

---

# 会場 C

## 領域 7, 10, 11

---

### C-1 電場印加その場 STEM 法によるイオン分極の直接観察に向けた検討

九州大学工学府<sup>A</sup> 宮内隆輝<sup>A</sup>, 佐藤幸生<sup>A</sup>, 藤中翔太<sup>A</sup>, 寺西亮<sup>A</sup>, 金子賢治<sup>A</sup>

電圧の印加により電荷を蓄えられる物質を誘電体と呼び、その性能の指標となる誘電率は電圧印加による陽イオンおよび陰イオンの相対変位（イオン分極）に起因する。イオン分極の直接観察を行うために、現在、我々は電場印加その場走査透過型電子顕微鏡（STEM）法による原子位置の精密同定技術を構築している。しかし、我々が過去に行った SrTiO<sub>3</sub> 結晶における測定では単一格子中の Ti イオン位置に最大約 20 pm の誤差があり (1)、測定精度の向上が必要である。誤差の要因としては、電子線走査の局所歪み、晶帯軸からの試料傾斜などがあり、各要因の影響を理解することが精度改善につながると考えられる。そこで本研究では、電場印加その場 STEM 観察によるイオン位置の測定誤差を再度測定し、電子線走査の局所歪みと試料傾斜による影響を検討することを目的とした。SrTiO<sub>3</sub> 単結晶を試料として電場印加その場 STEM 観察を行った。球面収差補正走査透過型電子顕微鏡および電圧印加二軸傾斜試料ホルダーを用い、0 kV/cm, ± 7.4 kV/cm の条件で同一視野から STEM 像を撮影した。像中の Sr および Ti イオンの位置をガウシアン・フィッティングで同定した。7.4 kV/cm の電場下で得られた STEM 像から得られたイオン変位量は 9 割以上の Ti イオンが約 12 pm 以内の誤差を示した。試料傾斜と電子線の局所歪みの影響について考慮した結果、試料傾斜は方向の揃った誤差を与え、電子線の局所歪みは方向のばらついた誤差を与えることが考えられた。

(1) Y. Sato et al., Appl. Phys. Lett. 111, 2017, 062904

## C-2 水熱合成法による Hf<sub>1-x</sub>Zr<sub>x</sub>O<sub>2</sub> ナノ粒子の作製

九州大学大学院工学研究院材料工学部門<sup>A</sup> 藤元このみ<sup>A</sup>, 佐藤幸生<sup>A</sup>, 寺西亮<sup>A</sup>, 金子賢治<sup>A</sup>

各種電子デバイスの小型化の要求に伴い、近年、誘電体ナノ材料の研究開発が進められている。しかしながら、現在強誘電体として最も広汎に利用されている BaTiO<sub>3</sub> には結晶子サイズの低下に伴い誘電特性が低下するサイズ効果があり、ナノ材料の開発を進める上での大きな障害となっている。一方、従来は強誘電性を示さない化合物とされてきた HfO<sub>2</sub> の薄膜が Zr や Si 等の元素を添加することで強誘電性を発現することが近年報告され (1-2)、膜厚が薄くなるにつれて強誘電性が向上することが明らかとなった (3)。このことは小型化を進める上において有利な特徴であると考えられる。これまで、HfO<sub>2</sub> 系材料における強誘電性の発現は薄膜においてのみ報告されているが、ナノ粒子においても強誘電性の発現が期待される。そこで本研究では、Zr を固溶した HfO<sub>2</sub> (以下、Hf<sub>1-x</sub>Zr<sub>x</sub>O<sub>2</sub> と呼称する) のナノ粒子を合成し、その構造解析を行った。出発原料として HfCl<sub>4</sub>, ZrCl<sub>4</sub> の粉末を用い、160 °C、24 時間の条件で水熱合成法により Hf<sub>1-x</sub>Zr<sub>x</sub>O<sub>2</sub> (x = 0, 0.42, 0.63) ナノ粒子を合成した。作製した粉末試料に対して、X 線回折 (XRD) 測定 ((株)Rigaku 製 RINT-2200)、透過型電子顕微鏡 (TEM) 観察 ((株)日本電子製 JEM-ARM200F)、エネルギー分散型 X 線分光 (EDS) 測定を行った。XRD による結晶構造解析の結果、Zr の添加量に依らずいずれの試料も単斜晶相の蛍石型構造を有する単相試料であった。また、TEM 像から、作成されたナノ粒子は尖った形状をしていることが分かった。各試料の平均径は Zr 添加量が増えるにつれて大きくなる傾向にあることが分かった。また、EDS 測定から粒子内で Hf および Zr が均一に固溶していることが明らかとなった。

【参考文献】 (1) T. S. Bö scke et al., Appl. Phys. Lett., 99 (2011) 102903 (2) J. Müller et al., Nano Lett., 12 (2012) 4318 (3) M. H. Park et al., Appl. Phys. Lett., 102 (2013) 242905 【謝辞】 本研究の一部は科学研究費補助金挑戦的研究 (萌芽) (課題番号: 18K18952) の支援の下で行われました。また、実験の一部は九州大学超顕微解析研究センターにて行いました。感謝申し上げます。

## C-3 Graphene/LiNbO<sub>3</sub> 界面における弾性表面波伝搬特性

九州工業大学大学院<sup>A</sup>, 九州工業大学<sup>B</sup> 衛藤大地<sup>A</sup>, 吉村匠平<sup>A</sup>, 前川創<sup>B</sup>, 孫勇<sup>A,B</sup>

