

VI. 物性理論グループ

教授	有光 敏彦、押山 淳、高田 慧
助教授	田上 由紀子、平島 大、谷口 伸彦 (2000年1月着任)
講師	大橋 洋士
助手	郡司 茂樹、桃井 勉 (在米)
準研究員	田中 篤司
学振ポスドク	Sukmin Jeong、Ji-wook Jeong
大学院生	17名

【1】 非平衡散逸系の統計物理 (有光)

(1) 発達乱流の非示量性統計による解析

(論文 [1, 3, 4]、紀要 [6, 7, 8, 9]、講演 [4, 6, 8, 9, 10, 11])

論文 [1] では、スケーリング関係式 $1/(1-q) = 1/\alpha_{\min}^B - 1/\alpha_{\max}^B$ を用いて、間欠性指数 μ の実測値より p モデルに対応する Tsallis 指数 q の値を求めた。ただし、 α_{\max}^B と α_{\min}^B は、 p モデルにおけるマルチフラクタル・スペクトル $f(\alpha)$ の α 領域の最大値ならびに最小値である。論文 [1] ではさらに、局所的散逸をあらわす確率密度関数に対して Tsallis 型分布関数を提案し、先のスケーリング関係式を利用して μ の測定値より決定した Tsallis 指数 $q = 0.237$ を採用すると、その分布関数が p モデルの二項分布関数と非常によく一致することを示した。このことから、発達乱流系の統計力学的背景に Tsallis 統計が関与している可能性が予想され、さらに $q < 1$ であることが明らかになった。

論文 [3, 4] では、発達乱流の本質をさらに明らかにするために論文 [1] の結果を踏襲し、その方針をセルフ・コンシステントに発展させた。すなわち、2つの条件(「確率の規格化」と「 α の分散値を一定にする」)の下に一般化されたエントロピー (Tsallis エントロピー) の極大値を与える分布関数を導出し、それをもって局所散逸に対する確率密度関数とするのである。なお、Tsallis エントロピーは Boltzmann-Gibbs エントロピーを内包している。確率密度関数が与えられると、それに対応するマルチフラクタル・スペクトル $f(\alpha)$ が分かるが、そこに現れるすべてのパラメータを、間欠性指数 μ の実測値によりセルフ・コンシステントに決定することができる。そこには、いわゆるフィッティング・パラメータは存在しない。得られた確率密度関数から、発達乱流の基礎となる統計は、示量性 Boltzmann-Gibbs 統計ではなく非示量性 Tsallis 統計であることが分かる。この密度関数を用いて、網目の大きさが ℓ_0 である格子の後方に発生した等方乱流における速度成分 u (たとえば、流れの速度場 \vec{u} の x 成分) の時系列を理論的に解析した。Taylor の凍結仮説の下に、 $\langle (\delta u(r))^m \rangle \propto r^{\zeta_m}$ で定義される m 次の速度相関関数に関するスケーリング指数 ζ_m を、マルチフラクタル・スペクトル $f(\alpha)$ を利用して求める。ただし、 $\delta u(r) = |u(x+r) - u(x)|$ は、距離 r 離れた2地点での同時刻における成分 u の差を表している。期待値 $\langle \dots \rangle$ は、先に求めた確率密度関数による平均である。導出されたスケーリング指数 ζ_m は、すべての実験データを大変よく説明している。他の理論で得られた ζ_m の結果 (K41, 対数正規, β モデル, p モデル, 対数 Poisson) との比較からも、本論文の結果が優れていることが分かる。なお、解析的な表式を評価すると、 $m \gg 1$ のとき、 ζ_m に対数項が存在することも分かる。

(2) NETFD とその応用 (論文 [2]、紀要 [1, 2, 4]、講演 [1, 5])

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。散逸系を演算子代数で扱う例題として、解析的に解ける「局所電子・フォノン系」をNETFDで系統的に調べた[論文[2]]。この応用例により、散逸系であるための影響が演算子代数のどこに現れるかを知ることができる。また、経路積分法や演算子を関数空間に射影する方法とNETFDとの関係も示した。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[紀要[2]: 講演[1, 5]]。

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[紀要[1]]。

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[4]]。

(3) レオロジー（紀要[5]、講演[3]）

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模型（the random-flight model; 高分子の長さが有限であることを取り入れた模型）を採用すると、そのピークがうまく説明できる[紀要[5]: 講演[3]]。今年度は、解離率に物理的な改良を加え、実験結果との一致がさらに良くなることを示した。

【2】 カオス

(1) 散逸系のカオス（有光）（単行本[1]、紀要[3, 10]、講演[2, 7]）

カオスの特徴であるストレンジ・アトラクタは、カオス領域のいたるところに内在する不安定周期軌道のまわりを、カオス軌道が次から次へとふらふら渡り歩くことにより描かれたものである。いわば、不安定周期軌道の群れが呈する輪郭を浮き彫りにしたものがストレンジアトラクタである。そこで、無数にある不安定周期軌道のトポロジーを利用してストレンジアトラクタの特徴づけをしようというのがこの研究の主題である。あえて言えば、この研究の目指しているものは、「カオス軌道の不安定周期軌道によるトポジカル展開」とでもいえる新しい分野（「テンプレート解析」）の幕開けである[単行本[1]]。軌道のトポジカルな性質を抽出するためには、結び目、記号力学、テンプレートといった知識が必要になる。単行本[1]では、はじめにこれらの基礎知識を丁寧に紹介した後、我々の導入した「局所交差数」によるカオス軌道の解析方法を解説している。幅広いバックグラウンドを必要とする超境界領域に踏み込む訳で、各分野の成果を使える形で習得しておく必要がある。そこで、定理などの厳密な証明は必要最小限にとどめ、むしろそれを利用する立場での理解に重点を置いた。

周期倍分岐軌道のトポジカルな性質（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、非線形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 [紀要 [3, 10] : 講演 [2, 7]]。

(2) 半古典論による量子 chaos の解析 (田中) (論文 [5], 講演 [12, 13, 14])

半古典 coherent state 経路積分は、古典論での相空間上の一点の自然な対応物である、Gauss 波束を初期状態とした時間発展に最適な半古典論です。しかしながら、古典軌道が込みいった形の境界条件を持つため、その構造は判然としませんでした。これに対し、半古典 coherent state 経路積分の実軌道の近傍の構造を解明しました。古典軌道の高階の安定性を評価する公式を開発することで、非線形ゆらぎと量子干渉が重要になる時間 scale を導出しました [5]。次いで、実軌道近傍の複素古典軌道を、Aharonov らの提案する、弱値の概念と関連づけることで、その測定可能性を議論しました [14]。

