

# 日本物理学会誌

■ 重イオンビームによる品種改良法の開発から  
遺伝子機能解明へ

■ 代議員立候補のお願い

**BUTSURI**

第67巻 第10号(通巻753号) ISSN 0029-0181

昭和30年6月13日 第3種郵便物認可

平成24年10月5日発行 毎月5日発行

**2012 VOL. 67 NO.**

**10**

5' CATTGAACAGGAAATCCCTTAGC 3'  
3' GTAACCTGTCCTTTAGGGAATCG 5'



5' CATTGAACA-----TCCCTTAGC 3'  
3' GTAACCTGT-----AGGGAATCG 5'

口絵：今月号の記事から		677
巻頭言	PTEPの出発に際して初代編集委員長からのお願い	坂井典佑 679
交流	重イオンビームによる品種改良法の開発から遺伝子機能解明へ 	阿部知子, 平野智也, 風間裕介 680
最近の研究から	第一原理計算で探るコヒーレントフォノンの生成機構 	篠原 康, 乙部智仁, 岩田潤一, 矢花一浩 685
	光格子中のボース・フェルミ混合原子気体が示す多様な量子相	山下 眞, 稲葉謙介 690
	有機半導体界面における浅い局在状態密度分布のスペクトル解析	長谷川達生, 松井弘之, ミシェンコ アンドレイ 695
	ガラスの硬さを計るレプリカ理論	吉野 元 699
	紐状分子の非平衡ダイナミクス：細孔通過現象を中心に	坂上貴洋, 齋藤拓也 705
	GRB起源PeV-EeV タウニュートリノ初探査	浅岡陽一, 佐々木真人 710
JPSJの最近の注目論文から	6月の編集委員会より	安藤恒也 715
学界ニュース	2012年フンボルト賞：谷畑勇夫氏 大森賢治氏	岸本忠史 718 百瀬孝昌 718
新著紹介		719
AAPPS だより	アジア太平洋物理学会連合 (AAPPS) と第12回アジア太平洋物理会議 (APPC12) 開催について	721
会員の声	■震災復興ののろし	722
掲示板	■人事公募 ■学術的会合 ■その他	723
行事予定		727
会告	■JPSJ編集委員会からのお知らせ ■第68回年次大会・講演募集掲載号 ■第68回 年次大会の企画募集 ■修正とお詫び ■2012年9月1日付新入会者 ■第69期～第 70期代議員候補者への立候補のお願い	729
本会関係欧文誌目次		734

**表紙の説明** 写真はダリア「美榛」(みはる：上段左端)をオリジナルの品種として窒素イオンビームを照射し改良した多様な変異花である。加速器で作る重イオンビームを植物や微生物に直接照射して、DNA変異を誘発する品種改良法は、日本独自の技術として発展してきた。広島市では、電照栽培で冬に切花ダリアの生産を行っているが、この栽培方法に向く品種に限られるため、重イオンビームによる品種改良に取り組んだ。下段左から2つ目の花びらの数が増え濃赤桃色となった変異体は形質が安定しており、「美榛」より大輪化し暖色系で豪華となった。そこで愛称「ワールド」として広島市中央卸売市場で試験販売したところ好評であった。新たに重イオンビームにより誘発されるのはDNA欠失変異が多い。白抜き文字で示した配列は炭素イオンビーム照射で誘発したシロイヌナズナ *hy* 変異体の例で、5塩基対欠失(右下)を示した。詳細は本号に掲載されている阿部知子氏らの「交流」記事を参照のこと。

<b>Graphic Page</b>	<b>677</b>
<b>Editorial</b>	
<i>Request from the First Editor-in-Chief at the Start of PTEP</i>	Norisuke Sakai <b>679</b>
<hr/>	
<b>Reviews</b>	
<i>Heavy-Ion Beam Mutagenesis: from Plant Breeding to Gene Function Analysis</i>	Tomoko Abe, Tomonari Hirano and Yusuke Kazama <b>680</b>
<b>Current Topics</b>	
<i>First-Principles Calculation to Explore Mechanisms of Coherent Phonon Generation</i>	Yasushi Shinohara, Tomohito Otake, Jun-Ichi Iwata and Kazuhiro Yabana <b>685</b>
<i>Diverse Quantum Phases of Bose-Fermi Mixtures in an Optical Lattice</i>	Makoto Yamashita and Kensuke Inaba <b>690</b>
<i>Spectral Analysis for Distribution of Weakly-Localized States at Organic Semiconductor Interfaces</i>	Tatsuo Hasegawa, Hiroyuki Matsui and Andrey S. Mishchenko <b>695</b>
<i>Extracting Rigidity of Glasses out of Liquids</i>	Hajime Yoshino <b>699</b>
<i>Driven Translocation of Polymer</i>	Takahiro Sakaue and Takuya Saito <b>705</b>
<i>First Observational Search for PeV–EeV Tau Neutrino from GRB</i>	Yoichi Asaoka and Makoto Sasaki <b>710</b>
<hr/>	
<b>JPSJ Selected Papers in the Latest Issue</b>	Tsuneya Ando <b>715</b>
<b>Physics Community News</b>	
<i>Humboldt-Forschungspreis 2012: Isao Tanihata</i>	<b>718</b>
<i>Humboldt-Forschungspreis 2012: Kenji Ohmori</i>	<b>718</b>
<b>Book Reviews</b>	<b>719</b>
<b>AAPPS News</b>	<b>721</b>
<b>Letters and Comments</b>	<b>722</b>
<hr/>	
<b>Notice Board</b>	<b>723</b>
<hr/>	
<b>JPS Announcements</b>	<b>729</b>

交流 「重イオンビームによる品種改良法の開発から遺伝子機能解明へ」 p.680

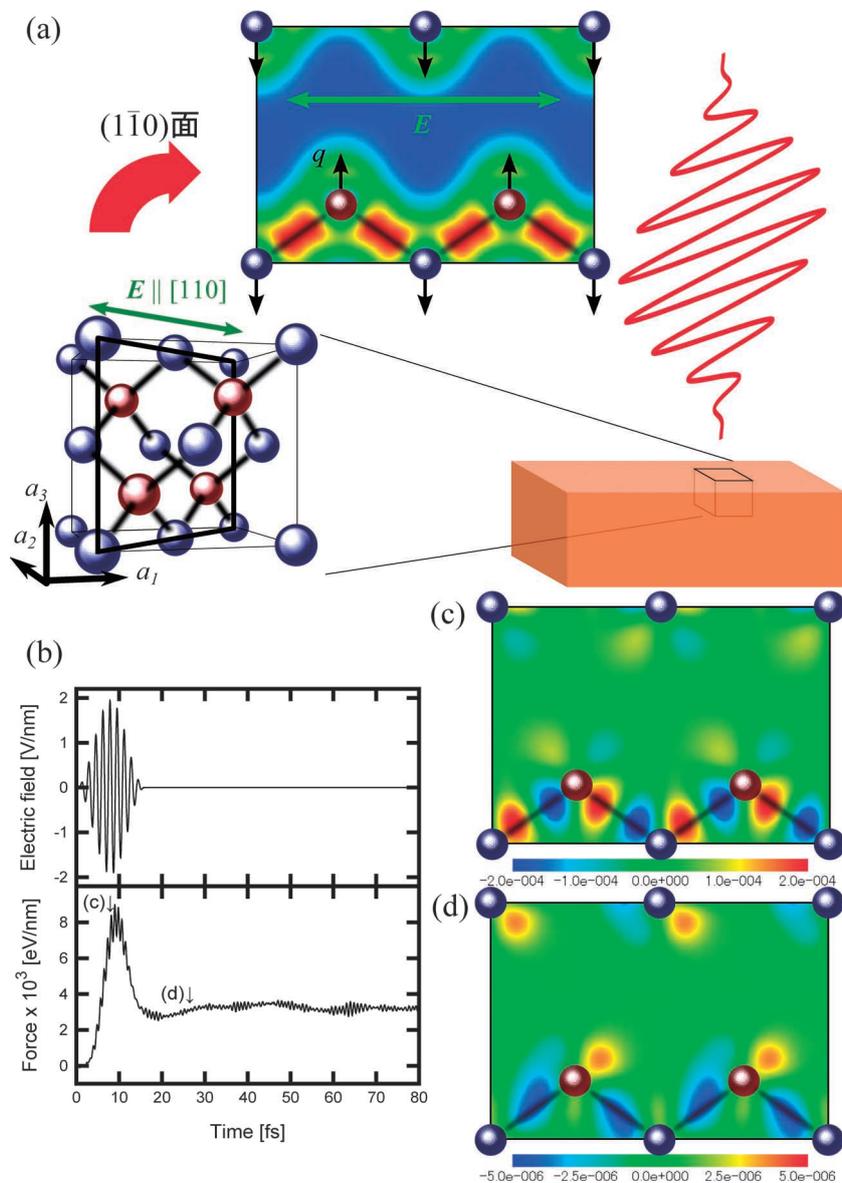


生物自動照射装置（自動試料交換装置と「レンジシフター」）。写真左の自動試料交換装置のステージ上に設置したカセットを順次取り出し、セットした試料を写真中央の照射ポイントに設置する。

重イオンビームによる品種改良により、花卉植物を中心に理研ブランドとして21の新品種を市販している。理研品種改良ユーザー会は現在国内156団体が所属しており、ユーザー増加の対応とLET精密制御照射のために、生物自動照射装置を作成した。



乾燥種子・吸水種子・培養体・培養細胞・穂木・挿し穂などの照射サンプルはそれぞれに適した試料容器に収め、その種類ごとに製作したカセットにセットし、カセットは自動試料交換装置のステージ上に設置する。写真カセットの照射試料は、手前3列はミカンの穂木、次の赤いテープを巻いたシャーレはベリーの吸水種子、奥の白いテープを巻いたシャーレはナシの培養体である。



シリコン結晶 (図 (a) の左下) の  $(1\bar{1}0)$  面における電子密度 (図 (a) の上) の図で,  $[110]$  方向に光電場 (緑色の線) を印加すると,  $[001]$  方向 (黒色の矢印) に力が生じ, コヒーレントフォノンが励起される.

図 (b) は, シリコン結晶に上部に示したレーザーパルスを照射した際に, 時間依存密度汎関数法で計算した力の様子を時間の関数として示している. (c) の時刻では, 一時的な電子励起による力が働き, 図 (c) に示すようなボンド内での電子振動に伴う基底状態からの密度変化が起きている. (d) の時刻では電子の実励起が起きている, 図 (d) に示すようにボンドから電子が抜けることによる力が働いている.

## PTEP の出発に際して初代編集委員長からのお願い

坂井典佑 (PTEP 編集委員長)

2012年9月から新学術誌 Progress of Theoretical and Experimental Physics (PTEP) の投稿受け付けが始まり、2013年1月からの刊行(特集号は2012年刊行)の予定です。日本物理学会が物性物理分野を中心に Journal of Physical Society of Japan (JPSJ) を刊行し、理論物理学刊行会が素粒子・原子核・宇宙分野の理論を中心とした Progress of Theoretical Physics (PTP) を刊行してきました。しかし、素粒子・原子核・宇宙分野の実験物理の論文の出版の場が不十分であったため、実験分野の論文のほとんどが海外の学術誌に投稿されてきたのが実態でした。最近では、J-PARCをはじめ、大型加速器での実験に世界中から研究者が参加しています。また、世界最大の加速器 LHC が完成し、我が国の実験物理学者たちも有力メンバーとして活躍しています。今こそ PTP を進化させ、理論物理だけでなく、素粒子・原子核・宇宙物理学の実験分野を大きな柱の一つとする新学術誌 PTEP が出発する好機です。

PTEP を充実した学術誌とするため、何よりも大きな支えは質の高い論文を学会員の皆様ができるだけ多く PTEP に投稿して下さることです。良い論文が掲載されることで、さらにその雑誌に投稿する意欲が生じ、投稿者が増えるという良い循環を作るためにも、皆様の積極的なご協力をぜひお願いいたします。それを促すためにも、編集委員会ではいくつかの工夫を行います。その第1は、Letter section の充実・強化です。速報性のある Letter 誌は、学術上の重要性・緊急性に応え、最も注目度の高い雑誌となっています。Letter section が PTEP においても注目される中核部分になると期待しています。Letter の速報性を生かすためには、

peer-review をして頂く研究者の皆様のご協力が不可欠です。第2は国際化です。そのために、より多くの外国人・外国在住の editor や Advisory Board をお願いします。アジア太平洋地域から高水準の学術論文がより多く掲載されるようになることも将来的な目標の一つです。第3はオープンアクセスです。この結果、世界中の研究者が PTEP の論文に直接触れることになり、我が国の学術誌の弱点とされてきたサーキュレーションの問題を解決する機会となります。

素粒子・原子核・宇宙物理学の実験分野は研究グループが国際化し、大きな研究者集団となる傾向が顕著です。大きな加速器も、またそれを用いた実験研究も巨額の投資を必要とします。これらの成果を広く社会に還元することは、研究者の強い要望であり、どのように実現するかが重要な課題です。そのために、購読料不要で誰もが電子化された論文を無料ダウンロードできる「オープンアクセス」を学術出版に導入する運動が始まっています。購読料なしに論文をダウンロードできることは、研究情報の流通と社会還元のために理想的なシステムであり、時代の流れでもあります。その一方で、オープンアクセスでは、購読料が得られなくなる結果、学術出版の経費を誰が負担するかという問題が生じます。今のところ、出版経費を著者からの掲載料でまかなうというモデルが最も多いようです。大実験グループのように、巨額の研究投資を受けている研究者にとっては、多少多くの掲載料を支払ってでも、社会全体に研究情報を流通させることに大きな意義を感じるはずですが、一方で、理論研究者は個人の研究も多く、多額の掲載料を負担することは難

しいのが実情です。

PTEP では、いくつかの方法を併用することによって、当面この財政上の問題を解決しようとしています。第1は、我が国を代表する共同利用機関である KEK が、オープンアクセスの積極的推進の立場から、PTEP 論文掲載料免除のための財源を提供して下さることになりました。これとは少し違う形ですが、理研も PTEP の趣旨に賛同して支援の枠組みを用意して下さる予定です。こうした財政的・精神的支援を、多くの大学・研究機関から得るように働きかけることを試みる予定です。実際、オープンアクセス誌の一つのモデルは大学・研究機関と協定を結んで掲載料無料化や減免を実施するというものです。最後に文部科学省もオープンアクセスの理念に賛同して下さり、科学研究費の中にオープンアクセス誌の立ち上げ用の新たな枠を導入して下さったのも、ありがたいことです。これらすべてを有効活用して、PTEP は大研究機関や実験グループのように掲載料を負担して頂けるところからは、正規の掲載料を頂き、それ以外の論文に対しては、申請された掲載料免除を実質的にすべて受け入れられる予定です。SCOAP<sup>3</sup> という CERN を中心とするオープンアクセス誌支援の国際的枠組みの出発も決まりましたが、詳細は今後の展開を待つ必要があります。これを含めて、PTEP の財政面での長期的展望は今後の検討課題となります。

最後に再度強調したいことは、成功への最も重要な鍵として、学会員の皆様が優れた論文を1篇でも多く PTEP に投稿して下さるように、ぜひともご協力をお願いいたします。

(2012年7月9日原稿受付)

# 重イオンビームによる品種改良法の開発から遺伝子機能解明へ

阿部知子\* (理化学研究所仁科加速器研究センター 351-0198 和光市広沢2-1 )

平野智也 (理化学研究所イノベーション推進センター 351-0198 和光市広沢2-1 )

風間裕介 (理化学研究所イノベーション推進センター 351-0198 和光市広沢2-1 )

加速器で作る重イオンビームを植物や微生物に直接照射して、DNA変異を誘発し、これを品種改良法に役立てる研究は、日本独自の技術として発展してきた。花卉植物を中心に理研ブランドとして21の新品種を市販している。私たちは植物の致死効果や変異効果に対する重イオンビームの影響を精査し、それぞれについて最適な線エネルギー付与(LET: Linear Energy Transfer)があることを発見した。ここでLETとは重イオンビームの細胞中でのイオン化・励起密度に対応する量で単位長さ当たりのエネルギー損失(keV/μm)で表される。また、そのDNA変異を調査したところ、変異誘発に最適なLETでは100 bp(塩基対, base pair)以下の小さな欠失変異がほとんどであるが、致死効果が高いLETでは1 kbpより大きな欠失変異が半分を占めた。一方、分子生物学の技術革新により、全ゲノム解析が身近となった。今後ゲノム情報と変異体を用いた遺伝子機能解析という新領域「Mutagenomics」を推進していく。

## 1. はじめに

理化学研究所(理研)は2011年11月、初のプライベートブランド商品である日本酒「仁科誉」を世に出した。これは、埼玉県との共同研究の成果である清酒酵母を用いて、埼玉県酒造組合の酒蔵が醸した吟醸香の高い日本酒である。理研のある埼玉県は35の酒蔵を持つ全国第6位の酒どころである。理研と埼玉県は、科学技術の振興およびその成果の地域社会への還元などを実施するため、2005年1月に包括的協力協定を締結、仁科加速器研究センター生物照射チームでは、2009年より埼玉県産業技術総合センター(SAITEC)北部研究所と清酒酵母の品種改良研究を開始した。微生物では鉄イオンが変異誘発に有効<sup>1)</sup>なので、埼玉酵母に鉄イオンを照射、SAITECでの発酵試験、小仕込み試験、清酒製造試験を経て最終的に香り高く華やかで味も軽快だった変異株を選抜した。2011年冬、4社の県内酒造場において実地試験に供し、4月ごろより製品はそれぞれの銘柄で販売された。

理研では、1919年に鈴木梅太郎博士が米を使わず防腐剤も要らない合成酒「理研酒」の製造研究に着手し、1923年に工業規模で製造されるようになったという歴史がある。理研酒は今なお健在で、「利久」ブランド(リキュールから命名、1928年から理研ベンチャー「理研化学興業」が販売していた)はアサヒビールが販売している。米不足解消、

食糧危機の回避が目的で理研酒を開発したその時代の主旨には反してしまうが、平成に理研では、埼玉県と「清酒理研酒」プロジェクトを立ち上げた。実地試験にご協力頂いた酒造会社と交渉を重ね、3社からそれぞれの純米吟醸・純米大吟醸・純米本生を統一ブランド「仁科誉」として販売することが決定した。また本変異株は、吟醸用「埼玉G酵母」として頒布され、2012年には使用実績が10社に増加した。

1943年の理研案内によると、仁科研究室では、1937年に完成した第1号サイクロトロンを使った生物学研究として「中性子の生物学的作用の研究、人工放射性物質の医学的応用に関する研究、人工放射性物質を用いて行う生物学上の研究」が行われていた。また、1939年には、サイクロトロンで発生した中性子によるショウジョウバエの突然変異誘発効果を報告している。<sup>2)</sup>「非核物理学分野にもビームタイムを分配する」という伝統は、現代の理研に引き継がれ、私たちはRIビームファクトリー(RIBF)で表1に示した重イオンビームを用いて品種改良技術の高度化研究を推進している。本稿では、品種改良の技術開発から実用化、LETの致死効果や変異効果などへの影響と重イオンビームの生物学利用の今後の展開について紹介する。

## 2. 重イオンビームの変異原としての有効性および実用化

国際連合食糧農業機関(FAO)/国際原子力機関(IAEA)のMutation Variety Databaseに登録される世界の突然変異品種は3,200種にのぼる。変異原として利用されているのは約半数がγ線である。続いてX線、化学変異剤となる。重イオンビームはγ線やX線に比べて、LETが大きいため、低線量で生物効果が高いということが知られていたが、がん治療を目的とした動物研究が中心であった。

理化学研究所加速器施設でも1975年の計画当初からがん治療の基礎実験のため、大気中に置かれた試料に対して

表1 RIBFで植物照射に実績のある重イオンビーム。

核種	エネルギー (GeV)	電荷	水中飛程 (mm)	LET (keV/μm)
<sup>12</sup> C	1.62	6 <sup>+</sup>	39	22.5
<sup>14</sup> N	1.89	7 <sup>+</sup>	33	30.6
<sup>20</sup> Ne	2.70	10 <sup>+</sup>	22	61.5
<sup>40</sup> Ar	3.80	17 <sup>+</sup>	6	280.0
<sup>56</sup> Fe	5.04	24 <sup>+</sup>	3	624.0

\* イノベーション推進センターイオンビーム育種研究チーム兼務

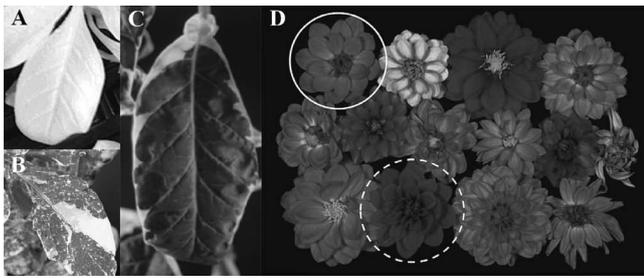


図1 重イオンビーム照射で得られた変異植物例。タバコで見られたアルビノ葉 (A) および斑入り葉 (B, C)。ダリアにおける花型と花色変異 (D)。図中の丸印 (実線) は照射に用いた元品種、丸印 (点線) は新品種。

重イオンビームの照射が可能な生物実験用ビームラインおよび照射室 (E5) を生物学者と物理学者が協力して設計していた。1986年に理研リングサイクロトロン (RRC) が1989年にAVFサイクロトロンが完成し、原子核物理学研究のための重イオン複合加速器施設が本格稼働した。理研では1991年より植物に対する照射実験を開始、1993年より本格的に植物の突然変異誘発に関する研究を展開した。

効率的に変異効果を調査するために、1花当たりの種子数が多く、組織培養法が確立し、栽培や交雑が容易である栽培タバコ (*Nicotiana tabacum*) の受精胚細胞をモデルとした。タバコのめしべには1,000粒の種子ができるため、受精直後に重イオンビームを照射し、1個の始原細胞 (受精胚細胞) が変異すればその個体は変異細胞で構成され、1花照射でも1,000種類の変異が期待できる。また植物では1変異個体から、組織培養技術により無菌的に変異体をクローン増殖することができる。一方、花が咲く日の制御は難しいので、温室いっぱいタバコ約1,600個体を栽培し、6時間ごとに受粉しビームタイムを待った。実験では鉢植えのタバコ植物を照射室に持ち込み、照射野に花を合わせて、窒素またはネオンイオンを照射した。その結果、生存率を低下させない極めて僅かな線量で照射当代に白化 (アルビノ) 個体 (図1. A) など形態異常株が出現すること、受粉30-48時間後のめしべ由来の種子では形態異常株の出現率が非常に高い (18%) ことが判明した。また形態 [斑入り株 (図1. B, C) ・アルビノ ・花色変異体など] や生理形質 (除草剤耐性 ・耐塩性 ・重金属耐性など) 変異体の選抜に成功し、変異原としての有効性を示した。<sup>3)</sup>

$\gamma$ 線やX線での変異選抜は半分の個体が枯死する半致死線量で行うのが常識であった。ところが重イオンビームでは、生存率が低下しない極低線量照射で、高い変異率と広い変異幅を示した。そのため飛来するイオン粒子数が少なく、目的とする遺伝子以外が影響を受けるリスクを低減できる。即ち、変異形質の固定が容易で、目的以外の農業上有益な形質は変異する確率が低いため、戻し交配を行う必要はなく、新品種開発期間の短縮が可能と考えられた。

1996年より重イオンビーム品種改良法による実用化品種育成の可能性を、民間企業・農業試験場・大学などとの多角的な共同研究によって検討した。その結果、1998年

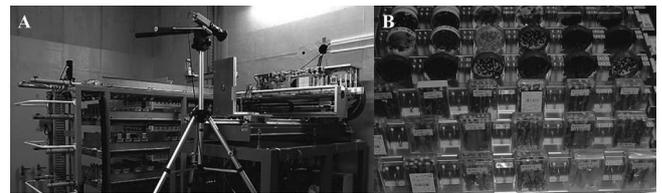


図2 生物自動照射装置 (A) およびカセットに配置したサンプル (B)。(フルカラー口絵参照)

の照射材料より僅か3年で2つの新品種が完成した。即ち、ダリアでは新色 & 大輪化に成功 (図1. D)、2001年秋から広島市での試験販売を開始、パーペナでは種 (たね) を付けない不稔化により花持ちを良くする品種改良に成功、2002年春に商品化した。現在までに不稔パーペナ、新色のベチュニア・ダリア・トレニア・ナデシコ・サクラ・サイネリア、わい性チガヤ・ヒエ・デロスぺルマなど21種類の市販品種を育成した。これらの品種の一部は日本のみならず、アメリカ、ヨーロッパでも販売され好評を博している。培養体や挿し穂を照射サンプルとする花卉植物の例では、目的とする変異のみが生じ、他の農業上有益な形質は変異していなかったためクローン花苗そのものが商品となり、通常5年程度を要する新品種開発期間が半分に短縮された。

研究交流と技術普及のため2001年に日本育種学会に「サイクロトロンミュータジェネシス研究会」を設立し、2003年にシンポジウムを開催、2008年に日本植物細胞分子生物学会誌 (Plant Biotechnology) 特集号「Innovative Technologies in Flower Breeding」(25号1巻) を刊行等により、1999年度に24団体だったユーザーは、2011年度には国内156団体、海外15団体となった。2003-2004年にユーザー増加の対応とLETの精密制御による照射の効率化を図るために、生物自動照射装置として「レンジシフター」と自動試料交換装置を製作した (図2. A)。レンジシフターは種々の厚さのアルミ製エネルギー減衰板にビームを通し、ビームエネルギーを減少することによりLETを選択することができる。乾燥種子・吸水種子・培養体・培養細胞・穂木・挿し穂などの照射サンプルはそれぞれに適した試料容器に収め、その種類ごとに製作したカセットにセットし (図2. B)、カセットは自動試料交換装置のステージ上に設置する。これらの装置開発によって1時間に最大30個であった照射個数は50個に増加した。

### 3. LETの致死効果や変異効果に与える影響

放射線が照射されると細胞核内のDNAに損傷をきたす。同じ線量を照射した場合でも、X線や $\gamma$ 線のような低LET放射線と重イオンビームのような高LET放射線では生物の反応が異なる。放射線によって生じるDNA損傷はモンテカルロ法によって推定されている。形成されるDNAの一本鎖切断 (SSB: Single Strand Break) と二本鎖切断 (DSB: Double Strand Break) 数をシミュレーションにより算出す

ると、 $\gamma$ 線はSSBが多く稀にDSBが生じるのに対して、重イオンビームはSSBが減少しDSBが高頻度で起こり、その割合はLETに依存して大きくなる。<sup>4)</sup> DSBは、SSBが近接した領域に起こることで形成される細胞にとって重篤なDNA損傷であり、致死や変異に結び付く。低LET放射線では、二次的に発生したラジカルが細胞核いっばいに広がる。重イオンビームはイオンの飛程に沿って高密度の電離領域を形成し、局所的に密なDNA損傷を誘発する。この空間的特性も、低LET放射線と高LET放射線によるDNA損傷の違いとなって現れていると考えられる。例えば、動物細胞のヒポキサンチンリボシル転移酵素遺伝子座変異では、全エクソン(遺伝子のうち、タンパク質合成の情報を持つDNA配列)領域が欠失する割合は、 $\gamma$ 線(<sup>137</sup>Cs)では約40%であるのに対して、炭素ビーム(核子当たり135 MeV(以後135 MeV/uと表記)、LET 68-124 keV/ $\mu$ m)では、約95-100%と高くなった。<sup>5)</sup> そこで、遺伝子破壊領域の大きさがLETに依存するかを簡便に検討するため、マーカー遺伝子を導入した根粒菌を用いて、効率的に変異株を選抜し、マーカー遺伝子の破壊領域を解析した。その結果、1) 炭素(135 MeV/u, 23-40 keV/ $\mu$ m)より鉄(90 MeV/u, 640 keV/ $\mu$ m)でDNAの塩基が失われる変異である欠失変異の出現率が高まる、2) 炭素より鉄の欠失領域は大きくなる、3) 変異の入りやすい場所があるということが判明した。<sup>1)</sup> 一方、動物細胞で最も低線量で致死効果があるのは100 keV/ $\mu$ mである<sup>5)</sup>が、ソバ<sup>6)</sup>やシロイヌナズナ<sup>7)</sup>では300 keV/ $\mu$ mであった。そこで、変異誘発にも適正なLETがあるかを検討したところ、シロイヌナズナ乾燥種子照射では30 keV/ $\mu$ m<sup>7)</sup>で、イネ吸水種子照射では50-70 keV/ $\mu$ mで、変異率が最も高かった。シロイヌナズナの変異率(同定した変異体数/栽培個体数の千分率)を同じ形態変異体(*glabrous*および*elongated hypocotyls*)を指標に他の変異原と比較すると、X線照射では0.32%、速中性子線照射では0.84%、エチルメタンスルホン酸処理では0.87%であり、<sup>8)</sup>炭素イオン(30 keV/ $\mu$ m)照射では0.78%であった。<sup>9)</sup>最も高い変異率を示し変異誘発に最適なLETであるLETmax照射では、変異率が高いとされる化学変異剤と同様の変異率が得られた。

#### 4. 重イオンビームが誘発するDNA変異

生物はDNA損傷に対応する様々な修復機構を備えており、迅速に損傷修復を行う。例えばDSBの修復では間違いの起こらない相同組換え機構によって修復を行うが、この経路は細胞増殖の限られた時期にしか利用できない。相同組換えが利用できない時期には誤りがちな経路である非同末端結合による修復が行われることから、全ての損傷を正確に修復することができず突然変異を生じる。<sup>10)</sup>

植物に重イオンビームを照射した後に見られるDNA変異の例を図3に示す。DNAはA, T, G, Cの4つの塩基の配列によって遺伝情報が構成されている。塩基配列の一部

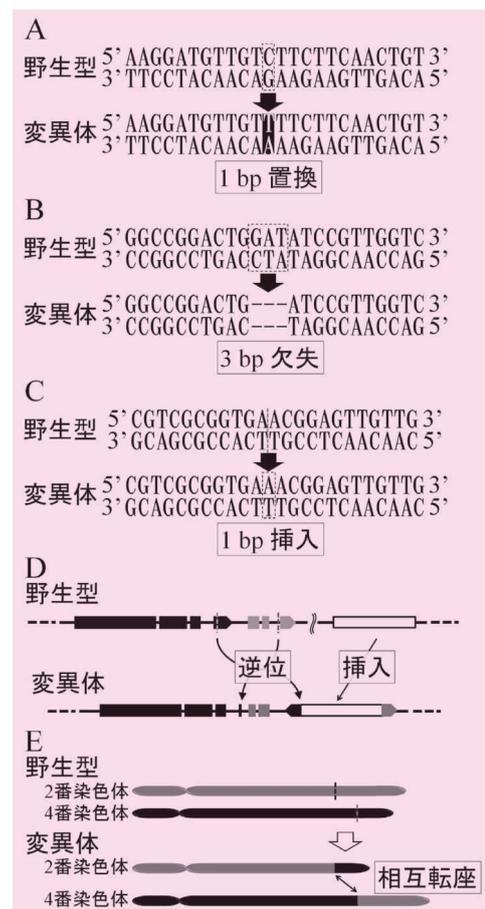


図3 重イオンビーム照射で誘発された突然変異例。小規模な変異として数bpの塩基置換(A)や欠失(B)、挿入(C)が見られる。また複雑な変異として数百から数千bpからなるDNA断片の逆位や挿入(D)、染色体レベルで起こる相互転座(E)が見られる。

分が別の塩基に置き換わる塩基置換(図3. A)や欠失変異(図3. B)、塩基が加えられる挿入変異(図3. C)が生じることで遺伝情報の一部が書き換えられる。さらに、数kbのDNA断片が逆向きにつながり逆位もしくは挿入される変異(図3. D)、染色体レベルでの構造変化も生じることがある(図3. E)。これらの変異の中で、重イオンビームは欠失変異を主に誘発する。<sup>5,11)</sup>

そこで、重イオンビームのLETが植物に誘発するDNA変異の種類や欠失する大きさに対する影響を調査した。シロイヌナズナ乾燥種子に炭素イオン22.5 keV/ $\mu$ mおよび30.0 keV/ $\mu$ mを照射し、誘発される変異を解析すると、そのほとんどが、数bpから数十bpの欠失変異であった。<sup>9)</sup>101-124 keV/ $\mu$ m炭素イオン照射<sup>11)</sup>および致死効果の高い290 keV/ $\mu$ m炭素およびアルゴンイオン照射<sup>12)</sup>での変異解析結果と比較すると、LET 30.0 keV/ $\mu$ mから290 keV/ $\mu$ mの範囲ではLETの上昇に伴い大きな欠失規模の割合が高くなった(図4)。

LETが変異誘発率およびDNA変異規模に与える影響が明らかになったことから、LET制御により目的に合わせた重イオンビームの使い分けという考え方が可能となった。まず30.0 keV/ $\mu$ m照射は非常に高い変異率を示すことか

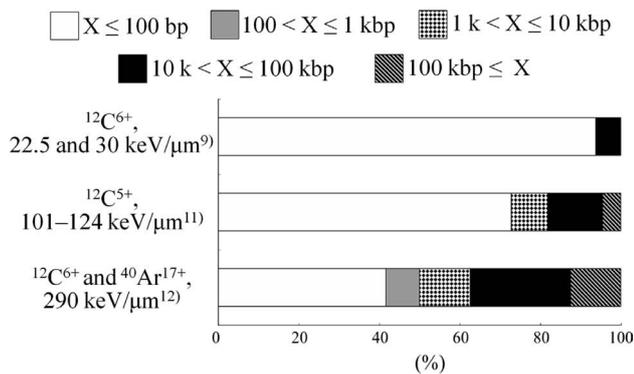


図4 LETが異なる重イオンビーム照射で誘発された欠失変異の大きさの比較。欠失変異を大きさごとにグループ分けし、全欠失数に対する割合で示した。

ら、<sup>7,9)</sup> 品種改良に有効である。また誘発される変異は主に小規模ではあるが、1つの遺伝子を破壊するには十分であり、標的とする遺伝子の機能欠損変異体を効率的に得ることができ、逆遺伝学に利用できる。290 keV/μm照射では巨大な欠失、特に数 kbp から数十 kbp の欠失が効率的に得られる。<sup>12)</sup> シロイヌナズナでは全遺伝子の10%程度が機能の重複した遺伝子が直列に反復するタンDEM重複遺伝子で構成される。<sup>13)</sup> タンDEM重複遺伝子の機能解析にはそれらの遺伝子機能を同時に欠損させる必要があり、シロイヌナズナではゲノム情報からおおよそ5-10 kbp の欠失変異が必要である。<sup>14)</sup> これまでにこのサイズの欠失変異を効率的に得る手法は存在しなかったことから、290 keV/μm照射はタンDEM重複遺伝子解析に適する新たな変異原として有望である。

## 5. 新領域ミュータジェノミクス (Mutagenomics) の確立

数年前は、遺伝子同定に突然変異体を使おうとゲノム科学者に提案しても、どの遺伝子が壊れたのか解析する方法が無いから使えないと言われた。この問題が近年、分子生物学技術の革新によって解決されようとしている(表2)。まず、ゲノム情報すなわち1つの生物が持つ全てのDNA配列情報が色々な生物種で明らかになりつつあり、次に配列が判れば全遺伝子を解析する方法が身近になってきたということである。

1988年に始まり2004年に終了したヒトゲノム計画は

DNA配列解析の技術革新をもたらした。当初、1台の解析装置が1日で読めるDNAは数 kbpであったものが、現在では60 Gbpとなり、ヒトの全ゲノム約3.1 Gbpを2日[短い断片(リード)をつなぐためののりしろが必要で正確に配列を並べるためにはゲノムサイズの30倍程度を読む必要がある]で解読できるようになった。同様にシロイヌナズナ120 Mbpでは1.6時間、イネ約330 Mbpでは4.8時間で解読できる。ところが、読み込んだDNA配列データ量は20-60 GBとなり、アセンブルに時間がかかる。現在植物のゲノム解析が終了しているのは、シロイヌナズナ(2000)・イネ(2005)・ポプラ(2006)・ブドウ(2007)・パパイヤ(2008)・トウモロコシ(2009)、キュウリ(2009)・ダイズ(2010)・モモ(2011)等、20種程度である。

北京ゲノムセンター(BGI)は2010年にジャイアントパンダのゲノム解読に成功したことで有名である。<sup>15)</sup> イルミナ社のHiSeq2000(リード長100 bp)を137台、ABI社のSoLid(リード長35-75 bp)を27台保有し、データ保存・処理のための102T flopsのピーク計算速度、20 TBのメモリ容量、10 PBのストレージを誇るスーパーコンピューティングセンターを複数保有する世界最大のゲノム解析センターである。中国本土に7つ、アメリカ・デンマーク・香港にも研究センターを持つ。BGIは次の2年間で1,000種の動植物のゲノム解析を終えることを目標とした1,000 Plant and Animal Genomes Projectを開始、現在植物ではジャガイモ・ラン・キマメの解析が進行している。決定した配列情報は論文発表後、国際的データベースGenbankで公開される。同プログラムは共同研究提案型であり、資料提供や資金援助を広く世界中の研究者に求めている。目標通りにプロジェクトが実現すれば数年後には、ほぼすべての有用作物でゲノム情報を活用した遺伝子同定が可能になるだろう。

ゲノム情報が解析できたからといって全遺伝子機能が判明するわけではない。タンパク質に翻訳できる配列の特徴が決まっているので、それを指標に遺伝子領域を推定すると、シロイヌナズナで遺伝子数は25,000個、イネで37,000個となるが、そのうち機能が解明しているものは僅か20%である。今後、突然変異体は遺伝子機能解析の強力なツールとなる。即ち様々な作物で突然変異体があれば、ゲノム情報を使って遺伝子機能解析ができる、Mutagenomicsの

表2 変異遺伝子検出法一覧。

	標的	解析速度*	ゲノム情報	検出可能変異	価格*
PCR+シーケンス	任意1遺伝子	2日	目的遺伝子情報のみ必要	全変異	数千円
HRM	任意1遺伝子	2時間	目的遺伝子情報のみ必要	全変異	数千円
全遺伝子タイリングアレイ	全遺伝子	1ヶ月	必要	200 bp以上の欠失	数十万円
全遺伝子シーケンス	全遺伝子	3ヶ月	必要	全変異	数百万円
全ゲノムシーケンス	全ゲノム	半年	不要**	全変異	数百~数千万円

\* 1サンプル当たりのおおよその値

\*\* 正常株と変異株とを両方シーケンスし比較すればゲノム情報は不要

・PCR (Polimerase Chain Reaction): DNAのある一部分だけを選択的に増幅する技術。増幅したDNAをシーケンサーで解読すれば変異が検出できる。

・HRM (High Resolution Melting): PCRで増幅した2本鎖DNAの溶液温度を徐々に上昇させ、1本鎖DNAに変性するタイミングを測定する手法。DNAに変異があると変性のタイミングがずれる現象を利用して変異を検出する。従来の電気泳動法やシーケンス解析よりも大幅な時間短縮を実現。

時代を迎えたのである。実際に、イネ・トマト・コムギなどでは、重イオンビーム照射を用いて突然変異体の大規模集団(ミュータントパネル)の整備が進んでいる。あらかじめ突然変異体を整備しておき、研究者は興味のある変異体をいつでも選んで解析できるという仕組みだ。一方、モデル植物であるシロイヌナズナでは、1遺伝子解析にとどまらず関連した遺伝子ネットワークを明らかにするニーズが増加している。ゲノム情報を活用すれば、突然変異体で発現量が変動する遺伝子群(Transcriptome)を調べることができる。また突然変異体にさらに変異を誘発して得た二重・三重変異体を解析すると遺伝子の発現制御や相互作用を調べることができる。このように、Mutagenomicsは、今後さらに発展する新領域といえる。

## 6. おわりに

イオンビームは先行するがん治療技術の有効性が世界的に認められ、日本でもがん治療を行っている陽子線治療施設は6カ所、重粒子線治療施設は3カ所あり、さらにはがん治療用の加速器施設の建設が続いている。これまで、イオンビームの植物・微生物研究は理化学研究所仁科加速器研究センター、日本原子力研究開発機構高崎量子応用研究所、若狭湾エネルギー研究センターで行われてきたが、がん治療の先導的加速器施設である放射線医学総合研究所が、植物研究を行っているように、がん治療用の加速器施設では工夫すれば植物照射は可能である。挿し穂や培養体などを照射サンプルとする場合、試料を傷つけない・寒天培地を崩さないなど移送に細心の注意を要するため、実験施設への実験者によるスピーディーな搬入および搬出が望ましい。日本全国に分布しているユーザーのためには、近場に使用可能な加速器施設があることが理想であり、植物利用できる施設が増えることを期待する。

2006年末に稼働したRIBFでは、既存のRRCを入射器としこれに続く3台の新設リングサイクロトロンを用いて、ウランに到る全元素を核子当たり345 MeVまで加速して、毎秒 $6 \times 10^{12}$ 個のビーム強度で供給する予定である。微生物の品種改良は鉄イオンが有効であることが示すように生物学研究にもさらに高エネルギービームが必要である。そこで、私たちは使用可能な重イオンビームの核種やエネルギー領域を増大することを目的に、E5実験室への戻しビームライン建設を計画している。重イオンビームによる品種改良法は、本格的な実験が開始され約20年が経ち、日本独自の技術として発展してきた。<sup>16)</sup> 新品種育成は民間企業を中心に、花卉植物が先行していたが、最近では農林水産省独立行政法人や地方農業試験場を中心にイネ、ソバ、<sup>17)</sup> ノリ、<sup>18)</sup> 野菜などでも有用な変異体が育成され始めた。また分子生物学分野の技術革新により、全ゲノム解析が身近になってきたため、基礎生物学分野でも遺伝子機能解析のための変異体作成や変異体のバイオリソースとしての利用などユーザーが拡大している。これらの分野の発展

に寄与し、核種・LET・線量など物理要因のDNA変異領域に対する影響をさらに精査し、重イオンビームによる変異誘発機構を解明していきたい。

## 参考文献

- 1) H. Ichida, *et al.*: *Mutat. Res. Fundam. Mol. Mech. Mutagen.* **639** (2008) 101.
- 2) Y. Nishina and D. Moriawaki: *Sci. Paper. Inst. Phys. Chem. Res.* **36** (1939) 419.
- 3) T. Abe, *et al.*: *Gamma Field Symp.* **39** (2000) 45.
- 4) 渡邊立子: *放射線科学* **89** (2010) 13.
- 5) M. Suzuki, *et al.*: *Adv. Space Res.* **18** (1996) 127.
- 6) T. Morishita, *et al.*: *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res.* **206** (2003) 565.
- 7) Y. Kazama, *et al.*: *Plant Biotech.* **25** (2008) 113.
- 8) M. Koornneef, *et al.*: *Mutat. Res.* **93** (1982) 109.
- 9) Y. Kazama, *et al.*: *BMC Plant Biol.* **11** (2011) 161.
- 10) A. Ciccina and S. J. Elledge: *Mol. Cell* **40** (2010) 179.
- 11) N. Shikazono, *et al.*: *J. Exp. Bot.* **56** (2005) 587.
- 12) T. Hirano, *et al.*: *Mutat. Res. Fundam. Mol. Mech. Mutagen.* **735** (2012) 19.
- 13) C. Rizzon, L. Ponger and B. S. Gaut: *PLoS Comput. Biol.* **2** (2006) e115.
- 14) The Arabidopsis Genome Initiative: *Nature* **408** (2000) 796.
- 15) R. Li, *et al.*: *Nature* **463** (2010) 311.
- 16) T. Abe, *et al.*: C09 Ion beam radiation mutagenesis in Plant Mutation Breeding and Biotechnology, The Joint FAO/IAEA Programme, Q. Y. Shu (Ed.), CABI, Oxfordshire, UK, pp. 99-106, in press.
- 17) 森下敏和, 他: *育種学研究* **12** (2010) 39.
- 18) K. Niwa, *et al.*: *Aquaculture* **314** (2011) 182.

