T < T_N$ において古典系の $\chi(T)$ は J' に依存しないのに対し、量子系においては J' とともに増加する。系の古典的要素が大きくなると帯磁率は大きくなるが、Fig.2は、量子系における χ の増加がスタッガード磁化 m_s の増加（古典系において m_s は J' の値に依らない）と対応していることを示唆している。 $\chi(T)$ と $m_s(T)$ の定量的関係を明らかにすることが今後の課題である。



密度行列繰り込み群を用いた1次元ランダム量子スピン系の磁化過程の研究

埼玉大理 飛田 和男

1. はじめに

一般に、DMRGでは小規模な計算で大きな物理系の低エネルギー状態を精度よく求められるが、ランダム1次元量子スピン系の磁化過程の計算では(1)多数回のLanczos対角化、(2)サンプル平均、(3)すべての磁化の値についての計算を含むことから、規模が大きくなり物性研システムの利用が有効である。以下に最近の計算例を示す。

2. 計算の具体例

- (1) 強いボンドにランダムな符号変化のある $S=1/2$ 交替ボンドハイゼンベルグ鎖のランダムネス誘起プラトー（図1）

強い反強磁性ボンドの濃度 p によって飽和磁化の $1-p$ 倍の磁化でプラトーを生じる。この現象は $(\text{CH}_3)_2\text{CHNH}_3\text{Cu}(\text{Cl}_x\text{Br}_{1-x})_3$ (Manaka *et al.*) 等で期待されるがまだ実験的観測にはかかっていない。

- (2) フラストレートしたランダム $S=1/2$ 交替ボンドハイゼンベルグ鎖におけるプラトーの消失（図2）

フラストレートした $S=1/2$ 交替ボンドハイゼンベルグ鎖は飽和磁化の半分で自発的並進対称性

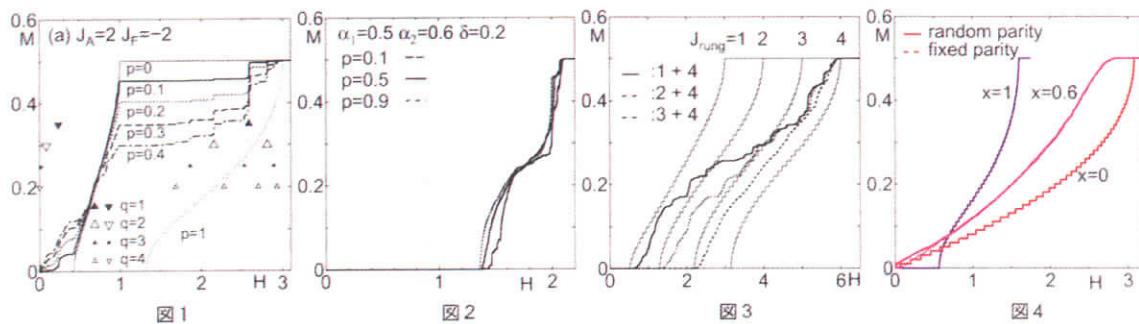
の破れを伴うプラトーを生じる (Tonegawa *et al.*) が、わずかにボンド交替の値の異なる 2 つの系を混ぜるとプラトーは消失する。このことは、この型のプラトーがランダムネスに対して不安定であること (Totuka) を示している。

(3) ランダム桁 $S=1/2$ ハイゼンベルグ梯子のランダムネス誘起プラトー (図 3)

2 種の桁の相互作用の差が大きいとプラトーが生じる。候補物質としては $\text{Cu}_2(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2(\text{Cl}_{1-x}\text{Br}_x)_4$ (Deguchi *et al.*) があるが明確なプラトーは観測されていない。

(4) $S=1/2$ 一様ハイゼンベルグ鎖とボンド交替の混合鎖 (図 4)

交替鎖部分のボンド交替が系全体で一貫している (fixed parity) と基底状態は量子グリフィス相になるが、一様部分が入るとランダムに交替パターンが変わる (random parity) とすると random singlet 相になり、この違いが低磁場磁化過程に反映する。 $\text{Cu}(\gamma\text{-pic})_2\text{Cl}_{2x}\text{Br}_{2(1-x)}$ (Ajiro *et al.*) での実験は random parity 思われる



3. まとめ

ランダム量子スピン系の磁化過程には非常に多彩な現象があり、DMRGを用いた数値計算によってその一端を示した。今後、実験的研究も含めた進展が期待される。

Neel and Spin - Peierls states of two dimensional SU(N) quantum antiferromagnets

京大情報 原田 健自
都立大理 川島 直輝
E T H Matthias Troyer

低次元量子系で RVB スピン液体を基底状態に持つモデルに関して強い興味が持たれ古くからさまざまな研究が行われてきた。RVB スピン液体は量子的な揺らぎによってつくられると考えられている。しかし、二次元正方格子上の $S=1/2$ 反強磁性ハイゼンベルグモデルにおいても量子性がネール磁気秩序を弱めるが絶対零度において長距離秩序が残ることがわかっている。したがって、RVB スピン液体状態をもつためにはさらに強い量子性が必要であると思われている。

そのようなモデルとして、フラストレーションをもつ格子上の量子スピンモデルも考えられるが、強い負符号問題があり、量子モンテカルロ法を用いた大きな系での数値的な検証は非常に難しい。今のところ、カゴメ格子上のモデルが RVB スpin液体状態ではないかということが示唆されているが

はっきりとしない。

これに対して、別の候補として対称性を高めた $SU(N)$ 量子反強磁性モデルがある。このモデルは次式のハミルトニアンで定義される。

$$H = \sum_{\langle rr' \rangle} H_{rr'} = \frac{J}{N} \sum_{\langle rr' \rangle} J_\beta^\alpha(r) J_\alpha^\beta(r') \quad (1)$$

ここで、 $\langle rr' \rangle$ は二次元正方格子上の隣接ペアを表す。また $J_\beta^\alpha(r)$ は $SU(N)$ 代数の生成子である。ただし、生成子の表現として、一方の副格子で基本表現をとり、残りの副格子でその共役な表現をとる事とする。この場合、モデルは、反強磁性ハイゼンベルグモデルを一般化したものとなっており、 $N \rightarrow \infty$ では強い量子性のため、2次元ではネール磁気秩序が壊れて、スピンドルス基底状態をとることが予想されている^[1]。

最近、Santoroら^[2]は $N=4$ の場合について、グリーン関数モンテカルロ法などを用いて基底状態を調べ、RVB スピン液体状態をもつだろうという結果を示した。しかし、彼らの実験は系の一辺の大きさ L が12までと小さく十分ではない。そこで我々は高い対称性をもつモデルに対して効率のよいループクラスターアルゴリズムを用いた大規模量子モンテカルロシミュレーションをおこなった。

$SU(N)$ 量子反強磁性モデルはスピンが $S=(N-1)/2$ の大きさをもつモデルとして表現される。我々は主に十分低温での静的構造因子 $S_{(\pi, \pi)}$ やダイマー静的構造因子 $S_{(\pi, 0)}^D$ を測り基底状態の長距離秩序を調べた。それぞれ L^2 で割った量は長距離秩序がある場合は $L \rightarrow \infty$ において有限値に収束する。我々の実験結果（詳細は^[3]）は、 $N \leq 4$ ではネール基底状態が、また、 $N \geq 5$ ではスピンドルス基底状態が実現されていることを示している。この結果は Readらの予想と一致しており、RVB スpin液体状態のような中間相が存在しないことを示している。

[1] N. Read and S. Sachdev, Phys. Rev. B **42**, 4568 (1990).

[2] G. Santoro *et al.*, Phys. Rev. Lett. **83**, 3065 (1999).

[3] K. Harada, N. Kawashima and M. Troyer, e - print (cond - mat/0210080).

d 次元量子系のダイナミクスを実現する量子モンテカルロ法

東北大工 伊藤 良行、中村 統太

臨界現象の問題を解決する効率的な手段である非平衡緩和法を量子系に応用する場合、従来の world - line 型ローカルフリップの量子モンテカルロ法はダイナミクスがトロッター数 m に依存するためあまり効率的ではなくなる。また、近年発展してきたクラスターアルゴリズムは $m=\infty$ の極限を先にとれる等のメリットはあるのだが、ダイナミックスケーリングが成り立たず、非平衡緩和法が使えない。そこでダイナミックスケーリングが成り立ち、かつ $m=\infty$ の極限が先にとれる新たな量子モンテカルロ法を提案する。

実空間方向の単位長さに対応した単位時間を持つダイナミクスを実現するために実空間方向の状態更新を局所的にする。一方、トロッター方向の状態更新を Swendsen - Wang 型のクラスターフリップで行う。この方法ではトロッター方向に伸びるクラスターが m に比例するため、クラスターのフ

リップ確率は m に依存しなくなる。さらにトロッター方向のスピン鎖を数直線とみなし、クラスターの切れ目をポアソン分布に従ってランダムに発生させて状態を更新することにより $m=\infty$ アルゴリズムが可能となる。

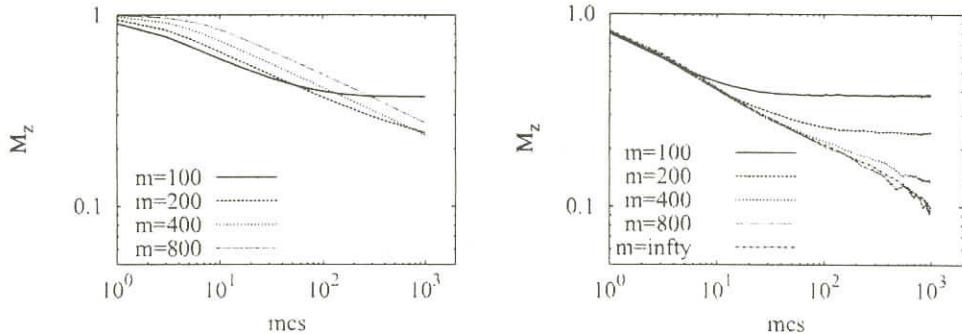


図1：2次元横磁場イジングモデルの転移点近傍（横磁場 $\Gamma \sim 3.04$ ）における磁化の緩和。温度 $T=0.1$, サイズ 99×100 。

この方法と従来法を2次元横磁場イジングモデルで比較したのが図1で、従来法は m に依存した初期緩和が見られるが、新しい方法では m 依存性は有限サイズ効果としてのみ現れる。また、計算時間にほとんど差はなく、平衡系のシミュレーションにおいても従来法より効率的な計算ができる。

この方法を用いて1次元横磁場イジングモデルを解析すると臨界指数 β/ν 、 γ/ν と及び z は

$$\beta/\nu \sim 0.125, \gamma/\nu \sim 0.175, z \sim 2.16$$

となり2次元古典イジングモデルとほぼ一致した。

この方法により量子ランダム系などのより複雑な系の効率的な解析が期待される。

Dynamics in Quantum Spin Systems

東大・工 宮下 精二

最近、分子磁性体における離散エネルギー準位を反映した量子ダイナミックスに興味が持たれてきている。これまで、離散準位が交差する点での量子力学的混合状態によるトンネル効果が共鳴トンネル効果として Mn_{12} や Fe_8 の結晶で詳しく調べられてきている。また、最近実質的に $S=1/2$ の分子磁性をもつ V_{15} においてほぼ完全な断熱磁化過程が観測され、熱の流入の大きさによりどのように等温磁化過程から断熱磁化過程に移行するのかが観測されている。^[1] そこでは極低温では格子の熱容量が小さいために、等温過程が実現しきれないという phonon - bottle - neck 機構が考えられ現象をうまく説明している。我々は、そこで現れる磁化の中間的プラトーが、ほぼ断熱的で少しの熱流入がある場合に一般的な機構であることを示し、磁気的フェーン現象と呼ぶことにした。^[2] その現象は基底状態がシングレットである鉄のリング Fe_{10} や Fe_{12} などでも発見されている。^[3]

V_{15} のような半奇数のスピンを持つ系では、時間反転対称性から基底状態が偶数次の縮退を持たなくてはならず、そこでトンネル機構が議論を集めていたが、格子の幾何学的フラストレーションの

ため基底状態が非自明な縮退を持つ場合に、トンネル機構あるいは断熱的な磁化反転が可能であることがわかった。^[3] この機構ではほぼ縮退した2つの反発準位交差が $S=1/2$ の範囲で存在し、それらそれぞれにおいて断熱的な磁化反転が起こるのであるが、この非自明な縮退のために生じる興味深い現象として $M=1/2$ から $3/2$ への変化の際に、二重に縮退した準位のうち一つだけが $3/2$ へ変わり、もう一つは $1/2$ に留まることがわかる。その結果、純粋な量子力学な過程では磁化は $3/2$ ではなく $1=(1/2+3/2)$ に移ることが期待される。実際には熱流入のためパルス磁化に対して $M=1$ 付近での磁化を中心にして磁気ループが観測されると予想される。^[4]

このような予想を計算機上で実行するためには ω を単位にした計算では、 10^{12} のオーダーの計算が必要となり、実際に方程式を逐次解いていくのは困難である。また、時間的に変化する外場であるのでチェビシェフ多項式の方法も適用が難しい。そこで、磁場の変化の時間スケールとスピニの才差時間の時間スケールが大きくちがうことを利用して、一定の外場のもとでの時間発展演算子を逐次つないでいく方法を緩和がある場合の量子マスター方程式の場合にも適用し、シミュレーションを可能にした。^[5] また、これまでの計算は主に、実効的3スピン模型で行ってきたが全15スピンの系での計算も進めている。^[6]

- [1] I. Chiorescu, W. Wernsdorfer, A. Müller, H. Bögge, and B. Barbara, Phys. Rev. Lett. 84 (2000) 3454. I. Chiorescu, W. Wernsdorfer, A. Müller, S. Miyashita, and B. Barbara, unpublished.
- [2] K. Saito and S. Miyashita: J. Phys. Soc. Jpn. 70 (2001) 3385.
- [3] S. Miyashita and N. Nagaosa: Prog. Theor. Phys. 106 (2001) 533.
- [4] H. Nojiri, private communication.
- [5] I. Rudra, K. Saito, S. Ramasesha and S. Miyashita, in preparation.
- [6] I. Rudra, S. Ramasesha and D. Sen: J. Phys. Condens. Matter (2001) 11717. N. P. Konstantinidis and D. Coffey: cond-mat/0204435.

