

# 物性研だより

第46巻  
第1号

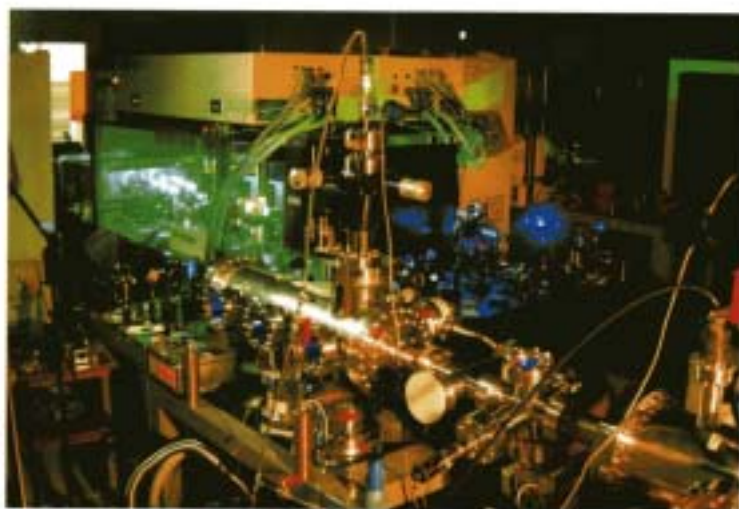
2006年4月

## 目次

- 1 メソスコピック系物理学の理論研究：  
優秀な実験家とともに……………江藤幹雄
- 3 外国人客員所員を経験して……………Yong-Shi WU
- 5 ワンフーズフィジックス……………関川太郎
- 物性研究所短期研究会報告
- 9 ○次世代ナノ・エレクトロニクスのための  
電子状態計算の基礎理論
- 41 物性研究所談話会
- 物性研ニュース
- 42 ○人事異動
- 48 ○東京大学物性研究所教職員公募の通知
- 53 ○平成18年度前期短期研究会一覧
- 54 ○平成18年度前期外来研究員一覧
- 64 ○平成18年度前期スーパーコンピュータ共同利用採択課題一覧
- 68 ○平成18年度中性子回折装置共同利用採択課題一覧
- 81 ○平成18年度後期共同利用の公募について（通知）
- 82 ○平成17年度外部資金の受入について
- 83 ○第51回物性若手夏の学校

## 編集後記

アト秒パルス発生・計測に使ったレーザー（後方）、高調波発生チェンバー（中央）、光電子分光器（右手前）（渡部研究室）



東京大学物性研究所

ISSN 0385-9843



# メゾスコピック系物理学の理論研究：優秀な実験家とともに

慶應義塾大学理工学部、東京大学物性研究所 江藤 幹雄

今年度の後期、客員所員として物性研究所での研究の機会をいただいた。受け入れて下さった勝本信吾教授には、いつも貴重な時間を割いて議論をしていただき、心より感謝している。私の専門は、メゾスコピック系、特に量子ドットの理論研究である。同じ分野の実験研究において、第一線で活躍中の勝本教授との共同研究はたいへん有益である。(勝本教授は実験家と言っても理論家よりも理論に通じていらっしゃるが。)言うまでもなく、半導体微細加工の研究分野の進展は著しく、ナノスケールの系において新しい物理現象が次々に見つかっている。実験結果に触発されて理論研究が進み、あるいは理論の検証のために実験技術が進歩する。物理学の理想的な状況だと言えよう。

私のこれまでの研究を振り返ってみても、実験家との関わりが強い[1-4]。1996年に樽茶清悟氏が縦型量子ドットを用いて「人工原子」の性質を観測された。それに触発させて、量子ドット中の少数電子系の研究を始めたのが、この分野への本格的な参入である。電子間相互作用を厳密対角化の方法で計算したところ、実験結果を定量的に説明することができた。樽茶氏と共同で実験をおこなっていた Kouwenhoven 氏(オランダ、デルフト工科大学)らとともに、磁場による基底状態の転移、強磁場下での強い電子相関効果、励起状態のふるまい等を理論、実験の両面から詳細に調べた[1]。

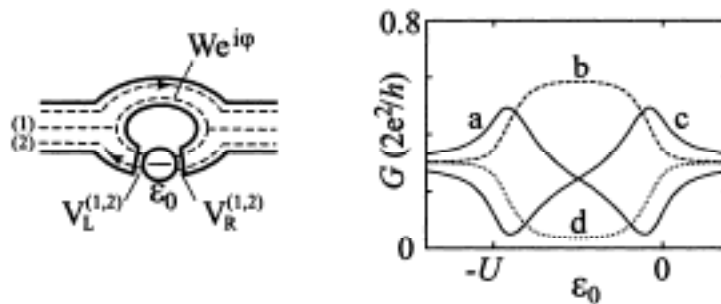
1999年度、デルフト工科大学に1年間滞在した。1980年代後半に理論家が予言していた量子ドットでの近藤効果が、実験で初めて観測された頃である。Kouwenhoven 氏のところで偶数電子系の示す近藤効果が観測され、その理論研究に従事することになった。量子ドットでは1電子準位の間隔を磁場で制御することができる(半導体中では  $g$  因子が小さく、磁場によるゼーマン効果は無視できる)。偶数電子系でスピン1重項と3重項のエネルギー差を制御すると、 $\nu = 0$ の近傍で近藤効果が著しく増大する。金属中の磁性不純物系では起こりえない、量子ドット系特有の近藤効果である。この現象の理論研究を、デルフトの理論グループの Nazarov 氏と共同でおこない、実験結果の説明に成功した[2]。

NTTの佐々木智氏らは、縦型量子ドットの近藤効果の実験を進展させ、奇数電子系(スピン  $S = 1/2$ )においても、エネルギー準位の縮退点近傍で大きな近藤効果が生じることを見出した。複数の軌道が寄与する近藤効果(スピンも含めた全縮退度が  $N$ )は、従来の磁性不純物系の研究で  $SU(N)$ 近藤効果として知られている。量子ドット中、2個の軌道エネルギーの縮退点では  $SU(4)$ 近藤効果が期待され、実際実験結果は  $SU(4)$ 近藤効果による近藤温度の増大としてほぼ説明された[3]。ただし、磁性不純物系との相違点も存在する。球対称のモデルで良く記述される磁性不純物系の場合とは異なり、量子ドット中の軌道とフェルミの海とのトンネル結合の大きさは軌道ごとに異なる。したがって、厳密には  $SU(4)$ 対称性は成り立たない。 $SU(4)$ 近藤モデルを一般化して解析したところ、 $SU(4)$ 近藤効果の強結合固定点が安定でなくなり(marginalとなる)、その結果近藤温度や電気伝導度のふるまいが  $SU(4)$ の場合と定量的に異なることがわかった[5, 6]。

現在、勝本教授と共同で、Aharonov-Bohm(AB)リング中に埋め込まれた量子ドットの近藤効果を研究している。近藤効果は共鳴準位が常にフェルミ準位に一致して現れる“共鳴現象”であるので、電子が量子ドットを通過するときの位相シフトは  $\pi/2$  に固定される。勝本教授らは、ABリングを貫く磁場を変えてAB振動を見ることで、その位相シフトの明確な観測に初めて成功した。まず見事な実験結果があって、それを説明するために“ない頭”を使う状況は、デルフト工科大学滞在中の研究状況と良く似ている。[大きな違いは、本務の大学での教育や雑用のために研究だけに集中できる環境ではないこと、物性研までの通勤時間がやたらと長いこと(筑波エクスプレスができたものの東横線沿いの家から柏キャンパスまでの道は遠い!)]である。]複雑な実験状況の中から、その物理現象の本質を抽出してモデル化する作業は、試行錯誤の繰り返しであるが、理論研究の醍醐味でもある。その結果辿り着いたモデルと計算結果を下図に示す: (i) 量子ドット中の準位  $\varepsilon_0$  をゲート電圧で変えると、 $-U < \varepsilon_0 < 0$  ( $U$  はドット中のクーロン反発)のときにドット中にスピン  $S = 1/2$  が局在し、左右のリードとのトンネル結合によって近藤効果が生じる。(ii) AB位相[(a)  $\varphi = 0$ , (b)  $\pi/2$ , (c)  $\pi$ , (d)  $3\pi/2$ ]とともに電気伝導度  $G$  が変化する様子は、近藤効果によって量子ドットでの位相シフトが  $\pi/2$  に固定されることを示している(ファノ・近藤効果)。これは実験結果とよく一致する[4]。(iii)モデルでは、ABリング内の磁場によって作られる端状

態を考え、2つの channel を計算で取り入れた[7]。Channel 2 はカイラリィーより伝導には寄与しないと仮定した。Channel 1 だけのモデルでは、2 端子測定での Onsager の関係式から  $\varphi = \pi/2$  と  $3\pi/2$  で同じ  $G$  を与えてしまい、実験結果に合わない。近藤効果の計算には有限  $U$  slave-boson 平均場近似を用いた。

最後に、はじめに理論ありき、の研究もあることを、2つの例をあげて示したい。(I) 青野友祐氏らと共同で、2重量子ドットの近藤効果を研究した[8]。ドット間のトンネル結合  $t$  がドットとリード間の結合(線幅 で特徴づけられる)よりも大きい場合、2つの近藤状態間の結合・反結合軌道が形成され、電子はそれを通して伝導する。 $t < \dots$  のときは近藤分子軌道の形成は見られず、一方の近藤共鳴準位から他方のそれへのホッピングで電気伝導が決定する。この理論が予言した2種類の近藤効果は後の実験で確かめられた[Jeong *et al.*: Science **293** (2001) 2221]。(II) 量子ポイントコンタクト(QPC)において、電気伝導度が  $2e^2/h$  を単位に量子化されることが知られている。スピン軌道相互作用がある場合のQPCの電気伝導を数値的に調べたところ、電気伝導度の量子化が見られる領域で自発的にスピン分極が生じることがわかった[9, 10]。InGaAs ヘテロ構造において分極率は50%以上になり得るため、スピントロニクス分野から興味を持たれている。この理論を検証する実験を、国内の複数のグループが開始して下さっている。勝本教授もこのスピン分極検出のユニークなアイデアをお持ちで、近い将来我々の理論が観測されるものと期待している。



## References

- [1] L. P. Kouwenhoven, T. H. Oosterkamp, M. W. S. Danoesastro, M. Eto, D. G. Austing, T. Honda and S. Tarucha: Science **278** (1997) 1788.
- [2] S. Sasaki, S. De Franceschi, J. M. Elzerman, W. G. van der Wiel, M. Eto, S. Tarucha and L. P. Kouwenhoven: Nature **405** (2000) 764.
- [3] S. Sasaki, S. Amaha, N. Asakawa, M. Eto and S. Tarucha: Phys. Rev. Lett. **93** (2004) 017205.
- [4] H. Aikawa, S. Katsumoto, Y. Iye and M. Eto: in preparation.
- [5] M. Eto: J. Phys. Soc. Jpn. **74** (2005) 95.
- [6] T. Sato and M. Eto: (NRGによる計算) in preparation.
- [7] 近藤効果には2つのchannelとも寄与するが、いわゆる“two-channel”近藤効果とはならない。4個の消滅演算子  $a_{r\alpha}^{(i)}$  ( $\alpha = 1, 2, r = L, R$ ) からユニタリ変換をおこなうと、1つのモード  $a_{eff} = (1/\sqrt{V_{eff}}) \sum_{\alpha,r} V_r^{(\alpha)} a_{r\alpha}^{(i)}$  のみが量子ドット中の準位と強さ  $V_{eff} = \sqrt{\sum_{\alpha,r} |V_r^{(\alpha)}|^2}$  でトンネル結合し、他の3つのモードは全く結合しないことがわかる。
- [8] T. Aono, M. Eto and K. Kawamura: J. Phys. Soc. Jpn. **67** (1998) 1860.
- [9] M. Eto, T. Hayashi and Y. Kurotani: J. Phys. Soc. Jpn. **74** (2005) 1934.
- [10] 江藤幹雄: 固体物理 **40** (2005) 955.

# 外国人客員所員を経験して

## Research and Activity Report for My ISSP Visit in 2005 Summer

**Yong-Shi WU†**

(† On sabbatical leave from Department of Physics, University of Utah, USA)

I am honored to have been awarded a Visiting Professorship from the Institute for Solid State Physics, the University of Tokyo. I paid the visit for three months in summer 2005, collaborating with my host Prof. Mahito Kohmoto and his theory group. The following is my research and activity report of this visit, including comments and impressions of mine for the ISSP.

### 1. My Academic Activities in Japan

I arrived at Tokyo on May 19th and left on August 20th. During this period, I stayed basically at the Institute for Solid State Physics, University of Tokyo, at the Kashiwa campus. During my stay I have had a trip outside Tokyo to Osaka University (at Osaka) and Hokkaido University (at Sapporo) for about ten days (see below).

I gave a formal seminar on my recent work in condensed matter theory, titled “Topological Aspects of the Spin Hall Effect” in the ISSP on July 15th, and actively participated in most academic activities of the Theory Division of the ISSP during my stay.

I have had numerous discussions with my host, Prof. Mahito Kohmoto, and with members of his research group at the ISSP including his assistant, Dr. Masatoshi Sato, and several of his postdoc and students. Our discussions were concentrated on two major research directions in the recent frontier of condensed matter theory: the spin Hall effect in solid-state systems, a recently emerging research direction in spintronics, as well as the topological orders in two-dimensional strongly correlated systems, a hot topic at the frontier of quantum phase transitions. In addition to giving informal presentations on relevant topics during the discussions, I also made concrete suggestions about what to do for the research topics.

Professor Kohmoto is expert in the quantum Hall effect and strongly correlated systems, which overlap with my interests, and in many other areas of condensed matter theory which I am not familiar with. His expertise motivates the research directions of his group. And his insightful remarks during discussions are often very beneficial to our ongoing collaborative research. In particular I spent a lot of time with Dr. M. Sato individually on many topics, to explore the effects of randomness in the Rashba model, a major model with spin-orbit coupling for spin Hall systems, and to formulate a better framework for classification of topological orders in two dimensional systems. By the end of my stay, we have made great progress in improving our understanding of the topics being discussed, which has not only resulted in one or two joint papers but also has laid down a solid foundation for continuing the beneficial and fruitful collaboration between Prof. Kohmoto (and his group) and me in the future. It is worth to mention that one of his students, Mr. Daijiro Tobe, has got involved in the numerical calculations of the random Rashba model and made impressive progress; though it will take a while to further confirm and finish the numerical computations, the present preliminary results look encouraging and significant. To report the new numerical findings is expected to take a couple of collaborative papers.

Moreover, through the introduction of Prof. Kohmoto, I had chances to discuss with Professor N. Kawashima on supersolid, a newly discovered phase of matter in the quantum regime, especially on the possibility of using Monte Carlo method to test theoretical ideas in the study of supersolids.

During the period of my stay, I also visited the other two campuses of University of Tokyo, the Hongo and the

Komaba campus, on June 22nd and July 12th, respectively. At the Hongo campus, I visited Prof. Hatsugai at the Department of Applied Physics, a former postdoc of Prof. Kohmoto, discussing recent progress of each of us on condensed matter theory. At the Komaba campus I gave a seminar on the spin Hall effect, and had discussions with Prof. Hikami and other members of the condensed matter theory group there.

I was invited by Professors Y. Hosotani and K. Higashijima of Osaka University and Professors K. Ishikawa and N. Kawamoto of Hokkaido University, who are my old particle theorist friends in Japan. So in early August I paid visit to Osaka and Sapporo and had good time with my hosts, giving seminars on my recent work in string theory and chatting about physics. While in Sapporo, there was a summer school on string theory for young scholars in Japan. I was invited by the organizers and gave a talk in string theory.

I have enjoyed my sabbatical leave at the ISSP. I am happy that this visit has not only promoted a successful ongoing collaboration with my host Professor M. Kohmoto and his capable and vigorous group, but has also laid down a good foundation for future fruitful collaboration.

## **2. My Impressions on Sciences in Japan**

From newspapers I read that the economic situation in Japan is in recovery, getting better and better. I have noticed that at least for my fields in science, that is string theory and condensed matter theory, the situation in Japan is in good shape. For these areas in basic researches, this is just opposite to that in the U.S., where the economy is not bad but severe budget cuts have damaged the basic research in science. I think the trend in Japan for maintaining and promoting basic scientific researches is very good and far-sighted. And I hope this good trend should keep its momentum.

## **3. Comments and Impressions about the ISSP**

Previously in 1990's I had several chances to visit the ISSP, when it was located in Roppongi area in Metropolitan Tokyo. The last time was in summer 1997. The present visit is my first time to the Kashiwa campus. I am impressed not only by the excellent new research environments, but also by the rapid success of the several experimental groups in ISSP, in particular by the progress in material research and fabrication and in physics under extreme conditions. This will further promote the success of theoretical research in the ISSP.

The ISSP visiting professorship program looks great and effective. It has benefited my Japanese colleagues and myself a lot. The ISSP program certainly should be continued and strengthened.

Also I was impressed by the efficiency and activities organized by the International Liaison Office. Not only I felt happy with the warm hospitality, but also with the opportunities to learn about Japanese culture. The quality of the activities is high, and the time intervals seem right too. The staff in the ILO must have spent quite a bit efforts in organizing the activities, and also the efficiency in dealing with administrative duties is admirable.

I feel the research environments of the ISSP are better than before. Discussions and exchange of scientific opinions between different labs and divisions, particularly among students and postdocs could be further encouraged. I have participated in several colloquia, which did not exist before in the ISSP. I have enjoyed them very much.

I am impressed by the research group of my host Professor Kohmoto at the ISSP. Prof. Kohmoto himself is recognized by my U.S. colleagues as one among the best Japanese condensed matter theorists, who has made fundamental contributions to our understanding of topological aspects of solid-state physics and the multi-fractal behavior of self-similar systems such as quasi-crystals etc. His researches are often original and creative, and well-received by the international scientific community. During this visit I have enjoyed his insightful remarks during discussions. Also I admire that he has built up a very capable and vigorous theory group, though the number of the members of his group is not big.

I deeply appreciate the warm hospitality and the chance to have a pleasant and fruitful collaboration from the ISSP, from the Director Professor K. Ueda and from Prof. Kohmoto and his group. I am happy that I will be busy, at least for a quite while, with the continuing productive collaboration with Prof. Kohmoto and his group. I sincerely hope that this visit of mine is the beginning of more exchanges between the ISSP and our department.

# ワンフリーズフィジックス

北海道大学大学院工学研究科 助教授 関川 太郎  
(物性研究所先端分光研究部門渡部研究室 元助手)

平成 16 年度の ISSP 学術奨励賞をいただいてから、早くも 1 年経とうとしています(この文章が掲載される時には、平成 17 年度受賞者が決まっているでしょう)。平成 17 年 8 月に北海道大学へ転出したこともあり、受賞の挨拶と転出の挨拶を兼ねて書かせていただくことになりました。しばらくの間おつき合い願います。

## 1. アト秒パルス光の発生と計測

最初に ISSP 学術奨励賞の対象となった研究を簡単に紹介させていただきます。やったことは、アト秒 ( $10^{-18}$  sec) 光パルスの発生と計測です [1,2]。特に、非線形光学現象を起こすほど強いアト秒パルスを発生したのが特徴です。なぜ超短光パルスを発生するのか? その動機の一つは瞬間写真を撮るためであることは間違いないと思います。目にもとまらない速い動きを止めてみたい、というのは人間の欲求の一つのようです。そのため、いまでもミルククラウンの写真(図 1)に多くの方が惹きつけられ、ノーベル化学賞が 2 回、時間分解分光に与えられているのだと思います。レーザーの発明により光パルスの時間幅は飛躍的に短くなり、現在、フェムト秒 ( $10^{-15}$  sec) 領域は比較的簡単にアクセスできるようになりました。1999 年に Zewail がフェムト秒レーザーを使って化学反応中の原子の動きをとらえたということでノーベル賞を受賞しましたが、ちょうど分子を含む物質内部での原子の振動周期がフェムト秒台であることに対応しています。

当然、次の目標はアト秒光パルスの発生です。世界中のレーザー関係の研究者が研究ののぎを削っています。現在、可視光を使った光パルスの最短パルス幅は約 3 フェムト秒です。電磁波の振動周期で 2 周期をきる時間幅となっており、これ以上の短パルス化はほぼ限界と考えられています。そのため、高次高調波発生はアト秒パルス生成のための有力な方法と考えられてきました。高次高調波は、レーザー電場と原子や分子の非線形相互作用により発生する次数の高い高調波のことです(図 2)。発生機構が非線形なのでもとのレーザーパルスより時間幅が短くなるのが期待されます。図 3 にモデル計算の結果を示します。時間幅が 8 fs パルスを使って 9 次高調波をアルゴンガスから発生した場合です。非線形応答により -5 fs 付近より急峻に高調波パルスが立ち上がりますが、-3 fs 付近でレーザー電場によるアルゴンガスのイオン化により高調波の発生が止まり、アト秒パルス発生が期待されます。



図 1:平成 17 年の夏に県立柏高校の生徒がスーパーサイエンスハイスクール研究室訪問で渡部研究室に来たときに撮影したミルククラウン。

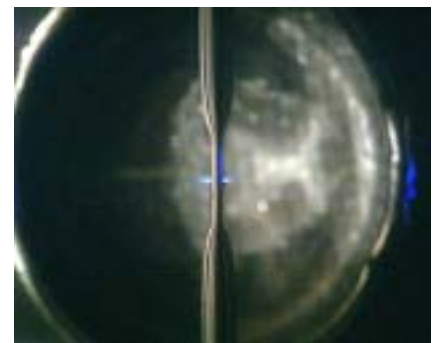


図 2:高次高調波の発生。青色超短パルスレーザー光を真空中に吹き出すアルゴンガスに集光し、高次高調波を発生させる。白く光っているのは、アルゴンガスがイオン化して生成したプラズマからの発光。

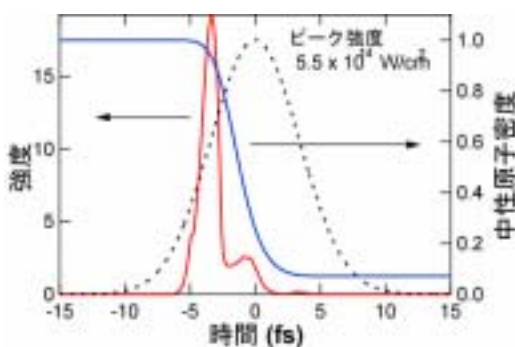


図 3:9 次高調波発生モデル計算。8 fs パルス(点線)から発生する、9 次高調波の時間波形(赤線)。青線は、高調波発生に寄与する中性原子の密度の時間変化を示す。

実験に使用したレーザーは、渡部研究室で開発された、繰り返しが1 kHz、パルスエネルギーが約10 mJ、パルス幅が最短21 fsのチタンサファイアレーザーシステムです(図4) [3]。モデル計算によると、アト秒光パルスを発生するためには、更に時間幅の短い光パルスを高調波発生に用いる必要があります。そこで、光パルスを構成するすべての周波数を2倍にする広帯域波長変換の手法を採用し、パルスエネルギーが約1.5 mJ、パルス幅が最短で8 fsの青色パルスレーザーを発生させました [4]。このレーザーパルスを、図2のように希ガスに集光すればアト秒光パルスが発生しているはずですが。今回の研究では、我々は、9次高調波(光子エネルギー27.9 eV)に注目しました。

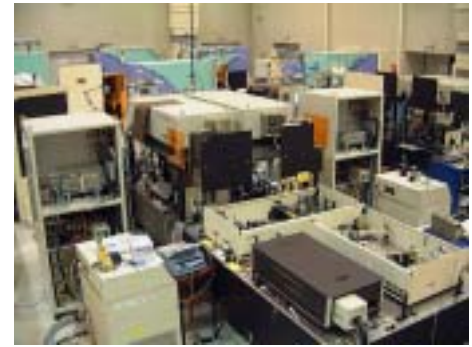


図4：渡部研究室の繰り返し1 kHzで21 fsパルスを発生するチタンサファイアレーザーシステム

次の課題は、どのようにアト秒光パルスを計測するか、ということになります。これまで、光ストリーク法やRABITと呼ばれる方法でアト秒光パルスの測定が報告されていますが、非線形光学現象を引き起こすほど強い光パルスは発生していませんでした。今回、我々が発生したアト秒光パルスにより、通常二光子イオン化の断面積より1桁断面積の小さい、二光子超閾イオン化(Above-threshold ionization)という現象が起きることを見いだしました。図5に二光子超閾イオン化により放出された光電子スペクトルを示します。ヘリウム原子が9次高調波光子を2つ吸収して、光電子を放出します。今回見いだした非線形光学過程を用いることにより、可視域の光パルスと同様に自己相関法によるパルス幅計測が行えます。

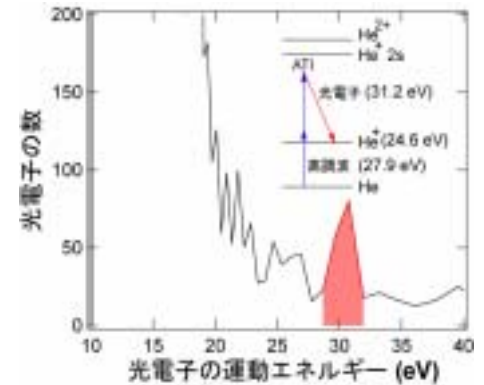


図5：二光子超閾イオン化によるヘリウムの光電子スペクトル

図6に自己相関法によるパルス幅の測定のための実験配置図を示します。青色パルスレーザーを空間的に分けて、別々に高調波パルスを発生します。高調波間の遅延時間は、青色パルスレーザーの遅延時間により変化させています。9次高調波を選択的に反射するSc/Siの多層膜鏡でヘリウム原子へ集光し、二光子超閾イオン化を起こします。二光子超閾イオン化は光強度の二乗に比例して遷移確率が大きくなります。そのため、二つのパルスが同時にヘリウム原子を照射すると、一つのパルスが独立に放出する光電子の数より3倍光電子の数が増えます。このように、出てくる光電子の数と遅延時間の関係を測定することにより自己相関関数を測定し、パルス幅を見積もります。図7に測定した自己相関関数を示します。高調波発生に用いたレーザーのパルス幅がa 8.3 fsの場合とb 12 fsの場合の結果です。パルスの時間波形をガウス関数(図中赤線)と仮定してパルス幅を見積もると、それぞれ950 asと1.3 fsでした。青線は9次高調波のスペクトル波形から考えられる最短パルスの自己相関波形であり、実験結

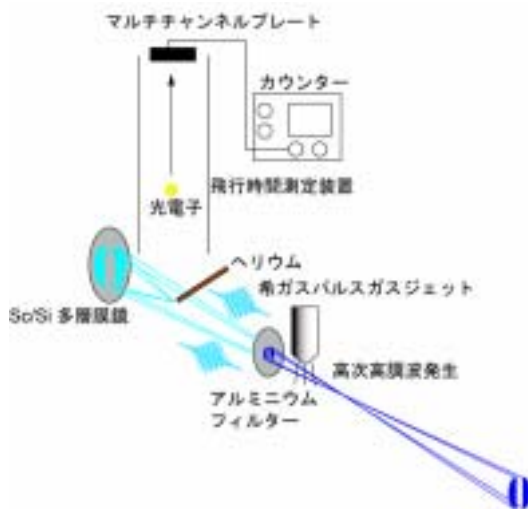


図6：高次高調波パルスの自己相関波形測定のための実験配置図。

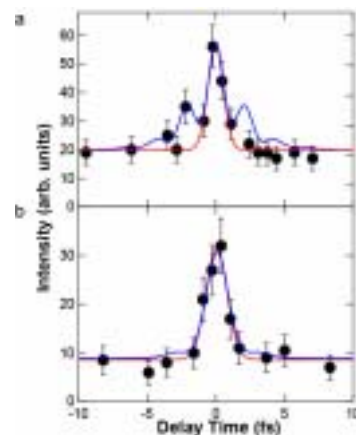


図7:a 8.3 fsレーザーで発生した9次高調波の自己相関波形。b 12 fsレーザーで発生した場合。赤線はガウス関数でフィッティングした結果。青線は、高調波発生に寄与する中性原子の密度の時間変化を示す。

果とほぼ一致しフーリエ限界パルスであることがわかりました。

アト秒光パルスを使い、今後どのような展開が期待できるでしょうか？当然、アト秒領域で起こる超高速現象の観測ができることとなります。物質を構成する原子はほぼ止まっていると考えられるので、電子の動きが見えるだろうと言われていています。ただ、これまでのフェムト秒レーザーパルスと異なり、アト秒光パルスの光子エネルギーは極端紫外から軟X線領域にあるため、価電子帯電子よりむしろ内殻電子との相互作用による現象も現れてくるはずですが、例えば、オージェ過程という内殻電子を励起した際に起こる特有の緩和過程がありますが、我々は信州大学の伊藤稔先生と共同研究をおこなうことにより、時間分解することに成功しています[5]。フェムト秒レーザーの延長というよりは超短パルス軌道放射光というイメージになり、アト秒スケールでの電子状態の変化を調べる時間分解光電子分光などに大きな威力を発揮するのではないかと考えています。

## 2. 物性研での研究生生活を振り返って

私が物性研に着任したのは1996年で、物性研が六本木にある時でした。近くにあった青山墓地で、満開の桜のもと花見に興じる人々が、とても新鮮に見えました。六本木という華やかなイメージの場所ということもあるでしょうが、ようやく職を得て新しいことをやろうという気持ちの高ぶりもあったと思います。学生時代は、光物性の中でも、分光法の開発など機器寄りの研究より物質のおもしろさを探求したい、と思い試行錯誤してきました。それが思いもかけずレーザー開発が一つの看板であった渡部先生に採っていただけることになったのですから、人生どう転ぶかわかりません。これからどういう世界が開けるのだろうかと思いつつ強光電場物理の世界へ足を踏み入れました。

最初の2年くらいは、研究上のバックグラウンドが乏しかったこともあり何が何だからわからず無我夢中でした。3年目くらいからようやく強光電場物理の世界に慣れ、自分の頭で考えることができるようになり、分野の研究の流れと自分の研究の相対関係も視野に入れながら仕事ができるようになったと思います。物性研での研究生生活で一番印象に残っているのは、やはり、柏移転です。ちょうど3年経ったところで柏移転がありました。今となっては想像もできませんが、最初の1年は原野の中に低層棟だけが完成していました。冬の西風が砂埃を舞い上げるので家に帰って耳を濡れタオルで拭くと黒くなり、砂漠を旅すると耳に砂がたまる、という旅行記の話を思い出したことを思い出します。また、天皇陛下の東葛テクノプラザご訪問を見に行ったことも印象に残っています。一方、研究は滞ることなく進みました。渡部先生の強力なリーダーシップのもと、移転もあつという間に終わり、装置の立ち上げも順調に進みました。この移転を機に実験器具が更新され、現在の実験室の原型ができたのです。移転の経験は、現在の実験室の立ち上げに非常に役に立っています。また、電子ジャーナルや学会などのホームページの利用でインターネットの便利さを実感したのもこの時でした。図書館に行かなくても不自由なく論文を見ることができ、郵便で論文を送る必要もなく、柏分室暮らしでもあまり困ることはありませんでした。

渡部研究室に入って学んだことの一つに、研究にはコンセプト重要である、ということがあります。渡部先生流にいうと「細かい」ことはするなということでしょう。例えば、当たり前ですが、レーザーの開発でも、他のグループが作ったレーザーとは顕著に違う特徴を持ったレーザーをつくる。一言で特徴が言い表せることが重要です。別の世界で「ワン・フレーズ・ポリティックス」という言葉が聞かれ、物事を単純化しすぎているということで批判もあります。しかし、人を引きつけるには一言で特徴を言い表せるほうが良いのは確かで、人間心理の一面についていると思います。学生時代、苦労してデータをとり論文にしても鳴かず飛ばず、という経験をしていたのでとてもおもしろく感じました。野球で、かつ飛ばそうと力んでも芯をはずすとポテポテなのに、芯をとらえると軽く振ったのによく飛ぶような感覚です。もちろん、良い研究が必ずワンフレーズで語られる、というわけではありませんが、多くの人に関心を持つような大きな特徴が必要だ、ということだと思います。今後もそのような研究をしたいと思っています。

ワンフレーズということからもう一つ。私は工学研究科の応用物理学専攻にいますが、進学志望者が減っているようです。物理離れ、少子化のためと思われる。札幌市内の高校の先生によると、成績上位者は医学部を志望する割合が高いそうです。医学部志望者が多いのは、仕事として何をやっているのが高校生でもイメージしやすいことや、高給ということがあるのではないのでしょうか。翻って応用物理学専攻を見直してみると、医学部に比べワンフレーズで高校生を惹きつけられるような特徴に乏しいような気がしています。これに対する即効薬は多分ないでしょう。唯一私ができることは、教育・研究・日々の暮らしを楽しそうに行っている姿を学生に見せたり、研究室のポスドク・学生に研究・日々の暮



らしを楽しんでもらったりして、物理を勉強しても楽しいことがある、ということ世の中に広めていくことだと思っています。

最後に、長い間、ご指導いただき様々な経験を踏ませていただきました渡部俊太郎先生に感謝し、厚く御礼申し上げます。技官だった鍋川康夫氏（現 理化学研究所）と現在技術職員の金井輝人氏にはレーザーの開発を受け持っていただきました。他にないレーザーを使い実験をできる強みを、北大に移って改めて感じています。深く感謝いたします。名前を挙げませんが、ともに研究を行ってきた渡部研究室の大学院生の諸氏には助けられ、また、学ぶことが多くありました。深く感謝します。また、直接・間接に物性研での生活を支えてくださった、物性研究所の皆様に御礼申し上げます。

#### 参考文献

- [1] T. Sekikawa, A. Kosuge, T. Kanai, and S. Watanabe, *Nature* **432**, 605 (2004).
- [2] 関川太郎、渡部俊太郎、*日本物理学会誌* 60 巻, 527 (2005)
- [3] Y. Nabekawa, Y. Kuramoto, T. Togashi, T. Sekikawa, and S. Watanabe, *Opt. Lett.* **23**, 1384 (1998).
- [4] T. Kanai, X.Zhou, T. Sekikawa, S. Watanabe, and T. Togashi, *Opt. Lett.* **28**, 1484 (2003).
- [5] T. Shimizu, T. Sekikawa, T. Kanai, S. Watanabe, and M. Itoh, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 017401 (2003).



高次高調波発生メカニズムのモデル提唱者 Corkum 博士（後列左 3）と渡部研究室一同。（2004 年 8 月）

# 物性研究所短期研究会

## 次世代ナノ・エレクトロニクスのための電子状態計算の基礎理論

日時：2005年12月26日(月) 11:00開始  
12月27日(火) 16:00終了  
場所：東京大学物性研究所 6階大講義室

提案者：草部 浩一	・大阪大学大学院基礎工学研究科
今田 正俊	・東京大学物性研究所
川添 良幸	・東北大学金属材料研究所
白井 正文	・東北大学電気通信研究所
矢花 一浩	・筑波大学計算科学研究センター
鈴木 直	・大阪大学大学院基礎工学研究科
赤井 久純	・大阪大学大学院理学研究科
吉田 博	・大阪大学産業科学研究所
笠井 秀明	・大阪大学大学院工学研究科
広瀬 喜久治	・大阪大学大学院工学研究科
白井 光雲	・大阪大学産業科学研究所
森川 良忠	・大阪大学産業科学研究所
中西 寛	・大阪大学大学院工学研究科
小野 倫也	・大阪大学大学院工学研究科
Wilson A. Diño	・大阪大学大学院工学研究科
佐藤 和則	・大阪大学産業科学研究所
小倉 昌子	・大阪大学大学院理学研究科

次世代エレクトロニクスを牽引する電子素材には、電子系の相転移点近傍における動作特性の活用が強く望まれつつある。この電子相転移する材料開発を基盤として、プロセス開発、デバイス開発から動作特性解析までを含めて、経験的方法論に頼らない電子状態計算手法が大きな役割を果たしつつある。この第一原理計算手法の継続的な発展は、量子デザイン手法として機能する予測能力を持つことが示されつつある。特に、これまで困難と考えられてきた、非局所短距離および長距離の電子相関効果の取り扱い、サブミクロンスケールに達する計算規模の確保など、幾つかの課題に対して解答を得る見通しがたってきた。また、各種デバイス設計に適用する際に必須となる、各種外場中での電子状態決定、伝導特性決定にも幾つかの進展が見られる。そこで、この研究会では、国内の主導的立場にある研究者が研究討論する場を提供することによって、次世代ナノ・エレクトロニクスを牽引する電子状態計算法の継続的開発を目指した。研究会では、第一原理電子状態計算および関連する理論手法に関する最近の成果についてオーラル発表 34 件、ポスター発表 17 件が行われた。登録を頂いた参加者数だけで 94 名と予想の 60 名を遙かに超える参加者を得た。加えて、文部科学省を中心に検討が進められている京速計算機に関するパネルディスカッションを「物性科学における京速計算に向けた展望と期待」として実施し、これまでの短期研究会には見られない政策的研究動向に関する検討を含めた議論が行われ、盛会のうちに終了した。これも、本研究分野に対する期待の高まりが、分野を超えたものとなっていることを示しているものと考えられる。

### プログラム

12月26日

午前の部 11時～12時30分

11:00～11:05 開会とアナウンス

<密度汎関数法基礎>

11:05～11:30 <sup>1</sup>樋口 雅彦、<sup>2</sup>樋口 克彦（<sup>1</sup>信州大理、<sup>2</sup>広島大院先端）

「拡張された制限つき探索理論」

11:30～11:45 <sup>1</sup>山中 秀介、<sup>1</sup>中田 一人、<sup>1</sup>山口 兆、<sup>2</sup>草部 浩一、<sup>3</sup>高田 俊和、（<sup>1</sup>阪大理、<sup>2</sup>阪大基礎工、<sup>3</sup>NEC）

「多配置参照密度汎関数理論の開発」

11:45 ~ 12:00 草部 浩一 (阪大基礎工)  
「有効ハミルトニアン構成法としての密度汎関数法」

<電子相関効果 I>

12:00 ~ 12:15 <sup>1</sup>中村 和磨、<sup>1</sup>有田 亮太郎、<sup>2</sup>吉本 芳英、<sup>1</sup>常行 真司 (<sup>1</sup>東大院理、<sup>2</sup>物性研)  
「オン・サイト有効クーロン相互作用の第一原理計算：3d遷移金属への適用」  
12:15 ~ 12:30 山元 進、藤原 毅夫、丹下 正章、初貝 安弘 (東大物工)  
「La<sub>1.5</sub>Sr<sub>0.5</sub>NiO<sub>4</sub>の電荷・スピン秩序状態」

昼 食 12時30分 ~ 13時30分

午後の部 13時30分 ~ 20時45分

<電子相関効果 II>

13:30 ~ 13:50 川添 良幸、本郷 研太、小山田 隆行、安原 洋 (東北大金研)  
「量子クーロン多体系に対する電子相関の厳密計算による従来の常識の破綻」  
13:50 ~ 14:15 今田 正俊 (物性研)  
「密度汎関数 - 経路積分繰り込み群法による強相関電子系の物性」  
14:15 ~ 14:30 野原 善郎、藤原 毅夫 (東大物工)  
「GW近似を用いたLaMnO<sub>3</sub>の電子構造計算と電子 - 正孔 励起の効果」  
14:30 ~ 14:55 高田 康民 (物性研)  
「GW法の基礎と最近の発展」  
14:55 ~ 15:10 <sup>1</sup>豊田 雅之、<sup>2</sup>赤井 久純、<sup>1</sup>佐藤 和則、<sup>1</sup>吉田 博 (<sup>1</sup>阪大産研、<sup>2</sup>阪大理)  
「自己相互作用補正による半導体スピントロニクス材料の第一原理計算」

15:10 ~ 15:20 休 憩

<表面反応プロセスとダイナミクス>

15:20 ~ 15:45 笠井 秀明、津田 宗幸 (阪大工)  
「燃料電池触媒・水素貯蔵材料と反応プロセスのデザイン」  
15:45 ~ 16:00 Wilson A. Dino (阪大工)  
「Can we probe local surface reactivity with hydrogen?」  
16:00 ~ 16:15 中西 寛 (阪大工)  
「水素吸着金属表面の第一原理計算」  
16:15 ~ 16:40 森川 良忠 (阪大産研)  
「電極界面の第一原理シミュレーション」  
16:40 ~ 17:00 後藤 英和 (阪大工)  
「表面創成プロセスの第一原理シミュレーション」  
17:00 ~ 17:15 相澤 秀昭 (北大創成)  
「遷移金属ステップ表面上での分子の振る舞いに関する第一原理的研究」

<材料設計・特別講演>

17:15 ~ 17:45 川添 良幸 (東北大金研)  
「第一原理シミュレーション計算による新材料設計の現状」

ポスターセッション 17時45分 ~ 19時00分 (ポスターセッションの内容は別掲)

夕 食 (物性研6階) 18時00分 ~ 19時00分

<マテリアルデザイン>

19:00 ~ 19:25 吉田 博 (阪大産研)  
「3d遷移金属を含まない新しいタイプの完全スピン分極強磁性体のデザインと実証」  
19:25 ~ 19:45 <sup>1</sup>佐藤 和則、<sup>1</sup>吉田 博士、<sup>2</sup>P. H. Dederichs (<sup>1</sup>阪大産研、<sup>2</sup>ユーリッヒ研)  
「希薄磁性半導体の有効交換相互作用と磁性」  
19:45 ~ 20:05 白井 光雲 (阪大産研)  
「半導体中の不純物拡散の制御」  
20:05 ~ 20:25 下司 雅章 (阪大基礎工)  
「ハーフメタル強磁性体 CaN の理論設計」