## 非会員筆者の紹介

阿部知子氏: 東北大学院博士課程修了後、理研研究員を経て、現在仁科センター応用研究開発室長兼イノベーション推進センターチームリーダー。専門は植物生理学、育種学。

平野智也氏: 1977年千葉生まれ。2006年千葉大学院博士課程修了後、かずさDNA研究所プロジェクト研究員、北大学術研究員を経て、現在理研イノベーション推進センター研究員。専門は植物遺伝・育種学、植物細胞工学。

風間裕介氏: 1977年東京生まれ。2006年東大院博士課程修了後、理研仁科センター基礎特研を経て、現在イノベーション推進センター研究員。2009年日本植物学会賞若手奨励賞受賞。専門は植物分子生物学。

(2012年2月28日原稿受付)

## Heavy-Ion Beam Mutagenesis: From Plant Breeding to Gene Function Analysis

Tomoko Abe, Tomonari Hirano and Yusuke Kazama

abstract: At RIKEN, we have developed a unique technology for mutation induction using heavy-ion beams from particle accelerators at the RI Beam Factory (RIBF). This development was achieved through an efficient synergistic link between agricultural science and accelerator physics. At relatively low doses, ion beams induce mutations at a high rate without severely inhibiting growth. The ion beam is a highly-efficient tool for improving crops through mutation breeding. We use high-throughput DNA sequencing techniques such as next-generation sequence instruments and microarray technologies for analysis of gene mutations. Mutants have become more and more useful and important in modern genetic studies, enabling the discovery of genes that control important traits, and revealing the functions and mechanisms underlying their operations. The discovery of genes using mutants may lead to the emergence of a new field in biology, 'Mutagenomics'.

# 第一原理計算で探るコヒーレントフォノンの生成機構

篠原 康 (筑波大学大学院数理物質科学研究科 305-8571 つくば市天王台 1-1-1 )

乙部 智仁 (日本原子力研究開発機構関西光科学研究所 619-0215 木津川市梅見台 8-1-7 )

岩田 潤一 (東京大学大学院工学系研究科 113-8656 東京都文京区本郷 7-3-1 )

矢花 一浩 (筑波大学計算科学研究センター 305-8577 つくば市天王台 1-1-1 )

コヒーレントフォノンは、フォノンの振動周期よりも短いパルスレーザー光を固体に照射することで生じる、マクロな空間スケールで位相のそろった原子の振動運動であり、その生成機構に関していくつかのモデルが提案されている。著者らは、パルス光の照射により固体中に生じるフェムト秒スケールの電子と原子核の量子ダイナミクスに対し、時間依存密度汎関数理論に基づき非経験的に記述する計算方法の開発を行っている。この方法を Si 結晶とパルス光の相互作用に適用することにより、コヒーレントフォノンの生成機構を定量的に明らかにすることができた。

## 1. はじめに

光科学の多様なフロンティアの一つに、超短パルスレーザーを用いた超高速分光がある。レーザー技術の発展により、計測可能な時間分解能はフェムト秒 ( $10^{-15}$  s) からアト秒 ( $10^{-18}$  s) に至っている。分子や固体は可視から紫外域に吸収を持つが、その光の振動周期は数フェムト秒以下であり、フェムト秒パルスの光電場はそのパルス長の中に数回しか振動を持たない。このような超短パルス光を用いることで、原子の運動はもとよりアト秒スケールの電子ダイナミクスを直接実時間で計測することが可能となってきている。<sup>1)</sup> 量子系を記述する理論について考えると、固体の電子状態に関しては、これまで時間と空間の自由度を変数分離し振動数領域で記述するものがほとんどであった。実時間計測が著しい発展を遂げている中で、フェムト秒以下の時間領域で起こる電子と原子核のダイナミクスを記述する理論の発展が求められている。

コヒーレントフォノンは、数フェムト秒程度のパルス光を固体に照射した際に見出される、マクロな空間スケールで原子が位相を揃えて一斉に運動を始める現象である。<sup>2-4)</sup> 実験では、直接原子の運動を捉えているわけではなく、誘電率など結晶のバルクな物理量の時間変調を観察している。この時間変調の振動数が  $\Gamma$  点の光学フォノンの振動数と一致することから、その起源が原子の振動にあると考えられている。

パルス光は、まず固体中の電子を励起し、励起された電子が原子核に力を及ぼすことで原子核の運動を引き起こす。このため、コヒーレントフォノン生成を理論的に記述するには、光・電子・原子核の運動を同時に扱うことが必要になる。これまでいくつかの現象論的なモデルが提案されているが、それらはみな格子振動の基準振動座標  $q$  に対するニュートンの運動方程式

$$\frac{d^2q}{dt^2} + \Omega^2q = F(t) \quad (1)$$

に帰着するものとなっている。すなわち、入射したパルス光の情報から、電子の励起を経て基準振動に働く古典力学

的な力  $F(t)$  をどのように得るかが問題とされている。この意味で、「フォノン」という名前に反し、コヒーレントフォノン自身の量子性は問題とされておらず、むしろ電子の量子論的な運動から原子核の古典力学的な運動を導くことが問題とされている。本稿は、このコヒーレントフォノンの生成機構に対し、量子論に基づく第一原理計算を用いた最近の研究を報告するものである。

物質の構造やダイナミクスを理解する上で、量子論に基づく第一原理計算が果たす役割はますます重要なものとなっている。計算物質科学における研究の中核をなすのが密度汎関数理論であるが、これは電子基底状態を対象とするので光による電子励起過程を記述することはできない。電子の励起状態や量子ダイナミクスを記述するため、時間領域に拡張された時間依存密度汎関数理論 (TDDFT = Time-Dependent Density Functional Theory)<sup>5)</sup> が発展している。<sup>6,7)</sup> 我々は最近この TDDFT に基づいて、パルス光が物質に照射した際に生じる電子のダイナミクスを実時間・実空間で記述し、電子の励起が格子に及ぼす力を求めるアプローチを発展させた。これは、固体の電子状態を記述するバンド計算を、フェムト秒の時間スケールで起こる電子ダイナミクスを記述できるように拡張したものである。この方法により、パルス光が引き起こす電子と格子のダイナミクスを、経験的なパラメータを用いることなく定量的に調べることが可能となった。

密度汎関数理論は (時間依存の場合を含めて)、経験的なパラメータを含まないという点で非経験的であり、第一原理計算と呼ばれる。しかし、実際の応用にあたっては大胆な近似を用いるので、それが正しく現象を記述するものであるか否かを慎重に判断することが必要となる場合がある。本稿で述べる計算では、後に述べるように、電子励起が起きている物質中で原子核に働く力をどのように定義すべきかというところに、一筋縄ではいかない点がある。このため、実験結果との比較を通じて理論と計算の有用性を検証することが大切になる。

以下では、コヒーレントフォノンの生成機構に関するこ

れまでのモデルを説明した後、時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理計算法を説明する。そして、光が誘起する固体中の電子ダイナミクスの様相を示し、計算結果からSi結晶におけるコヒーレントフォノン生成がどのように理解されるかを紹介する。最後に、電子と原子核の量子ダイナミクス計算の現状と課題、そして今後の展望を述べたい。

## 2. コヒーレントフォノン生成の2つの機構

コヒーレントフォノンは、半導体や金属など様々な物質で見出されているが、その生成機構は物質の種類やフォノンのモード、そして光の振動数に強く依存することが知られている。代表的な2つのモデルを図1に示す。コヒーレントフォノンの生成機構は多くの場合、これらの2つのモデルとその組み合わせにより議論されている。<sup>8-10)</sup>

それぞれを簡単に紹介しよう。

### 瞬間誘導ラマン型 (非共鳴 ISRS=Nonresonant Impulsive Stimulated Raman Scattering<sup>8)</sup>)

光電場と物質中の電子の相互作用を摂動論で扱うと、原子に対するシュタルク効果と同じように物質のエネルギーは2次のエネルギーの変化を示す。格子の基準振動座標  $q$  に依存した線形感受率  $\chi(q)$  を用いてエネルギー変化は、 $E(q, \mathcal{E}) = E(q, 0) - (1/2)\chi(q)|\mathcal{E}(t)|^2$  で表される。このエネルギーを  $q$  で微分すると、基準座標に対する力が得られる。

$$F(t) = (1/2)(d\chi/dq)|\mathcal{E}(t)|^2 \quad (2)$$

ここに現れる  $d\chi/dq$  は、固体による光の非弾性散乱過程で

あるラマン散乱を記述するテンソルである。このため、この機構によるコヒーレントフォノンの生成はラマン散乱と同一の電子格子相互作用から生じており、ラマン散乱が連続光によって起こる定常的な現象であるのに対し、コヒーレントフォノンは瞬間的なパルス光により生じるものと捉えることができる。実際、コヒーレントフォノンとラマン散乱の選択則も同一である。この機構では、原子核に対して働く力はパルス光が照射している間だけ撃力的に働き、基準振動座標は  $\sin(\Omega t)$  型の振動を与える。パルス光の振動数がエネルギーギャップよりも小さく、次に述べる実励起が起こらない場合に重要となると考えられている。

### 実励起型 (DECP=Displacive Excitation of Coherent Phonon<sup>9)</sup>, 共鳴 ISRS<sup>10)</sup>)

光の振動数がエネルギーギャップを越えた場合やエネルギーギャップを持たない金属の場合は、パルス光により電子励起が起こる。この励起がパルス光が通り過ぎた後も持続すれば、電子励起により基底状態から電子密度が変化するために原子核の平衡位置も変化するだろう。これが実励起型の機構である。パルス光が照射された直後は、原子核は基底状態での平衡位置にありそこから新たな平衡位置への振動が始まるので、基準振動座標は  $\cos(\Omega t)$  型の振る舞いをする。原子核に働く力は、光により励起された電子密度(キャリア密度)  $n_c$  に比例すると考えられる。電子励起が1次の摂動で記述されるとすれば、励起電子密度は電場の2乗に比例するので、

$$F(t) \propto n_c(t) \propto \int^t |\mathcal{E}(t')|^2 dt' \quad (3)$$

となる。

以下ではSi結晶を例にとり、コヒーレントフォノンの生成機構に対する第一原理計算の結果を紹介する。Si結晶に対する実験ではフォノンの位相に関する情報から、振動数が3.05 eV<sup>11)</sup> の場合には実励起型、1.55 eV<sup>12, 13)</sup> では瞬間ラマン型で説明される振る舞いが見出されている。しかし、力の大きさや向き、そして振動の振幅の絶対値を測定から求めることはできていない。BiやSbなどの半金属では複数の光学フォノンモードに対してコヒーレントフォノンが見出され、モードごとに異なる振る舞いが見られるが、その原因は未知の部分が多い。<sup>14, 15)</sup> またこれらの物質では極めて大振幅なコヒーレントフォノンが見出されている。TDDFTに基づく第一原理計算は、瞬間ラマン型・実励起型といった生成機構の解明に加え、コヒーレントフォノンの振幅や位相の振動数・モード依存性を調べるのに有用であり、さらに高強度なパルスによる非線形性が著しい現象にも有効となるため、強力な解析手段となることが期待できる。

## 3. 電子・核ダイナミクス第一原理計算の枠組み

時間依存密度汎関数理論(TDDFT)は、電子励起や光照射による電子のダイナミクスを扱うのに適した理論として

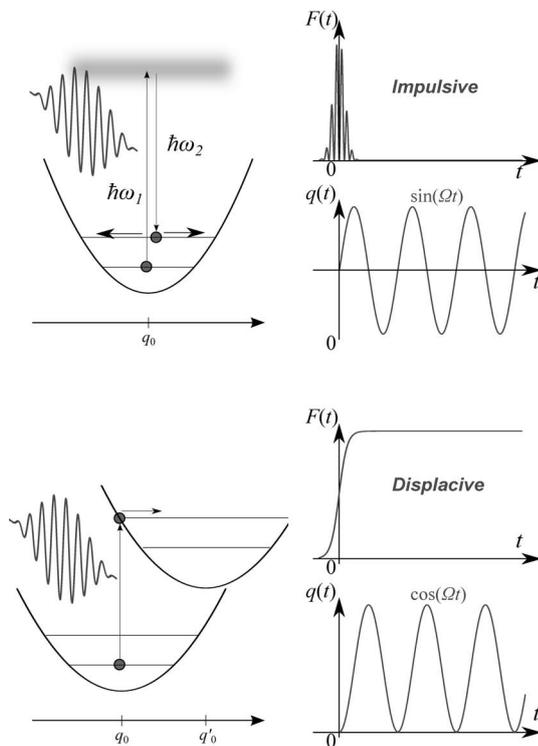


図1 瞬間誘導ラマン型機構で格子振動が励起される様子(左上)と、基準振動座標に働く力とその時間変化(右上)。実励起型機構で格子振動が励起される様子(左下)と、基準振動座標に働く力とその時間変化(右下)。

80年代以降発展してきた。90年代の後半からは、線形応答理論と組み合わせたTDDFTが分子の電子励起を記述する理論として用いられ、大きな成功を収めている。この線形応答TDDFTでは、時間とともに変化する電子ダイナミクスを直接計算するわけではなく、多くの場合時間と空間の変数に対して変数分離を行い、励起エネルギーに関する固有値問題に焼き直して計算がなされている。これに対して筆者らは、実時間で直接電子のダイナミクスを計算する第一原理シミュレーション法を発展させてきた。<sup>16-20)</sup> この枠組みを用いると、弱い光が入射する場合には線形応答TDDFTと等価な情報が得られるとともに、パルス光による時間領域での応答や、強い光電場による電子の非線形ダイナミクスを記述することが可能となる。

結晶の単位胞のサイズや、光により引き起こされる電子ダイナミクスの空間スケールは、nm程度かそれ以下である。一方レーザー光の波長は $\mu\text{m}$ 程度であり、固体中の電子ダイナミクスを考える場合も原子や分子の場合と同様に双極場近似(空間の各点で一様な電場が働くと考え)が有効である。しかし、時間とともに変化する一様な電場を、ポテンシャル $V=e\mathcal{E}(t)\cdot\mathbf{r}$ を用いて表すことにすると、このポテンシャルを加えたハミルトニアンは結晶格子に対する周期性を失い、バンド計算の基盤となるブロッホの定理が成り立たなくなってしまう。この問題は、電磁ポテンシャルに対するゲージの取り方を変えると克服することができる。電場 $\mathcal{E}(t)$ を、時間だけを変数に持つベクトルポテンシャル $A(t)=-c\int^t dt'\mathcal{E}(t')$ を用いて表すことにすれば、周期的なハミルトニアンを得ることができるのである。結局TDDFTによる電子軌道の時間発展は、次の時間依存コーン・シャム方程式で記述される。

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi_{nk}(t)=\left\{\frac{1}{2m}\left(\mathbf{p}+\frac{e}{c}\mathbf{A}(t)\right)^2+V[\rho(t)]\right\}\psi_{nk}(t). \quad (4)$$

ここで、 $V[\rho]$ は電子に働くポテンシャルであり、原子核や他の電子からのクーロンポテンシャルと相関交換ポテンシャルからなる。電子密度の時間変化は、 $\rho=\sum_{nk}|\psi_{nk}(t)|^2$ で得られる。実際の計算では、波動関数の表示、電子とイオンの相互作用の扱い、ベクトルポテンシャルに対する境界条件の設定などを考えることが必要になるが、これらについては文献17を参考にしたい。

(4)式は、固体のバンド計算を時間変化する光電場中の電子ダイナミクスに拡張したものと考えることができる。これを用いてパルス光により生じる電子ダイナミクスの第一原理計算が可能となる。次のステップは、原子核に働く力の評価である。我々は、各時刻での原子核と電子の密度分布から力を求める次の表式を用いることにする。

$$\mathbf{F}_a(t)=-\sum_{n,k}\left\langle\psi_{nk}(t)\left|\frac{\partial\hat{H}}{\partial\mathbf{R}_a}\right|\psi_{nk}(t)\right\rangle. \quad (5)$$

ここで $\mathbf{R}_a$ は $a$ 番目の原子核の座標を表す。電子励起を伴う過程で電子を量子論で、原子核の運動を古典論で同時に記述する場合に、原子核に働く力をどのように求めるかは、

実は大変難しい問題を含んでいる。孤立した分子の場合は、電子励起状態毎に決まるポテンシャルエネルギー面の上で原子核の運動を考え、異なるポテンシャル面への飛び移り(ホッピング)を考慮するという考え方が妥当になる。一方、固体では電子励起状態は連続スペクトルであるから、そもそも励起状態毎にポテンシャルエネルギー面を定義することができない。このような状況には、(5)式は妥当なものと考えられるのである。

#### 4. 光が誘起する電子ダイナミクス

以下では、Si結晶に直線偏光のパルス光が照射した場合の計算を示していく。図2に、Si結晶における原子配置とコヒーレントフォノンの概略を示す。左下に示したSiの単位胞で、 $[110]$ と平行に直線偏光した光電場を照射すると、 $[001]$ 方向の光学フォノンが励起される。左下図で黒枠で示された $(1\bar{1}0)$ 面におけるこの光学フォノンの基準振動モードの様子を、図2の上部に示している。この図の矢

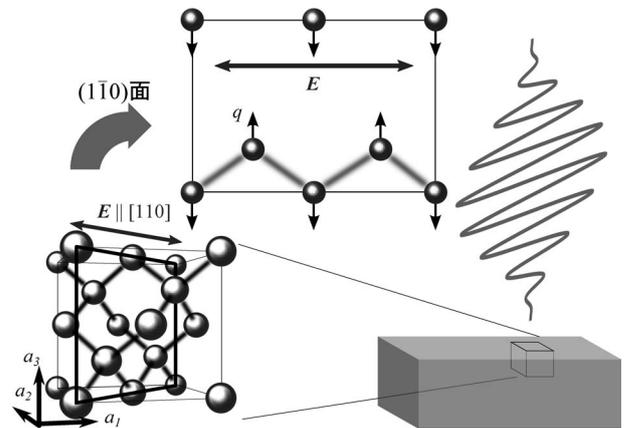


図2 Si結晶の原子配置と、パルスレーザーが照射した際に原子核に働く力。左下に、Si結晶の単位胞と電場の偏光方向が示されている。上部に、単位胞の $(1\bar{1}0)$ 断面、電場の偏光方向、光学フォノンの基準振動モードが示されている。(フルカラー口絵参照)

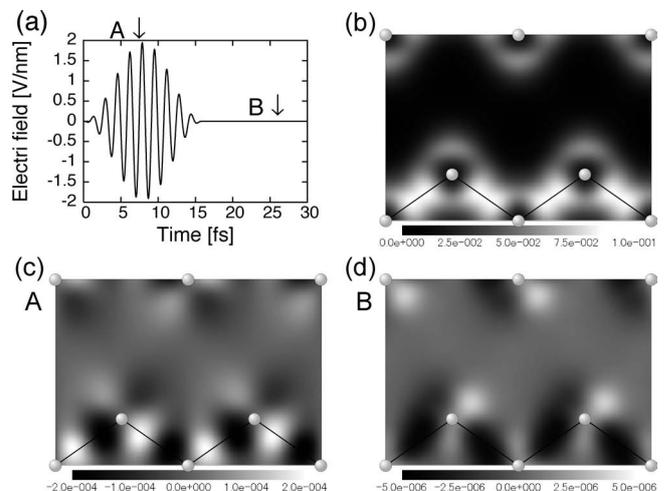


図3 照射電場の時間波形と、Si結晶の $(1\bar{1}0)$ 断面における電子の密度分布。<sup>19)</sup> (a)は中心振動数2.5 eV、最大強度が $10^{12}$  W/cm<sup>2</sup>の照射電場を示している。(b)は基底状態における電子の密度分布、(c)及び(d)はそれぞれパルス電場が最大の時((a)のAの時刻)と電場照射後((a)のBの時刻)での電子の密度分布の基底状態からの差。(フルカラー口絵参照)

印の方向を以下では基準座標  $q$  の正方向にとる。

まず始めに、パルス光の照射により生じる電子ダイナミクスの様子を示そう。図3(b)は、電子基底状態における(110)面での電子密度を表している。原子の位置は白丸で、原子を結ぶ共有結合ボンドが直線で示されている。白い部分は電子密度が高いことを示しており、図から原子を結ぶボンドの位置に電子が局在している様子が見られる。図3(c)及び(d)は、図3(a)に示した2つの時刻AとBにおける電子密度の基底状態からの変化を示している。白い部分は基底状態から電子密度が増加していることを、黒い部分は減少していることを示す。図3(c)に示すAの時刻では、電子密度の変化は、主にボンドの部分で起きている。Si原子のボンドの中間の位置を境に、電子密度の増加と減少が起きており、これはボンドにある電子が2つのSi原子の間をボンドと平行な向きに振動していることを意味しており、結合性軌道から反結合性軌道への励起が起きていることがわかる。一方、パルス光が通過した後の時刻であるBでは、ボンド領域から電子が減少し、励起した電子はボンド外の空間に広がっている。このように電子励起の振る舞いは、パルス光が照射中の過渡的な励起とパルス光が通過した後の実励起で、その様相が大きく異なっている。このように、TDDFTに基づく第一原理計算を用いると、光電場で生じる電子のフェムト秒スケールのダイナミクスを実時間・実空間で記述することが可能であり、光が電子、そして格子に及ぼす影響を直感的に理解する上で極めて有効な手段となる。

## 5. コヒーレントフォノン生成のミクロな理解

上述の電子ダイナミクスの振る舞いの違いは、格子振動を生じる力にも差異を生じる。図4は、異なる3つの中心振動数を持つパルス光を照射した場合に、Si結晶の光学フォノンの基準座標に対して働く力の時間変化を示している。直接遷移バンドギャップよりも小さい振動数(1.0 eV)の場合には、パルス光が照射している間だけ力が働く。力の時間変化は電場の2乗に比例して変化している。一方直接バンドギャップよりも高い振動数(4.0 eV)の場合には、

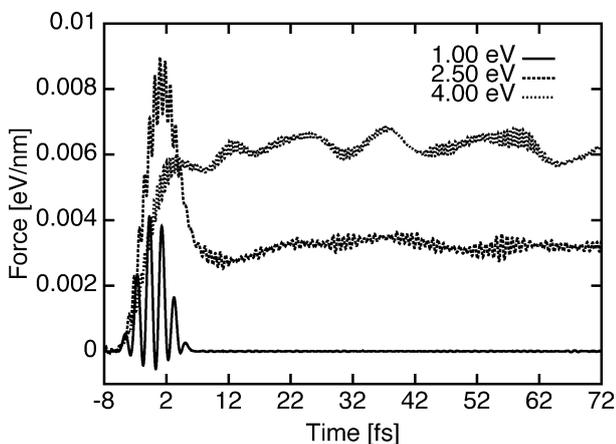


図4 いくつかの中心振動数の電場に対する原子核に働く力の時間変化。実線は1.00 eV、破線は2.50 eV、点線は4.00 eVの電場を照射した場合。

パルス光の照射後、ほぼ一定の力が働き続けている。ほぼ直接遷移バンドギャップに等しい振動数(2.5 eV)の場合には、両者の様相が混合している。このように、パルス光の中心振動数と直接バンドギャップの大小関係により、原子核に働く力の様相は大きく異なったものになる。このような力の振る舞いと、図3に示した電子ダイナミクスの様相を併せて考えると、次に述べるようにTDDFTによる計算が2章で示したコヒーレントフォノン生成の2つの機構—瞬間誘導ラマン型と実励起型—を含むことがわかる。

まずパルス光の照射中は、光電場により波動関数に電子励起状態が混ざる。それにより、電子密度は基底状態から変化し(図3(c))、原子核に力が働く(図4)。この波動関数の変化は一時的なものであり、パルス光が通過した後は、系の波動関数は基底状態に戻る。この過程は2章で述べた瞬間誘導ラマン型に対応し、パルスの振動数がバンドギャップよりも低い場合に顕著に現れる。一方、パルスの中心振動数がバンドギャップを越えると、パルス光の振動数と一致した励起エネルギーを持つ電子励起が強く起こる。この励起はパルス光が通過した後も残り(図3(d))、原子核に働く力はパルスが通り過ぎた後も持続する(図4)。この過程は2章で述べた実励起型に相当する。

図4に示した力  $F(t)$  を用いてニュートンの運動方程式(1)を解くことにより、 $q$ の時間変化を求めることができる。時間が十分に経過した後、力  $F(t)$  が時間に依らなくなると、(1)式の解は振幅  $q_0$ 、位相  $\phi$ 、平衡位置のずれ  $\bar{q}$  により次の形に表される。

$$q(t) = -q_0 \cos(\Omega t + \phi) + \bar{q} \quad (6)$$

図5に、振幅  $q_0$  と位相  $\phi$  の計算結果を振動数を横軸に取り示す。位相に関しては、いくつかの測定値も示している。振幅は、振動数がバンドギャップよりも低い瞬間誘導ラマン型の領域ではほぼ一定値となっているが、バンドギャップ

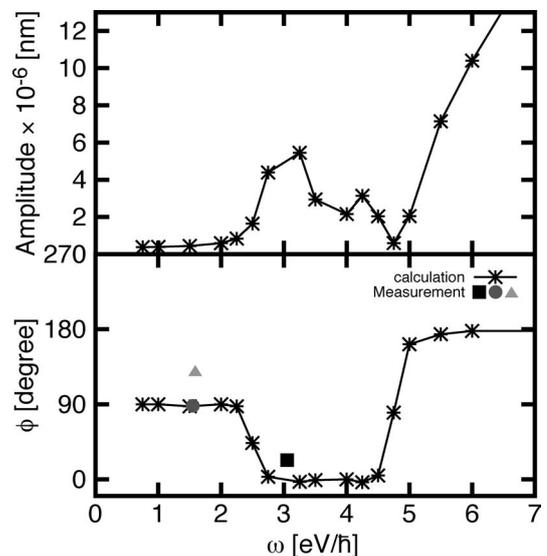


図5 式(6)における振幅  $q_0$ 、位相  $\phi$  の計算結果を照射電場の振動数を横軸にとり示す。<sup>19)</sup> ■, ●, ▲はそれぞれ文献11-13の実験値。

プを越え実励起型の領域になると振動数により大きく変化している。位相に関しては、バンドギャップのエネルギーを境に、瞬間誘導ラマン型に相当する  $90^\circ$  から実励起型に相当する  $0^\circ$  へと鋭く変化している。このような振る舞いは、測定結果におおよそ対応している。4.5–5 eV で振幅が一度小さくなり位相が  $180^\circ$  へと変化しているのは、この振動数を境にパルス照射後の平衡位置が、もとの基底状態での平衡位置を挟んで変化したことを示している。

このように、TDDFTによる第一原理計算を用いると、コヒーレントフォノンの位相に加え、振動の符号や振幅の絶対値が光の振動数とともにどのように変化するかを調べることができる。

## 6. おわりに

本稿は、固体中でのパルス光と電子・原子核の相互作用に対する時間依存密度汎関数理論 (TDDFT) に基づく第一原理計算を、Si 結晶で見られるコヒーレントフォノン生成に適用した結果を紹介した。TDDFT に基づく第一原理計算は、瞬間誘導ラマン型と実励起型の2つの機構を内包し、コヒーレントフォノン生成の定量的な記述に道を拓くものであることを示した。

本稿で紹介した内容は、比較的弱いパルス光と結晶の相互作用への応用であるが、TDDFT に基づく記述は他の理論では扱うことが困難な高強度パルス光のもとで起こる非線形電子ダイナミクスに対しても有効である。例えば光絶縁破壊の閾値を探る研究へも応用されている。<sup>18)</sup> また、本稿では与えられた光電場に対する電子や原子核の運動を論じたが、光照射を受けた固体中の電子応答は分極を生じ、それがパルス光の伝播を規定する。弱い光に対する分極の効果は誘電率を用いたマクスウェル方程式で記述されるが、電子応答の非線形性が増せばマクスウェル方程式と時間依存コーン・シャム方程式を同時に解き進めることが必要になる。そのような計算も、今日利用可能な最大規模の計算機を用いることで可能となりつつある。<sup>20)</sup>

本稿は、ワシントン大学の George F. Bertsch 教授、元筑波大学の川下洋輔博士との共同研究に基づくものである。

## 参考文献

- 1) F. Krausz and M. Ivanov: Rev. Mod. Phys. **81** (2009) 163.
- 2) R. Merlin: Solid State Commun. **102** (1997) 207.
- 3) 中島信一, 長谷宗明, 溝口幸司: 日本物理学会誌 **53** (1998) 607.
- 4) 北島正弘, 長谷宗明, Hrvoje Petek: 日本物理学会誌 **59** (2004) 888.
- 5) E. Runge and E. K. U. Gross: Phys. Rev. Lett. **52** (1984) 997.
- 6) 矢花一浩: 日本物理学会誌 **62** (2007) 406.
- 7) 宮本良之: 応用物理 **80** (2011) 598.
- 8) F. Yong-Xin Yan, Edward B. Gamble, Jr. and K. A. Nelson: J. Chem. Phys. **83** (1985) 5391.
- 9) H. J. Zeiger, J. Vidal, T. K. Cheng, E. P. Ippen, G. Dresselhaus and M. S. Dresselhaus: Phys. Rev. B **45** (1992) 768.
- 10) T. E. Steven, J. Kuhl and R. Merlin: Phys. Rev. Lett. **77** (1996) 3661.
- 11) M. Hase, M. Kitajima, A. Constantinescu and H. Petek: Nature (London) **426** (2003) 51.
- 12) D. M. Riffe and A. J. Saba: Phys. Rev. B **76** (2007) 085207.
- 13) K. Kato, A. Ishizawa, K. Oguri, K. Tateno, T. Tawara, H. Gotoh, M. Kitajima and H. Nakano: Jpn. J. Appl. Phys. **48** (2009) 100205.
- 14) K. Ishioka, M. Kitajima and O. V. Misochko: J. Appl. Phys. **100** (2006) 093501.
- 15) K. Ishioka, M. Kitajima and O. V. Misochko: J. Appl. Phys. **103** (2008) 123505.
- 16) K. Yabana and G. F. Bertsch: Phys. Rev. B **43** (1991) 1993.
- 17) G. F. Bertsch, J.-I. Iwata, A. Rubio and K. Yabana: Phys. Rev. B **62** (2000) 7998.
- 18) T. Otobe, M. Yamagiwa, J.-I. Iwata, K. Yabana, T. Nakatsukasa and G. F. Bertsch: Phys. Rev. B **77** (2008) 165104.
- 19) Y. Shinohara, K. Yabana, Y. Kawashita, J.-I. Iwata, T. Otobe and G. F. Bertsch: Phys. Rev. B **82** (2010) 155110.
- 20) K. Yabana, T. Sugiyama, Y. Shinohara, T. Otobe and G. F. Bertsch: Phys. Rev. B **85** (2012) 045134.

(2012年1月6日原稿受付)

## First-Principles Calculation to Explore Mechanisms of Coherent Phonon Generation

Yasushi Shinohara, Tomohito Otobe, Jun-Ichi Iwata and Kazuhiro Yabana

abstract: Coherent phonon is a coherent vibration of atoms in macroscopic spatial scale, generated by a laser pulse whose duration is shorter than the oscillation period of the phonon. The authors have been developing an *ab-initio* computational method for femto-second quantum dynamics of electrons and nuclei in crystalline solid based on the time-dependent density functional theory. We apply the method to a crystalline Si under irradiation of ultrashort laser pulse and show that it describes the mechanism of coherent phonon generation quantitatively.

