

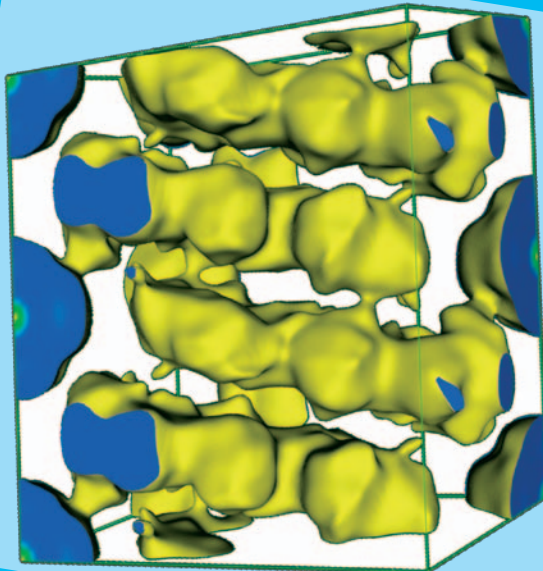
- 光で物質を変える, 創る.
- 情報理論に現れるランダム行列理論
- 強い電子格子相互作用をもつ有機結晶の多彩な光誘起ダイナミクス
- シリーズ「量子論の広がり」

NO.

8

2014 | VOL. 69

B U T S U R I
日本物理学会誌



魅力ある物理学会を目指して

石田 憲二* (領域委員長)

皆さんは「物理学会」と聞くと年二回開催される大会を思い浮かべると思いますが、私も最近まで大会に参加する側におり、物理学会の役割や仕事内容等については考えてきませんでした。昨年度より理事を拝命し、今年度は大会と広報担当として、少しでも会員の方々の役に立ちたいと考えています。以下では大会・広報の観点から皆さんに関係する物理学会の最近の取り組みについて紹介します。

物理学会の重要な活動として、刊行事業、年二回の大会、様々な広報活動があります。刊行事業では、英文雑誌JPSJ、PTEPがありますが、昨年11月より新たにJPS Conference Proceedings (JPS-CP) というオンラインジャーナルが加わりました。このJPS-CPは会議録専用のジャーナルであるため、どなたでも御覧頂けるオープンアクセスとなっています。以前は日本で開催の会議録等は、JPSJのsupplementとして刊行されていましたが、visibilityがあまりよくないことやcitationがつかないことなどの理由から、海外の研究者から敬遠されることも多くありました。この度、物性分野をカバーするJPSJからではなく、日本物理学会(JPS)の会議録専用雑誌として刊行されることとなりました。御尽力頂いた関係者に深く感謝します。実は、私は昨夏開催の国際会議の会議録を担当しJPS-CPから出版するため読者編集作業をしていますが、慣れ親しんだJPSJのシステムを利用できるため、ストレスを感じずに作業を進めることができます。国際会議録の出版の際は是非とも御利用下さい。

また本年1月より日本物理学会誌の表紙デザインが一新し、フルカラー記事も大幅に増えました。見た目の変化の他、会誌がより有益な親しみやすく

なるよう、従来の和文抄録を拡大した「リードページ」や専門外の読者の理解を助けるための用語解説も設けています。さらに物理各分野の最近の動向を伝える「現代物理のキーワード」欄が新設され、物理の読み物としても魅力的なものに変貌を遂げました。これらは宮下委員長をはじめとする編集委員会の御尽力によるものです。上記の「現代物理のキーワード」と「リードページ」は物理学会のホームページ(<http://www.jps.or.jp/books/gakkaishi.html>)から、また、会員専用ページでは会誌全文が御覧頂けます。通勤時等の“ちょっとした合間”に会誌を読めますので、御活用下さい。

年二回の大会ですが、前回(第69回年次大会)より講演の写真・ビデオ撮影は原則禁止となりました。(注:座長や講演者の了解により認めることもある。)これは発表者の了解なしに講演内容が出回ることを防ぐため、大会が活発な研究議論の場として維持されるためには必要な対策であろうと領域委員会で決定しました。既に多くの学会では撮影は原則禁止となっており、今後周知していくつもりです。

また大会には長期的検討課題である「領域番号制の問題」があります。領域番号制は物性分野の将来の再編や分野の流動性を考慮し、講演件数がほぼ同じになるように1つ以上の分野をまとめた経緯がありますが、現在では領域番号が固定化し各賞の推薦母体となっていること、さらに便宜上の番号であったため、各領域の研究内容が見えないという弊害も指摘されています。この問題に対し領域委員会等で活発な議論がなされ、昨年度の田村委員長の時に、領域の研究内容を明らかにするために領域番号と分野名を併記することにしました(領域番号は当面残すが分野名も可能な限り表記し、学会の出す正式な文章には「領域番号」または

「領域番号(分野名)」で記載する)。さらに分野名については毎年の年次大会のときに各領域のインフォーマルミーティングで変更の必要がないか話し合ってください。現在、領域8(強相関係)、領域11(物性基礎論、統計力学、流体力学、応用数学、社会経済物理)を除くと同程度の申込件数ですが、将来、件数の極端な偏りや複数領域から同じ分野名が挙がるようになれば領域再編の必要があると考えます。

最後に今後の取り組みについて紹介します。まず、大会の国際化の対応が急務となっています。海外からの大会参加者は最近5年間で倍増し、海外の研究者にも有益な大会になるよう努めていく必要があります。次回より学会申込時に英語題目の入力をお願いし、英語版講演プログラム(web版のみ)を製作する予定です。また講演スライドの英語表記を推奨し、海外の研究者にも内容がわかるような配慮をしたいと考えています。講演スライドが英語表記であれば、日本語で講演しても、海外の研究者が内容をある程度理解できるのではないかと考えるからです。また多くの大会参加者から、概要集の電子化の要望も頂いています。紙媒体の重い概要集をもって会場を移動するのは苦痛でしたが、概要集を電子媒体として配布することができれば参加者の利便性は向上すると考えられます。また他領域の講演概要も事前にわかれば、他領域も“覗いてみよう”という参加者も増えるのではないかと考えます。現在どのように概要集を電子化できるか関係者で検討中です。

今後も少しでも会員の方に魅力ある学会になれるよう微力ながら努めていきたいと思っております。

(2014年4月24日原稿受付)

* 広報委員長兼務

巻頭言 Preface

魅力ある物理学会を目指して
To Become More Useful and Attractive JPS

石田憲二 …… 517
Kenji Ishida

現代物理のキーワード Trends

光で物質を変える, 創る.
Changing and Creating of Materials with Light

岩井伸一郎 …… 520
Shinichiro Iwai

交 流 Interdisciplinary

情報理論に現れるランダム行列理論: 圧縮センシングとは?
Random Matrix Theory in Information Theory: What is Compressed Sensing?

竹田晃人 …… 522
Koujin Takeda

解 説 Reviews

強い電子格子相互作用をもつ有機結晶の多彩な光誘起ダイナミクス
A Variety of Dynamics in Organic Crystals Having Strong Electron-Lattice Interaction

恩田 健, 腰原伸也, 矢持秀起 …… 531
Ken Onda, Shin-ya Koshihara and Hideki Yamochi

シリーズ「量子論の広がり—非局所相関と不確定性—」

Quantum Realm—Nonlocal Correlation and Uncertainty—

エンタングルメント・エントロピーと共形場理論
Entanglement Entropy and Conformal Field Theory

古川俊輔, 白石潤一 …… 541
Shunsuke Furukawa and Jun'ichi Shiraishi

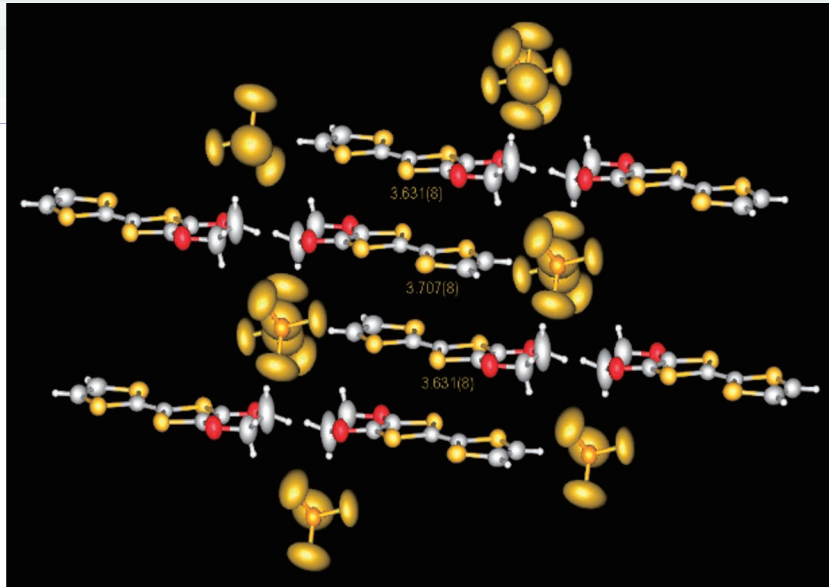
最近の研究から Researches

酸素分子の立体制御とアルミニウム酸化動的過程の解明
Preparation of an Aligned O₂ Beam and the Clarification of the Aluminum Oxidation Dynamics

倉橋光紀, 山内 泰 …… 547
Mitsunori Kurahashi and Yasushi Yamauchi

分子自由度から生じる相競合と実空間不均一
Phase Competition and Spatial Inhomogeneity Induced by Molecular Degrees of Freedom

岡崎竜二, 寺崎一郎 …… 553
Ryuji Okazaki and Ichiro Terasaki



解説(強い電子格子相互作用をもつ有機結晶の多彩な光誘起ダイナミクス)

JPSJの最近の注目論文から 4月の編集委員会より

学会報告 第69回年次大会 招待・企画・チュートリアル講演の報告

学界ニュース 第30回井上學術賞：安藤陽一氏
 第30回井上學術賞：上田佳宏氏
 科学技術分野の文部科学大臣表彰

追悼 井口洋夫先生を偲んで
 菅野暁先生を偲んで

新著紹介

会員の声

掲示板 ■人事公募 ■学術的会合 ■その他

行事予定

会告 ■会費年額改定のお願い ■物理学会の財政状況について ■2015年度の会費減額申込手続き(大学院学生・学部学生)のお願い ■2015年度の論文誌等購読の変更手続きのお願い ■大会の参加登録費改定および講演概要集電子化について ■賛助会員の追加雑誌に関する口数の変更について ■訂正とお詫び ■2014年7月1日付新入会者

本会記事 ■日本物理学会理事・監事・代議員, 委員会委員 キャリア支援センター, 物理系学術誌刊行センター, 等指名表

本会関係欧文誌目次

安藤恒也 …… 558

領域委員会 …… 560

前野悦輝 …… 566

嶺重 慎 …… 566

566

榎 敏明 …… 568

小島憲道 …… 569

570

571

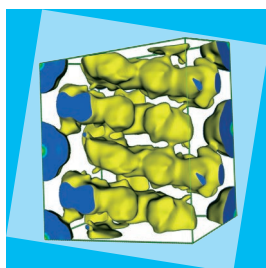
572

578

581

588

596



表紙の説明

電荷移動錯体は、その低次元性、強い電子相関、柔らかな構造という性質から、わずかな外場変化で金属、絶縁体、超伝導体などの様々な物性を示す。このような錯体に光を当てたときに起こる物性変化もまた多彩であり、超高速で物性制御可能な材料として注目されている。図はそのような錯体の一つである(EDO-TTF)₂PF₆単結晶の高精度X線回折測定およびその最大エントロピー法解析によって得られた電子密度分布である。図の中央にEDO-TTF分子がほぼ水平に並び、左右端にPF₆分子が配列している。EDO-TTFの π 軌道の重なりによって1次元性の強い電子バンドが形成され、EDO-TTFからPF₆へ電荷が移動することによって金属相の電気伝導性が生じる。この錯体における光誘起ダイナミクスの詳細は本号に掲載されている恩田健氏らの「解説」記事を参照のこと。

光で物質を変える，創る．

Keyword: 光誘起相転移

1. 光誘起相転移；フォトクロミズムとの違い

光の照射による物質の変質は，人工色素の退色，植物における光合成反応，視覚の初期プロセスや格子欠陥生成などの例に見られるように，一世紀以上にもわたって活発な研究の舞台であり続けている．しかし，1990年代の初めに π 共役高分子のポリジアセチレンにおいて見出された，光照射によるA相（金色）-B相（緑色）の双方向の色の变化¹⁾は，こうしたいわゆるフォトクロミズムとは，構造や電子状態の巨視的な変化であるという点で，本質的に異なっている．このような光照射による物質の巨視的な変化は，光誘起相転移と呼ばれている．²⁻⁴⁾ 図1に示すように，色だけでなく電気伝導性 (a)，磁性 (b)，誘電性など様々な固体の特性が，フェムト秒，ピコ秒時間領域で瞬時に変化する場合もあり，超高速スイッチの動作原理としても期待されている．スピントロニクスやブルーライトなどペロブスカイト型構造を持つ遷移金属（コバルト，鉄）-シアノ錯体が $S=0$ （低スピン）から $S=2$ （高スピン）状態へ変化するスピン転移（図2(a)），ドナー（D）-アクセプター（A）分子が交互積層した擬一次元分子性結晶の中性からイオン性への転移（図2(b)），分子性結晶における電荷秩序絶縁体から金属への転移（図2(c)）などが観測されている．そのほかにも銅酸化物やマンガノ酸化物，遷移金属カルコゲナイト，ハロゲン架橋金属錯体の電子，磁気転移を対象とした研究が，基礎（非平衡の多体問題）と応用（超高速スイッチ）の両面から行われている．

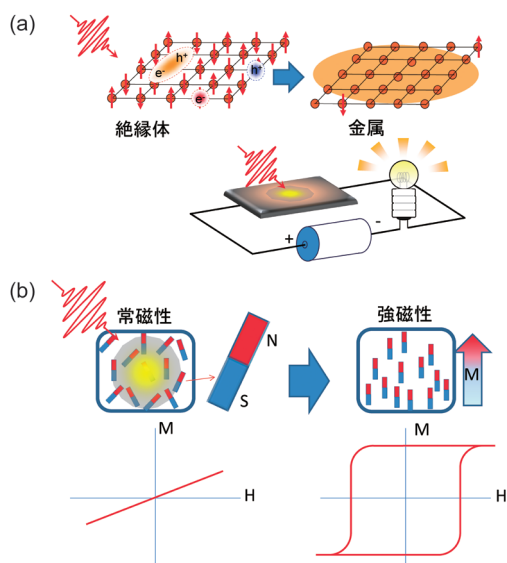


図1 光誘起相転移の模式図．

2. 協力現象としての光誘起相転移

光励起が巨視的な物性変化へと至るためには，光キャリアや励起子が協力的な電子間相互作用や電子-格子相互作用を経て集団的な応答へと成長する必要がある．このことを図3のようなポテンシャル図を用いて言い換えると，基底状態と拮抗する準安定状態を光などの外部刺激によって顕在化する，ということになる．特に興味深いのは，基底状態とのエネルギーの差が，熱エネルギー ($k_B T$) よりもはるかに大きい準安定相である．この，光励起によってのみ実現可能な非平衡物質相の実在性，実現性の探索が，光誘起相転移の研究の重要な目標の一つとも言える．本稿では具体的な研究の方向性として a) 光誘起相の電子状態や構造の同定， b) 初期過程の解明， c) 新しい光誘起相転移の探索，という三つの課題について解説したい．

3. 何をを目指すのか？

a) 光誘起相の電子状態や構造の同定

現在の研究の主要な舞台である強相関電子系では，光誘起相の寿命はしばしば短く（～ピコ秒）電気伝導性や磁性，構造を直接測定することが難しい．そのため，従来は主に可視光領域のフェムト秒レーザーを用いたポンプ・プロー

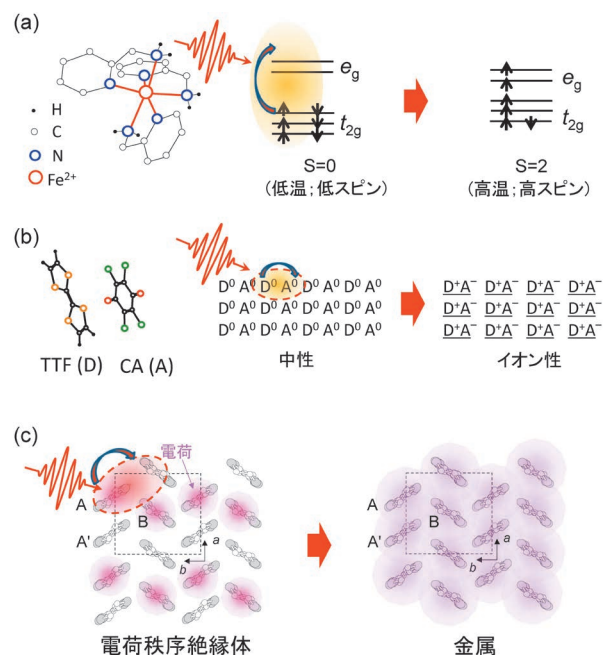


図2 (a) 鉄-シアノ錯体における光スピン転移の模式図． (b) 擬一次元分子性結晶 (TTF-CA) における光誘起中性-イオン性転移の模式図． (c) 二次元分子性結晶 (BEDT-TTF 錯体) における光誘起絶縁体-金属転移の模式図．

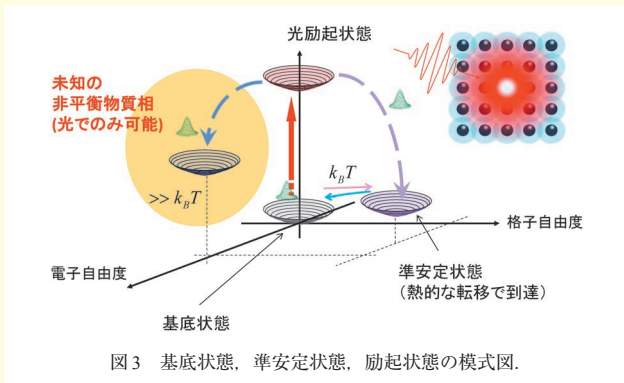


図3 基底状態、準安定状態、励起状態の模式図。

ブ分光が主な測定手法であった。しかし、中赤外光やテラヘルツ光の発生技術の飛躍的な進歩によって、現在では低エネルギー（数百 meV～meV）領域の過渡測定が可能になっている。光誘起絶縁体-金属転移や電荷密度波、超伝導や強誘電性に関係した低エネルギー集団励起、フォノンの光応答の測定に威力を発揮している。また、この10年ほどの間に、時間分解の光電子分光、X線および電子線構造解析も可能になり、光誘起相の構造的な対称性や波数空間における電子状態がより直接的に分かるようになった。

b) 初期過程の解明

光誘起相転移のダイナミクスは、光キャリアや励起子の生成が、互いに相関を持った $\sim 10^{23}$ 個におよぶ多数の電子や原子の配列の巨視的な変化へ至る複雑な過程であり、時間領域にしてフェムト秒から秒、時間まで実に15桁以上にわたる。その広大な時間領域の中で、数フェムト秒（以下）という時間スケールは、光励起状態と相転移をつなぐ重要な鍵となる。例えば、モット絶縁体や電荷秩序絶縁体における光誘起絶縁体-金属転移の機構は、光キャリアドープによる軌道占有数（フィリング）の変化として理解できる。しかし、その初期過程は、高周波電子分極が、電子間相互作用を介して多電子を駆動するダイナミックなものであり、静的なフィリングの変化とは異なるものである。現在、電子間相互作用（1～10フェムト秒程度）や電子-格子相互作用（おおよそ10～数百フェムト秒程度）を実時間で捉える試みが進行している。高周波電場振動である光が、どのように電子や原子を駆動して相転移に至るのかという“からくり”が、数年のうちに明らかになると期待される。

c) 新しい光誘起相転移の探索；秩序融解から形成へ

多くの光誘起相転移は、低対称（低温相）から高対称（高温相）へ、秩序から無秩序へと向かう。相転移が唯一の自由度によって記述されている場合、光励起によって、物質がエネルギーとエントロピーの増大する高温相側へ移行するのは自然である。しかし、複数の自由度が競合すれば事情はより複雑になる。電荷秩序が融解する過程で、別のパターンの秩序が過渡的に表れたり、三角格子の幾何学的な

フラストレーション効果によって抑制されていた秩序が光励起によって回復する可能性、さらにはストライプ秩序と高温超伝導が競合する物質では、光誘起超伝導の可能性についても議論されている。光誘起相転移の研究は、秩序を壊すことから、新たな秩序を創ることへ、そのフェーズを変えつつある。

4. 今後の展開

物質が秘めている特質を光によって最大限に生かすためには、物質開拓や物性の理解とともに、先端光源や測定技術の開発と最適化、および理論解析のバランスの良いコラボレーションが不可欠となる。物質開拓の立場からは、強固で唯一の秩序を持つ物質だけでなく、電荷・スピン・軌道間の相互作用、あるいは幾何学的なフラストレーション効果によって複数の秩序が互いに抑制された“液体”や“ガラス”状態にある系なども今後は対象となるだろう。測定技術に関しては、少なくとも100フェムト秒程度の時間領域に関する限り、これまで主役を務めてきたレーザー分光は、もはや唯一の超高速測定法ではない。最近目覚ましい進展を遂げているX線や電子線の構造解析や光電子分光の時間分解測定技術は、光測定だけでは分からなかった、構造や電子状態の様々なダイナミクスを詳細に明らかにしつつある。一方、電子間相互作用によって支配される初期過程の解明には、数フェムト秒からアト秒領域への挑戦が必要であるが、この時間領域では、今後もレーザー分光が開拓的役割を果たすだろう。また、現在開発が進んでいる瞬時電場強度がMV (10^6 V)/cmを超える高強度の数フェムト秒極超短光パルスやテラヘルツパルスは、電子や格子を大振幅で加速、駆動する新しい形の光と物質の相互作用を我々に見せてくれるに違いない。ここで述べたような実験の進歩によって実現されつつある多電子系の非平衡物質相は、あまりにも複雑であり、しばしば、実験家の直感的理解を凌駕する。そこでは、理論的な予測が不可欠であることが近年再認識されている。物質開拓、測定技術の向上、理論の有機的な連携によって今後数年の間にこの分野の大きなブレイクスルーがあると期待される。

参考文献

- 1) S. Koshihara, Y. Tokura, T. Takeda and T. Koda: Phys. Rev. Lett. **68** (1992) 1148.
- 2) K. Nasu, eds.: *Photoinduced Phase Transition* (World Scientific, Singapore, 2004).
- 3) M. Gonokami and S. Koshihara, eds.: J. Phys. Soc. Jpn. **75** (2006) 011001 —*Special Topic on Photo-Induced Phase Transition and Their Dynamics*.
- 4) K. Yonemitsu and K. Nasu: Physics Reports **465** (2008) 1.

岩井伸一郎（東北大学大学院理学研究科）

（2013年12月22日原稿受付）

情報理論に現れるランダム行列理論： 圧縮センシングとは？



竹田 晃人

茨城大学大学院理工学研究科

近年、情報科学の分野では情報の疎性を利用した情報処理技術が盛んに研究されている。それは圧縮センシングと呼ばれる手法が10年程前に考案され、情報科学の諸分野に大きいインパクトを与え、現代社会で重要視されているデータ科学の分野、具体的には医療画像技術や天体観測等で今後大きな役割を果たすことが期待されているからである。この圧縮センシングの理論は近年の研究で物理学的解析手法と関係することが分かってきた。そこで本稿では特にランダム行列理論との関連性の観点から圧縮センシングを紹介する。

圧縮センシングとは信号（又はデータ）に内在する疎性を利用し非常に少数の観測から高次元信号を復元可能とする手法である。その問題設定は極めて簡潔な数式で表現され、一言では「線型連立方程式を条件不足の下で如何に解くか」である。具体的には方程式の未知変数の数を原信号次元、方程式の本数を信号観測回数と考え、「観測回数 < 原信号次元」と仮定した上で原信号を復元する問題を考える。しかしこの設定のみでは当然解は不定で、問題は不良設定問題となる。そこでこの問題を適切に定義する為に、原信号が「疎」即ち零成分を多く持つ（疎な解）と仮定し、そのような解の求解を目標とする。

従ってこの問題では疎な解を効率良く求めることが重要だが、その為に考案されたのが l_1 ノルム最小化に基づく求解法である。この求解法は線型計画問題として表現されるため、線型計画アルゴリズムを用いれば原信号に相当する疎な解を実用上問題無い計算量で得ることが出来る。

ところでこの問題では原信号を復元する際に必要となる観測数が少ないほど応用上有利となるが、信号を完全復元するために必要な観測回数＝連立方程式の本数の下限を理論的に評価する方法が幾つか考案された。

まず「制限等長性」の概念を用いた評価法があり、 l_1 ノルム最小化で疎な解の求解が成功する十分条件はこの制限等長性を用い表現出来る。この概念とランダム行列理論（正確には最大最小固有値に関する確率不等式）を組み合わせるにより、信号完全復元の為の観測数に関する条件が得られる。

それとは別に幾何学を用いた評価法がある。この解析法は l_1 ノルム最小化が線型計画問題として表現出来ることに着目し、問題を高次元の線型な幾何学の問題に焼き直して、幾何学的解釈、より正確には射影の理論から観測数条件を求めようとするものである。

これらとは独立に統計力学に基づく評価法も考案された。これは l_1 ノルム最小化を統計力学の問題、具体的にはスピングラス模型の基底状態探索問題に置き直した上で、観測数条件を相図上の相転移線から求める方法である。これは驚くべきことに幾何学による結果と全く同じ結果を導く。さらにこの解析に自由確率論に基づくランダム行列理論の解析法を応用することで観測数条件のuniversalityを議論することが出来る。

以上のように圧縮センシングとランダム行列理論は様々な解析手法を通じ密接に関係しているのである。

—Keywords—

ランダム行列理論：

ランダム行列、直観的には各行列要素が何らかの確率分布に従い生成されている行列（より正確には行列値を持つランダム変数）を扱う理論。物理学では原子核の複雑なエネルギースペクトルの理解の為にWignerにより最初に注目された。現在では物性物理学・統計力学・量子色力学・量子カオス・数論・生態学・金融工学・複雑ネットワーク等の幅広い分野に応用されている。本稿で触れる情報理論（通信工学も含んだ意味）も応用分野の一つである。

線型計画問題：

最適化問題（等式/不等式で表される制約条件の下で目的関数を最大/最小化する問題）のうち、目的関数及び全ての制約条件が線型関数で書き表される問題。この問題には単体法（シンプレックス法）・楕円体法・内点法等の効率的解法が知られている。

制限等長性：

圧縮センシングを記述する線型連立方程式に現れる長方形行列が等長変換行列からどの程度ずれているかを定義する概念。CandèsとTaoにより導入された。「制限」とは線型連立方程式の解となるベクトルが「疎」、つまり多くの成分が0でなければならぬ制限を指す。制限等長性を用いることで圧縮センシングの問題で信号の完全復元が可能である十分条件を議論出来る。

1. はじめに

近年、ビッグデータという言葉が新聞・ニュース等で頻繁に取り上げられている。現代の高度に情報化された社会では日々多くの情報が往来しており、我々はその気になれば山のような情報に接することが出来る。その一方、重要な情報が身近にあるにも関わらずそれを見逃してしまうことは日常的にも多く、研究者の研究活動も例外ではない。近年は情報データベースやそれに伴う検索システムも整備されてきており状況は改善されつつあるが、膨大な情報を如何に有効活用するかの研究は未だ発展途上であり、現在の情報科学における一大目標であると言える。

一方で、統計力学を高次元データの効率的な取扱いに応用する試みは今世紀初頭から活発化しており、その分野は現在「情報統計力学」として確立されている。統計力学が多数の原子分子を統計的に扱うことで有意な情報を引き出すという動機を元に構築されたことを考えると、それがデータ科学等の分野に応用されたことは自然な流れであったのかもしれない。実際に統計力学は神経科学・生物情報学・情報通信・画像処理等大量・高次元データからの情報抽出が必要となる様々な情報科学の問題に応用されてきており、ビッグデータへの活用も今後期待されている。

本稿では「圧縮センシング」(原語では compressed sensing, compressive sampling 等¹⁻³⁾)というトピックを取り上げる。圧縮センシングとは「疎性」を含むビッグデータを如何に効率良く取り扱うかのアイデアの1つであり、2004年頃に Caltech の Candès, Stanford の Donoho らにより提唱された比較的新しい研究テーマである。その重要性は直ちに認知され、極めて多くの情報科学の研究者が参入し、最近では圧縮センシングの問題に限定されず疎性データの問題自体が重要視されるに至った。

この圧縮センシングの問題は実は物理学的解析手法、詳しく言えばスピングラス理論やランダム行列理論と相性が良いことが分かってきている。本稿では特にランダム行列理論の観点から圧縮センシングを情報科学にあまり馴染みの無い方々にも分かるよう紹介しようと試みる。圧縮センシング自体には英文による多数のレビューや書籍もあり、⁴⁻⁷⁾ 加え和文によるレビューも揃ってきており、⁸⁻¹²⁾ 問題自体を深く理解したい方はそちらを参照されるのが良い。

2. 圧縮センシングとは何か?

まず圧縮センシングとは何なのか、数式による表現を先に述べてしまう。問題自体は数式として極めて簡潔に表現されるのでその方が都合が良いからである。圧縮センシングとは要は以下の線型方程式の解を求める問題である。

$$\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x} \quad (1)$$

\mathbf{y} は M 次元ベクトル、 \mathbf{A} は $M \times N$ 行列、 \mathbf{x} は N 次元ベクトルとし、各ベクトル・行列の成分は実数値を取るものとする。その上で「 \mathbf{y} , \mathbf{A} が既知の上であらかじめ用意した真の



図1 圧縮センシングの問題設定： \mathbf{x} が原信号、 \mathbf{y} は観測信号に相当する。(本文中では真の原信号は特に \mathbf{x}^0 と表記。) \mathbf{A} は本文の通り信号観測過程及び原信号の展開基底から決定される行列である。原信号に相当するベクトル \mathbf{x} は疎、つまり多くの成分が0と仮定する。

解(特に \mathbf{x}^0 と表記)を求めよ」という問題である。これを見ただけでは単なる線型方程式の求解問題ではないかと思われるだろう。これだけでは設定不足で以下の2つの追加設定が必要である。

[A] 次元数について $M < N$ の関係がある。

[B] 真の解のベクトル \mathbf{x}^0 の多くの成分が0(つまり \mathbf{x}^0 は「疎」)である。ここでは0でない成分数を K とおき、 $M > K$ と仮定する。

[A] だけでは線型方程式の解を唯一決めることが出来ないと誰もが真っ先に思うだろう。この問題のポイントは[B]であり、 \mathbf{x}^0 の有意な成分(=非零成分)は N 個ではなく K 個に減っているのである。従ってベクトルの成分数を比較すると、 \mathbf{y} の成分数 M が \mathbf{x}^0 の「有意」な成分数 K よりも大きい為元の解 \mathbf{x}^0 が正しく求まる可能性がある。ここで注意すべき点が1点ある。もし我々がベクトル \mathbf{x}^0 のどの成分が0であるかを知っているならば零成分に相当する部分を方程式から排除すれば良く、解法は自明である。この問題では \mathbf{x}^0 の零成分がどこにあるかの情報は未知とされる。

3. 実問題としての圧縮センシング

何故この問題が重要と思われたのだろうか? 想定される応用例として少数回の観測による信号の再構築が挙げられる。次のような式を考える。

$$y_j = \int f(t) \phi_j(t) dt \quad (2)$$

(但し $j=1, \dots, M$) $f(t)$ は時間変動する信号を想定しており、上式は信号 $f(t)$ を M 個の積分核 $\phi_j(t)$ で積分変換し、 y_j を出力として得るという式である。例として $\phi_j(t)$ がデルタ関数の場合は出力 y_j は信号 $f(t)$ を時間領域で M 回サンプリングしたもの、正弦波の場合は周波数領域で M 成分サンプリングしたものであり、信号観測等でありふれた状況である。いずれにせよ、この式は信号 $f(t)$ を何らかの方法で M 回観測(サンプリング)した過程を表している。

その一方で、観測する信号 $f(t)$ が或る N 個の基底関数 $\psi_i(t)$ ($i=1, \dots, N$)で以下のように展開出来たとしよう。

$$f(t) = \sum_{i=1}^N x_i \psi_i(t) \quad (3)$$

この式を代入すると元々の式は

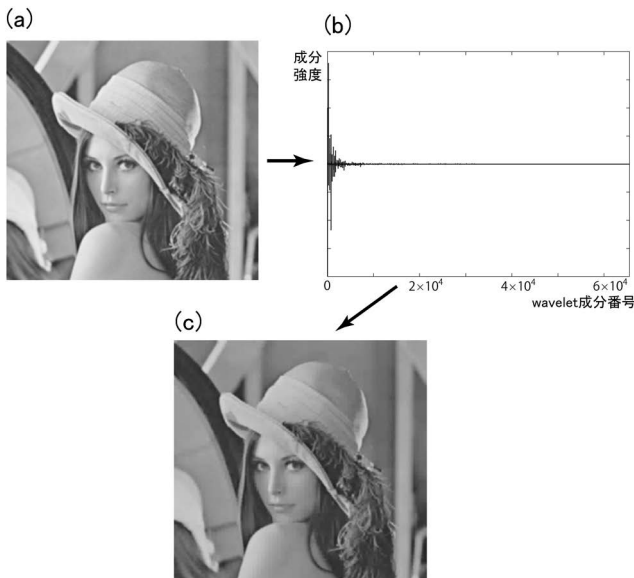


図2 画像の疎性：(a) 画像処理に利用する標準画像 Lenna (256×256 画素、モノクロ 256 階調) (b) 標準画像 Lenna をウェーブレット展開し、 $256^2 = 65,535$ 成分の強度をグラフに表示したもの。特定のウェーブレット成分のみが強い成分を持ち、大多数の成分はほぼ0であることが分かる。(この例のウェーブレットには8階層 Haar ウェーブレットを用いている。) (c) 上位10%の強度を持つウェーブレット成分のみを取り出し、逆ウェーブレット変換により原画像の再構成を試みたもの。ほぼ原画像と同じ画像が得られることが分かる。従って原画像はウェーブレット基底上でほぼ疎信号とみなして良いことを意味する。

$$y_j = \sum_{i=1}^N x_i \int \psi_i(t) \phi_j(t) dt \quad (4)$$

となる。積分の部分について以下の行列

$$A_{ij} := \int \psi_i(t) \phi_j(t) dt \quad (5)$$

を定義すると元々の信号観測の式は

$$y_j = \sum_{i=1}^N A_{ij} x_i \quad (6)$$

となる。これは圧縮センシングの問題の出発点の式(1)であった。圧縮センシングの問題設定として重要なのはベクトル x^0 が疎なことであるが、もし信号 $f(t)$ を展開した際に展開係数 x_i が疎となっていればこれは圧縮センシングの問題設定そのものとなる。そのような実際の信号として特定の周波数成分に偏っている信号、或いは2次元画像で特定のウェーブレット成分に偏在している信号を想像すれば良い。(2次元画像の場合は積分変数は空間座標 x, y となる。2次元画像の展開係数が偏在しているとは具体的に図2のような状況である。)

ここで後述する圧縮センシングの信号復元の手続きに従うと、観測次元 M が信号次元 N より小さい場合でも状況によっては展開係数 x_i の復元が可能となる。これはサンプリング定理の保証外となるような小さい観測数 M の場合でも信号 $f(t)$ の完全復元が達成し得ることを意味する。これが「圧縮センシング」の名称の由来である。つまりセンシング(観測)の回数をなるべく圧縮(少なく)しても信号の復元を行えるテクニックなのである。そこで応用として考えられているのは観測数を極力削減したい状況、例えば

医学的見地やデータ処理速度の観点から観測数削減が望ましいMRIやCTスキャン等の医療画像技術、或いは費用・技術面から観測数を大きく取れない天体観測等である。また圧縮センシングは少数のデータを保持すれば元々の信号 $f(t)$ の再現が可能なのも意味するので、データ圧縮及び復元の1つの方法を与えているともみなせる。

4. 信号復元と ℓ_1 ノルム最小化

応用面の背景を踏まえた上で圧縮センシングの問題に戻ろう。問題は「 x^0 が疎である」という前提の上で線型方程式(1)の解を求めるものである。勿論何も考えずに式(1)の解を探そうとしても条件不足であるため解は一意に定まらない。そこで解を定めるための基準が必要になる。

最も分かりやすい基準として、「多数ある解の中から最も疎である解を探す」がある。この基準を式で表すために「 ℓ_0 ノルム」という量を導入する。

$$\ell_0(x) := \sum_{i=1}^N \mathbb{I}(x_i \neq 0) \quad (7)$$

\mathbb{I} は括弧内の条件が満たされれば1、満たされなければ0となる関数(インジケータ関数)である。従って右辺はベクトル x の非零成分数である。 ℓ_0 ノルムは三角不等式を満たさないので厳密な意味でのノルムとならないが、圧縮センシングのような疎性を持つ情報の問題を議論する便宜上導入された量である。これを用い「最疎解求解」を「 ℓ_0 ノルム最小解求解」と置き換えて考えることが出来る。つまり、

$$\text{「条件 } y = Ax \text{ の下で } \ell_0(x) \text{ を最小とする } x \text{ を探す」} \quad (8)$$

という問題を解くことになる。

この求解法は ($M > K$ ならば) ほぼ確実に元の疎なベクトルを探索出来る方法だが重大な欠点があり、 M, N, K が十分大きい場合(8)の解探索には指数関数オーダーの計算量を必要とする。計算複雑性理論(計算量理論)の用語で正確に言えばNP困難問題となる。単純に考えると $y = Ax$ の解で K 個非零成分がある解を全て探すにあたって方程式を解く際、まず x のどの成分を非零にするかを定める為 N 成分中から K 成分を選ぶ組合せを選択しなければならないが、組合せ数は ${}_N C_K$ と2項係数分あり N, K が十分大きければ指数関数オーダーとなる。これは計算機科学の範疇では離散最適化問題という問題の特質である。この考察は直感的なものであり、かつ離散最適化問題は必ずしもNP困難問題になるとは限らないが、 ℓ_0 ノルム最小化問題は実際NP困難問題になっている。従って ($P \neq NP$ であれば) 計算

*1 計算複雑性理論で用いる「計算量的な」問題の難しさのクラスを要約する。P及びNPは各々決定性/非決定性チューリングマシンにより多項式時間で判定可能な判定問題(yesかnoが解答の問題)のクラス(集合)である。(簡単には普通の計算機で多項式オーダーの計算量でyes/no判定可能な問題がPに属すると思えばよい。) $P \subseteq NP$ は明らかで、少なくともNPはPと同等かそれ以上に難しいが、 $P \neq NP$ 予想はミレニアム懸賞問題として著名な未解決問題である。NP困難はNP中の最も難しい問題のクラス(NP完全)と同等かそれ以上に難しい問題のクラスである。

機を用いても実質的に求解不能となってしまう。^{*1}

そこで ℓ_0 ノルム最小化を諦め、緩和問題として ℓ_1 ノルム

$$\ell_1(\mathbf{x}) := \sum_{i=1}^N |x_i| \quad (9)$$

を「疎性」を表す基準として代用し「 ℓ_1 ノルム最小解求解」を行うことにする。従って我々が解く問題は今度は

「条件 $\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x}$ の下で $\ell_1(\mathbf{x})$ を最小とする \mathbf{x} を探す」 (10)

となる。ここで ℓ_1 ノルムを代用物とする利点は何だろうか？ ℓ_1 ノルムは $x_i = 0$ で非解析的であることは ℓ_0 ノルムと変わらないが、連続かつ凸関数なので求解の際に凸関数に対する最適化手法 = 凸最適化を利用出来る。凸最適化の効率的解法は様々知られているため ℓ_1 ノルム最小化は数値的に効率良く解けるのである。さらに良いことに ℓ_1 ノルムは関数として (折れ曲がりがあるものの) 線型、かつ最小化の拘束条件 $\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x}$ も線型方程式なので、(10) は線型計画問題 (多項式オーダーの計算量で求解可能) として書き直せ、線型計画アルゴリズムで高速に解けてしまう。

しかし ℓ_1 ノルム最小化は解法として有利だが、所詮 ℓ_0 ノルム最小化の緩和問題であり、「元の \mathbf{x}^0 が正しく求まる保証があるのか？」という自然な疑問が生じる。(ℓ_1 ノルムの応用自体は過去に他の情報科学の問題でも行われていたが) ℓ_1 ノルムを利用し以上の手続きでベクトル \mathbf{x}^0 を復元する手法は Candès らにより考案されたもので、復元が成功する条件はまず彼らにより詳しく調べられた。その後、多くの情報理論の研究者がこの問題に参入し理論が構築され、その過程でランダム行列理論との関係が議論された。

なお線型代数に詳しい方は「(1) を解く際に一般化逆行列を用いて解を求めるとどうか？」と思うかもしれない。そうして得られた場合の解は \mathbf{x} のユークリッドノルム (ℓ_2 ノルム) $\ell_2(\mathbf{x}) := \sqrt{\sum_{i=1}^N x_i^2}$ を最小とする解だが、これにより求まった解は元の (疎な) 解 \mathbf{x}^0 と一致しない、従って疎な解を再現出来ないことが知られている。

5. 制限等長性 (RIP)

ここまでの話で問題として残るのは、「 ℓ_1 ノルム最小化によりどのような場合に元のベクトル \mathbf{x}^0 を再現可能か」である。その成功失敗は長方形行列 \mathbf{A} の性質に大きく依存する。そこで行列 \mathbf{A} の性質を調べる必要が生じるが、重要となるのが Candès と Tao により導入された制限等長性 (Restricted Isometry Property, 以下 RIP) の概念¹⁾ である。(参考までに、Tao は Fields 賞受賞者の Terence Tao である。)

以降の RIP とランダム行列との関連については和田山氏による詳しい解説⁹⁾ がある。細かい計算はそちらを参照して頂きたい。ここではランダム行列と圧縮センシングがどう関係するか必要最小限の事項のみに絞り解説を試みる。

RIP の概念に入る前に ℓ_0 ノルム最小化を用いたベクトル \mathbf{x}^0 の復元可能性について調べてみよう。 ℓ_0 ノルム最小化について以下の定理が成り立つ。

・ [定理 1] \mathbf{A} を $M \times N$ 実行列、 \mathbf{x}^0 を最大 K 個の非零成分を持つ任意の N 次元実ベクトルとし、 \mathbf{y} は M 次元実ベクトルで $\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x}^0$ とする。

ここで \mathbf{A} から任意に選んだ $2K$ 本の列ベクトルの組が (どのように選んでも) 必ず線型独立ならば、 ℓ_0 ノルム最小化 (8) で得られる解は唯一で \mathbf{x}^0 と一致する。(即ち ℓ_0 ノルム最小化で必ず正しい解が得られる。)

証明は簡単で、 ℓ_0 ノルムが K 以下 (つまり非零成分が K 個以下) の $\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x}$ の解が 2 つあると仮定する ($\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2$ と表記)。 $\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2$ はそれぞれ最大 K 個の非零成分を持ち得るのでその差 $\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^2$ は最大で $2K$ 個の非零成分を持ち得る。一方、 $\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x}^1 = \mathbf{A}\mathbf{x}^2$ であるから $\mathbf{A}(\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^2) = \mathbf{0}$ が成り立つが、この式は \mathbf{A} の $2K$ 本以下の列ベクトルが線型従属であることを意味し前提条件と矛盾が生じる。これより $\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x}$ には ℓ_0 ノルムが K 以下の解 \mathbf{x} は 1 つしか許されない。それは自動的に (圧縮センシングとして) 得ようとしていた元々の \mathbf{x}^0 しかあり得ない。このことは ℓ_0 ノルム最小化により必ず \mathbf{x}^0 が探し出せることを意味する。

この定理で重要なのは、行列 \mathbf{A} の部分行列の列ベクトルの線型独立性である。この部分行列に関する線型独立性はスパーク (spark) という量でより明確に記述されるが本稿ではこれ以上は立ち入らない。

この線型独立性をより深く理解する為に RIP は考案された。RIP は次式で導入される概念である。

・ [定義] \mathbf{A} を $M \times N$ 実行列、 \mathbf{x} を最大 K 個の非零成分を持つ任意の N 次元実ベクトルとする。このときあらゆる \mathbf{x} を選んだ際に

$$(1 - \delta_K) \|\ell_2(\mathbf{x})\|^2 \leq \|\ell_2(\mathbf{A}\mathbf{x})\|^2 \leq (1 + \delta_K) \|\ell_2(\mathbf{x})\|^2 \quad (11)$$

が成り立つ最小の δ_K を K 次制限等長定数 (K 次 RIP 定数) と呼ぶ。

この式の意味を考える。もしあらゆる \mathbf{x} について $\|\ell_2(\mathbf{A}\mathbf{x})\|^2 = \|\ell_2(\mathbf{x})\|^2$ ならば $\delta_K = 0$ となるが、この場合は行列 \mathbf{A} はユークリッドノルム (ℓ_2 ノルム) 不変の線型変換、つまり等長変換となる。但し式 (11) の定義で現れるベクトル \mathbf{x} は最大で K 個の非零成分しか持てない「制限」された状況であることに注意を要する。さて $\delta_K > 0$ であれば \mathbf{A} は等長変換では無くなるが、その場合の δ_K は疎な \mathbf{x} という「制限」の下で \mathbf{A} が等長変換からどれだけずれるかを表す量である。これが「RIP = 制限等長性」の言葉の由来となっている。

この量は疎ベクトル \mathbf{x}^0 の復元成功性とどう関係するだろうか？ 以下の定理 2 が先程の定理 1 から直ちに示される。

・ [定理 2] $M \times N$ 実行列 \mathbf{A} の $2K$ 次 RIP 定数について

$$\delta_{2K} < 1 \quad (12)$$

が成り立てば ℓ_0 ノルム最小化 (8) による元のベクトル \mathbf{x}^0 の復元は成功する。

証明だが、 $\delta_{2K} < 1$ ならば RIP 定数の定義から $\ell_2(\mathbf{A}\mathbf{x}) = 0$,

つまり $Ax=0$ となる $2K$ 個 (以下) の非零成分を持った x は存在し得ない. これは A の任意の $2K$ 本の列ベクトルは必ず線型独立であることを意味する. 従って定理 1 により ℓ_0 ノルム最小化で必ず正しい解が得られる.

