

# 物性研だより

第47巻  
第3号

2007年10月

## 目次

- 外国人客員所員を経験して  
1 Thomas Dahm  
2 Robert H. Blick
- 物性研究所短期研究会報告  
3 ○ 高輝度軟X線放射光が拓く物質科学の新たな地平  
18 ○ Foundations and Applications of the Density Functional Theory  
(密度汎関数理論の基礎と応用)
- 39 物性研究所談話会
- 物性研ニュース  
41 ○ 人事異動  
42 ○ 平成19年度後期短期研究会一覧  
43 ○ 平成19年度後期外来研究員一覧  
55 ○ 平成19年後期スーパーコンピュータ共同利用採択課題一覧  
57 ○ 平成20年度前期共同利用公募のご案内  
58 ○ 物性研究所共同利用申請Web化のお知らせ  
60 ○ 平成19年度外部資金の受入れについて
- 編集後記
- 別冊 50周年記念号



国際ワークショップ、バンケットにて。  
E.K.U. Gross (写真左)、K. Burke (写真中央) による話は参加者全員を楽しませました。



東京大学物性研究所

ISSN 0385-9843

# 外国人客員所員を経験して

## Visiting Professorship at ISSP

**Thomas Dahm**

*Institut für Theoretische Physik, Universität Tübingen,*

*Auf der Morgenstelle 14, D-72076 Tübingen, Germany*

*dahm@uni-tuebingen.de*

I have been a visitor of ISSP, the University of Tokyo, under the foreign visiting professorship program from March 1<sup>st</sup> until August 31<sup>st</sup> 2007. My home institution is the University of Tuebingen in Germany. My main fields of interest are superconductivity and strongly correlated electron systems. My family, my wife and our now ten month old baby boy, came with me and stayed in Kashiwa for half a year.

It was a very strenuous and busy time for us. We realized that it takes a lot of time to care for a small baby and at the same time being in a foreign country, where one has to orientate oneself newly and find out many things, especially if one wants to get to know the culture and the country. Fortunately, we received a lot of help from many people. First of all, it was very helpful for us that ISSP could provide us with a well equipped three bedroom apartment at the Kashiwanoha Lodge. Also, the constant help of Akiko Kameda and Mihoko Kubo from the International Liaison Office at ISSP was very essential to help us getting adjusted and the paperwork done. They helped us obtaining the visa, do the foreign registration, get a bank account and health insurance and many other things, which would have been much more difficult without help due to the language problem. Whenever we had some larger or minor problem, they were ready to help us and we would like to thank them for their professional work.

When we arrived at Narita Airport, we were very happy that Dr. Tatsuya Fujii picked us up with his car. The connection from Narita Airport to Kashiwanoha is not so convenient, especially for a family with a baby unfamiliar with the public transport system in the Tokyo area.

Many of the Japanese families living at the Kashiwanoha Lodge were very kind and helpful. My wife particularly enjoyed the weekly babies meeting at which our son could play with other babies and make friends.

Certainly, the existence of the newly built “Kashiwanoha Campus Station” and “Lalaport” made our life easier. It gave us shopping opportunities within walking distance and easy access to the Tokyo area.

The most difficult time for us was the rainy season. Especially the high humidity and its side effects were unknown to us. Here, some advice how to cope with the high humidity and how to treat futon and tatami the right way would have been useful for us.

Scientifically, it was a very fruitful stay for me. Research at ISSP is of high quality and of world class. I particularly enjoyed that several groups at ISSP were interested in the same subject of pyrochlore oxide superconductors, both experimentally and theoretically. In these systems a strongly anharmonic, so-called “rattling” vibration of the alkali ions inside an oversized cage of Os-O ions is believed to play an essential role. I had very interesting discussions with Prof. Hiroi, Prof. Takigawa, and my host Prof. Kazuo Ueda, which strongly started to interest me in trying to understand the peculiar properties of this fascinating class of materials. We could quickly make progress in a theoretical understanding of the “rattling” phenomenon and its impact on NMR relaxation and resistivity of these compounds. Our work resulted in two papers and hopefully more in the future.

In summary, I believe that the visiting professorship program at ISSP including the support of the International Liaison Office is very effective and useful. It helps the visitors to concentrate on their work and eases the difficulties of adjusting oneself to the new surrounding, country, and culture. I think that this kind of help we have received is very essential for such a program in order to encourage more visitors to become interested in a longer stay at ISSP.

# 外国人客員所員を経験して

## Research Stay at ISSP University of Tokyo

**Robert H. Blick**

***University of Wisconsin-Madison, Electrical & Computer Engineering***

***1415 Engineering Drive, Madison, WI 53706, USA.***

***blick@engr.wisc.edu***

During the summer of 2007 I had the pleasure to stay at the Institute for Solid State Physics of the University of Tokyo. Let me start out by saying: it has been a wonderful time, which turned out to be very fruitful for my scientific work. I hope to continue the collaboration with the Katsumoto group in the future, since the field of doped nano-electromechanical systems (D-NEMS) is just being developed. The working conditions at this impressive new Institute of the University of Tokyo are excellent. The staff is extremely supportive, so that the scientific work really progresses. Since everyone is working extremely hard, I was always able to discuss pressing scientific questions and address also other work related issues. Another strong point of the Institute is its connection to other research sites in the greater Tokyo area. That gave me the impression of a very open community of top-notch researchers from all over the world working closely together on advanced Solid State Physics.

Apart from work I learnt a lot about Japanese culture and life, which made my stay even more enjoyable. The Institute is located outside of Kashiwa, but the Tsukuba Express offers a very fast connection to downtown Tokyo. To be more precise, it connects to Akihabara the 'electronic town'. This is a place every experimental physicist will find fascinating with its abundance of electronic department stores and small shops offering essentially every circuit one can imagine. From Akihabara it is then straight forward to connect to subway lines and to Japan Rail. In visiting colleagues and collaborators in and around Tokyo I found this dense mesh of public transportation extremely supportive – and so are the people. Once in a while I ended up in front of the huge pricing displays of one of the subway lines, which were in Japanese only. Since my Japanese is not that fluent, I always had to ask people to give me a hint to identify the different *kanjis*. Everyone I asked was very helpful and gave me directions – partly in excellent English. In contrast to my little improvements in speaking Japanese, I found that more people can communicate in English as compared to ten years ago.

Close to the Tsukuba Express train station is the Lalaport mall, which offers all you need regarding food, clothes, and a lot of other things you might not need. In addition there are many restaurants, which make life very convenient. This mall is only five minutes away by bicycle and since the ISSP was so kind to offer me a bicycle I was very happy. Housing on campus in the Kashiwa Lodge, as well as off campus is very convenient too. I believe it is the very best there is, since the spacious apartments offer a kitchen, a washing machine, TV, internet access and all have air condition. This last point is apparently more important than I thought, since during this summer it got quite hot.

In summary I have to say that the ISSP is an excellent place to work at and that it was a pleasure being there.

## 物性研究所短期研究会

# 高輝度軟X線放射光が拓く物質科学の新たな地平

日時：2007年7月5日(木)～6日(金)

場所：東京大学物性研究所6階講義室

(提案代表者) 東京大学物性研究所 柿崎 明人  
首都大学東京 宮原 恒昱  
奈良先端科学技術大学院大学 大門 寛  
東京大学 尾嶋 正治  
東京大学物性研究所 辛 埴  
東京大学物性研究所 松田 巖

近年、放射光施設では光電子顕微鏡によるナノ物質の構造解析、磁気円二色性分光による磁性研究、発光分光による生体物質の機能解析、光電子分光によるバルク電子状態研究など、物質科学分野での高輝度軟 X 線放射光を利用する研究の進展が著しい。また、放射光のコヒーレンスを利用した回折分光、パルス特性を利用する時間分解分光などによって、従来よりも空間、時間分解能が優れた研究もおこなわれている。一方、東京大学では、それまで全学的プランとして推進してきた高輝度光源計画で培った成果を全国の放射光研究者に還元し、放射光科学を強力に推進することを目的として、昨年5月に放射光連携研究機構を開設して既存の放射光源施設に最先端の高輝度アンジュレータと放射光利用実験設備を建設・整備する計画（アウトステーション計画）を策定した。東京大学は本年度から大学独自の予算で SPring-8 の長直線部に世界最高性能の高輝度軟 X 線放射光が利用できるビームラインの建設をスタートさせ、現在アンジュレータの整備が進行中である。順調にいけば、平成 20 年度中に放射光の発生が確認でき、平成 21 年度から、これまでよりも格段に優れた輝度、光強度、ビーサイズをもつ放射光軟 X 線が利用できる予定である。

この短期研究会は、最近各地で活発に行われている高輝度軟 X 線放射光を利用した物質科学研究の新たな発展の方向を探るとともに高輝度軟 X 線アンジュレータとビームライン・分光光学系の設計・開発の現状について理解し、新ビームラインで大きな発展が期待される実験手法、研究課題について議論することを目的として提案され、さる7月5、6日の2日間にわたって開催された。研究会の参加者は2日間合わせて147名（5日82名、6日65名）で、現在活躍中の若手研究者による講演が多く、新しい高輝度軟 X 線ビームラインを利用する実験、物質科学分野の新しい研究課題について活発な議論がなされた。とくに、これまでとりあげられることが少なかった発光分光、時間分解分光、コヒーレンスを利用する分光実験が関心を集めた。また、軟 X 線光電子分光による表面構造解析、3次元フェルミ面マッピングなど、これまでの研究成果に基づいてさらに発展が期待できる分野についてもこのビームラインが大きな役割を担うことを予感させる発表も多かった。今後、ビームライン建設計画の進捗に合わせて、この種の研究会を重ね、新しいビームラインで整備すべき実験設備、重点的に推進する研究課題と実施計画について議論を深めていくことが必要であることを強く感じさせる研究会であった。

## プログラム

7月5日(木) 13:30～18:00 (以下、講演はすべて20分)

- |  |                  |
|--|------------------|
| 1) はじめに 13:30～13:40                          | 柿崎 明人 (物性研)      |
| 13:40～14:00 「SPring-8の長直線部を活用した新型アンジュレータ」    | 田中 隆次 (SPring-8) |
| 2) 軟 X 線ナノスケール顕微分光 14:00～15:00               | 座長：柿崎 明人 (物性研)   |
| 14:00～14:20 「放射光 PEEM/LEEM による表面動的過程」        | 安江 常夫 (大阪電通大)    |
| 14:20～14:40 「フェムト秒レーザーを用いた時間分解 XMCD-PEEM」    | 福本 恵紀 (SPring-8) |
| 14:40～15:00 「高輝度軟 X 線放射光を用いた酸化物ヘテロ界面の電子状態解析」 | 組頭 広志 (東大)       |

COFFEE BREAK 15:00~15:20

- 3) 軟 X 線発光分光 15:20~16:40 座長：辛 埴 (物性研)  
15:20~15:40 「軟 X 線発光分光による DNA、鉄タンパク質の電子状態観測」 原田 慈久 (SPring-8)  
15:40~16:00 「Ti 酸化物の X 線ラマン散乱」 手塚 泰久 (弘前大)  
16:00~16:20 「表面吸着分子の軟 X 線発光」 高田 恭孝 (理研)  
16:20~16:40 「軟 X 線吸収発光分光法による界面価電子状態のサイト選択的観測」 山下 良之 (物材機構)

4) 軟 X 線で新たな展開が期待できる分光研究 16:40~18:00

- 4-1) スピン分解光電子分光 座長：木村 昭夫 (広島大)  
16:40~17:00 「新しいスピン分解光電子分光装置の開発とその現状」 奥田 太一 (物性研)  
17:00~17:20 「軟 X 線角度分解光電子分光による固体結晶の 3 次元フェルミオロジー」 関山 明 (阪大)  
4-2) 新手法  
17:20~17:40 STM 「放射光励起 STM による元素分析」 江口 豊明 (物性研)  
17:40~18:00 AFM 「表面ナノスケール元素分析を目指した X 線支援非接触原子間力顕微鏡」の開発 鈴木 秀士 (北大)

懇親会 18:00~19:30

7月6日(金) 9:20~16:40

4) 軟 X 線で新たな展開が期待できる分光研究 (つづき) 9:20~11:00

- 4-3) 光電子分光 座長：松田 巖 (物性研)  
9:20~ 9:40 「V 族半金属表面の超高分解能角度分解光電子分光」 菅原 克明 (東北大)  
9:40~10:00 「分光法×回折法=サイト選択的な電子状態解析の新手法」 松井 文彦 (奈良先端大)  
10:00~10:20 「時間・空間反転対称性の破れとスピン偏極電子」 木村 昭夫 (広島大)  
10:20~10:40 「空間分解能とエネルギー分解能を上げた ARPES での展望」 木村 真一 (UVSOR)  
10:40~11:00 「光電子顕微鏡による磁性ナノ構造の磁気イメージング」 谷内 敏之 (物性研)

COFFEE BREAK 11:00~11:20

5) 時間分解軟 X 線分光 11:20~12:20

- 11:20~11:40 「表面吸着種の時間分解内殻分光の現状と今後」 座長：組頭 広志 (東大) 近藤 寛 (東大)  
11:40~12:00 「放射光を利用した時間分解軟 X 線分光の最近の動向」 松田 巖 (物性研)  
12:00~12:20 「UVSOR-II 光源加速器の現状と展望」 加藤 政博 (UVSOR)

昼食 12:20~13:40

6) コヒーレンスを利用する軟 X 線回折分光 13:40~14:40

- 13:40~14:00 「内殻準位シフト分解光電子回折による GaP 表面の構造解析」 座長：大門 寛 (奈良先端大) 下村 勝 (静岡大)  
14:00~14:20 「放射光軟 X 線回折実験で何が見えるか」 田中 良和 (理研)  
14:20~14:40 「固体表面ナノ構造における光電子分光」 中辻 寛 (物性研)

7) 光源と分光光学系の性能 14:40~16:00

- 14:40~15:00 「SPring-8 光源加速器の高度化」 座長：尾嶋 正治 (東大) 大熊 春夫 (SPring-8)  
15:00~15:20 コメント 中村 典雄 (物性研)  
15:20~15:40 「SPring-8 の軟 X 線ビームライン光学系」 大橋 治彦 (SPring-8)  
15:40~16:00 「軟 X 線領域の集光光学系 -小さいスポットと高い作業性の両立を目指して-」 雨宮 健太 (PF)

8) 討論 16:00~16:30

司会：宮原 恒昱 (首都大)

9) 研究会のまとめ 16:30~16:40

尾嶋 正治 (東大)

## SPring-8 長直線部を活用した新型アンジュレータ

田中 隆次 (理研放射光センター)

SPring-8 には 25m 程度のアンジュレータを設置することができる長直線部と呼ばれる箇所が存在する。そのうちの 1 カ所には既に周期長 32mm、磁石長 25m の真空封止型アンジュレータが設置され、X 線ビームライン BL19LXU の光源として利用されている。真空封止構造を採用することによって、25m の磁石列を隙間無く並べることが可能となり、分割化に伴う位相整合の問題を回避している。一方、軟 X 線領域における長直線ビームライン用の光源としては、アンジュレータを積極的に分割し、位相を制御することにより、偏光制御を可能にする手法が検討されてきた。この結果、8 の字アンジュレータを分割し、それぞれのセグメント間に位相調整用の磁石を設置して位相を制御することにより、あらゆる偏光に対応可能な新型アンジュレータを提案した。講演ではこのアンジュレータの原理や得られる放射光のスペックについて報告する。

## 放射光 LEEM/PEEM による表面動的過程

安江 常夫、越川 孝範 (大阪電気通信大学)

低エネルギー電子顕微鏡 (LEEM)、光電子顕微鏡 (PEEM) は表面の動的過程の観察手段として近年注目されている新しい表面電子顕微鏡である。さらに放射光と組み合わせることによって、より多くの情報を得ることができるため、世界各国の主要な放射光施設において精力的な研究が展開されている。ここでは我々が SPring-8 に設置された SR-LEEM/PEEM を用いて行ったいくつかの研究例を紹介する。

我々は SR-LEEM/PEEM が有する分光能力を有効に活用し、内殻励起で放出された内殻光電子の結像を試みてきた (XPS 顕微鏡)。一つの例として、In が吸着した Si(111) において、複数の表面再配列構造が共存した表面上に Sb を成長させた場合の結果を示す。この場合には In と Sb といった異なる化学種を区別し、その空間的な分布を SR-PEEM によりマッピングを行った。その結果、Sb を蒸着する前の表面再配列構造の違いを反映して、元素の分布が異なることが明らかとなった。この結果は In/Si(111) の異なる表面再配列構造において Sb との反応性が異なることを意味しており、反応過程を動的に観察できることを示したものである。

もう一つの例は Ag/Si(111) において、二次元的な  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  構造とその上に形成される三次元島の間で、Ag の化学結合状態が違うことを利用して、化学結合状態のマッピングを試みたものである。局所領域 XPS スペクトルからは  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  構造と三次元島では約 0.5eV のケミカルシフトが観察された。それぞれの XPS スペクトルのピーク位置で SR-XPEEM 像の取得を行い、化学結合状態の違いを反映したコントラストを得ることに成功した。こうした化学結合状態マッピングの報告例は少なく、SR-XPEEM のポテンシャルの高さを示す結果である。

発表では時間が許せば SR-LEEM/PEEM の分解能向上に向けた収差補正の試みについても報告する。

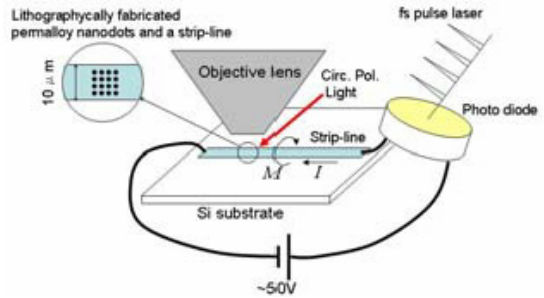
## フェムト秒レーザーを用いた時間分解 XMCD-PEEM

福本 恵紀 (JASRI)

情報通信量の拡大に伴い磁気記録素子のさらなる高速化・高密度化が必要であるが、高密度化による素子間の磁氣的相互作用が高速磁化反転に影響すると考えられている。そこで、我々は、SPring-8 軟 X 線ビームライン BL25SU において、放射光の特徴であるパルス性、元素選択性、また、(3d 遷移金属 L 吸収端での)強い磁気円二色性シグナルと高空間分解能を持つ光電子顕微鏡を組み合わせる手法で、ミクロンサイズ磁気円盤の大きさまたは円盤間距離に依存したスピンドYNAMICS 観察を目的として時間分解 XMCD-PEEM 測定を開始した。フェムト秒レーザーをポンプ光、円偏光放射光をプローブ光とした、ストロボスコーピックポンプ-プローブ測定を SPring-8 特有の複雑な蓄積リングバンチモード (684 ナノ秒間隔の 5 つのシングルバンチ+684 ナノ秒幅のバンチトレイン)で行なうために、84 MHz で発信するフェム

ト秒パルスレーザーはパルスピッカーにより 1.5 MHz のシングルバンチに同期し、バンチトレインからのシグナルはマイクロチャンネルプレート（MCP）の電圧をトレインに同期して降下することで遮断した。パルスレーザーを Strip-line (10 $\mu$ m 幅の Au ワイヤ) につながれているフォトダイオードに照射し、Strip-line に流れる電流パルスが磁場パルス (約 300 ピコ秒幅) を発生する。この磁場パルスポンプとして Strip-line 上に作製された磁気渦構造を持つマイクロサイズの磁気円盤のスピンドYNAMICS を観測した。

ここでは、主に実験概要について説明し、測定例として、磁気円盤中の磁気渦構造の周期的運動を紹介する。



## 04

### 高輝度軟 X 線放射光を用いた酸化物ヘテロ界面の電子状態解析

組頭 広志 (東京大学大学院工学系研究科)

近年、強相関電子系が引き起こす興味深い物性を利用した「強相関エレクトロニクス」が、半導体デバイスに替わる次世代の基幹エレクトロニクスとして注目を集めている。現在では、レーザー-MBE 法の進歩により、このような強相関酸化物を原子レベルで制御し、人工格子や量子細線・量子ドット等の「酸化物超構造」を作製することも可能になっている。このような強相関超構造においては、ヘテロ接合界面数 nm の領域で発現する特異な電子状態がその特性に大きな影響を与える。そのため、ヘテロ界面における特異な電子状態を明らかにすることは、これら強相関ナノ構造において発現する特異物性のメカニズムを明らかにし、新たなデバイス設計指針を構築するために非常に重要となる。公演では、これまで我々がやってきた放射光電子分光法による酸化物ヘテロ界面の電子状態研究について紹介し、現在開発を進めている走査型光電子分光装置 (3 次元ナノ ESCA) の開発現状について報告する。

## 05

### 軟 X 線発光分光による DNA、鉄タンパク質の電子状態観測

原田 慈久 (理研 SPring-8, \*現所属: 東大院工)

生命の主役を担う DNA とタンパク質は、構造を解明することで数多くの生理機能が分子レベルで説明される。一方で、分子構造だけではなく、その構造に起因する、あるいは構造を作り上げる源となる電子状態を観測することで、その構造でどのように機能が発揮されるかを解明することができる。その際に重要なことは、機能を発揮する部分の電子状態を抽出すること、またバッファ溶液中で生理活性を保持した状態で電子状態を観測することである。軟 X 線発光分光は、元素選択性を有しており、絶縁体でも測れるため、この 2 つの目的に応えることができる。

我々は、機能を発揮する部分がより明確なタンパク質として、金属タンパク質ミオグロビンと鉄貯蔵タンパク質フェリチンに注目し、軟 X 線発光分光による Fe3d 電子状態の抽出を試みている。これまで、軟 X 線分光は高真空を必要とするという「常識」があったが、近年 Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> やポリイミド系の薄膜を用いた技術の進歩により、溶液系への展開が著しく進展している。我々はこれをさらに推し進めるために、SPring-8 BL17SU に溶液専用の軟 X 線発光分光システムを構築し、これらのタンパク質を生理活性条件化で送液しながら測ることに成功した。特にミオグロビンでは、ヘム鉄に特有な低エネルギー励起状態が存在すること、最低 dd 励起エネルギーは基質に応じてわずかに変化することなどを見出した。

DNA は溶液中と乾燥状態では螺旋構造が異なることがよく知られている。これに伴う電子状態変化に興味を持たれるが、本講演では DNA の構成単位である塩基とヌクレオチドに見られる電子状態の変化について議論する。

## Ti 酸化物の X 線ラマン散乱

手塚 泰久 (弘前大)

種々の Ti 酸化物( $\text{TiO}_2$ ,  $\text{Ti}_2\text{O}_3$ ,  $\text{BaTiO}_3$ ,  $\text{SrTiO}_3$ )に関して、軟 X 線及び硬 X 線領域でのラマン散乱(XRS)/X 線発光(XES)の研究を行った。 $\text{TiO}_2$ ,  $\text{BaTiO}_3$ ,  $\text{SrTiO}_3$ は、nominal に  $d$  電子を持たない wide band gap の絶縁体である。 $\text{Ti}_2\text{O}_3$ は、 $d$  電子を 1 つ持つ Mott 絶縁体であり、約  $200^\circ\text{C}$ で金属に転移する。

軟 X 線ラマン散乱は、高エ研 PF の BL2c に設置してある回転式軟 X 線分光器によって測定した。直線偏光の励起光に対する偏光保存配置(polarized)と偏光非保存配置(depolarized)配置における Ti  $2p \leftrightarrow 3d$  共鳴ラマン散乱を測定した。測定した全ての酸化物で、電荷移動(CT)励起が観測される。また、 $d$  電子を持つ  $\text{Ti}_2\text{O}_3$ では  $d-d$  励起が観測される。一方、 $d^0$ 系である  $\text{SrTiO}_3$ の量子常誘電相で紫外線を照射した場合や  $\text{BaTiO}_3$ の強誘電相では  $d-d$  励起が観測される。これらの結果は、強誘電相転移と共有結合性の相関を示唆している。