## 応用物理 第81巻 第10号 (2012年10月号) 予定目次

特集: 教育と人材育成

巻頭言: 科学と社会の新しい関係……………村上陽一郎  
 総合報告: アメリカの物理教育研究の動向……………梶具博義  
 解説: 創造的研究のために……………赤祖父俊一  
 アメリカにおける科学教育改革の変遷; 国家繁栄のために求められる科学の素養とは何か……………丹沢哲郎  
 社会の中の科学技術; 科学者は何をすべきか……………北原和夫  
 最近の展望  
 ニセ科学と科学者の社会への関わり方……………菊池 誠  
 国際比較から見た日本の生徒にとっての理科学習……………小倉 康

研究紹介  
 一般学生への自然科学教育の意義……………表 實  
 危機に立つ日本の科学教育・科学リテラシー; 文系・理系問題解決のために理系にできること……………林 衛  
 原子炉事故緊急時における放射線安全; 社会の中の放射線安全とその教育……………小佐古敏荘  
 科学技術イノベーションとグローバル人材育成……………久間和生  
 基礎講座: デジタル時代の画像入力; レンズ系の役割とは? ……河合 滋

## 光格子中のボース・フェルミ混合原子気体が示す多様な量子相

山下 眞 (NTT 物性科学基礎研究所 243-0198 厚木市森の里若宮 3-1 )

稲葉 謙介 (NTT 物性科学基礎研究所 243-0198 厚木市森の里若宮 3-1 )

光格子にトラップされた冷却原子気体は固体物理で知られたハバード・モデルでよく記述され、その高い制御性から量子多体効果を調べる上での理想的な系となっている。近年、この系で典型的な量子相転移であるモット絶縁体転移が観測されたのは記憶に新しい。我々は京都大学・高橋義朗教授のグループと共同で、三次元光格子中のボース・フェルミ混合原子気体がモット絶縁体領域で示す新奇な物性を詳細に調べた。実験と理論の定量的比較を通して、微視的なボソンとフェルミオン間の相互作用が混合モット状態、相分離状態、複合粒子状態といった多様な量子相を発現させ、さらには相互作用が斥力か引力かに応じて系の熱力学的性質も大きく異なることが明らかになった。本稿では冷却原子気体の特徴に触れながら、これら最近の研究成果を紹介する。

## 1. 冷却原子気体を用いた量子シミュレーション

未解明の問題を制御性に優れた他の量子系を用いて効率よく調べようとする量子シミュレーションのアイデアは1982年にリチャード・ファインマンによって初めて提案されたが、<sup>1)</sup> 30年を経て冷却原子気体がこれに大きな進展をもたらしつつある。<sup>2)</sup> レーザー冷却などの冷却技術の著しい進歩は超高真空チャンバー中の中性原子気体を数nKといった量子縮退領域にまで冷却することを可能とした。しかも、このような極低温では気体密度や原子間の相互作用が高い精度で制御でき、さらには系のダイナミクスも観測できるなど、量子物理現象を研究する上での理想的な環境が実現しているのである。<sup>3)</sup> 量子シミュレーションの一例として、エネルギーや密度のスケールは桁違いに異なるが、原子間相互作用を発散的に増大させたユニタリー極限における冷却フェルミ原子気体が、<sup>4)</sup> 中性子星やクォーク・グルーオン・プラズマとの関連で議論されているのには驚かされる。<sup>2,5)</sup>

量子シミュレーションに向けた取り組みの中で近年大きな注目を集めているのが、非共鳴レーザー光を原子気体に対向的に照射させ、気体内部に光の定在波による周期的ポテンシャルを作る「光格子」と呼ばれる実験技術である。<sup>6)</sup> これにより、冷却原子の研究が固体物理と密接に関係するようになってきた。高度に安定化されたレーザー光で作成された光格子は不純物や格子欠陥のない非常にクリーンな人工の結晶とみなせ、光格子の中に閉じ込められた原子気体の振る舞いは量子多体系の基本的モデルの一つであるハバード・モデルでよく記述されることが知られている。<sup>6)</sup> 光格子の実験ではこれまでに、多体効果が引き起こす典型的な量子相転移であるモット絶縁体転移<sup>7)</sup> が、ボソンさらにはフェルミオンである原子を用いてそれぞれ観測されている。<sup>8-10)</sup> 最近では、顕微鏡技術を応用して、2次元光格子上に分布した冷却原子を対物レンズを通してサイトごとに単一原子レベルでその場観察することも可能となっており、<sup>2)</sup> 高温超伝導と関係が深い2次元ハバード・モデルに関する詳細な知見が得られるものと期待されている。

ここで原子を使ってシミュレートしようとする立場から

固体物理における多体効果そのものを見直してみたい。多体効果の本質は、まずそれが物質の示す多様性の起源であり、さらにその奥には物質の基本的性質を決める普遍性が潜んでいる点にあるのではないだろうか。多体効果に見られるこの多様性と普遍性の探求こそが光格子による量子シミュレーションの目的であると言っても過言ではない。冷却原子の持つ高い制御性と進んだ測定技術がそのための強力な道具立てになっていることは上述の通りである。一方で、冷却原子系では異種原子あるいは同種原子の異なる同位体を光格子の中で混ぜることで、通常物質系では実現が困難なような幅広い多成分量子混合系が実現する。これまでにボース・フェルミ、<sup>11-14)</sup> ボース・ボース、<sup>15-17)</sup> フェルミ・フェルミ混合気体<sup>18,19)</sup> が光格子中で実現されており、これらは多体効果によって発現する多様な物性や、またその中に含まれる普遍的性質を調べるための非常に魅力ある量子系となっている。光格子中の混合原子気体の研究はまだ端緒が開かれたばかりであり、超固体状態<sup>20)</sup> や密度波状態<sup>21)</sup> といった極低温でのエキゾチックな量子相の観測に向けて、実験・理論の両面から精力的な研究が進められている。

本稿では我々と京都大学・高橋義朗教授のグループとの共同研究であるイッテルビウム (Yb) 原子を用いた3次元光格子中のボース・フェルミ混合原子気体に関する研究成果を紹介する。<sup>14)</sup> 強相関のモット絶縁体領域での特性に注目し、ボソンとフェルミオン間に働く相互作用に起因して多様な量子相が出現し、さらには系の熱力学的性質も相互作用によって大きな影響を受けることを実験データと理論解析との定量的比較を通して議論していく。

## 2. 光格子中の Yb ボース・フェルミ混合気体

今回の研究で用いた Yb 原子の大きな特徴は、5種類のボソン (<sup>168</sup>Yb, <sup>170</sup>Yb, <sup>172</sup>Yb, <sup>174</sup>Yb, <sup>176</sup>Yb) と2種類のフェルミオン (<sup>171</sup>Yb, <sup>173</sup>Yb) から成る豊富な安定同位体を持つことである。京都大学のグループではボソンの<sup>172</sup>Ybを除く全ての同位体を量子縮退領域の極低温にまで冷却することに成功しており、これらを組み合わせることで、質量や光

学特性がほぼ等しく、光格子内で相互作用している理想的な量子混合系が実現できる。異なる原子種を用いたアルカリ原子による先行研究(ボソンは $^{87}\text{Rb}$ 、フェルミオンは $^{40}\text{K}$ )<sup>11-13)</sup>と比べて、Ybでは、はるかに純粋な形でボース・フェルミ混合系の多体効果を調べることが可能となっている。実験ではボソン・フェルミオン間の相互作用に注目して、相互作用が斥力の $^{174}\text{Yb}$ と $^{173}\text{Yb}$ 、これとは逆に相互作用が引力の $^{170}\text{Yb}$ と $^{173}\text{Yb}$ の組み合わせを用いて、2種類のボース・フェルミ混合原子気体を3次元光格子中で作成した。但し、同じ同位体原子の間に働く相互作用はすべて斥力である。また内部自由度に関しては、Ybの基底状態の電子配置は最外殻の6s軌道に電子が2個存在し、電子スピンはシングレット状態にある。したがって同位体としては、核スピンを持たないボソンの $^{174}\text{Yb}$ と $^{170}\text{Yb}$ は共にスピンレスであり、一方、フェルミオンの $^{173}\text{Yb}$ は核スピン $I=5/2$ に応じて $2I+1=6$ の大きなスピン自由度を持つ。実験では $^{173}\text{Yb}$ をスピン偏極させていないため、6成分がほぼ同じ割合で存在している。

光格子中の極低温ボース・フェルミ混合原子気体の振る舞いはボソンとフェルミオンで構成されたハバード・モデルで記述される。<sup>14)</sup> このモデルのハミルトニアン(以下ではBFHハミルトニアンと呼ぶ)は、最近接格子点間の原子のトンネリングと各格子点上での原子間の相互作用を基本要素として含み、さらに、実験で原子を光格子中に留めておくために必要な調和型の緩やかな閉じ込めポテンシャルがこれに加わる。このとき、隣接格子点間での原子間相互作用は非常に小さく、十分無視できる。Ybを用いた実験の場合、ハミルトニアンに含まれる原子のトンネル行列要素( $J$ )とレーザー光で作られた閉じ込めポテンシャルがボソンとフェルミオンとで等しくなるため、モデルが著しく単純化される。一方、格子点上で原子間に生じる相互作用については、極低温のため弾性衝突が支配的であり、BFHハミルトニアンに含まれる3種類の相互作用( $U_{\text{BB}}$ :ボソン間,  $U_{\text{FF}}$ :スピン成分が異なるフェルミオン間,  $U_{\text{BF}}$ :ボソン・フェルミオン間)は対応するそれぞれのs波散乱長に比例する。このように、光格子では散乱長や閉じ込めポテンシャルの実測値と、数値計算によって*ab initio*に求めたワニエ関数とを組み合わせることで、BFHハミルトニアンに含まれる全てのモデル・パラメータを精密に決定することができる。

本研究の理論解析は京都大学グループの実験系に即して求めた3次元のBFHハミルトニアンに基づいて行われている。但し、実験で用いられたYb原子数は最大で数万にも及ぶ。その上、閉じ込めポテンシャルの存在によって系は不均一になっており、理論的取り扱いをさらに困難なものとしている。このような巨大で複雑な量子多体系を有限温度で定量的に解析するには適切な近似を施す必要がある。我々はグッツヴィラー近似的な単一サイト近似を適用して有効ハミルトニアンを導出し、これを各格子点で対角化し

た後、所定の温度でのボソンとフェルミオンの局所熱平衡分布を数値的に求めた。そして、これらの分布が全系にわたって自己無撞着になるまで逐次的に計算を実行し、最終的に系全体の熱平衡分布を決定した。詳細については文献14のSupplementary Informationを参照して頂きたい。実験で実現されている温度領域(数nK~100 nK)での逐次計算の収束性は良く、この計算手法により閉じ込めポテンシャルの異方性までも精密に取り込んだ実験の定量的解析が可能となった。しかしながら、単一サイト近似であるためにサイト間の相関が重要となる秩序相の解析には直接適用できない。現状の実験では気体温度がまだ高く、低温で期待される磁気秩序や電荷密度波状態の観測には至っていないため、単一サイト近似による取り扱いで実験結果の説明に成功したと言える。ただ、近年の著しい実験技術の進展を見るに、秩序相をもカバーできる強力な理論の開拓は急務である。

### 3. 光会合によるペア占有数の測定

ボース・フェルミ混合原子気体の量子相を同定するために用いられた測定法も冷却原子の特性を最大限に利用したユニークなものである。実験結果を紹介する前に、ここではこの測定法の原理を説明しておく。実験では光格子中の混合気体に新たなレーザー光を照射して原子ペアに光会合<sup>22)</sup>を生じさせ、格子上での原子配置に関する情報を得ている。<sup>14,23)</sup> 図1(a)に模式的に示すように、光会合では非束縛状態にある原子のペアが衝突を起こす際に共鳴する光子を1個吸収して、電子励起を伴いながら分子状態に遷移する。ただし、形成された分子状態は不安定で、すぐに光を放射して高い運動エネルギーを持った独立した2個の原子へと崩壊し、これらは最終的に光格子から飛び出していく。光会合のこの仕組みを利用すれば、レーザー光の照射によって、例えば図1(b)のように、原子配置の中から点線で囲まれたボソンのペアだけを取り除くことができる。そして、光会合前後の原子数を測定すれば、その差から格子点上でペアを組んでいたボソンの数(ペア占有数 $D_{\text{B}}$ )が分かるのである。図のように格子点当たりの平均原子数が

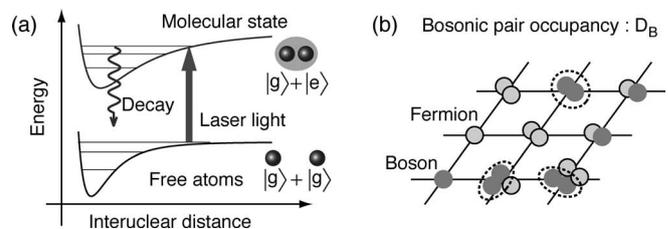


図1 (a) 一光子光会合の模式図。非束縛状態にある原子ペアが衝突の際に共鳴する光子を1個吸収して、電子励起を伴いながら分子状態に遷移する。ここで、 $|g\rangle$ と $|e\rangle$ は原子内の電子配置がそれぞれ基底状態および励起状態にあることを表している。形成された分子状態は不安定なため、すぐに光を放射して高い運動エネルギーを持った独立した2個の原子へと崩壊する。(b) 光格子上でボソンのペア占有数の測定。ボソン間の光会合に共鳴するレーザー光を照射すると、点線で囲まれたボソン・ペアだけが選択的に取り除かれ、格子点上での占有数が分かる。

少ない場合、 $D_B$  はまさしく二重占有しているボソン数に相当し、これはモット絶縁体転移に対して良い指標となる物理量である。また、照射する光会合用レーザーの波長を選択すれば、フェルミオンのペア占有数  $D_F$  やボソン・フェルミオンのペア占有数  $D_{BF}$  も同様に測定でき、これらを組み合わせることで光格子の中でボソンとフェルミオンがどのように配置されているかについての知見が得られる。

実際の実験では有限温度の熱揺らぎによって格子点上ではボソンとフェルミオンの様々な占有状態が実現されているはずである。しかしながら、光会合はその中からある特定のペア状態のみを取り出して観測することを可能にしており、これは量子光学でよく知られた射影測定を実行していることに他ならない。そのため、実験の解析に際しては測定に応じた射影演算子を導入する必要がある。ボソンのペア占有数  $D_B$  の測定には、各格子点で定義された次の射影演算子が対応する。<sup>14)</sup>

$$\hat{D}_{B,i} = 2 \sum_{n_{B,i}, n_{F,i}} \text{floor}(n_{B,i}/2) |n_{B,i}, n_{F,i}\rangle \langle n_{B,i}, n_{F,i}| \quad (1)$$

ここで、 $i$  は格子点を指定する番号であり、 $|n_{B,i}, n_{F,i}\rangle$  は  $i$  番目の格子点上での  $n_{B,i}$  個のボソン、 $n_{F,i}$  個のフェルミオンから成る局所フォック状態を表す。但し、フェルミオン数は6つあるスピン自由度  $\sigma$  についての和をとり  $n_{F,i} = \sum_{\sigma} n_{F,i,\sigma}$  である。また、 $\text{floor}(x)$  は実数  $x$  に対して  $x$  以下の最大の整数を与える床関数である。我々はグッツヴィラー近似で求めた熱平衡分布を用いて上式の射影演算子の期待値  $\langle \hat{D}_{B,i} \rangle$  を計算し、これを全系にわたって足し合わせ、ボソンのペア占有数  $D_B$  に対する解析値とした。

#### 4. モット絶縁体領域における混合気体の量子相

本研究では光格子を作成するためのレーザー光強度を十分に強くとり、原子のトンネリングに比べて相互作用がはるかに大きくなる強相関の条件で実験を実行している。これは、ボソン ( $^{170}\text{Yb}$ ,  $^{174}\text{Yb}$ ) あるいはフェルミオン ( $^{173}\text{Yb}$ ) 単体で同じ実験を行えば、強い斥力相互作用によりそれぞれはモット絶縁体状態になっていることを意味する。混合気体ではこのような単体としての性質はボソン・フェルミオン間の相互作用  $U_{BF}$  によって著しく変化してしまう。特に、閉じ込めポテンシャルの存在により、ボソンとフェルミオンは相互作用  $U_{BF}$  を通して強い相関を持ちながら光格子中で非一様に分布することになる。そこで、斥力系 ( $U_{BF} > 0$ ) および引力系 ( $U_{BF} < 0$ ) のボース・フェルミ混合原子気体に対して、ボソン数  $N_B$  を一定に保ちながら混合させるフェルミオン数  $N_F$  を変化させ、どのような量子相が出現するかを系統的に調べた。

まず最初に斥力系である  $^{174}\text{Yb}$ - $^{173}\text{Yb}$  混合気体に対する結果を紹介する。このときの相互作用パラメータは原子のトンネル行列要素  $J$  を単位として、 $U_{BB}/J = 100$ ,  $U_{FF}/J = 192$ ,  $U_{BF}/J = 135$  であり、系はモット絶縁体領域にある。図2(a) は  $N_B = 6 \times 10^3$  のもと、 $N_F$  を変化させた時のボソン

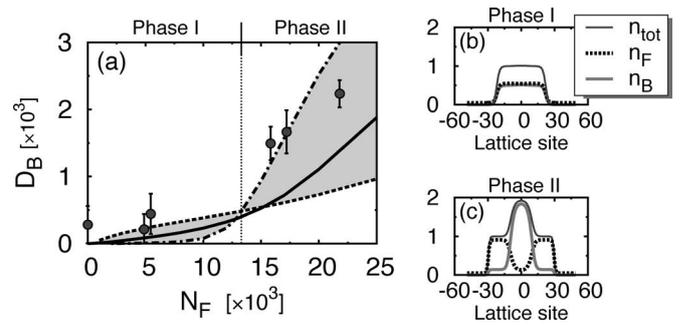


図2 斥力系ボース・フェルミ混合原子気体。(a) ボソンのペア占有数  $D_B$  のフェルミオン数  $N_F$  依存性。但し、ボソン数は  $N_B = 6 \times 10^3$  とする。それぞれ実験値 (丸印)、理論値 (一点鎖線  $T_{\text{ini}} = 30$  nK, 実線  $T_{\text{ini}} = 35$  nK, 破線  $T_{\text{ini}} = 40$  nK)。エラーバーは測定の標準偏差を表す。(b)  $N_F = 6 \times 10^3$ , (c)  $N_F = 1.5 \times 10^4$  での密度分布。(b), (c) 共に、 $N_B = 6 \times 10^3$ ,  $T_{\text{ini}} = 30$  nK とする。曲線はそれぞれボソン ( $n_B$ ), フェルミオン ( $n_F$ ), その和 ( $n_{\text{tot}}$ ) に対応。また、ゼロ番号の格子点は閉じ込めポテンシャルの中心と一致する。

のペア占有数  $D_B$  に対する実験と理論の結果をプロットしたものである。丸印は光会合による測定値を表し、実線は光格子にロードする前の混合気体の初期温度を  $T_{\text{ini}} = 35$  nK とした場合の計算結果である。また、破線および一点鎖線はこの初期温度を  $\pm 5$  nK 変化させた時の結果に対応している。図2(a) からは実験値と理論値が小さな温度幅の範囲内で定量的に一致していることが分かる。特徴として、 $N_F$  が小さい領域では  $D_B$  はほとんど変化せず小さな値にとどまっているが、 $N_F = 1.3 \times 10^4$  を境にして、 $N_F$  の増加に伴い  $D_B$  が急激に増大する。これは  $N_F$  の値に応じて異なる2つの量子相 (Phase I と Phase II) が実現していることを示唆している。

図2(b) に Phase I の例として、 $N_B = N_F = 6 \times 10^3$ ,  $T_{\text{ini}} = 30$  nK での密度分布の計算結果を示す。ボソン ( $n_B$ ) とフェルミオン ( $n_F$ ) の密度分布は一致し、それぞれは分数値 0.5 をとっている。しかし、これらを加えた全密度分布 ( $n_{\text{tot}} = n_B + n_F$ ) は整数値 1 となり、ボソンとフェルミオンがセットになってモット絶縁体のプラトー領域を形成していることが分かる。この結果は、強い斥力相互作用によって二重占有は排除され、格子点上にはボソンかフェルミオンのどちらか一方が1個存在するような状態が実現していることを意味する。但しその配置は有限温度の熱揺らぎによってランダムになっている。これは混合モット状態と呼ばれ、Ybを用いることで初めて見出された量子相である。ボソンとフェルミオンの配置に秩序が生じていないことは、光格子を時間的に変化させて各種ペア占有数を測定する実験により直接確認されている。<sup>14)</sup>

$N_F$  の値がさらに大きくなると、異なる量子相 Phase II が現れる。図2(c) に  $N_B = 6 \times 10^3$ ,  $N_F = 1.5 \times 10^4$ ,  $T_{\text{ini}} = 30$  nK での密度分布を示す。図から明らかなように、Phase II ではボソンとフェルミオンは相分離を起こしていることが分かる。これは相互作用の大小関係 ( $U_{BB} < U_{BF} < U_{FF}$ ) に注目すると理解しやすい。 $U_{FF}$  が最大であるため、フェルミオンは二重占有を避け、できるだけ空間的に広がって分布し

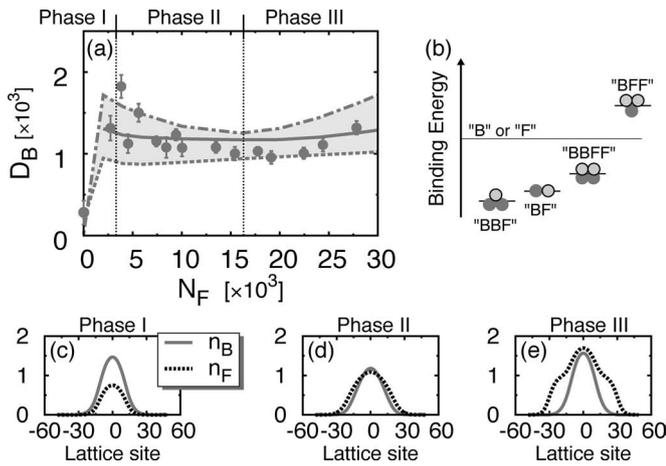


図3 引力系ボース・フェルミ混合原子気体。(a)  $D_B$  の  $N_F$  依存性。但し、 $N_B = 5 \times 10^3$  とする。それぞれ実験値 (丸印)、理論値 (一点鎖線  $T_{\text{im}} = 40$  nK、実線  $T_{\text{im}} = 45$  nK、破線  $T_{\text{im}} = 50$  nK)。エラーバーは測定の標準偏差を表す。(b) 格子点上で形成される多様な複合粒子。図中の B はボソン、F はフェルミオンを表す。横軸は束縛エネルギーがゼロのラインであり、格子点上の単一ボソン (あるいは単一フェルミオン) に対応する。(c)  $N_F = 2 \times 10^3$ 、(d)  $N_F = 1 \times 10^4$ 、(e)  $N_F = 3 \times 10^4$  での密度分布。(c)、(d)、(e) では  $N_B = 5 \times 10^3$ 、 $T_{\text{im}} = 40$  nK とする。ゼロ番号の格子点は閉じ込めポテンシャルの中心と一致する。

た方がエネルギー的に有利である。一方、強い斥力  $U_{\text{BF}}$  によりボソンとフェルミオンは互いに避け合うように分布しなければならない。したがって、 $N_F$  が  $N_B$  に比べて十分大きくなってくると、相互作用が一番小さく、統計性からも多重占有を許容しやすいボソンが閉じ込めポテンシャルの中心付近の狭い領域に局在し、その周りをモット絶縁体状態のフェルミオンが囲むような空間的な相分離が起きるのである。図2(a)で観測されている  $N_F$  が大きい領域での  $D_B$  の急激な増大は相分離によってボソンの二重占有が増えたことを反映した結果である。

次に引力系である  $^{170}\text{Yb}$ - $^{173}\text{Yb}$  混合気体での結果を紹介する。このときのモデル・パラメータは  $U_{\text{BB}}/J = 143$ 、 $U_{\text{FF}}/J = 443$ 、 $U_{\text{BF}}/J = -179$  である。図3(a)に  $N_B = 5 \times 10^3$  のもと、 $N_F$  を変化させた時の  $D_B$  に対する実験と理論の結果を示す。実線は  $T_{\text{im}} = 45$  nK とした場合の計算結果であり、破線および一点鎖線はこの値を  $\pm 5$  nK 変化させた時の結果に対応している。引力系においても実験値と理論値が小さな温度幅の範囲内で定量的に一致している。一方で、図2(a)の結果と比較すると、引力系と斥力系の違いは極めて顕著である。特に実験値に注目すると、図3(a)では、測定された  $D_B$  が  $N_F$  に対して非単調な依存性を示している。 $N_F$  が  $2.5 \times 10^3$  以下の領域では、 $D_B$  は  $N_F$  の増加に伴い急激に増大する (Phase I)。ところが、 $N_F$  が  $1.7 \times 10^4$  程度までの中間的な領域では、 $D_B$  は逆に  $N_F$  が増加するにつれて徐々に減少していく (Phase II)。そして、 $N_F$  がさらに大きい領域では、 $D_B$  は再び増大し始める (Phase III)。ボソンのペア占有数  $D_B$  のこのような特徴的な振る舞いから、引力系のボース・フェルミ混合原子気体では異なる3つの量子相が実現していることが明らかになった。

ここで、引力系に見られるこのような多様性の起源について考察してみたい。我々が対象としているのは相互作用がトンネリングに比べて桁違いに大きい強相関係である。この点に注意すると、ボソンとフェルミオンは格子点上で共存し、引力相互作用によって互いを束縛し合う、いわゆる複合粒子を形成していると考えられる。<sup>24)</sup> また、このときの束縛エネルギーは構成要素であるボソン、フェルミオンに働く全ての斥力および引力相互作用を加えたものとして与えられる。図3(b)は今の系で実現される複合粒子を束縛エネルギーの低いものから順に並べたものである。図中の B はボソンを、F はフェルミオンを表している。横軸はこの束縛エネルギーがゼロのラインであり、格子点上の単一ボソン“B” (あるいは単一フェルミオン“F”) に対応している。図3(b)に示されるように、複合粒子は構成するボソンとフェルミオンの組み合わせに応じて多種存在し、引力系の量子相はこれら複合粒子によって特徴づけられる。

では、図3(a)における  $D_B$  の振る舞いを複合粒子を通して見直してみる。図3(c)はPhase Iにおける代表的な密度分布であり、ボソンとフェルミオンが引き合い、モット絶縁体のプラトー構造は融解してしまっている。また閉じ込めポテンシャルの中心付近で  $n_B$  と  $n_F$  の比が 2:1 となっており、これは、束縛エネルギーが最も低く、ボソン2個とフェルミオン1個で構成された複合粒子“BBF”が形成されていることを意味する。Phase Iにおける  $D_B$  の急激な増大は、“BBF”粒子が形成されボソンの二重占有が増加したことを反映している。次に、図3(d)にPhase IIでの密度分布を示す。中心付近で  $n_B$  と  $n_F$  の比がほぼ 1:1 となっているのが特徴である。 $N_B$  が一定のため、Phase IIでは、すべてのボソンを使って“BBF”粒子を作ってもフェルミオンが余ってしまう。一方、図3(b)からは、フェルミオン1個と“BBF”粒子1個から“BF”粒子2個を作った方がエネルギー的に有利であることが分かる。このため、Phase IIでは過剰になったフェルミオンと“BBF”粒子から“BF”粒子が生成されるのである。 $N_F$  の増加に伴って  $D_B$  が減少する振る舞いは、“BF”粒子が増加しボソンの二重占有が減少した結果として理解できる。最後に、図3(e)は  $N_F$  が大きな値をとるPhase IIIでの密度分布である。ボソンとフェルミオンは引き合いながら中心付近に高い密度分布を持つことが分かる。また、過剰のフェルミオンは単一占有のモット絶縁体に近い状態でこれを取り囲むように分布している。中心付近で  $n_B$  と  $n_F$  は共に1を超えており、またその比がほぼ 1:1 であることから、この領域では“BF”粒子に加えて、束縛エネルギーが次に低い“BBFF”粒子が形成されている。Phase IIIにおける  $D_B$  の増大は、この“BBFF”粒子が新たに生成されることに起因する。

## 5. ボース・フェルミ混合気体の熱力学的性質

一般に光格子の実験では、閉じ込めポテンシャル中の原子気体に光格子ポテンシャルを徐々に印加して行われる。

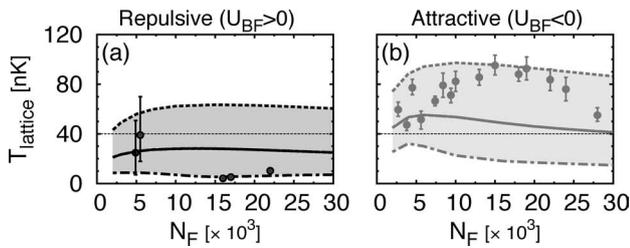


図4 光格子中の気体温度  $T_{\text{lattice}}$ . (a) 斥力系ボース・フェルミ混合原子気体. (b) 引力系ボース・フェルミ混合原子気体. (a), (b) 共に,  $D_B$  の実験値と理論値との比較によって見積もられた  $T_{\text{lattice}}$  (丸印), 断熱性を仮定して各初期温度から計算で求めた  $T_{\text{lattice}}$  (一点鎖線  $T_{\text{ini}} = 30$  nK, 実線  $T_{\text{ini}} = 40$  nK, 破線  $T_{\text{ini}} = 50$  nK). エラーバーは標準偏差を表す.

そのため, 光格子に原子気体をロードする過程はほぼ断熱的となり, ロードに際して系のエントロピーは保存されるが, 温度は変化してしまう. しかしながら, 現状で光格子にロードした後の気体温度  $T_{\text{lattice}}$  を信頼できる精度で測定する方法はまだ確立していない. 前節では光格子にロードする前の初期温度  $T_{\text{ini}}$  を唯一のフィッティング・パラメータとして, 妥当な温度幅 ( $T_{\text{ini}} = 40 \pm 10$  nK) の範囲内でボソンのペア占有数  $D_B$  の実験結果を理論計算で再現できることを示した. これは  $T_{\text{ini}}$  は実測可能であるという事情に由来している. このときの解析では断熱性を仮定し,  $T_{\text{ini}}$ ,  $N_B$ ,  $N_F$  で与えられる初期エントロピーを求め, これを保存するように  $T_{\text{lattice}}$  を見積もり, そして, その温度下での  $D_B$  を計算した (詳細は文献 14 の Supplementary Information を参照).

ここではこの方法とは異なり, 断熱性は仮定せず, 理論的に求めた  $D_B$  と図 2(a) および図 3(a) での実験値とを直接比較して, それぞれが一致するように  $T_{\text{lattice}}$  を決定する. 図 4 の丸印はこのようにして求めた  $T_{\text{lattice}}$  を示したものである. 図 4(a) の斥力系では  $T_{\text{lattice}}$  は 5 nK から 40 nK の範囲で, 一方, 図 4(b) の引力系では 40 nK から 100 nK の範囲で分布している. また, 図中の曲線は断熱性を仮定して各初期温度から計算で求めた  $T_{\text{lattice}}$  であり, 直接比較によって見積もった  $T_{\text{lattice}}$  のデータが陰で示された妥当な範囲内に収まっていることも確認できる. 今回の実験では初期温度  $T_{\text{ini}}$  はどちらの系でもほぼ 40 nK であることに注意すると, 図 4 の結果から, ボース・フェルミ混合原子気体を光格子にロードする過程で, 斥力系では冷却効果<sup>25, 26)</sup> が, 引力系では加熱効果<sup>27, 28)</sup> が生じていることが明らかになった.

では次に, 微視的なボソン・フェルミオン間の相互作用の違いが, 巨視的な熱力学的性質にも顕著な違いをもたらすメカニズムについて考察してみたい. 先ず, 斥力系である  $^{174}\text{Yb}$ - $^{173}\text{Yb}$  混合気体が混合モット状態および相分離状態を示すことはすでに述べた. いずれの状態においても, フェルミオンである  $^{173}\text{Yb}$  は格子点を単一で占有しており, そのスピン自由度が格子点当たり  $\ln 6$  の大きなエントロピーをもたらす. したがって, ボース・アインシュタイン凝

縮した  $^{174}\text{Yb}$  とフェルミ縮退した  $^{173}\text{Yb}$  の混合気体を光格子に断熱的にロードしモット絶縁体領域にまで到達する過程では, エントロピー保存の条件から他の自由度のエントロピーは減少しなければならず, その結果, 冷却が生じるのである.<sup>25, 26)</sup> これは  $^3\text{He}$  で知られているポメランチュク冷却<sup>29)</sup> と本質的に等しい. 一方, 引力系である  $^{170}\text{Yb}$ - $^{173}\text{Yb}$  混合気体では, 混合させるフェルミオンの数に応じて多様な複合粒子が形成される. 複合粒子の形成により, 系に含まれる実質的な粒子数は減り, それに応じてエントロピーも著しく減少する. したがって, 引力系混合気体を光格子に断熱的にロードする過程では, 粒子数以外の自由度のエントロピーが増大し, その結果, 加熱が生じる.

## 6. おわりに

光格子中のボース・フェルミ混合原子気体がモット絶縁体領域で示す多様な量子相を紹介してきた. Yb 原子が混合気体の多体効果を理想的な状況で調べることができるように, さらに, 光会合を用いた計測法が量子相に関して直接的な情報を与えてくれる. 実験と理論を詳細に比較することにより, 微視的なボソン・フェルミオン間の相互作用や, ボソンとフェルミオンの粒子数の違いが, 普遍的なモット絶縁体転移に多様性を発現させ, そして系の熱力学的性質にも大きな影響を与えることを明らかにした. さらなる低温で期待される超固体状態<sup>20)</sup> や密度波状態<sup>21)</sup> といったエキゾチックな量子相の探求に向けては, 実験と理論の両面からの進展が不可欠である. 量子シミュレーターとして優れた特性を持つ光格子中の冷却原子気体は, 原子物理, 物性物理, 量子光学などの幅広い分野を巻き込みながら, 今後ますます魅力ある研究分野へ発展していくと確信している.

本稿は素川靖司氏, 田家慎太郎氏, 山崎歴舟氏, 高橋義朗氏との共同研究の成果に基づくものです. ここに深く感謝いたします. また本研究は科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業チーム型研究 (CREST) の支援を受けて行われました.

## 参考文献

- 1) R. P. Feynman: Int. J. Theor. Phys. **21** (1982) 467.
- 2) I. Bloch, J. Dalibard and S. Nascimbène: Nature Phys. **8** (2012) 267.
- 3) レビューとして, 冷却原子気体に関する特集号 Nature **416** (2002) 205.
- 4) 堀越宗一, 向山 敬, 上田正仁: 日本物理学会誌 **67** (2012) 257.
- 5) C. V. Johnson and P. Steinberg: Phys. Today **63**(5) (2010) 29; J. E. Thomas: *ibid.* **63**(5) (2010) 34; B. Jacak and P. Steinberg: *ibid.* **63**(5) (2010) 39.
- 6) I. Bloch, J. Dalibard and W. Zwerger: Rev. Mod. Phys. **80** (2008) 885.
- 7) M. Imada, A. Fujimori and Y. Tokura: Rev. Mod. Phys. **70** (1998) 1039.
- 8) M. Greiner, *et al.*: Nature **415** (2002) 39.
- 9) R. Jördens, *et al.*: Nature **455** (2008) 204.
- 10) U. Schneider, *et al.*: Science **322** (2008) 1520.
- 11) K. Günter, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **96** (2006) 180402.
- 12) S. Ospelkaus, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **96** (2006) 180403.
- 13) Th. Best, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **102** (2009) 030408.
- 14) S. Sugawa, *et al.*: Nature Phys. **7** (2011) 642.
- 15) J. Catani, *et al.*: Phys. Rev. A **77** (2008) 011603(R).
- 16) D. M. Weld, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **103** (2009) 245301.

- 17) B. Gadway, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **105** (2010) 045303.
- 18) M. Taglieber, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **100** (2008) 010401.
- 19) S. Taie, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **105** (2010) 190401.
- 20) H. P. Büchler and G. Blatter: Phys. Rev. Lett. **91** (2003) 130404.
- 21) I. Titvinidze, M. Snoek and W. Hofstetter: Phys. Rev. Lett. **100** (2008) 100401.
- 22) K. M. Jones, *et al.*: Rev. Mod. Phys. **78** (2006) 483.
- 23) T. Rom, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **93** (2004) 073002.
- 24) M. Lewenstein, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **92** (2004) 050401.
- 25) F. Werner, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **95** (2005) 056401.
- 26) M. A. Cazalilla, A. F. Ho and M. Ueda: New J. Phys. **11** (2009) 103033.
- 27) M. Cramer: Phys. Rev. Lett. **106** (2011) 215302.
- 28) M. Snoek, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **106** (2011) 155301.
- 29) R. C. Richardson: Rev. Mod. Phys. **69** (1997) 683.

(2012年3月16日原稿受付)

## Diverse Quantum Phases of Bose-Fermi Mixtures in an Optical Lattice

Makoto Yamashita and Kensuke Inaba

abstract: We review our recent works on Bose-Fermi mixtures trapped in a three-dimensional optical lattice in collaboration with the group of Prof. Yoshiro Takahashi at Kyoto University. The quantitative comparison between the experiment and the theory reveals that, in the highly-correlated Mott-insulator regime, the interaction between bosons and fermions causes the diverse quantum phases, namely the mixed Mott state, the phase-separated state, and the composite-particle state. The thermodynamic properties of the mixtures also show the quite different features depending on whether the interspecies interaction is repulsive or attractive.

