年次研究報告

ANNUAL REPORT OF INSTITUTE OF PHYSICS THE UNIVERSITY OF TSUKUBA

2007 (平成19) 年度

筑波大学物理学系

目	次	

一 研究活動 一	
----------	--

Ι	素粒子理	目論グ	ルー	プ・	•	•••	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	1
П	素粒子実	ミ験グ	ルー	プ・	•	•••	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	1	8
Ш	宇宙物理	<b>里</b> 理論	jグル	ープ	•	• •	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	3	8
IV	宇宙観測	順グル	ープ	•••	•	•••	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	5	4
V	原子核理	11論グ	`ルー	プ・	•	•••	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	6	2
VI	原子核実	尾験グ	`ルー	プ・	•	•••	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	7	6
VII	物性理論	論グル	ープ																													
	VII - 1	凝縮	系理	論グ	ル	-7	7°•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	1	0	5
	VII - 2	計算	物性	グル	<u> </u>	プ・	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	1	2	4
	VII - 3	計算	生命	グル	/	プ・	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	1	3	4
VIII	物性実験	食グル	ープ																													
	$\mathrm{VIII}-1$	磁性	物性	グル	/	プ・	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	1	4	4
	$\mathrm{VII}-2$	半導	体物	性グ	ル	-7	7°•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	1	5	0
	V <b>Ⅲ</b> -3	強相	関物	性グ	ル	-7	7°•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	1	6	3
	$\mathrm{VII}-4$	表面	物性	グル	/	プ・	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	1	7	2
	V I - 5	低温	物性	グル	/	プ・	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	1	7	8
IX	プラズマ	マ研究	グル	ープ	•	•••	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	1	9	1

# 一 教育活動 一

Х	物理教	育および物理教育の研究・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・218
	【1】	物理教育
	[2]	体験学習

【3】 カリキュラム関係

### 一 補足資料 一

大学院資料・	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	2	2	0
物理学域資料	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	2	2	9

# |.素粒子理論グループ

教授 青木 慎也、 石橋 延幸、宇川 彰、 金谷 和至
准教授 石塚 成人、 藏增 嘉伸、吉江 友照
助教 佐藤 勇二、 谷口 祐介、 八田 佳孝、毛利 健司
研究員 石井 理修、浮田 尚哉、梅田 貴士、加堂 大輔、滑川 祐介
博士研究員 井出 健智、佐々木 潔
大学院生 (17名)

#### 【人事異動】

八田 佳孝氏が2008年2月に特任助教として着任した。

### 【研究活動】

素粒子理論グループにおいては、本年度も、格子場の理論の研究と超弦理論の研究を二本の柱に、活発な研究活動が行なわれた。また、2008年2月に新たに加 わった八田 佳孝氏を中心に高エネルギーでのハドロン物理の研究も行われた。

格子場の理論グループでは、計算科学研究センターと密接な連携のもと、格子 QCD の大型数値シミュレーションが推進された。

筑波大学の格子ゲージ理論の研究者は、2006年7月に計算科学研究センターの次期並列計算機として PACS-CS が導入されたのを契機として新たな研究グループとして立ち上げられた PACS-CS Collaboration に参加している。PACS-CS Collaboration では、物理的な u, d クォーク質量での  $N_f = 3$  QCD の大規模シミュレーションを行うことを目標にゲージ配位の生成を行った。

一方、一部の研究者は、高エネルギー加速器研究機構(KEK)の IBM BlueGene/L と日立 SR-11000 を用いて研究を進める JLQCD Collaboration に参加し、格子上で の厳密なカイラルを持つオーバーラップ・フェルミオン作用を用いた力学的クォー クの数値シミュレーションによる研究を展開した。

また、これらの大規模な研究と並行して、核子間ポテンシャルの研究、有限温度・ 有限密度 QCD の研究、繰り込み定数の非摂動的計算、なども行われた。

さらに、格子 QCD 配位やその他のデータを国内・外で共有する為のデータグリッド JLDG・ILDG の構築に参画した。

超弦理論の分野では弦の場の理論、行列模型、超弦理論とゲージ理論との対応という3つの関連するテーマを中心として研究が行われた。最近この分野においては、 D-ブレーンと呼ばれるソリトン解の研究を通じて、弦理論の非摂動的定式化として の行列模型や、超弦理論とゲージ理論の双対性等のテーマが盛んに研究されている。 特に近年、超弦理論とゲージ理論の関係が定量的なレベルまで明らかにされたり、弦 の場の理論における D-ブレーンの取り扱いが可能になったり等の大きな発展があっ た。この状況の下で、弦の場の理論と D-ブレーン、弦理論/スピン鎖対応、higher spin 場の理論等についての研究を行った。

八田 佳孝氏らは、ゲージ理論/重力理論双対性におけるジェットの時間発展を中 心に研究を行った。

### 【1】 格子場の理論

(青木 慎也、宇川 彰、金谷 和至、石塚 成人、藏增 嘉伸、吉江 友照、谷口 裕介、石井 理修、浮田 尚哉、梅田 貴士、加堂 大輔、滑川 祐介、井出 健智、佐々木 潔)

(1) PACS-CS Collaboration の活動

計算科学研究センターでは、平成17年度から3ヶ年計画で特別教育研究経費(拠 点形成)を受けて開発・製作が進められてきた超並列クラスタ計算機 PACS-CS (計算ノード数2560、ピーク演算性能14.3Tflops)が平成18年7月から稼働を 開始した。PACS-CS Collaboration は PACS-CS を主要な計算設備として格子 QCD の研究を行うことを目的とし、筑波大学物理学系メンバーを中心として 組織されている。その目標は、domain-decomposed HMC (DDHMC)アルゴ リズムと polynomial HMC (PHMC)アルゴリズムを組み合わせることによっ て3種類(up、down、strange)の軽いクォークをその物理的質量(physical point)において動的に扱うシミュレーションを行い、QCDに関する近似のな い物理的予言を行うことを目標としている。平成18年度は、PACS-CS 稼働開 始に伴うプログラム開発と比較的重い up-down クォーク質量でのシミュレー ションが主要課題であったが、以下に平成19年度における進展を述べる。

平成 18 年度に引き続き、非摂動的に O(a) 改良された Wilson クォーク作用と Iwasaki ゲージ作用を用いて、格子サイズ  $32^3 \times 64$ 、格子間隔  $a \approx 0.09$  fm の シミュレーションを行った。up-down クォーク質量に関しては、カイラル摂 動論からの予言を検証するために m<sub>ud</sub> = 61, 41, 22, 19, 11, 3MeV という広範な 値を採用した。strange クォーク質量に関しては過去の計算によって推定され た物理的質量に固定したが、m<sub>ud</sub> = 19MeV の場合は 20%程度軽い値を採用 し、strange クォーク質量依存性を調べた。平成 19 年度末の時点で最も軽い up-down クォーク質量は 3MeV 程度であり、これに対応するパイ中間子質量 は155MeVである。パイ中間子のコンプトン波長よりも大きな空間格子サイ ズで行われているシミュレーションとしては、現在のところ世界で最も軽い up-down クォーク質量を実現している。 $m_{\rm nd} = 3 {
m MeV}$ のシミュレーションに関 しては、これを可能とするために DDHMC に対して幾つかのアルゴリズム的 改良を施した。主な改良点は、(i) 質量前処理、(ii) クロノロジカル解法、(iii) デフレーション解法、の3つである。改良された DDHMC(MPDDHMC) アル ゴリズムの計算コストと従来のHMCアルゴリズムの計算コストを図1におい て比較している。従来の HMC 法と比べて格段のコスト削減に成功していると ともに、現在の計算機性能で physical point のシミュレーションが可能である ことが見てとれる。現実世界におけるパイ中間子質量 $m_{\pi} = 140 \text{MeV}$ はもはや 目前であり、平成 20 年度における目標は physical point におけるシミュレー



図 1: 改良された DDHMC(MPDDHMC) アルゴリズムと従来の HMC アルゴリズム の計算コスト比較。HMC アルゴリズムに対する計算コストのクォーク質量依存性は 過去のシミュレーション結果から得られた経験則。DDHMC の結果は m<sub>ud</sub> = 11MeV のシミュレーションポイントにおける計算コスト。

ションである。これは 1980 年代初頭に格子 QCD シミュレーションが始まって 以来の大きな夢であり、格子 QCD 分野における画期的成果となることが期待 される。

平成19年度末までに、 $m_{ud} = 61, 41, 22, 19, 11, 3$ MeV の点において各々250 0、2000、2250、2000、2000、990分子動力学時間単位分 のシミュレーションが終了し、生成されたグルーオン配位を用いてハドロン伝 播関数の計算が行われ、メソン・バリオン質量、擬スカラーメソン崩壊定数な どの測定がなされた。各物理量におけるクォーク質量依存性を解析した結果、 擬スカラーメソンチャネルにおいてカイラル摂動論の予言に従う曲率を確認 し、physical point におけるハドロン質量が数%の範囲内で実験と一致してい ることを見出した(図2)。以上の結果は、2007年 Lattice 国際会議で招待 講演(論文1)と一般講演で発表された(論文2,3)。以上と並行して、クォー ク質量の繰り込み定数および強い相互作用の結合定数の非摂動的決定、 $\rho$ 中間 子の崩壊幅の計算、トポロジカルチャージ測定、重いクォークの物理等、本課 題が目標とするテーマが推進された。

(2) 有限温度・有限密度QCDの研究

 $N_f = 2$  QCD の配位上での磁気的、および電気的遮蔽質量の計算を行った。 Euclid 時間反転 と 荷電共役 の対称性を考えることによって Polyakov loop 相 関をそれぞれの対称性に応じて分類し、これらの遮蔽質量を導出する事ができ る。それらの結果、有限温度摂動論からの予想の通り、磁気的遮蔽質量  $(m_M)$ 



図 2: ハドロン質量の実験値との比較。横棒は実験値を表す。

は電気的遮蔽質量  $(m_E)$  よりも大きくなる事などを示した。さらに両者の質量比  $(m_E/m_M)$  が AdS/CFT 対応より求められる値に良く一致する事などを議論した。また、昨年度までに計算した  $N_f = 2$  QCD のゲージ配位を用いて重いクォークの自由エネルギーや、クォーク数サセプティビリティーの有限密度効果に関する計算を行った。化学ポテンシャルに関する Taylor 展開法を用いた。従来の方法に加えて有限密度の複素位相部分をガウス関数で近似してreweighting 法を用いる手法による計算も行った(論文 4,5,7)。図 3 参照。



図 3: 有限温度・有限密度QCDの研究。左図は、磁気的遮蔽質量  $(m_E)$  と電気的遮蔽質量  $(m_M)$ の比である遮蔽質量比の温度依存性。AdS/CFT 対応からの予想  $m_E/m_{gap} = 1.46$ も図中に示した。 右図は、複素位相をガウス関数で近似する手法による有限密度でのクォーク数サセプティビリティー。

(3) <u>クォーク・グルオン・プラズマ相におけるチャーモニウム消失の研究</u>
 チャームクォークと反チャームクォークの束縛状態であるチャーモニウム (特に J/ψ, χ c, ψ'状態など)がクォーク・グルーオン・プラズマ (QGP) 相中で

消失する温度や特性を格子 QCD による第一原理計算で研究した。

これは、重イオン衝突実験で QGP 生成を示す重要なシグナルの一つである 「J/ψ 抑制」を判断する上で本質的な情報となる。チャーモニウムの相関関数 から、状態の質量スペクトルを計算し、それらの空間方向の境界条件を変える 事によって、QGP 相におけるチャーモニウム状態の消失を判定する。同時に 波動関数を計算し、その温度依存性も調べた。さらに、"間接的 J/ψ 抑制"の シナリオに重要な、励起状態 ψ (2S)の計算を行う為に、対角化のテクニック を用いて基底状態と各励起状態を分離し、また、メソン相関関数の定数モード の効果を取り除いた計算を行った。

手法の確認のため、第一段階として非等方格子でのクエンチ近似 QCD の計算 を行い、少なくとも 2.3Tc まで、チャーモニウムの S 状態、P 状態、さらにそ れらの励起状態まで含めてハドロン的状態の消失が確認できないことを示し た(論文 6)。図 4 参照。



図 4: チャーモニウム消失の研究。Bethe-Salpeter 波動関数の体積依存性で、左図がS波状態、右 図がP波状態に関する基底状態、第一励起状態を表す。

(4) 格子 QCD による中性 K 中間子の B パラメタの非摂動的繰り込み定数の計算

orbifolding を用いた格子上の Schrödinger functional の定式化を domain-wall fermion に適用し、その具体的な応用として Kaon B-parameter 及び *u*, *d*, *s* quark 質量の非摂動論的な繰り込みを行った (論文 8)。

 $N_f = 2 + 1$  QCD における結合定数の非摂動論的な running を、Schrödinger functional を用いて求めるための研究に着手した (学会発表 10)。

(5) ILDG・JLDGの構築

ILDG (International Lattice Data Grid) (論文10) は格子 QCD 配位を国際規 模で共有するための Data Grid で、2002 年から開発が進められ、2007 年 7 月 に 5 つの地域グリッドの相互運用が開始された(論文11)。格子場理論グルー プは計算科学研究センターと協力して、ILDG の日本の拠点として ILDG 構 築に参画し、Middleware 開発(論文11) と QCD markup 言語 QCDml の策 定(論文12)に貢献した。JLDG (Japan Lattice Data Grid)(論文10)は、国 内の格子 QCD 及び関連分野の研究者のデータ共有をサポートする Data Grid で、2005年に開発が開始され、2007年3月システムが完成した。2007年度は、 JLDG に接続する6研究拠点の担当者と協力して、試験運用を行った。2008 年第2四半期に実運用を開始する予定である。

(6) 格子 QCD による核力の研究

2つの核子の間に働く力、核力は、中遠距離では引力、近距離では強い斥力に なることが実験的に知られているが、この核力の性質、特に近距離での斥力 (斥力芯と呼ばれている)を理論的に導くことは、素粒子原子核物理に残された 大問題の1つである。青木、石井は東京大学の初田との共同研究で、核子間の ポテンシャルを格子 QCD の方法で計算した。CP-PACS Collaboration がパイ 中間子散乱の位相差を計算するために定義した2つのパイ中間子に対応する 波動関数を2核子の場合に拡張し、その波動関数からポテンシャルを計算する という方法を使った。格子 QCD のクエンチ近似で得られたポテンシャルを図 5に載せる。中長距離の引力と遠方での斥力が再現されている。研究結果は論 文13に発表された。

さらに、中心力以外の成分としてポテンシャルのテンソル力の計算を行った り、力学的クォークの寄与を含むゲージ配位での計算も開始した (論文 26)。ま た、この研究を発展させ、ストレンジ・クォークを含むバリオンであるハイペ ロンと核子のポテンシャルの計算も行った (論文 18)。

(7) 厳密なカイラル対称性を持つクォーク作用を用いた研究

JLQCD Collaboration は、格子上で厳密なカイラル対称性を持つオーバーラッ プ・フェルミオンを力学的クォーク作用に用いた N<sub>f</sub> = 2の格子 QCD の数値シ ミュレーションを行った。計算時間削減のためにゲージ場のトポロジーを固定 して計算を行ったが、この方法の理論的正当化を行った。(論文 17) また、こ の考察を用いて、トポロジカル電荷の帯磁率を計算した。

それ以外にもいろいろな物理量の計算を行った。(論文 14,16,22,23,25) 最近、 2+1 フレーバーの格子 QCD のゲージ配位生成を開始した (論文 24)。

【2】 超弦理論

(石橋 延幸、 毛利 健司、 佐藤 勇二)

(1) 弦の場の理論と D-ブレーン

弦の理論は D-ブレーンと呼ばれるソリトンを使ってその非摂動的な振る舞い が調べられてきた。ところが、これまでこの D-ブレーンが本当に弦理論の運 動方程式の解なのかということは問われてこなかった。弦理論を用いて素粒子 の模型を構築する際、このような基本的な問題が非常に重要になる。



図 5: 格子 QCD のクエンチ近似計算で得られた 2 核子間のポテンシャル。●は核力 のスピン1 重項成分、○はスピン3 重項の成分であり、実線は湯川ポテンシャルの 寄与である。

石橋、馬場は村上(KEK)とともに Osp 不変な閉弦の場の理論においては D-ブレーンは BRS 不変な演算子として実現できるのではないかという提案をし た。この提案を更に研究するため、 OSp 不変な閉弦の場の理論における BRS 不変な観測量を分類し、弦理論に含まれる粒子に対応するものを同定した。ま た、これらの粒子の S 行列をどの様に計算すればよいかを示した (論文 32)。 この結果を元に、OSp 不変な閉弦の場の理論において D-ブレーンに対応する 演算子を構築し、それを用いてディスク状のファインマングラフに対応する振 幅を計算した(論文 33)。

(2) ゲージ理論/重力理論双対性における可解構造

弦理論の主要なテーマの一つにゲージ理論/重力理論の双対性がある。特に、  $AdS_5 \times S^5$ 中の弦理論とN = 4 SU(N)超対称ゲージ理論の対応は、AdS/CFT (共形場理論)対応と呼ばれている。この研究において、近年、弦理論側を記 述するシグマ模型が古典的に可解であり、また、ラージ N(カラー)摂動論 の低次でゲージ理論演算子の異常次元が可解なスピン鎖模型のハミルトニア ンで表されることがわかり、弦理論、ゲージ理論、双方の可解構造が明らかに なってきた。この発見により、強/弱結合対応のために解析が困難であった、 超対称セクターを超えた AdS/CFT 対応が議論できるようになり、弦理論の 大きな成果の一つとなっている。さらに、弦の古典近似/ゲージ理論の低次の 摂動近似にとどまらずにこれらの可解構造が保たれ、双方の理論が完全に可解 であると期待されており、様々な状況証拠が積み上げられている。 こうした可解構造に基づく AdS/CFT 対応の研究の一つの到達点として、ゲージ理論演算子の異常次元/弦のエネルギースペクトルを、カラー数 N、演算 子の長さ/弦の角運動量が大きい極限において、結合定数の全ての領域で記述 するベーテ方程式が提案されている。理論の対称性からゲージ理論/弦理論の スペクトルは、このベーテ方程式に現れるスカラー因子で結びつけられている と考えられる。従って、このスカラー因子の物理的な意味や出現の機構を理解 することは、ゲージ理論/重力理論双対性の理解にとって大変重要である。 佐藤は酒井(慶應義塾大学)と共に、このスカラー因子が実は、物理的な真空 が非自明な配位を持っている時に現れる有効的な位相因子であり、真空の上の 励起の散乱を具体的に計算することで導かれることを提案した(論文 34,35)。 この結果は、スカラー因子は手で与えられるのではなく、背後にある可解模型 の真空を正しく選ぶことで自然に導かれ、弦/ゲージ理論、双方のスペクトラ ムが自己完結的に決まっていることを示唆している。

(3) 行列模型を用いた higher spin 場の理論の研究

花田氏、川合氏、木村氏らによって導入された超行列模型の新解釈に基づき、 齋藤は、超行列模型とスピン (3,5/2)を持つ質量0の4次元N=1超対称多重項 の場の理論との関係を自由場の場合について調べ、この超対称場の理論の運動 方程式の解は超行列模型の運動方程式を満たすことを示した (論文 36)。

(4) ホログラフィック QCD

ゲージ/重力対応を用いて、重力側の模型でQCDを解析する方法はホログラフィックQCDと呼ばれ、近年盛んに研究されている。齋藤は、O型弦理論の中で、あるDブレーン配位のもとでゲージ/重力対応を用いることで、QCDに近い模型が得られることを議論し、ベクトルメソンの質量スペクトルなどの計算をした。

(5) 1次元の非臨界弦の場の理論

1次元以下の時空で定義された非臨界弦と呼ばれる理論は、通常の弦理論のお もちゃの模型として、長年研究されてきた。この理論を用いて D-ブレーンと は何かという疑問について理解が進んでいる。石橋は山口(KEK)とともに1 次元の非臨界弦の場の理論を構築し、D-ブレーンに対応するフェルミオニック な演算子を弦の場で厳密に表す公式を与えた(論文 37)。

【3】 高エネルギーハドロン物理

(八田 佳孝)

(1) ゲージ理論/重力理論双対性におけるジェットの時間発展

RHIC 加速器における原子核衝突実験で生成されたと考えられるクォークグル オンプラズマは、従来の予想と異なり非常に強く相互作用している物質である ことが実験的に分かっている。ここでは有限温度のQCD 摂動論は適用できず、 なんらかの非摂動的な手法を用いて物理量を計算しなければならない。 $\mathcal{N} = 4$ 超対称ゲージ理論はゲージ理論/重力理論双対性によって強結合での解析が可 能であり、クォークグルオンプラズマのモデルとして近年非常に注目を集めて いる。

強結合プラズマ中の高エネルギー反応を解明するために、八田は Iancu(サク レー)、Mueller(コロンビア大学)らとともに有限温度 AdS/CFT を用いて、 プラズマ中を伝播するジェットの性質を調べた。双対性を用いると、高いエネ ルギーを持つジェットの減豪は超重力場がブラックホールの事象の地平線に落 ちていく過程で記述される。超重力場の方程式を解析することにより落下の 詳細な時間発展とそれに付随するゲージ理論側での現象をさまざまなエネル ギーの領域で理解することができた(論文 38)。

# く論文〉

- 1. Yoshinobu Kuramashi for the PACS-CS Collaboration,  $N_f = 2 + 1$  dynamical Wilson quark simulation toward the physical point, PoS(LATTICE 2007) 017.
- PACS-CS Collaboration: N. Ukita, S. Aoki, N. Ishii, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, T. Izubuchi, D. Kadoh, K. Kanaya, Y. Kuramashi, Y. Namekawa, M. Okawa, K. Sasaki, Y. Taniguchi, A. Ukawa, T. Yoshié, Light hadron spectrum with 2+1 flavor dynamical O(a)-improved Wilson quarks, PoS(LATTICE 2007) 138.
- 3. PACS-CS Collaboration: D. Kadoh, S. Aoki, N. Ishii, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, T. Izubuchi, K. Kanaya, Y. Kuramashi, Y. Namekawa, M. Okawa, K. Sasaki, Y. Taniguchi, A. Ukawa, N. Ukita, T. Yoshié, Application of chiral perturbation theory to 2+1 flavor lattice QCD with O(a)-improved Wilson quarks, PoS(LATTICE 2007) 109.
- 4. WHOT-QCD Collaboration: Y. Maezawa, N. Ukita, S. Aoki, S. Ejiri, T. Hatsuda, N. Ishii and K. Kanaya, Heavy-Quark Free Energy, Debye Mass, and Spatial String Tension at Finite Temperature in Two Flavor Lattice QCD with Wilson Quark Action, Phys. Rev. D 75 (2007) 074501.
- WHOT-QCD Collaboration: Y. Maezawa, S. Aoki, S. Ejiri, T. Hatsuda, N. Ishii, K. Kanaya and N. Ukita, Thermodynamics of two-flavor lattice QCD with an improved Wilson quark action at non-zero temperature and density, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 34 (2007) 651-654.
- 6. Takashi Umeda, Study of constant mode in charmonium correlators at finite temperature, PoS(LATTICE 2007) 233.

- WHOT-QCD Collaboration: Y. Maezawa, S. Aoki, S. Ejiri, T. Hatsuda, N. Ishii, K. Kanaya, N. Ukita, T. Umeda, Thermodynamics and heavy-quark free energies at finite temperature and density with two flavors of improved Wilson quarks, PoS(LATTICE 2007) 207.
- 8. Y. Nakamura, S. Aoki, Y. Taniguchi and T. Yoshie [CP-PACS Collaboration], Precise determination of  $B_K$  and right quark masses in quenched domain-wall QCD, arXiv:0803.2569 [hep-lat].
- 9. Y. Nakamura and Y. Taniguchi [CP-PACS Collaboration], Non-perturbative renormalization of four-quark operators and  $B_K$  with Schroedinger functional scheme in quenched domain-wall QCD, PoS(LATTICE 2007) 248.
- 10. 佐藤 三久, 建部 修見, 吉江 友照, 石井 理修, 朴 泰祐, 宇川 彰, 計算素粒子 物理学分野の国際データグ リッド ILDG と国内グリッド JLDG, 情報処理学 会研究報告, 2007-HPC-113, pp.13-18, 2007
- P.Coddington, S.Zhang, N.Ishii, M.Sato, D.Melkumyan, D.Pleiter, G.Beckett, R.Ostrowski, J.Simone, B.Joo, C.Watson (ILDG Middleware Working Group), Towards an interoperable International Lattice Datagrid, PoS(LATTICE 2007) 044.
- P. Coddington, B. Joo, C.M. Maynard, D. Pleiter, T. Yoshie (ILDG Metadata Working Group), Marking up lattice QCD configurations and ensembles, PoS(LATTICE 2007) 048.
- 13. N.Ishii, S.Aoki, T.Hatsuda, Nuclear Force from Lattice QCD, Physical Review Letters 99 (2007) 022001.
- 14. JLQCD collaboration: H. Fukaya, S. Aoki, T.W. Chiu, S. Hashimoto, T. Kaneko, H. Matsufuru, J. Noaki, K. Ogawa, M. Okamoto, T. Onogi, N. Ya-mada, Two-flavor lattice QCD simulation in the epsilon-regime with exact chiral symmetry, Physical Review Letters 98 (2007) 172001.
- T.Kaneko, S.Aoki, M.Della Morte, S.Hashimoto, R.Hoffmann, R.Sommer, Non-perturbative improvement of the axial current with three dynamical flavors and the Iwasaki gauge action, JHEP 0704 (2007) 092.
- H. Fukaya, S. Aoki, T.W. Chiu, S. Hashimoto, T. Kaneko, H. Matsufuru, J. Noaki, K. Ogawa, T. Onogi, N. Yamada , Two-flavor lattice QCD in the epsilon-regime and chiral Random Matrix Theory, Physical Review D76(2007) 054503.
- 17. Sinya Aoki, Hidenori Fukaya, Shoji Hashimoto, Tetsuya Onogi, Finite volume QCD at fixed topological charge, Physical Review D76(2007) 054508.

- 18. CP-PACS Collaboration: S. Aoki, M. Fukugita, K-I. Ishikawa, N. Ishizuka, K. Kanaya, Y. Kuramashi, Y. Namekawa, M. Okawa, K. Sasaki, A. Ukawa, T. Yoshie, Lattice QCD Calculation of the  $\rho$  Meson Decay Width, Physical Review D76(2007) 094506.
- Sinya Aoki, Oliver Bär, WChPT analysis of twisted mass lattice data, Eur. Phys. J. A **31** (2007) 781.
- Sinya Aoki, Lattice QCD simulations with light dynamical quarks, AIP Conf. Proc. 892 (2007) 1.
- 21. S. Aoki and O. Bär, The Vector and axial vector current in Wilson ChPT, PoS(LATTICE 2007) 062.
- 22. JLQCD Collaboration: J.Noaki, S.Aoki, H.Fukaya, S.Hashimoto, T.Kaneko, H.Matsufuru, T.Onogi, E.Shintani, N.Yamada, Light meson spectrum with  $N_f = 2$  dynamical overlap fermions, PoS(LATTICE 2007) 126.
- JLQCD Collaboration: N. Yamada, S. Aoki, H. Fukaya, S. Hashimoto, J. Noaki, T. Kaneko, H. Matsufuru, T. Onogi, B(K) with dynamical overlap fermions, PoS(LATTICE 2007) 379.
- JLQCD collaboration: S. Hashimoto, S. Aoki, H. Fukaya, T. Kaneko, H. Matsufuru, J. Noaki, T. Onogi, N. Yamada, Lattice simulation of 2+1 flavors of overlap light quarks, PoS(LATTICE 2007) 101.
- JLQCD collaboration:H. Fukaya, S. Aoki, S. Hashimoto, T. Kaneko, H. Matsufuru, J. Noaki, K. Ogawa, T. Onogi, N. Yamada, Meson correlators in the epsilon-regime of two-flavor lattice QCD, PoS(LATTICE 2007) 073.
- 26. Hidekatsu Nemura, Noriyoshi Ishii, Sinya Aoki, Tetsuo Hatsuda Hyperon-nucleon potentials from lattice QCD, PoS(LATTICE 2007) 156.
- 27. Noriyoshi Ishii, Sinya Aoki, Tetsuo Hatsuda, Lattice QCD approach to nuclear force, PoS(LATTICE 2007) 146,
- 28. Sinya Aoki, Hidenori Fukaya, Shoji Hashimoto, Tetsuya Onogi, Theta vacuum physics from QCD at fixed topology, PoS(LATTICE 2007) 080.
- 29. Sinya Aoki, Hadron interactions from lattice QCD, PoS(LATTICE 2007) 002.
- Taku Izubuchi, Sinya Aoki, Koichi Hashimoto, Yoshifumi Nakamura, Toru Sekido, Gerrit Schierholz, Dynamical QCD simulation with theta terms, PoS(LATTICE 2007) 106.
- 31. N. Namekawa, Y. Kikukawa, Thermodynamics of  $N_f = 2$  QCD on anisotropic lattices, PoS(LATTICE 2007) 212.

- 32. Y. Baba, N. Ishibashi and K. Murakami, D-brane States and Disk Amplitudes in OSp Invariant Closed String Field Theory, JHEP0710 (2007) 008.
- 33. Y. Baba, N. Ishibashi and K. Murakami, D-branes and Closed String Field Theory, Proceedings of "Workshop on Progress of String Theory and Quantum Field Theory" (Osaka City University, December 7-10, 2007).
- 34. K. Sakai and Y. Satoh, On the origin of the dressing phase in  $\mathcal{N} = 4$  Super Yang-Mills, Phys. Lett. B 661 (2008) 216-219.
- 35. K. Sakai and Y. Satoh, Microscopic formulation of the S-matrix in AdS/CFT, JHEP 0712 (2007) 044.
- 36. T. Saitou, Superfield formulation of 4D, N=1 massless higher spin gauge field theory and supermatrix model, JHEP 0707 (2007) 057.
- 37. N. Ishibashi and A. Yamaguchi, An exact bosonization rule for c=1 noncritical string theory, JHEP 0708 (2007) 097.
- 38. Y. Hatta, E. Iancu and A. H. Mueller, Jet evolution in the N=4 SYM plasma at strong coupling, arXiv:0803.2481 [hep-th], JHEP in press.

#### 〈著書・総説等〉

- 1. 岩崎 洋一, 次世代スーパーコンピュータと計算科学の発展, 応用数理 17, No.1 (2007) 57-64.
- 2. 金谷 和至, 格子QCD理論の進展, 別冊・数理科学「素粒子物理学の発展 –未 解決問題への多彩なアプローチ」 (2007) 54-60.

#### く学位論文〉

[博士論文]

- 1. 馬場 裕「D-branes in OSp invariant closed string field theory」
- 2. 中村 庸介「クエンチのドメインウォール QCD における4 クォーク演算子と Kaon バックパラメータのシュレディンガー汎関数スキームを用いた非摂動的 繰り込み」

[修士論文]

1. 大野 浩史「クエンチ近似を用いた有限温度格子 QCD によるチャーモニウム 消失温度の探索」

- 2. 幸田 義行「格子 QCD のトポロジーとアノーマラスウォード高橋恒等式」
- 3. 杉山 友規「揺らぎ定理」
- 4. 武田 光平「Pi-N Sigma term の研究に向けた all-to-all propagator による核子 相関関数の計算」
- 5. 田宮 亮「Witten の弦の場の理論におけるタキオン凝縮の解析解」

### 〈集中講義〉

- 1. 石橋 延幸、「D-branes and String Field Theory」 The 2nd Asian School of Particles, Strings and Cosmology, 2008年1月16日~18日.
- 2. 石橋 延幸 「D-brane と弦の場の理論」立教大学、2007年11月10, 15, 16日.

# 〈研究成果発表(講演)〉

[国際会議]

- 藏 靖 嘉伸「Dynamical Wilson quark simulations toward the physical point」 The XXV International Symposium on Lattice Field Theory 招待講演 (Regensburg, Germany, July 30 - August 4, 2007)
- 2. 浮田 尚哉「Light hadron spectrum with 2+1 flavor QCD with O(a)-improved Wilson quarks」, The XXV International Symposium on Lattice Field Theory (Regensburg, Germany, July 30 August 4, 2007)
- 3. 加堂 大輔 「Application of Wilson chiral perturbation theory to 2+1 flavor lattice QCD with O(a)-improved Wilson quarks」 The XXV International Symposium on Lattice Field Theory (Regensburg, Germany, July 30 - August. 4, 2007)
- 4. 梅田 貴士 「Study of constant mode in charmonium correlators at finite temperature」 The XXV International Symposium on Lattice Field Theory (Regensburg, Germany, July 30 August 4, 2007)
- 5. 梅田 貴士 「Study of constant mode in charmonium correlators in hot QCD」 QCD in extreme conditions (INFN Frascati, Rome, Italy, August 6-8, 2007)
- 6. 梅田 貴士 「Charmonium dissociation temperatures in lattice QCD with a finite volume technique」 The 20th International Conference on Ultra-Relativistic Nucleus-Nucleus Collisions (QM2008) (Jaipur, India, Feb. 9, 2008)
- 7. 吉江 友照「QCDml: Update Proposal」Workshop ILDG10 (Video conference hosted by CSSM, May 18, 2007)

- 8. 吉江 友照「Marking up lattice QCD configurations and ensembles」The XXV International Symposium on Lattice Field Theory (Regensburg, Germany, July 30 - August 4, 2007)
- 9. 吉江 友照「Update of the QCDmll」Workshop ILDG11 (Video conference hosted by CSSM, Nov 30, 2007)
- 10. 青木 慎也「Can we extract physics at fixed topological charge ?」YITP@40 Aniversary Symposium 招待講演 (SUNY at Stony Brook, Stony Brook, NY, USA, May 2-5, 2007)
- 11. 青木 慎也「Hadron interactions from lattice QCD」The XXVth International Symposium on Lattice Field Theory 招待講演 (Regensburg, Germany, July 30 - August 4, 2007)
- 12. 青木 慎也「Nuclear force from lattice QCD」Riken BNL Research Center Annual Review meeting (Riken BNL Research Center, Upton, USA, November 5-6, 2007)
- 石井 理修「Lattice QCD approach to baryon-baryon potentials」 Nuclear Physics at J-PARC – Pre-symposium of INPC2007– (RICOTTI in Tokai village, Japan, June 1–2, 2007).
- 14. 石井 理修「Lattice QCD studies to nuclear force」International Nuclear Physics Conference(INPC2007) (Tokyo, Japan, June 2007).
- 石井 理修「Lattice QCD approach to nuclear force」, The XXV International Symposium on Lattice Field Theory (Regensburg, Germany, July 30 - August 4, 2007).
- 16. 石井 理修「(The) Nuclear Force from lattice QCD」, Workshop on Hadron Physics on the Lattice 招待講演 (Milos, Greece, September 2007).
- 17. 石井 理修「Lattice QCD calculation of Nuclear Forces」The international workshop on chiral symmetry in hadrons and nuclei 招待講演 (Osaka, Japan, November 13 16, 2007).
- 18. 石井 理修「Lattice QCD approach to NN potentials」QCD Downunder II (Auckland, New Zealand, January 17 19, 2008).
- 19. 滑川 裕介 「Thermodynamics of  $N_f = 2$  QCD on anisotropic lattices」 The XXV International Symposium on Lattice Field Theory (Regensburg, Germany, July 30 August 4, 2007)
- 20. 中村 庸介 「Non-perturbative renormalization of four-quark operators and  $B_K$  with Schroedinger functional scheme in quenched domain-wall QCD」 The XXV International Symposium on Lattice Field Theory (Regensburg, Germany, July 30 August 4, 2007)

- 石橋 延幸 「D-branes and closed string field theory」Progress of String Theory and Quantum Field Theory 招待講演 (Osaka City University, Osaka, Dec. 7-10, 2007)
- 22. 佐藤 勇二 「S-matrix in AdS/CFT」Asia-Pacific Center for Theoretical Physics Workshop "Liouville, Integrability and Branes (4)" 招待講義 (APCTP, Pohang, Korea, December 11- 24, 2007)
- 23. 八田 佳孝 「Small-x physics in QCD and in gauge/string duality」YITP International Symposium "Fundamental Problems in Hot and/or Dense QCD" (京都大学基礎物理学研究所、京都、2008年3月3-6日)

[国内学会、研究会]

- 浮田 尚哉「Light hadron spectrum with 2+1 flavor dynamical O(a)-improved Wilson quarks」日本物理学会 第62回年次大会(北海道大学、札幌、200 7年9月21-24日)
- 2. 浮田 尚哉 「O(a) 改良されたウィルソンフェルミオンを用いた現実的なクォー ク質量での  $N_f = 2 + 1$  格子 QCD とハドロンスペクトラム」日本物理学会年 会 第63回年次大会(近畿大学、東大阪、2008年3月22-26日)
- 加堂 大輔「Application of Wilson chiral perturbation theory to 2+1 flavor lattice QCD with O(a)-improved Wilson quarks」日本物理学会 第62回年次 大会(北海道大学、札幌、2007年9月21-24日)
- 加堂 大輔「O(a) 改良したウィルソンフェルミオンによる Nf = 2+1 格子 QCD におけるウィルソンカイラル摂動論を用いた解析」日本物理学会 第63回年 次大会(近畿大学、東大阪、2008年3月22-26日)
- 5. 滑川 裕介「Topological susceptibility in 2+1 flavor lattice QCD」日本物理学 会 第63回年次大会(近畿大学、東大阪、2008年3月22-26日)
- 6. 梅田 貴士 「格子 QCD による QGP 物質の性質の解明」基研研究会「熱場の 量子論とその応用」(京都大学基礎物理学研究所, 京都, Sept.5-7, 2007)
- 7. 梅田 貴士 「Finite temperature lattice QCD with Nf=2+1 Wilson quark action」日本物理学会第62回年次大会(北海道大学、札幌、2007年9月21-24日)
- 8. 梅田 貴士 「Lattice QCD study of charmonium dissociation temperatures」日本物理学会第63回年次大会(近畿大学、東大阪、2008年3月22-26日)
- 9. 大野 浩史「有限温度格子 QCD によるチャーモニウム消失温度の探索」日本物 理学会 第63回年次大会(近畿大学、東大阪、2008年3月22-26日)

- 10. 谷口 裕介 「Non-perturbative renormalization of quark mass for three flavours QCD with Wilson fermion and RG improved gauge action」日本物理学会第 62回年次大会(北海道大学、札幌、2007年9月21-24日)
- 11. 吉江 友照「格子 QCD 計算の将来像 –ペタフロップス計算機からグリッドまで」「計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム(筑波大学、つくば、2007年9月3-4日)
- 12. 吉江 友照「格子 QCD データグリッド ILDG/JLDG の開発と運用」日本物理 学会 第62回年次大会(北海道大学、札幌、2007年9月21-24日)
- 13. 吉江 友照「シミュレーションのためのデータグリッド –JLDG/ILDG の現状 と将来」in シンポジウム"未来の素粒子・原子核数値シミュレーション"(エ ポカルつくば、つくば、2007年12月19-20日)
- 14. 吉江 友照「HEPnet-J/sc 報告」HEPnet-J 利用者会 2008 (岡山大学,岡山、 2008年1月13日-14日)
- 15. 青木 慎也「格子 QCD のチャレンジ:ハドロンからハドロン間相互作用へ」in シンポジウム"未来の素粒子・原子核数値シミュレーション"(エポカルつく ば、つくば、2007年12月19-20日)
- 石井 理修「The nuclear force from lattice QCD」, 理研 RIBF ミニワークショップ プ 不安定核・ストレンジハドロン原子核の合同理論研究会—軽いエキゾチック系の構造を中心として—"(理化学研究所、和光、2007年7月17日)
- 17. 石井 理修「格子 QCD による核力の研究」日本物理学会 第62回年次大会(北 海道大学、札幌、2007年9月21-24日)
- 18. 石井 理修「NN potentials from lattice QCD」原子核・ハドロン物理横断研究 会 招待講演 (KEK、つくば、2007年11月)
- 19. 石井 理修「核力の第一原理計算」日本物理学会 第63回年次大会(近畿大学、 東大阪、 2008年3月22-26日)
- 20. 武田 光平「all-to-all クォークプロパゲーターを用いた核子の相関関数の計算」 日本物理学会 第63回年次大会(近畿大学、東大阪、 2008年3月22-26日)
- 21. 石橋 延幸 「D-branes and closed string field theory」理研シンポジウム"弦の場の理論07"招待講演(理化学研究所、和光、2007年10月16-17日)
- 22. 佐藤 勇二 「Mocroscopic formulation of the S-matrix in AdS/CFT」KEK 集中セミナー 招待講演(KEK, つくば, 2008年1月10-12日)

- 23. 佐藤 勇二 「ゲージノ重力双対性は証明できるだろうか?」日本物理学会第
  62回年次大会 企画講演(北海道大学、札幌、2007年9月21-2 4日)
- 24. 馬場 裕 「D-brane states and disk amplitudes in OSp invariant closed string field theory」基研研究会「弦理論と場の理論 -量子と時空の最前線」(近畿大学、東大阪、2007年8月6-10日)
- 25. 馬場 裕 「D-brane States and Disk Amplitudes in OSp Invariant Closed String Field Theory」日本物理学会 第62回年次大会(北海道大学、札幌、2007年9月21-24日)
- 26. 馬場 裕 「OSp 不変な閉弦場の理論における annulus 振幅」日本物理学会 第 63回年次大会(近畿大学、東大阪、2008年3月22-26日)
- 27. 齋藤 卓 「Holographic QCD in Type 0 String Theory」日本物理学会 第63 回年次大会(近畿大学、東大阪、 2008年3月22-26日)

### く国内外の共同組織への参加、および顕著な学会の委員活動〉

1. 佐藤 勇二 日本物理学会会誌編集委員

### くその他特記事項〉

- 青木 慎也と石井 理修は2007年6月20日に「原子核の中にある" 強い力"の起源を解明 -格子ゲージ理論とスーパーコンピュータが拓く物質研究ー」という記者説明会を筑波大学本部棟で行った。その内容が読売(6月20日)、朝日(6月21日)、東京(7月15日)などの各新聞やそのインターネット版などで紹介された。
- 論文 N. Ishii,S. Aoki and T. Hatsuda, "Nuclear Force from Lattice QCD", Physical Review Letters 99 (2007) 022001 がネイチャー誌による2007年 の自然科学のハイライト研究21件の1つに選ばれた。(Research Highlights 2007, Nature 450 (2007) 1130)

# Ⅱ.素粒子実験グループ

教授	ч Z	金	信弘	,	受川	史彦			
講節	帀	原	和彦	,	丸山	和純	,	武内	勇司
助教	攵	戸村	友宣						
研究科	斗特別研究員	倉田	正和						
科研費	費研究員	三宅	秀樹						
大学院	完生	14 <b>名</b>							
研究生	E	2 <b>名</b>							
学群4	1年次生	11 <b>名</b>							

素粒子実験グループは高エネルギー粒子加速器を用いた素粒子物理学実験 CDF, ATLAS, および ILC に参加している. CDF は現在進行中, ATLAS はまもなく稼動, ILC は検討設 計中の実験である.本年度もそれぞれにおいて様々な研究活動が行われた.また,昨年度よ り,ニュートリノ崩壊の探索を目的とした高分解能光検出器の開発を開始した.

# 【1】 陽子・反陽子衝突実験 CDF

CDF 実験は,米国フェルミ国立加速器研究所のテバトロン加速器を用いた陽子・反陽子 衝突実験であり,日本をはじめアジア,北米,欧州の研究機関・大学からなる計11ヶ国の国 際協力により行なわれている.1996年の物理実験 Run Iの終了後 CDF 検出器およびテバ トロン加速器の増強を経て,2001年度より Run II 実験が開始された.

1996年に前回の物理実験 Run I が終了した後, テバトロン加速器は, 大幅な増強が行われ, ビーム輝度およびエネルギーが増大した.これに伴い CDF も,検出器の増強を行ってきた が,新しい検出器の建設を終え,2001年6月より本格的に物理データの収集 Run IIa を開始 した.テバトロン加速器の瞬間ルミノシティはこれまでに,最高値  $\mathcal{L} = 3.15 \times 10^{32}$  cm<sup>-2</sup> s<sup>-1</sup> が達成されており(2008年3月記録更新),設計値 $10^{32}$  cm<sup>-2</sup> s<sup>-1</sup>を突破している.また, 週毎の積分ルミノシティも最大で 50 pb<sup>-1</sup>程度,全積分ルミノシティは4.1 fb<sup>-1</sup> に達して いる. CDF 検出器により記録されたデータ量は約3.3 fb<sup>-1</sup> である. Run II 実験は,2009年 まで継続されることが決定しており,最終的には6-7 fb<sup>-1</sup>相当の衝突事象の収集が見込ま れている.また,テバトロン加速器の重心系エネルギーは1.8 TeV から1.96 TeV に増強さ れ,検出器も改良・増強の結果,検出効率が向上した.このため,データ量の増大のみなら ず,単位積分ルミノシティあたりの有効観測事象数の増加も得られている.

筑波大学グループでは, Run II用 CDF 検出器に関してシリコン飛跡検出器, 端冠部カロ リメータ, 飛行時間検出器, およびデータ収集システムの建設・調整・運転を行なってきた. これらの検出器は順調に稼働しており, 実データを用いた較正がなされて, 物理解析に使用 されている.

以下には, Run II 実験でこれまでに得られた物理解析の結果および今後期待される成果 について主なものを記す.



図 1: W<sup>±</sup> ボソンと光子の随伴生成の測定.候補事象の(左)レプトン-ニュートリノ-光子 3体系の横方向質量と(右)光子の横運動量の分布.

#### (1) 電弱相互作用の物理

電弱統一理論は非可換ゲージ理論であり、ゲージボソン同士の自己結合を含む、ゲージボ ソンの対生成を測定することにより、理論の詳細な検証が可能となる、CDF実験では、 $W^{\pm}$ ボソンと光子の随伴生成の研究を継続した、Wボソンの電子への崩壊様式を新たに加え、1 fb<sup>-1</sup>のデータを解析した結果、光子の横運動量 7 GeV/*c* 以上の領域に 908 (857)の候補事象が  $W \to e\nu (\to \mu\nu)$ チャンネルで観測された、図1にレプトン-ニュートリノ-光子 3 体系の横方向質量と光子の横運動量の分布を示す、いずれも期待されるものとよい一致を示している、生成断面積は $\sigma(\bar{p}p \to W\gamma X) \cdot \mathcal{B}(W \to \ell\nu) = 18.03 \pm 0.65 \pm 2.55 \pm 1.05$  pb であり、理論値 19.3 ± 0.4 pb とよく一致する、

#### (2) トップクォークの物理

CDF 実験による 1995 年のトップクォーク発見後十年以上が経過し, Run II 実験におい ては高統計のトップクォーク事象を用いて,その様々な性質がより詳細に研究されている. テバトロンでのトップクォーク生成は,クォーク・反クォーク衝突を素過程とする対生成が 主である.その生成断面積は多くの終状態を用いて測定されている.トップクォークの崩壊 で生じた W ボソンが両方ともレプトン対に崩壊する dilepton チャンネルでは,1.2 fb<sup>-1</sup> 相 当のデータを用いて

 $\sigma_{t\bar{t}}(dilepton) = 6.2 \pm 1.1 \pm 0.7 \pm 0.4 \text{ pb}$ という新しい結果を得た. W ボソンの一方がレ プトン対に崩壊し,他方が  $q\bar{q}'$ 対に崩壊する lepton+jets チャンネルでは, $\sigma_{t\bar{t}}(dilepton) = 8.2 \pm 0.5 \pm 0.8 \pm 0.5 \text{ pb}$ を得ている.測定結果は理論予想を良く支持している.

トップクォークの質量の測定では,lepton+jet チャンネルにおいて 1.7 fb<sup>-1</sup> のデータに 力学的最尤法 (Dynamical Likelihood Method) と呼ばれる方法を適用し  $M_{top} = 171.6 \pm 2.0 (stat) \pm 1.3 \text{ GeV}/c^2$  という精度の高い結果を得た.CDF 実験におけるトップクォーク質 量の最新の測定結果をまとめたものを図2(右)に示す.他実験も含むすべての測定の平均値



図 2: トップクォークの質量測定.左:Lepton+jets チャンネルでの力学的最尤法を用いた 測定.トップクォーク質量とジェットのエネルギー尺度の2次元尤度分布.右:CDF実験での測定一覧.



図 3: W ボソンとトップクォークの質量の測定とヒッグス粒子の質量に対する制限.



図 4:  $B_s^0 \overline{B}_s^0$  混合における CP 対称性の破れの探索 (左):  $B_s^0 \rightarrow J/\psi \phi$  の信号 (右): 位相  $\beta_s$  と崩壊率の差  $\Delta \Gamma_s$  の 2 次元尤度分布 .

は $M_{\text{top}} = 172.6 \pm 1.4 \text{ GeV}/c^2$ である.トップクォークの質量とWボソンの質量を共に測定することにより,ヒッグス粒子の質量に対する制限を得る.図3にこれを示す.ヒッグス粒子の質量について $M_{\text{Higgs}} = 87^{+36}_{-27} \text{ GeV}/c^2$  (68%CL) および $M_{\text{Higgs}} < 160 \text{ GeV}/c^2$  (95%CL) が与えられた.

その他,現在進行中の解析に,dilepton チャンネルを用いたトップクォーク対生成機構の 解明とスピン偏極度相関の測定,電弱相互作用によるトップクォークの単一生成の観測など がある.

(3) **B**粒子の物理

陽子・反陽子衝突では b クォークの生成率が高いため,その崩壊を効率よく収集すること ができれば,精度の高い測定が可能となる.CDF Run-II 実験では,Silicon Vertex Trigger (SVT)と呼ばれる装置を導入した結果, B 粒子やチャーム粒子などの長寿命粒子の崩壊物 を選択的に効率よく収集することが可能となった.

CDF Run II 実験での *B* 粒子の物理の目標のひとつは,ストレンジネスを持つ中性 *B* 中間子 *B*<sup>0</sup><sub>s</sub>の粒子・反粒子振動の観測にあった.昨年度にはこれを達成し,弱い相互作用における CP 対称性の破れを記述する小林・益川理論を高精度で検証することに成功した.

 $B_s^0 \overline{B}_s^0$ 振動の観測は,それに同期した CP 非対称度の測定の道を開いた. $B_s^0 \rightarrow J/\psi \phi$ 崩壊における CP 非対称度測定が初めて行われ, CP 位相  $\beta_s$ に対する制限が与えられた(図4).近い将来には非対称度を  $\pm 0.2$  程度の精度で測定できると期待され,もし大きな CP の破れが観測されれば,標準理論を超える新しい物理の存在を示す確たる証拠となる.



図 5: (左)  $\bar{p}p \rightarrow WHX \rightarrow \ell \nu b \bar{b}X$  過程によるヒッグス粒子の探索.二次崩壊点を用いて同定した  $b \bar{b}$  ジェット対の質量分布(右)標準模型ヒッグス粒子探索の結果.生成断面積の上限値の理論値に対する比を質量の関数として示したもの.

(4) 新粒子の探索

ヒッグス粒子の探索が種々の過程を用いてなされた.テバトロンでのヒッグス粒子は,素 過程  $gg \rightarrow H$ による単一生成と弱ゲージボソン  $W^{\pm}$ ,  $Z^{0}$  との随伴生成が主である.質量が 軽い場合(およそ 120 GeV/ $c^{2}$  以下)は  $H \rightarrow b\bar{b}$ 崩壊がほとんどであり,重い場合には弱 ゲージボソン対  $W^{+}W^{-}$  および  $Z^{0}Z^{0}$  への崩壊が主なものとなる.

生成率は,単一生成が一番高いが,ヒッグス粒子が軽い場合には $p\bar{p} \rightarrow b\bar{b}X$ 過程による バックグラウンド中に信号を見出すのはほぼ不可能である.よって,弱ゲージボソン $W^{\pm}$ (あるいは $Z^{0}$ )との随伴生成 $p\bar{p} \rightarrow HWX \rightarrow b\bar{b}\ell\nu X$ を用いる.終状態は,高運動量のレプ トンと消失運動量(あるいはレプトン対)と $b\bar{b}$ クォーク対となる.bクォーク起源のジェッ トを,トップクォーク探索時と同様に,二次崩壊点の存在を要求して同定する.主なバック グラウンドは,QCD 過程によるW粒子と $b\bar{b}$ 対の随伴生成である.図5(左)に $b\bar{b}$ 候補対 の質量分布を示す.

中間質量領域(140 GeV/ $c^2$  程度)では,  $H \rightarrow W^+W^{(*)-}$ 崩壊が寄与し始める. W ボソンの随伴生成では,終状態に W ボソンが3個存在し,そのうちの二つは必ず同電荷を持つ.それらがレプトンに崩壊すれば,同符号のレプトン対という特徴的な信号となる.

高質量領域では, $W^+W^-$ への崩壊が主になるが,この終状態はバックグラウンドが少なく,単一生成  $p\bar{p} \rightarrow HX$ の探索が可能である.終状態は,二つの高運動量レプトンと大きな損失運動量となる.

これらの過程を用いてヒッグス粒子による寄与を探索したが,いずれも既知のバックグラウンドによるものと矛盾しない.よって,ヒッグス粒子生成に対する上限を設定した.図5(右)にこれらの上限値を標準模型による予言値で規格化したものを示す.実験値は予言値の数倍であり,質量160 GeV/c<sup>2</sup> 近辺では2008年中にその存在が排除される可能性がある.

以上は CDF Run II 実験においてこれまでに得られた結果および今後期待される成果を

述べたものであるが, CDF 実験は,LHC 加速器が本格稼働し物理の結果を生みだし始める 2010年頃までは,エネルギー最先端の実験であり続ける.2009年末までに6-7fb<sup>-1</sup>相当 のデータを蓄積する予定であり,さらに米国年度2010年の運転継続も検討されている.こ れは現在までに解析されたデータの数倍となり,素粒子物理学の知見を深める多くの結果を 生み出すと期待される.

# 【2】 LHC ATLAS 実験

欧州セルン研究所の陽子・陽子衝突型加速器 LHC は, すべての加速器用電磁石の据え付 けが終了し,8分割したセクター毎に順次,冷却,励磁の試験が開始された.試験の結果, 大きく2つの問題点が明らかになった.その内のひとつ,衝突点近くの四重極電磁石群の固 定強度不足は補強により解決された.もうひとつの問題点は RF フィンガーと呼ばれる,電 磁石システム間の接合部の配管である.液体ヘリウムにより 1.9 K まで冷却すると約 50 m 長の電磁石システムは約4 cm 縮み,この RF フィンガーはその変形を調整するためのもの である.目標温度までの冷却を達成するために管の内径形状も一様に保持しなくてはなら ない.試験冷却の段階で,いくつかの RF フィンガーが破損し,電磁石システム間の距離や 角度への精度要求が厳しいことが判明した.この問題点を解決しながら 2007 年度中に半数 のセクターの冷却を達成した.但し,一度冷却に成功したものを室温に戻して再び冷却し たところ再度の不具合いが発生し,2008 年度は,設計の 14 TeV を下回る衝突エネルギー 10 TeV での運転を検討している.

ATLAS 検出器のすべての実験装置は,衝突点である地下 100 m の実験室に据え付けられた.据え付け後,順次,調整運転を開始し,定期的にその時点で稼動している装置を統合したデータ収集システムの試験を繰り返している.

筑波大学のグループは,半導体を用いた中央部飛跡検出器(SCT)の建設を担当してきた.2007年度は,SCTの据え付けと調整を行った.また,再構成する飛跡の精度解析を開始した.継続して統計精度を向上させるために,加速器のビーム輝度をLHCの設計を超えたSuperLHC実験が検討されているが,そのような高放射線環境でも稼動する新しいシリコン検出器の開発と,SOIピクセル検出器の開発を継続した.

(1) シリコン飛跡検出器 (SCT)

バレル部 SCT は,その外側に位置する TRT (遷移輻射型飛跡検出器)とともに2007年 2月に地下の ATLAS 検出器本体に組み込まれた(図6).ケーブルや冷却パイプなどの敷 設はすでに終了していたので,引き続いて結線や冷却試験を行った.膨大な数のケーブルは 2005年にケーブル単体の試験を開始していたもので,2007年9月に高電圧、低電圧、信号 ラインすべての試験が完了した.冷却システムに関しては,約-20°Cの液体冷媒を常温ガ スに加熱するヒータが,全48系統の内の1系統でショートする問題が発生した.X線等も用 いた徹底的な検査と設計の見直しを経て,最終的には12月になって全システムの冷却が可 能となった.引き続いて宇宙線試験を行い,2008年2月に宇宙線の飛跡を初めて観測した.

SCT モジュールの一部は,2006 年度の地上での試験の段階でバイアス電圧ラインが高抵 抗になっていると判明した.再現試験を経て,センサー裏面との電気接触を担う銀ペースト 入りの導電性エポキシがアルミ面との間に絶縁性薄膜を発生させていると判明した.これは 5 V も電圧を加えれば破壊されるので,実際の運転では問題がないと結論できる.





図 6: ATLAS 測定器に組み込まれる SCT + TRT.

図 7: p型シリコンセンサーの放射線耐性. 全空乏化電圧と収集電荷の変化を様々なウェ ハ 製造法に対して評価した.

バレル部モジュールは,2枚ずつのシリコンセンサーを基板の上下に張り合わせた形状を しているが,基板の加工精度のために完全な平面ではない.モジュールの製造時検査でこの 形状を測定をしているので,飛跡再構成に実際に与える影響の評価を,モンテカルロ法を用 いて開始した.衝突実験の初期では,ψ粒子やZ粒子を観測して,運動量測定の較正を行 う.今後,SCTの非平面度のこの較正への影響を見積もっていく.

#### (2) SuperLHC のための高放射線耐性シリコンの開発

LHC は稼動 3 年で目標とする瞬間輝度  $10^{34}$  cm<sup>-2</sup> s<sup>-1</sup> に達する予定である.それ迄のデー タ量で 1 TeV までのヒッグス粒子は発見できるはずであるが,さらに継続して測定精度を 向上させ,ヒッグス粒子の自己結合も測定するために,2016 年以降に瞬間輝度を一桁上げ る SuperLHC 実験が計画されている.

SuperLHC では,粒子数密度が増大し放射線環境が厳しくなるので,現行の飛跡検出器は,再設計しなくてはならない.ドリフト時間を測定する TRT は応答の速いシリコン検出器に交換し,現在の SCT 部は,電極長を短くしたものにすることで高粒子数密度でも飛跡検出できるようにする.

現 SCT は  $2 \times 10^{14}$  n/cm<sup>2</sup> 相当の放射線耐性がある.これは LHC 実験で 10 年分に相当 するが SuperLHC では 1 年である.基板には n 型の高抵抗シリコンを用いているが,放射 線を浴びると実効的に p 型不純物が増え,全空乏化に要する電圧は次第に増大する.n 型基 板には p 型の電極が形成されているので,p 型に変換した後は全空乏化電圧がシステムの耐 圧(500 V)を超えると信号分離ができなくなる.そこで我々は,p 型基板に n 型電極を埋 め込むセンサーを候補としてその評価を行っている.全空乏化電圧が上昇するのは同じであ るが, pn 接合面が常に電極側にあるので,システムの耐圧を越えた場合に電圧を下げても 信号分離が可能であるという特長がある.収集できる電荷量は減少するが,電極を短くする ことでノイズが減り総合的なS/Nは大きく劣化しないことが期待できる.p型基板の場合は 電極間の電気的分離のための構造が別途必要で,そのために今までp型基板を用いた大規 模なシリコン検出器は検討されてこなかった.電極分離の性質は用いるウェハーによって異 なるため,候補となるいくつかのものに対して分離構造の最適化や放射線耐性の測定を行っ た(図7).設計の要点となる収集電荷量の測定をレーザーを用いて評価し,収集電荷の減 少が少なく SuperLHC でも使用できる候補が得られた.

