

"Find your Nobelty"

第 61 回 物性若手夏の学校

ポスターセッション 概要集

長野県 ホテルシャレードイン志賀

7月31日(日) 13:00~15:00

8月1日(月) 13:00~15:00

PS 番号が奇数の方は7月31日の13:00~14:00

PS 番号が偶数の方は8月1日の13:00~14:00

には自分のポスターの前にいてください。

PS-01	状態識別能力と擾乱の関係 濱村一航 京都大学
PS-02	Bose-Einstein 凝縮体に現われる非エルミート性 大橋輝道 名大工
PS-03	流体シミュレーションによるレーザーアブレーションプラズマの解析 池田千穂 広大院工
PS-04	テンソルネットワークによるトポロジカル絶縁体の解析に関するレビュー 山本卓矢 東京大学大学院理学系研究科
PS-05	パリティを使わずに Z_2 不変量を計算する方法~トポロジカル絶縁体の第一原理計算入門~ 澤端日華瑠 金沢大数物
PS-06	トポロジカル絶縁体 Bi_2Se_3 の軌道選択スピン分解光電子分光 野口亮 東大物性研
PS-07	$\text{Cr}(\text{NbS}_2)_3$ とその関連物質の第一原理計算 黒田文彬 広大院先端
PS-08	ワイル半金属におけるカイラル磁気効果 立石幾真 東大理学系
PS-09	空間群対称性に起因するノーダルライン半金属 高橋亮 東工大理
PS-10	キラル磁性体におけるマイクロ波応答と電流効果 蔣男 東京大学総合文化研究科
PS-11	カイラルらせん磁性体中の扇状構造 篠寄美沙子 東大総合文化
PS-12	近藤格子模型におけるカイラル螺旋磁性体 奥村駿 東京大学大学院工学系研究科
PS-13	カイラル結晶における自然円二色性とその角度依存性 勝本啓資 阪大産研

PS-14	Rashba 型スピン分裂バンドに起因した非相反電荷輸送現象 越川翔太 東京大学大学院工学系研究科
PS-15	磁気スキルミオンによるトポロジカルホール効果の理論 濱本敬大 東京大学工学系研究科
PS-16	ディラック系における反磁性電流の緩和時間 広沢智紀 東大理
PS-17	強磁性体下の Kane-Mele 模型におけるエンタングルメントチャーン数 荒木広夢 筑波大数理
PS-18	微小磁性体における高周波「電流雑音」測定系の開発 岩切秀一 大阪大学大学院理学研究科
PS-19	第一原理計算による n 型及び p 型 SnSe のゼーベック効果の解析 森 仁志 大阪大学理学研究科
PS-20	量子ドット系における温度・電圧誘起断熱ポンピング 長谷川雅大 東大物性研
PS-21	有機半導体単結晶薄膜における異方的伝導特性 浜井貴将 東大物工
PS-22	3D プリンターを用いたテラヘルツ領域の波長板の作成 坂田諒一 京大院理
PS-23	量子スピン液体候補物質 κ -(ET) ₂ Ag ₂ (CN) ₃ の熱伝導率測定 近藤潤 東大物性研
PS-24	キタエフモデルとマヨラナフェルミオンの集団的性質 ミシエンコピョートル 東京大学大学院工学系研究科
PS-25	Kitaev 模型における量子スピンの行列要素 越田真史 東京大学大学院総合文化研究科
PS-26	繰り込み群で眺めるフェルミ液体 渡邊光 京都大学大学院理学研究科
PS-27	カゴメ格子上の Laughlin 状態と Chern 数 工藤耕司 筑波大学大学院数理物質科学研究科
PS-28	一次元 Majorana フェルミオン系のダイナミクス 太田卓見 京都大学基礎物理学研究所
PS-29	超伝導-InAs ナノ細線接合でのマヨラナ粒子の実証とクーパー対分離 上田健人 東京大学工学系研究科
PS-30	多軌道 Hubbard 模型の励起子相における低エネルギー励起スペクトル 山口伴紀 千葉大院理
PS-31	立方体上の Hubbard モデルにおける強磁性相関と反強磁性相関の競合 栗原春香 島根大総合理工
PS-32	トポロジカル絶縁体接合の電子状態 野村拓人 名大工
PS-33	2次元カイラル p 波超流動体の有効理論[1] 藤井啓資 東工大院理工
PS-34	CeCoIn ₅ の Zn 置換系における精密磁歪測定 湯谷大志朗 富山大理
PS-35	半導体特性を示す黒リンの ³¹ P-NMR 測定 藤井拓斗 兵庫県大院物質理
PS-36	ペロブスカイト型 Co 酸化物の放射光粉末回折とスピン転移 下野聖矢 阪府大院理

- PS-37 S=1/2 三本鎖スピントラップの磁化プラトー
伊藤敬佑 兵庫県立大学
- PS-38 角度分解価電子帯/ 内殻光電子分光による強相関 CeNi₂Ge₂ の異方的重い準粒子状態の研究
中谷泰博 阪大院基礎工
- PS-39 3次元トポロジカルスピン構造をもつ MnGe における電気輸送特性のバンドフィリング制御
藤代有絵子 東京大学工学系研究科
- PS-40 Eu 水素化物の高水素圧力誘起構造相転移
久野敬司 岐阜大工
- PS-41 二本鎖梯子ハバード模型の変分モンテカルロ法による解析
加藤大智 阪大理
- PS-42 Tb_{0.47}Y_{0.53}Ni₂B₂C の FZ 法による単結晶育成とその物性
高橋美郷 お茶の水女子大学人間文化創成科学研究科
- PS-43 一層系銅酸化物超伝導体における斥力起源二電子交換散乱強度の増加機構
寺西慎伍 大阪大学基礎工学研究科
- PS-44 n 型銅酸化物高温超伝導体における電解質ゲートを用いた電子相図の構築
松岡秀樹 東京大学大学院工学系研究科
- PS-45 鉄系超伝導体 K_xFe_{2-y}Se₂ の相分離制御
柳沢佑典 物材機構
- PS-46 ABC 積層三層グラフェンの自発的ギャップに起因するバレーホール効果
田中未羽子 東京大学工学系研究科
- PS-47 非平衡グリーン関数による熱浴に挟まれた二つの量子ドットの解析
深代隆央 東京工業大学大学院理工学研究科
- PS-48 実空間差分法に基づく第一原理伝導計算手法の開発
岩瀬滋 筑波大学数理物質科学研究科
- PS-49 拡張ニコライ模型における超対称性の破れと南部ゴールドストーンフェルミオン
三ノ宮典昭 東大院理
- PS-50 非平衡定常状態における量子ゆらぎ定理: 可解モデルによる解析
諸留昇平 早大理工
- PS-51 共形場理論と確率過程の対応
福住吉喜 東京大学
- PS-52 Entanglement Entropy and Quantum Field Theory
吉野匠 東京大学大学院理学系研究科
- PS-53 量子連続測定による量子フィードバック制御
八角繁男 京都大学大学院理学研究科
- PS-54 量子状態の断熱制御と非線形可積分系
奥山真佳 東工大
- PS-55 アンサンブルの等価性を破る異常量子状態
龍田真美子 東京大学理学系研究科
- PS-56 熱的な量子純粋状態を用いた統計力学の定式化とその応用
遠藤寛之 東京大学理学系研究科
- PS-57 スピン系の臨界現象にボゾン環境が及ぼす影響
高田珠武己 東工大理
- PS-58 1次元系における異常熱輸送の解析
藤平悠太 東京工業大学理学院物理学系
- PS-59 異常熱輸送と巨視的ゆらぎの理論
玉木脩二 慶應義塾大学

PS-60	熱揺らぎを用いたスピングラス基底状態の復元 西村光嗣 東工大理
PS-61	情報駆動エンジンにおける Onsager の相反関係 山本峻平 東大総合文化
PS-62	擬似的再帰を用いた大局結合写像の不安定性解析解析 清水太郎 東京工業大学理学院
PS-63	液晶電気対流による半空間における界面ゆらぎの研究 伊藤康文 東京工業大学理学院
PS-64	記号力学系における Hofbauer ポテンシャルの相転移 篠田万穂 慶應義塾大学
PS-65	ジャミング相における斥力ベクトルスピン模型のシア応答 光元亨汰 阪大理
PS-66	ゆらぎの定理と摩擦 大窪健児 東京大学大学院総合文化研究科
PS-67	はねかえり係数 0 球のミクロからの構成 谷口柊平 京都大学理学研究科
PS-68	転送行列法によるスケーリング次元の数値的研究 越智裕紀 東大物性研
PS-69	Generalized Gibbs Ensemble in Nonintegrable Systems with an Extensive Number of Local Symmetries 濱崎立資 東大理
PS-70	森-中島-Zwanzig の射影演算子法 石川文啓 東京大学大学院理学系研究科
PS-71	逆イジング問題 島垣凱 東京大学理学系研究科
PS-72	十分統計量を操るデーモン-過ぎた事は忘れよう- 松本拓巳 東京大学総合文化研究科
PS-73	普通の男子大学院生がいじんぐやってみた 金子和哉 東京大学大学院総合文化研究科
PS-74	触媒反応ネットワークと細胞集団の統計則 佐藤匠哉 東京大学総合文化
PS-75	食物連鎖の力学系 野澤恵理花 お茶の水女子大学大学院人間文化創成科学研究科
PS-76	力学系モデルにおける多様性の形成 西浦直人 東京大学大学院総合文化研究科
PS-77	タイトル未定 羅恒宇 東京大学大学院工学系研究科
PS-78	タイトル未定 山田将之 名古屋大学大学院 理学研究科
PS-79	タイトル未定 井辺洋平 京都大学大学院理学研究科
PS-80	タイトル未定 鳥井陽平 京都大学大学院理学研究科
PS-81	タイトル未定 永田新太郎 大阪大学大学院理学研究科

状態識別能力と擾乱の関係

京都大学
濱村 一航

Tradeoff relation between state-distinction power and non
disturbingness
Kyoto University
Ikko Hamamura

Keywords : 量子測定理論, 情報擾乱定理

量子測定理論とは量子物理学における物理量の測定を扱う理論である。ここで、一般的には物理量の測定は正作用素値測度、状態変化は CPTP 写像で表される。量子物理において状態に対して行なうことの出来る操作はこの物理量の測定や状態変化である。これらの操作の組が同時に行えるわけではないという性質は操作の両立不可能性と呼ばれ量子論の重要な性質の一つである。この両立不可能性については分科会において話す予定である。

このポスター発表では特に量子測定と状態変化の両立不可能性について考える。関心があるのは「どのような測定とどのような状態変化を同時に行なうことが出来るか」という問題である。そこで、より多くの情報が得られる物理量の測定と両立可能な状態変化にはより大きな擾乱が伴うという情報と擾乱の関係をヒントにする。現在までの情報擾乱関係の議論では、物理量の「情報の量」と状態変化の「擾乱の程度」を定量的に評価する方法を用いて情報擾乱定理を示されてきた。一方、[1]によって、物理量の集合と状態変化の集合における前順序関係を用いた定性的な情報擾乱関係が与えられた。先行研究では事後過程 (post-processing) を用いて関係を入れているが、ここでは先行研究とは異なる関係を用いる。物理量の集合には状態識別能力を用いて関係を導入する。状態識別能力とは異なる状態の組を準備して物理量を測定して得た確率分布から状態を識別する能力のことである。状態変化に導入する関係としては、状態変化による物理量の不変性(無擾乱性)[2]に着目し、前順序関係を導入する。これらの状態識別能力と擾乱の関係について、定性的な情報擾乱定理について議論する。さらに、定量的な量としてベクトル空間の次元を用いて、上で議論した定性的な関係を定量化し不等式の形の両立可能性の必要条件を得る。

参考文献

- [1] T. Heinosaari and T. Miyadera, *Physical Review A* **88**, 1 (2013).
- [2] T. Heinosaari and M. M. Wolf, *Journal of Mathematical Physics* **51**, 092201 (2010).

Bose-Einstein 凝縮体に現われる非エルミート性

名大工^A, 名大高等研究院^B

大橋 輝道^A, 小林伸吾^B, 川口 由紀^A

Non-Hermitian property of a Bose-Einstein condensed system

^A*Dep. Applied Physics, Nagoya Univ.,*

^B*Institute for Advanced Research, Nagoya Univ.*

Terumichi Ohashi^A, Shingo Kobayashi^B, Yuki Kawaguchi^A

Keywords: Bose-Einstein 凝縮体, 非エルミート性, 動的不安定性

Bose-Einstein 凝縮とは粒子の量子統計性が原因で巨視的な数のボーズ粒子がある温度以下で最低一粒子状態に縮退する現象である。こうした量子的に縮退した系を扱う場合、基底状態からどのような励起がおこりうるかを理解することは重要である。一様系では安定なエネルギー状態から励起が起こるが、非一様系では準安定状態なのでより素励起が熱的に励起される。この素励起の励起スペクトルを求めるために Bogoliubov 変換し、素励起が従う Bogoliubov 方程式を得る[1]。この時のハミルトニアンはフェルミ粒子系ではエルミートであるが、ボーズ粒子系では非エルミートであるので実固有値以外に複素固有値が出現する領域があることが知られている。Bose-Einstein 凝縮における動的不安定性はこの複素固有値の出現で量子的な揺らぎが指数関数的に大きくなることが原因であると理解されている。

今回私は冷却原子気体で実現する Bose-Einstein 凝縮の基本的な性質と Bose-Einstein 凝縮体に現われる非エルミート性について紹介する予定である。

[1] Lev Pitaevskii, Sandro Stringari, Bose-Einstein Condensation (2003), OXFORD Press .

流体シミュレーションによる
レーザーアブレーションプラズマの解析

広大院工^A, レーザー総研^B
池田千穂^A, 砂原淳^B, 難波慎一^A

Analysis of laser-ablated plumes by using of fluid simulation

^ADepartment of Mechanical Science Engineering, Hiroshima Univ. , ^BILT

Chiho Ikeda^A, Atsushi Sunahara^B and Shinichi Namba^A

Keywords: レーザープラズマ, 流体シミュレーション, Laser-produced plasma, Fluid simulation

レーザーアブレーションプラズマの流体シミュレーションには、大きく2つの特徴がある。まず1つ目は、固体—真空までの急激な密度変化を伴う流れであること、そして2つ目は、電子とイオンは温度非平衡状態にあり、電子温度およびイオン温度として別々に扱う必要があることである。我々は、1流体2温度モデルによる流体シミュレーションコードを開発した。このコードでは、質量および運動量については保存型スキームであるHLL-HLLC法[1]、電子温度およびイオン温度については非保存型のオイラー方程式を風上差分法を用いて計算を行う。このコードにより、物理量の保存性が向上し、数値的にも安定したシミュレーション計算を行うことに成功した。

一方で、流体シミュレーションを行う際には、温度と密度から圧力を与える状態方程式が必要となる。低温高密度となる固体付近を取り扱う場合、その状態方程式は理想気体とは異なるものとなり、正しく取り扱う必要がある。よく使われる状態方程式QEOS[2]では、スケーリング則により広い範囲の元素に適用できる一方で、計算を行ううちに固体が自然に膨張してしまうという問題がある。これは状態方程式に不足しているモデルが原因であると考えられる。そこで我々は新しい状態方程式ライブラリを導入し、状態方程式が流体シミュレーションに与える影響や、モデルの不完全な部分に関して議論する。

[1] T.Miyoshi and K.Kusano, J. Comput. Phys. **208**, 315 (2005).

[2] R. H. More *et al.*, Phys. Fluids **31**, 3059 (1988).

PS-04

テンソルネットワークによるトポロジカル絶縁体の解析に関する レビュー

東京大学大学院理学系研究科

山本 卓矢

Review in terms of analysis of topological insulator by using
tensor network

Department of Physics, University of Tokyo

Takuya Yamamoto

Keywords : トポロジカル絶縁体、テンソルネットワーク

近年、トポロジカル絶縁体という、表面にだけ電流が流れ、内部は絶縁状態という新たな物質に注目が集まり、デバイスへの応用に向けた研究が盛んに行われている。しかし、金属を表面に接触させた場合など、具体的な応用に向けた理論の構築はまだ存在しない。今回の発表では、テンソルネットワーク [1] という、計算量が指数的に増える厳密対角化などに比べ、計算量がべき的な程度にすむ手法を用いてトポロジカル絶縁体の性質を求める研究を紹介していく。

[1] R. Orus ,”A practical introduction to tensor networks: Matrix product states and projected entangled pair states,” , Annals of Physics **349**, 117-158 (2014).

パリティを使わずに Z_2 不変量を計算する方法 ～ トポロジカル絶縁体の第一原理計算入門～

金沢大数物^A, 金沢大自然^B
澤端日華瑠^A, 山口直也^B, 石井史之^A
The method of calculating Z_2 invariant without inversion symmetry
Kanazawa University
Hikaru Sawahata^A, Naoya Yamaguchi^B and Fumiyuki Ishii^A

Keywords: トポロジカル絶縁体, Z_2 不変量, 時間反転電気分極, 格子チャーン数, Wannier 関数, OpenMX, トポロジカル相転移

時間反転対称性によって守られた金属状態をエッジに持つトポロジカル絶縁体を第一原理計算で解析するにあたって, トポロジカル絶縁体と自明な絶縁体を区別する Z_2 不変量を計算することは必要不可欠である. 特に, 電界や電気分極によって空間対称性が破れた系の Z_2 不変量を解析することはトポロジカル絶縁体のデバイス応用を考える上で非常に重要である.

トポロジカル絶縁体について簡単に解説するような文献には「トポロジカル絶縁体は通常の絶縁体と Z_2 不変量と呼ばれるトポロジカル不変量によって区別される. Z_2 が0ならば自明な絶縁体, 1ならばトポロジカル絶縁体である. この Z_2 不変量は時間反転不変な波数上のパリティの積によって求められる.」と Z_2 不変量の意味と求め方について端的に書かれている. しかし, 「そもそも Z_2 不変量にはどのような物理的な意味があるのか», 「パリティが破れた系では Z_2 不変量をどのように求めるのか」について簡単に解説した文献は殆どないと思われる.

本講演ではまず Z_2 不変量の時間反転電気分極による元来の定義[1]を説明し, Z_2 不変量の物理的意味を明らかにする. 次に, パリティ法[2], 格子チャーン数法[3], Wilson ループ法[4], 時間反転電気分極法[5]の4つの Z_2 不変量の計算手法と第一原理計算コードOpenMX[6]への実装について説明し, テスト計算によって明らかとなった, それぞれの長所, 短所について述べる. 最後に, パリティ法が適用できない空間反転対称性のない系について, 我々が今回 OpenMX に実装した上述の3つの手法を用いた適用例: (i) Bi(111) 薄膜の電界誘起トポロジカル相転移, (ii) BiTeI の格子の歪みによるトポロジカル相転移[7]について簡単に紹介する.

当日は同じ分野の学生に限らず, 異分野の方, 学部生の方にも興味を持って頂けるようにイントロダクションに重きを置いた発表を行う予定である.

- [1] L. Fu and C. L. Kane, Phys. Rev. B **74**, 195312 (2006).
- [2] L. Fu and C. L. Kane, Phys. Rev. B **76**, 045302 (2007).
- [3] T. Fukui and Y. Hatsugai, J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 053702 (2007).
- [4] R. Yu, X. L. Qi, A. Bernevig, Z. Fang and X. Dai, Phys. Rev. B **84**, 075119 (2011).
- [5] A. A. Soluyanov and D. Vanderbilt, Phys. Rev. B **83**, 235401 (2011).
- [6] T. Ozaki et al., Open source package for Material eXplorer, <http://www.openmx-square.org/>
- [7] M. S. Bahramy, B. -J. Yang, R. Arita and N. Nagaosa, Nat. Commun. **3**, 679 (2012).

トポロジカル絶縁体 Bi_2Se_3 の軌道選択スピン分解光電子分光東大物性研^A野口亮^A, 黒田健太^A, 矢治光一郎^A, 近藤猛^A, 小森文夫^A, 辛埴^AOrbital-dependent SARPES of Bi_2Se_3 ISSP, The University of Tokyo^ARyo Noguchi^A, Kenta Kuroda^A, Koichiro Yaji^A, Takeshi Kondo^A, Fumio Komori^A, Shik Shin^A

トポロジカル絶縁体の表面には、スピン軌道相互作用によってスピン偏極した電子状態が現れる。このようなスピン偏極した電子状態は、スピントロニクスや量子コンピュータといった応用面から注目されているだけでなく、固体中の新奇な電子状態としても盛んに研究されている [1]。代表的な三次元トポロジカル絶縁体として知られる Bi_2Se_3 は、その発見以来様々な実験手法で研究がなされてきた [1,2]。特にスピン分解角度分解光電子分光 (SARPES) は物質中のスピン偏極した電子状態を直接的に観測できる有力な手法であり、 Bi_2Se_3 のスピン偏極表面状態に関しても複数の SARPES 実験の報告がある [3,4]。しかし、 Bi_2Se_3 においてはスピン軌道相互作用によってスピンと軌道が結合した電子状態が形成されることが理論的に考えられており、励起光の偏光や装置のジオメトリまで含めないと正確な実験の検証をすることが出来ない [5]。しかし、適切な装置配置で、励起光の偏光を光電子放出過程の反応面に関して p -pol.・ s -pol. とすると、波動関数の偶対称・奇対称成分を分離した測定を行える。

図??は、励起光であるレーザー光の偏光を光電子放出過程の反応面に関して p -pol.・ s -pol. とした場合の SARPES 測定の結果である。実験結果から、 p -pol. では $+y$ 方向、 s -pol. では $-y$ 方向にスピン偏極した電子状態を選択的に測定できていることが確認された。この実験結果と解釈は、 Bi_2Se_3 のトポロジカル表面状態においてスピンと軌道が結合していることを示しており、トポロジカル絶縁体のみにとどまらず、スピン軌道相互作用由来でスピン偏極した固体中の電子状態への理解を深めるものである。

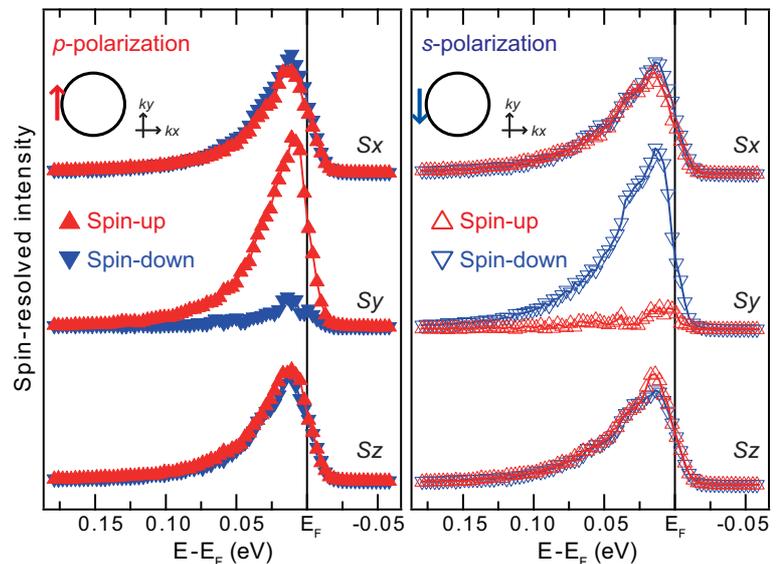


図 1: (左) 励起光を p -pol. とした場合の三次元スピン分解結果。(右) 励起光を s -pol. とした場合。

[1] M. Hasan and C. Kane, Rev. Mod. Phys. **82**, 3045 (2010).

[2] Y. Xia, *et al.*, Nat. Phys. **5**, 18 (2009).

[3] C. Jozwiak, *et al.*, Nat. Phys. **9**, 293 (2013).

[4] Z. H. Zhu, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **112**, 076802 (2014).

[5] H. Zhang, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **111**, 066801 (2013).

Cr(NbS₂)₃ とその関連物質の第一原理計算

広大院先端^A University of Wisconsin-Milwaukee^B

黒田 文彬^A 獅子堂 達也^B

First-principles study of the chiral magnet Cr(NbS₂)₃
and related compounds

ADSM, Hiroshima University University of Wisconsin-Milwaukee^B

F.Kuroda^A and T. Shishidou^B

近年、Cr(NbS₂)₃ は大きな注目を集めている[1-4]。この物質は外部磁場を c 面内にかけることで、カイラルスピンソリトン格子を形成することが理論的[1]にも実験的[2]にも実証され、さらにソリトン密度に依存した電気伝導異常も観測されているためである[3]。この物質の結晶構造はNbS₂にCrを1/3だけインターカレートしCrが $\sqrt{3}\cdot\sqrt{3}$ の長周期構造をもち、空間群がP6₃/mmcから反転対称性のないP6₃22になる。カイラル磁性出現の微視的起源としては、隣接スピン間強磁性的交換相互作用 J と Dzyaloshinskii-守谷相互作用 D の競合によるものであると考えられている。さらに同じ結晶対称性をもち、長周期らせん構造をもつと考えられている関連物質としてCr(NbSe₂)₃、Cr(TaS₂)₃やMn(NbS₂)₃がある。しかし、第一原理計算からこれらの磁氣的相互作用を定量的に評価する試みは行われていない。本研究では、Cr(NbS₂)₃ とその関連物質について強磁性を仮定した第一原理電子状態の計算を行い、そこから磁性元素CrやMnの3d電子の状態について議論した。さらに実験から観測されているように、これらの物質の磁化容易軸が c 面内にあることを第一原理の観点で導いた。一般的にらせん磁性のような長周期らせん磁気構造を持つ物質の計算は困難である。しかし、一般化されたブロッホの定理[5]を用いることで、これを全電子FLAPW法の枠組みのなかで実現し、波数ベクトル \mathbf{q} で指定されるらせん磁気状態のエネルギー $E(\mathbf{q})$ を密度汎関数理論にもとづく第一原理計算から得ることを可能にした。様々な \mathbf{q} に対する結果をハイゼンベルグ模型にマップし[6]、Crの層間スピン交換相互作用 J_{ij} を抽出した。その結果から、Crの最近接層の強磁性的作用と第二近接層の反強磁的作用の競合が確認された。さらに、その圧力効果についても議論する。

[1] J. Kishine *et al.*, Phys. Rev. Lett. **107**, 017205 (2011).