スピングラスにおけるエイジング現象—シミュレーションと実験

東大物性研 高山 一

今年度の物性研短期研究会「フラストレート系の磁性」、「ガラス転移」に続いて、ほぼ同じタイトルでの三つ目の報告になる本研究会では、スピングラスにおけるエイジング現象に関して、シミュレーションと実験の側面を強調し報告を行った。

エイジング現象とは、スピングラス(SG)の低温 SG 相におけるきわめて遅い平衡化過程であり、実験室時間、 $t_{\text{exp}} \approx 10^1 \sim 10^6$ s、で等温過程、温度シフト過程、温度サイクリング過程など種々のエイジング過程が調べられている。スピングリップ素過程の時間を $t_0 = 10^{-12}$ s として、実験は $t_{\text{exp}}/t_0 \approx 10^{13} \sim 10^{18}$ の時間窓で測定を行っていることになる。一方、我々が行っている三次元 EA イジング模型に対するモンテカルロ(MC)シミュレーションでは、 $t_0 = 1 \text{ MCS}$ として、高々 $t_{\text{sim}}/t_0 \approx 10^0 \sim 10^5$ の時間窓を調べていることになる。両者の時間窓の幅はほぼ同じだが、時間軸 t/t_0 上の位置は 10 衡以上離れている。それにもかかわらず定性的な比較に限れば、シミュレーションは実験で観測されるエイジング現象の多くを再現する。

さらに、ゼロ磁場冷却磁化に関する以下の解析は^[1]、シミュレーションと実験の一致が‘(半)定量的’であることを示している。SG転移温度 T_c 以下のある温度 T までゼロ磁場下で急冷し、そこで磁場をかけ、以後一定の割合で温度を上げながら、あるいは、その途中の温度で長い時間温度を止めたりして、磁化 $M_{T[t]}$ を測定する($T[t]$ は温度上昇の過程を表す)。それまでのシミュレーションの結果^[2]から、SG相に急冷後、ある温度 T においては SG 相関長 (SG ドメインサイズ) は、

$$R_T(t) \simeq (t/t_0)^{0.15(T/T_c)} \quad (1)$$

で成長すること、温度シフトがあっても SG 相関長に不連続的な変化はなく、単に成長速度を違えて連続的な成長を続けること（累加的記憶効果）が確かめられている。これを用いると、種々の温度上昇過程 $T[t]$ について $R_{T[t]}$ を評価できる。その $R_{T[t]}$ に対して $M_{T[t]}$ をプロットしたところ、種々の温度上昇過程の $M_{T[t]}$ がすべて同一曲線に載ることが確認された。そこで、伊藤らの $\text{Fe}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{TiO}_3$ に関する対応する実験結果について、 t_0 だけを $t_0=10^{-12}\text{s}$ に替えた(1)式を用いて同様な解析を行ったところ、実験結果の $M_{T[t]}$ も(1)式で評価した $R_{T[t]}$ でスケールされることが確認できた。SG ドメインの成長則が、シミュレーションでも実験でも、そのベキ指数の定量的な値を含めて(1)式で記述される、という結果である。べき指数が小さいので、10桁の時間の違いも、長さ $R_{T[t]}$ でほぼファクター 10 の違いでしかないと考えると、この一致は奇異というほどのことはない。

温度シフト過程^[3]や、現在解析を進めている磁場シフト過程についても、実験結果との(半)定量的な比較を目指して、研究を進めている。その際、問題になるのは、ハイゼンベルグ型 SG とイジング SG におけるエイジング現象について定量的にかなり違う実験結果がでていることである。ハイゼンベルグ型 SG の有限温度相転移の機構に関連する可能性もあり、ハイゼンベルグ型 SG におけるエイジング現象の解析も今後進めていきたい。

- [1] L. W. Bernardi, H. Yoshino, K. Hukushima, H. Takayama, A. Tobe and A. Ito: Phys. Rev. Lett. **86** (2001) 720.
- [2] T. Komori, H. Yoshino and H. Takayama: J. Phys. Soc. Jpn. **69** Suppl. A (2000) 228.
- [3] H. Takayama and K. Hukushima: J. Phys. Soc. Jpn. **71** (2002) No. 12.

Mixed Phase Initialization による一次相転移の非平衡緩和解析

東工大理 尾関 之康
慈恵医大物理 加園 克己

非平衡緩和法では、秩序変数等の緩和過程から相転移温度や臨界指数を評価する。フラストレーション系やランダム系に現れる遅い緩和に影響されず、大きな格子サイズで精度の良い結果が得られる。通常の二次相転移では、秩序状態からの秩序変数の緩和を測定し、指数緩和（常磁性相）と一定値への収束傾向（秩序相）の間に現れる幕緩和 $m(t) \sim t^{-\lambda}$ する点を転移温度と判定する。

一方一次転移では、この判定法は正確な転移温度を与えない。ヒステリシスによる過飽和現象のため、常磁性側にシフトした温度で準安定な秩序状態が消失するからである。この現象は、準安定状態の障壁が格子サイズと共に高くなることを考えれば、精度の良い数値計算では避けられない。転移温

度の評価には、上で述べた秩序状態からの緩和（即ち加熱過程）の他に、冷却過程に相当するランダム初期状態（高温極限）からの緩和も考えられる。二次相転移では各秩序相に対称な秩序変数、例えば二乗磁化の $1/N$ （磁化率に相当）の成長を調べ、 $O(1)$ への飽和傾向（常磁性相） $O(N)$ への発散傾向（秩序相）の間に現れる幕発散する点を転移温度と判定できる。しかし一次相転移では、この場合もヒステリシスのため冷却状態が現れ、秩序相側にシフトした温度を転移温度と判定してしまう。

ヒステリシスの小さな、いわゆる弱い一次相転移の二次相転移との区別に過去盛んに研究され、平衡シミュレーションにおけるヒストグラム法等が成果を上げている^[1]。非平衡緩和法では、上で述べた加熱過程と冷却過程の差を大きな格子サイズ（二次元では $L=2000$ 以上、三次元では $L=150$ 以上）で評価でき、有効であることが指摘されている^[2,3]。

我々は、非平衡緩和法で正確な転移温度を評価する、Mixed Phase Initialization (MPI) 法を提案する^[3]。初期状態として、格子の上半分を秩序状態（の一つ）に、した半分を無秩序状態（ランダム）に選ぶ。ヒステリシスの原因は、転移温度近傍での準安定状態中に現れる安定相クラスターの成長が臨界長を有し、小さいクラスターが安定化できないことに起因する。MPI 法では大きな安定クラスターを始めから含んでいるので、そのままそのクラスターが成長し、安定相への緩和が実現する。即ち、転移温度を境にして指数緩和と収束傾向が区別され、正しい転移温度を判定することができる。MPI 法は元々格子ゲージ理論等の解析^[4]に提案されたものだが、非平衡緩和法の解析と組み合わせることで、今後の応用・発展が期待される。

[1] A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen: Phys. Rev. Lett. **61** 1635 (1988); **62** 1195 (1989).

[2] L. Schülke and B. Zheng: Phys. Rev. E **62** 7482 (2000).

[3] Y. Ozeki, K. Kasono, N. Ito and S. Miyashita: Physica A (2003)に掲載予定

[4] C. Rebbi: Phys. Rev. D **21** 3350 (1980).

非平衡緩和法によるスピングラス研究

東北大工 中村 統太

短距離相互作用型のスピングラス模型において、実験で観測されるようなスピングラス相転移が起こるのかという問題は、実験を理論的に説明するという点のみならず、ランダム系一般の理論的な理解にかかわる非常に重要な問題である。これまでの研究により、 $\pm J$ Ising 模型においてはその転移温度、臨界指数等が矛盾無く求められておりスピングラス相転移が起こる事はほぼ既知の事実とされている。一方、最も現実物質に近いHeisenberg 模型においては、これまで相転移は無いとされてきたが、最近、相転移の存在を示唆する研究が発表され、相転移の有無に関する見直しが行われている。

我々は、近年開発された「非平衡緩和法」を用いてこの問題を明らかにする研究を行い、Heisenberg 模型においてもスピングラス相転移が起こることを確かめた。^[1] また、臨界指数についてもほぼ実験結果と矛盾の無い値を得ることが出来、理論模型が正しく実験結果を記述する事がわかった。^[2] しかし、ここで用いた方法が短時間の緩和過程を基にした解析であるため、slow dynamics なスピングラス問題に適用可能かどうかは自明ではない。そこで、非平衡緩和過程におけるオーバーラップの分布関数、correction to scaling^[3] も含めた解析、更に、議論が収束しているIsing 模型の場合

の同様な計算との比較を行う事によって、スピングラス問題においても、非平衡緩和過程はその極初期の緩和過程から臨界現象を“知っている”事を明らかにした。これは驚くべき事実である。具体的には、

- 転移温度直上におけるスピングラス帶磁率の緩和曲線は、correction to scaling の指数 $\omega=0.5$ を含めれば、1ステップ目からスケーリングに乗る。(Heisenberg, Ising 共)
- オーバーラップ分布関数も、1ステップ目からスケーリングに乗る。(Ising)
- Heisenberg 模型、Ising 模型ともにその転移温度直上でのスピングラス帶磁率の緩和曲線は、1ステップ目からほぼ完全に重なる。そのときの臨界指数は $\gamma/z\nu=0.38$ であり、これはXY模型でも同様である。

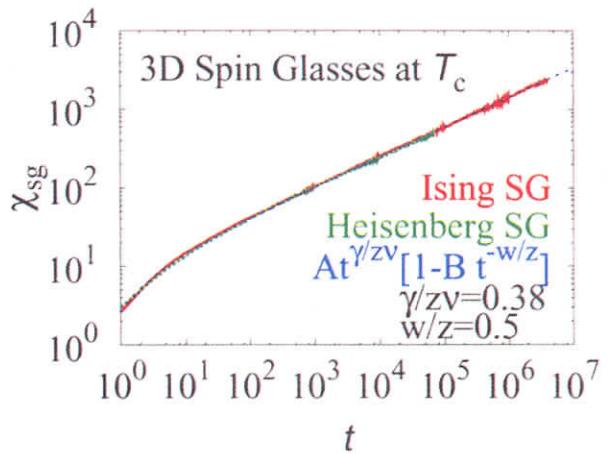


FIG: 転移点直上 (Ising は $T/J = 1.17$, Heisenberg は $T/J = 0.21$) における χ_{sg} の生データと、correction to scaling の式の全てが重なっている。

最後の項目に関しては、スピングラス転移の弱普遍性を示唆しており、極めて重要な結果である。

- [1] T. Nakamura and S. Endoh, J. Phys. Soc. Jpn. **71**, 2113 (2002).
- [2] T. Nakamura and S. Endoh, in preparation.
- [3] P. O. Mari and I. A. Campbell, Phys. Rev. B **65**, 184409 (2002).

異方性のある3次元ハイゼンベルグスピングラスの磁場中相転移

阪大理 今川 大輔、川村 光

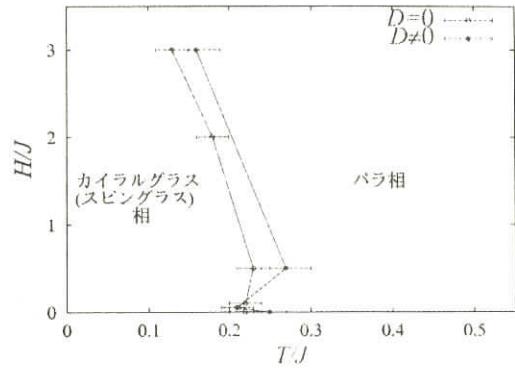
実験的には多くのスピングラス磁性体、とりわけカノニカルスピングラスとして過去多くの研究がなされてきた希薄磁性合金スピングラスにおいては、磁気異方性が弱く、ハイゼンベルグ型とみなせることが知られている。従って、スピングラスの物性、とりわけスピングラス秩序化の機構を理解するためには、3次元のハイゼンベルグスピングラスについての研究が不可欠である。しかしながら、等方的な3次元ハイゼンベルグスピングラスでは有限温度スピングラス秩序が無いと考えられてきたため、3次元ハイゼンベルグスピングラスのランダム磁気異方性を入れ、更に磁場中の秩序化現象に関する研究はなされていない。

そこで、我々は、スピンに加えカイラリティという自由度を考慮した「カイラリティ機構」の立場から、有限磁場中の異方性のある3次元ハイゼンベルグスピングラスの秩序化現象について、熱平衡モンテカルロシミュレーションを用いて調べた。本計算はベクトル化やMPIが有効なので、物性研のスーパーコンピュータ(Hitachi SR8000)を利用し計算を行なった。系としては、ハミルトニアンが

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\mu, \nu=x, y, z} D_{ij}^{\mu\nu} S_i^\mu S_j^\nu - H \sum_{i=1}^{L^3} S_i^z$$

で与えられる3次元立方格子（一辺 $L=4,6,8,10,12,16$ ）上の古典 Heisenbergスピンを考え、周期境界条件を課した。

ボンド分布 J_{ij} は土 J 分布($J=1$)に異方性 D_{ij} は $[-D:D]$ 一様分布($D/J=0.05$)に、外部磁場は $H/J=0.05, 0.5, 3.0$ の3点を取った。その結果ハミルトニアンのグローバルな対称性は何も残っていないにも拘らず有限温度でカイラルグラス転移を示しその時レプリカ対称性の破れを伴うこと、同時にスピングラス転移も起こっていることが分かった。磁場-温度面相図を描くと図のようになり、カイラリティ機構の予言に矛盾しない結果を得た。カイラルグラス転移に付随する臨界指数 $H/J=0.05$ について求めると $\gamma_{CG} \sim 2.1, \eta_{CG} \sim 0.3, \nu_{CG} \sim 1.2$ という値が得られた。



3次元XYスピングラスモデルにおけるスピングラス転移とその性質

東北大工 山本 剛生、中村 統太

スピングラスの理論研究において、これまでの数値計算では3次元スピングラス(SG)モデルの相転移はIsingモデルのみで起こり、HeisenbergモデルやXYモデルでは起こらないとされてきた。しかし、現在計算機の発達や解析方法の向上に伴いこれらの結果に対して見直しが行われている。我々は、「非平衡緩和法」を用いて、3次元SGモデルの相転移の有無を調べているが、その結果、Heisenberg SGモデルにおいてもSG転移が起こることを明らかにした。^[1,2]

本講演では、3次元XYSGモデルにおけるSG転移について調べたことを報告する。下図にSG帶磁率の時間発展 $\chi_{SG}(t)$ を示す。 $\chi_{SG}(t)$ は高温で一定値に収束し、ある温度以下でベキ発散する傾向が見られた。これは、XYモデルでも有限温度スピングラス転移を起こすことを示唆している。 $\chi_{SG}(t)$ とカイラルグラス(CG)帶磁率 $\chi_{CG}(t)$ の高温相のデータの有限時間スケーリング解析によって転移温度や各臨界指数を以下のように見積もった。

$$\text{SG転移 } \begin{cases} T_{SG} = 0.38 \pm 0.05 \\ z\nu = 6.2 \pm 1.3 \\ \gamma = 2.3 \pm 0.4 \end{cases} \quad \text{CG転移 } \begin{cases} T_{CG} = 0.47 \pm 0.04 \\ z\nu = 3.5 \pm 1.1 \\ \gamma = 1.1 \pm 0.3 \end{cases}$$

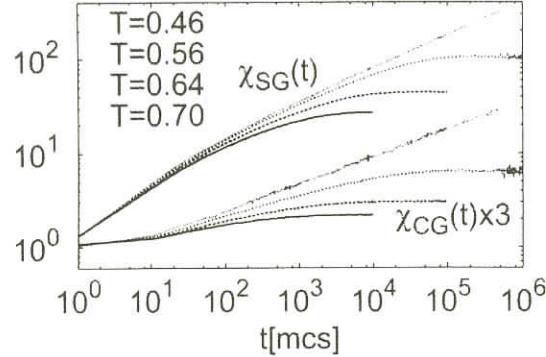
今回の解析では T_{SG} と T_{CG} が一致するのかしないのかは明らかにすることが出来なかった。これは解析に用いたデータの温度領域が転移温度から離れすぎていることに起因している可能性もあり、より低温での長時間計算が必要である。これは今後の課題とする。

また、低温相におけるオーバーラップ分布関数 $P(q)$ の時間発展も計算した。サイズが $L=5 \sim 11$ の範囲内での非平衡緩和過程では、 $P(q)$ の分布は $q=0$ での1つ山であることがわかった。この物理的な意味は今後検討する余地がある。

非平衡緩和法による我々の一連の計算によって、3次元SGモデルはIsing, X, Y, Heisenbergの全てにおいてSG転移が起こることが分かった。さらにその転移点直上でのSG帶磁率の発散の指数

が $\frac{\gamma}{z\nu} \sim 0.38$ とほぼ同じ値を示すことも分かった。これは、SG 転移の Weak Universality を示しているのだろうか？この謎の解明も今後の課題である。

- [1] 中村統太 同研究会 非平衡緩和法によるスピングラス研究
- [2] T.Nakamura and S. Endoh J. Phys. Soc. Jpn **71**, 2113 (2002)



First Principles approach to the electronic structure of strongly correlated systems

産総研 F. Aryasetiawan

We propose a dynamical mean field approach for calculating the electronic structure of strongly correlated materials from first principles. The scheme combines the GW method with dynamical mean field theory, which enables one to treat strong interaction effects. It avoids the conceptual problems inherent to conventional “LDA+DMFT”, such as Hubbard interaction parameters and double counting terms. The basic idea is to employ the self-energy from the DMFT for the on-site term and approximate the off-site self-energy by the Gw approximation. This idea can be formulated in a precise way as follows:

$$\begin{aligned}\Sigma^{xc}(\mathbf{k}, i\omega_n)_{LL'} &= \Sigma_{GW}^{xc}(\mathbf{k}, i\omega_n)_{LL'} - \sum_{\mathbf{k}} \Sigma_{GW}^{xc}(\mathbf{k}, i\omega_n)_{LL'} + [\Sigma_{imp}^{xc}(i\omega_n)]_{LL'} \\ P(\mathbf{q}, i\nu_n)_{\alpha\beta} &= P^{GW}(\mathbf{q}, i\nu_n)_{\alpha\beta} - \sum_{\mathbf{q}} P^{GW}(\mathbf{q}, i\nu_n)_{\alpha\beta} + P^{imp}(i\nu_n)_{\alpha\beta}\end{aligned}$$

where Σ denotes the self-energy and P denotes the polarization function. This treatment thus goes beyond usual extended DMFT, where the lattice self-energy and polarization are just taken to be their impurity counterparts. We apply a simplified version of the approach to the electronic structure of nickel and find encouraging results.

