

日本物理学会誌

BUTSURI

第67巻 第5号(通巻 747号) ISSN 0029-0181

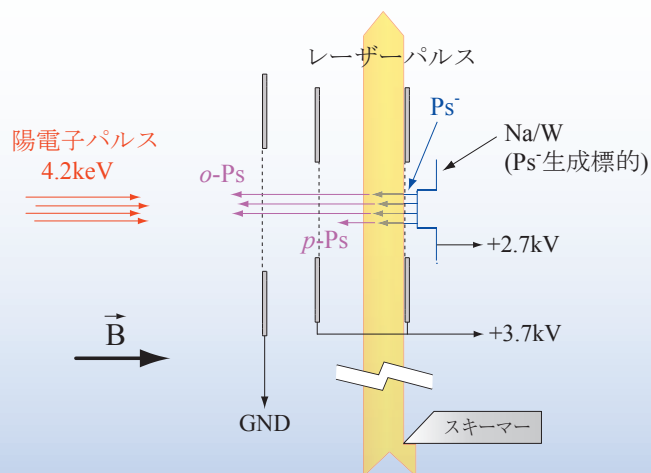
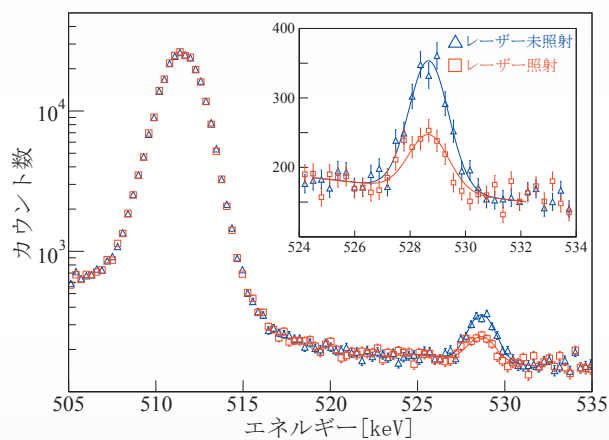
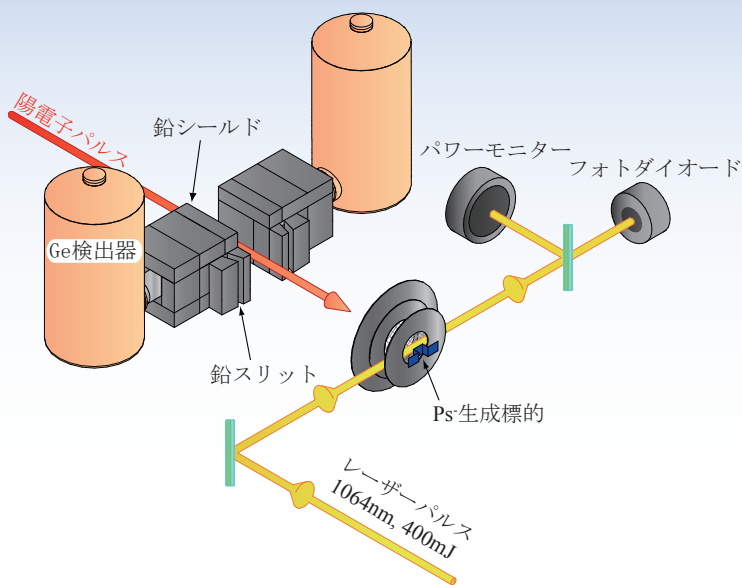
昭和30年 6月13日 第3種郵便物認可

平成24年 5月5日発行 毎月5日発行

2012 VOL. 67 NO.



5

- 和達三樹先生の思い出に寄せて
- ハッブルカルメートルか
- ソフトマターのマルチスケールシミュレーション
- 重いクォーク物理の進展



口絵：今月号の記事から	303
巻頭言 JPSJ編集委員長への就任にあたって	安藤恒也 305

最近のトピックス

荷電ボトモニウム Z_b の発見	保坂 淳 306
和達三樹先生の思い出に寄せて	Mark Ablowitz, Harvey Segur, 訳 矢嶋 徹 308
交流 ハッブルカルメートルか：宇宙膨張発見史をめぐる謎	須藤 靖 311
解説 ソフトマターのマルチスケールシミュレーション	谷口貴志, 山本量一 317
重いクォーク物理の進展—QCDと量子力学系ポテンシャルの対応—	駒 佳明, 駒 美保 325
最近の研究から 最も軽い三体束縛系—ポジトロニウム負イオンの研究—	長嶋泰之, 満汐孝治 333
物質中の繰り込み群による原子核の記述 	月山幸志郎 338
タンパク質系分子シミュレーションのための力場関数 	榮 慶丈, 依田隆夫, 杉田有治, 岡本祐幸 343

JPSJの最近の注目論文から 1月の編集委員会より	川畑有郷 350
学界ニュース 2011年 Rolf Wideroe 賞：黒川眞一氏	352
2011年 Gersh Budker 賞：矢野安重氏	352
2011年度朝日賞：香取秀俊氏	352
新著紹介	353

掲示板 ■人事公募 ■学術的会合 ■その他	355
行事予定	361

会告	■事務所移転のお知らせ ■会費納入のお願いと未納者への雑誌発送停止のお知らせ ■2012年秋季大会講演募集について ■朝日賞, 井上學術賞, サー・マーティン・ウッド賞, 島津賞, 本多記念賞, 本多フロンティア賞, 本多記念研究奨励賞, 松尾學術賞の各受賞候補者の推薦について(募集) ■松尾學術研究助成候補者の募集 ■平成24年度東レ科学技術賞および東レ科学技術研究助成の候補者推薦について ■2012年4月1日付新入会者	364
----	--	-----

本会記事	■日本物理学会第17回論文賞授賞論文	366
------	--------------------	-----

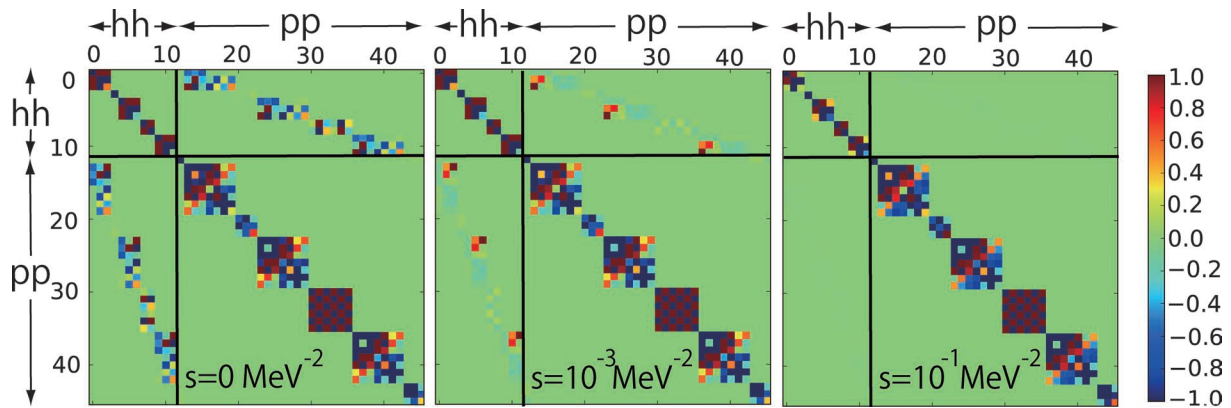
本会関係欧文誌目次	369
-----------	-----

表紙の説明 陽電子1個と電子2個の束縛状態であるポジトロニウム負イオンを生成し、レーザー光を照射することによって、光脱離を引き起こす実験に成功した。左上の図はその実験装置、左下は光脱離領域の詳細図である。図には示されていないが、陽電子のビームラインおよび光脱離領域は、全て超高真空チャンバー内に設置されている。ライナックで生成されるパルス状低速陽電子ビームを、ナトリウム蒸着したタングステン表面に入射してポジトロニウム負イオンを放出させ、電場で加速したのちに高出力パルスNd:YAGレーザーの基本波を照射した。右図は得られた γ 線エネルギースペクトルである。528 keVに見られるピークはポジトロニウム負イオンの生成に起因するものである。レーザー光の照射によって、このピークの強度が減衰しており、ポジトロニウム負イオンの光脱離が起こっていることを示している。詳細は本号に掲載されている長嶋泰之氏らの「最近の研究から」記事を参照のこと。

Graphic Page		303
Editorial		
<i>As the Editor-in-Chief of JPSJ</i>	Tsuneya Ando	305
<hr/>		
Recent Topics		
<i>Discovery of the Charged Botomonia Z_b</i>	Atsushi Hosaka	306
To the Memory of Professor Miki Wadati	Mark Ablowitz, Harvey Segur, transl. by Tetsu Yajima	308
Reviews		
<i>Hubble or Lemaître: Who Discovered the Expanding Universe?</i>	Yasushi Suto	311
<i>Multiscale Simulations for Soft Matters</i>	Takashi Taniguchi and Ryoichi Yamamoto	317
<i>A Progress in Heavy Quark Physics: Quantum Mechanical Heavy Quark Potential from QCD</i>	Yoshiaki Koma and Miho Koma	325
Current Topics		
<i>The Lightest Three Body System: Positronium Negative Ion</i>	Yasuyuki Nagashima and Koji Michishio	333
<i>In-Medium Similarity Renormalization Group for Nuclear Many-Body Problems</i>	Koshiroh Tsukiyama	338
<i>Force Field Functions for Molecular Simulations of Protein Systems</i>	Yoshitake Sakae, Takao Yoda, Yuji Sugita and Yuko Okamoto	343
<hr/>		
JPSJ Selected Papers in the Latest Issue	Arisato Kawabata	350
Physics Community News		
<i>2011 The Rolf Wideroe Prize: Shin-ichi Kurokawa</i>		352
<i>2011 The Gersh Budker Prize: Yasushige Yano</i>		352
<i>The Asahi Prize in 2011: Hidetoshi Katori</i>		352
Book Reviews		353
<hr/>		
Notice Board		355
<hr/>		
JPS Announcements		364
JPS News		366

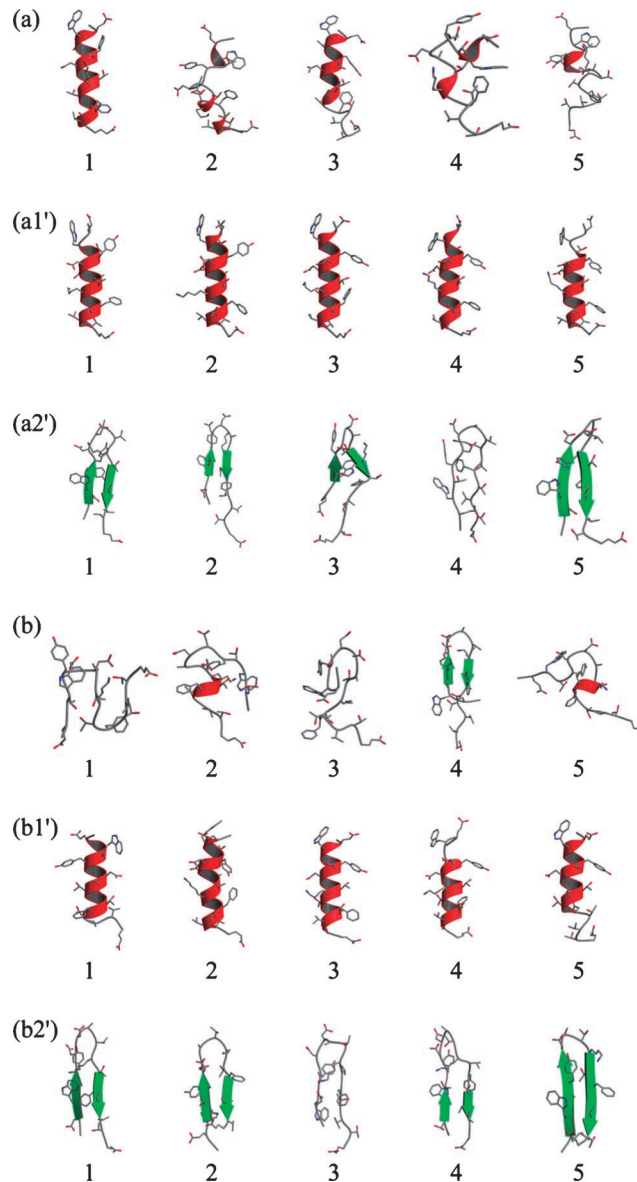
最近の研究から 「物質中の繰り込み群による原子核の記述」 p.338

核力に基づく原子核の第一原理計算に関する新しい方法を紹介する。原子核が有する閉殻構造に着目し、繰り込み群により核子多体問題を閉殻原子核とその周りのバレンス核子の問題に分離する。繰り込み群を自由空間ではなく核内で定義することで、高精度かつ効率的な第一原理計算を可能にした。理論の概要とベンチマーク計算の結果を説明する。



ハミルトニアン Γ の2体行列要素のフロー。角運動量が $J=0$ に組んだ行列要素のうち $\Gamma_{pp'p''}$, $\Gamma_{hh'h''}$, $\Gamma_{pp'hh'}$ 及びそのエルミート共役なもののみをプロットしている。それぞれの軸は2体状態 $|ij\rangle$ に対応している。繰り込み群のフローパラメータ s が増加するにしたがって、ハミルトニアンが $|pp'\rangle$, $|hh'\rangle$ に関してブロック対角になっていき、核子多体問題は大幅に単純化される。

タンパク質系の計算物理学的研究は、モンテカルロ法や分子動力学法に基づく分子シミュレーションによってなされる。これらの計算機シミュレーションを実行するには、系の有効ポテンシャルエネルギー（力場と呼ばれる）を与える必要がある。ここでは、これらの力場関数の妥当性を調べ、より精度の高い力場関数を開発する手法を紹介する。特に、2,000を超える数の力場パラメータの中で、主鎖のねじれエネルギー項のパラメータ数個だけを微調整することで、タンパク質の二次構造（ α ヘリックス構造や β シート構造など）の形成傾向性を制御できることが判明した。



G ペプチドの徐冷分子動力学シミュレーションで得られたポテンシャルエネルギーの低い5つの構造。力場関数は、(a) AMBER ff94, (a1') AMBER ff94 を α ヘリックス形成を促進するように改良したもの、(a2') AMBER ff94 を β シート形成を促進するように改良したもの、(b) AMBER ff96, (b1') AMBER ff96 を α ヘリックス形成を促進するように改良したもの、(b2') AMBER ff96 を β シート形成を促進するように改良したもの（許可を得て J. Phys. Soc. Jpn. 75 (2006) 054802 から転載）。

JPSJ 編集委員長への就任にあたって

安藤 恒也 (JPSJ 編集委員長)

JPSJ 専任編集委員長を4月から引き継ぐことになりました。これまで、斯波弘行氏、高山一氏、川畑有郷氏が務められてきた責任の重い仕事である。これまで、この歴代編集委員長や編集委員会の多大な努力の結果、JPSJの電子化に対応した各種サービスの充実、Papers of Editors' Choice, News and Comments, Invited Papers, Special Topics など、さまざまな新しい試みが功を奏して、JPSJは世界に誇れる学術雑誌となっている。

筆者もいろいろな雑誌のホームページから論文のダウンロードを行ってきた。その経験では、アメリカ物理学会 (APS) の Physical Review 等のホームページが最も充実していて、使い勝手も抜群である。JPSJはその次ぐらいで、便利さではトップクラスである。英国の Institute of Physics (IOP) や Elsevier のホームページにもたまにお世話になるが、IOPは特に使いにくい。最近、Natureとその関連雑誌、Scienceからダウンロードする機会が増えたが、その不便さのためかなり時間を無駄にする。

プロジェクト関連の評価委員会で、企業所属の委員の方が、評価基準の一つに、その分野の研究者が競って出版を目指す有名雑誌 (例えば Nature, Science 等) への出版論文数を挙げておられた。議論すべきは業績の内容であって、どの雑誌に発表されているかは問題ではないので、かなりびっくりした。グローバル化の波にのまれながら世界と競争している企業にとっては、競争・勝利することがすべてであり、成果発表でもそれが当然と考えられているようである。また、JPSJやJJAPのように世界的に認められている学術雑誌のない分野や学会が多く、学会活動の一環として、その学術雑誌に投稿するなどの発想はほとんどないのであろう。物理学では、これまでの仕事の上に新しい仕事が積み重なって、大きな一つ概念となることが多く、本来、研究成果の発表先まで競争する必要はない。物理学のこのような事情も例外的なのかもしれない。

とは言え、自分の書いた論文をなるべく多くの研究者に読んでもらうこと

が重要であることは間違いない。近頃は、ダウンロードできない文献を調べることがほとんどなくなり、したがって、すぐダウンロードできない雑誌に掲載することを避けるのは当然である。新しい学術雑誌が年々刊行され、購入費用の増大も相まって、大学の図書では購入雑誌を減らざるを得ない状況である。そのような中で、JPSJも世界のかなりの大学で直接ダウンロードできないようになっており、国内でもJPSJが見られない地方大学もある。

2010年のノーベル物理学賞の対象となったグラフェンを、以前から、カーボンナノチューブとの関係で研究し、その大部分を最もなじみ深いJPSJに出版していた。arXivも使っていないためもあり、しばらく前、関連研究者から「お前は論文を隠している」と言われたことがあった。これは所属する大学がJPSJを購入していないことと、大部分の論文をAPSの雑誌に出版し、特に流行のものはNature, Scienceへこぞって投稿することが常識化しているためである。国内の研究者ですら、JPSJに発表された論文を無視して、APS等の出版論文だけを引用することが多く、憤りを覚えることも多い。

最近、論文の被引用数やH指数 (論文を被引用数の多い方から並べたとき、被引用数が論文番号を超える論文数のこと) などが、評価の指標に用いられる。被引用数は分野とその現状に大きく依存するため、その数値を直接比較するのは危険であるが、少なくともその仕事の波及効果の大きさを表す指標としては使える。もちろん、被引用数と雑誌のインパクトファクター (IF) を掛けて数値化するなどは論外である。個人的には被引用数を雑誌のIFで割った数値の方が論文の価値の高さを表していると考えている。IFは過去2年間の論文の被引用数で決まるために、その雑誌に歴史的に重要な論文が多数出版されていても全く関係がない。学会が出版する学術雑誌の真の価値は、重要な論文が数多く定常的に出版されることであろう。

若い世代の研究者を中心として、論文をAPSの雑誌に発表する割合が増

えている。便利で世界中のほぼすべての研究者が見ることができるという魅力、そこに論文を出版すれば、その仲間になれるのではとの期待 (幻想?)、また、PRBは投稿料がタダ (JPSJはそうではなく、Open Accessにするにはさらに本論文で10万円必要) である、…、など、魅力が多い (魔力が強い) ので、当然のことではないかと思われる。これに対しては、日本物理学会を活動の拠点として、我が国の学術の発展を目指して研究しているのであれば、物理学会活動の重要な割合を占めるJPSJをより立てることに是非協力してほしいと願うしかないのである。研究成果は国内学会でまず評価され、それが積み重なって海外から認められるようになることが大半を占めている。論文賞だけではなく、学会として、会員の業績を評価・表彰する機会をさらに充実することが必要ではないかと思われる。

JPSJの地位を確固たるものに高めるためには、当然、論文の質の向上しかない。そのためには、学会に所属する研究者にその研究の自信作を投稿してもらえない。我が国の研究レベルは米国やヨーロッパと肩を並べる水準にあることは間違いないからである。JPSJのこれまでの努力により、投稿された論文が非常に迅速に出版されるようになった。実際、私もオンライン版が出版されるまでの時間が短いことを実感している。レターのように長さ制限を気にして、また質がバラバラな閲読報告への対策に時間を取られるのがいやなのも、JPSJを愛用してきた理由の一つである。この印刷の速さはほぼ限界まで近づいており、閲読の質をさらに向上することが最大の課題であろう。招待論文やSpecial Topicsなどもさらに充実することも考えられる。

以上、あまりまとまらない話題が並んだ巻頭言となってしまった。これから、会員諸氏のご協力を得て、地道にJPSJの評価を上げ、さらにより学術雑誌とするよう、努力したいと思いますので、よろしくお願い致します。

(2012年2月22日原稿受付)

荷電ボトモニウム Z_b の発見

1. はじめに

KEK Bファクトリーで実験を行う Belle グループによって、昨年5月、新粒子が2個発見されたことが報告され、それぞれ Z_{b1} , Z_{b2} と命名された。論文は *Physical Review Letters* に掲載され、¹⁾ あわせてプレスリリースもされた。6種類あるクォークのうち2番目に重いボトムクォーク (b) と反ボトムクォーク (\bar{b}) を含むほか、電荷を持つので少なくともあと2個のクォーク、例えば u , d を含んでいると考えられている。

クォークを4個以上含む粒子はエキゾチックハドロンとよばれる粒子の一種で、世界中で研究が精力的に行なわれるようになってから約10年になる。ペンタクォークの候補 Θ^+ と、テトラクォークの候補 $X(3872)$ の観測がきっかけであった。^{2,3)} 今日までにBファクトリーを中心に、 X , Y , Z とよばれるいくつものエキゾチック粒子の候補が報告されてきた。10年経った今、なぜ再びこの発見が目されるのか紹介する。

2. エキゾチックなハドロン

20世紀初頭まで素粒子と思われていた陽子や中性子もはや「素」ではなく、クォークを構成子とする「複合」粒子であることが、20世紀の半ば頃から明らかにされてきた。当時発見されてきた新粒子を説明するために、Gell-Mann と Zweig によってクォーク模型が提唱された。今日その基盤は量子色力学 (QCD) によって与えられる。現在、クォーク模型に登場するのは (以下の議論においても) 構成クォークとよばれるものであり、QCD に現れる裸のクォークとは区別されている。その構成クォークを用いて、バリオン (核子の仲間) はクォーク3個、メソン (中間子) は1対のクォークと反クォークからなるとして、基底状態の量子数や質量のみならず、磁気能率等の簡単な静的な性質が記述されてきた。⁴⁾

ハドロンは複合系であるため励起状態が存在し、クォークの軌道運動によって説明される。しかしこのとき次のような疑問が生じる。励起エネルギーは不確定性関係によってハドロンの大きさに関係し、数百 MeV 程度と予想される。ところがこれは、クォークと反クォーク対を生成するエネルギーと同程度なので、ハドロンの励起状態にはより多くのクォークが混ざっているのではないだろうか。さらに適当な量子数を持ち込めば、最低でも4個、5個等のクォークを、さらにはグルーオンをも必要とするハドロンが存在するのではないだろうか。クォーク模型で想定される $q\bar{q}$, qqq より豊富な構成要素を持つ状態がエキゾチックハドロンであり、特に多くのクォークによって構成されるものは、マルチクォークハドロン (テトラクォーク、ペンタクォーク等) と称される。

3. 新粒子の発見

こうした背景のもと、新粒子の発見が報告された。まず実験の概要を概念図 (図1) を見ながら説明しよう。KEK Bファクトリーは e^+e^- 消滅過程において、大量の $b\bar{b}$ 対を生成することができる。実験ではボトモニウム $\Upsilon(5S)$ ($\Upsilon(nS)$ は $b\bar{b}$ の S 波状態で、 $J^{PC}=1^{--}$ 、主量子数が n である) の質量近傍に照準が当てられた。以前からこの領域ではパイオンを2個放出する反応率が異常に大きくなることがわかっていた。このことが今回の実験の動機の一つにもなった。実際には以下の3体崩壊過程が詳しく調べられた：

$$\begin{aligned} \Upsilon(5S) &\rightarrow \pi\pi\Upsilon(nS), \quad n=1, 2, 3, \\ \Upsilon(5S) &\rightarrow \pi\pi h_b(mP), \quad m=1, 2. \end{aligned} \quad (1)$$

ここで $h_b(mP)$ は $b\bar{b}$ の P 波状態で $J^{PC}=1^{+-}$ 、主量子数が m のボトモニウムである。

この反応の中で、 $\pi\Upsilon$ もしくは πh_b の不変質量分布が解析された。興味深いことに、 h_b も今回の Z_b の発見と密接に絡んで、Belle によってその存在が確認されていた。⁵⁾ その結果5つの崩壊モード全てにおいて、矛盾なく2つの明確なピークが観測された。一例として $\Upsilon(2S)\pi$ の不変質量分布を図2に示す。矢印の位置が Z_{b1} , Z_{b2} の位置である。他の崩壊モードのデータと合わせ、質量と崩壊幅はそれぞれ

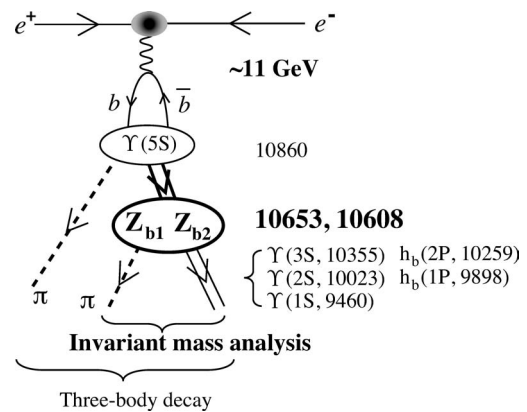


図1 Z_b 生成反応の概念図。

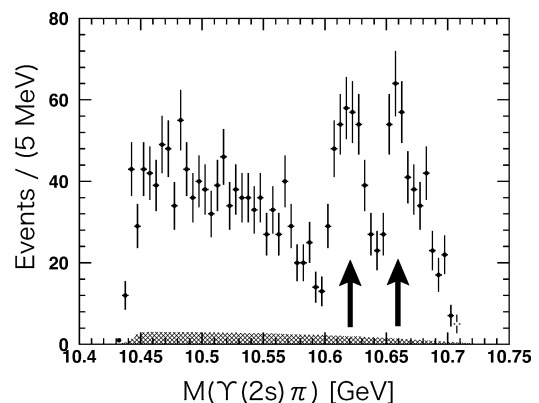


図2 Z_b の存在を示す $\Upsilon(2S)\pi$ の不変質量分布。¹⁾

$$M_1 = 10,608.4 \pm 2.0 \text{ MeV}, \quad \Gamma_1 = 15.6 \pm 2.5 \text{ MeV},$$

$$M_2 = 10,653.2 \pm 1.5 \text{ MeV}, \quad \Gamma_2 = 14.4 \pm 3.2 \text{ MeV},$$

とされた。これらの結果は、質量が B 中間子 ($\sim 5,279$ MeV) と B^* 中間子 ($\sim 5,325$ MeV) の質量和 (敷居) に非常に近く ($10,608 \sim 5,279 + 5,325$, $10,653 \sim 5,325 + 5,325$)、崩壊幅が狭いという特徴を示している。また崩壊粒子とその角度分布から、アイソスピン、 G パリティ、スピン、パリティが $J^G(J^P) = 1^+(1^+)$ と決定された。これらのことから Z_b は、 $b\bar{b}u\bar{d}$ 等を構成要素とするエキゾチックなテトラクォーク粒子であると推論された。

4. なぜ注目されるのか

まずはボトム領域で、最低でも4個のクォークを必要とするハドロンの発見されたこと自体、その意義は大きい。次にマルチクォークの存在形態に対する興味がある。ダイクォーク (qq) 相関やハドロ的な ($q\bar{q}$) 相関が重要との予想があるが、現在のところほとんどわかっていない。これに対して今回発見された Z_b は、 B, B^* 中間子の敷居に近いことに加え、崩壊モードの特徴から、強いハドロン相関によるボトム中間子の分子状態であることが示唆されている。

多粒子系ではそれらが一塊になる代わりに、部分部分がクラスターを作り、それらを新たな構成要素とする分子的な状態がより安定となる場合が知られている。原子核では、有名な ^{12}C の Hoyle 状態をはじめ、 α クラスターを構成要素とする状態が予想されてきた。⁶⁾ ハドロンでは $\Lambda(1405)$ が有力な候補と考えられている。⁷⁾ Z_b は、4つのクォーク $b\bar{b}q\bar{q}$ (q は u, d クォークのいずれか) に取って代わり、 $q\bar{b}, b\bar{q}$ 等の B 中間子が新たな構成要素となる分子状態である。なぜこのような分子状態が形成されるかは相互作用による。原子核では、カイラル対称性の自発的破れによって出現するパイオン交換力がスピンとアイソスピンに依存することと深く関係している。ハドロンの場合には、クォーク間力がカラーに依存することによると考えられる。

もう一つの興味深い観測事実は、(1) の2つの反応、 $\Upsilon(5S)$ が $\Upsilon(nS)$ と $h_b(mP)$ に遷移する確率が同程度ということである。 Υ は $b\bar{b}$ の 3S_1 状態、 h_b は 1P_1 であることがわかっている。従って Υ への遷移では b クォークのスピンの向きは変わらないが、後者では変わるようになる。ところがスピンの向きを変化させる磁気的な力は質量に反比例するので、重いクォークのスピンは変化しにくく (重いクォーク対称性)、 h_b への遷移は抑制されるはずだがデータはそうになっていない。しかし $Z_{b1,2}$ が B, B^* の分子状態であるとすれば、この矛盾を解決できることが文献⁸⁾で説明された。

5. ハドロン物理の今後

ハドロン分子状態は、エキゾチックでない通常のハドロンの新たな構成要素となりできあがった、エキゾチックなハドロンの存在である。この点でたくさんのクォークが一塊とな

って存在する状態とは異なる。マルチクォーク状態が塊となるのか、あるいは分子的になるのかによって、できあがったハドロンの性質に質的な違いがみられるに違いない。それらは質量や大きさ等の単純な物理量に反映されるはずで、今後これらのさらなる研究が望まれる。また分子状態では、クォークから一旦ハドロンができあがり、それらが再び集まって新たなハドロンを作るという、階層性を示唆している。こうした分子状態の特徴は最近の学会誌で、兵藤、慈道氏によって詳しく議論された。⁷⁾

ハドロン分子状態ができあがるためには、ハドロン間相互作用として適度な強さの引力が必要である。興味深いことに、パイオンを交換し原子核が束縛されるのと同じ機構によって、 B, B^* が束縛状態を作る可能性が最近の研究で次第に明らかになってきた。⁹⁾ $\sigma \cdot q$ 型の湯川結合がテンソル力を生み出し、スピンと角運動量を変化させながら状態の混合を引き起こし、適度な引力を生み出すのである。テンソル力の重要性は、最近核構造の分野で精力的に研究されている。同様の機構が重いクォークのハドロン系でも確認できれば、ハドロン間相互作用の普遍性という点でも興味深い。

さらに理論研究によると、 B, B^* の分子状態には2個の Z_b の他にもいくつか存在することが予想されている。^{9,10)} それらはクォークの言葉ではスピン多重項と解釈され、原子の微細構造に対応する。一般に重い粒子は束縛されやすくなるので、重いクォークを含む系ほどより多くの状態ができると予想される。今後それらの存在が実験的に確立し、理論でも説明されれば、1世紀前、原子の理解が微細構造によって進んだのと同様の進展がここでも期待される。

本稿では、新粒子の構造として分子的な特徴に重きを置いたが、多数のクォークが塊となるような、あるいはグラーオンをあらわに含むようなハドロンにも興味を寄せられている。これら諸々の可能性を一つずつ解き明かしていきながら、QCDのより難しい問題への解決の糸口が見いだされていくことを期待したい。

参考文献

- 1) I. Adachi, *et al.* Belle Collaboration: to appear in Phys. Rev. Lett.; arXiv: 1105.4583 [hep-ex].
- 2) T. Nakano, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **91** (2003) 012002.
- 3) S. K. Choi, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **91** (2003) 262001.
- 4) 例えば、A. Hosaka and H. Toki: *Quarks, Baryons and Chiral Symmetry* (World Scientific, Singapore, 2001).
- 5) I. Adachi, *et al.* Belle Collaboration: Phys. Rev. Lett. **108** (2012) 032001; arXiv: 1103.3419 [hep-ex].
- 6) K. Ikeda, H. Horiuchi and S. Saito: Prog. Theor. Phys. Suppl. **68** (1980) 1.
- 7) 兵藤哲雄、慈道大介: 日本物理学会誌 **67** (2012) 226.
- 8) A. E. Bondar, A. Garmash, A. I. Milstein, R. Mizuk and M. B. Voloshin: arXiv: 1105.4473 [hep-ph].
- 9) S. Ohkoda, Y. Yamaguchi, S. Yasui, K. Sudoh and A. Hosaka: arXiv: 1111.2921 [hep-ph].
- 10) M. B. Voloshin: Phys. Rev. D **84** (2011) 031502; arXiv: 1105.5829 [hep-ph].

保坂 淳 (大阪大学核物理研究センター)

(2012年2月8日原稿受付)



和達三樹先生の思い出に寄せて

Mark Ablowitz 〈Department of Applied Mathematics, University of Colorado at Boulder, Colorado 80309-0526, U.S.A.〉

Harvey Segur 〈Department of Applied Mathematics, University of Colorado at Boulder, Colorado 80309-0526, U.S.A.〉

訳 矢嶋 徹 〈宇都宮大学工学研究科情報システム科学専攻 321-8585 宇都宮市陽東7-1-2〉

東京大学で研究生生活の大半を送られた数理物理学者、和達三樹先生が2011年9月に逝去された。ご遺族はご令室の朝子夫人とご子息の大樹氏である。先生は1945年2月、著名な科学者の一族に生まれた。先生の御尊父、和達清夫先生は、1928年に深発地震の観測上の証拠を最初に示された。そのお仕事は、現在の地震学で和達-ベニオフ帯と呼ばれているものの発見や、リヒタースケールとなるものへの発展へとつながっている。後に、和達清夫先生は気象庁の初代長官となられ、日本学術会議の会長も務められた。また、朝子夫人は科学者である6人兄弟の長兄で有機化学者である梅澤純夫先生のご令嬢として育てられた。ご子息の大樹氏は、現在、東京大学に実験物理学の講師として勤務されている。

和達先生の研究業績としてまず第一に挙げるべきものは、可積分発展方程式の理論と、これらの方程式および関連する方程式の様々な物理分野への応用に関するものである。このクラスに属する方程式は興味深いもので、非線形ではあるが顕著な構造を持っており、そのために初期値問題を一連の線形問題を用いて解くことができるのである。この解法をまとめて逆散乱変換または逆散乱法と呼ぶ。この方法で解かれた最初の方程式は、コルトベーク・ドフリース (KdV) 方程式で、Gardner, Greene, Kruskal, Miura, Zabuskyらが1965年に始まる一連の論文で解析した。彼らはまた、KdV方程式には非線形相互作用にもかかわらず、構造をよく保つ局在した進行波解が存在することを示し、この解を「ソリトン」と名付けた。和達先生は1972年と1973年に変形されたKdV方程式 (mKdV方程式) を逆散乱法によって解き、 N ソリトン解の存在を示された。これは、KdV方程式とmKdV方程式の関係を明らかにしたMiura変換や、ZakharovとShabatによる非線形シュレディンガー方程式の逆散乱法などと共に初期のソリトン理論の研究において重要な役割を果たすもので、後のAblowitz, Kaup, Newell, Segurによる、可積分方程式に適用できる統一的な方法の発見へとつながっている。1970年代は、この分野の創成期において新しく重要な結果が数多く見いだされたときであった。

和達先生の研究におけるもう1つの重要な分野は、離散もしくは微分差分ソリトン系の研究である。そのよく知られた例は戸田格子である—これは、同一質量の質点からなる1次元系で、隣り合う質点は同一の指数関数型ポテンシャルを持つ非線形ばねによって連結されているものである。

このモデルは、1967年にこれを発見した戸田盛和先生にちなんで名付けられたもので、いろいろ尋常でない特徴によって知られている。和達と戸田は、1975年に戸田格子のBäcklund変換 (これは、1つの厳密解を別の厳密解に変換するものである) を発見した。この結果は、戸田格子の逆散乱変換を構成したFlaschkaの仕事と共に、可積分系としての戸田格子の解析に大いに貢献したのである。

可積分系の問題は、その顕著な構造の一部として、初期値問題を解くことができるだけでなく、通常は厳密な N ソリトン解があったり、無限個の保存則があったり、Bäcklund変換が存在したりするなど、他の非線形問題にはとても見られないような特徴がある。和達・佐貫・紺野は、1975年に、このような通常には見られない特徴が互いにどのように関係しているかを説明した。Web of Scienceによると、これは和達先生の最も有名な論文であって、500近くの引用回数を誇っている。

この注目すべき理論の発展と同時期に、別の可積分あるいは「解ける」モデルもまた発展途上にあった。この第2のモデルの重要性は、初期値問題を解くと言うよりはむしろ、統計力学の文脈でダイナミクスを解析するという点にある。非線形シュレディンガー方程式のようなモデルは古典的にも量子的にも考えることができるが、逆散乱の量子版は自然に統計力学の枠組みに行き着くのである。和達先生は、他の研究者たちと共に、この第2のアプローチの発展に尽力された。この手法は、その発展に伴い、ベータ仮説 (1931年) やヤン-バクスター関係式 (Yang 1967やBaxter 1972) と言った、統計力学において厳密な結果を得るために古くから知られていた様々な方法を1つの枠組みの中にまとめることになったのである。さらに、阿久津と和達は、1987年の論文において、V. Jonesによる組みひも理論の新展開 (1983年) のような、新しい数学的な発展もまたこのアプローチによく適合することを示している。

和達先生は、かつてレイリー卿をご自身の「ヒーロー」だと言われたことがある。というのは、レイリーはその研究生活において、権威ある書物の他にも500編を超える論文を著したからである。先生の業績は数の上ではレイリーほどではなかったが、遠く及ばなかったわけではない。Web of Knowledgeによると、共著論文も含め、先生が著した学術論文は350編を超え、総引用回数は8,000近くに上る。これは実に驚くべき記録であり、また、私たちが先生を世界に名だたる科学者であると考えていることにまさに

一致している事実なのである。

学術的な業績もさることながら、和達先生は国際的な科学コミュニティが互いにより近いものとなるよう、関係の構築に尽くされた。この方面への第1歩は、1967年から1971年にニューヨーク州立大学バッファロー校の大学院で物理学を専攻したことである。このことで、先生は異国の地で母国語でない言葉で大学院教育を受けることになった。先生ならば他の方法でも可能だったと思うが、疑いもなく先生はアメリカ社会の骨組みそのものについていろいろなことを学んだのである。その後、先生はカナダのアルバータで2年間を過ごされ、これによって日本、カナダ、アメリカの習慣を比べられることになったのである。

私たちは、東京大学の物理学科と我々コロラド大学ボウルダー校の応用数学科の間での共同研究プログラムを先生が立ち上げられた際、国際的なコミュニケーションを強化しようとする先生のご努力から多大な恩恵を受けた。1990年代に日本政府からの補助金を得て、先生は私たちを繰り返し日本に招く手はずを整えてくれたほか、大学院の学生たちを数週間にわたって何組も私たちの学科に（そしてその周辺に）派遣してくれた。先生はこの訪問が学生たちにとって如何に意義があるものであるかを私たちに説明してくれた。1人の学生は、この点において際だっていた。(i) 東京からサンフランシスコまでの10時間のフライトが初の飛行機搭乗体験であった。(ii) ボウルダーに滞在していた間にオルガンコンサートに行ったが、パイプオルガンを見たのも聞いたのも生まれて初めてであった。(iii) グリルビーフを供するコロラドのレストランで「3次元ステーキ」と表現したものに驚嘆した。学生たちとのこういった精力的な訪問は、指導における先生から学生への心遣いが表れたものでもあった。結局のところ、先生の研究グループからは多数のすぐれた博士課程の学生が輩出され、彼らもまた先生を非常に尊敬しているのである。

私たちは、和達三樹先生の追想を、個人的な思い出のエピソードの紹介で締めくりたい。

Mark Ablowitz より：妻 Enid と私は、ソリトン理論研究の初期の頃から先生を知っていた。私たちが先生に会ったのは、1976年7月に最初に日本を訪問したときである。それはまた私たちが最初に外国旅行したときでもあった。私たちは「小さく」荷づくりして、荷物はそれぞれに大きなスーツケース2個ずつになった。東京に着いたとき、先生は私たちを出迎えに来てくれていた。空港の国際線の出口で「Soliton」と書いた小さな紙を持って。

先生と一緒に私たちは4つのスーツケースを持ってドアに向かった。驚いた！日本のタクシーはアメリカのよりも小さい一ずっと小さいじゃないか。でも先生は全く問題にしなかった。先生はタクシーを2台呼んで1台に我々3人が乗り、もう1台に荷物を載せた。先生はこうなることを予想していたのだと私は何となく思っている。いざ出発だ。私たちは、直接ホテルに行くものだと思っていた。ニ

ューヨークから14時間も飛行機に乗っていたし、機内では全く眠れなかったのだから。

しかし、私たちが向かったのは、ホテルではなく戸田（盛和）先生ご夫妻のお宅での茶会であった。素晴らしい！美しくエレガントで特別なものだった。まるで昨日のこのように覚えている。先生は何もかもを説明して手伝ってくれて、また私たち夫婦にあぐらをかいて座るように言って手助けしてくれた。この旅は本当に素晴らしい経験だった。先生は私たちが東京のとおきの景観をちゃんと見られるように骨を折ってくれたし、当時東京付近でソリトン理論を研究していた人々に引き合わせてくれた。

日本への次の旅行は1984年の秋のことであった。私たちは当時12歳と5歳の2人の息子連れてモスクワから日本に入った。東京に到着したとき、先生は私たちを出迎えて、新宿のホテルに連れて行ってくれた。またまた驚いた！光の洪水、たくさんの店、特に数々の電器店に！当時のモスクワと、そしてアメリカと何と違うことよ。先生は本当に親切だった。私たちのために時間を割いていると面白い場所や、あの電器店に連れて行ってくれたのである。本当に驚きだ！

私が東京大学の物理教室で講演をしたときのこと、私はその一部始終を覚えている。講演していたときに地震があった—日本の基準では小さいものだったが。教室の窓はみんなガタガタと揺れ、ひび割れが起きる大きな音も聞こえた。だが、心配していたのは「私だけ」だった。先生はこの小さい地震に気もつかないようであった。

Harvey Segur より：和達三樹先生と仕事をして楽しかったことが2つある。先生のユーモアのセンスと先生のご興味が広い範囲にわたっていたことである。先生のジョークや気の利いた言葉はしばしば核心を鋭くついたものであったし、先生は会話の中に、皮肉の効いたコメントをにこりとせせず、実に巧みに混ぜ込んだものだった。時折、先生は実行するのが馬鹿げているというまさにその理由で、やってみようかと提案してくれたことなどもあった。

話題1：先生が最初に学生を連れて日本からコロラドに來られたときのことである。到着は11月も末の土曜のことであった（したがって、特に標高1,600 mにあるボウルダーでは外は寒く、夜には気温が優に氷点下になるほどだった）。先生と学生たちはコロラドまで12時間以上も飛行機に乗って来たのだが、到着したその晩にわがコロラド大学がライバル校とアメリカンフットボールの試合をすることがわかった。そこで時差ボケ解消に寝るのではなく、先生と学生たちはいちばん暖かい服を着込み、その晩は屋外スタジアムの座席で理解できない試合を見ながら3、4時間を余計に過ごしたのだった。ようこそアメリカへ！

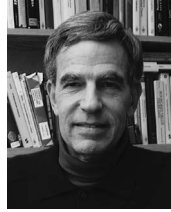
話題2：日本に家族と訪れた際のあるときのこと、当時10代だった娘が、東京大学のキャンパスからさほど遠くない日本旅館を予約して、私たちはそこに滞在することになった。到着の翌朝、先生が迎えに来てくれた。私たちが出か

ける用意をしている間、先生はやはり知り合いを迎えに来たらしい力士が1人旅館にいるのに気づいた。先生はわざわざ私たちが力士と一緒に写真に納まるよう取りはからってくれた。その訪問の際、後日私たち白人3人は、理解できない相撲を観に行っただった。ようこそ日本へ！

我々2人より：私たちは人生で和達三樹先生に出会えたことに大変感謝している。というのは、私たちは科学上の様々なことについて先生と交流を持つことで恩恵を受けたからであり、それにも増して先生が人間として大変優れた方であったと考えるからである。私たちは、先生が亡くなられて大変寂しく思っている。

本稿について、木村芳文氏と和達大樹氏から有意義なコメントを頂いたことを感謝する。

著者紹介



Mark Ablowitz氏： 1945年米国生まれ。1971年マサチューセッツ工科大学Ph.D.(数学)。クラークソン大学、プリンストン大学等を経て1985年よりクラークソン大学理学部長。1989年から2000年までコロラド大学ボルダー校応用数学科のDirectorおよびChairを務める。現在は同学科教授。興味ある研究分野は非線形波動、水の波、光ファイバーやレーザー中の極短波パルスのダイナミクスなど。



Harvey Segur氏： 1942年米国生まれ。1969年カリフォルニア大学バークレー校Ph.D.(航空科学)。民間企業、クラークソン大学等を経て、1989年よりコロラド大学ボルダー校応用数学科教授。Mark Ablowitz氏と共に同学科の設立に尽力。興味ある研究分野はソリトン理論、非線形波動、摂動論とこれらの物理における応用。

Ablowitz氏とSegur氏の共著として、*Solitons and the Inverse Scattering Transform* (SIAM, Philadelphia, 1981) (薩摩順吉・及川正行訳『ソリトンと逆散乱変換』(日本評論社, 1991))がある。

(翻訳) 矢嶋 徹氏： 専門分野は、非線形波動、特に可積分方程式の理論解析や数値計算、およびこれらの物理的な応用。

(2012年1月30日原稿受付)

ハッブルカルメートルか：宇宙膨張発見史をめぐる謎

須藤 靖 (東京大学大学院理学系研究科 113-0033 東京都文京区本郷7-3-1)

宇宙膨張は(正しく理解されているかは別として)今や現代人の常識と言っても良いほど広く知られた事実である。理論的には一般相対論の自然な帰結であり、その膨張宇宙解は、ロシアのアレキサンドル・フリードマン(1922年)およびベルギーのジョルジュ・ルメートル(1927年)によって発見された。一方、それが単なる理論的な解ではなく、我々の宇宙を記述していると考えられる根拠は、遠方銀河があまねく我々から遠ざかっており、しかもその速度がその銀河までの距離と比例しているという観測事実である。この速度-距離関係は、1929年の論文で発表した米国の天文学者エドウィン・ハッブルの名前を冠してハッブルの法則、速度と距離の比例係数はハッブル定数と呼ばれている。しかし、ルメートルは1927年の論文(フランス語)ですでに「ハッブルの法則」を発見していたという。しかも1931年に出版された英訳版の論文では、その該当箇所がなぜか消えている。このミステリアスな事実が最近、一部の天文学者の間で注目を集めている。

1. はじめに

2011年6月のある日、研究室で行っている新着アーカイブ論文の紹介の時間に、ビッグバン宇宙国際研究センター博士研究員のS君が「研究とは直接関係ないんですが、こんな話がでてました」と教えてくれたのが、“The curious case of Lemaitre’s equation No. 24.”¹⁾論文というよりはむしろエッセイである。そこでは宇宙膨張を発見したのはハッブルではなくルメートルであるという主張が展開されている。実はS君は、ルメートルが在職していたベルギーのルーヴェン・カトリック大学で2年間ポスドクを経験している。彼によれば、ベルギーの宇宙物理研究者の間ではずっと以前からその話は周知の事実だったとのこと。ただし、今回明らかになった歴史的経緯がすこぶる面白い。おかげでその後、世界中の(一部の)天文学者の間で大いな盛り上がりを見せた。私もワイドショーのゴシップを見るような感覚でその顛末を楽しみながらウォッチしてきた。そこで、いつも研究・教育に追われて忙しい日々を過ごしているであろう会員諸子の息抜きになればと思い、紹介させて頂くこととした。²⁾

2. ハッブルの法則とハッブル定数

宇宙膨張の発見は、我々の自然観を根底からくつがえした希有な科学的業績である。20世紀に成し遂げられた科学的発見のベストテン入りは確実であろう。しかもそれは遠方銀河の後退速度 v が我々とその銀河までの距離 r と比例する：

$$v = H_0 r \quad (1)$$

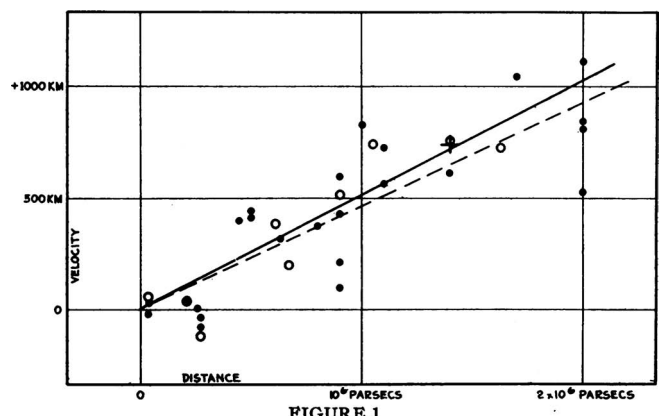
という極めて単純な観測事実に基づいている。この比例係数は最初にこの関係式を発見したアメリカの天文学者エドウィン・ハッブルにちなんでハッブル定数と呼ばれ、そのイニシャルをとった H という記号がついている。^{*1}(1)式から明らかのように、ハッブル定数は時間の逆数の次元を

^{*1} 下添字の0は現在の値であることを示すこの業界の掟にしたがったものの。

持つ。天文学では天体までの距離をパーセク(pc)という単位で表すことが多いため、 H_0 はkm/s/Mpcという一見奇妙な組み合わせの単位をとることが慣用となっている。

現代の立場からアインシュタインの一般相対論を素直に信じるならば、膨張宇宙(あるいは進化する宇宙)という概念は極めて単純かつ自然な論理的帰結に思える。³⁻⁷⁾にもかかわらず、それまで当然のように堅く信じられていた静的宇宙という呪縛から逃れることは、当時の優れた物理学者たちですら容易でなかったようだ。そのために時空の計量が時間変化するようなアインシュタイン方程式の解は、我々の宇宙には対応していない非現実的なものとされていた。³⁾

そのなかでド・ジッター解⁸⁾と呼ばれる解は例外的に注目されていた。これは正の宇宙項を持つアインシュタイン方程式の真空解であるが、ある座標変換をすることによって計量が時間に依存しない静的な形に書き直せる。にもか



Velocity-Distance Relation among Extra-Galactic Nebulae.