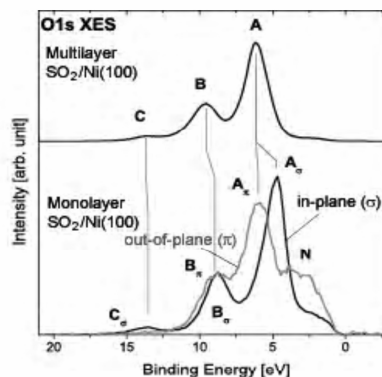
硬 X 線ラマン散乱は、BL7c, BL9a, BL15b1 で測定した。Ti  $K$  吸収スペクトルには、強い Ti  $1s \rightarrow 4p$  吸収の他に、吸収端に Ti  $1s \rightarrow 3d$  による吸収構造が観測される。Ti  $4p$  準位へ励起した場合、各サンプルで、CT 励起によるラマン散乱が観測される。ナノ粒子の  $\text{BaTiO}_3$ の場合、粒径によって CT 励起が変化する。これは、粒径変化による強誘電性変化との関連を示唆している。一方、吸収端付近で励起した場合、 $K\alpha$  蛍光(Ti  $2p \rightarrow 1s$ ;  $E \approx 4.5\text{keV}$ )のエネルギー付近にラマン散乱( $\Delta E \sim 450\text{eV}$ )が観測される。励起が吸収端より十分低い場合、ラマン活性な monopole 励起の Ti  $2p \leftrightarrow 4p$  励起が観測される(非共鳴時)。吸収端直下での励起では、共鳴によって Ti  $2p \leftrightarrow 3d$  励起によるラマン散乱が増大する。このラマンスペクトルは、単結晶  $\text{BaTiO}_3$ において、自発極方向に対する励起方向によって、変化が観測される。自発極に伴うイオン変位方向である  $e_g$  励起方向によるラマン散乱に顕著な変化が観測され、イオン変位による共有結合性の変化を反映していると考えられる。 $\text{TiO}_2$ では、Ti  $1s \rightarrow 4p$  吸収スペクトルに方向依存性が観測されるが、その変化が Ti  $2p \leftrightarrow 4p$  励起のラマン散乱に反映されている。この事は、非共鳴ラマン散乱が Ti  $4p$  のバンド構造を反映している事を示唆している。これらの結果は、多様な内殻に対する共鳴ラマン散乱測定が有効である事を示している。

## 表面吸着分子の軟 X 線発光分光

高田 恭孝 (理研・放射光科学総合研究センター)

固体表面上に吸着した分子の化学結合・電子状態を理解することは、触媒反応に代表される表面固有の反応を理解するうえで必須である。放射光を利用した軟 X 線発光分光は、光励起する内殻ホールを選択することで価電子軌道の情報を元素選択に得ることができ、さらには光学遷移過程であるため軌道の対象性を判別した情報が得られるという優れた特徴を有している。また、内殻吸収スペクトル(NEXAFS)から得られる非占有軌道の情報を組み合わせることで、吸着分子と基板との間の電荷の授受・化学結合の詳細を明らかにできる優れた手法である。

研究例として、図に Ni(100)表面に単層吸着した  $\text{SO}_2$  分子について、O  $1s$  内殻吸収端で測定した軟 X 線発光スペクトルを示した。実験は SPring-8 の BL27SU で行った。表面に平行に寝て吸着した  $\text{SO}_2$  分子の面内( $\sigma$ )と面外( $\pi$ )に拡がりをもつ軌道を分離して価電子軌道の情報が得られている。また、フェルミエネルギー近傍に基板 Ni との表面化学結合によって形成された(孤立分子には無い)軌道が観測されている。東大物性研・常行研究室による理論計算の結果、NEXAFS の結果も示しこの系の表面化学結合について紹介し、この手法の今後の展開についても述べる予定である。



- [1] T. Tokushima, Y. Harada, Y. Takata, K. Sodeyama, M. Nagasono, Y. Kitajima, Y. Tamenori, H. Ohashi, S. Tshuneyuki, A. Hiraya and S. Shin, *in preparation*.



## 軟 X 線吸収発光分光法による界面価電子状態のサイト選択的観測

山下 良之(物質・材料研究機構/SPring-8)

固体界面は、構造・化学組成がバルクとは異なることからバルクにはない興味深い物性が発現する。今日まで固体界面について多くの研究がなされてきたにもかかわらず、界面の価電子状態は平均情報として測定されてきた。界面の化学環境の異なる価電子状態を直接観測し局所価電子状態を明らかにすることは、界面物性を原子レベルで理解する上で非常に重要である。我々は SPring-8 BL27SU の軟 X 線発光分光装置を用いて入射する軟 X 線のエネルギーをチューンする事により界面価電子状態をサイト選択的に観測する事に成功した[1-5]。本講演では界面の制御が非常に重要であるデバイス材料を例にとり  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  及び  $\text{SiON}/\text{Si}$  を中心として界面価電子状態のサイト選択的観測(図 1)についての講演を行う。

### References

- [1] Y. Yamashita et al., Phys. Rev. B **73** (2006) 045336.
- [2] 山下良之等、表面科学 **26** (2005) 474.
- [3] Y. Yamashita et al., Journal de Physique IV **132** (2006)259.
- [4] Y. Yamashita et al., e-Journal of Surface Science and Nanotechnology **4**(2006) 280.
- [5] Y. Yamashita et al., Jpn. J. Appl. Phys. **46**(2007) L77.

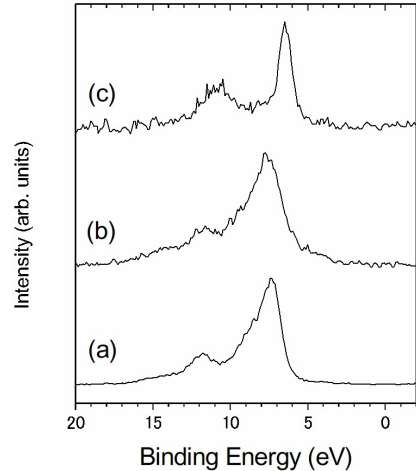


図 1 :  $\text{SiO}_2/\text{Si}(111)$ における O K-edge SXE スペクトル、(a) $\text{SiO}_2$ , (b)P3, (c)P1。ここで P3 及び P1 は界面電子状態である。

## 新しいスピン分解光電子分光装置の開発とその現状

奥田 太一 (東京大学物性研究所)

固体内の電子の運動量とエネルギーだけでなくスピンも露わに分解して観測することのできるスピン・角度分解光電子分光実験は、いわば完全な光電子分光実験と言える。一方、励起光として軟 X 線を用いた軟 X 線光電子分光では平均自由行程が紫外光による光電子分光に比べて長くなるため、固体のバルク電子状態についての情報を得ることが可能となる。従って軟 X 線を励起光としてスピン・角度分解光電子分光を行うことができれば、固体のバルク物性をこれまで以上に詳細に調べることが可能になることが期待される。

しかしながら従来のスピン検出手法はそのスピン検出効率が極めて低くスピン分解光電子分光実験は余り普及していないのが現状である。また軟 X 線では真空紫外光のエネルギー領域に比べて光イオン化断面積が二桁近く減少するのでスピン分解と軟 X 線光電子分光を組み合わせた実験は非常に困難である事が予想される。

現在我々が開発を進めている低エネルギー電子の磁性体表面による散乱確率の非対称性を利用したスピン検出装置では、これまで広く普及している Mott 散乱を用いた検出器に比べ一桁から二桁程度検出効率が大きくなる事が知られている[1]。従って SPring-8 長直線部の長尺アンジュレータから得られる高輝度軟 X 線と高効率スピン検出器を組み合わせれば、軟 X 線領域でのスピン・角度分解光電子分光の実現も夢ではなくなるかもしれない。

そこで、本公演では現在我々が KEK-PF、BL19A で開発中のスピン検出器のデザインとその開発の現状を紹介し、軟 X 線光電子分光実験との組み合わせの可能性などについて議論する。

- [1] F. U. Hillebrecht et al., Rev. Sci. Instrum. **73**, 1229 (2002).

## 軟 X 線角度分解光電子分光による固体結晶の 3 次元フェルミオロジー

関山 明 (阪大基礎工)

高輝度軟 X 線を用いた角度分解光電子分光 (ARPES) の利点の一つは、従来広く行われている低エネルギー励起 ( $h\nu < 100$  eV) ARPES と比べてバルクと異なりうる表面電子状態の寄与が抑えられ、バルク電子状態を強く反映したスペクトルが得られる[1]ことにある。これに加え、軟 X 線 ARPES の高いバルク感性=長い脱出深さは「試料表面に垂直な運動量成分  $k_z$  の分解能向上」をもたらす[2]。  $k_z$  は励起エネルギーで制御でき、物質にも依るが  $h\nu : 500-1000$  eV の測定なら 50-100 eV の変化で  $k_z$  方向の周期性をカバーできる。よって利用者が思うままにアンジュレータギャップを変えられる第 3 世代高輝度放射光の利用によって、軟 X 線 ARPES は従来の「 $h\nu$ 一定の ARPES による面内運動量空間 ( $k_x$ - $k_y$  平面) の 2 次元フェルミ面マッピング」から(原理的可能性はすでに知られているが)「 $h\nu$  制御測定による面内、及び面直方向も加わった 3 次元フェルミ面マッピング」へと質的な進化を遂げたことになる。

本講演では、3 次元強相関化合物  $CeRu_2Ge_2$  の  $h\nu$  制御軟 X 線 ARPES による 3 次元フェルミ面・電子構造[3]を中心とした我々の得た結果を報告する。この物質は 8 K 以下で強磁性を示し、この強磁性相のフェルミ面や参照系常磁性  $LaRu_2Ge_2$  のフェルミ面については量子振動測定で報告されている。しかし今回測定した 20 K の常磁性相のフェルミ面は、これらと類似する点も多い一方で、観測されていたフェルミ面の一つが本質的に消失しているという定性的な差異も見いだした。このように軟 X 線 ARPES は量子振動測定が苦手とする高温のフェルミ面観測も可能であり、「温度可変 3 次元フェルミオロジー」の新手法として今後の高輝度軟 X 線利用実験によりさらに大きく発展していく事が期待できる。

[1] A. Sekiyama *et al.*, Phys. Rev. B **70**, 060506(R) (2004).

[2] H. Wadati *et al.*, Phys. Rev. B **74**, 115114 (2006).

[3] M. Yano *et al.*, Phys. Rev. Lett. **98**, 036405 (2007).

## 放射光励起 STM による元素分析

江口 豊明 (東京大学物性研究所)

我々は、STM の試料表面に放射光を照射し、励起された内殻電子に伴い放出される電子を STM 探針で検出することにより元素情報を導き出す、いわば光電子分光の高空間分解能版と言える手法の開発を進めている。放射光の利点は、高い光強度・輝度に加え、光のエネルギー可変性にある。これを活かして、特定元素の内殻準位の電子励起や、内殻準位に起因する吸収スペクトルの測定が可能となる。図 1 は、Si(001)基板上の Au 緩衝層上に作製した Ni ドット試料に、Ni  $L_3$  吸収端 (852.7 eV) よりやや高いエネルギーの放射光 ( $h \cdot = 855$  eV) を照射しながら得た STM トポグラフィ像(図左上)と同時に得た光誘起電流像(図右上)である。図中下のラインプロファイルに示されるように、Ni ドット上では光誘起電流が増加しており、元素固有情報の二次元分布像が得られている[1]。得られた光誘起電流像から見積もられる空間分解能は約 14 nm と、既に PEEM よりも高い分解能が実現されている。より高輝度の放射光を利用することで、更なる分解能の向上が期待される。

[1] T. Eguchi *et al.*, Appl. Phys. Lett. **89**, 243119 (2006).

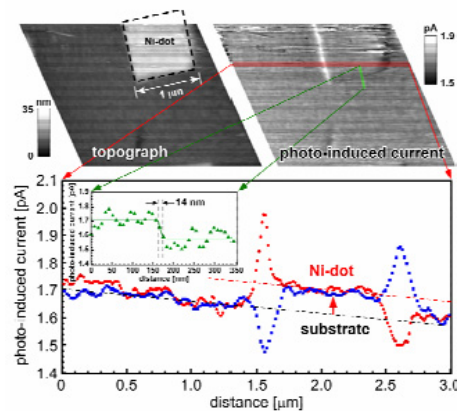


図 1 放射光 ( $h\nu = 855$  eV) 照射下で得た Ni ドット試料の STM トポグラフィ像(左上)と光誘起電流像(右上)。(図下) 光誘起電流像から得たラインプロファイル。

## 表面ナノスケール元素分析を目指した X 線支援非接触原子間力顕微鏡の開発

鈴木 秀士<sup>1,3</sup>・小池 祐一郎<sup>2</sup>・木下 久美子<sup>1</sup>・中村 元弘<sup>1</sup>・藤川 敬介<sup>1</sup>・田旺帝<sup>1,3</sup>・野村 昌治<sup>2</sup>・朝倉 清高<sup>1</sup>  
(北大触媒セ<sup>1</sup>, KEK-PF<sup>2</sup>, JST-CREST<sup>3</sup>)

我々は、絶縁試料にも適用できる NC-AFM と X 線分光による表面ナノ元素マッピング法の開発を行っている。これまで試料元素に固有な吸収端付近の X 線照射により表面-AFM 探針間に働く力場相互作用が変化する新しい物理現象を見出し、X 線支援非接触原子間力顕微鏡法(X-ray Aided Noncontact Atomic Force Microscopy; XANAM)と名付けた。この手法は探針-表面間に形成される原子間力を内殻電子の励起により制御するという方法であり、局所ポテンシャルに依存することから、高い空間分解能が期待される。これまでの計測では周波数シフト一定モードで X 線エネルギーに対する探針-試料(Au)間距離 Z の応答を測定した所、Au L<sub>α</sub>X 線吸収端エネルギー付近でピーク状の応答と、吸収端前後で緩やかな Z 増加率の変化が観測された。これは 2 つの成分の存在を示唆し、ピークは近距離力、ゆるやかな変化は遠距離力によると推察している。また最近、Au 表面を NC-AFM 観察中に、吸収端前と吸収端後の X 線掃印を繰り返した所(図 1 左)、X 線エネルギー吸収端位置に縞状の Z 応答が二次元に観測された。これは通常像(図 1 右)にはなく、この応答の有無を利用した元素マッピング法への展開が期待される。

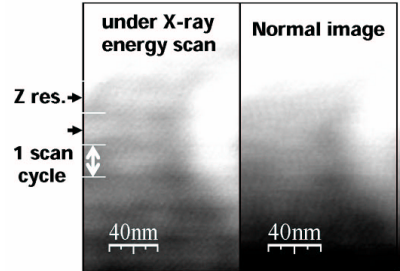


図 1 左：X 線エネルギーを吸収端前から後ろへ掃印しながら得た NC-AFM 像。右：非照射の NC-AFM 像。左には X 線吸収端位置で Z 応答が現れている。

## V 族半金属表面の超高分解能角度分解光電子分光

菅原 克明 (東北大院理)

V 族半金属 As, Sb, Bi は、グラニュー超伝導、量子サイズ効果等の特異物性を示す点から、数多くの研究がなされて来た。これらの特異物性はバルクの電子状態では説明できない点から、表面に起因した電子状態が密接に関係しているものと考えられる。そこで V 族半金属表面における電子状態の解明と、As, Sb, Bi それぞれの類似点、相違点を明らかにする目的で、As, Sb, Bi(111) 表面の超高分解能角度分解光電子分光を行い、系統的比較を行った。

Sb(111)表面においては、表面ブリルアンゾーンの $\Gamma$ 点中心の六角形状の電子面とその周りの 6 つのホール面を明確に観測した。これらを形成する 2 本のバンドは $\Gamma$ 点約 0.2eV に底を持ち、 $\Gamma$ 点でのみ縮退している。スピン軌道相互作用により分裂した表面準位は、表面での空間反転対称性の破れによって $\Gamma$ 点でのみ縮退する事が期待される事から、観測された表面準位はスピン軌道相互作用によって分裂した表面準位に帰属される。また、Bi(111)表面における表面準位は、Sb 表面のものと同様している点から、Bi 表面における表面準位もスピン軌道相互作用の影響によって分裂したものと考えられる。しかしながら As(111)表面においては、Bi, Sb とは異なり、 $\Gamma$ 点中心に小さな電子面とその周りに 3 回対称性を示すホール面のみを観測した。バルクバンド計算との比較より、As 表面のホール面はバルクに由来したホール面に帰属される。このフェルミ面形状の違いは、Bi, Sb, As の順に相対論効果が弱くなる事によって、スピン軌道相互作用が系統的に弱くなった結果、生じたものと考えられる。

謝辞

本研究は東北大学の佐藤宇史・高橋隆および物材機構の佐々木泰造・新井正男各氏との共同研究です。

## 分光法×回折法＝サイト選択的な電子状態解析の新技术

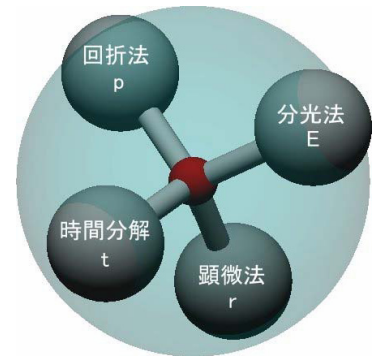
松井 文彦、大門 寛（奈良先端科学技術大学院大学）

松下 智裕（JASRI / SPring-8）

第三世代放射光施設の登場で手にすることのできるようになった高エネルギー分解能・微小ビーム・パルスという光の特徴を生かし、「顕微法」・「分光法」・「時分割測定」を組み合わせた新技术による研究が大きな成功を収めている。一方「回折法<sup>1</sup>」的測定も、高性能ビームラインと分析器の誕生により、X線回折・非弾性散乱・光電子フェルミオロジーの分野で大きな飛躍を遂げた。しかし、「回折法」的測定はデータサンプリング点数が膨大で測定に長い時間を要することから、これまで他の手法と組み合わせる試みは少なかった。

新しい光源には上記の特徴に加え、大強度・空間コヒーレンスが期待される。そこでは、照射された試料からあらゆる方向に放出される信号を余すところなく拾い集める「回折法」的測定と、「顕微法」・「分光法」・「時分割測定」とを掛け合わせる発想が有効となってくる。またこれまで挿入光源が可能にした様々な偏光特性を存分に活用する上でも「回折法」的測定は重要である。

ここでは、「回折法」的測定として二次元電子分析器による Auger 電子回折に、「分光法」として X 線吸収測定を掛け合わせた例を紹介する<sup>2</sup>。結晶表面からの Auger 電子回折には、励起原子から散乱原子の方向に前方散乱ピークと回折リングが現れ、原子構造解析を可能にする。逆にその強度が由来する励起原子が特定できる。前方散乱ピークを原子レベルのプロープとして用い、分光法と組み合わせることで、サイト選択的な電子状態解析を行った。磁性薄膜の原子層別磁気構造のほか、いくつかの適応例について触れたい。



<sup>1</sup> 広く放出・散乱量子強度の二次元角度分布測定と定義。

<sup>2</sup> 実験は SPring-8 BL25SU で行った。

## 時間・空間反転対称性の破れとスピン偏極電子

木村 昭夫（広島大学大学院理学研究科）

結晶構造において空間反転対称性の破れた系は、外部電場によって磁化を、外部磁場によって誘電分極を制御する「交差相関性」を示すとして、基礎的・応用上の立場から注目されている。さらに空間反転対称性の破れた超伝導体においてもスピン・1重項と3重項状態が混在する系として関心が高まりつつある。結晶構造において空間反転対称性が破れると、スピン軌道相互作用により電子のフェルミ面はスピン縮退が解けて、フェルミ面上においてスピン量子化軸が波数方向ごとに異なるような電子構造をとる。これらの系のスピン縮退が解けたバンド構造を直接的に観測することは重要課題であり、角度分解光電子分光はそれが可能な最良のツールと言えよう。さらにスピン検出器でスピンを区別し、波長可変な放射光と組み合わせることで、スピン縮退の解けたフェルミ面を3次元的に決定することが出来る。一方、入射光が円偏光あるいは p 偏光の場合、スピン軌道相互作用が存在すると終状態の光電子はスピン偏極することが知られる。したがって、空間反転対称性の破れた系のバンドの観察には、s 偏光配置など自在に偏光設定が可能な可変偏光型アンジュレータが好まれる。

広島大学では小型モットスピン検出器を備えた「スピン・角度分解光電子分光装置」の開発を行った。最近、空間反転対称性の破れた非磁性体表面におけるスピン分裂バンドの直接観測を行った。これら最近の研究結果を踏まえ、今後の研究展開について述べたい。

## 空間分解能とエネルギー分解能を上げた ARPES での展望

木村 真一 (分子研 UVSOR 施設)

角度分解光電子分光(ARPES)は、物質のフェルミ準位以下の電子状態を、波数ベクトルを分解して測定できる強力な実験手法である。現在は、ARPES のエネルギー分解能を上げることに主眼が置かれており、空間分解能を上げる努力はあまり行われていないのが現状である。一般に物性測定は、観測する実空間領域内の電子状態が均一であることが前提である。しかしながら、最近の強相関電子系の研究で、原子間隔に比べて桁違いに大きな相分離が予想されており、その相分離内の電子状態の直接観測および電子状態の違いをマッピングする試みも角度積分光電子分光[1]や赤外磁気光学イメージング[2]などで行われ始めている。しかしながら、電気伝導などの熱物性は特定の波数ベクトルで起こるため、角度積分光電子分光ではわずかな変化としてしか現れない。赤外分光は同じ波数における直接遷移を観測するため、ある意味で波数を特定した電子状態を決定できる。しかしながら、波長の長い赤外光は、近接場などの特殊な手法以外では、光の回折効果により数 $\mu\text{m}$ 以下の小さなスポットに絞ることは不可能である。そこで、紫外や軟 X 線の短波長の光を回折限界まで絞った ARPES が実現すると、微小領域で特定の波数での電子状態の決定が可能であるため、熱物性の起源を可視化できるものと考えられる。

以上のような考えで、UVSOR-II の新真空紫外光電子分光ビームライン BL7U に顕微分光系の設置が進行中である。しかしながら、光の最大エネルギーが 40eV であるため、回折限界まで絞っても 50nm が限界である。より波長の短い軟 X 線領域であれば、光学系の技術の向上を期待すると、さらに 1 桁小さな空間分解能を得ることが出来るものと期待できる。講演では、数 10nm の空間分解能で観測可能となる物性について議論したい。

[1] D. D. Sarma et al., PRL **93**, 097202 (2004).

[2] T. Nishi et al., PRB **75**, 014525 (2007).