[2] Y. Togawa *et al.*, Phys. Rev. Lett. **108**, 107202 (2012).

[3] Y. Togawa *et al.*, Phys. Rev. Lett. **111**, 197204 (2013).

[4] Y. Togawa *et al.*, Phys. Rev. B **92**, 220412(R) (2015).

[5] L. M. Sandratskii, Phys. Status Solidi B **136**, 167 (1986).

[6] M. Lezaic, P. Mavropoulos, G. Bihlmayer, and S. Blügel, Phys. Rev. B **88**, 134403 (2013).

ワイル半金属におけるカイラル磁気効果

東大理学系, 小形研究室
立石幾真

Ogata Laboratory, Graduate School of Science, The University of Tokyo
Ikuma Tateishi

ワイル半金属とは、バンド構造中に縮退のない二つの線形分散を伴うノードを持つ物質である。ワイル半金属中の電子は、相対論的場の量子論で現れるワイルフェルミオンが固体中で実現したものと理解され、場の理論での考察からカイラルアノマリーと呼ばれる現象が起こると予想されている。カイラルアノマリーとは特定のカイラリティを持った粒子の数が保存しない現象であり、ワイル半金属に特徴的な現象である異常ホール効果やカイラル磁気効果が起こる原因と考えることができる。

この度のポスター発表ではトポロジカル絶縁体と絶縁体の多層構造からなるワイル半金属におけるカイラル磁気効果に関する論文のレビューを行う [1,2,3]。カイラル磁気効果とは磁場を印加した方向にその磁場の大きさに比例した電流が流れる現象で、その比例係数は波数空間内の二つのワイルノードの位置関係に依っている。ワイルノードの位置関係はハミルトニアン中の時間反転対称性と空間反転対称性を破る項の大きさによって変化し、二つのノードが波数とエネルギーの両方向に離れているときカイラル磁気効果が現れる。また、格子系ではカイラル磁気効果は消失するとも指摘されており [4]、その論文についても上記の論文と異なる点に注目しながら説明する。

- [1] A. A. Zyuzin, Si Wu, and A. A. Burkov , Phys. Rev. B **85**, 165110 (2012).
- [2] A. A. Burkov and Leon Balents , Phys. Rev. Lett. **107**, 127205 (2011).
- [3] Y. Chen, Si Wu, and A. A. Burkov , Phys. Rev. B **88** 125105 (2013).
- [4] M. M. Vazifeh and M. Franz , Phys. Rev. Lett. **111**, 027201 (2013).

空間群対称性に起因するノーダルライン半金属

東工大理^A, 東工大元素戦略研究セ^B
高橋亮^A, 村上修一^{A,B}

Nodal line semimetals arising from crystal symmetry

Dept. Phys., Tokyo Inst. Tech.,^A, TIES, Tokyo Inst. Tech.^B
Ryo Takahashi^A and Shuichi Murakami^{A,B}

Keywords : ワイル半金属, ノーダルライン半金属, 映進対称性

通常、エネルギーバンドは準位反発により、波数空間の一般の点では縮退点を持たない。対称性の高い点では、対称性の要請からエネルギーバンドが縮退することがあり、このような縮退は空間群の既約表現の理論を用いて理解される。一方、既約表現だけからでは予想できない縮退を持つ物質も存在する。そのような物質群はトポロジカル半金属と呼ばれ、近年注目を集めている。

ノーダルライン半金属はトポロジカル半金属の一種であり、波数空間の一般の点に線状の縮退点（ノーダルライン）を持つ物質である。ノーダルラインは、ベリー位相と呼ばれるトポロジカル数によって保護されており、空間反転対称性と時間反転対称性を壊さない限り安定して存在できる。

ノーダルラインが出現するための必要条件として、次の二つのいずれかを満たせばよいことが知られている:

- 1: 空間反転対称性と時間反転対称性を持ち、スピン軌道相互作用が無視できる。
- 2: 鏡映対称性もしくは映進対称性を持つ。

しかし、これらの条件は十分条件ではない。ノーダルラインは偶然縮退により出現しており、偶然縮退は普通は対称性だけでは判断できないものだからである。このため、物質が持つ対称性だけから、それがノーダルライン半金属か否かを判断するのは不可能だと思われるようになってきた。

我々は、空間群 No.135 を持つスピンレスの系の模型を用いて、ノーダルラインが必ず出現することを示した。特に、空間群の既約表現を詳しく分析することで、この空間群においては、ノーダルラインの出現が模型の対称性だけから判断できることを示した。この結果は、模型が鏡映対称性と映進対称性の両方を持ち、それらが特別な関係にあることに起因しており、他にも同様の性質を持つ空間群が複数存在する事も明らかにした。ポスターセッションでは、模型でノーダルラインが出現する様子を紹介し、何故ノーダルラインが必ず出現すると言えるのかについて、鏡映固有値を用いて簡単に説明する。

[1] B. J. Wieder, Y. Kim, A. M. Rappe, and C. L. Kane, Phys. Rev. Lett. 116, 186402 (2016).

キラル磁性体におけるマイクロ波応答と電流効果

東京大学総合文化研究科^A, 産業技術総合研究所^B蔣男^A, 井口雄介^A, 新居陽一^A, 富岡泰秀^B, 小野瀬佳文^A

Microwave response and current effect in a chiral magnet

^ADept. of Basic Science, Univ. of Tokyo, ^BAIISTN. Jiang^A, Y. Iguchi^A, Y. Nii^A, Y. Tomioka^B, Y. Onose^A

Keywords : D · M 相互作用, スピン軌道相互作用, スピン分裂, 電流効果

物理現象は系の対称性に強く依存し、その物質の対称性を反映した興味深い現象が起こる。キラル磁性体のような空間反転対称性が破れた物質ではジャロシンスキー・守谷相互作用が働き、らせん磁性相が安定になることがある。そのような相では特異な磁気共鳴が起こる [1]。さらに、一般に空間反転対称性が破れた系では、スピン軌道相互作用によって伝導電子の分散関係が運動方向に対して分裂する。そのような系では、電流を流すことで局在モーメントに磁気トルク（スピン軌道トルク）を与えることができる。近年では半導体薄膜におけるラシュバ分裂などが盛んに研究されている [2] が、キラル磁性体ではラシュバ型とは異なるスピン分裂が起き（図 1）、磁気ダイナミクスに大きな影響を与えることが期待される。そこで本研究では、まずキラル磁性体における特異な磁気共鳴を測定する。さらに、スピン分裂由来の電流効果の観測を目指した。

キラルな金属磁性体として $\text{Fe}_{0.8}\text{Co}_{0.2}\text{Si}$ を使用し、強磁性相での強磁性共鳴のほか、らせん磁性相でもマイクロ波吸収を観測することに成功した。図 2 に 4K における代表的な磁場 B でのマイクロ波吸収スペクトルを示す。吸収ピーク周波数は、 $0\text{mT} \leq B \leq 160\text{mT}$ のらせん磁性相では減少し、 $160\text{mT} \leq B$ の強磁性相では増加するのが観測できた。

電流効果に関しては、電流を流した際のマイクロ波応答を測定したが、有意な変化は観測されなかった。そこでより高い電流密度を実現するために、集束イオンビームを用いてサンプルをナノ加工したが、そのデバイスでは磁気共鳴が観測されなかった。現在は共振器デバイスを作製し、感度を上げたデバイスにおいて電流効果の観測を目指している。

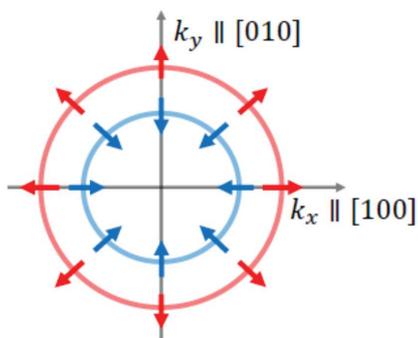


図 1: キラル磁性体におけるスピン分裂

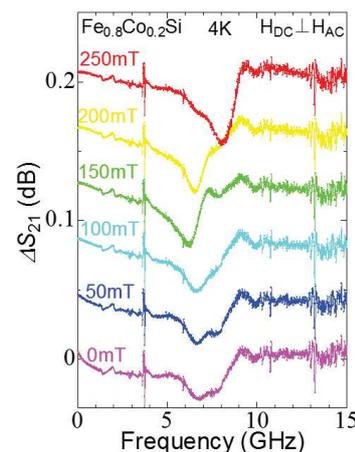


図 2: 4K における $\text{Fe}_{0.8}\text{Co}_{0.2}\text{Si}$ のマイクロ波応答

[1] T.Schwarze *et al.*, Nature Material **14**, 478 (2015).

[2] D.Fang *et al.*, Nature Nanotechnology **6**, 413 (2011).

カイラルらせん磁性体中の扇状構造

東大総合文化^A, 理化学研究所^B, 東大理^C, 放送大学^D
 篠崎 美沙子^A, 星野 晋太郎^B, 正木 祐輔^C, 岸根 順一郎^D, 加藤 雄介^{A,C}

Chiral-Fan structure in Chiral Helimagnet
The University of Tokyo^A, RIKEN^B, The Open University of Japan^C
 M. Shinozaki^A, S. Hoshino^B, Y. Masaki^A, J. Kishine^C, and Y. Kato^A

Keywords : カイラルらせん磁性体、平均場 :

らせん磁性体 [図 1] には、吉森型と呼ばれる対称型のらせん磁気秩序と、カイラルらせん磁性体と呼ばれるジャロシンスキー・守谷 (DM) 相互作用に由来するカイラリティを持つらせん磁性体の二種類が存在する。これらのらせん磁性体は、らせん軸に垂直に磁場をかけたときに違いが生じる。吉森型らせん磁性では、らせんの巻き方向は任意であるから、外部磁場との競合でらせんが短い周期で右巻きと左巻きを繰り返す扇状構造 (fan structure) が形成される [1]。一方カイラルらせん磁性体は、カイラルソリトン格子と呼ばれるスピン構造を形成する [2, 図 2]。これはらせんの巻き方向が DM 相互作用により一意に定められているためであり、カイラルらせん磁性体中に扇状構造が形成されることはないといこれまで考えられてきた。

今回我々は平均場近似を用いて三次元カイラルらせん磁性体の有限温度の性質を研究した。この結果、スピンの長さの空間変調を伴う扇状構造 [図 3] が、転移点近傍のごく小さな磁場中で現れうることを発見した [3]。この構造は有限温度効果によって十分スピンの短くなった場合に、外部磁場による Zeeman エネルギーの利得が、逆まきのらせん部分における DM 相互作用によるエネルギー損失分に勝る場合に実現され得る。さらに、近年実験でも存在が示唆されている一次相転移と二次相転移の境界点である三重臨界点 [4] が、平均場近似の範囲内でも確認され、そのパラメーター依存性を調べた。

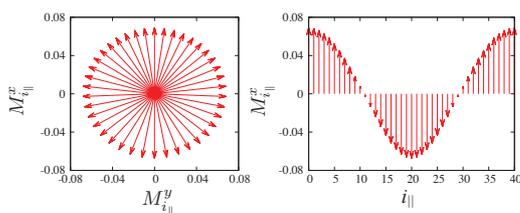


図1 らせん磁気構造

左：スピンのらせん構造を

らせん軸上から眺めた図

右：らせん構造を横から眺めた図

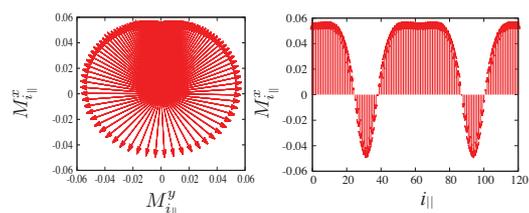


図2 カイラルソリトン格子

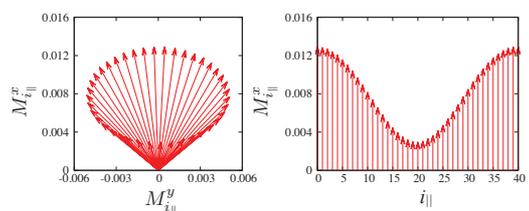


図3 カイラルな扇状構造

[1] A. Yoshimori, J. Phys. Soc. Jpn. **14**, 807 (1959). [2] J. Kishine, *et al.*, Prog. Theor. Phys, Suppl. **159**, 82 (2005). [3] M. Shinozaki *et al.*, arXiv:1512.00235v3 (to be published in J. Phys. Soc. Jpn.). [4] K. Tsuruta *et al.*, Phys. Rev. B **93**, 104402 (2016).

近藤格子模型におけるカイラル螺旋磁性体

東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻

奥村 駿

Keywords : カイラル磁性、近藤格子模型、二重交換相互作用、スピン軌道相互作用

スピン、電荷、軌道の自由度の結合によってもたらされる物理は強相関電子系を舞台に長い間精力的に研究がなされてきた。近年では、コンピュータや数値計算手法のめざましい発達によって、解析的には困難とされてきた量子多体系の計算が可能となってきた。近年では、近藤格子模型によってこれまで切り離されて考えられてきた局在スピンと伝導電子が相関しあう系を取り扱う研究がなされている。その一方で、理論や実験を問わず、軌道とスピンの結合によるスピン軌道相互作用についても多くの研究がなされている。しかし、スピンと電荷、軌道の自由度をすべて取り入れた計算については未だ報告がなされていない。そのような中で、ごく最近になって一次元系において CrNbS などの物質にカイラル螺旋磁性体を実現しうることが実験的に示された [1]。この物質では、磁場の印加による磁気抵抗の減少が確認されているが、これはまだ理論的に計算されていないトピックである。そこで我々は、近藤格子模型を用い二重交換相互作用と Dzyaloshinskii-Moriya 相互作用が働く系を考えた上で、理論的な計算を行っている。このような系では多数の自由度を取り入れた計算となるため、大きなハミルトニアンを扱うことが必須となる。我々は、物理量を求める計算の際に厳密対角化ではなく多項式展開法を代用することで計算コストを小さくすることを考えている。本発表では、カイラル螺旋磁性体を実現する系について触れるとともに計算手法として多項式展開法について紹介し、今後の研究の展望を示す。

[1] T. Togawa *et al.*, Phys. Rev. Lett. **111**, 197204 (2013).

カイラル結晶における自然円二色性とその角度依存性

阪大産研^A, 物財機構 MI²I^B勝本啓資^A, 藤井将^B, 小口多美夫^{A,B}X-ray Natural Circular Dichroism in Chiral Crystal and the Angular
Dependence^AISIR, ^BNIMS MI²IHiroshi Katsumoto^A, Hitoshi Fujii^B and Tamio Oguchi^{A,B}

Keywords: カイラリティ、カイラル結晶、自然円二色性、第 1 原理計算

TeO₂ や LiIO₃ などのカイラルな空間群を持つ結晶をカイラル結晶と呼ぶ。この結晶は中心反転対称性が破れており、他の化合物に見られるような物性とは異なる特徴を持っており、その一つが X 線領域における自然円二色性 (XNCD ; X-ray Natural Circular Dichroism) である[1]。これは、円偏光した X 線を照射した場合、ヘリシティによって光の吸収強度が異なることを示す。その理由として、物質中の電子の遷移が電子双極子遷移と電子四極子遷移の干渉項によるものであることが分かっている[2]。本研究では、第一原理計算コード、HiLAPW を用いて TeO₂、LiIO₃ の XNCD の角度依存性を計算した。それとともに理論的な表式について議論したい。

[1] A. Rogalev *et al.*, C. R. Physique 9 (2008)

[2] Ch. Brouder, J. Phys.: Condens. Matter 2 (1990) 701

Rashba 型スピン分裂バンドに起因した非相反電荷輸送現象

東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻^A,
理化学研究所創発物性科学研究センター^B

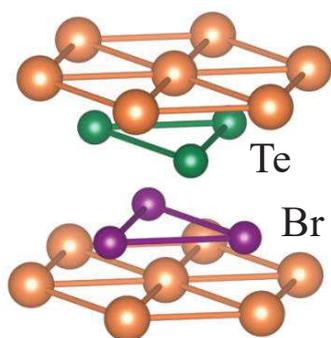
越川 翔太^A, 井手上 敏也^A, 濱本 敬大^A, 江澤 雅彦^A, 金子 良夫^B,
永長 直人^{A,B}, 十倉 好紀^{A,B}, 岩佐 義宏^{A,B}

Keywords: Rashba 系, 層状物質, スピン軌道相互作用, 実験

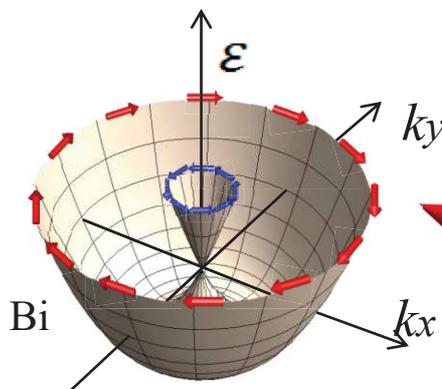
空間反転対称性の破れに起因した物性には非従来型超伝導状態や磁性と誘電性の結合であるマルチフェロイック等の様々な興味深い現象が数多く存在する。これは、空間反転対称性の破れた結晶では、電子バンドのスピン分裂に代表されるように、結晶対称性の破れを反映した特異なスピン軌道相互作用が固体の電子状態に本質的な影響を与えるためであると考えられる。そのような空間反転対称性の破れに起因する物性の一つに非相反電荷輸送現象がある。この現象は電流を流す向きによって電気抵抗値が変わるというもので、電流に関する二色性と捉えることができる。

本発表では、近年新しく発見された巨大な Rashba 型スピン分裂バンドを持つ層状化合物である BiTeX(X=I,Br)に着目し、空間反転対称性の破れに起因した電荷-スピン輸送の検証と新現象開拓に取り組むことで、三次元極性半導体において初めて非相反電荷輸送現象を観測すると同時に、その特徴的な振る舞いを明らかにしたことを述べる。

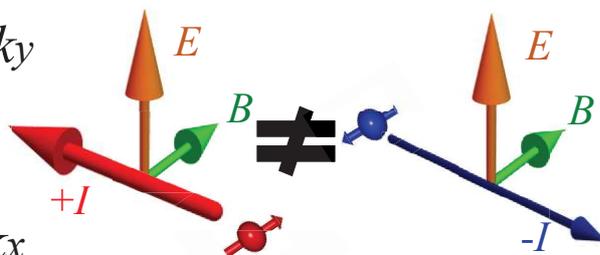
■ 結晶構造



■ バンド構造



■ 非相反電荷輸送現象



磁気スキルミオンによるトポロジカルホール効果の理論

東京大学工学系研究科 物理工学専攻^A, 理研 CEMS^B濱本敬大^A, 江澤雅彦^A, 永長直人^{A,B}**Keywords** : スキルミオン、トポロジカルホール効果、量子ホール効果

空間反転対称性の破れた強磁性体中に現れる磁気スキルミオンは、渦状のスピンの配置を持つトポロジカルに安定な準粒子励起である。元々はハドロンのモデルとして提唱され、近年 MnSi や FeGe などのらせん磁性体中で実験的な観測がなされた。スキルミオンは数～数 10nm 程度の小さなサイズ、トポロジカルな安定性、微小電流での駆動可能性から高密度、不揮発性、低消費電力のメモリデバイスへの応用が期待され、近年実験理論の両面から爆発的に研究が進められている [1]。

また、スキルミオンのようにねじれたスピン構造を持つ物質中ではそのスピンの立体角に比例した有効磁場が創発され、伝導電子の伝導特性に顕著な影響を与えることが知られている。この創発磁場によるホール効果は外部磁場なしでも生じる異常ホール効果の一種であり、特にトポロジカルホール効果と呼ばれる。スキルミオンにおいては創発磁場が最大で 4000T にもおよび、そのホール電圧の観測はスキルミオンが形成されたことの実験的証拠として広く用いられている。本ポスター発表では、スキルミオンの存在に起因するトポロジカルホール効果に関して我々の二つの研究を紹介する。

第一の研究はスキルミオンが周期的に配列したスキルミオン結晶相における、巨大な有効磁場による量子ホール効果に関するものである。この相ではその有効磁場も空間的に周期的なものとなるが、このような系で起こる量子化されたトポロジカルホール効果と、通常の一様外部磁場による量子ホール効果との類似点相違点、実験的な観測における条件等を明らかにした [2]。

第二の研究では、メソスコピックスケールのデバイス中に孤立スキルミオンが存在する際のホール信号のスキルミオン位置依存性を調べた。結果としてスキルミオンの位置情報がホール信号のピークによって検出可能であることを示した。これはスキルミオンを用いた磁気メモリデバイスにおける情報の読みだしに対応する機構であり、応用上重要な意味を持つ [3]。

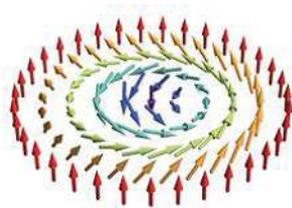


図 1: スキルミオン

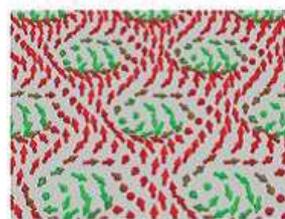


図 2: スキルミオン結晶

[1] N. Nagaosa and Y. Tokura, *Phys. Scr.* T146, 014020 (2012)[2] K. Hamamoto, M. Ezawa and N. Nagaosa *Phys. Rev. B* 92, 115417 (2015)[3] K. Hamamoto, M. Ezawa and N. Nagaosa, *Appl. Phys. Lett.* 108, 112401 (2016)

ディラック系における反磁性電流の緩和時間

東大理

広沢 智紀

Relaxation time of diamagnetic current in Dirac systems

Department of Physics, University of Tokyo

Tomoki Hiroswawa

外部磁場によって変化した核スピンの状態は、格子系との相互作用で熱平衡状態まで戻る。このプロセスにかかる時間をスピン格子緩和時間と呼ぶ。緩和は電子の作る電流、またはスピンによる局所的な磁場によって核スピンの状態が変化することで起きる。多くの場合反磁性電流の効果は小さいため、電子のスピンによる効果が主なものとして解析されてきた^{1,2)}。しかしビスマスの帯磁率の計算などにより³⁾、ディラック系ではバンド間効果が大きく働き、反磁性電流による帯磁率は無視できないことが明らかになった。これを踏まえると、緩和時間においても同様に反磁性電流の効果を考えることが重要であると予想される。

実際に beta-NMR と呼ばれる手法を用いた実験により、 $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.9}$ からなる三次元トポロジカル絶縁体の緩和時間は Bi や Sb 単体の結晶とは異なる温度依存性を持ち、その値は非常に短いものとなることが示された。⁴⁾

これは三次元トポロジカル絶縁体の表面で実現するディラック系特有の効果が関係しているのではないかと考えられる。本研究ではディラック系電子の反磁性電流の緩和時間の計算を行い、その補正効果を考えることで上記の実験結果の定性的な理解を試みる予定である。

参照

- [1] J. Korryng: *Physica* **16**, 601 (1950)
- [2] T. Moriya: *Phys. Soc. Jpn.* **18**, 516 (1963)
- [3] Y. Fuseya, M.Ogata and H. Fukuyama: *J. Phys. Soc. Jpn.* **84**, 012001 (2015)
- [4] W. A. MacFarlane *et al.*: *Phys. Rev. B* **90**, 214422 (2014)

強磁性体下の Kane-Mele 模型におけるエンタングルメント チャーン数

筑波大数理^A, NIMS^B, 茨城大物理^C

荒木広夢^A, 苅宿俊風^B, 福井隆裕^C, 初貝安弘^A

Entanglement Chern Number of the Kane-Mele Model with Ferromagnetism

^A*Division of Physics, Univ. of Tsukuba*, ^B*NIMS*,

^C*Department of Physics Ibaraki Univ.*

H. Araki^A, T. Kariyado^B, T. Fukui^C and Y. Hatsugai^A

Keywords: Kane-Mele 模型, スピンホール効果, トポロジカル絶縁体

量子スピンホール効果とは、系の端に時間反転対称性に保護されたスピン伝導状態が生じる現象のことである。Kane-Mele模型[1]はハニカム格子のタイトバインディング模型で、量子スピンホール効果が起こる典型的な模型である。Kane-Mele模型は、量子スピンホール効果に本質的なスピン軌道相互作用に加え、サイト間の電子のホッピング、ラシュバ効果、副格子間のスタグガードポテンシャルの効果を含む。量子スピンホール効果の起こる量子スピンホール相と通常の絶縁体相は、2値の値をとる Z_2 トポロジカル数で特徴付けられる[1]。

また、Kane-Mele模型の量子スピンホール相はエンタングルメントチャーン数によっても特徴付けられることが知られている[2]。エンタングルメントチャーン数は、系を二つの部分系に分けたときのエンタングルメントハミルトニアン基底状態のチャーン数として定義される。Kane-Mele模型の相を決定するために、部分系として、系のスピニアップの電子、スピンドアウンの電子で分けることが有効である。

また我々は、Kane-Mele 模型にゼーマン項を加えて時間反転対称性を破った系について、エンタングルメントチャーン数による相図を調べた[3]。このとき、K 点または K' 点のエネルギーギャップが閉じることで相転移が起きる。また、このとき現れる非自明な相におけるエッジ伝導状態について詳しく調べた。

[1] C. L. Kane and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. **95**, 146802 (2005).

[2] T. Fukui and Y. Hatsugai, J. Phys. Soc. Jpn. **83**, 113705 (2014).

