

目 次

0. 序にかえて—物質科学の系譜と展開	[家 泰弘]	1
0.1 はじめに		1
0.2 自然理解と物質科学の系譜		2
0.2.1 始原物質		2
0.2.2 錬金術から近代化学へ		4
0.2.3 磁石と磁力		7
0.2.4 近代的原子論		9
0.3 物性科学の位置づけ		11
0.3.1 現代社会と科学・技術		11
0.3.2 基礎科学としての物性物理学		13
0.3.3 物性物理学の構成と物性研究の展開		15
0.4 本書の構成		20
文 献		25

第 I 部 物性理論

1. 物性理論の考え方—超伝導を例として	[上田 和夫]	29
1.1 金属電子論の基礎		29
1.1.1 多電子問題と 1 体近似		29
1.1.2 プロッホの定理		30
1.1.3 バンド構造と金属・絶縁体の区分		33
1.1.4 自由電子気体モデル		35
1.1.5 ハバードモデル		38
1.2 BCS 型の超伝導		40
1.2.1 超伝導現象		40
1.2.2 ギンツブルク-ランダウ (GL) 理論		41
1.2.3 クーパー対形成		48
1.2.4 BCS 理論		50

1.2.5 電子格子相互作用と引力の起源	55
1.3 強相関電子系の超伝導	57
1.3.1 重い電子系の超伝導と銅酸化物高温超伝導体	57
1.3.2 一般化されたBCS理論	60
1.3.3 一般化されたGL理論	65
1.4 量子相転移と強相関電子系の超伝導	70
1.4.1 金属磁性の平均場近似	71
1.4.2 金属磁性のスピン揺らぎの理論	75
1.4.3 量子臨界性と超伝導	80
文 献	86

2. 第一原理からの物性理論 [高田 康民]	88
2.1 物性理論概観	88
2.1.1 自然の階層構造と物性理論	88
2.1.2 第一原理系のハミルトニアン	89
2.1.3 第一原理系を取り扱う理論手法	91
2.1.4 第一原理計算の狙い	94
2.2 波動関数的アプローチ	94
2.2.1 水素原子と電子軌道の古典力学的イメージ	94
2.2.2 陽子の質量効果と断熱近似	96
2.2.3 ヘリウム原子：ハートリー-フォック近似と自己相互作用補正	98
2.2.4 相関効果とジャストロウ因子	100
2.2.5 交換効果とフント則	103
2.2.6 水素分子とハイトラー-ロンドン理論	104
2.2.7 水素分子における化学結合の本質	107
2.2.8 断熱ポテンシャルと2陽子系の運動	109
2.2.9 閉じ込め分子模型と高圧下の固体水素	111
2.3 場の量子論的アプローチ	113
2.3.1 第2量子化と電子場の生成・消滅演算子	113
2.3.2 断熱近似下の価電子イオン複合系	114
2.3.3 電子ガス系とそのハートリー-フォック近似の状態	116
2.3.4 動径分布関数：フェルミホールとクーロンホール	117
2.3.5 基底状態エネルギーと相関エネルギー	121
2.3.6 圧縮率とスピン帯磁率：電子ガス系とアルカリ金属の比較	121
2.3.7 誘電異常と超臨界状態のアルカリ金属流体	124

2.3.8 GWΓ法：動的構造因子と1電子スペクトル関数	127
2.4 密度汎関数論的アプローチ	130
2.4.1 ホーエンバーグ-コーンの密度汎関数原理	130
2.4.2 ホーエンバーグ-コーンの密度変分原理と普遍汎関数	131
2.4.3 コーン-シャムの方法と相互作用のない参照系	133
2.4.4 実用的な交換相関エネルギー汎関数とLDA	134
2.4.5 1原子埋め込み電子ガス系とスピン偏極	135
2.4.6 不純物アンダーソン模型：近藤効果から近藤問題へ	139
2.4.7 陽子埋め込み電子ガス系：第一原理からの近藤問題	144
文 献	148
3. モンテカルロ法と量子臨界現象 [川島 直輝]	151
3.1 計算物理学による物理現象の「理解」	151
3.2 計算物理学の展開	152
3.3 モデル計算の手法	154
3.3.1 有限系の数値厳密解	155
3.3.2 級数展開	155
3.3.3 分子動力学シミュレーション	156
3.3.4 連続体モデルと有限要素法	157
3.3.5 新しい方法論	157
3.4 モンテカルロ法	158
3.4.1 単純な確率的求積法	158
3.4.2 マルコフ鎖モンテカルロ法	159
3.4.3 詳細釣り合いとエルゴード性	160
3.4.4 収束性	161
3.4.5 「自由エネルギー」の単調増加性	162
3.4.6 クラスタ更新	163
3.5 経路積分表示による量子モンテカルロ法	166
3.5.1 ループ分割による状態更新	168
3.5.2 ワームによる状態更新	170
3.6 臨界現象の一般論と有限サイズスケールリング	175
3.7 ボース凝縮—U(1)対称性のある場合—	176
3.7.1 XYモデルとボース-ハバードモデル	177
3.7.2 臨界現象 ($d > 2$)	180
3.7.3 実験—シングレットダイマー物質—	181