## 光電子顕微鏡による磁性ナノ構造の磁気イメージング

谷内 敏之 (東京大学物性研究所)

磁気記録デバイスは近年、超高密度化にともない素子の微小化が急速に進んでいる。このようなデバイスの特性は素子の磁区構造に大きく影響を受けるが、ミクロン～サブミクロンの磁性体ではバルクとは異なり磁区構造が形状や大きさに強く依存することが知られている。本講演では次世代トンネル磁気接合素子へ応用が期待されるペロブスカイト型 Mn 酸化物  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ (LSMO)のナノ構造の磁区形成を明らかにするため、放射光光電子顕微鏡(PEEM)による磁区構造の直接観察を行った。

PEEM 観察の結果、ステップ方向によって磁場印加後の磁区構造が全く異なることが明らかになった。例として、図 1 に基板のステップが縦方向に向いた  $5\cdot\mu\text{m}\times 20\cdot\mu\text{m}$  の LSMO ナノ構造の磁区構造観察結果を示す。磁場は素子の長手方向に印加後測定を行った。図 1(a)ではステップ方向に磁化の向いた単磁区構造を持っている一方、図 1(b)では磁区構造が互いに反平行の磁化を持つ複数の磁区が形成された。これらの結果はこのサイズにおいてステップ誘起の一軸磁気異方性が形状異方性よりも非常に大きいことを示している。これは LSMO の磁気・電気特性をステップによって制御することが可能であることを示唆している。本講演では磁区形成の素子サイズ依存性についても議論する。

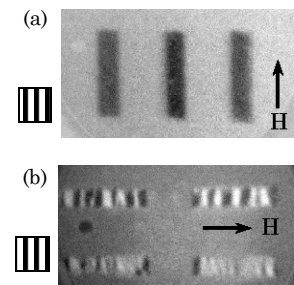
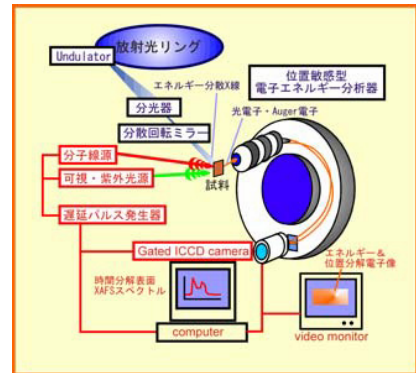


図 1  $5\mu\text{m}\times 20\mu\text{m}$  の  $\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{MnO}_3$  ナノ構造の磁区構造。ステップは縦方向に並んでいる(挿入図)。

## 表面吸着種の時間分解内殻分光の現状と今後

近藤 寛 (東大院理)

内殻分光は表面吸着種の静的な構造や電子状態を調べるうえで重要な役割を果たしてきたが、最近では、吸着種の動的な過程を追跡する研究にも用いられ始めている。数秒から数十秒ごとに表面反応のキネティクスや膜成長過程を XPS や NEXAFS で追跡しそのメカニズムを調べることが可能である。これらは不加逆的な表面プロセスを時分割で追いかけるアプローチであるが、繰り返し可能な表面プロセスに適用することで時間分解能を上げることが可能である。我々は、表面に飛来する分子が誘起する過渡的な吸着状態を時間分解的に調べることが目標として、パルス分子線と時間分解型の XPS や NEXAFS を組み合わせ、ミリ秒オーダーの時間分解実験を行ってきた。パルス分子線については、ソレノイドバルブによって射出した超音速分子線を差動排気を介してチェンバーに導入した。時間分解実験は、パルス分子線の表面への到着をトリガーにして、遅延時間を変えながらその後の吸着種の時間変化を追跡した。X 線光路上に設置したメカニカルシャッター、もしくはゲートのかかる検出系によって時間分解能を持たせた。単分子層の吸着種に対して、前者の場合で 10 ミリ秒、後者の場合で数百マイクロ秒程度の時間分解能を得られる。このような実験セットアップで、エチレンや一酸化窒素の分子線飛来に伴う過渡的な吸着状態を捉えることができた。本講演では、このような吸着種の内殻分光の時間分解実験の現状を紹介するとともに、今後の展開について議論する。



## 放射光を利用した時間分解軟 X 線分光の最近の動向

松田 巖 (東大物性研究所)

蓄積リング内の電子はいわゆるバンチを形成し、そこから軌道放射された光はパルス光である。そのパルス構造は電子バンチの時間的広がりによって決定され、例えば Spring-8 の場合放射光パルス幅は 40 ps 程であり、またパルス間隔は 2 ns (マルチバンチモード) 及び 5 $\cdot$ s (シングルバンチモード) である。この放射光パルスを利用した時間分解分光の実験では、ナノ秒 (ns) 以下の時間分解能が要求される場合、パルスレーザーなどを用いたポンプ・プローブ法が用いられる[1]。これまでの放射光とレーザーの同期技術開発の結果、現在軟 X 線光電子顕微鏡はサブナノ秒 (~300ps) の分解能で時間分解イメージングができ[2]、また軟 X 線光電子分光は 1 ナノ秒の時間分解能で測定されている[3]。

一方、蓄積リング内の電子バンチにフェムト秒レーザーを照射すると laser-slicing 現象により電子バンチの一部が圧縮し、その結果フェムト秒 X 線パルスが発生する[4]。現在この超短 X 線パルスを利用した軟 X 線回折法により様々な相転移における非平衡状態を直接調べられている[5]。

本講演では、これら最近の放射光を利用した時間分解軟 X 線分光の現状を紹介し、さらに今後の展開について議論する。

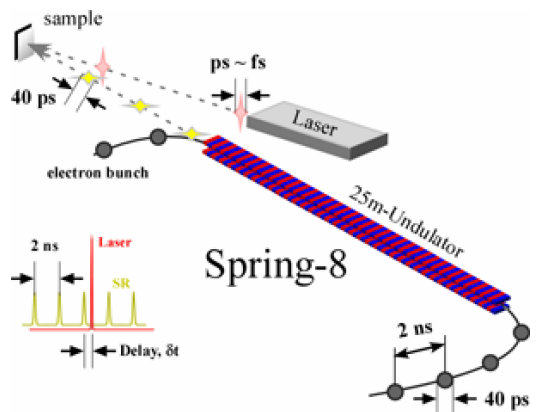


図 25 m アンジュレータを用いたポンプ・プローブ実験

[1] 足立伸一、田中義人、放射光 **20**, 117 (2007); [2] J. Raabe *et al.*, Phys. Rev. Lett. **94**, 217204 (2005); [3] T. Giebel *et al.*, Rev. Sci. Instrum. **74**, 4624 (2003); [4] R. W. Schoenlein *et al.*, Science **287**, 2237 (2000). [5] A.Cavalleri *et al.*, Nature **442**, 664 (2006).

## UVSOR-II 光源加速器の現状と展望

加藤 政博 (分子科学研究所)

UVSOR-II 光源加速器は 2003 年の大規模な高度化改造以降、順調に運転されている。エミッタンスは 27nm-rad、アンジュレータ設置可能な直線部は短いものも含めると合計 6 箇所あり、そのうち 4 箇所にはアンジュレータが設置済みである。真空封止型 2 台と可変偏光型 2 台が稼動している。

運転時間は現在 1 日 12 時間である。朝 9 時と午後 3 時に入射を行う。マルチバンチ運転では 350mA、シングルバンチ運転では 100mA を蓄積する。約 1 年前より、申請上は 24 時間運転が可能となっている。マンパワーの問題でユーザー運転は 12 時間としているが、深夜にビームライン調整や以下で述べる自由電子レーザー利用を行うケースが増えている。

UVSOR-II は専用のブースターシンクロトロンを入射器としているが、そのエネルギーは蓄積リングのエネルギー 750MeV よりも低い 600MeV であり、いわゆるフルエネルギーでの入射は不可能であった。しかし昨年夏にシンクロトロンの電磁石電源を更新し、750MeV までの加速が可能となった。その後ビーム輸送路の電磁石電源も更新され、フルエネルギー入射が可能となった。放射線遮蔽壁の増強なども行われ、近い将来のトップアップ運転の実現に向けて準備が着々と進んでいる。UVSOR-II の自由電子レーザーは、光源加速器の性能向上に伴い、波長 200–250nm 付近の深紫外領域で 1 W を超えるような大強度発振が可能となった。いくつかのユーザーグループの利用が始まっている。また、電子ビームと同期の取れるフェムト秒レーザーが導入され、レーザーバンチスライスやコヒーレント高調波発生といった新しい光発生技術の開発が進んでいる。

## 内殻準位シフト分解光電子回折による GaP 表面の構造解析

下村 勝 (静岡大学電子工学研究所)

アルゴンイオン衝撃とアニール処理 (IBA: ion bombardment and annealing) による表面の清浄化は簡便な手法であるため、様々な場面で用いられている。これまで、この IBA 処理によって得られた GaP(001)  $2 \times 4$  表面に関して、低速電子回折 (LEED)、走査トンネル顕微鏡 (STM)、第一原理計算によって研究され、 $2 \times 4$  表面は mixed-dimer (MD) モデルと呼ばれる Ga と P のダイマーを含んだ構造である可能性が示唆されている [1,2]。しかし、その構造の詳細について回折法を用いた研究は報告されていない。本研究では内殻準位シフト分解光電子回折 (PED) を用いて構造と Ga 3d, P 2p における内殻準位シフトの起源について詳しく調べた。

$2 \times 4$  表面の Ga 3d スペクトルには、バルク成分 (B) に加え低結合エネルギー側 (S1) と高結合エネルギー側 (S2) にシフトした表面成分が観察された。図 1 (a)-(c) は S1, S2, B 成分の PED パターンである。ここで右半分のパターンは実験結果、左半分のパターンはシミュレーション結果である。シミュレーションにおいて (d) に示すような MD モデルを用い、S1 に 4 配位の表面 Ga 原子 (実線)、S2 に 3 配位の表面 Ga 原子 (破線) を想定すると実験とシミュレーションの一致が良いことが分かった。講演ではこの他 P 2p の内殻準位シフトの起源についても議論する。

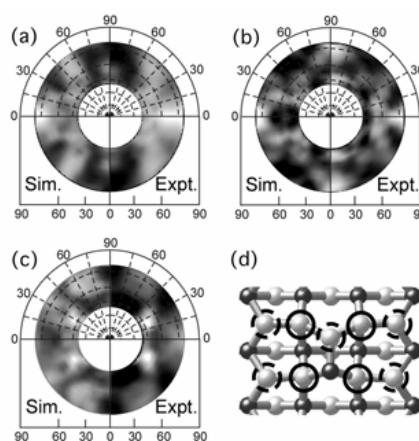


図 1 (a)S1, (b)S2, (c)B の Ga 3d PED パターン。(d)MD モデル。

## 放射光軟 X 線回折で何が見えるか

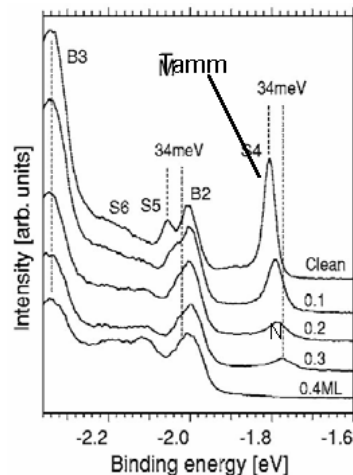
田中 良和 (理化学研究所・播磨研究所)

軟 X 線を用いた回折実験は近年海外で盛んに行われるようになってきた。その歴史的な一因として、共鳴交換散乱法を用いた強相関物質の軌道秩序の直接観察が挙げられる。硬 X 線を用いた共鳴 X 線回折では、3d 金属元素が持つ軌道自由度が織りなすモチーフを直接観察することはできない。ところが軟 X 線を用いれば、1s→3d への双極子遷移によって直接、3d 電子状態の情報が得ることができる。本講演では、軟 X 線回折実験の研究背景、現在どのような測定がなされているかを紹介し、さらに我々が精力的に研究を行っている水晶 (quartz) の共鳴 X 線回折実験について紹介する。水晶には鏡像異性体 (enantiomer) が存在し、右手、左手水晶がある。右手、左手の選別は、通常その結晶の旋光性を調べることでなされるが、X 線回折実験で右手、左手を選別することはできない。では、軟 X 線共鳴 X 線回折を用いれば、その選別が可能であろうか。これが、我々の現在のテーマである。

## 固体表面ナノ構造における光電子分光

中辻 寛 (東京大学物性研究所)

遷移金属表面での気体分子の解離吸着等の化学反応性に、表面の格子歪みが重要な役割を果たすことが知られている。これまで、表面に機械的応力を加えたり [1]、アルゴンバブルの導入による局所歪みを加えることで [2]、格子歪みと反応性の相関が議論されているが、これらは所謂 *d* バンドモデルでの定性的な理解にとどまっている。すなわち、格子定数とともに *d* バンドの幅と重心が変わり、反応に伴うエネルギー利得が変わるという描像である。しかしながらこのモデルが適用できない系もあり、この問題の理解を深めるには、どのような対称性の表面状態が、どのようにエネルギーシフトするかの詳細な情報が必要と考えられる。我々はその第一段階として、Cu(100) 表面に 5nm 四方の窒素吸着領域を形成することで、その隙間に残る Cu 清浄表面に局所的な圧縮歪み (数%程度) を導入し、表面歪みによるバンド構造の変化を明らかにしたので、その詳細を紹介する [3]。測定は、*3d* バンド上端の Tamm 状態、下端の表面状態 (S7)、および *sp* バンド (Shockley 状態) について行った。エネルギーシフトは最大でも数十 meV 程度で、高分解能測定が不可欠である。電子構造の変化は、弾性体モデルに基づく第一原理計算により、定量的に良く再現された。ただし、化学反応性との相関については今後さらなる研究が必要である。また、光電子回折等による格子歪みの定量解析により、表面ナノ構造における表面歪みと電子状態の相関について、さらに理解が深まると期待される。



Tamm 状態 (S4) が歪みとともにフェルミレベル側にシフトする様子。

## References

- [1] Uesugi-Saitow *et al.*, PRL **88** (2002) 256104.
- [2] Gsell *et al.*, Science **280** (1998) 717.
- [3] D. Sekiba *et al.*, PRL **94** (2005) 016808, PRB **75** (2007) 115404.



## SPring-8 光源加速器の高度化

大熊 春夫（高輝度光科学研究センター）

2004年5月から開始したSPring-8のTop-up運転（2005年9月から6.3nm-radから3.4nm-radに低エミッタンス化）は、飛躍的に放射光利用の利便性を向上させた。それ以後も、Top-up運転におけるビーム性能の向上は続けられてきたが、現在の一番の課題は、孤立バンチからのパルス放射光利用における孤立バンチの大電流化である。大電流化に当たっての問題点の1つは、ゲートバルブやベローズ部などの発熱である。このために行われている機器開発等の状況を説明する。

東大物質科学アウトステーション計画など、SPring-8の特徴ある資産である30m長直線部の本格的な利用が始まっている。30m直線部はその前後のセルを含む約90mのベータトロンの位相進みを $2\pi$ として、この区間の透明性を確保することで実現しているが、実際にはエネルギーのずれた電子に対してこの条件が成立しないために、局所クロマチシティ補正で緩和してはいるものの、ビーム寿命の低下とダイナミックアパチャーが小さくなる事による入射効率の低下という問題を抱えている。これに対して局所クロマチシティ補正で発生する非線形キックを新たに設置するカウンター6極電磁石で打ち消す方法を考案した。これにより、ビーム寿命、ダイナミックアパチャーの両方の改善が出来るだけでなく、長直線部のオブティックスを独立に変更することが可能になる。すなわち、長直線部に設置する長尺アンジュレタなどのデバイスに少しでも適したベータ関数の値を取ることが出来る。

この他に、10T超伝導ウイグラーによるMeV高エネルギー放射光の生成、バンチキックによる短パルス放射光の生成、Low- $\alpha$ オブティックスによる短バンチ化の試み、遠赤外レーザーコンプトンによる10MeVフォトンの生成、将来のリング改造を視野に入れたエミッタンス低減化ラティスの検討等を話題とする予定である。また、SPring-8でのレーザースライシングによる短パルスX線生成の可能性についても触れてみたい。

## SPring-8の軟X線ビームライン光学系

大橋 治彦（高輝度光科学研究センター）

SPring-8では、4本の軟X線専用のビームラインが稼動しており、建設当初から活発な利用研究が展開されている。約0.3~2keVのエネルギー領域で、高分解能の軟X線が提供されており、利用研究に応じて直線偏光あるいは円偏光を利用可能である。

軟X線領域では挿入光源によって偏光を制御しており、各ビームラインの特徴のひとつとなっている。SPring-8の挿入光源はいずれも、軸上パワーを実用的な大きさに抑制している点では共通であるが、光学系にとって、その軸上パワーの大きさや分布には有意な差がある。

一方、ビームライン光学系への要請として高分解能であること、明るいことに加え、後置光学系を含めて微小ビーム集光へのニーズが高まっている。これら光の性能を高度化するとともに、より「安定な」光学系が望まれている。

安定性は、光学系への熱負荷の処理方法によって大きく影響される。熱的な要因による光学素子や調整機構の変形、光学素子の冷却流体等に起因する振動などにより、長時間あるいは短時間での安定性を損なう恐れがある。エネルギー分解能やビームサイズが極限化するほど、求められる安定性への要請は厳しくなる。

本講演では、既存のビームライン光学系の安定性を熱負荷と冷却の観点から紹介し、計画されている軟X線長尺アンジュレタビームラインでの技術的課題に触れたい。

## 軟 X 線領域の集光光学系—小さいスポットと高い作業性の両立を目指して—

両宮 健太 (KEK-PF, JST-CREST)

軟 X 線領域において微小なスポットを得るために用いられる光学素子として、ミラーとゾーンプレートが挙げられる。それぞれの利点・欠点をまとめると、おおむね以下ようになる。

## [ミラー]

集光条件が波長によらないため、光学系は固定したままでよい。

製作精度の問題から市販品では小さいスポットが得られないことが多い。

斜入射で用いるためにある程度の大きさが必要で、その分作業スペースが減る。

入射角を精密に調整する必要がある。

## [ゾーンプレート]

集光条件が波長に依存するため、波長掃引の際にゾーンプレートの位置を変える必要がある。

市販品でも比較的質の高いものが入手でき、小さいスポットが容易に得られる。

直入射配置になるため素子が小さくてよく、スペースをとらない。ただし、ゾーンプレートの下流にアパーチャーが必要なので、試料まわりのスペースは必ずしも広くはない。

一方、これらの光学素子に共通して、微小なスポットを得るために縮小率の高い光学系を組もうとすると、(仮想)光源から光学素子までの距離を長くするか、光学素子から試料までの距離を短くするか、またはその両方が必要になる。前者については建物の大きさで上限が決まってしまう、後者については試料まわりのスペースを犠牲にすることになる。本講演では、これを解決する可能性の一つとして二段階集光光学系[1]を紹介する。これは一段階目でミラーもしくはゾーンプレートによって高い縮小率で集光を行い、そこを仮想光源として二段階目でゆるい集光(例えば 1:1 集光)を行うことで、小さいスポットと広い作業スペースを両立させようというものである。

[1] K. Amemiya et al., Jpn. J. Appl. Phys. 46 (2007) 3640.

## 物性研究所短期研究会

# Foundations and Applications of the Density Functional Theory (密度汎関数理論の基礎と応用)

日時：2007年8月1日(水)～3日(金)

会場：東京大学物性研究所6階講義室

提案者 杉野 修 (物性研)  
高田 康民 (物性研)  
吉本 芳秀 (物性研)  
前橋 英明 (物性研)  
大谷 実 (物性研)  
前園 涼 (北陸先端大)  
常行 真司 (東大理)  
W. Pickett (カリフォルニア大デービス校)

本研究会は物性理論研究部門で行っている滞在型国際ワークショップ・シンポジウムの一環として企画されたものである。今回のテーマは密度汎関数理論の基礎と応用および発展ということで、トピックスを密度汎関数理論の理論基盤の深化、スーパーコンピュータを用いた大規模シミュレーション、励起状態や動的過程の研究、強相関電子系を扱うための取り組みなどにフォーカスしての開催となった。発表は招待講演が33件、ポスター発表が23件、参加者は発表者を含め110名を数えた。ポスター発表は初日の夕方18:15から、パンケットは二日目の夕方18:30からいずれも物性研究所本館6階のロビーで開かれた。

当該分野における研究の広がりや目を見張るものがあり、各方面で著しい進展がみられている。それを反映して興味深い発表が相次いだ。例えば理論的側面では、多体系を独立電子系にマップするKohn-Shamの枠組みを超えるいくつかの試みや、自由電子系から交換相関相互作用を導き出す局所密度近似を超えた数々の定式化などが紹介された。これらは、より強い電子相関効果や弱い相互作用(van der Waals力など)に対しても密度汎関数理論を適用するための重要なステップになると考えられる。また、超伝導やレーザー励起現象などに対する新たな取り組みも紹介された。

また大規模シミュレーションの分野では、地球シミュレータ等の巨大計算機を用いた巨大計算が可能になり、そのために応用範囲が著しく広がっていることが報告された。さらにそのような計算の精度を向上させるためのアルゴリズムが進展している様子も紹介された。

強相関物質を扱うための密度汎関数理論を越えた理論体系(あるいは密度汎関数理論と多体電子理論を組み合わせたハイブリッド)に関する研究も多数紹介され、着実に計算可能な物質の範囲が広がっていることが分かった。この強相関物質に対する取り組みは世界的にも精力的に行われ最も発展著しい分野であるが、日本では比較的若い研究者が中心となって取り組み、成果を出していることが分かった。

この他に、量子化学の分野での密度汎関数理論の発展や第一原理計算の産業応用などに関する講演があった。また実験と理論が密接に連絡を取り研究を著しく進展させた例(カーボンナノチューブ等)の紹介がなされた。

なお、この三日間のシンポジウムの前後に開催された約三週間にわたる滞在型国際ワークショップでの講義や、大学院生に向けて特別に開催されたチュートリアル、発表後に行われた研究討論(およびインフォーマルな討論会)を併せて考えると、当該分野において発展しているトピックを実に深く掘り下げ、膨大な時間をかけて議論を行ったことになる。その結果、有意義な会議になったと総括することができるであろう。

以下にシンポジウムのプログラムを添付する。本報告書では招待講演者の要旨のみを添付するが、全要旨を希望の方には要旨集(A4, 60頁)を配布することが可能なのでメーリングリスト(fadft\_secretary@issp.u-tokyo.ac.jp)まで連絡していただきたい。

## Symposium Program

### August 1, Wednesday

#### Morning Session I (Chair: Y. Takada)

- 09:10~09:30 K. Ueda (ISSP, University of Tokyo)  
Opening
- 09:30~10:00 E. K. U. Gross (Freie Universität Berlin)  
How to predict the critical temperature of superconductors: A density functional perspective
- 10:00~10:30 K. Yabana (University of Tsukuba)  
Simulation for electron dynamics in solid under intense laser pulse
- 10:30~11:00 A. V. Krasheninnikov (University of Helsinki)  
Simulations of irradiation-induced effects in carbon nanostructures

Coffee Break (11:00~11:30)

#### Morning Session II (Chair: T. Miyake)

- 11:30~12:00 H. Akai (Osaka University)  
Exact Exchange Method Applied to Diluted Magnetic Semiconductors
- 12:00~12:30 T. Fujiwara (University of Tokyo)  
First Principles Electronic Structure Calculations for Strongly Correlated Systems
- 12:30~13:00 S. Y. Savrasov (UC Davis)  
Predictive Capabilities for Strongly Correlated Systems: Spectral Density Functional Theory and its Applications

Lunch Break (13:00~14:00)

#### Afternoon Session I (Chair: O. Sugino)

- 14:30~15:00 G. Galli (UC Davis)  
Recent progress in the description of excited state properties of liquids and nanostructures
- 15:00~15:30 M. Otani (ISSP, University of Tokyo)  
First principles description of electrochemical reactions at water/ Pt (111) interface
- 15:30~16:00 Y. Tateyama (NIMS)  
Density-functional constrained molecular dynamics energy gap (DF-CMD-EG) method for free energy calculation of chemical reaction coupled to electron transfer

Coffee Break (16:00~16:30)

#### Afternoon Session II (Chair: G. Galli)

- 16:30~17:00 T. Miyazaki (NIMS)  
Developments and applications of a linear-scaling DFT code CONQUEST
- 17:00~17:30 T. Ogitsu (Lawrence Livermore National Laboratory)  
Ab-initio study of the ground state structure of elemental boron
- 17:30~18:00 F. Gygi (UC Davis)  
Computation of Maximally Localized Wannier Functions and Compact Representations of Kohn-Sham Invariant Subspaces
- 18:00~18:15 Y. Yoshimoto (ISSP, University of Tokyo)  
Extended multicanonical method combined with thermodynamically optimized potential