近年、数原子層グラフェン膜は電子及び光学デバイスの材料として注目されている。しかし、このような薄い材料は単独使用できず支持基板が必要である。また、多くの場合、グラフェン膜と支持基板の間には主にファンデルワールス力が働いており、その界面での機械的な相互作用、つまり静摩擦や動摩擦などはグラフェン膜の電気的特性に強い影響を与えると報告されている [1]。本研究では、弾性表面波 (SAW) デバイスの表面に異なる層数のグラフェン膜を作製し、伝搬表面波特性の温度依存性を測定してグラフェン膜/基板の界面の機械的特性を評価した。圧電結晶として 128° Y-X LiNbO<sub>3</sub> 結晶を用い、SAW の基本周波数を 50MHz とした。また、グラフェンの堆積には結晶性がなく、層間には異分子の混入も予想される。更に、SAW デバイスのサイズは 10mm × 30mm × 0.5mm で、入出力電極間に作製された 1~5 層グラフェン膜のサイズは 10mm × 10mm であった。超高真空中で試料における SAW の中心周波数を 280~320K の温度範囲で測定した。1~5 層グラフェン膜/LiNbO<sub>3</sub> の SAW 中心周波数の温度依存性において、3 と 5 層試料の中心周波数が 290 305K で急激に変化することが確認できた。しかし、1 と 4 層試料では目立った変化はなかった。実験結果から、グラフェン膜/LiNbO<sub>3</sub> 界面の機械的な相互作用は、グラフェン膜作製時の温度、両物質の熱膨張係数や両物質間の摩擦力等に関係していることが推測される。また、層数によってグラフェン膜自身の熱膨張係数は正~負の間で変化することも考えられる。[1] Y. Sun, K. Kirimoto, H. Kamada, K. Onishi, D. Etoh, S. Yoshimura, and S. Kanemitsu, AIP Advances 9, 025316 (1-10) (2019).

## C-4

### $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> の電子比熱についての理論研究

熊本大学教育<sup>A</sup>, 兵庫県立大学物質理学<sup>B</sup> 築出啓太<sup>A</sup>, 岸木敬太<sup>A</sup>, 長谷川泰正<sup>B</sup>

二次元有機導体  $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> ではグラフェンと同様に「質量のないディラック電子系」の存在が知られている [1]. ただし, グラフェンとは異なりディラックコーンは傾いている.  $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> はバルク結晶なので, グラフェンよりも比熱の測定が容易である. 15kbar の静水圧力下で  $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> の電子比熱測定が行われている [2]. 電子比熱の温度依存は  $T^{1.8}$  と  $T^2$  に近い値であり, ディラックコーンの存在を裏付けるような結果であった.

拡張ヒュッケル法で得られる飛び移り積分 [3] に基づく内挿関数によって, 一軸 ( $y$  軸) 圧力下の  $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> のエネルギーバンドが調べられている. 圧力を大きくしていくとディラック点が移動し, 39.15kbar において 2 つのディラック点は結合する. このとき,  $k_y$  方向の分散は線形のままであるが,  $k_x$  方向の分散には線形依存がなくなり二次の波数依存になる [4]. この状態はセミディラックと呼ばれている. 状態密度のエネルギー依存は  $\sqrt{\epsilon}$  に比例するので [5], 電子比熱などの物理量もディラック電子系とは異なる温度依存になると考えられる.

本研究では, 圧力を変化させ (39.15kbar, 35.0kbar, 20.0kbar),  $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> の電子比熱を計算した. ディラックからセミディラックに移り変わる場合, 電子比熱がどのように変化するかを調べた. 我々の計算結果が, 実験により確かめられることが期待される.

#### 参考文献

- [1] K. Kajita, Y. Nishio, N. Tajima, Y. Suzumura and A. Kobayashi, J. Phys. Soc. Jpn. **83**, 072002 (2014).
- [2] T. Konoike, M. Sato, and N. Nagaosa, Journal of the Physical Society of Japan **81** No.4, 043601 (2012).
- [3] R. Kondo, S. Kagoshima, and J. Harada, Rev. Sci. Instrum. **76**, 093902 (2005).
- [4] Y. Suzumura, Takao Morinari, and Frederic Piéchon, J. Phys. Soc. Jpn. **82**, 023708 (2013).
- [5] Y. Hasegawa, R. Konno, H. Nakano, and M. Kohmoto, Phys. Rev. B **74**, 033413 (2006).

## C-5

### 有機ディラック電子系の $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> の圧力下のバンド構造

熊本大学教育<sup>A</sup>, 兵庫県立大学物質理学<sup>B</sup> 今福晴仁<sup>A</sup>, 岸木敬太<sup>A</sup>, 長谷川泰正<sup>B</sup>

二次元有機導体の  $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> [1] は, 一軸 ( $y$  軸) 圧力下での拡張ヒュッケル法で得られる飛び移り積分 [2] に基づく内挿関数を使って, 二つの線形のバンドが一点で接していることが示されている [3]. これは, グラフェンと同様に,  $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> が質量のないディラック電子系であることを意味する. しかしながら,  $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> では, ディラックコーンは傾いている. バンド構造の圧力変化を詳細に調べることで, ディラックコーンの傾きが過傾斜から傾斜に変化し, 2.3kbar では臨界的な傾きになり, 3/4 ディラックコーンという新しい分散になっていることを見つけている [4]. 3/4 ディラックコーンでは三方向の分散が線形であり, 一方向の分散が二次曲線である.

本研究では, 一軸 ( $x$  軸) 圧力下および,  $y$  軸と  $x$  軸の両圧力下での  $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> のディラックコーンの分散と傾きを詳細に調べる.  $x$  軸圧力下での計算には拡張ヒュッケル法による飛び移り積分の値 [2] に基づいた関数を使用する.

結果として,  $x$  軸に 14.6kbar の圧力を加えた時, 3/4 ディラックコーンが実現していることを見つけた. さらに, ディラックコーンの傾斜の種類 (過傾斜, 傾斜, 臨界的な傾斜) と分散に関して,  $x$  軸と  $y$  軸の両圧力下に関する相図を作成した.

#### 参考文献

- [1] K. Kajita, Y. Nishio, N. Tajima, Y. Suzumura and A. Kobayashi, J. Phys. Soc. Jpn. **83**, 072002 (2014).
- [2] R. Kondo, S. Kagoshima, and J. Harada, Rev. Sci. Instrum. **76**, 093902 (2005).
- [3] S. Katayama, A. Kobayashi and Y. Suzumura, J. Phys. Soc. Jpn. **75**, 054705 (2006).
- [4] K. Kishigi, and Y. Hasegawa, Phys. Rev. B **96**, 085430 (2017).