### 最近の研究から

## 有機半導体界面における浅い局在状態密度分布のスペクトル解析

長谷川達生

〈産業技術総合研究所フレキシブルエレクトロニクス研究センター 305-8562 つくば市東1-1-1 〉

松井弘之

〈産業技術総合研究所フレキシブルエレクトロニクス研究センター 305-8562 つくば市東1-1-1 〉

ミシエンコ

アンドレイ

〈理化学研究所基幹研究所交差相関物性科学研究グループ 351-0198 和光市広沢2-1 〉

電子スピンと核スピンの相互作用にもとづく電子スピン共鳴 (ESR) スペクトルの解析から、有機半導体界面の局在状態密度分布を調べる手法を開発した。低温で動きを止めたキャリアによる ESR スペクトルは、分子内の数十個の核スピンとの超微細相互作用と、キャリアの空間広がりのため、統計的性格を帯びている。ガウス型スペクトルへの分解により浅い局在状態の空間広がり・束縛エネルギーに対する状態密度分布を得た。

### 1. はじめに

軽い・薄い・落としても壊れないという特徴を備えた次世代の情報通信端末機器 (フレキシブルデバイス) 実現への期待を背景に、その核となる半導体として、パイ電子系有機分子材料を用いる研究開発が加速している。有機半導体は、炭素や水素などの共有結合からなる有機分子を基本単位とし、これらが弱いファンデルワールス力により規則正しく配列して得られる固体である。近年、新しい有機半導体の分子設計と開発が進み、製膜性・結晶性・溶解性などを制御できる材料の開発とともに、移動度などの特性が大きく向上している。これに伴いパイ電子系有機半導体の限界性能を探るため、電荷輸送を微視的に基礎づけることが強く求められている。しかしながら、これまでバンドモデルかホッピングモデルかといった出発点の議論すら、決定的な実験データの不足のため十分な状況にはなかった。

電子スピン共鳴 (ESR) 法は半導体・磁性体・金属などの電子状態を微視的に調べる実験法として、無機・有機材料を問わず利用されてきた。特に最近、スピン軌道相互作用が弱く電子スピンの緩和時間が長い有機材料の特徴を活

かし、有機半導体による電界効果型トランジスタ素子内に蓄えたごく僅かのキャリアを捉えることが可能な実験法として注目されている。<sup>1-8)</sup> ここでは、本来、真性半導体である有機半導体に対し、ゲート電圧印加によりゲート絶縁膜

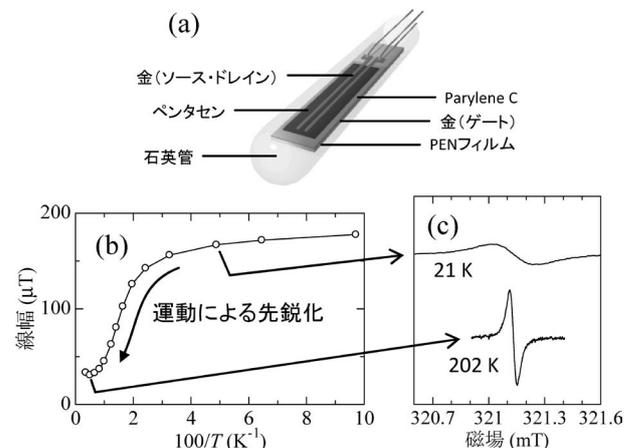


図1 (a) ESR測定用有機薄膜トランジスタのデバイス構造, (b) ペンタセン薄膜トランジスタの線幅の活性化型プロット, (c) 各温度で得られた ESR スペクトル。

との界面近傍にキャリアを誘起し、これによる ESR スペクトルを高感度に検出する(図1(a)). 室温付近では、ゲート電圧(キャリア量)や温度の変化によってスペクトル線幅が変化する「運動による尖鋭化(Motional Narrowing)効果」が観測され、キャリア輸送の特徴について議論できる.<sup>4,5)</sup> 一方低温(<数十K以下)では、ESR スペクトルの線幅はやや幅広の一定値に落ち着く(図1(b)). これは半導体内のキャリアが熱運動のエネルギーを失い、浅い局在状態(トラップ)に捕らえられ動けなくなるためである。デバイスが動作しない低温に冷却し、動けなくなったキャリアの ESR スペクトルを詳細に解析すれば、室温付近のキャリア輸送を支配する浅い局在状態について詳しく調べることができる.<sup>6,7)</sup> これが本稿で述べるスペクトル解析の出発点である。

## 2. 分子内の超微細相互作用

低温で動きを止めたキャリアの電子スピンは、トラップされたサイト毎に異なる局所的な磁場が作用するため、ESR スペクトルは不均一になる。その主な原因となるものは、電子スピんと核スピンの超微細相互作用によって生じる局所磁場である。<sup>9)</sup> とりわけ有機材料は大きな磁気モーメントを有するプロトン核を数多く含んでいる(図2)。分子軌道上の電子のスピンプロトン核スピン1個あたりから受ける超微細相互作用定数は、1 mT のオーダーに達する。これら核スピンの向きはそれぞれ独立であり、局所磁場は核スピンの向きとその組み合わせに応じて定まるため、サイト毎に異なる値をとる。電磁石によって加える外部磁場の関数として共鳴信号を測定する ESR では、局所磁場の確率分布がそのまま不均一な ESR スペクトルとして観測されることになる。

例として、典型的な有機半導体であるペンタセンの ESR

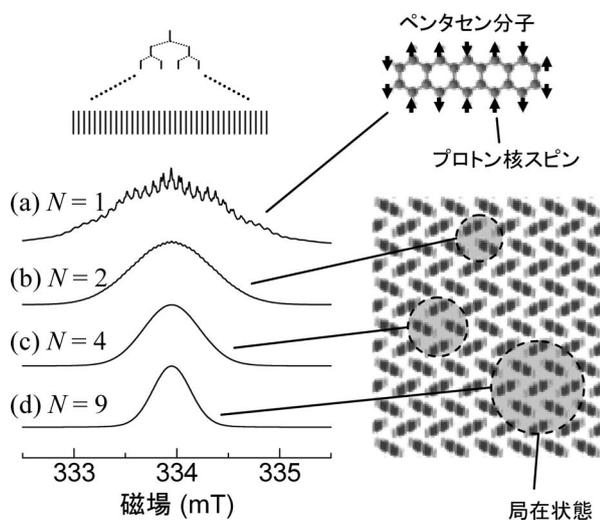


図2 ペンタセン分子内のプロトン核スピンの配向組み合わせによる局所磁場と ESR スペクトル。(a) 溶液中のペンタセン陽イオンラジカルの実測 ESR スペクトル。および固体中で (b)  $N=2$ , (c)  $N=4$ , (d)  $N=9$  分子に広がった場合の計算スペクトル。図右は固体内のキャリアの浅い局在状態の模式図。

スペクトルを溶液中で測定すると、図2(a)のような複雑に超微細分裂するスペクトルが得られる。<sup>10)</sup> 溶液中ではペンタセン分子は孤立しているため、不対電子の電子スピンはペンタセン分子内の14個のプロトン核と相互作用する。それぞれのプロトン核( $I=1/2$ )1個につき ESR 信号は2重に分裂し、最終的に【全て上向き】 $\leftrightarrow$ 【全て下向き】をそれぞれ分岐の最両端として $2^{14}=16,384$ (分子の対称性により独立な数は375)の数に分裂する。実際のスペクトルでは、個々の信号は有限の線幅によって互いに重なり合い、図2(a)のように波打つが、その包絡線はおおよそ正規分布に近い形状となる。

一方、分子が凝集した固体内では1つの電子スピンは複数の分子に広がって存在することが起こりうる。言い換えれば、固体中の電子波動関数は必ずしも単一分子に局在するとは限らない。このときの波動関数の広がり(の程度)を  $N$  分子とすると、 $N$  分子に含まれる全ての核スピンの相互作用により、スペクトルの分裂数は  $N$  に対し指数関数的に増大する一方で、各プロトン核から受ける局所磁場の大きさはもとの  $1/N$  倍となり、その分布はほぼ連続的なガウス型曲線となる(図2(b)-(d))。特に中心極限定理によれば、正規分布(ガウス型)曲線の分布幅は1分子の場合と比べ  $\sqrt{1/N}$  だけ狭くなる。有機トランジスタの ESR スペクトルを最初に報告した丸本・黒田らは、このような前提のもと、スペクトル線幅がラジカル分子溶液のスペクトル包絡線の幅と比べ約  $1/3$  程度であることから、室温でペンタセンの波動関数が10分子程度に広がっていると考えた。<sup>2,3)</sup> ただこの段階では、得られたスペクトルがガウス型でないこと、また室温付近で線幅がキャリア運動やスピン格子緩和のため温度変化すること等は考慮されていない。以下では、低温で動きを止めたキャリアの空間広がりの度合いを解き明かすため、まず次節で低温の電界誘起 ESR スペクトルを高精度に測定する方法について述べ、続いてこれを様々な分布幅を有するガウス型曲線に分解するスペクトル解析法について述べる。

## 3. 電界誘起 ESR スペクトルの精密測定

測定に用いたペンタセン薄膜は、純度の高い真性半導体による平板状の微結晶が、平板面と基板面が平行になるように一軸配向した多結晶薄膜からなる。平板状微結晶のサイズは  $100 \text{ nm}^2$  程度で、各分子の長軸はすべて基板面に対しほぼ垂直な向きを向いている。ペンタセン薄膜の電界誘起 ESR スペクトルは、基本的に自由電子の  $g$  値と近い位置に幅の狭い(十~数百  $\mu\text{T}$ )吸収線を示す。分子の  $g$  値異方性のため、磁場が基板面に垂直な場合と平行な場合で共鳴中心の磁場が若干異なるが、全ての温度・磁場方向において、左右対称な単一ピークの曲線が観測された(図1(c))。

後述するように、局在状態密度分布を得るためのスペクトル解析には、ESR スペクトルを高い S/N 比で測定することが必要である。このためデバイスは非磁性のプラスチック

クシート, ゲート絶縁膜, 膜厚 30 nm (≪ 表皮効果の厚さ) の金薄膜によって作製し, 電界誘起キャリア以外の ESR 信号が生じないように注意をはらった. ESR 信号強度は半導体薄膜の面積に比例するため, デバイスのサイズを ESR 管に収まる程度の大きさ (2.5 mm × 20 mm) とし, これを 10 枚程度重ねたものを用いた. ゲート電圧 (-200 V) を印加することにより, デバイス内には ~10<sup>13</sup> 個程度のキャリアが蓄積され, これによる ESR 信号を長時間積算により測定した. 測定は高い *Q* 値 (*TE*<sub>011</sub> モードで 4,000–6,000) の空洞共振器を備えた X バンド (9 GHz) ESR 装置を用いて行った. *g* 値の異方性によるスペクトルの幅広化の効果を避けるため, 静磁場は各微結晶の結晶軸が揃った基板面に垂直な向きに印加して測定を行った. また低温での温度揺らぎによるスピン磁化率の揺らぎを抑えるため, 高い温度安定性 (20 ± 0.01 K) のもとで測定を行った.

低温の電界誘起 ESR スペクトルが超微細相互作用に支配されていることは, 連続波飽和法による実験によって確かめられた.<sup>6)</sup> 典型的なペンタセン薄膜トランジスタについて, 入射するマイクロ波強度の関数として ESR 吸収の飽和の様子を調べたところ, 室温付近のスペクトルは, 運動による尖鋭化によって均一性が高く, 吸収飽和とともに線幅が増加していく典型的な挙動を示すことが分かった. 一方低温の 50 K 以下では, 吸収飽和のもとでも線幅は全く変化しなかった. これより, 低温の ESR スペクトルが多数のスペクトル成分からなる不均一な起源を持つことが確かめられた.

#### 4. 局在状態密度分布のスペクトル解析

低温で測定したペンタセン薄膜トランジスタの ESR スペクトルをガウス型曲線と比較すると, 明らかに裾の形状が一致していないことが分かる (図 3(a)). このように低温で動きを止めたキャリアによる ESR スペクトルがガウス型曲線にならないのは, キャリア局在の原因が一様でないためと考えられる. すなわち, 複数の浅い局在状態が存在する場合には, 実測スペクトルは線幅の異なる複数のガウス型スペクトルの足し合わせになる. *N* 分子に広がった局在状態によるガウス型スペクトルを *G*(*B*, *N*) (*B*: 磁場) とし, その状態密度分布を *D*(*N*) とするとき, 微分形の ESR スペクトル *S*(*B*) は,

$$S(B) = \int_1^{+\infty} \frac{\partial G(B, N)}{\partial B} D(N) dN, \quad (1)$$

$$G(B, N) = \sqrt{\frac{N}{2\pi\sigma_0^2}} \exp\left[-\frac{(B-B_0)^2}{2(\sigma_0^2/N)}\right]. \quad (2)$$

と表される.  $\sigma_0$  は 1 分子の場合のガウス型スペクトルの線幅, また  $B_0$  は中心共鳴磁場である. 実測のスペクトルが高い左右対称性を示すことから, 各局在状態の共鳴磁場  $B_0$  は共通とした. キャリアの広がり *N* は,  $N = (\sum_i p_i)^{-1}$  ( $p_i$  は *i* 番目の分子上の確率振幅) で定義し, 整数でなくてよいとする.  $N > 1$  の場合には,  $p_i$  が一様でない場合でもペン

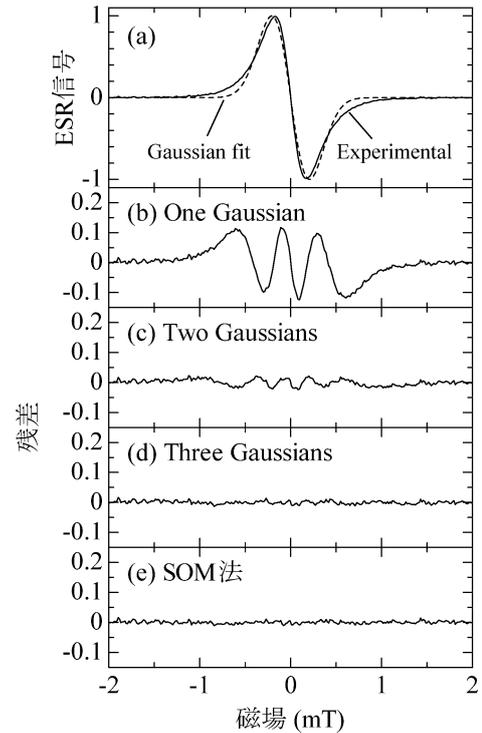


図 3 (a) ペンタセン薄膜トランジスタの低温 ESR スペクトル (実線) と単一のガウス曲線によるフィッティング (破線). (b)–(e) b: 単一ガウス曲線, c: 2 種ガウス曲線, d: 3 種ガウス曲線, e: SOM 解析によるそれぞれのフィッティング残差.

タセンの超微細スペクトルがガウス型曲線になることを確認した. 上記の積分方程式を逆問題として数値的に解くことにより, ESR スペクトルから局在状態密度分布 *D*(*N*) を得ることができる.

実験で得られる ESR スペクトル *S*(*B*) は, 有限個のデータ列から構成され, かつノイズを含むことから, スペクトル解析では, 状態密度 *D*(*N*) を数値的最適解として求めることになる. ただ (1) 式, (2) 式は非適切 (ill-posed) 問題のひとつとして知られる積分方程式で, データのノイズ成分が *D*(*N*) の揺らぎに大きく影響し, しばしば不合理な解に収束することが知られる. ここではその解法として, 統計的に独立な多数の最適解の平均により最終解を組み立てる確率的最適化法 (SOM: Stochastic Optimization Method) による解析を用いた.<sup>11, 12)</sup> 解析の信頼性を確認するため, 任意の試行関数 *D*(*N*) からまず (1) 式により *S*(*B*) を求め, これにランダムノイズを加えて得たスペクトル *S*(*B*) に関する逆問題を SOM 解析により解き, もとの *D*(*N*) と一致するかどうかを調べた. 図 4 に示すように, スペクトルのノイズレベルが低い場合には, もとの *D*(*N*) (破線) と SOM 解析により得られた状態密度 (実線) は良く一致しており, 信頼性の高い解析結果が得られることが確かめられた.

実測したペンタセン薄膜トランジスタの ESR スペクトルの解析により得られた状態密度分布 *D*(*N*) を図 5(a) に示す. *D*(*N*) は, 二つの離散的なピーク (A, B) と, 6–20 分子に広がった幅広い構造 (C) からなる. 実験で得たスペクトルと解析結果をもとに再現したスペクトルとの間の残

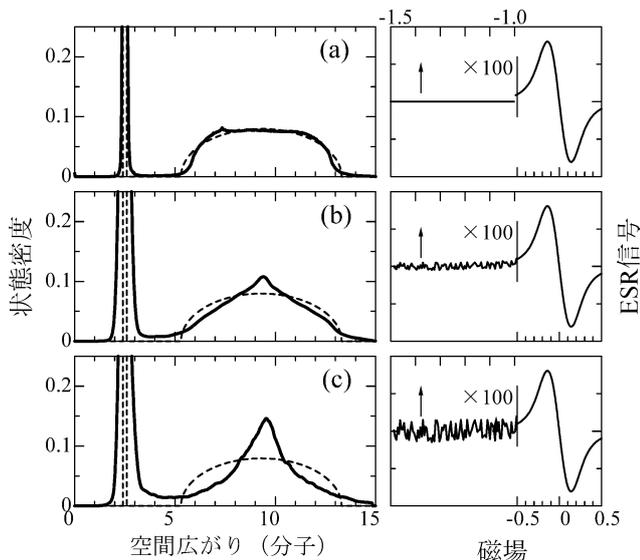


図4 確率的最適化法による積分方程式 (1) 式、(2) 式の逆問題の SOM 解析のシミュレーション。予め作成した  $D(N)$  の試行関数 (左図点線) から (1) 式により  $S(B)$  を求め、ランダムノイズを加えた ( $a < b < c$ , 右図実線) 後に、逆問題の SOM 解析により得られた  $D(N)$  (左図実線)。

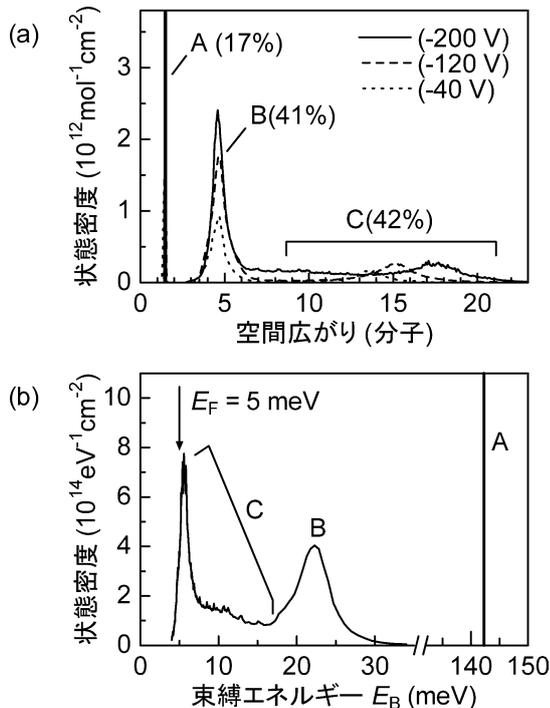


図5 (a) ペンタセン薄膜トランジスタの低温 ESR スペクトルの SOM 解析により得られた局在状態密度分布の空間広がりに対するプロット。(b) 局在状態密度の束縛エネルギーに対するプロット。

差は白色ノイズのみからなり、2種のガウス関数等によるフィッティングの結果と比べ相関ノイズは見られなかった (図3(b)-(e))。一方、3種のガウス関数でフィッティングを行った場合には相関ノイズがほぼ消失した。ここで SOM 解析には解となる関数形に前提がないことを注意しておく。これより今回用いた ESR スペクトルのノイズレベルでは、少なくとも3種の局在状態があるという結果の信頼性は高いと言える。ノイズをさらに低減することにより、より詳細な構造の解析が可能になると考えられる。

## 5. 浅い局在状態密度の分布

上記で得られた浅い局在状態は、分子配置の僅かなずれや化学変化などが結晶内に存在し、これによる引力ポテンシャルが一電子バンド幅よりも小さいため生じたものと推測される。局在状態の広がり束縛強さの関係を求めるため、二次元正方格子のホルシュタインポーラロンモデルによる次式を用いた解析を行った。

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^+ c_j + \omega_{ph} \sum_i b_i^+ b_i - \gamma \sum_i (b_i^+ + b_i) c_i^+ c_i - U c_0^+ c_0. \quad (3)$$

ここで、 $c_i^+$  ( $b_i^+$ ) は  $i$  番目の分子上のキャリア (フォノン) の生成演算子、 $\omega_{ph}$  はフォノン周波数、 $\gamma$  は電子格子結合定数、 $U$  は0番目の分子サイトにある局在中心のオンサイト引力ポテンシャルである (ハバード  $U$  でないことに注意したい)。パラメータとしてバンド計算等で得られた値 ( $t = 0.1$  eV,  $\omega_{ph} = 0.1$  eV,  $\gamma^2/4t\omega_{ph} = 0.15$ ) を仮定し、実空間ダイアグラムモンテカルロ法により、 $U$  の関数として局在状態の広がり  $N$  と束縛エネルギー  $E_B$  を求め、 $E_B$  と  $N$  を関連づけた。

図5(b)に、上記を用いて束縛エネルギー  $E_B$  に対し局在状態密度をプロットした結果を示す。離散的な局在状態は、100 meV 以上 (A) と 20-25 meV (B) にそれぞれピークを示し、また連続的な構造 (C) は、束縛エネルギーが 5-15 meV の間に分布すると見積もられた。また異なるゲート電圧 (-200 V, -120 V, -40 V) におけるスペクトルの解析から、いずれの電圧においても3種の局在状態が確認されるとともに、キャリア数増加によって、より浅い準位が占められていく様子が見てとれた。

以上の局在状態は、ペンタセン薄膜トランジスタの室温におけるデバイス動作に本質的な役割を担っていると考えられる。実際、高温領域 (>50 K) の電界誘起 ESR スペクトルが約 15 meV 程度の活性化エネルギーで運動による尖鋭化効果を示していることから、室温 ( $k_B T \sim 30$  meV) でのデバイス動作はこれら浅い局在状態へのトラップと解放を繰り返すキャリア輸送によって担われていると考えられる。薄膜の移動度の温度依存性から見積もられる活性化エネルギーはこれよりも数倍程度高いが、これは微結晶間の粒界、または半導体/電極界面の障壁ポテンシャルによるものである。実際、ペンタセン薄膜の移動度の温度依存性は、製膜条件によってしばしば異なる挙動を示している。これらの局在状態の起源について、各局在状態の中心共鳴磁場が共通であることから、その引力ポテンシャルは、結晶を構成する分子と種類・配向とも同一の分子を中心に形成されていると考えられる。その物理的な起源の解明は今後の議論を待ちたいが、例えば最も浅い準位については、アモルファスゲート誘電体内に誘起されたランダムな双極子を起源とすることなどが考えられる。

## 6. おわりに

有機薄膜トランジスタの動作を決定づける浅い局在状態を、デバイスが動作しない低温のESRスペクトルをもとに調べる手法について述べた。そこでは有機材料の二つの側面—電子スピンの緩和時間が長いこと・分子が大きな内部自由度を有すること—が、スペクトルの高精度測定と統計性にもとづく精密解析を実行する上で有用であった。本研究をきっかけとして、有機半導体のエレクトロニクス応用を基礎づけるキャリア輸送の微視的理解がさらに進むことを期待したい。またここで示した「滑らかなスペクトルから微細構造を割り出す」新しいスペクトル解析法が、他の研究分野においても役立つことがあれば幸いである。

### 参考文献

- 1) K. Marumoto, Y. Muramatsu, Y. Nagano, T. Iwata, S. Ukai, H. Ito, S. Kuroda, Y. Shimoi and S. Abe: *J. Phys. Soc. Jpn.* **74** (2005) 3066.
- 2) K. Marumoto, S.-I. Kuroda, T. Takenobu and Y. Iwasa: *Phys. Rev. Lett.* **97** (2006) 256603.
- 3) 丸本一弘, 黒田新一: *日本物理学会誌* **62** (2007) 851.
- 4) H. Matsui, T. Hasegawa, Y. Tokura, M. Hiraoka and T. Yamada: *Phys. Rev. Lett.* **100** (2008) 126601.
- 5) 長谷川達生, 松井弘之: *固体物理* **43** (2008) 351.
- 6) H. Matsui, A. S. Mishchenko and T. Hasegawa: *Phys. Rev. Lett.* **104** (2010) 056602.
- 7) A. S. Mishchenko, H. Matsui and T. Hasegawa: *Phys. Rev. B* **85** (2012) 085211.
- 8) H. Matsui, D. Kumaki, E. Takahashi, K. Takimiya, S. Tokito and T. Hase-

gawa: *Phys. Rev. B* **85** (2012) 035308.

- 9) 伊達宗行: 『電子スピン共鳴』新物理学シリーズ (培風館, 1978).
- 10) J. R. Bolton: *J. Chem. Phys.* **46** (1967) 408.
- 11) A. S. Mishchenko, N. V. Prokof'ev, A. Sakamoto and B. V. Svistunov: *Phys. Rev. B* **62** (2000) 6317.
- 12) A. S. Mishchenko: *Usp. Fiz. Nauk* **175** (2005) 925; [*Phys. Usp.* **48** (2005) 887].

### 非会員著者の紹介

ミシェンコ アンドレイ氏: ウクライナ生まれ。モスクワ国立工科大学で学位取得、クルチャトフ研究所を経て、2000年来日。研究分野は強相関電子系・電子格子強結合系の理論、モンテカルロ解析等。

(2012年3月6日原稿受付)

## Spectral Analysis for Distribution of Weakly-Localized States at Organic Semiconductor Interfaces

Tatsuo Hasegawa, Hiroyuki Matsui and Andrey S. Mishchenko

abstract: We develop a method to study the density of localized states at organic semiconductor interfaces from the fine analyses of electron spin resonance (ESR) spectra that are dominated by the interactions between electronic spins and nuclear spins. The ESR spectra from the carriers trapped at low temperature are characterized by the statistical nature, due to the hyperfine interactions with a number of nuclear spins within the molecules and the spatial extension of the carrier states. We obtain the distributions of trapped carriers over both their degree of localization and their binding energy by resolving the spectra into the Gaussian components.

## 最近の研究から

## ガラスの硬さを計るレプリカ理論

吉野 元 (大阪大学理学研究科 562-0043 豊中市待兼山1-1)

ガラスは液体のように乱れていて結晶のように硬い。最近、構造ガラス・過冷却液体の実効的な剛性率(シアモジュラス)を第一原理的に求める方法を、クローン液体論と呼ばれる理論手法に基づいて構成した。「液体をひねってガラスの硬さを求める」という一見非常に奇妙なことができることを紹介する。

### 1. はじめに

液体が冷却されると、通常ある融点  $T_m$  での1次相転移によって結晶化が起こる。一方、ガラスを作る場合、まず急冷などによってこの  $T_m$  以下の過冷却液体状態に系を持ち込む。さらに系を冷却してゆくとガラス化する。ガラスとは、液体のように乱れた構造を持ちながら、結晶と同じように剛性を持つものである。

「剛性」とは、系の体積  $V$  を変えずにその「形」だけを変える操作、すなわちシア(剪断)ひずみに対する復元力の存在を意味する。この復元力、シア応力  $\sigma$  の大きさは、微小なシアひずみの大きさ  $\gamma$  (図1a)を参照)に比例し、その

比例係数  $\mu$  はシアモジュラス(剪断弾性率)と呼ばれる。 $\mu$  は気体や液体では0、固体でのみ有限になるため弾性係数の中でも特別な意味を持ち、「剛性率」とも呼ばれる。これは、体積変化に対する弾性定数である体積弾性率が、気体でも有限であるのと対照的である。

液体と結晶の違いは、分子配置の構造の違いからも一目瞭然である。従ってどのような秩序パラメータに基づいてその相転移を理解するべきかも明快であった。ところがガラスは、その構造を液体と比べても違いは見られず、結晶のような自明な秩序パラメータが見つからない。ガラス転移の理解はその入り口から困難があり、物理学の未解決問

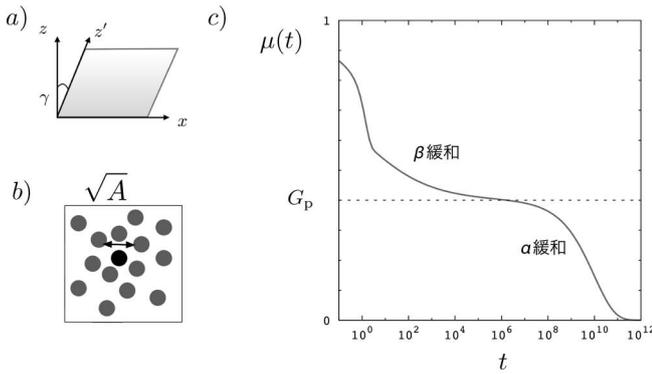


図1 ガラス・過冷却液体におけるシア応力緩和の模式図。a) に示すように、シア（剪断）は系の体積  $V$  を変化させずに、「形」だけを変える摂動であり、その摂動の大きさは、シアひずみ  $\gamma$  で与えられる。系に微小なシアひずみ  $\gamma$  を加えると、その線形応答としてシア応力  $\sigma$  が発生し、その値はシアひずみを入れてからの経過時間  $t$  とともに減衰する。c) はガラス・過冷却液体における応答関数  $\mu(t) = \sigma(t)/\gamma$  の典型的な振る舞いを示している。ここでは摂動を加えた瞬間の値を  $\mu(0) = 1$  としている。ガラス・過冷却液体においてはこのような2段階緩和が見られる。 $\beta$ 緩和の領域では、b) のように、個々の粒子は周囲の粒子に囲まれた、ある大きさ  $\sqrt{A}$  のケージ構造の中に捕われている。 $\alpha$ 緩和の緩和時間  $\tau_\alpha$  よりも短い時間スケールでは、系は有限の実効的な剛性率（平坦部弾性率） $G_p$  を持つ固体として捉えられる。温度の低下などによって緩和時間  $\tau_\alpha$  は急激に増大し、現実的な時間スケールを超えてしまう。

題として今なお、残されている。<sup>1-3)</sup>

しかし、剛性率の有無の判定は、操作としては明快である。ならば剛性率の解析からガラスの物性、ガラス転移の研究をするのは意味がありそうである。固体が硬いなどということは日常的には当たり前で、普段は気にも止めていないことかも知れないが、物理としては今一度考えてみる価値のある問題である。<sup>4)</sup> いずれにせよ剛性率は応用上も重要な基本的な物性値であることは間違いない。本稿では、クローン液体論<sup>5,6)</sup> と呼ばれる第一原理的な方法を用いて、ガラスの剛性率を解析する微視的理論を紹介する。<sup>7,8)</sup>

ところが少し考え始めると、思いがけず次のような根本的なパラドックスに遭遇し、ガラスはおろか、剛性率とはそもそも何なのか、考え直さなければならなくなってしまう。

## 2. 剛性率をめぐるパラドックス

剛性率の定義を考える。図1a) のように、ある分子（粒子）密度  $\rho$  の系を収める「箱」がシアによって変形可能であるとすると、その自由エネルギー  $F = Nf$  ( $N = \rho V$ ) がシアひずみ  $\gamma$  の解析的な関数であるとすると、一粒子あたりの自由エネルギー  $f(\gamma) = F(\gamma)/N$  は、

$$f(\gamma) = f(0) + \sigma\gamma + \frac{\gamma^2}{2}\mu + \dots \quad (1)$$

のように展開できる。ここで展開係数  $\sigma$  をシア応力、 $\mu$  を剛性率と解釈できる。しかし、熱力学的な自由エネルギーは、「箱」の形などによってはならないはずである。すなわち、熱力学極限  $N \rightarrow \infty$  で  $f(\gamma)$  は  $\gamma$  に依存しなくなるので、中身が液体であろうと、固体であろうと、熱力学的な意味での剛性率はつねに0になる(!) はずである。<sup>9)</sup> これは明らか

に固体で  $\mu > 0$  を期待する素朴な直感と矛盾する。

この「パラドックス」は、固体においては熱力学極限  $N \rightarrow \infty$  と、シアひずみ0の極限  $\gamma \rightarrow 0$  が交換しないことを意味している。<sup>7,8)</sup> 「線形応答」としての剛性率  $\mu$  は、 $\gamma \rightarrow 0$  の方を先にとって定義する。固体において  $\mu > 0$  となることは、2つの極限が非可換になることを意味する。これは並進対称性の破れを反映していると考えられる。さらに固体における線形応答の破綻をも意味する。剛性率が特徴づける「弾性」とともに、「降伏」あるいは「塑性」と呼ばれる非線形応答が現れて流動が起こり、巨視的なスケールで並進対称性が回復し、熱力学と整合するのである。

このように剛性率は、微妙な問題を孕んだ物理量である。しかし、線形応答の意味での剛性率  $\mu$  は、相転移を感知する繊細なセンサーとして働くことは間違いなさそうである。

しかしまた疑問にぶつかる。線形応答が破綻するのであれば、剛性率など無意味ではないか？ そもそも、ガラスは非平衡状態にあり、統計力学による解析など不可能では？ これらの疑問を念頭に、実際にガラス化する系で観測される、「応力緩和」という現象について次に議論する。

## 3. 剛性と粘性、2段階緩和

「水は方円の器に従う」という言葉の通り、液体や気体は、「形」を際限なく変化できる。つまり流動性を持つ。シアひずみのある一定の割合  $\dot{\gamma}$  で時間とともに増大させるときに発生するシア応力  $\sigma$  の大きさは、シアひずみ速度  $\dot{\gamma}$  が十分小さいときにはこれに比例し、その比例係数  $\eta$  を粘性率と呼ぶ。粘性は、流動しにくさを表す。流動性がないこと  $\eta = \infty$  を、固体の定義とすることもできる。剛性と粘性は、ともにシア（剪断）に対する系の抵抗を特徴づける。

これまで述べてきたことと矛盾するようであるが、実際の系では、しばしば時間領域を分けてこの2つの物性が共存する。すなわち、シアに対する「短時間」の応答は（実効的な）「剛性」を、「長時間」の応答は「粘性」を示す、ということである。例えば、マントルは岩石だが対流している。このような剛性と粘性の共存は「粘弾性」と呼ばれる。自然界に広く見られるこの現象を研究する分野をレオロジーと呼ぶ。線形応答理論の枠組みの中では、剛性と粘性を揺らぎの公式によって統一的に記述することができる。<sup>8)</sup>

粘弾性を観測する一つの標準的な方法は、ある瞬間にシアひずみ  $\gamma$  をかけてから、その応答としてのシア応力  $\sigma(t)$  の時間変化を追うことである。ガラス化する系の、過冷却液体状態における応力緩和の模式図を図1c) に示す。動的な剛性率を  $\mu(t) = \sigma(t)/\gamma$  と定義すると、これは時間  $t$  とともに緩和してゆく。固体ならばある有限の静的な剛性率  $\mu$  までの緩和にとどまる。液体の場合は0まで緩和する。粘性率  $\eta$  が高いほどその緩和は遅くなる。

過冷却液体・ガラスに普遍的に見られる重要な特徴は、その応力緩和  $\mu(t)$  が図1c) のように特徴的な「平坦部」(plateau) を伴う、「2段階緩和」によって起こるというこ

とである。<sup>1)</sup> すなわち、平坦部付近での $\beta$ 緩和、平坦部から0まで緩和する $\alpha$ 緩和からなっている。温度を下げてゆくと、この $\alpha$ 緩和の緩和時間 $\tau_\alpha$ が増大し、現実的な実験室の時間スケールを超えてしまい、実質的に $\eta = \infty$ 、すなわちガラスとなる。注目したいのは、完全にガラス化する前の過冷却液体状態から、系は $\beta$ 緩和の時間領域で、図1c)にある平坦部の高さに対応した、ある実効的な剛性率 $G_p$ を持つ固体として振る舞うということである。この実効的な剛性率は「平坦部弾性率」(plateau modulus)と呼ばれる。

応力緩和においても、長時間においては非線形応答が支配的になり、最終的には線形応答が破綻し、 $\mu(t)$ は摂動の強さ $\gamma$ の値にあらわに依存するようになる。ただし非線形性は、 $\beta$ 緩和ではそれほど強くないことが知られている。さらにエイジング効果など、非平衡ダイナミクスの特徴も、 $\beta$ 緩和にはほとんど現れないことが知られている。このような $\alpha$ 緩和、 $\beta$ 緩和の定性的な違いの背後には、次節で紹介する「ケージ構造」、と呼ばれる過冷却液体・ガラスの物理において重要なメカニズムがある。

以上のことから、もし何らかの方法で $\alpha$ 緩和と $\beta$ 緩和を「切り分ける」ことができれば、平坦部弾性率 $G_p$ を統計力学的な手法で抽出することができるかも知れない、と思われる。しかしそんなうまい手があるのだろうか？ 我々は、後で紹介するように、「レプリカ法」と呼ばれるトリックを用いると、この「切り分け」が可能であることに気付いた。

#### 4. ガラスの秩序パラメータ

2段階緩和の物理的な描像は、次のようなものである。まず、 $\beta$ 緩和の時間領域では、図1b)に模式的に表すように、個々の分子は周囲の分子に囲まれて自由な運動を束縛された「ケージ」と呼ばれる構造に捕まっている。結晶でこれに対応するものは、結晶格子点のまわりの微小な熱振動である。一方、 $\alpha$ 緩和では、このケージ構造そのものが組み替えられる。これは、構造緩和とも呼ばれる。ケージ構造の存在は、寿命の長い、ある安定性を持った状態の存在を示唆する。特にもしある温度で構造緩和時間 $\tau_\alpha$ が発散すれば、その温度以下で無限の寿命を持った準安定なアモルファス固体状態が存在することを意味する。このことから、ガラスの秩序パラメータの候補が一つ浮かび上がる。

各分子(以下「粒子」)の座標 $\mathbf{r}_i(t)$  ( $i=1, 2, \dots, N$ )の時間 $t$ による変化を追ってみる。ここで $\alpha$ 緩和を一旦忘れ、ケージ構造が壊れないという理想的な状況を仮に想定してみる。この場合、粒子の平均自乗変位は長時間極限で収束し、

$$A = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2Nd} \sum_{i=1}^N \langle (\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0))^2 \rangle_{\text{ini}} \quad (2)$$

をケージの大きさの指標とできる。ここで $d$ は空間次元、 $\langle \dots \rangle_{\text{ini}}$ は初期配位についての平均である。過冷却液体のモード結合理論<sup>10,3)</sup>は、ケージサイズ $A$ が有限になるガラス転移が起こりうることを、初めて微視的理論によって示した。興味深いことに、この本来動的な量は、以下のように

全く静的な物理量として再定義できる。<sup>5)</sup>

全く同じ形のハミルトニアンに従う、それぞれ $N$ 個の粒子からなる2つのグループ $a, b$ を考える。 $a, b$ 間に、あらわな相互作用はない。これをレプリカと呼ぶ。レプリカ $a, b$ に含まれる粒子の座標をそれぞれ $\mathbf{r}_i^a, \mathbf{r}_i^b$ とする。上記の平均自乗変位の収束値 $A$ は、レプリカ $a, b$ の間の平均自乗「距離」の熱期待値として以下のように表せる。

$$A = \frac{1}{2Nd} \sum_{i=1}^N \langle (\mathbf{r}_i^a - \mathbf{r}_i^b)^2 \rangle \quad (3)$$

ここで、 $\langle \dots \rangle$ は熱平均である。すなわち、もし $A$ が有限であれば固体であり、無限大であれば液体と判定できる。これは粒子配位が空間的に無秩序でも、固体か液体かを判別でき、結晶などの空間的秩序の有無に注目する通常の秩序パラメータとは全く異なる。以上のようにケージサイズは、動的、静的側面を併せ持つ秩序パラメータである。

もしケージサイズが有限になるとすれば、準安定状態が存在する。このガラスの秩序パラメータのアイディアは、スピングラスにおけるEdwards-Anderson (EA) 秩序パラメータ<sup>11)</sup>に倣っている。スピングラスにおいては、EA秩序パラメータが有限になるスピングラス転移が、熱平衡相転移として存在することが理論的にも実験的にも確立している。一方、現実のガラスにおいて、寿命が無限大の準安定状態が本当に存在するのかどうかは、決着していない。