[3] H. Araki, T. Kariyado, T. Fukui and Y. Hatsugai, J. Phys. Soc. Jpn. **85**, 043706 (2016).

微小磁性体における高周波「電流雑音」測定系の開発

大阪大学大学院理学研究科物理学専攻^A, 物質・材料研究機構^B
岩切秀一^A, 則元将太^A, 荒川智紀^A, 葛西伸哉^B, 新見康洋^A, 小林研介^A

Development of high frequency current noise measurement system in
micromagnets.

^ADepartment of Physics, Graduate School of Science, Osaka University,

^BNational Institute for Material Science

Shuichi Iwakiri^A, Shohta Norimoto^A, Tomonori Arakawa^A, Shinya Kasai^B,
Yasuhiro Niimi^A, Kensuke Kobayashi^A

Keywords: メゾスコピック系, 電流雑音, 磁気接合, マグノン

試料に一定電圧を印加すれば直流電流が流れる。このとき測定系の誤差が全くなかったとしても、原理的に電流は平均値の回りを時間的にゆらぐ。このゆらぎが電流雑音である。電流雑音は、量子ドットや微小接合などメゾスコピック系における電子伝導過程を探る有力なプローブとなる。

電流雑音は幅広い周波数成分からなり、従来は低周波(~数 10MHz)の測定が主流であった。しかし近年、GHz 以上の高周波数領域の電流雑音が注目されている。その領域は大きく分けて二つの特徴をもつ。

すなわち、

①系を特徴付けるエネルギースケールと周波数が同等である(たとえば量子ドットの準位間隔は 10ueV~数 GHz)

②熱ゆらぎの効果が顕著にならず、量子コヒーレンスが保たれる(たとえば 01K~2GHz)

である。

数 GHz 以上の電流雑音を測定することで、量子系の伝導ダイナミクスを直接的に研究できる[1]。

さて、強磁性体を絶縁体や常磁性体と接合した系(たとえばトンネル磁気接合と呼ばれるもの)は主に応用への興味から研究されているが、低温でのマグノン励起やその量子相関など基礎物理の観点からも興味深い。本研究では「マグノンの量子性・ダイナミクスの検出」を目標にし、「高周波の電流雑音測定系の開発と評価」を行った。

[1]K. Thibault *et al.*, Phys. Rev. Lett {114}, 236604 (2015).

第一原理計算による n 型及び p 型 SnSe のゼーベック効果の解析

大阪大学理学研究科物理学専攻
森 仁志, 臼井 秀知, 越智 正之, 黒木 和彦

First principles study of the Seebeck effect in n- and p-type SnSe

Department of Physics, Osaka University
Hitoshi Mori, Hidetomo Usui, Masayuki Ochi and Kazuhiko Kuroki

Keywords : 第一原理計算 (first principles calculations), 熱電効果 (thermoelectric effect), SnSe

熱電効果は熱エネルギーが電気エネルギーに、もしくは電気エネルギーから熱エネルギーに変換される現象である。熱電効果の性能評価には無次元性能指数 $ZT = \sigma S^2 T / \kappa$ が用いられる (σ は電気伝導度, S は Seebeck 係数, κ は熱伝導度)。 $ZT > 1$ が熱電材料としての実用化の目安となっているが、すでに応用されている BiTe 系でも ZT は 1 程度であり、更なる向上が望まれている。

最近、半導体の一つである SnSe で温度 923K において $ZT = 2.6$ という高い熱電効果が実験的に報告された [1]。それ以来、SnSe に対する研究は、精力的に行われている。先行の理論研究 [2,3] ではフォノンによる強い非調和性に起因して ZT が大きいことが示され、また、キャリアドーパ量の最適化により、更に ZT が大きくなる可能性が示唆された。

我々の研究では、バンド構造の観点から SnSe の高い熱電性能の起源を解明するため、第一原理計算を用いて n 型及び p 型 SnSe の熱電特性の解析を行った。手法としてはまず、バンド構造を計算し、最局在 Wannier 関数を用いて Sn と Se を考慮した 24 軌道有効モデルを構築した。このモデルと Boltzmann 方程式を用いて、電気伝導度や Seebeck 係数の評価を行った。軌道別寄与の詳細な解析の結果、ホールドーパ側では価電子帯の最も高いバンドがいわゆる「プリン型バンド」 [4] の形状をしていることが熱電特性に主に寄与し、一方、電子ドーパ側では伝導帯の最も低いバンドが擬一次元的かつ急峻な形状をしていることが重要だとわかった。今回は軌道別寄与やバンド構造と、熱電性能との関係について議論したいと考えている。

- [1] Li-Dong Zhao *et al.*, Nature **508**, 373 (2014).
- [2] K.Kutorasinski *et al.*, Phys. Rev. B **91**, 205201 (2015).
- [3] R.Guo *et al.*, Phys. Rev. B **92**, 115202 (2015).
- [4] K.Kuroki and R.Arita, J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 083707 (2007).

量子ドット系における温度・電圧誘起断熱ポンピング

東大物性研

長谷川雅大, 加藤岳生

Temperature and electrochemical-potential driven adiabatic pumping in a quantum dot

ISSP, The University of Tokyo

Masahiro Hasegawa and Takeo Kato

Keywords : 量子ドット, 断熱ポンピング, quantum dot, adiabatic pumping

量子ドット (図??) とは、少数のエネルギー固有状態を持つ人工的な系であり、近年の表面微細加工技術の発展により半導体表面上に作成することが可能となった。この量子ドットに複数の電極 (電子浴) を接続した際の量子ドットを介した電子の非平衡輸送特性は、量子的な性質が輸送に強く現れるため研究が盛んに行なわれている。そういった輸送現象の一つとして、周期的なパラメータ変調によって粒子あるいはエネルギーを電子浴間でやりとりするポンピング現象がある。例えば、量子ドットと電子浴が強く結合している領域 (コヒーレント伝導領域) において、電子浴に断熱的かつ周期的な温度・電圧変調を印加した際に、電子浴から電子浴へ電荷をポンプすることが可能である。本発表では、そのようなポンピングについて定性的・定量的な理解を発表する [1]。

断熱的かつ周期的な温度・電圧変調がある電子浴を2つ、ドット内に電子間相互作用のある単一準位量子ドットに強く結合させたモデルを用いる。ポンピングの定式化には非平衡グリーン関数法を用い、電子間相互作用について摂動的に取り扱った。

本発表では、量子ドットでポンピングが発生する機構を説明し、その数値計算による定量的評価 (図??) も示す。

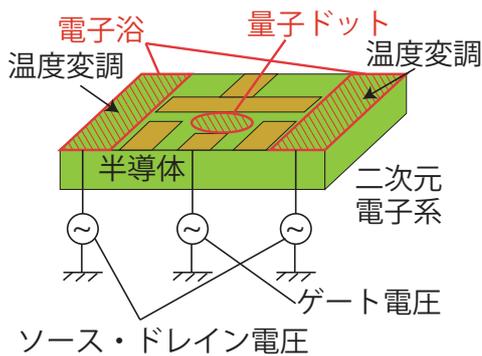
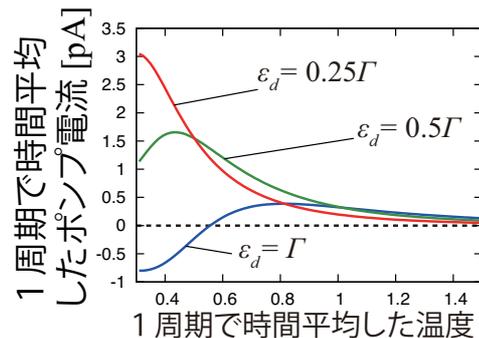


図 1: 本講演で対象とする輸送のセットアップ。半導体表面上に微細加工を行うことで量子ドット状態を作る。



ϵ_d : フェルミ準位を原点としたドットのエネルギー準位
 Γ : ドットの線幅

図 2: 温度変調を電子浴を印加した際に流れるポンプ電流の定量評価。

[1] M.Hasegawa and T. Kato, arXiv:1601.05812 (2016).

有機半導体単結晶薄膜における異方的伝導特性

東大物工^A, 産総研 FLEC^B

浜井 貴将^{A,B}, 荒井 俊人^A, 峯廻 洋美^B, 長谷川 達生^{A,B}

Anisotropic conductivity in single-crystalline thin film of organic semiconductor

U. Tokyo^A, AIST-FLEC^B

Takamasa Hamai^A, Shunto Arai^A, Hiromi Minemawari^B, Tatsuo Hasegawa^{A,B}

Keywords: 有機半導体, 薄膜トランジスタ, プリントッドエレクトロニクス, organic semiconductor, thin film transistor, printed electronics

ベンゾチエノベンゾチオフェン (BTBT) 骨格を持つ誘導体は高い半導体特性を示すことが知られており、特にフェニル基、アルキル基で非対称に置換した Ph-BTBT-C_n (n はアルキル鎖長) は高い層状結晶性・溶解性・熱耐性を持つことからプロセス性・デバイス特性の優れた材料であり、プリントッドエレクトロニクスでの応用が期待されている。これまでに Ph-BTBT-C_n (n ≥ 5) がフェニル基同士を向かい合わせた 2 分子膜構造を取ること [1,2]、アルキル鎖長 10 の誘導体 Ph-BTBT-C10 において、スピコート法で作製した多結晶薄膜が 10cm²/Vs を越える高い移動度を示すことが知られている [3]。

我々は Ph-BTBT-C10 分子の持つ高い層状結晶性を活かした溶液プロセスを用いることで均質な単結晶薄膜を作製し、FET 特性の膜厚依存性の測定に成功した。製膜条件を制御することで、厚さの異なる大面積単結晶薄膜を得ることができ、原子間力顕微鏡 (AFM) や、薄膜 X 線回折による観察から、バルク単結晶と同様の 2 分子膜を単位とした積層構造を持つことがわかった。トップコンタクト型 FET の特性を測定したところ、2 分子膜 3 層以下の非常に薄い薄膜においては 10cm²/Vs 程度の高い移動度が見られる一方で、層数の増加に伴ってデバイス移動度の低下と非線形な出力特性が見られた。これらの結果は、2 分子膜積層構造の中で π 電子骨格によるキャリア輸送層と分離して、アルキル鎖による絶縁層が形成されており、これが電極 - チャネル間の層間アクセス抵抗としてキャリア注入を阻害しているためだと考えられる。発表では、デバイス特性の積層数依存性や四端子測定の結果について議論する。

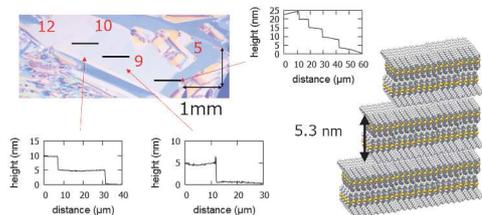


図 1: (a) 作製した薄膜の顕微鏡像 (b-d) AFM で測定したステップ (e) 2 分子膜構造の模式図

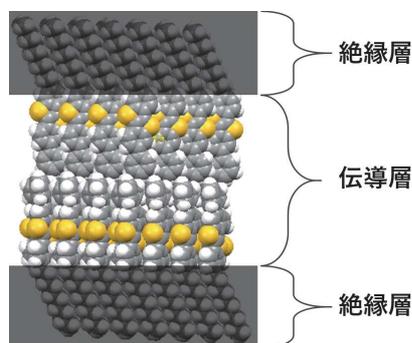


図 2: アルキル絶縁層の模式図

[1] H. Minemawari, *et al.*, *APEX* **7**, 091601 (2014). [2] S. Inoue, *et al.*, *Chem. Mater* **27**, 3809 (2015). [1] H. Iino, *et al.*, *Nat. Commun* **6**, 6828 (2015).

3D プリンターを用いたテラヘルツ領域の波長板の作成

京大院理 光物性研究室^A, 京大物質—細胞統合システム拠点^B

坂田諒一^A, 的場みづほ^A, 有川敬^A, 田中耕一郎^{A,B}

Fabrication of terahertz wave plate by 3D printer

^ADept. Physics, Kyoto Univ., ^BBiCeMS, Kyoto Univ.

Sakata Ryoichi, Matoba Mizuho, Arikawa Takashi, Tanaka Koichiro

Keywords: テラヘルツ光学素子, 波長板, 複屈折, 3D プリンター,
Terahertz optics, Wave plate, Birefringence, 3D printer

近年、イメージングやセンシング、物性研究などテラヘルツ(THz)光を用いた分野が発展しており、THz 領域の光学素子の需要はますます高まっている。しかしながら、様々な理由により可視域や紫外・赤外域等の他の領域の光学素子の作成方法・素材をそのまま THz の領域に適用することは難しいことが多い。たとえば、THz 領域の広帯域の(広い周波数域で機能する)波長板は、屈折率の分散などが理由で、異方性のある素材を切り出す方法では作成が難しい。そのような背景で、近年でも THz 領域の広帯域の波長板について活発に研究がなされている[1,2]。そこで、我々は 3D プリンターで波長以下の異方的な構造を作成することで THz 領域の $\lambda/4$ 板(直線偏光を円偏光に変換する素子)の作成を試みた。

今回は3Dプリンターで壁を並べた構造[3]を設計することにより、複屈折を実現した。図1(a)に今回作成した $\lambda/4$ 板の一例を示す。周期が $651\mu\text{m}$ なので 0.46 THz 以下の周波数でメタマテリアル近似が使える。また[3]の理論式を用いると、 0.2 THz で $\lambda/4$ の位相差がつくと考えられる。図1(a)で E の向きに直線偏光を入射し、透過型テラヘルツ時間領域分光装置で、偏光子を利用することで透過光の偏光状態を調べた。片方の円偏光成分が占める割合を意味する楕円度を用いて性能を評価したところ、図1(b)のように 0.2 THz で 0.92 程度の楕円度が達成された。

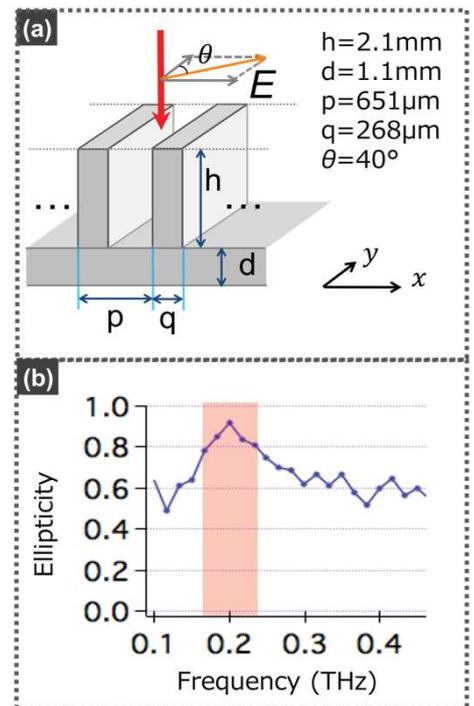


Figure 1.

(a) Structure of the quarter wave plate

(b) Ellipticity of the transmitted THz pulse

[1] M. Nagai *et al.* Opt. Lett. **39**, 146 (2014).

[2] Benedikt Scherger *et al.* Opt. Express **19**, 24884-9 (2011).

[3] M. Scheller *et al.* Opt. Express **18**, 10137–10142 (2010).

量子スピ液体候補物質 κ -(ET)₂Ag₂(CN)₃ の熱伝導率測定

東大物性研^A, 京大院理^B, 名城大農^C, 豊田理研^D,
 近藤潤^A, 下澤雅明^A, 山下穰^A, 前里光彦^B, 平松孝章^C, 吉田幸大^C, 齋藤軍治^{C,D}
 Thermal conductivity measurements in a quantum spin-liquid candidate

κ -(ET)₂Ag₂(CN)₃

*ISSP, The Univ of Tokyo^A, Division of Chemistry, Kyoto Univ^B,
 Faculty of Agriculture, Meijo Univ^C, Toyota Phys. Chem. Res. Inst^D*

J. Kondo^A, M. Shimozawa^A, M. Yamashita^A, M. Maesato^B,
 T. Hiramatsu^C, Y. Yoshida^C, G. Saito^{C,D},

Keywords : 量子スピ液体、quantum spin liquid

磁性体の温度を下げていったとき、スピンの交換相互作用により強磁性や反強磁性といった長距離秩序を形成する。ところが、系に幾何学フラストレーション (図1) が存在するときは状況が一変し、長距離秩序が抑制され、さらに量子揺らぎの効果によって量子スピ液体が実現すると理論的に予想されてきた。しかし、長い間量子スピ液体の候補物質は発見されてこなかったため、実験面からの研究はほとんど行われてこなかった。最近になってフラストレーションの強い格子を持つ物質が発見されたことにより、量子スピ液体の研究が進展してきた。

κ -(ET)₂Ag₂(CN)₃ は、スピン 1/2 の二次元三角格子を持つ有機モット絶縁体である (図2)。幾何学的フラストレーションの効果があり、交換相互作用のエネルギースケールより十分低温でもスピンの長距離秩序を示さないことから、有力な量子スピ液体候補物質となっている[1]。このような量子スピ液体状態を明らかにするうえで重要なことは、その基底状態の性質を特徴づける素励起を解明することである。熱伝導測定では、極低温まで測定することにより素励起を評価することができる[2]。今回我々は κ -(ET)₂Ag₂(CN)₃ について、同様に熱伝導測定を行った。当日は実験結果の詳細について発表する予定である。

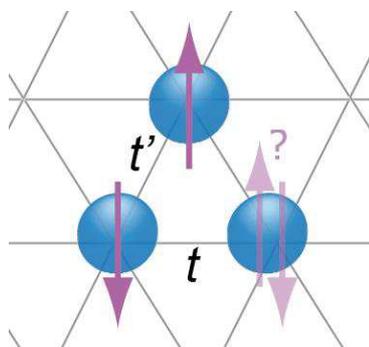


図1. 三角格子上的イジングスピン.

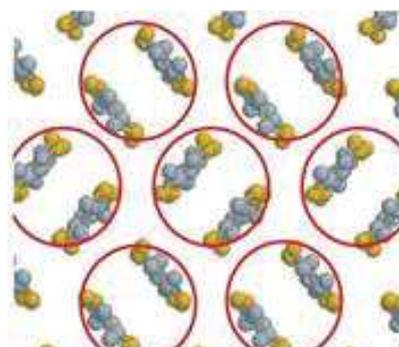


図2. κ 型の二次元三角格子.

[1] Y. Shimizu *et al.*, (2016) airXiv 1604.01460v1.

[2] M. Yamashita *et al.*, (2010) Science **328**, 1246-1248.

キタエフモデルとマヨラナフェルミオンの集団的性質

東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻
ミシエンコ ピョートル

Keywords：キタエフ模型, 自由度の分数化, マヨラナフェルミオン

アレクセイ・キタエフによる蜂の巣格子上の量子スピン模型であるキタエフ模型の提案 [1] を切っ掛けに, 磁性体におけるマヨラナフェルミオン探索という新しい潮流が生まれた. 実際, キタエフ模型で記述される量子スピン系では, 単独粒子としてのマヨラナフェルミオンの性質だけでなく, 量子多体系としての集団的な性質も詳細に調べられる可能性がある.

このような磁性体の研究は, キタエフ模型の基底状態が量子スピン液体であり, マヨラナフェルミオンによって記述されるためだけでなく, 一部のイリジウム化合物ではキタエフ模型が良い記述を与えるという指摘 [2] などによっても促進されている.

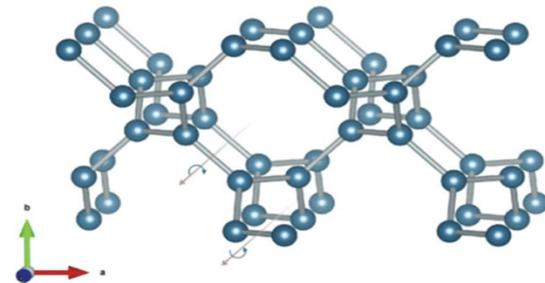
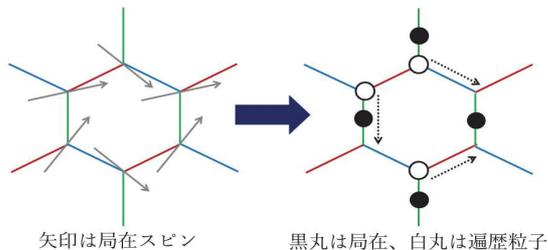
今回は, マヨラナフェルミオン表示を用いたモンテカルロ法を改良する方法に関して説明する. つまり, 従来手法で最も計算コストの高い厳密対角化の部分にチェビシヨフ多項式展開法 [3] を適用し, 今までより大きな系を扱えるような計算方法を紹介する.

また, キタエフ模型が適用できる様々な格子を紹介し, 量子スピン液体などの量子状態探索の観点から注目を集めているハイパーオクタゴン格子 [4] の熱力学的な性質を議論する.

図 1: キタエフモデルとスピンの分数化

図 2: ハイパーオクタゴン格子

量子スピン $S = 1/2$ の自由度が2種類のマヨラナ粒子に分数化:
局在したマヨラナ粒子と遍歴的なマヨラナ粒子



参考文献

- [1] A. Kitaev, Ann. Phys. **321**, 2 (2006).
- [2] G. Jackely and G. Khaliullin, Phys. Rev. Lett. **102**, 017205 (2009).
- [3] A. Weisse, Phys. Rev. Lett. **102**, 150604 (2009).
- [4] M. Hermanns and S. Trebst, Phys. Rev. B **89**, 235102 (2014).

Kitaev 模型における量子スピンの行列要素

東京大学大学院総合文化研究科
越田真史

Matrix elements of quantum spins in Kitaev's honey-comb
lattice model
Department of Basic Science, The University of Tokyo
Shinji Koshida

Keywords : Kitaev 模型, 量子スピン液体, トポロジカル秩序

ハニカム格子上的の Kitaev 模型は [1] で導入された量子スピン系の模型であり, そのハミルトニアンは

$$H_{\text{Kit}} = -\frac{1}{2} \sum_{\mu=1,2,3} \left(J_{\mu} \sum_{(x,y) \in B_{\Lambda}^{\mu}} S_x^{\mu} S_y^{\mu} \right)$$

の形で与えられる. ここで, ハニカム格子 Λ のボンドは 3 種類 ($\mu = 1, 2, 3$) に分類され, それぞれの種類ボンドの集合を B_{Λ}^{μ} と表記している. この模型の解析方法として, 境界条件をうまく設定して Jordan-Wigner 変換によりフェルミオン系の問題にマップする方法 [2] があるが, ここでは Kitaev [1] によって与えられた, ヒルベルト空間を拡張する方法を考える. この方法では拡張されたヒルベルト空間に作用するマヨラナフェルミオンを導入し, マヨラナフェルミオンの組み合わせで作られる作用素のある部分空間 (物理的な部分空間と呼ぶ) への制限として量子スピンの作用素を実現する. すると, Kitaev 模型を解く問題は, \mathbb{Z}_2 -ゲージ場に結合したマヨラナフェルミオン系の固有状態を物理的な部分空間へ射影する問題へと置き換わる. しかもゲージ場とマヨラナフェルミオンのハミルトニアンが可換なことから, ゲージ場の配位を決めたハミルトニアン (タイトバインディング模型) を解けば良いことになる. この方法により, Kitaev 模型の様々な性質が調べられてきた [3-6]. 特に, 静的な相関関数に関しては強力な結果が得られている [3].

一方, 動的な相関関数を計算しようとする, マヨラナフェルミオンのハミルトニアンを対角化した基底による量子スピンの行列要素が分からないために, 困難が生じる. 本講演では, この行列要素の計算を目標に, 拡張されたヒルベルト空間の構造と, その上でのマヨラナフェルミオンの作用を考察する.

- [1] Alexei Kitaev, *Ann. Phys.* **321**, 2 (2006).
- [2] Han-Dong Chen and Zohar Nussinov, *J. Phys. A: Math. Theor.* **41**, 075001 (2008).
- [3] G. Baskaran *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 247201 (2007).
- [4] Fabio L. Pedrocchi *et al.*, *Phys. Rev. B* **64**, 165414 (2011).
- [5] Ville Lahtinen *et al.*, *Ann. Phys.* **323**, 2286 (2008).
- [6] Olga Petrova *et al.*, *Phys. Rev. B* **90**, 134404 (2014).

繰り込み群で眺めるフェルミ液体

京都大学大学院 理学研究科

渡邊 光

Fermi liquid from the viewpoint of the renormalization-group

Department of Science, Kyoto University

Hikaru Watanabe

Keywords: フェルミ流体、繰り込み群

フェルミ液体とは極低温下における、相互作用するフェルミオンの多体系を記述する概念である。これは 1950 年代後半にランダウが現象論的な描像として提案し[1, 2]、その後、アプリコソフらによってダイアグラム法を用いた微視的な導出がなされた。しかし[3]によれば、ダイアグラム法による議論の詳細は長ったらしく、シンプルでない。そこで提案されたのが繰り込み群によるアプローチである[3]。このアプローチに従うと、ダイアグラム法における摂動項を無限次まで足し上げる操作は、微分方程式の組を解くことに帰着する。ここで、繰り込み群の効用とは主要な相互作用のチャンネルを抽出し、系を物理的に理解することが容易に、かつシステマティックに行うことができる点にある。

本発表では、繰り込み群の視点から極低温下でのフェルミオン系を解析した結果について紹介する。ここではフェルミ流体は一つの固定点に対応し、ランダウが現象論的に導入した有効質量やランダウパラメータなどは固定点の性質として理解することができる。可能であれば、繰り込み群を用いた他の例に関しても紹介し、物性物理における繰り込み群のアプローチの有効性について議論したいと考えている。

[1] L. D. Landau, *Sov. Phys.* **3**, 920 (1956).

[2] L. D. Landau, *Sov. Phys.* **5**, 101 (1957).

[3] R. Shanker, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 129 (1994).