Radial velocities, corrected for solar motion, are plotted against distances estimated from involved stars and mean luminosities of nebulae in a cluster. The black discs and full line represent the solution for solar motion using the nebulae individually; the circles and broken line represent the solution combining the nebulae into groups; the cross represents the mean velocity corresponding to the mean distance of 22 nebulae whose distances could not be estimated individually.

図1 ハッブルの原論文で示された遠方天体の距離-速度関係。⁹⁾

かわらず、興味深いことにこのモデルでは、距離と後退速度の間の比例関係が導かれる。^{*2}

実際、ハッブルの論文⁹⁾に示されている観測的な距離-後退速度のデータ(図1)を眺めると、そこに比例関係を見つけるにはかなりの心眼が必要であることに気づく。ワインバーグは「ハッブルがどうして比例関係を結論できたのか全く理解に苦しむ。データはほとんど無相関、せいぜい距離とともに速度も増加しているような傾向をかるうじて読み取れる程度」であると述べ、だからこそ、ハッブルはド・ジッターモデルの予言を知っておりそれが先入観として働いた結果、ハッブルの法則を強引に結論したのではないか、と推測している。⁴⁾ 実際、ハッブルの原論文の最後にはド・ジッターモデルとの関連が言及されている。^{*3}

「3σならまだevidence, 5σ以上で初めてdiscovery」という厳しい戒律のもとに禁欲的に暮らしているという噂のある(幻聴かもしれない)品行方正な素粒子物理業界の方々には全く理解不能であろう。一方、図1のデータ群に対して「エイヤっ」と直線を引けないような天文学者はセンスがない、という天文業界関係者からの反論も聞こえてきそう(これも幻聴だろう)。

それはさておき、図1の直線の傾き(ハッブルの原論文では $K \approx 500 \text{ km/s/Mpc}$ となっている)は、現在の観測データから導かれた値($H_0 \approx 70 \text{ km/s/Mpc}$)とは7倍の違いがある。ハッブル定数は、その逆数が時間の次元を持つことから想像できるように、現在の宇宙年齢の目安を与える。実際、速度が時間変化しないとすれば r/v だけ時間を過去にさかのぼれば、その天体は我々の位置に引き戻されてしまう。(1)式は、この r/v の値が、天体には依存せずあまねく $1/H_0$ となることを意味する。いわばその瞬間が宇宙の誕生であり、したがって $1/H_0$ がその時点から現在までの宇宙年齢と考えられるわけだ。

オランダの天文学者ヤン・オールトは、当時、ハッブルが推定した距離は信頼性に問題があることを(正しく)指摘している。¹⁰⁾ 確かに、現在の推定値からは $1/H_0 \approx 140$ 億年となるが、ハッブル本人による値を用いれば $1/K \approx 20$ 億年になってしまう。現在、放射性同位体元素による年代測定法から地球の年齢は約45.4億年と推定されており、これ

では地球が宇宙より先に誕生したことになってしまう。^{*4}

この矛盾には主として2つの原因があった。一つは、銀河までの距離を推定する際に較正源として用いたセファイド変光星に異なる2つのタイプが存在するという事実が知られていなかったことである。1944年にウォルター・バーデが銀河の距離指標を与えるセファイド変光星には2つの種族が存在することを発見した。¹³⁾ まもなくこの2つの種族のセファイド変光星は、周期-光度関係のゼロ点が異なることがわかった。もう一つは、ハッブルが明るい星だと思っていたものが実は電離水素雲であったなど、「もっとも明るい恒星」に関する種々の問題点が明らかにされた。その結果、宇宙のスケール(すなわち年齢)はそれぞれ2倍¹⁴⁾ および(2~3)倍¹⁵⁾ 大きくなり、1950年代半ばにはハッブル定数はハッブルの最初の推定値の約5倍になった。¹²⁾ おかげで宇宙年齢と地球の年齢の間の矛盾は解消した。^{*5} この歴史を考慮すれば、用いた距離指標が大きく間違っていたにもかかわらず、図1に「エイヤっ」と引いた直線関係だけは結果的に生き残っていることのほうが奇跡的な幸運と呼ぶべきであろう。

3. 謎

いずれにせよ、このようにハッブルの法則は宇宙に始まりがあるという事実を端的に示した重要な観測事実である。その発見者であるハッブルは、歴史的発見を成し遂げた大天文学者として歴史に名前を残すこととなった。一方で、ハッブルの法則の発見に至る過程で大きな貢献をした多くの天文学者はどちらかと言えば忘れ去られている感がある。^{*6}

むしろこれは別に珍しい例ではない。科学上の発見に限らず、一般に物事はあるレベルを超えた段階で初めて注目を浴び、その重要な節目において決め手となる貢献を行った人物や出来事だけが記憶されるという結果は、ある意味では不可避でもある。マグカップにコーヒーを徐々に注いでいる場合、外から眺めていただけでは、内側にどこまでコーヒーが入っているのかわからないし、大して興味もない。マグカップからコーヒーが溢れ出した瞬間に初めて注目されるのと同じことだ。もしも複数の人間が交代で少しずつコーヒーを入れる作業を行っていたとすれば、カップの中のコーヒーの量を20%から40%まで増やした人は別に評価されないが、最後に95%から102%にした人は評価される(今の場合は、責任をとってテーブルを拭くことが

^{*2} そもそも、(1)式は一様等方性(いわゆる宇宙原理)を満たすモデルでは一般的に成り立つ関係式である。その比例係数は一般には時間の関数であり、特に、現在の時刻での値がハッブル「定数」 H_0 と呼ばれている。ド・ジッター解はさらにこの比例係数が時間にも依存しない定数となるという著しい性質を持っている。このため、形式的に時間依存性がない計量を持つ座標に変換できるのである。

^{*3} 岡村定矩氏の指摘による。

^{*4} 同位体年代測定法を確立したアーサー・ホームズは、1911年の最初の論文で地球の年齢は3.7億年であると推定した。¹¹⁾ ウィキペディアによれば、彼が1927年に出版した“The age of the Earth, an introduction to geological ideas”という本では16~30億年としたらしい。このように当時は、ハッブル自身が求めたハッブル定数による宇宙年齢の推定値である20億年とすばらしい一致を示すものとして学生達に教えられていたとのこと。¹²⁾ もちろん当時は中性子の発見以前でもあり、この推定はその後たびたび修正された。特に1940年代半ばには突如36億年程度にまではね上がり、宇宙年齢との矛盾が深刻に受け止められるようになったようだ。¹²⁾

^{*5} ファインマンは、カルテクからコーネル大学へ移る決心をした直後に自分のオフィスへ歩いている際、知り合いからこの話を教えてもらった。さらにオフィスへ向かうためにキャンパスを横切っているところで、生物学者のマット・メルソンに会い、彼が密度遠心分離法によってDNAの半保存的複製の実験的証明に成功したこと¹⁶⁾を直接聞いた。ファインマンは、オフィスに着いた時、科学の全分野の最新結果をただちに知りうるカルテクこそ自分がいるべき場所であると確信して、コーネル大学へ断りの電話を入れたとのことである。¹⁷⁾

^{*6} 文献18はハッブルの赤裸々な姿と彼の影に隠れてしまった複数の天文学者を記述した興味深い読み物である。興味をお持ちの方にはぜひともお薦めしたい。

求められる)ことであろう。別の表現をすれば、人生とは本質的に非可換だということだ。¹⁹⁾

しかしながら、このハッブルの法則の発見をめぐる歴史はさらにもう少し込み入っている。それが注目された発端は、2011年6月6日にカナダの天文学者シドニー・ファン・デン・バーグが、アーカイブサイトに投稿した前述のエッセイ風の論文「ルメートルの方程式24番にまつわる奇妙な事件」¹⁾である。

ルメートルはベルギー出身のカトリック神父であるが、ロシアのフリードマンと独立に一般相対論における膨張宇宙解を導いた理論家として良く知られている。ファン・デン・バーグが注目したのは、ルメートルが1927年、ブリュッセル科学会紀要というマイナーな雑誌にフランス語で発表した論文、特に(24)式である。²⁰⁾ 実はこの論文は、ハッブル以前に「ハッブル」の法則を発見したものとして、一部の人々の間ではすでに知られていたようだ。²¹⁾

といっても仮にこれだけならば、科学史上さほど珍しくない話の一例でしかない。すでに述べた人生非可換性原理にしたがえば、ルメートルはコーヒーを99%まで満たしたにもかかわらず、最後にカップからコーヒーを溢れさせる榮譽に浴したのがハッブルだっただけでもいえる。ただ、今回の場合はそれだけではすませられない複雑な事情が絡んでいる。

ルメートルの論文はその重要性が認められたため、フランス語原論文発表の4年後の1931年、英国王立天文学会誌に英訳版²²⁾が掲載されている。ファン・デン・バーグは、この英訳版とフランス語の原論文を比較してみると、本文27行分、(24)式の一部、脚注11行分がごっそりと欠落していることに気づいた。さらに奇妙なことに、それらはいずれも「ハッブル定数」を具体的に計算している部分ばかりなのだ。

例えば、問題となっている(24)式はフランス語原論文では

$$\frac{R'}{R} = \frac{v}{rc} = \frac{625 \times 10^5}{10^6 \times 3.08 \times 10^{18} \times 3 \times 10^{10}} = 0.68 \times 10^{-27} \text{ cm}^{-1} \quad (2)$$

となっている。(2)式からは、ルメートルが自ら導いた「ハッブル定数」 $v/r = 625 \text{ km/s/Mpc}$ を、 $1 \text{ km} = 10^5 \text{ cm}$ と $1 \text{ Mpc} = 10^6 \times 3.08 \times 10^{18} \text{ cm}$ を用いてcgs単位系に換算し、さらに光速 $c = 3 \times 10^{10} \text{ cm/s}$ で割り算したという計算過程が明らかである。さらに、その式の上にある3つの段落とそれに関連した3つの脚注において、この 625 km/s/Mpc を導いた過程と、文献、太陽系の速度による補正法などについても丁寧に説明がなされている。

しかしながら、英訳版²²⁾ではこの式が単に

$$\frac{R'}{R} = 0.68 \times 10^{-27} \text{ cm}^{-1} \quad (3)$$

に短縮されている。しかも上述の3つの段落と3つの脚注

は跡形もなく消えさっているのである。(3)式を眺めただけでは、ルメートルが何を考えてこの数値を書いたのかすぐにはわからない。^{*7)} とすれば、英訳版だけを見ては、ルメートルがハッブル以前に「ハッブル定数」を導いていたことがわからないのも当然だ。

ここまで来ると、単なる翻訳上のミスとは考えがたい。背後に何らかの意図が働いたのではあるまいかと想像したくなるのも人情である。現在の英国王立天文学会誌編集部に問い合わせても、もはや当時の記録は残っていないという回答が返ってくるだけ。こうなると、本職の科学史家はもちろん、「にわか科学史家」となった天文学者まで登場し、様々な説が提案されることになる。

4. 憶測

この謎に対する有力な説はおおまかには二つ。宇宙膨張発見の榮譽を自分のものにしたいと考えたハッブルが圧力をかけたとする説と、ハッブルを怒らせることを恐れた英国王立天文学会月報編集部が圧力をかけたという説である。いずれにせよ、ハッブルがかなりの悪人であることが前提とされている。提案された具体的な説のいくつか²³⁻²⁶⁾を順に紹介してみよう。

1. ハッブルは自分の研究のきっかけとなった先行研究をほとんど引用しないのが常だった。1926年の銀河のハッブル分類に関してはレイノルズの研究²⁷⁾ 1929年のハッブルの法則に関しては、遠方の銀河はほとんどが我々から遠ざかっていることを発見したヴェスト・スライファーの論文²⁸⁾が引用されていないのはどう考えても公平とはいえない。ハッブルは当時すでに、コペルニクス以降で宇宙観を変革したもっとも影響力のある天文学者だとみなされていた。英訳はルメートル自身によるものだと思うのだが、この事情を配慮した誰かが該当部分を検閲し削除したのだろう。²³⁾
2. ハッブルカルメートルかといった議論は問題を矮小化している。すべての科学において、偉大な発見は決してそれだけが突然生み出されるわけではない。今回の場合も、アインシュタイン、スライファー、ウィレム・ド・ジッター、フリードマン(1922年に膨張宇宙の一般解²⁹⁾を発見)、カール・ヴィルツ(1924年に銀河の写真乾板上での視直径と後退速度間の相関を指摘³⁰⁾)、クヌート・ルンドマルク(1925年に銀河の距離と後退速度に相関があることを示唆し、これが事実であれば平均的な比例関係をもとに宇宙の距離指標と

^{*7)} もちろん左辺の次元が長さの逆数であることから、右辺の数値は宇宙年齢かけて光が到達できる長さ、言い換えれば(ある意味では)宇宙の大きさの逆数に対応することは想像できる。したがって、少し計算すればルメートルが前提としていた「ハッブル定数」の値を読み取ることが簡単である。しかしこれだけでは、彼がいかにして観測データからこの値を導いたのかまではわかり得ない。

して使える可能性を指摘³²⁾), グスタフ・ストレームベルク(ルメートルとハッブルが用いた43個の銀河の後退速度はいずれもこの論文の結果³¹⁾に基づいている)などを含め、多くの先行研究の上に成り立っている。その意味では、ハッブルの法則は、「科学上の発見には本当の発見者の名前がつけられることはない」というスティグラーの法則の一例に過ぎない。^{*8, 24)}

3. ハッブルは1950年代初め頃まで、遠方銀河の後退速度は必ずしも宇宙膨張を反映したものではないと解釈していたようである。その理由の一つはそれが示唆する宇宙年齢と地球の年齢との間の矛盾だ。とすれば、ハッブルは単にルメートルの膨張宇宙モデルを信じてなかったから引用しなかっただけではないか。一方、ルメートルはそもそもプロの天文学者と言われることを嫌がっていたらしい。彼は(ハッブルが成し遂げた)系外銀河の発見なしには、そもそもハッブルの法則を確立することなど論外だという立場であった。ルメートルの1952年の論文³³⁾では、ハッブルの発見した速度-距離関係は理論的に予言されていたもので、その係数は膨張宇宙のスケールを与える重要な値であると述べているものの、自分がハッブルより前にその係数を計算していたことには触れていない。また、英訳したのは(ルメートルが一年間ケンブリッジに滞在したときの指導教員でもある)アーサー・エディントンではないかと想像されるが、検閲がなされた理由とその背景は不明である。²⁵⁾

4. 1929年のハッブルの結果をさらに強固にした1931年の論文³⁴⁾の共著者であるミルトン・ハムソンによれば「おそらくオランダで開催された国際天文連合の会議の後で、ハッブルが興奮してやってきた。その会議では、数人の天文学者が暗い遠方の銀河ほど大きな赤方偏移(後退速度)を持つという傾向を示唆していたらしい。そこでハッブルはそれを調べてみる気はないかと聞いてきた」とのこと。当時の記録を調べたところ、第3回国際天文連合会議が1928年9月5日から13日まで、オランダのライデンで開催されており、ド・ジッター、ハッブル、ルメートル、ルンドマルク、ハーロー・シャプレー、ウィリアム・スマートらが出席していた。また、1924年にヴィルツが発表した論文³⁰⁾はドイツ語で書かれているが、ハッブルの高校でのドイツ語の成績はAであり、さらに会社法に関するドイツ語の教科書まで読めたらしい。^{*9)}したがって、彼ならばヴィルツのドイツ語論文を容易に理解で

きたに違いない。このように、ハッブルはいくつかの重要な先行研究を知っていながら、それらをすべて自分の業績と見せかけるべく意図的に無視したのではないか。²⁶⁾

このようにハッブル悪人説を裏付ける根拠として示された傍証の数々は、失礼ながら思わず突っ込んでしまうほど楽しい。そしてそれらを総合すれば、宇宙膨張を発見した科学上の偉人であったハッブルは、すべてを自分の業績にしないと気が済まず独占欲が強い卑怯で傲慢な人物に仕立て上げられる。一方で、ルメートルはベルギーのルーヴェン・カトリック大学の教授であると同時にカトリック神父であったという事実ともあいまって、世俗的な名誉などには全く関心のない謙虚で純粋な学者像^{*10)}とぴったり一致する。そのため、この仮説は十分説得力を持ち、全くの傍観者であるはずの我々もついつい信じこんでしまう。真実はわからない。だが、我々の世界観を変えた宇宙膨張の発見者がハッブルであるとする教科書の記述は今後修正される可能性がある。

5. 真相?

さて、本来今回の執筆依頼をお引き受けした時点(2011年10月21日)では、謎を残したまま終えるはずであった。ところが、アメリカの天文学者マリオ・リビオ^{*11)}がNatureの2011年11月10日号に発表した文章³⁵⁾により、さらに興味深い真実(の一部)が明らかになったので、それを付け加えざるを得なくなった。

リビオは、ルーヴェンカトリック大学と王立天文学会に残されていた数多くの書簡を調べ上げ、ついに当時の王立天文学会月報編集長であったスマートがルメートルに論文の英訳出版許可を打診した手紙と、それに対するルメートルの返信を発見した。それによると、スマートはルメートルに対してその後の進展があるならばそれを追加してはど

^{*10)} 実は日本の天文学業界にも少なからぬ数のお坊さん有資格者がいらっしゃる。統計的に有意な多さかどうかはわからない。そして確かに彼らはどなたも高い人徳を有した方々ばかりである(心当たりの方々のお顔を思い浮かべて頂ければただちに納得して頂けることだろう)。そのなかのお一人はかつて大学院生の頃、シニアな先生方も多く出席されていた国内のある研究会で「皆さんのような専門家を前にしてこのようなイントロを申し上げるのは、まさに馬の耳に念仏だとは思いますが、…」を枕として発表し始めた(今から20年ほど前のことであるが、決して幻聴ではなかったと思う)。今や大学の学生を前にそのような前口上から始めれば明らかにアカデミックハラスメントで訴えられるに違いない。その後数多くの功徳を積んだ結果、現在は学生に対しては釈迦に説法的懇切丁寧な講義をなされていることを期待したい。

^{*11)} 彼の所属はSpace Telescope Science Institute, つまりハッブル望遠鏡を運用している研究所である。彼の文章にも、ハッブルの名前を冠した場所にいるものとしてこのミステリーに興味を持った、というしゃれた一節がある。実際、アメリカのある会議で、次世代の宇宙望遠鏡はルメートル望遠鏡と呼ぶべきではないかという意見が出され、宇宙マイクロ波探査衛星COBEのPIでノーベル賞受賞者でもあるジョン・マーサーが、ルメートルはまさにそれに値する業績を挙げているが、それはアメリカではなくヨーロッパが打ち上げる宇宙望遠鏡の際に考えるのがより適切であろうと回答したとのこと。このハッブルルメートル論争が有名であることを示すエピソードである。

^{*8)} ウィキペディアによれば、この法則に名前を冠せられているシカゴ大学の統計学者スティーブン・スティグラーは、その法則の真の発見者は社会学者のロバート・メルトンであると主張しているようだ。

^{*9)} 当初ハッブルは親から天文学ではなく法律関係に進むように強要されていたようだ。¹⁸⁾

うかという前向きな提案すら行っている。陰にも陽にも圧力をかけた気配はない。それどころかその返信から、英訳をしたのはルメートルであり、問題とされている箇所をすべて削除したのもまたルメートル本人の希望であったことが明らかとなった。ただし削除の理由はそっけなく“of no actual interest”と簡単に述べているだけだ。さらにその手紙の末尾には、

I would like very much to become a fellow of your society and would appreciate to be presented by Prof. Eddington and you.

という謎の一文も付け加えられている。まだ完全にすっきりというわけではなく、何か腑に落ちない点が残ったままだ。

この残された謎は科学史家の方々にとっては格好の研究テーマかもしれない。先取権に過度に神経質となっている現在の科学者への警鐘なのか、この書簡だけでは明らかにされていない理由がまだ隠されているのか、世俗的な名誉を超越した神父の謙虚さなのか、あるいはまったく逆に王立天文学会フェローの称号欲しさの布石なのか。ただし、このように面白さを優先した無責任な想像はここらあたりでやめておくべきだろう。

いずれにせよ、この件をめぐる展開されたハッブル悪人説は誤解だったことになる。この結末を知った上で、4章にまとめておいた仮説を読み返してみると一層楽しめる。といっても、ハッブルが悪人でなかったという結論を導くことはできない。あくまで今回の経緯はハッブルの人格とは無関係であったというだけだ。実際、文献18によれば、ハッブルはかなりの人物であったらしい。

ところで、2011年のノーベル物理学賞は「宇宙の加速膨張の発見」に対して与えられた。ノーベル賞公式ホームページ³⁶⁾にある受賞理由の文書は非常に優れたまとめであるので、ぜひとも一読をお勧めしたい。ただし私ももっとも感銘を受けたのは、その中でかなりの長さを割いて、ここで紹介したハッブルの法則にまつわる歴史を丁寧に記述している点である。ノーベル賞選考委員会もまた、この話題にかなり神経質になっていたことを意味しているものと推察する。^{*12} ちなみに、これもまたウィキペディアによれば、ハッブルは晩年ノーベル賞が天文学をその受賞対象として認めるように働きかけたそうである。そして自分自身が最初の天文学からのノーベル物理学賞受賞者に内定していたのだが、その直前の1953年に死去したため受賞を逃したということである。その意味では、今回のノーベル物理学賞はいろいろな意味でハッブルと切っても切れない深い関係にあるわけだ。

6. 教訓

歴史は歪められて伝わるものだ。人間は程度の差こそあれ誰でも善人であると同時に悪人であるわけだが、とくに偉い人ほど功罪相半ばすると言われがちだ。その場合、負の側面についてはその当時は遠慮して口にするのを控えていただけであっても、やがて歴史としてはその人はすばらしい人であったというバイアスされた「事実」だけが残り後世に語り継がれることとなる。逆もまた真であろう。当たり前のことであるが、科学の業績と個人の人格や見識の間に相関がある必然性はないのだ。¹⁹⁾

科学的大発見を成し遂げたハッブルは(おそらく実像以上に)偶像視されてきた。¹⁸⁾ 本来は「英雄の登場」を祝福する人々の善意だったはずである。そして一旦そのような風潮がでると、それに水をさすような話は控えられ、タブー視され、結果として少し時間が経つと何も知られないままとなる。一方、何かをきっかけとしてそのイメージが疑問視されるようになると、一転して「今まで黙っていたけれど実は…」といったタイプの逸話が氾濫し始める。さらに、ハッブルの陰で不利益を被っていたとされるルメートルのような人まで登場してくれば、話は当然ますます盛り上がる。「判官贔屓」と同程度に「汚れた英雄」というのもまた我々が好きな話題である。「坊主憎くけりゃ袈裟まで憎い」という言葉があるが、幸いなことに今回の話においては、ルメートル神父はそれとは全く逆に「正義の味方」という役回りが与えられたようだ。

このようにみえてみると、この話題は決して「宇宙膨張の発見者は誰か？」という極めて限定された事例の話ではなく、世の中の普遍的な法則を示唆しているのではあるまいか。つまり、人々は真実とは無関係に、すっきり理解しやすくしかもどこかで溜飲を下げられるようなストーリーを待ち望んでおり、それが事実であることを信じたいようだ。そして、一旦そのような話が流布し始めるともはや真実などどうでもよく、待ち望んでいたストーリー以外にはあまり興味を持たなくなってしまう。上述の文脈の、ハッブルとルメートルを適宜二つの対立する人物・組織・概念に置き換えてみれば、驚くほど多くの社会的な話題に応用可能である。まさにぴったりの例があまりにも数多く、しかもすぐさま思い浮かぶことであろうから、あえて具体例は挙げないでおく。あとは読者の皆様の自主的な演習問題とさせて頂きたい。

この記事のきっかけとなった論文を最初に教えてくれた須山輝明氏、今回の執筆を勧めてくれた樽家篤史氏、原稿を丁寧に読み数々の有用なコメントをして頂いた岡村定矩氏に厚く感謝する。

^{*12} NASAの文献データベースADSによれば、ルメートルのフランス語の原論文の引用度は2011年に入ってから急激に増加している。

参考文献

- 1) S. van den Bergh: "The curious case of Lemaître's equation No. 24" <http://xxx.yukawa.kyoto-u.ac.jp/abs/1106.1195>
- 2) 須藤 靖: 朝日新聞 Webronza 科学・環境の記事 2011 年 9 月 15 日「消された歴史—宇宙膨張、本当の発見者は？」および 11 月 29 日「謎はまだ残る—続・宇宙膨張の発見者」.
- 3) S. Weinberg: *Gravitation and Cosmology* (Wiley, 1972).
- 4) S. Weinberg: *The First Three Minutes* (Andre Deutsch, 1977).
- 5) 須藤 靖: 『一般相対論入門』(日本評論社, 2005).
- 6) 須藤 靖: 『ものごの大きさ: 自然の階層・宇宙の階層』(東大出版会, 2006).
- 7) 須藤 靖: 『もうひとつの一般相対論入門』(日本評論社, 2010).
- 8) W. de Sitter: Proc. Akad. Wetensch. Amsterdam **19** (1917) 1217; *ibid.* **20** (1917) 229.
- 9) E. Hubble: Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **15** (1929) 168—A Relation between Distance and Radial Velocity among Extra-Galactic Nebulae.
- 10) J. H. Oort: Bull. Astro. Inst. Netherlands **6** (1931) 155—Some problems concerning the distribution of luminosities and peculiar velocities of extragalactic nebulae.
- 11) A. Holmes: Proc. R. Soc. A **85** (1911) 248—The association of lead with uranium in rock-minerals and its application to the measurement of geological time.
- 12) G. de Vaucouleurs: *The cosmic distance scale and the Hubble constant* (Australian National Univ., 1982).
- 13) W. Baade: Astrophys. J. **100** (1944) 137—The resolution of Messier 32, NGC 205, and the central region of the Andromeda nebula.
- 14) Report of meeting of commission 28, Trans. Int. Astronomical Union **8** (1954) 397 中の記述.
- 15) M. L. Humason, N. U. Mayall and A. R. Sandage: Astron. J. **61** (1956) 97—Redshifts and magnitudes of extragalactic nebulae.
- 16) M. Meselson and F. W. Stahl: Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **44** (1958) 671—The replication of DNA in *Escherichia coli*.
- 17) R. P. Feynman: *Surely, you're joking, Mr. Feynman* (W. W. Norton, 1985) p. 232.
- 18) M. Bartusiak: *The Day We Found the Universe* (Pantheon Books, 2009). 邦訳は、長沢 工・永山淳子訳『膨張宇宙の発見 ハッブルの影に消えた天文学者たち』(地人書館, 2011).
- 19) 須藤 靖: 『三日月とクロワッサン』(毎日新聞社, 2012).
- 20) G. Lemaître: Annales de la Société Scientifique de Bruxelles A **47** (1927) 49—Un Univers homogène de masse constante et de rayon croissant rendant compte de la vitesse radiale des nébuleuses extra-galactiques.
- 21) P. J. E. Peebles: In Proc. of the Symp. "The Big Bang and Georges Lemaître" (Dordrecht, 1984) p. 23—Impact of Lemaître's ideas on modern cosmology.
- 22) G. Lemaître: Mon. Not. R. Astron. Soc. **91** (1931) 483—Expansion of the universe, A homogeneous universe of constant mass and increasing radius accounting for the radial velocity of extra-galactic nebulae.
- 23) D. L. Block: "A Hubble eclipse: Lemaître and censorship" <http://xxx.yukawa.kyoto-u.ac.jp/abs/1106.3928>
- 24) H. Nussbaumer and L. Brieger: "Who discovered the expanding universe" <http://xxx.yukawa.kyoto-u.ac.jp/abs/1107.2281>
- 25) G. Shaviv: "Did Edwin Hubble plagiarize?" <http://xxx.yukawa.kyoto-u.ac.jp/abs/1107.0442>
- 26) S. van den Bergh: "Discovery of the expanding universe" <http://xxx.yukawa.kyoto-u.ac.jp/abs/1108.0709>
- 27) J. H. Reynolds: Mon. Not. R. Astron. Soc. **80** (1920) 746—Photometric measures of the nuclei of some typical spiral nebulae.
- 28) V. M. Slipher: Proc. American Philos. Soc. **56** (1917) 403—Nebulae.
- 29) A. Friedmann: Zeitschrift für Physik **21** (1924) 326—Über die Krümmung des Raumes.
- 30) C. Wirtz: Astr. Nachr. **222** (1924) 21—De Sitters Kosmologie und die Radialbewegungen der Spiralnebel.
- 31) G. Strömberg: Astrophys. J. **61** (1925) 353—Analysis of radial velocities of globular clusters and non-galactic nebulae.
- 32) K. Lundmark: Mon. Not. R. Astron. Soc. **84** (1924) 747—The determination of the curvature of space-time in de Sitter's world.
- 33) G. Lemaître: Mon. Not. Astron. Soc. South Africa **11** (1952) 110—Clusters of nebulae in an expanding universe.
- 34) E. Hubble and M. Humason: Astrophys. J. **82** (1931) 302—The velocity-distance relation among extra-galactic nebulae.
- 35) M. Livio: Nature **479** (2011) 171—Mystery of the missing text solved.
- 36) <http://www.nobelprize.org/>

(2011 年 12 月 20 日原稿受付)

Hubble or Lemaître: Who Discovered the Expanding Universe?

Yasushi Suto

abstract: The expansion of the universe is established as a very well-known "fact" among us in the current era. Theoretically it is a natural outcome from general relativity, and the corresponding solutions to the Einstein equation were derived by A. Friedmann in 1922 and by G. Lemaître in 1927. The observational evidence for the expansion of the universe came from the linear relation between the recession velocities and distances of extra-galactic nebulae. It is now called as the Hubble law according to the first discoverer of the relation, Edwin Hubble. It was recently pointed out that the "Hubble" law had been discovered by Lemaître in 1927, a couple of years earlier than the famous Hubble paper in 1929. His French original paper was later translated into English, and published in Monthly Notices of Royal Astronomical Society in 1931. Intriguingly, one equation and several paragraphs and footnotes discussing the Hubble constant were completely lost in the English translation. This curious fact has attracted much attention of astronomers.

ソフトマターのマルチスケールシミュレーション

谷口 貴志 (京都大学工学研究科 615-8510 京都市西京区京都大学桂)
 山本 量一 (京都大学工学研究科 615-8510 京都市西京区京都大学桂)

時間・空間スケールが異なる複数のシミュレーション法を連結し、大規模で複雑な問題の解決を目指すマルチスケールシミュレーションが注目されている。この手法は様々な研究領域で広く最先端の手法として認識されており、ソフトマターに対しても極めて有効である。ソフトマターは、マイクロ～メソスケールの内部構造を反映した複雑な巨視的性質(相挙動や流動挙動)を示す物質であるので、微視的な計算機シミュレーションでは計算量が膨大になり最先端のスパコンでも計算ができない。我々はメソスケールの高分子鎖の構造・運動と巨視的な流動現象を連結するマルチスケールシミュレーションでこの問題の解決に取り組み、分子描像に直結した高分子流体の流動挙動の解析を実現した。

1. はじめに

物理学の諸問題に計算機シミュレーションが使われるようになって久しく、今では実験的・理論的アプローチに並ぶ新しい第三のアプローチとして完全に定着している。通常、計算機シミュレーションでは、物質や現象をある単一スケールの構成要素に分解し、それらの相互作用を定式化(モデル化)することで、集合体の巨視的な性質に迫る。例えば材料科学の分野でよく用いられる分子シミュレーション(分子動力学法(MD: Molecular Dynamics)、モンテカルロ法など)では、物質を原子・分子レベルのマイクロモデルで表現する。マイクロモデルの利点は、マイクロな構成要素の特徴とそれらの集合体のマクロな性質を直接関係付けられる点にあるが、同時に計算量が膨大になるため大きな空間スケールの現象への適用性の悪さが最大の欠点となっている。

高分子、液晶、ゲル、コロイド、膜など、我々人間にとって「柔らかい物質」は古くから我々の生活において重要な役割を果たしてきた。これらの物質は、内在する相構造のような特徴的構造が、原子のスケールに比べてはるかに大きく、しばしば階層的構造を持ち、更にその構造は壊れ易く平衡構造に戻るまでに長い緩和時間を要するという特徴を有する。ド・ジャンがノーベル賞受賞講演で、これらの「柔らかい物質」を総称してソフトマターと呼んだことを契機に、今日、この用語が1つの研究分野名として広く使われている。我々が研究対象としているこのソフトマターの巨視的レベルの物性は、分子配向、高分子であれば分子の絡み合いのような微視的な状態や、相界面、相構造、欠陥の空間分布などのメソスケールの状態、また他の材料物質と接した表面の状態のような境界条件にも依存し、場合によっては周囲の流体やイオンを介した長距離相互作用による大規模な協調運動からも影響を受ける。それゆえに、これらの物質のマクロな物性を数値計算によって予測する場合、分子レベルからメソスケールの相構造や物質全体のスケールまでに及ぶ幅広い時間・空間スケールを考慮しなければならず、¹⁾ マイクロモデルのみを用いた分子シミュレーションでは、たとえ世界最速の計算機を占有したとしても現状では全く歯が立たない。全原子モデルではなく複数

の原子や分子をひとまとめにした粗視化分子モデルを用いたとしても、この状況は変わらない。

一方、流体力学や固体力学の分野では古くから連続体描像に基づくマクロモデルを用いたシミュレーション(計算流体力学(CFD: Computational Fluid Dynamics))が盛んに行われてきた。この場合、物質の個性は、物質に印加される歪みや歪速度とその応答である応力の間の関係式のような物質固有の関係式としてマクロな変数を用いて表現されており、通常は原子・分子のミクロスケールはもとより、ソフトマターで興味の対象となるメソスケールの構造やダイナミクスも考慮されない。そのためソフトマターでは、個別の対象に対し、目的とする空間スケールの問題を取り扱うことができるような独自のメソスケールモデル(時間依存ギンツブルグ・ランダウ方程式、密度汎関数法、ブラウン動力学法など)が構築されてきた。系の物理的な普遍性のみを抽出することで、メソスケールモデルは相転移などの物質の詳細に依らない普遍的な現象の解明に大きな成功を収めた。その反面、メソスケールモデルでは分子の個性(分子形状や化学的な性質)を粗視化により生じた少数のパラメーターに押し込めざるを得ないため、分子シミュレーションのようにマイクロな構成要素の特徴とそれらの集合体のマクロな性質を直接関係づけることはできない。これは材料開発に必要な物性を予測するシミュレーションでは致命的な欠点である。

我々が実際に目にする巨視的現象は、マクロスケール(上位階層)で点と考える各場所に膨大なマイクロ・メソスケールの自由度(下位階層)が内在しており、それらの下位階層が相互に関連し合って発現したものである。他方、いくつかの空間および時間スケールにおいてはそのスケール特有の物理法則が存在し、それを記述するのに有効な物理モデルが成立することもよく知られている。このような観点から「各階層を連結してマクロな物性を予測する階層間接続法」や「マクロな物性からマイクロパラメータを推定するという逆問題」を扱う方法論の発展が強く望まれている。そこで注目されているのが、マイクロモデル・メソモデル・マクロモデルを相互に組み合わせて行うマルチスケール・シミュレーションである。この方法はソフトマターの

みならず、固体物理学や分子科学、あるいは地球科学などの分野においても、計算科学の最先端の手法として認識されている。新しい研究分野であるが、大きな動向として平成17年度にJST-CREST (Japan Science and Technology Agency-Core Research for Evolutional Science and Technology) 「マルチスケール・マルチフィジクス現象の統合シミュレーション領域」が発足し、本会会員も多数参加している。

2. 異なる階層間の接続

今日までに様々な方法でこのマルチスケールシミュレーションに関する研究が進められているが、それらは広い意味で次の3つ：(1)「パラメータ連結法」、(2)「領域分割法」、(3)「局所サンプリング法」に分類される。

(1) パラメータ連結法とは、小さなスケール(下位階層)で詳細なシミュレーションをあらかじめ行い、その結果からモデル定数や関数を決定し、それをを用いて大きなスケール(上位階層)のシミュレーションを行う方法である。分子系を例にとると、分子軌道計算によって孤立分子間の相互作用ポテンシャル関数をあらかじめ決定し、その関数を用いて古典的分子動力学計算を行って分子集合体の性質を求める方法がこれにあたる。流体系であれば、分子動力学計算によって目的の物質のレオロジー特性を関数化し、その結果を流体力学方程式に反映させて流体挙動を計算する場合がこれに相当する。

(2) 領域分割法とは、対象とする系を2つ以上の領域に分割し、それぞれ異なるスケールのモデルによるシミュレーションを実行する方法である。この場合、各領域の一部を重ね合わせ、その重ね合わせた領域を介して、特定の物理量を異なる階層間で結合させて解く。例えば分子系では、大きな分子の一部を量子力学(QM: Quantum Mechanics)的に扱い、他の部分は古典力学(MM: Molecular Mechanics)的に扱い、特定の原子を介して両者を接続するQM/MMと呼ばれる方法が開発されている。流体系の場合だと、液相中で気相が核生成する場合のような相転移が起こる部分だけを分子シミュレーションで扱い、他の部分は通常ナビエ・ストークス方程式で計算する場合がこれに相当する。

(3) 局所サンプリング法とは、上位階層の領域を細かく空間分割し、その各要素に対して下位階層のシステムを割り当て、その点での物理量を下位階層の自由度の統計平均で表し、上位階層と下位階層の方程式を連結させて解く方法である。分子系の場合、今日第一原理分子動力学法²⁾として知られる方法が、この考え方に近い。流体系では、本稿で解説する高分子流体のマルチスケール法がこれに相当する。

図1に流体系を例にとった場合の局所サンプリング法の概念図を示す。(a)は構成分子が内部構造を持たない球形粒子から成る単純流体のキャビティー流の場合(単純流体の一般的な流れの例)、(b)は高分子液体など複雑流体の平行流の場合(流れに沿って状態が異なる場合の例)(c)

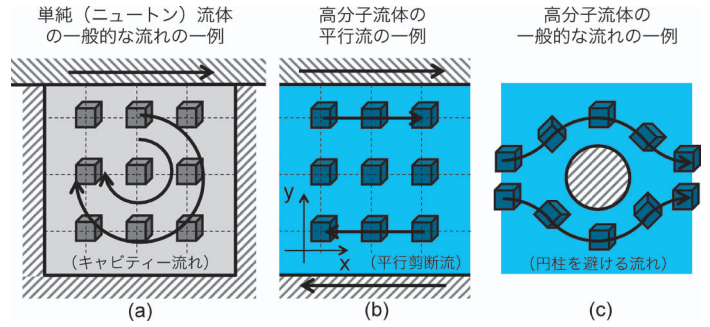


図1 連続体描像に基づく計算流体力学法(CFD)と粒子(分子・原子)描像に基づく分子動力学法(MD)や粗視化モデル(CG: Corase-Grained Model)を結合させたマルチスケールシミュレーション法の概念図。(a)-(c)それぞれの系の中に置かれた立方体の小さな箱は、MDまたはCGシミュレーションを実行するための単位セルを表し、適度な密度で系全体をびっしりと埋め尽くしている。それら全てのセルでシミュレーションを行うことによって、その場所の流体要素中の応力をサンプルする。(a)は定常状態へ達する時間がマクロスケールの特徴的時間 τ_M より十分に短い単純流体のキャビティー流(全ての境界壁面の中で、一面だけが一定速度で移動することで生じる流れ)の場合である。単純流体での応力の応答は、流体が過去に経験した歪速度に依存しないと考えてよいので、たとえ(a)のように渦がある流れを考える場合でも、ミクロな情報の移流が重要になることはなく単位セルを固定したオイラー描像で十分である。一方、高分子流体(応力の緩和時間が τ_M と同程度かそれ以上の場合)では、一般に、流体要素が流れる途中で分子が経験してきた歪速度の履歴が応力の応答に対して強く影響を及ぼす。よって、それを扱うためには、ミクロな情報の移流を正確に扱えるラグランジュ描像を用いることが本質的に重要となる。(b)は高分子流体の流動様式を平行流に限定した場合の問題。(c)は円柱回りの流れの問題をそれぞれ模式的に表している。(b)の問題では各々の流線に沿って並進対称性があり、図のようにセルを固定したオイラー描像で計算を行っても実質的にはラグランジュ的な描像で解くことと等価であるが、(c)ではそのような対称性がないため、単位セルを流線に沿って移動・回転させながら解くラグランジュ描像が本質的に必要となる。

は複雑流体が障害物の周りを流れる場合(複雑流体の一般的な流れの例)をそれぞれ模式的に表している。ここでいう複雑流体と単純流体は、応力の応答が、流体が過去に受けた歪速度に依存するか、しないかによって分けられている。図1中の立方体の小さな箱は、ミクロレベルのシミュレーションを実行するための単位セルを表し、適度な密度で系全体をびっしりと埋め尽くしている。また、(c)では全ての箱を流れに従って回転・移流させている。これらの箱の中で粒子(原子・分子)描像に基づく分子動力学法を用い、マクロレベルに連続体描像に基づく計算流体力学法を用いて結合させることでマルチスケールシミュレーションを行っている。つまり、マクロな流動を解く際に必要な流動状態と応力の関係を与える構成方程式を一切使わずに、流体中の各点に液体のミクロな状態を解くシミュレーターを埋め込み、応力をその点でのミクロ状態の統計平均(サンプリング)から求めるのである。³⁻⁵⁾

従来、メソスケールもしくはマクロスケールの現象を扱う場合には、対象とする空間スケールの現象を物理的に考察し、(i) 微視的世界の中から遅い自由度、あるいは、(ii) 巨視的現象を記述するのに最も適した変数を探し出し、それ以外の自由度を適切な方法(射影演算子の方法、速い自由度の輸送係数等への繰り込み、あるいは物理的考察による直感的方法)により消去することが行われてきた。この