新たに p 型基板によるシリコンマイクロストリップ検出器を設計するにあたって,パンチ スルー特性や耐圧構造などの基礎特性を測定した.また,放射線を浴びたセンサーのアニ リング特性も評価した.

新しい SCT ではモジュール数が増えるので,電源供給を,従来のモジュール個別へ供給 する方式から複数のモジュールに対する方式(直列電源供給方式)に変更する必要がある. ケーブル本数や消費電力量を現状から大きく増やせないからである.直列電源供給ではモ ジュール毎にグランドレベルがシフトするので,実際にレギュレ タと LVDS 回路を用いて 現行のモジュール4台を稼動させて,宇宙線を観測し,ノイズの状況を評価した.

#### (3) SOI 技術を用いたピクセル検出器の開発

Silicon-on-Insulator (SOI)技術による CMOS プロセスは,最先端のプロセッサ等に実用 化されているが,トランジスタが個別に酸化膜により完全に囲まれているので,高速,低消 費電力などの特徴がある.SOIのウェハ 製造法のひとつに UNIBOND という張り合わせ 法があるが,我々は SOI 基板部 (handle wafer)に高抵抗のシリコン,SOI 回路部に通常のシ リコンを用いて荷電粒子を測定できる読み出し回路一体型ピクセル検出器の開発を,KEK の測定器開発室のプロジェクトの一つとして継続した.開発したピクセル検出器は,36×36 のピクセル信号を個別に増幅,保持し,外部からのアドレス信号に従いアナログ信号を出力 するアクティブピクセルセンサー型のものである.テストパルスやレーザーを用いる試験に より検出器性能を評価し,異常ピクセル率が当初の約5%から10分の1以下になり,検出器 あたり2~3 ピクセルまで減少した.これらの異常は読み出し回路部の不良であり,既存技 術にないため新たに開発した SOI 酸化膜(BOX)を貫いて電極を形成する技術に関しては, この研究により確立できた.

高抵抗シリコンに逆バイアスを加えることで空乏層を広げ,荷電粒子を検出できるピクセル検出器を開発することが最終目標であり,そのためには高圧耐性のある設計が必要となる. 2006年度の試作品は100Vで暗電流が急増した.赤外線カメラを用いて暗電流が発生する場所を特定することで,電極形状を変更し,電極インプラントのエネルギーを上げることで2007年度の試作品は約130Vまで耐圧が向上した.

実際に高エネルギー実験に応用するには,放射線耐性が重要になる.SOIシリコンは薄い(50 nm)ので放射線による直接の損傷は小さいが,酸化膜の帯電による影響が顕著になる. また,裏面に電圧を加えるとBOX層を介して表面の回路動作に影響を与える.BOXの帯 電により影響の程度が変わることも予見できる.そこで,回路部分の放射線損傷をコバルト 線源を用い,回路と基板部両方への影響を70 MeVの陽子線を照射することで評価した.照 射はピクセル検出器と,トランジスタ単体を評価できるTrTEGの両方に対して行った.



図 8: ILC (GLD) 検出器の構造,およびカロリメータのモジュールの拡大図(左).カロリ メータは,吸収体と検出層をもつサンプリングカロリメータとなっており,検出層は,スト リップシンチレータを横方向と縦方向を交差させ並べた構造になっている(右上).またス トリップシンチレータには波長変換ファイバーが埋め込まれ,光検出器によって読み出され る(右下).

# 【3】 ILC 実験

次世代のエネルギーフロンティアにおける素粒子実験を遂行するため,重心系エネルギー 0.5 TeVの電子・陽電子衝突型線形加速器を建設する計画が提案されている.国際協力によ り進められているこの計画は ILC 計画と名付けられ,精力的に加速器や測定器の研究・開 発が行われている.ILC での実験では,素粒子である電子を衝突に用いるので,加速したエ ネルギーを効率良く衝突に使用することができ,またバックグラウンドの少ない環境での精 密測定や新粒子探索が可能となる.

現在筑波大学グループでは, KEK, 神戸大, 信州大, 新潟大等と共同で, ILC 実験にお いて使用される検出器(図8左)のうち, カロリメータ(エネルギー測定器)の研究開発を 行なっている.現在計画されている ILC カロリメータでは, シンチレータとタングステン 板を積層構造にしたサンプリングタイプと呼ばれるものが考えられている.

ILC 実験では,ゲージボソンやトップクォーク,ヒッグス粒子などの崩壊により発生する多数のジェットのエネルギーを精密に測定することが非常に重要であり,そのために ILC 実験では,ジェットに対するエネルギー測定精度をより向上させるため,Particle Flow Algorithm と呼ばれるジェット再構成/エネルギー測定方法が提唱されている.この方法では,ジェット 中の粒子をカロリメータ中で一つ一つ区別し,中性粒子についてはカロリメータでエネル ギーを測定し,荷電粒子の運動量については,より優れた分解能を持つ飛跡検出器で測定す



図 9: 1600-pixel MPPC の性能測定の結果.それぞれ,増幅率(左上),ノイズ頻度(右上), クロストーク(左下),および光子検出効率(右下)のバイアス電圧依存性を表す.

ることにより,ジェットに対するエネルギー分解能の向上を図るものである.このような方法を用いるには,カロリメータは単一の入射粒子に対する優れたエネルギー分解能に加え, 非常に細かいセルに分割された構造を有することが要求される.我々は,このような細分割 を実現するために,図8(右下)のように,シンチレータを短冊(ストリップ)型にし,交差 させて交互に積み重ねる方法を採用した.

我々は,これまで,このような構造を持ったカロリメータのテストモジュールを試作器を 作成し,電子,パイ中間子等のビームによって得られたデータの解析を行ってきた.また, シミュレーションを用いて,カロリメータのセル(分割)サイズの最適化,その際の性能等 の評価も行ってきた.そして,2007年度においては,主にカロリメータの光信号読み出し のための,新型光センサーの研究開発を行った.

(1) 光信号読み出し MPPC の開発

ILC カロリメータでは,非常に細かいセル構造が要求されるため,読み出しのために膨大 な数の光センサーが必要となる.また,磁場中で使用されることもあり,これまで広く用い られてきた光センサーである光電子増倍管の使用は難しい.このため,ILC カロリメータ では,新しいタイプの半導体光センサーである MPPC (Multi Pixel Photon Counter)を採 用する予定である.MPPCは,小さく低コストで磁場の影響を受けないため,ILC カロリ メータの読み出しには最適である.我々は,MPPCの実用化を予定している浜松ホトニク ス,また高エネルギー加速器研究機構を中心とした光センサーグループと共に,ILC カロリ メータでの使用を目指して MPPC の研究開発を行ってきた.

今年度は 1600 ピクセルの 1 mm× 1 mm の MPPC のサンプルを用いて基本的な性能評



図 10: 最適 Hf 成膜条件探索 . Hf 膜を成膜する際のスパッタリングガス圧力・放電パワー の条件を変えて Hf 成膜後の基板上での歪み,かつ,表面粗さを測定し,最適な Hf 成膜条 件を探索した.

価を行った.光検出効率,応答線形性,増幅率,ノイズ頻度,クロストークの確率,放射線 耐性,信号頻度依存性の測定を行い,それぞれ要求性能は,応答線形性を除きほぼ満たされ ていることが分かった(図9).応答線形性については,現在数百光電子数相当までの出力に 対して線形性が保たれているが,我々の要求値は,およそ千光電子数相当までの出力に対す る線形性であり,この点においてはまだ改良の余地があるということが分かった.今後,長 期安定性,多数のサンプルにおける個体差の測定,磁場中での動作テストなどを行い,試作 器を用いたビームテストを行う予定である.

# 【4】 超伝導体赤外線検出器の開発

過去 10 年間に超伝導トンネル接合素子 STJ (Superconducting Tunnel Junction)を用い た光検出器の開発研究が世界で広く行われてきた.これは超伝導体が半導体と比較してはる かに小さいエネルギーバンドギャップを有することを利用して,半導体検出器などの既存の 光検出器に比べてエネルギー分解能がはるかに高い光検出器を原理的に実現できることが強 い動機となっている.このことから,高エネルギー分解能のX線検出器や赤外線検出器への 応用を目指して開発が進められてきた.

本開発研究では,遠赤外線( $E_{\gamma} \sim 数 10 \text{ meV}$ )のエネルギーを一光子ごとに数%の精度 で測定するために,従来用いられている Nb (3.1 meV), Al (0.34 meV)よりもさらにエネ ルギーバンドギャップの小さい Hf (0.051 meV,  $T_c = 0.165$  K) あるいは W (0.0049 meV,  $T_c = 0.016$  K)を超伝導素材として用いた超伝導体検出器の開発を目指し,これまで困難で あった赤外線領域の一光子分光を目指した STJを開発する.本研究では,Hf や W といっ た,より転移温度が低い超伝導体の使用を計画しているため,10 mK 程度の極低温での安 定した運転を妨げる問題を解決しなければならない.

2007年1月より KEK 測定器開発室のプログラムの一つとして筑波大学, KEK, 理研の

共同研究によって,この STJ 開発が進められてきた.この開発研究では,これまでの超伝 導体検出器の開発において問題となっていることを解決しつつ,新しい超伝導体素材であ る Hf あるいは W を用いた超伝導体検出器の開発を行っている.2007 年度は,Hf 成膜(ス パッタリング)のためのガス圧力・放電パワー等の最適条件の探索(図10),および Hf 膜の パターン加工方法の確立を行った.特に Hf 膜の場合,これまでの Nb 膜や Al 膜において用 いられてきた加工技術が使えないため,Hf 膜のパターン加工例は,世界初である.Hf-STJ 製作に向けた技術的問題は,ほぼクリアしたので,今後3年あまりの期間に20 mm 角程度 の Hf,W という超伝導素材を用いた超伝導体検出器実証モデルを開発する.

この検出器はニュートリノ崩壊探索実験に用いることを目的として開発されてきた.ニュートリノがディラック粒子であるならば,標準模型の枠内で重いニュートリノ( $\nu_3$ )は軽いニュートリノ( $\nu_2$ )と光子に寿命約10<sup>36</sup>年で崩壊する.また右巻き weak boson  $W_R$ が存在する場合には,このニュートリノの寿命ははるかに短くなる.現在の $W_R$ の質量下限および $W_R$ と $W_L$ の混合角の上限を用いるとニュートリノの寿命は最小で10<sup>17</sup>年程度となる.我々はニュートリノの崩壊で生成する光子のエネルギースペクトルを測定することによってニュートリノ崩壊を観測することを目指す.このような長寿命のニュートリノの崩壊を観測するには,非常に多くのニュートリノが必要であるので,宇宙背景ニュートリノを用いる.その崩壊で生成される遠赤外線光子のエネルギースペクトルが高い端(~30 meV)で急に落ちることが崩壊の信号となる.我々は,これまでに,この宇宙背景ニュートリノの輻射崩壊のシミュレーションを行い,検出器に要求される性能は,30 meVの光子に対して2~3%のエネルギー分解能を有することであることがわかった.

今後,超伝導体検出器技術をさらに発展させて,遠赤外線領域で一光子ごとに数%の分解 能でエネルギーを測定できる検出器の実現を目指す.この検出器はニュートリノ崩壊探索, 宇宙赤外線背景輻射の観測などの素粒子実験,宇宙観測のみならずさまざまな分野における 実用にも供する.

### 【5】 外部資金

- 日米科学技術協力事業「陽子・反陽子衝突による重い粒子の検出(CDF)」 共同研究(日本側参加機関:筑波大物理,大阪市大理,早稲田大理工,岡山大理,近 畿大理工,京都教育大理.日本側研究代表:金信弘) 校費:70,000千円,旅費:18,000千円
- 2. 科学研究費補助金「陽子反陽子衝突実験 CDF によるトップとボトム・フレーバーの物理」
   共同研究(研究代表者:金信弘)特定領域研究 35,800千円
- 3. 科学研究費補助金「CDF 実験におけるトップクォークの質量の精密測定と対共鳴生成の探索」
   丸山 和純:若手研究(B) 1,400千円
- 4. 科学研究費補助金「中性 B 中間子の η'η'K<sub>S</sub> 崩壊の探索と CP 非保存現象の研究」
   三宅 秀樹:若手研究(B) 600 千円

# 【6】 研究発表

### (1) 学会誌等への発表論文

 "Measurements of Inclusive W and Z Cross Sections in pp̄ Collisions at √s = 1.96 TeV,"
 A. Abulencia *et al.* [CDF Collaboration], J. Phys. G 34, 2457 (2007).

2. "Search for V + A current in top quark decay in  $p\bar{p}$  collisions at  $\sqrt{s} = 1.96$  TeV,"

- A. Abulencia et al. [CDF Collaboration], Phys. Rev. Lett. 98, 072001 (2007).
- 3. "Measurement of the  $\Lambda_b^0$  lifetime in  $\Lambda_b^0 \to J/\psi \Lambda^0$  in  $p\bar{p}$  collisions at  $\sqrt{s} = 1.96$  TeV," A. Abulencia *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. Lett. **98**, 122001 (2007).
- 4. "Measurement of the ratios of branching fractions  $B(B_s^0 \to D_s^- \pi^+ \pi^+ \pi^-)/B(B^0 \to D^- \pi^+ \pi^+ \pi^-)$  and  $B(B_s^0 \to D_s^- \pi^+)/B(B^0 \to D^- \pi^+)$ ," A. Abulencia *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. Lett. **98**, 061802 (2007).
- 5. "Search for W' boson decaying to electron-neutrino pairs in pp̄ collisions at √s = 1.96 TeV,"
  A. Abulencia et al. [CDF Collaboration], Phys. Rev. D 75, 091101 (2007).
- 6. "Observation of exclusive electron positron production in hadron hadron collisions,"A. Abulencia *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. Lett. **98**, 112001 (2007).
- 7. "Measurement of the Helicity Fractions of W Bosons from Top Quark Decays using Fully Reconstructed tt Events with CDF II,"
  A. Abulencia et al. [CDF Collaboration], Phys. Rev. D 75, 052001 (2007).
- 8. "Measurement of the B<sup>+</sup> production cross section in pp̄ collisions at √s = 1960 GeV,"
  A. Abulencia *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. D **75**, 012010 (2007).
- 9. "Measurement of the top-quark mass in all-hadronic decays in pp̄ collisions at CDF II,"
  T. Aaltonen *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. Lett. 98, 142001 (2007).
- 10. "Analysis of the quantum numbers J<sup>PC</sup> of the X(3872),"
  A. Abulencia *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. Lett. **98**, 132002 (2007).
- "Precision measurement of the top quark mass from dilepton events at CDF II,"
   A. Abulencia *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. D 75, 031105 (2007).
- 12. "Measurement of the Top Quark Mass in pp̄ Collisions at √s = 1.96 TeV using the Decay Length Technique,"
  A. Abulencia *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. D **75**, 071102 (2007).
- 13. "Search for Exotic S = -2 Baryons in  $p\bar{p}$  Collisions at  $\sqrt{s} = 1.96$  TeV," A. Abulencia *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. D **75**, 032003 (2007).

- 14. "Search for anomalous production of multi-lepton events in pp̄ collisions at √s = 1.96 TeV,"
  A. Abulencia *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. Lett. 98, 131804 (2007).
- 15. "Measurement of the Inclusive Jet Cross Section using the k<sub>T</sub> algorithm in pp̄ Collisions at √s = 1.96 TeV with the CDF II Detector,"
  A. Abulencia *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. D **75**, 092006 (2007) [Erratumibid. D **75**, 119901 (2007)].
- "Observation of WZ Production,"
   A. Abulencia *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. Lett. **98**, 161801 (2007).
- 17. "Search for new physics in lepton + photon + X events with 929 pb<sup>-1</sup> of pp̄ collisions at √s = 1.96 TeV,"
  A. Abulencia *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. D **75**, 112001 (2007).
- 18. "First Measurement of the Ratio of Central-Electron to Forward-Electron W Partial Cross Sections in pp̄ Collisions at √s = 1.96 TeV,"
  A. Abulencia *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. Lett. 98, 251801 (2007).
- 19. "Inclusive search for new physics with like-sign dilepton events in  $p\bar{p}$  collisions at  $\sqrt{s} = 1.96$  TeV," A. Abulencia *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. Lett. **98**, 221803 (2007).
- 20. "Measurement of  $\sigma_{\chi_{c2}} \mathcal{B}(\chi_{c2} \to J/\psi\gamma) / \sigma_{\chi_{c1}} \mathcal{B}(\chi_{c1} \to J/\psi\gamma)$  in  $p\bar{p}$  collisions at  $\sqrt{s} = 1.96$  TeV," A. Abulencia *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. Lett. **98**, 232001 (2007).
- 21. "Precise measurement of the top quark mass in the lepton+jets topology at CDF II,"
  A. Abulencia *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. Lett. **99**, 182002 (2007).
- 22. "Polarization of  $J/\psi$  and  $\psi(2S)$  mesons produced in  $p\bar{p}$  collisions at  $\sqrt{s} = 1.96$  TeV," A. Abulencia *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. Lett. **99**, 132001 (2007).
- 23. "Search for heavy, long-lived particles that decay to photons at CDF II,"A. Abulencia *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. Lett. **99**, 121801 (2007).
- 24. "Measurement of the top-quark mass using missing E<sub>T</sub> + jets events with secondary vertex b-tagging at CDF II,"
  T. Aaltonen et al. [CDF Collaboration], Phys. Rev. D 75, 111103 (2007).
- 25. "Search for New Particles Leading to Z+ jets Final States in pp̄ Collisions at √s = 1.96 TeV,"
  T. Aaltonen *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. D 76, 072006 (2007).
- 26. "Measurement of the  $p\bar{p} \rightarrow t\bar{t}$  production cross- section and the top quark mass at  $\sqrt{s} = 1.96$  TeV in the all-hadronic decay mode," T. Aaltonen *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. D **76**, 072009 (2007).

- 27. "First observation of heavy baryons  $\Sigma_b$  and  $\Sigma_b^*$ ," T. Aaltonen *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. Lett. **99**, 202001 (2007).
- "First Measurement of the W Boson Mass in Run II of the Tevatron,"
   T. Aaltonen *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. Lett. **99**, 151801 (2007).
- 29. "Observation and mass measurement of the baryon  $Xi_b^-$ ," T. Aaltonen *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. Lett. **99**, 052002 (2007).
- 30. "Search for a high-mass diphoton state and limits on Randall-Sundrum gravitons at CDF,"
  T. Aaltonen *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. Lett. **99**, 171801 (2007).
- 31. "Search for chargino-neutralino production in  $p\bar{p}$  collisions at  $\sqrt{s} = 1.96$  TeV," T. Aaltonen *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. Lett. **99**, 191806 (2007).
- 32. "Search for exclusive  $\gamma\gamma$  production in hadron-hadron collisions," T. Aaltonen *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. Lett. **99**, 242002 (2007).
- 33. "Search for new physics in high mass electron-positron events in pp̄ collisions at √s = 1.96 TeV,"
  T. Aaltonen *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. Lett. **99**, 171802 (2007).
- 34. "Search for Direct Pair Production of Supersymmetric Top and Supersymmetric Bottom Quarks in pp̄ Collisions at √s = 1.96 TeV,"
  T. Aaltonen *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. D 76, 072010 (2007).
- 35. "Search for Standard Model Higgs Bosons Produced in Association with W Bosons,"T. Aaltonen *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. Lett. **100**, 041801 (2008).
- 36. "Cross-Section Constrained Top Quark Mass Measurement from Dilepton Events at the Tevatron,"
  T. Aaltonen *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. Lett. **100**, 062005 (2008).
- 37. "A direct Measurement of the W Boson Width in ppbar Collisions at sqrt(s) = 1.96 TeV,"
  T. Aaltonen *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. Lett. **100**, 071801 (2008).
- 38. "Observation of Orbitally Excited B<sub>s</sub> Mesons,"
  T. Aaltonen *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. Lett. **100**, 082001 (2008).
- 39. "First Measurement of the Production of a W Boson in Association with a Single Charm Quark in Proton Anti-proton Collisions at √s = 1.96 TeV,"
  T. Aaltonen *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. Lett. **100**, 091803 (2008).
- 40. "Measurement of Inclusive Jet Cross Sections in Z/γ\*(→ e<sup>+</sup>e<sup>-</sup>)+ jets Production in pp̄ Collisions at √s = 1.96 TeV,"
  T. Aaltonen et al. [CDF Collaboration], Phys. Rev. Lett. 100, 102001 (2008).

- 41. "Search for chargino-neutralino production in pp̄ collisions at 1.96 TeV with high-p<sub>T</sub> leptons,"
  T. Aaltonen *et al.* [CDF Collaboration], Phys. Rev. D 77, 052002 (2008).
- 42. "Limits on Anomalous Triple Gauge Couplings in  $p\bar{p}$  Collisions at  $\sqrt{s} = 1.96$ -TeV," T. Aaltonen *et al.* [CDF Collaboration], arXiv:0705.2247 [hep-ex]. (Submitted to Phys. Rev. Lett.)
- 43. "Search for Third Generation Vector Leptoquarks in pp̄ Collisions at √s = 1.96 TeV,"
  T. Aaltonen *et al.* [CDF Collaboration], arXiv:0706.2832 [hep-ex]. (Submitted to Phys. Rev. Lett.)
- 44. "First Run II Measurement of the W Boson Mass,"
  T. Aaltonen *et al.* [CDF Collaboration], arXiv:0708.3642 [hep-ex]. (Submitted to Phys. Rev. D)
- 45. "Search for resonant  $t\bar{t}$  production in  $p\bar{p}$  collisions at  $\sqrt{s} = 1.96$  TeV," T. Aaltonen *et al.* [CDF Collaboration], arXiv:0709.0705 [hep-ex]. (Submitted to Phys. Rev. Lett.)
- 46. "Observation of Exclusive Dijet Production at the Fermilab Tevatron  $p\bar{p}$  Collider," T. Aaltonen *et al.* [CDF Run II Collaboration], arXiv:0712.0604 [hep-ex]. (Submitted to Phys. Rev. D)
- 47. "First Flavor-Tagged Determination of Bounds on Mixing-Induced CP Violation in  $B_s \rightarrow J/\psi\phi$  Decays," T. Aaltonen *et al.* [CDF Collaboration], arXiv:0712.2397 [hep-ex]. (Submitted to Phys. Rev. Lett.)
- 48. "Search for New Heavy Particles Decaying to  $Z^0 Z^0 \rightarrow eeee$  in  $p\bar{p}$  Collisions at  $\sqrt{s} = 1.96$  TeV," T. Aaltonen *et al.* [CDF Collaboration], arXiv:0801.1129 [hep-ex]. (Submitted to Phys. Rev. D)
- 49. "Search for the Higgs boson in events with missing transverse energy and b quark jets produced in proton-antiproton collisions at √S = 1.96 TeV,"
  T. Aaltonen *et al.* [CDF Collaboration], arXiv:0802.0432 [hep-ex]. (Submitted to Phys. Rev. Lett.)
- 50. "Two-Particle Momentum Correlations in Jets Produced in ppbar Collisions at  $\sqrt{s} = 1.96$  TeV," T. Aaltonen *et al.* [CDF Collaboration], arXiv:0802.3182 [hep-ex]. (Submitted to Phys. Rev. D)
- 51. "CDF Central Preshower and Crack Detector Upgrade,"
  A. Artikov, N. Kimura, K. Nakamura, K. Sato, F. Ukegawa, Y. Yamada *et al.*, arXiv:0706.3922 [physics.ins-det]. (Submitted to Nucl. Instrum. Methods)

- 52. "*B*<sup>0</sup><sub>s</sub> 中間子の粒子・反粒子振動の観測", 受川史彦,魚住聖,金信弘:日本物理学会誌 **62**,249 (2007).
- 53. "p-bulk silicon microstrip sensors and irradiation",
  Y. Unno, K. Hara *et al.*, Nucl. Instrum. Methods A579, 614-622 (2007).
- 54. "Evaluation of OKI SOI technology",
  Y. Ikegami, K. Hara, H. Miyake *et al.*, Nucl. Instrum. Methods A579, 706-711 (2007).
- 55. "Systematic study of micro-discharge characteristics of ATLAS barrel silicon modules",
  T. Kuwano, K. Hara *et al.*, Nucl. Instrum. Methods A579, 782-787 (2007).
- "Hybrid and module designs for ATLAS silicon tracker upgrade for super LHC", T. Kohriki, K. Hara *et al.*, Nucl. Instrum. Methods A579, 806-811 (2007).
- 57. "Anomalous IV behavior of ATLAS SCT microstrip sensors",
  Y. Nakamura, K. Hara *et al.*, Nucl. Instrum. Methods A579, 812-816 (2007).
- 58. "R&D of a pixel sensor based on 0.15-μm fully depleted SOI technology", T. Tsuboyama, K. Hara, H. Miyake *et al.*, Nucl. Instrum. Methods A583, 861-8865 (2007).
- 59. "The ATLAS semiconductor tracker end-cap module",
  A. Abdesselam, K. Hara *et al.*, Nucl. Instrum. Methods A575, 353-389 (2007).
- "The ATLAS microstrip sensor of the ATLAS semiconductor tracker",
   A. Ahmed, K. Hara *et al.*, Nucl. Instrum. Methods A578, 98-118 (2007).
- 61. "Deep sub-micron FD-SOI for front-end application",
  H. Ikeda, K. Hara, H. Miyake *et al.*, Nucl. Instrum. Methods A579, 701-705 (2007).

#### (2) 学会・研究会での講演(国内)

- 1. 目黒立真: SuperLHC ATLAS 実験のための高放射線耐性シリコン検出器の開発, 日本物理学会 第 62 回年次大会(2007 年 9 月 21 - 24 日),北海道大学.
- 2. 望月亜衣: SOI 技術を用いた monolithic pixel 検出器の開発(3)(陽子線照射実験), 日本物理学会 第 62 回年次大会(2007 年 9 月 21 - 24 日),北海道大学.
- 3. 山崎 秀樹: GLD カロリメータの読み出しに用いられる光検出器 MPPC の性能評価, 日本物理学会 第 62 回年次大会(2007 年 9 月 21 - 24 日), 北海道大学.
- 4. 須藤 裕司:1600-pixel MPPC の基礎特性の評価, 日本物理学会 第 62 回年次大会(2007年9月21 - 24日),北海道大学.
- 5. 武政健一:ニュートリノ崩壊光の観測に用いる超伝導接合素子 (STJ)の開発, 日本物理学会第62回年次大会(2007年9月21 - 24日),北海道大学.
- 6. 増渕 達也: CDF 実験での WH チャンネルを用いたヒッグス粒子探索,
   科研費特定領域「フレーバー物理の新展開」第二回研究会(2008年2月21-22日),
   宮城県仙台市作並.
- 7. 戸村 友宣: CDF 実験でのトップ・フレーバーの物理,
   科研費特定領域「フレーバー物理の新展開」第二回研究会(2008年2月21 22日),
   宮城県仙台市作並.
- 三宅 秀樹: CDF 実験でのボトム・フレーバーの物理,
   科研費特定領域「フレーバー物理の新展開」第二回研究会(2008年2月21 22日),
   宮城県仙台市作並.
- 9. 須藤 裕司: ILC のための MPPC の基礎特性の測定, 日本物理学会 第 63 回年次大会 (2008 年 3 月 22 日-26 日), 近畿大学.
- 10. 生野利典: ILC カロリメータに用いる光検出器 MPPC の放射線耐性の研究, 日本物理学会第63回年次大会(2008年3月22日-26日),近畿大学.
- 11. 大賀珠実: CDF 実験 TOF 測定器に用いる光電子増倍管の LED 光源を用いた長期耐久性試験,
   日本物理学会第63回年次大会(2008年3月22日-26日),近畿大学.
- 12. 増渕 達也: 1.96 TeV 陽子反陽子衝突実験 CDF における W ボソン随伴生成のヒッグ ス粒子探索, 日本物理学会 第 63 回年次大会 (2008 年 3 月 22 日-26 日), 近畿大学.
- 13. 久保 太一: CDF 実験におけるレプトン+ジェット事象を用いた力学的最尤法による トップクォークの質量測定,
   日本物理学会第63回年次大会(2008年3月22日-26日),近畿大学.
- 14. 永野 あい: 1.96 TeV の陽子・反陽子衝突における Wボソン・光子対生成の研究, 日本物理学会 第 63 回年次大会 (2008 年 3 月 22 日-26 日), 近畿大学.
- 15. 望月亜衣: SOI 技術を用いた monolithic pixel 検出器の開発( $\gamma$  線照射実験), 日本物理学会(2008年3月26日),近畿大学.
- 16. 秦野博光: SLHC 用シリコンマイクロストリップ検出器の開発, 日本物理学会(2008 年 3 月 26 日),近畿大学.
- 17. 目黒立真: ATLAS 実験シリコン飛跡検出器の飛跡再構成の精度解析, 日本物理学会(2008年3月26日),近畿大学.

# (3) 国際会議・研究会での講演

 Naoki Kimura, "Measurement of the Ratio qq̄/gḡ in the tt̄ Production Mechanism using the Dilepton Channel at CDF", American Physical Society April Meeting, April 14 – 17, 2007, Jacksonville, Florida, USA.

- Taichi Kubo, "Measurement of Top Quark Mass by Dynamical Likelihood Method in the Lepton+Jets Channel at CDF", American Physical Society April Meeting, April 14 – 17, 2007, Jacksonville, Florida, USA.
- Tatsuya Masubuchi, "Search for Higgs Boson Production in Association with a W Boson at CDF", American Physical Society April Meeting, April 14 – 17, 2007, Jacksonville, Florida,

USA.

- 4. Ai Nagano, "Study of  $W\gamma$  Production at the Tevatron", American Physical Society April Meeting, April 14 – 17, 2007, Jacksonville, Florida, USA.
- Kazuhiko Hara, "Highlights from the Tevatron", KEK Theory Meeting on Particle Physics Phoenomenology (KEKH0712), December 12 – 14, 2007, Tsukuba, Japan.
- 6. Tatsuya Masubuchi, "Search for SM Higgs in the  $WH \rightarrow \ell \nu b \bar{b}$  channel using 2 fb<sup>-1</sup> at CDF",

XLIII Recontres de Moriond, Electroweak Interactions and Unified Theories, March $1-8,\ 2008,$  La Thuile, Italy.

# (4) 会議・研究会報告書

- K. Hara *et al.*, "Development of Radiation Hard N-on-P Silicon Microstrip Sensors for Super LHC", IEEE 2007 Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference, Conference Record N15-245, Oct. 27 – Nov. 3, 2007, Honolulu, Hawaii, USA.
- S. Terada, K. Hara *et al.*, "Evaluation of Contact Resistance of Siliver-Loaded Epoxy with Aluminized Backplane of Silicon Microstrip Sensors", IEEE 2007 Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference, Conference Record N15-267, Oct. 27 – Nov. 3, 2007, Honolulu, Hawaii, USA.
- 3. Y. Arai, K. Hara, H. Miyake et~al., "SOI Pixel Developments in a 0.15  $\mu \rm m$  Technology",

IEEE 2007 Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference, Conference Record N20-2, Oct. 27 – Nov. 3, 2007, Honolulu, Hawaii, USA.

- M. Hazumi, K. Hara, H. Miyake *et al.*, "TCAD Simulation for SOI Pixel Detector", IEEE 2007 Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference, Conference Record N20-3, Oct. 27 – Nov. 3, 2007, Honolulu, Hawaii, USA.
- E. Martin, K. Hara, H. Miyake *et al.*, "A Silicon-on-Insulator Implementation of a Fifth Generation Continuous Acquisition Pixel Detector", IEEE 2007 Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference, Conference Record N20-5, Oct. 27 – Nov. 3, 2007, Honolulu, Hawaii, USA.

6. Y. Ikegami, K. Hara, H. Miyake *et al.*, "Total Dose Effects for 0.15μm FD-SOI CMOS Transistors",
IEEE 2007 Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference, Conference Record N44-6, Oct. 27 – Nov. 3, 2007, Honolulu, Hawaii.

# (5) 学位論文

# 博士論文

 久保太一: Measurement of the Top Quark Mass with Dynamical Likelihood Method using Lepton+Jets Events with the Collider Detector at Fermilab. (CDF 実験に おけるレプトン+ジェット事象を用いた力学的最尤法によるトップクォークの質量測 定),

筑波大学大学院数理物質科学研究科,2008年2月.

- ネ野 あい: Measurement of W+ Photon Production in Proton-Antiproton Collisions at 1.96 TeV. (1.96 TeV の陽子・反陽子衝突における Wボソンと光子の対生成), 筑波大学大学院数理物質科学研究科,2008 年 2 月.
- 3. 増渕 達也: Search for Higgs Boson Production in Association with a W Boson in 1.96-TeV Proton-Antiproton Collsions. (1.96TeV 陽子反陽子衝突実験における W ボソン随伴生成のヒッグス粒子探索), 筑波大学大学院数理物質科学研究科,2008年2月.

## 修士論文

筑波大学大学院数理物質科学研究科,2008年2月.

- 1. 望月 亜衣: Silicon-On-Insulator 技術を用いた読み出し回路一体型シリコンピクセル 検出器の開発
- 2. 山崎 秀樹: リニアコライダー実験用カロリメータの読み出しに用いられる光検出器 MPPC の放射線耐性の研究
- (6) 研究会の主催
  - 1. CDF 実験日本グループ研究会 筑波大学,2007年12月22-23日.

# 【構成員の異動】

1. 2007年4月に倉田正和が研究科特別研究員として着任.

# III. 宇宙物理理論グループ

教授	梅村 雅之
講師	吉川 耕司
講師(特別教員配置)	平下 博之 (3月15日まで)
研究員	加藤 成晃
研究員	諏訪 多聞
研究員	赤堀 卓也
研究員	渡部 靖之
大学院生	15 <b>名</b>
4 <b>年生</b>	4 <b>名</b>

本年度,当グループスタッフは, FIRST プロジェクトを推し進めると共に,これを用いた 宇宙第一世代天体および銀河形成の研究を行った。また,宇宙の電離史と銀河形成,銀河進化, 銀河中心核,並びに星・惑星系形成の研究を展開した。

【1】 FIRST プロジェクト

(1)概要

文部科学省科学研究費補助金 特別推進研究「融合型並列計算機による宇宙第一世代天体の起源の解明」(平成16年度~平成19年度,代表 梅村雅之)に基づき,宇宙第一世代天体形成に 関する大規模なシミュレーションを実行するプロジェクト(FIRST プロジェクト)を推進した。

## (2)宇宙シミュレータ FIRST

宇宙第一世代天体の形成過程について大規模な輻射流体力学シミュレーションを行うために は、物質と光の作用および重力相互作用を極めて高速に計算する必要がある。目的とするシミュ レーションのためには、物質・光の計算性能が数 Tflops,重力計算性能が数 10Tflopsの計算機 を必要とする。我々は、これを実現するために、PC クラスタに新規開発したサーバ組み込み型 の重力計算専用ボード Blade-GRAPEを埋め込んだ宇宙シミュレータ FIRST を完成させた。

FIRST は,256の計算ノード,2つの管理ノード,2つのファイルサーバ,および Gfarm ファ イルシステムからなる。計算ノードのうち,16 ノードは32 ビット型 Blade-GRAPE を有し, 224 ノードは64 ビット型 Blade-GRAPE X64 を有する。ファイルサーバは2台で合計4.5TB の容量をもつ。Gfarm ファイルシステムは,ネットワーク共有ファイルシステムであり,分散 したローカルディスクから一つの共有ファイルシステムをつくる機構である。これにより,総 計22TB の共有ファイルシステムが構築されている。FIRST の総演算性能は,36.1TFLOPS で あり,内ホスト部分3.1TFLOPS,Blade-GRAPE 部分33TFLOPS である。また,主記憶容量 は総計1.6TB である。

#### (3) FIRST による第一世代天体形成シミュレーション

宇宙で最初に生まれた天体 (宇宙第一世代天体) は宇宙晴れ上がりの時点に存在したわずかな 密度揺らぎが重力不安定によって成長することで生まれたと考えられており、水素とヘリウム 以外の重元素をまったく含まない点を特徴とする。そのため、われわれの銀河系やその近傍で起 きる星形成では重要な役割を果たす重元素による輻射冷却が効かず、第一世代天体内部で生ま れる星 (第一世代星) は大質量星であると考えられてきた。また、数値計算を用いて宇宙論的な 初期条件から重元素を含まないガスの進化を解き 100-数 100M<sub>☉</sub> 程度の大質量星が形成される という研究結果も報告されている (Abel, Bryan, & Norman 2002; Yoshida et al. 2006, O'shea & Norman 2007)。しかしながら、従来の計算ではダークマターの小スケールの揺らぎについて あまり注意が払われていなかったといえる。例えば、O'shea & Norman (2007)の研究では、計 算の初期には粗い解像度であった領域を計算の進捗にあわせて密度の高い箇所のみを細かなメッ シュに切りなおすことで流体計算の解像度を段階的に挙げる手法を採用している。もし、計算 初期には解像度以下であったような小スケールの揺らぎが第一世代天体の形成過程に影響を及 ぼしているとすれば、この効果は彼らの計算には反映されていないことになる。

そこで、本研究では計算領域の全体を可能な限り高解像度にした宇宙論的な構造形成シミュレーションを行い、第一世代天体の形成と進化を調べることにした。具体的な手法としては、Particle-Particle-Mesh ( $P^{3}M$ ) 法を用いた N 体計算と Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) 法を用いた流体計算を組み合わせて、ダークマター粒子の質量分解能として、一粒子あたり  $0.3M_{\odot}$  程度の計算を行った。ここで特に強調するべきことは、計算領域の全体が高解像度であるため、第一世代天体の形成に小スケールの揺らぎが及ぼす影響を取り込むことができた点である。

その結果、第一世代星の質量に対して小スケールの揺らぎが影響を与えている可能性がある ことがわかってきた。ダークマターが重力的に束縛されることで形成されるダークハローは、そ の中心部にカスプと呼ばれる構造を持つことが N 体計算の結果わかっている。カスプは中心に 向かって密度が半径の-1.5 乗程度に比例する構造であり、これは密度が半径の-1 乗以下に比例 していることから、中心部で重力の大きさが発散する。このような状況では、そのダークハロー 中心近くに存在するバリオン物質が強く中心部に引かれるため、中心部近くの小スケールで密 度が速く上昇する。N 体計算の結果形成されるカスプはダークハロー中心で密度一定のコアを 作り、実際には密度が発散することはない。このコアのサイズはわれわれが計算した範囲では N 体計算の解像度をあげる程、より小さくなる傾向にあり、小スケールの密度が成長する速度 を早くすることになった。このため、計算の解像度としては単に第一世代星そのものを分解す るだけでは不足であり、ダークハローのカスプを正しく扱えるスケールまで分解できなくては ならないことが言える。また、従来考えられてきた描像においては、第一世代星はそのジーン ズ質量 ( $10^5 M_{\odot}$ 程度) に達するまでは収縮を起こさず、そのために初期の小スケールの構造はな らされてしまっているとされてきたが、今回の計算結果は中心にカスプを持つダークハローの 中においてはこの描像に見直しが必要であることを示唆している。

ダークハローの密度構造をどのスケールまで分解する必要があるのか、カスプ・コア構造の 形成がどのような物理機構で生まれるのか、を明らかにすることは今後の重要な課題として残 されている。

### (4) ライマンアルファ輝線天体の新たな描像

SSA22 領域 (z = 3.1) で発見された Ly emitter (LAEs) の大規模構造は,現在標準的な構造形成論となっている CDM 理論では6 のゆらぎに相当し,宇宙全体での期待値が10 - 2 しかないこと,また高密度領域内において CDM 理論で予言される角度相関が見られないことなど,単純な CDM 構造形成論とは相容れない性質を持っている (Hayashino et al. 2004)。

そこで,これまで標準的な銀河形成モデルでは考慮されていなかった LAEs の寿命を現象論的に考慮する事で,観測を上手く説明できることを示した (Shimizu et al. 2007)。このモデルによると LAEs の寿命は~108yr 程度で,さらに LAEs は銀河形成の極初期のフェーズの天体である事が分かった。

しかしながらこれまでの議論は,Zel'dovich近似を用いた構造解析であり宇宙構造形成の計算

を行って妥当性を検証する必要があった。そこで,宇宙論的N体計算を行い,さらに銀河内の 各サブストラクチャーの星形成史・化学進化を evolutionary spectral synthesis code 'PEGASE' を用いて独立に扱う事により,銀河の力学進化と化学進化をより現実的に扱った。計算の結果, LAEs になりうる天体として非常に若い halo (halo A)の他に,すでに形成している halo に降 着してくる粒子が星形成を始めてそこから Ly 輝線を放出する (halo B) という2つの場合が あることがわかった。前者は観測の LAE の空間分布と同様の分布をもつが,後者は観測されて いる LAE の分布とは異なるものである。さらに halo B が LAEs として観測されていないとす ると,降着していくガスが Ly 輝線を放出しないような何らかのフィードバックが必要なこと が示唆される。そこで,フィードバックとして化学進化に伴うダストによる吸収の効果をさら に採り入れた結果,halo B の Ly 輝線が弱まり,観測の空間分布を説明できる事が分かった。 これは,先行研究で得た LAE のほとんどが非常に若い天体であるという結論を支持するもので ある。

#### (5)球状星団の形成と力学進化

球状星団は低質量星の非常に高密度な天体として知られているが,その形成過程は未解明で ある。また,近年のWMAP観測と球状星団の年齢分布の比較によれば,多くの球状星団が宇 宙再電離期以降に形成された事が示唆されている。これまでの研究では,低質量天体では紫外 線による電離と光加熱により,その形成が常に阻害されると考えられてきた。本論文では,低 質量のガス雲が紫外線で電離された場合であっても,ガス雲の落下速度が電離ガスの音速を超 えている場合には,ガス雲は収縮を続け,最終的には紫外線に対して光学的に厚くなることに より天体形成が起こるのではないかという可能性に着目している。実際にそのような天体形成 が起こった場合,ガスが中心付近まで収縮し紫外線に対して遮蔽された後に星が形成されるた め,エネルギー散逸が大きくなる。その結果,高密度な天体が形成されることが予想される。

そこで,一次元球対称で,紫外線の輻射輸送と,原子・分子冷却過程を採り入れた輻射流体 シミュレーションを行う事で上記のような形成過程で低質量星の高密度な天体が形成されるか を検証した。その結果,紫外線が強い場合には,実際に超音速落下によって天体が形成される 事と形成される天体が非常に高密度になれる事も示した。

さらに,形成された天体と観測される球状星団との直接比較を行うため,上記の過程で形成 された天体の力学進化をN体計算によってシミュレートした。この際,球状星団が受けるであ ろう母銀河との潮汐相互作用も考慮した。力学進化の間,星団のコア半径や表面輝度は二体緩 和によって刻々と変化する。また,潮汐力によるはぎ取りによって星団の質量は減少していく。 シミュレーションの結果,得られたコア半径,表面輝度,速度分散,明るさは観測される球状 星団の特徴をよく再現できる事がわかった。

(6) 衝突銀河団における重元素の電離状態と電子・イオン温度の研究

銀河団の銀河は銀河団が銀河や銀河群の度重なる衝突合体で成長するときに力学的・熱的影響を強く受け形成・形態進化を遂げ、その過程で銀河団ガスに重元素を供給してきたであろう。 重元素の量と分布はこれらの形成進化をひもとく鍵であり、それは数千万度の温度にある銀河 団ガスから放射される X 線を分光し、輝線を調べることで分かる。これまでに多くの銀河団で 重元素の組成や量、空間分布が X 線観測の研究によって調べられてきた。これらの研究におい ては重元素は衝突電離平衡にあり電子・イオンは温度平衡にあると仮定されるが、これは銀河 団中心部ではこれらの平衡状態に達する時間スケールが十分短いと考えられるだけガスの密度 が高いからである。しかしながら、ビリアル半径にせまる希薄な周縁領域や衝突加熱領域では 平衡状態に達していない可能性を我々は注目している。もしそうであれば、平衡を仮定した解 析結果は誤った重元素量を推定しかねない。そこで我々は FIRST シミュレータを用いて鉄などの主要な重元素の衝突電離平衡と電子・イオンの温度平衡を仮定せず時間進化を解くダークマターとガスを含めた衝突銀河団の3次元数値実験を世界で初めて行った。その結果、最近すざく衛星で観測された Abell 399/401 連銀河団の連結領域においては、24 解電離鉄の割合が平衡値より 10-20 %多いことや電子温度がガスの平均温度より数%低いことを明らかにした。また観測される X 線のスペクトルを計算し、鉄の K 輝線の強度が数%増強されていることも示した。

#### (7) Streaming SIMD Extension を用いた SPH 法の高速化

宇宙物理学で広く用いられている粒子法に基づく流体計算手法である Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) 法は,大きなダイナミックレンジを必要とする宇宙シミュレーションに適 したものであるが,計算時間がメッシュ法に基づく計算方法と比較して非常に長いのが欠点と なっている.我々は,Intel 社や AMD 社が製造している x86 系のプロセッサに搭載されてい る Streaming SIMD Extension (SSE) と呼ばれる拡張命令セットを用いて,SPH 法の高速化を 実現した.SSE は,4個の単精度浮動小数点演算を1サイクルで計算することができる Single Instruction Multi Data (SIMD)型の並列演算を実行可能であるが,通常のコンパイラではSSE で並列化可能なループを検出する能力に欠けているため SSE を効率よく利用することは望めな い.そこで,我々はアセンブリ言語を用いて直接 SSE を利用することによって SPH 法の高速化 を達成した.現在のところ,SSE を使うことによって,3-4 倍程度の高速化が実現できている.

#### 【2】 宇宙論・銀河形成

#### (1) 星間ダスト進化モデルの検証

銀河の進化は、星形成活動により、星の集合体としての銀河がどのように成長してきたかで特 徴付けられる。星形成活動は、星の材料である星間ガスの物理状態に支配されるが、Hirashita & Hunt (2004)の理論研究等により、星間ダスト(塵)が、紫外線吸収や分子形成等を通して星 間ガスの物理状態に大きな影響を及ぼすことが示されている。本年度は、星間ダストの性質を、 観測的に検証する研究を行った。

まず、今年度から解析が可能となった「あかり」データの解析を進めた。「あかり」は遠方の 原始銀河を直接的に観測することはできない。そこで、近傍銀河のうちで原始銀河に最も近い 種族である矮小銀河、特に blue compact dwarf galaxies (BCD) と呼ばれる種族のデータを用 いた。これらは、実際に低重元素率の下で激しい星形成を行っているといった原始銀河に典型 的な特徴を持つ。「あかり」遠赤外データの解析の結果、BCD には高温 (40 K 程度) のダスト が存在することが明らかになった。これは、集中して激しい星形成を行っていることを示して おり、それはまさに我々のモデル (Hirashita & Hunt 2004 等) で予言されたものである。また、 遠赤外放射の特性も我々が構築したダスト放射モデル (Hirashita et al. 2007) と矛盾しないこと も明らかになった。

他にも、重力レンズ天体を利用した遠方銀河のダスト探査 (Yonehara, Hirashita & Richter 2008) や、遠方銀河のダスト形成モデルの観測的検証 (Hirashita et al. 2008) から、高赤方偏移 銀河のダストの吸収・放射特性を明らかにし、理論モデルの多角的検証を行った。

### (2)爆発的星形成 - AGN 関係を生み出す物理機構の観測的示唆

近年の観測によって,活動銀河中心核 (AGN) とその周囲の爆発的星形成活動には,何らかの物理的関連があることが示唆されている。我々は,爆発的星形成と AGN の物理的関連の原因機構を明らかにするために,爆発的星形成に起因する強力な輻射場が,その内側のガスに及ぼす輻射流体力学的効果を観測データから検証した。観測データとしては,爆発的星形成領域

の半径や光度,爆発的星形成領域より内側の力学的質量,ガス円盤のサイズが必要であり,こ れらのデータが得られている7天体;セイファート銀河 (NGC 7469, NGC 1097, NGC 6951, Circinus galaxy),ライナー (NGC 4314), non-AGN 銀河 (NGC 2903, NGC 3351)を用いた。 その結果,爆発的星形成領域の内側に分布するガス円盤のサイズは,輻射流体力学的モデルに 基づく理論予測と一致することが分かった。さらに,輻射圧によって強く圧縮されたガス円盤 をもつ銀河は,中心核の活動性が高い(AGN を持つ)傾向が得られた。これらの結果は,爆発 的星形成活動に起因する輻射圧が,ガス分布に影響を与え,中心核の活動性を誘起することを 示唆している。

さらに、地上観測による、1秒角程度のアパーチャーを用いた 3.3 um PAH(芳香族炭化水素) 輝線観測により、銀河中心から 100 pc 以内の領域で爆発的星形成活動 (nuclear starburst)の存 在が明らかになっており、AGN の光度と nuclear starburst の光度には統計的な正の相関があ ることが Imanishi & Wada (2004) により示唆されている。この結果は、nuclear starburst が AGN の活動性に寄与していることを意味している。また、さらに外側(AGN から数 100pc ~ kpc の領域)で起こる爆発的星形成活動(circumnuclear starburst)は、nuclear starburst よ リも 1 桁程度明るいため、赤外線衛星によって測定された銀河全体の 6.2, 7.7, 11.3 PAH 輝線 を circumnuclear starburst の指標とすることができる。我々は、これら nuclear starburst と circumnuclear starburst の両方に注目し、Imanishi & Wada (2004)のサンプルに対してブラッ クホールの質量を求め、エディントン光度で規格化した AGN の光度と様々な領域で起こる爆 発的星形成領域の光度の関係を調べた。結果、nuclear starburst だけでなく、 circumnuclear starburst の光度も AGN の光度と統計的に正の相関を持つことが明らかになった。さらに、AGN エディントン光度で規格化した AGN の光度は、circumnuclear starburst の光度よりも、nuclear starburst の光度と、統計的に強い相関を持つことが分かった。これは、AGN により近い領域 で起こる爆発的星形成ほど、AGN への質量降着と強く相関することを意味する。

### (3)中間赤外スペクトルで探るサブミリ銀河中の活動銀河中心核の活動性

近年見つかり始めている、サブミリで明るい銀河(Sub-millimeter galaxy: SMG)は、主に 赤方偏移 1-3 付近に分布する。SMGs の遠赤外光度は 10<sup>12</sup> 太陽光度以上にもなり、そのエネル ギー源として、銀河全体で起こる爆発的星形成活動や活動銀河中心核(AGN)が考えられてい る。これら SMGs は、比較的重い楕円銀河や超大質量ブラックホール、AGN の形成初期段階 と結びついていると考えられているため、SMGs のエネルギー源を明らかにすることは、AGN や銀河形成の理解にも重要なものとなり得る。SMGs 中のエネルギー源を解明するために、中 間赤外スペクトルは、比較的低い不定性で、AGN(AGNに照らされたダストからの連続波)と 爆発的星形成活動(強い分子輝線)を切り分けることができる。そこで、スピッツァー宇宙望遠 鏡のアーカイブデータを用いて、SMGs 中の AGN と爆発的星形成活動の寄与を定量的に見積 もった。その結果、より高赤方編移の SMGs は、より低赤方偏移の SMGs と比較して、AGN の活動性が高い、もしくは銀河中心の超大質量ブラックホールの質量が高い傾向を得ることが できた。これは、AGN の活動性や銀河中心の超大質量ブラックホールの進化史を探る手がかり となり得る結果である。

### (4)輻射輸送計算による Lyman 光子の脱出確率

高赤方偏移宇宙で見つかっているライマンアルファ輝線天体におけるライマンアルファ光子 の脱出確率を求めるために,輝線プロファイルを考慮した輻射輸送計算を行った。結果として, 光学的に厚い系においては,部分再分配の場合には,完全再分配の近似をした場合に比べ,2 桁以上脱出確率が上がることがわかった。また,部分再分配の場合においても,光学的厚みが 大きい系では,脱出確率が10%程度にしかならないことを明らかにした。

#### (5)相対論的変動エディントン因子の輻射輸送計算

コンパクト天体の降着円盤における輻射力の寄与を明らかにするために,相対論的輻射輸送 方程式を解いて,エディントン因子の計算を行ったものである。実験室系から共動系へのロー レンツ変換を行った輻射輸送の正確な計算により,エディントン因子は速度の増加と共に単調 増加するのではなく,一旦等方的な場合の値(=1/3)よりも低下した後,自由流極限の値(= 1)に向かって増加することが明らかになった。これは,これまで用いられてきた等方の値と自 由流極限を結んだ内挿式が物理的に正しくないことを示すものであり,結果として輻射力はこ れまでの評価よりも大きくなることが分かった。

【3】 星・惑星系形成過程の研究

(1)宇宙塵の3次元形状 地球大気中で溶融したダスト粒子の変形

宇宙塵は様々な変形度をもつことが観測的に分かっているが,形状を決めるメカニズムはま だ解明されていない。宇宙塵の形状の起源を調べるために,地球大気に突入したダスト粒子に ついて,溶融から再固化までの過程について,ガス動圧や遠心力効果,および蒸発の効果を採 り入れて運動方程式とエネルギー方程式を数値的に解いた。結果として,変形度の上限値は0.1 程度になることがわかった。これは,観測的に得られている値(0~0.3)の内,変形度の小さな ものに対応し,大きなものを説明するためには,新たな物理過程が必要となることがわかった。

## <受賞>

小泉 貴之 数理物質科学研究科長修士論文表彰,2008年3月 "相対論的変動エディントン因子の輻射輸送計算"

< 科研費採択状況 >

特別推進研究:梅村 雅之(代表者)(継続)

「融合型並列計算機による宇宙第一世代天体の起源の解明」(830万円)

若手研究(B):平下博之(代表者)(継続)

「遠赤外線・サブミリ波での原始銀河の直接検出」(90万円)

- 特定領域「サブミリ波の宇宙」公募研究:平下博之(代表者),諏訪多聞(分担者)(継続) 「サブミリ波での原始銀河観測に向けた理論的枠組みの構築」(100万円)
- 日本学術振興会特別研究員奨励費:渡部 靖之(代表者)
  - 「活動銀河中心核の新たな物理的描像の構築」(100万円)

< 学位論文 >

#### 博士論文

 清水 一紘 Novel Picture for Lyman Alpha Emitters (ライマンアルファ輝線天体の新たな描像)  長谷川 賢二
 Formation and Dynamical Evolution of Globular Cluster (球状星団の形成と力学進化)

## 修士論文

- 1. 小泉 貴之 相対論的変動エディントン因子の輻射輸送計算
- 1. 千葉 真弓
   輻射輸送計算による Lyman 光子の脱出確率について
- 3. 土居 政雄
   宇宙塵の3次元形状 地球大気中で溶融したダスト粒子の変形

学士論文

- 1. 久保田 夕紀 矮小楕円銀河の力学的性質とダークマター
- 2. 黒鳥 裕美子 放射冷却と典型的銀河質量
- 3. 齋藤 恵樹
   遠方 Ia 型超新星から探る宇宙論パラメータ
- 4. 松嶺 雅仁 Sunyaev-Zel'dovich 効果を用いた銀河団探査

## <論文>

- Shimizu, I.; Umemura, M; Yonehara, A. Large-Scale Structure of Short-Lived Lymanα Emitters Mon. Not. Roy. Astron. Soc. Letters, 380, L49-L53 (2007)
- Mori, Masao; Umemura, Masayuki Galactic winds from primeval galaxies Astrophysics and Space Science, **311**, 111-115 (2007)
- Hirashita, H.; Hibi, Y.; Shibai, H.
   Far-infrared dust properties in the Galaxy and the Magellanic Clouds Mon. Not. Roy. Astron. Soc., 379, 974-984 (2007)
- Fukue, J.; Akizuki, C. Relativistic Radiation Hydrodynamical Accretion-Disk Winds *Publ. Astron. Soc. Japan*, **59**, 1027-1032 (2007)
- Sumitomo, N.; Nishiyama, S.; Akizuki, C.; Watarai, K.; Fukue, J. Observational Appearance of Relativistic, Spherically Symmetric Massive Winds *Publ. Astron. Soc. Japan*, **59**, 1043-1048 (2007)

- Yonehara, A.; Hirashita, H.; Richter, P.
   Origin of chromatic features in multiple quasars variability, dust, or microlensing Astronomy & Astrophysics, 478, 95-109 (2008)
- Hirashita, H.; Nozawa, T.; Takeuchi, T. T.; Kozasa, T. Extinction curves flattened by reverse shocks in supernovae Mon. Not. Roy. Astron. Soc., 384, 1725-1732 (2008)
- Watabe, Yasuyuki; Kawakatu, Nozomu; Imanishi, Masatoshi Nuclear/Circumnuclear Starbursts and Active Galactic Nuclei Mass Accretion in Seyfert Galaxies Astrophysical Journal, 677, 895-905 (2008)
- Miura, Hitoshi; Yasuda, Seiji; Nakamoto Taishi Fragment-collision Model for Compound Chondrule Formation: Estimation of Collision Frequency *Icarus*, **194**, 811-821 (2008)
- Sato, J.; Umemura, M.; Sawada, K. The Impact of a Supernova Explosion in a Very Massive Binary Mon. Not. Roy. Astron. Soc., in press (2008)
- Kawanaka, N.; Kato, Y.; Mineshige, S. X-ray Emissions from Three-dimensional Magnetohydrodynamic Coronal Accretion Flows *Publ. Astron. Soc. Japan*, in press (2008)
- Akizuki, Chizuru; Fukue, Jun Spherical Relativistic Radiation Flows with Variable Eddington Factor Publ. Astron. Soc. Japan, in press (2008)
- Fukue, Jun; Akizuki, Chizuru Relativistic Radiation Hydrodynamical Accretion Disk Winds *Publ. Astron. Soc. Japan*, in press (2008)
- Mori, M.; Umemura, M. Chemodynamics of Lyman alpha emitters, Lyman break galaxies and elliptical galaxies EAS Publications Series, Volume 24, pp.221-226 (2007)
- Watabe, Y.; Umemura, M.
   Obscuration of AGNs by Circumnuclear Starbursts
   The Central Engine of Active Galactic Nuclei, ASP Conference Series, Vol. 373, p.491 (2007)
- 16. Umemura, Masayuki

Coevolution and Downsizing of Supermassive Black Holes and Galactic Bulges Mapping the Galaxy and Nearby Galaxies, p. 283 (2008)

 Watabe, Yasuyuki; Umemura, Masayuki Beyond the Unified Theory: Evolution of Active Galactic Nuclei Driven by Starburst Events Mapping the Galaxy and Nearby Galaxies, p. 284 (2008)

- Umemura, M.; Susa, H.; Suwa, T.; Sato, D.; FIRST Project Team FIRST Project: Formation and Feedback of First Stars First Stars III, pp. 386-389 (2008)
- Suwa, T.; Umemura, M.; Sato, D.; Susa, H.; FIRST Project Team High Resolution P<sup>3</sup>M-GRAPE-SPH Simulations of PopIII Star Formation First Stars III, pp. 390-392 (2008)
- 20. Sato, D.; Umemura, M.; Susa, H.; Suwa, T.; FIRST Project Team Radiative Transfer SPH Simulations of UV Feedback on Pop III Star Formation First Stars III, pp. 393-394 (2008)

## < 解説記事 >

- 1. 渡會兼也、川田明寛、田中謙一、西山晋史、秋月千鶴、植野健一、松本 桂、福江 純 宇宙の蜃気楼「重力レンズで見る世界」:
   第7回こどものためのジオ・カーニバル活動報告
   2007年、天文月報、100巻、5号、234 - 240
- 2.秋月千鶴、福江 純 トロイダル磁場を考慮した移流優勢降着流の自己相似解 2007年、天文月報、100巻、6号、281
- 福江 純、秋月千鶴
   厚みの有限な平行平板大気 降着円盤 における輻射輸送の新しい解析解 2007年、天文月報、100巻、6号、281

## <出典>

1. FIRST プロジェクト 「SC2007」(Nov 12-16, 2007, Reno, USA)

## <座長>

### <国際会議発表>

- Umemura, M. Radiation Hydrodynamic Feedback on First Star Formation New Trend in Radiation Hydrodynamics (May 9 - 11, 2007, Stockholm, Sweden)
- Sese, RMD; Nakamoto, T.; Umemura, M. Density and Temperature Distribution of Massive Circumstellar Disks Using Flux-Limited Diffusion Approximation IAU Symposium 243: Star-Disk Interaction in Young Stars, (May 21-25, 2007, Grenoble, France)
- 3. Sese, RMD; Nakamoto, T; Umemura M.

