

VI. 物性理論グループ

教授	高田 慧、久保 健、押山 淳
助教授	有光 敏彦、平島 大
講師	田上 由紀子、大橋 洋士
助手	郡司 茂樹、桃井 勉
準研究員	田中 篤司
学振ポスドク	Sukmin Jeong
大学院生	16名

【1】 超伝導・超流動状態の研究

(1) 酸化物高温超伝導体 (*d*-wave 超伝導) におけるジョセフソンプラズマの研究

(大橋、高田) [論文 1-3、講演 1,2]

擬2次元 *d* 波超伝導におけるジョセフソンプラズマを研究、種々の銅酸化物高温超伝導体 ($Tl_2Ba_2CuO_6$ 、 $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$) で観測されたプラズマの温度変化の解析を行った。その解析から、 $Tl_2Ba_2CuO_6$ では単純なジョセフソンプラズマとは異なり、超流動成分に加え常流体成分もプラズマ振動に参加している可能性を指摘した。さらに、酸化物高温超伝導において実験的に指摘されている、*c* 軸方向の磁場侵入長と伝導率との相関 (Basov の相関) について、もし、この系種々の物質における *c* 軸伝導率の大きさの差異が散乱強度ではなくバンド構造に起因するのであれば、理論的に説明可能であることを明らかにした。

(2) 異方的超伝導界面における自発表面電流に対するフェルミ面の形状、

及び束縛状態の影響の研究 (大橋) [論文 4、講演 3]

異方的超伝導界面においてその発生の可能性が指摘されている自発表面電流について、界面近傍に生じる低エネルギー束縛状態の役割、フェルミ面の形状効果について研究した。結果、自発表面電流の発生は低エネルギー束縛状態に起因すること、また、電流の大きさや方向はフェルミ面の形状に大きく依存し、その形状によっては束縛状態自身は存在していても表面電流は生じないことを明らかにした。(院生 草間 喜克氏との共同研究)

(3) 酸化物高温超伝導体中における局所反強磁性秩序出現の研究 (大橋) [論文 5]

反強磁性的スピン揺らぎの強い酸化物高温超伝導体における、超伝導状態下での反強磁性秩序出現の可能性について実空間超伝導理論を用い研究した。結果、一様な系では超伝導により反強磁性秩序の出現が抑えられていても、*d* 波超伝導では界面、不純物近傍に反強磁性秩序が局所的に誘起されることを明らかにした。これは、*d* 波超伝導では界面、不純物近傍にゼロエネルギー束縛状態が形成される為、それら周辺で低エネルギー状態密度が一様な系に比べ大きくなり、それにより反強磁性秩序が発生するという機構に因る。

(4) 2次元液体³Heの研究 (平島、高橋) [講演 4]

2次元液体³Heの実験的な研究は確実に進展を遂げている。その大きな目標の1つは、超流動状態の実現である。3次元においては、*p* 波超流動状態が実現することが知られているが、3次元超流動状態も *p* 波状態となるかどうかは、自明な問題ではない。3次元超流動状態については、まず、T行列を用いた理論によって *d* 波超流動状態が予想された。その後の実験によっ

てこの予想は正しくないことが示されたわけだが、その理由は、現実の3次元液体 ^3He は、きわめて相関が強く主に2体相関のみ取り込むT行列理論では不十分であったためと考えられる。一方、2次元液体 ^3He は、実験において密度を広い領域で変化させることができる。十分希薄な領域では相関効果は弱くT行列理論が有効であると考えられる。このような観点から、高橋は2次元液体 ^3He に対してT行列理論を適用し、現実的なレナードジョーンズポテンシャルを用いて有効相互作用を求め、可能な超流動状態の対称性を調べた。その結果、希薄な領域ではp波引力が最も強いことが分かった。密度が濃くなるにしたがってd波引力のほうが強くなるが、この領域は多体相関効果がより強くなる領域でありT行列理論は有効とは考えにくい。むしろ、高橋が前年度に研究したスピンゆらぎを媒介とする引力が重要であると考えられる。

【2】 重い電子系の研究

(1) 重い電子系におけるMicromagnetismの理論 (大橋) [論文8、講演5,6]

URu₂Si₂において出現する、Micromagnetism (誘起される磁気モーメントが極端に小さい磁気秩序状態)に対し、運動量空間で符号が変化する秩序パラメータを有するスピン密度波状態を提案、転移温度における核磁気共鳴、比熱の異常、磁気モーメントの消失に加え、この状態を用いると転移温度で観測される非線形帯磁率の飛びも説明可能であることを示した。(京都大学池田 浩章氏との共同研究)

(2) 重い電子系における非フェルミ流体的な振る舞いに関する研究 (平島、久保勝) [講演7、修士論文1]

近年、重い電子系における非フェルミ流体的振る舞いが強い関心を集めている。様々な原因が考えられるが、そのひとつが磁氣的量子臨界点の存在である。そのような場合の非フェルミ流体的振る舞いは、スピンゆらぎの自己無撞着くりこみ理論(SCR理論)あるいはそれと同等な1ループのくりこみ理論によって説明される場合が多い。しかし、CeCu_{6-x}Au_x ($x \simeq 0.1$)における非フェルミ流体的振る舞いの原因は量子臨界点によるものと考えられるにも関わらず、その一様帯磁率の温度依存は、SCR理論では説明が困難である。そこで久保(勝)は、近似を進めて2ループ補正の効果を計算し一様帯磁率の温度依存がどのような影響を受けるか調べた。その結果、2ループ補正が臨界指数を変化させることはないが、transientな振る舞いとして実験的に見いだされているような特徴的な温度依存性をもたらすことがわかった。