## C-6

### メキシカンハット型ポテンシャル加振系における一方向回転運動とカオス拡散

佐大医<sup>A</sup> 富永広貴<sup>A</sup>

実験, 数理モデルを問わず色々な所で見られる一方向加振により生じる回転運動を非線形力学系の観点から捉え直し, そこに普遍性や一般性を見出せないかと考え, 比較的単純な力学系であるメキシカンハット型ポテンシャル加振系を導入し, 数値シミュレーションを行った。運動方程式は, 次式のようにパラメータ  $a$  で, 円周方向に非対称性を与えたメキシカンハット型ポテンシャルに水平方向に周期外力を加えた物である。

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -\nabla V(X, Y, t) - \mu \frac{d\mathbf{r}}{dt}$$
$$V(X, Y, t) = V_0(X, Y) + h \cos \Omega t (\mathbf{e} \cdot \mathbf{r})$$
$$V_0(X, Y) = \{1 - (X^2 + Y^2)\}^2 - \frac{a}{2}(X^2 - Y^2)$$

ここで,  $m$  は質点の質量,  $\mu$  は摩擦係数,  $\Omega, h, \mathbf{e}$  は, それぞれ, 振動外力の角振動数, 振幅と加振方向の単位ベクトルである。加振方向は  $\phi$  で与える。

外力の振幅  $h$  を徐々に大きくしていくと, ポテンシャル中の粒子はポテンシャルの底に沿った回転運動を始める。 $h$  がある大きさになると外力の周期に対応した一方向回転運動が見られるようになる。更に  $h$  を大きくしていくと, 軌道がカオス的に正負に回転しながら拡散していくいわゆるカオス拡散が起こる。パラメータ探索の範囲を広げて調べてみても, カオス拡散は周期軌道である一方向回転運動の直後にしか現れない事がわかってきた。カオス拡散発生後は,  $h$  を増大させても様々なりミットサイクルは見られるが, 一方向回転運動は見られない。これらのことから, カオス拡散への分岐は一方向回転周期軌道の不安定化による現象ではないかと考えられる。

[1] 富永, 宮崎, 信学技報 NLP2017-26, pp127-130.

[2] 富永, 信学技報 NLP2019-17, pp93-96.

## C-7

### 流動状態における粉粒体の粘性

九大理物<sup>A</sup> 河本彩帆<sup>A</sup>, 稲垣紫緒<sup>A</sup>

粉粒体の特徴的な現象の1つに、「ブラジルナッツ効果」と呼ばれるサイズ分離現象がある。サイズの違う粒子を容器に入れて振ると、大きな粒子が上部に集まってくる現象だ。粒子の大きさや密度の比によって、大きい粒子が底のほうに沈む「逆ブラジルナッツ効果」が起こったり、サイズ分離自体が起こらなかつたりするが、最終的にどの状態を取るかを定める明確な基準はまだない。[1] 我々は、粉粒体のサイズ分離現象に粉粒体の粘性が関係あるのではないかと考え、サイズの異なるガラスビーズの粘度を測定した。ガラスビーズを直径4 cm の円筒容器に入れ、鉛直方向に加振して流動状態にし、粘度計を用いて粘度を測

定した。発表では各ガラスビーズの粘性と振動数の関係について報告したい。[1] A.P.J Breu, H.-M. Ensner, C.A. Kruelle, and I. Rehberg *Phys.Rev.Lett.***90**,014302(2003)

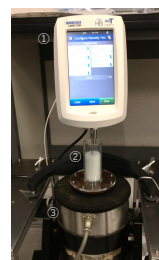


図1 セットアップ図  
加振器(3)で振動させた対象(2)  
を粘度計(1)で測定している。

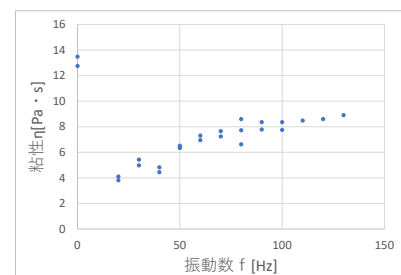


図2 流動状態におけるガラスビーズ(粒径0.4mm)の粘度の加振振動数依存性

## C-8

### 回転円筒容器内における粉粒体のゆっくりとした対流現象について

九大理物<sup>A</sup> 黒河俊介<sup>A</sup>, 内海脩帆<sup>A</sup>, 稲垣紫緒<sup>A</sup>

円筒容器内に2種類の粒子を混合して入れ、円筒容器を水平にして軸を中心に回転させたとき、軸方向に内部の粒子が相分離し縞模様のバンドが形成される。このバンドは内部に封入される粒子の充填率によって振る舞いを変える。充填率が100%に近いときには円筒容器の中央付近からバンドが湧き出し、容器の端に進行していく現象が継続的に繰り返される。[1]このとき、バンドが定常的に一方向に動くのは、軸方向へ巨視的対流に駆動されているのではないかと考えた。この巨視的対流が、サイズ分離を伴わずに生じるかどうかを検証するために、2重円筒容器に、単種の粒子を複数色に着色して縞状になるよう封入して回転させ(図1)、円筒容器の回転中の表面の様子、および回転後の内部構造を観察することで、この対流を評価した。 [1]S.Inagaki, et.al *Phys.Rev.E*.**91**,010201(2015)