Simulation of Massive Protostellar Disks: Comparison with Observational Evidences Structure Formation in the Universe: Galaxies, Stars and Planets (May 27-June 1, 2007, Chamonix, France)

- 4. Umemura, M.; Susa, H.; Suwa, T.; Sato, D.; FIRST Project Team FIRST Project: Formation and Feedback of First Stars First Stars III (July 16-20 2007, SantaFe, USA)
- Suwa, Tamon; Umemura, Masayuki; Susa, Hajime; Sato, Daisuke High Resolution P3M-GRAPE-SPH Simulations of PopIII Star Formation First Stars III (July 16-20 2007, SantaFe, USA)
- 6. Sato, D.; Umemura, M.; Susa, H.; Suwa, T.; FIRST Project Team Radiative Transfer SPH Simulations of UV Feedback on Pop III Star Formation First Stars III (July 16-20 2007, SantaFe, USA)
- Yajima, H.; Umemura, M.; Nakamoto, T.; Hiroi, K. Escape probability of ionizing photons from a proto-galaxy Galaxy Growth in a dark Universe (July 16-20, 2007, Heidelberg, Germany)
- Doi, M.; Nakamoto, T. Prolate Cocmic Spherule Formation Kobe International School of Planetary Sciences (July 16-20, 2007, Hyogo, Japan)
- Watabe, Y.; Hirashita, H.; Umemura. M.; Kawakatu, N.; Imanishi, M. Direct Evidence of Starburst-Driven AGN Fueling Galaxy Growth in a dark Universe (July 16-20, 2007, Heidelberg, Germany)
- Watabe, Y.; Hirashita, H.; Umemura, M.; Kawakatu, N.; Imanishi, M. Radiatively-Driven AGN-Starburst Connection Active Galactic Nuclei at the highest angular resolution: theory and observations (August 25 - September 7, 2007, Torun, Porand)
- Kato, Y.
   Radiation Transfer in Magnetohydro flows around Black Holes Radiative Transfer Workshop (Sept. 3-7, 2007, Durham, UK)
- Hirashita, H.; Hibi, Y.; Shibai, H. Common Far-Infrared Properties of the Galactic Disk and Nearby Galaxies Formation and Evolution of Galaxy Disks (Oct. 1-5, 2007, Rome, Italy)
- Akizuki, C.; Umemura M.; Kato, Y. The Significance of Radiation Force in Magneto-Hydrodynamic Jets A Population Explosion: The Nature and Evolution of X-ray Binaries in Diverse Environments (Oct. 28 - Nov. 2, 2007, St. Petersburg, USA)
- 14. Yasuda, S.; Miura, H.; Nakamoto. T Compound Chondrule Formation in the Shock-wave Heating Model: Three- Dimensional Hydrodynamic Simulation of Disruption of the Molten Dust Particle (Nov. 5-7, 2007, Kauai, Hawaii, USA)

15. Kato, Y.

Magnetohydrodynamic Studies on Quasi-Periodic Oscillations in Accretion Flows around Black Holes YITP Workshop on Quasi-Periodic Oscillations and Time Variabilities of Accretion Flows

YITP Workshop on Quasi-Periodic Oscillations and Time Variabilities of Accretion Flows (Nov. 20 - 22, 2007, Kyoto, Japan)

- Kato, Y.; Ohsuga, K.; Mineshige, S.; Umemura, M. Radiative MHD Accretion Flows around Black Holes VSOP-2 Symposium (Dec. 3-7, 2007, ISAS, Sagamihara, Japan)
- Hirashita, H.; Nozawa, T.; Kozasa, T.; Takeuchi, T. T. Extinction Curves as a Probe of High-Redshift Metal Enrichment Subaru International Conference "Panoramic Views of Galaxy Formation and Evolution" (Dec. 11-15, 2007, Hayama, Japan)
- Ikkoh Shimizu; Umemura Masayuki Novel Picture for Lyman Alpha Emitters Subaru International Conference "Panoramic Views of Galaxy Formation and Evolution" (Dec. 11-16, 2007, Hayama, Japan)
- Yajima, H.; Umemura, M.; Mori, M; Nakamoto, T. Escape fraction of ionizing photons from high-z proto-galaxy Subaru International Conference "Panoramic Views of Galaxy Formation and Evolution" (Dec. 11-16, 2007, Hayama, Japan)
- 20. Hirashita, H.; Nozawa, T.; Kozasa, T.; Takeuchi, T. T. Extinction Curves as a Probe of High-Redshift Metal Enrichment APCTP-YITP Workshop on Accretion and Outflow in Astrophysics 2008 and 2nd Korea-Japan Young Astronomers' Meeting (Jan. 7-11, 2008, Kyoto, Japan)
- 21. Kato, Y.

Radiative MHD Accretion Flows around Black Holes APCTP-YITP Workshop on Accretion and Outflow in Astrophysics 2008 and 2nd Korea-Japan Young Astronomers' Meeting (Jan. 7-11, 2008, Kyoto, Japan)

22. Watabe, Y.; Kawakatu, N.; Imanishi, M.

Connection between nuclear/circumnuclear starburst and AGN mass accretion Accretion and Outflow in Astrophysics 2008 and APCTP-YITP Workshop on Accretion and Outflow in Astrophysics 2008 and 2nd Korea-Japan Young Astronomers' Meeting (Jan. 7-11, 2008, Kyoto, Japan)

- 23. Akahori, T.; Yoshikawa,K. Study of Two Temperature and Non-Equilibrium Ionization States of Plasma in Merging Galaxy Clusters APCTP-YITP Workshop on Accretion and Outflow in Astrophysics 2008 and 2nd Korea-Japan Young Astronomers' Meeting (Jan. 7-11, 2008, Kyoto, Japan)
- 24. Hasegawa, K.; Umemura. M.

Globular Cluster Formation within UV Radiation Field APCTP-YITP Workshop on Accretion and Outflow in Astrophysics 2008 and 2nd Korea-Japan Young Astronomers' Meeting (Jan. 7-11, 2008, Kyoto, Japan)

- 25. Yajima, H.; Umemura, M.; Mori, M; Nakamoto, T. Escape fraction of ionizing photons from high-z proto-galaxy APCTP-YITP Workshop on Accretion and Outflow in Astrophysics 2008 and 2nd Korea-Japan Young Astronomers' Meeting (Jan. 7-11, 2008, Kyoto, Japan)
- 26. Akizuki, C.; Umemura, M.; Kato, Y. The significance of the radiation force in magnetic-hydrodynamic jets APCTP-YITP Workshop on Accretion and Outflow in Astrophysics 2008 and 2nd Korea-Japan Young Astronomers' Meeting (Jan. 7-11, 2008, Kyoto, Japan)
- 27. Doi, M.; Nakamoto, T.; Nakamura, T.; Yamauchi, Y.
  Three-Dimensional Shapes of Cosmic spherules: Deformation of Dust Particles Molten in the Earth Atmosphere
  39th Annual Lunar and Planetary Science Conference (March 10-14, 2008, Houston, USA)

< 依頼セミナー講演等 >

- 1. 梅村 雅之
  - 「宇宙のなりたち」 茨城県高等学校文化連盟天文科学部講演会(2007年12月1日,プラトーさとみ,常陸太田 市,茨城)
- 2. 梅村 雅之
   「FIRST プロジェクトと宇宙第一世代天体形成」
   京都大学,宇宙物理学教室談話会(2007年12月1日,京都)
- 3. 梅村 雅之

「宇宙の旅をして宇宙の大きさを知ろう」 竹園東小学校講演会(2007年12月13日,竹園東小学校,茨城)

<講演>

- 1. 保田 誠司,三浦均,中本泰史 「三次元熱流体計算コードの開発:高速ガス流中でのダスト溶融・分裂現象」 地球惑星科学関連学会合同大会(2007年5月20-24日,幕張メッセ,千葉)
- 2. 土居 政雄,中本 泰史
   「プロレート宇宙塵の形成」
   地球惑星科学関連学会合同大会(2007年5月19日~24日,幕張メッセ,千葉)
- 3. 平下 博之,日比 康詞,芝井 広
   「銀河系と近傍銀河に共通する遠赤外輻射の特徴」
   「サブミリ波の宇宙」第3回大研究会(2007年6月7日~8日,名古屋)
- 4. 秋月千鶴, 福江 純

「相対論的ジェットは輻射圧で加速できるのか?」

天文天体物理 若手の会 夏の学校 (2007 年 7 月 30 日 ~ 2007 年 8 月 2 日)

5. 梅村 雅之

「融合型並列計算機 FIRST による計算宇宙物理学の展開」 第3回「計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム PACS-CS システムと 計算科学 (2007 年 9 月 3 日 ~ 9 月 4 日,筑波大学計算科学研究センター,つくば)

6. 吉川 耕司

「天文シミュレーションにおける High Performance Computing」第3回「計算科学による 新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム PACS-CS システムと計算科学 (2007 年 9 月 3 日~9 月 4 日,筑波大学計算科学研究センター,つくば)

7. 保田 誠司, 三浦 均, 中本 泰史

「衝撃波加熱モデルによる複合コンドリュール形成:溶融ダスト分裂の三次元流体シミュレー ション」

日本惑星科学会秋季講演会 (2007 年 9 月 25 日 ~ 27 日, 高知大学, 高知)

- 8. 土居 政雄 , 中本 泰史
  - 「プロレート宇宙塵の形成」

日本惑星科学会秋季講演会 (2007 年 9 月 25 日 ~ 27 日, 高知大学, 高知)

9. 梅村 雅之

「初代天体形成理論」(招待講演)

日本天文学会秋季年会(2007年9月26~28日,岐阜大学,岐阜)

- 10. 吉川 耕司, 似鳥 啓吾 「x86 プロセッサの SIMD 拡張命令を用いた SPH の高速化」 日本天文学会秋季年会(2007 年 9 月 26~28 日, 岐阜大学, 岐阜)
- 11. 平下 博之,野沢 貴也,小笹 隆司,竹内 努
   「減光曲線から探る高赤方偏移銀河進化」
   日本天文学会秋季年会(2007年9月26~28日,岐阜大学,岐阜)
- 12. 諏訪 多聞,梅村 雅之,佐藤 大介,須佐 元,他 FIRST プロジェクトチーム
   FIRST による第一世代星形成の超高分解能シミュレーション
   日本天文学会秋季年会(2007年9月26日~29日 岐阜大学,岐阜)
- 13. 長谷川 賢二,梅村 雅之,他 FIRST プロジェクトチーム 「FIRST を用いた球状星団の力学進化の計算 II」 日本天文学会秋季年会(2007年9月26日~28日,岐阜大学,岐阜)
- 14. 清水一紘,梅村雅之
   「SSA22 領域における LAEs 形成モデルの検証」日本天文学会秋季年会(2007年9月26日 ~28日,岐阜大学,岐阜)
- 15. 佐藤 大介,梅村 雅之,諏訪 多聞,須佐 元,他 FIRST プロジェクトチーム
   「第一世代天体における輻射性フィードバックの宇宙論的計算」
   日本天文学会秋季年会(2007年9月26日~28日,岐阜大学,岐阜)

- 16. 佐久間優, 須佐元
   「第一世代星の超新星爆発による誘発的星形成」
   日本天文学会秋季年会(2007年9月26日~28日,岐阜大学,岐阜)
- 17. 保田 誠司,三浦均,中本泰史
   「衝撃波加熱モデルによる複合コンドリュール形成の可能性」
   日本天文学会秋季年会(2007年9月26日~28日,岐阜大学,岐阜)
- 18. 矢島 秀伸,梅村 雅之,森正夫,中本 泰史
   「原始銀河の非一様ガス構造における電離光子脱出確率」
   日本天文学会秋季年会(2007年9月26日~28日,岐阜大学,岐阜)
- 19. 秋月 千鶴,梅村 雅之,加藤 成晃
   「相対論的ジェットの輻射特性」日本天文学会秋季年会(2007年9月26~28日,岐阜大学,岐阜)
- 20. 小泉 貴之,梅村 雅之
   「相対論的変動エディントン因子の輻射輸送計算」
   日本天文学会秋季年会(2007年9月26~28日,岐阜大学,岐阜)
- 21. 土居 政雄,中本 泰史
   「プロレート宇宙塵の形成」
   日本天文学会秋季年会(2007年9月26日~28日,岐阜大学,岐阜)
- 22. 加藤 成晃 「磁気流体降着円盤とジェットの輻射輸送計算」 日本天文学会プラズマ合同セッション (2007 年 9 月 28 日、岐阜大学、岐阜)
- 23. 諏訪 多聞,梅村 雅之,佐藤 大介,須佐 元,他 FIRST プロジェクトチーム
   融合型並列計算機 FIRST による宇宙第一世代星形成の高分解能シミュレーション
   次世代スーパーコンピューティングシンポジウム 2007 (2007年10月3日~4日 MY PLAZA ホール,千代田区丸の内、東京)
- 24. 赤堀 卓也,吉川 耕司 「銀河群衝突における2温度プラズマ形成と電離非平衡の数値実験」 マクロでミクロな銀河団(2007年10月24日~26日,たかみや瑠璃倶楽リゾート,山形)
- Watabe, Y.; Risaliti, G.; Nardini, E.; Sani, E.; Salvati, M. Mid-Infrared Spectra of Sub-millimeter Galaxies: Starburst vs. AGN Fellows Days (October 8, 2007, Arcetri Observatory, Italy)
- 26. 平下 博之, Andrea Ferrara, 和田桂一, Philipp Richter 「水素分子から探る Damped Ly 雲の星形成とダスト形成」 クェーサー吸収線研究の展望 (2007 年 11 月 9 日 ~ 11 日, 箱根)
- 27. 梅村 雅之

「未来の宇宙シミュレーション」 シンポジウム「未来の素粒子・原子核数値シミュレーション」(2007年12月19日~20日, エポカルつくば,つくば)

- 28. 赤堀 卓也,吉川 耕司
   銀河群衝突における2温度プラズマ形成と電離非平衡の数値実験
   研究会「マクロでミクロな銀河団」(2007年10月24日~26日,たかみや瑠璃倶楽リゾート,山形)
- 29. 平下 博之,野沢 貴也,小笹 隆司,竹内 努
   「減光曲線から探る遠方銀河の重元素合成」
   第2回銀河のダスト研究会(2007年10月26日~27日,名古屋)
- 30. 土居 政雄,中本 泰史,中村 智樹,山内 祐司 「宇宙塵の3次元形状について 地球大気中で溶融したダスト粒子の変形」 地球外起源固体微粒子に関する総合研究(2007年12月14日,東京大学,柏)
- 31. 渡部 靖之,川勝 望,今西昌俊
   「様々な領域で起こる爆発的星形成と活動銀河中心核への質量降着の関係」
   第 20 回理論懇シンポジウム「宇宙物理学の未解決問題」(2007年12月25~27日,京都大学基礎物理研究所,京都)
- 32. 赤堀 卓也 ,吉川 耕司
   「銀河群衝突における2温度プラズマ形成と電離非平衡の数値実験」
   第 20 回理論懇シンポジウム「宇宙物理学の未解決問題」(2007年12月25~27日,京都大学基礎物理研究所,京都)
- 33. 長谷川 賢二,梅村 雅之
   「紫外線輻射場内での球状星団形成について」
   第 20 回理論懇シンポジウム「宇宙物理学の未解決問題」(2007年12月25~27日,京都大学基礎物理研究所,京都)
- 34. 矢島 秀伸,梅村 雅之,森正夫,中本泰史
   「原始銀河の初期進化段階における電離光子脱出確率」
   第 20 回理論懇シンポジウム「宇宙物理学の未解決問題」(2007年12月25~27日,京都大学基礎物理研究所,京都)
- 35. 加藤 成晃

「Broadband Emissions in Magnetohydrodynamic Accretion Flows in the Galactic Center」 第 20 回理論懇シンポジウム 「宇宙物理学の未解決問題」(2007 年 12 月 25~27 日,京都大 学基礎物理研究所,京都)

36. 秋月千鶴, 梅村雅之, 加藤成晃

「相対論的ジェットの輻射特性」 第 20 回理論懇シンポジウム 「宇宙物理学の未解決問題」(2007 年 12 月 25~27 日,京都大 学基礎物理研究所,京都)

37. 平下 博之,野沢 貴也,小笹 隆司,竹内 努

「Extinction Curves as a Probe of High-Redshift Metal Enrichment」 銀河形成研究の最前線 (2008 年 2 月 13 日 ~ 15 日,三鷹)

38. 加藤 成晃

「降着円盤とジェットの磁気流体研究と輻射輸送研究」

輻射輸送計算による数値天文学最前線研究会(2008年2月12~14日,北海道大学,札幌)

- 39. 梅村 雅之,他 FIRST プロジェクトチーム
   「宇宙シミュレータ FIRST 最終構成機」
   日本天文学会春季年会(2008 年 3 月 24 日~27 日,国立オリンピック記念青少年総合センター,東京)
- 40. 渡部 靖之,川勝 望,今西 昌俊
   「様々な領域で起こる爆発的星形成と AGN への質量降着の関係」
   日本天文学会春季年会(2008 年 3 月 24 日~27 日,国立オリンピック記念青少年総合セン ター,東京)
- 41. Watabe, Y.; Risaliti, G.; Salvati, M.; Nardini, E.; Sani, E. 「Different AGNs contributions to SMGs and ULIRGs at High Redshifts」 日本天文学会春季年会(2008年3月24日~27日,国立オリンピック記念青少年総合セン ター,東京)
- 42. 赤堀 卓也 ,吉川 耕司
   「衝突銀河団における非平衡電離・2 温度プラズマの3次元流体数値実験」
   日本天文学会春季年会(2008年3月24日~27日,国立オリンピック記念青少年総合センター,東京)
- 43. 長谷川 賢二,梅村 雅之,須佐元,他 FIRST プロジェクトチーム
   「第一世代星紫外線フィードバックの星質量依存性」
   日本天文学会春季年会(2008 年 3 月 24 日~27 日,国立オリンピック記念青少年総合センター,東京)
- 44. 保田 誠司,中本 泰史
   「複合コンドリュール形成のための衝突条件」
   日本天文学会春季年会(2008 年 3 月 24 日~27 日,国立オリンピック記念青少年総合セン
   ター,東京)
- 45. 矢島 秀伸, 梅村 雅之, 森 正夫, 中本 泰史

「原始銀河の電離光子脱出過程:衝突電離とダストの効果」 日本天文学会春季年会(2008年3月24日~27日,国立オリンピック記念青少年総合セン ター,東京)

46. 土居 政雄,中本 泰史,中村 智樹,山内 祐司

「宇宙塵の3次元形状 地球大気中で溶融したダスト粒子の変形」

日本天文学会春季年会(2008年3月24日~27日,国立オリンピック記念青少年総合セン ター,東京)

# IV. 宇宙観測グループ

教 授 甲升	F直止
--------	-----

- 講 師 瀬田 益道
- 準研究員 山内 彩

大学院生 15名(数理物質科学研究科後期課程5名、前期課程8名;教育研究科2名)

研究室が発足して4年目となった。国土地理院 32m 鏡の 20GHz 帯電波望遠鏡化の整備を引き続き行い、単一鏡として本格的な観測を開始した。また南極ドームふじ基地における天文観測の計画を国立極地研究所と協力しつつ推進し、同時にプロトタイプとして 30cm サブミリ波望遠鏡の開発を開始した。準研究員山内彩が年度末をもって転出した。

### 【1】国土地理院 32m 鏡の電波望遠鏡化と観測の開始

(1) 実効雑音の改善

昨年度に 20GHz 帯受信機等を立ち上げて 12 月に 22GHz で最初に天体からの電波を受信し、本 年度の5月 18 日に鹿島 34m 鏡との間で最初の VLBI 実験に成功した(天体は 3C84)。しかしなが ら、スペクトルに現れる雑音の大きさがシステム雑音温度から計算される理論値よりも数十倍も大 きく、本格的な観測は不可能であった。

異常な実効雑音の原因を探るために夏に調査を行った。受信機の真空窓とその上のどこかで反射 が起きて定在波が立っている可能性が高いと判断し、スペクトルのフーリエ変換による波長解析や ビーム伝送系への吸収体の挿入、副鏡裏や副鏡ステイへの吸収体の貼り付けなど種々の実験を行っ た結果、主鏡中心にあってビーム伝送系上部の雨避けカバーを外すと、異常雑音が劇的に消失する ことがわかった。そこで10月21日に雨避けカバーを吸収・反射の少ないゴアテックス製の膜 (RA7956)に交換して実効雑音を大幅に改善した。短時間周期のポジションスイッチではほぼ理 論値に近い雑音を達成している。ただ、定在波がまだ若干残っていることと受信機やデジタル分光 計の利得の不安定性による影響から、長時間周期のポジションスイッチや強い連続波電波を持つ天 体の観測では異常雑音が発生する。今後、利得の安定化を一層進める必要がある。

(2) アンテナ系

アンテナの最適化と性能測定 を行った。まず天体を使って副 鏡の位置を 20GHz 帯光学系に 最適化した(但し、天体が昇る ときと下るときで系統的に副鏡 の最適位置に差が出る現象が発 生している)。次に、晩期型星の 水メーザーや QSO の連続波電 波を使って全天で指向性の誤差 を測定し、ポインティングモデ ルに最小2乗法を適用してパラ メータを決定した。その結果、



適用後の残差が rms=15"となった。実際、天体を入れて実測した結果もこれと矛盾しない。主ビームの大きさを考えるとこれで十分に観測可能となった。主ビームの大きさは強い点状電波源を観測して測定し、HPBW=100"を得た。但し、EL=30~40°付近ではビームは丸いが、その上下では仰角方向に長いビームとなることがわかった(右図)。

主ビーム能率は惑星を用いて測定した。火星と土星も用いたが輝度温度が不明朗なので、主として木星を用いた。またその仰角依存性も測定した。その結果、仰角 EL~35° 付近で最大で $\eta$  mb=0.52であった。仰角がその前後では主ビーム能率は低下し、特に 70°以上では大幅に低下することがわかった(下図左)。また主ビーム能率とビームサイズから開口能率を計算し、同じく仰角 EL~35° 付近で $\eta$  a=0.45であり、その上下で低下することもわかった(下図右)。これらの仰角依存性はビームサイズ(従ってビームの形状)の変化と性質が合致する。またこれらの能率の周波数依存性も測定した。



(3)受信機系

受信機の冷却増幅部の改良を行い、受信機雑音温度の向上を図った。受信周波数は 19.5-25.2GHz である。中間周波数部は第1中間周波数が 4~8GHz で、第2中間周波数はデジタル分光 計用が 0-1.0GHz、VLBI 用が 0.5-1.0GHz である。増幅器の周囲の温度変化による利得変動が問 題であったので、シェルター内の工夫により利得変動を抑制した。また第2中間周波数変換部をシ ェルターから観測局舎内に移動することによって、周囲環境の温度変動を抑制した。

デジタル分光計の制御ソフトウェアーを整備し、装置部分の安定化も図って、実際の観測に用いることができるようにした。その結果、サンプルビット数が8ビット、周波数帯域幅が2GHz、分光点数が1万6千チャネルで分光できる。この広い周波数帯域幅によりアンモニアの(J,K) = (1,1)~(5,5)の輝線が同時観測可能となった。

(4) 望遠鏡制御系ソフトウェアー

望遠鏡の制御ソフトウェアーを開発し、実際の観測に供した。観測者が観測パラメータを入力す る観測テーブル作成部分とそれを読み込んで装置を動作させる中央制御部分からなる。中央制御部 分は独立に動作する各装置の制御パソコンに指令を送っている。天体の追尾計算部分は国立天文台 野辺山 45m 電波望遠鏡の COSMOS を元に一部修正を加えて、位置計算誤差を 0.01"以下、速度計 算誤差を 0.01km/s 以下とした。また分光計の出力を実時間でモニターすることのできるクイック ルックシステムも整備した。

(5) データ処理系

分光計で取得されたスペクトル線データはフラッシュメモリで大学まで持ってきて処理する。取

得周波数帯域 1GHz から任意の 2048 チャネル分(125MHz)を最大 8 個までに分割し、データ形 式を変換して野辺山 45m 電波望遠鏡のデータ処理システムである NEWSTAR で処理する。

(6) 観測の開始

12月15日にオリオン分子雲に おいて23-25GHz帯にあるアン モニアの4本のスペクトル線およ び再結合線を初めて観測した(右 図)。その後12月24日から本格 的な観測を開始し、4年生の卒業 研究および修士論文や博士論文に 向けての観測を継続した。

その中で、銀河 NGC 6946 や NGC 3079 のアンモニア輝線を初 めて検出した。また活動的銀河中 心核からの水メーザーの速度のモ ニター観測も開始した。



#### 【2】南極望遠鏡計画

南極大陸の昭和基地から約 1000 km 内陸側の高原地帯にある日本のドームふじ基地において南 極天文学を開拓するために、プロトタイプとして 30 cm サーベイ望遠鏡の開発を始め、今年度は設 計及び基幹部品の製作を行った。

システム設計において、観測帯域は、星間物質の主要なプローブである、一酸化炭素分子と炭素 原子の観測に適した 500 GHz と定めた。アンテナの形式は、広視野望遠鏡の特性を最大に生かす オフセットカセグレン型とし、空間分解能は、既存のサーベイデータを有効に活用にできるように 30 cm 鏡の採用で9分角とした。伝送光学系の設計においては、将来の高周波数観測の際にも、伝 送光学系の更新を不要とする、周波数の依存性が少ない光学パラメータを定めた。受信機の設計で は、超伝導素子を用いた高感度受信機を採用した。小型軽量の4K 冷凍機を採用しながら、信号窓 径の最小化等により流入熱を抑制し、2系等の観測信号の同時受信も可能な高感度受信機システム を設計した。これらの搭載機器は、南極現地での人力での運搬性を考慮して、60 kg 以下に分割で きる構成にした。

アンテナ光学系のシュミレーションによる評価では、対称性が良い所望のビームサイズが実現で きていることを確認し、伝送光学系は、観測周波数である 500 GHz 帯に加え、将来計画である1 THz の観測においても、今回開発した伝送光学系が使用できることを確認した。製作した超伝導受 信機を用いた評価試験の結果、超伝導素子の電流―電圧特性では、超伝導素子の 4K への確実な冷 却及び良好な膜質を示す急峻な非線形の特性を確認し、雑音性能の評価では等価熱雑音換算で 140 K を実現した。この雑音温度は世界レベルでの標準値であり、高感度受信機システムの開発に成功 したと言える。

また、南極天文学の推進組織として発足させた南極天文コンソーシアムの活動を、東北大学等と 協力して継続している。南極研究観測シンポジウム等で計画の発表を行い、国立極地研究所と計画 の協議を行った。



## 【3】銀河の観測的研究

距離約 79Mpc にある円盤銀河 IC1481 の活動的銀河中心核(AGN)から出ている超強力水メーザー を VLBA で観測した結果、半径が r=2.8-14.0 pc、厚さが 2H=1.5-4.1 pc、回転速度が V<sub>rot</sub>=124 -168 km/s,速度分散が ΔV=31 km/s である分子ガス円盤を発見した。この円盤の回転曲線は式 V<sub>rot</sub> ∝ r<sup>-(0.19±0.04)</sup>

で表わされ、中心から離れるほどケプラー回転よりも有意にゆっくりと速度が減少している。この回転曲線を円盤の質量と中心にあるブラックホールの質量によるものとするモデルで計算すると、それぞれの質量は $M_{disk}$ =(4.3±0.3)×107 Mo と $M_{BH}$ <107 Mo となり、円盤の質量だけで説明できるとともにブラックホールの質量の上限値を与えることができた。この結果はガス円盤が静水圧平行よりもはるかに厚いこととも合致している。また円盤に垂直方向にその片側に連続波電波のジェットも検出した。

# <論 文>

(査読論文)

- <u>Mamyoda,K.</u>, <u>Nakai,N.</u>, <u>Yamauchi,A.</u>, Diamond,H., Hure,J.M.
   "Detection of a Sub-Keplerian Water Maser Disk at the Active Galactic Nucleus of the Galaxy IC 1481" *Publ. of Astron. Soc. Japan*, submitted.
- Sorai,K., Habe,A., Nishitani,H., Hosaka,K., Watanabe,Y., Miwa,S., Ohishi,Y., Motogi,K., Minamidani,T., Awano,J., Sumida,S., Fukuya,Y., Uchida,R., Kaneko,N., Fujimoto,M.Y., Koyama,Y., Kimura,M., <u>Nakai,N.</u>
   "Large-scale NH3 Observations toward the Galactic Star Forming Regions I. W51 Molecular Clouds Complex"

Publ. of Astron. Soc. Japan, submitted.

(国際研究会集録等)

 Kuno,N., Sato,N., Nakanishi,H., Hirota,A., Tosaki,T., Shioya,Y., Sorai,K., <u>Nakai,N.</u>, Nishiyama,K. and Vila-Vilaro,B. 2008 "Nobeyama CO Atlas of Nearby Spiral Galaxies", in *Mapping the Galaxy and Nearby Galaxies*, ed. Wada,K. and Combes,F. (Springer Science+ Business Media, New York), 170.

- Nakanishi,K., Sato,N., Kuno,N., Okumura,S.K., Kawabe,R., Kohno,K., <u>Yamauchi,A.</u>, and <u>Nakai,N</u>. 2008 "Radio Continuum and Water Vapor Maser Monitoring Toward the Luminous Infrared Galaxy NGC 6240", in *Mapping the Galaxy and Nearby Galaxies*, ed. Wada,K. and Combes,F. (Springer Science+ Business Media, New York), 364.
- Sorai,K., Kuno,N., <u>Nakai,N.</u>, Matsui,H. and Habe,A. 2008 "Kinematics of Molecular Gas in the Bar of Maffei 2", in *Mapping the Galaxy and Nearby Galaxies*, ed. Wada,K. and Combes,F. (Springer Science+ Business Media, New York), 380.
- Yamauchi, A., Nakai, N., Ishihara, Y., Diamond, P. and Sato, N. 2008 "Water-Vapor Maser Disk at the Nucleus of the Seyfert 2, IC 2560", in *Mapping the Galaxy and Nearby Galaxies*, ed. Wada, K. and Combes, F. (Springer Science+ Business Media, New York), 385.
- <u>Yamauchi,A.</u>, <u>Nakai,N.</u>, Ishihara,Y., Diamond,P., and Sato,N., 2007 "Water-vapor maser disk at the nucleus of the Seyfert 2, IC 2560", in *Astrophysical Masers and their Environments*, Proceeding of the International Astronomical Union, IAU Symposium, Vol. 242, 412-413.

# <学位論文>

(修士論文) 数理物質科学研究科·物理学専攻

1. 石井 峻

「南極可搬型サブミリ波望遠鏡光学系の開発」

2. 小出祐輔

```
「筑波大学電波望遠鏡制御ソフトウェアーの開発」
```

3. 益田多美

The Physical State of the CO Gas in the Spiral Galaxies Based on the Study of CO J=1-0 and J=2-1 Lines  $\tt J$ 

客川直己
 「南極可搬型サブミリ波望遠鏡冷却受信機の開発」

1. 粉川慶太

```
「つくば 32m 電波望遠鏡の 20GHz 帯における受信観測性能の向上」
```

2. 高丘茂樹

「活動的銀河中心核ケンタウルスAのアンモニア観測」

3. 善甫啓一

「アンモニア観測による近傍銀河 NGC6946 中心部の分子ガスの研究」

4. 坪川 雅

「オリオン分子雲のアンモニア観測」

5. 野々川博晃

「星形成初期のコアを含む分子雲のアンモニア観測」

6. 前橋秀樹

「南極 30cm 可搬型電波望遠鏡受信機中間周波数部の設計」

7. 森 洋治

「つくば 32m 電波望遠鏡による W51 電離領域の観測的研究」

<sup>(</sup>卒業論文)

<学会発表>

- 瀬田益道、石井峻、宮川直己、小出祐輔、宮本祐介、萩原健三郎、山内彩、中井直正、南 極天文コンソーシアム
   「南極 30cm 望遠鏡による 500GHz 帯の銀河面サーベイ計画」
   日本天文学会秋季年会(2007 年 9 月 26 日)
- 2. 中村佳代子、並河大地、亀野誠二、澤田一佐藤聡子、吉川亮、<u>中井直正</u>、佐藤奈穂子 「活動的銀河 NGC1052 のプラズマトーラス構造とメーザースポットの分布」 日本天文学会秋季年会(2007 年 9 月 26 日)
- 3. <u>宮川直己、瀬田益道、石井峻、小出祐輔、宮本祐介、萩原健三郎、山内彩、中井直正</u>、前 澤裕之 「南極 30cm サブミリ波望遠鏡の開発」

日本天文学会秋季年会(2007年9月27日)

- 4. <u>石井峻、永井里、瀬田益道、中井直正</u>、本山秀明、田口真 「南極ドームふじ基地における 220GHz 帯大気透過率の測定」 日本天文学会秋季年会(2007 年 9 月 28 日)
- 5. 中西康一郎、久野成夫、濤崎智佳、奥田武志、河野孝太郎、徂徠和夫、<u>中井直正</u>
   「CO(1-0) and CO(3-2) Mapping Observations toward Nearby Barred Spiral Galaxy
   NGC253」
   日本天文学会春季年会(2008年3月25日)
- 6. <u>石井峻、宮川直己、瀬田益道、小出祐輔、宮本祐介、萩原健三郎、山内彩、中井直正</u>、前 澤裕之
   「南極 30cm サブミリ波望遠鏡の開発」
   日本天文学会春季年会(2008 年 3 月 25 日)
- 7. <u>山倉鉄矢、中井直正、瀬田益道</u>、前澤裕之、芝祥一、新保謙、山本智 「準光学型ホットエレクトロンボロメータの開発」 日本天文学会春季年会(2008年3月25日)
- 8. <u>瀬田益道、山内彩、萩原健三郎、宮本祐介、堀江雅明、間明田好一、宮川直己、小出祐輔、石井峻、荒井均、扇野光俊、平井克明、丸山理樹、大城航、永井里、中井直正</u>、他 32m 鏡運用チーム、栗原忍、他宇宙測地グループ
   「つくば 32m 電波望遠鏡 20GHz 帯観測システムの開発」
   日本天文学会春季年会(2008 年 3 月 27 日)
- 9. <u>山内彩</u>、<u>小出祐輔</u>、<u>萩原健三郎</u>、<u>堀江雅明</u>、<u>丸山理樹</u>、<u>瀬田益道</u>、<u>中井直正</u>、栗原忍、他 宇宙測地グループ

「つくば 32m 電波望遠鏡の単一鏡観測制御システムの開発」

日本天文学会春季年会(2008年3月27日)

- 10. <u>宮本祐介</u>、<u>瀬田益道</u>、<u>萩原健三郎</u>、<u>間明田好一</u>、<u>堀江雅明</u>、<u>石井峻</u>、<u>小出祐輔</u>、<u>宮川直</u>
   <u>己</u>、<u>中井直正</u>、栗原忍、他宇宙測地グループ
   「つくば 32m 電波望遠鏡の 20GHz 帯受信観測システムの開発」
   日本天文学会春季年会(2008 年 3 月 27 日)
- 11. <u>萩原健三郎、堀江雅明、宮本祐介、助田悠紀、間明田好一、石井峻、宮川直己、小出祐</u> <u>輔、荒井均、扇野光俊、平井克明、丸山理樹、大城航、永井里、山内彩、瀬田益道、中井</u> <u>直正</u>、栗原忍、他宇宙測地グループ

「つくば 32m 電波望遠鏡の 20GHz 帯実効雑音の評価と雨避けカバーの交換」

日本天文学会春季年会(2008年3月27日)

12. 丸山理樹、中井直正、瀬田益道、山内彩、萩原健三郎、間明田好一、堀江雅明、宮本祐 介、石井峻、小出祐輔、宮川直己、荒井均、扇野光俊、平井克明、大城航、永井里、粉川 慶太、善甫啓一、高丘茂樹、坪川雅、野々川博晃、森洋治、前橋秀紀、栗原忍、他宇宙測 地グループ

「つくば 32m 電波望遠鏡の 20GHz 帯アンテナ性能評価」 日本天文学会春季年会(2008 年 3 月 27 日)

## <外部資金>

(学内)

- 学内プロジェクト研究(特別助成研究):瀬田益道(研究代表者) 中井直正 山内彩 「南極天文学開拓に向けてのサーベイ望遠鏡の開発」 (交付額 905 万円)(2/3 年)
- 物理学系若手奨励研究プロジェクト:山内彩(研究代表者)
   「アンモニア吸収線の観測による活動的銀河中心核の研究」
   (交付額 32 万 5 千円)(1/1 年)

(学外)

- 科学研究費補助金(基盤研究 B):中井直正(研究代表者)
   「水メーザーの観測によるセイファート銀河の統一モデルの再考」
   (交付額 100 万円)(3/3 年)
- 2. 科学研究費補助金(基盤研究 A):瀬田益道(研究代表者)、中井直正、山内彩 「南極天文学を切り開くサブミリ波サーベイ望遠鏡の開発」 (交付額 2040 万円)(1/3 年)
- 国立極地研究所共同研究:中井直正(研究代表者)、瀬田益道、他 「ドームふじ基地における天文観測の調査検討」 (交付額 9 万 9 千円)(1/3 年)
- 4. 自然科学研究機構国立天文台:中井直正(研究代表者)
   「大学間連携VLBI観測事業に係る研究―先端的天文学研究の推進―」
   (交付額 435 万 5 千円)(1/1 年)
- 東レ科学技術研究助成金:瀬田益道(研究代表者)、中井直正、山内彩 「南極天文学の開拓」
   (交付額 1152 万 9 千円)(1/2 年)

### <共同研究・受託研究>

 「大学間連携VLBI観測事業に係る研究:先端的天文学研究の推進―高精度VLBI観測による銀 河系の構造及び進化の解明」一般受託研究契約 大学共同利用機関法人自然科学研究機構(2007年4月2日~2008年3月31日)

## <社会活動・広報活動>

(一般向講演)

中井直正:第17回 ALMA 公開講演会

 「銀河の中心とブラックホールをさぐる」
 2007年8月12日(日)つくば市つくばエクスポセンター

(新聞記事等)

- 1. 2007年6月4日、毎日新聞(夕刊):「南極に天文台」
- 2. 2007年7月3日、NHK国際放送「ラジオ日本」:ニュースで南極天文台計画紹介

3. 2008年2月22日、日本経済新聞(夕刊):「南極に天文台を」



(毎日新聞夕刊、2007年6月4日)

# V. 原子核理論グループ

教授 矢花 浩
講師 橋本幸男、中務孝(平成19年7月31日まで)
準所員 稲倉恒法
学振所員 林慎明
大常注 6名

【1】原子核集団運動の理論、不安定核の構造

(1) Skyrme 汎関数による光吸収断面積の実時間 TDDFT 計算

(中務、矢花)

時間依存密度汎関数理論(TDDFT)に基き、実験データが存在する安定核の光吸収断面積のエネルギー 依存性を非経験的手法で計算した。光子エネルギーが中性子(陽子)分離エネルギーを超えると、原 子核からの核子放出が可能になり、強度分布は連続分布となる。このような核子の連続状態の取扱 には、これまで我々が開発してきた吸収境界条件法を用いた。ヘリウムからカルシウムまでの比較 的軽い原子核について、実験データと比較した。その結果、断面積のエネルギー依存性について定 性的に再現する一方で、強度のピーク位置が系統的に過小評価することが分った。重い原子核の光 吸収が対称エネルギーで主に規定されているのに対して、軽い核では、それ以外の相関が重要であ ることを示唆していると考えられる。

(2) 断熱自己無撞着集団座標(ASCC)法による変形共存現象の解析

(中務、日野原(京都大)、松尾(新潟大)、松柳(京都大))

昨年度、数値的不安定性が理論のゲージ不変性にあることをつきとめ、ゲージ固定によってこの不 安定性が解消されることが分った。今年度、ASCC法で求めた正準集団座標、運動量によって記述さ れる集団ハミルトニアンを量子化し、励起スペクトルと集団波動関数を求めた。その結果、波動関 数の広がりが角運動量の大きさに強く依存することが分った。例えば、プロレート・オブレートの 変形状態が1つの原子核に共存する「変形共存現象」において、角運動量がゼロでは、プロレート とオブレートの変形が強く混ざっていても、わずかに回転を与えることで、これらの変形は独自性 を高め、別々の回転バンドとして存在することが示された。実験データとの比較を実行し、この予 言を確かめる観測量を現在模索中である。

(3) 不安定核でのピグミー共鳴状態の集団性の研究

(稲倉、松尾(新潟大))

不安定核に特有な集団励起モードの候補とされているピグミー共鳴状態を自己無撞着な RPA を用いて計算し、その集団性 及び 集団性の起源について議論した。ピグミー共鳴状態を粒子・正 孔励起に分解すると、幾つかの粒子・正孔励起でその大部分を占めており、一番寄与が大きいもの は 単独で 50%を超えていた。これは巨大共鳴の性質とは明らかに異なり、これまでの解釈ではピグ ミー共鳴状態に集団性は無いものとなる。しかしながら、個々の粒子・正孔励起の遷移密度を見る と、非常に寄与の小さな粒子・正孔励起もコヒーレントに効いており、このコヒーレンスが全体の 遷移密度に重要な役割を担っている事が判明した。非常に集団性の高い状態として有名な低エネル ギーの八重極振動でも 同様の結果を得ている、これは、低エネルギー領域での集団性の議論には、 粒子・正孔励起の寄与の分散のみならず、遷移密度のコヒーレンスも重要である事を示唆している。 (4)時間依存密度汎関数理論による原子核の応答関数の系統的計算

(稲倉、矢花、中務(理研))

重い短寿命の不安定核も生成可能となり、実験でアクセスできる核種が増えている。安定核、 不安定核を分け隔てる事なく全核種の励起状態を計算し、不安定核まで含めた原子核の諸性質を議 論する為の系統的計算を開始した。先行する計算では対象核が球形に限られるものが殆どであり、 系統的計算に適用可能な変形自由度を考慮に入れた計算コードを作成、質量数80前後までの原子 核の電気双極子励起(E1)モードについて計算を実施した。巨大共鳴のエネルギーの質量依存性、基 底状態の変形度が巨大共鳴に及ぼす影響などについて議論した。また、数種の重い核についても計 算を実施し、実験と比較する事で、我々の計算の有用性を示した。これ迄に幾つかの不安定核で観 測された、低エネルギー領域でのE1 遷移強度が、安定線から離れた不安定核一般で現わる事を示し た。また、特定の一粒子軌道がその出現に重要な役割を果している事も指摘した。

(5) BCS 形式による時間依存密度汎関数理論の拡張

(江幡、中務、稲倉、橋本、矢花)

原子核を超重領域まで系統的に計算するためには、対相関を取り入れることが重要である。最も良 く知られた方法としては、超伝導の理論として開発された BCS (Bardeen-Cooper-Schriefer)の理論 があり、原子核の核子超流動性を扱う理論として、古くから用いられてきた。我々は、この BCS 状 態を時間依存として、一粒子軌道および(u, v)因子が従うべき方程式を導き、原子核の応答計算に応 用した。これまでのところ、BKN 相互作用によるアイソスカラー型の強度分布関数の計算に応用し、 変形により単極子強度分布に著しい変化が現れることを示した。これは、回転対称性が破れたこと により、巨大四重極共鳴の状態と結合し、エネルギーの低い領域にピークが現れることによる。現 在、より現実的な Skyrme 汎関数へのプログラムの改訂を実行中である。

(6) 有限振幅法の開発

(中務(理研)、稲倉、矢花)

原子核の励起状態の計算には RPA がよく使われる。しかしながら、エネルギー密度汎関数を密 度の2階微分する事で得られる残留相互作用は、その繁雑さから簡略化される事が殆どであった。 核力の自己無撞着性を満たしつつ、計算が容易な手法として、有限振幅法を開発した。波動関数の 時間発展をエネルギー表示の枠組みで線形化する事で RPA と同値な方程式を導出し、残留相互作用 は容易に(数値的に)計算できる手法である。この手法は平均場の計算コードに若干の修正を施すだ けで良いので、コードの開発自体も容易に行なえる利点もある。この新しい手法で計算を実施し、 完全に自己無撞着な RPA の結果をよく再現する事を示した。

## (7) 原子核の三次元的回転運動の理論

(橋本、堀端(青森大))

有限量子系である原子核は様々な集団運動のモードを持っている。回転運動は、その中でも最 も顕著な集団運動の例である。原子核平均場は密度分布と緊密に関係している(nuclear self-consistency)ので、原子核平均場の回転運動は内部核子によるコヒーレントな運動の現れで ある。原子核の回転運動の研究は主に軸対称変形をした核の主軸まわりの定常回転を対象に行われ てきた。クランキング模型に基づくこの考え方は、原子核の回転スペクトルの構造とその背景にあ る力学について説明する上で、定性的にも定量的にも成功してきた。一方、理論的な立場からは、 主軸のまわりの回転運動だけではなく、より一般的な回転運動の存在が期待されている。原子核が 軸対称から離れ、三軸非対称変形をすると、"主軸まわりの定常的な回転"という基礎の上に一種の フォノンが生じたような運動モードが起こることが Bohr と Mottelson の教科書でも指摘されてい る。ウォブリング(wobbling)と呼ばれるこの揺動運動は回転軸が平均場の主軸から離れて才差運動 のように動き出すことを意味している。本研究では、ウォブリング運動のような三次元的な回転運 動が原子核において生じる力学的機構を微視的に理解することを目的としている。

今年度は特にオスミウム 1820s の J=24 の場合に、ウォブリングをはじめとする励起モードの 計算を生成座標法(GCM)に基づいて進めた。J=24 の場合に特徴的なことは、角運動量の拘束を主 軸から離れた値にして行う傾斜角運動量ハートレーフォックボゴリュボフ(tilted axis HFB)の計 算において、対称軸に垂直な x 軸から対称軸(z 軸)へと拘束角運動量を倒す角度(チルト角)に 依存して HFB 解の内部構造が 3 種類に変化することである。ひとつは、エネルギーの局所平衡点に 相当する傾斜角回転(tilted axis rotation; TAR)と呼ばれるモードを含む分枝である。この、TAR モードは、主軸回転運動を仮定した計算では出てこないモードであり、P.M. Walker らの実験で K 量 子数が 8 のバンドに相当すると考えられる。これらの K=8 のバンドは x 軸まわりの回転運動に対応 するイラスト線に対して、新しいタイプのイラスト線になっている。他のひとつは、角運動量が対 称軸に近い向きのときに起きる歳差運動(precession)である。さらに、これらのモードをつなぐ 過渡的な領域が存在することがわかった。GCM 計算による歳差運動の励起エネルギーは、実験値に 近い値が得られている。これらのモードの内部構造を解析することが次の段階になる。

(8) Gogny 力を用いた時間依存 HFB コードの開発

(橋本、野出木)

不安定核の励起状態の研究は、主にSkyrme 力+ゼロレンジ対相関力に基づいた準粒子乱雑位相 近似(QRPA)によって行われている。この組み合わせの場合には、Skyrme 力は粒子・空孔相関のチ ャネルに、また、ゼロレンジ対相関力は粒子・粒子相関のチャネルに働く。対相関は、適当なカッ トオフを導入して実用化されている。一方、Gogny 力を用いた QRPA の場合には粒子・空孔チャネル と粒子・粒子チャネルは共通の有効核力を用いて計算される。われわれは、この自己完結性に着目 し、Gogny 力に基づいた時間依存 HFB(TDHFB)の方程式を解くためのコードを開発した。目的は、 Skyrme 力+ゼロレンジ対相関の計算と比較しつつ軽い不安定核から始めて不安定核の系統的な励起 状態の情報を蓄積することである。微小振幅の TDHFB 方程式は QRPA と同等であるので、これは、QRPA を解く方法のひとつでもある。応用は、酸素の同位体で四重極および双極型振動の強度関数を調べ、 スペクトルの位置と全強度を確かめた。また、変形核を含むマグネシウム同位体で同様に計算し、 変形の効果と対相関の効果が取り入れられていることを確認した。目下、クーロン力を取り入れた 計算過程全体の時間的な効率を上げること、及び、基底空間を大きく取れるように改良することが 課題となっている。

【2】原子核のクラスター構造

(1)中性子過剰 Mg 同位体の包括的研究

(木村)

中性子過剰のN~20同位体では、中性子魔法数N=20が成立していない。この現象の理解へ向けて、 現在この質量領域の原子核の励起スペクトルを網羅的に調べる実験が数多く実行、計画されている。 しかしながら、この質量領域の原子核のスペクトルに関する理論的研究は、そのほとんどが基底状態と第一励起状態のみに限られており、理論研究による情報、理解が必要とされている。

本研究では、反対称化分子動力学を用い、"N=20 魔法数の破れ"現象が起こっていると考えられて いる Mg 同位体及び、その周辺核の構造について包括的な議論を行った。その結果、魔法数が破れて いる同位体においては、低励起状態に多数の多粒子多空孔状態が共存するため、非常に特徴的な励 起スペクトルが現れることを予言した。また状態間の電磁遷移確率のみならず、親核から Mg 同位体 へのβ崩壊、Mg 同位体から娘核へのβ崩壊を測定することで、基底、励起状態の構造について多く の情報が得られることを指摘し、それら観測量に対する理論的予言を行った。

(2) 改良 AMD 法の開発と p-shell 核への適用

(古立(東京理科大)、木村、土手(KEK)、延與(京都大基研))

反対称化分子動力学法(AMD)は、比較的軽い核に現れるさまざまな構造をよく記述する模型で あるが、基底関数の制限のために、中性子過剰核に現れる特異な構造である中性子ハローを記述す ることができない。空間的に広がった中性子波動関数を持つハロー構造の記述を行うために、AM D模型の改善を行い、併せて、p-shell に現れる中性子、陽子ハロー核に適用することでその有効 性を示した。一粒子波動関数を記述する際に、複数のガウス基底を重ね合わせるという改善を行っ た。He 同位体への適用では、従来のAMD模型に比べ、He 同位体の記述が劇的に改善し、それら の束縛エネルギー、半径などの実験値が精度よく記述できることがわかった。また、陽子過剰の 9B、 10C に対しても適用し、これらの核では陽子ハロー構造が発達すること、さらに 10C では、コアに おいて二体クラスター構造が発達することを示した。

(3) Skyrme Hartree-Fock による 16C の直鎖状態の探索

(木村, 板垣(東大), J.A. Maruhn(Frankfurt))

三つの $\alpha$ 粒子が直線上に並ぶ直鎖状態が12Cの励起状態に存在するのかどうかは、古くから議論 されてきた。しかし、 $\alpha$ クラスター模型や、最近のより精密な模型による研究ではその存在につい ては、むしろ否定的な結果が多く、また実験的にもその存在を示すデータは得られていない。一方 で、中性子過剰核を用いた実験により Be 同位体で二つの $\alpha$ 粒子の周りを中性子が運動する分子状態 が発見されたことで、中性子過剰の不安定 C 同位体では、余剰中性子が付け加わることで、三つの  $\alpha$ 粒子の直鎖状態が安定化し、存在しうるのではないかとの議論が理論的にも、実験的にもされ始 めた。そこで、 $\alpha$ 粒子コアの存在や、余剰中性子の運動に対して一切仮定を設けない Skyrme Hartree-Fock 模型を用いて、16C の励起状態に直鎖状態が現れる可能性を調べた。その結果、16C の励起状態に直鎖状態が存在しうることを指摘した。また、時間依存 Hartree-Fock 計算を行うこ とで、その状態が摂動に対して安定であることを示し、比較的狭い幅をもった状態として観測され うることを示した。

(4)24Mgの α クラスター構造の研究

(木村, 板垣(東大))

近年、12Cの励起状態( $0_2$ )は、三つの $\alpha$ 粒子が 0s 状態に凝縮した BEC 凝縮状態であることが明 らかにされた。より数の多い 4 $\alpha$ 、5 $\alpha$ の BEC の存在が期待されるが、粒子数が増加するにともなっ て従来の模型による計算が難しくなってくる。そこで、stochastic に基底波動関数を生成し、大規 模行列を対角化する手法を用いることで、24Mg(5 $\alpha$ 系)の構造研究を行った。その結果、励起状態に 5 つの $\alpha$ クラスターからなる状態が複数個現れ、そのうち $\alpha$ 敷居値エネルギー近傍に現れる状態は BEC 状態と見なせることを指摘した。

### 【3】強レーザー場と物質の相互作用に対する第一原理計算

原子核は核子からなる凝縮したフェルミ粒子多体系であるが、物質は同じくフェルミ粒子である電子の 凝縮した多体系である。このため、電子の量子状態を記述する多体理論は原子核を記述する多体理論と 共通する場合が多い。我々は、原子核物理学で長い歴史を持つ時間依存平均場理論を物質科学分野 で応用する研究を進めている。特に強いレーザー場中で起こる電子のダイナミクスは、様々な非線形現 象が現れ興味深い。 (1) 誘電体の光絶縁破壊に対する第一原理シミュレーション

(矢花、中務、岩田(計科セ)、乙部(関西原研)、山極(関西原研)、Bertsch(ワシントン大)

透明な絶縁体に可視領域の強いレーザー光を照射すると不可逆な損傷が生じ、レーザーを用いた加 エに利用される。この過程の最初のステップでは、レーザー光による電子励起とそれに伴う光絶縁破壊 が起こると考えられている。この光絶縁破壊に対し、時間依存密度汎関数理論を用いた第一原理シミュレ ーションを行った。

周期系に一様な外場が働く場合の電子ダイナミクスを記述する枠組みは、以前実時間計算から誘電 関数を求める際に構築した。その基礎方程式は、外場と分極場を表す空間的に一様なベクトルポテンシ ャルを含む時間依存Kohn-Sham 方程式である。外場のポテンシャルとして一様なパルスレーザーを表す ものを用い、ブロッホ関数の時間変化を計算することにより、レーザー場に起因するダイナミクスを記述す ることができる。

右図は、ダイアモンドに強レーザー場を照射 した場合の計算結果を示す。横軸にレーザー 場の最大強度、縦軸にレーザー場から電子へ のエネルギー移行をプロットしている。レーザ ーの振動数は3.1eV、パルス長は16fsにとって いる。レーザーの強度が7x10<sup>14</sup>W/cm<sup>2</sup>に達した 段階で、電子へのエネルギー移行が急に増加 している。この強度において、外場の振動数と 励起によって伝導帯に生じたキャリアの作るプ ラズマ振動数が一致し、共鳴的にエネルギー 移行が進んだものと考えられる。この強度が光 絶縁破壊に相当するものと考えられる。



(2) 強レーザー場中で起こる分子のクーロン爆発

(川下、矢花、中務)

強いレーザー場中にある分子は、多重イオン化の後にクーロン爆発を起こす。この過程に対し、時間 依存密度汎関数理論によるシミュレーションを行った。イオン化の記述のため必要な広範な空間領域で 計算を行うため、超並列計算機PACS-CS を利用した。空間領域を3次元的に分割し、各々の領域の計 算を異なるCPUが担うことにより、効率の良い並列計算の実施が可能となっている。

N<sub>2</sub>分子を対象に計算を行った。まず、交換相関ポテンシャルの選択に関する検討を行った。中性原子や分子のイオン化に対しては、最適化有効ポテンシャルなどの自己相互作用補正を行ったポテンシャルを用いることの重要性が知られている。しかし一方で、最適化有効ポテンシャルでは全エネルギー計算が困難な場合があり、イオンに働く力を求める際に問題が生じる。局所密度近似は最も単純だが、中性からのイオン化率を過大評価することが知られている。これに対して、我々が検討を行ったところ、クーロン爆発が問題となる4価程度のイオン化では、局所密度近似と最適化有効ポテンシャルは、同一のレーザー強度でほぼ等しいイオン化価数となることが確認された。

分子のクーロン爆発実験で測定される量に、爆発後のイオンの運動エネルギー分布と運動量分布が ある。運動エネルギーは中性分子の平衡位置におけるクーロンエネルギーよりも小さいことが知られてお り、イオン化が進む過程でイオン間距離が増大することに起因すると考えられている。また、イオンの運動 量がレーザーの偏極方向に偏ることが見いだされており、これは分子がレーザー場中でレーザー偏極 方向にトルクを受けて回転することに起因すると指摘されていた。我々は、第一原理的なシミュレーション からこれらの解釈の妥当性について検討した。その結果、運動エネルギーの抑制に関しては、実験で見 出されている4割程度の抑制が計算でも見られた。ただし、実験では非常に短いパルスを用いた場合に は抑制がほとんど見られないことが報告されているが、計算ではパルスの長さが短い場合にも抑制が見いだされた。レーザー偏極方向への運動量の整列についても、計算によりそのような効果があることが確認できた。

【4】 クォーク分子動力学法による重イオン衝突のシミュレーション

(松山、丸山(連携・原研))

核物質のクォーク閉じ込めに関わる相転移や高エネルギー重イオン衝突現象をミクロに記述す ることを目標に、クォークを基本自由度とする量子分子動力学計算(QMD計算)を発展させた。 クォークQMDでは、クォークの1粒子軌道をガウス波束により、その直積状態で全系の波動関数 を記述し、波束中心の運動を位相空間で古典的に記述することによりクォークのダイナミクスを調 べる。今年度は、クォーク間の有効相互作用を適切に取ることにより、クォーク物質と有限核を記 述することができることを示した。さらに、予備的にではあるが、原子核衝突のシミュレーション を行い、クォーク間の衝突項の重要性を指摘した。

<学位>

#### 1. 理学修士:

# 江幡 修一郎 氏

「超流動原子核の構造・応答に対する時間依存密度汎関数計算」

#### 野出木 健一 氏

「Gogny 力を用いた TDHFB 法による軽い核の微小振幅応答」

## 松山 裕右 氏

「クォークの分子動力学法による原子核衝突のシミュレーション」

#### <発表論文>

- G. E. Ballentine, G.F. Bertsch, N. Onishi, K. Yabana, Moment distributions of clusters and molecules in the adiabatic rotor model Comp. Phys. Comm. 178, 48-51 (2008).
- K. Nobusada, K. Yabana Electric currents in ring-shaped molecules induced by circularly polarized laser pulses Comp. Phys. Comm. 177, 54-54 (2007).
- 3. T. Otobe, K. Yabana, Density-functional calculation for the tunnel ionization rate of hydrocarbon molecules Phys. Rev. A75, 062507 (2007).
- 4. T. Otobe, M. Yamagiwa, J.-I. Iwata, K. Yabana, T. Nakatsukasa, G.F. Bertsch, First-principles electron dynamics simulation for optical breakdown of dielectrics under

an intense laser field Phys. Rev. B77, 165104 (2008).