$\delta_{2K} < 1$ は ℓ_0 ノルム最小化によりベクトル x^0 の復元が成功する十分条件であり, これから RIP が復元の成功と密接に関係していることが分かる. だが話はこれでは終わらず, RIP を使うと ℓ_0 ノルムだけではなく ℓ_1 ノルム最小化復元の成功に関する条件を導き出すことが出来る. これが RIP が圧縮センシングの理論において重要な理由である.

ℓ_1 ノルム最小化による復元成功条件は現在でも調べられており RIP 定数を用いた条件式は色々示されている. ここでは Candès により得られた簡素な十分条件を挙げておく.

・ [定理 3 : Candès (2008)¹³⁾] $M \times N$ 実行列 A の $2K$ 次 RIP 定数について

$$\delta_{2K} < \sqrt{2} - 1 \quad (13)$$

が成り立てば ℓ_1 ノルム最小化 (10) による元のベクトル x^0 の復元は成功する.

証明は省略する. ここで定理 2 と定理 3 を比べると定理 3 の条件の方が厳しくなっていることが分かる. 勿論十分条件を比べているのでこれだけでは結論付けられないが, この結果は行列 A に対し ℓ_1 ノルム最小化で復元が成功する条件が ℓ_0 ノルムの場合の条件よりも厳しい, 即ち ℓ_1 ノルム最小化の疎ベクトル復元能力は ℓ_0 ノルムの場合には劣ることを示唆している. ℓ_1 ノルム最小化は ℓ_0 ノルム最小化の緩和問題だったので自然な結論ではある.

6. 制限等長性とランダム行列理論

ところでこの記事は圧縮センシングとランダム行列との関係を記述することが目的だった. 圧縮センシングで現れる行列は $M \times N$ 長方形行列 A であるが, この行列は任意の行列で良く, 別にランダム行列である必要は無い. RIP 定数を用いた疎ベクトルの復元可能判定条件でも A がランダム行列である必要は無い. では何故ランダム行列を持ち出す必要があるのだろうか? だがランダム行列の話に踏み込むにはもう少し準備が必要である.

ここまでの議論で RIP 定数を使って復元可能条件を表現出来ることは分かった. だが RIP 定数自体を評価するのは簡単だろうか? 次にこのことを考えてみる. ポイントは RIP 定数の定義が 2 次形式で書けていることである.

RIP 定数を定義する不等式 (11) は次のように書き直せる.

$$(1 - \delta_K) x^T x \leq x^T A^T A x \leq (1 + \delta_K) x^T x \quad (14)$$

x は最大 K 個非零成分を持つ任意の実ベクトルだったが, 今 x の非零成分が K' 個 ($K' \leq K$) であり, それが $c_1, c_2, \dots, c_{K'}$ 番目の成分だとする. それに対応して $M \times N$ 行列 A から $c_1, c_2, \dots, c_{K'}$ 番目の列ベクトルを抜き出してこの順に並べ $M \times K'$ 部分行列 $\tilde{A}_{(c_1, c_2, \dots, c_{K'})}$ を構成する. さらに以下の

$K' \times K'$ 行列

$$W_{(c_1, c_2, \dots, c_{K'})} := \tilde{A}_{(c_1, c_2, \dots, c_{K'})}^T \tilde{A}_{(c_1, c_2, \dots, c_{K'})} \quad (15)$$

を定義すると不等式 (14) は

$$(1 - \delta_K) v^T v \leq v^T W_{(c_1, c_2, \dots, c_{K'})} v \leq (1 + \delta_K) v^T v \quad (16)$$

と書き直せる. ここで v は x の非零成分を並べて作った K' 次元ベクトルである. この不等式の中央には 2 次形式が現れているが, 2 次形式の最大値と最小値は行列の最大固有値及び最小固有値を用いて表せることが良く知られている. 具体的には $W_{(c_1, c_2, \dots, c_{K'})}$ の最大/最小固有値を $\lambda_{\max}(W_{(c_1, c_2, \dots, c_{K'})})$, $\lambda_{\min}(W_{(c_1, c_2, \dots, c_{K'})})$ と表記すると,

$$\lambda_{\min}(W_{(c_1, c_2, \dots, c_{K'})}) v^T v \leq v^T W_{(c_1, c_2, \dots, c_{K'})} v \leq \lambda_{\max}(W_{(c_1, c_2, \dots, c_{K'})}) v^T v \quad (17)$$

が成り立つ. これと不等式 (16) を利用し, さらに RIP 定数を評価するにはあらゆる K 次元以下のベクトル v を考えなければならないことに注意すると, K 次 RIP 定数について 2 つの不等式が得られる.

$$1 - \delta_K \leq \min_{(c_1, c_2, \dots, c_{K'}): K' \leq K} \lambda_{\min}(W_{(c_1, c_2, \dots, c_{K'})}), \quad \max_{(c_1, c_2, \dots, c_{K'}): K' \leq K} \lambda_{\max}(W_{(c_1, c_2, \dots, c_{K'})}) \leq 1 + \delta_K \quad (18)$$

但し, $\max_{(c_1, c_2, \dots, c_{K'}): K' \leq K}$ 及び $\min_{(c_1, c_2, \dots, c_{K'}): K' \leq K}$ は $K' \leq K$ を満たすあらゆる K' 次元正方向行列 $W_{(c_1, c_2, \dots, c_{K'})}$ を構成した際の最大/最小値であることを示す. 一方, 先程の定理 3 で ℓ_1 ノルム最小化が成功する十分条件が RIP 定数で書けることを述べたが, 式 (18) と組み合わせるとこの十分条件を最大/最小固有値で表現出来る. 結果は

$$\min_{(c_1, c_2, \dots, c_{K'}): K' \leq 2K} (\lambda_{\min}(W_{(c_1, c_2, \dots, c_{K'})})) > 2 - \sqrt{2}, \quad \max_{(c_1, c_2, \dots, c_{K'}): K' \leq 2K} (\lambda_{\max}(W_{(c_1, c_2, \dots, c_{K'})})) < \sqrt{2} \quad (19)$$

となる. (定理 3 では $2K$ 次 RIP 定数を考えていたことに注意.) このことは, 行列 A の部分行列から構成される $K' \leq 2K$ を満たす任意の K' 次元正方向行列 $W_{(c_1, c_2, \dots, c_{K'})}$ の固有値を調べることで ℓ_1 ノルム最小化復元が成功する十分条件を判定出来ることを示している. 但し式 (19) の判定の際にはあらゆる $(c_1, c_2, \dots, c_{K'})$ の組に対応する $W_{(c_1, c_2, \dots, c_{K'})}$ の固有値を調べなければならない点に注意が必要である. その組合せは $\sum_{K'=1}^{2K} N C_{K'}$ だけあるので, N, K が $O(1)$ の量であるうちは全て調べ尽くすことは可能だが, N, K が比 K/N を一定に保ったまま増大していくと (組合せ数は指数関数的に増大するので) もはや計算機を使っても式 (19) が成立するか判定不能になってしまう. そのような状況では個々の行列 A について ℓ_1 ノルム最小化復元が成功するかを固有値を用いて判定するのは難しい.

そこで A がランダム行列であると仮定してみよう. このような仮定を置くと「実際の観測で使う A はあらかじめ決まっているのだから実用上無意味ではないのか?」という疑問を抱かれるかもしれないが, 後で述べる通りこの設定

は重要な意味を含む。その点は後回しにし、当面は解析の便宜上ランダム行列の仮定を置いたと思って頂けると良い。

ここでは行列 A の各成分が独立に平均0分散 $1/N$ のガウス分布に従い生成されるとする。この時部分行列 $\tilde{A}_{(c_1, c_2, \dots, c_{K'})}$ の成分も当然ガウス分布に従い生成されるが、それより構成した K' 次元正方行列 $\mathbf{W}_{(c_1, c_2, \dots, c_{K'})}$ は Wishart 行列と呼ばれる多変量解析で頻出するランダム行列となり、 $M, K' \rightarrow \infty$ かつ $K'/M \sim O(1)$ の極限での漸近固有値密度 $P(\lambda)$ は以下の Marcenko-Pastur 分布となることが知られている。

$$P(\lambda) = \frac{M}{2\pi K'} \frac{\sqrt{(\lambda_+ - \lambda)(\lambda - \lambda_-)}}{\lambda} \Theta(\lambda_+ - \lambda) \Theta(\lambda - \lambda_-) \quad (20)$$

但し $\Theta(\lambda)$ は Heaviside 関数であり、 $K'/M < 1$ かつ $K'/M \sim O(1)$ 、 $\lambda_{\pm} := (1 \pm \sqrt{K'/M})^2$ である。この漸近固有値密度から、現在考えている極限では最大固有値が $(1 + \sqrt{K'/M})^2$ 、最小固有値が $(1 - \sqrt{K'/M})^2$ にあることが分かる。これを条件式(19)に適用すれば A がランダム行列の場合の ℓ_1 ノルム最小化成功の十分条件が得られるように思えるが話はそう簡単ではない。Wishart 行列 $\mathbf{W}_{(c_1, c_2, \dots, c_{K'})}$ の最大/最小固有値は行列がランダムなので当然ゆらぐが、そのゆらぎを正確に評価するためには大偏差理論(今の問題との対応では $O(e^{-M})$ の確率を扱う為の理論)を必要とするからである。それと同時に、不等式(19)の成立/不成立は $\sum_{K'=1}^{2K} C_{K'}$ 個の Wishart 行列の最大/最小固有値を対象として調べる必要があるが、その総数は $N, K \rightarrow \infty, K/N \sim O(1)$ の極限で N の指数関数オーダーとなり大偏差理論でのゆらぎの評価に寄与する程度であることにも注意を要する。加えてそれらの Wishart 行列は(同一の行列からサンプルし構成された為)互いに独立でなく相関があるという事情もある。

最もよく調べられているガウシアンランダム行列については、大偏差統計に相当するものとして(適切なスケールリングを行った)最大固有値密度の漸近形である Tracy-Widom 分布が知られているが、今の問題で必要な Wishart 行列の場合については最大/最小固有値に関する(大偏差)

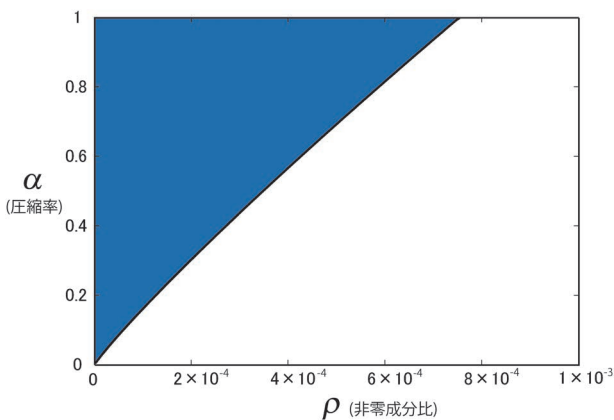


図3 RIPとランダム行列理論から求めた ℓ_1 ノルム最小化による疎ベクトル復元の成功保証領域：青色は本文中の極限を考えた際に確率1で復元の成功が保証される領域である。 $\rho \sim 10^{-4}$ 程度の非常に疎なベクトルに相当する領域に成功保証領域が現れる。圧縮率 α の定義は観測数 M と信号次元 N の比なので、 α が大きい場合は観測数が大きく復元が比較的容易なはずである。実際に α が大きい領域では成功保証領域が広がる。

確率不等式として次の結果が得られている。¹⁴⁾

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\left(\lambda_{\max}(\mathbf{W}_{(c_1, c_2, \dots, c_{K'})}) > \left(1 + \sqrt{\frac{K'}{M}} + t\right)^2\right) &\leq 2e^{-Mt^2/2}, \\ \mathbb{P}\left(\lambda_{\min}(\mathbf{W}_{(c_1, c_2, \dots, c_{K'})}) < \left(1 - \sqrt{\frac{K'}{M}} - t\right)^2\right) &\leq 2e^{-Mt^2/2} \end{aligned} \quad (21)$$

$\mathbb{P}(\dots)$ は括弧内が満たされる確率を示す。この式と式(19)の結果を利用し、加えて固有値同士の相関を切り離す為に和集合上界不等式を組み合わせると、 $M, N, K \rightarrow \infty$ かつ $\alpha := M/N \sim O(1)$ 、 $\rho := K/N \sim O(1)$ (α は観測の際の原信号圧縮率、 ρ は原信号内の非零成分比に相当)の極限で条件式(19)が確率1で成立する α, ρ の限界値を知ることが出来る。計算の詳細は省略するが、Candès-Tao の原論文と同じ方法^{*2}で限界値を評価すると図3のようになり、図中の青色の領域では ℓ_1 ノルムによる復元の成功が保証される。

この結果のみでは原信号が展開基底上で極めて疎に表現されていないと復元の成功が保証されないことになるが、RIPとランダム行列の大偏差確率不等式を駆使し ℓ_1 ノルムによる復元が成功するパラメータ領域の具体形を初めて示したことが情報理論的に重要な結果であった。

7. Donoho-Tanner 転移と幾何学的解析法

以上で解説した RIP に基づく ℓ_1 ノルム最小化復元の成功条件はあくまでも十分条件であり、この条件が満たされなくても ℓ_1 ノルム最小化復元が必ず成功する領域が存在する可能性は残っている。では実際に計算機を用いて復元の実験を行うとどうなっているのだろうか？

図4は筆者が実際に復元実験を行った結果をグラフにしたものである。このグラフは $M, N, K \rightarrow \infty$ 及び $\alpha, \rho \sim O(1)$ の極限で復元が成功する領域と失敗する領域に明確な境界が存在することを意味する。また実際に復元が(実験結果として)確率1で成功する領域は先程の RIP を用いた議論で保証される領域よりもずっと広いことが示唆されている。

この境界を解析的に求めることは可能だろうか？ この点を最初に議論したのは Donoho と Tanner であり、¹⁶⁾ 彼らの名を取って図中の成功/失敗領域間の「転移現象」を Donoho-Tanner 転移と呼ぶことがある。彼らの方法を逐一解説するのは紙面を要するので以下の解説では要点のみに止めさせて頂く。(日本語による詳しい解説は田中氏による解説記事¹¹⁾があるので参照されたい。)

ℓ_1 ノルム最小化問題は線型計画問題となっていることは最初の方で述べた。ところで線型計画問題を教科書などで解説する際、直線的な図形で視覚的に解を求めようとする方法をよく目にする。 ℓ_1 ノルム最小化でも勿論こういったことは可能であり、それを例示したのが図5である。図では $M=1, N=2, K=1$ の場合、つまり原信号 \mathbf{x}^0 は2次元で

^{*2} Candès-Tao の原論文¹⁾ で用いられた RIP 定数に関する ℓ_1 ノルム最小化復元成功の十分条件は定理3のものとは異なる。ここでは便宜上定理3と組み合わせたものを表示した。

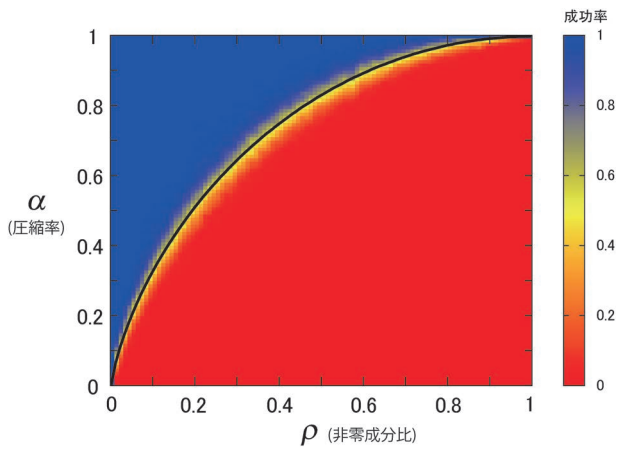


図4 ℓ_1 ノルム最小化による復元実験の結果：色は復元の成功率を示す。実験では行列 A の各成分が独立に平均0、分散 $1/N$ のガウス分布に従うランダム行列とし、 $N=100$ と固定した上で各 K, M の値 (刻み幅は1) について100回復元実験を行い成功率を評価している。(原信号 x^0 の非零成分の位置はランダムとし、非零成分の値は平均0分散1のガウス分布に従うランダム値とした。) 明らかに「成功領域」と「失敗領域」の間に境界が存在している。図中の曲線は式(22)に対応し、幾何学による解析法の結果が成功/失敗領域境界を正しく再現していることが分かる。(実験ではルーチン CVX¹⁵⁾ を利用した。)

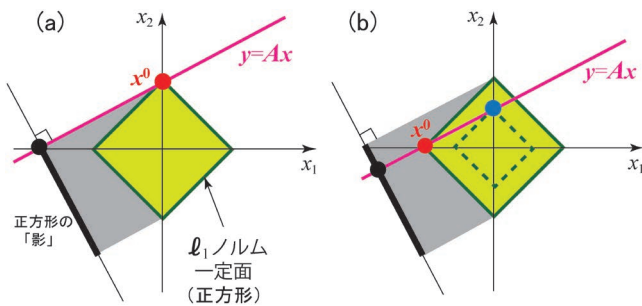


図5 ℓ_1 ノルム最小化による復元が成功/失敗する例：(a) は復元が成功する例 (相似拡大していった正方形及び直線 $y=Ax$ との最初の接点が赤丸=原信号点 x^0 と一致する場合)、(b) は失敗する場合 (正方形が原信号点 x^0 に達した際、既に内側に他の解候補点 (= 青丸) が存在する場合) である。これらの図で $y=Ax$ の直線と直交する直線 (細い黒線) に向け垂直に正方形及び赤丸=原信号点を投影し「影」を作った場合、(a) では赤丸の影は正方形の影の境界にあるが、(b) では内側に入ってしまう。

そのうち1次元分は0、かつ観測信号 y が1次元の場合の ℓ_1 ノルム最小化の様子を示している。この場合、原信号 x^0 を2次元平面上に表現するとそのうち1つの成分は0なので2次元座標軸上の原点を除くいずれかの点に存在する。図5の例ではその位置を赤丸で表記した。線型条件 $y=Ax$ はこの平面上で直線で表現されるが、原信号に相当する赤丸は当然この条件を満たすので直線上にある。線型条件を満たす ℓ_1 ノルム最小解はこの直線 $y=Ax$ をまず描き、次に原点を中心とし45度傾いた正方形 (= ℓ_1 ノルム一定面) を作りそれを徐々に相似拡大していったときに両者が初めて接する点 (= 直線上で ℓ_1 ノルムが最小となる点) に相当する。もしこの点が原信号点と一致する場合信号復元は成功であり、そうでない場合は失敗である。

復元の成功失敗の図形的な解釈はこれで良いが、これを少し異なる見方で捉えてみよう。今、直線 $y=Ax$ と直交する直線に対し垂直に正方形を投影し「影」を描いてみる。

(図中の太い黒線に相当。) 原信号点に相当する赤丸も同様に投影した場合 (影は図中黒丸の位置)、もし赤丸の影が正方形の影の端点 = 境界にある場合復元は成功、内部に入ってしまう場合は復元は失敗と考えることが出来る。これは図の例の場合に限らず一般的に成り立つ事実である。

この解釈から復元の成功/失敗はこれら図形の配置に依存することが分かるが、もし図形の配置を「平均化」出来れば「平均して何%復元が成功するか」を議論出来るだろう。平均化の操作として [A] 4頂点の内1つをランダムに選ぶ (= x^0 の非零成分の位置と符号をランダムに選ぶ)、及び [B] ランダムに回転された直線に向け正方形及び頂点を射影する、以上2操作を考える。図5の例では4頂点の内特定の2つを選べばその影は正方形の影の端点に投影されるので、[A] の平均化を行うと $2/4 = 50\%$ の確率で復元が成功すると言える。さらに [B] の平均化として直線をランダムに回転させてもこの事実は変わらず、(文章としてややこしいが) 「『成功確率50%』となる確率は1」と言える。

さてこの見方は一般の M, N, K に拡張出来る。(射影は N 次元 $\rightarrow M$ 次元について行うが、[B] の平均操作は高次元射影群の Haar 測度に関し一様に行うことになる。) 結果は、 $M, N, K \rightarrow \infty$ 及び $\alpha, \rho \sim O(1)$ の極限で「『成功確率が100%に漸近する』状況が確率1で起きる」境界として

$$\alpha = 2(1-\rho) \int_x^\infty \frac{e^{-z^2/2}}{\sqrt{2\pi}} dz + \rho,$$

$$\alpha = 2(1-\rho) \frac{e^{-x^2/2}}{\sqrt{2\pi x}} \quad (22)$$

の (x を変数とした) 非線型連立方程式を満たす $\alpha-\rho$ 曲線が得られる。この境界線より ρ が小さい側では ℓ_1 ノルム最小化による復元は「(確率1で) 100%成功」、大きい側では「(確率1で) 100%失敗」となる。この結果と先程の数値実験の結果を比較すると (図4参照) 境界線は完全に一致している。つまり高次元の幾何学の議論で成功/失敗境界が解析的に議論出来たことになる。^{*3}

8. Donoho-Tanner 転移とスピングラス理論

ところで数値実験の図4はこの問題に「相図」が存在することを示唆している。つまりこの問題には「成功」の相と「失敗」の相が存在し、Donoho-Tanner 転移は物理的にそれらの間の相転移とみなせるのではないかという発想である。では実際に図4は相転移描像で説明出来るだろうか？

このアイデアで実際に解析を行った樺島・和田山・田中3氏の論文¹⁷⁾の内容を概説する。このアイデアによる解析は平衡統計力学の範疇で行うことが出来るが、その為には「成功相」と「失敗相」に対する自由エネルギーの比較が必要なので、まずは ℓ_1 ノルム最小化の手続きに対応したモデルを定義し自由エネルギーを計算する必要がある。

^{*3} 参考までに今の議論で得られた境界は原論文で「弱閾値」と呼ばれる。またこの議論は積分幾何学と呼ばれる分野の手法に基づく。

この系の Boltzmann 因子を以下で定義しておこう。

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \exp(-\beta \ell_1(\mathbf{x})) \delta^{(M)}(\mathbf{y} - \mathbf{A}\mathbf{x}) \quad (23)$$

(規格化因子は省略。)最初の因子は ℓ_1 ノルム最小化, M 次元デルタ関数 $\delta^{(M)}$ の部分は線型拘束条件にそれぞれ対応する。要するに絶対零度の系を考えなければならない。それは今注目している状態は(エネルギーとして考えている) ℓ_1 ノルムが最小となる状態 = 基底状態だからである。

この Boltzmann 因子から自由エネルギーを計算するのだが, Candès-Tao の設定に倣えば行列 \mathbf{A} をランダム行列とすべきことに注意しなければならない。従って解析の際に自由エネルギーのランダム平均操作が必要となり, それには統計力学のレプリカ法が必要になる。この「 ℓ_1 ノルム最小化模型」でのレプリカ法による平均操作は神経回路網理論での Hopfield 模型¹⁸⁾ や, 或いは無線通信理論の CDMA 系での解析¹⁹⁾ 等, スピングラスの応用問題として現れるものと同じなのでそれを流用出来る。つまりこの問題はスピングラスの問題になっている。

解析の詳細は原論文及び樺島氏の解説¹⁰⁾ を参照して頂きたいが, 結論を簡潔に述べるとオーダーパラメータとして「真の原信号」と「 ℓ_1 ノルム最小化で得られた復元信号」間の平均 2 乗誤差を選ぶと, それが 0 から非 0 に移り変わる点が成功相と失敗相の境界となり, その境界を解析的に求めると式(22)と全く同じ結果が得られる。これは幾何学の解析結果と統計力学の解析結果の一致を示している。正しく解析すれば同じ結果が導かれるのは当たり前ではないかと思われるかもしれないが, レプリカ法が数学的に厳密性を欠く解析法であることは良く知られているにも関わらず, この問題では全く違うアプローチから結果の正当性が保証されていることになり興味深い。さらに付け加えると, 幾何学の解析では高次元射影群の対称性(つまり高い対称性)を仮定する必要があるが, レプリカ法による解析ではランダム行列に対する仮定等の問題設定を比較的自由に変更することが出来る。その意味でレプリカ法による解析を用いると ℓ_1 ノルム最小化に現れる相転移現象をより一般的な設定下で調べられる利点があり, 実際に問題設定を色々変更して成功/失敗境界の解析を行うことが可能となる。²⁰⁾

9. Donoho-Tanner 転移とランダム行列理論

ここで再びランダム行列理論が登場する。実はこのスピングラス理論に基づく解析法もランダム行列理論と関連がある。但しそれは RIP の所で議論したランダム行列の最大/最小固有値の議論とは異なる点においてである。

それを説明する前に Donoho-Tanner 転移について 1 点付け加えておかなければならない。Donoho-Tanner 転移の復元実験では行列 \mathbf{A} は各成分がガウス分布するランダム行列と設定し境界を求めた。だが Donoho-Tanner はこのランダム行列 \mathbf{A} に対する設定を様々変更(例えば列ベクトルにラ

ンダムな Fourier 基底やランダムな Hadamard 基底を選ぶ)しても境界が変わらないことを後の論文で数値的に指摘している。²¹⁾ この事実は Donoho-Tanner universality と呼ばれることもある。この記事では行列 \mathbf{A} を「とりあえず」ランダムに選んでいたのだが, その設定は強い universality を持つ結果を導くのである。

一方, 幾何学による解析の設定では射影群の測度 (Haar 測度) での一様な平均操作を仮定していた。これは図 4 の数値実験の設定 (ガウス分布する成分を持つランダム行列) とは異なるが, 結果は図 4 の結果を極めて良く再現していた。この事実は Donoho-Tanner universality がランダム行列のある種の対称性に起因することを示唆するように思える。

この universality についてスピングラス理論による解析から何か議論出来ないだろうか? それを述べるにはスピングラス模型の自由エネルギー評価の際のランダム行列 \mathbf{A} の平均操作に深入りする必要がある(ここでは概要のみに止める。その平均操作法は元は行列積分^{22,23)} に基づくものである。高エネルギー理論の方には量子色力学における Itzykson-Zuber の行列模型の論文を御存じの方もおられるだろうが, そこではユニタリ群の Haar 測度に関する分配関数中の行列変数の積分操作に関する方法が議論されている。この手法はその後 Voiculescu による自由確率論に基づく積分変換を利用した系統的計算法²⁴⁾ と結び付き発展した一方, 自由確率論とは独立な流れとして等価な方法がスピングラス模型の解析法としても応用されていた。²⁵⁾ (自由確率論的手法は情報理論にも応用されているが詳細は Tulino, Verdú 両氏の著書,²⁶⁾ 及び田中氏の解説記事²⁷⁾ を参照のこと。筆者らも関連する研究を行っている。²⁸⁾)

この自由確率論的手法に基づく解析法は圧縮センシングの問題にも応用することが出来る。その際の仮定は

[A] ランダム行列の平均操作を回転群の Haar 測度に関し一様に行うこと

[B] ランダム (正方) 行列 $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$ の漸近固有値密度について, 0 固有値成分が存在しないこと

である。この仮定下で成功/失敗境界を評価すると式(22)と全く同じ結果を導き出すこと (=ランダム行列の回転対称性が Donoho-Tanner universality と結び付いていること) が示される。具体例として行列 \mathbf{A} の各成分がガウス分布するランダム行列の場合, 行列 $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$ の漸近固有値密度は Marčenko-Pastur 分布となるが, 漸近固有値密度がそれよりずれても(回転対称性が保たれる限り)成功/失敗境界は universal な境界のままであることを行列積分の方法で議論出来る。¹⁷⁾ 筆者らはこの点を掘り下げ, 回転対称性を破るようなランダム行列を用意すれば Donoho-Tanner universality から逸脱する結果を導き出せることをレプリカ法を用いて示した。^{29,30)} これは自由確率論的解析手法があった上で予想されることであり, 実際結果はその通りになっているのである。

10. おわりに

本稿では圧縮センシングとランダム行列理論との繋がりを RIP = 制限等長性及びスピニングラス解析の2つの点から述べた。筆者がここで述べるまでもなくランダム行列理論は幅広い分野への応用が知られているが、このように同一の問題にランダム行列理論の全く異なる2つの解析法(大偏差理論及び自由確率論)が関係するのも理論的に面白い点ではないだろうか。ランダム行列に関わる研究者の方々に本稿の内容が何か新たな知見を少しでも与えることになれば筆者にとって大きな幸いである。

樺島祥介・田中利幸・和田山正各氏には草稿を精読頂き背景や論理叙述の不備等を御指摘頂きました。深く御礼申し上げます。

参考文献

- 1) E. Candès and T. Tao: IEEE Trans. Inform. Theory **51** (2005) 4203.
- 2) E. Candès, J. Romberg and T. Tao: IEEE Trans. Inform. Theory **52** (2006) 489.
- 3) D. L. Donoho: IEEE Trans. Inform. Theory **52** (2006) 1289.
- 4) E. J. Candès and M. B. Wakin: IEEE Signal Proc. Mag. **25** (2008) 21.
- 5) R. G. Baraniuk, E. Candès, M. Elad and Y. Ma (eds.): Proc. of the IEEE (special issue) **98-6** (2010).
- 6) M. Elad: *Sparse and Redundant Representations* (Springer, 2010).
- 7) Y. C. Eldar and G. Kutyniok (eds.): *Compressed Sensing: Theory and Applications* (Cambridge Univ. Press, 2012).
- 8) 平林 晃: 電子情報通信学会技術研究報告 CAS2009-11, VLD2009-16, SIP2009-28 (2009) 55.
- 9) 和田山 正: 日本神経回路学会誌 **17** (2010) 63.
- 10) 樺島祥介: 日本神経回路学会誌 **17** (2010) 70.
- 11) 田中利幸: IEICE Fundamentals Review **4** (2010) 39.
- 12) 三村和史: 数理解析研究所講究録 **1803** (2012) 26.
- 13) E. Candès: C. R. Acad. Sci. I, Math. **346** (2008) 589.
- 14) M. Ledoux: *The Concentration of Measure Phenomenon* (Amer. Math. Soc., 2001).
- 15) M. Grant and S. Boyd: *CVX: Matlab software for disciplined convex programming, version 2.0 beta* (2013). <http://cvxr.com/cvx> で入手可能.

- 16) D. Donoho and J. Tanner: Proc. Natl. Acad. Sci. USA **102** (2005) 9452.
- 17) Y. Kabashima, T. Wadayama and T. Tanaka: J. Stat. Mech. (2009) L09003.
- 18) D. J. Amit, H. Gutfreund and H. Sompolinsky: Phys. Rev. A **32** (1985) 1007.
- 19) T. Tanaka: IEEE Trans. Inform. Theory **48** (2002) 2888.
- 20) 例えば K. Takeda and Y. Kabashima: Europhys. Lett. **95** (2011) 18006.
- 21) D. Donoho and J. Tanner: Phil. Trans. R. Soc. A **367** (2009) 4273.
- 22) Harish-Chandra: Amer. J. Math. **79** (1957) 87.
- 23) C. Itzykson and J.-B. Zuber: J. Math. Phys. **21** (1980) 411.
- 24) D. V. Voiculescu, K. J. Dykema and A. Nica: *Free Random Variables* (Amer. Math. Soc., 1992).
- 25) E. Marinari, G. Parisi and F. Ritort: J. Phys. A **27** (1994) 7647.
- 26) A. Tulino and S. Verdú: *Random Matrix Theory and Wireless Communications* (Now Publishers, 2004).
- 27) 田中利幸: 数理科学 **524** (2007) 50.
- 28) K. Takeda, S. Uda and Y. Kabashima: Europhys. Lett. **76** (2006) 1193.
- 29) K. Takeda and Y. Kabashima: Proc. of IEEE Int. Symp. on Information Theory (2010) 1538.
- 30) K. Takeda and Y. Kabashima: Proc. of 46th Annual Conf. on Information Sciences and Systems (2012).

著者紹介

竹田晃人氏: 研究分野はランダム系の統計物理学, 特にスピニングラス理論とランダム行列理論及びその情報科学への応用.

(2014年2月7日原稿受付)

Random Matrix Theory in Information Theory: What is Compressed Sensing?

Koujin Takeda

abstract: Recently, in information science, information processing based on signal sparsity has been intensively investigated. This is because a quite impactful idea for reconstruction of sparse signal, called *compressed sensing*, was proposed about ten years ago, which has been widely spread onto variety of fields in information science. In this article the author attempts to elucidate the relationship between theoretical physics and information theory through random matrix theory, and to attract the physicists' interests onto this problem.

強い電子格子相互作用をもつ有機結晶の多彩な光誘起ダイナミクス



恩田 健†

JST さきがけ



腰原 伸也

東京工業大学大学院
理工学研究科



矢持 秀起

京都大学低温物質科学
研究センター

物質に光を当てたときに起こる現象は、温度上昇により起こる現象とは本質的に異なる。温度を上げた場合、固体中の電子はフェルミ分布に、格子振動（フォノン）はボーズ分布に従うため、高温でも多くの電子やフォノンは基底状態付近に分布したままである。また温度上昇に際して系は熱平衡状態を保つため熱力学、統計力学を用いて記述できる。他方、光を当てた場合、電子やフォノンをその光子エネルギーに対応した状態へ直接励起することができる。この場合、電子やフォノンはそれぞれフェルミ分布、ボーズ分布から遠く離れた非平衡状態にあってそれらの温度は定義できず、またその状態の振る舞いを体系的に説明できる理論もまだない。そのため依然として物理において解明すべき重要な課題となっている。

このような状態を、実験的に観測するにはどのようにすれば良いのであろうか？一般に物質の性質は、結晶構造と各原子の最外殻の電子、すなわち価電子により決まる。そのため結晶構造と価電子の変化を、光励起により状態変化が起こっている時間スケール、すなわちフェムト (10^{-15}) 秒からピコ (10^{-12}) 秒で観測できれば、時々刻々と変化する非平衡状態を知ることができる。現在では超短パルスレーザーの発達により、このような時間幅の光パルスを容易に得られるようになってきている。また価電子や結晶構造の状態は、赤外から紫外にわたる分光スペクトルやX線などによる回折像から知ることができる。

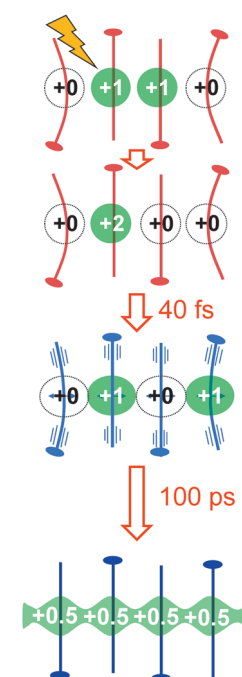
光励起状態において特異な物性を示す物質のひとつに、電子同士のクーロン相互作用

が強く一電子近似が成り立たない強相関物質が挙げられる。中でも有機電荷移動錯体はその低次元性、柔らかい構造ゆえに、わずかな電場や圧力の印加によって著しい物性変化を示すだけでなく、光励起によっても構造相転移をはじめ様々な現象が現れることが期待される。特に電子と格子の間の相互作用の強い電荷移動錯体 (EDO-TTF)₂PF₆ では、これまでフェムト秒からナノ秒の時間スケールに対応した様々な超高速観測手段により、特徴的な光誘起相転移現象が明らかにされている。

この物質は室温で金属的な1次元伝導を示し、280 Kまで冷やすと電荷が局在化して絶縁体へ転移する。この絶縁体相に近赤外光 (800 nm, 1.55 eV) を当てると、光励起によって作り出された電子のコヒーレンスと分子内振動のコヒーレンスがともに20 fs程度で失われ、代わって別の状態が40 fsかかって現れることが明らかになった。後者の状態は、熱平衡状態とは異なる電荷秩序をもつ状態、すなわち光誘起相であり、電子相関と電子格子相互作用のバランスにより成立していることが、赤外から可視にわたる過渡電子スペクトル測定およびモデル計算により判明した。さらにこの光誘起相から100 psかかって電荷秩序の融解および構造緩和が起こり金属相的な状態が生じることが、ピコ秒時間分解振動分光により見出された。これらの状態変化の全体をフェムト秒電子線回折を用いて観測すると、単位格子を構成する各分子が別々の時間スケールで動いている様子が現れ、このことが2段階で起こる相転移の原因となっていると考えられる。

—Keywords—

電荷移動錯体：電子供与性分子（ドナー）と電子受容性分子（アクセプター）より成る分子間化合物。ドナーからアクセプターに電荷移動が起こることにより錯体を形成する。広義には、少なくとも成分の一方が分子であれば、閉殻イオンを成分とする場合を含む。



† 東京工業大学大学院理工学研究科

1. はじめに

近年、太陽電池や光電子デバイス、人工光合成などエネルギーや環境問題を解決するために様々な光機能性物質の開発が行われている。また目的とする機能を実現するため、その構造や動作はますます複雑化している。しかし物質に光を当てた状態は極めて非平衡であり、また時々刻々と変化するため、このような状態を熱平衡や定常状態を仮定した通常の物理理論で理解することは困難である。これを克服するため、非平衡状態を直接、実時間で観測できる様々な超高速観測手段が開発されてきた。その結果、気相や溶液中における分子、あるいは無機半導体、金属などの単純な固体物質においては、その詳細がかなり判明している。一方、有機固体や酸化物、化合物のように複雑な構造、組成をもつ物質に関しては、その有用性にも関わらずほとんど理解されていない。そこで我々は、このような物質における光誘起後の動的過程(ダイナミクス)を、それぞれの系に適した超高速分光法を開発することにより明らかにしてきた。¹⁾ 本解説では、その中でも特に分子性の単結晶である電荷移動錯体の光誘起ダイナミクスについて取り上げる。

電荷移動錯体は、電子を放出しやすい分子(ドナー分子)と電子を受け取りやすい分子(アクセプター分子)からなる錯体である。^{2,3)} 特に本解説で扱う錯体は π 共役電子系小分子を含む結晶であり、結晶生成時に分子間で電子移動が起こった際、電子移動の度合いと結晶構造が適切な場合に未充填のバンドが形成される。その結果、有機物であるにもかかわらず半導体や金属的な性質をもつ。また π 電子の異方的な軌道から、その重なりにより生成するバンド構造は1次元または2次元的になる。さらにそれらの軌道の重なり(移動積分 t)は、典型的な無機金属に比べてあまり大きくない($t \sim 0.1$ eV)ため、相対的に電子同士の相互作用が強い強相関物質となる。また分子間相互作用が弱いため変形しやすい柔らかな結晶である。そのため圧力変化、温度、電場などの影響を受けやすい。このような性質、すなわち低次元、強電子相関、柔らかな構造などから多彩な物性が生じ、その圧力、温度相図は複雑なものとなる。

熱平衡状態にある電荷移動錯体の電子状態は、比較的簡単なモデルで表すことができる。⁴⁻⁶⁾ まず基本となるのは、電子が各分子に局在化した強束縛モデルである。このモデルでは、イオン殻とそれに束縛された電子が結晶中で整列していると仮定する。その電子軌道としては、このような π 共役分子の性質を決定づける最高被占軌道(HOMO)、あるいは最低空軌道(LUMO)のみを考え、残りをイオン殻として考える。結晶構造はX線構造解析により実験的に決まるため、各構成分子間の移動積分(t)およびバンド構造は容易に計算できる。^{4,5)} さらに電子相関を取り入れるには、2つの電子が一つの軌道に入ったときのクーロン反発力、すなわちオンサイトクーロン力(U)をハミルトニアンに入れたハバードモデルが有効である。⁶⁾ さらに、隣り合う軌道間のクーロン反発(V)を入れた拡張ハバード

モデルやこの解説でも後ほど取り上げる電子格子相互作用を入れたモデルなどを用いることにより、一見複雑そうな電荷移動錯体結晶の電子状態を記述することが可能になる。さらにこのような知見に基づき、目的の物性をもつ錯体有機合成の手段を使って作り出すことも可能である。

このように電荷移動錯体は、分子性物質としては特異な物性を持ち、理論的にも理解しやすく、またそれらが化学合成の手法で制御可能であることから、基礎的な固体物性の観点からも興味深い研究対象である。さらに、その物性が温度、圧力、電場などの外場により容易に変化することから、光による物性制御の対象としても最適な物質と考えられる。そのため近年、電荷移動錯体における光誘起ダイナミクスの研究が盛んに行われるようになってきた。その最初の例と考えられるのが混合積層型錯体のTTF-CA(tetrathiafulvalene-*p*-chloranil)である。この錯体が光によりイオン性-中性相転移を起こすことが1990年Koshiharaらにより明らかにされた。⁷⁾ その後しばらくは超高速で起こる光誘起ダイナミクスを観測する手段がなく詳細は不明であったが、超短パルスレーザー技術の発達により、2000年代に入り急速に研究が進んだ。⁸⁻¹⁰⁾ さらに他の多くの錯体においてもこのような光による相転移現象、すなわち光誘起相転移が見出されるようになり、光によるマクロな物性制御が可能な系として現在盛んに研究がなされている。代表的な錯体としては、バンドの半分が占有された(1/2フィールド)1次元電子系のTCNQ塩¹¹⁻¹³⁾(TCNQ=tetracyanoquinodimethane)、2次元電子系のBEDT-TTF塩¹⁴⁻¹⁶⁾(BEDT-TTF=bis(ethylenedithio)tetrathiafulvalene)、強いダイマーを形作る[Pd(dmit)₂]塩^{17,18)}(dmit=1,3-dithiole-2-thione-4,5-dithiolate)などがあげられる。これらに対して、この解説で取り上げる(EDO-TTF)₂PF₆(EDO-TTF=ethylenedioxytetrathiafulvalene)は、3/4フィールド擬1次元電子系であり、特に電子同士の相関だけでなく電子格子相互作用も強いことが特徴である。¹⁹⁻²¹⁾ そのため他の錯体では見られない多彩な光誘起ダイナミクスが見出されている。

2. (EDO-TTF)₂PF₆の特徴

この錯体は室温で擬1次元の有機導電体であり、外見は図1(a)の写真のように黒く細長い結晶である。構成分子のEDO-TTFは図1(b)に示した分子構造をしており、電子を放出して陽イオンになりやすいドナー分子の一つである。室温の結晶構造は図1(d)のようであるため、EDO-TTF分子の π 軌道の重なりにより1次元性の強いバンドが形成されている。ここで、EDO-TTF分子からPF₆⁻へ電荷が移動することによって、EDO-TTFの列(カラム)で生じるバンドが未充填になり電気伝導性が生じる。この際、EDO-TTF分子2個に対して1個の電子がPF₆⁻へ移動するため、電子が3/4充填したバンドとなる。しかしこのような1次元的な電子構造は、もともとパリエルス不安定性により絶縁体化しやすい。(EDO-TTF)₂PF₆ではこれに加えて電子相関、

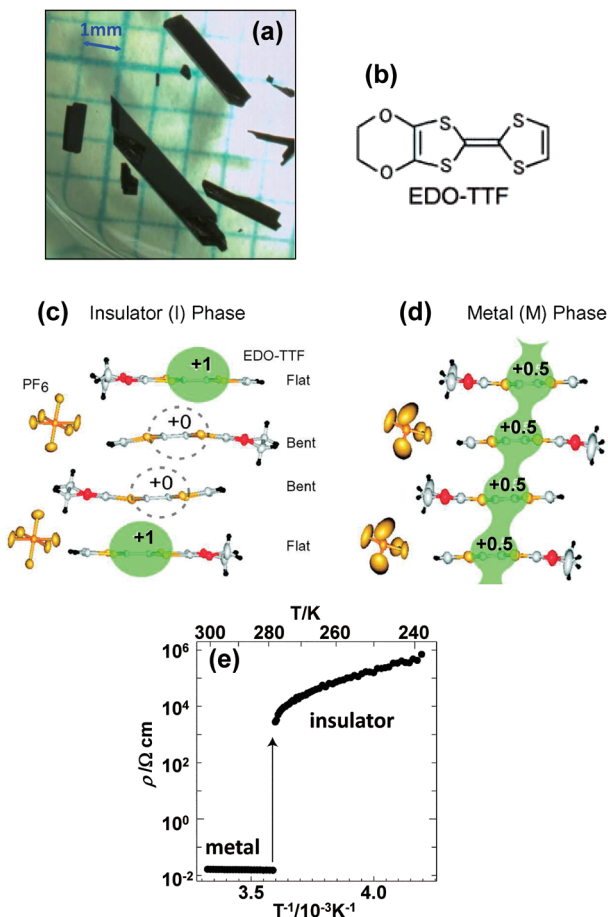


図1 (a) (EDO-TTF)₂PF₆結晶の写真, (b) EDO-TTFの構造式, (c), (d) (EDO-TTF)₂PF₆の低温相 (c), 高温相 (d)の結晶構造, 数字は各サイトにおける電荷を表す.²⁷⁾ (e) (EDO-TTF)₂PF₆の電気抵抗の温度変化.¹⁹⁾

電子格子相互作用による電荷秩序, 陰イオン秩序の効果も働き, 280 Kという室温に近い温度で電荷が局在化して絶縁体となる (図1(e)).²⁰⁾ また赤外・ラマン分光法, X線構造解析などから, 絶縁体相における各EDO-TTF分子の1次元の電荷の並びが (0, 1, 1, 0) であること, 電荷が0のものは図1(c)に示すように他の価数のもの比べて大きく曲がっているという特徴が明らかになっている.