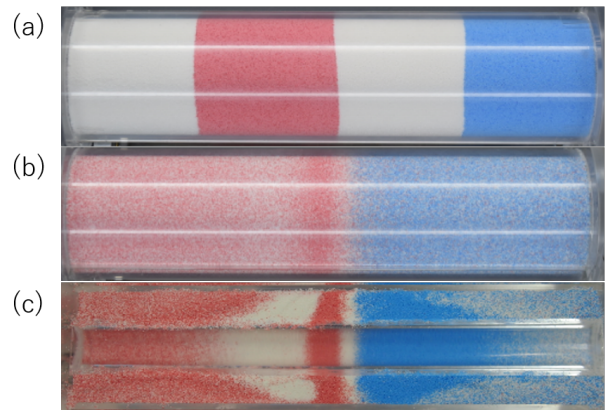


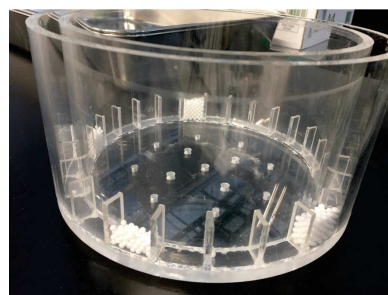
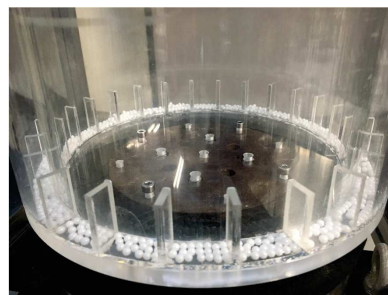
図1：アルミナビーズ( $\phi=0.5\text{mm}$ )を用いた実験  
(a)実験開始時の容器表面  
(b)6時間後の容器表面  
(c)6時間後の内部構造(断面図)

## C-9

### 二分散粉体ガスのクラスタリング現象

九大理物<sup>A</sup> 益永真聡<sup>A</sup>, 稲垣紫緒<sup>A</sup>

一定の高さを持った壁で2つのセルに区画化された容器内に粉粒体を入れ、鉛直方向に振動を加えることを考える。振動の強さや粒子の大きさ、数といった条件を調節すると、粒子が片方のセルでクラスターを形成する現象が観察される。これは、粒子間の衝突が非弾性であるために、粒子の多いセルではより大きなエネルギーが失われ、濃度の濃い領域はより濃く、希薄な領域はより希薄になるためである。これは「粉粒体のマクスウェルの悪魔」と呼ばれている [1]。2種類の粒子を用いた場合、一定の条件下においてクラスタリングが起こるセルが周期的に入れ替わる「粉体時計」と呼ばれる現象が起こることも知られている [2][3]。本発表は、容器のセル数を24にまで増やして、様々な条件下での粒子の振る舞いについての実験結果について報告する。 [1] Jens Eggers *Phys. Rev. Lett.* 83.5322 [2] Rene Mikkelsen, Devaraj van der Meer, Ko van der Weele, and Detlef Lohse *Phys. Rev. Lett.* 89.214301 [3] Devaraj van der Meer, Ko van der Weele, and Detlef Lohse *JSTAT*(2004) P04004



## C-10 4次元保存力学系におけるカオス拡散

福岡県立大学人間社会学部<sup>A</sup> 石崎龍二<sup>A</sup>

流体粒子のカオス的運動は、ラグランジアンカオスと呼ばれる [1]。ラグランジアンカオスの研究においては、通常、流体の非圧縮性が仮定され、流体粒子の運動を記述する方程式は保存力学系となる。低次元保存力学系におけるカオス拡散の解析および数値的研究は、乱流輸送現象を力学系の観点から解明するための有効な手がかりを与えるものと期待される。

保存力学系において、カオスが発生する場合の相空間は、一般に規則的な運動をする領域である「トーラスの島」と不規則的な運動をする領域である「カオスの海」から構成される。保存力学系におけるカオス拡散では、相空間上のカオスの海の領域内で通常拡散や異常拡散が発生することが知られている。

講演では、代表的な保存力学系の2次元の標準写像 [2] と標準写像を結合した4次元の Froeschlé 写像における相空間内でのカオス軌道の拡散 [3] の性質について数値計算により調べた結果について報告する。

### 参考文献

[1] T. H. Solomon and J. P. Gollub: Chaotic particle transport in time-dependent Rayleigh-Bénard convection, Phys. Rev. A38, pp. 6280-6286 (1988).

[2] R. Ishizaki, T. Horita, T. Kobayashi and H. Mori: Anomalous Diffusion Due to Accelerator Modes in the Standard Map, Prog. Theor. Phys., Vol. 85, No. 5, pp. 1013-1022 (1991).

[3] 石崎龍二「保測写像におけるカオス軌道の相対拡散」, 福岡県立大学人間社会学部紀要, Vol. 17, No. 2, pp. 109-118 (2009).

## C-11 1次元 S=1 ボンド交代次近接量子スピン系の相転移

九大理<sup>A</sup> 藤村啓<sup>A</sup>, 野村清英<sup>A</sup>

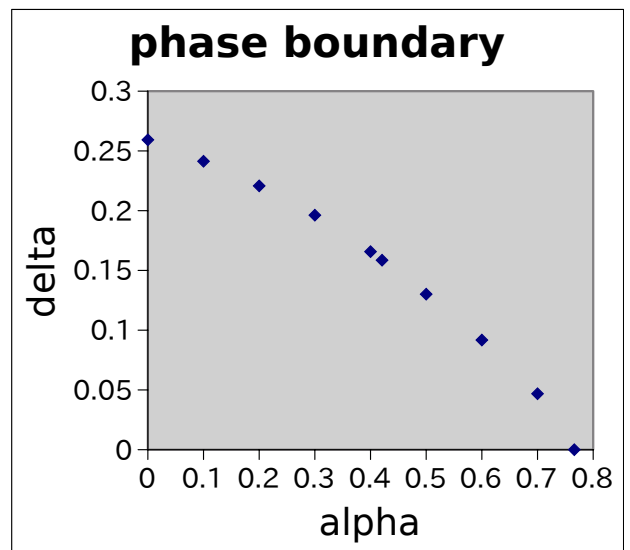
1次元  $S = 1$  ボンド交代次近接量子スピン系

$$H(\alpha, \delta, L) = \sum_{i=1}^L \left( 1 + \delta(-1)^i \right) (S_i S_{i+1} + \alpha S_i S_{i+2})$$