- 5. T. Otobe, K. Yabana, J.-I. Iwata, First-principle calculation for high harmonic generation in diamond Submitted to Journal of Computational and Theoretical Nanoscience
- 6. K. Yabana, T. Nakatsukasa, M. Ito, Time-dependent description for nuclear reaction dynamics in the continuum Submitted to Proceedings of the 20<sup>th</sup> European Few-Body Conference.
- 7. 矢花一浩
   多電子ダイナミクスの量子シミュレーションー時間依存密度汎関数理論の最近の発展-日本物理学会誌 Vol. 62, No. 6, pp. 406-414 (2007).
- N. Hinohara, T. Nakatsukasa, M. Matsuo, and K. Matsuyanagi, Gauge-Invariant Formulation of Adiabatic Self-Consistent Collective Coordinate Method Prog. Theor. Phys. 117 (2007) 451-478.
- 9. M. Ito, K. Yabana, T. Nakatsukasa, and M. Ueda, Fusion Reaction of Halo Nuclei: A Real-Time Wave-Packet Method for Three-Body Tunneling Dynamics Nucl. Phys. A787 (2007) 267c-274c.
- O. T.Nakatsukasa and K.Yabana, Real-time Skyrme TDHF dynamics of giant resonances Nucl. Phys. A788 (2007) 349c-354c.
- T. Nakatsukasa, T. Inakura, and K. Yabana Finite Amplitude Method for the Solution of the Random-Phase Approximation Phys. Rev. C 76 (2007) 024318 (9 pages).
- 1 2. N. Hinohara, T. Nakatsukasa, M. Matsuo, and K. Matsuyanagi, Microscopic derivation of collective Hamiltonian by means of the adiabatic self-consistent collective coordinate method Prog. Theor. Phys. 119 (2008) 59-101.
- T. Nakatsukasa, K. Yabana, and M. Ito, Time-dependent approaches for reaction and response in unstable nuclei Eur. Phys. J. Special Topics 156 (2008) 249-256.
- 1 4. T.Nakatsukasa, S.Shinohara, K.Yabana, H.Ohta, Stochastic approach to correlation beyond the mean field with

Skyrme interaction to be published in Proceedings of the international nuclear physics conference (INPC2007).

- 1 5. T. Nakatsukasa, T. Inakura, K. Yabana Linear response calculations with the time-dependent Skyrme density functional to be published in Proceedings of the international symposium on Physics of Unstable Nuclei (ISPUN07).
- 1 6. Lu Guo, J. A. Maruhn, P. -G. Reinhard, and Y. Hashimoto Conservation properties in the time-dependent Hartree-Fock theory Phys. Rev. C77 (2008), 041301(R).
- 1 7. N. Itagaki, M. Kimura, C. Kurokawa, M. Ito, W. von Oertzen "  $\alpha-{\rm condensed}$  state with a core nucleus" Phys. Rev. C 75, 037303 (2007)
- 1 8. M.Kimura "Molecular orbitals and  $\alpha$  + 180 molecular bands of 22Ne" Phys.Rev. C 75, 034312 (2007)
- 1 9. M.Kimura
   "Intruder features of 31Mg and the coexistence of many-particle and
   many-hole states"
   Phys.Rev. C 75, 041302 (2007)
- 2 O. Y. Taniguchi, M. Kimura, Y. Kanada-Enyo, H. Horiuchi "Clustering and triaxial deformations of 40Ca" Phys. Rev. C 76, 044317 (2007)
- 2 1. Y. Taniguchi, M. Kimura, Y. Kanada-En'yo, H. Horiuchi "Coexistence of cluster structure and mean-field-type structure in medium-weight nuclei" Nucl. Phys. A787, 547c-552c (2007) Ninth International Conference on Nucleus-Nucleus Collisions Aug 28 - Sep 1, 2006.

# <国際会議発表>

1. K. Yabana,

TDDFT Description for Laser-Induced Breakdown in Dielectrics, Minerva Gentner Symposium on Time-Dependent Density Functional Theory, Eilat, Israle, 16-21, Dec, 2007.

## 2. K. Yabana

Time-dependent description for nuclear reaction dynamics in the continuum - Reaction and response of exotic nuclei -

20<sup>th</sup> European Conference on Few-Body Problems in Physics, Pisa, Italy, 10-14 September 2007.

# 3. K. Yabana

Configuration mixing calculation with Skyrme Hamiltonian UNEDF workshop, Pac Forest, Washington, U.S.A., 12-17, August, 2007.

# 4. K. Yabana,

Simulation for electron dynamics in solid under intense laser pulse ISSP International Symposium on "Foundations and Applications of the Density Functional Theory", 1-3, August, 2007.

# 5. K. Yabana,

Time-dependent description for nuclear reaction dynamics in the continuum - Fusion mechanism of halo nuclei -International Nuclear Physics Conference, Tokyo, Japan, June 3-8, 2007.

6. T.Nakatsukasa

Time-dependent approaches for reactions and responses of unstable nuclei Invited talk at Theoretical Nuclear Physics School ``Exotic Nuclei: New Challenges'', (Les Houches, France, May 7-18, 2007).

# 7. T.Nakatsukasa

Time-dependent method for structure and reaction Invited talk at International Workshop on Many-body open quantum systems: From atomic nuclei to quantum dots (Trento, Italy, May 14-18, 2007).

8. T.Nakatsukasa

Dipole response calculations with the Skyrme density functional Invited talk at UNEDF Workshop (Pack Forest, Washington, USA, August 13-17, 2007).

## 9. T.Nakatsukasa

Nuclear response function calculated with the time-dependent Skyrme density functional Invited talk at 3rd Japanese-German Workshop on Nuclear structure and astrophysics (Chiemsee, Germany, September 29-October 2, 2007).
- 1 O. T.Nakatsukasa, S.Shinohara, K.Yabana, H.Ohta Stochastic approach to correlation beyond the mean field with Skyrme interaction Talk at the international nuclear physics conference (INPC2007) (Tokyo, Japan, June 3-8, 2007).
- 1 1. T.Nakatsukasa, T.Inakura, K.Yabana Linear response calculations with the time-dependent Skyrme density functional Talk at the international symposium on Physics of Unstable Nuclei (ISPUN07 (Hoi An, Vietnam, July 3-7, 2007).
- 12. T.Nakatsukasa

Time-dependent method for nuclear dipole response Talk at 4-th JUSTIPEN-EFES Workshop on shell structure of exotic nuclei (RIKEN, Wako, Japan, June 22, 2007).

13. Y. Hashimoto and T. Horibata

Tilted-axis rotation and wobbling motion in the framework of three-dimensional cranked HFB International Nuclear Physiscs Conference (INPC 2007) 東京国際展示場, 2007 年 6 月 3-8 日

# 14. Y. Hashimoto and K. Nodeki

Small-amplitude responses in light nuclei in TDHFB calculation with Gogny force First FIDIPRO-JSPS Workshop on Energy Density Functionals in Nuclei Keurusselka, (Jyvaskyla), Finland. 2007年 10月 25-27日

# 15. T. Inakura and M. Matsuo

Collectivity of pygmy resonance in spherical and deformed Ni and Fe isotopes International Nuclear Physiscs Conference (INPC 2007) 東京国際展示場, 2007 年 6月 3-8日

16. T. Inakura and M. Matsuo

Collectivity of pygmy resonance in spherical and deformed Ni and Fe isotopes International Workshop on Nuclear Structure: New Physics in the Extended Isospin Space 京都大学基礎物理学研究所 2007 年 6 月 11-14 日

17. T. Inakura, T. Nakatsukasa and K. Yabana Fully self-consistent calculation of isovector dipole response: Systematic study up to A=50 First FIDIPRO-JSPS Workshop on Energy Density Functionals in Nuclei Keurusselka, (Jyvaskyla), Finland. 2007年 10月 25-27 日 18. M. Kimura

International Nuclear Physics Conference 2007 Tokyo, Japan, Jun 3-8, 2007 "Molecular-Orbital and Di-nuclei States in Ne and F isotopes"

# 19. M. Kimura

International Symposium on Physics of Unstable Nuclei Hoi An, Vietnam 3 - 7 July 2007 "Molecular-Orbital and Di-nuclei States in Ne and F isotopes"

# 20. M.Kimura

International Conference on the Clustering Aspects in Nuclei Stratford avon Avon 3-7 Sep 2007 "Many-particle and many-hole states of the nuclei with odd neutron number in the island of inversion"

# 21. Y. Kawashita, T. Nakatsukasa, K. Yabana "TDDFT calculation for electron-ion dynamics in molecules under intense laser pulse" IPPS International Workshop and Symposium on

"Foundations and Applications the Density Functional Theory" 東大物性研 2007.8.1-3

22. Shuichiro Ebata, Takashi Nakatsukasa, Tsunenori Inakura, Yukio Hashimoto, Kazuhiro Yabana Calculation of Response Function with TDHF+BCS in Real-Time CNS International Summer School [理研 仁科ホール, 2007.08.28 - 09.01]

# <国内研究会·学会等>

- 矢花一浩 光に起因する電子・イオンダイナミクスに対する実時間シミュレーション法の開発 「次世代量子シミュレータ・量子デザイン手法開発」特定領域研究19年度成果報告会、国際高 等研究所、2008年3月18-19日
- 2. 矢花一浩

超短パルスレーザーと物質の相互作用-TDDFT による計算-「凝縮系の超高速現象とコヒーレント制御」、東京工業大学国際交流会館多目的ホール、2008 年2月21-22日

3. 矢花一浩

電子励起ダイナミクスの第一原理シミュレーション 第3回「計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム「PACS-CS システムと計 算科学」、筑波大学計算科学研究センター、2007年9月3-4日

4. 矢花一浩

光に起因する電子・イオンダイナミクスに対する実時間シミュレーション法の開発 特定領域研究「次世代量子シミュレータ・量子デザイン手法の開発」平成19年度顔合わせ会、 国際高等研究所、2007年6月8-9日

5. 矢花一浩、

はじめに

日本物理学会第63回年次大会、理論核物理領域シンポジウム「原子核物理学における大規模計算の現在と未来」、近畿大学本部キャンパス、2008年3月23日

6. 中務孝

原子核密度汎関数理論の発展 研究会「原子核物理學の将来像」、京都大学、2007 年 8 月 8-9 日

7. 中務孝

核構造大規模計算と密度汎関数法による数値シミュレーション 日本物理学会年次大会シンポジウム「原子核物理學における大規模計算の現在と未来」、 近畿大学、2008 年 3 月 23-26 日

- 8. 橋本幸男、堀端孝俊
  GCM による 182Os の TAR モードの計算
  日本物理学会第62回年次大会
  北海道大学2007年9月21-24日
- 9.橋本幸男、堀端孝俊
  1820sにおける傾斜角回転に対応するバンド状態
  日本物理学会第63回年次大会
  近畿大学2008年3月22-26日
- 10. 稲倉恒法,中務孝,矢花一浩 有限振幅法を用いた Skyrme-RPA 計算 日本物理学会第62回年次大会 北海道大学2007年9月21日
- 11. 稲倉恒法,中務孝,矢花一浩 Systematic study of isovector dipole mode up to A=50 KEK 研究会『原子核・ハドロン物理 横断研究会』 KEK 2007 年 11月 19-21 日
- 12. 稲倉恒法, 中務孝, 矢花一浩 Systematic study of photoabsorption spectra in nuclei -Fully selfconsistent RPA calculaiton-シンポジウム「未来の素粒子・原子核数値シミュレーション」 つくば国際会議場「エポカルつくば」 2007 年 12 月 19-20 日

- 13. 稲倉恒法,中務孝,矢花一浩
  平均場理論に基づいた電気双極子励起の応答関数に関する系統的計算
  2008 年国立天文台研究会 プロセス元素合成の統合的理解 ー 量子ビームで探る宇宙進化の
  理解を目指して ー
  筑波大学 2008 年 3 月 13-14 日
- 14. 稲倉恒法,中務孝,矢花一浩
  Electric dipole mode の系統的計算-中重核までの Skyrme-RPA 計算
  日本物理学会 第 63 回年次大会
  近畿大学 2008 年 3 月 26 日
- 谷口億宇,木村真明,延与佳子,堀内昶
  "原子核の励起状態の理論計算における有効相互作用依存性"
  日本物理学会 第62回年次大会
  北海道大学 2007 年 9 月 21~24 日
- 古立直也、木村真明、延与佳子 土手昭伸
  "拡張した AMD による軽い不安定核の構造研究"
  日本物理学会 第62回年次大会
  北海道大学 2007 年 9 月 21~24 日
- 17. 木村真明
  "中性子過剰 sd-pf 殻核における α クラスター構造、分子軌道構造の研究"
  日本物理学会 第 62 回年次大会
  北海道大学 2007 年 9 月 21~24 日
- 18. 川下洋輔 中務孝 矢花一浩 「分子における強レーザー場中の電子・イオンダイナミクスの第一原理計算」 第8回光量子科学研究シンポジウム 関西原研 2007.6.4-5
- 19.川下洋輔 中務孝 矢花一浩
  「分子の多重イオン化過程に対する第一原理シミュレーション」
  第1回分子科学討論会2007仙台 東北大 2007.9.17-20
- 20.川下洋輔 中務孝 矢花一浩
  「分子の多重イオン化過程に対する第一原理シミュレーション」
  日本物理学会第62回年次大会 北海道大 2007.9.21-24
- 21. 川下洋輔 中務孝 矢花一浩 「実時間・実空間法による電子・イオンダイナミクスの大規模並列計算」 次世代スーパーコンピューティングシンポジウム2007 MY PLAZA ホール 2007.10.3-4
- 22. 川下洋輔 中務孝 矢花一浩 「実時間・実空間 TDDFT による電子・イオンダイナミクスの大規模並列計算」

スーパーコンピューターワークショップ2008 "大規模計算と分子のダイナミクス" 自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター 2008.2.18-19

- 23. 川下洋輔 中務孝 矢花一浩 「TDDFT を用いた分子の多重イオン化過程に対する第一原理シミュレーション」 凝縮系の超高速現象とコヒーレント制御 東工大 2008.2.21-22
- 24. 川下洋輔 中務孝 矢花一浩

「実時間・実空間 TDDFT による電子・イオンダイナミクスの大規模並列計算」 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発 第2回公開シンポジウム 自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター 2008.3.4-5

- 25. 川下洋輔 中務孝 矢花一浩 「強レーザーパルスによる分子の多重イオン化過程に対する第一原理シミュレーション」 第55回応用物理学関係連合講演会 日本大学理工学部船橋キャンパス 2008.03.27-30
- 26. 江幡修一郎、中務 孝、稲倉恒法、橋本幸男、矢花一浩
  TDHF-BCS を用いた実時間応答関数の計算 21aYE-7
  日本物理学会 第62 回年次大会 北海道大学,2007.09.21-24
- 27. 江幡修一郎、中務 孝、稲倉恒法、橋本幸男、矢花一浩 TDHF+BCS を用いた実時間応答関数の計算 26pZH-5 日本物理学会 第63 回年次大会 近畿大学, 2008.03.22-26
- 28.野出木健一、橋本幸男、中務 孝、矢花一浩
  Gogny 相互作用を用いた時間依存 HFB の計算
  日本物理学会 第62 回年次大会 北海道大学,2007.09.21-24
- 29.野出木健一、橋本幸男 Gogny 力による TDHFB 計算 KEK 研究会『原子核・ハドロン物理 横断研究会』 KEK 2007 年 11 月 19-21 日
- 30.野出木健一、橋本幸男、中務 孝、矢花一浩 Gogny 力を用いた時間依存 HFB 計算による軽い変形核の応答 日本物理学会 第63 回年次大会 近畿大学, 2008.03.22-26
- 31. 松山裕右、丸山敏毅、矢花一浩 クォークの分子動力学法による原子核衝突のシミュレーション 日本物理学会第63回年次大会、近畿大学、2008年3月22-26日

# VII-1. 凝縮系理論グル - プ

教授有光 敏彦,初貝 安弘(2007年4月1日着任)准教授谷口 伸彦,宮崎 州正(2008年3月1日着任)助教吉田 恭研究科特別研究員有川 晃弘(2007年4月1日着任)博士前期課程大学院生3名博士課程(5年一貫)大学院生3名社会人早期修了プログラム1名学群生(卒業研究)4名

# 【1】対称性の破れを伴わない量子液体相の幾何学的位相による相分類

現代物理学においては「対称性の破れ」とそれを記述する「秩序変数」の概念が基本的であると考えられ てきた。主たる現代物理学の目的の一つはこれらを用いた物理的な「相」の分類、理解であったと言えよ う。特にその相の質的変化としての「相転移」においては臨界点における局所的ゆらぎの時空間的な発散的 振る舞いの正確な記述のために局所的場の理論を用いた繰り込み群ならびにその再帰的階層的概念が極め て有効であり、Landau-Ginzberg-Wilson (LGW)による一つの認識論的パラダイムが構築されるに至った。

一方近年の研究の進展により、量子効果が古典論に対する摂動であるにとどまらず、新たな物質相を選択 することにより生じる「量子相」が広く存在することが認知されるに至った。 物性論に例をとれば種々の 量子ホール相、強相関電子群におけるスピン液体相、近藤格子系等における量子液体相、整数スピン鎖に おける Haldane 相等がその典型例となる。これらは、如何なる対称性の破れを伴わず、古典的秩序変数に よっては特徴づけることのできない古典的対応物の存在しない真に量子的な新物質相である。これらの相 は「量子液体相」と近年総称され多くの興味を集めている。これらの新奇な「量子相」「量子液体相」の存 在とその重大な意義の認識は上述のLGW-パラダイムからのパラダイムシフトの必要性を強く示唆し、あ らたな自然法則の理解、発見を要求する。

その要求に応えるべく提案されたのが、「トポロジカル秩序」「量子秩序」の概念であり、共同研究者と ともに、私もその概念形成を行ってきたものである。これは従来のLGW 理論が局所場の理論にその概念 的基礎をおいているのに対して、トポロジカルな場の理論にその概念形成の発端をもつものである。「量子 液体相」においては励起に有限のエネルギーギャップが存在し、低エネルギーの局所的な準粒子が存在しな い。一般に連続対称性の破れに対応して存在するギャップレス(質量ゼロ)の Nambu-Goldston ボソンが 存在しないわけである。対応して、この量子液体相の基底状態は本質的に非局所的となる。一つの系のト ポロジカルな形状に支配される形で、系に境界が存在して初めて生じたギャップレスのフェルミ統計に従う 境界に局在する準粒子励起が状態を特徴づける。例えば量子ホール相等におけるギャップレスのエッジ状態 がこれに対応する。これが非自明なトポロジカル秩序相としての量子液体相における「バルクエッジ対応」 である。

以上を歴史的背景として量子系の特徴である「幾何学的位相」を用いたベリー接続を直接の手段とし多 体の電子論、物性論におけるトポロジカルな秩序変数を構成する理論的提案を行い、それに基づく大規模 数値計算機による具体的な数値計算により幾つかの量子液体相の特徴付けを行った。また「バルクエッジ対 応」の観点からエンタングルメントエントロピーという新しい量子的な物理量を大局的な秩序変数として 用いる試みも展開し、その有効性を確認した。  (1) ベリー位相による量子液体相における局所秩序変数に関する研究(初貝)論文[1,6,10], 講演[1,2,3,5,7,8,9,10,11,12,14,15,16,17,18,24,25]

ベリー位相は歴史的には量子力学における断熱過程の解析から発見されたが、その真の意義はパラメター 依存のエルミート演算子の固有空間の正確な理解をもたらした点にある。固有ベクトルのパラメター空間 上での形式的微分(1-form)により定義されるベクトル場は固有ベクトルの位相の不定性に起因する自由 度を持つが、これは対応するベクトル場に U(1)のゲージ変換を引き起こす。より一般に固有ベクトルの M 本の組により張られる固有空間を考えたとき、対応するベクトル場は M 次元の行列となり基底のユニタリ 変換は(非可換)ゲージ変換を引き起こす。このようにして、非可換ゲージ場はパラメター空間上で固有空 間を考えたとき極めて自然に導入されることとなる。ここで構成されたゲージ場をパラメター空間上の異 なる2点間の関係を与えるものとしてベリー接続と呼んだとき、これを用いてベリー位相、チャーン数等の トポロジカルな量が一般に定義されることとなる。これが近年注目を集めている幾何学的位相の本質的部 分である。これらのトポロジカルな量を具体的な物理系に対して計算する際、ベリー接続に関する明示的な ゲージ固定が必要となることにまず注意したい。一方で、パラメター空間を離散化することで得られるパラ メター空間上の格子上で非可換ゲージ場を構成し、ベリー接続としての格子上のゲージ不変量を直接扱う こともできる。その際格子ゲージ理論により開発された手法が直接適用されることとなる。 一方でラン ダウ以来の相転移の理論によれば、古典的な物質相は局所的な秩序変数を用い対称性の破れの概念に基づ き、その多くが長距離秩序の存在により特徴づけられることを思い起こそう。局所磁化による長距離秩序で 強磁性相が、局所的な電荷密度の長距離相関で、電荷密度相がそれぞれ特徴づけられるわけである。一方、 低次元量子系では、その強い量子ゆらぎならびにその低次元性により、通常の秩序形成が強く妨げられ、対 称性の破れを伴わず、それでいて極めて特徴的な物理相が存在し得ることとなる。フラストレートしたスピ ン系におけるスピン液体相、整数スピン鎖における Haldane 相、量子ホール相等がその典型例である。こ れらの量子液体相の物理的理解を目指すとき、古典的な概念では不十分であることはほぼ自明であろう。

これら対称性の破れを伴わない古典的には特徴付けが困難である量子液体相、特に励起にエネルギーギャッ プを持つ相を量子的に特徴付けることを目指しベリー接続を用いて幾何学的位相の代表例であるベリー位 相を構成し量子的な「局所」秩序変数を構成するものである。古典的観測量はエルミート演算子の期待値で 与えられ、それ故ユニタリ不変であるが、ベリー位相は基底のユニタリ変換により2 の整数倍だけ不定 であり決して古典的な物理量とはならない。また、ゲージ不変なチャーン数も量子液体相の特徴付けに有効 である。例えば異方的超伝導相、単層炭素2次元系であるグラフェン等におけるスピンホール伝導道がその 例である。

(2) バルクエッジ対応に基づく量子液体相でのエンタングルメントエントロピーに関する研究(初貝、有川)論文 [7,8],講演 [7,27],卒論 [1]

上述の対称性の破れを伴わない量子液体相に対して私が提案してきた「バルク-エッジ対応」の概念に立 脚し、近年量子情報分野という物性論とは全く異なる分野において展開されてきたエンタングルメントエ ントロピーなる新しい物理量を用いることにより波動関数の量子的絡み合いに関連する大局的な情報を得 ることを目的とし具体的な種々の物理系に対して理論的研究を行い、相の特徴を同定した。

- (3) グラフェンにおけるトポロジカル秩序とバルクエッジ対応
- 2 次元 Dirac Fermion としてのグラフェンにおけるトポロジカル秩序(初貝)論文 [2, 12, 13], 講演 [4, 6, 20, 21, 23, 26, 32]

グラフェン無限結晶は Dirac cone 型のエネルギー分散を持ち、単位胞内の2原子の電子論的等価性であるカイラル対称性に起因するトポロジカル安定性をもつ。特に磁場中ではこの特異な電子構造に起因する

種々のトポロジカルな効果が顕在化し、理論実験の両面から多くの興味をもたれている。これに関して「ト ポロジカル秩序」、「バルクエッジ対応」という独自の観点から研究を遂行し電子相関に起因するボンド秩 序相の存在の可能性を提起する等、重要な成果を得た。またグラフェンの光応答に関してもそのトポロジカ ルな側面に基づき重要な成果を得た。

2. 有限磁場下のグラフェンの端状態(有川,初貝)講演 [32]

zigzag 端を持つグラフェンでは端に局在する1粒子状態が存在することが知られ、ゼロモードとしての トポロジカルな起源を持つ。一方、強磁場下では、通常の2次元量子ホール系では、磁場下での端状態が 存在し、このエネルギー分散がランダウギャップ内にあるために  $E_F$  がランダウ準位間にあってもギャップ レスの励起をもつ。 $E_F$  がバルクのランダウ準位内のときには、電荷密度は端で磁場長程度の領域で減少す る。これに対して、磁場下のグラフェンでは、Dirac 型の分散に起因して E = 0(Dirac cone 点)に特異な ランダウ準位が生じるので、端状態のエネルギー分散がどうなるかは興味深い。特に、zigzag 端では磁場 下でもトポロジカルに保護されたゼロモード・エッジ状態が存在し、E = 0でバルク・ランダウ準位とエッ ジ状態が共存する新しい状況が生まれる。

本研究では、端のある磁場中グラフェン(1層および2層)に対して、エネルギー・スペクトルおよび実 空間における波動関数を zigzag, armchair 端に対して計算し、電荷密度における端の依存性について調べ た。この結果は STM-STS により測定可能である。

(4) スピンホール効果におけるトポロジカル秩序の研究

1. 量子スピンホール相における Z<sub>2</sub> 不変量とベリー接続 (初貝)論文 [9, 11], 講演 [22]

スピンホール効果における Z<sub>2</sub> 不変量に関して、格子上で効率的にそれを具体的に得る手法を理論的に開 発し、それを 3 次元系を含む具体的な系に適用し、その有効性を示した。

2. 量子スピンホール相におけるトポロジカルな秩序変数(有川,初貝)講演 [29,30]

グラフェン系を記述する蜂の巣格子上の Kane-Mele 模型では、バルクではエネルギーギャップをもつが 端状態にはギャップゼロとなる  $Z_2$  で分類される Spin Hall 相の存在が知られている。断熱変化させること で  $\pi$  フラックス格子の問題に帰着させ系の性質を境界条件を捻ることで得られる Spin Chern 数とよばれる トポロジカルな量で特徴づけた。

(5) 量子ホール効果におけるトポロジカル秩序の新しい数値的手法による研究(初貝)
 論文[4]

我々が開発したベリー接続による位相不変量を効率的に計算するスキームを乱れをふくむ2次元量子ホー ル系に対して具体的に適用し、その有効性を示すとともに理論、実験双方に有効な新たな知見を得た。

# 【2】強相関電子系における理論的研究

種々の手法により広く強相関電子系における理論的研究をおこない新しいブレークスルーにつながり得る重要な成果を得た。

(1) 1次元強相関電子系における鎖間電荷揺らぎの密度行列繰り込み群による研究
 (初貝)論文 [3], 講演 [13]

準一次元系で、本質的と考えられる鎖間の電荷移動、電荷揺らぎを理論的に取り扱う新しい手法を開発 し、具体的な系に対して密度行列繰り込み群を用いて適用し、有効な成果を得た。

(2) 量子ドットとナノ構造における非断熱電荷移動の研究(初貝)講演[19]

量子ホール効果を用いたナノデバイスで重要になると考えられる非断熱効果について新しい理論的手 法を開発し数値計算をふくめて重要な成果を得た。

(3) 強相関物質における電荷秩序とストライプ秩序の電子論的研究(初貝)論文[5]

強相関電子系で興味がもたれている電荷秩序、ストライプ秩序に関して、電子論的側面から研究を行 い、理論的のみならず、実験的側面からも有意義である成果を得た。

(4) 1次元電子系の解析的研究 (有川)論文[14]

ー般に可解模型であっても多体系の相関関数を導出するのは困難である。電子相関を考慮した、サイトあたりの電子数の二重占有数を変分パラメータにもつGutzwiller波動関数と呼ばれる試行関数がよく用いられる。1次元系でかつ、サイトあたりの電子数の二重占有を禁止した場合は $1/r^2$ 型相互作用をもつt-J模型の厳密な基底状態であることが知られている。この場合のGutzwiller波動関数に対する1粒子密度行列の厳密な解析形の導出をダイアグラムの方法により行った。得られた熱力学極限における1粒子密度行列G(x)の表式はきわめて単純な形をしており、2変数 $v_sx$ ,  $v_cx$ (ここで $v_s$ , $v_c$ は上記のt-J模型)を引数にもつベッセル関数を用いて具体的に表される。運動量分布の特異性も1粒子密度行列G(x)の長距離における漸近的な振る舞いから容易に求められた。

(5) フラストレーションスピン系の物理(有川)講演[28,31]

反強磁性スピン系では磁気モーメントを反対に向けるようにスピンを配置させることでエネルギーを下 げる。しかし三角格子の場合には幾何学的なフラストレーションのため、そのように配置することができ ない。1次元系でスピンのフラストレーションが実現する系として、本研究ではスピンチューブとよばれる 3本の S=1/2 Heisenberg スピン鎖がリング状につながった系の基底状態と絶対零度における動的スピン構 造因子について(動的)密度行列繰り込み群を用いて調べた。リング状の交換相互作用が全て等しい場合は スピン励起にギャップをもち、系が大きい極限でもダイマーのオーダーパラメータが有限に残ることを示し た。一方、リング状の交換相互作用にわずかに異方性を導入した場合、フラストレーションは失われスピン ギャップは閉じ、ダイマーのオーダーパラメータは系が大きい極限でゼロになることを示した。

# 【3】ナノストラクチャー系の電子相関と量子輸送現象

近年、半導体の微細加工技術の発展に伴い多様な形態の量子ドット系が現れて来ている。縦型量子ドット や並列2重量子ドット、ナノ量子干渉系等のナノ複合構造量子ドット系、カーボンナノチューブを用いた量 子ドットがその例である。我々は、これらの多彩な量子ドット系において、電子相関が量子輸送現象に果た す役割を継続的に調べている。 (1) 軌道縮退系の電子相関と輸送現象(小口,谷口)講演[33]

従来型量子ドット系と比べ、縦型/並列2重量子ドットやカーボンナノチューブによる量子ドット系は、 量子ドット系に軌道縮退や内部自由度を持つ点が大きく異なる。軌道縮退している量子ドット系では低温で 近藤効果が強まることが知られる(軌道近藤効果)が、スピン・軌道に完全な対称性が存在しない時、低温 で通常の近藤効果と軌道近藤効果がどのように現れるかの理解は、いまだ不十分である。

我々は、軌道縮退を考慮した量子ドット系として、同軌道内に Coulomb 相互作用 U、異軌道間に Coulomb 相互作用 V が働くと考えた 2 サイトハバード型模型を用い、この系を素子として用いた系の量子輸送現象 について研究を進めている。これまで我々は、運動方程式による解析 / 近似法を軌道縮退系に拡張するア プローチにより、上記の量子ドット系を通過する際のコンダクタンスの依存性を調べて来た。この方法は、 計算コストもそれほど大きくなく、非線形コンダクタンスにも適用可能であるという利点を持ち、近藤温度 よりも十分高い温度領域であれば、数値繰り込み群による詳細な線形コンダクタンスの結果とも定量的に 一致する。しかし、近藤温度より一層低い温度の振舞いは定性的に異なることが明らかになった。

特に非線形コンダクタンスを考察していく上で、数値繰り込み群を適用することは現時点では難しく、こ のような非線形輸送現象を扱うためには、運動方程式の方法を低温領域で改善していくことが強く望まれる。

今後、T = 0における定性的性質 (局所フェルミ流体)を再現する近似方法として、有限-Uスレープボゾン法に着目し、運動方程式の方法と組み合わせることにより、軌道縮退系の電子間相互作用の対称性と近藤効果に関する研究を進める予定である。



図 1: コンダクタンス・スピン偏極度の磁場依存性

(2) ナノスピン干渉計のゼーマン分裂による新機能の模索(小口,谷口)講演[34]

近年、半導体中のスピン軌道相互作用 (Rashba 相互作用)を利用し、電場によりスピン操作を可能とする 量子ドット系が注目を集めている。特にスピン依存の量子干渉効果を用いてスピンフィルタリングを電場磁 場により制御する、アハロノフ・ボームリング系に量子ドットを組み込んだナノスピン干渉計が提案され、 注目されている。本研究では、磁束を作る際の漏れ磁場が与えるゼーマン分裂がスピン輸送に及ぼす影響 とともに、このような磁気効果を積極活用することにより、ナノスピン干渉計に新しい機能を付与する可能 性について理論解析を行った。特に磁場制御する際の外部磁場の印加方向に着目した。スピン軌道相互作用 による有効磁場  $\vec{B}_{so} \propto \vec{p} \times \vec{E}$  と印加する外部磁場の向きによりスピンフィルタと質的に異なる効果が期待 できるためである。本年度は、最も単純な状況として(1)外磁場を有効磁場と平行に入れた場合と(2) 垂 直に入れた場合の2通りについてクーロンブロッケード領域で依存の輸送係数の数値計算を行った。リニア コンダクタンス・スピン偏極度の結果を図1に示す。結果は以下の通りである(図2)。

(1)外部磁場を有効磁場  $\vec{B}_{so}$  と平行に印加する場合 (図1左側) この場合、スピンはドットを通過中にフ リップせず保存する。磁場の増大に伴い共鳴準位付近で偏極度  $\eta$ が増大している。スピンの と でピーク 分裂することによる。スピンの偏極度  $\eta$ が1程度変化するのに磁場は 10[T] 程度必要になることが分かる。 (2)外部磁場を有効磁場  $\vec{B}_{so}$  と垂直に印加する場合 (図1右側)スピンはドット通過中にフリップするので リード L 側とリード R 側で偏極度  $\eta$ が変わる。磁場の増大に伴い、電子数が奇数の谷かつ共鳴準位付近で、 偏極度  $\eta$ が増大している。これは、ドットの電子数が奇数だとスピンがフリップでき、偶数だとフリップが 抑制されることによる。スピンの偏極度  $\eta$ が1程度変化させるのに 1[T] 程度の磁場で十分なことが分かる。

磁場の方向 Zeeman分裂	スピン制御性	偏極がでやすい ゲート電圧	1オーダーの遍極 に必要な磁場
$oldsymbol{B} \parallel oldsymbol{B}_{ ext{SO}}$	スピンフィルタリング の変調	ピーク周辺	~10[T]
$\boldsymbol{B} \perp \boldsymbol{B}_{\mathrm{SO}}$	スピン分極	ピーク周辺かつドットの 電子数が奇数の谷側	~1[T]

図 2: まとめ

# 【4】電子系の量子相転移,量子カオス系

(1) 電子相関と乱れ(谷口)論文 [15], 解説・紀要 [2, 3]

電子系における電子相関と乱れの影響、特にこれらが誘起する量子相転移に関する研究を行っている。電 子系の絶縁相として、乱れのない電子相関系で電子相関に起因するモット絶縁相、電子相関のない系で乱れ に起因して起こるアンダーソン局在相が存在することが知られている。実験的には、電子相関と乱れに関 して量子相転移の存在が示唆されているが、2つの効果が存在するときの理論解析は困難であり、理論的解 明はまだ十分なされていない。

本年度は、原子力機構の町田グループ (奥村雅彦・山田進・町田昌彦) と共同研究を行い、電子相関と乱 れが同時に存在する一次元電子系 (Anderson-Hubbard 模型)を取り上げ、DMRG 法により研究を行った。

$$H_{AH} = \sum_{(i,j)\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \sum_{i\sigma} \epsilon_i n_{i\sigma} + U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}; \quad P(\epsilon_i) = \theta(W/2 - |\epsilon_i|)/W$$

この系に関しては乱れのない時 (W = 0)には、半充填 ( $\bar{n} = 1$ ) でモット絶縁体、それ以外の充填 ( $0 < \bar{n} < 2, \bar{n} \neq 1$ ) では金属相となることが理論的に知られている。ここで  $W \neq 0$ の系に対して半充填からホール ドープを行った場合を特に調べた。 従来の研究では、電子相関と乱れは競合関係にあり、W = 0 で金属相 にあるホールドープ系 ( $\bar{n} < 1$ ) では乱れを導入してもモット絶縁相は現れず、アンダーソン局在相に移行す ると考えられて来た。ところが、我々の数値計算の結果、ドープしたホール自体がまず局在することにより、モット絶縁相が現 れる領域が存在することが明らかになった。



図 3: 一次元アンダーソンハバード 模型:密度プロファイルの W 依存性  $(U/t = 30, \bar{n} = 0.96)$ 

# (2) 量子カオス系の有効場理論と等エネルギー面上の場の理論(谷口)外部資金[2],卒研[3]

弾動的な量子カオス系の有効場理論として、等エネルギー面上の位相空間に場の理論を構築する必要性 を認識し、その定式化を行っている。本年度の研究結果は以下の通りである。

[1] 量子ドット系のアンダーソン模型に対し、具体的に電子相互作用系における等エネルギー面の場の理 論における場の演算子を構成し、ハーシュフィールドらが非平衡定常状態の議論に導入した準粒子場(=散 乱状態演算子)と比較を行なった。その結果、両者が等価であることが示され、等エネルギー面上の場の理 論が相互作用を持つ系にも拡張可能とわかる。[2] ウェグナーのフロー方程式による繰り込み群の手法と [1] の議論を合わせると(非平衡定常状態であっても)アンダーソン模型では繰り込み前後のハミルトニアンは 一種の散乱問題と考えることができ、リウヴィユ演算子によるリップマン・シューウィンガー方程式により 結びつくことがわかった。これは特に、非平衡定常状態の熱力学の構築に重要な知見と思われる。

また、系のカオス性と相転移現象の関連を調べるため、卒業研究として卒研 [3] を行った。

# 【5】量子散逸系,量子情報物理

Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics(NETFD)の体系(1984)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。こ の体系は,量子系確率微分方程式(量子確率 Liouville 方程式,量子 Langevin 方程式)も取り入れる形で, 一貫した正準演算子形式の体系として拡張定式化された(1990)。

NETFDの体系を駆使して,量子情報物理に関わる問題(主に,量子コヒーレンスと散逸の関わるダイナ ミカルな問題)への応用を進めている。量子通信や量子計算を実現するためには量子もつれ状態(量子エン タングル状態)を駆使するが,それが散逸の影響で時間と共に如何に壊されるかを考慮に入れて,これまで 量子情報物理において開発された手法や概念を検討し直す必要がある。

(1) 空間相関を考慮した環境下での量子誤り訂正(院生:林剛史,有光,北島)論文[16,19],
 講演[39,41,42]

空間的相関を有するノイズの影響下にある量子ビット列の時間発展を NETFD の理論体系で解析し,既存の(独立ノイズ仮説に基づいた)量子誤り訂正符号が,空間的相関を有するノイズにより量子ビット列に 生じる誤りをも訂正できることを示した。量子プラウン運動の理論及びそれに基づく量子リウヴィユ方程 式を利用して,空間的相関を有するノイズ影響下にある量子ビット列の時間発展を記述する完全正値写像 を求めた。NETFDの体系での写像演算子の具体的表式を利用して,空間的相関を有するノイズにより量子 ビット列に生じる誤りが,スタビライザー符号による通常の(すなわち,無相関ノイズに対するのと全く同 じ)誤り訂正手続きによって訂正されることを証明したものである。

# (2) 量子散逸系の真空と消滅演算子(吉田,有光)講演[35]

NETFDの枠組において、非平衡状態では真空は不安定で時間発展し、それに伴いその真空を消す消滅演算子も時間発展する。

本研究では、その不安定な真空を消す消滅演算子を求める新しい手法を示した。この手法は、量子力学で 真空からユニタリ変換によって得られた状態を消す演算子を求める方法と類似の構造を持ち、見通しが良 い。また、この手法を用いて、ボソンとフェルミオンの semi-free 場、散逸を伴ったスクイーズド光につい て、消滅演算子を求めた。特に後者は量子通信の信頼性における散逸の寄与を見積もるなどの応用上にも 重要な情報を与える。

# 【6】流動系の非平衡統計物理

(1) マルティフラクタル PDF 解析 (有光,吉田) 論文 [17], 著書 [1], 講演 [40, 44]

マルティフラクタル確率密度関数解析 (MPDFA) は 『間欠性の本質は, N-S 方程式のスケール不変性に 起因する速度場の特異性が実空間にマルティフラクタル分布していることの現れである』との仮説に基づ いて,古典乱流および量子乱流などで得られる裾の広い各種確率密度関数 (PDF)の高精度解析を可能にし た理論体系である。

MPDFA におけるズーム率が物理量の解析に顕に依らない形で理論体系を再構成できることを示した。また,併せて,空間次元あるいはデータ次元の MPDFA への取り込み方についての他の理論との比較検討を行い,MPDFA の基礎をなすスケーリング関係を深く再検討することの必要性を提唱した。その詳細は,次項に記してある。

(2) n<sup>∞</sup> 周期軌道のべキ的不安定性と特異性スペクトルの解析(社会人早修院生:本池巧, 有光)講演 [45]

乱流のアンサンブル理論の基礎となるカスケードモデルにおいては,大きなスケールで注入されたエネルギーによってサイズ  $\ell_{in}$ の渦が生み出され,この渦は流れに沿って移動する過程でサイズ  $\ell_{in}\delta^{-1}$ の渦に分裂し,次々に小さな渦(サイズ  $\ell_{in}\delta^{-n}$ )が生み出されると考える。大小様々なスケールの渦の存在は,Navier-Stokes 方程式の持つスケール不変性により,速度場などの物理量に特異性をもたらす。

マルティフラクタル確率密度関数解析 (MPDFA) では,特異性を特徴づける指数 $\alpha$ が実空間上にマルティフラクタル分布しているという仮定のもとに解析を行うのであるが,特異性指数 $\alpha$ の確率分布を決める際に,速度場の特異性スペクトルとカスケードモデルの渦生成のダイナミクスの関係が必要となる。MPDFAでは, $\delta = 2$ のカスケードモデルを仮定した上で、写像力学系における $2^{\infty}$ 周期軌道に対するLyra-Tsallisの公式 $1/(1-q) = 1/\alpha_{min} - 1/\alpha_{max}$ を一般化した式を用いて $\alpha$ の確率分布を決定している。

本研究では、一般的な渦のサイズのスケーリング  $\delta$ の場合についての MPDFA の解析方法を探る目的で、 Lyra-Tsallis では解析されていない一般の  $n(>2)^{\infty}$  周期軌道について、特異性スペクトルとダイナミクスの 関係を解析した。その結果、 $\delta = 2$ での MPDFA が基にした Lyra-Tsallis の公式は一般の  $n^{\infty}$  周期軌道につい ても成り立つことが判明したが、この式を MPDFA に適応する場合、 $1/(1-q) = (\ln \delta / \ln 2) (1/\alpha_{-} - 1/\alpha_{+})$ と修正しなければならないことを導き出した。この結果は、従来の乱流の理論および実験において暗黙の 仮定としてきた δ = 2 以外での解析方法を与えることとなり,数あるアンサンブル理論の中で MPDFA の 優位性を表している。今後,更に n<sup>∞</sup> 周期軌道のダイナミカルな構造を解析することで,速度場等の特異 性のマルティフラクタル分布と乱流の間欠性の関係などを明らかにしたい。

(3) Lagrange 繰り込み近似による電磁流体乱流の統計解析(吉田、有光)論文 [20], 解説・紀要 [4]、講演 [37, 38]、外部資金 [3]

乱流統計の近似理論の一つとして Lagrange 繰り込み近似(LRA)がある。LRA は Navier-Stokes 方程 式から系統的に Lagrange 統計量について閉じた方程式を導く方法で、Kolmogorovのエネルギースペクト ルを無次元比例定数まで含めて見積もり実験と良く一致しているなど、ある程度の成功を収めている。

本研究では、LRA を、太陽表面、太陽風、地球のコア、核融合炉などのプラズマの流体近似モデルとなる電磁流体(MHD)の一様等方性乱流に適用し、全(運動 + 磁場)エネルギーのスペクトル E(k)(kは 波数)が  $k^{-3/2}$ 、残差(運動 – 磁場)エネルギーのスペクトル  $E^R(k)$ が  $k^{-2}$ に従うことを示し、その比例 定数まで見積もった。また、周期境界条件による一様等方性 MHD 乱流の直接数値シミュレーションを行い、LRA 解析との比較を行った。その結果、E(k)の巾則は  $k^{-3/2}$ に近く、その比例定数まで LRA の見積 もりと良く一致した。 $E^R(k)$ の巾則は  $k^{-2}$ に近く、これも LRA と整合した。

(4) 量子流体乱流の数値シミュレーション(吉田、有光)論文[18], 講演[43]

液体ヘリウムの超流動状態や Bose-Einstein 凝縮体の流動などの量子流体の運動は、適切な近似のもと Gross-Piaevskii(GP)方程式により支配される。量子流体は、循環が量子化された渦糸が存在するなど、 Navier-Stokes 方程式に従う古典流体とは異なる性質を有する。

本研究では、支配方程式の構造がどのようにエネルギースペクトルなどの乱流統計に影響を与えるのか を探る目的で、GP 方程式の数値シミュレーションを行った。その結果、相互作用エネルギースペクトルに ついて、 $k^{-3/2}$ の巾則が観測された。 $k^{-3/2}$ の巾則は非線形相互作用が弱いと仮定する弱乱流理論の結果と 整合するが、詳細なデータ解析により本研究でシミュレートされた乱流では非線形相互作用が強いことが 明らかになり、弱乱流理論に代わる描像が必要であることが分かった。

(5) 粉粒体における粒子回転場の解析(院生:武智公平,有光,吉田)学位論文(修士)[1],
 講演[46]

砂や小麦粉といった多数の粒子からなる系を総称して粉粒体と呼ぶ。粉粒体を速度場の他に回転速度場 の自由度を持つ極性流体と捉えたとき、その運動方程式を閉じるには、応力・偶応力と場の量との間の関 係、すなわち構成方程式、を決める必要がある。

本研究では、粉粒体に特化したシミュレーション手法である離散要素法を用いて、一様せん断率の速度 場下における2次元粉粒体の振る舞いを調べた。散逸関数や構成方程式を測定し、その関数形を決定した。 その結果は粉粒体の構成方程式を決定する手法の1つである金谷の理論の結果とは整合しなかった。その 理由として、シミュレーションにおける粉粒体の摩擦係数が金谷の理論の想定するものより大きいことが考 えられ、摩擦係数が大きいことを考慮した理論モデルを新たに構成し散逸関数を見積もったところ、シミュ レーション結果とよく一致した。この散逸関数から構成方程式を導くことは、今後の課題である。

# 【7】ガラス系の非平衡統計物理

(1) やわらかいガラスのレオロジー(宮崎)論文[23],解説・紀要[6,7],講演[50,51,56,57,58]

ガラスは固くて脆い物質の代名詞であるが、身の回りには、固くも脆くもない「ガラス」が溢れている。高 濃度のコロイドの分散系やクリームの泡などがそれで、「やわらかいガラス (Soft Glassy Materials、SGM)」 と総称されている。SGM は、外力(シア応力など)を加えると非常に敏感に応答し、ダイナミクスが質的 に変化するのが特徴である。我々は、ガラスの力学応答の視点から、SGM の非線形レオロジーの研究を行っ



図 4: (a): ガラス転移点近傍におけるハイドロゲルの分散系の G''(単位は Pa)の周波数 (rad/sec)依存性。シア率の 振幅 (ý)をいくつかの値に固定した状態で、測定した結果。(b): (a)を緩和時間でスケールした結果。同様のスケー リングを、エマルジョン、シェービングクリーム、そして剛体球コロイドに対して行った結果も示した。

た。SGMの複素弾性率のシア依存性を調べると、貯蔵弾性率 (G') は Strain softening を示すが、損失弾性率 (G'') には奇妙なピークが普遍的に観測されることが、古くから知られていた。このピークの起源は、MCT を用いて微視的な詳細を定量的に解明されている (宮崎,2002-2008)。この議論によれば、G'' の周波数は、シアに依存する構造緩和時間でスケールされる。我々は、この原理を、Time-Temperature Superposition に倣って、Strain-Rate-Frequency Superposition (SRFS) と呼んでいる。我々は、実験により SRFS を検証 することに成功した (図 4)。この新しい非線形レオロジー測定法は、ゲルや生細胞のマイクロレオロジーの ような問題にも、有効な研究手段の一つになると期待される。

# (2) ガラス転移と動的相関長(宮崎)論文[21, 22], 解説・紀要[5, 7, 8], 講演[48, 49, 52, 53, 56, 57, 58, 59]

ガラス転移は、見かけ上、熱揺らぎの相関は何ら異常を示さないにもかかわらず、緩和時間や粘性係数は 発散をするという点で、普通の臨界現象とは非常に異なっている。最近の実験と数値実験により、この緩和 時間の発散の陰には、動的な不均一性と、その不均一性に起因する動的相関長が存在することがわかって きた。この相関長を捕らえるためには、高次相関関数(例えば4次相関関数)を観測しなければならない。 我々は、この高次相関関数を数値計算と理論により解析した。 (3) ランダム媒質中のガラス転移(宮崎)解説・紀要[7],講演[54,55,56,57,58]

コロイドガラスやコロイドゲルのミニマルモデルとして、易動度の異なるコロイドの混合系(たとえば 不純物と自由粒子)のスローダイナミクスの解明を試みた。不純物はコロイド粒子と同じ大きさとし、運 動のみが凍結されているものとする。最近、モード結合理論(MCT)により、不純物密度が大きい領域にお いて、スローダイナミクスが質的な変化(A-B 転移と呼ぶ)することが予言された。これはコロイドゲル およびガラスで観測されるダイナミクスに酷似している。これを数値実験により、検証することを試みた。 さらに、ガラスのスローダイナミクスの鍵を握る、協調的な揺らぎ(動的不均一性)の変化を捉えるために、 高次相関関数の解析を行った。さらに、理論が予言している、不純物密度が大きい極限でダイナミクスが早 くなる現象、いわゆるリエントラント転移を数値実験により検証した。

# 【8】研究・教育成果の社会への還元・奉仕活動

(1) 東京大学大学院工学系研究科委嘱教授(初貝)社会還元等[1]

東京大学大学院工学系研究科にて委嘱教授として数学2Fを講義するとともに修士課程の学生2人(久家 祥宏)(平野嵩明)、博士課程学生1名(岸正人)を指導し修士論文を指導した

東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻修士論文 2008年3月

「Si,Ge,GaAsにおける表面状態のトポロジカルな起源」 (久家祥宏)

• 東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 修士論文 2008 年 3 月

"Topological classification of gapped spin systems: Berry phases and entanglement entropy" ( 平 野嵩明)

(2) 東京大学物性研究所附属物質設計評価施設(初貝)社会還元等[2]

スーパーコンピュータ共同利用課題審査をおこなった。

(3) 出前講義(有光)社会還元等 [3]

茨城県立竹園高等学校にて,出前講義を行った。

- (4) 雑誌編集委員(有光)社会還元等 [4,5]
  - 日本応用物理学会欧文誌 (JJAP) の編集委員 (Ei) を務めた [4]。
  - ウクライナ国科学アカデミー凝縮系物理学研究所出版の学術雑誌「Condensed Matter Physics」の編 集委員を務めた [5]。
- (5) 物理チャレンジ・オリンピック委員会(有光,吉田,院生:平野覚,小口悠,小松崎慎人, 武智公平,大日向正志)講演[36,47],社会還元等[6,7]

筑波大学を主会場として,2007年7月29日~8月1日に開催した「物理チャレンジ2007」(チャレンジ ジャーの生徒98名)において,有光は現地実行部会長として,大学内での組織立ち上げおよび関連部署と の連絡・調整,試験会場準備と実施,フィジックスライブの準備と実施,宿舎(筑波研修センター)の手 配・準備と合宿生活,つくば市内研究施設(KEK,JAXA,産総研)の見学,および JPARCの見学に向けた調整と実施,つくばエキスポセンター見学に向けた調整と実施,などを行なった。 吉田は現地実行委員として,また,院生諸君は学生スタッフとして協力した。

(6) 学会役員(吉田)社会還元等[8]

日本物理学会領域 11 領域役員を務めた(2007 年 5 月~2008 年 4 月)。

# <論文>

- T. Hirano, H. Katsura, and Y. Hatsugai, "Topological classification of gapped spin chains: Quantized Berry phase as a local order parameter", Phys. Rev. B77, 94431 (2008)
- [2] Y. Hatsugai, T. Fukui, H. Aoki, "Topological low-energy modes in N = 0 Landau levels of graphene: a possibility of a quantum-liquid ground state", Physica E40, 1530 (2008)
- [3] Isao Maruyama, Tetsuji Koide, and Yasuhiro Hatsugai, "U(1) symmetry breaking in one-dimensional Mott insulators studied by the density matrix renormalization group method", Phys. Rev. B76, 235105 (2007)
- [4] Hui Song, Isao Maruyama, and Yasuhiro Hatsugai, "Levitation and percolation in quantum Hall systems with correlated disorder", Phys. Rev. B76, 132202 (2007)
- [5] S. Yamamoto, T. Fujiwara and Y. Hatsugai, "Electronic structure of charge and spin stripe order in La2-xSrxNiO4", Phys. Rev. B76, 165114 (2007)
- [6] Isao Maruyama and Yasuhiro Hatsugai, "Nontrivial quantized Berry phases for itinerant spin liquids", Journal of the Physical Society of Japan (Lett) 76, 113601 (2007)
- [7] Hosho Katsura, Takaaki Hirano, and Yasuhiro Hatsugai, "Exact analysis of entanglement in gapped quantum spin chains", Phys. Rev. B76, 12401 (2007)
- [8] Takaaki Hirano and Yasuhiro Hatsugai, "Entanglement Entropy of One-dimensional Gapped Spin Chains", Journal of the Physical Society of Japan (Lett) 76, 74603 (2007)
- [9] Takahiro Fukui and Yasuhiro Hatsugai, "Topological aspects of the quantum spin-Hall effect in graphene: Z2 topological order and spin Chern number", Phys. Rev. B75, 121403(R) (2007)
- [10] Yasuhiro Hatsugai, "Quantized Berry phases for a local characterization of spin liquids in frustrated spin systems", J. Phys.: Condens. Matter 19, 145209 (2007)
- [11] Takahiro Fukui and Yasuhiro Hatsugai, "Quantum Spin Hall Effect in Three Dimensional Materials: Lattice Computation of Z2 Topological Invariants and Its Application to Bi and Sb", Journal of the Physical Society of Japan (Lett) 76, 53702 (2007)
- [12] Y. Hatsugai, T. Fukui, H. Aoki, "Topological aspects of graphene: Dirac fermions and the bulk-edge correspondence in magnetic fields", The European Physical Journal Special Topics (Advances in Graphene Physics) 148, 133 (2007)
- [13] Hideo Aoki, Takahiro Fukui, Yasuhiro Hatsugai, "Topological Aspects of Quantum Hall Effect in Graphene", Int. J. Mod. Phys. B21, 1133 (2007)

- [14] Onuttom Narayan, Yoshio Kuramoto and Mitsuhiro Arikawa : "Exact density matrix of the Gutzwiller wave function: II. Minority spin component", Phys. Rev. B 77 (2008) 045114(14 pages).
- [15] M. Okumura, S. Yamada, N. Taniguchi and M. Machida, "Hole Localizkation in One-Dimensional Doped Anderson-Hubbard Model", arXiv/0803.2793 (submitted to PRL).
- [16] T. Hayashi, T. Arimitsu, S. Kitajima and F. Shibata: "Stabilizer Code for Uncorrelated Errors Can Correct Spatially Correlated Ones", J. Phys. A: Math. Theor. 40 (2007) F457-F463.
- [17] T. Arimitsu, N. Arimitsu, K. Yoshida and H. Mouri: "Multifractal PDF Analysis of Energy Dissipation Rates in Turbulence", IUTUM Symposium on Computational Physics and New Perspectives in Turbulence (IUPUM Booksiries, Springer, 2008) pp.117-123.
- [18] K. Yoshida and T. Arimitsu: "Numerical Simulation of Quantum Fluid Turbulence", IUTUM Symposium on Computational Physics and New Perspectives in Turbulence (IUPUM Booksiries, Springer, 2008) pp.379-384.
- [19] T. Arimitsu, T. Hayashi, S. Kitajima and F. Shibata: "Quantum Error Correction for Spatially Correlated Errors" Int. J. Quantum Information (2007) submitted.
- [20] Kyo Yoshida and Toshihico Arimitsu, "Inertial-subrange structures of isotropic incompressible magnetohydrodynamic turbulence in the Lagrangian renormalized approximation", Physics of Fluids 19(4) 045106-1—045106-14 (2007).
- [21] L. Berthier, G. Biroli, J.-P. Bouchaud, W. Kob, K. Miyazaki, and D. R. Reichman: "Spontaneous and induced dynamic fluctuations in glass formers. I. General results and dependence on ensemble and dynamics", J. Chem. Phys. **126** (2007) 184503.
- [22] L. Berthier, G. Biroli, J.-P. Bouchaud, W. Kob, K. Miyazaki, and D. R. Reichman: "Spontaneous and induced dynamic correlations in glass formers. II. Model calculations and comparison to numerical simulations", J. Chem. Phys. **126** (2007) 184504.
- [23] Hans M. Wyss, K. Miyazaki, Johan Mattsson, Zhibing Hu, David R. Reichman, and David A. Weitz: "Strain-Rate Frequency Superposition (SRFS) - A rheological probe of structural relaxation in soft materials", *Phys. Rev. Lett.* 98 (2007) 238303.

# <著書>

 T. Arimitsu, N. Arimitsu, K. Yoshida and H. Mouri: "Multifractal PDF analysis for intermittent systems"(分担執筆); Anomalous Fluctuation Phenomena in Complex Systems: Plasma Physics, Bio-Science and Econophysics, Edited by C. Riccardi and H.E. Roman (Transworld Research Network, India, 2008) in press.

# < 解説・紀要 >

- [1] 初貝安弘「非可換ベリー位相」数理科学6月号 528, 26 (2007)
- [2] M. Okumura, S. Yamada, N. Taniguchi and M. Machida, "Hole Localization in Strongly-Correlated and Disordered Systems: DMRG Studies for 1-D and n-leg ladder Random Hubbard Models" (ISSP2007, 2007).

- [3] M. Okumura, S. Yamada, N. Taniguchi and M. Machida, "Hole Localization in Doped Anderson-Hubbard Model: DMRG Studies for 1-D and n-leg ladder models" (YKIS 2007, 2007.11).
- [4] 吉田恭, 有光敏彦「電磁流体乱流のエネルギースペクトル」研究集会報告(19ME-S7)「乱流現象及び 多自由度系の動力学,構造と統計法則」(九州大学応用力学研究所,2008年3月)116—123.
- [5] 宮崎州正: "ガラス転移理論の新展開 動的不均一性とモード 結合理論 ",日本物理学会誌 62 (2007 年 6 月号) 431-434.
- [6] 宮崎州正: "ガラスの非線形レオロジーの微視的理論 モード 結合理論によるアプローチ ",物性研究 88 (2007 年 6 月号) 360-367.
- [7] 宮崎州正: "ガラス転移とモード結合理論 最近の発展と課題 ", 物性研究 88 (2007 年 8 月号) 621-720.
- [8] K. Miyazaki, G. Biroli, J-P. Bouchaud, and D. R. Reichman: "Nonlinear Susceptibility and Dynamical Length Scale of Glassy Systems", In Michio Tokuyama, Irwin Oppenheim, and Hideya Nishiyama, editors, "COMPLEX SYSTEMS: 5th International Workshop on Complax Systems", volume 982 (AIP Conference Proceedings, 2008) 173–176.