(EDO-TTF)₂PF₆の1次元性金属から絶縁体への相転移の様子は, 定常状態の反射率スペクトルの温度変化にも如実に表れている.^{20, 21)} 図2はこの物質における, 反射率スペクトル (a) およびそのクラマース-クロニッヒ変換により得られた光学的伝導度スペクトル (b) である. 290 Kの高温金属相では, 0.8 eV以下でドルーデ的な反射率の増大が見られる. 一方, 180 Kの低温絶縁体相では, 低エネルギーで光学的伝導度が大きく下がっている反面, 局在化した電子間の遷移 (電荷移動遷移) に対応するピークが0.6 eVと1.4 eVの近赤外領域に見られ, それぞれCT1, CT2と名付けられている. さらに10 Kまで冷やすと, 0.8 eVにもう一つの電荷移動バンドが現れ, CT3と名付けられている. これらのピークの帰属は, 電荷の並びが (0, 1, 1, 0) であることを考慮にいたった簡単なモデル計算により, CT1が1価と0価間の電子移動, CT2が1価同士の電子移動, さらに

解説 強い電子格子相互作用をもつ有機結晶の多彩な光誘起ダイナミクス

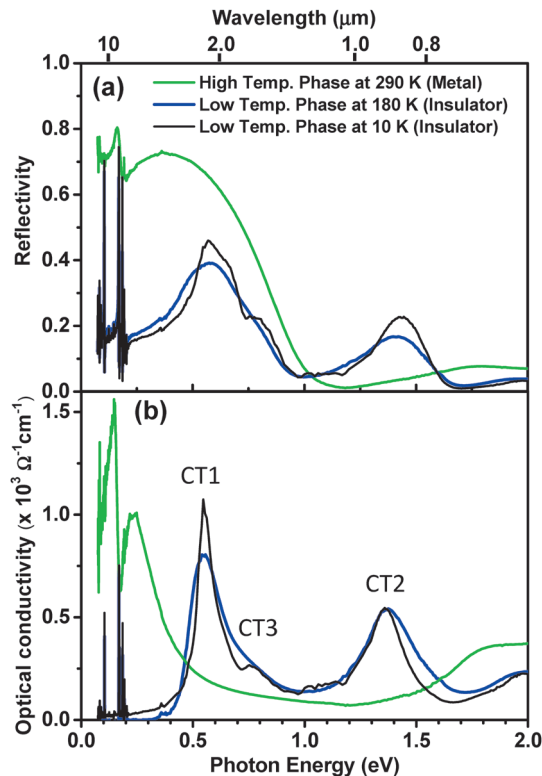


図2 (EDO-TTF)₂PF₆の (a) 反射率スペクトルと (b) 光学的伝導度スペクトル. 低温相10 K, 低温相180 K, 高温相290 Kをそれぞれ黒線, 青線, 緑線で表した.

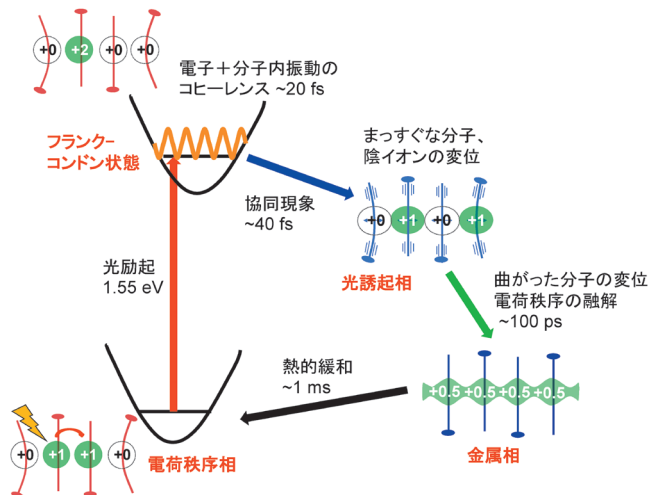


図3 (EDO-TTF)₂PF₆光誘起ダイナミクスの概略.

CT3はそれらが混ざった遷移と帰属されている.²¹⁾

この物質の光励起に伴うダイナミクスは, その強い電子相関, 電子格子相互作用に基づく協同現象や有機物ならではの柔軟な構造も相まって非常に複雑である. その詳細を明らかにすることは, 他の様々な有機結晶一般の光誘起ダイナミクスのみならず, デバイスとして応用された場合のキャリア注入への応答を考える上でも重要である. しかしその複雑さ故, 一つの解析手段だけでそれを理解することは難しい. そこで, 観測する時間領域, 状態に合わせた時間分解観測手段を開発し適用した. その結果明らかになった光誘起ダイナミクスの概要を図3にまとめた. 以下こ

これらのダイナミクスを時系列に従って詳細に述べる。

3. 光誘起相の生成, 電子コヒーレンス

物質に光を照射すると, 電子はほぼ瞬間的に励起されるが, 原子核の動きがそれに追従できないため, 構造は基底状態を保ったままの励起状態が生成する. これをフランク-コンドン (FC) 状態といい, これが光励起ダイナミクスにおけるスタート地点となる. 固体においてこのような状態は不安定で, 素早く他の状態へ遷移する. そのため, FC 状態を直接観測するためには, 非常に短い時間分解能すなわち短いパルスが必要となる. 価電子帯における励起電子の緩和寿命は短くても数フェムト秒であり, 近年の超短パルスレーザー技術の発達によって, その程度の時間幅のパルス光の発生自体は可能になっている. しかし, 実際に固体における動的過程を測定する場合, 観測する物質, 現象に合わせてパルス光の波長, 時間幅, 強度, 繰り返し周波数などを適切に制御しなければならない.

FC 状態の観測のために, チタンサファイア増幅器の出力 (波長 800 nm, 時間幅 120 fs, エネルギー 1 mJ/pulse) から貴ガスの自己位相変調^{22,23)}を利用して, 0.4 eV 程度のバンド幅をもつ白色光 (図4の赤線) を発生させた.²⁴⁾ この白色光は, 波長により相対的な時間差ができていく (群速度分散) ため, 誘電多層膜を用いた負分散ミラーを用いて高次の分散も含めて時間幅を圧縮した. こうして得た 12 fs のパルスを用いて, ポンプ・プローブ反射測定^{*1)}を行った.²⁴⁾

図4に示すように試料 (低温相) の反射率スペクトルの 1.4 eV 付近に見られる電荷移動遷移 CT2 は, 12 fs パルスのスペクトルと部分的に重なっている. 試料の励起, 検出共に 12 fs パルスのスペクトル全体を用いているが, 反射率変化の光子エネルギー依存性を見るため検出器の直前にフィルターをおいて分光した. 図5(a)は, その反射率の 1.65 eV 付近 (図4の斜線の部分) の時間変化をプロットしたものである. ここには3つの大きな特徴が見て取れる. 時間原点付近の早い立ち上がり, その後に続くゆっくりとした増加, そして負の時間から続く弱い振動である. まず, 早い立ち上がりとはゆっくりとした増加は, 図5(b)に示したような三準位モデルで説明可能である. すなわち, $G(t)$ の関数形をもつパルスで, 基底状態から FC 状態への励起が起これ, そこから別の状態へ τ の時定数で変化する. また基底状態に対する FC 状態と他の状態での反射率の変化割合をそれぞれ R_1, R_2 とした. このモデルにより, ここでは示していない他の光子エネルギー領域も含めて反射率変

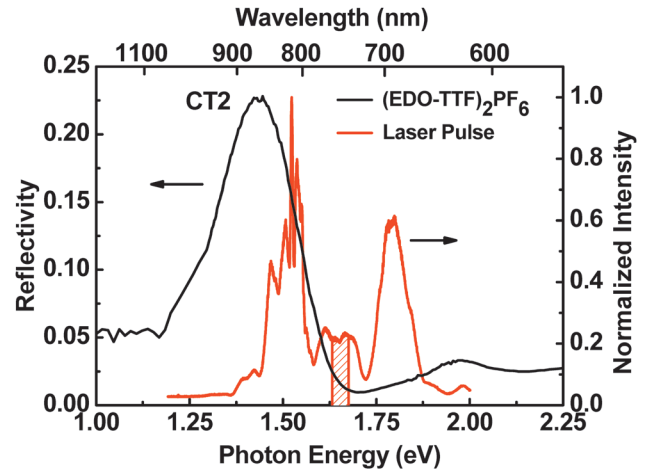


図4 12 fs パルス光のスペクトル (赤線) と (EDO-TTF)₂PF₆ の 180 K における反射率スペクトル (黒線).

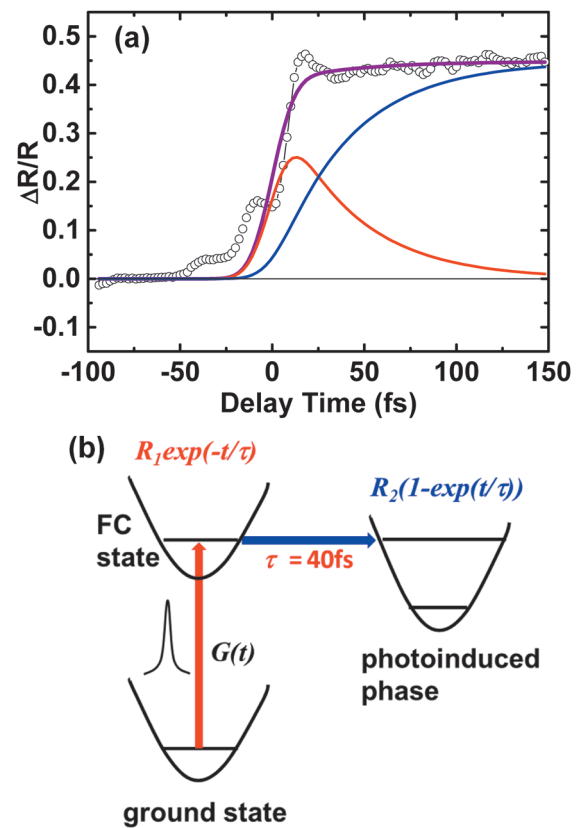


図5 (a) (EDO-TTF)₂PF₆ の低温相を 12 fs パルスで励起した時の 1.65 eV 付近の反射率変化. 赤線, 青線, 紫色線はそれぞれ (b) のモデルに基づきシミュレーションした場合の FC 状態成分, 光誘起相成分の寄与およびそれらの重ね合わせを表す.

化をシミュレーションしたところ, $\tau=40$ fs のとき実験結果を良く再現した. つまり励起直後の FC 状態から他の状態の生成が 40 fs で起こっていると結論づけられる. 後者の状態は, 次章で説明するように光誘起特有の相 (光誘起相) である.

このモデルでは負の時間から続く弱い振動の部分は再現できない. 負の時間の信号というと奇妙に聞こえるかもしれないが, ポンプ・プローブ法における負の時間の信号とは, ポンプ光とプローブ光の順序が入れ替わったもの, す

*1) ポンプ・プローブ法は, ある現象を特徴付ける時定数より十分短いパルス光 (ポンプ光) を用いて現象を誘起し, その後の時間発展を時間差をおいた別のパルス光 (プローブ光) により観測するものである. 2つのパルス間の遅延時間は, 2つの光路に距離差をつけることにより精密に制御できる (光路差 300 nm が 1 fs の時間差に対応). 時間分解能はパルス光の時間幅で決まり, 光検出器の時定数にはよらないのが, この手法の大きな利点である.

なわちプローブ光で励起された状態をポンプ光で観測しているわけである。今回の測定ではポンプ光は光検出器に入らないようにブロックされているので、このようなことが起こるためには、ポンプ光が反射後のプローブ光と同じ方向へ散乱される必要がある。その散乱の起源は、プローブ光で生成された系のコヒーレンスとポンプ光が干渉して生成した過渡的回折格子である。これは2つの光パルスを媒質に照射したときに起こる3次の非線形光学過程であり、位相緩和過程の情報を与える。²⁵⁾ 特にここで得られた負の時間の信号は、光パルスがCT2に共鳴していることからCT2励起状態の電子コヒーレンスの位相緩和が起源と考えられる。一方、一緒に観測される振動は約26 fs周期で起こっており、これは約 $1,300\text{ cm}^{-1}$ の波数に対応する。この辺りの波数は、EDO-TTFの分子内振動の多くに対応することから、分子内振動もコヒーレントに励起されていることを示している。これらを考慮して負の時間の信号を解析することによりFC状態の電子コヒーレンスの緩和定数として22 fsが得られた。このように有機結晶において、純粋にFC状態の電子および振動のコヒーレンスを測った例は、これまでほとんどない。そこで、このコヒーレンスを利用して、光誘起相の生成過程の制御も試みた。^{24, 26)} その結果、2つのポンプパルス光を位相を制御して干渉させることにより、光誘起相の生成が制御できることが示された。このことは光の電場の振動周期(2.7 fs @ 800 nm)で物性を制御できる可能性を示している。

4. 光誘起相の帰属

FC状態から40 fsかかって生成する光誘起相の性質を知るために、まず前章と同じ800 nm付近のスペクトル変化を100 fsのパルスを用いて確認したところ、²⁷⁾ 励起直後に反射率が倍以上変化することを見出した。この変化は、光励起により高温金属相ができたと仮定すると説明できる。さらに反射率変化の励起強度依存性に閾値が見られた(ある程度の光子密度が無いとこのような変化が起こらない)こと、その変換効率(すなわち1光子当たりの変化した分子数)を見積もったところ数十から数百であった*2ことなどから、この変化が複数の分子間の協同的な現象によるものであることが分かった。このような現象は、熱平衡状態で定義される「相」とは厳密には異なるものの、「光誘起相転移」と呼ばれている。

光によって新たに生じたこの「光誘起相」は、本当に高温相と同じものであろうか? 40 fsという短い時間に、本当に熱平衡状態の高温相と同じものができるとあろうか? この疑問に答えるためには、その光誘起相の電子状態を特定しなければならない。通常、原子、分子における電子状態の帰属は吸収スペクトル測定によって行われる。し

*2 光が全く透過しないほど結晶の吸収係数が大きい上、過渡スペクトルにおけるスペクトル強度と分子数との関係が明らかでないために、正確な変換効率の見積もりは難しい。

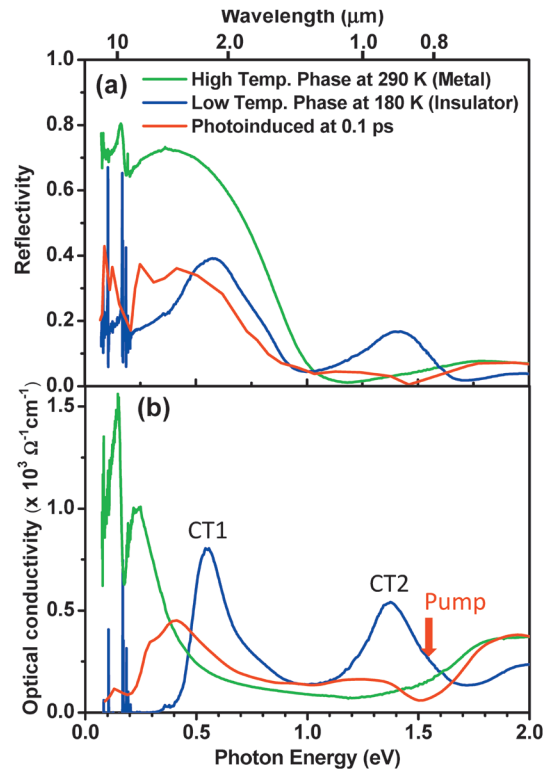


図6 (EDO-TTF)₂PF₆の低温相を光励起したのち0.1 ps後(赤線)および定常状態での低温相180 K(青線)と高温相290 K(緑線)の(a)反射率スペクトルおよび(b)光学的伝導度スペクトル。

かし固体の場合、光が試料を十分透過せず、吸収スペクトルを測定するのが難しい。そこで、反射率スペクトル測定から、クラマース-クロニツヒ変換により間接的に吸収スペクトルを求める方法がしばしば用いられる。²⁸⁾ なお固体の場合は通常、吸収スペクトルの代わりに光学的伝導度(σ)スペクトルを用いる。これは、原子、分子における振動子強度に対応する量であり、吸収係数(α)との関係は $\sigma \propto n\alpha$ (n :屈折率)である。この値は積分値が1となり、また周波数ゼロの極限では直流伝導度に一致するなど、固体の性質を議論するには都合が良い。反射スペクトル測定に用いる広範囲で波長可変なパルス光は、前述のチタンサファイア増幅器から光パラメトリック過程*3を利用して得た。

図6(a)に、電荷移動遷移CT2に対応する800 nmで励起し、異なる波長の光でプローブした光励起100 fs後の反射率スペクトルを示す。²⁹⁾ 同時に熱平衡状態における低温絶縁体相(青線)、高温金属相(緑線)のスペクトルも示した。これらのスペクトルに適切な外挿を施して、クラマース-クロニツヒ変換を行った結果が図6(b)である。一見して分かることは、0.2 eV以下の低エネルギーにおいて、光誘起相の光学的伝導度が大きく下がっていることである。こ

*3 光パラメトリック過程とは、2次の非線形光学過程により光子エネルギーを2つに分ける過程である。光子エネルギー E_0 の光を非線形光学結晶に通すことにより、 $E_0 = E_1 + E_2$ という関係になるように光子エネルギーのより低い、すなわち波長のより長い二種類の光を得ることができる。800 nmの光を β -BaB₂O₄(BBO)結晶に通して得られる光の波長は1.2-1.6 μm と1.6-2.5 μm になる。こうして得た光をさらに非線形光学結晶に通して高調波あるいは差周波を取ることにより、最終的に600 nm-20 μm (2.1-0.06 eV)の光を得た。

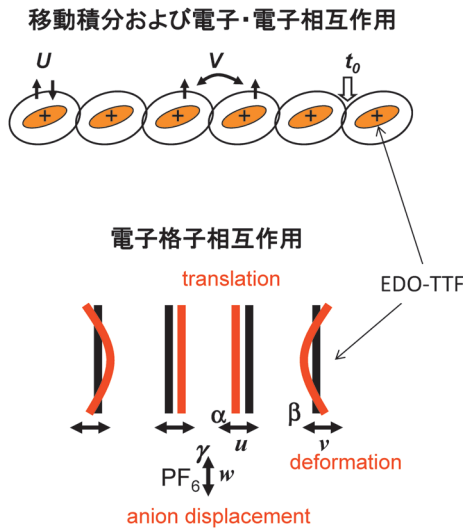


図7 モデル計算で取り入れた相互作用の概念図。

れは、この状態が高温相とは異なり絶縁体的であることを示している。また図6(a)の0.4 eV付近にブロードなピークが一本認められる。このエネルギー付近の吸収は、通常、電荷移動遷移に伴うものであるが、前に説明した低温相のものとは異なる。これらのことから光誘起相は高温相とも低温相とも異なる電荷秩序状態であると考えられる。

この状態をより詳細に知るためにモデル計算によるスペクトルの再現を試みた。基本となるのは、各分子のHOMOから構成される強束縛モデルである。そのハミルトニアンとして、この物質の強い電子格子相互作用を反映させるため、拡張ハバードモデルに電子格子相互作用を導入したパイエルス-ホルスタイン拡張ハバードモデルにさらにいくつかの項を追加したものを用いた。^{29,30} 式(1)がそのハミルトニアンであり、さらに各相互作用を図7に模式的に示した。

$$\begin{aligned}
 H = & -\sum_{j,\sigma} [t_0 - \alpha(u_{j+1} - u_j)] (c_{j,\sigma}^\dagger c_{j+1,\sigma} + \text{h.c.}) \\
 & - \beta \sum_j v_j (n_j - 1/2) + U \sum_j n_{j,\uparrow} n_{j,\downarrow} \\
 & + \frac{1}{2} K_\alpha \sum_j (u_{j+1} - u_j)^2 + \frac{1}{2} K_\beta \sum_j v_j^2 \\
 & + \frac{2K_\alpha}{\omega_\alpha^2} \sum_j \dot{u}_j^2 + \frac{K_\beta}{2\omega_\beta^2} \sum_j \dot{v}_j^2 - \gamma \sum_l w_l (n_{2l-1} + n_{2l} - 1) \\
 & + \frac{1}{2} K_\gamma \sum_l w_l^2 + \frac{K_\gamma}{2\omega_\gamma^2} \sum_l \dot{w}_l^2 + V \sum_j n_j n_{j+1}
 \end{aligned} \quad (1)$$

ここで t_0 が移動積分、 U がオンサイトのクーロン反発、 V が最近接クーロン反発、 α, β, γ がそれぞれ陽イオンの変位、陽イオンの変形、陰イオンの変位に対応する電子格子相互作用である。また $K_\alpha, K_\beta, K_\gamma$ および u_j, v_j, w_l は、図7に示した各サイトにおけるバネ定数および変位や変形を表す。さらに $c_{j,\sigma}^\dagger$ および $c_{j,\sigma}$ はそれぞれスピン σ をもち j サイトにあるホールの生成および消滅演算子、 n は数演算子を表し $n_{j,\sigma} = c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}$ 、 $n_j = n_{j,\uparrow} + n_{j,\downarrow}$ の関係にある。なおここで陰イ

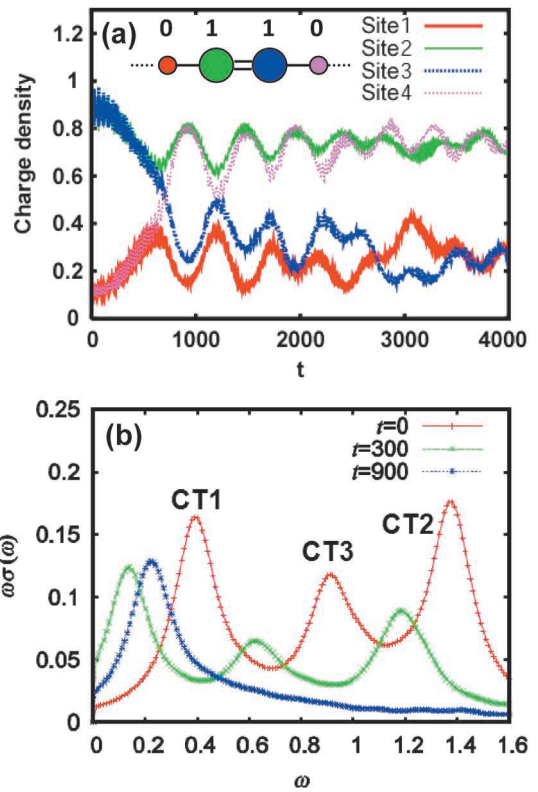


図8 (a) モデル計算により得られた各 EDO-TTF 分子の電荷の時間変化。t は計算で用いた時間のパラメーター、(b) モデル計算により得られた過渡スペクトル。²⁹⁾

オンは結晶構造から2つの陽イオンの間に存在するためそれぞれの陽イオンとの相互作用を考慮に入れている。まず、これらのパラメータをできるだけ実験の低温相スペクトルの形を再現するように決定した。

さらに、光励起として短時間だけ続く振動電場を導入した後の時間発展を、時間依存するシュレディンガー方程式を解くことにより求めた。その結果をまとめたものが図8である。ここで図8(a)は、時間と共に各 EDO-TTF 分子上の電荷がどのように変化するかを示したものである。ただし横軸の時間は実時間とは異なる。この結果をみると、 $t=0$ で振動電場を導入した後、 $t=700$ ぐらいで突然電荷の並びが変わることが分かる。近似的に表すと、始めに $(0, 1, 1, 0)$ であったものが $(0, 1, 0, 1)$ に変化していることになる。さらに、この変化をスペクトルの形で表したものが図8(b)である。 $t=0$ で3つあるバンドが、 $t=900$ では低エネルギー側に1つだけに変化しているのが分かる。この3つの電荷移動バンドが1つに変化するスペクトル変化は図6の実験結果を良く再現していることから、生成した光誘起相は電荷秩序が $(0, 1, 0, 1)$ のように変わったものであると結論づけた。ただし、その秩序は短距離であると思われる。電荷分布、構造共に揺らいだ状態であると考えている。またこの時間的振る舞い、すなわち電子状態や分子振動のコヒーレンスを保ったまましばらく経過してから電荷秩序の入れ替わりが起る様子は、前章で示した40 fs かけて光誘起相が生成する過程も良く再現している。

5. より遅い過程の観測, 電荷秩序の融解

このように光励起後100 fs前後に生じた光誘起相は、熱平衡状態では現れない光誘起特有の状態であることが分かった。しかし十分時間が経ったあとには元の低温絶縁体相に戻るはずである。その間に起こる過程はどのようなものであろうか？ 図9に示すように反射率変化は、励起直後の大きな変化の後、0.5 ps周期の振動を伴って3 ps程度で緩和している。^{31,32)} この0.5 ps周期は、波数に直すと66 cm^{-1} に対応しており、これはEDO-TTF分子間の振動と考えられる。しかし3 ps以降も変化はゼロとはならず、1,000 ps経っても元の低温相へは戻っていないことが分かる。³²⁾ この長時間の変化は、強度が弱いだけでなく、固体中を伝搬する衝撃波と思われる不規則な振動を伴っているため、光誘起相と同様のスペクトル解析は困難であった。そこでさらに別の観点から光誘起状態変化を観測するために、時間分解振動スペクトル測定を行った。³²⁾

図10(a)は、これまでと同様、低温絶縁体相の電荷移動遷移CT2を励起した後、1 ps, 20 ps, 300 psで測定した、赤外域(1,300-1,700 cm^{-1})の反射率変化スペクトルである。この波数領域にはEDO-TTF分子のような π 共役分子のC=C伸縮振動が存在し、これまでEDO-TTFをはじめ多くの電荷移動錯体の電荷分布や構造変化の指標として使われてきた。^{21,33,34)} 同じ図に、熱平衡状態の低温絶縁体相(黒線)、高温金属相(緑線)の反射スペクトルも示した。なおこの測定では光の偏光方向を1次元伝導方向と垂直にしているため、高温相においても反射率の大きな増大は観測されていない。

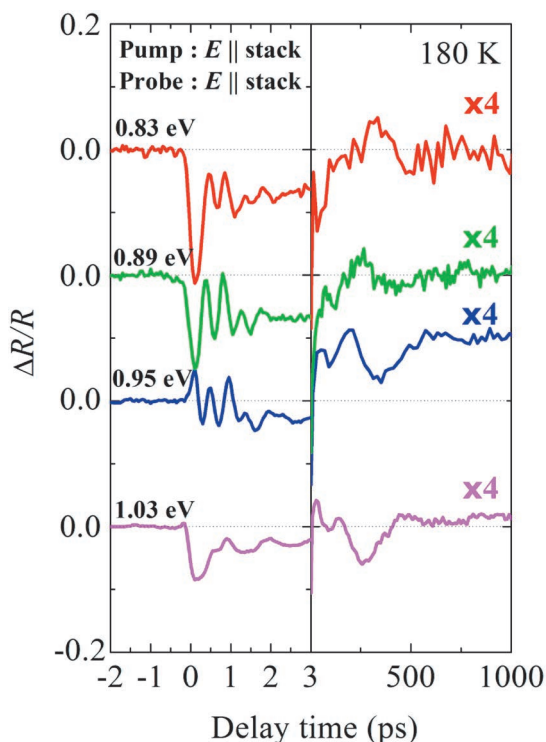


図9 (EDO-TTF)₂PF₆の低温相を光励起した後の反射率変化の時間依存、各エネルギーはプローブ光の光子エネルギーを表す。³²⁾

光励起1 ps後の反射率変化スペクトルをみると、低温相のピーク位置において反射率が鋭く減少しているのが分かる。これは、光励起により低温相が失われたことを示している。それと同時に反射率が全体的に増えており、これは電気伝導方向に対して垂直方向へキャリアが生成した可能性や電荷や構造の揺らぎによる各振動ピークのブロードニングが考えられる。次に20 ps後では、依然として鋭い反射率の減少は続いているものの全体的な反射率の増大が収まっている。これは、基底状態への緩和はまだ起こっていないものの、この波数領域に明確なピークを与えるような振動構造が無いことを示している。最後に300 psになると1,570 cm^{-1} 付近に新たなピークが出現している。この波数は高温金属相のピークと一致していることから、高温相的な状態がこの時間スケールで現れたと解釈できる。そこで、この波数における反射率変化の時間依存を測定した(図10(b))。その結果、励起直後に反射率が大きく増大した後、すぐに減少し、その後ゆっくりと100 psほどかかってまた増大することが分かった。このことは、高温相的な状態の生成に100 psかかっていることを意味している。

以上の結果を元に、光誘起相生成以降のダイナミクスをまとめたのが図11である。電荷が局在化して整列した低温相に光を当てると、その40 fs後には別の電荷秩序をも

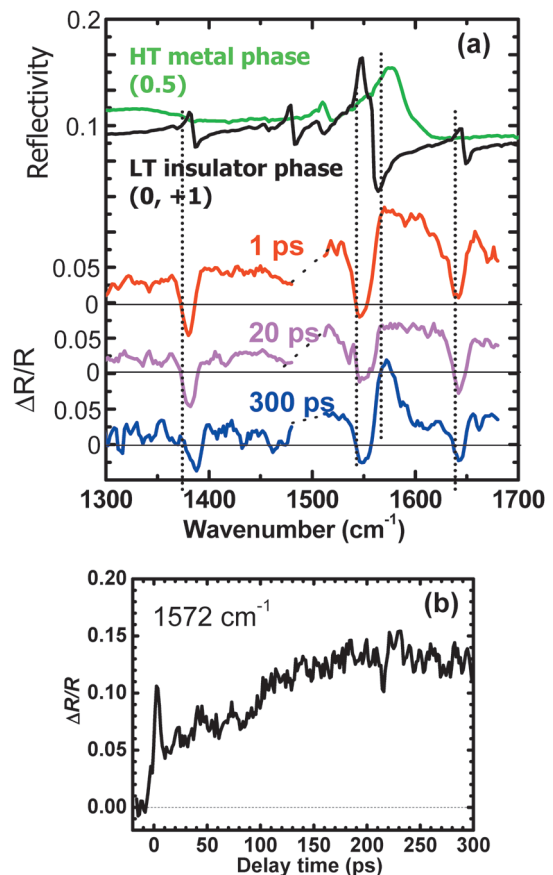


図10 (a) (EDO-TTF)₂PF₆の低温相を光励起した後1 ps, 20 ps, 300 psにおける分子振動領域の反射率変化、および低温相180 K(黒線)、高温相290 K(緑線)における反射率スペクトル、(b) 高温相で顕著なピークが存在する1,572 cm^{-1} における反射率の時間変化。

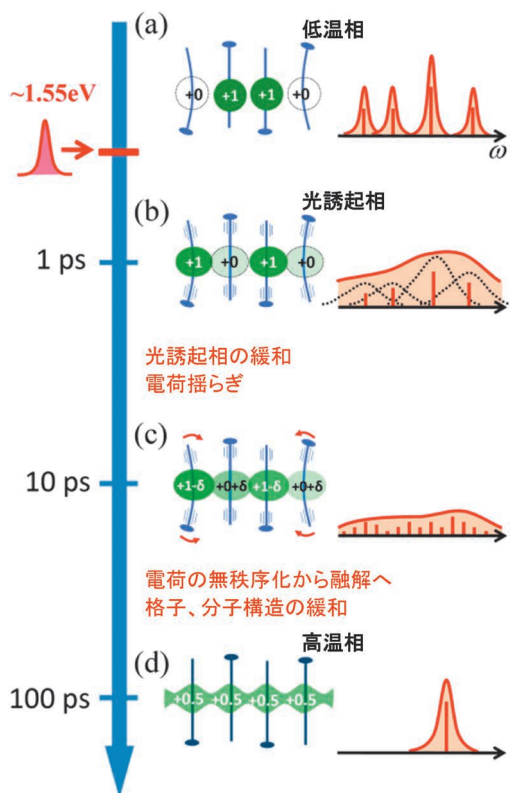


図11 時間分解振動分光の結果から推定される(EDO-TTF)₂PF₆の光誘起ダイナミクス。中央は光励起後の各時間スケールにおける電荷の配置を、右は対応する赤外域反射スペクトルの形を模式的に示す。³²⁾

つ光誘起相が生成される。その状態の電荷や構造は揺らいでおり、そのため伝導方向とは垂直な方向にブロードな反射率の増大が観測される。その後、電荷や構造の揺らぎがより大きくなるとさらにスペクトルが広がり、この領域の反射率が全体的に小さくなる。しかし、完全に電荷が均一化した状態は、電荷秩序が溶けた高温金属相と同じであるため、最終的には、高温相と同じ位置にピークが現れる。この変化に100 psほどかかる。

一般に固体の光励起状態は多くの電子状態・振動状態と相互作用するため緩和が速く、ここで得られた100 psという時間スケールはかなり遅い部類に入る。しかし、我々は他の電荷移動錯体でも100 ps程度の遅い変化を観測しており、^{18, 35)}このような系では普遍的な現象であると考えられる。それでは、この現象の起源はなんであろうか？ 詳細なメカニズムについてはまだ分かっていないものの、これまでの研究から、構造変化を起こすときに分子間の立体障害が大きい結晶でこのような遅い現象が観測されることが判明している。¹⁸⁾ また次章の結晶構造変化の直接観測では、同一結晶内における個々の分子の動きにも同様に100 ps程度という遅い動きをするものもあり、今後、詳細な研究が必要とされる。

6. 結晶構造変化の直接観測

ここまでは光をプローブとした分光法を用いて、励起直後のFC状態から電荷秩序が溶けて高温金属相的状态が現

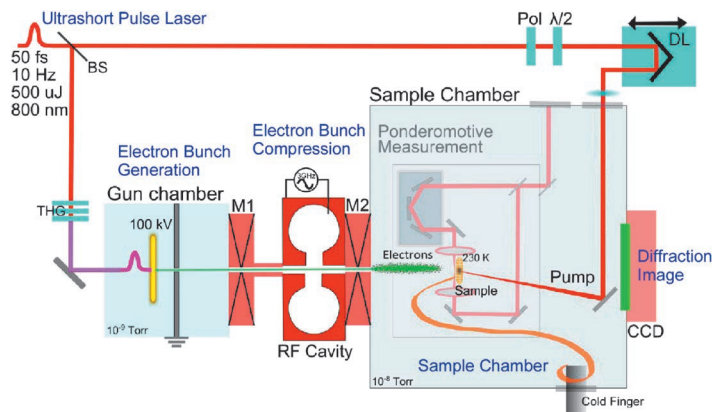


図12 時間分解電子線回折装置の概略図。BS: ビームスプリッター, THG: 非線形光学結晶, λ/2: 1/2波長板, Pol: 偏光子, M1, M2: 磁気レンズ。³⁷⁾

れるまでの様子を見てきた。しかしこの方法では構成原子の実空間での配列の仕方、すなわち結晶構造は分からない。定常状態で結晶構造を直接知る方法としては、X線などを用いた回折法が広く使われている。回折測定を時間分解で行えば結晶構造が時々刻々と変化する様子、すなわち分子動画が撮れるはずである。このような試みの1つとして、時間幅の非常に短い電子パルス(バンチ)を用いた時間分解電子線回折測定があげられる。このような電子バンチは、金などの金属箔に光電子放出エネルギー(仕事関数)をわずかに超える光子エネルギーをもつ超短パルス光を照射することにより発生できる。すなわち100 fsの光パルスを用いれば、100 fsの電子バンチが生成する。しかし電子バンチは、発生直後から電子同士のクーロン反発により空間的にも時間的にも広がるため、実際の測定には様々な工夫が必要となる。³⁶⁾

図12は、我々の試料の測定で用いた時間分解電子線回折装置の概略図である。³⁷⁾ チタンサファイア増幅器の出力(50 fs, 800 nm, 500 μJ/pulse, 1 kHz)を2つに分け、一方を試料の励起に用い、他方を非線形光学結晶を用いて266 nmに波長変換し、この紫外光パルスを通した厚さ20 nmの金の薄膜に照射することにより電子バンチを発生させる。この電子バンチをRFキャビティにより圧縮する。RFキャビティの役割は、電子バンチ到達と同期させた高周波電場により、先へ進んだ電子を押し戻し遅れた電子を押し出すことにより、電子バンチの時間幅を短くすることである。試料は電子線が透過できるように100 nmの厚みにスライスしたものを、帯電を防ぐため銅のメッシュの上に貼り付けた。試料を透過して散乱してきた電子の回折パターンはCCDカメラで観測した。このシステムの時間分解能は400 fsと見積もられる。

図13はこの装置を用いて測定した定常状態の回折像である。左側が低温絶縁体相、右側が高温金属相である。これらを、すでにX線構造解析により分かっている構造を元にシミュレーションをしたところ良い一致を示した。次に図14(a)は、低温相の結晶に光をあてた後の回折像の時

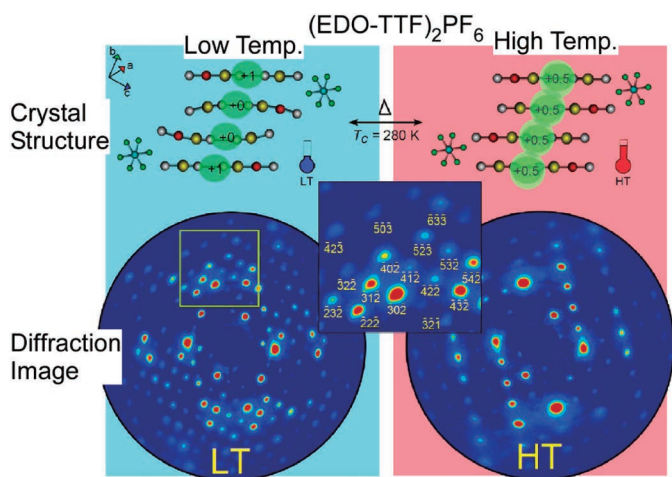


図13 時間分解電子線回折装置によって得られた(EDO-TTF)₂PF₆低温相、高温相の回折像および構造の概略図。³⁷⁾

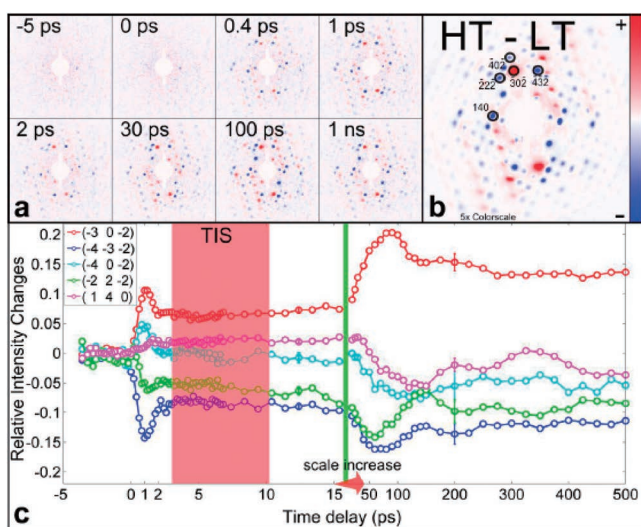


図14 (a) (EDO-TTF)₂PF₆の低温相を光励起した後の回折像の励起前からの相対変化。(b) 低温相から高温相に変化したときの回折像の相対変化。(c) 各回折点の強度変化の時間依存。³⁷⁾