ような方法がうまくいくのは、ミクロな自由度のダイナミクスと適切に選択されたマクロな自由度のダイナミクスとの間の時間スケールが大きく異なり、両者の分離が可能な場合である。この時間スケールの分離は、単純流体に図1(a)のように遅い流動を印加した系で可能である。図1(a)の系を局所サンプリング法により解く場合、過去の流動状態に対する記憶効果が無視できるため、時刻 t 、場所 r における局所応力 σ は、局所的な歪速度テンソル $\dot{\gamma}$ の関数、つまり、次式となる。

$$\sigma(r, t) = f(\dot{\gamma}(r, t)). \quad (1)$$

一方、ミクロな状態の緩和速度とマクロスケールの状態変化の速度が同程度で、相互に関連し合いながら時間発展するような場合、前述の局所定常の仮定は成立しない。よってマクロな状態とミクロな状態の変化を同時並行的に考えなければならず、状況はずっと困難になる。高分子流体の流れのように分子変形の緩和時間がマクロな特徴的空間スケールを移動する時間程度である場合がこれに相当する。この場合、ミクロな速い自由度の消去といった解析的なアプローチは有効ではなく、ミクロな状態とマクロな状態を同時に扱い、過去の履歴の扱いを容易にする図1(b)と(c)のような方法を用いたアプローチが必要となる。(b)では高分子液体が1次元的な振動剪断流(平行流)中にあるが、この場合は流れの勾配は剪断方向(y)のみに存在し、流動方向(x)には勾配がない。つまり流線の方向(x)に沿って流動状態が同一であるので、局所応力は過去の時間 $t' \leq t$ における固定された場所 y の剪断速度の関数として次のようになる：

$$\sigma(y, t) = F[\dot{\gamma}(y, t'); t' \leq t]. \quad (2)$$

(c)は円柱状の障害物の周囲を流れる高分子液体の場合(一般的な流れの一例)である。この場合は高分子の状態が流れる流線に沿って変化するため、局所応力は、次のように過去の時間 $t' \leq t$ において高分子が存在した場所 $R(t')$ で受けた歪速度 $\dot{\gamma}(R(t'), t')$ の関数となる：

$$\sigma(r, t) = F[\dot{\gamma}(R(t'), t'); t' \leq t]. \quad (3)$$

以上から分かるように図1で挙げた系は(a)→(c)の順序で技術的困難度が大きく増加する。

本稿では、上述した図1(c)の場合を具体的に取り上げ、ミクロな自由度とマクロな流動が相互に結合したマルチスケールシミュレーション法を解説する。図1(a)、(b)の場合については文献6, 7を参照されたい。

3. 高分子流体マルチスケールシミュレーション

3.1 高分子鎖ダイナミクスの基礎

図2(a)のような高分子流体のマクロな流動挙動の予測は、最新の計算機シミュレーション技術を持ってしても容易ではない。なぜなら、マクロな流れがミクロスケールの

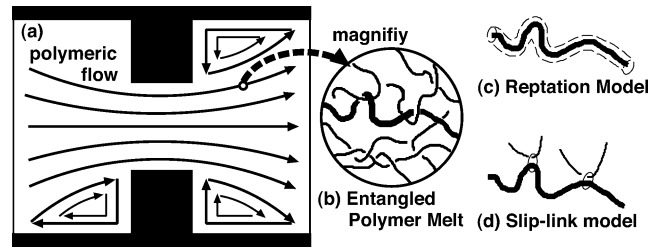


図2 急縮小急拡大路中の高分子溶融体の流動の模式図 (a)、図中の小さな○は、ある流体要素を表しており、その中で高分子同士が互いに絡み合っている様子の模式図を(b)に示す。(c)は、(b)で着目した1本の高分子鎖の運動が仮想的なチューブにより束縛されているレプテーション・モデルを表す。(d)は、同じ高分子鎖に対するスリップ・リンクモデルの模式図を示している。

高分子の状態に非常に強く依存することに加えて、非常に長い分子長を有する高分子のミクロな状態が非常に複雑で、かつ長い緩和時間を持つためである。つまり、マクロな高分子流動の予測は本質的にマルチスケールの問題であり、マクロとミクロのダイナミクスで時間スケールの分離が可能ではない場合がほとんどである。

高分子溶融体(図2(b))がある分子量以上の高分子からなるとき、高分子は互いに絡み合った状態にあることが知られている。この分子量を絡み合い点間分子量 M_e という。高分子溶融体が M_e より大きな分子量の高分子からなるとき、高分子のコンフォメーション(形状や絡み合いの情報)の緩和時間は希薄系のそれに比べ格段に長くなる。それゆえに、高分子の内部自由度に対して適切な粗視化を行わなければ、ミクロモデルからマクロな流動挙動を予測することは均一な高分子バルク系においてさえ困難である。ド・ジャンらは高分子溶融体中の1本の高分子鎖に注目し、周囲の多数の高分子鎖との絡み合いの効果を仮想的なチューブによる拘束に置き換えたモデル(図2(c))を提案した。高分子鎖の長時間スケールの運動はチューブに沿った運動が本質的であると考え、この運動をレプテーションと呼んだ。そのモデルに基づいてレプテーション理論⁸⁻¹⁰⁾(土井・エドワーズ理論)が構築され、高分子のミクロモデルから絡み合った単分散の高分子溶融体の複雑なレオロジー挙動を理論的に予測する礎となった。その後、このレプテーション理論はチューブ長の揺らぎやチューブ径の膨張の効果や束縛解放機構などのいくつかの重要な物理機構を導入することによって改良され、非常に多くの実験結果の説明に成功してきた。¹¹⁻¹³⁾ しかしながら、この理論を任意の分岐構造を有する高分子に適用することは難しい。なぜならレプテーション理論は、チューブセグメントの存在確率に対するフォッカー・プランク方程式によって記述されており、任意の分岐構造の寄与を同方程式に組み込むことは数学的に煩雑で、ほとんど実行不可能だからである。

一方、工学的な観点での高分子溶融体のマクロな流動挙動の予測には、通常、構成方程式を用いた流体シミュレーション法が用いられている。ここでいう構成方程式とは、

応力テンソルと歪速度テンソルとを結びつける式で、一般には非線形関数で、物質固有の方程式である。また、式(3)にあるように過去に流体要素に作用した速度勾配の履歴にも依存する。しかし、構成方程式が与える情報はせいぜいミクロな自由度の統計平均のみであり、ミクロ状態の詳細までは含まれていない。また多くの工学的な問題においては、用いられる構成方程式はミクロレベルから導かれたものではなく、経験的な式が用いられることが多い。レプテーション理論から導かれる構成方程式はミクロな高分子モデルから導かれた式であるが、同じ枠組みで任意の分岐構造を持った高分子の絡み合いを記述できる構成方程式の導出にはまだ誰も成功していない。このことが単純な流動様式においてさえ、工業的に使われているような多分散で多様な分岐構造を有する高分子の応力応答の予測を難しいものになっている。

レプテーション理論の根幹であるチューブや束縛リンク(スリップリンク: 2本の高分子対を束縛している輪(図2(d)参照))の概念を取り入れ、複雑な分岐構造を有する高分子のダイナミクスを絡み合い点と絡み合い点間に含まれるセグメント数に対するランジュバン型の確率微分方程式によって記述するモデルの研究が進められている。このアプローチの有利な点は、高分子の幾何学的構造変化や新しい物理機構の方程式への導入が、フォッカー・プランク型の方程式に比べれば容易であるという点にあり、近年、様々な分岐構造や分子量分布を持つ高分子溶融体に応用され、それらのレオロジー特性を定量的に、かつ低計算負荷で予測することに成功している。¹⁴⁻¹⁷⁾ この低計算負荷という利点は、現実の高分子鎖を「絡み合い点の位置」と「絡み合い点間のセグメント長」という少数の自由度を持ったプリミティブ・パスと呼ばれる仮想的な鎖に粗視化していることに由来している。

このようにバルクの高分子溶融体のレオロジー特性が高精度かつ低計算コストで予測できるようになってきているが、それでもこのモデルだけを用いてマクロスケールの流れを直接シミュレートすることは、数値計算技術と計算コストの両面で非現実的であり、我々が目指している空間的に非一様な流動の予測は不可能である。結論として、現状ではマクロな、あるいはミクロなシミュレーションだけで適用可能な対象はかなり限定されると言わざるを得ない。

3.2 高分子鎖の分子論的粗視化モデル(下位階層)

マルチスケールシミュレーションのミクロレベル(下位階層)を担う高分子鎖のダイナミクスには、直感的分かり易さと拡張性の観点から前節で説明したランジュバン型の粗視化モデルを用いる。既存の研究では、比較的短い(つまり高分子同士の絡み合いが無い)鎖からなる高分子溶液の流動挙動の予測に対して、マルチスケールシミュレーション法のアプローチが用いられてきた。そこでは高分子の特徴を最小限まで簡略化したモデルの1つであるダンベルモデル(流体中でストークス抵抗を持つ2つの質点がバネ

で繋がれたモデル)を用いている。ダンベルモデルが用いられた理由は、(a)高分子の特徴である粘弾性を示す最も単純なモデルであるということ、(b)ダンベルに対するランジュバン方程式から等価なフォッカー・プランク方程式と構成方程式が解析的に導けるため、理論との比較による検証が可能であったこと、(c)ダンベル同士に絡み合いがなく、かつ異なるダンベルが互いに相互作用を及ぼすことがないため、ダンベルの大規模な統計集団を計算することが可能なためである。

高分子溶融体では希薄な高分子溶液系とは違い、近隣の高分子同士が絡み合っている。そのため溶融体のダイナミクスは溶液と比べると非常に遅く、適切に粗視化された高分子モデルを用いることが重要となる。絡み合いのある高分子のミクロな状態をシミュレートするためのモデルには、粗視化の程度に応じて、Kremer-Grest粗視化高分子モデル(KGモデル)、¹⁸⁾ PCN(Primitive Chain Network)モデル、¹⁴⁾ SL(Slip-Link)モデル¹⁵⁻¹⁷⁾などの候補がある。

KGモデル¹⁸⁾は、複数のモノマー単位を1つのビーズで置き換え粗視化した高分子モデルであり、通常MDシミュレーションで用いられる。KGモデルでは絡み合い点間のビーズ数が35~100程度であると報告されているので、十分に絡み合った高分子流体を扱うには少なくとも数百~数千ビーズ以上の長さの高分子の運動を長時間計算する必要がある。¹⁹⁾ 計算に必要な時間は高分子の長さの3乗に比例するので、このモデルを用いて膨大な数の高分子が絡み合う溶融体のシミュレーションを行うことは、計算量の観点からはほぼ不可能であることが容易に試算できる。

一方、PCNモデルとSLモデルは空間的に一様な流動を想定したバルクのレオロジー特性の計算に特化したモデルである。PCNモデル¹⁴⁾は絡み合い点での力の釣り合いを考慮して、絡み合い点と絡み合い点間にあるセグメント数のダイナミクスを解きレオロジーを計算するモデルである。SLモデル^{15,16)}は、PCNモデルで扱っている絡み合い点の力の釣り合いは考慮していないが、仮想的に選んだ高分子鎖のペアを絡み合い点とし、バルクの高分子溶融体のレオロジーを効率よく計算する方法である。SLモデルでは、絡み合い点を表すスリップリンクを結ぶボンドベクトルと高分子鎖長(各ボンドベクトルの長さの和)の集合で高分子鎖の状態を表す。1本の高分子上のスリップリンクの数(絡み合い点の数)は Z で表され、チューブがその両端でスリップリンクから抜けるか、対となっているもう一方の高分子がリンクから抜ける場合に減少し、高分子端の自由なチューブがある長さ以上になったときに増加する。平衡状態では、1本の高分子中の絡み合い点の数 $\langle Z \rangle_{eq}$ は、高分子の分子量 M と絡み合い点間分子量 M_e により $\langle Z \rangle_{eq} = M/M_e$ で表される。マルチスケールシミュレーションでは、上述の全てのモデルをミクロレベルのモデルとして用いることが可能であるが、3.6節の解説ではこのSLモデルを採用している。

3.3 ラグランジュ描像による流体力学（上位階層）

マルチスケールシミュレーションの巨視的レベル（上位階層）を担うのが、流体力学計算である。通常、マクロな流動を解くときは、空間を格子に分割したオイラー的な描像で計算を行う場合がほとんどである（図1(a), (b)）。しかし、局所サンプリング法では応力をその点に埋め込まれたミクロな系の自由度の統計平均から求めるので、流体が格子間の距離 a 程度進む時間 t_a より応力の緩和時間が長い場合にはミクロな自由度の情報の移流が非常に重要となり、オイラー描像では支障が出てくる。特に、絡み合いがある高分子溶液では高分子の絡み合いがほどける時間 τ_d が、マクロな流れの特徴時間 τ よりも長い状況 ($\tau_d \gg \tau$) が容易に起こり得るため、マクロな流動をオイラー描像ではなくラグランジュ描像で扱うことが本質的な解決策となる（図1(c)）。もしミクロな状態をオイラー描像において移流させれば、ミクロな自由度で表された物理量の統計的平均量を考え、その量をマクロなレベルで移流させた後で、新しい統計平均量を再現するミクロな状態を逆問題として再構成するような手続きが必要になる。このような方法は、*deformation field method*²⁰⁾ と呼ばれる方法で用いられているが、通常このような統計的な操作を行うと、各高分子鎖上にある絡み合い点の位置などといったミクロな詳細情報は失われる。よって、ミクロな状態の詳細を保ったまま、それらを移流させるには、ラグランジュ描像を用いる以外に有効な手段は今のところない。一般に、マクロスケールの流れ場 $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ は、時間 t と位置 \mathbf{r} に依存し、速度勾配テンソル $\boldsymbol{\kappa} \equiv \nabla \mathbf{v}$ で表される変形場を引き起こす。時間に依存した変形場は巨視的レベルでの流体要素に、その流線上を流れていく間に流体要素に歪を生じさせ、これがマクロな流動に影響を及ぼすのである。ゆえに、図1(c)のように流体要素の軌跡を追っていきけるラグランジュ流体粒子法が非常に有効であり、その流体粒子の中で絡み合った高分子の遅いダイナミクスを追っていくことができるようになるのである。^{21, 22)} また、局所サンプリング法では、マクロレベルと繋ぐ物理量をミクロな自由度の統計平均から求めるので、十分多くのミクロな自由度を扱う必要がある。

3.4 下位階層と上位階層の連結

下位階層のスリップリンクは、上位階層の流体力学計算で決まる速度勾配テンソル $\boldsymbol{\kappa}$ によって相対的に流され、その結果チューブの配位は歪められる。高分子鎖のレプテーション運動はスリップリンクの消滅と生成を引き起こす。高分子鎖のコンフォメーションが与えられたとき、応力テンソル $\boldsymbol{\sigma}_p$ は、

$$\sigma_{p\alpha\beta} = \sigma_e \sum_j \langle r_{ja} r_{j\beta} / |r_j| \rangle / a_s \quad (4)$$

で求められる。ここで a_s はスリップリンクモデルの単位長さ、 r_{ja} は j 番目と $j+1$ 番目のスリップリンク間を結ぶチューブセグメントベクトルの α 成分 ($\alpha = \{x, y, z\}$) を表す。応力の単位 σ_e は、平坦弾性率 G_N と $\sigma_e = (15/4)G_N$ の関係¹⁵⁾

で結ばれている。この平坦弾性率 G_N とは、高分子流体の動的粘弾性測定において、比較的振動数の高い領域でほぼ一定の値を示す貯蔵弾性率の値である。

スリップリンクモデルは2つの特徴的な時間スケールを持っている。1つはラウス緩和時間 τ_R でもう1つは最長緩和時間（束縛開放時間） τ_d である。この2つの特徴時間は Z を用いて、 $\tau_R \propto \langle Z \rangle_{eq}^2 t_e$ 、 $\tau_d \propto \langle Z \rangle_{eq}^{3.4} t_e$ と表される。ここで t_e はスリップリンクモデルの時間単位である。チューブの長さの緩和は τ_R の時間スケールで起こり、チューブの配向の緩和は τ_d の時間スケールで起こる。これら2つの特徴的な時間は応力緩和の中に現れる。スリップリンクモデルはチューブセグメントの長さ以下のミクロなダイナミクスを無視しているので、マクロスケールでの流体の局所応力 $\boldsymbol{\sigma}$ をスリップリンクモデルからの直接的な寄与 $\boldsymbol{\sigma}_p$ とスリップリンクモデルで無視した M_e より短い高分子からの応力の寄与（ニュートン流体的な寄与を与えると仮定） $\boldsymbol{\sigma}_d = \eta_d \dot{\boldsymbol{\gamma}}$ の和と考えるのが妥当である。ここで $\dot{\boldsymbol{\gamma}}$ は歪速度テンソル $\dot{\boldsymbol{\gamma}} = \boldsymbol{\kappa} + \boldsymbol{\kappa}^T$ である。このようにして下位階層である SL モデルで局所応力 $\boldsymbol{\sigma}$ を求め、それを上位階層である流体力学計算で用いて流動場を時間発展させると、新しい速度勾配テンソル $\boldsymbol{\kappa}$ が決まる。この一連の操作を繰り返すことで、下位階層と上位階層が矛盾なく相互に連結したマルチスケールシミュレーションを実現する。

流体粒子中に埋め込まれている高分子シミュレーターでは、高分子の全コンフォメーションをマクロスケールで適切な時間ステップ間隔毎 Δt_M の時刻で通信し、この情報を次のステップでの初期条件として用いる。既に述べたようにマクロな現象の特徴的時間とミクロなスケールの現象の特徴的時間との間に大きな時間スケールのギャップがある場合（図1(a)）には、ミクロな系に局所定常の仮定を適用してよく、各時刻で用いるミクロな系の初期条件に特に気を付ける必要はない。⁶⁾ 一方、時間スケールの分離が十分ではないがまだ大きな差がある場合（図1(b)と(c)）、マクロレベルで時間間隔 Δt_M だけ時間を進めるとき、ミクロレベルでは、 $\Delta t_M = N \Delta t_m$ のように多くのステップ数 $N (\gg 1)$ の計算が必要である。⁷⁾ しかしながら、ここで用いるスリップリンクモデルは十分に粗視化されているので、ミクロな状態を解くために用いる時間間隔が、マクロな流動を解くのに用いる時間間隔に近い。3.6節で述べる具体例では、マクロなスケールを解く際に用いる時間間隔を、ミクロな系の Δt_m と等しく取っている ($\Delta t_M = \Delta t_m$)。²⁷⁾ また、1つの高分子鎖の重心の拡散距離は、今考えている時間スケールでは、マクロな流体を記述する流体粒子のサイズと比較して十分に小さいので、隣り合う流体粒子間での高分子鎖の移動は無視できると仮定する。この仮定の下で、異なる流体粒子中のミクロ系のシミュレーションは独立に計算できることになる。このことは、この計算手法において並列計算が非常に有効であることを意味する。

3.5 熱力学との整合性

以上まで大まかに局所サンプリング法を用いた高分子流体のマルチスケール・シミュレーション法について述べたが、このような異なる階層間を接続するシミュレーション法で用いている枠組みが熱力学的な観点から見たときに矛盾がないか、あるいは、如何に熱力学的な理論体系と整合しているかについての研究も進められている。その1つが GENERIC (General Equation for the Nonequilibrium Reversible-Irreversible Coupling)²³⁾ と呼ばれる理論形式である。例えば2つの階層をつなぐマルチスケールシミュレーション法があるとき、この理論形式では、全ての階層の全ての自由度 \mathbf{x} に対する運動方程式が

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{L} \cdot \frac{\delta E}{\delta \mathbf{x}} + \mathbf{M} \cdot \frac{\delta S}{\delta \mathbf{x}}, \quad \mathbf{L} \cdot \frac{\delta S}{\delta \mathbf{x}} = 0, \quad \mathbf{M} \cdot \frac{\delta E}{\delta \mathbf{x}} = 0 \quad (5)$$

の形式で書けることを要請する。²⁴⁾ ここで E と S は全エネルギーと全エントロピーであり、 \mathbf{L} は反対称行列 ($\mathbf{L}^T = -\mathbf{L}$) で、 \mathbf{M} は正値対称行列である。(5) の第二式の要請は、第一式の運動方程式で \mathbf{L} と関連した項がエントロピー増大則 ($dS/dt \geq 0$) を保証し、第三式の要請は、運動方程式で \mathbf{M} と関連した項がエネルギー保存則 ($dE/dt = 0$) を保証する。異なる階層間の結合は、この行列の非対角項中の異なる階層間の自由度を仲介する項により表現される。すなわち、この GENERIC 形式は、全自由度が \mathbf{x} で表される階層間結合モデルに対して、式(5)を満たす反対称行列 \mathbf{L} と正値行列 \mathbf{M} を構築することができれば、そのモデルは熱力学との整合性を少なくとも担保できていることを保証する。

この解説で述べているマルチスケールモデルは、各々の流体粒子が持つ内部エネルギーの時間発展を考慮すると、先に述べた GENERIC 形式に整合することが確かめられている。^{21, 26, 27)} GENERIC 形式は、熱的ゆらぎが重要となる場合に特に有効なものである。もし系内の温度が一定とみなせる場合であれば内部エネルギーの時間変化について考える必要がなくなり、GENERIC 形式にとらわれない、より直感的なモデルを考えることも可能である。

3.6 高分子の微視的状態の移流が必要な例題

上述したマルチスケールシミュレーション法の有効性を示すために、絡み合った高分子溶融体の流動履歴が流れ自身に影響を及ぼし、流動の方向に並進対称性のない系を考える。話を簡単にするために、高分子溶融体は温度が一定であり非圧縮流体と仮定する。そのような系の1つとして、円柱周りの高分子流体の流れ(円柱は無限に長く z 方向を向く。流れと圧力勾配の方向は円柱軸に垂直で x 軸の方向)について我々のグループで行った数値計算の結果について紹介する。²⁷⁾ 既に述べてきたように、マクロスケールの流れを扱うためにラグランジュ流体粒子を導入し、各流体粒子中にマイクロレベルでの高分子鎖のダイナミクスを解くシミュレーションシステム(スリッリンクモデル)を導入する。系の形状の対称性より xy -平面上の流れの問題として取り扱う。図3(a)に示すように、半径 $r_c = 3a$ の円柱が

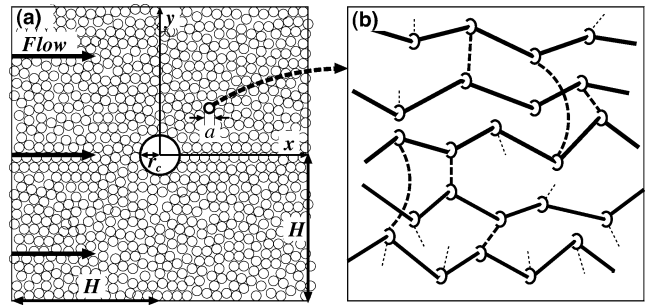


図3 図1(c)の局所サンプリング法を用いた高分子溶融体の流れのマルチスケールシミュレーション。(a)はマクロレベルの流体シミュレーション。半径 r_c の円柱が正方形システム中央に配置され、流体はサイズ a の多数の流体粒子により表されている。システム境界には周期境界条件が課されている。(b)は、ある流体粒子中の高分子鎖のダイナミクス(マイクロレベル)のシミュレーションの模式図を表す。実線は高分子鎖を表し、鎖に付いている輪は他の高分子鎖との絡み合いを表すスリッリンクである。破線は絡み合い対を表し、太い破線は相手となる鎖が図中にある場合で、細い破線は、この図には書かれていない鎖が相手の場合を表す。全ての流体粒子に、このようなマイクロな情報を持たせ、(a)と(b)を相互に連携させながら計算を行う。

一辺 $2H = 30a$ の正方形ボックスの中央に配置されている。 a は流体計算での長さの単位で、流体粒子のサイズである。また、全ての流体粒子には質量 m が与えられている。よって流体の密度は $\rho = m/a^d$ となる。円柱壁面ではマクロな速度場に滑りなし境界条件が課されており、システム境界には周期境界条件が課されている。高分子溶融体の流体粒子は、各高分子鎖が平均で $\langle Z \rangle_{\text{eq}} = 7$ の絡み合い数を有する単分散の線形高分子から構成されているとする(図3(b))。流体を構成している i -番目の流体粒子の方程式は

$$\rho_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_i - (\nabla p)_i + \mathbf{F}_b, \quad \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i \quad (6)$$

で与えられる。ここで \mathbf{F}_b は体積力、 $(\nabla p)_i$ は i -番目の粒子位置での圧力勾配であり、流体の非圧縮性を保証する。応力項を除く、式(6)中の他の全ての変数は、マクロレベルで求めることができる。この局所的な応力テンソルは、マイクロな自由度、すなわち、その流体粒子の位置 \mathbf{r}_i での歪速度の下での高分子の絡み合い状態を表している変数の統計平均(式(4))を用いて $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_p + \boldsymbol{\sigma}_d$ により計算される。この流れ問題のコントロールパラメータはレイノルズ数 $\text{Re} = \rho \bar{v} r_c / \eta_0$ 、ワイゼンベルグ数 $\text{Wi} = \tau_d \dot{\gamma}_{xy}$ 、($\dot{\gamma}_{xy}$ は歪速度テンソル $\boldsymbol{\gamma}$ の xy 成分) 粘度比 η_d / η_0 ($\eta_0 = \eta_d + \eta_{p0}$) の3つである。ここで、 \bar{v} は平均流速、 η_0 は高分子溶融体のゼロ剪断粘度、 η_{p0} はスリッリンクモデルの高分子溶融体のみからなる流体のゼロ剪断粘度である。絡み合い以下の高分子の効果も取り入れたバルクの数値計算から、この高分子溶融体のゼロ剪断粘度 η_0 と最長緩和時間 τ_d は $\eta_0 = 19.4t_c \sigma_e$ と $\tau_d = 200t_c$ である。この円柱の周りで流体粒子は、その流線に沿った位置に応じた歪速度を経験するので、高分子の分子形態は円柱に対して上流側と下流側で非対称となる。これらの2つの領域にいる高分子の形態の差は、式(4)を介してマクロスケールでの応力の分布として観測される。ここで紹介す

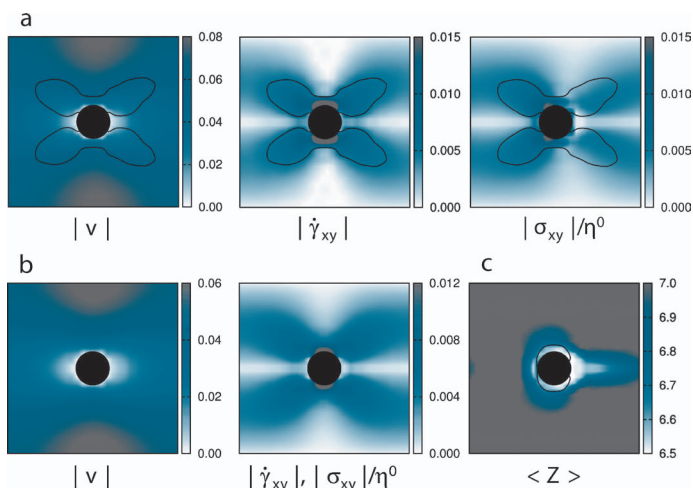


図4 円柱障害物の周りの (a) 高分子溶液体 ($Z_{eq}=7, \eta_d/\eta_0=0.1$) と (b) ニュートン流体 ($\eta_0=\eta_d$) の定常状態での2次元流れ。それぞれ、速度場の大きさ $|v| [a/t_c]$ 、歪速度の xy 成分の大きさ $|\dot{\gamma}_{xy}| [1/t_c]$ とゼロ剪断粘度で規格化した剪断応力 $|\sigma_{xy}|/\eta_0 [1/t_c]$ を示す。 (c) は (a) 高分子溶液体中での絡み合い点数 Z の空間分布である。 (a) での黒の実線の内側は $Wi \geq 1$ を、 (c) では $\tau_R \dot{\gamma} \geq 1$ が成り立つ領域を表している。ここで $\dot{\gamma} \equiv \sqrt{\text{Tr}(\boldsymbol{\kappa}^T \cdot \boldsymbol{\kappa})}$ である。(EPLの許諾を得て掲載)

る計算では、約1,000個の流体粒子が、初期状態として系中にはほぼ一様に配置され、その流体粒子1つ1つに10,000本の高分子鎖²⁸⁾を有するマイクロな系が埋めこまれており、流体粒子は式(6)に従って運動する。つまり、1千万本の高分子鎖の運動を同時に解くことになる。

この系に体積力 $\mathbf{F}_b/(\eta_0 a t_c) = (5 \times 10^{-4}, 0)$ を印加すると、高分子溶液体の流れは約500 t_c 後には系は定常状態に達し、系の平均速度は $(5.5 \times 10^{-2}, 0) [a/t_c]$ ($Re=0.2$) となる。図4(a)にこの高分子溶液体の定常状態での流れの様子を、また、比較のために (b) に η_d の粘度を持つニュートン流体の場合の結果を示す。この条件下では流れはどちらも層流で円柱の上流と下流側で速度の大きさ $|v|$ は対称となる。一方、図4から分かるように高分子溶液体の流れでは、応力 σ_{xy} は上流と下流側で明らかな非対称性を示す。一般的に、粘弾性応力は、式(3)で示されているように剪断速度 $\dot{\gamma}_{xy}$ の履歴が影響する。また、マクロなスケールの流動場に依存する絡み合い点数 $\langle Z \rangle$ の空間分布を得ることができる。このような高分子の絡み合い量というマイクロな詳細と関係した量のマクロスケールでの空間分布は、マルチスケールシミュレーションのみで可能であり、我々のグループで初めて示されたものであることを強調しておきたい。図4(c)から分かるように、絡み合いの数は円柱の周りでは若干減少する。これは、 $\tau_R \dot{\gamma} > 1$ の時 (図4(c)の黒い実線の内側、ここで $\dot{\gamma} \equiv \sqrt{\text{Tr}(\boldsymbol{\kappa}^T \cdot \boldsymbol{\kappa})}$ である)、高分子鎖のプリミティブパスは非常に強く引き伸ばされ、 $\langle Z \rangle_{eq} a$ よりも長く引き伸ばされた高分子は容易に収縮し、それが絡み合いの解消を引き起こすためである。また、円柱のちょうど上流側と下流側でも $\langle Z \rangle$ の減少が見られるが、これは有限の $|\dot{\gamma}_{xy}|$ のためである。流体の移流は下流側で $\langle Z \rangle < \langle Z \rangle_{eq}$ の領

域を広げる働きをする。この下流側の広がりはおおよそ $\tau_R |\dot{v}| (\sim r_c)$ 程度であると見積もられる。

以上のように、応力の計算に構成方程式を用いることなく、流体粒子に埋め込まれたマイクロな高分子モデルのダイナミクスを直接解くことで局所応力を求め、それに従ってマクロな流動をラグランジュ的に時間発展させるマルチスケールシミュレーションが十分実用的であることを今回の結果は示している。この方法は任意の流れについて適応可能であり、現在、工学的に重要な、より複雑な3次元流れに対する応用研究を進めている。

4. まとめと将来展望

本解説で取り上げた高分子液体のマルチスケールシミュレーション法では、高分子鎖のコンフォメーションの詳細情報を流体粒子の中に保持し、それを自然に移流させるラグランジュ粒子法を用いることで、従来のオイラー描像を用いたマルチスケールシミュレーション法で直面していた「相関の強いマイクロな自由度の移流の問題」を解決することができた。さらに、ミクロスケールの内部状態が経験する変形速度の履歴に由来するメモリー効果を記述することにも成功した。この方法では、マイクロな高分子モデルとしてスリップリンクモデルが使われているが、他の粗視化モデルに入れ替えることも容易である。例えば、線形あるいは分岐構造を持つ高分子や、そのブレンド、そして、分子量分布を持つ高分子を扱える粗視化されたマイクロなモデルに置き換える、もしくは、将来提案される他の有効なモデルに置き換えれば、特に大きな変更なしに、様々な高分子溶液体に応用可能である。大規模数値計算において並列計算が主流になりつつある現在、このマルチスケールシミュレーション法は、材料設計の観点から必要な性質を持つ新しい材料を開発するという逆問題にも有効である。

一方、各階層の現象を有効に説明する新しい物理モデルの構築とミニマム化 (数値計算的観点での軽量化) は常に重要である。階層間を繋ぐことが本質的に重要でない問題については、このようなヘビーな計算を伴うマルチスケールシミュレーションを使う積極的な動機はない。また、問題によっては (1) パラメータ連結、あるいは (2) 領域分割の方法がより有効である場合も多いであろう。いずれにせよ、各階層のモデルを適切に連携/統合するマルチスケールシミュレーションのアプローチは、我々に新しい物理学的洞察をもたらし、学問体系そのものをより富んだものにする確信する。

本研究で開発されたマルチスケールシミュレーション法は、通常の分子動力学法とは異なり、膨大な計算ユニットを持つコンピューターとの相性が極めて高いというユニークな特徴も持っている。これは、計算負荷の最も高い分子動力学法による計算部分が各計算点で独立であるため、計算の並列実行が容易であることに起因する。この方法を「京」のような膨大なCPUを持つコンピューターや、大規

模な GPGPU (General-purpose computing on graphics processing units; GPU による汎目的計算) を用いることにより,^{29,31)} 数年内に分子数が 100 億個にも達する世界最大規模の分子動力学シミュレーションを実現することができると思われる。近い将来、これまで有効なシミュレーションを行うことが難しかった大規模な流動・変形現象を伴う機能性材料の製造プロセスをまるごと解析するといった、理論や実験では全く歯が立たない未開拓の問題へのアプローチが可能となるだろう。

本研究は科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業 (JST-CREST)/マルチスケール・マルチフィジックス現象の統合シミュレーション領域「ソフトマターの多階層/相互接続シミュレーション」の一環として行われた。本稿で紹介した具体的な例題については、村島隆浩氏と安田修悟氏の貢献が最も大きい。畝山多加志氏、増淵雄一氏、泰岡顕治氏をはじめとする CREST 実施メンバーの多大な貢献にも感謝したい。

参考文献

- 1) 土井正男: 日本物理学会誌 **50** (1995) 295; 同 **59** (2004) 84; 兵頭志明, 土井正男: 高分子論文集 **67** (2010) 164.
- 2) 第一原理分子動力学法では、与えられた原子配置について電子の波動関数を量子力学によって計算し、原子間に働く力を求め、その力を用いて原子の運動を古典的分子動力学法によって解く。
- 3) M. Laso and H. Öttinger: *J. Non-Newton. Fluid Mech.* **47** (1993) 1.
- 4) M. A. Hulsen, A. P. G. van Heel and B. H. A. A. van den Brule: *J. Non-Newton. Fluid Mech.* **70** (1997) 79.
- 5) P. Halin, *et al.*: *J. Non-Newton. Fluid Mech.* **79** (1998) 387.
- 6) S. Yasuda and R. Yamamoto: *Phys. Fluids* **20** (2008) 113101.
- 7) S. Yasuda and R. Yamamoto: *Europhys. Lett.* **86** (2009) 18002; *Phys. Rev. E* **81** (2010) 036308; *Phys. Rev. E* **84** (2011) 031501; 安田修悟, 山本量一: 分子シミュレーション研究会誌アンサンブル **13** (2011) 105.
- 8) S. F. Edwards: *Proc. Phys. Soc.* **92** (1967) 9.
- 9) P. G. de Gennes: *J. Chem. Phys.* **55** (1971) 572.
- 10) M. Doi and S. F. Edwards: *The Theory of Polymer Dynamics* (Oxford Univ. Press, 1986); 土井正男: 日本物理学会誌 **42** (1987) 333.
- 11) D. W. Mead, R. G. Larson and M. Doi: *Macromolecule* **31** (1998) 7895.
- 12) G. Ianniruberto and G. Marrucci: *J. Rheol.* **45** (2001) 1305; G. Ianniruberto and G. Marrucci: *J. Non-Newton. Fluid Mech.* **102** (2002) 383.
- 13) A. E. Likhtman and R. S. Graham: *J. Non-Newton. Fluid Mech.* **114** (2003) 1.
- 14) Y. Masubuchi, *et al.*: *J. Chem. Phys.* **115** (2001) 4387.
- 15) S. Shanbhag, *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001) 195502.
- 16) M. Doi and J. Takimoto: *Phil. Trans. R. Soc. A* **361** (2003) 641.
- 17) A. E. Likhtman: *Macromolecule* **38** (2005) 6128.
- 18) K. Kremer and G. S. Grest: *J. Chem. Phys.* **92** (1990) 5057.
- 19) A. E. Likhtman, S. K. Sukumaran and J. Ramirez: *Macromolecule* **40** (2007) 6748.
- 20) A. P. G. van Heel, M. A. Hulsen and B. H. A. A. van den Brule: *J. Rheol.* **43** (1999) 1239; E. A. J. F. Peters, *et al.*: *J. Rheol.* **44** (2000) 811; M. A. Hulsen, E. A. J. F. Peters and B. H. A. A. van den Brule: *J. Non-Newton. Fluid Mech.* **98** (2001) 201.
- 21) M. Ellero, M. Kröger and S. Hess: *J. Non-Newton. Fluid Mech.* **105** (2002) 35; M. Ellero, P. Español and E. G. Flekkøy: *Phys. Rev. E* **68** (2003) 041504.
- 22) T. Murashima and T. Taniguchi: *J. Polym. Sci. B* **48** (2010) 886.
- 23) M. Grmela and H. C. Öttinger: *Phys. Rev. E* **56** (1997) 6620; H. C. Öttinger and M. Grmela: *ibid.* **56** (1997) 6633.
- 24) 熱揺動の寄与も入れて式(5)を確率微分方程式とした形式が現在は主流であるが、分かりやすくするために熱揺動項の無い初期の形式で説明している。熱揺動を入れた形式については、文献21, 25, 26を参照されたい。
- 25) H. C. Öttinger: *Beyond Equilibrium Thermodynamics* (Wiley-Interscience, 2005).
- 26) A. Vázquez-Quesada, M. Ellero and P. Español: *Phys. Rev. E* **79** (2009) 056707.
- 27) T. Murashima and T. Taniguchi: *Europhys. Lett.* **96** (2011) 18002; 村島隆浩, 谷口貴志: 分子シミュレーション研究会誌アンサンブル **13** (2011) 118.
- 28) 1 流体粒子当りの高分子数が 10^3 以上であれば、実験的に可能な剪断速度領域での剪断及び伸長レオロジー挙動を再現するのに十分であることを確認している。
- 29) T. Narumi, *et al.*: *Int. J. Comp. Methods* **8** (2011) 561; 坂牧隆司, 成見 哲, 泰岡顕治: 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム **2** (2009) 89.
- 30) T. Hamada, *et al.*: *Proc. SC2009* (Portland, USA, 2009).
- 31) T. Uneyama: *Nihon Reoroji Gakkaishi* (*J. Soc. Rheol. Japan*) **39** (2011) 135; 畝山多加志: 分子シミュレーション研究会誌アンサンブル **13** (2011) 112.

著者紹介



谷口貴志氏: ソフトマターの物理, 特に高分子系及び多成分脂質二重膜の物理に興味がある。



山本量一氏: 専門はソフトマターの計算科学, 科学と工学の境界領域など, 人があまり本気でやらないところを突き詰めた。

(2011年11月7日原稿受付)

Multiscale Simulations for Soft Matters

Takashi Taniguchi and Ryoichi Yamamoto

abstract: Multiscale simulation methods have been developed based on the local stress sampling strategy and applied to three flow problems with different difficulty levels: (a) general flow problems of simple fluids, (b) parallel (one-dimensional) flow problems of polymeric liquids, and (c) general (two- or three-dimensional) flow problems of polymeric liquids. In our multiscale methods, the local stress of each fluid element is calculated directly by performing microscopic or mesoscopic simulations according to the local flow quantities instead of using any constitutive relations. For general (two- or three-dimensional) flow problems of polymeric liquids (c), it is necessary to trace the history of microscopic information such as polymer-chain conformation, which carries the memories of past flow history, along the streamline of each fluid element. A Lagrangian-based CFD is thus implemented to correctly advect the polymer-chain conformation consistently with the flow. On each fluid element, coarse-grained polymer simulations are carried out to consider the dynamics of entangled polymer chains that show extremely slow relaxation compared to microscopic time scales. This method is successfully applied to simulate a flow around a cylindrical obstacle.