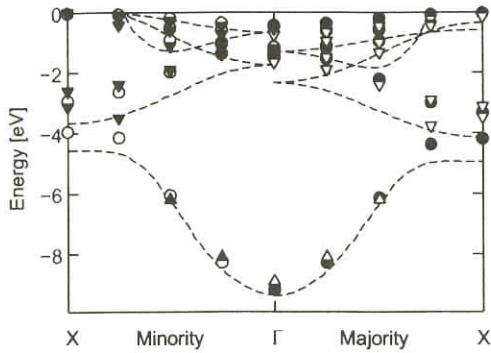


図 1 : Band structure of Ni (minority and majority spin) as obtained from the linearization procedure of the GW+DMFT self-energy described in the text (dots) in comparison to the LDA band structure (dashed lines) and the experimental data of [Bünemann et al. (2002)](triangles).

[Hedin (1965)] L. Hedin, Phys. Rev. **139** (1965).

[Aryasetiawan and Gunnarsson (1998)] F. Aryasetiawan and O. Gunnarsson, Rep. Prog. Phys. **61**, 237 (1998).

[DMF()] For reviews see: A. Georges *et al.*, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996); T. Pruschke *et al.*, Adv. Phys. **42**, 187 (1995).

[Bünemann *et al.* (2002)] J. Bünemann *et al.* (2002), cond-mat/0204142.

Ce 系絶縁体の局在長と熱起電力の第一原理計算

広大先端物質 石井 史之、小口多美夫

バンドギャップを持つ金属間化合物は興味深い電気的、時期的な性質を示す。その一つに熱電性があり、 $M\text{NiSn}$ ($M=\text{Ti}, \text{Zr}, \text{Hf}$)はその代表的物質の一群であり、これらの物質は大きな熱起電力を持つことが知られており、新しい熱電材料の候補物質として期待されている。一方で関連物質の CeNiSn は近藤半導体（半金属）と呼ばれ、異常に小さいギャップを形成し、強相関電子系ということで興味を持たれている。CeRhAs, CeRhSb もこの種の物質であるが、低温で半導体（半金属）的な振る舞いを示し、通常の熱電半導体より低温で大きな熱起電力を持つことが報告されている。

我々はこれらの系に対して FLAPW 法を用いてそのバンドギャップ形成の起源と熱電性について調べた。 $M\text{NiSn}$ ($M=\text{Ti}, \text{Zr}, \text{Hf}$) は 0.2eV～0.5eV 程度のバンドギャップを持つのに対し CeNiSn では半金属、CeRhAs は 0.038eV のバンドギャップをもち、CeRhSb では半金属となり、実験結果と定性的に一致した。^[1] また、ボルツマン理論より、ゼーベック係数の計算を行った結果、PbTe、TiNiSn 等に比べ低温でより大きなゼーベック係数を示し、この傾向は実験結果とよく対応がつく。

次に、バンドギャップの起源を考察することと関連して、波動関数の局在長を求めた。波動関数の局在長の二乗は、バンドギャップの逆数と不等号関係にあることが、Souza らによって示されている^[2]。Souza らの基礎理論の後、巨視的分極を求めるベリー位相の方法と関係深い Sgiarovello らの具体的な定式化^[3]に基づき、我々は、ELAPW 法を用いて局在長を計算した。傾向として、CeRhAsにおいて、異方的なバンドギャップを反映した局在長の結果が得られた。典型的な半導体と同様にバンドギャップが大きいほど波動関数は局在していることが異方的な系ではじめて明らかとなった。また、Ce の $4f$ 軌道は価電子帯に混成してはいるが、Rh d -As p と混成し、大変広がっていることが明らかとなった。Rh d -As p の局在長の二乗は Ge の $s-p$: $3.34(\text{bohr}^2)$ より大きく、 a 軸、 b 軸、 c 軸とそれぞれ 3.93 、 3.58 、 3.69 (bohr^2) となっている。これらから、価電子帯には予想

されているよも局在的 Ce 4f 状態が少なく、周期アンダーソンモデルで記述される単純な“混成ギャップ”とはかけ離れている可能性が示唆される。これは、最近の高分解能共鳴光電子分光の実験からも主張されている^[4]。

- [1] F. Ishii, Physica B in press.
- [2] I. Souza, *et al.*, Phys. Rev. B 62 (2000) 1666.
- [3] C. Sgairovello, *et al.*, Phys Rev. B 64 (2001) 115202.
- [4] K. Shimada, *et al.*, Phys. Rev. B 66 (2002) 155202.

第一原理計算による異方的圧縮下における LiBC の格子異常

物質・材料研 小林 一昭、新井 正男

LiBCは、MgB₂に関連した物質として注目されている^[1]。本物質は圧力ゼロの状態（平衡格子定数下）では半導体である。我々は当初、異方的圧縮により、電子状態がどのように変化するかを探る目的で計算を始めたが、異方的圧縮を加えることにより、格子変化が異常を示すことを発見した^{[2][3]}。LiBC（六方晶：P63/mmc）に異方的圧縮（c 軸方向及び、a,b 軸方向）を行ない、その構造最適化と電子状態の計算を行なった。この時、圧縮は結晶構造を保ったまま行なわれる（構造相転移、層のすべり、結晶の破壊等は想定しない。）また対称性による制限から、計算においてユニットセル内の原子の変位は（一部の場合を除いて）起こらない。この計算の過程で、a,b 軸方向（2 軸同時の）圧縮において、圧力をかけていない c 軸が縮む結果が得られた。但し縮みは、50GPa の圧縮で、0.01 Å のオーダーと大変小さい（予備的計算ながら、およそ 1 TPa 近傍まで c 軸は縮み続ける：内殻の影響は無視）。通常、a,b 軸方向に圧縮を加えた場合、加圧していない自由な c 軸方向は伸びるはずである。尚、c 軸方向の一軸圧縮、等方圧縮では、このような格子変化における異常は見られなかった。関連する物質として、LiB₂、LiC₂、NaBC、NgBC、MgC₂ 等の計算を行なったが、いずれの場合でも a,b 軸圧縮により c 軸は伸びる結果を得ている（明らかに異常を示すものは LiBC のみ）。尚、これら関連物質は、圧力ゼロでの NaBC を除いて、全て電子状態は金属的である。NaBCも a,b 軸圧縮（20GPa 以上）での電子状態は金属的になっている。

LiBCにおいて、a,b 軸圧縮で c 軸が縮む原因是、この物質が常圧及び、a,b 軸圧縮においても電子状態が半導体的であることが関係していると思われる。つまり、a,b 軸を圧縮することにより、正にイオン化している Li 層と、負にイオン化している B-C 層の電荷密度が増す。この時、系の電子状態が金属ならこれら各層の密度増加を遮蔽するような電荷の再分布が起こるが、LiBC は（圧縮下でも）半導体的なため、そのようなことが起こらない。従って、a,b 軸圧縮により層間の静電的相互作用は、より強くなり、層間同士が引っ張り合う。これが、a,b 軸圧縮において、c 軸が縮む原因であると筆者等は考えている。

我々は、擬ポテンシャル+平面波及び、全電子計算（Wien2Kコード）の二つの異なる方法で計算を行ない、いずれの手法でも a,b 軸圧縮で同様な格子異常を示すことを確認している。k 点数、k 点の取り方、エネルギーカットオフ、ブロードニングの幅、LDA（局所密度近似）の種類等、精度上考えられ得るあらゆる可能性に関して十分な検証も行なっており、この格子異常が、DFT+LDA

(GGA) 計算の範疇では正しい結果であると考えている。

- [1] H.Rosner, A. Kitaigorodsky and W. E. Pickett, Phys. Rev. Lett., Vol. 88, No. 12, (2002) 127001.
- [2] K. Kobayashi and M. Arai, "LiBC and related compounds under high pressure", in proceedings of LT23 (Physica C), in press.
- [3] K. Kobayashi and M. Arai, to be published in Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 72, No. 2. (2003).

First Principles Study of CO and NO Adsorption Transition Metal Surfaces

物質・材料研 相沢 秀昭
東大理 常行 真司

It has long been believed that NO molecules are first adsorbed at bridge sites of the Pt(111) surface, and that they move from bridge sites to atop sites as the coverage of NO is increased. This hypothesis originates from several vibrational spectra (EELS and IR) exhibiting a low-frequency N - O stretch peak at low coverages, which is attenuated with a new high - frequency peak developing as the coverage is increased. Our total - energy calculation from first principles, however, reveal that at the coverage of 0.25 ML, the fcc - hollow site is the most stable, and that at the coverage of 0.50 ML atop species coexist together with fcc - hollow species. We then calculated vibrational spectra in the case of 0.50 ML, and showed that the peak intensity of the fcc - hollow species is the tenth as small as that of the atop species, reproducing the observed vibrational spectra qualitatively. Considering that the fcc-hollow species exist at the surface as much as the atop species, such a phenomenon is quite unexpected and has been misleading the experimentalists. A well - known intensity transfer effect due to phonon - phonon coupling is small for two absorption peaks as much as 200cm^{-1} apart. We studied the origin of such anomalous spectra, and found that the dynamical dipole moment with respect to the N - O stretching mode of the fcc - hollow species is screened in the presence of the atop species. Such screening is considered to be derived from the short - range dipole - dipole interaction between adjacent adsorbates, which manifests itself only at high coverages. Our calculations indicate that such misleading features of vibrational spectra are also seen at other systems such as CO/Rh(111) and NO/Rh(111), suggesting that they are quite general phenomena for systems of small molecules chemisorbed at transition - metal surfaces.

This research is supported by ACT - JST. The calculations have been performed mainly using the Numerical Materials Simulator in National Institute for Materials Science.

金属人工格子の電子構造とスピン密度波

奈良医大物理 平井 國友

Cr 人工格子におけるスピン密度波 (SDW) 秩序の第一原理計算に基づき、金属人工格子の電子構造の特性を議論する。層状の人工格子において、Cr の SDW のような遍歴電子系特有の磁気秩序がどのように境界層から影響を受けているのかを調べ、電子の遍歴性に対する実空間における近接効果を分析する。計算には KKR 法、局所スピン密度汎関数 (LSD) 近似を用い、周期的な bcc(100) 層状人工格子について、Cr 層の厚さ N_{Cr} (単原子層の数) を連続的に変化させて調べている。境界層は Fe、V、および Cu について計算し、以下のような結果を得ている。

Fe/Cr 人工格子では、Fe 層は強磁性であり、Cr 層の SDW 秩序はその磁化の影響を強く受けている。すなわち、磁化との強い反強磁性結合のため、Fe 層との界面で Cr の局在磁気モーメントは大きくなり、界面は SDW の腹になる。このとき、 N_{Cr} がそれほど大きくない場合には、Cr 層には半周期分の SDW が収まり、その SDW の波数は、フェルミ面のネスティングベクトルからではなく、 $N_{\text{rm, Cr}}$ によって決まるところになる。¹⁾ また、界面での Cr の局在磁気モーメントの大きさは純粋 (バルク) の Cr の SDW の振幅よりも大きくなっている。 N_{Cr} を増してゆくと、Cr 層には一周期分の SDW が収まるようになるが、依然として、その SDW の波数は N_{Cr} によって変化している。しかし、さらに N_{Cr} を増すと、SDW の節の間隔が N_{Cr} を変えても変化しなくなり、その値はバルクの Cr の値にほぼ一致するようになる。また、Cr 層の中央部付近の SDW の振幅もバルクの Cr の値に近づいてくる。すなわち、Cr 層の中央部付近は N_{Cr} によってあまり変化しなくなり、しかも、バルクの Cr の SDW の特徴が現れてくる。このように、 N_{Cr} の変化により、Fe 層の近接効果の影響を強く受けた SDW から Cr 層固有の自発的な SDW へと変化することが分かる。²⁾ これは、人工格子からバルクへの Cr 層の電子構造の質的な変化を意味している。

一方、V/Cr 人工格子では、V 層は常磁性であり、V 層との界面で Cr の局在磁気モーメントは小さくなり、界面は SDW の節になる。V/Cr 人工格子においても、 N_{Cr} を増してゆくと、Cr 層には一周期分の SDW が収まるようになり、このとき、Cr 層の中央部付近にはバルクの Cr の SDW の特徴が現れてくる。しかし、界面付近は、Fe/Cr 人工格子と同様に、 N_{Cr} を変えても SDW 秩序の様子はあまり変化しておらず、しかも、SDW 秩序とは異なった秩序が形成されているように見える。V 層は常磁性であるにもかかわらず、Cr 層の SDW にある程度の近接効果を及ぼしているといえる。また、Cu/Cr 人工格子では、Cu 層は常磁性であるにもかかわらず、Cu 層との界面で Cr の局在磁気モーメントは大きくなり、界面は SDW の腹になる。これは、Cu 層と Cr 層の界面における電子状態の混成が小さく、界面の Cr 層の局所的なバンド幅が狭くなるためである。Cu/Cr と Fe/Cr 人工格子の SDW 秩序は界面が SDW の腹であるという点で同様であるが、両者はかなり異なっており、Cu 層と Fe 層の近接効果の違いが現れている。

このように、Cr 人工格子の SDW 秩序は、界面での磁気的結合や電子状態の混成を通じて、境界層の近接効果の影響を受けている。逆に考えると、境界層の近接効果が SDW 秩序の解析から調べられるといえる。ここで、Cr の SDW が電子の遍歴性に由来するということは重要であり、遍歴性と実空間での近接効果の競合という観点での解析である。これにより、Fe/Cr 人工格子では、Fe 層の近接効果と Cr 層のバルク効果を定量的に分離できるという見通しを得ており、現在、さらに解析を続けている。

1) K. Hirai: J. Phys. Soc. Japan **70** (2001) 841.

2) K. Hirai: Phys. Rev. B **66** (2002) 132406.