< 相対論効果 >

20:25 ~ 20:45 小田 竜樹、細川 明彦 (金沢大自然)  
「スピン軌道相互作用を考慮した二成分スピノル型ウルトラソフト擬ポテンシャルの開発と磁気異方性エネルギーの見積り」

12月27日

午前の部 9時 ~ 12時30分

< 大規模系 >

9:00 ~ 9:15 <sup>1,2</sup>星 健夫、<sup>2</sup>張 爽、<sup>1,2</sup>藤原 毅夫 (<sup>1</sup>東大工、<sup>2</sup>CREST-JST)  
「大規模電子構造計算による分子動力学シミュレーション」  
9:15 ~ 9:40 宮崎 剛、大野 隆央 (物材機構)  
「第一原理オーダーN法プログラム CONQUEST による応用計算に向けて」

< 物質の応答 >

9:40 ~ 10:05 小口 多美夫、澤田 庸介、獅子堂 達也 (広大院先端)  
「X線内殻吸収における円二色性と線二色性」  
10:05 ~ 10:25 播磨 尚朝 (神戸大理)  
「f電子系物質の電場勾配計算でわかること」  
10:25 ~ 10:50 矢花 一浩 (筑波大)  
「光応答の実時間・実空間第一原理計算」  
10:50 ~ 11:00 休憩

パネルディスカッション 11時00分 ~ 12時30分

「物性科学における京速計算に向けた展望と期待」

議 事 進 行 : 寺倉 清之 (北大)

パ ネ ラ ー : 星野 利彦 (文科省)、青柳 睦 (九大)、高山 一 (東大)、今田 正俊 (東大)、山口 兆 (阪大)、  
吉田 博 (阪大)、宮本 良之 (NEC)

世話人兼書記 : 草部 浩一 (阪大)

昼 食 12時30分 ~ 13時30分

午後の部 13時30分 ~ 16時00分

< 電場中の電子状態とナノ伝導 >

13:30 ~ 13:50 杉野 修、大谷 実 (物性研)  
「電圧を印加した固体表面・ナノ構造体の電子状態計算」  
13:50 ~ 14:10 赤木 和人 (東大院理)  
「半導体表面に吸着した有機分子への電場効果」  
14:10 ~ 14:30 小野 倫也 (阪大工)  
「ナノストラクチャーの電子輸送特性計算」  
14:30 ~ 14:50 <sup>1,3</sup>渡邊 聡、<sup>2,3</sup>戸塚 英臣、<sup>1,3</sup>田中 倫子、<sup>1,3</sup>中村 泰弘、<sup>1,3</sup>多田 朋史 (<sup>1</sup>東大院工 <sup>2</sup>日大理工、<sup>3</sup>CREST-JST)  
「ナノ物性計測の理論解析：現状と課題」  
14:50 ~ 15:00 休 憩 )  
15:00 ~ 15:20 相馬 聡文、山本 貴博、渡辺 一之 (東理大理)  
「タイトバインディング密度汎関数法によるグラファイトリボンの電気伝導解析」  
15:20 ~ 15:40 三浦 良雄、白井 正文、長尾 和多加 (東北大通研)  
「ウルトラソフト擬ポテンシャル法をベースとしたバリスティック電気伝導計算の応用」  
15:40 ~ 16:00 <sup>1</sup>広瀬 賢二、<sup>2</sup>小林 伸彦 (<sup>1</sup>NEC、<sup>2</sup>産総研)  
「ナノ架橋系での伝導計算」

16:00 閉 会

## ポスターセッション

1. 水関 博志、上原 朋樹、五十嵐 伸昭、Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, 川添 良幸 (東北大金研)  
「メタロセン分子の電気伝導予測」
2. 小野 裕己、楠野 順弘、草部 浩一、鈴木 直 (阪大基礎工)  
「くびれナノチューブの振動・伝導度解析」
3. <sup>1</sup>南川 義久、<sup>2</sup>大谷 実、<sup>2</sup>杉野 修、<sup>1</sup>草部 浩一、<sup>1</sup>鈴木 直 (<sup>1</sup>阪大基礎工、<sup>2</sup>東大物性研)  
「ゲートバイアス下にあるナノチューブの電子状態計算」
4. 土居 抄太郎、赤井 久純 (阪大理)  
「Screened KKR法による第一原理計算」
5. 高橋 均成、草部 浩一、鈴木 直 (阪大基礎工)  
「平面波展開を用いた非周期系の数値解析手法の開発」
6. <sup>1</sup>白鳥 和矢、<sup>1,2</sup>信定 克幸 (<sup>1</sup>総研大、<sup>2</sup>分子研)  
「有限温度密度汎関数理論に基づく量子化学計算 - 表面吸着分子系への適用 - 」
7. Uma Maheswari、長柄 一誠、草部 浩一、鈴木 直 (阪大基礎工)  
「Ab-initio Calculation of Lattice Dynamics and Superconductivity in Simple Systems」
8. 仲野 達也、白井 正文、長尾 和多加、三浦 良雄 (東北大通研)  
「(Ga,Cr)NにおけるN空孔が交換相互作用に及ぼす影響に関する第一原理計算」
9. <sup>1</sup>光武 邦寛、<sup>2</sup>塚田 捷 (<sup>1</sup>キャノン、<sup>2</sup>早大ナノ理工)  
「有機ナノ構造体におけるキャリア輸送過程の理論解析：電子 - 分子振動カップリングの効果」
10. 塚本 秀一、下司 雅章、草部 浩一、鈴木 直 (阪大基礎工)  
「CoPt 超格子の磁気異方性に関する第一原理的評価」
11. <sup>1</sup>福島 鉄也、<sup>1</sup>佐藤 和則、<sup>1</sup>吉田 博、<sup>2</sup>P.H. Dederichs (<sup>1</sup>阪大産研、<sup>2</sup>ユーリッヒ研)  
「磁性半導体中の磁性不純物のクラスタリングとキュリー温度への影響」
12. 木崎 栄年、佐藤 和則、柳瀬 章、吉田 博 (阪大産研)  
「第一原理計算による CuAlO<sub>2</sub> を母体とした希薄磁性半導体の物質設計」
13. 石井 晃 (鳥取大)  
「第一原理原子熱力学」によるInAs/GaAs(001)量子ドット形成初期過程シミュレーション」
14. 内田 和之、影島 博之、猪川 洋 (NTT 物性基礎研)  
「遷移金属酸化物 SrTiO<sub>3</sub> に対する電界ドーピングの第一原理シミュレーション」
15. 山内 邦彦 (阪大産研)  
「CeRh<sub>3</sub>B<sub>2</sub> の電子状態とフェルミ面」
16. 柳澤 将、森川 良忠 (阪大産研)  
「Alq<sub>3</sub>/Al 界面の構造と電子状態に関する理論的研究」
17. 江戸 喜幸、佐々木 孝、小野 倫也、広瀬 喜久治 (阪大工)  
「第一原理に基づく金属ナノワイヤ列における電気伝導特性計算」

## 拡張された制限つき探索理論

信州大理、広島大先端物質 樋口 雅彦、樋口 克彦

近年の密度汎関数理論の発展を眺めたとき、有望だと思われる2つの方向性がある。1つは、基本変数として電子密度よりも多くの情報を有した物理量を選びそれを再現しようとする試み、もう1つは、ユニバーサル汎関数の分割の任意性を利用したコーン-シャム スキーム自身の拡張が挙げられる。前者の試みでは特に、電子密度をその中に含んだ簡約化密度行列（あるいはその一部）を基本変数に選ぶ形式が有望視されている。後者では、電子密度による変分を波動関数による変分に置き換えるいわゆるハジサバス-セオフィロウの方法を使って、ある種の相互作用を含んだ多体系の方程式にマッピングする形式が有望視されている。

われわれは最近、前者のさらなる進展をめざし拡張された制限つき探索理論 (extended constrained-search theory、以下 ECS と呼ぶ) の構築をおこなってきた。本理論はレビーの制限つき探索理論を拡張したもので、任意に選んだ物理量を再現するという利点をもつ。一粒子有効方程式は、従来のコーン シャム方程式における有効ポテンシャルに加え、任意に選んだ物理量に依存した項が付加されている。<sup>1)</sup> 物理量として適当なものを選べば、従来のスピン密度汎関数理論、電流密度汎関数理論、LDA+U法、ハートレー-フォック-コーン-シャム法などが自然と導かれ、ECSの有効性は確認されている。<sup>2)</sup> ここで注意をしたいのは、LDA+U法の導出では、スレーター積分自身を再現する物理量として選んでいるわけではなく(2重勘定項に含まれるものも含め単にパラメータ)、局在軌道の占有行列を基本変数と見なすことで等価な方程式が導出できることを示している。<sup>2)</sup> 確からしいモデル的相互作用が与えられたとしてそれを密度汎関数理論に組み込む場合、簡約化密度行列が鍵の量となるのはしごく自然で、LDA+U法はその一例と見なせるのである。

ECSに基づいてエネルギーバンド計算を行うためには、交換・相関エネルギー汎関数の近似形が必要不可欠である。近似形の開発には二つの戦略が考えられる。この戦略に沿って、ECSにおける交換・相関エネルギー汎関数の結合定数積分表示を求め、また、交換・相関エネルギー汎関数の満たすべき総和則をビリアル定理から求めた。<sup>3)</sup>

- 1) M. Higuchi and K. Higuchi, Phys. Rev. B **69**, 035113 (2004).
- 2) K. Higuchi and M. Higuchi, Phys. Rev. B **69**, 165118 (2004).
- 3) K. Higuchi and M. Higuchi, Phys. Rev. B **71**, 035116 (2005).

## 多配置参照密度汎関数理論の開発

阪大理 山中 秀介、中田 一人、山口 兆  
阪大基礎工 草部 浩一  
NEC 高田 俊和

Kohn-Sham(KS)による密度汎関数理論(DFT)は、量子多体問題を、相互作用のない参照系を導入する事により、エネルギー表式上近似のない形で平均場近似の問題とし、第一原理計算の化学物理分野での対象を飛躍的に拡大した。しかし同時にその処方、(i) スピン制限型(RKS-DFT)では明白な形で二電子励起型電子相関効果をカバーできない、(ii) (i)の問題をスピン非制限型(UKS-DFT)にして解決すると対称性の破れを生じる、といった平均場近似由来の問題を生じる。実際、共有結合の解離曲線やジラジカル分子系といった分子系でのあらわな量子効果を伴う問題に対し、現在の所KS-DFTの範囲内(交換相関項の改良)での解決は見られていない。

一方近年 KS-DFT の枠組み自体を「部分的に相互作用のある参照系」に置き換えた多配置参照密度汎関数理論(MR-DFT)の開発の試みがなされている[1-3]。MR-DFTの要はその参照系の定義であり、これにはクーロン相互作用の一部を普遍汎関数でカバーするCoulomb-driven MR-DFT型[1,2]:

$$F[\rho] = \text{Min}_{\Psi \rightarrow \rho} \langle \Psi | \hat{T} + \hat{V}_{ee}^p | \Psi \rangle \quad (1)$$

と制限付き探索の範囲を波動関数展開の truncation によって制限 ( $\text{Min}^p$ ) した wavefunction-driven MR-DFT 型 [3]:

$$F[\rho] = \text{Min}_{\Psi \rightarrow \rho}^p \langle \Psi | \hat{T} + \hat{V}_{ee} | \Psi \rangle \quad (2)$$

に大別できる。残余相関項はいずれも密度汎関数で記述する。我々はHOMO/LUMO近傍の活性軌道空間に関する展開を用いたComplete-active-space CI (CASCI)をこの式(2)の定義に用いてきた[3]が、本研究会ではより柔軟な波動関数に対応可能なMR-DFTの開発の試みを報告する。具体的には、交換項(および古典クーロン項)および相関項の長距離クーロン部分、を波動関数で取り扱い、残った短距離クーロン部分による相関項、を密度汎関数(局所密度近似)で扱う事を目的とし、有効古典クーロン/交換/長距離相関演算子ならびに残余DFT相関演算子を導入し、有効CI方程式を導出した。数値計算の結果も当日報告する。

- [1] A. Savin, H.-J. Flad, Int. J. Quant. Chem. **56**(1995) 327; R. Pollet, A. Savin, T. Leininger, H. Stoll, J. Chem. Phys. **116**(2002) 1250; J. Toulouse, F. Colonna, A. Savin, Phys. Rev. A, **70**(2004)062505.
- [2] K. Kusakabe, J. Phys. Soc. Jpn. **70** (2001) 2038.
- [3] B. Miehlich, H. Stoll, A. Savin, Mol. Phys. **91**(1997) 527; J. Gräfenstein, D. Cremer, Chem. Phys. Lett., **316**(2000)569. R. Takeda, S. Yamanaka, K. Yamaguchi, Chem. Phys. Lett. **366**(2002) 321.

密度汎関数法は本来密度を基本変数とした変分原理を与えるものとして定式化されたものであるが、実用上重要な Kohn-Sham による補助方程式が実際に行っていることは、ある有効ポテンシャル中の独立粒子系の波動関数による最適化問題の解法である。[1] この一体の補助波動関数の決定問題は、事実上任意に設定できるものと見なすことができる。物理的な実態を崩さない範囲でこの補助問題を最適なものとする方法論は、しかしながらこれまで十分な検討は行われて来なかったと言える。

我々は、補助問題が多粒子系の決定問題にも拡張出来ることに着目し、[2] 以前から拡張された Kohn-Sham 方程式の性質を調べてきた。その結果、通常言われる密度を再現する補助問題を与える以上に、密度汎関数理論の与える枠組みはより高精度と認識できる方法論を系統的に発生しうることが分かってきた。具体的には、系を特徴付ける物理量を、一粒子密度と与えるエネルギー汎関数の最小値としての基底状態エネルギーに加えて、ある特定された密度・密度相関関数も加えることを考える。この局所密度・密度相関関数をも再現するように補助多体方程式が最適化されたとき、この密度汎関数法の与える方程式系は、有効多体相互作用を含んだ多粒子系の方程式であると見なすことができる。[3] 従って、ここで第一原理的に不純物アンダーソン模型が定式化されたことになる。その拡張として、第一原理的ハバード模型の定式化も可能である。

この第一原理的不純物アンダーソン模型、第一原理的ハバード模型には、次に挙げる物質系の予測理論に対して必要とされる性質がある。まず、一粒子密度を秩序変数としてもつある種の自己無撞着方程式系を与えている。局所相互作用をもつため、多粒子系の基底状態が解として得られるが、その解には期待される相関効果による波動関数の変形効果が現れることになる。加えて、局所密度・密度相関関数がもとのクーロン系のものと同じに一致させることが示されている。この最後の性質を満たす縮退のない模型は、唯一に決まることが示されている。[3] 得られた方程式系には、相関・交換残差項があるが、この項をある種の切断近似を用いて評価した後に、さらに局所密度近似を導入すれば、通常知られている LDA+U 法のハミルトニアンとカウンター項の形式の差を除いて同一のものが得られる。つまり、LDA+U ハミルトニアンを近似ハミルトニアンとしてもつ厳密な方程式系を得たことになる。この方法論は、電子系の第一原理的表現法の一つとして、密度汎関数法の枠組みから強相関系の物理を取り込んだ統一的なものとなっていると見なすこともできる。

- [1] N. Hadjisavvas and A. Theophilou, Phys. Rev. A 30 (1984) 2183.
- [2] K. Kusakabe, J. Phys. Soc. Jpn. 70 (2001) 2038.
- [3] K. Kusakabe, cond-mat/0505703.
- [4] K. Kusakabe, M. Takahashi and N. Suzuki, to be published in Physica B.

オン・サイト有効クーロン相互作用の第一原理計算：3d 遷移金属への適用

東大院理、物性研 A 中村 和磨、有田 亮太郎、吉本 芳英 A、常行 真司

遍歴電子系及び強相関電子系の研究において重要なパラメータである局在  $d$  電子のオンサイト有効クーロン相互作用  $U_{\text{eff}}$  を第一原理的に評価するための方法論開発を行った。これまでの  $U_{\text{eff}}$  の評価は、linear muffin tin orbital (LMTO) を用いた constrained local density functional 計算によってなされてきたが、このやり方では LMTO 電子状態計算で採用される原子球近似 (ASA) のために、電荷密度の異方向性が強い系には適用できないという制限があった。今回、我々は、最大局在ワニア関数 (MLWF) に基づく constrained scheme を開発し、汎用性バンド計算ソフト「東京大学 *ab initio* program package」への組み込みを行った。本手法の最大の利点は任意の基底関数系において constrained 計算を実行できることであり、平面波基底を用いるプログラムにおいても計算が可能となる。また先の ASA のような制限がないので、LMTO に基づく手法では計算困難な BEDT-TTF のような有機超伝導体の  $U_{\text{eff}}$  の評価も可能である。今回は、開発された手法を 3d 遷移金属の  $U_{\text{eff}}$  の系統的な研究に適用し、オージェ分光による実験値との比較を行った。

図 1 に計算と実験の比較をしめす。定量的不一致が見られるものの、計算値のオーダーは定性的に実験と一致している。特に実験にみられる軽金属から重金属にかけての  $U_{\text{eff}}$  の増加傾向を計算はよく再現している。この傾向を理解するために、各金属の  $U_{\text{eff}}$  の違いに寄与できる 2 つの因子を考える。1 つは各金属の 3d 軌道の空間広がり の違いであり、値は 3d MLWF の 2 次のモーメント (局在長) の計算から評価される。もう 1 つは各金属の有効遮蔽長 の違いであり、この値は湯川ポテンシャル  $\exp(-r/\lambda)$  の MLWF の 1 中心クーロン積分が *ab initio* の  $U_{\text{eff}}$  に一致するように決められる。図 2 から  $U_{\text{eff}}$  の増加傾向は  $\lambda$  の減少、すなわち、局在 3d 軌道の収縮傾向と相関していることが分かる。一方で有効遮蔽長は金属種によらずほぼ一定である。本計算は遷移金属単体に対するものであるが、遷移金属酸化物や高温超伝導体の  $U_{\text{eff}}$  の考察においても役立つものと思われる。

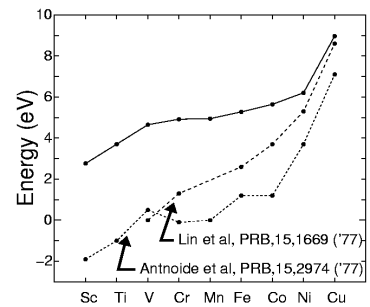


図 1. 理論 (実線) と実験 (点線) の比較

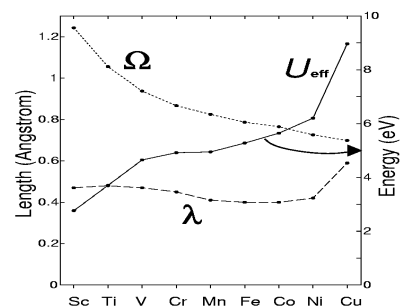


図 2.  $U_{\text{eff}}$  (実線)、局在長 (点線)、有効遮蔽長 (破線)

## La<sub>1.5</sub>Sr<sub>0.5</sub>NiO<sub>4</sub>の電荷・スピン秩序状態

東大物工、CREST-JST 山元 進、藤原 毅夫  
東大物工 丹下 正章、初貝 安弘

実験的に、La<sub>1.5</sub>Sr<sub>0.5</sub>NiO<sub>4</sub>の高温相では、結晶格子と整合した電荷整列が観測され、低温相では、不整合な、電荷とスピンのストライプ秩序が観測される[1]。この系にLSDA+U法を適用すると電荷が一様に分布する金属状態が得られる。これらは実験結果[2]と矛盾する。しかし、フェルミエネルギー付近でNi 3d-電子のe<sub>g</sub>バンドが良く分離していることは確かめられた。そこで基底をNi e<sub>g</sub>電子に限った、簡約されたハミルトニアンを構成し、Lanczos法を用いて厳密な基底状態を求めた。このハミルトニアンには、LDAの計算から求めたSlater Koster型のパラメータ、LSDA+Uと同じオンサイトクーロン相互作用のパラメータ、及び、最近接サイト間のクーロン相互作用のパラメータ(V)が含まれている。GW法によるLaMnO<sub>3</sub>の計算で求められた、スクリーンされたサイト間クーロンの静的極限の値(0.34eV)[3]を参考にV=0.5eVと定め、V=0eVの場合と比較した。その結果、電荷秩序の形成にサイト間クーロン相互作用が大きな役割を持つことが確認できた。(図1)このことは、1/4フィリングの拡張ハバードモデルの、量子モンテカルロを用いた解析でも確かめられた。また、次近接サイト間のホッピングの4回対称性を崩すことで、実験結果と整合するスピンのストライプ秩序が発現することが確かめられた(図2)

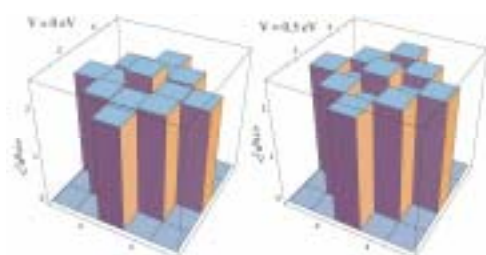


図1．単位胞に8サイトを置いたときの電荷の相関関数。中央を0サイトとして $\langle n_i n_j \rangle$ をプロットした。

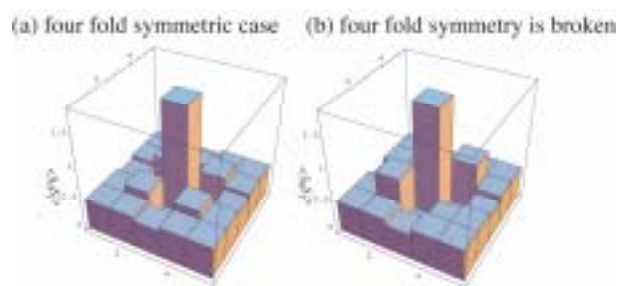


図2．単位胞に8サイトを置いたときのスピン相関関数。中央を0サイトとして $\langle S_i S_j \rangle$ をプロットした。

- [1] H. Yoshizawa, T. Kakeshita, R. Kajimoto, T. Tanabe, T. Katsufuji and Y. Tokura, Phys. Rev. B61 (2000) R854.  
[2] R. J. Cava, B. Batlogg, T. T. Palstra, J. J. Krajewski, W. F. Peck, Jr., A. P. Ramirez and L. W. Ruppe, Jr., Phys. Rev B43 (1991) 1229.  
[3] Y. Nohara, A. Yamasaki, S. Kobayashi and T. Fujiwara, cond-mat/0508751.

## 量子クーロン多体系に対する電子相関の厳密計算による従来の常識の破綻

東北大金研 川添 良幸、本郷 研太、小山田 隆行、安原 洋

多電子系がスピン分極するかどうかという問題における電子相関の役割は、系の定常状態の形成に支配的役割を演ずる原子核引力に対する電子間斥力の相対的な重要性の程度および関与する電子の局在性の程度に応じて、全く異なる様相を呈す。電子相関の研究は、本来、原子核と電子の集合を記述する基本的ハミルトニアンから出発して、ビリアル定理とパウリの排他原理に則して、推進すべきである。量子力学の誕生直後考案されたハイゼンベルグ模型およびその拡張は、パウリの排他原理に由来する交換エネルギー自身に着目するものである。しかし、分子・固体の磁性研究は、現在では、これらの伝統的模型から脱却し、系を記述する量子力学方程式と原子核と電子間の相互作用であるクーロン力から出発する本来の多体論に基づき電子計算機の処理能力をフルに活用して、系の安定性と磁性発現の関連を詳細に解明すべき発展段階に達している。また、「強相関係」と分類されている様々な興味ある物性を示す新しい物質に関しても、単なるモデル計算による「理解」ではなく、本来のクーロン多体系に対する量子力学方程式の厳密な数値解法により、一切実験に依らずにナノテクノロジー等の分野で必要とされる新物質を「予言・設計」することが可能となった。これまでの50年ほどは、計算機の能力不足により、物性理論はモデル計算と実験の解釈に終始していたが、ここに至って、始めて本来の正しい物性理論のあり方が成立するようになった。

1925年、フントは、原子スペクトルの解析から、「同一電子配置に属す全軌道角運動量Lおよび全スピン角運動量Sで指定されるLS状態の中で、スピン多重度Sの最大状態が最低エネルギーを示す」という経験則を発見した。1929年、スレーターは、「スピン最多多重度状態と多重度のより少ない状態間のエネルギー差は、主要項である原子核電子間引力エネルギーおよび運動エネルギーについては両状態に共通しているので、パウリの排他原理による電子間斥力エネルギーの低下、すなわち交換エネルギーによる利得に原因する」という摂動論的考えに基づいてフント則を解釈した。ほとんど全ての教科書や参考書は、現在でも、この伝統的解釈を踏襲し、物性物理の「常識」となっているが、実はこの解釈は全くの間違ったものである。



1964年、ダビッドソンは、ヘリウム原子の低励起状態について、ハートレー-フォック(HF)の自己無撞着な計算を初めて実行した。その結果、「フントの多重度則の起源は、運動エネルギーはもちろんのこと、電子間斥力エネルギーをも増加させる代償として、主要項である原子核電子間クーロン引力エネルギーが低下することにある」と指摘した。しかし、ここで、HFモデルの自己無撞着な計算には電子相関の効果が無視されているので、そのために、このような結果になるのではないかと疑問が残る。我々は、電子相関を最も良く取り入れた計算が可能な拡散量子モンテカルロ法(DMC)による数値計算結果を示し、やはり、スレーターの解釈は間違いで、正しい解釈は、ダビッドソンの示した「スピン多重度最大状態の原子核電子間クーロン引力エネルギーが負で最も大きい」ことにあることを証明した。

## 密度汎関数 - 経路積分繰り込み群法による強相関電子系の物性

物性研究所 今田 正俊

現実の物質中の電子の示す挙動をミクロなレベルから解明し、さまざまな物質の性質を第一原理的に予測できるような、信頼できる計算手法が開発できれば大きな波及効果が期待できる。ところが、従来のすべての第一原理的な計算手法では、ある電子の挙動を計算するときに、他の電子は個々のふるまいをならしてしまっただけの平均的な影響しか与えないとする近似を行ってきた。この近似は電子間のクーロン相互作用の効果の大きな、強相関電子系とよばれる物質群では定性的にも誤った結果を与えることが知られており、信頼できる計算手法は知られていなかった。本講演では新しく開発した経路積分繰り込み群法と従来の計算手法とをハイブリッド的に組み合わせたDFT-PIRG法という方法を紹介し、強相関物質での精度の高い計算手法の検証の現状を議論した。計算手法の精度の高さは強相関物質である $\text{Sr}_2\text{VO}_4$ の電子状態の計算に応用することによって実証されている[1]。この物質は金属と絶縁体の境目にあって、わずかに絶縁体的であり、かつ磁気的には反強磁性という秩序状態であると信じられている。しかし、従来の計算手法では良い金属を予想したり、磁気的に間違った状態である強磁性を予想したりして、実験事実を説明できる計算はなかった。われわれの計算結果は初めて実験事実を定量的にも正しく説明し、さらにまだ実験的にわかっていないスピンと軌道の秩序状態を予測している。またDFT-PIRG法を用いて、 $\text{YVO}_3$ でも今まで正しく説明できなかった絶縁体ギャップの定量的な評価に成功した。

[1] Y. Imai, I. Solov'yev and M. Imada: Phys. Rev. Lett. 95 (2005) 176405.

## GW近似を用いた $\text{LaMnO}_3$ の電子構造計算と電子 - 正孔 励起の効果

東大物工 野原 善郎  
東大物工、CREST-JST 藤原 毅夫

密度汎関数理論(DFT)により、物質の電子構造は広く議論され大きな成功を納めている。DFTは励起状態や大きな局所揺らぎ、動的遮蔽による効果を扱うことが困難である。また、絶縁体や半導体のバンドギャップを過小評価し、バンド幅の評価に関しても問題がある。GW近似は多体摂動論の立場からRPA(Random Phase Approximation)による分極を取り入れたもので、励起状態や局所揺らぎ、動的遮蔽を扱うことができる。GW近似の計算コストは軌道数の4乗に比例する為、Ni(軌道数16)、NiO(反強磁性:軌道数100)、 $\text{LaMnO}_3$ (立方対称、常磁性:軌道数68)のような比較的小さな系に限って適用されてきた。今回、我々は種々の新しいアルゴリズムおよび並列アルゴリズムの採用により、現実の系である $\text{LaMnO}_3$ (ヤーンテラー歪、 $\text{GdFeO}_3$ 型歪、反強磁性:軌道数272)について計算した。また、LSDAの波動関数を無摂動状態として使用する。

その結果、バンドギャップの値は実験値1.1eVと近い0.82eVを得た。占有Mn-d( $t_{2g}$ )と占有O-pのバンド幅は小さくなる。それに対し、占有Mn-d( $3z^2-r^2$ )のバンド幅は大きくなる。全体のスペクトルは藤森らの実験により得られたXPS、XASと良い一致を示す。動的に遮蔽されたクーロン相互作用 $W$ は、エネルギーに依存する。Mn-d、Majorityスピン、オンサイトについては、 $W$ は裸のクーロン相互作用を用いた値23.4eVとなる。これは高エネルギー側では遮蔽が効かなくなるためである。低エネルギー側では遮蔽が強く効き、静的極限で3.0eVとなる。グリーン関数は伝導帯側と価電子帯側では著しい違いを示し、伝導帯側ではスペクトルの幅が急激に広がる。従って、伝導帯側の電子は強く散乱され、価電子帯側の正孔より寿命が短いと判断される。

## GW法の基礎と最近の発展

東大物性研 高田 康民

ヘディン理論[1]によれば、相互作用する多電子系における1電子グリーン関数 $G$ は図1に示すような方程式群を自己無撞着に解くことによって得られる。ここで、5<sup>0</sup>のベータ・サルペーター(BS)方程式から決められる頂点関数 $\Gamma$ が電子間の交換相関効果を正しく取り込む際に鍵になる物理量であるが、その取り扱いの難しさゆえに、多くの場合、 $\Gamma=1$ と近似されてきた(GW近似)。過去10年間、この近似を越えて $\Gamma$ の効果を取り入れるいくつかの試み(GW法)があった[2]。こ

れらは主として時間依存密度汎関数理論の立場から局所場補正の概念を用いるものであったが、ワード恒等式を満たす形での近似はなかった。

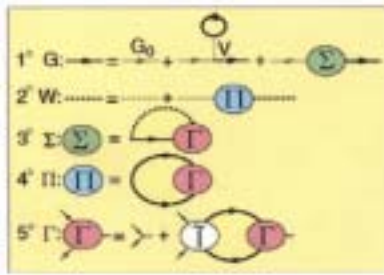


図1. ヘディン方程式群図

$$\Gamma(p+q, p) = [1 - \langle \tilde{I} \rangle_{p+q, p} \Pi(q)] \Gamma_{WI}(p+q, p)$$

$$\Gamma_{WI}(p+q, p) \equiv \frac{G(p+q)^{-1} - G(p)^{-1}}{\tilde{G}(p+q)^{-1} - \tilde{G}(p)^{-1}}$$

$$\tilde{G}(p)^{-1} \equiv G_0(p)^{-1} - \sum_{p'} \tilde{I}(p+q, p, p'+q, p') G(p')$$

$$\langle \tilde{I} \rangle_{p+q, p} \equiv \frac{\sum_{p'} \tilde{I}(p+q, p, p'+q, p') G(p') G(p'+q) \Gamma(p'+q, p')}{\sum_{p'} G(p') G(p'+q) \Gamma(p'+q, p')}$$

2. ワード恒等式を常に満たす の一般的な汎関数形

今回、BS 方程式を基礎にしつつ、スカラー頂点関数とベクトル頂点関数の縦成分の比から定義される比関数[3]という概念、および、ワード恒等式 (WI) を用いて、 の  $G$  (あるいは自己エネルギー ) についての汎関数形を一般的な立場から図 2 に示す形で導出した。ここで定義された平均化された規約電子正孔有効相互作用  $\langle \tilde{I} \rangle_{p+q, p}$  に対して (いわゆる局所場補正近似などの) 適当な近似を導入すると、ワード恒等式を常に満たしながら局所場補正による交換相関効果も取り入れた を考慮した GW 法が構成されることになる。しかも、この場合、数値計算的には GW 近似とほぼ同じ負荷で 1 電子グリーン関数  $G$  が決定されるので、(ワンショットの計算ではなく、逐次近似を遂行する) GW 近似さえ実行できれば、それはすぐに GW 法にアップグレードできることになる。

[1] L. Hedin, Phys. Rev. **139** (1965) A796.

[2] たとえば、R. Del Sole et al., Phys. Rev. B **49** (1994) 8024; I. V. Tokatly et al., Phys. Rev. **65** (2002) 113107; F. Bruneval et al., Phys. Rev. Lett. **94** (2005) 186402.

[3] Y. Takada, Phys. Rev. Lett. **89** (2001) 226402; Int. J. Mod. Phys. B **15** (2001) 2595.

### 自己相互作用補正による半導体スピントロニクス材料の第一原理計算

\*阪大産研、\*\*阪大理 豊田 雅之\*、赤井 久純\*\*、佐藤 和則\*、吉田 博\*

半導体スピントロニクスの実用化に向けて、高い強磁性転移温度を持つ稀薄磁性半導体を合成する試みが続けられている。第一原理電子状態計算を用いた解析により、稀薄磁性半導体における強磁性的相互作用として  $p$ - $d$  交換相互作用および二重交換相互作用にもとづくモデルが提案されている。さらに佐藤らの研究により、遷移金属の  $d$  状態と母体半導体の価電子帯との相対的な位置関係によって、主に働く強磁性的相互作用が区別されることが指摘されている[1]。ところが、通常の局所密度近似(LDA; Local Density Approximation)にもとづく第一原理電子状態計算では、遷移金属の  $d$  状態の結合エネルギーが光電子分光実験などの結果と比較して小さく(浅く)評価される傾向がある。そこで我々は LDA を超える手法を用いて、 $d$  状態の結合エネルギーの過小評価を改善し、その計算結果にもとづいて稀薄磁性半導体の磁性状態を予測しようと試みた。

我々は LDA における自己相互作用の影響に着目した。これは電子が自分自身の電荷と相互作用するという非物理的な効果である。斥力的な相互作用であり、かつ局在性の高い状態にとくに強く働くという性質をもつ。つまり LDA において  $d$  状態の結合エネルギーが過小評価される原因になっている。Filippetti らは、彼らの開発した Pseudopotential self-interaction correction 法を用いることにより自己相互作用の影響を簡便に補正し、半導体や酸化物などの系で、光電子分光実験の結果と良く一致する電子状態を得ることに成功した[2]。我々はこの手法を、稀薄磁性半導体のような不規則系を扱うことのできる KKR(Korringa-Kohn-Rostoker)-CPA(coherent potential approximation)法のプログラム[3]に組み込み、典型的な稀薄磁性半導体である GaMnN や GaMnAs、さらに ZnO を母体とする ZnVO や ZnCoO などの電子状態を計算した。計算された  $d$  状態の結合エネルギーは LDA で計算されるものよりも深くなり、光電子分光実験の結果と良い一致を示した。

[1] K. Sato, P. H. Dederichs, and H. K.-Yoshida, Europhys. Lett. **61**, 403 (2003).

[2] A. Filippetti and N. A. Spaldin, Phys. Rev. B **67**, 125109 (2003).

[3] MACHIKANNEYAMA coded by H. Akai (<http://sham.phys.sci.osaka-u.ac.jp/~kkr/>).

