

物性の解明から新物質開発へと展開する  
物性科学研究の俯瞰図を描く

# 物性科学 ハンドブック

—概念・現象・物質—

東京大学物性研究所

【編集】

- 東京大学物性研究所の研究者を中心に第一線で活躍する執筆陣による最新ハンドブック。
- 「物性理論」「物性実験（小型施設／大型設備）」「新物質開発」の全13章+序章から構成。
- 各章では主要テーマの基礎概念、理論、実験手法、最新の知見、展望までを体系的に解説。

A5判 1044頁 上製本  
定価(本体26,000円+税)  
ISBN 978-4-254-13112-3 C3042

 朝倉書店

## 編集委員

家 泰弘 日本学術振興会  
前 東京大学物性研究所

高田 康民 前 東京大学物性研究所

## 執筆者 (執筆順)

家 泰弘 日本学術振興会	長田 俊人 東京大学物性研究所	金道 浩一 東京大学物性研究所
上田 和夫 東京大学名誉教授	勝本 信吾 東京大学物性研究所	松田 康弘 東京大学物性研究所
高田 康民 東京大学物性研究所	河野 公俊 理化学研究所	徳永 将史 東京大学物性研究所
川島 直輝 東京大学物性研究所	小森 文夫 東京大学物性研究所	柴山 充弘 東京大学物性研究所
押川 正毅 東京大学物性研究所	松田 巖 東京大学物性研究所	森 初果 東京大学物性研究所
榊原 俊郎 東京大学物性研究所	秋山 英文 東京大学物性研究所	廣井 善二 東京大学物性研究所
瀧川 仁 東京大学物性研究所	板谷 治郎 東京大学物性研究所	中辻 知 東京大学物性研究所

## 内容目次

### 0. 序にかえて—物質科学の系譜と展開—

はじめに／自然理解と物質科学の系譜／物性科学の位置づけ／本書の構成

### 第I部：物性理論

#### 1. 物性理論の考え方—超伝導を例として—

金属電子論の基礎／BCS型の超伝導／強相関電子系の超伝導／量子転移と強相関電子系の超伝導

#### 2. 第一原理からの物性理論

物性理論概観／波動関数的アプローチ／場の量子論的アプローチ／密度汎関数論的アプローチ

#### 3. モンテカルロ法と量子臨界現象

計算物理学による物理現象の「理解」／計算物理学の展開／モデル計算の手法／モンテカルロ法／経路積分表示による量子モンテカルロ法／ボーズ凝縮／シングレットダイマー系の臨界現象／新しいタイプの臨界現象／他

#### 4. 物性理論の新潮流

量子臨界現象／物性物理学におけるトポロジー

### 第II部：スモールサイエンスとしての物性実験

#### 5. 基礎の物性実験—比熱・磁化測定からわかること—

比熱測定（格子振動と比熱，電子系の比熱，核比熱）／磁化測定／磁化測定における最近の発展

#### 6. 核磁気共鳴法

核磁気共鳴の基礎と超微細相互作用／NMRスペクトルとスピン・電荷・格子の局所構造／核磁気緩和現象と電子・格子のダイナミクス

#### 7. 電気伝導—低次元電子系の量子伝導—

固体中の電子動力学／電気伝導の扱い／電気伝導とフェルミオロジ／量子ホール効果／グラフェンと固体中ディラック電子系

#### 8. ナノスケール人工量子系

ナノスケール量子系（量子構造，半導体人工構造，半導体量子構造の光学現象，量子ドットほか）／スピントロニクス（磁性の基礎事項，スピン輸送現象，スピン注入・スピン緩和・スピン流生成ほか）

### 9. その他の物性実験

超低温物性（低温生成，超流動<sup>4</sup>He，超流動<sup>3</sup>He）／走査トンネル顕微鏡による表面研究（原理，局所電子状態密度の測定，探針による原子操作ほか）

### 第III部：大型施設を使った物性実験

#### 10. 光物性実験

光と物質の相互作用／真空紫外—軟X線での物性実験／非線形光学／ヘテロ構造・ナノ構造デバイス光科学

#### 11. 磁場開発と物性測定

強磁場下の電子／パルス強磁場発生技術／定常強磁場および非破壊パルス磁場下における物性測定／破壊パルス強磁場における物性測定／強磁場下での物性

#### 12. 中性子散乱実験とソフトマター

中性子の性質／中性子の散乱／中性子散乱装置と測定手法／高分子／ブレイクスルー研究／トピックス／将来の展望

### 第IV部：新物質開発

#### 13. 強相関電子系の物質開発

分子性物質／遷移金属酸化物における物質開発／金属間化合物における強相関電子系：重い電子系



## まえがき

「物性科学とは何か？」という問いにごく簡単に答えるならば、「多様で多彩な物質の性質を物理学や化学の基本法則から統一的に理解する営み」ということになる。しかしながら、本書の序章で歴史的な観点から俯瞰され、諸学問分野の中で適切に位置づけられるように、物性科学は物質観を構築する基礎学問という側面にとどまらず、現代社会を支える先端技術や材料工学の基盤になっているものである。

