

会場 C

領域 11

C-1 二次元粉体流における障害物の影響

九大理^A, 九大院理^B 山口雅也^A, 稲垣紫緒^B

大会場で非常事態が起こり、大人数が一斉に出口から出ようとする、密集して出づらくなる [1]。サイロなどでも粒子の集団が狭い出口から出ようとするとき、詰まって出なくなったり、出るスピードが遅くなったりする。これは主に粒子の数密度が出口付近で大きくなり、アーチを形成することが原因である。しかし、出口手前に障害物を設置すると粒子の流れが変わり、詰まりにくくなったり、出るスピードが速くなったりすることがある。鉛直面内に二次元的なサイロを作ったとき、サイロの出口で詰まらずに出てくる確率は、障害物の位置に依存することが知られている [2]。今回は粒子の詰まりが起きにくい二次元斜面系 (図 1) で、粒子の排出速度が障害物の有無や位置などにどれほど影響されるのか、実験的に調べた結果を報告する (図 2)。 [1] Dirk Helbing, Transportation Science 39,1, (2005). [2] Iker Zurigul et al., PRL 107, 278001 (2011).

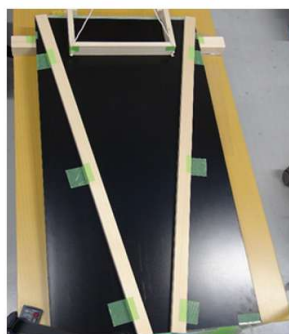


図1：セットアップ

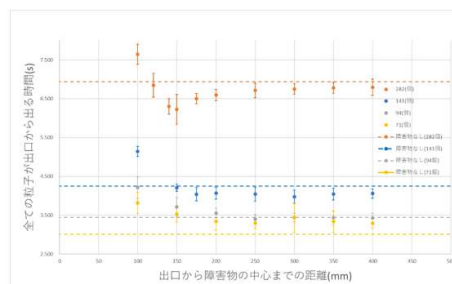


図2：障害物の位置と排出時間

C-2 粉粒体の安息角に対する障害物の影響

九大理^A, 九大院理^B 山科スミレ^A, 稲垣紫緒^B

粉粒体の流動性を示す指数の一つとして安息角が知られている。安息角とは“山の斜面と水平面がなす、粒子が滑らない最大の角度”である。雪崩や地滑りは、積雪や斜面の土壌が安息角より急な斜面で起こる身近な自然災害の一つである。山では木々が根をはることでなだれを抑制し斜面を安定に保つことが知られている [1]。安息角の実験系の一つとして、セルの中に擬二次元的な山を作成するものがある。セルに挟まれた粒子の安息角はセルが厚くなるにつれ指数関数的に減少する。これはセルの壁に影響された粒子がアーチを形成して安定しているためと考えられているが、安息角がどのように決まるのか明確にはわかっていない [2]。今回我々は植生がなだれへ及ぼす影響から着想を得て、剣山(多数の棒)を立てた場(図1(a))での安息角を測定した。発表では剣山に埋もれている場合や一部分のみに剣山がある場合などの安息角について報告する(図1(b))。[1] 佐伯正夫, 森林立地, 23巻25ページ(1981) [2] Y. Grasselli *, H.J. Hen'mann. Physica A 246 (1997) 301-312