【3】 強相関電子系・磁性

(1) 縮退したバンドをもつ強相関電子系の研究 (平島、久保勝) [論文9]

酸化物高温超伝導体(LaSr)₂CuO₄と同じ結晶構造をもつSr₂RuO₄は、p波超伝導が実現している可能性が高く注目されている。この系が酸化物高温超伝導体と異なるのは、d軌道がほぼ3重縮退していることであり、軌道間のフント結合が磁性、超伝導に重要な役割を演じている可能性がある。そこで、久保(勝)と平島は、軌道縮退およびそれに伴うフント結合を考慮にいたれたアンダーソン模型を用いて、特に、フント結合の電子間引力に対する効果を量子モンテカルロ法を用いて調べた。その結果、フント結合によって同一軌道上の平行スピン電子間にも強い引力が生じることが分かった。この引力によってSr₂RuO₄においてp波の超伝導が実現している可能性がある。

(2) 2次元フェルミ粒子系の磁性 (平島、久保勝) [論文10]

前年度の研究に引き続いて、平島と久保(勝)は、相互作用する2次元フェルミ粒子系の自由

エネルギーの特異性について研究を進めた：その結果、有限温度有限磁場中において自由エネルギーに $\sqrt{T^2 + H^2}$ というタイプの特異性をもつ項が現われることが分かった。これは、前年度の研究で見出された温度に比例して温度変化する一様帯磁率とコンシステントな結果である。

(3) 金属強磁性の研究 (桃井、久保) [論文 11-14、講演 8,9、博士論文 1]

金属強磁性を示す多くの系では軌道の縮退があり、強磁性の実現には軌道縮退の効果が重要と思われる。我々は、前年に引き続き強磁性の出現における軌道縮重依存性及びフント結合の効果に注目し研究した。

- a) 格子次元無限大の極限で2バンド・ハバード模型の基底状態を数値対角化法を用い調べた。その結果、金属強磁性は、格子点当りの電子密度 n が1以上の時に現れるが1以下の場合には現れなかった。この結果は、軌道縮退した系において強磁性を引き起こす原因として提案されていた“Double Exchange Mechanism”が、この系において有効に働いている事を示している。またこの系では金属絶縁体転移の起る近傍の密度で相分離が起る事が示された。
- b) 1次元格子上的2バンド・ハバード模型における強磁性出現の条件を、密度行列繰り込み群と摂動展開を用い調べた。まず最近接格子間のみホッピングのある場合については $n > 1$ の場合も $n < 1$ の場合も強磁性基底状態が安定に現れる事がわかった。さらにバンド構造の影響を調べる為、バンドの分散が波数の一次関数となる特殊なモデルでも計算を行った。 $n > 1$ の場合には強磁性がこの系でもほぼ同じパラメタ領域で現れるのに対して、 $n < 1$ の場合には強磁性の現れる領域が非常に狭められることが分った。この結果と無限大次元の結果とから、以下の事が結論される。(大学院生 坂本晴美氏との共同研究)
 - $n > 1$ の場合の強磁性はdouble exchange mechanismにより引き起こされ、次元バンド構造等にあまり依らず安定である。
 - $n < 1$ の場合強磁性の安定性は次元あるいはバンド構造に強く依存する。この場合の2あるいは3次元での金属強磁性の安定条件を解明する事は今後に残された課題である。
- c) 二重交換相互作用系における1電子グリーン関数を1サイト近似で求め、電子状態を調べた。またグリーン関数から電気伝導率を計算した。スピンの乱雑さによる散乱から生ずる電気抵抗は現実のマンガン化合物の抵抗に比べ1桁以上小さく実験を説明するためには他の効果を取り入れる必要があることがわかった。(Imperial College, D.M. Edwards, A.C.M. Green 氏らとの共同研究)
- d) 二重交換模型の局在スピンの $S = 1/2$ の場合の基底状態を無限大次元において調べ基底状態の磁気相図を求めた。従来調べられてきた古典スピンの場合との比較を行い量子効果の影響を調べた。強磁性状態がスピンの量子性の影響を強く受けることが分った。(大学院生 長井健太郎氏との共同研究)

(4) 2次元量子固体の磁性 (桃井、久保) [論文 15、講演 10,11]

グラファイト表面上の固体ヘリウム3薄膜における磁性の研究を行った。この系では、3個以上の粒子の交換により生じる多体スピン交換相互作用が強く働いている。多体交換相互作用の効果調べる為、三角格子上的4体交換相互作用を持つスピン模型を調べた。固体 ^3He 薄

膜で従来観測されてきた低密度領域に対応すると考えられる4体と2体の相互作用が強く競合する領域では、古典的基底状態が無限に縮退している。そのため量子揺らぎにより、量子的な無秩序相が現れる可能性が高い事が示された。この系に外部磁場をかけると縮退した基底状態のうちでもっとも磁化の大きな状態である $uvud$ 状態が安定化される。この状態は量子揺らぎに対しても有限の磁場領域で安定であることが有限系の計算でしめされた。したがって磁化曲線の磁化1/2のところプラトーが現れる。またこの状態は格子の並進対称性を破る状態なので、有限温度で相転移を起し相転移点で比熱の鋭いピークを示す。(大学院生 坂本晴美氏との共同研究)

(5) 量子スピン系の理論的研究：磁化プラトーの研究 (桃井) [講演 12]