x	目 次	
3.7.4	臨界現象 ($1 \leq d \leq 2$)	182
3.7.5	フラストレーションの効果	183
3.8	シングレットダイマー系の臨界現象—SU(2) 対称性のある場合—	185
3.8.1	ボンド変調のある反強磁性ハイゼンベルクモデル	185
3.8.2	コヒーレント表示	185
3.8.3	トポロジカル数とハルデーンギャップ	187
3.8.4	2次元以上の場合	189
3.8.5	数値計算	189
3.9	新しいタイプの臨界現象	191
3.9.1	SU(N) ハイゼンベルクモデル	191
3.9.2	脱閉じ込め転移	193
3.9.3	数値計算	196
文 献		197
4.	物性理論の新潮流	200
4.1	はじめに [高田 康民]	200
4.2	量子臨界現象 [川島 直輝]	201
4.3	物性物理学におけるトポロジ— [押川 正毅]	206
4.3.1	トポロジ—とは?	206
4.3.2	トポロジカルな現象としての整数量子ホール効果	210
4.3.3	ディラックフェルミオン	217
4.3.4	端 状 態	219
4.3.5	トポロジカル絶縁体	220
文 献		229

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 [榊原 俊郎]	233
5.1	比熱測定	233
5.1.1	格子振動と比熱	233
5.1.2	電子系の比熱	243
5.1.3	核 比 熱	254
5.2	磁化測定	258
5.2.1	磁化および帯磁率の一般論	258
5.2.2	さまざまな磁化	261

	目 次	xi
5.2.3	磁化および磁場・温度相図に関する熱力学関係式	279
5.3	磁化測定における最近の発展	282
文 献		288
6.	核磁気共鳴法 [瀧川 仁]	291
6.1	核磁気共鳴の基礎と超微細相互作用	291
6.1.1	磁気共鳴の原理	292
6.1.2	固体中の超微細相互作用, 4重極相互作用	302
6.1.3	NMR で見る固体の性質	304
6.2	NMR スペクトルとスピン・電荷・格子の局所構造	313
6.2.1	常磁性状態における NMR スペクトル	314
6.2.2	磁気秩序状態における NMR スペクトル	321
6.2.3	f 電子系の多極子秩序と NMR スペクトル	327
6.3	核磁気緩和現象と電子・格子のダイナミクス	331
6.3.1	核スピン-格子緩和率	331
6.3.2	スピネコー減衰率	338
6.3.3	フォノンによる緩和の例, ラットリングと超伝導	343
文 献		345
7.	電気伝導—低次元電子系の量子伝導 [長田 俊人]	348
7.1	はじめに	348
7.2	固体中の電子動力学	349
7.2.1	有効質量近似	350
7.2.2	半古典近似	353
7.2.3	磁場中の電子状態	353
7.2.4	ベリー位相と異常速度	359
7.2.5	スピン軌道相互作用	365
7.3	電気伝導の扱い	370
7.3.1	ドルーデ理論	370
7.3.2	ボルツマン方程式	371
7.3.3	久保公式	374
7.4	電気伝導とフェルミオロジー	383
7.4.1	角度依存磁気抵抗振動	384
7.4.2	量子振動効果	400
7.5	量子ホール効果	407