【3】 銅酸化物高温超伝導の理論的研究

(1) 酸化物高温超伝導における Josephson plasma, Carlson-Goldman mode の研究

(大橋、高田) (論文 [6, 7, 8], 講演 [15, 16, 17])

近年、銅酸化物高温超伝導 c 軸方向におけるジョセフソンプラズマの温度変化が観測されたが、その実験結果はプラズマ振動が超流体成分のみに依るとした単純な 2 流体モデルでは説明できない。そこで、超流体成分に加え、常流体成分も加味したモデルを提案、両者が共に振動に参加していると考えることで実験結果を全温度域にわたり説明できることを示した。c 軸伝導はこれまでインコヒーレント (面間伝導で運動量が全く保存されない状況) ではないかと考えられてきたが、この結果は c 軸伝導がコヒーレント、インコヒーレントの中間的状況にあることを示唆している。

銅酸化物高温超伝導では、転移温度直上での c 軸伝導率 (σ_c) と c 軸磁場侵入長の間に Basov 相関と呼ばれる関係があることが実験的に知られている。この相関はこれまで、Anderson らの interlayer tunneling model の立場から説明されてきたが、今回、従来の超伝導機構の枠内でも説明できることを示した。また、類似の現象として、 σ_c と Josephson plasma 周波数の間にも相関が存在しうることを提案、実際いくつかの物質に対し成立していることを示した。

ジョセフソンプラズマに加え、超伝導状態におけるもう一つの集団励起、Carlson-Goldman (CG) mode を 2 次元 d 波超伝導に対し研究、その性質が s 波超伝導の場合とは質的に異なることを明らかにした: s 波超伝導では CG モードは dirty な系の転移温度直下でしか観測できないのに対し、d 波超伝導では逆に clean な系の低温で観測できる。これは d 波超伝導では秩序パラメータのノードの存在があたかも正常相にある 1 次元バンド的效果をもたらし、CG モード発生に必要な電子間クーロン相互作用の遮蔽効果を極めて低温までもたらすことに因る。(s 波超伝導ではこの遮蔽がない為、準粒子が多数存在する転移温度直下でしか CG モードは存在できない。) 尚、ノードに起因するこの遮蔽効果は不純物散乱で抑えられる。更に、d 波超伝導では、CG モードのエネルギーはモードの伝播方向に大きく依存、方向によっては、スペクトル中に 2 つのピークとして現れることも理論的に示した。

(2) 酸化物高温超伝導における反強磁性的スピン揺らぎの増強効果の研究

(大橋) (論文 [9, 10], 講演 [18])

銅酸化物高温超伝導のメカニズムについては、反強磁性的スピン揺らぎを媒介とした理論が有力であるが、電子間引力を直接検出する実験がない為、この説の正否は未だ明らかではない。これに対し近年、中性子非弾性散乱、NMR- T_1^{-1} の実験から、非磁性不純物 (Zn) のドーピングにより $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ 、 $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ における反強磁性的スピン揺らぎが大きな影響を受けることが明らかとなった。もし、電子間引力が反強磁性的スピン揺らぎに因るのであれば、このようなスピン揺らぎの大きな変化は、引力自身に直接影響が及ぶ為、スピン揺らぎを引力起源としない他の機構と比べ、大きな違いを引き起こすはずである。従ってこの差異から電子間引力の起源を特定できる可能性がある。この着想に基き、本研究では、先ず、非磁性不純物により何故反強磁性的スピン揺らぎが大きな影響を受けるかについて研究した。その結果、d 波超伝導の場合、不純物散乱がユニタリティ極限にあるとゼロエネルギー近傍に束縛状態が形成、その状態を使って低エネルギーのスピン揺らぎが超伝導状態下であっても発達し続けることを明らかにした。この結果は中性子非弾性散乱、NMR- T_1^{-1} の実験結果と定性的に一致するものである。更に、ある場合には、スピン揺らぎが発達し続けた結果、不純物近傍に低温で反強磁性秩序が発生、超伝導と共存することも明らかにした。尚、これらの現象は不純物がボロン散乱体である場合には起らない。

(3) 超伝導体中における非磁性、磁性不純物、共鳴散乱体近傍の電子状態の数値繰り込み群による研究 (大橋) (論文 [11]、博士論文 [1]、講演 [19])

超伝導状態での 1 不純物対称、非対称アンダーソン模型を数値繰り込み群を用い研究した。この手法では、近藤効果の影響は完全に取り込まれている。本研究により、これまで個々に調べられてきた非磁性、磁性不純物、共鳴散乱体近傍の電子状態相互の移り変わりが解明された。磁性極限では不純物近傍に生じる束縛状態のエネルギーは超伝導秩序パラメータと近藤温度の比でスケールされることが知られていたが、この性質が不純物が磁性極限から離れ、平均場近似での磁気転移点近傍、あるいは価数揺動領域に至るまで成立することを明らかにした。また、ある領域ではエネルギーの異なる 2 つの束縛状態が同時に現れること、更に平均場近似で得られていた磁気転移近傍、価数揺動領域での束縛状態エネルギーの不連続性は実際には存在しないことも明らかにした。[院生 吉岡智樹氏との共同研究]

(4) 酸化物高温超伝導における c 軸電気抵抗の半導体的振る舞いの機構に対する研究

(大橋) (論文準備中、講演 [20])

アンダードーピング領域にある銅酸化物高温超伝導体では、正常相において c 軸抵抗が半導体的温度変化を示す。一方、そのような場合でも面内の抵抗は金属的振る舞いを示し、この「面内金属、面間半導体」の機構は未だ解明されていない。本研究では、面内反強磁性的スピン揺らぎの発達によるフェルミ面の繰り込み効果が原因とする機構を提案した。すなわち、低温にいくにしたがい、スピン揺らぎに因りフェルミ面が 2 次元性を発達させる方向に変形、c 軸方向のキャリア数が減少、このため電気抵抗が増大する。一方、面内方向のキャリア数は変化しないため、この方向の伝導は金属的状態を維持する。本研究では反強磁性的スピン揺らぎによるフェルミ面の形状の温度変化を実際に計算、上記シナリオが実現可能であることを示した。[院生 寺尾允一氏との共同研究]

【4】 超流動・超伝導、重い電子系、磁性の理論的研究

(1) 2次元液体³Heの研究 (平島) (論文[13])

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、2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(現在、防衛庁技術本部)と平島は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。さらに、自己エネルギー効果も考慮し(自己無撞着*T*行列—*K*行列—理論)、低密度領域では、自己エネルギー効果が重要ではないこと、従って*T*行列理論の結果が半定量的に信頼できるものであることを示した。また、現実の系で超流動を実現するための条件も考察した。