しかし、構造ガラスとは一見無関係な、あるクラスの拡張された平均場スピングラス模型において、構造ガラスと非常に良く似た振る舞いが「理想的な形」で起きていることが1980年代半ばにKirkpatrick, Thirumalai, Wolynesらの研究によって明らかになった。<sup>12)</sup> これらの系のスピン自己相関関数は高温側で、モード結合理論<sup>10,3)</sup>と同じ時間発展方程式に厳密に従って、前述の2段階緩和( $\alpha, \beta$ 緩和)を示す。また、次節で紹介するような「熱力学的な」ガラス転移がいわゆる1段階のレプリカ対称性の破れ(RSB)を伴って起こる。この知見はガラスの平均場理論の存在を予感させた。Kirkpatrickらの研究に引き続いて、1990年代以降、主にヨーロッパで行われたこれらの平均場スピングラス模型の平衡、非平衡状態についての徹底した研究と、それによる解析技法の進歩が、クローン液体論の誕生を促した。Kirkpatrickらの研究から始まるこの一連の理論を総称してRandom First Order Transition (RFOT) 理論と呼ぶ。<sup>13)</sup>

#### 5. ガラス転移の平均場描像

ここで、RFOT理論<sup>13)</sup>の枠組みの中での、ガラス転移についての平均場描像について紹介する。準安定状態の1つ1つを $\alpha=1, 2, 3, \dots$ のようにラベルし、それぞれの1粒子あたりの自由エネルギーを $f_\alpha(T)$ とすると、逆温度を $\beta=1/k_B T$ として、系全体の自由エネルギー $F$ は形式的に、

$$-\beta F = \log Z \quad Z = \sum_{\alpha} e^{-N\beta f_\alpha} = \int d\mathbf{f} e^{N(-\beta f + \Sigma(\mathbf{f}, T))} \quad (4)$$

のように表せる。ここで、 $\Sigma(\mathbf{f}, T)$ は構造エントロピーま

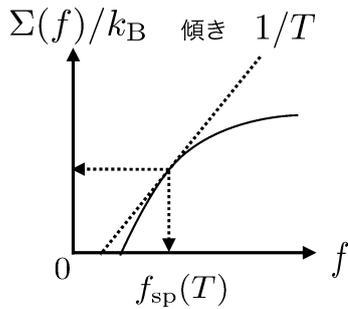


図2 過冷却液体・ガラスにおける構造エントロピーの模式図。熱平衡状態は、関数 $\Sigma(f)$ の傾き $1/T$ の接線の接点で与えられる。カウズマン転移温度 $T_K$  (熱力学的なガラス転移温度)は、接点での構造エントロピーが0になる温度である。

たは complexity と呼ばれる量であり、

$$\Sigma(f, T) \equiv \frac{1}{N} \log \sum_{\alpha} \delta(f - f_{\alpha}(T)) \quad (5)$$

と定義される。構造エントロピーが有限にあるということは、指数関数的に多くの準安定状態があることを意味する。これは過冷却液体の比熱測定に基づく考察によって、以前から示唆されていた。<sup>14)</sup> また、前述の平均場スピングラス模型においては、理論的に求められている。

構造エントロピーの存在を認め、それが $f$ について図2のように上に凸な関数であるとすると、(4)の第2式の積分は、熱力学極限 $N \rightarrow \infty$ で鞍点法によって評価できる。その結果、自由エネルギーは

$$\lim_{N \rightarrow \infty} F/N = f_{\text{sp}}(T) \quad \beta \equiv - \left. \frac{\partial \Sigma(f, T)}{\partial f} \right|_{f=f_{\text{sp}}(T)} \quad (6)$$

ようになる。ここで $f_{\text{sp}}(T)$ が鞍点での自由エネルギーで、その値は第2式によって決まる。これは図2で構造エントロピーに対して傾き $1/T$ の接線を引くことによって求められる接点の位置に対応する。鞍点での構造エントロピーの値が正である限り、指数関数的に多くの準安定状態が熱力学に寄与していることになり、熱力学的には液体状態にある。これが、過冷却液体に対する平均場描像である。

温度 $T$ を下げて行くと鞍点は図2の左の方に移動してゆく。このとき、系の熱力学を支配する準安定状態の数は次第に減少してゆく。そしてある温度 $T_K$ で、鞍点での構造エントロピーが0になる。この温度以下では、自由エネルギーの最も低い準安定状態が熱力学を支配するようになる。これは(もし本当に存在すれば)熱力学的な相転移であり、カウズマン転移<sup>14)</sup>と呼ばれる。このカウズマン転移において、構造緩和時間 $\tau_{\alpha}$ が発散するという予想が1960年代に既に現象論的に提案されていた。<sup>15)</sup> 最近、より微視的な理論解析や詳細な数値実験によってその是非を明らかにする試みがRFOT理論の枠組みに基づいて活発に行われている。

## 6. クローン液体

上で秩序パラメーター $A$ を定義するために、2つのレプリカを用いたが、これを $m$ 個に拡張してみる。この $m$ 個のレプリカが、ある有限のケージサイズ $A < \infty$ のケージの

中に留まっている、すなわち同じ準安定状態に留まっている、という状況を考える。このような系を「クローン系」と呼ぶ。<sup>5)</sup> クローン系の自由エネルギーは形式的に、

$$-m\beta F_m(T) \equiv \log \sum_{\alpha} e^{-Nm\beta f_{\alpha}(T)} = \log \int df e^{-N(m\beta f - \Sigma(f, T))} \quad (7)$$

のように表すことができる。前出の(4)式と比べると、指数関数の肩が $-Nm\beta f_{\alpha}$ となっていて、因子 $m$ だけ異なっている。これは今、 $m$ 個のレプリカがつねに同じ準安定状態にいる、「クローン系」を考えているからである。このことは、クローン系の実効的な温度が、元々の温度 $T$ から、有効温度 $T_{\text{eff}}(m) = T/m$ に変わっていることを意味する。

クローン液体論<sup>5)</sup>では、以下に見るようにこのパラメータ $m$ を自然数から実数に解析接続し、積極的に利用する。その一つの重要な理由は、この有効温度 $T_{\text{eff}}(m) = T/m$ を制御できるからである。知りたいのは、クローン系の自由エネルギーなどではなく、あくまである1つの系( $m=1$ )のガラスの自由エネルギーであるが、「ガラス」の自由エネルギーを直接計算する手段などはない。そこで $m$ を十分小さく取って、有効温度 $T_{\text{eff}}(m)$ を引き上げておいて、クローン系を「液体」に保ち、液体の自由エネルギー $F_m(T)$ の極限 $\lim_{m \rightarrow 1} F_m(T)$ を考えよう、というのが戦略である。

そこで、クローン系の自由エネルギー $F_m(T)$ の性質について少し考察する。上の(7)の第2式は、再び鞍点法によって評価できる。すなわち、図2での「傾き $1/T$ 」を $1/T_{\text{eff}} = m/T$ に読み直せば良い。温度 $T$ を固定したまま、 $m$ を変化させることができる。このとき温度 $T$ が、仮にカウズマン温度 $T_K$ より低いような低温であっても、 $m$ を十分小さくしておけば、実効的な温度 $T_{\text{eff}}(m)$ は十分に高くなり、鞍点における complexity の値、つまり構造エントロピーを正にすることができる。つまり、このときこのクローン系全体はある種の(過冷却)液体にあるとみなせ、密度汎関数理論<sup>16)</sup>など液体論の技法を用いてその自由エネルギーを評価することができる。さて、ここから $m$ をおもむろに増大させてゆくとある臨界値 $m^*(T)$ で、接点における complexity が0になり、 $m$ 軸上でのカウズマン転移が起こる。今度は、これ以上 $m$ を増大させても、鞍点は止まったままであり、クローン系の自由エネルギーは変化しない。つまり、 $m=1$ におけるガラスの自由エネルギーが、 $F_{m^*(T)}(T)/N = f_{\text{sp}}(T, m=m^*(T))$ と求められる。ここで $f_{\text{sp}}(T, m)$ は、鞍点の位置である。このことは、本質的に液体の情報だけでガラス相の熱力学量が計算できてしまうことを示唆している。

具体的に、 $N$ 個の「粒子」が互いの距離 $r$ の関数であるポテンシャル $v(r)$ によって2体相互作用する系を考える。系のハミルトニアンは、

$$H = \sum_{i < j} v(r_{ij}) \quad (8)$$

となる。 $m$ 個の全てのレプリカにおいて、それぞれに属する粒子がこの形のハミルトニアンに従っている。この系における、クローン液体状態を考えると以下のようなものに

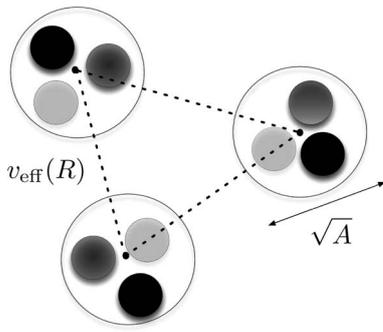


図3 クローン液体の概念図. 異なるレプリカに属する分子が, 互いにある距離 $\sqrt{A}$ の範囲に留まって, クラスタ (1, 2, ...) を形成している. ここで $A$ はケージサイズで, 秩序パラメータである. クラスタ同士は, 互いの重心間距離 $R$ に依存する有効相互作用 $v_{\text{eff}}(R)$ で相互作用している.

なる.<sup>5)</sup> 図3の模式図に示すように, その構成要素は $N$ 個の「クラスタ」で, それぞれ $m$ 個の「レプリカ粒子」から構成されている. これらのレプリカ粒子はクラスタの重心の周り $\sqrt{A}$ 程度の範囲で熱的に揺らいでいる. 一方, クラスタ同士は, 互いの重心間距離 $R$ に依存する有効ポテンシャル $v_{\text{eff}}(R)$ で相互作用している. この $v_{\text{eff}}(R)$ は, 元々のポテンシャル $v(R)$ に, 上記のクラスタ内の熱揺らぎによる補正を加えたものになっている. このクラスタの集団は, 実効的な温度 $T_{\text{eff}}(m) = T/m$ の熱平衡状態にある. このクローン液体の自由エネルギーは, クラスタ内の揺らぎの大きさを指定するケージサイズ $A$ の関数になっており, これについての変分条件から秩序パラメータであるケージサイズが極値 $A^*(T, m)$ として求まる.

ここでのレプリカの使い方は, 従来のランダム系の統計力学とは全く異なる (そもそもハミルトニアンにランダムネスがない!). しかし, 実は上記の $m^*(T)$ は, 1段階のRSBを表すいわゆるParisi行列における, ブロック行列の大きさに対応し, 物理的にも密接な対応関係がある.<sup>5,8)</sup>

## 7. 構造ガラスの剛性率の第一原理的計算

このクローン液体の方法は, アクロバティックに見えるが, 構造エントロピーや比熱などの計算において有意な結果を産み出してきた.<sup>5,6)</sup> そこで, 我々はこれを使って構造ガラスの剛性率を解析することができないか, 検討を始めた. しかし, また根本的な疑問にぶつかってしまう: 「クローン液体はあくまで液体なのだから, 剛性率は0でしかないのではないのか? そもそも, 液体の情報からガラスの物性を引き出すなど, おかしいのではないのか?」

しかし, 図3で模式的に表したクローン液体において, クラスタの配置の変化が $\alpha$ 緩和に, クラスタ内のレプリカ粒子の揺らぎが $\beta$ 緩和に対応していると見なすと,  $\alpha$ 緩和,  $\beta$ 緩和を「切り分け」, 実効的な剛性率 $G_p$ を取り出すことができるのではないかと, どの期待が湧いてくる.

具体的な解析に入る前に, まず $m$ 個のレプリカからなるクローン系(7)で, レプリカごとに異なるシアひずみ

$\gamma_a (a=1, 2, \dots, m)$  を掛けることを仮想的に考える.<sup>7,8)</sup> このとき, 系の自由エネルギーは形式的に次のように展開できる.

$$\begin{aligned} -m\beta F_m(T, \{\gamma_a\}) &\equiv \log \sum_{\alpha} e^{-N \sum_{a=1}^m \beta f_{\alpha}(T, \gamma_a)} \\ &= -m\beta F_m(T, \{0\}) + V \langle \sigma \rangle \sum_{a=1}^m \gamma_a \\ &\quad + V \sum_{a,b=1}^m \frac{\mu_{ab}}{2} \gamma_a \gamma_b + \dots \end{aligned} \quad (9)$$

ここで $\mu_{ab}$ は, ある種の拡張された剛性率(行列)で,

$$\mu_{ab} = \hat{\mu} \delta_{ab} + \tilde{\mu} \quad (10)$$

$$\hat{\mu} \equiv \llbracket \mu_{\alpha} \rrbracket_{T,m} \quad \tilde{\mu} \equiv -\beta V (\llbracket \sigma_{\alpha}^2 \rrbracket_{T,m} - \llbracket \sigma_{\alpha} \rrbracket_{T,m}^2) \quad (11)$$

と表せる. ただし $\sigma_{\alpha}$ ,  $\mu_{\alpha}$ はそれぞれ準安定状態 $\alpha$ に固有の内部応力, 剛性率であり, 数密度を $\rho = N/V$ として,

$$\sigma_{\alpha} \equiv \rho \frac{\partial f_{\alpha}(T, \gamma)}{\partial \gamma} \quad \mu_{\alpha} \equiv \rho \frac{\partial^2 f_{\alpha}(T, \gamma)}{\partial \gamma^2} \quad (12)$$

と定義される. また $\llbracket \dots \rrbracket_{T,m}$ は準安定状態のアンサンブル平均で, 次式のように定義される.

$$\llbracket \dots \rrbracket_{T,m} \equiv \frac{\sum_{\alpha} e^{-Nm\beta f_{\alpha}(T)} \dots}{\sum_{\alpha} e^{-Nm\beta f_{\alpha}(T)}} \quad (13)$$

(11)の第1式の $\hat{\mu}$ は準安定状態「内」における熱揺らぎの効果( $\beta$ 緩和)を繰り込んだ実効的な剛性率であり, 平坦部弾性率 $G_p$ に対応する, と解釈できる. 一方, (11)の第2式の $\tilde{\mu}$ は, 異なる準安定状態「間」を乗り移る熱揺らぎ( $\alpha$ 緩和)による, 剛性率のさらなる低下を表している.

実際にクローン液体の方法を用いて, 剛性率行列 $\mu_{ab}$ の計算を実行すると, 嬉しいことに, 確かに(10)式の形の行列が得られ, 「切り分け」ができることがわかった. さらに,

$$\sum_b \mu_{ab} = \hat{\mu} + m\tilde{\mu} = 0 \quad (14)$$

という和則が成り立つことがわかった. すなわち, 全てのレプリカに一樣なシアひずみ $\gamma_a = \gamma_b = \dots$ を掛ける操作については, 剛性率が0となる. すなわち, 当然だがクローン液体は, 確かに全体としては「ただの液体」なのである.

この和則の物理的な意義を考えてみる. これは, 準安定状態「間」の応答が,  $\tilde{\mu} = -(1/m)\hat{\mu}$ のように準安定状態「内」の剛性率 $\hat{\mu}$ と関係づけられている, とも読める. しかしこの「負の剛性率」が一体何を意味するのか当初はさっぱり理解できなかった. しかし, スピングラスにおけるある問題<sup>17)</sup>との類似性をヒントにすると, シアによって準安定状態がレベル交差し, ある種の(静的な)「降伏」が起こることを意味していることに気がついた. これが, 2節で議論した「パラドックス」を解消するメカニズムであることを和則(14)式は示唆している.

さらに, 準安定状態の剛性率 $\hat{\mu}$ は次式のように得られた.

$$\hat{\mu} = \frac{\rho}{2} \int_{\mathbf{r}} g_*(r) b_{\text{eff}}(r) - \frac{d}{\frac{\rho}{2} \int_{\mathbf{r}} g_*(r) \nabla^2 v(r)} \left[ \rho \int_{\mathbf{r}} g_*(r) |\nabla \sigma(\mathbf{r})|^2 + \rho^2 \int_{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2} g_*^{(3)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \nabla \sigma(\mathbf{r}_1) \cdot \nabla \sigma(\mathbf{r}_2) \right] \quad (15)$$

ケージサイズ  $A$  が小さいとしたケージ展開 (低温展開) を用いた結果である。ここで  $\int_{\mathbf{r}}$  は空間積分である。また  $g_*(r)$  と  $g_*^{(3)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  はそれぞれ有効温度  $T_{\text{eff}} = T/m^*(T)$  における動径分布関数および3体分布関数である。これらは、既存の液体の密度汎関数理論<sup>16)</sup> によって求めることができる。

(15)式の右辺第1項は、有効ポテンシャル  $v_{\text{eff}}(r)$  で相互作用する「クラスター」液体の、アフィン変形による自明な剛性で、ボルン項と呼ばれる。  $b_{\text{eff}}(r)$  は、  $v_{\text{eff}}(r)$  の2階微分を用いて表される。「アフィン変形」とは、例えば図1a)の  $x$ - $z$  平面の中のある一点  $(x, z)$  を、  $(x+\gamma z, z)$  にそのまま移すというものである。

一方、第2項はケージ内での粒子の緩和によるアフィン変形からのずれ、非アフィン変形の効果を表す。これはまさに、応力緩和 (図2参照) での平坦部までの緩和、 $\beta$ 緩和に相当する。  $\sigma(r)$  は、相互作用によるシア応力への寄与で  $v(r)$  の1階微分を用いて表される。

非アフィン変形は、乱れた固体において重要である。バネ定数が乱れたばねのネットワークにシアを掛けることを想像してみると、アフィン変形からずれた応答が現れるのは容易に想像できよう。また前述した「負の剛性率」 $\hat{\mu}$  は、「塑性的」な非アフィン変形を表している。<sup>20)</sup>

最近、Athermal Quasi-static Shear (AQS) 過程と呼ばれる、断熱的なシア変形過程における非アフィン変形が詳しく数値解析されている。<sup>21)</sup> 興味深いことにハミルトニアン (8) をエネルギー極小状態近傍での調和近似で置き換えると、レプリカ法を経由しないで (15)式を直感的に導出でき、

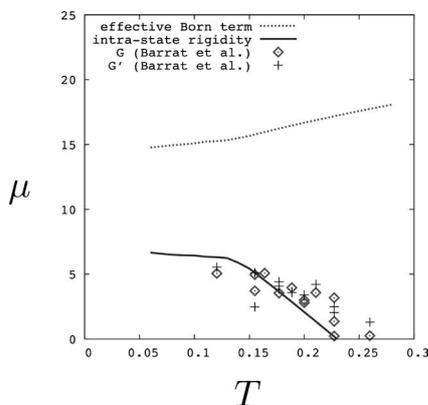


図4 2成分ソフトポテンシャル系での剛性率: 点線および実線は理論計算値<sup>7,8)</sup>で、それぞれアフィン変形による剛性 ((15)式の右辺第1項)、また非アフィン変形による補正 ((15)式の右辺第2項) を含む、準安定状態の剛性率  $\hat{\mu}$  である。記号は以前に行われたMDシミュレーション<sup>18)</sup> による剛性率の測定結果。(注: 2種類の剛性率  $G=C_{44}$  と  $G'=(C_{11}-C_{12})/2$  はガラスの場合、空間的な等方性により一致する。) この系のカウズマン転移温度は  $T_k=0.12$ <sup>6)</sup>、MCT (疑似) 臨界点は  $T_{\text{MCT}}=0.23$ <sup>19)</sup> である。(ここではエネルギーの単位を  $e_0=1$ 、またボルツマン定数を  $k_B=1$  とした。)

AQSでの剛性率の表式と対応することがわかる。<sup>8)</sup>

具体的にソフトポテンシャル  $v(r)=e_0(r/\sigma)^{-12}$  の系における、剛性率  $\hat{\mu}$  の計算を行った例<sup>7,8)</sup> を図4に示す。液体密度汎関数法としてはHNC近似<sup>16)</sup> を用いた。剛性率  $\hat{\mu}$  の温度依存性を見ると、 $T_k$  以下ではほとんど温度によらず、一方  $T_k$  以上では顕著に減少していることが注目される。これは圧倒的に、ケージ内での緩和 ( $\beta$ 緩和) による非アフィン変形の効果である。また全温度で非アフィン変形による補正が大きい。また、カウズマン転移温度  $T_k$  が、剛性率  $\hat{\mu}$  の温度依存性に現れていることも興味深い。

図4には以前の分子動力学 (MD) シミュレーション<sup>18)</sup> の結果も示しているが、理論はこれをフィッティング・パラメータなしでほぼ再現している。なお、モード結合理論の予想する疑似臨界温度  $T_{\text{MCT}}$  付近で剛性率が連続的に0になるように見えるが、低次のケージ展開では捉えられない小さな不連続性が存在している可能性がある。<sup>8)</sup>

## 8. おわりに

本稿で紹介したアプローチが、ジャミング転移<sup>22)</sup> を含め、ガラス系の物性研究、さらには材料科学にも役立つことを期待したい。レプリカ法を用いて、 $\alpha$ 緩和と $\beta$ 緩和を「切り分け」、過冷却液体・ガラスの準静的な応答関数を取り出す方法は他の物理量に対しても自然に応用できる。<sup>8)</sup>

これまでのクローン液体論は、いわばガラスのアインシュタイン模型の段階にあったが、これに基づいて剛性率を評価したことは、第一原理的にデバイ模型を抽出したことに相当する。今後、ケージサイズや、シアひずみ場の空間揺らぎ、これらの結合に注目することにより、過冷却液体における異常に高い粘性、揺らぎの不均一性、非線形レオロジーのメカニズムを解明したいと考えている。

本研究はMarc Mézard教授 (Univ. Paris Sud) との共同研究です。本研究は、Triangle de la physiqueの研究助成を受けて行われました。この場を借りて感謝いたします。

## 参考文献

- 1) C. A. Angel, *et al.*: *J. Appl. Phys.* **88** (2000) 3113.
- 2) 山本量一, 小貫 明: *日本物理学会誌* **60** (2005) 602.
- 3) 宮崎州正: *日本物理学会誌* **62** (2007) 431.
- 4) P. W. Anderson: *Science* **117** (1972) 393.
- 5) M. Mézard and G. Parisi: *J. Chem. Phys.* **111** (1999) 1076; G. Parisi and F. Zamponi: *Rev. Mod. Phys.* **82** (2010) 789.
- 6) B. Coluzzi, *et al.*: *J. Chem. Phys.* **111** (1999) 9039.
- 7) H. Yoshino and M. Mézard: *Phys. Rev. Lett.* **105** (2010) 015504.
- 8) H. Yoshino: *J. Chem. Phys.* **136** (2012) 214108.
- 9) O. Penrose: *Markov Processes and Related Fields* **8** (2002) 351.
- 10) W. Götze and L. Sjögren: *Rep. Prog. Phys.* **55** (1992) 241.
- 11) S. F. Edwards and P. W. Anderson: *J. Phys. F: Met. Phys.* **5** (1975) 965.
- 12) T. R. Kirkpatrick and D. Thirumalai: *Phys. Rev. Lett.* **58** (1987) 2091; T. R. Kirkpatrick and P. G. Wolynes: *Phys. Rev. B* **36** (1987) 8552.
- 13) レビューとして G. Biroli and J.-P. Bouchaud: in *Structural Glasses and Supercooled Liquids: Theory, Experiment, and Applications*, Eds. P. G. Wolynes and V. Lubchenko (Wiley, 2012) preprint arXiv: 0912.2542.
- 14) A. W. Kauzmann: *Chem. Rev.* **43** (1948) 219.
- 15) G. Adam and J. H. Gibbs: *J. Chem. Phys.* **43** (1965) 139.
- 16) J.-P. Hansen and I. R. McDonald: *Theory of Simple Liquids* (Academic

Press, 2006).

- 17) メソスケールでのスピングラスの間欠的な磁場応答 (H. Yoshino and T. Rizzo: Phys. Rev. B **77** (2008) 104429) に類似した現象が、構造ガラスにもあるのではないか、と共同研究者の Marc Mézard 氏に促されたことが、実はこの研究のきっかけであった。
- 18) J. L. Barrat, *et al.*: Europhys. Lett. **7** (1988) 707.
- 19) J. N. Roux, *et al.*: J. Phys.: Condens. Matter **1** (1989) 7171.
- 20) 非アフィン変形による剛性率の補正項と、粘性率  $\eta$  は共に、シア応力の揺らぎの相関関数によって表され、密接に関連している。<sup>8)</sup>
- 21) C. Maloney and A. Lemaitre: Phys. Rev. Lett. **93** (2004) 195501.
- 22) C. S. O'Hern, *et al.*: Phys. Rev. E **68** (2003) 011306.

(2011年11月25日原稿受付)

## Extracting Rigidity of Glasses out of Liquids

Hajime Yoshino

abstract: In this article we sketch a recently developed, first principle theoretical scheme to compute the rigidity, namely the shear modulus of structural glasses. Somewhat paradoxically the method allows us to extract the rigidity of glasses just from the knowledge of liquids.

## 最近の研究から

# 紐状分子の非平衡ダイナミクス：細孔通過現象を中心に

坂上 貴洋 (九州大学大学院理学研究院 812-8581 福岡市東区箱崎 6-10-1 )

齋藤 拓也 (九州大学大学院理学研究院 812-8581 福岡市東区箱崎 6-10-1 )

局所的に作用する強い駆動力に対して、屈曲性の高分子鎖は一度に応答することができない。これは、マクロな世界の日常的な経験からもほぼ自明のことであるように思われるが、意外なことに、高分子物理学の研究において十分な議論がなされるようになったのはごく最近になってからのことである。この研究の流れにおいて中心的役割を担ってきたのが、DNA鎖やRNA鎖がナノメートルサイズの細孔を通過する現象である。本稿では、「紐に沿っての張力の伝播」をキーワードに、外力により駆動される高分子鎖の大変形を伴う非平衡ダイナミクスの普遍的側面を議論し、そのような視点から、細孔通過現象の物理的メカニズムを解明する。

## 1. はじめに

1996年、Kasianowiczらは、DNA鎖もしくはRNA鎖がナノメートルサイズの細孔(ナノポア)を通過する過程を分子レベルで検出できる技術を発表した<sup>1)</sup>(図1)。高分子は分子量の大きな巨大分子であるが、その一次構造は単量体が紐状に連なった一次的なものである。壁に開いた微小な孔を通しての巨大分子の移動は、まさに高分子鎖に特有の輸送現象であり、ここでは、これを細孔通過現象(polymer translocation)と呼ぶことにする。

Kasianowiczらの研究は二つの大きな意義を持つように思う。一つは応用面においてであり、細孔を利用したセン

サー(ナノポアセンサー)の可能性を切り開いたことである。近年、微細加工技術の飛躍的進歩に伴い、ナノメートル(～高分子鎖の太さ程度)のスケールでサイズを調整し細孔を作り出すことができるようになった。<sup>2,3)</sup>この技術を更に発展させ、細孔を用いた新しいDNAシーケンシング(塩基配列の決定)法を開発することに多大な関心が寄せられている。DNAの遺伝情報解析における基本手段であるシーケンシングにおいては、通常、PCR法によるDNAの増幅、化学的修飾やDNA鎖の切断などのプロセスが必要となる。細孔を用いた技術では、これらのプロセスを必要とせず、巨大なDNAの遺伝情報を正確、かつ高速に決定することができる次世代シーケンシング手法と成りえると期待されている。

もう一つは、基礎的レベルの研究を促進したことである。以前から、高分子鎖の細孔通過現象は、RNAの核膜孔通過や、細胞内での膜を介した蛋白質輸送など、生命現象における重要な素過程として細胞生物学の分野で関心が持たれていた。細孔を用いたKasianowiczらの手法により、同様の過程を人工的に再現し、<sup>1,4-6)</sup>定量的な解析が可能となったことが一つの転機となり、多くの物理学者が、この高分子鎖に特有の輸送現象を如何に記述するかという問題に興味を持ち始めたのである。

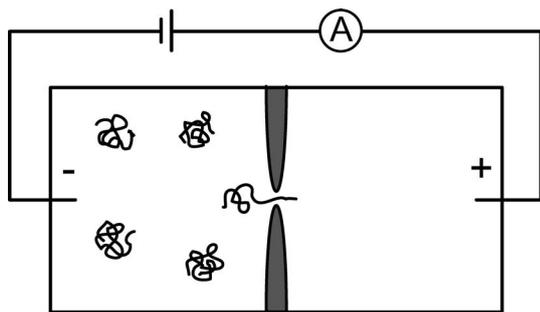


図1 実験系の模式図。電流の値の時間変化により、微細孔を高分子鎖が通り抜ける時間が測定できる。

ここでは、後者に焦点をあて、高分子鎖の普遍性という視点から、これまでの研究の経緯と最近の発展について紹介する。以下では、全長(重合度)  $N_0 \gg 1$  の長い線形の高分子鎖を考える。モノマーのサイズを  $a$ 、熱エネルギーを  $k_B T$ 、溶液の粘性率を  $\eta$  と記す。モノマースケールの特徴的な時間と力のスケールはそれぞれ、 $\tau_0 = \eta a^3 / k_B T$ 、 $f_0 = k_B T / a$  となる。また、壁(膜)は十分薄く、そこに開いている孔も小さいと見なし、ある瞬間に孔には一つのモノマーのみ存在すると理想化した状況を考える。Kasianowicz らの実験では、DNA もしくは RNA 鎖は膜付近の電圧勾配により駆動されているが、より一般には、細孔通過現象は、壁の両側の(電気)化学ポテンシャル差  $\Delta\mu$  による能動輸送現象である。

## 2. Brownian translocation

初期の頃の統計力学的な定式化は Sung と Park による。<sup>7)</sup> 彼らは、細孔通過中の高分子鎖を、壁両側に生えた二本のグラフト鎖とみため、壁の存在による鎖の自由エネルギーを評価することからはじめた。モノマーを先頭から順にラベルし、ある時刻  $t$  に孔の位置にいるモノマーを  $M(t)$  とする。化学反応における反応座標 (reaction coordinate) との類似から、これは細孔座標 (translocation coordinate) と呼ばれる。グラフト鎖は一般に、壁の存在のために自由空間に比べ状態数が制限され、その効果は鎖長  $N_0$  に対数的に依存する自由エネルギー  $\Delta F_g(N_0) / k_B T = \ln N_0$  により表される。これを細孔通過中の高分子鎖に当てはめると  $\Delta F(M) = \Delta F_g(M) + \Delta F_g(N_0 - M) = k_B T \ln[(N_0 - M)M]$  となる。即ち、この定式化では、細孔通過現象は、極めて緩やかな(対数的な)エントロピー障壁存在下での細孔座標上のブラウン運動として描写される。駆動力  $f = \Delta\mu/a$  の強さによって、拡散過程と駆動力が支配的になる過程があり、主要な結果として細孔通過時間の表式

$$\tau = \begin{cases} N_0^2 a^2 / D & (faN_0 / k_B T \ll 1) \\ N_0 a k_B T / Df & (faN_0 / k_B T \gg 1) \end{cases} \quad (1)$$

が得られる。ここで、 $D$  は“拡散係数”である。<sup>\*1</sup>

Sung と Park の理論は、後の理論研究に大きな影響を与えたが、現在では、様々な点において、実際の現象の記述において不十分であることが知られている。特に、この定式化が、細孔座標が最も遅い自由度である場合にのみ正当化されることを把握することは重要である。エントロピー障壁という概念自体、各瞬間に、他の自由度が熱平衡状態に達していることを仮定しているのである。実際には、鎖全体のダイナミクスは非常に遅く、そのため、上記の要請は極めて厳しいものである。以下では、実空間での鎖の非平衡ダイナミクスという視点から、細孔通過現象の本質に迫る。

## 3. 高分子鎖の非平衡ダイナミクス

運動会の定番競技に綱引きがある。今、綱引きで使う綱が、無造作にグラウンドに置かれていて、これを片付けるとする。片付け方にも色々あるだろうが、ここでは、立ち位置を定めて、綱を手繰り寄せることにする。すると、綱は一樣には動き出さない。手前からピンと張って動き始め、遠い端が動き始めるまでにはしばらく時間がかかる。このような応答挙動は、柔らかな紐状物体に内在する本質的性質であり、細孔を通過する高分子においても例外ではない。問題は、綱引きの例における直感的記述を熱ゆらぎが支配的である微小な系において如何に定式化するかである。まずは、鎖の変形と運動の記述からはじめる。

### 3.1 動的伸張則

自由な状態では、鎖長  $N_0$  の鎖は  $R_0 = aN_0^{\nu}$  程度の空間的広がりを持つ。<sup>11)</sup> 指数  $\nu$  は、空間次元や溶媒条件に依存し、特に、理想鎖では  $\nu = 1/2$ 、排除体積効果が重要となる良溶媒では  $\nu = 3/4$  (二次元)、 $\nu = 0.588 \dots$  (三次元) である。鎖の一端を引っ張ると、鎖は変形し、動き出す。力  $f$  が一定のとき、鎖の定常状態はどのように記述できるだろうか(図2)。この問題に取り掛かる前に、静的な伸張則、つまり両端を力  $f$  で引っ張る場合を復習しておこう(図2(a))<sup>11)</sup>。外力  $f$  の下での鎖の伸びた長さを  $R(f)$  と書く。高分子鎖は、その立体配座の状態数に由来するエントロピー弾性を持つが、そのバネ定数は  $\sim k_B T / R_0^2$  と評価される。エネルギー等分配則から、 $R(f=0)$  の揺らぎは  $R_0$  と同程度であり、 $f < k_B T / R_0$  のときには外力の効果は弱い摂動でしかないことがわかる。 $f > k_B T / R_0$  では、 $\xi = k_B T / f < R_0$  という長さスケールを基に議論を進めるのが便利だ。これは、力の効果が本質的に利いてくるスケールであり、ここを境に鎖の振る舞いは定性的に変化する。 $\xi$  のスケール内にあるモノマーの

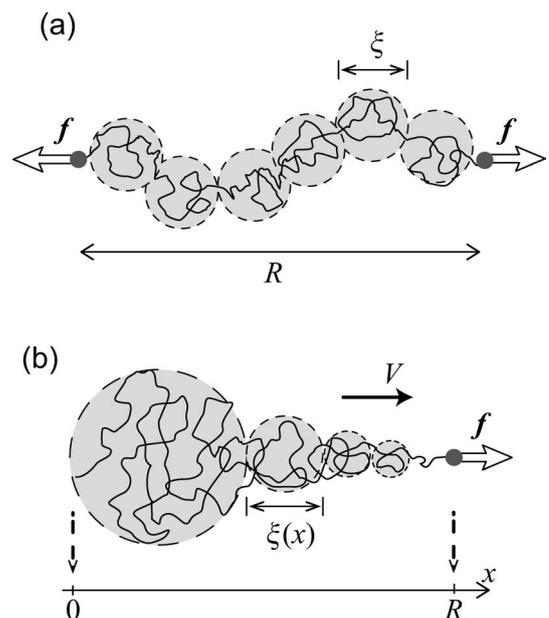


図2 高分子鎖を伸張させた状況の模式図。(a) 両端を引っ張った場合(平衡状態)。(b) 一端を引っ張った場合(定常状態)。このときの定常速さ  $V$  は式(6)により与えられる。

\*1 Sung と Park は、式(1)の分母に現れる  $D$  を鎖の並進拡散係数と考えた。しかし、細孔座標上の運動と、実空間での鎖のそれとの関係はそんなに単純ではない。その後の研究により、細孔座標上での運動は、異常拡散として表現されることが指摘されている。<sup>8-10)</sup>

数を  $g$  としよう. このスケール以下では鎖はほぼ自由な状態の統計則に従うため,  $\xi = ag^\nu$  の関係が成り立つ. 一方,  $\xi$  以上のスケールでは鎖は本質的に伸張している (図2(a)). これより, 次の伸張則を得る.

$$R(f) \approx \xi \left( \frac{N_0}{g} \right) = aN_0 \left( \frac{fa}{k_B T} \right)^{(1-\nu)/\nu} \quad (2)$$

理想鎖 ( $\nu = 1/2$ ) では, 伸びと力は比例関係にあるが, 排除体積鎖では, 伸張則は非線形となることが見て取れる.

