

VI. 物性理論グループ

教授	高田 慧、久保 健、押山 淳
助教授	有光 敏彦、平島 大
講師	田上 由紀子
助手	大橋 洋士、郡司 茂樹、桃井 勉
準研究員	斎藤 健 (9月転出)、田中 篤司 (11月着任)
学振ポスドク	Sukmin Jeong
大学院生	15名

【1】 密度汎関数法による全エネルギー電子構造理論 (押山、郡司、Jeong)

電子同士の相互作用を密度汎関数法の局所密度近似ないしは一般化密度勾配近似で扱い、実際の物質の原子構造とそれに伴う電子的性質を調べる研究が今年度も進められた (解説論文として 1,2)。

(1) 半導体エピタキシャル成長の機構 [論文 3-5、講演 1-4]

結晶成長はある種の複雑現象であり、特に薄膜のエピタキシャル成長は今日的意義も大きい。Jeong と押山は典型的半導体である Si の(100)面に注目し、エピタキシャル成長中では常に水素原子が成長表面に存在していることに着目し、水素で被覆された表面上での Si 飛来原子の吸着と拡散を局所密度近似で調べた。その結果、[1] 飛来原子は表面水素原子を置換して吸着し、その置換過程にはエネルギー障壁が存在しないこと、[2] 吸着した Si 飛来原子は水素原子の捕獲・放出、さらには下地 Si 原子との交換を伴う、複雑な拡散機構により原子移動を行うこと、[3] 拡散のエネルギー障壁は水素被覆率に敏感であること、が明らかになった。この計算結果は、実験的に知られている薄膜のモフォロジーの水素被覆依存性を説明する。押山はこの内容を、*Int. Workshop on Large-Scale Quantum Simulations: Total Energy and Force Methods* 及び *APCTP/ICTP Joint International Conference on Highlights in Condensed Matter Physics* で招待講演した。

(2) ダイヤモンド(111)表面でのフォノンのソフト化 [論文 6]

押山は斎藤峯雄、宮本良之 (NEC 基礎研究所) と協同でダイヤモンド(111)表面の原子再構成を局所密度近似および一般化密度勾配近似で調べた。この表面は $2 \times 1\pi$ ボンド構造を取ることが知られている。この π ボンド構造は 1 次元的な鎖構造なので、1 次元系に特徴的なパイエルス不安定性、及び電子間相互作用による変調、が絡み合っただ安定構造が決まっていると考えられ、実際理論・実験の間で論争が繰り広げられてきた。今回の計算で、パイエルス転移的な原子のダイマー化再構成、バックリング再構成は無視できるほど小さいことが判明した。その代わりに表面フォノンモードが大きくソフト化することが見出され、実験的な検証が期待される。

(3) 二酸化珪素中の酸素空孔の双安定性とリーク電流 [論文 7-9、講演 5-6]

現在の半導体テクノロジーを支えているのは珪素 (Si) といわれているが、実態は Si ではなくその良質な酸化膜 (絶縁体) である SiO_2 である。しかし近年のデバイス微細化に伴い、この SiO_2 の良質絶縁体神話にも陰りが見られる。一方科学的には、 SiO_2 は共有結合性物質とイオン性物質とをつなぐ橋渡しであり、非金属の物性を統一的に理解する上で興味深い。押山はこの SiO_2 (実際は最も安定な結晶型である α クォーツ) 中の欠陥に対して局所密度近似による計算を行った。その結果、[1] 酸素空孔の生成エネルギーが固有欠陥中では最も低く、したがってこの酸素空孔が重要であること、[2] 酸素空孔周囲の原子配置には 2 種類の配置 (最近接 Si がボンドを形成した dimer 構造と最近接 Si のひとつが大きく、格子間位置に移動した puckered 構造) が存在し、双安定性を示すこと、[3] その双安定性は荷電状態によって大きく変化し、したがってキャリア捕獲をトリガーとする欠陥周囲の構造変化が期待されること、[4] 欠陥周囲の構造が荷電状態に依存することから、この系は P.W.

Anderson のいう negative-U の系であること、が判った。結果は日本物理学会シンポジウム講演でも発表された。さらにNECグループとの協同で、この酸素空孔がパーコレーション機構によるリーク電流を生じさせることを示した。

(4) 半導体中の水素分子の微視的同定 [論文 10,11、講演 7]

水素は半導体中に存在する最も普通の不純物であり、その微量な水素が半導体そのものの物性を大きく左右する。最近筑波大学物質工学系村上研究室における Ramann 散乱実験により、Si 中の水素分子の存在が初めて確認された (Murakami et al., Phys. Rev. Lett. **77**, 3161 (1996))。しかし測定された Si 中の水素分子の振動数は、気相中のそれと殆ど等しく、物議を醸している。その後マックスプランク研究所のグループは GaAs での水素分子の存在を確認し、低周波への振動数の変化を見いだした。押山は岡本隠治、斎藤峯雄 (NEC 基礎研究所) と協同で、密度汎関数法による半導体中の水素分子の計算を実行した。局所密度近似、一般化密度勾配近似のいずれの計算でも、Si あるいは GaAs 中の水素分子の振動数は大きく低周波数側にシフトする。更に量子化学のアプローチを試み、クラスター計算とはいえ、電子相関効果について configuration interaction 法とほぼ同じ精度を有する hybrid-density-functional 法を用いて、やはり水素分子の振動数は低周波側にシフトする事を見いだした。半導体中の水素分子の形態についての現時点での第一原理計算からの最終結果と考えられると同時に、密度汎関数法における電子相関の考慮の程度についての重要な知見が得られた。この結果は日本物理学会シンポジウム講演でも発表された。

(5) 希土類元素硫黄酸化物の電子構造と固有欠陥 [論文 12,13、講演 8]