**Poster Session (18:15~20:15)**

- P01 K. Yoshizawa (Sophia University)  
Improved STLS approach to the correlation energy of the spin polarized electron gas
- P02 M. Shimomoto (ISSP, University of Tokyo)  
Effect of Quantum Fluctuations on the Binding Nature of Three- and Four-body Coulomb Systems
- P03 M. Saito (Kanazawa University)  
Two-component density functional calculations on lifetimes of positrons in a variety of crystals
- P04 Y. Ono (Chiba University)  
The non-empirical versatile calculation method of the van der Waals interaction for isolated systems
- P05 K. Sodeyama (University of Tokyo)  
Transcorrelated method applied to solids: Total energy and band structure calculation
- P06 O. Miura (University of Tokyo)  
LDA+DMFT method with Iterative Perturbation Theory and its application to ferromagnetic bcc-Fe, fcc-Ni and anti-ferromagnetic NiO
- P07 Y. Nohara (University of Tokyo)  
Electronic structure of NiO and MnO by GW approximation starting from LSDA+U
- P08 S. Yamamoto (CREST-JST)  
Role of inter-site Coulomb interaction on charge and stripe order of  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_4$
- P09 K. Kobayashi (NIMS)  
First-principles study of 5H-BN
- P10 T. Koretsune (Tokyo Institute of Technology)  
Electronic structures of boron-doped single-walled carbon nanotube
- P11 A. Ishii (Tottori University)  
DFT study for ferromagnetic thin film of iron silicide on Si(111) surface
- P12 K. Akagi (University of Tokyo)  
Cycloaddition of Alkene Molecules on Si(100) Clean Surface
- P13 H. Fujiwara (University of Tokyo)  
An Epitaxial SiON Layer on a SiC Surface Studied by the Density Functional Theory
- P14 M. Araidai (Tokyo University of Science)  
First-principles study on surface atom evaporation under electron field emission
- P15 T. Morishita (AIST)  
Polyamorphic transformations in liquid and amorphous silicon: A first-principles molecular-dynamics study
- P16 M. Otani (ISSP, University of Tokyo)  
A new approach to first principles calculation of charged surface/interface
- P17 S. Obata (Tokyo Denki University)  
Heitler-London Type Start Functions in Real-Space Electronic State Calculations
- P18 H. Hirai (ISSP, University of Tokyo)  
Simulation of Nonadiabatic Chemical Reaction using TD-DFT
- P19 K. Shiratori (Graduate University for Advanced Studies)  
Finite-temperature density functional calculation of a molecule in electrochemical environment
- P20 K. Koide (National Center for Geriatrics and Gerontology)  
An Unicursal method to give hydrogen atom placement of Hydrogen Hydrate Clathrate
- P21 H. Matsuura (National Center for Geriatrics and Gerontology)  
Non-Perturbation Method on Quantum Electrodynamics (Atomic Schwinger-Dyson Method)
- P22 K. Nishio (AIST)  
Electronic structure of polyicosahedral silicon nanostructures
- P23 Y. Kawashita (University of Tsukuba)  
TDDFT calculation for electron-ion dynamics in molecules under intense laser pulse

## August 2, Thursday

### Morning Session I (Chair: S. Tsuneyuki)

- 09:30~10:00 J. F. Dobson (Griffith University)  
Unusual Aspects of Dispersion Forces in Nanostructures
- 10:00~10:30 K. Burke (Department of Chemistry and Physics, UC Irvine)  
PBEsol, a generalized gradient approximation for solids and their surfaces
- 10:30~11:00 K. Kusakabe (Osaka University)  
Multi-reference density functional theory for Mott's insulators and electron-electron interaction mediated superconductivity

Coffee Break (11:00~11:30)

### Morning Session II (Chair: J. F. Dobson)

- 11:30~12:00 M. Higuchi (Shinshu University)  
Extended constrained-search theory and its applications
- 12:00~12:30 V. U. Nazarov (Academia Sinica)  
Nonlocal exchange-correlation kernel from time-dependent current density functional theory:  
Application to the stopping power of an electron liquid

Lunch Break (13:00~14:00)

### Afternoon Session I (Chair: K. Burke)

- 14:00~14:30 R. Car (Princeton University)  
Water surprises from ab-initio molecular dynamics simulations
- 14:30~15:00 K. Hirose (NEC)  
Quantum Transport Calculations through Molecules and Carbon Nanotubes
- 15:00~15:30 A. G. Zacarias (Freie Universität Berlin)  
Density Matrix Functional Theory for Molecules and Solids (Chair: E. K. U. Gross)
- 15:30~16:00 A. Selloni (Princeton University)  
Surface defects and doping in TiO<sub>2</sub>

Coffee Break (16:00~16:30)

### Afternoon Session II

- 16:30~17:00 T. Tsuneda (University of Tokyo)  
Long-range corrected TDDFT and its applications
- 17:00~17:15 C. Hu (ISSP, University of Tokyo)  
Formal derivation of nonadiabatic couplings from time-dependent density functional theory and the extension within modified linear response (Chair: Y. Tateyama)
- 17:15~17:45 K. Shiraishi (University of Tsukuba)  
How can first principles calculations give large contributions to industries?
- 17:45~18:15 S. Maruyama (University of Tokyo)  
Exciton transition energy in photoluminescence of single-walled carbon nanotubes

Banquet (18:15~20:15)

## August 3, Friday

### Morning Session I (Chair: T. Fujiwara)

- 09:30~10:00 I. Solovyev (NIMS)  
Combining DFT and many-body methods to understand correlated materials
- 10:00~10:30 T. Miyake (AIST)  
Wannier function approach to electronic excitation spectra
- 10:30~11:00 S. Tsuneyuki (University of Tokyo)  
A wave-function approach to solids

Coffee Break (11:00~11:30)

### Morning Session II (Chair: I. Solovyev)

- 11:30~12:00 R. Arita (RIKEN)  
First-principles scheme for strongly correlated electron systems with maximally localized Wannier functions: Application to black sodalite
- 12:00~12:30 H. Maebashi (ISSP, University of Tokyo)  
Pseudo-quantum criticality in electron liquids exhibited in expanded alkali metals

Lunch Break (13:00~14:00)

### Afternoon Session (Chair: R. Maezono)

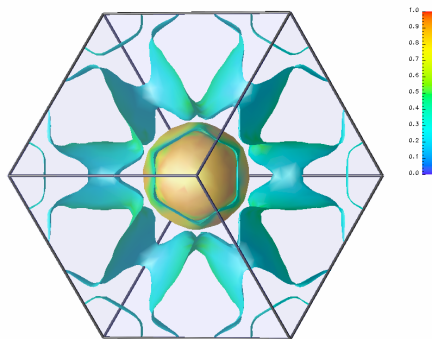
- 14:00~14:30 S. Tanaka (Kobe University)  
Biomolecular calculations based on electron-correlated fragment molecular orbital methods
- 14:30~15:00 Y. Imamura (Waseda University)  
Time-dependent density functional theory for core excited states
- 15:00~15:10 Y. Takada (ISSP, University of Tokyo)  
Closing

## Symposium Abstract

### How to predict the critical temperature of superconductors: A density functional perspective

Eberhard K. U. Gross (Freie Universität Berlin)

A novel density-functional-type approach to the description of phonon-mediated superconductivity is presented. The goal of this approach is to provide a theory with predictive power, allowing the calculation of material-specific properties such as the critical temperature. To this end, the electron-phonon interaction and the electron-electron repulsion are treated on the same footing. There are no adjustable parameters such as the  $\mu^*$  of Eliashberg theory. The formalism can be viewed as the superconducting generalization of the multi-component density-functional theory for electrons and nuclei. Approximations of the universal xc functionals are derived on the basis of many-body perturbation theory. Numerical results for the critical temperature and the gap will be presented for simple metals, for  $\text{MgB}_2$ , and for Li, Al and K under pressure. In particular, for  $\text{MgB}_2$ , the two gaps and the specific heat as function of temperature are in very good agreement with experimental data. For Li and Al under pressure, the calculations explain why these two metals behave very differently, leading to a strong enhancement of superconductivity for Li and to a clear suppression for Al with increasing pressure. For K we predict a behavior similar to Li, i.e. a strong increase of  $T_c$  with increasing pressure. Furthermore, the peculiar features of the superconducting phase of  $\text{CaC}_6$  will be analyzed. In the figure above, the gap function of  $\text{CaC}_6$  is shown on the Fermi surface. Finally, results for hydrogen under extreme pressure will be presented. It turns out that hydrogen is a three-gap superconductor whose critical temperature increases with increasing pressure until about 100K (at 500 GPa).



### Simulation for electron dynamics in solid under intense laser pulse

Kazuhiro Yabana (University of Tsukuba)

We have been developing a real-time, real-space computational method to describe electron dynamics based on the time-dependent density-functional theory (TDDFT). This method has been successful to describe linear optical responses of molecules and solids [1]. We are currently applying the method for nonlinear and nonperturbative dynamics of electrons in molecule and solids induced by intense, ultra-short laser pulse.

When the strength of the electric field of laser pulse is comparable to the electric field which binds electrons in materials, a variety of phenomena reflecting nonlinear electron dynamics are observed. They include multiphoton and tunnel ionizations, rescattering phenomena which induce high harmonic generation in atoms and molecules, and optical breakdown in dielectric materials. In my presentation, I would like to discuss our recent study on nonlinear electron dynamics induced by intense laser pulse, mainly in solid, employing the real-time, real-space implementation of the TDDFT.

Our basic equation to describe electron dynamics in solid is the time-dependent Kohn-Sham equation in which the induced polarization field as well as the external laser electric field are treated as the time-varying, spatially uniform vector potential, taking long-wavelength limit. The time-evolution of the induced vector potential is determined by the current averaged over the unit cell. When this framework is used for a weak external field, the Fourier decomposition of the induced vector potential gives us frequency-dependent dielectric function [2].

We will show our calculations for diamond, a typical dielectric material. We observe that the calculated results



show the dielectric breakdown when the laser intensity approaches  $10^{15}\text{W/cm}^2$  where the laser electric field is comparable to the electric field acting on valence electrons. We discuss in detail an interesting nonlinear dynamics described by the time-dependent Kohn-Sham scheme which induces the optical dielectric breakdown.

[1] K. Yabana, T. Nakatsukasa, J.-I. Iwata, and G.F. Bertsch, Phys. Status Solidi B243, 1121 (2006).

[2] G.F. Bertsch, J.-I. Iwata, A. Rubio, and K. Yabana, Phys. Rev. B62, 7998 (2000).

## Simulations of irradiation-induced effects in carbon nanostructures

Arkady V. Krasheninnikov (University of Helsinki)

The irradiation of solids with energetic particles such as electrons or ions is associated with disorder, normally an undesirable phenomenon. However, recent experiments on bombardment of carbon nanostructures with energetic particles demonstrate that irradiation can have beneficial effects and that electron or ion beams may serve as tools to change the morphology and tailor mechanical, electronic and even magnetic properties of nanostructured carbon systems, and first of all, carbon nanotubes.

We systematically study irradiation effects [1] in carbon nanotubes and other forms of nano-structured carbon. By employing various atomistic models ranging from empirical potentials to time-dependent density functional theory [2] we simulate collisions of energetic particles with carbon nanostructures, and calculate the properties of the irradiated systems.

In my presentation, I briefly review the recent progress in our understanding of ion-irradiation-induced phenomena in nano-structured carbon and compare the simulation results to the experimental data. I dwell on the application of density functional theory to simulations of production of defects under irradiation, their properties and the "beneficial" role of defects and impurities in carbon nanotubes and related systems. I will also point out the issues which still lack complete comprehension and further outline the simulation challenges in the field.

Finally, I will present the results of simulations of irradiation-induced pressure build-up inside nanotubes encapsulated with metals [3]. Electron irradiation of such composite systems in the transmission electron microscope gives rise to contraction of nanotube shells and thus to pressure in the encapsulate. As recently shown [3], irradiation-stimulated pressure can be as high as pressure up to 40 GPa, which makes it possible to study phase transformations at the nanoscale with high spatial resolution.

[1] See our publications listed at <http://www.acclab.helsinki.fi/~akrashen/publist.html>

[2] A.V Krasheninnikov, Y. Miyamoto, and D. Tomanek, Phys. Rev. Lett., 99 (2007) in press.

[3] L. Sun, F. Banhart, A.V Krasheninnikov, J.A. Rodriguez-Manzo, M. Terrones, and P.M. Ajayan, Science 312 (2006) 1199.

## Exact Exchange Method Applied to Diluted Magnetic Semiconductors

Hisazumi Akai (Osaka University)

The exact exchange (EXX) method, which uses the exchange terms calculated on the Kohn-Sham orbitals, in the framework of the optimized effective potential method (OPM) provides us with one of ways going beyond LDA. Though EXX level calculation is only the first step of OPM, it gives unexpectedly good results when applied to semiconductors. The calculated band gaps of various semiconductors well reproduce the experimental observation: the accuracy is comparable with those obtained by far more sophisticated calculation based on the GW method. The main reason is that the self-interactions are crucial in determining the band gap and EXX is completely free from self-interactions.

One of big issues in the theory of diluted magnetic semiconductors (DMSs) is the nature of the magnetic coupling between magnetic ions in DMSs: whether it is long-ranged or not? This is important since it finally determines the

magnetic transition temperature in the case of diluted systems. The position of the d-states energy of magnetic ions in DMS is essential for the above question. Expecting that EXX might give reasonable description on the position of the d-states energy as well as band gap of host semiconductors, we have performed the EXX calculations on various DMS systems.

The results show that the d-states are shifted considerably in the energy scale towards deeper positions compared with those obtained by LDA calculations. This means that the magnetic couplings become more long-ranged but, on the other hand, could be weakened. These results are consistent with the previous calculation using the self-interaction corrected (SIC) or pseudo-SIC LDA calculations and also the so-called LDA+U calculations. The present approach using EXX, however, has a big advantage that it is completely within the framework of density functional theory, and hence, first-principles.

## **First Principles Electronic Structure Calculations for Strongly Correlated Systems**

Takeo Fujiwara (University of Tokyo)

We are proposing two novel methods of the electronic structure calculation for strongly correlated electron systems. First one is a novel GW Approximation method named U+GWA, starting from the LSDA+U method, is proposed, where we can start the GW Approximation with more localized wave functions. Second one is a novel LDA+DMFT with the iterative perturbation theory (IPT).

GWA is the first term approximation of the many-body perturbation series and the self-energy is replaced by the lowest order term of the exchange energy with the dynamically screened interaction of the random phase approximation (RPA). In fact, this approach is successful if LSDA would give reasonably good starting wave-functions, though it may not be always true. Several trials of partially self-consistent treatment have been proposed to improve the quasi-particle band structure. The essence of these methodologies exists how to obtain localized wave-functions in transition metal oxides. Another possibility would be an establishment of a methodology to start from some unperturbed Hamiltonian which gives localized wave-functions. U+GWA is a novel methodology starting from the LSDA+U method. Examples of calculated results will be shown for antiferromagnetic NiO and  $V_2O_3$  and we will show a good agreement of the band gap and spectrum with those of experiments.

We also propose a novel LDA+DMFT method with IPT in order to include all orbitals s, p and d, instead of projection onto Wannier type wave-functions. IPT is an approximation method for the self-energy of many-body Green's function, an interpolation method of the self-energy between that of the strong U limit and that of the high frequency limit. IPT is actually quite efficient in the calculation of multi-orbital case and the case of many atoms in a unit cell. Since our LDA+DMFT can change the hybridization mixing as a result of strong Coulomb interaction, it can establish a character of the charge-transfer type antiferromagnetic insulator of NiO with a good agreement of the value of the band gap and spectrum.

## **Predictive Capabilities for Strongly Correlated Systems: Spectral Density Functional Theory and its Applications**

Sergey Y. Savrasov (UC Davis)

Density functional theory (DFT) known to work well for weakly correlated materials fails to attack real strongly correlated phenomena, and recent progress in understanding those using many-body model-hamiltonian-based dynamical mean-field theory (DMFT) has triggered developments of new approaches for computational material science in searching for alternatives to DFT. In this talk, one of such new techniques, a spectral density functional theory [1], which considers total free energy as a functional of a local electronic Green function, will be discussed. Local dynamical mean-field theory is seen as an approximation within this functional approach, which can be used

for practical calculations. Illustrations of the method to compute total energies, local excitational spectra, lattice dynamics and other properties of strongly correlated systems will be given.

[1] S. Savrasov, G. Kotliar, and E. Abrahams, *Nature* 410, 793 (2001).

## **Recent progress in the description of excited state properties of liquids and nanostructures**

Giulia Galli (UC Davis)

Recent progress and open problems in the description of excited state properties of liquids (in particular water) and nanostructures (in particular Si rods and nanoparticles and simple organic molecules on gold surfaces) will be discussed. Calculations will be presented, that are based on many body perturbation theory, in particular GW, and approximate treatments of dielectric matrices.

## **First principles description of electrochemical reactions at water/Pt(111) interface**

Minoru Otani (ISSP, University of Tokyo)

To elucidate microscopic details of an electrochemical reaction that takes place at the electrode-electrolyte interface has been an issue of long standing in the electrochemistry as well as the surface science. One of the reasons for this is the following: An electrochemical reaction is promoted by an applied bias in an experiment whereas it is difficult to control the bias potential in a conventional first principles molecular dynamics (FPMD) simulation. Thus we cannot simulate and analyze the electrochemical reaction, which would not occur spontaneously, by a FPMD simulation. To overcome this problem two of the present authors have developed a new method, effective screening (ESM) method [1], to calculate biased surface/interface. This method can directly treat the nonrepeated slab model with use of a Green's function technique. In this research, we have carried out FPMD simulations for the initial step of the hydrogen evolution reaction (HER) at water/Pt(111) interface by utilizing the ESM method. We model the water/Pt(111) interface as a slab model and put one more hydrogen atom in the form of  $\text{H}_3\text{O}^+$  into the calculation cell.

In the present talk, after characterizing the ESM method and our simulation model, we will present following results. With increasing applied potential, the excess proton is bound in the first water layer and diffuses in this layer region via the  $\text{H}_5\text{O}_2^+$  complex. When we applied substantially strong potential, the excess proton is adsorbed onto the Pt surface. The adsorption is accompanied by a transfer of an electron from the interface state. These results show that we have succeeded in simulating one of the electrochemical reactions by the FPMD+ESM simulation.

[1] M. Otani and O. Sugino, *Phys. Rev. B* (2006) 73, 115407.

## **Density-functional constrained molecular dynamics energy gap (DF-CMD-EG) method for free energy calculation of chemical reaction coupled to electron transfer**

Yoshitaka Tateyama (National Institute for Materials Science)

Chemical reactions with electron-transfer in solution, so called "redox reactions", play crucial roles in diverse topics such as battery, fuel cell, catalysis, corrosion, photosynthesis. Fundamental quantities of redox reactions are usually characterized by free energies, which are mainly governed by structural fluctuations of the target species (solute) as well as the environment (solvent). The free energy changes among different charged states associated with electron transfer should be taken into account as well. In most redox reactions, change of chemical bonds is

coupled to the electron transfer. Therefore first-principles free energy calculation method that can involve change of the electron number as well as bond breaking/formation is quite desired for quantitative investigation of the above phenomena of interest.

For this purpose, we have recently developed novel computational methods for redox reactions [1,2]. The density-functional molecular dynamics energy gap (DF-MD-EG) method [1] is derived from statistical mechanics for redox couples and the Marcus theory of electron transfer. It is found that this formulation is quite compatible with the fundamentals of DFT. However it is only applicable to electron transfer process without bond change in practice. Then, combining this method with constrained MD (CMD) scheme of blue-moon ensemble, we have newly constructed the DF-CMD-EG method [2] that can deal with free energies of bond breaking/formation coupled to electron transfer, based on the fundamental principles of quantum and statistical mechanics.

We have applied this DF-CMD-EG method to a water cleavage reaction coupled to electron transfer on a transition metal oxide ion in aqueous solution and demonstrated that it can well reproduce experimental reaction free energy. We consider that this will open new perspectives for first-principles investigation of electron transfer reactions coupled to chemical bond breaking/formation.

[1] Y. Tateyama, J. Blumberger, M. Sprik, and I. Tavernelli, *J. Chem. Phys.* **122**, 234505 (2005).

[2] Y. Tateyama, J. Blumberger, T. Ohno, and M. Sprik, *J. Chem. Phys.* **126**, 204506 (2007).

## Developments and applications of a linear-scaling DFT code CONQUEST

Tsuyoshi Miyazaki (National Institute for Materials Science)

We report our recent progress in developments and applications of our linear-scaling DFT code CONQUEST. The code is efficient on massively parallel computers and has an ability to treat the systems containing more than ten thousands of atoms. The code is based on the strategy of minimizing the total energy with respect to the Kohn-Sham density matrix, and the practical techniques for implementing this strategy will be briefly summarized. The code can be run at different levels of precision, ranging from empirical tight-binding, through *ab initio* tight-binding, to full plane-wave precision, and the way in which this is achieved will be outlined.

As one of the research example by CONQUEST, we show our theoretical study on the nanostructured Ge 3D islands on Si(001). We demonstrate that it is now possible to perform DFT calculations on such large and scientifically important systems. We have succeeded in employing DFT structure optimization on the systems containing more than 20,000 atoms. We are also using the code for the study on biological systems, and in preparation for large-scale calculations on DNA systems, we have recently calculated single DNA bases and on DNA base pairs and compared the results with those obtained by other codes. The results of these test calculations will be given with our future targets.

We have recently released the beta version of the code. We plan to release the code under a GNU General Public Licence soon.

## *Ab-initio* study of the ground state structure of elemental boron

Tadashi Ogitsu (Lawrence Livermore National Laboratory)

It is generally considered that an elemental material solidifies into a crystal form with a full translational symmetry. To the best of my knowledge, helium is only the well-known exception in the periodic table, which does not solidify at  $T=0\text{K}$  at ambient pressure. Boron, the fifth element in the periodic table, is known to have a peculiar solid phase; the believed-to-be most stable structure at ambient condition has partially occupied sites (POS, 23 out of 320 atoms per hexagonal cell), therefore the translational symmetry is likely to be violated. Since this solid form,  $\beta$ -rhombohedral boron ( $\beta$ -boron), is usually made from its melt by slow cooling, it might be reasonable to assume that

$\beta$ -boron is a thermodynamically stable only at high temperature due to the entropic contribution from the POS. Indeed, many of previous *ab-initio* studies, except for one, concluded that a simpler allotrope of boron,  $\alpha$ -rhombohedral boron is more stable than  $\beta$ -boron at T=0K, though the observed POS were not fully counted in their studies.

We have performed the first-ever global optimization on the POS configuration using the method combining the discrete lattice model Monte Carlo and the *ab initio* DFT calculation and found that  $\beta$ -boron is more stable than  $\alpha$ -boron at T=0K. The keys to understand the stabilization mechanisms of  $\beta$ -boron are the followings: The imbalance in the electron deficiency among of its building units, the local instability in the one of building units, and the three-center bond unique to boron. *Boron is likely to be an exceptional case in the periodic table, whose ground state structure is an imperfect crystal due to intrinsic frustration.*

## Computation of Maximally Localized Wannier Functions and Compact Representations of Kohn-Sham Invariant Subspaces

Francois Gygi (UC Davis)

Maximally Localized Wannier Functions (MLWFs) are useful for computations of physical properties such as the polarization in insulators. They can be computed using iterative algorithms to minimize the wavefunction spread, but also by approximate simultaneous diagonalization of non-commuting matrices [1]. In large-scale electronic structure calculations, the cost of a simultaneous diagonalization scales as  $O(N^3)$  for  $N$  electrons. This unfavorable scaling makes it necessary to develop efficient scalable algorithms for massively parallel computers. We present a new parallel algorithm for simultaneous diagonalization and demonstrate its scalability on up to 1024 processors for applications to the calculations of MLWFs.