カゴメ格子上的 Laughlin 状態と Chern 数

筑波大学大学院数理物質科学研究科^A, NIMS^B工藤耕司^A, 苅宿俊風^B, 初貝安弘^A*Laughlin state on a kagome lattice and Chern number
Graduate School of Pure and Applied Sciences, University of
Tsukuba^A, NIMS^B*Koji Kudo^A, Toshikaze Kariyado^B, and Yasuhiro Hatsugai^A**Keywords** : 分数量子ホール効果, チャーン数, カゴメ格子, fractional quantum Hall effect, Chern number, kagome lattice

量子ホール効果は、低温かつ強磁場下の二次元電子系で引き起こされる特異な現象であり、現在に至るまで数多くの研究がされている。量子ホール効果は整数量子ホール効果と分数量子ホール効果に分類され、前者はホール係数の整数量子化について一体の問題として特徴づけられる。後者は電子間相互作用によってもたされる現象であり、多体の強相関問題である。

Laughlin 関数は分数量子ホール系の試行関数である [1]。本ポスターの前半で、この関数が考案される契機となった Laughlin による磁場中 3 電子系の論文 [2] を再現した。

後半では、前半の議論をふまえカゴメ格子上的分数量子ホール効果を議論した [3,5]。我々は、ハニカム格子でのカイラル凝縮体の議論 [4] をカゴメ格子上的多電子系に拡張し、乱れの効果を含めて Chern 数を計算するなどトポロジカルな観点から研究を行った [5]。

[1] R. B. Laughlin, Phys. Rev. Lett. **50**, 1395 (1983).

[2] R. B. Laughlin, Phys. Rev. B **27**, 3383 (1983).

[3] Y.-L. Wu, B. A. Bernevig, and N. Regnault, Phys. Rev. B. **85**, 075116 (2012).

[4] Y. Hamamoto, H. Aoki, and Y. Hatsugai, Phys. Rev. B **86**, 205424 (2012).

[5] K. Kudo, T. Kariyado, and Y. Hatsugai, in preparation.

一次元 Majorana フェルミオン系のダイナミクス

京都大学基礎物理学研究所

太田卓見

Title: Topological and Dynamical Properties of Majorana Fermions in One Dimension

Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University

Takumi Ohta

Keywords: Topological phases, entanglement, dynamics

Recently, motivated by condensed matter physics and quantum information science, topological phases have attracted both theoretical and experimental attention. In the phases, dynamics of edge modes depends on the topological properties of the system. In this presentation, we study the static and dynamical properties of Majorana fermions in one dimension. First, we investigate the quantum phase transitions of a generalized cluster model [1], which shows a variety of topological phases. We characterize each phase by the entanglement spectrum (ES) and the string correlation functions (SCFs). Second, we study the dynamical properties during an interaction sweep across the critical points associated with topological phases [2]. For slow sweep, spatially periodic and oscillating structures are observed both in the ES and in the SCFs. These structures are understood in terms of the Bogoliubov excitations generated near the critical points. This breakdown of adiabaticity is due to the topological degeneracy.

References

- [1] T. Ohta, S. Tanaka, I. Danshita, and K. Totsuka, *J. Phys. Soc. Jpn.* **84**, 063001 (2015). (arXiv:1503.03204)
- [2] T. Ohta, S. Tanaka, I. Danshita, and K. Totsuka, *Phys. Rev. B*, **93**, 165423 (2016). (arXiv:1603.03166)

超伝導-InAs ナノ細線接合
でのマヨラナ粒子の実証とクーパー対分離

東京大学工学系研究科 樽茶・山本研究室

上田 健人

Keywords: マヨラナフェルミオン、トポロジカル相、超伝導、
ナノ細線、クーパー対分離、アンドレーエフ反射

マヨラナフェルミオンはディラック方程式の実数解として記述され、その演算子が生成演算子と消滅演算子両方を記述する。マヨラナフェルミオンは外部の影響を受けにくいいため、量子コンピューターなどの応用につながるとされており[1]、現在、マヨラナフェルミオンの観測、実現にむけて様々な方向からアプローチがなされている。その一つとして InAs ナノ細線と s 波超伝導体で構成されたデバイスの端にマヨラナフェルミオンが出現するとされている[2]。

また、超伝導中ではクーパー対がスピン重項という量子もつれ状態を形成しており、近年 InAs ナノ細線を用いて、このクーパー対を空間的に分離するという事に成功している[3]。さらに、マヨラナフェルミオン存在下ではクーパー対分離確率が高くなるとされているため[4]、このクーパー対分離確率の上昇を見ることで間接的にマヨラナフェルミオンを観測することが今回の実験の目的の一つである。加えてクーパー対分離の磁場依存性についての実験はまだされておらず、これを初めて観測することを目指す。

[1] J.Alicea. , Rep. Prog. Phys. 75 (2012).

[2] V.Mourik *et al.* , Science 336 (2012).

[3] L.Hofstetter *et al.* , Nature 461 (2009).

[4] J.Nilsson *et al.* , Phys. Rev. Lett. 101, 120403 (2008).

多軌道 Hubbard 模型の励起子相における低エネルギー 励起スペクトル

千葉大院理^A, 千葉大先進^B

山口伴紀^A, 杉本高大^B, 宮腰祥平^A, 太田幸則^A

Low-energy excitations in the excitonic phases of multi-orbital
Hubbard model

Dept. Phys., Chiba Univ.^A, CFS, Chiba Univ.^B

Tomoki Yamaguchi^A, Koudai Sugimoto^B, Shohei Miyakoshi^A,
Yukinori Ohta^A

Keywords : d 電子系, コバルト酸化物, 励起子凝縮

励起子相とは, バンドの重なりの中の小さい半金属やギャップの小さい半導体において, 励起子 (電子-正孔対) の凝縮状態が基底状態となる相のことである. 有限のギャップを生じることから, 励起子絶縁相ともよばれる.

実験的な観測の困難から長い間議論されてこなかったが, 近年, いくつかの物質でこの励起子相が発現している可能性が指摘されている. その候補物質としては, Ta_2NiSe_5 , $TiSe_2$, $Pr_{0.5}Ca_{0.5}CoO_3$, 強磁場下の $LaCoO_3$ 等がある. この相が発現していることを示すことを目的として, 数多くの実験が行われているものの, 未だに確定的な実験事実を得るに至っていない.

理論側からのアプローチとしては, 拡張 Falicov-Kimball 模型や, 多軌道 Hubbard 模型などを使って議論されている. 多軌道 Hubbard モデルでは, 平均場計算や, 電子相関を取り入れた変分クラスター計算等によって, バンド絶縁相と Mott 絶縁相の中間領域に励起子相が発現することが指摘されている [1]. また, 実際の物質に関しては, Ta_2NiSe_5 を模型化することによって, 角度分解光電子分光の計算結果を再現したり [2], マクロな量子干渉効果を解析するといった試みもなされている [3]. その他の候補物質に関しても, $Pr_{0.5}Ca_{0.5}CoO_3$ においては, 第一原理計算の結果から低温において励起子があり, 磁気多極子秩序を作る可能性が示唆されている [4].

以上を背景として, 本研究では候補物質の一つであるペロブスカイト $Pr_{0.5}Ca_{0.5}CoO_3$ に関して, この相の実験的な観測の可能性を検討する. 具体的には, 平均場計算を用いて得られた励起子相に対し, 乱雑位相近似を行いスピン相関関数 (低エネルギー磁気励起スペクトル) を解析する. この物理量は中性子散乱を用いて実際に観測できる量であり, 励起子相の実験的な観測のための重要な手掛かりになることが期待される.

[1] T. Kaneko *et al.*, Phys. Rev. B **88**, 035312 (2013).

[2] K. Seki *et al.*, Phys. Rev. B **90**, 155116 (2014).

[3] K. Sugimoto *et al.*, Phys. Rev. B **93**, 041105 (2016).

[4] J. Kuneš *et al.*, Phys. Rev. B **90**, 235112 (2014).

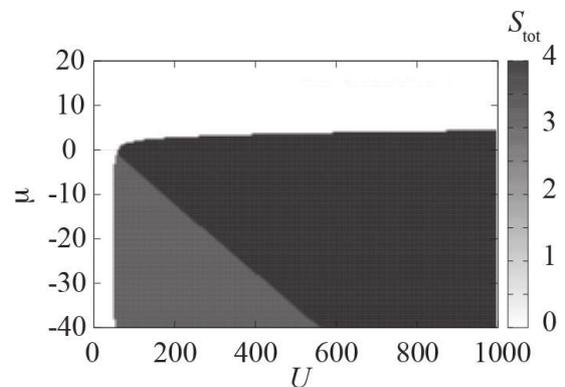
立方体上の Hubbard モデルにおける強磁性相関と反強磁性相関の競合

島根大総合理工^A, 島根大院総合理工^B栗原春香^A, 武藤哲也^BInterplay between the ferromagnetic correlation and the anti-ferromagnetic correlation
in the Hubbard model on a cubic cluster*Interdisciplinary Faculty of Science and Engineering, Shimane Univ.*

H. Kurihara and T. Mutou

Hubbard モデルに基づく遍歴強磁性の研究は古くから行われてきた。近年, Miyashita により, 有限サイトからなる Hubbard モデルにおいて, 系自体に含まれた“粒子浴サイト”の“化学ポテンシャル”の変化による電子数密度の制御が提案され^[1], いわゆる Nagaoka 強磁性に対応する遍歴強磁性状態から, 電子が局在した反強磁性状態への転移が研究されている^[1, 2]. [1]の系は, 正方形の4つの頂点に1つずつ, 一方の対角線上に1つ, 合わせて5つのサイトを持つ Hubbard モデルであり, [2]では, そのユニットを1次元方向に拡張している(ここでは, ユニットを正方クラスターと呼ぶ. 中心サイトと呼ばれる対角線上のサイトが粒子浴サイトであり, それ以外のサイトを副システムと呼ぶ). [2]における拡張は系の中心サイト数密度が一定[†]の1次元的な拡張である.

本研究では, [1]の正方クラスターと異なる中心サイト数密度の3次元的な拡張を考えるため, 立方クラスター上の Hubbard モデル(サイト数は9)を対象として, 数値的厳密対角化法により系の基底状態を調べた. ホッピングエネルギー t をエネルギーの単位とし, 斥力エネルギー U と中心サイトの化学ポテンシャル μ を変化させて, 系の全スピン量子数 S_{tot} を調べた(図参照). μ が正で大きく, U が大きい $S_{\text{tot}}=0$ の領域は, 中心サイトの電子が完全に排除され, 副システムの電子の二重占有が押さえられて, 隣接スピン相関が負となる Mott 状態である. μ が負で大きく, U が大きい $S_{\text{tot}}=4$ の領域は全ての隣接スピン相関が正の状態である. 本研究では, さらに $S_{\text{tot}}=3$ の広い領域を見出した. この領域は, 副システム内の全てのスピン相関が正で, 副システムと中心サイトとのスピン相関のみが負となる, いわば副システム内のみの強磁性状態である.

[1] S. Miyashita, Prog. Theor. Phys. **120**, 785 (2008).[2] H. Onishi and S. Miyashita, Phys. Rev. B **90**, 224426 (2014).[†]熱力学極限では系の中心サイト数密度が1/3に漸近するが, 有限サイズでは数密度は一定ではない.

トポロジカル絶縁体接合の電子状態

名大工

野村拓人, 矢田圭司

Electronic states in topological insulator junction
Department of Applied Physics, Nagoya University
 Takuto Nomura and Keiji Yada

Keywords : トポロジカル絶縁体, 接合系, 薄膜

トポロジカル絶縁体 (Topological Insulator, TI) は強いスピン軌道相互作用を持つ物質である。この特徴から TI には時間反転対称性を破らずに、境界 (2次元系ではエッジ、3次元系では表面) にギャップレススピンヘリカルな状態を持つことが知られている。[2] そのような TI の上に超伝導体/強磁性体を接合すると両者の間に興味深い状態が現れる [1]。しかし、その計算は TI の表面のみを考慮して行われており、TI が無限に厚いものとして計算しているものである。[1]

今回私は、TI を薄膜にした、有限厚さの系を計算した。この系においては有限系であるために TI の上面と下面のディラックコーンが混成し、バンドギャップが生じる。このギャップは TI の層数が増えるにつれて指数関数的に減少するが、有限系を考える限りギャップは存在することになる。このように有限系の TI 上に強磁性体/超伝導体をのせた接合系において、その間にどのような状態が生じるのかを検証した。また強磁性体が TI に与える磁化の影響を変え、それに伴う状態の変化についても考えた。

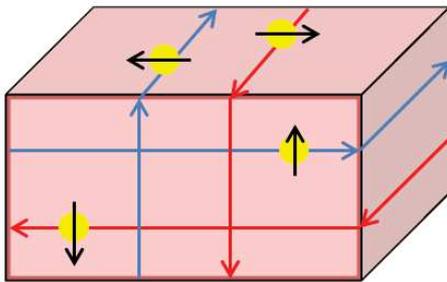


図 1: トポロジカル絶縁体

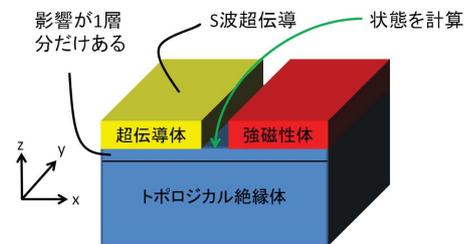


図 2: TI と強磁性体/超伝導体の接合系

[1] Y.Tanaka, T.Yokoyama, N.Nagaosa Phys. Rev. Lett. **103**, 107002 (2009).

[2] 安藤陽一, トポロジカル絶縁体入門 (2014) 講談社.

2次元カイラルp波超流動体の有効理論 [1]

東工大院理工^A藤井 啓資^A

Effective theory of two-dimensional chiral superfluids
Department of Physics, Tokyo Institute of Technology^A
Keisuke Fujii^A

カイラルp波超流動体は、軌道角運動量を持ったクーパー対が凝縮している超流動体であり、薄膜上のヘリウム3のA相で実現されている。特に、カイラルp波超流動体はトポロジカル超流動という観点からも注目されており、超流動体の全角運動量の値を問う「軌道角運動量の問題」がよく知られている。クーパー対は軌道角運動量1を持つため、単純に考えれば、全角運動量の値はクーパー対の数と対応すると考えられる。フェルミ多体系では、フェルミ面近傍の粒子のみが対形成に参加するため、クーパー対の数は全粒子数より著しく小さな値となる。したがって、全角運動量の値は全粒子数より著しく小さな値となると考えられる。しかしながら、従来の多くのモデルでの計算では、エッジを流れるカレントによって、全角運動量の値が全粒子数と同程度の大きさとなると予言されてきた。本発表では、モデルに依存しない解析手法を用いて全角運動量の値を計算し、従来の予言がモデルに依存しない普遍的な結果であるのかを検証した。

モデルに依存しない解析手法として、有効場の理論と呼ばれる手法を用いる。有効場の理論は、低エネルギーで有効な自由度を基本的な場とした有効作用を、対称性から構築する手法である。具体的には、低エネルギーで有効な自由度を用いて、課された対称性を満たす最も一般的なラグランジアンを構築する。ここで課される対称性は系の微視的な理論の持つ対称性である。有効場の理論の手法では、課された対称性を満たす最も一般的なラグランジアンを用いて解析するため、モデルの詳細に依存しない普遍的な結果を得ることが出来る。しかしながら、この方法で構成されたラグランジアンには、対称性だけでは定めることの出来ない任意性が残るという欠点が存在する。この任意性を減らし、より高い予言能力を持つ有効理論を構築するためには、対象とする系の持つ対称性を最大限に認識し活用することが課題となる。

今回、ガリレイ変換を局所的な変換へと拡張した非相対論的一般座標変換を導入し、この新たな変換の下での不変性を用いることで、従来のガリレイ不変性を用いた有効理論より任意性の少ない有効理論を構築した。特に、非相対論的一般座標変換に対する不変性に加えて、カイラルp波超流動体の持つ回転対称性を用いることで、より高い予言能力を有する有効理論を得た。この有効理論を用いて、エッジカレント及び全角運動量を計算し、全角運動量の値が全粒子数と同程度の値となることを確認した。

[1] C. Hoyos, S. Moroz, and D. T. Son, Phys. Rev. B **89**, 174507 (2014).

CeCoIn₅ の Zn 置換系における精密磁歪測定

富山大理^A, 茨城大理^B, 東大物性研^C

湯谷 大志郎^A, 田山 孝^A, 横山 淳^B, 益子 寛明^B, 榊原 俊郎^C

High-resolution magnetostriction measurements of
Zn-doped CeCoIn₅

Univ. of Toyama^A, Ibaraki Univ.^B, ISSP, Univ. of Tokyo^C

D. Yutani^A, T. Tayama^A, M. Yokoyama^B,

H. Mashiko^B and T. Sakakibara^C

Keywords : *f*電子系, 超伝導, *f*-electron, superconductivity

CeCoIn₅ は $T_c = 2.3$ K の重い電子系超伝導体である。比熱や電気抵抗率の温度依存性に非フェルミ液体的振る舞いが見られ、反強磁性の量子臨界点に近い物質であると考えられている。事実、In サイトへの Cd 置換により反強磁性秩序が誘起される。また $H \parallel a$ では上部臨界磁場 H_{c2} 付近に反強磁性秩序を持つ新たな超伝導相が観測され、FFLO 超伝導の可能性が議論されている。最近、In を Zn で置換した新たな置換系 CeCo(In_{1-x}Zn_x)₅ の単結晶が育成された^[1,2]。比熱、電気抵抗、磁化の測定から Zn 置換でも Cd 置換と同様に超伝導を抑制し、反強磁性を誘起することが確認されている。今回我々は $x = 0, 0.025, 0.05, 0.07$ の Zn 置換系について新たな知見を得るべく、最低温度 0.2 K、0-8.5 T の範囲で精密磁歪測定を行った。

図 1 に 0.2 K における $x = 0, 0.025$ の c 軸方向の縦磁歪 ($\Delta L \parallel H$) の結果を示す。まず注目すべき点は、 $x = 0.025$ の試料だけ低磁場領域で顕著な磁場ヒステリシスが観測されたことである。通常、超伝導状態における磁場ヒステリシスは磁束のピン止め効果によって現れる。しかし磁歪はピン止め効果に鈍感な物理量であり、実際 $x = 0$ での磁歪の磁場ヒステリシスは小さい。したがって、 $x = 0.025$ で観測された顕著な磁場ヒステリシスは特異であると考えられる。もう一つ注目すべき点は、 H_{c2} 以上における磁歪の振る舞いが Zn 置換によって大きく変化した点である。同じ磁場領域における磁化の大きさは Zn 置換によってあまり変化していないことから、磁歪と磁化はかなり対照的な結果を示すことが明らかとなった。当日はこれらの異常について、他の置換濃度の結果も交えて詳しく紹介する。

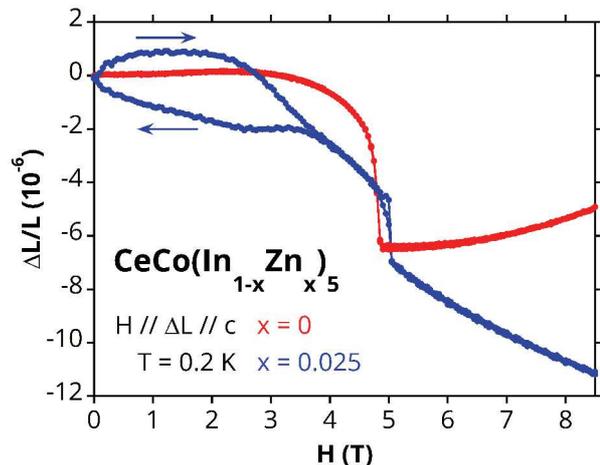


図 1: CeCo(In_{1-x}Zn_x)₅ の $T = 0.2$ K における $x = 0, 0.025$ の c 軸方向の縦磁歪

[1] M. Yokoyama *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn **83**, 033706 (2014).

[2] M. Yokoyama *et al.*, Phys. Rev. B **92**, 184509 (2015).

半導体特性を示す黒リンの³¹P-NMR測定

兵庫県大院物質理

藤井 拓斗, 赤浜 裕一, 小山 岳秀, 上田 光一, 水戸 毅

³¹P-NMR study of semiconducting properties in Black Phosphorus

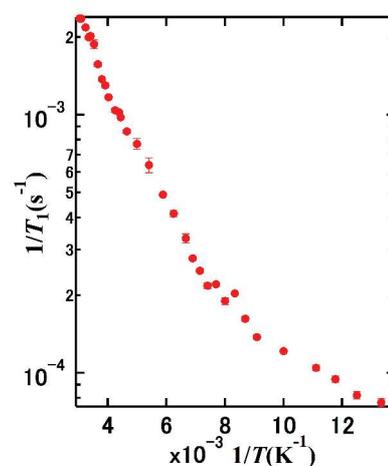
Univ. of Hyogo

T. Fujii, Y. Akahama, T. Koyama, K. Ueda, T. Mito

Keywords : 半導体, 半金属転移, 核磁気共鳴, グラフェン関連物質

黒リンは2次元層状構造をとり、常圧下において約0.3eVのナローギャップを有する半導体である [1]。黒リンは2次元構造をとる半導体であるため、薄膜半導体として期待されており、シリコンに代わる半導体材料として考えられている物質の1つである。理論計算、及び様々な実験手法を用いた研究が行われ、物理的理解が深められている。その中で、圧力を印加するに従ってエネルギーギャップの大きさが減少し、約1.5GPaの圧力下において半金属状態に転移するという報告がある [2]。半金属状態はこれまでにグラファイトやビスマスにおいて研究がされており、電子とホールによって励起子が生成される可能性が期待される。このような新奇的な電子状態の発現の可能性が黒リンの半金属状態に対しても期待されている。

本研究の目的は微視的な実験手法である核磁気共鳴法 (NMR) を用い、常圧下の黒リンの半導体状態における電子状態を解明することである。常圧下において³¹P-NMRによる核スピン格子緩和率 ($1/T_1$) の温度依存性測定を行った。その結果、図に示すように降温に伴って、 $1/T_1$ が減少する半導体的振る舞いが観測された。125K付近で減少率が小さくなることから、高温領域から125K付近までが真性領域、125K以下は外因性領域であるという結果が得られた。この真性領域におけるエネルギーギャップを見積ると0.17eVであった。またマクロな測定では真性領域が200K付近以上で観測されているのに対し [3]、微視的な実験手法であるNMRではより低温領域の125K付近以上で観測された。NMR測定では、不純物の影響を受けにくいと、より低温領域まで半導体的振る舞いが観測されたものと考えられる。講演においてはNMR測定によって得られた常圧下における黒リンの電子状態に関して議論を進めるのに加え、圧力下におけるNMR測定の結果についても議論を行う予定である。

[1] J. Qiao *et al.*, nature communication **10**, 1038 (2014).[2] K. Akiba *et al.*, J.Phys. Soc. Jpn. **84**, 073708 (2015).[3] Y. Akahama *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn **52**, 2148 (1983).

図：常圧下の黒リンの $1/T_1$ の温度依存性

ペロブスカイト型 Co 酸化物の放射光粉末回折とスピン転移

阪府大院理^A, JASRI^B

下野聖矢^A, 石橋広記^A, 河口彰吾^B, 久保田佳基^A

Synchrotron powder diffraction and spin state transition
in perovskite cobalt oxide

Dep. of Phys. Sci., Osaka Pref. Univ.^A, JASRI^B

S. Shimono^A, H. Ishibashi^A, S. Kawaguchi^B, Y. Kubota^A

Keywords: perovskite, synchrotron powder diffraction, spin state transition

ペロブスカイト型コバルト酸化物 $\text{Sr}_3\text{YCo}_4\text{O}_{10+\delta}$ は、図 1 のように酸素の欠損が見られる酸素欠損層と八面体層が c 軸方向に交互に積層した構造を持つ。また $\text{Sr}_3\text{YCo}_4\text{O}_{10+\delta}$ は、ペロブスカイト型コバルト酸化物で、最も高い強磁性転移温度 ($T_c \sim 340$ K) を持つ物質として近年発見された[2]。さらに最近、室温における共鳴 X 線散乱実験により Co^{3+} イオンの中間スピンの存在が報告されているが[3]、詳細な結晶構造は明らかになっていない。そこで、本研究では、高分解能放射光回折実験を $90 \sim 800$ K の広い温度範囲で行い、精密結晶構造解析により、結晶構造の観点から Co イオンの軌道整列および中間スピン状態を明らかにすることを目的とした。粉末回折実験は、イメージングプレートと多連装型の一次元半導体検出器を用いて大型放射光施設 SPring-8 の BL02B2 で行った。

図 2 に、ピークプロファイルの温度依存性を示す。この結果から、積層構造の変化に起因する超格子反射 (図 2(a)) やスピン転移による格子変形を示唆するピーク分裂 (図 2(b)) が観測された。当日は、これらの結果の詳細と、結晶構造解析の結果を用いて Co イオンの軌道整列及びスピン状態について議論する。

[1]D. D. Khalyavin *et al.*, *Phys. Rev. B* **83**, 140403 (2011).

[2]W. Kobayashi *et al.*, *Phys. Rev. B* **72**, 104408 (2005).

[3]H. Nakao *et al.*, *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, 023711 (2011).