第一原理分子動力学による Si(001)-2×3-Ag 表面の研究

鳥取大工 小山 聖史

金属/Si 初期界面は、典型的な金属・半導体界面を有する系である。中でも、Ag/Si(001)表面は、金属・半導体界面の基本的性質を明らかにすることや、電子デバイスへの応用に適した系であり、これまで多くの研究がなされてきた。しかしながら Ag/Si (001) 表面の典型的な再構成構造である 2×3-Ag 構造については、未だ確定的な構造モデルが得られていないのが現状である。

そこで我々は理論的な側面から詳細な構造を確定するため、Ag/Si 表面の第一原理計算を行った。まず、実験事実に基づいたモデルをいくつか考え、分子動力学を行うことにより、安定な原子配列を決定した。その結果、実験で得られているいくつかの情報と比較することで、モデルの良し悪しを判断した。

その結果、以下に示すモデルが実験事実との整合性が良く、安定性も良いことがわかった。



図1 : Si(001)-2×3-Ag 表面構造モデル。

Si: 灰色、Ag: 黒色。Si ダイマーの上に Si と Ag が並んでいる。

電場印加系に対する第一原理計算－電界電子放出を中心に

東大工 渡邊 聰

強い電場中の電子状態の解明は、ナノ構造の電気特性やその計測の研究の進展と共に一段と重要な課題となってきている。この問題に理論計算でアプローチする場合、標準的な電子状態計算手法では不自然な電荷移動が生じてしまう^[1]などの問題が生じる。そこで我々は、半無限電極を考慮し、電流・電界下での電子状態を密度汎関数法に基づいて自己無撞着に計算する方法論を開発した^[2]。

この方法を用いて、まず原子スケールの微小突起を持つアルミニウム表面からの電界放出電流を計算した^[3]。その結果、先端が同じように単原子で終端されている突起であっても、サイズが大きい場合には放出電子のエネルギー分布に2つのピークが出現するのに対し、小さい場合にはピークが一つしか現れないことがわかった。この結果は、突起のサイズによって電子放出特性が大きく変化することを示すと共に、不純物を含まない金属微小突起でエネルギー分布に2つのピークが現れるか、という点に関する実験データ間の不一致の理由を説明できる。

次に、清浄 Si(100)2×1 表面、Si(100)2×2-Al 表面、清浄 Al(100) 表面からの電界電子放出電流を比較した^[4]。放出電流の差は仕事関数の違いでは説明できないが、電場印加時のポテンシャル障壁の最小値の違いから説明できることがわかった。

また、ジェリウム電極間のアルミニウム原子鎖の電子状態と電気特性についても計算した^[5]。その結果、原子鎖内での電位降下が従来の推測（原子鎖の部分では電位が一定、あるいは電極からの距離に比例して電位降下）に比べて複雑で、電位降下が一部に集中する傾向があることなどを見出した。

以上の結果は、いずれも電場を印加されたナノ構造の電子状態が従来想像されていたより複雑であることを示しており、今後の一層の研究の発展が期待される。

- [1] N. Nakaoaka *et al.*, Phys. Rev. Lett. 86 (2001) 540.
- [2] Y. Gohda *et al.*, Phys. Rev. Lett. 85 (2000) 1750.
- [3] Y. Gohda and S. Watanabe, Phys. Rev. Lett. 87 (2001) 177601.
- [4] Y. Gohda and S. Watanabe, submitted to Phys. Rev. B.
- [5] S. Furuya *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. 41 (2002) L 989.

$O(N)$ モンテカルロ法による二重交換系の臨界現象の研究

科技団ERATO-SSS 求 幸年
青学大理工 古川 信夫

$O(N)$ 法すなわち系のサイズ N に比例した計算時間で実行できるモンテカルロ法を提案した。この手法は、断熱的なポテンシャルと相互作用している電子系に広く適用できるものである。ここではアルゴリズムの詳細を紹介し、適用例として二重交換模型の金属強磁性転移における臨界現象の計算結果を示した。

従来のモンテカルロ法は、モンテカルロ重み関数の計算において電子系のハミルトニアンの対角化を行なうものであった。この手法では、系の全ての自由度（一般に $O(N)$ 個存在する）をアップデートするのに必要な計算時間（1 モンテカルロステップ）は $O(N^4)$ であった。これを改善するために、以前我々は多項式展開モンテカルロ法を提案した。^[1] この手法は、対角化によって固有状態を全て求める代わりに、Chebyshev 多項式を用いた直行多項式展開によって状態密度を精度良く求めるものである。これにより計算時間は $O(N)^3$ となっていた。今回は、この多項式展開モンテカルロ法において、展開における有効な truncation を導入することにより 1 モンテカルロステップ当たりの計算時間を $O(N)$ に短縮することに成功した。^[2]

具体的な truncation の手法は以下の通りである。状態密度の多項式展開によるモーメントの計算では、ある基底に対してハミルトニアンを繰り返し作用させる演算を行なう。例えばあるサイトに局在した基底から出発すると、ハミルトニアンの演算により状態は広がっていくことになる。電子系の移動積分が近距離のみである場合、この広がりは多項式展開の次数程度以上には及ばないため、以降の計算に必要なベクトルの要素の数は展開の次数程度となる。ここで、必要とする精度を得るために多項式展開の次数は系のサイズにほとんど依らないことから、計算を有限な要素だけに限定することによりモーメントひとつ当たりの計算時間が $O(1)$ になる。この結果、全体として 1 モンテカルロス

ステップの計算時間が $O(N)$ となった。さらにここでは、重要な寄与をしない小さなベクトル要素についても計算を行なわないように多項式展開に対して truncation を導入することにより、さらなる高速化を図った。

具体的な適用例として二重交換模型における計算結果を示した。[3]まず、PCクラスタ並列計算システム[4]におけるベンチマークの結果により、本アルゴリズムが $O(N)$ 法になっていることを示した。また、従来のモンテカルロ計算では困難だった 20^3 サイトまでの計算を行ない、系統的なシステムサイズスケーリングの解析から転移温度および臨界指数の見積もりを行なった。これらの結果から、この系における強磁性転移は Heisenberg 模型と同じ普遍性クラスに属することを議論した。今後はこの系以外にも適用していく予定である。

- [1] Y. Motome and N. Furukawa, J. Phys. Soc. Jpn. **68** (1999) 3835; *ibid.* **69** (2000) 3785; *ibid.* **70** (2001) 3186 .
- [2] N. Furukawa and Y. Motome, in preparation.
- [3] Y. Motome and N. Furukawa, in preparation.
- [4] <http://www.phys.aoyama.ac.jp/~aoyama/>

ハバード模型における軌道縮退の効果

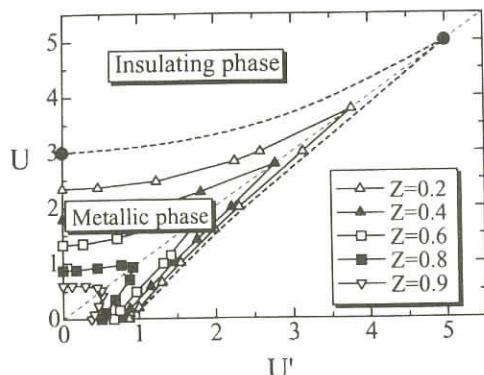
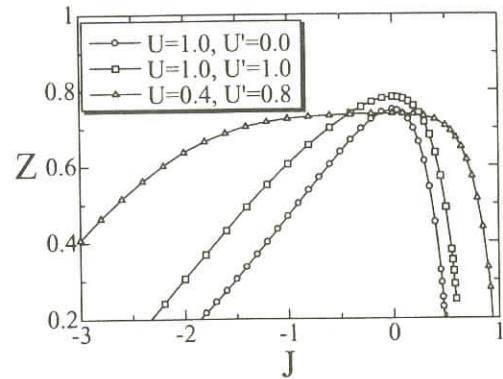
阪大工 古賀 昌久、大橋 琢磨、今井 剛樹、菅 誠一郎、川上 則雄

近年、縮退したバンドを持つ強相関電子系が注目を集めている。典型例として、マンガン酸化物やルテニウム酸化物などがあり、そこでは巨大磁気抵抗効果やトリプレット超伝導などの興味深い現象が観測されている。また、重い電子的な挙動を示す LiV_2O_4 においては、 t_{2g} 軌道における縮退の効果が重要な役割を果たしていることが指摘されている。このように、上記の物質において縮退バンドが重要な役割をしていることから、バンド間相互作用が金属的な性質にどのように影響を与えるのか明らかにする必要がある。

本講演では二重縮退したハバード模型を取り上げ、その低温における性質について議論する。ハミルトニアンは以下のとおりである。

$$H = \sum_{\substack{i,j \\ \alpha,\sigma}} t_{ij} c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{j\alpha\sigma} + U \sum_{i\alpha} n_{i\alpha\uparrow} n_{i\alpha\downarrow} + U' \sum_{i,\sigma,\sigma'} n_{i1\sigma} n_{i2\sigma'} + J \sum_i \mathbf{S}_{i1} \cdot \mathbf{S}_{i2}, \quad (1)$$

t, U, U', J はそれぞれ、サイト間のホッピング、オンサイトのクーロン相互作用、バンド間クーロン相互作用、バンド間交換相互作用を表す。この縮退ハバード模型における金属絶縁体転移を調べるため、動的平均場近似^[1]を用いた。ここでは、有効不純物問題を解くため、厳密対角化法と量子モンテカルロ法を用いて、金属相の性質について議論した。その結果、 $U \sim U'$ の時、軌道自由度に伴うゆらぎにより金属相が安定化されることを明らかにした。さらに、帯磁率の温度変化の振る舞いを解析することにより、相図（下図）の上半面 ($U > U'$) における Mott 絶縁体と右半面 ($U < U'$) における Mott 絶縁体との磁気的性質の違いを明らかにした。また、交換相互作用の符号[強磁性 ($J < 0$)、反強磁性 ($J > 0$)]についても議論し、有効的な自由度が系の金属的な性質と深く関連していることを明らかにした^[2]。

相図($J=0$)

繰り込み因子

[1] A. Georges, et. al., Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).

[2] A. Koga, Y. Imai and N. Kawakami, Phys. Rev. B **66**, 165107 (2002).

周期アンダーソンモデルにおける伝導電子相相互作用の効果

阪大工 大橋 琢磨、古賀 昌久、菅 誠一郎、川上 則雄

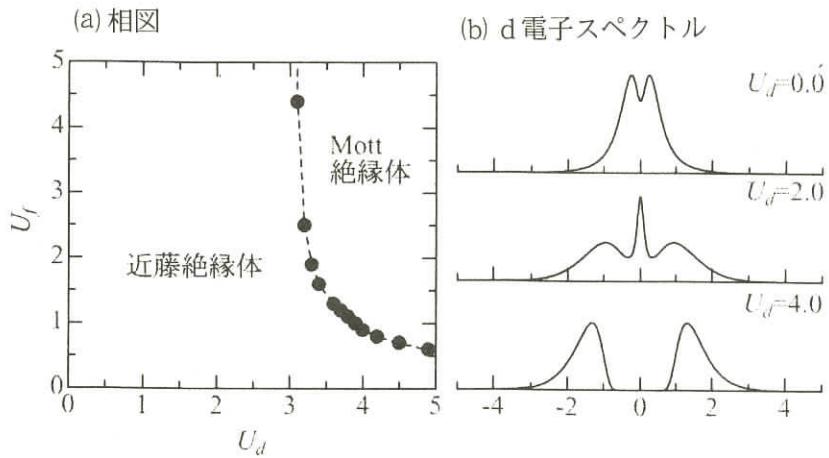
希土類元素やアクチノイド元素を含む f 電子系の物性は、これまで主に周期アンダーソン模型を用いて調べられてきた。しかしながら、この系は局在した f 電子と伝導を担う d 電子から構成されるため、 d 軌道における電子相関関係についても考慮する必要がある^[1]。

本研究では、より一般化した周期アンダーソン模型

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} d_{i\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + \sum_{i,\sigma} [E_d d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + E_f f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma}] + V \sum_{i,\sigma} [d_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + f_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma}] + \sum_i [U_d d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + U_f f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma}] \quad (1)$$

を用い、伝導電子間の相互作用の効果について議論する。(1)式において、 t_{ij} はサイト間のホッピング、 V は d 軌道と f 軌道の間の混成を表し、 U_d と U_f は、それぞれ d 軌道と f 軌道におけるクーロン相互作用を示す。この模型を動的平均場近似^[2]の枠内で扱い、基底状態について議論した。ここでは、有効不純物問題を解く際、厳密対角化法と量子モンテカルロ法を用いた。

帯磁率、電荷感受率の温度依存性、及び、1粒子スペクトルを計算した結果、伝導電子間の相互作用 U_d の効果によって d 軌道と f 軌道の間の有効的な混成が小さくなることを明らかにした。また、 U_d を大きくすると、近藤絶縁体からMott絶縁体へ転移することを明らかにし、図(a)の相図を得た。図(b)に、温度 $T=1/16$ 、 $U_f=3.0$ における d 電子の1粒子スペクトルを示した。 U_d を変化させると、近藤絶縁体からMott絶縁体へ転移することがわかる。



[1] T. Schork and S. Blawid, Phys. Rev. B. **56**, 6559 (1997).

[2] A. Georges, et. al., Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).

数値対角化を基礎とする低次元系の量子相転移の研究

東北大理 坂井 徹
東工大院理工 岡本 清美

行列の数値対角化、とくにランチョス法を基礎とする数値解析による低次元スピニ系の量子相転移の最近の研究成果の中から、スピニ1ラダー系の基礎誘起ギャップによる磁化曲線のプラトーの問題について報告した。これは、最近始めて合成されたスピニ量子数1を持つ、スピニラダー系有機化合物BIP-TENO^[1]の強磁場磁化測定^[2]で観測された、飽和磁化の4分の1で現れる磁化プラトーの生じるメカニズムを理論的に説明するものである。この4分の1プラトーは、厳密な磁化の量子化条件によると、自発的対称性の破れによる基底状態の2倍周期構造を伴う必要がある。そこで我々はこの2倍周期構造をもたらす原因として、3次近接スピニ間の交換相互作用によるフラストレーションの効果を取り入れたモデルを提唱し^[3]、これを理論的・数値的に解析した。ランチョス法と有限サイズスケーリング、レベルスペクトロスコピー法等による解析の結果、このフラストレーションによる新たなダイマー構造の出現が磁化プラトーの原因となり得ることがわかった。また、最近開発された有限温度ランチョス法^[4]で計算した磁化率の温度依存性が実験結果をよく再現することからも、このメカニズムが正当化された。なお、講演では今後の計画として、並列計算のランチョス法への導入についても議論した。

[1] K. Kato et al.: J.Phys. Soc. Jpn. 69 (2000) 1008.

[2] T. Goto et al.: Physica B 294 - 295 (2001) 43.

[3] K. Okamoto et al.: J. Phys. Soc. Jpn. 70 (2001) 636.

[4] J. Jaklic, P. Prelovsek, Phys. Rev. Lett. 74 (1995) 3411.

カーボンナノチューブにおける輸送現象

東工大理 安藤 恒也

カーボンナノチューブは、NECの飯島により発見された半径ナノメートル程度の黒鉛の極微細管であり、中心部分が空洞で2次元グラファイト面を丸めて得られる円筒状をしている。それぞれの円筒上では炭素の6員環が管の軸方向に螺旋状に配置しており、その螺旋のピッチも様々である。ナノチューブは、通常の量子細線とはトポロジカルに異なっており、さらに2次元グラファイト上で電子が自由電子とは非常に異なった運動をするために、興味深い性質を示す。この特徴は、2次元グラファイトを連続体とみなし、有効質量近似で扱うことにより、はっきりする。すなわち、ナノチューブ上の電子の運動はニュートリノに対する2行2列のWeylの方程式で記述される。ただし、円筒を一周したときには波動関数はもとに戻るわけではなく、余分の位相がつく。この位相はナノチューブの螺旋構造により決まり、その結果ナノチューブが1次元金属になるか半導体になるのかが決まる。

特にナノチューブの興味深い輸送特性をもつ。実際、金属的ナノチケーブではポテンシャルの到達距離が格子定数より大きな通常の不純物では後方散乱が全く存在せず、ナノチューブが完全導体となることが理論的に予言され^[1,2]、これを示唆する実験結果もいくつか報告されている^[3,4]。これは線形の分散をもつバンドにフェルミ準位がある場合であるが、最近、一般のエネルギーへの拡張を行った^[5]。フェルミ準位に複数のバンドが共存するとバンド間散乱が起こるが、その場合にも完全透過のチャネルが存在し、十分長いナノチューブではコンダクタンスが量子化されることが示された。この量子化には電子の位相コヒーレンスが重要で、非弾性散乱があると完全透過のチャネルがなくなり、コンダクタンスが長さに逆比例し、散乱のある通常の細線と同様の振る舞いを示す（図参照）。

- [1] T. Aado and T. Nakanishi, J. Phys. Soc. Jpn. **67**, 1704 (1998).
- [2] T. Ando, T. Nakanishi, and R. Saito, J. Phys. Soc. Jpn. **67**, 2857 (1998).
- [3] P. L. McEuen, M. Bockrath, D. H. Cobden, Y.-G. Yoon, and S. G. Louie, Phys. Rev. Lett. **83**, 5098 (1999).
- [4] A. Bachtold, M. S. Fuhrer, S. Plyasunov, M. Forero, E. H. Anderson, A. Zettl, and P. L. McEuen, Phys. Rev. Lett. **84**, 6082 (2000).
- [5] T. Ando and H. Suzuura, Journal J. Phys. Soc. Jpn. **71**, No. 11 (2002).