間変化を、照射前の回折像との差分で表したものである。これらを見ると光励起と共に大きな変化をしていることが分かる。さらに図14(c)は、いくつかの回折点における強度の時間変化を示したものである。全ての点は励起直後に大きく強度が変化した後、1 ps程度で途中まで変化が緩和する。さらにゆっくりと100 ps近くかかって再び変化が増大している。このことは、横軸のスケールが途中で変わるので分かりづらいが、5章の時間分解振動分光における金属相のピークの強度変化(図10(b))と非常によく似ている。このことは、この回折点強度変化が、振動分光で得られたものと同じ光誘起ダイナミクスを反映していることを示している。

しかしながら電子線回折で得られる回折点の数は少なく、それだけで各時間における結晶構造を決めることはできない。そこで、光誘起による構造変化が低温相から高温相へ向かうと仮定し、低温相結晶中の3つの異なる分子それぞれに反応座標を定義した。すなわち+1個のEDO-TTFの

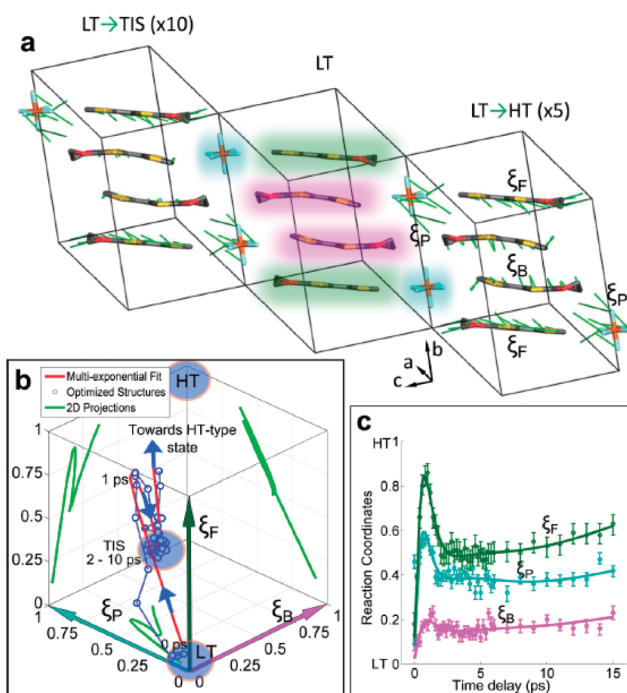


図15 (a) 回折像から得られた構造変化。各直線は低温相(LT)から光誘起相(TIS)または高温相(HT)への各原子変位を示す。(b) +1個のEDO-TTF、0個のEDO-TTF、PF₆の変位をそれぞれ反応座標 ξ_F 、 ξ_B 、 ξ_P で表したときの構造変化。(c) それぞれの反応座標方向の時間変化。³⁷⁾

変位を ξ_F 、0個のEDO-TTFの変位を ξ_B 、PF₆の変位を ξ_P とした。その結果再現された結晶構造変化が図15である。図15(a)は中央の低温相の構造からの各原子の変位を緑線で表したもので、右側が高温相への変化、左側が光励起後3-10 ps (TIS)における変化を表す。図15(b)は構造変化を3つの反応座標を軸としてプロットしたもので、図15(c)はそれぞれの反応座標方向の時間変化を示したものである。図15(a)の構造図から、TISにおける変位がおもに1個のEDO-TTFとPF₆に起こっており、0個のEDO-TTFはほとんど変化していないことが分かる。また図15(b)、(c)のグラフからは、このような変化が1 psでより顕著に起こっていることが分かる。一方、TIS以降は全ての分子がゆっくりと高温相的な構造へと変化している。その時間スケールは図14(c)のグラフから100 ps程度と見積もられる。

このような構造変化を前章までの分光による結果と比較すると、まず、光誘起相に対応する時間で見られる構造変化は、+1個の平らなEDO-TTF分子とPF₆が大きく高温相の方向に移動するが、0個の曲がった分子は動いていない。この並びは分光的に同定された(0, 1, 0, 1)的な並びとは異なるが、この時間領域では電子の動きに核の動きが十分追従していなくてもおかしくはない。逆にこの動きにくい分子の存在が、光誘起特有の相の形成に関与しているとも考えられる。また平らな分子が最初に大きく動くことは、光誘起相生成後、反射率変化において波数66 cm⁻¹の分子間振動(図9)が誘起されていることを説明できる。さらに100 psかかる遅い構造変化は、振動スペクトル変化と良く一致している。この遅い構造変化は曲がった分子の平坦化

であり、分子が形を変えるとときに周りの分子との立体的な接触が起きる場合には阻害される可能性がある。現段階で、著者らは実際にそのような立体障害が起きたと考えている。いずれにせよこのことが(EDO-TTF)₂PF₆におけるユニークな2段階の光誘起ダイナミクスを決定づけているといえる。

7. まとめ

電子相関、電子格子相互作用の強い電荷移動錯体(EDO-TTF)₂PF₆における光誘起ダイナミクスを、過渡電子スペクトル測定、時間分解振動スペクトル測定、時間分解電子線回折測定という異なる超高速分析手段を用いて観測した。その結果、低温の電荷秩序状態を光励起することにより、熱平衡状態では見られない光誘起独特の相が40 fsで形成され、その後100 psかかって電荷秩序が溶けた金属相的な状態が生成する過程が明らかになった。このように強相関物質における非平衡状態では、協同現象に基づき様々な状態が超高速で生成、消滅していることが分かってきた。これらを理解し、うまく利用できれば、電気伝導や磁性などマクロな物性を、従来にない速さで制御できるようになると考えられる。また強い電子格子相互作用をもつ系では結晶構造変化も超高速で生じている。このことは機械的な動きも超高速で制御できる可能性を示している。一方、光エネルギー利用の観点からも、新たに協同現象を利用した高効率な光エネルギー変換系を構築できる可能性が考えられる。しかしながら最初に述べたように非平衡状態の扱いは、依然として実験的にも理論的にも難しく、ここで紹介したような様々な手法を発展させることによりこの困難を克服する必要がある。

最後にこの研究は筆者らが長年にわたり多くの共同研究者と共に進めたものである。その全ての方々へ感謝いたします。特に石川忠彦氏、沖本洋一氏、米満賢治氏、前島展也氏、斎藤軍治氏、邵向鋒氏、中野義明氏には研究全般にわたり協力していただき改めて感謝の意を表します。またここで紹介した時間分解電子線回折の測定はカナダ・トロント大R. J. Dwayne-Miller氏のグループによって行われたものであります。合わせてここに感謝いたします。

参考文献

- 1) 恩田 健: 分光研究 **62** (2013) 213.
- 2) 鹿見鳥誠一編著: 『物性科学選書: 低次元導体(改訂改題)』(裳華房, 2000).
- 3) 森 健彦: 『分子エレクトロニクスの基礎』(化学同人, 2013).
- 4) T. Mori: Bull. Chem. Soc. Jpn. **71** (1998) 2509.
- 5) T. Mori: Bull. Chem. Soc. Jpn. **72** (1999) 179.
- 6) H. Seo, *et al.*: Chem. Rev. **104** (2004) 5005.

- 7) S. Koshihara, *et al.*: Phys. Rev. B **44** (1990) 6853.
- 8) S. Iwai, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **88** (2002) 057402.
- 9) K. Tanimura: Phys. Rev. B **70** (2004) 144112.
- 10) H. Okamoto, *et al.*: Phys. Rev. B **70** (2004) 165202.
- 11) H. Okamoto, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **96** (2006) 037405.
- 12) H. Okamoto, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **98** (2007) 037401.
- 13) S. Wall, *et al.*: Nat. Phys. **7** (2011) 114.
- 14) N. Tajima, *et al.*: J. Phys. Soc. Jpn. **74** (2005) 511.
- 15) S. Iwai, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **98** (2007) 097402.
- 16) S. Iwai: J. Lumi. **131** (2011) 409.
- 17) T. Ishikawa, *et al.*: Phys. Rev. B **80** (2009) 115108.
- 18) N. Fukazawa, *et al.*: J. Phys. Chem. C **117** (2013) 074721.
- 19) A. Ota, *et al.*: J. Mater. Chem. **12** (2002) 2600.
- 20) O. Drozdova, *et al.*: Synthetic Metals **133-134** (2003) 227.
- 21) O. Drozdova, *et al.*: Phys. Rev. B **70** (2004) 075107.
- 22) M. Nisoli, *et al.*: Appl. Phys. Lett. **68** (1996) 2793.
- 23) J. Herrmann and B. Wilhelmi 著, 小林孝壽訳: 『超短光パルスレーザー』(共立出版, 1991).
- 24) Y. Matsubara, *et al.*: Phys. Rev. B **89** (2014) 161102(R).
- 25) T. Yajima and Y. Taira: J. Phys. Soc. Jpn. **47** (1979) 1620.
- 26) K. Onda, *et al.*: J. Phys. Conf. Ser. **148** (2009) 012002.
- 27) M. Chollet, *et al.*: Science **307** (2005) 86.
- 28) 井戸立身, 内田慎一: 日本物理学会誌 **47** (1992) 212.
- 29) K. Onda, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **101** (2008) 067403.
- 30) K. Yonemitsu and N. Maeshima: Phys. Rev. B **76** (2007) 075105.
- 31) K. Onda, *et al.*: J. Phys. Condens. Matter **20** (2008) 224018.
- 32) N. Fukazawa, *et al.*: J. Phys. Chem. C **116** (2012) 340.
- 33) T. Yamamoto, *et al.*: J. Phys. Chem. B **109** (2005) 15226.
- 34) T. Yamamoto, *et al.*: J. Phys. Soc. Jpn. **80** (2011) 074717.
- 35) Y. Matsubara, *et al.*: Acta Phys. Polonica A **121** (2012) 340.
- 36) G. Sciaini and R. J. D. Miller: Rep. Prog. Phys. **74** (2011) 096101.
- 37) M. Gao, *et al.*: Nature **496** (2013) 343.

著者紹介

恩田 健氏: 専門は物理化学。物質がいかに化けるのかに興味をもって研究を行っています。

腰原伸也氏: 専門は光物性、光誘起相転移。固体中の光誘起協同現象を様々な手法の組み合わせで追及している。

矢持秀起氏: 分子性物質の開拓と解析。分子やその集合体を創り、研究仲間と共に構造や電子物性を理解する事が楽しい。

(2013年12月19日原稿受付)

A Variety of Dynamics in Organic Crystals Having Strong Electron-Lattice Interaction

Ken Onda, Shin-ya Koshihara and Hideki Yamochi

abstract: We studied photoinduced dynamics in an organic crystal (EDO-TTF)₂PF₆, which has strong electron-electron and electron-lattice interactions, by applying four types of ultrafast techniques. Using 10 fs reflectivity change measurement, we found that a new state emerges over 40 fs. The optical conductivity spectrum at 100 fs from mid-infrared to visible light revealed this state to be a photoinduced phase which has never seen in thermal equilibrium. The crystal and molecular structural changes over 100 ps were studied using picosecond infrared vibrational spectroscopy and femtosecond electron diffraction and it is figured out that molecular deformation is much slower than its translation.

エンタングルメント・エントロピーと共形場理論

古川 俊輔 〈東京大学大学院理学系研究科〉

白石 潤一 〈東京大学大学院数理科学研究科〉

多体系の量子状態が個々の自由度の単純な直積状態としては表せないとき、エンタングルメント（絡み合い）構造が存在しているという。このような構造は量子情報科学において古典的方法を超えた計算・通信手段に欠かせないものとして注目され、その分類・定量化が研究されている。近年、エンタングルメントの概念が従来の枠を超え、物性物理学にも応用されるようになった。特に、基底状態のエンタングルメントを定量的に評価することで、量子臨界点やトポロジカル秩序相の属する普遍性クラスに関する情報が得られることが明らかになってきた。

多体状態のエンタングルメントの便利な尺度の一つがエンタングルメント・エントロピー（Entanglement Entropy; EE）である。EEは系の部分領域とそれ以外の領域との間のエンタングルメントを測る指標であり、大まかには領域間の量子的相関の強さを表す。領域の大きさを変えるとき、EEがどのようなスケール則に従うかを見ることで、系を特徴づける重要な情報を得ることができる。例えば、一次元量子臨界系においては、一次元鎖中の一区間とそれ以外の領域との間のEEの示すスケール則から、背後の共形場理論のセントラル・チャージ c （ギャップレス・モードの数の指標）を求めることができる。これは実際に数値解析で臨界点の c を評価する方法として応用されている。また、トポロジカル秩序相においては、背後のゲージ理論を反映した普遍的定数項がEEに現れる。EEは系を構成する個々の自由度でなく領域に着目することで、長距離スケールを支配する場の理論の情報にアクセスできるところにその特徴があると言える。

一般に一次元量子臨界系を記述する共形場理論はセントラル・チャージ c だけでは単一に定まらないことが知られる。例えば、一次元量子系に広く現れる朝永・Luttinger流体（TLL）は連続的な臨界相を形成し、その中では c は整数値に固定されるが、いわゆるTLLパラメータが連続的に変化する。TLLパラメータは相関関数や応答関数の冪振る舞いを決める重要なパラメータである。では、EEやその他の指標を用いて、このような共形場理論のより詳細な情報を引き出すことができるだろうか。

最近の研究により、系の中の離れた二区間でのEEが背後の共形場理論についてセントラル・チャージ c 以上の情報を含んでいることが明らかになった。特に一成分TLLにおいては、一区間と二区間のEEの線形結合を取って得られる相互情報量が、系の詳細によらず、TLLパラメータ K のみによって定まる普遍的なスケール則に従うことが示された。従来、 K を数値的に決定する際には、相関関数を数値計算と場の理論で比較するなどの方法が用いられてきたが、それにはミクロな自由度と場の演算子の対応関係の知識が必要であった。相互情報量は、そのような知識を要することなく、基底状態から直に K に関する情報を引き出せる点が新しい。現在、この結果の他の共形場理論への拡張やAdS/CFTとの関連も議論され、EEと共形場理論の関係に新たな関心が寄せられている。

—Keywords—

量子臨界現象：

量子多体系が絶対零度において示す連続相転移現象。ハミルトニアンのパラメータを操作することで起こる。量子臨界点では相関長が発散し、冪的になだらかに減衰する相関が現れる。また、エネルギー・ギャップが閉じ、ギャップレスな励起が存在する。このような状態が有限区間の相をなすこともあり、臨界相と呼ぶ。

共形場理論：

スケール変換の概念を拡張し、スケール因子が位置に依存して変化するような変換を考慮することができる。これは数学的には等角写像（共形変換）として表現される。共形変換に対し不変な場の理論が共形場理論である。特に1+1次元時空においては、共形変換は無次元の代数をなし、理論に強い制約を与える。一次元量子臨界系は共形場理論を用いて系統的に記述される。

朝永・ラッティンジャー流体：

（主にU(1)対称性を持った）相互作用する一次元量子多体系の低エネルギーの振る舞いに広く現れる臨界的状態。連続的な臨界相を形成し、その中では相関関数などに現れる冪が連続的に変化する。系の構成粒子がフェルミオンであるかボソンであるかに関わらず、ボソン化の手続きを通して自由ボソン場の理論（共形場理論の一つ）で有効的に記述される。

1. はじめに

近年、量子多体系の研究において、量子エンタングルメントの概念が盛んに応用されている。その中で中心的な役割を果たしているのが、エンタングルメント・エントロピー (EE) である。EE は系の部分領域 A とそれ以外の領域 B との間のエンタングルメントを測る指標である。EE を用いて系の中の非自明な相関を検出することで、量子臨界点やトポロジカル秩序相の属する普遍性クラスの情報が得られることが明らかになってきた。また、密度行列くりこみ群などの数値計算手法が EE のスケージングの観点から見直され、新しいアルゴリズムの開発が行われている。

EE が最も美しい形で応用されたのは一次元量子臨界系である。一次元量子臨界系は、局所スケール不変性 (共形不変性) を持つ理論である共形場理論によって系統的に記述できることが知られる。¹⁾ 一次元鎖中の一区間における EE から、共形場理論を特徴づける重要なパラメータであるセントラル・チャージ c を決定できることが明らかになり、²⁻⁵⁾ EE が量子多体系分野で注目されるきっかけとなった。

一般に、 $1+1$ 次元の共形場理論は c だけでは単一に定まらないことが知られる。近年の研究により、系の中の離れた二区間での EE に、共形場理論の c 以上のより詳細な情報が含まれることが明らかになった。⁵⁾ 当初、このような結果は $c=1$ の朝永・Luttinger 流体 (TLL) において得られたが、^{6,7)} 他の共形場理論に対しても計算が行われており、新しい研究の広がりを見せている。

本稿では、多体系の EE についての基礎知識から始め、一次元量子臨界系における EE と共形場理論の関係、特に二区間 EE についての最近の研究の進展を解説する。

2. エンタングルメント・エントロピー (EE)

系を領域 A と B に分ける。これらの間の EE を定義するには、まず領域 B の自由度に関し、全系の密度行列 $|\Psi\rangle\langle\Psi|$ の部分トレースをとり、領域 A の自由度についての縮約密度行列 $\rho_A = \text{Tr}_B |\Psi\rangle\langle\Psi|$ を作る。EE はそのフォン・ノイマン・エントロピーとして定義される⁸⁾：

$$S_A = -\text{Tr}(\rho_A \ln \rho_A) = -\sum_i p_i \ln p_i. \quad (1)$$

ここで、最右辺は ρ_A の固有値 $\{p_i\}$ を使った表現である。全系の状態が直積状態 $|\Psi_A\rangle \otimes |\Psi_B\rangle$ のときには、縮約密度行列は $\rho_A = |\Psi_A\rangle\langle\Psi_A|$ と純粋状態になり、 $S_A=0$ である。全系の状態が直積状態でなければ、 ρ_A は混合状態となり S_A は有限になる。このように、EE は部分系の縮約密度行列がどれくらい混合されたものになっているかで、エンタングルメントを定量化したものと言える。

EE は大まかには領域間の量子的相関の強さを表す。系が短距離相関のみを持つ場合には、領域間の相関は境界付近を通してのみ起こる。このとき、EE は境界付近の相関を集めた結果、境界のサイズに比例して増加することが知

られる。⁹⁾ 三次元空間では EE が領域の二次元的境界の面積に比例することになるため、これは面積則と呼ばれる。この呼び方はしばしば他の次元でも使われるが、一般次元でも誤解のないよう、ここでは境界則と呼ぶことにしよう。もし与えられた多体状態の EE が境界則から何らかのずれを示すとしたら、系には短距離相関のみでは捉えられない特別な相関が存在していることになる。実際、境界則の破れや境界則への付加的項の中に、臨界系やトポロジカル秩序相を特徴づける情報が現れることが明らかになってきた。

3. 一次元量子系への応用

EE と系の属する普遍性クラスとの関係が最も端的に現れるのは一次元量子臨界系である。無限鎖中の一区間 $A = [x_1, x_2]$ に着目する。共形場理論を用いた計算のもと、EE は

$$S_A = \frac{c}{3} \ln \frac{x_{21}}{a} \quad (2)$$

というスケージング則に従うことが示された。^{2,4)} ここで $x_{ij} = x_i - x_j$ であり、 a は短距離でのカットオフである。

一方、臨界点から離れると (ギャップ相)、系は有限の相関長 ξ を持つようになる。このとき EE は境界則に従うと期待されるが、この場合は境界は二点のみであるため、EE は定数値をとる。³⁾ 実際には、区間の長さ x_{21} が相関長 ξ より十分短い間は EE は臨界点同様に振る舞い、 x_{21} が ξ より長くなると定数値に漸近していくため、

$$S_A \rightarrow \frac{c}{3} \ln \frac{\xi}{a} \quad (x_{21} \rightarrow \infty) \quad (3)$$

と振る舞う。⁴⁾

一次元量子系ではこのように EE が $x_{21} \rightarrow \infty$ で発散するかどうかで臨界点とギャップ相が区別され、臨界点では対数的増加の係数からセントラル・チャージ c を読み出すことができる。以上の議論は無限鎖の系について行なったが、全系が長さ L のリングの場合でも、 x_{21} をリング上の二点間の弦距離 $(L/\pi) \sin(\pi x_{21}/L)$ に置き換えることで同様の式が成立する。⁴⁾ 式(2)は共形不変性のみを用いて導かれた式であり、系が共形場理論に従う限り厳密な式である。一方、共形場理論はセントラル・チャージ c だけでは単一に指定されないことが知られる。では、EE または他の指標を用いて共形場理論のより詳細な情報を得ることはできるだろうか。答えは非常に単純で、これから議論するように系の中の一区間でなく二区間での EE に c 以上の情報が含まれている。

4. 二区間の相互情報量

無限鎖中の離れた二区間 $A_1 = [x_1, x_2]$ と $A_2 = [x_3, x_4]$ を考える。このとき、和領域 $A_1 \cup A_2$ とそれ以外の領域の間で式(1)に従い EE を定義することができる。この二区間 EE そのもので議論を続けても良いが、ここでは一区間 EE との線形結合を取って定義される相互情報量

$$I_{A_1:A_2} = S_{A_1} + S_{A_2} - S_{A_1 \cup A_2} \quad (4)$$

を考える。この量は一般に非負の値を取り、和領域の密度行列が個々の領域の密度行列の直積で表わされるとき ($\rho_{A_1 \cup A_2} = \rho_{A_1} \otimes \rho_{A_2}$) のみ零となる。この量は二領域間の (量子・古典的寄与両方を含んだ) 相関の強さを定量化したもとのとして解釈される。

一次元量子臨界系での二区間 EE について、Calabrese と Cardy は 2004 年の論文⁴⁾で、

$$S_{A_1 \cup A_2} = \frac{c}{3} \ln \left(\frac{x_{21} x_{32} x_{43} x_{41}}{x_{31} x_{42} a^2} \right) \quad (5)$$

というスケールリング則が成り立つことを提案した。式(2)よりは複雑になったが、カットオフ a を除いて c のみで定まるシンプルな式である。後で述べるようにこの式は特殊な場合でしか成立しないことが後にわかったが、まずこの式で相互情報量を計算してみると、

$$I_{A_1:A_2}^R = \frac{c}{3} \ln \left(\frac{x_{31} x_{42}}{x_{32} x_{41}} \right) \quad (6)$$

が得られる。この式は後の議論の参照点 (reference) となるため、 R の添え字をつけた。式(5)と比べ、カットオフ依存性が消え、普遍的性質をより捉えやすい表現となった。この式はスケール変換のもと不変であり、二領域の長さとその間の距離の比のみで値が定まる。

ここで相互情報量が二領域間の相関の強さを表すという解釈との整合性を見てみよう。一般に臨界系では局所的物理量の相関関数は長距離で冪的に減衰する。式(6)において、二領域の長さ x_{21}, x_{43} を固定したまま (局所性を保ったまま)、その間の距離 x_{32} を離すとき、 $I_{A_1:A_2}^R$ は零へと減衰していくことが確認でき、領域間の全ての相関関数が減衰することと符合する。一方、二領域の長さとその間の距離を互いの比を一定に保ったまま大きくするときには、 $I_{A_1:A_2}^R$ は有限のままとどまる。境界則が成り立つ系では同じ極限で $I_{A_1:A_2}^R$ は零に収束することと比較すると、これは臨界系特有の準長距離相関の現れと解釈できる。

このように式(6)は量子臨界系の相関の特徴を捉えたシンプルでわかりやすい表現を与えている。しかしながら、6章で述べるように文献4での二区間 EE に関する式(5)の導出には実は誤りがあった (文献4は式(2), (3)の導出を始め、1+1次元場の理論での EE に関する基礎的定式化を与えた論文であり、一つの誤りだけでその価値は損なわれないことをコメントする)。2008年、古川は量子スピン鎖で EE を数値的に研究する中で、臨界相での相互情報量が式(6)からずれていることを偶然発見した。文献4の議論に再考が必要ながわたり、数理物理を専門とする白石、V. Pasquier 氏に相談を持ちかけ、共同研究が始まった。⁶⁾

5. 相互情報量の数値計算結果

我々が数値計算で取り扱ったのは、磁場中のスピン 1/2 反強磁性 XXZ 鎖である。そのハミルトニアンは

$$H = \sum_{j=1}^L (S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y + \Delta S_j^z S_{j+1}^z) - h \sum_{j=1}^L S_j^z \quad (7)$$

と与えられる。ここで (S_j^x, S_j^y, S_j^z) はサイト j におけるスピン 1/2 演算子である。この模型は絶対零度において連続的な臨界相を形成し、その長距離スケールの振る舞いは一成分朝永・ラッティンジャー流体 (TLL) 理論によって記述されることが知られる。^{1,10)} 一成分 TLL 理論は $c=1$ の共形場理論の一つであり、二つのパラメータ v と K によって特徴づけられる。 v は速度と呼ばれ、エネルギー・スケールを与えるパラメータである。 K は TLL パラメータと呼ばれ、相関関数や応答関数の冪的振る舞いを決める重要なパラメータである。例えば、式(7)の XXZ 鎖模型の臨界相では、スピン相関関数は $\eta = 1/(2K)$ として、

$$\langle S_j^x S_{j+r}^x \rangle \sim (-1)^r r^{-\eta}, \quad \langle S_j^z S_{j+r}^z \rangle \sim (-1)^r r^{-1/\eta} \quad (8)$$

と冪減衰する。一般に (スピンもしくはボソンからなる) 一成分 TLL では、指数 $n^2 \eta + m^2 \eta^{-1}$ (n, m は整数) で減衰する相関関数が存在する。指数 η は臨界相の中で連続的に変化する。磁場が零 ($h=0$) のとき、臨界相は $-1 < \Delta \leq 1$ の領域に形成され、そこでは $\eta = 1 - (1/\pi) \arccos \Delta$ と与えられる。特に、XX 鎖模型 $\Delta=0$ では $\eta=1/2$ 、 $SU(2)$ 対称点 $\Delta=1$ では $\eta=1$ の値を取る。磁場が有限のときには、 $\Delta > 1$ の領域にも臨界相が広がり、 η は Δ, h の複雑な関数となるが、¹⁰⁾ ベーテ仮設解から導かれる積分方程式を解くことで精密に計算することができる。

二つのパラメータ Δ と h を臨界相内で様々に動かしながら、各パラメータ点で相互情報量 $I_{A_1:A_2}$ を有限系の厳密対角化で得られた基底状態から計算した。それと、指数 η (こちらはベーテ仮設解で計算) との関係を図1にプロットした。 $SU(2)$ 対称点 $\eta=1$ では $I_{A_1:A_2}$ は式(6)の $I_{A_1:A_2}^R$ (図中破線) と良く一致するが、この点から離れるにつれて $I_{A_1:A_2}$ が $I_{A_1:A_2}^R$ から明確にずれていく様子がわかる。また、模型は二つのパラメータを持つにもかかわらず、 $(\eta, I_{A_1:A_2})$ のデー

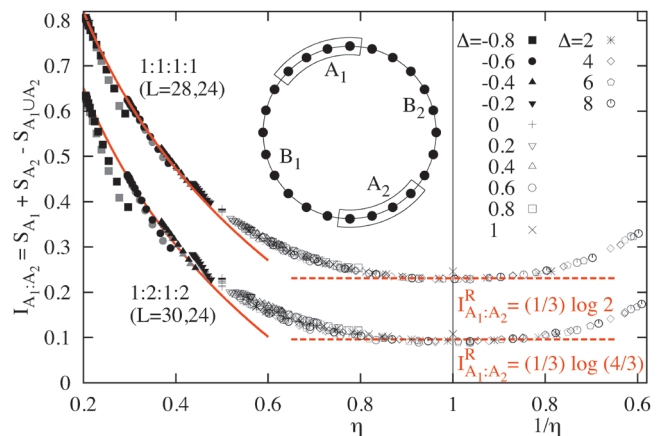


図1 相互情報量 $I_{A_1:A_2}$ と指数 $\eta = 1/(2K)$ の間の普遍的関係。⁶⁾ サイト数 $L = 24, 28, 30$ のリング系を挿入図のように4つの領域 A_1, B_1, A_2, B_2 に (長さの比 $1:1:1:1$ または $1:2:1:2$ で) 分割して $I_{A_1:A_2}$ を計算した。水平な破線は式(6)の $I_{A_1:A_2}^R$ を有限系に翻訳して計算したものを示す。実線は後に得られた $\eta \ll 1$ での解析解⁷⁾を示す。

タ点はきれいに一次元曲線上にのっており、 I_{A_1, A_2} と η の間に直接的関係があることを示している。我々は相関の強さを測る I_{A_1, A_2} は相関関数の指数と何らかの形で結びついているだろうという単純な期待からこのようなプロットを行ったが、サイト数 $L=20-30$ 程度の有限系でこのように明確な普遍的関係が現れたのは驚きであった。

6. 相互情報量の新しい解析的表式へ

図1の結果は、相互情報量が式(6)のようなシンプルな式には従わず、セントラル・チャージ c 以外の情報にも依存したより複雑な式に従うことを意味する。では、相互情報量の実際の解析的表式はどのようなものであろうか。

この問題を考えるために、Calabrese と Cardy⁴⁾ の議論を追い、そのどこに問題があったかを見てみよう。彼らの議論ではまずレプリカ法を用いる。式(1)のEEの代わりに、それを拡張したレニーEE

$$S_A^{(n)} = -\frac{1}{n-1} \ln(\text{Tr } \rho_A^n) \quad (9)$$

を導入する。これを2以上の整数 n で計算し、得られた表式を実数の $n \rightarrow 1$ の極限を取ってEEを求めるのがここでのレプリカ法である。レプリカ法の正当性も議論的となりそうだが、結論から言えばこの点には問題はないようなので、そのまま議論を進める。

まず、 A は一区間 $[x_1, x_2]$ であるとし、縮約密度行列の n 次のモーメント $\text{Tr } \rho_A^n$ の経路積分表示を導入しよう。逆温度 β での分配関数 $Z = \text{Tr } e^{-\beta H}$ は虚時間方向の周囲が β のシリンダー上に住む場 $\phi(x, t_E)$ ($0 \leq t_E < \beta$) についての経路積分として表現される。縮約密度行列 $\rho_A = (1/Z) \text{Tr}_B e^{-\beta H}$ の中にある部分トレースは図2(a)にあるように、 $(x, t_E) = (x_1, 0), (x_2, 0)$ 間に切り込みを入れ、 A でのトレースを避けることによって表現される。 $\beta \rightarrow \infty$ とし、シリンダーの周

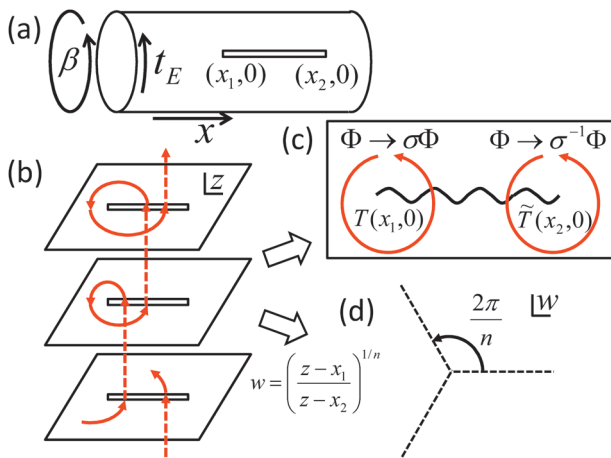


図2 (a) 部分トレース $\text{Tr}_B e^{-\beta H}$ の表現。(b) n 次のモーメント $\text{Tr } \rho_A^n$ を表現するリーマン面 $\mathcal{R}_n(A)$ 。 n 枚の無限平面がカットを通して張り合わされている。(c) n 成分場 Φ に対する分岐点ツイスト場 $\mathcal{T}, \tilde{\mathcal{T}}$ 。ツイスト場 \mathcal{T} の周りを一周すると成分が $\Phi \rightarrow \sigma\Phi = (\phi_2, \dots, \phi_n, \phi_1)$ と巡回置換される。(d) リーマン面 $\mathcal{R}_n(A)$ における各々のシートを中心角 $2\pi/n$ の扇形へ写し、それらをつなぎ合わせることで、無限平面が得られる。

囲を無限大にすることで、基底状態の縮約密度行列の表現が得られる。モーメント $\text{Tr } \rho_A^n$ を表現するには、このような切り込みの入った無限平面を n 枚用意し、図2(b)のように周期的につなぎ合わせて得られるリーマン面 $\mathcal{R}_n(A)$ を考える。このリーマン面上の分配関数を $Z_n(A)$ とすると、

$$\text{Tr } \rho_A^n = Z_n(A) / Z^n \quad (10)$$

となる。

ここで別の見方を導入する。図2(c)のように、 $\mathcal{R}_n(A)$ における n 枚のシートを重ね合わせ、1枚のシートに n 成分場 $\Phi = (\phi_1, \dots, \phi_n)$ が住んでいると考える。 $\mathcal{R}_n(A)$ の複雑な境界条件を表現するために、点 $(x, t_E) = (x_1, 0), (x_2, 0)$ に分岐点ツイスト場と呼ばれる場 $\mathcal{T}, \tilde{\mathcal{T}}$ をそれぞれ配置する。これらは、その点の周りを n 成分場 Φ が一周するとき、その成分が巡回置換されるように定義した、操作的な場である。式(10)は n 成分系におけるツイスト場の2点関数として表現される：

$$\text{Tr } \rho_A^n = \langle \mathcal{T}(x_1, 0) \tilde{\mathcal{T}}(x_2, 0) \rangle. \quad (11)$$

文献4では、 $\mathcal{R}_n(A)$ が共形変換のもとで図2(d)のような一枚の無限平面へ移されることを利用して、 $\mathcal{T}, \tilde{\mathcal{T}}$ の性質を導いた。その結果、これらが共形変換に対しプライマリー場と同様の変換則に従うこと、その共形次元が解析・反解析部分ともに $\Delta_n = (c/24)(n-1/n)$ で与えられることが示された。従って、式(11)は冪減衰 $(x_2/a)^{-4\Delta_n}$ に従う。これを式(9)に代入し、極限 $n \rightarrow 1$ を取ると、式(2)が得られる。

次に二区間領域 $A_1 \cup A_2 = [x_1, x_2] \cup [x_3, x_4]$ を考える。モーメント $\text{Tr } \rho_{A_1 \cup A_2}^n$ は図2(b)のようなつなぎ目を二箇所入れて得られるリーマン面 $\mathcal{R}_n(A_1 \cup A_2)$ 上の分配関数を用いて表現される。文献4では、ある共形変換を用いて $\mathcal{R}_n(A_1 \cup A_2)$ が一枚の無限平面へ移されるとし、式(5)が導かれたが、この変換が不適切なものだった。実は $\mathcal{R}_n(A_1 \cup A_2)$ はジーナス $n-1$ の曲面と同相であり、無限平面へ一対一対応で移すことはできない。

モーメント $\text{Tr } \rho_{A_1 \cup A_2}^n$ の可能な形を決めるため、ツイスト場の4点関数として表現しよう：

$$\text{Tr } \rho_{A_1 \cup A_2}^n = \langle \mathcal{T}(x_1, 0) \tilde{\mathcal{T}}(x_2, 0) \mathcal{T}(x_3, 0) \tilde{\mathcal{T}}(x_4, 0) \rangle. \quad (12)$$

$\mathcal{T}, \tilde{\mathcal{T}}$ がプライマリー場と同様の変換性を示すことから、この4点関数は

$$\left(\frac{x_{21}x_{32}x_{43}x_{41}}{x_{31}x_{42}a^2} \right)^{-4\Delta_n} \mathcal{F}_n(x) \quad (13)$$

という形を持つべきであることが導かれる。¹⁾ 冪関数部分が極限 $n \rightarrow 1$ で文献4の結果(5)を与える。 $\mathcal{F}_n(x)$ は交差比 $x = x_{21}x_{43}/x_{42}x_{31}$ の関数であり、共形不変性だけではその具体形を決めることはできない。文献4では誤った議論により実質上 $\mathcal{F}_n(x) = 1$ となる計算がされていたことになる。関数 $\mathcal{F}_n(x)$ が、相互情報量 I_{A_1, A_2} に新しい寄与

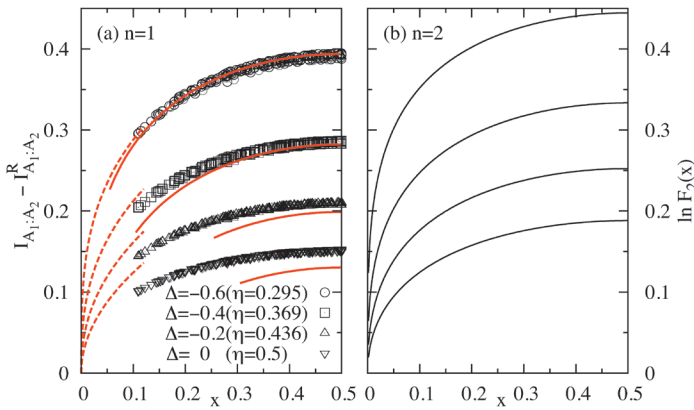


図3 (a) $I_{A_1:A_2}^R - I_{A_1:A_2}^L$ と交差比 $x = x_{21}x_{43}/x_{42}x_{31}$ の関係。⁶⁾ x は $0 < x < 1$ の範囲に値を取るが、結果は $x = 1/2$ まわりで対称になるため、半分の領域での結果を示す。異なる η の値を持つ4つの基底状態で計算を行った。式(14)から示唆されるように、それぞれの η に対しデータ点が一本の曲線に従っていることを確認できる。実線、破線はそれぞれ $\eta \ll 1$, $x \ll 1$ での解析解^{7,12)}を示す。(b) 対応する η の値での $\ln \mathcal{F}_2(x)$ [式(15) 参照]。

$$f(x) \equiv \lim_{n \rightarrow 1} \frac{1}{n-1} \ln \mathcal{F}_n(x) \quad (14)$$

を与える。図1で見られた相互情報量の式(6)からのずれ、およびその指数 η に対する依存性はこの部分にあった。実際に数値計算において、 $A_1 \cup A_2$ の取り方を様々に変えても、 $I_{A_1:A_2}^R - I_{A_1:A_2}^L$ の値は常に交差比 x のみの関数になっていることが図3(a)のように確かめられた。

関数 $\mathcal{F}_n(x)$ を計算するには、 $\mathcal{R}_n(A_1 \cup A_2)$ 上の分配関数を直に計算する必要がある。我々は、 $n=2$ の場合について、 $\mathcal{R}_2(A_1 \cup A_2)$ がトラスと同相であることを利用して、

$$\mathcal{F}_2(x) = \frac{\theta_3(\eta\tau)\theta_3(\eta^{-1}\tau)}{[\theta_3(\tau)]^2} \quad (15)$$

という式を得た。ここで τ は純虚数で、交差比 x と $x = [\theta_2(\tau)/\theta_3(\tau)]^4$ という関係で結びついている。 $\theta_2(\cdot)$, $\theta_3(\cdot)$ はヤコビのテータ関数である。これは、文献11などで行われていたツイスト場の4点関数の計算を今の場合に応用したものである。 η 依存性が明確に入っていることがわかる。

図3(b)では、関数 $\ln \mathcal{F}_2(x)$ を図3(a)に対応した η の値でプロットしている。 $n \rightarrow 1$ の極限が取られていないにも関わらず、図3(a)の数値データの概形は $n=2$ の場合でも定性的に再現できていることがわかる。

我々の研究⁶⁾ から約半年後、Calabrese, Cardy, Tonni は詳細な計算により、一般の整数 $n \geq 2$ での $\mathcal{F}_n(x)$ の解析式を決定した。⁷⁾ 結果の式は少し複雑になるのでここでは省略するが、式(15)におけるヤコビのテータ関数が $(n-1) \times (n-1)$ 行列を引数とするリーマンのテータ関数で一般化されたものである。全ての整数 $n \geq 2$ に対し、 $\mathcal{F}_n(x)$ は η のみで決まる関数になっており、極限 $n \rightarrow 1$ をとったときに得られる $f(x)$ [式(14)] も η で決まる関数になると期待される。しかしながら、 $\mathcal{F}_n(x)$ の表式の複雑さのため、極限 $n \rightarrow 1$ を取るのは容易ではない。文献7, 12では、(i) $\eta \ll 1$ および (ii) $x \ll 1$ での漸近的振る舞いについて、極限 $n \rightarrow 1$ を取ることに成功した。(i) の解を図1, 図3(a)で実

線で示す。実際に小さい η において数値データと良く一致することが確認できる。(ii) の解を図3(a)で破線で示す。最も小さな η については、数値データとうまくつながる様子が見られるが、より大きな η についてはそのような様子が見られず、解の適用範囲はかなり小さい x に限られるようである。 η, x の全範囲で適用可能な $f(x)$ の解析的表式を求めることは残された重要な課題である。

7. おわりに

一次元量子臨界系において、一区間の EE からは背後の共形場理論のセントラル・チャージ c を決定できること、二区間の相互情報量 $I_{A_1:A_2}$ からは c 以上の情報を引き出せることを見てきた。相互情報量 $I_{A_1:A_2}$ は、 c のみから決まる寄与 $I_{A_1:A_2}^R$ [式(6)] と交差比 x の関数 $f(x)$ [式(14)] の和からなる。特に $c=1$ の一成分 TLL において、 $f(x)$ が TLL パラメータ K (もしくは指数 $\eta = 1/(2K)$) のみで決まる普遍的関数になることが、数値計算、解析計算から明らかになった。この結果は基底状態から直に K を決定できる新しい方法として利用できるだろう。より一般の一次元量子臨界系においては、 $f(x)$ を系の背後の共形場理論を同定する指紋のように使うことができると期待される。例えば、一区間 EE の解析から同じ c を持つと考えられる二つの臨界系に対して、 $f(x)$ を比較すれば同じ共形場理論に従うか否かの判定ができるだろう。

量子臨界系での相互情報量の研究は様々な広がりを見せている。一次元量子臨界系では、 $c=1/2$ のイジング模型、 $c=1$ の Z_2 オービフォルド模型などで普遍的関数 $\mathcal{F}_n(x)$ や $f(x)$ の計算がされている。^{12,13)} 一成分 TLL 理論に従う系であっても、構成粒子がボソンであるかフェルミオンであるかによって $f(x)$ が異なることが指摘され、その場の理論的解釈が行われている¹⁴⁾ (前章までの議論はボソンの場合に対応する)。さらには、AdS/CFT 対応との関係についての議論¹⁵⁾ や、高次元共形場理論での計算¹⁶⁾ も行われている。また、ネガティビティと呼ばれる、領域間の量子的相関の新しい測度についても、その普遍的振る舞いが研究されている。¹⁷⁾ このような研究を通して、エンタングルメントや情報量などの概念が、臨界系の普遍性を捉える道具としてさらに発展していくことが期待される。

参考文献

- 川上則雄, 梁 成吉: 『共形場理論と1次元量子系』(岩波書店, 1997).
- C. Holzhey, F. Larsen and F. Wilczek: Nucl. Phys. B **424** (1994) 443.
- G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico and A. Kitaev: Phys. Rev. Lett. **90** (2003) 227902.
- P. Calabrese and J. Cardy: J. Stat. Mech. (2004) P06002.
- レビューとして, P. Calabrese and J. Cardy: J. Phys. A: Math. Theor. **42** (2009) 504005.
- S. Furukawa, V. Pasquier and J. Shiraishi: Phys. Rev. Lett. **102** (2009) 170602.
- P. Calabrese, J. Cardy and E. Tonni: J. Stat. Mech. (2009) P11001.
- C. H. Bennett, H. J. Bernstein, S. Popescu and B. Schumacher: Phys. Rev. A **53** (1996) 2046.
- 境界則についてのレビューとして, J. Eisert, M. Cramer and M. B. Plenio:

Rev. Mod. Phys. **82** (2010) 277.