重いクォーク物理の進展—QCDと量子力学系ポテンシャルの対応—

駒 佳明 (沼津工業高等専門学校 410-8501 沼津市大岡 3600)
 駒 美保* (沼津工業高等専門学校 410-8501 沼津市大岡 3600)

重いクォークの物理に関して精密な実験データが精力的な研究により蓄積されている。既知のクォークコニウムに加えて、従来のクォークコニウムの描像では説明が困難なエキゾチックな粒子が次々と発見されるなど、最近の重いクォークの物理の進展はめざましい。現象論的方法やクォーク模型に基づく分類など、様々な手法による研究が盛んに行われている中で、重いクォークの物理を量子色力学 (QCD) に基づいて系統的に理解することは、ハドロン物理において重要な課題である。本稿では、QCD に基づいたクォークコニウムの研究のうち、QCD の有効場の理論であるポテンシャル非相対論的 QCD の導出と、それに含まれる相対論的補正項を含む重いクォーク間ポテンシャルの格子 QCD 数値シミュレーションを用いた非摂動的な決定について、最近の成果を含めて解説する。

1. はじめに

宇宙を構成する素粒子の一つであるクォークには、アップ、ダウン、ストレンジ、チャーム、ボトム、トップの6種類のフレーバーがあることが知られている。これらのクォークはグルーオンを媒介して相互作用をし、核子や中間子などのハドロンを形成する。この力学を記述するのが SU(3) ゲージ対称性をもつ場の量子論、量子色力学 (quantum chromodynamics; QCD) である。

QCD ではクォークやグルーオンが運ぶ運動量に応じて、相互作用の強さを決める結合定数 α_s が極端に変化する。高エネルギー (近距離) 領域では α_s が小さくなり、その展開に基づく摂動論が適用できるものの、低エネルギー (長距離) 領域では α_s が逆に大きくなるため摂動論は破綻する。ハドロンのような束縛状態では低エネルギーの物理が必然的に絡むため、結果として QCD に基づいてハドロンの性質を調べるためには非摂動的な方法が必要になる。例えば、クォークはこれまで単体で観測されていないが、これは QCD の非摂動的な性質に起因して、ハドロンの中に閉じ込められているためと考えられている。

この点に関して重いクォーク系の物理、特に重いクォークと反クォークからなるクォークコニウムと呼ばれる中間子の物理は、クォークの閉じ込めやハドロン形成に絡む QCD の非摂動的な性質を解明する上で非常に貴重な情報を含んでいる。¹⁾ 重いクォークとはチャーム、ボトム、トップクォークを指すが、それらの質量はそれぞれ陽子の約 1.4 倍、4.5 倍、170 倍にもなる (陽子の質量は $938 \text{ MeV}/c^2$, c は光速)。チャームクォークからなるクォークコニウムをチャーモニウム、ボトムクォークからなるクォークコニウムをボトモニウムという。^{*1} 1974 年のブルックヘブン国立研究所 (BNL) とスタンフォード線型加速器センター (SLAC) における最初のチャーモニウム J/ψ の発見、²⁾ そして、1977 年のフェルミ国立加速器研究所による最初のボトモニウム Υ の発見³⁾ 以来、現在までに図 1 に示すよう

な^{*2}数多くの状態が観測されている。⁵⁾

クォークコニウムの研究では、発見当初から現在に至るまで、クォーク質量が十分大きいことに着目した非相対論的二体系の量子力学的な記述に基づく研究が数多くなされている。¹⁾ この観点では、既知のクォークコニウムの実験データを再現するようにクォークと反クォーク間のポテンシ

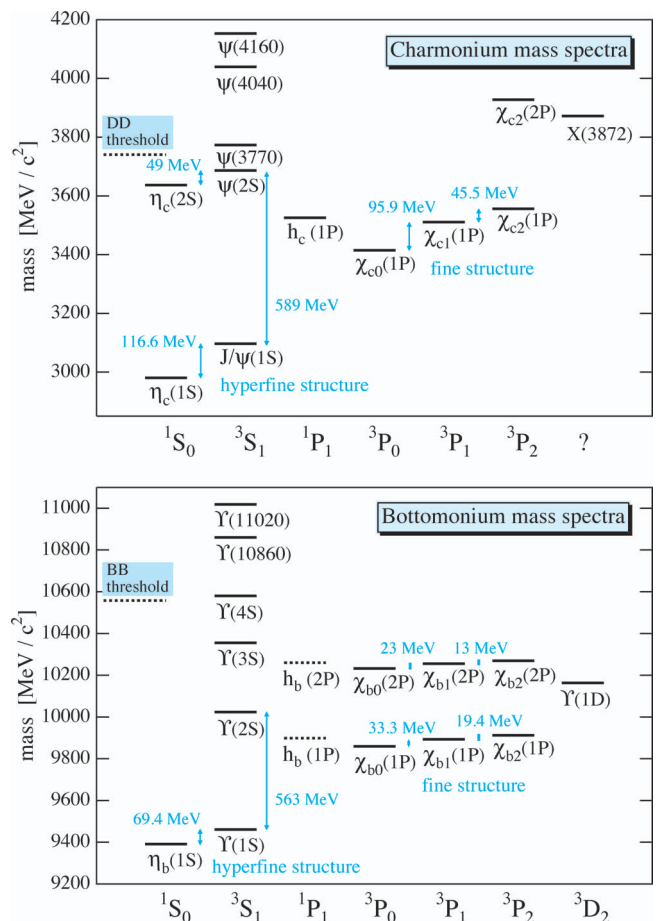


図1 チャーモニウム (上) とボトモニウム (下) の質量スペクトル。単位は MeV/c^2 。横軸のラベルは量子数 $^{2S+1}L_J$ で S はスピン、 L は軌道角運動量、 $J=L+S$ は全角運動量を表す。

* 日本学術振興会特別研究員

*1 トップクォークはクォークコニウムを作る前に弱い相互作用で崩壊してしまうので、トポニウムは観測されていない。

*2 この図には 2011 年 3 月に公表された Belle@KEK の h_b のデータも含める。⁴⁾ 一方、量子数が確定していない状態も数多く報告されているが、一例として $X(3872)$ を除き、図には載せていない。

ルを指定すれば、他の様々な量子数をもつクォークoniumの質量、波動関数や状態間の遷移などを系統的に計算できるという利点があり、未知のクォークoniumの予言も可能である。このような現象論的な方法からは、クォークと反クォークの距離に比例したポテンシャルが質量スペクトルのパターンに寄与していることが示唆されており、クォークの閉じ込めの根拠を与えている。しかし一方で、QCDと量子力学系ポテンシャルとの対応は非自明であり、どのような条件下で対応が見つかるかを明らかにすることは興味深い課題として残されている。

近年、この対応をつける有効場の理論としてポテンシャル非相対論的QCD (pNRQCD) が提唱された。⁶⁾ この理論はQCDを重いクォーク系に適用したときに現れるエネルギースケールの階層性に着目して導きだされた。pNRQCDでは、ポテンシャルが静的ポテンシャルと、クォーク質量を m_q として $1/m_q$ の展開で分類される相対論的補正項から構成される。この補正項の中には、現象論でスペクトルの微細構造などを説明するために用いられているスピンの依存する補正項が含まれているだけでなく、現象論では考慮されていないQCDならではの補正項も含まれている。ポテンシャルは非摂動的に定義されており、これを格子QCDシミュレーションを利用して決定すれば、QCDと非相対論的量子力学の対応が見つかることになる。

本稿では、QCDとpNRQCDの対応について、格子QCDシミュレーションの結果も含めて解説する。これをするにあたり、まずQCDとクォークoniumの関係が、量子電気力学 (quantum electrodynamics; QED) とポジトロニウムとの関係に対応していることに着目する。ポジトロニウムは電子と陽電子の束縛状態で、そのエネルギースペクトルの実験データは非常に精度が高く、QEDの精密検証に重要な役割を果たしている。QEDの精密計算において、非相対論的QED (NRQED),⁷⁾ そしてポテンシャル非相対論的QED (pNRQED)⁸⁾ が有効場の理論として活躍するが、そのQCD版こそがNRQCD、そしてpNRQCDである。

2. ポジトロニウムとクォークonium

ポジトロニウムのエネルギー準位は、大雑把には水素原子の問題と同様に計算できる。量子力学的には、換算質量を μ 、結合定数を $\alpha=e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c)$ として、ハミルトニアンが $H=p^2/2\mu-ahc/r$ で与えられる固有値問題を解けばよく、エネルギー固有値は、主量子数を n とすると $E_n=-(1/2n^2)\mu c^2\alpha^2$ となる。基底状態の電子と陽電子の相対運動量を $p=\mu v$ とすると相対速度は $v=ac$ である。ここで電子質量 $m_e=0.511\text{ MeV}/c^2$ 、 $\mu=m_e/2$ 、結合定数 $\alpha=1/137$ を代入すると、基底状態のエネルギーは $E_1=-(1/4)m_e c^2\alpha^2=-6.80\text{ eV}$ 、第一励起状態とのエネルギー差は $E_2-E_1=(3/16)m_e c^2\alpha^2=5.10\text{ eV}$ となり、図2に示すエネルギー準位をほぼ再現することがわかる。

ところが実験データはかなり精密であり、図2では縮退

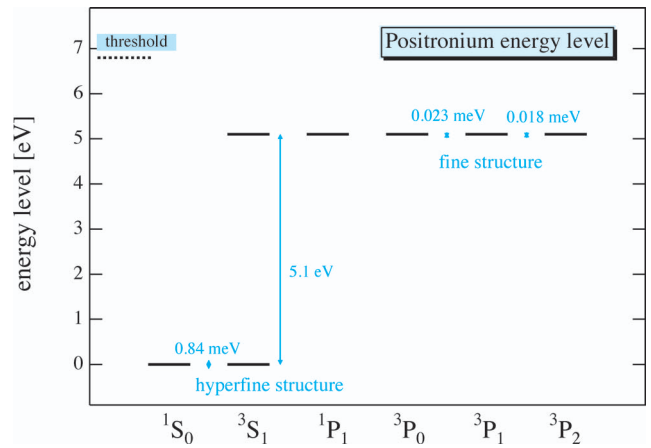


図2 ポジトロニウムのエネルギー準位。 $1S_0$ の準位を基準としたもの。

しているように見えるそれぞれ $n=1$ と $n=2$ の状態は実際は $\Delta E(3S_1-1S_0)=0.841150(3)\text{ meV}$ 、また、 $\Delta E(3P_1-3P_0)=0.022759(57)\text{ meV}$ 、 $\Delta E(3P_2-3P_1)=0.018200(27)\text{ meV}$ ほど分離している。⁹⁾ これらはそれぞれ超微細構造、微細構造と呼ばれており、ハミルトニアンに中心力以外にスピンや軌道角運動量に依存した寄与があることを意味している。これらの寄与がどのような形で与えられるかはクーロンポテンシャルの量子力学だけでは解決できず、QEDに基づく束縛状態の解析が必要となる。

一方、図1をみると、ポトモニウムの質量スペクトルは比較的ポジトロニウムに近いパターンであることがわかる。そして、チャーモニウムの質量スペクトルはポトモニウムのそれをさらに乱したような形になっている。いずれのスペクトルにも超微細構造、微細構造がみられ、クォークの質量が軽くなるほど顕著である。^{*3} また、2S状態に比べて1P状態の質量が平均的に小さくなっていることもわかる。これは中心力ポテンシャルにクーロンのもの以外の寄与が混じっていることを示唆している。一方で、1Sと2S状態の間のエネルギー差がチャーモニウムとポトモニウムで600 MeV弱と同程度であることは興味深い。

QEDでポジトロニウムを解析するにあたり、一つの方法はベアテ・サルピーター (BS) 方程式を解くことである。BS方程式に基づいてポジトロニウムのエネルギー準位を計算する場合、よく取られる方法はBS方程式に谷-フォルディ変換を行って様々な相対論的補正項を含むシュレディンガー方程式 (二成分スピノルを含むので正確にはパウリ方程式) に帰着させ、それを解くというものである。この方法で、例えば $O(m_e c^2\alpha^4)$ までを考慮した補正項を用いれば、 $O(10^{-4})$ の精度でポジトロニウムのエネルギー準位を得ることができる。ただし、実験ではポジトロニウムの超微細構造は $O(10^{-6})$ の精度で測定されているので、

*3 ポジトロニウムのエネルギーは電子2つ分の静止エネルギー ($2 \times 0.511\text{ MeV}$) と結合エネルギー -6.8 eV の和であるが、結合エネルギーの割合は極端に小さい。これはある意味、ポジトロニウムが重いクォーク系の極限のようになっており、このため $\Delta E(2S-1S)$ のエネルギー差に比べ超微細構造、微細構造が小さいと考えることができる。

理論計算もこれと同等以上の精度が求められる。⁹⁾ この方法では相互作用を決める部分以外にも様々な近似を使っているので、近似の精度を上げることは容易ではないものの、 $O(m_e c^2 \alpha^7)$ までの計算結果も報告されている。⁹⁾

もう一つの方法は、束縛系に適用できる非相対論的な有効場の理論を構築し、それを解析するという方法である。ポジトロニウムやクォーコニウムのように、質量に対して束縛エネルギーが小さい場合には、ローレンツ対称性はあまり重要な役割を果たさず、むしろ非相対論的な束縛状態としての性質が主に現れるはずである。^{*4} それならば、ローレンツ対称性を前面に押し出したBS方程式をだんだん非相対論的極限に近似して使うより、非相対論的な枠組みから出発して、相対論的補正項を順次導入し、その枠組みの中で束縛状態を議論しても良さそうである。実際にポジトロニウムやクォーコニウムのスペクトルをみる限りでは、この方法によりスペクトルの超微細構造や微細構造を、その限界も含めて系統的に説明できそうである。

ポジトロニウムの場合は、QEDにおいて α の摂動展開が可能のため、BS方程式でも有効場の理論でも、最終的に同じ答えを導くことができる。しかし、クォーコニウムの場合は本質的に非摂動論的であるため、近似を系統的にコントロールするためには、後述するように、有効場の理論の方が適していると考えられる。

3. 有効場の理論の構築

QED, QCDの非相対論的な有効場の理論, NRQEDとNRQCDは、1986年に、Caswell, Lepageらによって提唱された。⁷⁾ ここでは、NRQEDを例にとり、その構築手順を解説する。簡単のため、以降では $\hbar=c=1$ とする。

ポジトロニウムでは、系を特徴づけるエネルギースケールは、電子と陽電子の質量 m_e 、相対運動量 $p=\mu v \sim m_e v$ 、束縛エネルギー $E=(\alpha^2/2)\mu \sim m_e v^2$ である。 $\alpha \sim v$ なので、 α の展開と v の展開は同等である。NRQEDの構成要素は、表1にまとめるように、二成分スピノルの電子場 ψ 、陽電子場 χ_c 、電磁場のスカラーポテンシャルとベクターポテンシャル $e\phi$, $e\mathbf{A}$ 、共変微分の時間成分と空間成分 D_0 , \mathbf{D} 、電場 $e\mathbf{E}$ と磁場 $e\mathbf{B}$ である。QEDでは、電子は四成分のディラックスピノルで表されるが、NRQEDでは、電子・陽電子の対生成は起こらない系を扱うとして、電子・陽電子の場として独立な二成分のパウリスピノルを用いる。

これらの場から、要求される対称性(ゲージ対称性, パリティ保存, 回転対称性, ユニタリー性, 時間反転対称性, ガリレイ共変性)と、表1にまとめられた場の次数の見積もりを考慮して、解析に必要な次数に応じたラグランジアンを書き下す。例えば相対論的補正項の入った最低次のラグランジアンは $O(m_e \alpha^4)$ であり、

^{*4} ここで議論しているのは、相互作用が良くわかっていて、その大きさが小さい場合である。重陽子のように、強い引力と強い斥力が相殺して小さな束縛エネルギーを出すような、束縛エネルギーが小さくても相対論効果が大きくなる系もある。

表1 NRQEDを構成する場と、その次数の見積もり。⁷⁾ 電子が $dx \sim 1/p$ に局在していることと規格化条件 $\int d^3x \psi^\dagger \psi \sim 1$ から $O(\psi^\dagger \psi) = O((m_e v)^3)$ 、従って $O(\psi) = O((m_e v)^{3/2})$ 、また、 $D^2/2m_e$ の期待値は $O(m_e v^2)$ のエネルギーとなることから $O(\mathbf{D}) = O(m_e v)$ などと勘定する。

場	次数	名称
ψ	$(m_e v)^{3/2}$	電子場 (消滅演算子)
χ_c	$(m_e v)^{3/2}$	陽電子場 (消滅演算子)
$e\phi$	$m_e v^2$	スカラーポテンシャル
$e\mathbf{A}$	$m_e v^3$	ベクターポテンシャル
D_0	$m_e v^2$	共変微分 (時間成分) $\partial_0 + ie\phi$
\mathbf{D}	$m_e v$	(空間成分) $\nabla - ie\mathbf{A}$
$e\mathbf{E}$	$m_e^2 v^3$	電場 $e\mathbf{E} = -e\nabla\phi$
$e\mathbf{B}$	$m_e^2 v^4$	磁場 $e\mathbf{B} = e\nabla \times \mathbf{A}$

$$\mathcal{L}_{\text{NRQED}} = \int d^3x [\mathcal{L}_{\text{kin}} + \mathcal{L}_{\text{bilin}} + \mathcal{L}_{\text{cont}}], \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\text{kin}} = & \psi^\dagger \left[iD_0 + \frac{\mathbf{D}^2}{2m_e} + \frac{\mathbf{D}^4}{8m_e^3} \right] \psi \\ & + (\psi \rightarrow \chi_c, e \rightarrow -e) - \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}, \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\text{bilin}} = & \psi^\dagger \left[\frac{e c_D}{8m_e^2} (\mathbf{D} \cdot \mathbf{E} - \mathbf{E} \cdot \mathbf{D}) + \frac{ie c_S}{8m_e^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{D} \times \mathbf{E} - \mathbf{E} \times \mathbf{D}) \right. \\ & \left. + \frac{e c_F}{2m_e} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right] \psi + (\psi \rightarrow \chi_c, e \rightarrow -e), \end{aligned} \quad (3)$$

$$\mathcal{L}_{\text{cont}} = -\frac{d_s}{m_e^2} \psi^\dagger \psi \chi_c^\dagger \chi_c + \frac{d_v}{m_e^2} \psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \psi \cdot \chi_c^\dagger \boldsymbol{\sigma} \chi_c \quad (4)$$

となる。 \mathcal{L}_{kin} は相対論的な運動エネルギー $\sqrt{\mathbf{p}^2 + m_e^2}$ の展開や電磁場の運動項から成るので、あわせて運動エネルギー項とする。 $\mathcal{L}_{\text{bilin}}$ は双一次形式の相互作用項、 $\mathcal{L}_{\text{cont}}$ は四点相互作用項である。 c_D, c_S, c_F, d_s, d_v はマッチング係数と呼ばれ、QEDとNRQEDで同じ物理量を同じゲージで計算した際に、結果が一致するように決められる。例えば、散乱振幅をファインマンダイアグラムを用いて計算し、それが α の各次数で一致するように決定する。上のラグランジアンの場合、次のようになる。

$$\begin{aligned} c_D = 1 + O(\alpha), \quad c_S = 1 + O(\alpha), \quad c_F = 1 + O(\alpha), \\ d_s = \frac{3\pi\alpha}{2} + O(\alpha^2), \quad d_v = -\frac{\pi\alpha}{2} + O(\alpha^2). \end{aligned} \quad (5)$$

なお、精度(α の次数)を上げたい場合には $\mathcal{L}_{\text{NRQED}}$ に高次の相互作用項を追加する必要がある。その際、新たなマッチング係数の導入が必要となるが、その決定とあわせて既出のマッチング係数 $c_{D,S,F}$ の $O(\alpha)$ の寄与、 $d_{s,v}$ の $O(\alpha^2)$ の寄与も含めれば、高次のラグランジアンが得られる。有効場理論の構築と束縛状態の計算が分離しているため、マッチング係数の計算では散乱振幅を考えれば良く、束縛状態の情報を使う必要はない。NRQEDではこのようにして逐次的に精度の高い計算ができる枠組みに移行することができる。

4. ポテンシャル非相対論的QED (pNRQED)

NRQEDを用いると電子や陽電子の非相対論的な束縛系

について高精度の理論計算が可能である。しかし、束縛問題では、束縛エネルギー $E \sim m_e v^2$ より有意に大きい運動量 $p \sim m_e v$ を運ぶ場が依然として存在するので、相互作用項の次数の見積りに不定性が残る。従って、計算の度に各次数の寄与を注意深く見積もる必要がある。そこで、NRQED の運動量 $p \sim m_e v$ の場を積分した pNRQED が 1998 年に Pineda と Soto によって提唱された。⁸⁾

pNRQED のラグランジアンは、NRQED と同じパウリスピノルの電子・陽電子の場と、運動量の大きさが $m_e v^2$ 程度の電磁場で、NRQED ラグランジアンをフーリエ変換のような形で与えられる。

$$L_{\text{pNRQED}}(\psi, \chi_c) = L_{\text{kin}} + L_{\text{pot}}, \quad (6)$$

$$L_{\text{kin}} = \int d^3\mathbf{x} \left(\psi^\dagger(t, \mathbf{x}) \left\{ iD_t + \frac{\mathbf{D}^2}{2m_e} + \frac{\mathbf{D}^4}{8m_e^3} \right\} \psi(t, \mathbf{x}) + (\psi \rightarrow \chi_c, e \rightarrow -e) - \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \right), \quad (7)$$

$$L_{\text{pot}} = - \int d^3\mathbf{x}_1 d^3\mathbf{x}_2 \psi^\dagger(t, \mathbf{x}_1) \chi_c^\dagger(t, \mathbf{x}_2) \times V(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2) \chi_c(t, \mathbf{x}_2) \psi(t, \mathbf{x}_1). \quad (8)$$

ここで、 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ と $\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2$ は電子・陽電子の座標とスピンである。また、 $\mathbf{r} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$ は相対座標、 \mathbf{p} は相対運動量である。 L_{pot} には、時間方向には局所的で空間方向には非局所的、つまり r 依存性のあるポテンシャル V が導入される。この点は次のように理解できる。電子・陽電子が、サイズ r のポジトロニウムを構成するとき、典型的な運動量は $p \sim 1/r \sim m_e v$ で、エネルギー $E \sim m_e v^2$ である。このとき、電子・陽電子間を媒介する電磁場の四元運動量を (k_0, \mathbf{k}) として、 $(m_e v^2, m_e v)$ と $(m_e v^2, m_e v^2)$ が許される。ここで、 $(m_e v^2, m_e v)$ の電磁場の伝搬関数 $1/(k_0^2 - \mathbf{k}^2)$ を積分するとき、 $k_0^2 \ll \mathbf{k}^2$ として k_0 の寄与を無視すると、時間方向に局所的で相対座標 \mathbf{r} の関数となる。 V の決定は、NRQED と pNRQED とをマッチングすることに相当する。なお、残った $(m_e v^2, m_e v^2)$ のスケール (ウルトラソフトスケールと呼ぶ) の電磁場は、波長がポジトロニウムサイズ r より大きくなるので重心の周りで多重極展開することができ、時間に依らないエネルギーとして評価することもできる。この寄与は $O(m_e \alpha^5)$ から考慮する必要がある。⁸⁾

$L_{\text{pNRQED}}(\psi, \chi_c)$ は、 ψ と χ_c およびベクトルポテンシャル \mathbf{A} から電子-陽電子対のゲージ不変な状態 (波動関数) S を構成してさらに変形できる。この際、共変微分 \mathbf{D} を重心座標 \mathbf{R} と相対座標 \mathbf{r} で表し、ゲージ場を \mathbf{R} のまわりで展開し、 S の運動項と、それ以外の \mathbf{p}, \mathbf{r} の関数の部分に分け、さらに $V(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2)$ とあわせて $1/m_e$ のべきで整理すると、

$$L_{\text{pNRQED}}(S) = \int d^3\mathbf{R} d^3\mathbf{r} S^\dagger \left[i\partial_0 - \frac{\mathbf{P}^2}{4m_e} - \left\{ \frac{\mathbf{p}^2}{m_e} - \frac{\mathbf{p}^4}{4m_e^2} + V^{(0)} + \frac{V^{(1)}}{m_e} + \frac{V^{(2)}}{m_e^2} + \dots \right\} \right] S - \int d^3\mathbf{x} \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \quad (9)$$

という形に書ける。そして、 $\{\dots\}$ の中が相対自由度を含むシュレーディンガー方程式のハミルトニアンとなる。

静的ポテンシャル $V^{(0)}$ と補正項 $V^{(i \geq 1)}$ は、NRQED で電子・陽電子の四点関数を計算し、そのフーリエ変換と式 (9) を対応づけることで得られる。例えば $O(m_e \alpha^4)$ では、

$$V^{(0)} = -\frac{\alpha}{r}, \quad V^{(1)} = 0, \\ V^{(2)} = (\pi\alpha(c_D - 2c_F^2) + d_s + 3d_v)\delta^{(3)}(\mathbf{r}) - \frac{\alpha}{2r} \left(\mathbf{p}^2 + \frac{1}{r^2} \mathbf{r} \cdot (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}) \mathbf{p} \right) + (c_S + 2c_F) \frac{\alpha}{2r^3} \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} + c_F^2 \frac{\alpha}{r^3} s_{12} + \left(\frac{4\pi\alpha}{3} c_F^2 - 2d_v \right) \delta^{(3)}(\mathbf{r}) s^2 \quad (10)$$

となる。ここで、 $\mathbf{l} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ 、 $\mathbf{s} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2 = (\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2)/2$ 、 $s_{12} = 3r_{ij}s_i s_j^2$ である ($r_{ij} \equiv r_i r_j / r^2 - \delta_{ij}/3$)。 $\delta^{(3)}(\mathbf{r})$ は S 状態にのみ効く。そして $\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}$ と s_{12} を含む項は微細構造に、 s^2 を含む最後の項は超微細構造に寄与する。式 (5) のマッチング係数を代入すると、この表式は BS 方程式から導出した同じ次数の有効相互作用と一致する。エネルギー準位差は $\Delta E(^1S_0 - ^3S_1) = (7/12)m_e \alpha^4 = 0.845 \text{ meV}$ 、 $\Delta E(^3P_0 - ^3P_1) = (1/64)m_e \alpha^4 = 0.0226 \text{ meV}$ 、 $\Delta E(^3P_1 - ^3P_2) = (1/80)m_e \alpha^4 = 0.0181 \text{ meV}$ などとなり、実験データの振る舞いを説明することができる。なお、 $\mathcal{L}_{\text{cont}}$ の寄与が超微細構造 0.845 meV のうちの約 40% を担っている点は興味深い。

5. ポテンシャル非相対論的 QCD (pNRQCD)

前節と同様のことを QCD で行えば、つまり、電子と陽電子をクォークと反クォークに、電磁場をカラー電磁場に読み替えれば、NRQCD および pNRQCD を導くことができる。この際、QCD と NRQCD のマッチングは、重いクォークの質量 m_q に対し QCD の典型的なエネルギースケール Λ_{QCD} (数百 MeV) が十分小さいとみなせるので、QED と同様に摂動論を用いて行うことができる。しかし、NRQCD と pNRQCD のマッチング (ポテンシャルの決定) はスケール $m_q v$ が Λ_{QCD} と同じかそれ以下となることもあり得るため、一般には結合定数 α_s の摂動論に依らない方法で行う必要がある。そこで以下のような量子力学の摂動論を用いた方法を採用する。

まず、pNRQCD のポテンシャル項に相当する部分を NRQCD のラグランジアンから抽出し、それを $1/m_q$ 展開で整理する。すると、カラー電磁場を \mathbf{E}, \mathbf{B} として

$$H = H^{(0)} + \frac{1}{m_q} H^{(1)} + \frac{1}{m_q^2} H^{(2)} + \dots, \quad (11)$$

$$H^{(0)} = \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{x} (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2), \quad (12)$$

$$H^{(1)} = -\frac{1}{2} \int d^3\mathbf{x} \psi^\dagger (\mathbf{D}^2 + g_{c_F} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}) \psi + (\psi \rightarrow \chi_c), \quad (13)$$

$$\begin{aligned}
H^{(2)} = & -\frac{1}{8} \int d^3x \left[\psi^\dagger \left\{ g_{c_D} (\mathbf{D} \cdot \mathbf{E} - \mathbf{E} \cdot \mathbf{D}) \right. \right. \\
& + i g_{c_S} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{D} \times \mathbf{E} - \mathbf{E} \times \mathbf{D}) \left. \right\} \psi + (\psi \rightarrow \chi_c) \\
& - d_{ss} \psi^\dagger \psi \chi_c^\dagger \chi_c + d_{sv} \psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \psi \cdot \chi_c^\dagger \boldsymbol{\sigma} \chi_c \\
& \left. - d_{vs} \psi^\dagger T^a \psi \chi_c^\dagger T^a \chi_c + d_{vv} \psi^\dagger T^a \boldsymbol{\sigma} \psi \cdot \chi_c^\dagger T^a \boldsymbol{\sigma} \chi_c \right] \quad (14)
\end{aligned}$$

となる。^{*5} SU(3) の場合はスピンだけでなくカラーの量子数もあるため、 $H^{(2)}$ には4種類の四点フェルミ相互作用項が現れる (T^a は SU(3) 代数の生成子)。

次に、 $H^{(0)} |n; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\rangle = E_n^{(0)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) |n; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\rangle$ を満たす前節の S に相当するゲージ不変なカラー一重項状態を定義する。ここで、 n は量子数、 \mathbf{x}_1 と \mathbf{x}_2 はクォークと反クォークの空間座標である。この状態は SU(3) ゲージ場の $\mathbf{3} \otimes \mathbf{3}^*$ の状態 $|n; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\rangle$ と $|n; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\rangle = \psi^\dagger(\mathbf{x}_1) \chi_c^\dagger(\mathbf{x}_2) |n; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\rangle$ の関係にある (ここで $\langle m; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | n; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\rangle = \delta_{mn}$)。そして、

$$\begin{aligned}
\langle \underline{m}; \mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2 | H | n; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\rangle \\
= E_n(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \delta_{mn} \delta^{(3)}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{y}_1) \delta^{(3)}(\mathbf{x}_2 - \mathbf{y}_2) \quad (15)
\end{aligned}$$

からエネルギー E_n を抜き出し、それを $E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}/m_q + E_n^{(2)}/m_q^2 + \dots$ のように $1/m_q$ 展開し、特に $n=0$ の基底状態を pNRQCD の $1/m_q$ 展開されたポテンシャル $V^{(0)}$, $V^{(1)}$, $V^{(2)}$ 等に対応させる。これを量子力学的マッチングという。具体的には、 $|n\rangle \equiv |n; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\rangle$ として、

$$V^{(0)} = E_0^{(0)}, \quad (16)$$

$$V^{(1)} = E_0^{(1)} = \sum_{n \geq 1} \frac{\langle 0 | g\mathbf{E}(\mathbf{x}_1) | n\rangle \cdot \langle n | g\mathbf{E}(\mathbf{x}_1) | 0\rangle}{(\Delta E_{n0})^2}. \quad (17)$$

ここで $\Delta E_{n0} \equiv E_n^{(0)} - E_0^{(0)}$ は励起状態と基底状態のエネルギー差である。また、 $V^{(2)}$ は、pNRQED と同様に運動量や角運動量だけに依存する項も含まれるが^{*6}、すべて書き下すと煩雑になるので、次節で紹介するスピンに依存する項だけを書く、

$$\begin{aligned}
V_{\text{SD}}^{(2)} = E_{0,\text{SD}}^{(2)} = \frac{1}{2r} \left(c_S \frac{dV^{(0)}}{dr} + 2c_F (V_1' + V_2') \right) \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} \\
+ \frac{c_F^2}{3} V_3 s_{12} + \left(\frac{1}{6} c_F^2 V_4 - 2(d_{sv} + d_{vv} c_F) \delta^{(3)}(\mathbf{r}) \right) \mathbf{s}^2 \quad (18)
\end{aligned}$$

となる。^{*6} ここで、 V_1' , V_2' , V_3 , V_4 は

$$\frac{r_k}{r} V_1' = \epsilon_{ijk} \sum_{n \geq 1} \frac{\langle 0 | gB_i(\mathbf{x}_1) | n\rangle \langle n | gE_j(\mathbf{x}_1) | 0\rangle}{(\Delta E_{n0})^2}, \quad (19)$$

$$\frac{r_k}{r} V_2' = \epsilon_{ijk} \sum_{n \geq 1} \frac{\langle 0 | gB_i(\mathbf{x}_1) | n\rangle \langle n | gE_j(\mathbf{x}_2) | 0\rangle}{(\Delta E_{n0})^2}, \quad (20)$$

$$r_{ij} V_3 + \frac{\delta_{ij}}{3} V_4 = 2 \sum_{n \geq 1} \frac{\langle 0 | gB_i(\mathbf{x}_1) | n\rangle \langle n | gB_j(\mathbf{x}_2) | 0\rangle}{\Delta E_{n0}} \quad (21)$$

^{*5} この式ではクォークと反クォークの質量を同じとしている。異なる場合は式が多少複雑になるものの同様に書き下すことができる (例えば B_c 中間子に応用)。

^{*6} カシミア因子 $C_F = 4/3$ (基本表現) とマッチング係数 c_F を混同しないように注意する必要がある。もう一つのカシミア因子として $C_A = 3$ (随伴表現) がある。

となっている。 $V_{\text{SD}}^{(2)}$ は、 α_s の摂動論の最低次では $\alpha \equiv C_F \alpha_s$ として、 $c_S = c_F = 1$, $d_{sv} + d_{vv} c_F = 0$, また、

$$V_1' = 0, \quad V_2' = \frac{\alpha}{r^2}, \quad V_3 = \frac{3\alpha}{r^3}, \quad V_4 = 8\pi\alpha\delta^{(3)}(\mathbf{r}) \quad (22)$$

であり、pNRQED のスピンに依存するポテンシャルとはほぼ同じ形式になる。若干の違いは、四点フェルミ相互作用からくるマッチング係数 d_{sv} と d_{vv} がこの次数では相殺していることである。¹⁰⁾ マッチング係数を摂動論の最低次のものとした $V_{\text{SD}}^{(2)}$ のカラー場の強さの相関関数の表式は、1980年代に Eichten-Feinberg により示されたスピン依存補正項になる。¹¹⁾ $V^{(1)}$ は $O(\alpha_s^2)$ で

$$V^{(1)} = -2C_F C_A \frac{\alpha_s^2}{4r^2} = -2 \frac{\alpha_s^2}{r^2} \quad (23)$$

となることが示されている。⁶⁾

$V^{(0)}$ は真空のエネルギーに対して、位置 \mathbf{x}_1 と \mathbf{x}_2 にクォークと反クォークがあるときのエネルギー増分であり、まさに静的ポテンシャルに対応する。従ってこれはウィルソングループにより表すことができる (後述)。また、 $V^{(1)}$ や、 V_1' , V_2' , V_3 , V_4 はクォークと反クォークの対上で定義された、カラー場の強さの相関関数で表されている。これらは $|n; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\rangle$ の状態ではなく、 $\mathbf{3} \otimes \mathbf{3}^*$ 状態 $|n; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\rangle$ の行列要素で与えられており、ウィルソングループと同様にグルーオンの自由度により評価できる。NRQCD のマッチング係数は m_q より高エネルギーのグルーオンの真空偏極の効果を含み、ポテンシャルは低エネルギー相互作用の寄与を含む。これにより、QCD と pNRQCD の対応が付く。

ところで、QCD は当然ローレンツ不変性を有しているが、そこから構築された NRQCD, pNRQCD においてそれは明らかでない。ただ、その名残はマッチング係数間の関係式として残っている。例えば NRQCD のマッチング係数に対しては $c_S = 2c_F - 1$, pNRQCD のスピンに依存する補正項に関しては、 $dV^{(0)}/dr = V_2' - V_1'$ (Gromes 関係式) などが成り立つ。⁶⁾ Gromes 関係式は非常に示唆的であり、仮に静的ポテンシャルに非摂動的な要因が含まれるのならば、 V_1' と V_2' の少なくともどちらか一方に必ずそれが含まれるということの意味する。実際、静的ポテンシャルには非摂動的なクォークの閉じ込めの効果が入っている、補正項は非摂動的に決定すべしということになる。一つの有力な方法が格子 QCD シミュレーションであり、次節ではこれについて述べる。

6. 格子 QCD とクォーク間ポテンシャル

格子 QCD では、大きさ $L^3 \times T$ の四次元ユークリッド空間を格子間隔 a で離散化し、 $a \rightarrow 0$ の極限で連続理論の QCD と一致する格子作用 S_{LQCD} の分配関数を数値シミュレーションにより計算する。¹²⁾ 分配関数を用いて様々な物理量 (演算子) の期待値を計算することができる。

クォーク-反クォーク間の静的ポテンシャルはウィルソングループ $W(r, t)$ の期待値から計算できる (図3左)。格子ゲ

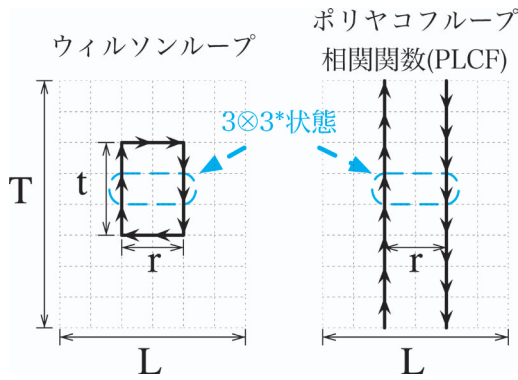


図3 ウィルソンループとポリヤコフループ相関関数 (PLCF) の模式図. ウィルソンループやPLCFの中間状態は、時間方向に正および負を向いたリンク変数(黒矢印)の直積となるが、これが $3 \times 3^*$ 状態を与える。通常、格子には周期境界条件を課すが、その場合の格子サイズ L は少なくとも $L > 2r$ 、また T はウィルソンループの場合、 $T > 2t$ とする必要がある。

ージ理論では、ゲージ場を引数とする指数関数で定義されるリンク変数が基本的な自由度となるが、ウィルソンループとは、そのリンク変数の周回積で構成したループである。物理的には、ある時刻に距離 r だけ離れた無限に重いクォーク-反クォーク対が生成されて時間方向に伝搬し、時間 t が経過した後に対消滅する過程を表す。ウィルソンループの中間状態では、時間方向を向いたリンク変数とその逆方向を向いたリンク変数の直積の状態が現れるが、これが先の $3 \times 3^*$ 状態 $|n; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\rangle$ である。十分時間が経過するとウィルソンループの期待値は $\langle W(r, t) \rangle \propto \exp(-V^{(0)}(r)t)$ となるので、この対数から $V^{(0)}$ を抽出できる。その振る舞いが

$$V^{(0)} = -\frac{\alpha}{r} + \sigma r + \text{const.} \quad (24)$$

となることは良く知られている。 σ は弦張力と呼ばれ、閉じ込め力の強さを表す。 α は摂動論の最低次では $C_F \alpha_s$ となるが、ポテンシャルを上関数でフィットして決めた α_s は裸の結合定数とは通常異なっている。

静的ポテンシャルは原理的にはポリヤコフループ P の相関関数(PLCF)からも計算できる。ポリヤコフループとはリンク変数の時間方向の周回積である(図3右)。通常、四次元格子の時間方向には周期境界条件を課すので、ポリヤコフループはクォークが永久に伝搬する状態を表す。従ってポリヤコフループと反ポリヤコフループを距離 r だけ離れた演算子 $PP^*(r)$ を定義すれば、それは静的クォーク-反クォーク対が永久に伝搬する状態を表し、その期待値からエネルギーの増分、つまりポテンシャルを計算できる。 T を十分大きく取れば理論上 $\langle PP^*(r) \rangle = \exp(-V^{(0)}(r)T)$ となる。

シミュレーションでは、具体的には熱浴法やメトロポリス法を使って S_{LQCD} の重みをもつ独立なリンク変数のセット(QCD真空配位)を生成し、それぞれの真空で計算した演算子の統計平均をとることで期待値を計算する。このとき統計誤差は配位数 N に対して $1/\sqrt{N}$ でしか小さくならない。 $\langle W(r, t) \rangle$ や $\langle PP^*(r) \rangle$ はリンク変数をかければかける

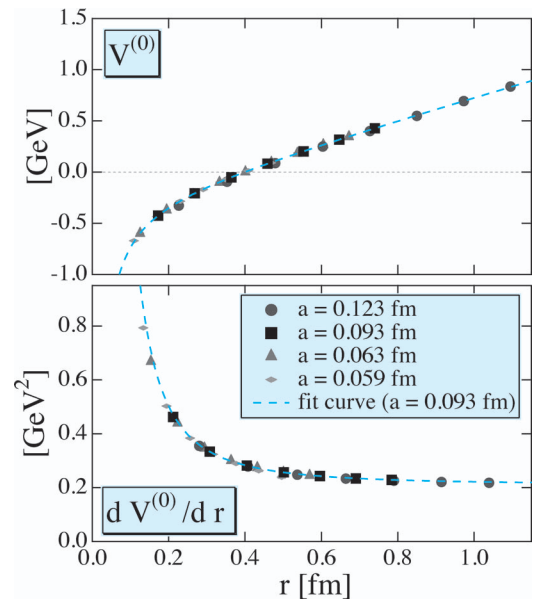


図4 静的ポテンシャル $V^{(0)}$ (上)とその微分 $dV^{(0)}/dr$ (下)。点線は関数 $V^{(0)} = -\alpha/r + \sigma r + \text{const.}$ とその微分 $dV^{(0)}/dr = \alpha/r^2 + \sigma$ 。

ほど指数的に小さくなっていくため、ポテンシャルの長距離の振る舞いを精密に決定するためには膨大な統計(計算時間)が必要となる。そのため通常では、静的ポテンシャルを計算するのにウィルソンループを用い、距離 r が大きい場合にはとりにあらず時間 t を小さくして計算し、有限の t から $t \rightarrow \infty$ での値を抜き出せるように各種の技巧を凝らす。PLCFの場合は零温度(T が十分大きい)ではその期待値は限りなく零に近いので上記の方法で精度よく長距離までポテンシャルを計算することはほぼ不可能である。

しかし2001年にLüscherとWeiszにより提唱されたマルチレベル法¹³⁾と呼ばれるシミュレーションの方法により、ダイナミカルなクォーク-反クォーク対生成効果を無視したクエンチ近似の範囲ではこの状況が克服された。マルチレベル法では格子を時間方向にいくつかの部分格子に分割し、各部分格子においてPLCFの部品の平均値を計算し、最終的にその平均値の積からPLCFを組んで期待値を計算する。例えば $\langle PP^*(r) \rangle$ が $O(10^{-12})$ 程度るとき、格子を4分割しそれぞれに部品を割り当てれば各部品の平均値は高々 $O(10^{-3})$ であるから、これは精度よく決めることができ、従ってその積も同様に精度よく決まる。PLCFが精度よく計算できると、ポテンシャルは

$$V^{(0)}(r) = -\frac{1}{T} \ln \langle PP^*(r) \rangle + O(e^{-\Delta E_{10} T}), \quad (25)$$

と計算できる。ここで $\Delta E_{10} = E_1^{(0)} - V^{(0)}$ は第一励起状態と基底状態ポテンシャルのエネルギー差であり、 T が大きければ $O(e^{-\Delta E_{10} T})$ の項は完全に無視できる。

図4にこの方法で計算した静的ポテンシャルと距離 r に関する微分 $dV^{(0)}/dr$ を示す(ウィルソンゲージ作用を使用)。統計誤差はマーカーのサイズより小さい。ポテンシャルが精度よく決まらなければその微分を精度よく決めることは到底不可能であるが、マルチレベル法はそれを可能にして

いる。ここで、格子間隔は $r_0^2(dV^{(0)}/dr)|_{r=r_0}=1.65$ を満たす距離 r_0 が 0.5 fm ($1 \text{ fm}=10^{-15} \text{ m}$) に相当するとして決められている。これを Sommer スケールという。¹⁴⁾ 式(24) でフィットすると、 $\alpha=0.297$, $\sigma a^2=0.0468$ となる。

我々はマルチレベル法を相対論的補正項の決定に応用した。¹⁵⁾ 例えば、 $V^{(1)}$ で必要となるのはクォーク-反クォーク対上のカラー電場の相関関数

$$C(r, \tau) = \frac{\langle g\mathbf{E}(\mathbf{x}_1, t_1) \cdot g\mathbf{E}(\mathbf{x}_2, t_2) \rangle_{PP^*}}{\langle P(\mathbf{x}_1) P^*(\mathbf{x}_2) \rangle} \quad (26)$$

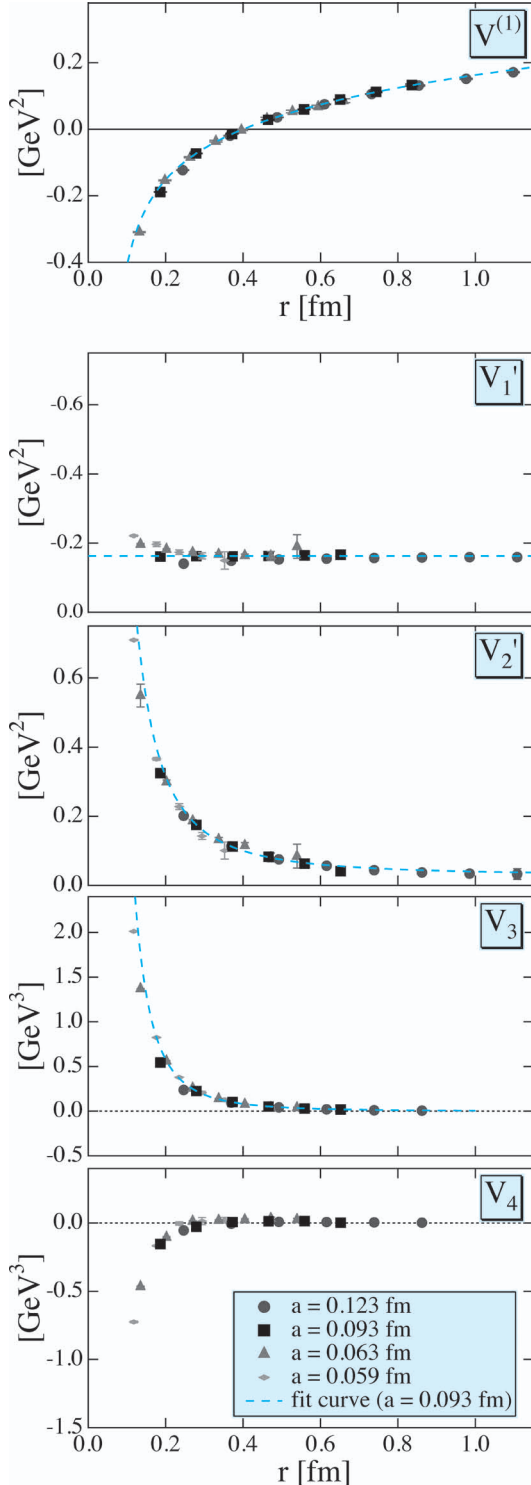


図5 上から順に $V^{(1)}$ と V_1', V_2', V_3, V_4 .

である。これを様々な $r=|\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2|$ および $\tau=t_1-t_2$ について計算する。 $3 \otimes 3^*$ の状態 $|n; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\rangle$ を用いて表すと、

$$C(r, \tau) = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \langle 0 | g\mathbf{E}(\mathbf{x}_1) | n \rangle \cdot \langle n | g\mathbf{E}(\mathbf{x}_2) | 0 \rangle e^{-(\Delta E_n)T/2} \times \cosh((\Delta E_n)(T/2 - \tau)) + O(e^{-(\Delta E_0)T}) \quad (27)$$

となる。つまり相関関数を格子QCDで計算し、その振る舞いから行列要素やエネルギー差を求め、それを pNRQCD の式(17) に代入することで $V^{(1)}$ が決まる。なお、カラー電磁場はプラケット変数から構成できる。¹⁶⁾

図5に $V^{(1)}$ および V_1', V_2', V_3, V_4 を示す。後者のスピんに依存する補正項は質量スペクトルの微細構造、超微細構造を説明し得る重要な物理量のため、pNRQCDとは別に、1980年代から Eichten-Feinberg の表式¹¹⁾ に基づいた格子QCDシミュレーションが行われていた。¹⁶⁾ しかし、計算精度を向上することが困難だったため結果は不確定であり、1997年以降は一切計算されていなかった。¹⁷⁾ 今回、マルチレベル法を応用することで初めて、これらを長距離 ($\sim 1 \text{ fm}$) まで精度良く決定することができた。

図5の破線の関数形について簡単に解説する。¹⁵⁾ まず、 $V^{(1)}=2(-\alpha_s^2/r^2+\sigma^{(1)} \ln r)+\text{const.}$ で、 α_s は $V^{(0)}$ の振る舞いから決定した値 ($\alpha_s=a/C_F=0.223$) を用いると、 $\sigma^{(1)}a^2=0.0158$ によりデータの振る舞いを説明できる。次に、 $V_1'=-\sigma_1$, $V_2'=a/r^2+\sigma_2$ とすると、 $\sigma_1=(0.77 \pm 0.08)\sigma$, $\sigma_2=(0.15 \pm 0.08)\sigma$ となる。この結果は、主に V_1' に、そして V_2' にも長距離まで残る寄与が含まれることを示唆している。また、 $V_2'-V_1'=a/r^2+\sigma$ であり、Gromes 関係式が満たされていることがわかる。 V_3 の振る舞いは摂動論の $3a/r^3$ に近い振る舞いであるが、このべきを3より若干小さくしたほうがデータの全体を説明できる。 V_4 については、摂動論の最低次では原点で δ 関数とされるが、この影響が $r>0$ にも現れているかはまだわからない。

7. クォークoniumの質量スペクトルの解析

この節では、格子QCDシミュレーションで得られたポテンシャルを用いた場合のクォークoniumの質量スペクトルについて、特に、(i) $O(1/m_q)$ の $V^{(1)}$ と (ii) $O(1/m_q^2)$ の V_1' および V_2' の効果に着目して議論する。 $V^{(1)}$ はスペクトルのスピんに依らない部分全体に影響し、一方、 V_1' と V_2' は微細構造、つまり ${}^3P_{J=0,1,2}$ 状態間の分離に影響を及ぼす。

スペクトルの計算方法は、まず $H^{(0)}=p^2/m_q - C_F\alpha_s/r + \sigma r$ で与えられるシュレーディンガー方程式を解いて波動関数を求め、次にそれを用いて $H^{(1)}=V^{(1)}/m_q$ と $H_{\text{SD}}^{(2)}=V_{\text{SD}}^{(2)}/m_q^2$ からくるエネルギーを一次摂動として加える。 α_s や σ などのパラメータは格子QCDシミュレーションで決定したものをを用いる。クォーク質量はボトムクォークにあわせて $m_q=4.2 \text{ GeV}$ とし、NRQCDのマッチング係数は $C_F=1$ とする。この設定では、 $\Delta E^{(0)}(2S-1S)=483 \text{ MeV}$, $\Delta E^{(0)}(2P-1P)=366 \text{ MeV}$ となる。

(i) $V^{(1)}$ の $-2\alpha_s^2/r^2$ の項は、基底状態を押し下げ励起状態

を押し上げるように働く。対数関数の項を加えるとその傾向はより顕著になる。これにより、 $\Delta[E^{(0)}+E^{(1)}](2S-1S)=483+46=529$ MeV, $\Delta[E^{(0)}+E^{(1)}](2P-1P)=366+15=381$ MeVとなる。なお、これと関係する実験データは $\Upsilon(2S-1S)=563$ MeV, $h_b(2P-1P)=362$ MeVであるが、より詳しく比較するためにはスピン非依存の補正項 $V_{\text{st}}^{(2)}$ の寄与も同時に取り入れる必要がある。

(ii) $V_1'=-\sigma_1$ と $V_2'=a/r^2+\sigma_2$ において、 $\sigma_1=(1-\epsilon)\sigma$, $\sigma_2=\epsilon\sigma$ と置くと、

$$\frac{V_{\text{SD-LS}}^{(2)}}{m_q^2} = \frac{1}{m_q^2} \left(\frac{3C_F\alpha_s}{2r^3} - \frac{(1-4\epsilon)\sigma}{2r} \right) \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} \quad (28)$$

と書ける。フィット結果は $\epsilon \sim 0.2$ だった。また $\langle \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} \rangle$ は ${}^3P_{J=0,1,2}$ 状態に対し $-2, -1, 1$ である。これにより、 $1P$ 状態に対しては、 $\Delta E_{\text{SD-LS}}^{(2)}({}^3P_1-{}^3P_0)=7.8$ MeV, $\Delta E_{\text{SD-LS}}^{(2)}({}^3P_2-{}^3P_1)=15.6$ MeVとなる。 $V_{\text{SD-LS}}^{(2)}$ だけでは、 $\Delta E_{\text{SD-LS}}^{(2)}({}^3P_1-{}^3P_0)$ と $\Delta E_{\text{SD-LS}}^{(2)}({}^3P_2-{}^3P_1)$ の比は常に $1:2$ であり、実験データの比、 $\Delta E(\chi_{b1}-\chi_{b0}):\Delta E(\chi_{b2}-\chi_{b1})=33.3$ MeV:19.4 MeV(図1参照)は再現できない。 V_3 のテンソル項の寄与が必要となる。式(28)において、 ϵ を自由パラメータとみると興味深いことがわかる。現象論的な研究では $\epsilon=0$ としたものが多々あるが、この場合、式(28)の二項目は常に負として効く。 α_s が十分大きければ全体としての寄与は正であり、実験データ通りのエネルギー準位の大小関係 ${}^3P_0 < {}^3P_1 < {}^3P_2$ となるが、そうでない場合は準位が逆転してしまう。 $\sigma \sim 1$ GeV/fmのとき、 $\alpha_s \sim 0.2$ だと逆転が起こりうる。従って現象論では $\alpha_s \sim 0.5$ とするなど、比較的大きな値が採用されている。¹⁸⁾また、 $\epsilon=0.25$ では、式(28)の一項目だけが残り、あたかも摂動論の最低次のみを考慮したような寄与となる。

なお、以上の解析は格子QCDシミュレーション結果を用いているものの、まだ定性的である。より詳しくスペクトル解析するためには、すべての補正項を同時に取り入れ、加えて α_s の近距離での r 依存性なども考慮する必要がある。

8. おわりに

本稿では、基礎理論となるゲージ場の理論から非相対論的二体系の記述に適した有効場の理論を構築し、二体系の量子力学系ポテンシャルを決定するという道筋を、QEDとポジトロニウムを例にとって概観し、QCDからクォーク間ポテンシャルの決定について最近の成果を含めて解説した。QCDの非摂動論的な性質は、静的ポテンシャルだけでなく相対論的補正項にまで及ぶことを示した。クォークコニウムが発見され、同時にポテンシャル模型による研究が始まってから約40年、依然としてQEDとポジトロニウムの関係ほど精密ではないが、QCDからNRQCD、そしてpNRQCDという枠組みを経て、クォークコニウムを量子力学系ポテンシャルを用いて統一的に解析できるようになりつつある。そのような中で、格子QCD数値シミュレーションによるポテンシャルの精密計算はまだ途上である。特に軽い動的クォークの寄与が入った場合の格子QCDの結果

はまだ確立しておらず、今後も系統的な研究が必要である。

本稿で紹介したクォーク間ポテンシャル決定の研究の一部はマインツ大学のHartmut Wittig教授との共同研究に基づきます。また、マックスプランク物理学研究所のPeter Weisz教授には本研究の発端となったマルチレベル法についてご教授いただきました。この場を借りて深く感謝致します。

参考文献

- 1) N. Brambilla, *et al.*: CERN Yellow Report (2004); Eur. Phys. J. C **71** (2011) 1534.
- 2) J. J. Aubert, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **33** (1974) 1404; J. E. Augustin, *et al.*: *ibid.* **33** (1974) 1406; 一足遅れて C. Bacci, *et al.*: *ibid.* **33** (1974) 1408.
- 3) S. W. Herb, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **39** (1977) 252.
- 4) I. Adachi, *et al.* (Belle Collaboration): Phys. Rev. Lett. **108** (2012) 032001.
- 5) K. Nakamura, *et al.* (Particle Data Group): J. Phys. G **37** (2010) 075021.
- 6) N. Brambilla, *et al.*: Rev. Mod. Phys. **77** (2005) 1423.
- 7) W. E. Caswell and G. P. Lepage: Phys. Lett. B **167** (1986) 437; G. P. Lepage, *et al.*: Phys. Rev. D **46** (1992) 4052; G. T. Bodwin, *et al.*: Phys. Rev. D **51** (1995) 1125; Phys. Rev. D **55** (1997) 5853.
- 8) A. Pineda and J. Soto: Phys. Rev. D **59** (1999) 016005.
- 9) S. G. Karshenboim: Phys. Rept. **422** (2005) 1.
- 10) A. Pineda and J. Soto: Phys. Rev. D **58** (1998) 114011.
- 11) E. Eichten and F. Feinberg: Phys. Rev. Lett. **43** (1979) 1205; Phys. Rev. D **23** (1981) 2724.
- 12) 青木慎也:『格子場の理論』(シュプリンガーフェアラーク東京, 2005).
- 13) M. Lüscher and P. Weisz: JHEP **09** (2001) 010; *ibid.* **07** (2002) 049.
- 14) S. Necco and R. Sommer: Nucl. Phys. B **622** (2002) 328.
- 15) Y. Koma and M. Koma: Nucl. Phys. B **769** (2007) 79; Y. Koma, M. Koma and H. Wittig: Phys. Rev. Lett. **97** (2006) 122003; Y. Koma and M. Koma: Prog. Theor. Phys. Suppl. **186** (2010) 205.
- 16) A. Huntley and C. Michael: Nucl. Phys. B **286** (1987) 211.
- 17) G. S. Bali, K. Schilling and A. Wachter: Phys. Rev. D **56** (1997) 2566.
- 18) 例えば、W. Buchmüller: Phys. Lett. B **112** (1982) 479.