化石燃料の枯渇や地球温暖化等の環境問題が深刻化する中、クリーンエネルギーである水素を利用して発電する固体高分子形燃料電池(PEFC)の研究開発が精力的に行われている。燃料電池内では、燃料極で水素分子の解離吸着、水素原子の拡散、陽子としての脱離、電解質膜でのその陽子の移動、さらには、酸素極で陽子、電子、酸素分子を巻き込んでの水分子生成反応が起こる。また、PEFCを自動車内に搭載する場合には、その燃料となる水素を何らかの媒体に効率良く貯め込むことが必要不可欠となる。これらは全て、原子レベルで進行する反応に関わるもので、これらに付随する諸問題を解決するためには、まず何が起きているかを原子レベルで解明しなければならない。もちろんそのために、実験による研究開発も盛んに行われているが、原子レベルでおこる反応を同定することは極めて困難であり、試行錯誤的の探査にも限界がある。したがって、原理・原則からその探査方向を示すべき理論的研究が有効かつ必要であると考えている。特に、経験的パラメータを含まず電子系の状態を計算できる第一原理計算と、水素の量子力学的運動特性を正確に考慮できる、我々独自の量子反応シミュレーション計算法を合わせた量子第一原理計算手法が、燃料電池触媒や水素貯蔵材料、およびそれらを巻き込む反応プロセスのデザインに有効であると考えている。本講演では、我々がこれらの手法を駆使して得た研究の一例を紹介する。

### 電極界面の第一原理シミュレーション

大阪大学産業科学研究所、物性研究所客員助教授 森川 良忠

近年、有機電界発光素子(有機EL)、有機太陽電池、有機電界効果トランジスタ等、有機分子薄膜を電子デバイスに応用する研究が盛んになされている。さらに、その先の技術として、一つの分子を電子素子として利用することを目指した基礎研究も注目を集めている。これらの電子デバイスの効率、有機分子と金属電極との界面での構造や電子状態に大きく左右される。特に、有機分子のHOMO(最高被占軌道)、LUMO(最低空軌道)といった分子軌道と電極金属のフェルミレベルとのエネルギー準位関係が、金属から有機分子層への電荷注入障壁を支配する。最も単純には、図1(a)に示すように、金属電極から有機分子層への電子注入障壁は、金属の仕事関数と分子層の電子親和力の差になり、正孔注入障壁は金属の仕事関数と分子層のイオン化エネルギーとの差

$$\Phi_B^n = \Phi_m - A, \quad (1)$$

$$\Phi_B^p = I - \Phi_m, \quad (2)$$

になると考えられる。しかしながら、実際には図1(b)に示すように、多くの金属と有機分子との界面では界面電気二重層が生じ、金属電極と分子層とのポテンシャルにはずれ( $\Delta$ )が生じることが実験的に指摘されている[1,2]。この界面電気二重層によるポテンシャルのずれは1eV程度になり、有機分子層のHOMO-LUMOギャップが数eVであることを考えると、 $\Delta$ は電荷注入障壁に大きな影響を与えることがわかる。

$$\Phi_B^n = \Phi_m - A + \Delta, \quad (3)$$

$$\Phi_B^p = I - \Phi_m - \Delta, \quad (4)$$

様々な有機分子と金属表面との組み合わせについて研究がなされ、次の二つの傾向があることが示された。1)多くの有機-金属界面では $\Delta$ は負となるように界面電気二重層が生じる。2)基板金属の仕事関数( $\Phi_m$ )が大きいほど $\Delta$ の大きさも大きくなる。界面電気二重層が生成する原因としては、有機分子-金属表面間での電子移動や、化学結合を作ることによって電子配置が変化すること、あるいは、有機分子自身が持つ双極子が並ぶこと、有機分子層のギャップ内に界面状態が生じ、それがキャリアのバッファとなることによってポテンシャルが変化するなどが提案されている。しかしながら、なぜ、多くの有機-金属界面で $\Delta$ が負になるか、また、なぜ $\Phi_m$ と $\Delta$ の大きさに相関があるか、確かな説明はなされていない。界面電気二重層の生成要因を明らかにし、さらにはそれらを制御していくことは、有機分子デバイスの性能を向上させるためには必要不可欠のことと考えられる。われわれのグループでは第一原理電子状態計算によってこれらの疑問を解き明かす研究を進めている[3-5]。

n-アルカンは電気双極子モーメントを持たず、また、金属表面とも化学的な結合を作らないので、界面電気二重層が形成することは考えにくい。n-アルカンがほぼ一層吸着することによって、銅表面で約-0.3eV、銀表面では約-0.5eV、金表面では-0.7eVもの $\Delta$ が観測されている。このような物理吸着系で界面電気二重層が生成する原因としては、1)金属表面付近では鏡像ポテンシャルによって電子が表面側により強く引きつけられるため分子が分極する効果、2)金属表面では電子が真空側に染み出しているが、それが分子の吸着によって表面側に押し戻されることによって電子分布が変化する効果(push back効果)が提案されている。これらの効果ではいずれも負の $\Delta$ を与える電気二重層が生成する。

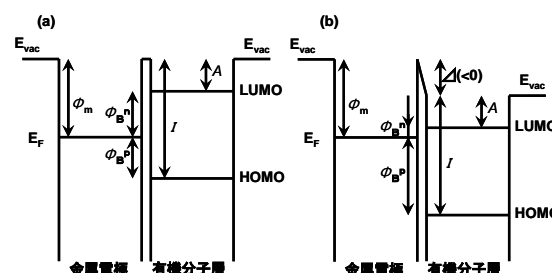


図1. 有機-金属界面での電子状態。(a)が従来モデル、(b)が界面電気二重層を考慮したモデル。

図 2 に n-アルカン分子が C-C-C 面を基板に平行にして吸着した図を示す。そして、図 3 に様々な基板金属表面上での  $Z_c$  の関数として示す。この図で重要なことは、各表面での曲線は互いに良く似ており、また、必ずしも基板の仕事関数の順に並んでいるものではないということである。つまり、アルカン分子の吸着位置が各基板でほぼ同じと仮定すると、基板金属の仕事関数が大きいほど界面電気二重層も大きくなるという傾向は再現しない。これは、仕事関数の大きい基板金属ほど分子による染み出した電子の押し戻し効果が大きくなっているという直感的な描像は成り立っていないことを示している。そうでは無く、より大きな  $Z_c$  を持つ基板では分子 - 表面間の距離はより近づいていることを強く示唆している。すなわち、基板金属の仕事関数と、分子吸着によるポテンシャルの変化 ( $\Delta\phi$ ) は直接的な相関はなく、基板金属の仕事関数が大きい程、分子 - 基板間の距離が小さくなる傾向があるために、 $Z_c$  も大きくなると考えられる。

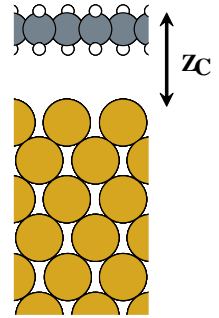


図 2 .n-アルカンが金属表面上に吸着した構造

第 4 図には各基板の仕事関数と  $Z_c^{opt}$  の関係を図示してある。基板の仕事関数が大きいほど  $Z_c^{opt}$  が小さくなるという傾向があることを概ね示している。仕事関数の大きな金属は Pt や Au など 5d 電子を持つ金属であるが、5d 電子は 3d や 4d 軌道に比較して広がっており、そのために分極しやすく、ファンデルワールス相互作用に対する寄与が大きくなり、分子をより表面に近づけるのではないかと考えられる。このように、基板金属の仕事関数と界面電気二重層の大きさが直接関係を持つのではなく、仕事関数の大きい金属表面上では分子 - 金属間距離が小さくなる傾向があるため、その結果として界面電気二重層も大きくなっているということがわかった。

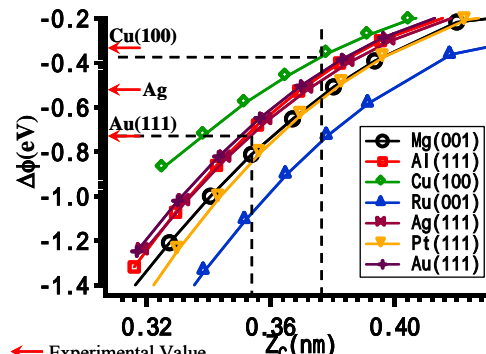


図 3 .様々な金属表面でのn-アルカン吸着による仕事関数変化 .

tris-(8-hydroxy quinolinato) aluminum ( $Alq_3$ ) という分子は有機 EL デバイスの電子輸送層およびエミッション層の材料として最も良く使われている分子である。金属電極から電子輸送層への電子注入効率が有機 EL デバイスの効率を大きく左右することから、 $Alq_3$  分子と金属との界面に関する研究は多くなされてきた。実験的には界面で分子のギャップ内に新たな状態が観測され、また、 $-1.4\text{eV}$  もの界面電気二重層が観測され、基板 - 分子間に強い化学的相互作用があると考えられている。図 5 に  $Alq_3$  が Al 表面に吸着した構造のシミュレーション結果を示す。この図が示しているように、 $Alq_3$  分子の酸素原子と基板の Al とが結合を作っていることが重要であることがわかる。この点は、様々な分子の配置を計算して調べたところ、基板との結合エネルギーは酸素原子が基板 Al 原子と作る結合の数に依存することからも確かめられる。また、多くの酸素原子が基板と結合を作って安定になる構造は、ちょうど分子の持つ双極子が真空側を向き、表面の仕事関数を  $1.0\text{eV} \sim 1.6\text{eV}$  下げる。これは実験値の  $-1.4\text{eV}$  と良く一致しており、界面の電気双極子は主として分子の持つ永久双極子によるものであることが明らかとなった。さらに、界面での分子の HOMO レベル、LUMO レベルと基板のフェルミレベルとの位置関係は、分子の持つ双極子の方向によって大きく変わることもわかった。このため、実験的に観測された界面ギャップ状態は、いくつかの異なる分子の配向によって双極子の方向が異なり、HOMO レベルが異なる準位となって見えることに由来すると考えられる。

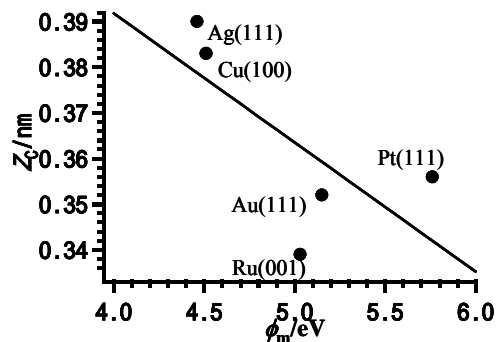


図 4 .金属表面の仕事関数と金属 - 分子間距離の相関

有機/金属界面のシミュレーションに加えて、我々のグループが力を入れて研究を進めているのが、水と金属電極との界面での反応シミュレーションである。最近、高効率なエネルギー変換機器として燃料電池が注目されているが、それに伴い、水と金属との界面での反応シミュレーションの重要性も増している。しかしながら、その複雑さのために、金属表面との界面の構造のシミュレーションはあまり行われていない。特に、溶媒である水の影響は大きく、また、電極界面での電場の影響も取り入れる必要があり、両者の効果を適切に取り入れたシミュレーションはまだ行われていない。その予備的な研究として、Pt や Rh 金属表面上の氷の吸着状態について研究を進めている (図 6)。第一原理分子動力学シミュレーションにより安定構造や振動モード、振動スペクトルを求め、東大物性研吉信グループの実験と比較することにより水と金属との界面構造を明らかにすることを目指している。さらに、図 7 に示すように、溶媒としての水の影響と、電極表面での電場の影響の両方を取り入れて、現実に出る限り近いモデルを用いて電極反応をシミュレーションすることを目指している。この研究は濱田幾太郎氏 (阪大産研) 岡本隼治氏 (NEC 基礎研) 杉野修氏、大谷実氏 (東大物性研) 池庄司民夫氏 (産総研) らとの共同研究で進めている。

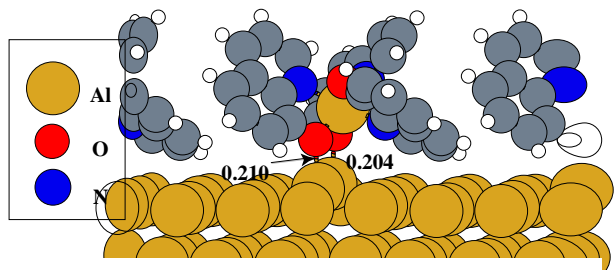


図 5 .Al 表面上での  $Alq_3$  分子の吸着構造

図 6 に Pt や Rh 金属表面上の氷の吸着状態について研究を進めている (図 6)。第一原理分子動力学シミュレーションにより安定構造や振動モード、振動スペクトルを求め、東大物性研吉信グループの実験と比較することにより水と金属との界面構造を明らかにすることを目指している。さらに、図 7 に示すように、溶媒としての水の影響と、電極表面での電場の影響の両方を取り入れて、現実に出る限り近いモデルを用いて電極反応をシミュレーションすることを目指している。この研究は濱田幾太郎氏 (阪大産研) 岡本隼治氏 (NEC 基礎研) 杉野修氏、大谷実氏 (東大物性研) 池庄司民夫氏 (産総研) らとの共同研究で進めている。

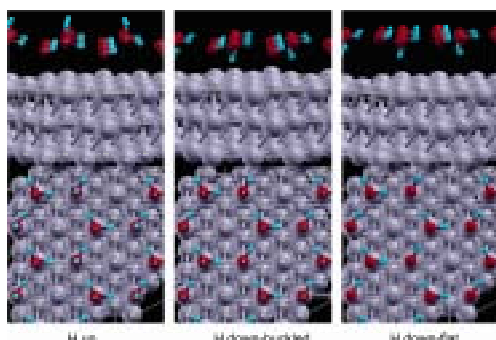


図6 ロジウム原子層上の水分子吸着の異なる構造。

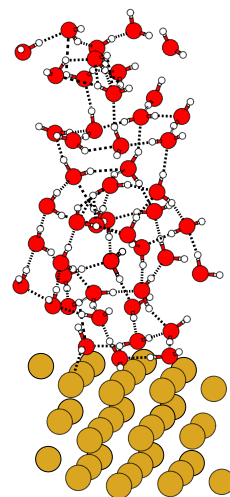


図7 . Pt(111)表面と水との界面。

- [1] H. Ishii, K. Sugiyama, E. Ito, and K. Seki, *Adv. Mater.*, **11**, 605 (1999).
- [2] H. Ishii and K. Seki, in “*Conjugated Polymer and Molecular Interfaces*”, edited by W.R. Salaneck, K. Seki, A. Kahn, and J.-J. Pireaux (Marcel Dekker, New York, 2002), p293.
- [3] Y. Morikawa, H. Ishii, and K. Seki, *Phys. Rev. B* **69**, 041403 (R) (2004).
- [4] S. Yanagisawa and Y. Morikawa, *Jpn. J. Appl. Phys.*, in press.
- [5] S. Yanagisawa and Y. Morikawa, *Chem. Phys. Lett.*, to be published.
- [6] Y. Okamoto, O. Sugino, Y. Mochizuki, T. Ikeshoji, and Y. Morikawa, *Chem. Phys. Lett.* **377** 236 (2003).

### 表面創成プロセスの第一原理シミュレーション

阪大工 後藤 英和

超純水中の水分子を解離し、生成した OH や H ラジカルとの化学反応による材料表面のエッチングを行うことができれば、薬液や反応性ガスを用いず、かつ廃液や排ガスを伴わない低コストで環境負荷の小さい表面創成プロセスを開発することができる[1-5]。そこで本研究では、OH や H を含む水と材料表面との反応プロセスの第一原理分子動力学シミュレーションを行っている。材料としては、Si、Al、Cu 単結晶(001)表面および有機材料などを対象としている。図1はその一例であり、Si 単結晶(001)水素終端化表面に1個のH原子を含む18個の水分子を作用させたモデルによるシミュレーション結果である。計算方法や条件は、既報[6-9]に従った。図1(a)(b)では、 $H_2O+H \rightarrow OH+H_2$ の反応によってOHが生成され、かつ生成したOHが水素終端化されたSi表面原子と結合し、Si表面原子の2本のバックボンドのうち1本を切断することがわかった。さらに2個目のOHを作用させた結果を図1(c)(d)に示す。2個目のOHによって2本目のバックボンドが切断され、Si表面原子は、 $Si_2(OH)_2H_2$ 分子となって加工されることがわかった。また、Al(001)表面においても、同様の反応プロセスにより表面原子がエッチングされることや、OHとの反応によりポリエチレン分子の分解反応が誘起されることが明らかになった。

- [1] 森勇藏、後藤英和、広瀬喜久治他、精密工学会誌、**67**, **6** (2001) 932.
- [2] 森勇藏、後藤英和、広瀬喜久治他、精密工学会誌、**68**, **9** (2002) 1241.
- [3] 森勇藏、後藤英和、広瀬喜久治他、精密工学会誌、**68**, **11** (2002) 1486.
- [4] 森勇藏、後藤英和、広瀬喜久治他、精密工学会誌、**70**, **5** (2004) 666.
- [5] Y.Ichii, K.Hirose, H.Goto, et al., *Electrochimica Acta*, **50** (2005) 5379.
- [6] H.Goto, K.Hirose, et al., *Computational Materials Science*, **14** (1999) 77.
- [7] 後藤英和、広瀬喜久治他、精密工学会誌、**67**, **7** (2001) 1169.
- [8] 後藤英和、広瀬喜久治他、精密工学会誌、**67**, **10** (2001) 1680.
- [9] 後藤英和、広瀬喜久治他、精密工学会誌、**69**, **9** (2003) 1332.

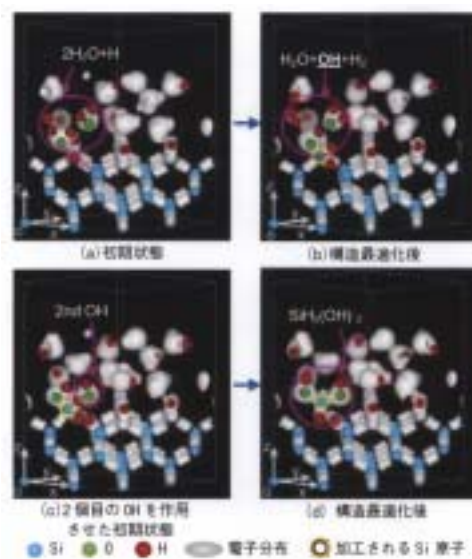


図1 水によるSi(001)表面原子のエッチング

遷移金属は様々な反応過程に対して触媒作用を示すことから工業的に大変重要である。一例として、自動車の排気ガスの有毒な3成分CO, NO<sub>x</sub>(主にNO)、およびHC(炭化水素)をいっぺんに無毒化する三元触媒がある。三元触媒はアルミナやシリカのような酸化物上に分散したRh, Pd, および/またはPtからなる遷移金属クラスターである。化学反応が起こるのはクラスターの表面であるから、遷移金属表面と上述のCOやNOといった分子との相互作用を調べることは非常に重要であり、実際に何十年も前から、表面科学的手法を用いた実験的研究や固体電子論あるいは量子化学的手法を用いた理論的研究が精力的になされてきた。

ステップ表面は平坦表面より触媒活性が一般に高いことが知られている。これは、ステップ近傍の原子は配位数が少ないので、化学的に反応性が高いことを考えると自明である。例えばNO分子の解離反応を例にとると、Rh(111)平坦表面では表面上のNO分子の3%しか解離しないが、Rh(331)ステップ表面では33%と実に平坦表面の10倍以上の分子が解離することが実験により明らかになっている。本講演では、NO/Rh(331)系を中心に(NO/Pd(331)系やNO/Pt(331)系との比較もまじえて)、第一原理計算の結果を紹介する。(331)表面とは3原子列の(111)テラスと(111)monatomicステップが周期的に並んだ表面である。Rh(331), Pd(331)およびPt(331)表面上の様々なサイトにNOを吸着させて吸着エネルギーを計算したところ、RhとPtではステップブリッジサイトが、Pdではステップホローサイトが最安定であることがわかった。NOの解離過程のenergeticsを調べるためにNとOが解離して吸着した場合の全エネルギーを計算し、NOが分子状に吸着している場合と比較してみたところ、Pdでは0.54 eV, Ptでは1.12 eVだけ分子状吸着の方が安定であるが、Rhでは逆に解離吸着状態が0.33 eVだけ安定であることがわかった。厳密には活性化障壁の値を比べて見なければならぬが、これらの結果はRhがNOの解離反応に対して特異に触媒活性が高いことを示唆している。

ところで、活性化障壁の値を計算する代表的な手法の一つにNudged Elastic Band(NEB)法があるが、この方法では過程の始状態と終状態を指定しなければならない。Rh(331)表面上でのNOの解離過程の活性化障壁を計算するには、始状態は分子状吸着で最安定のステップブリッジサイトに吸着した状態として、安定な終状態を探すには、より大きなユニットセルを用いた大規模な計算が必要になる。様々な位置にN原子とO原子を吸着させて全エネルギーが低くなる状態を探してみたところ、N原子がステップブリッジサイトに残り、O原子がステップを下って下のテラスのhcp-ホローサイトに吸着した状態が最安定であることがわかった。NEB法は大幅に計算量が多くなるが、計算機の発展により可能となってきているので、始状態と終状態がわかった今となっては、活性化障壁を求めるのはそれほど困難ではない。我々は計算結果が大きなステップ効果、すなわちステップの存在による活性化障壁の大幅な減少を示すのではないかと期待している。

## 第一原理シミュレーション計算による新材料設計の現状

我が国は、材料立国と言われ、米国もこれを認めている。例えば、英語ではmaterialsただ一つの単語が、日本語では、材料、物質、素材、原料等と複雑に使分けられること一つを採っても、我が国における材料研究・産業の重要性が分かる。抜本的に新しい技術の創出の基には必ず新材料開発がある。これをさらに発展させ、最初から各種機能を持つように原子レベルで設計された新材料を創製することができれば、それはナノメータースケールの次世代デバイスと呼ぶべきものである。この次世代デバイスによれば、21世紀においても、我が国が高度情報化社会で必要とされる他所では作れない新素材を提供できるため、材料立国の揺るぎない地位を継続的に確保できる。その実現のためには、もちろん実験的研究が重要であるが、今後はますます第一原理に基づくシミュレーション研究が欠かせない要素、さらには設計指針となるに違いない。これは、化学の分野の発展形としてのドラッグデザインの材料版であるコンビナトリアル材料開発のシミュレーション部分である。また、原子レベル制御次世代デバイスは、そのサイズが従来の1万分の1程度になるので、同じ仕事量を行わせるとエネルギー消費量が極めて少なく、環境に優しい。また、第一原理シミュレーション計算が得意とするナノスケールシミュレーションの世界では有機高分子を使うことが多くなり、従来技術のように希少金属等を多く使わないという意味で、原理的に価格も低く抑えられる夢の新材料である。ナノテクノロジーは、バルクでは金属でない元素を使って金属の性質を出したりするという意味で、全く新しい錬金術であるとも言える。

従来型の実験研究方針は、基本的に経験に基づくため、抜本的に新しい物質の探索というよりは既存物質の改善という形を採ってきた。例えば、環境問題のために使えなくなるPZTの代替材料としての非鉛圧電素子とか、燃料電池用触媒として量的に全く不足する白金の代替材料等の創製は、現在、第一原理シミュレーション計算による予測が最初になされ、その実現のための実験が行われる場合も多く出てきている。

材料研究は、錬金術に始まる。最近まで使われていた冶金学という言葉でさえ、基本的に理論ではとても解決できる問題ではなく、経験と勘に頼る世界であることを如実に示している。しかし、世の中には、理論先行という研究分野も多い。例えば、最近ノーベル物理学賞に輝いたニュートリノは理論的にその存在が予言され、実験による発見はその検証という形で進められた。実験事実の説明に過ぎなかった従来の物性理論が、第一原理計算に基づく超大規模シミュレーション計

算を適用することにより、実験以前に、新材料・新物質・新素材からさらには次世代デバイスを設計し、その物性を予言することが可能になることは明白になりつつある。今後、計算機パワーの一層の進展に伴い、いよいよ計算材料学と呼ぶべき研究分野が材料研究のキー技術となり、それなしの新材料・デバイス開発はない時代が到来する。

### 3d 遷移金属を含まない新しいタイプの完全スピン分極強磁性体のデザインと実証

大阪大学産業科学研究所 吉田 博

第一原理計算に基づいて、ワイドギャップ半導体をベースにギャップ中に作った深い不純物準位の電子相関エネルギー  $U(=E(N+1)+E(N-1)-2E(N))$  と深い不純物バンド幅  $W(W \sim \sqrt{C})$ 、 $C$ : 不純物濃度) を調整制御することにより、完全スピン分極した強磁性状態を安定化させるためのマテリアルデザインについて報告する。一般に、バンドギャップを持つ絶縁体や半導体にキャリアをドーピングしてゆくと、絶縁体 反強磁性半導体 バッドメタル (超伝導対もしくは強磁性体) 通常金属とその電子状態が順次変化して行く。第一原理計算を用いて、 $U > W$  の条件を満たすように深い不純物濃度を制御して磁性状態を安定化させ、さらに、部分的に占有された深い不純物状態により完全スピン分極した強磁性状態を安定化させる。

具体的な物質として、逆  $\text{CaF}_2$  構造をもつ  $\text{K}_2\text{S}$ ,  $\text{Na}_2\text{S}$ ,  $\text{KL}_2\text{S}$ ,  $\text{Rb}_2\text{S}$  にドーピングした  $\text{C}$ ,  $\text{N}$ ,  $\text{Si}$ ,  $4d$  遷移金属,  $\text{SiO}_2$  にドーピングした  $\text{N}$ ,  $\text{CaO}$  にドーピングした  $\text{C}$ ,  $\text{N}$ ,  $\text{MgO}$  にドーピングした  $\text{C}$ ,  $\text{N}$ , また、Diamond にドーピングした  $\text{P}$  と  $\text{H}$  や  $\text{B}$  と  $\text{H}$  などの同時ドーピング法を例に取り上げ、 $3d$  遷移金属の仮想束縛状態のかわりに、深い不純物による仮想束縛状態を利用し、部分的に占有された深い不純物バンドを利用した二重交換相互作用による強磁性発現機構について議論する。さらには、アクセプターやドナーのドーピングによる強磁性状態のキャリア濃度依存性についても議論する。現在、多くの実証実験が進みつつあり、許されればデザインと実証実験との比較も行う予定である。本研究は、Masayoshi SEIKE, Kazuhide KENMOCHI, Kazunori SATO, Akira YANASE との共同研究に基づいています。

- (1). New Route to Fabricate Ferromagnetic Semiconductors without Transition Metal Elements, Masayoshi SEIKE, Kazuhide KENMOCHI, Kazunori SATO, Akira YANASE and Hiroshi KATAYAMA-YOSHIDA, Jpn. J. of Appl. Phys., 43, (2004) L579-L581.
- (2). Materials Design of Transparent, Half-metallic and Room-temperature Ferromagnets in I2-VI Semiconductors with 4d Transition Metal Element., Masayoshi SEIKE, Kazunori SATO, A. YANASE, and H. KATAYAMA-YOSHIDA, Jpn. J. Appl. Phys. 43 (2004) L834-L837.
- (3). New Class of Diluted Ferromagnetic Semiconductors based on  $\text{CaO}$  without Transition Metal Elements. Kazuhide KENMOCHI, Masayoshi SEIKE, Kazunori SATO, Akira YANASE, and Hiroshi KATAYAMA-YOSHIDA, Jpn. J. Appl. Phys. 43 (2004) L934-L936.
- (4). Design of Transparent, Half-Metallic Ferromagnetic 4d-Transition-Metal-Doped  $\text{K}_2\text{S}$  with High Curie Temperature, Masayoshi SEIKE, Kazunori SATO, Akira YANASE, and Hiroshi KATAYAMA-YOSHIDA, Jpn. J. Appl. Phys. 43 (2004) 3367-3370.
- (5). Materials Design of Transparent and Half-Metallic Ferromagnets of  $\text{MgO}$ ,  $\text{SrO}$  and  $\text{BaO}$  without Magnetic Elements, Kazuhide KENMOCHI, Van Ann DINH, Kazunori SATO, Akira YANASE and Hiroshi KATAYAMA-YOSHIDA, J. Phy. Soc. Jpn, 73, (2004), pp. 2952-2954.
- (6). Materials Design of Ferromagnetic Diamond, Kazuhide KENMOCHI, Kazunori SATO, Akira YANASE and Hiroshi KATAYAMA-YOSHIDA, Jpn. J. Appl. Phys, 44, (2005) L 51-L 53.
- (7). Dilute magnetic semiconductors based on wide bandgap  $\text{SiO}_2$  with and without transition metal elements. Van An Dinh, Kazunori Sato, Hiroshi Katayama-Yoshida, Solid State Communications 136 (2005) 1-5.

### 希薄磁性半導体の交換相互作用と磁性

阪大産研 佐藤 和則、吉田 博  
ユーリッヒ研 P. H. Dederichs

半導体スピントロニクス材料として希薄磁性半導体が注目を集めているが、最も研究が進んでいる  $(\text{Ga}, \text{Mn})\text{As}$  においてキュリー温度が  $\text{Mn}8\%$  で  $170\text{K}$  程度であり、高いキュリー温度をもった材料の合成が重要な課題となっている。この系の磁性については Dietl らの  $p$ - $d$  交換相互作用モデルによる研究をはじめとして多くの理論計算があるが、古典ハイゼンベルク模型を用い交換相互作用を第一原理計算から求めておき、系の磁性をモンテカルロ法でシミュレートする方法が比較的よいキュリー温度の予測値を与えることがわかってきている[1,2]。しかし、実験的に合成されている様々な希薄磁性半導体の磁性をすべて矛盾なく説明できていないわけではなく、理論及び計算法の改良が求められている。本講演では次の2点について考察する。

今までのシミュレーションでは、コヒーレントポテンシャル近似で計算した有効媒質中の2つの磁性不純物間に働く交換相互作用を Liechtenstein らによる方法[3]で計算しているため、計算で得た交換相互作用は周りの不純物原子の配置によらない。一方、磁性イオンの配置により交換相互作用は大きく変化しキュリー温度に影響を与えることが指摘されてい

る[4]。本研究ではそのような局所環境効果をクラスター埋め込み法により考慮する方法について議論する。

また、今までの計算では、不純物の分布は完全にランダムで系全体に様に分布していることを仮定しているが、クラスタリング等、強い不均一分布があることが指摘されている[5]。本研究では希薄磁性半導体中の不純物間の相互作用を計算し、系に不均一分布がおこる様子をモンテカルロ法でシミュレートした。一般に希薄磁性半導体中で磁性不純物間の相互作用は引力的であり系は相分離をおこす。そのため低濃度では小さい独立したクラスターが多数でき結果的にキュリー温度は下がるが、ある程度(~15%)以上の濃度では高濃度領域が互いに連結した複雑な構造をとる。このとき同時に磁気的なネットワークも形成されるためキュリー温度を上げる可能性があることがわかってきた[6]。さらに、結晶成長方向を導入したシミュレーションの結果についても議論する。

[1] K. Sato et al. Phys. Rev. B 70 (2004) 201202.

[2] L. Bergqvist et al., Phys. Rev. Lett. 93 (2004) 137202.

[3] A. I. Liechtenstein et al., J. Magn. Magn. Mater 67 (1987) 65.

[4] J. L. Xu et al., Phys. Rev. Lett. 94 (2005) 97201.

[5] L. Gu et al., J. Magn. Magn. Mater. 290-291 (2005) 1395.

[6] K. Sato Jpn. J. Appl. Phys. 44 (2005) L 948.

## 半導体中の不純物拡散の制御

### IR excitations for controlling of impurity diffusion in semiconductors

大阪大学産業科学研究所産業科学ナノテクノロジーセンター 白井 光雲  
Nanoscience and Nanotechnology Center, ISIR, Osaka University Koun Shirai

#### 1 はじめに

シリコン中の不純物拡散はデバイスプロセスの中で重要な位置を占める。熱的な方法では制御しようとする不純物だけでなく、他の原子全てにその効果が及ぶので、これがプロセスにさまざまな制限、困難性を課す。この制限を取り払い、さらに不純物の種類ごとに選択的に拡散させる試みの一つとして、不純物固有の振動を利用した赤外線照射励起による不純物拡散の促進が提案されている。[1] シリコン中の不純物の局在振動モードをその振動数に同調した赤外線強制励起して、問題としている不純物種のみを選択的に拡散促進しようというものである。

赤外線照射により本当に不純物拡散が促進するか、またするとしてどれくらいの効率か？などさまざまな興味がある。しかしながら、実験では使える赤外線レーザーの波長には大きな制約がある。可視光領域と違い利用できる波長は非常に限られているため、不純物固有の振動数に同調することが難しい。このことが実験による検証を阻んでいる最大要因である。この研究では、実験におけるこのような制限に捕らわれないように、第一原理分子動力学シミュレーション (FP-MDS) により研究し、どれくらいの効果があるか、さらに効果があるとして実際の実験に必要な条件を予測することを目指している。

FP-MDS には実験における制約はないが、しかしながら第一原理計算に内在する技術的な制約はある。特にシミュレーション時間の制約は深刻である。本研究では、最初にそれらの問題解決に関する進展について述べる。外部バイアスにより、拡散定数にして従来より一、二桁くらい広い範囲をカバーできる。この計算技法の発展として、上で述べた赤外線照射励起のシミュレーションが実現できる。本稿ではこの技法を実際の不純物種 O、B、P に適用してみて、赤外線照射励起の効果を調べてみている。

#### 2 半導体中の不純物拡散の理論

不純物拡散の機構 不純物拡散の制御という場合、半導体中の不純物拡散の機構の解明が必要である。半導体中の不純物の拡散に関してはこの 20 年に非常に大きな進展があった。

半導体中の不純物拡散の機構は、主に拡散障壁あるいは拡散の活性化エネルギー  $Q$  で議論される。その値は典型的なドーピング不純物の場合、3~4eV の大きさである。ホスト結晶にはじめからある格子欠陥の助けなしで、不純物原子だけで拡散する機構も古くから提唱されていたが[5]、1980 年代終わりまでに、それはほとんど支配的でないことがわかった。[6, 7, 8, 9, 10] そのかわり、格子欠陥あるいは格子間 Si とペアを組むことで拡散が行われることが、 $Q$  の評価より明らかにされた。拡散を担う欠陥も多くの場合、格子間 Si であることがほぼ確定している。

近年ではこの格子間 Si で不純物の拡散を制御する試みがなされているが、問題点としては B、P など典型的な不純物種のほとんどはこの格子間 Si で拡散が担われているため、不純物種に関する選択制がないことである。選択的拡散を目指す研究にとってこれは好ましくない。そこで冒頭で述べた不純物種固有の振動モード励起の活用が提案されたのである。不純物拡散の第一原理シミュレーションの問題 拡散の活性化エネルギー  $Q$  が先程の数 eV 位のオーダーの時は問題とならないが、1eV 以下くらいになると原子の運動エネルギーの効果 (動的効果) が重要となり、静的な計算だけでは正しく拡散過程を記述できない。そこで MD シミュレーションが必要となる。第一原理計算による不純物拡散シミュレーションは既に 15 年も前に Car-Parrinello のグループにより[2]、シリコン中の水素イオンの拡散現象に適用されたことに始まる。その後、第一原理計算の技法は様々に発展してきているが、こと不純物の拡散現象シミュレーションに限ると、それほど発展はないように見える。

それは本質的に固体中の原子拡散は原子スケールでは非常に緩慢な過程であるからである。 $D \sim 10^{-4} \text{cm}^2/\text{s}$  の拡散定数を



持つもので 1 ps くらいの時間（典型的な FP-MD シミュレーション時間）で 1 くらいの移動しかない。これより小さい移動量では熱振動に埋もれて拡散しているかどうか判別できない。 $D \sim 10^{-4} \text{cm}^2/\text{s}$  という値は固体中の拡散定数としては、非常に高い値で、このような値を持つものは、高温におけるシリコン中の水素くらいのものである（銅も高温でこれくらいの大きさになり得る）。これが 15 年も前に FP-MD シミュレーションが適用されてからそれほど進展がない理由である。

筆者らは最近、Cu に関する FP-MD シミュレーションを行った。[3] その拡散定数の温度依存性が図 1 で示されている。拡散の活性化エネルギー  $Q$  で、実験値 0.18 eV [4] との一致を見ている。注意したいのは、従来の静的な計算による評価では  $Q$  はその倍くらいの値となっていることである。

拡散における動的な効果は重要で、水素の拡散の問題でも議論されている。[?]

## 2.1 バイアスによる拡散促進

拡散現象は上で見たように原子スケールでは非常に遅い現象なので、第一原理シミュレーションは非常に限られた場合にしか適用できない。その適用性を広げるためには、何らかの方法で拡散を加速する必要がある。ここで述べられる不純物に対するバイアス力印加の方法はその内の一つの方法である。[12] それは結晶中の不純物原子だけに時間的に一定の外部力  $F_{\text{ext}}$  を加えるという方法である。それにより不純物原子の運動には  $F_{\text{ext}}$  に比例したドリフト速度  $v_d$  が生まれる。

$$v_d = \mu F_{\text{ext}} \quad (1)$$

$v_d$  を測定できれば易動度  $\mu$  が得られる。 $\mu$  が得られればアインシュタインの関係によりその温度  $T$  での拡散定数  $D$  が求まる。これがバイアス法の基本的なアイデアである。

しかしながら数値計算技法上はこの方法はいくつかの問題点を提起した。[12] 特に重要な点は系の温度制御である。外部から強制的に力を印加している以上、系のエネルギーは増加し続ける。 $D$  の温度依存性を調べようとする限り、系の温度が明確に決まらなければならない。温度制御が求められる。温度制御として Nose の方法を適応した。[13]

図 2 は、その適応例で、シリコン中の  $\text{H}^+$  拡散をシミュレーションしている。図から  $\text{H}^+$  は熱的に揺らぎながらも  $x$  方向に一定ドリフト速度を持つことが分かる。このとき拡散定数を評価してみると、 $D = 6.4 \times 10^{-4} \text{cm}^2/\text{s}$  と合理的な値を出している。

この方法により従来の熱拡散に比べて格段にシミュレーション時間を節約できることが示された。さらなる詳細については文献[12] を参照していただく。

## 3 赤外線照射励起のシミュレーション

不純物振動 不純物振動には、ホストフォノンより高い振動数の局在モード、ホストフォノンのバンド中にあるバンドモード、ホストフォノンの中の禁止帯にあるギャップモードがある。単純に言えば局在モードが外部場による共鳴効果が最も期待できるものであるが、固体中でのフォノン間相互作用の複雑さにより、本当にそうなるかやってみないと分からない部分が多い。

ここで取り上げた不純物種は O、B、P である。これらを Si のスーパーセルの中に入れ、まず不純物の局所振動モードを割り出し、次にその振動数の外場をその不純物だけに印加したシミュレーションを行って、この赤外線照射による不純物拡散促進の効果を調べた。

まず不純物の局所振動モードを割り出しを行う。もう実験的に分かっているのだから [14]、後の赤外線照射効果を見るため、計算で行っておく。フォノンを求めるにはいわゆる凍結フォノン (frozen phonon) 法という静的な計算が行われるのが普通であるが、ここでは後の赤外線照射効果を見るため MD シミュレーションによる動的な計算を行う。

シリコン中の O、B、P の不純物モードを計算するため、 $\text{Si}_{16}$  のスーパーセルを用意した。MD シミュレーションの時間ステップはどの不純物でも 2.42 fs、全体のシミュレーション時間は 3.87 ps としている。このシミュレーション時間はフォノンスペクトルにおける振動数分解能  $\omega = 8.6 \text{cm}^{-1}$  を与える。

このようにして得られたフォノンスペクトルが図 3 に示される。ここで示されているスペクトルは各原子の振幅のパワースペクトル  $P_i(\omega)$  である。図 3 では比較のため、全振動 DOS もプロットされているが、それは各原子の  $|u_i(\omega)|^2$  を全原子で平均化したもの、 $|\bar{u}(\omega)|^2$  である。

共鳴効果 次に、不純物に対してのみ交流の外場  $F_{\text{ext}}(t) = F_{\text{ac}} \exp(i\omega_{\text{ext}} t)$  を印加する。

計算条件は前節のものに加えて、印加バイアス力  $F_{\text{ac}} = 1.0 \times 10^{-2} \text{Ry/Bohr}$ 、Nose の熱浴温度  $T=1000\text{K}$  を用いる。

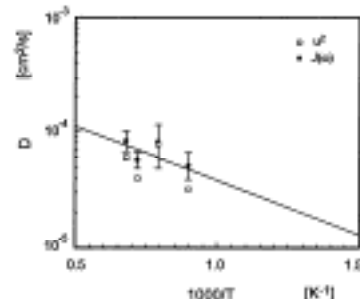


図 1: Si 中の Cu の拡散定数の温度依存性。実線が実験値をプロットしたもので [4] から取ってきている。

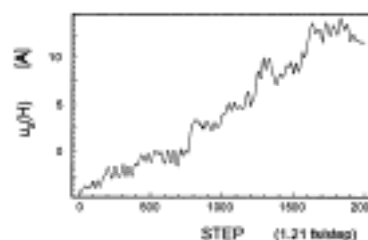


図 2:  $x$  方向に外部バイアス力 ( $F_{\text{ext}} = 5 \times 10^{-3} \text{Ry/Bohr}$ ) を印加したときのシリコン中の  $\text{H}^+$  の  $x$  方向の変位。

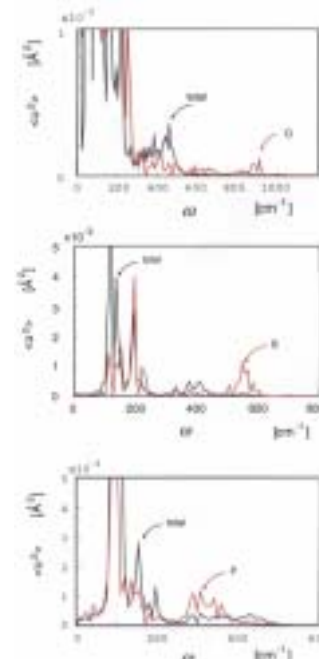


図 3: シリコン中の不純物モード。黒線は全振動 DOS で赤がそのうち不純物だけの部分 DOS。振幅は原子あたりに規格化している。 $\omega = 8.6 \text{cm}^{-1}$

外部交流バイアスとして、O に対して、 $\omega_{\text{ext}}=877$ 、B に対して 551、P に対して  $309\text{cm}^{-1}$  の交流を掛ける。

結果は図 4 に示されている。この図には不純物振動スペクトル  $|u_i(\omega)|^2$  を外部バイアスがあり・なし、B 両方の場合を比較している。O の場合、明らかに  $\omega \sim 900\text{cm}^{-1}$  付近の局在モードの振幅が増加している。B の場合も、やはり  $\omega \sim 500\text{cm}^{-1}$  を中心に振幅の増加が認められる。一方、P では予測されたようにほとんど差異が認められない。不純物モードがバンドモードであることの反映である。

以上で、局在モードの特性が明確な O、B では赤外線励起の効果はあり、その特性の明確でない P (バンドモード) では効果がないことが分かった。

#### 4 まとめ

第一原理分子動力学法シミュレーションにより、半導体中の不純物の拡散過程をシミュレーションすることを行ってきた。

第一原理計算に本質的な計算コストを、バイアス力を印加するにより効率的に計算する方法を提案した。その応用として赤外線照射下で不純物振動を励起し、それによりその不純物種の選択的拡散させる方法のシミュレーションを行った。

不純物振動の振幅の増加から判断する限り、局在モードの特性が明確な O、B では赤外線励起の効果はあり、その特性の明確でない P (バンドモード) では効果がないことが分かった。

#### 参考文献

- [1] H. Yamada-Kaneta, *Proc. 4th Int. Symp. on Advanced Science and Technology of Silicon Materials*, 2004, Hawaii, pp. 305-308; H. Yamada-Kaneta and K. Tanahashi, *Physica B*, in press.
- [2] F. Buda, G. L. Chiarotti, R. Car, and M. Parrinello, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 294 (1989); G. L. Chiarotti, F. Buda, R. Car, and M. Parrinello, *Mat. Res. Symp. Proc.* **163**, 383 (1990).
- [3] K. Shirai, T. Michikita, H. Katayama-Yoshida, *Jpn. J. Appl. Phys.* **44** 7760 (2005).
- [4] A. A. Istratov, C. Flink, H. Hieslmair, E. R. Weber, and T. Heiser, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 1243 (1998).
- [5] K.C. Pandey, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 2287 (1986).
- [6] R. Car, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1814 (1984); **54**, 360 (1985).
- [7] C.S. Nichols, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 1049 (1989); *Phys. Rev. B* **40**, 5484 (1989).
- [8] N.E.B. Cowern, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2434 (1990); **67**, 212 (1991); **69**, 116 (1992).
- [9] P. Blöchl, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 2435 (1993); M. Tang *et al.*, *Phys. Rev. B* **35**, 14279 (1997).
- [10] B. Sadigh *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 4341 (1999). W. Windl *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 4345 (1999); E. Napolitani *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 055901 (2004).
- [11] K. Shirai, I. Hamada, and H. Katayama -Yoshida, *Physica B*, in press.
- [12] K. Shirai, T. Michikita, and H. Katayama - Yoshida, *Proc. 4th Int. Symp. on Advanced Science and Technology of Silicon Materials*, 2004, Hawaii, pp. 129-134.
- [13] S. Nose, *J. Chem. Phys.* **81**, 511 (1984); W. G. Hoover, *Phys. Rev. A* **31**, 1695 (1985); **34**, 2499 (1984).
- [14] J. F. Angress, A. R. Goodwin, and S. D. Smith, *Proc. Roy. Soc. A.* **308**, 111 (1968).