希土類元素硫黄酸化物はH社のカラーTVの製品名に使われていることでわかるように、蛍光物質として半世紀以上も使われてきているが、その物性、特にバンド構造、欠陥の引き起こす電子状態については、五里霧中の状況である。三上昌義 (三菱化学研究所) は押山と協同で、典型的な硫黄酸化物である YO_2S について局所密度近似による電子構造計算を実行した。その結果、[1] この物質が間接半導体であり、バンドの異方性は光学スペクトルの異方性を良く説明すること、[2] p型n型を問わず、空孔型欠陥の生成エネルギーが小さく、したがってその制御は肝要であること、がわかった。イットリウム原子の d 軌道に起因する多配位の構造とあわせて、希土類硫黄酸化物の特異性が明らかになった。

[2] タイト・バインディング模型による電子構造計算 (北村、秋山、渡邊、押山)

密度汎関数法計算は実際の物質の基底状態について、極めて正確な答えを与えるが、計算コストは膨大である。一方タイト・バインディング模型はその簡便さゆえに、多数の原子群を比較的容易に扱える。模型のパラメータを密度汎関数法による主要結果を再現するようを選び、ある程度の定量的正確さを持ったタイト・バインディング模型 (transferable tight-binding model) を構成することも可能である。また計算時間を原子群の個数 N に比例するような、新しい計算スキームの開拓も盛んである。これについては渡邊栄一 (現D2) が精力的に取り組んでいる。昨年度はこの transferable tight-binding model により、興味深い二つの計算が実行された。

(1) 曲がったグラファイトの構造と電子状態 [論文 14、講演 9、修士論文 1]

1985年のフラレン、1992年のナノ・チューブの発見を契機に、炭素系物質の豊富なヴァリエティへの興味が増してきている。フラレン、チューブなどの特異な形状の生成機構の解明に向けて、北村、押山は、曲率をもったグラファイトの原子構造と電子状態を計算した。これは実際にAFM等で見られている曲がったグラファイトの微視的構造を調べる目的もある。計算の結果、[1] グラファイトは鋭角的に曲げることはできず、原子間反発力により、曲げた箇所でも丸みが生じ、また原子スケールでのさざ波的構造が出現すること、[2] 曲がったグラファイトの電子構造は、対称性の低下と s p 軌道混成の変化により、フェルミ準位付近にギャップを生じること、が明らかになった。後者の結果は、当学系福山研究室での低温STSの実験結果を説明するものと、考えられる。

(2) Si 結晶中の多原子空孔の魔法数 [論文 15、講演 10、修士論文 2]

典型的な半導体である Si 中の原子空孔については、何十年にも渡って多くの研究が行われているが、原子空孔が集積した多原子空孔については、その性質は殆ど判っていない。またこの多原子空孔は負のクラスターともみなせ、その安定サイズ（魔法数）があるのではないかと推測される。秋山、押山は、Si 中の n 個の単原子空孔が集まった多原子空孔 V_n について、全エネルギー計算を行った。その結果 $n = 6, 10, 14, 17, 22, 26, 35$ が安定なサイズであり、負のクラスターの魔法数であることを突き止めた。この安定性には、原子空孔によって生じたダングリング・ボンドの数、及び周囲の原子の対生成原子緩和の二つが、重要であることがわかった。

【3】 2次元フェルミ粒子系の磁性（平島） [論文 16-18、講演 11-14、修士論文 3]

平島と高橋は、自由空間中のフェルミ粒子系の帯磁率の波数依存性に対する相関効果を摂動論を用いて研究した。その結果、温度 $T = 0$ で非解析的な寄与が存在し、例えば、長波長の極限で帯磁率は波数に比例して変化することがわかった。

高橋は、さらに進んで、同じ問題を量子モンテカルロ法および高次摂動論を用いて研究した。計算の便利のため、計算は、ハバード模型に対して行なわれているが、格子の影響をなくするために希薄極限に限っている。この計算の結果、相関効果によって、帯磁率の波数依存は“強磁性的”になる、すなわち、波数 $q = 0$ が極大になることがわかった。この結果は、2次元液体³Heにおいても、3次元の場合と同じく、スピン揺らぎを媒介とした引力によって p 波超流動が実現する可能性があることを示唆する。

電子ガスは希薄極限において結晶化する（ウイグナー結晶）。片野と平島は、最近の学習院大学グループの実験に触発されて、2次元ウイグナー結晶における多体スピン交換相互作用の大きさを WKB 法を用いて計算することを試みた。その結果、2次元ウイグナー結晶においても（固体³Heの場合と同じく）、3体以上の交換相互作用が、2体交換相互作用にくらべて無視できないことがわかった。特に、密度が小さくなるに従って3体交換が支配的となり、系は強磁性的になる。この研究は、片野真史の修士論文となっている。

【4】 金属強磁性の発現における軌道縮退の効果（桃井、久保） [論文 19、講演 15-17]

最近の研究により、単1バンドのハバード模型では強磁性が起こりづらいことがわかってきている。強磁性を示す実際の多くの系は軌道の縮退を含んでおり、軌道縮退の効果が重要と思われる。そこで、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。

1. 格子次元無限大の極限で2バンド・ハバード模型の基底状態を数値対角化法を用いて調べた。その結果、軌道縮退の効果で、金属強磁性が起こりうる事がわかった。金属強磁性は、電子密度が格子点当たり1以上の時に現れるが1以下の場合には現れなかった。この結果は、軌道縮退した系において強磁性を引き起こす原因として提案されていた“Double Exchange Mechanism”が、この系において実際に働いている事を示している。
2. 1次元格子上の2バンド・ハバード模型を密度行列繰り込み群の方法を用いて調べ、強磁性出現の条件を調べた。この研究は98年度に継続する。（大学院生・坂本晴美との共同研究）
3. 二重交換相互作用系における電子状態を、近似的な1電子グリーン関数を求めることによって調べ、またグリーン関数を用いて電気伝導率を計算した。（Imperial College, D.M. Edwards, A.P. Green との共同研究）