著者紹介



駒 佳明氏: 専門はハドロン物理。ゲージ場の理論の非摂動論的側面に興味がある。高専の物理教育にも力を入れている。



駒 美保氏: 専門はハドロン物理。数値シミュレーション、ソフトウェア工学にも興味がある。

(2011年12月14日原稿受付)

A Progress in Heavy Quark Physics: Quantum Mechanical Heavy Quark Potential from QCD

Yoshiaki Koma and Miho Koma

abstract: Rich experimental data on heavy quarkonium states have been accumulated so far including not only conventional quark-antiquark bound states but also exotic states. Quantum chromodynamics (QCD) should provide us with a systematic understanding for these states, which is one of the important subject in hadron physics. We review a recent theoretical progress on heavy quarkonium physics based on an effective field theory called potential non-relativistic QCD, and on non-perturbative determination of heavy quark potentials including relativistic corrections with lattice QCD simulations.

最も軽い三体束縛系—ポジトロニウム負イオンの研究—

長嶋 泰之 (東京理科大学理学部 162-8601 東京都新宿区神楽坂 1-3)

満汐 孝治 (東京理科大学大学院理学研究科 162-8601 東京都新宿区神楽坂 1-3)

電子の反粒子である陽電子は、2個の電子と束縛してポジトロニウム負イオンを形成することがある。我々は、タングステンに低速陽電子ビームを入射すると、表面でポジトロニウム負イオンが生成されて真空中に飛び出すこと、さらに、タングステン表面にアルカリ金属を蒸着すればその生成率が大幅に増大し、従来の生成法よりも2桁近くも高くなることを発見した。また、この方法で生成したポジトロニウム負イオンにレーザー光を照射し、ポジトロニウムと電子に分離することに成功した。これら一連の研究は、ポジトロニウム負イオンに関する分光学的な実験が可能となったことを示しただけでなく、エネルギー可変ポジトロニウムビームの生成に向けて大きな第一歩を踏み出したものである。

1. はじめに

2003年の夏の終わりのことである。著者の一人(YN)は深夜、最寄りの駅から自宅まで歩く途中、ふと「タングステンに低速の陽電子を入射すると、表面からポジトロニウム負イオンが自発的に放出されるのではないか」と思いついた。これが我々の一連の研究の発端である。

陽電子は電子とともにポジトロニウム(以下Psと略記する)と呼ばれる束縛状態を形成する。Psが形成されることは昔からよく知られており、その特性について理論・実験の両面からおびただしい数の研究が行われている。¹⁾ Psは電子と陽電子がクーロン力を介して束縛しあっている系で、軌道関数を水素原子の場合と同じように求めることができる。ただし、換算質量は水素原子の場合のおよそ半分となるため、真空中における基底状態の束縛エネルギーは水素原子の束縛エネルギーの半分(6.80 eV)で、電子-陽電子間の平均距離は $2a_0$ (a_0 はボーア半径, 0.529 Å)である。電子と陽電子の合成スピンの固有状態のうち、大きさが0(一重項状態)であるPsはパラポジトロニウム(*p*-Ps)と呼ばれ、真空中では125 psの寿命で主に2本の γ 線に自己消滅する。大きさが1(三重項状態)であるPsはオルソポジトロニウム(*o*-Ps)と呼ばれ、真空中では142 nsの寿命で主に3本の γ 線に自己消滅する。前者の場合に放出される γ 線は511 keVのエネルギーを持つのに対し、後者の γ 線は0から511 keVまでの連続スペクトルを持つ。

Psに、さらに電子や陽電子が束縛した三体、あるいはそれ以上の束縛状態が形成されることもある。²⁾ 1個の陽電子と2個の電子が束縛すれば、最も軽い三体束縛状態であるポジトロニウム負イオン(以下Ps⁻と略記する)が形成される。Ps⁻が存在することは実験で確かめられている。³⁾ 陽電子2個と電子1個の束縛状態であるポジトロニウム正イオンも形成されるはずだが、実験的に生成されたという報告は未だない。数年前には、2個のPsが結合したPs分子が生成されたかもしれないという報告があった。⁴⁾ Ps分子にさらにもう1個の電子が束縛したPs分子イオンPs₂e⁻の理論的な計算も始まっているが、⁵⁾ 実際に生成する試みはまだ行われていない。

Ps⁻が存在することは、1946年にJ. A. Wheeler²⁾によっ

て予測された。その後、様々な理論的研究が行われている。Ps⁻は水素負イオン(H⁻)、あるいは水素分子イオン(H₂⁻)と類似の三体束縛状態であるが、構成要素がすべて等しい質量を持っているという点で、H⁻やH₂⁻とは、理論的取り扱いが大きく異なる。それゆえ多くの理論研究者を魅了し、寿命や束縛エネルギーの値などが計算されている。たとえば、Ps⁻は短い寿命で自己消滅し、511 keVのエネルギーを持つ2本の γ 線と1個の電子が放出されるが、理論計算によれば、その寿命は479 psである。 γ 線が1本、あるいは3本以上放出される消滅も起こり得るが、その確率は極めて低い。また理論計算によれば、電子のPsへの束縛エネルギーの計算値は0.33 eVである。一般に、H⁻などの負イオンの電子束縛エネルギーはかなり小さい。Ps⁻では核が陽電子であるため、束縛エネルギーはことさら小さくなる。これを反映して、Ps⁻中の陽電子-電子間の平均距離は a_0 よりもかなり大きく、 $5.5a_0$ である。⁶⁾

Ps⁻が最初に生成されたのは1981年のことである。³⁾ 低速陽電子ビームを厚さ40 Åのカーボン薄膜に入射すると、一部がPs⁻となって下流側から放出されることが見出された。ただしその生成率(入射陽電子のうちPs⁻となって放出される割合)は極めて低く、わずか0.03%であった。その後は実験的研究は殆ど行われておらず、寿命測定が3例報告されているのみである。⁷⁻⁹⁾ これは、Ps⁻を効率よく生成することが不可能だったからである。

筆者らは、冒頭に述べた発想に基づいて実験を行い、2006年にタングステン表面からPs⁻が放出されることを発見した。¹⁰⁾ その後、タングステン表面にアルカリ金属を蒸着すれば、Ps⁻の生成率が2桁も向上することを突き止めた。¹¹⁾ さらに2010年には、Ps⁻にレーザー光を照射して電子を脱離させることに成功した。¹²⁾

2. 金属表面からのPs⁻の放出

陽電子が電子と対消滅すると複数本の γ 線が放出されることは、よく知られている。実際には、陽電子の対消滅の断面積は陽電子-電子散乱の断面積よりもはるかに小さい。陽電子を金属中に入射した場合、数psで熱化した後、100 ps程度の時間を経てようやく対消滅して γ 線となるが、こ

表1 種々の金属における電子および陽電子の仕事関数と、それらから見積もられる ϕ_{Ps} , ϕ_{Ps^-} の値.

金属	ϕ_- (eV)	ϕ_+ (eV)	ϕ_{Ps} (eV)	ϕ_{Ps^-} (eV)
Al (多結晶)	4.25	-0.2	-2.8	1.2
Al (1 0 0)	4.20	-0.16	-2.76	1.11
Al (1 1 1)	4.26	0.065	-2.48	1.46
Fe (多結晶)	4.4	-1.2	-3.6	0.5
Ni (多結晶)	5.15	-1.2	-2.9	2.0
Ni (1 0 0)	5.22	-1.0	-2.6	2.3
Ni (1 1 0)	5.04	-1.4	-3.2	1.6
Cu (1 0 0)	5.10	-0.3	-2.0	2.8
Cu (1 1 0)	4.48	-0.2	-2.5	1.6
Cu (1 1 1)	4.94	-0.4	-2.3	2.4
Mo (多結晶)	4.6	-2.2	-4.4	-0.1
Mo (1 0 0)	4.53	-1.7	-4.0	0.2
W (多結晶)	4.55	-2.75	-5.00	-0.78
W (1 0 0)	4.63	-3.0	-5.2	-0.9
W (1 1 0)	5.22	-3.0	-4.6	0.3
W (1 1 1)	4.45	-2.59	-4.94	-0.82
Pt (多結晶)	5.64	-1.8	-3.0	2.4
Au (多結晶)	5.2	0.9	-0.7	4.2
Pb (多結晶)	4.25	0.9	-1.7	2.3

の間に陽電子は周囲の電子と何度も衝突する。金属中に空孔型の格子欠陥などの陽電子消滅サイト¹³⁾がなければ、熱化した陽電子は消滅するまでの間、金属中を動き回る(もしそのようなサイトが存在すれば、陽電子にとっては低いポテンシャルとなっているため、そこに捕獲されて周囲の電子と対消滅する)。その拡散距離は1,000 Å程度である。陽電子の入射エネルギーが10 keVよりも低い場合には、侵入距離は1,000 Åより短いため、多くは表面に戻り表面特有の現象を起こす。

バルク中における陽電子のエネルギー準位から測った真空準位(陽電子の仕事関数と呼ぶ)を ϕ_+ とすれば、表1に示すように、多くの金属でその値は負となる。この場合は、表面に到達した陽電子は最大 $|\phi_+|$ のエネルギーを持って自発的に飛び出す。また、表面には電気二重層と鏡像ポテンシャルの足し合わせによってポテンシャル井戸が形成されており、陽電子はそこに捕捉されて対消滅することもある。さらに、電子と束縛してPsとなって真空中に放出されることもある。

電子の仕事関数を ϕ_- とすれば、金属表面からPsを放出させるために外から与えなければならない最小のエネルギー ϕ_{Ps} は

$$\phi_{Ps} = \phi_+ + \phi_- - E_{Ps} \quad (1)$$

と書くことができる。 E_{Ps} はPsの束縛エネルギーで、その値はすでに述べたように6.80 eVである。表1に示すように、 ϕ_{Ps} は殆どの金属で負となる。このことは、表面からPsを放出させるためには外からエネルギーを与える必要はなく、自発的に飛び出す可能性があることを意味する。実際に、種々の金属に低速陽電子を入射すると、表面からPsが放出されることが実験で確かめられている。¹⁴⁾

それでは、金属表面からPs⁻が自発的に飛び出すことはあるだろうか。Psの場合と同様に、表面からPs⁻を放出さ

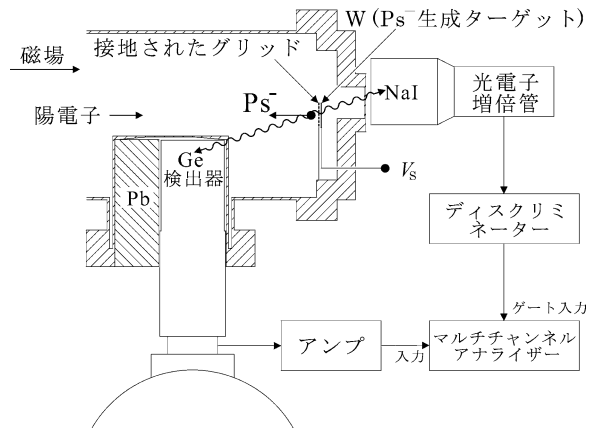


図1 タングステン表面から放出されたPs⁻を検出するための実験装置。¹⁰⁾

せるために外から与えなければならないエネルギー ϕ_{Ps^-} は、 ϕ_+ および ϕ_- を使って

$$\phi_{Ps^-} = \phi_+ + 2\phi_- - E_{Ps^-} - E_{Ps^-} \quad (2)$$

と書くことができる。 E_{Ps^-} は電子のPsへの束縛エネルギーで、すでに述べたように理論計算によれば0.33 eVである。この値を用いて ϕ_{Ps^-} を計算すると、表1に示すように多くの金属で正となるが、タングステンとモリブデンでは負となり、Ps⁻がこれらの表面から自発的に放出される可能性があることが示唆される。これを確かめるために、以下の実験を行った。

Ps⁻は負の電荷を持つため、電場で加速することが可能である。したがって、放出される γ 線のエネルギーを分解能の良いゲルマニウム検出器で測定すれば、Ps⁻は γ 線エネルギースペクトル上に、511 keVからドップラーシフトしたピークとして現れることになる。図1に、用いた実験装置を示す。陽電子は、紙面右向きにかけられた磁束密度0.01 Tの磁場に沿って輸送され、接地されたグリッドを通り抜けてターゲットに入射する。ターゲットには負の電位 V_S が印加され、陽電子はグリッドとターゲットの間の電場によって加速されてターゲットに入射する。Ps⁻が放出されれば、この電場によって逆向きに加速される。このため、グリッドを通り抜けた後に自己消滅によって放出される γ 線のエネルギーは、ドップラーシフトして

$$E = \frac{1}{1 + \lambda - \sqrt{2\lambda + \lambda^2} \cos \theta} mc^2 \quad (3)$$

となる。ここで θ はPs⁻の加速方向と検出器に入射する γ 線のなす角度、 m は電子の静止質量、 c は光速である。また、 $\lambda = e|V_S|/3mc^2$ である。

タングステン(100)面をターゲットに用いて得られた γ 線のエネルギースペクトルを図2に示す。ターゲットの電位 V_S は-3 kVである。(a)はターゲット装着直後のスペクトルで、Ps⁻の放出を示すピークは見られない。(b)は、タングステンターゲットを1,500°Cで30分間焼鈍することによって、格子欠陥を除去すると同時に表面を清浄にした後に得られたスペクトルである。(3)式で予測される542 keV

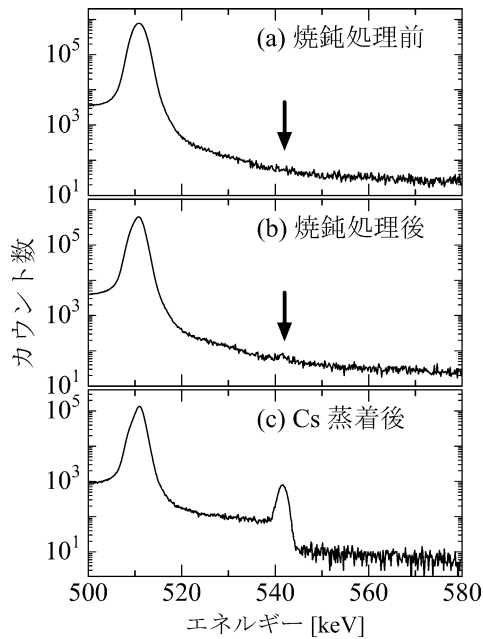


図2 γ 線エネルギースペクトル。¹¹⁾ 矢印は(3)式で予測される Ps^- からの消滅 γ 線のエネルギーを示す。(c)はセシウムを0.8原子層蒸着した場合のエネルギースペクトルである。

のエネルギーに、極めて小さなピークが認められる。このことは、清浄なタンゲステン表面から Ps^- が自発的に放出されることを表している。しかし、その生成率は0.01%以下であり、カーボン薄膜を用いた場合よりもさらに低い。カーボン薄膜での Ps^- の生成は、入射陽電子がエネルギーを失う過程でカーボンから電子を剥ぎ取って捕獲することと損失することを繰り返し、最終的には下流側表面で捕獲した電子を2個伴って放出する過程である。それに対し、タンゲステン表面での生成は、熱化した陽電子が表面を通り過ぎるときにそっと電子2個を捕獲する、いわばジェントルな過程であると考えられる。

ϕ_{Ps^-} が負で、その絶対値がタンゲステンよりも小さいモリブデン表面からも、 Ps^- が放出されることが確認されている。¹⁵⁾ ただしその生成率は、 $|\phi_{\text{Ps}^-}|$ が小さいことを反映して、タンゲステンの場合よりもさらに低い。

3. Ps^- の放出に対するアルカリ金属の効果

Ps^- の放出量を増やすには、どうしたらいいだろうか。AshcroftとMerminの教科書¹⁶⁾の第18章に書かれているように、 ϕ_- は化学ポテンシャル μ_- と表面電気二重層の効果 D を用いて

$$\phi_- = -\mu_- + D \quad (4)$$

と書くことができる。 D の値は表面に分極率の大きな原子を蒸着すれば小さくなり、この結果、電子の仕事関数は低下する。この現象は、金属表面から二次電子放出率を向上させるためにしばしば利用されている。

陽電子では、電荷が正であるため表面電気二重層の効果は負となり、仕事関数は陽電子の化学ポテンシャル μ_+ を

用いて

$$\phi_+ = -\mu_+ - D \quad (5)$$

と書くことができる。¹⁷⁾したがって ϕ_{Ps^-} は

$$\phi_{\text{Ps}^-} = -\mu_+ - 2\mu_- - E_{\text{Ps}^-} - E_{\text{Ps}^-} + D \quad (6)$$

となる。つまり、電子1個分の寄与と陽電子1個分の寄与が打ち消されても、なおかつ電子1個分の寄与が残るのである。タンゲステン表面にセシウムを単原子層程度蒸着した場合、 D は3 eVも低下する。¹⁸⁾このため、 ϕ_{Ps^-} も低下して-4 eV程度となる。このことは、 Ps^- の生成に寄与する伝導電子数が増え、放出量が増加することを示唆する。

実際に、タンゲステン表面にセシウムを蒸着して測定した γ 線エネルギースペクトルを図2(c)に示す。セシウムを蒸着することによって、 Ps^- の放出量が劇的に増大することがわかる。放出量が最大となったのは、セシウムの膜厚が0.8原子層のときである。この膜厚は、電子の仕事関数が最小になる厚さとはほぼ等しい。またそのときの Ps^- の生成率は1.25%で、蒸着する前と比べて2桁も高い。 Ps^- の生成率の上昇が表面電気二重層の効果の変化によるものであることは定性的には明らかであるが、なぜ2桁も上昇するのかについての定量的な説明は、まだ得られていない。

また、 ϕ_{Ps^-} の値が正であるタンタル等でも、表面にセシウムを蒸着すれば、 Ps^- が放出されるようになることも確かめられている。¹⁵⁾

ただし、この高い生成率は、セシウムが反応性の極めて高い元素であるため長続きしない。 2×10^{-8} Pa程度の超高真空中でも、半日ほどで1/10に減少してしまう。セシウムよりも反応性が低いアルカリ金属を使えば、生成率の最大値は減少しても、長時間そこそこの生成率を保持しながら Ps^- を放出し続けるだろうと考え、ナトリウムを蒸着して生成率の時間変化を調べた。驚いたことに、セシウムを蒸着した場合よりも高い生成率が得られ、しかも数日にわたって0.5%以上の生成率を保持し続けた。¹⁹⁾

このように、 Ps^- を数日間、従来よりもはるかに高い効率で放出させ続けることが可能となった。この手法を用いて、 Ps^- の光脱離実験を行った。

4. Ps^- の光脱離実験

Ps^- の光脱離



の研究の重要性は以前から指摘されており、光脱離断面積の理論計算も精力的に行われている。²⁰⁾しかしながら、 Ps^- を効率よく生成する方法がなかったため、光脱離の実験は行われていなかった。筆者らは、ナトリウムを蒸着したタンゲステン表面を用いて Ps^- を効率よく生成し、レーザー光を照射して光脱離させる実験を行った。¹²⁾

Ps^- は寿命が短いため、レーザー光と交差させようとし

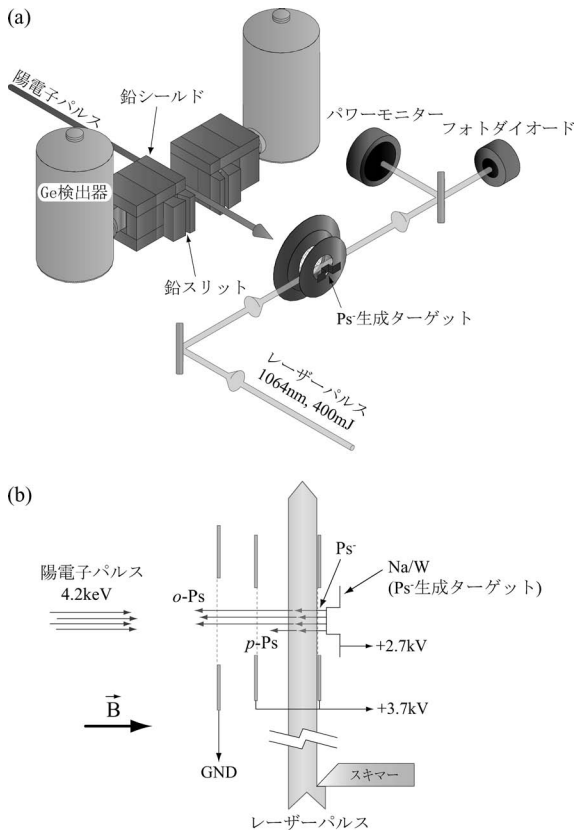


図3 Ps^- 光脱離実験装置。(a)は陽電子ビームの流れと γ 線検出器の配置を、(b)は Ps^- 生成用ターゲット付近の様子を示す。

でも、光子と相互作用する前に急速に自己消滅を起こしてしまう。これを避けるためには、極めて強度の高いレーザー光を用いばよい。幸い、ナノ秒パルスレーザーならば、市販されている程度のもので瞬間的に十分高い光子密度が得られるため、光脱離の観測が可能である。ただしその場合、陽電子源にも同じような時間特性を持つパルス状低速陽電子ビームを用い、レーザー光を同期させる必要がある。そこで、高エネルギー加速器研究機構の低速陽電子実験施設で得られる陽電子ビーム²¹⁾を用いた。この施設では、ライナックで電子を加速して重金属に入射し、制動放射の対生成によって得られる陽電子を減速してビームとして取り出している。そのビームは、ライナックの特性を反映して、時間幅 12 ns、繰り返し周波数 50 Hz のパルス状である。

図3に、この測定に用いた装置を示す。図1と同様に、生成した Ps^- を電場で加速し、その消滅 γ 線のエネルギーをGe検出器で測定する。レーザー光の照射によって Ps^- が光脱離されると、電子と Ps に分離する。光脱離によって生成された Ps のうち、1/4は $p\text{-Ps}$ 、3/4は $o\text{-Ps}$ である。²²⁾1章で述べたように、前者が消滅すれば2本の確定したエネルギーを持つ γ 線になるのに対し、後者は3本の連続スペクトルを持つ γ 線になる。このため、 γ 線スペクトルに現れている Ps^- のピークの強度は $o\text{-Ps}$ が生成された割合だけ低下し、1/4になるはずである。この様子が確認できれば、 Ps^- の光脱離が観測されたことになる。

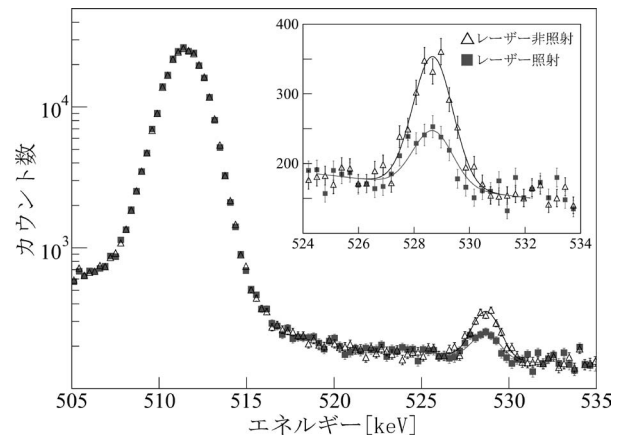


図4 Ps^- にレーザーを照射した場合の γ 線エネルギースペクトル。レーザー光を照射すると Ps^- に起因するピークの強度が低下することがわかる。¹²⁾

レーザーパルスの繰り返し周波数は、陽電子パルスの繰り返し周波数の半分の 25 Hz に設定した。このため、1パルス毎にレーザー照射、レーザー非照射を繰り返しながら測定が可能である。レーザー光には、高出力パルス Nd:YAG レーザーからの基本波を用いた。波長は 1,064 nm、光子のエネルギーは 1.165 eV であり、光脱離の閾値 0.33 eV よりも大きい。しかも都合のよいことに、理論計算によれば、このエネルギーでは光脱離断面積は比較的大きくなる。²⁰⁾用いたレーザー光のパワーは 400 mJ/pulse であった。

得られた γ 線エネルギースペクトルを図4に示す。レーザー光照射の場合は、非照射の場合と比べて Ps^- のピーク強度が低下しており、 Ps^- の光脱離が起きていることを示している。ただし、上述のようにピーク強度は1/4にまでは低下していない。これは、 Ps^- の一部が、加速されてからレーザー光と交差するまでわずかな距離飛行する間にも消滅し、ピークに寄与してしまうこと、および用いたレーザーのパワーでは光脱離されずに通り抜けるものがあることが主な原因である。この現象を解析することによって、 Ps^- 光脱離断面積の下限值が得られた。その値は $2 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$ であり、理論計算の値と一致している。

紙面の都合で詳細は割愛するが、この実験の後に、 Ps^- の光脱離で生成される Ps をマイクロチャンネルプレートで検出する実験にも成功している。²³⁾

5. 最後に： Ps^- 光脱離の応用—エネルギー可変 Ps ビームの生成に向けて—

これまで述べてきたように、ナトリウムを蒸着したタングステン標的を用いることにより、 Ps^- を効率よく放出させることが可能となった。さらにレーザー光を照射して光脱離させ、生成される Ps を検出することも可能となった。こうして得られる Ps は、エネルギー可変 Ps ビームとして用いることができるはずである。

Ps は電氣的に中性で、一旦生成すれば、電場を用いて加速することができない。このため、エネルギー可変 Ps ビームの生成には、加速した低速陽電子ビームを気体中

透過させ、電荷交換によってPsを生成する方法が用いられてきた。生成されるPsのエネルギーは入射陽電子のエネルギー E_e^+ と気体分子のイオン化エネルギー I を用いて $E_e^+ - I + E_B$ と書くことができる。実際に得られているエネルギー領域は10–400 eVと低く、強度もかなり低い。この手法を利用した実験としては、LiF結晶表面でのPs鏡面反射の研究²⁴⁾とPs-気体分子散乱断面積の測定²⁵⁾が報告されているのみである。

Ps⁻の光脱離によって得られるPsビームは、気体分子との電荷交換で得られるビームと比較すると

- (1) keV領域のエネルギーを持つ
- (2) 超高真空中で得られるため、固体表面分析に使える
- (3) 強度が高い

といった特徴を持つ。これを活かして、絶縁体表面の分析ができるのではないかと考えている。ここ10年ほどの間に、反射高速電子線回折法を、電子線の代わりに陽電子線を用いて行う反射高速陽電子線回折法が開発され、新たな固体表面の分析が可能となってきた。²⁶⁾ また近年、絶縁体に中性原子を表面すれすれの角度で入射し、反射回折像を得る研究も行われている。^{27, 28)} このような回折像を、Psを使って得ることも可能になるかもしれない。

本稿の内容は、坂井隆彦、函館俊秀、宮本あやか、立花隆行、寺部宏基(以上東京理科大学)、五十嵐明則(宮崎大学)、兵頭俊夫、和田 健、柳下 明(以上高エネルギー加速器研究機構)、久我隆弘(東京大学)の皆さんとの共同研究によるものです。皆様に深く感謝いたします。また、松尾学術研究助成および日本原子力研究開発機構先端基礎研究センター黎明研究の助成を得て行われました。

参考文献

- 1) 兵頭俊夫, 長嶋泰之: 固体物理 **43** (2008) 185.
- 2) J. A. Wheeler: Ann. N. Y. Acad. Sci. **48** (1946) 219.
- 3) A. P. Mills, Jr.: Phys. Rev. Lett. **46** (1981) 717.

- 4) D. B. Cassidy and A. P. Mills, Jr.: Nature **449** (2007) 195.
- 5) A. M. Frolov and D. M. Wardlaw: Phys. Lett. A **372** (2008) 6721.
- 6) W. Kolos, C. C. Roothaan and R. A. Sack: Rev. Mod. Phys. **32** (1960) 178.
- 7) A. P. Mills, Jr.: Phys. Rev. Lett. **50** (1983) 671.
- 8) F. Fleischer, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **96** (2006) 063401.
- 9) H. Ceeh, *et al.*: Phys. Rev. A **84** (2011) 062508.
- 10) Y. Nagashima and T. Sakai: New J. Phys. **8** (2006) 319.
- 11) Y. Nagashima, T. Hakodate, A. Miyamoto and K. Michishio: New J. Phys. **10** (2008) 123029.
- 12) K. Michishio, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **106** (2011) 153401.
- 13) 永井康介, 長谷川雅幸: 日本物理学会誌 **60** (2005) 842.
- 14) P. J. Schultz and K. G. Lynn: Rev. Mod. Phys. **60** (1988) 701.
- 15) K. Michishio, *et al.*: J. Phys. Conf. Ser. **199** (2010) 012003.
- 16) N. W. Ashcroft and N. D. Mermin: *Solid State Physics* (Sauders College, Philadelphia, U.S.A., 1976).
- 17) O. V. Boev, M. J. Puska and R. M. Nieminen: Phys. Rev. B **36** (1987) 7786.
- 18) A. Kiejna and K. F. Wojciechowski: Prog. Surf. Sci. **11** (1981) 293.
- 19) H. Terabe, *et al.*: New J. Phys. **14** (2012) 015003.
- 20) A. Igarashi, I. Shimamura and N. Toshiya: New J. Phys. **2** (2000) 17.
- 21) T. Hyodo, *et al.*: J. Phys. Conf. Ser. **262** (2011) 012026.
- 22) A. Igarashi: private communication.
- 23) K. Michishio, *et al.*: in preparation.
- 24) M. H. Weber, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **61** (1988) 2542.
- 25) S. J. Brawley, *et al.*: Science **330** (2010) 789.
- 26) A. Kawasuso and S. Okada: Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 2695.
- 27) A. Schüller, S. Wethekam and H. Winter: Phys. Rev. Lett. **98** (2007) 016103.
- 28) P. Rousseau, H. Khemliche, A. G. Borisov and P. Roncin: Phys. Rev. Lett. **98** (2007) 016104.

(2011年10月17日原稿受付)

The Lightest Three Body System: Positronium Negative Ion Yasuyuki Nagashima and Koji Michishio

abstract: The bound state of a positron and two electrons is known as positronium negative ion. Recently, we have observed efficient emission of the ions from alkali-metal coated tungsten surfaces. We have also succeeded in the observation of the photodetachment of the ions produced using this method. The experimental scheme developed in the present work gives new opportunities to study not only for the investigation of spectroscopic investigation for the ions but also for the production of an energy-tunable positronium beam for future applications.

物質中の繰り込み群による原子核の記述

月山幸志郎 (東京大学大学院理学研究科附属原子核科学研究センター 133-0033 東京都文京区本郷7-3-1)

核力に基づく原子核の第一原理計算に関する新しい方法を紹介する。原子核が有する閉殻構造に着目し、繰り込み群により核子多体問題を閉殻原子核とその周りのバレンス核子の問題に分離する。繰り込み群を自由空間ではなく核内で定義することで、高精度かつ効率的な第一原理計算を可能にした。理論の概要とベンチマーク計算の結果を説明する。

1. はじめに

原子核は陽子と中性子(総称して核子)からなり、核力と呼ばれる核子間相互作用によって束縛される有限量子多体系である。自然界に安定に存在する300種の安定核に加え、実験技術の進歩により6,000種以上の不安定核が研究対象となり、魔法数の変化や中性子ハロー現象などに代表されるように、安定核には見られなかった現象が発現している。同時に、核力に対する理解の深まりに伴って、核子多体計算には高い定量性が求められている。中性子過剰領域の精密な核構造は元素合成プロセスの理解に必要不可欠であるし、中性子星や超新星爆発のシミュレーションは、温度・密度・陽子混在度に関して核物質の状態方程式の外挿を必要とする。また、二重ベータ崩壊の遷移振幅における精密な核行列要素が、ニュートリノの性質決定にとって重要な情報となる。計算機の能力が進歩を続ける現在、核力に基づき、モデルに依存しない第一原理計算によって原子核の構造を記述することが重要な課題となってきた。

2. 現実的核力と第一原理計算

核力は、基本的には低エネルギーにおける2核子の散乱位相差のデータや重陽子の束縛エネルギーを再現するように現象論的に決定されてきた。この20年間で、低エネルギー有効理論の立場で核力を記述するカイラル有効場の理論が進展し、多体力の階層性や精度の制御に関して、これまでになかった系統的な現象論が可能となっている。¹⁾このような現象論的核力は、低エネルギーでの2核子(3核子)の性質を高精度で再現する意味で現実的核力と呼ばれており、第一原理計算の出発点とされている。近年では、格子QCDによる核力の導出が行われている。核構造計算のインプットには至っていないが、最も基礎的なレベルからの核力の理解であり、今後の進展が期待されている。

現実的核力が共通に持つ性質として低運動量・高運動量成分間の強い結合^{*1}がある。これは核力の短距離斥力や短距離で特異的なテンソル力成分を反映しており、原子核を極めて非摂動的な系としている。最先端の計算機をもってしても、第一原理計算は軽い核に限定されているのが現状である。

核子数の多い場合にはバレンス核子による有効理論が用いられる。原子核において平均場は第0近似を与え、1粒

子軌道を定義する。一定の軌道が全て占有された状態である閉殻を考え、その周りのバレンス核子の相互作用を考慮することで、原子核の低エネルギー状態の性質は良く記述される。しかし、出発点の現実的核力とバレンス核子間の有効相互作用の関係は、未だに第一原理的には理解されていない。

さらに重い領域では密度汎関数理論(DFT)が用いられる。DFTは計算コストが比較的少なく、広範囲の原子核を統一的に記述することができる。しかし、エネルギー汎関数と核力の関係は詳細には理解されていない。

このように、異なる質量数領域において様々な多体問題の方法が存在する。これらの方法と核力の関係を明らかにすることは、原子核の包括的な理解には不可欠であり、そのために我々は、Similarity Renormalization Group (SRG)という方法を拡張し、原子核構造に応用した。本稿ではこれに関する研究の一部を紹介する。SRGは高エネルギー物理²⁾及び凝縮系物理³⁾の分野でほぼ同時期に独立に提唱され、特に電子多体系に広く適用されてきた。以下ではまずSRGについて説明し、原子核への応用について具体的に議論する。^{*2}

3. Similarity Renormalization Group

核力の低・高運動量成分の強い結合を取り除く手段として、繰り込み群に基づく手法が近年提唱された。その一つであるSRGは、連続的なユニタリ変換によって2核子(3核子)系の物理量を保存しながらエネルギースケールを分離する。定式化が単純な点と、系統的に精度を改善できる点で汎用性が高い。

以下のようにハミルトニアンが二つの部分に分けられると考える。^{*3}

$$H = H^d + H^{od}. \quad (1)$$

SRGが行うのは、変換後のハミルトニアンが $H^d(s)$ で支配されるようなユニタリ変換 $U(s)$ を求めることである。ここで、 s は変換を特徴づけるパラメータであり $H(0) = H$ である。

^{*1} この意味でハードという形容詞が用いられることがある。

^{*2} また、原子核の記述には3体力が必要不可欠であるが、本文では方法論に焦点を当て、核力は2体力に限定する。

^{*3} H^d, H^{od} 対角部分と非対角部分、あるいは非摂動部分と摂動部分、など任意で良い。

$$H(s) = U(s)HU^\dagger(s) = H^d(s) + H^{od}(s) \quad (2)$$

$$\rightarrow H^d(\infty) (s \rightarrow \infty) \quad (3)$$

両辺を変数 s で微分することで以下の式が容易に得られる.

$$\frac{dH(s)}{ds} = [\eta(s), H(s)]. \quad (4)$$

ただし,

$$\eta(s) \equiv \frac{dU(s)}{ds} U^\dagger(s) \quad (5)$$

はユニタリ変換の生成子である. ユニタリ変換 $U(s)$ は形式的には $U(s) = \mathcal{T}_s \exp \{-\int_0^s ds' \eta(s')\}$ と書かれる.*4 ここで, \mathcal{T}_s は演算子を s の大きな順に並べ替える演算子である. ここまでの議論で, 生成子 $\eta(s)$ に関する条件は反エルミートであることしか課されていないことに注意されたい. 生成子をうまく設計することで問題に応じてハミルトニアンの変換を与えることができる. 最も基本的な生成子は Wegner³⁾ によって与えられたものである.

$$\eta(s) = [H^d(s), H(s)] = [H^d(s), H^{od}(s)]. \quad (6)$$

この場合, $H^{od}(s)$ が s の増加とともに抑えられることが証明されている.^{3,5)}

$$\frac{d}{ds} \text{Tr}|H^{od}(s)|^2 < 0. \quad (7)$$

ただし, トレースはハミルトニアンを表現する任意の基底の全状態に関して取っている. 原子核物理において SRG は, 核力の高運動量成分を積分し低運動量空間の有効核力を得る方法として適用された.⁴⁾ 具体的には相対2核子系のハミルトニアン $H(0) = T_{\text{rel}} + V$ に対して, $H^{od} = T_{\text{rel}}$, $H^{od} = V$ と選び, $dH(s)/ds = [[T_{\text{rel}}, V(s)], H(s)]$ を運動量空間で書くと, フロー方程式

$$\frac{d}{ds} V_{k,k'}(s) = -(k^2 - k'^2)^2 V_{k,k'}(s) + \frac{2}{\pi} \int_0^\infty q^2 dq (k^2 + k'^2 - 2q^2) V_{k,q}(s) V_{q,k'}(s) \quad (8)$$

が得られ, 核子間ポテンシャルのフローを与える. 対角要素から大きく離れた行列要素では式(8)は第1項で支配され, $V_{k,k'}(s) \approx V_{k,k'}(0) \exp\{-s(k^2 - k'^2)^2\}$ と非対角要素が指数的に落ちて行くことが分かる.

このようにしてソフト化された核力は, 低運動量成分と高運動量成分の結合が弱く, 多体計算の収束性を高める. しかし, 一般に繰り込み群は多体力を生成し, それらを無視する限りユニタリ変換は近似的なものにとどまり, 物理量に s 依存性という形で影響する.⁶⁾ 従って, 幅広い質量数の原子核を記述するためには, 誘起される多体力を考慮することが必要になる.

*4 波動関数は $|\Psi\rangle = U(s)|\Phi\rangle$ と変換される. $|\Psi\rangle$ と $|\Phi\rangle$ が断熱的に繋がらないような場合は SRG は機能しない.

4. In-Medium SRG (IM-SRG)

SRG で生成されてしまう多体力を上手く近似するため, 原子核の持つ閉殻構造を活用し, SRG 変換を原子核多体系の中で再定義する (以後 IM-SRG と呼ぶ).⁷⁾ 自由空間での SRG と異なり, IM-SRG では3体以上の多体力を近似的に2体までの演算子に繰り込むことができる, という性質を持つ.