(2) 酸化物高温超伝導体におけるストライプに関する研究
(平島、久保(勝)) (講演[21])

酸化物高温超伝導体におけるストライプ秩序あるいはゆらぎが注目を集めている。たとえば、角度分解能光電子分光実験において、ブリルアンゾーンの対角方向で準粒子ピークが抑制されるという結果が得られており、ストライプゆらぎとの関係が示唆されている。これに関連して、平島と久保は、ストライプ状電荷密度波状態に対して不安定な性質を持つ(スピンレス)ハバード型モデルの量子モンテカルロ計算を行い、ストライプ型ゆらぎが1電子スペクトルにどのような影響を及ぼすか調べた。その結果フェルミ面上であつても $\mathbf{p} = (\pi/2, \pi/2)$ においては、スペクトルが著しく広がってしまうことが分かった。

(3) 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
(久保(勝)) (論文[14]、講演[22])

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1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、 $\text{CeCu}_{6-x}\text{Au}_x$ ($x \simeq 0.1$)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性は、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ループ補正の効果計算し一様帯磁率の温度依存性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。

(4) 多体交換相互作用 (平島、片野、芦沢) (論文[15, 16]、講演[23])

片野、平島は、ウイグナ-結晶中の多体スピン交換に関する研究を論文にまとめた。5体交換、6体交換がかなり大きいこと、粒子の交換経路が実験結果から予想されるものと定量的にはよく一致しないことなど、興味深いと同時に今後の一層の研究が必要であることを示唆する結果が得られた。

芦沢、平島は、グラファイト上低密度2次元固体ヘリウム3(いわゆる*R*相)において強磁性的

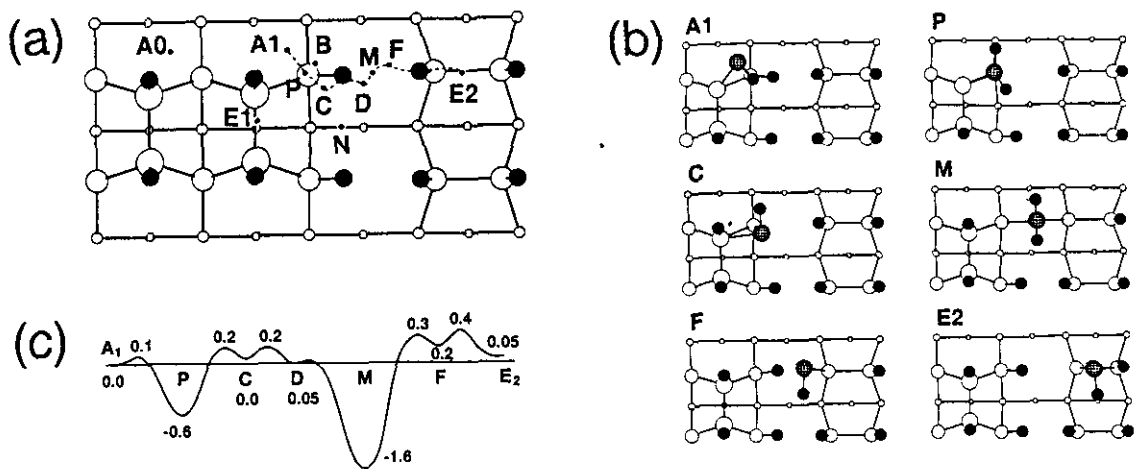
な交換相互作用が観測されることの定性的な説明を試みた。基盤ポテンシャルの影響をあらわに考慮することによって、 R 相では、反強磁性的な4体、6体交換相互作用が強く抑制され、2体と3体の交換相互作用だけが重要であることがわかった。2体交換相互作用と3体交換相互作用の大小は基盤ポテンシャルの詳細等に敏感に依存する。 R 相においては、3体交換相互作用の大きさが若干2体のそれを若干上回っていると思われる。

【5】 半導体表面の科学

(1) Si エピタキシャル成長の微視的機構

(S. Jeong, 押山) (論文 [17, 18, 19, 20, 21, 22]、双書 [2]、講演 [24, 25, 26])

結晶成長現象は太古の昔から人々を魅了してきた。一方、現在の半導体テクノロジーでは、実験室あるいは生産現場で多層膜を形成する技術(エピタキシャル成長技術)が確立してきた。しかしその技術は、多分に経験と勘によっている。量子力学の第一原理からの理論計算によって、原子スケールでの成長現象の機構解明が望まれてきた。S. Jeong はそうしたエピタキシャル成長のひとつの典型である、Si(100)面での成長を取り上げ、計算を続けてきた。電子同士の相互作用を密度汎関数法で扱い、飛来原子の拡散経路と活性化エネルギーを決定する、言い換えれば多次元空間での断熱ポテンシャル面の探索計算である。下図は結果の一例であり、水素で被覆されたSi(100)面上での、Si 飛来原子の拡散機構を解明したものである。表面上には必ず原子ステップが存在し、図(a)は計算により多く存在することが予言される単原子層ステップSBである。飛来原子(図(a)には示されていない)は図の点線で示される拡散経路を取り、それにそった拡散の活性化エネルギーは図(c)に示されている。原子スケールでの拡散機構は図(b)に示されるような、複雑な原子反応であることがわかった。



図： 水素化 Si(100) 面上での非再結合 SB ステップ近傍での Si アドアトムの拡散経路 (a)。左手が上方テラスで、白丸は下地 Si 原子、黒丸は水素原子を示す。アドアトムは図中黒点で示すいくつかの(準)安定配置を取り、点線で示す拡散経路を移動する。(準)安定配置を (b) に示す。ここでメッシュ丸が Si アドアトム。(c) は拡散経路に沿った全エネルギーの変化 (eV)。

得られた大きな知見のひとつは、ステップ下端における深い捕獲位置(図のM)の発見である。言い換えれば、SB ステップ下端がエピタキシャル成長の nucleation 位置になることを示唆している。これはSTM実験による成長表面の観察結果と整合している。

尚、この研究プロジェクトは日本学術振興会未来開拓学術研究推進事業の支援を受けており、他の成果と併せて、平成12年3月2日、3日に筑波国際会議場で、当研究グループによって開催

された、「原子スケール表面・界面ダイナミクス」国際シンポジウムで発表された。

(2) Si 表面欠陥の微視的同定 (岡野、押山) (論文 [23])