【5】 2次元固体ヘリウム3の磁性（桃井、久保） [論文 20-24、講演 18-22]

グラファイト表面上の固体ヘリウム3薄膜や、半導体界面における電子のウイグナー結晶等の量子

固体では、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く働いていることが近年明らかになって来ている。これらの系の磁性における多体交換相互作用の効果を調べる為に、三角格子上の4体交換相互作用を持つスピンモデルを調べた。その結果、4体交換相互作用が強い場合に新しいスピン構造が基底状態に現れることを発見した。

まず、4体と2体の相互作用が強く競合する領域では、量子揺らぎの増強により、量子的な無秩序相が現れる可能性が高い事が示された。この領域は、固体³He薄膜で従来観測されてきた低密度領域に対応すると考えられる。これは、2体と4体の交換の競合によるフラストレーションによって量子揺らぎが増強された結果と考えられる。また、この相では、磁場をかけると磁化曲線の磁化1/2のところにプラトーが現れる事がわかった。この1/2-プラトーの出現は、4体交換相互作用固有の現象である。

また、4体交換相互作用が強い領域では、スカラー・カイラル秩序を持つ状態が基底状態に現れる事を予言した。この系は完全なスピン対称性を持つ2次元系であるにも関わらず、有限温度でカイラル秩序を伴う相転移を起こし得る。これはスピンのSO(3)対称性を持つ2次元の現実的なモデルでカイラル対称性の破れが実現する初めての例である。古典系をモンテカルロシミュレーションで調べ、有限温度で相転移が起こり、この温度以下でカイラリティの秩序が出来ることを確かめた。また、相転移の臨界指数が2次元イジングモデルの値から大きくずれていることが判った。

【6】 量子スピン系の理論的研究：

一般的S=1/2 2重スピン鎖における Haldane 状態と Dimer 状態 (高田)

[論文 25,26]

近年、一次元S=1/2量子スピン系の中で、その基底状態が励起エネルギーギャップを持ちスピンの長距離秩序を持たない系が、高温超伝導の発現機構とも関連して、理論的にも実験的にも勢力的に研究されている。このような状態は、スピン長距離秩序を持たないが、ストリング秩序を持たないことで、特徴づけられる。我々は、ストリング秩序をスピン秩序に変えるS=1のHaldane状態に対して考案された変換をS=1/2系に拡張した変換を提起し、変換された系に変分法を適用することにより、Haldane状態やDimer状態の基底状態や励起状態を有効に記述し得ることを示してきた。我々は、上記変分法と数値的対角化法を用いて、 Δ chain(論文25)、一般的な2重スピン鎖(論文26)に関する研究を行った。基底状態に関しては、各々の状態に関する二つのストリング変数の計算を行い、Dimer相とHaldane相の区別をおこない、fully-frustratedな対称点で、スピンパイエルス系と同様に、ダイマー不安定性が存在することを明らかにした。また、広い領域でスピンギャップを与える最低励起状態がkink-antikink束縛状態であることを明らかにし、変分法によるその解析的一般的表式を得た。更に、ダイマー的状態かハルデン的状態かで、帯磁率の温度変化が、特徴的振る舞いをすることを示し、このような系と考えられているKCuCl₃の解析を行い、ダイマー的であることを明らかにした。(東北大学工学部助手中村統太氏、東京工業大学理学部講師岡本清美氏との共同研究)

【7】 超伝導状態の研究

(1) 超伝導体中における集団励起 (Carlson-Goldman モード, プラズマ, ジョセフソンプラズマ) の研究 (大橋、高田) [論文 27-30、講演 23,24]

超伝導状態に見られる集団励起 (Carlson-Goldman (CG) モード, プラズマ, ジョセフソンプラズマ) を研究, 観測可能性, 不純物, 系の次元性の効果を調べた. [1] CG モードはダーティな系であれば酸化物超伝導のような2次元性の強い系であっても観測可能である, [2] 低次元系ではプラズマ周波数が非常に低くなりうる為, CG モードの極とプラズマのそれが結合するようになるが, 実際の観測では, そのような状況下でも2つのモードが別々に観測される, ことを理論的に明らかにした. 更に, ジョセフソンプラズマについても微視的立場から研究, 現象論に頼ることなく, 観測されているプラズマ周波数の温度変化を説明できることを示した.

(2) 異方的超伝導界面における自発表面電流の微視的研究 (大橋) [講演 25、修士論文 4]

異方的超伝導界面において理論的にその存在が提案されている、全電流有限の自発表面電流を実空間超伝導理論を用いて研究、「熱力学的に安定な状態は全電流0でなくてはならない」とするブロッホの定理との不一致の原因を調べた。その結果、[1] 自発表面電流が存在する場合、それを打ち消すようにBCS超流動が生じた方がエネルギー的に安定である、[2] 最も安定な状態はこのBCS超流動によって全電流が0となった時である、[3] ただし、その状態は局所的には電流は有限となっている、ことを明らかにした。このことから全電流有限の状態が安定に得られていたのはBCS超流動が考慮されていなかったことによるものであることが明らかとなった。(院生草間 喜克氏との共同研究)

【8】 Sc結晶における核磁気秩序の理論的研究 (大橋, 久保, 高田) [講演 26,27、修士論文 5]