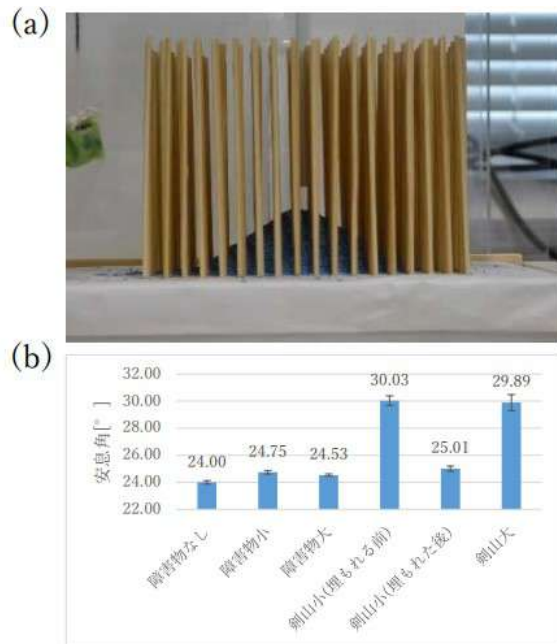


図1 : (a)剣山大での砂山
(b)それぞれの系での安息角の平均

C-3 BPI 液晶の双晶の連続体シミュレーション

九州大学大学院理学府 物理学専攻^A, 九州大学大学院理学研究院 物理学部門^B 山下晃弘^A, 福田順一^B

【緒言】ブルー相は三次元周期構造をもつ液晶相で、BPIは体心立方、BPIIは単純立方の対称性をもっている。先行研究の実験において、BPIIからBPIへ相転移させることでBPIの双晶が発現することが確認されている。双晶は一定の角度で同種の単結晶が接合したもので、接合部が面の場合はその面を双晶面と呼ぶ。BPI双晶の双晶面がどのような構造をもっているのかについてはまだわかっておらず、実験で観測することは難しい。本研究ではその構造を解明するために、Landau-de Gennes理論に基づく連続体シミュレーションを行い、双晶面の構造を解析することを目指した。【結果と考察】BPI単結晶の接合の仕方によって、双晶は異なった構造をとる。Fig. 1, Fig. 2にシミュレーションによって求めた、BPI双晶における液晶配向の欠陥構造の例を示す。図の赤い点線は双晶面の位置を示している。Fig. 1とFig. 2はそれぞれBPIの単結晶の繋ぎ方を変えたもので、Fig. 1は双晶面で線欠陥が繋がっていないが、Fig. 2では繋がることわかった。

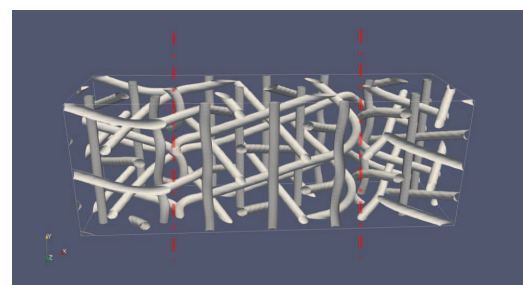


Fig. 1

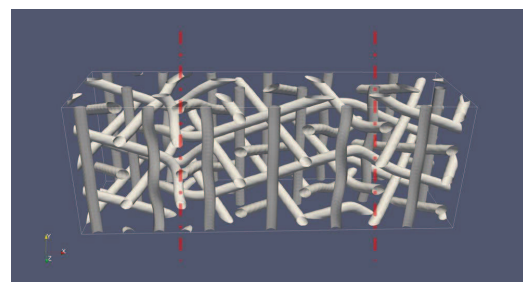


Fig. 2

C-4 回転円筒容器における単分散粉体系の対流現象

九大理^A, 九大院理^B 米田翔一^A, 内海脩帆^B, 稲垣紫緒^B

概要粉粒体とは、熱ゆらぎの影響を受けない程度に十分大きな粒子の集合であり、粒子間の相互作用が散逸的であることから、非平衡系をなす。非平衡系が示す自発的な時空間構造の一つの例として、粉体系の対流現象に注目した実験がある。2種類の粒子を円筒容器に入れ、円筒の中心軸を水平にして回転させることで、円筒表面に粒子が分離して縞模様を形成する。円筒容器に封入された粉体の充填率によって、その縞模様が振動したり、円筒中央から両端に向かって進行波パターンを形成することがわかっている [1]。この縞模様の動きが粉体の巨視的な流れに乗っているのではないかと考え、分離現象がなくてもこのような対流構造を形成するかどうかを検証するため、今回我々は1種類の粒子を充填して回転し(図1)、回転時間を変えて円筒中心の断面(図2)を観察することで、内部構造の時間発展について調べる実験を行った。[1] S. Inagaki, H. Ebata, and K. Yoshikawa. *Physical Review E*, 91, 010201(R) (2015)