Simultaneous diagonalization can also be used to compute reduced numerical representations of the solutions of the Kohn-Sham equations. We present a data compression method that allows for *a priori* control of the error caused by the reduction process. When applied to Kohn-Sham wavefunctions expanded on a plane-wave basis, this approach leads to a substantial reduction of the size of the datasets used to restart first-principles simulations, with controlled loss of accuracy. Examples of applications to liquid water and carbon nanotubes will be presented.

[1] F. Gygi, J.-L. Fattebert and E. Schwegler, *Comput. Phys. Comm.* 155, 1 (2003).

## Extended multicanonical method combined with thermodynamically optimized potential

Yoshihide Yoshimoto (ISSP, University of Tokyo)

The author studied the combination of multicanonical ensemble method with first-principles simulations for real materials. The study focused crystal to liquid transition which is a basic procedure for material synthesis. The talk will present his recent results: a direct simulation of the crystal to liquid transition by a kind of two-component multicanonical ensemble, a multi-order multi-thermal ensemble, with an order parameter defined with structure factors that characterize the transition, and optimization of a model interatomic potential in terms of the ensemble from an accurate one called thermodynamic downfolding of a potential. These provide a principle to project a first-principles approach on a model-based approach conserving thermodynamic properties of multiple phases to a maximum extent.

## Unusual Aspects of Dispersion Forces in Nanostructures

John F. Dobson (Griffith University)

There has been much recent progress in the ab initio description of dispersion forces between condensed-matter entities. In particular, empirical and non-empirical density functionals have been derived that produce both a reasonable short-ranged behavior and a reasonable asymptotic dispersion force, when applied to a wide variety of dimers where at least one component is a small molecule. They thus describe the whole van der Waals (vdW) interaction curve.

This talk will focus on dimers made from metallic or near-metallic nanostructures that are highly anisotropic, such as carbon nanotubes or graphene planes. In contrast to the case of bulk metals, the spontaneous long-wavelength electron density fluctuations on these systems are incompletely screened, leading to predictions of unusual dispersion forces that cannot be reproduced by any of the currently popular functionals. Cases will be discussed where not only the asymptotic force, but also the force at shorter distances (but still outside the regime of substantial electron cloud overlap) should be strongly different from the predictions of conventional vdW theories.

## PBEsol, a generalized gradient approximation for solids and their surfaces

Kieron Burke (UC Irvine)

Successful modern generalized gradient approximations (GGA's) are biased toward atomic energies. Restoration of the first-principles gradient expansion for the exchange energy over a wide range of density gradients eliminates this bias. With many collaborators, I introduce PBEsol, a revised Perdew-Burke-Ernzerhof GGA that improves equilibrium properties of densely-packed solids and their surfaces.

## Multi-reference density functional theory for Mott's insulators and electron-electron interaction mediated superconductivity

Koichi Kusakabe (Osaka University)

We have found that an effective Hamiltonian of an interacting Fermion system representing the many electron system in the non-relativistic description is determined by referencing Coulomb interaction driven fluctuation in the multi-reference density functional theory (MR-DFT). In our MR-DFT, an effective Hubbard-type Hamiltonian is defined as an extended Kohn-Sham Hamiltonian, which gives a self-consistent calculation scheme applicable for the materials design. The effective interaction may be determined by adjusting local fluctuation determined by a reference calculation. A kinetic energy functional may be used as an indicator to detect occurrence of the strong suppression of fluctuation, which provides us a self-contained calculational scheme within MR-DFT.

In this presentation, we focus on the  $N$  representability satisfied in our MR-DFT. Two geometries to detect occurrence of the Mott insulating transition and the electron-electron interaction mediated superconductivity are proposed for the rigorous MR-DFT. The momentum boost technique may be used by adopting a twisted boundary condition in one direction of the Born-von-Karman boundary condition. The Harriman construction is easily generalized for the twisted boundary condition. The Meissner effect may happen for a sample with a cylinder geometry. The internal vector potential should appear, if the superconducting current flows on the surface of the ring. This broken symmetry state can be detected as a stable solution within a symmetry restricted phase space, where the  $N$  representability is again ensured. Test calculations using simplified model systems are shown.

## Extended constrained-search theory and its applications

Masahiko Higuchi (Shinshu University)

The pair density (PD) functional theory has recently attracted particular interest because it provides the obvious way to improve on the density functional theory (DFT). Ziesche first proposed the PD functional theory about a decade ago, and then many workers followed his work and have developed a variety of approaches.

Very recently, we have proposed an approximate scheme for calculating the PD on the basis of the extended constrained-search theory. By introducing a noninteracting reference system, the resultant PD corresponds to the best solution within the set of PDs that are constructed from a single Slater determinant (SSD). This PD functional theory has two kinds of merit. The first is that the reproduced PD is necessarily  $N$ -representable. This is a strong merit because the necessary and sufficient conditions for the  $N$ -representable PD are not yet known exactly. The second merit is the tractable form of the kinetic energy functional. The kinetic energy functional cannot exactly be written by using the PD alone. Some approximation is required. In this theory, we have successfully given an approximate form of the kinetic energy functional with the aid of the coordinate scaling of electrons.

On the other hand, a significant problem remains in that approach; namely, there exists the possibility that the solution might be far from the correct value of the ground-state PD. This is because the search region of the PDs may be smaller than the set of  $N$ -representable PDs. In order to improve the PD functional theory, we have to extend the search region of the PDs to the set of  $N$ -representable PDs as closely as possible.

In this paper, we present a density functional scheme for calculating the PD by means of the correlated wave function. The Jastrow wave function is adopted as the correlated wave function. By using the lowest-order approximation to the Jastrow wave function PDs, the search region for the ground-state PD is substantially extended as compared with our previous theory. The variational principle results in the simultaneous equations that are practicable to calculate the ground-state PD.

## Nonlocal exchange-correlation kernel from time-dependent current density functional theory: Application to the stopping power of an electron liquid

Vladimir U. Nazarov (Academia Sinica)

We develop a procedure for building the scalar exchange-correlation kernel of time-dependent density functional theory (TDDFT) from the tensorial kernel of time-dependent *current* density functional theory [1] (TDCDFT) and the Kohn-Sham current-density response function. Doing the local approximation on the kernel of TDCDFT results in a nonlocal approximation for the kernel of TDDFT, which is free of the contradictions that plague the standard local density approximation to TDDFT. As an application of the general formalism, we calculate the dynamical exchange-correlation contribution to the stopping power of an electron liquid for slow ions. The results of this calculation are found to be in considerably better agreement with experiment [2] than the results obtained from a conventional TDDFT calculation in the local density approximation [3].

[1] G. Vignale and W. Kohn, Phys. Rev. Lett. **77**, 2037 (1996).

[2] H. Winter, J. I. Juaristi, I. Nagy, A. Arnau, and P. M. Echenique, Phys. Rev. B **67**, 245401 (2003).

[3] V. U. Nazarov, J. M. Pitarke, C. S. Kim, and Y. Takada, Phys. Rev. B **71**, 121106 (2005).

## Water surprises from ab-initio molecular dynamics simulations

Roberto Car (Princeton University)

The electronic charge and the corresponding electric field distribution are at the origin of many of the unusual properties of liquid water. First, I will discuss how static and dynamic dielectric properties of water result from the distribution of molecular dipoles and their correlations due to hydrogen bonds. Finally, I will discuss a surprising charging effect that occurs at the interface between water and hydrophobic substances.

## Quantum Transport Calculations through Molecules and Carbon Nanotubes

Kenji Hirose (NEC Corporation)

Recently much effort has been focused to measure the transport properties of single molecules and carbon nanotubes (CNT) bridged between electrodes for the molecular electronics. Since it is still difficult to construct well-characterized nanometer-scale device system between electrodes, theoretical approaches based on the first-principles calculations become important to characterize the transport properties of such nanometer-scale devices.

Here we present our recent calculations for the transport properties of single molecules and carbon nanotubes (CNT) bridged between electrodes. We use two calculation methods.

One is the recursion-transfer-matrix (RTM) method, which is a reliable tool to calculate accurate scattering waves in plane-wave expansions. Combined with the NEGF method and density-functional formalism, we perform calculations of transport properties through single molecules and molecular wires between electrodes. Especially, we focus on the contact effects to electrodes on the transport.

The other is the time-dependent wave-packet diffusion method. Based on the linear-response Kubo formula with localized basis sets, we perform  $O(N)$  calculation for the transport of large systems (micron length). We apply this method for the carbon nanotube (CNT) transistors and show the results on the electron-phonon coupling, disorder, and contact effects on the conductance of CNT-FET.

## Density Matrix Functional Theory for Molecules and Solids

Angelica G. Zacarias (Freie Universität Berlin)

Density-matrix functional theory has enjoyed increasing popularity in recent years. For the one-body reduced density matrix, the theory rests on a Hohenberg-Kohn-type theorem formulated by Gilbert [1]. Employing some well-known reduced-density-matrix functionals [2] for the exchange-correlation energy, we minimize the total energy with the suitable constraints ensuring  $N$ -representability of the density matrix and conservation of the total particle number. Atoms and molecules, periodic bulk insulators, and the electron gas are studied in this way. For molecules, we find that some of the more advanced functionals, such as the BBC3 functional [2], perform as well as MP2, with a much lower numerical cost. For insulators we propose a novel method to calculate the fundamental gap  $\Delta$  [3]. This quantity is defined as the difference between the ionization potential and the electron affinity. Given a system with integer particle number  $N_0$ , the fundamental gap can be expressed rigorously as the discontinuity which the chemical potential  $\mu$  exhibits at the integer  $N_0$ , i. e.,  $\Delta = \mu(N_0+\eta) - \mu(N_0-\eta)$  with a positive infinitesimal  $\eta$ . We demonstrate [3] that this discontinuity, when evaluated within density-matrix functional theory, represents an excellent measure of the gap, far superior to LDA or GGA calculations. Studying the electron gas [4], we finally propose a novel functional [5], which performs well in two extreme limits: For the dissociation of closed-shell molecules into open-shell fragments, and for the electron gas.



- [1] T. L. Gilbert, Phys. Rev. B **12**, 2111 (1975).
- [2] O. Gritsenko, K. Pernal, E. J. Baerends, J. Chem. Phys. **122**, 204102 (2005).
- [3] N. Helbig, N. N. Lathiotakis, M. Albrecht, E. K. U. Gross, Europhys. Lett. **77**, 67003 (2007).
- [4] N. N. Lathiotakis, N. Helbig, E. K. U. Gross, Phys. Rev. B **75**, 195120 (2007).
- [5] N. N. Lathiotakis, N. Helbig, Z. Zacarias, E. K. U. Gross, submitted to Phys. Rev. Lett. (2007).

## Surface defects and doping in TiO<sub>2</sub>

Annabella Selloni (Princeton University)

Titanium dioxide, TiO<sub>2</sub>, is a widely used, yet quite inefficient photocatalyst. Among the important drawbacks, its band gap is rather large for efficient use of sunlight, and control of trapping and recombination sites for photo-excited carriers is very limited.

In this talk I will present results of theoretical studies aimed at obtaining insights into issues relevant to TiO<sub>2</sub>-based photocatalysis. In particular, I will discuss the geometric and electronic structure of surface defects and their influence on the adsorption of different species, the effect of replacing oxygen with dopants, notably nitrogen, and the role of defect and impurity states as electron and hole trapping sites.

## Long-range corrected TDDFT and its applications

Takao Tsuneda (University of Tokyo)

Long-range corrected (LC) TDDFT [1] has been applied to various subjects in TDDFT calculations. As a result, the underestimations of long-range charge transfers and Rydberg excitation energies and oscillator strengths have already been solved by LC-TDDFT [1]. We implemented LC-TDDFT on the analytical gradient algorithm of TDDFT [2]. At first, we applied it to various geometry optimizations of excited states. By calculating several adiabatic excitations, it was found that LC-TDDFT makes it possible to estimate accurate excitation energies and excited state geometries especially for charge transfer excitations. Especially, we succeeded to make clear the whole twisted intramolecular charge transfer (TICT) mechanism of 4-N, N-dimethylaminobenzonitrile (DMABN) [3]. We recently applied this LC-TDDFT gradient algorithm to anharmonic vibrational state calculations [4].

- [1] Y. Tawada, T. Tsuneda, S. Yanagisawa, T. Yanai and K. Hirao, J. Chem. Phys., **120**, 8425 (2004).
- [2] M. Chiba, T. Tsuneda, and K. Hirao, J. Chem. Phys., **123**, 144106, 2006.
- [3] M. Chiba, T. Tsuneda, and K. Hirao, J. Chem. Phys., **124**, 034504(1-11), 2007.
- [4] S. Tokura, K. Yagi, T. Tsuneda, and K. Hirao, Chem. Phys. Lett., **436**, 30-35, 2007.

## Formal derivation of nonadiabatic couplings from time-dependent density functional theory and the extension within modified linear response

Chunping Hu (ISSP, University of Tokyo)

We present an efficient method to calculate nonadiabatic couplings (NACs) between the electronically ground and excited states of molecules, within time-dependent density functional theory (TDDFT) in frequency domain. Based on the comparison of dynamic polarizability formulated both in the many-body wavefunction form and the TDDFT linear response theory, a rigorous expression is established for NACs, which is similar to the calculation of oscillator strength in the Casida formalism [1] of TDDFT. The performance of adiabatic local density approximation can be greatly improved by the extension of our method within modified linear response [2, 3]. This scheme has been

demonstrated to give NACs with an accuracy comparable to that of wavefunction-based methods, not only in the vicinity of conical intersections, but also for Rydberg and charge-transfer excitations [4].

- [1] M. E. Casida et al., J. Chem. Phys. 108, 4439 (1998).
- [2] C. Hu, O. Sugino and Y. Miyamoto, Phys. Rev. A 74, 032508 (2006).
- [3] C. Hu and O. Sugino, J. Chem. Phys. 126, 074112 (2007).
- [4] C. Hu, H. Hirai, and O. Sugino, J. Chem. Phys., in press.

## **How can first principles calculations give large contributions to industries?**

Kenji Shiraishi (University of Tsukuba)

Recent technological problems especially in ULSI industries are intimately related to basic science, since each building block of ULSIs becomes nano-meter size. In such circumstance, first principles calculations are thought as a powerful tool to obtain useful knowledge of nano-structures and nano-materials that are crucial for the development of future technologies. However, there are few examples that first principles calculations really affect industries so far. This is due to the difference in the research attitudes between technological and scientific people: Technological people would like to develop high-performance devices timely according to commercial demands, whereas scientists would like to pursue deep science without considering markets. For instance, in order to contribute ULSI technologies, we scientists have to take into account some unscientific factors: Among them, one of the most important factors is the research speed, since ULSI technologies need rapid progress based on ITRS road map. In this presentation, I show one recipe how first principles calculations can give large contribution to industries, by showing some examples which we have succeeded in contributing to ULSI technologies.

First, I show our new concept of interface physics that energetics of interface reaction determines the Shottoky barrier height of metal/high-k dielectric interfaces, by using first principles calculations, model physics and experiments. This new physical concept results in the big technological message that commonly used poly-Si gates should not be used with high-k gate dielectrics, leading to the world-wide change in the trend of ULSI technologies. Next, I show that this concept can naturally expand to another new concept of nano-interface: When the building block of interfaces becomes nano-scale, Shottoky barrier height of one interface can be governed by the energetics of the other interface. I also show that our designed photoemission experiments have clearly confirmed this concept.

Second, I show the atomistic mechanism of Si oxidation. Our first principles calculations clearly show that Si species should be emitted from the Si/SiO<sub>2</sub> interface toward SiO<sub>2</sub> region during thermal oxidation, since Si oxidation induces volume expansion due to the Si-O-Si bond formation. Such knowledge is very important for recent ULSI technologies, since ULSI technologies require very thin SiO<sub>2</sub> dielectric films. To detect this phenomenon, we designed Rutherford backscattering (RBS) experiments, and have succeeded to detect Si emission from the Si/SiO<sub>2</sub> interface toward SiO<sub>2</sub> during Si thermal oxidation.

Moreover, I also show that "Shottoky limit" is not the real limit of Shottoky Barrier heights of metal/insulator interfaces by constructing a new physical concept, and this concept has also been confirmed by the experiments.

As described above, first principles calculations can really give large contributions to modern technologies by the proper and speedy collaboration with experiments and model physics.

## **Exciton transition energy in photoluminescence of single-walled carbon nanotubes**

Shigeo Maruyama (University of Tokyo)

Photoluminescence excitation (PLE) spectroscopy of single-walled carbon nanotubes (SWNTs) has been extensively studied for characterization of their unique electronic properties due to the one-dimensionality. The precise evaluation of exciton transition energy is essential for experimental assignments of optical absorption,

photoluminescence, and resonant Raman scatterings. Here, several experimental topics related to exciton transition energy observed photoluminescence spectroscopy are discussed, namely, excitonic phonon side-band, absorption of cross-polarized light, dielectric environmental effect. Detailed DFT-level theoretical studies are desired to understand and predict these phenomena.

We have demonstrated the excitonic phonon side-band peaks in the PLE spectra of micelle-suspended SWNTs by employing the SWNTs from  $^{13}\text{C}$ . By comparing photoluminescence excitation spectra of SW $^{13}\text{CNTs}$  and normal SWNTs, the excitonic phonon sideband due to strong exciton-phonon interaction was clearly identified with the expected isotope shift. In addition to the direct experimental proof of the strong exciton-phonon interaction, we also found low-intensity “pure electronic” features whose origin has never been elucidated.

We ascribed these peaks to the cross polarized absorption by the polarized-PLE experiment on partially aligned SWNTs in a gelatine film. Then, we further studied polarized PLE spectra of various (n, m) nanotubes in surfactant suspension. Using a simple theory for PL anisotropy, we have obtained decomposed PL maps for parallel and perpendicular polarization from two PL maps measured by so-called L-format method. Distinct absorption peaks corresponding to  $E_{12}$  and  $E_{21}$  transitions for perpendicular polarization were observed. Observed  $E_{12}$  and  $E_{21}$  energies were considerably blue-shifted compared to the qualitative values predicted within a single-particle theory. The results indicate a smaller exciton binding energy for perpendicular excitations than for parallel excitations.

Optical transition energies of SWNTs are affected up to 80 meV by the change of environment materials around SWNTs, which is known as an environmental effect. Environmental dielectric screening effects on exciton transition energies in SWNTs have been studied quantitatively in the range of dielectric constants from 1.0 to 37 by immersing SWNTs bridged over trenches in various organic solvents by means of photoluminescence excitation spectroscopy. With increasing environmental dielectric constant  $\epsilon_{\text{env}}$ , both  $E_{11}$  and  $E_{22}$  exhibited a red shift by several tens meV and a tendency to saturate at a  $\epsilon_{\text{env}} \sim 5$  without an indication of significant (n,m) dependence. The red shifts can be explained by dielectric screening of the repulsive electron-electron interaction. We make a simple model for the relation between dielectric constant of environment and a static dielectric constant describing the effects of electrons in core states,  $\sigma$  bonds and surrounding materials. Although the model is very simple, calculated results well reproduce experimental transition energy dependence on dielectric constant of various surrounding materials.

## Combining DFT and many-body methods to understand correlated materials

Igor Solovyev (National Institute for Materials Science)

Electronic and magnetic properties of strongly-correlated systems are typically controlled by a limited number of states, located near the Fermi level and well isolated from the rest of the spectrum. This opens a formal way for combining the first-principles methods of electronic structure calculations, based on the density-functional theory (DFT), with the model many-body techniques, formulated in a restricted Hilbert space of states near the Fermi level. The core of this project is the construction of “*ab initio* low-energy models”, which incorporate the physics of Coulomb correlations and provide a transparent picture for the low-energy properties. First, I will describe how such models can be constructed. The procedure consists of three major steps, starting from the electronic structure in the local-density approximation.<sup>1</sup> (i) Construction of the kinetic-energy part using an exact version of the downfolding method;<sup>1,2</sup> (ii) Construction of the Wannier functions; (iii) Calculation of screened Coulomb interactions using a hybrid approach, which combines the random phase approximation with the constraint DFT.<sup>1,3</sup>

The abilities of this method will be illustrated on two examples.

The first one is the narrow  $t_{2g}$  band perovskite oxides:  $\text{YTiO}_3$ ,  $\text{YVO}_3$ , and  $\text{LaVO}_3$ . Recently, they have attracted much attention due to the large variety of the magnetic structures, which can be realised in these compounds. These magnetic properties are controlled by tiny distortions in the perovskite structure, which are amplified by Coulomb correlations. For example,  $\text{YVO}_3$  can be found in two distinct antiferromagnetic configurations, the existence of which is closely related with the orthorhombic-monoclinic structural phase transition at  $T = 77\text{K}$ . We could not only reproduce this behaviour, but also present a transparent physical picture, explaining how the lattice distortion changes the distribution of electron densities around the V sites and controls the form of interatomic magnetic

interactions.<sup>4</sup>

Another example is the alkali hyperoxide,  $\text{KO}_2$ . This system can be regarded as a molecular analogue of correlated electron systems, comprising of orbitally degenerate magnetic  $\text{O}_2^-$  ions. Using first-principles electronic structure calculations, we set up an effective spin-orbital model for the low-energy *molecular* bands of  $\text{KO}_2$  and argue that many anomalous properties of this compound replicate the status of its orbital system in different temperature regimes.<sup>5</sup>

<sup>1</sup>I. V. Solovyev, Phys. Rev. B **73**, 155117 (2006).

<sup>2</sup>I. V. Solovyev, Z. V. Pchelkina, and V. I. Anisimov, Phys. Rev. B **73**, 045110 (2007).

<sup>3</sup>I. V. Solovyev and M. Imada, Phys. Rev. B **71**, 045103 (2005).

<sup>4</sup>I. V. Solovyev, Phys. Rev. B **74**, 054412 (2006).

<sup>5</sup>I. V. Solovyev, cond-mat/0612475.

## Wannier function approach to electronic excitation spectra

Takashi Miyake (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology)

We present an efficient scheme for calculating the optical absorption spectra of condensed matter systems including electron hole interactions. A modern computational approach to photoexcitation consists of the following three steps. We first compute quasiparticle wavefunctions in the local density approximation of density functional theory. In the next step, the many-body correction in the GW approximation is added to quasiparticle energies. Then, the Bethe-Salpeter equation (BSE) is solved to include electron-hole interaction effects.

In the present work, we propose a Wannier interpolation scheme for BSE. The most time-consuming part in the BSE method is computation of the electron-hole interaction kernel on a fine k-point mesh. In our approach, we first compute the kernel on a coarse k-point mesh. The kernel is then transformed to the Wannier gauge in which the Wannier function is maximally localized. Since the kernel is smooth as a function of k in the Wannier gauge, it is accurately interpolated to a fine mesh. The interpolated kernel is transformed to the Hamiltonian gauge and put into the BSE. A similar interpolation technique is used also for the Berry connection to evaluate the optical transition matrix on a fine k mesh. We will discuss the detail of the scheme and present an application to silicon.