半導体表面にはなんらかの構造不完全性が存在する。微視的に同定されていない不完全性のひとつに、Si(100) 面での C 型欠陥とよばれるものがある。岡野は真空中といえども必ず存在する水分子に着目し、水分子が解離吸着した安定構造を密度汎関数法計算によって見出し、その安定構造での STM イメージを計算し、実験の C 型欠陥のイメージと酷似していることを発見した。C 型欠陥の同定に一石を投じるものであろう。

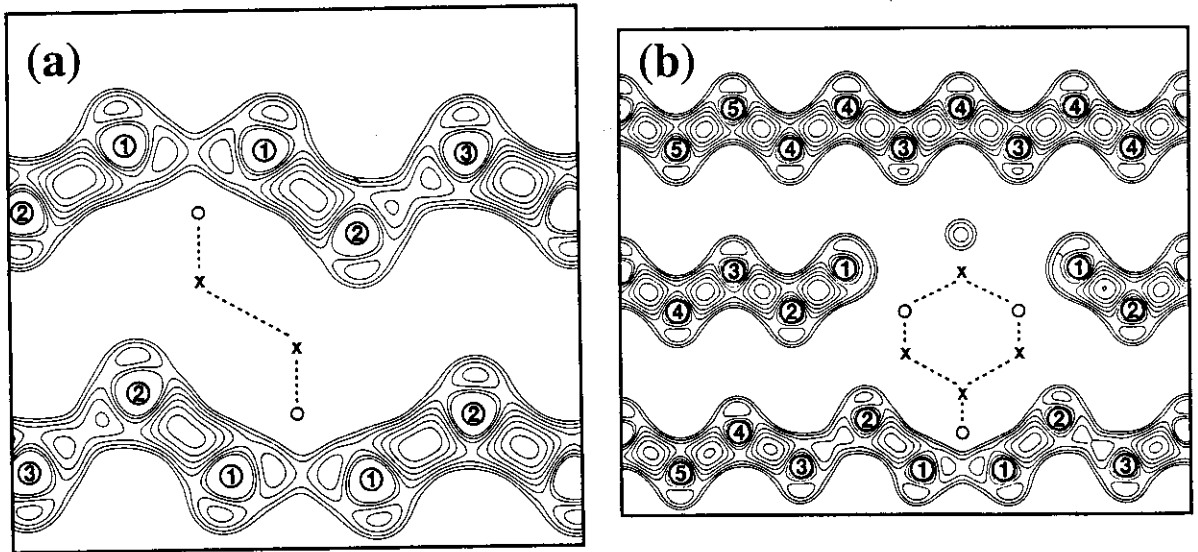
(3) 表面ナノ構造での新物性の予測 (岡田、押山) (論文 [24, 25]、講演 [27])

最近の STM を用いた原子操作により、原子 1 個 1 個を表面に配置することも不可能ではなくなってきた。ひとつの例は、Si(100) 面上の Ga のワイヤーである。従来このワイヤーは、日立基礎研究所のグループにより作成され、興味深いことに、非常に平坦なバンド構造を有することが示されていた。今回、岡田 (物質工学系) は、密度汎関数法の局所スピン密度近似および一般化スピン密度勾配近似により、この Ga ワイヤーの構造安定性とスピン秩序を調べた。その結果、3 つの (準) 構造を見出し、そのうちのひとつの構造は、電子的には強磁性状態であることを明らかにした。他の二つの構造との相対的安定性、構造間の転移の活性化エネルギー、他の秩序状態 (電荷密度波状態、反強磁性状態) の可能性、キャリアー・ドーピングの効果も吟味した結果、この強磁性状態は充分ロバストであることが示された。

【6】 半導体中欠陥の科学

(1) Si 結晶中の多原子空孔の安定性とその不純物による修飾

(秋山、押山) (論文 [26, 27, 28, 29]、講演 [28, 29])



図： 安定原子空孔である 6 原子空孔 (a) と 10 原子空孔 (b) の周囲の (110) 面上での電子密度分布。空格子点周囲の第 m 近接原子は、 m という数字入りの丸で示されおり、一方、空格子点は x ないし白丸で示されている。空格子点周囲の再結合ボンドの存在がみてとれる。

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、微視的同一性は全くなされていない。秋山は、多原子空孔の安定サイズ (魔法数) と微視的な原子構造を、密度汎関数法の局所密度近似、一般化勾配近似を用いて明らかにした。6 原子空孔、10 原子空孔が魔法数であり、緩和のパターンの特異性が解明された。また、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した。

この結果は、Berkeley で開かれた第 20 回半導体欠陥国際会議において、秋山によって口頭発表された。

(2) Si 結晶中のドーパント原子の拡散機構 (J.-W. Jeong、押山) (論文 [30, 31])

半導体の代表である Si に対するアクセプター原子の代表はボロンである。その拡散機構の解明と分布の制御は、デバイスのデザインにとって基本的に重要である。J. Jeong は、このボロン原子が Si 中の Si 格子間原子と対を作って拡散していくことを、密度汎関数法の局所密度近似および一般化密度勾配近似で見出した。またキャリアの捕獲により、荷電状態を変化させながら拡散すると、その活性化エネルギーは低下し、いわゆる再結合増速拡散現象が見られるはずであることを明らかにした。

【7】 炭素系新物質の物性

(1) 炭素ナノチューブの生成機構 (北村、押山)

炭素ナノチューブは魅力ある物性を有する新材料である。北村は、そのナノチューブの生成機構を明らかにすべく、チューブの端での炭素原子の吸着形態、端を経巡る拡散経路とそのエネルギー障壁を、transferrable tight binding 模型を用いて調べた。この計算により全エネルギーのランドスケープが得られた。一般的な傾向として、チューブ端での炭素原子の拡散障壁は、半導体表面での拡散障壁に比べて、かなり高いことが判明した。計算を密度汎関数法のレベルで行うこと、他の反応経路の探索、が今後の課題である。

(2) 圧力下のフラレン固体 (岡田、押山) (論文 [32])

C_{60} フラレンに圧力を加えることにより、新しい物性をもつ新物質の探索を理論的に行った。岡田、斎藤 (東工大)、押山は密度汎関数法計算により、20 GPa の圧力で、フラレン固体は 3 次元のフラレン・ポリマーとなること、このポリマーは一旦生成されると、常圧でも安定に存在すること、金属であること、を予言した。

(3) アルカリ土類金属原子ドーピングによるフラレン超伝導体

(梅本、斎藤、押山) (論文 [33])