極低温において観測されたSc結晶の核磁気秩序(フェリ磁性)を研究、この秩序状態が実際に実現可能であるか否かを理論的に調べた。モンテカルロシミュレーションにより、この系において実現可能な核磁気秩序のタイプを研究、結果、実験を説明しうるフェリ磁性が存在することを明らかにした。更に、核の間にはたらく核双極子相互作用、RKKY相互作用を微視的に評価、これら相互作用が実際にどのような状態を実現させるか調べた。その結果、接触型のHyper-fine相互作用を考える範囲では、理論的には完全強磁性が予想されることを示した。(院生鐘ヶ江 義晴氏との共同研究)

【9】 重い電子系におけるMicromagnetismの理論 (大橋) [講演 28,29]

URu₂Si₂において観測される、転移温度において大きな比熱の飛びを生ずるも、微小な磁気モーメント($\sim 0.02\mu_B$)しか発生しない反強磁性状態(Micromagnetism)を理論的に研究した。この秩序状態を記述するオーダーパラメータとして波数空間においてその符号を変えるSDW秩序パラメータを提案、それにより、実験結果を説明できることを示した。すなわち、SDW秩序パラメータにより生じたエネルギーギャップの結果、比熱、帯磁率には磁気転移に伴う大きな異常が現れる。しかし、磁気モーメント自身は秩序パラメータを波数空間内で足し上げたものである為、系の対称性が高い場合、秩序パラメータのプラス、マイナスが相殺され、全体として0となる。他方、フェルミが変形するとこのプラス、マイナスの相殺が不完全となり、微小な磁気モーメントが生じる。更に、このような、「異方的」なSDWの実現可能性について研究、現実的なパラメータ(クーロン相互作用の強さ)の範囲内で十分実現可能であることを示した。(京都大学池田 浩章氏との共同研究)

【10】 非平衡散逸系の統計物理 (有光, 斎藤) [論文 31-39、講演 30-49、紀要等 1-7]

量子光学、巨視的量子現象の関わる固体物理、物性物理、化学物理、量子情報理論など幅広い分野でその重要性が認識され、近年その研究が急速に盛んとなりつつある「量子コヒーレンスと散逸」に関わる問題は、その多くが「非平衡状態の量子性と散逸」にかかわる現象である。これらの現象を一貫して扱うことのできる非平衡開放系を扱う正準演算子形式の場の量子論、Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics(NETFD)、の整備・拡充を進めている。この体系では、「量子揺らぎ」と「熱揺らぎ」を「演算子代数とその表現空間の設定」という場の量子論における基本的立場によって扱う。例えば、散逸過程を伴う系の時間発展は、「ある種の粒子対の真空への凝縮」として捕らえることができる。

今年度は、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が呈するマルチンゲール演算子の「自由度」に関する考察を中心に研究を進めた。この「自由度」とは、同一の量子マスター方程式を与える確率微分方程式が、マルチンゲール演算子の違いにより非加算無限個存在することに由来する。この事実は、NETFDの体系によりはじめて明らかにされたことであり、その物理的意味付けを探ることが重要な課題である。量子系における連続測定の問題(霧箱中に宇宙線粒子がつくる飛跡の問題)をNETFDにおける確率過程の手法により扱い、マルチンゲール項と非破壊測定の間に関連を探求し、以下の興味深い解釈に達した。マルチンゲール演算子の違いは、測定装置と注目している系との相互作用の違いによるものである。したがって、如何なる物理量をどのようにして測定

するかによって、マルチンゲールが決まるのである。つまり、マルチンゲールに非加算無限個のオプションがあるということは、測定装置にそれだけの「自由度」があることを意味し、理論的枠組みとしてはこの上もなく好ましいことである。ちょうど、真空の自発的対称性の破れに関連して、非加算無限個の非同値表現が存在することが、自然界の「相」を記述するのに本質的であったのと似通った事情が浮き彫りにされた訳である。「ある種の粒子対の真空への凝縮」によって非平衡散逸系の時間発展（不安定真空の時間発展）が記述できることを積極的に取り入れ、「何らかの対照性の破れとして散逸を捕らえることができるか？」という問題を、先の「自由度」の存在も踏まえた上で、さらに追求している。

【11】 カオス

(1) 散逸系のカオス（有光） [論文 40、講演 50、紀要等 8,9]

周期倍分岐軌道のトポロジカルな性質（各軌道の捻じれを表わす「局所交差数」、軌道間の絡みを表わす「絡み数」など）を用いて周期倍分岐を特徴付けるのに成功し、さらにストレンジ・アトラクターを構成している不安定周期軌道の「シリーズ」を特定することによるカオス軌道の特徴づけを進めている。それは「テンプレート」を特定することにより可能となる。テンプレートとは、ストレンジ・アトラクターを構成しているあらゆる不安定周期軌道やそれらの間のトポロジカルな性質（ひねり具合や絡み方など）を表現するものである。

今年度は、流れ場の局所的情報により作られたテンプレート模型の非局所的有効性を探るため区分線形系を解析的に扱い、実際の流れ図を調べた。また、二文字の記号力学では記述できない周期倍分岐軌道の解析も進めている。

(2) 量子多成分系の半古典論（田中） [論文 41、講演 51,52]

量子多成分系は外部自由度と内部自由度から構成される量子複合系です。量子多成分系では、外部自由度が“古典的な”自由度である一方、この古典的な自由度が量子的な内部自由度と相互作用することで、量子的に絡み合い、“非古典化”していきます。この非古典化の様相の骨組みを、外部自由度についての半古典論を用いて記述することを試みました。特に本研究では、外部自由度の半古典論として、Feynman 核の coherent state path integral 表示の定常位相評価を用いました。このとき、内部自由度からの量子振動の影響を外部自由度が被ることで現れる新種の Phase Space Caustics (PSCs) を見出しました。この PSC が起因となって外部自由度の量子干渉が発現します。すなわち、外部自由度は名実ともに非古典化します。一方、外部自由度の chaos 動力学が内部自由度の量子振動を incoherent にする現象を、新種の PSCs を用いて半古典的に議論しました。