## A wave-function approach to solids

Shinji Tsuneyuki (University of Tokyo)

Hartree-Fock (HF) method is a useful first-step tool for investigating electronic structure and total energy of atoms and molecules: it gives very good electron density, reasonably accurate total energy, and molecular orbitals and orbital energies that are helpful for understanding the electronic structure. The HF method is, however, not commonly applied to solids nowadays, since electronic screening effect is neglected, thereby resulting in vanishing density of states at the Fermi level of metals and serious overestimation of band gap of semiconductors. Although systematic improvement is considered to be an advantage of wave function theory (WFT) against the density functional theory (DFT), so-called post-HF methods are computationally too demanding for solids. For long, therefore, variational Monte Carlo (VMC) method and diffusion Monte Carlo (DMC) method have been only practical ways to calculate accurate total energy of solids within WFT.

We are developing another wave function approach to solids based on the transcorrelated (TC) method by Boys and Handy [1, 2]. In the TC method, an explicitly correlated wave function of Slater-Jastrow-type is adopted. After similarity transformation of the Hamiltonian with the Jastrow function, one obtains a HF-like self-consistent-field equation to determine one-electron orbitals in the Slater determinant, which also provides TC orbital energies. Koopmans' theorem holds for the TC orbital energies and so we can easily draw electronic band structure of solids

with taking account of the electron correlation effect through the Jastrow function. This is an advantage of the TC method against VMC or DMC. Total energy of solids can be calculated without Monte Carlo sampling.

In this talk I review recent applications of the TC method to solids and demonstrate how the HF results are improved by taking account of the electron correlation effect [3-5].

- [1] S.F. Boys and N.C. Handy, Proc. R. Soc. London, Ser. A 309, 209 (1969); *ibid.* 310, 63 (1969); *ibid.* 311, 309 (1969).
- [2] N.C. Handy, Mol. Phys. 21, 817 (1971).
- [3] N. Umezawa and S. Tsuneyuki, Phys. Rev. B 69, 165102 (2004).
- [4] R. Sakuma and S. Tsuneyuki, J. Phys. Soc. Jpn. 75, 103705 (2006).
- [5] K. Sodeyama, R. Sakuma and S. Tsuneyuki, poster presentation in this symposium.

## **First-principles scheme for strongly correlated electron systems with maximally localized Wannier functions: Application to black sodalite**

Ryotaro Arita (RIKEN)

In *ab initio* calculation for strongly correlated materials which combines model calculation and density functional calculation, constructing an effective model from realistic electronic structure calculation is one of the most important steps. Recently, a variety of methods for this “downfolding” procedure have been proposed, and have been applied to various correlated materials such as transition metals, transition metal oxides etc.

On the other hand, reliable downfolding has not been performed for materials for which the localized basis of the effective model extends beyond a single site in a non-trivial manner. For example, although various interesting many-body phenomena observed in organic compounds such as BEDT-TTF salts have been studied in terms of Hubbard-like models, *ab initio* estimation of interaction parameters like Hubbard  $U$  is yet to be performed. To overcome this problem, recently, the present author and his collaborators have developed a new method to estimate  $U$  by using maximally localized Wannier functions (MLWFs) [1].

In order to demonstrate how this new method works well for materials which have been problematic so far, here we apply it to black sodalite,  $\text{Na}_8(\text{AlSiO}_4)_6$ . For this material, it is well known that a periodic array of  $\text{Na}_4^{3+}$  clusters loaded in the aluminosilicate cages forms narrow bands in the wide band gap, and the system can be mapped to the half-filling Hubbard model or the  $S=1/2$  Heisenberg model [2]. This material is interesting in that it is magnetic while only non-magnetic elements comprised of this material.

While the bare interaction parameter was estimated in Ref. [2], the (screened) Hubbard  $U$  for the  $\text{Na}_4^{3+}$  cluster has not been evaluated. In this study, we construct the MLWF for the  $\text{Na}_4^{3+}$  cluster and estimate  $U$  for it. Then we derive an effective spin model  $H = \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j$ , for which we find  $J=28.2\text{K}$  for the nearest neighbours and  $J=8.6\text{K}$  for the next-nearest neighbours.

The Neel temperature ( $T_N$ ) and the Weiss temperature ( $\theta$ ) calculated by the mean field approximation are 87K and 139K, which are in good agreement with experimental values,  $T_N=55\text{K}$  and  $\theta=170\text{K}$ . We also calculate the uniform spin susceptibility as a function of the temperature by the Pade approximation of the high temperature expansion up to the 8<sup>th</sup> order. The obtained spin susceptibility is in excellent agreement with the experimental result, suggesting that our downfolding method indeed works successfully.

- [1] K. Nakamura *et al*, Phys. Rev. B 74 235113 (2006).
- [2] O.F. Sankey *et al*, Phys. Rev. B 57 15129 (1998).

## Pseudo-quantum criticality in electron liquids exhibited in expanded alkali metals

Hideaki Maebashi (ISSP, University of Tokyo)

It is well known that the compressibility  $\kappa$  of the homogeneous electron gas provides vitally important information on determining the exchange-correlation kernel, a fundamental quantity in the density functional theory. A notable feature of  $\kappa$  is its divergence at  $r_s = 5.25$  with  $r_s$  the Wigner-Seitz radius of electrons, resulting in singular long-range fluctuations in the electronic polarization. Usually, singular fluctuations in the response function at zero temperature invoke continuous quantum phase transition. In the electron gas, however, there is no true phase transition owing to the fact that the polarization function in this case represents response to a total of external and induced charges, making it acausal. This singularity which does not induce any phase transition leads to a new concept of pseudo-quantum criticality.

In considering the actual valence electrons in solids or liquids, we should include not only the above-mentioned effects of the electron-electron Coulomb interaction but also those of the electron-ion interaction. Basically, the latter effects are complicated to treat due to the complex nature of an ion composed of a nucleus and core electrons surrounding it. But they can be described by employing another important concept or pseudopotential, taking into account the core-valence orthogonality which makes the valence electrons exclude from the core region.

These two concepts manifest themselves in the problem of the Coulombic screening in alkali metals [1]; the pseudo-quantum criticality combined with the exclusion effect of valence electrons makes the observable phenomena intriguing, in which an important role is played by the emergence of a short-range attractive part in the screened Coulomb interaction between ions. In this talk, we predict the decrease of the equilibration distance between ions against the increase of  $r_s$ , provided that the condition of  $2r_c < r_s < 4r_c$  is satisfied with  $r_c$  the ion-core radius. This prediction is in good quantitative agreement with the recent experiment on expanded liquid Rb exhibiting that an average distance between nearest-neighbor ions decreases with the increase of the Wigner-Seitz radius of ions [2].

[1] H. Maebashi and Y. Takada, cond-mat/0706.4001.

[2] K. Matsuda, K. Tamura, and M. Inui, Phys. Rev. Lett. **98**, 096401 (2007).

## Biomolecular calculations based on electron-correlated fragment molecular orbital methods

Shigenori Tanaka (Kobe University)

This talk will review recent developments in the ab initio fragment molecular orbital (FMO) method and its applications to bio-macromolecules, especially focusing on the roles of electron correlations.

Kitaura et al. have proposed an ab initio FMO method by which large molecules such as proteins and nucleic acids can be easily treated with chemical accuracy. In the ab initio FMO method, a molecule or a molecular cluster is divided into fragments, and the MO calculations on the fragments (monomers) and the fragment pairs (dimers) are performed to obtain the total energy that is expressed as a summation of the fragment energies and inter-fragment interaction energies (IFIEs). Recently, the FMO methodology has been developed so as to include the descriptions of various properties other than energies and the electron correlation effects on the bases of MP2, DFT, CI and QMC methods.

The ABINIT-MP and BioStation Viewer programs have been used for the applications of FMO method. For instance, the FMO method was applied to the problem of transcriptional regulation, including the interactions of nuclear receptor, ligand molecule, transcription factor and DNA. Detailed interactions between biomolecules and the roles of each amino acid residue were revealed through analyses of IFIEs, charge distribution and orbital configuration. Electrostatic and van der Waals dispersion interactions were found to be equally important in molecular recognition. It was thus found that the inclusion of electron correlation was essential to obtain appropriate pictures for biomolecular interactions. Other applications such as the photo-excitation process in fluorescent protein will also be illustrated.

## Time-dependent density functional theory for core excited states

Yutaka Imamura (Waseda University)

Time-dependent density functional theory (TDDFT) is one of the most popular methods to calculate low-lying excited states because of its reasonable accuracy with low-computational cost. However, TDDFT fails to describe core and Rydberg excitations with high accuracy [1,2]. Based on our assessment [1] and analysis [2], we have proposed two different kinds of new exchange-correlation functionals for core and Rydberg excitations: pure [3] and hybrid functionals [4-6]: The hybrid functional, core-valence B3LYP (CV-B3LYP) [4], is designed to reproduce the behaviors of the BHHLYP and B3LYP functionals for core and valence regions separately. The newly developed functional, core-valence-Rydberg B3LYP (CVR-B3LYP) [5], is constructed so as to accurately describe the excitations from core and occupied valence orbitals not only to unoccupied valence orbitals (C→V and V→V excitations) but also to Rydberg orbitals (C→R and V→R excitations). Based on the arbitrariness of virtual orbitals, CVR-B3LYP overcomes the disadvantages of CVB3LYP by adopting the appropriate portions of HF exchange for unoccupied valence and Rydberg regions separately. C→V, C→R, V→V, and V→R excitation energies of C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, CH<sub>2</sub>O, CO, and N<sub>2</sub> molecules were calculated with the use of the cc-pCVTZ. Single s and p Rydberg basis functions of Dunning-Hay were added for describing 3s and 3p orbitals. Rydberg orbitals were distinguished from the others by the second moments of the orbitals. While the results of CV-B3LYP have similar accuracy to those of CVR-B3LYP for C→V and V→V excitations, CV-B3LYP gives inaccurate results for C→R and V→R excitations. CVR-B3LYP provides accurate descriptions for not only (C→V, V→V) but also (C→R, V→R) excitations: The mean absolute errors (MAEs) of CVR-B3LYP are 0.3, 0.7, 0.3, and 0.3 eV for C→V, C→R, V→V, and V→R excitations, respectively. Thus, CVR-B3LYP is a powerful tool for describing all types of excitations with high accuracy.

- [1] Y. Imamura, T. Otsuka, H. Nakai, *J. Comput. Chem.* **2007**, 28, 2067.
- [2] Y. Imamura, H. Nakai, *Int. J. Quant. Chem.* **2007**, 107, 23.
- [3] Y. Imamura, H. Nakai, *Chem. Phys. Lett.* **2006**, 419, 297.
- [4] A. Nakata, Y. Imamura, T. Otsuka, H. Nakai, *J. Chem. Phys.* **2006**, 124, 094105.
- [5] A. Nakata, Y. Imamura, H. Nakai, *J. Chem. Phys.* **2006**, 125, 064109.
- [6] A. Nakata, Y. Imamura, H. Nakai, *J. Chem. Theory Comput.*, *in press*.

# 物性研究所談話会

日時：2007年7月13日(金) 午後1時30分～午後3時

場所：物性研究所本館6階 大講義室(A632)

講師：松田 巖

(物性研究所 軌道放射物性研究施設)

題目：ミクロスコピック系のフェルミ面トポロジー、スピン特性、電子輸送現象：表面超構造による金属超薄膜の物性制御  
要旨：

Reduction of film thickness down to the electron wavelength induces energy quantization by the quantum size effect and quantum-well states (QWS) formed in such a film has been a good playground to study low-dimensional physics. While a film is as thin as de Broglie wavelength of 10 nanometers for semiconductor superlattices, film thickness must be so thin as about Fermi wave length (several  $\text{\AA}$  ~ several  $10 \text{\AA}$ ) for metal films. Such an ultrathin metal film with an atomically flat surface has been extremely difficult to be artificially fabricated but it can be self-organized on a surface superstructure, a long-range ordered monatomic layer on a solid surface. Then, I have been engaged in studying the QWS in various metal films on solid surfaces [1] and have found out that, in contrast to a freestanding metal film, these QWS's exhibit additionally intriguing physical properties such as oscillation of the superconducting transition temperature with thickness, spin polarization, and anomalous in-plane dispersion [2].

In this presentation, I summarize recent topics on QWS in metal films on semiconductor surfaces and introduce our recent results on Fermi surface topology, spin characters, and electron transport phenomena. I plan to focus mainly on two intriguing issues; topological phase transition induced by the interface atomic layer [3] and distinctive spin characters of surface states and QWS [4], studied by photoemission spectroscopy and the first principle calculations.

We found that the in-plane energy dispersion of quantized states in an ultrathin Ag film formed on the one-dimensional (1-D) surface superstructure, Si(111)4x1-In, shows clear 1-D anisotropy instead of the isotropic 2-D free-electron-like behavior expected for an isolated metal film.

In contrast with the semimetallic nature of bulk Bi, both the experiment and theory demonstrate the metallic character of the films with the Fermi surface formed by spin-orbit-split surface states. On the other hand, below the Fermi level, we clearly detected quantum well states, which were surprisingly found to be non-spin-orbit split; the films are "electronically symmetric" despite the obvious structural nonequivalence of the top and bottom interfaces.

[1] (Reviews papers), I. Matsuda et al., J. Elec. Spec. Rel. Phen. 126, 101 (2002); e-J. Surf. Sci. and Nanotech. 2, 169 (2004); 表面科学 23, 509 (2002).

[2] I. Matsuda, T. Ohta, and H. W. Yeom, Phys. Rev. B 65, 085327 (2002).

[3] N. Nagamura, I. Matsuda et al., Phys. Rev. Lett. 96, 256801(2006).

[4] T. Hirahara, T. Nagao, I. Matsuda, et al., Phys. Rev. Lett. 97, 146803 (2006).



日時：2007年8月28日(火) 午後1時30～午後2時30分

場所：物性研究所本館6階 大講義室(A632)

講師：Prof. Robert. H. Blick

(ISSP and Electrical & Computer Engineering, University of Wisconsin)

題目：Probing Single Nanoscale Bio-Transistors

要旨：

In this talk I will review on-chip screening techniques for single ion channels and pores embedded in suspended bilipid membranes. Ion channels and pores are proteins regulating the flow of ions and small molecules in and out of cells with typically 4 nm diameter and 5 - 15 nm length. These gate keepers of the cellular network are essential for every living system. Hence, the interest in developing chip-based tools for ultra-sensitive, high-throughput drug screening on these specific proteins. The presentation will introduce the early stages of the project focusing on DC recordings and will discuss most recent results on AC recordings. Especially, the engineered chips for probing ion channel activity on time-scales of 100 - 0.1 nsec has the potential to deliver real-time in-vitro information on channel conformations.

For an overview on DC-recordings see :

'Cellular electrophysiology on a chip', N. Fertig, R.H. Blick, and J.C. Behrends, *Biophysical Journal* 82, 3056 (2002); the DC-tools developed can be purchased from [www.nanion.de](http://www.nanion.de).

The most recent work will be posted on cond-mat soon: S. Ramachandran, R.H. Blick, and D.W. van der Weide, to be published (2007).

日時：2007年9月25日(火) 午後3時～午後4時

場所：物性研究所本館6階 大講義室

講師：Prof. Daniel Agterberg

(ISSP and Univ. of Wisconsin-Milwaukee)

題目：Superconductivity in non-centrosymmetric materials

要旨：

The absence of inversion symmetry has a pronounced effect on the quasi-particle states through the splitting of the usually spin degenerate bands. This in turn influences the superconducting state, which relies on quasi-particle degeneracy under time reversal and parity symmetries to form Cooper pairs. It is relatively easy to remove time-reversal symmetry (with magnetic fields for example) but manipulating parity symmetry in superconductors is not straightforward. Superconductivity in non-centrosymmetric materials therefore provides a unique opportunity in this respect. Recent theoretical results on non-centrosymmetric superconductors will be presented with an emphasis on the materials CePt3Si, CeRhSi3, CeIrSi3, and Li2Pt3B. This will include a discussion of the appearance of line nodes in the energy gap due to the mixing of spin-singlet and spin-triplet order parameters and a demonstration that new superconducting phases appear under the application of magnetic fields. The relationship between these new phases and the FFLO phase of conventional superconductors will be presented. Finally, the role of fractional vortices in FFLO and related phases will be discussed.

# 人 事 異 動

## 【研究部】

○ 平成19年10月1日付け

### (採用)

氏名	所属	職名	異動内容
内海 裕洋	物性理論研究部門	助教	理化学研究所基礎科学特別研究員から

## 【事務部】

○ 平成19年10月1日付け

### (転出)

氏名	所属	職名	異動内容
関 祐子	物性研担当課共同利用係	係長	農学系総務課総務チーム主査へ
小林 茂	経理担当課契約チーム	主任	宇宙航空研究開発機構総合技術研究本部プログラム推進室主査へ

### (転入)

氏名	所属	職名	異動内容
北見 篤	経理担当課契約チーム	主任	理学系研究科等財務チーム主任から

## (部内異動)

氏名	所属	職名	異動内容
辻角 隆之	物性研担当課共同利用係	係長	物性研担当課総務係主任から
中川 健太郎	物性研担当課総務係	係員	人事・労務グループ人事チームから
安田 正子	給与・施設グループ施設管理チーム	係員	物性研担当課共同利用係から

「物性研だより」第47巻第2号50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。

(誤) 瀬戸美香子 宇宙線研担当課総務係長 主任 人事・労務グループ人事チームから

(正) 瀬戸美香子 宇宙線研担当課総務係 係長 人事・労務グループ人事チーム主任から

# 平成 19 年度後期短期研究会一覧

研 究 会 名	開 催 期 日	参加予定 人 数	提 案 者
圧力を物理パラメータとした低温物性研究の今後の展望	19. 10. 10～19. 10. 12 (3日間)	60 (20)	○清水 克哉 (大阪大学・極限量子科学研究センター) 高橋 博樹 (日本大学・文理学部) 巨海 玄道 (九州大学・大学院理学研究院) 上床 美也 (東京大学・物性研究所) 村田 惠三 (大阪市立大学・理学部)
低温走査トンネル顕微鏡の現状と展望	19. 10. 12～19. 10. 13 (2日間)	70 (14)	○福山 寛 (東京大学・大学院理学系研究科) 西田 信彦 (東京工業大学・大学院理工学研究科) 花栗 哲郎 (理化学研究所・中央研究所) 小森 文夫 (東京大学・物性研究所) 長谷川幸雄 (東京大学・物性研究所)
計算物性物理学の進展 (スーパーコンピュータ共同利用成果報告会)	19. 11. 1～19. 11. 2 (2日間)	70 (18)	○川島 直輝 (東京大学・物性研究所) 川勝 年洋 (東北大学・大学院理学研究科) 古川 信夫 (青山学院大学・理工学部) 常行 真司 (東京大学・大学院理学系研究科) 富田 裕介 (東京大学・物性研究所) 鈴木 隆史 (東京大学・物性研究所)
物性化学のフロンティア2007 : これから何をめざすのか?	19. 11. 21～19. 11. 23 (3日間)	120 (24)	○吉信 淳 (東京大学・物性研究所) 松本 吉泰 (京都大学・大学院理学研究科) 川合 真紀 (東京大学・大学院新領域創成科学研究科) 佐藤 直樹 (京都大学・化学研究所) 大門 寛 (奈良先端科学技術大学院大学) 上田 寛 (東京大学・物性研究所) 辛 埴 (東京大学・物性研究所) 末元 徹 (東京大学・物性研究所) 柴山 充弘 (東京大学・物性研究所) 廣井 善二 (東京大学・物性研究所) 田島 裕之 (東京大学・物性研究所) 森 初果 (東京大学・物性研究所) 山室 修 (東京大学・物性研究所) 杉野 修 (東京大学・物性研究所)
短波長コヒーレント光と物質中のコヒーレンスの生成・消滅	19. 11. 26～19. 11. 27 (2日間)	50 (15)	○宮原 恒昱 (首都大学東京・大学院理工学研究科) 相原 正樹 (奈良先端科学技術大学院大学) 渡部俊太郎 (東京大学・物性研究所) 末元 徹 (東京大学・物性研究所)

( ) は旅費支給者      ○は提案代表者

# 平成 19 年度後期外来研究員一覧

## 嘱託研究員

氏 名	所 属	研 究 題 目	関係所員
米 田 忠 弘	東北大学多元物質科学研究所 教 授	STM による単一吸着分子の反応と物性	吉 信
成 島 哲 也	自然科学研究機構分子科学研究所 助 教	温度可変高速 STM による表面ダイナミクスの研究	〃
片 野 進	埼玉大学理工学研究科 教 授	中性子回析に用いる圧力装置の開発	上 床
井 澤 公 一	東京工業大学理工学研究科 准教授	圧力下熱電・熱輸送係数測定を試み	〃
梅 原 出	横浜国立大学工学研究院 准教授	高圧下の比熱測定装置の開発	〃
藤 原 直 樹	京都大学人間環境学研究所 准教授	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 准教授	チョコレート式 $^3\text{He}$ 冷凍機の装置の開発	〃
藤 原 哲 也	山口大学理工学研究科 助 教	$\text{Ce}_2\text{Pd}_3\text{Si}_5$ の単結晶試料評価とその圧力効果	〃
磯 田 誠	香川大学教育学部 教 授	$\text{Fe}_2\text{P}$ における圧力下電気抵抗測定	〃
辺 土 正 人	琉球大学理学部 准教授	低温用マルチアンビル装置の開発	〃
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 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 教	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 教	有機化合物の光電子分光	〃
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	〃
田 村 隆 治	東京理科大学基礎工学部 講 師	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 教	共鳴逆光電子分光装置の開発	〃
木 村 真 一	自然科学研究機構分子科学研究所 准教授	強相関系物質の共鳴逆光電子分光の研究	〃
津 田 俊 輔	物質・材料研究機構若手国際研究拠点 研究員	レーザー光電子分光による酸化物薄膜の研究	〃
馬 場 輝 久	理化学研究所中央研究所 協力研究員	$\text{ErNiB}_2\text{C}_2$ の角度分解光電子分光	〃
石 田 行 章	理化学研究所播磨研究所 協力研究員	時間分解光電子分光の開発	〃
石 井 啓 文	Synchrotron Radiation Research Center 研究員	X線非弾性散乱の研究	〃

朝倉清高	北海道大学触媒化学研究センター 教授	高輝度軟 X 線を利用する光電子顕微鏡装置の設計・開発	柿崎
手塚泰久	弘前大学理工学研究科 准教授	希土類金属化合物の非占有電子状態解析	〃
柳原美広	東北大学多元物質科学研究所 教授	高輝度極紫外ビームラインの設計・評価	〃
高橋隆	東北大学理学研究科 教授	高分解能光電子分光による電子状態の研究	〃
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	〃
坂本一之	千葉大学融合科学研究科 准教授	高輝度軟 X 線を利用する光電子顕微鏡装置の設計・開発	〃
中村仁	電気通信大学電気通信学部 助教	高輝度軟 X 線を利用する軟 X 線発光実験装置の設計開発	〃
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	〃
鎌田雅夫	佐賀大学シンクロト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 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	〃
太田俊明	立命館大学総合理工学研究機構 SR センター センター長	高輝度軟 X 線ビームラインの設計・評価	〃
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	〃
木村真一	自然科学研究機構分子科学研究所 准教授	高輝度極紫外ビームラインの設計・評価	〃
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	〃
伊藤健二	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 准教授	高輝度光源計画における直入射ビームラインおよびその利用計画の検討	〃
小野寛太	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 准教授	高輝度極紫外ビームラインの設計・評価	〃
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 准教授	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	〃
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	〃
後藤俊治	高輝度光科学研究センター放射光研究所 ビームライン部門長	高輝度光源ビームラインにおける分光光学系の設計・開発	〃
石川哲也	理化学研究所播磨研究所 センター長	高輝度軟 X 線ビームラインの設計・評価	〃
栗木雅夫	広島大学先端物質科学研究所 准教授	高輝度電子銃の研究	中村
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	〃
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 教授	挿入光源の研究	〃
小関忠	高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設 准教授	電磁石及び高周波加速システムの開発研究	〃
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 准教授	ラティス設計及び色収差に関する研究	〃
設楽哲夫	高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設 准教授	入射線型加速器の研究	〃
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 准教授	超高真空システムの開発研究	〃