において、周期的境界条件 (PBC) と  $z$  軸ひねり境界条件 (TBC) を用い、数値対角化からエネルギーを計算した。またそこからレベルスペクトルコピーを行い、パラメータ  $(\alpha, \delta)$  に対する

- $(\alpha, \delta)$  相境界図
- 相転移のユニバーサリティクラス

を求めた。



## C-12

### Majumdar-Ghosh モデル近傍におけるエネルギーギャップの解析と整合・非整合波数

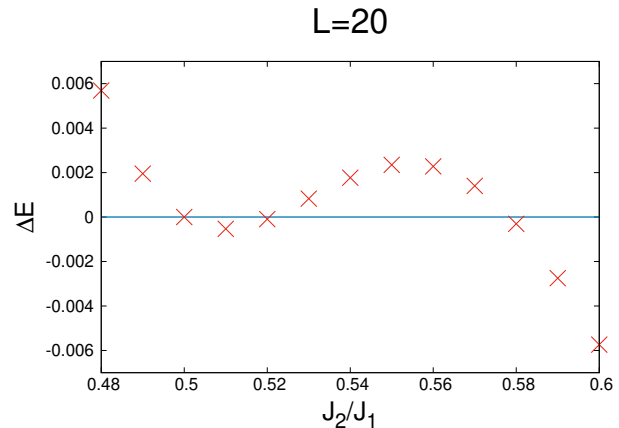
九大理<sup>A</sup> 加峰悠貴<sup>A</sup>, 野村清英<sup>A</sup>

本研究では近接相互作用、次近接相互作用をもつ、周期的境界条件を課した  $S = 1/2$  の  $J_1$ - $J_2$  モデル

$$\hat{H} = J_1 \sum_{j=1}^L \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1} + J_2 \sum_{j=1}^L \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+2}$$

を扱う。このモデルは  $J_2/J_1 = 1/2$  (Majumdar-Ghosh モデル) で厳密解が存在するが、本研究では Majumdar-Ghosh モデル近傍で、波数の異なる基底状態どうしのエネルギーギャップを数値対角化法を用いて求めた。次に求めたエネルギーギャップの零点を解析し、零点の振る舞いを整合・非整合波数と関連づけ、その妥当性を評価した。

T.Murashima and K.Nomura, Phys.Rev.B73,214431(2006)



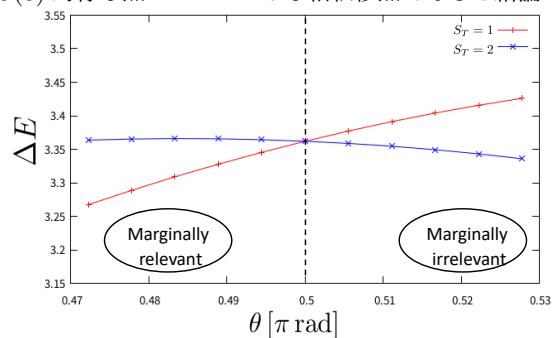
## C-13

### 一次元 S=1 量子スピン系における DT モデルの SU(3) 対称性

九大理<sup>A</sup> 益子通生流<sup>A</sup>, 野村清英<sup>A</sup>, 守屋俊志<sup>A</sup>

2017 年に王・桂らの研究グループが、一次元 S=1 量子スピン系における Dimer-Trimer(DT) モデルを提案した。本研究ではハミルトニアンに関して厳密対角化を実行し、SU(3) 対称な点近傍においての相転移現象を議論することが目的である。その結果、SU(3) 対称な点において系はスケール次元  $\nu=2/3$ 、セントラルチャージ  $c=2$  の共形場理論に従うことが分かった。さらに SU(3) 対称な点近傍を調べると、SU(3) 対称な点を境にして、スケール変数が有意な変数から有意でない変数に変化していることがわかった。以上の結果から、我々は DT モデルの

SU(3) 対称な点は BKT-like な相転移点であると結論づけた。

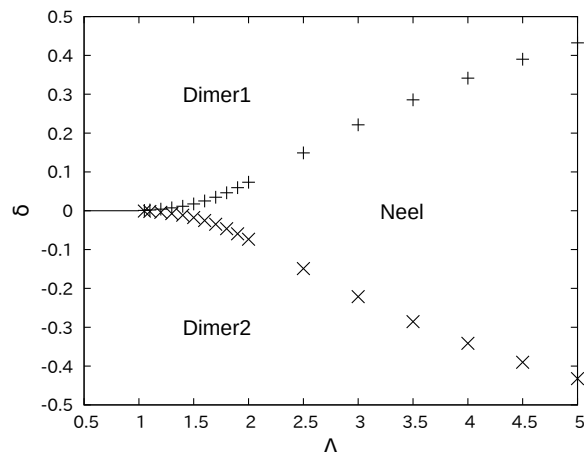


## C-14

### ひねり境界条件を用いたイジングユニバーサリティの相転移の数値的計算

九州大学<sup>A</sup> 守屋俊志<sup>A</sup>, 野村清英<sup>A</sup>

本研究では量子スピンモデルの Ising universality の相転移点を計算する手法として、 $z$  軸ひねり境界条件と  $y$  軸ひねり境界条件を使った方法を提案する。Dimer 相と Neel 相で 2 つの境界条件でのエネルギーが逆転することを用いて相転移点を計算する。 $S=1/2$  ボンド交代 XXZ 鎖に本研究の方法を適応し、数値計算を行った。このモデルは 3 重臨界点を持ち、その付近では複数の相転移点が非常に近くなるため相関距離が増大する。そのため数値計算において有限サイズ補正の影響が大きくなっていく。それに対し本研究の方法では、用いている 2 つのひねり境界条件が 3 重臨界点上では等価となることを用いて、有限サイズ補正の影響を抑制することができる。



