

電子状態の計算と物質設計

講師 東北大・理 吉田 博

本講義では、最近の半導体物理学における電子状態の計算の動向を踏まえ、その方法や物質設計を行うにあたっての新しい概念等について述べられた。

まず電子状態の計算の歴史を追う形で、Hohenberg, Korn, Sham によるDensity Functional Theory やLocal Density Appr.等の説明から始まった。そして固体のTotal Energy の最小値を求める計算方法として、分子動力学とDensity Functional Theory を組み合わせた、Car & Parrinello の方法について述べられた。

次に、第一原理に立脚した不純物グリーン関数法について話された。具体的な計算結果として、Si中の格子間3d遷移金属不純物の電子状態を挙げられた。理論計算で決定されたいろいろな荷電状態のスピン多重項が、現存する電子スピン共鳴の結果と一致すること、また特に計算では Ti^0 、 Ti^- 、 V^0 、 V^+ 、 Co^{2+} 、については低スピン状態が実現されること、これが半導体のような共有結合性の強い物質中の3d不純物では必ずしもフントの規則が成立しないことを意味していることも話された。他にはSi中の3d不純物の第一アクセプター準位と第一ドナー準位、電子スピンのg値、核スピンと電子スピンとの間の超微細相互作用定数についても触れ、計算結果と実験結果が定量的によく一致すること等についても述べられた。

次に話されたのは Dynamical Simulated Annealing 法についてであった。これを用いてなされた研究として、P型Si結晶中の水素による不働態化(Hydrogen Passivation)の機構の解明と青色LED(ZnSe:Li)の不安定性機構の解明を取り上げて説明された。

本題の最後として、”物質設計システム(Material Design System; MDS)”について述べられた。これは新物質の開発を効率的に行うために新物質探索のガイドラインを新物質開発実験グループに提供するというもので、21世紀のエンジニアリングとして期待されるとのことであった。

以上が本題として講義されたものであるが、これ以外に吉田先生が近年精力的に研究なさっている酸化物高温超伝導体に関して2日目の後半にお話しがあった。内容は、正常な超伝導状態、異常な常伝導状態、バンド計算からみた電子状態、

光電子分光からみた電子状態，等であった。

尚，講義では原子が不安定な配置から安定な配置へと移行していく様子をシミュレーションとしておさめたVideoの上映もあった。

2日間，延べ6時間にわたる講義でしたが，非常に興味深い内容で有意義な時間を過ごせたと思います。熱心に講義して頂いた吉田先生に感謝致します。

(文責 根岸 紀夫)

中性子散乱による磁性研究

講師 東北大・理 遠藤康夫

東北大学理学部の遠藤康夫先生に中性子散乱の実験について基礎的な知識から最近の研究に至るまでを簡単に紹介して頂いた。

中性子は磁気モーメントを持つ電氣的に中性の粒子である。中性子が物質により散乱される過程には、原子核散乱と磁気散乱の2種類がある。原子核散乱は原子核を構成する素粒子と入射中性子との間に働く核力による散乱である。例えば、NaH結晶中のH原子の位置は、重水置換によって原子核散乱の強度が変化することを利用して決定することが出来る。また、磁気散乱は原子の持つ磁気モーメントと入射中性子の持つ磁気モーメントとの間の相互作用によるものであり、物質の磁性についての知識はここから得られる。

1日目は、上記のような基礎知識について述べられた後、偏極中性子（スピンの向きが揃った中性子）を用いた実験、また実験に用いられる熱中性子やパルス中性子を得る方法、実験における測定方法などについて講義して頂きました。

2日目は、中性子散乱によるMnSiのスピ構造の解析、また有名な酸化物高温超伝導物質の磁性研究等、最近の研究についてお話して頂きました。

遠藤先生は、よく日に焼けたエネルギーッシュな方で、精力的に研究活動をされているという印象を受けました。

以上2日間の講義を非常に簡単にまとめてみました。終始力強く講義して下さいました遠藤先生に心から感謝致します。

(文責 酒田 健)