東京大学物性研究所は、その物性科学の基礎的研究を高度の総合性をもって行う、わが国の中心的研究機関という使命を託されて1957年に設立された。その目的に沿って十分な近代的な研究設備を整えるとともに、その設備を全国の研究者に開放して共同利用・共同研究を強力に推進している。設立後半世紀以上の時を経て今日（2016年春）を迎えているが、その間、時代の要請に応えるべく、研究所内外の研究者の十分な議論の下に3度の大きな自己変革を繰り返してきた。とりわけ、2000年には物質科学の国際拠点としての共同利用研究所を目指して、研究所全体が六本木から柏に移転した。その後、放射光・レーザー・強磁場・中性子・スーパーコンピュータなどの大型施設の高度化による世界最高水準の研究設備の充実に意を注ぎ、2006年に国際超強磁場科学研究施設、2011年に計算物質科学研究センター、2012年には極限コヒーレント光科学研究センターを発足させることができた。これらの施設の充実もあって、2009年には物性科学研究拠点として国の共同利用・共同研究拠頭に認定され、2015年の文部科学省の期末評価では、「物性物理学分野における多数の先端実験装置やスーパーコンピュータなどの総合的な研究プラットフォームを国内外の多数の共同研究者に提供し、多くの優れた研究成果を挙げるとともに、学術の大型プロジェクト「強磁場コラボラトリー」の実現など、当該分野の発展に大きく貢献している」として、高く評価された。

この物性科学研究拠点の認定を一つの契機として、2010年の春に家泰弘所長（当

時)の発案でハンドブック形式の本書が計画された。ただ、ハンドブック形式とはいえ、この計画の当初から物性科学全般を網羅した解説書を上梓しようという意図はなく、予定される著者はこのような使命と歴史をもつ物性研究所の(旧教員を含む)スタッフに限ることとした。内容の取捨選択に関して幾度かの会議をもった後に、最終的には21名のスタッフに依頼し、それぞれが基本的には独立した(平均として)約50ページの研究解説を執筆し、それらを一つに集めて本書が構成されている。なお、本書で取り扱われる題材のほとんどは何らかの意味で物性研究所の研究に関連したものに限定されているとはいえ、物性科学研究の基本である3つの要素、すなわち、「物質」、「現象」、「概念」を偏りなく解説したものになっている。具体的には、新規な物性を生じさせる舞台としての無機物および有機物の合成を推進する物質開発グループ、軌道放射・中性子・超強磁場などの国家的大型施設を含む最先端の研究設備を有して新たな興味ある現象を求める物性実験グループ、そして、スーパーコンピュータ施設も活用しながら現象の裏にある新概念を探る物性理論グループのそれぞれが十分な紙幅をもって当該分野のごく基礎的・初歩的な知識の紹介から始めて世界トップレベルの研究を展開して得られた結果を丁寧に説き起こしながら、その分野や関連する隣接分野における今後の発展動向を展望するという解説スタイルをとっている。そして、本書を全体としてみれば、これら基本3要素が有機的に結合して物性科学研究の全体を構成している現状が浮き彫りにされるとともに、近未来の研究動向が明確になるように意を注いだ。

最後に、2016年度以降の物性研究所の動向について一言ふれておこう。先に述べたように、柏移転以降の16年間で大型研究施設は充実され、それに伴ういくつかの組織改革が行われたが、一方、スモールサイエンスを担う新物質科学、物性理論、ナノスケール物性、極限環境の4研究部門と物質設計評価施設の物質グループでは組織更新はほとんどなされていない。確かに、スモールサイエンスを遂行する研究活動においては研究者個々のアイデアを自由に追求する研究環境が重要で、そこで生み出される研究成果は長期的な視野で評価されるべきものではあるが、同時に、物性研究所のサイエンスの屋台骨を担うこれらの研究グループの不断の活性化は時代の要請であり、また、研究組織の固定化は各分野の高度化と相まって異分野間の交流を通して新しいサイエンスの芽を育む機会が少なくなっているとの問題点も指摘されている。そこで、これを改善するための処方として、従来の研究部門を横断

する形で横串となる研究組織2つを新たに導入することになった。ひとつは「量子物質研究グループ」で、長年にわたって蓄積されてきた強相関電子系の物質研究を発展させ、新規物質における新しい量子現象を対象として、新たな視点をもって物性コミュニティを先導することを目指すものである。もう一つは「機能物性研究グループ」で、これまで伝統的な物性物理学では扱われてこなかったソフトマターや生体物質に代表される階層構造をもつ物質系に着目し、そこに現れる有用な機能や特異な物性の理解を目指して励起状態やダイナミクスの研究を行い、新しい「機能物性」の確立を模索するものである。この横断的で柔軟に研究方向や研究体制を変化させていく2つの新しい組織が人的交流を加速させ、そこで芽生えた研究テーマが大型施設・センターを巻き込んで物性研究所内の共同研究を活性化し、新たなサイエンスの方向を模索するための基盤となり、ひいては物性研究所の大局的な研究動向に新機軸をもたらすことが期待される。本書の読者には、この物性研究所の新しい試みに是非とも注目していただきたい。