4.1 物質中でのフロー方程式

一般に原子核のハミルトニアンは以下のように書かれる.

$$H = \sum_{ij} T_{\text{rel},ij} a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2!} \sum_{ijkl} V_{ijkl}^{(2)} a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \quad (9)$$

$$+ \frac{1}{3!} \sum_{ijklmn} V_{ijklmn}^{(3)} a_i^\dagger a_j^\dagger a_k^\dagger a_n a_m a_l + \dots \quad (10)$$

ただし, T_{rel} は重心系での運動エネルギーであり, 核子間の n -体相互作用を $V^{(n)}$ で表す. 閉殻原子核を考え, フェルミエネルギー ε_F 以下の平均場軌道が全て占有された状態 $|\Phi\rangle$ を参照状態とし, この状態についてハミルトニアン⁸⁾の正規積を取ると, ハミルトニアン(10)は以下のように書き直される.

$$H = E_0 + \sum_{ij} f_{ij} N(a_i^\dagger a_j) + \frac{1}{2!} \sum_{ijkl} \Gamma_{ijkl} N(a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k) + \dots$$

ここで, 正規積を取った演算子は $\langle \Phi | N(a_i^\dagger \dots a_j) | \Phi \rangle = 0$ に従い, 演算子の係数は以下で与えられる.

$$E_0 = \langle \Phi | H | \Phi \rangle = \sum_i T_{\text{rel},ii} n_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} V_{ijij}^{(2)} n_i n_j + \frac{1}{6} \sum_{ijk} V_{ijkijk}^{(3)} n_i n_j n_k, \quad (11)$$

$$f_{ij} = T_{\text{rel},ij} + \sum_k V_{ikjk}^{(2)} n_k + \frac{1}{2} \sum_{kl} V_{iklkl}^{(3)} n_k n_l, \quad (12)$$

$$\Gamma_{ijkl} = V_{ijkl}^{(2)} + \frac{1}{4} \sum_m V_{ijmklm}^{(3)} n_m, \quad (13)$$

ここで, $n_i = \theta(\varepsilon_F - \varepsilon_i)$ は参照状態 $|\Phi\rangle$ における核子の占有数を表す. 正規積を取った0体から2体の項 E_0, f, Γ は参照状態 $|\Phi\rangle$ における占有状態にわたる和を通して3体力 $V^{(3)}$ の寄与を含んでいる. 従って正規積を取った演算子で定式化した SRG のフロー方程式は多体力の有効な近似となり得ると考えられる. Wick の定理を用い, 正規積の2体までの演算子, $H(s) = E_0(s) + f(s) + \Gamma(s)$, $\eta = \eta^{(1)} + \eta^{(2)}$, の範囲で式(4)を計算すると, IM-SRG(2)^{*5)}のフロー方程式が以下のように得られる. ($\bar{n}_i \equiv 1 - n_i$)

$$\frac{dE_0}{ds} = \sum_{ab} \eta_{ab}^{(1)} f_{ba} (n_a - n_b) + \frac{1}{2} \sum_{abcd} \eta_{abcd}^{(2)} \Gamma_{cdab} n_a n_b \bar{n}_c \bar{n}_d, \quad (14)$$

$$\frac{df_{ij}}{ds} = \sum_a (1 + P_{ij}) \eta_{ia}^{(1)} f_{aj} + \sum_{ab} (n_a - n_b) (\eta_{ab}^{(1)} \Gamma_{biaj} - f_{ab} \eta_{biaj}^{(2)}) + \frac{1}{2} \sum_{abc} (n_a n_b \bar{n}_c + \bar{n}_a \bar{n}_b n_c) (1 + P_{ij}) \eta_{ciab}^{(2)} \Gamma_{abcj}, \quad (15)$$

*5 2体までを考慮しているという意味で IM-SRG(2) と表記している.

$$\begin{aligned}
\frac{d\Gamma_{ijkl}}{ds} = & \sum_a (1-P_{ij})(\eta_{ia}^{(1)}\Gamma_{ajkl} - f_{ia}\eta_{ajkl}^{(2)}) \\
& - \sum_a (1-P_{kl})(\eta_{ak}^{(1)}\Gamma_{ijal} - f_{ak}\eta_{ijal}^{(2)}) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{ab} (1-n_a - n_b)[\eta_{ijab}^{(2)}\Gamma_{abkl} + \Gamma_{ijab}\eta_{abkl}^{(2)}] \\
& - \sum_{ab} (n_a - n_b)(1-P_{ij})(1-P_{kl})\eta_{bjal}^{(2)}\Gamma_{aibk}. \quad (16)
\end{aligned}$$

ここで、 P_{ij} は*i*と*j*を入れ替える演算子である。下線部は除外される項であるが、詳細は後述する。このフロー方程式は3つの重要な特徴を持つ。第一に、方程式は交換子で記述されており、演算子は互いに一つ以上の縮約を含むため理論はsize-extensiveである。^{*6} Size-extensiveとは、系の内部エネルギーが構成粒子数に比例することを意味し、電子系や核子系において満たされるべき性質である。また、粒子数に依らず理論の誤差が評価できるという利点もある。第二に、式(14)-(16)に現れる2粒子(pp), 2空孔(hh)及び1粒子1空孔(ph)ループを通して、核子相関を非摂動的に足し上げていることである。特にphループはIM-SRGでのみ記述される相関である。第三に、1粒子状態数*N*について計算量が $\mathcal{O}(N^6)$ であり、対角化による方法と比べるとはるかに穏やかにスケールする。

フロー方程式を相互作用の強さに関して展開した解析から、IM-SRG(2)で得られる閉殻原子核の基底エネルギーは摂動論を3次まで厳密に含むことが分かっている。含まれる摂動論の次数は、演算子を正規積の3体、4体、と増やして行くことでより高くなる。また*f*や Γ を有効1体力、2体力として見る際、同様の議論が成り立つ。この摂動論解析から、フロー方程式(14)-(16)の下線部の項は、3体以上の演算子から導かれる高次項と互いにキャンセルされることが明らかになった。つまりこれらの項を含める場合は、3体の演算子も整合的にフロー方程式に取り入れる必要がある。従って、IM-SRG(2)では下線部の項を除外する。

4.2 生成子の選択

IM-SRGのフローは生成子によって決まり、生成子は H^{od} によって決まる。従ってフローは $H^{\text{od}}=f^{\text{od}}(s)+\Gamma^{\text{od}}(s)$ の選択によって決まる。ここでは以下のように選ぶ。

二重閉殻の基底状態の性質を知りたい場合、参照状態 $|\Phi_0\rangle$ をヒルベルト空間から分離するように H^{od} を選べば良い(図1(a)に対応)。

$$f_{ij}^{\text{od};c} \in \{f_{ph}\} + \text{h.c.}, \quad \Gamma_{ijkl}^{\text{od};c} \in \{\Gamma_{pp'hh'}\} + \text{h.c.} \quad (17)$$

ここで、 $p, p'(h, h')$ は非占有(占有)されたHF軌道を意味する。

次にバレンス空間を分離する場合、参照状態に加えて、バレンス空間とそれより高エネルギーの空間を分離する必要がある(図1(b)に対応)。

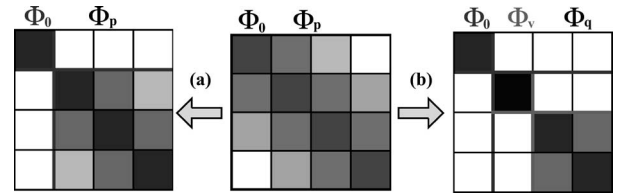


図1 非対角要素 H^{od} の選択。

$$f_{ij}^{\text{od};v} \in \{f_{ph}\} + \{f_{vq}\} + \text{h.c.} \quad (18)$$

$$\Gamma_{ijkl}^{\text{od};v} \in \{\Gamma_{pp'hh'}\} + \{\Gamma_{vv'qq'}\} + \{\Gamma_{pp'vh}\} + \{\Gamma_{vv'v''v''}\} + \text{h.c.} \quad (19)$$

ただし、 v, v', v'' は非占有軌道(p)のなかのバレンス軌道を意味し、 q, q' はそれ以外を意味する。

ここで選択した H^{od} はそれぞれの場合の分離を達成するための最小の条件であることを付記しておく。^{*7}

このようにして選択した H^{od} を除去する生成子として以下の二つを考える。一つ目はWegner³⁾に従い

$$\eta^{\text{I}}(s) = [H^{\text{d}}(s), H^{\text{od}}(s)] \quad (20)$$

を用いる。二つ目はWhiteの定義⁸⁾を原子核に応用し、

$$\begin{aligned}
\eta^{\text{II}} = & \sum_{ij} \frac{f_{ij}^{\text{od}} N(a_i^\dagger a_j)}{f_i - f_j + (n_i - n_j)\Gamma_{ijij}} - \text{h.c.} \\
& + \sum_{ijkl} \frac{\Gamma_{ijkl}^{\text{od}} N(a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k)}{f_i + f_j - f_k - f_l + A_{ijkl}} - \text{h.c.}, \quad (21)
\end{aligned}$$

と選ぶ。ただし、 $A_{pp'hh'} = \Gamma_{pp'pp'} + \Gamma_{hh'hh'} - \Gamma_{phph} - \Gamma_{p'h'h'} - \Gamma_{ph'ph'} - \Gamma_{p'h'p'h}$, $A_{pp'vh} = \Gamma_{pp'pp'} - \Gamma_{phph} - \Gamma_{p'h'p'h}$, $A_{pp'p''p''} = \Gamma_{pp'pp'} - \Gamma_{p''p''p''p''}$, $f_p \equiv f_{pp}$ (引数の*s*は簡単のため省略)。また Σ' は H^{od} に属する添字にわたって和を取ることを意味する。二つの生成子は、フロー方程式を多体力項の切断なしに完全に解いた場合には等価である。従って、物理量に差があれば、それは正規順序の3体以上の項を切断したことによる理論誤差の見積もりになる。^{*8}

フロー方程式は、 10^{7-8} 次元の連立微分方程式になるため、数値的に解く。系の球対称性を仮定し、フロー方程式を全角運動量*J*に結合した行列方程式に変換し、全ての項を行列の掛け算として表現し直すことで計算コストを100分の1程度に抑えている。以下に示す計算結果にはカイラル摂動論で得られた2体核力¹⁾を式(8)によってソフトにしたものを用いている。

4.3 二重閉殻原子核の基底エネルギー

まずは二重閉殻原子核の基底状態を分離した場合(図1(a)に対応)について議論する。図2には⁴Heの基底エネ

^{*6} Goldstone展開などのように、連結ダイアグラムのみを含む摂動論もsize-extensiveである。

^{*7} これらの H^{od} の選択は、準粒子のカウンティング演算子を導入することで系統的に求められるが本稿では割愛している。最小の条件とは、 H^{od} として選ぶハミルトニアン行列要素の数が最小という意味である。分離条件はいくらでも厳しくできるが、それに伴い H^{od} に属する行列要素数が増えるため、フロー方程式を正規積2体で切断することによる理論誤差が大きくなってしまう。

^{*8} 特にWhiteの生成子(η^{II})は数値計算上大変有用である。具体的には、解くべき連立微分方程式が硬い方程式になるのを避け、解の収束を加速する。

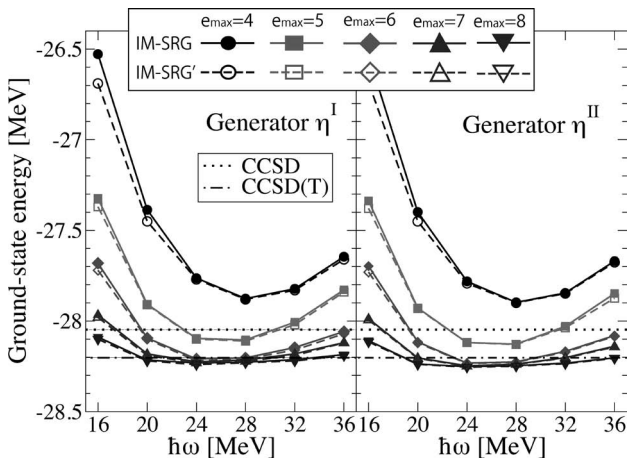


図2 IM-SRG(2)による ${}^4\text{He}$ の基底エネルギー。横軸には基底関数に内在する変数($h\omega$)をとっている。左右の図は二つの生成子(式(20)及び(21))に対応し、模型空間の大きさ(e_{\max})ごとにプロットしている。実線はフロー方程式(式(14)–(16))において下線部の項を排除した場合(IM-SRG(2))の結果で、点線は排除しない場合(IM-SRG(2)')の結果を表す。二本の水平線は既存の第一原理計算CCSDとCCSD(T)の収束値。⁹⁾

ルギー($E_0(\infty)$)の収束性をプロットしている。横軸は計算を行う際に用いた基底関数(調和振動子関数)に内在する変数 $h\omega$ である。従って最終的な結果は $h\omega$ に依存してはならない。計算を行う模型空間の大きさは $2n+l \leq e_{\max}$ によって指定される。ただし、 n と l はそれぞれ1粒子状態の主量子数及び軌道角運動量であり、全ての粒子は e_{\max} 以下の状態を取り得る。図からは、この e_{\max} の増大と共に基底エネルギーが収束し、 $h\omega$ にも依存しなくなる様子が示されている。図には2種類の生成子 η^I, η^{II} の結果が示されている。これらの差がほとんどないことは、IM-SRG(2)の誤差が小さいことを意味している。また、それぞれの生成子に対して、式(14)–(16)の下線部を除外したもの(IM-SRG(2))と除外しないもの(IM-SRG(2)')をプロットしている。これらの差は高次の相互作用項から出てくるはずであるが、今の場合用いている核力が比較的ソフトなものであるため、その差がほとんど見えない。実際に、核力がハードな場合には有意な差が生じ、IM-SRG(2)の方が優れている。図にある二本の水平線は既存の第一原理計算であるCouple-Cluster(CC)法⁹⁾の結果を示している。CCSDは相関エネルギーの95%をCCSD(T)は99%を尽くしていることが知られている。従って今の場合IM-SRG(2)は非常に高精度であると言える。

図3には生成子 η^{II} を用いてIM-SRG(2)を ${}^4\text{He}$ の次に重い二重閉殻核である ${}^{16}\text{O}$ 及び ${}^{40}\text{Ca}$ に対して行った結果を示している。鎖線で描かれているのは同じ条件下で行ったCCSDの結果である。つまり系の粒子数が16, 40と増加しても同精度を保っていることを示しており、IM-SRG(2)のsize-extensivityを数値的に実証している。

図4には2体演算子 Γ の $J=0$ の行列要素をフローパラメータ s の増加と共に2次元プロットしている。行列要素の大きさは1にスケールされている。 $\Gamma_{pp'hh'} \in \{H^{0d}\}$ が s の増

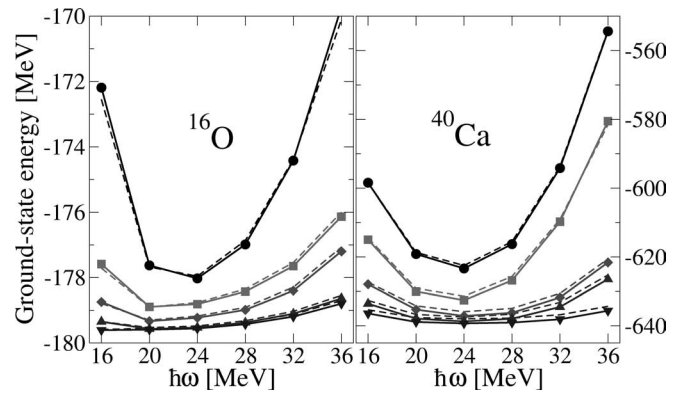


図3 IM-SRG(2)による ${}^{16}\text{O}$ 及び ${}^{40}\text{Ca}$ の基底エネルギー。横軸と凡例は図2と同じ。シンボル付きの実線はIM-SRG(2)、鎖線はCCSDの結果をそれぞれプロットしている。

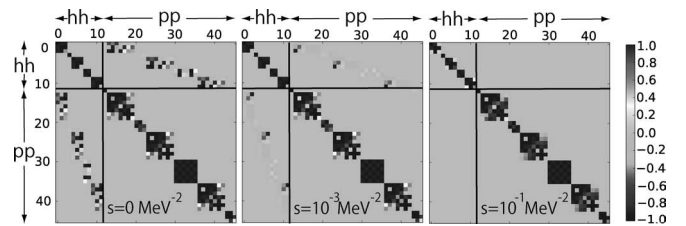


図4 ハミルトニアン Γ の2体行列要素のフロー。角運動量が $J=0$ に組んだ行列要素のうち $\Gamma_{pp'p'p}, \Gamma_{hh'h'h}, \Gamma_{pp'hh'}$ 及びそのエルミート共役なもののみをプロットしている。それぞれの軸は2体状態 $|ij\rangle$ に対応している。生成子は η^I を用いている。(フルカラー口絵参照)

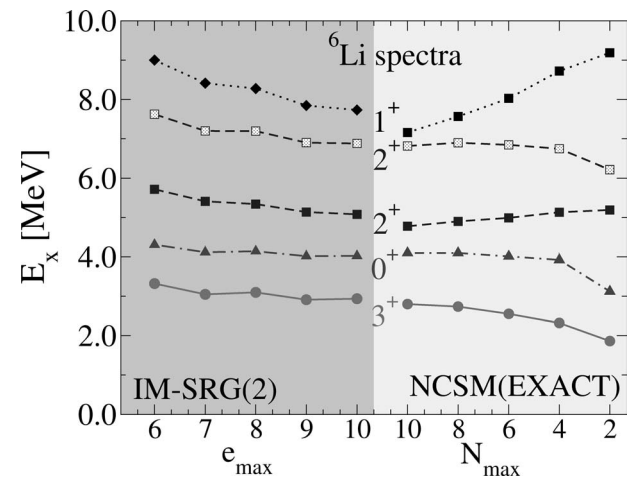


図5 ${}^6\text{Li}$ の励起エネルギーに関する、IM-SRG(2)と厳密対角化法(NCSM)¹⁰⁾の比較。IM-SRG(2)ではフロー方程式で得られた有効相互作用をバレンス空間で対角化している。他方、NCSMでは6体問題を対角化している。横軸はそれぞれの方法における模型空間の大きさを表す。

加と共に抑えられ、 $s \rightarrow \infty$ では $H^{0d} \rightarrow 0$ となっている様子が分かり、自由度の分離が確認できる。

4.4 バレンス空間の有効問題

次に図1(b)のように生成子を構成した場合の結果を示す。 ${}^6\text{Li}$ に対して ${}^4\text{He}$ を参照状態とし、6体問題を ${}^4\text{He}$ の外側のバレンス空間での2体問題に変換する。 $f^d(\infty) + \Gamma^d(\infty)$ をバレンス空間の有効ハミルトニアンとして対角化し、スペクトルを得た。また、その基底エネルギーと $E_0(\infty)$ の和をとることで、 ${}^6\text{Li}$ の基底エネルギーが得られ

る。^{*9} ${}^6\text{Li}$ には厳密対角化(NCSM)が可能なので、図5にて比較している。横軸は模型空間の大きさで、縦軸が励起エネルギーである。左反面にIM-SRG(2)、右反面に厳密対角化(NCSM)¹⁰の解をプロットしている。二つの方法の最大模型空間で比較すると、両者のスペクトルは高精度で一致していることが分かる。ここでは示していないが、基底エネルギーも同精度で一致している。IM-SRG(2)によって、6体問題が有効2体問題に還元され得ることを示している。

5. まとめ

核子とその間に働く核力から出発して第一原理的に原子核構造を記述することは、核力の複雑さもあって困難な問題である。実行可能でかつ系統的な精度の向上が可能な方法として、IM-SRGを紹介した。原子核が持つ殻構造、特に閉殻構造を積極的に利用し繰り込み群と組み合わせることで、核子多体問題のハミルトニアンを二重閉殻の基底状態とそのまわりのバレンス核子を記述する部分に分離した。二重閉殻の基底エネルギーについて、既存の他の第一原理手法と同程度の高精度を持ち、相関エネルギーの95%以上を説明できることが示された。また、理論の構造上 size-extensivityを持ち、粒子数に依らず高精度を保つことができる。さらに、 ${}^6\text{Li}$ のベンチマークにより、IM-SRGによってバレンス核子の有効理論が構築できることが示唆された。

本稿では示していないが、IM-SRGでは同一の生成子によりハミルトニアンと同様に任意の演算子について $d/ds O(s) = [\eta(s), O(s)]$ により有効演算子を導出することができる。例として二重閉殻原子核の核半径のベンチマークを行い、その精度の高さを確認している。また、IM-SRGで得られる実験室系の多体波動関数への重心励起の混在が十分に小さいことを数値計算で確認している。^{*10}

^{*9} 参照状態 $|\Phi_0\rangle$ も分離しているので、単純に和をとることで6体系の基底エネルギーを得ることができる。

^{*10} 有限孤立系である原子核において、重心運動・相対運動の分離は自明ではなく有限に切断されたヒルベルト空間で得られた実験室系の多体波動関数には、非物理的な重心運動の励起が混在してしまう。

現在は、3体の項までを含むフロー方程式の拡張や、電磁気的応答に対応する有効演算子の導出に取り組んでいる。また、第一原理計算を通してDFTのエネルギー汎関数や核物質の状態方程式のパラメータへの制約を与えることができれば、より幅広い物理現象と核力を結びつけることができると考えている。

本研究はAchim Schwenk氏(ダルムシュタット工科大学)とScott K. Bogner氏(ミシガン州立大学)との共同研究であると同時に、次世代スーパーコンピュータ「京」を中核とするプロジェクト、HPCI戦略プログラム分野5・課題2「大規模量子多体計算による核物性解明とその応用」の一端を担っている。^{*11}

参考文献

- 1) D. R. Entem and R. Machleidt: Phys. Rev. C **68** (2003) 041001.
- 2) S. D. Glazek and K. G. Wilson: Phys. Rev. D **48** (1993) 5863.
- 3) F. Wegner: Ann. Phys. (Leipzig) **506** (1994) 77.
- 4) S. K. Bogner, *et al.*: Phys. Rev. C **75** (2007) 061001.
- 5) S. Kheirein: *The Flow Equation Approach to Many-Particle Systems* (Springer, Berlin, 2006).
- 6) S. K. Bogner, *et al.*: Prog. Part. Nucl. Phys. **65** (2010) 94.
- 7) K. Tsukiyama, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **106** (2011) 222502.
- 8) S. R. White: J. Chem. Phys. **117** (2002) 7472.
- 9) G. Hagen, *et al.*: Phys. Rev. C **82** (2010) 034330.
- 10) P. Navrátil, *et al.*: J. Phys. G **36** (2009) 083101.

(2011年12月15日原稿受付)

In-Medium Similarity Renormalization Group for Nuclear Many-Body Problems

Koshiroh Tsukiyama

abstract: We present a new method regarding the nuclear *ab-initio* calculations. Taking advantage of “closed-shell” structure, which is inherent in nuclei, nucleonic many-body problems are decoupled into the closed-shell nucleus and the fewbody problems among valence nucleons. Formulation of RG equation in nuclear medium enables us to perform accurate and effective *ab-initio* calculations. We briefly explain the theory and some results of benchmarks.

^{*11} <http://www.jicfus.jp/field5/jp/>

タンパク質系分子シミュレーションのための力場関数

榮 慶丈
依田隆夫
杉田有治
岡本祐幸

〈名古屋大学大学院理学研究科 464-8602 名古屋市千種区不老町 〉

〈長浜バイオ大学バイオサイエンス学部 526-0829 長浜市田村町1266 〉

〈理化学研究所基幹研究所 351-0198 和光市広沢2-1 〉

〈名古屋大学大学院理学研究科 464-8602 名古屋市千種区不老町 〉

タンパク質系の計算物理学的研究は、モンテカルロ法や分子動力学法に基づく分子シミュレーションによってなされる。これらの計算機シミュレーションを実行するには、系のポテンシャルエネルギー（力場と呼ばれる）を与える必要があるが、長年にわたり欧米の研究グループが開発してきた関数が標準的に広く使われている。ここでは、これらの力場関数の妥当性を調べ、より精度の高い力場関数を開発する手法を紹介する。

1. はじめに

生命現象の多くはタンパク質分子によって担われている。タンパク質はアミノ酸が（小さいものでは数十個、大きいものでは数千個）ペプチド結合で鎖状につながった分子であるが、その機能を調べるためには、立体構造を知る必要がある。1950年代後半からX線回折実験やNMR実験などにより、タンパク質の立体構造が決定されるようになり、そのデータはProtein Data Bank (PDB)¹⁾として公開されている。ここで、立体構造データとは、タンパク質分子を構成する各原子の重心の3次元座標のことであり、単位はÅで与えられる。図1にタンパク質分子の化学式の例を描く。炭素原子(C)と窒素原子(N)が横に(-N-C-C-)と連なっている部分がタンパク質の主鎖であり、それぞれのNのすぐ右のCに付いて上下に伸びている部分が側鎖と呼ばれる。PDBには、実験で決定されたこれらの原子の重心の3次元座標が蓄積されている訳である。

タンパク質系の計算機シミュレーションを行う場合、まず、タンパク質とその周りを取り囲む水分子の各原子の重心座標を初期座標として計算機上に用意する。量子力学に基づく計算では、ポテンシャルエネルギーはクーロンの静

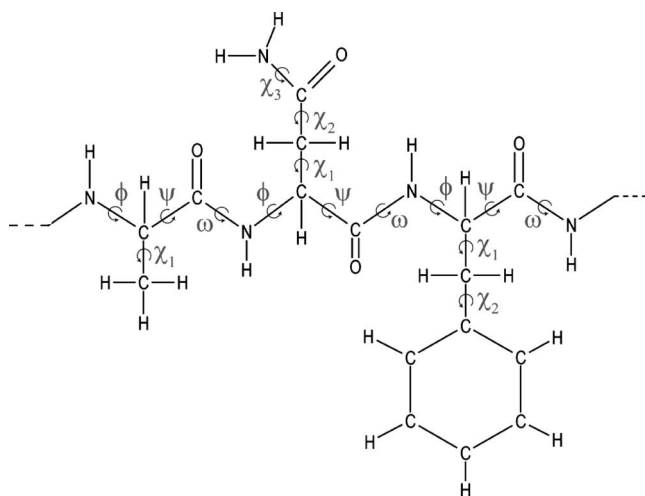


図1 タンパク質分子の化学式の例。左からアラニン、アスパラギン、フェニルアラニンという3個のアミノ酸がペプチド結合(CO-NH)でつながっている。左にも右にもまだアミノ酸が続いていることを点線で示した。

電相互作用項だけを考慮すればよく、後はシュレーディンガー方程式を解けばよい訳であるが、それには、膨大な計算時間がかかる。普通の大きさのタンパク質においては、水分子をあらわに取り入れる場合、スーパーコンピュータを数ヶ月回してやっと1ステップの時間発展が追えるという状態であり、タンパク質の機能発現にかかわる現象を追うには、何千万ステップも時間発展をすることが要求されるので、何らかの近似計算を導入せざるを得ない。そして、最も広く使われてきた近似は、各原子をその重心に部分電荷が集中した相互作用点として扱い、タンパク質内の原子間の化学結合をそれら相互作用点をつなぐバネで表し、古典力学に基づき運動方程式を解くことである。すなわち、タンパク質内の原子間の相互作用の有効ポテンシャルエネルギー（力場と呼ばれる）は以下で与えられる。

$$E_{\text{conf}} = E_{\text{BL}} + E_{\text{BA}} + E_{\text{torsion}} + E_{\text{nonbond}} \quad (1)$$

$$E_{\text{BL}} = \sum_{\text{bond length } l} K_l (l - l_{\text{eq}})^2 \quad (2)$$

$$E_{\text{BA}} = \sum_{\text{bond angle } \theta} K_\theta (\theta - \theta_{\text{eq}})^2 \quad (3)$$

$$E_{\text{torsion}} = \sum_{\text{dihedral angle } \Phi} \sum_n \frac{V_n}{2} [1 + \cos(n\Phi - \gamma_n)] \quad (4)$$

$$E_{\text{nonbond}} = \sum_{i < j} \left[\frac{A_{ij}}{r_{ij}^{12}} - \frac{B_{ij}}{r_{ij}^6} + \frac{kq_i q_j}{\epsilon r_{ij}} \right] \quad (5)$$

ここで、 E_{BL} は化学結合を表すボンドの両端に位置する原子対の結合長についての調和振動子項、 E_{BA} は2つの続くボンド間の結合角についての調和振動子項である。それらが実験で決められた「自然長」や「自然角」になるようにバネの力で拘束されている訳である。これらのバネ定数は中性子散乱の実験データ等に基づいて決められる。また、式(5)の E_{nonbond} は非結合相互作用項と呼ばれ、各原子対のレナード・ジョーンズ項とクーロンの静電相互作用項から成り、原子対*i*と*j*の距離 r_{ij} の関数である。これらの項のパラメータも小分子の実験やアミノ酸ごとの量子化学計算で決定される。最後に、式(4)のエネルギー項 E_{torsion} であるが、

ねじれエネルギー項と呼ばれる。これは、4個の原子が3本のボンドで結ばれるとき、最初の3個の原子で定義される平面と残りの1個の原子を含む3個の原子で定義される平面のなす角度(二面角またはねじれ角と呼ばれる)の関数である。図1に二面角 ϕ の例が示されているが、 ϕ, ψ, ω が主鎖の二面角であり、 χ が側鎖の二面角である。このねじれエネルギー項 E_{torsion} は、いわば他の三項だけでは実験データを説明できないために、手で入れた「おつり」の部分であり、そのパラメータは最も曖昧性が高い。

タンパク質系の力場として広く用いられているものに、AMBER,²⁾ CHARMM,³⁾ OPLS,⁴⁾ GROMOS,⁵⁾ ECEPP⁶⁾ などがあり、欧米の異なる研究組織で数十年にわたり開発・改良が進められている。これらの力場関数は、小異を除けば、同じ式(1)–(5)の関数形を用い、似たパラメータ値を使っている。

本稿ではこれら既存の力場関数の精度を比較した我々の研究成果を紹介し、それらの精度を更に上げるために我々が提案した新しい力場関数項とパラメータ最適化法について議論する。なお、式(1)–(5)は現在最も一般的に使われている力場関数であるが、これらの項に更に分極の効果を取り入れる努力⁷⁾などもなされているが、新しい関数形が導入されれば、本稿で紹介される手法がそのまま適用できることをコメントしておく。また、最近、CHARMM力場を改良した独自の力場を用いた非常に長い分子動力学シミュレーションによって、複数の小タンパク質が自然の構造に折り畳まれたと報告されたが、⁸⁾ その結果は力場の改良の重要性を示すものであり、本研究と同一の方向性を示している。

2. 既存の力場関数の比較

既存の力場関数の精度を比べるためには、それらに基づいた小タンパク質の折り畳みシミュレーションを実行して、その結果が実験で示唆されるものと一致するかどうかを比較すればよい。しかし、水分子を含むタンパク質系は多自由度複雑系であり、系に無数にエネルギー極小状態が存在するために、従来のモンテカルロ法や分子動力学法に基づくシミュレーションでは、それらエネルギー極小状態に留まってしまい、誤った答えを出してしまうことが多い。よって、我々はタンパク質系の分子シミュレーションに適した拡張アンサンブル法と総称される手法を開発して、この困難を克服してきた。⁹⁾ 有効な拡張アンサンブル法を適用して初めて、精度の良い力場の比較ができる訳である。

我々は、特にタンパク質の二次構造(α ヘリックスや β シート構造などの主鎖の規則的な構造)形成の傾向を詳細に調べることににより、広く研究者の間で用いられている6つの力場、AMBER ff94, AMBER ff96, AMBER ff99, CHARMM22, OPLS-AA/L, GROMOS96について比較を行った。^{10,11)} 実験で α ヘリックス構造を持つことが知られているアミノ酸残基数13個のCペプチド¹²⁾と β シート(β ヘ

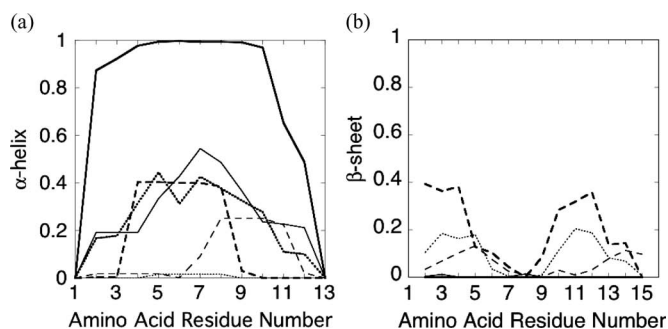


図2 水中の(a)Cペプチドと(b)Gペプチドの室温におけるアミノ酸残基数の関数としての二次構造(α ヘリックスと β シート)形成傾向性。値1.0は100%の二次構造形成を表す。太い実線はAMBER ff94, 太いダッシュ線はAMBER ff96, 太い点線はAMBER ff99, 細い実線はCHARMM22, 細いダッシュ線はOPLS-AA/L, 細い点線はGROMOS96の力場における結果に対応する(許可を得て文献10から転載)。

アピン)構造を持つことが知られているアミノ酸残基数16個のGペプチド¹³⁾の2つの小タンパク質(ペプチド)において、ランダムな初期構造から折り畳みシミュレーションを実行した。拡張アンサンブル法としては、マルチカノニカル法¹⁴⁾とレプリカ交換法¹⁵⁾を組み合わせたREMUCA^{16,17)}とMUCAREM^{16,17)}を適用した。ペプチドの周囲に千数百個から二千数百個の水分子をあらわに配置したランダムな初期構造から分子動力学シミュレーションを実行した。水分子模型については、それぞれの力場で指定されている通りに、GROMOS96についてはSPC,¹⁸⁾ その他の力場についてはTIP3P¹⁹⁾を使った。

図2に、2つのペプチドの室温における二次構造形成傾向性をアミノ酸残基数の関数として示した。ここで、二次構造とはタンパク質の主鎖の構造のうち、主鎖の原子間の水素結合により形成される規則的な構造のことであり、 α ヘリックス構造や β シート構造など数種類に分類できる。タンパク質の立体構造を与えられたとき、アミノ酸残基ごとにどの二次構造をとっているかを定めることができるので、ここでは、それぞれのアミノ酸残基が α ヘリックス構造や β シート構造を何パーセントの確率でとっているかを計算したわけである。図2から、力場によって結果が大きく異なることが分かる。これから、AMBER ff99とCHARMM22はCペプチドの自然の構造(α ヘリックス)によく合い、GペプチドにおいてはAMBER ff96およびGROMOS96が実験から示唆された構造(β ヘアピン)と良く一致することが分かった。これでは、タンパク質の二次構造の種類に合うような力場を選択する必要があることになる。すなわち、この結果はあらゆる二次構造に対応できる万能型の力場は少なくとも解析した6種類の力場の中には存在しないことを示している。よって、二次構造が未知のタンパク質の折り畳みシミュレーションではどの力場を使って良いか分からず、力場の精度を上げる必要があるということが判明した。^{10,11)}

更に、図2で分かることは、AMBER ff94は α ヘリックス形成を強く促す力場であるのに対して、AMBER ff96は β

シートを作りやすいことである。(水分子の寄与を簡略化したシミュレーションにおいても同様の結果が得られた。^{20,21)}ここで注目すべきは、これら2つの力場は式(1)において、式(4)の E_{torsion} の中の主鎖の二面角 ϕ と ψ に関するねじれエネルギー項のみに違いがあり、他の項は全て同じものであることである。すなわち、主鎖のねじれエネルギー項の違いが力場の二次構造形成傾向性の差に直接影響している。よって、力場の精度を上げるには、このエネルギー項を優先的に改良すべきであるといえる。このことは、AMBERなどで使われている2,000を超える数の力場パラメータの中で、主鎖のねじれエネルギー項のパラメータ数個だけを微調整することで、タンパク質の二次構造の形成傾向性を制御できる可能性を示唆している。実際、以下の章でそのことを具体例で示す。また、これらの結果を踏まえて、AMBERやCHARMMの最近の力場ではすべて ϕ と ψ のねじれエネルギー項の力場パラメータが新しく決めなおされたり、 ϕ と ψ のねじれエネルギー項に新しい項が追加されたりしている。²²⁻²⁵⁾このように、有名な力場であっても ϕ と ψ のねじれエネルギー項は積極的に改良が続けられているのが現状である。

これらの力場比較は小ペプチドにおいて行われたが、我々はもう少し大きい系(アミノ酸数60個のプロテインA、69個のコールドショックプロテイン、56個のプロテインG)においても折り畳みシミュレーションを行い、これらの力場に同様の傾向があることを示した。²⁶⁾

3. 力場関数のパラメータの最適化

前節の結果を受けて、既存の力場関数を改良することを考えるが、ここでは、まず、力場の関数形が与えられたとして、そのパラメータを最適化する方法の一般論を述べる。^{20,21)}

最初にPDBのデータベースから N 個のタンパク質の自然の構造の座標データを用意する。このとき、アミノ酸配列にできる限り相同性のない、さまざまな折り畳み構造を持つタンパク質を取り出すようにする。もし、力場パラメータが正しい値を持つとすれば、タンパク質が自然の構造(最も安定な構造)をとるとき、各原子に働く力は平均的にゼロであると言えるであろう。すなわち、

$$F=0, \quad (6)$$

を要求する。ここで、

$$F = \sum_{m=1}^N \frac{1}{N_m} \sum_{i_m}^{N_m} |f_{i_m}|^2. \quad (7)$$

そして

$$f_{i_m} = -\frac{\partial E_{\text{tot}}^{(m)}}{\partial \mathbf{x}_{i_m}} \quad (8)$$

である。 N_m は分子 m 中の原子の総数、 $E_{\text{tot}}^{(m)}$ は分子 m のポテンシャルエネルギー、 \mathbf{x}_i は原子 i の位置座標、そして f_i は原子 i にかかる力である。実際には、 F をゼロにするの

は不可能であり、 F は常に正なので、我々は力場パラメータを変数とするシミュレーションによって F の値を最小化する。すなわち、我々は力場パラメータ空間上で、 F の最小値を求めるシミュレーションを行う。

我々はこの力場パラメータ最適化法を既存の5つの力場AMBER ff94, AMBER ff96, AMBER ff99, CHARMM22, OPLS-AAの部分電荷と主鎖のねじれエネルギー項のパラメータに適用し、全ての場合において、最適化したパラメータの方がオリジナルパラメータより、実験結果をより正確に再現することを示した。^{20,21)}また、PDBのデータベースに基づく類似の力場パラメータ最適化法も最近開発された。²⁷⁾

4. 主鎖のねじれエネルギー項の改良

4.1 二次元フーリエ級数の導入

前々節の結果を受けて、特に主鎖のねじれエネルギー項を改良することを考える。前節では、関数形は既存の力場のままにして、パラメータだけを改良することを議論したが、ここでは、その関数形までも変えることを考える。主鎖の二面角 ϕ, ψ, ω がタンパク質の骨格の構造を決めているが、それらのうち、平面構造をしているペプチド結合に対応する ω は、ほぼ 180° の値を持つので、残る ϕ と ψ が重要になる。これらの角度の値と二次構造の関係は次のようになっている。²⁸⁾ α ヘリックスは $(\phi, \psi) \approx (-57^\circ, -47^\circ)$ 、平行 β シートは $(\phi, \psi) \approx (-119^\circ, 113^\circ)$ 、逆平行 β シートは $(\phi, \psi) \approx (-139^\circ, 135^\circ)$ あたりの値を持つ。すなわち、これらの特徴的な角度対がアミノ酸配列上で続くと、対応する二次構造ができていくことになる。

さて、力場関数のうち、式(4)のねじれエネルギー項 E_{torsion} であるが、主鎖の二面角 ϕ と ψ のエネルギー項 $E(\phi, \psi)$ と残りの二面角の項に分けて以下のように書くことにする。

$$E_{\text{torsion}} = E(\phi, \psi) + E_{\text{rest}} \quad (9)$$

ここで、 ϕ と ψ のエネルギー項は以下ようになる。

$$E(\phi, \psi) = \sum_m \frac{V_m}{2} [1 + \cos(m\phi - \gamma_m)] + \sum_n \frac{V_n}{2} [1 + \cos(n\psi - \gamma_n)] \quad (10)$$

例えば、AMBER ff94とAMBER ff96の場合はそれぞれ以下のような関数形となる。

$$E_{\text{ff94}}(\phi, \psi) = 2.7 - 0.2 \cos 2\phi - 0.75 \cos \psi - 1.35 \cos 2\psi - 0.4 \cos 4\psi \quad (11)$$

$$E_{\text{ff96}}(\phi, \psi) = 2.3 + 0.85 \cos \phi - 0.3 \cos 2\phi + 0.85 \cos \psi - 0.3 \cos 2\psi \quad (12)$$

このように主鎖二面角のエネルギー項は ϕ と ψ について、それぞれ次元のフーリエ級数の一部として表現され、 ϕ と ψ は独立している。図3に、5つの力場AMBER ff94,

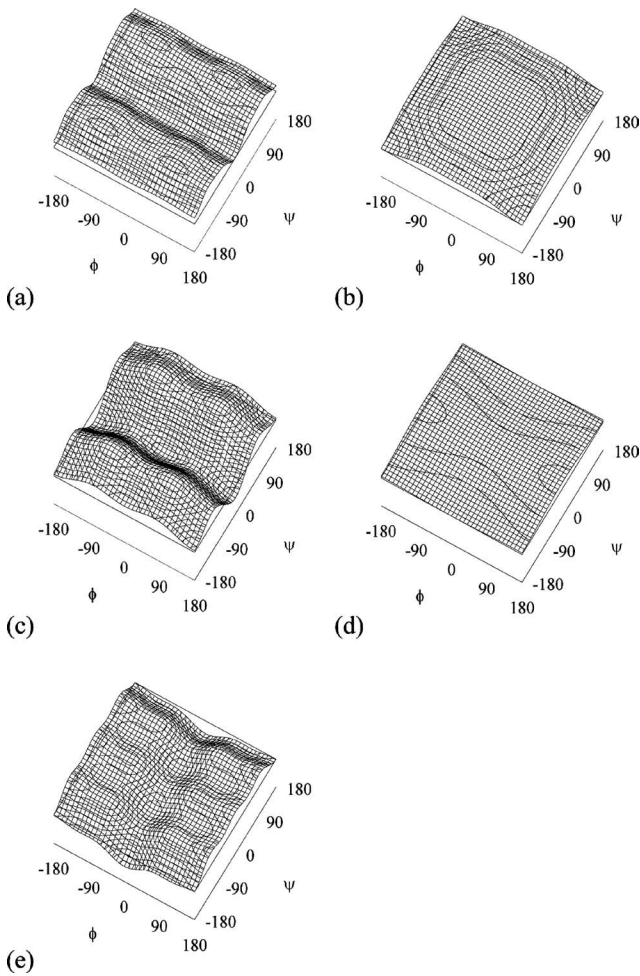


図3 5種類の既存力場の主鎖のねじれエネルギー項 $E(\phi, \psi)$ (式(10))のエネルギー曲面。力場は (a) AMBER ff94, (b) AMBER ff96, (c) AMBER ff99, (d) CHARMM22, (e) OPLS-AA。

AMBER ff96, AMBER ff99, CHARMM22, OPLS-AA について、それぞれ主鎖の二面角 ϕ と ψ のエネルギー項 $E(\phi, \psi)$ のエネルギー曲面を示す。図から分かるように、5つの力場の $E(\phi, \psi)$ は、それぞれ大きく異なったエネルギー曲面を描いている。

主鎖のねじれエネルギー項 $E(\phi, \psi)$ は ϕ と ψ について、それぞれ周期 2π の周期関数である。よって、我々は $E(\phi, \psi)$ の最も自然で一般的な拡張として、 ϕ と ψ を二変数とした二次元のフーリエ級数として以下のように表現することを提唱した。^{29, 30)}

$$\begin{aligned} \varepsilon(\phi, \psi) = & a + \sum_{m=1}^{\infty} (b_m \cos m\phi + c_m \sin m\phi) \\ & + \sum_{n=1}^{\infty} (d_n \cos n\psi + e_n \sin n\psi) \\ & + \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} (f_{mn} \cos m\phi \cos n\psi + g_{mn} \cos m\phi \sin n\psi \\ & + h_{mn} \sin m\phi \cos n\psi + i_{mn} \sin m\phi \sin n\psi) \end{aligned} \quad (13)$$

ここで、 $a, b_m, c_m, d_n, e_n, f_{mn}, g_{mn}, h_{mn}, i_{mn}$ はフーリエ係数である。この関数形では ϕ と ψ を同時に含む交叉項があり、

このことからより複雑なエネルギー曲面を表現することが可能となっている。各フーリエ係数は以下の式で求めることができる。

$$\begin{aligned} c &= \frac{1}{\alpha} \int_{-\pi}^{\pi} d\phi \int_{-\pi}^{\pi} d\psi \varepsilon(\phi, \psi) x(\phi, \psi) \\ &= \left(\frac{\pi}{180}\right)^2 \frac{1}{\alpha} \int_{-180}^{180} d\tilde{\phi} \int_{-180}^{180} d\tilde{\psi} \varepsilon\left(\frac{\pi}{180}\tilde{\phi}, \frac{\pi}{180}\tilde{\psi}\right) \\ &\quad \times x\left(\frac{\pi}{180}\tilde{\phi}, \frac{\pi}{180}\tilde{\psi}\right) \end{aligned} \quad (14)$$

ここで、 α は規格化定数、 $x(\phi, \psi)$ はフーリエ級数の基底関数である。^{29, 30)} 以後、 ϕ と ψ はラジアンで表し、 $\tilde{\phi}$ と $\tilde{\psi}$ は度で表すことにする ($\phi = \tilde{\phi}\pi/180, \psi = \tilde{\psi}\pi/180$)。

そして、我々は新しい全ねじれエネルギー項 (式(9)) を以下のように表す。

$$E_{\text{torsion}} = \varepsilon(\phi, \psi) + E_{\text{rest}} \quad (15)$$

ここで強調したいことは、正しいエネルギー曲面 $E(\phi, \psi)$ が何らかの方法で得られたとすると、それがどのような複雑なものであろうとも、式(13)の二次元フーリエ級数で表すことができることである (十分な精度を出すために必要な級数の項数は $E(\phi, \psi)$ の複雑さによって違ってくるが)。例えば、将来、水分子も取り入れた厳密な量子化学計算で $E(\phi, \psi)$ が得られたとすると、それを式(13)で展開すれば良い訳である。また、この二次元フーリエ級数を使えば、既存のエネルギー関数において、タンパク質の α ヘリックスや β シート構造などの二次構造の形成傾向性を容易に変化させることもできる。例えば、もしある既存の力場が実験結果と比較して α ヘリックス構造が取りにくいことが分かれば、 $(\tilde{\phi}, \tilde{\psi}) \approx (-57^\circ, -47^\circ)$ 近傍の主鎖のねじれエネルギー値が低くなるようにエネルギー曲面を変形すればよいことになる。そのために、我々は以下の式を定義する。

$$\varepsilon(\phi, \psi) = E(\phi, \psi) - f(\phi, \psi) \quad (16)$$

ここで、 $E(\phi, \psi)$ は我々が改良したい既存の主鎖のねじれエネルギー項を示し、 $f(\phi, \psi)$ は特定の ϕ と ψ の値を中心にし、中心へ向かいエネルギー値を徐々に大きくする関数である。関数 $f(\phi, \psi)$ は様々な形を選ぶことができるが、例えば我々は以下のような関数を用いた。^{29, 30)}

$$f(\phi, \psi) = \begin{cases} A \exp\left(\frac{B}{(\phi - \phi_0)^2 + (\psi - \psi_0)^2 - r_0^2}\right), & \text{for } (\phi - \phi_0)^2 + (\psi - \psi_0)^2 < r_0^2, \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (17)$$

ここで、 A, B, r_0 は適当な定数である。この関数のエネルギー曲面では半径 r_0 、中心 $(\phi, \psi) = (\phi_0, \psi_0)$ の円形の領域のエネルギー値が連続的に低くなる。ただし、この関数は ϕ と ψ の二面角の範囲内で周期境界条件を満たすとする。

4.2 適用例

我々は式(13)で提案した二次元フーリエ級数による主

鎖のねじれエネルギー項について次の近似式を用い、小ペプチドの折り畳みシミュレーションを行った。²⁹⁾

$$\begin{aligned} \varepsilon(\phi, \psi) = & a + b_1 \cos \phi + c_1 \sin \phi + b_2 \cos 2\phi + c_2 \sin 2\phi \\ & + d_1 \cos \psi + e_1 \sin \psi + d_2 \cos 2\psi + e_2 \sin 2\psi \\ & + f_{11} \cos \phi \cos \psi + g_{11} \cos \phi \sin \psi \\ & + h_{11} \sin \phi \cos \psi + i_{11} \sin \phi \sin \psi \end{aligned} \quad (18)$$