## C-15

### 量子スピン系における磁化率の異常性と共形場の対応

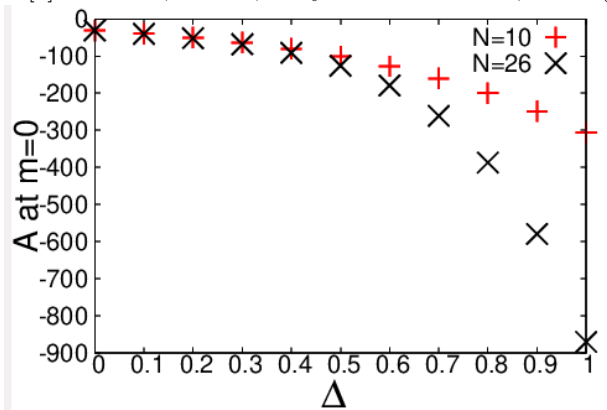
九大院理<sup>A</sup> 相場信孝<sup>A</sup>, 野村清英<sup>A</sup>

量子スピン系においてエネルギーギャップはその有無により系の挙動を変化させるという点で重要である。エネルギーギャップの有無を確認する際に、磁化-磁場曲線を用いることが一般的である。しかし、磁化曲線ではエネルギーギャップの有無を判別しにくいことがある。これに対し、Nakano、Sakai[1] は磁化率を導入することでエネルギーギャップを判別できると報告した。この報告で、磁化 0 付近の磁化率は相転移に関する異常性-発散-を持つことを確認した。

この先行研究を受け、本研究では  $S = 1/2$ , 1 次元 XXZ モデルでの磁化率  $\chi$  とエネルギーの 4 階微分  $A$  について数値対角化を用いて調べる。用いたハミルトニアンは下記に示す。 $\hat{H} = \sum_{j=1}^N (\hat{S}_j^x \hat{S}_{j+1}^x + \hat{S}_j^y \hat{S}_{j+1}^y + \Delta \hat{S}_j^z \hat{S}_{j+1}^z)$ ,  $\hat{S}_j^x, \hat{S}_j^y, \hat{S}_j^z, \Delta$  はそれぞれ  $x, y, z$  方向のスピン演算子、異方性パラメータとする。その結果、先行研究と同様に 1 次元系においても  $\chi$  と  $A$  の異常性を確認した。そして、 $\chi$  より  $A$  の方が強い異常性が現れると新たに明らかになった。加えて、4 階微分  $A$  は

$\Delta = 1/2$  において超対称性と対応すると明らかになった。これらのことは、 $A$  による観測の方が相転移に関する異常性をより容易に確認でき、超対称性が現れるかどうかの判別にも有効であると示す。

[1]H.Nakano,T.Sakai,J.Phys.:Conf.Series 868,012006(2017)





## C-16

### 1次元非対称排除過程の待ち時間分布

佐賀大学<sup>A</sup> 日永田泰啓<sup>A</sup>

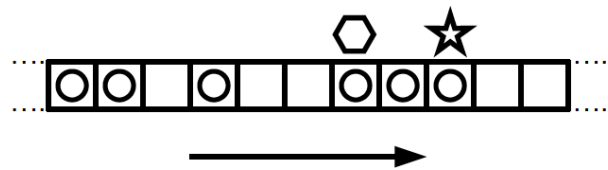
1次元完全非対称排除過程 (“Totally Asymmetric Simple Exclusion Process” 略して “TASEP”) と呼ばれる模型がある。これは1次元格子上的粒子たちが (全粒子に共通の) 進行方向の隣接格子に jump を試みる事を繰り返す模型である。より詳細は以下の通りである:

図は、TASEP の、ある時刻での状態である。図の正方形、○印は、それぞれ格子、粒子を表しており、矢印は「(全粒子に共通の) 進行方向」を表している。各格子は粒子を1個まで収容できる。各粒子たちにはそれぞれランダムな待ち時間 (WT) が与えられる。これらの WT は、予め定められた待ち時間分布 (WTD) に従ってランダムに定められる。各粒子たちは、それぞれに与えられた WT が経過すると、(図の場合) 右隣の格子への jump を試みる。右隣の格子に既に粒子が居る場合 (たとえば図の六角形でマークした位置の○印の場合) は jump に失敗し、そうでなければ (たとえば図の星形

でマークした位置の○印の場合) jump に成功する。成功・失敗に関わらず新たな「ランダムな WT」が各粒子に与えられ、その WT が経過すると各粒子は jump を試みる。このような jump を試みる事を繰り返す模型である。

上述のように、各粒子はランダムに与えられた待ち時間 (WT) が経過すると jump しようとするが、jump 先に別の粒子が居れば jump を中止する。これ故に、各粒子が実際に「経験する」「jump する (jump できる) までの待ち時間の分布」(経験待ち時間分布 (EWTD)) は、上記の WTD と一般に同じではない。

以上の EWTD について調べた事を発表する。



## C-17

### エンタングルメント・エントロピーの時間発展

福岡工大情報工<sup>A</sup> 神園弘大<sup>A</sup>, 丸山勲<sup>A</sup>

近年注目を浴びているエンタングルメントダイナミクス [1] について、今回、自由電子系を分断する光格子の時間変形を想定して数値計算した。時刻  $\tau$  におけるハミルトニアン  $H(\tau)$  は、初期ハミルトニアン  $H_0$  から最終ハミルトニアン  $H_1$  へと時間変化させ、

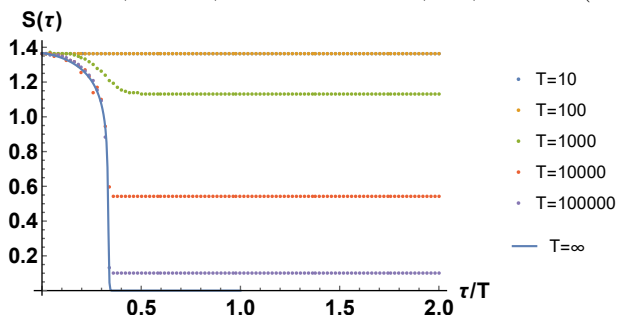
$$H(\tau) = \begin{cases} (1 - \frac{\tau}{T})H_0 + \frac{\tau}{T}H_1 & (\tau < T) \\ H_1 & (\tau \geq T) \end{cases}$$