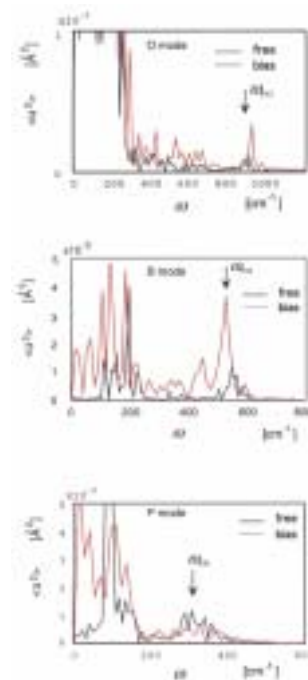


図 4: 赤外線照射の効果。O、B、P に対して、照射していないときの不純物振動 DOS (黒線) と照射下でのそれ (赤線) を比較している。  $\omega = 8.6\text{cm}^{-1}$

## ハーフメタル強磁性体 CaN の理論設計

阪大基礎工 下司 雅章

遷移金属を含まないハーフメタル強磁性体である CaN を第一原理計算によって理論設計した結果を示し、合成プロセスまでの提案を行った。

我々は Ca で強磁性が発現することを発見したが、幾つかの構造安定性や元素の組み合わせを調べた結果、岩塩構造で窒化物を作った場合が最も全エネルギーが低く、強磁性状態も体積変化に対して広い範囲で安定に存在することが分かった。岩塩構造 CaN では強磁性状態は反強磁性状態に比べて、約  $0.1\text{eV}$  のエネルギーの利得があり、キュリー温度も高いことが推測される。磁気モーメントは  $1\mu_B$  でハーフメタル状態の特徴を有している。磁気モーメントのほとんどは窒素原子が担っており、スピン偏極しているのは窒素原子の p 電子である。

岩塩構造 CaN の構造安定性をより確かなものとするため、第一原理分子動力学計算を実行した。Damped dynamics 法による結果から、少なくとも岩塩構造が準安定構造として存在しうることを確認した。また圧力一定分子動力学法による結果から、常圧状態で岩塩構造が崩れることはないことを幾つかの温度で確認した。

上の結果から、何らかの方法で合成できれば岩塩構造 CaN は存在しうると考えられる。幾つかの可能性の中から、今回は高压合成について注目して、第一原理計算からその可能性を議論した。Ca と N との化合物は  $\text{Ca}_3\text{N}_2$  が安定なものとして存在しており ( $\alpha\text{-Ca}_3\text{N}_2$ )、形成エネルギーを調べても、かなり安定である。しかし、これは温度を 500 くらいに上昇させると結晶構造が  $Ia\bar{3}$  から  $P\bar{3}m1$  に構造相転移することが実験的に知られている ( $\beta\text{-Ca}_3\text{N}_2$ )。この構造での形成エネルギーは CaN と Ca が形成された場合の形成エネルギーよりも高いことが分かった。このことから合成プロセスとして、まず  $\alpha\text{-Ca}_3\text{N}_2$  が  $\beta\text{-Ca}_3\text{N}_2$  になるまで過熱し、その状態で何らかの方法で外力を加えて CaN ができる状態にしてやり、CaN が出来てしまえば温度を下げ、圧力を抜いて常圧で取り出せるというものが考えられる(図 1)。

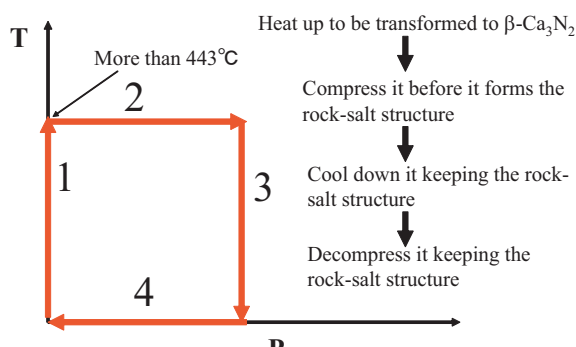


図 1 . 提案した CaN の P-T 相図上での合成プロセス。

バルク結晶で p 電子による強磁性を発現する物質の提案はこれが世界で始めてであり、その合成プロセスに対して、第一原理計算に基づいて提案を行ったのも初めてである。

## スピン軌道相互作用を考慮した二成分スピノル型ウルトラソフト 擬ポテンシャルの開発と磁気異方性エネルギーの見積り

金沢大自然 小田 竜樹、細川 明彦

原子の質量が重くなると電子運動における相対論効果を無視することができなくなる。電子のスピン軌道相互作用もその一つである。第一原理計算において相対論効果は Scalar relativistic 方程式という形で半相対論的に取り入れられることが多いが、この場合スピン軌道相互作用は含まれない。スピン軌道相互作用を取り入れるためには、スピンの概念が自然に取り入れられているディラック方程式を扱うのが自然であり、第一原理的アプローチの中でも全電子を扱う手法では、すでに広く用いられている。第一原理的に分子動力学シミュレーションを実行する場合は、擬ポテンシャルを使うことが多いが、スピン軌道相互作用を取り入れた手法は、摂動的な手法を通して取り入れられるにとどまっていた。近年、擬ポテンシャル法にもスピノル型の波動関数を用いる方法[1]が、使われるようになり、セルフコンシステントにスピン軌道相互作用を取り入れた手法が、開発されている[2,3]。我々のグループでも、2 成分型ウルトラソフト擬ポテンシャルを開発し、ノンコリニア-磁性の平面波コードにて、重い原子の典型的な例について、テスト計算を行った。また、スピン軌道相互作用が主因であると考えられる磁気異方性についても計算した。前者だけでなく、後者についても、全電子計算との比較的良い一致を得た[4]。

相対論効果についてよく調べられている原子番号 82 の鉛(Pb, 電子配置  $5d^{10}6s^26p^2$ )における結果を示した。図 1、2 は  $6s$  および  $6p$  軌道の擬波動関数と真の波動関数である。カットオフ半径は 2.5 a.u.である。表 1 には価電子の固有値をあげた。

今後、結晶構造とスピン軌道相互作用との関係を明らかにできるものと考えられる。

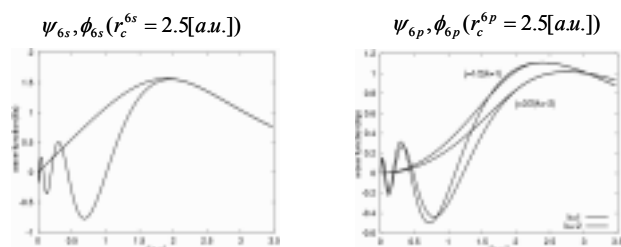


図 1  $6s$  軌道に対する擬波動関数 図 2  $6p$  軌道に対する擬波動関数

$n\ell$	$j$	all electron	pseudo ( $\Delta E$ )
$5d$	$3/2$	-1.6734	-1.6733 (+0.0001)
$5d$	$5/2$	-1.4823	-1.4821 (+0.0002)
$6s$	$1/2$	-0.9016	-0.9014 (+0.0002)
$6p$	$1/2$	-0.3547	-0.3545 (+0.0002)
$6p$	$3/2$	-0.2440	-0.2439 (+0.0001)

表 1 擬ポテンシャルで計算した Pb の固有値と

- [1] T.Oda, A. Pasquarello, and R. Car, Phys. Rev. Lett. 80 (1998) 3622.  
 [2] G. Theurich and N. A. Hill, Phys. Rev. B 64 (2001) 073106.  
 [3] A. D. Corso and A. M. Conte, Phys. Rev. B 71 (2005) 115106.  
 [4] T. Oda and A. Hosokawa, Phys. Rev. B 72 (2005) 224428.

# 大規模電子構造計算による分子動力学シミュレーション

東大工<sup>1</sup>、CREST-JST<sup>2</sup> 星 健夫<sup>1,2</sup>、張 爽<sup>2</sup>、藤原 毅夫<sup>1,2</sup>

近年我々が開発した計算手法により、大規模系( $10^4$ - $10^7$ 原子系)の電子構造計算、およびそれに基づく分子動力学計算が可能となってきた。[1-6]その数理的基礎は、実空間基底を用いたうえで、一電子固有状態の代わりに一体密度行列やグリーン関数を計算することにある。また、本研究では、スレーターコスター形式にマップされたハミルトニアンを用いている。図には最大 $10^7$ 原子までの計算例を示した。従来法以外の手法は、計算量がシステムサイズ(原子数) $N$ に比例している(オーダー $N$ 法)。

特に分子動力学計算を行う際には、厳密な基礎方程式を用いて残差を計算し、動的かつ微視的に精度を保證することが重要となる。結果として、一つの系であっても、例えば表面部分とバルク部分とで、計算コストはそれぞれ独立に制御される。[5]

本手法の有用な応用分野としては、ナノ構造系(特に数nmから数十nmスケール系)のプロセスが考えられ、そこでは、バルク部分と非バルク部分(表面・界面・欠陥等)の双方が本質的役割を果たしている。具体的応用課題として、シリコン劈(へき)開における、表面生成プロセスを取り上げた。[2,4,6] 10nmスケール(または $10^4$  -  $10^5$ 原子)系に対する、10psオーダーの動的プロセスに相当する。分子動力学計算により、実験的に得られているSi(111)-(2x1)構造の形成プロセスが示され、さらに、へき開面のベンディング(折れ曲がり)やステップ形成が得られた。グリーン関数から表面系の局所状態密度を計算し、ステップ構造はバイアス依存性STM像を示す結論に至った。これらは実験結果を再現し、また、結論が確立されていない実験データへの示唆を与えている。講演では、上記シリコン系その他、fcc Cuや液体Cでのテスト計算も取り上げたい。

[1] 完全な文献リストや動画ファイルなど; <http://fujimac.t.u-tokyo.ac.jp/lses/>.

[2] T. Hoshi, and T. Fujiwara, JPSJ72, 2429 (2003).

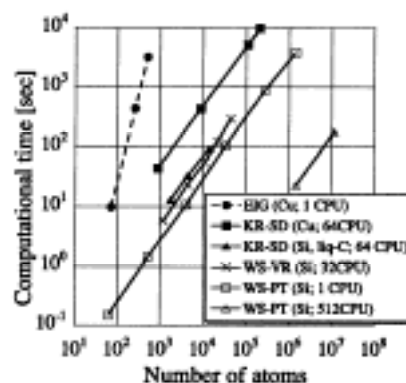
[3] R. Takayama, T. Hoshi, and T. Fujiwara, JPSJ73, 1519 (2004).

[4] T. Hoshi, Y. Iguchi and T. Fujiwara, PRB72, 075323 (2005).

[5] R. Takayama, T. Hoshi, T. Sogabe, S.-L. Zhang, and T. Fujiwara, preprint (condmat/0503394); 関連計算コードは公開されている(<http://act.jst.go.jp>).

[6] T. Hoshi, R. Takayama, Y. Iguchi, and T. Fujiwara, preprint (cond-mat/0508277).

図：大規模( $10^7$ 原子系まで)電子構造計算の例; [2,4,6]金属系(バルクCu、液体C)、半導体系(バルクSi)に対する計算時間。固有状態を計算する従来手法(EIG)の他、以下の手法で一体密度行列を計算している; クリロフ部分空間法(KR-SD)、一般化ワニア状態に対する変分法(WS-VR)および摂動法(WS-PT)。Cuでは、LMTO法から構成されたハミルトニアン( $H^2$ )を用いた。C、Siでは、文献[4]の文献リストにあげたハミルトニアンを用いた。非並列(1CPU)計算には標準的ワークステーション(2 GHz, Pentium 4™プロセッサ搭載)が、並列計算にはSGI Origin 3800™, SGI Altix3700™などが用いられている。



## 第一原理オーダー $N$ 法プログラムCONQUESTによる応用計算に向けて

物材機構 宮崎 剛・大野 隆央

密度汎関数法にもとづく第一原理計算は、物性物理や材料科学、さらには生体物理など様々な分野で使われている。しかし、現在使われている手法では計算に必要なメモリ量は系の原子数 $N$ の2乗、計算量は $N$ の3乗に比例するので、超大規模系に対して第一原理計算を適用することは極めて困難である。我々は、この問題に対してメモリ量、計算量が $N$ に比例するオーダー $N$ 法第一原理計算プログラム CONQUEST を開発してきた。オーダー $N$ 法の実現にはいくつかの手法が提案されてきたが、我々は Kohn-Sham の一体波動関数から作られる密度行列を最適化する方法を現在採用している。プログラムの並列化効率、演算効率は高く、CONQUEST を用いた数万原子の系に対する第一原理計算が可能となっている。また、プログラムは精度の異なる手法、すなわち経験的 Tight Binding モデル、第一原理 Tight Binding、さらに平面波基底の精度をもつ第一原理計算が可能であり、これにより効率の高い構造最適化が実現できる。さらにはハイブリッド計算への応用なども考えられる。今回は、方法、プログラムの特長の簡単な説明と共に、我々が現在取り組んでいる Si(001)上の Ge ハットクラスターの構造安定性に対する理論研究の現状を報告する。(CONQUEST は、英国 University College London (UCL)の Prof. M. J. Gillan、Dr. D. R. Bowler との共同開発です。)

## X線内殻吸収における円二色性と線二色性

広大院先端 小口 多美夫、澤田 庸介、獅子堂 達也

近年、放射光源を利用したX線内殻吸収測定の実験報告が急増している。これは、高輝度X線の利用がより容易となったことに加えて、チューナブルなX線エネルギーによる元素選択性や偏光を応用して特定の秩序を観測する手法により物質の電子状態に関するより詳細な情報を得ることが可能となったことからであろう。X線内殻吸収の結果の解釈には電子状態計算による解析が必要不可欠である。ここでは、第一原理計算によるX線内殻吸収スペクトルに関する最近の研究を報告する。円二色性は左右円偏光の吸収スペクトルの差を観測しているため、基本的に遷移の終状態である非占有軌道の軌道角運動量の $\pm$ 成分の差、すなわち軌道磁気モーメントを見ている。また、 $p$ や $d$ の内殻を始状態とするとスピンの軌道相互作用で分裂した吸収スペクトルの分岐比からスピン磁気モーメントの情報を引き出すことが可能である。このことから、円二色性はしばしば磁気円二色性とよばれている。一方、線二色性は終状態となっている非占有の実軌道成分を反映しており、いわゆる軌道秩序を見ている。円二色性に関してウランモノカルコゲナイドに対する応用を、線二色性に関して $\text{LaMnO}_3$ および $\text{YTiO}_3$ に対する応用を紹介する。

## f電子系物質の電場勾配計算でわかること

神戸大理 播磨 尚朝

最近の計算機資源の急速な普及により計算可能になった物理量に結晶中の原子位置での電場勾配がある。電場勾配は電荷分布にのみ依存した量であるが、一般に電荷分布の収束は遅く、精度良く電場勾配を求めるには、BZ内の積分に用いる $k$ 点として1000点から10000点ほどを必要とする。電場勾配の結果は、実験で与えられるNQR周波数 $q$ や非対称パラメータと比較する事が出来る。

電場勾配を計算から与える事で、1)NQR実験で $q$ が予め解るので実験の効率は向上する。また、2)実験の $q$ と計算された電場勾配 $V_{zz}$ を比較する事で、未知の核四重極モーメント $Q$ の値が確定する。しかし、これ以外にも3)実験と計算の $q$ や非対称パラメータを比較する事で、正確な原子位置や希土類など局在性の強いf電子の異方的な電荷分布を決定する事が出来る。実際に $\text{UGe}_2$ では3つあるGe位置からの信号の同定が計算結果と比較する事で可能になった。[1]また、Sbを含むスクッテルダイトと $\text{USb}_2$ の計算結果と実験結果を比較することで、Sbの核四重極モーメントを決定した。[2]さらに、の一致がよくない $\text{LaRu}_4\text{Sb}_{12}$ についてSb位置を決める結晶の内部パラメータを変えて実験のを再現するSb位置を求め、この時のフェルミ面が実験で得られたものとよく一致するという結果を得ている。LDA+U法を用いたPrスクッテルダイトの計算から得られるは、単純な一重項基底状態を仮定した場合は、実験結果と大きくずれる。これは、Prの非磁性基底状態の電荷分布がSb位置のに大きく影響する事を示しており、今後、様々な基底状態を仮定した計算を行えば、Pr位置の電荷分布の異方性を決定出来ると考えられる。その他、多極子秩序した系や、圧力下で局在-遍歴転移を示すと言われる物質などに対して、電場勾配計算とNQR実験を組み合わせる手法が、電荷分布を決定する新たなプローブになると考えている。

[1] H. Kotegawa *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. 74 (2005) 705, Y. Kitaoka *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter 17 (2005) S975, A. Harada *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. 74 (2005) 2675.

[2] H. Harima, Physica B in press (Proceedings of SCES05, Vienna).

## 電圧を印加した固体表面・ナノ構造体の電子状態計算

東京大学物性研究所 大谷 実、杉野 修

固体表面に電圧を印加することにより、発生する物理現象には興味深いものが多い。電極表面での触媒反応、STM観察下で起こる構造変化などがその例である。しかし、第一原理計算を用いた電圧印加表面の電子状態計算手法は十分発展しているとはいえない。我々は、このような電圧印加表面やナノ構造体に電圧を印加した状況を扱う第一原理計算手法を開発した。本手法の特徴は以下の2点である。まず、本手法ではKohn-Sham方程式とPoisson方程式を別々の境界条件のもとで解く。これにより、スラブモデルの片側又は両側に電圧を印加することが可能になる。次に、本手法は既存の電子状態計算プログラムパッケージに容易に導入することが可能であり、余分な計算時間の増加はほとんどない点である。講演では実際の電圧印加表面の計算例を紹介する。

近年、分子架橋系やトンネル接合系といったナノコンタクト系の電気伝導についての研究がさかんに展開されている。しかし、種々の興味深い I/V 特性が報告される一方で、再現性の難しさが指摘されたり解釈についての合意がまだ得られていないのが現状である。このことは、電極表面と分子との結合部の現実的な構造がどうなっているのか、分子と電極との接触で電子状態がどのように変化するかといった基本的な事柄についての理解を深める地道な作業が必要であることを示唆している。

そこで我々は、STS(走査トンネル分光)/STM(走査トンネル顕微鏡)のような well-defined な系についての知見を蓄積・整備して問題を切り分けていくことにする。もちろん、実際にはトンネル電流の影響も考えられるが、電場のみの効果を評価することは最初の近似としては悪くないだろう。

一般に、STS/STM による実験では系に「強電場」が印加されているが、我々にはナノスケールの系に対する「強電場」のイメージが確立していないため、各種実験データを比較する際に電場の影響を考慮することができない。つまり、電場をかけない表面観察手法(UPS, HREELS など)によって得られた結果と STS/STM によって得られた結果を突き合わせる

- 吸着子由来の状態がフェルミ準位に対して大きなエネルギーシフトを起こす
- 吸着子の構造に自由度があるとき、別の conformation に変化する
- 分極が誘起されて特定の振動モードに影響があらわれる

などの事柄が考えられるが、これが有意な差として測定結果に顔を出すかどうかを第一原理的な手法によって評価しようというのが本研究の目的である。

第一原理計算の枠組みで電場を印加する方法としては、大谷・杉野によって提案された ESM(Effective Screening Medium)法を採用した[1]。また、今回の計算例としては、これまで詳細に吸着構造を調べてきた「1,4-シクロヘキサジエン/Si(001)」系を選んだ。この 0.5ML 吸着系に  $\pm 0.3V/\text{\AA}$  の電場をかけたときの結果は次のとおりであった。

- 吸着子由来の局所状態密度のピークは、基板由来のピークに対して最大 0.6eV 程度シフトする。シフト量は軌道の性質に依存しているようである。
- この系では、電場の効果によって吸着子の conformation 変化することはなさそうである。
- 振動数変化の大きなモードは top most の C-H 伸縮だが、変化量はただか 0.5% である。

この結果は、1,4-シクロヘキサジエン系の STS/STM データを UPS や HREELS のデータと突き合わせることに大きな問題がないことを示しているように思われるが、それでも STS でバイアスを振る範囲が 1V/ を越えるような場合には、局所状態密度の解釈には少し注意を払っておいた方が良さそうである。また、分極の大きな官能基を持つ分子やもっと背の高い分子に対してはより大きな影響が出る可能性があるが、それらについてはこれから知見を積んでいかななくてはならない。

[1] M.Otani and O.Sugino, Phys. Rev. B *submitted*.

## ナノストラクチャーの電子輸送特性計算

近年のデバイスの微細化にともない、配線のスケールは原子・分子サイズに近づきつつある。このようなナノデバイスにおいては、電子の通路である配線が電子の平均自由行程よりもはるかに小さな構造をしているために、電子の波動性が顕著になり電気伝導のコンダクタンスは量子化される。このような特異な電気伝導は、ナノデバイスの新しい動作原理として利用できるものと期待されている。しかし、ナノデバイスのどの部分が電気伝導を支配しているかなど量子化された電子輸送現象の全貌を実験で捉えることは容易でなく、正確な輸送現象解明のためには、実験と連携した理論計算による解析が必要である。

そこで、我々は、エヴァネッセント波の取り扱いの困難を回避する計算手法(overbridging boundary-matching method)[1,2]を開発し、実空間差分法に基づく電子状態計算手法[1,3]と組み合わせることで、電極間にナノ構造を挟んだときの量子輸送特性の解析・予測を行ってきた。本講演では、これらの計算手法の簡単な紹介と、そのアプリケーションとして、フラレン分子の電気伝導特性を調べた結果について報告する。

フラレンをはじめとするナノデバイスの構成要素となる可能性を持つ物質は、その性質が明らかになっていないことが多く、またナノスケールの構造物であるがゆえに、特異な振る舞いをすることもありうると思われる。ここでは、最小のフラレンである C<sub>20</sub> 分子を電極間に挟み、量子輸送特性を調べた。まず、1 個の C<sub>20</sub> 分子の場合には、2.6 G<sub>0</sub> という高いコンダクタンスを得た。これは、電極から電子が分子の方に移動し、分子が金属的になったことが原因と考えられる。次に、C<sub>20</sub> 分子のダイマーを電極間に挟んだところ、コンダクタンスは 0.2 G<sub>0</sub> であった。このとき、電極から入射された電子のほとんどが、ダイマーの結合部分で反射されていることが分かった。

- [1] K. Hirose, T. Ono, Y. Fujimoto and S. Tsukamoto, First-Principles Calculations in Real-Space Formalism, Electronic Configurations and Transport Properties of Nanostructures, (Imperial College Press, London, 2005).  
 [2] Y. Fujimoto and K. Hirose, Phys. Rev. B 67 (2003) 195315; T. Ono and K. Hirose, Phys. Rev. B 70 (2004) 033403.  
 [3] T. Ono and K. Hirose, Phys. Rev. Lett. 82 (1999) 5016; Phys. Rev. B 72 (2005) 085115.

## ナノ物性計測の理論解析：現状と課題

<sup>1</sup>東大院工、<sup>2</sup>日大理工、<sup>3</sup>科学技術振興機構 CREST  
 渡邊 聡<sup>1,3</sup>、戸塚 英臣<sup>2,3</sup>、田中 倫子<sup>1,3</sup>、中村 泰弘<sup>1,3</sup>、多田 朋史<sup>1,3</sup>

進歩が著しい超微細加工技術を用いて新規な素子を作製する可能性を探索する上で、作製されたナノ構造の局所的な物性を計測し(ナノ物性計測)、有用な構造を設計するための指針を導くことは重要な課題である。しかし、ナノ物性計測の実験データの解釈は、探針-試料間相互作用や印加電場の影響等のため必ずしも容易でない。そこで我々は、電氣的刺激(バイアス電圧を含む)を印加するナノ物性計測について、外場や探針の影響を取り込んで計測量をシミュレーションすることにより微視的な物理現象・ナノ構造物性と計測量との相関を明らかにし、計測量からナノ構造の物性やナノ領域での物理現象に関する情報を信頼性高く導出するための解析法を確立する事を目指して研究を進めている。本講演では、その最近の成果から下記の内容を紹介し、研究の現状と課題を概観したい。

### (1) 局所トンネル障壁高さ計測の理論解析

この計測法では、走査トンネル顕微鏡における探針-試料間距離の微小変位に対する電流変化を検出する。非平衡開放系に対する電子状態計算法として本グループで開発した境界マッチング密度汎関数(BSDF)法を用い、AI表面をモデル系にこの計測で得られる走査像のシミュレーションを行った。その結果、実験解析で用いられる理論式で求められたトンネル障壁高さ像と計算で得られるポテンシャルから直接評価した障壁高さ像とで凹凸が反転することを見出した。これは実験で得られるトンネル障壁高さ像が本来意図された通りの物理量には必ずしもなっていないことを示している。

### (2)非接触原子間力顕微鏡におけるジュール熱の理論解析

我々はキャパシタンスのナノスケールにおける振舞いをBSDF法を用いて解析してきたが、その結果をみた富取氏(北陸先端大)から示唆を受け、非接触原子間力顕微鏡(NC-AFM)におけるジュール熱を探針振動に伴うキャパシタンス変化から評価した。その結果、「探針-試料間距離を短くしていくとある所まではジュール熱による散逸が増え、ごく近距離で逆に減少する」という実験結果を定性的に説明できることがわかった。

なおキャパシタンス解析に関連して、非平衡開放系に対する電子状態計算におけるバイアス電圧の定義に検討すべき問題点があることを見出したので、講演ではこの点も合わせて紹介したい。

### (3)ケルビン力顕微鏡の理論解析

この計測法は、バイアス電圧微小変化に対する探針-試料間力変化を検出するものである。BSDF法を用いて探針に働く力を試行計算したところ、電極間距離が長い場合には妥当かつ予想された結果を得たが、トンネル電流が無視できない短距離領域では、2電極の力が釣りあわず、系全体として一方向に動く力が働くことを見出した。この点について現在解析および考察を進めている。

なお、この顕微鏡をはじめとするいくつかのナノ物性計測においては探針のマクロないしメゾスコピックな形状の影響が重要と思われる。この点を計算にどう取り込んでいくかという点も今後の重要な課題である。

## タイトバインディング密度汎関数法によるグラファイトリボンの電気伝導解析

東理大理、CREST-JST 相馬 聡文、山本 貴博、渡辺 一之

ナノスケールでの有限バイアス電気伝導の数値シミュレーションにおいては、非平衡下における電子状態を正確に求める事が重要であり、これを目的として近年様々な計算方法が提案されてきた。我々は、より大きな系の信頼性の高いシミュレーションを目指し、タイトバインディング密度汎関数法と非平衡グリーン関数を組み合わせた数値計算を行っている。

今回は、上記の計算手法により、ジグザグ型の端を持ったグラファイトリボン(GR)の有限バイアス下での電気伝導の解析を行った。GRは有限の幅を持った準一次元的なグラファイトであるが、電子状態が端の形状に強く依存する事が知られており、特にジグザグ型の端の場合にはフェルミ面で端に局在した状態(エッジ状態)が得られる。一方このような系の電気伝導については、零バイアスコンダクタンスの研究が報告されているのみであり、電流電圧特性に関する系統的な研究は無い。我々の計算により、(1)微小なバイアス下では、バンドと\*バンドのフェルミ面における微小な重なり或いは分散が線形応答的な電流電圧特性を与え、その電流分布は端に局在している事、(2)更にバイアスを印加していくと、左右電極の、\*バンドが分離する為に電流は飽和し、それと共にGR内部にも電流が流れ始める事が示された。

# ウルトラソフト擬ポテンシャル法をベースとしたバリストティック電気伝導計算の応用

<sup>1</sup> 東北大学電気通信研究所 三浦 良雄<sup>1</sup>、白井 正文、長尾 和多加

## 1. はじめに

スピントロニクス分野において、高スピン偏極強磁性体(以下、ハーフメタル)は、高い磁気抵抗比を有するトンネル磁気抵抗(TMR)素子や巨大磁気抵抗(GMR)素子、また高効率なスピン注入素子や電流注入磁化反転素子等における強磁性材料として必要不可欠となっている。これまで、理論的には多くのハーフメタルが提案されているが、その中でも Co ベースのフルホイスラー合金  $\text{Co}_2\text{YZ}$  (Y=Cr, Mn, Fe, Z=Al, Ga, Si, Ge) は、その高い強磁性温度と作製プロセスの容易さから注目を集めている。そこで本研究では  $\text{Co}_2\text{YZ}$  ベースの TMR3 層構造(絶縁層として MgO を想定)におけるバリストティック電気伝導度の第一原理計算を行い、特に界面状態がスピン依存電気伝導に与える影響について解析した。

## 2. 手法と結果

電子状態の第一原理計算は、局所密度近似の範囲内でウルトラソフト擬ポテンシャル法を用いて行う。また電気伝導度の計算には、ランダウアー公式をベースとした散乱方程式を直接解く手法を用いる[1]。まず、 $\text{Co}_2\text{MnAl}/\text{MgO}/\text{Co}_2\text{MnAl}$  の[001](z)方向の三層構造に対して電子状態と電気伝導の計算を行った。 $\text{Co}_2\text{MnAl}$  はバルクでは 80% のスピン偏極率を持つ高スピン偏極材料であるが、MgO との界面では MnAl 終端で 60%、Co 終端に至っては 30% とそのハーフメタル性は劣化する。これは、Co, Mn の 3d の非結合状態が少数スピンのギャップ中に生じるためである。しかしながら電気伝導をみると、終端面にかかわらず少数スピンのフェルミ準位での透過率はゼロとなった。また、透過率の  $k_{\perp}$  (電流方向に垂直な波数) 依存性を調べたところ、Fe/MgO/Fe にみられる界面状態間の共鳴トンネル(Hot-spot)による伝導はほとんどみられなかった。以上のことから界面に生じた局在状態は、散乱体としてのみ働き、新たな電気伝導が生み出すことはないことがわかった。一方多数スピンの透過率には終端面の違いによる界面電子状態の違いが現れ、Co 終端の透過率は MnAl 終端の透過率の 100 分の 1 程度となった。これは、 $\text{Co}_2\text{MnAl}$  のフェルミ準位での *sp* 状態はほとんど Mn と Al が担っていることに起因していると考えられる。すなわち、Co 終端に比べて、MnAl 終端のときはその *sp* 状態の影響で MgO のギャップ中に MIGS (Metal induced gap states) が生じやすく、実行的にバリア幅が狭くなりトンネル電流が流れやすくなっていると考えられる。よって、絶縁層と金属層の界面におけるフェルミ準位付近でのバンドの対称性の一致がホイスラー/MgO 系においても重要であるといえる。

## 参考文献:

1) A. Smogunov, A. Dal Corso and E. Tosatti, Phys. Rev. B **70** (2004) 045417.

## ナノ架橋系での伝導計算

NEC 基礎・環境研 広瀬 賢二  
産総研ナノテク 小林 伸彦

デバイスサイズの微細化の進展とともに、電極に挟まれた数ナノメートル程度のナノ領域(ナノ架橋系)を流れる電気伝導特性に注目が集まっている。特に分子を用いてナノ架橋系を構成する素子は、分子エレクトロニクスとして従来のシリコン素子の微細化限界を超える極小素子の可能性や、量子効果を顕在化させた新たな機能素子の可能性などの観点から大きな注目を集めている。

一方デバイスシミュレーションの観点からは、これらの新規素子の機能解析には従来の古典的なボルツマン方程式による解析では不十分であり、量子力学に立脚した新たな伝導計算手法の開発が求められている。

そこで我々は電極に挟まれた数ナノメートルサイズのナノ架橋系を流れる電子伝導の電流・電圧特性を計算する手法を考案する。計算手法のポイントは半無限電極を含んだ架橋系を流れる電子状態を高精度の散乱波で記述すること、次にそれを基底に非平衡グリーン関数を構築し、密度汎関数法に基づき電荷と有効ポテンシャルを自己無撞着に求めること、そして電気伝導を非平衡グリーン関数理論より計算することである。これにより、バイアス効果、温度効果、量子効果などを含んだ第一原理電気伝導計算を行うことが可能になる。

この計算手法を、分子架橋系、カーボンナノチューブ架橋系での伝導計算に応用した例について報告する。



## メタロセン分子の電気伝導予測

東北大学・金属材料研究所

水関 博志、上原 朋樹、五十嵐 伸昭、Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, 川添 良幸

従来のシリコン技術は回路のサイズが 10nm 以下となった際に原理的限界に直面すると考えられている。そのためポストシリコン技術のひとつとして、単一または少数の分子をナノスケールのワイヤー、メモリー、ダイオードなどに利用する単一分子デバイスに注目が集まっている。我々のグループでは密度汎関数法と非平衡グリーン関数法を用いて原子・分子細線の安定構造と電気伝導特性を評価している。[1]

本研究では有機分子中の金属元素の導電性へ影響を調べるために、メタロセン分子を取り上げる。メタロセン分子は図 1、2 に示されるように  $[M(C_5H_5)_2]$  ( $M=Fe, V, Cr$  など) で表せる中央に金属をはさんだサンドイッチ構造を持つ分子であり、中心金属が Fe であるフェロセン分子は、分子デバイスのビルディングブロックとして有望であることが報告されている。そのため本研究では特にフェロセン分子を取り上げ、金電極との接合のために水素原子を硫黄原子で置換した分子を計算モデルとした。金電極に接合したメタロセン分子の電気的特性について理論解析を行い、接続部位や中心金属元素が電気伝導特性に及ぼす影響について検討することを本研究の目的とする。

電気伝導性計算は TranSIESTA-C プログラムを用いて行った[2]。図 1 のように硫黄原子を異なる五員環（シクロペンタジエニル環）につけた分子と図 2 のように同じ五員環に接続した構造におけるフロンティア軌道(HOMO、LUMO)の空間的な広がりおよび電気伝導特性について比較し、— スタッキングの導電性への影響を検討した。図 3 はフェロセン分子の I-V 特性を示しており、同じ五員環に接続した系が低電圧において、より大きな電流値を示している。これは  $E_F$  近傍における金電極の軌道の電気伝導への寄与が接続により異なるためであることを分子軌道の解析から確認した。[3]

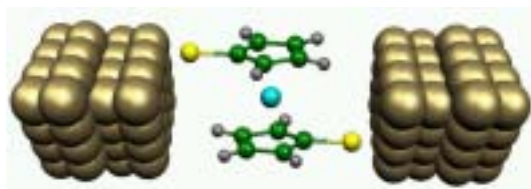


図 1 異なる五員環を Au 電極に接続した系

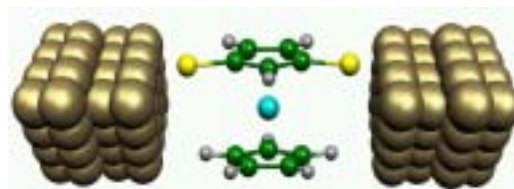


図 2 同じ五員環を Au 電極に接続した系

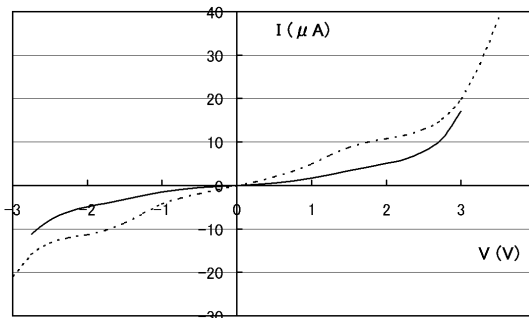


図 3 フェロセン分子の I-V 特性  
異なる五員環を接続した系(実線)、同じ五員環を接続した系(点線)

[1] <http://www-lab.imr.edu/~mizuseki/nanowire.html>

[2] M. Brandbyge, J. L. Mozos, P. Ordejón, J. Taylor and K. Stokbro: Phys. Rev. B **65** (2002) 165401.

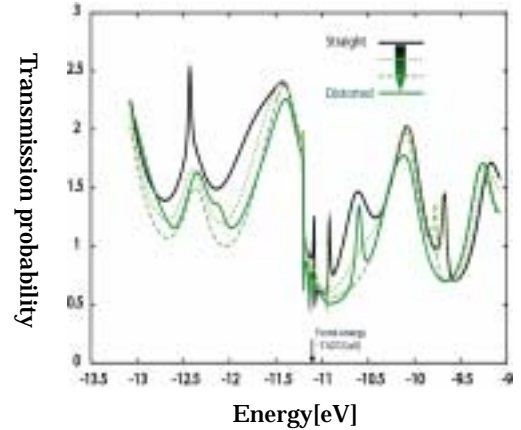
[3] T. Uehara, R. V. Belosludov, A. A. Farajian, H. Mizuseki, and Y. Kawazoe, Jpn. J. Appl. Phys., in press.

## くびれナノチューブの振動・伝導度解析

阪大基礎工 小野 裕己、楠野 順弘、草部 浩一、鈴木 直

振動モード毎のナノチューブの伝導度を各原子間の遷移確率も含めて予測した。伝導度を一つ一つ評価・比較し、振動モードごとで異なることを予測することで、伝導特性をスイッチ可能な新たなデバイス提案としての可能性が広がる。まず単純な(5, 5)ナノチューブに関して、特徴のある固有振動モードで振動しているナノチューブの電気伝導特性を評価し、各モードにおける定性的な違いを予測した。続いて、局在した振動モードの存在する、くびれ(トポロジカル欠陥)を持つナノチューブにおける電気伝導特性を予測した。図は(5, 5)ナノチューブが途中一箇所だけ(3, 3)ナノチューブになった

くびれたナノチューブにおける伝導確率である。歪ませてないストレートなとき(濃い直線)に比べて、固有振動モードの一つである「引っ張りモード」に沿って歪ませたときの伝導確率(薄い直線)の方が落ちていることがわかる。特にストレートなチューブにおいては存在していたグラフのピークがこのモードに沿って歪むことで消滅している箇所があることが確認できる。これはこのナノチューブの伝導特性が歪むことで大きく減少することを示している。固有振動モードごとに伝導特性の受ける影響は異なっており、例えば「曲げモード」ではほとんど変化が無いことも確認された。このモード毎の伝導性の違いは、外部から任意の振動モードを励起することで、この系の伝導特性をスイッチすることが可能なことを示している。



### Screened KKR 法による第一原理計算

阪大理 土居 抄太郎、赤井 久純

KKR-Green 関数法による第一原理計算では、Kohn-Sham 方程式を自己無撞着に解くことにより電子構造を決定する過程において、系の 1 体 Green 関数を直接計算することで電荷密度を構築する。結晶の Green 関数は任意の参照系をもとにして Dyson 方程式を解くことで得られ、通常はポテンシャルのない自由空間がとられる。この場合ポテンシャル散乱を表す  $t$  マトリックスは常に零となり、結晶構造のみで決まる構造定数は解析的な表現が与えられる一方、実空間での減衰は遅い。そして Dyson 方程式を解く際には扱う原子数  $N$  に比例するサイズの行列の逆行列を計算する必要があるが、一般に逆行列を求める計算量は  $N$  の 3 乗で増大する。この部分が KKR 法においてもっとも時間を要する部分なので大規模な系の計算を実行することが現実的に困難となる。この困難は構造定数の実空間での減衰が遅いために、行列が密な形になりまともに逆行列を計算するしかないことにより生じる。

そこで、もし構造定数が実空間で速やかに減衰するような参照系がとれるならば、行列の形は零の要素が多い疎行列となるので、疎行列の逆行列を高速に計算するアルゴリズムと組み合わせることにより、精度を損なうことなく計算を高速化できることが期待される。これが Screened KKR 法の基本的な考え方であり、このような参照系は系の各原子位置に価電子のエネルギー領域より充分に高い一定の高さをもつ斥力ポテンシャルを並べることによって実現される。この場合構造定数は自由空間のように解析的には与えられないが、実空間での局在性のため自由空間の構造定数をもとに Dyson 方程式を解くことにより容易に計算できる。更に、系の 2 次元周期性を仮定して実空間と波数空間を組み合わせたとることで、得られる疎行列はブロック 3 重対角行列となる。ブロック 3 重対角行列に関しては電荷密度の計算に必要な逆行列の対角要素を行列の次元に比例する計算量で求めることが出来るアルゴリズムが存在するので、必要な全計算量は正確にオーダー  $N$  となる。これによって従来より大規模な系の第一原理計算をほとんど精度を損ねることなく実行できる可能性がひらける。

本発表では、この Screened KKR 法に基づいて我々が開発したプログラムにより第一原理計算を行った結果について報告する。

### 平面波展開を用いた非周期系の数値解析手法の開発

阪大基礎工 高橋 均成、草部 浩一、鈴木 直

Kohn-Sham 理論の拡張[1][2]において定義される有効相互作用を精密に評価する方法[3]の一つとして、我々は Parl と Handy によって提案された混合基底法[4]の実装を進めている。この手法は非周期化された平面波と局在数値基底を同時に用いる。

我々は今回、この非周期化を加えた平面波基底による UHF プログラムを実装すると同時に、非周期化において重要となる発散項の収束性について、そのパラメータ依存性を評価した。

$$I_\beta = \lim_{\beta \rightarrow 0} I_\beta + \beta \lim_{\beta \rightarrow 0} \frac{\partial I_\beta}{\partial \beta} + \beta^2 \lim_{\beta \rightarrow 0} \frac{\partial^2 I_\beta}{\partial \beta^2} + \dots$$

$$I_\beta = \int \frac{4\pi}{k^2} \left[ \sum_{\vec{k}'} \delta(\vec{k} - \vec{k}') - \frac{V}{(2\pi)^3} \right] \exp(-\beta \vec{k}^2) d^3k$$

$$= \sum_{\vec{k}} \frac{4\pi}{k^2} \exp(-\beta \vec{k}^2) - \frac{V}{(\pi\beta)^{3/2}}$$

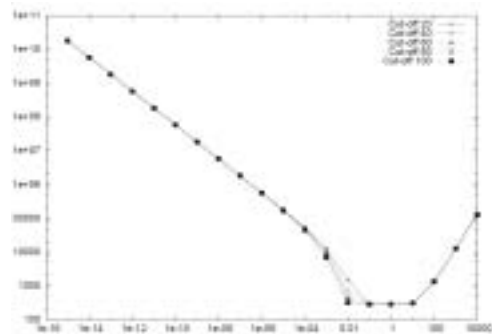


Fig.1  $I_\beta$  の  $\beta$  依存性

## References:

- [1] K. Kusakabe, J. Phys. Soc. Jpn. 70 (2001) 2038.
- [2] K. Kusakabe, cond-mat/0505703.
- [3] K. Kusakabe, M. Takahashi, and N. Suzuki, Physica B (in press).
- [4] F.A. Pahl and N.C. Handy, Mol. Phys. 100(20) 3199 (2002).