# <受賞>

[1] 宮崎州正: 第1回物理学会若手奨励賞(領域12)(2007年)

# <講演>

- [1] (招待講演)初貝安弘,「フラストレートしたスピン液体での量子化ベリー位相と局所秩序変数」,日本物理学会 第63回年次大会24pRJ-4フラストレート磁性体の新奇秩序化現象,2008年3月24日,近 畿大学
- [2] 平野嵩明, 桂法称, 初貝安弘, 「ベリー位相と Lieb-Schultz-Mattis の定理」, 日本物理学会 第 63 回年 次大会 23pWD-12, 2008 年 3 月 23 日, 近畿大学
- [3] 初貝安弘, 平野嵩明, 桂法称, 「ベリー位相を用いた整数スピン鎖のトポロジカルな分類」, 日本物理学 会 第 63 回年次大会 23pWD-3, 2008 年 3 月 23 日, 近畿大学
- [4] 森本高裕,初貝安弘,青木秀夫,「量子ホール系の THz 領域における ac ホール伝導度の理論的提案」, 日本物理学会 第 63 回年次大会 23aWH-4, 2008 年 3 月 23 日,近畿大学
- [5] 丸山勲,初貝安弘,「近藤絶縁体における局所秩序変数」,日本物理学会 第63回年次大会 23aTE-3, 2008 年 3 月 23 日,近畿大学
- [6] T. Morimoto, Y. Hatsugai, H. Aoki, "Cyclotron radiation and emission in graphene", 2008 APS March Meeting, 2008年3月12日, New Orleans, Louisiana, USA
- [7] Takaaki Hirano, Hosho Katsura, Yasuhiro Hatsugai, "A topological classification of gapped spin chains by quantized Berry phases: VBS picture and the fractionalization", 2008 APS March Meeting, 2008 March 12 New Orleans, Louisiana, USA

- [8] Yasuhiro Hatsugai, "Berry Phases of Gapped Spin Liquids: Fractionalization and Entanglement Entropy", Seminar in Condensed Matter Physics at Institute for Theoretical Physics, ETH Zurich, 2008 Jan. 31, Swiss Federal Institute of Technology Zurich, Zurich, Switzerland
- [9] Yasuhiro Hatsugai, "Spin Liquids with Fractionalization : Berry Phases and Entanglement Entropy", Condensed matter theory seminar at Paul Scherrer Institut, 2008 Jan. 30, Paul Scherrer Institut, Villigen PSI Switzerland
- [10] 平野嵩明、丸山勲、初貝安弘、「四体交換相互作用を持つフラストレートしたスピン梯子系の量子化ベ リー位相によるトポロジカルな相分類」特定領域「フラストレーションが創る新しい物性」第一回ト ピカルミーティング 2008 年 1 月 11 日、京都大学京大会館
- [11] 初貝安弘,「量子液体相、スピン液体相における量子的な秩序とベリー位相」青山学院大学・物理・数 理学科 コロキウム, 2007 年 12 月 21 日,青山学院大学理工学部
- [12] 初貝安弘「ものの区別からトポロジカルな量子相転移へ」筑波大学大学院数理物質科学研究科コロキュ ウム 2007 年 12 月 20 日筑波大学数理物質科学研究科
- [13] 丸山勲、初貝安弘,「一次元モット絶縁体における鎖間平均場による粒子数揺らぎと超伝導」「超伝導が拓く物性科学の最前線-4特定領域合同研究会」,2007年12月7日首都大学東京 南大沢キャン パス
- [14] 初貝安弘「新しい秩序としてのダイマー秩序とベリー位相」東邦大学理学部物理学科コロキウム, 2007 年12月5日,東邦大学理学部
- [15] Y. Hatsugai, "Topological Quantum Phase Transitions Characterized by Quantized Berry Phases and Entanglement Entropy", 近畿大学理工学部講演会, 2007年11月15日, 近畿大学東大阪キャンパス
- [16] Y. Hatsugai, "Berry Phases and Entanglement Entropies of Quantum Liquids : Quantum Interferences in Many-body States", International Symposium on Physics of New Quantum Phases in Superclean Materials (PSM2007), 2007 Nov. 1, Nagaragawa Convention Center, Gifu, Japan.
- [17] 初貝安弘,「対称性の破れを伴わない量子相における新しい秩序変数:幾何学的位相の量子化を用いて」筑波大学大学院数理物質科学研究科 凝縮系理論コロキウム,2007 年 10 月 18 日,筑波大学自然系 学系棟
- [18] 平野嵩明, 丸山勲, 初貝安弘, 「四体スピン交換相互作用とトポロジカル秩序」日本物理学会 2007 年秋 「第 62 回年次大会」 24aTL-3, 2007 年 9 月 24 日, 北海道大学
- [19] 丸山勲,初貝安弘「量子ホール系でのラフリンの議論に関する非断熱効果」日本物理学会 2007 年秋
  「第 62 回年次大会」 22aTH-6,2007 年 9 月 22 日,北海道大学
- [20] 森本高裕,初貝安弘,青木秀夫,「磁場中グラフェンにおけるサイクロトロン発光の理論」日本物理学 会 2007 年秋 「第62 回年次大会」22aTH-10,2007 年9月22日,北海道大学
- [21] 初貝安弘, 福井隆裕, 青木秀夫, 「グラフェンの N=0 ランダウ準位におけるボンド秩序形成とトポロジ カル励起」日本物理学会 2007 年秋 「第 62 回年次大会」22aTH-11, 2007 年 9 月 22 日, 北海道大学
- [22] 福井隆裕,初貝安弘,「量子スピンホール効果を特徴づける Z2 不変量の簡便な計算方法と 3 次元物質 への応用」日本物理学会 2007 年秋 「第 62 回年次大会」21aWA-6, 2007 年 9 月 21 日,北海道大学
- [23] Y. Hatsugai, T. Fukui, and H. Aoki, "Topological low-energy modes in N=0 Landau levels of graphene: a possibility of a quantum liquid", EP2DS-17, 17th International Conference on Electronic Properties of Two-Dimensional Systems, 2007 July 15, Genova, Italy

- [24] Y. Hatsugai, "Gauge Dependent Local Order Parameters of Quantum Disordered States : Characterization by Berry Connections", (Oral) STATPHYS 23, the 23rd International Conference on Statistical Physics of the International Union for Pure and Applied Physics (IUPAP), 2007年7月9 日, Genova, Italy
- [25] 初貝安弘,「ベリー接続としての非可換ゲージ場と量子液体相」筑波大学物理学系素粒子理論セミナー, 2007 年 6 月 29 日, 筑波大学計算科学研究センター
- [26] 初貝安弘,「グラフェンの異常量子ホール効果」高エネルギー加速器研究機構 放射光セミナー(物 構研セミナー), 2007 年 6 月 15 日, 高エネルギー加速器研究機構 4 号館
- [27] 初貝安弘,「量子液体相における幾何学的位相とエンタングルメントエントロピー」第 25 回 原研・兵 県大合同コロキウム, 2007 年 5 月 17 日, SPring-8, 萌光館
- [28] M. Arikawa and S. Nishimoto: "Dynamics of 3-tube spin ladders", Physics and Mathematics of Interacting Quantum Systems in low Dimensions, 2007年5月, 東京大学物性研究所(ポスター発表).
- [29] 有川晃弘,初貝安弘: "量子スピンホール相におけるトポロジカルな秩序変数",日本物理学会 2007 年 秋季大会,2007 年 9 月,北海道大学.
- [30] M. Arikawa: "Local topologigal order parameter on quantum spin-Hall phase", Yukawa International Seminar 2007, "Interaction and Nanostructural Effects in Low-Dimensional Systems", 2007年11月, 京都大学基礎物理学研究所(ポスター発表).
- [31] M. Arikawa and S. Nishimoto: "Dynamics of the three-leg spin tube system", 第1回学際物質科学 国際シンポジウム, 2008 年 3 月, 筑波大学(ポスター発表).
- [32] 有川晃弘, 初貝安弘, 青木秀夫: "磁場中グラフェンの端状態の理論", 日本物理学会 2008 年 春季大会, 2008 年 3 月, 近畿大学.
- [33] 小口悠、谷口伸彦: "An analysis on quantum nano systems using an improved EOM method: Orbital degenerated quantum dots"、ICYS-ICMR Summer School on Nanomaterials、2007 年 7 月、物質・ 材料研究機構
- [34] 小口悠,谷口伸彦:「Rashba 結合によるナノスピン干渉計と帯電効果」,日本物理学会 第63回年次 大会,2008年3月,近畿大学
- [35] 吉田 恭,有光敏彦,北島佐知子:「量子散逸系の真空と生成消滅演算子」,日本物理学会 第62回年 次大会,2007年9月,北海道大学,札幌
- [36] 有光敏彦,有山正孝,北原和夫,二宮正夫,並木雅俊:「物理チャレンジ 2007 報告 I 概要」,日本物理 学会 第 62 回年次大会,2007 年 9 月,北海道大学,札幌
- [37] 吉田恭「乱流の統計理論の新展開」,物理学セミナー(筑波大学,つくば,2007年10月24日).
- [38] 吉田恭, 有光敏彦「電磁流体乱流のエネルギースペクトル」, 研究集会「乱流現象及び多自由度系の動力学, 構造と統計法則」(九州大学, 福岡, 2007 年 11 月 25 日).
- [39] T. Arimitsu, T. Hayashi, S. Kitajima and F. Shibata: 「Quantum Error Correction for Spatially Correlated Errors」, International Conference "Noise Information & Complexity @ Quantum Scale (NIC@QS07)", 2007年11月, Ettore Majorana Centre, Erice (Sicily), Italy

- [40] (招待講演)有光敏彦,有光直子,吉田恭,毛利英昭,本池巧:「大偏差を呈する系のマルティフラク タル PDF 解析とその周辺― 乱流を中心として ―」,経済物理学セミナー,2007年12月,東京工業 大学,東京
- [41] (招待講演) 有光敏彦,林 剛史,北島佐知子,柴田文明:「Canonical Operator Formalism for Dissipative Quantum Systems and its Application to Quantum Error-Correction」,ワークショップ「量子応答・ 量子ダイナミックスの新展開」,2008年2月,談露館,甲府
- [42] (招待講演) T. Arimitsu, T. Hayashi, S. Kitajima and F. Shibata: Canonical Operator Formalism for Dissipative Quantum Systems and its Application to Quantum Error-Correction」, 2008年3月, University of Salerno, Salerno, Italy
- [43] Kyo Yoshida "Statistics of quantum fluid turbulence", Frontiers of Computational Science Macroscopic Systems/ Fluid Mechanics, (Nagoya University, Nagoya, Japan, 26 Mar. 2008).
- [44] (招待講演)有光敏彦,有光直子,吉田恭,毛利英昭,本池巧:「乱流のマルティフラクタル PDF 解析とその周辺」,第三回九州大学産業技術数理研究センターワークショップ「自然現象における階層構造と数理的アプローチ」,2008年3月,九州大学産業技術数理研究センター,福岡
- [45] 本池 巧,有光敏彦:「n(> 2)<sup>∞</sup> 周期軌道のベキ的不安定性とマルティフラクタル構造の関係」,第三回九州大学産業技術数理研究センターワークショップ「自然現象における階層構造と数理的アプローチ」,2008年3月,九州大学産業技術数理研究センター,福岡
- [46] 武智公平,吉田恭,有光敏彦:「粉粒体における粒子回転緩和過程のシミュレーションによる解析 金谷理論の検証 —」,日本物理学会 第63回年次大会,2008年3月,近畿大学,東大阪
- [47] 杉山忠男,有光敏彦,原田 勲:「国際物理オリンピックの問題とその教育実践」,日本物理学会 第63 回年次大会,2008 年 3 月,近畿大学,東大阪
- [48] K. Miyazaki: 「ガラス転移における動的相関 モード 結合理論によるアプローチ 」特定領域研究 第 2 回領域研究会, 2007 年 6 月, 米沢市
- [49] K. Miyazaki, Giulio Biroli, Jean-Philippe Bouchaud, and David R. Reichman: "Nonlinear susceptibility and dynamical length scale of glassy materials", SOCOBIM2007, 2007 年 7 月, シチリア島
- [50] K. Miyazaki, Hans M. Wyss, David A. Weitz, and David R. Reichman: "Nonlinear rheology of soft-glassy materials -mode-coupling approach-", StatPhys 23, 2007年7月, Genova
- [51] K. Miyazaki: "Nonlinear rheology of soft glassy materials", The YITP workshop on "New Frontiers in Colloidal Physics: A Bridge between Micro- and Macroscpic Concepts in Soft Matter", 2007年 7月, 京都市
- [52] K. Miyazaki: "Nonlinear susceptibility and dynamical length scale of glassy systems", The 5th International Workshop on Complex Systems, 2007年9月, 仙台市
- [53] (若手奨励賞受賞講演) 宮崎州正:「ガラス転移における動的相関長の微視的理論」,日本物理学会 2007 年秋季大会,2007年9月,北海道大学
- [54] 金鋼,宮崎州正,斉藤真司:「多孔質媒体中のガラス転移:ガラス転移とローレンツガスのクロスオー バー」,日本物理学会2007年秋季大会,2007年9月,北海道大学
- [55] 宮崎州正: 「コロイドのゲル化に現れる動的不均一性の数理モデル」,日本物理学会 2007 年秋季大会, 2007 年 9 月,北海道大学

- [56] K. Miyazaki: "Mode-Coupling Theory and Glass Transition: Recent progresses", Symposium on the 50th Anniversary of the Alder transition, 2007 年 11 月, 金沢市
- [57] (招待講演) K. Miyazaki: "Recent Progresses on Mode-Coupling Theory for Glass Transition", Fukuoka International Workshop on Unifying Concepts of Glass Transition, 2007 年 11 月, 福岡市
- [58] (招待講演) 宮崎州正: 「ガラス転移とモード 結合理論」, 京都大学 数理解析研究所 共同研究集会「乱流研究の展望: ブレークスルーを求めて」, 2008 年1月, 京都大学
- [59] 宮崎州正:「1次元拡散問題とモード結合理論」,日本物理学会 2008 年春季大会,2008 年 3 月,近畿 大学

# < 社会還元等 >

- [1] 初貝安弘:東京大学大学院工学系研究科委嘱教授
- [2] 初貝安弘:東京大学物性研究所附属物質設計評価施設(スーパーコンピュータ共同利用課題審査)
- [3] 有光敏彦:平成19年度竹園高校SSH事業先端科学講話,講義題目「カオスとフラクタル構造」,2007 年7月,茨城県立竹園高等学校
- [4] 有光敏彦: Japanese Journal of Applied Physics,編集委員
- [5] **有光敏彦**: Condensed Matter Physics (The Institute for Condensed Matter Physics on the National Academy of Science of Ukrain), 編集委員.
- [6] 有光敏彦:物理チャレンジ・オリンピック委員会運営委員,および物理チャレンジ 2007 実行委員会 現 地実行部会長.
- [7] 吉田恭:物理チャレンジ 2007 現地実行部会委員.
- [8] 吉田恭:日本物理学会領域 11 領域役員, 2007 年 5 月-2008 年 4 月.

# <卒業論文(学士)>

- [1] 筑波大学卒業論文:棚谷翔(初貝、有川)「励起ギャップを持つ量子スピン系のエンタングルメントエントロピー」(2008)3月.
- [2] 筑波大学卒業論文:斎藤佑弥(有川、初貝)「1次元 *t-J* モデルの熱力学的性質の数値的研究」(2008) 3月.
- [3] 筑波大学卒業論文: 岡崎智美(谷口)「相転移とハミルトン動力学: 無限レンジ模型による検証」(2008) 3月.
- [4] 筑波大学卒業論文: 轟木貴人(有光,吉田)「高分子系の統計理論 スケーリング則に基づいた考察 — 」(2008)3月.

<学位論文(修士)>

 [1] 筑波大学修士論文:武智公平「粉粒体における粒子回転緩和過程のシミュレーションによる解析— 金 谷理論の検証 — 」(2008)3月. <外部資金>

- [1] 特定領域研究「スーパークリーン物質で実現する新しい量子相の物理」(公募研究),課題番号 18043007 「量子液体相におけるトポロジカル秩序」代表:初貝安弘(平成19年度,140万円)
- [2] 科学研究費補助金 萌芽研究「等エネルギー面上の場の理論の研究:量子カオスから量子的複雑流体・ 量子相転移へ」(課題番号 17654071 研究代表者:谷口伸彦)(平成 19 年度 500 千円)
- [3] 科学研究費補助金若手研究 (B)(平成 19 年度~平成 20 年度、研究代表者:吉田恭) 課題番号 19740229 「乱流統計理論の宇宙規模流体への展開」(平成 19 年度,1,100 千円)
- [4] 科学研究費補助金基盤研究 (C) (平成 19 年度~平成 20 年度、研究代表者: 宮崎州正) 課題番号 19540432 「ガラス転移と動的相関長」(平成 19 年度 1,800 千円)
- [5] 科学研究費補助金特定領域研究「非平衡ソフトマター物理学の創成:メソスコピック系の構造とダイナ ミクス」(公募研究)(平成19年度~平成20年度、研究代表者:宮崎州正)課題番号19031027「コロ イドゲルの生成ダイナミクスとレオロジー」(平成19年度2,300千円)分担者:古沢浩(平成19年度0 円)
- [6] 科学研究費補助金特定領域研究「実在系の分子理論」(計画研究)(平成19年度~平成21年度、研究 代表者:斎藤真司)課題番号18066018「空間・時間不均一ダイナミックス理論の構築」(平成19年度 6,000千円)分担者:宮崎州正(平成19年度0円)

# VII-2 計算物性グループ

教授 白石賢二、押山淳(現東大)

准教授 岡田晋

博士研究員 岩田潤一、内田和之、村口正和、藤本義隆

大学院生 7名

# 概要:

計算物性グループは本年度は大きくわけて2つの大きなテーマを中心に研究を推進した。 第1のテーマは新しい計算手法の開発、第2のテーマはナノ物質・ナノ材料の機能・物性 解明、及び、新奇ナノ物質のデザインを目指したナノサイエンスの研究である。

本報告書は計算物性研究室で行っているテーマを上記2つの大きなテーマに分類し、 各々のテーマについての19年度の成果を報告する。

# [1] 新しい計算手法の開発

# 1)超高速並列計算機 PACS-CS 上での実空間密度汎関数法プログラムの開発とその応用

# [論文 1、講演 18-20]

実空間に格子を導入し、全ての量を格子点上で計算する RSDFT は、FFT などの重い通 信タスクが生じないこと、非周期系・周期系などの任意の境界条件を計算セルに設定でき ること、などから次世代並列計算機での主要シミュレーションツールになると期待されて いる。19年度 RSDFT の PACS-CS 上での超並列化を行い、Si 中の原子空孔の計算、さ らには一万個以上のシリコン原子から構成されるナノクラスタの計算に成功した。

# [2] ナノ物質・ナノ材料の機能・物性解明、及び新奇ナノ物質のデザイン

# 1) グラフェンの端のエネルギー論 [論文 21、講演 32,37]

グラファイト、CNT 等の sp2 炭素ネットワーク物質の端に対するエネルギー論はこれまで まったくなされていない。しかしながら、CNT やグラファイトをデバイスとして用いる際、 その端の存在、さらには端と異種物質との複合界面の存在は本質である。例えば、シリコ ン等の半導体に対しては、その表面の生成エネルギー等が詳細に調べられている。そこで、 我々は sp2 炭素ネットワークの端(1 次元表面)生成のエネルギー論の解明を行った。ここ では、グラファイトリボンに対して、その端の生成エネルギーの計算を行った。その結果、 清浄、水素化端両者に対して、アームチェア型と呼ばれる端形状がより安定であることが 明らかになった(図1)。清浄端の生成エネルギーは、アームチェアで2.3eV/bond、ジグザ グで3.3eV/bondであり、水素終端により、このエネルギーは著しく減少し、アームチェア では0.1eV/bond,ジグザグでは0.3eV/bondとなる。清浄端におけるアームチェアの高い安 定性は、端における2配位サイトの構造緩和によるものである。すなわち、端の2つの2 配位サイトが強くダイマー化し、三重結合を形成し安定化する。これに対して、ジグザグ 端ではそのような構造緩和ができない。水素化端における、ジグザグ端の高い生成エネル ギーの起源は、グラファイトジグザグ端において本質である、フェルミレベルに発現する 平坦バンド状態によるものである。また、ジグザグ端の生成エネルギーが比較的リボン幅 に依存しないのに対して、アームチェアのそれは明らかなリボン幅依存性を示す。これは、

アームチェア端を持つリボ ンにおいて、その幅の3倍 周期で、金属(スモールギ ャップ半導体)、ラージギャ ップ半導体と電子状態の特 徴を反映している。すなわ ち、sp2炭素ネットワーク における端形成においては、 その電子状態が端安定性と 密接に関係している。



図1: グラファイトリボンにおける端の生成エネルギー(a)アームチ ェア端、(b)ジグザグ端

# 2) ピーポッドにおける電子状態変調 [論文 18]

我々はこれまでに、ナノチューブにフラーレンを挿入することにより得られるピーポッド において、その電子物性が構成単位であるフラーレン、ナノチューブの単純な足し合わせ ではないことを示してきた。すなわち、空隙に存在する電子状態を介して、両者の電子構 造の間の混成が生じ、空隙の大きさに依存した電子構造の変調が生じる。この事は、ホス トであるチューブ固有の物性に対しても何らかの影響を及ぼしていることが予想される。 そこで、我々は、C60を内包したアームチェアナノチューブにおいて、その動径収縮モード の内包前後での変調を調べた。その結果、(10,10)チューブでは、RBM 振動数のハードニン グが起こることが明らかになった。これは、内包 C60が(10,10)チューブに対して、その動 径方向の構造変化に対して障害物として働くためである。それに対して、太いチューブに おいては、その RBM シフトは僅かにソフト化することが明らかになった。これは、C60とチ ューブの間の波動関数混成により、空隙領域での電荷分布が増加し、その結果として CNT の π電子密度が有効的に減少したことに起因するものである。

また、この混成が CNT の電子構造に及ぼす影響も明らかにした。すなわち、半導体ナノチ ューブにおける、第一ギャップ・第二ギャップが、C60の内包の前後においてわずかにシフ トする。また、このシフトは、チューブのカイラリティーに依存し、内包分子-CNT の複合 構造の直接的な影響に加えて、複合構造体+構成単位の詳細構造も重要な物性決定の条件 である。

# 3) 欠陥を持つナノチューブの電子状態 [論文 22]

熱処理による欠陥修復が可能なナノチューブの実験的報告がなされている。我々は、その ような欠陥構造の構造候補の同定を行った。その結果、アドアトム-原子空孔欠陥がその生 成のエネルギー障壁が大きく、修復のエネルギー障壁が小さいことが明らかになった。計 算の結果得られた、欠陥生成の活性障壁は約 10eV、これに対して、修復の活性障壁は 2eV 程度となり、実験で報告されている可逆的な現象の説明となる。

また、特筆すべき特徴として、(9,0) CNT では欠陥導入により電子状態が半導体的に変調さ れる。また、全ての CNT の電子状態は、導入される欠陥の向きに大きく依存し、対称に導 入された場合は2本の欠陥順位がディープレベルとしてチューブのギャップ中に形成され る。それに対して、非対称に導入された場合は、1本の深い順位と1本の浅い順位が形成 され、浅い順位は CNT のバルクπ状態と強く混成することが明らかになった。

# 4) ショットキーバリア高さ極限の破綻 [論文 12]

これまで「バーディーン極限」と「ショットキー極限」がショットキーバリア高さにおけ る絶対的な極限として信じられてきた。我々は界面の選択的な軌道混成と界面構造を第一 原理量子論等で詳細に検討することにより、上記2つの極限は本当の極限ではないことを 理論的に明らかにした。さらに、ショットキー極限の破綻については実験グループと共同 でこのことを検証し、界面物理学に新しい展開を与えることに成功した。

# 5) ショットキー障壁高さの制御指針の研究 [講演 5,9]

平衡プロセス(高温プロセス)で CMOS 構 成が可能なプロセスを模索した。その結果、 S i 基板側の界面を制御することは有効な 指針となることを示すとともに、酸素を導入 して酸素空孔を消滅させる手法について特 に考察した。その結果、フェルミレベルピニ ングが起こっている状況では酸素空孔を消 滅させる反応は基板の Si を酸化する反応と 熱力学的には等価であることを証明した。こ の結果は、酸素空孔の消滅と有効絶縁膜厚の 増加はトレードオフの関係にあり、酸素空孔 だけを消滅させるプロセスウインドーは極



図2:酸素注入による酸素空孔消去プロセス。 (a)酸素空孔が消去できると Si 基板も酸化され る。(b)基板酸化が進まない条件では酸素空孔も 消去できない。 めて狭いことを明らかにした。上記考察は、酸素注入による酸素空孔の消去を行うプロセスは、集積化を目指した手法としては望み薄であることを意味している(図2)。

# 6) SiN 電荷蓄積層の量子論的考察 [講演 23]

MONOS 型メモリの電荷蓄積層である SiN 絶縁膜 の電荷蓄積機構を第一原理計算で検討した。その 結果、SiN 絶縁膜の堅固さと柔軟さが電荷トラッ プ機構に密接に関係することを明らかにし、酸素 が混入して柔軟になった SiN 絶縁膜は電子トラッ プ・ホールトラップ双方ともに形成されやすいこ とを明らかにした(図3)



図3:SiN 絶縁膜の堅固さとキャリアトラップとの 関係の模式図。

# く論文>

- 1) JI. Iwata, K. Shiraishi, and A. Oshiyama, "Large-scale density-functional calculations on silicon divacancies", Phys. Rev. B, in press.
- K. Takai, K. Shiraishi, and A. Oshiyama, "Ge vacancies at Ge/Si interfaces: Stress-enhanced pairing distortion", Phys. Rev. B, Vol 77, Art. No. 045308 (2008).
- N. Umezawa, K. Shiraishi, S. Sugino, A. Tachibana, K. Ohmori, K. Kakushima, H. Iwai, T. Chikyow, T. Ohno, Y. Nara, and K. Yamada, "Suppression of oxygen vacancy formation in Hf-based high-k dielectrics by lanthanum incorporation", Appl. Phys. Lett., Vol 91, Art. No. 132904 (2007)
- N. Umezawa, K. Shiraishi, S. Miyazaki, T. Ohno, T. Chikyow, K. Yamada, and Y. Nara. "Hafnium 4f core-level shifts caused by nitrogen incorporation in Hf-based high-k gate dielectrics", Jpn. J. Appl. Phys., Vol 46, pp,3507-3509 (2007).
- N. Umezawa, K. Shiraishi, S. Miyazaki, A. Uedono, Y. Akasaka, S. Inumiya, R. Hasunuma, K. Yamabe, H. Momida, T. Ohno, K. Ohmori, T. Chikyow, Y. Nara, and K. Yamada, "Guiding principle of energy level controllability of silicon dangling bonds in HfSiON", Jpn. J. Appl. Phys., Vol 46, pp. 1891-1894 (2007).
- 6) A. Uedono, T. Naito, T. Otsuka, K. Ito, K. Shiraishi, K. Yamabe, S. Miyazaki, H. Watanabe, N. Umezawa, T. Chikyow, T. Ohdaira, R. Suzuki, Y. Akasaka, S. Kamiyama, Y. Nara, and K. Yamada, "Characterization of metal/high-k structures using monoenergetic positron beams", Jpn. J. Appl. Phys., Vol 46, pp,3214-3218 (2007)
- K. Doi, Y. Mikazuki, S. Sugino, T. Doi, P. Szarek, M. Senami, K. Shiraishi, H. Iwai, N. Umezawa, T. Chikyo, K. Yamada, and A. Tachibana, "Electronic Structure Study of Local Dielectric Properties of Lanthanoid Oxide Clusters", Jpn. J. Appl. Phys. Vol 47, pp. 205-211 (2008).

- N. Umezawa, K. Shiraishi, K. Torii, M. Boero, T. Chikyow, H. Watanabe, K. Yamabe, T. Ohno, K. Yamada, and Y. Nara, "Role of nitrogen atoms in reduction of electron charge traps in Hf-based high-kappa dielectrics", IEEE ELECTRON DEVICE LETTERS, Vol 28, pp. 363-365 (2007)
- 9) K. Ohmori, P. Ahmet, M. Yoshitake, T. Chikyow, K. Shiraishi, K. Yamabe, H. Watanabe, Y. Akasaka, Y. Nara, K.-S. Chang, M. L. Green, and K. Yamada, "Influences of annealing in reducing and oxidizing ambients on flatband voltage properties of HfO2 gate stack structures", J. Appl. Phys., Vol 101, Art. No. 084118 (2007)
- Kazuyuki Uchida, <u>Susumu Okada</u>, <u>Kenji Shiraishi</u>, and <u>Atsushi Oshiyama</u>, ``Quantum effects in cylindrical carbon-nanotube capacitor " Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. 19, Art. No. 365218 (2007).
- Kazuyuki Uchida, <u>Susumu Okada, Kenji Shiraishi</u>, and <u>Atsushi Oshiyama</u>, "Quantum effects in double-walled carbon nanotube capacitor", Physical Review B, Vol. 76, art. no. 155436 (2007)
- 12) 白石賢二、中山隆史、「金属/絶縁体界面の統一理論」、 表面科学, Vol 29, pp. 92-98, (2008)
- K. Kamiya, M. Boero, M. Tateno, K. Shiraishi and A. Oshiyama, "Possible mechanism of proton transfer through peptide groups in the H-pathway of the bovine cytochrome c oxidase", J. Am. Chem. Soc. 129, 9663-9673 (2007).
- K. Kamiya, M. Boero, M. Tateno, K. Shiraishi and A. Oshiyama, "First-principles molecular dynamics study of proton transfer mechanism in bovine cytochrome c oxidase", J. Phys. Cond. Matt. 19, Art. No. 3652209 (2007).
- 15) Susumu Okada, Kyoko Nakada, and Takazumi Kawai, ``Orientaiton Dependence of Magnetic Moment of Carbon Nanotubes with Topological Line Defects", Applied Physics Letters, Vol. 90, art. no. 103120 (2007).
- 16) Susumu Okada, `Electronic structures of finite-length carbon nanotubes: Crossover from fullerenes to nanotubes", NANO, Vol. 2, pp. 51--57 (2007).
- 17) Shojun Hino, Masayuki Kato, Daisuke Yoshimura, Hiroe Moribe, Hisashi Umemoto, Yasuhiro Ito, Toshiki Sugai, Hisanori Shinohara, Minoru Otani, Yoshihide Yoshimoto, and Susumu Okada, Effect of encapsulated atoms on the electronicstructure of the fullerene cage: A case study on La2@C78 and Ti2C2@C78 via ultraviolet photoelectron spectroscopy", Physical Review B, Vol. 75, 125418 (2007).
- Susumu Okada, ``Radial-breathing mode frequencies for nanotubes encapsulating fullerenes", Chemical Physics Letters, Vol. 438, pp. 59-62 (2007).
- 19) Minoru Otani, Susumu Okada, and Atsushi Oshiyama . ``Formation of

Titanium-carbide in nanospace of C78 fullerenes'. Chemical Physics Letters, Vol. 438, pp. 274-278 (2007).

- 20) Takahiro Kurita, Susumu Okada, and Atsushi Oshiyama, `Energetics of ice nanotubes and their encapsulation in carbon nanotubes from density-functional theory", Physical Review B Vol. 75, art. no. 205424 (2007).
- Susumu Okada, Kyoko Nakada, and Takazumi Kawai, `Energetics and Electronic Structure of Armchair Nanotubes with Topological Line Defect", Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. 19, 365231 (2007).
- 22) Susumu Okada, ``Energetics and Electronic Structures of Carbon Nanotubes with Adatom-Vacancy Defects", Chemical Physics Letters, Vol. 447, pp 263-267 (2007).
- 23) Susumu Okada, `Energetics of nanoscale graphene ribbons: Edge geometries and electronic structures", Physical Review B, Vol. 77, art. no. 041408(R) (2008).
- 24) Toshiya Okazaki, Shingo Okubo, Takeshi Nakanishi, Takeshi Saito, Minoru Otani, Susumu Okada, Shunji Bandow, and Sumio Iijima, `Optical Bandgap Modulation of Single-Walled Carbon Nanotubes by Encapsulated Fullerenes", Journal of the American Chemical Society, in press.

# く講演>

- (招待講演> K. Shiraishi, Y. Akasaka, G. Nakamura, T. Nakayama, S.Miyazaki, H.Watanabe, A.Ohta, K. Ohmori, T. Chikyow, Y. Nara, K.Yamabe, and K. Yamada, "Theoretical Studies on Metal/.High-k Gate Stacks" (invited), 211th Meeting of Electrochemical Society, Chicago, USA, (May 7-10, 2007).
- 名符講演> K. Shiraishi, "How can first principles calculations give large contributions to industries?", (invited) ISSP International Workshop/Symposium on Foundation and Application of Density Functional Theory, Kashiwa, Japan, (Aug. 1-3, 2007).
- 3) <招待講演>R. Hasunuma, T. Naito, C. Tamura, A. Uedono, K. Shiraishi, N. Umezawa, T. Chikyow, S. Inumiya, M. Sato, Y. Tamura, H. Watanabe, Y. Nara, Y. Ohji, S. Miyazaki, K. Yamada and K. Yamabe, "<u>Tight Distribution of Dielectric Characteristics of HfSiON</u>" (invited), 212th Meeting of Electrochemical Society, Washington D. C., USA, (Oct. 7 –12, 2007).
- 4) <招待講演> M. Zhao, K. Nakajima, M. Suzuki, K. Kimura, M. Uematsu, K. Torii, S. Kamiyama, Y. Nara, H. Watanabe, K. Shiraishi, T. Chikyow and K. Yamada (invited), "Interface Reaction of High-k Gate Stack Structures Observed by High-Resolution RBS", 212th Meeting of Electrochemical Society, Washington D. C., USA, (Oct. 7–12, 2007).
- 5) <招待講演> K. Shiraishi, Y. Akasaka, G. Nakamura, M. Kadoshima, H. Watanabe, K. Ohmori, T. Chikyow, K. Yamabe, Y. Nara, Y. Ohji and K. Yamada (invited), "Theoretical Studies on Fermi Level Pining of Hf-Based High-k Gate Stacks Based on Thermodynamics", 212th Meeting of

Electrochemical Society, Washington D. C., USA, (Oct. 7-12, 2007).

- 6) <招待講演> M. Kadoshima, Y. Sugita, K. Shiraishi, H. Watanabe, A. Ohta, S. Miyazaki, K. Nakajima, T. Chikyow, K. Yamada, T. Aminaka, E. Kurosawa, T. Matsuki, T. Aoyama, Y. Nara and Y. Ohji, "Improvement in Fermi-Level Pinning of p-MOS Metal Gate Electrodes on HfSiON by Employing Ru Gate Electrodes", 212th Meeting of Electrochemical Society, Washington D. C., USA, (Oct. 7–12, 2007).
- 7) <招待講演> N. Umezawa, K. Shiraishi, S. Miyazaki, A. Uedono, Y. Akasaka, S. Inumiya, A. Oshiyama, R. Hasunuma, K. Yamabe, H. Momida, T. Ohno, K. Ohmori, T. Chikyow, Y. Nara and K. Yamada, "Role of the Ionicity in Defect Formation of Hf-Based Dielectrics", (invited) 212th Meeting of Electrochemical Society, Washington D. C., USA, (Oct. 7 –12, 2007).
- 8) <招待講演> M. Sato, K. Yamabe, K. Shiraishi, S. Miyazaki, K. Yamada, C. Tamura, R. Hasunuma, S. Inumiya, T. Aoyama, Y. Nara and Y. Ohji, "Microscopic Understanding of PBTI and NBTI Mechanisms in High-k / Metal Gate Stacks", (invited) 212th Meeting of Electrochemical Society, Washington D. C., USA, (Oct. 7–12, 2007).
- 9) <招待講演> K. Shiraishi, "Interface Properties of Hf-Based High-k Gate Dielectrics -O Vacancies and Interface Reaction-" 14th International Workshop on the Physics of Semiconductor Devices, Mumbai, India (Dec. 16-20, 2007)
- 10) **<招待講演>** K. Shiraishi, "Characteristic Nature of High-k Dielectric Interfaces", IEEE EDS WIMNACT 2008 on NANOELECRONICS, Sikkim, India, (Mar. 6-8, 2008).
- <招待講演> T. Nakayama, R. Ayuda, H. Nii, K. Shiraishi, "Physics of Schottky barrier at Metal/high-k Interfaces" (invited), 2008 MRS Spring Meeting, H5.5, Mar.24-28, 2008, San Francisco, USA.
- 12) Y. Takada, K.Shiraishi: "Physical Model for Multi-electron Injection to Si-Quantum-Dot Floating Gate Embedded in SiO2 Matrix from Si Substrates", 5<sup>th</sup> International Conference on Silicon Epitaxy and Heterostructure, Marseille France, May 20-25, 2007
- 13) K. Takai, K. Shiraishi, and A. Oshiyama: "Atomic Structures and Energetics of Ge Vacancies at Ge/Si Interfaces", 5<sup>th</sup> International Conference on Silicon Epitaxy and Heterostructure,, Marseille France, May 20-25, 2007
- 14) Y. Takada, M.Muraguchi, K.Shiraishi: "Quantum Cascade Multi-electron Injection into Si-Quantum-Dot Floating Gate Embedded in SiO2 Matrix",5<sup>th</sup> International Symposium on Control of Semiconductor Interfaces,, Tokyo Japan, November 12-14, 2007
- 15) M. Kadoshima, Y. Sugita, K. Shiraishi, H. Watanabe, S. Miyazaki, T. Chikyow, K. Yamada, T. Aminaka, E. Kurosawa, T. Matsuki, T. Aoyama, Y. Nara, Y. Ohji, "Gate-component-induced high-k compositional change for dual-metal/dual-high-k CMOS- Cost-effective approach to utilize the effective work function stabilization by pinning –" 2007 Symp. on VLSI Tech. June 13-15, 2007 Kyoto, Japan.

- 16) M. Kadoshima, T. Matsuki, M. Sato, T. Aminaka, E. Kurosawa, A. Ohta, H. Yoshinaga, S. Miyazaki, K. Shiraishi, K. Yamabe, K. Yamada, T. Aoyama, Y. Nara, Y. Ohji: "Practical dual-metal-gate dual-high-k CMOS integration technology for hp 32 nm LSTP utilizing process-friendly TiAlN metal gate", 2007 International Electron Devices Meetings, Dec. 12-14, 2007, Washington D.C. USA.
- 17) K. Ohmori, T. Chikyow, T. Hosoi, H. Watanabe, K. Nakajima, T. Adachi, A. Ishikawa, Y. Sugita, Y. Nara, Y. Ohji, K. Shiraishi, K. Yamabe, K. Yamada: "Wide Controllability of Flatband Voltage by Tuning Crystalline Microstructures in Metal Gate Electrodes", 2007 International Electron Devices Meetings, Dec. 12-14, 2007, Washington D.C. USA.
- 18) 岩田潤一、押山淳、白石賢二、岡田晋、藤本義隆、"実空間密度汎関数コード(RSD FT)による大規模第一原理電子状態計算"、理研・ナノ統合拠点連携ワークショッ プ、2007年6月14日
- 19) 岩田潤一、白石賢二、押山淳、"実空間差分法による大規模第一原理電子状態計算"、 理研次世代スーパーコンピューティングシンポジウム、2007 年 10 月 3 日-4 日
- 20) 岩田潤一、白石賢二、押山淳、 "Si複空孔欠陥構造に関する大規模第一原理計算"、 日本物理学会第62回年次大会(札幌市北海道大学)、2007年9月21--24日
- 21) 高田幸宏,白石賢二: "SiO<sub>2</sub>に埋め込まれたフローティングゲートへの多電子注入機構の提案",シリコン材料・デバイス研究会,広島大学,2007年6月7日-8日
- 22) 高田幸宏,村口正和,白石賢二: "絶縁膜に埋め込まれた量子ドットフローティング ゲートへの多電子注入機構の理論提案",第68回応用物理学会学術講演会,北海道工 業大学,2007年9月4日-8日
- 23) <2007 年度応用物理学会 JJAP 論文賞受賞記念講演> 赤坂泰志,中村源志,白石賢二, 梅澤直人,山辺紀久夫,小川修,李明範,網中利夫,粕谷透,渡部平司,知京豊裕,大 塚文雄,奈良安雄,中村邦雄: "Modified Oxygen Vacancy Induced Fermi Level Pinning Model Extendable to P-Metal Pinning"、第 68 回応用物理学会学術講演会,北海道工 業大学,2007 年 9 月 4 日-8 日
- 24)高田幸宏,村口正和,白石賢二: "絶縁膜に埋め込まれたシリコン量子ドットフロー ティングゲートへの量子なだれ的多電子注入機構の理論提案",第55回応用物理学会 学術講演会,日本大学,2008年3月27日-30日
- 25) 小林賢司, 白石賢二: "MONOS 型メモリの劣化の原子レベルの機構の第一原理計算に よる考察、第13回ゲートスタック研究会、2008年1月13日—15日、三島、静岡
- 26)小幡輝明、白石賢二、押山淳: "密度汎関数理論に基づく窒化インジウムガリウムにおける窒素単原子空孔の研究",第 55回応用物理学会学術講演会、日本大学、2008年3月27日-30日
- 27) イ ヨンフン,大竹朗,永田貴弘,白石賢二: "シリコンナノワイヤの電子構造の理論的研究",第 55回応用物理学会学術講演会,日本大学,2008年3月27日-30日

- 28) 小林賢司、白石賢二: "MONOS 型メモリの電荷トラップ機構の第一原理計算による考察",第 55 回応用物理学会学術講演会,日本大学,2008 年 3 月 27 日-30 日
- 29) 喜多祐起,景井悠介,細井卓治,志村考功,渡部平司,白石賢二,門島勝,奈良安雄, 山田啓作: "格子間酸素に起因した金属電極/Hf系ゲート絶縁膜の実効仕事関数変調", 第 55 回応用物理学会学術講演会,日本大学,2008年3月27日-30日
- 30) <招待講演> 白石賢二、梅澤直人、杉野信也、立花明知、知京豊裕: "High-k ゲート絶 縁膜への元素添加効果の物理的起源",第 55 回応用物理学会学術講演会シンポジウム, 日本大学,2008 年 3 月 27 日-30 日
- 31) <招待講演> 岡田 晋 "ナノチューブ新奇物性: 複合構造体とネットワーク制御" ナノ 学会第5回大会(つくば市エポカルつくば), 2007 年 5 月 21 日--23 日
- 32) 岡田 晋 "ナノグラファイトのエネルギー論:端形状と電子状態"フラーレン・ナノチューブ学会,第33回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム(福岡市九州大学),2007年7月11日--13日
- 33) 岡田 晋 "ナノチューブ内における C<sub>60</sub>のエネルギー論"フラーレン・ナノチューブ学
  会,第33回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム(福岡市九州大学),2007 年7月
  11日--13日
- 34) 内田和之、岡田晋 "カーボンナノチューブに対する電界ドープの第一原理計算"フラ ーレン・ナノチューブ学会,第 33 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム(福岡 市九州大学),2007 年 7 月 11 日--13 日
- 35) 岡崎俊也、大窪清吾、中西毅、斎藤毅、大谷実、岡田晋、坂東俊治、飯島澄男 "フラ ーレン内包による単層カーボンナノチューブの光学的バンドギャップ変調"フラーレ ン・ナノチューブ学会,第 33 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム(福岡市九 州大学),2007年7月11日--13日
- 36) <2007 年度日本物理学会若手奨励賞受賞記念講演> 岡田晋 "ナノスケール炭素物質の 電子状態:ネットワークと階層構造"日本物理学会第62回年次大会(札幌市北海道大学) 2007 年 9 月 21--24 日
- 37) 岡田晋 "ナノグラファイトのエネルギー論:端形状と電子状態"日本物理学会第62回
  年次大会(札幌市北海道大学)2007年9月21--24日
- 38) 内田和之,岡田晋 "グラフェンリボンに対する電界ドープの第一原理計算"日本物理 学会第62回年次大会(札幌市北海道大学)2007年9月21--24日
- 39) 岡田 晋 "原子空孔を持つフラーレンのエネルギー論と電子状態"フラーレン・ナノチューブ学会,第34回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム(福岡市九州大学),2008年3月3日--5日
- 40) 岡田 晋 "Si ナノチューブの物質設計:新しい多層ナノチューブ"フラーレン・ナノチューブ学会,第34回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム(福岡市九州大学),2008年3月3日-5日

- 41) 澤田啓介,石井史之,斎藤峯雄,岡田晋,河合孝純 "グラファイトリボンのノンコリニア磁気相図"フラーレン・ナノチューブ学会,第34回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム(福岡市九州大学),2008年3月3日--5日
- 42) <招待講演> 岡田晋 "ナノチューブ関連新物質設計の理論"日本物理学会第 63 回年次 大会 (東大阪市近畿大学) 2008 年 3 月 22--26 日
- 43) 岡田晋 "ナノチューブ内空隙を用いた新たなチューブ上物質の物質設計"日本物理学
  会第63回年次大会(東大阪市近畿大学)2008年3月22--26日

# く受賞>

- 1) 白石賢二 応用物理学会 JJAP 論文賞 (平成19年9月)「Modified Oxygen Vacancy Induced Fermi Level Pinning Model Extendable to P-Metal Pinning」
- 2) 岡田晋 日本物理学会 若手奨励賞(平成19年9月)「炭素クラスター及びカーボン ナノチューブの第一原理電子状態計算」

# <新聞発表>

1) 日刊工業新聞(平成19年6月12日号)「原子レベルの界面制御により高誘電率絶縁 膜を用いたトランジスタの閾値制御に指針確立」

# <学位論文(修士)>

- 1) 小幡輝明 「密度汎関数理論に基づく窒化インジウムガリウムにおける窒素単原子空 孔の研究」
- 2) 小林賢司 「SiN 絶縁膜中の欠陥の第一原理による考察」

# VII-3 計算生命グループ 准教授 ボエロ マウロ 准教授 舘野 賢 講師 重田 育照 大学院生(6名)

当グループは本年度より新たにスタートしたティームであり、「生体機能高分子システムによる重要な生体反応の分子・電子ダイナミクスの解明」を目的として、研究を推進する。そのために、物理学における基本原理(力学、量子力学、統計力学、電磁気学など)に基づき、生体機能分子システムの電子構造・分子構造を正確に記述し、生物学的に重要な反応機構を解析する。こうした研究を高精度に実現するためには、解析対象を省略することなく、高度に複雑かつ巨大な生体分子システムをリアルなまま、「まるごと」理論的に解析することが重要である。

そのためには、量子力学計算などを単に表面的に適用するのは、ファンデルワールス相互作用を例に挙げ るまでもなく、本質的な相互作用の正確な記述さえおぼつかない。そうした生半可な研究が極めて危険である ことは、これまでの実例が示すところでもある。すなわち、複雑な生体機能分子システムに対して、その機能構 造を一切省略することなく、精密かつリアルな体系のまま、科学的に深く解析するためには、物理学や化学の みならず、構造生物学理論や情報科学理論の応用(Structural Bioinformatics)が不可欠である。さらにはその ために、大規模計算(計算科学)が必要となる場面も多く、筑波大学・計算科学研究センタなどと連携し、超高 速・超並列コンピュータを駆使して、それらの課題に取り組む。

こうした様々な解析技術を集中的に駆使することによって,重要な生物機能を担う生体機能分子システムの ダイナミクスを解明し,以って生物機能の実体を原理的に明らかにすることが,当研究グループの基本方針で ある。それらによって,ひいては複雑な生体システムに内在する物理的法則性を解明し,生命科学におけるゲ ノムワイドな現実の諸課題へと,広くそれらの知見を応用することを目指して,本年度の研究を推進した。

# 【1】RNA 酵素(リボザイム)および RNA・タンパク質複合体による酵素触媒反応機構

# (1) リボザイムの触媒反応機構 (ボエロ, 萩原, 舘野)

酵素機能はタンパク質だけではなく, RNA もまた保持し得ることが20世紀後半に発見さ れ,原始生命の発生の仕組みと,疾病の遺 伝子治療などへの応用の両面から,精力的 な研究が行われている。こうした RNA 分子は リボザイムとよばれ,我々はこれまでに「2個 の Mg<sup>2+</sup>イオンによってその酵素活性が著しく 促進」されること(Mg<sup>2+</sup>が無いとき,または1個 のときには,活性障壁が高いこと)を,第一原



図1 リボザイムによる酵素触媒反応

理(量子力学)・分子動力学シミュレーション(CPMD)によって、世界に先駆けて明らかにした。

しかしこの研究は、リボザイムの活性部位のみを抽出した、小さなモデル系を用いた計算であった。そこで本 年度はリボザイム分子の全体を含むリアルな系をコンピュータ内に構築し、この計算モデルを用いて、その反 応機構を飛躍的に精密なモデルにより検証した。この系では、分子全体に第一原理(量子力学;QM)を適用 することは不可能であり、古典力学に基づく有効ポテンシャル場(MM)と併用し、分子動力学(MD)シミュレー ションを実行することが極めて有効である。すなわち、活性部位に対しては QM 場(CPMD)を、触媒反応が生 じないそれ以外の部位に対しては MM 場を適用することにより、両者を融合した QM/MM 計算を実行した。

その結果,本年度はまず,リボザイム分子に結合した2個の Mg<sup>2+</sup>イオンが,OH<sup>-</sup>イオンにブリッジされることに よって,リボザイムと結合して水和構造を形成し,以って安定に存在し得ることを明らかにした。これは,X 線結 晶構造解析による知見とよく一致している。そこでさらに,2個の Mg<sup>2+</sup>イオンによる触媒機構および反応経路を 推定し,これを作業仮説として,QM/MM-MD シミュレーションを開始するに至った。

### (2) RNA・タンパク質複合体による酵素触媒反応機構(ボエロ, 萩原, 舘野)

生命の最も基本的かつ重要な機能のひとつを担う, アミノアシル tRNA 合成酵素による触媒反応の機構を, 新しい計算プログラム(後述)を用いた QM/MM-MD シミュレーションによって解析した。この系では, 解析対象 の RNA・タンパク質複合体の実験構造が, そのクオリティの点で不十分であることから, まず,

① 低解像度の実験データにおける分子構造に関する情報を理論的に予測することによって補い、その計算 モデルを構築し、実験構造に内在する複数の誤りを系全域にわたって修正することにより、精密な複合体

この計算モデル構築の過程において,低分子量の化合物をタンパク質分子に正確にドッキングさせる予測技図2

構造を理論的に再構築した。この計算モデルは、約170,000原子よりなる大規模なものとなった。

a)解析の対象である生体機能高分子系 LeuRS・tRNA 複合体の周囲に水分子を配置し,全体で約170,000 個の原子から構成される計算 モデルを構築し,その系全体に渡って立体構造の高度な精密化を,計算科学的手法と理論構造生物学的な手法を有機的に組み合わせ て行った。その後,我々の研究室で開発された新しい計算プログラムを用いて,QM/MM ハイブリッド分子動力学計算を実行した。

b), c) LeuRS に結合した基質とその近傍の立体構造および電子構造(LUMO)のステレオ図。反応が生じる箇所(カルボニル基)をb) 図の 矢印(白)で示した。その近傍には,カルボニル基を攻撃する水分子(求核剤)が初めて同定された。b) 図では,水分子が反応点から 3.8 A離れており,LUMOは基質分子内に広く分布しているが,基質と水分子との水素結合が切断されると(H-gateの開放), c) 図に示したよ うに,この水分子は 2.4 A まで反応点に接近し,同時に LUMO は反応点に局在する。


術を新たに開発することが必要であった。このアルゴリズムは,計算モデル内に溶媒水分子を露わに含み,し かもタンパク質および化合物の両者が完全にフレキシブルな運動性を有しながらドッキング・シミュレーションを 行うもので,予測に必要なあらゆるファクタを最大限に含んだ,世界的に見ても初めての計算アルゴリズムであ る。これを用いて,上記の系における実験データのクオリティを補い,大規模でリアルな計算モデル系を構築し た。そこで次に,

② 得られた大規模な生体分子系全体を対象に、QM/MMハイブリッドMD計算を実行し、その生体触媒反応 (多段階反応)の初段における電子構造および立体構造の変化を明らかにした。

この解析結果を前のページに図示した。これにより、反応点近傍に水分子が安定に存在すると共に、反応点を 形成する原子に LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital)の存在することも明らかになった。すなわちこ の反応は、水分子の孤立電子対 (Lonepair)が、反応点に存在する LUMO を攻撃することにより開始されるもの と考えられる。

これらの仮説を検証するために、タンパク質の活性部位の一部の化学構造に変異を与え、得られた反応機構を実験的に検証するための実験系の設計を理論的に行い、生体分子に対する量子デザイン・スキームの開発を開始した。

#### (3) GatCAB におけるアンモニア輸送機構

(畔柳,萩原,ボエロ,舘野)

遺伝情報の発現において必須の機能を担う, グル タミンアミド基転移酵素(GatCAB)においては, 2つ の酵素反応が生じる(グルタミナーゼ反応およびトラ ンスアミダーゼ反応)。これら2つの活性中心は、長さ 30 Åものトンネルで結ばれており、アンモニア(アン モニウム・イオンまたはアンモニア分子)がその中を 輸送されると考えられている。本年度は、GatCAB・ Gln(基質)複合体のチャネル内部に, NH3 分子, NH<sup>4+</sup>分子を個別に置き、分子動力学(MD)計算およ び QM/MM 計算を行なって, アンモニアがどのような 仕組みで輸送されるかについて解析した。



図3 GatCAB の立体構造とふたつのチャネル (アンモニア輸送経路)

その結果,アンモニアはこれまで考えられていたトンネルを通過せず,本研究による分子動力学(MD)計算 によって新たに見出した,別の経路によるトンネルを通って輸送されることが明らかになった。しかもこのトンネ ルの場合には,従来予想されていたアンモニウム・イオン(NH<sub>4</sub>+)が輸送されるのではなく,アンモニア分子 (NH<sub>3</sub>)が通過することも明らかになった。こうした解析によって同時に得られたアンモニア分子輸送における自 由エネルギ曲面は,速度論的な生化学実験の結果とよく一致しており,こうして解析結果の検証も果たした。

【2】シトクーム酸化酵素による機能発現機構 (Kang, ボエロ, 舘野)

シトクロムc酸化酵素(CcO)は、ミトコンドリア内膜に存在する膜タンパク質であり、酸素分子を水分子に還元 することにより(酵素反応)、その自由エネルギ変化を用いて、膜間のプロトンの濃度勾配に逆らってプロトンを 輸送する(プロトン・ポンプ)。すなわち、タンパク質分子による生体内「ポンプ」である。

そのプロトンポンプ機構の解明を目 指し,酵素触媒反応およびプロトン輸送 に寄与するヘムa,ヘムa3の電子構造 を,HF/DFT ハイブリッド計算および QM/MM ハイブリッド計算(後述)により 解析した。その結果,ヘム単体および CcO 内部(ヘム・CcO 複合体)における 電子状態とでは,大きく異なる側面のあ ることが明らかになった。これはヘム周



シトクローム酸化酵素における電子およびプロトンの移動経路

囲のタンパク質構造が、 へムの機能を強く制御していることを示唆している。

また,2個の銅(Cu)原子が互いに結合し,さらにタンパク質内部のアミノ酸残基がそれらに配位した,極めて 特徴的な Cu<sub>A</sub>サイトの電子構造について,同様に HF/DFT ハイブリッド計算および QM/MM ハイブリッド計算 により詳細に解析した。その結果,近傍に存在する Mg<sup>2+</sup>イオンが,Cu<sub>A</sub>サイトの電子構造に対して影響を有す ることが明らかになった。これまでこの Mg<sup>2+</sup>イオンの機能はほとんど未知であったが,タンパク質機能に対する その役割を解明するための第一歩といえるものである。

#### 【3】QM/MM ハイブリッド分子動力学計算システムの開発 (萩原, 舘野)

現在,QM/MMハイブリッド分子動力学計算プログラムとしては,QM計算にCPMD(カー・パリネロ分子動力 学)を用いたものが広く使われており,当グループにおいても酵素触媒反応機構の解析への応用を進めてい る。CPMD は計算速度が速く,自由エネルギ曲面の解明に非常に有効である。他方で,当グループにおける 研究の対象には,Cu原子やFe原子などの遷移金属と,タンパク質やポルフィリンとの間の相互作用機構も含 まれ,それらの強相関電子系を含む系やプロトン移動などの機構をより高精度かつ詳細に解析するためには, 新たなQM/MM 計算プログラムの開発が必要であった。

そこで、より高精度な計算法を導入するために、QM 計算部分には「Hartree-Fock (HF)/density functional theory (DFT)ハイブリッド汎関数(B3LYP など)による全電子計算法」を採用し、QM/MM インタフェース・プログラムを開発することにより、高速(高度な並列計算)かつ高精度な QM/MM 計算を実現することに本年度は成功した。さらにこのプログラムには、我々が新たに開発した、ファンデルワールス相互作用の高精度かつ高速な計算法も、今後直に実装される予定である。これによって、生体高分子における機能構造の詳細な解析において、従来アプローチすることの不可能であった領域に対しても、非常に有効な解析ツールを提供することが可能となった。

この計算システムを用いて、巨大な RNA・タンパク質複合体やシトクローム酸化酵素などの系に対して既に 実証研究が進められ(前述)、その有効性が示されつつある。また、このプログラムを用いて、国内および国外 の他の大学・研究機関との共同研究が既に開始されている。それらの中には、金属結合タンパク質による生物 機能の発現機構(電子移動など)や、環境ホルモンなどの作用機序の解明など、興味深く重要な多くの対象が 含まれており、今後、多大な発展が期待されている。

#### 【4】タンパク質間相互作用予測システムの開発(橘田, 舘野)

生物機能の実体は、タンパク質や DNA、RNA などの生体高分子間の相互作用にある。例えば、あるタンパ ク質の機能は、他の生体機能高分子との相互作用によって発現されることがほとんどである。したがって、これ らの生体分子間の相互作用を、理論的に正確に予測するための技術は、生命の本質の解明に直結するツー ルである。こうしたことから、医薬品などを開発するためのターゲットとなるファクタを探すためにも、それらのシス テム開発は極めて重要である(医薬品は、体内でタンパク質や DNA などの生 体高分子に作用することによって初めて、その機能を発揮することから、ター

ゲットとなるタンパク質自体をまず見出すことが本質的である)。

これまでに当グループでは、タンパク質・DNA ドッキング計算法などの開 発を既に行い、その応用によってタンパク質・DNA 複合体の立体構造予測を 実現している。実際、それらの主要な成果(得られたタンパク質・DNA 複合体 構造)は、Protein Data Bank にも登録され、広く一般の利用に供しているとこ ろである。本年度は、これらの知見を元にして、タンパク質・タンパク質ドッキ ング予測計算システムの開発を進めた。

タンパク質分子同士の複合体構造の予測については、十分な精度と信頼 性を有するシステムはいまだ見当たらない。そこで、これまでとはまったく異な る手法により、タンパク質分子間ドッキング予測のための情報システムの開発 を試みた。一般に生体高分子間の分子認識においては、分子間に形成され る水素結合が重要な役割を果たす。本研究では、分子間の水素結合ネットワ ークを情報科学的な解析手法(クリーク探索法)によって予測することにより、 タンパク質分子間のドッキングシステムを構築した。



すなわち、水素結合が形成され得る分子間の原子群を 2D グラフによって 表現し,同時に存在し得る水素結合のセットを、クリーク探索アルゴリズムによって抽出する。得られた原子セットから,それらの原子間距離の拘束(水素結合距離)を満たすように,両タンパク質分子の立体的な位置関係 を最適化し、複合体構造の候補を得る。この計算段階では,まだ分子間の重なりの大きな配置も存在すること から,最後に複合体のエネルギを計算し評価する。ここで,クリーク探索アルゴリズムは完全 NP 問題であり,現 実の計算においてはその計算量の効率化が極めて重要となる。そこで本研究では、タンパク質分子間の相互 作用面の候補をあらかじめ離散的に同定し、計算領域を限定した上で先の一連の計算アルゴリズムを実行し た。その結果このシステムは、従来の予測システムをはるかに超える計算精度を有することが明らかになった。

現在, 複合体の立体構造が解明されていない系に対して応用しており, 例えば, シトクローム酸化酵素 (CcO)およびシトクローム c(Cyt c)複合体に対する予測は, そのひとつの例である。これによって, Cyt c から CcO へ, どのようなしくみで電子移動が生じるのか, 上記の QM/MM ハイブリッド計算システムを駆使した応用 へと, 今後さらに研究を発展させる予定にある。

#### 【5】 TARA プロジェクト (ボエロ, 重田, 舘野)

「電子ダイナミクスに基づく生体物質の構造と反応機構の解析」(研究代表者:舘野 賢)

当グループを中心としたメンバにより、上記の学内プロジェクトを推進している(3年のうちの2年目)。単に量 子力学理論・計算科学の表面的な応用に留まることなく、さらに情報科学的手法などの開発・融合(構造バイ オインフォマティクス)を進め、以って計算モデルの構築自体を理論的に行うことによって、構造生物学的により 精密な生体高分子の立体構造を構築する。これ自体が、生命科学の進展に重要な寄与をもたらすものと考え られる。そこでこの計算モデルに基づいて、高精度な分子動力学シミュレーションおよび QM/MM 分子動力学 シミュレーションを実現し、生体機能高分子システムの機能発現のしくみを、電子構造および分子構造のダイ ナミクスに基づいて解明することを目指す。

一般に,極めて複雑な立体構造を有する生体機能分子においては,実験データを鵜呑みにしたシミュレーションは,根本的な誤りを導く原因となる。これは,現実にこれまでの実例が示す事実である。実験によって得られたタンパク質構造に内在する誤りを,むしろ理論的に正して,それによって得られた精密な原子座標を計算に用いることにより QM/MM 分子動力学シミュレーションを実行する,この一連のワークフローこそが,次世代の生物物理学において極めて重要なストラテジの第一歩である。量子シミュレーションなどの計算技術が,単独で生命科学を革新することはあり得ない。その枠を超え,他領域に渡る複数の解析技術をひとつの研究対象に対して統合的に集中して適用すること,これが次代の新しい生物物理学を開拓する試金石となる。

以上が、本研究の基本コンセプトである。これに基づいて得られた成果は、これまでにない新規の生体反応 機構の発見などに既に結びつき、しかもその一般性が次第に明らかになりつつある。次世代の新しい生物物 理学分野を創出する基盤となる技術開発およびニューコンセプトの創出を目指した研究を、今後も推進する考 えである。

#### 【6】研究業績

#### (1)研究論文

- First Principles Molecular Dynamics Study of Catalytic Reactions of Biological Macromolecular Systems: Toward Analyses with QM/MM Hybrid Molecular Simulations, Boero, M., Park, J. M., Hagiwara, Y., and Tateno, M., *J. Phys. Cond. Mat.*, 19, 365217 (2007).
- First-Principles Molecular Dynamics Study of Proton Transfer Mechanism in Bovine Cytochrome c Oxidase, Kamiya, K., Boero, M., Tateno, M., Shiraishi, K., and Oshiyama, A., J. Phys. Cond. Mat., 19, 365220 (2007).
- 3. Possible mechanism of proton transfer through peptide groups in the H-pathway of the Bovine cytochrome c

oxidase, Kamiya, K., Boero, M., Tateno, M., Shiraishi, K., and Oshiyama, A., J. Am. Chem. Soc., 129, 9663 (2007).