いくつかの量子スピン系において、磁化曲線中にプラトー構造が現れることが知られている。我々はこれらの現象を、励起状態が磁性粒子として振る舞い、粒子間相互作用により Mott 絶縁体になる事により起こる量子相転移現象として理解出来ることを示した。また、 $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ や CaV_4O_9 の物質で、これまで見つかっていない磁化プラトーの出現を予言した。(理研、戸塚圭介氏との共同研究)

【4】 非平衡散逸系の統計物理 (有光) [論文 16-21、講演 13-24、紀要 1-13]

Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics (NETFD) の体系では、非平衡量子散逸系が正準演算子形式(量子力学や場の量子論と同じ)で扱え、散逸過程にある物理量を真空期待値として求められる。ところで、場の量子論では、真空と一粒子状態の安定性が大前提である。有限温度では、真空は安定であるが、一粒子状態は不安定となる。さらに、非平衡散逸系では、真空と一粒子状態が共に不安定になってしまう。つまり、NETFDでは、従来の場の量子論での大前提(真空と一粒子状態の安定性)が拡張されているのである。そこでは、散逸時間発展が、ある種の粒子対の真空への凝縮の結果として記述される。これは、散逸あるいは熱現象が、まったく新しい概念(拡張された意味での自発的対称性の破れ)で捉えられる可能性を示している[論文 17 : 紀要 3, 11 : 講演 15-18, 22, 25]。

NETFDにより実現した量子系確率微分方程式の一貫した体系に基づくと[論文 17 : 紀要 1, 2, 4]、従来射影演算子法により導出されていた量子ランジュバン方程式が、通常信じられているストラトノヴィッチ型ではなく伊藤型であることが判明した[論文 16, 19 : 紀要 8, 10 : 講演 11]。その関連で、量子クラマース方程式を微視的に導出する手続きをNETFDに基づいて定式化した。通常の演算子を確率演算子に表現し直す際、従来数学者により提唱されている手法では物理的に矛盾が生じることを明かにし、正しい確率微分方程式を導出するには適切な繰り込み手続きが必要であることを示した[論文 18 : 紀要 7, 9 : 講演 11]。

また、NETFDではマルチンゲール演算子の「自由度」なる概念が導入でき、測定装置に関わる新しい解釈が可能となった。この「自由度」とは、同一の量子マスター方程式を与える確率微分方程式が、マルチンゲール演算子の違いにより非加算無限個存在することに由来する。マルチンゲール演算子の違いは、測定装置と注目している系との相互作用の違いによるものである。したがって、如何なる物理量をどのようにして測定するかによって、マルチンゲールが決まるのである。つまり、マルチンゲールに非加算無限個のオプションがあるということは、測定装置にそれだけの「自由度」があることを意味し、理論的枠組みとしてはこの上もなく好ましいことである。ちょうど、真空の自発的対称性の破れに関連して、非加算無限個の非同値表現が存在することが、自然界の「相」を記述するのに本質的であったのと似通った事情が浮き彫りにされた訳である。このことが端的に現れる系として、霧箱内の入射粒子(宇宙線等)軌

跡の問題をNETFDにおける量子確率微分方程式の体系で定式化した。そこでは霧箱内の気体分子がイオン化することによる入射粒子測定（連続非破壊測定）の効果を、入射粒子に対する白色雑音演算子の作用として捕らえるのである。この測定（番犬効果）の結果として、入射粒子の波束の拡がりが増えらるることをダイナミカルな扱いで示すことに成功した[紀要 6：講演 12, 13]。

量子限界を克服するために導入された量子非破壊測定に対する散逸の効果を、NETFDの方法を利用してダイナミカルに調べた。その結果、カー媒質を利用して光子数の非破壊測定を実現できる系に散逸を考慮すると、測定精度に「散逸限界」が現れることを見出した[紀要 12：講演 21, 24]。

NETFDの体系にD.N. Zubarevが導入・発展させた非平衡統計演算子の方法を拡張・移植することにより運動学および流体力学的領域を一貫して扱い、クォーク・グルオン・プラズマ(QGP)の輸送係数を求め、その輸送現象解明への準備を進めた。そもそも、クォークとグルオンは高温、高密度状態で強く相互作用してQGP状態を成しており、その解析には運動学および流体力学的方程式の導出が不可欠であるが、従来の理論では主に平衡状態近傍で有効な統計力学的手法が用いられ、しかも希薄プラズマ状態での輸送係数を求めるに止まっている。おりしもQGPの本格的な実験が始まろうとしている時期である。運動学および流体力学的領域の現象に対して新しい視点を導入しQGPの非平衡状態での過渡的振る舞いを明らかにするとともに、実験結果からそれを抽出する可能性を探っている[論文 20]。

発達乱流の間欠性指数とTsallis統計特有のパラメータ（以下、Tsallisパラメータ）が直接関係つくことを明らかにした。その際、乱流を構成する渦のサイズに関わるマルチフラクタル性がTsallis統計の基礎に深く関連しているであろうことを積極的に利用した。渦サイズ（エネルギー散逸機構）のマルチフラクタル性は、間欠性の重要な背景をなすものである。実験やシミュレーションでの測定可能量である間欠性指数が直接Tsallisパラメータと関連付けられた訳である。さらに、Tsallis統計を利用してエネルギー散逸分布関数を求めた。上記の関係式を用いて測定結果から得たTsallisパラメータを採用すると、全領域に渡ってその分布関数が乗法的二項過程（multiplicative binomial process）に基づいた発達乱流モデル（pモデル）のものと非常によく一致することが明らかになった。このことより、発達乱流の間欠性の本質は、pモデルにではなく、むしろTsallis統計にあるのではないかという仮説が成り立つ。Tsallis統計が多くの実験やシミュレーションを説明しその一般性が示されているので、この仮説もそれほど突飛なものではない。この観点から発達乱流を再考し、それを通じてTsallis統計の意味するところを物理的に探ることはたいへん興味深い問題である[論文 21]。

