

VI. 物性理論グループ

教授	有光 敏彦, 押山 淳, 松本 秀樹 (2002年4月着任)
助教授	阿部 純義, 白石 賢二, 谷口 伸彦, Mauro Boero (2002年9月着任)
講師	岡田 晋, 大橋 洋士
助手	桃井 勉, 大谷 実, Alexander Kobryn
学振ポスドク	Petr Jizba
大学院生	13名
国費留学生	1名
研究生	2名

【1】 非平衡散逸系の統計物理・散逸場の量子論

- (1) 発達乱流のマルチフラクタル解析 (有光) 論文 [1, 2, 3, 4, 6, 9, 11],
紀要 [1, 2, 3], 講演 [1, 2, 3, 4, 6, 8, 10, 12, 13, 20]

乱流のマルチフラクタル解析 (MFA) とは, Tsallis 型分布関数に基づいて構築された, 大偏差系を扱うための系統的で自己無撞着な統計力学的方法である。Tsallis 型分布関数は, 適切な条件下で示量的 Rényi エントロピーかあるいは非示量的 Tsallis エントロピーの極値を与える定常分布である。この解析法は, 高 Reynolds 数における Navier-Stokes 方程式のスケール変換不変性と, この不変性に起因する特異点を実空間にマルチフラクタル分布しているという仮定に基づいている。なお, MFA は, 対数正規モデルを一般化したものととらえることもできる。既に報告したように Boltzmann-Gibbs エントロピーに基づいて MFA を行うと, 対数正規モデルが導かれる。

今年度は, 実験や Direct Numerical Simulation (DNS) で得られた乱流中流体粒子の加速度確率密度関数 (PDF) を主に解析し, 高精度で再現することに成功した。実験は Bodenschitz によるもので, 乱流中に流し込んだ試験粒子の直接追跡により加速度を測定した画期的なものである ($R_\lambda = 970$)。上記の特異点を直接捕らえたものと理解できる。また, DNS は後藤によるもので, メッシュサイズ 1024^3 での数値計算を行ったものである ($R_\lambda = 380$)。この DNS で得られた PDF の精度は, 現時点で史上最高を誇る画期的なものである (現在, 地球シミュレータを利用した 4096^3 の DNS が進んでいる)。

以下の詳しい解析により, 間欠性を呈する乱流系には, PDF の裾部分を司るダイナミックスとその中央部分を司るダイナミックスの二つがきれいに分離されることを示した。裾部分は, Tsallis パラメータ q により特徴付けられる。パラメータ q は, その系の間欠性指数 (あるいは Reynolds 数), つまり, 乱流系が与えられると自己無撞着に決まる。実空間にマルチフラクタルに分布する特異性により決まる部分で, ダイナミックスの大域的な様子を表しており, 希少事象による大偏差 (間欠性) を与えるものである。一方, 中央部分は, Tsallis パラメータ q' により特徴付けられる。標準偏差より小さいダイナミックスが司る部分で, 以下に述べるスケール変換不変性を破るもの (乱流を構成している渦糸などの欠陥のうねりや振動など) の特徴が現れるものと予想される。この部分の理解をさらに深めるため, 超流動 ^4He 中のタングルのシミュレーションを開発中であり, それから得られる PDF を MFA で解析することにより, 大偏差統計系に対する理解をさらに深めることが今後の課題である。

非圧縮性流体を記述する Navier-Stokes 方程式が高 Reynolds 数で有するスケール変換不変性から、速度導関数や流体粒子加速度の特異性（発散）が導かれる。その発散の程度は特異性指数 α で分類されるが、各 α で特徴付けられた特異点は、フラクタル次元 $f(\alpha)$ で実空間を占めていると考えられる。実空間のある点において、指数 α の特異点を見つける確率 $P^{(n)}(\alpha)d\alpha$ が、Tsallis 型分布関数 $P^{(n)}(\alpha) = [1 - (\alpha - \alpha_0)^2 / (\Delta\alpha)^2]^{n/(1-q)} / Z_\alpha^{(n)}$ で与えられる。この分布関数は、適切な条件の下に一般化されたエントロピーより導かれる定常分布となっている。 $Z_\alpha^{(n)}$ は分配関数であり、 $(\Delta\alpha)^2 = 2X / [(1-q) \ln 2]$ である。 $f(\alpha)$ は $P^{(n)}(\alpha)$ より得られる。 $n = -\log_2(\delta_n)$ ($\delta_n = l_n / l_0$) は、2点間の距離 l_n の指標となる。ただし、 l_0 は長さの基準を与える量である。 $P^{(n)}(\alpha)$ に表れる3つのパラメータ q , α_0 , X は間欠性指数 μ の関数として完全に自己無撞着に決定される。流体粒子の加速度に対す

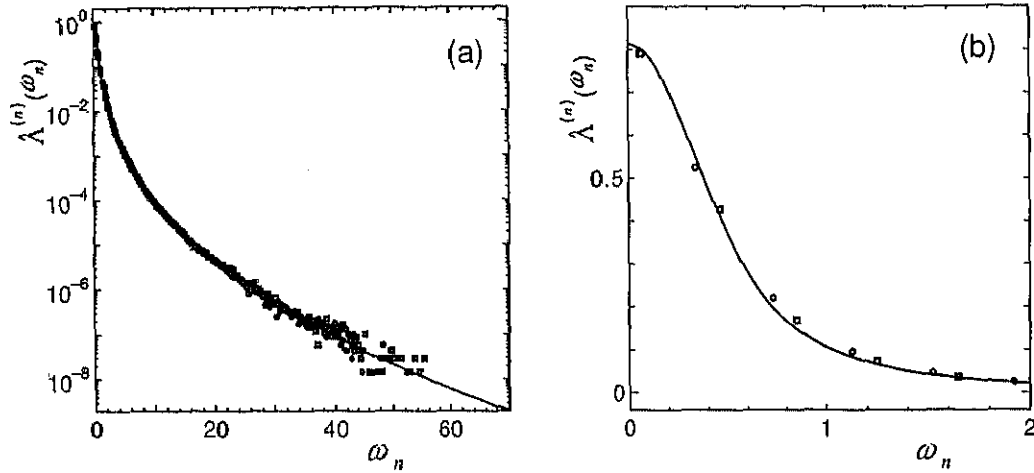


図 1: PDF of accelerations plotted on (a) log and (b) linear scale. Comparison between the experimentally measured PDF of fluid particle accelerations by Bodenschatz et al. at $R_\lambda = 690$ ($Re = 31\,400$) and the present theoretical PDF $\hat{\lambda}^{(n)}(\omega_n)$. Open squares are the experimental data points on the left hand side of the PDF, whereas open circles are those on the right hand side. Solid lines represent the curves given by the present theory (1) and (2) with $\mu = 0.240$ ($q = 0.391$), $n = 17.1$, $q' = 1.45$, $\omega_n^\dagger = 0.605$ ($\alpha^\dagger = 1.01$) and $\omega_n^{\max} = 2040$.

る確率密度関数の裾部分 $\omega_n^\dagger \leq |\omega_n| \leq \omega_n^{\max}$ は

$$\hat{\lambda}^{(n)}(\omega_n)d\omega_n = \tilde{\lambda}_S^{(n)} \frac{\bar{\omega}_n}{|\omega_n|} \left[1 - \frac{1-q}{n} \frac{(3 \ln |\omega_n / \omega_{n,0}|)^2}{8X |\ln \delta_n|} \right]^{n/(1-q)} d\omega_n \quad (1)$$

で与えられ、中央部分 $|\omega_n| \leq \omega_n^\dagger$ は、

$$\hat{\lambda}^{(n)}(\omega_n)d\omega_n = \tilde{\lambda}_S^{(n)} \left\{ 1 - \frac{1-q'}{2} \left[1 + \frac{3}{2} f'(\alpha^\dagger) \right] \left[\left(\frac{\omega_n}{\omega_n^\dagger} \right)^2 - 1 \right] \right\}^{1/(1-q')} d\omega_n. \quad (2)$$

で与えられる。ただし、 $\omega_{n,0} = \bar{\omega}_n \delta_n^{2\alpha_0/3 - \zeta_4/2}$, $\omega_n^{\max} = \bar{\omega}_n \delta_n^{2\alpha_{\min}/3 - \zeta_4/2}$ である。裾部分と中央部分は、 $\omega_n^\dagger = \bar{\omega}_n \delta_n^{2\alpha^\dagger/3 - \zeta_4/2}$ で関数値と導関数が一致するように繋がれている。ただし、

α^\dagger は, $\zeta_4/2 - 2\alpha/3 + 1 - f(\alpha) = 0$ の小さい方の解である。 ζ_m は速度構造関数の m 次モーメントに対するスケーリング指数で, 解析的表式

$$\zeta_m = \frac{\alpha_0 m}{3} - \frac{2Xm^2}{9(1 + \sqrt{C_{m/3}})} - \frac{1}{1-q} [1 - \log_2(1 + \sqrt{C_{m/3}})] \quad (3)$$

にて与えられる。 $\tilde{\lambda}_s^{(n)}$ や $\tilde{\omega}_n$ は, PDF $\hat{\lambda}^{(n)}(\omega_n)$ の規格化で決定される量である。

表式 (1), (2) で得られた加速度 PDF $\hat{\lambda}^{(n)}(\omega_n)$ と測定された加速度 PDF を, 加速度の偏差値で規格化した新たな変数 ω_n に対して記述したものを, 図 1 と図 2 に載せておく。

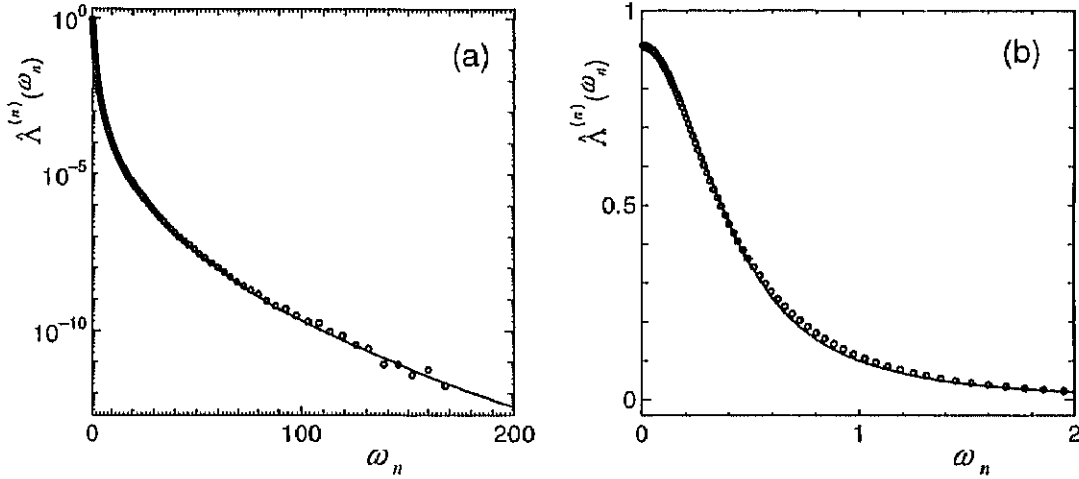


図 2: PDF of accelerations plotted on (a) log and (b) linear scale. Comparison between the PDF of fluid particle accelerations measured in the DNS by Gotoh et al. at $R_\lambda = 380$ and the present theoretical PDF $\hat{\lambda}^{(n)}(\omega_n)$. Closed circles are the DNS data points both on the left and right hand sides of the PDF. Solid lines represent the curves given by the present theory (1) and (2) with $\mu = 0.240$ ($q = 0.391$), $n = 17.5$, $q' = 1.70$, $\omega_n^\dagger = 0.622$ ($\alpha^\dagger = 1.01$) and $\omega_n^{\max} = 2530$.

(2) Generalized Statistics (Jizba, 有光) 論文 [8, 10, 14], 講演 [7, 15, 21, 22]

One of the major last-year projects was dedicated to study of physical setting for Rényi's information entropy. We have tried to find more quantitative aspects of Rényi's statistics as well the non-extensive statistics of Tsallis-Havrda-Charvat (THC). Especially, we have tried to generalize Hagedorn's statistical theory of momentum spectra of particles produced in high-energy collisions utilizing both Rényi's and THC entropy. While for collider experiments (e.g., e^+e^- annihilation) the Hagedorn theory yields a good description for relatively small center of mass energies ($<10\text{GeV}$), it fails at large energies. For example, Hagedorn's approach predicts an exponential decay of differential cross sections for large transverse momenta, whereas in experiments one observes non-exponential behavior for

large energies ($>10\text{GeV}$). For this reason one usually restricts to comparison of the experimental results at high energies to Monte Carlo simulations, which reasonably well reproduce the experimental data. But obviously, for a more fundamental understanding from a statistical physics of view there is a need to generalize Hagedorn's original ideas. One crucial points, namely the self-similarity of the high-energy scattering processes, already recognized by Hagedorn, was never quantitatively taken into account. From this point of view Rényi's statistics seems to be particularly suitable for generalization of the Hagedorn theory because of its build-in predisposition to describe self-similar systems. Such a generalization could in turn bring and enhancement in the predictability of momentum spectra of particles produced, for example, in cosmic ray experiments, in hadronic collisions or in collisions of nuclei. One can also speculate that some novel signatures of quark-gluon plasma (deconfined phase quarks and gluons created, for instance, in relativistic heavy ion collisions) could be predicted.