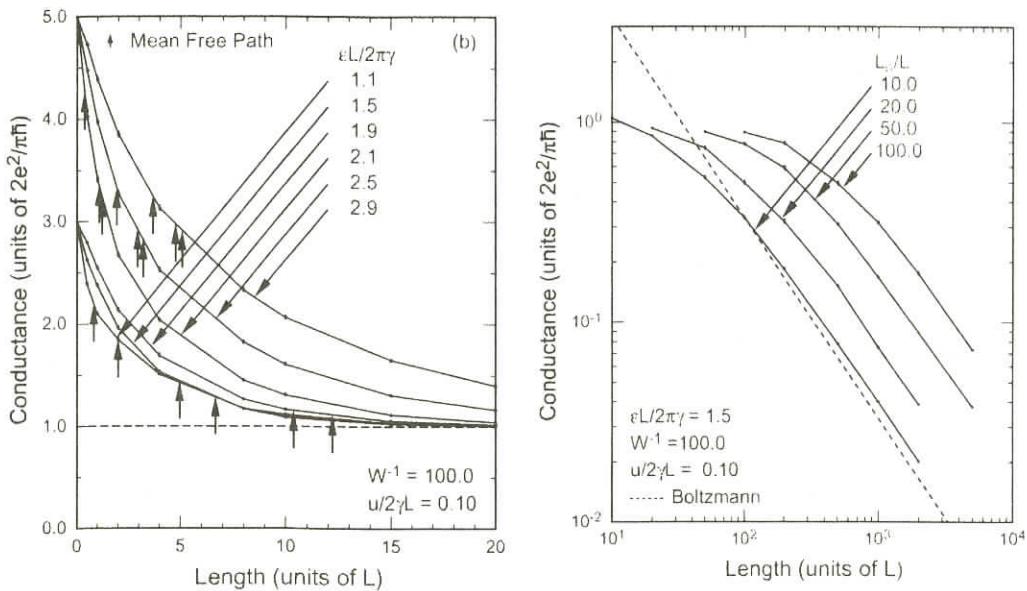


図1：複数バンドが共存する場合のコンダクタンス。左図：コヒーレントな場合。右図：非弾性散乱の効果。
Lは周長、 L_ϕ は位相コヒーレンス長さ、 γ はバンドパラメータ。

第一原理電子状態計算による磁気的ナノグラファイトの可能性

新潟大院自然 丸山 正憲、草部 浩一

ナノグラファイトと呼ばれる、ナノメータースケールにあるグラファイト様炭素構造では、その端の形状に応じて、両端にクライインにより検討された修飾されたエッジ（クライイン端）や藤田らが検討したジグザグ端を持つとき、局在磁性が存在するという可能性が指摘されていた。これらのUHF近似による研究は、端に特徴的なエッジ状態が現れると同時に、電子間相互作用により、両端には逆向きのスピントリートメントが生じ、それらが反強磁的に結合するという共通の性質を示していた。さらに、岡田一押山によるLSDA計算もその結果を支持するものとなっていた。昨年、草部一高木によって、両端にジグザグ端とクライイン端、両方の構造を持つナノグラファイト構造において、自発的スピントリートメントが発生する可能性が、 π 電子ネットワークに対してハーバードモデルを適用することによって示された。実際、強磁性スピントリートメントがエッジ状態の作る平坦バンドに発生するために、一種の表面磁性が現れる。

我々は、この結果をもとに、両端にジグザグ端を持つナノグラファイトにおいて、一方のジグザグ端を1つの水素で、もう一方のジグザグ端を2つの水素で終端することで、磁性発現の可能性が存在するということを、LSDAによるバンド計算によって示している。そこでは、フェルミレベル近傍に平坦なバンドが現れ、そのバンドが完全にスピントリートメントするという結論が得られている。^[1]

今回、我々は、さらに、水素付加以外の方法で、同様の π 電子ネットワークの改質を行うことによって、磁性を持つナノグラファイト構造の選び出しを行った。具体的には、ジグザグ端を持つナノグラファイトにおいて、水素を付加した構造以外に、フッ素を付加した構造、酸素を付加した構造、メチレン基で終端した構造について、それぞれ検証していった。計算には、炭素系の構造と磁性の決定には十分な精度を持つと考えられている密度汎関数法に基づくLSDA計算を用いている。計算は、

ウルトラソフト擬ポテンシャルを用いた平面波展開によるもので、平面波展開のエネルギー・カットオフは49Ryまでとすることによって、構造の最適化を行っている。その結果、それぞれの構造は安定であることを確認した。バンド計算の結果、フッ素を付加した構造について、水素付加と同様の効果により、フェルミレベル近傍に平坦なバンドが生じることがわかった。図の実線と破線は、それぞれ、上向き及び下向きのスピンを持つ電子のバンドを示している、この平坦なバンドについて、水素付加の場合、完全にスピン偏極していたのに対して、フッ素付加の場合は、スピン偏極は部分的であることもわかった。また、酸素付加の場合は、主に、酸素原子上の局在軌道による偏極したバンドが生じるのに対して、メチレン基で終端したナノグラファイトにおいては、スピン偏極は存在しないこともわかった。

[1] 草部浩一・丸山正憲 「磁気的ナノグラファイト及び磁気的ナノチューブの合成可能性」 炭素 205 (2002) 出版予定。

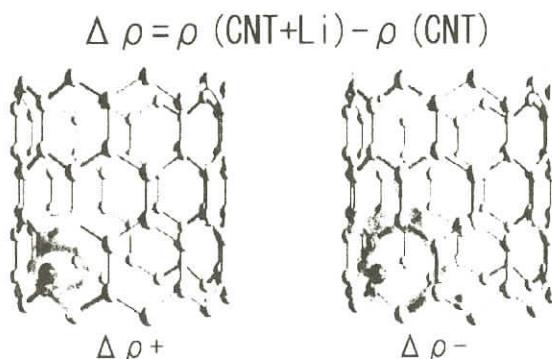
Li をドープしたカーボンナノチューブの第一原理電子状態計算

岩手大工 西館 数芽、馬場 守、長谷川正之

カーボンナノチューブ (CNT) はユニークな電子特性から21世紀におけるナノテクノロジーへの応用が非常に期待されている物質である。一方、CNT はまた、リチウムイオンを使用した充放電可能な高エネルギー密度二次電池の負極材料の有力な候補として期待されている物質でもある。ここ数年、特にリチウムイオン二次電池電極材料としての CNT の利用を目指した実験的研究が多くなされるようになってきた。第一原理計算法を用いた理論研究にも進展が見られ、特に単層 CNT (SWNT) を束ねたバンドル系へのリチウムイオンやカリウムイオンのドーピングについて、HF 法などによるクラスター計算やウルトラソフト擬ポテンシャルによる LDA レベルの計算が行われつつある。

リチウムイオン二次電池は正極と負極との間でリチウムイオンを取り取りすることによって電池動作が進行する。我々は先に Li イオンの含有濃度に依存した正極材料としての LiMnO_2 系の構造と磁性の安定性に関する第一原理計算を行った^[1]。また、圧力制御を施した $O(N)$ 強結合近似分子動力学法 (TBMD) コードにより、SWNT の一軸性加圧下における構造安定性について調べた^[2, 3]。

本研究は SWNT への Li イオンの吸着過程を第一原理電子状態計算により調べることを目的とする。計算にはコード VASP を用い平面波基底と PAW 法^[4]を使用した。交換相関項の評価は局所密度近似 (LDA) による。スーパーセルは SWNT を横切る軸方向に大きく取り、仮想的に孤立した SWNT を構築した。カットオフエネルギーは 400eV である。システム B における 32CPU から 64CPU の並列計算を実行した。並列化に関する計算時間のスケーリングは良好であった。図に (10,0) SWNT への Li 原子の吸着前後における電荷密度の変化 (差電荷密度分布) を示す。 $\Delta\rho^+$ ($\Delta\rho^-$) は Li 原子の吸着に伴い、新たに形成される (消滅する) 電荷分布を表している。



図から明らかなように、Li 原子の吸着過程は SWNT を構成する他の 6 員環からの電子雲の移動も伴うことがわかる。このことは、Li 原子からの電子の移動が、単純な Li 外郭 2s 電子の SWNT への移動過程として捕えることが出来ないことを示している。現在、Li イオン吸着における SWNT のバンド構造の変化についての詳細な計算を計画中である。

本研究の計算は物性研究所のスーパーコンピュータ（システムB）を使用することにより可能となりました。ここに深く感謝いたします。

- [1] K. Nishidate, M. Baba, M. Hasegawa, S. Komaba, and N. Kumagai, Jpn. J. Appl. Phys., **40**, (2001) 6873 - 6883.
- [2] T. Ito, K. Nishidate, M. Baba, T. Sato, K. Shindo, and K. Nishikawa, J. Phys. Soc. Jpn., **69**, (2000) 2531 - 2535.
- [3] T. Ito, K. Nishidate, M. Baba, and M. Hasegawa, J. Phys. Soc. Jpn., **70**, (2001) 2593 - 2597.
- [4] G. Kresse and D. Joubert, Phys. Rev. B **59** (1999) 1758.

炭素系物質の構造特性と電子構造

東工大理 三宅 隆

固体の性質を電子論の立場から記述する簡便な方法としてタイトバインディング法が挙げられる。電子構造の概形を理解する方法として優れているが、長距離相互作用や電子相関の効果はうまく取り込めない。本研究会では、炭素系物質を例にとり、長距離相互作用が密度汎関数理論およびグリーン関数法により如何に記述されるかを議論した。

1. ピーポッドの電子構造

最近、カーボンナノチューブが C_{60} などのフラーレンを内包した炭素系複合物質が実験的に合成されるようになり、その形状からピーポッド（さやえんどう）と呼ばれている。我々は、半導体である (14,7) チューブが C_{60} を内包したピーポッドの電子バンド構造を局所密度近似 (LDA) を用いた密度汎関数理論により求め、タイトバインディング法による結果と比較した。

その結果、タイトバインディング法ではフェルミ準位近傍のバンド構造はナノチューブに起因するのに対し、LDAでは C_{60} の非占有状態である t_{1u} バンドがギャップ中に降りてくることが見つかった。

電荷分布の解析などから、これは、 t_{1u} 状態がナノチューブの中空に広がった自由電子的な状態と混成して、そのエネルギー準位を押し下げられるためであることがわかった。すなわち、ナノチューブとフラーレンの相互作用が電子物性を決定する重要な役割を果たしている。

2. グラファイトの層間相互作用

さて、ナノチューブやフラーレンは、弱い相互作用により束縛しあって固体を形成する。このように化学結合によらない相互作用を、グリーン関数法を基に考察した。ここでは、グラファイトの層間相互作用を例としてとりあげた。グリーン関数は LDA で得られた一体の波動関数と一電子固有値とともに構成し、電子相関の効果を乱雑位相近似 (RPA) によって取り込んだ。

全エネルギーを層間距離の関数として計算した結果、距離が実験値の二倍程度まで離れたとき、LDA では交換相関エネルギーがほぼ定数と見なせるのに対して、RPA では層間距離とともに相関エネルギーの絶対値が減少し続ける様子が見られた。これは、長距離力である分散力が本質的に非局所な相互作用であることに起因すると考えられる。この結果は、LDA では記述が困難な分散力が RPA で改善されることを示唆している。

量子ドットを介した超伝導接合系の数値解析

新潟大学自然 草部 浩一

量子ドットを介した異方的超伝導体接合においては、接合界面にゼロエネルギー状態として知られるアンドレーフ・束縛状態が形成される効果と、量子ドット上の電子相関効果が共存することにより、特有のトンネル現象が現れる。^[1, 2]我々は、量子モンテカルロ法を用いた数値計算により、異方的超伝導体-量子ドット接合系や量子ドットを含む SQUID を調べ以下の特性が現れることを示した。

(1) 異方的超伝導体-量子ドット接合系における近藤効果

单一ドットを介した超伝導接合では、クーロンブロックエイドにより π 接合が実現し、さらに低温で近藤効果により再び 0 接合になることが理論予測されている。我々はクーロンブロックエイドによる π 接合形成を、量子モンテカルロ計算による dc ジョセフソン電流の決定により確認していたが^[3]、異方的超伝導体接合において生じるゼロエネルギー状態の形成により、極低温で生じる近藤効果を数値計算上も確認できると予想した。量子ドットを介した p 波超伝導体接合に対する電流の温度依存性を見ることで、ドット上のクーロン反発 U による近藤効果が温度の低下とともに π 接合から 0 接合に至るクロスオーバーとして捉えられた。^[2]

(2) 量子ドットを含む dc-SQUID におけるジョセフソン電流

SQUID 構造にドットを埋め込んだ場合には、クーロンブロックエイドによる π 接合形成により、外部磁束に対する電流依存性においても電流の符号反転が生じると考えられる。そこで、ポテンシャル障壁と量子ドットの 2 種類のトンネル接合を持つ dc-SQUID を考え、量子ドットのトンネル接合が弱い場合を考える。系の自由エネルギーを最小にする超伝導位相差は、ポテンシャルバリヤ側の接合により決まつくるため、 U の値によらず超伝導位相差を決めることが出来る。このようにして、孤立した dc-SQUID のパラメータを定めてから U の効果を量子モンテカルロ法により評価した。得られた結果は、 U による π 接合形成により電流の符号反転が生じていることを示している。(図 1)

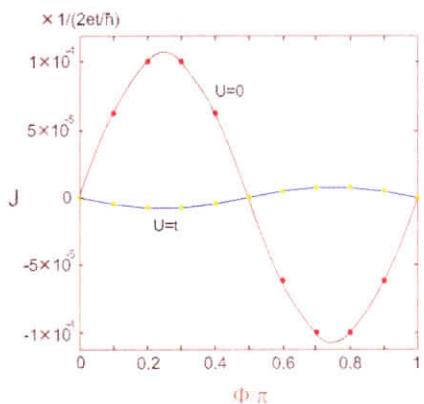


図1：量子ドットを含むdc-SQUIDにおける永久電流の外部磁束依存性。クーロン反発 U があると、 π 接合が生じることによる電流の符号反転が生じる。 Φ を外部磁束を $\hbar c/e$ により規格化した値とする。

(1)の研究は、名古屋大学田仲由喜夫助教授、神奈川大学田沼慶忠助手との共同研究です。

- [1] Y. Avishai and A. Golub, *Phys. Rev. B* **61**, 11293 (2000).
- [2] K. Kusakabe, Y. Tanaka and Y. Tanuma, presented at the 23rd Int. Conf. on Low Temp. Phys. (Hiroshima) August (2002).
- [3] K. Kusakabe and Y. Tanaka, *J. Phys. Chem. solid* **63**, 1511 (2002).