梅本 (東工大)、斎藤 (東工大)、押山は、超伝導フラレン固体である $K_3Ba_3C_{60}$ と $Rb_3Ba_3C_{60}$ の電子構造を、密度汎関数法の局所密度近似で計算し、フェルミ準位での状態密度と超伝導転移温度との相関を明らかにした。アルカリ金属原子と C_{60} との軌道混成が、フェルミ準位付近の電

子構造を決定する大きな要素であることが判明した。この状況は最も有名な超伝導体 A_3C_{60} とは大きく異なる。

(4) ナノチューブにおける自由電子状態 (岡田、斎藤、押山) (論文 [34])

物が無い空間での1電子の固有状態は自由電子状態(平面波状態)である。もし内部に空間を有する物質があったとしたら、その空間に主なる振幅を持つ、自由電子状態に近い状態が固有状態となり得るであろう。しかも原子核からの引力ポテンシャルをその裾で感じることができれば、自由電子状態に近い束縛状態が可能となる。炭素ナノチューブは正にそうした内部空間を持つ物質である。岡田は、チューブのバンドル構造を考え、そこでの Nearly-Free-Electron (殆ど自由電子)状態の存在を密度汎関数法の局所密度近似計算で明らかにした。その殆ど自由電子状態の振幅は、原子層から約3 Å離れた地点に極大をもつこと、チューブの内側にも外側にも振幅をもつこと、などの知見が得られた。光励起などにより、このNFE状態に電子を注入することにより、光制御の電流が期待される。

(5) グラファイト状ヘテロシートにおける境界状態の予言とその特異性
(岡田、押山) (論文 [35])

中田恭子(現青山学院大)と故藤田光孝氏(当時物質工学系)とにより、ジグザグ状の端をもつグラファイトでは、端に局在したエッジ状態がフェルミ準位に出現し、ブリルアン域の一部で平坦な分散をもつ特異な性質をもつことが示された。今回岡田は、他のヘキサゴナル対象性をもつシート、BN, BC, BNCx, などに対して、密度汎関数法の局所密度近似を実行し、このエッジ状態はすべてのヘキサゴナル対象性を持つシートに共通の特質であることを見出した。さらにこれは端にのみ起こることではなく、異種原子との境界(Border)でも、その境界がジグザグ状であれば、生じることを発見した。この結果は、異種原子とのジグザグ境界を形成することにより、そしてその異種原子種を選ぶことにより、特異な性質をもつ状態(Border State)を所望のエネルギー位置に出現させ得る可能性を示唆している。そうした可能性のひとつとして、チューブによるナノ・ソレノイドの作成を提唱した。

【8】 新計算手法の開発

物質中での原子拡散の問題は、様々な現象での中心的素過程である。従来の密度汎関数法計算では、拡散の経路、活性化エネルギーを断熱ポテンシャル面の探索によつて求めた。しかし実際の実験とのより定量的な比較のためには、任意の温度での拡散係数の計算が望まれる。言い換えればそれは拡散種の安定配置と鞍点配置での自由エネルギー差の計算である。S. Jeong、J. Jeong、押山は、NEC基礎研究所 杉野修、Princeton 大学 Roberto Car との共同で、密度汎関数法のハミルトニアンを用い、自由エネルギー差をエンタルピーの熱力学積分で表し、熱力学平均を Molecular Dynamics シミュレーションで求める新計算手法を開発し、半導体中の自己拡散、半導体表面での飛来原子拡散に対して適用した。またいわゆる Car-Parrinello の動力学ではない通常の Newton の動力学で原子核の運動を扱う手法も、効率の観点から有利であることも予想され、現在詳細な検討が進行中である。

【9】 セラミックスの焼結に関する理論的研究 (田上) (論文 [36], 講演 [30])

セラミックスの主要な製造法の一つである焼結の理解において、初期焼結段階における粒界拡散と表面拡散により等大球状粒子間に形成されるネックの形状を調べることは基本的な問題である。

これについて以前からいくつかの仕事があったが、1995年に、ネックの表面の輪郭を表す非線型の支配方程式を幾何学的近似なしに解いて相似解を求め、それに基づいて数値計算を行う仕事が発表された。しかし、この相似解は線形化により求められたためにその適用範囲に疑問があったが、今回初めて、線形化なしに原方程式を直接解くことができ、得られた厳密なネックの輪郭を用いて初期焼結の解析を行った。

本年度より谷口 伸彦 助教授が広島大学より物性理論グループに着任した。以下は最近の彼の研究活動である。

【10】 メゾスコピック系・量子カオス系

(1) 量子カオス系における半古典近似の妥当性と破綻 (谷口) (論文[37])

半導体量子ドット系やナノストラクチャー系といった系の有限性や閉じ込め効果が重要な役割を果たす物質において、系からの応答が磁場の印加に伴いどのように変化するかという問題は、応用上興味ある問題である。また理論的には、量子カオス系における「半古典近似の妥当性と破綻」の問題として重要である。

量子ドットにおいて観測されているエネルギー準位間の反発現象は半古典近似により低エネルギーの領域まで正確に再現することはできない。が、ある種の応答(例えば光吸収など)を考えた場合には、半古典近似の結果が、その見かけ上の適応領域を越え正確である場合がある。これは種々の応答にはDOS 相関のモードと拡散モードが適当な重みに従って寄与していて、前者は非摂動的な効果を含むのに対し、後者の寄与には、ある状況下では、ほとんど非摂動的な効果がない事情による。実際、拡散系における半古典的近似(=弱局在摂動論)に現れる拡散モードについては、磁場のない系、および磁場の強い状況の双方において求めた摂動的な表式は、普遍領域では非摂動的にも正しいことが知られている。このような状況のもとでは、磁場をわずかに印加した時の磁場依存性も半古典近似のもとでほぼ説明できるのではないかとの期待が生じる。

本研究では、このような磁場依存性には、半古典的計算では捉えることのできない非摂動的な寄与が本質的に現れることを示した。ここで得られた結果は、今後量子ドットの応答の磁場依存性を論ずる際に、半古典近似の無分別な適用にたいして警鐘をならすものである。(B. Mehlig との共同研究)

(2) 量子ホール系のプラトー転移と離散的対称性 (谷口) (論文[38, 39], 講演[31, 32])

2次元ランダム系の量子相転移として、理論・実験の両面から最も良く調べられているものとして、量子ホール系のプラトー転移がある。が、その量子相転移の本質は依然十分な理解が得られていない。これまでのところ、実験や数値実験で得られている臨界指数を再現できる理論はこれまで得られていない。