Another interesting subject in this line of research which we were concentrated on has been the application of generalized statistics to cosmology and particularly to the cosmic strings physics. In cosmology, unified gauge theories of particle interactions allows for a sequence of phase transitions in the very early universe some of which may lead to defect formation via the so called Kibble-Zurek mechanism. Cosmic strings as the most pronounced example of such defects, could have important relevance on the large scale structure formation of the universe or on CMBR (cosmic microwave background radiation) anisotropies. In astrophysics, for instance, cosmic strings play important rôle in dynamics of neutron stars and in the galaxy astrophysics. In usual cases when the grand canonical approach is applied it is argued that at the critical (phase transition) temperature at which strings tend to fragment into smallest allowed loops, while large loops become exponentially suppressed - i.e., at Hagedorn temperature, the correspondence between the canonical and microcanonical ensembles breaks down and the grand canonical partition function diverges. Various viewpoints with different remedies were proposed recently in the literature. On the other hand, it is well known that the distribution of string loops in the universe should be scale invariant. The latter suggests that Rényi's or THC statistics could be applied to construct the generalized grand canonical partition function for the string network. Our current results suggest that the new phase transition temperature should be lower than Hagedorn's one.

(3) NETFD とその応用 (有光, Kobryn, 院生: 林剛史, 院生: 福田佑介, 院生: 鍋木優一朗) 論文 [5, 7, 13], 講演 [5, 11, 14, 16, 18, 19]

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。

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 [5, 7]]。

1. Fermion系における Tilde 共役の適切な定義 (院生: 林剛史, 有光) 講演 [16]

ゴーストと反ゴーストを適切に導入すると、それらをも漸近場を含めたゲージ場の量子論を共変な正準演算子形式として構成できることが、九後・小嶋 (1978) により示された。観測にかからないゴースト状態や反ゴースト状態は、ノルムがゼロの状態として扱われる。これを有限温度のゲージ場理論へ拡張する試みが、カノニカル・アンサンブル熱平衡状態を記述する正準演算子形式の場の量子論, Thermo Field Dynamics (TFD), を駆使して小嶋 (1981) により成された。その過程で、フェルミオンのティルダ共役の定義に関わる任意性を解消できることが指摘された。一方、散逸非平衡状態を記述する正準演算子形式の場の量子論への TFD の拡張は、NETFD で成された。この拡張は、散逸系を記述する量子マスター方程式を「対応原理」を駆使して thermal space へ移植することにより、その口火が切られた。散逸非平衡状態の統計演算子 $\rho(t)$ の一般形は与えられていないので、TFD とは違って、NETFD では対称化した thermal vacuum を導入することは適切ではない。

本研究では、以上の進展を踏まえて、正準演算子形式のゲージ場の量子論の散逸非平衡系への拡張を行った。昨年度に引き続き、論理構造のより簡潔化が図られた。

2. 量子確率微分方程式の体系 (Kobryn, 院生: 林剛史, 有光) 論文 [5, 7, 13], 講演 [19]

Dynamics of quantum systems which are perturbed by linear coupling to the reservoir stochastically can be studied in terms of quantum stochastic differential equations (QSDEs) (for example, quantum stochastic Liouville equation and quantum Langevin equation). To work it out one needs definition of quantum Brownian motion. Since till very recent times only its boson version has been known, a definition which makes possible consideration also for fermion Brownian motion has been demonstrated. Using that definition, quantum stochastic differential equations for both boson and fermion systems have been investigated within the framework of Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics (NETFD).

The obtained results have two fixed parameters: the real parameter σ specifying different commutation rules for boson and fermion operators, and the complex parameter τ specifying different thermal state conditions for boson and fermion systems. Such a combined consideration was made possible due to the unification of fermion and boson stochastic calculus where fermion annihilation and creation processes are realized in a Boson Fock space by means of a simple stochastic integral prescription leading to similar multiplication rules for stochastic differentials. The dissipation mechanism is considered through the concept of a quantum noise, i.e. as a quantum field interacting with the relevant system. In our study we considered two types of interaction with external fields:

hermitian and non-hermitian. With the latter, conservation of the probability is satisfied within the relevant system. With the former, information about only relevant system is not enough and instead of that we can speak about conservation of the probability within the total system: relevant system plus environment system.

As we are concentrated on the stochastic equations, there are two types of stochastic calculus: Itô and Stratonovich. Correspondingly, equations used one or another type of stochastic calculus are classified as QSDE of the Itô or Stratonovich types. The Langevin equation of the Stratonovich type has structure similar to one of the Heisenberg equation of motion for a dynamical quantity in quantum mechanics and quantum field theory. As a result of different stochastic multiplication rule, the Langevin equation of the Itô type contains an extra term proportional to a product of random forces. The corresponding Fokker-Planck equation is then obtained most easily from the quantum stochastic Liouville equation of the Itô type by taking the random average. Though in fermion case the connection with the classical Brownian motion is only formal, the Itô/Stratonovich product formula is the same as in boson case. It has been shown that the averaged equation of motion for a dynamical quantity can be obtained in two ways. From the Langevin equation by taking both random average and the relevant vacuum expectation, or from the Fokker-Planck equation by taking the vacuum expectation of operators corresponding to the dynamical quantity. In our study we also showed that QSDEs constructed upon hermitian and non-hermitian interaction hat-Hamiltonians lead to the same averaged equation of motion for an arbitrary operator of the relevant system. In the case of stationary semi-free quantum stochastic process, its irreversibility has been checked in terms of the Boltzmann entropy. We also demonstrated the relationship to the method of quantum jump simulations.

3. NETFD による非破壊連続測定 (院生: 鍋木優一郎, 有光) 修士論文 [2]

通常の量子力学の体系では測定の効果は Schrodinger 方程式には含まれていないため、波束の収縮という人為的操作の導入を余儀なくされている。ところで、泡箱中の粒子線の軌跡の中がほぼ一定に見える。これは、泡箱内のイオンと粒子線の相互作用を量子連続非破壊測定と理解し、波束が連続的に収縮するためであると解釈されている。そこで、泡箱中の粒子が被る連続測定の影響は、乱雑に働く白色雑音と同等に扱えるとし、量子確率微分方程式によって一貫して扱えるものと仮定する。この方程式は、一事象の実験を記述する基礎方程式であると理解できる。すると、通常確率解釈に対応する基礎方程式は、乱雑力に対して平均をとった量子マスター方程式で与えられると考えられる。この解釈の下に、粒子線中の時間発展を、量子散逸系を扱う正準演算子形式の理論体系 NETFD で系統的に調べた。その結果、一事象に対しては、巾が有限値に収束することが分かった。一方、連続的波束の収縮の解釈に対応する量子マスター方程式の結果は、予想に反して、連続測定下の方が自由粒子の巾よりも急速に広がることを示している。通常解釈に問題があるのか、あるいはここでの扱いに問題があるのかは今後の問題であるが、ここで採用した連続測定に対する Belavkin 流の解釈を原点に立ち返って吟味しなおす必要のあることが明らかになった。

4. 量子エンタングルメントと散逸（院生：福田佑介，有光）修士論文 [1]

量子通信，量子計算機の開発で必要になる量子力学的重ね合わせ状態の散逸影響下における時間発展を調べた。特にデコヒーレンスに注目し，その指標として線形エントロピーを採用して解析を行った。量子散逸系を扱う正準演算子形式の理論体系 NETFD を利用すると，線形エントロピーに関わる無限小時間発展演算子を演算子代数のみで見通し良く求められることを駆使し，その解析的表式を求め物理的な性質を吟味した。これにより，今まで求められていなかった全時間領域での線形エントロピーの時間発展に対する解析解の導出に成功した。その結果，系の初期状態がコヒーレント状態で形成された Schrodinger の猫状態にある場合には，急速なデコヒーレンスが起これり，その後，線形エントロピーに極大が現れることを発見した（図 3）。その極大が現れる理由は，古典気体に於ける混合エントロピーとの類推で理解できることも示した。量子コヒーレンスが消える状況や，線形エントロピーにピークが現れる状況を，量子状態を可視化することにより分かり易く示すことも行っている。

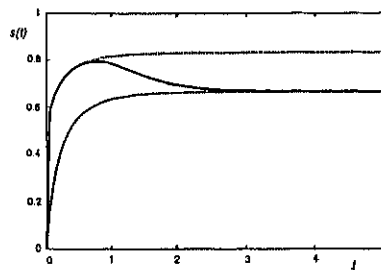


図 3: Linear entropy の時間発展。横軸は時間。縦軸は linear entropy である。実線は、初期状態がコヒーレント状態の重ね合わせ $(|\alpha\rangle + |-\alpha\rangle) / \sqrt{2(1 + e^{-2|\alpha|^2})}$ の場合。下の破線は初期状態がコヒーレント状態 $|\alpha\rangle$ の場合。上の破線は初期状態が $(|\alpha\rangle_1 + |\alpha\rangle_2) / \sqrt{2(1 + e^{-2|\alpha|^2})}$ で与えられるが， $|\alpha\rangle_1$ と $|\alpha\rangle_2$ は直交している場合。

(4) レオロジー（研究生：印出井努，有光）論文 [12]，講演 [17]

高分子両末端の結合により形成されるネットワークは，その結合の仕方により二種類に分けることができる。ひとつは，共有結合（熱的には切れない）で繋がっている「化学ゲル」，もうひとつは，水素結合やイオン結合（熱的に切れる）で繋がっている「物理ゲル」である。後者は，熱平衡状態において，高分子両末端の架橋点で熱的な解離と結合を繰り返している。物理ゲルに「ずらし (shear)」の力を加え「ずり速度」を与えると，特徴的なずり速度で粘性の急速な増加と減少 (shear-thickening；異常粘性ピーク) が観測される。この異常ピークのメカニズムの物理的な解釈は，いくつかの試みにもかかわらず，高分子ネットワークの難問のひとつとして解明されずに残されたままになっていた。本研究では，活動鎖（両端が架橋点に繋がっており，ネットワークを構成している高分子），末端鎖（一端のみが架橋点に繋がっている高分子），環状鎖（ループ；両端が同一の架橋点に繋がっている高分子）の三種類を考える（図 4）。ずり速度をかけていない状態では，これら三種類の高分子間の遷移確率に対応した熱平衡状態が実現している。ずり速度を増していくとネットワークが変形し三種類の高分子数間のバランスが変化するために，粘性に変化が現れるのである。高く鋭いピーク要素の説明は，高分子末端間に働くエントロ

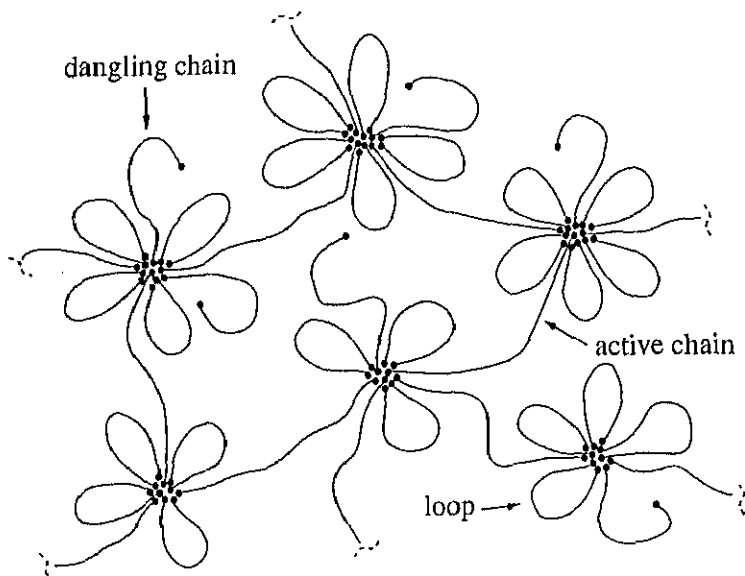


図 4: Schematic representation of a network constructed by HEUR in aqueous solution.