- 4. Multiple proton-transfer reaction in DNA base pairs by coordination of Pt complex, T. Matsui, Y. Shigeta, K. Hirao, *Journal of Physical Chemistry B* 111, 1176 (2007).
- 5. Quantal cumulant dynamics for dissipative Systems, Y. Shigeta, AIP Conference Issue, 963, 1371 (2007).
- 6. Role of Nitrogen Atoms in Reduction of Electron Charge Traps in Hf-based High-k Dielectrics, N. Umezawa, K. Shiraishi, K. Torii, M. Boero, et al., *IEEE Electron Dev. Lett.*, 28, 363 (2007).
- Hydration properties of magnesium and calcium ions from constrained first principles molecular dynamics, T. Ikeda, M. Boero and K. Terakura, J. Chem. Phys., 127, 12248 (2007).
- 8. Excess electron in water at different thermodynamic conditions, M. Boero, J. Phys. Chem., A111, 12248 (2007).
- Structures and evolutionary origins of plant-specific transcription factor DNA binding domains, Yamasaki, K., Kigawa, T., Inoue, M., Watanabe, S., Tateno, M., et al., *Plant Physiol. and Biochem.*, 46, 394 (2008).
- Elderberry bark lectins evolved to recognize Neu5Aca2,6Gal/GalNAc sequence from a Gal/GalNAc binding lectin through the substitution of amino-acid residues critical for the binding to sialic acid, Kaku, H., Kaneko, H., Minamihara, N., Iwata, K., Jordan, E. T., Rojo, M. A., Minami-Ishii, N., Minami, E., Hisajima, S., and Shibuya, N., *J. Biochem*, 142, 393 (2007).
- Function of second glucan binding site including tyrosine 54 and 101 in Thermus aquaticusamylomaltase, Fujii, K., Minagawa, H., Terada, Y., Takaha, T., Kuriki, T., Shimada, J., and Kaneko, H., *J. Biosci. Bioeng.*, 103, 167 (2007).
- 12. Improving the thermal stability of lactate oxidase by directed evolution, Minagawa, H., Yoshida, Y., Kenmochi, N., Furuichi, M., Shimada, J., and Kaneko, H., *Cell. Mol. Life Sci.*, 64, 77 (2007).
- 13. X-ray structures of Aerococcus viridanslactate oxidase and its complex with d-lactate at pH 4.5 show ana-hydroxyacid oxidation mechanism, Furuichi, M., Suzuki, N., Dhakshnamoorhty, B., Minagawa, H., Yamagishi, R., Watanabe, Y., Goto, Y., Kaneko, H., Yoshida, Y., Yagi, H., Waga, I., Kumar, P. K. R., and

Mizuno, H., J Mol Biol., 378, 436 (2008).

- 14. 生体高分子の分子動力学計算, 舘野 賢, 計算シミュレーションと分析データ解析(日本表面科学 会編, 丸善出版), 21 (2007).
- 15. RNA による酵素反応の機構---量子力学に基づくシミュレーションが創る「量子構造生物学」への
   序, 舘野 賢, ボエロ マウロ, 化学と工業(日本化学会), 60, 587 (2007).
- 16. 第一原理計算が明らかにする生体反応の精巧な仕組み, 舘野 賢, ボエロ マウロ, 生物物理(日本生物物理学会), in press.

#### (2)学会発表

#### (A)招待講演

- Computational Analyses of reaction mechanisms of biological macromolecules combined with informatical techniques, Tateno, M., The 4th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Sciences (ACCMS-4), Seoul, 2007.9.10.
- Importance of fluctuation on molecular properties by molecular dynamics method, Shigeta, Y., International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering, Symposium 1, Greece, 2007.9.
- 3. Quantal Cumulant Dynamics for dissipative systems, Shigeta, Y., International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering, Symposium 1, Greece, 2007.9.
- Possible mechanism of proton transfer through peptide groups in the H-pathway of the bovine cytochrome c oxidase, Shiraishi, K., Kamiya, K., Boero, M., Tateno, M., and Oshiyama, A., Workshop on the proton-pumping mechanism of mitochondorial respiratory system, Hyogo, 2007.11.3.
- Introduction to molecular dynamics from classical force fields to first principles, Boero, M., Spring College on "Water in Physics, Chemistry and Biology", Trieste, 2007.4.10-21.
- 6. Reactive first principles molecular dynamics, Boero, M., Spring College on "Water in Physics, Chemistry and Biology", Trieste, 2007.4.10-21.
- 7. Water as a catalyst, Boero, M., Spring College on "Water in Physics, Chemistry and Biology", Trieste,

2007.4.10-21.

- Computer simulations from silicon to DNA: nanoscience in a virtual laboratory, Boero M., "From Micro to Nanotechnologies" International Workshop, Tokyo, 2007.5.17.
- ATP Synthase and Cytochrome c Oxidase: Reactive simulations for biochemical processes, Boero, M., 10<sup>th</sup> Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN10), Hiroshima 2007.10.29-31.
- Reactive simulations for biochemical processes: the example of cytochrome c oxidase, Boero, M., Materials-Biology Interface: A Simulation Approach, Strasbourg, 2008.3.7.
- 準量子キュミュラント分子動力学法,重田育照,若手研究会「理論分子科学のフロンティアを探る」,岡崎,2008.1.15-17.
- 大規模量子動力学計算のための基礎理論の開発:準量子キュミュラント分子動力学法,重田育照, スーパーコンピューターワークショップ「大規模計算と分子のダイナミクス」,岡崎, 2008.2.18-19,

#### (B)その他の学会発表

- 超分子における機能制御機構の量子構造生物学, 舘野賢、神谷克也、白石賢二、押山淳、ボエロ マウロ, 科学研究費補助金特定領域研究「生体超分子構造」第三回ワークショップ, 熱海, 2007.7.11.
- シトクローム酸化酵素の機能発現機構の理論的解析, 舘野賢、神谷克也、白石賢二、押山淳、ボ エロマウロ, 科学研究費補助金特定領域研究「生体超分子構造」公開シンポジウム, 千里, 2007.12.18.
- 3. ロイシル tRNA 合成酵素の触媒反応機構の動力学的解析, 萩原陽介, ボエロマウロ, 舘野賢, 第 7回蛋白質科学会年会, 仙台, 2007.5.24.
- 信報科学および計算科学的手法を組み合わせたタンパク質間分子間ドッキング計算手法の開発, 橘田和志, 舘野賢, 第7回蛋白質科学会年会, 仙台, 2007.5.24.
- 5. GatCAB におけるアンモニア輸送機構の計算科学的解析, 畔柳成秀, 仲田まゆみ, 萩原陽介, 舘

野賢, 第7回蛋白質科学会年会, 仙台, 2007.5.24.

- 6. tRNA 依存性アミド基転移酵素におけるアンモニア分子輸送機構の動力学的解析, 畔柳成秀, 仲田まゆみ, 萩原陽介, 舘野賢, 第7回蛋白質科学会年会, 仙台, 2007.5.24.
- ロイシル tRNA 合成酵素の触媒反応機構の計算科学的解析, 萩原陽介, ボエロマウロ, 深井周也, 濡木理, 舘野賢, 科学研究費補助金特定領域研究「生体超分子構造」第三回ワークショップ, 熱 海, 2007.7.11.
- 生体超分子・機能発現機構解析のための QM/MM 分子動力学計算システムの開発,重田育照,萩 原陽介,姜 志始,舘野賢,科学研究費補助金特定領域研究「生体超分子構造」第三回ワークシ ョップ,熱海,2007.7.11.
- 電子相関を露わに導入した QM/MM レプリカ・分子動力学計算法の開発, 萩原陽介, 重田育照, 舘野賢, 次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム 2007, 東京, 2007.10.3.
- 10. 生体分子機能発現機構解析の為の QM/MM 分子動力学計算プログラムの開発, 重田育照, 萩原陽介, 舘野賢, 次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム 2007, 東京, 2007.10.3.
- 11. キュミュラント表示による量子分布関数,重田育照,第1回分子科学会,仙台,2007.9.17.
- 12. 核輸送因子と転写因子の組み合わせに関する構造生物学的考察,山岸良介、安原徳子、米田悦啓、 金子寛生,第30回日本分子生物学会年会,東京,2007.12.
- Highly-conserved tryptophan residue in the fourth transmembrane domain of A1 adenosine receptor is critical for ligand binding activity, but not for dimerization, Suzuki, T., Namba, K., Yamagishi, R., Kaneko, H., Nakata, H., 第 80 回日本生化学会大会, 東京, 2007.12.

# VIII-1.磁性物性グループ

准教授 小野田 雅 重

大学院生 (7名)

### 研究概要

X 線四軸回折・結晶構造解析,核磁気共鳴,電子スピン共鳴,磁気・電気・熱測定等の多角的手法 による,3d 遷移金属酸化物を対象とした量子スピン系(幾何学的競合系),相関電子系(金属 – 絶 縁体転移系),複合結晶系,機能性物質系および新型超伝導系の研究.

この報告書では,本グループによる「バナジウム酸化物系」,コバルト酸化物系」等の研究状況を 簡潔に整理する<sup>1</sup>.

# 【1】バナジウム酸化物系

近年,本グループがバナジウム酸化物系において対象とした物質群を図1(a)に示す.

### (1) 量子スピン系

フラストレーションのある系は量子効果の最も強く現れる系として興味深い.たとえば1次元交換結合  $J_1 - J_2$  モデルでは,古典的にはスパイラル秩序が現れるのに対して, $S = \frac{1}{2}$ 系では2量体秩序が現れる.現在,最も活発に研究されている格子はスピネル格子と三角格子である.

a) スピネル格子  $MV_2O_4$ 

- Li<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>V<sub>2</sub>O<sub>4</sub> NMR および高分解能 NMR による Anderson 型金属 絶縁体転移機構(特に絶縁相)の微視的解析.
- Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>V<sub>2</sub>O<sub>4</sub> 断熱比熱測定に基づく,交換歪型 Jahn-Teller 秩序相,反強磁性秩序相(軌 道秩序効果との競合)およびスピングラス相の組成依存性の検討.

b) 三角格子  $M_x VO_2$ 

- Li<sub>x</sub>VO<sub>2</sub> NMR および高分解能 NMR による物性の微視的解析.常磁性相における擬 3 量体 模型の構築およびスピン 1 重項 3 量体転移に関する構造解析.
- Na<sub>x</sub>VO<sub>2</sub> − NaVO<sub>2</sub>の超常磁性転移とNa<sub>0.7</sub>VO<sub>2</sub>のスピン <sup>1</sup>/<sub>2</sub>-3 量体転移の確立.

#### c) 他の物質群

- SrV<sub>5</sub>O<sub>11</sub> 新規低次元導体の結晶構造解析.
- MV<sub>2</sub>O<sub>5</sub> − V<sup>4+</sup> と V<sup>5+</sup> からなる分子軌道を持つトレリス格子 NaV<sub>2</sub>O<sub>5</sub> の伝導機構の 1 次元ハ バードモデルに基づく考察 .

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>バナジウム酸化物系に関する 2006 年時点での過去約 5 年間の成果の概略に関しては,次の文献を参照のこと:小野田雅 重,バナジウム酸化物系の科学,セラミックス 41(3),167-172 (2006).



図 1: 近年,本グループが研究対象とした(a)バナジウムおよび(b)コバルト酸化物系の物質群.

(2) 金属 - 絶縁体転移系

上記  $Li_x M_{1-x} V_2 O_4$  系は組成に応じて Anderson 型金属 – 絶縁体転移を示す.機能性物質の有力 候補と考えられる複合結晶  $Cu_x V_4 O_{11}$  は組成および温度に応じて金属 – 絶縁体転移を示す.これら の他に代表的ペロブスカイト系,  $MV_{10}O_{15}$ ,  $Li_x V_6 O_{13}$ 等が現在の研究対象である.

(3)機能性物質系·複合結晶系

機能性物質系として,イオンバッテリー,熱電変換等で代表されるエネルギー貯蔵・変換系を扱っている.前者の実用的目標は充放電のサイクル特性向上と高容量化であり,後者は熱電性能指数の向上である.イオンバッテリー放電試料は,ほぼ V<sup>4+</sup>のみからなる高密度電子系に対応し,量子スピン系あるいは相関電子系における物質探索の観点からも興味深い.しかしながら,これまで充放電過程における物質の基礎的性質を多角的に追究した例はほとんどなく,多くの検討すべき課題が存在する.

前述の 2 つの機能性を備えた物質系として  $Cu_xV_4O_{11}$  が挙げられる.本物質は, 2 種類の Cu 鎖と  $V_4O_{11}$  格子からなり,その中の 1 つの Cu 鎖と  $CuV_4O_{11}$  結晶の基本周期が異なる複合結晶である. 複合結晶はそれほど珍しい系ではないが, Cu, V 両イオンが不対電子を持つことが特徴である.

•  $(Cu_{1-z}M_z)_xV_4O_{11} - x = 2.2$ に固定し, M = Co, Ni, Zn, Agの置換合成を進めている. M = Niにおいて良好な熱電性能指数( $P = S^2/\rho \approx 3 \times 10^{-4}$  W m<sup>-1</sup> K<sup>-2</sup>)が得られた. 一方, Ag および Zn の非磁性イオン置換に対しては,電気伝導度の減少とともに熱電能が減少するという特異な振る舞いが見られた. すなわち, Cu 鎖への異種スピン導入が,熱電素材構築の上で重要であることが明らかになった.

(4) 新物質系

 Na<sub>0.7</sub>VO<sub>2</sub> — Na<sub>x</sub>VO<sub>2</sub> 系は LiVO<sub>2</sub> と同様の構造を持つと予想されていたが,原子パラメー ター等は決定されていなかった.NaVO<sub>2</sub>の室温構造は LiVO<sub>2</sub>の常磁性相構造と同様であるが, Na<sub>0.7</sub>VO<sub>2</sub> はそれとは異なる新物質であることがわかった(1.1.2(b)).

# 【2】コバルト酸化物系

三角格子型  $Li_xCoO_2$  をはじめとするコバルト酸化物系は特にイオンバッテリーの観点から精力的 に研究されている.また類似の構造を持つ  $Na_{0.3}CoO_2 \cdot 1.3H_2O$  における超伝導の発見を契機として,  $Na_xCoO_2$  も含め基礎研究も活発に行われるようになった. $Na_xCoO_2$  は熱電素材としても注目され ている.図 1(b) は,近年,本グループがコバルト酸化物系において対象とした物質群を表す.

### (1) 量子スピン系

- スピネル格子  $Co(Co_{1-x}Al_x)_2O_4$   $Co_3O_4$  は 40 K で反強磁性秩序を示すが、 $CoAl_2O_4$ の磁気秩序状態に関しては未解決である. $0 \le x \le 1$ の全領域について、それらの基底状態を考察している.
- 三角格子 HCoO<sub>2</sub> 本物質は MVO<sub>2</sub> と類似の構造をとるとされるが,構造および物性に関す る詳しい研究はほとんどない.X線粉末回折から積層不整に起因した構造の乱れを持つことが 示唆され,基礎物性が評価された.

(2) 相関電子系

- $H_{0.3}CoO_2 Na_xCoO_2$ のソフト化学処理により新物質  $H_xCoO_2$  ( $x \approx 0.3$ )を得たので,その 結晶構造と物性評価を行った. $CoO_2$ の積層パターンは P2 型で  $\gamma$ 相  $Na_xCoO_2$  と同じである が, $CoO_2$ 層間の酸素プリズム位置に Na は存在せず,代わりに直線状 O-H-O が存在する. このために層間距離は  $Na_xCoO_2$  (x = 0.58の非変調構造)と比較して極端に短い.電気的, 磁気的性質から,本物質は弱相関金属として位置づけられる.
- CoO<sub>2</sub> (P3) LiCoO<sub>2</sub> のソフト化学処理により CoO<sub>2</sub> を得たので,その結晶構造と物性評価を 行った.CoO<sub>2</sub> の積層パターンは P3型で,CoO<sub>2</sub> 層間方向に関してシフトベクトル  $s_1 = \frac{2}{3}a + \frac{1}{3}b$ および  $s_2 = \frac{1}{3}a + \frac{2}{3}b$ を伴う積層不整がある.電気的,磁気的性質から,本物質は H<sub>0.3</sub>CoO<sub>2</sub> と同様に弱相関金属と考えられる.

(3) イオンバッテリー系

Li<sub>x</sub>CoO<sub>2</sub> — 代表的イオンバッテリーである.LiCoO<sub>2</sub>のLi脱ドープ過程における結晶構造および電子構造の変化は,実験と理論両面から広範囲に研究されている.電気化学法およびソフト化学法によりLi脱ドープ試料(CoO<sub>2-δ</sub>を含む)を作成し,それらの構造と物性評価を行っている.

(4) 新規超伝導系

 Na<sub>0.3</sub>CoO<sub>2</sub>·1.3H<sub>2</sub>O — コバルト系酸化物超伝導体の電子構造や超伝導の性質は,試料の化学 組成に大きく影響される.良質の粉末試料を磁場中で配向させ,結晶 c 軸を揃えることにより, *H* || c および *H* ⊥ c に対して NMR および NQR を詳細に行っている.

- (5) 新物質系
  - TeCo<sub>3</sub>O<sub>6</sub> TeCl<sub>4</sub> を輸送剤とした化学輸送法により合成された Te-Co-O の結晶構造を精密 に決定し、その化学組成が TeCo<sub>3</sub>O<sub>6</sub> であることを明らかにした.本構造はこれまでに報告さ れていない新しい型であり、基礎物性評価を進めている.
  - $H_{0.3}CoO_2$  既出 ( 2.2(b) ) .

# 【3】他の3d遷移金属酸化物系

バナジウムおよびコバルト以外の 3d 遷移金属酸化物系として,現在 LiNiO<sub>2</sub> および LiCrO<sub>2</sub> の Li 欠損系に注目している.いずれもソフト化学的手法により合成を進めているが,イオンバッテリー系 合成時に行った電気化学的合成も並行して進める予定である.

# (論 文)

1. Masashige Onoda and Tomohiro Ikeda, Modulated and unmodulated structures, and the transport mechanisms in the triangular lattice system  $Na_x CoO_2$  with  $x \simeq 0.48$ , 0.58 and 0.65

Journal of Physics: Condensed Matter 19, 186213 (14pp) (2007)

- 2. Masashige Onoda and Yuji Kikuchi, Weakly correlated triangular lattice metal  $H_x CoO_2$ Journal of Physics: Condensed Matter **19**, 346206 (8pp) (2007)
- 3. Masashige Onoda, Geometrically frustrated triangular lattice system  $Na_x VO_2$ : superparamagnetism in x = 1 and trimerization in  $x \approx 0.7$ Journal of Physics: Condensed Matter **20**, 145205 (8pp) (2008)
- 4. Masashige Onoda and Asami Sugawara, Stacking faults and metallic properties of triangular lattice  $CoO_2$  with a three-layer structure

Journal of Physics: Condensed Matter 20, 175207 (6pp) (2008)

# 〈学位論文〉

 小野田航,三角格子系 Na<sub>0.7</sub>VO<sub>2</sub> の三量体転移 数理物質科学研究科修士(物理学)論文,2008 年 3 月

 $M_x TO_2$ (M:アルカリ金属,T:遷移金属)の化学式で表される二次元三角格子系は,基礎科学的な観点からは幾何学的フラストレーション系として,応用科学的には二次電池正極活物質や熱電素材として注目されている.本研究で対象とする $Na_x VO_2$ 系は大気と敏感に反応するため, $Li_x VO_2$ でスピン1重項3量体転移という興味深い現象が報告されているにもかかわらず,特に非化学量論的組成 $Na_{0.7} VO_2$ の物性に関する報告はほとんどない.本研究は, $Na_{0.7} VO_2$ の構造および磁気・電気的性質を解明し,二次元三角格子系の新しい物理を探求することを目的として行われた.本物質の結晶構造は $NaVO_2$ とは異なり,単位胞に2枚の $VO_2$ 層が存在し,Naはプリズム型配位を持つP2型であることが明らかになった.また300~370Kの領域において1次の磁気転移を示し,それはスピン  $\frac{1}{2}$ の3量体形成に帰着されることがわかった.

 前小屋忠暁, 複合結晶系 Cu<sub>x</sub>V<sub>4</sub>O<sub>11</sub>の熱電性能 数理物質科学研究科修士(物理学)論文, 2008 年 3 月

 $Cu_xV_4O_{11}$ は、 $CuV_4O_{11}$ (部分格子1)とCu鎖(部分格子2)からなる複合結晶である.基礎科学的には、複合結晶性、低次元伝導性、金属絶縁体転移あるいは電荷移動型相転移等の問題を含み、応用的面では高容量 Li イオンバッテリー正極活物質あるいは新奇熱電素材として注目されている.熱電性能因子は $10^{-4}$  W m<sup>-1</sup> K<sup>-2</sup> 程度で、最近研究されている Co 酸化物よりも若干小さい値であるが、元素置換による電気抵抗率の改善の余地があることや、フォノン散乱の増強などを考慮すれば、熱電素材の有力候補と考えてよい.本研究は、Cu - Co元素置換による熱電性能の改善を第一の目的として行った.数パーセント置換した単結晶における電気抵抗率および熱電能の結果から、室温における熱電性能因子の改善は見られなかったが、低温における金属絶縁体転移が著しく抑制されることが明らかになった.

 3. 水口佳一,擬一次元系 NaV<sub>2</sub>O<sub>5</sub>の伝導と相関効果 数理物質科学研究科修士(物理学)論文,2008年3月

論文の前半ではトレリス格子を持つ擬 1 次元系 NaV<sub>2</sub>O<sub>5</sub> を扱った.本物質の常磁性相は 1 次元 的であり,そこではトレリス格子ラング上で V-O-V 型分子軌道が形成されている.34 K で スピン 1 重項転移および電荷秩序転移を示すが,その起源についてはまだ解明されていない. 本研究は,NaV<sub>2</sub>O<sub>5</sub>の Na 欠損系および Na-Ca 置換系を通じて,伝導の電子数依存性を追究 することにより,伝導機構と電子相関効果を解明することを目的として行われた.電気抵抗率 の振る舞いは,元素置換の乱雑効果として 1 次元 VRH モデルで説明できた.一方,熱電能の 結果は V-O-V 分子軌道に強相関効果を取り入れることで説明できることがわかった.論文 の後半ではスピネル系  $Cd_{1-x}Zn_xV_2O_4$  を対象とした.フラストレーション系の典型的物質に おける構造転移,反強磁性転移およびスピングラス転移に関する熱的性質を評価した.

# 〈講 演〉

- 小野田雅重,バナジウムおよびコバルト酸化物系の科学 青山学院大学理工学部「物理・数理コロキウム」・青山学院大学理工学部相模原キャンパス・ 2007 年 6 月 8 日
- 2. 池田知廣,小野田雅重, MV<sub>10</sub>O<sub>15</sub> (M=Sr,Ba)の構造と物性
   日本物理学会第 62 回年次大会・北海道大学札幌キャンパス・2007 年 9 月 21 日・21aPS-112
- 3. 前小屋忠暁,池田知廣,後藤育郎,小野田雅重,Cu<sub>x</sub>V<sub>4</sub>O<sub>11</sub>の元素置換効果 日本物理学会第 62 回年次大会・北海道大学札幌キャンパス・2007 年 9 月 21 日・21aPS-113
- 4. 高尾健二郎,小野田雅重,三角格子系およびスピネル格子系バナデートの磁性 IV 日本物理学会第 62 回年次大会・北海道大学札幌キャンパス・2007 年 9 月 22 日・22aPS-42
- 5. 小野田雅重,菊池勇二,菅原麻美,新しい三角格子金属 H<sub>x</sub>CoO<sub>2</sub> 日本物理学会第 62 回年次大会・北海道大学札幌キャンパス・2007 年 9 月 23 日・23pWH-15
- 6. 小野田雅重,バナジウムおよびコバルト酸化物系における幾何学的フラストレーション効果
   第1回トピカルミーティング「フラストレート新規物質」・京大会館・2008年1月11日
- 7. Yoshikazu Mizuguchi, Masashige Onoda , Specific heat measurements of the geometrically frustrated system  $Cd_{1-x}Zn_xV_2O_4$

First International Symposium on Interdisciplinary Materials Science・International Congress Center (Epochal Tsukuba)  $\cdot$  2008 年 3 月 13 日

8. Kenjiro Takao, Masashige Onoda , NMR study of the geometrically frustrated system  ${\rm Li}_x{\rm VO}_2$  and  ${\rm Li}_y{\rm Zn}_{1-y}{\rm V}_2{\rm O}_4$ 

First International Symposium on Interdisciplinary Materials Science・International Congress Center (Epochal Tsukuba)  $\cdot$  2008 年 3 月 13 日

9. Ikuo Goto, Masashige Onoda , Substitution effects of the multifunctional composite crystal  ${\rm Cu}_x{\rm V}_4{\rm O}_{11}$ 

First International Symposium on Interdisciplinary Materials Science・International Congress Center (Epochal Tsukuba) • 2008 年 3 月 13 日

- 10. 後藤育郎,前小屋忠暁,小野田雅重,機能性複合結晶 Cu<sub>x</sub>V<sub>4</sub>O<sub>11</sub>の元素置換効果 日本物理学会第 63 回年次大会・近畿大学本部キャンパス・2008 年 3 月 24 日・24aPS-22
- 11. 菅原麻美,小野田雅重,三角格子系 CoO<sub>2</sub>(P3)の積層不整と電子状態 日本物理学会第 63 回年次大会・近畿大学本部キャンパス・2008 年 3 月 24 日・24pYB-8
- 12. 高尾健二郎,小野田雅重,Li<sub>x</sub>VO<sub>2</sub> およびLi<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>V<sub>2</sub>O<sub>4</sub>のNMR
   日本物理学会第 63 回年次大会・近畿大学本部キャンパス・2008 年 3 月 25 日・25pWK-13
- 13. 小野田雅重,高尾健二郎,小野田航,三角格子系 Na<sub>x</sub>VO<sub>2</sub>の超常磁性転移と三量体転移 日本物理学会第 63 回年次大会・近畿大学本部キャンパス・2008 年 3 月 25 日・25pWK-14

# 〈特記事項〉

1. 小野田雅重, Selection for Marquis Who's Who in the World, 遷移金属酸化物系の研究」の 業績に対して (2008) VIII - 2. 半導体物性グループ
教授 舛本 泰章
准教授 野村晋太郎
講師 池沢 道男
助教 冨本 慎一
助教 阪東 一毅
日本学術振興会外国人特別研究員 Bipul Pal
大学院生 9(名)

【1】半導体におけるフェムト秒、ピコ秒時間分解分光(冨本慎一、舛本泰章)

<ディスク状 InAs/InP 量子ドットにおける励起子輻射再結合過程の研究>

(冨本慎一、黒川篤、佐久間芳樹 <sup>A</sup>、舛 本泰章、 <sup>A</sup>物質・材料研究機構)[論文

7]

ディスク状量子ドットにおいて励起 子のディスク面内方向の閉じ込めが輻 射再結合寿命にどのような影響を与え ているかを調べるため、InAs/InP系のデ ィスク状量子ドットと量子井戸の2種類 の試料について、フォトルミネッセンス (PL)寿命の温度依存性の測定を行い比較 した。これらの試料のPLスペクトルを 図1に示す。平均積層厚2MLの量子井



図1:(a) InAs/InP 量子井戸及び(b) ディスク状量子ドットのPL スペクトル。積分強度の温度依存性を各パネルの右上に示す。

戸試料が1つのピークのみを示すのに対して(図1(a))、ディスク状量子ドット試料は分裂した複数のピ

ーク(f3~f9)を示している(同図(b))。これは1原子層の厚 みを単位とする離散的な量子ドットの高さ分布のためであり、 f3~f9のピークはそれぞれ3~9 MLの高さに対応している。 図2はこれらの試料についてアップ・コンバージョン法を用 いてPLを時間分解測定した結果である。この図の曲線のよう に1成分の指数関数的な減衰を仮定してPL寿命を求め、それ を温度に対して調べ、PL時間積分強度の温度依存性(図1) を考慮して、輻射再結合寿命を求めることができる。量子井 戸中の励起子の輻射再結合寿命は強く温度に依存し、最低温 部を除いて温度に比例するように増大しているが、これは GaAs/AlGaAs 系量子井戸などにおいて示されている結果と同 様である。これに比べ、ディスク状量子ドットでは、温度依 存性がかなり抑えられていることが分かった。これは量子ド ットに固有の離散的なエネルギースペクトルを反映したもの と考えられる。



図 2: 時間分解 PL の測定結果。(a) InAs/InP 量子井戸、 (c)(d) ディスク状量子ドットの f5、f6 ピークにおける温 度依存性。(b) はf5 ピークにおける励起密度依存性。

【2】半導体量子ドットのスピン光物性(舛本泰章、池沢道男) <InP量子ドットにおける動的核スピン分極>

(B.Pal、S. Verbin<sup>A</sup>、I. Ignatiev<sup>A</sup>、舛本泰章 <sup>A</sup>St. Petersburg State Univ.) [論文1]

動的核スピン分極が InP 量子ドットにおいて起こってい ることを 2 個の電子と 1 個の正孔からなるトリオンの負の 円偏光発光を縦磁場下で観測することで確認できる。動的 核スピン分極がおこると、電子スピンが感じる有効外部磁 場  $B_{eff}$ は外部磁場 Bと有効核磁場  $B_N$ の和として  $B_{eff} = B + B_N$ と表わされる。右(左)円偏光励起下でトリオンの発光 の円偏光度を外部磁場 Bの関数として測定すると、図 3 の 様に $\pm B_N$ (励起強度 40 mW のとき~4.5 mT)で負の円偏光 度が鋭く減少する半値半幅 15 mT の Lorentz 型の磁場依存性 が得られる。右(左)円偏光で負の円偏光度が最小になる



外部磁場が-(+)にシフトすることから、有効核磁場  $B_N$ を相殺する外部磁場のとき、すなわち有効外部磁場が 0 のとき、負の円偏光度が最小になり、核スピンのゆらぎによる核磁場が 15mT であるとして 図 3 は理解できる。図 3 の挿入図に示すように、光照射強度の増加に比例して有効核磁場  $B_N$ は線形に増加し、比較的励起強度の強い 50mW でも、 $B_N = 6mT$  であることは、InP 量子ドットにおける超微細相互作用は比較的弱いことを示している。

<チャージチューナブル InP 量子ドット中の電子スピンの緩和時間>

(B. Pal、舛本泰章、池沢道男)[論文3]

チャージチューナブル InP 量子ドットは、電気バイアスを-0.6V にすると中性、-0.1V にすると 1 電子 がドープされ、+0.5V にすると 2 電子がドープされる。準共鳴励起で、Hanle 効果測定を行うと、1 電子 ドープされた時のみ円偏光レーザー励起に対し負の円偏光度をゼロ磁場で示す発光を示す(図 4)。Hanle 曲線は半値半幅 1.54T、128mT、4.6mT の 3 ローレンツ成分の和で構成される。4.6mT の幅の最も鋭いロ ーレンツ成分は負で、トリオン量子ビートが観測される同じバイアスで現れるから、ドープされた 1 電 子のスピン緩和によるものと同定できる。4.6mT から  $gT_2^* = 2.5$  ns が導かれ、InP 量子ドットの電子の g-因子は 1.5 なのでドープ電子のスピン緩和時間は  $T_2^* = 1.7$  ns と導かれる。この値は、超微細構造相互作用 を通して、核スピン揺らぎが引き起こす電子スピン緩和として説明される。実際、核スピン揺らぎの有 効磁場を円偏光度の縦磁場依存性から求めた値 15mT が引き起こす電子スピン緩和として比較的良い一

致を示した。128mT の幅のローレンツ成分は、1 電子ドー プに呼応して負になるので光励起電子・正孔対のスピンフ リップによると同定されスピン緩和時間は  $T_2^* = 51$  ps と導 かれる。最も広い 1.54T の幅のローレンツ成分は、1 粒子正 孔のスピン緩和と同定されスピン緩和時間は  $T_2^* = 29$  ps と 導かれる。ドットの発光ピーク波長における Hanle 効果は ドープ電子数を変えると劇的に変化する。2 電子ドープの時 には、Hanle 曲線は正の 2 成分ローレンツ関数の和から構成 される。この場合、最も低い電子の量子状態は終始、上向 きスピン、下向きスピンの 2 電子で占められているので、 正孔のスピン緩和を反映している。中性の時は、 Hanle 曲 線は 3 成分ローレンツ関数 (2 つの正と 1 つの負)の和から 構成される。



<チャージチューナブルInP 量子ドットにおけるスピン緩和と円偏光フォトルミネッセンス> (鈴木宰、利行 健、池沢道男、舛本泰章)[論文11]

直線偏光による準共鳴励起の下、量子ドット中の励起状態にアップ・ダウンスピンを等量生成し基底

状態からの発光の円偏光度を検出することで量子ドットでの励起子の共鳴スピン偏極と微細構造準位を 明らかにした。チャージチューナブルInP量子ドットでは、電圧を印加することでドット内の電子の数を 操作する事ができる。量子ドット中に電子が1つドープされている時には磁場の増加とともに円偏光度が 単調に変化しており、これは残留電子のゼーマン準位間の熱平衡にともなうスピン偏極と荷電励起子形 成時の正孔のスピン偏極、活性な荷電励起子準位間の熱平衡化により理解できるであろう。また、量子 ドット中に電子が2つドープされている時にも磁場の向きに合わせて円偏光度が単調に変化しており、こ れは光励起された電子と正孔対がそれぞれのゼーマン準位間で相関をもちながら熱平衡化することによ



図 5: 元元ハンクトル(a)、励起于理団の秘磁場依得性(b) と、直線偏光励起下の発光の円偏光度の磁場依存性(c)。

を1.02 と求められる。InP 量子ドット中の励起子準位の計算結果を図5(b)に示す。これは1.5T、2.5Tの磁場で準位が交差しており実験結果を支持する。

【3】単一量子ドットの分光研究(池沢道男、阪東一毅、舛本泰章)

<GaP:N 等電子トラップからの単光子発生>

(池沢道男、佐久間芳樹<sup>A</sup>、舛本泰章、<sup>A</sup>物質・材料研究機構)[論文6]

Ⅲ-V族半導体にドープした光学活性な等電子トラップ不純物を究極の量子ドットと見なして、1 個の 不純物原子あるいは不純物原子ペアに束縛された励起子に着目し、これら単一の不純物準位からの自然 放出光を単一光子発生に利用する可能性を明らかにするため、GaP 結晶中にドープされた窒素原子(N) による等電子トラップに着目した研究を行った。

物質・材料研究機構の佐久間芳樹博士により、窒素原子を 1~2 原子層だけドープした GaP:N 試料を有機金属気相成長法

(MOCVD)で作製された。孤立窒素原子ではなく、近接する 窒素原子が2つペアになったNNと呼ばれる束縛準位を用い ることにより、約3桁ほどトラップの面内数密度を下げる事 が出来るので、通常の顕微分光の分解能の範囲に含まれるト ラップの数は数個程度に抑えられ、単一トラップの検出も可 能になる。例えばNN3やNN4は1つの窒素原子が原点(000)に 存在するとした時に、もう一つの窒素原子がそれぞれ(211)と (220)の位置にあるときに形成される束縛準位である。



不純物の面内分布の様子を得るために、顕微鏡下の試料の 発光イメージを分光器スリットに結像する方法で得られた結

図 6:希薄な GaP:N 試料の発光スペクトル(a)と試料上の一次元的な位置と発光スペクトルの関係(b)を示す。

果を図 6 に示す。(b)は分光器に取り付けられた 2 次元検出器上の光強度分布であり、縦方向が試料上の

位置に直接対応する。横方向は分光器で分光された波長である。強度分布には NN<sub>3</sub>および NN<sub>4</sub>の波長に 輝点が何点か観測されている。これら1つ1つの点が単一の NN<sub>3</sub>および NN<sub>4</sub>からの発光である。孤立窒 素原子によるピーク A は、同図中の青線のようになり、こちらには全く構造が観測されない。これは、 孤立 N 原子は NN ペアの数よりも数千倍多く均一に存在している事を考えれば理解できる。

これらの輝点が単一のトラップセンターによるものか どうかは、Hanbury-Brown Twiss 型の強度相関測定を行う ことによって確認した。図7は同試料に対してピンホー ルを用いて数ミクロンサイズの領域からの発光を選択し、 狭帯域フィルターで NN4に相当する波長だけを切り出し て得られた二次の相関関数である。遅延時間0nsの位置 に明瞭なディップが観測されている。バックグラウンド 成分を含んでいるためゼロまでは落ちていないものの、 単一トラップセンターからの単一光子の発生を示す結果 と言える。これまでIII-V族半導体中の等電子トラップに よる単一光子発生は報告が無く、本研究により初めて実 現された。



図 7: GaP:N 中の単一 NN4 トラップセンターについて初 めて観測されたアンチバンチング。

<半導体単一量子ドットにおける温度上昇にともなう励起子線幅先鋭化>

#### (阪東一毅, 舛本泰章) [論文13]

半導体量子ドット中の励起子はコヒーレンスを利用した量子ゲート操作など量子情報科学への応用が 期待されている。しかし単一ドットレベルでの位相緩和時間の測定は困難が多い。しかし近年、フーリ エ分光法を単一量子ドットに適用することにより高感度・高分解能に励起子の位相緩和計測が可能であ ることが示され、国内外いくつかのグループで報告されるようになった。GaInPマトリックス中に成長さ

れた InP 量子ドットでは構造非対称性及 びトラップキャリアなどの周囲の環境 からの影響が個々の量子ドットによっ て異なり、個々の光学的特徴が現れてく る。このフーリエ分光法をこのような単 ー InP 量子ドットに適用し、その周囲環 境が引き起こすドットの位相緩和過程 を調べた。その結果、低温下において温 度上昇とともに励起子線幅が先鋭化す る、つまりコヒーレンスが回復するとい う極めて興味深い結果が見出された。

図 8(a)は発光の自己相関強度であり、 位相緩和を直接反映したものである。 20Kまでは温度上昇とともに位相緩和



得られたスペクトルの半値全幅。

が抑制されていくのが明確に確認できる。フォノンによる位相緩和と環境揺らぎを仮定し、指数関数と ガウス関数の積でフィッティングを行なった。図 8(b)は、そのフィッティングパラメータから求めた半値 全幅を、温度に対してプロットしたものである。フーリエ変換によって指数減衰成分はローレンツ型、 ガウス減衰成分はガウス型、二つの積はフォークト関数型スペクトルになる。図 8(b)からローレンツ型成 分は通常のフォノンによる位相緩和の温度依存性を示すが、ガウス型成分は温度によって線幅の減少を 引き起こすことがわかる。モンテカルロシミュレーションによって、ドット周囲のキャリアがもたらす ランダムな揺らぎの温度依存性がガウス線幅減少の原因であることが説明できた。この結果、温度上昇 にともなう線幅の先鋭化が明瞭に説明できることがわかり、低温下で環境揺らぎが位相緩和に極めて重 要な寄与をもたらすことがわかった。

<CdTe/ZnTe 量子井戸、量子ドットにおけるスピンダイナミクスの研究>

(冨本慎一、野澤伸介、舛本泰章、寺井慶和<sup>A</sup>、黒田眞司<sup>A</sup>、瀧田宏樹<sup>A</sup>、<sup>A</sup>物性・分子工学専攻) 半導体量子構造における電子のg因子やスピン緩和は、閉じ込めの次元や形状に依存し、また希薄に 磁性イオンをドープすることによりsp-d交換相互作用を通じて積極的に操作することも可能である。本 研究では、分子線ビームエピタキシー法で作成した CdTe/ZnTe 量子ドット及び単一量子井戸において、 閉じ込め電子のスピンダイナミクスを時間分解 Kerr 回転法により観察した。この方法は、円偏光のポン プ光が生成する電子スピンの光軸方向成分の時間発展を、直線偏光のプローブ光の偏光方向回転(Kerr 回転)によって調べるものである。図9は CdTe/ZnTe 量子ドットにおける実験結果である。光軸に対し 垂直に印加した磁場の周りで電子スピンが歳差運動を行うため、Kerr 回転角の時間変化に減衰振動が明 瞭に現れている。この振動の周波数の磁場依存性(図10)から、閉じ込め電子のg因子はg=0.32-0.34 と 決定された。また、振動の減衰からスピン緩和時間は約50 ps と見積もられた。同様の測定を井戸幅1 ML 及び2 ML の2種類の単一量子井戸に対しても行い、g因子をそれぞれ/g=0.42-0.43、/g=0.44 と決定した。 これらの数値はバルク CdTe の電子のg因子 (g=-1.6)よりもバルク ZnTe の電子のg因子 (g=-0.4)に 近く、閉じ込め電子の存在確率の大部分が ZnTe 障壁層に浸み出していることを示唆していると考えられ る。同様の実験を、Mn イオンを希薄にドープした Cd<sub>1×</sub>Mn<sub>x</sub>Te/ZnTe 量子井戸、量子ドットに対しても進 めている。



図 9: CdTe/ZnTe 量子ドットにおける時間分解 Kerr 回転の測定結果。各パネルに磁場を表示している。



図 10: スピン歳差運動周波数の磁場依存性。(観測波 長 564 及び 569 nm)。

#### 【4】新しいナノ構造の光物性

<InP/InAs/InP コアマルチシェル型ナノワイヤ光物性>

(後藤健、B. Pal、舛本泰章、P. Mohan<sup>A</sup>、本久順一<sup>A</sup>,福井孝志<sup>A</sup>、 <sup>A</sup>北大量子集積エレクトロニクス研究 センター) [論文 2]

InP/InAs/InP コアマルチシェル型ナノワイヤは InP ナノワイヤに内包された InAs 層が量子井戸となり、 その層厚が1原子層ずつ変化するのに応じて発光波長が離散的に変化する。準共鳴励起下で数 ns までの 時間領域をストリークカメラで発光の時間依存性を測定した。発光の重心は時間と共にゆっくりと低エ ネルギー側にシフトしていき、量子井戸中の低エネルギー領域へ励起子が移動していく過程が観測され た。さらに長い時間領域となる数十 ns までの発光の時間依存性を単一光子係数法により測定した。 発光の重心の低エネルギー側へのシフトが 1ns までは早く 1ns 以降は遅い2 段階の励起子の移動が 確認された。これは励起子がナノワイヤの側面から角へと移動していることを現している。有限要素法による数値計算からもこのような励起子の振る舞いが確認された。発光は数十 ns まで非指数関数型の裾をひき、タイプII型の量子井戸の特徴をもっていることが明らかになった。1~3 原子層量子井戸では、電子の波動関数が InP 層に大きく広がっていると考えられる。

#### く(チオフェン/フェニレン) コオリゴマー結晶の励起子光学遷移> [論文9]

π電子共役系化合物は有機電界発光(EL)素子などの発光デバイスへの応用や、その優れた電気的特性よ り 有機薄膜 FET への応用が期待されている。特に(チオフェン/フェニレン)コオリゴマー [2,5-Bis(4-biphenylyl)oligothiophenes (BPnT)]結晶は室温において非常に高い発光量子効率を有し、光強励起 下で自然放射増幅光(ASE)を発生するので、有機半導体レーザーなどへの応用が期待される。しかし、詳 細な基礎光学遷移やレーザー作用の起源については未解明で、これに関して解明をめざした。

BPnT(n=1-4)単結晶はそれぞれほぼ同じ分子振動モードを持っているため、発光及び吸収スペクトルに それらの結合モードが生じ、ほぼ同じエネルギー間隔で光学遷移のピークが現れることが確認されてき た。まず、レーザー作用は分子振動モードを伴った光学遷移で起こることを誘導放出スペクトルと発光 スペクトルを低温から室温まで温度を変えて調べることで解明した。次に、振動モードを介さない 0-0 遷移に関しては n=2-4 の BPnT 結晶では明瞭な吸収ピークが観測されていたが、BP1T 結晶のみ発光、吸

収ともに 0-0 遷移に対応するピークが観測できないとい うパズルがあったが、結晶構造中での分子配列から、こ の振る舞いは分子の遷移双極子モーメントの向きと電子 的に結合した隣接分子の遷移双極子モーメントの向きと の間の関係によって説明できることが明らかにされた。 BP1T 結晶では分子の遷移双極子モーメントの向きがほ ぼ平行に配列しているため、H 会合体様の光学遷移の振 る舞いを示し、0-0 遷移が禁制遷移となる。実際、これら の結晶で 0-0 遷移ピーク付近における吸収スペクトルの 偏光依存性を調べたところ、明らかな異方性が見られた。 図 11 は BP3T 結晶の吸収スペクトルで、ab 面内における b 軸方向からの偏光角度依存性を示したものである。0-0, 0-1 遷移ともにb 軸方向に強く偏光していることがわかる。



図 11: BP3T 結晶の吸収スペクトルの偏光依存性。

これは分子がお互い平行な配列方向からわずかに傾いており、結晶 b 軸方向には遷移双極子モーメントの位相が合うため光学遷移が生じると解釈できる。このような偏光異方性は BP2T 結晶でも同様に見られるため、BPnT 結晶(n = 1-4)の光学遷移の振る舞いは結晶構造中の分子間の遷移双極子モーメントの向きに大きく支配されていることが解明された。

<(チオフェン/フェニレン) コオリゴマー結晶のリング状マイクロレーザー> [論文4,8]

(チオフェン/フェニレン) コオリゴマー結晶は、室温において高密度励起を行なうことにより、バルク 結晶や薄膜結晶でも、自然放射増幅光が観測されている。また電界発光も観測されており、電流注入型 有機半導体レーザーへの応用が期待されている。この研究では、BP1Tの薄膜結晶を用いてマイクロサ イズの光閉じ込め構造を作製し、光励起下で共振器モードによるレーザー発振を実現した。励起光源と してチタンサファイアレーザー増幅器の第二高調波(3.12eV)を用い、リソグラフィー加工によって形成さ れた直径 10-40 µm のマイクロリング及びマイクロディスク構造からの発光を観測した。マイクロリング 及びマイクロディスク構造はSi 基板上に BP1T 薄膜を蒸着・アニールし結晶化させた後、電子ビーム露 光と反応性イオンエッチングによって作製された。マイクロリング構造の共振器モードを反映したレー ザー発振が観測された。バルク薄膜とマイクロリング構造のレーザー発振閾値を比較すると、マイクロ リング構造の場合 1/7 程度の低減があること、スペクトルに見られる共振器モードを反映したモード間隔 はリングの円周長の逆数に比例することが明らかにされた。共振器長は円周長に対応することから円周 上に分布した周回モードであると解明された。この振る舞いはマイクロディスク構造でも同様に観測さ れた。

【5】 強磁場中空間分解分光システムを用いた研究

<ヘリウム3温度近接場光学顕微鏡の開発>

(伊藤宙陛、近江徹哉、野村晋太郎、大塚洋一本、 本物理学専攻) 極低温強磁場下近接場光学顕微鏡を用いた空間分解分光測定シス テムの開発を行った。図 12 に開発された装置の外観を示す。極低温 部に光弾性変調器を設置できるように、混合器等の配置等が特に工夫 された独自設計の希釈冷凍機である。試料温度 300 mK、最大印加磁 場 5 T を目標としていたが、混合器の最低到達温度 70 mK を 5 T にお いて得ることに成功した。室温部から単一モード光ファイバーにより 極低温部に設置された近接場顕微鏡ユニットまでレーザー光を導入 した。本装置を用いて、二次元電子系端状態のスピン状態、電子線リ ソグラフィー法により作製した量子ポイントコンタクトの光応答等 に関する研究を実施した。



図12: 希釈冷凍機と近接場顕微鏡ユニット。

<量子ポイントコンタクト構造のイメージング>

(伊藤宙陛、野村晋太郎)

ホールバー上に形成した量子ポイントコンタクト構造により伝導チ ャネルを狭い領域に絞り、光伝導イメージングを行った結果について研 究を実施した。AlGaAs/GaAs単一へテロ接合を用いた量子ポイントコン タクト構造を作製し約5Kで光伝導測定を行った。さらにマクロ光照射 下での試料評価を70mKで行った。光チョッパーにより変調したレー ザー光を試料表面上に集光して走査し、ゲート電圧(Vg)、ソース・ドレ イン電流(Isd)一定の条件下でソース・ドレイン電圧(Vsd)をAC測定した。

図 13 に Vg=0、-1.5 V のバイアス電圧印加条件下において、128×128µm<sup>2</sup>

領域で得られた光照射による *V*sd の減少のマッピング、即ち各点に光が 照射されたときの伝導度の増大のマッピングを示す。この結果はゲート 電圧の印加により伝導チャネルがポイントコンタクト付近に絞られる と、光照射による伝導度の増加が顕著になることを示している。この伝 導度の増加の原因として、光照射による電子温度の上昇、光励起された ホールがドナーにトラップされたことによるポテンシャルの低下等が 考えられる。



図 13: (a) Vg=0 V, (b) Vg= -1.5 V における 光照射による V<sub>sd</sub> の減少のイメージング。

#### <ゲート付き非ドープ量子井戸発光の空間分布>

(津村公平、野村晋太郎、赤崎達志<sup>A</sup>、 <sup>A</sup>NTT 物性科学基礎研究所)

半導体中二次元電子系の研究には障壁層にドーパントイオンをドープして井戸層への電子の流れ込みにより二次元電子系を形成する変調ドープ量子井戸構造が通常広く用いられている。これに対して、 ドーパントイオン層を排して非ドープの量子井戸構造の裏面 n 電極と量子井戸層にとられたオーミック 電極の間にゲート電圧を印加することにより静電的に二次元電子系を形成する試料の発光分布を調べた。 この試料はドーパントイオンによる散乱がないため電子移動 度を高く保ちつつ極低電子密度領域から電子密度を制御可能 であるという大きな特徴を有するが、どのような電子密度の 空間分布を示すのかは知られていなかった。そこでこのゲー ト付き非ドープ量子井戸試料の発光スペクトルの空間分布を 調べた。その結果の一例を図14に示す。表面ゲートの下と表 面ゲートのない部分とでは発光スペクトルに差が見られるが、 表面ゲートの下からの発光は測定精度の範囲内では一様であ ることが示された。



図14: 試料の各位置からの発光スペクトル(左上)と表面ゲート下で照射スポットを一方向に 掃引した際の空間分解発光スペクトル。

【6】半導体ナノメートル構造の光物性

<ゲート付き非ドープ量子井戸構造における有効質量の電子密度依存性>

(野村晋太郎、赤崎達志<sup>A</sup>、平山祥郎<sup>B</sup>、 <sup>A</sup>NTT 物性科学基礎研究所、<sup>B</sup>東北大学)[論文 14, 17, 20] ゲート付き非ドープ量子井戸試料はドーパントイオンによる散乱がないため電子移動度を高く保ち

つつ極低電子密度領域から電子密度を制御可能 であり、低電子密度領域での二次元電子系の物 性を調べるために適した特徴をもつ試料である。 二次元電子系において、電子密度が低くなるに 従いスピン感受率や有効質量に異常が起こりう ることが理論的に示されてきたが、その実験的 検証を行った。

非ドープ量子井戸試料構造を改良して電子密度の 制御性に関して最高水準の試料を得ることができた。 私たちは、8.6x10°cm<sup>2</sup>の二次元電子密度において、電 子占有数 v=1 での発光の異常を観測することに成功 した。この試料を用いて、複数のランダウ準位に起因 する発光ピークから図 15 に示すように電子有効質量、 正孔有効質量の電子密度依存性を評価した。得られた 有効質量はいずれも電子密度の低下に伴い増大を示 した。これらの増大は電子間相互作用の増大に起因す るものであると考えられる。



図 15: (a) 電子有効質量の電子密度依存性、m<sub>e10</sub>\*, m<sub>e21</sub>\*はそれぞ れランダウ準位の N=0 と N=1 準位、N=1 と N=2 準位から決定した電 子有効質量である。m<sub>e(1<v<2</sub>)\*は電子占有数 1<v<2 の場合における 電子有効質量である。(b) 正孔の有効質量の電子密度依存性。

<非ドープ GaAs 量子井戸の光照射後の発光の時間変化> (野村晋太郎、赤崎達志<sup>A</sup>、 <sup>A</sup>NTT 物性科学基礎研究所)

量子ポイントコンタクト等の光照射効果が最近注目を集めているが、極低温では時間スケールが数秒から数時間にわたるゆっくりとした光照射による電気伝導の変化が観測されている。このような遅い現象を解明するために、私たちはn型 GaAs 基板の上に MBE 成長した非ドープ GaAs 量子井戸を波長 800 nm のレーザー光で励起して、温度 2 K に冷却した後の光照射時間に依存した発光スペクトルの変化を測定した。量子井戸からは荷電励起子 X と中性励起子 X<sup>0</sup>



図16: T=100 Kから2 K へ冷却した後の X<sup>0</sup>と X の発 光強度の時間変化。

の発光が検出され、図16に示すように、それらは積分強度を一定に保ちつつ発光強度比が時間とともに 変化した。X・の発光強度の時間変化は、量子井戸中の残留電荷量の変化に対応していると考えられる。 この発光強度比の時間変化は表面にトラップされた電子の光励起による流出に起因していると考えられ、 最終的には裏面の基板と表面の電位はほぼ一致していると解釈できる。これは、n型基板を裏面ゲート とした時のゲート誘起二次元電子系誘起の光照射による閾値電圧の変化とも矛盾しない。1µW 程度の弱 励起では最終的な平衡に達するまでに4時間以上を必要とすることがわかった。私たちはこの測定を励 起強度と昇温温度を変化させて系統的に行い、最終状態に落ち着くまでの光照射総量が一定であること や、約100K で表面状態が回復することなどを確かめた。 <論文>

- 1. B. Pal, S.Yu. Verbin, I.V. Ignatiev, M. Ikezawa and Y. Masumoto: "Nuclear-spin effects in singly negatively charged InP quantum dots", Phys. Rev. B 75, 125322 (2007).
- B. Pal, K. Goto, M. Ikezawa, Y. Masumoto, P. Mohan, J. Motohisa and T. Fukui: "Time- and spectrally-resolved PL study of a regular array of InP/InAs/InP core-multishell nanowires", Technical Digest of Conference on Lasers and Electro-Optics (CLEO'07) and Quantum Electronics and Laser Science Conference (QELS'07, Baltimore), JThD37.pdf (2007).
- Y. Masumoto, B. Pal, S. Oguchi and M. Ikezawa: "Spin relaxation in charge tunable InP quantum dots", Technical Digest of Quantum Electronics and Laser Science Conference (QELS'07, Baltimore), QFD3.pdf (2007).
- S. Fujiwara, K. Bando and Y. Masumoto, F. Sasaki and S. Kobayashi, S. Haraichi, S. Hotta: "Laser oscillations of whispering gallery modes in thiophene/phenylene co-oligomer microrings", Appl. Phys. Lett. 91, 021104 (2007).
- 5. 池沢道男, 舛本泰章: "半導体量子ドットにおけるコヒーレンスの超高感度光検出ー光へテロダイン 検出法を利用したフォトンエコー", 日本物理学会誌 62,609 (2007).
- 6. M. Ikezawa, Y. Sakuma and Y. Masumoto: "Single photon emission from individual nitrogen pairs in GaP", Jpn. J. Appl. Phys. 46, L871 (2007).
- 7. S. Tomimoto, A. Kurokawa, Y. Sakuma, T. Usuki and Y. Masumoto: "Radiative recombination of excitons in disk-shaped InAs/InP quantum dots", Phys. Rev. B 76, 205317 (2007).
- F. Sasaki, S. Kobayashi, S. Haraichi, S. Fujiwara, K. Bando, Y. Masumoto and S. Hotta: "Microdisk and microringLasers of thiophene–phenylene co-oligomers embedded in Si/SiO<sub>2</sub> substrates", Adv. Mater. 19, 3653 (2007).
- 9. K. Bando, T. Nakamura, S. Fujiwara and Y. Masumoto: "Optical selection rule for the lower Davydov excitons in co-oligomer single crystals", Phys. Rev. B 77, 045205 (2008).
- 10. J. H. Kim, K. Kyhm and Y. Masumoto: "Ultrafast dynamics of the band-gap renormalization and the state-filling effect in strongly-confined CdSe/ZnS nanocrystals", J. Korean Phys. Soc. 52, 64 (2008).
- 11. Y. Masumoto, K. Toshiyuki, T. Suzuki and M. Ikezawa: "Resonant spin orientation at the exciton level anticrossing in InP quantum dots", Phys. Rev. B 77, 115331 (2008) [in press].
- I. Ya Gerlovon, I. V. Ignatiev, I. A. Yugova and Y. Masumoto: "Quantum beats of spin states in the InP quantum dots", Optica i Spectroscopia 104, 662 (2008) [Russian]; Opt. Spectroscopy 104, 577 (2008) [English translation].
- 13. K. Bando and Y. Masumoto: "Interferometric spectroscopy for excitons in InP single quantum dots", J. Lumin. 128, 855–857 (2008).
- S. Nomura, M. Yamaguchi, T. Akazaki, H. Tamura, T. Maruyama, S. Miyashita and Y. Hirayama: "Enhancement of electron and hole effective masses in back-gated GaAs/AlxGa1-xAs quantum wells", Phys. Rev. B 56 (20) R201306/1-R201306/4 (2007).
- 15. S. Nomura and T. Iitaka: "Linear scaling calculation of an *n*-type GaAs quantum dot", Phys. Rev. E 76, 037701/1-037701/4 (2007).
- S. Nomura, K. Tsumura, P. Mohan, J. Motohisa, and T. Fukui: "Optical evidence for Aharonov-Bohm effect in quantum tubes", Physica E 40, 1081-1082 (2008).
- 17. S. Nomura, M. Yamaguchi, T. Akazaki, H. Tamura, T. Maruyama, S. Miyashita and Y. Hirayama: "Density dependent electron effective mass probed by photoluminescence down to dilute electron density limit", Physica E 40, 1467-1469 (2008).
- T. Akazaki, M. Yamaguchi, K. Tsumura, S. Nomura, and H. Takayanagi: "Negative photoconductivity in In<sub>0.52</sub>Al<sub>0.48</sub>As/In<sub>0.7</sub>Ga<sub>0.3</sub>As heterostructures", Physica E 40, 1341-1343 (2008).
- 19. N. Hayashi, K. Tsumura, S. Nomura, M. Yamaguchi, H. Tamura, T. Akazaki, Y. Hirayama: "Optical mapping of properties of two-dimensional electron system in magnetic fields", Physica E 40, 1533-1535 (2008).
- S. Nomura, M. Yamaguchi, T. Akazaki, K. Miyakoshi, H. Tamura, H. Takayanagi, and Y. Hirayama: "Enhancement of electron effective mass and reduced mass in a dilute electron density regime", Physics of Semiconductors, (ed. W. Jantsch and F. Schaffler American Institute of Physics, AIP Conference Proceedings Volume 893, 2007) pp. 389-390.
- S. Nomura and T. Iitaka: "Order-N electronic structure calculation of *n*-type GaAs quantum dots", Physics of Semiconductors, (ed. W. Jantsch and F. Schaffler American Institute of Physics, AIP Conference Proceedings Volume 893, 2007) pp. 885-886.
- 22. M. Yamaguchi, S. Nomura, T. Maruyama, S. Miyashita, Y. Hirayama, H. Tamura, and T. Akazaki: "Clear evidencce of transition from nonlinear to linear screening of a two-dimensional electron system detected by photoluminescence spectroscopy", Phys. Rev. Lett. (submitted).