同様のレベルの議論を動的な状況 (図2(b)) に行おう. 系は, 外力による仕事と粘性散逸がバランスした定常状態にあり, 鎖の状態の記述には, 静的な指数  $\nu$  の他に, 動的な指数  $z$  を導入する必要がある. 自由な状態の鎖の最長緩和時間は, 動的指数を用いて  $\sim \tau_0 (R_0/a)^z$  と書ける. 鎖の一端をつまんで, 十分弱い力 ( $f < k_B T/R_0$ ) で引っ張ると, 鎖全体は大きく変形することなく力に追随する. そのときの摩擦係数は  $\Gamma(R_0) \approx \eta a (R_0/a)^{z-2}$  と書ける. 通常, 鎖のダイナミクスには周りの溶媒の流体効果が重要であり,  $z = 3$  であるが, 流体効果を無視した解析では,  $z = (2\nu + 1)/\nu$  となる. それぞれの場合に,  $\Gamma \sim R_0 \sim N_0^\nu$  (Stokes 則),  $\Gamma \sim N_0$  (Rouse 則) となる.\*2

$f > k_B T/R_0$  となると, 鎖は平衡形状を保ったまま力に追随することができなくなり, 大きく変形して引っ張られるようになる. 静的伸張の場合のように  $\xi = k_B T/f$  というスケールが重要となるが, 今の状況では, 張力が鎖に沿って均一ではない. 定常状態では, 鎖全体がほぼ同じ速さ  $V$  で動くが, よりたくさんのモノマーを引きずる上流側のほうに強い張力がかかるのである. 図2(b)のように座標系をとり, 位置  $x$  での力の釣り合いを書こう.

$$\frac{df(x)}{dx} - \frac{\Gamma(\xi(x))}{\xi(x)} V = 0 \quad (3)$$

ここで,  $f(x) = k_B T/\xi(x)$  は鎖に働く内部張力であり,  $\Gamma(\xi(x))/\xi(x) = \eta(\xi(x)/a)^{z-3}$  は単位長さ当たりの摩擦係数である. この微分方程式を解き, 鎖の定常状態の形状プロファイル

$$\xi(x) = a \left( \frac{\tau_0 V x}{a^2} \right)^{1/(2-z)} \quad (4)$$

を得る. 更に, 駆動点 ( $x = R$ ) での力の釣り合い条件  $f = k_B T/\xi(x=R)$  と, モノマーの密度プロファイルの空間積分が一定であるという質量保存の関係  $\int_0^R dx g(x)/\xi(x) = N_0$  より, 定常状態での  $f, V, R, N_0$  の関係を表す動的伸張則が得られる.

$$RV \approx \frac{a^2}{\tau_0} \left( \frac{fa}{k_B T} \right)^{p_z} \quad (5)$$

$$N_0 V \approx \frac{a}{\tau_0} \left( \frac{fa}{k_B T} \right)^{p_z - p_\nu} \quad (6)$$

\*2 後者では摩擦係数は鎖長に比例しており, 高分子鎖ダイナミクスの基本的モデルである Rouse モデルの状況に対応する. ところが, 一般に希薄溶液では溶媒の流れを介した流体力学的相互作用が重要となり, 摩擦係数は鎖長ではなく, 鎖の空間的サイズに比例するようになる. これは, 剛体球の粘性抵抗を記述する Stokes 則と類似している.<sup>11)</sup>

ここで新たに  $p_z$  と  $p_\nu$  を定義したが, これは指数  $z$  と  $\nu$  が, しばしば  $p_z = z - 2$  と  $p_\nu = (1 - \nu)/\nu$  という形で現れることを考慮に入れてのことである. この一般化した動的伸張則を吟味しておくのは教訓的である. まず,  $\nu = 1/2$  (排除体積無し),  $z = (1 + 2\nu)/\nu$  (流体効果無し) とすると, いわゆる Rouse モデルの計算結果に帰する (Rouse モデルについての厳密な結果は文献18を参照). 次に, 力と速さの関係を表す式(6)で  $z = (1 + 2\nu)/\nu$  としてみると  $V \sim f/N_0$  となることからわかるように, 非線形な摩擦則は流体力学的相互作用に由来する. また, 式(5)と式(6)から  $V$  を消去すると, 式(2)と同じ伸張則を得る. つまり, 伸びと力の関係における非線形性は, 静的な場合と同様, 排除体積効果に由来するのである.

### 3.2 過渡的な応答: 張力伝播のダイナミクス

本章冒頭の綱引きの例に戻り, 次の問いを考えてみよう. 最初の瞬間に, 端から手繰り寄せるといふ操作に応答できるのは, 全体の内どの程度であろうか?<sup>12-14)</sup> 鎖は平衡形状のまま孔の辺りにやってきて, 一端が入口に入り込んだ時を時間の原点にとる (図3). 立ち位置を定めて綱を引き寄せることは, 細孔通過現象では, 孔の位置にあるモノマーが駆動されることに相当する. 最初に  $g_0$  個のモノマーが平衡形状を保ったまま応答すると仮定しよう. これらのモノマーは, 孔の位置から  $\xi_0 = ag_0^\nu$  程度の距離に広がっていて,  $V_0 = f/\Gamma(\xi_0)$  の速さで動き出す. しかし, これはあくまで平均的な速さであって, 実際にはその内部には  $\sim V_0/\xi_0$  程度の速度勾配がある. 初期の平衡状態の形状を保ったまま応答できるということは, この速度勾配が最長緩和時間  $\sim \tau_0 (\xi_0/a)^z$  に比べて小さいということである. これから,  $\xi_0 = k_B T/f$ ,  $g_0 = (k_B T/fa)^{1/\nu}$  と求まる. これより, 伸張則のときに出てきた特徴的な力  $f = k_B T/R_0$  よりも大きな力で手繰り寄せると, 鎖は一度に応答することができないことがわかる. そのため, 最初には  $g_0 (< N_0)$  個のモノマーのみが動き出し, 駆動力の効果は, 鎖に沿って, 後方に順次, 伝達されていくことになる. 力が  $f > k_B T/R_0$  を満た

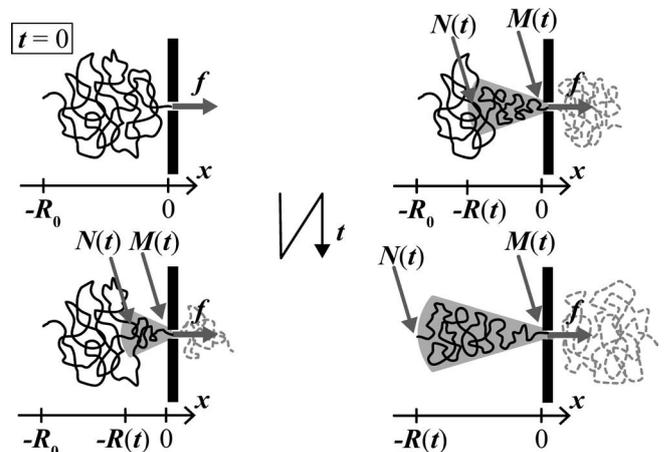


図3 駆動力存在下, 微細孔を通り抜ける高分子鎖の模式図. 影のついた部分は, 張力の影響を受けて, 変形して動き出している領域を示す.

すことからわかるように、この過程は、鎖の大変形を伴う非平衡過程である。以下では、二状態近似による解析を行う。<sup>12-15)</sup>

時刻  $t$  に、頭から数えて  $M(t)$  番目のモノマーが孔に吸い込まれ、 $N(t)$  番目のモノマーまで張力が伝わったとしよう (図3)。これより後方には、まだ駆動力の効果は伝わっておらず、初期の平衡形状を保っている。このことは、孔の位置から  $N(t)$  のモノマーまでの距離を  $R(t)$  とすると

$$R(t) = aN(t)^{\nu} \quad (7)$$

の関係が成り立つことを意味する。<sup>\*3</sup> 二状態近似の精神は、孔の手前にある  $N_0 - M(t)$  のモノマーを、駆動力の影響を受けて運動している  $N(t) - M(t)$  のモノマーと、依然、駆動力を感じていない平衡状態にある  $N_0 - N(t)$  のモノマーとに分けることにより、その境界面のダイナミクスに注目することにある。各瞬間、応答領域にあるモノマーは近似的に定常状態にあると見なせ、そこでは、式(5)、(6)の動的伸張則が成り立つ (式(6)で  $N_0 \rightarrow N(t) - M(t)$  と置き換えたものが必要)。式(5)、(6)から  $V$  を消去したものを次のように書き直そう。

$$N(t) - M(t) = \sigma_0 R(t) \quad (8)$$

ここで、 $\sigma_0 = g(x=0)/\xi(x=0) \sim f^{-p_\nu}$  は駆動箇所 (孔の位置) でのモノマーの線密度であり、時間に依らない。両辺を時間微分し、孔を通過するモノマー流束の定義式  $dM(t)/dt = \sigma_0 v_0 = \sigma_0 V$  ( $v_0$  は孔の位置でのモノマーの速さ) を用いると、次の関係式を得る。

$$\frac{dN(t)}{dt} = \sigma_0 \left( V + \frac{dR(t)}{dt} \right) \quad (9)$$

ここに式(5)、(7)を用いることにより、張力の伝播面  $R(t)$  に対する閉じた微分方程式が得られる。こうして、張力の伝播についての動的スケーリング則

$$R(t) \sim [t f^\beta]^\gamma \quad (10)$$

が得られる。ここで、 $\beta = p_z - p_\nu$ 、 $\gamma = \nu/(1 + \nu)$  である。式(7)からもわかるように、鎖の後方末端の位置は  $R_0 = aN_0^\nu$  であるので、張力が鎖の後方末端に達する時間  $\tau_p$  は、上式で  $R(\tau_p) = R_0$  とすることにより

$$\tau_p \sim N_0^\alpha f^{-\beta} \quad (11)$$

と求まる。ここで、 $\alpha = \nu/\gamma$  であるが、この関係はランダムな界面成長模型における動的指数、成長指数、荒さ指数間の関係と同様である。

最後の式(10)、(11)のところでは、スケーリング極限で、

<sup>\*3</sup> この関係式について補足しておく。図3の影のついた部分を見ると、 $N(t) - M(t)$  個のモノマーが張力により伸長されて長さ  $R(t)$  の領域に広がっている。これらの量は、式(8)により結ばれている。この状態で  $R(t)$  と  $N(t)$  を記録しておき、時間を  $t=0$  まで巻き戻すと、 $R(t)$  の領域に  $N(t)$  個のモノマーが存在することになるが、これらの量は、平衡状態での統計的關係式(7)を満たす。

細孔通過過程の主要項のみの解を記述したが、実際には式(9)右辺第2項に由来した補正項がつく。また、 $\tau_p$  は、孔の位置で手繰り寄せる駆動力の効果が張力として鎖の末端まで到達するのに要する時間であり、細孔通過にかかる正確な時間は、その後この末端が孔に到達するまでの時間 ( $\tau_{pp}$ ) を足したものとなる。 $\tau_p > \tau_{pp}$  であることは容易に示すことができ、その意味で、この張力伝播後のダイナミクスも上のスケーリング解への補正項とみなせる。

#### 4. まとめと展望

本稿では、高分子鎖の細孔通過現象を紹介し、高分子統計の立場から、その過程における普遍的側面を議論した。特に、長い屈曲性分子の基本的な特性として、柔らかさと遅いダイナミクスを強調した。そのため、微弱な駆動力においても大変形を伴う非平衡ダイナミクスが顕在化する。

細孔通過現象は、鎖を構成する多数のモノマー間の相関に加え、周りの溶媒や壁の効果をも含めた多体問題である。これを解析的に取り扱うためには、なんらかの粗視化が必要となる。その方向性として、従来は2章で見たように遅い変数として細孔座標を想定し、その振る舞いを解析するというのが主流であった。しかし、鎖状分子の非平衡ダイナミクスという視点からは、着目すべき自然な物理変数は張力の伝播面 ( $R(t)$  もしくは  $N(t)$ ) であり、細孔座標に相当する  $M(t)$  は、式(8)を通して従属的に決まると考えるのが自然である。それはいいとして、二状態近似は少し乱暴ではないかと思われる読者もいるかもしれない。より厳密には、このような外力により駆動する高分子鎖のダイナミクスはセグメントの濃度場に対する非線形拡散方程式として定式化することができる。面白いことに、同じ部類の方程式は、生態学における種の移動<sup>16)</sup> や、多孔質媒体中の流体のダイナミクス<sup>17)</sup> にも用いられている。非線形拡散方程式としての定式化、解析、また、それとの二状態近似との対応については、文献18で議論しているので、参照されたい。

本稿では“平均的”なダイナミクスを議論したが、実際の実験で測定される細孔通過時間は、その度ごとに異なる値である。確率性の由来としては、勿論、熱ゆらぎの効果があるが、別要因として、孔に到達した段階での鎖状分子の形状のランダムさ (初期状態の不確定性) も挙げられる。最近、著者たちは、両者の相対的重要性が駆動力に依存することを指摘し、特に、強く駆動された場合には、ランダムな経路を通して張力が伝播することによる確率性が細孔通過時間の分布を支配するという説を提案した。<sup>19)</sup> これによると、通過時間の標準偏差と平均の比は、長鎖の極限でもゼロに収束せずに有限値に留まる。これらの知見は、実際の実験系のデザインにおいても有用であると思われるが、実験、数値シミュレーションとの比較も含めた詳しい検証は今後の課題である。

終わりに、細孔通過現象の研究における今後の展望につ

いて私見を述べておきたい。冒頭で、Kasianowiczらの開発した技術の二つの意義について触れた。応用面におけるここ数年の進展は目覚ましく、例えば、つい数ヶ月前には、イギリスのOxford Nanopore Technologies社がナノポアを用いたシーケンサーを発表した。性能面では、様々な点でこれまでの次世代シーケンサーを凌駕しているとのことで、近く製品化が予定されている。<sup>\*4</sup> 一方、基礎的研究においては、ここ数年で、駆動型の細孔通過現象の本質は、張力伝播に伴う鎖状分子の非平衡ダイナミクスにあるということが共通認識となり、本稿で紹介した枠組みを基本に更なる研究が行われている状況である。この基礎的研究の進展は、実際の応用においてどのような貢献をしたのか？ 複雑な現象の背後に潜む法則性の理解は、それを制御する上で極めて有用であろう。その意味で、現場の技術開発者が基礎的研究に関心を持っていることは間違いないと思われる。<sup>20)</sup> しかし、シーケンシング効率を上げたいという現場でのニーズと、物理学者の細部に寄らない普遍則を明らかにしたいという姿勢との間に隔たりがあるというのも事実であろう。今後は、物理学サイドからも、DNA鎖の配列情報や、孔と塩基との相互作用などの詳細や特異性にまで踏み込んだ研究を進展していくことが期待される。また、本稿で取り上げた高分子鎖の応答挙動は、紐状の分子全般に共通する内在的性質である。細孔通過現象は、張力伝播とそれに伴う非平衡ダイナミクスについて、現在最も詳しく研究の行われている例であるが、その他にも、基本的なものとして吸着、脱着過程、生命現象との関連例として二本の分子鎖が一本に組み合う zipping 過程、更には、一分子操作による生体高分子伸張過程などでも、同様の機構が重要となると期待される。

本研究は、JST 戦略的創造研究推進事業さきがけの一環として行われたものである。

<sup>\*4</sup> 2012年2月17日のプレスリリース：<http://www.nanoporetech.com/news/press-releases/view/39>

## 参考文献

- 1) J. J. Kasianowicz, E. Brandin, D. Branton and D. W. Deamer: Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **93** (1996) 13770.
- 2) J. Li, D. Stein, C. McMullan, D. Branton, M. J. Aziz and J. A. Golovchenko: Nature **412** (2001) 166.
- 3) A. J. Storm, J. H. Chen, X. S. Ling, H. W. Zandbergen and C. Dekker: Nature Mater. **2** (2003) 537.
- 4) A. Meller, L. Nivon and D. Branton: Phys. Rev. Lett. **86** (2001) 3435.
- 5) A. J. Storm, C. Storm, J. Chen, H. Zandbergen, J.-F. Joanny and C. Dekker: Nano Lett. **5** (2005) 1193.
- 6) A. J. Storm, J. H. Chen, H. W. Zandbergen and C. Dekker: Phys. Rev. E **71** (2005) 051903.
- 7) W. Sung and P. J. Park: Phys. Rev. Lett. **77** (1996) 783.
- 8) J. Chuang, Y. Kantor and M. Kardar: Phys. Rev. E **65** (2001) 011802.
- 9) J. L. A. Dubbeldam, A. Milchev, V. G. Rostiashvili and T. A. Vilgis: Phys. Rev. E **76** (2007) 010801(R).
- 10) D. Panja, G. T. Barkema and R. C. Ball: J. Phys.: Cond. Mat. **19** (2007) 432202.
- 11) P.-G. de Gennes: *Scaling Concepts in Polymer Physics* (Cornell Univ. Press, Ithaca, 1979).
- 12) T. Sakaue: Phys. Rev. E **76** (2007) 021803.
- 13) T. Sakaue: Phys. Rev. E **81** (2010) 041808.
- 14) T. Saito and T. Sakaue: Eur. Phys. J. E. **34** (2011) 135.
- 15) P. Rowghanian and A. Y. Grosberg: J. Phys. Chem. B **115** (2011) 14127.
- 16) J. D. Murray: *Mathematical Biology* (Springer-Verlag, New York, 2002).
- 17) G. I. Barenblatt, M. Bertsch, A. E. Chertock and V. M. Protokishin: Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **97** (2000) 9844.
- 18) T. Sakaue, T. Saito and H. Wada: Phys. Rev. E **86** (2012) 011804.
- 19) T. Saito and T. Sakaue: Phys. Rev. E **85** (2012) 061803.
- 20) M. Fyta, S. Melchionna and S. Succi: J. Polym. Sci. B: Polym. Phys. **49** (2011) 985.

(2012年5月14日原稿受付)

## Driven Translocation of Polymer

Takahiro Sakaue and Takuya Saito

abstract: When a flexible chain is pulled or sucked, it can initially respond only locally, and sequential nonequilibrium processes with large conformational distortion follow in line with the propagation of tensile force along the chain backbone. By analyzing universal aspects of the dynamical response inherent in chain-like-molecules, we elucidate the dynamical scaling scenario in such situations. From this viewpoint, we highlight the richness and complexity involved in the dynamics of translocation, *i.e.*, macromolecular transport across a pore, actively driven by external forces.

## 日本物理学会誌 第67巻 第11号 (2012年11月号) 予定目次

口絵：今月号の記事から

巻頭言

日本物理学会の会計担当理事として……………播磨尚朝  
解説

陽子と中性子のスピン構造……………柴田利明  
QCDによる核力研究とその展開

……………青木慎也, 初田哲男, 石井理修, 根村英克

最近の研究から

流体力学的同期現象：鞭毛や繊毛の集団運動の理解に向けて  
……………内田就也

ついにとらえたガンマ線バーストの偏光

……………村上敏夫, 米徳大輔, 郡司修一, 三原建弘

幾何学的フラストレーションとスピン格子結合から生じる新しい  
スピングラス挙動……………品岡 寛, 富田裕介, 求 幸年

希ガス固体におけるイオン衝撃脱離……………立花隆行, 平山孝人  
JPSJの最近の注目論文から 7月の編集委員会より

……………安藤恒也

シリーズ「物理教育は今」

第7回全国物理コンテスト・第1チャレンジ2011報告

……………江尻有郷

ラ・トッカータ

現代物理学の素晴らしい贈り物を学生そして市民に届ける  
活動を……………八木浩輔

談話室

Asia Pacific Center for Theoretical Physics (APCTP) の現状と  
今後……………多田 司

新著紹介

# GRB 起源 PeV-EeV タウニュートリノ初探査

浅岡陽一 (東京大学宇宙線研究所 277-8582 柏市柏の葉5-1-5 )  
 佐々木真人 (東京大学宇宙線研究所 277-8582 柏市柏の葉5-1-5 )

試運転期の Ashra 集光器を用いた、初めての GRB 起源タウニュートリノ ( $\nu_\tau$ ) 探索結果を報告する。本探索では検出方法として、地球かすり  $\nu_\tau$  起源のタウ崩壊空気シャワーからのチェレンコフ光のイメージングを用いている。この方法には、大質量を有する山や地殻をニュートリノ相互作用の標的として使用すると同時に、バックグラウンドとなる宇宙線 2 次粒子を完璧に遮蔽することができるという大きな利点がある。我々は、衛星による GRB081203A のガンマ線トリガーの 2.83 時間前から 1.78 時間前までの 3,780 秒間におけるプリカーサー放射と、21.2 時間後から 22.2 時間後までの 3,780 秒間における残光放射からの  $\nu$  流量に対し、ペタ電子ボルト ( $10^{15}$  eV; PeV) からエクサ電子ボルト ( $10^{18}$  eV; EeV) のエネルギー領域で厳しい観測的制限を与えた。この、PeV-EeV での  $\nu_\tau$  初探査は、これまでの水チェレンコフ検出器や大規模空気シャワーアレイ実験とエネルギー領域や検出方法において相補的であり、優れた時間及び位置同定による“多粒子天文学”の幕開けを示唆する。

## 1. はじめに

ガンマ線バースト (GRB)<sup>1)</sup> は、中心から正反対の 2 方向に物質が噴出してジェット流を生成する。周囲の星間物質に対してローレンツ因子  $\Gamma \sim 100$  かそれ以上で相対論的に膨張しつつ、宇宙で最大のエネルギーを放出する。そこでは、熱的な電磁放射よりも、高いエネルギーまで加速された粒子同士の衝突や崩壊によるエネルギー散逸過程が重要な役割を担うと考えられているが、観測的には未解決のままである。GRB からの PeV-EeV ニュートリノ ( $\nu$ ) の検出は、EeV まで加速された陽子が光中間子生成の相互作用をした直接的な証拠となる。GRB 標準モデル<sup>2)</sup> は、内部衝撃波と外部衝撃波による加速<sup>3)</sup> に基づき、GRB と多波長の残光特性をよく再現すると考えられてきた。しかしながら、標準モデルでは最近発見された現象をうまく説明しきれないことが分かってきた。まず第一に、Swift 衛星による観測<sup>4)</sup> から、多くの GRB が X 線残光の光度曲線に急-緩-急 (Steep-Flat-Steep) の典型的な振る舞いを有することが分かった。第二に、10-15% の GRB にプリカーサー放射が検出されていることが挙げられる。主バーストから数 100 秒先立って、有意なエネルギー放射を行う事例も報告されている。また、Fermi 衛星<sup>5)</sup> が観測した GRB090510 及び GRB090902b のスペクトルからは、通常期待されるよりもよりハードな成分が検出された。さらに、Fermi 及び Swift 衛星による同時観測が行われた GRB090510 からは、ギガ電子ボルト ( $10^9$  eV; GeV) のガンマ線が、より低エネルギー側で発生したトリガーの 200 秒後まで検出された。多数の著者がこれらの複雑な GRB の時間発展や高エネルギー放射成分を説明するためのモデルを構築しようとしているが、そのどれも決定的ではない。<sup>6)</sup> 多様で複雑な様相を見せる GRB の物理的機構を解き明かすには、電磁成分にとって光学的に厚い領域を見通し、GRB 発生以前から残光フェーズに至る全局面におけるハドロン加速過程に観測的制限を与えることのできる新たなプローブが必要である。

超高エネルギー (VHE)  $\nu$  は、光学的に厚い領域をも見通

すことのできる、直接的な観測プローブとなる。十分な時間分解能・空間解像度とサーベイ能力を有した、GRB 起源 VHE  $\nu$  の監視探査が望まれる。空気シャワーを検出する「地球かすり  $\nu_\tau$ 」法<sup>7)</sup> は、観測対象としてタウ粒子 (タウ) の崩壊によって生成される空気シャワーを使用するため、大きな標的質量を有効に利用できる。VHE  $\nu_\tau$  と大地の相互作用の結果生成されるタウは、山の斜面もしくは大地から検出器に向かって出現する (図 1(下) 参照)。EeV 以上のエネルギー領域において、「地球かすり  $\nu_\tau$ 」検出法を適用した観測が報告されている。<sup>8)</sup> 一方、チェレンコフ光による「地球かすり  $\nu_\tau$ 」からのタウ崩壊空気シャワー検出方法 (以下、チェレンコフタウシャワー法と呼ぶ) を適用した観測結果はまだ報告されていない。しかし、本検出方法は PeV-EeV のエネルギー領域において、天体において EeV まで加速されたハドロンから生成される  $\nu$  を探索するのに有用な検出感度を達成し得る。チェレンコフタウシャワー法の更なる利点として、山や地殻を宇宙線 2 次粒子に対する完璧な遮蔽体として利用できること、高精度での親  $\nu$  の方向決定が可能なこと、PeV-EeV 領域では大気ニュー

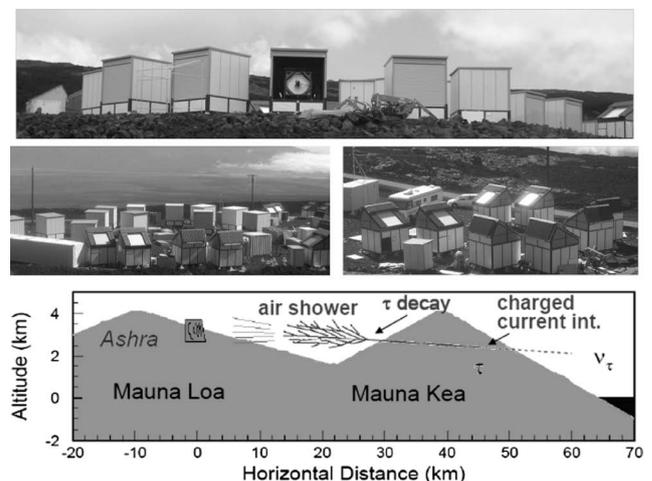


図 1 (上) Ashra マウナロア観測地概観。(下) タウニュートリノ検出原理。

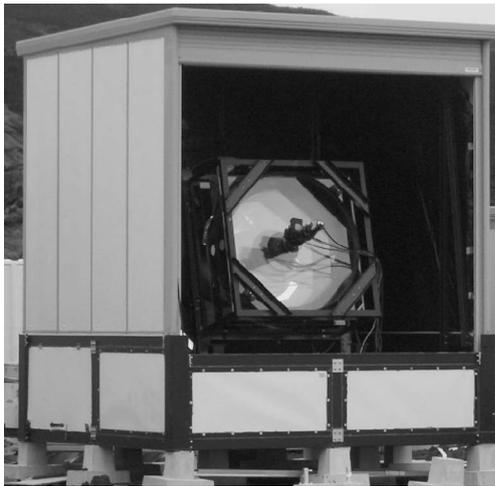


図2 マウナケア向きの Ashra 集光器.

トリノからのバックグラウンドが無視できることが挙げられる。

## 2. Ashra 実験と観測

全天高精度素粒子望遠鏡 Ashra (All-sky Survey High Resolution Air-shower detector) は、それぞれ  $42^\circ$  の視野を持つ集光器を 12 方向に向け、1 分角に迫る分解能で天空の 77% を同時に監視する、超高エネルギー空気シャワー撮像検出器である。<sup>9-11)</sup> Ashra 第 1 計画 (Ashra-1) では、ハワイ州ハワイ島のマウナロア中腹、標高 3,300 m の土地を観測所として使用している (図 1(上) 参照)。1 台の集光器は、反射光学系による集光に加えて光電撮像管を用いた電子の静電収束を利用することで、<sup>12)</sup>  $42^\circ$  の視野を分角の分解能を保持したまま固体撮像素子の画角にまで縮小する超広角光学系を構成し、低価格で高性能の撮像装置を実現している。<sup>13)</sup> 光電子の静電収束によって 1 インチまで縮小された焦点面像を輝度増幅の後に光分岐し、異なる独立なトリガー/撮像装置に分配することで、信号 SN 比の損失なく時間スケールの異なる大気チェレンコフ発光 (ns)、大気蛍光 ( $\mu\text{s}$ )、星像 (s) を独立に監視撮像するように設計されている。その広視野・高精度での光学撮像監視の機能は、ガンマ線バーストや超新星爆発などの突発天体の光学観測にも有効である。

マウナケア方向を向く一台の集光器 (図 2 参照) は、大きなマウナケアの標的質量を集光器視野内に捉えるだけでなく、タウの崩壊後の空気シャワー発達を効率よく撮像するために適度な距離である 30 km に位置し、大きな幾何学的利点を有する。これにより、空気シャワー軸に指向性を持つチェレンコフ光の撮像において良好な観測効率を得られる。これらの利点を活かし、2008 年 10 月から 12 月にかけての計 197.1 時間、本集光器にてチェレンコフ空気シャワーの試運転探査を行った。試運転観測用に準備した 62 本の光電子増倍管 (PMT) をトリガー装置として使用し、マウナケアの表面積を最大限に覆うよう配置した (図 3 参

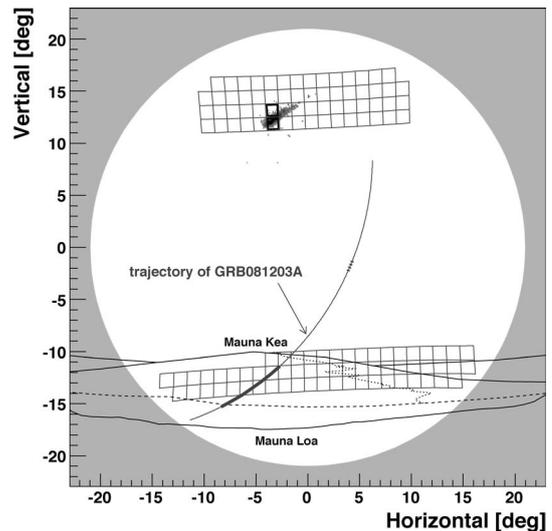


図3 Ashra-1 集光器の撮像視野 (境界: 大円, 外: ハッチ) とチェレンコフ空気シャワー観測用のトリガー用センサーの画素視野の配置 (図下方の格子)。宇宙線空気シャワー観測用のトリガー用センサーの画素視野 (図上方の格子)。実際にトリガーしたトリガー画素 (太線四角)、読み出された宇宙線空気シャワー撮像例も共に示した。さらに、集光器視野を横切った GRB081203A 対応天体の軌跡の一部 (円弧)、そのうち  $\nu_r$  探査を行った部分 (太円弧実線)、光学探査を行った部分 (太円弧点線)、マウナケアとマウナロアの山の稜線、地平線、サドル道路 (破線)、マウナケアアクセス道路 (点線) も示している。

照)。本配置は、チェレンコフ空気シャワーに対する感度を最大化するようにモンテカルロ (MC) シミュレーションによって最適化されている。その格子状に並んだ複数の PMT からの信号を波高弁別した後、隣接する 2 個のトリガー画素が同時にヒットすることを条件としてトリガー判定し、夜光などのバックグラウンド光を除去して大気チェレンコフ光の精細画像を選択して取得する。この試運転探査観測中、Swift による GRB081203A トリガー<sup>14)</sup> の約 2 時間前に、観測所から見たマウナケアの後方を GRB 対応位置 (RA 15:32:07.58, Dec +63:31:14.9) が通過した。同一の集光器において、トリガー撮像装置の直前で像を分配することで取得している連続露光画像を用い、GRB081203A に関する Swift トリガー時刻をカバーする計 600 秒の光学観測も実施した。GRB 対応天体の光度曲線に対して、露光時間 6 秒ごとに実視等級として約 12 等級の制限を与えている。<sup>15)</sup>

## 3. 検出器の性能評価とデータ解析

チェレンコフ空気シャワー像の観測において、その特徴や事象選択、検出効率及びバックグラウンドの頻度を研究するため、1 PeV から 100 EeV までのエネルギー領域で天体から到来する  $\nu_r$  事象をシミュレートした。その際、マウナケア山中に侵入する  $\nu_r$  の到来方向と位置に関しては、十分に広い面積と立体角の中から事象ごとにランダムに選択し、特別な方向や位置の流束にバイアスしないようにした。山中での荷電カレント相互作用によるタウ発生地点も MC 法にて決定した本シミュレーションでは、ハワイ周辺の測地学のデータベースを使用し、我々自身でも観測地周辺の

地形や標的となる山を測量した結果も組み込んでいる。地中でのタウ粒子の生成と伝播、特にその過程での方向変化を研究するためには、以下の方法を用いた（詳細については文献16, 17を参照）。粒子の相互作用については、素粒子・宇宙線分野で広く用いられ定評のあるシミュレーションプログラムを使用した。 $\nu$ と地殻との荷電カレント相互作用をシミュレートするためにはPYTHIA<sup>18)</sup>を用いた。次に、タウの地中伝播における対生成と制動放射によるエネルギー損失はGEANT4を用いてシミュレートした。光核反応の寄与は文献19, 20に与えられた微分断面積の表式を用いて推定した。タウ粒子の崩壊にはTAUOLAを利用し、タウ崩壊によって生成される空気シャワーのシミュレーションには CORSIKA を用いた（相互作用モデルとしては QGSJET01 を使用した）。検出器シミュレーションには、集光器の集光面積、鏡反射率、レンズ透過率、光電撮像管の量子効率が組み込まれ、トリガー判定及び取得されるべき精細画像データの事象毎の予想ができる限り現実的なものとなるようにしている。親粒子である $\nu_r$ に対するタウ粒子のなす角度を $\theta_r$ とすると、1 PeV以上のエネルギーにおいて、地殻内での物理過程に起因する $\theta_r$ は、1分角よりも十分に小さいと推定されている。<sup>17)</sup> さらに、十分に細かい解像度でチェレンコフ像を撮像すれば、再構成されたタウのシャワー軸は $\nu_r$ の方向をよく再現する。従って、精細なチェレンコフ像を取得できれば、PeV-EeV  $\nu_r$ に起因するチェレンコフタウシャワーは宇宙におけるVHEハドロン加速器の優れたプローブとなる。そのような精細な画像データは、Ashra 検出器によって取得可能である。

集光器の撮像ゲインとトリガー閾値の較正は、安定した光源である YAP (YAlO<sub>3</sub>:Ce) パルサーを光電撮像管の入射表面に張り付けて行った。さらに細かいゲイン非一様性は、球面上に様に蛍光体が塗布されたフラット補正板を光電撮像管の入射表面に置いて、相対的な位置依存性を導出し、YAPによるゲイン測定を入力面全体に拡張することで補正した。また、主に観測中の雲や霧などによる大気的光学的厚さの変動に起因する、ゲインやトリガー感度の時間変動を補正するため、連続露光画像で撮像された BD+75D325 (B 等級 9.2 等) などの標準星の輝度を用いて、測定器の出力と比較しながら注意深く較正した。ここで、連続露光画像はトリガー撮像と最終段の読み出し以外は同じ集光伝送経路を用いて撮像されている。これらの相補的なゲイン較正手順の適用に起因する検出感度の系統誤差は、30%と見積もられた。

集光器の検出感度とゲイン較正を実証するため、2008年12月に計44時間の宇宙線シャワーの観測を行い、140事象の宇宙線空気シャワー像を取得した。本観測では、同じ集光器視野内で、マウナケア上空、天頂角 $\sim 65^\circ$ を中心とする領域にトリガー感度を有するように、トリガー用画素センサー受光面の配置を変えている(図3参照)。観測データ及びMCシミュレーションデータに同様のエネルギー

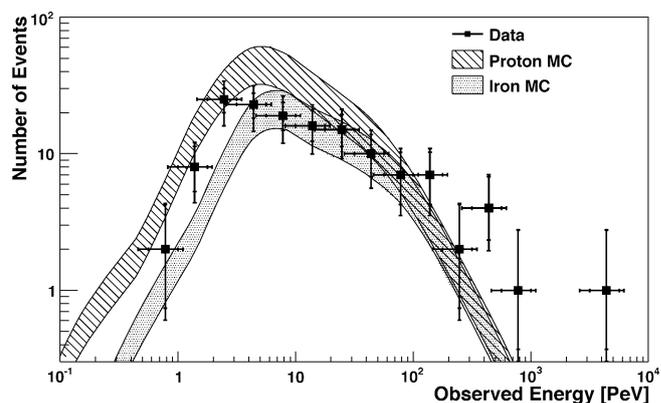


図4 Ashra 集光器によって観測された宇宙線スペクトルの実データ(黒四角点)を統計誤差のみと系統誤差も含めた誤差棒とともに示す。1次宇宙線を陽子(ハッチ帯)と鉄(シェード帯)と仮定した場合のMCシミュレーションによる予想観測スペクトルも示す。予想観測スペクトルにおける帯の広さは各観測エネルギーにおける系統誤差30%を示す(本文参照)。

一再構成解析を適用し、宇宙線流束の実観測とMCシミュレーション予想のスペクトルを求め、図4にて比較した。エネルギー再構成はシャワー軸までの距離の不定性の影響を受ける。MCシミュレーションを用いて再構成されたエネルギーの分解能は62%と評価された。MCシミュレーション予想には、Knee領域の宇宙線流束データ<sup>21,22)</sup>を単純な関数にあてはめて利用している。Knee領域の観測実験が報告している宇宙線流束データにおける系統誤差(20~28%)に比べ、データに関数にあてはめる操作の際に生じる誤差( $\sim 14\%$ )は優勢ではなく、宇宙線流束スペクトルに対するMCシミュレーション予想の不定性は合わせて $\sim 30\%$ と見積もられた。一次宇宙線の組成が観測的には不定なため、MCシミュレーション予想スペクトルとしては陽子のみの場合と鉄のみの場合の2通りを仮定した。いずれの場合も、データと予想観測スペクトルは、その形と積分事例数が誤差の範囲で良く整合している。Ashra 集光器のトリガー撮像感度と再構成解析方法の実証が行えたと言える。

GRB081203Aに関する $\nu_r$ 探査には、好天時の全観測時間215.8時間のうち、検出器に一部でも故障や不具合等が見られず「良好」な状態と定義された計197.1時間にトリガー撮像された画像データを用いた。実データから、隣接する検出画素の塊である「クラスター」をチェレンコフタウシャワー事例候補の前選択として選び、有効視野外の事例や、視野内でも道路上の車からのライト、検出器を横切って飛跡を残す通常の宇宙線事例を除去して、最終的なチェレンコフタウシャワー事例候補を選別する。

計197.1時間分の実データから、前選択クラスター5事象が、有効領域のカットを通過し、そのうち3事象が車ライトのカットによって、2事象が宇宙線バックグラウンド事例のカットによって除去され、最終的なチェレンコフタウシャワー事例候補は0事象となった。なお、大天頂角の宇宙線空気シャワーが本解析で最終候補事例として残る期待数を CORSIKA の“Curved Earth Option”を用いて評価したところ、 $1.3 \times 10^{-4}$  事象という結果が得られている。

## 4. 結果

解析の結果  $\nu_e$  事象候補が0となったこと、及びMCシミュレーションにより見積られた有効検出面積に基づき、集光器視野内での対応天体の位置とマウナロア山とが一致する時間帯、つまり GRB081203A のトリガーの2.83時間前から1.78時間前までの3,780秒間と、21.2時間後から22.2時間後までの3,780秒間における PeV-EeV  $\nu_e$  放射に対する、90% Confidence Level 上限値を図5に示した(太実線)。有効検出面積のMCシミュレーション予想に対する系統誤差の起源として、 $\nu_e$  荷電カレント相互作用断面積、タウ粒子の地殻でのエネルギー損失、観測地周辺の地質モデル、及び、集光器のゲイン較正を考え、各々に対して、50%、50%、10%、及び、30%と評価した。<sup>17)</sup> それらの2乗和から得られた Conservative なMCシミュレーション予想に対する系統誤差の総計は77%となり、図5の結果として Confidence Level の評価の際に反映させて  $\nu_e$  放射に対する上限値を求めている。

我々が観測を行った期間に VHE  $\nu$  流束を予測するモデルはいくつか存在する。GRBの前に超新星爆発を仮定するプリカーサーモデル<sup>25,26)</sup>では、質量降着によって生成されたものの、星残骸の外層まで到達できずに消えたジェットを考えることで、GRBの数時間前のVHE  $\nu$  放射が許される。キャノンボールモデルも同様に星残骸の外層まで到達できずに消えたキャノンボールからのVHE  $\nu$  放射を予測する。<sup>27)</sup> GRBの外部前方衝撃波に基づく残光モデル<sup>28-31)</sup>やキャノンボールモデル<sup>32,33)</sup>は、GRB発生後1日以上継続するVHE  $\nu$  放射を予測する(具体的なモデル流束との比較については文献16を参照)。なお、観測的にはまだ未決定のGRBの物理的機構にバイアスのない制限を与えるため、図5におけるVHE  $\nu$  スペクトルとしては、典型的な  $E^{-2}$  流束を仮定している。