ピークとして、乱雑飛行模型を採用することにより行った。この模型は、高分子の全長が有限である効果を適切に取り入れている。この論文では、さらに、ある長さ r^* を導入し、この長さにした活動鎖は必ず解離して末端鎖になるものと仮定する。これは物理ゲルが解離し易い相互作用で結合していることを取り入れたもので、 r^* は物理ゲルに固有の長さである。解析の結果、このピーク要素は、「 r^* 近傍まで引き伸ばされた活動鎖が、強いエントロピー力で架橋点を引き合うため」現れることが解明された。高分子全長が短いほどピークが高くなるという実験結果も、全長が短いほど r^* 近傍の活動鎖数が多いことにより理解できる。

一方、低く幅広いピーク要素に対しては、以下のメカニズムが解明された。ずり速度が増すと共に、糸毬状の環状鎖に衝突する末端鎖や他の環状鎖の数が増加し、環状鎖が解離して末端鎖になる確率が増える。末端鎖の増加は活動鎖の増加を促し、結果として低く幅広いピークを形成するのである。このピークが高分子の全長にほとんど依らないのは、糸毬状の環状鎖の広がりが高分子の全長にほとんど依存しないからである。

以上の解析により、物理ゲルの異常ピークの実験結果を見事に再現した (図 5)。得られた r^* の値は、実験された何れの高分子長の場合も、全長の 97 パーセントであることが得られた。これは、独立の実験で得られた解離エネルギーから見積もった値 (96 パーセント) ときわめて近い。また、ネットワークの緩和時間をこの解析より見積もると、他の実験で測定された値と極めて近いことも示された。

(5) Other Activities

1. Topological Defects and QFT (Jizba) 論文 [15, 16] 講演 [9]

We have developed a new approach which combines a description of topological defect as condensates of quanta, together with the non-equilibrium dynamics of quantum fields, in the framework of the so called Closed-Time-Path (CTP) formalism, first introduced by Schwinger and Keldysh. We showed that macroscopic (topological) objects arise nat-

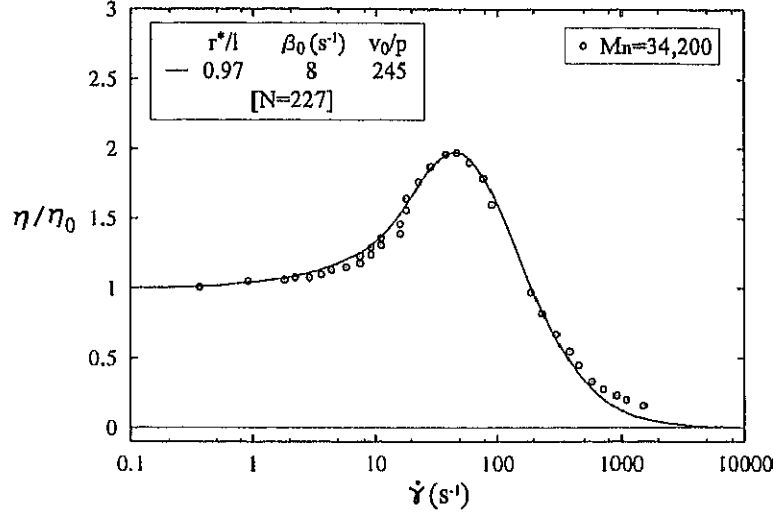


Figure 5: The steady shear viscosity plotted against the shear rate for $N = 227$ ($M_n = 34,200$). The solid line represents the theoretical result, whereas the dots represent the experimental results observed for $\eta_0 = 3.0$ Poise, $T = 298$ K and $c = 1$ wt%.

usually in the framework of Quantum Field Theory (QFT) as localized (inhomogeneous) condensates of quanta: the usual classical soliton solutions are then obtained in the Born approximation (i.e. the $\hbar \rightarrow 0$ limit) and in the heavy-mass (WKB or Gutzwiller) approximation. Recently we started to concentrate on a paradigmatic system, namely $\lambda\phi^4$ in $1 + 1$ dimensions at finite temperature T . Whilst $T = 0$ case was already investigated by Dr. Blasone (IC, London) and myself, the case of $T \neq 0$ poses an interesting challenge. The nature of the dynamics at finite temperature is far more complex and is closely connected with, the so called, infrared catastrophe which is seemingly inherent to finite temperature quantum field theories. Using the hard thermal loop resummation technique we investigated how the one and two point correlation functions behave in the infrared region and hence as the kink shape changes and eventually disappears at a “critical” value of T . The consideration of hydrostatic pressure or the propagation of second sound waves (if He II is in question) could be an interesting practical/theoretical probe allowing one to test the dynamics (and number) of topological defects.

2. Dissipation and Quantization (Jizba) 論文 [17, 18, 19, 20], 講演 [9, 17]

In a recent series of papers G.’t Hooft has put forward the idea that Quantum Mechanics (QM) may be not fundamental but merely the low-energy limit of a dissipative deterministic theory with more degrees of freedom. Thus the essential non-deterministic nature of QM would arise as a consequence of information loss, occurring presumably at the Planck scale in a completely deterministic regime. ’t Hooft’s most urgent motivations come from black-hole physics and the so-called holographic principle, which puts an upper bound to the total number of quantum states of any theory combining gravity and QM: this number increases exponentially with the surface of the system, rather than with its

volume. The key idea in 't Hooft's approach is that it is possible to describe deterministic system by means of the Hilbert space techniques: indeed he found a class of Hamiltonian systems which remain deterministic even after quantization. The price to pay for this is information loss.

We have recently studied examples of dissipative systems which realize 't Hooft's scheme and present also some novel features with respect to it: in particular, we have shown that the zero point energy of the quantum harmonic oscillator may be seen to arise from the geometric phase for an underlying two-dimensional system of coupled damped-amplified oscillators. For this system, we determined explicitly the time-dependent wave functions (generalized Laguerre polynomials), exhibiting a dissipative nature (breakdown of time-reversal invariance). It is the intrinsic non-local nature of geometric phases which takes naturally care of potential objections based, for example, on Bell's inequalities. Related algebraic issues were studied.

【2】 非加法性の物理

(1) 非加法的量子情報理論 (阿部) 論文 [21]

Tsallis の非加法的エントロピーに附随する条件付きエントロピーを用いた拡張された量子情報理論を展開した。この理論を応用して、 N 準位をもつ n 粒子系の混合状態を記述する密度行列の分離可能性と量子エンタングルメントについて調べた。エントロピー指数が 1 より大きい場合、非加法的量子情報理論が通常の von Neumann 型量子情報理論よりも常に優れた結果を与えることを見出した。特に、エントロピー指数が限りなく大きい極限で、密度行列の分離可能性に対する必要十分条件が得られることが分かった。この条件は、Bell の不等式から得られるものよりもはるかに強い条件である。このような量子状態の熱力学的極限について議論した。

(2) 非加法的熱統計力学 (阿部) 論文 [22, 23, 24, 25]

非平衡定常状態にある多くの複雑系の統計的性質が、いわゆる q -指数分布という Zipf-Mandelbrot 則を拡張した法則に従って理解できることが知られている。しかしながら、このような分布関数が最適化する一般化されたエントロピーは、実は一意的ではない。Tsallis エントロピー、Renyi エントロピー、規格化された Tsallis エントロピーという 3 つの一般化されたエントロピーが、 q -指数分布によって最適化される。論文 [22] において、これら 3 つの量のうち Tsallis エントロピーのみが安定性 (一様連続性) をもち、他の 2 つが不安定であることを証明した。これによって、Renyi エントロピーなどが統計力学の拡張に対して用いられないことが厳密に示された。論文 [23] においては、通常の熱力学的形式が適用できない物理系について考察した。

論文 [24] では、Heisenberg 型不確定性関係が意味をなさなくなるようなベキ則的波束に対して、エントロピー型不確定性関係を吟味した。最小不確定性をもつ新しい波束の類を見出した。論文 [25] では、量子状態の古典性の尺度である Wehrl 測度を、量子相空間上の von Neuman 格子以上に拡張した。

【3】 量子ドット系・量子カオス系とランダム系の量子相転移

(1) 非エルミート誘起非局在転移と局在状態 (谷口) [26]

前年に引き続き、虚数ベクトルポテンシャルによる非局在転移の性質の研究を行った。我々は、2次元系の非エルミート誘起型非局在転移に特に着目し、その非局在転移の性質を使い、局在状態へのプローブとしての虚数ベクトルポテンシャルの利用可能性を模索して来た。プロトタイプとなるハミルトニアンは以下のような、虚数ベクトルポテンシャル \mathbf{h} をもつ、tight-binding モデルである。

$$H(\mathbf{h}) = -\frac{t}{2} \sum_{(i,j)} \exp(\mathbf{h} \cdot \mathbf{r}_{ij}) |i\rangle\langle j| + \sum_i V_i |i\rangle\langle i|, \quad (4)$$

本年度は特に、波動関数に対して虚数ゲージ変換の破れを用いて局在状態を感知しようとすると、 \mathbf{h} の増大に従って波動関数の局在中心がジャンプする現象が起こることにより、虚数ゲージ変換が見かけ上破れたように見えることがあり多々有ることを示した。これは、(数値計算に使われる)有限系から非エルミート誘起非局在転移を同定するには、「波動関数自体ではなく、複素エネルギーの交差により同定すべき」という我々の従来からの主張を補強する結果になっている。

(2) 量子ドット系における弱局在効果とサイズ効果 (谷口) [27]

量子ドット系の動的電気伝導度 $\sigma(\omega)$ は系の光学応答を特徴付ける。一般に $\sigma(\omega)$ は、 $\omega > 1/\tau$ では Drude 型となるが、 $\omega \lesssim 1/\tau$ では弱局在効果の影響が現れ、 $\omega \lesssim \Delta$ の領域ではさらに準位反発の効果が現れる。 $\Delta \ll \omega \lesssim 1/\tau$ の領域における $\sigma(\omega)$ の弱局在補正は、弱局在摂動論により評価することができ、それは静的伝導度 $\sigma(\omega = 0)$ に対する補正と同じである。従って、2次元系では弱局在特有の対数発散を有する。一方、 $\omega \ll \Delta$ の領域では、系の性質は、ランダム行列理論の普遍的 Wigner-Dyson 相関を使って記述することができると考えられている。実際、Gorkov-Eliashberg 理論で用いられる波動関数と準位の揺らぎの独立性の仮設を使うと、動的伝導度の実部 $\text{Re}[\sigma(\omega)]$ は、DOS 相関 $R_2(s) = \Delta^2 \langle \nu(E) \nu(E + \omega) \rangle$ 、従って Dyson-Wigner の普遍関数 $R_2^{\text{WD}}(s)$ に比例することが示される (電子遮蔽の効果は無視する)。

$$\langle \nu(E + \omega) \nu(E) \rangle =: \frac{1}{\Delta^2} R_2(s = \frac{\omega}{\Delta}) \rightarrow \frac{1}{\Delta^2} R_2^{\text{WD}}(s), \quad (5)$$

$$\text{Re} \sigma_s(\omega) \approx \frac{\pi e^2 \langle v^2 \rangle}{V} \langle \nu(E + \omega) \nu(E) \rangle = \sigma_0 R_2^{\text{WD}}(s), \quad (6)$$

摂動論から予想される $\text{Re}[\sigma(\omega)]$ と DOS 相関 $R_2(s)$ の弱局在補正は大きく異なる。このことから、系のサイズが十分小さくて波動関数と準位がほぼ独立に揺らぐ中間領域が存在すれば、その領域では通常の弱局在効果とは異なる $\langle \nu(E) \nu(E + \omega) \rangle$ 型の弱局在補正が $\text{Re} \sigma(\omega)$ に観測されるのではないかと示唆されて来た。以上のことを踏まえ、本研究では、非摂動領域 ($\omega \sim \Delta$) で、動的伝導度 $\sigma(\omega)$ に上述したような non-standard な弱局在補正が本当に存在するか否かを議論した。

ランダム行列理論を含む非摂動領域における解析が必要となるため、乱れた電子系の性質を記述する有効場理論 (超行列非線形シグマ模型) を使い、動的伝導度を評価する際

には、より正確な評価を期すため、線形応答理論に従った動的伝導度をゲージ場に対する応答により評価した。時間反転対称性のない unitary class についての結果を書くと以下の通りになる。

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_s(\omega)}{\sigma_0} = \mathcal{R}(s) & \left[1 + \frac{2\epsilon}{d} \Pi_1^2(\omega) - \frac{4(d+3)}{d} \Pi_2(\omega) \right] \\ & - \frac{2}{i\pi s d} \epsilon \Pi_1(\omega) + \left[\frac{4\epsilon}{d} s \mathcal{R}'(s) + s^2 \mathcal{R}''(s) \right] \Pi_2(\omega) + \dots, \end{aligned} \quad (7)$$

ここで以下のものを定義した

$$\mathcal{R}(s) := 1 + \frac{e^{2i\pi s} - 1}{2\pi^2 s^2}; \quad \text{Re}[\mathcal{R}(s)] = R_2^{\text{WD}}(s), \quad (8)$$

$$\Pi_k(\omega) = \sum_q \left(\frac{1}{\pi g} \cdot \frac{L^{-2}}{q^2 - i\omega/D} \right)^k \quad (9)$$

この結果によれば、動的伝導度 $\sigma(\omega)$ が non-standard な弱局在補正を示す中間領域は存在しないことを意味する。つまり、 $g = \infty$ の極限ではランダム行列理論と同様に、波動関数と準位は独立した揺らぎをもつが、 $g \gg 1$ の領域であっても両者の揺らぎに独立性は存在しないことを示している。

(3) 量子カオス系の Wigner-Dyson 相関: 量子ダイナミクスの不純物平均の処方箋 (谷口)[23, 24, 25]