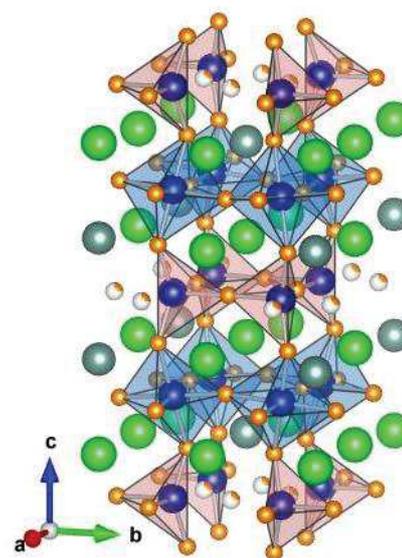


図 1. $\text{Sr}_3\text{YCo}_4\text{O}_{10+\delta}$ の結晶構造[1]

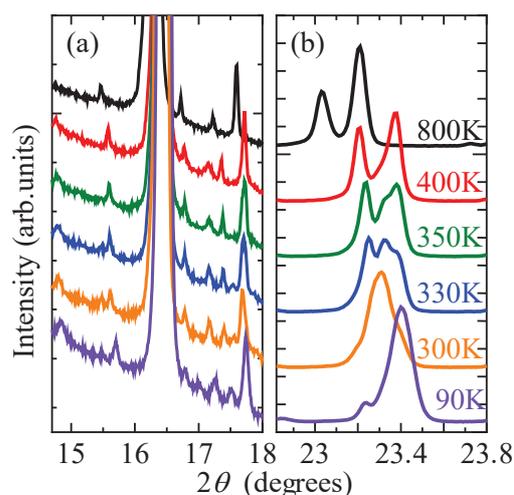


図 2. ピークプロファイルの温度依存性

S=1/2 三本鎖スピントューブの磁化プラトー

兵庫県立大学 物質理学研究科
伊藤 敬佑, 坂井 徹

**QUANTUM PHASE TRANSITION
IN THE TWISTED THREE-LEG SPIN TUBE**

Graduate School of Material Science, University of Hyogo,
Keisuke Ito and Toru Sakai

**Keywords: スピン, 量子相転移, 磁化プラトー,
Spin, Quantum phase transition, Magnetization plateau**

チューブ状の構造を持つ量子スピン系は、物質物理学において興味深い特徴を持つモデルのひとつである。特にS=1/2の三本鎖スピントューブは、大きなフラストレーションと量子ゆらぎを持つ重要な構造であるといえる。その特徴として、S=1/2の三本鎖のスピンラダーはギャップレスなのに対し、その系はスピンギャップを持つことが挙げられる[1,2]。近年の研究で三本鎖のツイストしたチューブ構造を持つCuCl₂(tachH)₃Cl₂が合成されたことから、このような量子スピントューブについて研究を行った[3,4]。

S=1/2の三本鎖のツイストした量子スピントューブについて、ランチョス法による数値対角化を行って調べた。磁性体に磁場を加えると、磁化はなめらかに増加する。しかし量子効果によって、磁場誘起スピンギャップが生じ、磁化曲線に磁化プラトーとよばれる平坦な部分がある。これは磁化の量子化ともいう。この研究では、スピンの容易面異方性を変えると、1/3磁化プラトー相が消失する量子相転移が起きることがわかった。また現象論的繰り込みにより、磁化プラトー相とプラトーレス相の相境界を求め、相図を得ることができた。これらの結果を得られた相図と共に示す。

- [1] Toru Sakai, Masahiro Sato, Kiyomi Okamoto, Kouichi Okunishi and Chigak Itoi, *Journal of physics: Condensed matter* **2010**,22,403201.
[2] D.C.Cabra, A.Honecker and P.Pujol, *Phys Rev B*,**1998**,58,6241
[3] Jürgen Schnack, Hiroyuki Nojiri, Paul Kögerler, Geoffrey J.T.Cooper and LeroyCronin, *Phys Rev B*,**2004**,70,174420
[4] J.-B. Fouet, A.Läuchli, S.Pilgram, R.M.Noack, and F.Mila, *Phys Rev B*,**2006**,73,014409

角度分解価電子帯 / 内殻光電子分光による強相関 CeNi_2Ge_2 の異方的重い準粒子状態の研究

阪大院基礎工^A, 理研 SPring-8^B, 甲南大理工^C, 原子力機構量子ビーム^D, SPring-8/JASRI^E, 京産大理^F, 広大先端^G, 東大物性研^H, 摂南大理工^I, 立命館大理工^J, 静岡大理^K

中谷泰博^{A,B}, 荒谷秀和^{A,B}, 金井惟奈^{A,B}, 森健雄^A, 鶴田篤史^A, 橘祥一^{A,B}, 山口貴司^A, 山神光平^{A,B}, 内免翔^{A,B}, 藤岡修平^{A,B}, 藤原秀紀^{A,B}, 木須孝幸^{A,B}, 山崎篤志^C, 保井晃^{D,E}, 山上浩志^{D,F}, 田中新^G, 玉作賢治^B, 矢橋牧名^B, 石川哲也^B, 宮脇淳^H, 東谷篤志^{B,I}, 今田真^{B,J}, 室隆桂之^E, 海老原孝雄^K, 斎藤祐児^D, 関山明^{A,B}

Anisotropic heavy fermionic electronic structures of CeNi_2Ge_2 investigated by angle-resolved valence / core-level photoemission spectroscopy

Osaka Univ.^A, SPring-8/RIKEN^B, Konan Univ.^C, JAEA^D, SPring-8/JASRI^E, Kyoto Sangyo Univ.^F, Hiroshima Univ.^G, Univ. of Tokyo^H, Setsunan Univ.^I, Ritsumeikan Univ.^J, Shizuoka Univ.^K

Y. Nakatani^{A,B}, H. Aratani^{A,B}, Y. Kanai^{A,B}, T. Mori^A, A. Tsuruta^A, S. Tachibana^{A,B}, T. Yamaguchi^A, K. Yamagami^{A,B}, S. Naimen^{A,B}, S. Fujioka^{A,B}, H. Fujiwara^{A,B}, T. Kiss^{A,B}, A. Yamasaki^C, A. Yasui^{D,E}, H. Yamagami^{D,F}, A. Tanaka^G, K. Tamasaku^B, M. Yabashi^B, T. Ishikawa^B, J. Miyawaki^H, A. Higashiya^{B,I}, S. Imada^{B,J}, T. Muro^E, T. Ebihara^K, Y. Saitoh^D, and A. Sekiyama^{A,B}

Keywords : 物理, 実験, 強相関系, 重い電子, 4f 電子, 角度分解光電子分光, 電荷分布

電子相関が特に強い 4f 電子系物質において現れる磁気転移, 超伝導, 重い電子といった特異な物性には 4f 電子と伝導電子の混成が重要な役割を果たすと考えられている. 本研究では, 低温で超伝導を示し [1]

伝導電子の有効質量が異常に増大する [2] CeNi_2Ge_2 を取り上げ, Ce 4f 電子とその混成相手の Ni 3d 電子の両方に着目した研究を行う. Ni 3d 電子については, SPring-8 BL23SU において最高分解能 70 meV, 温度 8 K で価電子帯角度分解光電子分光を行い, 図 1 のように, f 電子のない LaNi_2Ge_2 で観測される電子的なバンドが, CeNi_2Ge_2 では Fermi 準位付近で 4f 電子と混成して有効質量が重くなることを観測した. この他にも, 繰り込まれたバンド, 全く混成の影響を受けないバンド, Fermi 面が大きくなるバンドが観測された. 一方で Ce 4f 電子については, SPring-8 BL19LXU で行う内殻角度分解光電子分光から軌道対称性を決定することができる. これらの結果を合わせて, CeNi_2Ge_2 において両電子にどのような混成が起こるのかを議論する.

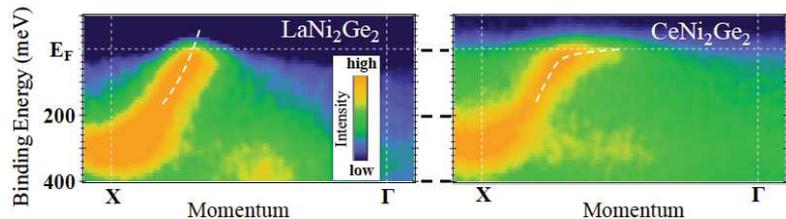


図 1: LaNi_2Ge_2 (左), CeNi_2Ge_2 (右) の Γ -X 方向の ARPES 結果.

[1] F. M. Grosche *et al.*, J. Phys. Condens. Matter **12**, L533 (2000).

[2] F. Steglich *et al.*, J. Phys. Condens. Matter **8**, 9909 (1996).

3次元トポロジカルスピン構造をもつ MnGe における
電気輸送特性のバンドフィリング制御

東京大学工学系研究科物理工学専攻

藤代有絵子

**Band-Filling Control of Electrical Transport Properties in
MnGe with Three-dimensional Topological Spin Texture**

Department of Applied Physics, The University of Tokyo
Yukako Fujishiro

Keywords : トポロジー、ベリー位相、磁気抵抗、ホール効果

近年、MnGe においてトポロジカルな性質をもつ新たなスピン構造が発見された。具体的には、中性子回折^[1]や LTEM による実空間観測^[2]によって、ヘッジホッグ/アンチヘッジホッグと呼ばれるスピン構造の 3 次元格子状態であることが提案され、さらにそれぞれが、伝導電子がベリー位相を獲得することでうける仮想的な磁場の湧き出し/吸い込みに対応していることが判明した。このような 3 次元トポロジカルスピン構造をもつ MnGe の電気輸送特性は非常に特異的であり、仮想磁場による動的/静的応答が、それぞれ異常な縦/横応答として現われており、たとえば磁性体としては非自明な正の磁気抵抗や磁場に対して符号変化するトポロジカルホール効果^[3] (THE) などが報告されている。前者の起源としては磁気モノポール・アンチモノポールの対消滅による仮想磁場のゆらぎが提案されている^[4]が、後者の THE の符号変化に関してはまだ起源が解明されていない。

そこで今回の研究では、Fe や Cr を微量 (2%~5%) ドープしたり、Si (2%~10%) をドープしたりすることで、フェルミエネルギーや磁性サイトの欠陥の有無に対してどのように異常な磁気抵抗や THE が変化するかを系統的に調査した。その結果、磁性サイトの欠陥は仮想磁場のゆらぎの消失につながることや、THE の符号・大きさがフェルミエネルギーに依存することが初めて明らかになった。

[1] N. Kanazawa *et al.*, PRB **86**, 134425 (2012)

[2] T. Tanigaki *et al.*, Nano Lett. **15**(8), 5438 (2015)

[3] N. Kanazawa *et al.*, PRL **106**, 156603 (2011)

[4] N. Kanazawa *et al.*, Nature Commun. **7**, 11622 (2016)

Eu 水素化物の高水素圧力誘起構造相転移

岐阜大工^A, AIST^B, JASRI/SPring-8^C, 原子力機構^D, 東大理^E, 阪大基極セ^F
 久野敬司^A, 松岡岳洋^A, 藤久裕司^B, 平尾直久^C, 大石泰生^C,
 町田晃彦^D, 青木勝敏^{D,E}, 清水克哉^F, 久米徹二^A, 佐々木重雄^A

Pressure-induced structural changes of Europium hydride
 under high-pressure H₂ condition

^AGifu Univ., ^BAIST, ^CJASRI/SPring-8,

^DJAEA, ^ETokyo Univ., ^FGKYOKUGEN, Osaka Univ.

K. Kuno^A, T. Matsuoka^A, H. Fujihisa^B, N. Hirao^C, Y. Ohishi^C,
 A. Machida^D, K. Aoki^{D,E}, K. Shimizu^F, T. Kume^A, and S. Sasaki^A

Keywords: 高圧, 水素化物, X線回折, ラマン散乱法

ユウロピウム二水素化物(EuH₂)は常圧で *Pnma* 構造(I相)をとり, Eu の価数が 2 価であることを反映して, 17 K 以下で強磁性を示す。EuH₂ を高水素圧力雰囲気下で加圧すると, *P6₃/mmc* 構造(II相), *I4/m* 構造(III相), そして *I4/mmm* 構造(IV相)へ, それぞれ 7.2 GPa, 8.4 GPa, 8.7 GPa で構造相転移をする[1]。III相とIV相はEuH₂とH₂が化学反応した結果生成し, 水素の含有量が増えたと考えられる(EuH_x, $x > 2$)。さらに, Mössbauer 分光測定よりIV相でEuは3価であることが明らかにされており, 非磁性であると予想される[1]。本研究ではEuH₂とH₂の反応に伴う結晶構造変化を詳細に明らかにするためにラマン散乱測定を行った。

右図はダイヤモンドアンビルセルによって17 GPaまで加圧した水素雰囲気下のEu水素化物のラマン散乱ピークの圧力依存性である。7 GPa以上でX線回折測定では観測されなかった4つの新たな相転移を発見し, それぞれ γ 相(7.5~9.9 GPa), δ 相(9.9~12.7 GPa), ε 相(12.7~14.8 GPa), ζ 相(14.8~15.6 GPa), η 相(15.6 GPa~)と命名しなおした。 γ 相~ ε 相では水素化が段階的に進行して価数混合状態にあると考えられる。

[1] T. Matsuoka *et al.*, Phys. Rev. Lett. {107}, 025501 (2011).

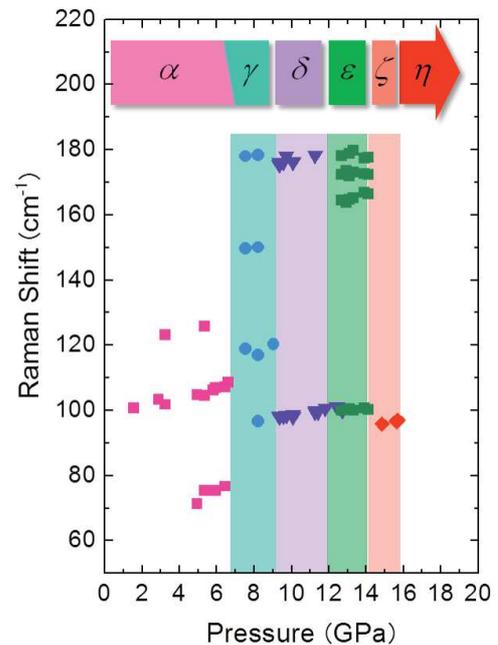


図 水素雰囲気下のEu水素化物のラマン散乱ピークの圧力依存性

二本鎖梯子ハバード模型の変分モンテカルロ法による解析

阪大理

加藤大智, 黒木和彦

Variational Monte-Carlo studies of two-leg ladder Hubbard model

Department of Physics, Osaka Univ

D. Kato and K. Kuroki

Keywords: 強相関電子系, 擬一次元系, 超伝導, Strongly correlated system, Quasi-one-dimensional system, Superconductivity

超伝導転移温度を向上させるための方針の1つとして、クーパー対の形成に有利な結晶構造を理論的に予測することが挙げられる。そのような戦略に基づいて提案されたのが、梯子型の結晶構造を有する強相関電子系である。梯子系において、rung 方向のホッピングが (leg 方向に対して) 大きい場合、rung 方向にスピン重項のクーパー対が形成されやすい (図 1)。そのような状況では、電子がクーパー対を組む際の“迷い”が生じにくいため、超伝導の発現に有利であると考えられる。しかし、現実の梯子系は rung 方向のホッピングが小さく、超伝導転移温度 T_c も 10K 程度である^[1]。それに対し、rung 方向や斜め方向のホッピングが大きい場合には、梯子系が 100K オーダーの T_c を示す可能性が、揺らぎ交換(FLEX)近似を用いた研究によって指摘されている^[2,3]。

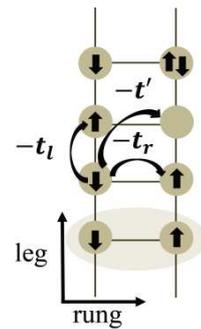


図 1 : 二本鎖梯子ハバード模型

擬一次元系では、超伝導相とモット絶縁相は競合関係にあるが、先行研究で用いられた FLEX 近似は、摂動論に基づく手法であるため、強相関効果に由来するモット絶縁相を記述できない。それに加え、摂動論は、相互作用項の一部分のみを考慮する理論形式であるため、どの項を取り入れるかによって、結果にバイアスがかかり得る。そこで、強相関効果を適切に扱える手法である多変数変分モンテカルロ (multi-variable Variational Monte-Carlo : mVMC) 法^[4]を二本鎖梯子ハバード模型に適用し、rung 方向のホッピングと超伝導の関係を調べた。当日はその結果を発表する。

[1] M. Uehara, et al., J.Phys. Soc. Jpn. **65**, 2764 (1996).

[2] K. Kuroki and R. Arita, Phys. Rev. B **64**, 024501 (2001).

[3] K. Kuroki, T. Higashida, and R. Arita, Phys. Rev. B **72**, 212509 (2005).

[4] D. Tahara and M. Imada, J.Phys. Soc. Jpn. **77**, 114701 (2008).

Tb_{0.47}Y_{0.53}Ni₂B₂C の FZ 法による単結晶育成とその物性

お茶の水女子大学 人間文化創成科学研究科
高橋美郷

Physical Properties of Tb_{0.47}Y_{0.53}Ni₂B₂C grown by floating zone method
Ochanomizu University

M. Takahashi

Keywords: 超伝導, 磁性, 単結晶

ホウ素炭化物 RETN₂B₂C (RE:希土類元素、TN:遷移金属元素)は RE サイトの元素によって磁性や超伝導などの性質を示す興味深い系である。ErNi₂B₂C は弱強磁性秩序と超伝導秩序の共存がミクロスコピックな測定手段(偏極・非偏極中性子回折)で確認された初めての系である[1]。しかし、超伝導転移温度 T_c と弱強磁性転移温度 T_{WFM} の関係が $T_{WFM} < T_c$ であり、自発的磁束格子の確証を目的に行った中性子小角散乱実験において、弱強磁性ドメインを揃えるため T_{WFM} 以下で外部磁場を印加しなくてはならず、ピン止め効果の影響を完全に否定することができていない[2]。そこで Tb_xY_{1-x}Ni₂B₂C に注目し、 $T_{WFM} < T_c$ を満たす x を決定し(図 1)、FZ 法により大型の単結晶育成に成功した。Tb_{0.47}Y_{0.53}Ni₂B₂C 及び同位体ホウ素を用いた Tb_{0.47}Y_{0.53}Ni¹¹B₂C の物性測定を行った。

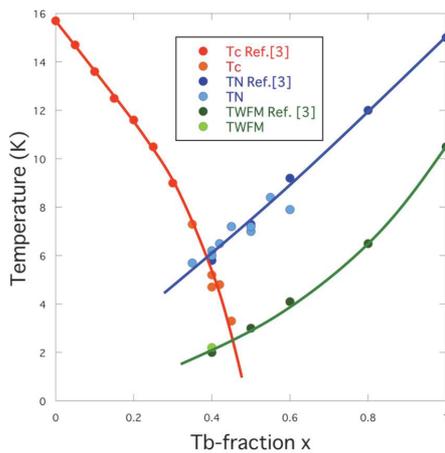


図 1 Tb_xY_{1-x}Ni₂B₂C における x-T 相図

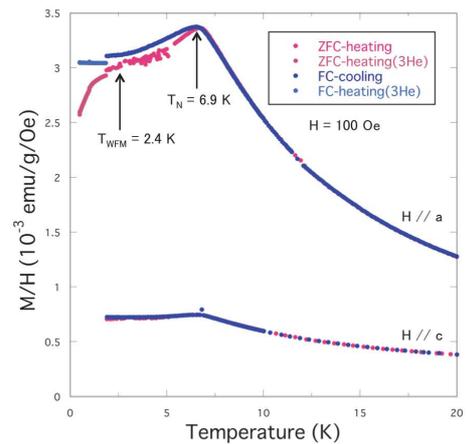


図 2 Tb_{0.47}Y_{0.53}Ni₂¹¹B₂C の磁化の温度変化

[1] H. Kawano *et al.*, J. Phys. Chem. Solids {60}, 1053 (1999).

[2] H. Kawano-Furukawa *et al.*, submitted to PRL, cond-mat/0106273.

[3] B. K. Cho *et al.*, Phys. Rev. B {63}, 144528 (2000).

一層系銅酸化物超伝導体における斥力起源二電子交換散乱強度の増加機構

大阪大学 基礎工学研究科

寺西 慎伍, 宮尾 哲亮, 草部 浩一

Enhancement mechanism of two-particle exchange scattering in single-layer cuprate superconductors

Graduate school of engineering science, Osaka University

Shingo Teranishi, Satoaki Miyao and Koichi Kusakabe

Keywords : 超伝導、銅酸化物、第一原理計算

銅酸化物超伝導体は CuO_2 面と、電荷供給の役割を果たすバッファ層から構成されており、 CuO_2 面の重要性について議論されてきた。銅酸化物超伝導体における超伝導転移温度 (以下 T_C とする。) の物質依存性を説明するため、様々な理論的アプローチがなされており、例えば、銅の $3d_{x^2-y^2}$ ワニエ軌道と $3d_{3z^2-r^2}$ ワニエ軌道の混成 [1] や、 CuO_2 面間の二電子ホッピング [2] が T_C に与える影響について現在までに報告されている。私たちは、超伝導転移温度の物質依存性をより理解するために、また、現在よりも T_C の高い超伝導体を設計するためバッファ層を介した二電子散乱強度の調査を行っている。

私たちはいくつかの銅酸化物超伝導体に対して一電子ホッピングの計算を行ってきた。そのために第一原理計算パッケージ”Quantum Espresso[3]”, ”VASP[4]”を用い、また、得られた電子状態の情報から、低エネルギー有効モデルを構築するため”Wannier90[5]”を用いてきた。

今回の発表では、銅酸化物超伝導体に対する計算結果、用いた理論的手法などについて議論する。

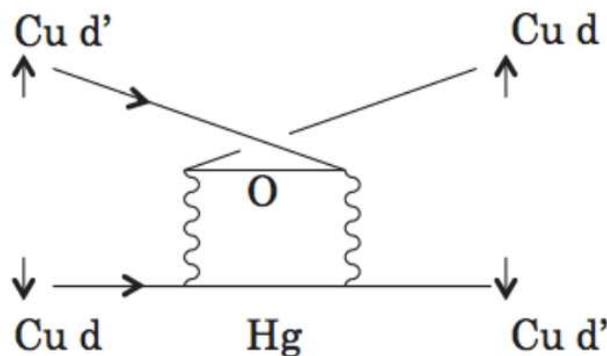


図 1: 水銀系銅酸化物超伝導体における二電子交換散乱プロセス

[1]H. Sakakibara *et al.*, Phys. Rev. Lett. **105**, 057003 (2010).

[2]K. Nishiguchi *et al.*, Phys. Rev. B **88**, 014509 (2013).