量子粒子の固化（ゼロ点振動の効果）

名大理 平島 大

最近、北村らによって、陽子の量子効果を取り入れた固体水素の第1原理計算が行なわれた。^[1] その結果によると、量子効果によって、水素分子は配向秩序する。通常、量子効果（ゼロ点振動）は、局在を妨げると考えられるが、彼らの結果は、そのナイーブな直感に反しているように思われる。一方、すでに、量子効果によって粒子の局在が促進されることを示すと考えられる実験結果が得られている：グラファイト上に吸着された水素分子系の相図が、80年代に詳しく調べられており、同位体効果も調べられている。^[2] たとえば、気相から、 $\sqrt{3}$ 相とよばれる基盤ポテンシャルとコメンシュレートな固体相に転移する温度は、水素分子 H_2 の場合、約 21K であるのに対して、これより質量の大きい重水素分子 D_2 の場合、転移温度は約 18K である。つまり、より軽い、従って、よりゼロ点振動の大きな粒子の方が、より高い温度で固化する。このような事柄を動機として、我々は、粒子の固化（局在）に対する量子効果（ゼロ点振動の効果）を明らかにするために、適当な基盤上に吸着された2次元粒子系の気相-固相転移を、経路積分モンテカルロ法を用いて研究した。

粒子の統計性は、いまの場合本質的には重要ではないので、粒子は区別できるものとした。また、基盤ポテンシャルの corrugation を導入し、さらに、密度は固体相が $\sqrt{3}$ となるような値に固定した（これによって、KT的転移の可能性を排除できる）。転移温度（融解温度）は、ビンダーパラメーターを用いて決定した。粒子間の相互作用は、純粋な斥力相互作用の場合と、レナードジョーンズポテンシャルで与えられる場合とを扱った。粒子の質量を変化させて、転移温度を計算したところ、粒子の質量が軽くなると、すなわち、量子効果が大きくなるに従って、転移温度が上昇することが確かめられた。すなわち、量子効果によって、固体相が安定化されることが確かめられた。

純粋な剛体球については、量子効果によって、固体相が安定化されることがすでに知られている。^[3] 今回の我々の結果によって、圧力下の固化（局在化）においては、一般に、量子効果によって、固体

相（局在相）が安定化され得ることが示された。

- [1] H. Kitamura, S. Tsuneyuki, T. Ogitsu and T. Miyake: *Nature* **404** (2000) 259.
- [2] H. Wiechert: *Physica B* **169** (1991) 144.
- [3] たとえば、M. H. Kalos, D. Levesque and L. Verlet: *Phys. Rev. A* **9** (1974) 2178.

Catalytic Role of Metal Ions in the Cleavage of RNA: a Car - Parrinello Molecular Dynamics Point of View

筑波大物理 Mauro Boero
産総研 館野 賢、寺倉 清之

Since their discovery in the early 1980s, catalytic RNA molecules have been at the center of great attention in molecular biology and medical science. The main reason is the fact that RNA enzymes (ribozymes) can be engineered to cleave other target RNA molecules. In this respect, ribozymes are very promising therapeutic agents able to inhibit gene expression and can be used in gene therapy of cancer^[1,2,3]. Yet, the mechanism of the cleavage reaction escapes experimental probes. By using a density functional based molecular dynamics approach within the Car - Parrinello formulation^[4] we have simulated the phosphodiester cleavage process^[5]. The results of the simulations indicate that a divalent metal cation (Mg^{2+}) is essential both in selecting the right reaction path between two possible competing channels and in lowering the activation barrier of the reaction. Another important factor is the presence of the solvent, in which all the experiments either *in vitro* or *in vivo* occur. Water molecules form a continuous hydrogen bond (H - bond) network connected to all the hydrophilic part (O atoms and OH groups) of the RNA molecule. On one hand, the H - bonds stabilize the structure, on the other hand, they provide a path along which the H^+ transfer via a *proton wire*^[6] mechanism can occur. On a second instance, we have found that a Mg^{2+} cation can promote the proton abstraction process, that represent the initial stage of the reaction, but, at the same time, the formation of a solvation shell around it interrupts the H - bond network and can prevent a true transfer from one site of the ribozyme to another one. In this case, the lost proton is dispersed in the solvent in form of a hydronium (OH_3^+) group.

- [1] D. Zhou, and K. Taira *Chem. Rev.* **98**, 991 (1998).
- [2] D. M. Perreault and E. V. Anslyn *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **36**, 433 (1997).
- [3] G. F. Joyce *Science* **289**, 401 (2000); E. A. Schlutes and D. P. Bartel *Science* **289**, 448 (2000).
- [4] R. Car and M. Parrinello *Phys. Rev. Lett.* **55**, 2471 (1985).
- [5] M. Boero, K. Terakura and M. Tateno *J. Am. chem. Soc.* **124**, 8949 (2002).
- [6] R. Pomès, B. Roux *J. Phys. Chem.* **100**, 2519 (1996).

確率変動クラスターアルゴリズムとその応用

都立大院理 富田 裕介、岡部 豊

モンテカルロ法で臨界点近傍の様子を調べようすると、相関長が系のサイズと同程度に大きくなり、スローダイナミクスと呼ばれる系の状態更新が極度に遅くなる問題が発生する。この問題を克服する1つの方法としてSwendsen-Wang(SW)クラスターアルゴリズムがある。通常のモンテカルロ法では系の状態更新は局所的になされるが、SWクラスターアルゴリズムでは相関長を反映したクラスターが形成され、系は大域的に更新される。その結果、スローダイナミクスの問題は大幅に改善された。

確率変動クラスター(PCC)アルゴリズム^[1]はSWクラスターアルゴリズムに1つ手を加え、臨界点を前もって知ることなしに自動的に臨界点に近づき物理量を計算するアルゴリズムである。具体的には以下の手順をクラスター形成のあとに加える。

クラスターがパーコレートしているかどうかを調べ、もしパーコレートしていれば(いなければ) 温度を ΔT だけ上げる(下げる)。

パラメタ $\Delta T \rightarrow 0$ の極限で通常のSWアルゴリズムと一致する。我々はPCCアルゴリズムを2次元Pottsモデルに対し適用し、厳密解との比較からPCCアルゴリズムを使うことで効率よく少ない計算量で臨界現象を解析できることを示した。

確率変動クラスターアルゴリズムの応用として2次元希釈イジングモデルの臨界現象を調べた。不純物を加えたランダムな系と不純物のない純粋な系のそれぞれで臨界現象が同じユニバーサリティクラスに属するか否かがランダムスピニ系での大きな興味の一つである。くりこみ群による最近の計算結果からランダムなサンプルごとの臨界温度と物理量の分布の重要性が指摘されている。従来のアルゴリズムでサンプルごとの臨界温度を評価することは困難な計算だが、PCCアルゴリズムでは自動的にサンプルに依存する臨界温度が得られるので特別な困難は無い。我々がPCCアルゴリズムを用いて計算した臨界温度と磁化の分布はくりこみ群の計算結果と無矛盾であった。またBinderパラメタの計算から、2次元希釈イジングモデルの臨界現象は純粋系の固定点によって記述され、純粋系の固定点のまわりではシステムサイズに対し対数のくりこみがあることを示した。

温度の上げ下げの判定基準としてクラスターのパーコレーションの他に相関関数の比(相関比)を使うことができる。この場合、相関比の値に適当な閾値を設定し、あるスピニ配置における相関比がこの閾値を超えたか否かで温度を調節する。相関比を用いることでクラスターアルゴリズムの存在しない物理系に対しても確率変動アルゴリズムを適用することができる。

我々はこの確率変動アルゴリズムを2次元量子XYモデルに適用した。アルゴリズムは最近量子モンテカルロ法で進展のあった連続虚時間ループクラスターアルゴリズムを用いた。非対角成分の相関比の計算は従来のアルゴリズムでは困難であったがループクラスターアルゴリズムでは容易である。我々が得たデータと最近の計算結果とを比較した結果、確率変動アルゴリズムが量子スピニ系の解析にも有効であることを示した。

[1] Y. Tomita and Y. Okabe, Phys. Rev. Lett. **86**, 572 (2001); J. Phys. Soc. Jpn. **71**, 1570 (2002).

基底状態ループアルゴリズム

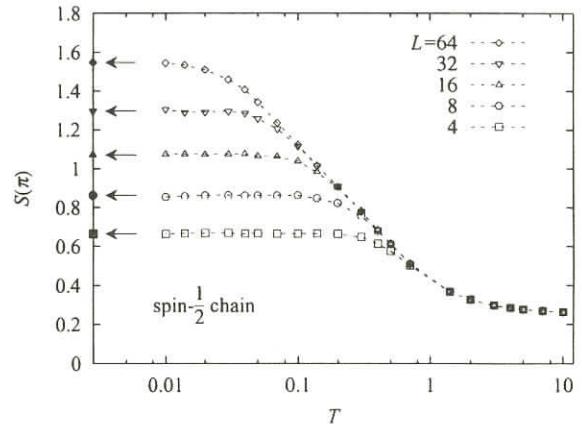
東大院工 藤堂 真治

量子モンテカルロ法における連続虚時間ループアルゴリズムは、量子スピン系のシミュレーションにおいて最も強力な手法の一つである^[1]。我々はループアルゴリズムを拡張し、基底状態の物理量を直接求める新しいアルゴリズムを提案した^[2]。基底状態の性質を調べる場合、これまでには有限温度のシミュレーションで得られた結果を $T=0$ まで手で外挿していたが、今回提案するアルゴリズムにはパラメータとして温度が含まれておらず、直接基底状態でシミュレーションが行なわれるため、外挿は全く不要である。

このアルゴリズムの基本的な考えは^[3]に基づくが、我々のアルゴリズムでは虚時間 $\gamma=0$ を通る複数のループを考える。さらに鈴木-Trotter 分解に基づく経路積分表示ではなく、SSE (Stochastic Series Expansion) 表示をもじいて量子系を古典系にマップする。これにより量子スピン系の基底状態を非常に効率良くモンテカルロ計算することが可能となる。有限温度の連続虚時間ループアルゴリズムと同様に、虚時間の離散化にともなう系統誤差はなく、トロッター外挿は不要である。また物理量の自己相関時間も非常に短い。

図に従来の有限温度アルゴリズムと今回我々が提案した絶対零度アルゴリズムとの比較結果を示す。ここでは $S = \frac{1}{2}$ 反強磁性ハイゼンベルグ鎖（長さ L ）の静的構造因子 $S(k=\pi)$ の計算を行なった。有限温度の計算（白抜きのデータ）では、 L が大きくなるにしたがって、絶対零度の値への収束が遅くなり、 $L=64$ では $T=0.01$ においてもまだ収束していないが、絶対零度アルゴリズム（左端）では系のサイズに関係なく一度の計算で絶対零度の値が精度良く得られていることがわかる。

今回提案したアルゴリズムは、ランダム量子スピン系のシミュレーションに特に有効である。ランダム系ではサンプル毎にギャップの絶対値が大きく異なるため、従来の有限温度アルゴリズムでは絶対零度の極限を取るのは非常に困難であった。一方、今回のアルゴリズムではギャップの大小にかかわらず常に絶対零度の結果が得られる。さらに計算に必要なメモリ量、CPU時間はサンプル毎に自動的に最適化されたものとなる。



[1] S. Todo and K. Kato, Phys. Rev. Lett. 87, 047203 (2001).

[2] S. Todo, in preparation.

[3] H. G. Evertz and W. von der Linden, Phys. Rev. Lett. 86, 5164 (2001).

Path - Integral Renormalization Group

東京大学物性研究所 今田 正俊

経路積分繰り込み群法を用いた最近の進展について述べた。

1. 方法の進展

経路積分繰り込み群法を、量子数を限定して、射影してゆく方法を報告した。これによって、励起状態についての計算が可能になった。特にスピンと運動量を限定した計算によって励起の分散やスピニギャップの有無などの情報が得られることがわかった。また、求められたエネルギーの精度も顕著に向上了。通常のハバード模型に対してこの手法を適用した結果、chiral perturbation theory によって、反強磁性秩序があるときにスピン波励起から予想される有限サイズギャップのスケーリングのふるまいと良く一致する結果が得られた。さらに、運動量などの量子数を限定して、対称性に対する拘束条件を課しながら、エネルギーを最小化して行く方法（対称性射影型経路積分繰り込み群法）を開発したが、これによってそれぞれの量子数での最低エネルギー状態の評価の精度がさらに向上した。

2. 非磁性絶縁体

幾何学的フラストレーションのあるハバード模型で、モット転移の近傍のモット絶縁体領域に非磁性絶縁体相が以前のPIRG計算によって、見出されていたが、この相の基底状態の持つ性質をより詳しく明らかにした結果を報告した。スピン励起などにギャップを持たない、固有のモット絶縁体としての様相が明らかとなっている。

なおここに報告した成果は、水崎高浩、渡辺真仁、鹿島毅、森田秀和各氏との共同研究に基づくものである。

物性研短期研究会パネルディスカッション報告

パネラー 岡部 豊、川勝 年洋、寺倉 清之、宮下 精二、高山 一

研究会に先立ち、物性研究所スーパーコンピュータシステム（物性研システム）の活用状況に関する調査委員会によって、物性研システムが物性研究のコミュニティにおいてどのように使われているか、どのように役立ってきたか、今後どのように改善して行くべきかを調べるために、アンケートが行われた¹。

その結果の報告をもとに、物性研システムのありかたに関して熱心な議論が、予定時間を延長してなされた。

アンケートの概要と調査委員会メンバーの感想、そこで出てきた要望などへの物性研側からの回答を以下に示す。

これらの議論の後、ユーザーがより主体的に物性研システムの有効活用に参加する組織として、「計算物性物理連絡会」の設立が決まった。ユーザー側世話人として渡邊（第一原理計算）、古川（強相関電子系）、藤堂（強相関スピン系）、福島（統計力学）、川勝（ソフトマテリアル）の各氏にお願いすることになった。これらの世話人の判断による、関連する分野のより集中的なミニワークショップや講習会、物性研システムへの要望の提案などを通じて、より緊密な研究協力、物性研シス

テムならではの方法論の共有、開発をめざし、タイムリーでより具体的な対応を可能にしていきたいと考えている。

アンケートの概要について

[研究分野、グループの規模]研究分野に関しては、第一原理計算、強相関電子系、などの電子状態の計算が全体の約半分、残りがスピニ系や非平衡系の統計力学である。研究グループの人数は、10人以下の中小規模なグループが多い。

[発表論文]半数近くのグループが10編以上の論文を出版し、物性研システムは非常に役立っているといえる。他の共同利用センターあるいは大学の計算機センターを、物性研に続く第2のリソースとして考えているユーザーが半数。残りの半数は、研究室のワークステーションで（不十分ではあっても）出来る範囲まで計算するか、あるいは研究が完成できないということで、物性研システムの重要性が分かる。

[物性研システムの役割]ほとんどのユーザーが計算リソースに期待。これに次いで多いのが、研究者の交流の場としての役割。研究会・講習会に対する期待は、あまり大きくない。研究室のワークステーションの利用が盛んになった今日でも、超大型計算を行う場としての物性研スーパーコンピュータシステムの重要度が理解できる。（このアンケートは物性研システムのユーザーだけを対象にしているので、もどもと小・中規模の計算が主体の物性研究者の多くが含まれていない可能性がある。）

[物性研システムの利用の満足度]システムに関して全体として、大きな不満はないように見える。ただ、海外の研究者に対する配慮を希望する声が比較的多い。審査方法に関してはほぼ満足されているようであるが、大型申請に関する制限の緩和を望む声もあった。ジョブクラスをもっと細分化して、色々なニーズに柔軟に対応して欲しいという要求が多い。

[他の計算リソース]物性研システムと他の計算リソースの関係では研究室のワークステーションで準備計算し、ISSPのスーパーコンピュータでプロダクションを行うという使い分けが一般的。その他全国共同利用のスーパーコンピュータも使用されているが、当然ながらISSPがメイン。