乱れた電子系や不規則境界を持つビリヤード系 (量子カオス系) のエネルギー準位相関は、「カオスの領域」においてランダム行列理論から得られる普遍的な Wigner-Dyson 相関に従う。この conjecture は Bohigas-Giannoni-Schmit によるものであり、以後多くの量子カオス系において数値的に実証されてきた。ランダムポテンシャルを持つ乱れた電子系に対しては、解析的にこの conjecture の有効性と限界とを確認する事ができる。しかし、従来用いられている「不純物平均の処方箋」は、拡散的ダイナミクスしか記述することができないため、弾動的ダイナミクスを持つ系や空間的に広がったポテンシャルを持つ系を扱うためにはより広い枠組が必要とされる。

不純物平均をとった有効理論においては、いくつかのステップを経た後、 $Q^2 = I$ という拘束条件をもつ超行列上の有効理論=超行列非線形シグマ模型が得られる。この模型において、0次元近似 ($Q = \text{定超行列}$) を行った結果が Wigner-Dyson 相関を再現するが、その時の有効理論は

$$F_{\text{OD}}[Q] = \frac{\pi}{4\Delta} \text{Str} [-i\omega^+ \Lambda_3 Q] \quad (10)$$

という形になる。従って BSG conjecture (=普遍的な Wigner-Dyson 相関の存在) を正当化するためには、上の $F_{\text{OD}}[Q]$ の存在と近似の妥当性を示せば良い。以上のような観点から、スペクトル平均や一連の (ユニタリ等価な) ハミルトニアン族についての平均を考える事により、 $F_{\text{OD}}[Q]$ を正当化する試みが行われて来た。本研究では、系の対称性を用いたより一般的な定式化を行い、 $F_{\text{OD}}[Q]$ の導出を行った。

標準的な手法に従い 2 体の exact な Green 関数 $G_{\omega/2}^R G_{-\omega/2}^A$ を生成する汎関数として作用を定義する。

$$iS = i \int \bar{\psi}(\mathbf{r}) \left(\frac{\omega^+}{2} \Lambda_3 - H \otimes I \right) \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (11)$$

ただし $\psi = (b_R, f_R, b_A^\dagger, f_A^\dagger)^T$, $\bar{\psi} = (b_R^\dagger, f_R^\dagger, -b_A, f_A)^T$ 。kinetic mode を生み出す H の効果を見れば、これは外場 ω が「スピン」 $\bar{\psi}\Lambda_3\psi$ と Zeeman coupling している系に類似する。状態和を考えると、有限系では対称性を破ることができないため、highest state だけでなく、 $|j, m\rangle$ ($m = -j, \dots, j$) のすべての状態和をとる必要がある。この状態和を coherent state により書き換えてやると、 $F_{0D}[Q]$ に対応することがわかる。従って、Wigner-Dyson 相関は系に内在する極めて一般的なグローバルな対称性からの帰結であることがわかった。

0次元近似を正当化するためには、系の kinetic modes の影響を評価しなくてはならない。この効果を考慮すると、有効場理論は exact な Green 関数によって定義された (空間依存した) 輸送係数をもつ非局所モデルとなること示す事ができる。また無次元コンダクタンス $g \gg 1$ の場合には従来の拡散的シグマモデル $F[Q]$ が、半古典近似の元では、弾道的シグマモデルが自然に得られる。つまり、種々のアンサンブル平均の操作は、系のダイナミクスを粗視化するための有用な便法とみなす事ができる

(4) 量子ドット系における電子間相互作用の繰り込み群による研究 (院生: 浜谷、谷口)

量子ドット系において、電子間相互作用や不規則境界の効果を考慮する時に、従来行われていたアプローチは、自由電子描像から出発し、これらの効果を摂動計算により取り込む手法であった。しかし、系のサイズが小さい量子ドットでは、準位の離散性・準位反発の効果が特に重要になり、電子の挙動は通常のフェルミ流体描像の範疇に留まらなくなる。実際、このような系のサイズの小さな領域では、電子間相互作用を見れば、準位間の反発効果を考慮したランダム行列理論により、良く性質が記述できることが知られている。最近 Murthy-Mathur らにより提案されたランダム行列理論から出発して摂動的繰り込み群を用いて電子間相互作用を取り込む新しい手法が提案され、フェルミ流体的な固定点が特定の条件下で不安定 (Pomeranchuk 不安定性) になることを示した。ただし、彼らの用いた仮定や取り扱いには疑問点があり、特に波動関数の空間相関の取扱いが微妙となることはランダム行列理論においても知られている。また磁場やスピン軌道相互作用の有無により適用すべきランダム行列理論の対称性も異なる。以上の状態を鑑み、量子ドット系の電子間相互作用の役割を明らかにすることを目的とし、研究を開始した。現在はまだ研究の初期段階であり、Murthy-Mathur による仮定と結果の検討を行っている段階である。

【4】 磁性・強相関電子系と量子相転移

(1) 磁性・強相関電子系

1. 金属強磁性の研究 (桃井) 講演 [29]、論文 [28]

遍歴電子系において、クーロン相互作用により金属強磁性がどの様に起こるか調べた。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、強磁性の出現における軌道縮退依存性及びフント結合の効果に注目し研究した。軌道縮退のあるハバードモデルを1次元の場合に数値計算 (DMRG 法) と厳密な議論を用いて調べた。その結果、軌道縮退の効果で金属強磁性が広いパラメタ領域で起こり得る事を示した。特に、電子密度が1以上の時に2重交換機構が有効に働き、次元

によらず金属強磁性が現れる事を明らかにした。

2. 多体交換相互作用の磁性 (桃井) 講演 [31, 34, 36, 37, 38, 39, 41, 42, 43, 44], 論文 [31, 33, 34]

固体 ^3He 薄膜、2次元ウイグナー結晶等の量子固体や銅酸化物体では、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いことが近年明らかになった。これらの系における多体交換相互作用が引き起こす磁性を明らかにする為、三角格子上の4体交換相互作用を持つ多体交換モデルを調べた。4体交換相互作用が強い時にスカラー型カイラル秩序が形成される事を予言し、固体 ^3He 薄膜の低密度領域に相当すると思われる領域では4体と2体の交換相互作用が強く競合している事を示した。さらにこの系に磁場をかけると磁化曲線の磁化 $1/2$ の位置にプラトーが現れる事を予言した。また、4体スピン相互作用を含むスピン梯子系を調べた。この系は銅酸化物体との対応から興味を持たれている。我々は、この系にスピンとカイラリティの双対性があり、4体相互作用を大きくするとカイラリティ自由度が強くなる事を示した。また、スカラー型カイラリティ秩序相の出現を、厳密な基底状態と数値計算 (DMRG 法) により示した。

(2) 量子相転移

1. 量子スピン系の磁化プラトー (桃井) [講演 [28]]

近年、磁性体の磁化曲線に平坦な部分 (プラトー) が実験で見つかっている。2次元系における磁化プラトーの出現は、これまで理解されていなかった。我々は、様々な2次元磁性体に磁化プラトーが出現することを予言し、次のように出現機構の理解を与えた: 磁場中で誘起される磁性励起が粒子として動き回り、ある一定の粒子密度において粒子間の斥力相互作用により SDW の長距離秩序を作り、Mott 絶縁体転移を起こす。このように磁場によって引き起こされる量子相転移が磁化プラトーとして観測される。具体的に、三角格子上の多体交換モデル (2次元固体 ^3He)、Shastry-Sutherland 格子 [$\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$]、 $1/5$ -depleted 正方格子 (CaV_4O_9) を粒子描象と強結合展開を用い調べ、磁化プラトーの出現を新たに予言した。いずれのプラトーも絶縁体・超流動転移であることを示した。このうち、Shastry-Sutherland 格子について我々が予言した $1/3$ -プラトーは、すでに $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ で陰山らの実験により存在が確かめられた。

2. 2次元ストライプの量子融解転移 (桃井) [講演 [27, 30, 33, 35], 論文 [29, 30, 32]]

不整合相においてドメイン壁 (ソリトン) が巨視的な数現れることが知られているが、近年の高温超伝導体における不整合ストライプの観測に伴いストライプ構造 (2次元ソリトン格子) の量子効果に興味を持たれている。2次元不整合相にみられるストライプ構造、及び蜂の巣構造のドメイン壁における量子揺らぎと転位の効果を調べ、整合相-不整合相の量子相転移の振る舞いを明らかにした。ストライプ構造は、ストライプ間隔が大きい時に量子揺らぎにより転位が現れ量子融解し、新しい量子液体状態 (ストライプ流体) となる事を示した。この状態は中性子散乱で観測されているストライプ流体相に対応すると思われる。この量子融解転移は3次元 XY モデルの転移と等価である。通常、3次元の融解は1次転移であり、ストライプは $2+1$ 次元で融解が2次転移となる初めての例である。この研究により、グラファイト上の吸着原子の不整合相におけるソリトン流体相と固体相の

相図を得た。この相図は実験結果を良く再現しており、今後ストライプ流体相が観測されることが期待される。

3. 量子液体の固化における量子揺らぎの効果 (桃井) [講演 [32, 40]、論文 [35]

種々の原子の固化において、質量が小さいほど転移温度が大きくなる現象が実験において観測されている。この現象を検証するために量子モンテカルロ法によるシミュレーションを行ない、固体・液体転移における量子揺らぎの効果を調べた。その結果、量子揺らぎが固体をより安定化させることを確かめた。

【5】 ボーズ・アインシュタイン凝縮 (BEC) の理論的研究

(1) トラップされたフェルミ原子ガスにおける BCS – BEC クロスオーバーの研究 (大橋) 論文 [36, 37, 38, 39], 講演 [45, 46, 47, 48, 49, 50, 51, 52]

現在、原子物理学の大きな目標の一つになっているフェルミ原子ガスの超流動化について、その機構としてもっとも期待されている Feshbach 共鳴機構を研究した。この機構では、Feshbach 共鳴で生じた分子状態のボソン (実際は共鳴状態) により媒介された引力相互作用により、高い超流動転移温度が期待されるが、このような強結合超流動に対しては通常の弱結合 BCS 理論では不完全である。そこで、強結合領域で重要となる揺らぎの効果を加味し、更に Feshbach 共鳴で 2 原子が分子化したボソンを考慮した理論を提案、超流動の性質が BCS 的なものから、転移温度以上で形成されたクーパー対、Feshbach 共鳴ボソンの BEC へと、共鳴の閾値を下げることにより連続的に移行することを明らかにした。また、この BCS – BEC クロスオーバーを観測する手段として density profile や集団励起が有効であることを示した。

(2) ゼロ・モードと位相変換対称性 (松本) 論文 [45, 46]、紀要等 [4]、講演 [54]

稀薄アルカリ原子気体のボーズ・アインシュタイン凝縮は、その凝縮相の生成が 100ms のオーダーの時間で粒子分布の変化が観測されることから、非平衡理論検証の実験系として最適な系である。時空で変化する秩序変数のもと、励起粒子状態が如何に変化していくかの問題は、多重素粒子反応、ビッグバン後の宇宙進化の問題などから、量子デバイス素子の制御に付随する非平衡現象などに到る物理現象に共通する非平衡場の理論の問題を含んでいると言う事ができる。この系の解析を通して、有限温度・有限密度の場の理論の立場から非平衡場理論を展開している。今年度は、空間・時間による秩序パラメータを持つ系に対して位相変換対称性を満足させる理論体系が構築できるかという点と、その物理的効果を調べた。

論文 [46] においては、時空変化の秩序パラメータを含む場合の摂動展開の方式を明らかにし、時空変数による係数を持った準粒子場方程式が、位相変換対称性を満足するように決定できることを明らかにした。時空変化がある場合にも、繰り込まれた秩序パラメータを基準として、位相変換対称性を満足する摂動展開のビルディングブロックが形成できる。

また、論文 [45] では、このようにして得られた準粒子場方程式には必ず位相対称性に関連したゼロ・モードが存在し、トラップポテンシャルの存在のため、孤立スペクトルとな

る。解の完全性と共役交換関係から、このゼロ・モードに対応する量子力学的変数が必要となり、それが位相交換に関連する、量子位相座標とその共役運動量に対応することを示した。このモードの熱力学的寄与は全粒子数に対する寄与は3次元では $\sim k_B T N_c^{-2/5}$ 、1次元で $\sim k_B T N_c^{-2/3}$ と評価でき、低次元でゼロ・モードが赤外発散を引き起こすことは無いことを示した。ここで N_c は、凝縮粒子数を表し、これが大きいときには無視できることが分かった。少数粒子系で、量子集団位相座標が観測に寄与する現象があるかは、興味深い問題である。

(3) BECの転移温度 (松本) 論文 [47, 49]、講演 [56, 57, 58]