梅 森 健 成	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 助 教	超伝導加速空洞の開発研究	中 村
帯 名 崇	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 助 教	放射光源の制御及びモニタシステムの開発研究	”
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 教	線型加速器のビーム制御に関する研究	”
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 教	挿入光源磁場のビームへの影響に関する研究	”
北 村 英 男	理化学研究所播磨研究所 主任研究員	偏光制御軟X線アンジュレタの研究開発	”
田 中 隆 次	理化学研究所播磨研究所 専任研究員	垂直8の字アンジュレタと位相器の研究開発	”
金 子 純 一	北海道大学工学研究科 准教授	中性子極小角散乱実験装置のアップグレード	中性子
野 田 幸 男	東北大学多元物質科学研究所 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	”
岩 佐 和 晃	東北大学理学研究科 准教授	中性子散乱装置の共同利用による強相関電子系物質の静的・動的構造研究の推進	”
大 山 研 司	東北大学金属材料研究所 准教授	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	”
木 村 宏 之	東北大学多元物質科学研究所 助 教	”	”
平 賀 晴 弘	東北大学金属材料研究所 助 教	”	”
藤 田 全 基	東北大学金属材料研究所 助 教	”	”
松 村 武	東北大学理学研究科 助 教	”	”
田 畑 吉 計	京都大学工学研究科 助 教	”	”
田 崎 誠 司	京都大学工学研究科 准教授	冷中性子スピン干渉計の応用と MINE ビームラインの整備	”
瀬 戸 秀 紀	京都大学理学研究科 准教授	リン脂質系の階層構造と相転移	”
杉 山 正 明	京都大学原子炉実験所 准教授	Cl-3 ULS 極小角散乱装置 IRT	”
日 野 正 浩	京都大学原子炉実験所 准教授	冷中性子反射率計・干渉計のアップグレードと共同利用研究の推進	”
北 口 雅 暁	京都大学原子炉実験所 助 教	”	”
藤 原 哲 也	山口大学理工学研究科 助 教	中性子散乱用高圧セルの開発および高圧下における中性子散乱実験	”
高 橋 良 彰	九州大学先端物質化学研究所 准教授	流動場での高分子系ソフトマターの変形を配向に関する研究	”
川 端 庸 平	首都大学東京理工学研究科 助 教	界面活性剤水溶液におけるゲル構造形成過程の研究	”
大 竹 淑 恵	理化学研究所和光研究所仁科加速器センター 前任研究員	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	”
百 瀬 英 毅	大阪大学低温センター 助 教	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	熊本大学自然科学研究科 准教授	単層カーボンナノチューブの超強磁場下近赤外特性測定システムの開発	”

一 般

氏 名	所 属	研 究 題 目	関係所員
城 谷 一 民	室蘭工業大学工学研究科 特任教授	新スカッテルタイト化合物 LnRu <sub>4</sub> P <sub>12</sub> (Ln=重希土類)の高圧 合成	八 木
杉 内 陽 平	室蘭工業大学工学研究科 修士課程	”	”
山 口 周	東京大学工学系研究科 教 授	超高压プレスを用いた新規プロトニクス酸化物のソフト化 学的合成法の検討	”
尾 山 由紀子	東京大学工学系研究科 助 教	”	”
三 好 正 悟	東京大学工学系研究科 特任助教	”	”
田 中 和 彦	東京大学工学系研究科 技術専門職員	”	”
Cervera Rinlee Butch Mangrobang	東京大学工学系研究科 博士課程	”	”
福 田 哲 央	東京大学工学系研究科 修士課程	”	”
大 場 隆 之	東京大学産学連携本部 特任教授	超高压下における半導体めっき Cu 材料の挙動に関する調 査研究	”
浜 谷 望	お茶の水女子大学人間文化創成科学研究科 教 授	四ヨウ化錫の高圧液体-液体相転移測定技術の開発	”
近 藤 忠	大阪大学理学研究科 教 授	高温高压下における水素-ヘリウム系の相関係に関する研究	”
境 家 達 弘	大阪大学理学研究科 助 教	”	”
川 代 雄 太	東北大学理学研究科 修士課程	”	”
鈴 木 義 茂	大阪大学基礎工学研究科 教 授	有機分子/強磁性体グラニューラー系における核磁気共鳴の研 究	瀧 川
草 井 悠	大阪大学基礎工学研究科 修士課程	”	”
水 戸 毅	神戸大学理学研究科 助 教	充填スカッテルタイト化合物 SmRu <sub>4</sub> P <sub>12</sub> の核磁気共鳴によ る研究	”
正 木 了	神戸大学自然科学研究科 博士課程	”	”
米 澤 進 吾	京都大学理学研究科 博士課程	Ag <sub>5</sub> Pb <sub>2</sub> O <sub>6</sub> の Cu ドープ系における低温磁気秩序相の解明	榊 原
町 田 一 成	岡山大学自然科学研究科 教 授	第 2 種超伝導体の混合状態の研究	”
松 平 和 之	九州工業大学工学部 助 教	幾何学的フラストレーションを示すパイロクロア酸化物の 極低温磁化の研究	”
東 中 隆 二	理化学研究所中央研究所 基礎科学特別研究員	パイロクロア酸化物 Tb <sub>2</sub> Ti <sub>2</sub> O <sub>7</sub> における量子スピンアイス状 態の探索	”
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 (IV)	田 島
長谷川 裕 之	情報通信研究機構未来 ICT 研究センター 特別研究員	有機スピントロニクスを目指したナノ単結晶デバイスの作 製と評価	”
森 山 広 思	東邦大学理学部 教 授	トリアリールメタン系色素により安定化された C <sub>60</sub> フラー ライド化合物の磁気特性	森
持 田 智 行	東邦大学理学部 准教授	フェロセン系電荷移動錯体の合成と物性評価	”
赤 坂 隆 拓	東邦大学理学研究科 博士課程	”	”
菅 野 忠	明治学院大学法学部 教 授	分子結晶の磁性と構造	”
中 村 正 明	東京理科大学理学部 助 教	2次元ディラック・フェルミオン系の物性に関する研究	押 川

猪野和住	東京大学総合文化研究科 助教	波動関数のトポロジ-的性質についての共同研究	甲元
長谷部一気	詫間電波工業高等専門学校 講師	超対称量子ホール効果のスピンチェーンへの応用	〃
神藤欣一	東京工業大学総合理工学研究科 助教	合金の相安定性、相変態の第一原理計算と新物質の探索	杉野
大岩顕	東京大学工学系研究科 講師	2次元電子ガスでの電子 focusing を用いた Stern-Gerlach 効果の研究	勝本
Michel Pioro-Ladriere	科学技術振興機構国際共同研究 博士研究員	〃	〃
李相潤	東京大学工学系研究科修士課程	〃	〃
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	電流駆動による磁性体磁化ダイナミクスの直接観察	大谷
金沢育三	東京学芸大学教育学研究科 教授	水素吸着金属表面の低速陽電子ビーム法による研究	小森
広田幸二	東京学芸大学教育学研究科 修士課程	〃	〃
金沢育三	東京学芸大学教育学研究科 教授	低速陽電子ビーム法による準結晶・近似結晶中の構造欠陥の研究	〃
駒形栄一	東京学芸大学教育学研究科 修士課程	〃	〃
大野真也	横浜国立大学工学研究院 特別研究教員	ナノスケール磁性薄膜の光学計測	〃
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 准教授	〃	〃
小林直人	横浜国立大学工学府 修士課程	〃	〃
石井晃	鳥取大学工学部 教授	Ge(001)および、Sn 吸着 Ge(001)表面の電子状態の第一原理計算	〃
星健夫	鳥取大学工学部 准教授	超大規模電子構造計算の半導体ナノ構造プロセスへの適用	〃
河村紀一	日本放送協会放送技術研究所 主任研究員	ナノ磁性体の応用研究	〃
大久保勇男	東京大学工学系研究科 助教	積層型抵抗変化不揮発性メモリーの作製	Lippmaa
坪内賢太	東京大学工学系研究科 博士課程	〃	〃
原田尚之	東京大学工学系研究科 修士課程	〃	〃
組頭広志	東京大学工学系研究科 准教授	放射光分光を用いた遷移金属酸化物ヘテロ界面電子状態の研究	〃
近松彰	東京大学工学系研究科 博士課程	〃	〃
箕原誠人	東京大学総合文化研究科 博士課程	〃	〃
吉松公平	東京大学工学系研究科 修士課程	〃	〃
Chris Bell	東京大学新領域創成科学研究科 博士研究員	光キャリアによる SrTiO <sub>3</sub> の物性制御	〃
疋田育之	東京大学新領域創成科学研究科 博士研究員	酸化物ショットキーダイオードの特性のデバイスサイズ依存性	〃
小塚裕介	東京大学新領域創成科学研究科 博士課程	光キャリアドーピングによる酸化物ヘテロ接合の物性探索	〃
角谷正友	物質・材料研究機構センサ材料センター 主幹研究員	有機金属化学堆積法による酸化亜鉛薄膜の構造・物性評価	〃
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 助教	低温下における金属中の水素の量子効果	久保田
佐々木 豊	京都大学低温物質科学研究センター 准教授	回転超流動ヘリウム3のテクスチャーダイナミクスの研究	〃
石川 修六	大阪市立大学理学研究科 准教授	回転する超流動ヘリウム3中の渦の研究	〃
石黒 亮輔	大阪市立大学理学研究科 博士研究員	〃	〃
白濱 圭也	慶應義塾大学工学部 准教授	固体ヘリウム4の超流動現象	〃
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	〃	〃
石内 真吾	室蘭工業大学工学研究科 修士課程	〃	〃
梅原 出	横浜国立大学工学研究院 准教授	キュービックアンビルをもちいた熱容量測定法の開発	〃
吉岡 顕人	横浜国立大学工学府 博士課程	〃	〃
谷口 弘三	埼玉大学理工学研究科 准教授	キュービックアンビルプレスを用いた TCNQ 塩の高圧下物性研究	〃
小松 宏彰	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	YbCo <sub>2</sub> Zn <sub>20</sub> の圧力誘起相	〃
大橋 政司	金沢大学工学部 准教授	ターンバックル式ダイヤモンドアンビルセルを用いた超高圧下電気抵抗測定	〃
中島 美帆	信州大学理学部 准教授	セリウム化合物の量子臨界点付近の物性	〃
佐藤 憲昭	名古屋大学理学研究科 教授	重い電子系化合物 CeTen の高圧下物性の研究	〃
出口 和彦	名古屋大学理学研究科 助教	〃	〃
岡田 智嗣	名古屋大学理学研究科 修士課程	〃	〃
太田 仁	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター 教授	高圧下磁化測定による量子スピン系の研究	〃
世良 正文	広島大学先端物質科学研究科 教授	CeB <sub>6</sub> における圧力効果	〃
永井 翔太	広島大学先端物質科学研究科 修士課程	〃	〃
繁岡 透	山口大学理工学研究科 教授	Pr(Rh <sub>1-x</sub> Ru <sub>x</sub> ) <sub>2</sub> Ge <sub>2</sub> の磁気転移の圧力効果	〃
張 雅恒	山口大学理工学研究科 修士課程	〃	〃
藤原 哲也	山口大学理工学研究科 助教	RFe <sub>2</sub> Ge <sub>2</sub> (R=Y, Lu)の圧力下における Fe 局在磁気モーメントの形成機構と量子臨界現象の研究	〃
金沢 綾子	山口大学理工学研究科 修士課程	〃	〃
藤原 哲也	山口大学理工学研究科 助教	Yb <sub>2</sub> Rh <sub>3</sub> Ga <sub>9</sub> の量子相転移についての研究	〃
張 雅恒	山口大学理工学研究科 修士課程	〃	〃
河江 達也	九州大学工学研究院 准教授	極低温強磁場下における圧力下比熱測定セルの開発	〃
八板 克仁	九州大学工学府 修士課程	〃	〃
仲間 隆男	琉球大学理学部 教授	希土類・コバルト化合物の輸送特性に及ぼす圧力効果の研究	〃

高 良 江里子	琉球大学理工学研究科 修士課程	希土類・コバルト化合物の輸送特性に及ぼす圧力効果の研究	上 床
矢ヶ崎 克 馬	琉球大学理学部 教 授	スピニル化合物の高圧力中の物性研究	”
高江洲 義 尚	琉球大学理工学研究科 博士課程	”	”
仲 村 大	琉球大学理工学研究科 修士課程	”	”
門 脇 広 明	首都大学東京理工学研究科 准教授	中性子散乱用ヘリウムガス加圧セルの開発	”
門 脇 広 明	首都大学東京理工学研究科 准教授	遍歴電子反強磁性体(V <sub>1-x</sub> Ti <sub>x</sub> ) <sub>2</sub> O <sub>3</sub> の量子相転移	”
田 畑 吉 計	京都大学工学研究科 助 教	”	”
鹿 又 武	東北学院大学工学部 教 授	メタ磁性形状記憶合金の高圧力下における磁気特性	”
安 田 泰 士	東北学院大学工学研究科 修士課程	”	”
三 浦 康 弘	桐蔭横浜大学工学研究科 准教授	導電性ラングミュア・プロジェクト膜の高圧下の電気的性質	”
村 田 恵 三	大阪市立大学理学研究科 教 授	有機伝導体の超高圧下の物性	”
小 林 賢 介	大阪市立大学理学研究科 博士課程	”	”
ナタラジャン R タミルセルバン	大阪市立大学理学研究科 博士課程	”	”
中 坊 一 也	大阪市立大学理学研究科 修士課程	”	”
山 口 周	東京大学工学系研究科 教 授	希土類元素をドーブした BaPrO <sub>3</sub> のプロトン-電子混合伝導性の評価	辛
尾 山 由紀子	東京大学工学系研究科 助 教	”	”
三 好 正 悟	東京大学工学系研究科 特任助教	”	”
田 中 和 彦	東京大学工学系研究科 技術専門職員	”	”
横 谷 尚 睦	岡山大学自然科学研究科 教 授	機能的金属間化合物の光エネルギー依存光電子分光	”
岡 崎 宏 之	岡山大学自然科学研究科 修士課程	”	”
横 谷 尚 睦	岡山大学自然科学研究科 教 授	機能的金属間化合物のレーザー光電子分光	”
吉 田 力 矢	岡山大学自然科学研究科 修士課程	”	”
山 本 和 矢	大阪府立大学工学研究科 博士課程	強相関電子系の時間分解光電子分光測定	”
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及びヘテロ構造の作製と構造評価	高 橋
窪 谷 茂 幸	東京大学新領域創成科学研究科 博士課程	”	”
ティユクァントウ	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 教	立方晶窒化物半導体混晶及びヘテロ構造の作製と構造評価	”
中 村 照 幸	東京大学新領域創成科学研究科 博士課程	”	”
片 岡 敬 弘	東京大学新領域創成科学研究科 修士課程	”	”
栞 原 浩	九州大学総合理工学研究院 教 授	低温半導体表面構造の電子励起と構造	”

矢口 裕之	埼玉大学理工学研究科 准教授	窒素原子層ドーパド半導体からの単一光子発生に関する研究	秋山
遠藤 雄太	埼玉大学理工学研究科 修士課程	〃	〃
小柴 俊	香川大学工学部 教授	窒素を含む MBE 成長化合物半導体ナノ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	〃	〃
中瀬 大介	香川大学工学研究科 修士課程	〃	〃
石井 晃	鳥取大学工学部 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	〃
丹羽 一樹	産業技術総合研究所関西センター 研究員	生物化学発光の絶対発光量測定	〃
河村 聖子	お茶の水女子大学人間文化創成科学研究科 リサーチフェロー	新奇超伝導体の物性測定	吉澤
藤原 哲也	山口大学理工学研究科 助教	PPMS 用 3 万気圧級高圧力発生装置の開発および改良	〃
柴崎 洋志	山口大学理工学研究科 修士課程	〃	〃
佐々木 陽介	北海道大学工学研究科 修士課程	小型収束型小角散乱装置プロトタイプの開発研究	柴山
錦 織 紳一	東京大学総合文化研究科 准教授	Hofmann-diam 型包接体ホスト一次元キャビティにおけるゲスト分子運動	山室
長原 愛子	東京大学理学系研究科 修士課程	〃	〃
中野 元裕	大阪大学工学研究科 准教授	動的ヤーン・テラー効果をしめす分子性 Mn(III)錯体の誘電応答に関する研究	〃
馬場 晴之	大阪大学工学研究科 修士課程	〃	〃
大野 隆	徳島大学ソシオテクノサイエンス研究部 教授	スピン・ラダー系 $V_4O_9$ におけるスピン・ダイマーの NMR による研究	上田 (寛)
山田 高広	東北大学多元物質科学研究所 助教	遷移金属シリサイドおよびゲルマナイドの磁気特性評価	廣井
竹田 真帆人	横浜国立大学工学研究院 准教授	SQUID およびローレンツ顕微鏡法による Cu-Fe 系合金中の Fe 微粒子内部の磁区構造と磁性	〃
村松 鉄平	横浜国立大学大学院工学府 修士課程	〃	〃
村岡 祐治	岡山大学自然科学研究科 准教授	ホランダイト型マンガ酸化物の伝導および磁気特性	〃
百瀬 英毅	大阪大学低温センター 助教	III-V 族化合物半導体レーザー材料の超強磁場下における物性に関する研究	嶽山
東 晃太郎	大阪大学工学研究科 修士課程	〃	〃
横井 裕之	熊本大学自然科学研究科 准教授	高分散単層カーボンナノチューブ配向膜の強磁場下近赤外・可視域光吸収特性	〃
ムフタール エフェンディ	熊本大学自然科学研究科 博士課程	〃	〃
畑堀 直樹	熊本大学自然科学研究科 修士課程	〃	〃
網塚 浩	北海道大学理学研究院 教授	重い電子系 $URu_2Si_2$ 及び関連物質の高圧・超強磁場磁性	金道
高山 茂貴	北海道大学理学研究院 修士課程	〃	〃
古川 裕次	北海道大学理学研究院 助教	ナノスケール分子磁性体の極低温強磁場磁化測定	〃
木内 和樹	北海道大学理学研究院 修士課程	〃	〃
佐々木 実	山形大学理学部 教授	パルスマグネット用磁気熱電気効果測定装置の開発とその応用	〃

大西彰正	山形大学理学部 准教授	パルスマグネット用磁気熱電気効果測定装置の開発とその 応用	金道
掛谷一弘	筑波大学数理学物質科学研究科 講師	NbSe <sub>3</sub> のパルス強磁場下輸送現象	〃
西村武徳	筑波大学数理学物質科学研究科 修士課程	〃	〃
田中秀数	東京工業大学理工学研究科 教授	フラストレーションのある量子スピン系 Cs <sub>2</sub> CuBr <sub>4</sub> の強磁 場磁化測定	〃
小野俊雄	東京工業大学理工学研究科 助教	〃	〃
海老原孝雄	静岡大学理学部 准教授	Ce 金属間化合物における強磁場電子物性	〃
杉山優介	静岡大学理学部 修士課程	〃	〃
菊池彦光	福井大学工学研究科 教授	新規量子スピン系の強磁場磁化過程測定	〃
藤井裕	福井大学遠赤外線領域開発研究センター 准教授	〃	〃
田邊雄一	福井大学工学研究科 修士課程	〃	〃
中村裕之	京都大学工学研究科 教授	BaVS <sub>3</sub> とその関連物質の強磁場物性	〃
直江和明	京都大学工学研究科 修士課程	〃	〃
田畑吉計	京都大学工学研究科 助教	希釈反強磁性体 Ho <sub>x</sub> Y <sub>1-x</sub> Ru <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> の量子相転移	〃
松田紘典	京都大学工学研究科 修士課程	〃	〃
吉村一良	京都大学理学研究科 教授	高磁場を用いた量子臨界点近傍及び二次元磁性系の研究	〃
太田寛人	京都大学理学研究科 博士課程	〃	〃
陳斌	京都大学理学研究科 博士課程	〃	〃
陰山洋	京都大学理学研究科 准教授	二次元量子スピン系の磁化プラトーに関する研究	〃
辻本吉廣	京都大学理学研究科 博士課程	〃	〃
渡辺貴志	京都大学理学研究科 修士課程	〃	〃
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過程	〃
堀彰宏	岡山大学自然科学研究科 博士課程	〃	〃
山口毅典	岡山大学自然科学研究科 修士課程	〃	〃
神戸高志	岡山大学自然科学研究科 助教	1次元ハルデン物質 TMNIN の 1/2 磁化プラトーの検証	〃
伊賀文俊	広島大学先端物質科学研究科 准教授	近藤半導体 YbB <sub>12</sub> 置換合金系の準定常強磁場下の磁化およ び磁気抵抗	〃
道村真司	広島大学先端物質科学研究科 博士課程	〃	〃
伊賀文俊	広島大学先端物質科学研究科 准教授	多段磁化を示す TbB <sub>4</sub> の磁性に対する Y 置換効果	〃
道村真司	広島大学先端物質科学研究科 博士課程	〃	〃
浅野貴行	九州大学理学研究院 助教	一次元幾何学的競合系化合物の強磁場磁化過程	〃
市村収太	九州大学理学府 修士課程	〃	〃

浅野 貴行	九州大学理学研究院 助教	CuMoO <sub>4</sub> の磁場誘起マグネットクロミズム	金道
西村 泰三	九州大学理学府 修士課程	”	”
光田 暁弘	九州大学理学研究院 准教授	価数揺動 Yb 化合物のパルス強磁場磁化測定	”
山田 健二	九州大学理学府 修士課程	”	”
鹿又 武	東北学院大学工学部 教授	ホイスラー合金 Ru <sub>2-x</sub> Fe <sub>x</sub> CrGe の強磁場磁気特性	”
草刈 陽介	東北学院大学工学研究科 修士課程	”	”
佐藤 博彦	中央大学理工学部 准教授	フラストレーション構造を持つ新しい鉄ホウ酸化物の強磁場磁化	”
野本 一平	中央大学理工学部 修士課程	”	”
香取 浩子	理化学研究所中央研究所 専任研究員	フラストレート磁性体の強磁場下での振舞い	”
星 武道	埼玉大学理工学研究科 修士課程	”	”