【12】 量子論における部分系の概念の研究：断熱表示の一般論（田中） [講演 53]

量子論では、系を部分(要素)から構成されるものとして記述することで、分離不能性が発現します。分子を構成する原子核と電子のように、部分系間に力学的な相互作用がある場合、部分系間の量子相関の議論において、“核”と“電子”という部分系の特定が自明ではなく、曖昧さが入りこむ余地が現れます。これに対して、部分系を特定することを一般的に議論するため、量子系の「分割」という概念を導入しました。分割は、作用素代数で表現すると、全系の作用素を部分系に割り振る方法です。(例えば、分子の中で \hat{P} は核の作用素であり、 \hat{p} は電子の作用素であるといったこと。) 分割の応用例として、分子系の断熱表示の一般論を与えました。

【13】 外国人のための科学・技術日本語のカリキュラム（田上） [講演 54、紀要等 10]

筑波大学において14年間にわたって構築してきた私の上記のカリキュラムは、系統的な専門日本語教育の中に綿密に日本の伝統文化を取り入れたデザインが他に類を見ない。このため、今回、異文化コミュニケーションのデザインを探る、(社)人工知能学会 第34回ヒューマンインターフェー

スデザイン研究会において招待講演を行った。

< 論文 >

1. 押山淳, “シリコン結晶中の原子空孔” 日本応用物理学会誌 66 (1997) 678-684.
2. 押山淳, “半導体表面の成長機構と第一原理計算” 表面科学19 (1998) pp41-146.
3. S. Jeong and A. Oshiyama, “Adsorption and Diffusion of Si Adatom on Hydrogenated Si(100) surfaces” Phys. Rev. Lett. 79 (1997) 4425-4428.
4. S. Jeong, A. Oshiyama, “Novel Diffusion Mechanism of Si Adatom on H-terminated Si(100) Surfaces” submitted to Phys. Rev. B
5. S. Jeong, A. Oshiyama, “Barrierless Bond Breaking and Exchange Diffusion on Si(100)-H” 4'th Int. Sympo. on Atomically Controlled Surfaces and Interfaces” (Tokyo, October 1997) Applied Surface Science (1998) in press.
6. M. Saito, A. Oshiyama, and Y. Miyamoto, “Atomic Structure and Phonon in the π bonded chain of the clean diamond (111) surface” Phys. Rev. B 57 (1998) R9412-R9415.
7. A. Oshiyama, “Bistability of Oxygen Vacancy in Silicon Dioxides” Proc. 19th Int. Conf. Defects in Semiconductors (Portugal, 1997, Trans Tech Pub) pp1479-pp1484.
8. A. Yokozawa, A. Oshiyama, Y. Miyamoto and S. Kumashiro, “Oxygen Vacancy with Large Lattice Distortion as an Origin of Leakage Currents in SiO₂” IEDM Tech. Dig., 1997 pp703-pp706.
9. A. Oshiyama, “Hole-Injection-Induced Structural Transformation of Oxygen Vacancy in α -Quartz” Jpn. J. Appl. Physics 37 (1998) L232-L234.
10. Y. Okamoto, M. Saito and A. Oshiyama, “Comparative Study of H₂ Molecules in Si and GaAs” Phys. Rev. B 56 (1997) R10016-R10019.
11. Y. Okamoto, M. Saito, and A. Oshiyama, “Hybrid density Functional Study on Vibrational Frequency of a H₂ Molecule at the Tetrahedral Site of Silicon”, Phys. Rev. B, in press.
12. M. Mikami and A. Oshiyama, “First-Principles Band-Structure Calculation of Yttrium Oxy-sulfide” Phys. Rev. B 57 (1998) 8939-8944.
13. M. Mikami and A. Oshiyama, “First-Principles Study of Intrinsic Defects in Yttrium Oxy-sulfide” submitted to Phys. Rev. B.
14. N. Kitamura, A. Oshiyama and O. Sugino, “Atomic and Electronic Structures of Deformed Graphite” submitted to J. Phys. Soc. Jpn.
15. T. Akiyama, A. Oshiyama and O. Sugino, “Magic Numbers of Multivacancies in Crystalline Si” submitted to J. Phys. Soc. Jpn.
16. T. Mutou, H. Takahashi and D.S. Hirashima: “Carrier Concentration Dependence of Spectral Functions in Strongly Correlated System — Study by the Dynamical Mean Field Theory —”, J. Phys. Soc. Jpn. 66 (1997) 2781-2789.
17. D.S. Hirashima and H. Takahashi: “Correlation Effects on the Spin Susceptibility in Two Dimensional Fermion Systems. ”, submitted to J. Phys. Soc. Jpn.
18. H. Takahashi: “Susceptibility and Effective Interaction in the Two Dimensional Dilute Hubbard Model.”, submitted to J. Phys. Soc. Jpn.
19. T. Momoi and K. Kubo, “Ferromagnetism in the Hubbard model with orbital degeneracy in infinite dimensions”; Phys. Rev. B (Rapid communication), in press.
20. K. Kubo and T. Momoi, “Ground state of a spin system with two- and four-spin exchange interactions on the triangular lattice” Z. Phys. B 103 (1997) 485.