多くの物理ゲルの定常粘性率は、低いずり率において一定（Maxwell型）で、高いずり率に対してはゲルを構成するネットワーク破壊のため減少する。興味深いことに、多くの実験で「Maxwell型から減少に転ずる辺りのずり率で定常粘性率にピークが現れること」が報告されている。田中・エドワーズの組替え網目理論（transient network theory）を基礎にして、ネットワークを構成している高分子に乱雑飛行モデル（the random-flight model; 高分子の長さが有限であることを取り入れたモデル）を採用すると、そのピークがうまく説明できることを示した。なお、オリジナルの田中・エドワードモデルでは高分子にガウス鎖モデルを採用したため、ピークの説明ができていなかった[紀要 13]。

【5】 カオス

(1) 散逸系のカオス（有光） [講演 25-28、紀要 14-16]

周期倍分岐軌道のトポロジカルな性質（各軌道の捻じれを表わす「局所交差数」、軌道間の

絡みを表わす「絡み数」など) を特徴付けるテンプレートには、可約と既約の二つのタイプがある。後者の場合について、バンド融合後のアトラクターの構造を特徴付けるテンプレートの存在を、非線型マシュー方程式の場合について調べた。その結果、不安定多様体の構造から推定したテンプレートが、周期倍分岐を特徴付けるテンプレートと一致することが分かった。さらに、実際の軌道の絡みを、得られたテンプレートと三乗写像 (the cubic map) における可能文字列 (the admissible words) で特徴付けられることが分かった。また、実際の軌道の時間発展より求めた文字列が、可能文字列とその大小関係も含めて一致することを確認した。

(2) 量子カオス： 長時間時間発展に対する半古典論の数値的研究 (田中)

coherent state 経路積分の、数値的な半古典評価の手法を開発しました。coherent state 経路積分の定常位相(半古典)評価では、どの鞍点(物理的な対象は 古典軌道) が積分(物理的な対象は Feynman 核) に寄与するかどうかを判定する必要があります。寄与する解の集合と寄与しない解の集合(を parameter 付けする面) を分かつ境界は Stokes 線と呼ばれます。漸近解析論の指数的優越の原理によれば、Stokes 線を定める条件は局所的で、微分方程式で与えられます。しかし、この微分方程式に現われる係数は多価関数なので、そのままでは数値解析の対象になりません。本研究で行なったことは、問題の Stokes 線の方程式に、自由度を増やすことで、Stokes 線を記述する微分方程式の係数を(水増しされた自由度で見て)一価のものに焼きなおしたことです。これによって、Stokes 線を、数値的に安定に求めることが可能になりました。このことは、半古典論で、カオス系の長時間の時間発展を追いかけるために必要不可欠なことです。

【6】 密度汎関数法による全エネルギー・電子構造理論

(1) 半導体エピタキシャル成長の機構 (押山, S. Jeong) [論文 22 - 25、講演 29 - 32]

半導体のエピタキシャル成長は、基板物質と気相との界面における原子反応の所産であり、その原子スケールでの素過程の解明は、理論物理に対するチャレンジであり、テクノロジーに対する貢献でもある。Jeong は、エピタキシャル成長のひとつのパラダイムであり、応用上最も重要な水素で覆われた Si(100) 面での飛来 Si 原子の吸着と拡散を密度汎関数法の局所密度近似によって調べた。表面に必ず存在する原子層ステップの原子構造を決定し、STM イメージを予言した。水素原子で覆われない場合との構造の違いは顕著なことが判明し、実験的な表面ステップ構造同定に道を開いた。更にそのステップ近傍での飛来 Si 原子の拡散機構を明らかにした。主な結果は、(1) 単原子層ステップ近傍には、従来想像されてきたような、拡散の活性化エネルギーの増加はみられない、(2) しかしながらステップ下端に飛来原子に対する深いスィンク(捕獲位置)が存在し、これがエピタキシャル成長の核位置となりうる、(3) 飛来原子の化学種(Si あるいは Ge)の違いにより、拡散経路、拡散障壁に、少なくとも違いが見られ、それが生成薄膜のモフォロジーの違いを作っている、である。こうした知見を得るためには、多自由度空間での全エネルギー断熱ポテンシャル面の探索、特に鞍点探索の数学的技術が必要であった。

(2) 半導体結晶中の点欠陥の原子・電子構造 (押山, 秋山) [論文 26 - 28]

物質中には必ず不完全性が存在し、その不完全性(例えば原子空孔なら母体原子の1000万分の1の濃度)が母体物質の物性に決定的な影響を及ぼす。その典型は半導体中の原子空孔であろう。典型的半導体である Si 結晶中の単原子空孔、複原子空孔については昔から多くの研究があるが、それらが集積した多原子空孔については、その存在は疑い得ないにも係わらず、微視的同定は全くなされていらない。秋山は前年度に、transferable タイト・バインディング模

型を用いて、多原子空孔の安定サイズ（魔法数）を予言したが、今回それを密度汎関数法の局所密度近似、一般化勾配近似を用いて検証し、魔法数の第一原理からの予言を行った。更に、空孔周囲の原子の緩和の状況を仔細に計算し、安定空孔である、6原子空孔、10原子空孔での、緩和のパターンを明らかにし、それによって生じる禁制帯中の深い準位と浅い準位の構造を予言した。