7.5.1	2次元電子系	407
7.5.2	整数量子ホール効果	409
7.5.3	量子ホール効果のゲージ理論	414
7.5.4	プロッホ電子系の量子ホール効果	420
7.5.5	エッジ描像とバルク・エッジ対応	426
7.5.6	分数量子ホール効果	434
7.5.7	複合粒子描像	441
7.6	グラフェンと固体中ディラック電子系	446
7.6.1	ディラック方程式	447
7.6.2	グラフェンの電子構造	448
7.6.3	ベリー位相と後方散乱の消失	454
7.6.4	ランダウ準位と量子ホール効果	458
7.6.5	歪誘起ゲージ場	465
7.6.6	2層グラフェン	466
7.6.7	固体中ディラック電子系	469
7.7	まとめと展望	472
文 献		473
8.	ナノスケール人工量子系 [勝本 信吾]	476
8.1	ナノスケール量子系	476
8.1.1	量子構造	476
8.1.2	半導体人工構造	478
8.1.3	半導体量子構造の光学現象	486
8.1.4	コヒーレント輸送現象	497
8.1.5	単電子帯電効果と量子ドット	509
8.1.6	量子コヒーレンス・デコヒーレンスと非平衡伝導	512
8.1.7	量子ドットを舞台とする物理現象	528
8.1.8	半導体複合ナノスケール系	536
8.2	スピントロニクス	540
8.2.1	スピントロニクスとは	540
8.2.2	磁性の基礎事項	542
8.2.3	スピン輸送現象	549
8.2.4	スピン注入・スピン緩和・スピン流生成	557
8.2.5	微小磁性体	568
8.2.6	スピン情報処理	573

文 献		577
9.	その他の物性実験	580
9.1	超低温物性 [河野 公俊]	580
9.1.1	低温生成	580
9.1.2	超流動 ^4He	594
9.1.3	超流動 ^3He	614
9.2	走査トンネル顕微鏡による表面研究 [小森 文夫]	623
9.2.1	固体表面研究	623
9.2.2	走査トンネル顕微鏡の動作原理	625
9.2.3	局所電子状態密度の測定	628
9.2.4	探針による原子操作	631
9.2.5	表面電子波動関数の観察とその分散関係の測定	634
9.2.6	表面原子構造の解明	636
9.2.7	探針電流による表面構造の可逆制御	638
9.2.8	おわりに	640
文 献		640

第 III 部 大型施設を使った物性実験

10.	光物性実験	645
10.1	序 論 [秋山英文・板谷治郎・松田巖]	645
10.1.1	序 論	645
10.1.2	レーザー	647
10.1.3	シンクロトロン放射	652
10.1.4	自由電子レーザー	657
10.1.5	本章の構成	659
10.2	光と物質の相互作用 [板谷 治郎]	659
10.2.1	光学応答の現象論	659
10.2.2	古典論とローレンツモデル	666
10.2.3	光と物質の相互作用の半古典論	672
10.3	真空紫外—軟 X 線での物性実験 [松田 巖]	678
10.3.1	双極子遷移	678
10.3.2	真空紫外～軟 X 線での物性実験	683
10.3.3	発 光	706

10.3.4	より高度な実験	709
10.4	非線形光学 [板谷 治郎]	716
10.4.1	光パルスの伝搬	716
10.4.2	摂動論的な非線形光学	717
10.5	ヘテロ構造・ナノ構造デバイス光科学 [秋山 英文]	722
10.5.1	はじめに	722
10.5.2	半導体低次元系の光学遷移の基礎	723
10.5.3	半導体光デバイス (レーザー) の基礎	729
10.5.4	低次元半導体量子構造の光学物性	739
	文 献	760
11.	磁場開発と物性測定 [金道浩一・松田康弘・徳永将史]	766
11.1	緒 言	766
11.1.1	はじめに	766
11.1.2	磁場に関する基礎事項	771
11.2	強磁場下の電子	780
11.2.1	単位系について	780
11.2.2	1電子系の問題	780
11.2.3	多電子系の問題	784
11.3	パルス強磁場発生技術	786
11.3.1	非破壊型	786
11.3.2	破壊型	789
11.4	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	804
11.4.1	直流測定	804
11.4.2	低周波交流測定	806
11.4.3	高周波交流測定	807
11.4.4	磁化測定	808
11.4.5	構造測定	813
11.5	破壊パルス強磁場における物性測定	818
11.5.1	表皮効果とインピーダンスマッチング	818
11.5.2	磁場計測技術	822
11.5.3	電磁ノイズ	828
11.5.4	物性測定技術	830
11.6	強磁場下での物性	839
11.6.1	量子スピン	839