## 有限温度密度汎関数理論に基づく量子化学計算 表面吸着分子系への適用

総研大物理 白鳥 和矢  
総研大物理・分子研 信定 克幸

### 【序】

有限温度密度汎関数理論に基づく、温度と化学ポテンシャルを通じて、系と熱浴との間で熱及び粒子の交換が起こるグランドカノニカル集団を記述することが可能である。このため有限温度密度汎関数理論は、表面化学、溶液化学、電気化学など温度や化学ポテンシャルが重要な物理量となる分野への適用が期待されている[1,2]。そこで我々は現在、有限温度密度汎関数理論に基づいた量子化学計算を、電極反応などへ適用することを目指して研究を行っている。現状では、通常孤立分子系を扱う量子化学の分野では、有限温度密度汎関数理論はあまり用いられておらず、化学ポテンシャルだけでなく温度が電子状態にもたらす効果についても不明な点が多いため、ここでは温度の効果について明らかにすることを目標とした。但し、本研究では化学ポテンシャルの代わりに電子数をパラメータとして用いることで、特に温度のみに注目し、電子状態の温度依存性について検討した。

### 【理論計算】

本計算では自由エネルギー  $F=U-TS$  ( $U$ : 内部エネルギー、 $S$ : エントロピー) を最適化することで温度  $T$  において平衡状態にある電子状態を求める。計算対象としては、状態密度が高くかつ温度の効果が顕著に現れると期待でき、また、電極への応用も考慮して、Au(111)面にフッ素原子が吸着した系のクラスターモデルを採用した。基底関数及び有効内殻ポテンシャル(ECP)としてSBKJCを用い、交換-相関ポテンシャルは絶対零度におけるポテンシャル(BLYP)で近似した。

### 【結果・考察】

Au<sub>10</sub>-Fの計算により得られたフェルミ準位付近の軌道エネルギーを図1に示した。太線が占有数を表している。温度に対してフェルミ分布が変化するため、軌道の占有数が変化し、軌道エネルギーが変化していることがわかる。少数占有数の状態が増加すると  $U$  及び  $S$  が増大することから、自由エネルギーに対する二つの項  $U$  及び  $-TS$  の寄与は逆になっており、図1における占有数と軌道エネルギーの変化は内部エネルギーとエントロピーの兼ね合いによって自由エネルギーが最小になるように決定されていると考えられる。当日は原子核間距離や解離エネルギーなどの温度依存性も含め、詳細を報告する。

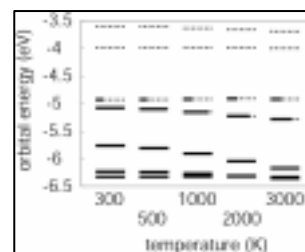


図1：軌道エネルギーの温度依存性

- [1] A.Y.Loizovoi, A.Alavi, J.Kohanoff, R.M.Lynden-Bell, J. Chem. Phys. 115 (2001) 1661.
- [2] R. Vuilleumier, M. Sprik, A. Alavi, THEOCHEM 506 (2000) 343.

## AB-INITIO CALCULATION OF LATTICE DYNAMICS AND SUPERCONDUCTIVITY IN SIMPLE SYSTEMS

S. Uma Maheswari, H. Nagara, K. Kusakabe and N. Suzuki  
Graduate School of Engineering Sciences, Osaka University.

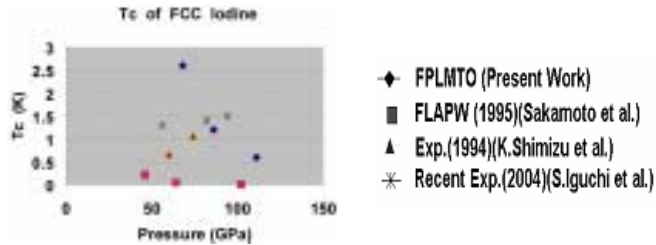
First principles calculations of lattice dynamics and superconducting transition temperature have been done on the high pressure FCC phases of Iodine and Lithium. The Full Potential Linear Muffin Tin Orbital technique (FPLMTO) has been employed using local density approximation (LDA). The Allen-Dynes formula was used to calculate the value of  $T_c$ .

FCC Iodine has been studied at pressures of 68, 86 and 111 GPa. Lattice dynamics study reveals progressive softening (decrease in frequency) of a transverse mode at a particular  $q$  vector as the pressure is decreased from 111 to 68 GPa [Fig.1]. The superconducting transition temperature  $T_c$  of FCC Iodine is within quantitative agreement with recent experimental results[1] but  $T_c$  variation with pressure exhibits a reversed trend[Fig.2]. The  $T_c$  values obtained are 2.6, 1.2 and 0.6K at 68, 86 and 111 GPa respectively. The Coulomb repulsion constant  $\mu^*$  was taken to be 0.1 for all the three pressure calculations.

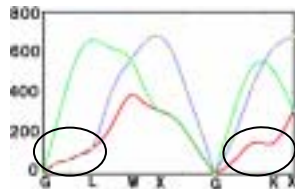
In FCC Lithium, phonon softening was observed all along the lambda line and at a particular  $\mathbf{q}$  vector along the sigma line[Fig.3]. The phonon frequency becomes imaginary at lattice volume  $V/V_0 = 0.4$  ( $V_0$  taken as the volume at ambient pressure when it is in the bcc phase) suggesting a phase change between  $V/V_0= 0.47$  and  $0.4$ . This is a new result in the present study. The hR1 structure is found to be of lesser total energy than the fcc structure at this pressure. Also, the superconducting transition temperature  $T_c$  was found to be much lower than earlier theoretical reports [2].  $T_c$  increases with increasing pressure[Fig.4]. These results are in agreement with recent experimental observations [3,4]. The calculated  $T_c$  values were 8.7,15.4 and 18.3K at  $V/V_0=0.6, 0.5$  and  $0.47$  respectively. The Coulomb repulsion constant  $\mu^*$  was taken to be 0.13 for these calculations. The poster will contain the details of the 2 cases.



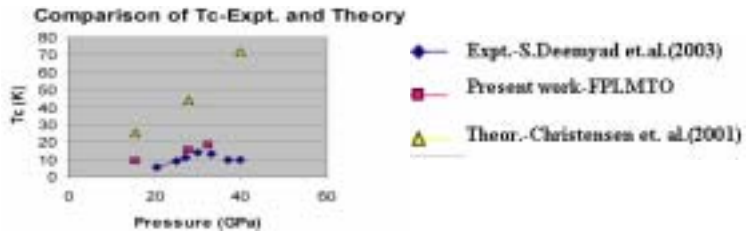
**Fig.1.** Phonon frequencies in  $\text{cm}^{-1}$  of FCC Iodine at 68 GPa.(Softened points encircled)



**Fig.2.** Comparison of  $T_c$  (expt. and theory) in FCC Iodine



**Fig.3.** Phonon frequencies in  $\text{cm}^{-1}$  of FCC Lithium at  $V/V_0=0.47$ (about 32.5 GPa) (Softened points encircled)



**Fig.4** Comparison of  $T_c$  (expt. and theory) in FCC Lithium

## References:

1. Iguchi et. al.- private communication.
2. N.E Christensen and D.L.Novikov,PRL, **86**,1861.(2001)
3. Shanti Deemyad and James S.Schilling PRL,**91**,167001(2003)
4. Matsuoka et.al –Koatsu Conference, Hokkaido,(2005).

## (Ga,Cr)N における N 空孔が交換相互作用に及ぼす影響に関する第一原理計算

東北大通研 仲野 達也、白井 正文、長尾 和多加、三浦 良雄

(Ga,Cr)N は可視光に対して透明であるという特長を持った希薄磁性半導体であり、半導体の光・電氣的機能と磁性体の磁氣的機能を融合した光スピントロニクスデバイス材料の有力な候補として注目を集めている。本研究では GaN 中に N 空孔が形成しやすいという経験的事実を踏まえて、N 空孔が(Ga,Cr)N の交換相互作用に及ぼす影響を第一原理計算した。計算手法は平面波基底および projector augmented-wave (PAW)法を用い、交換相関ポテンシャルとして generalized gradient approximation (GGA)を採用した (VASP)[1]。構造は Cr 原子と N 空孔 ( $V_N$ )を同じセル内に含んだ  $2 \times 2 \times 2$  ウルツ鉱型の (Ga,Cr)N を仮定した。

まず Cr- $V_N$  距離に対する形成エネルギーは、N 空孔が Cr 原子から最近接の位置にあるときに系統的な変化から外れて低くなり、すなわち N 空孔は Cr 原子とペアを形成するように混入し易いという結果が得られた。そしてそのように N 空孔が混入したときの、Cr スピン間にはたらく交換相互作用  $J_{ij}$  を計算した結果が Fig.1 である。交換相互作用  $J_{ij}$  は N 空孔により弱められることが明らかになった。その影響は N 空孔が Cr-N-Cr の結合を切断するときに顕著に現れた (Fig.1)。このことはキュリー温度の減少につながる。(Ga, Cr)N の交換相互作用、換言すれば強磁性のメカニズム、は二重交換相互作用[2]であると考えられている。N 空孔の混入でフェルミ準位に形成されたダウンスピンの状態により、二重交換相互作用が弱められたと解釈できる。したがって、より高いキュリー温度を持つ (Ga,Cr)N を作製するためには、N-rich で作製するなど N 空孔の生成を抑制する必要がある。

また今回、オンサイトクーロン相互作用  $U=4.5\text{eV}$ [3]を考慮した計算[4]も行い、交換相互作用に与える  $U$  の効果を調べたところ、 $U$  の導入により交換相互作用は弱められるという結果が得られた。状態密度のフェルミ準位近傍での  $\text{Cr-}3d$  状態が減少したことから、この交換相互作用の弱化は  $3d$  キャリアが減少すること起因するといえる。

- [1] G. Kresse, et al., Phys. Rev. B 54 (1996) 11169; G. Kresse, et al., Comput. Mat. Sci. 6 (1996) 15.
- [2] K. Sato, et al., Phys. Rev. B 70 (2004) 201202; H. Akai, et al., Phys. Rev. Lett. 81 (1998) 3002.
- [3] M. Wierzbowska, et al., Phys. Rev. B 70 (2004) 235209.
- [4] S. L. Dudarev, et al., Phys. Rev. B 57 (1998) 1505.

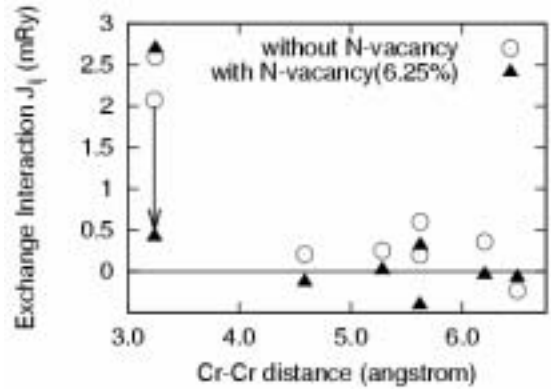


Fig.1 Exchange Interaction  $J_{ij}$

### 有機ナノ構造体におけるキャリア輸送過程の理論解析 ：電子 - 分子振動カップリングの効果

キヤノン先端融合研 光武 邦寛  
早大ナノ理工 塚田 捷

近年、有機分子を電極間に配置した有機ナノ構造体が注目を集めている。一般に、有機分子はイオン化すると構造変化が起こることが多く、有機ナノ構造体では、キャリアと分子振動とのカップリングが重要になると考えられる。

本研究においては、図1に示す、電極間にチオフェン分子を配置したモデルに対し、解析を行った。電極を除いた領域のハミルトニアンは、次のように記述できる。

$$H = \sum_{n=1}^N E_n a_n^+ a_n + \sum_{n=1}^{N-1} (V a_n^+ a_{n+1} + V^* a_{n+1}^+ a_n) + \sum_{n=1}^N \sum_{\lambda} \gamma_{\lambda}^{(n)} \hbar \omega_{\lambda} a_n^+ (b_{\lambda}^+ + b_{\lambda}) + \sum_{\lambda} \hbar \omega_{\lambda} b_{\lambda}^+ b_{\lambda}$$

今回、チオフェン分子における第一原理計算により、キャリアと分子振動とのカップリングパラメータ、トランスファー積分などを決定した。このモデルに対し、ポーラロン型の波動関数と非ポーラロン型の波動関数を重ね合わせて系の状態を記述し、その係数を変分原理により決定することにより、有機分子の領域における電子状態・分子振動状態を決定した。

次に、この状態間の遷移確率を Fermi の Golden rule を用いて計算し、さらに、マスター方程式を解くことにより、片方の電極に存在していたキャリアが有機分子中を通して他方の電極に移動する過程をシミュレートした。その結果を図2、図3に示す。この結果より、時刻  $t=0$  に注入が起こるとすぐに、サイト 1,2,4,5 が占有され、約 0.2fsec 後には、対向電極に抜けることがわかる(図2)。さらに、バルクの有機物に対し、しばしば評価が行われている Time of Flight の実験に類似した結果が得られることがわかった(図3)。

今回の手法は、シーケンシャルなホッピング過程、及び、長距離のトンネル過程の双方を記述でき、有機ナノ構造体の材料設計に有効だと考えられる。

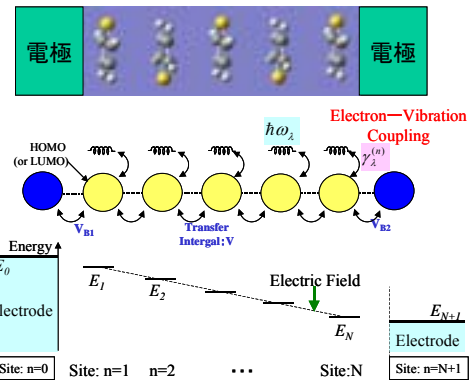
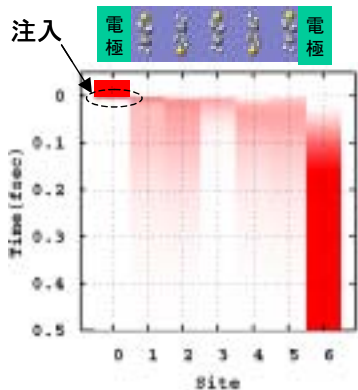


図1 . モデル



2 各サイトの占有率の時間変化

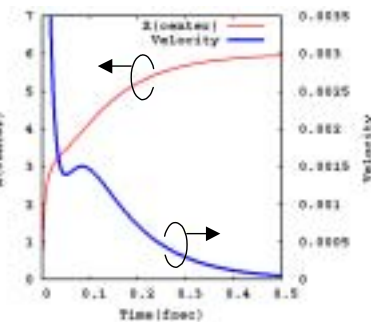


図3 . キャリアの重心、及び、速度の時間変化

## CoPt 超格子の磁気異方性に関する第一原理的評価

阪大基礎工 塚本 秀一、下司 雅章、草部 浩一、鈴木 直、荻 博次、垂水 竜一、中村 暢件

CoPt 超格子の磁気異方性が膜厚に依存するという興味深い実験結果が確認されているが、膜厚に依存した Co の構造変化や、その構造変化と磁気異方性の関連は明らかになっていない。今回我々は、Co/Pt 超格子において膜厚に依存した Co の最安定構造の変化と、その構造変化が磁気異方性に与える影響というものを、第一原理電子状態計算を用いて確認した。計算結果より、Co2 層 Pt3 層の Co の最安定構造が fcc を示したのに対して、Co3 層 Pt2 層の Co の最安定構造は hcp になるのが確認された。つまり Co が薄い 2 層の時は Pt の影響を大きく受け、Co が fcc 構造を持ったのに対して、Co が厚くなると Co が持つ安定構造である hcp 構造に戻っていくということが確認できた。

磁気異方性に関するもおもしろい結果が確認された。

Co が fcc 構造になった時にはほとんど磁気異方性が確認できなかったのに対して、hcp 構造を示した時に大きな垂直磁気異方性が確認できた。つまり Co がある程度の厚さとなるまでは Co が fcc 構造となり、磁気異方性を示さない。そしてある程度の厚さになった時に Co が hcp 構造を持ち、垂直磁気異方性を示すと予想される。それに加え、面内方向の格子定数も影響していることがわかった。つまり Pt 側にある程度の厚みがありその影響により Co が歪まなければ大きな垂直磁気異方性がでないことが推測される。

	Co2(hcp) Pt3	Co2(fcc) Pt3	Co3(hcp) Pt2	Co3(fcc) Pt2
実験のPt 格子定数 a=2.77 Å	0.408	0.075	0.406	0.0091
実験のCo 格子定数 a=2.50 Å	(0)	0.238	0.1428	(0.1859)

表 1 各構造での CoPt 超格子の垂直磁気異方性エネルギー(meV)

## Spinodal decomposition under layer by layer growth condition and high Curie temperature quasi-one-dimensional nano-structure in dilute magnetic semiconductor

T. Fukushima\*<sup>1</sup>, K. Sato<sup>1,2</sup>, H. Katayama-Yoshida<sup>1</sup> and P. H. Dederichs<sup>2</sup>

<sup>1</sup>The Institute of Scientific and Industrial Research, Osaka University, 8-1 Mihogaoka, Ibaraki, Osaka 567-0047, Japan

<sup>2</sup>Institut für Festkörperforschung, Forschungszentrum Jülich, Jülich, Germany

According to the first-principles calculations of effective exchange interactions in dilute magnetic semiconductor (DMS), this magnetic percolation problem is significant in the DMS based on wide band gap semiconductors, where exchange interaction is very short ranged. For example, very low- Curie temperature ( $T_C$ ) is predicted by the Monte Carlo simulation for the magnetism in (Ga, Mn)N. However, from experimental side, some experiments support this prediction of low Curie temperature ferromagnetism in (Ga, Mn)N, but the others do not and report high-  $T_C$  ferromagnetism. Thus, high-  $T_C$  in wide gap DMS has been in controversy and a consistent explanation has been desired. Already Sato *et al.* [1] tried to explain high-  $T_C$  in the wide gap DMS. They show that in general the DMS system undergoes the spinodal decomposition due to the attractive interaction between magnetic impurities and the spinodal decomposition enhances  $T_C$  in (Ga, Mn)N considerably due to the formation of magnetic percolation paths. However, this effect is only significant for high concentrations (higher than 20%) and high-  $T_C$  phases in wide gap DMS is still open question.

In this Letter, as an extension of the previous Sato *et al.*'s attempt [1], we examine the effect of a layer by layer crystal growth condition during the spinodal decomposition process. First, the chemical pair interactions are calculated by using the first principles calculations. As shown in Fig.1, the chemical pair interaction of (Zn, Cr)Te is attractive, so this interaction causes spinodal decomposition. Next, we simulate the spinodal decomposition under layer by layer crystal growth condition by using the Monte Carlo simulation and calculated chemical pair interaction. Calculated spinodal phase of (Zn<sub>0.95</sub>, Cr<sub>0.05</sub>)Te is shown in Fig. 1. It is found that DMS systems can form rather large clusters with highly anisotropic shape even for low concentrations. This result suggests that the blocking phenomena in the super-paramagnetism, the magnetic dipole-dipole interaction and the network of the one-dimensional structures should be considered to understand the magnetism in DMS.

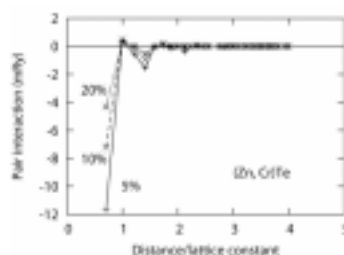


Fig.1 Left figure: chemical pair interaction between Cr atoms in (Zn, Cr)Te as a function of distance. Right figure: quasi-one-dimensional nano-structure of (Zn<sub>0.95</sub>, Cr<sub>0.05</sub>)Te. White region shows Cr atom.

[1] K. Sato, H. Katayama-Yoshida and P. H. Dederichs, Jpn. J. Appl. Phys. **44**, L948 (2005).

# First-principles materials design of CuAlO<sub>2</sub> based dilute magnetic semiconducting oxide

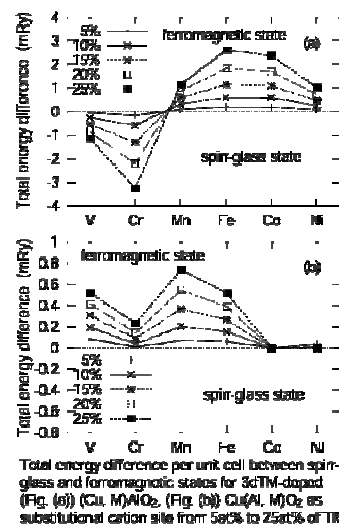
H. Kizaki, K. Sato, A. Yanase and H. Katayama-Yoshida

The Institute of Scientific and Industrial Research, Osaka University, Osaka, Japan

Keywords: CuAlO<sub>2</sub>, delafossite structure, first-principles calculation, materials design

First-principles materials design of CuAlO<sub>2</sub> based dilute magnetic semiconductors (DMSs) are proposed. The electronic structures and the magnetic properties of CuAlO<sub>2</sub> based DMSs are calculated by using the Korringa-Kohn-Rostoker method combined with the coherent potential approximation within the local density approximation. CuAlO<sub>2</sub> has the delafossite structure in which Cu and O form O-Cu-O dumbbell-like structure. Although tetrahedral sites are partially replaced by magnetic ions in traditional DMSs, in the delafossite structure Cu-site in the center of the dumbbell are partially replaced by 3d transition metal elements. Due to this characteristic local structure, hybridization between 3d states of impurities with valence bands is weak and half-metallic and high-spin states are expected in the ferromagnetic CuAlO<sub>2</sub>-DMSs. We also think about Al sites for substitution, because this site is easily replaced by transition metal impurities. Total energy difference between ferromagnetic states and spin-glass states is calculated and Curie temperatures are estimated by the mean-field approximation from the energy difference.

Results are shown in Figs (a) and (b). It is shown that the high-spin states are realized and the ferromagnetic states are more stable than the spin-glass states in Mn, Fe, Co and Ni-doped ones at Cu sites (Fig. (a)). On the other hand, spin-glass states are stable in V and Cr-doped ones. Curie temperature is expected as high as 1100K in Fe-25at%-doped CuAlO<sub>2</sub>. Due to higher coordination number, transition metal impurities show low spin states for Al sites. For this site, almost all of 3d transition metal elements show ferromagnetism except for Co and Ni, and Curie temperature is calculated as 310K in Mn-25at%-doped CuAlO<sub>2</sub> (Fig. (b)). Subject Number: #2

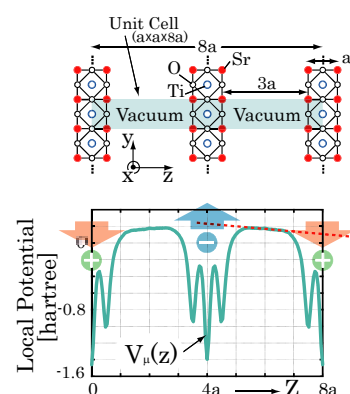


## 遷移金属酸化物 SrTiO<sub>3</sub> に対する電界ドーピングの第一原理シミュレーション

NTT 物性科学基礎研究所 内田 和之、影島 博之、猪川 洋

遷移金属酸化物 SrTiO<sub>3</sub> の極薄膜を一对の電極として用いたコンデンサにおいて、両極間にバイアス  $\mu$  を印加した場合の蓄積電荷量  $Q$  とその空間分布  $\rho(\mathbf{r})$ 、電気容量 (キャパシタンス)  $C = dQ/d\mu$  をフェルミエネルギー分割法 [1-2] を用いて計算し (周期境界条件)、 $C$  がバイアス  $\mu$  に依存する事を示した (量子効果)。 $C$  は 両電極の状態密度  $D_1, D_2$  と 静電キャパシタンス  $C_0$  に分解可能であり、今回の場合そのバイアス依存性は、電極の擬二次元性を反映して状態密度がマルチステップ構造を持つこと、蓄積電荷の真空へのしみ出しに伴い有効電極間距離  $d_{\text{eff}}$  がバイアス増大と共に減少すること、から理解可能であることを示した。

- [1] K. Uchida, H. Kageshima, H. Inokawa, eJSSNT Vol.3 (2005), 453.
- [2] K. Uchida, H. Kageshima, H. Inokawa, PRL, Submitted.



## CeRh<sub>3</sub>B<sub>2</sub> の電子状態とフェルミ面

阪大産研 山内 邦彦

本研究では、L(S)DA+ $U$  法を用いた電子状態計算を行ない、強磁性相 CeRh<sub>3</sub>B<sub>2</sub> の電子状態およびフェルミ面を明らかにした。その際、強い相関を示す強磁性体の計算に有用である、スピン・軌道相互作用および LSDA+ $U$  法による有効クーロンポテンシャルの両方を従来の FLAPW 法に取り入れた新しい計算手法を開発し、その妥当性を議論した。[1]

Ce のように原子番号が大きい元素の電子状態を考える場合には、相対論的效果が無視できなくなる。相対論的效果はスピン・軌道相互作用とスカラー相対論的效果に分けて考えられるが、前者によって生じるスピン・軌道分裂の大きさは、

4f電子系においては結晶場分裂の大きさに比べて一桁大きく、基底状態を考える上で重要になる。スピン・軌道相互作用は、Koelling-Harmon の表式に従い、再変分法で自己無撞着に取り入れて、時間反転対称性が破れた磁性体の計算にも適用できるようにした。

また、4f電子系では、f電子が局在しているか遍歴しているかが重要な問題になる。従来の局所密度近似(LDA)を用いた計算では、f電子が遍歴的とみなせる非磁性化合物に应用が限られていた。局在電子を取り扱うためには、ハートリー・フォック的な近似を用いた LSDA+U 法による計算を行なう必要がある。実験結果をよく説明するような f電子の占有状態をフェルミ準位より下におき、LSDA+U法を用いて自己無撞着な計算を行なう方法を用いた。ここで、f電子には軌道の自由度があるため、スピン・軌道相互作用と結晶場を考慮に入れなければならない。

CeRh<sub>3</sub>B<sub>2</sub> は、六方晶の結晶構造をもち、Ce 化合物の中では最高の  $T_c \sim 120\text{K}$  という強磁性転移温度を示す。また、磁化測定の結果によると、その飽和磁気モーメントは  $0.45 \mu_B$  と小さく、c 面内を向いていることが分かっている。本研究では、量子化軸を c 面内にとり、結晶構造を底心格子として計算を行なった。dHvA 効果の実験結果を比較的よく再現する計算例では、f電子の占有状態が f電子間の混成による大きな分散を示すバンドをもっており、c 面内に小さな磁気モーメントの期待値をもつことが示された。この計算結果は、この系のフェルミ面を説明する初めての理論的解釈を与えた。

[1] "Fermi surfaces of CeRh<sub>3</sub>B<sub>2</sub>: An LSDA+U study", K. Yamauchi, H. Harima and A. Yanase: to be published to Physica B.

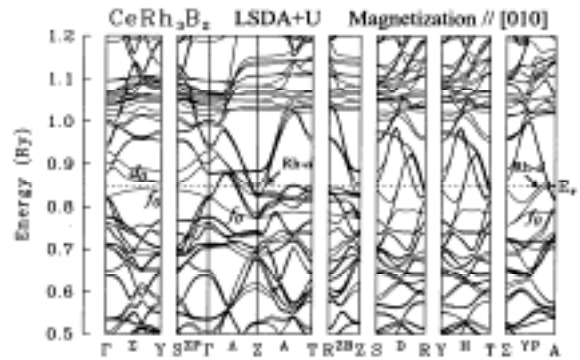


図: LSDA+U 法によって得られた CeRh<sub>3</sub>B<sub>2</sub> のバンド構造

## Alq<sub>3</sub>/Al 界面の構造と電子状態に関する理論的研究

阪大産研<sup>1</sup>、JST-CREST<sup>2</sup>、産総研<sup>3</sup> 柳澤 将<sup>1,2</sup>、森川 良忠<sup>1,2,3</sup>

### 1. 序

Alq<sub>3</sub> (tris-(8-hydroxyquinoline) aluminum) は、有機 EL 素子の発光・輸送層物質として広く用いられている。Alq<sub>3</sub> 膜と Al 電極からなる界面 (Alq<sub>3</sub>/Al) は典型的な界面で、その電子構造に関する実験的研究が精力的に行なわれてきた。有機/金属界面における電子注入の効率は、有機層側の LUMO と金属の Fermi 準位の接合によって支配され、このエネルギー準位の接合は、界面電気二重層の生成による有機層側のエネルギー準位の相対的シフトによって左右される。本研究では、第一原理電子状態計算によって Alq<sub>3</sub>/Al 界面での電気二重層の起源を探ることを目的とした。

### 2. 計算方法

計算は、計算プログラム STATE により行なった。DFT 計算の交換・相関効果は、GGA または LDA により記述した。電子・イオン間相互作用はウルトラソフト擬ポテンシャルで記述し、波動関数と電荷密度を平面波により展開した。

Al 電極は、3 層または 6 層の原子層からなる Al(111) の周期的スラブでモデルし、表面垂直方向のスラブ間には 2.3 nm 程度の真空層を挿入した。実験の電極表面で予期される表面の粗さの効果を取り込むために Al(332) 表面や、adatom のある Al(111) 表面の計算も行なった。

### 3. 計算結果・考察

Alq<sub>3</sub>/Al 界面では、Alq<sub>3</sub> 分子の永久双極子が真空側に向けた界面 (up) で仕事関数が 0.9 - 1.7 eV の範囲で減少することが分かった。これは界面双極子の生成による Alq<sub>3</sub> 側のエネルギー準位の相対的シフトに対応しており、紫外光電子分光 (UPS) の実験値 (-1.4 eV) [1] に近い。一方、永久双極子が Al 基板側に向けた界面 (down) では仕事関数は増加する。以上から、界面では up の配置をした Alq<sub>3</sub> が支配的に存在することが示唆される。

UPS の実験 [1] では、HOMO よりもやや高い準位に界面状態のピークが観測され、それは界面の強い相互作用に由来すると報告された。この界面状態は、up または down の構造のみの状態密度 (DOS) では説明できない。しかしながら、界面での up と down の構造の共存を仮定し、各構造の DOS を 4:1 の割合で重ね合わせると up と down に由来する 2 つの HOMO 準位が現れた。それらの準位の差は 1.5 eV 程度で、UPS で観測されたピークとよく似ていることが見出された (図)。詳細は当日報告する。

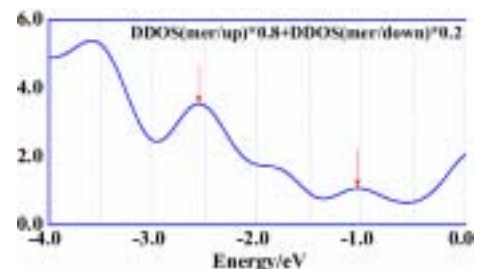


図. Alq<sub>3</sub>/Al(111) 界面の DOS 変化 (吸着系の DOS から Al 基板の DOS を引いたものを、up 配置と down 配置について 4:1 の割合で重ね合わせたもの。横軸は Fermi 準位に対する相対エネルギー。Up, down 各配置に由来する HOMO 準位は矢印で示されている。

[1] Yokoyama *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. 42, (2003) 3666.



## 第一原理に基づく金属ナノワイヤ列における電気伝導特性計算

阪大工 江上 喜幸、佐々木 孝、小野 倫也

近年、高精度加工技術や超微細構造の観察・評価技術の発展が進み、原子・分子スケールのデバイスの開発が現実になろうとしている。しかし、このようなスケールでは電子が量子的な振る舞いをするようになるため、マクロスケールとは異なった物性が現れることが知られており、多くの実験的・理論的研究がなされている。例えば、走査型トンネル顕微鏡などを利用した実験や、計算機を用いた理論計算によって、金属細線のコンダクタンスが  $G_0 (=2 e^2 / h)$  を単位とした量子的な振る舞いをするようになることが確認されている。さらに、細線の長さによってコンダクタンスが振動する現象が生じることも確認されている。今回我々は、この原子細線におけるコンダクタンスの振動現象を調べるために、半無限電極間に挟まれた金単原子鎖および Jellium 細線モデルを用意し、第一原理計算[3]によってその電気伝導特性の予測を行った[1,2]。その結果、コンダクタンスの振動現象が無限長の原子鎖における性質に大きく影響されることがわかった。さらに、図 1 に示すような複数の単原子鎖列を半無限電極間に挟んだモデルについても同様の計算を行った。講演では、半無限電極間に挟まれた金単原子鎖と Jellium 細線を用いて行った電気伝導特性計算の結果を比較しながら、コンダクタンスの振動現象を理論的に解析した結果について紹介する。また、ナノワイヤ列を用いた計算結果についても報告を行なう。

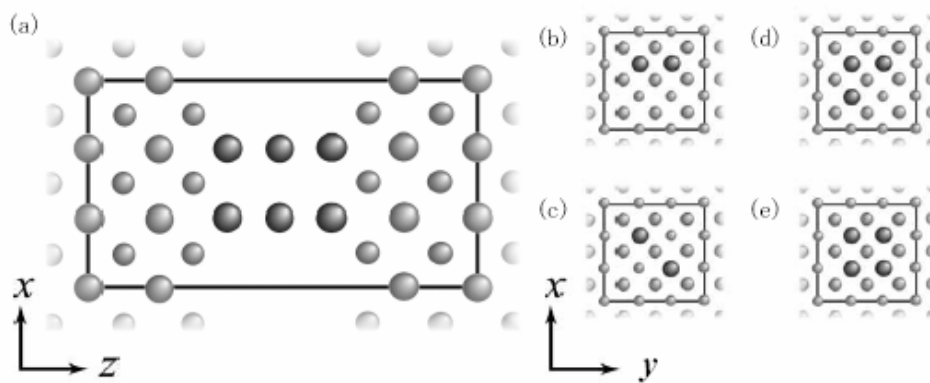


図 1 : 半無限結晶電極間に挟まれたナノワイヤ列モデル

(a)側面図, (b)-(e)断面図

- [1] K. Hirose, T. Ono and Y. Fujimoto and S. Tsukamoto, *First-Principles Calculations in Real-Space Formalism, Electronic Configurations and Transport Properties of Nanostructures*, (Imperial College Press, London, 2005).
- [2] Y. Egami, T. Ono and K. Hirose, *Phys. Rev. B* 72, 125318 (2005).
- [3] Y. Egami, T. Sasaki, T. Ono and K. Hirose, *Jpn. J. Appl. Phys.*, accepted.

# 物性研究所談話会

日時：2006年2月23日(木) 午後4時～

場所：物性研究所本館6階 講義室

講師：江藤 幹雄

(慶應義塾大学理工学部)

題目：量子ポイントコンタクトを用いたスピン流の生成とその測定法

要旨：

電子のスピンを操作してデバイスに用いるスピントロニクスにおいて、半導体へのスピン注入は重要な課題である。我々は、フェルミ波長程度の狭いくびれ構造である「量子ポイントコンタクト(QPC)」の電気伝導特性を理論的に調べ、スピン軌道相互作用がある場合に電流が自発的にスピン分極する現象を見出した。我々の結論は以下の通りである。(i)電気伝導度の量子化は、スピン軌道相互作用がある場合でも観測される。(ii)透過した電流は、電流に垂直方向にスピン分極する。外部磁場や磁性体は不要である。(iii) InGaAs ヘテロ構造の場合、スピン分極率は50%以上になり得る。このスピン分極は、スピンの異なるサブバンド間の断熱的な遷移として理解される。QPC構造に強磁性体を接合した複合系の伝導特性を調べ、スピン流の測定方法について議論する。

Reference:

M. Eto, T. Hayashi and Y. Kurotani: J. Phys. Soc. Jpn. 74, (2005) 1934.

# 人 事 異 動

## 【研究部門等】

平成 18 年 2 月 1 日付け

### (採 用)

氏 名	所 属	職 名	異 動 内 容
足 立 俊 輔	先端分光研究部門	助 手	日本学術振興会特別研究員から

平成 18 年 3 月 1 日付け

### (採 用)

氏 名	所 属	職 名	異 動 内 容
岡 田 卓	新物質科学研究部門	助 手	大阪大学大学院理学研究科特任助手から

平成 18 年 3 月 31 日付け

### (辞 職)

氏 名	所 属	職 名	異 動 内 容
木 村 伸 也	新物質科学研究部門	助 手	特許庁審査官補へ
村 岡 祐 治	附属物質設計評価施設	助 手	岡山大学大学院自然科学研究科助教授へ

### (定 年)

氏 名	所 属	職 名	異 動 内 容
東 堂 栄	極限環境物性研究部門	助 手	
森 多美子	極限環境物性研究部門	助 手	
坂 井 富美子	附属物質設計評価施設	助 手	

平成 18 年 4 月 1 日付け

### (採 用)

氏 名	所 属	職 名	異 動 内 容
押 川 正 毅	物性理論研究部門	教 授	東京工業大学大学院理工学研究科教授から
中 辻 知	新物質科学研究部門	助 教授	京都大学大学院理学研究科講師から
阿 部 英 介	ナノスケール物性研究部門	助 手	慶應義塾大学大学院理工学研究科博士課程から

### (転 出)

氏 名	所 属	職 名	異 動 内 容
今 田 正 俊	物性理論研究部門	教 授	大学院工学系研究科教授へ
渡 辺 真 仁	物性理論研究部門	助 手	大学院工学系研究科助手へ

**(所内異動)**

氏名	所属	職名	異動内容
嶽山 正二郎	附属国際超強磁場科学研究施設	教授	極限環境物性研究部門から
金道 浩一	附属国際超強磁場科学研究施設	教授	極限環境物性研究部門から
小嶋 英二	附属国際超強磁場科学研究施設	助手	極限環境物性研究部門から
鳴海 康雄	附属国際超強磁場科学研究施設	助手	極限環境物性研究部門から
三田村 裕幸	新物質科学研究部門	助手	極限環境物性研究部門から
川口 孝志	附属国際超強磁場科学研究施設	技術専門職員	工作室から
福田 毅哉	附属物質設計評価施設	技術職員	極限環境物性研究部門から

**(昇任)**

氏名	所属	職名	異動内容
北澤 恒男	附属物質設計評価施設	技術専門職員	技術専門職員から昇任
後藤 弘匡	新物質科学研究部門	技術専門職員	技術職員から昇任
矢田 裕行	附属物質設計評価施設	技術専門職員	技術職員から昇任
土屋 光	低温液化室	技術専門職員	技術職員から昇任
山崎 淳	工作室	技術専門職員	技術職員から昇任

**(委嘱)**

氏名	所属	職名	異動内容
松田 祐司	新物質科学研究部門	教授	本務：京都大学大学院理学研究科教授
常次 宏一	物性理論研究部門	教授	本務：京都大学基礎物理学研究所教授
常行 真司	附属物質設計評価施設	助教授	本務：大学院理学系研究科助教授

**(委嘱(客員))**

氏名	所属	職名	異動内容
館山 佳尚	物性理論研究部門	助教授	本務：物質・材料研究機構主任研究官 任期：平成18年4月1日～平成18年9月30日
河合 伸	ナノスケール物性研究部門	助教授	本務：九州大学大学院理学研究院助教授 任期：平成18年10月1日～平成19年3月31日
稲田 佳彦	極限環境物性研究部門	助教授	本務：岡山大学教育学部助教授 任期：平成18年4月1日～平成18年9月30日
白濱 圭也	極限環境物性研究部門	助教授	本務：慶應義塾大学理工学部助教授 任期：平成18年4月1日～平成18年9月31日
松原 明	極限環境物性研究部門	助教授	本務：京都大学低温物質科学研究センター助教授 任期：平成18年10月1日～平成19年3月31日
萱沼 洋輔	先端分光研究部門	教授	本務：大阪府立大学大学院工学研究科教授 任期：平成18年4月1日～平成18年9月30日
伊藤 健二	附属軌道放射物性研究施設	助教授	本務：高エネルギー加速器研究機構 任期：平成18年4月1日～平成18年9月30日
小林 幸則	附属軌道放射物性研究施設	助教授	本務：高エネルギー加速器研究機構 任期：平成18年10月1日～平成19年3月31日
高倉 洋礼	附属中性子科学研究施設	助教授	本務：北海道大学工学研究科助教授 任期：平成18年4月1日～平成19年3月31日

氏名	所属	職名	異動内容
岡部 豊	附属物質設計評価施設	教授	本務：首都大学東京都市教養学部教授 任期：平成18年10月1日～平成19年3月31日
陰山 洋	附属物質設計評価施設	助教授	本務：京都大学大学院理学研究科助教授 任期：平成18年10月1日～平成19年3月31日

**(兼務)**

氏名	所属	職名	異動内容
上田 和夫	物性理論研究部門	教授	物性研究所長（再任～平成20年3月31日）
渡部 俊太郎	先端分光研究部門	教授	物性研究副所長（再任～平成20年3月31日）
吉澤 英樹	附属中性子科学研究施設	教授	附属中性子科学研究施設長（再任～平成21年3月31日）
嶽山 正二郎	附属国際超強磁場科学研究施設	教授	附属国際超強磁場科学研究施設長（～平成21年3月31日）

**【事務部】**

平成18年2月1日付け

**(事務組織改組による配置換)**

氏名	所属	職名	異動内容
中塚 数夫	宇宙線研担当課	課長	企画課長から
柳田 則幸	物性研担当課	課長	庶務課長から
山岸 公明	経理担当課	課長	経理課長から
白勢 祐次郎	新領域担当課	課長	学務課長から
鈴木 和美	物性研担当課	副課長	庶務課専門員から
小林 健二	新領域担当課	副課長	学務課副課長から
日向 知実治	新領域担当課	副課長	経理課副課長から
渡邊 保	センター支援グループ	副課長	センター支援室副課長から
岩下 健吾	給与・施設グループ	副課長	経理課副課長から
田淵 章博	新領域担当課	主査	学務課主査から
飯田 信之	渉外・広報グループ	専門職員	企画課専門職員から
大澤 悦子	人事・労務グループ	主査	庶務課主査から
前田 哲男	給与・施設グループ	主査	経理課主査から
長野 國明	給与・施設グループ	主査	経理課主査から
山本 哲也	宇宙線研担当課	総務係長	企画課総務係長から
秋本 真利	宇宙線研担当課	附属施設事務室係長	企画課附属研究施設事務室係長から
関 祐子	物性研担当課	共同利用係長	庶務課共同利用係長から
渡邊 慎二	経理担当課	予算・決算係長	経理課司計係長から
齋藤 信一	経理担当課	専門職員	経理課専門職員から