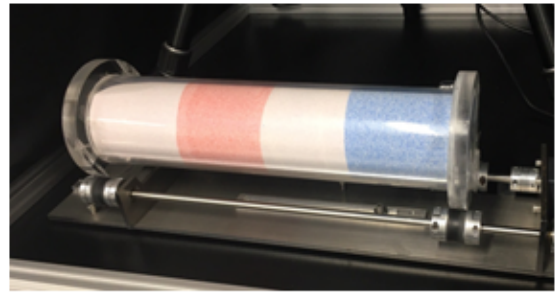


図1 回転させる時の円筒容器



図2 円筒容器の断面 (3時間後)

C-5 円筒容器内の粉体分離現象における回転速度依存性

九大理^A, 九大院理^B 辻村翔輝^A, 近堂くるみ^B, 稲垣紫緒^B

粉粒体は外部から揺動を加えると分離しやすい性質がある。水平に置いた円筒容器に混合させた二種類の粉粒体を入れ回転させると、三パターンの終状態を取りうる。一つ目は混合状態(図1.(a))、二つ目は回転軸に沿ってコアの部分に小さい粒子が集まり、その周囲を大きい粒子が覆う radial segregation (図1.(b))、三つ目が回転軸に対して垂直に縞々のパターンが現れる axial segregation (図1.(c))である。我々のこれまでの研究で、粒子のサイズと比重によって終状態の相図が描くとうまく分類できることがわかっている [1]。また、先行研究で回転速度を下げると axial segregation から radial segregation に転移することが知られている [2]。分離状態の相図が回転速度によって変化すると考え、この相図が回転速度によってどのような影響を受け

るか実験的に調べた。[1] 近堂くるみ, 九州大学 2019 年度修士論文 [2] K.M.Hill and J.Kakalios, *PRE* 52, 4393 (1995)

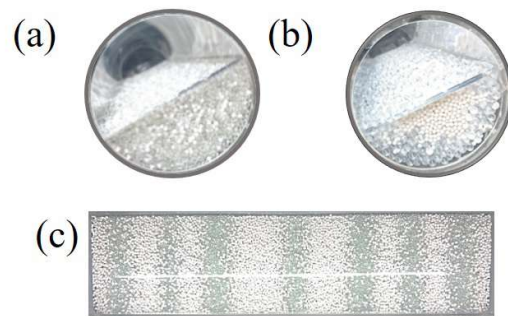


図1: (a)混合状態 (b) radial segregation (c) axial segregation

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 II

佐大医^A 富永広貴^A

これまで、我々は実験、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てきた。典型的な力学系として用いた運動方程式は次式である。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ている。

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

ここで、 m は質点の質量、 μ は摩擦係数、 Ω, 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 ϕ で与える。

この系は、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ると、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周期の周期軌道（所謂、リミットサイクル）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、写像系ではない実際の力学系においては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と考えられるのではないかと推測する。

[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

微小球のブラウン運動と分子力学

九大理名誉教授^A 中山正敏^A

C-7 (10:30 - 10:42) 微小球のブラウン運動と分子力学 (九大理名誉教授 A) 中山正敏 A

流体中の球は、分子衝突によってブラウン運動し、その結果速度と球の半径に比例するストークス抵抗を受けると普通言われている。しかし、新型コロナウイルスの担体となるエアロゾル粒子のように、球の半径が小さい場合には、抵抗力は半径の2乗に比例する。このことは、前方からの分子衝突が後方からよりも頻繁であることから、簡明に説明できる。同じ程度の簡明さで、ストークス抵抗を導くことは可能だろうか？ ストークス抵抗を導くには、流体の分子運動が球の運動の影響を受けて変化することを取り入れなければならない。流体分子の速度分布に対する Boltzmann 方程式を球の運動と連立させて解く「分子気体力学」があるが、この場合球の表面での分子衝突については散漫散乱（球の温度のマクスウエル分布で出射）が仮定されることが多い。これは球表面の熱運動を仮定している。流体分子系と球表面との純力学的運動からいかにして分子力学的運動が簡明に導かれるかを検討する。抵抗力はブラウン運動からの平均量であって、それが正しく与えられるような撃力パルス列を知ることによって、球のブラウン運動は正しく理解できたといえよう。以上のことは、微小球を用いた分子機械や分子情報記録を考えることの基礎ともなる。