更に秋山は、半導体中に最もしばしば存在する水素原子（分子）が、この安定多原子空孔（負のSiクラスター）に捕獲される可能性を検討し、水素原子の化学ポテンシャルの関数としての水素修飾多原子空孔の安定性を明らかにした。さらにその多原子空孔に水素分子が捕獲される際のエンタルピーを計算し、また水素分子の伸縮振動の周波数が、原子空孔のサイズによって変化することを突き止めた。振動数の計算には、周囲原子の緩和効果と電子相関効果の双方が重要であることがわかった。この理論的結果は、最近のラマン散乱実験で観測されている複数種類のピーク出現のパズルを無理無く説明する。

(3) 炭素系新物質の新物性（押山、北村） [論文 29 - 31、講演 33]

C₆₀ に代表されるフラレン、また炭素ナノチューブの発見により、炭素系材料への興味は大きく広がっている。北村はこうした新規炭素系物質群の生成機構を調べるため、有限サイズのグラファイトの原子構造・電子構造の歪み依存性を、タイト・バインディング模型で調べ昨年度報告した。今年度はそれを密度汎関数法を用いて計算し、タイト・バインディング模型の結果は少なくとも定性的には正しいことを確かめた。さらにグラファイトに特有な表面状態類似の inter-layer 状態の存在などを見出した。

岡田晋（物質工学系）、斎藤晋（東工大）、押山は、C₆₀ 固体に圧力をかけると、1次元あるいは2次元 C₆₀ ポリマーが出現するという実験結果にヒントを得て、さらに軸性圧力をかけると、3次元 C₆₀ ポリマーが出現することを理論的に示した。理論で予言される相転移の臨界圧力は20 GPaであり、実験的な検証が望まれる。この新3次元層は驚くべきことに金属になることが予想され、炭素原子のみで構成された初めての金属相となるかもしれない。

(4) ダイヤモンド表面のフォノン構造（押山） [論文 32、講演 34]

ダイヤモンド（111）面はπボンド構造という特有な表面再構成を示すが、その正確な原子位置については、局所密度近似による計算と、X線回折による結果とが一致していなかった。斎藤峯雄（NEC）、宮本良之（NEC）、押山は一般化勾配近似計算により、原子構造位置を正確に決めるとともに、表面フォノン構造を計算し、ある特定モードのソフト化を見出した。実験的な検証が望まれる。

(5) 希土類元素硫黄酸化物の固有欠陥（押山） [論文 33]

希土類元素硫黄酸化物は、蛍光物質として半世紀以上も使われてきているが、その物性、特にバンド構造、欠陥の引き起こす電子状態については、五里霧中の状況である。三上昌義（三菱化学研究所）、押山は、典型的な硫黄酸化物である YO₂S について局所密度近似による電子構造計算を実行し、p型n型を問わず、空孔型欠陥の生成エネルギーが小さく、したがってその制御は肝要であること、を明らかにした。イットリウム原子のd軌道に起因する多配位の構造とあわせて、希土類硫黄酸化物の特異性が明らかになった。

上記密度汎関数法計算の有効性と問題点について、押山は電子材料学会で基調講演を行った。 [講演 33]

【7】 タイト・バインディング模型による原子・電子構造計算：オーダー（N）新手法の
開発と Si 表面構造への応用（押山、渡邊） [修士論文 2]

タイト・バインディング模型は、実際の物質に対する大胆な簡単化モデルであり、多くの重要な物理と化学が抜け落ちる可能性があるが、一方密度汎関数法計算などの第一原理的アプローチとスマートに組み合わせれば、有用な情報が得られる。何といたっても模型の簡便さゆえに、多数の原子群を曲がりなりに量子論的效果を含んで扱えることは魅力であろう。渡邊はそうした観点から、従来のシュレディンガー方程式を解く解法ではなく、密度行列の汎関数としての自由エネルギーを極小化する新しい計算手法を導入し、それに基づいたオーダー（N）計算法（計算時間がサイズNに比例）を開発した。これにより $10^3 \sim 10^4$ 個の原子群を容易に扱うことが可能となった。タイト・バインディング模型のパラメータを局所密度近似計算の結果を再現するように決定し、Si 表面での原子層ステップ構造を調べた。ステップの生成エネルギーのテラス幅依存性を系統的に調べ、実験的に見られているモフォロジーの原因を探った。

< 論文 >

1. Y. Ohashi and S. Takada: "Theoretical Studies on the Observation of the Low-frequency Plasma Oscillation and its Coupling with the Carlson-Goldman Mode in Dirty Quasi-two-dimensional Superconductors" Phys. Rev. B **59** (1999) 4404.
2. Y. Ohashi and S. Takada: "Temperature dependence of the *c*-axis Josephson plasma oscillation in high- T_c superconductors" Phys. Rev. B [投稿中].
3. Y. Ohashi: "Theory of Basov correlation between penetration depth and conductivity along the *c*-axis in high- T_c cuprate superconductors" Phys. Rev. Lett. [投稿中].
4. Y. Kusama and Y. Ohashi: "Effect of the BCS Supercurrent on the Spontaneous Surface Flow in Unconventional Superconductivity with Broken Time-Reversal-Symmetry" J. Phys. Soc. Jpn. **68** (1999) 987.
5. Y. Ohashi: "Local antiferromagnetism in high- T_c cuprate superconductors and the magnetic phases of U-based heavy fermion compounds" Phys. Rev. B [投稿中].
6. T. Yoshioka and Y. Ohashi: "Ground State Properties and Localized Excited States around a Magnetic Impurity Described by the Anisotropic s-d Interaction in Superconductivity" J. Phys. Soc. Jpn. **67** (1998) 1332.
7. Y. Kanegae, Y. Ohashi, and H. Ikeda: Monte Carlo Study on the Nuclear Magnetic Ordering in Scandium Crystal: Possibility of a Ferrimagnetic State. J. Phys. Soc. Jpn. **68** No.7 (1999) 掲載決定.
8. H. Ikeda and Y. Ohashi: "Theory of Unconventional Spin Density Wave: A Possible Mechanism of the Micromagnetism in U-based Heavy Fermion Compounds" Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 3723.
9. K. Kubo and D. S. Hirashima: "Effects of the Hund's Rule Coupling in the Orbital Degenerate Anderson Model" J. Phys. Soc. Jpn. **68** (1999) No. 7.
10. D. S. Hirashima and K. Kubo: "Non-analytic Contribution to the Free energy of Interacting Two-dimensional Fermion Systems" J. Phys. Soc. Jpn. **68** (1999) No. 7.