11.6.2	高温超伝導体の強磁場物性研究	846
11.6.3	銅酸化物超伝導体の量子振動	851
11.6.4	半金属の強磁場物性	854
11.6.5	重い電子	861
11.6.6	構造物性	865
	文 献	873
12.	中性子散乱実験とソフトマター [柴山 充弘]	879
12.1	はじめに	879
12.2	中性子の性質	881
12.2.1	中性子の発生と種類	881
12.2.2	中性子の性質	882
12.2.3	電磁波, 電子線, および中性子線のエネルギー分散比較	882
12.3	中性子の散乱	883
12.3.1	散乱断面積	884
12.3.2	単一核の散乱理論	884
12.3.3	フェルミの疑似ポテンシャルと散乱長	886
12.3.4	非干渉性散乱	887
12.3.5	弾性散乱と非弾性散乱	888
12.3.6	散乱長密度	888
12.3.7	多数の核からの散乱	890
12.3.8	散乱長密度分布関数と相関関数	891
12.3.9	透 過 率	892
12.4	中性子散乱装置と測定手法	893
12.4.1	小角散乱	893
12.4.2	中性子反射率	896
12.4.3	非弾性散乱	899
12.5	高 分 子	901
12.5.1	領域 I: 希薄系—単一鎖状高分子の統計力学—	902
12.5.2	回転半径と Debye の散乱関数	903
12.5.3	領域 II: 準濃厚系 — C^* 定理—	905
12.5.4	領域 III: 濃厚系およびメルト—ポリマーブレンド—	905
12.5.5	ブロック共重合体	906
12.6	ブレークスルー研究	906
12.6.1	高分子鎖の広がり	906

12. 6. 2	高分子ブレンドの臨界現象	908
12. 6. 3	同位体高分子ブレンドの量子相分離	909
12. 6. 4	スピネコー法による高分子メルトのレプテーション運動の直接観察	909
12. 6. 5	反射率測定によるブロック共重合体薄膜の規則構造研究	910
12. 6. 6	高分子ゲルの体積相転移	911
12. 6. 7	コントラスト変調法による界面活性効果の研究	912
12. 7	トピックス	913
12. 7. 1	高分子溶液の圧力・温度誘起相分離	913
12. 7. 2	脂質膜中の両親媒性分子のキネティクス	914
12. 7. 3	シシカバブ構造	916
12. 7. 4	イオンの選択溶媒和による水/有機溶媒の膜状構造形成	916
12. 7. 5	新奇高強力ゲル	916
12. 8	将来の展望	918
12. 8. 1	中性子散乱技法の発展	918
12. 8. 2	ソフトマターサイエンス	921
12. 9	結 語	923
文 献		924

第 IV 部 新物質開発

13.	強相関電子系の物質開発	[中辻 知] ... 929
13. 1	分子性物質	[森 初果] ... 932
13. 1. 1	分子性導体の発展の歴史—低次元導体から強相関電子系超伝導体まで—	932
13. 1. 2	強相関電子系分子性物質開発の手法	937
13. 1. 3	トピックス	958
13. 1. 4	強相関電子系分子性結晶のまとめと展望	971
13. 2	遷移金属酸化物における物質開発	[廣井 善二] ... 974
13. 2. 1	遷移金属酸化物の特徴	974
13. 2. 2	d 電 子	977
13. 2. 3	遷移金属酸化物における格子	978
13. 2. 4	様々な物性	979
13. 2. 5	量子スピン系	982
13. 2. 6	フラストレーションとカゴメ格子	982
13. 2. 7	5d パイロクロア酸化物	984

13. 3	金属間化合物における強相関電子系：重い電子系	[中辻 知] ... 989
13. 3. 1	はじめに	989
13. 3. 2	量子臨界現象, スピン揺らぎ, フェルミ液体, 異常金属	990
13. 3. 3	金属間化合物の合成法	993
13. 3. 4	重い電子系における量子臨界現象	996
13. 3. 5	Pr 系重い電子化合物における非磁性軌道揺らぎと異常金属, 超伝導	1003
13. 3. 6	さいごに	1006
文 献		1007
索 引		1013