稀薄アルカリ原子ガスのボーズ・アインシュタイン凝縮においては、空間的にガスを閉じ込めておくために、トラップポテンシャルの存在が必然である。この状況下では、原子気体のエネルギースペクトルは不連続スペクトルを持つことになり、例えば、平均場近似の範囲では、常流動・超流動どちらの解も絶対温度まで可能な解として存在する。熱力学安定性の観点から、ヘルムホルツの自由エネルギーを比較してどちらの相が安定かを調べた。秩序パラメータの消滅する臨界温度 T_c^* と自由エネルギーのクロスする臨界温度 T_c が定義され、一般に $T_c < T_c^*$ である。調和振動子型トラップポテンシャル、斥力相互作用 V のある系で、1) $V=0$ では、 $T_c=0$ 、2) V の増加とともに T_c は T_c^* に近づく、3) 粒子数 N の増加とともに T_c は T_c^* に近づく、4) T_c と T_c^* の違いは低次元ほど大きい、5) 3次元での密度分布は常流動・超流動状態でほとんど変わらないなどの結果を得た。自由エネルギーのクロスは一次相転移または、相分離の傾向があることを期待させるが、どのような現象に T_c と T_c^* の違いが現れてくるかを明らかにするのが今後の課題である。

【6】 超伝導の理論的研究

(1) 等方的超伝導体における FFLO 相の安定性の研究 (大橋) 論文 [40]

トラップされたフェルミ原子ガスでの超流動のような、等方的な系における FFLO について研究した。超伝導の場合では磁場中、あるいは原子ガス系では注入する up-spin と down-spin の原子数が違っている場合、ある条件下では秩序パラメータが空間的に振動する FFLO 状態が BCS 状態に比べ安定であることが知られているが、等方的な系では、空間的な構造の揺らぎによって FFLO は安定に存在できないことを明らかにした。この結果は、トラップされたフェルミ原子ガスを用いて FFLO を作り出すには、光学ポテンシャル等により異方性を導入しなければならないことを示している。

(2) 酸化物高温超伝導における不純物効果の研究 (大橋) 論文 [41, 42]

銅酸化物高温超伝導体では、不純物効果により磁氣的性質が影響を受けることが知られている。そこで、反強磁性的スピン揺らぎの強い系での超伝導状態下での不純物効果を Zn, Li, などの非磁性不純物については理論的に、また Ni については実験グループと共同で研究を実施した。特に非磁性不純物の場合については、散乱が unitarity limit に近く、かつ散乱ポテンシャルが空間的にある程度広がっていると、不純物近傍で一様帯磁化率が超伝導状態であっても低温に向かって増大、実験結果を説明できることを理論的に示した。この機構の特徴は、従来言われているような「不純物近傍での局在スピンの形

成」を必要としない、という点である。

(3) MgB₂における2バンド超伝導の研究 (大橋) 論文 [43]

超伝導体 MgB₂ では、物質自体は dirty limit に近いと考えられているにもかかわらず、STM 等の実験では2つのエネルギーギャップの存在が明瞭に観測されており、何故、散乱の効果でこれらのギャップが混成、平均化された1つのギャップになってしまわないのか謎である。この問題に対し、この物質の特徴である2バンドに2つの超伝導秩序パラメータを有するモデルを考え、不純物散乱による秩序パラメータの混成効果を研究した。結果、ボルン近似の範囲では従来の結論通り、散乱効果で秩序パラメータが混成されるが、散乱が強くなる(ボルン近似を越えた高次の過程を考慮する)と、逆に混成効果が弱まり状態密度に2つのギャップが復活してくることを明らかにした。

(4) 原子スケールの超伝導/磁性多層膜における π -phase の研究 (大橋) 論文 [44] 博士論文 [1]

RuSr₂RECu₂O₈ (RE:Y,Gd) は磁性を担う RuO₂ 層と超伝導を担う CuO₂ 層が交互に積層、磁性と超伝導が共存する系として知られている。この系での Ru サイト(磁性層)の核磁気緩和率の温度変化については2つの異なる実験結果が報告されており、温度変化の起源について磁性の影響である、とする説と、超伝導層からの超伝導近接効果に因る、とする説が唱えられてきた。今回、この問題を理論的に研究、前者の説が正しいことを示した。磁性層が反強磁性状態になると、近接効果による超伝導のしみ出しは磁気秩序で抑制されていしまい、Ru サイトの磁気緩和は反強磁性によるギャップに支配されることを微視的モデルに基づいて明らかにした。[院生 鐘ヶ江義晴氏との共同研究]

(5) λ -(BETS)₂Fe_xGa_{1-x}Cl₄ における超伝導-絶縁体の研究。(大橋) 講演 [53]

有機導体 λ -(BETS)₂FeCl₄ は低温で反強磁性絶縁体となるが、磁性原子 Fe を非磁性の Ga に置換していくと超伝導相が出現する。置換量 50% 程度のところでは温度を下げていくと先ず超伝導が発生、その後絶縁体に転移する。この問題に対し、特に置換による相図の解明を目指し、 λ -(BETS)₂FeCl₄ のバンド構造を考慮し、かつ、Fe の局在スピ間に RKKY 相互作用がはたらくとしたモデルを用いて研究を実施した。これまでのところ、局在スピが Ga 置換でランダムに抜けていく事による磁気秩序の消滅、及び、ランダムな局在スピによる対破壊効果に起因した超伝導の消滅の再現に成功、現在、置換量 50% 近傍での超伝導-絶縁体転移再現に向けて研究を進めている。[院生 寺尾允一氏との共同研究]

(6) 多重ジョセフソン接合モデルの電磁特性 (松本) 論文 [48]、講演 [55, 59]

Bi₂Sr₂CaCu₂O₈ などの高温超伝導体は、その異方性の強い結晶構造から、超伝導層と絶縁体層が積層して天然にできた多重ジョセフソン接合としてその電磁的性質が理解できることが分かってきた。前年までは、主に超伝導層の帯電効果によってもたらされる超伝導位相差の層間相互作用で、I-V 特性の分岐構造の現われ方が理解できることを調べて

きたが、本年度は磁場効果も入れた解析を行った。

多重ジョセフソン系での、位相差、電場、磁場、超伝導電流、ジョセフソン電流などを取り入れた電磁気を考えることにより、層間相互作用が、超伝導層の帯電効果と超伝導電流による電磁誘導効果で媒介される。この他に、トンネル電流の超伝導非平衡効果による効果も層間相互作用として提唱されているが、今回はこれを無視した。帯電効果による層間相互作用は位相差の時間微分に、電磁誘導効果による層間相互作用は位相差の空間微分を通して寄与することから、それぞれが $I-V$ 特性及び内部に誘起される電磁波に異なる寄与を与えることを明らかにした。要約すると、帯電効果は層間の電場振動を誘起するのに主に寄与し、電磁誘導効果は層に沿った振動を誘起する。この二つの効果が異方性によりカップルし競合することになる。結果として、 $I-V$ 特性には大きな飛びを持つ分岐に小さい飛びの分岐が混じる分岐構造をとること、帯電効果はジョセフソン渦糸の運動という観点からは、その運動を乱し層間のコヒーレンスを乱す方向に働くことなどが分かった。

帯電効果と電磁誘導効果により、ジョセフソン渦糸状態の運動やそれと結合した電磁振動（ジョセフソンプラズマ）などがどのような新しい現象を引き出すかは、今後の興味ある問題である。

【7】 半導体量子ドット配列に基づく人工物質の設計 (白石) 論文 [57]

近年の半導体の微細加工技術の発展に伴い、半導体量子細線、半導体量子ドット等が自在に設計できるようになってきた。本研究では量子ドットを一つの構成単位（人工原子）と考えて、量子ドット配列を制御することによって新しい物質設計を試みた。その結果、InGaAs 中に断面が約 50nm の InAs のプラケット細線ネットワークを作製することにより、超伝導が実現できることを密度汎関数法によって得られる電子構造の特徴を再現する物理モデルを考察することによって示した。この時の超伝導転移温度は 90mK であり、現在の低温技術をもってすれば、十分測定可能である。また、半導体量子ドット結合系では量子ドットが空間に固定されて動かないので、電子フォノン相互作用が極めて弱いと考えられる。すなわち、この系で超伝導が実現されれば、電子メカニズムの超伝導発現を示した初めての証拠となる。現在では、我々が理論的に設計した量子ドット超伝導の実現を目指して実験研究も始められている。

【8】 半導体ナノ構造での新物性

(1) 半導体ナノ薄膜の弾性的性質の第一原理計算による予言 (白石、岡田) 講演 [67, 69]

ナノ構造の弾性的性質について第一原理計算で考察した。GaAs 9 原子層からなるフリースタANDINGのナノ薄膜の弾性的性質を密度汎関数法に基づく第一原理計算によって考察した。その結果、ナノ薄膜の表面に平行に 7% 程度の引っ張り歪みを印加すると、GaAs の表面構造は通常の $(2 \times 4) b_2$ 構造から $(2 \times 4) b_1$ 構造に変化することが明らかとなった。この構造変化は、 $(2 \times 4) b_1$ 構造と $(2 \times 4) b_2$ 構造で引っ張り方向に対応するボンドの数に相違があることが原因であると考えられる。さらに、この表面構造変化に起因して、弾性定数の不連続的なジャンプが見られることも明らかにした。

(2) Si表面上のダングリングボンドナノネットワーク磁性 (岡田, 白石, 押山), 論文 [62]

Si(111)2x1 表面では反強磁性的な磁気秩序の出現が示唆されていた。しかしながら、表面再構成構造の方がより大きな電子系のエネルギー利得を与えるために、実験的には π ボンドモデルと呼ばれる複雑な表面構造が実現されている。

近年、原子レベルでの表面末端水素原子の除去が可能となっており、ナノ、アトミックレベルでのダングリングボンドネットワークが実現が可能となっている。このような、ナノスケールのダングリングボンドネットワークでは、周辺の水素末端表面領域の格子緩和に対するフレキシビリティの低さから、格子系と電子系による緩和の競合が期待される。そこで、我々は水素末端 Si(111) 表面の水素を原子レベルで除去することによって構築されるナノスケールネットワークにたいして、密度汎関数理論をもちいてその電子状態、特に磁気的秩序状態出現の可能性を探索した。その結果、3 角形の最小ダングリングボンドユニットでは、格子緩和によるエネルギー利得よりも、電子系のスピン分極によるエネルギー利得が大きくなり、隣り合うサイト間で反平行のスピン分極状態が出現する事が明らかになった。すなわち、二個の電子スピンの分極がダングリングボンドユニット上に生じることになる。このことは、ダングリングボンドユニットは、シリコンベースの材料として最小のメモリユニットとなり、今後のデバイス微細化に対して新たな道を開く物と考えられる。さらに、このダングリングボンドユニットから構築される 2 次元的なダングリングボンドネットワークでは、そのネットワークが AB 副格子系 (bipartite 系) であるときフェリ磁性秩序が実現され、特にネットワーク中の副格子数の間に差がある場合、その差に対応するスピン分極が起る事が明らかになった。

【9】 ナノチューブ、ピーポッドの新物性

(1) 多層 BN ナノチューブの層間相互作用と電子構造 (岡田, 押山, 斎藤 (東工大物理)), 論文 [60, 61]

カーボンナノチューブの合成後しばらくして、同様のチューブ状構造をもつ蜂の巣ネットワークからなる BN ナノチューブの合成がなされている。BN ナノチューブはその電子状態が常に絶縁体であると言う点で、カーボンナノチューブの電子構造と大きく異なることが知られている。

ここでは、密度汎関数理論に基づく全エネルギー計算から、多層 BN ナノチューブのエネルギー論と電子状態の解明を行う。今回計算に用いたチューブは 2 層の BN ナノチューブで、 $(n,0)@(15,0)$ ($n=5, 6, 7, 8, 9$), $(n,0)@(20,0)$ ($n=10, 11, 12, 13$) である。その結果、最安定な層間距離は $3.0 \sim 3.5 \text{ \AA}$ であり、それは、 $(7,0)@(15,0)$, $(6,0)@(15,0)$, $(12,0)@(20,0)$, $(11,0)@(20,0)$ の多層 BN チューブであることが明らかになった。その結果から、チューブ間における原子配置の整合性は、チューブの限られた領域においてのみ実現されることが予想される。次に、多層 BN ナノチューブの電子構造は、単層チューブと比較してギャップ近傍において変調を受けることが明らかになった: すなわち、チューブの曲率に差による π 電子と s 電子との混成に起因する π 状態の低エネルギー側へのシフトにより、価電子帯の上端は外側の BN チューブに局在し、伝導帯の底は内側のチューブに局在するような

電子構造が実現される。さらに、多層構造に起因する電荷の再配置が見られることも明らかになった。

(2) ピーポッドの電子状態と安定性 (大谷、岡田、押山) 講演 [75, 76], 論文 [66]

カーボンナノチューブは原子配列のわずかな違いによって半導体、金属が実現する。このことは、単一種類の原子でナノスケールの金属と半導体が作成可能であることを示しており、今後のナノスケールデバイスへの応用が期待されている。カーボンナノチューブの中にフラーレンを内包したピーポッドはさらに、“サヤ”にあたるナノチューブと“豆”にあたるフラーレンの自由度があり、ピーポッドの電子状態の解明はナノスケールデバイスへの応用の可能性を広げる為にも必要不可欠である。半導体カーボンナノチューブにフラーレンを内包したピーポッドに関して構造安定性、および電子状態の考察を擬ポテンシャル法を用いた第一原理計算によって行った。エネルギー論から安定に生成されるピーポッドにおけるナノチューブの最小半径は実験で得られている値と非常に良い一致を示した。さらに、チューブ径を変えることにより系の電子状態を制御することが可能であり、内包するフラーレンを変えることによってもバンドギャップが制御できることを見出した。