11. T. Momoi and K. Kubo, "Ferromagnetism in the Hubbard model with orbital degeneracy in infinite dimensions": *Phys. Rev. B*, **58** (1998) R567 - R570.
12. K. Kubo, D. M. Edwards, A.C.M. Green, T. Momoi and H. Sakamoto: "Magnetism and Electronic States of Systems with Strong Hund Coupling" *Physics of Manganites* ed. by T. A. Kaplan and S.D. Mahanti, Plenum Publishing Corp. (1999) in press.
13. D.M. Edwards, A.C.M. Green and K. Kubo: "Quantum spins in the double exchange model of manganites" *Physica B*, (1998) in press.
14. D.M. Edwards, A.C.M. Green and K. Kubo: "Electronic Structure and resistivity of the double exchange model" *J. Phys.: Condens. Matter*, (1999) to be published.
15. T. Momoi, H. Sakamoto and K. Kubo: "Magnetization plateau in a two-dimensional multiple-spin exchange model" *Phys. Rev. B*, **59** (1999) 9491 - 9499.
16. T. Imagire, T. Saito, K. Nemoto and T. Arimitsu: "A Comment on the Shibata-Hashitsume Langevin Equation — Is It of the Stratonovich Type or of the Ito Type? —", *Physica A***256** (1997) 129–148.
17. T. Arimitsu: "A Unified System of Stochastic Differential Equations in terms of Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics", *Stochastic Processes and their Applications*, Ed. A. Vijayakumar and M. Sreenivasan (Narosa Publishing House, Madras, 1999) 279 - 294.
18. T. Satio and T. Arimitsu: "A Microscopic Derivation of Quantum Stochastic Differential Equations corresponding to the Quantum Kramers Equation", *Stochastic Processes and their Applications*, Ed. A. Vijayakumar and M. Sreenivasan (Narosa Publishing House, Madras, 1999) 323 - 333.
19. T. Imagire and T. Arimitsu: "A Calculus of the Shibata-Hashitsume Langevin Equation — Is It of the Stratonovich Type or of the Ito Type? —", *Stochastic Processes and their Applications*, Ed. A. Vijayakumar and M. Sreenivasan (Narosa Publishing House, Madras, 1999) 334 - 338.
20. M. V. Tokarchuk, T. Arimitsu and A. E. Kobryn: "Thermo Field Hydrodynamic and Kinetic Equations of Dense Quantum Nuclear Systems" *Condensed Matter Physics* **1** (1998) 605–642.
21. T. Arimitsu and N. Arimitsu: "Analysis of Fully Developed Turbulence in terms of Tsallis Statistics" *Phys. Rev. Lett.* (1999) submitted.
22. S. Jeong, A. Oshiyama, "Diffusion Mechanism of Si Adatom on H-terminated Si(100) Surfaces" *Phys. Rev. B* **58** (1998) 12958-12963.
23. S. Jeong and A. Oshiyama, "Structural Stability and Adatom Diffusion at Steps on Hydrogenated Si(100) Surfaces" *Phys. Rev. Lett.* **81** (1998) 5366-5369.
24. S. Jeong and A. Oshiyama, "Energetics and Kinetics for Si-Ge Intermixing on Ge-adsorbed Hydrogenated Si(001) Surfaces" *Surface Sci. Lett.* (1999) in press.
25. S. Jeong and A. Oshiyama, "Chemical Difference in Surface Diffusion: Si and Ge Adsorption at the D_B Step on the Hydrogenated Si(100) Surfaces" *Phys. Rev B Rapid Communications*, submitted.
26. Y. Okamoto, M. Saito, and A. Oshiyama, "Hybrid Density Functional Study on Vibrational Frequency of a H_2 Molecule at the Tetrahedral Site of Silicon", *Phys. Rev. B* **58** (1998) 7701-7706.

27. T. Akiyama, A. Oshiyama and O. Sugino, "Magic Numbers of Multivacancies in Crystalline Si" J. Phys. Soc. Jpn. **67** (1998) 4110-4116.
28. T. Akiyama, Y. Okamoto, M. Saito and A. Oshiyama, "Multivacancy and Its Hydrogen Decoration in Crystalline Si" Phys. Rev. Lett. (1999) submitted.
29. N. Kitamura, A. Oshiyama and O. Sugino, "Atomic and Electronic Structures of Deformed Graphite" J. Phys. Soc. Jpn **67** (1998) 3976-3984.
30. S. Okada, S. Saito, A. Oshiyama, "New Metallic Crystalline Carbon: Three-Dimensionally Polymerized C₆₀ Fullerite" Phys. Rev. Lett. (1999) in press.
31. K. Umemoto, S. Saito and A. Oshiyama, "Electronic Structure of K₃Ba₃C₆₀ and Rb₃Ba₃C₆₀ Superconductors" Phys. Rev. B (1999) submitted.
32. M. Saito, Y. Miyamoto and A. Oshiyama, "Stability and Lattice Vibrations of the Clean Diamond (111) Surface" Proc. 9th Int. Conf. Vibrations at Surfaces, Surf. Sci. in press.
33. M. Mikami and A. Oshiyama, "First-Principles Study of Intrinsic Defects in Yttrium Oxysulfide" Phys. Rev. B. (1999) in press.