[3]P. Giannozzi *et al.* J. Phys.: Condens. Matter **21**, 395502 (2009)

[4]The Vienna Ab initio Simulation Package(VASP) : <https://www.vasp.at>

[5]Wannier90 : <http://www.wannier.org>

n 型銅酸化物高温超伝導体における 電解質ゲートを用いた電子相図の構築

東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻^A,
理研 CEMS^B

松岡秀樹^A, 中野匡規^A, 打田正輝^A, 川崎雅司^{A,B}, 岩佐義宏^{A,B}

Keywords: 実験, 銅酸化物, 高温超伝導, 電解質ゲート, EDLT

電解質ゲートは電気化学の原理で固体中のキャリア密度を制御する手法であり、固体ゲートと比較して電解質ゲートは多量のキャリアを制御できるという理由から、強相関物質の物性制御において電解質ゲートは有効な手法である。同時に、この手法は同一試料中のキャリア密度を連続的に変化させることで詳細な電子相図の構築を可能とする。

また一方で、n 型銅酸化物高温超伝導体は、その種類の少なさと作製の困難さ、構造の特異性、そして輸送特性やフェルミ面の示すエキゾチックな振る舞いによって、その電子状態の議論が活発になされている物質である。

本研究では、この電解質ゲートを電子ドープ型銅酸化物高温超伝導体の一種である $\text{La}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ に適用し、電圧による転移温度の制御・超伝導絶縁体転移の実現に成功した。発表においては、実験の結果得られた超伝導物性の制御の結果を示すとともに、それを基に n 型銅酸化物高温超伝導体 $\text{La}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ の電子相図を構築し、電子物性の議論を行う。

Fig 1: 結晶構造

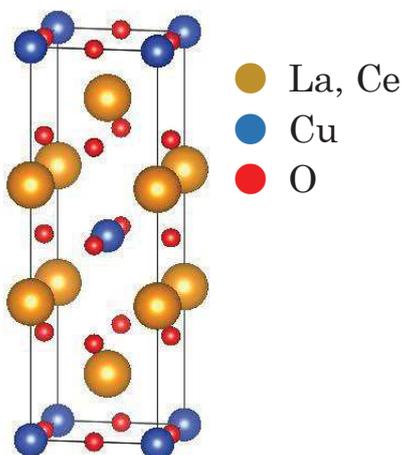
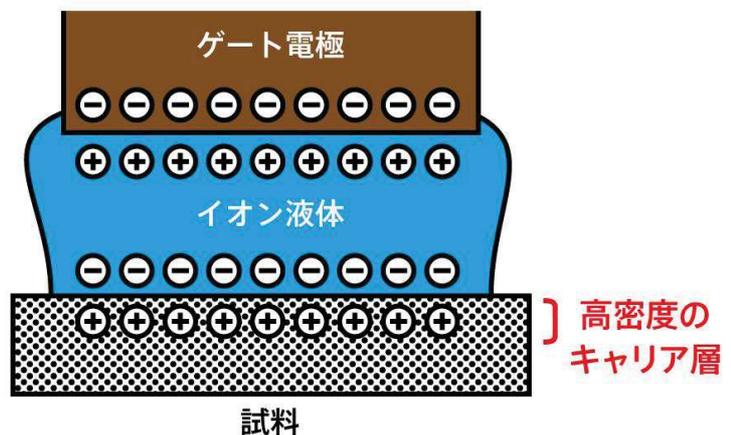


Fig 2: 電解質ゲートを用いたデバイス構造



鉄系超伝導体 $K_xFe_{2-y}Se_2$ の相分離制御

物材機構^A, 筑波大^B

柳沢佑典^{A,B}, 田中将嗣^A, 竹屋浩幸^A, 高野義彦^{A,B}

Phase-separation Control of Iron-based Superconductor $K_xFe_{2-y}Se_2$

NIMS^A, Univ. of Tsukuba^B

Y. Yanagisawa^{A,B}, M. Tanaka^A, H. Takeya^A, Y. Takano^{A,B}

鉄系超伝導体 $K_xFe_{2-y}Se_2$ ($T_c \sim 33$ K^[1])は、Fe 欠損サイトがランダム配列した超伝導相 $K_xFe_{2-y}Se_2$ と規則配列した反強磁性絶縁相 $K_{0.8}Fe_{1.6}Se_2$ に相分離することから、これまで単相の単結晶が得られていない。ARPES 測定からは、他の鉄系超伝導体では存在する Γ 点のホールフェルミ面が存在せず、異なる超伝導発現機構の可能性が挙げられている^[2]。しかし、従来測定に使用されてきた単結晶は上記の通り、相分離が生じており、超伝導相の割合も少なかったため、正確にその物性を評価することは難しかった。最近我々は高温で急冷することで超伝導相の割合が従来よりも多くなるを見出し^[3]、この単結晶を用いた ARPES 測定からは、フェルミ準位に向かって分散を示すホールバンドが観測された^[4]。鉄系超伝導共通の機構で超伝導が発現している可能性が考えられる。本研究ではさらに直接的な証拠を得るために超伝導相の単相化を目指した。

$T_s \sim 270^\circ\text{C}$ 以下で起こる Fe 欠損の規則配列化よりも、高速で冷却することで相分離を完全に抑制、つまり Fe 欠損がランダム配列した単相の超伝導相を合成できると考えた。冷却速度は一般的に物体と冷媒との温度差および物体の熱伝導度に比例することに注目して、様々な冷媒や試料合成容器を用いて合成して、冷却速度の違いによる超伝導特性と組織の変化を調べた。図 1 に様々な冷却条件で得られた単結晶表面の反射電子像を示す。冷却速度の向上により、超伝導相の網目状の組織はサブミクロンオーダーまで細くなり、超伝導相の割合は増加することが分かった。この結果は冷却速度の向上によって絶縁相のバルク成長が抑制されていることを示唆する。一方、その電気的特性は組織が細くなるほど、半導体的な抵抗上昇を伴い、ブロードな超伝導転移へと変化した (図 2)。優れた超伝導特性を得るには、それに適した微細組織が必要であることが分かった。当日では合成条件、超伝導特性と微細組織の関係について詳細に議論する。

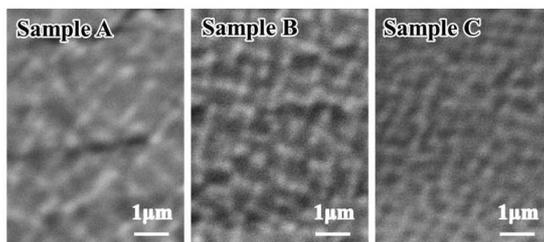


図1. 様々な冷却条件で得られた単結晶表面の反射電子像
白い領域は超伝導相 $K_xFe_{2-y}Se_2$ 、
黒い領域は絶縁相 $K_{0.8}Fe_{1.6}Se_2$ に対応する

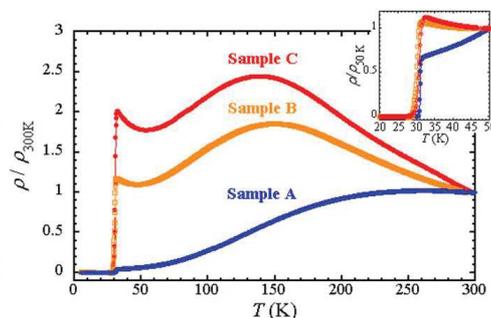


図2. 得られた単結晶の規格化した電気抵抗の温度依存性

[1] Y. Mizuguchi *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **98** (2011) 042511 [2] Y. Zhang *et al.*, *Nat. Mater.* **10**(4) (2011) 273

[3] M. Tanaka *et al.*, *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**, 044710 (2016). [4] M. Tanaka *et al.*, *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**, 073704 (2016)

ABC 積層三層グラフェンの 自発的ギャップに起因するバレーホール効果

東京大学工学系研究科
田中 未羽子

Department of Applied Physics, University of Tokyo
Miuko Tanaka

Keywords: グラフェン バレーホール効果 非局所輸送

2004年に半導体中の2次元電子ガスとは質的に異なるような量子ホール効果が発見されて以来、グラフェンは様々な特異な性質によって注目を集めてきた。その一つがバレーと呼ばれる自由度がよい量子数になっているという性質である。

グラフェンや遷移金属ダイカルコゲナイトなどの2次元ハニカム格子状物質はK点とK'点というブリリアンゾーン中の隔たった点においてバンドが縮退しており、ギャップ付近の電子はどちらのバンドにいるかということに対応する2次元の自由度を持つ。これがバレーである。

バレー自由度の効果が表に表れる現象の一つに電流に対して垂直方向にバレー流が流れるバレーホール効果がある。この効果はベリー曲率による異常速度に起因しているため、空間反転対称性の破れた系でないと観測されない。グラフェンの結晶構造は空間反転対称性を持っているため、バレーホール効果の観測は今まで窒化ホウ素上に乗せた単層グラフェン[1]、面直電場を印加した二層グラフェン[2]など外場で対称性を破った系で行われてきた。

近年ABC積層三層グラフェンの基底状態は電子間相互作用によって自発的に対称性が破れ、ギャップが開いた状態なのではないかという報告がなされている[3]。自発的に対称性が破れているなら面直電場や窒化ホウ素のポテンシャルなしでもバレーホール効果が表れるのではないかと[4]、というのが本研究の趣旨である。

[1] R.V.Gorbachev, *et al.*, *Science* **346**, 6208 (2014)

[2] Y.Shimazaki, *et al.*, *Nature Phys.* **11**, 1032 (2015)

[3] P.Maher, *et al.*, *Nature Phys.* **9**, 154 (2013)

[4] F.Zhang, *et al.*, *Phys. Rev. Lett* **106**, 156801 (2011)

非平衡グリーン関数による 熱浴に挟まれた二つの量子ドットの解析

東京工業大学大学院理工学研究科物性物理学専攻

深代隆央

Analysis of double quantum dots between two reservoirs with non-equilibrium Green function

Department of Physics, Tokyo Institute of Technology

Takahisa Fukadai

Keywords : 非平衡、量子輸送、非平衡グリーン関数、量子揺らぎ

近年、非平衡物理の観点から量子輸送に関する研究が行われている。その中でも、一つの系における量子輸送が非平衡グリーン関数法を用いて非摂動的に理解出来る事が示された [1]。非平衡グリーン関数法では、干渉効果のような量子性は含まれる。一方で、複数の部分系から成る系 (多体系) については、マスター方程式 [2] や量子マスター方程式による解析が行われている [3] が、これらの手法では干渉効果といった量子性を適切に取り扱えないという問題点がある [4]。

今回、多体系における量子輸送に関する理解を深める為に、多体系の最も単純な場合と考えられる二つの熱浴に挟まれた二つの量子ドットに関する解析を行った。手法としては非平衡グリーン関数法を用い、ワイドバンド極限近似の中で片方の量子ドットの電子密度及びカレントの具体的な表式を求めた。特別な場合として、片方の熱浴に一定の電圧が掛かっている状況で電子密度の数値計算を行い、干渉効果による電子密度の揺らぎを観測した。さらに、任意の初期状態から定常状態へ至る緩和時間の具体的な表式を求めた。

[1] M. Ridley, A. MacKinnon and L. Kantorovich, *Phys. Rev. B* **91**, 125433 (2015)

[2] R. Ziegler, C. Bruder and H. Schoeller, *Phys. Rev. B* **62**, 1961 (2000)

[3] U. Harbola, M. Esposito and S. Mukamel, *Phys. Rev. B* **74**, 235309 (2006)

[4] M. Esposito, U. Harbola and S. Mukamel, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 1665(2009)

実空間差分法に基づく第一原理伝導計算手法の開発

筑波大学数理物質科学研究科

岩瀬 滋, 小野倫也

Development of first-principle transport calculation method based on
real-space finite-difference method

Graduate School of Pure and Applied Physics, University of Tsukuba

Shigeru Iwase and Tomoya Ono

Keywords: 第一原理計算, First-principles calculation

ナノ構造体の伝導計算は、半無限電極との電子の移動を許す非平衡開放系を扱うため、孤立系や周期系で用いられてきた標準的な第一原理計算手法とは異なるアプローチが必要となる。現在、このために開発された方法の中で、非平衡グリーン関数(NEGF)法と原子基底関数を組み合わせた方法がよく用いられているが、計算精度が基底関数の取り方に依存してしまい、トンネル電流や表面系の扱いが困難であるという欠点を持つ。

本研究では、上記の困難を解消することを目的に、実空間差分法と非平衡グリーン関数を組み合わせた第一原理計算手法の開発を行った[1]。実空間差分法は、精度のコントロールが容易であり、超並列計算機上で高いパフォーマンスを発揮できるという特徴を持つが、膨大な計算量とメモリを必要とするため、非平衡グリーン関数法には適用されてこなかった。そこで我々は、実空間差分法におけるハミルトニアンがブロック 3 重対角行列で表されることに着目して、計算量とメモリをオーダー N に軽減できる計算手法を考案した。

発表では、開発した伝導計算プログラムと半導体/絶縁体界面の電気伝導特性の計算結果について紹介する。

[1] S. Iwase *et al.* in preparation.

拡張ニコライ模型における超対称性の破れと
南部ゴールドストーンフェルミオン

東大院理^A, 立教大学^B, IPMU^C
三ノ宮 典昭^A, 桂 法称^A, 中山 優^{B,C}

Supersymmetry breaking and Nambu-Goldstone fermion
in an extended Nicolai model.

Dept. Phys., Univ. Tokyo^A, Dept. Phys., Rikkyo Univ^B, Kavli
IPMU^C

Noriaki Sannomiya^A, Hosho Katsura^A and Yu Nakayama^{B,C}

Keywords : 数理解論, 格子模型, 超対称性, 低次元物性

Goldstone の定理とは、「大域的な連続対称性が自発的に破れたときに、massless な励起が現れる」という定理である。この massless な励起のことを南部-Goldstone ボソンという。この定理は非相対論的な場合についても拡張されており、特に近年になって有効ラグランジアン法や射影演算子法を用いた南部-Goldstone ボソンの個数の数え上げについて盛んに研究がなされてる [1,2]。一方で、理論が超対称性を有する場合には、エネルギーの真空期待値が 0 でないことで定義される超対称性の自発的な破れにともない、Goldstone フェルミオンという massless な励起が現れることが相対論的な場合に知られている [3]。しかし非相対論的な場合の超対称性の破れについては一般論が存在せず、それゆえに一般論の構築といった観点からも具体的な模型についてどのようなことが言えるのかという点が重要になってくる。

そこで、我々は、非相対論的な超対称性の破れを論じるために、超対称性を有する具体的な一次元格子模型である Nicolai 模型 [4] を拡張し、その性質を調べた。この模型において超対称性が自発的に破れることにより、massless 励起として Goldstone フェルミオンが現れることが期待される。我々はこのような模型に対し、有限系および無限系で超対称性の破れが起こることを示した。また、massless な励起があるかどうかを不等式を用いた解析、厳密対角化および有限サイズスケールリングにより調べた。この結果、低エネルギー励起の分散関係は線形かつギャップレスであることが分かったので、さらにそうした数値解の妥当性を確かめるために、くりこみ群によって有効ハミルトニアンが massless Thirring フェルミオンによって記述されることを確かめた。このことから今回のような非相対論的な格子模型においても、超対称性の破れに伴い Goldstone フェルミオンが現れることが明らかになった。

[1] H. Watanabe and H. Murayama, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 251602 (2012).

[2] Y. Hidaka, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 091601 (2013).

[3] A. Salam and J. Strathdee, *Phys. Lett.* **49B**, 465 (1974).

[4] H. Nicolai, *J. Phys. A: Math. Gen.* **9**, 1497 (1976).

非平衡定常状態における量子ゆらぎ定理：可解モデルによる解析

早大理工^A, 成蹊大理工^B

諸留昇平^A, 門内隆明^B, 湯浅一哉^A

Quantum fluctuation theorem in nonequilibrium steady state:

Analysis with solvable model

Waseda Univ.^A, Seikei Univ.^B

Shohei Morodome^A, Takaaki Monnai^B and Kazuya Yuasa^A

Keywords : 量子ゆらぎ定理, 非平衡定常状態, quantum fluctuation theorem, nonequilibrium steady state

近年, 非平衡過程で成り立つ「ゆらぎ定理」が注目されている. この定理は通常, 熱平衡状態にある系にする仕事を議論するが, 本研究では非平衡定常状態 (NESS) においてゆらぎ定理を議論する. 可解モデルを採用し, 厳密に解析する.

量子系 S が複数の熱浴と相互作用する設定を考える (図 1). 熱浴は無限に大きい系として扱い, 十分時間が経つと S を通じて熱浴間に定常的にカレントが流れる NESS が実現される. 本研究では次のハミルトニアンで記述されるモデルを採用する:

$$H(t) = \Omega[a - f(t)]^\dagger[a - f(t)] + \sum_{\nu=1}^M \int d^3\mathbf{k} \omega_{\mathbf{k}\nu} a_{\mathbf{k}\nu}^\dagger a_{\mathbf{k}\nu} + \lambda \sum_{\nu=1}^M \int d^3\mathbf{k} (u_{\mathbf{k}\nu}^* a_{\mathbf{k}\nu}^\dagger a_{\mathbf{k}\nu} + u_{\mathbf{k}\nu} a_{\mathbf{k}\nu}^\dagger a_{\mathbf{k}\nu}).$$

調和振動子が M 個のボソン場熱浴と相互作用するモデルであり, $f(t)$ で系に操作を加える [$f(0) = 0$ とする]. これは可解モデルであり, S の自由度が関与するモードに関しては, $A_\omega = c_\omega^* a + \sum_{\nu=1}^M \int d^3\mathbf{k} c_{\omega, \mathbf{k}\nu}^* a_{\mathbf{k}\nu}$ で $H(0) = \int_0^\infty d\omega \omega A_\omega^\dagger A_\omega + \dots$ と厳密に対角化できる.

この設定で, 系にする仕事の分布に対する特性関数を計算すると, $M = 1$ で熱平衡状態から操作を加える場合にはゆらぎ定理が成立するが, $M > 1$ で NESS の場合には成立しないことがわかった. これに対し, エネルギーとは異なる次の物理量に注目した:

$$X = \int_0^\infty d\omega x(\omega) A_\omega^\dagger A_\omega, \quad x(\omega) = \ln \frac{\Gamma_\beta(\omega) + \Gamma(\omega)}{\Gamma_\beta(\omega) - \Gamma(\omega)}.$$

ここで, $\Gamma(\omega) = 2\pi \sum_{\nu=1}^M \int d^3\mathbf{k} |u_{\mathbf{k}\nu}|^2 \delta(\omega - \omega_{\mathbf{k}\nu})$, $\Gamma_\beta(\omega) = 2\pi \sum_{\nu=1}^M \int d^3\mathbf{k} [1 + 2n_\nu(\omega)] \times |u_{\mathbf{k}\nu}|^2 \delta(\omega - \omega_{\mathbf{k}\nu})$ である. この X の増加量の分布に対する特性関数は

$$\chi(\xi) = \exp \left[-\Omega^2 \int_0^\infty d\omega \left| c_\omega^* \int_0^t dt' f(t') e^{i\omega t'} \right|^2 \left\{ \frac{\Gamma_\beta(\omega)}{\Gamma(\omega)} [1 - \cos \xi x(\omega)] - i \sin \xi x(\omega) \right\} \right]$$

となり, 非平衡定常状態でも X に関してゆらぎ定理 $\chi(\xi) = \chi(-\xi + i)$ が成立する. しかも, 順方向の過程だけでゆらぎ定理が成立することがわかった.

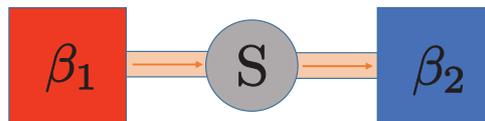


図 1: 2 個の熱浴と相互作用する量子系 S

共形場理論と確率過程の対応

東京大学^A, 東京理科大学^B

福住 吉喜^A, 堺 和光^B

Conformal field theories and corresponding stochastic processes

The University of Tokyo^A, *Tokyo University of Science*^B

Yoshiki. Fukusumi^A, Kazumitsu. Sakai^B

Keywords: 共形場理論, 拡散過程, パラフェルミオン, Kac-Moody 代数

Schramm-Loewner 発展(SLE)は二次元の共形不変なフラクタル曲線を記述する強力な手法である[1]。具体的には、一次元のブラウン運動を複素平面に Loewner 方程式を満たす共形変換により写すことで、二次元のフラクタル図形を得る確率過程である。これにより、臨界 Ising 模型や臨界 Potts 模型、パーコレーション、自己回避ランダムウォークなど共形場の理論(CFT)で記述される格子模型上でのフラクタルな境界曲線の性質が明らかになってきている。逆に、CFT の方から、SLE を構成することも行われている[2]。物性物理学においても、量子ホール系の金属-絶縁体転移はネットワーク模型と呼ばれる二次元格子模型にマップされる場合があり、模型のマルチフラクタル性と関連している。

我々は、これまでの研究で CFT の一般的な模型の一つである Coset Wess-Zumino-Witten 模型において SLE の一般化である多重 SLE を構成した。今回の発表ではこの成果を中心に、格子上でのパラフェルミオンと SLE の関係や、共形場理論の可積分変形と SLE の構成の問題など SLE の様々な拡張について話す予定である。

[1] O. Schramm, *Isr. J. Math.* **118** :221-288, 2000.

[2] K. Sakai, *Nucl. Phys. B* **867** :429-447, 2013.

Entanglement Entropy and Quantum Field Theory

東京大学大学院理学系研究科物理学専攻上田研究室,
吉野匠,

Entanglement Entropy and Quantum Field Theory
Department of Physics, The University of Tokyo, Ueda Group
Takumi Yoshino

Keywords: Entanglement Entropy, Conformal Field Theory

近年、量子多体系を情報論を用いて理解しようとする試みが盛んである。その際に用いられる量がエントロピー $S = -\text{tr}_A(\rho_A \log \rho_A)$ であり、これで系のエンタングルメントを調べる時、エンタングルメント・エントロピー (EE) と言う。一方、1+1 次元系は共形場理論 (CFT) を用いることで、様々な量を厳密に決定することができる。これは CFT が作用の具体的な形や摂動によらずに、場の相関関数を決定できるという優れた性質による。CFT を用いることで、1次元ボゾン系の EE を計算したのが P.Calabrese and J.Cardy [1] であり、本ポスターではこの論文の紹介をする。P.Calabrese and J.Cardy らは境界のない無限に長い系では、長さ l を持った部分の EE は $S = c/3 \log(l/a)$ と書けることを示した。 c とはセントラルチャージと言われる定数で、考えている系の CFT の性質を決定する量である。ここから系のエンタングルメントを表す EE が系の具体的な作用によらず、セントラルチャージと注目する部分の長さのみによることが示された。

ポスターは以下のように構成されている。

- 1 : 経路積分を用いて一次元ボゾン場の分配関数を求める。そして、この議論のアナロジーから注目する系の密度行列 ρ_A を求める。
- 2 : 座標の共形変換について説明したのち、場の共形変換、すなわち共形場理論についての入門的な解説を行う。
- 3 : 経路積分で表示した密度行列と共形場理論を合わせて、一次元ボゾン場でのエンタングルメント・エントロピーを求める。

[1] P.Calabrese and J.Cardy, "Entanglement entropy and quantum field theory",
J.Stat.Mech.0406,P002(2004)

量子連続測定による量子フィードバック制御

京都大学大学院理学研究科

八角 繁男

Keywords : 量子測定、量子フィードバック制御、スクイジング、ホモダイーン測定、確率マスター方程式

近年、より高速な演算を可能にすることを目的とした量子計算や、磁場などの外場パラメータをより精緻に推定する量子精密計測が実用化されつつある。これらの性能を担保するためには欲しい量子状態を用意する手続きが必要不可欠であり、それこそが量子フィードバック制御に他ならない。量子フィードバック制御は量子測定の結果に基づきシステムを操作することを指し、その目的は関心のある物理量の量子ゆらぎなどを抑制し、欲しい状態を実現することにある。

今回は、量子連続測定による量子フィードバック制御を行うことで直交位相振幅のスクイジングを実現する方法を紹介する。具体的には以下のような系を考える。光子が閉じ込められているキャビティ（二枚の鏡を向かい合わせることで光を閉じ込める装置）があり、そのキャビティには左右に微小な穴が開いている。片方の穴から出た光子をホモダイーン測定することで直交位相振幅を測定することができ、もう片方の穴から測定結果に応じた操作をシステムに施せる。ここで直交位相振幅とは電場の正弦成分と余弦成分を規格化したものに相当する物理量である。またスクイジングとは直交位相振幅について最小不確定性関係を満たしながら、一方の分散を小さくしつつ他方の分散を大きくする操作を指す。

発表内容の流れは以下のように計画している。まずはじめに、非ユニタリ過程を含む一般的な時間発展を記述できるクラウド表現、量子連続測定を記述するのに有用な確率マスター方程式を入門的に解説する。次に、量子フィードバック制御について説明する。最後に、先に述べた系を通じて、量子連続測定で得た結果をリアルタイムにフィードバックして直交位相振幅をスクイジングする方法を解説する。

[1] 沙川貴大、上田正仁、「量子測定と量子制御」（サイエンス社、SGCライブラリ 123、2016）。

[2] H. M. Wiseman and G. J. Milburn, *Quantum Measurement and Control*, Cambridge Univ. Press (2009).

[3] H. M. Wiseman and G. J. Milburn, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 548 (1993).

量子状態の断熱制御と非線形可積分系

東工大
奥山真佳, 高橋和孝

From classical nonlinear integrable systems to quantum shortcuts to adiabaticity

Tokyo Institute of Technology
Manaka Okuyama and Kazutaka Takahashi

Keywords: 断熱状態, 断熱制御, adiabatic state, shortcuts to adiabaticity

本講演では量子状態の断熱制御に非線形古典可積分系の手法を適用した結果[1]について報告する。

量子系の動的制御は応用だけではなく、原理的な側面からも注目を集めており、その中でも断熱時間発展を加速する Shortcuts to adiabaticity (STA) とよばれる方法は多くの研究が行われている[2],[3]。この方法では、ハミルトニアン各瞬間での固有状態が Schrödinger 方程式の厳密な解となるように、制御ハミルトニアンと呼ばれる制御項を元のハミルトニアンに付加する。これにより、任意の速度で断熱状態を保ったまま任意の時間で時間発展を行うことが可能となり、他の状態に遷移せずに状態を制御することができる。

STA の一般論は既に確立しており、任意のハミルトニアンに対して、制御項の一般的なスペクトル表示は与えられているが[3]、個別の物理系に対する適用は2準位系など単純な系でしか実現されていない。その原因は主に二つあり、第一に制御ハミルトニアンの演算子形を得ることが一般には困難であるということ、第二に得られたとしても無限和や多体相互作用項など、複雑で非現実的な形をしていることが多いということである。

本講演では、非線形可積分系において可積分性を表す Lax 形式の手法を用いることにより、一次元量子力学系では KdV 方程式と呼ばれる非線形可積分方程式を、一次元量子スピン系では戸田方程式と呼ばれる非線形可積分方程式を用いることにより、制御ハミルトニアンを得られることを示す。得られた制御ハミルトニアンは複雑な形をしているが、ゲージ変換を用いることにより、この困難を回避することが出来る。

[1] M. Okuyama, K. Takahashi, arXiv :1603.01053 (2016).

[2] M. Demirplak and S. A. Rice, J. Phys. Chem. A **107**, 9937(2003).

[3] M. V. Berry, J. Phys. A: Math. Theor. **42**, 365303 (2009)

アンサンブルの等価性を破る異常量子状態

東京大学理学系研究科
龍田真美子, 清水明

Properties of Anomalous Quantum States Violating Equivalence of Ensembles
Department of Physics, University of Tokyo
Mamiko Tatsuta and Akira Shimizu

Keywords: 物量子統計力学, アンサンブルの等価性, 猫状態

統計力学の重要な性質として、アンサンブルの等価性がある[1]。従来の統計力学で用いられるアンサンブル形式には、同じエネルギーの状態をすべて集めたミクロカノニカルアンサンブルや、同じ温度の状態をすべて集めたカノニカルアンサンブルなど、様々なアンサンブルがあり、これらのアンサンブルがすべて、等価な熱力学的予言を与えるということが、アンサンブルの等価性である。アンサンブルの等価性は、統計力学の汎用性を高める重要な性質として、信じられてきた。

ところが、アンサンブルの等価性が成り立たない例が発見された[2]。それは、ハミルトニアンと、系の平衡状態を指定する物理量が非可換な量子系においてである。このときそれぞれのアンサンブルが、実験で測られる量（比熱など）について異なる予言を与えてしまう上に、どのアンサンブルが（通常の実験と整合するような）「正しい」アンサンブルなのかもわからない。加えて、アンサンブルの等価性が破れているときに、「正しい」アンサンブルと非等価な結果を与える「異常」なアンサンブルが、どのような物理的性質を持っているかは、未知である。

今回の発表では、

- 1 : アンサンブルの等価性に関する簡単なおさらいとその破れ
 - 2 : 「正常」アンサンブルが、系の平衡状態を指定する変数を可能な限り多く示強変数としたアンサンブル (Maximally Canonical Ensemble) であること
 - 3 : 「異常」アンサンブルが、巨視的マクロ状態の重ね合わせ（いわゆる「猫状態」）となっていること
- を説明する。

[1] 田崎晴明 : 『統計力学 I』 (培風館, 2008) .