氏名	所属	職名	異動内容
押木久雄	経理担当課	契約チーム係長	経理課用度第二係長から
油井聡	新領域担当課	教務係長	学務課教務係長から
横田政雄	新領域担当課	予算・決算係長	経理課経理第一係長から
鬼武祐二	新領域担当課	研究交流係長	学務課専門職員から
小淵和宏	新領域担当課	契約係長	経理課用度第一係長から
三浦弘三	センター支援グループ	総務係長	センター支援室センター支援係長から
田村吉弘	人事・労務グループ	労務・安全管理チーム係長	学務課研究交流係長から
宮城明治	人事・労務グループ	人事チーム係長	庶務課人事係長から
佐藤省二	給与・施設グループ	施設管理チーム係長	経理課施設第二係長から
濱野輝子	宇宙線研担当課	予算・決算係主任	企画課企画渉外係主任から
狩野真二	宇宙線研担当課	予算・決算係主任	経理課司計係主任から
濱田真実子	物性研担当課	総務係主任	庶務課庶務係主任から
辻角隆之	物性研担当課	総務係主任	センター支援室センター支援係主任から
寺口正展	経理担当課	予算・決算係主任	経理課経理第二係主任から
細島靖久	経理担当課	契約チーム主任	経理課用度第二係主任から
古川稔子	新領域担当課	総務係主任	学務課総務係主任から
荻野とみ	新領域担当課	教務係主任	学務課教務係主任から
三田智子	新領域担当課	契約係主任	学務課用度第一係主任から
阿部宣	新領域担当課	契約係主任	学務課用度第一係主任から
佐藤公一郎	センター支援グループ	総務係主任	センター支援室センター支援係主任から
佐藤美香	センター支援グループ	総務係主任	センター支援室センター支援係主任から
常行晴美	人事・労務グループ	人事チーム主任	庶務課人事係主任から
瀬戸美香子	人事・労務グループ	人事チーム主任	庶務課人事係主任から
清水雅弘	給与・施設グループ	給与・旅費チーム主任	センター支援室センター支援係主任から
河原博之	給与・施設グループ	施設管理チーム主任	経理課施設第二係主任から
山口禎介	宇宙線研担当課	総務係	企画課総務係から
松本健一	宇宙線研担当課	予算・決算係	経理課用度第一係から
三浦勝正	物性研担当課	総務係	庶務課庶務係から
伊藤央	物性研担当課	共同利用係	庶務課共同利用係から
橋本宏之	物性研担当課	共同利用係	庶務課共同利用係から
目黒哲	経理担当課	契約チーム	経理課用度第二係から
山寺祐介	経理担当課	契約チーム	経理課用度第二係から
篠原貴士	経理担当課	契約チーム	経理課用度第二係から
南雅登	新領域担当課	総務係	学務課総務係から

氏名	所属	職名	異動内容
齋藤節朗	新領域担当課	教務係	学務課教務係から
山岡憲明	新領域担当課	教務係	学務課教務係から
鎌倉恒	新領域担当課	教務係	学務課教務係から
石田さよ	新領域担当課	教務係	学務課教務係から
古沢清宗	新領域担当課	予算・決算係	経理課経理第一係から
高村真也	新領域担当課	研究交流係	学務課研究交流係から
伊藤英明	人事・労務グループ	労務・安全管理チーム	経理課経理第一係から
中川健太郎	人事・労務グループ	人事チーム	庶務課人事係から
小塚直美	給与・施設グループ	給与・旅費チーム	経理課経理第二係から
市川貴士	給与・施設グループ	給与・旅費チーム	経理課経理第一係から
小野間健二	給与・施設グループ	施設管理チーム	経理課施設第二係から
安田真徳	給与・施設グループ	施設管理チーム	経理課施設第一係から
後藤宗利	物性研担当課	附属施設事務室	庶務課附属施設事務室から
中川繁	物性研担当課	研究交流係	学務課研究交流係から

平成18年2月19日付け

(育児休業)

氏名	所属	職名	異動内容
濱田真実子	物性研担当課	総務係主任	平成18年12月23日まで

平成18年2月20日付け

(採用)

氏名	所属	職名	異動内容
野村かおる	物性研担当課	総務係	育児休業代員(～平成18年12月23日)

平成18年3月31日付け

(定年)

氏名	所属	職名	異動内容
長野國明	給与・施設グループ	主査	定年退職

(勸奨)

氏名	所属	職名	異動内容
濱野輝子	宇宙線研担当課	予算・決算係主任	勸奨退職

(任期満了)

氏名	所属	職名	異動内容
中川 繁	新領域担当課	研究交流係	再雇用任期満了

平成18年4月1日付け

(転出)

氏名	所属	職名	異動内容
三浦 弘三	センター支援グループ	総務係長	研究協力部博物館グループ係長へ
荻野 とみ	新領域担当課	教務係主任	農学系教務課教務第一係長へ
寺口 正展	経理担当課	予算・決算係主任	教養学部等経理課旅費謝金係主任へ
石田 さよ	新領域担当課	教務係	教養学部等総務課数理科学総務係主任へ
小塚 直美	給与・施設グループ	給与・旅費チーム	法学政治学研究科等会計係へ

(転入)

氏名	所属	職名	異動内容
和栗 正幸	センター支援グループ	総務係長	医学部附属病院管理課経理チーム主任から
進藤 文子	新領域担当課	研究交流係	人事部人事課から
山末 亜紀子	新領域担当課	教務係主任	教養学部等総務課数理科学総務係から
安藤 洋平	経理担当課	予算・決算係	財務部財務課予算チームから
荒井 整	給与・施設グループ	給与・旅費チーム	国立大学財務・経営センター総務課総務係から

(昇任)

氏名	所属	職名	異動内容
鎌倉 恒	新領域担当課	教務係主任	一般職員から昇任
山口 禎介	宇宙線研担当課	総務係主任	一般職員から昇任
松本 健一	宇宙線研担当課	予算・決算係主任	一般職員から昇任
伊藤 英明	人事・労務グループ	労務・安全管理チーム主任	一般職員から昇任

平成18年4月1日付け

(更新)

氏名	所属	職名	異動内容
後藤 宗利	物性研担当課	附属施設事務室	再雇用更新(～平成19年3月31日)

「物性研だより」第45巻第4号54頁の人事異動の記事において、以下のとおり誤りがありました。

お詫びして訂正いたします。

平成17年11月1日付け採用

(誤) 鈴木 孝史

(正) 鈴木 隆史



# 東京大学物性研究所教職員公募の通知

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

1. 研究部門名等および公募人員数  
物質設計評価施設（廣井研究室）助手 1 名
2. 研究内容  
新しい強相関電子系物質の開発。固体物理の視点を持って、固体化学的手法により、物質合成、評価、物性測定を積極的に行う意欲のある若手研究者を希望する。
3. 応募資格  
修士課程修了、または、これと同等以上の能力を持つ方。
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 18 年 5 月 15 日（月）必着
6. 着任時期  
決定後なるべく早い時期
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（略歴で可）  
業績論文リスト（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）  
研究業績の概要（A 4 用紙 2 ページ以内）  
被推薦者の自己アピール（A 4 用紙 1 ページ以内）  
(ロ) 応募の場合  
履歴書（略歴で可）  
業績論文リスト（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）  
健康診断書  
所属の長または指導教員等による応募者本人についての意見書（作成者から宛先へ直送）  
研究業績の概要（A 4 用紙 2 ページ以内）  
自己アピール（A 4 用紙 1 ページ以内）
8. 書類提出先  
〒277-8581 千葉県柏市柏の葉 5 丁目 1 番 5 号  
東京大学柏地区人事・労務グループ人事チーム  
電話 04-7136-3205  
e-mail [jinji@kashiwa-jimu.u-tokyo.ac.jp](mailto:jinji@kashiwa-jimu.u-tokyo.ac.jp)
9. 本件に関する問い合わせ先  
東京大学物性研究所附属物質設計評価施設 教授 廣井善二  
電話 04-7136-3445 e-mail [hiroi@issp.u-tokyo.ac.jp](mailto:hiroi@issp.u-tokyo.ac.jp)
10. 注意事項  
「物質設計評価施設（廣井研究室）助手応募書類在中」、または「意見書在中」の旨を朱書き、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にて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 18 年 2 月 16 日

東京大学物性研究所長  
上 田 和 夫

下記により技術職員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. 研究部門名等および公募人員数

附属国際超強磁場科学研究施設（嶽山研究室）技術職員 1名

2. 職務内容

平成18年4月より、東京大学物性研究所超強磁場研究室を改組し、「附属国際超強磁場科学研究施設」が発足します。そこで、破壊型超強磁場発生に関わる業務に携わる技術職員1名を募集します。巨大な電気エネルギーをコンデンサーに蓄積し、これを一気に電気コイルに放電、世界最強の超強磁場を発生し、様々な物性測定を行う実験研究の技術支援が主な業務で、磁場発生毎に全て破壊してしまう特殊な実験です。具体的には、超強磁場発生用の超大型高圧大電流電源の修理などの維持管理、磁場発生用大型コイル組み立て作業、機器の修理、破壊実験後の清掃作業などが含まれます。東京大学初めての選考採用（統一採用試験なし）ですので、新卒者ではなく、ある程度の職務経験を必要としますが、必ずしも、本業務の専門的経験を問いません。電気や機械工作、あるいは部品に関する知識を広く有し、電気回路製作、機械、木工工作などが好きで得意であることが望ましく、強い精神力と体力も要求されますので、35歳前後より若い方が望まれます。

3. 応募資格

高等学校、大学卒業程度で工学系の素養があり、職務経験のある方

4. 公募締切

平成18年5月8日（月）必着

5. 着任時期

決定後なるべく早い時期を希望する。平成18年9月を予定。

6. 提出書類（書式自由）

履歴書

職務経歴書（経歴ごとに職務内容を具体的に記述）

「自分にとって仕事とは」をテーマに作文（2000-3000字程度）

健康診断書

7. 書類提出先

〒277-8581 千葉県柏市柏の葉5丁目1番5号  
東京大学柏地区人事・労務グループ人事チーム  
電話 04(7136)3205  
e-mail [jinji@kashiwa-jimu.u-tokyo.ac.jp](mailto:jinji@kashiwa-jimu.u-tokyo.ac.jp)

8. 本件に関する問い合わせ先

東京大学物性研究所 極限環境物性研究部門 教授 嶽山 正二郎  
電話 04(7136)5309  
e-mail [takeyama@issp.u-tokyo.ac.jp](mailto:takeyama@issp.u-tokyo.ac.jp)

9. 注意事項

「附属国際超強磁場科学研究施設（嶽山研究室）技術職員応募書類在中」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

物性研究所において書類選考および2次審査（面接）を行った後、東京大学本部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18年2月17日

東京大学物性研究所長  
上 田 和 夫

下記により技術職員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. 研究部門名等および公募人員数

附属国際超強磁場科学研究施設（金道研究室）技術職員 1名

2. 職務内容

平成18年4月より、東京大学物性研究所超強磁場研究室を改組し、「附属国際超強磁場科学研究施設」が発足します。そこで、ロングパルス強磁場発生に関わる業務に携わる技術職員1名を募集します。本業務は、世界最大のフライホイール付き直流発電機に電気エネルギーを蓄積し、ここから取り出した電流を1秒～10秒間に電磁石へ投入することにより世界最高の非破壊強磁場を発生することです。また、直流発電機の代わりにコンデンサー電源を利用した強磁場発生や、両者を組み合わせた強磁場発生も業務に含まれます。本業務に携わる技術職員に求められる職務内容は、第一に、直流発電機の維持管理です。本発電機の蓄積エネルギーは210MJもあり、安全かつ安定的に運転するためには毎日の保守点検が必要です。第二の職務内容は、強磁場発生を行う負荷コイル側の安全管理です。強磁場を発生するコイルは常に破壊の危険をはらんでいます。そこでコイルの破壊や短絡事故によって電源および測定設備が著しい損傷を受けることが無いように磁場発生およびその利用を含めた安全管理を行ってまいります。

3. 応募資格（下記のうち、ひとつ以上）

大学またはこれと同等の機関において強電関連の装置を用いた業務経験が5年以上  
強磁場発生および測定の技術を有している  
電気工作物取扱の資格（第三種電気主任技術者）

4. 公募締切

平成18年5月8日（月）必着

5. 着任時期

決定後なるべく早い時期を希望する。平成18年7月を予定。

6. 提出書類（書式自由）

履歴書

職務経歴書（経歴ごとに職務内容を具体的に記述）

本公募に応募した理由（3000字以内）

健康診断書

7. 書類提出先

〒277-8581 千葉県柏市柏の葉5丁目1番5号  
東京大学柏地区人事・労務グループ人事チーム  
電話 04(7136)3205  
E-mail [jinji@kashiwa-jimu.u-tokyo.ac.jp](mailto:jinji@kashiwa-jimu.u-tokyo.ac.jp)

8. 本件に関する問い合わせ先

東京大学物性研究所 極限環境物性研究部門 教授 金道 浩一  
電話 04(7136)3336  
E-mail [kindo@issp.u-tokyo.ac.jp](mailto:kindo@issp.u-tokyo.ac.jp)

9. 注意事項

「附属国際超強磁場科学研究施設（金道研究室）技術職員応募書類在中」の旨を朱書き、郵送の場合は書留で郵送のこと。

10. 選考方法

物性研究所において書類選考および2次審査（面接）を行った後、東京大学本部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18年2月17日

東京大学物性研究所長  
上 田 和 夫

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

1. 研究部門名等および公募人員数

新物質科学研究部門（森研究室）助手1名

2. 研究内容

新しい機能性分子性物質の開発とその構造、物性評価。特に機能性出現を目指した物質合成の能力を有し、その構造、物性測定を積極的に行う若手研究者を希望する。

3. 応募資格

修士課程修了、またはこれと同等以上の能力を持つ方。

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18年6月16日（金）必着

6. 着任時期

決定後なるべく早い時期

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（略歴で可）

業績論文リスト（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（略歴で可）

業績論文リスト（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）

健康診断書

所属の長または指導教員作成の応募者本人についての意見書（作成者から宛先へ直送）

8. 書類提出先

〒277-8581 千葉県柏市柏の葉5丁目1番5号

東京大学柏地区人事・労務グループ人事チーム

電話 04(7136)3205

e-mail [jinji@kashiwa-jimu.u-tokyo.ac.jp](mailto:jinji@kashiwa-jimu.u-tokyo.ac.jp)

9. 本件に関する問い合わせ先

東京大学物性研究所新物質科学研究部門 助教授 森 初果

電話 04(7136)3444

e-mail [hmori@issp.u-tokyo.ac.jp](mailto:hmori@issp.u-tokyo.ac.jp)

10. 注意事項

新物質科学研究部門（森研究室）「助手応募書類在中」、または「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。

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18年3月9日

東京大学物性研究所長

上 田 和 夫

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

1. 研究部門名等および公募人員数

附属中性子科学研究施設（柴山研究室）助手1名

当施設は日本原子力研究開発機構研究用原子炉(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。

2. 研究内容

中性子散乱、特に中性子スピネコーならびに小角中性子散乱法を用いたソフトマターの構造・ダイナミクスの研究に従事し、中性子散乱法の開発にも強い関心をもつ意欲のある若手研究者を希望する。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。

3. 応募資格

修士課程修了、またはこれと同等以上の能力を持つ方。

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18年6月30日(金)必着

6. 着任時期

決定後なるべく早い時期

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(略歴で可)

業績論文リスト(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(略歴で可)

業績論文リスト(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)

健康診断書

所属の長または指導教員作成の応募者本人についての意見書(作成者から宛先へ直送)

8. 書類提出先

〒277-8581 千葉県柏市柏の葉5丁目1番5号

東京大学柏地区人事・労務グループ人事チーム

電話 04(7136)3205

e-mail [jinji@kashiwa-jimu.u-tokyo.ac.jp](mailto:jinji@kashiwa-jimu.u-tokyo.ac.jp)

9. 本件に関する問い合わせ先

東京大学物性研究所附属中性子科学研究施設 教授 柴山 充弘

電話 (029)287-8904

e-mail [shibayama@issp.u-tokyo.ac.jp](mailto:shibayama@issp.u-tokyo.ac.jp)

10. 注意事項

附属中性子科学研究施設(柴山研究室)「助手応募書類在中」、または「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。

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18年3月13日

東京大学物性研究所長

上 田 和 夫

# 平成 18 年度前期短期研究会一覽

研究会名	開催期日	参加予定 人数	提案者
有機物質のナノ電子物性	18.4.24(月)～18.4.26(水) (3日間)	41 (20)	阿波賀邦夫(名古屋大学・理学研究科) 山下 正廣(東北大学・理学研究科) 松本 卓也(大阪大学・産業科学研究所) 西川 浩之(筑波大学・数理物質科学研究科) 田島 裕之(物性研究所)
フォノンの物性研究の新展開	18.6.5(月)～18.6.7(水) (3日間)	40 (20)	岩佐 和晃(東北大学・理学研究科) 廣田 和馬(物性研究所) 山室 修(物性研究所) 筑紫 格(千葉工業大学)
Computational Approaches to Quantum Critical Phenomena	18.8.9(水)～18.8.11(金) (3日間)	25 (10)	川島 直輝(物性研究所) 加藤 岳生(物性研究所) 藤堂 眞治(東京大学・工学系研究科) 富田 裕介(物性研究所) 鈴木 隆史(物性研究所) 今田 正俊(東京大学・工学系研究科) 上田 寛(物性研究所) 上田 和夫(物性研究所) 岡部 豊(首都大学東京・理学研究科) 榊原 俊郎(物性研究所) 高橋 實(物性研究所) 高山 一(物性研究所) 廣井 善二(物性研究所) 瀧川 仁(物性研究所)

( )は旅費支給者      は提案代表者

# 平成 18 年度前期外来研究員一覧

## 嘱託研究員

氏名	所属	研究題目	関係所員
近藤 忠	東北大学理学研究科 助教授	レーザー加熱ダイヤモンドアンビル装置における測温技術の開発	八木
百瀬 英毅	大阪大学低温センター 助手	超強磁場下における半導体短周期超格子の遠赤外磁気光学効果に関する研究	嶽山
横井 裕之	熊本大学工学部 助教授	単層カーボンナノチューブの超強磁場下遠赤外特性の研究	〃
香取 浩子	理化学研究所中央研究所 前任研究員	一巻きコイル法を用いた超強磁場磁化測定	〃
梅原 雅捷	前物質・材料研究機構	半導体中の電子・正孔複合体と強磁場効果( )	〃
小林 達生	岡山大学自然科学研究科 教授	多孔性配位高分子に吸着した酸素分子の強磁場磁化測定	金道
高柳 滋	北海道教育大学教育学部 教授	高圧下の比熱測定装置の開発	上床
梅原 出	横浜国立大学工学研究院 助教授	〃	〃
藤原 直樹	京都大学人間・環境学研究科 助教授	圧力下NMR測定法に関する開発	〃
稲田 佳彦	岡山大学教育学部 助教授	チャコール式3He冷凍機の装置の開発	〃
磯田 誠	香川大学教育学部 教授	Fe2Pにおける圧力下電気抵抗測定	〃
村田 恵三	大阪市立大学理学研究科 教授	有機伝導体の圧力効果	〃
高橋 博樹	日本大学文理学部 教授	多重極限関連装置の調整	〃
富樫 格	理化学研究所播磨研究所 連携研究員	極端紫外レーザーの研究	渡部
竹内 恒博	名古屋大学エコトピア科学研究所 講師	Bi系超伝導体の角度分解光電子分光	辛
岡崎 浩三	名古屋大学理学研究科 助手	YBCOフィルムの光電子分光	〃
金井 要	名古屋大学理学研究科 助手	有機化合物の光電子分光	〃
河合 潤	京都大学工学研究科 教授	固体の発光実験	〃
横谷 尚睦	岡山大学自然科学研究科 教授	高分解能光電子分光による強相関物質の研究	〃
鎌田 雅夫	佐賀大学ソックロトロン光応用研究センター 教授	レーザーおよび放射光の同時照射の研究	〃
田村 隆治	東京理科大学基礎工学部 助手	準結晶の高分解能光電子分光	〃
樋口 透	東京理科大学理学部 助手	共鳴逆光電子分光装置の開発	〃
木須 孝幸	理化学研究所中央研究所 基礎特別研究員	光電子分光法を用いた各種分子性結晶の電子状態の研究及び装置の低温化	〃
木村 真一	自然科学研究機構分子科学研究所 助教授	強相関系物質の共鳴逆光電子分光の研究	〃
石井 啓文	Synchrotron Radiation Research Center 研究員	X線非弾性散乱の研究	〃

江口律子	理化学研究所播磨研究所 連携研究員	酸化バナジウムの高分解能光電子分光	辛
堀場弘司	理化学研究所播磨研究所 連携研究員	マンガンペロブスカイトの高分解能光電子分光	〃
松波雅治	理化学研究所播磨研究所 基礎科学特別研究員	4f電子系物質の高分解能光電子分光	〃
手塚泰久	弘前大学理工学部 助教授	希土類金属化合物の非占有電子状態解析	柿崎
上野信雄	千葉大学工学部 教授	高輝度放射光を利用する有機薄膜光電子分光ビームラインの設計	〃
関一彦	名古屋大学理学研究科 教授	高輝度放射光を利用する有機固体分光実験設備の基本設計	〃
曾田一雄	名古屋大学工学部 教授	高輝度放射光仕様発光実験装置の開発	〃
大門寛	奈良先端科学技術大学院大学 教授	二次元表示型スピン分解光電子エネルギー分析器の開発	〃
菅滋正	大阪大学基礎工学研究科 教授	高輝度放射光を用いた固体分光実験設備の基本設計	〃
田中健一郎	広島大学理学研究科 教授	高輝度放射光における表面化学研究用コインシデンス分光ビームラインの設計	〃
谷口雅樹	広島大学放射光科学研究センター 教授	軟X線発光分光及び高分解能光電子分光実験の検討	〃
鎌田雅夫	佐賀大学ソクロン光応用研究センター 教授	レーザーと放射光を組み合わせた分光研究	〃
宮原恒昱	首都大学東京都市教養学部 教授	コヒーレント放射光を用いた分光研究	〃
佐藤繁	東北工業大学客員教授	高輝度放射光を用いた固体分光実験設備の基本設計	〃
神谷幸秀	高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設 施設長	高輝度放射光計画の光源設計及び加速器の開発研究	〃
柳下明	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 教授	高輝度放射光を利用する原子分光実験設備の基本設計	〃
間瀬一彦	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 助教授	高輝度放射光における表面化学研究用コインシデンス分光ビームラインの設計	〃
宇理須恒雄	自然科学研究機構分子科学研究所 教授	表面光化学反応研究用大フラックスビームラインの設計	〃
小杉信博	自然科学研究機構分子科学研究所 教授	高輝度放射光を利用する分子分光実験設備の基本設計	〃
木下豊彦	高輝度光科学研究センター 主席研究員	光電子顕微鏡による磁性ナノ構造物質の磁化過程	〃
設楽哲夫	高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設 助教授	入射線型加速器の研究	中村
佐藤政則	高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設 助手	線型加速器のビーム制御に関する研究	〃
伊澤正陽	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 教授	高周波加速空洞の開発研究	〃
小林幸則	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 助教授	ラティス設計及び色収差に関する研究	〃
堀洋一郎	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 助教授	真空システムの開発設計	〃
本田融	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 助教授	電子ビームモニタの設計	〃
山本樹	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 助教授	挿入光源の研究	〃
原田健太郎	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 助手	挿入光源磁場のビームへの影響に関する研究	〃
佐藤佳裕	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 技術職員	制御システムの開発研究	〃
小関忠	高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設 助教授	電磁石及び高周波加速システムの開発研究	〃



熊谷 教 孝	高輝度光科学研究センター 部門長	光源加速器の研究	中 村
岩佐 和 晃	東北大学理学研究科 助教授	中性子散乱装置のアップグレード後の研究計画の実施と共同 利用の推進	中性子
大山 研 司	東北大学金属材料研究所 助教授	"	"
平賀 晴 弘	東北大学金属材料研究所 助 手	"	"
野田 幸 男	東北大学多元物質科学研究所 教 授	"	"
日野 正 裕	京都大学原子炉実験所 助教授	"	"
河原崎 修 三	大阪大学理学研究科 教 授	"	"
日高 昌 則	九州大学理学研究院 助教授	"	"
大竹 淑 恵	理化学研究所和光研究所 前任研究員	"	"
金子 純 一	北海道大学工学研究科 助教授	中性子極小角散乱実験装置のアップグレード	"
古坂 道 弘	北海道大学工学研究科 教 授	"	"

一 般

氏 名	所 属	研 究 題 目	関係所員
平井 寿 子	筑波大学生命環境科学研究科 講 師	水素ハイドレードの高圧・低温合金	八 木
町田 真 一	筑波大学生命環境科学研究科 博士課程	"	"
小長井 敬 介	筑波大学生命環境科学研究科 博士課程	"	"
鍵 裕 之	東京大学理学系研究科 助教授	下部マントル起源のダイヤモンドに含まれる含有物に関する 研究	"
小竹 翔 子	東京大学理学系研究科 修士課程	"	"
福良 哲 史	東京大学理学系研究科 博士課程	カルボナドダイヤモンド(天然多結晶ダイヤモンド)中の含 有物周辺の分光観察	"
山本 隆 一	東京工業大学資源化学研究所 教 授	パイ共役高分子のピエゾクロミズム	"
佐藤 貴 夫	東京工業大学総合理工学研究科 博士課程	"	"
奥地 拓 生	名古屋大学環境学研究科 助 手	ダイヤモンドアンピルのレーザー穴空け加工	"
大濱 哲 夫	千葉大学自然科学研究科 助教授	三角格子磁性誘電体のNMR	瀧 川
伊藤 大 輔	千葉大学自然科学研究科 修士課程	"	"
菊池 淳	明治大学理工学部 助教授	擬一次元磁性体TiOBrの逐次相転移とスピン状態の核磁気共 鳴・核四重極共鳴による研究	"
樹神 克 明	日本原子力研究開発機構量子ビーム応用研究部門 研究員	バナジウム酸化物ナノチューブの51V-NMR	"
後藤 輝 孝	新潟大学自然科学研究科 教 授	希土類化合物PrPb3とPr1-xLaxPb3の電気四極子秩序のバル ス強磁場での超音波実験	榊 原
福浦 基	新潟大学自然科学研究科 修士課程	"	"
根本 祐 一	新潟大学自然科学研究科 助教授	希土類化合物CexLa1-xB6の強磁場超音波測定	"

渡辺 智行	新潟大学自然科学研究科 修士課程	希土類化合物CexLa1-xB6の強磁場超音波測定	榊原
山田 興治	埼玉大学工学部 教授	CaCoO系の磁気物性及び磁気抵抗効果の研究	〃
町田 一成	岡山大学自然科学研究科 教授	第2種超伝導体の渦の研究	〃
世良 正文	広島大学先端物質科学研究科 教授	CexLa1-xB6：相へのPrイオン添加化合物の極低温磁化測定による多極子秩序の研究	〃
近藤 晃弘	広島大学先端物質科学研究科 修士課程	〃	〃
松平 和之	九州工業大学工学部 助手	ベクトルマグネットを用いたスピンアイス化合物の磁場誘起新奇相転移の研究	〃
鶴殿 治彦	茨城大学工学部 助教授	ベータ鉄シリサイドおよびマグネシウムシリサイド単結晶の光学特性評価	田島
伊東 裕	名古屋大学工学研究科 助教授	擬1次元DMET塩の伝導体の電子状態の分光学的研究	〃
鳥塚 潔	神奈川工科大学 非常勤講師	有機薄膜の低温物性測定 ( )	〃
持田 智行	東邦大学理学部 助教授	フェロセン系電荷移動錯体の合成と物性評価	森
赤坂 隆拓	東邦大学理学研究科 修士課程	〃	〃
菅野 忠	明治学院大学法学部 教授	分子結晶の磁性と構造	〃
山本 昌司	北海道大学理学研究科 教授	低次元磁性体の熱力学・動力学	高橋 (實)
有川 晃弘	京都大学基礎物理学研究所 非常勤研究員	一次元スピン系の動力学と素励起描像	〃
坂井 徹	日本原子力研究開発機構量子ビーム応用研究部門 主任研究員	低次元磁性体の統計力学	〃
長谷部 一気	詫間電波工業高等専門学校 講師	量子多体系における位相的秩序の解析	甲本
御領 潤	青山学院大学理工学部 助手	スピンホール効果の理論的研究	甲元
戸川 欣彦	理化学研究所フロンティア研究システム 研究員	スピン偏極電流駆動による磁性体磁壁の動的振る舞いの直接観察	大谷
金沢 育三	東京学芸大学教育学部 教授	低速陽電子ビーム法による表面吸着水素の動的挙動の研究	小森
広田 幸二	東京学芸大学教育学研究科 修士課程	〃	〃
川村 隆明	山梨大学教育人間科学部 教授	結晶表面の原子配列制御	〃
石井 晃	鳥取大学工学部 助教授	Ge(001)表面および、Ag、吸着Ge(001)表面の電子状態の第一原理計算	〃
栃原 浩	九州大学総合理工学研究院 教授	Si(111)表面上のインジウム吸着(2x2)構造と相転移のSTM観察	〃
白澤 徹郎	九州大学総合理工学府 PD	〃	〃
ピコフスキ アントン	九州大学総合理工学府 博士課程	〃	〃
栃原 浩	九州大学総合理工学研究院 教授	表面3元規則合金の形成過程のSTM観察	〃
東 相吾	九州大学総合理工学府 博士課程	〃	〃
酒井 明	京都大学国際融合創造センター 教授	半導体表面近傍に存在するドーパント原子のKFM観察	長谷川
小林 賢吾	京都大学工学研究科 博士課程	〃	〃
福村 知昭	東北大学金属材料研究所 講師	大学間データ共有へ向けたマテリアル・インフォマティクス手法の開発	Lippmaa

上野和紀	東北大学金属材料研究所 研究機関研究員	大学間データ共有へ向けたマテリアル・インフォマティクス 手法の開発	Lippmaa
池田将洋	東北大学理学研究科 博士課程	"	"
組頭広志	東京大学工学系研究科 講師	放射光分光を用いた遷移金属酸化物薄膜・超格子の電子状態 の研究	"
近松彰	東京大学工学系研究科 博士課程	"	"
摩庭篤	東京大学工学系研究科 修士課程	"	"
大久保勇男	東京大学工学系研究科 助手	遷移金属酸化物を用いた抵抗変化型不揮発性メモリー素子の コンビナトリアル作製	"
坪内賢太	東京大学工学系研究科 修士課程	"	"
松本祐司	東京工業大学応用セラミックス研究所 講師	同軸型直衝突イオン散乱分光法による金属ガラス薄膜の相転 移観測	"
目黒伸也	物質・材料研究機構 特別研究員	薄膜合成と新規酸化物発見のためのソフトウェアツールの開発	"
河野公俊	理化学研究所中央研究所 主任研究員	量子流体の表面物性の研究	石本
斎藤政通	理化学研究所中央研究所 基礎科学特別研究員	"	"
百瀬英毅	大阪大学低温センター 助手	超強磁場下における半導体短周期超格子のサイクロトロン共 鳴に関する研究	嶽山
濱口智尋	高知工科大学 客員教授	"	"
岡井宏樹	大阪大学工学研究科 修士課程	"	"
横井裕之	熊本大学工学部 助教授	高分散単層カーボンナノチューブ配向膜の超強磁場下光吸収 特性	"
ムフタル エフエンディ	熊本大学自然科学研究科 博士課程	"	"
森啓一郎	熊本大学自然科学研究科 修士課程	"	"
満田節生	東京理科大学理学部 助教授	CuFe <sub>1-x</sub> Al <sub>x</sub> O <sub>2</sub> の強磁場磁化過程	嶽山・金道
金築俊介	東京理科大学理学研究科 修士課程	"	"
香取浩子	理化学研究所中央研究所 前任研究員	フラストレート磁性体の強磁場磁化測定	"
星武道	埼玉大学理工学研究科 修士課程	"	"
海老原孝雄	静岡大学理学部 助手	Ce化合物の強磁場物性	金道
森下健治	静岡大学理工学研究科 修士課程	"	"
菊池彦光	福井大学工学部 助教授	新規量子スピン系の強磁場磁化課程測定	"
藤井裕	福井大学工学部 助手	"	"
佐々木隆暁	福井大学工学研究科 修士課程	"	"
陰山洋	京都大学理学研究科 助教授	"	"
大場紀章	京都大学理学研究科 博士課程	"	"
馬場洋一	京都大学理学研究科 修士課程	"	"
萩原政幸	大阪大学極限科学研究センター 教授	強磁場高圧下での磁化測定	"

千田 敦子	大阪大学理学研究科 修士課程	強磁場高圧下での磁化測定	金 道
伊賀 文俊	広島大学先端物質科学研究科 助教授	近藤半導体YbB12の準定常強磁場下の磁化および磁気抵抗	〃
稲垣 祐次	九州大学工学研究院 学術研究員	量子スピン系の磁化過程における金属絶縁体転移モデルの検証	〃
浅野 貴行	九州大学理学研究院 助 手	〃	〃
堀 富 栄	芝浦工業大学システム工学部 教 授	RMn6Sn6およびRMn6Ge6(R=rear earth)合金の強磁場磁化過程	〃
新高 誠司	理化学研究所中央研究所 基礎科学特別研究員	メタ磁性を示すスピネル型酸化物の強磁場磁化・磁気抵抗測定	〃
吉川 明子	理化学研究所播磨研究所 連携研究員	パルスマグネットを用いた強磁場下におけるCoO単結晶の磁化測定および磁歪測定	〃
吉川 明子	理化学研究所播磨研究所 連携研究員	パルスマグネットを用いた強磁場下におけるGdB4単結晶の磁化・磁気抵抗測定	〃
原田 修治	新潟大学工学部 教 授	低温下における金属中の水素の量子効果	久保田
荒木 秀明	長岡工業高等専門学校 助 手	〃	久保田
伊東 裕	名古屋大学工学研究科 助教授	擬一次元伝導体DMET塩の強磁場電子状態の研究	長 田
村山 茂幸	室蘭工業大学工学部 教 授	強相関型セリウム化合物の量子相転移と磁性	上 床
雨海 有佑	室蘭工業大学工学研究科 博士課程	〃	〃
堀井 剛志	室蘭工業大学工学研究科 修士課程	〃	〃
谷口 弘三	埼玉大学理学部 助教授	キュービックアンビルプレスを用いた <sup>11</sup> B型BEDSe-TTF系有機伝導体の研究	〃
片山 和弘	埼玉大学理工学研究科 修士課程	〃	〃
才賀 裕太	埼玉大学理工学研究科 博士課程	YbMn2Ge2の高圧力下熱膨張測定	〃
梅原 出	横浜国立大学工学研究院 助教授	Ce2RhSi3の断熱法による高圧下比熱測定	〃
富岡 史明	横浜国立大学工学府 博士課程	〃	〃
石川 文洋	新潟大学自然科学研究科 助 手	Pr2Ba4Cu7O15- の低温における超伝導	〃
中島 美帆	信州大学理学部 助教授	反転対称性のないセリウム化合物の量子臨界点付近の物性	〃
前野 悦輝	京都大学国際融合創造センター 教 授	三角格子反強磁性体における圧力効果	〃
小沼 圭介	京都大学理学研究科 修士課程	〃	〃
前野 悦輝	京都大学国際融合創造センター 教 授	Feを含む反強磁性体における圧力効果	〃
久我 健太郎	京都大学理学研究科 修士課程	〃	〃
摂待 力生	大阪大学理学研究科 助教授	Ce2PdGe6の電子状態の圧力効果	〃
奥田 悠介	大阪大学理学研究科 博士課程	〃	〃
稲田 佳彦	岡山大学教育学部 助教授	スティック式冷凍機を用いた極低温磁気測定	〃
渡部 陽平	岡山大学教育学研究科 修士課程	〃	〃
高畠 敏郎	広島大学先端物質科学研究科 教 授	遍歴電子メタ磁性体MnFe(P,Ge)及びMnFe(P,As)の圧力効果	〃

藪田 久人	広島大学先端物質科学研究科 博士課程	遍歴電子メタ磁性体MnFe(P,Ge)及びMnFe(P,As)の圧力効果	上床
繁岡 透	山口大学理学部 教授	ErCu <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> 単結晶の磁化過程とその圧力効果	〃
田中 満	山口大学理工学研究科 修士課程	〃	〃
繁岡 透	山口大学理学部 教授	TbCu <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> の磁気転移とその圧力効果	〃
麻生 由紀	山口大学理工学研究科 修士課程	〃	〃
岡山 泰	佐賀大学理学部 助教授	小数キャリア系CeSbの高圧下(P>8Gpa)における電気・磁気特性と構造相転移との相関	〃
江木 孝幸	佐賀大学工学系研究科 修士課程	〃	〃
廣井 政彦	鹿児島大学理学部 助教授	ホイスラー型合金Ru <sub>2</sub> -xFexCrSiの圧力効果	〃
六角 継美	鹿児島大学理工学研究科 修士課程	〃	〃
矢ヶ崎 克馬	琉球大学理学部 教授	希土類金属間化合物RCo <sub>2</sub> 系の輸送特性への圧力効果	〃
仲間 隆男	琉球大学理学部 教授	〃	〃
高江洲 義尚	琉球大学理工学研究科 博士課程	〃	〃
竹田 政貴	琉球大学理工学研究科 修士課程	〃	〃
村田 恵三	大阪市立大学理学研究科 教授	8GPaを超える超高压下での磁場下での有機伝導体の物性	〃
安塚 周磨	大阪市立大学理学研究科 学振特別研究員	〃	〃
藤本 勉	大阪市立大学理学研究科 博士課程	〃	〃
中野 智仁	早稲田大学工学部 客員研究員	秩序相を示すIr酸化物に対する圧力下における輸送現象測定	〃
三浦 康弘	桐蔭横浜大学工学研究科 助教授	導電性ラングミュア・プロジェクト膜の高圧下の電氣的性質	〃
松井 春樹	桐蔭横浜大学工学研究科 修士課程	〃	〃
松田 達磨	日本原子力研究開発機構先端基礎研究センター 研究員	新規なアクチノイド化合物の創成とエキゾチック磁性・超伝導の探索	〃
池田 修悟	日本原子力研究開発機構先端基礎研究センター 博士研究員	〃	〃
池田 修悟	日本原子力研究開発機構先端基礎研究センター 博士研究員	ウランカルコゲナイド化合物における電子状態の圧力効果	〃
松田 達磨	日本原子力研究開発機構先端基礎研究センター 研究員	〃	〃
芳賀 芳範	日本原子力研究開発機構先端基礎研究センター 研究員	〃	〃
尾鍋 研太郎	東京大学新領域創成科学研究科 教授	希薄窒化物半導体混晶薄膜及びヘテロ構造の作製と構造評価	高橋 (敏)
中島 史博	東京大学新領域創成科学研究科 博士課程	〃	〃
窪谷 茂幸	東京大学新領域創成科学研究科 博士課程	〃	〃
テイユ クァン トゥ	東京大学新領域創成科学研究科 修士課程	〃	〃
片山 竜二	東京大学新領域創成科学研究科 助手	立法晶窒化物半導体混晶及びヘテロ構造の作製と構造評価	〃
小牧 弘典	東京大学新領域創成科学研究科 博士課程(研究生)	〃	〃

中村 照幸	東京大学新領域創成科学研究科 博士課程	立法晶窒化物半導体混晶及びヘテロ構造の作製と構造評価	高橋 (敏)
河野 雅俊	東京大学新領域創成科学研究科 修士課程	"	"
矢口 裕之	埼玉大学工学部 助教授	窒素原子層ドーピング半導体の発光特性に関する研究	秋山
遠藤 雄太	埼玉大学理工学研究科 修士課程	"	"
石井 晃	鳥取大学工学部 助教授	GaAs (110) 結晶成長の第一原理計算と動的モンテカルロシミュレーション	"
小柴 俊	香川大学工学部 教授	窒素を含むMBE成長化合物半導体超短周期超格子構造の光学特性の評価	"
藤井 健輔	香川大学工学研究科 博士課程	"	"
大野 真也	横浜国立大学工学研究院 助手	低温電子線励起酸化によるシリコン表面上の極薄酸化膜成長過程の電子分光測定	柿崎
田中正俊	横浜国立大学工学研究院 教授	"	"
首藤 健一	横浜国立大学工学研究院 助教授	"	"
九鬼 隆良	横浜国立大学工学研究府 修士課程	"	"
神藤 欣一	東京工業大学総合理工学研究科 助手	モンテカルロ法による合金の相変態、相安定性の研究と新物質の探索	高山
大野 隆	徳島大学工学部 教授	規則格子RbMn <sub>2</sub> O <sub>6</sub> のNMRによる研究	上田 (寛)
原田 健自	京都大学情報学研究科 助手	低次元量子スピン系の量子相転移に対する数値的研究	川島
野崎 龍介	北海道大学理学研究科 助教授	過冷却ポリオール のnearly constant dielectric loss	山室
蓑口 あゆみ	北海道大学ベンチャー・ビジネス・ラボラトリー 学術研究員	"	"
外川 一	北海道大学理学研究科 修士課程	"	"
蓑口 あゆみ	北海道大学ベンチャー・ビジネス・ラボラトリー 学術研究員	熱容量測定から見た過冷却ポリオールのガラス転移	"
加藤 美保子	北海道大学理学研究科 修士課程	"	"