とし、自由電子の強束縛模型を用いて、 $H_\alpha = \sum_{x=1}^L t_x^{(\alpha)} (c_{x+1}^\dagger \cdot c_x + c_x^\dagger \cdot c_{x+1}) + \mu_x^{(\alpha)} c_x^\dagger \cdot c_x$  とする。パラメタ  $t_x^{(\alpha)}$ ,  $\mu_x^{(\alpha)}$  は、想定したレーザーを用いて作られる光格子ポテンシャル上に  $R_b$  原子をトラップさせ、最近接サイト間のホッピングとオンサイトエネルギーから計算した。

初期時刻  $\tau = 0$  における  $N$  粒子状態  $|\Psi_N\rangle$  を初期ハミルトニアン  $H_0$  を厳密対角化して求め、時間依存シュレディンガー方程式を鈴木トロッター分解により解くことで時刻  $\tau$  における状態  $|\Psi_N(\tau)\rangle$  を求め、システムを半分にした際のエンタングルメント・エントロピー  $S(\tau)$  を計算した (図1)。た

だし、断熱極限  $T = \infty$  は、各時刻  $\tau$  におけるハミルトニアン  $H(\tau)$  を厳密対角化することで  $S(\tau)$  を求め、 $T = 1$  として図示した。結果として断熱極限に向かって徐々にエンタングルメント・エントロピーが滑らかに減少していることが分かった。また  $T = 10000$  において、他の  $T$  と比較してエンタングルメント・エントロピー減少時に振動を伴っていることが分かった。

I. Pitsios, *et.al.*, Nature Comm, 8, 1569 (2017)



## C-18

### ボナボーモデルにおける足跡の効果

九州工業大学大学院 情報工学研究院<sup>A</sup> 大澤智興<sup>A</sup>

[序論] 階層構造は、人間や社会性動物にみられる。このような階層構造の自己組織化モデルに Bonabeau モデル [1] がある。このモデルは、周期的境界条件の 2 次元正方形格子平面内をランダムウォークするエージェントが用いられてきており、エージェント間の競争の結果として、少数勝者と多数の敗者が出現し階層構造が形成される。

[モデル] 本研究では、2 次元上エージェントの運動性に非等方的な効果を調べるために、動的フロアフィールド (DFF)[2] を導入した。これによりエージェント間に足跡の追跡、忌避する効果が導入できる。具体的には、エージェント密度  $\rho$  と DFF のパラメタである足跡の拡散の程度を示す  $\alpha$  と、足跡の分解の程度を示す  $\delta$  を変化させるだけでなく、さらに足跡への追従と回避も考慮するために、 $Kd$  を大小正負の場合も計算した。

[結果と考察] 種々のパラメタ ( $\alpha, \delta, Kd$ ) の組み合わせで秩序変数  $\sigma^2$  のエージェント密度  $\rho$  と緩和パラメタ  $\mu$  の比  $\frac{\rho}{\mu}$  依存性を調べた。エージェントがより集合しやすいパラメタの組み合わせでは、より小さい  $\frac{\rho}{\mu}$  で、 $\sigma^2$  の急激な変化がみられた。逆に、エージェントが集合しにくいパラメタの組み合わせでは、より大きい  $\frac{\rho}{\mu}$  で、 $\sigma^2$  の急激な変化がみられた。 $\sigma^2$  の相転移点は、平均場近似から  $\rho = \frac{\mu}{2}$  に存在することが報告されている [3]。そこで、計算結果からエージェントの衝突頻度から実効エージェント密度  $\rho^*$  を求め、秩序変数の上下端の平均に対応する  $\mu^*$  を求めた。次に、 $\rho = \frac{\mu}{2}$  と種々のパラメタの組み合わせの数値計算結果である  $(\mu^*, \rho^*)$  を重ねて表示すると、この線 ( $\rho = \frac{\mu}{2}$ ) の近傍に、 $(\mu^*, \rho^*)$  が集中した。これは、文献 [3-5] などと一貫性のある結果である。したがって、DFF は実効エージェント密度を変化させる効果があることが分かった。

[文献] [1] E.Bonabeau, G.Theraulaz, J.-L. Deneubourg, Phys. A 217(1995)373. [2] A.Kirchner, K. Nishinari, A. Schadschneider, Phys. Rev. E 67(2003)056122. [3] T.Okubo, T.Odagaki, Phys. Rev. E 76(2007)036105. [4] R.Fujie, T.Odagaki, J. Stat. Mech.(2011)P06011. [5] R.Fujie, T.Odagaki, J. Phys. Soc. Jpn.80(2011)124802.

## C-19

### 惑星軌道と電子軌道

日本文理大学<sup>A</sup>, 日本文理大学工学部機械電気工学科<sup>B</sup> 竹本義夫<sup>A</sup>, 島元世秀<sup>B</sup>

(1) (Maxwell 方程式による) 運動方程式  $C_0$  はエネルギーの定数、 $C$  は面積速度として、

$$\text{電子の主方程式は } \left(\frac{dr}{d\tau}\right)^2 = \left(\frac{C_0}{c} e^{\frac{R_0}{r}}\right)^2 - \left(\frac{C}{cr}\right)^2 - 1, R_0 = \frac{keQ}{me^2} = 2.81795 \times 10^{-15} m.$$

ここで、 $R_0 = \frac{keQ}{me^2}$  を  $M_G = \frac{GM}{c^2}$  (シュバルツシルト半径) に替えると、

$$\text{惑星の主方程式は } \left(\frac{dr}{d\tau}\right)^2 = \left(\frac{C_0}{c} e^{\frac{M_G}{r}}\right)^2 - \left(\frac{C}{cr}\right)^2 - 1, M_G = \frac{GM}{c^2} = 1476.68 m \text{ となる。}$$