[2] C. Maes *et al.*, J. Math. Phys. {47}, 073303 (2006).

熱的な量子純粋状態を用いた統計力学の定式化とその応用

東京大学理学系研究科^A,

遠藤 寛之^A

**Statistical Mechanics with Thermal Pure Quantum States, and
Its Applications**

Graduate School of Science, the University of Tokyo^A,
Hiroyuki Endo^A

Keywords : 統計力学の基礎、純粋量子状態、数値計算

本発表では、ここ数年行われている統計力学を熱的な量子純粋状態を用いて定式化し直すという研究、またその手法を用いた数値計算などへの応用についての研究をレビューする。

マクロな物理系の性質を記述する熱力学を、ミクロな観点から説明し熱力学量の表式を与えようというのが統計力学の試みである。元来、統計力学はアンサンブル形式による計算が広く用いられている。(量子統計力学での)アンサンブル形式では、量子混合状態を表す密度演算子を導入して系の熱平衡状態としている。つまり、熱平衡状態を表す状態として、量子混合状態を導入しているのである。

他方で、統計力学の基礎付けの議論の中で、「典型性」というキーワードが用いられる。これは、熱力学で熱平衡状態を表すマクロ変数を示すような量子状態のうち、圧倒的多数が平衡状態を示すという考え方である。例えばこのアイディアはアンサンブル平均におけるトレース計算によって平衡状態の値が求まるということの理由付けの一つだとも言える。

この典型性というアイディアに対応して、混合状態ではなく一つ量子純粋状態を持ってきてそれを元に対応する熱力学状態を表そうという定式化が進められた。それらはミクロカノニカル分布に対応したミクロカノニカル TPQ 状態、カノニカル分布に対応したカノニカル TPQ 状態などと呼ばれ、それぞれのアンサンブルに等価な結果を与える。もちろんこの結果は純粋に力学的な変数だけではなく、エントロピーや自由エネルギーなどといった純粋に熱力学的な量に対する結果も再現するものである。

この TPQ 形式と呼ばれる統計力学の定式化は、量子純粋状態を用いるため、混合状態を用いていた従来のアンサンブル形式に比べて数値計算が容易になるという大きな利点がある。本発表では TPQ 形式を用いた数値計算の諸結果についても発表したい。

[1] Sho Sugiura and Akira Shimizu, Phys. Rev. Lett. 108, 240401 (2012)

[2] Sho Sugiura and Akira Shimizu, Phys. Rev. Lett. 111, 010401 (2013)

[3] A. Sugita, RIMS Kokyuroku (Kyoto) 1507, 147 (2006).

スピン系の臨界現象にボソン環境が及ぼす影響

東工大理

高田珠武己, 西森秀稔

Effects of a bosonic bath on critical properties of a spin system

Department of Physics, Tokyo Institute of Technology

Kabuki Takada and Hidetoshi Nishimori

Keywords : 相転移, 臨界現象, 散逸, 量子アニーリング

我々は, Ohm スペクトル密度を持つボソン環境と相互作用した d 次元最近接相互作用横磁場 Ising 模型 (スピン・ボソン模型 [1]) の臨界現象を調べた. 鈴木-Trotter 分解による虚時間の導入とボソン自由度の消去をすると, この模型の有効作用は古典的な $d+1$ 次元 Ising 模型として表せる. ここで, ボソン環境との相互作用がなければ $d+1$ 次元の有効 Ising 模型は最近接相互作用しか持たないが, 環境との相互作用があると新たに虚時間方向の逆二乗的な長距離相互作用が現れる. 我々はこの $d+1$ 次元有効 Ising 模型を $O(n)$ 模型に一般化し, n が無限大の極限をとった. 結果的に得られる模型は球形模型と等価である. これを解析したところ, 正の空間次元 d に対して系は 2 次相転移することがわかった. また, 静的な臨界指数は $d+2$ 次元最近接相互作用球形模型のものと一致し, 動的臨界指数は $z=2$ となった. 本結果は, $d=1,2$ の場合に対してくりこみ群 [2] や Monte Carlo 法 [3] で得られたものと整合している.

スピン系と環境が相互作用した系の性質を調べることは, 量子アニーリングに環境のノイズが及ぼす影響という観点から重要性を増している. 特に, 量子アニーリングの計算時間は系が 2 次相転移するならサイズに関して多項式的にしか増えないが, 1 次相転移するなら指数増大することが知られているので, 散逸系の相転移を調べることで環境のノイズ下における計算時間を見積もることができる. 我々が導いた結果は, ノイズ下での量子アニーリングの計算時間が, サイズの関数としてノイズなしの場合の 2 乗程度となることを示している. この結果は環境のノイズが量子アニーリングの計算時間に深刻な影響を及ぼさないことを示唆する. また, 我々の解析手法はスピン系が複雑な結合をした場合にも適用できるので, 量子アニーリングにとってより現実的な模型への環境の影響を解析する足がかりになると考えている.

[1] A. J. Leggett *et al.*, Rev. Mod. Phys. **59**, 1 (1987).

[2] S. Pankov *et al.*, Phys. Rev. B **69**, 054426 (2004).

[3] P. Werner *et al.*, Phys. Rev. Lett. **94**, 047201 (2005).

1次元系における異常熱輸送の解析

東京工業大学 理学院物理学系
藤平悠太**Keywords** : 異常熱輸送, Nonlinear Fluctuating Hydrodynamics, レヴィウォーク, スケーリング

異常熱輸送 [1] とはフーリエの法則に従わないような熱伝導である。熱伝導は格子振動 (フォノン) や自由電子などが熱キャリアとして熱を輸送する現象である。低次元系では、熱伝導率が系のサイズに対しべき的に発散し、異常熱輸送が現れることが線形応答理論の適応において知られており、FPU 鎖での数値計算 [1] や 1次元カーボンナノチューブ [2] での実験などの系で熱伝導率のべき的な発散が確認されている。

本発表では異常熱輸送を現象論的に解析する手法として、レヴィウォーク [3] および非線形な揺らぐ流体力学 (Nonlinear Fluctuating Hydrodynamics) [4] を紹介する。レヴィウォークはランダムウォークの一種であり、1ステップあたりの移動距離がべき則で決定されるように設定したものである。べき則の指数を調節し、分散が発散するようにすることで異常輸送を記述することができる。レヴィウォークでは、本来は多体現象である熱輸送を1体問題の確率モデルとして単純化することで、無限系・有限系問わず解析をひと通り行うことができ、異常熱輸送が起こっているときの温度分布がどのような関数形であるかを知ることができる。

また、揺らぐ流体力学は、ミクロスケールでは1次元非調和振動子鎖である系をメソスケールで連続体近似したとき、微小変動がどのように伝搬するかを記述した理論である。多体系の時間発展を、ゆっくりと変動する3成分の保存量と、素早い変動をするノイズ項に分離する近似をすることで、輸送問題の計算を進めることができる。揺らぐ流体力学では、モード結合理論を適用することで2点相関関数が異常輸送を示すことが分かり、異常輸送を特徴づける指数がミクロに与えた粒子間ポテンシャルの性質により決定されることも知ることができる。

[1] A. Dhar, Adv. Phys. **57** (2008) 457.

[2] C. W. Chang, D. Okawa, H. Garcia, A. Majumdar, and A. Zettl, Phys. Rev. Lett. **101** (2008) 075903.

[3] A. Dhar, K. Saito, B. Derrida, Phys. Rev. E **87** (2013) 010103.

[4] H. Spohn, J. Stat. Phys. **154** (2014) 1191.

異常熱輸送と巨視的ゆらぎの理論

慶應義塾大学

玉木 脩二

Anomalous Heat Transport and Macroscopic Fluctuation
Theory

Keio University

S. Tamaki

Keywords : 異常熱輸送, 巨視的ゆらぎの理論, anomalous heat transport, macroscopic fluctuation theory

非平衡定常状態での定常流のゆらぎを理解することは、統計物理学における最重要課題の一つである。このテーマを研究するために我々は、境界の熱浴によって系に駆動される定常熱流のゆらぎを調べた。本研究では、異なる輸送、すなわちそれぞれ弾道的輸送、異常熱輸送、拡散的輸送を示す三つのモデルを考えた。特に拡散的輸送における一般論である巨視的ゆらぎの理論が異常熱輸送にも拡張し得るか否かを調べた。

時間 τ の間に系を流れる流量を Q_τ とする。この量はランダムに変動する量であるからそのゆらぎの確率 $P(Q_\tau)$ について研究することができる。このゆらぎの確率 $P(Q_\tau)$, 特にそれを定量的評価するキュミュラント $\langle Q_\tau^n \rangle_c$ が本研究の対象となる物理量である。

輸送が拡散的である場合には、Bertini らによって提案された巨視的ゆらぎの理論 (MFT) [1] と呼ばれる一般的な枠組みの中で、熱流ゆらぎのキュミュラント $\langle Q_\tau^n \rangle_c$ を定量的に評価することができる。MFT ではインプットとして熱伝導率 κ を必要とする。そのため MFT で扱われる輸送は、熱伝導率 κ が系のサイズ L に依存しない示強変数として定義される拡散的輸送である。

一方で、一次元の熱輸送では熱伝導率が $\kappa \propto L^\alpha$, ($0 < \alpha < 1$) のようにシステムサイズに依存しながら発散する異常熱輸送が広く生じる ($\alpha = 1$ の場合は弾道的輸送と呼ばれる)。この場合の一般論は知られていないが、有限サイズで定義される熱伝導率を用いれば、MFT によってキュミュラントを計算することができる。我々は具体的なモデルを用いて MFT の予言するキュミュラントが、数値計算によって直接得られるものと定量的に一致するかどうかを調べた。

本研究では、一次元調和格子とそのダイナミクスをノイズで乱したモデルにおける熱輸送を調べた。これらのモデルでは、熱伝導率の振る舞いはよく調べられており、調和格子では $\kappa \sim L$ のように振る舞う弾道的輸送となるが、ダイナミクスをノイズで乱すことで、ノイズが運動量を保存するなら $\kappa \sim L^{0.5}$ のように発散する異常熱輸送、保存しなければ $\kappa \sim L^0$ のように振る舞う拡散的輸送が生じることが知られている。

結果として MFT は拡散的輸送に限らず異常熱輸送の場合にも定量的に正しい値を与えることが分かった。このような結果は異常熱輸送を示す他のモデルでも見られており [2,3], MFT を異常熱輸送へ拡張することが一般的に可能であることを示唆している。

[1] L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio, and C. Landim, Rev. Mod. Phys. 87, 593 (2015).

[2] A. Dhar, K. Saito, and B. Derrida, Phys. Rev. Lett. 87, 010103 (2013).

[3] K. Saito and A. Dhar, Phys. Rev. Lett. 107, 250601 (2011).

熱揺らぎを用いたスピングラス基底状態の復元

東工大理^A, テキサス A&M 大^B

西村光嗣^A, 西森秀稔^A, Andrew J. Ochoa^B, Helmut G. Katzgraber^B

Retrieving the ground state of spin glasses using thermal noise

^ATokyo Institute of Technology, ^BTexas A&M University

Kohji Nishimura^A, Hidetoshi Nishimori^A,

Andrew J. Ochoa^B, and Helmut G. Katzgraber^B

Keywords: 統計力学, スピングラス, 量子アニーリング

Statistical mechanics, Spin glasses, Quantum Annealing

本ポスターでは, Gaussian ノイズが乗った相互作用係数を持つスピングラスのハミルトニアンから, 有限温度復号を用いることでノイズが混入する前のハミルトニアンの基底状態をより良く推定できることを示す.

情報理論における誤り訂正符号は, 対応する相互作用係数にノイズが乗ったスピングラスの基底状態を推定する問題に帰着できるため [1], 2 つの関連性についての研究がなされており, 特に有限温度復号 [2]という手法を用いることで西森温度 [3]において最も高い復号率を得ることができていることが知られている. これらは一般の相互作用係数についての問題に拡張することができるが, これに対する解は今のところ得られていない.

一方, スピングラスの基底状態を求める問題は組み合わせ最適化問題を解くことに相当するため, 近年この問題を解くために量子アニーリング [4]を用いたデバイスが開発されているが, デバイスに付随するノイズにより正しい基底状態を得ることが問題となっている. 上で紹介した問題を研究することは, このようなデバイスの性能改善につながるという点において意義があると考えられる.

我々は数値転送行列法を用いた数値計算を行うことにより, 有限温度復号がノイズの乗ったスピングラスから元のスピングラスの基底状態を推定するのに有用であることを確かめ, さらに最も高い復号率を得る温度が西森温度とは異なる結果になることも確かめた. そして, 平均場解析を行うことによりこの振る舞いを定性的に説明することも試みた.

[1] N. Sourlas: Nature **339** (1989) 693.

[2] P. Ruján: Phys. Rev. Lett. **70** (1993) 2968.

[3] H. Nishimori: Prog. Theor. Phys. Jpn. **66** (1981) 1169.

[4] T. Kadowaki and H. Nishimori: Phys. Rev. E **58** (1998) 5355.

情報駆動エンジンにおける Onsager の相反関係

東大総合文化^A, 東工大理工^B, 東大工^C

山本峻平^A, 伊藤創祐^B, 白石直人^A, 沙川貴大^C

Linear Irreversible Thermodynamics and Onsager Reciprocity
for Information-driven Engines

*Dept. of Basic Sci. Univ. of Tokyo^A, Dept. of Phys. Tokyo
Inst. of Tech.^B, Dept of App. Phys. Univ. of Tokyo^C*

Shumpei Yamamoto^A, Sosuke Ito^B, Naoto Shiraishi^A and
Takahiro Sagawa^C

Keywords : 情報熱力学, 線形非平衡熱力学

熱力学第二法則と情報理論との関係は19世紀から議論されてきた。「Maxwell デーモンのパラドックス」と呼ばれる思考実験によると、確率的なシステムの状態を測定し、その結果に応じて制御を行う「デーモン」が存在するとき、一見すると第二法則に反する操作が可能となってしまう。この問題を端緒とし熱力学と情報理論の融合を行った、情報熱力学と呼ばれる分野が近年盛んに研究されている [1]。その結果、相互情報量と呼ばれる、2つの確率的システムの相関を表す量が情報理論のみならず物理学においても重要な役割を果たすことが理解された。すなわち、情報のやりとりがある状況においては熱力学第二法則は相互情報量変化を含めた形で成立する。概略すれば、正の相互情報量変化を生み出すにはそれを補償するエントロピー生成が必要であり、逆に相互情報量を「消費」することによって、部分系のエントロピーを減らす操作も可能となる。このように「パラドックス」は情報熱力学の成立として解決をみたが、理論上・応用上の興味から拡張が進められている。特に系が外部からの操作なしに自律的に情報をやり取りするような状況への拡張 [2] は生体内情報処理コストの解析等に応用可能であると期待されている。

Onsager によって確立された線形非平衡熱力学 [3] によれば、系の熱力学は系にかかる熱力学的力 (温度差, 電位差など) および共役な流れ (熱流, 電流など) で記述できる。例えば温度差と電位差が掛かっている系において、温度差による電流の駆動、及び電位差による熱流の駆動が起きることはゼーベック効果、ペルティエ効果などとして知られているが、それらの交差係数、つまり一方の熱力学的力による他方の流れの線形応答係数が等しいことが理論的に証明できる。これは熱力学的力に依らず普遍的に成り立ち、Onsager の相反関係と呼ぶ。このような線形非平衡熱力学の枠組みを、情報を含む形に拡張することは未解決の問題であった。我々は情報駆動力とよばれる量が、熱力学的力と同等の役割を果たすことを一般的な設定で理論的に証明した。特に、情報駆動力および従来の熱力学的力によって駆動される系について、拡張された Onsager の相反関係が成立することを示した。これにより我々は情報処理過程の線形非平衡熱力学というべき新たな理論を構築した [4]。PS では証明手法の概略等を適宜説明したい。

[1] JMR. Parrondo, JM. Horowitz, T. Sagawa, Nature Physics 17, 045012(2015).

[2] JM. Horowitz, M. Esposito, Phys. Rev. X 4, 031015 (2014).

[3] L. Onsager, Phys. Rev. 37, 405 (1931).

[4] <http://arxiv.org/abs/1604.07988>

擬似的再帰を用いた大局結合写像の不安定性解析

東京工業大学 理学院
清水 太郎, 竹内 一将

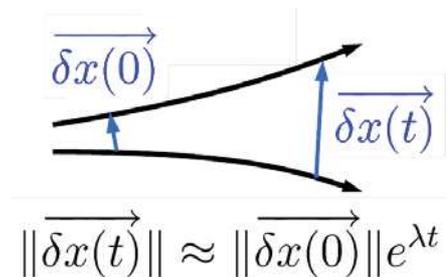
Measurement of the Lyapunov exponents of GCM with pseudo recurrence

Department of Physics, Tokyo Institute of Technology

Taro Shimizu and Kazumasa A. Takeuchi

Keywords: カオス, 非線形力学系, Chaos, Nonlinear System

カオスとは、決定論的な系であるが初期条件鋭敏性を持つために、長期的な挙動の振る舞いを予測することが困難である現象である。定量的には次のように定義される。初期条件として、ある点 $x(0)$ とその点に対する摂動 $\delta x(0)$ を与える。時間発展したこれら 2 点間の距離は指数関数的に増大する。初期条件に対する摂動の指数関数的な成長率を Lyapunov 指数と定義する。したがって、系がカオスであるとは Lyapunov 指数が正であると言い換えることができる。カオスはこれまでに天体の運動、気象モデル、蛇口から滴る水の周期など、様々な分野において理論と実験の両面からその存在が確認されている。これまでに、少数自由度カオス実験系においては Lyapunov 指数の測定手法が確立されている。一例として、Sano-Sawada アルゴリズム[1]が挙げられる。このアルゴリズムは、対象となる系から得られた時系列信号を用いて摂動を構成し、その系の Lyapunov 指数を算出する方法である。一方、大自由度カオス実験系では大自由度に起因する困難があるために、現在までに有用な測定方法は確立されていない。



$$\|\delta x(t)\| \approx \|\delta x(0)\| e^{\lambda t}$$

本研究では、大自由度カオス実験系での Lyapunov 指数測定の手法開発の準備として、数値シミュレーションで大自由度カオス系の Lyapunov 指数を算出する手法開発に取り組んだ。まず、Lyapunov 指数を算出する既存手法を理解するために、Sano-Sawada アルゴリズムを実装し、少数自由度カオス系として知られている Henon 写像と Lorenz 系に適用した。次に、大自由度カオス系の不安定性解析に向けて、本研究で提唱する擬似的な再帰を導入し、大自由度カオス系として知られている大域結合写像(GCM)[2]に対して適用した。

[1] M. Sano and Y. Sawada, Phys. Rev. Lett {55}, 1082 (1985).

[2] K. Kaneko, Physica D {86}, 158 (1995).

液晶電気対流による半空間における界面ゆらぎの研究

東京工業大学 理学院
伊藤 康文, 竹内 一将

Approach to Half-Space Surface Growth Problem by Liquid Crystal Turbulence

Department of Physics, Tokyo Institute of Technology
Yasufumi Ito and Kazumasa A. Takeuchi

Keywords: 非平衡物理, 界面成長, KPZ, Non-equilibrium, Surface Growth

成長する界面の問題は非平衡統計物理学の重要な問題のひとつであり、界面が成長するという現象は身の回りにありふれている。この成長界面はしばしばゆらぎをとめない、スケーリング指数によって特徴づけられている。このスケーリング指数によって界面は普遍クラスに分類される。界面成長を記述する重要な普遍クラスとして Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) 普遍クラスがある。これは 1986 年に M. Kardar、G. Parisi、Y.-C. Zhang の 3 人によって提唱された KPZ 方程式から得られるスケーリング指数を共有するクラスである [1]。KPZ クラスに属する 1+1 次元の実験系はいくつか報告されており、液晶乱流における界面の成長も KPZ クラスに属することが知られている [2]。

近年 KPZ クラスの理解が著しく進んでおり、その重要性が高まっている。KPZ クラスの界面はその形状によって異なるゆらぎの分布関数や空間相関関数に従うことが理論的に示され、液晶乱流系によって実験的に確かめられた [2]。これによって KPZ クラスはサブクラス構造を持つことが明らかとなった。しかし、現在知られている結果は円形や直線的な界面のように比較的単純な形状に対して得られたものである。理論的には、界面を半空間に限定して境界条件を導入した問題も考えられている。実験系で半空間を実現することはできないが、我々は液晶乱流系でそれに近い状況を構築した。

我々はフォトリソグラフィ技術を応用して電圧を印加する領域を 2 つに分け、成長速度の異なる 2 つの接触した界面を作り出した(図 1)。本ポスターでは、実験によって得られた界面の平均プロフィールやゆらぎの性質について紹介する。

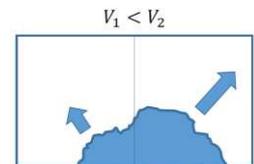


図 1 異なる速度で成長する接触した 2 つの界面。

V_1 と V_2 は 2 領域に印加した電圧を表す。

[1] M. Kardar, G. Parisi and Y.-C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 889 (1986).

[2] K. A. Takeuchi and M. Sano, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 230601 (2010); *J. Stat. Phys.* **147**, 853 (2012).

記号力学系における Hofbauer ポテンシャルの相転移

慶應義塾大学

篠田 万穂

Phase transitions of Hofbauer potentials on a symbolic dynamical system.

Keio University

Mao SHINODA

Keywords : カオス力学系、エルゴード理論、熱力学形式、相転移

本発表では、基本的なカオス力学系である記号力学系における複数の平衡状態の共存、つまり相転移の具体例 [H] を紹介する。

記号力学系は記号 $0, 1, \dots, n$ の無限列の集合 $\Sigma_n^+ = \{0, 1, \dots, n\}^{\mathbb{N}}$ と shift 写像 $\sigma : \Sigma_n^+ \ni \{x_i\}_{i=0}^\infty \mapsto \{x_{i+1}\}_{i=0}^\infty \in \Sigma_n^+$ により定まるカオス力学系である。カオス力学系の研究において、力学系の挙動を文字列に記号化する、つまり記号力学系に帰着させることは基本的な研究方法であり、記号化によって力学系の本質的な性質を失わず、文字列という扱いが容易な対象で研究を行うことが可能である。

記号力学系上の連続関数（以下ポテンシャル）を一次元格子上の粒子系のエネルギーと捉え、統計物理学との類似による概念を導入するという画期的な着想により、カオス力学系の確率論的振る舞いの解析が進展した。平衡状態の概念はカオス力学系の確率論的振る舞いを解析する上で重要であり、ポテンシャル ϕ に対する自由エネルギー $F(\mu) = -(h_\mu + \int \phi d\mu)$ を最小にする σ 不変確率測度 μ として定義される。

記号力学系上のポテンシャルがヘルダー連続性という良い連続性をもつ場合、平衡状態の一意性が従うことが知られている [B]。一方で、相転移を持つポテンシャルの解析はまだ十分になされておらず、具体例も乏しい状況である。本発表で扱う Hofbauer による具体例は統計物理学に由来した相転移の数学モデルである。

参考文献

[B] Rufus Bowen, Equilibrium States and the Ergodic Theory of Anosov Diffeomorphisms, Lecture Notes in Mathematics vol. 470, Springer, Berlin, 1975.

[H] Franz Hofbauer, Examples for the Nonuniqueness of the Equilibrium States, Transactions of the American Mathematical Society vol. 228, 1977, pp.223-241.

ジャミング相における斥力ベクトルスピン模型のシア応答

阪大理^{A,B}, 阪大サイバー^B光元亨汰^A, 吉野元^B

Shear response of a repulsive vector spin model in the jammed phase

*School of science Osaka Univ.^A, Cybermedia Center Osaka Univ.^B*Kota Mitsumoto^A and Hajime Yoshino^B

Keywords : ガラス, ジャミング, 古典スピン, glass, jamming, classical spin

これまでのガラス・ジャミング転移の理論研究は主として、粒子の並進自由度について行われてきた。しかし、現実の多くのガラス・ジャミング転移の問題においては、並進自由度だけでなく回転自由度の存在も重要であると考えられる。そこで、我々は回転自由度のジャミング転移について調べるために、有効的な2次元XYスピン模型を構成し、数値シミュレーションを行った。

モデル: 2次元正方格子の格子点 ($i = 1, 2, \dots, L^2$) に置かれたXYスピンが、次のようなハミルトニアンに従うとする。

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} V(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) \quad V(x) = \begin{cases} \epsilon(D-x)^2 & x \geq D \\ 0 & x \leq D \end{cases}$$

ここで $\langle ij \rangle$ の和は全ての最近接スピンについてとることとする。我々はこの系において D を小さくするとジャミング転移が生じること、さらにこの転移がコンタクトのパーコレーションに関係していることを発見した。

また、並進自由度のジャミング系においては、平均場理論から剛性率が階層化されることが予想されており [1]、実際に、3次元ソフトポテンシャル球系における数値シミュレーションにおいて圧縮とシアの非可換性が生じ、2つの剛性率 μ_{FC} (シア→圧縮), μ_{ZFC} (圧縮→シア) が観測された [2]。そこで我々は、この系においても同様に2つの剛性率が存在する可能性を考え、計算した結果、確かに圧縮とシアが非可換になり、2つの剛性率が存在することを見いだした。

[1]Yoshino, Hajime, and Francesco Zamponi. "Shear modulus of glasses: Results from the full replica-symmetry-breaking solution." *Physical Review E* 90.2 (2014): 022302.

[2]Nakayama Daiju, Hajime Yoshino, and Francesco Zamponi. "Protocol-dependent shear modulus of amorphous solids." arXiv preprint arXiv:1512.06544 (2015).