C-8

動的フロアフィールドに基づく自己駆動粒子モデル

九工大 情報 物理情報^A 大澤智興^A

<序論>

樟脳粒を水面に浮かべると、自己駆動粒子として振る舞うことが知られている [1-3]。樟脳分子は、粒から水の表面への溶解、拡散するが、この樟脳の濃度が高い方が表面張力が低くなり、結果的に樟脳粒は表面張力の大きい方へ、つまり樟脳濃度が低い方向へ移動する。このような自己駆動粒子は、微分方程式によりモデル化されてきたが、本報告では、動的フロアフィールド (DFF) モデル [4] を用いてモデル化を行った。

<方法>

モデル中のパラメタである k_D は、粒の樟脳に対する選好の強度を示し、 $k_D < 0$ では、より低濃度側へ移動する確率が上昇する。これにより、樟脳粒の運動を簡便な形でモデル化した。モデル中の拡散速度 α [0.0-0.5] や分解速度 δ [0.0-1.0] を変化させながら、1次元内で移動する樟脳粒の数値解を求めると同時に、その移動メカニズムを調べるために、使用したモデルから解析的に樟脳濃度分布を求めた。

<結果と考察>

数値解は、 $k_D = 0$ や $\delta = 1$ では、平均移動距離がステップ数の平方根に比例し、ランダムウォークと一致し、負の k_D では一方向に移動する確率が上昇した。解析解により樟脳濃度の空間分布を求めることができた [5]。これにより進行方向より後方の濃度が高くなり一方向へ移動する確率が上昇することがわかった。本モデルのような簡便なモデルのほうが、ASEP や BOID モデルのように多数のエージェントの計算に向いていると考えられる [6]。

<文献>

[1] K.Nishi et al., Phys.Rev.E 92,022910(2015). [2] H.Nishimori et al., J.Phys.Soc.Jpn. 86,101012(2012). [3] Y.Matsuda et al., J.Phys.Soc.Jpn. 88,093002(2019). [4] A.Kirchner et al., Phys. Rev. E 67(2003)056122. [5] C.Oosawa, submitted. [6] C.Oosawa, Annual Meeting JSMB, PS25, p126 (2020).

C-9

ハミルトン系におけるカオス拡散

福岡県立大人社^A 石崎龍二^A

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ハミルトン系となる。低次元ハミルトン系におけるカオス拡散の解析的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。

低次元ハミルトン系におけるカオス拡散では、相空間上でブラウン運動のような通常拡散 (平均 2 乗変位が t に比例) や異常拡散 [平均 2 乗変位が t のべき乗 (指数が 1 とは異なる) に比例] が生じる。

講演では、代表的なハミルトン系の 2 次元の標準写像 [2] と標準写像を結合した 4 次元写像における相空間内でのカオス軌道の拡散 [3] 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

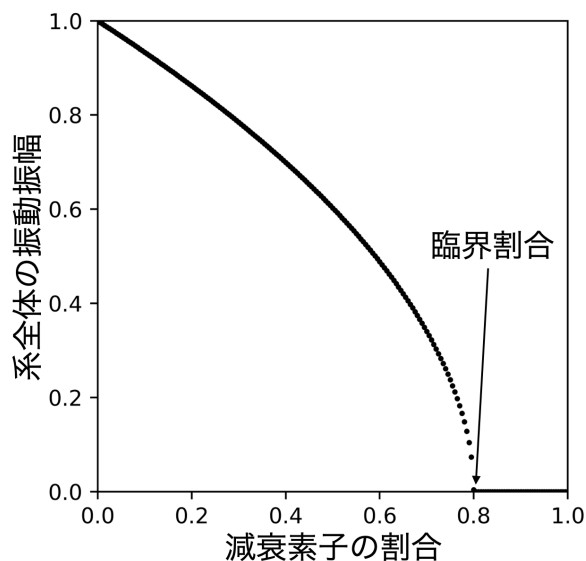
- [1] T. H. Solomon and J. P. Gollub: Chaotic particle transport in time-dependent Rayleigh-Bénard convection, Phys. Rev. A38, pp. 6280-6286 (1988).
[2] R. Ishizaki, T. Horita, T. Kobayashi and H. Mori: Anomalous Diffusion Due to Accelerator Modes in the Standard Map, Prog. Theor. Phys., Vol. 85, No. 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-10