21. T. Momoi, K. Kubo, and K. Niki, "Possible chiral phase transition of two-dimensional solid ^3He " *Phys. Rev. Lett.* **79** (1997) 2081.
22. T. Momoi, K. Kubo and K. Niki, "Possibility of a chiral phase transition in 2D solid ^3He " *J. Magn. Magn. Mater.* **177-181** (1998) 167.
23. K. Kubo, T. Momoi and K. Niki, "Possibility of a chiral phase transition in two-dimensional ^3He solid" *J. Low Temp. Phys.* **110** (1998) 339.
24. K. Kubo, H. Sakamoto, T. Momoi and K. Niki, "A possible magnetic phase with scalar chirality in solid ^3He layers" *J. Low Temp. Phys.* **111** (1998) 583.
25. T. Nakamura and S. Takada : "Behavior of a frustrated quantum spin chain with bond dimerization " , *Phys.Rev.B* **55** 14413-14422 (1997)
26. T. Nakamura, S Takada, K.Okamoto, and N.Kurosawa : "Haldane and dimer gaps in general double-spin-chain models " , *J.Phys. Cond.Matt.* **9** 6401 - 6415 (1997).
27. R. Kadono, R. Kiefl, J. Chakhalian, S. Dunsiger, B. Hitti, W. MacFarlane, J. Major, L. Schimmele, M. Matsumoto and Y. Ohashi: "Quantum Diffusion of the Positive Muon in Superconducting Tantalum", *Phys. Rev. Lett.* **79** (1997) 107-110.
28. Y. Ohashi and S. Takada: "Goldstone Mode in Charged Superconductivity: Theoretical Studies of the Carlson-Goldman Mode and Effect of the Landau Damping in the Superconducting State", *J. Phys. Soc. Jpn.* **66** (1997) 2437-2458.
29. Y. Ohashi and S. Takada: "On the Plasma Oscillation in Superconductivity", *J. Phys. Soc. Jpn.* **67** (1998) 551-559.
30. 「解説論文」 大橋 洋士, 高田 慧: 「超伝導状態におけるゴールドストーンモード: Carlson-Goldman モードとランダウ減衰」, *固体物理* **32** (1997) 903-912 (45-54).
31. T. Arimitsu: (Invited Paper) "An Extension of the Dynamical Mapping to Non-Equilibrium Dissipative Systems", *Physics Essays* **9** (1996) 591.
32. T. Arimitsu, T. Saito and T. Imagire: "Quantum Stochastic Systems in terms of Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics", *Quantum Communication, Computing, and Measurement* (Plenum Press 1997) 57-69.
33. T. Saito and T. Arimitsu: "A System of Quantum Stochastic Differential Equations in terms of Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics". *J. Phys. A: Math. and Gen.* **30** (1997) 7573-7595.
34. T. Arimitsu: "On Migration of A Vacuum within Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics", *Similarities and Differences between Atomic Nuclei and Clusters*, ed. Abe, Arai, Lee and Yabana (The American Institute of Physics 1997) 389-392.
35. T. Imagire, T. Saito, K. Nemoto and T. Arimitsu: "A Comment on the Shibata-Hashitsume Langevin Equation — Is It of the Stratonovich Type or of the Ito Type? —", *Physica A* (1997) in press.
36. T. Arimitsu: "A Unified System of Quantum Stochastic Differential Equations within Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics", *Statistical Physics — Experiments, Theories and Computer Simulations —*, ed. M. Tokuyama and I. Oppenheim (World Scientific, 1998) 108.
37. T. Arimitsu: "A Unified System of Stochastic Differential Equations in terms of Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics", *Proceedings of the International Conference on Stochastic Processes and Their Applications at Chennai (Madras) in India*, (1998) in press.
38. T. Satio and T. Arimitsu: "A Microscopic Derivation of Quantum Stochastic Differential Equations corresponding to the Quantum Kramers Equation", *Proceedings of the International Conference on Stochastic Processes and Their Applications at Chennai (Madras) in India*, (1998) in press.

39. T. Imagire and T. Arimitsu: "A Calculus of the Shibata-Hashitsume Langevin Equation — Is It of the Stratonovich Type or of the Ito Type? —", Proceedings of the International Conference on Stochastic Processes and Their Applications at Chennai (Madras) in India, (1998) in press.
40. T. Motoike and T. Arimitsu: "A Topological Investigation of Chaotic Systems", Statistical Physics — Experiments, Theories and Computer Simulations —, ed. M. Tokuyama and I. Oppenheim (World Scientific, 1998) 224.
41. Atushi Tanaka, *Phase Space Caustics in Multicomponent Systems*, *Phys. Rev. Lett.* **80** (1998) p. 1414–1417

< 学位論文 >

修士論文

1. 北村直和： グラファイト・シートの変形と電子状態
2. 秋山亨： Si 結晶中の多原子空孔の構造と電子状態 - 負のクラスターの魔法数 -
3. 片野真史： 2次元ウィグナー結晶における多体交換相互作用.
4. 草間喜克： 異方的超伝導界面における自発表面電流の研究
5. 鐘ヶ江 義晴: Sc 結晶における核磁気秩序の理論的研究