- 10) T. Giamarchi: *Quantum Physics in One Dimension* (Oxford Univ. Press, New York, 2004).
- 11) A.I. B. Zamolodchikov: Sov. Phys. JETP **63** (1986) 1061; Nucl. Phys. B **285** (1987) 481; L. Dixon, D. Friedan, E. Martinec and S. Shenker: *ibid.* **282** (1987) 13.
- 12) P. Calabrese, J. Cardy and E. Tonni: J. Stat. Mech. (2011) P01021.
- 13) V. Alba, L. Tagliacozzo and P. Calabrese: J. Stat. Mech. (2011) P06012.
- 14) M. Headrick, A. Lawrence and M. M. Roberts: J. Stat. Mech. (2013) P02022.
- 15) M. Headrick: Phys. Rev. D **82** (2010) 126010.
- 16) J. Cardy: J. Phys. A: Math. Theor. **46** (2013) 285402.
- 17) P. Calabrese, J. Cardy and E. Tonni: Phys. Rev. Lett. **109** (2012) 130502.

(2014年1月17日原稿受付)

Entanglement Entropy and Conformal Field Theory

Shunsuke Furukawa and Jun'ichi Shiraishi

abstract: Entanglement entropy (EE), which is an important quantity in the quantum information science, has recently attracted a great attention as a new tool for probing the universal properties of quantum many-body systems. In one-dimensional quantum critical systems, the scaling of EE on a single interval in the system can be used to determine the central charge, a universal number, of the underlying conformal field theory (CFT). Recent studies have shown that the EE contains more refined information of CFT if it is calculated on two disjoint intervals in the system. This article reviews some basic knowledge on EE and recent developments on the connection between EE and CFT.

『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. 20-2 (7月15日発行) 目次

物理教育について……………兵頭俊夫
年間特集 大学入試
 高大接続と達成度テスト……………佐々木隆生
 新課程「物理基礎」および「物理」への期待……………屋敷秀樹
特集 アクティブラーニング
 反転授業の長所と短所を探る—「反転」ではなく「事前」
 授業を—……………土佐幸子
 理学部初年次の物理学における反転授業の試み—Moodleを
 活用して—……………満田節生, 廣沢佑幸
 ピア・インストラクションとその分析……………新田英雄
講義室
 導体表面の電荷分布と導体の電気容量……………谷林 衛, 谷林 慧
 熱は全て仕事に変わる……………齋藤嘉夫

実験室
 水銀単体の三態の実感……………沢田 功
外国の動向
 中等の科学カリキュラムをめぐる英国の論争と英国物理学会
 ………………笠 潤平
連載 物理オリンピックと物理教育
 物理オリンピック事業10年から見えて来た我が国の物理教育
 の課題……………北原和夫
教育に関する一言……………太田雅久/仁藤 修/三嶋昭臣/
 佐藤正範/江尻有郷/吉祥瑞枝
開催情報
寄贈書リスト
編集後記

酸素分子の立体制御とアルミニウム酸化動的過程の解明

倉橋 光紀 (物質・材料研究機構極限計測ユニット)

山内 泰 (物質・材料研究機構極限計測ユニット)

酸素分子は最も身近に存在する活性な分子である。燃焼反応、集積回路の絶縁膜作製、合成化学反応、自動車排ガス処理、燃料電池、光触媒等において我々はその活性を利用する一方、酸素による腐食に耐える新材料を開発してきた。ここで酸化反応の場が表面である場合、反応は酸素分子が表面に吸着するところから始まる。絶縁膜作製、触媒、腐食などは全てこれに該当する。従って酸素吸着を研究する動機は、主にその応用上の重要性にあった。しかし、その挙動は基礎科学的視点からも興味深く、理解は未だ十分でない。例えばアルミニウム酸化反応は非常に発熱的でエネルギー的に有利であるにもかかわらず、酸素ガス分子の吸着確率は0.1以下である。O₂分子が持つ直線分子という異方的形状や電子スピンの役割が近年議論されている。

酸素吸着を含め、吸着とは分子が表面に接近・衝突し、表面と化学結合を形成する過程である。この過程を議論する際、以下の二点についてまず認識しておく必要がある。第一は、衝突反応の時間スケールである。数百メートル毎秒の速度で熱運動している分子が、数Å以下の距離まで表面原子に接近したときに相互作用が始まり、反応が起きる。従って相互作用の時間スケールは10⁻¹²秒以下と大変短く、時々刻々の状態変化を実時間追跡することは容易ではない。第二は、様々な入射条件の分子が反応に関与する点である。分子の運動エネルギー、入射方向はもちろん、分子軸の向き、回転、振動、スピン状態等も反応に影響する因子として考慮する必要がある。

この反応の動的過程を明らかにするため、二つの異なるアプローチが採用されてきた。第一は、走査型トンネル顕微鏡、光電子分光法等の表面分析法を用いる方法である。

ここでは反応後の表面吸着種の構造や化学状態を原子スケールの空間分解能で調べ、その知見を基に反応中の様子を探る。第二は、運動エネルギー、入射角等を指定した分子のビームを用いる方法である。ここでは、どのような入射条件の分子が主に反応しているのかを明らかにする。分子の回転・振動・スピン等の内部量子状態を制御することも可能になりつつある。例えば回転状態を制御した分子ビームにより、特定の軸方位を持つ分子の反応確率が高いと判明すれば、吸着反応にはその軸方位の分子が主に関与しているとわかる。

酸素吸着の動的過程は、上記二つのアプローチにより詳しく研究されてきた。しかし、内部量子状態を指定した酸素分子ビームによる表面反応研究は、ほとんど報告がない。筆者らは、酸素分子の磁気モーメントが電子スピンと分子内回転の角運動量に依存することに着目し、分子軸とスピンの向きをよく定義できる酸素分子ビームを初めて開発した。この実験では、試料位置における磁場方向を制御することにより、酸素分子回転面が表面平行のヘリコプター型 (helicopter) 配置と垂直な車輪型 (cartwheel) 配置を区別することができる。このように立体配置を制御した酸素分子ビームを用いて、アルミニウム表面酸化反応の立体効果を明らかにし、長年謎であった反応動的過程を解明した。

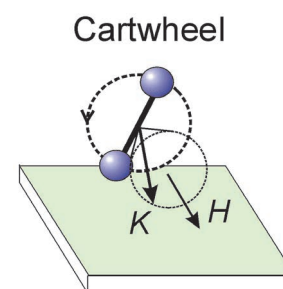
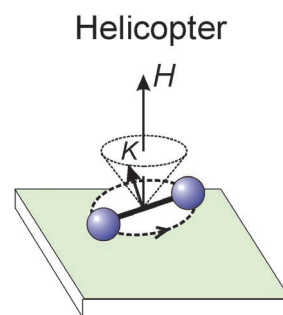
—Keywords—

内部量子状態:

分子の運動は、分子全体への並進運動と、分子中心に対する回転・振動運動に分離できる。内部量子状態は並進運動以外の分子の状態を表すもので、原子核の回転・振動状態、電子状態、核および電子スピン状態などを指す。

立体効果:

化学反応の速度や生成物は、反応する二分子の相対的な立体配置に依存する。この事情は分子と固体表面の反応でも同様であり、表面に対する分子の向きにより反応確率や生成物は異なる。



1. はじめに

酸素吸着は、酸化膜作製、触媒、腐食等、産業的に重要な化学反応の最初のステップであり、これらの反応のメカニズムを理解する鍵である。従って、固体表面に酸素分子がどのように吸着するのかという問題は、表面科学研究の重要なトピックであり続けている。酸素分子が吸着した表面の構造や電子状態に関しては、走査型トンネル顕微鏡 (STM)、光電子分光法、電子状態計算等により、^{1,2)} また吸着反応の並進エネルギーや入射角依存性に関しては、これらの量をよく定義した分子ビームを用いて研究されてきた。^{2,3)} 一方、酸素分子は直線分子という異方的形状を持ち、基底状態において二個の対電子に由来する電子スピンを持つ。一般に、二個の分子が接近・衝突して化学反応を起こす際、反応速度や生成物は分子相互の立体配置に依存する。従って、表面に対するO₂分子軸の向きは、酸素吸着確率はもちろん、表面に生じる酸化物の化学状態や構造にも影響する可能性がある。さらに、電子スピン状態と酸素吸着速度の相関を示す数値シミュレーションもある。⁴⁾ しかし、分子軸の向きやスピンの酸素吸着に与える影響はよく理解されていない。

表面反応の立体効果を研究するには、分子の向きを制御できる実験手法が必要である。一酸化窒素など一部の極性分子に対しては、不均一電場法により分子の電気双極子モーメントの向きを制御し、表面に対する分子の頭と尻尾の向きを定義した反応実験が実現されている。⁵⁾ しかし、O₂分子は無極性分子のため電場を用いて軸方位を制御することはできない。分子衝突効果^{*1}を利用して生成した部分偏極O₂ビーム⁶⁾は知られているが、立体効果観測例はPd(100)清浄表面、CO被覆面へのO₂吸着⁷⁾に限られる。

我々は、O₂分子の磁気モーメントが分子内回転の角運動量と結びつく点に着目し、六極磁子^{*2}による磁場選別法を用いてスピン状態と回転状態の双方を指定できるO₂分子ビームを生成した。^{8,9)}そして、シリコン、^{10,11)}アルミニウム初期酸化反応¹²⁾に顕著な立体効果を観測した。本稿では、ビーム生成技術、^{8,9)}およびアルミニウム表面酸化研究への応用例¹²⁾を述べる。

2. O₂分子のスピン、回転状態

O₂分子の磁気モーメントは二個の対電子のスピン (S) に由来するが、分子内回転の角運動量 (K) にも依存す

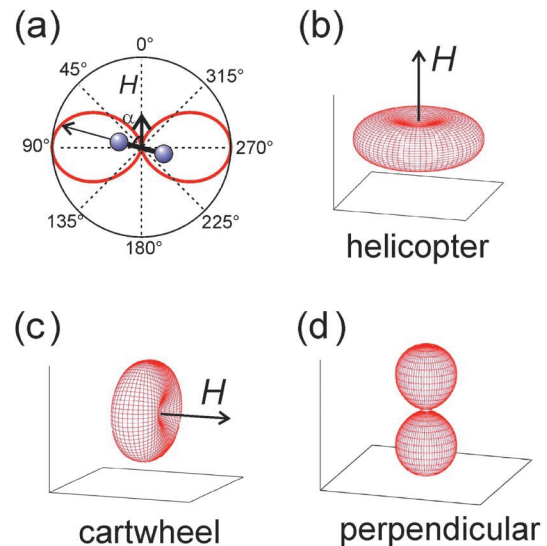


図1 (a) 量子状態 $(J, M) = (2, 2)$ における O₂ 分子軸角度分布関数。磁場方向を $\alpha = 0^\circ$ とした。(b) helicopter, (c) cartwheel, (d) perpendicular 配置における O₂ 分子軸角度分布。

る。^{*3} このKS結合のため、O₂分子のスピン・回転状態は合成角運動量 ($J = K + S$) を用いて表現され、波動関数は複雑な形をとる。¹⁴⁾しかし量子状態 $(J, M_J) = (2, 2)$ では、回転状態 $(K, M_K) = (1, 1)$ およびスピン状態 $(S, M_S) = (1, 1)$ をほぼ特定することができる。⁸⁾この回転状態は球面調和関数 Y_{11} で与えられるため、磁場に対する分子軸の極角を α とすると、分子軸角度分布関数は $\sin^2 \alpha$ に比例する (図1 (a)).¹⁰⁾ (2, 2) 状態のO₂分子を断熱的^{*4}に分析室に導き、試料位置における磁場を表面法線方向に向ければ、分子軸は主に表面平行方向に分布する (helicopter 配置 (図1 (b))). 一方、磁場を表面平行方向に向ければ軸が表面平行と垂直が混在する配置となる (cartwheel 配置 (図1 (c))). 従って、両配置を比較することにより、表面反応の分子軸方位依存性を議論することができる。さらに、後述のAl(111)表面の場合、結晶対称性を考慮すると、helicopter 配置 (S_H) と cartwheel 配置 (S_C) の吸着確率から得られる量 ($2S_C - S_H$) は、図1 (d) に示した perpendicular 配置に対する吸着確率に等しくなる。この配置では、角度分布関数が $\cos^2 \theta$ (θ : 分子軸の表面法線方向に対する極角) に比例するため、¹²⁾ 分子軸が表面垂直の場合における吸着確率の良い指標となる。

なお、helicopter というと回転翼を高速で回転しながら機体がゆっくり着地するイメージを持つかもしれない。しかし、回転量子状態 $K = 1$ の酸素分子が持つ回転エネルギーは、0.3 meV 程度である。この回転状態の分子が 10 meV 以上の並進エネルギーで表面に衝突する場合、回転運動が吸着反応に与える影響は、並進運動のそれに比べて無視でき

^{*1} 混合ガスを断熱膨脹させる際、速度の異なる異種ガス分子が互いに衝突し、分子回転面が揃う効果。

^{*2} 3対のNS磁極対が内径空間に形成する不均一磁場を六極磁場と呼ぶ。磁気モーメント (μ) が負の場合、分子は中心軸に収束する力を受け、その大きさは $|\mu|$ に比例する。

^{*3} 一般に、電子スピンの持つ二原子分子の磁気モーメントを議論する際、電子の軌道角運動量とスピンの結合をまず第一に考える必要がある。¹³⁾ 二原子分子内の電子は、分子軸に対称な電場の中を運動するため、軸方向に軌道角運動量を持ち、これによって誘起される磁場が電子スピンと結合する。しかし、基底状態のO₂分子 ($^3\Sigma_g^-$) の場合、軌道角運動量の軸方向成分がゼロであるため、この結合は弱く、分子内回転角運動量とスピンの結合が重要になる。

^{*4} ビームライン上の磁場には空間分布があるため、運動している分子は時間とともに変動する磁場を感じることになる。この変動磁場の周波数がLarmor歳差運動の周波数より十分に低いとき (断熱条件)、磁場に対する分子の磁気モーメントの向き (磁気量子数) は不変に保たれる。^{8,9)} この事情は、偏極中性子、偏極準安定ヘリウム原子ビーム実験¹⁵⁾等と同様である。

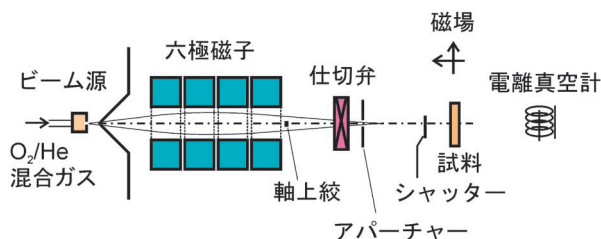


図2 量子状態選別酸素分子ビーム生成装置の概念図。

るほど小さいだろう。

3. 状態選別 O₂ 分子ビームの生成

(J, M_J) = (2, 2) 状態の O₂ 分子ビームは、超音速分子線と六極磁子を組み合わせることで生成することができる。⁸⁾ 詳細は解説⁹⁾があるので割愛するが、基本原理は以下の通りである。ビーム発生装置を図2に示す。(2, 2) 状態は回転量子数が最低の $K=1$ 由来の状態であるので、ビーム源のノズルから O₂/He 混合ガスを真空中に断熱膨張させることにより、O₂ 分子の回転温度を 4 K 程度まで下げる。^{8, 9)} この段階のビームには磁気モーメントの異なる複数の量子状態が含まれており、このうち (2, 2) 状態の磁気モーメントの大きさは最大である。六極磁子に入射後、各量子状態の O₂ 分子は磁気モーメントと並進エネルギーの値に応じて異なる軌道を描く。そこで O₂ 分子の並進エネルギーを調整し、(2, 2) 成分のみがアパーチャーを通過するようにする。並進エネルギーは O₂/He 混合ガス比により調整した。このときの Stern-Gerlach スペクトルの変化を図3(b)に示す。O₂/He 混合比が大きく並進エネルギーが低い時には、(1, 1) 状態など磁気モーメントが小さい成分が混じる。(2, 2) 状態のピーク強度は混合比 8:7 の時に最大となるが、O₂/He 混合比をさらに下げて O₂ 分子を加速しすぎると (2, 2) 状態の集束が不十分となるために、ビーム強度が減少する。なお、磁場偏向と速度からビームを構成する O₂ 分子の磁気モーメントが見積もられ、(2, 2) 状態と帰属できる。^{8, 9)}

表面反応実験では、吸着確率の並進エネルギー依存性を測定する必要がある。エネルギー可変状態選別ビームは、通常、電磁石六極磁子を用い、励磁電流を変化させることにより実現される。しかし、装置が大型化重量化する上、漏洩磁界も大きいなどの問題がある。一方、永久磁石型六極磁子を使用する場合、装置は小型化されるが、状態選別ビームの並進エネルギーは六極磁子の構造により決定されてしまう。エネルギーを変化させるには、通常真空装置内に設置される六極磁子を真空外に取り出し、全体を組み替えなければならない。我々は抜き差し可能な分割式の永久磁石六極磁子を開発し、状態選別ビームの並進エネルギーを数点変化させている。エネルギー可変範囲は分割段数を増やすことにより広げることができる。

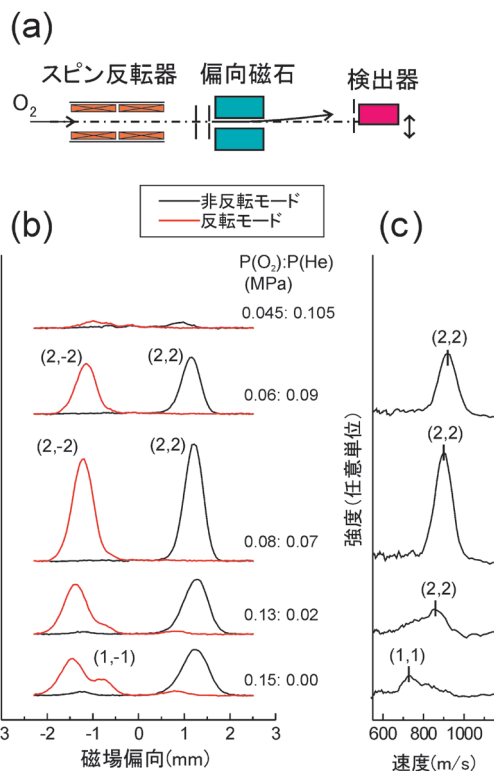


図3 Stern-Gerlach 実験の概念図 (a)、O₂ 分子ビームの Stern-Gerlach スペクトル (b) および速度分布 (c) の O₂/He 混合ガス圧依存性。スピン反転器内では、分子が感じる磁場の向きをラーマー周波数より高い周波数で反転させることにより、磁気量子数の符号を変えることができる。^{8, 9, 15)} 黒線 (赤線) は非反転 (反転) モードに対応する。

4. 酸素吸着立体効果の測定

前節の状態選別 O₂ ビームを用い、アルミニウム表面への酸素吸着立体効果を King & Wells 法により観測した。^{10, 11)} 並進エネルギー 0.14 eV の (2, 2) 状態の O₂ ビームを Al(111) 表面に照射した際の真空度の変化を図4に示す。真空度は電離真空計により測定した。時刻 t_1 に仕切弁 (図2) を開けると分析室にビームが入り、図4縦軸に示した真空度が上昇する。このときの酸素分圧上昇を $P(O_2)$ とする。^{*5} 次に時刻 t_2 にシャッターを開けると試料表面にビームが照射され、一部の O₂ 分子が吸着するため酸素分圧が減少する。この減少を ΔP とすると、吸着確率は $\Delta P/P(O_2)$ で与えられる。同じ時刻 t_2 以後、試料位置における磁場 ($|H|=1$ Gauss) の向きを表面垂直/平行と制御信号に従って変化させる。真空度が同期して変調を示しているが、これは helicopter 配置と cartwheel 配置で O₂ 吸着確率が異なることを反映する。helicopter 配置での $\Delta P(\Delta P_H)$ の方が cartwheel 配置 (ΔP_C) より大きい。従って、前者での吸着確率の方が後者より高い。helicopter 配置では分子軸は主に表面平行、cartwheel 配置では表面平行と垂直が混在するため、本結果は、軸が表面平行の分子の方が垂直の分子より反応確率が高いことを意

*5 時刻 t_1 における真空度変化には、ビーム中に含まれる O₂, He の双方が寄与する。O₂ の割合はビーム生成条件により決まり、反応実験後、ガス質量分析により求めている。このとき、純 O₂, He ガスを用いて決定した電離真空計と質量分析計の感度係数比を用いている。^{10, 11)}

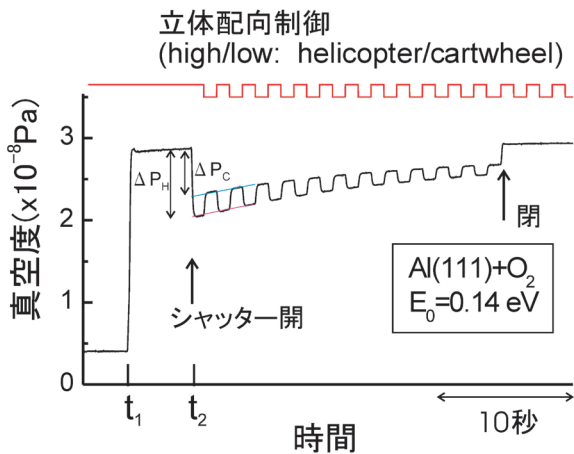


図4 真空中度計測によるアルミニウム(111)表面への酸素吸着立体効果測定.

味する.

5. アルミニウム酸化反応の動的過程

アルミニウム酸化は表面酸化反応の最も基本的な系として詳しく議論されてきた.^{4,16-24)} しかし、反応機構は以下の二点においてよく理解されていない。第一は、室温の酸素ガス分子(並進エネルギー約40 meV)に対する吸着確率が0.1以下と大変低く、高い確率で反応させるには0.2 eV以上の並進エネルギーが必要な点である。¹⁶⁾ アルミニウム酸化は非常に発熱的でエネルギー的に有利であるため、このように活性化障壁がある事実は理解しがたい。O₂分子の電子スピン⁴⁾や電荷¹⁷⁾が表面近傍でどのように振る舞うのかが、この障壁の起源を議論する上で重要と考えられている。第二は、反応動的過程である。Bruneら¹⁸⁾は、酸素吸着後のAl(111)表面に対してSTM測定を行い、観測される吸着酸素の像を一個の酸素原子に帰属した。そして吸着種が互いに80 Å以上離れていることを説明するため、解離吸着後、反応熱が運動エネルギーに変換されて個々の原子が表面上を動くという「ホットアトム」機構を提案した。¹⁸⁾ しかし、この機構は大変考えにくいことが数値シミュレーションにより示された。酸素原子がAl表面上で80 Å動くには初期運動エネルギーとして約9 eV/原子¹⁹⁾が必要と見積もられたが、これはO₂分子の化学吸着エネルギー(5 eV/原子²⁴⁾)より遙かに高いのである。これに代わる機構として、軸が表面垂直のO₂分子の表面側の原子が吸着し、片方は真空外に飛び去るという「引き抜き」機構(図5(a))が提案された。^{20,21)} この過程は表面上に原子状酸素を残すため、酸素吸着表面に原子状酸素がほとんどバラバラに分布することを提案したBruneらのSTM研究¹⁸⁾とも矛盾しない。さらに、吸着の際に放出される酸素原子が共鳴多光子イオン化法(REMPI)により観測されたこと、その収率がO₂吸着確率と類似の並進エネルギー依存性を示すこと^{20,21)}からもこの機構は支持を集めてきた。一方、表面吸着種を原子状酸素ではなく、隣接する酸素原子ペアと解釈したSTM研究も報告された。²²⁾ このSTM解釈は、

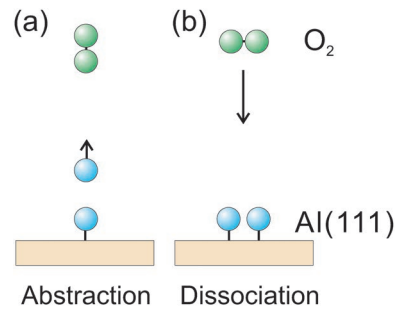


図5 引き抜き(a)および解離(b)によるAl(111)表面へのO₂吸着. 本結果(図6)は、低エネルギー条件では解離反応のみ、高エネルギー条件では両反応が起きることを示す.

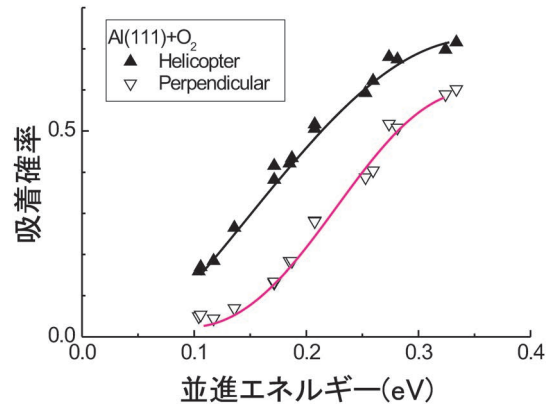


図6 Al(111)表面への酸素吸着確率の分子軸方位および並進エネルギー依存性. 試料温度は300-310 K, ビーム入射方向は試料法線方向である.

軸が表面平行の分子が反応し二個の隣接する吸着酸素原子を残す、という解離機構(図5(b))を提案する。その結果、引き抜き反応か解離反応のいずれが起きているのか、判断できない状況が続いていた。

我々は反応機構を解明するため、状態選別O₂分子ビームを用いて吸着確率の分子軸方位依存性を測定した。¹²⁾ 図6にAl(111)表面へのO₂分子吸着確率をhelicopter配置(図1(b))およびperpendicular配置(図1(d))に対して示す。並進エネルギー0.2 eV以下では、helicopter配置の吸着確率の方がperpendicular配置より遙かに高い。これは、低エネルギー条件下において軸が表面平行なO₂分子が主に反応していることの証拠である。一方、0.2 eV以上では、perpendicular配置の分子の反応確率も並進エネルギーとともに上昇する。このことから、低エネルギー条件では、表面平行配置の分子が引き起こす解離反応が主過程であること、高エネルギー条件では解離反応と引き抜き反応が並行して起きることが結論される。

本結果を基に、報告されたREMPIおよびSTM測定、第一原理計算の結果を議論する。REMPI測定^{20,21)}では、吸着の際に表面真空側に飛び出る酸素原子が観測された。これは過去に提案された通り、^{20,21)} 軸が表面垂直の分子が起こす引き抜き反応によるものと考えられる。しかし、図6が示す通り、表面垂直配置での活性化障壁は、表面平行配置に比べて0.1 eV程度高い。従って、引き抜き反応は低エ

エネルギー条件下での主過程ではない。引き抜き収率^{20,21)}が、ランダム配向の酸素分子に対する吸着確率¹⁶⁾と類似の並進エネルギー依存性を示したのは、引き抜きと解離の活性化障壁が0.1 eVしか異ならないためと解釈される。

STM測定^{18,22)}で用いられた室温の酸素ガスの場合、分子の並進エネルギーは0.1 eV以下である。図6は並進エネルギー0.2 eV以下では表面平行分子の吸着確率が垂直分子より遙かに高いことを示している。従って0.1 eV以下という低エネルギー条件下では、表面平行に近いO₂分子しか吸着できないと考えられる。^{*6} ホットアトム機構は考えにくいことが示されているので、可能な過程は図5(b)に示した解離過程のみである。吸着酸素のSTM像は当初¹⁸⁾単原子と解釈されたが、本結果は二原子から構成されると主張したSchmidらの解釈²²⁾を支持する。なお、軸が表面平行の場合に解離が起きることは理論計算でも予測されている。^{17,23)}

Komrowski²⁰⁾らは、STMとO₂分子ビームを組み合わせ、低並進エネルギー(0.02-0.1 eV)条件ではサイズの小さい吸着種が多く形成されること、並進エネルギーの増加とともに倍程度のサイズを持つ吸着種の割合が増すことを示した。彼らは、サイズの小さい吸着種を引き抜き反応の結果生じた原子状酸素、倍程度のサイズの吸着種を解離反応により生じた二原子ペアと解釈した。しかし、この解釈には疑問が残った。Al(111)表面上の原子状酸素は不安定で、クラスターを作る傾向があると理論予測されている。²⁴⁾ さらにSchmidらは、Al(111)表面上の原子状酸素が室温で表面上を拡散してクラスター化することを実証している。²²⁾ これらの報告、および図6の結果を考慮すると、可能な反応機構およびSTM像解釈は次のようになる。低エネルギー条件下では軸が表面平行のO₂分子が解離反応を起こし、表面に二原子から構成される吸着種を形成する。二原子ペアは互いに離れた原子状酸素より安定のため、室温で分裂・拡散は起こさない。一方、高エネルギー条件下では軸方位によらず分子は吸着する。表面平行の分子は二原子ペアを形成し、垂直の分子は引き抜き反応により原子状酸素を表面上に残す。原子状酸素は室温条件下で表面上を拡散し、他の吸着種と融合して安定化する。高エネルギー条件下で観測されたサイズの大きい吸着種²⁰⁾は、この機構により形成されたものと我々は解釈する。

活性化障壁の分子軸方位依存性は最近の数値シミュレーションでも議論されている。^{4,17)} 図6は、表面平行配置での活性化障壁が垂直配置より0.1 eV低いことを示しているが、この結果を正しく再現した計算は未だ報告されてい

ない。O₂分子の解離は、表面電子がO₂分子の反結合性軌道に移りO-O結合が弱まって起きると考えられる。表面に分子が近づくとつれ、表面側の電荷が少しずつ連続的にO₂分子に移るのか、電子一個単位で不連続的にO₂分子に飛び移るのか、スピンはこの過程にどのように関わるのか、未だ明確な解答が示されていないと思われる。本結果は、この問題を扱う理論手法の検討や、活性化障壁の起源を議論するための基礎データとしても役立つであろう。

6. おわりに

単一スピン・回転状態選別O₂分子ビームを用いた実験により、アルミニウム表面酸化反応に明瞭な立体効果があることを示した。立体効果は、軸方位が角度条件を満たす一部の分子しか反応できないことを示すもので、O₂吸着確率が低エネルギー条件で低い事実と符合する。吸着確率は分子軸の面内角¹¹⁾や吸着サイトにも依存するので、今後これらの効果も検討する必要がある。O₂分子が表面に接近し反応を起こす時々刻々の変化をモニターすることは困難である。しかし、立体効果計測は反応しているO₂分子の向きに関する情報を提供できるため、この様子を知る貴重な手がかりとなる。散乱粒子計測、表面分光、顕微鏡等と組み合わせれば、さらなる新知見が得られると考えられる。さらに10¹⁵個/秒程度の分子の軸方位を制御できるため、マクロな反応制御への利用も期待される。O₂分子のスピンに着目した実験も進行中である。

本研究の遂行に当たり、A. W. Kleyn, 矢田雅規, 植田寛和, 佐々木泰造各氏との議論は非常に有益であった。本研究は科研費補助金(No. 22360021, 25286060)の支援の下で行われた。

参考文献

- 1) F. Besenbacher and J. K. Nørskov: Prog. Surf. Sci. **44** (1993) 5.
- 2) T. Engel: Surf. Sci. Rep. **18** (1993) 91.
- 3) A. W. Kleyn: Chem. Soc. Rev. **32** (2003) 87.
- 4) J. Behler, K. Reuter and M. Scheffler: Phys. Rev. B **77** (2008) 115421.
- 5) E. W. Kuipers, M. G. Tenner, A. W. Kleyn and S. Stolte: Nature **334** (1988) 420; 岡田美智雄: 日本物理学会誌 **63** (2008) 205.
- 6) V. Aquilanti, D. Ascenzi, D. Cappelletti and F. Pirani: Nature **371** (1994) 399.
- 7) L. Vattuone, L. Savio, F. Pirani, D. Cappelletti, M. Okada and M. Rocca: Prog. Surf. Sci. **85** (2010) 92.
- 8) M. Kurahashi and Y. Yamauchi: Rev. Sci. Instrum. **80** (2009) 083103.
- 9) M. Kurahashi and Y. Yamauchi: J. Vac. Soc. Jpn. **53** (2010) 681.
- 10) M. Kurahashi and Y. Yamauchi: Phys. Rev. B **85** (2012) 161302(R).
- 11) M. Kurahashi and Y. Yamauchi: J. Chem. Phys. **140** (2014) 031102.
- 12) M. Kurahashi and Y. Yamauchi: Phys. Rev. Lett. **110** (2013) 246102.
- 13) 例えばF. H. Crawford: Rev. Mod. Phys. **6** (1934) 90.
- 14) M. Tinkham and M. W. P. Strandberg: Phys. Rev. **97** (1955) 937; N. A. Kuebler, M. B. Robin, J. J. Yang, A. Gedanken and D. R. Herrick: Phys. Rev. A **38** (1988) 737.
- 15) 山内 泰, 倉橋光紀, 鈴木 拓: 応用物理 **74** (2005) 1345.
- 16) L. Österlund, I. Zorić and B. Kasemo: Phys. Rev. B **55** (1997) 15452.
- 17) F. Libisch, C. Huang, P. Liao, M. Pavone and E. A. Carter: Phys. Rev. Lett. **109** (2012) 198303.
- 18) H. Brune, J. Winterlin, R. J. Behm and G. Ertl: Phys. Rev. Lett. **68** (1992) 624.
- 19) C. Engdahl and G. Wahnström: Surf. Sci. **312** (1994) 429.

*6 アルミニウム表面への酸素吸着では、吸着確率は表面法線方向の並進エネルギー(E_n)に依存する。¹²⁾ 並進エネルギー0.1 eVのビームを斜入射条件下で用い、 $E_n=60$ meVにおいても表面平行配置が反応に有利であることを確認している。¹²⁾ 一般に低温、低エネルギー条件下では、物理吸着状態の中間体(プリカーサー)を経由した吸着反応が重要になる。しかし、Al(111)表面へのO₂吸着に対しては、温度80 K以上、並進エネルギー72 meV以上においてプリカーサー経由過程は観測されていない。¹⁶⁾

- 20) A. J. Komrowski, J. Z. Sexton, A. C. Kummel, M. Binetti, O. Weiße and E. Hasselbrink: Phys. Rev. Lett. **87** (2001) 246103.
 21) M. Binetti and E. Hasselbrink: J. Phys. Chem. B **108** (2004) 14677.
 22) M. Schmid, G. Leonaldelli, R. Tscheließnig, A. Biedermann and P. Varga: Surf. Sci. **478** (2001) L355.
 23) Y. Yourdshahyan, B. Razaznejad and B. I. Lundqvist: Phys. Rev. B **65** (2002) 075416.
 24) J. Jacobsen, B. Hammer, K. W. Jacobsen and J. K. Nørskov: Phys. Rev. B **52** (1995) 14954.

(2014年1月9日原稿受付)

Preparation of an Aligned O₂ Beam and the Clarification of the Aluminum Oxidation Dynamics

Mitsunori Kurahashi and Yasushi Yamauchi

abstract: A single spin-rotational state-selected O₂ beam was developed by combining a supersonic seeded O₂ beam with a hexapole magnet. It permits a precise analysis of the molecular alignment effect and the spin effect in O₂ chemisorption. The dynamical process of O₂ adsorption on an Al(111) surface, despite intensive studies, has remained unresolved because of the lack of conclusive experimental evidences that verify the reaction mechanisms proposed previously. The alignment resolved O₂ sticking on Al(111) has clarified that O₂ molecules parallel to the surface have much higher sticking probabilities than those perpendicular to the surface at translational energies less than 0.2 eV. This proves that the abstraction process is a minor event at low energy conditions.

応用物理 第83巻 第8号(2014年8月号) 予定目次

特集：完全保存版：これをみれば応物がわかる

図解：講演大会大分類

- ①有機分子バイオエレクトロニクス ②薄膜・表面 ③光
 ④結晶工学 ⑤半導体B ⑥量子エレクトロニクス ⑦ナノカーボン
 ⑧半導体A ⑨超伝導 ⑩プラズマエレクトロニクス
 ⑪応用物理一般 ⑫応用物性 ⑬光エレクトロニクス ⑭スピントロニクス・マグネティクス ⑮ビーム応用 ⑯非晶質・微結晶 ⑰放射線

解説：アタカマ大型ミリ波サブミリ波干渉計(ALMA)用

超伝導受信機の開発……………鶴澤佳徳

最近の展望

タンタル酸化物を用いた抵抗変化型メモリの開発……………二宮健生

宇宙で活躍する半導体デバイス……………廣瀬和之, 小林大輔

研究紹介：赤外領域の光電変換を可能に；

カクテルペロブスカイト太陽電池……………早瀬修二
 ホットひといき, ほか

変わりゆく講演会……………民谷栄一
 東京大学の教育改革の今……………小関敏彦, 永田 敬
 第75回応用物理学会秋季学術講演会ご当地ガイド

……………北海道大学現地実行委員会, POROCO編集部

Science As Art：結晶の森……………長谷川裕之

分子自由度から生じる相競合と実空間不均一

岡崎 竜二 〈名古屋大学大学院理学研究科〉

寺崎 一郎 〈名古屋大学大学院理学研究科〉

系に内在する自由度(内部自由度)の概念は、自然科学における様々な現象を理解するための基本的概念である。少し広い視点から見てみよう。素粒子分野に目を向けると、クォークが有するカラー自由度は、高密度クォーク物質におけるカラー超伝導の発現を担っており、¹⁾ また現在その検出に向けた実験が進行中である中性子電気双極子モーメントは、中性子が有する電荷自由度に起因している。²⁾ 私たちの身近な例を挙げると、強磁性体(磁石)は、電子が有するスピン自由度を示す代表例であろう。生命体にも内部自由度の概念を広げれば、血液中のヘモグロビンが行う酸素運搬は、鉄イオンのスピン状態の変化を通して行われており、これは遷移金属イオンの *d* 電子が有する軌道自由度から生じている。

固体物理学における中心的課題の1つは、そのような内部自由度から生じる多彩な電子物性の理解である。³⁾ 系の自由度は温度を下げるに従って失われ、相転移を経て様々な形で秩序化する。自由度から生じる秩序は実に豊かで、先に挙げた強磁性や、強誘電、超伝導等のように、すでに機能として私たちの役に立っているものもあれば、隠れた秩序のように秩序変数すら決定されていないものもある。⁴⁾ 自由度はときに秩序と秩序の競合を生み、その拮抗は新しい物理現象を創発する。巨大な誘電率を示すリラクサーと呼ばれる誘電体⁵⁾ や巨大磁気抵抗を示すマンガン酸化物⁶⁾ では、2つの異なる相がナノスケールで混ざり合う。ここでは、相は競合によって短距離秩序(ゆらぎ)として存在し、系は僅かな外場に対して巨大な応答を示し得る。

本稿で取り上げる分子性導体は、そんな相競合現象の格好の舞台となろう。分子性導体は、有機分子と無機イオンで形成され

るイオン性結晶であり、結晶を構成する有機分子の配向・配列パターンの自由度や、分子内における電荷自由度といった、無機物にはないユニークな「分子自由度」を持つ。このことは、分子性導体が、その特徴的な自由度に応じたユニークな秩序状態を多々とり得ることを意味する。さらに、そのような秩序は有機物特有のやわらかさと相俟って、僅かな外場や化学的修飾によって劇的な変化を示す。^{7,8)} その変化の狭間で生じ得る競合現象は、どのように理解されるだろうか。

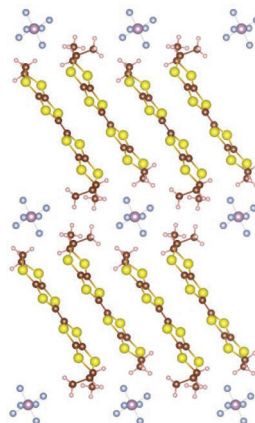
筆者らは最近、SPring-8の高輝度放射光を利用した赤外イメージング分光測定により、分子性導体 β -(meso-DMBEDT-TTF)₂PF₆において、2つの異なる電子秩序が競合し、空間的に不均一な状態を示すことを見出した。⁹⁾ これは、この物質では2つの秩序がほぼ縮退しており、この物質が2つの相の狭間に位置することを意味するだろう。しかしながら、この競合現象はこれまでに観測されたものとは大きく異なる性質を持つ。この相競合は、均一な単結晶母物質の中に現れ、非常に広い温度域で安定して存在する。この奇妙な相競合現象は、分子自由度と有機物のやわらかさという分子性導体の2つの特徴の協奏の結果であると考えられ、本物質だけでなく他の分子性導体の電子物性に対しても新しい視点からの理解をもたらす。

—Keywords—

分子性導体の電子物性：

有機分子が三次元ネットワークを作り結晶化した分子性導体では、分子内の炭素や硫黄の電子が π 軌道を形成するため、分子をひとつかたまりの電子と考えることができる。遷移金属や希土類固体物質と比較するとき、分子そのものの対称性の低さに起因して、分子性導体の電子状態は強い異方性を持つ、という特徴がある。また、電子の軌道運動のエネルギー縮退は解けているケースが多く、軌道量子数が電子物性に与える影響はほとんどない。

分子性導体は柔らかいため、物性測定手法としても分子の振動運動を利用した赤外分光やラマン分光が有効となる。これらの手法は分子上の電子分布を直接反映し、電子状態を理解する有効な実験手法である。



1. はじめに

分子性導体は、有機分子を基本単位として構成される結晶である。一見すると、その組成式や結晶構造は極めて複雑であるが、分子を1つの格子点に置き換えてみれば、系は非常に単純化される。そこでは、各点の分子軌道の最外殻である最高被占分子軌道 (HOMO) および最低空分子軌道 (LUMO) の重なりによってエネルギーバンドが形成され、そこに詰まる電子によって物性が支配される。¹⁰⁾

ではこの単純化によって、分子の個性が失われるかというと、そうではない。分子の屈曲や伸縮といった変形自由度や分子配向・配列パターンの自由度、分子が作る多量体内における電荷自由度といった、ユニークな分子自由度は依然系に残っている。分子性導体はさらに、有機物特有のやわらかさによって、僅かな外場や分子修飾に敏感に反応する。これらの結果、多くの分子性導体は、その特徴的な内部自由度に応じた様々な秩序を示すだけでなく、外部圧力などの摂動に極めて敏感に反応し、実に豊かで複雑な電子相図を示す。^{7,8)} この「単純」・「複雑」の2つの相反する性質こそが、分子性導体の研究の面白みであろう。

分子自由度によって生じる多彩な秩序はときに互いに競合し、その相競合からも新しい物理現象が創発されよう。本稿では、最近筆者らが赤外顕微分光計測を通して明らかにした、ダイマー型分子性導体を舞台として実空間で起こる奇妙な相競合現象について紹介しよう。

2. ダイマー型分子性導体

これまでの分子性導体の研究の多くは、 A_2B と表される組成の物質群において行われてきた。この物質群では、通常B分子は閉殻構造を取る ± 1 価のイオンとなり、結晶を電氣的に安定化させる。電氣的中性条件より、A分子の形式価数は ∓ 0.5 価となり、その結果系は、A分子2個に対して1個の電子またはホールが存在する1/4充填となる。

この状況で、図1(a)のように、太線で示した2つの分子間の移動積分が大きく、それらが結合・反結合軌道を形成し、2量体 (ダイマー) 構造をとる場合を考えよう。この場合、A分子2つを1つの基本単位として見れば、ダイマーあたり1つの電荷が存在することになる。従って系は1/2充填となり、図1(b)のように電子間斥力によって電荷が局在すれば系はモット絶縁体とみなすことができる。この様子は「ダイマーモット絶縁体」と呼ばれ、ダイマー性の強い κ 型^{*1}の分子配列をとる物質で報告されている。