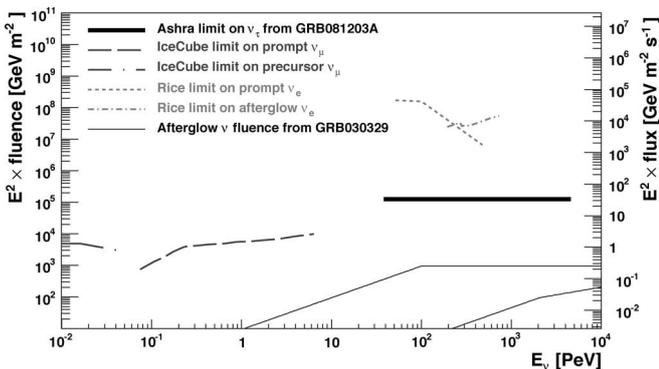


図5 GRB081203A 対応天体から来る  $\nu_e$  流量のプリカーサー放射及び残光放射に対する Ashra 実験の観測流束制限(太実線)。比較のため、即時放射期(長破線)とプリカーサー期(長破点線)における IceCube の制限<sup>23)</sup> 及び、即時放射期(破線)と残光期(破点線)における Rice の制限<sup>24)</sup> を示した。IceCube のプリカーサー期は即時放射期直前の100秒間を、Rice 実験の残光期は即時放射期直後の数十から数百秒間を探索している。Ashra 実験と IceCube 実験の制限において、エネルギー領域は期待される信号の90%を含む領域として定義されている。RICE 実験では総信号の80%を含む領域となっている(本文参照)。また、参考のため、比較的近距离で発生した GRB030329 の残光から期待されるニュートリノ流量を細い実線で示した。<sup>25)</sup> 上から、恒星風環境、星間物質環境での予測流量である。

図5には、点源をターゲットとした他実験との流量制限の比較も示されている。<sup>23,24)</sup> 41個のGRBを重ね合わせた流量に対して制限を与えた IceCube の結果<sup>23)</sup> (破線、一点鎖線)に比べ、我々の結果はより高いエネルギー領域に感度を有している。一方、5個のGRBを重ね合わせた流量に対して制限を与えた RICE の結果<sup>24)</sup> (二点鎖線、長破線)は、ほぼ同じエネルギー領域をカバーしているが、我々の制限はより厳しい値となっている。

## 5. おわりに

我々の結果は PeV-EeV 領域のプリカーサー及び残光ニュートリノの探査において最も厳しい制限を与え、PeV未達の領域に感度を有する IceCube の結果と相補的である。試運転期間中とはいえ、我々の検出器の高い瞬間的感度を示唆していると言える。残念ながら今回我々が観測した GRB は、赤方偏移  $z=2.05$  という大変遠方で発生したため、直接理論モデル予想を検定するには程遠い。そのため図5では、比較的近距离で実際に起きた GRB030329 に基づく理論予想(細い実線)<sup>25)</sup> を示した。Ashra のフル観測では、トリガー用センサーの画素視野が精細(面積1/4)となり、かつ、集光器視野全体を覆うことにより、10 PeV 付近で約100倍の感度向上が期待できる。感度向上により、年間0.55事象の空気シャワーバックグラウンドの混入が期待されるが、Ashra の優れた ( $0.1^\circ$  以下) チェレンコフシャワーの到来方向決定精度により除去が可能であり、より完全なゼロバックグラウンドの地球かすり  $\nu_e$  観測が可能である。その段階では GRB030329 のように比較的近距离で発生した GRB からの、超高エネルギーニュートリノ放出モデルと観測結果を直接比較して、検定することが実現するであろう。本論文にて報告した、我々の PeV-EeV での  $\nu_e$  初探査は、これまでの水チェレンコフ検出器や大規模宇宙線アレイ実験とエネルギー領域や検出方法において相補的であり、優れた時間及び位置同定による“多粒子天文学”<sup>34)</sup> の幕開けを示唆する。

## 参考文献

- 1) 中村卓史, 山崎 了: 日本物理学会誌 **60** (2005) 271.
- 2) P. Mészáros: Rep. Prog. Phys. **69** (2006) 2259.
- 3) 例えば教科書として、『ブラックホールと高エネルギー現象(シリーズ現代の天文学)』(日本評論社, 2007).
- 4) 坂本貴紀: 日本物理学会誌 **61** (2006) 346.
- 5) 釜江常好, 田島宏康, 深沢泰司: 日本物理学会誌 **65** (2010) 163.
- 6) M. Ackermann, *et al.*: Astrophys. J. **716** (2010) 1178.
- 7) D. Fargion: Astrophys. J. **570** (2002) 909.
- 8) J. Abraham, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **100** (2008) 211101.
- 9) M. Sasaki: J. Phys. Soc. Jpn. **77SB** (2008) 83.
- 10) Y. Aita, *et al.*: Proc. 30th ICRC **3** (2008) 1405.
- 11) M. Sasaki, *et al.*: Proc. 30th ICRC **3** (2008) 1559.
- 12) Y. Asaoka and M. Sasaki: Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A **647** (2011) 34.
- 13) 佐々木真人: 高エネルギーニュース **23** (2004) 63.
- 14) A. M. Parsons, *et al.*: GCN Circ. (2008) 8595.
- 15) Y. Aita, *et al.*: GCN Circ. (2008) 8632.
- 16) Y. Aita, *et al.*: Astrophys. J. **736** (2011) L12.
- 17) Y. Asaoka and M. Sasaki: arXiv: astro-ph/1202.5656 (2012).

- 18) T. Sjöstrand, *et al.*: Comput. Phys. Commun. **135** (2001) 238.
- 19) S. I. Dutta, M. H. Reno, I. Sarcevic and D. Seckel: Phys. Rev. D **63** (2001) 094020.
- 20) H. Abramowicz and A. Levy: arXiv: hep-ph/9712415v2 (1997).
- 21) T. Antoni, *et al.*: Astropart. Phys. **24** (2005) 1.
- 22) M. Amenomori, *et al.*: Astrophys. J. **678** (2008) 1165.
- 23) R. Abbasi, *et al.*: Astrophys. J. **710** (2010) 346.
- 24) D. Besson, S. Razzaque, J. Adams and P. Harris: Astropart. Phys. **26** (2007) 367.
- 25) S. Razzaque, P. Mészáros and E. Waxman: Phys. Rev. D **69** (2004) 023001.
- 26) M. Vietri and L. Stella: Astrophys. J. **507** (1998) L45.
- 27) A. Dar and A. D. Rújula: arXiv: astro-ph/0105094v1 (2001).
- 28) M. Vietri: Phys. Rev. Lett. **80** (1998) 3690.
- 29) M. Vietri: Astrophys. J. **507** (1998) 40.
- 30) M. Vietri, D. D. Marco and D. Gueta: Astrophys. J. **592** (2003) 378.
- 31) Z. Li, Z. G. Dai and T. Lu: Astron. Astrophys. **396** (2002) 303.
- 32) A. Dar and A. D. Rújula: Phys. Rep. **466** (2008) 179.
- 33) T. Krings: PhD thesis (RWTH Aachen Univ., 2010).
- 34) M. Sasaki: in *Proc. ICRR2000 Satellite Symposium: Workshop of Comprehensive Study of the High Energy Universe*, ed. by T. Kifune, *et al.* (ICRR, the Univ. of Tokyo, 2000) p. 110.

(2011年11月25日原稿受付)

## First Observational Search for PeV–EeV Tau Neutrino from GRB

Yoichi Asaoka and Makoto Sasaki

abstract: We report the first observational search for tau neutrinos ( $\nu_\tau$ ) from gamma-ray bursts (GRBs) using one of the Ashra light collectors. The Earth-skimming  $\nu_\tau$  technique of imaging Cherenkov tau showers was applied as a detection method. We set stringent upper limits on the  $\nu_\tau$  fluence in PeV–EeV region for 3,780 s (between 2.83 and 1.78 hr before) and another 3,780 s (between 21.2 and 22.2 hr after) surrounding GRB081203A triggered by the *Swift* satellite. This first search for PeV–EeV  $\nu_\tau$  complements other experiments in energy range and methodology, and suggests the prologue of “multi-particle astronomy” with a precise determination of time and location.

### 『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(03-3816-6201)またはFax(03-3816-6208)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. 18-2 (7月15日発行) 目次

物理学は積み上げ型の学問ではない? ……三沢和彦  
**講義室**  
 ニュートリノは光速度を超えていない ……齋藤嘉夫  
 ラドン検出器を用いた放射線教育—教材開発と実践—  
 ……中島 朋, 三好康郎  
 法律の適用のための物理の知識—限界旋回速度と危険運転  
 致死傷罪— ……那須 修  
 キュリー夫人の幻の実験授業とガリレオの指 ……吉祥瑞枝  
**実験室**  
 鉄棒を登っていくリング—回転する達成円環磁石の上昇下降  
 現象— ……夏目雄平  
**物理教育シンポジウム**  
 大学の理数系教育と社会との接続 ……三沢和彦, 田中忠芳  
 産業界が期待する理数系学生—外村博士にみるイノベーション  
 人材— ……内田史彦

科学教育とキャリア ……田代直幸  
 物理学を学んだ人材と社会 ……横山広美  
**教育実践**  
 物理授業でのノートの作成とその教育的効果  
 ……樋口勝一, 溝邊和成  
 カルチャーショックを感じずにインタラクティブな物理の授業  
 に進むこと ……ハル・マイケル  
**海外の動向**  
 中学校理科教員養成用物理カリキュラムの改善点を探る  
 —一日米比較研究で明らかになったことから— ……土佐幸子  
**教育に関する一言** ……笠 潤平/山田弘明  
**開催情報**  
**寄贈書リスト**  
**編集後記**

安藤恒也 (JPSJ編集委員長)

日本物理学会が発行している Journal of Physical Society of Japan (JPSJ) の論文で2012年5月に掲載可となったものの中から2012年6月の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。なお、編集委員会での選考では読者等の論文に対する評価を重要な要素としております。

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ため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、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(掲載から約1年間は無料公開)。また、関連した話題についての解説やコメントがJPSJホームページの「News and Comments」欄に掲載される場合もありますので、合わせてご覧ください。

JPSJ編集委員会では物理学のあらゆる分野の興味深い論文を「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。

### 私たちは心臓に Bekki-Nozaki ホールなる位相特異点を持っているか？

非線形・非平衡開放系の臨界現象に対して複素 Ginzburg-Landau 方程式 (CGLE) モデルは重要な役割を果たしてきた。約30年前に1次元CGLEの解析的厳密解が発見され、とりわけ、振幅の凹みを伴う伝播する位相特異点のダイナミクスを記述する解は、Bekki-Nozaki (BN) ホール解と呼ばれている。これまで、このBNホール解の実験的検証は困難を極め、測定結果とBNホール解との定量的比較は十分ではなかった。例えば、直線上の幅の狭いセルを用いて、側壁加熱のシリコン油の熱対流の実験で、Hopf分岐点近傍で振幅の凹みを観測し、定性的にBNホール解と比較されたが、定量的には不十分であった。そこで、BNホール解の実験的検証については、実験対象を流体や

プラズマなどに拘ることをやめて、健康な人間の心臓の心筋運動による波のダイナミクスを測定して、それらの力学的特性を調べることにした。

測定原理は超音波の位相トラッキング法による。超音波の周波数は、普通の医療器に用いるものと同じで3.75 MHzである。このとき1波長は0.411 mmになり、対象の変位計測は、この波長程度の精度しか得られない。しかし、位相トラッキング法では、サブミクロンの細かな変位まで計測することが可能になり、高分解能の測定が実現された。図1左は、第2心音直前の心室中隔壁(IVS)上の2次元位相データのスナップショットで、IVSの○印のところに典型的な位相特異点が観察される。また、図1右は、その位相特異点がビームライン方向に伝播している様子を示している。

最近、東北大学大学院工学研究科のグループは、大動脈

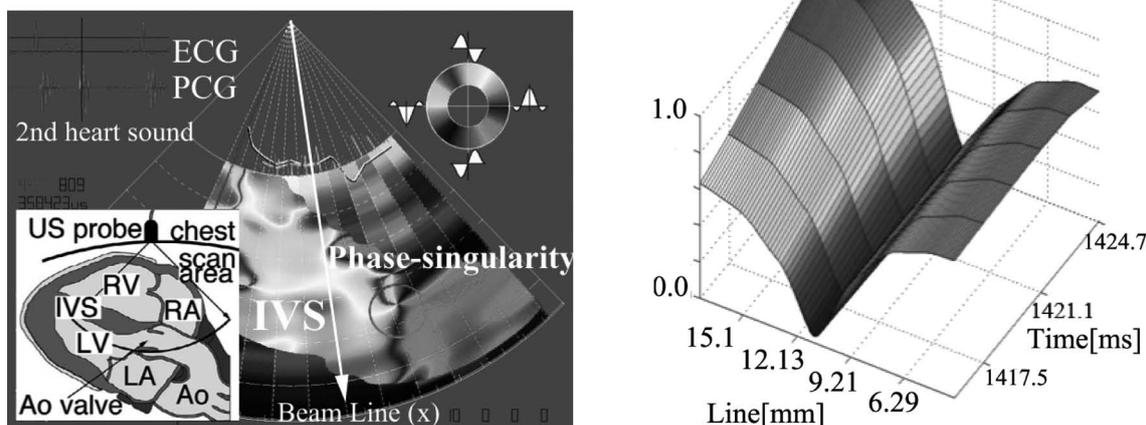


図1 第2心音直前の心室中隔壁上の2次元位相データのスナップショット(左)と興奮波の位相特異点近傍の振幅の時空間プロフィール(右)。上右図に興奮波位相特異点付近の振幅の凹み(ホール)が確かに観察できる。

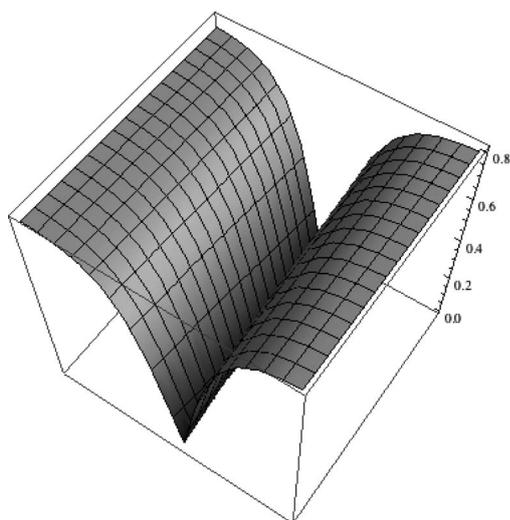


図2 1次元CGLEのBekki-Nozakiホール解の時空間プロフィール(時間空間は観測値の振幅(図1右)と同じスケールで描かれている)。

弁が閉じた直後において、心臓壁を伝播する波を計測することに初めて成功した。日本大学工学部と東北大学大学院工学研究科のグループは、その計測データの力学的特性を調べた。この波は、生きている健康な人間の最も基本的な心臓の状態を特徴付けており、この非線形波動の振る舞いを調べることは、心臓疾患などの診断に役に立つことが予想されて、非常に重要である。この波は、流体や化学反応系の波動とは異なり、心筋収縮系自体の粘弾性力学的特性が加わった非常にユニークな強い非線形波動である。驚くべきことに、その非線形波の振る舞いが1次元CGLEモデルで説明できることが初めて明らかにされた。即ち、非線形波の位相と振幅のダイナミクスがCGLEの厳密解の一つとして知られているBekki-Nozakiホール解でコンシステントに説明可能なことが、本論文で示された。この成果は、日本物理学会が発行する英文誌Journal of Physical Society of Japan (JPSJ)の2012年7月号に掲載された。

本研究は、心室中隔壁の心筋の力学的特性がCGLEのBekki-Nozakiホール解で説明できることを初めて実証した例の一つとして、注目すべき成果である。心筋収縮系自体の粘弾性力学特性が加わった強い非線形波動である波の相互作用によるBNホール解の生成過程などが調べられているが、心筋細胞の集団運動による波の織りなすBNホール以外の複雑なパターンの振る舞いは未だ明らかではなく、今後の研究の展開が期待される。

### 原論文

Bekki-Nozaki Hole in Traveling Excited Waves on Human Cardiac Interventricular Septum  
N. Bekki, Y. Harada and H. Kanai: J. Phys. Soc. Jpn. **81** (2012) 073801.

〈情報提供：戸次直明(日本大学工学部総合教育・数学研究室)〉

原田義文(福井大学)

金井 浩(東北大学大学院工学研究科)

## 重い電子系超伝導体 $UPt_3$ のスピン3重項対関数の同定

1979年に発見された  $CeCu_2Si_2$  を皮切りにその数年間に  $UBe_{13}$  と  $UPt_3$  が相次いで見いだされたことで、重い電子系超伝導研究という新しい分野が切り拓かれ、電子間相互作用の強い系に発現する超伝導体の研究が開始された。それに続いて、1986年の銅酸化物高温超伝導発見や重い電子系の第二世代とも言える  $CeCoIn_5$  等を含めて強相関物質系についての広範な研究がなされるようになった。そうした超伝導研究の流れが現在の鉄系超伝導につながっているとも言える。

冒頭の3つの第一世代重い電子系超伝導体の中でも  $UPt_3$  は磁場と温度平面で少なくとも3つの超伝導相が出現するという意味で特異な位置を占め、その多重相図の解明と対関数の同定を巡って30年近く論争が行われてきた。とりわけ対関数がスピン1重項であるのか、スピン3重項であるのかについて様々な角度からの検討が行われ、後者であることについては一定のコンセンサスが得られた。その後、スピン3重項状態であることは1996年の藤氏らのNMRによるKnight shift実験<sup>1)</sup>によって確立した。対関数のスピン部分が確定したので残るは軌道部分である。スピン3重項シナリオの中でもいくつかの提案があったが、最近の角度分解熱伝導率測定<sup>2)</sup>によって低温高磁場相、いわゆるC相が2回対称性を有する対状態であることが見出された。

これらの研究動向を受けて、最近、岡山大学大学院自然科学研究科のメンバーを中心とする研究グループは対関数の対称性の分類とそれに伴う超伝導状態の微視的研究を行い、 $UPt_3$  の特異な超伝導状態を統一的に説明することに成功し、長年の対称性を巡る論争に終止符をうった。同定

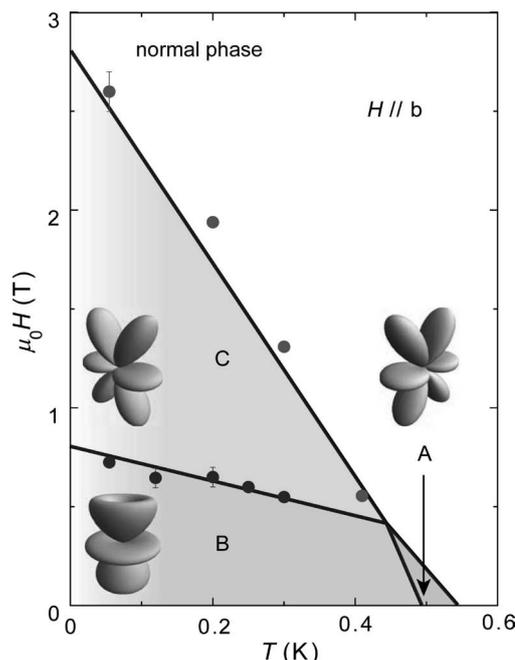


図1  $UPt_3$  の磁場温度の多重相図。<sup>2)</sup> それぞれの相に対して対関数のギャップの模式図を示してある。

された対関数は低温低磁場の  $B$  相では  $(bk_a + ck_b)(5k_c^2 - 1)$  ( $a, b, c$  は六方晶の実空間単位ベクトル,  $k_a, k_b, k_c$  は  $k$  空間での単位ベクトル) であると結論された. この対関数は  $^3\text{He}$  の超流動  $B$  相 ( $xk_x + yk_y + zk_z$ ) と類似で, いわゆる planar 状態として知られている状態と似ている. 図1に磁場温度相図で, 各相のノードの様子を模式的に示した.  $B$  相では北極と南極に点ノード, 赤道から少し外れた所に2本の線ノードが存在する.  $C$  相では  $ak_b(5k_c^2 - 1)$  となり, 前者が  $c$  軸回りに回転対称であるのに対して後者は自発的に2回対称に対称性の低下が起きている. 更に興味あることにこの  $f$  波 planar 状態は  $^3\text{He}$  の  $B$  相と同様にトポロジカル超伝導の側面をもつことが明らかになった. これを契機に  $\text{UPt}_3$  のこの面での実験的理論的研究が促進されることが望まれる. この成果は, 日本物理学会が発行する英文誌 *Journal of Physical Society of Japan (JPSJ)* の2012年7月号に掲載された.

対関数の同定を踏まえて対形成機構の解明が期待される.

電子格子相互作用ではない, 何らかの新規な対形成の機構がこの特異な  $f$  波 planar 状態を安定化させているに違いない. その中ではゼロ磁場での超伝導転移温度 ( $T_{c1} = 550$  mK,  $T_{c2} = 500$  mK) の分裂の原因が自然に説明されねばならない. 更には重い電子系研究を30年以上にも渡って牽引してきた第一世代の超伝導体  $\text{CeCu}_2\text{Si}_2$  と  $\text{UBe}_{13}$  の対関数の同定が待たれる.

#### 参考文献

- 1) H. Tou, *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996) 1374.
- 2) Y. Machida, *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **108** (2012) 157002.

#### 原論文

A Spin Triplet Superconductor  $\text{UPt}_3$

Y. Tsutsumi, K. Machida, T. Ohmi and M. Ozaki: *J. Phys. Soc. Jpn.* **81** (2012) 074717.

〈情報提供: 堤 康雅 (理化学研究所)

町田一成 (岡山大学大学院自然科学研究科)〉

### 物理教育 第60巻 第3号 (2012) 目次

#### 研究論文: 自転するパイプの飛行におけるマグヌス効果

..... 藤田正実, 他

#### 研究報告

液体の分子運動モデルの開発と授業展開..... 柿原聖治  
塩化カルシウムを寒剤とした拡散霧箱の開発

..... 柚木朋也, 津田将史

Clement のロケット問題の誤概念を支える要因

..... 加藤伸明, 定本嘉郎

浮力の実験「気体押し縮めると重くなる?」..... 矢野幸夫  
論説

霜田のパラドックスの落とし穴..... 中川雅仁  
理科教師の社会的責任—東日本大震災及び原発事故に際して—

..... 八巻俊憲

私の実践: 夕焼けの教材開発と中学理科授業実践

..... 橋本和恵, 他

#### 企画: 変位電流とは何か

「変位電流は磁場を創らない」を考察するモデルについて

..... 斎藤吉彦

変位電流と磁場の関係—企画「変位電流とは何か」への

コメント—..... 菅野礼司

マクスウェルの電磁理論の確立過程にみる変位電流の意義

..... 鬼塚史朗

#### 図書紹介

物理学とは何かを理解するために—基礎概念の発展を追って—

..... 高橋憲明

測り方の科学史II 原子から素粒子へ..... 大井みさほ

#### 《東北支部特集》

東北支部特集にあたって: 東日本大震災と東北支部 (その2)

..... 須藤彰三

平野とV字谷を襲う津波のメカニズムについての一考察実験  
と東日本大震災大津波東松島市, 女川町の調査を通して

..... 堀込智之

Fukushima より..... 穂積裕一

東日本大震災「宮城県における被害等について」..... 笹野義博

震災と物理教育..... 佐々木彰子

放射線セミナーを開いて..... 藤井俊介

八戸より..... 川本 清

イメージする力..... 遠藤龍介

今回の震災に学んだこと..... 鈴木秀明

「3・11 東日本大震災」..... 佐々木 満

学会報告: 「第21回今春の物理入試問題についての懇談会」(東  
京) 報告..... 関東地区連絡会・入試検討委員会

#### ワンポイント

磁石で机上のアルミ箔を持ち上げられるか?..... 村尾美明

Power Point とは?..... 柿原聖治

シリンジポンプによる大気圧の測定..... 真鍋和朗

人体の放射能..... 編集委員会, A

人体内のカリウムによる放射能..... 編集委員会, A

人体内の炭素による放射能..... 編集委員会, A

人体内のルビジウムによる放射能..... 編集委員会, A

人体内の鉛による放射能..... 編集委員会, A

人体内のポロニウムによる放射能..... 編集委員会, A

#### Information

## 2012年フンボルト賞： 谷畑勇夫氏

岸本忠史〈阪大核物理研究センター〉

大阪大学核物理研究センターの谷畑勇夫教授がフンボルト賞を受賞されました。フンボルト賞(独: Humboldt-Forschungspreis)は、ドイツ政府が全額出資するアレキサンダー・フォン・フンボルト財団が創設した賞で、自然科学から人文・社会科学に至る幅広い研究分野において、基本的な発見もしくは新しい理論によって分野に多大なインパクトを与え、今後も最先端の学術的成果を出し続けると期待される国際的に著名な研究者に対して授与されます。ドイツの最も栄誉ある学術賞であり、これまでに40余名のフンボルト賞受賞者が後にノーベル賞を受賞しています。特に、成し遂げた研究成果の重要性だけでなく、今後も活躍出来ることが受賞理由としてあげられていることに特徴があります。2012年6月にベルリンのシャルロッテンブルグ城で授賞式が執り行われました。谷畑教授にとっては、1989年の仁科賞、1993年のアメリカ物理学会フェローに続く栄誉となりました。

今回の受賞は、谷畑教授による exotic nuclear beam を用いた研究が評価されたものです。谷畑教授は高エネルギー重イオンの入射核破砕反応で生成される不安定核を用いた研究の創始者で、特に中性子過剰核において、中性子が原子核の周りを通常の原子核半径を大きく超えて存在するハロー現象の発見で研究の流れに一時代を築きました。この研究は国際的な認知度も高く、現在も世界中の多くの研究者が取り組んでいます。

フンボルト賞の受賞者は国際的に選ばれますが、推薦はドイツ国内で

establishした研究者が行います。受賞者は、ドイツの研究者と緊密な共同研究を推進することが期待されています。谷畑教授は、ドイツ連邦共和国のダルムシュタットにある原子核物理学、素粒子、生物物理学、核化学に関する研究施設である重イオン研究所(GSI)のシャイデンバーガー教授に招聘され、原子核におけるテンソル力や中性子数が極端に少ない原子核の荷電半径の研究を進めています。

谷畑教授は核物理研究センターの寄付研究部門の教授です。純粋に研究を進める目的で設置された個人の寄付による研究部門は非常に稀で、そこで顕著な業績を上げて来られました。また、核物理研究センターでは、2001年に当時のセンター長で現名誉教授の土岐博博士も同賞を受賞しており、2重の喜びになりました。このように受賞者を輩出する伝統は是非とも継続したいと考えています。

(2012年7月4日原稿受付)

## 2012年フンボルト賞： 大森賢治氏

百瀬孝昌〈ブリティッシュコロロンビア大〉

自然科学研究機構分子科学研究所の大森賢治教授に対して、2012年のフンボルト賞がドイツ政府の国際的学術活動機関であるアレキサンダー・フォン・フンボルト財団より授与されました。フンボルト賞は、基礎的な発見、新しい理論、または深い洞察によってそれぞれの専門分野および分野を超えた領域に重要な影響を与え、かつ今後も学問の最先端で活躍すると期待される国際的研究者に授与される、ドイツでもっとも栄誉ある学術賞です。今回の大森賢治氏の受賞は、超高速レーザ

ー光を用いて分子の振動波束をアト秒(アト=10<sup>-18</sup>)精度で制御する技術を確立し、それを量子力学の検証と量子テクノロジーへの応用に活用することで、「アト秒時空量子エンジニアリング」という原子・分子・光科学領域における新学術分野を開拓・発展させたことが高く評価されました。大森教授は複数の超極短パルスレーザー光の位相をアト秒精度で制御するアト秒位相変調器を開発し、ヨウ素分子(I<sub>2</sub>)内に発生させた2個の電子振動波束の干渉を精密に制御することに成功しました。また、その波束干渉によって得られる量子力学的時空間模様をピコメートル(ピコ=10<sup>-12</sup>)・フェムト秒(フェムト=10<sup>-15</sup>)の分解能で可視化する検出手法を開発しました。さらに波形整形器を用いることで、任意の強度・位相を持つ分子振動波束の発生およびその干渉を可能にしました。この技術を応用することで得られた、ヨウ素分子の振動波束を用いた高速フーリエ変換の実現(Phys. Rev. Lett. **104** (2010) 180501)は、Nature誌のハイライトに取り上げられるなど大きな注目を集めました。この成果は、分子の量子状態を用いた量子情報処理が大きな可能性を秘めていることを示しており、分子量子コンピューターの確立など今後の発展が期待されます。大森教授は今回のフンボルト賞受賞を基にして、ハイデルベルグ大学を拠点に、バイデミューラー(M. Weidemüller)教授らと共にアト秒時空量子エンジニアリングの更なる展開研究を行う予定です。位相制御した超極短パルスレーザーを用いて、原子や分子の波としての性質を光で完全に制御する研究を推進することで、量子力学の検証と量子テクノロジー開発における新しい展開が大いに期待されています。

(2012年7月9日原稿受付)

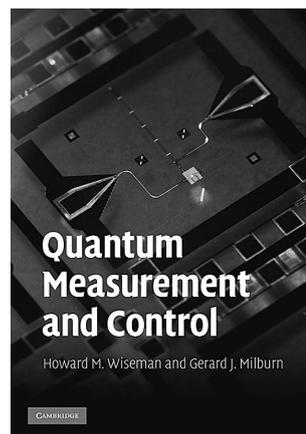
H. M. Wiseman and G. J. Milburn

## Quantum Measurement and Control

Cambridge Univ. Press, New York, 2010, xvi + 460p, 26 × 18 cm, \$86.00 [専門・大学院向]

ISBN 978-0-521-80442-4

沙川 貴大\* (京大白眉)



近年、量子光学系など多彩な量子系において、精密な量子測定と量子制御が可能になっている。その際、散逸や測定の効果でダイナミクスが非ユニタリになることが多い。マルコフ過程の場合は、量子マスター方程式によって非ユニタリ過程を記述できることが知られている。さらに、環境が連続的にモニターされている量子連続測定の場合は、量子軌跡 (quantum trajectory) によって系の時間発展を記述することができる。量子測定の結果をリアルタイムで用いた制御である「量子フィードバック制御」を解析するうえでも、量子軌跡は重要な役割を果たす。

量子フィードバック制御は、古典最適制御理論の拡張として、1980年代に Belavkin によって提案された。その後、1990年代に量子光学の観点から量子フィードバック制御の理論が大きく発展したが、そのときに中心的な役

割を担ったのが本書の著者である Wiseman と Milburn であった。

本書は量子フィードバック制御の初めての本格的な教科書である。内容は、著者らが構築した理論の解説はもちろんのこと、量子測定の入門的な解説から比較的最近の研究の紹介まで、広範囲に及んでいる。ただし、マルコフ過程の解説が中心であり、非マルコフ過程はほとんど扱われていない。

第1章は量子測定の、第2章は量子推定の入門である。第3章は量子マスター方程式の解説にあてられている。第4章では、ホモダイン測定・ヘテロダイン測定を中心に、量子軌跡が解説されている。具体例としては、量子ドットの連続測定が挙げられている。他の標準的な教科書の一つである Breuer と Petruccione の “The Theory of Quantum Open Systems” (Oxford, 2002) と比べると、本書には、伊藤公式の量子版 (非可換版) に相当する関係式が積極的に用いられているという特色がある。

第5章と第6章で量子フィードバック制御が解説されている。状態ベースの量子フィードバック制御を理解するためには古典制御理論の知識が必要になるが、その解説に多くの紙数があてられていることも本書の特色である。第7章では量子情報処理への応用が述べられている。

本書は、入門的な解説からテクニカルな理論的内容、さらに関連する実験系の解説まで、幅広くカバーしている教科書である。量子光学や量子情報の理論家と実験家の両方に、本書を推薦したい。

(2012年5月11日原稿受付)

\* 兼京大基研

上田和夫

## 磁性入門

裳華房, 東京, 2011, ix + 167p, 21 × 15 cm, 本体2,700円 (物性科学入門シリーズ) [大学院向]

ISBN 978-4-7853-2918-1

佐久間昭正 (東北大院工)



著者は1980年代から、我が国のお家芸である磁性と超伝導の理論研究を牽引してきた第一線の研究者である。表紙は一見すると昨今の学部1, 2年生向けの入門書のような雰囲気呈しているが、著者が言うように、本書は学部4年生以上を対象としたものである。長年の風雪の中でリファインされてきた現代の磁性理論を、贅肉をそぎ落とした形で簡潔に説明してくれている。

一般に学部の物性物理学の講義において、磁性は後半の章に回されること

が多いが、今日の物性物理学の研究現場は磁性物理に関するバックグラウンドなしでは一歩も進めない状況にあるといっても過言ではなからう。重い電子系は言うに及ばず、電荷の自由度にスピン自由度を絡めたスピントロニクス、銅酸化物系や鉄系の超伝導発現機構など、磁性は現在の物性研究の中核を支える重要な概念である。最近、磁性に関する教科書が多く出版されているのを見ると、磁性も成熟期に入ったかという印象が持たれるが、本書は

ここからが磁性理論の本番であることを主張しているように思える。

内容は6章から成り、150ページほどの中に磁性理論のエキスが詰まっている。第1章は「磁性の古典論と量子論」、第2章は「原子・イオンの磁性」、第3章は「遍歴電子のモデル」、第4章

は「磁性絶縁体の理論」, 第5章は「遍歴電子系の磁性理論」, そして最終章は「磁性と超伝導—結びに変えて—」である。また、各章には適切な問題が用意されており、本文の理解を助けている。第1章から第3章までは磁性の定番と言える内容であるが、第4章から第6章まで進めば、現在の物性物理学の最前線からの風景をのぞくことができる。

第4章の「磁性絶縁体の理論」はハイゼンベルグ模型に代表されるスピン系の話である。実際の磁性体の多く(特に強磁性体)は金属であるが、スピン系の模型は磁性の低エネルギー励起や相転移現象を理解するうえで格好の舞台装置となっている。本書でも分子場理論から始まってスピン波理論、GL理論、繰り込みとスケールリング則を経て量子相転移という順で説明がなされている。量子相転移の節では、ハ

ルデインギャップ(本書ではホールデンギャップ)やRVB状態など低次元系の低エネルギー励起に関する説明が簡潔になされ、銅酸化物系の高温超伝導発現機構との関連で読者の関心をうまく導いている。

第5章の「遍歴電子系の磁性理論」では、我が国で育った線形応答理論やそれを利用したスピン揺らぎ理論がわずか30ページ余りで過不足なく説明されている。特に自己無撞着繰り込み(SCR)理論の説明においては、ハートリー・フォック近似(HFA)と乱雑位相近似(RPA)のそれぞれに対してのSCR理論の(補正理論としての)位置づけが明解に記されており、著者ならではの要を得た記述になっている。また、本章の最後に、磁性体の量子臨界点近傍における諸物性の非フェルミ液体的な温度依存性がSCR理論によって記述し得ることを述べ、さらにこ

のシナリオが重い電子系や銅酸化物系の超伝導発現機構に密接に関係することを最終章「磁性と超伝導—結びに変えて—」で主張している。勿論、著者が言うように、ここから先は研究現場である。入門書といえども研究の最前線への誘導に抜かりがない。

以上、話題は豊富であるが、文章全体が簡にして要を得ているので飽きる前に章が終わるという安堵感がある。これなら意欲をそぐことなしに初学者の琴線に触れる内容となろう。初学者はもちろんであるが、第一線の研究者もぜひ一冊手元において、今日の磁性理論の構造を確認されることを勧めたい。特に、若い研究者が本書を道しるべに、上記のような未知領域に道を築いてくれることを期待したい。

(2012年5月21日原稿受付)

C. Carson

### Heisenberg in the Atomic Age; Science and the Public Sphere

Cambridge Univ. Press, New York, 2010, xvi + 541p, 24 × 16 cm, \$92.00 [一般向]

ISBN 978-0-521-82170-4

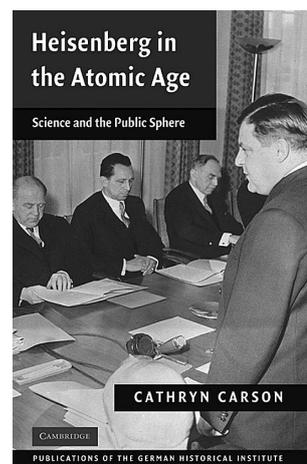
後藤 邦夫 (学術研究ネット)

20世紀の大物理学者 Werner Heisenberg (1901-1976) の新たな伝記である。ただし、既刊の Cassidy の “Uncertainty” や Powers の “Heisenberg’s War” (いずれも邦訳あり) などとは異なり、既刊書ではあまり扱われなかった第二次大戦後の活動に重点がおかれている。すなわち、Max Planck Gesellschaft, 原子力委員会, フンボルト財団, 学術研究評議会などで果たした指導的な役割や、ドイツ核武装反対のゲッティンゲン宣言や「オーデル・ナイセ以東の領土権放棄」を提唱して論議を呼んだチュービンゲン・メモランダムへの彼の積極的関与に多くのスペースが割かれている。

当然のことながら、本書の記述は戦後の西ドイツの政治史(それは同時に社会史でもある)をも含む。そのさいの「陰の主演」が副題の Public Sphere である。「公共圏」と訳されるこの概念の原語は Öffentlichkeit であり、18世紀の領邦分立時代のドイツで、権力を

振るう国家とは別に「教養ある富裕な都市の民」(ビュルガーは「市民」と訳されるがブルジョワと同義である)が公共的機能を担う政治的空間を形成する可能性を期待して唱導された。Kant が定式化したこの古典的概念を1960年代初頭のマスメディアと大衆民主主義の時代に再定式化したのがフランクフルト学派の Habermas であり、「市民と科学者のコミュニケーション」をめぐる現代的課題につながるのである。