< 学位論文 >

修士論文

1. 久保 勝規：磁気的な量子臨界点近傍における非フェルミ液体の研究（1999年3月）
2. 渡邊 栄一：シリコン表面のステップ構造：オーダー（N）タイト・バインディング法（1999年3月）

博士論文

1. 坂本晴美：Ferromagnetism in the Two-Band Hubbard Model（1999年6月）

< 講演 >

1. 大橋洋士, 高田慧：「層状超伝導体における低周波プラズマと Carlson-Goldman モードの結合の理論的研究」 1998年9月 日本物理学会（沖縄国際大学）.
2. 大橋洋士：「Theoretical Studies on the Low-frequency Plasma and the Carlson-Goldman Mode in Layered Superconductors」 1998年12月 Workshop on the Intrinsic Josephson Phenomena（東京琴平会館）.
3. 草間喜克、大橋洋士、高田慧：「自発表面電流に対するフェルミ面の形状と束縛状態の影響」 1998年9月 日本物理学会（沖縄国際大学）.
4. 高橋英昭：“2次元³Heの有効相互作用” 科研費研究会「低次元ヘリウム3の新物性」、1999年1月、伊豆。
5. 大橋洋士：「重い電子系における Micromagnetism の理論」 1998年5月 東京理科大学.
6. 池田浩章, 大橋洋士：「URu₂Si₂における Micromagnetism の理論II」 1998年9月 日本物理学会（沖縄国際大学）.

7. 久保勝規：“磁氣的量子臨界点における高次補正の効果”，日本物理学会、1999年3月、広島。
8. (Invited) K. Kubo, D.M. Edwards, A.C.M. Green, T. Momoi and H. Sakamoto：“Magnetism and Electronic States of Systems with Strong Hund Coupling”; International Workshop on Physics of Manganites, 1998年7月 Michigan State Univ., E. Lansing, USA
9. 長井健太郎、桃井 勉、久保 健：“動的平均場による二重交換模型の基底状態の相図”日本物理学会分科会、平成10年9月、琉球大学。
10. 坂本晴美、桃井 勉、久保 健：“4体交換相互作用のある2次元三角格子上のスピン系における磁化プラトー”日本物理学会分科会、平成10年9月、琉球大学。
11. 桃井 勉、坂本晴美、久保 健：“2次元多体交換模型における磁化プラトー”研究会『低次元ヘリウム3の新物性』、平成11年1月、伊豆高原
12. 桃井 勉、戸塚圭介：“2次元スピン系の磁化プラトーにおける insulator-conductor 転移描像”研究会『量子効果が顕著な役割を果たす磁性現象の新展開』、平成11年3月、京都大学基礎物理学研究所
13. T. Arimitsu and N. Arimitsu: 「A Quantum Stochastic Model for the Track in the Cloud Chamber」XXth IUPAP International Conference on Statistical Mechanics (STATPHYS 20), 1998年7月, UNESCO Conference Centre at Paris, France
14. N. Arimitsu and T. Arimitsu: 「Absorption Spectrum in a Localized Electron-Phonon System — Algebraic Approach in Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics —」XXth IUPAP International Conference on Statistical Mechanics (STATPHYS 20), 1998年7月, UNESCO Conference Centre at Paris, France
15. T. Arimitsu: 「A Method of Thermo Field Dynamics」NATO Advanced Study Institute on Models and Kinetic Methods for Non-Equilibrium Many-Body Systems, 1998年7月-8月, University of Leiden at Leiden, The Netherlands
16. T. Arimitsu: 「Migration of Unstable Vacuum for Dissipative Systems」5th International Workshop on Thermo Field Theories and Their Applications, 1998年8月, University of Regensburg at Regensburg, Germany
17. 有光敏彦: 「On Migration of Unstable Vacuum for Dissipative Systems」無限次元非可換解析学の展開, 1998年10月 京都大学数理解析研究所
18. T. Arimitsu: 「Applications of the System of Quantum Stochastic Differential Equations within Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics」ガウス過程と量子解析, 1999年10月 名古屋大学
19. T. Arimitsu: 「Introduction to Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics I」第9回統計物理学研究会, 1998年10月 サンペルナ志摩
20. T. Arimitsu: 「Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics」The 21st Solvay International Conference — Dynamical Systems and Irreversibility —, 1998年11月 けいはんな都ホテル
21. Y. Endo and T. Arimitsu: 「Quantum Nondemolition Measurement of Photon Numbers by a Dissipative Kerr Medium」第7回非平衡系の統計物理シンポジウム, 1998年12月 筑波大学
22. 印出井 努, 有光敏彦: 「A Theoretical Study of Shear-Thickening Behavior in Physical Gel」第7回非平衡系の統計物理シンポジウム, 1998年12月 筑波大学