ダイマー格子上でより大きな電子間斥力がはたらく場合には、電荷は互いにできるだけ離れて整列する傾向を示し、その結果、図1(c)のような電荷不均化が起きる。このダイマー性電荷秩序はダイマーモット絶縁体と競合し、これらは分子間の移動積分やクーロン相互作用といった物質パラメーターの大きさによって連続的に移り変わる。¹¹⁾ このダ

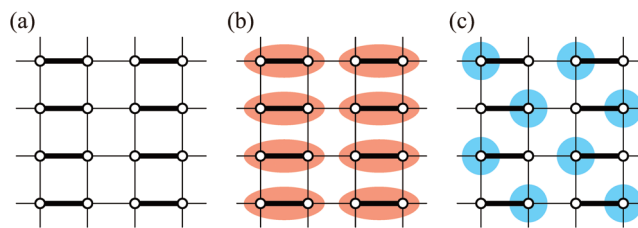


図1 A_2B の組成式を持つ2量体 (ダイマー) 型分子性導体の電子状態の模式図。(a) 2次元格子。白丸がA分子、太線が分子のダイマー化を表す。(b) ダイマーモット絶縁体。(c) 電荷秩序絶縁体。色のついた部分が電荷分布を表す。

イマー内の電荷自由度から生じる競合を顕わに示す物質が、最近いくつか報告された。その1つである κ -(ET) $_2$ Cu $_2$ (CN) $_3$ は、A分子であるET分子が強くダイマー化し、それを基本単位として三角格子を形成するダイマー性物質である。これまでこの物質は、ダイマーモット絶縁体であると考えられており、系に残されたスピン自由度から生じる基底状態に注目されてきた。¹²⁻¹⁴⁾ 最近Jawadらは、この系に非自明な電荷自由度が潜在することを示唆する異常な誘電応答を観測し、このダイマーモット絶縁体が有する電荷秩序への不安定性を提案した。¹⁵⁾ 図1(b)の状態に対して図1(c)に示すような電荷の偏りが生じ、それが電気双極子としてゆらぎ、誘電応答を示すというのである。これと似た誘電異常が、同様にダイマーモット絶縁体であると考えられてきた κ -(ET) $_2$ Cu $_2$ [N(CN) $_2$]Clや β -(ET) $_2$ ICl $_2$ でも観測されている。^{16,17)} これらの結果は、ダイマーモット絶縁体に本質的に潜む電荷秩序への不安定性を示唆している。一方、これまで電荷秩序をプローブしてきた赤外反射や磁気共鳴測定では、電荷不均化の兆候は全く観測されておらず、¹⁸⁾ 報告された誘電異常がそのような不安定性に由来するものなのかどうか疑問視する声もある。

3. β -(meso-DMBEDT-TTF) $_2$ PF $_6$

筆者らは、逆の発想からこの不安定性の問題に取り組んだ。ダイマーモット絶縁体に存在しうる電荷秩序への不安定性を調べるためには、逆に電荷秩序絶縁体が有するであろうダイマーモット相への不安定性を調べれば良いのではないだろうか。そのような観点から筆者らが注目した物質が、ダイマー性分子性導体 β -(meso-DMBEDT-TTF) $_2$ PF $_6$ である。図2(a)にその結晶構造を示す。本物質も先に述べた A_2B 組成を有しており、A分子であるmeso-DMBEDT-TTFが伝導層をなし、1価の陰イオンであるPF $_6$ (B分子) が絶縁層をなしてb軸方向に積層した層状構造をとる。図2(b)は本物質の伝導面(ac面)の分子配列を示し、点線で囲んだ2つの分子が弱くダイマー化する。

この系の電子物性については、 $T_c = 70$ Kより低温で電気抵抗率の急激な上昇が見られ、放射光X線回折実験からは、 T_c 以下で図2(c)に示すようなパターンの電荷秩序が形成されることがすでに報告されている。¹⁹⁾ 分子振動を捉える赤外・ラマン分光からも T_c 以下での電荷不均化が指摘さ

*1 組成式の前に付くこのギリシャ文字は、2次元面内でのA分子の配列パターンを表す。

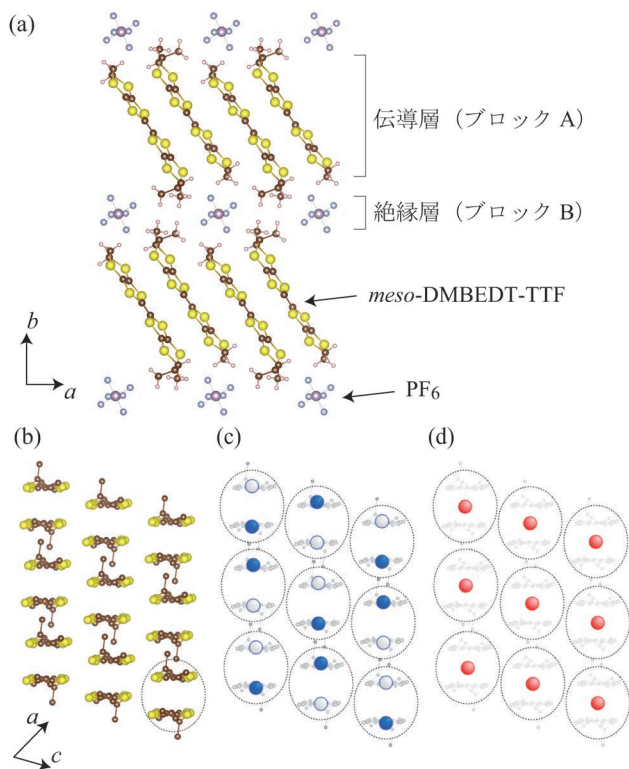


図2 (a) 分子性導体 β -(*meso*-DMBEDT-TTF) $_2$ PF $_6$ の結晶構造。(b) 伝導層の分子配置。点線で囲まれた2つの分子が弱く2量体化している。(c) 電荷秩序絶縁体状態。青と白色の丸が電荷の有無を表す。(d) ダイマーモット絶縁体状態。赤色の丸が2量体の反結合軌道にある局在ホールを表す。

れている。²⁰⁾ その電荷整列パターンは特徴的であり、電荷が片方の分子に偏極したダイマーが、隣のダイマーと分極方向を反対にして並んだ反強誘電秩序と捉えることができる。従って、ダイマー内で電荷が偏極した状態(電気双極子)がゆらいでいると述べた κ 型ダイマーモット絶縁体と比較すると、本物質は電気双極子が秩序化した状態であり、これらは相境界に対して双対をなす物質群であると言えるだろう。

では、本物質にダイマーモット絶縁相への不安定性は存在するのだろうか。筆者らは、分光学的研究からこの問題を検証した。図3に反射率測定より得られた光学伝導度スペクトルを示す。これらは非常に強い温度依存性を示しており、特に T_c 前後でスペクトルの形状ががらりと変わり、0.2 eV付近に電荷秩序の形成に伴う大きなピークが現れる。スペクトルに見られるもう1つの特徴は、高温相で強い温度依存性を示す0.6 eV付近のピーク構造である。この領域に存在するピークは、ダイマー性分子性導体にしばしば観測されるピークであり、ダイマーの結合-反結合軌道間の遷移に対応するダイマーピークとして知られているものである。重要な点は、このダイマーピークの振動子強度が降温に伴い T_c に向かって増大している点である。この振る舞いは、ダイマーモット絶縁相で見られる特徴であり、²¹⁾ このことは本物質の高温相がダイマーモット絶縁相とみなせることを示唆する。実際、直流伝導率から見積もられるドルーデの寄与は、観測されたエネルギー域の伝導度の値

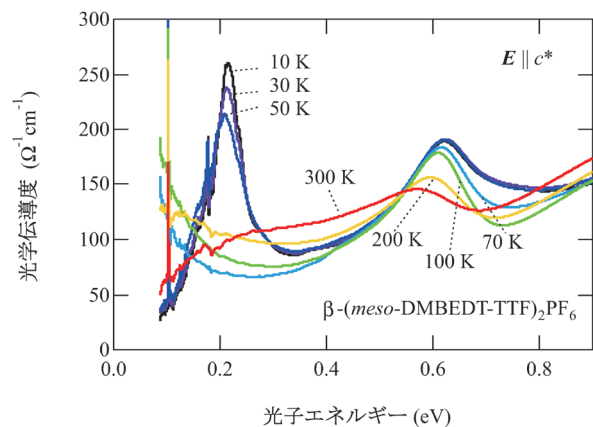


図3 反射率をクラマース・クロネック変換して求められた β -(*meso*-DMBEDT-TTF) $_2$ PF $_6$ の各温度における光学伝導度。

と比較して十分小さく、0.3 eV程度までの遷移に参与する有効電子数も、組成式あたりわずか0.1程度と典型的な金属と比較して極めて小さな値に見積もられる。これらの結果は、この系の相転移が、ダイマーモット相から電荷秩序相への絶縁体-絶縁体転移であることを意味する。

4. 赤外イメージング分光で見た実空間相競合

筆者らは、SPring-8の赤外ビームラインBL43IRに設置された顕微分光ステーションにて、この競合する2相間の相転移現象の実空間観察を行った。このビームラインでは、高輝度放射光を光源として用いることで、赤外光の回折限界程度まで測定領域を絞り込み、かつ精度良く反射スペクトルを計測できる。局所的な電子状態を赤外分光で捉え、その場所依存性を測定することで、試料表面の電子状態をイメージングとして可視化するわけである。

局所的な電子状態の解析手法として、ここでは反射率に現れる*meso*-DMBEDT-TTF分子の分子振動ピークに着目した。電荷秩序を示す分子性導体では、転移温度以上で等価であった2つの分子が、電荷秩序形成により非等価となることで、対応する分子振動のピークが2つに分裂する。²²⁾ 本物質の場合、ダイマーモット相で181 meVに存在するピークが、電荷秩序相で178 meVと184.5 meVの2つのピークに分裂する。²⁰⁾ そこで、この分子振動を局所電子状態の指標とし、それぞれの場所の局所反射スペクトルに対して、電荷秩序状態とダイマーモット状態の分子振動ピークエネルギーでの反射率の値の比をとって、図4にカラープロットで示した。図の青色の領域が電荷秩序状態、赤色がダイマーモット絶縁体状態を表している。

図から明らかなように、高温側では均一な状態であるのに対し、 T_c 以下では、電荷秩序とダイマーモット絶縁体が混在した空間的に不均一な電子状態が実現していることが分かる。この原因として、試料温度の不均一や、試料の接着に使用したペーストからかかる圧力の不均一がすぐに思い浮かぶだろう。詳細は文献9を参照していただきたいが、高温相でのスペクトルの均一性や、異なる接着方法を用い

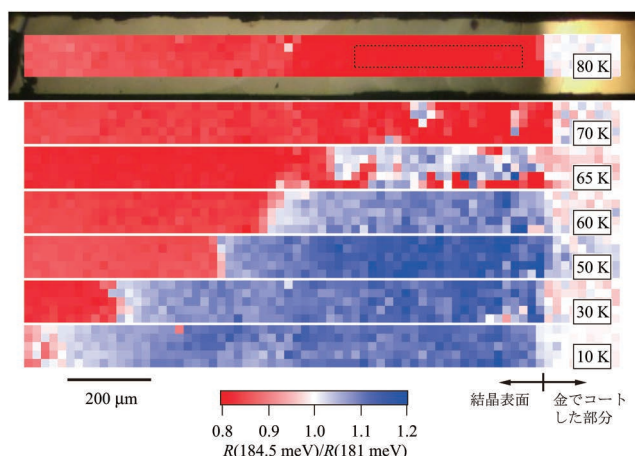


図4 ダイマー型分子性導体 β -(*meso*-DMBEDT-TTF) $_2$ PF $_6$ における実空間不均一、電荷秩序状態とダイマーモット状態の分子振動ピークエネルギーでの反射率の比を、カラープロットで示す。青色の領域が電荷秩序状態、赤色がダイマーモット絶縁体状態を表す。測定した試料の写真を、80 Kのデータと重ねて示す。また、80 Kのデータに点線で示してある領域は、図3のスペクトルを計測した領域を表している。

て固定した試料の不均一性の評価から、これらの外因的な可能性は排除される。

この不均一は非常に奇妙である。まず、この状態が均一な単結晶試料で起きていることに注意していただきたい。酸化物で見られるような、元素置換を行って現れる2相競合の不均一とは質的に異なる。^{5,6)} 均一な系で起きる競合という意味では、異なる波数の電荷秩序が競合する θ 型分子性導体と状況は同じである。²³⁾ ただし、本物質で観測された不均一の空間スケールは異常なまでに大きい。この原因については今のところ分かっていないが、重水素置換した κ 型物質でも巨視的な不均一が観測されており、²⁴⁾ これは分子性導体特有の性質であるかもしれない。観測された不均一が、 T_c よりも十分低い10 Kでも生じていることも注目すべきだろう。通常の1次相転移のヒステリシスに伴うような、2相共存とも異なることは明白である。

高温相が T_c よりも十分低温で存在することは、従来の相転移の概念とは全く異なる。このことは、この相転移が生じる際、有限温度の転移現象であるのにも関わらず、自由エネルギーのエントロピー項はほとんど関与していないことを示唆する。筆者らはむしろ、この系の相転移が基底状態の相図上で理解され、温度によって分子間の移動積分やクーロン相互作用といった物質パラメーターが変化し、ある臨界値に達したことで生じている相転移現象であると考えた。実際、この系の物質パラメーターの温度変化は大きく、特にダイマー間の移動積分は室温から11.5 Kで2倍程度増大する。²⁵⁾ 分子の個性に立ち戻れば、*meso*-DMBEDT-TTF分子端のメチル基が立体障害となって生じた大きな空間自由度が、物質パラメーターの大きな温度変化を引き起こしているかもしれない。Clayらの提案する基底状態の相図によれば、²⁶⁾ ダイマー間の移動積分の増大は、ダイマーモット相からPaired electron crystal相への相転移を引き起こす。図2(b)に示した電荷整列パターンは、その概念

とも一致している。本研究で見出した2つの電子相が低温で残存することは、この物質が正にそのような2相競合の境界線上に位置する物質であることを示唆する。

このような不均一が、他の実験結果をよく説明できることについても言及したい。この系における電荷秩序はX線と分光測定によって見出されたが、観測された転移の振る舞いは両者が異なっている。X線で見えた超格子反射強度は T_c 以下で緩やかに上昇しており2次相転移的であるのに対し、¹⁹⁾ 反射スペクトルに観測されるピーク分裂は極めて急激であり、1次相転移的であった。²⁰⁾ 筆者らが見出した不均一からは、X線の結果が体積分率の温度依存性も含んでいるものとして解釈できる。

5. おわりに

本稿では、筆者らが赤外分光測定を通じて見出した、ダイマー型分子性導体 β -(*meso*-DMBEDT-TTF) $_2$ PF $_6$ における相競合現象について紹介した。筆者らは観測された実験結果から、(1)この系の高温相は、電荷がダイマーに局在するダイマーモット絶縁体とみなせること、(2)この系の相転移は温度変化を通じた物質パラメーターの変化によって駆動され、本物質が競合する電荷秩序相とダイマーモット絶縁体相の境界線上に位置することで、実空間不均一が十分低温まで現れ得ることを提案した。

本稿で紹介した β -(*meso*-DMBEDT-TTF) $_2$ PF $_6$ は、まさに電荷秩序とダイマーモット絶縁体の競合する2つの顔を併せ持つ物質である。観測された不均一は外場に対してどのような応答を示すのか、またその低エネルギー励起はどのように記述され、 κ 系で指摘された不安定性とどのように整合させるのかなど、今後の課題は多い。一方、本稿で指摘した、物質パラメーターの変化を通して駆動される相転移現象は、この物質だけでなく、やわらかな分子性導体に共通する概念であろう。とりわけ、結晶構造が大きく温度変化する高温域で起きる相転移に関しては、このようなメカニズムも考慮して理解する必要があるだろう。

本稿で論じた相競合現象は、ダイマーの有する内部自由度によって生じた現象であり、そのようなクラスター自由度の概念は、無機化合物にも拡張して考えることができる。このような観点から、最近筆者らはBaIrO $_3$ やBa $_4$ Ru $_3$ O $_{10}$ の研究も進めている。^{27,28)} これらの物質は、酸素八面体が面共有で連なった3量体構造を内包し、低温で特徴的な相転移現象を示す。そのような物質群はいわば無機分子で構成された分子性導体であり、そのような新しい自由度が導入された系では、私たちがまだ認知していない新しい秩序とその競合もまた生じ得るだろう。

本稿で紹介した内容は、池本夕佳、森脇太郎、高橋一志、森 初果、佐々木孝彦、安井幸夫の各氏らとの共同研究です。また、薬師久弥、岡本 博、福山秀敏の各氏には有益な議論をして頂きました。この場をお借りしてお礼申し上げます。

参考文献

- 1) 飯田 圭: 日本物理学会誌 **57** (2002) 883.
- 2) 酒見泰寛: 原子核研究 **52** (2007) 46.
- 3) 求 幸年: 物性研究 **89** (2008) 863.
- 4) J. A. Mydosh, P. M. Oppeneer: Rev. Mod. Phys. **83** (2011) 1301.
- 5) 符 徳勝, 谷口博基, 伊藤 満, 森 茂生: 日本物理学会誌 **66** (2011) 270.
- 6) 守友 浩: 日本物理学会誌 **57** (2002) 84.
- 7) K. Kanoda: Hyperfine Interact. **104** (1997) 235.
- 8) C. Bourbonnais and D. Jérôme: Science **281** (1998) 1155.
- 9) R. Okazaki, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **111** (2013) 217801.
- 10) T. Mori, *et al.*: Bull. Chem. Soc. Jpn. **57** (1984) 627.
- 11) 妹尾仁嗣, 鹿野田一司, 福山秀敏: 日本物理学会誌 **58** (2003) 801.
- 12) Y. Shimizu, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **91** (2003) 107001.
- 13) S. Yamashita, *et al.*: Nat. Phys. **4** (2008) 459.
- 14) M. Yamashita, *et al.*: Nat. Phys. **5** (2009) 44.
- 15) M. Abdel-Jawad, *et al.*: Phys. Rev. B **82** (2010) 125119.
- 16) P. Lunkenheimer, *et al.*: Nat. Mater. **11** (2012) 755.
- 17) S. Iguchi, *et al.*: Phys. Rev. B **87** (2013) 075107.
- 18) K. Sedlmeier, *et al.*: Phys. Rev. B **86** (2012) 245103.
- 19) S. Kimura, *et al.*: J. Am. Chem. Soc. **128** (2006) 1456.
- 20) M. Tanaka, *et al.*: J. Phys. Soc. Jpn. **77** (2008) 024714.

- 21) T. Sasaki, *et al.*: Phys. Rev. B **69** (2004) 064508.
- 22) K. Yakushi: Crystals **2** (2012) 1291.
- 23) 寺崎一郎: 日本物理学会誌 **60** (2005) 212.
- 24) T. Sasaki, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **92** (2004) 227001.
- 25) T. Shikama, *et al.*: Crystals **2** (2012) 1502.
- 26) S. Dayal, *et al.*: Phys. Rev. B **83** (2011) 245106.
- 27) 中野智仁: 高圧力の科学と技術 **18** (2008) 62.
- 28) T. Igarashi, *et al.*: J. Phys. Soc. Jpn. **82** (2013) 104603.

(2014年2月3日原稿受付)

Phase Competition and Spatial Inhomogeneity Induced by Molecular Degrees of Freedom

Ryuji Okazaki and Ichiro Terasaki

abstract: Internal degrees of freedom are a fundamental concept penetrating into various fields of physics. The organic molecular conductors possess unique molecular degrees of freedom, which lead to complex electronic and magnetic phases at low temperatures. Here we review a novel phase-competition phenomenon associated with large-scale spatial inhomogeneity emerged in a border of such ordered states.

日本物理学会誌 第69巻 第9号 (2014年9月号) 予定目次

巻頭言

物理共同体……………宮下精二

最近のトピックス

宇宙からの謎の電波突発現象, 高速電波バースト……………木坂将大
現代物理のキーワード

同期現象研究の広がり……………郡 宏
解説

キログラムの定義改定に向けた質量標準の開発動向……………藤井賢一
シリーズ「量子論の広がり—非局所相関と不確定性—」

量子エネルギーテレポーテーション……………堀田昌寛, 遊佐 剛
最近の研究から

多価イオンの衝突過程に現れるブライト相互作用効果
……………中村信行

磁気構造変化の実時間追跡……………元屋清一郎
ピエゾ応答力顕微鏡を用いた有機強誘電体ドメイン構造と

分極反転過程の可視化……………賀川史敬, 堀内佐智雄

光合成系の光捕集過程を構造に立脚して理解する: 理論と実験
の融合で見えてきたこと……………柴田 穰

話題

サイエンスコミュニケーション……………縣 秀彦
JPSJの最近の注目論文から 5月の編集委員会より

……………安藤恒也
談話室

屋久杉に残された¹⁴Cと宇宙線強度……………江沢 洋
長岡・ラザフォード・ボア模型のすすめ……………稲村 卓

追悼

八木浩輔先生を偲んで……………三明康郎, 初田哲男, 永宮正治

新著紹介

会員の声

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 the Physical Society of Japan (JPSJ) の論文で2014年3月に掲載可となった中から2014年4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、紹介文は物理学会のホームページの「JPSJ注目論文」でも公開しています。

内容の詳細は、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ご覧ください (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」覧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。なお、今月は本年の6月号に掲載された特集“Special Topics: Advances in Physics of Strongly Correlated Electron System”についても紹介いたします。

異なる立体構造を持つ2種類の超固体相の間の相転移

レーザーの定常波によって作られた周期ポテンシャルの中にアルカリ金属原子などの冷却原子気体を閉じ込めた光格子系は、格子形状やポテンシャルの深さ、粒子間の相互作用など、様々なパラメータを制御することができ、理論的な格子模型の低温物性を実験的に検証することのできる理想的な系である。実際、 ^{87}Rb などのボゾン系においては、粒子の遍歴性に起因する超流動性と局在性に起因する固体相の競合が観測されている。相互作用が強い時には、粒子は隣のサイトに移動することができず、それぞれ1つのサイトに局在する状態が実現する。この状態は、遷移金属酸化物中の d 軌道電子における同様の現象にちなんでモット絶縁体と呼ばれている。一方、相互作用が弱い極限では、ボーズ・アインシュタイン凝縮が起こり、超流動性を示す。これら2つの状態が競合することで起こる超流動-モット絶縁体転移は、格子ポテンシャルの深さによって実効的に粒子間の相互作用の大きさを制御することで、2002年に実現されている。

近年では、粒子の局在性と遍歴性が共存する“超固体相”の存在が注目を集めている。相関ボゾン系を記述するハー

ドコア・ボーズ・ハバード模型において、相互作用が強い極限では粒子は局在化し固体 (密度波) を形成する一方、相互作用が弱い極限ではBEC超流動状態が起こる。これらの中間領域において、粒子の超流動性と局在性が同時に発現する超固体相の存在が理論的に明らかにされた。最近接相互作用モデルにおいては2次元三角格子と面心立方格子でのみ示されており、格子の形状は超固体相の安定性と深く関連している。一方、冷却ボーズ原子を用いた実験においては純粋な2次元の三角格子を実現することは難しく、3次元的構造を考慮した積層三角格子系において超固体状態の実現可能性を明らかにすることが求められている。

最近、東京工業大学大学院理工学研究科の研究グループは、積層三角格子上のハードコアボゾン系においてクラスター平均場理論と密度行列繰り込み群法を組み合わせた方法により、絶対零度における超固体相の安定性の解析を行った。その結果、2種類の超固体相が安定化することを見出した。この成果は、日本物理学会が発行する英文誌 Journal of the Physical Society of Japan (JPSJ) の2014年6月号に掲載された。

これらの2種類の超固体相は、図1に示すように異なる3次元的固体構造を持つ。また、三角格子の面内、層間の

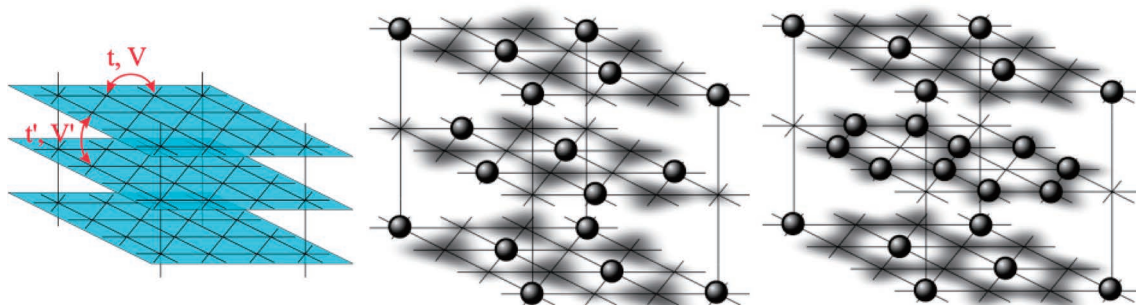


図1 積層三角格子 (左) と、2つの超固体相 SS- α (中央)、SS-1/2 (右) の3次元構造の模式図

相互作用を変化させることにより、これらの超固体相の間の量子相転移が起こることを示した。これまでの2次元三角格子における解析によると、超固体相はハーフフィリングにおいて実現しなかったが、積層三角格子系においては、偶数番目の層の粒子の一部が奇数番目の層に移動するセルフドーピングよりハーフフィリングを保ち、超固体相が安定化することが明らかとなった。

本研究においては、三角格子を光格子系で実現する際に排除することができない層間の効果に注目し、超固体相が広いパラメタ領域において安定であることを明らかにした。さらに、異なる3次元構造を持つ超固体相の間の量子相転移という新しい現象の存在を示した。本研究では粒子間の相互作用が斥力の時のみを扱っているが、引力相互作用のモデルはグラファイト表面上の⁴He系のモデルとなっており、今後の研究が期待される。

原論文

Supersolid states in a hard-core Bose-Hubbard model on a layered triangular lattice

Ryota Suzuki and Akihisa Koga: J. Phys. Soc. Jpn. **83** (2014) 064003.

〈情報提供：鈴木亮太(東京工業大学大学院理工学研究科)
古賀昌久(東京工業大学大学院理工学研究科)〉

News and Comments

The appearance of a supersolid phase on a three-dimensional frustrated lattice

S. Miyashita: JPSJ News Comments **11** (2014) 08.

Special Topics: 「Advances in Physics of Strongly Correlated Electron System」

近年、強相関電子系のキーワードがカバーする物質系も増え、重い電子系化合物の*f*電子系をはじめ、銅酸化物・鉄砒素超伝導に代表される*d*電子系、*p*電子が重要な役割を果たす有機物化合物系などが挙げられます。これらの系は、物質が持つ創発性が顕著に現れる舞台であり、物性物理の主要な概念を生み出してきたことをご承知の通りです。

本特集は、2013年8月に東京大学本郷キャンパスで開催された「強相関電子系の国際会議(SCES2013)」におけるPlenaryおよび招待講演者に、強相関電子系の最近の実験・理論の研究動向を解説いただくReview論文の執筆を依頼しました。依頼した著者は各物質系で精力的に活躍されている研究グループの方々に、その系やその系の問題点について、背景から最近のホットな研究内容にわたって解説していただくようお願いしました。大変お忙しい中、執筆いただいた著者の方々には厚くお礼申し上げます。全部で19編の論文が2014年83巻6月号に掲載されています(DOI: <http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.83.061001-061019>)。全論文はどなたもご覧いただけるようになっています。本特集が、当該研究者の今後の更なる研究の発展に役立つことを期待しています。

企画担当編集員：

石田憲二(京都大学)、小形正男(東京大学)、堀田貴嗣(首都大学東京)、川上則雄(京都大学)、上田和夫(chair of SCES2013, 東京大学)

第69回年次大会 招待・企画・チュートリアル講演の報告

領域委員会

【招待講演】

素粒子実験領域「The T2K experiment—electron neutrino appearance, muon neutrino disappearance and future prospects」
田島 治 (KEK)

[A] Roger Wendell (ICRR)

[B] T2K実験における、電子型ニュートリノ出現事象とミュー型ニュートリノ消失事象の独立な解析に加え、両事象を同時に解析した統合解析の最新結果が報告された。同実験によりミュー型ニュートリノから電子型ニュートリノへの振動現象が発見されて、ニュートリノ振動においてCPの破れの測定が実現可能になったが、この現象は、CPの破れのパラメーターである δ_{CP} だけでなく、全ての混合角に依存するため、ミュー型ニュートリノの消失パラメーターを精密に測定する必要がある。最新結果では、加速器から標的に到達した陽子数 (POT) にして 6.57×10^{20} POT相当のデータが使用され、前置検出器の測定によりニュートリノフラックスとニュートリノ反応モデルの不定性を厳しく制限でき、後置検出器における事象数の不定性が約20%から8%に削減された。実験データから120個のミュー型事象が確認された結果、T2Kは混合角 θ_{23} に対してもっとも厳しい制限を掛けることができた。これらの事象と28個の電子型事象を同時に解析し、原子炉実験の制限を用いることで、 δ_{CP} の一部の領域が90%の信頼度で排除されることが示された。この示唆が、CPの破れの兆候になるかを判断するため、更にデータを蓄積する必要がある。将来感度としては、T2K実験の最終的なデータで複数のシナリオにおいてCPの破れを90%信頼度で証明できることも報告された。(報告：中家 剛 (京大))

宇宙線・宇宙物理領域、素粒子論領域「重力的に崩壊する粒子へのビッグバン元素合成からの制限」

谷口敬介 (東大総合文化)

[A] 郡 和範 (KEK素核研)

[B] 昨年2013年に川崎雅裕、郡 和範、諸井健夫の三氏が第7回湯川記念財団・木村利栄理論物理学賞を受賞された。本講演では、その受賞研究課題「超重力理論と初期宇宙の元素合成」の内容について、郡氏に分り易く解説していただいた。

我々の宇宙は、ビッグバンと呼ばれる熱い火の玉から始まったというモデルにより、近似的に記述されることが知られている。宇宙初期の火の玉の中でリチウムまでの軽い元素の合成が行われ、それらの軽元素に対する理論予言値と観測値は非常によく一致している。しかし、宇宙初期に

未知の粒子が崩壊して高エネルギー粒子を放出すると、合成される軽元素の存在量に影響を与える。郡氏らの研究では、その影響が大きくなれば現在の観測と矛盾する、ということを利用して、そのような新粒子の性質に対して制限を与えた。講演ではまず、郡氏らの研究へと続くビッグバン元素合成の理論研究の歴史に言及した後、宇宙の歴史に沿った標準ビッグバン元素合成についての説明と、軽元素の観測量についての解説を行った。最後に、量子重力の候補理論に存在する不安定粒子の存在量にどのように制限を加えるか、例として超対称性理論を取り上げ、詳しい解説が行われた。

領域4「スピン軌道相互作用をもちいたスピントロニクス」

寺澤大樹 (兵庫医大物理)

[A] 新田淳作 (東北大院工)

[B] 半導体スピントロニクスに関する分野は領域4でも特に研究が盛んで、これまでに多くの発表が行われてきた。新田教授は、半導体スピントロニクスの分野を多年にわたりリードしてきたが、最近も半導体中の電子スピンの幾何学的位相の観測に成功するなど、すばらしい成果を次々に発表している。しかしながら、新田教授は主に応用物理学学会において成果発表を行っており、これまで物理学会では詳しく成果を拝聴する機会がなかった。そこで、上記スピンの幾何学的位相観測の内容を中心に、半導体中のスピン軌道相互作用をもちいたスピントロニクスの研究に関する講演を新田教授に行っていたいただいた。

講演では、スピン-軌道相互作用の基礎的な事柄から始まり、半導体中でのシュテルン-ゲルラッハ実験の再現、アハラノフ-キャッシャー効果を用いた幾何学的位相の検出など、これまでの研究成果をもとにした多岐にわたるトピックが紹介され、Spin-Orbitronicsの本格的な応用に向けて非常に示唆に富んだ内容だった。本講演は、通常の半導体スピントロニクスセッションでは異例の100名を超える聴衆を集め、大変魅力的な内容であったことが示された。

領域4「Transport through topological states of matter」

村上修一 (東工大)

[A] Patrik Recher (Braunschweig工科大, 東工大)

[B] トポロジカル絶縁体、トポロジカル超伝導体、マヨラナフェルミオンに関連した新しい物理現象、伝導特性を持つ系が提案され最近注目を集めている。以前はかなり理論主導であったが、最近は様々な実験が報告され、理論・実験とも精力的に研究が進められている。

Patrik Recher氏はメゾスコピック伝導、グラフェンなどで多くの顕著な業績をあげてきた物性理論の研究者であり、最近ではトポロジカル絶縁体の伝導について精力的に研究されている。本講演ではRecher氏の最近の研究の中から、トポロジカル絶縁体のヘリカルエッジ状態に対する種々の後方散乱機構の話題、またマヨラナ端状態を持つワイヤのTジャンクションについての話題について講演をされた。ヘリカルエッジ状態については、非磁性不純物による弾性散乱を受けないという顕著な特徴があるが、非弾性散乱の影響があるとコンダクタンスが量子化値からずれる。これについて、端でのラッシュバ相互作用とフォノンがある場合の影響、量子ドットとの結合などについて、電子間相互作用によってラッティンジャー流体として記述される場合も含めて議論された。またマヨラナ端状態を持つワイヤのTジャンクションについては、full counting statisticsに基づき、端子間のコンダクタンス測定からいかにマヨラナ端状態の証拠を引き出すか、という点について詳しく解説が行われた。特に実験での観測にも重点をおいて講演されたため、理論家のみならず実験家にも分かりやすい講演であった。280人程度収容できる会場であったが、ほぼ満席で立ち見も出るほどの盛況であり、こうした話題に対する関心の大きさをうかがわせる。

領域5「半導体における励起子分極のコヒーレント過渡現象」

金光義彦(京大化研)

[A] 南 不二雄(東工大院理工)

[B] 超短時間光パルス発生技術の発展により、フェムト秒・アト秒の光パルスの発生が可能となった。このような超短時間光パルスを使った実験により、今まで見えなかった時間領域の現象が見えるようになり、かつ今まで出来なかったような制御が可能となりつつある。講演者の南氏は、超短時間光パルスを用いた非線形分光およびコヒーレント制御に関して、その初期から現在まで精力的に研究を進めてきた。また最近では、励起子-フォノン相互作用に現れる非マルコフ的過渡応答や励起子間相互作用に現れる非マルコフ性について独創的な研究を行っている。本講演では、固体における非線形分光とコヒーレント制御の概要から最近の研究成果まで、解説していただいた。講演では、はじめに固体中の励起子分極の位相緩和現象とその代表的な測定法である四光波混合法を解説した。続けて、位相制御した光パルス列を用いたコヒーレント制御技術とこれを用いた光励起状態の操作について最近の実験結果を交えて解説を行った。また、層状化合物半導体や半導体量子ドットにおける熱浴と励起子の相互作用に由来した非マルコフ的緩和現象について紹介した。さらに、励起子系が熱浴との相互作用を覚えていることを利用して、励起子系の位相緩和過程を凍結する操作である位相緩和抑制についても述べた。講演は非常にわかりやすく、多くの聴講があり、休憩時間も含めて活発な質疑応答が行われた。

領域5「Fiber-based platform for functional studies in neurophotonics」

迫田和彰(物・材機構)

[A] Andrei Fedotov(モスクワ大学国際レーザーセンター)

[B] アンドレイ・フェドトフ准教授の研究グループは、これまでに各種のフォトニック結晶ファイバーを開発して群速度分散の制御技術を確立し、効率的な4光波混合やスーパーコンティニューム発生を達成するとともに、フォトニック結晶ファイバーで得られた広帯域超短光パルスを利用してコヒーレントアンチストークスラマン散乱などの非線形光学実験に応用してきた。また、最近では、神経細胞に結合した蛍光マーカーを用いて、生体内に埋め込んだフォトニック結晶ファイバーで光励起と蛍光捕捉を行うことにより、神経細胞の興奮状態の観測などを試みている。さらに、開口数が大きく蛍光の効率的な捕捉が可能で、かつ、励起光の波長で群速度分散をゼロにする構造を中心部分に導入した2重フォトニック結晶ファイバーを作製するなどして、細胞レベルの空間分解能をもつ効率的な蛍光イメージングを目指している。本招待講演では、これらの研究の最新の成果について紹介していただいた。また、頭部に埋め込んだ光ファイバーを通して脳に光刺激を与えることで、マウスの運動性が変化する様子等、ビデオ映像もたいへん面白かった。

領域9「対称性に起因したシリコン表面上の特異なラッシュバ効果」

武田さくら(奈良先端大)

[A] 坂本一之(千葉大)

[B] 微細化による半導体素子の高性能化が限界を迎えつつある現在、半導体スピン物性の利用は限界を打破しうる手段の一つとして重要である。半導体で出現するスピン物性のうちエネルギースケールの最も大きなものは、近年相次いで発見されている金属吸着半導体表面のラッシュバ型スピン分裂(RSS)電子状態である。本招待講演ではこのRSS電子状態のスピンの向きや輸送特性に関する研究における、坂本氏らによる重要な進展をまとめて講演頂いた。金属吸着半導体表面系のRSS電子状態のスピンが、理想的2次元電子系の単純なRSSと異なり波数に応じて回転し表面垂直成分を持つこと、またそれらのスピンの挙動が表面超構造の対称性で説明でき、表面超構造の対称性を変えればスピンの挙動も変わることが紹介された。更に、坂本氏らが発見した完全なスピン偏極を持つRSSバンドについて、そのエネルギー位置を表面キャリアドーピング法でフェルミ面に合わせ、このバンドを経由する伝導電子の後方散乱がスピン保存の成り立たない方向では実際に抑制されることを示した実験結果が発表された。光電子分光にてRSSが初めて観測されてから18年が経ち、実際の系におけるRSSの詳細の解明がここまで進んだことは感慨深い。本招待講演において聴衆は100人を超え、会場後方には立ち見の方々もおられた。講演後には、活発な質疑応答が行われた。

【企画講演】

素粒子論領域, 理論核物理領域, 宇宙線・宇宙物理領域

「第8回中村誠太郎賞受賞講演」 金児隆志 (KEK)

[A] 授賞式 (菅本晶夫: お茶大理), 巨大ブラックホールの形成過程の解明に向けて (川口俊宏: 山口大理工), Spontaneous supersymmetry breaking in noncritical covariant superstring theory (黒木経秀: 名大KMI), ローレンツ対称性がない場合の南部・ゴールドストーンボソンの一般論 (渡辺悠樹: U.C. Berkeley)

[B] 素粒子奨学会により第8回中村誠太郎賞の授賞式が執り行われ, 続いて, 受賞者である川口俊宏氏, 黒木経秀氏, 渡辺悠樹氏による受賞講演が行われた。

川口氏の講演では, 巨大ブラックホールの形成過程の解明に向けた業績が解説された。巨大ブラックホールの起源や成長過程はこれまでよくわかっていなかったが, 川口氏は, 電子散乱や相対論的効果を取り入れた現実的な数値計算により, ブラックホールが急速に成長する超臨界ガス降着が起こることを示した。この業績は, 観測されている輻射スペクトルを説明することに成功し, 巨大ブラックホールの発見にもつながっている。

黒木氏の受賞論文は, 行列模型と超弦理論の等価性と超対称性の破れに関するものである。講演では, まず, ある Ramond-Ramond 背景場上の type IIA 超弦理論と double-well 型相互作用をもつ超対称行列模型が2重スケーリング極限で等価であることが, 様々な相関関数の計算によって示された。次いで, この等価性と行列模型側での秩序変数の計算に基づき, 超弦理論側の超対称性が自発的に破れるという興味深い指摘がなされた。

渡辺氏の講演は, 南部-Goldstone 定理の一般化についてであった。対称性の自発的破れによってギャップレスの励起モードが現れることは, 南部-Goldstone 定理として知られており, 素粒子物理における重要な基本概念の一つである。渡辺氏は, この定理をローレンツ対称性が顕に破れている系に拡張し, 物性物理における結晶格子など, 幅広い系に応用できる一般的定理を導くことに成功した。

本企画講演では, これらの優秀な業績が丁寧に解説され, 多くの聴衆が集まった。今後も中村誠太郎賞によって優れた業績が評価され, 若手研究者の意欲的研究を促すことを期待したい。

素粒子論領域, 宇宙線・宇宙物理領域「初期宇宙におけるスカラー場のダイナミクス」 金児隆志 (KEK)

[A] 中山和則 (東大理)

[B] 素粒子の統一モデルに含まれる各種のスカラー場は, 初期宇宙の進化において, インフレーション, 密度揺らぎの生成, バリオン数生成, モジュライ問題など様々な場面で重要な役割を果たす。一例としては, 最近存在が報告された宇宙背景輻射の B モード偏光が, 宇宙のインフレーションを起こすインフラトンというスカラー場の, 超高エネ

ルギー領域での性質に対する条件を与えることで強い関心を集めている。

本講演では, 素粒子論的宇宙論における若手の第一人者である中山氏により, 初期宇宙でのスカラー場のダイナミクスに関する解説が行われた。インフレーションのレビューに続き, インフレーション終了後に起きる, インフラトン場の振動エネルギーの輻射エネルギーへの転換 (宇宙の再加熱) が議論された。それに関して, 中山氏らの近年の研究成果に基づき, 再加熱過程においてインフラトン場の振動や宇宙の熱浴による影響を適切に扱う手法, およびそれが再加熱温度に与える効果が紹介された。

本講演は, 近年大きく進展している素粒子論的初期宇宙論の重要なテーマを扱っていることもあり, 多くの聴衆の関心を集め, 大変意義のあるものであった。

素粒子論領域「M理論の分配関数を計算する」

佐藤勇二 (筑波大数物)

[A] 奥山和美 (信州大理)

[B] 重力を含む素粒子の統一理論の有望な候補である弦理論において, 様々な摂動論的超弦理論を包括する 11 次元理論 (M 理論) や弦理論のソリトン (ブレイン) は中心的な研究テーマとなっている。また, ブレインの研究から重力・弦理論が次元の低い時空中のゲージ理論と等価であるというゲージ/重力対応 (双対性) が発見され, 強結合ゲージ理論への応用など, 精力的な研究が続いている。特に, 反ドジッター時空中での M 理論の双対理論として ABJM (Aharony-Bergman-Jafferis-Maldacena) 理論と呼ばれるゲージ理論があり, M 理論, ブレインのダイナミクス, ゲージ/重力対応の解明に向けた研究が進展している。

本講演では, 弦理論の分野を牽引する研究者の一人である奥山氏により, ABJM 理論の分配関数に関する近年の進展について解説が行われた。まず, この話題の背景が説明された後, 奥山氏と共同研究者らによる非摂動効果まで含めた厳密な分配関数の計算が紹介された。局所化, 位相的弦理論, フェルミガス描像といった様々な手法・考察を取り入れながら計算を推し進め理論の性質が明らかになってゆく様が数式を多用せず解り易く示された。この話題に直接関わらない方も含めた多くの聴衆にとって大変興味深い講演となった。

素粒子論領域「格子ゲージ理論による新物理模型の非摂動論的研究」 山田洋一 (東北大理)

[A] 伊藤悦子 (KEK)