【10】 SiO₂ 中における B 原子の拡散機構 (大谷、白石、押山) 講演 [71, 72, 73, 74], 論文 [64, 65], 紀要等 [5]

固体中の原子拡散、特に半導体中の不純物拡散は物理的にも工業的にも非常に重要な問題であり、現在までに非常に多くの理論的研究がなされている。しかし、近年の LSI の微細化に伴い、半導体中のみならず酸化膜 (SiO₂) 中の不純物拡散も重要な問題として注目されている。つまり、微細化に伴い SiO₂ 膜も薄膜化された。このことにより、ゲート電極中の B 原子などの不純物がゲート絶縁膜に用いられている SiO₂ 膜を突き抜けて基盤まで達し、素子を劣化させるという“B 原子の突き抜け”が大きな問題となっている。この突き抜けの抑制方法として酸化膜に窒素を添加する等の方法が試されているが、実験的にも理論的にも SiO₂ 中の B 原子の拡散機構は全く解明されていないのが現状である。

本研究では B 原子の拡散機構を微視的に解明するために、第一原理電子状態計算を用いて B 原子の安定配置、拡散経路及び拡散障壁を検討した。拡散経路及び拡散障壁の計算は多次元空間の最適化問題であり扱いが難しいが、本研究では制限付最小化法のプログラムを新たに作成し、電子状態計算プログラムに組み込み計算を行った。B 原子は荷電状態に応じて次のようにそれぞれ非常に特徴的な安定構造を取る。① B 原子は酸素と非常に強く結合する為に、Si 原子上にダングリングボンドを形成しても系は安定化する②負に帯電した B 原子と Si 原子はフローティングボンドと呼ばれる 5 本目のボンドで結合する③正に帯電した B 原子の軌道と酸素原子の非結合性軌道が混成することにより B-O 結合が形成される。

B 原子は SiO₂ 中のネットワークに沿って、ボンドの切断と結合を繰り返して拡散することがわかり、安定構造と同様に B 原子の拡散経路及び拡散障壁は荷電状態に応じてそれぞれ異なる。これは荷電状態に応じた実現可能な結合様式に依存して拡散機構が異なることを意味している。得られた拡散障壁は実験で得られている値と同程度である。

【11】 ソフト・バイオ物質への展開

(1) Ziegler-Natta 触媒反応の第一原理計算による考察 (Boero) 論文 [67, 68, 70, 72]

The effect of the destabilization of catalytic sites in the Ziegler-Natta catalysis was studied via Car-Parrinello dynamics. The relationship linking the surface morphology, the Ti(IV)/Ti(III) active site geometry and the polymerization reaction have been understood providing a clear picture of the industrial process. The possible use of V as an alternative catalyst has been studied for the first time, providing useful insight in both analogies and differences with respect to the conventional Ti-based catalytic systems. In particular, it has been shown that V can exist only in a non-isotactic V(III) oxidation state, a fact that makes this transition metal able to form syndiotactic polymers, but not isotactic ones. Furthermore, the study of photo-catalysts able to give rise to hydrolysis in the visible light wavelength range could be started.

(2) 第一原理計算による RNA 酵素反応の解明 (Boero) 論文 [69, 73]

The reaction path leading to the cleavage of RNA has been studied for the first time at a full first principles molecular dynamics level. The mechanisms responsible for different reaction paths leading either to a true transesterification or to an undesired RNA-chain transfer have been understood. Furthermore, the crucial role of both metal ions, acting as catalysts, and the solvent, forming hydrogen bonds have been unraveled giving a comprehensive picture of the process as it occurs in vitro and in vivo.

(3) 第一原理計算による超臨界水の考察 (Mauro Boero) 論文 [71]

The solvation properties of water at normal and supercritical conditions were theoretically studied by looking at the phenomena occurring when an electron is added to the solvent. The good agreement of the computed optical conductivity with the experimental data, have provided a strong support to the microscopic picture offered by the simulation. The solvation shell formation is strongly enhanced in supercritical water because of pre-existing cavities due to the non-continuous hydrogen bond network, despite the fact that the lifetime is reduced as a consequence of the high temperature (700 K), thus making water at supercritical condition a very unique solvent.

論文

- [1] N. Arimitsu and T. Arimitsu: 「Multifractal Analysis of Turbulence by using Statistics based on Non-Extensive Tsallis' or Extensive Rényi's Entropy」, J. Korean Phys. Soc. 40 (2002) 1032–1036 [cond-mat/0109132].

- [2] T. Arimitsu and N. Arimitsu: 「PDF of Velocity Fluctuation in Turbulence by a Statistics based on Generalized Entropy」, *Physica A* **305** (2002) 218–226 [cond-mat/0109007].
- [3] T. Arimitsu and N. Arimitsu: 「Analysis of Velocity Fluctuation in Turbulence based on Generalized Statistics」, *J. Phys.: Condens. Matter* **14** (2002) 2237–2246 [cond-mat/0110349].
- [4] N. Arimitsu and T. Arimitsu: 「Analysis of Velocity Derivatives in Turbulence based on Generalized Statistics」, *Europhys. Lett.* **60** (2002) 60–65 [cond-mat/0201106].
- [5] (招待論文) T. Arimitsu: 「Quantum Stochastic Differential Equations in view of Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics」, in *Fundamental Aspects of Quantum Physics* eds. L. Accardi and S. Tasaki (World Scientific, 2003) pp.24–47 [ISBN 981-238-295-X; math-ph/0206015].
- [6] T. Arimitsu and N. Arimitsu: 「Analysis of Accelerations in Turbulence based on Generalized Statistics」, *Condensed Matter Phys. (Leviv, Ukrain)* **6** (2003) 85–92 [cond-mat/0203240].
- [7] (招待論文) T. Arimitsu: 「Can "Quantumness" be an Origin of Dissipation?」, in *Non-Commutativity, Infinite-Dimensionality and Probability at the Crossroads* eds. N. Obata, T. Matsui and A. Hora (World Scientific, 2002) pp.206–224 [ISBN 981-238-297-6; quant-ph/0206062].
- [8] P. Jizba and T. Arimitsu: 「The World according to Rényi: Thermodynamics of Fractal Systems」, (2002) submitted [cond-mat/0207707].
- [9] T. Arimitsu and N. Arimitsu: 「Multifractal Analysis of Fluid Particle Accelerations in Turbulence」, (2002) submitted [cond-mat/0210274].
- [10] P. Jizba: 「Information theory and generalized statistics」, will appear in Springer Verlag Physics Lecture Series [cond-mat/0301343].
- [11] T. Arimitsu and N. Arimitsu: 「Multifractal Analysis of Various Probability Density Functions in Turbulence」, *J. Computational Methods in Sciences and Engineering* (2003) submitted [cond-mat/0301516].
- [12] T. Indei and T. Arimitsu: 「Analysis of Shear-Thickening in Physical Gel. — A Stochastic Theory for Polymer Networks —」, (2002) submitted [cond-mat/0212081].
- [13] A.E. Kobryn, T. Hayashi and T. Arimitsu: 「Quantum Stochastic Differential Equations for Boson and Fermion Systems — Method of Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics」, (2003) submitted [math-ph/0304023].
- [14] P. Jizba and T. Arimitsu: 「On measurability of Renyi entropy」 (just about finishing).
- [15] M. Blasone and P. Jizba: *Annals Phys.* **295** (2002) 230.

- [16] P. Jizba: 「Hydrostatic Pressure of the $O(N) \phi^4$ Theory in the Large N Limit」, Physics Review D (2002) submitted.
- [17] M. Blasone and P. Jizba: Can. J. Phys. **80** (2002) 16.
- [18] M. Blasone, E. Celeghini, P. Jizba and G. Vitiello: 「Quantization, group contraction and zero point energy」, Phys. Lett. A **310** (2003) 393.
- [19] M. Blasone, P. Jizba and G. Vitiello: 「Dissipation, Emergent Quantization and Quantum Fluctuations」, will appear in Springer Verlag Physics Lecture Series [quant-ph/0301031].
- [20] M. Blasone, P. Jizba and G. Vitiello: 「Quantum limit of deterministic theories」, Submitted to conference proceedings of the JPS [quant-ph/0302011].
- [21] S. Abe, “Nonadditive information measure and quantum entanglement in a class of mixed states of an N^n system”, Phys. Rev. A **65** (2002) 052323.
- [22] S. Abe, “Stability of Tsallis entropy and instabilities of Renyi and normalized Tsallis entropies: A basis for q -exponential distributions”, Phys. Rev. E **66** (2002) 046134.
- [23] H. Meyer-Ortmanns, P. T. Landsberg, S. Abe, A. K. Rajagopal, and T. Yamano, “A note on limitations of standard thermodynamics”, Ann. Phys. (Leipzig) **11** (2002) 457–460.
- [24] S. Abe, S. Martinez, F. Pennini, and A. Plastino, “Entropic uncertainty relation for power-law wave packets”, Phys. Lett. A **295** (2002) 74–77.
- [25] S. Abe and J. Zak, “Entropy on the von Neumann lattice and its evaluation”, J. Phys. A **35** (2002) 2395–2400.
- [26] N. Taniguchi, “Two-dimensional localization detected by the imaginary vector potential”, J. Phys. Soc. (Japan) **72**, 159–160 (2003) Suppl. A (Proc. of Localisation 2002, International Conference on Quantum Transport and Quantum Coherence).
- [27] N. Taniguchi, “Dynamical Conductivity and Localization Corrections in Small and Large Quantum Dots and Disordered Systems”, to appear in Physica E (2002) (Proc. of the 23rd International Conference on Low Temperature Physics).
- [28] H. Sakamoto, T. Momoi and K. Kubo, “Ferromagnetism in the One-Dimensional Hubbard Model with Orbital Degeneracy: From Low to High Electron Density”, Phys. Rev. B **65**, 224403 (2002).
- [29] T. Momoi, “Quantum Melting of Domain Walls in 2D Incommensurate Phases”, J. Low. Temp. Phys. **126**, (2002) 731–736.
- [30] T. Momoi, “Quantum Melting of Incommensurate Domain Walls in Two Dimensions”, Phys. Rev. B **67**, 014529 (2003).
- [31] “Spin-Chirality Duality in a Spin Ladder with Four-Spin Cyclic Exchange”, T. Hikihara, T. Momoi, and X. Hu, Phys. Rev. Lett. **90**, 087204 (2003).

- [32] "Quantum Phase Transition in Striped Domain Walls",
T. Momoi, *Physica C* (2003) *in press*.
- [33] "Magnetic Ground-State Phase Diagram of a Multiple-Spin Exchange Model on the Triangular Lattice",
K. Kubo and T. Momoi, *Physica B* (2003) *in press*.
- [34] "Scalar Chiral Ground States of Spin Ladders with Four-Spin Exchanges",
T. Momoi, T. Hikihara, M. Nakamura, and X. Hu, *Phys. Rev. B*, **67**, 174410 (2003).
- [35] "Effect of Zero Point Motion on Solidification of Quantum Particles",
D. S. Hirashima, T. Momoi, and T. Takagi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **72**, No. 6, (2003), *in press*.
- [36] Y. Ohashi and A. Griffin: "The BCS-BEC crossover in a gas of Fermi atoms with a Feshbach resonance." *Phys. Rev. Lett.* **89** (2002) 130402.
- [37] Y. Ohashi and A. Griffin: "Superfluid transition temperature in a trapped gas of Fermi atoms with a Feshbach resonance." *Phys. Rev. A* **67** (2003) 033603.
- [38] Y. Ohashi and A. Griffin: "Superfluidity and collective modes in a uniform gas of Fermi atoms with a Feshbach resonance." *Phys. Rev. A* (2003), *in press*.
- [39] Y. Ohashi and A. Griffin: "BCS-BEC Crossover in a Trapped Gas of Fermi Atoms with a Feshbach Resonance."
Physica B (2003), *in press*.
- [40] Y. Ohashi: "On the Fulde-Ferrell State in Spatially Isotropic Superconductors." *J. Phys. Soc. Jpn.* **71** (2002) 2625-2628.
- [41] Y. Ohashi: "Anomalous Temperature Dependence of Spin Susceptibility around a Nonmagnetic Impurity Scattering in High- T_c Superconductors." *Phys. Rev. B.* **66** (2002) 054522.
- [42] Y. Itoh, S. Adachi, T. Machi, Y. Ohashi and N. Koshizuka: "Ni-substituted sites and the effect on Cu electron spin dynamics of $\text{YBa}_2\text{Cu}_{3-x}\text{Ni}_x\text{O}_{7-\delta}$." *Phys. Rev. B* **66** (2002) 134511.
- [43] Y. Ohashi: "Bound State and Order Parameter Mixing Effect by Nonmagnetic Impurity Scattering in Two-band Superconductors." *J. Phys. Soc. Jpn.* **71** (2002) 1978-1992.
- [44] Y. Kanegae and Y. Ohashi: "Nuclear Magnetic Resonance in Atomic-Scale Superconductor/Magnet Multilayered Systems." submitted to *J. Phys. Soc. Jpn.*
- [45] H. Matsumoto and S. Sakamoto, "Quantum phase coordinate as a zero-mode in Bose-Einstein condensed states", *Prog. Theor. Phys.* **107**, 679-688 (2002.4).
- [46] H. Matsumoto and S. Sakamoto, "Phase invariant perturbation scheme in Bose-Einstein condensed states", *Prog. Theor. Phys.* **107**, 689-702 (2002.4).