量子ホール系の相図においては、磁束付加と複合ボゾン描像における有効ランダウ準位のシフトに対応する離散的対称性が、少なくとも近似的には存在する。更に興味深いことに、実験もこのような対称性の存在を支持している。この対称性は、数学的には、 $\Gamma_0(2)$ と呼ばれているもので、双対変換を拡張したモジュラー不変性の一種にあたる、無次元離散対称性であり、このような無次元対称性の存在から、様々な非摂動的な情報を引き出すことが可能なはずである。本研究では、繰り込み群関数が理想的に無次元離散的対称性を持つと言う仮定から、量子プラトー転移のどのような臨界的性質が説明できるか、研究を行っている。

(3) 2次元ランダム系の量子相転移と共形場理論 (谷口) (論文[40])

局在-非局在転移点近傍の臨界的性質を記述する有効場理論がどのようなものであるかは、現在明らかでない。一方、2次元平衡系の相転移の性質を調べるには、共形場理論による記述が大変有効であることが認識されているものの、2次元ランダム系に共形場理論をどのように適用すべきは自明ではない。また、乱れた電子系の非臨界的な性質は、超行列上の非線形シグマ模型という場の理論のモデルにより良く記述されていることが知られている。本研究では、2次元系において、局在-非局在(-局在)転移を記述する理論として、共形不変性をもつ超行列上の場の理論的模型を考え、2次元ランダム電子系の臨界的な性質に関する研究を行っている。

特に本年度は、転移点近傍においては、波動関数が臨界的になり、マルチフラクタル性を示すことが知られている。このマルチフラクタル性と共形場理論との関連を調べた。(Oxford 大学理論物理グループとの共同研究)

(4) 非エルミート量子力学系の2次元局在現象 (谷口) (講演 [33])

高温超伝導体では渦糸を銅酸化物面にある角度をもって導入することが可能であり、渦糸を記述する2次元有効的なボゾン模型には、磁場の平面に平行成分の効果が、一様な虚ベクトルポテンシャルの効果として現れたため、系は非エルミート系となる。また、柱状欠陥はランダムポテンシャルとして働く。このような非エルミート Anderson 模型は、通常とは異なり、たとえ一次元系においても、非エルミート性による局在-非局在転移が誘起され、従来とは様相が劇的に異なる。また、この非エルミート性を新しいプローブとして使うことにより、局在状態を調べることも可能となる。

状態密度の虚ベクトルポテンシャル依存性を調べることにより、系の局在状態を研究する手法は、特に1次元系において大きな成功を収めた。ところが、2次元以上の局在状態に関しては、状態密度の構造は極めて複雑になり、このような解析はこれまで成功していなかった。本研究では、2次元の tight-binding 模型を用いた数値計算を行い、その結果、虚ベクトルポテンシャルによるゲージ変換の破れから、2次元系における局在長が、定性的のみならず、かなり定量的にも評価され得ることを示した。(広島大学工学部 桑江常尚との共同研究)

< 論文 >

- [1] T. Arimitsu and N. Arimitsu: "Analysis of Fully Developed Turbulence in terms of Tsallis Statistics", *Phys. Rev. E* **61** (2000) 3237-3240.
- [2] N. Arimitsu and T. Arimitsu: "An Application of NETFD to the System of a Localized-Electron and Phonons", *Condensed Matter Physics* **3** (Lviv, Ukraine) (2000) 103-132.
- [3] T. Arimitsu and N. Arimitsu: "Tsallis Statistics and Fully Developed Turbulence", *J. Phys A: Math and Gen.* (2000) in press.
- [4] T. Arimitsu and N. Arimitsu: "Analysis of Fully Developed Turbulence by a Generalized Statistics", (2000) submitted.
- [5] Atushi Tanaka, "Semiclassical coherent state path integral around classically realizable trajectory", *J. Phys. A*, 投稿中
- [6] Y. Ohashi and S. Takada: Temperature dependence of *c*-axis Josephson plasma oscillation in high- T_c superconductors. *Phys. Rev. B* **61** (2000) 4276.

- [7] Y. Ohashi: Theory of Basov correlation between penetration depth and conductivity along the c -axis in high- T_c cuprate superconductors. *J. Phys. Soc. Jpn.* **69** (2000) 659.
- [8] Y. Ohashi and S. Takada: Collective phase oscillation in two-dimensional d-wave superconductors. *Phys. Rev. B* [投稿中].
- [9] Y. Ohashi: Local antiferromagnetism in high- T_c cuprate superconductors and the magnetic phases of U-based heavy fermion compounds. *Phys. Rev. B* **60** (1999) 15388.
- [10] Y. Ohashi: Nonmagnetic Impurity Effects on Spectrum of Antiferromagnetic Spin Fluctuations and Nuclear Spin-lattice Relaxation Rate in High- T_c Superconductivity. *J. Phys. Soc. Jpn.* [投稿中].
- [11] T. Yoshioka and Y. Ohashi: Numerical Renormalization Group Studies on Single Impurity Anderson Model in Superconductivity: A Unified Treatment of Magnetic, Nonmagnetic Impurities, and Resonance Scattering. *J. Phys. Soc. Jpn.* **69** No. 6 (2000).
- [12] 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** (1999) 2366.
- [13] H. Takahashi and D. S. Hirashima, "Effective Interaction and Superfluidity in Two-dimensional Liquid ^3He .", submitted to *J. Low Temp. Phys.*
- [14] K. Kubo, "Uniform susceptibility near an antiferromagnetic quantum critical point.", *Physica B* **281-282**, 414-416 (2000).
- [15] M. Katano and D. S. Hirashima, "Multiple-spin exchange in a two-dimensional Wigner crystal.", *Phys. Rev. B* **62** (2000), in press.
- [16] H. Ashizawa and D. S. Hirashima. "WKB calculation of multiple spin exchange in monolayer solid ^3He .", submitted to *Phys. Rev. B*.
- [17] S. Jeong, A. Oshiyama, "Complex Diffusion Mechanism of a Silicon Adatom on Hydrogenated Si(100) Surfaces: On terraces and near Steps" *Surf. Sci.* **433-435** (1999) 481-485.
- [18] S. Jeong and A. Oshiyama, "Energetics and Kinetics for Si-Ge Intermixing on Ge-adsorbed Hydrogenated Si(001) Surfaces" *Surface Sci.* **436** (1999) L666-L670.
- [19] 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* **60** (1999) R11269 - R11272.
- [20] S. Jeong and A. Oshiyama, "Behaviors of Si and Ge Adatoms on the H/Si(100) Surfaces with Single and Double Layer Steps" *Proc. 3'rd Int Symposium on Control of Semiconductor Interfaces*, (Karuizawa, Japan 1999) *Appl. Surf. Sci.* in press.
- [21] A. Oshiyama and S. Jeong, "Step Structures and Group IV Adatom Diffusion on Hydrogenated Si(100) Surfaces" *表面科学会誌* **20** (1999) 690-695.
- [22] A. Oshiyama, "First-Principles Calculations for Semiconductor Epitaxial Growth" *日本物理学会誌* **54** (1999) 954-961.