ゆらぎの定理と摩擦

東京大学大学院総合文化研究科広域科学専攻関連基礎科学系^A

大窪健児^A, 金子邦彦^A

Fluctuation Theorem and Friction

*Department of Basic Science, School of Arts and Sciences,
University of Tokyo^A*

Kenji Okubo^A and Kunihiko Kaneko^A

Keywords: 情報熱力学, ゆらぎの定理, 摩擦, Informational Thermodynamics, Fluctuation Theorem, Friction

「静止摩擦は動摩擦より大きい」という経験則は高校物理でも登場するほど初歩的なものであるが、これについての統一的な理論は未だに得られていない。その理由として、静止摩擦は実際には流動的な現象であることが挙げられる。たとえば、静止摩擦が接触を開始してからの時間に依存する ([1])、接触面の初等幾何的な性質に依存し最大摩擦力を超えても非一様にすべりが開始される ([2])、静止しているように見えるときでもわずかに動いている ([3]) といった静止摩擦の動的な性質が報告されている。

この発表では、動摩擦における RSF 則 ([4]、[5])、

$$\mu = \mu_* + a \log \frac{V}{V_*} + b \log \frac{\theta}{\theta_*} \quad (1)$$

(a 、 b は定数。 μ は静止摩擦係数。 V は速さ。 θ は界面の状態。 $*$ は参照結果での値を表す。) を参考に、ゆらぎの定理 ([6]) などをはじめとした情報熱力学の手法を用いて静止摩擦の動的な性質の解明と動摩擦との関係について考察した結果を紹介したい。

[1] DIETERICH J, KILGORE B. DIRECT OBSERVATION OF FRICTIONAL CONTACTS - NEW INSIGHTS FOR STATE-DEPENDENT PROPERTIES. PURE AND APPLIED GEOPHYSICS. 1994;143(1-3):283-302.

[2] Ben-David O, Fineberg J. Static Friction Coefficient Is Not a Material Constant. PHYSICAL REVIEW LETTERS. 2011;106(25):254301.

[3] Popov VL, Starcevic J, Filippov AE. Influence of Ultrasonic In-Plane Oscillations on Static and Sliding Friction and Intrinsic Length Scale of Dry Friction Processes. Tribology Letters. 2010;39(1):25-30.

[4] Dieterich, J. H., 1979. Modeling of Rock Friction 1. Experimental Results and Constitutive Equations, Journal of Geophysical Research, 84 (B5), 2161-2168.

[5] Ruina, A. L., 1983. Slip instability and state variable friction laws, Journal of Geophysical Research, 88 (B12), 10359-10370.

[6] Jarzynski C. Nonequilibrium equality for free energy differences. PHYSICAL REVIEW LETTERS. 1997;78(14):2690-3.

[7] 波多野恭弘 東京大学大学院「関連基礎科学特殊講 IV」授業スライド

はねかえり係数 0 球のミクロからの構成

京都大学理学研究科

谷口柗平, 佐々真一

Construction of the ball whose coefficient of restitution is zero from microscopic

Kyoto University

Shuhei Taniguchi, Shin-ichi Sasa

Keywords: はね返り係数, coefficient of restitution

次のようなおもちゃが現実存在している。見た目はスーパーボールのようだが、地面に落とすとほとんど弾まない。それは落とした前後で大きな変形をしているわけではなく、何度繰り返しても同じような現象が見られる。この現象は非常に不思議だ。そして、この現象をミクロから理解することが本研究のモチベーションである。しかし、最初からこの現象をミクロから理解するのは非常に難しい。したがって、その第一歩としてはねかえり係数が 0 であるような物体をミクロから構成することが本研究の目的である。

モデルのはねかえり係数を数値実験で測定したが、設定は以下の通りである。まずモデルとして粒子系のハミルトニアンを与える。各粒子にマクスウェル分布で初速度を与え、時間発展させ、十分待つことで平衡状態を用意する。そして、得られた平衡状態の系全体に対し初速度 V_{in} を与え、系を壁に衝突させる。その際、壁は調和ポテンシャルで表現する。そして衝突後の系の速度 V_{out} を求める。実際 V_{out} は粒子数 N とともに減衰するので、 N を変えながら V_{out} を求め、外挿した値 V_{out}^* をマクロ極限での衝突後の速度とする。したがって初速度 V_{in} におけるはねかえり係数 e は $e \equiv V_{out}^*/V_{in}$ で得られる。

いくつかのモデルを考えて、実際にはねかえり係数を測定した。はねかえり係数 0 が実現する模型があるかどうかは当日に紹介したい。

転送行列法によるスケーリング次元の数値的研究

東大物性研

Numerical Study of Scaling Dimensions by Transfer Matrix Method

ISSP, University of Tokyo

H. Ochi and N. Kawashima

Keywords: 統計力学、数値計算、転送行列法、臨界現象

臨界現象の理解には繰り込み群や共形場理論といった場の理論が有効であることが知られている。一方で数値計算により臨界現象を理解しようということも行われている。場の理論では扱う系は連続であるが、数値計算で扱う系は格子系であり離散的であるという違いがある。この違いは特に近距離で大きく見えることが予想される。また、格子系の局所的な物理量と場の理論のオペレータがどの程度対応するかは明らかではない。これを明らかにするためには相関関数の近距離の振る舞いを精度よく調べる必要がある。そこで本研究ではできるだけ精度のよい計算手法として転送行列法が有効であると考え、解析的にわかっている二次元イジング模型について計算した。その結果、イジング模型の局所的物理量は場の理論のプライマリオペレータとよく一致することを確認した。また、場の理論で確立している演算子積展開について調べた。その結果、プライマリオペレータのスケーリング次元から 2 だけ大きい冪で減衰する高次の項の存在を数値的に確認した。これは場の理論の演算子積展開で現れるプライマリオペレータの微分に対応すると考えられる。

Generalized Gibbs Ensemble in Nonintegrable Systems with an Extensive Number of Local Symmetries

東大理^A, 東大物性研^B, 理研^C
濱崎立資^A, 池田達彦^B, 上田正仁^{A,C}

Generalized Gibbs Ensemble in Nonintegrable Systems with an Extensive Number of Local Symmetries

*Department of Physics, University of Tokyo^A,
Institute for Solid State Physics, University of Tokyo^B,
RIKEN Center for Emergent Matter Science (CEMS)^C*
Ryusuke Hamazaki^A, Tatsuhiko N. Ikeda^B and Masahito Ueda^{A,C}

Keywords : 孤立量子系, 熱平衡化, 一般化 Gibbs 分布, 局所対称性

近年の冷却原子などを用いた実験技術の発展により、外界からほとんど孤立した量子系が実現されるようになった。それに触発され、ユニタリー発展に従う非平衡ダイナミクスの研究が理論的にも著しく進展している。最も重要なテーマの一つとして、非平衡な系がカノニカルアンサンブルで記述される状態に緩和するかどうか、という熱平衡化の問題がある。エネルギーのみが保存する非可積分系では、eigenstate thermalization hypothesis (ETH) と呼ばれる機構によってカノニカルアンサンブルが正当化されると期待されている。一方、可積分系においては、多くの非自明な保存量の存在により、定常状態はカノニカルアンサンブルでなく、一般化 Gibbs 分布 (GGE) と呼ばれる分布に緩和すると期待されている。しかし、どれほどの個数の保存量が存在すれば GGE を用いる必要があるかということを実験的に示した研究は存在しなかった。

このポスターでは、示量的な（系に比例した個数の）局所対称性があれば、非可積分系であっても定常状態の記述に GGE が必要であることを明らかにした。具体的には、ハードコアボゾンからなる非可積分系に、示量的な局所的な \mathbb{Z}_2 対称性を持たせることで多くの保存量を課し、そのダイナミクスを数値的に調べた。結果として、定常状態での局所物理量の期待値が、カノニカルアンサンブルでなく、GGE で記述されることを示した。さらに、この場合は全スペクトルに関する ETH は成り立たないが、対称性セクターごとに見ると ETH が成り立っていることを発見した。次に、大域的な \mathbb{Z}_2 対称性を一つ持つモデル、また系のサイズに依存しない個数の局所的 \mathbb{Z}_2 対称性を持つモデルについても同様な解析を行った。その結果、このモデルの定常状態は通常のカノニカルアンサンブルで記述され、GGE を用いる必要がないことが明らかになった [1]。

[1] R.H., T. N. Ikeda and M. Ueda, Phys. Rev. E **93**, 032116 (2016).

森 - 中島 - Zwanzig の射影演算子法

東京大学大学院理学系研究科物理学専攻藤堂研究室^A

石川文啓^A

Review of Mori-Zwanzig Projection Method

Todo Group, Department of Physics, University of Tokyo^A

Fumihiko Ishikawa^A

Keywords : 非平衡統計力学, 射影演算子法, ランジュバン方程式

統計力学、物性物理学でよく知られている揺動散逸定理とは、注目する系あるいは変数の散逸と系に加えられる揺動との間の関係式である。この揺動散逸定理を再現する最も簡単なモデルはランジュバン方程式であり、ランダム変数を含む確率微分方程式として与えられる。ランジュバン方程式は、全系における方程式を注目する系あるいは巨視変数とそれ以外の効果へと分離し粗視化した方程式と解釈できる。ランジュバン方程式は現象論的方程式として与えられたが、微視的描像から系統的に導出する方法が存在する。この方法は厳密な正準方程式やリウヴィル方程式を、注目する系あるいは変数とそれ以外にある種の射影演算子を用いて project out することでランジュバン方程式を導出することから、発見者の名前を冠し森 - Zwanzig の射影演算子法と呼ばれている [1][2][3]。森らが開発した射影演算子法の利点は、どのような巨視変数に置いてもランジュバン方程式を構成できることであり、これは系統的に粗視化方程式を導出できることを意味する。また、ランジュバン方程式における各項の微視的な由来が明確であるため、拡張性に優れており、量子輸送現象、化学分野など広い分野で利用されている。本発表ではこの射影演算子法について紹介する。

[1] Robert Zwanzig, J. Chem. Phys. 33, 1338 (1960).

[2] Sadao Nakajima, Prog. Theor. Phys. 20, 948-959 (1958).

[3] Hazime Mori, Prog. Theor. Phys. 33, 423-455 (1965).

逆イジング問題

東京大学理学系研究科物理学専攻^A島垣凱^A**Keywords : アルゴリズム、逆問題、最尤推定、機械学習**

イジングモデルは、二つの配位をとる確率変数同士が相互作用するモデルである。きわめてシンプルなモデルではあるが、相転移現象を記述できることが知られている。と言ったことは夏の学校に参加されている皆様に言うまでもないはずである。しかしながらスピン変数の配位が複数与えられた下で、その配位を生成するパラメータ (結合定数や温度) を求める問題設定をどれだけ多くの人が見聞きした事があるだろうか？すなわち問題は以下である。

Find \mathbf{h} and \mathbf{J} such that

$$\text{maximize } p(\{s\}_{s \in \mathcal{D}} | \mathbf{h}, \mathbf{J}), \quad \text{for } \mathbf{h} \in \mathbb{R}^d, \mathbf{J} \in \mathbb{R}^{d \times d} \quad (1)$$

$$p(\{s\}_{s \in \mathcal{D}} | \mathbf{h}, \mathbf{J}) := \exp\left\{\sum_{i=1}^d h_i s_i + \sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j - \psi\right\} \quad (2)$$

ただし、 $s \in \{-1, +1\}^d$ は d 次元のスピン配位の一つであるとし、 \mathcal{D} は (d 格子点ある) 確率標本に対応し、その標本数は $|\mathcal{D}|$ としている。 \mathbf{h}, \mathbf{J} はそれぞれ外場、結合定数である。そして ψ は式 (1) が確率密度になるための規格化因子である。

首尾よくパラメータ \mathbf{h}, \mathbf{J} を推定すれば、各スピン変数が受ける外場の強度や、スピン変数間の相互作用が分かることになる。ここで問題となるのが規格化因子 ψ である。 ψ は統計物理学的には自由エネルギーに相当し、自由エネルギーが分かれば、統計量が直ちに求められる。分配関数を厳密に求める事はごく限られたモデルのみである。そして本問題のようなスピン変数ごとに異なる結合定数、外場の場合は厳密に求めることは絶望的に難しい。そこで、計算機の力を借りて計算しようとするのだが、分配関数の計算には全ての配位の和を取らなければならない。わずか $d = 30 \times 30$ の正方格子常に置かれたスピンの場合であっても 10^9 の計算量が必要となる。そこで何らかの近似計算が必要になるわけである。逆イジング問題を数値的に解くアルゴリズムとして、平均場近似、ベータ近似などの物理学に馴染み深い手法から、Boltzmann Machine と呼ばれる機械学習の手法や近年提案された、遷移確率の流量を最小にする手法である Minimum Probability Flow[1] を講演では扱う。

ところで、イジングモデルのパラメータを推定するという問題設定はどこにも有用性が無いように感じるかもしれない。近年になり電気生理学分野において、多数の神経細胞が密集する検体の同時測定が可能となった。神経細胞間に生じる相互作用の解明に近づく測定技術が得られた訳であるが、パラメータ数に応じて増大する計算量が依然として問題視とされている。神経細胞の状態は発火、非発火の二つの特徴的な状態になることが知られている。そこでこの 2 状態をイジングモデルに対応させ、神経細胞間の相互作用の様子を推定に適用することができる [2]。物理学の問題を通して情報科学や生命科学の問題を垣間見れることは面白い。

[1] E.Schneidman, M.J.Berry, R.Segev, and W.Bialek, Nature 440, 1007 (2006)

[2] Sohl-Dickstein, J.: Persistent minimum probability flow. Tech. rep., Redwood Centre for Theoretical Neuroscience (2011)

十分統計量を操るデーモン —過ぎた事は忘れよう—

東京大学総合文化研究科 相関基礎科学系
松本拓巳

A demon who handles sufficient statistics
—Let's forget about the past—
Department of basic science, The University of Tokyo
Takumi Matsumoto

Keywords : 情報熱力学, 非平衡統計力学, マクスウェルの悪魔, 制御理論,
Information thermodynamics, Non-equilibrium statistical mechanics,
Maxwell's Demons, Control theory

測定によってシステムに関する“情報”を得て, その“情報”を使用することによってシステムから仕事を獲得する. そのような測定とフィードバックを行う存在を「デーモン」という. そのような情報処理過程を記述する一般化された熱力学が「情報熱力学」である [1].

また, 雑音の入った観測値の時系列からシステムの真の値を推定し, 制御することを目指した理論体系に「制御理論」がある. 例えばカルマンフィルタや線形レギュレータはそれぞれ, 線形システムにおける“最適推定”, “最適制御”の方法として知られている.

このように, 情報熱力学と制御理論は測定や制御といった情報処理の観点から見れば非常に似た構造を有している. しかし, これまでこれらの理論の間関係は不明確なままであった. そこで我々は

制御理論の「最適」とは情報熱力学では何を意味するのか?

といった点に注目し, その関係は統計学における「十分統計量」という概念の下で統一的理解できることを明らかにした. この結果は定常系や線形システムの解析に限定されていた先行研究 [2][3] の結果を含み, 非定常系や非線形システムにも当てはまる非常に広いクラスに対するものである.

本発表では情報熱力学と制御理論を紹介した後, システムに関する情報を記憶するメモリの値が「十分統計量」であるときに成立する「情報熱力学で現れる各種情報量の間の特殊な関係」について述べる.

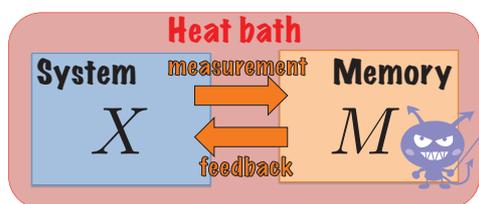


図 1: 情報熱力学が扱うセットアップ

[1]J. M. R. Parrondo, J. M. Horowitz and T. Sagawa, Nature Phys. **11**, 13 (2015). [2]J. M. Horowitz and H. Sandberg, New J. Phys. **16**, 125007 (2014). [3]D. Hartich, A. C. Barato and U. Seifert, Phys. Rev. E **93** 022116 (2016).

普通の男子大学院生がいじぐやってみた

東京大学大学院 総合文化研究科
金子 和哉

Quantum renormalization group and ground-state fidelity
approach to the Ising model
The University of Tokyo, Department of Basic Science
Kazuya Kaneko

Keywords : 未解決問題, 統計力学, 臨界現象, Ising 病

問. 次の □に入る数字は何か?

1	2	3	4	5	...
なし	1	?	0.5	0.5	...

Wikipedia[1]によると、0.629971らしいです。私が計算した値は0.6278です。皆さんはいくつだと思いますか？

あなたの答え： _____

今回の私の計算は、文献 [2] の基底状態の Fidelity の計算にくりこみ群を応用する手法と文献 [3] の Ising 模型に対するくりこみ群の方法を組みあせて得られたものです。2日程度で100行ほどのコードを書いて、ちょこちょこっと数値計算をしたところ3次元 Ising 模型の臨界指数 ν の値が先行研究に近い値が得られたので、その結果について発表をしたと思います。実はこの方法で何故上手く臨界指数 ν の値が計算できているのかは分かっていません。臨界点の値や他の臨界指数については上手く求めることができません。そこらへの機構を物理的に考察できれば、面白いことが分かるのかもしれないね。

最後に一言、Ising 病には罹らない方がいいと思います。

参考文献

- [1] https://en.wikipedia.org/wiki/Ising_critical_exponents
- [2] A. Langari and A. T. Rezakhani, *New J. Phys.* **14**, 053014 (2012)
- [3] C. Monthus, *J. Stat. Mech.* P01023 (2015).

触媒反応ネットワークと細胞集団の統計則

東京大学総合文化
佐藤匠哉

Chemical reaction network and statistical's law of population of
cell

University of Tokyo
Takuya Sato

Keywords : 生物物理、ネットワーク、触媒反応ネットワーク

ここ 10 年の細胞の観測技術の進展は素晴らしく、長時間に及び高い精度の観測を行うことができるようになってきている。特に、同じ遺伝情報を持つ生物種に対し、様々な量の細胞集団内でのゆらぎや、環境条件を変化させた時の応答の違いなどが精力的に調べられている。このように実験データが大量に蓄積されている一方で、それらを広く説明できるような細胞の理論モデルというものは存在していない。今回紹介する触媒反応ネットワークは細胞の統計則を説明できると期待されているモデルの一つで、古くは Eigen の Hypercycle¹などで調べられたものの拡張となっている。基本的な仮定としては細胞内に N 種の反応を触媒するような化学種が存在しそれらが反応し、ある条件で分裂するのを繰り返すというものである。現段階では何を紹介するかは決まっていないが、細胞の集団が示す統計則について実験での結果を交えつつ紹介するつもりである。

[1] Eigen, Manfred, and Peter Schuster. "The hypercycle." *Naturwissenschaften* 65.1 (1978): 7-41.

[2] Furusawa, Chikara, and Kunihiko Kaneko. "Adaptation to optimal cell growth through self-organized criticality." *Physical review letters* 108.20 (2012): 208103.

[3] Furusawa, Chikara, and Kunihiko Kaneko. "Zipf's law in gene expression." *Physical review letters* 90.8 (2003): 088102.

食物連鎖の力学系

お茶の水女子大学大学院人間文化創成科学研究科博士前期課程理学専攻物理科学コース1年
野澤恵理花

A Dynamical System for the Food Chain

Department of Physics, Graduate School of Humanities and Sciences, Ochanomizu University
Erika Nozawa

世代が重ならず、完全に入れ替わるような複数種の生物（例えば、一年草、バッタ、カマキリなど）による食物連鎖^[1]の力学系を構築したい（図1）。

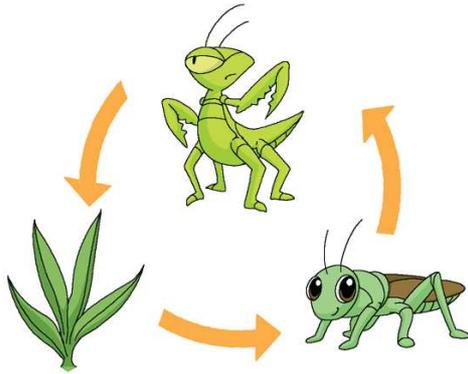


図1: 食物連鎖。一年草をバッタが食べ、バッタをカマキリが食べ、カマキリの死骸を一年草が栄養とする。

そのような力学系は、世代が離散的（離散世代）であることから、離散世代 n における M 種の個体群^[1]の個体群密度 x_i^n ($i = 1, 2, \dots, M$) を状態変数にとるような離散力学系となるであろう。そこで、一般化ロトカ=ヴォルテラ方程式^[1]を差分化し、個体群間の相互作用に、 i 番目（同一）の個体群からの阻害効果（餌や雌の奪い合いなど）、 $i+1$ 番目（天敵）の個体群からの阻害効果（天敵による捕食）、 $i-1$ 番目（餌）の個体群からの増進効果（餌の摂取）を仮定することで、食物連鎖の力学系、

$$x_i^{n+1} = \alpha(1 - x_i^n - \beta x_{i+1}^n + \beta x_{i-1}^n)x_i^n \quad (1)$$

を導いた。ここで、 α は繁殖率を表し、 β は他の個体群 ($i \pm 1$ 番目の個体群) からの影響率の大きさを表す。この力学系において、種の数 M を $M = 3$ 種とし、繁殖率 α を分岐パラメータとし、影響率の大きさ β を3通り ($\beta = 1, 0.5, 0.05$) として、以下を調べた。

- 固定点とその安定性
- 分岐図と最大リアプノフ指数^[2]

- 時系列と軌道の様子
- カオス的遍歴^{[3][4]}

これらの結果から、種の数 M がわずか3種である食物連鎖の力学系においてさえも、固定点、周期点、準周期点、カオス（図2(左)）、準アトラクターなどの、多種多様なアトラクターが存在することが分かった。特に、影響率の大きさ β を $\beta = 0.05$ とした、生態ピラミッド^[1]の栄養段階上位に位置する個体群において、個体群同士の協調と裏切りによって生み出されたと思われる（戦略的な）カオス的遍歴（図2(右)）が観測された。

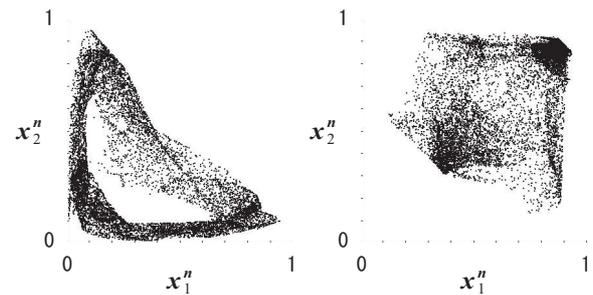


図2: 軌道の様子。(左) カオスのアトラクター ($\alpha = 2.11$, $\beta = 1$)、(右) カオス的遍歴のアトラクター ($\alpha = 3.568$, $\beta = 0.05$)。横軸は一年草の個体群密度 x_1^n であり、縦軸はバッタの個体群密度 x_2^n である。初期状態 $(x_1^0, x_2^0, x_3^0) = (0.7, 0.4, 0.2)$ とし、軌道 $\{(x_1^{10000}, x_2^{10000}), \dots, (x_1^{20000}, x_2^{20000})\}$ をプロット。

参考文献

- [1] 日本生態学会編, "生態学入門 (第2版)", 東京化学同人 (2012).
- [2] 合原一幸編, "カオス", サイエンス社 (1990).
- [3] 金子邦彦, 津田一郎, "複雑系双書1 複雑系のカオスのシナリオ", 朝倉書店 (1996).
- [4] Ichiro Tsuda, Scholarpedia, 8(1):4459 (2013).

力学系モデルにおける多様性の形成

東京大学大学院総合文化研究科

西浦 直人

Biodiversity in dynamical systems

Department of Basic Science University of Tokyo

Naoto Nishiura

Keywords : 力学系, 種分化, 多様性, 表現型可塑性

生命において多様性は細胞から生態系まであらゆる階層にみられる性質である。生物多様性の仕組みを解き明かすことは進化生物学や生態学が目指す大きなゴールとなっている。生物を増殖する系と見たとき、生命を維持する上で多様性は生命システムの原因と結果のどちらであるのかに決定的な答えは出ていない。生命を構成する多種の要素（細胞内の化学成分、細胞、個体等）が安定的に共存するには最適者が他の要素を圧倒しない（ひとり勝ちを許さない）ような仕組みが必要とされ、このような観点から生態学では多様性と安定性の議論が長らく行われてきた [1]。また、近年、表現系可塑性（生物が発生過程において同一遺伝子から多様な表現系を発現する能力）と多様性や種分化の関係が注目されている [2]。

生命という多数の状態を含む系を扱う物理学的枠組みとして状態空間上の時間発展を記述する力学系によるアプローチがある。非線形素子を組み合わせた結合力学系研究の発展によって安定状態が要素間の相互作用により不安定化し複数の安定状態へと移行するような現象が様々な系で見つかった [3][4]。このような結合力学系を細胞に当てはめ細胞の多様性つまりは細胞分化機構の説明するモデルが提示されている [4][5][6]。

今回の発表では細胞や種の多様性の起源について発生過程において相互作用を取り入れた（表現系可塑性を有した）結合力学系の先行研究 [6] を踏まえて要素間相互作用を本質とする分化機構での多種共存状態を議論したい。

[1] R.M.May, *Nature* **238**, 413-414 (1972).

[2] D.W.Pfennig, *et al.*, *Trends Ecol Evol.* **25**, 459-467(2010).

[3] K.Kaneko and T.Yomo, *J.Theor.Biol.* **199**, 243 (1999).

[4] C.Furusawa and K.Kaneko, *J.Theor.* **209**,395(2001).

[5] N.Suzuki, C.Furusawa, and K.Kaneko *PLos ONE* **6**, e27232 (2011).

[6] Y.Goto and K.Kaneko, *Phys.Rev.E* **88**, 032718 (2013).