## 物質合成・評価設備Pクラス

氏名	所属	研究題目	関係所属
稲辺 保	北海道大学大学院理学研究院 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. C.	北海道大学大学院理学研究院 博士課程	”	”
石川 学	北海道大学大学院理学研究院 博士課程	”	”
陰山 洋	京都大学大学院理学研究院 准教授	二次元量子スピンフラストレート系の逐次相転移に関する研究	上田 (寛)
辻本 吉廣	京都大学大学院理学研究院 博士課程	”	”
北田 敦	京都大学大学院理学研究院 修士課程	”	”
中山 則昭	山口大学大学院理工学研究科 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	”
中島 智彦	産業技術総合研究所先進製造プロセス研究部門 研究員	ペロブスカイト型 Mn 酸化物薄膜における磁気抵抗特性及び電荷整列相の観察	”
松平和之	九州工業大学工学部 助教	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
竹田 真帆人	横浜国立大学工学研究院 准教授	Cu-Co/Fe 合金中のナノ Co/Fe 磁性粒子の組織、形態的特徴と磁氣的性質	物質合成室
桑田 幸作	横浜国立大学大学院工学府 修士課程	"	物質合成室
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 20 面体クラスター個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
岡田 純平	東京大学工学系研究科 助教	"	"
兵藤 宏	東京大学新領域創成科学研究科 博士課程	"	"
高際 良樹	東京大学新領域創成科学研究科 博士課程	"	"
宮崎 吉宣	東京大学新領域創成科学研究科 博士課程	"	"
上村 享彦	東京大学新領域創成科学研究科 修士課程	"	"
松田 准一	大阪大学理学研究科 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
津田 浩克	大阪大学理学研究科 修士課程	"	"
金澤 英樹	京都学園大学経済学部 非常勤講師	精密物性測定に必要なディオプサイド (MgCaSi <sub>2</sub> O <sub>6</sub> ) 単結晶の合成	"
原田 祥久	産業技術総合研究所 研究員	フローティングゾーン法を用いたペロブスカイト型酸化物シンチレータの開発	"
寺川 史一	東京大学工学系研究科 博士課程	高温・高圧水中の固体金属酸化物触媒を使用した水と反応に対する水の影響の調査	化学分析室 X線測定室 電子顕微鏡室
石河 睦生	東京大学新領域創成科学研究科 特任助教	水熱合成法によるニオブ酸カリウムの生成	化学分析室 X線測定室
大崎 博之	東京大学新領域創成科学研究科 教授	表面波プロセスプラズマ措置のプラズマポテンシャル制御によるダイヤモンド薄膜合成に関する研究	化学分析室
金 東珉	東京大学新領域創成科学研究科 修士課程	"	"
大島 義人	東京大学新領域創成科学研究科 教授	高温・高圧下における金属片の腐食の解析、及び堆積塩の分析	化学分析室 電子顕微鏡室 X線測定室
石原 真吾	東京大学新領域創成科学研究科 修士課程	"	"
大島 義人	東京大学新領域創成科学研究科 教授	超臨界流体技術による新規機能性複合材料の合成	"
古舘 学	東京大学新領域創成科学研究科 修士課程	"	"
大島 義人	東京大学新領域創成科学研究科 教授	高温高圧水による有機-無機ハイブリッド材料の合成	"
渡辺 潤	東京大学新領域創成科学研究科 修士課程	"	"
大友 順一郎	東京大学新領域創成科学研究科 准教授	リン酸二水素セシウムを電解質に用いた直接エタノール形燃料電池の電極反応評価	"
加藤 博行	東京大学新領域創成科学研究科 修士課程	"	"
大友 順一郎	東京大学新領域創成科学研究科 准教授	RF スパッタリング法を用いたバリウムセレート複合酸化物薄膜の合成とプロトン伝導特性	"
塩野谷 瞳	東京大学新領域創成科学研究科 修士課程	"	"

横道 治 男	富山県立大学工学部 准教授	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
市原 秀 紀	東京大学新領域創成科学研究科 博士課程	陽極酸化アルミナポーラス中で作製した低次元有機ナノ構造体の構造・電気物性評価	X線測定室
澤井 理	東京大学工学系研究科 博士課程	超臨界水中の水熱微粒子合成とその触媒調製法としての応用	電子顕微鏡室 化学分析室 X線測定室
佐々木 岳 彦	東京大学新領域創成科学研究科 准教授	ナノ金属酸化物粒子のTEM観察と物性計測	電子顕微鏡室 電磁気測定室 光学測定室
Jinhu Yang	東京大学新領域創成科学研究科 客員共同研究員	"	"
鄧 飛	東京大学新領域創成科学研究科 博士課程	電子顕微鏡法によるカーボンナノチューブ含有複合材料の界面特性評価	電子顕微鏡室
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
河野 紀 雄	千葉工業大学工学部 教授	AZ91 マグネシウム合金の粒内析出物のTEM観察	電子顕微鏡室
鈴木 あゆみ	千葉工業大学工学部 修士課程	"	"
西本 一 恵	東京理科大学基礎工学研究科 博士課程	正20面体クラスター固体の構造相転移	"
緒方 啓 典	法政大学工学部 教授	新規ナノチューブ状物質の構造研究	"
大串 研 也	理化学研究所中央研究所 基礎科学特別研究員	パイロクロア型酸化物 $Pb_2Ir_2O_7$ の結晶構造	"
藤森 淳	東京大学理学系研究科 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	"
宋 敬 錫	東京大学理学系研究科 修士課程	"	"
服部 賢	奈良先端科学技術大学院大学 准教授	Si(111)-Fe 表面試料の SQUID 測定	"
熊谷 智 宏	奈良先端科学技術大学院大学 修士課程	"	"
繁岡 透	山口大学理工学研究科 教授	$PrRh_2Ge_2$ 単結晶の磁氣的振舞い	"
柴崎 洋 志	山口大学理工学研究科 修士課程	"	"
廣井 政 彦	鹿児島大学理学部 教授	ホイスラー型化合物の磁性と伝導の研究	"
重田 出	鹿児島大学理学部 助教	"	"
吉田 喜 孝	いわき明星大学科学技術部 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	"
西原 弘 訓	龍谷大学理工学部 教授	遍歴電子強磁性体 $Co_2VGa$ のキュリー点近傍での磁化過程	"
矢口 裕 之	埼玉大学理工学研究科 准教授	レーザー照射に伴う InGaAsN 混晶の発光効率変化に関する研究	光学測定室
谷岡 健太郎	埼玉大学理工学研究科 修士課程	"	"

# 平成19年度後期 スーパーコンピュータ共同利用採択課題一覧

所 属	代 表 者	タ イ ト ル
大阪大学大学院理学研究科 教 授	小 川 哲 生	励起子モット転移の拡張動的平均場理論
岐阜大学工学部 准教授	寺 尾 貴 道	ソフトマテリアル系における非平衡分子シミュレーション
埼玉大学大学院理工学研究科 教 授	飛 田 和 男	フラストレートした側鎖のある混合スピン系における新奇な非磁性状態の数値的研究
首都大学東京大学院理工学研究科 准教授	門 脇 広 明	分子動力学を用いたカーボンナノチューブ内の吸着分子の研究
東京大学大学院総合文化研究科 助 教	猪 野 和 住	トポロジカル・オーダーと量子計算
横浜国立大学大学院工学研究院 准教授	首 藤 健 一	TiSi <sub>x</sub> クラスターの電子状態の評価
大阪大学大学院理学研究科 准教授	湯 川 論	非平衡シミュレーションによるレオロジーの研究
神奈川大学工学部 助 教	田 沼 慶 忠	有限サイズの常伝導/異方的超伝導体接合のトンネルスペクトルの数値計算
山梨大学教育人間科学部 准教授	川 口 高 明	超伝導ネットワークにおける動的性質
北海道大学大学院工学研究科 博士研究員	西 野 信 也	ランダム磁場下2次元フラットバンド不規則電子系における電子状態
大阪大学大学院理学研究科 教 授	川 村 光	地震の統計モデルの数値シミュレーション
産業技術総合研究所 主任研究員	灘 浩 樹	II型クラスレートハイドレートの生成機構の分子動力学研究
金沢大学大学院自然科学研究科 准教授	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
北海道大学大学院理学研究院 COE学術研究員	能 川 知 昭	外力駆動された磁束格子の秩序状態
福井工業大学工学部 教 授	利根川 孝	空間構造をもつ一次元量子スピン系の数値的研究
琉球大学理学部 教 授	梯 祥 郎	動的CPA+LDA理論の開発と鉄の有限温度磁性への応用 II
日本原子力研究開発機構先端基礎研究センター 研究主幹	堀 田 貴 嗣	揺らぎ交換近似法による超ウラン化合物の超伝導の研究
東北大学金属材料研究所 教 授	前 川 禎 通	遷移金属酸化物中の磁気相互作用と励起スペクトル
慶応義塾大学理工学部 教 授	佐 藤 徹 哉	低次元系パラジウムの磁性
大阪大学大学院工学研究科 助 教	小 野 倫 也	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
東京大学大学院工学系研究科 講 師	藤 堂 眞 治	長距離相互作用をもつスピン系の相転移と臨界現象
秋田大学工学資源学部 講 師	足 立 高 弘	微細溝加工を施した平板を流れる薄膜流の熱輸送特性
名古屋大学大学院工学研究科 准教授	田 仲 由喜夫	異方的超伝導の理論 発現機構と量子現象の理論
東京大学大学院理学系研究科 助 教	柳 瀬 陽 一	強相関電子系における幾何学的フラストレーションと新奇な量子相の理論的研究
愛媛大学大学院理工学研究科 教 授	淵 崎 員 弘	非平衡状態での遅い緩和過程



東京大学大学総合教育研究センター 特任教授	藤原毅夫	複手法による第一原理電子構造計算の拡張
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
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結晶中マンガシリサイドの形成の検討
物質・材料研究機構計算科学センター PD	松下勝義	ランダムピン止め中の磁壁運動の数値的研究
筑波大学計算科学研究センター 産学官連携研究員	藤本義隆	第一原理による電子輸送特性計算手法の構築とナノスケールデバイスの設計
日本原子力研究開発機構量子ビーム応用研究部門 研究主幹	坂井徹	キャリア・ドープしたスピントラップにおけるカイラリティ誘起超伝導
電気通信大学電気通信学部 准教授	尾関之康	非平衡緩和法によるランダム系の普遍性解析
千葉大学理学部 教授	中山隆史	InN半導体の転位と電荷中性準位の研究
東京工業大学大学院総合理工学研究科 助教	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
東京工業大学大学院理工学研究科 日本学術振興会特別研究員 PD	手塚真樹	冷却原子系の超流動: 密度行列繰り込み群によるアプローチ
日本大学理工学部 助手	勝木厚成	粉流体で構築される砂丘の動力学
防衛大学校応用科学群 助教	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
京都大学大学院理学研究科 教授	川上則雄	一次元光格子中冷却フェルミ原子気体の動的性質の解析
東京大学大学院工学系研究科 教授	渡邊聡	ナノ構造の電気特性とその計測に関する理論解析
日本大学理工学部 助手	田中倫子	第一原理計算によるカーボンナノチューブを用いた新機能デバイスの設計
理化学研究所中央研究所 研究員	小野田繁樹	空間反転対称性が破れた固体のスピン・軌道磁性と磁気電気効果の第一原理的研究
東京大学大学院理学系研究科 助教	赤木和人	シリコン基板上のF4TCNQおよび1-アルケン分子の電子状態と電場の影響
産業技術総合研究所 研究員	橋本保	表面・界面及び強誘電体の第一原理分子動力学計算
東京大学大学院工学系研究科 助教	島田尚	粒子系及び格子系を用いた輸送現象の研究
京都大学大学院理学研究科 准教授	池田隆介	2次元磁場誘起超伝導・絶縁体転移の数値的研究
物質・材料研究機構計算科学センター 主任研究員	館山佳尚	第一原理拘束MDエネルギーギャップ法による溶液中の酸化還元反応の自由エネルギー解析
金沢大学大学院自然科学研究科 教授	斎藤峯雄	ナノ薄膜とナノチューブの電子状態
東京大学物性研究所 助教	佐藤昌利	非交差準位間隔分布の普遍性に基づくスピンホール効果の研究
東京大学物性研究所 准教授	加藤岳生	摩擦のある量子系の経路積分モンテカルロ法による研究
東京大学大学院工学系研究科 助手	沖津康平	X線高木-トウパン型動力学理論による計算機シミュレーション
東京大学物性研究所 准教授	甲元真人	柔らかいゲル化過程の数値計算(IV): 架橋点濃度に対するゲル化の相図2
大阪大学大学院理学研究科 教授	川村光	フラストレート磁性とカイラリティ秩序
東京大学物性研究所 准教授	川島直輝	拡張アンサンブル法の量子相転移研究への応用
大阪大学大学院理学研究科 助教	吉野元	層状物質の相転移と非線形レオロジーの数値解析

# 平成20年度前期共同利用公募のご案内

東大物性研共第5号

平成19年10月12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20年度前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) 一般研究員 (一般、スーパーコンピュータ、物質合成・評価設備) | (平成20年4月～平成20年9月前期実施分) |
| (2) 一般研究員 (中性子: 東海村)                | (平成20年4月～平成21年3月実施分)   |
| (3) 長期留学研究員                         | (平成20年4月～平成21年3月実施分)   |
| (4) 短期留学研究員                         | (平成20年4月～平成20年9月前期実施分) |
| (5) 短期研究会                           | (平成20年4月～平成20年9月前期実施分) |

#### 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ください。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

今期から Web 申請となりました。詳しくは本研究所ホームページ

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

なお、申請書は Web 申請後にプリントアウトし、押印のうえ、下記まで郵送願います。

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 04-7136-3484

#### 4 申請期限

- |                     |                    |
|---------------------|--------------------|
| (1) スーパーコンピュータの共同利用 | 平成19年11月22日 (木) 必着 |
| (2) 中性子科学研究施設の共同利用  | 平成19年11月15日 (木) 必着 |
| (3) その他の共同利用        | 平成19年11月22日 (木) 必着 |

#### 5 採否の判定

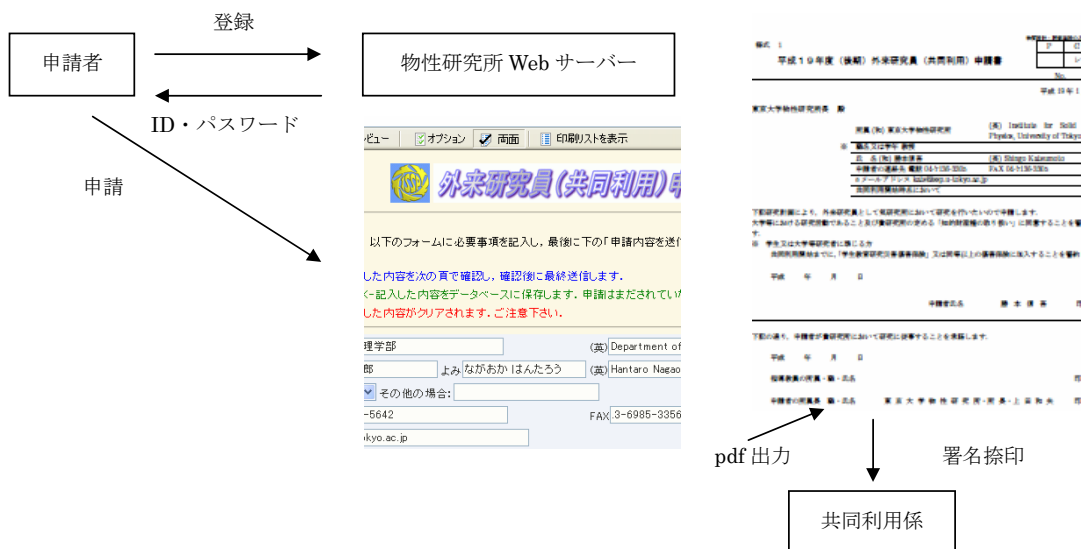
平成20年3月下旬

# 物性研究所共同利用申請 Web 化のお知らせ

共同利用事務の簡素化、共同利用申請者の便宜を図る目的で、平成 20 年度前期申請より、共同利用申請の Web 申請化を行います。

## (1) Web 化できる範囲

現在の制度下では、知財条項、その他誓約事項に対して申請者及び機関代表者（あるいは所属部局代表者）の署名捺印のある書類を提出していただく必要があり、この部分だけは Web 化がどうしても不可能です。そこで、暫定的に下の図のように、申請は Web で行っていただき、申請内容を元に作成した書類に署名捺印の上、共同利用係までご提出いただく方法をとります。



## (2) Web 申請の流れ

### 2-1 ID・パスワードの取得

指定 URL をブラウザで開いて、必要な研究者情報を入力します。入力された e メールアドレスに ID とパスワードが送付されます。

### 2-2 申請内容の入力

上記 ID とパスワードを使用して申請フォームを開き、必要事項を入力します。

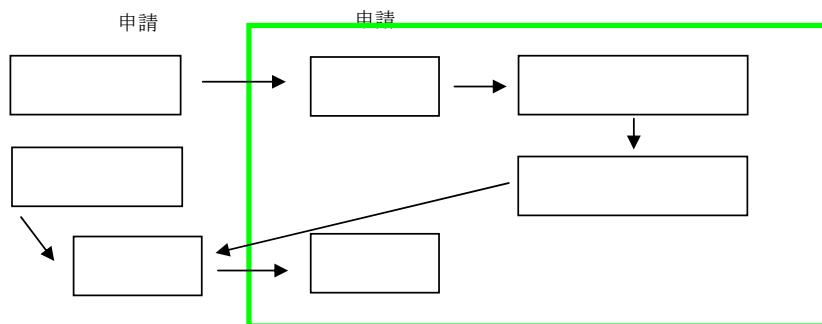
### 2-3 申請書の印刷

入力が正常に終了すると、申請書が Adobe pdf フォーマットで作成されます。作成された申請書を印刷し、所属長、学生の場合は指導教員の認印を受けて下さい。認印を受けた申請書は、共同利用係に郵送いただくか、共同利用係に直接提出下さい。

### (3) 研究プロジェクト制

これまで、「研究代表者」の申請に、協力者の申請が付随して申請書が提出される形式が取られてきましたが、これを Web 上では「研究プロジェクト」という形で引き継ぎます。印刷と研究申請書の形式には変化がありません。

「研究プロジェクト」のために、特別な入力をする必要はなく、既存プロジェクトの下ではない新しい申請を行うと、この申請内容に基づき新規プロジェクトが同時に作成されます。プロジェクト番号が交付され、次からは、プロジェクト番号と代表者の ID を入力することでこのプロジェクトに付随する申請を行うことができるようになります。



既存のプロジェクトの下で申請を行うと、入力フォームは宿泊日時等以外の必要事項は入力済の形で開きます。

### (4) Web 申請の便利な機能

Web 申請においては、事務の簡素化ばかりでなく、申請者の利便性も向上させたいと考え、便利な機能を盛り込んであります。

#### 4-1 個人情報入力の省略

登録時に入力された情報は、申請時には入力済の形でフォームがオープンします。

#### 4-2 過去申請の参照

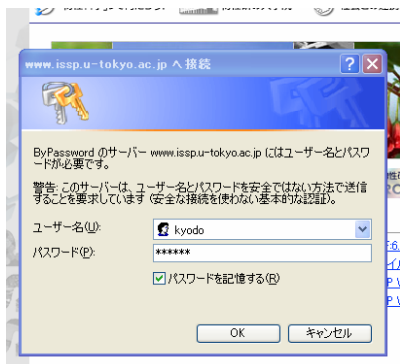
プロジェクト下の申請でなくても、以前に入力したデータがあれば、これを参照して入力することができます。

#### 4-3 簡易 TeX 入力

特殊文字等は TeX 形式で入力していただくこととなりますが、コマンドを覚えなくても簡単に入力できるようなウィンドウを用意しました (Internet Explorer のみ)。

### (5) URL、パスワード

申請 URL: [http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/joint/joint\\_research.html](http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/joint/joint_research.html)



# 平成19年度外部資金の受入れについて

## 1. 奨学寄附金

件数	金額(円)
11件	7,510,199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	
熱可塑性オレフィン系ポリマーブレンドの相溶性ならびに成形加工品の固体構造に関する研究	住友化学株式会社石油化学品研究所	840,000		附属中性子科学研究施設 教授 柴山 充弘
中性子・光散乱法およびレオロジー測定を用いた化粧品製剤の状態解析	花王㈱ビューティケア研究センター	1,000,000		附属中性子科学研究施設 教授 柴山 充弘
散乱手法による硬化挙動および塗膜架橋構造の研究	トヨタ自動車㈱	3,615,500		附属中性子科学研究施設 教授 柴山 充弘
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㈱	11,857,650		物性理論研究部門 准教授 杉野 修
高性能ビーム位置モニタに関する研究	エムティティ㈱	300,000		附属軌道放射物性研究施設 准教授 中村 典雄
金属材料の水素化、水素脆化及び水素透過の研究	カンオ計算機㈱	3,500,000		極限環境物性研究部門 准教授 上床 美也
中性子散乱による材料評価	㈱豊田中央研究所	700,000		附属中性子科学研究施設 准教授 佐藤 卓
合計		21,813,150		

## 3. 受託研究

研究題目	委託者	受入金額(円)	研究担当職員
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	3,250,000	附属中性子科学研究施設 教授 柴山 充弘
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	22,490,000	先端分光研究部門 准教授 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	6,110,000	新物質科学研究部門 准教授 森 初果
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	6,788,600	ナノスケール物性研究部門 准教授 吉信 淳
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	2,535,000	物性理論研究部門 准教授 杉野 修
ナノスケール分解能スピン共鳴原子間力顕微鏡の開発	(独) 科学技術振興機構	3,822,000	ナノスケール物性研究部門 准教授 長谷川 幸雄
量子ビットの制御・観測に関する理論的評価	(独) 科学技術振興機構	650,000	物性理論研究部門 准教授 加藤 岳生
サブ100アト秒パルスの発生とアト秒時間分解分光	(独) 科学技術振興機構	48,750,000	先端分光研究部門 教授 渡部 俊太郎
中性子散乱法によるプロトンの動的構造の解析	(独) 科学技術振興機構	14,040,000	附属中性子科学研究施設 准教授 山室 修
マイクロ軟X線発光分光法による有機・高分子薄膜界面の解析と界面制御	(独) 科学技術振興機構	3,120,000	先端分光研究部門 教授 辛 埴
次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発	文部科学省研究振興局	40,682,000	附属物質設計評価施設 教授 常次 宏一
合計		152,237,600	

## 編集後記

物性研創立 50 周年なので記念号を出しましょう、それで編集方針は、特集記事の執筆を OB に依頼しましょう、という所までは早々と決まった。しかし誰にどうやって依頼するのか？という疑問が解決されないまま気が付けば夏が来ていた。しかも猛暑であった。まあ猛暑と言っても所詮は柏の暑さである。オレは 3 年前まで大阪の夏を耐えてきたので全然平気である。結局、今年も所員室のクーラーは一度も使わなかった。エコロジーやなあ。これは自慢と思ってもらっても結構だ。うだる所員室で原稿依頼について考えた。ポイントは次の 2 点である。まず、事情通に相談すると候補者は決められるが、バイアスがかかる恐れがある。次に、多くの人で話し合い候補者を選出する手があるが、結論が出にくい。その点、物性研歴 3 年のオレであればバイアスは無いし、一人で考えれば結論は早い。という事で、一人でたどり着いたのが、見開き 2 ページで良いからなるべく多くの OB にお願しようという結論だった。そこで、「物性研だより」送付リストと物性研名簿を基にして依頼状を発送した。もっと便利な「りゅうど会名簿」なるものの存在を知ったのはだいぶ後の事である。しまったやはり誰かに相談しておくべきだったと思いはしたが、アホのやる事はせいぜいこんな所である。しかしながら、せっかくの原稿なのだから記念事業で配布できる様に特集記事を分冊にしようという事になり、今号は二分冊である。ええんやろうか？こんなんで。

『真実を追究する者はまず歴史を学ばなければならない』と言うが、今回の特集記事は物性研の歴史を勉強する上で役に立つのでは無いだろうか。所員 OB の生の話には正史からだけでは分からない裏の事情が含まれているだろう。誕生時の話や部門制への移行などは初めて聞く事も多く、物性研の使命について考えさせられた。また、柏移転と放射光は多くの方が触れられている話題であり、これが当時からの大問題であった事がうかがえた。柏移転に否定的な意見もあった様だが、柏で頑張っているオレには残念であった。ただ、柏への移転後は良く知らないというご意見には情報発信への努力不足を指摘されていると感じた。これに関して本誌が担うべき役割は小さくないと考える。例えば「放射光」については近いうちに特集記事を予定しており、この問題に対する物性研の解答をお知らせする事が出来ると考えている。今後も、本誌を通じて説明責任の一端を担う所存である。

最後に、原稿を頂戴しました 22 名の OB の皆様に改めてお礼を申し上げます。本当にありがとうございました。また、編集中心にお亡くなりになりました田沼先生のご冥福をお祈りします。

金 道 浩 一