振動素子と減衰素子の振動数差がエイジング転移に与える影響

鹿児島大学理工学研究科^A 上川慎太郎^A, 秦浩起^A, 秦重史^A

リミットサイクル振動を示す振動素子と減衰振動を示す減衰素子が混在した大域結合振動子系では、減衰素子の割合が増えるにつれて、系全体の振動振幅が小さくなり、ある臨界割合で0になることが知られている(エイジング転移, 右図)[1]。本研究では、振動素子と減衰素子に振動数差を設け、これがエイジング転移に与える影響を調べた。数値実験から、振動数差が大きいほどエイジング転移の臨界割合が下がるという結果が得られた。また、十分に時間が経つと、振動素子集団・減衰素子集団がそれぞれ完全同期することが示唆された。これを踏まえ、素子集団の運動を振動素子と減衰素子の二振動子系を用いて記述し、線形安定性解析を通して臨界割合を解析的に導出した。この解析結果は、先の数値実験の結果とよく整合することが確認できた。本発表では上記の内容に加え、演者の最近の研究を紹介する予定である。[1] H. Daido and K. Nakanishi, Phys. Rev. Lett. 93, 104101 (2004).



C-11

ブーリアンネットワーク上の情報流をダイアグラムで展開する理論

九州大学 芸術工学研究院^A, 九州大学数理データサイエンスセンター^B, 理研 iTHEMS^C 森史^{A,B}, 岡田崇^C

遺伝子制御系やニューラルネットワーク系などの生物ネットワークが、効率的な情報伝達をどのように実現しているのかという問題は、生物学のみならず物理学としても非常に興味深い。これらの系の記述には、各素子が ON と OFF の 2 状態を取るブーリアンネットワークモデルが適しているため、ブーリアンネットワーク上の移動エントロピー (Transfer Entropy) に対する解析的アプローチが存在すれば、情報伝達に有利なネットワークシステムの特徴が明らかになると期待される。しかし、ブーリアンネットワークの状態空間は極めて広大であるため、従来の一般的な方法で移動エントロピーを解析的に求めるのは非常に困難であった。また、形式的な行列計算では、生成される情報流と背後にあるグラフ構造との関係性は不透明のままである。

そこで、我々は、ブーリアンネットワークにおける移動エントロピーをグラフに基づいて摂動展開する理論を開発した。これにより、行列計算等の数値的手法に頼ることなく、非常に良い精度で解析的に移動エントロピーを計算することができる。ここで導出された移動エントロピーの公式は、制御関係に時間方向の次元を加えたグラフ内で定義された情報伝達経路の重み (Pathway weight) の多項式で表現される。デモンストレーションとして、4 素子で構成されるネットワークモチーフにおいては、広いパラメータ範囲で、公式が数値解を再現した。また、8 素子で構成されるランダムネットワークにおいては、ブル関数に 3 種類のバイアスをかけた場合、移動エントロピーは理論の予想通りの振舞を示した。移動エントロピーのグラフに基づく摂動理論は、生物ネットワークの解明のみならず、複雑ネットワーク上の情報流に対する物理的な理解を深めることにもつながる。

C-12 内閣支持率の時系列解析

九大総理工^A 濱崎瑤子^A, 坂口英継^A

時間とともに変動するデータを時系列データといい、観測対象をモデル化し、過去のデータから未来のデータを予測する手法を時系列解析という。内閣支持率は政治、経済、外交など様々な要素により変動している。それらの要素を人々はマスメディアの報道や周囲の人の意見をふまえて判断し、内閣の支持・不支持を決定する。本研究では第2次安倍政権の支持率変動に対して新聞のニュースを用いた時系列解析を行う。

