

講義ノート

縮合して出来た中空の状分子)を中心とするフラーレン類(C_{60} をはじめとし、更により大きな球形状分子 C_{70} 、 C_{240} 、 C_{540} 等、あるいはチューブ状分子が存在し、中空の状分子(フラーレン)を形成する)が発見され、第三の炭素材料として大きな注目を集めており、炭素材料の概念が大きく変わろうとしています。そこで、このフラーレン類も含めた炭素系物質の化学的性質、構造、物性等について最近の研究を紹介してもらいました。

この講義では以下のように大きく五つに分けられて進められています。はじめに、イントロダクションとして、炭素系物質全般の話をされ、次にグラファイトの電子構造、第三番目としては、グラファイト層間化合物及び単層グラファイトやアルカリ金属挿入化合物についての話でした。例えば KC_8 、 RbC_8 やさらに超伝導転移点が約 2 ~ 3 桁高い M_3C_{60} 、 M_4C_{60} 、 M_6C_{60} ($M = K, Rb$)、またはルビジウムとタリウムの合金をドーブした系で超伝導転移点が 48 K にも達する高温超伝導の $Rb_1Tl_7C_{60}$ についての研究など説明をしていただきました。 K_3C_{60} 、 Rb_3C_{60} については、超伝導メカニズムを含めてその詳細が明らかにされつつあるそうです。一方、 C_{60} 化合物は磁性の観点からも興味を持たれ、 $T_c = 16K$ の遍歴電子強磁性体である有機化合物ドナーとの電荷移動錯体(TDAE) $0.86C_{60}$ を例とされ、紹介してくださいました。そして多孔性炭素材料の話をされた後、最後にフラーレン類を基本とした化合物の話という事で、特にその中でもチューブ状のフラーレン(フラーレンチューブ)におけるらせん構造、金属から半導体への変化等興味のある問題について紹介をしていただきました。

[2] 「フラーレンの構造と成長」

発表者 若林知成(東京都立大・理)

今までの話というのは既にフラーレン類が形成されていて、または作ってみて、その物性を調べてみるという流れであった様に思えます。ここでは少し視点を変えてみて、じゃあどうやって状の分子が形成されるのか? 又は何故状の分子が自発的に生成するのか? という成長メカニズムの問題に触れ、発表者らの都立大グループが提案している成長メカニズムのモデル(Ring-stacking-model)を C_{84} を例に他のグループが提案しているモデルも取り上げながら、実験との対応を話してもらいました。またフラーレンの分離、構造決定の話や最近相次いで報告されている $C_{82}@La$ などの、金属がのなかに取り込まれたフラーレンの実験も紹介してもらいました。

世話人: 三宅啓太(九州大・工)

サブゼミ 物性基礎論(I)

東京大学教養 戎崎俊一、東大理 泰池真弘人、東工大物理 深町

従来の物理学は解析物理学とでもいうべきものであり、物理になぜ計算機を使うのか? という事について疑問のある方も多いと思います。そこで今年は計算機物理ということにしました。単に汎用の『計算機をどう使う』という次元を越え、『専用計算機』を作って使っている方々に来ていただくことにし、重力専用コンピューター: GRAPE のチームを率いる東京大学教養の戎崎さんとスピン系専用コンピューター: イジングマシンを作った中の一人: 泰地さんに来ていただいて専用計算機のお話を伺いました。

GRAPE (GRAvity PipE) とは:

古典力学では既に重力の方程式が決まっています。また律速段階である N 自乗の計算量になる相互作用項のみが速ければよいのでそれ専用 architecture を作ってしまう。GRAPE ボードを見せてもらいましたが、目で見て流れがわかるハードウェアでした。こうして汎用性を捨てれば速くなる。汎用性のある程度捨ててはいますが相互作用が $f(r)$ 型のものならなんでもできるタイプもあり、タンパク質の研究などに使えるそうです。

イジングマシン:

つまるところ古典スピンは bit 演算です。もっともコンピュータにのりやすいといえます。このマシンも専用のアーキテクチャを作ってしまうことで個人で持てる大型機並の性能を実現しています。

専用計算機の時代：

かつて計算機と言えば専用機のことでした (ENIAC とかの時代)。そのうち計算機の発達は汎用性への道を歩んでいきました。しかし今のいわゆるスーパーコンピューター (この文脈では、かなり汎用性があるマシンのカテゴリーに入る) の性能・発展スピード等は決して科学技術計算に十分なものではありません。その時どうすればいいのか？

普通物理実験の人は実験装置を自分で作るものです。でも (理論物理&数値実験) の人だけは市販品のマシンで、動きさえすればいいプログラムが書ければそれだけでいいのか？

今までは確かにそうでした。これからもそうだとは言いきれません。ハードウェアの設計も昔に比べ容易になりました。これからは知りたいことがあってそれに計算機が essential なことなら自分で専用機を作って行なう時代になるのではないかと？ そういったものの具体例のが GRAPE やイジングマシンでしょう。

スーパーコンピューターとはオーダーが異なる優れたコストパフォーマンスを実現できる専用機を作りそれを使いこなす物理屋の時代がそこまで来ているのかもしれませんが。上のテーマとは直接的には関係ないのですが、この話の延長上には”手足のごとく使いこなす道具”としてのコンピュータという位置付けが成り立つと思います。道具の面倒は自分でみるのが当然であるという理屈に関連して、道具としての UNIX マシン (similar equal to ワークステーション) の管理についての話し合いも少し行ないました。自分の道具の面倒は自分でというしごく当たり前という意見に落ち着いたと思います。

世話人：深町 賢一@東工大物理