[並列化の取組み]並列化に関しては2極分化しているようで、積極的に活用しているグループと、ほとんど取り組んでいないグループの温度差が激しい。

[システムAとシステムBの使い分け]システムAを主体としているユーザーが多い。違いがよく分からぬいため、使いやすい（慣れた）システムを使っているというユーザーも多く見られる。システムの長所・短所などの啓蒙活動が必要と考えられる。

[諸外国のシステムとの比較]ISSPのシステムは、諸外国のシステムに比べて優位であるかあるいは見劣りしないというコメントが大多数。ただ、機種更新のタイミングが遅れれば、すぐに諸外国に抜かれてしまうのではないかと心配する声もあった。

[どのようなマシンを望むか?]高速、大容量、高精度の計算機を望むという一般的な希望が多いが、意見としてベクトルマシン（システムAを意味している場合もある）の存続を望む声が多かった。単体性能が高いことに力点が置かれている。本格ベクトル機のNECマシンの希望もある。逆に、高ノードパラレルを押す意見もあった。SR8000/60は使いにくいという意見もあった。

[OS、ジョブ制御言語はどのようなものが適当か?]圧倒的に、現在のunixへの支持が多い。

[重点的に取り組むべき研究分野、研究手法などについてご意見は?]パッケージの整備への要望が多い。分野に関しては、各研究者の研究分野を進めてほしいとの意見が多いが、重点領域を指定しない方が物性物理の幅広い発展に寄与できるのではないかとの意見もあった。

[研究室規模のワークステーションとのすみわけをどう考えるか?]計算準備は研究室、本計算は物性研システムという標準的な回答が多かったが、ワークステーションの性能向上によりその分かれ目が難しくなっている。技術的な問題として、ワークステーションと物性研システムが同様の環境で使えるようにしてほしいとの意見があった。大型計算にのみ専念すべきとの意見が複数あった。それに対して少数による独占は避けるべきとの声もあった。

[他の共同利用センターとの連携（ネットワーク化、申請の一本化、使用法の統一など）についてのご意見は?]ほとんどのユーザーは物性研システムのみを用いており、強い関心を示していないが、複数のセンターの間で利用を調整されるのをおそれる意見、センター自身が他センターとの統合につながるのではとのおそれなどのネガティブなものと、センターごとに使い方が異なり使いにくいくことの解消につながるとの意見の両方があった。ITBL, GRIDへの対応にも賛否両論があった。

[そもそも物性研システムを今後も是非とも維持すべきかどうか?]当然のことながら、大規模計算にはぜひ必要である。是非とも維持すべきとの意見が多かった。しかし、運営の困難さを心配する意見もあった。

1アンケートの詳しいデータはウェブ (<http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/public/cmp>) に掲載しておりますのでご覧下さい。

バネラーの印象

アンケート結果から受けた印象等（岡部豊）

1. 物性研システムの役割に関する質問について、ユーザー自身にとっての役割（B4）、現在物性研システムが果している役割（B5）、今後物性研システムに期待する役割（B6）を比較すると、ユーザー動向がわかるように思えた。個人としては「計算リソースが保証され、最先端の計算を目指す」との回答が最も多く同時に「単に計算リソースの一つとして利用」という回答も2割ほどあった。しかし、物性研システムの果している役割としては「物性研究において重要な計算リソースを提供し、全体の向上に役立っている」との回答が非常に多く、さらに将来については、「超大型計算可能なシステムの提供」、「安定した計算リソースの提供」、「プログラムの情報化と流通、研究会の開催」など、多様な期待が寄せられている。この多様性は、物性研究における計算物理学の特徴を反映しているもので、これに応えるシステムを継続運用することが望ましい。
2. ハードウェアに関して、世界のスーパーコンピュータにおける日本の占める寄与についての興味深い統計があるので紹介したい。Top 500 Supercomputer Sites (<http://www.top500.org/>) の2002年6月の統計によれば、物性研のシステムAは0.58Tflopsで62位（日本で13位）である。一方、35.86 Tflopsの「地球シミュレーター」が抜きん出た1位である。筑波大学の宇川氏が国際会議CCP2002（San Diego, 2002年8月）で報告された資料によると、1997年にはTop100の内30システムを日本が占め、計算能力としては23%だったのが、2002年には日本のシステムは20に減り、一方計算能力は37%になっている。「地球シミュレーター」のような超大型計算システムに国家予算が集中投資されていく中で、物性研のような大型計算システムにしわ寄せが及ばないことを望む。

3. ソフトウェアとコミュニティーに関しては、パッケージ整備や情報提供のコミュニティー作りをすると同時に、物性研が計算物理の研究センター的な役割を持つことが将来にわたる存在意義を示すことになると思われる。

アンケート結果から受けた印象（川勝年洋）

1. アンケートの集計結果および2001年度の採択課題数から、研究テーマとしては、大きくわけて(1)第一原理計算、(2)強相関電子系、(3)量子スピン系・磁性、(4)非平衡統計力学・ソフトマテリアルの4分野があり、そのうちで小規模な計算が主体的な分野（特に第(4)の分野）の応募が縮小傾向にあることがわかる。これは、物性研計算機センターの「計算物性研究の中心」としての役割の点からは好ましいことではないと考えられる。
2. 小規模かつ多様な計算課題を行う研究グループでは、物性研計算機センターの将来の役割として、「超大型計算のサポート」よりも「安定した計算リソースの提供」「物性研究全般を俯瞰した研究会の開催」など、計算物性研究分野全体のバックアップと情報交換の場を提供する役割を期待する声が多い。
3. 小規模研究グループでは、並列化やA／B両システムの適切な使い分けなどに対する取り組みがかなり遅れているが、これはテーマの多様性・個別性によるものとともに、計算機センターの啓蒙活動が行き渡っていないことを示していると思われる。
4. 物性研計算機センターの将来の方向として、最重点課題としての超大型計算のサポートとともに、計算物性研究の裾野を広げるべく、多様な小規模計算のサポートと啓蒙活動にも注力していただきたい。ただし、ユーザーの多様なニーズを少数の物性研職員の方だけで対応することは実際的ではないため、有志によるユーザーグループを用いたサポート体制の整備が適切であると思われる。

アンケート結果から受けた印象（寺倉清之）

1. 並列計算については、熱心なグループもある一方、全体的には不熱心だという印象を受けた。今後の一般的動向を考慮し、個々の研究効率の問題と同時に、計算機の効率的利用という観点から考えると、多少問題ではないかと危惧する。
2. ベクトル計算機への期待がまだまだ強い。ベクトル計算機の将来性を危ぶむ声もある一方、ベクトル計算機はわが国の得意な部分であり、計算機会社にも働きかけて、これを積極的に推進するということも一つの方策と考えられる。
3. 物性研の計算機システムの将来性については、独立行政法人化をひかえて、その見通しをよく議論しておく必要がある。物性研究における貴重な施設であり、将来的にも維持できることが望まれている。運用にあたる物性研メンバーがコミュニティのために公正な立場を貫いてこられた点に敬意を表するとともに、その恩恵を受けている人達からの一層の強力な支援をお願いしたい。
4. 計算物理の国内のコミュニティを整備し、上記のような支援体制を強化しておく必要がある。
5. 更に希望することとして、アジアでのコミュニティ形成とそこにおける研究活動活性化のために、物性研が貢献していただけることを期待したい。米国での活動、EUでの国際的な活動に対抗する上でも、アジアでのコミュニティ形成の努力があつてしかるべきではないかと考えている。例えば、第一原理電子状態計算の分野においては、既に4年前から我々が取り組んでおり、順調に発展しつつある。ここで重要なことは、研究レベルを高く維持しつつ、段階的にコミュニティの輪を広げることと考えている。

アンケート結果から受けた印象（宮下精二）

1. 物性研究で、未知の分野への挑戦への意欲を高め、世界への発信基地としての役割を果たしているといえる。
2. 高速、大容量、高精度で手続きは簡単にというタイプの抽象的な意見が多く、具体的にどのようにという回答が少なかった。物性研システムの研究対象が非常に広いという物性研究の特殊性から、特定の大型計算への過剰な集中を避け、広く一般の研究者にも利用を広げている方針は正しいと思うが、アンケートの中に物性研システムへの依頼心が強くなっているような印象を持った。いくつかの要望は、すでに可能なものがあるが、マニュアルなどの周知の不徹底の現れか？
3. ベクトルマシーン（システムAを意味している場合もある）の存続を望む声が多かった。単体性能が高いことに力点が置かれている意見も多かった。昔から使っているプログラムを変更したくないという消極的な動機もあるが、やはり、「速い」計算機を維持していくことは重要なのではないか。システムA、Bともに固有のユーザーがあることがわかった。
4. 計算準備は研究室、本計算は物性研システムという標準的な回答が多かったが、ワークステーションの性能向上によりその別れ目が難しくなっている。また、パッケージの整備への要望も多かった。単なる計算リソース配給でなく、物性研システムならではのノウハウの蓄積など積極的な活動を高めていく必要があるのではないか。それに対するユーザーの意識改革も必要。
5. 大型計算への配慮は良く行われているが、ディスクIOに改良の余地あり。申請の仕方については考慮の余地あり。投入の仕方について考慮必要。

物性研からの報告（高山一）

アンケートでは物性研システムに関して数多くの質問・要望が寄せられた。以下では、主に、システムの運用に関する質問等にお応えする。

○申請課題クラスについて

「Sクラスの敷居が高すぎる」との意見が寄せられたが、Sクラス申請ポイント数は10万kpt程度またはそれ以上を想定している。システムの1年間の総CPU時間をポイント数に換算すると、システムAで約90万kpt、システムBで約60万kptである。その1割程度を1年間にわたって利用するのがSクラス課題である。大規模計算による研究の支援が目的であるが、それなりの条件（共同利用委員会での説明）が付いている。

一方、Dクラス課題は随時申請でき、かつ共同利用委員会での説明は不要である。申請ポイント数の大きな課題に対しては、書面審査委員の数を増やすなどして審査に慎重を期している。そのような大型Dクラス課題は、研究の機動性を重視した、準Sクラス課題と位置付けている。なお、B、Cクラス課題などの研究から生じた緊急を要する重要な計算を行うのがDクラス課題である。従って、B、Cクラス課題のポイント数が残っている場合でもDクラス課題の申請は受理している。逆に、B、Cクラス課題のポイント数の不足を補うような主旨のDクラス課題は低い評価がされている。

「ユーザの裾野を広げるために、無審査&報告の義務のないクラスを設けては」とのコメントがあったが、現在のAクラス課題は、目的が物性研究であるか否かを委員長がチェックするだけで、無審査に近い。物性研システムに慣れてもらうのが目的であり、報告の義務なしとしてもよいであろう。

○課題審査

半期ごとのB、C課題は、課題審査委員の書面審査報告に基づき共同利用委員会で採択案を決定している。Dクラス課題は書面審査報告に基づき委員長が採択を決め、共同利用委員会で事後承認を得ている。「審査に時間がかかりすぎ」とのコメントがあった。課題審査委員には迅速な審査をお願いしているが、夏季休暇中など、審査委員の長期出張による審査の遅れについては対応策を検討していきたい。

○ジョブクラス

「大型、長時間クラスをもっと増やして欲しい」、「デバク用の大容量・短時間のクラスが欲しい」など、ユーザサイドに立てば当然と思われる要望が多々あったが、システム全体の利用効率とのバランスが問題であり、現在のジョブクラスにご理解をいただきたい。システムBについては月例の保守点検後に、128, 256CPUによる大規模計算を行うことができるので（要申請）、ご活用いただきたい。

○外国から（外国人）の利用

物性研共同利用の申請資格者、{国公私立大学及び国公立研究機関の教員、研究者並びにこれに準ずる者}、が長期国外出張している場合、国外からも申請、利用できる。国外の計算研究者（外国人を含む）でも、有資格者が研究代表者となった課題の共同研究者として、国外からの利用を認めている。

○単にCPU時間を提供するだけでなく、計算物性物理のセンターとしての役割を果たすべきとの指摘は、今回のアンケートに限らず、これまでも所内外からなされていた。研究会やテーマ別のミニワークショップの開催、物性関連のアルリズムやプログラムパッケージの収集など、いろいろすべきことはあるが、所内外の協力が不可欠であり、積極的なご協力をお願いしたい。

研究会事後経過報告

研究会終了後、本報告のまとめの段階での世話人間のメール交信により、上記の「計算物性物理連絡会」に加えて、計算物性物理のメーリングリストおよびホームページを構築していくこととし、これらの活動を検討していくワーキンググループとして「計算物性物理幹事会」を設立した。メンバーは岡部、川勝、寺倉、宮下、今田、上田（和）、吉本、高山。

その目的は、単に、物性研システムの充実・向上にあるだけでなく、計算物性物理分野全体の計算環境の向上と学問自体の発展を追及することにある。

現在、かなり大規模の大型計算機システムの導入を伴うプロジェクト「ナノグリッド」の構想があり、その実現に向けた動きが急である。テーマをナノサイエンス・ナノテクノロジーに限定し、産官学共同研究として、また、物理と化学の学際領域研究として推進しようとするものである。この類のテーマ限定のプロジェクトは計算物性物理にとっても必然性の高いものであるが、それが従来の共同利用大型計算機システムが不要になるということには繋がらない。特に、物性研システムのように、誰もがそれぞれの研究の進展に応じた規模の大型計算を実行できるシステムは堅持していかなければならない。このような問題についても、幹事会・連絡会が核となって計算物性物理のコミュニティとして議論を深めていく必要があろう。

物性研究所談話会

日時：2002年12月13日（金） 午前11時～12時30分

場所：物性研究所 6階 A615号室

講師：Prof. Pavel Lipavsky

(Institute of Physics, Academy of Sciences, Praha, Czech Republic)

題目：Electrostatic field in stationary superconductors

要旨：

Diamagnetic currents in superconductors, would they be at surfaces or in the Abrikosov vortex lattice, create inhomogeneous patterns that are accompanied by the local charge transfer. Theoretical and experimental approaches to these charges and related electrostatic field will be discussed from early measurements of the Hall voltage to recent NMR and NQR experiment.

日時：2002年12月20日（金） 午後1時30分～3時30分

場所：物性研究所 6階 A615号室

講師：Prof. Christopher J. Stanton

(Department of Physics, University of Florida)

題目：Coherent Acoustic Phonons in GaN and GaN/InGaN Heterostructures and Epilayers

要旨：

While for years, ultrafast lasers have been used to generate coherent optical phonons in bulk semiconductors, recently huge coherent acoustic phonons have been generated in GaN/InGaN superlattices, multiple quantum wells, and epilayers. The complex microscopic theory – including the effects of strain - induced piezoelectric fields and valence band mixing – can be mapped onto a simpler problem: a nonuniformly loaded string. In superlattices the oscillation frequency is set by the superlattice period. In epilayers and single quantum wells, the oscillation frequency is surprisingly determined by the wavelength of the probe laser! Furthermore, in epilayers, the coherent phonons are localized wavepackets and can be used to probe nano - scale structures below the sample surface – a technique we call “Nanoseismology”. Finally multiple laser pulses can be used to coherently control the dynamics of the acoustic phonons and to manipulate the large piezoelectric fields in these systems.

日時：2003年2月7日（金） 午前10時30分～12時

場所：物性研究所6階 A615号室

講師：Dr. A. V. Balatsky

(Los Alamos National Laboratory)

題目：Inelastic tunneling spectroscopy in d-wave superconductors

要旨：

Inelastic tunneling spectroscopy is a standard tool to measure collective excitation spectrum. Recently it has been implemented in STM tunneling near adsorbed molecule on the surface of metal. We propose to extend this technique to the case of nonmetallic density of states, such as d-wave superconductor and pseudogap state. The spectroscopic features in dI/dV and its dependence on position will be discussed. Simple analysis indicates the effect is in a 10 percent range and might be measurable. Recent success of STM in connecting the ARPES and local density of states proves that STM can be used to extract detailed spectroscopic information about quasiparticle spectrum. We find that one also can use STM to possibly detect the neutron scattering collective mode(so called 42 meV mode). I will discuss the proposal to use STM to detect collective modes in d-wave superconductor.