[B] 格子上の数値シミュレーションは, ゲージ理論を非摂動論的に研究できる有望な手法であり, 高温高密度下でのクォーク物質の諸性質の研究など, QCD の定量的研究に用いられてきた。近年では, この手法を用いて, 標準理論を超える新物理の模型を非摂動論的に研究することが本格化しつつある。例えば, QCD の研究で培われてきた計

算手法を比較的簡単に適用できるため、ウォーキング・テクニカラーモデルへの応用を目指した多フレーバーゲージ理論の研究は急速に進展している。そこで、本企画講演では、多フレーバーゲージ理論や余剰次元モデルなど、幅広い研究で活躍されている KEK の伊藤悦子氏に、これまでの研究を俯瞰し、その問題点を議論して頂いた。講演では、特に、多くのグループが異なる計算結果を報告していて、近年の懸案となっている、多フレーバーゲージ理論の異常次元の計算に焦点が置かれた。これまでの研究を、用いている計算手法の観点から俯瞰し、各計算手法の長短所と、計算結果の食い違いの原因についての考察を、非専門家にもわかるように丁寧に説明して頂いた。講演後も活発な質疑応答が行われ、非常に有意義な講演となった。

素粒子実験領域、ビーム物理領域「SuperKEKB 加速器の技術進展と建設状況・展望」 吉岡瑞樹 (九大 RCAPP)

[A] 岩崎昌子 (KEK 加速器)

[B] KEK の加速器グループの岩崎氏から、SuperKEKB 加速器で用いられている技術や、建設状況について報告があった。SuperKEKB は 2010 年に運転を終了した KEKB 加速器を高度化する加速器で、世界最高だったルミノシティをさらに 40 倍に増強することをめざしている。そのために SuperKEKB が採用したのは「ナノ・ビーム」方式で、水平方向のビームサイズをナノメートルのオーダーまで小さくし、ビームの交差角度を大きくする。

そのための KEKB からの改造点の技術的な側面についての発表は興味深いものであった。衝突点の設計では、きわめて複雑な形状の多数の小さな磁石からなる最終収束用の磁石システムが用いられており、KEKB 加速器からの技術の革新があったことが伺える。また、わずかな振動を抑制するための床面の対策や、KEKB とアメリカの PEP-II の両方の方式を取り入れたビームの衝突を維持するためのフィードバックシステムなど、様々な点で新しい技術を取り入れ、開発されていることがわかった。

この他にも、ダンピングリングの建設状況、主リングでの磁石やビームパイプの設置の状況についても報告された。2015 年への SuperKEKB の運転開始が楽しみである。

(報告：西田昌平 (KEK))

素粒子実験領域「Belle II 検出器建設の現状」

吉岡瑞樹 (九大 RCAPP)

[A] 宇野彰二 (KEK 素核研)

[B] Belle II 検出器の建設の状況について、宇野氏が講演した。当初この講演は、KEK 素核研の住澤氏が行う予定であったが、Belle II 検出器の最も外側に位置する KLM (ミュー粒子および K_L 中間子検出器) のインストール作業で一日も現場を離れられない状況のため、宇野氏が代わりをつとめることになった。

バレル部の KLM についてはすでに作業が完了しており、

これが Belle II に最初にインストールされた検出器である。エンドキャップ部についても、若干の遅れがあるもののインストールが行われている。その一方で、Belle II の他の検出器の建設も行われている。CDC (中央ドリフトチェンバー) は 56,576 本のワイヤー張りが 1 年かけて予定通り完了した。今後は宇宙線を用いたテストと読み出しの量産などインストールまでには多くの工程があるが、大きなマイルストーンを達成したと言ってよいであろう。カロリメータについては、検出器そのものは Belle のものを用い、読み出しエレクトロニクスだけを更新する作業がすでに始まっている。一方、新型粒子検出器である TOP 検出器の製作には遅れがあり、まずは一部だけをインストールして運転する予定であることが報告された。また、Belle II では大量のデータを高レートで収集しなければならないため、データ収集システムが重要な鍵であることが指摘された。これに関しては、ピクセル検出器やシリコン崩壊点検出器のプロトタイプを用いたビームテストが行われ、Belle II のデータ収集スキームが機能することが確認された。講演は Belle II 検出器の建設状況が的確にまとめられた興味深いものであった。

(報告：西田昌平 (KEK))

素粒子実験領域「Belle の最新結果と Belle II への展望」

吉岡瑞樹 (九大 RCAPP)

[A] 西田昌平 (KEK 素核研)

[B] この講演は Belle 実験の最新結果と Belle II で期待される物理についてであった。最新結果には、 B 中間子の輻射崩壊に関するものが二つあった。一つは、準包括的再構成法を用いた $B \rightarrow X_s \gamma$ の分岐比の測定で、従来の Belle の測定結果の精度を改善するものであり、標準模型とは無矛盾な結果が得られている。もう一つは $B \rightarrow K \eta \gamma$ 崩壊の時間依存 CP 非対称性の測定結果で、この測定からは B 中間子の輻射崩壊における光子の偏極度の情報を得ることができ、新物理の探索が行える。今回の測定ではまだ精度はよくないが、将来 Belle II で、 B の輻射崩壊の時間依存 CP 非対称性によって、新物理のモデルの検証が行える。

近年、LHCb などから D 中間子の直接的 CP 対称性の破れ (ACP) を示唆する結果が得られている。Belle でもこの検証として $D_0 \rightarrow \pi^0 \pi^0$ 崩壊での ACP の測定を行った。その結果、従来の測定結果を大幅に改善することができ、ACP=0 と矛盾しない値であった。 D 中間子の ACP が新物理を示唆するものなのかは議論のあるところで、今後も種々の崩壊モードで測定を行うことが肝要である。この他、 D 中間子混合についての新結果も発表された。

Belle II では新物理に感度のある観測量をできるだけ多く測定し、標準模型からのずれを探すことにより、新物理の探索と識別を行う。そのために有望なモードや現在の実験結果で標準模型からのずれがあるモードとして、 $B \rightarrow K \pi$ や $B \rightarrow \tau \nu$ 、 $\mu \nu$ および $B \rightarrow D \tau \nu$ の展望が議論された。質疑応答での議論もあり、講演は盛況であった。

素粒子実験領域「Belle実験によるtauの精密測定」

吉岡瑞樹 (九大RCAPP)

[A] 早坂圭司 (名古屋大KMI)

[B] この講演は Belle 実験の物理結果の中でも、 τ の精密測定に焦点を絞ったものであった。Belle 実験では B 中間子と同時に τ も大量生成されており、 τ の Lepton Flavor Violation 探索などが行われ、それ以外にも τ のハドロン崩壊の研究などが行われている。例えば、 $\tau \rightarrow \pi\pi^0\nu$ 崩壊は、 μ の $g-2$ の理論計算の入力情報として用いることができるモードで、 $g-2$ の標準模型との不一致について議論する際に非常に有用なモードである。このほか、 τ の η や K_s を含んだ多くの崩壊が研究されていることが紹介された。

τ レプトンそのものの性質を調べる測定も重要である。新しい結果として、Belle で生成された2つの τ がともに $\pi\pi\nu$ に崩壊する際の崩壊点の情報から τ の寿命を求めた結果について報告された。これにより、従来の測定よりも大幅に精度のよい測定結果が得られた。また、これまで行われた τ の質量や電子双極子モーメントについての測定や、現在解析が進行中のミシェルパラメータの測定についても紹介された。

Belle による τ の精密測定は、これまであまり注目されていなかったが、興味深く重要な結果が出ていること、今後期待されることを認識させられる講演であった。質疑での議論も活発に行われた。(報告: 西田昌平 (KEK))

領域4「2次元結晶におけるスピン・バレー物性」

植田暁子 (筑波大数物)

[A] 岩佐義宏 (東大院工, 理研CMS)

[B] ポストグラフェンとして、単層あるいは数層の薄膜でできた2次元結晶が盛んに研究されている。その中でも、遷移金属ダイカルコゲナイド (TMD) は、縮退したバレーやスピン軌道相互作用などに起因して、興味深い物性を示すことが知られ、注目を集めている。この分野において先駆的な研究をされている岩佐氏に、最新の研究成果についてご講演頂いた。

単層のTMDにおいては、K点とK'点のバレーが縮退し、また、スピン軌道相互作用の影響で、価電子帯のスピンがZeeman分裂する。単層TMDだけでなく、3R相の反転対称性の破れた系においても、単層同様にバレー分極を保持していることが観測されるとの報告があった。一方、反転対称性のある2H構造では、バレー機能は失われる。また、電界誘起により超伝導が発現し、パウリリミットが增強されること、両極性トランジスタを用いた円偏光した電界発光が観測され、電圧の向きによって円偏光が反転すること等、数々の研究成果について解説を頂いた。本講演には300人近い聴衆が集まり、講演後も活発な議論が行われた。

領域6「TEM-EELSを用いた10族12族金属間化合物の光学特性の研究」

野澤和生 (中大理工)

[A] 佐藤庸平 (東北大多元物質科学研)

[B] 金属の色は、紫外域のプラズマ振動数に起因する可視光全域にわたる反射と、バンド間遷移による吸収によって、ある程度定量的に説明できることが知られている。しかしながら、これまでの研究は単純金属に対してのもののみであり、合金化に伴う光学特性の変化や、物理的・化学的性質の変化との関連を議論した研究はほとんどない。佐藤氏は、メタノール水蒸気改質反応においてPdZn合金がCuと同等の触媒特性をもつことに着目し、電子損失エネルギー分光測定によって電子構造を調べることで、合金化に伴う光学特性の変化を調べて興味深い結果を得ている。講演では、佐藤氏らの研究グループで開発した装置の説明から、良好な結果を得るために必要になった測定手法の改良、第一原理計算の結果との比較による光学特性と触媒特性の関連性についての議論などが紹介された。会場には他分野の会員の姿も見られ、質疑応答では活発な議論がなされた。

【チュートリアル講演】

領域3, 領域8, 領域11「スピン系の量子相転移とHiggsモード」

田中秀数 (東工大)

[A] 松本正茂 (静岡大)

[B] 大会2日目の13:30より、松本氏による上記講演が開催された。聴衆は多く、後ろで立ち見の人も多く見受けられた。講演は素粒子の質量の起源を解くHiggs理論と励起のHiggsモードの概要説明からスタートし、超伝導のアンダーソン・Higgs機構の説明が行われた。この機構によってマيسナー効果がどのように記述されるのかという説明は素人には興味深く感じられた。次に本題のスピン系のHiggsモード(スピンの長さの振動)と南部・Goldstoneモード(スピンの横振動)の分かり易い説明があった。磁気モーメントが伸びきった通常の磁性体ではHiggsモードは観測できないので、スピンの期待値が量子力学的効果によって小さくなり、スピンの長さ方向の振動が起こり易いことがHiggsモードを観測できる要件であるとの解説があった。続いて松本氏自身が理論的研究を行ったスピンドイマー系 TiCuCl_3 の圧力誘起量子相転移を例に、量子臨界点近傍で観測されるHiggsモードと南部・Goldstoneモードに対応する磁気励起とその観測手法の詳しい解説があった。質疑応答では、多くの質問が出され、活発な意見交換がなされた。

領域4「ゼロギャップ半導体におけるワイル半金属相とスピン物性」

寺澤大樹 (兵庫医科大物理)

[A] 野村健太郎 (東北大金研)

[B] 近年、新たなトポロジカル相として、ワイル半金属と呼ばれる状態が注目を集めている。ワイル半金属相は、

グラフェンと同じように、ワイル方程式によって記述され、分散関係にカイラリティを持つディラックコーンが現れることが特徴で、トポロジカル絶縁体とともに、現代物理の新たな潮流を作りつつある。野村健太郎准教授は、スピン-軌道相互作用と電子相間が強い場合、磁性不純物によってトポロジカル絶縁体相と通常の絶縁体相の間でワイル半金属相が現れることを理論的に示すなど、実験家にとっても非常に刺激となる内容の研究で成果を挙げている。そこで、ワイル半金属について興味のある研究者のために、その興味深い性質を解説していただくとともに、今後の実験的な研究の可能性などを講演していただいた。

講演では、ディラック方程式からワイル方程式を導く非常に基本的なことから始められ、ワイル半金属相が現れるための条件を理論的に示された。特に、ナローギャップ半導体という領域4で馴染み深い物質において実現できる可能性があることを講演され、実験による検証につながりやすい、非常に示唆に富んだ内容であった。300名ほどの聴衆が集まり、質疑応答も盛んで、非常に関心の高い講演であった。

領域4「超伝導におけるマヨラナ粒子～実現と検出への展望」 植田暁子（筑波大数物）

[A] 藤本 聡（京大理）

[B] マヨラナフェルミオンは、近年、その存在を示唆する実験結果が発表され、非常に注目を集めている。トポロジカル絶縁体、超伝導体の分野において、業界をリードする藤本氏に、学生や他分野の研究者のためにチュートリアル講演をして頂いた。

講演の前半では超伝導体におけるマヨラナ・フェルミオンの基本的な性質である分数化、非局所性、それらに基づく非アーベル統計、トポロジカル量子計算との関連、および実現が有望な現実の系について解説をして頂いた。さらに後半ではどのような実験をすればマヨラナ・フェルミオン検出を確立できるかについての様々な理論提案のうち、有力と思われるもの、特にAB干渉効果、AC干渉効果等についてレビューをして頂いた。

初学者にもわかりやすい教育的な内容になっており、大変勉強になった。300人近い聴衆が熱心に聴き入り、活発な質疑が交わされた。

(2014年5月8日原稿受付)

第70期（2014年3月31日～2015年3月31日）理事・監事

会 長	兵頭俊夫	副会長(会長予定者)	藤井保彦
庶務理事	石田憲二・小林富雄・櫻井博儀・柴田利明・須藤彰三・松川 宏・三沢和彦		
	森 初果		
会 計 理 事	川村 光・柴田利明(兼任)・松井哲男・松川 宏(兼任)		
会誌編集委員長	宮下精二	JPSJ 編集委員長	安藤恒也 PTEP 編集委員長 坂井典佑
刊行委員長	大槻東巳	監 事	波田野彰・三宅康博

第30回井上學術賞： 安藤陽一氏

前野悦輝〈京大院理〉

今回の井上學術賞は、大阪大学産業科学研究所の安藤陽一氏が受賞されました。この賞は自然科学の基礎的研究で特に顕著な業績を挙げた50歳未満の研究者に対し与えられるもので、安藤氏の「トポロジカル絶縁体・超伝導体の先駆的研究」が評価されたものです。心からお祝いを申し上げます。

現代の物性物理学の分野で世界的に特に注目されているのが、2005-2007年のトポロジカル絶縁体の予言に端を発した新しい視点での物質開発と物性理解です。安藤陽一氏は世界的フロンランナーの一人としてトポロジカル絶縁体・超伝導体の実験研究分野で世界的に注目される目覚ましい成果を数多く挙げてきました。

この分野はこれまで理論研究が先行し、実験での実証が待たれていました。安藤陽一氏は自らの研究グループを率いて、実際に絶縁性を示す物質の表面状態が予言された特性の金属状態にあることを明確にしました。また、トポロジカル表面同士の干渉効果の観測や、トポロジカル結晶絶縁体という新種の物質の実証にも世界に先駆けて成功しました。さらにトポロジカル絶縁体由来するトポロジカル超伝導の実験結果も得て世界的に注目されています。

安藤氏は以下の3つの観点で傑出した力を発揮してこのような成果を挙げたといえます。(1)物質の開発力：狙った新物質を開発し、それらの良質単結晶や良質薄膜を作製してきたこと。(2)物性測定的能力：表面の特性を引き出すための量子振動実験やトンネルスペクトル測定、また共同研究による光電子分光での表面電子状態の特定など、目的に必要とされる実験を的確に進めたこと。(3)研究のリーダーシップ：研究室の若手研究者の育成はもちろん、国内外の理論家との密接な研究情報交換により、いち早くターゲットとなる物質の開発に取り組んできたこと。

安藤氏によるレビュー論文(J. Phys. Soc. Jpn. **82** (2013) 102001)はトポロジカル絶縁体の基礎と研究成果を大学院生にも分かりやすく解説したもので、是非お薦めしたいものです。今後はマヨラナ粒子としての準粒子状態の検証や、「トポロジカル量子現象」という視点からの物質観の構築など、この分野の次の目標に向かって安藤氏の大いなる活躍に期待しております。

(2014年4月14日原稿受付)

第30回井上學術賞： 上田佳宏氏

嶺重 慎〈京大院理〉

上田佳宏氏(京都大学大学院理学研究科)が、「巨大ブラックホール進化におけるダウンサイジング現象の発見」により、第30回井上學術賞を受賞した。同賞は、自然科学のあらゆる分野における基礎的研究で特に顕著な業績を挙げた50歳未満の研究者、毎年5名に贈呈されるものである。ここで、上田氏の業績について紹介したい。

現代天文学最大の課題の一つは、138億年にわたる宇宙の歴史の解明にあらう。私たちが、今、住んでいるこの宇宙の姿がどのようにできてきたのか、誰も興味をもつ課題である。現在、標準的なボトムアップ(階層的構造形成)シナリオによると、ダークマターの作用の下、まず小スケールの天体ができ、それらが集合して大スケールの構造ができたこととされる。一方、今世紀に入り、巨大ブラックホールの役割がにわかにクローズアップされてきた。ほぼ全ての銀河の中心に巨大ブラックホールがあることがわかり、しかも銀河と巨大ブラックホールの質量の間に明確な相関が見つかり、両者の共進化が示唆された。そこで研究者の関心は、巨大ブラックホールの宇宙論的進化の解明に向けられた。小から大へという天体形成パラダイムに、ブラックホールも従うと予想されたのである。上田氏は、硬X線観測を駆使する

ことにより、誰も予想だにできなかった「巨大ブラックホールの宇宙論的進化におけるダウンサイジング現象」を発見した。予想に反し、大きなブラックホールほど宇宙早期に形成されていたのである。この現象は、「ダウンサイジング」(あるいは、「反階層的進化」)として広く知られている。上田氏のこの発見は、極めて独創的であり、また観測衛星の性能を限界まで引き出すべく慎重になされたX線データ解析によって初めてなされた偉業である。さらに衝撃的なのは、銀河における星形成活動史が子細に調べられ、やはり同様のダウンサイジング現象が確立したことである。上田氏の発見は、新たな展開と新しい謎をよび起こし、天文学研究の一大潮流を創始したという点で、極めて高く評価できる。

上田氏はほかにも、硬X線背景放射の起源解明や、深く埋もれた巨大ブラックホールの発見、宇宙ジェットや円盤風などのガス噴出流の観測でも、多くの先駆的な成果を上げている。またX線に限らず、電波、赤外線、可視光などを用いた多波長天文学の重要性をいち早く理解し、開拓してきた。今後のより一層の幅広い活躍が期待される。

(2014年4月5日原稿受付)

科学技術分野の文部科学大臣表彰

2014年4月7日に、平成26年度科学技術分野の文部科学大臣表彰が発表されました。科学技術賞および若手科学者賞の受賞者の内34名が本会の会員です。受賞おめでとうございます。以下、賞ごとに五十音順に受賞者名(敬称略)と業績を記載させていただきます*。

科学技術賞(開発部門)

○清本晋作：超高速暗号KCipher-2の開発 ○田中信夫：ガス中ナノ観察研

* 受賞者が本会会員であるかどうかは会員名簿にて確認させていただきましたが、もし、間違いなどありましたら、会誌編集部宛にご連絡いただければ幸いです。

究のための反応科学超高压電子顕微鏡の開発

科学技術賞(研究部門)

○岩佐義宏：電気二重層トランジスタの開発と電子相制御の研究 ○尾嶋正治：放射光利用ナノ分光法及びオペランド電子状態解析法の研究 ○金子修，竹入康彦，長壁正樹：先進的加熱技法による核融合を見通す超高イオン温度化の研究 ○河裾厚男，一宮彪彦：全反射陽電子回折とそれによる固体表面物性の研究 ○北上 修：ナノサイズ磁性体の物性と機能に関する研究 ○腰原伸也：光誘起相転移とその関連現象に関する実験的研究 ○田中耕一郎：高強度テラヘルツ光による物質の非線形光学応答の研究 ○永長直人：幾何学を用いた電子と光機能の理論的研究 ○初田哲男，青木慎也，石

井理修：量子色力学の第一原理計算に基づく核力の研究

科学技術賞(理解増進部門)

○武田雅敏：技術を科学する技学の劇空間的手法による理解増進 ○杉山滋郎：アウトリーチ活動とそれを担う人材の育成を統合した理解増進若手科学者賞 ○堀田知佐：強相関フラストレート系の特異な量子相に関する理論的研究 ○石渡晋太郎：巨大な外場応答を示す新規遷移金属化合物の研究 ○上野和紀：新規超伝導体の電場誘起キャリアドーピング法による研究 ○江澤雅彦：グラフェン及びシリセンの電子物性とトポロジーの研究 ○賀川史敬：分子性固体を用いた強相関電子物性の研究 ○石坂香子：レーザー光電子分光を用いた新規物質の電子状態の研究

○小寺哲夫：半導体量子ナノ構造中のスピンに関する研究 ○後藤田 浩：複雑系数理学による反応系熱流体ダイナミックスの解明の研究 ○関 真一郎：電場による磁性の制御に関する研究 ○徳永祐介：磁気強誘電体における交差相関物性の研究 ○藤芳 暁：温度数Kにおけるタンパク質1分子分光法に関する研究 ○牧浦理恵：有機-無機複合ナノ構造体の構築と機能創出に関する研究 ○柳田健之：新規国産単結晶シンチレータの実用化研究 ○山本 俊：光量子操作による量子情報技術の研究 ○米澤英宏：スクイーズド光を用いた量子情報実験の研究 ○渡邊紳一：テラヘルツ新分光技術の開拓と物質科学応用に関する研究

(2014年4月20日原稿受付，
文責：会誌編集委員会)

井口洋夫先生を偲んで

榎 敏明 (東工大)

井口洋夫先生が3月20日にご逝去されました。

先生は1927年、広島市段原のお生まれで、1948年東京大学理学部化学科をご卒業後、同大学助手となられ、1955-57年に英国Nottingham大学D. D. Eley教授のもとに留学し、1956年に理学博士(東京大学)、1957年にPh.D.(Nottingham大学)を取得され、助教授を経たのち、1960年に東京大学物性研究所に移り、1967年に同教授になられました。その後、分子科学研究所の創設準備室長として、その創設に中心的に関われ、1975年に創設された同研究所の教授として、その発展に、赤松秀雄、長倉三郎両所長とともに大きな寄与をされました。在任中は、放射光実験の重要性をいち早く認識され、UVSOR建設にも当たられました。第3代所長としてご貢献し、岡崎国立共同研究機構機構長を経た後、1995年にご退官されました。ご退官後は、国際高等研究所副所長、また、宇宙開発事業団に新設された宇宙環境利用研究システム長として、宇宙ステーションの日本実験棟「きぼう」で行う実験の準備に携わられました。2009年からは豊田理化学研究所所長としてご逝去になるまで、ご活躍されました。

井口先生は、戦後間もない時期に、“有機化合物が電気を流すか”にご関心を持たれ、その電気伝導の研究をスタートし、忍耐強い努力の結果、有機化合物が電気を流すことを発見し、その後の有機伝導体の研究の発展に大きな貢献をされてきました。先生は電気を流すグラファイトがベンゼン環の縮合した構造を持つことから、ベンゼン環からなる有機化合物で電気を流す可能性を推測し、最初、ベンゼン環7個

から構成されるビオラントロン分子の研究を行い、さらには様々な分子に研究を発展させ、有機物が電気を流すことを明らかにしました。また、これらの物質で、電気伝導が半導体的振る舞いをするところから有機半導体と名付けました。1954年には有機分子ペリレンの結晶を臭素の蒸気に曝すことにより、高伝導性が発現することを発見しました。当時はMullikenによる電荷移動理論(1951)が出たばかりで、まだ、この高伝導現象が電荷移動錯体形成によるものとは理解されておらず、その後の研究からペリレンから臭素への電荷移動による電荷移動錯体の形成により高伝導性が理解されました。このような井口先生によって切り開かれた有機伝導体の研究分野は、1960年にはTCNQの発見、1973年には金属性有機伝導体TTF-TCNQ、1980年には(TMTSF) X_2 系での有機超伝導の発見と続き、有機伝導体の大きな分野が形成されました。この中で、井口先生は、2次元金属性有機物BEDT-TTF錯体の発見、有機分子の間に働く分子間力を巧みに使った分子ファスナーの発見等、重要な貢献をされております。

もう一つの先生のご研究の大きな流れは、電気を流す仕組みのもととなる電子構造の理解を目指したもので、光電子分光実験による有機化合物の研究によって多くの有機化合物の電子構造の体系的解明に貢献されました。また、電荷移動機構が伝導性の仕組みの基本にあることから、グラファイトと電子受容体/供与体とから出来るグラファイト層間化合物の研究、さらには、電荷移動錯体の触媒作用の研究にも関心を寄せられました。この中で生体物質の電気伝導にもご興味を持たれ、チト



クローム C_3 が酸化還元酵素ヒドロゲナーゼの存在、水素雰囲気下で高伝導性を有することを見出しております。

井口先生によって開かれた有機伝導体の分野は、今日、有機EL、有機太陽電池、有機トランジスター等、有機エレクトロニクスの大きな科学技術分野に発展してきております。このような先生の偉大なご業績に対して、日本学士院賞(1965)、日本化学会賞(1978)、Kipping Fellow(1984)、藤原賞(1989)、文化功労者(1994)、中国科学院外国人会員(2000)、文化勲章(2001)、京都賞(2007)等、数々の賞が授与されております。

私は、創設直後の分子科学研究所において助手として10年間、井口先生にお世話になりました。先生は気さくで、いつも物腰が柔らかく、自由な発想を持ち、若い研究者に、自由に研究を任せる心をお持ちでした。当時、セミナーや日常的な議論の中から、若い研究者が勝手気ままに様々な研究の発想を展開し、興味のおもむくままに研究が行われる気風があり、それを許す先生から多くのことを学ばせて頂きました。

井口洋夫先生のご冥福を心からお祈りいたします。

(2014年5月11日原稿受付)

菅野暁 先生を偲んで

小島 憲道 (東大)

東京大学名誉教授で兵庫県立大学元理学部長の菅野暁先生は、病氣療養中のところ、2014年4月7日に逝去されました。享年85歳でした。

菅野先生は、1928年静岡県浜松市にお生まれになりました。1952年に旧制東京大学理学部物理学科を卒業後、NHK放送技術研究所研究員、東京大学理学部物理学科助手、ベル電信電話研究所研究員、東京大学物性研究所助教授を経て、1972年に同教授に就任されました。1989年3月に東京大学を定年退官された後は、姫路工業大学(現兵庫県立大学)で理学部設置準備室長として理学部の創設に尽力され、1989年から1994年まで同大学初代理学部長、1994年から1997年まで理化学研究所顧問を勤められました。

菅野先生の名前が国際的に有名になったのは田辺・菅野準位図に代表される配位子場理論の確立でありました。菅野先生は旧制東京大学の最終年である3年生の時、理学部物理学科の小谷正雄先生のもとでd電子多体系の研究に取り組みました。東京大学卒業後、就職先のNHK放送技術研究所でテレビ映像管の研究に従事される傍ら、田辺行人先生と一緒に配位子場理論の体系化に取り組みました。正八面体場におけるd電子の多重項エネルギーは、配位子場の強さを表すパラメータ(10Dq)と電子間相互作用の強さを表すRacahパラメータ(A, B, C)で表されますが、BとCの間には金属イオンに殆ど依存しない比例関係があることから、多重項エネルギーをEとして、縦軸をE/B、横軸をDq/Bにとったエネルギー準位図を構築され、J. Phys. Soc. Jpn. (1954)に発表されました。菅野先生が26歳の時に発表された多重項の準位図は、物理学や化学などの分野で広く活用され、田辺・菅野準位図と呼ばれるようになりました。また、1958年にJ. Phys. Soc. Jpn.に発表された配

位子場理論に基づくルビーのR線の研究は、世界初のレーザーであるルビーレーザーの発明(1960年)の引き金になったことはあまりにも有名であります。R線の論文を発表された翌年、ベル電信電話研究所の招聘を受け、Schawlow博士(1981年にレーザーの研究でノーベル物理学賞受賞)のグループと一緒にルビーなどを対象に固体レーザーの開発研究に参画されましたが、惜しくもヒューズ・エアクラフト社のT. H. Maimanに先を越されてしまいました。また、ベル電信電話研究所滞在中には、ハートリー・フォック方程式を用いた分子軌道計算に取り組みましたが、この計算は、当時としては初めての非経験的計算であり、注目を集めました。

菅野先生が帰国されて間もない頃、反強磁性体MnF₂でd軌道間の遷移とスピン波が結合した複合励起(マグノンサイドバンド)が発見されましたが、同年、菅野先生は田辺先生および守谷亨先生と一緒にマグノンサイドバンドの遷移機構を理論的に解明されました。この研究を契機に、磁性体の分光学的研究をNHK放送科学基礎研究所の磁気光学部門と共同で推進され、当該分野の重要な研究拠点となりました。

1970年代後半になると、遷移金属化合物の光電子スペクトルに現れるサテライトピークなど、これまでの配位子場理論では説明できない様々な現象について取り組み、配位子から金属イオンに電子が移行した電子配置を取り入れた配置間相互作用モデルを適用し、解明してこられました。1980年代になると、真空紫外・X線領域の分光学的研究から次第に表面物性の研究へと展開して行かれましたが、代表的な表面物性の研究として、磁性体表面における水素分子のオルト-バラ変換の理論研究などがあります。1980年代後半からは、マイクロクラスタの



研究に集中して取り組まれましたが、この研究は菅野先生にとって最後のライフワークになりました。菅野先生は1994年に神戸で開催されたInt. Symp. Small Particles and Inorganic Clusters (ISSPIC)のCo-chairmanを務められ、また「ナノ学会」の前身である「超微粒子とクラスター懇談会」の創設(1997年)に尽力されるなど、今日のクラスター科学の発展の基礎を築きました。

このように菅野先生は一流の物理学者であるとともに、優れた教育者でありました。これまで研究された成果は原著論文のみならず*Multiplets of Transition-Metal Ions in Crystals* (Academic Press)などの洋書4冊、『配位子場理論とその応用』(裳華房)などの和書10冊を出版され、国内外の若手研究者の啓蒙に努められました。菅野先生の周りには、理論、実験を問わず研究者が集まり、いつしか菅野スクールと呼ばれるようになりました。菅野先生が姫路工業大学を退官された頃、菅野スクールの提案で、配位子場の科学の振興を目的として、「菅野シンポジウム」(1997-2001年)、「第2期菅野シンポジウム」(2005-2009年)が開催されました。今から36年前、NHK基礎研の博士研究員として菅野スクールのメンバーに入り、菅野先生から研究、教育、人生の姿勢すべての面において薫陶を受けた者として、心からの尊敬と感謝の念を捧げ、ご冥福をお祈り致します。(2014年6月4日原稿受付)

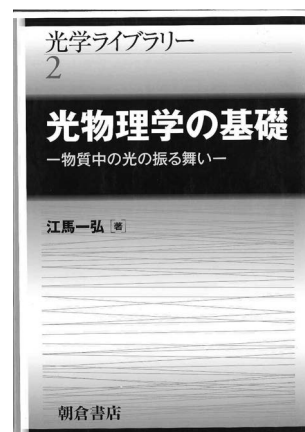
江馬一弘

光物理学の基礎；物質中の光の振る舞い

朝倉書店，東京，2010，ix + 196p，21 × 15 cm，本体3,600円（光学ライブラリー2）[専門～学部向]

ISBN 978-4-254-13732-3

早瀬潤子（慶應大理工）



本書は，光物理学の最も基本的なことから一つである「物質中の光の振る舞い」を学ぶために書かれた初学者向けの教科書である。本書の特徴は，著者がまえがきで述べている通り，様々な光学現象を系統的に整理・解説することを目的としているのではなく，その現象が起こる物理的起源に焦点を当てて解説している点にある。

著者の意図が最も強く表れているのは，本書の導入部分である第1章であろう。第1章では，物質中の光の伝搬が，原子による散乱光（2次波）と，元の入射光との和によって物理的に理解できることを，わかりやすいイラストとともに丁寧に解説している。込み入った数式を取り扱う前に，光学現象の物理的イメージをつかむための導入部分があることは，初学者にとってあ

りがたい配慮である。

第2章から第6章にかけては，光の伝搬方程式や物質の応答関数，反射と屈折の法則，誘電体ローレンツモデルや金属ドローデモデルといった，「物質中の光の振る舞い」を理解する上で必要となる基本的なことがらを網羅した内容となっている。必要十分な数式や豊富な図表に加え，物理的概念に関する記述が随所にちりばめてあり，大変わかりやすい参考書となっている。他の教科書と比べて比較的平易な内容であり，当該分野を独学で学びたい初学者の参考書として，あるいは学部生向けの講義の教科書としてお勧めしたい。また，「ポラリトンの概念は必要か」や「超光速伝搬とは何か」といった興味深いトピックも含まれており，研究者にとっても楽しめる内容となっ

ている。しかし一方，本書は入門書である面が強く，光物理学の深い専門知識を得たい研究者に対しては，より専門的な内容を取り扱う参考書が適しているかもしれないことを付記しておく。

本書で取り扱う光物理学は，物理学の基礎をなす研究分野の一つであるとともに，最先端光テクノロジーの発展に必要な不可欠な分野である。本書のような良質な参考書により，一人でも多くの若者が光物理学に興味を抱いてくれることを期待したい。

（2014年3月23日原稿受付）

デトネーション研究会編

デトネーションの熱流体力学1；基礎編

理工図書，東京，2011，ix + 291p，26 × 18 cm，本体3,500円 [大学院・学部向]

ISBN 978-4-8446-0784-7

遠藤琢磨

デトネーションの熱流体力学2；関連事項編

理工図書，東京，2011，ix + 411p，26 × 18 cm，本体3,500円 [大学院・学部向]

ISBN 978-4-8446-0785-4

長友英夫（阪大レーザーエネルギー学研究セ）

デトネーション (Detonation) とは，衝撃波を伴った燃焼波のことであり，爆轟と訳されることもある。一見馴染みのない現象のようにも思えるが，通常の燃焼 (Deflagration: デフラグレーション) がある条件下で遷移した場合に発生する現象である。爆轟という言葉からは大変危険な印象を受けるが，大きな化学エネルギーを瞬時に運動エネルギーに変換させることも可能であることを意味しており，現象を理解し

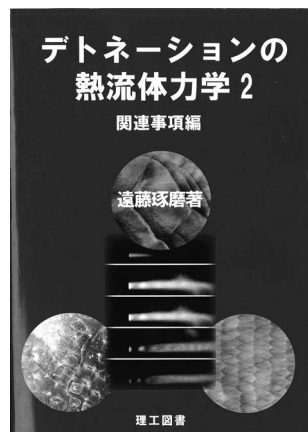
制御できれば工学的な活用も期待できる。しかしながら，熱力学，流体力学，燃焼学，化学の複合分野の現象で，学生や初学者にとってはどこから手を付けたらいいのか分かりにくい。そのような状況を踏まえ，教育，研究の現場で使いやすいように上手くまとめた書である。

本書は2冊分冊で構成されている。

1. 「基礎編」はデトネーションを習得するための基礎知識をまとめた教科書，

2. 「関連事項編」はデトネーションに限らず熱流体を研究する際に必要な公式，数式導出をまとめたハンドブックのような書である。内容は独立しており，それぞれ単独でも活用できる。以下主に「基礎編」について紹介する。

第2, 3章で，「燃焼における化学反応」および「デトネーションの1次元解析」と題し，デトネーションに関連する基本的な化学と物理を説明している。ここでは，1次元解析に必要な流体力学も含まれているが簡潔な支配方程式の導出の後に，理想気体を仮定しないデトネーションの1次元解析から断熱曲線の導出に進むため少しステップが高いかもしれない。ただし，流体力学を履修したことがあれば，本書は式の導出は比較的丁寧に書かれているので，追従しやすいと思う。また，これらの前提となっている熱力学，音速，および流体の基礎方程式の導出，変形



などは「関連事項編」に、化学反応を伴う場合も含め多様な観点から解説、補足されている。これらはデトネーション研究以外でも化学反応やプラズマ流関係の研究において数式を参照したいときにも活用できる充実した内容に展開している。

典型的なデトネーションの伝播例として、第5章「デトネーションのセル構造」の「5.1 実験」で、デトネーションの3次元的な挙動を写真や図を多用しながら説明している。その特殊な条件を満たすときに、理想的な伝播例の一つ、シングルスピントネーションとなる。これは円管内をらせん状に燃焼波が伝播する場合で、その存在条件を第4章で導いている。ここは読み手

によっては、章を入れ替えて読んだ方が理解しやすい。また「5.2 数値シミュレーション」でも、セル構造が図解で詳しく示されており、セル構造の定性的な理解の助けとなる。

第6章「起爆」では、燃焼による圧力波形成から衝撃波を駆動して燃焼波になる条件 (DDT: Deflagration to Detonation Transition), 球状の爆風波を起動するのに必要な最小エネルギー、急拡大管におけるデトネーションの存在条件について、解析解や実験結果を詳しく紹介している。さらに続く章で、爆薬、火薬による燃焼、爆轟、実験計測技術、数値シミュレーション技術、パルスデトネーションエンジンの理論、デトネーション特性解析コードについ

て説明している。最新の手法、特性値や関係グラフを多用しているので実用面でも有用であろう。

全般に、式の導出も含め丁寧な説明と多くの参考文献が随所に掲げられている。やや過保護のようにも思えるが複合的な分野を短期間で習得するためには最適な一冊である。また、研究会が主導して執筆したためか、バランスのとれた構成になっていることも読みやすさにつながっていると思う。

「関連事項編」は、「基礎編」の著者の一人が周囲の人に勧められて「基礎編」では詳細を記述できなかった公式、式の導出などをまとめた書だけあって、やや独特だが興味深い構成になっている。特に、本題からは脇道に逸れるが著者の思い入れのある関連する事項をまとめた部分は深く掘り下げた記述も見られ、関連分野を研究する人が読んでも大変参考になる。

(2013年9月7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。



新粒子の存在確率の疑問

森本安夫*◇

物理屋としてはまことにひったるんだ話でまことに申し訳ないがどうしても理解できない事項があるので恥をしのんで投稿するしだいである。もっとも物理屋と言っても枯葉マークの付いたシルバー会員なのでご容赦願いたい。

だいぶんと昔の話になるがHiggs粒子がLHCで確認されたというニュースが入ったとき“まだイベント数が少ないので存在

確率は90%くらいだがもう少しイベント数が増えると99.9999%にはなる”というコメントがあった。つい最近の日本物理学会誌(2014年2号)にもHiggs粒子の解説でもう少し統計学的な表現がなされていた。もちろんこのような言い方はHiggs粒子だけでなくその他のいわゆる新粒子についても同様な表現がなされる。そのような粒子は単独で取り出されないのだからこのような統計学的な表現がなされるのだろう。

良く理解できないことというのは、普通統計的検定を行う時、帰無仮説、 H_0 に対して対立仮説 H_1 を立て、 H_0 を検定する。そのとき誤る確率は0にはならないので H_0 が正しいのにこれを棄却する確率を α (第1種の誤り)として適当な統計量がこれより大きいかわ小さいかで H_0 を採用するか棄却するかを決める。これに対して H_0 が正

しくないのにこれを採択する確率を β (第2種の誤り)とする。 α はいくらでも小さくすることは可能であるが(特に現在話題になっているビッグデータなどで)その犠牲となって β はどんどん大きくなってしまふ。普通重要だと思ふ方の仮説について α を設定し β ができるだけ小さくなるような方策を採用する(Fisher)。

そこで質問したいのだがHiggs粒子の存在確率が99.99999%というような言い方はどのような統計検定法を使っているのだろうか。統計分布にはいろいろある。初等的な範囲だが t, F, χ^2 等々、もちろんノンパラ法もある。あるいは赤池先生のAICなども出てくるのだろうか? それとも素粒子実験、理論に独特の統計的検定法があるのだろうか? 私は物性の実験屋であったのでその方面の知識は無い。核物理の友達

* 明治鍼灸大学名誉教授

に聞いてもはっきりした答えは帰ってこない。是非専門家の方に正確なところを伺いたいと思っている。無論原論文をきちんと読めば解説してあることなのかもしれないが、現役を離れた身にはそれは難しい。なお私は現役の頃小さい医療系の大学で医学統計の講義をしていた。尚更この問題が気になって仕方がないのである。

以下は余談である。普通 $\alpha=0.05$ とされることが多い。0.01のときもあるが0.05と

することが多い。何故か？近代統計学の創始者ともいえるFisherはイギリスで農事試験所に20年間勤めた。その間実験をし、データをまとめそれを解析する統計理論を完成させた。仕事は春に種をまき秋に収穫してその結果をまとめることだ。そうすると20回そんなことを繰り返したわけだ。うち1回くらいはチョンボをしても許されるだろうということで $1/20=0.05$ になったという。もちろんあらぬ噂である可能性は

高い。

(2014年2月23日原稿受付)

- 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します。
- 2) その内容に関する責任は投稿者が負います。



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/books/keijiban.html>にありますので、それに従ってお申込み下さい。webからのお申込みができない場合は、e-mail: keijiban@jps.or.jpへお送り下さい。必ずFax 03-3816-6208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)

理化学研究所特別研究員

1. 特別研究員2名
2. 量子ナノ磁性研究チーム
3. ナノスケール強磁性体と良導体、半導

体、超伝導体等多様な物質群からなる複合構造を用いたスピントロニクスに関する基礎研究。スピン注入により誘起される磁気渦やスカーミオン等のナノスケールの磁気構造のダイナミクス、磁化反転、磁気相転移やスピンホール効果やラシュバ効果等を用いたスピンドル電流変換物性や電圧誘起スピン波励起等に関する研究を含む。

4. 決定後早期(応相談)
5. 単年度契約の任期制職員で評価により2018年3月31日迄再契約
6. 着任時点で博士号取得者
7. ○履歴書(写真貼付、e-mail明記) ○研究業績一覧 ○現職の所属長からの推薦書1通(推薦者の氏名、所属、身分、連絡先を記載) ○今迄の研究概要と今後の抱負(約1,500字) ○簡易書留又はe-mailにて送付
8. 適任者決定次第
9. 351-0198 和光市広沢2-1 理化学研究所量子ナノ磁性研究チーム 大谷義近 Fax 048-467-9650 nanomagnetism-riken.jp <http://www.riken.jp/lab-www/nanomag/indexjpn.html>
10. 書類選考後、英語のセミナー形式の面接。

東北大学大学院理学研究科助教

1. 助教1名
2. 物理学専攻巨視的量子物性グループ
3. 大申研也教授と協力して、遷移金属化合物における強相関電子物性に関する実験研究を推進。本物理学専攻教員と連携して学部(全学教育を含む)と大学院の教育も担当。
4. 2015年4月1日迄の決定後早期
5. なし
6. 博士号取得者又は取得見込者。研究室の立ち上げに意欲的に取り組む若手研究者を希望。

7. ○履歴書(顔写真、電話、e-mail含) ○業績リスト(原著論文・解説等、学会発表、受賞歴) ○主要論文別刷3編以内(コピー可) ○研究業績概要(2,000字以内) ○今後の研究計画及び教育に対する抱負(2,000字以内) ○推薦状1通 ○推薦者以外の照会可能者1名の氏名、連絡先
8. 2014年8月18日(月)
9. 980-8578 仙台市青葉区荒巻字青葉6-3 東北大学大学院理学研究科物理学専攻大申研也 電話022-795-5556 ohgushi@tohoku.ac.jp
10. 封筒に「教員応募書類在中」と朱書し簡易書留で送付。応募書類不返却。本学は男女共同参画を推進している。