< 講演 >

1. S. Jeong and A. Oshiyama, "Barrierless Bond Breaking and Exchange Diffusion on Si(100)-H" 4'th Int. Sympo. on Atomically Controlled Surfaces and Interfaces" (Tokyo, October 1997).
2. (invited) A. Oshiyama, "Complex Diffusion Mechanisms of Si Adatom on Hydrogenated Si(100)" Int. Workshop on Large-Scale Quantum Simulations: Total Energy and Force Methods" (Tsukuba, January 1998).
3. S. Jeong and A. Oshiyama, "Novel Diffusion Mechanism of Si Adatom on H-terminated Si(100) Surfaces" APS March Meeting (LA, March 1998) Bull. Am. Phys. Soc. **43**, 917 (1998).
4. (invited) A. Oshiyama, "Density-Functional Calculations for Semiconductor Epitaxial Growth and for Defects in Materials" APCTP/ICTP Joint International Conference on Highlights in Condensed Matter Physics (Seoul, June 1998).
5. A. Oshiyama, "Bistability of Oxygen Vacancy in Silicon Dioxides" 19th Int. Conf. Defects in Semiconductors (Portugal, 1997, Trans Tech Pub).
6. 押山淳, "SiO₂ 中の酸素空孔の双安定性と絶縁劣化" 日本物理学会秋の分科会半導体シンポジウム (神戸大学 1997年)
7. 岡本隠治, "半導体中の水素分子の振動数に関する非経験的計算" 日本物理学会53回年会半導体シンポジウム (東邦大学 1998年)
8. M. Mikami and A. Oshiyama, "First-Principles Study of Defect Structures in Yttrium Oxysulfides" APS March Meeting (LA, March 1998) Bull. Am. Phys. Soc. **43**, 377 (1998).
9. 北村直和、押山淳、"グラファイト・シートの折れ曲がりと歪み" 日本物理学会53回年会 (東邦大学 1998年)
10. 秋山亨、郡司茂樹、押山淳、"Si 結晶中の多原子空孔の魔法数" 日本物理学会53回年会 (東邦大学 1998年)

11. 片野真史, 平島大: “2次元ウィグナー結晶における多体交換相互作用”, 日本物理学会, 1997年10月, 神戸大学.
12. 平島大, 片野真史: “2次元ウィグナー結晶における多体交換相互作用”, 科研費研究会「低次元フェルミ流体系の物理」, 1997年10月, 浜松.
13. 高橋英昭: “2次元フェルミオン系の帯磁率に対する相関効果 (II)”, 日本物理学会, 1998年4月, 日本大学.
14. 平島大: “多体交換相互作用とはなにか”, 日本物理学会, 1998年4月, 日本大学.
15. T. Momoi and K. Kubo: “Ferromagnetism in the $D = \infty$ Hubbard model with orbital degeneracy”, 1997年7月, International Conference on Magnetism 1997, Cairns, Australia.
16. 桃井 勉、久保 健: “軌道縮退を持つ無限次元ハバード模型の金属強磁性”; 日本物理学会秋の分科会、1997年9月、神戸大学.
17. 坂本晴美、久保 健: “1次元の2バンドハバード模型における強磁性”; 日本物理学会第53回年会、1998年3月、東邦大学.
18. T. Momoi and K. Kubo: “Possibility of chiral phase transition in 2D solid ^3He ”, 1997年7月, International Conference on Magnetism ICM97, Cairns, Australia.
19. K. Kubo, T. Momoi and K. Niki: “Possibility of Chiral Phase Transition in Two-Dimensional ^3He Solid”, 1997年7月, International Symposium on Quantum Fluids and Solids 'qfs97, Paris, France.
20. K. Kubo, H. Sakamoto, T. Momoi and K. Niki: “A Possible Magnetic Phase with Scalar Chirality in Solid ^3He Layers”, 1997年9月, 2nd International Conference on Cryocrystals and Quantum Crystals, Polanica Zdrój, Poland.
21. 桃井 勉、久保 健: “2次元固体ヘリウム3における多体交換相互作用の効果”; 研究会“低次元フェルミ流体系の物理”、1997年10月、浜松.
22. 桃井 勉、久保 健: (招待講演) “4体交換相互作用を持つ2次元スピン系におけるカイラル相転移—2次元固体ヘリウム3の磁性—”; 日本物理学会第53回年会シンポジウム、1998年3月、東邦大学.
23. 大橋 洋士: 「酸化物高温超伝導におけるゴールドストーンモード: Carlson-Goldman mode に対する次元性の効果, 及びフェイゾン, プラズマ, ジョセフソンプラズマとの関連性の研究」超伝導若手春の学校 1997年6月 浜松市商工会議所福利研修センター カリアック
24. 大橋 洋士, 高田 慧: 「超伝導状態における集団励起の研究」 日本物理学会 1997年10月 神戸大学
25. 草間 喜克, 大橋 洋士, 高田 慧: 「異方的超伝導界面における自発表面電流の研究」 日本物理学会 1997年10月 神戸大学
26. 鐘ヶ江 義晴, 大橋 洋士, 久保 健, 高田 慧: 「Sc 結晶における核磁気秩序の理論的研究」 日本物理学会 1997年10月 神戸大学
27. 鐘ヶ江 義晴, 大橋 洋士: 「Sc 結晶における核磁気秩序の理論的研究」 基盤研究 (A) 「マイクロケルヴィン温度領域の物性—電子及び核」 研究会 1997年11月 石川県山中温泉ほくりく荘
28. 大橋 洋士, 池田 浩章: 「重い電子系における Micromagnetism の理論」 物性物理の最前線若手研究会 1998年1月 岡崎市桑谷山荘
29. 池田 浩章, 大橋 洋士: 「URu₂Si₂における Micromagnetism の理論」 日本物理学会 1998年3月 東邦大学
30. 有光敏彦: “A System of Quantum Stochastic Differential Equations in terms of Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics — From a Physicist's Point of View —”, 無限次元解析・量子確率セミナー, 1997年5月 名古屋大学多元数理科学