<国際会議>

- Y. Masumoto: "Research Results of Masumoto Group in 2006-2007" Workshop on PNU-Tsukuba Collaborated Research "Photo-induced ferromagnetism and coherent optical manipulation in semiconductor nanostructures" (Tsukuba, 2007.12.16-18).
- Y. Masumoto: "Research Results of Masumoto Group in 2006-2007" Workshop on PNU-Tsukuba Collaborated Research "Photo-induced ferromagnetism and coherent optical manipulation in semiconductor nanostructures" (Pusan, 2008.3.16-18).
- N. Hayashi, K. Tsumura, S. Nomura, M. Yamaguchi, H. Tamura, T. Akazaki, and Y. Hirayama, "Optical mapping of properties of two-dimensional electron systems magnetic fields", the 17th International Conference on Electronic Properties of Two-dimensional Systems (EP2DS-17) (Genoa, 2007.7.15-20).
- S. Nomura, K. Tsumura, P. Mohan, J. Motohisa, and T. Fukui, "Optical evidence for Aharonov-Bohm effect in quantum tubes", the 17th International Conference on Electronic Properties of Two-dimensional Systems (EP2DS-17) (Genoa, 2007.7.15-20).
- S. Nomura, M. Yamaguchi, T. Akazaki, H. Tamura, T. Maruyama, S. Miyashita, and Y. Hirayama, "Density dependent electron effective mass probed by photoluminescence down to dilute electron density limit", the 17th International Conference on Electronic Properties of Two-dimensional Systems (EP2DS-17) (Genoa, 2007.7.15-20).
- Tatsushi Akazaki, Masumi Yamaguchi, Kouhei Tsumura, Shintaro Nomura, Hideaki Takayanagi, "Negative photoconductivity in In<sub>0.52</sub>Al<sub>0.48</sub>As/In<sub>0.7</sub>Ga<sub>0.3</sub>As heterostructures", the 17th International Conference on Electronic Properties of Two-dimensional Systems (EP2DS-17) (Genoa, 2007.7.15-20).
- Masumi Yamaguchi, Shintaro Nomura, Tatsuhi Maruyama, Sen Miyashita, and Yoshiro Hirayama, Hiroyuki Tamura, and Tatsushi Akazaki, "Photoluminescence evolution across the metal-insulator transition in an undoped GaAs quantumwell", the 17th International Conference on Electronic Properties of Two-dimensional Systems (EP2DS-17) (Genoa, 2007.7.15-20).
- 8. Y. Masumoto: "New functions of artificial atoms" Tata Institute of Fundamental Research (TIFR), Seminar (Munbai, 2008.1.23).
- 9. Y. Masumoto: "New functions of artificial atoms" Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics (CIOMP), Lecture (Changchun, 2008.3.3).
- K. Goto, S. Tomimoto, B. Pal, Y. Masumoto, P. Mohan, J. Motohisa, and T. Fukui: "Transient band bending in InP/InAs/InP core-multishell nanowires" First International Symposium on Interdisciplinary Materials Science (ISIMS-2008) (Tsukuba, 2008.3. 13-14).
- 11. K. Bando and Y. Masumoto: "Narrowing of exciton linewidth of a quantum dot with increasing temperature" First International Symposium on Interdisciplinary Materials Science (ISIMS-2008) (Tsukuba, 2008.3. 13-14).
- T. Suzuki, K. Kawana, M. Ikezawa and Y. Masumoto: "Spin orientation of excitons, trions and tetraons in charge tunable InP quantum dots" First International Symposium on Interdisciplinary Materials Science (ISIMS-2008) (Tsukuba, 2008.3. 13-14).
- M. Ikezawa, Y. Sakuma, M. Watanabe, Y. Masumoto: "Single NN pair luminescence and single photon generation in nitrogen δ-doped GaP" First International Symposium on Interdisciplinary Materials Science (ISIMS-2008) (Tsukuba, 2008.3. 13-14).
- H. Ito, T. Omi, and S. Nomura, "Photoconductance imaging of a quantum point contact under local optical excitations", First International Symposium on Interdisciplinary Materials Science (ISIMS-2008) (Tsukuba, 2008.3. 13-14).
- 15. T. Omi, H. Ito, K.Tsumura, S. Nomura, Y. Ootuka, "A low temperature-high magnetic field-near field-scanning optical microscope for imaging electronic states in GaAs/AlGaAs heterostructures", First International

Symposium on Interdisciplinary Materials Science (ISIMS-2008) (Tsukuba, 2008.3. 13-14).

 K. Tsumura, S. Nomura, T. Akazaki, H. Takayanagi, "Voltage response images of a superconductor-normal metal-superconductor junction to the light", First International Symposium on Interdisciplinary Materials Science (ISIMS-2008) (Tsukuba, 2008.3. 13-14).

<学位論文>

数理物質科学研究科物質創成先端科学専攻修士論文(2008年2月)

- 1. 鈴木 宰: "チャージチューナブル InP 量子ドットの円偏光フォトルミネッセンスとスピン偏極"
- 2. 近江徹哉: "近接場光学顕微鏡を用いた GaAs ヘテロ構造の光照射効果の研究"」(数理物質科学 研究科長表彰優秀論文賞受賞)

<講演>

- 1. 野村晋太郎,山口真澄,赤崎達志,田村浩之,丸山達朗,宮下宣,平山祥郎: "整数量子ホール効果領 域での発光の異常と有効質量の増大" CREST 合同研究会「超高速・超省電力高性能光デバイスの創 製に向けて」NTT 厚木 R&D センター,厚木(2007 年 5 月).
- 2. 野村晋太郎: "量子ホール系の発光分光"京都大学研究討論会-高密度励起物質の光物性,宇治(2007 年7月).
- 3. 野村晋太郎: "二次元系の発光分光研究"千葉大学物性セミナー,千葉市(2007年7月).
- 後藤健、パルビプル、舛本泰章、モハンプリメーラ、本久順一、福井孝志: "InP/InAs/InP コアマル チシェル型ナノワイヤにおける励起子緩和過程"日本物理学会、札幌(2007年9月)
- 5. 阪東一毅, 舛本泰章: "単一 InP 量子ドットにおける励起子位相緩和過程の非指数関数的減衰"日本 物理学会, 札幌(2007 年 9 月).
- 6. 鈴木宰,川名啓介,池沢道男,舛本泰章: "チャージチューナブル InP 量子ドットにおける励起子準 位の交差・反交差に伴うスピン偏極"日本物理学会,札幌(2007年9月).
- 7. 冨本慎一,黒川篤,佐久間芳樹,臼杵達哉,舛本泰章: "InAs/InP 量子井戸及びディスク状量子ドット における励起子輻射再結合寿命"日本物理学会,札幌(2007年9月).
- 8. 岩井滋人, 奥村恒雄, 徳永英司, 小林孝嘉, 李定植, 西研一, 舛本泰章: "InP, CuCl 量子点の顕微非線 形吸収分光"日本物理学会, 札幌(2007年9月).
- 9. 池沢道男, 佐久間芳樹, 舛本泰章: "GaP 中の単一窒素等電子トラップによる単一光子発生"日本物 理学会, 札幌(2007 年 9 月).
- 10. 池沢道男, 佐久間芳樹, 舛本泰章: "窒素をδドープした GaP における単一等電子トラップの顕微 PLと単一光子発生"応用物理学会, 札幌(2007年9月).
- 11. 山口真澄,野村晋太郎,津村公平,田村浩之,赤崎達志: "ゲート付き非ドープ量子井戸の顕微分光 スペクトル" 応用物理学会,札幌(2007年9月).
- 12. 赤崎達志,羽柴秀臣,山口真澄,津村公平,野村晋太郎,高柳英明: "超伝導体/半導体接合への光照射の影響(II)" 応用物理学会,札幌(2007年9月).
- 13. 伊藤宙陸, 野村晋太郎: "量子ポイントコンタクト構造の光伝導イメージング" 応用物理学会, 札 幌(2007年9月).
- 14. 山口真澄,野村晋太郎,田村浩之,赤崎達志,丸山達朗,宮下宣,平山祥郎: "非ドープ GaAs 量子井 戸の中性励起子と荷電励起子" 日本物理学会,札幌(2007 年 9 月).
- 15. 野村晋太郎,山口真澄,田村浩之,赤崎達志,丸山達朗,宮下宣,平山祥郎: "低電子密度領域二次元 電子系発光による電子・正孔有効質量の増大の検出"日本物理学会,札幌(2007年9月).

- 16. 野村晋太郎: "低密度二次元電子系の電子間相互作用と局在効果"平成19年度東北大学電気通信 研究所共同プロジェクト研究会「ナノスケール半導体の物理とそのナノテクノロジーへの展開」,宮 城松島(2007年10月).
- 17. 舛本泰章: "人工原子の新光機能性" ナノフォトニクスセミナー. 東京(2007年10月).
- 18. 舛本泰章: "量子ドットのスピン"ナノ量子エレクトロニクスセミナー.東京. (2007年12月).
- 19. 鈴木宰,川名啓介,池沢道男,舛本泰章: "チャージチューナブル InP 量子ドットの励起子準位の反 交差に伴うスピン偏極"日本物理学会,東大阪(2008 年 3 月).
- 池沢道男, 佐久間芳樹, 渡邉真人, 舛本泰章: "窒素をδドープした GaP の単一等電子トラップ分光" 日本物理学会, 東大阪(2008 年 3 月).
- 21. 後藤健, 冨本慎一, パル ビプル, 舛本泰章, モハン プリメーラ, 本久順一, 福井孝志: "InP/InAs/InP コアマルチシェル型ナノワイヤにおける光励起キャリアの過渡現象"日本物理学会, 東大阪(2008 年3月).
- 22. 池沢道男, 佐久間芳樹, 渡邉真人, 舛本泰章: "窒素をδドープした GaP における単一等電子トラップの高分解能発光測定"応用物理学会, 船橋(2008 年 3 月).
- 渡邉真人,池沢道男,佐久間芳樹,舛本泰章: "窒素をδドープした GaP における NN ペア空間分布の濃度依存性"応用物理学会,船橋(2008 年 3 月).
- 24. 阪東一毅, 舛本泰章: "半導体量子ドットにおける励起子線幅の温度上昇による先鋭化"応用物理学 会, 船橋(2008年3月).
- 25. 藤田祥一, 柴田大地, 坂東弘之, 松末俊夫, 奥野剛史, 舛本泰章: "InP 及び InGaAs における 2 光子 吸収係数の波長・偏波依存性"応用物理学会, 船橋(2008 年 3 月)
- 26. 伊藤宙陸, 野村晋太郎: "量子ポイントコンタクトの光伝導イメージング" 日本物理学会, 東大阪 (2008 年 3 月).
- 27. マシュー・デルベック,山口真澄,野村晋太郎,田村浩之,赤崎達志: "冷却した非ドープ GaAs 量子 井戸の光照射後の発光の時間変化" 日本物理学会,東大阪(2008 年 3 月).

#### 国際特許出願

"Process of producing microparticles and nanostructures by using nanoporous material",指定国 US, Canada, EP, JP, 国際出願番号PCT/JP2005/009990, 特願2006-514010(2006/11/01)発明者 野村晋太郎, 伊藤宙陸 出願 人独立行政法人科学技術振興機構

 VIII-3 強相関物性グループ
 教授 守友 浩 平成17年6月着任
 助教 上岡隼人 平成17年12月着任
 大学院生 M1 中田文也 M1 柴田恭幸

### 【1】Co-Feシアノ架橋金属錯体のフェムト秒時間分解分光[1]

### (1)研究背景

プルシャン・ブルー型結晶構造を有するシアノ架橋金属 錯体( $A_x$ M[M'(CN)<sub>6</sub>]<sub>y</sub>・zH<sub>2</sub>O:A=Na, K, Rb, Cs, M=V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Cd, M'=Fe, Cr, Co, Mn, V は遷移金属) では、右図に示すように配列ナノ空間構造を有する。遷移 金属(黒丸と灰色丸)がシアノ基(白丸)で架橋され、三次元 的なネットワークを組んでいる。この八配位のナノ空間は、 部分的にアルカリ金属や水分子に占有されている。特に、 アルカリ金属の濃度(x)を変化させることにより、遷移金属の



価数制御が可能である。この物質系は顕著な電荷移動相転移や光磁性を示す。例えば、 Co-Fe シアノ錯体では、温度の上昇に伴い Fe イオンの電子が Co イオンに移動し、Co イ オンが低スピン状態(低温相)から高スピン状態(高温相)へと一次の構造相転移を起こす。 また、低温で光励起を行うと強磁性が誘起される。

# (2) Co-Fe シアノ架橋金属錯体のフェムト 秒時間分解分光

実験に用いた Co-Fe シアノ架橋金属錯体 Co[Fe(CN)<sub>6</sub>]<sub>2/3</sub>5H<sub>2</sub>Oの電子配置は Co<sup>II</sup>-Fe<sup>III</sup>であり、最低温度まで電荷移動相転移を示さない。右図に、(a)線形吸収スペクトル、(b)1.55eV励起時の差分吸収スペクトル各成分、(c)3.10eV励起時の差分吸収スペクトル各成分、(d)各成分の寿命を示す。 光誘起信号は、早い成分(黒丸)と遅い成分(白丸)に分離できる。早い成分の寿命 は、数十 ps であり格子緩和を伴わない Franc-Condon 状態に由来すると考えられる。他方、遅い成分の寿命は数ナノ秒であり、格子緩和を伴った電荷移動ペア (Co<sup>III</sup>-Fe<sup>II</sup>)に由来すると考えられる。遅い成分の 2eV 以下誘導吸収は、光生成され



た Co<sup>III</sup> のスピン状態が高スピン状態(または、中間スピン状態)であることを示唆する。また、

2.4eV に位置する電荷移動吸収帯を励起すると、電荷移動ペアの形成効率が増大すること が分かる。

さらに、遅い成分の寿命を温度および励起光強度の関数として詳細に調べた。その結果、 10K において励起光強度ともに寿命が増大することを見出した。この寿命増大現象は、光 励起により新たな秩序相が形成されようとしていることを示唆している。

### 【2】シアノ架橋金属錯体の価数制御と物性相図 [2]

Co-Fe シアノ架橋金属錯体 ( $Na_xCo[Fe(CN)_6]_y$ ・ zH<sub>2</sub>O:)のナノ空間は、部分的にアルカリ金属や水分 子に占有されている。我々は、ITO 基盤上に電解析 出法で薄膜を作成し、それを酸化処理することにより 価数制御を行った。さらに、製膜条件を最適化するこ とにより<111>配向膜の作成に成功した。[特許 4] 酸 化処理により、Na 濃度(x)だけが変化し、他の組成 (y,z)は変化しなかった。

このように作成された Na<sub>0.86-δ</sub> Co[Fe(CN)<sub>6</sub>]<sub>0.71</sub>3.8H<sub>2</sub>O の室温での電子配置はCo<sup>II</sup>-Fe<sup>II</sup>-Fe<sup>III</sup>である。右図は、 Co<sup>II</sup>-Fe<sup>II</sup>を基準としたホール濃度( $\delta$ )の関数として、(a) 格子定数、(b)有効磁気モーメントの比、(c)電荷整列 温度をプロットしたものである。温度低下に伴い、電 子配置が Co<sup>II</sup>-Fe<sup>II</sup>-Fe<sup>III</sup> (高温相)から Co<sup>III</sup>-Co<sup>II</sup>-Fe<sup>III</sup> (低温相) へと変化する。有効磁気モーメントの比は、 この価数モデル((b)の実線)で定量的に再現できる。 電荷整列温度自体は $\delta$  にほとんど依存しないこと がわかる。しかしながら、 $\delta$ の増加に伴い、電荷整 列相転移の性質が二次転移から一次転移へと変化 した。また、 $\delta$ の増加に伴い、電荷整列相転移にお ける格子定数のとびも大きくなる。このように、価数 制御によりシアノ架橋金属錯体の物性制御に成功 した。

### 【3】シアノ架橋金属錯体の減圧効果と相制御[3]

実験に用いた Co-Fe シアノ架橋金属錯体 Na<sub>0.50</sub>Co[Fe(CN)<sub>6</sub>]<sub>0.72</sub>3.8H<sub>2</sub>Oの室温での電子配置は Co<sup>III</sup>-Co<sup>II</sup>-Fe<sup>II</sup>である。右図に、(a)Co<sup>2+</sup>吸収のスペクト ル強度、(b)OH 伸縮振動のスペクトル強度、(c)CN 伸縮振動のスペクトル強度、(d)格子定数の圧力依 存性を示す。圧力の増加に伴い、格子定数が 10.0Aから10.2A へと不連続に変化し、減圧誘起構 造相転移がおこることが分かる。この相転移が起こ



る圧力近傍において、Co<sup>2+</sup>吸収のスペクトル強度や OH 伸縮振動のスペクトル強度が急激 に変化する。こうした減圧誘起構造相転移は、非常に簡便な圧力定点に利用できる。[特許 3]

# 【4】電荷整列・電荷移動相転移の可視化 [4,12]

島根大学の田中らが開発した「MEM 電子分 布から静電ポテンシャルを計算する方法」を強 相関物質であるマンガン酸化物 Nd<sub>1/2</sub>Sr<sub>1/2</sub>MnO<sub>3</sub> およびシアノ架橋金属錯体 RbMn[Fe(CN)<sub>6</sub>]に 適用した。右図に、巨大磁気抵抗効果を示す マンガン酸化物 Nd<sub>1/2</sub>Sr<sub>1/2</sub>MnO<sub>3</sub>の(a)金属相と(b) 電荷整列相の静電ポテンシャルを示す。電荷 整列相では、電荷整列による Mn1 サイトと Mn2 サイトの静電ポテンシャルが大きく異なることが わかる。このように、静電ポテンシャルは強相関 電子系の研究に大きな力を発揮することが明ら かとなった。この研究成果は新聞報道されてい る。

【5】シアノ架橋金属錯体の温度圧力相図 [5] シアノ架橋金属錯体の一種である Cs[Co(3-CNpy)<sub>2</sub>[W(CN)<sub>8</sub>]H<sub>2</sub>O]は、二次元的な Co-W のネットワークを形成している。この物質 は温度低下に伴い顕著な電荷移動相転移を示 し、試料の色が赤から青に変化する。

我々は、圧力下磁化率測定により、この物質 の温度圧力相図を決定(右図)した。この物質 の電荷移動相転移温度の圧力係数は 250K/GPaときわめて高い。さらに、温度低下お よび圧力印加に伴う構造変化を詳細に調べる ことにより、この巨大圧力係数の起源を明らか にした。また、温度効果を体積効果をエントロピ ー効果に分離し、その割合を実験的に決定し た。





# 【6】 SPring-8 における CREST プロジェクト [8,9,15,16]

### (1) 本研究グループの役割

本研究グループは、チームリーダーとして CREST プロジェクト(「反応現象の X 線ピンポ

イント構造計測」:代表 高田昌樹 H16.10 - H21.9)に参加している。プロジェクト全体の詳細は、http://pinpoint.spring8.or.jp/CREST/ を参照して頂きたい。このプロジェクトは、5 つの研究チームより構成されている。

- ・ 高田チーム:X線ピンポイント構造計測装置の構築とその実用デバイスへの応用
- 木村チーム:X線マイクロビームの発生と高精度回折系の開発
- 田中チーム:フェムト秒パルスの発生と同期技術の開発
- 守友チーム:極限環境下での計測技術の開発と本装置の有用性の実証
- ・ 鳥海チーム:微小空間での計測技術の開発と本装置の有用性の実証

守友チームの役割は、時間分解構造解析装置の装置開発とその有用性の実証である。これまでの期間で装置開発は、ほぼ終了した。今後は、時間分解構造解析といった実験手法を光誘起相転移や巨大光応答に適用し、その有用性を実証してゆく。

# 【7】 XFEL 利用推進に向けた委託研究

### (1) 本研究グループの役割

本研究グループは、文部科学省からXFEL利用推進課題(「フェムト秒時間分解 顕微鏡の構築とMEM電子分布解析の高度化」:代表 守友 浩、H18.9-H21.3)の 委託研究を推進している。この研究では、試料を時間・空間領域で分光学的に監 視するフェムト秒時間分解顕微鏡の開発、及び、MEM電子分布解析の高度化技 術の開発を、独立行政法人理化学研究所と共同で実施する。筑波大学では、フェ ムト秒時間分解顕微鏡試作機の開発と性能評価に関わる研究開発を実施する。

### (2) 本年度の経過

a) 画像部の開発

フェムト秒時間分解顕微鏡の画像部の開発に取り組み、Lock-in 方式とA/D 変換器方式の性能比較を行った。その結果、A/D 変換器方式が、以下の点で優れていることが分かった。

- ・ 信号の絶対値測定が容易である
- ・ 積算回数を増やすことにより、任意の精度のデーター取得が可能である
- ・ Channel 当りの単価が安く、channel 数の拡大が容易
- A/D 変換機を擬似 boxcar と使 用することにより、S/N を向上 できる

そこで、A/D 変換器を用いた擬似 boxcar 方式での 72ch チャンネル データー取り込みシステムを構築 した。

b) 鏡筒部の開発

昨年度開発した光源部を利 用して、鏡筒試作機の性能評



価を行った。10倍の対物レンズ(作動距離30.5mm)を使用することにより、励起 光を24µmまで絞り込むことができた。また、顕微鏡の空間分解能は4µmであ った。これらは計画仕様を満たしている。この性能評価に基づき、小型・軽量な 鏡筒部を検討した。独立行政法人理化学研究所グループの空間・時間制御技 術と組み合わせるためには、小型化は60cm四方以下、軽量化14kg以下である 必要がある。小型軽量鏡筒部の図面を作成し、必要部品をリストアップした。

c) 性能評価物質の合成

フェムト秒時間分解顕微鏡の性能評価には、光応答性の高いシアノ架橋金属錯体 が適していると考えられる。そこで、光応答の実験に不可欠なシアノ架橋金属錯体薄 膜を電解析出法で作成した。特に、作成条件を最適化することにより、111配向膜 が得られることを見出した。さらに、作成された薄膜を酸化する事により、膜の化学 組成を変えることなくカチオンの量を制御できることを見出した。価数制御されたシ アノ錯体膜の基礎物性を測定し、電子相図を完成した。

d) プロジェクトの総合的推進

平成19年度は、9月22日、10月30日、1月26日の計三回、メンバーを招集してプロジェクトの運営に関する打ち合わせを行った。また、国立大学法人筑波大学で開発している小型軽量鏡筒部と独立行政法人理化学研究所で開発している空間・時間制御技術との融合のため、現地での打ち合わせを重ねた。他方、時間分解顕微鏡の検証実験として、フェムト秒レーザーが設置してある高輝度光科学研究センターBL19LXUビームラインにおいてSiまたはGeを用いた実験を立案した。そして、この課題をプロジェクトの重要課題と位置づけ、他の課題に優先して遂行することとした。

### 【8】 プレ戦略イニシャテイブに関する活動

平成19年度のプレ戦略イニシャティブとして、学際物質科学研究拠点(代表:大塚洋一) の提案が、学際光科学研究拠点(代表:守友浩)と革新的ハイブリッド分子創生教育研究 (代表:寺西利治)との融合を条件に、採択された。学際光科学研究拠点では、拠点形成に 向けた活動の一環として、<u>第一回レーザー安全講習会</u>(平成20年3月4日:総合研究棟B棟 0110号室)、および、<u>第一回「光と物質」研究会</u>(平成19年11月10日:総合研究棟B棟0108 号室)、<u>第二回「光と物質」研究会</u>(平成20年3月3日:総合研究棟B棟0108号室)を開催し た。

「光と物質」研究会の趣旨は、「先端光科学とナノサイエンスとの融合」をテーマに分野を 超えた研究者が議論と交流を深め、学際的な新しい研究分野を切り開くきっかけとなること である。講演者のバックグラウンドは、物性物理、化学、工学、生物ときわめて広く、この意 味で独特な研究会となっている。一回目の研究会は、学際光科学研究拠点のメンバーを中 心に行った。ここでは、学際光科学研究拠点が目指すべき方向性、といった将来に向けて の議論を行った。二回目の研究会は、講演者を筑波大学と周辺の研究所に広げた。

### <論文>

 H. Kamioka, Y. Moritomo, W. Kosaka, S. Ohkoshi, Dynamics of charge-transfer pairs in the cyano-bridged Co<sup>2+</sup>-Fe<sup>3+</sup> transition-metal compound, Phys. Rev. B,77, 180301 (2008).

- 2. F, Nakada, H. Kamioka, Y. Moritomo and J. E. . Kim, Electronic phase diagram of valence-controlled Co Fe cyanide, submitted
- Y. Moritomo, F. Nakada, H. Kamioka, J. E. Kim, M. Takata, Desorption–Induced First–Order Phase Transition in a Cyano–Bridged Compound, Appl. Phys. Lett., 92, 141197 (2008).
- K. Kato, Y. Moritomo, M. Takata, H. Tanaka and N. Hamada, Visualization of charge ordering in a half-doped manganite by an electrostatic potential analysis, Phys. Rev. B, 77 (2008) 081101(R).
- J. E. Kim, Y. Ohishi, Y. Moritomo, K. Kato, M. Takata and S. Ohkoshi, Pressure-temperature phase diagram for charge-transfer transition in Cs[Co(3-cyanopyridine)<sub>2</sub>][W(CN)<sub>8</sub>]H<sub>2</sub>O, Phys. Rev. B77, 012101 (2008).
- H. Tokoro, T. Motsuda, T. Nuida, Y. Moritomo, K. Ohoyama, E. d. Loutete, K. Boukheddaden and S. Ohkoshi, Visible–light–induced reversible photomagnetism in rubidium manganese hexacyanoferrate, Chem. Matt., 20, 423–428 (2008).
- K. Kajihara, T. Miura, H. Kamioka, A. Aiba, M. Uramoto, Y. Morimoto, M. Hirano, L. Skuja, H. Hosono, Diffusion and reactions of interstitial oxygen species in amorphous SiO<sub>2</sub>, Journal of Non-Crystalline Solids 354, 224–232 (2008).
- Y. Fukuyama, N. Yasuda, J. E. Kim, H. Murayama, Y. Tanaka, S. Kimura, K. Kato, S. Kohara, Y. Moritomo, T. Matsunaga, R. Kojima, N. Yamada, H. Tanaka, T. Ohshima and M. Takata, Time–Resolved Investigation of Nanosecond Crystal Growth in Rapid–Phase–Change Materials: Correlation with the Recording Speed of Digital Versatile Disc Media, Applied Physics Express, 1 (2008) 045001.
- Y. Fukuyama, N. Yasuda, J. E. Kim, H. Murayama, S. Kimura, H. Kamioka, Y. Moritomo, K. Toriumi, T. Ohshima, H. Tanaka, Y. Tanaka, K. Kato, T. Ishikawa and M. Takata, Ultra-high-precision time control system over any long time delay for laser pump and synchrotron x-ray probe experiment, Review of Scientific Instruments, 79, 045107 (2008).
- Y. Moritomo, F. Nakada, H. Kamioka, T. Hozumi and S. Ohkoshi, Role of the intermediate state in the photoinduced process of Co–Fe cyanide, Phys. Rev. B75, 214110 (2007)
- K. Kato, M. Takata, Y. Moritomo, A. Nakamoto and N. Kojima, On-off optical switching of the magnetic and structural properties in a spincrossover complex., Appl. Phys. Lett. 90, 201902 (2007).
- 12. K. Kato, Y. Moritomo, H. Takata, H. Tokoro, S. Ohokoshi and M. Takata, Extended charge-transfer state of RbMn[Fe(CN)<sub>6</sub>], J. Phys. Soc. Jpn., 76, 123602 (2007).
- J. E. Kim, Y. Ohishi, Y. Moritomo, K. Kato, M. Takata and S. Ohkoshi, Charge-transfer transition in two-dimensional Cs[Co(3-cyanopyridine)<sub>2</sub>][W(CN)<sub>8</sub>]H<sub>2</sub>O as investigated by angle-resolved x-ray diffraction, Phys. Rev. B76, 014106 (2007).

- 14. H. Kamioka, T. Yamaguchi, M. Hirano, T. Kamiya, H. Hosono, Structural and photo-induced properties of Eu<sup>2+</sup>-doped Ca<sub>2</sub>ZnSi<sub>2</sub>O<sub>7</sub>: A red phosphor for white light generation by blue ray excitation, J. Lumi. 122–123, 339–341 (2007)
- 15. S. Kimura, Y. Moritomo, Y. Tanaka, H. Tanaka, K. Toriumi, K. Kato, N. Yasuda, Y. Fukuyama, J. Kim, H. Murayama and M. Takata, X-ray Pinpoint Structural Measurement for Nanomaterials and Devices at BL40XU of the SPring-8,, AIP Conference Proceedings, 879 (2007) 1238–1241
- 16. S. Kimura, Y. Moritomo, Y. Tanaka, H. Tanaka, K. Toriumi, K. Kato, N. Yasuda, Y. Fukuyama, J. Kim, H. Murayama and M. Takata, X-ray pinpoint structural measurement for nanomaterials and devices at BL40XU of the Spring-8, Syncrotoron Radiation Instrumentation: Nineth International Conference, 1238 (2007).
- 17. M.-W. Kim, H. J. Lee, B. J. Yang, K. H. Kim, Y. Moritomo, Jaejun Yu, and T. W. Noh, Enhanced Charge Gap in the Bilayer Manganite La<sub>2-2x</sub>Sr<sub>1+2x</sub>Mn<sub>2</sub>O<sub>7</sub> near *x*=0.4, Phys. Rev. Lett. 98, 187201 (2007).

# <著書>

# <学位論文>

# <講演>

- (invited) Y. Moritomo, Photo-induced effect on some magnetic materials, 3<sup>rd</sup> Indo-Japan Conference on ferroics and multiferroics@koltaka, india, 2008/2/4-6
- (invited) Y. Moritomo, Time-resolved spectroscopy of cyano-bridged compound, PDSTM2008@Bordeaux, France, 2008/1/15-17
- 3. (invited) 守友 浩「反射率同時測定による光誘起現象の構造物性研究」構造物性 研究会@SPring-8、2007/10/29
- 4. (invited) 守友 浩「シアノ架橋金属錯体の温度圧力相図と構造スケーリング」ISSP 短期研究会「圧力をパラメターとして低温物性研究の今後の展望」、2007/10/11-12
- 5. (invited) 守友 浩「シアノ錯体の超高速分光」学術創生研究会@仙台、 2008/3/14-16
- Hayato Kamioka, Yutaka Moritomo, Wataru Kosaka, Shin-ichi Ohkoshi, Time-resolved spectroscopy of Fe-Co nano particle, ISIMS-2008@Tsukuba、 2008/3/13-14
- 7. Hayato Kamioka, Yutaka Moritomo, Wataru Kosaka, Shinichi Ohokoshi, Dynamics of the charge-transfer excitation in a cyano-bridged metal system, PDSTM2008@Bordeaux, France、2008/1/15-17 (ポスター)
- 8. 上岡隼人、中田文也、守友浩、高坂亘、大越慎一「フェムト秒過渡吸収分光法を用いた Co-Fe シアノ錯体における電荷移動初期過程の観測」2008 年日本物理学会 年次大会@大阪、2008/3/23-26

- 9. 中田文也、上岡隼人、金廷恩、守友浩、「価数制御された Co-Fe シアノ錯体の電子 相図」2008 年日本物理学会年次大会@大阪、2008/3/23-26
- 10. 福山祥光、安田伸広、金廷恩、村山美乃、田中義人、木村滋、守友浩、鳥海幸四郎、 大島隆、上岡隼人、田中均、松永利之、児島理恵、山田昇、加藤健一、小原真司、 高田昌樹「ピンポイント構造計測による DVD 記録材料の時分割構造評価」2007 年 日本物理学会年次大会@北海道、2007/9/21-24
- 11. 福山祥光、安田伸広、金廷恩、村山美乃、田中義人、木村滋、守友浩、鳥海幸四郎、 大島隆、上岡隼人、田中均、松永利之、児島理恵、山田昇、加藤健一、小原真司、 高田昌樹「X線ピンポイント構造計測による DVD 記録材料の結晶-アモルファス相 変化の直接観察」2007 年日本物理学会年次大会@北海道、2007/9/21-24
- 12. 福山祥光、安田伸広、金廷恩、村山美乃、田中義人、木村滋、守友浩、鳥海幸四郎、 大島隆、上岡隼人、田中均、松永利之、児島理恵、山田昇、加藤健一、小原真司、 高田昌樹「時間分解X線回折装置を用いたピンポイント構造計測」2007年日本物理 学会年次大会@北海道、2007/9/21-24(ポスター)
- 13. 金廷恩、大石泰生、守友浩、大越慎一、高田昌樹「Co-Wシアノ錯体の温度-圧 カ相図と構造との相関」2007年日本物理学会年次大会@北海道、2007/9/21-24
- 14. 中田文也、上岡隼人、金廷恩、守友浩「Co-Fe シアノ錯体の光学スペクトルの組成 依存性」2007年日本物理学会年次大会@北海道、2007/9/21-24
- 15. 上岡隼人, 守友浩「磁気相転移の時間・空間発展過程を一括取得するための多チャンネル測定系の開発」2007年日本物理学会年次大会@北海道、2007/9/21-24 (ポスター)

# <受賞>

### <特許>

- 1. 守友 浩、中田文也「シアノ架橋金属錯体作成方法およびシアノ架橋金属錯体作 成装置」特願 2007-216249、筑波大学、2007/8/31
- 2. 守友 浩、金 廷恩、加藤健一、高田昌樹「微細物性加工方法および微細物性加工 装置」特願 2007-191255、高輝度光科学研究センター、2007/7/31
- 3. 守友 浩、中田文也「圧力素子および圧力測定方法」 特願 2007-284858、筑波大学、 2007/11/1
- 4. 守友 浩、川本徹、田中寿「シアノ架橋金属錯体抵抗素子および抵抗制御方法」特 願 2007-336449、産業技術総合研究所、2008/12/27

### <その他>

そした。「またい」ので、こので、こので、こので、こので、こので、こので、こので、こので、こので、こ	ど物質の性質に明なな、酸化学の性質に明なな、酸化学に必要の性質に関ム、生態に適切と可能化質に関ム、生態に適切と可能化的に適可し	上簡龍一教授研究室は、高州ミカンの側 イム和田町では水の名が小細胞」の増殖を得え た場合、肝臓がん細胞」の増殖を得え た場合、肝臓がん細胞」の増殖を得え た場合、肝臓がん細胞」の増殖を得え	And the second s
きる。 これでいた学 親たじへの学 発育しい機 フィンラン アイズの コンア(パー	現在の 電子の 電子の 電子の 電子の 電子の 電子の 電子の 電子	ル指出物や て臨床応用を している。今	大りつけ 間(8月44月3日) 「大」 育成を提励して、 有成を提励して、
ショー市」ない木材防護用で乾田	をかけると」での 「主教会」としての のためになることを解問 ないための と、この 物を相み合わせ をしていため していた。 たちることを解問 のたいできたので、 様 や のので、 ので、 ので、 ので、 ので、 ので、 ので、 ので	はないなかった。今日の1000000000000000000000000000000000000	いる。 一般本へ変化するという 和学が職能 電気抵抗率が一万 しょって実験的に解 ので、 の学が職能 電気抵抗率が一万
n retorn いつかった報告、境来のキル など、約~3店福を要した だと約~3店福を要した にならて、従来の ドレンロートにものとい、従来のキル	を からア マーショク・ショク の の た い カラ マーショク・ショク ショク 、 ショク 、 の の た 、 、 、 、 、 、 、 、 、 、 、 、 、	表示 素 素 素 素 ま ま ま ま ま ま た ま ま た ま ま た ま ま た ま ま た よ ま こ た よ う い ま こ た よ う い ま こ た よ う い ま こ た よ う い た こ た よ う い た こ た よ う い た こ た よ う い た こ た よ う い た こ た う い た こ た う い た こ た う い た こ た う い た こ た う い た こ た う い た こ た う い た こ た う い た こ た う い た う い た う た い た こ た う い た う た う に た う い に う い た う う う う う ち う た た た う た う た た た た た た た た た た た た た	時され 「日本」、 和助したいとしている。

2008年2月28日(木) 日刊工業新聞 朝刊 33面


₩-5. 低温物性グループ

教	授	大塚洋一							
講	師	神田晶申							
助	教	森下將史							
研究	段	大木泰造、	後藤秀徳	贰 下岸史	こ明				
大賞	综生	坂口勇也、	佐藤崇、	古堅亮、	新山雄	(数理物質研究科	2年)、	山岸徹	(同1年)

低温物性実験グループでは、金属クラスター、カーボンナノチューブ、グラファイト超薄膜、サイズ がコヒーレンス長以下の微小超伝導体、単原子接合や単分子接合など様々なナノスコピック構造の電子 輸送現象の研究および吸着<sup>3</sup>He 薄膜の核磁性の研究を行っている。大塚および神田は学際物質科学研究 センター量子制御コアの担当である。2006 年度から大阪大学および東京理科大学との三大学連携融合事 業「アトミックテクノロジー創出事業」のメンバーとして、国際会議 ISAT-2(淡路国際会議場)や3大 学連携学生研究会(長万部)の開催・参加に当たった。また、平成 19 年度筑波大学プレ戦略イニシアテ ィブ「学際物質科学研究拠点」(代表:大塚)のメンバーとして、国際シンポジウム(ISIMS-1)を開催す るとともに、学際研修コース「ナノリソグラフィー実習」を研究室の微細加工設備を用いて実施した。

【1】Ni<sub>3</sub>A1(111)上アルミナ超薄膜の電子状態 (新山、大木)

NiAl(110)やNi<sub>3</sub>Al(111)等のニッケルーアルミ合金の清浄表面を適当な条件下で酸化させると、原子レベルで均質な厚さ0.5 nmのアルミナ超薄膜が成長することが最近の研究で報告されている。この膜の厚さは走査トンネル顕微鏡(Scanning Tunneling Microscopy: STM)の試料-探針間(約 1 nm)に比べて小さいため、アルミナ超薄膜/金属の系の局所的な構造、電子状態を原子スケールで探ることができる理想的な試料といえる。加えてNi<sub>3</sub>Al(111)の場合、アルミナ長薄膜が超構造を持つことにより金属を蒸着すると決まったサイトに金属クラスターが成長することが最近発見された。これはモデル触媒として、またはクラスター自体の電子状態や磁気的性質を探るためのテンプレートとして特に注目を集めている。

Ni<sub>3</sub>Al (111)上アルミナ超薄膜の電子状態についてはこれまでSTM、STS、UPS による実験が幾つかな されているが、まだ十分にわかっていない。我々はNi<sub>3</sub>Al (111) 上に成長するアルミナ超薄膜の局所電子 状態をより詳細に調べるため、STM /STS を用い測定を行った。特にコンスタントカレントモードで *dl/dV* 



図1:(a) Ni<sub>3</sub>Al (111)上アルミナ超薄膜のトポ像(上段)と dl/dV 像(下段) (11×11 nm<sup>2</sup>)(b) dl/dV スペクトル測定中の探針高さ変化(c) dl/dV スペ クトルの場所依存性。スペクトルの測定中はトンネル電流を0.10 nA に一定 にするようにフィードバック回路をオンにして測定している。点線は二重 トンネルバリアのモデルを用いた計算結果。



測定を行うことで、超構造のサイトに強く依存するスペクトルを高い精度で得ることができた(図1)。 膜のほぼすべての場所で+2.7V付近に鋭いピークが見られ、またA・Bサイトではこれに加え、広いバイ アス範囲でいくつかのブロードなピークが見られた。2.7Vのピークは、この位置に伝導帯端をもつアル ミナ超薄膜と真空からなる2重トンネルバリアを仮定するとうまく説明できた。またこのモデルはスペク トル測定中の探針の動きも再現でき、アルミナ超薄膜の伝導帯端が基板フェルミレベル上2.7eVに位置し ていると結論した。A・Bサイトに見られたそのほかのピークは界面状態の影響等が可能性として考えら れるが詳細はわかっていない。

### 【2】多層グラフェン(グラファイト超薄膜)の電気伝導(佐藤、田中、後藤、神田)

従来の有機トランジスタ材料を凌駕する移動度を持つ系としてパイ電子系分子面内伝導材料に着目し、 その代表例としてグラファイト超薄膜の基礎的な伝導特性(電子、スピン、クーパー対)を明らかにす べく、研究を行っている。近年単層膜であるグラフェンの研究が盛んに行われているが、グラフェンは その単原子膜厚という極端な薄さのためにキャリヤ輸送に基板凹凸や不純物の影響が大きく現れ、材料 が本来持つ高性能が発現しにくい可能性がある。実際そのようなことが最近の実験で指摘され始めてい

る。一方、膜厚を厚くしすぎると電界効果が遮蔽され るためにデバイス制御がしにくくなるので、膜厚の最 適化が必要となる。我々は、独自の方法によって、高 効率のトップゲート電圧印加を実現し(図2(a))、伝導 の膜厚、ゲート電圧依存性から、層間方向の電界遮蔽 長が1.2 nmであることを実験的にはじめて明らかにし た。これは、今後のデバイス設計に大きな指針を与え る。また、微細加工法と自然形成法の両方の方法によ ってグラファイトリボンを形成することに成功し、リ ボンでは膜の凹凸に起因した単一電子帯電効果によっ て伝導のゲート制御が可能であることを初めて示した。

さらに超伝導体、磁性体を電極に用いることで、ク ーパー対伝導、スピン伝導の特性を明らかにした(図 3)。超伝導体接合では、近接効果による超伝導電流を ゲート電圧によって変調させることに成功した。超伝 導電流は exp(-(T/T<sub>0</sub>)<sup>2</sup>)に比例して温度低下とともに 急激に増加するが、これは従来のSNS接合の振る舞 いとは大きく異なり、電界遮蔽の影響を考慮しなけれ ばならないことを示唆している。また、超伝導電流の ゲート電圧依存性を調べることによって、電子超伝導

臨界電流がホール超伝導臨 界電流よりも常に大きくな る「電子ホールの非対称性」 を見出した。磁性体接合で は、非局所磁気抵抗測定を 用いて、磁性体の磁化の向 きに応じたスピン注入を観 測した。スピンシグナル(磁 性体電極の磁化が平行・反



図<sup>2</sup>:多層グラフェンの(a)トップゲート 試料と(b)ナノリボン。



図3:多層グラフェンの超伝導(a)、磁性体(b)デバイス。

平行のときの非局所磁気抵抗の差)とグラファイトの面抵抗には線形の依存性があることを見出し、理 論との比較から、スピン緩和長が8ミクロンよりも十分に大きいという結論を得た。この長さは、他の 材料(グラフェン含む)に比べてもきわめて長く、グラファイト超薄膜のスピンデバイス材料としての 優位性を示している。

本研究は、塚越一仁、宮崎久生(産総研)、小高隼介、青柳克信(東工大)、林正彦(秋田大)、吉岡英生(奈良女子大)各氏との共同研究である。

【 3 】メゾスコピック超伝導体における渦糸状態(古堅、初見、神田)

サイズが超伝導コヒーレンス長や磁場侵入深さと同程度のメゾスコピック超伝導体では、磁場を印加 すると、バルクとは異なる特殊な超伝導状態が出現する。例えば、バルクの第2種超伝導体では通常、 渦糸は渦糸間に働く斥力のために三角格子(Abrikosov)を組むが、メゾスコピック超伝導薄膜では、試 料境界からの反発力も受けるので、試料形状を反映したいわゆる多重渦糸状態や巨大渦糸状態を形成す る。また、微細リングでは、超伝導電流の1次元渦という特殊な現象も理論的に20年来予測されてきた。 我々は、Multiple-small-tunnel-junction(MSTJ)法と呼ぶ独自の方法を使って、このような新奇 渦糸状態の実験的検証を行っている。MSTJ法では、メゾスコピック超伝導体の複数箇所にSINトン ネル接合を取り付け、その箇所のトンネル分光から超伝導電流密度の空間分布に関する情報を得る。得 られる情報は部分的なものであるが、試料形状の対称性を考慮することによって、渦糸状態を予測する ことが出来る。また、実験結果を、非線形ギンツブルグーランダウ理論に基づいた数値計算結果と比較 することで、実験結果の正当性を判断できる。前年度までに、巨大渦糸状態、多重渦糸状態一巨大渦糸 状態間の転移(2次転移)、非対称リングにおける1次元渦糸の存在を実験的に明らかにしてきた。今年 度は、2000年以降理論的にその存在が予言されていながら、未だに実験的証拠が得られていない反渦糸 の観測と、情報処理を目指した渦糸状態の外部パラメタによるコントロールを目標として実験を行った。

(1) 反渦糸の探索

渦度3の矩形試料では、巨大渦糸状態、3つの渦糸が存在する多重渦糸状態のほかに、試料の頂点付 近に渦糸が(計4個)あり、中心に反渦糸が存在する渦糸一反渦糸分子が存在する可能性がある。ただ し、渦糸反渦糸間に働く引力のためにその間隔が極めて小さくなり、実験的な検証は困難とされてきた。 近年、共同研究をしているアントワープ大学のグループから、試料に2x2の微細孔をあけることで反 渦糸が安定化するパラメタ範囲が広くなり、実験的検証も容易になることが提案された。我々は、アン トワープ大学との綿密な打合せのもと、物質材料研究機構高野グループの協力も得て、MSTJ法や渦 糸状態転移磁場の温度依存性を手段に反渦糸の検証を試みた。現在のところ、決定的な証拠を得るまで には至っていない。

(2) 磁束ピニング中心の配置と渦糸状態の安定性

矩形試料に微細孔をあけることで、渦糸状態の安定性がどのように変化するかを調べた。2 x 2 の微 細孔がある試料では、無い試料に比べて、すべての渦度において、渦糸状態の安定化する磁場範囲が大 きくなる。とくに、渦糸配置と微細孔配置の対称性が一致する渦度2、4、8で増大が顕著になるとい うマッチング効果が観測された。また、2 x 2 の微細孔のある試料と、2 x 2 のうちの1 つの孔がない試 料を比較すると、渦度4の状態の渦糸排出磁場のみが大きな変更を受けるが、他の渦度に関してはあま り影響が現れないことがわかった。この結果は一部数値計算結果と合わないところがあり、現在その原 因を検討している。

(3) 渦糸位置の検出と渦糸状態制御

矩形試料の渦度2の状態では、安定な渦糸配置は対角線方向の2通りある。これらを"0"、"1"に



図4:2x2の微細孔を持つ矩形試料 (MSTJ 測定用)の概略図(a)と磁場掃 引時((b)上昇(c)下降)の接合J1、J2 の電圧変化。電圧のとびが渦糸の侵入、 排出に対応する。

対応させることで、quantum cellular automata の渦糸版(Fluxonic cellular automata)ができあがる。 これは本研究開始当初からのターゲットのひとつであったが、理論グループ(アントワープ大学)の最 近の論文で、実際に演算可能であることが示された。我々はこれを実現すべく、基礎実験に取り掛かっ た。我々の場合、MSTJ法を使うことで、演算結果を容易に検出できるという利点がある。まず、2x 2 の微細孔をもつ矩形試料に対しMSTJ法を用いることで、実際に渦糸配置が検出できることを示し た(図4)。さらに、外部パラメタを変化させることで、渦糸配置の切り替えを試みたが、希釈冷凍機の 不調もあり、成功には至っていない。

本研究は、M.V. Mikošević, F. M. Peeters (アントワープ大学 (ベルギー))、J. Berger (テクニオン (イスラエル))、林正彦 (秋田大)、山口尚秀、高野義彦 (物材機構) 各氏との共同研究である。

#### 【 4 】 MBJ 法による単分子伝導の研究 (下岸、坂口、乾、萩原、大塚)

機能性ブロックを設計的に組み込んだ1分子デバイスへの展開を一つの目標として、原子ワイヤ、単 原子ポイントコンタクト、少数分子接合等の電子輸送の研究が注目を集めている。このようなナノ導体 の電気伝導はランダウアの伝導描像で理解され、その電気伝導度は量子コンダクタンス

 $G_0 = 2e^2 / h = (12.9 \text{ k}\Omega)^{-1}$ を係数とした各伝導チャネルの透過率 $\tau_i$ の和に等しい。従って、伝導の素過程

を理解するにはチャネル数とその透過率を知る必要があるが、通常のオーミック抵抗測定では透過率の 和のみしか知り得ない。ナノ導体をはさむ電極が超伝導金属である場合、電流はクーパー対と準粒子に よって運ばれ、特に超伝導エネルギーギャップ以下の電圧領域で著しい非線形性を示す。この領域では 多重アンドレーエフ反射による複数のクーパー対と準粒子が関与した過程によって伝導が起こるためで ある。アンドレーエフ反射の確率は透過率に強く依存するため、非線形の度合いは透過率によって異な り、一般には、アンドレーエフ反射の回数に応じて V=2Δ /ne の位置に特徴的な階段状構造が生じる。 複数のチャネルからなる接合では電流はこれらの曲線の和となるため、非線形性を手がかりにしてチャ ネル毎の透過率を決定することが可能となる。

我々は機械的破断接合(mechanical break jucntion, MBJ)法を使って超伝導金属の原子ポイントコンタクトや少数分子接合系の伝導を調べている。MBJ法は弾性基板を曲げ変形させることによって、その上に固定した金属細線を破断し再結合させる方法であり、簡単に高精度の間隔制御ができるほか、構造が単純であるため低温装置への実装も容易である。今年度はNbとPbを電極としてこれに水素分子を架橋した系について研究を行った。

Nb の場合、水素の導入によってコンダクタンスヒストグラムに見られるピーク位置が2.5 ~ 3 G<sub>0</sub>から1 G<sub>0</sub>付近に移動し、バリスティックな伝導チャネルの形成を示唆する。0~3 G<sub>0</sub>コンダクタンスを有する接合について4.2Kで電流・電圧特性を測り、多重アンドレーエフ反射理論による解析を行った



図5: (A) Nb-Nb、及び (B) Nb-H2-Nb ナノブリッジの伝導チャネル透過率の構成

結果、同理論でおおむねフィッティング可能であることがわかった。多数の IV 曲線に関するフィッティ ングによって得た透過率 { τ<sub>i</sub>}の構成を図 5 - B に示す。図 5 - A は水素導入前の Nb ポイントコンタクト における同様の解析の結果である。コンダクタンスヒストグラムの 1 Gでのピークは透過率 1 のバリス ティックな伝導チャネルの形成を示唆するが、1 × G近傍の 17 本の IV 曲線にはそれを示すものは発見 されなかった。一方、Pb 及び Pb+H<sub>2</sub>系の場合はヒストグラムのピークに大きな変化はみられず、伝導チ ャネル及びチャネルの透過率にも変化はみられなかった。これは、接合や伝導に関して、Pb 電極は水素 分子の影響をほとんど受けないことを意味する。

また、金を電極とした**MCBJ**法で有機分子1,4-Benzenedithiolの単分子伝導について室温度で測定を行った。ベンゼンジチオールは最も単純な有機分子の一つであるにもかかわらず、そのコンダクタンスに関して1.1×10<sup>-2</sup> G<sub>0</sub> ~4.1×10<sup>-4</sup> G<sub>0</sub>の実験によって桁違いの値が報告されている。我々は1G<sub>0</sub>以下の領域でのコンダクタンスヒストグラムを詳しく検討することによって、平均破断曲線を導いた。ヒストグラムには明確なピークは見られないが、約0.01G<sub>0</sub>以上のコンダクタンス領域でAu-Au系とAu-BDT-Au系の平均破断曲線に違いが生じることから、BZT分子のコンダクタンスは0.01G<sub>0</sub>程度以上であるが、その値は接合毎に大きく変わると結論した。

### 【5】トンネル接合型マイクロ SQUID の開発 (山岸、大塚)

数年前に手がけその後中断していた微小トンネル接合を利用した小型 SQUID の研究を再開した。図6 は試作したマイクロ SQUID の電子顕微鏡画像であり、2 層レジストによる電子線リソグラフィーと真空 斜め蒸着、リフトオフで作製した。一辺が 2 μm、線幅 0.2 μm の A1 四角リングで、図中の白丸 2 カ所に あるトンネル接合は接合面積は 0.015μm<sup>2</sup>、トンネル抵抗は約 10 kΩである。この素子は希釈冷凍温度域 でも抵抗ゼロの超伝導分枝はなく、代わって低電流領域ではほぼオーミックな特性を示す。さらにこの



図 6 : トンネル接合型 Al マイクロ SQUID (走査電子顕微鏡写真)



図7. SQUID 両端の電圧の垂直磁場依存性

オーミック抵抗値は外部磁場によって変化する(図7)。また図が示すように、0.1mV×0.1nA=10fW以下の発熱量で定常的な測定が十分可能である。応用を目指す上で、より高い温度で動作する素子の開発は 欠かせない。そこで9.2Kの超伝導臨界温度をもつNbを用いたマイクロ SQUID の作製も行いつつある。 Nb は活性な金属であり、PMMA を用いたレジストマスクに蒸着した場合 T<sub>c</sub>が著しく低下することが知ら れている。これを抑制する方法として PES (phenylene-ether-sulfone) レジストを用いたプロセスも試 みた。

【6】 グラファイト上吸着ヘリウム3固相薄膜の研究 (森下)

グラファイトは原子レベルで平坦な表面をもち、ここに吸着したヘリウム3(<sup>3</sup>He)薄膜もよく定義された層構造 をもつ。<sup>3</sup>He は核スピン 1/2 をもち、固相薄膜はほぼ理想的な2次元量子スピン系のモデル物質を与える。こ の系の特徴は吸着面密度を変化させることにより、磁性を強磁性から反強磁性まで広い範囲で変化させること ができることにある。これは、多体交換相互作用の競合の変化として理解されている。<sup>3</sup>He 薄膜は2次元性に優 れ、整合三角格子で反強磁性を与えるため、frustrate した2次元反強磁性量子スピン系の研究に有力な情報 を与える一方、多体交換相互作用の競合がさらなる frustration を与え、事情は複雑になっている。本研究にお いては、超低温度までの熱容量測定を中心にこの系の調査を行っている。本年度はこれまで行ってきた弱い 磁場中での熱容量・熱伝導測定を300 Gまでから600 Gまで拡張して行い、吸着第2原子層の固相スピン系に ついて新たな知見を得た。また、吸着第2原子層整合固相において 1/4 の<sup>3</sup>He 原子を<sup>4</sup>He 原子に置換するこ とにより、カゴメ格子上量子スピン系を実現できる可能性を強く示唆する結果を得た。以下に詳細を示す。なお、 実験は全て、研究基盤総合センター低温部門共同利用設備を用いて行われた。