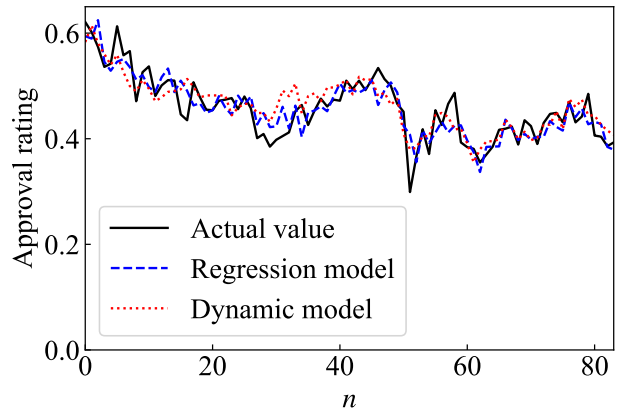
時系列解析には自己回帰モデル (AR モデル) を応用した式 (1), 式 (2) を用いる。

$$b_n = c_1 a_{n-1} + c_2 a_{n-2} + c_3 a_{n-3} + d + \sum_{i=1}^9 d_i f_{n-1}^i + \xi_n \quad (1)$$

$$b_n = c_1 b_{n-1} + c_2 b_{n-2} + c_3 b_{n-3} + d + \sum_{i=1}^9 d_i f_{n-1}^i + \xi_n \quad (2)$$

式 (1) を回帰モデル, 式 (2) を力学モデルと呼ぶ。ここで,

a_n は n 月の支持率の実データ, b_n は n 月の支持率の予測値である。 c_1, c_2, c_3, d, d_i は定数係数, ξ_n はホワイトノイズである。 f_{n-1}^i は $n-1$ 月の i 項目のニュースのポイントである。これは毎日新聞の一面のニュースを経済、外交などの9項目に分類し、ポイントをつけて各月の合計を出したものである。また、自己アフィンフラクタル解析を行う。



C-13 時系列データ解析のための隠れマルコフシミュレーション：量子ドット発光・消光継続時間解析への応用

九州工業大学大学院工学研究院^A 古田達央^A, 中村和磨^A, 小田勝^A

本講演では、量子ドットの発光・消光時系列データに対する機械学習解析について発表する。量子ドットの性能評価指標として、発光・消光継続時間の確率密度分布が一般に用いられる。このデータは、実験よりリアルタイム観測された発光強度を縦軸にとった時系列データから求められる。時系列データは実験装置や測定環境等に起因するノイズを大量に含むため、発光状態および消光状態を定量判定することが難しい。これまでは、観測者自らが発光状態・消光状態を人為的に判定し、この判定に基づいて発光継続時間・消光継続時間を算出していた [1]。今回、こうした人為的作業を排除し、機械学習に基づいて客観的に定量判定するための隠れマルコフモデルプログラムを作成した。隠れマルコフモデル [2] は、時系列データ解析に用いられる代表的な手法で、観測値に対する状態変数を隠れ変数として導入する。量子ドットの時系列データ解析の場合、時系列データそのものから発光・消光継続時間を判定するのではなく、この隠れ変数の時系列データから状態判定することで、ノイズに起因する判定困難を避けることができる。講演では、アルゴリズムおよびプログラムの詳細、量子ドットデータ解析に対する応用、従来までの解析手法との比較について発表する。

[1] B. Bruhn, F. Qejvanaj, I. Sychugov, J. Linnros, "Blinking Statistics and Excitation-Dependent Luminescence Yield in Si and CdSe Nanocrystals", J. Phys. Chem. C 118, 2202 (2014).

[2] 須山敦志, バイズ推論による機械学習入門, 2017.