## 物質合成・評価設備Pクラス

氏名	所属	研究題目	関係所員
稲辺 保	北海道大学理学研究科 教授	分子性伝導体における強相関効果の研究	田島
Yu, Derrick, E.	北海道大学理学研究科 博士課程	"	"
石川 学	北海道大学 博士課程	"	"
松下 能孝	東京大学理学系研究科 技術補佐員	フラックス法を用いた重い電子系化合物LiV <sub>2</sub> O <sub>4</sub> 単結晶育成とその評価	上田 (寛)
陰山 洋	京都大学理学研究科 助教授	二次元正方格子磁性化合物群の化学評価と単結晶育成	"
大場 紀章	京都大学理学研究科 博士課程	"	"
安田 淳	京都大学理学研究科 修士課程	"	"
中山 則昭	山口大学工学部 教授	強相関系遷移金属酸化物の透過電子顕微鏡法による研究	"

佐藤 啓	山口大学理工学研究科 修士課程	強相関系遷移金属酸化物の透過電子顕微鏡法による研究	上田 (寛)
松平 和之	九州工業大学工学部 助手	パイロクロア型希土類酸化物の単結晶育成と磁気フラストレーションの研究	廣井

## 物質合成・評価設備 G クラス

氏名	所属	研究題目	関係所員
木村 薫	東京大学新領域創成科学研究科 教授	ボロン系およびアルミ系正 2 0 面体クラスター固体の電子物性に関する研究	物質合成室 化学分析室 電子顕微鏡室 電磁気測定室
兵藤 宏	東京大学新領域創成科学研究科 修士課程	"	化学分析室 電磁気測定室
佐藤 博樹	大阪大学理学研究科 助教授	精密物性測定のためのオリビン大型単結晶の育成	物質合成室
熊取谷 瑞穂	大阪大学理学研究科 修士課程	"	"
金澤 英樹	京都大学人間・環境学研究科 博士課程	ケイ酸塩単結晶の合成	"
横道 治男	富山県立大学助教授	電気化学的手法により強磁場中で合成されたナノカーボンの形状に関する研究	化学分析室 電子顕微鏡室
武田 博明	奈良先端科学技術大学院大学 助手	高温対応圧電単結晶材料Al置換La3Nb0.5Ga5.5O14の構造解析	X線測定室
寺嶋 和夫	東京大学新領域創成科学研究科 助教授	超臨界流体Co2における非平衡プラズマの材料合成プロセスへの応用	電子顕微鏡室
久保 裕丈	東京大学新領域創成科学研究科 修士課程	"	"
筈 居 高明	東京大学新領域創成科学研究科 博士課程	超臨界Co2雰囲気において発生させた非平衡プラズマを用いた金属薄膜堆積への応用	"
片山 竜二	東京大学新領域創成科学研究科 助手	収束イオンビーム加工機を用いた窒化物半導体フォトニックヘテロ構造の作製と光物性応用	"
和泉 充	東京海洋大学海洋工学部 教授	非超電導ナノ粒子を添加した熔融成長バルク超電流体の構造組織の研究	"
徐 彩宣	東京海洋大学海洋科学技術研究科 博士課程	"	"
河野 紀雄	千葉工業大学工学部 教授	Mg-3%Al-1%Zn合金の超微細粒組織の観察	"
佐々木 正則	千葉工業大学工学部 修士課程	"	"
緒方 啓典	法政大学工学部 助教授	新規ナノマテリアルの合成と構造評価	"
齋藤 哲治	千葉工業大学工学部 教授	高性能希土類磁性材料の構造解析	電子顕微鏡室 電磁気測定室
藤森 淳	東京大学新領域創成科学研究科 教授	光電子分光及び軟X線磁気円二色性を用いた磁性半導体の研究	電磁気測定室
廣井 政彦	鹿児島大学理学部 助教授	ホイスラー型合金の磁性と伝導の研究	"
小関 健介	鹿児島大学理工学研究科 修士課程	"	"
吉田 喜孝	いわき明星大学理工学部 教授	カーボンナノチューブに内包された金属炭化物の超伝導に関する研究	"
秋津 貴城	慶應義塾大学理工学部 助手	機能性遷移金属錯体の磁気物性	"
原田 祥久	産業技術総合研究所先進製造プロセス研究部門 研究員	融液成長複合材料の高温腐食特性に及ぼす水蒸気吸湿の影響	光学測定室

## 長期留学研究員

氏名	所属	研究題目	関係所員
森中直紀	東邦大学理学研究科 修士課程	新規有機伝導体における圧力下の輸送現象	森

## 短期留学研究員

氏名	所属	研究題目	関係所員
堀井剛志	室蘭工業大学工学研究科 修士課程	重い電子系化合物CeRu <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> および元素置換系における量子相転移と磁性	上床



# 平成 18 年度前期 スーパーコンピュータ共同利用採択課題一覧

所 属	代 表 者	タ イ ト ル
産業技術総合研究所 主任研究員	灘 浩 樹	不凍タンパク質による水の結晶化抑制力イネティクスに関する計算機シミュレーション研究
お茶の水女子大学理学部物理学科 教 授	小 林 功 佳	ナノスケールでの表面伝導の理論的研究
長岡技術科学大学工学部 助教授	北 谷 英 嗣	スピングラスの局所エネルギー分布関数
東北大学金属材料研究所 助教授	遠 山 貴 己	モット絶縁体の光学応答
東北大学金属材料研究所 教 授	前 川 禎 通	遷移金属酸化物の励起スペクトル
大阪大学大学院理学研究科 教 授	小 川 哲 生	電子-正孔系での励起子Mott転移と量子対凝縮
茨城大学工学部 助教授	篠 嶋 妥	極細配線における粒成長の計算機実験
東北大学大学院理学研究科 助 手	横 山 寿 敏	最適化変分モンテカルロ法によるハーフフィリング系の研究
東京大学理学系研究科 助 手	柳 瀬 陽 一	強相関電子系における異方的超伝導の理論的研究
富山大学工学部 助 手	三 井 隆 志	ナノリンク分子の電子構造と輸送現象
上智大学理工学部 教 授	大 槻 東 巳	Chalker-Coddington模型の臨界指数の高精度評価
岐阜大学工学部 助教授	寺 尾 貴 道	荷電ソフトマテリアル系におけるナノ構造形成に関する研究
東京電機大学理工学部 助教授	小 畑 修 二	複雑系材料の電子構造計算
千葉大学理学部 助教授	太 田 幸 則	低次元強相関電子模型に対する新型数値計算手法の開発
千葉大学理学部物理学科 教 授	中 山 隆 史	垂直分極をもつ半導体表面からの光学応答スペクトル
千葉大学理学部物理学科 教 授	中 山 隆 史	電荷を帯びた半導体表面における原子/分子拡散
産業技術総合研究所ナノテクノロジー研究部門 研究員	小 林 伸 彦	ナノ構造の量子伝導の第一原理計算
北海道大学大学院工学研究科 助教授	矢久保 考 介	金属-絶縁体転移点における異常局在状態と臨界準位統計
島根大学教育学部 助教授	川 口 高 明	超伝導ネットワークにおける動的相転移
理化学研究所中央研究所 前任研究員	飯 高 敏 晃	第一原理計算による地球惑星科学
横浜市立大学 教 授	岡 田 勇	カーボンナノチューブの構造欠陥についての分子動力学計算
北海道大学理学研究科物理学専攻 COE 学術研究員	能 川 知 昭	ランダム磁場XYモデルの非平衡緩和ダイナミクス
京都大学大学院情報学研究科 助 手	原 田 健 自	四重極相互作用を持つ量子スピンモデルにおける量子パーコレーション
神戸大学理学部 教 授	播 磨 尚 朝	FLAPW法によるf電子系の電子構造の研究
大阪大学理学研究科 教 授	川 村 光	地震の統計モデルの数値シミュレーション

物質・材料研究機構 計算材料科学研究センター 主任研究員	西野正理	スピントロニクスオーバー化合物における光誘起相転移の機構解明
東京工業大学大学院理工学研究科 物性物理学専攻 助教授	押川正毅	量子スピン鎖の高温極限におけるダイナミクス-- スピン拡散は存在するか --
物質・材料研究機構 主任研究員	館山佳尚	グランドカノニカル第一原理分子動力学法による溶液中の酸化還元反応の反応自由エネルギー計算
東京大学総合文化研究科 助教授	加藤雄介	柱状欠陥の下での渦糸状態
首都大学東京理学研究科物理学専攻 教授	酒井治	動的平均場法によるCe化合物のバンド計算
東京大学物性研究所 助手	藤井達也	量子ドットにおける非平衡状態での近藤効果の理論
広島大学大学院先端物質科学研究科 助手	田中新	遷移金属化合物における軌道、スピン、電荷秩序と共鳴軟X線散乱
京都大学基礎物理学研究所 教授	常次宏一	フラストレートした強相関電子系の数値的研究
名古屋工業大学 助手	礮部雅晴	極限環境下での不可逆過程の分子動力学法開発と大規模シミュレーション
東京工業大学大学院理工学研究科物性物理学専攻 教授	斎藤晋	圧力下の炭素ナノ構造体の安定性と物性
大阪市立大学工学部応用物理学学科 助教授	寺井章	鎖間相互作用のある系におけるスピン・パイエルズ転移
静岡大学理学部 助教授	溜淵継博	2次元ランダム・イジング系における厳密数値計算
山形大学地域教育文化学部 教授	野々山信二	金属表面上の微小磁性体における磁気励起
東京大学物性研究所 助教授	甲元真人	Gap statistics によるスピンホール効果の研究
日本原子力研究所放射光科学研究センター 主任研究員	坂井徹	ナノ磁性体の量子ダイナミクス
福井工業大学機械工学科 教授	利根川孝	空間構造をもつ次元量子スピン系の数値的研究
埼玉大学理学部物理学 教授	飛田和男	低次元磁性体における量子効果による新奇な磁気秩序の数値的研究
岩手大学工学部 助教授	西館数芽	第一原理電子構造計算によるナノ二次電池のデザイン
東京大学大学院工学系研究科 教授	藤原毅夫	複合手法による第一原理電子構造計算の拡張
大阪大学産業科学研究所 助教授	森川良忠	第一原理分子動力学法による固液界面、有機-金属界面および触媒反応過程の研究
京都工芸繊維大学 教授	高河原俊秀	ナノ構造における電子・核スピンドイナミクスの理論的研究
三重大学工学部 助手	秋山亨	化合物半導体ナノ構造に関する計算物理学的研究
金沢大学理学部計算科学科 教授	斎藤峯雄	ナノ物質の構造と安定性
鳥取大学工学部応用数理工学科 助教授	石井晃	第一原理計算によるカーボンナノチューブを土台としたナノ構造自律形成の研究
大阪大学大学院工学研究科精密科学専攻 教授	広瀬喜久治	第一原理に基づくナノ構造体の電子輸送特性予測シミュレーションプログラムの開発
筑波大学物理学系 助教授	白石賢二	第一原理量子論によるナノスケール界面の研究
奈良県立医科大学医学部物理学 助教授	平井國友	層状人工格子界面の電子状態と近接効果
東京大学大学院総合文化研究科 助教授	福島孝治	拡張アンサンブル法を活用した相転移の研究
名古屋大学情報科学研究科複雑系科学専攻 多自由度システム情報論講座 助手	渡辺宙志	相転移を伴う気液二相界面の動力学の研究
青山学院大学理工学部物理・数理学科 COE研究支援者	安田千寿	スピンパイエルズ系における乱れの効果

東京工業大学大学院総合理工学研究科 助 手	神 藤 欣 一	第一原理計算による合金の相変態の研究と新物質の探索
日本原子力研究開発機構 研究主幹	堀 田 貴 嗣	$\delta$ -PuおよびPu化合物の磁性と超伝導の研究
三重大学工学部物理工学科 助教授	中 村 浩 次	表面・界面におけるノンコリニア磁性の第一原理計算
東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 助教授	初 貝 安 弘	多体問題におけるトポロジカル秩序相ならびに幾何学的位相の数値的研究
大阪大学大学院工学研究科電気工学専攻 特任助手	川 原 実	フラックス法を用いたバルク 族窒化物単結晶育成における、フラックス成分の効果の解明
青山学院大学理工学部 教 授	松 川 宏	摩擦の物理
お茶の水女子大学理学部物理学科 非常勤講師	立 川 崇 之	長距離相互作用系における平衡・準平衡分布と緩和過程
広島大学大学院先端物質科学研究科 教 授	小 口 多美夫	HiLAPWコードによる凝縮系の第一原理計算
兵庫県立大学大学院物質理学研究科 助 手	中 野 博 生	強相関電子系の厳密対角化法による理論的研究
防衛大学校応用科学群応用物理学科 助 手	萩 田 克 美	2次元極小角散乱データ用に拡張されたリバースモンテカルロ法の開発
秋田大学工学資源学部機械工学科 講 師	足 立 高 弘	微細加工を施した平板を流れる薄膜流の熱輸送特性
東京大学物性研究所 産学官連携研究員	松 下 勝 義	格子上的ナノ双極子系における磁氣的性質の研究
電気通信大学電気通信学部 助教授	尾 関 之 康	非平衡緩和法の応用：クロック・ゲージグラスを中心にして
慶應義塾大学理工学部 専任講師	山 内 淳	半導体薄膜の電子輸送特性に関する第一原理研究
金沢大学自然科学研究科 講 師	小 田 竜 樹	磁性クラスターを内包したカーボンナノチューブの第一原理分子動力学
大阪大学大学院工学研究科応用物理学専攻 教 授	川 上 則 雄	スピンおよび軌道の自由度が織り成すナノスケール電子系の輸送特性
東京大学大学院理学系研究科物理学専攻 教 授	青 木 秀 夫	多軌道相関電子系の動的平均場による研究
東京大学生産技術研究所 助教授	羽田野 直 道	相互作用のあるメソスコピック系の電気伝導
東京大学生産技術研究所 産学官連携研究員	藤 本 義 隆	ナノスケール構造物の第一原理電子状態計算と電子輸送特性計算
筑波大学数理物質科学研究科 教 授	押 山 淳	ハード及びソフトナノ物質の原子構造と電子物性
大阪大学大学院工学研究科応用物理学専攻 助教授	菅 誠一郎	軌道自由度及び幾何学的フラストレーションを持つ強相関電子系の解析
東京大学分子細胞生物研究所 助教授	北 尾 彰 朗	分子シミュレーションによる生体高分子の中性子散乱実験データ解析
早稲田大学大学院理工系研究科ナノ理工学専攻 教 授	塚 田 捷	第一原理電子状態によるナノ構造の物性予測
産業技術総合研究所計算科学研究部門 研究グループ長	石 橋 章 司	分子性固体の第一原理電子構造計算
東京大学大学院工学系研究科マテリアル工学 教 授	渡 邊 聡	走査プローブナノ計測に関する理論解析
東京理科大学理学部 教 授	渡 辺 一 之	ナノスケール構造の非平衡電子過程の第一原理計算
電気通信大学 助教授	黒 木 和 彦	有機物質におけるオフ・サイト相互作用とフェルミ面ネスティングによる電荷揺らぎに関する研究
物質・材料研究機構 ナノマテリアル研究所 特別研究員	塚 本 茂	第一原理計算による有限電場中にあるC <sub>60</sub> 薄膜の物性
大阪大学理学研究科 教 授	川 村 光	フラストレート磁性とカイラリティ秩序
東京大学理学系研究科物理学専攻 教 授	宮 下 精 二	動的な環境のもとでの秩序形態とそのダイナミクス

愛媛大学理学部物質理学科 教授	淵 崎 員 弘	非平衡状態での遅い緩和過程
東北大学大学院工学研究科 助手	佐々木 志 剛	数値的実空間繰り込み群法による、XYスピングラスとハイゼンベルクススピングラスの研究
東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 助手	湯 川 諭	Lennard-Jones粒子における相転移を伴う非平衡現象についての研究
東京大学工学系研究科総合研究機構 助手	沖 津 康 平	新しいX線多波動力学理論による結晶内波動場の計算機シミュレーション
熊本大学理学部 助教授	下 條 冬 樹	ペロブスカイト型酸化物表面上における分子吸着の第一原理シミュレーション
東京大学 大学院理学系研究科 助手	赤 木 和 人	Si(001)面における有機分子の化学吸着プロセスの温度依存性
名古屋大学大学院工学研究科 助教授	田 仲 由喜夫	異方的超伝導体の理論 発現機構と量子現象の理論
東北大学金属材料研究所 講師(研究機関研究員)	本 郷 研 太	フント則の解釈を目指したFe原子基底状態の量子拡散モンテカルロ計算
東京大学物性研究所 教授	今 田 正 俊	強相関物質の第一原理計算と電子状態の解明
産業技術総合研究所 研究員	橋 本 保	表面及び強誘電体の第一原理分子動力学計算
筑波大学計算科学研究センター 教授	矢 花 一 浩	フェムト秒多電子ダイナミクスの第一原理計算
慶應義塾大学理工学部 教授	太 田 英 二	第一原理計算によるSi結晶中Mnへの2次元歪みの影響
東京都立大学大学院理学研究科 教授	岡 部 豊	新しいモンテカルロアルゴリズムのスピ系への応用
東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 講師	藤 堂 眞 治	量子格子模型のためのシミュレーションフレームワークの開発とランダムスピ系への応用
東京大学物性研究所 助教授	川 島 直 輝	対角フラストレーション系の量子モンテカルロシミュレーション
京都大学大学院理学研究科 助教授	池 田 隆 介	超伝導渦糸相図への線状欠陥の効果の数値的研究
東京大学大学院新領域創成科学研究科 助教授	佐々木 岳 彦	第一原理計算とLEED動力学解析による金属吸着系の解析
産業技術総合研究所 研究グループ長	柳 沢 孝	量子モンテカルロ法と電子状態計算による多体電子系の研究
東京大学大学院理学系研究科物理学専攻 助教授	常 行 真 司	波動関数理論に基づく固体の第一原理電子状態計算
慶應義塾大学理工学部 教授	佐 藤 徹 哉	低次元Pdにおける強磁性の発現
大阪大学大学院基礎工学研究科 助教授	草 部 浩 一	ナノ・デバイスのための材料とデバイスの理論設計
東京大学物性研究所 助教授	加 藤 岳 生	分子性導体の示す有限温度物性に対する理論的研究
大阪大学産業科学研究所 教授	吉 田 博	第一原理計算による半導体価電子制御とその物理
東京大学物性研究所 教授	高 山 一	スピングラスと磁気双極子系に関する数値実験
東京大学物性研究所 助教授	甲 元 真 人	3次元系における柔らかいゲル化過程の数値計算
東京大学物性研究所 助手	富 田 裕 介	双極子格子系の臨界現象
筑波大学数理解物質科学研究科 助教授	ボエロ マウロ	第一原理MDによる生体触媒反応機構の解析

# 平成 18 年度 中性子回折装置共同利用採択課題一覧

所 属	研究代表者	課 題 課 題 名	申請装置
東京大学物性研究所	佐 藤 卓	GPTAS (汎用3軸型中性子分光器) IRT課題	4G:GPTAS
京都大学化学研究所	金 谷 利 治	高分子薄膜の運動の異方性と不均一性	4G:GPTAS
九州大学大学院理学研究院	武 田 信 一	熔融CuBr及び混合系の局所構造	4G:GPTAS
山形大学理学部	亀 田 恭 男	35Cl/37Cl同位体置換法中性子回折によるイオン交換樹脂内における塩化物イオンの局所構造解析	4G:GPTAS
北海道大学大学院理学研究科	網 塚 浩	強相関5f電子系化合物の圧力効果	4G:GPTAS
大阪大学大学院理学研究科	田 畑 吉 計	重い電子反強磁性体CeRh2Si2の一軸応力、静水圧印可による量子相転移	4G:GPTAS
大阪大学大学院理学研究科	田 畑 吉 計	重い電子系Ce(Ru1-xRhx)2(Si1-yGe)yにおける量子臨界領域の磁気秩序の研究	4G:GPTAS
東京大学物性研究所	大 原 泰 明	Cu1-xZnxCr2Se4の磁気揺らぎ	4G:GPTAS
東京大学物性研究所	大 原 泰 明	Y2-xBixRu2O7の中性子散乱	4G:GPTAS
東京大学物性研究所	大 原 泰 明	Nd0.5+xSr0.5-xMn1-yCryO3の中性子散乱	4G:GPTAS
名古屋大学大学院理学研究科	佐 藤 憲 昭	磁性超伝導体CeRhIn5および関連物質における磁性の研究	4G:GPTAS
お茶の水女子大学理学部物理学科	古 川 はづき	p波超伝導Sr2RuO4の超伝導転移温度以下のスピン揺動	4G:GPTAS
お茶の水女子大学理学部物理学科	古 川 はづき	新奇超伝導CeCoIn5における電子スピンの役割解明	4G:GPTAS
高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所	久保田 正 人	Nd2-xSrxMnO4のスピン波	4G:GPTAS
東京大学物性研究所	吉 沢 英 樹	2次元Ni酸化物 Nd2-xSrx(Ni1-yCuy)O4 系のストライプ秩序と金属絶縁体転移	4G:GPTAS
東京大学物性研究所	吉 沢 英 樹	2次元コバルト酸化物 Pr2-xCaxCoO4 系の電荷秩序と磁気秩序	4G:GPTAS
茨城大学理学部	横 山 淳	Ce115系化合物における量子臨界現象と磁性	4G:GPTAS
東京大学物性研究所	阿 曾 尚 文	圧力誘起超伝導体CeRhSi3の磁気構造と磁気励起	4G:GPTAS
東京都立大学大学院理学研究科	門 脇 広 明	反強磁性量子相転移の研究	4G:GPTAS
東京理科大学理学部物理学科	満 田 節 生	フラストレート系擬Ising磁性体CuFeO2の構造相転移と磁気励起	4G:GPTAS
東京理科大学理学部物理学科	満 田 節 生	フラストレートした磁性体CuFeO2の磁場誘起強誘電相(OVS状態)の探査	4G:GPTAS
大阪大学大学院理学研究科	田 畑 吉 計	希土類化合物(La1-xErx)Ni2Ge2の異方的磁気相転移	4G:GPTAS
東京理科大学理工学部物理学科	室 裕 司	多段階メタ磁性転移を示すCeIr3Si2の磁気構造解析	4G:GPTAS
東京大学物性研究所	鬼 丸 孝 博	準周期磁性体Zn-Mg-(Y,R) (R = Ce, Pr, Yb)の中性子散乱	4G:GPTAS
東京大学物性研究所	鬼 丸 孝 博	Pr1-xLaxPb3(x<0.05)における磁場誘起秩序相の秩序変数	4G:GPTAS

東京大学物性研究所	榊原俊郎	反強四極子秩序物質PrPb3の変調四極子構造	4G:GPTAS
東京大学物性研究所	佐藤卓	三角および六角クラスター分子磁性体の磁気相関と励起	4G:GPTAS
東京大学物性研究所	佐藤卓	Zn-Fe-Sc-RE (RE: 希土類元素)正20面体準結晶の磁気構造と励起	4G:GPTAS
東京理科大学理工学部物理学科	元屋清一郎	ランダム磁性体における異なる磁気相関・磁気励起の共存とそれらの時間発展	4G:GPTAS
お茶の水女子大学理学部物理学科	永田貴志	RENi2B2Cの磁性と超伝導	4G:GPTAS
東京都立大学大学院理学研究科	門脇広明	カーボンナノチューブに吸着された分子の構造	4G:GPTAS
東京大学物性研究所	西正和	熱電材料BiSb系、BiTe系大型単結晶のフォノン分散関係	4G:GPTAS
島根大学教育学部自然環境教育講座	重松宏武	Ba-Ti-O系強誘電体の構造相転移とフォノン分散	4G:GPTAS
島根大学教育学部自然環境教育講座	重松宏武	硫安系酸化物誘電体の仮想相転移に寄与するソフトモードの振る舞い	4G:GPTAS
東京大学物性研究所	吉沢英樹	CaAlSiのフォノンと超伝導	4G:GPTAS
東京大学物性研究所	廣田和馬	PONTA (高性能偏極中性子散乱装置) IRT課題	5G:PONTA
東京大学物性研究所	上床美也	中性子散乱実験用高圧力発生装置の開発および量子臨界現象の観察	5G:PONTA
東北大学多元物質科学研究所	有馬孝尚	TbMnO3のスピンの構造と強誘電分極の相関	5G:PONTA
北海道大学大学院理学研究科	網塚浩	Pr3Pd20Ge6における結晶場励起と磁場誘起相転移	5G:PONTA
東北大学金属材料研究所	藤田全基	磁気モーメントの大きな元素による置換効果を利用したLSCO系における磁気相関の起源の研究	5G:PONTA
青山学院大学理工学部物理数理学科	秋光純	CuB2O4におけるスクリュウ磁性体の単一磁区生成	5G:PONTA
青山学院大学理工学部物理数理学科	秋光純	Lu2Cr2O7の軌道整列の直接観測	5G:PONTA
青山学院大学理工学部物理数理学科	秋光純	Sr0.75Y0.25CoO3-の軌道整列の直接観測	5G:PONTA
名古屋大学大学院理学研究科	佐藤正俊	磁気秩序相を持つNa0.5CoO2のスピンの励起	5G:PONTA
名古屋大学大学院理学研究科	佐藤憲昭	UGe2およびURhGeにおける強磁性と超伝導の共存状態の研究	5G:PONTA
東京都立大学大学院理学研究科	桑原慶太郎	URu2Si2の隠れた秩序	5G:PONTA
茨城大学理学部	横山淳	Ce115系化合物における量子臨界現象と磁性	5G:PONTA
高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所	伊藤晋一	ハロゲン架橋型ニッケル錯体の磁気励起	5G:PONTA
高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所	富安啓輔	CoCr2O4のスピンの励起	5G:PONTA
東京大学物性研究所	西正和	二次元直交ダイマー系Nd2BaZnO5の研究	5G:PONTA
東京大学物性研究所	西正和	二次元三角格子反強磁性体の磁性	5G:PONTA
東京大学物性研究所	松浦直人	Bi2212微小結晶を用いた高温超伝導に共通する磁気励起の探索II	5G:PONTA
青山学院大学理工学部物理数理学科	秋光純	CrB2の磁気励起	5G:PONTA
名古屋大学大学院理学研究科	佐藤正俊	Co3V2O8における逐次相転移とmultiferroic相	5G:PONTA
東京大学物性研究所	佐藤卓	正方晶希土類化合物CeB2C2の磁気構造および結晶場分裂の研究	5G:PONTA

筑波大学数理物質科学研究科	高橋 美和子	3元合金CuMnPt6における動的磁気構造	5G:PONTA
東京理科大学理工学部物理学科	元屋 清一郎	ランダム磁性体における異なる磁気相関・磁気励起の共存とそれらの時間発展	5G:PONTA
早稲田大学理工学術院応用物理	角田 頼彦	FeNiインバー合金の垂直磁気成分	5G:PONTA
横浜市立大学国際総合科学研究科	益田 隆嗣	酸素ガス吸着磁性体の中性子散乱	5G:PONTA
横浜市立大学国際総合科学研究科	益田 隆嗣	2次元反強磁性体Ba <sub>2</sub> MnGe <sub>2</sub> O <sub>7</sub> の磁性	5G:PONTA
横浜市立大学国際総合科学研究科	益田 隆嗣	Cu <sub>2</sub> (Fe <sub>1-x</sub> Sc <sub>x</sub> ) <sub>2</sub> Ge <sub>4</sub> O <sub>13</sub> の異常なCuダイマー励起	5G:PONTA
横浜市立大学国際総合科学研究科	益田 隆嗣	新しいS=1スピン鎖NaV(WO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> の磁気励起	5G:PONTA
京都大学大学院理学研究科	陰山 洋	S=1/2正方格子磁性体(CuX)LaNb <sub>2</sub> O <sub>7</sub> (X=Cl,Br)の磁性	5G:PONTA
東京大学物性研究所	廣田 和馬	パイロクロア酸化物超伝導体AOs <sub>2</sub> O <sub>6</sub> (A=K, Rb, Cs) のラトリングフォノン	5G:PONTA
秋田大学教育文化学部	留野 泉	立方晶PbTiO <sub>3</sub> のフォノン分散	5G:PONTA
島根大学総合理工学部	大庭 卓也	二次変態の挙動を示すマルテンサイトTiPdFeのフォノン分散関係	5G:PONTA
東京大学物性研究所	松浦 直人	リラクサー-PMN-34%PTにおける散漫散乱の研究	5G:PONTA
東京大学物性研究所	松浦 直人	消衰効果を利用したリラクサー-PMN-xPTにおける局所歪みの研究	5G:PONTA
高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所	鹿内 文仁	プロトン伝導体K <sub>3</sub> H(SeO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> のフォノン測定	5G:PONTA
東北大学大学院理学研究科	岩佐 和晃	TOPAN (東北大学偏極中性子分光器) IRT課題	6G:TOPAN
東北大学金属材料研究所	平賀 晴弘	銅酸化物超伝導体のオーバードープ相におけるNi誘起磁気相関の探査	6G:TOPAN
東北大学金属材料研究所	藤田 全基	平坦CuO <sub>2</sub> 面を有する系で調べるLa <sub>2</sub> 14超伝導体の本質的な磁気励起	6G:TOPAN
東北大学金属材料研究所	藤田 全基	電子ドープされたMott絶縁体の磁気基底状態	6G:TOPAN
東北大学金属材料研究所	大山 研司	希土類四極子秩序化合物HoB <sub>2</sub> C <sub>2</sub> でのスピン格子ダイナミクス観測	6G:TOPAN
京都大学大学院人間環境学研究科	小山田 明	Ybモノブニクタイトにおける混成型4極子秩序とその励起状態の研究	6G:TOPAN
埼玉大学理学部	小坂 昌史	液体窒素温度を越える高温で四極子秩序転移を示すYbAl <sub>3</sub> C <sub>3</sub> の結晶場	6G:TOPAN
青山学院大学理工学部物理数理学科	秋光 純	La <sub>2-x</sub> CaxCoO <sub>4</sub> の磁気励起	6G:TOPAN
高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所	古府 麻衣子	アンダードープ領域La <sub>2-x</sub> SrxCuO <sub>4</sub> におけるスピンギャップ状態の変化の観測	6G:TOPAN
東京都立大学大学院理学研究科	桑原 慶太郎	充填スクッテルダイト化合物PrFe <sub>4</sub> Sb <sub>12</sub> の4f電子状態	6G:TOPAN
東北大学大学院理学研究科	岩佐 和晃	重い電子的な異常を示す強磁性体NdFe <sub>4</sub> P <sub>12</sub> とNdOs <sub>4</sub> Sb <sub>12</sub> の磁気励起	6G:TOPAN
東北大学大学院理学研究科	岩佐 和晃	重い電子系PrFe <sub>4</sub> P <sub>12</sub> における磁気励起と4f電子状態	6G:TOPAN
東北大学大学院理学研究科	岩佐 和晃	CeOs <sub>4</sub> Sb <sub>12</sub> における磁場によってエンハンスされる反強磁気秩序相	6G:TOPAN
東北大学多元物質科学研究所	木村 宏之	マルチフェロイックRMn <sub>2</sub> O <sub>5</sub> におけるスピンドイナミクス	6G:TOPAN
東北大学金属材料研究所	平賀 晴弘	遍歴電子反強磁性体Crのスピン密度波に対する不純物効果	6G:TOPAN
東北大学大学院理学研究科	松村 武	DyB <sub>4</sub> における幾何学的フラストレーションと特異な磁気相関	6G:TOPAN

東北大学大学院理学研究科	松村 武	HoB4の磁気相関とスピン格子ダイナミクス	6G:TOPAN
東北大学大学院理学研究科	松岡 英一	RPd <sub>3</sub> S <sub>4</sub> (R:希土類金属)の中性子非弾性散乱	6G:TOPAN
東北大学金属材料研究所	大山 研司	強誘電体LiNbO3での電荷放出と格子振動の関係の解明	6G:TOPAN
東北大学大学院理学研究科	岩佐 和晃	ROs <sub>4</sub> Sb <sub>12</sub> (R = Ce, Pr, Nd) における希土類イオンのラットリング	6G:TOPAN
東京大学物性研究所	阿曾 尚文	HER (高エネルギー分解能3軸分光器) IRT課題	C1-1:HER
東京都立大学理学研究科物理学専攻	門脇 広明	Ce(Ni <sub>1-x</sub> Pd <sub>x</sub> ) <sub>2</sub> Ge <sub>2</sub> の量子臨界点近傍におけるスピン揺らぎ	C1-1:HER
北海道大学大学院理学研究科	網塚 浩	強相関5f電子系化合物の圧力効果	C1-1:HER
北海道大学大学院理学研究科	網塚 浩	Pr <sub>3</sub> Pd <sub>20</sub> Ge <sub>6</sub> における結晶場励起と磁場誘起相転移	C1-1:HER
東北大学金属材料研究所	平賀 晴弘	銅酸化物超伝導体のオーバードープ相におけるNi誘起磁気相関の探査	C1-1:HER
東北大学金属材料研究所	藤田 全基	平坦CuO <sub>2</sub> 面を有する系で調べるLa <sub>2</sub> 14超伝導体の本質的な磁気励起	C1-1:HER
東北大学金属材料研究所	藤田 全基	電子ドープされたMott絶縁体の磁気基底状態	C1-1:HER
東北大学金属材料研究所	藤田 全基	磁気モーメントの大きな元素による置換効果を利用したLSCO系における磁気相関の起源の研究	C1-1:HER
大阪大学大学院理学研究科	田畑 吉計	量子グリフィス相におけるスピンダイナミクス	C1-1:HER
東北大学金属材料研究所	大山 研司	希土類四極子秩序化合物HoB <sub>2</sub> C <sub>2</sub> でのスピン格子ダイナミクス観測	C1-1:HER
東京大学物性研究所	大原 泰明	Cu <sub>1-x</sub> Zn <sub>x</sub> Cr <sub>2</sub> Se <sub>4</sub> の磁気揺らぎ	C1-1:HER
東京大学物性研究所	大原 泰明	Nd <sub>0.5+x</sub> Sr <sub>0.5-x</sub> Mn <sub>1-y</sub> Cr <sub>y</sub> O <sub>3</sub> の中性子散乱	C1-1:HER
首都大学理工学研究科	神木 正史	近藤半導体CeOs <sub>4</sub> Sb <sub>12</sub> における磁気励起	C1-1:HER
京都大学大学院人間環境学研究所	小山田 明	Ybモノプニクタイトにおける混成型4極子秩序とその励起状態の研究	C1-1:HER
埼玉大学理学部	小坂 昌史	液体窒素温度を越える高温で四極子秩序転移を示すYbAl <sub>3</sub> C <sub>3</sub> の結晶場	C1-1:HER
名古屋大学大学院理学研究科	佐藤 憲昭	磁性超伝導体CeRhIn <sub>5</sub> および関連物質における磁性の研究	C1-1:HER
名古屋大学大学院理学研究科	佐藤 憲昭	UGe <sub>2</sub> およびURhGeにおける強磁性と超伝導の共存状態の研究	C1-1:HER
東京都立大学大学院理学研究科	桑原 慶太郎	充填スクッテルダイト化合物PrFe <sub>4</sub> Sb <sub>12</sub> の4f電子状態	C1-1:HER
高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所	久保田 正人	Nd <sub>2-x</sub> Sr <sub>x</sub> MnO <sub>4</sub> のスピン波	C1-1:HER
東北大学大学院理学研究科	岩佐 和晃	重い電子的な異常を示す強磁性体NdFe <sub>4</sub> P <sub>12</sub> とNdOs <sub>4</sub> Sb <sub>12</sub> の磁気励起	C1-1:HER
東北大学大学院理学研究科	岩佐 和晃	重い電子系PrFe <sub>4</sub> P <sub>12</sub> における磁気励起と4f電子状態	C1-1:HER
東京大学物性研究所	阿曾 尚文	圧力誘起超伝導体CeRhSi <sub>3</sub> の磁気構造と磁気励起	C1-1:HER
東京都立大学大学院理学研究科	門脇 広明	反強磁性量子相転移の研究	C1-1:HER
東北大学多元物質科学研究所	木村 宏之	マルチフェロイックRMn <sub>2</sub> O <sub>5</sub> におけるスピンダイナミクス	C1-1:HER
東京理科大学理学部物理学科	満田 節生	フラストレート系擬Ising磁性体CuFeO <sub>2</sub> の構造相転移と磁気励起	C1-1:HER
東北大学金属材料研究所	平賀 晴弘	遍歴電子反強磁性体Crのスピン密度波に対する不純物効果	C1-1:HER



高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所	富安 啓輔	CoCr <sub>2</sub> O <sub>4</sub> のスピン波	C1-1:HER
東京大学物性研究所	西 正和	二次元三角格子反強磁性体の磁性	C1-1:HER
東北大学大学院理学研究科	松村 武	HoB <sub>4</sub> の磁気相関とスピナー格子ダイナミクス	C1-1:HER
東北大学大学院理学研究科	松岡 英一	RPd <sub>3</sub> S <sub>4</sub> (R:希土類金属)の中性子非弾性散乱	C1-1:HER
東京工業大学大学院理工学研究科	小野 俊雄	2次元量子三角格子反強磁性体Cs <sub>2</sub> CuBr <sub>4</sub> -の臨界現象と磁気励起	C1-1:HER
東京大学物性研究所	鬼丸 孝博	準周期磁性体Zn-Mg-(Y,R) (R = Ce, Pr, Yb)の中性子散乱	C1-1:HER
東京大学物性研究所	榊原 俊郎	反強四極子秩序物質PrPb <sub>3</sub> の変調四極子構造	C1-1:HER
東京大学物性研究所	佐藤 卓	Yb <sub>3</sub> Ga <sub>5</sub> O <sub>12</sub> ガーネットのスピン液体状態	C1-1:HER
東京大学物性研究所	佐藤 卓	Ni <sub>4</sub> 磁気クラスターの磁気励起	C1-1:HER
東京大学物性研究所	佐藤 卓	三角および六角クラスター分子磁性体の磁気相関と励起	C1-1:HER
東京大学物性研究所	佐藤 卓	Zn-Fe-Sc-RE (RE: 希土類元素)正20面体準結晶の磁気構造と励起	C1-1:HER
東北大学大学院理学研究科	岩佐 和晃	希土類ボロンクラスター化合物TbB <sub>44</sub> Si <sub>2</sub> における1次元反強磁性揺らぎ	C1-1:HER
横浜市立大学国際総合科学研究科	益田 隆嗣	酸素ガス吸着磁性体の中性子散乱	C1-1:HER
横浜市立大学国際総合科学研究科	益田 隆嗣	2次元反強磁性体Ba <sub>2</sub> MnGe <sub>2</sub> O <sub>7</sub> の磁性	C1-1:HER
横浜市立大学国際総合科学研究科	益田 隆嗣	新しいS=1スピン鎖NaV(WO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> の磁気励起	C1-1:HER
京都大学大学院理学研究科	陰山 洋	S=1/2正方格子スピン液体物質(CuCl)LaNb <sub>2</sub> O <sub>7</sub> の低エネルギー励起	C1-1:HER
京都大学大学院理学研究科	陰山 洋	S=1/2正方格子磁性体(CuX)LaNb <sub>2</sub> O <sub>7</sub> (X=Cl,Br)の磁性	C1-1:HER
東京大学物性研究所	廣田 和馬	パイロクロア酸化物超伝導体AOs <sub>2</sub> O <sub>6</sub> (A=K, Rb, Cs) のラトリングフォノン	C1-1:HER
東北大学金属材料研究所	平賀 晴弘	リラクサーPb(Mg <sub>1/3</sub> Nb <sub>2/3</sub> )O <sub>3</sub> における化学的短距離秩序	C1-1:HER
東京大学物性研究所	松浦 直人	リラクサーPMN-34%PTにおける散漫散乱の研究	C1-1:HER
東京大学物性研究所	松浦 直人	リラクサーPMN-xPTにおける散漫散乱の起源の研究	C1-1:HER
高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所	鹿内 文仁	プロトン伝導体K <sub>3</sub> H(SeO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> のフォノン測定	C1-1:HER
東北大学大学院理学研究科	岩佐 和晃	ROs <sub>4</sub> Sb <sub>12</sub> (R = Ce, Pr, Nd) における希土類イオンのラトリング	C1-1:HER
東京大学物性研究所	柴山 充弘	SANS-U (二次元位置測定小角散乱装置) IRT課題	C1-2:SANS-U
名古屋大学大学院工学研究科	北野 利明	単分散環状ポリオキシメチレンのコンフォメーションに関する研究	C1-2:SANS-U
広島大学総合科学部	武田 隆義	両親媒子分子系複雑液体の膜構造の熱的揺らぎ	C1-2:SANS-U
京都大学化学研究所	渡辺 宏	絡み合い星形高分子の高速流動下での分子内配向分布	C1-2:SANS-U
東京大学物性研究所	長尾 道弘	相対形状因子法による粒子形状の濃度依存性の解析	C1-2:SANS-U
東京大学物性研究所	長尾 道弘	高分子ゲル中のマイクロエマルジョンの構造とダイナミクス	C1-2:SANS-U
京都大学大学院薬学研究科	中野 実	中性子小角散乱による粒子間脂質交換速度の評価	C1-2:SANS-U