この関数は13個のパラメータ(フーリエ係数)を持つ。もし、より高精度のシミュレーションを行いたい場合には、フーリエ級数の項数を増やすことで対応できる。

我々の最終目的は、既存の力場に対し実験結果から得られる二次構造形成の傾向を再現するような力場へと改善することである。そこでまず二次元フーリエ級数によるエネルギー関数を用いることで容易にタンパク質の二次構造形成傾向を意図的に変えることが可能であることを示す。

式(17)の関数 $f(\phi, \psi)$ は (ϕ_0, ψ_0) を中心とする半径 r_0 の円内で $E(\phi, \psi)$ の値を低くする。ここで、 $\tilde{r}_0 = 100^\circ$ とした。我々は α ヘリックス構造と β シート構造の強い形成傾向性を持つ力場を作成するために、それぞれ、 $(\tilde{\phi}_0, \tilde{\psi}_0) = (-57^\circ, -47^\circ)$ 、 $(\tilde{\phi}_0, \tilde{\psi}_0) = (-130^\circ, 125^\circ)$ と置いた。

図4には、AMBER ff94とAMBER ff96に式(16)の修正を加えた主鎖のねじれエネルギー曲面を示す。ここでは、既存力場を α ヘリックスおよび β シート構造の形成傾向性が高まるようにエネルギー曲面を変化させている(図3(a)と(b)参照)。次に、ここで得られた式(16)の関数を、式(14)により求めたフーリエ係数を用い、式(18)の二次元フーリエ級数により展開する。

我々は得られた二次元フーリエ級数の項を含むポテンシ

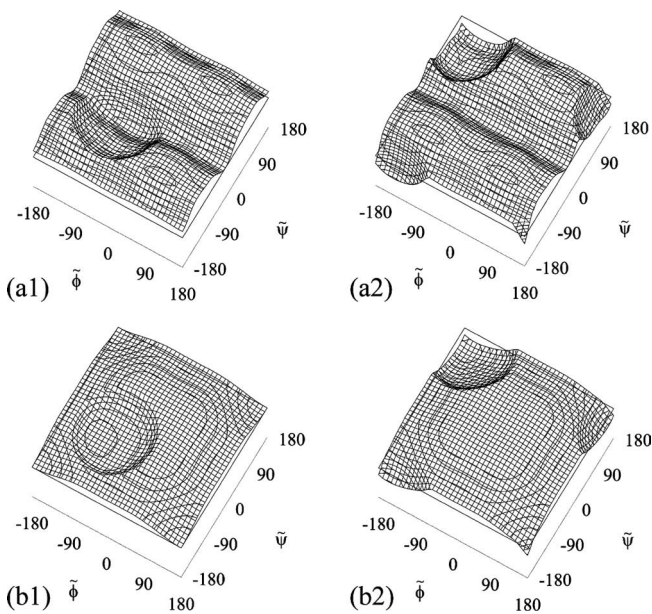


図4 式(16)によって、(a1) AMBER ff94を α ヘリックス構造が出やすいように修正したエネルギー曲面 (AMBER ff94a)、(a2) AMBER ff94を β シート構造が出やすいように修正したエネルギー曲面 (AMBER ff94 β)、(b1) AMBER ff96を α ヘリックス構造が出やすいように修正したエネルギー曲面 (AMBER ff96a)、(b2) AMBER ff96を β シート構造が出やすいように修正したエネルギー曲面 (AMBER ff96 β) (許可を得て文献29から転載)。

ャルエネルギー関数を用いて、実際に小ペプチドの折り畳みシミュレーションを行った。用いた分子は再びCペプチドとGペプチドである。シミュレーション手法は徐冷³¹⁾分子動力学法を用い、伸びたコイル状態を初期構造とし、温度を2,000 Kから250 Kまで徐々に下げる1.0 nsecのシミュレーションを実行した。以上の条件のシミュレーションを各力場について初期乱数を変えて、それぞれ60回繰り返し、60個の得られた最終構造を解析した。まず、オリジナルの既存力場について見てみるとAMBER ff94の場合は全ての得られた最終構造に α ヘリックスが見られ、AMBER ff96の場合には60構造中14構造が α ヘリックス、16構造が β ヘアピン構造となった。これらの結果はAMBER ff94は強く α ヘリックスを好み、AMBER ff96はわずかに β ヘアピン構造を好むことを示唆している。これは以前に行った複数の力場の比較結果と一致している。^{10, 11, 20, 21)}一方、 α ヘリックス構造を意図的に出やすくした2つの力場 (AMBER ff94aとAMBER ff96a) の場合、両方の力場でほとんど全ての構造が α ヘリックスとなり

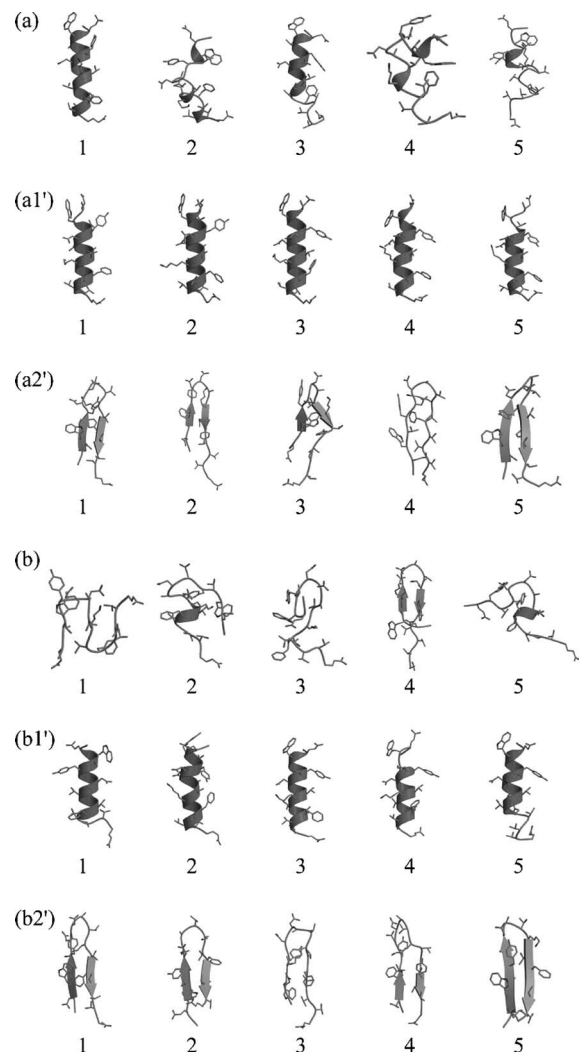


図5 Gペプチドの徐冷分子動力学シミュレーションで得られたポテンシャルエネルギーの低い構造。力場関数は、(a) AMBER ff94、(a1') AMBER ff94a、(a2') AMBER ff94 β 、(b) AMBER ff96、(b1') AMBER ff96a、(b2') AMBER ff96 β (許可を得て文献29から転載)。(フルカラー口絵参照)

(それぞれ60構造と50構造), 共に β ヘアピン構造は見られなかった. また, β シート構造を意図的に出やすくした2つの力場 (AMBER ff94 β とAMBER ff96 β) の場合には, 2種類の力場とも約半数が β ヘアピン構造となり, α ヘリックス構造は見られなかった.

図5には6種類の全ての力場について, Gペプチドで得られた60構造中, ポテンシャルエネルギーの低い5つの構造を低い順に並べた. 3種類の力場, すなわち, オリジナルのAMBER ff94, AMBER ff94 α , AMBER ff96 α はほとんど全ての構造が α ヘリックスとなっている. また, オリジナルAMBER ff94と比べて, AMBER ff94 α とAMBER ff96 α はより伸びた(長い)ヘリックス構造を作っていることが分かる. さらに, 力場AMBER ff94 β , AMBER ff96 β においては, 多くの β ヘアピン構造を見ることができる.

結果としてオリジナルの力場の持つ二次構造形成傾向にほぼ関わりなく, 我々が修正した力場は, 我々が意図したように二次構造形成傾向性を変えられることが示された.

5. おわりに

本稿では, タンパク質系の分子シミュレーションのための有効ポテンシャルエネルギー関数(力場)について筆者らの最近の研究成果を記した. まず, 広く使われている既存の数種の力場関数の精度を小タンパク質の拡張アンサンブルシミュレーションによって比較し, 関数によって二次構造(α ヘリックス構造や β シート構造など)の形成傾向性に大きな差があることを示した. これは, 既存の力場関数を改良する必要があることを示しているが, 我々なりの力場パラメータの最適化法を紹介した. 我々は, 更に, 特に重要な力場項である, 主鎖のねじれエネルギー項を二次元フーリエ級数で表すことを提案し, これによって, 力場の二次構造形成傾向性を微調整できることを示した. 二次元フーリエ級数は項の数が既存のエネルギー項より多いので, 計算時間が増えるように思われるかもしれないが, 実際は, 計算機シミュレーションにおいては, ほとんどの計算時間を原子対間の距離の計算に費やしているため, ねじれエネルギー項における計算量の増加はほとんど無視できる. 最後に, これら2つ(すなわち, 力場パラメータの最適化法と二次元フーリエ級数による一般化されたエネルギー項)を組み合わせることで, 理想的な力場関数を決定することができることを期待できる. 実際, そのような試みの一つは既に最近なされており,³²⁾ このアプローチを更に系統的に進めて行きたい. その延長線上で, 第一原理からのタンパク質の立体構造予測が可能になって行くであろう.

参考文献

- 1) http://www.pdbj.org/index_j.html.
- 2) W. D. Cornell, P. Cieplak, C. I. Bayly, I. R. Gould, J. Kenneth M. Merz, D. M. Ferguson, D. C. Spellmeyer, T. Fox, J. W. Caldwell and P. A. Kollman: *J. Am. Chem. Soc.* **117** (1995) 5179.
- 3) A. D. MacKerell Jr., D. Bashford, M. Bellott, R. L. Dunbrack Jr., J. D.

- 4) W. L. Jorgensen, D. S. Maxwell and J. Tirado-Rives: *J. Am. Chem. Soc.* **118** (1996) 11225.
- 5) W. F. van Gunsteren, S. R. Billeter, A. A. Eising, P. H. Hünenberger, P. Krüger, A. E. Mark, W. R. P. Scott and I. G. Tironi: *Biomolecular Simulation; The GROMOS96 Manual and UserGuide* (Vdf Hochschulverlag AG an der ETH Zürich, Zürich, 1996).
- 6) Y. A. Armutova, A. Jagielska and H. A. Scheraga: *J. Phys. Chem. B* **110** (2006) 5025.
- 7) T. A. Halgren and W. Damm: *Curr. Opin. Struct. Biol.* **11** (2001) 236.
- 8) K. Lindorff-Larsen, S. Piana, R. O. Dror and D. E. Shaw: *Science* **334** (2011) 517.
- 9) 解説としては, 例えば以下を参照されたい. 岡本祐幸: *物性研究* **70** (1998) 719; 杉田有治, 光武垂代理. 岡本祐幸: *日本物理学会誌* **56** (2001) 591.
- 10) T. Yoda, Y. Sugita and Y. Okamoto: *Chem. Phys. Lett.* **386** (2004) 460.
- 11) T. Yoda, Y. Sugita and Y. Okamoto: *Chem. Phys.* **307** (2004) 269.
- 12) K. R. Shoemaker, P. S. Kim, D. N. Brems, S. Marqusee, E. J. York, I. M. Chaiken, J. M. Stewart and R. L. Baldwin: *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **82** (1985) 2349.
- 13) S. Honda, N. Kobayashi and E. Munekata: *J. Mol. Biol.* **295** (2000) 269.
- 14) B. A. Berg and T. Neuhaus: *Phys. Lett. B* **267** (1991) 249; *Phys. Rev. Lett.* **68** (1992) 9.
- 15) K. Hukushima and K. Nemoto: *J. Phys. Soc. Jpn.* **65** (1996) 1604.
- 16) Y. Sugita and Y. Okamoto: *Chem. Phys. Lett.* **329** (2000) 261.
- 17) A. Mitsutake, Y. Sugita and Y. Okamoto: *J. Chem. Phys.* **118** (2003) 6664; *ibid.* **118** (2003) 6676.
- 18) H. J. C. Berendsen, J. P. M. Postma, W. F. van Gunsteren and J. Hermans: in *Intermolecular Forces*, ed. B. Pullman (Reidel Pub., Dordrecht, 1981) p. 331.
- 19) W. L. Jorgensen, J. Chandrasekhar, J. D. Madura, R. W. Impey and M. L. Klein: *J. Chem. Phys.* **79** (1983) 926.
- 20) Y. Sakae and Y. Okamoto: *Chem. Phys. Lett.* **382** (2003) 626.
- 21) Y. Sakae and Y. Okamoto: *J. Theo. Comput. Chem.* **3** (2004) 339; *ibid.* **3** (2004) 359.
- 22) V. Hornak, A. Abel, R. Okur, B. Strockbine, A. Roitberg and C. Simmerling: *Proteins* **65** (2006) 712.
- 23) Y. Duan, C. Wu, S. Chowdhury, M. C. Lee, G. Xiong, W. Zhang, R. Yang, P. Cieplak, R. Luo and T. Lee: *J. Comput. Chem.* **24** (2003) 1999.
- 24) A. MacKerell Jr., M. Feig and C. Brooks III: *J. Comput. Chem.* **25** (2004) 1400.
- 25) N. Kamiya, Y. S. Watanabe, S. Ono and J. Higo: *Chem. Phys. Lett.* **401** (2005) 312.
- 26) Y. Sakae and Y. Okamoto: *Mol. Sim.* **36** (2010) 302.
- 27) Y. Sakae and Y. Okamoto: *Mol. Sim.* **36** (2010) 159.
- 28) G. N. Ramachandran and V. Sasisekharan: *Adv. Protein Chem.* **23** (1968) 283.
- 29) Y. Sakae and Y. Okamoto: *J. Phys. Soc. Jpn.* **75** (2006) 054802.
- 30) Y. Sakae and Y. Okamoto: *Mol. Sim.* **36** (2010) 138.
- 31) S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt Jr. and M. P. Vecchi: *Science* **220** (1983) 671.
- 32) Y. Sakae and Y. Okamoto: in preparation.

非会員著者の紹介

榮 慶丈氏: 総合研究大学院大学数物科学研究科博士課程退学(2003年). 博士(理学). 広島大学にて助手, 特任助手, 特任助教(2003-2008). 名古屋大学にて博士研究員, 特任助教を経て, 現在, 分子科学研究所博士研究員(名古屋大学大学院理学研究科勤務). 専門は分子シミュレーション.

(2010年6月1日原稿受付)

Force Field Functions for Molecular Simulations of Protein Systems

Yoshitake Sakae, Takao Yoda, Yuji Sugita and Yuko Okamoto

abstract: Computational physics study of protein systems is done by molecular simulations based on Monte Carlo and molecular dynamics methods. In order to perform such computer simulations, one has to

specify a potential energy (or, force field) of the system. The force field functions that have been developed by research groups in the U.S.A. and Europe for many years are commonly used. In this article, we discuss the validity of these force fields and introduce a method for developing a new force field with high accuracy.

日本物理学会誌 第67巻 第6号 (2012年6月号) 予定目次

口絵：今月号の記事から

巻頭言

物理学って難しい……………本林 透

最近のトピックス

ヒッグス粒子に迫る……………浅井祥仁

実験技術

ソーラー電力セイル実証機 IKAROS……………森 治, 津田雄一

最近の研究から

パターン形成と結合した液滴の自発運動

……………北畑裕之, 義永那津人, 住野 豊, 永井 健

二重ベータ崩壊の核行列要素を検証する

……………矢向謙太郎, 酒井英行

エネルギー・スケール変調による量子系の境界条件・

トポロジーの制御

……………引原俊哉, 桂 法称, 丸山 勲, 西野友年

一般化されたハイゼンベルグの不確定性関係の実験的検証

……………長谷川祐司

JPSJの最近の注目論文から 2月の編集委員会より

……………川畑有郷

シリーズ「物理教育は今」

日本物理学会第7回Jr.セッション報告……………北本俊二, 松尾正之

ラ・トッカータ

教養としての物理教育：過去・現在と将来……………国府田隆夫

歴史の小径

ガリレオの知財戦略……………田中一郎

追悼

橋本治先生を偲んで……………田村裕和

新著紹介

『大学の物理教育』誌定期購読のすすめ

『大学の物理教育』は、年3回(3月, 7月, 11月)発行で年間購読料(個人)は1,000円です。購読ご希望の方は、お電話(03-3434-2671)またはFax(03-3432-0997)でご連絡下さい。

また、本誌ホームページのURLは次の通りですので、どうぞご覧下さい。

<http://www.jps.or.jp/book/kyoikushi/>

『大学の物理教育』編集委員会

Vol. 18-1 (3月15日発行) 目次

放射線の科学教育を考える……………赤羽 明

講義室

金星太陽面通過の科学—ハレーが考えたこと……………岡崎 隆

地震と津波—物理教育の立場から……………高木隆司

中学校理科での「原子力」の扱い方についての考察

—英国の『21世紀科学』第1版などを参考に— ……笠 潤平

帯電した平板導体上の電荷分布……………谷林 衛, 牧原義一

教育報告

日本代表選手と引率役員の両面から見た国際物理オリンピック

……………西口大貴

海外の動向

ヨーロッパの物理教育の多様性……………吉永契一朗

図書室

『測り方の科学史I 地球から宇宙へ』……………大井みさほ

教育に関する一言……………澤田信一, 鈴木 勝, 梶具博義,

鶴岡靖彦, 浅井朋彦, 山田吉英, 原田 勲, 岸本 功

開催情報

寄贈書リスト

編集後記

川畑有郷 (JPSJ編集委員長)

日本物理学会が発行している Journal of the Physical Society of Japan (JPSJ) の論文で 2011 年 12 月と 2012 年 1 月の編集委員会に間に掲載可となったものの中から編集委員会が選んだ "Papers of Editors' Choice" (JPSJ 注目論文) を以下に紹介します。

この紹介記事は国内の新聞社の科学部、科学雑誌の編集部に電子メールで送っている「紹介文」をこの欄のために少し書き直したものです。専門外の読者を想定し、「何が問題で、何が明らかになったのか」を中心にした読み物であるので、参考文献などはなるべく省いています。なお、図に関しては、原図はカラーのものでもモノクロで印刷しているので不鮮明になる場合がありますが、その場合は、物理学会のホームページの「JPSJ 注目論文」にカラー版を載せていますので、そちらをご覧ください。

もっと詳しく知りたいと思う読者は、末尾に挙げる論文掲載誌と電子版の URL、または、JPSJ のホームページの「Editors' Choice」の欄から掲載論文を見ることができます (2010 年 8 月号以降に掲載されたものは、掲載から約 1 年間は無料公開)。

JPSJ 編集委員会では物理学のあらゆる分野の興味ある優れた論文を「注目論文」としてこの欄で紹介したいと思っています。物理学会会員からの JPSJ への自信作の投稿を期待します。

強電場下電気伝導に現れるサイクロトロン共鳴

マイクロ波技術を用いたサイクロトロン共鳴の実験は、大戦後の半導体物理学の発展に重要な役割を果たした。半導体結晶中の伝導電子は磁場中でローレンツ力を受け周期的なサイクロトロン軌道運動を行う。これに周波数の等しいマイクロ波を加えると共鳴的な吸収が起こる。これがサイクロトロン共鳴の原理で、共鳴周波数から有効質量などの電子構造に関する情報を得ることができる。一方、半導体より伝導度が高い金属結晶では、表皮効果のためマイクロ波が試料内部に侵入できず、表面近傍での軌道運動を反映した Azbel-Kaner 共鳴が起こる。

マイクロ波の振動電磁場の代わりに、他の方法で振動的な電子運動を励起しても、サイクロトロン軌道運動との共鳴が起こるはずである。強電場下の結晶内電子は真空中のように無限には加速されず、結晶から Bragg 反射を受け往復運動 (Bloch 振動) を行う。この Bloch 振動をサイクロト

ロン軌道運動と結合させれば、強電場下の磁場中電気伝導に共鳴現象が現れるはずである。これは表皮効果による制約がないため、金属でも観測可能な効果となる。

最近、東京大学物性研究所の研究グループは、強電場と傾斜磁場下の電気抵抗測定により層状金属の電子構造を調べる新しい研究手法を提案した。これは電子の磁場中サイクロトロン軌道運動と電場中 Bloch 振動を傾斜磁場を用いて結合させた共鳴現象で、「角度依存 Stark サイクロトロン共鳴」と呼ばれる。同グループは層状有機伝導体 α -(BEDT-TTF)₂NH₄Hg(SCN)₄ において磁場方位を変えながらパルス強電場下で電気伝導測定を行い、本現象を実証した。マイクロ波を用いた従来のサイクロトロン共鳴に対し、本手法は簡便で表皮効果の制約を受けないという特長を持ち、酸化物伝導体・有機伝導体・人工超格子・層間化合物など多くの層状金属物質の電子構造解明に役立つことが期待される。この成果は、日本物理学会が発行する英文誌 Journal of the Physical Society of Japan (JPSJ) の 2012 年 2 月号に掲載された。

Stark サイクロトロン共鳴という用語自体は、元来、強電場・垂直磁場下で半導体超格子の層間電気伝導に現れる共鳴現象に対して用いられたもので、電子散乱のため層方向の電子軌道運動が定義できない半導体超格子において隣接した 2 層の Wannier-Stark-Landau 準位 (電場磁場中量子準位) 間で起こるフォノン補助共鳴トンネル効果として解釈される。これに対し今回の現象は層間方向の電子軌道運動が良く定義できるクリーンなバルク結晶における半古典的共鳴現象であるという点が異なる。

角度依存 Stark サイクロトロン共鳴は、柱状 Fermi 面を持った層状金属の層間磁気抵抗の磁場依存性に現れる「角度依存磁気抵抗振動」(AMRO, Kartsovnik - 梶田 - 山地振

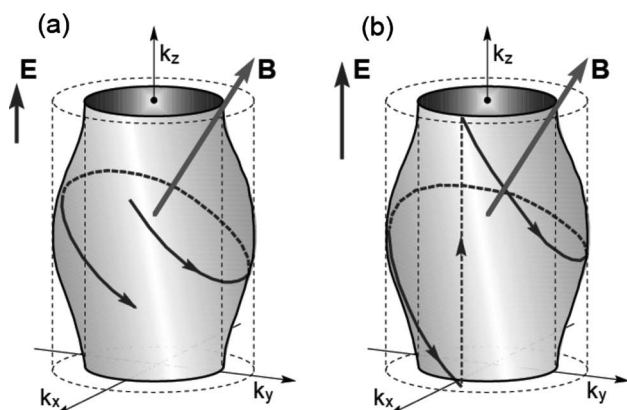


図1 層状物質の柱状 Fermi 面と強電場・傾斜磁場下の非共鳴時 (a) と共鳴時 (b) の電子軌道運動。

動)を有限電場に拡張したのものである。角度依存磁気抵抗振動は層状物質の柱状Fermi面形状(バンドパラメータの相対値)の情報を与える実験手法であるが、磁場は軌道運動する電子に対して仕事をしないため、バンド幅、Fermi速度、有効質量といったエネルギー軸方向の情報(バンドパラメータの絶対値)を得ることはできない。電場を加えて電子軌道運動のエネルギーを変えることにより、エネルギー絶対値に関する情報が得られるようになったのである。

本研究成果は、角度依存 Stark サイクロトロン共鳴とい

う磁気輸送における普遍的な新現象を発見したのみならず、近年重要な研究対象となっている層状酸化物や層状有機導体などのフェルミオロジー研究に新しい研究手法を提供するもので、今後これを用いた種々の研究の展開が期待される。

論文掲載誌：J. Phys. Soc. Jpn. **81** (2012) No. 2, p. 023708.

電子版：<http://jpsj.ipap.jp/link?JPSJ/81/023708> (1月26日公開済)

〈情報提供：長田俊人(東京大学物性研究所)

鴻池貴子(東京大学物性研究所)〉

応用物理 第81巻 第5号(2012年5月号) 予定目次

特集：微細構造形成技術

巻頭言：微細構造形成技術の新展開……………古室昌徳
解説

Si集積回路の発展を支えるフォトリソグラフィにおける最先端技術……………東 司
ナノパターン一括転写を可能にするナノインプリント技術の開発と産業応用……………平井義彦
フェムト秒レーザーが切り開く新しい微細加工技術……………藤田雅之
最近の展望

微細パターン直描を可能にするスーパインクジェット印刷技術の開発……………村田和広
ナノデバイス量産に向けた極端紫外線リソグラフィ技術の開発……………木下博雄

Si貫通ビア技術と3次元積層IC化への展開……………傳田精一
ホログラムによる3次元一括微細加工技術……………田中修平

研究紹介

電気化学的手法による機能マイクロ・ナノ構造体形成プロセス……………本間敬之

SiGe ミキシング誘起溶融成長によるGOI (Ge on Insulator) の形成：人工単結晶への道……………宮尾正信, 他
光集積技術としてのフォトニック結晶……………納富雅也
ニューヨーク州立大学アルバニー校における産官学連携と
ナノテクノロジー産業への展開……………平山 誠

基礎講座：走査電子顕微鏡の研究開発への応用：解析事例, こんなことに使われる……………米光恭子

2011年 Rolf Wideroe 賞： 黒川眞一氏

2011年のRolf Wideroe賞が、高エネルギー加速器研究機構名誉教授の黒川眞一氏に、ヨーロッパ物理学会から贈られました。ノルウェー出身の加速器物理学者ロルフ・ヴィデレーの名前を冠したRolf Wideroe賞は、加速器分野において顕著な業績を上げた個人に贈られる賞です。黒川氏は、高エネルギー加速器研究機構(KEK)での高エネルギー加速器計画に長年にわたって精力的に従事され、陽子シンクロトロン

のビームライン建設で中心的な役割を果たされたほか、TRISTAN計画では加速器制御を担当されました。特に、KEK B-Factoryでは加速器部門の統括責任者の担当主幹として先頭に立ち、設計、建設、運転、性能改善を通じて顕著な貢献をされました。また、国際研究協力の分野でも積極的に尽力され、日本とアジア、さらに、その他の地域との間の学術交流、相互理解に基づく協力関係の構築に大きく貢献をされました。

詳しくは、http://epac.web.cern.ch/EPAC/EP5-AG/Accelerator_Prizes/EP5-AG_Prize_Winners.htmをご覧ください。

(2012年1月28日原稿受付、
文責：小川 了)

2011年 Gersh Budker 賞： 矢野安重氏

2011年のGersh Budker賞が理化学研究所仁科加速器研究センター特別顧問(前センター長)の矢野安重氏に贈られました。この賞はロシアの著名な加速器物理学者の名前を冠したもので、ヨーロッパ物理学会加速器部会から加

速器科学において、顕著な貢献をもたらした研究者に対し贈られるものです。

受賞理由には、理研RIビームファクトリーの設計・構築ならびに運用において、矢野氏がもたらした様々な新機軸や統率力が挙げられています。RIビームファクトリーは、世界で初めての超伝導リングサイクロトロンを用いた不安定核ビーム施設であり、同氏の深い理解力と洞察力によりサイクロトロン

の技術的進歩と実際への応用がなされ、これから数年にわたり並ぶものがない原子核物理学の拠点が誕生しました。

なお、詳しい受賞理由などについては、http://epac.web.cern.ch/EPAC/EP5-AG/Accelerator_Prizes/EP5-AG_Prize_Winners.htmをご覧ください。

(2012年1月19日原稿受付、
文責：板橋健太)

2011年度朝日賞： 香取秀俊氏

東京大学工学系研究科教授、理化学研究所招聘主任研究員の香取秀俊氏が「光格子時計に関する研究」との授賞理由で2011年度朝日賞を受賞された。香取氏は90年代後半より極低温にレーザー冷却された中性アルカリ土類金属原子の可能性に着目し、これにマックスプランク量子光学研究所でのイオントラップの経験で得た知見を絶妙に組み合わせることによって「光格子時計」を提案・実現した。光格子時計とは、レーザー光の干渉縞で作成する光の波長オーダーのトラップポテンシャルに中性原子を多数個束縛して、イオントラップ同等の先鋭なドップラーシフトフリーのスペクトルを多数の中性原子から一挙に強い信号強度で得る、

という原子時計の新しい方式である。香取氏はこの光格子時計のアイデアについて「関する」どころか、ど真ん中の光格子時計の生みの親である。その後現在に至るまで光格子時計は世界中の国立標準研究所でSr, Yb, Hg原子によるものが精力的に研究されており、とりわけSrについては既に日米仏独の5機関(うち日本は2機関)で15桁、国内の2機関(東大, NICT)では国際原子時を介さずファイバリンクによって16桁の周波数一致が確認されている。16桁の精度は現在の最高精度のセシウム時計と比して同等もしくはそれを超えるものであり、また香取氏のグループは最近17桁実現への道筋もはっきりと示すことに成功し、光格子時計による周波数標準は国際単位系の秒の再定義の有力な候補となっている。周波数標準はその抜きでた実現精度により標準の中の標準とも言われて各国が威信をかけて研究開発を行っており、その中で光格子時計は日本発のイノベーションとして燦然と輝いている。従って香取氏は朝日賞の「学術、芸術などの分野で傑出した業績をあげ、日本の文化や社会の発展、向上に貢献した個人」そのものといえよう。2012年1月27日に執り行われた授賞式では、不慣れたスライド無し

の受賞者スピーチではあったが「光格子時計を利用すれば、例えば壇上の私と皆さんの間では重力による時空のひずみによりもはや時を共有できないことが明白になり、これまでの時の概念を根底から覆す世界が見えてくる」と説明し、芸術・人文社会科学等幅広い分野の聴衆の興味を引くことに成功していた。

(2012年1月29日原稿受付、
文責：井戸哲也)

大沢文夫

大沢流 手づくり統計力学

名古屋大学出版会, 愛知, 2011, vii + 154p, 21 × 15 cm, 本体 2,400円 [大学院〜一般向]

ISBN 978-4-8158-0674-3



20年前になるが、つくば市の筑波コンソーシアムで私が主宰していたプロジェクトの面々と大沢流統計力学の講義を受けたことがある。「目からウロコ」とはこのことかと思うほどの衝撃を受けたのを思い出す。私一人に留まらず、受講者全員が同じ思いだったろう。たった2時間の講義で3つの普遍的真実を悟ったのである。①「手づくりの物理は身につく」、②「ボルツマン分布の本質」、③「統計法則の普遍性」。

①はこの本を読むときの心構えと関係している。読者は統計力学を体感するためサイコロとチップで問題を解かなければならない。この作業はゲーム性や意外性があり、楽しい。そして私達の統計事象に関する根源的先入観を矯正してくれる。粒子間のエネルギーの自由な交換は交換回数が多ければ多いほどエネルギーの偏在を招来する。その偏在の程度がエネルギー分布関数ボルツマン分布である(②)。この物理の深遠な法則を2つのサイコロと30枚のチップを用いて1時間かからずに納得できる。そしてはたと気づくのだ。自由な市場経済において富が偏在(少数の金持ちと大多数の貧民)するのは逃れられない統計的普遍法則なのだ(③)。

この機会均等にチップのやりとりをする消費税型のルールを変えると異なる分布が生まれる。各粒子のエネルギー

永山 國 昭 (自然科学研究機構)

一量に比例して交換量を増減させると(所得税型ルール)低エネルギーに分布の山が出て極端な低エネルギー粒子は減る。しかし高エネルギー粒子はやはり少数。どんなことをしても統計法則の呪縛、結果不平等(チャンス平等だが)はなくなる。いやおかし、物理の世界にそんな不平等のあるわけがないと思う人には次のゲームが用意されている。

1つの粒子に注目し、そのエネルギー量の変動を時系列で追うのである。長い時間をかけると1つの粒子は低エネルギー、中エネルギー、高エネルギーの間をめぐり、すなわち長時間かけて平均をとれば系の平均エネルギーと等しくなり、物理法則は中立を保証していると分かる。しかし粒子一個一個のエネルギー滞在時間を見るとほとんどの時間は低エネルギーでたまに高エネルギーとなる。それはボルツマン分布の時間表現でもある。このことは純粋な自由市場経済においてほとんどの場合人間一生の平均所得がその社会の

平均所得に及ばないことを意味する。人生100年では富の時間平均化は実現せず、多くの人間は一度もお金持ちになれない。人類の歴史を見てもこれは充分納得がいく。しかしそれが人間の努力や英知を超えた自然法則だと達観すればかえってすがすがしい気持ちにもなる。

私が20年前に悟れなかったさらに大事なメッセージがこの本の第二部を形成している。④「3個以上の要素よりなる系から統計力学は成立し、少数自由度よりなる生体系の分子機械の作動機構を説明し得る」。日常機械に比べ熱的揺動の中で動く蛋白質という分子機械が何故高効率の化学-力学エネルギー変換を成し得るのか(筋肉を構成する分子モーターなど)。その秘密を少数多体系においてさえ定義し得る局所温度の導入で説明している。これは多くの物理屋の先入観を裏返す革命的物理モデルではないだろうか。最先端の物理計測法で是非とも実証したいと願うのは私だけではないだろう。

この本を物理屋に読んでもらいたい。さらに政治家、経済学者そして一般社会人にもささげたい。ここには世の中の根源的不条理をすがすがしく説明し納得させる真実が詰まっているのだから。

(2012年1月10日原稿受付)

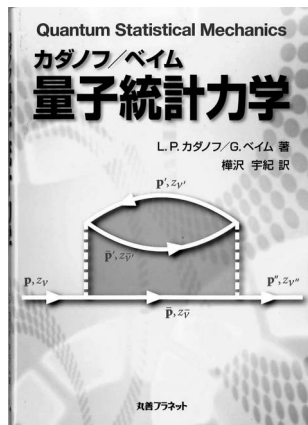
L. P. カダノフ, G. ベイム著, 樺沢宇紀訳

カダノフ/ベイム 量子統計力学

丸善プラネット, 東京, 2011, ix + 202p, 21 × 15 cm, 本体 4,800円 [大学院向]

ISBN 978-4-86345-090-5

北 孝文 (北大理)



グリーン関数法を用いた量子統計力学の古典的名著「カダノフ-ベイム」が、丁寧に訳出されて、英語の得意でない大学院生にとっても身近な存在となった。ハーバード大学の同じシュヴィンガー・スクールで独立に博士号を取った若きカダノフとベイムが、ポスドクとして再会したニールス・ボーア研究所で初めて共同研究をして講義をし、それをもとに1962年に書き上げたのが本書である。同時期の他の教科書と比べたその大きな特徴は、シュヴ

インガー直伝の汎関数微分法を駆使して、非平衡系を扱っていることにある。具体的には、一粒子グリーン関数のシュヴィンガー-ダイソン方程式がボルツマン方程式の一般化になっていることを示し、それらの間の関係を明らかにした点に大きな業績がある。これにより、非平衡現象を、シュヴィンガー-ダイソン方程式と摂動論を用いて、微視的かつ系統的に扱う道が開かれた。シュヴィンガー-ダイソン方程式に勾配展開をほどこして得られた(9.30)式と(9.31)式は、しばしば“カダノフ-ベウム方程式”と呼ばれる。

議論は、二次摂動までの結果と物理的直観とに基づいて、本質を射抜いて簡潔にきびきびと進められていく。これについていけば良いのであるが、一般には、敷居が高いことを覚悟して読み始めるべきか。摂動展開の一般論や既約自己エネルギーの定義も出てこない。また、ここで扱われている摂動

展開は、繰り込まれたグリーン関数を用いた自己無撞着摂動展開であって、単純な摂動論ではないのだが、その辺りに関する説明も不足している。さらに、早い時期に書かれたことから、後年における二つの大きな発展が取り込まれていない。その一つは、ケルディシュによる実時間非平衡グリーン関数法(1964年)である。本書は、平衡状態の虚時間松原形式を経由して実時間の動力学を議論しているが、このアプローチは現時点から見るとやや冗長で、その上、三次摂動以上に踏み込むのは困難である。一方、最初からケルディシュ・グリーン関数を用いれば、見通しよく高次まで議論を進めることが可能である。第二点は、ベウム自身による Φ 微分近似の開発(1962年)である。一般に、非平衡現象を扱うには、時間発展しても粒子数・運動量・エネルギーを保存するような枠組みを用いる必要があるが、本書でもその点には十分な

注意が払われている。しかし、 Φ 微分近似は、「保存則に従う」という非平衡系必須の要請に対して、より簡潔で見通しの良い条件を与え、また、本書で議論されている様々な近似も、採用する Φ の違いとして明快に理解できる。以上の難点を補ってあまりあるのは、随所に散りばめられた物理的な議論で、今読んでも大変有益で学ぶ所が多い。身近な書棚に置いて暇を見つけて繰り返し読んでみると、味わいが深まり、得る所の多いこと請け合いの名著である。

(2012年2月13日原稿受付)

本欄では物理に関する新著を中心に、隠れた良書や学会員にとって有意義な本などを紹介していきます。紹介書籍の表紙画像につきましては、出版社の許可を得られたもののみ掲載しております。

図書リスト

最近の寄贈書

- D. Budker, D. F. Kimball and D. P. DeMille: Atomic Physics; An Exploration through Problems and Solutions (2nd ed.)
Oxford Univ. Press, Oxford, 2008, xiii + 518p, 25×17 cm, £29.95
ISBN 978-0-19-953241-4
- G. Grynberg, A. Aspect and C. Fabre: Introduction to Quantum Optics; From the Semi-classical Approach to Quantized Light
Cambridge Univ. Press, New York, 2010, xxix + 665p, 26×20 cm, £45.00
ISBN 978-0-521-55112-0
- T. Imae, T. Kanaya, M. Furusaka and N. Torikai, ed.: Neutrons in Soft Matter
Wiley, New Jersey, 2011, x + 654p, 24×17 cm, \$149.95
ISBN 978-0-470-40252-8
- C. C.-Tannoudji and D. G.-Odelin: Advances in Atomic Physics; An Overview
World Scientific, Singapore, 2011, xxv +

- 767p, 25×18 cm, \$98
ISBN 978-981-277-496-5
- 大沢文夫, 寺本 英, 斎藤信彦, 西尾英之助: 生命の物理
岩波書店, 東京, 2012, xv + 466p, 22×16 cm, 本体7,200円(新装版 現代の物理学の基礎8)
ISBN 978-4-00-029808-7
- J. ヴェス, J. バガー著, 志摩一成訳: 超対称性と超重力
丸善, 東京, 2011, xiv + 254p, 21×15 cm, 本体6,800円
ISBN 978-4-621-08446-5
- 小野昱郎: 波動; 音波・光波
森北出版, 東京, 2012, vi + 193p, 22×16 cm, 本体2,800円
ISBN 978-4-627-15381-3
- C. グルーベン著, 岡田 淳, 吉田勝英訳: 放射線防護の実用的知識
講談社, 東京, 2011, xi + 194p, 26×18 cm, 本体3,800円
ISBN 978-4-06-155798-7
- 郡 宏, 森田善久: 生物リズムと力学系

- 共立出版, 東京, 2010, xi + 171p, 22×16 cm, 本体2,800円(シリーズ・現象を解明する数学)
ISBN 978-4-320-11000-7
- 竹内 伸, 枝川圭一, 蔡 安邦, 木村 薫: 準結晶の物理
朝倉書店, 東京, 2012, iv + 126p, 26×16 cm, 本体3,500円
ISBN 978-4-254-13109-3
- 中嶋貞雄, 豊沢 豊, 阿部龍蔵: 「物性II: 素励起の物理」
岩波書店, 東京, 2012, xiii + 378p, 22×16 cm, 本体6,800円(新装版 現代の物理学の基礎7)
ISBN 978-4-00-029807-0
- 松原隆彦: 宇宙に外側はあるか
光文社, 東京, 2012, 258p, 18×11 cm, 本体780円
ISBN 978-4-334-03667-6
- 宮本健郎: 核融合のためのプラズマ物理
サイエンス・カルチャー出版, 東京, 2012, vi + 448p, 25×17 cm, 本体5,000円
ISBN 978-4-9900839-1-5

掲示板

毎月1日締切(17:00必着)、翌月号掲載。但し1月号、2月号は前々月の20日締切。修正等をお願いする場合があります。締切日よりなるべくお早目にお申込み下さい。書式は<http://www.jps.or.jp/book/keijiban.html>にありますので、それに従ってお申込み下さい。webからのお申込みができない場合は、e-mail: keijiban@jps.or.jpへお送り下さい。必ずFax 03-3432-0997へも原稿をお送り下さい。Faxがありませんと、掲載できない場合がございます。HP掲載をご希望される場合は、上記URLの「2. ホームページ掲載」をご参照下さい。本欄の各項目の内容につきましては、本会は関与致しかねますのでご了解下さい。

人事公募

人事公募の標準書式(1件500字以内)

1. 公募人員(職名、人数) 2. 所属部門、講座、研究室等 3. 専門分野、仕事の内容(1行17字で7行以内) 4. 着任時期(西暦年月日) 5. 任期 6. 応募資格 7. 提出書類(書類名の前に○印をつけ簡潔に、1行17字で6行以内) 8. 公募締切(西暦年月日、曜日) 9. ①書類送付先(郵便番号、住所、所属、担当者名) ②問合せ先(郵便番号、住所、所属、担当者名、電話、Fax、e-mail等、必要と思われるもの。①と同じ場合は省略) 10. その他(1行17字で5行以内)

■山形大学地域教育文化学部教員

1. 准教授又は講師1名
2. 地域教育文化学科生活環境科学コース
3. 物理学(実験系)、物理学の研究と学部及び大学院の教育(講義、実験)
4. 2012年10月1日
5. なし
6. 博士号取得者又は同等以上の能力者。小・中・高校物理分野の実験指導ができる方。地域の教育現場に対する指導にも積極的に関与できる方。
7. ○履歴書(写真貼付、e-mail明記) ○研究業績一覧表 ○著書及び論文別刷又はコピー ○主要業績3編の要旨(各500字、A4、1枚) ○教育業績、管理運営業績、社会貢献業績一覧表(様式指定) ○今迄の研究概要と今後の研究計画(2,000字以内) ○今迄の

教育概要と本コースでの教育に対する抱負(2,000字以内)

8. 2012年5月21日(月)必着
9. ①990-8560山形市小白川町1-4-12山形大学地域教育文化学部長
②生活環境科学コース 佐藤慎也 電話023-628-4377
10. 封筒に「地域教育学科(生活環境科学コース)教員公募書類在中」と朱書き書留で送付。詳細は<http://www.e.yamagata-u.ac.jp/koubo.html>参照。

■秋田大学大学院工学資源学研究所教員

1. 准教授又は講師1名
2. 機械工学専攻機械物理学講座
3. 機械工学科・同専攻学生の卒論・修論研究を指導可能な分野、例えば、素材物性や熱物性等の物性実験分野等。担当授業として、基礎教育での物理学講義・実験、応用物理学及び大学院での応用物理学特論等。
4. 決定後早期
5. 特になし
6. 博士号取得者
7. ○履歴書(写真貼付、e-mail明記) ○業績リスト(著書、論文、国際会議を区別し、企業経験・特許等あれば記入) ○今迄の研究業績概要(A4、約1枚) ○今後の研究計画と教育への抱負(A4、約1枚) ○主要論文別刷又はコピー5編以内 ○推薦状1通 ○照会可能者の氏名、連絡先
8. 2012年5月31日(木)必着
9. ①010-8502秋田市市形学園町1-1秋田大学工学資源学研究所機械工学専攻土岐 仁
②上柿英二 電話018-889-2583
uegaki@phys.akita-u.ac.jp
10. 封筒に「教員応募書類在中」と朱書き簡易書留で送付。

■東京大学大学院理学系研究科教員

[I]

1. 教授1名
2. 附属原子核科学研究センター
3. 原子核物理学実験。重イオン核物理に実績を有し、理研RIBFからのRIビームを用いて新しい実験プロジェクトを展開、推進することが望まれる。
4. 決定後早期
7. ○履歴書 ○研究歴 ○着任後の抱負 ○発表論文リスト ○論文別刷3編 ○推薦書又は参考意見書2通
8. 2012年5月31日(木)
9. ①113-0033東京都文京区本郷7-3-1

東京大学大学院理学系研究科附属原子核科学研究センター 大塚孝治

②同上 電話03-3812-7886 otsuka@phys.s.u-tokyo.ac.jp

10. 封筒に「教員公募関係」と朱書き持参又は書留送付。応募書類は履歴書、論文別刷を除きA4判横書きとし各々別様にする。応募書類不返却。

[II]

1. 助教1名
2. 附属ビッグバン宇宙国際研究センター初期宇宙論部門
3. 宇宙物理学理論。当センター専任教員として宇宙物理学の研究及び大学院教育を推進すると共に、物理学教室と協力し理学部物理学の学部教育を担当(学部教育に関しては物理学教室所属の助教と同等な義務を負う)。
- 4は[I]に同じ。
5. なし
6. 博士号取得者
7. ○履歴書 ○業績リスト(主要論文5編以内に印) ○主要論文別刷(コピー可)各1部 ○研究業績概要 ○研究計画(A4、約3頁) ○教育に関する抱負(A4、約2頁) ○照会可能者2名の氏名、連絡先(推薦書又は意見書を添付しても良い)
8. 2012年6月1日(金)必着
9. ①113-0033東京都文京区本郷7-3-1東京大学大学院理学系研究科附属ビッグバン宇宙国際研究センター 牧島一夫
②横山順一 電話03-5841-7637
10. 封筒に「宇宙物理学助教応募書類在中」と朱書き書留扱いとなる方法で送付。応募書類不返却。本研究科では男女共同参画を推進している。

■京都大学原子炉実験所助教

1. 助教1名
2. 粒子線物質科学研究本部中性子材料科学研究分野
3. 中性子散乱を用いた機能材料の構造研究及び関連した装置の開発を推進
4. 決定後早期
5. なし
6. 博士号取得者
7. ○履歴書 ○研究歴及び実務歴の概要並びに研究業績及び論文別刷5編以内各3部 ○推薦状 ○着任後における研究構想及び抱負 ○照会可能者若干名の氏名・連絡先 ○その他参考となる事項
8. 2012年6月1日(金)必着

9. ① 590-0494 大阪府泉南郡熊取町朝代西2丁目 京都大学原子炉実験所総務課総務掛気付助教選考委員会 電話 072-451-2310
② 粒子線物質科学研究本部 森本幸生 電話072-451-2371 morimoto rri.kyoto-u.ac.jp
10. 封筒に「粒子線物質科学助教応募関係書類」と朱書き書留で送付. 詳細は <http://www.rri.kyoto-u.ac.jp/index/kobo.html> 参照.