23. 有光敏彦：「Migration of Unstable Vacuum for Dissipative Systems」第7回非平衡系の統計物理シンポジウム，1998年12月 筑波大学
24. 遠藤幸夫，有光敏彦：「散逸のある Kerr 媒質による光子数の量子非破壊測定」日本物理学会第54回年会，1999年3月 広島大学
25. 本池 巧，有光敏彦：「2文字の記号力学で記述できない周期倍分岐軌道の解析II」日本物理学会 年会，1998年4月 東邦大学，日本大学
26. 本池 巧，有光敏彦：「2文字の記号力学で記述できない周期倍分岐軌道の解析III」日本物理学会秋の分科会，1998年9月 琉球大学，沖縄国際大学
27. 本池 巧，有光敏彦：「記号力学を用いたカオス力学系のトポロジカルな特徴付けの一般化」第7回非平衡系の統計物理シンポジウム，1998年12月 筑波大学
28. T. Motoike and T. Arimitsu: 「Topological Characterization of Strange Attractors」Dynamics and Topology, 1999年3月 京都大学
29. S. Jeong and A. Oshiyama: “Complex diffusion mechanism of a silicon adatom on hydrogenated Si(100) surfaces: on terraces and near steps” 10th international Conference on Solid Surfaces (ICSS-10) (Birmingham, September 1998) to appear in Surface Science.
30. S. Jeong and A. Oshiyama: “Structural Stability and Atomic Diffusion at Steps on Hydrogenated Si(100)” APS Centennial Meeting (Atlanta, March 1999) Bull of APS 44 (1999) 1832.
31. 押山 淳: “Si エピタキシャル成長中の水素： エナーゲティクスとキネティクス” 第59回応用物理学会シンポジウム講演 (広島大学、1998年9月) .
32. 押山 淳: “水素化シリコン表面： 拡散とダイナミクス” 日本物理学会秋の分科会シンポジウム講演 (琉球大学、1998年9月) .
33. S. Okada, S. Saito and A. Oshiyama: “Design of New Crystalline Carbon System : Three Dimensionally Polymerized C₆₀ Fullerenes” APS Centennial Meeting (Atlanta, March 1999) Bull of APS 44 (1999) 1432.
34. M. Saito, Y. Miyamoto and A. Oshiyama, “Stability and Lattice Vibrations of the Clean Diamond (111) Surface” 9th Int. Conf. Vibrations at Surfaces, (Kanagawa, 1998).
35. (invited) A. Oshiyama: “Do First-Principles Calculations Work in Development of Materials” 17th Electronic Materials Symposium (Sizuoka, July 1998).

< 紀要等 >

1. 斎藤 健，有光敏彦：「非平衡 Thermo Field Dynamics による量子確率微分方程式の体系」物性研究 69-1 (1997-10) 83-102.
2. T. Arimitsu: 「Introduction to the Method of Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics —A Unified System of Stochastic Differential Equations—」数理解析研究所講究録 (RIMS Report, Kyoto), 1035 (1998) 33-43.
3. T. Arimitsu: 「On Migration of A Vacuum within Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics」*Similarities and Differences between Atomic Nuclei and Clusters*, ed. Abe, Arai, Lee and Yabana (The American Institute of Physics 1998) 389-392.

4. T. Arimitsu: 「A Unified System of Quantum Stochastic Differential Equations within Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics」 *Statistical Physics — Experiments, Theories and Computer Simulations* —, ed. M. Tokuyama and I. Oppenheim (World Scientific, 1998) 108–108.
5. T. Arimitsu: 「Introduction to the Method of Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics I」 *Proceedings of the Workshop on Recent Developments in the Study of Irreversible Processes*, ed. M. Sugiyama (Nagoya Institute of Technology, 1998) 43–63.
6. T. Arimitsu and Y. Endo: 「Non-Demolition Continuous Measurement and the Quantum Stochastic Differential Equations」 京都大学数理解析研究所講究録 [RIMS Report] **1066** (1998) 25–36.
7. 斎藤 健, 有光敏彦: 「非線形減衰振動子に対する量子確立微分方程式の微視的導出」 物性研究 **71-5** (1999-2) 780-793.
8. 今給黎 隆, 斎藤 健, 根本香絵, 有光敏彦: 「柴田・橋爪の Langevin 方程式は Stratonovich 型か Ito 型か?」 物性研究 **71-5** (1999-2) 870-883.
9. T. Saito and T. Arimitsu: 「量子 Kramers 方程式の基礎となる量子確率微分方程式の微視的導出」 物性研究 (1999) in press.
10. T. Imagire and T. Arimitsu: 「射影演算子法による導出が「伊藤型」量子確率微分方程式を与える訳」 物性研究 (1999) in press.
11. T. Arimitsu: 「Migration of Unstable Vacuum for Dissipative Systems」 京都大学数理解析研究所講究録 [RIMS Report] (1999) in press.
12. Y. Endo and T. Arimitsu: 「Quantum Nondemolition Measurement of Photon Numbers by a Dissipative Kerr Medium」 物性研究 (1999) in press.
13. 印出井 努, 有光敏彦: 「A Theoretical Study of Shear-Thickening Behavior in Physical Gel」 物性研究 (1999) in press.
14. T. Motoike and T. Arimitsu: 「A Topological Investigation of Chaotic Systems」 *Statistical Physics — Experiments, Theories and Computer Simulations* —, ed. M. Tokuyama and I. Oppenheim (World Scientific, 1998) 224–224.
15. 本池 巧, 有光敏彦: 「カオス力学系のトポロジカルな取り扱い」 物性研究 **71-5** (1999-2) 910-920.
16. 本池 巧, 有光敏彦: 「記号力学を用いたカオス力学系のトポロジカルな特徴付けの一般化」 物性研究 (1999) in press.