足利工業大学物理学担当教員

1. 講師又は助教1名
2. 工学部共通課程
3. 担当科目は主に工学部1・2年生に対する基礎物理教育。所属教員と協力し、実験的物性研究に取り組んで頂ける方が望ましい。
4. 2015年4月1日
5. なし
6. 博士号取得者又は着任時迄の取得見込者。地方私立大学の現状を理解し、本学に教育・研究の基盤をおき、物理教育に熱意を持って取り組んで頂ける方。
7. ○履歴書(写真貼付、e-mail記載) ○業績リスト(査読付学術論文、国際会議発表、著書、教育業績) ○主要論文別刷2編 ○教育実績及び着任後の教育の抱負(約1,500字) ○研究業績概要及び今後の研究計画(約1,500字) ○希望職位、主たる専門分野 ○照会可能者1名の氏名、所属、連絡先
8. 2014年8月22日(金) 必着
9. ①326-8558 足利市大前町268-1 足利工業大学庶務課

②工学部共通課程物理研究室 朝光 敦 asamitsu.atsushi v90.ashitech.ac.jp

10. 封筒に「工学部共通過程物理学担当教員公募書類在中」と朱書き簡易書留で送付。応募書類不返却。

■静岡大学工学研究科助教

1. テニユアトラック助教1名
2. 工学研究科数理システム工学専攻(工学部数理システム工学科兼任)
3. 数理学,特にモデリング・シミュレーション・最適化等,着任後の工学的応用が望ましい。
4. 2014年11月1日以降早期
5. 5年間(テニユア移行あり)
6. 博士号を有し,募集分野において優秀な研究を行っている若手研究者,2014年9月1日現在において40歳未満,且つ博士号取得後10年以内の者。
7. ○指定の応募申請書 ○今迄の研究概要 ○今後5年間の研究計画 ○教育に対する抱負 ○主要論文5編以内 ○1名の推薦書又は照会可能者2名の氏名,連絡先
8. 2014年8月29日(金)17時必着
9. ①432-8561 浜松市中区城北3-5-1 静岡大学テニユアトラック支援室
②同工学部数理システム工学科 吉村 仁 電話/Fax 053-478-1215
jin sys.eng.shizuoka.ac.jp
10. 封筒に「テニユアトラック助教応募書類」と朱書き簡易書留で送付。詳細は http://www.shizuoka.ac.jp/recruit/2014/20140624_tenure.html参照。

■自然科学研究機構新分野創成センター教員

1. 特任助教及び特任研究員若干名
2. 宇宙における生命(アストロバイオロジー)研究分野
3. 新たな学際領域であるアストロバイオロジーの研究に専念,従来の研究分野は不問。
4. 決定後早期
5. 最長5年間(年度毎更新)
6. 博士号取得者
7. ○履歴書(写真貼付, e-mail) ○研究歴(様式任意約2枚, 6部) ○採用後の研究計画:研究計画と抱負(様式任意約3枚, 6部) ○業績リスト:和文と英文は別葉(査読の有無, 共著論文は共著者名を全て記入, 様式任意, 6部) ○主要論文別刷5編以内各6部(学位論文及び投稿中又は投稿予定含, コピー可, 不返却) ○照会可能者2

名の氏名,連絡先

8. 2014年8月29日(金)17時必着
9. ①105-0001 東京都港区虎ノ門4-3-13 ヒューリック神谷町ビル2階 自然科学研究機構事務局総務課人事係
②自然科学研究機構 観山正見
cnsi-jimu nins.jp
10. 採用情報は <http://ab.cnsi.nins.jp/recruit/>参照。

■大阪大学大学院工学研究科特任研究員

1. 特任研究員1名
2. 環境・エネルギー工学専攻量子エネルギー工学講座
3. 科研費新学術領域研究「3次元半導体検出器で切り拓く新たな量子イメージングの展開」においてイメージング質量分析用イオン検出器の開発を行う。
4. できるだけ早期
5. 1年更新で最長3年
6. 博士号又は同等の経験を有し,回路設計, FPGA等プログラミング, 又は質量分析装置等の開発に経験, 興味がある方
7. ○履歴書 ○業績リスト ○今迄の研究概要 ○主要論文3編以内 ○照会可能者1~2名の氏名,連絡先
8. 2014年8月29日(金)必着
9. 565-0871 吹田市山田丘2-1 大阪大学大学院工学研究科環境・エネルギー工学専攻 間 久直 電話 06-6879-7773
hazama-h see.eng.osaka-u.ac.jp

■琉球大学理学部助教

1. 助教1名
2. 物理系物質情報学講座
3. 物性実験(強相関電子系の分野), 専門教育及び共通教育を担当。
4. 2014年12月1日以降早期
5. なし
6. 博士号取得者又は取得見込者, 大学院前期課程の授業を担当できる方, 現有スタッフと協力して研究できる方, 教育, 研究, 学科運営に積極的に参加し, 極低温センターの運営に協力できる方。
7. ○履歴書(写真貼付) ○研究概要及び今後の研究計画(各A4, 約2枚) ○業績リスト(口頭発表等含) ○主要論文約3編の別刷又はコピー及び要約 ○教育に対する抱負(A4, 約1枚) ○教育経験がある場合はその概要 ○照会可能者2名の氏名,連絡先(電話, e-mail等)
8. 2014年8月29日(金)必着
9. ①903-0213 沖縄県西原町千原1番地

琉球大学理学部物質地球科学科物理系 梯 祥郎

- ②仲間隆男 電話098-895-8514
nakama sci.u-ryukyuu.ac.jp, 物理系事務室 電話098-895-8098
10. 封筒に「応募書類在中」と朱書き簡易書留で送付。選考過程で講演等をお願いする(旅費等自己負担)。本学は男女共同参画を推進している。

■明治大学理工学部教員

1. 准教授又は講師1名
2. 物理学科
3. 物性物理学の理論研究, 量子力学・統計力学等物理学の基幹科目を担当頂ける方, 物理学科の4年生・大学院生の研究指導に従事。
4. 2015年4月1日
5. なし
6. 博士号取得者
7. ○履歴書(写真貼付, e-mail記載) ○研究業績リスト ○研究概要(2,000字以内) ○主要論文別刷3編(コピー可) ○教育への抱負(1,500字以内) ○研究計画(2,000字以内) ○外部資金等獲得状況とその他特記事項 ○推薦書1通 ○照会者2名の氏名,連絡先(e-mail含) ○書類一式と共に電子ファイル(推薦書以外, PDF又はWord)を保存したCDを提出
8. 2014年8月29日(金)必着
9. 214-8571 川崎市多摩区東三田1-1-1 明治大学理工学部物理学科 立川真樹 電話044-934-7271 Fax 044-934-7911
tachikaw isc.meiji.ac.jp
10. 封筒に「理論物性物理学教員応募書類在中」と朱書き簡易書留で送付。応募書類不返却。書類は選考目的以外には使用しない。

■中央大学理工学部物理学科助教

1. 任期制助教1名
2. 素粒子理論研究室
3. 教育:学生実験(物理)の指導補佐。週2回, 合計5コマ相当を担当(拘束時間外に実験レポート採点等の業務あり)。全体統括は専任教員が行う。研究:自身の研究計画に基づき, 理論物理学の研究を行う。当研究室の主たる研究テーマに関連した研究を行って下さる方を歓迎。
4. 2015年4月1日
5. 最長5年(1年+2年+2年:1年目, 3年目に更新必要)
6. 博士号取得者か2015年3月31日迄の

取得見込者

- 履歴書 ○発表論文リスト(主要論文3編以内に印) ○本学における研究計画(A4, 約1枚以内) ○照会可能者2名の氏名・所属・連絡先(電話, e-mail含)
- 2014年8月31日(日) 必着
- 中央大学理工学部物理学科・素粒子理論研究室 中村 真 電話03-3817-1789 nakamura phys.chuo-u.ac.jp
- e-mail件名は「任期制助教応募」とし電子化した応募書類をe-mailで送付。応募書類送信後1日以内に受領確認メールが未着の場合は問合せること。

■東京理科大学理学部第一部嘱託助教

- 嘱託助教1名
- 物理学科・計算物性物理研究室(但し, 勤務地については変更を命ずることがある)
- 第一原理計算による物性物理, ナノ物質の動的現象や励起状態物理等, 物理数学と解析力学関連科目の演習。
- 2015年4月1日
- 上限5年
- 博士号取得者又は着任時迄の取得見込者。学部と大学院の教育・研究に熱意を持ち取り組める方。
- 履歴書(写真貼付, 教育経験, 在外経験等明記) ○今迄の研究概要(約1枚) ○教育・研究等業績リスト(受賞等特記事項, 招待講演, 国際会議での講演, 外部資金取得状況含, 国内学会等での一般発表除く) ○照会可能者2名の氏名, 連絡先 ○学位記の写し(取得見込者はその旨明記)
- 2014年9月8日(月) 必着
- 162-8601 東京都新宿区神楽坂1-3 東京理科大学理学部第一部物理学科 渡辺一之 電話03-5228-8221 kazuyuki rs.kagu.tus.ac.jp (件名: KOUBO)
- 封筒に「理学部第一部物理学科教員応募書類在中」と朱書き書留等で送付。応募書類不返却。

■東京理科大学専任講師

- 専任講師1名
- 基礎工学部材料工学科
- 学術としての固体物性を基礎として, 環境, エネルギー, 医療, 健康に関する新規性のある応用研究に発展する材料工学研究を実施できることが望ましい。
- 2015年4月1日
- なし(常勤)
- 博士号取得者。学部における教育と大

学院修士課程の研究指導を担当できる方。学部及び大学院の教育・研究に対して意欲と熱意のある方。上記専門分野において, 実験的研究を行うことのできる方。学内外の研究者と学際的な連携研究を積極的に実施できる方。学科・学部・大学院の運営に積極的に貢献できる方。

- 詳細は<https://www.tus.ac.jp/boshuu/kyoin/>参照。
- 2014年9月12日(金)
- 125-8585 東京都葛飾区新宿6-3-1 東京理科大学基礎工学部材料工学科 石黒 孝 電話/Fax 03-5876-1418 ishiguro rs.noda.tus.ac.jp

■立命館大学理工学部教員

- 教授又は准教授1名
- 物理科学科
- 物性分野特に放射光を積極的に活用した研究。学科学部・大学院生の教育, 他学部・他学科の基礎物理教育, 本学SRセンターの管理, 運営。
- 2015年4月1日
- なし
- 博士学位及び上記専門分野の優れた研究業績がある方。私学の状況をよく理解し, 本学学生に対する教育と学内運営に強い熱意を持って取り組める方。
- 履歴書(様式その1, 2) ○教育研究業績書(様式その3, 4-2, 業績は主要なもの) ○業績リスト(全ての業績を記載) ○論文別刷約5編(コピー可) ○研究業績概要(約1,000字) ○研究計画(約2,000字) ○教育への抱負(約2,000字) ○照会可能者2名の氏名, 連絡先 ○博士学位授与と証明書等 ○応募書類様式等はhttp://www.ritsumeiji.jp/job/index_j.htmlよりダウンロード可
- 2014年9月19日(金) 必着
- ①525-8577 草津市野路東1-1-1 立命館大学理工学部物理科学科 深尾浩次 ②同物理科学科 中田俊隆 nakada se.ritsumeiji.ac.jp
- 封筒に「物理科学科教授又は准教授応募書類」と朱書き書留又は簡易書留で送付。応募書類不返却。

■大阪大学大学院理学研究科准教授

- [I]
- 准教授1名
 - 物理学専攻物性物理学講座
 - 強相関系物質(分子性物質, 遷移金属化合物, 金属錯体等)の試料合成を含

む物性実験を同講座の花咲教授と協力して推進して頂ける方。教育・研究に熱意を持って取り組む方。

- 決定後早期
- なし
- 博士号取得者
- 履歴書(写真貼付) ○業績リスト(論文, 解説, 国際会議発表, 外部資金獲得実績, 特記事項等) ○研究業績概要(論文リストを適宜引用) ○主要論文別刷約5編(コピー可) ○研究計画と教育の抱負(A4, 3頁以上) ○照会可能者2名以上の氏名, 連絡先
- 2014年9月26日(金) 必着
- ①560-0043 豊中市待兼山町1-1 大阪大学大学院理学研究科物理学専攻 山中 卓 ②同専攻 花咲徳亮 電話06-6850-5751 hanasaki phys.sci.osaka-u.ac.jp <http://www-gmr.phys.sci.osaka-u.ac.jp/>
- 封筒に「強相関物性准教授応募書類在中」と朱書き応募書類と書類のPDF(CD-ROM又はUSBメモリに保存)を併せて簡易書留で送付。応募書類原則不返却。

[II]

- 准教授1名
- 5, 6, 9①は[I]に同じ。
- 物性実験。固体素子を用いた精密物性科学を推進する。具体的には, メゾスコピック系・低次元電子系・スピントロニクス系等における量子多体制御・新機能探索・新しい測定手法の開発等を行う。着任後は同講座の小林研介教授と協力して教育研究を行う。
- 2015年4月1日
- 履歴書(写真貼付) ○業績リスト ○研究業績概要(約2,000字) ○今後の研究計画と教育・研究に対する抱負(約1,000字) ○主要論文別刷又はコピー約5編 ○意見書又は推薦書2通(直送可) ○意見書(又は推薦書)以外の応募書類一式をPDFにして, CD-ROM又はUSBメモリ等に保存し併せて提出
- 2014年9月30日(火) 必着
- ②大阪大学大学院理学研究科物理学専攻 小林研介 電話06-6850-5368 kensuke phys.sci.osaka-u.ac.jp
- 封筒に「物性物理学講座(小林グループ)准教授公募関係」と朱書き簡易書留で送付。応募書類原則不返却。

■東北大学金属材料研究所准教授

- 准教授1名
- 量子ビーム金属物理学研究部門

3. 中性子を中心とする量子ビームを用いた強相関電子系の研究. 中性子装置の開発にも意欲的に取り組める方.
4. 決定後早期
5. あり
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, プロシーディングス, 著書・解説, 国内・国際会議招待講演等分類, 研究資金獲得実績・特許等, 応募者氏名に下線) ○主要論文別刷5編(コピー可) ○論文引用に関する情報(被引用総数等, 内容や書式は任意) ○今迄の研究概要と着任後の抱負(各約2,000字) ○照会可能者2名の氏名, 連絡先
8. 2014年9月30日(火)
9. 980-8577 仙台市青葉区片平2-1-1 東北大学金属材料研究所 藤田全基 電話022-215-2035 fujita imr.tohoku.ac.jp
10. 封筒に「量子ビーム金属物理学研究部門准教授応募書類在中」と朱書き簡易書留で送付. 本学は男女共同参画を推進している.

■日本大学医学部一般教育学系助教

1. 助教1名
2. 物理学分野
3. 物理学(物性物理学が望ましい). 学部教育における一般教育の物理学, 物理学実験等の基礎科目の担当, 及び大学院での講義, 並びに大学の種々の運営業務.
4. 2015年4月1日
5. 1期3年, 再任は2回限り
6. 博士号を有し, 学生教育と研究に熱意と経験・能力を持っていること.
7. ○履歴書1部(所定様式: 医学部庶務課 (med.shomu nihon-u.ac.jp) 宛請求) ○研究業績リスト1部 ○主要論文別刷3編(コピー可) ○物理学分野における教育と研究の抱負(2,000字以内, 様式任意) ○今迄の研究概要(2,000字以内, 様式任意) ○推薦状1部
8. 2014年10月1日(水) 17時必着
9. 173-8610 東京都板橋区大谷口上町30-1 日本大学医学部一般教育学系 田近謙一 電話03-3972-8111 (ex.2290) tadika.kennichi nihon-u.ac.jp
10. 封筒に「応募書類在中」と朱書き簡易書留にて送付.

■分子科学研究所助教

- [I]
1. 助教1名
 2. 光分子科学研究領域光分子科学第三研究部門
 3. 放射光やレーザーを用いた光電子分光実験による機能性分子材料の物性研究に意欲ある研究者. 主として当該研究部門の解良聡教授と協力して研究を行う.
 4. できる限り早期
 5. 6年を目途に転出を推奨
 6. 修士課程修了者又は同等以上の学力を有する者.
 7. ○推薦書(自薦の場合は不要) ○履歴書(所定様式, HP参照) ○研究業績概要(A4, 2頁以内) ○業績リスト(所定様式, HP参照) ○主要論文5編以内の別刷又はプレプリント各2部
 8. 2014年10月10日(金) 消印有効
 9. 444-8585 岡崎市明大寺町西郷中38番地 自然科学研究機構岡崎統合事務センター総務課人事係 電話0564-55-7113
 10. 詳細は<http://www.ims.ac.jp/recruit/2014/>参照. 本研究所は男女雇用機会均等法を遵守し男女共同参画に取り組んでいる.

[II]

1. 助教1名
2. 極端紫外光研究施設光物性測定器開発研究部門
3. 放射光を用いた角度分解, スピン分解光電子分光実験による固体・表面の電子構造研究に意欲ある研究者. 経験不問. 主として当該研究部門の田中清尚准教授と協力して研究を行う. 当該施設の放射光ビームラインの維持管理及び施設利用に関する業務を分担.
- 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10は [I] に同じ.

■高エネルギー加速器研究機構博士研究員

1. 博士研究員(常勤)1名
2. 共通基盤研究施設計算科学センター
3. 計算科学センターは, 本機構で行われる研究活動の為の計算環境の提供及び技術支援及び加速器科学(加速器本体又は加速器を利用する研究分野全般)に関連する計算科学分野の研究開発を行っている. 具体的には, 大規模数値解析, 広域分散コンピューティング, コンピュータシミュレーション及び実験データ収集・解析等に関するソフトウェア又はハードウェアシステムの研究開発であり, 本公募で採用された

- 博士研究員はこれらのテーマのひとつに取り組む.
4. 決定後早期
 5. 単年度契約で2年
 6. 応募締切時点で博士号取得後10年内の者, 又は着任迄に取得確実な者
 - 7, 9は <http://www.kek.jp/ja/Jobs/>参照.
 8. 2014年10月24日(金) 必着
 10. 本機構は男女共同参画を推進しており, 女性研究者の積極的な応募を歓迎.

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21回高校課題研究フォーラム「高校でできるセラミックス実験」

主催 日本セラミックス協会
日時 2014年8月25日(月)
場所 湘南工科大学 (251-8511 藤沢市辻堂 西海岸1-1-25 電話0466-30-0274)
内容 ①講義と演示実験: 竹本 稔(神奈川県川工大) フォトクロミック材料の合成と着脱色の観察 ②体験実習: 木枝暢夫(湘南工科大学) プンゼンバーナーを使った色ガラスづくり ③研究発表: 加藤龍輔(岐阜県立多治見工業高校) 海外インターンシップ, 都築信雄(愛知県立常滑高校) 職人の技「ヨリコづくり」

定員 20名
参加費 3,000円, 学生3,000円
申込 e-mailにて, 氏名・勤務先・連絡先住所・電話番号・参加費送金予定を連絡先まで通知
参加申込締切 2014年8月24日(日), 但し定員になり次第締切
連絡先 169-0073 東京都新宿区百人町2-22-17 日本セラミックス協会教育委員会 阿部 電話03-3362-5231 Fax 03-3362-5714 cersj-kyouiku cersj.org http://www.ceramic.or.jp/ikyoku/kadai_kenkyu_forum.html

■プラズマシミュレータシンポジウム2014

主催 核融合科学研究所数値実験炉研究プロジェクト

日時 2014年9月10日(水)~12日(金)

場所 核融合科学研究所(509-5292土岐市下石町322-6 電話0572-58-2541)

内容 「数値実験研究プロジェクト共同研究」の報告会としてスーパーコンピュータ「プラズマシミュレータ」を利用して得られた最新の研究成果の報告とその議論を行う一方、プラズマ・核融合分野はもとより関連分野の最前線で活躍する研究者を招待講演者として招き、最新の研究トピックスについて紹介する。また、スーパーコンピュータの能力向上に伴う今後の展望について議論を行う。

定員 なし

参加費 無料(懇親会費別途)

発表申込締切 2014年8月22日(金)

参加申込締切 当日受付可

連絡先 核融合科学研究所プラズマシミュレータシンポジウム2014実行委員会(総務:大谷寛明, 受付担当:佐々栄美子) pss2014 nifs.ac.jp <http://nsrp.nifs.ac.jp/pss2014/>

その他 講演申込等は<http://nsrp.nifs.ac.jp/pss2014/>参照。

■第5回社会人のための表面科学ベーシック講座

主催 日本表面科学会

協賛 日本物理学会

日時 2014年9月11日(木)~12日(金)

場所 東京理科大学森戸記念館第2フォーラム(162-8601東京都新宿区神楽坂4-2-2 電話03-5225-1033)

内容 大学で表面科学の基礎を学ぶ機会を逸した方やもう一度基礎から学び直したい方を主な対象として、表面がなぜ重要なかを大学学部レベルの基礎知識をもとに解きほぐして解説する。

定員 70名

参加費 30,000円, 学生9,000円(教科書・配布資料代, 消費税込)

参加申込締切 2014年9月5日(金)

連絡先 113-0033東京都文京区本郷2-40-13 本郷コーポレーション402 日本表面科学会事務局 電話03-3812-0266

Fax 03-3812-2897 shomu sssj.org

<http://www.sssj.org>

その他 詳細はHP参照。

■第17回薄膜基礎講座

主催 日本表面科学会

協賛 日本物理学会

日時 2014年9月24日(水)~25日(木)

場所 東京理科大学森戸記念館第1会議室(162-0825東京都新宿区神楽坂4-2-2 電話03-5225-1033)

内容 [第1日(9月24日)]概論:深津 晋<東京大> 薄膜の作製と加工:成長技術入門, 他. [第2日(9月25日)]特性・信頼性:中村友二<富士通研> いい膜と悪い膜は目的に応じて異なる, 他.

定員 80名

参加費 29,500円, 学生6,500円(書籍代, 別冊資料代, 消費税込)

参加申込締切 2014年9月17日(水)

連絡先 113-0033東京都文京区本郷2-40-13 本郷コーポレーション402 日本表面科学会事務局 電話03-3812-0266

Fax 03-3812-2897 shomu sssj.org

その他 詳細は<http://www.sssj.org>参照。

■第19回久保記念シンポジウム「超伝導と線形応答」

主催 久保記念シンポジウム組織委員会

日時 2014年10月4日(土)13時~16時

場所 学士会館202号室(東京都千代田区神田錦町3-28 電話03-3292-5936)

内容 小形正男<東大理>超伝導と久保公式をめぐって, 松田祐司<京大理>鉄系高温超伝導体の物理, 紺谷 浩<名大理>強相関電子系における輸送現象と超伝導

定員 100名

参加費 無料

連絡先 東京都渋谷区南平台15-15 今井ビル6F 井上科学振興財団 電話03-3477-2738 inoue01 inoue-zaidan.or.jp

その他 久保記念シンポジウム組織委員会:田崎晴明(学習院大理), 樽茶清悟(東大工), 宮下精二(東大理). 詳細は<http://www.gakushuin.ac.jp/~881791/ks/19/>参照. シンポジウムに引き続き第18回(2014年度)久保亮五記念賞贈呈式を開催。

■The 2nd International Symposium on Long-Period Stacking Ordered Structure and Its Related Materials

日時 2014年10月5日(日)~8日(水)

場所 ホテル日航熊本(860-8536熊本市中央区上通町2-1 電話096-211-1111)

内容 日本で開発されたマグネシウム合金である長周期積層型マグネシウム合金の優れた力学特性発現因子と考えられている, シンクロ型長周期積層構造(シンクロ型LPSO構造)を対象とした国際会議. シンクロ型LPSO構造は積層構造と溶質

元素が同期した新奇な長周期的構造を持つことから学術的な関心も高く, 2011年度にはLPSO構造に特化したプロジェクト研究が科学研究費補助金・新学術領域研究に採択され, 現在, LPSO構造の「精密構造の解明」, 「形成メカニズム解明」及び「強化メカニズム解明」を目指して精力的な研究が推進されている. シンクロ型LPSO構造に関する最新の研究成果を発表。

参加費 75,000円, 学生40,000円

連絡先 860-8555熊本市中央区黒髪2-39-1 熊本大学内 LPSO2014事務局 矢野 電話/Fax 096-342-3547

lpsol kumamoto-u.ac.jp <http://www.msre.kumamoto-u.ac.jp/LPSO2014/>

■第53回NMR討論会

主催 日本核磁気共鳴学会

日時 2014年11月4日(火)~6日(木)

場所 大阪大学コンベンションセンター(565-0871吹田市山田丘3-2 電話06-6879-8598)

内容 日本核磁気共鳴学会主催・第53回NMR討論会の開催を企画。日本核磁気共鳴学会は, NMRの解明と応用に関して, 物理学・材料化学・応用物理学・有機化学・高分子化学・天然物化学・生化学・構造生物学・生物物理学等多方面の領域に係わる研究者が集まる学際的な学会。討論を通じて当該分野の発展に貢献することを目的に毎年開催。今迄に52回を重ねた本討論会では, 毎年海外からNMR研究の第一線で活躍する数多くの研究者を招待講演者として招いており, 国内外での研究交流及び情報交換を推進している。

定員 なし

参加費 12,000円, 学生6,000円

発表演題登録締切 2014年8月1日(金)

事前参加登録締切 2014年9月26日(金)

連絡先 565-0871大阪府吹田市山田丘3-2 第53回NMR討論会世話人 藤原敏道 電話06-6879-8598 Fax 06-6879-8599 nmr53 protein.osaka-u.ac.jp <http://www.nmrj.jp/NMR2014/>

■第34回表面科学学術講演会

主催 日本表面科学会

協賛 日本物理学会

日時 2014年11月6日(木)~8日(土)

場所 島根県立産業交流会館くにびきメッセ(690-0826松江市学園南1-2-1 電話0852-24-1111)

内容 講演分類:表面物性, 表面反応, 表

面構造作製技術, 表面構造・表面物性評価技術, 半導体, 低次元・ナノ物質, ソフトマター, 環境・エネルギー, その他
参加費 7,000円, 学生5,000円(要旨集代
込), ISSS-7登録者無料(要旨集代2,000
円別途)

講演申込締切 2014年7月25日(金)14時
要旨原稿受付締切 2014年9月26日(金)
17時(予定)

参加申込締切 当日受付

連絡先 113-0033 東京都文京区本郷2-40-
13 本郷コーポレイション402 日本表
面科学会事務局 電話03-3812-0266

Fax 03-3812-2897 taikai14 sssj.org

<http://www.sssj.org>

■有機分子・バイオエレクトロニクス分科 会講習会「有機半導体デバイスの界面分 析の基礎と応用」

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

日時 2014年11月10日(月)

場所 産業技術総合研究所臨海副都心セン
ター別館11F(135-0064東京都江東区青
海2-3-26 電話03-3599-8001)

内容 有機半導体薄膜を用いた電子デバイ
スの無機/有機, 有機/有機の物質界面は,
機能発現に欠かせない存在であると同時に,
非常に複雑であり最も厄介な部分と
言えるが, 今後の様々なデバイスの高性
能化に向けて避けては通れない課題であ
る。M&BE分科会では, 有機半導体薄膜
中での界面特性の理解を目指した様々な
理論や技術に関する基礎から最新の応用
について, 包括的な情報を提供する場と
して, 本講習会を企画。

定員 120名

参加費 8,000円, 学生4,000円

参加申込締切 2014年10月29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 小田康代 電話03-5802-0863
Fax 03-5802-6250 [oda.jsap.or.jp](http://annex.jsap.or.jp/support/division/MandBE/) [http://
annex.jsap.or.jp/support/division/MandBE/](http://annex.jsap.or.jp/support/division/MandBE/)

■ International Symposium on Recent Progress of Photonic Devices and Materials

主催 神戸大学大学院工学研究科

協賛 日本物理学会, 他

日時 2014年11月13日(木)~14日(金)

場所 神戸大学瀧川記念学術交流会館(657-
8501 神戸市灘区六甲台町1-1)

内容 光デバイス及び材料を対象とし, 国
内外の研究者を一堂に会して国際シンポ

ジウムを開催。半導体量子ドットや量子
井戸等の低次元系半導体やナノメータ
サイズで加工された材料等の, 光物性的な
側面に焦点を当てる一方で, 太陽電池や
半導体レーザー等のデバイスや量子情報
通信のような光を操作する技術等にも焦
点を当て, 基礎的な物性から応用まで,
光をキーワードとした多彩なトピックス
を扱う。

定員 なし

参加費 無料

申込 事前登録制

参加申込締切 2014年10月10日(金)

連絡先 657-8501 神戸市灘区六甲台町1-1
神戸大学大学院工学研究科電気電子工学
専攻 小島 磨 電話/Fax 078-803-6077
kojima.phoenix.kobe-u.ac.jp [http://www.
research.kobe-u.ac.jp/eng-photonics/kojima/
symposium/Program.html](http://www.research.kobe-u.ac.jp/eng-photonics/kojima/symposium/Program.html)

■日本希土類学会第32回講演会

主催 日本希土類学会

協賛 日本物理学会

日時 2014年11月14日(金)13:30より

場所 アイビーホール青学会館(東京都渋
谷区渋谷4-4-25)

内容 佐藤智司(千葉大院工)グリコール
類の脱水反応における希土類酸化物の触
媒機能, 富重圭一(東北大院工)二酸化
炭素と水酸基およびアミノ基との反応を
促進する酸化セリウム触媒, 森 利之
(物質・材料研究機構)活性金属-酸化セ
リウムヘテロ界面機能を活用した燃料電
池用電極材料設計研究。

定員 未定

参加費 4,000円, 学生2,000円

参加申込締切 2014年10月31日(金)

連絡先 565-0871 吹田市山田丘2-1 大阪
大学大学院工学研究科応用化学専攻内
日本希土類学会事務局 電話06-6879-7352
Fax 06-6879-7354 [kidorui.chem.eng.
osaka-u.ac.jp](mailto:kidorui.chem.eng.osaka-u.ac.jp)

その他 懇親会:同日17:30よりアイビー
ホール青学会館にて(会費:予約(10/31
迄に払込済の方)7,000円, 当日8,000円)。

■ The 1st International Symposium on Interactive Materials Science Cadet Program

主催 文部科学省博士課程教育リーディ
ングプログラム 大阪大学未来戦略機構第
三部門「インタラクティブ物質科学・カ
デットプログラム」

日時 2014年11月16日(日)~19日(水)

場所 ホテル阪急エキスポパーク(565-

0826吹田市千里万博公園1-5 電話06-
6878-5151)

内容 Theoretical and experimental elucidation
of Interface reactions / Function of Multi-
metal Complexes / Controlling Quantum
Effects in Solid / Organic Material Science /
Novel Development of Nanophotonics /
Theoretical aspects of functional materials /
Material Design and Realization on Green
Energy / Interfacial Chemistry for Novel
Functions / Energy Harvesting and Saving

定員 200名

参加申込締切 2014年10月30日(木)

連絡先 560-8531 大阪府豊中市待兼山町
1-3 大阪大学大学院基礎工学研究科 G
棟204号室 未来戦略機構第三部門
橋本治子 電話 06-6850-6474 / 06-6850-
6403

isimscl@gmail.com [http://www.msc.
osaka-u.ac.jp/isims/](http://www.msc.osaka-u.ac.jp/isims/)

■第25回プラズマエレクトロニクス講習 会~プラズマプロセスの基礎とその応 用・制御技術~

主催 応用物理学会プラズマエレクトロ
ニクス分科会

日時 2014年11月26日(水)

場所 東京工業大学田町キャンパス国際会
議室(108-0023東京都港区芝浦3-3-6)

内容 プラズマプロセスはエレクトロニク
ス分野では半導体デバイスやフラットパ
ネルディスプレイの開発・製造を支える
技術であると共に, 医療やエネルギー・
環境応用等幅広い分野でも欠くことので
きない基盤技術となりつつある。産業応
用で必要とされるプロセスプラズマの生
成, 診断・制御, モニタリング技術の基
本と, その先端応用技術について第一線
でご活躍の先生方よりご講義頂く。今年
は, 応用技術として大気圧プラズマによ
る成膜及び環境クリーン化技術, 半導体
製造における極微細エッチング及びその
制御技術にフォーカス。

定員 99名

参加費 22,000円, 学生6,000円

申込 <http://annex.jsap.or.jp/plasma/>より

申込締切 2014年11月10日(月)

振込締切 2014年11月17日(月)

連絡先 日立ハイテク 伊澤 勝

izawa-masaru.sme.hitachi-hitec.com

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

■第9回凝縮系科学賞候補者推薦依頼

対象 広い意味での凝縮系科学の研究に従事する若い研究者 (2014年12月末日現在, 博士学位取得後10年以内の者). 原則と

して実験系・理論系各1名 (該当者が無い場合には見送ることがある).

顕彰 賞状, 盾及び賞金20万円

推薦方法 自薦又は他薦

推薦締切 2014年9月26日(金)

問合せ先 名古屋大学理学研究科物理学教室 寺崎一郎 電話052-789-5255

terra cc.nagoya-u.ac.jp

その他 推薦者は候補者についての書類 (○略歴 ○全業績リスト ○研究業績概要 (A4, 2枚以内) ○主要論文別刷3編以内 ○他薦の場合は推薦書 ○書式は自由) をe-mailで送付. 運営委員: 北岡良雄 (委員長), 秋光 純, 鹿野田一司, 福山秀敏, 寺倉清之, 寺崎一郎, 常行真司, 永長直人, 三宅和正, 宮野健次郎.

詳細は <http://prize.condmat.net/> 参照.

■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.)

8月ユーザ名 : 14Aug

パスワード: Louis831

9月ユーザ名 : 14Sep

パスワード: Pieter797

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
2014年			
5月~11月	セラミックス大学2014 (CEPRO2014)	首都圏各地	69-4
8/8~10	基研研究会「若手のための量子情報基礎セミナー」	京都市	69-6
8/17~20	第10回日韓強誘電体会議 (JKC-FE10)	広島市	69-6
8/25	第21回高校課題研究フォーラム「高校のできるセラミックス実験」	藤沢市 (神奈川)	69-8
8/29~31	平成26年度未踏科学サマー道場「次世代バイオマテリアルとその応用」	葉山町 (神奈川)	69-7
8/31~9/2	第8回プラズマエレクトロニクスインキュベーションホール	御殿場市 (静岡)	69-7
9/1~3	第17回XAFS討論会	徳島市	69-7
9/3~5	第47回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム	名古屋市	69-6
9/4~6	第23回日本バイオイメージング学会学術集会「公開講座」・「学術講演会」	吹田市 (大阪)	69-7
9/7~10	日本物理学会2014年秋季大会 (中部大学) (領域2を除く物性)	春日井市 (愛知)	日本物理学会
9/10~12	プラズマシミュレータシンポジウム2014	土岐市 (岐阜)	69-8
9/11~12	第24回格子欠陥フォーラム「パワーデバイス開発のための格子欠陥評価・制御」	恵那市 (岐阜)	69-7
9/11~12	第5回社会人のための表面科学ベーシック講座	東京	69-8
9/18~21	日本物理学会2014年秋季大会 (佐賀大学) (素粒子, 宇宙線, 宇宙物理)	佐賀市	日本物理学会
9/24~25	第17回薄膜基礎講座	東京	69-8
9/24~27	Fujihara Seminar: Real-time Dynamics of Physical Phenomena and Manipulation by External Fields	苫小牧市 (北海道)	69-7
10/4	第19回久保記念シンポジウム「超伝導と線形応答」	東京	69-8
10/5~8	The 2nd Int. Symp. on Long-Period Stacking Ordered Structure and Its Related Materials	熊本市	69-8
10/8~11	日本物理学会2014年秋季大会 (ハワイ) (核物理)	ハワイ島	日本物理学会・アメリカ物理学会合同
10/15~17	第62回レオロジー討論会	福井市	69-5
10/19~22	第7回シリコン材料の科学と技術フォーラム2014 (浜松)	浜松市 (静岡)	69-5
11/2~6	The 7th Int. Symp. on Surface Science	松江市	68-4
11/4~6	第53回NMR討論会	吹田市 (大阪)	69-8
11/4~12/5	国際滞在型研究会「Novel Quantum States in Condensed Matter」	京都市	69-6
11/6~8	第34回表面科学学術講演会	松江市	69-8
11/10	有機分子・バイオエレクトロニクス分科会講習会「有機半導体デバイスの界面分析の基礎と応用」	東京	69-8
11/13~14	Int. Symp. on Recent Progress of Photonic Devices and Materials	神戸市	69-8

開催月日	名 称	開 催 地	会誌巻号または世話人
2014年 11/14	日本希土類学会第32回講演会	東京	69-8
11/16~19	The 1st Int. Symp. on Interactive Materials Science Cadet Program	吹田市(大阪)	69-8
11/18~21	日本物理学会2014年秋季大会(朱鷺メッセ)(領域2)	新潟市	日本物理学会, 応用物理学会 プラズマエレクトロニクス 分科会, プラズマ・核融合 学会
11/22~24	第55回高圧討論会	徳島市	69-7
11/22~24	第35回日本熱物性シンポジウム	東京	69-7
11/24~28	4th Workshop on Quantum Simulations and Quantum Walks	KwaZulu Natal (南アフリカ)	69-6
11/24~28	2014 Int. Conf. on Artificial Photosynthesis	淡路市(兵庫)	69-7
11/26	第25回プラズマエレクトロニクス講習会~プラズマプロセスの基礎とその応用・制御技術~	東京	69-8
2015年 3/21~24	日本物理学会第70回年次大会(早稲田大学)	東京	日本物理学会
9/16~19	日本物理学会2015年秋季大会(関西大学)(物性)	吹田市(大阪)	日本物理学会
9/25~28	日本物理学会2015年秋季大会(大阪市立大学)(素粒子, 核物理, 宇宙線, 宇宙物理)	大阪市	日本物理学会

編集後記

昨年末、自然科学入門科目の教材として科学史の概要を1章分書くことになった。2月末の締切日に原稿を送って東の間安堵していたら、科目の内容を精査する御仁(私の大学には「考査係」というこの方面の専門家がおられる)から「ギリシャ語の勉強大変だったでしょう」と言われて驚いた。冗談と受け止めて「科学史の本を何冊か読んで勉強したんですけど」と答えたら相手の顔が曇った。2次文献や3次文献で知識を仕入れて書くなどというのは危険極まりないというのである。急に酔いが覚めた気分がしたが、送り出した原稿を引っ込めるわけにもいかず、ひとまず初校が来てから考え直そうと決めた。

この一件でやや気が縮こまったが言われてみれば御説御尤もというわけで、やはり門外の徒が他分野に侵入して原稿を書いたり意見を述べたりするものではないという気持ちになった(ちなみに初校はまだ手元にある)。

今年の4月に編集委員会に加わったのはこのような気分の時であった。ところが委員の皆さんを観察していると、なかなかそういう気分で縮こまっていたはいるわけにもいかないということがわかってきた。物理学という広大な学問の動向を毎月50ペ

ージ程度の会誌に盛っていかなくてはならない。しかも内容については30人弱の編集委員の裁量にほぼ委ねられているようである。こうなると自分の分野の記事を提案するだけでは済まなくなる。他分野にも若干侵入(進入?)して記事について感想や印象を述べる必要が出てくる。これは責任重大だ。

こんなことを考えながら会誌の記事を眺め直してみると、物理学の対象領域がどんどん広がっていることと、分野ごとの先鋭化がますます進行していることに今更ながら驚かされる。しかし、物理の魅力は何とんでも対象に縛られない論理と方法の普遍性にあるだろう。いったん平地まで下りさえすれば、たとえ高峰でも互いに往来できるのだという確信を持ち続けたいものである。

「交流」、「解説」、「最近の研究から」、「実験技術」の各欄にリードページがついて今号で8号目だ。リードページは、落語でいえばマクラである。著者の皆様には、どうかいったん平地に下りてリードページをマクラにして頂き、できるだけゆったりと本題に進んでいただければお願いしたい。

今月号の記事を眺めると、「光・非平衡」、「情報・エントロピー」、「電子状態・分子自由度」といった普遍的なテーマが浮き出している。異なる話題に共通の物理が潜

んでいることを探るのは大きな楽しみである。リードページを充実させることで、読者の皆様それぞれの宝探しがしやすくなるだろう。

最後になるが、本号には井口先生と菅野先生の追悼記事が掲載された。井口先生は有機物の化学と伝導体の物理を結び付けて新しい領域を築かれ、(筆者もかつて在籍した)分子研という融合拠点を作られた。6年前に苫小牧で藤原セミナーを開催した折には3日間缶詰で我々組織委員をサポートしてくださった。さらに4年前にひよんな事情で宇宙関係のプロジェクトに関わった際には、JAXAにおられた先生に相談に乗っていただいた。しかしすでにその時点でかなり体調が悪いようだった。

菅野先生とお話ししたのは一度だけであるが、その時にいただいたヒントはメモしていまも大事に持っている。配位子場理論は、物質科学の出発点となる局所構造と電子状態の関係を記述する重厚な理論体系である。その伝統を若い世代がきちんと継いでくれるだろうかという危惧を口にされたことも印象に残っている。生年を拝見するとお二人はおひとつ違いである。同時代を駆け抜けて我々の世代に肥沃な大地を残されたお二人の先生に哀悼と感謝を捧げたい。

岸根順一郎 <

編集委員

宮下 精二(委員長), 森川 雅博,
井岡 邦仁, 石岡 邦江, 今村 卓史,
岡田 邦宏, 沖本 洋一, 加藤 岳生,
角野 秀一, 桑本 剛, 小島智恵子,
関 和彦, 岸根順一郎, 高須 昌子,
常定 芳基, 長谷川修司, 松尾 泰,
松本 重貴, 水崎 高浩, 南 龍太郎,

望月 維人, 野口 博司, 李 哲虎,
目良 裕, 山本 隆夫, 渡邊 康,
平野 哲文, 板橋 健太, 藤山 茂樹
(支部委員)
奥西 巧一, 黒岩 芳弘, 小山 晋之,
酒井 彰, 中村 光廣, 野村 清英,
前田 史郎, 松井 広志, 水野 義之,
山崎 祐司

新著紹介小委員会委員

平野 哲文(委員長), 大江純一郎,
片山 郁文, 桂 法称, 加藤 進,
小芦 雅斗, 合田 義弘, 郡 宏,
長谷川秀一, 廣政 直彦, 間瀬 圭一,
宮原ひろ子, 三輪 光嗣, 山本 貴博

本誌の複写をご希望の方へ

日本物理学会は、本誌掲載著作物の複写に関する権利を(一社)学術著作権協会(以下、学著協)に委託しております。

本誌に掲載された著作物の複写をご希望の方は、学著協より許諾を受けて下さい。

※企業等法人で、(公社)日本複製権センター(学著協が社内利用目的複写に関する権利を再委託している団体)と包括複写許諾契約を締結している場合を除く(社外頒布目的の複写については、学著協の許諾が必要です)。

※複写以外の許諾(著作物の転載等)に関しては、学著協に委託しておりません。

直接、日本物理学会(E-mail: pubpub_jps.or.jp)へお問合せ下さい。

※日本国外における複写について、学著協が双務協定を締結している国・地域においてはその国・地域のRRO(海外複製権機構)に、締結していない国・地域においては学著協に許諾申請して下さい。

権利委託先 一般社団法人学術著作権協会

〒107-0052 東京都港区赤坂9-6-41 乃木坂ビル 3F

Fax: 03-3475-5619 e-mail: info_jaacc.jp

日本物理学会誌 第69巻 第8号 (平成26年8月5日発行) 通巻778号

©日本物理学会 2014

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 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。