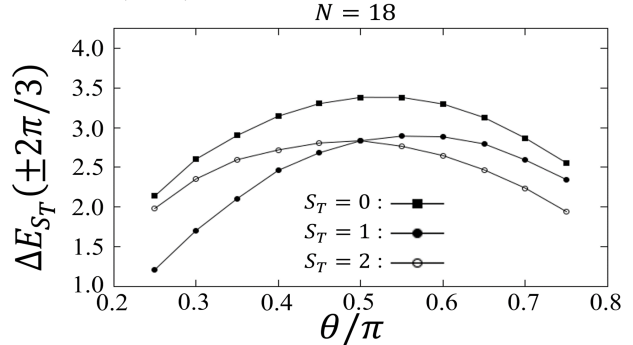
C-14

一次元 S=1 量子スピン系 ダイマー・トライマーモデルの SU(3) 対称性

九大理^A 益子通生流^A, 守屋俊志^A, 野村清英^A

一次元 S=1 量子スピン系におけるダイマー-トライマー (DT) モデルは 2017 年に、Oh et al. の研究グループによって提案された。本研究ではこのハミルトニアンについて、SU(3) 対称な点 ($\theta = \pi/2$) 近傍において厳密対角化を実行し、エネルギー固有値を計算した。その結果 DT モデルの SU(3) 対称な点は『セントラルチャージ 2』、『スケーリング次元 2/3』の共形場理論に従うことが分かった。さらに、SU(3) 対称な点以外についてもエネルギースペクトルを調べると、以下の図のような結果を得た。これを糸井・加藤らのくりこみ群解析の計算と照らし合わせると、 $\theta < \pi/2$ の領域が massive な相、 $\theta > \pi/2$ の領域 massless な相に

なっていることが分かった。以上の結果から我々は、SU(3) 対称な点 ($\theta = \pi/2$) を境にして Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) 的な相転移が起きていると結論付けた。



C-15

1次元 S=1 ボンド交代次近接量子スピン系の相転移

九州大学大学院 理学府 物理学専攻 統計物理学研究室^A 藤村啓^A, 野村清英^A, 守屋俊志^A

1次元 S=1 ボンド交代次近接量子スピン鎖ハイゼンベルグモデルでの相転移 1次元 S=1 ボンド交代次近接量子スピン鎖ハイゼンベルグモデル

$$H = \sum_j \left(1 + \delta(-1)^j\right) (S_j S_{j+1} + \alpha S_j S_{j+2}) \quad (1)$$

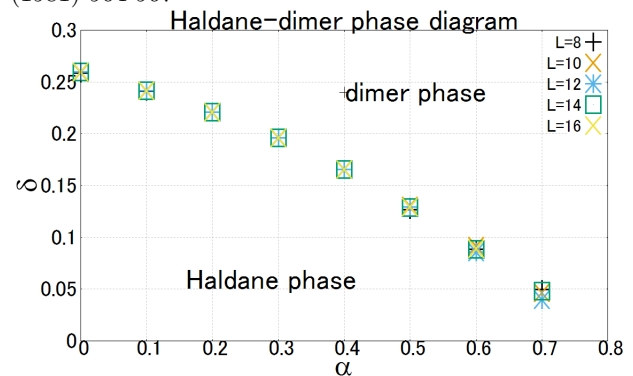
において単位交差 [1] から 2つのパラメータについての相境界図を求めた。

さらにその相境界上の相転移のユニバーサリティクラス (スケーリング次元とセントラルチャージ) についてを検証し、相転移が 2次相転移から 1次相転移に切り替わる点についてを計算した。最後に先行文献 [2] より指摘されているパラメータライン”dimer ライン”でのエネルギー縮退を計算した。