- [47] S. Sakamoto and H. Matsumoto, "Transition temperature in one-dimensional Bose-Einstein condensation", *Jour. Phys. Soc. Japan* **71**, 1939-1946 (2002.8).
- [48] Hideki Matsumoto, Shoichi Sakamoto and Satoshi Katoh, "Capacitive and inductive effects in multi-Josephson junction model in high T_c superconductors", (to be published in *Physica C*)
- [49] Shoichi Sakamoto, Shigeto Ichino and Hideki Matsumoto, "Numerical Analysis of Transition Temperature in Bose-Einstein Condensation", (to be published in *Physica C*)
- [50] M. Uematsu, H. Kageshima, and K. Shiraishi, "Interfacial silicon emission in dry oxidation - the effect of H and Cl" *Jpn. J. Appl. Phys. Part1*, **41** 2455-2458, (2002).
- [51] Y. Kangawa, T. Ito, A. Taguchi, K. Shiraishi, T. Irisawa, and T. Ohachi, "Monte Carlo simulation for temperature dependence of Ga diffusion length on GaAs(001)" *Appl. Surf. Sci.*, **190** 517-520 (2002).
- [52] N. Miyagishima, K. Okajima, N. Oyama, K. Shiraishi, K. Takeda, T. Ohno, and T. Ito, "Energetics in the growth mechanism of semiconductor heteroepitaxy" *J. Cryst. Growth*, **237** 1599-1602 (2002).
- [53] K. Shiraishi, N. Oyama, K. Okajima, N. Miyagishima, K. Takeda, H. Yamaguchi, T. Ito, and T. Ohno, "First principles and macroscopic theories of semiconductor epitaxial growth" *J. Cryst. Growth*, **237** 206-211 (2002).
- [54] Y. Kangawa, T. Ito, A. Taguchi, K. Shiraishi, and T. Ohachi, "Empirical interatomic potential calculations for relative stability of Ga adatom on GaAs(100) and (n11)A surfaces" *J. Cryst. Growth*, **237** 223-226 (2002).
- [55] M. Uematsu, H. Kageshima, and K. Shiraishi, "Microscopic mechanism of thermal silicon oxide growth" *Comp. Mater. Sci.* **24** 229-234 (2002).
- [56] Y. Kangawa, T. Ito, YS. Hiraoka, A. Taguchi, K. Shiraishi, and T. Ohachi, "Theoretical approach to influence of As₂ pressure on GaAs growth kinetics" *Surf. Sci.*, **507** 285-289 (2002).
- [57] T. Kimura, H. Tamura, K. Kuroki, K. Shiraishi, H. Takayanagi, and R. Arita, "Superconductivity in quantum dot superlattices composed of quantum wire networks" *Phys. Rev. B*, **66** art. no. 13508 (2002).
- [58] Y. Ono, K. Yamazaki, M. Nagase, S. Horiguchi, K. Shiraishi, and Y. Takahashi, "Fabrication of single-electron transistors and circuits using SOIs" *Solid State Electron.*, **46** 1723-1727 (2002).
- [59] T. Takahashi, S. Fukatsu, KM. Itoh, M. Uematsu, A. Fujiwara, H. Kageshima, Y. Takahashi, and K. Shiraishi, "Self-diffusion of Si in thermally grown SiO₂ under equilibrium conditions" *J. Appl. Phys.*, **93** 3674-3676 (2003).
- [60] S. Okada, S. Saito, and A. Oshiyama, "Inter-wall interaction and electronic structure of double-walled BN nanotubes", *Phys. Rev. B*, **65**, 165410 (2002).

- [61] S. Okada, S. Saito, and A. Oshiyama, "Electronic and Geometric Structure of Multi-walled BN Nanotubes", Proc. of Tsukuba Symposium on Carbon Nanotube, October, 2001, *Physica B*, **323**, 224 (2002).
- [62] S. Okada, K. Shiraishi, and A. Oshiyama, "Magnetic Ordering of Dangling Bond Networks on Hydrogen Deposited Si(111) Surfaces", *Phys. Rev. Lett.*, **90**, 026803 (2003).
- [63] M. Saito, Y. Miyamoto and S. Okada, "Theoretical identification of C₂₀ fullerene and prediction of electronic properties of its solid phases", Proc. of International Symposium on Nanocarbons 2001, Nagano, November, 2001, *Molecular Crystal and Liquid Crystal*, **386**, 97 (2002).
- [64] M. Otani, K. Shiraishi, and A. Oshiyama, "Theoretical Study on Stable Structures and Diffusion Mechanisms of B in SiO₂", *Applied Surface Science*, in press.
- [65] M. Otani, K. Shiraishi, and A. Oshiyama, "Mechanisms of Diffusion of Boron Impurity in SiO₂", *Phys. Rev. Lett.* **90**, 075901 (2003).
- [66] M. Otani, S. Okada, and A. Oshiyama, "Metallization of Semiconducting Nanotubes by Encapsulation of Fullerenes", submitted.
- [67] M. Boero, K. Terakura and M. Parrinello, "First Principles Molecular Dynamics Study of Catalysis for Polyolefins: the Ziegler-Natta Heterogeneous System" *Int. J. Mol. Sci.* **3**, 395-406 (2002)
- [68] M. Boero, M. Parrinello, K. Terakura and H. Weiss, "Car-Parrinello Study of Ziegler-Natta Heterogeneous Catalysis: Stability and Destabilization Problems of the Active Site Models" *Mol. Phys.* **100**, 2935-2940 (2002)
- [69] M. Boero, K. Terakura and M. Tateno, "Catalytic Role of Metal Ion in the Selection of Competing Reaction Paths: a First Principles Molecular Dynamics Study of the Enzymatic Reaction in Ribozyme" *J. Am. Chem. Soc.* **124**, 8949-8957 (2002)
- [70] M. Oshikiri, M. Boero, J. Ye, Z. Zou and G. Kido, "Electronic Structures of Promising Photocatalysts InMO₄ (M=V,Nb,Ta) and BiV₄ for Water Decomposition in the Visible Wavelength Region" *J. Chem. Phys.* **117**, 7313-7318 (2002)
- [71] M. Boero, M. Parrinello, K. Terakura, T. Ikeshoji and C. C. Liew, "First Principles Molecular Dynamics Simulations of a Solvated Electron in Normal and Supercritical Water" *Phys. Rev. Lett.* (2003) - in press
- [72] M. Boero, K. Terakura, M. Parrinello and H. Weiss, "Car-Parinello Molecular Dynamics Investigation of Active Surfaces and Ti/V Catalytic Sites in Ziegler-Natta Heterogeneous Catalysis" *Future Technologies for Polyolefin and Olefin Polymerization Catalysis* pp. 210-215, ed. by M. Terano and T. Shiono, Tech. and Edu. Pubs, Tokyo, 2002.
- [73] M. Boero "リボザイムによる酵素反応のコンピュータシミュレーション" *AIST Today* **11**, 17 (November 2002)

<学位論文（博士）>

- [1] 鐘ヶ江義晴, Study on Atomic-Scale Superconductor / Magnet Multilayered Systems (原子スケールの超伝導/磁性多層膜に関する研究) (2002) 7月

<学位論文（修士）>

- [1] 福田佑介, 「Schrodinger の猫状態とデコヒーレンス —NETFD による解析—」 (2003) 3月.
- [2] 鎗木優一郎, 「量子連続非破壊測定 of 動的取り扱い —NETFD における量子確率微分方程式を用いて—」 (2003) 3月.
- [3] 守谷昌己, 「緩衝物質 Si₃N₄ を用いた Si(111) 基板上的 GaN 成長の理論的研究」 (2003) 3月
- [4] 若槻哲良, 「密度汎関数法による Si 表面ステップの崩壊機構の研究」 (2003) 3月
- [5] 神谷克政, 「密度汎関数法に基づくチトクロム酸化酵素の電子構造」 (2003) 3月

紀要等

- [1] T. Arimitsu and N. Arimitsu: 「Analysis of Turbulence by a Statistics based on Generalized Entropy」, 物性研究 (2001) in press.
- [2] N. Arimitsu and T. Arimitsu: 「乱流における流体粒子加速度密度関数のマルチフラクタル解析」, 物性研究 (2003) in press.
- [3] T. Arimitsu and N. Arimitsu: 「Multifractal Analysis of Various Probability Density Functions in Turbulence」, 九州大学応用力学研究所 研究集会報告 (2003) in press.
- [4] 松本秀樹, "Zero-mode in Bose-Einstein condensed state", 基研研究会「熱場の量子論とその応用」研究報告書 (素粒子論研究, vol. 106 No. 2, E11-E11, 2003.2)
- [5] 大谷 実, 白石 賢二, 押山 淳, "SiO₂ 中における B の拡散機構", 薄膜・表面物理分科会/シリコンテクノロジー分科会共催特別研究会研究報告, JAP Catalog Number: AP032203, 105-110.

講演

- [1] T. Arimitsu and N. Arimitsu: 「Tsallis 統計に基づく乱流解析」, INSAM セミナー, 2002 年 6 月, 広島大学.
- [2] (招待講演) T. Arimitsu and N. Arimitsu: Multifractal Analysis of Turbulence based on Generalized Entropy I, II, 「材料科学におけるパターン形成の数理」研究会, 2002 年 6 月, 広島大学.

- [3] T. Arimitsu and N. Arimitsu: 「Multifractal Analysis of Fluid Particle Accelerations in Turbulence」, International Conference on Theoretical Physics (TH-2002), 2002年7月, UNESCO, Paris, France.
- [4] N. Arimitsu and T. Arimitsu: 「Multifractal Analysis of Turbulence based on Generalized Statistics」, International Conference on Theoretical Physics (TH-2002), 2002年7月, UNESCO, Paris, France.
- [5] A.E. Kobryn, T. Hayashi and T. Arimitsu: 「Study of quantum stochastic differential equations within the NETFD approach」, International Conference on Theoretical Physics (TH-2002), 2002年7月, UNESCO, Paris, France.
- [6] T. Arimitsu and N. Arimitsu: 「Multifractal Analysis of Turbulence based on Generalized Statistics —A way to vortex tangle in superfluid He and to cosmic strings—」, Patterns of Symmetry Breaking, NATO Advanced Study Institute & COSLAB School, 2002年9月, Krakow, Poland.
- [7] (招待講演) P. Jizba: 「Decoherence, Information, Complexity and Entropy」 First International Workshop DICE2002, September 2002, Piombino (Tuscany), Italy
- [8] T. Arimitsu and N. Arimitsu: 「Multifractal Analysis of Various PDF's in Turbulence」, The 5th International Congress on Mathematical Modeling, 2002年10月, Dubne, Russia.
- [9] (招待講演) P. Jizba: International Workshop "Strong and Electroweak Matter 2002", October 2002, Heidelberg, Germany.
- [10] (招待講演) T. Arimitsu and N. Arimitsu: 「Multifractal Analysis of Various PDF's in Turbulence Toward a test of non-extensivity —」, International Workshop on Anomalous distributions, Nonlinear Dynamics and Nonextensivity, 2002年11月, Santa Fe, U.S.A..
- [11] A. Kobryn, T. Hayashi and T. Arimitsu: 「Quantum Stochastic Differential Equations in terms of NETFD」, New Perspective in Quantum Physics, 2002年11月, 早稲田大学.
- [12] T. Arimitsu and N. Arimitsu: 「Multifractal Analysis of Various PDF's in Turbulence Toward a test of non-extensivity —」, 研究集会「乱流現象の多様性と普遍性」, 2002年12月, 九州大学応力研.
- [13] T. Arimitsu and N. Arimitsu: 「乱流における流体粒子加速度密度関数のマルチフラクタル解析」, 第11回凝縮系(非平衡系の統計)物理シンポジウム, 2002年12月, 筑波大学.
- [14] Alex Kobryn, 林 剛史, 有光敏彦: 「Study of quantum stochastic differential equations within the formalism of Non-equilibrium thermo field dynamics」, 第11回凝縮系(非平衡系の統計)物理シンポジウム, 2002年12月, 筑波大学.
- [15] Petr Jizba, 有光敏彦: 「On observability of Rényi entropy」, 第11回凝縮系(非平衡系の統計)物理シンポジウム, 2002年12月, 筑波大学.