2016年4月

編集委員を代表して 高田康民

## 4. 物性理論の新潮流

### 4.1 はじめに

1983年の初秋、筆者はランチでの雑談の合間に「これからの30年を考えて、物性理論のなかで主流になってくる研究テーマや分野は何か？」とコーン(W. Kohn)先生<sup>1)</sup>にお尋ねしたところ、あまり躊躇せず次々の5つをあげられた。(1)モンテカルロ法を活用した諸分野。特に、量子系には限定せずに分子動力学法で取り扱えるような莫大な数の多粒子系における運動概念の深化に言及された。(2)強結合電子格子相互作用系。これは超伝導の文脈というよりはイオンの非断熱性とそれから生まれるイオン運動の新概念に結びつくような文脈で語られたもので、例えば、イオンの量子トンネル効果(とそれに伴う電子運動の問題)も示唆された。(3)強相関電子系。これは一般的な意味での電子相関というよりも、もっと具体的に価数揺動や価数スキッピング現象を念頭に置いたもので、それらの系での近藤効果や超伝導の問題も絡められた。(4)化学反応。量子化学の伝統的なテーマではあるが、これは基底状態の計算に重点をおいた従来の物性理論の限界を越えて、動的、非平衡的、非線形的というキーワードで語られるような新しい方向へ物性理論を発展させるうえで大変よいトピックであると説明された。また、溶媒中や表面というような環境に依存した化学反応の違いを定量的に理解することの重要性にもふれられた。そして、最後に、(5)1次相転移現象。特に、ホーエンバーグ(P. C. Hohenberg)とハルペリン(B. I. Halperin)の論文<sup>2)</sup>をあげながら、ランダウ理論でその普遍的な振る舞いが大まかには理解される2次相転移と違う側面、特に、その動的現象の面白さを強調された。

さて、実際に30年を経てコーン先生の予言を見直してみると、第3章でも解説されたように、モンテカルロ法の発展とその1次相転移を含む相転移現象への応用における進展は目を見張るものがある。また、化学反応の問題は今や量子化学固有のものでなくなり、物理と化学(さらには生物学)の学際フロンティア領域における中核的課題と見なされるようになった。このほかの2つの問題、すなわち、強結合電子格子系や強相関電子系の問題

は、もちろん、物性理論の中心課題ではあるが、ただ、30年前と比べて大きく進展したかといわれれば、その評価には大きなバラツキがあって、あまり本質的な進展はなかったという意見も多く聞かれる。確かに、このような結合定数が大きな系における量子統計力学の問題を現実の系に沿って高精度に解くような理論がこの30年間に開発されて安定して計算結果が得られるようなコードがスーパーコンピュータに実装されたわけでもないで、その意味で真に革新的な進歩がなかったといえる。

ところで、一般に理論物理には（あるいは、もっと一般的にいえば、数学には）2つの大きな役割がある。その一つは「具体的な課題の解決」、もう一つは「概念の提起」というものである。第2章で述べたような第一原理のハミルトニアンを高精度に解くという行為は前者に根ざしたものであるのに対して、第1章で解説されたような概念の形成とそれによって具体的な現象や物質を理解するという行為は後者の立場と理解される。これら2つの理論の側面はお互いに排他的なものではなく、両方が助け合って進展していくものである。実際、精緻な概念は高精度の理論計算の結果を土台として得られるものであるし、逆に、いくら多数の物質で高精度の結果を得たとしても、それだけでは人類に「新しい知を与えた」ことにはならない。その事情はトポロジーの概念を発見したポアンカレ（Jules Henri Poincaré）の名言「科学者は秩序づけを志すべきである。事実の集積が科学でないことは、石の堆積が家でないのと同じである」でいみじくも言い表されている。さらにいえば、人間の脳機能の特徴は認識の際に概念化しその概念化されたものの相互関係をいろいろと操作して創造に至ると考えられる。したがって、理論とはこの概念形成とそのように形成された概念の操作を指すものと理解されるので、「物性理論の新潮流」という題目で語られる事項は、いつの時代でも、その時代の最先端の実験や理論の手法を用いて新たに付け加えられた結果に基づいて、新しい概念を形成し、それによって諸現象や物質群に新しい関連づけを行うこと、あるいは、古い結果に基づいてすでに作り上げられていた概念をより深化させたり、より普遍化したりすることといえる。

このような観点から、本章では最近話題になっている概念のうちの2つ、すなわち、「量子相転移」と「物性物理学におけるトポロジー」を解説する。このほか、非平衡・非線形・量子計算・量子情報・多階層モデリング（階層間接続やマルチスケール計算）などが近年の物性理論に現れるキーワードであるが、（まだまだしっかりとした概念の形成途上であることも理由のひとつとして）これらについてはここでは割愛したい。 [高田康民]

## 4.2 量子臨界現象

物性理論で登場する多体問題においては、個々の自由度の振る舞いからは単純には予見することのできない多様な物理現象が生じるが、臨界現象に着目すると多様な物性の中にも普遍性を見いだすことができる。それが臨界現象の研究対象としての魅力であり、相図