<先行文献>

A.Kitazawa and K.Nomura: J.Phys.Soc.Jpn. 66(1997)3944-3956

B.S.Shastry and B.Sutherland, Phys. Rev. Lett. 47, (1981) 964-967



C-16

SrTiO₃/SrVO₃ 多層膜および SrTiO₃/CaCuO₂ 多層膜に対する第一原理バンド計算

九州工業大学大学院工学研究院^A 糸満亮平^A, 中村和磨^A, 堀出朋哉^A, 松本要^A

本講演では, SrTiO₃ (STO) / SrVO₃ (SVO) 多層膜に対する第一原理バンド計算について発表する。STO および SVO はともにペロブスカイト構造であり, 格子定数が類似しているため, 容易に超格子構造を形成する。実験では, SVO 層数を減らすにつれて, 電気伝導度が金属的挙動から絶縁体挙動にシフトしていくことが知られている [1]。この金属絶縁体転移を理解するため, 我々は様々な膜厚の STO/SVO 超格子に対して第一原理バンド計算を行い, 系の強相関度の膜厚依存性を調べた。STO/SVO 多層膜を模した超格子モデルとして, STO を 6 層, SVO を n 層 (n = 1-6) を (100) 方向に堆積した構造モデル (STO)₆/(SVO)_n を構築した。この構造モデルに対して, ソフトウェア xTAPP [2] によるバンド計算を行い, さらに多体摂動計算ソフトウェア RESPACK [3] を用いて有効モデルパラメータ導出を行った。フェルミ面を形成するバナジウム t_{2g} 軌道のオンサイトクーロン反発 U, 隣接サイト間クーロン反発 V, バンド幅 W を求め, 強相関度 (U-V)/W を求めた。SVO 層が 1-2 層のとき, 強相関度は顕著に大きく, 層数が大きくなるにつれて次第に小さくなった。これは実験結果と整合している。類似構造の CaCuO₂ (CCO)/STO 超伝導多層膜 [4] の第一原理バンド計算を行っており, これの解析についても報告したい。

[1] D. H Kim, D. -W. Kim, B. S. Kang, T. W. Noh, D. R. Lee, K. - B. Lee, S. J. Lee, “Electrical properties of srvo₃/stio₃ superlattices grown by laser molecular beam epitaxy”, Solid State Communications, 114, 473 (2000).

[2] <http://xtapp.cp.is.s.u-tokyo.ac.jp>

[3] <https://sites.google.com/view/kazuma7k6r>

[4] D. Di Castro, G. Balestrino, “Superconductivity in interacting interfaces of cuprate-based heterostructures”, Supercond. Sci. Technol. 31, 073001 (2018).

C-17

全電子計算法と強束縛模型を用いた Lieb 格子の研究

福岡工業大学^A 下柳田千晶^A, 森亮輔^A, 西将輝^A, 丸山勲^A

近年, フラットバンドとディラック型バンドを併せ持つ Lieb 格子 (二次元辺心正方格子) は光格子により実現されるなど [1], 注目を集めている。しかし, 元素を実際に格子点上に配置した場合の電子状態は, 電子間相互作用により単純なバンド構造とはならない [2]。実際に第一原理計算を実行すると擬ポテンシャルによる違いが現れるため, 全電子計算法が必要となる。本研究では, 全電子計算法 (TOMBO) により求めたエネルギーバンドを, 自由電子の 3 バンド強束縛模型 (次次近接ホッピングまで含める) により解析した。図は, Be 元素 1s 軌道のバンドの解析結果であり, 強束縛模型の AB サイトについてのオンサイトポテンシャルの差 $\mu_1 - \mu_2$ をバンド幅 W で割ったものを格子定数に対しプロットしている。 $\frac{\mu_1 - \mu_2}{W}$ がゼロになるときバンド構造にディラック点が現れる。図では最安定状態と準安定状態の 2 種類が得られた。計算条件は, Lieb 格子面の間隔を 10 Å として擬二次元面を作成し, エネルギーカットオフを 30Ry, また K 点数は試行的に 1 点とした。

発表では, 電子状態の磁性や, Be 以外の結果を議論する予定である。

[1] S. Taie, H. Ozawa, T. Ichinoe, T. Nishio, S. Nakajima, and Y. Takahashi, Science Advances, Vol. 1, No. 10, p. e1500854, 2015. [2] 中川朋奈, 丸山勲: Lieb 格子上に配置した元素の第一原理計算, 第 124 回日本物理学会九州支部例会 (大分), 2018.

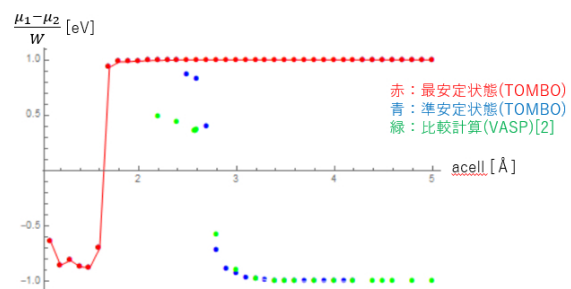


図 最安定/準安定状態の比較