31. T. Saito and T. Arimitsu: "Quantum Stochastic Differential Equations for a Non-Linear Damped Oscillator", White Noise Mini-Workshop, 1997年6月 名古屋大学
32. T. Arimitsu: (招待講演) "Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics and Quantum Stochastic Differential Equations", White Noise Mini-Workshop, 1997年6月 名古屋大学
33. 有光敏彦: 「非平衡量子統計力学の方法」応用物性特別講義, 1997年7, 9月 東京工業大学 応用物理
34. T. Arimitsu: (招待講演) "Introduction to the Method of Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics", Workshop on Recent Developments in the Study of Irreversible Processes, 1997年9月 名古屋工業大学
35. 有光直子, 有光敏彦, 今給黎 隆: 「NETFDによる影響汎関数の導出」日本物理学会秋の分科会, 1997年10月 神戸大学
36. 今給黎隆, 有光敏彦: 「射影演算子法による伊藤確率微分方程式の解釈」日本物理学会秋の分科会, 1997年10月 神戸大学
37. 斎藤 健, 有光敏彦: 「確率微分方程式の微視的基礎付けII」日本物理学会秋の分科会, 1997年10月 神戸大学
38. 有光敏彦, 遠藤幸夫: 「連続非破壊測定 NETFD 量子確率微分方程式による定式化」日本物理学会秋の分科会, 1997年10月 神戸大学
39. T. Arimitsu: (招待講演) "Introduction to the Method of Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics" Recent Trends in Infinite Non-Commutative Analysis (無限次元非可換解析学の動向), 1997年10月, 京都大学数理解析研究所
40. T. Arimitsu: "A Unified System of Quantum Stochastic Differential Equations within Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics" The 2nd Tohwa University International Meeting on Statistical Physics, 1997年11月, 東和大学
41. T. Arimitsu: (招待講演) "Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics 入門 —Divisorによる散逸場の導入—" 第6回非平衡系の統計物理シンポジウム, 1997年12月, 筑波大学
42. 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" 第6回非平衡系の統計物理シンポジウム, 1997年12月, 筑波大学
43. T. Imagire and T. Arimitsu: "射影演算子法による導出が「伊藤型」量子確率微分方程式を与える訳" 第6回非平衡系の統計物理シンポジウム, 1997年12月, 筑波大学
44. T. Arimitsu and Y. Endo: "Non-demolition Continuous Measurement and the Quantum Stochastic Differential Equations" 量子確率論とエントロピー解析, 1997年12月, 京都大学数理解析研究所
45. T. Arimitsu: (Invited Plenary Talk) "A Unified System of Stochastic Differential Equations in terms of Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics", International Conference on Stochastic Processes and Their Applications, December 1998, Anna University at Chennai (Madras) in India,
46. T. Satio and T. Arimitsu: (Invited Talk) "A Microscopic Derivation of Quantum Stochastic Differential Equations corresponding to the Quantum Kramers Equation", International Conference on Stochastic Processes and Their Applications, December 1998, Anna University at Chennai (Madras) in India,
47. T. Imagire and T. Arimitsu: "A Calculus of the Shibata-Hashitsume Langevin Equation — Is It of the Stratonovich Type or of the Ito Type? —", International Conference on Stochastic Processes and Their Applications, December 1998, Anna University at Chennai (Madras) in India,
48. 今給黎 隆, 斎藤 健, 有光敏彦: 「量子確率微分方程式とKramers方程式」日本物理学会 年会, 1998年3月, 4月 東邦大学, 日本大学

49. 遠藤幸夫, 有光敏彦:「連続非破壊測定 of NETFD 量子確率微分方程式による定式化II」日本物理学会 年会, 1998年3月, 4月 東邦大学, 日本大学
50. 本池 巧, 有光敏彦:「2文字の記号力学で記述できない周期倍分岐軌道の解析II」日本物理学会 年会, 1998年3月, 4月 東邦大学, 日本大学
51. 田中篤司, 「量子多成分系の Phase Space Caustics」, ハミルトン力学系とカオス, 京都大学基礎物理学研究所, 1997年 11月 27日
52. 田中篤司, 「量子多成分系の半古典論」, 第6回非平衡系の統計物理シンポジウム, 筑波大学, 1997年 12月 11日
53. Atushi Tanaka, *A general theory of adiabatic representations*, Molecular Science of Excited States and Nonadiabatic Transitions, 分子科学研究所, 1998年 3月 26日
54. 田上由紀子, 「外国人科学・技術者のための日本語教育」 1998年3月24日 人工知能学会

< 紀要等 >

1. 有光敏彦: “量子性と散逸 -いくつかの新しい視点?” , 物性研究 (1997) in press.
2. T. Arimitsu: “Physics and Mathematics in Quantum Stochastic Process” , 京都大学数理解析研究所講究録 [RIMS Report] 982 (1997) 91-102.
3. T. Arimitsu: “Comment on the Microscopic Derivation of the Langevin Equation — From the New Aspect of the Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics —” , 京都大学数理解析研究所講究録 [RIMS Report] 1013 (1997) 17-27.
4. T. Saito and T. Arimitsu: “A Microscopic Derivation of Quantum Stochastic Differential Equations for A Non-Linear Damped Oscillator” , 京都大学数理解析研究所講究録 [RIMS Report] 1013 (1997) 65-75.
5. T. Arimitsu: “Introduction to the Method of Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics” , Proceedings of the Workshop on Recent Developments in the Study of Irreversible Processes, ed. M. Sugiyama (Nagoya Institute of Technology, 1998) 43-63.
6. T. Arimitsu: “Introduction to the Method of Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics — A Unified System of Stochastic Differential Equations- -” , 京都大学数理解析研究所講究録 [RIMS Report] 1035 (1998) 33-43.
7. T. Arimitsu and Y. Endo: “Non-Demolition Continuous Measurement and the Quantum Stochastic Differential Equations” , 京都大学数理解析研究所講究録 [RIMS Report] (1998) in press.
8. 本池 巧, 有光敏彦: “幾何学的に見た周期倍分岐” , 物性研究 (1997) in press.
9. 山崎仁士, 有光敏彦: “レーザー系におけるカオス軌道の幾何学的解析” , 物性研究 (1997) in press.
10. 田上由紀子, 「外国人科学・技術者のための日本語教育 Scientific and Technical Japanese for Foreigners」 人工知能学会研究会資料 SIG-HIDSN-9703 pp.9 - 13.