(2) 水星軌道 (近日点移動) 楕円軌道とすると、

$$\text{軌道方程式は } \frac{dr}{d\theta} = \frac{dr}{e^{-\frac{M_G}{r}} d\Phi} = -r \sqrt{\frac{C_0^2 - c^2}{C^2} r^2 + M_G \left(\frac{4C_0^2 - 2c^2}{C^2}\right) r - \left(1 - M_G^2 \frac{8C_0^2 - 2c^2}{C^2}\right)} \text{ となる。}$$

$$\text{これを解いて } r = \frac{5.5460540066287445 \times 10^{10}}{1 + 0.2056307973976857 \sin(0.999999920122028\theta)}$$

(3) 光軌道 (重力での屈曲)  $R_\odot = 6.955 \times 10^8 m$  の位置を光が通過するとき、

$$\text{軌道方程式は } \frac{dr}{d\theta} = \frac{dr}{e^{-\frac{M_G}{r}} d\Phi} = -r \sqrt{\frac{1}{R_\odot^2} r^2 + M_G \left(\frac{4}{R_\odot^2}\right) r - \left(1 - M_G^2 \frac{8}{R_\odot^2}\right)} \text{ である。}$$

$$\text{これを解いて } r = \frac{1.64021 \times 10^{14}}{1 + 235662 \sin(0.999999999981994\theta)}$$

\*詳しくは <http://www.nbu.ac.jp/~shimamoto/genko.html>

逆二乗 + 逆三乗の中心力加速度 ( $A = \frac{B}{r^2} (1 + \frac{S}{r})$ ) で起る運動を軌道式 (極形式) で表すと  $r = \frac{R}{1 - e \cos k\theta}$  ( $k = \frac{R}{R+S}$ ) という美しい式で表せる。この式は  $k = 1$  で円錐曲線 ( $e = 0$ : 円,  $0 < e < 1$ : 楕円,  $e = 1$ : 放物線,  $1 < e$ : 双曲線) となり、逆二乗 ( $S = 0$ ) をその中に含む。また  $k \approx 1$  で近日点移動、 $k$  が 2 以上の整数で多角星 (仮称) を示す。ペルトランの定理からベキ数以外の力は否定されているが、近日点移動においては重力を圧力とし、またプランク長さ等を格子とする光速調和振動を仮定することで、密度差が付随し、一般相対性理論と全く同じ結果を得る。密度差は  $\frac{\rho^0}{\rho} = \exp(\frac{6GM}{C^2 r})$ 、加速度  $A = \frac{\rho^0}{\rho} \cdot \frac{GM}{r^2} = \exp(\frac{6GM}{C^2 r}) \cdot \frac{GM}{r^2} \approx \frac{GM}{r^2} + \frac{6GM^2}{C^2 r^3}$

また多角星はドブロイ波に似る。量子力学との対応原理のもとに多角星と方位量子軌道形の一部を比較すると (図1)  $k$  を主量子数  $n$  と捉えるとき、最外殻  $s$  軌道は  $n = 1$ 、 $p$  軌道は  $n = 2$ 、 $d$  軌道は  $n = 4$ 、 $f$  軌道は  $n = 6$  に対応する。1 以外の奇数が抜けるが、多角星では逆方向 ( $180^\circ$ ) に電子がないと不安定と考えられ、波動方程式では非共有電子対の安定性 (スピン量子数  $\pm 1$ ) が対応する。次に原子の大きさの水素原子変換を図2に示す。  $r_{HN} v_N = r_{HN} v_{HN}$  (面積速度一定、 $r_{HN}$ : 水素軌道半径、 $v_{HN}$ : 軌道速度) = 一定、 $N$  原子番号とすると、電気力遠心力の釣り合いから  $N k e^2 = r_{HN} v_N^2 = (r_{HN}/N) (N v_{HN})^2$ 、従って  $r_{HN} = N r_N =$  原子番号  $\times$  各原子半径 となる。図2を見るとそれが、周期ごとにほぼ同じ値を持ち、およそ 1 周期 100、2 周期 400、3 周期 1600、4 周期 3600 ( $\times 10^{-12}m$ ) と読めないか。ボーアは角運動量の整数倍として主量子数を決めたが、このとき  $k e^2 = r_a v_a^2 = n^2 R (U/n)^2$  ( $R$ : ボーア半径、 $U$ : ボーア速度 (=光速  $\times$  微細構造定数。仮称)) より  $r_a = n^2 R$  であり、図2から  $n$  は  $n = 1, 2, 4, 6$  と 1 以外偶数で変化していることになる。また確かめのために描かせた水素波動方程式の距離関係式の極大値もそうなることが読み取れる。これまでの主量子数  $n$  なら、主量子数  $n = 1$ ; 方位量子数  $l = 0$  ( $s$  軌道)、 $n = 2$ ;  $2l = \sim \pm 2$  ( $p$  軌道)、 $n = 4$ ;  $2l = \sim \pm 4$  ( $d$  軌道)、 $n = 6$ ;  $2l = \sim \pm 6$  ( $f$  軌道)、と置き直されるべきではないか。

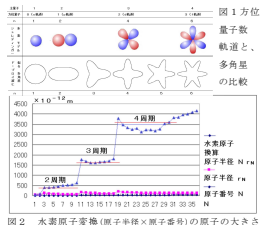


図2 水素原子変換 (原子半径  $\times$  原子番号) の原子の大きさ

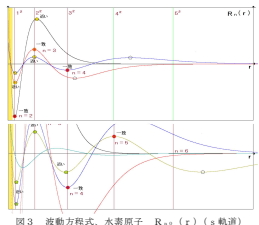


図3 波動方程式、水素原子  $R_{nl}(r)$  ( $s$  軌道)