■東京大学物性研究所員

[I]

1. 特任研究員 A, B 若干名
2. 各研究部門
3. 物性科学における実験的又は理論的研究
4. 2012年9月1日以降
5. 原則2年間(年度更新). その後再応募可, 但し1年間
6. 博士号取得後約10年以内(着任時迄の博士号取得者含む). 着任予定時に主たる職又は大学院生及び研究生等の身分を有しないこと. 応募の際, 関連する物性研究所所員(教授又は准教授)と連絡をとり研究計画等を調整すること. 複数の研究室に跨る研究テーマに取り組む方歓迎.
7. ○履歴書 ○発表論文リスト ○主要論文別刷3編以内 ○今迄の主な業績(2,000字以内) ○研究計画(2,000字以内) ○指導教員又は推薦者による意見書
8. 2012年6月8日(金)
9. 277-8581 柏市柏の葉5-1-5 東京大学物性研究所総務係 電話04-7136-3207 issp-somu kj.u-tokyo.ac.jp
10. ABとも週5日, 1週38時間45分勤務. A: 年額約480万円, B: 年額約380万円. ABについては書類選考時に決定し事前に連絡.

[II]

1. 助教1名
2. 物質設計評価施設設計部
3. 全国共同利用スパコンシステムの導入, 管理, 運用業務に携わる. 設計部所員と協力し物性物理学における種々の問題を解明するため第一原理電子状態計算等, 計算物理学的諸手法を用いた大規模並列計算による研究を行う. アルゴリズム/コード開発や大型計算機による計算経験のある方希望.
4. 決定後早期
5. 5年, 但し1回を限度に再任可.

6. 修士課程修了又は同等以上の能力
7. ○履歴書(略歴可) ○業績リスト(重要論文に○印) ○主要論文別刷約3編(コピー可) ○研究業績の概要(約2,000字) ○研究計画書(約2,000字) ○推薦の場合は推薦書, 応募の場合は所属長・指導教員等による意見書(作成者から直送)
8. 2012年6月22日(金)
9. ① 277-8581 柏市柏の葉5-1-5 東京大学物性研究所総務係 電話04-7136-3207 issp-somu kj.u-tokyo.ac.jp
② 物質設計評価施設 川島直輝 電話04-7136-3263 kawashima issp.u-tokyo.ac.jp
10. 封筒に「物質設計評価施設(設計部)助教応募書類在中」又は「意見書在中」と朱書き郵送の場合は書留で送付. 応募書類等不返却. 履歴書は本応募の用途に限り使用し, 個人情報に正当な理由なく第三者への開示, 譲渡及び貸与は一切しない.

[III]

1. 助教1名
2. 附属軌道放射物性研究施設
3. 本施設はSPring-8に建設した世界最高性能の軟X線発光分光装置を用いて強相関物質, 液体, 触媒反応等幅広い電子物性研究を行っている. 今迄の研究分野を問わず, 独自性の高い最先端軟X線発光分光研究を現有スタッフと共に推進し大学院生指導も積極的に行う意欲的な方を希望.
- 4, 5, 6, 7, 9①は [II] に同じ.
8. 2012年7月13日(金)
9. ② 軌道放射物性研究施設 原田慈久 電話04-7136-3406 harada issp.u-tokyo.ac.jp
10. 封筒に「軌道放射物性研究施設助教応募書類在中」又は「意見書在中」と朱書き郵送の場合は書留で送付. 応募書類等不返却. 履歴書は本応募の用途に限り使用し, 個人情報は正当な理由なく第三者への開示, 譲渡及び貸与は一切しない.

[IV]

1. 助教1名
2. ナノスケール物性研究部門小森研究室
3. 固体表面及びその上に構築したナノメートルスケール構造の電子物性を走査プローブ法・電子分光法等の実験手法を用いて研究している. 測定手法開発やナノ構造作製等を含め, 表面科学に新たな領域を開拓し大学院生指導も積極的に行う意欲ある若手研究者を希望.

- 4, 5, 6, 7, 9①は [II] に同じ.
8. 2012年7月27日(金)
9. ② ナノスケール物性研究部門 小森文夫 電話04-7136-3310 komori issp.u-tokyo.ac.jp
10. 封筒に「ナノスケール物性研究部門(小森研究室)助教応募書類在中」又は「意見書在中」と朱書き郵送の場合は書留で送付. 応募書類等不返却. 履歴書は本応募の用途に限り使用し, 個人情報は正当な理由なく第三者への開示, 譲渡及び貸与は一切しない.

■理化学研究所研究員

[I]

1. 研究員1名
2. 和光基幹研究所平山量子光素子研究室
3. 光技術とナノテクノロジーを融合し, 特に半導体結晶成長の開拓や, それらを駆使した原子・ナノスケールで制御された人工構造体を用いて, 未踏波長レーザー等の革新的な機能を有するデバイスを生み出す研究をオリジナルに進める.
4. 2012年10月1日以降早期
5. 定年制職員(60歳定年)
6. 上記の分野の博士号取得者で, 1年以上の海外研究歴を有することが望ましい.
7. ○履歴書(写真付) ○研究業績一覧 ○現職の所属長を含む推薦書2通(最低1通は外国人からのもの, 所属長からの推薦書が困難な場合には, 第三者による推薦書) ○今迄の外部資金獲得リスト(書式自由)
8. 2012年6月15日(金)17時必着
9. 351-0198 和光市広沢2-1 理化学研究所基礎基盤研究推進部研究業務課 rps-saiyo24 riken.jp
10. 封筒に「平山量子光素子研究室研究員応募書類在中」と朱書き簡易書留又は書留で送付. 推薦書の宛名は「独立行政法人理化学研究所 理事長」とすること. e-mailでの申請や電話での問合せ不可.

[II]

1. 准主任研究員1名
2. 勤務地は原則として, 和光研究所(埼玉県和光市)又は播磨研究所(兵庫県佐用郡)
3. 研究分野は特定しない. 応募者自身の自由な発想に基づく学際的な研究分野を開拓して頂く.
4. 原則2013年4月1日
5. 常勤, 60歳定年

6. 長期的視野を持つ、次世代の科学技術分野を創成できる自律的研究者で、研究室を主宰するのに十分な能力と研究業績を有する方。
7. ○ <http://www.riken.jp/r-world/research/research/associate/2013/index.html> より取得のこと。
8. 2012年6月22日(金)17時必着
9. 351-0198 和光市広沢2-1 理化学研究所基礎基盤研究推進部研究業務課 准主任研究員担当 riken-acs24.riken.jp
10. 電話による問合せ不可。提出書類不返却。

■京都大学大学院人間・環境学研究科准教授

1. 准教授1名
2. 物質関連論講座物質物性関連論分野
3. 広い意味での物性物理学(実験)。人間・環境学研究科：物質物性関連論演習等。総合人間学部：物性基礎論、物性特論、課題演習(物理科学)等の講義又は演習。全学共通科目：実験を含む物理系科目(前後期、各週3コマ)。
4. 2013年4月1日
5. なし
6. 博士号取得者
7. ○履歴書(高等学校卒業以降) ○研究業績リスト ○主要論文別刷5編以内(各6部、コピー可) ○研究概要、研究・教育への抱負(各約1,500字) ○照会可能者2名の氏名、連絡先
8. 2012年6月15日(金)必着
9. ① 606-8501 京都市左京区吉田二本松町 京都大学大学院人間・環境学研究科長
② 関連環境学専攻 木下俊哉 kinoshita.toshiya.6x@kyoto-u.ac.jp
10. 封筒に「物質関連論講座准教授応募書類在中」と朱筆し書留で送付。応募書類不返却。審査の過程で面接を行うことがある(旅費・滞在費等応募者負担)。本学は男女共同参画を推進している。

■東京大学生産技術研究所助教

1. 助教1名
2. 基礎系部門羽田野研究室
3. 専門分野は統計物理学を中心に物性基礎論・量子基礎論・量子情報理論等。職務内容は研究活動・大学院生の指導補助・研究室の運営補助。
4. 決定後早期
5. 5年、業績に応じ5年更新の可能性あり

6. 博士号取得者(取得予定者は応相談)。羽田野研究室で研究されているテーマ(<http://hatano-lab.iis.u-tokyo.ac.jp/research.html>参照)を含めた幅広い分野に熱意を持って取り組める方。
7. ○履歴書 ○業績リスト ○研究成果概要(A4, 約1枚) ○今後の研究計画及び羽田野研究室での大学院生指導への抱負(A4, 約1枚) ○意見書2通以上
8. 2012年6月15日(金)必着
9. 153-8505 東京都目黒区駒場4-6-1 東京大学生産技術研究所 羽田野直道 電話03-5452-6154 hatano.iis.u-tokyo.ac.jp
10. 郵送の際は、封筒に「助教応募書類」と朱筆。e-mail送付(件名「助教応募書類」)も受付。意見書は執筆者より直送。

■島根大学大学院総合理工学研究科教員

1. 教授又は准教授又は講師1名
2. 物理・材料科学領域
3. 強関連電子系の物性の実験的研究。物理・材料科学関係の基礎科目、演習、学生実験を担当。専門分野において先導的研究を行い、教育・研究共に熱意を持って取り組める方。本領域の強関連電子系の物性研究分野のスタッフと協力して研究を行える方。
4. 2012年10月1日以降早期
5. なし
6. 博士号取得者
7. ○履歴書(写真貼付) ○研究業績リスト(研究費獲得実績、学会・社会活動の実績を含む) ○主要論文別刷3編程度(コピー可) ○研究概要と今後の研究に関する抱負(合計約2,000字) ○教育経験の概略と今後の教育に関する抱負(合計約2,000字) ○希望する職種(教授、准教授、講師) ○照会可能者2名の氏名、連絡先
8. 2012年6月22日(金)必着
9. 690-8504 松江市西川津町1060 島根大学大学院総合理工学研究科物理・材料科学領域 藤原賢二 電話0852-32-6393 fujiwara.riko.shimane-u.ac.jp
10. 封筒に「物理・材料科学領域 教員応募書類在中」と朱筆し簡易書留で送付。原則応募書類不返却。

■青山学院大学理工学部教員

1. 教授又は准教授1名
2. 物理・数理学科
3. 広義の統計力学、物性理論
4. 2013年4月1日

5. なし
6. 博士号取得者。着任と同時に博士前期課程の学生を指導でき、私学教育の現状を理解し、熱心に取り組める方。キリスト教に理解のある方。
7. ○履歴書 ○業績リスト(主要論文に印) ○主要論文別刷5編(コピー可) ○今迄の研究概要 ○研究計画 ○教育に対する抱負と卒業研究の指導計画 ○推薦文1通 ○照会可能者1名以上の氏名、連絡先
8. 2012年6月29日(金)必着
9. 252-5258 相模原市中央区淵野辺5-10-1 青山学院大学理工学部物理・数理学科 吉田篤正 電話042-759-6278 ayoshida.phys.aoyama.ac.jp
10. 封筒に「人事応募」と朱筆し簡易書留で送付。電子応募希望の場合は予め連絡のこと。応募書類不返却。

■北海道大学大学院工学研究院助教

1. 助教1名
2. 応用物理学部門物性物理工学研究室
3. 物性理論。学部・大学院での教育を担当。
4. 2012年10月1日以降早期
5. 5年(審査後1回再任可、期間5年)
6. 着任時点で博士号又はPh.D取得者
7. ○履歴書(写真貼付) ○研究業績リスト ○教育実績(以上は所定の書式を <http://www.eng.hokudai.ac.jp/faculty/recruit/> からダウンロード) ○主要論文別刷3編 ○研究計画(約2,000字) ○教育に対する抱負(約1,000字)
8. 2012年6月29日(金)必着
9. ① 060-8628 札幌市北区北13条西8丁目 北海道大学工学系事務総務課人事担当 電話011-706-6156
② 応用物理学部門 明楽浩史 電話011-706-6727 akera.eng.hokudai.ac.jp
10. 封筒に「応用物理学部門助教公募23-55」と朱筆し書留で送付。応募書類不返却。面接を行う場合あり。詳細は <http://www.eng.hokudai.ac.jp/faculty/> 参照。

■千葉大学工学研究科准教授

1. 准教授1名
2. 電気電子系コース光エレクトロニクス教育研究分野
3. 無機半導体の光・電子物性を基盤とした新たな光デバイスの動作原理に関する研究及び量子力学の講義等の教育。III族窒化物半導体やその結晶成長にも興味があればより望ましい。

4. 2013年4月1日迄
5. なし
6. 博士号取得者
7. ○履歴書(写真貼付) ○研究業績リスト(査読付学術論文, 国際会議論文, 解説記事, 著書, 受賞, 研究費獲得状況(代表・分担を明記), その他等, 項目別に記載) ○主要論文5編の別刷又はコピー3部 ○今迄の研究概要(約1,000字) ○今後の研究・教育の抱負(約1,000字) ○推薦書1通又は照会可能者1名の氏名, 連絡先
8. 2012年6月29日(金)必着
9. 263-8522 千葉市稲毛区弥生町1-33 千葉大学工学研究科電気電子系コース 石谷善博 電話043-290-3330 ishitani faculty.chiba-u.jp
10. 封筒に「公募書類在中」と朱書き簡易書留で送付. 原則提出書類不返却. 詳細は<http://www.te.chiba-u.jp/>参照.

■東京工業大学大学院理工学研究科准教授

1. 准教授1名
2. 物性物理学専攻
3. 物性理論. 学部教育は理学部物理学科を担当.
4. 決定後早期
5. なし
7. ○履歴書 ○業績リスト(主要論文3編に印) ○研究業績概要 ○研究計画書 ○大学院教育・学部教育の実績と抱負 ○推薦書又は意見書2通
8. 2012年7月18日(水)必着
9. ①152-8551 東京都目黒区大岡山2-12-1 東京工業大学大学院理工学研究科物性物理学専攻 吉野淳二
②西森秀稔 nishimori phys.titech.ac.jp
10. 封筒に「物性理論准教授応募書類在中」と朱書き簡易書留で送付. 原則応募書類不返却. 詳細は<http://www.stat.phys.titech.ac.jp/index-j.html>参照.

■早稲田大学電気・情報生命工学科専任教員

1. 教授又は准教授1名
2. 電子・電気材料, 電子・電気物性に関連する分野
3. 主な担当講義科目: 電磁気学及び専門に関する科目
4. 2013年4月以降早期
5. なし(常勤)
6. 博士号取得者, 国籍・性別・年齢不問
7. ○履歴書 ○研究業績リスト ○主要論文別刷 ○「今迄の研究概要と今後の研究計画」及び「教育経験と教育への抱負」

- 照会可能者2名 ○担当可能な専門に関する科目
8. 2012年8月20日(月)必着
 9. ①169-8555 東京都新宿区大久保3-4-1 早稲田大学先進理工学部電気・情報生命工学科連絡事務所内「電気・情報生命工学科教員選考委員会」
②小林正和 電話03-5286-3006 Fax 03-5286-3492 office eb.waseda.ac.jp
 10. 提出書類不返却. 詳細は<http://www.eb.waseda.ac.jp>参照.

学術的会合

学術的会合の標準様式(1件500字以内)

掲載されている例を参考にして, 次の項目中, 必要なものを簡潔に作成して下さい:
○会合名 ○主催 ○日時(西暦年月日, 曜日) ○場所(会場名の後に括弧して郵便番号, 住所, 電話) ○内容(1行18字で12行以内) ○定員 ○参加費(物理学会員, 学生の参加費) ○申込締切(講演, 参加, 抄録, 原稿提出の別を明記) ○連絡先(郵便番号, 住所, 所属, 担当者名, 電話, Fax, e-mail等) ○その他(1行18字で5行以内)

■The 3rd International Symposium on Advanced Microscopy and Theoretical Calculations

主催 ファインセラミックスセンターナノ構造研究所
日時 2012年5月9日(水)~11日(金)
場所 長良川国際会議場(502-0817岐阜市長良福光2695-2 電話058-296-1200 Fax 058-296-1210)
内容 ナノ構造解析又は材料設計に用いられる最先端の電子顕微鏡及び理論計算の技術とその研究成果について議論する. 産学の研究者間における技術交流を促進する為, 2年に1度定期的に開催しており, 今回が3回目. 約24件の招待講演, 及び一般参加者によるポスター発表を予定.
定員 約250名
参加費 無料
連絡先 460-0004名古屋市中区新栄町2-13栄第一生命ビルディング8階 (株)コングレ中部支社 電話052-950-3369 Fax 052-950-3370 amt3 congre.co.jp

■「融合マテリアル」第5回公開シンポジウム

主催 新学術領域研究「融合マテリアル: 分子制御による材料創成と機能開拓」総

括班

日時 2012年6月8日(金)
場所 慶應義塾大学日吉キャンパス協生館 藤原洋記念ホール(223-8526横浜市港北区日吉4-1-1)
内容 文部科学省科学研究費補助金新学術領域研究「融合マテリアル: 分子制御による材料創成と機能開拓」(平成22~26年)は, 自然と調和して永続的に発展可能な人類の為の「材料調和社会」の実現を目的とする. 本領域の内容と研究成果について報告する. 特別講演: 彌田智一(東工大)かたちの機能を創るプレート材料化学, 山下正廣(東北大)マルチプルデッカー型フタロシアニンLn(III)単分子量子磁石を用いた量子分子スピントロニクス

参加費 無料
連絡先 office fusion-materials.org <http://www.fusion-materials.org/>

■ISSP-CMSI international workshop/symposium on MAterial Science Petaflops era

主催 東京大学物性研究所, 計算科学イニシアティブ
日時 2012年6月25日(月)~7月13日(金)
場所 東京大学物性研究所(277-8581柏市柏の葉5-1-5)
内容 物性研究所理論部門が主催する第6回国際ワークショップ・シンポジウム. 3週間のワークショップ(講師によるレクチャー)と3日間のシンポジウム(口頭, ポスター発表)を通じて主に「Dispersion force and hydrogen bound.」, 「Excitation — many-body perturbation methods.」, 「Accurate and/or large-scale ground state calculations.」, 「Application to energy-conversion processes — photocatalysis, fuel cells and solar cells.」について議論を行う予定.

定員 100名
参加費 無料
参加申込締切 2012年6月1日(金)
連絡先 277-8581柏市柏の葉5-1-5 東京大学物性研究所 杉野 修 電話04-7136-3290 sugino issp.u-tokyo.ac.jp, MASP2012事務局 電話04-7136-3296 Fax 04-7136-3443 masp2012scrt issp.u-tokyo.ac.jp <http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/public/masp2012>

■ **International Workshop: Physics of information, information in physics, and the demon**

日時 2012年6月27日(水)~29日(金)
場所 岡崎コンファレンスセンター中会議室(444-0864岡崎市明大寺町字伝馬8)
内容 マックスウェル悪魔のパラドックスはランダウアの「消去原理」により解決されたとは言え、かの悪魔は現在においても情報と物理学を結ぶ象徴的存在として、熱力学、統計力学、量子情報理論など多くの理論・実験分野で「活躍」している。悪魔の近況をキーワードのひとつとし、情報・物理間相互作用の研究における最近の進展、今後の展望を議論するためのワークショップを開催する。特定の分野を指定することなく、「物理における情報の基本的役割」「情報を介した異なる分野間のつながり」「情報処理の観点から見る自然のダイナミクス」「実験室、あるいは宇宙における情報、そして悪魔」等々、異なる専門領域の方々の交流を図りたいと考えている。

定員 約70名

参加費 無料

講演申込締切 2012年6月1日(金)

連絡先 大阪市立大学 丸山耕司 電話 06-6605-3126 maruyama sci.osaka-cu.ac.jp, 分子科学研究所 鹿野 豊 電話 0564-55-7419 yshikano ims.ac.jp

■ **日本真空学会関西支部 & 日本表面科学会関西支部合同セミナー2012 生物に学ぶさまざまな機能—環境に調和した自然界の知恵—**

主催 日本真空学会関西支部、日本表面科学会関西支部、神戸大学研究基盤センター

日時 2012年7月6日(金)13:00~17:00

場所 神戸大学百年記念館六甲ホール(657-8501神戸市灘区六甲台町1-1)

内容 近年、自然界の生物がもつ様々な機能を科学の目で分析し、それを工学的に応用するバイオミメティクスという分野が盛んに研究されるようになってきた。数十億年にわたる進化の過程で生物が獲得してきたこれらの機能は、エネルギー消費が小さく、場所もとらず、毒性も無く、環境に調和した理想的なシステムである場合が多く見られる。それらの多くは表面・界面に深く関わる現象に基づいており、多岐にわたる。生物に学ぶ様々な機能を、地球環境をできる限り損なわずに人類の生活を豊かにするキーテクノ

ロジーの礎と捉え、幅広い専門家が紹介・解説する。

定員 200名

参加費 無料

参加申込締切 2012年7月2日(月)

連絡先 565-0871吹田市山田丘2-1 大阪大学 齋藤 彰 電話/Fax 06-6879-7298 saito prec.eng.osaka-u.ac.jp http://www.sssj.org/

■ **第53回表面科学基礎講座**

主催 日本表面科学会

協賛 日本物理学会

日時 2012年7月10日(火)~12日(木)

場所 東京大学山上会館2階大会議室(113-8654東京都文京区本郷7-3-1 電話03-3812-2111)

内容 表面・界面分析の基礎と応用。第1日:表面・界面分析概論/SPMの基礎/SPMの応用/走査電子顕微鏡/等他。第2日:表面の特性基礎/電子回折法/放射光表面構造解析/測定データ取扱の基礎/等他。第3日:真空技術基礎/紫外光電子分光/X線光電子分光法/オージェ電子分光法/等他。

定員 150名

参加費 40,000円、学生10,000円(テキスト代、消費税込)

参加申込締切 2012年6月29日(金)

連絡先 113-0033東京都文京区本郷2-40-13本郷コーポレイション402 日本表面科学会 電話03-3812-0266 Fax 03-3812-2897 shomu sssj.org http://www.sssj.org

■ **第10回ESR夏の学校**

主催 電子スピンスイエンズ学会

日時 2012年7月21日(土)13:00~23日(月)12:30

場所 ANAホリデイ・イン仙台(984-0051仙台市若林区新寺1-4-1 電話022-256-5111)

内容 「スピン科学の基礎と実践」の習得を目指し、講義タイトル「電磁波分光法としての電子スピン共鳴(ESR)」、「ESRとサイクロトロン共鳴の基礎」、「スピン緩和の基礎と動的スピン系への応用」のもと、基礎から実践への繋がりをしっかりと勉強する。講義と共に、講師を含めた参加者の研究・自己紹介や多くの質問の時間を設定している。参加者相互の親睦を図ることも本校の重要な目的の一つであり、全て泊り込み方式で行う。

定員 30名

参加費 30,000円、学生20,000円(宿泊、食事、テキスト代等込)

申込 1.氏名(ふりがな)、2.所属・研究室名・学年、3.連絡先(研究室住所・電話・e-mail)を明記し、e-mailにて参加申込締切 定員になり次第、最長2012年6月8日(金)

連絡先 京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科生命物質科学専攻 櫻井康博 d0811005 edu.kit.ac.jp, SEST若手の会 電話075-724-7807

その他 詳細はhttp://sestwakate.web.fc2.com/参照。

■ **第40回薄膜・表面物理セミナー(2012) 半導体SiCの基礎と応用(省エネ・低炭素社会を目指したパワーデバイス開発の将来)**

主催 応用物理学会薄膜・表面物理分科会
協賛 日本物理学会、他

日時 2012年8月3日(金)

場所 東京工業大学蔵前会館ロイヤルブルーホール(東京都目黒区大岡山2-12-1 電話03-5734-3737)

内容 プログラム:恩田正一<デンソー> SiC技術の進展—なぜいまSiC技術が重要なのか—、吉田貞史<産総研> SiCの基礎物性、藤本辰雄<新日鉄> SiC単結晶の結晶成長技術、土田秀一<電中研> SiCエピタキシャル成長技術、北畠 真<パナソニック> SiCウエハの検査・評価技術、渡部平司<阪大> SiCパワーデバイス開発と評価技術、谷本 智<日産/FUPET> 産業分野でのSiCへの期待—自動車産業への応用—

定員 60名

参加費 15,000円、学生3,000円

参加申込締切 2012年7月20日(金)

参加費振込締切 2012年7月27日(金)

連絡先 113-0034東京都文京区湯島2-31-22湯島アーバンビル7F 応用物理学会事務局分科会担当 上村さつき 電話03-5802-0863 Fax 03-5802-6250 kamimura jsap.or.jp

■ **第57回物性若手夏の学校**

主催 第57回物性若手夏の学校準備局

日時 2012年8月6日(月)~10日(金)

場所 ホテルパーク(500-8009岐阜市湊町397-2 電話058-265-5211)

内容 物性若手夏の学校は大学院生を中心とした若手研究者のためのサマースクール。各界を代表する先生方による講義・セミナーや、参加者による口頭発表、ポスター発表の機会を通じて広く物性科学の見聞を広げることができる。参加者同士の交流が非常に盛んで、全国の若手研

究者と知り合いになるチャンス。この夏、一緒に、一歩前に進んでみませんか。

定員 200名(予定)

参加費 3,000円(宿泊費等別)

申込 2012年5月1日(火)より

参加登録締切 2012年6月15日(金)

連絡先 info cmpss.jp <https://cmpss.jp>

その他 企画詳細、講師のリスト、宿泊費等の詳細はHP参照。

■ Summer School 数理物理2012「結び目の数理と物理」

主催 緒方芳子(東大数理)、小嶋 泉(京大数理研)、河東泰之(東大数理)

日時 2012年9月7日(金)~9日(日)

場所 東京大学大学院数理科学研究科大講義室(153-8914東京都目黒区駒場3-8-1 電話03-5465-7001)

内容 出口哲生<お茶大物理>ランダム結び目と環状高分子の統計物理、長尾健太郎<名大多元数理>3次元双曲幾何とクラスター代数、藤 博之<名大物理>結び目不変量と量子場の理論、村上 順<早大数学>結び目の量子不変量とその応用

定員 200名

参加費 2,000円

参加申込締切 2012年8月20日(月)

連絡先 153-8914東京都目黒区駒場3-8-1 東京大学大学院数理科学研究科 河東泰之 yasuyuki ms.u-tokyo.ac.jp <http://www.ms.u-tokyo.ac.jp/~yasuyuki/mp2012.htm>

■ The 4th International Symposium on Slow Dynamics in Complex Systems—頑張ろう東北—

主催 東北大学グローバルCOEプログラム「流動ダイナミクス知の融合教育研究世界拠点」

日時 2012年12月3日(月)~8日(土)

場所 東北大学片平キャンパスサクラホール(980-8577仙台市青葉区片平2-1-1 電話022-217-5301)

内容 様々な複雑系で見られるガラス転移現象のメカニズムの解明を目指し、世界中の研究者を招き、実験・理論・計算機実験の異なる立場から議論を行う。主なテーマは、(1)Supercooled liquids and glass transition, (2)Complex fluids, (3)Polymer dynamics, (4)Biological systems, (5)Complex systems, (6)Other related topics

定員 162名

参加費 35,000円、学生25,000円

(Proceedings 1冊分込)

登録・抄録提出締切 2012年6月1日(金)
連絡先 980-8577仙台市青葉区片平2-1-1 東北大学原子分子材料科学高等研究機構(WPI-AIMR) 徳山道夫 電話022-217-5954

その他 一般講演54件、ポスター発表54件。採用通知は2012年7月1日(日)迄にe-mailにて連絡。詳細は<http://www.ifs.tohoku.ac.jp/tokuyama-lab/slow-dynamics/>参照。

その他

助成公募の標準様式(1件500字以内)

○名称 ○対象(1行18字で7行以内)
○助成内容 ○応募方法(1行18字で4行以内) ○応募締切(西暦年月日、曜日)
○詳細問合せ先(郵便番号、住所、所属、担当者名、電話、Fax、e-mail等)

その他 ○標題 ○内容 ○連絡先

■宇宙科学振興会助成

[I]

内容 国際学会出席旅費支援

対象 宇宙理学(地上観測除く)及び宇宙工学(宇宙航空工学含む)に関する独創的・先端的な研究活動を行っている若手研究者(当該年度4月2日で35歳以下)又はシニアの研究者(当該年度4月2日で63歳以上で定年退職した者)で国際研究集会で論文発表又は主要な役割等が原則として確定している者。

助成内容 1件あたり約10~25万円、年間約10~15件

応募締切 2012年7月1日~10月末の出発者:2012年5月15日(火)、2012年11月1日~2013年2月末の出発者:2012年9月15日(土)、2013年3月1日~6月末の間の出発者:2013年1月15日(火)

応募方法 <http://www.spss.or.jp>を参照し申請書に必要書類を添付の上、admin spss.or.jp宛に送付。

問合せ先 252-5210相模原市中央区由野台3-1-1 公益財団法人宇宙科学振興会事務局 電話042-751-1126 admin spss.or.jp <http://www.spss.or.jp>

[II]

内容 国際学会開催支援

対象 宇宙科学研究を推進している国内の学術団体(研究所、大学等)で、宇宙理学(地上観測除く)及び宇宙工学(宇宙航空工学含む)に関する国際学会、国際研究集会の国内開催を主催する団体。

助成内容 1件あたり約30~50万円、年間約5~6件

応募締切 2012年10月~2013年3月開催の国際学会:2012年7月15日(日)、2013年4月~2013年9月開催の国際学会:2013年1月15日(火)

応募方法・問合せ先 [I]に同じ。

■一般財団法人キヤノン財団第4回(2012年)研究助成

[I]

内容 研究助成プログラム「産業基盤の創生」

対象 情報・通信、エレクトロニクス、機械・精密、オプティクス・フォトニクス、応用化学、応用物理、ナノテクノロジー・材料等の既存分野、医工連携等の融合分野、新興分野における新たな挑戦的な研究

助成内容 新規採択総額約2億円、1件あたり助成期間中の研究費2,000万円以下。期間は1年又は2年間。

応募締切 2012年6月29日(金)15時

問合せ先 146-8501東京都大田区下丸子3-30-2 電話03-3757-6573 Fax 03-3757-0674 <http://www.canon-foundation.jp>

[II]

内容 研究助成プログラム「理想の追求」

対象 大きなイノベーションを起こすことが期待される、独創的で先駆的な研究プロジェクト。2012年の募集課題は、『海』に関する研究。

助成内容 新規採択総額約1億円、1件あたり研究期間中の研究費上限の目安は5,000万円程度。期間は原則3年間。

応募締切 2012年7月13日(金)15時

問合せ先 [I]に同じ。

■第6回(2012年度)湯川記念財団木村利栄理論物理学賞候補者募集

対象 重力・時空理論、場の理論とその周辺の基礎的な理論研究において顕著な業績を上げ、且つ受賞以降も対象分野で中心的な役割を果たしていくことが期待される研究者。原則毎年1件に授賞。

顕彰 賞状及びメダルと副賞(60万円/件)

推薦方法 他薦

推薦締切 2012年6月29日(金)必着

提出先 606-8502京都市北白川追分町 京都大学基礎物理学研究所 木村利栄理論物理学賞選考委員会 kimurasho yukawa.kyoto-u.ac.jp

その他 推薦者は所定の推薦票等の書類を簡易書留又はe-mailにて提出先に送付。募集要項・推薦票は<http://www2.yukawa>。

kyoto-u.ac.jp/~kimuratp/kimurasho/index.htm からダウンロードのこと。

■平成24年度(第2回) RIEC Award 受賞候補者募集

趣旨 RIEC Awardは電気通信工学振興会のもとに東北大学電気通信研究所が2011年度に創設。電気情報通信分野の学術研究の発展に顕著な貢献があり、将来にわたり当該分野の発展に寄与することが期待される優秀な若手研究者を顕彰することで、当該分野の発展を図る。

対象 電気情報通信に関連する広い意味での電気工学、電子工学、情報工学、通信工学各分野の大きな賞の受賞経験のない将来性の高い若手研究者。関連分野で将来的な発展が期待できる顕著な研究業績をあげた者。2012年4月1日現在45歳以下。

授賞内容 授賞者は原則毎年度1名。賞状、賞牌及び副賞として賞金20万円を贈呈。東北大学電気・情報仙台フォーラム(11月9日開催)にて授賞式を予定。

応募方法 封筒に「RIEC Award申請書類在中」と朱書き指定必要書類を指定期日迄に送付。候補者の推薦は他薦のみ。必要書類は <http://www.riec.tohoku.ac.jp/>

ricaward/2012/shinsei.doc よりダウンロード。

応募締切 2012年7月27日(金)必着
提出先 980-8577 仙台市青葉区片平2-1-1 東北大学電気通信研究所内 (財)電気通信工学振興会 RIEC Award 授賞委員会

■平成24年度光科学技術研究振興財団研究助成・表彰の募集

助成対象 第1課題：光科学の未知領域の研究—とくに光の本質について。第2課題：細胞間あるいは分子間の情報伝達についての研究。

表彰対象 光科学に関する基礎的な研究で、内容が独創的且つ過去2年以内に発表された研究論文、講演、報告等の内容により対象者(35歳以下)を選定。

助成内容 総額約5,000万円

表彰内容 総額100万円

応募締切 2012年7月31日(火)

問合せ先 430-0926 浜松市中区砂山町325-6 公益財団法人光科学技術研究振興財団
電話 053-454-0598 Fax 053-454-1929
info refost-cs.or.jp <http://www.refost-hq.jp>

その他 応募書類は当財団宛に直接郵送。

■島津科学技術振興財団研究開発助成募集(2012年度)

対象 科学技術、主として科学計測及びその周辺の領域における基礎的な研究。

応募資格 国内の研究機関に所属する45歳以下の日本人研究者

助成内容 総額1,200万円(100万円以下/件)

応募締切 2012年9月30日(日)必着

問合せ先 島津科学技術振興財団事務局
電話 075-823-3240 Fax 075-823-3241
ssf zaidan.shimadzu.co.jp <http://www.shimadzu.co.jp/SSF>

■会員専用ページ：ユーザ名とパスワード

本会 web site (<http://www.jps.or.jp/>) の会員専用ページには、各種変更届、刊行委員会報告、過去の大会プログラム等の情報を掲載しています。アクセスするためのユーザ名とパスワード(今月と来月分)は次の通りです。(英数字は半角入力、大文字小文字は区別されます。)

5月 ユーザ名 : 12May

パスワード : Chadwick326

6月 ユーザ名 : 12Jun

パスワード : Tomonaga708

行事予定

[詳しくは表中の右欄記載の会誌各巻号の揭示板欄(*印は会告欄)をご参照下さい。]

開催月日	名 称	開催地	会誌巻号または世話人
2012年			
5/9~11	The 3rd Int. Symp. on Advanced Microscopy and Theoretical Calculations	岐阜市	67-5
5/15~16	第29回希土類討論会	札幌市	66-12
5/18~20	第8回ESR入門セミナー	八王子市(東京)	67-4
5/21~22	第26回量子情報技術研究会	福井市	67-3
5/24	食品ナノコロイドセミナー2012~初心者のためのナノコロイド研究法の解説~	東京	67-3
5/25	第23回食品ナノコロイドシンポジウム	東京	67-3
5/25	第184回研究会・強磁場応用専門研究会「強磁場を利用した物質分離技術」	東京	67-4
6/3~7	第5回光学、光電、フォトニック材料およびその応用に関する国際会議	奈良市	66-12
6/8	「融合マテリアル」第5回公開シンポジウム	横浜市	67-5
6/25~7/13	ISSP-CMSI int. workshop/symp. on MAterial Science Petaflops era	柏市(千葉)	67-5
6/27~29	Int. Workshop: Physics of information, information in physics, and the demon	岡崎市(愛知)	67-5
7/4~6	The 4th Int. Workshop on the Dual Nature of f-electrons	姫路市(兵庫)	67-3
7/6	日本真空学会関西支部&日本表面科学会関西支部合同セミナー2012 生物に学ぶさまざまな機能—環境に調和した自然界の知恵—	神戸市	67-5
7/10~12	第53回表面科学基礎講座	東京	67-5
7/21~23	第10回ESR夏の学校	仙台市	67-5

開催月日	名 称	開 催 地	会誌巻号または世話人
2012年 8/3	第40回薄膜・表面物理セミナー (2012) 半導体SiCの基礎と応用 (省エネ・低炭素社会を目指したパワーデバイス開発の将来)	東京	67-5
8/6~10	第57回物性若手夏の学校	岐阜市	67-5
8/20~25	The 20th Int. IUPAP Conf. on Few-Body Problems in Physics	福岡市	67-3
8/26~31	第21回ヤーン・テラー効果に関する国際会議	つくば市 (茨城)	67-3
9/3~7	19th WIEN2k WORKSHOP	東京	67-3
9/5~8	フレキシブル・プリンテッド・エレクトロニクス国際会議2012 (ICFPE2012)	東京	67-2
9/7~9	Summer School 数理物理2012「結び目の数理と物理」	東京	67-5
9/11~14	日本物理学会2012年秋季大会 (京産大) (素粒子, 核物理, 宇宙線, 宇宙物理)	京都市	日本物理学会
9/18~21	日本物理学会2012年秋季大会 (横浜国大) (主として物性)	横浜市	日本物理学会
9/23~28	IUMRS-ICEM2012 シンポジウム D-5「先進計算材料科学・工学 Advanced Computational Materials Science and Engineering」	横浜市	67-3
9/24~28	14th Int. Conf. on Vibrations at Surfaces	神戸市	67-3
10/21~25	第25回固体内原子衝突に関する国際会議	京都市	66-10
12/3~8	The 4th Int. Symp. on Slow Dynamics in Complex Systems—頑張ろう東北—	仙台市	67-5
2013年 3/26~29	日本物理学会第68回年次大会 (広島大)	東広島市 (広島)	日本物理学会
9/20~23	日本物理学会2013年秋季大会 (高知大) (素粒子, 核物理, 宇宙線, 宇宙物理)	高知市	日本物理学会
9/25~28	日本物理学会2013年秋季大会 (徳島大) (主として物性)	徳島市	日本物理学会

編集後記

大型連休を利用して、実家に里帰りされた方もおられるだろう。日頃はどちらかというが無機質な物理学研究に勤しみつつも、たまには親兄弟や旧友と再会するというのも心地の良いものだ。さて、読者に今号が届く頃、私たち会員をつなぐ“実家”である物理学会事務局が新橋から湯島に移転する。

筆者にとって、馴染みの深かった事務局は東京タワーに隣接する、機械振興会館にあった時代。当時は春秋学会の予稿は事務局で処理されたため、締切日に研究室の先輩の予稿と共に持参するのが修士課程院生のタスクであった。提出後には同様にお遣いに出されてきた友人を捕まえてボーリング場に行くのもアリだ。また、郵送でしか受け付けなかったJPSJに投稿する際にも、事務局近くの郵便局までわざわざ持参し、柏手を打って帰る、といった笑い種もある。

予稿提出もJPSJ投稿も電子化され事務局の住所がかつほど意識されなくなった現在も、物理学会は会員をつなぐハブとしての機能を有している。いやむしろ、これら電子化やメーリングリストのおかげで会員の利便は確実に増しているだろう。しかし、実体としての事務局が覆い隠されることで、主として若い学生からのこういった必要以上の気負いや人間臭さといったもの

を受け止める場所が失われていることも事実かも知れない。研究者の社会への発信や還元が厳しく問われる昨今、牧歌的に過ぎるし、そもそも最近の学生は相対的にクールだ。しかし、15年前に打った柏手には絶大な威力があったとしか考えられないのも、自らの英文筆力の(遅々としているが)進捗に鑑みるにまた事実なのである。

物理学会誌では、広い分野にまたがる会員の相互理解に繋がるよう注力している。平易なイントロダクションや綺麗な図面の作成など、著者には多大なご負担を強いている。ここには論文には書けないような、時には論理を超えた研究のパースペクティブや個人的労苦の跡が窺い知れる記述がもっとあって良いだろう。ある知見に至る過程は人それぞれだ。学会誌では、単に成果を発表するというよりむしろ、記事を通して読者が著者の考え方を追体験し「このような視点もあるのか、自分の研究を眺め直すとうなるか」という、気づき、を通して相互交流を深めることに重きを置くのが良いのではなからうか。編集委員会に身をおく者として、物理という共通言語で語られる多様な対象の面白さが一層伝わるよう尽力したいと考えると同時に、会員諸兄のご協力を賜りたくひとえに願うばかりである。

朋遠方より来るまた楽しからずや—湯島

聖堂から徒歩5分の新天地への移転という“実家の引越”を行った物理学会と会員は、今後どのように交流し、分野を発展させていくであろうか。新しい歴史が楽しみである。

藤山茂樹〈

編集委員

旭 耕一郎 (委員長), 宮下 精二, 有田亮太郎, 板橋 健太, 伊藤 克司, 遠藤 仁, 小川 了, 北島 昌史, 小島智恵子, 佐藤 丈, 佐藤 実, 島野 亮, 鈴木 陽子, 竹内 幸子, 田中 秋広, 谷本 久典, 田村 忠久, 樽家 篤史, 西野 晃徳, 長谷川太郎, 平山 博之, 藤谷 洋平, 藤山 茂樹, 古川はづき, 古川 勝, 宮本 良之, 加藤 岳生

(支部委員)

朝日 孝尚, 石井 史之, 奥西 巧一, 岸田 英夫, 久保木一浩, 酒井 彰, 仲野 英司, 野村 清英, 松井 広志, 水野 義之

新著紹介小委員会委員

加藤 岳生 (委員長), 雨宮 高久, 木村 元, 榊田 創, 柴田 絢也, 竹延 大志, 多田 司, 多田 朋史, 中川 賢一, 村山 能宏, 森川 雅博, 矢向謙太郎, 吉越 貴紀, 渡邊 紳一

(p. 369より続く)

Cross-disciplinary physics and related areas of science and technology
Inverse Problem in Pairwise Markov Random Fields Using Loopy Belief Propagation..... Muneki YASUDA, Shun KATAOKA, and Kazuyuki TANAKA
Structural Evidence for High Ionic Conductivity of $\text{Li}_7\text{P}_3\text{S}_{11}$ Metastable Crystal..... Yohei ONODERA, Kazuhiro MORI, Toshiya OTOMO, Masaaki SUGIYAMA, and Toshiharu FUKUNAGA

SHORT NOTES

Novel Temperature Dependence of the Dielectric Constant in Rb_2ZnI_4 at Low Temperatures..... Masaaki TAKASHIGE, Toshihisa YAMAGUCHI, and Fuminao SHIMIZU

PROGRESS OF THEORETICAL PHYSICS
Vol. 127, No. 4, April 2012

Papers

General and Mathematical Physics

Solutions Associated with Discrete and Continuous Spectrums in the Inverse Scattering Method for the Vakhnenko-Parkes Equation V. O. Vakhnenko and E. J. Parkes
Decay Forms of the Time Correlation Functions for Turbulence and Chaos..... Hazime Mori and Makoto Okamura
Quantum Decoherence and Entanglement Induced by Nonlinear Dissipative Environment..... Hosny A. Hessian
Analysis of Popper's Experiment and Its Realization Tabish Qureshi

Particles and Fields

Average Number of the Lightest Supersymmetric Particles in Decay of Superheavy Particle with Long Lifetime Yasuhiro Kurata and Nobuhiro Maekawa
Boundary State Analysis on the Equivalence of T-Duality and Nahm Transformation in Superstring Theory Tsuguhiko Asakawa, Ursula Carow-Watamura, Yoshiro Teshima and Satoshi Watamura
Solving the Naturalness Problem by Baby Universes in the Lorentzian Multiverse Hikaru Kawai and Takashi Okada

Nuclear Physics

Exploring Three-Nucleon Forces in Lattice QCD Takumi Doi, Sinya Aoki, Tetsuo Hatsuda, Yoichi Ikeda, Takashi Inoue, Noriyoshi Ishii, Keiko Murano, Hidekatsu Nemura and Kenji Sasaki
Skyrme-Hartree-Fock plus Tensor Correction for Nuclear Matter Yannan Wang, Jinniu Hu, Hiroshi Toki and Hong Shen
Re-Formation of Many-Quark Model with the $su(4)$ -Algebraic Structure in the Schwinger Boson Realization; *Reconsideration in the Original Fermion Space*.... Yasuhiko Tsue, Constança Providência, João da Providência and Masatoshi Yamamura
Color-Singlet Three-Quark States in the $su(4)$ -Algebraic Many-Quark Model; *An Example of the $su(4) \otimes su(4)$ -Model* Yasuhiko Tsue, Constança Providência, João da Providência and Masatoshi Yamamura

Cross-Disciplinary Physics

Fast Quantum Gate with Superconducting Flux Qubits Coupled to a Cavity..... Chui-Ping Yang

本誌を複写される方に (Notice about photocopying)

(参照：本誌 47 (1992) 4号会告)

本誌に掲載された著作物を複写したい方は、(社)日本複写権センターと包括複写許諾契約を締結されている企業の方でない限り、日本物理学会が複写権等の行使の委託をしている次の団体から許諾を受けて下さい。

(In order to photocopy any work from this publication, you or your organization must obtain permission from the following organization which has been delegated for copyright clearance by the copyright owner of this publication.)

〒107-0052 東京都港区赤坂 9-6-41 乃木坂ビル 3F
一般社団法人学術著作権協会
電話 03-3475-5618 Fax 03-3475-5619 info jaacc.jp

アメリカ合衆国における複写については、下記 CCC に連絡して下さい。

Copyright Clearance Center, Inc.
222 Rosewood Drive, Danvers, MA 01923 USA
Phone 1-978-750-8400 Fax 1-978-646-8600

なお、著作物の転載・翻訳のような、複写以外の許諾は、直接日本物理学会へご連絡下さい。

日本物理学会誌 第67巻 第5号 (平成24年5月5日発行) 通巻747号

©日本物理学会 2012

Butsuri

発行者 〒105-0004 東京都港区新橋 5丁目34番3号 栄進開発ビル 5F

永井治男

印刷所 〒169-0075 東京都新宿区高田馬場 3丁目8番8号

株式会社 国際文献印刷社

発行所 〒105-0004 東京都港区新橋 5丁目34番3号 栄進開発ビル 5F

一般社団法人 日本物理学会

電話 03-3434-2671 Fax 03-3432-0997

郵便振替 00120-4-167544 定価 1部2,400円 年額 25,000円

本誌に掲載された寄稿等の著作権は一般社団法人日本物理学会が所有しています。