- [23] S. Okano and A. Oshiyama, "A New Identification of C-Type Defects on Si(100) Surfaces" *Surf. Sci.* (2000) submitted.
- [24] S. Okada and A. Oshiyama, "Ferromagnetic Electronic Structures of Ga Wires on Si(001) Surfaces" *Proc. Int. Symposium on Surface Science for Micro- and Nano-Device Fabrication* (Tokyo, 1999) *Jpn. J. Appl. Phys.* in press.
- [25] S. Okada and A. Oshiyama, "Nanometer Scale Ferromagnets on Semiconductors: Ga Wires on Si(100) Surfaces" *Phys. Rev. Lett.* (2000) submitted.
- [26] T. Akiyama and A. Oshiyama, "Magic Numbers of Multivacancy in Si and Its Hydrogen Decoration" *Proc. 20th Int. Conf. Defects in Semiconductors* (Berkeley, USA, 1999) *Physica B* **273-274**, (1999) 516-519.
- [27] T. Akiyama, Y. Okamoto, M. Saito and A. Oshiyama, "Multivacancy and Its Hydrogen Decoration in Crystalline Si" *Jpn. J. Appl. Phys.* **38** (1999) L1363-L1365.
- [28] T. Akiyama and A. Oshiyama, "First-principles Study of Multivacancy and Hydrogen Trapping in Silicon" *Phys. Rev. B* (2000) submitted.
- [29] M. Saito, Y. Okamoto and A. Oshiyama, "Vibration of Hydrogen Molecules in Semiconductors: Anharmonicity and Electron Correlation" *Proc. 20th Int. Conf. Defects in Semiconductors* (Berkeley, USA, 1999) *Physica B* **273-274**, (1999) 196-199.
- [30] J.-W. Jeong and A. Oshiyama, "Atomic and Electronic Structures of Boron Impurity and its Diffusion Mechanism" *Phys. Rev. B* (2000) submitted.
- [31] A. Oshiyama, "Microscopic Mechanisms of Atomic Diffusion" *応用物理* (The Japan Society of Applied Physics) **68** (1999) 1167-1170.
- [32] S. Okada, S. Saito, A. Oshiyama, "New Metallic Crystalline Carbon: Three-Dimensionally Polymerized C₆₀ Fullerite" *Phys. Rev. Lett.* **83** (1999) 1986-1989.
- [33] K. Umemoto, S. Saito and A. Oshiyama, "Electronic Structure of K₃Ba₃C₆₀ and Rb₃Ba₃C₆₀ Superconductors" *Phys. Rev. B* **60** (1999) 16186-16191.
- [34] S. Okada, A. Oshiyama and S. Saito, "Nearly-Free-electron States in Carbon-Nanotube Solids" *Phys. Rev. B* (1999) submitted.
- [35] S. Okada, M. Igami, K. Nakada, and A. Oshiyama, "Border States in Hetero-Sheets with Hexagonal Symmetry" *Phys. Rev. B* (2000) submitted.
- [36] Y. Tagami: "Precise Shape Function for Interparticle Necks Formed During Solid-State Sintering" *Ceramic Trans., Amer. Ceramics Soc.* (2000) to appear.
- [37] B. Mehlig and N. Taniguchi, "Fluctuations of expectation values in Chaotic Systems and Time-reversal Symmetry Breaking", *Physica E* **4**, 316-322 (1999).
- [38] N. Taniguchi, "Nonperturbative Renormalization Group Function for Quantum Hall Plateau Transitions Imposed by Global Symmetries" (cond-mat/9810334).

- [39] N. Taniguchi, "Toward a Nonperturbative Beta-function in Quantum Hall Effect: RG flows compatible with Law of Corresponding States", *Ann. Phys. (Leipzig)* **8**, 257–260 (1999).
- [40] M. J. Bhaseen, I. I. Kogan, O. A. Soloviev, N. Taniguchi and A. M. Tsvelik, "Towards a Field Theory of the Plateau Transitions in the Integer Quantum Hall Effect", submitted to *Nucl. Phys. B (cond-mat/9912060)*.

< 学位論文 (博士) >

- [1] 吉岡 智樹: "Numerical Renormalization Group Study on Localized Excited States around an Impurity in Superconductivity" (2000) 3月.
- [2] 長井 健太郎: "Study of the Double Exchange Interaction in Infinite Dimensions" (2000) 3月.

< 単行本、双書 >

- [1] 本池 巧, 有光敏彦:
「カオスとトポロジー」
培風館 1999, pp.224 (ISBN4-563-00277-1 C3041)
- [2] 押山淳, "水素化 Si(100) での Si アドアトムの吸着と拡散", in 「自己組織化プロセス技術」
(培風館、1999年、ISBN4-563-03620-X) p59 - p69.

< 紀要等 >

- [1] 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* **72-3** (1999-6) 361–371.
- [2] T. Arimitsu: 「Migration of Unstable Vacuum for Dissipative Systems」*京都大学数理解析研究所講義録 [RIMS Report]* **1099** (1999) 70–95.
- [3] 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* **73-4** (2000-1) 750–761.
- [4] Y. Endo and T. Arimitsu: 「Quantum Nondemolition Measurement of Photon Numbers by a Dissipative Kerr Medium」*物性研究* **73-4** (2000-1) 762–774.
- [5] 印出井 努, 有光敏彦: 「A Theoretical Study of Shear-Thickening Behavior in Physical Gel」*物性研究* **73-4** (2000-1) 775–788.
- [6] 有光敏彦, 有光直子: 「非示量性 Tsallis 統計による発達乱流の解析」第 10 回統計物理学研究会 研究報告集 (2000) 120–127.
- [7] 有光敏彦, 有光直子: 「Tsallis 統計と乱流」九州大学応用力学研究所 共同研究報告 (2000) in press.

- [8] 有光敏彦, 有光直子: 「乱流と Tsallis 統計」統計数理研究所共同研究レポート (Statistical Theory of Fluid Turbulence and its Application) 129 (2000) 6-29.
- [9] T. Arimitsu and N. Arimitsu: 「An Analysis of Fully Developed Turbulence in terms of Tsallis Statistics」物性研究 (2000) in press.
- [10] T. Motoike and T. Arimitsu: 「Chaos and Topology」物性研究 (2000) in press.