本書では、Heisenberg がまさに「教養ある富裕な都市の民」の末裔として、古典的公共圏の「市民」にふさわしく行動したとされる。量子力学の建設、場の量子論の開拓、S行列の提唱を経て非線形スピノル場方程式に及ぶ彼の物理学研究は、それ自体が哲学的・文化的行為であり、多くの一般的著作も同様であったとする。その姿勢は科学技術政策への関与や政治的発言においても一貫していたが、古典的公共圏自



体の解体に伴い、彼の学問は巨大科学と化した素粒子物理学の主流から外れてゆき、科学技術政策の主導的地位からも退出することになったという。しかし、変貌する新たな公共圏への可能性を求め、Habermas らとも交流し、リベラル左派の立場をとり、Willy Brandt の社会民主党政権とその「東方政策」を歓迎するにいたる。本書は、おびただしい書簡を含む膨大な資料や、ヒトラー体制下の行動の率直な回顧を含む著書『部分と全体』などの精密な「解説」を通じて、このような Heisenberg の半生を分析している。先行研究に対する評価や反証も丹念である。

本書の構成は必ずしも時系列を追わず、文化的活動(物理学研究と講演・著作活動)と政治的活動(研究所運営、科学政策への関与、社会的発言)、ナチ時代の核研究問題に関する言説、などがテーマ別に整理され、最後を「公共圏における科学的理性」という1章で結ぶ。そこでは右にHeidegger、左にフランクフルト学派を配した戦後西ドイツの思想潮流が概括され、そのなかでのHeisenbergの遍歴が総括される。重視されるのはリベラル左派のHaber-

mas的公共圏の思想であるが、「公共圏における科学」の可能性については、それを認めない立場を含め更なる検討が必要であろう。

本書は歴史書であるが、「社会と科学」という現代的課題を扱った力作である。それは同様に「戦後」を生きてきた私たち自身のテーマでもある。デジタル社会のもとで「フクシマ」問題に直面し、「市民社会と科学技術」について考察を深めなければならない現在の日本で多く読まれることを期待し

たい。

(2012年5月25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。

## AAPPS だより

### アジア太平洋物理学会連合(AAPPS)と 第12回アジア太平洋物理会議(APPC12)開催について

アジア太平洋物理学会連合(AAPPS=Association of Asia Pacific Physical Societies)という言葉をお聞きになったことがあるでしょうか? アジア地区の物理学会の連合で、発足してから24年になります。しかし、物理学会員には、ほとんど知られていないばかりか、そんな昔から存在していたにしては、何もこれまで知らされていないのはどういうことだと、疑問を發する方も多いと思います。

私は、昨年より、このAAPPSの会長を務めております。日本物理学会の会長であった頃、これからはアジア連合体の発展や連携協力が必要な時代だと考え、この仕事を引き受けることにしました。AAPPSは、昔は認知されていたかもしれませんが、ここ10年近く、何となく日本物理学会とは離れた存在になっておりました。しかし、今後はAAPPS運営に対してより積極的であるべきだと考え、数年前に、応用物理学会、韓国物理学会、そして北京と台北の中国物理学会と何度も連絡を取りました。少なくともこれらの学会とAAPPSは密接に結び付いたものにしたい、と話し合いました。幸い、これらの学会の皆さんからは「そうすべきだ」という強い反応があり、折し

も行われたAAPPS会長選挙で私が会長に選出された次第です。

会長になろうとなるまいと、もう一つの大きなこととして、アジア太平洋物理会議(APPC12=Asia Pacific Physics Conference)を日本で開催すべきだと考え、2010年の上海会議で提案いたしました。日本でこの会議が一度も開催されたことがなかったからです。幸い、この提案は認められ、2013年7月14日から19日の1週間、千葉の幕張で開催することになりました。ホームページを開設しておりますので、ぜひご覧ください。(http://www.jps.or.jp/APPC12/index.html)

以下、この会議をまずお知らせし、AAPPSの活動についても多少触れたと思います。

APPC会議の第1回は、1983年にシンガポールで開催されました。当時、日本物理学会の会長を務められていた有馬朗人氏に誘われて、私も出席しました。その頃は、Wボソンが発見された頃で、Rubbia氏による世界初演の発表がありました。それをチェアマンのC. N. Yang氏が、別の理由で制止し、二人で口論になったのをよく覚えております。また、久保亮五氏や後藤英一氏も講演され、私の記憶に鮮明に

残っています。小田 稔氏や江口 徹氏、小林俊一氏、山崎敏光氏等も出席されました。さらに多くの重要人物も参加されたと思いますが、思い出せません。

今回はAPPC発足30周年になります。30年の歴史を眺めると、物理学は大きく変わりました。加速器等の大型計画を例にとっても、また物性実験においても、アジア地区の台頭には目覚ましいものがあります。このような背景の中で開催される今回の会議は、大きな意味があると思います。多くの日本物理学会の会員の皆様に、是非ともご参加いただきたいと思います。久しぶりに大型の国際会議になることを期待しています。

一方、AAPPSでは、目下、理事会において、いくつかのことを進めております。これまでやや複雑であった会計を一本化し、約1年かけてその執行を明瞭化いたしました。この作業は大変でしたが、最近やっと成功いたしました。また、昨年8月より、装いを新たにAAPPS Bulletinを発行し、各国学会の紹介の中に、日本からの記事もたくさん掲載することにいたしました。編集委員会も一新しました。2か月に1回発行しておりますので、ご覧いただければ幸いです。(http://aappsbulletin.org/)

また、AAPPSにおける最大の努力として、Divisionの立ち上げ作業を進めています。これは、3年に一度のAPPCにおけるプログラム構成組織に

結びつきます。すでに、多くの分野でアジア連合が立ち上がっており、これらを AAPPS の Division として認知し、特に、次回の幕張での学会に役立てたいと思っております。

さらに、これまで開催国から3名の若手を選び、APPCの折に表彰していた C. N. Yang Award の運営を全面的に改めることにしました。今回から、開催国から1名、それ以外の国から2名選ぶことにし、賞金も与えることにします。

最後に、ASEPS (Asia Europe Physics

Summit) について記します。今回の APPC は、会議を単にアジア太平洋地域からの視点のみで運営せず、ヨーロッパとの交流の機会を持つべきであろうと考えました。すでに、AAPPS と欧州物理学会 (EPS) との間で、ASEPS は2回開催されております。第3回 ASEPS を APPC12 の会期中に開催し、種々のワーキンググループセッションを企画することにいたしました。

繰り返しになりますが、APPC12 に関しては、物理学会諸氏の参加を、是非ともお願いいたします。より詳しく

は、次号以下で紹介したいと思いますので、今回は、7月14日から19日の間、千葉県の幕張で APPC12 が開催されることだけをカレンダーに書き入れていただければ幸いです。また、AAPPS の活動に関しても、折に触れ、紹介していきたいと思っております。

永宮正治 (アジア太平洋物理学会連合会長、  
APPC12 組織委員長)

(2012年7月5日原稿受付)



## 震災復興ののろし

上羽牧夫 (名大理)

7月22日から1週間、仙台で結晶成長に関する小さな国際会議とサマースクール (<http://www.gcoe.es.tohoku.ac.jp/ICGS2/>) が連続して開催された。普通なら報告するほどのことでもないが、今回は震災からの復興をアピールするという特別な目的があった。前者はオランダと日本で交互に開催している JANE (Japan-Netherlands) と呼ばれるものの5回目にあたり、本来はオランダで開催予定だったものを、あえて仙台で開催したのである。表面融解やグラフェンの Y. Frenken、カイラル結晶化の W. Noorduin や E. Vlieg、ナノ表面の H. Zandvliet などを迎え、北大の佐崎元氏らが組織した小規模ながら水準の高い会議である。後者は1960年代から結晶成長理論の中核となってきた大御所 A. Chernov らの講義シリー

ズと課題研究的実験を中心に据えた特色あるサマースクールである。学生を数人のグループに分け、複数の専門家の講師を配置してテーマ実験を行い、最終日に全員でプレゼンテーションを行うという密度の高い意欲的な試みである (学生は文字通り夜を徹して準備をしていた)。日本人学生が多く、つたない英語であったが熱のこもった発表に聴衆からの称賛の拍手がわいた。このようなスタイルは主催者である東北大の塚本勝男氏がはじめたもので国際的にも高い評価を得ている。

JANE の夜のセッションには東北大松澤暢氏による東北地震についての特別講義があり、合同のエクスカージョンは被災地塩釜の見学であった。海岸沿いに広がる草原と瓦礫の山を見ると皆言葉が出ない。塩釜では4千人以上の死者行方不明者を出しただけでなく、6千人以上が街を離れている。復興のためには水産業などの産業が動き出し、人が戻ってくることが何よりも大切であるとガイドの方が説明された。今回の会議、スクールも仙台での科学研究の復興をアピールするのが狙いである。組織委員の

一人 Garcia-Ruiz 氏は東北大滞在中に震災に会い、原子炉事故による帰国勧告を受けて新潟経由の長いバスの旅のちに日本を脱出した。1年半ぶりに仙台に戻った彼の閉会挨拶は、当時人々から受けたさまざまな親切を紹介して復興への激励の言葉を述べ、参加者の胸を打つものであった。震災で困難な状態にある東北大の方々が中心になって準備したこの会議が研究教育活動での震災復興ののろしとなることを祈って、紹介記事としたい。

(2012年8月6日原稿受付)

### 会員の声 投稿規定 (3,000字以内)

- 1) 広く会員にとって関心があると思われる話題についての個人的な意見や感想を述べた投書を掲載する。
- 2) 採否は編集委員長の判断による。その内容に関する責任は投稿者が負う。
- 3) 毎月15日までに投稿された原稿は原則として翌々月号掲載とする。

## 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](mailto:keijiban_jps.or.jp)へお送り下さい。必ず Fax 03-3816-6208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)

### ■高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所教授

1. 教授1名
2. 放射光科学研究施設物質化学グループ
3. 同研究所放射光科学研究施設(PF)の物質化学グループリーダーとして、主に放射光X線吸収分光法や蛍光X線分析法を用いた物質化学研究を推進し、物構研が推進する将来光源における利用研究開拓、PFの高輝度挿入光源を用いた先端的なビームライン及び実験手法の開発において中心的役割を担う。関連するビームライン及び実験装置の性能向上、維持管理に努め、大学共同利用研究や産業利用を推進。
4. 決定後早期
5. なし
7. ○履歴書 ○研究歴 ○着任後の抱負

○発表論文リスト ○論文別刷5編以内 ○その他参考資料 ○推薦書又は参考意見書

8. 2012年10月10日(水)
9. ①305-0801つくば市大穂1-1高エネルギー加速器研究機構総務部人事労務課人事第一係  
②放射光科学第二研究系 足立伸一  
電話 029-879-6022 [shinichi.adachi@kek.jp](mailto:shinichi.adachi@kek.jp)
10. 詳細は<http://www.kek.jp/ja/Jobs/>参照。

### ■防衛大学校応用科学群教官

1. 准教授又は講師1名
2. 応用物理学科
3. 表面物理・光物性分野(レーザー光と表面・ナノ物質との相互作用等に関する研究分野が望ましい)、基礎物理学(実験含む)及び当該分野に関連する専門科目及び研究指導。
4. 2013年4月1日
5. なし
6. 上記専門分野で優れた実績を有する博士号取得者
7. ○履歴書 ○e-mail ○研究業績リスト ○主要論文別刷5編 ○今迄の研究概要と教育実績(A4、約1枚) ○今後の教育・研究に対する抱負・計画(A4、約1枚) ○照会可能者2名の氏名、連絡先
8. 2012年10月15日(月)
9. ①239-8686横須賀市走水1-10-20 防衛大学校応用科学群応用物理学科 荒井 隆  
②同学科 鈴木隆則 電話046-841-3810(内線3606) [tsuzuki@nda.ac.jp](mailto:tsuzuki@nda.ac.jp)
10. 封筒に「教官応募書類在中」と朱書き簡易書留で送付。提出書類原則不返却。書類選考の上、面接することがある。選考結果については、直接応募者に知らせる。詳細は<http://www.mod.go.jp/nda/>参照。

### ■北陸先端科学技術大学院大学・ナノマテリアルテクノロジーセンター准教授

1. 准教授(テニユアトラック)1名
2. ナノ加工・低温強磁場を用いた量子デバイス科学分野
3. 独立研究室を運営。マテリアルサイエンス研究科及びナノマテリアルテクノロジー教育コースの講義担当。微細加工及び各種低温強磁場関連装置の維持管理
4. 2013年1月1日以降早期
5. 10年(3年の再任制度有)、任期内にテ

ニユア審査可

6. 博士号取得者
7. ○履歴書(写真貼付)及び学位証明書の写し ○研究業績リスト(国際・国内論文誌、研究会等の発表論文、著書、特許、その他に区別し年代順に列記) ○主要論文別刷又はコピー5編 ○主たる研究概要(約2,000字) ○研究、教育に関するその他の活動 ○10年間の研究計画(約2,000字) ○教育に対する抱負(約2,000字) ○連絡先(郵便宛先、e-mail) ○推薦書2通又は照会者2名の氏名、所属、連絡先
8. 2012年10月31日(水)必着
9. 923-1292能美市旭台1-1 北陸先端大学院大学ナノセンター 山田省二 電話0761-51-1448 [shooji@jaist.ac.jp](mailto:shooji@jaist.ac.jp)
10. 封書に「教員応募書類在中(ナノセンター量子デバイス科学分野・准教授)」と朱書き簡易書留で送付。詳細は本学HP参照。

### ■新潟大学自然科学系准教授

1. 准教授1名
2. 数理工学系物理理論分野
3. 物理理論(広義の複雑系含)、学部・大学院における教育・研究及び学科・学部等の運営。
4. 2013年4月1日
5. なし
6. 博士号取得者
7. ○履歴書 ○研究業績リスト(学位論文、原著論文、プロシーディングス、著書、総説等区別) ○主要論文別刷5編以内(コピー可) ○主要研究業績概要(2,000字以内) ○着任後の研究計画と教育に関する抱負(2,000字以内) ○その他特記事項(科研費等外部資金獲得状況、招待講演、受賞歴、大学院生指導実績等) ○照会可能者2名の氏名、連絡先 ○以上の印刷物及び履歴書以外のPDFが保存された電子媒体(CD-R等)を提出
8. 2012年10月31日(水)必着
9. ①950-2181新潟市西区五十嵐2の町8050 新潟大学自然科学系総務課学系庶務係  
②理学部物理学科物理理論研究室 大野義章 電話025-262-6275 [y.ono@phys.sc.niigata-u.ac.jp](mailto:y.ono@phys.sc.niigata-u.ac.jp)
10. 封筒に「物理理論教員応募書類在中」と朱書き簡易書留で送付。提出書類不返却。

## ■上智大学理工学部教員

1. 准教授又は助教1名
2. 機能創造理工学科(大学院理工学専攻物理学領域)
3. 物性物理学(実験)
4. 2013年4月1日
5. 助教の場合は5年(昇任の可能性有)
6. 博士号取得者,又は着任時迄に取得可の者.英語で講義ができること.研究分野としては,本学科の物理学領域に所属する教員と協力体制が組めることが望ましい.
7. ○履歴書(写真貼付, e-mail明記) ○研究業績リスト ○科研費等外部資金取得リスト ○主要論文別刷約5編(コピー可) ○今迄の研究概要(約2,000字) ○着任後の研究計画と教育への抱負(約2,000字) ○国内の照会可能者2名(氏名,連絡先)
8. 2012年10月31日(水)必着
9. ①102-8554東京都千代田区紀尾井町7-1 上智大学理工学部 早下隆士  
②機能創造理工学科 高尾智明 電話03-3238-3310 d-eas1 sophia.ac.jp
10. 封筒に「機能創造理工学科教員応募(物性物理学)」と朱書き送付.女性研究者の積極的な応募歓迎.詳細は<http://www.sophia.ac.jp/jpn/top/info/employment>参照.

## ■東北大学大学院工学研究科助教

1. 助教1名
2. 附属エネルギー安全科学国際研究センターマルチフィジックス計算科学研究分野
3. 第一原理計算又は第一原理分子動力学法
4. 2013年4月1日以降早期
5. 2016年3月31日(更新有)
6. 博士号取得者(2013年3月迄の取得予定者含)
7. ○履歴書(写真貼付) ○研究業績リスト(学術論文(全文査読の論文),参考論文(前記以外の論文),その他) ○主要論文3編の別刷又はコピー ○今迄の研究概要(A4,約2,000字) ○研究に対する抱負(A4,約1,000字) ○作成した計算科学プログラム又はサブルーチンの説明(A4,約500字) ○照会可能者2名の氏名,連絡先,電話, e-mail
8. 2012年10月31日(水)
9. 980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉6-

6-11-701 東北大学大学院工学研究科  
附属エネルギー安全科学国際研究センター 久保百司 電話022-795-6930  
Fax 022-795-6931 momoji\_rift.mech.  
tohoku.ac.jp

10. 詳細は<http://www.rift.mech.tohoku.ac.jp/employment/201208.html>参照.

## ■名古屋大学大学院理学研究科助教

1. 助教1名
2. 素粒子宇宙物理学専攻高エネルギー物理学研究室(N研)
3. 素粒子実験.高エネルギー物理学研究室(N研)において,主としてLHC-ATLAS実験における研究を進めると共に,学部学生,大学院生の教育を行う.
4. 2013年4月1日
5. なし
6. 博士号取得者(2013年3月迄の取得見込者含)
7. ○履歴書 ○研究業績リスト(原著,総説,学会発表別) ○主要論文別刷3編以内(コピー可)各1部 ○今迄の研究内容 ○着任後の研究計画と教育に関する抱負 ○推薦書又は意見書2通
8. 2012年11月30日(金)必着
9. ①464-8602名古屋市中種区不老町名古屋大学大学院理学研究科物理学教室 神山 勉  
②同教室 飯嶋 徹 電話052-789-2893 ijijima hep1.phys.nagoya-u.ac.jp
10. 封筒に「素粒子実験助教応募書類在中」と朱書き書留で送付.応募書類不返却.物理教室の選考基準については<http://www.phys.nagoya-u.ac.jp/scholar/pub.html>参照.

## ■東北大学金属材料研究所教授

1. 教授1名
2. 結晶物理学研究部門
3. 基礎物理学に立脚して新物質や物質系の開拓を行う分野.物質創製又は先端計測,及び両者の融合分野等の研究に意欲的に取り組める方.  
詳細は<http://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/op/2012crystalphysics.html>参照.
4. 決定後早期
5. 10年,審査後再任可
6. 博士号取得者
7. ○履歴書(写真貼付) ○研究業績リスト(原著論文,国際会議の発表・プロシーディング,総説・解説,国内・国際会議での招待講演,著書,特許等) ○外部資金の導入状況(研究代表者のもののみ) ○主要論文別刷10編(コ

ピー可) ○今迄の研究概要(約2,000字) ○着任後の研究計画(約2,000字) ○推薦書又は照会可能者2名の氏名,連絡先

8. 2012年12月25日(火)必着
9. ①980-8577仙台市青葉区片平2-1-1 東北大学金属材料研究所長  
②宇田 聡 電話022-215-2100 uda  
imr.tohoku.ac.jp
10. 封筒に「結晶物理学研究部門教授応募書類在中」と朱書き書留送付.提出書類原則不返却.

## 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)

### ■第7回高崎量子応用研究シンポジウム

主催 日本原子力研究開発機構高崎量子応用研究所  
協賛 日本物理学会  
日時 2012年10月11日(木)~12日(金)  
場所 高崎シティギャラリー (370-0829 高崎市高松町35-1 電話027-328-5050)  
内容 イオン照射研究施設(TIARA),電子線及びコバルト60ガンマ線照射施設等において実施された研究の成果の発表,利用者や利用を計画している研究者が情報交換・討論を行うことにより量子ビーム応用研究の推進と施設の有効利用を図ることを目的として開催.

定員 460名  
参加費 無料  
申込 事前にe-mail又はFax(当日受付も可)  
連絡先 370-1292 高崎市綿貫町1233 番地 日本原子力研究開発機構高崎量子応用研究所放射線高度利用施設部業務課 電話027-346-9600 Fax 027-346-9690 taka-sympo jaea.go.jp <http://www.taka.jaea.go.jp/>

■応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会講習会～有機半導体分析技術の基礎～

主催 応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会  
協賛 日本物理学会  
日時 2012年11月12日(月)  
場所 CIVI新大阪研修センター9階会議室 905D (532-0011 大阪市淀川区西中島3-9-13 NLC新大阪8号館 電話06-6390-3633)  
内容 有機デバイスに共通する有機半導体薄膜の分析技術に焦点を絞り、解析手法、何が分かるか、特に測定原理に関し詳細に議論する。ある物性に関して、異なる手法で得られる値の違いや意味についても議論を行えるよう企画。  
定員 120名  
参加費 8,000円、学生3,000円  
参加申込締切 2012年10月31日(水)  
連絡先 113-0034 東京都文京区湯島2-31-22 湯島アーバンビル7階 応用物理学会分科会担当 上村さつき 電話03-5802-0863 Fax 03-5802-6250 kamimura jsap.or.jp

■京大基研研究会「量子スピン系の物理」

日時 2012年11月12日(月)～14日(水)  
場所 京都大学基礎物理学研究所 (606-8502 京都市左京区北白川追分町 電話075-753-7000)  
内容 スピン系の最近のトピックスであるスピン液体・マグノンBEC・多極子秩序・ネマティック相・カイラル秩序・ヒッグス機構等について実験・理論両面から議論すると共に、長期的視野に立って新しい研究領域創世に繋がるコンセプトを模索する。分野・領域・世代を超えた交流の場としたいので、強相関系・古典スピン系はもちろん、異分野からの参加も歓迎。  
申込 <http://www2.yukawa.kyoto-u.ac.jp/ws/2012/qss2012> より  
講演申込締切 2012年10月21日(日)  
連絡先 679-5148 兵庫県佐用郡佐用町光都1-1-1 日本原子力研究開発機構 坂井 徹 電話0791-58-2623 Fax 0791-58-0311 sakai spring8.or.jp

■平成24年度応用物理学会関西支部シンポジウム「最先端の脳科学とその将来」

主催 応用物理学会関西支部  
協賛 日本物理学会  
日時 2012年11月15日(木) 10:00～16:15

場所 島津製作所関西支社マルチホール (530-0012 大阪市北区芝田1-1-4 阪急ターミナルビル14階)

内容 脳科学は基礎研究からブレインマシンインターフェイスまで幅広い分野にわたっている。研究における論理的側面も重要であり、社会へのインパクトは大きなものがある。これらの最新の脳科学研究の話題を分かりやすく紹介すると共に将来展望について議論する。

定員 70名  
参加費 2,000円、学生1,000円  
参加申込締切 定員になり次第  
連絡先・申込先 565-0871 吹田市山田丘2-1 大阪大学大学院工学研究科応用物理学専攻内 応用物理学会関西支部事務局 電話/Fax 06-4864-0125 (火・木のみ) secretary jsap-kansai.jp  
問合せ先 632-8567 天理市樺本町2613-1 シャープ株式会社研究開発本部基盤技術研究所 和泉 真 電話0743-65-5874 Fax 0743-65-2369 makoto.izumi sharp.co.jp <http://jsap-kansai.jp/index.php?symp>

■第6回物性科学領域横断研究会

主催 科研費5新学術領域  
日時 2012年11月27日(火)～28日(水)  
場所 東京大学武田先端知ビル5階武田ホール (113-8656 東京都文京区弥生2-11-16)  
内容 物性科学に関連した5つの新学術領域研究が合同で開催する研究会。各領域の研究内容を専門外の研究者や大学院学生に対し解説し、領域間のシナジー効果高めると共に、物性科学のホットな話題を2日間で概観することを目的とする。一般からの発表としてポスターセッションを設ける。凝縮系科学賞の授賞式と記念講演も行う。

定員 200名  
参加費 無料  
参加申込締切 発表あり：2012年10月31日(水) 12:00、発表なし：2012年11月16日(金) 12:00 (定員に空きがあれば、当日の参加登録も可)  
連絡先 東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 鹿野田一司 kanoda ap.t.u-tokyo.ac.jp  
その他 詳細は <http://www.topological-qp.jp/ryoikioudan2012/index.html> 参照。

■日本物理学会北陸支部定例学術講演会

日時 2012年12月1日(土)  
場所 金沢大学自然科学5号館 (920-1192 金沢市角間町 電話076-264-5668)

内容 物理一般  
講演申込・原稿提出締切 2012年10月31日(水)  
連絡先 920-1192 金沢市角間町 金沢大学数物科学系 藤下豪司 Fax 076-264-5739 fujishit staff.kanazawa-u.ac.jp  
その他 講演会HP (講演申込含) へのリンクを <http://h-jps.w3.kanazawa-u.ac.jp/> に掲載予定。

■第二回文部科学省「量子ビーム基盤技術開発プログラム」シンポジウム

主催 文部科学省、高エネルギー加速器研究機構  
日時 2012年12月3日(月)  
場所 秋葉原UDXギャラリーNEXT4階 NEXT-1,3 (101-0021 東京都千代田区外神田4-14-1)  
内容 文部科学省では「量子ビーム」の将来性に着目し、「先端技術」のキーテクノロジーの一つと位置づけ、2008年度より「文部科学省量子ビーム基盤技術開発プログラム」を実施。ネットワーク型の研究拠点を構築して、量子科学技術分野のシーズと産業界等のニーズとの融合を図り、新たな知見を創出することで、国際競争力を強化することを目的とする。初回(2010年2月25日開催)のシンポジウムに続き、プログラム参加機関が一堂に会し、研究概要及び研究成果を公開することを目的として開催。

定員 200名  
参加費 無料  
申込 要事前  
連絡先 305-0801 つくば市大穂1-1 高エネルギー加速器研究機構406号室 量子ビーム基盤技術開発プログラムシンポジウム事務局 池田 電話029-879-6251 Fax 029-879-6246 quantumbeam ml.post.kek.jp

■基研研究会(国際): Resonances and non-Hermitian systems in quantum mechanics (量子力学における「共鳴状態」と非エルミート系)

主催 京都大学基礎物理学研究所  
共催 京都大学グローバルCOEプログラム「普遍性と創発性から紡ぐ次世代物理学」  
日時 2012年12月11日(火)～13日(木)  
場所 京都大学基礎物理学研究所 (606-8502 京都市左京区北白川追分町 電話075-753-7000)  
内容 原子核物理、原子分子過程、物性物理、ハドロン物理等の分野で近年とみに

進展している量子力学的共鳴過程の理論研究につき、分野間の情報交換を行い、今後の更なる発展への道程や共同研究の可能性を模索する。招待講演を中心とし、希望者にはポスター発表をお願いする。  
参加費 無料(茶菓代、懇親会費は実費)  
ポスター発表申込締切 2012年11月9日(金)

参加申込締切 2012年11月22日(木)  
連絡先 060-0810 札幌市北区北十条西8  
北海道大学大学院理学研究院核データセンター 加藤幾芳 電話011-706-3724  
kato nucl.sci.hokudai.ac.jp, 606-8502 京都市左京区北白川追分町 京都大学基礎物理学研究所 慈道大介 電話075-753-7034 jido yukawa.kyoto-u.ac.jp http://hatano-lab.iis.u-tokyo.ac.jp/hatano/NonHermite/

### ■ The 20th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy [走査型プローブ顕微鏡 (26)]

主催 応用物理学会  
日時 2012年12月17日(月)~19日(水)  
場所 沖縄かりゆしアーバンリゾート・ナハ (900-0016 那覇市前島3-25-1 電話098-860-2111)  
内容 微細な構造の創製、物性評価におけるSPMの潜在力は高く、本研究会がますます重要な役割を担っていくことは間違いない。皆様の参加を心よりお待ちしております。

定員 120名  
参加費 36,000円, 学生23,000円(宿泊費17,000円)  
講演申込締切 2012年10月31日(水)  
参加申込締切 2012年11月30日(金)  
論文投稿締切 2013年1月15日(日)  
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 応用物理学会分科会担当 上村さつき 電話03-5802-0863 Fax 03-5802-6250 kamimura jsap.or.jp

### ■ 第11回国際フェライト会議 (ICF11)

主催 粉体粉末冶金協会  
協賛 日本物理学会, 他

日時 2013年4月15日(月)~19日(金)  
場所 沖縄コンベンションセンター (901-2224 宜野湾市真志喜4-3-1)

内容 フェライトを含む機能性材料の物理・化学、結晶成長、微細構造、薄膜・ナノ粒子といった基礎科学から情報、医学、エネルギー・環境の各分野への応用展開、そしてスピントロニクス/マルチフェロイックをはじめとした新規テーマを含む学術講演・展示会を予定。

参加費 事前登録: 60,000円, 学生30,000円, 当日登録: 70,000円, 学生40,000円  
申込 http://www.icf11.jp/参照

連絡先 東京工業大学応用セラミックス研究所松下研究室 ICF11事務局 松下伸広 ICF11 msl.titech.ac.jp

### 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

#### ■ 「宇宙科学奨励賞」候補者推薦依頼

対象 宇宙科学分野で優れた研究業績を上げ、宇宙科学の発展に寄与した若手研究者を顕彰し、宇宙科学奨励賞を授与すべく、平成24年度の第5回宇宙科学奨励賞候補者の推薦を募集。宇宙理学(地上観測を除く)分野及び宇宙工学分野で独創的な研究を行い、宇宙科学の進展に寄与する優れた研究業績を上げた37歳以下(当該年度の4月1日現在)の若手研究者個人。候補者の推薦は他薦に限る。

内容 授賞は原則として毎年宇宙学関係1名、宇宙工学関係1名とする(但し適格者がない場合は受賞者なしとする場合あり)。本賞(賞状と表彰楯)と副賞(賞金20万円)を授与。

推薦締切 2012年10月31日(水)必着  
問合せ先・推薦書送付先 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 Fax 042-751-2165 admin spss.or.jp

その他 推薦の手続き等詳細は<http://www.spss.or.jp>参照。推薦書式をダウンロード、必要事項を記載し、(1)候補者の略歴、(2)論文リスト、(3)推薦の対象となる論文の別刷等必要書類を添付の上、e-mailにて投稿。選考結果は推薦者と受賞者に通知すると共に当財団HPに発表。2013年3月に表彰式を行い、受賞者には受賞対象となった研究に関する講演をして頂く。

#### ■ 平成25年度前期高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所放射光共同利用実験課題公募

対象 当研究所施設の放射光及び低速陽電子を利用する実験。主に大学等の研究者を対象とするが、科学研究費補助金の申請資格を有する企業等の基礎研究も対象。  
応募要領 実験課題申請システム <https://pmsweb.kek.jp/k-pas/> を利用した電子申請。現在申請受付中。具体的な申請書作成等に関する詳細は<http://uskek.kek.jp/apply/pf.html>参照。

応募締切 2012年11月2日(金)17時  
問合せ先 高エネルギー加速器研究機構研究協力部研究協力課共同利用支援室共同利用係 担当: 郷田, 南 電話029-864-5126 kyodo1 mail.kek.jp  
その他 研究成果は公表して頂く。

#### ■ 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。)

10月 ユーザ名 : 12Oct

パスワード: Schrieffer892

11月 ユーザ名 : 12Nov

パスワード: Bardeen568

# 行事予定

[詳しくは表中の右欄記載の会誌各巻号の掲示板欄(\*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			
10/5~6	Int. Workshop on Laser Science	調布市(東京)	67-9
10/6	第17回久保記念シンポジウム「ゆらぎのなかの構造」	東京	67-8
10/10~11	第4回MLFシンポジウム・茨城県ビームライン平成23年度成果報告会	東京	67-8
10/11~12	第7回高崎量子応用研究シンポジウム	高崎市(群馬)	67-10
10/14	京都大学グローバルCOEプログラム「普遍性と創発性から紡ぐ次世代物理学」第5回市民講座「宇宙と物質の謎に迫る」	京都市	67-9
10/14~18	Conf. on Computational Physics 2012	神戸市	67-7
10/16~17	第54回表面科学基礎講座「表面・界面分析の基礎と応用」	吹田市(大阪)	67-9
10/17~18	第41回薄膜・表面物理基礎講座(2012)	東京	67-9
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
11/7~9	日本希土類学会第30回講演会・30周年記念国際シンポジウム	那覇市	67-8
11/9~11	第42回結晶成長国内会議(NCCG-42)	春日市(福岡)	67-9
11/12	応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会講習会~有機半導体分析技術の基礎~	大阪市	67-10
11/12~13	第3回真空・表面科学若手勉強会	神戸市	67-9
11/12~14	京大基研研究会「量子スピン系の物理」	京都市	67-10
11/12~16	Int. Momiji School for Young Scientists "High Field Science—Kyoto 2012" JAEA-ISTC Joint Meetings	木津川市(京都)	67-9
11/14	第23回プラズマエレクトロニクス講習会	東京	67-9
11/15	平成24年度応用物理学会関西支部シンポジウム「最先端の脳科学とその将来」	大阪市	67-10
11/20~22	第32回表面科学学術講演会	仙台市	67-9
11/26~28	第26回分子シミュレーション討論会	福岡市	67-9
11/27~28	第27回量子情報技術研究会	横浜市	67-8
11/27~28	第6回物性科学領域横断研究会	東京	67-10
12/1	日本物理学会北陸支部定例学術講演会	金沢市	67-10
12/3	第二回文部科学省「量子ビーム基盤技術開発プログラム」シンポジウム	東京	67-10
12/3~5	第25回国際超電導シンポジウム(ISS2012)	東京	67-6
12/3~8	The 4th Int. Symp. on Slow Dynamics in Complex Systems—頑張ろう東北—	仙台市	67-5
12/5	第31回法政大学イオンビーム工学研究所シンポジウム	小金井市(東京)	67-9
12/11~13	基研研究会(国際): Resonances and non-Hermitian systems in quantum mechanics	京都市	67-10
12/12~14	The 16th Asia Pacific Symp. on Intelligent and Evolutionary Systems	京都市	67-8
12/17~19	The 20th Int. Colloquium on Scanning Probe Microscopy「走査型プローブ顕微鏡(26)」	那覇市	67-10
12/20~22	太陽電池と量子エレクトロニクス—発光デバイス・光物性の研究実績をどう生かすか—	軽井沢町(長野)	67-9
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
4/15~19	第11回国際フェライト会議(ICF11)	宜野湾市(沖縄)	67-10
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

編集後記を書くよう要請された7月下旬、世間はオリンピックで盛り上がっている。私もご多分に漏れず、なんだかんだと見ているし結果もチェックしている。オリンピック観戦は、もちろん単純に日本の選手を応援する、そうでなくても極限まで鍛えられた人々の競技を見る、というのが楽しみなのだが、昨年度から学部一年生向けに力

学の授業をしているので、もう一つ違う見方をしてしまう。それは、選手の動きをモデル化して力学の問題として出せないだろうか、というものである。

例えば、柔道。よく「重心を崩す」という言い方をしますが、この重心は本当に力学で学ぶ重心という概念と一致するものと言えるのだろうか。そのためには、人の体をどのように単純化した問題を解いて貰えばいいのだろうか。重心の位置と支点(足の

位置?)の関係をどう設定するのがいいのだろうか。簡単な構造を入れておけば、慣性モーメントや剛体の回転まで含めた問題になるかもしれない。これらの概念を入れた上で、学問としての物理を初めて学ぶ一年生でも解けるようにうまい誘導を入れつつも、現実からそれほど外れていない解を得られるような問題を作れるだろうか?

例えば、水泳。水の抵抗を上手にモデル化して、何か抵抗力の問題に出来ないか。

流体の問題としておもしろいのかかもしれないが、入学したての一年生には少々難しいか、など。

さて、ここから話を転回させるが、水泳に関しては、減量にもっともふさわしい運動ということで、実際に問題を出してみたことがある。ウェブの情報を信じれば、一時間に1,000 kcal消費するそうである。それを元に出した問題が、(1)もし一時間泳ぎ続けたとすると仕事率はいくつ？ その仕事率を達成するためには、(2)もしカロリーの消費が水の抵抗に打ち勝つためだけに使われているとすれば、水の抵抗力はどれくらいか？ というものである。必要な設定は自分たちに行わせるのだが、常識的な速さを設定すると、抵抗力が常識的にあり得ない大きさになってしまう。従って、カロリーの消費は実は違うところで行われているのだろう、という結論も出せそうなものだが、そういう感覚を持ってくれる人

は残念ながら稀なようである。

まわりの学生を見る限り、「物理学」はお勉強の対象であって現実とは遊離したものの、と思っているようである。他にも身近な問題をモデル化して出し、時にはあり得ない数値が出てくるようにするのであるが、それに違和感を持ってくれない。せっかく時間をたっぷりかけて勉強するのにもったいない、と常々思う。

編集委員になるまでろくに学会誌を読んでこなかったのにこう言うのも何だが、学会員は教育に携わる人も多いのだから、もっと教育関連の話、特に授業の題材の交換の場などもあればいいのになあ、と思う。昔そういう企画があったような気がするのだが、どうなったのだろう？

佐藤 丈〈

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, 片沼伊佐夫, 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, 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

### 第68期 (2012年3月24日~2013年3月31日) 理事・監事

会 長	家 泰弘	副会長 (次期会長)	斯波 弘行		
庶 務 理 事	伊藤好孝・嘉規香織・高野 宏・田村裕和・千葉順成・松川 宏・三沢和彦 本林 透				
会 計 理 事	千葉順成 (兼任)・野崎光昭・播磨尚朝・松川 宏 (兼任)				
会誌編集委員長	旭 耕一郎	JPSJ 編集委員長	安藤恒也	刊行委員長	瀧川 仁
監 事	鹿兒島誠一・渡邊靖志				

#### 本誌を複製される方に (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製したい方は、(社)日本複製権センターと包括複製許諾契約を締結されている企業の方でない限り、日本物理学会が複製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製については、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、複製以外の許諾は、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10号 (平成24年10月5日発行) 通巻753号

©日本物理学会 2012

Butsuri

発行者 〒113-0034 東京都文京区湯島 2-31-22 湯島アーバンビル 8F

白 勢 祐 次 郎

印刷所 〒169-0075 東京都新宿区高田馬場 3-8-8

株式会社 国際文献印刷社

発行所 〒113-0034 東京都文京区湯島 2-31-22 湯島アーバンビル 8F

一般社団法人 日 本 物 理 学 会

電話 03-3816-6201 Fax 03-3816-6208

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。