- [16] 林 剛史, 有光敏彦:「非平衡系における九後・小嶋の補助条件」, 第11回凝縮系(非平衡系の統計)物理シンポジウム, 2002年12月, 筑波大学.
- [17] 印出井勉, 有光敏彦:「定常ずり流動下における物理ゲルの解析」, 第11回凝縮系(非平衡系の統計)物理シンポジウム, 2002年12月, 筑波大学.
- [18] A. Kobryn, T. Hayashi and T. Arimitsu: 「Study of quantum stochastic differential equations within the formalism of Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics」, 「量子力学系の数理とその量子コンピュータへの応用」研究集会, 2002年12月, 京都大学数理解析研究所.
- [19] A. Kobryn, T. Hayashi and T. Arimitsu: 「Study of quantum stochastic differential equations within the formalism of Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics」, Sendai Workshop Quantum Probability and Quantum Information, 2003年1月, 東北大学.
- [20] 有光直子, 有光敏彦:「乱流中における流体粒子の加速度確率密度関数」, 日本物理学会 第58回年次大会, 2003年3月, 東北大学
- [21] (招待講演) P. Jizba: LANL, T-8 Group, March 2003, Los Alamos, U.S.A..
- [22] P. Jizba: APS March Meeting, March 2003, Austin, Texas, U.S.A..
- [23] N. Taniguchi, “Wigner-Dyson correlation and the nonlinear sigma model without averaging”, 2003年3月日本物理学会第58回年次大会(東北大学)
- [24] N. Taniguchi, Wigner-Dyson correlation without ensemble averaging 2003年3月基礎研究会「物性理論と場の理論」
- [25] N. Taniguchi, “Effective field theory in disordered and quantum chaotic systems (almost) without the ensemble averaging”, (2003年2月12日 東京工業大学物理)
- [26] 谷口 伸彦、東京工業大学 集中講義(大学院)物性物理学特論第六 “Field theoretical treatment of mesoscopic and quantum chaotic systems — Symmetry principles, symmetry breaking and supersymmetry” 2003年2月
- [27] Tsutomu MOMOI, “Quantum Melting of Striped Domain Walls in Two Dimensions”, International Conference on Theoretical Physics (2002, July, Paris, France).
- [28] Tsutomu MOMOI, Keisuke TOTSUKA, “Magnetization Plateaus in Two-Dimensional Frustrated Antiferromagnets”, International Conference on Theoretical Physics (2002, July, Paris, France).
- [29] Tsutomu MOMOI, Harumi SAKAMOTO, Kenn KUBO, “Ferromagnetism in the Hubbard model with orbital degeneracy”, International Conference on Theoretical Physics (July, 2002, Paris, France).
- [30] Tsutomu Momoi, “Quantum phase transition of striped domain walls”, The 23rd International Conference on Low Temperature Physics (August, 2002, Hiroshima, Japan).

- [31] Kenn Kubo and Tsutomu Momoi “The magnetic groundstate phase diagram of a multiple-spin exchange model on the triangular lattice”, The 23rd International Conference on Low Temperature Physics (August, 2002, Hiroshima, Japan).
- [32] D. S. Hirashima, T. Momoi, and T. Takagi, “Effect of Zero Point Motion on Solidification of Quantum Particles”, International Symposium on Ultra Low Temperature Physics (August 28-31, 2002, Kanazawa, Japan)
- [33] T. Momoi, “Quantum Melting Transition of Stripes, and Stripe Liquid”, INTERNATIONAL WORKSHOP “Novel Quantum Phenomena in Transition Metal Compounds” (August, 2002, Sendai, Japan)
- [34] Tsutomu Momoi, Toshiya Hikihara, and Xiao Hu, “Spin-chirality duality in a spin ladder with four-spin cyclicexchange”, INTERNATIONAL WORKSHOP “Novel Quantum Phenomena in Transition Metal Compounds” (August, 2002, Sendai, Japan)
- [35] 桃井 勉：“ストライプ構造の量子融解転移とストライプ流体”，平成14年6月、基研研究会「新奇な秩序を持つ系での相転移」（京大基研）。
- [36] 引原俊哉、桃井 勉、胡：“Spin-chirality duality in a spin ladder system with four-spin cyclic exchange”，平成14年6月、基研研究会「新奇な秩序を持つ系での相転移」（京大基研）。
- [37] 桃井 勉、引原俊哉、胡：“スピン梯子系におけるスピン・カイラリティー双対性”，平成14年6月、物性研短期研究会「フラストレート系の磁性と新しい物性」（東大物性研）。
- [38] 桃井 勉：“Spin-chirality duality in the spin ladder with four-spin cyclic exchange”，平成14年7月、東工大 押川研セミナー。
- [39] 引原俊哉、桃井 勉、胡：“4体相互作用を持つ $S=1/2$ スピン梯子系におけるスピン・カイラリティー双対性”，平成14年9月、日本物理学会（中部大学）。
- [40] 平島 大、桃井 勉、高木丈夫：“量子粒子の固化（ゼロ点振動の効果）”，平成14年11月、物性研短期研究会「物性研究における計算物理」（東大物性研）。
- [41] 桃井 勉、引原俊哉、中村正明、胡：“梯子系の $SU(4)$ 対称点近傍に現れるスカラー・カイラル秩序相”，平成14年11月、基研研究会「軌道自由度を持つ強相関電子系の理論の進展」（京大基研）。
- [42] 桃井 勉：“Spin-chirality duality and scalar chiral order in spin ladders with four-spin exchanges”，平成14年12月、阪大応物 川上研セミナー。
- [43] 桃井 勉：“Scalar chiral order and spin-chirality duality in spin ladders with four-spin exchanges”，平成14年1月、東北大理学部物理学教室 物性コロキウム。
- [44] (Invited) Tsutomu Momoi “Scalar chiral order in the two-leg spin ladder with four-spin exchanges”，平成15年2月、原研第2回ワークショップ「d-およびf-電子系における軌道秩序と揺らぎ」（日本原子力研究所）

- [45] Y. Ohashi and A. Griffin: "BCS-BEC Crossover in a Trapped Gas of Fermi Atoms with a Feshbach Resonance." LT23, 2002年8月、広島.
- [46] (Invited) Y. Ohashi: "BCS-BEC Crossover in a Trapped Gas of Fermi Atoms with a Feshbach Resonance." 2002年9月、東京都立大学.
- [47] (Invited) Y. Ohashi: "BCS-BEC Crossover in a Trapped Gas of Fermi Atoms with a Feshbach Resonance." 2002年10月、東京工業大学.
- [48] (Invited) Y. Ohashi: "Feshbach 共鳴を有するフェルミ原子ガスにおける BCS - BEC クロスオーバー." 11回凝縮系物理シンポ、2002年12月、つくば.
- [49] Y. Ohashi and A. Griffin: "Feshbach 共鳴を有する、トラップされたフェルミ原子ガスにおける超流動の研究: BCS - BEC クロスオーバー." 日本物理学会、2003年3月、東北大学.
- [50] (Invited) A. Griffin and Y. Ohashi: "Cooper Pairing and the BCS-BEC crossover in Fermi Gases with a Feshbach Resonance." University of Otago, March 22, 2002, New Zealand.
- [51] (Invited) A. Griffin and Y. Ohashi: "Cooper Pairing and the BCS-BEC crossover in Fermi Gases with a Feshbach Resonance." Benasque Workshop on "The Physics of Ultracold Dilute Atomic Gases", June 20, 2002, Benasque, Spain.
- [52] (Invited) A. Griffin and Y. Ohashi: "Cooper Pairing and the BCS-BEC crossover in Fermi Gases with a Feshbach Resonance." "BEC Summer Programme", July 2, 2002, Trento, Italy.
- [53] M. Terao and Y. Ohashi: " λ -(BETS) $_2$ Fe $_x$ Ga $_{1-x}$ Cl $_4$ における超伝導-絶縁体の理論." 日本物理学会、2003年3月、東北大学.
- [54] 松本秀樹, "Zero-mode in Bose -Einstein condensed state", 基研研究会「熱場の量子論とその応用」(2002年8月7日-8月9日)
- [55] Hideki Matsumoto, Shoichi Sakamoto and Satoshi Katoh, "Capacitive and inductive effects in multi-Josephson junction model in high T_c superconductors", (The 23rd International Conference on Low Temperature Physics, Hiroshima, 8/20-8/26, 2002)
- [56] Shoichi Sakamoto, Shigeto Ichino and Hideki Matsumoto, "Numerical Analysis of Transition Temperature in Bose-Einstein Condensation", (The 23rd International Conference on Low Temperature Physics, Hiroshima, 8/20-8/26, 2002)
- [57] 市野茂人、坂本昇一、松本秀樹「Bose-Einstein 凝縮の転移温度」(2000年秋季物理学会 9/6-9/9、中部大学、春日井市)
- [58] 坂本昇一、市野茂人、松本秀樹「ボーズ・アインシュタイン凝縮の転移温度」、第11回『凝縮系物理(非平衡系の統計物理)シンポジウム(筑波大学学生会館特別会議室、2002年12月18日-20日)
- [59] 松本秀樹「多重ジョセフソン模型における帯電効果と電磁誘導効果」(2003年春季物理学会 3/28-3/31、東北大学、仙台)

- [60] 岡田 晋, 押山 淳 “有限長ナノチューブの電子構造”
第 23 回フラーレン総合シンポジウム、(松島, 松島大観荘)、2002 年 7 月.
- [61] S. Okada, K. Shiraishi, and A. Oshiyama “Magnetic Ordering of Dangling Bond Networks on Si(111) Surfaces”
26th International Conference on Physics of Semiconductor, 28 July – 2 August, 2002, Edinburgh.
- [62] 岡田 晋 “ナノ炭素ネットワークの誘起する特異な電子状態：空隙と端”
第 40 回茅コンファレンス、(岩手県, 八幡平ロイヤルホテル)、2002 年 8 月。(招待講演)
- [63] 岡田 晋 “ナノチューブ状物質～理論的立場から～”
日本物理学会 2002 年秋の分科会、(春日井市, 中部大学)、2002 年 9 月。(シンポジウム講演)
- [64] 岡田 晋, 押山 淳 “Electron-Hole Injection in Double-walled Carbon Nanotubes”
第 24 回フラーレン総合シンポジウム、(岡崎, 分子研)、2003 年 1 月.
- [65] 岡田 晋, 押山 淳 “Electronic Structures of Metallic C₆₀ Polymers”
第 24 回フラーレン総合シンポジウム、(岡崎, 分子研)、2003 年 1 月.
- [66] 岡田 晋, 押山 淳 “空隙充填によるナノチューブ電子構造制御”
日本物理学会第 58 回年会、(仙台市, 東北大学)、2002 年 3 月 29 日.
- [67] K. Shiraishi, A. Taguchi, and S. Okada, “Theoretical studies on elasticity of free-standing nano films” Fourth International Symposium on Control of Semiconductor Interfaces, 軽井沢、(2002/10/21-25).
- [68] M. Uematsu, H. Kageshima, and K. Shiraishi, “Unified Theory of Thermal Silicon Oxide Growth” 9th International Symposium on Silicon Material Science and Technology, 100th Meeting of the Electro-Chemical Society, Philadelphia, USA, (2002/5/16). (Invited Talk).
- [69] K. Shiraishi, A. Taguchi, and S. Okada, “First principles calculations on elastic properties of GaAs nano films” Advanced Heterostructure Workshop, Kohala Coast, Hawaii, USA, (2002/12/1-6).
- [70] H. Kageshima, K. Shiraishi, and M. Uematsu, “Si emission mechanism for the Si thermal oxidation” 5th Asian Workshop on the first-principles electronic structure calculations, Seoul, Korea, (2002/10/21) (Invited talk).
- [71] 大谷 実, 白石 賢二, 押山 淳, “SiO₂ 中の B の安定配置と拡散機構の理論的研究”, 第 3 回応用物理学会学術講演会, (新潟市, 新潟大学), 2002 年 9 月.
- [72] M. Otani, K. Shiraishi, and A. Oshiyama, “Theoretical Study on Stable Structures and Diffusion Mechanisms of B in SiO₂”, Fourth International Symposium on Control of Semiconductor Interfaces, Karuizawa, Japan, (2002 年 10 月 21-26 日).
- [73] 大谷 実, 白石 賢二, 押山 淳, “SiO₂ 中における B の拡散機構”, 極薄シリコン酸化膜の形成・評価・信頼性 第 8 回研究会, (静岡県賀茂郡東伊豆, 熱川ハイツ), 2003 年 1 月.

- [74] 大谷 実, 白石 賢二, 押山 淳, “SiO₂ 中の B 拡散に対する過剰酸素の効果”, 第 50 回応用物理学関係連合講演会, (横浜市, 神奈川大学), 2003 年 3 月.
- [75] 大谷 実, 岡田 晋, 押山 淳, “Fullerene 内包による半導体 CNT の金属化の可能性”, 第 22 回フラーレン総合シンポジウム, (岡崎市, 岡崎国立共同研究機構), 2003 年 1 月.
- [76] 大谷 実, 岡田 晋, 押山 淳, “フラーレン内包によるカーボンナノチューブのバンドギャップ制御”, 日本物理学会第 58 回年会, (仙台市, 東北大学), 2003 年 3 月.