< 講演 >

- [1] T. Arimitsu: 「Can the Framework of Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics Get its Heart?」Ilya Prigogine Center for Statistical Mechanics and Complex Systems, 1999年4月, University of Texas at Austin, U.S.A.
- [2] 本池 巧, 有光敏彦: 「標準テンプレートと原始テンプレート」日本物理学会, 1999年9月, 岩手大学
- [3] 印出井努, 有光敏彦: 「物理ゲルにおける Shear-Thickening 現象の解析」日本物理学会, 1999年9月, 岩手大学
- [4] 有光敏彦, 有光直子: 「マルチフラクタルと非 Gibbs 統計に基づいた発達乱流の解析」日本物理学会, 1999年9月, 岩手大学
- [5] T. Arimitsu: 「Can Quantumness be an Origin of Dissipation?」Ilya Prigogine Center for Statistical Mechanics and Complex Systems, 1999年11月, University of Texas at Austin, U.S.A.
- [6] T. Arimitsu and N. Arimitsu: 「An Analysis of Fully Developed Turbulence in terms of Tsallis Statistics」(Invited Talk) The 8th Symposium on Non-Equilibrium Statistical Physics, 1999年11月, University of Tsukuba.
- [7] T. Motoike and T. Arimitsu: 「Chaos and Topology」The 8th Symposium on Non-Equilibrium Statistical Physics, 1999年11月, University of Tsukuba.
- [8] 有光敏彦, 有光直子: 「Tsallis 統計と乱流」(招待講演) 乱流現象とその周辺, 1999年12月, 九州大学応用力学研究所
- [9] 有光敏彦, 有光直子: 「Analysis of Turbulence by a Statistics based on Non-Extensive Entropy」量子情報をその周辺分野の解析的研究, 2000年1月, 京都大学数理科学研究所
- [10] 有光敏彦, 有光直子: 「乱流と Tsallis 統計」(招待講演) 乱流の統計理論とその応用, 2000年2月, 統計数理研究所
- [11] 有光敏彦, 有光直子: 「乱流」(招待講演) 非加法的統計力学の研究会 —Tsallis 統計の可能性—, 2000年3月, お茶の水大学
- [12] 田中篤司: “量子多成分系の半古典論” 有限量子系の新しい展開, 京都大学, 1999年6月

- [13] 田中篤司: “半古典 coherent state 経路積分の実軌道に関する展開” 日本物理学会秋の分科会, 岩手大学, 1999年9月
- [14] 田中篤司: “近似的な弱値としての複素古典軌道” 日本物理学会春の分科会, 関西大学, 2000年3月
- [15] 大橋洋士: 「酸化物高温超伝導 c 軸方向におけるジョセフソンプラズマの理論的研究」 第6回田中シンポジウム 1999年7月 浜名湖国際頭脳センター.
- [16] 大橋洋士、高田慧: 「銅酸化物高温超伝導におけるジョセフソンプラズマの理論的研究」 日本物理学会 1999年9月 岩手大学.
- [17] 大橋洋士: 「酸化物高温超伝導における集団位相励起」 基礎理論関連動向調査研究会 2000年2月 金属材料技術研究所.
- [18] 大橋洋士: 「銅酸化物高温超伝導における非磁性不純物による反強磁性的スピン揺らぎの増強効果」 日本物理学会 2000年3月 関西大学.
- [19] 吉岡智樹、大橋洋士: 「アンダーソン模型を用いた、超伝導体中における不純物周囲の束縛状態の数値繰り込み群による研究」 日本物理学会 2000年3月 関西大学.
- [20] 寺尾允一、大橋洋士: 「銅酸化物高温超伝導体における c 軸伝導率の半導体的振る舞いの理論的研究」 日本物理学会 2000年3月 関西大学.
- [21] K. Kubo and D. S. Hirashima, “Effect of Stripe Charge Fluctuations on the One-electron Spectral Function”, Yamada Conference on Strongly Correlated Electron Systems, Nagano, Aug. 24-28, 1999.
- [22] K. Kubo, “Uniform susceptibility near an antiferromagnetic quantum critical point”, Yamada Conference on Strongly Correlated Electron Systems, Nagano, Aug. 24-28, 1999.
- [23] 芦沢久幸、平島大、 “グラフィイト上に吸着された2次元固体ヘリウム3における多体交換相互作用”, 日本物理学会分科会、関西大学、3月22日-25日、2000.
- [24] (invited) A. Oshiyama, “Mechanisms of Semiconductor Epitaxial Growth: Approach from the First-Principles Calculations” NCCG-30 (Japanese Association for Crystal Growth), (Fukuoka, Japan, 1999).
- [25] (invited) J. Jeong and A. Oshiyama, “Microscopic Mechanisms of B Diffusion in Si” 2'nd Korean-Japan Joint Workshop on Electronic Structure Calculations (Seoul, 1999).
- [26] S. Jeong and A. Oshiyama, “Behaviors of Si and Ge Adatoms on the H/Si(100) Surfaces with Single and Double Layer Steps” 3'rd Int Symposium on Control of Semiconductor Interfaces, (Karuziawa, Japan 1999).
- [27] (invited) A. Oshiyama, “Ga Wires on Si(100) Surfaces: Possible Ferromagnets on Semiconductors” 5th Symposium on the Physics and Application of Spin-related Phenomena in Semiconductors (Sendai, Japan, 1999).
- [28] T. Akiyama and A. Oshiyama, “Magic Numbers of Multivacancy in Si and Its Hydrogen Decoration” 20th Int. Conf. Defects in Semiconductors (Berkeley, USA, 1999).

- [29] M. Saito, Y. Okamoto and A. Oshiyama, "Vibration of Hydrogen Molecules in Semiconductors: Anharmonicity and Electron Correlation" 20th Int. Conf. Defects in Semiconductors (Berkeley, USA, 1999).
- [30] Y. Tagami: 「 Precise Shape Function for Interparticle Necks Formed During Solid-State Sintering」 JFCC International Workshop on Fine Ceramics 2000, 2000年3月 名古屋国際センター
- [31] N. Taniguchi, "Toward a Nonperturbative Beta-function in Quantum Hall Effect" CREST workshop, July 1999 (Komaba, Tokyo).
- [32] N. Taniguchi, "Quantum Field Theories for Disordered Electronic Systems and quantum Hall Transitions" KEK workshop, March 2000 (KEK, Tsukuba).
- [33] 谷口伸彦、桑江常尚、Imaginary vector potential による2次元局在長の評価 2000年3月日本物理学会 (関西大学)