お茶の水女子大学理学部物理学科	中谷香織	高分子を内包したマイクロエマルジョンのネマチックゲル転移におけるshear効果	C1-2:SANS-U
お茶の水女子大学理学部物理学科	中谷香織	高分子鎖を閉じ込めたマイクロエマルジョンの形態転移	C1-2:SANS-U
京都大学大学院理学研究科	瀬戸秀紀	リン脂質膜ラメラ構造における異常膨潤	C1-2:SANS-U
京都大学大学院理学研究科	瀬戸秀紀	紐状ミセルの構造形成とダイナミクス	C1-2:SANS-U
京都大学大学院理学研究科	瀬戸秀紀	溶媒効果と濃度揺らぎのカップリングによる新しい秩序構造	C1-2:SANS-U
京都大学化学研究所	西田幸次	高分子のせん断流動場における結晶化過程の観察	C1-2:SANS-U
名古屋大学大学院工学研究科	松下裕秀	層状シリコン化合物から合成したナノシートの構造解析	C1-2:SANS-U
京都大学大学院工学研究科	松岡秀樹	高分子微粒子上に密生したイオン性高分子コロナのナノ構造とその応答性	C1-2:SANS-U
京都大学大学院工学研究科	松岡秀樹	界面不活性イオン性両親媒性高分子ミセルのナノ構造とダイナミクス	C1-2:SANS-U
京都大学大学院工学研究科	松岡秀樹	含スルホン酸ブロックコポリマー膜のナノ構造解析	C1-2:SANS-U
東京大学大学院新領域創成科学研究科	伊藤耕三	環動ゲルの可動性架橋点ダイナミクス	C1-2:SANS-U
東京大学物性研究所	柴山充弘	網目鎖上荷電基の空間配置が異なる弱荷電高分子ゲルの微視的構造解析 ~pH依存性~	C1-2:SANS-U
東京大学物性研究所	柴山充弘	ダイラタンシー挙動を有するナノエマルジョン・高分子混合剤の構造解析	C1-2:SANS-U
東京大学物性研究所	柴山充弘	熱可塑性オレフィン系ポリマーブレンドの相溶性に関する研究3	C1-2:SANS-U
東京大学物性研究所	柴山充弘	天然ゴムの歪み誘起結晶化と不均質性に関する研究	C1-2:SANS-U
東京大学物性研究所	柴山充弘	ナノコンポジット型ハイドロゲルの形成機構の解明	C1-2:SANS-U
東京大学物性研究所	長尾道弘	両親媒性ブロックコポリマー水溶液の圧力誘起相分離	C1-2:SANS-U
高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所	山田悟史	長鎖リン脂質/短鎖リン脂質/水系における単層膜ベシクルの形成メカニズム	C1-2:SANS-U
お茶の水女子大学理学部物理学科	今井正幸	球状ミセルの秩序転移におけるスローダイナミクス	C1-2:SANS-U
お茶の水女子大学理学部物理学科	今井正幸	リン脂質+コレステロール複合膜におけるマイクロドメイン構造のダイナミクス	C1-2:SANS-U
お茶の水女子大学理学部物理学科	今井正幸	ゲスト粒子が誘起する界面活性剤メソ構造の秩序転移	C1-2:SANS-U
名古屋大学大学院工学研究科	高野敦志	カテナン型ポリマーの溶液中におけるコンフォーメーション	C1-2:SANS-U
九州大学大学院総合理工学研究科	高田晃彦	可逆的熱硬化性を有する白金含有低分子ゲル化物の力学物性と構造転移との関係	C1-2:SANS-U
九州大学大学院総合理工学研究科	高橋良彰	両末端にカルボキシル基を有するポリエチレンブチレンとステアリルアミンからなる弾性体の構造のSANSによる研究	C1-2:SANS-U
京都大学化学研究所	金谷利治	高分子ブレンド薄膜のdewetting構造中における相分離構造	C1-2:SANS-U
東京都立大学理学研究科	加藤直	非イオン界面活性剤ラメラ相の流動場誘起構造転移に対する温度効果	C1-2:SANS-U
大阪大学大学院理学研究科	浦川理	2成分高分子混合系の相溶性におよぼす分子間水素結合の効果	C1-2:SANS-U
九州大学大学院理学研究院	安中雅彦	角膜ゲルの病態下における微視的構造の変化に関する研究	C1-2:SANS-U
京都大学原子炉実験所	杉山正明	紫外線照射による水晶体内タンパク質クリスタリンの異常凝集の研究	C1-2:SANS-U
群馬大学工学部	高橋浩	哺乳動物の皮膚角層中に水和短周期ラメラ構造が共通に存在することの検証	C1-2:SANS-U

京都大学原子炉実験所	杉山正明	超臨界流体の臨界揺らぎ構造のリバースモンテカルロ法を適用した中性子小角散乱法による可視化	C1-2:SANS-U
佐賀大学理工学部	高椋利幸	アルコール-水混合溶媒中におけるアミノ酸分子の選択的溶媒和の研究	C1-2:SANS-U
福岡大学理学部	吉田亨次	アルコール-水混合溶媒中におけるb-ラクトグロブリンのダイナミクス	C1-2:SANS-U
青山学院大学理工学部物理数 理学科	秋光純	中性子小角散乱を用いた第二種超伝導体Ca(AlSi)単結晶の磁束状態の研究	C1-2:SANS-U
お茶の水女子大学理学部物理 学科	古川はづき	磁束研究を通じたフェルミ速度とギャップ構造の研究	C1-2:SANS-U
お茶の水女子大学理学部物理 学科	古川はづき	Sr <sub>2</sub> RuO <sub>4</sub> のFFLO相出現の可能性について	C1-2:SANS-U
お茶の水女子大学理学部物理 学科	古川はづき	CeCoIn <sub>5</sub> の磁束状態の観測を通じた新奇超伝導体の電子状態・機構解明研究	C1-2:SANS-U
お茶の水女子大学理学部物理	永田貴志	NaCoO <sub>2</sub> yD <sub>2</sub> Oの強磁性散乱の検証	C1-2:SANS-U
北海道大学大学院工学研究科	金子純一	ULS (極小角散乱装置) IRT課題	C1-3: ULS
東京大学物性研究所	長尾道弘	iNSE (中性子スピンエコー分光器) IRT課題	C2-3-1: NSE
北海道大学電子科学研究所	眞山博幸	特異な2分子膜系: DGI/SDS/D <sub>2</sub> O系における膜曲げ弾性率の測定	C2-3-1:iNSE
広島大学総合科学部	武田隆義	両親媒子分子系複雑液体の膜構造の熱的揺らぎ	C2-3-1:iNSE
東京大学物性研究所	長尾道弘	高分子ゲル中のマイクロエマルションの構造とダイナミクス	C2-3-1:iNSE
お茶の水女子大学理学部物理 学科	中谷香織	高分子鎖を閉じ込めたマイクロエマルションの形態転移	C2-3-1:iNSE
東京都立大学理学研究科	川端庸平	界面活性剤水溶液におけるゲル/液晶転移	C2-3-1:iNSE
京都大学大学院理学研究科	瀬戸秀紀	リン脂質膜ラメラ構造における異常膨潤	C2-3-1:iNSE
京都大学大学院理学研究科	瀬戸秀紀	紐状ミセルの構造形成とダイナミクス	C2-3-1:iNSE
京都大学工学研究科	松岡秀樹	界面不活性イオン性両親媒性高分子ミセルのナノ構造とダイナミクス	C2-3-1:iNSE
東京大学物性研究所	長尾道弘	ポリN-イソプロピルアクリルアミド水溶液の高圧下ダイナミクス	C2-3-1:iNSE
東京大学物性研究所	伊藤耕三	環動ゲルの可動性架橋点ダイナミクス	C2-3-1:iNSE
東京大学物性研究所	柴山充弘	熱可塑性オレフィン系ポリマーブレンドの相溶性に関する研究 <sup>3</sup>	C2-3-1:iNSE
東京大学物性研究所	柴山充弘	中性子スピンエコー法を用いたナノコンポジット型ハイドロゲルの動的性質に関する研究	C2-3-1:iNSE
高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所	山田悟史	長鎖リン脂質/短鎖リン脂質/水系における単層膜ベシクルの形成メカニズム	C2-3-1:iNSE
お茶の水女子大学理学部物理 学科	今井正幸	球状ミセルの秩序転移におけるスローダイナミクス	C2-3-1:iNSE
お茶の水女子大学理学部物理 学科	今井正幸	リン脂質+コレステロール複合膜におけるミクロドメイン構造のダイナミクス	C2-3-1:iNSE
お茶の水女子大学理学部物理 学科	今井正幸	ゲスト粒子が誘起する界面活性剤メソ構造の秩序転移	C2-3-1:iNSE
京都大学化学研究所	金谷利治	ポリビニルアルコールゲルの融解過程におけるナノスケールダイナミクス	C2-3-1:iNSE
群馬大学工学部	平井光博	神経インパルスモデルにおけるラフト膜の構造とダイナミクスの研究	C2-3-1:iNSE
京都大学大学院理学研究科	八尾誠	液体カルコゲン系の半導体-金属転移におけるメソスケール揺らぎの動的構造	C2-3-1:iNSE
東京大学物性研究所	山室修	イオンゲルPMMA/EMITFSIのガラス転移とイオン伝導機構	C2-3-1:iNSE

東京電機大学理工学部	山室 憲子	セルロース誘導体水溶液の熱ゲル化および相分離のダイナミクス	C2-3-1:iNSE
福岡大学理学部	吉田 亨次	アルコール-水混合溶媒中におけるb-ラクトグロブリンのダイナミクス	C2-3-1:iNSE
東京大学物性研究所	稲村 泰弘	イオン液体bmimBrおよびbmimIの拡散運動と低エネルギー励起	C2-3-1:iNSE
東京都立大学大学院理学研究科	桑原 慶太郎	PrOs4Sb12のラトリング	C2-3-1:iNSE
東京大学物性研究所	山室 修	AGNES (高分解能パルス冷中性子分光器) IRT課題	C3-1-1:AGNES
千葉工業大学工学部	筑紫 格	細孔中におけるアモルファススチレンのフラジリティー評価	C3-1-1:AGNES
大阪大学大学院理学研究科	川口 辰也	シンジオタクチックポリスチレン 相における高分子鎖の運動性	C3-1-1:AGNES
京都大学化学研究所	金谷 利治	高分子ブレンドの相溶性の波数依存性	C3-1-1:AGNES
京都大学化学研究所	金谷 利治	ラメラ構造を有するブロックポリマーのダイナミクス研究	C3-1-1:AGNES
大阪大学大学院理学研究科	金子 文俊	シンジオタクチックポリスチレンの包接結晶相内のゲスト分子のダイナミクス	C3-1-1:AGNES
東京大学分子細胞生物学研究所	城地 保昌	タンパク質の構造エントロピーの評価	C3-1-1:AGNES
東京大学物性研究所	山室 修	水分子の拡散運動から見た気体水和物の生成過程	C3-1-1:AGNES
東京大学物性研究所	山室 修	イオンゲルPMMA/EMITFSIのガラス転移とイオン伝導機構	C3-1-1:AGNES
東京電機大学理工学部	山室 憲子	セルロース誘導体水溶液の熱ゲル化および相分離のダイナミクス	C3-1-1:AGNES
新潟大学理学部	三沢 正勝	tert-ブチルアルコール水溶液における水分子の拡散ダイナミクス	C3-1-1:AGNES
高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所	大友 季哉	ナノ多孔質体FSMの細孔内水分子のダイナミクスの温度依存性	C3-1-1:AGNES
岡山理科大学理学部	高原 周一	ナノ空間における2成分液体のダイナミクス	C3-1-1:AGNES
大阪大学大学院理学研究科	稲葉 章	キラル液晶物質5*CBの等方液体、コレステリック液晶、ガラス、結晶における分子の速い再配向運動	C3-1-1:AGNES
東京大学物性研究所	稲村 泰弘	イオン液体bmimBrおよびbmimIの拡散運動と低エネルギー励起	C3-1-1:AGNES
京都大学大学院工学研究科	田崎 誠司	重水の準・非弾性散乱測定による群定数の構築III	C3-1-1:AGNES
京都大学原子炉実験所	森 一広	寒冷下におけるコンクリート中自由水のダイナミクス観測	C3-1-1:AGNES
京都大学原子炉実験所	森 一広	低熱ポルトランドセメントの長期水和反応過程の観測	C3-1-1:AGNES
京都大学原子炉実験所	日野 正裕	MINE1 (多層膜中性子干渉計・反射率計) IRT課題	C3-1-2-2:MINE1
京都大学原子炉実験所	北口 雅暁	Jamin型多層膜冷中性子干渉計の改良とAharonov-Casher効果の測定	C3-1-2-2:MINE1
京都大学原子炉実験所	北口 雅暁	J-Parc共鳴スピンエコー装置のための高周波スピンフリップの開発	C3-1-2-2:MINE1
京都大学原子炉実験所	日野 正裕	Mieze型スピンエコー法による表面・界面ダイナミクス測定の試み	C3-1-2-2:MINE1
京都大学原子炉実験所	日野 正裕	MINE2 (多層膜中性子干渉計・反射率計) IRT課題	C3-1-2-3:MINE2
京都大学原子炉実験所	北口 雅暁	Jamin型多層膜冷中性子干渉計の改良とAharonov-Casher効果の測定	C3-1-2-3:MINE2
京都大学原子炉実験所	日野 正裕	イオンビームスパッタ法による高性能中性子偏極スーパーミラーの開発	C3-1-2-3:MINE2
京都大学工学研究科原子核工学専攻	田崎 誠司	多層膜スピンスプリッターを用いた水素吸蔵金属中の水素量の精密測定II	C3-1-2-3:MINE2

理化学研究所イメージ情報研究ユニット	池田 一 昭	曲面スーパーミラーによる中性子集光素子の開発	C3-1-2-3:MINE2
京都大学大学院理学研究科	舟橋 春彦	コヒーレントビームステアリング技術の開発と応用	C3-1-2-3:MINE2
京都大学大学院理学研究科	舟橋 春彦	マッハ=ツェンダー型多層膜冷中性子干渉計の開発 III	C3-1-2-3:MINE2
龍谷大学理工学部機械システム工学科	井上 和子	固体-固体間界面からの中性子反射を用いた面粗度評価	C3-1-2-3:MINE2
東京大学素粒子物理国際研究センター	佐貫 智行	超冷中性子用ピクセル検出器の開発	C3-1-2-3:MINE2
九州大学大学院工学研究院	田中 敬二	固体基板間に拘束されたポリマーブレンド超薄膜の凝集構造評価	C3-1-2-3:MINE2
神戸大学工学部機械工学科	竹中 信幸	中性子反射率計による界面活性剤水溶液の摩擦損失低減現象の解明	C3-1-2-3:MINE2
名古屋大学大学院工学研究科	川口 大輔	相溶性高分子ブレンドの表面偏析に及ぼすブロック共重合化の影響	C3-1-2-3:MINE2
九州大学先端物質化学研究所	高原 淳	(分子鎖末端にかご形珪素化合物を導入した重水素化ポリスチレン/ポリスチレン)ブレンド薄膜の表面・界面構造	C3-1-2-3:MINE2
九州大学先端物質化学研究所	高原 淳	中性子反射率測定に基づく超親水性ポリマーブラシの水界面での構造評価	C3-1-2-3:MINE2
京都大学化学研究所	金谷 利治	液晶分子と高分子配向膜の界面構造に関する研究	C3-1-2-3:MINE2
京都大学化学研究所	金谷 利治	高分子ブレンド薄膜の臨界温度近傍における厚さ方向の濃度揺らぎ	C3-1-2-3:MINE2
高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所	鳥飼 直也	コントラスト変化を利用した中性子反射率法による多孔材料薄膜の構造解析	C3-1-2-3:MINE2
同志社大学工学部	平山 朋子	中性子反射率法による表面/界面形成水膜の膜厚測定	C3-1-2-3:MINE2
東京大学物性研究所	西 正和	HQR (高分解能中性子散乱装置) IRT課題	T1-1:HQR
東京大学物性研究所	上床 美也	中性子散乱実験用高圧力発生装置の開発および量子臨界現象の観察	T1-1:HQR
東京大学物性研究所	大原 泰明	Cu <sub>1-x</sub> Zn <sub>x</sub> Cr <sub>2</sub> Se <sub>4</sub> の磁気揺らぎ	T1-1:HQR
高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所	久保田 正人	Nd <sub>2-x</sub> Sr <sub>x</sub> MnO <sub>4</sub> のスピンの波	T1-1:HQR
東京大学物性研究所	吉沢 英樹	2次元コバルト酸化物 Pr <sub>2-x</sub> Ca <sub>x</sub> CoO <sub>4</sub> 系の電荷秩序と磁気秩序	T1-1:HQR
秋田大学教育文化学部	留野 泉	Mn <sub>3</sub> Pt合金のフォノン	T1-1:HQR
東京理科大学理学部物理学科	満田 節生	スピンフラストレーション系の部分無秩序相に固有な熱力学的異常	T1-1:HQR
東京理科大学理学部物理学科	満田 節生	スピンフラストレーション系CuFe <sub>1-x</sub> Al <sub>x</sub> O <sub>2</sub> におけるゼロ磁場有効ランダム磁場効果	T1-1:HQR
山口大学理学部	繁岡 透	TbCu <sub>2</sub> Ge <sub>2</sub> の異常磁性転移	T1-1:HQR
山口大学理学部	繁岡 透	HoCu <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> のなぞの磁気相	T1-1:HQR
大阪大学大学院理学研究科	田畑 吉計	希土類化合物(La <sub>1-x</sub> Er <sub>x</sub> )Ni <sub>2</sub> Ge <sub>2</sub> の異方的磁気相転移	T1-1:HQR
広島大学大学院教育学研究科	篤岡 孝則	希土類化合物Dy <sub>7</sub> Rh <sub>3</sub> , Pr <sub>7</sub> Ni <sub>3</sub> の磁気構造	T1-1:HQR
北陸先端科学技術大学院大学材料科学研究科	中本 剛	RRhGe(R=Tb, Dy)化合物単結晶の磁気構造	T1-1:HQR
名古屋大学大学院理学研究科	佐藤 正俊	Co <sub>3</sub> V <sub>2</sub> O <sub>8</sub> における逐次相転移とmultiferroic相	T1-1:HQR
東京大学物性研究所	佐藤 卓	Yb <sub>3</sub> Ga <sub>5</sub> O <sub>12</sub> ガーネットのスピン液体状態	T1-1:HQR
東京大学物性研究所	佐藤 卓	正方晶希土類化合物CeB <sub>2</sub> C <sub>2</sub> の磁気構造および結晶場分裂の研究	T1-1:HQR

東京理科大学工学部物理学科	元屋 清一郎	ランダム磁性体における異なる磁気相関・磁気励起の共存とそれらの時間発展	T1-1:HQR
早稲田大学理工学部応用物理学科	角田 頼彦	マンガン-銅合金のスピンフラストレーション	T1-1:HQR
早稲田大学理工学部応用物理学科	角田 頼彦	Pt3Fe合金の1軸性圧力効果	T1-1:HQR
早稲田大学理工学部応用物理学科	角田 頼彦	磁気幾何学的フラストレーション系ZnCr2O4の中性子散乱	T1-1:HQR
早稲田大学理工学部応用物理学科	角田 頼彦	FeNiインパー合金の垂直磁気成分	T1-1:HQR
鳥取大学地域学部	安藤 由和	RPdSn(R=Tb, Ho, Dy)の磁気構造	T1-1:HQR
秋田大学教育文化学部	留野 泉	遷移金属炭化物のフォノン	T1-1:HQR
秋田大学教育文化学部	留野 泉	NaNbO3のフォノン分散	T1-1:HQR
秋田大学教育文化学部	留野 泉	立方晶PbTiO3のフォノン分散	T1-1:HQR
早稲田大学理工学術院	上江洲 由晃	中性子準弾性散乱を用いたLi添加KTaO3の相転移機構	T1-1:HQR
島根大学教育学部自然環境教育講座	重松 宏武	Ba-Ti-O系強誘電体の構造相転移とフォノン分散	T1-1:HQR
島根大学教育学部自然環境教育講座	重松 宏武	硫安系酸化物誘電体の仮想相転移に寄与するソフトモードの振る舞い	T1-1:HQR
東北大学金属材料研究所	平賀 晴弘	AKANE (東北大金研三軸型中性子分光器) IRT課題	T1-2:AKANE
九州大学大学院理学研究院	武田 信一	熔融CuBr及び混合系の局所構造	T1-2:AKANE
東北大学金属材料研究所	平賀 晴弘	銅酸化物超伝導体のオーバードープ相におけるNi誘起磁気相関の探査	T1-2:AKANE
九州大学大学院理学研究院	日高 昌則	強磁性誘電体CdCr2S4, CdCr2Se4の磁気構造相転移と電気的相転移の相関	T1-2:AKANE
東北大学金属材料研究所	藤田 全基	平坦CuO2面を有する系で調べるLa214超伝導体の本質的な磁気励起	T1-2:AKANE
東北大学金属材料研究所	藤田 全基	電子ドーピングされたMott絶縁体の磁気基底状態	T1-2:AKANE
東北大学金属材料研究所	藤田 全基	磁気モーメントの大きな元素による置換効果を利用したLSCO系における磁気相関の起源の研究	T1-2:AKANE
青山学院大学理工学部、物理数理学科	秋光 純	層状Co酸化物の中間スピン状態における電荷秩序の役割解明	T1-2:AKANE
東北大学多元物質科学研究所	木村 宏之	マルチフェロイックRMn2O5におけるスピンドYNAMICS	T1-2:AKANE
東北大学金属材料研究所	平賀 晴弘	遍歴電子反強磁性体Crのスピン密度波に対する不純物効果	T1-2:AKANE
高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所	富安 啓輔	CoCr2O4のスピン波	T1-2:AKANE
東北大学多元物質科学研究所	野田 幸男	RMn2O5の磁気秩序に対する外部電場の影響	T1-2:AKANE
東北大学多元物質科学研究所	野田 幸男	SrTiO3の外部電場下での構造変化	T1-2:AKANE
東北大学金属材料研究所	平賀 晴弘	リラクサーPb(Mg1/3Nb2/3)O3における化学的短距離秩序	T1-2:AKANE
龍谷大学理工学部機械システム工学科	井上 和子	ホイスラー型Ni2MnGa形状記憶合金系におけるマルテンサイト変態の前駆現象	T1-2:AKANE
東北大学金属材料研究所	大山 研司	HERMES (中性子粉末回折装置) IRT課題	T1-3:HERMES
東北大学金属材料研究所	林 好一	原子分解能中性子線ホログラフィーに関する基礎研究	T1-3:HERMES
龍谷大学理工学部	中沖 隆彦	高分子ゲル中で凝固させた溶媒の自由溶媒と束縛溶媒の凝集構造の相違	T1-3:HERMES

九州大学大学院理学研究院	武田 信一	溶融貴金属合金系の共晶組成近傍における局所構造	T1-3:HERMES
高エネルギー加速器研究機構 大強度陽子加速器計画推進部	大友 季哉	ナノ多孔質体(FSM)細孔内における水の静的構造因子測定	T1-3:HERMES
九州大学大学院理学研究院	日高 昌則	強磁性誘電体CdCr <sub>2</sub> S <sub>4</sub> , CdCr <sub>2</sub> Se <sub>4</sub> の磁氣的、構造的特性	T1-3:HERMES
北陸先端科学技術大学院大学 材料科学研究科	中本 剛	YbPtGe, YbPdGe化合物の磁気構造	T1-3:HERMES
横浜国立大学大学院工学研究院	中津川 博	化学修飾された層状熱電変換酸化物の熱電特性と結晶構造に関する研究	T1-3:HERMES
青山学院大学理工学部物理数 理学科	秋光 純	La <sub>2-x</sub> Sr <sub>x</sub> CoO <sub>4</sub> (x=0.5, 1.5)の結晶構造解析-反強磁性-強磁性 転移を理解するために-	T1-3:HERMES
青山学院大学理工学部物理数 理学科	秋光 純	K <sub>2</sub> NiF <sub>4</sub> 型Sr <sub>2</sub> VO <sub>4</sub> の結晶・磁気構造解析	T1-3:HERMES
首都大学東京都市教養学部理 工学系	桑原 慶太郎	充填スクッテルダイト化合物PrFe <sub>4</sub> P <sub>12</sub> の4f電子状態	T1-3:HERMES
横浜国立大学大学院工学研究院	鈴木 和也	R <sub>2</sub> Pd <sub>2</sub> X (X=In, Sn)の磁気構造	T1-3:HERMES
芝浦工業大学システム工学部	堀 富栄	Y <sub>1-x</sub> R <sub>x</sub> Mn <sub>6</sub> Sn <sub>6</sub> (R:4f 希土類)合金の磁気構造	T1-3:HERMES
北海道大学大学院理学系研究科	分島 亮	擬一次元遷移金属テルライドの磁気構造	T1-3:HERMES
芝浦工業大学工学部	白石 浩	Ni <sub>2</sub> In型金属間化合物の磁性	T1-3:HERMES
東北大学大学院工学研究科	梅津 理恵	遍歴電子反強磁性体 -Mn <sup>TM</sup> (TM=Os, Ir, Ru)合金の磁気秩序	T1-3:HERMES
北海道大学大学院理学研究科	日夏 幸雄	低次元・クラスター構造を持つ遷移金属酸化物の磁気構造	T1-3:HERMES
大阪大学大学院理学研究科	田畑 吉計	希土類化合物(La <sub>1-x</sub> Er <sub>x</sub> )Ni <sub>2</sub> Ge <sub>2</sub> の異方的磁気相転移	T1-3:HERMES
慶應義塾大学理工学部	的場 正憲	アンチペロブスカイト型金属強磁性体Sn <sub>2</sub> Co <sub>3</sub> S <sub>2</sub> 関連物質 の磁気構造と電子状態	T1-3:HERMES
佐賀大学理工学部	鄭 旭光	磁気秩序と非秩序が共存する新しい幾何学的フラストレー ション系シリーズM <sub>2</sub> X(OD) <sub>3</sub> [M:遷移金属 X:ハロゲン]の磁 気構造解析	T1-3:HERMES
広島大学大学院教育学研究科	薦岡 孝則	金属水素化物R <sub>7</sub> Rh <sub>3</sub> D <sub>x</sub> (R = Y, Tb, Ho, Dy) の中性 子回折	T1-3:HERMES
宇都宮大学工学部応用化学科	手塚 慶太郎	二価クロムイオンを含むランタノイド複硫化物の磁気構造 と結晶構造	T1-3:HERMES
茨城大学理学部	横山 淳	Ru酸化物における金属絶縁体転移と磁性	T1-3:HERMES
横浜市立大学国際総合科学研 究科	益田 隆嗣	Staggered磁場中におけるダイマーの磁化過程	T1-3:HERMES
京都大学大学院理学研究科	陰山 洋	正方格子磁性体(MX)LaNb <sub>2</sub> O <sub>7</sub> (M=Cu, Mn, Cl, Br)と関連 物質の磁気構造	T1-3:HERMES
広島大学大学院先端物質科学 研究科	伊賀 文俊	Shastry-Sutherland格子系RB <sub>4</sub> の磁気構造と構造相転移	T1-3:HERMES
東京大学物性研究所	阿曾 尚文	圧力誘起超伝導体CeRhSi <sub>3</sub> と参照物質LaRhSi <sub>3</sub> の結晶構造	T1-3:HERMES
東京工業大学大学院総合理工 学研究科	八島 正知	リン酸塩系生体材料の構造変化	T1-3:HERMES
東京工業大学大学院総合理工 学研究科	八島 正知	蛍石型酸化物における酸化物イオンのディスオーダーと伝 導経路	T1-3:HERMES
東京工業大学大学院総合理工 学研究科	八島 正知	可視光応答型水全分解酸窒化物光触媒の結晶構造	T1-3:HERMES
東京工業大学大学院総合理工 学研究科	八島 正知	セリア-ジルコニア触媒の結晶構造とディスオーダー	T1-3:HERMES
山口大学大学院医学系研究科	藤森 宏高	水酸アパタイトの構造欠陥とイオン伝導	T1-3:HERMES
宇都宮大学工学部応用化学科	単 躍進	秩序ペロフスカイト型酸化物Ca <sub>2</sub> MTeO <sub>6</sub> (M = Mn, Co)の 磁気構造	T1-3:HERMES

九州大学大学院比較社会文化研究院	石田清隆	重水素化(Al,Ga,Ge)-シロウモノの水素位置分裂	T1-3:HERMES
九州大学大学院比較社会文化研究院	石田清隆	砥部石の層間アンモニウムイオンの温度依存性	T1-3:HERMES
東北大学大学院工学研究科	石田清仁	Co <sub>2</sub> YGa (Y = Ti, V, Cr, Mn, Fe) ホイスラー合金の相安定性及び磁気的性質	T1-3:HERMES
明治大学理工学部工業化学科	深澤倫子	中性子回折によるCO <sub>2</sub> ハイドレートのゲスト-ホスト相互作用に関する研究	T1-3:HERMES
岡山大学自然科学研究科	三宅通博	高速酸化イオン伝導体ランタンガレート系ペロブスカイト化合物の伝導特性の検討	T1-3:HERMES
新潟大学工学部	佐藤峰夫	非化学量論組成をもつ長残光蛍光体の構造解析	T1-3:HERMES
東京大学物性研究所	佐藤卓	Cd-Yb合金系における液相構造と準結晶-近似結晶相変態	T1-3:HERMES
鳥取大学工学部	江坂享男	Zn <sub>2</sub> TiO <sub>4</sub> 系酸化イオン伝導体の中性子回折	T1-3:HERMES
新潟大学大学院自然科学研究科	戸田健司	可視光応答性光触媒の構造解析	T1-3:HERMES
山梨大学 大学院医学工学総合研究部	熊田伸弘	五価のビスマスを含む新しいビスマス酸化物の合成と結晶構造解析	T1-3:HERMES
東北大学大学院工学研究科	宮崎謙	化学修飾された層状コバルト酸化物の結晶構造	T1-3:HERMES
東京理科大学理工学部工業化学科	井手本康	(Bi,M)4(Ti,Si)3O <sub>12</sub> (M=La, Nd, Pr)強誘電体酸化物の強誘電特性と結晶構造の組成、熱処理依存	T1-3:HERMES
東京理科大学理工学部工業化学科	井手本康	リチウム二次電池正極材料Li <sub>x</sub> (Mn,Ni,Co,M)O <sub>2</sub> の熱力学的安定性および結晶構造の置換およびLi組成依存	T1-3:HERMES
東北大学多元物質科学研究所	野田幸男	FONDER (中性子4軸回折装置) IRT課題	T2-2:FONDER
青山学院大学理工学部物理数理学科	秋光純	CuB <sub>2</sub> O <sub>4</sub> の磁気構造解析	T2-2:FONDER
東北大学多元物質科学研究所	木村宏之	マルチフェロイックRMn <sub>2</sub> O <sub>5</sub> の格子不整合磁気秩序相における磁気構造解析	T2-2:FONDER
東京理科大学理学部	満田節生	三角格子反強磁性体CuFeO <sub>2</sub> の磁気秩序相における構造相転移とspin orientationの変化	T2-2:FONDER
東北大学多元物質科学研究所	有馬孝尚	水素結合型強誘電体フェナジン-クロロニル酸錯体とフェナジン-プロマニル酸錯体の水素位置の比較	T2-2:FONDER
東北大学多元物質科学研究所	野田幸男	RMn <sub>2</sub> O <sub>5</sub> の磁気秩序に対する外部電場の影響	T2-2:FONDER
東北大学多元物質科学研究所	野田幸男	SrTiO <sub>3</sub> の外部電場下での構造変化	T2-2:FONDER
山口大学理学部	増山博行	デバイワラー因子から推定する構造相転移機構	T2-2:FONDER
北里大学理学部物理学科	菅原洋子	ヌクレオチド水和物結晶の相転移に伴う水素結合網改変の解析	T2-2:FONDER
大阪大学大学院理学研究科附属分子熱力学研究センター	高倉洋礼	P型Zn-Mg-Ho正20面体準結晶の構造解析	T2-2:FONDER
筑波大学数理物質科学研究科	高橋美和子	鉛ペロブスカイト型半導体の構造と相転移	T2-2:FONDER
大阪大学大学院理学研究科	河原崎修三	アクセサリ-IRT課題	分光器以外
科学技術振興機構ERATO十倉スピン超構造	徳永祐介	Pr <sub>2-2x</sub> Ca <sub>1+2x</sub> Mn <sub>2</sub> O <sub>7</sub> (x~0.5)の磁気構造	4G:GPTAS
産業技術総合研究所エネルギー技術研究部門	李哲虎	かご状物質のフォノンダイナミクス	4G:GPTAS
産業技術総合研究所エネルギー技術研究部門	李哲虎	La <sub>3</sub> Pd <sub>20</sub> Ge <sub>6</sub> のフォノンダイナミクス	6G:TOPAN
産業技術総合研究所エネルギー技術研究部門	李哲虎	かご状物質のフォノンダイナミクス	C1-1:HER
日本原子力研究開発機構量子ビーム応用研究部門	藤原悟	F-アクチンの動的特性の解析	C2-3-1:iNSE



産業技術総合研究所エネルギー技術研究部門	李 哲 虎	かご状物質のフォノンダイナミクス	T1-2:AKANE
産業技術総合研究所コピキタスエネルギー研究部門	野 村 勝 裕	LaCoO <sub>3</sub> 系ペロブスカイト型混合伝導体のin situ構造解析	T1-3:HERMES
産業技術総合研究所コピキタスエネルギー研究部門	野 村 勝 裕	LaMnO <sub>3</sub> 系ペロブスカイト型混合伝導性材料のin situ構造解析	T1-3:HERMES
産業技術総合研究所コピキタスエネルギー研究部門	野 村 勝 裕	BaZrO <sub>3</sub> 系ペロブスカイト型プロトン伝導体のイオン伝導経路の研究	T1-3:HERMES
日本原子力研究開発機構量子ビーム応用研究部門	星 川 晃 範	ガス包接化合物における形成及び分解過程のその場観察	T1-3:HERMES
物質・材料研究機構超伝導材料研究センター	茂 筑 高 士	強磁性TiO <sub>2</sub> の結晶構造	T2-2:FONDER
日本原子力研究開発機構先端基礎研究センター	金 子 耕 士	充填スクッテルダイト化合物におけるラットリング	T2-2:FONDER

# 平成 18 年度後期共同利用の公募について

東大物性研共第 1 号  
平成 18 年 4 月 14 日

関係各研究機関長 殿

東京大学物性研究所長  
上 田 和 夫 (公印省略)

## 平成 18 年度後期東京大学物性研究所共同利用の公募について (通知)

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

### 記

#### 1 公募事項 (要項参照)

- (1) 共同利用 (一般、物質合成・評価設備) (平成 18 年 10 月～平成 19 年 3 月後期実施分)
- (2) 共同利用 (スーパーコンピュータ) (平成 18 年 10 月～平成 19 年 3 月実施分)
- (3) 短期研究会 (平成 18 年 10 月～平成 19 年 3 月後期実施分)

#### 2 申請資格

国立大学法人、公、私立大学及び国公立研究機関 (以下「大学等」という) の教員、研究者並びにこれに準ずる者。ただし、上記の者が行う大学等の研究活動に限ります。大学院学生にあっては大学等の教員の指導の下、研究を行なう者。注1

注1) 修士課程学生は指導教員と共同で申請して下さい。なお、1 研究課題に許される修士課程学生数は 1 名を原則とします。また、申請時点で学部学生であっても修士課程に入学予定である者は申請可能とします。その場合には、申請時に入学先指導教員から入学予定である旨の書面 (記名・押印) を申請書に添付し、入学後に研究科長の承認印が押印された申請書を再度提出していただきます。

#### 3 申請方法

東京大学物性研究所ホームページ「平成 18 年度後期共同利用公募要項」

(<http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/kyoudou/h18kkyoudou.html>) をご覧ください。

申請書は、ここからダウンロードし、記入・押印のうえ、下記まで郵送してください。

**送付先:** 〒277-8581 千葉県柏市柏の葉 5 - 1 - 5

東京大学柏地区事務部 物性研担当課共同利用係

電話 04 - 7136 - 3209

#### 4 申請期限

- (1) スーパーコンピュータの共同利用 平成 18 年 6 月 12 日 (月) 必着
- (2) その他の共同利用 平成 18 年 6 月 16 日 (金) 必着

#### 5 採否の判定

平成 18 年 9 月下旬

# 平成 17 年度外部資金の受入について

## 1. 奨学寄附金

件数	金額
16 件	18,090,000 円

## 2. 民間等との共同研究

研究題目	相手側機関	共同研究経費(円)		研究担当職員
		相手側負担分	本学負担分	
電子蓄積リング用加速空洞における構造最適化	(株)東芝 電力・社会システム社	420,000		附属軌道放射性研究施設 助教授 中村 典雄
中性子・光散乱法を用いた化粧品剤の状態解析	花王(株) スキンケア研究所	500,000		附属中性子科学研究施設 教授 柴山 充弘
金属水素脆性及びその耐水素化の研究	カシオ計算機(株)	2,000,000		極限環境物性研究部門 助教授 上床 美也
レーザー光散乱法による塗装条件下の硬化挙動解析法開発	トヨタ自動車(株)	5,392,000		附属中性子科学研究施設 教授 柴山 充弘
ナノカーボン、ナノ触媒	日本電気(株)	420,000		物性理論研究部門 助教授 杉野 修
白金代替触媒材料の開発にむけた大規模量子化学計算による触媒構造・電子状態解析	三菱重工業(株)	4,273,500		物性理論研究部門 助教授 杉野 修
合計		13,005,500		

## 3. 受託研究

研究題目	委託者	受入金額(円)	研究担当職員
量子細線レーザーの作製とデバイス特性の解明	(独) 科学技術振興機構	3,575,000	先端分光研究部門 助教授 秋山 英文
機能性ナノ分子の形成および置換による新規電子物性の創出	(独) 科学技術振興機構	780,000	新物質科学研究部門 助教授 森 初果
関連電子系の新しい大規模計算アルゴリズム	(独) 科学技術振興機構	1,300,000	物質理論研究部門 教授 今田 正俊
ナノサイズ一次元構造の電子物性特性評価	(独) 科学技術振興機構	1,410,500	ナノスケール物性研究部門 助教授 長谷川幸雄
トポロジカルゲルの構造解析および動的制御の実現	(独) 科学技術振興機構	1,300,000	附属中性子科学研究施設 教授 柴山 充弘
電極二相界面のナノ領域シミュレーション	(独) 科学技術振興機構	887,900	物性理論研究部門 助教授 杉野 修
シリコン表面に結合した有機分子のトンネル分光による単一分子物性の研究	(独) 科学技術振興機構	1,300,000	ナノスケール物性研究部門 助教授 吉信 淳
スピン注入磁化反転素子の評価	(独) 科学技術振興機構	650,000	ナノスケール物性研究部門 助教授 大谷 義近
準結晶の中性子散乱	(独) 科学技術振興機構	1,300,000	附属中性子科学研究施設 助教授 佐藤 卓
ナノ磁性	大学共同利用機関法人 自然科学研究機構	54,649,000	附属物質設計評価施設 教授 高山 一
化学発光・生物発光の計測標準システムに関する調査研究	(独) 産業技術総合研究所	462,000	先端分光研究部門 助教授 秋山 英文
合計		67,614,400	

## 第 51 回物性若手夏の学校

- 主 催：第 51 回物性若手夏の学校準備局
- 後 援：日本物理学会、応用物理学会、日本化学会
- 日 程：2006 年 8 月 1 日(火)～8 月 5 日(土)
- 場 所：三河湾国定公園 西浦温泉 ホテル たつき  
(〒443-0105 愛知県蒲郡市西浦町大山 25)
- 内 容：大学院生を中心とした若手研究者の研鑽および交流を目的としたサ  
マースクールを開催します。具体的には物性各分野より講師として  
お招きした研究者による講義の受講、分科会やポスターセッション  
等の参加者による発表からなります。奮ってご参加下さい！
- 定 員：250 名程度
- 申込期間：2006 年 4 月中旬～6 月中旬
- 申込方法：第 51 回物性若手夏の学校のウェブサイトより申し込み  
<http://ss2006.issp.u-tokyo.ac.jp/>
- 詳細・問合せ：上記ウェブサイトをご覧いただくか、準備局の mail  
ss2006@issp.u-tokyo.ac.jp へお問い合わせください。
- 代 表：277-8581 千葉県柏市柏の葉 5-1-5  
東京大学物性研究所 下元 正義

## 編集後記

新しい年度が始まりました。今年度最初の「物性研だより」をお届けいたします。今回は、平成 16 年度に ISSP 学術奨励賞を受賞された関川氏に受賞対象となった「アト秒パルス光」の研究成果について書いていただきました。またその後、北大に転出されたということもありまして、物性研での研究活動全般についてもコメントをいただいています。

いただいた題目が「ワンフーズフィジックス」というので何のこと？と読み始めましたが、説明は最後のほうにありました。渡部先生の研究指導方針に感銘を受けるとともに、自分の場合はどうなのかと考えさせられる内容です。ほかにも柏移転のエピソードなどおもしろく読ませていただきました。

客員の先生方にも慶応大の江藤先生・ユタ大の Wu 先生に寄稿していただきました。お忙しい中原稿を寄せていただきましてありがとうございます。

物性研も柏に移転して 7 年目を迎え、新たに国際超強磁場科学研究施設も設置されました。今年度も、物性研ならびに「物性研だより」を宜しくお願いいたします。

長谷川 幸 雄