#### (1)<sup>3</sup>He 固相薄膜熱容量の異常な磁場依存性

これまで行ってきた吸着第2層における磁場中での熱容量測定を継続するとともに、300 G までから 600 G まで拡張した。磁場はグラファイトの表面にほぼ平行にかけられている。100 G の磁場は 10 µK の Zeeman エネルギーに相当し、交換相互作用の大きさに比べ2桁程度小さい。

図8に様々な磁場における 18 nm<sup>-2</sup>の面密度をもつ整合反強磁性試料(4/7 相)の熱容量を示す。三角格子 構造をとるために幾何学的 frustration が強く、多体交換相互作用の競合も強くなっており、gapless spin liquid 状態が実現しているものと考えられている。零磁場で多体交換相互作用の強い競合のために熱容量はダブ

ルピーク構造をもつが、磁場の増大とともに低温ピ ークが増大し、600 G の磁場では2つのピークがほ ぼ1つになり大きなピークを与えている。強い fustrationのために多数存在する low lying states に 磁場によりギャップを生じ、低温側に隠れていたエ ントロピー変化が高温に出現した可能性が考えられ る。また、強い fustration や競合のために T -linear に近い異常な依存性を示していたが、磁場により fustration や競合が解かれ、正常な T<sup>2</sup> に比例した 依存性に近づいた可能性もある。測定された熱容量 から求めたスピンエントロピー変化は 600 G の磁場 で急増しており、零磁場中では従来考えられていた より、さらに低温にスピン自由度が残っており、low lying states の状態密度が大きいことを示す。



図8: 吸着第2層反強磁性固相薄膜(18 nm<sup>-2</sup>) の熱容量の磁場変化。実線はガイドライン。 弱い磁場にも関わらず、顕著な磁場依存性 が観測される。



図9: 吸着第2層強磁性固相薄膜(26 nm<sup>--</sup>)の熱容量(a)及びスピンエントロピー(b)の磁場変化。(a) での実線はガイドライン。(a)において、ピークの高さやピークを与える温度は変化するが、ピーク の低温での温度依存性は変わらない。(b)において破線は*T*-linearな熱容量を仮定して外挿した 変化であるが、600 G で観測された変化量を説明できない。

一方、強磁性的な振る舞いを示す 26 nm<sup>2</sup>の面密度をもつ試料の様々な磁場中における熱容量を図9(a)に示 す。零磁場における熱容量の振る舞いは、高温域は三角格子上強磁性 Heisenberg 系比熱の高温展開で、低 温域は同系スピン波の *T* -linear な比熱で良く再現でき、一見単純な強磁性 Heisenberg 系と見なして良さそう に見える。磁場をかけても、高温域の温度依存性は変化せず、ピークの低温側は温度に比例し、やはり強磁 性 Heisenberg 系の振る舞いを示す。しかし、磁場をかけることにより、ピークの高さは一旦減少したあと、低温 にシフトしながら増大を示している。磁場による変化をわかりやすくするために、図9(b)に測定された熱容量か ら求めたエントロピー変化を示す。零磁場と 300 G の磁場中での結果を比較すると、磁場をかけた方がエント ロピーの変化が減少する。この面密度における<sup>3</sup>He 薄膜吸着第2層は絶対零度では完全に偏極するものと考 えられていたが、磁場が短距離秩序の成長を阻害することは説明できない。例えば Canted Antiferromagnetismを示すのであれば、磁場が短距離秩序の成長を阻害することも可能である。600 G の磁場 をかけることによりスピンエントロピーの変化は増大している。これも非常に多くの low lying states が存在し、最

低温度付近でもまだ多くのスピン自由度を残していることを意味 し、単純な強磁性相でないとの仮説と一致する。

(2) カゴメ格子<sup>3</sup>He 単原子層膜の熱容量

三角格子上、及びカゴメ格子上の反強磁性スピンは、2次元 系における幾何学的 frustration の強い代表的な系である。これ らはともに三角形を基調としているが、その性質は大きく異なる。 古典スピン系では、三角格子上反強磁性スピン系の基底状態は ただ一つであるのに対し、カゴメ格子上反強磁性スピン系の基 底状態はマクロな個数の状態が縮退している。また、三角格子 では絶対零度で長距離秩序を生ずるのに対し、カゴメ格子では ゆらぎの影響がより強く、絶対零度においてすら長距離秩序が 期待できない。三角格子、カゴメ格子、双方ともに様々な物質で 精力的な研究が為されているが、格子の違いに由来する明確な 差異はこれまで観測されていない。



A-site (2nd layer)
 B-site (2nd layer)

図10: 吸着第2層 4/7 相について 最近提案された吸着構造。A-site のみを取り出すとカゴメ格子が形成 される。



図11: <sup>3</sup>He-<sup>4</sup>He 吸着薄膜の熱容量。面密 度は 4/7 相を 1 として表示。ダブルピーク 構造のうち、低温ピークはスピン由来、高 温ピークは<sup>3</sup>He/<sup>4</sup>He 置換に由来すると考え られる。



図12: カゴメ格子と三角格子での熱 容量の比較。三角格子の方が大きく ブロードなピークが観測されている。

グラファイト上吸着<sup>3</sup>He 薄膜の吸着第2原子層に生ずる 4/7 相と呼ばれる三角格子整合固相は反強磁性的 な性質をもつ。この系の吸着構造は Elser により提案されている。これによると、吸着第2層の<sup>3</sup>He 原子の吸着 サイトには2種類有り、3/4 がエネルギーの低い安定なサイト、1/4 がエネルギーの高い不安定なサイトである。 ごく最近、Takagi により、Elser の提案する吸着構造は誤りであり、図10に示すような、より安定な吸着構造が存 在することが示された。これによると、Elser の吸着構造とは逆に 1/4 がエネルギーの低い安定なサイトに、残り 3/4 がエネルギーの高い不安定なサイトに吸着する。もし Takagiの提案する吸着構造が正しければ、4/7 相に おいて吸着第2層の<sup>3</sup>He 原子の 1/4 を<sup>4</sup>He に置換すると、安定なサイトを非磁性な<sup>4</sup>He が占めることが期待さ れるため、純然たるカゴメ格子上量子スピン系が実現される可能性が指摘できる。実際に、このような<sup>3</sup>He-<sup>4</sup>He 薄膜の熱容量を測定し、実際にカゴメ格子が実現されているか検証を行った。試料は、面密度スケールの誤 差も考慮し、3種類のものを用意した。熱容量の測定結果は図11に示すようにダブルピーク構造をもつ。低温 側のピークがスピン短距離秩序の成長に伴う熱容量ピーク、高温側のピークは、<sup>3</sup>He と<sup>4</sup>He の置換(混合)の自 由度に由来するものと考えられる。実際、基底状態として Takagi の提案する吸着構造を仮定すると破線のよう になり、高温ピークを比較的よく再現できる。一方、Elser の提案する吸着構造を基底状態に仮定したのでは、 一点鎖線で示すように非常に小さな熱容量ピークしか出現が期待されない。これは、Takagi の主張する吸着 構造を強く支持し、カゴメ格子実現を強く示唆する。以下、この系をカゴメ格子と見なして議論を行う。

上述のモデルに従って、混合の熱容量を差し引き、カゴメ格子スピン系の熱容量を取り出すと図12のように なる。ここでは、低温域のみを片対数グラフで示してある。これを三角格子と比較する意味で、東大グループ による吸着第1層目が<sup>4</sup>He、2層目が純粋な<sup>3</sup>Heの4/7相での測定結果と比較する。<sup>3</sup>He原子の個数が等しく なるように、三角格子の結果は3/4倍して示す。ピークを与える温度やピークの高さを含め、振る舞いは三角 格子とカゴメ格子で異なる。また、三角格子で観測されたダブルピーク構造はカゴメ格子では見られない。理 論計算により格子の違いによる差異が予測されているが、両格子におけるピークの大小や位置、幅などの関 係は、観測結果と理論計算で非常によく一致しており、これもカゴメ格子の実現を強く示唆する結果である。ダ ブルピーク構造の有無については観測と理論計算とでは全く逆の結果になっているが、これは理論計算では 多体交換相互作用を考慮していないためと考えられる。

置換に由来すると考えられる高温ピーク、スピン系からの寄与である低温ピークともに、カゴメ格子の実現 を非常に強く示唆している。 <学位論文>

- 佐藤崇:グラファイト超薄膜における超伝導近接効果(数理物質科学研究科、物理学専攻、修士論 文、2008年3月)
- ・ 坂口勇也: 超伝導ポイントコンタクトスペクトロスコピーによる単分子接合系の伝導チャネル解析 (数理物質科学研究科、物理学専攻、修士論文、2008年3月)
- ・ 新山雄:Ni<sub>3</sub>Al(111)上アルミナ超薄膜の電子状態(数理物質科学研究科、物理学専攻、修士論文、 2008年3月)
- ・ 古堅亮:メゾスコピック超伝導体における新奇渦糸状態の探索(数理物質科学研究科、物理学専攻、 修士論文、2008 年 3 月)

<論文>

- H. Goto, A. Kanda, T. Sato, S. Tanaka, Y. Ootuka, S. Odaka, H. Miyazaki, K. Tsukagoshi, and Y. Aoyagi: Gate control of spin transport in multilayer graphene, Applied Physics Letters, in press.
- 2. 神田晶申,塚越一仁:グラファイト超薄膜の超伝導近接効果,表面科学,印刷中
- T. Sato, A. Kanda, T. Moriki, H. Goto, S. Tanaka, Y. Ootuka, H. Miyazaki, S. Odaka, K. Tsukagoshi, Y. Aoyagi: A different type of reentrant behavior in superconductor/thin graphite film/superconductor Josephson junctions, Physica C, in press.
- S. Odaka, H. Miyazaki, T. Moriki, T. Sato, A. Kanda, K. Tsukagoshi, Y. Ootuka, Y. Aoyagi: Coulomb Blockade Oscillations in Patterned Ultrathin Graphite Films, Jap. J. Appl. Phys. 47(1), 697-699 (2008).
- H. Miyazaki, S. Odaka, T. Sato, S. Tanaka, H. Goto, A. Kanda, K. Tsukagoshi, Y. Ootuka, Y. Aoyagi: Inter-Layer Screening Length to Electric Field in Thin Graphite Film: Applied Physics Express 1, 034007 (3 pages) (2008).
- H. Miyazaki, S. Odaka, T. Sato, S. Tanaka, H. Goto, A. Kanda, K. Tsukagoshi, Y. Ootuka, Y. Aoyagi: Coulomb Blockade Oscillations in Narrow Corrugated Graphite Ribbons, Applied Physics Express 1, 024001 (3 pages) (2008).
- T. Sato, S. Tanaka, H. Goto, A. Kanda, Y. Ootuka, H. Miyazaki, S. Odaka, K. Tsukagoshi, Y. Aoyagi: Observation of gate-controlled superconducting proximity effect in microfabricated thin graphite films, Journal of Physics Conference Series, 109, 012301 (4 pages) (2008).
- T. Sato, T. Moriki, S. Tanaka, A. Kanda, H. Miyazaki, S. Odaka, Y. Ootuka, K. Tsukagoshi,
   Y. Aoyagi: Gate-controlled superconducting proximity effect in ultrathin graphite films: Physica E 40, 1495-1497 (2008).
- T. Moriki, A. Kanda, T. Sato, H. Miyazaki, S. Odaka, Y. Ootuka, Y. Aoyagi and K. Tsukagoshi: Electron transport in thin graphite films: Influence of microfabrication processes, Physica E 40, 241-244 (2007).
- 10. R. Furugen, S. Hatsumi, Y. Ootuka, A. Kanda: Stability of vortex states in mesoscopic superconducting squares with artificial pinning, Physica C, in press.
- 11. J. Berger, A. Kanda, R. Furugen, Y. Ootuka: Location of flux-induced vortex, Physica C, in press.
- R. Furugen, S. Hatsumi, Y. Ootuka, A. Kanda: Vortex states in mesoscopic superconducting squares with engineered pinning, Journal of Physics Conference Series, 109, 012010 (4 pages) (2008).
- 13. M. Hayashi, H. Yoshioka, A. Kanda: Superconducting proximity effect through graphene and graphite films, Journal of Physics Conference Series, 109, 012014 (4 pages) (2008).
- A. Kanda, S. Hatsumi, R. Furugen, Y. Ootuka: Detecting superconducting states in nanoscale superconductors using multiple-small-tunnel-junction method, Journal of Physics Conference Series, 109, 012016 (4 pages) (2008).
- 15. A. Kanda, B. J. Baelus, D. Y. Vodolazov, J. Berger, R. Furugen, Y. Ootuka, F. M. Peeters: Evidence

of a different type of vortex that mediates a continuous fluxoid- state transition in a mesoscopic superconducting ring, Phys. Rev. B, 76, 094519 (8 pages) (2007).

- R. Furugen, A. Kanda, D.Y. Vodolazov, B.J. Baelus, Y. Ootuka and F.M. Peeters: Fluxoid state transitions in mesoscopic superconducting rings: Effect of geometrical symmetry, Physica C, 463-465, 251-253 (2007).
- 17. B. J. Baelus, A. Kanda, D.Y. Vodolazov, Y. Ootuka and F.M. Peeters: Quasi-one-dimensional vortex in an asymmetric superconducting ring, Physica C, 460-462, 320-321 (2007).
- M. Morishita, "Heat Capacity of <sup>3</sup>He Solid Films on Graphite in Magnetic Fields", J. Low Temp. Phys., 148, 761-765 (2007).
- M. Morishita, "Heat Transfer between <sup>3</sup>He Solid Films and Graphite in Magnetic Fields", J. Low Temp. Phys., 148, 767-771 (2007).

#### <講演>

国際会議

- 1. Hidenori Goto, Takashi Sato, Sho Tanaka, Akinobu Kanda, Youiti Ootuka, Shunsuke Odaka, Hisao Miyazaki, Kazuhito Tsukagoshi and Yoshinobu Aoyagi Spin Transport in Ultrathin Graphite Films ISIMS2008(First International Symposium on Interdisciplinary Materials Science) エポカルつくば 2008.3.13-14
- 2. Yuya Sakaguchi, Fumiaki Shimogishi and Youiti Ootuka, Conduction-channel analysis of hydrogen molecule junctions by superconducting point-contact spectroscopy, ISIMS2008(First International Symposium on Interdisciplinary Materials Science), エポカルつくば, 2008.3.13-14
- 3. Tooru Yamagishi and Youiti Ootuka, Amicro SQUID using small tunnel junctions, ISIMS2008(First International Symposium on Interdisciplinary Materials Science), エポカルつくば, 2008.3.13-14

4. A. Kanda, T. Sato, S. Tanaka, H. Goto, Y. Ootuka, K. Tsukagoshi, H. Miyazaki, S. Odaka, Y. Aoyagi: Superconducting proximity effect in thin graphite films, 2008 APS March Meeting, New Orleans (USA), March 12, 2008.

5. M. Hayashi, H. Yoshioka, A. Kanda: Superconducting Proximity Effect in Graphite Films, 2008 APS March Meeting, New Orleans (USA), March 12, 2008.

6. H. Miyazaki, K. Tsukagoshi, S. Odaka, Y. Aoyagi, T. Sato, S. Tanaka, H. Goto, A. Kanda, Y. Ootuka: Direct measurement of electric-field-screening length in thin graphite film, 2008 APS March Meeting, New Orleans (USA), March 12, 2008.

- A. Kanda (招待講演): Gate-controlled superconducting proximity effect in thin graphite films, Miniworkshop on Mesoscopic Physics 2008, National Chiao Tung University, Hsinchu (Taiwan), Jan. 11, 2008
- 8. A. Kanda (招待講演): Experimental detection of novel vortex states in mesoscopic superconductors with various geometry, Miniworkshop on Mesoscopic Physics 2008, National Chiao Tung University, Hsinchu (Taiwan), Jan. 10, 2008.
- A. Kanda, T. Sato, S. Tanaka, H. Goto, Y. Ootuka, K. Tsukagoshi, H. Miyazaki, S. Odaka, Y. Aoyagi: Gate-controlled superconducting proximity effect in thin graphite films, Frontiers in Nanoscience and Nanotechnology Workshop, Basel (Switzerland), January 6-8, 2008.
- A. Kanda, Y. Ootuka and F.M. Peeters: Detecting superconducting states in nanoscale superconductors using multiple-small-tunnel-junction technique, International Symposium on Advanced Nanodevices and Nanotechnology (ISANN2007), Waikoloa, Hawaii (USA), December 6, 2007.
- M. Hayashi, H. Yoshioka, A. Kanda: Superconducting proximity effect through graphene and graphite films, International Symposium on Advanced Nanodevices and Nanotechnology (ISANN2007), Waikoloa, Hawaii (USA), December 6, 2007.
- 12. T. Sato, S. Tanaka, H. Goto, A. Kanda, Y. Ootuka, H. Miyazaki, S. Odaka, K. Tsukagoshi, Y. Aoyagi: Superconducting proximity effect in ultrathin graphite films, International

Symposium on Advanced Nanodevices and Nanotechnology (ISANN2007), Waikoloa, Hawaii (USA), December 6, 2007.

- H. Miyazaki, K. Tsukagoshi, S. Odaka, T. Sato, S. Tanaka, H. Goto, A. Kanda, Y. Ootuka, Y. Aoyagi: Coulomb blockade oscillations in ultrathin graphite film with corrugation, International Symposium on Advanced Nanodevices and Nanotechnology (ISANN2007), Waikoloa, Hawaii (USA), December 6, 2007.
- R. Furugen, S. Hatsumi, Y. Ootuka, A. Kanda: Stability of vortex states in mesoscopic superconducting squares with engineered pinning, International Symposium on Advanced Nanodevices and Nanotechnology (ISANN2007), Waikoloa, Hawaii (USA), December 6, 2007.
- 15. A. Kanda (招待講演): Macroscopic superconductivity, 2nd International Autumn Seminar on Nanoscience and Engineering in Superconductivity for Young Scientists, ホテルエピナール那 須(栃木県)、2007年11月26-27日.
- A. Kanda, R. Furugen, S. Hatsumi, Y. Ootuka: Vortex states in mesoscopic superconducting squares with artificial pinning, 20th International Symposium on Superconductivity (ISS2007), Tsukuba, November 7, 2007.
- M. Morishita, "Effects of Magnetic Field on Frustrated Quantum Spin System of <sup>3</sup>He Solid Film on Graphite", International Symposium on Physics of New Quantum Phases in Superclean Materials (PSM2007) (Gifu, October 29, 2007).
- M. Morishita, "Heat Flow in <sup>3</sup>He Solid Films on Graphite", International Symposium on Physics of New Quantum Phases in Superclean Materials (PSM2007) (Gifu, October 30, 2007).
- 19. 新山雄, 大木泰造, 大塚洋一, Local electronic states of ultra-thin Al203 films on Ni3Al(111), ISAT-2 (Second International Symposium on Atomic Technology ) 淡路国際会議場, 2007.10.1-2
- 20. 佐藤崇, 後藤秀徳, 神田晶申, 大塚洋一, Proximity-induced superconductivity in ultra thin graphite films ISAT-2 (Second International Symposium on Atomic Technology ), 淡路国際会 議場, 2007.10.1-2
- 21. 坂口勇也, 下岸史明, 大塚洋一, Point contact spectroscopy of metal-hydrogen-metal junctions, ISAT-2 (Second International Symposium on Atomic Technology), 淡路国際会議場, 2007.10.1-2
- 22. S. Odaka, H. Miyazaki, T. Moriki, T. Sato, A. Kanda, K. Tsukagoshi, Y. Ootuka, and Y. Aoyagi: Nano-wire favrication and Coulomb blockade oscillations in thin graphite film, Korea-Japan Joint Forum 2007 (KJF2007), Korea University, Seoul (Korea), September 27-29, 2007.
- A. Kanda, T. Sato, S. Tanaka, Y. Ootuka, H. Miyazaki, S. Odaka, K. Tsukagoshi, Y. Aoyagi: Superconducting Proximity Effect in Thin Graphite Films, Fifth International Conference on Votex Matter in Nanostructured Superconductors (VORTEX V), Rhodes (Greece), September 13, 2007.
- 24. A. Kanda, T. Moriki, T. Sato, Y. Ootuka, H. Miyazaki, S. Odaka, K. Tsukagoshi, and Y. Aoyagi: Gate modulation of superconducting proximity effect in ultrathin graphite films, The 17th International Conference on Electronic Properties of Two-Dimensional Systems (EP2DS17), Geneva (Italy), July 15-20, 2007.
- 25. H. Miyazaki, K. Tsukagoshi, S. Odaka, T. Moriki, T. Sato, A. Kanda, Y. Ootuka, Y. Aoyagi: Electric potential corrugation in transport of ultra-thin graphite film, The 17th International Conference on Electronic Properties of Two-Dimensional Systems (EP2DS17), Geneva (Italy), July 15-20, 2007.
- 26. S. Odaka, H. Miyazaki, T. Moriki, T. Sato, A. Kanda, K. Tsukagoshi, Y. Ootuka, and Y. Aoyagi: Coulomb blockade oscillations in patterned ultra-thin graphite films, 2007 International Symposium on Organic and Inorganic Electronic Materials and Related Nanotechnologies (EM-NANO 2007), Nagano (Japan), June 19-22, 2007.
- S. Odaka, K. Tsukagoshi, H. Miyazaki, A. Kanda, T. Moriki, T. Sato, Y. Ootuka, Y. Aoyagi: Single electron device formation in thin graphite films, 6th International Conference on Low Dimensional Structures and Devices (LDSD2007), San Andres (Colombia), Apr. 15-20, 2007.
- 28. A. Kanda, T. Moriki, T. Sato, Y. Ootuka, H. Miyazaki, S. Odaka, K. Tsukagoshi, and Y. Aoyagi: Superconducting proximity effect in thin graphite films, 6th International Conference on Low

Dimensional Structures and Devices (LDSD2007), San Andres (Colombia), Apr. 15-20, 2007.

国内会議

- 1. 宮崎久生,小高隼介,佐藤崇,田中翔,後藤秀徳,神田晶申,塚越一仁,大塚洋一,青柳克信:グラファイト超薄膜における電場による絶縁体転移,2008 年春季第 55 回応用物理学関連講演会,日本大学船橋キャンパス,2008年3月30日.
- 2. 山岸徹、大塚洋一、A micro SQUID using small tunnel junctions、第4回「超伝導ナノサイエン スと応用」研究会, CTC (有馬、2008.3.27-28)
- 森下将史、「カゴメ格子へリウム3単原子層膜の熱容量」,日本物理学会2008年春季大会(近畿大学,2008年3月26日).
- 4. 神田晶申,佐藤崇,田中翔,後藤秀徳,大塚洋一,宮崎久生,小高隼介,塚越一仁,青柳克信: グ ラファイト超薄膜における超伝導近接効果 II,日本物理学会第 63 回年次大会,近畿大学本部キャ ンパス、2008 年 3 月 24 日.
- 5. 後藤秀徳,田中翔,佐藤崇,神田晶申,大塚洋一,宮崎久生,小高隼介,塚越一仁,青柳克信:グラファイト超薄膜-強磁性体接合の電気伝導特性 II,日本物理学会第63回年次大会,近畿大学本部キャンパス、2008年3月24日.
- 6. 坂口勇也,下岸史明,乾由美子,萩原宏規,大塚洋一,小数分子で接合した超伝導ナノリンクの伝 導チャネルの決定,日本物理学会 第63回年次大会 近畿大 2008/3/22(土)-26(水)
- 大塚洋一、Electron Transport through a superconducting nano-link, ナノリンク分子の電気伝 導 第3回領域ミーティング,名古屋大学東山キャンパス 野依記念物質科学研究館 2008.3.17-18
- 大塚洋一,超伝導を利用した単原子・単分子伝導の研究,第2回ポリスケールテクノロジーワークショップ,東京理科大学野田キャンパスカナル会館・大会議室2008年3月7日(金)
- 9. 山岸徹、前川匡史、大塚洋一,トンネル接合型マイクロ SQUID の作製と磁場応答の測定,第2回ポ リスケールテクノロジーワークショップ東京理科大学野田キャンパスカナル会館・大会議室 2008年3月7日(金)
- 10. 神田晶申(招待講演): グラフェンおよびグラファイト超薄膜の電気伝導, 仙台プラズマフォーラム, 東北大学, 2008 年 2 月 21 日
- 11. 神田晶申(招待講演):グラフェンおよびグラファイト超薄膜の電気伝導:実験的見地から,日本学術振興会未踏・ナノデバイステクノロジー第151委員会第83回研究会,KKR逗子松汀園(逗子),2008年2月2日.
- 12. 後藤秀徳,佐藤崇,田中翔,神田晶申,大塚洋一,宮崎久生,小高隼介,塚越一仁,青柳克信:グラファイト超薄膜のスピン伝導のゲート制御,「量子ナノ物理学」第3回公開シンポジウム,五反田ゆうぽうと(東京),2007年12月20日.
- 13. 宮崎久生、小高隼介、佐藤崇、田中翔、後藤秀徳、神田晶申、塚越一仁、大塚洋一、青柳克信: グラファイト超薄膜における電場遮蔽長の決定、「量子ナノ物理学」第3回公開シンポジウム、五反田ゆうぽうと(東京)、2007年12月20日.
- 14. 神田晶申(招待講演): 超薄膜グラファイトの伝導とゲート電圧効果,日本物理学会第62回年次 大会シンポジウム「グラファイトからグラフェンへ」,北海道大学,2007年9月23日.
- 15. 後藤秀徳,田中翔,佐藤崇,神田晶申,大塚洋一,宮崎久生,小高隼介,塚越一仁,青柳克信: グ ラファイト超薄膜-強磁性体接合の電気伝導特性,日本物理学会第 62 回年次大会,北海道大学, 2007 年 9 月 24 日.
- 16. 佐藤崇,田中翔,後藤秀徳,神田晶申,大塚洋一,宮崎久生,小高隼介,塚越一仁,青柳克信:グラファイト超薄膜における超伝導近接効果,日本物理学会第62回年次大会,北海道大学、2007年9月24日.
- 17. 宮崎久生,小高隼介,佐藤崇,神田晶申,塚越一仁,大塚洋一,青柳克信: グラファイト超薄膜の 電気伝導における Al トップゲートによる電界効果,日本物理学会第62回年次大会,北海道大学、 2007 年 9 月 24 日.
- 18. 宮崎久生,小高隼介,佐藤崇,後藤秀徳,神田晶申,塚越一仁,大塚洋一,青柳克信: グラファイト超薄膜 FET における A1 電極による高効率ゲート,2007 年秋季第68 回応用物理学学会学術講演会, 北海道工業大学,2007 年 9 月 4-8 日.
- 19. 古堅亮, 初見慎也, 神田晶申, 大塚洋一, F.M. Peeters: 微細孔のあるメゾスコピック超伝導体に

おける渦糸状態,日本物理学会第62回年次大会,北海道大学,2007年9月21日.

- 20. 新山雄,大木泰造,大塚洋一,Ni3A1(111)上アルミナ超薄膜のトンネル分光(II),日本物理学会第 62 回年次大会 北大 2007.9.21-27
- 21. 坂口勇也, 下岸史明, 大塚洋一, 水素単分子接合によるポイントコンタクトスペクトロスピー, 日本物理学会 第 62 回年次大会 北大 2007.9.21-27
- 22. 森下将史、「グラファイト上吸着<sup>3</sup>He 固相薄膜の磁場中熱容量」,日本物理学会2007年秋季大会(北海道大学,2007年9月24日).

<授賞等>

- ・佐藤崇:研究科長表彰(修士優秀論文), 2008.3
- ・山岸徹 : First International Symposium on Interdisciplinary Materials Science 優秀ポスター賞, 2008.3.14

### X 物理教育および物理教育の研究

【1】物理教育(矢花一浩)

今年度から全学的な学群・学類システムの変更があり、理工学群物理学類(入学定員 60 名)が発足した。これにより物理学系に所属する教員は、学部教育を行う物理学類と、大 学院(博士前期、後期課程)の教育を行う数理物質科学研究科物理学専攻、及び物質創成 先端科学専攻の物理学分野を担当する。また、全学の学類生を対象とする物理学に関する 総合科目や、医学類、生物学類、生物資源学類の物理学に関する基礎教育を担当するなど、 筑波大学の物理学教育の中軸を担っている。

物理学類では、旧自然学類物理学主専攻をベースに教育の一層の充実を図っている。新 たな試みとして、夏季休業中に1学期必修科目の再履修コースを設けた。また、文系学生 をも対象とした新しい総合科目である「初めて学ぶ物理学 I, II, III」を創設した。

また、従来自然学類で行ってきた、1年次の基礎科目に対する学生による授業改善のア ンケートと学生と教員の懇談会を発展させ、2年次以上の専門科目に対しても、学生の主 導による授業改善アンケートを実施し、教員と学生の協力による授業改善の取り組みを進 めている。

【2】体験学習(今井剛)

高校生に大学における自然科学の教育研究の内容を知ってもらうために毎年実施してい る体験学習を本年度も8月3日(金)に実施した。本年度から、学類再編のため、名称を 自然科学体験学習と変更したが、旧自然学類の物理学類、数学類、化学類、地球学類が一 緒に体験学習を行った。全体的な紹介のあと各学類に分かれて、それぞれのプログラムで 実施した。物理学類では、講義、物理学実験、在校生との懇談、センターの見学等を実施 した。参加者については、本年はスーパーサイエンス・スクール関連での大口の参加者が 無かったこともあり、昨年に比べて33名と少なめであった。関東からの参加がやはり多 いが、沖縄、山形、香川、三重などといった遠方からの参加も8名あった。在校生との懇 談会では、TAの学生に高校生の目線で内容を検討してもらい、学生主体で会を進めてもら ったところ、高校生からの多くの質問がでるなど非常に活発な懇談会となった。体験学習 の具体的な内容とスケジュールは以下の通りである。

9:30~10:40 実行委員長(伊藤数学類長)挨拶9:50~10:10 物理学類説明、実験内容説明、アンケート(今井剛)10:20~11:00 授業 宇宙物理「相対性理論と宇宙の進化」(梅村雅之)

11:10~11:50 授業 物性物理「量子論と凝縮系物理学」(初貝安弘)
11:50~12:50 昼食
12:50~13:00 実験組み分け(今井剛)
13:00~15:30 実験(①光の干渉(冨本慎一)、②エレクトロニクス(東山和幸)、
③放射線(三明康郎)、 ④極低温(大塚洋一))
15:10~16:15 在校生との懇談
16:15~16:30 おわりの挨拶(今井剛)
16:30~18:00 見学(希望者)計算科学研究センター、プラズマ研究センター

( )内は担当者であるが、その他にも多数の学類生及び大学院生の協力を得た。また、 昼食は学類生に食堂に案内をしてもらうことにより、受講生とのコミュニケーションを取 りやすくし、その後の実験や在校生との懇談で受講生が相談しやすい雰囲気造りを心がけ てもらった。センターの見学も、高校が手配したバスで他学類の受講生と一緒に帰ったも のを除いて、ほとんどが参加し盛況であった。その後の感想においても、体験学習の効果 が十分感じられ、物理学系の高校生へのアピールとして非常に有効な手段となっている。

【3】カリキュラム関係(今井剛)

学類再編後の最初の年度がスタートし、特に大きな問題なく新1年生の授業が実施された。新しい試みである夏休みに導入した物理学AI、BIの再履修クラスは順調にスタートした。また、文系等の学生を対象とした総合科目「初めて学ぶ物理学 I, II. III」も多い時には100名近い聴講者が参加するなど、成功なスタートであった。

物理学類の筑波スタンダードの中でも謳われている学生の能動的な学習を喚起するための授業の在り方について検討を進めているが、その一環として「課題解決型授業」を1~3年生が横断的に参加できるような形で次年度から試行してみることとなった。この授業は、教員が参考に与えた研究テーマについて、学生が主体となって研究し解決していく内容である。3~5年先の学類のカリキュラムの見直し時をターゲットに、能動的授業の新しい取組みの一環として、本授業を位置づけ、今後、検討をさらに進めて行く事とした。

3年次の専門英語では、社会において科学技術分野で活躍するのに必須の英語の強化の 観点から、ネイティブによる授業をさらに推進すべく英語を母国語とする講師の授業を、 次年度からさらに増加することとした。また、英語の基礎力を養うため e-learning の導入 をする。

学生による授業アンケートの結果に基づき、電磁気学演習と量子力学演習が授業と同時 進行できるように物理学演習 IV, V, VI とすることとした。

# 《大学院資料》

大学院生・卒業研究生・学振特別研究員 員数表

|--|

			財	主			卒研	계	* 羊振		*			.⊒∔.		
	1年	2年	3年	4年	5年	小計	生	PD	DC		TA			ΠI		
素粒子理論	3	7	2	2	3	17	5	0	{ 2 }	[	6	22	{ 2	} [	6	; ]
宇宙理論	5	3	4	2	2	16	4	0	{ 2 }	[	2	20	{ 2	} [	2	? ]
原子核理論	0	4	1	0	1	6	0	1	{ 0 }	[	8	7	{ 0	} [	8	3]
凝縮系理論	2	1	2	1	3	9	5	0	{ 0 }	[	6	14	{ 0	} [	6	; ]
計算物性物理 (創)	3	1	2	1	1	8	0	0	{ 0 }	[	4	8	{ 0	} [	4	[ ]
計算生命理論	2	1	3	0	0	6	4	0	{ 0 }	[	2	10	{ 0	} [	2	; ]
素粒子実験	4	3	1	1	4	13	11	0	{ 0 }	[	8	24	{ 0	} [	8	; ]
宇宙観測	3	4	3	2	0	12	7	0	{ 0 }	[	7	19	{ 0	} [	7	']
原子核高エネ	4	2	2	1	4	13	5	0	{ 0 }	[	1	18	{ 0	} [	1	. ]
原子核低エネ	0	4	1	0	3	8	3	0	{ 0 }	[	4	11	{ 0	} [	4	[ ]
磁性物性	3	5	0	1	0	9	0	0	{ 0 }	[	3	9	{ 0	} [	3	; ]
半導体物性 (創)	5	3	1	2	1	12	8	0	{ 0 }	[	7	20	{ 0	} [	7	']
強相関物性	2	0	0	0	0	2	0	0	{ 0 }	[	2	2	{ 0	} [	2	? ]
表面物性	0	0	0	0	0	0	0	0	{ 0 }	[	0	0	{ 0	} [	C	) ]
低温物性	0	4	0	0	0	4	5	0	{ 0 }	[	4	9	{ 0	} [	4	[ ]
プラズマ	9	9	1	0	3	22	8	0	{ 0 }	[	10	30	{ 0	} [	10	) ]
合計	37	47	20	10	23	137	57	1	{ 4 }	[	63	195	{ 4	} [	63	3]
(創)	8	4	3	3	2	20	8	0	{0}	[	11	28	{ 0	} [	[ 1]	[]

\*学振欄の{ }内数字はDC1, DC2で内数、{ }なし数字は、PDで外数

\*[]は大学院生のため内数

【博士論文】 <課程博士>〔〕内は指導教員名 数理物質科学研究科・物理学専攻

- 益井 宙〔三明 康郎〕 Measurement of Centrality Dependence of Elliptic Flow for Identified Hadrons in Au+Au Collisions at √SNN = 200 GeV (重心系核子対当たり200GeVの金・金衝突における識別された荷電ハドロンの楕円フロー の衝突中心度依存性の測定)
- 金野 正裕〔江角 晋一〕
   Proton and Antiproton Production in High Energy Heavy Ion Collisions at RHIC (RHICでの高エネルギー重イオン衝突における陽子反陽子生成)
- 3) 中村 庸介 〔青木 慎也〕

Non-perturbative renormalization of four-quark operators and  $B_{\kappa}$  with Schrödinger functional scheme in quenched domain-wall QCD

(クエンチ近似のドメインウォールQCDにおける4クォーク演算子とKaonバックパラメー タのシュレディンガー汎関数スキームを用いた非摂動的繰り込み)

4)馬場 裕〔石橋 延幸〕

D-branes in OSp invariant closed string field theory (OSp不変な閉弦の場の理論におけるDブレーン)

- 5) 清水 一紘〔梅村 雅之〕
   Novel Picture for Lyman Alpha Emitters
   (ライマンアルファ輝線天体の新たな描像)
- 6) 長谷川 賢二〔梅村 雅之〕

Formation and Dynamical Evolution of Globular Cluster (球状星団の形成と力学進化)

7) 久保 太一〔金 信弘〕

Measurement of the Top Quark Mass by Dynamical Likelihood Method using the Lepton + Jets Events with the Collider Detector at Fermilab

(CDF実験におけるレプトン+ジェット事象を用いた力学的最尤法によるトップクォークの質量測定)

8) 増渕 達也〔金 信弘〕

Search for Higgs Boson Production in Association with a W Boson in 1.96-TeV Proton-Antiproton Collisions

(1.96TeV陽子反陽子衝突実験におけるWボソン随伴生成のヒッグス粒子探索)

9) 永野 あい 〔受川 史彦〕

Measurement of W+Photon Production in Proton-Antiproton Collisions at 1.96 TeV (1.96 TeVの陽子・反陽子衝突におけるWボソンと光子の対生成)

10) 宮田 良明〔今井 剛〕

Study of Confinement Improvement due to Fluctuations Suppression during Potential Formation

(電位形成に伴う揺動抑制に起因する閉じ込め改善の研究)

11) 東園 雄太〔中嶋 洋輔〕

Study of Neutral Transport Based on Visible-Light Measurement and 3-Dimensional Simulation in Plasma Confinement Devices

(プラズマ閉じ込め装置における可視光計測及び3次元シミュレーションに基づく中性粒 子輸送の研究)

12) 西丸 浩〔北條 仁士〕

Ion radial diffusion due to non-uniform electrostatic potential in axisymmetric mirror magnetic field

(軸対称ミラー磁場中の非一様電位に起因するイオンの径方向拡散)

【修士論文】

<博士課程修士>〔 〕内は指導教員名 数理物質科学研究科・物理学専攻

- 1) 大野 浩史〔青木 慎也〕 クエンチ近似を用いた有限温度格子 QCD によるチャーモニウム消失温度の探索
- 2) 杉山 友規 〔青木 慎也〕
   揺らぎ定理
- 田宮 亮〔石橋 延幸〕
   Witten の弦の場の理論におけるタキオン凝縮の解析解
- 4) 武田 光平〔石塚 成人〕 Pi-N Sigma term の研究に向けた all-to-all propagator による核子相関関数の計算
- 5) 幸田 義行〔吉江 友照〕
   格子 QCD のトポロジーとアノーマラスウォード高橋恒等式
- 6)小泉 貴之〔梅村 雅之〕 相対論的変動エディントン因子の輻射輸送計算
- 7)千葉 真弓〔梅村 雅之〕 輻射輸送計算による Lyman α 光子の脱出確率について
- 8) 土居 政雄〔梅村 雅之〕 宇宙塵の3次元形状 - 地球大気中で溶融したダスト粒子の変形 -
- 9) 江幡 修一郎〔矢花 一浩〕 超流動原子核の構造・応答に対する時間依存密度汎関数計算
- 10)野出木 健一〔矢花 一浩〕 Gogny 力を用いた TDHFB 法による軽い核の微小振幅応答
- 11) 舟津 宇紘〔矢花 一浩〕 フェルミ原子気体の超流動転移温度における強結合効果
- 12) 松山 裕右〔丸山 敏毅〕 クォークの分子動力学法による原子核衝突のシミュレーション
- 13) 武智 公平〔有光 敏彦〕 粉粒体における粒子回転緩和過程のシミュレーションによる解析 一金谷理論の検証—
- 14)小林 賢司〔白石 賢二〕SiN 絶縁膜中の欠陥の第一原理計算による考察
- 15) 山崎 秀樹〔受川 史彦〕 リニアコライダー実験用カロリメータの読み出しに用いられる光検出器 MPPC の 放射線耐性の研究

- 16) 望月 亜衣〔金 信弘〕 Silicon-On-Insulator 技術を用いた読み出し回路一体型シリコンピクセル検出器の 開発研究
- 17) 石井 峻〔中井 直正〕 南極可搬型サブミリ波望遠鏡光学系の開発
- 18)小出 祐輔〔中井 直正〕 筑波大学電波望遠鏡制御ソフトウェアの開発
- 19) 益田 多美〔中井 直正〕 The Physical State of the CO Gas in the Spiral Galaxies Based on the Study of CO J=1-0 and J=2-1 Lines (CO(J=1-0)と CO(J=2-1)の解析に基づく渦巻銀河における分子ガスの物理状態の研究)
- 20) 宮川 直己〔中井 直正〕 南極可搬型サブミリ波望遠鏡冷却受信機の開発
- 21) 佐藤 尚徳〔三明 康郎〕 高エネルギー重イオン衝突実験における Multi-gap Resistive Plate Chamber の性能評価
- 22) 渡邊 健悟〔三明 康郎〕
   Development of High Voltage Control System and Performance Evaluation of Transition Radiation Detector for LHC-ALICE Experiment (LHC-ALICE 実験の為の遷移放射検出器の高電圧制御システムの開発と性能評価)
- 23) 恵比寿 和也〔新井 一郎〕 高エネルギー陽子マイクロビームによる水素分析法の検出精度向上
- 24)橋爪 祐平〔小沢 顕〕 中性子ドリップライン近傍炭素同位体核からの中性子剥離破砕片の運動量分布の測定
- 25)保谷 毅〔小沢 顕〕 中高エネルギーでの<sup>3</sup>He、<sup>3</sup>Hの反応断面積の測定
- 26) 森口 哲朗〔小沢 顕〕 RI ビームの飛行時間測定のための Hybrid Photo Detector の研究
- 27) 小野田 航〔小野田 雅重〕 三角格子系 Na<sub>0.7</sub>VO<sub>2</sub>の三量体転移
- 28)前小屋 忠暁〔小野田 雅重〕 複合結晶系 Cu<sub>x</sub>V<sub>4</sub>O<sub>11</sub>の熱電性能
- 29) 水口 佳一〔小野田 雅重〕 擬一次元系 NaV<sub>2</sub>O<sub>5</sub>の伝導と相関効果
- 30) 坂口 勇也〔大塚 洋一〕 超伝導ポイントコンタクトスペクトロスコピーによる単分子接合系の伝導チャネル解析

- 31) 佐藤 崇〔大塚 洋一〕 グラファイト超薄膜における超伝導近接効果
- 32) 新山 雄 〔大塚 洋一〕 Ni<sub>3</sub>Al(111)上アルミナ超薄膜の電子状態
- 33) 古堅 亮〔大塚 洋一〕 メゾスコピック超伝導体における新奇渦糸状態の探索
- 34) 中村 真理亜〔今井 剛〕 ECRH 用アンテナ系高性能化のための2次元マイクロ波パワー測定システムの開発
- 35) 溝口 祥也〔今井 剛〕 GAMMA10 セントラルダイバータ磁場配位における運動論的フルートモードの安定性解析
- 36) 茂木 ゆき美〔今井 剛〕 ガンマ10におけるイオンサイクロトロン波動の低周波波動への分岐に関する研究
- 37) 伊藤 万梨絵〔中嶋 洋輔〕 軸方向Hα線検出器及び中速カメラを用いたプラズマ生成条件最適化の研究
- 38) 河野 博一〔中嶋 洋輔〕 高速カメラを用いた GAMMA10 セントラル部におけるプラズマ可視光 2 次元イメージ計測
- 39) 森本 直道〔中嶋 洋輔〕 GAMMA10 セントラル部におけるイオンエネルギーバランスの時間発展解析
- 40) 木村 拓哉 〔北條 仁士〕 ファブリー・ペロー干渉法を応用したプラズマ計測の研究
- 41) 能登 将光〔吉川 正志〕 多チャンネル H α 線計測器を用いた GAMMA10 プラズマの中性粒子密度計測
- 42) 松本 俊昭〔吉川 正志〕 多チャンネルマイクロ波干渉計を用いた閉じ込め電位生成時のプラズマ密度揺動計測

【修士論文】

<博士課程修士>〔 〕内は指導教員名 数理物質科学研究科・物質創成先端科学専攻

- 1) 近江 徹哉〔野村 晋太郎〕 近接場光学顕微鏡を用いた GaAs ヘテロ構造の光照射効果の研究
- 2)小幡 輝明〔岡田 晋〕 密度汎関数理論に基づく窒化インジウムガリウムにおける窒素単原子空孔の研究
- 3) 鈴木 宰〔舛本 泰章〕 チャージチューナブル InP 量子ドットの円偏光フォトルミネッセンスとスピン偏極

# 物理学セミナー

平成19年度

	開催日	講師	題目
第1回	4月25日	中井 直正 (宇宙観測)	電波天文学の大型計画:ALMA(アルマ)と SKA -その計画推進から何を学ぶか-
第2回	5月16日	大塚 洋一 (物性実験)	単電子帯電効果とその周辺
第3回	6月20日	谷口 裕介 (素粒子理論)	格子における非摂動論的な繰り込みの方法
第4回	9月12日	吉川 耕司 (宇宙理論)	宇宙の暗黒エネルギーとバリオン音響振動
第5回	9月19日	山口 栄一 (同志社大学) (物理と社会)	イノベーション 破壊と共鳴 -物理学者は社会貢献できるのか-
第6回	10月24日	吉田 恭 (凝縮系理論)	乱流の統計理論の新展開
第7回	11月7日	坂本 慶司 (連携大学院 教授) (プラズマ)	大電力ミリ波帯電磁波の発生と応用
第8回	12月12日	武内 勇司 (素粒子実験)	陽子反陽子衝突実験 CDF による素粒子物理
第9回	1月16日	橋本 幸男 (原子核理論)	原子核の三次元的回転運動
第10回	1月30日	江角 晋一 (原子核実験)	高エネルギー原子核衝突実験でみるクォー ク・グルーオン・プラズマ(QGP)

# 大学院関係経費

1. TA経費 数理物質科学研究科 物理学専攻分 <u>3,877,871 円</u>

2. TA経費 数理物質科学研究科 物質創成先端科学専攻(物理学分野)分 <u>662,008 円</u>

研究種目		職 名	研究代表者	課題番号	研 究 題 目	金額(千円)
特別推進研究		教授	梅村 雅之	16002003	融合型並列計算機による宇宙第一世代天体の起源の解明	8, 300
特定領域研究	막	准教授	吉川 正志	16082203	先進シナリオに則した電位閉じ込め効果究明のための新しい電位計 測	2, 900
"	막	教授	押山 淳	17064002	ナノ・バイオ物質における形状と機能の量子デザイン	10, 200
11		教授	大塚 洋一	17069004	固定電極にリンクしたナノスケール導体の電気伝導特性	30, 800
11	公	講師	平下 博之	18026002	サブミリ波での原始銀河観測に向けた理論的枠組みの構築	1,000
11	公	准教授	Boero Mauro	18054004	タンパク質超分子中のプロトン移動機構の電子レベルでの解明	3, 300
11	計	准教授	白石 賢二	18063003	第一原理量子論によるナノデバイス材料・界面の物性予測	11, 900
11	計	教授	金 信弘	18071002	陽子反陽子衝突実験CDFによるトップとボトム・フレーバーの物理	35, 800
11	公	教授	矢花 一浩	19019002	光に起因する電子・イオンダイナミクスに対する実時間シミュレー ション法の開発	1,700
11	公	准教授	舘野 賢	19019003	量子ハイブリッド分子動力学法による生体機能の量子デザイン	2,400
11	公	教授	初貝 安弘	18043007	量子液体相におけるトポロジカル秩序	1,400
基盤研究(S)		教授	守友 浩	15104005	放射光粉末構造解析による光励起状態の構造決定	9,200
基盤研究(S)		教授	宇川 彰	18104005	超並列クラスタ計算機による計算素粒子物理学の展開	18, 600
基盤基盤(A)	一般	教授	舛本 泰章	18204028	チャージチューナブル量子ドットのスピン緩和と制御	12, 300
11	11	講師	瀬田 益道	19204016	南極天文学を切り開くサブミリ波サーベイ望遠鏡の開発	20, 400
基盤研究(B)	一般	教授	中井 直正	17340052	水メーザーの観測によるセイファート銀河の統一モデルの再考	1,000
11	11	教授	金谷 和至	17340066	有限温度・有限密度QCDの非摂動論的研究	3, 800
11	11	准教授	野村 晋太郎	17340093	結合ナノ構造中3He温度電子スピン密度分布のイメージング	1,200
11	11	講師	神田 晶申	17340101	メゾスコピック超伝導体における新しい渦糸状態の研究	1,800
11	11	准教授	白石 賢二	18360017	ナノ界面理論の新展開とそのナノデバイスへの応用	3,700
11	11	講師	笹 公和	18360043	極微量放射性核種シリコン32の加速器質量分析による超高感度検出 法の開発	3, 800
11	11	教授	長 照二	18360441	帯状流の乱流渦によるプラズマ閉じ込め劣化の抑制効果と内部輸送 障壁形成の相関究明	3, 800
11	11	准教授	Boero Mauro	19340108	電子ダイナミクスに基づく生体分子触媒反応のシミュレーション	7, 700
基盤研究(C)	一般	講師	中務孝	17540231	不安定核の応答・反応における多粒子系ダイナミクスの研究	800
11	11	講師	蔵増 嘉伸	18540250	格子上の場の理論による標準理論の研究	900
"	11	助教	森下 将史	18540337	2次元量子固体多体交換相互作用の競合における不純物・磁場効果	1,400
"	11	教授	矢花 一浩	18540366	フェムト秒多電子ダイナミクスの第一原理シミュレーション	800
"	11	教授	今井 剛	19560825	電子サイクロトロン加熱によるプラズマ能動制御と閉じ込め改善	1,800
萌芽研究		准教授	谷口 伸彦	17654071	等エネルギー面上の場の理論の研究:量子カオスから量子的複雑流 体・量子相転移へ	500
11		講師	神田 晶申	19651044	グラファイト超薄膜のインターカレーションと電気伝導測定	3,200
"		教授	大塚 洋一	19654049	極微小トンネル接合高磁場SQUIDの開発と応用	2,000
若手研究(B)		講師	平下 博之	18740097	遠赤外線・サブミリ波での原始銀河の直接検出	900
11		講師	丸山 和純	18740128	CDF実験におけるトップクォーク質量の精密測定と対共鳴生成の探索	1,400
11		助教	谷口 裕介	18740130	格子上の超対称性理論の数値的解析	600
11		研究員	三宅 秀樹	18740149	中性 B 中間子の η'η'Ks崩壊の探索とCP非保存現象の研究	600
11		講師	小波蔵 純子	18760634	シリコン半導体計測器の核融合生成中性子照射によるX線感度特性変化	1,100
11		准教授	岡田 晋	19710087	ナノ物質系のネットワーク形状制御による新奇物性探索	1,300
"		助教	富本 慎一	19740174	ディスク状半導体量子ドットにおける励起子輻射再結合寿命の研究	2,600
"		助教	阪東 一毅	19740175	半導体単一量子ドットにおける励起子複合体位相緩和過程の高感度 測定	2,000
11		助教	吉田 恭	19740229	乱流統計理論の宇宙規模流体への展開	1,100
11		講師	沼倉 友晴	19740340	高電位・強経電場シアー形成によるプラズマ閉じ込め改善効果の評価	800
特別研究促進	費	研究員	梅田 貴士	19549001	有限温度格子QCDによるチャーモニウム消失温度の研究	1,000
					合 <b>計</b>	221,800

網掛けは計算科学研究センターより申請・交付

### 平成19年度 各種受賞等

NO	職名	氏名	賞名	受賞論文等	受賞月
1	教授	白石賢二	応用物理学会JJAP論文賞	Modified Oxygen Vacancy Induced Fermi Level Pinning Model Extendable to P-Metal Pinning	9月
2	准教授	岡田晋	日本物理学会若手奨励賞	炭素クラスター及びカーボンナノチューブの第一原理電子状態 計算	9月
3	准教授	假家 強	プラズマ核融合学会 第12回技術進歩賞	ITER用ジャイロトロンの開発	11月

### 平成19年度 一般受託研究等

NO	職名	氏名	委託者名	研究題目	金 額 (千円)
1	講師	神田 晶申	(独)科学技術振興機構	面内伝導システム基礎伝導	3,900
2	准教授	野村 晋太郎	(独)科学技術振興機構	スピン光物性測定及び量子ドットの光・磁性測定	3,900
3	教授	中井 直正	自然科学研究機構	大学間連携VLBI観測事業に係る研究一先端的天文学研究の推 進一	4,355
4	教授	守友 浩	文部科学省	「フェムト秒時間分解顕微鏡の構築とMEM電子分布解析の高度 化	24,200
合 計					36,355

### 平成19年度 奨学寄付金

NO	職名	氏名	寄付者等名	寄付の目的	金 額 (千円)
1	助教	阪東 一毅	財団法人 池谷科学技術振興財団	「半導体単ー量子ドットにおけるスピンを担う励起子系の高感度 コヒーレンス検出」に対する研究助成	1,500
2	教授	舛本 泰章	筑波大学 大学院数理物質科 学研究科 教授 舛本泰章	「光スピン変換による量子情報通信の研究」に対する研究助成	5,202
3	講師	池沢 道男	筑波大学 大学院数理物質科 学研究科 教授 舛本泰章	「光スピン変換による量子情報通信の研究」に対する研究助成	1,375
4	教授	守友 浩	財団法人 テレコム先端技術研 究支援センター	「ナノサイズ錯体の創生と高次光機能性の発現」	1,000
5	准教授	白石 賢二	東芝セラミックス 株式会社	「シリコン表面の酸化特性に関する研究」に対する研究助成	300
6	准教授	白石 賢二	株式会社 半導体先端テクノロ ジーズ	「高誘電率ゲート絶縁膜/メタルゲートスタックの理論的研究」に 対する研究助成	500
7	講師	神田 晶申	財団法人 住友財団	「メゾスコピック超伝導体における新規渦糸状態の観測と制御」 に対する研究助成	1,600
合 計					11,477

### 平成19年度 民間等との共同研究

NO	職名	氏名	民間等機関	研究題目	金 額 (千円)
1	准教授	北條 仁士	株式会社 日立製作所中央研究所	UHF-ECRプラズマ解析技術の研究	1,000
2	准教授	白石 賢二	株式会社 日立製作所中央研究所	MONOS型不揮発性メモリの電荷蓄積膜物理の研究	800
3	准教授	白石 賢二	コハ・レントマテリアル 株式会社	Si/Si02界面の初期生成メカニズムに関する研究	420
4	准教授	白石 賢二	株式会社 半導体先端テクノロ ジーズ	高誘電率ゲート絶縁膜/メタルゲートスタックの理論的研究	300
5	准教授	白石 賢二	松下電器産業 株式会社 先行デバイス開発センター	第1原理計算によるReRAMの動作メカニズムに関する研究	2,310
合 計					4,830

### 平成19年度 その他

NO	職 名	氏名	民間等機関	研究題目	金 額 (千円)
1	教授	舛本 泰章	国際共同研究助成金 (情報通信研究機構)	光スピン変換による量子情報通信の研究	9,800
合 計					9,800

# 役 務 分 担

平成19年度

数理物質科学研究科物理学専攻長 物理学系長	金谷和至
数理物質科学研究科学務委員(物理学専攻)	金信弘
数理物質科学研究科運営委員(物理学専攻)	金谷和至,金信弘
物理学類長	矢花一浩
物理学類学務委員	今井剛
自然学類運営委員	矢花一浩, 今井剛
物理学関係自己点検委員	金谷和至 (委員長),青木慎也,有光敏彦,
	今井剛,受川史彦,梅村雅之,大塚洋一,
	押山淳,中井直正,舛本泰章,矢花一浩,
	小沢顕
図書係	舘野賢
カリキュラム委員	今井剛 (委員長), 石橋延幸, 受川史彦,
	梅村雅之,金信弘,中井直正,初貝安弘,
	矢花一浩, 新井一郎, 野村晋太郎
学類クラス担任(1年)	守友浩,岡田晋
(2年)	今井剛,橋本幸男
(3年)	石塚成人,神田晶申
(4年)	谷口伸彦, 江角晋一
自然学類就職委員	江角晋一
自然学類学生委員会(学生生活審議会委員)	1年クラス担任:守友浩,岡田晋
(学生担当教員)	
学類学生委員会	守友浩,岡田晋
ハラスメント委員/相談員	江角晋一
実験廃棄物取扱責任者	東山和幸

# 物理学系人事異動

 $(\mp 1 9. 4. 1 \sim \mp 2 0. 3. 31)$ 

【物理学系に来られた方々】

氏 名	職名	発令日	異動内容(前職)
初貝安弘	教授	平19.4.1	東京大学大学院工学系研究科助教授
久保敦	助教	平20.1.1	科学技術振興機構さきがけ専任研究員
南龍太郎	講師	平20.1.1	プラズマ研究センター 研究機関研究員
八田佳孝	助教	平20.2.1	サクレー研究所ポスドク
宮崎州正	准教授	平20.3.1	高知工科大学総合研究所准教授

【物理学系を去られた方々】

氏 名	職名	発令日	異動内容		
中務孝	講師	平19.7.31	理化学研究所准主任研究員		
押山淳	教授	平19.11.30	東京大学大学院工学系研究科物理 工学専攻教授		
平下博之	講師	平20.3.15	台湾中央研究院天文及天文物理研 究所・Visiting Scientist		
阪東一毅	助教	平20.3.31	静岡大学助教		
山内彩	準研究員	平20.3.31	国立天文台研究員		

# 物理学系構成員

2007.4.1~2008.3.31

		教授	准教授	講 師	助 教	準研	技術
理論	素 粒 子	青木(慎)	石塚[批]		佐藤(勇)		
		石橋	吉江 [計1]		谷口(裕) [批]		
		宇川[計]	藏増[計2]		毛利		
		金谷					
	宇宙物理	梅村 [批]	牧野[額·訛]	平下[訛] 吉川[訛]			
	原子核	矢花[壯]	丸山 [連携・物理]	中務[壯]	八田	稲倉	
				橋本[計]			
	物性	有光	岡田 [計セ]	重田 [TARAセ]	吉田		
		押山[計t]	舘野[計]				
		白石 [計1]	谷口(伸)				
		初貝	BOERO				
			宮崎				
	素 粒 子	受川	新井[額·姍]	武内	戸村		
		金		原			
				丸山			
	宇宙観測	中井		瀬田		山内	
	原 子 核	三明	新井(一)	小松原 [研究基盤セ]		安田	加藤
		宮武 [客員・物理]	江角	笹[研究基盤セ]			
			小沢	中條			
			田中 [客員・物理]				
宝							
~	磁性物性		小野田				
	半導体物性	舛本	野村	池沢	富本		
		蔡[連携・物質創成]	二 í [ 連携 · 物質創成]		阪東[TARAセ]		
験		馬場 [鶐· 續鯎]					
	強相関物性	守友		-+	上岡		
	表面物性			東山	<u> </u>		
	低温物性	大塚 [学際セ長]		神田 [学際セ]	森下		
	プラズマ	今井	假家	小波蔵 [フセ]			大川
		長 [プセ長]	中嶋 [フセ]	沼倉 [フセ]			平田
		坂本 [連携・物理]	北條 [フセ]	平田 [フセ]			
		三浦 [連携·物理]	吉川	南 [フセ]			
	□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□						
	事務室 岡野,杉浦,中川,比企						

### 年次研究報告 筑波大学物理学系

2007(平成19)年度

発行 2008年9月

発行者 筑波大学物理学系 〒305-8571 茨城県つくば市天王台1-1-1 TEL 029-853-4033 FAX 029-853-6618

11111 020 000 001

ISSN 0915-5317