

資料 1

研究場所 基 研

モ レ キ ュ ー ル

1 秩序無秩序現象の電子計算機による simulation(継続)

内 容

固体における秩序無秩序現象、特に転移点近傍の緩和現象の特異性の問題に対する一つの新しい接近法として計算機に格子点の状態を記憶させ、その時間発展を simulate させることによつて簡単なモデルのもつ特徴的な振舞いを追求することを目的とする。前回モレキユールが認められ、一応最も簡単な場合即ち二次元イジング模型に対するプログラムが出来上り、simulation を行い得るようになったが、結論を得るのはこれからの段階で、例えば平衡状態の到達に関する判定等について問題が残されている。

今後検討を進めるとともに更にプログラムを改良発展させてこの方法の可能性を追求して行きたい。

参 加 者 上 田 顕 (京大工) 萩 田 直 史 (理研)

松 原 武 生 (京大理) 松 田 博 嗣 (基研)

研究会・場所 理研および京大

2 生体高分子の π 電子論

内 容

我が国における生体高分子の電子状態に関する研究は主として右衛門佐 (名大)・鈴木 (早大) らを中心とするグループによつて精力的に研究され、福留 (京大) は多体問題の手法を取入れた新しい接近法を開発してきた。しかし電子相関、 $\sigma - \pi$ 分離の問題、或は高分子の非周期性の効果等未解決の問題が多

く残されている。

一方松田（京大）、米沢（京大）はそれぞれ生体高分子とは異なる分野で原子軌道関数の非直交性の問題、diagram 法、非周期性の問題等を研究してきており、これらの研究と生体高分子の電子論とのつながりに深い関心をもっている。ここにおいて上記グループの有力メンバーである宮田（早大）と分子構造論のベテランである大野（北大）を京都に迎えて相互に意見を交換して問題の所在点を明らかにし、出来れば具体的な計算を行いたい。

モレキュール参加者	宮 田 隆（早大理工）
	大 野 公 男（北 大 理）
	米 沢 富美子（京大基研）
	松 田 博 嗣（京大基研）
	福 留 秀 雄（京 大 理）

研究場所時期	京大研究 4月～6月
--------	------------