日時：2003年2月17日（金） 午後3時30分～5時

場所：物性研究所6階 A614号室

講師：Prof. David N. Hendrickson

(カリフォルニア大学 サンディエゴ校 化学科)

題目：Molecular Nanomagnets

要旨：

Single-molecule magnets(SMMs)are molecules that function as single-domain magnetic particles which, below their blocking temperature, exhibit the classical macroscale property of a magnet, namely magnetization hysteresis.⁽¹⁾

SMMs owe their properties to a combination of a large ground state spin value and easy-axis-type anisotropy, which give a significant barrier to magnetization relaxation. SMMs thus represent a molecular (or bottom up) approach to new nanoscale magnetic materials, offering all the advantages of molecular chemistry (room temperature synthesis, purity, solubility in many solvents, a well defined periphery of organic groups, a crystalline ensemble of monodisperse units) as well as displaying the superparamagnetism of a mesoscale magnetic particle. They also display quantum tunneling of magnetization(QTM), emphasizing that they straddle the interface between the classical and quantum regimes. SMMs have many potential applications, but these require that their properties be both understood and controlled, particularly QTM. The Mn₁₂ SMMs are the best understood. Various derivatives have been prepared differing in the organic groups, and it has been discovered that the [Mn₁₂O₁₂(O₂CR)₁₆(H₂O)₄]SMMs can be reduced to give both the [Mn₁₂] - (S=19/2 or 21/2) and [Mn₁₂]₂ - (S=10) versions. Mn₄ SMMs with S=9/2 have also been

extensively studied. In some cases, two Mn₄ SMMs occur as supramolecular dimers, [Mn₄]₂, and exchange interactions between them lead to interesting modifications of their QTM properties, establishing the feasibility of tuning the QTM in SMMs.⁽²⁾

- 1) G. Christou, D. Gatteschi, D. N. Hendrickson, and R. Sessoli, MRS Bulletin 25, 66 (2000).
- 2) W. Wernsdorfer, N. Aliaga - Alcade, D. N. Hendrickson, and G. Christou, Nature 416, 406(2002).

日時：2003年2月27日（木）午前10時30分～12時

場所：物性研究所6階 A615号室

講師：Dr. P. Thalmeier

（Max - Planck - Institute for the Chemical Physics of Solid, Dresden, Germany）

題目：MAGNETISM AND SUPERCONDUCTIVITY IN BOROCARBIDES

要旨：

The rare earth borocarbide superconductors RNi₂B₂C are a new class of electron - phonon superconductors with relatively enhanced T_c. However in the nonmagnetic compounds R=Lu, Y low temperature and thermomagnetic properties show clearly the presence of gap nodes uncommon for electron phonon superconductors. An s+g wave model for the gap function is presented and its consequences are discussed. The magnetic borocarbides like HoNi₂B₂C show an interesting coexistence behaviour of commensurate and Incommensurate AF with superconductivity which leads to near reentrance behaviour of the latter. The observed metamagnetism is due to local Ho moments and can be explained within a CEF model, it also explains the incommensurate structure. Reconstruction of conduction electron Bloch states due to AF leads to observed AF/S C coexistence behaviour.

日時：2003年3月3日（月）午後1時30分～

場所：物性研究所6階 A615号室

講師：杉野 修

（東大物性研究所）

題目：界面構造とショットキー障壁

要旨：

金属半導体接合に生じる界面電位（ショットキー障壁）は、半世紀以上の歴史を持つ界面物理の古典的な問題である。ショットキー障壁は、金属側と半導体側のフェルミレベルが一致するように電荷移動が起こり、電気二重層が形成されることにより生じるものであり、電気伝導に本質的な役割を果たす。この障壁の高さΦが、金属種にあまりよらないことから、Φは半導体固有の性質（電荷中性点の位置）を反映しているものと考えられてきた。

さて90年代の後半に、半導体集積回路のコンタクト材料が TiSi₂ から CoSi₂ へ転換する時期が訪れたが、その時筆者らはNECにおいて CoSi₂/Si(001) や NiSi₂/Si(001) の第一原理計算を行い、界面

構造やショットキー障壁に関する予測を行った。その結果、界面構造には数種類の準安定構造が存在し、それぞれ Si のダングリングボンドの数やフェルミレベル付近の電子状態がかなり異なっている事が解った。ショットキー障壁の高さ Φ も 1eV 近く異なっており、 Φ が界面構造に鈍感だというこれまでの経験則と反する結果が得られた。この事は、もし電極材料として均一・平坦なエピタキシャル界面が用いられた場合、 Φ が変えられることを意味すると同時に、将来の分子（ナノ）デバイスにおいても界面構造を含めた議論が重要であることを示唆する。

日時：2003年3月10日（月）午前11時～

場所：物性研究所6階 A615号室

講師：芳賀 芳範

（原子力研究所 先端基礎研究センター）

題目：SmS の圧力誘起磁気秩序

要旨：

SmS は 0.7GPa 以上の圧力で価数揺動状態を示す。このとき室温の電気抵抗は常圧半導体相の値よりひと桁小さく、可視光の反射率が極めて大きい事からgold phaseと呼ばれる。しかし低温では狭いギャップを持つ半導体的振舞いに変わり、Kondo 絶縁体の典型例として考えられる。 2GPa 以上では電気抵抗に鋭いピークが現れると同時に低温では金属的振舞に変化することが報告されている。我々は、高圧下での磁気抵抗、交流比熱、 ^{149}Sm メスバウア分光により、この金属相の基底状態の研究を行った。

比熱では、比熱のピークに相当する温度で明瞭な2次相転移が観測され、低温の秩序相では、Sm 位置に $4f$ 電子による内部磁場と電場勾配が生じることが分かった。この事は Sm が 3 値のクラマースイオンになっていることを意味する。一方、この磁気転移温度は 23T の強磁場まで全く変化せず、特異な磁気秩序相が実現していると考えられる。

日時：2003年3月18日（火）午後1時30分～2時30分

場所：物性研究所6階 A615号室

講師：Prof. H.-J. Mikeska

（University of Hannover, Germany）

題目：Biquadratic exchange interactions in low-dimensional spin systems

要旨：

We present results on phase diagrams and elementary excitations of $S=1/2$ ladders in the presence of biquadratic interactions, in particular of cyclic (ring)exchange: Combining weak and strong coupling approaches a rather complete picture of ring exchange related phases is obtained, including the existence of a spontaneously dimerized phase. The elementary excitations of the spin ladder material $\text{La}_6\text{Ca}_8\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ show the signature of the corresponding phase transition. The relevance of cyclic exchange on the elementary excitations in 2D Cu-O materials such as La_2CuO_4 and copperdeuteroformate will be discussed.

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 助教授 1名

2. 研究内容

物性理論。新しい分野の開拓に意欲的な若手研究者。

なお、物性理論研究部門は、例えば量子輸送現象、ナノ構造物理学、ソフトマテリアル、光科学などの分野を含め、総合的に物性科学研究を推進しようとしている。

3. 任期

任期は10年とする。ただし、再任は可とし、1回を限度とする。

4. 公募締切

平成15年5月30日(金) 必着

5. 就任時期

決定後なるべく早い時期を希望する。

6. 提出書類

(イ) 推薦の場合:

推薦書（健康に関する所見を含む）

履歴書（略歴で結構です）

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）

着任後の研究計画書（2000字程度）

(ロ) 応募の場合

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）

着任後の研究計画書（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）

7. 書類提出先

〒277-8581 千葉県柏市柏の葉5丁目1番5号 東京大学柏地区庶務課人事掛
電話 04 (7136) 3205 e-mail jinji-kakari@issp.u-tokyo.ac.jp

8. 本件に関する問い合わせ先

〒277-8581 千葉県柏市柏の葉5丁目1番5号 東京大学物性研究所物性理論研究部門 今田正俊
電話 04 (7136) 3275 FAX 04 (7136) 3276
e-mail imada@issp.u-tokyo.ac.jp

9. 注意事項

「物性理論研究部門助教授応募書類在中」、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。

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15年2月20日

東京大学物性研究所長
福山秀敏

下記により助手の公募をいたします。適任者の推薦、希望者の応募をよろしくお願ひいたします。

1. 研究施設名等及び公募人員数

附属中性子科学研究施設*

中性子量子物性領域（廣田研究室） 助手 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大学共同利用機関であり、茨城県那珂郡東海村に設置されている。したがって、主たる勤務地は同設置場所である。

(*本施設は、平成14年度末で廃止・転換される附属中性子散乱研究施設に替わって、平成15年度に新設されるものである)

2. 研究分野及び任務

中性子散乱を用いた固体物理学（高温超伝導体、強相関電子系、リラクサー誘電体など）の研究に強い意欲を持ち、かつ中性子散乱関連の装置、実験手法およびデータ収集システム等の開発にも強い関心をもつ研究者を希望する。中性子散乱の経験の有無は問わない。全国共同利用に関連する業務（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、当研究施設は日米科学技術協力「中性子散乱」の実施機関でもあるため、米国への派遣などの関連業務もある。

3. 応募資格

修士課程修了、又はこれと同等以上の能力を持つ人。

4. 任期

任期は5年とする。ただし、再任は可とし、1回を限度とする。

5. 公募締切

平成15年6月30日(月)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（3編程度）

(ロ) 応募の場合

- 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（3編程度）
- 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）

8. 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科学研究施設 廣田和馬

電話 029 (287) 8903 e-mail hirota@issp.u-tokyo.ac.jp

9. 書類提出先

〒277-8581 千葉県柏市柏の葉5丁目1番5号

東京大学柏地区庶務課人事掛

電話 04 (7136) 3205 e-mail jinji-kakari@issp.u-tokyo.ac.jp

10. 注意事項

「附属中性子科学研究施設（廣田研究室）助手応募書類在中」、又は「意見書在中」の旨を朱書きし、郵送の場合は書留とすること。

11. 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15年2月26日

東京大学物性研究所長
福山秀敏

Technical Report of ISSP 新刊リスト

Ser. A

- No. 3690** Generation and Application of Megagauss Magnetic Fields, by N.Miura,
Y. H. Matsuda, K. Uchida, S. Ikeda, T. Sekitani and F. Herlach.
- No. 3691** Superconductivity of the $Sr_2 Ca_{12} Cu_{24} O_{41}$ Spin Ladder System:
Are the Superconducting Pairing and the Spin-Gap Formation of the Same
Origin?, by N.Fujiwara, N. Mori, Y. Uwatoko, T. Matsumoto, N. Motoyama
and S. Uchida.
- No. 3692** Perpendicular Magnetic Anisotropy of Co/Pd(111) Studied by Spin-
Resolved Photoelectron Spectroscopy, by Masahiro Sawada, Kei Hayashi and
Akito Kakizaki.

物性研だより第42巻目録（第1号～第6号）

第42巻第1号 2002年5月

物性研究所研究会報告

- 「極紫外・軟X線高輝度光源の実現へむけて」 1

物性研究所ISSPワークショップ報告

- 「ゆらぐSi(100)の構造」 4

物性研ニュース

- 人事異動 19

- 東京大学物性研究所の教官公募の通知 22

- 平成14年度物性研究所協議会委員名簿 24

- 平成14年度共同利用施設専門委員会委員名簿 24

- 平成14年度外来研究員等委員会委員名簿 25

- 平成14年度人事選考協議会委員名簿 25

- 平成14年度高輝度光源計画推進委員会委員名簿 25

- 平成14年度軌道放射物性研究施設運営委員会委員名簿 26

- 平成14年度中性子散乱研究施設運営委員会委員名簿 26

- 平成14年度中性子散乱実験審査委員会委員名簿 27

- 平成14年度物質設計評価施設運営委員会委員名簿 27

- 平成14年度スーパーコンピュータ共同利用委員会委員名簿 28

- 平成14年度スーパーコンピュータ共同利用課題審査委員会委員名簿 28

- 平成14年度物質合成・評価設備共同利用委員会委員名簿 29

- 平成14年度前期外来研究員一覧 30

- 平成14年度中性子回折装置共同利用採択課題一覧 44

- 平成14年度前期スーパーコンピュータ共同利用採択課題一覧 55

- 平成14年度前期短期研究会一覧 58

- 平成14年度後期共同利用の公募について 59

- 平成13年度外部資金の受入状況について 71

- テクニカルレポート 新刊リスト 72

- 第47回物性若手夏の学校 73

編集後記

第42卷第2号 2002年7月

物性研究所短期研究会報告

- 「高温超伝導体におけるボルテックス・マターの物理」 1

物性研究所ISSPワークショップ報告

- 「ISSP Theory Forum for the 21 Century」 40

- 強磁場物性の現状と将来展望 53

- Cd₂Re₂O₇に関するミーティング 57

- 高輝度光源における光学素子評価と分光器の提案 58

- 物性研究所談話会 60

物性研ニュース

- 人事異動 61

- 東京大学物性研究所の教官公募の通知 62

- テクニカルレポート 新刊リスト 67

編集後記

第42卷第3号 2002年9月

物性研究所短期研究会報告

- フラストレート系の磁性と新しい物性 1

- ガラス物性およびガラス転移研究の新展開 63

物性研究所ISSPワークショップ報告

- DSC ワークショップ 107

- 物性研究所談話会 127

物性研ニュース

- 東京大学物性研究所の教官公募の通知 132

- 東京大学物性研究所一般公開のお知らせ 133

- テクニカルレポート 新刊リスト 135

編集後記

第42卷第4号 2002年11月

- 2次元直交ダイマースピン系における磁化プラトーと磁気超構造 龍川 仁、樹神 克明 1

物性研究所ISSPワークショップ報告

- VUX・SX高輝度光源における原子分子科学・生命科学の展望 7

- ソフトマター中性子散乱研究の将来計画 27

- 物性研究所談話会 45

物性研ニュース

○人事異動	47
○平成14年度後期短期研究会一覧	48
○平成14年度後期外来研究員一覧	49
○平成14年度後期スーパーコンピュータ共同利用採択課題一覧	59
○平成15年度前期共同利用の公募について	61
○平成14年度外部資金の受入れについて	74

編集後記

第42巻第5号 2003年1月

物性研に着任して	廣田 和馬	1
第1回物性研短期研究会	菅野 晓	3
超高圧で超伝導が誘起される有機化合物 β - (BEDT-TTF) ₂ Cl ₂	上床 美也、谷口 弘三	5
物性研究所短期研究会報告		
○分子性導体の物質探索と新機能開拓		11
○「高輝度極紫外・軟X線放射光」による物性21世紀		66
物性研究所談話会		102
物性研ニュース		
○アンダーソン教授来所		105
○退官記念講演会		106
○人事異動		107
○東京大学物性研究所の教官公募の通知		108
○テクニカル・レポート 新刊リスト		110

編集後記

第42巻第6号 2003年3月

物性研に着任して	杉野 修	1
物性研究所短期研究会報告		
○強磁場下物性研究の現状と新展開－新しい基盤構築へ向けて		3
○物性研究における計算物理		25
物性研究所談話会		69
物性研ニュース		
○東京大学物性研究所の教官公募の通知		73
○テクニカル・レポート 新刊リスト		75
○物性研だより第42巻目録（第1号～第6号）		76

編集後記

編 集 後 記

今年の冬は予想より寒く桜の開花も去年よりだいぶ遅いようです。イラクでの戦争も始まり、海外旅行も大きく減るのでしょうか。

この第6号は、強磁場研究会の報告および計算物理の短期研究会報告が入りました。また杉野先生の新任の挨拶もいただきました。今年も国立大学法人化、COE等で忙しくなりそうです。

新年度からは物性研ホームページも大幅に模様替えし、充実する予定です。これにともない、図書委員会は大幅な物性研だよりの変更を計画中です。

次号の締め切りは4月18日です。

所属または住所変更の場合等は事務部共同利用までお願いします。

高 橋 實