

## 磁性の根源 — 85年も続いた誤解 —

川添 良幸

### はじめに

小学校の理科の勉強と言えば、馬蹄型磁石を砂場に持って行って砂鉄を集めたり、磁力線という不思議な模様ができることに感動した思い出が一番印象に残っているという人が多い。しかし、NとSという極がある、半分にするとその両方に同様の極が発生すると説明され…どンドン切るとどうなる？ そもそもNとかSとかは何？ Nだけ、Sだけの磁石はある？ 磁力線というのは何？ と出来の良い子供ほど疑問が広がり先生に尋ねる。すると、磁石とはそういうものなのだという質問者の興味を無視した紋切り型の回答がなされる。理科って暗記なのだとか割り切って良い成績を残して満足するか、考えても分からずに理科が嫌いになるかの分かれ目である。中学校になると、永久磁石に次いで電磁石を使ったモーターが出てきて、その原理としてフレミングの左手の法則が叩き込まれる。さらに右手の法則が発電機の説明として提示される。こうなると、理科とは原理とか法則とかが並ぶものとなってしまう、思考は停止する。それなのに、良く考えなさいと言ったり、理科室振興策を唱えても子供の興味が湧くはずはない。原理や法則があるから不思議なことが起こるわけではなく、自然の摂理に従って様々な現象が生起する。

大学理工系では、強磁性、常磁性、反磁性、フェリ磁性…といよいよ些細な分類学が登場する。では、これらに共通の磁性そのものの根源は本当に分かっているのか？ 標準的に、磁性には電子のスピンが関与しており、それが整列した場合に発現すると教える。これは正しい概念の提示である。しかし、量子力学の例題として適切な範囲の問題と

して、クーロン積分、交換積分、等とまたまた説明が並ぶ。実は、これは量子力学誕生時にスレーターが導入した摂動論<sup>1)</sup>に基づくのであるが、本稿で実証するように、この説明は一見正しそうに見えるだけで全くの間違いである。何と85年もの長きにわたって、この本質的誤解が標準的に教えられてきた(いる)。教科書問題という歴史のみが取り上げられるが、理科でも数学でも問題は沢山あるのに登場しないのは、マスコミに文科系の人が多いからか、一般読者には理工系の話題は興味がないと決めつけているからだと思われる。さらに、本稿のテーマである量子力学は自分の頭で考えても良く理解できる範囲をはるかに超えた問題であると勝手に誤解し、鵜呑みにしている向きも多い(間違っていることを無理に理解しようとするが、やはりおかしいと感じているため、納得できない)。以下に述べるように量子力学自体が難しいわけではなく(ニュートン力学でも高校で習うカーテシアン座標での重力下のボールの飛跡レベルを超え、独楽の歳差運動を扱うともなれば、球座標系やラグランジアンが必要で、量子力学の原子の問題と同等の数学力が求められる)、多体問題が難しいのであり、そのため、実験値を説明する「分かりやすい(が、間違った)」模型が作られ、それが流布している。スーパーコンピュータの進展によって多体問題を精密に解くことが可能になり、最近になって磁性の問題の本質が理解できるようになった。やっと初学者が筋よく勉強できる環境が整備されたとも言える。教科書を書き直して正しい講義内容を実施するだけでなく、関係する工業界にも広める必要がある。磁性の産業応用に関する基盤が21世紀になって初めて確立されたことの意義は大きい。

本稿では、最初に多体問題の困難さの例を、太陽系としての月の軌道を例に導入し、それに続いて原子、分子の電子状態の正しい理解法を述べる。従来全く間違っただけで教え込まれてきて（そのために量子力学が分からなくなった）複数の原子から分子や結晶が構成される真の理由を会得し、それを基盤として磁性の根源理解へと進む。

## 多体問題の困難さ

「常識」では錬金術は過去の非科学的思想の代表である。化学的手法では卑金属原子を貴金属に変えることができなかったのは、原子核変換のエネルギーが必要だったためであることは今では常識である。しかし、21世紀のナノテクノロジーが、錬金術を新たな形で復活させた。原子や分子の持つ特異な性質を組み合わせることで従来から使われていた材料より根本的に優れた機能を持つ新物質が創り出され、環境に優しい素材を使って持続可能な世界を実現させることができる。量子力学が出てくるから、錬金術を間違っただけで理解したりナノテクノロジーが分からなかったりするの？ 実は、そういう問題ではなく、三体問題に代表される多体問題の難しさが全ての根源に横たわっている。小学校の時から常識だった、月は地球の衛星であるという「常識」さえ間違っている。数年前に、惑星の数をいくつにするかが話題に上がったが、そこで議論されるべき本当の重要問題は一般には全く理解されていない。図1を見れば分かるように、太陽の周りの運動という観点では、月は地球の周りを回ったりなどしていない。重力の値を計算すれば、一番強いのはもちろん太陽と地球。二番目は太陽と月。そして地球と月の間の重力はその半分ほどである。これで月を衛星と呼ぶのはおかしい(太陽と月の重力は摂動扱いできない!)<sup>2)</sup>。地球と月の関係は連星系と呼ぶのがふさわしく、太陽の周りのほとんど同一の軌道を時速10万kmもの超高速で一緒に回転している。慣性の法則は恐ろしいもので我々はこのスピードを全く関知しないため、月が地球の周りを回っていると誤解してしまう。

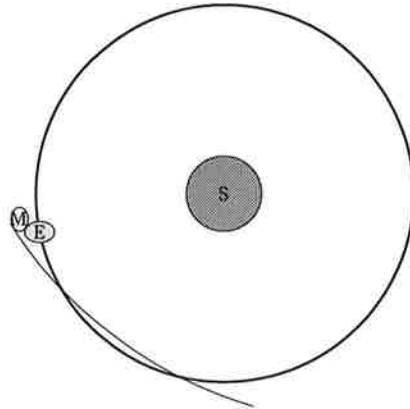


図1 太陽の周りの地球と月の軌道。太陽からより近くなったり遠くなったりしながら、絡み合うように一緒に回っている(この図は誇張してあり、実際の縮尺で描くと月の軌道は線の太さ内にあり識別できない。1年に12回地球と月は太陽から近くなったり遠くなったりする)。地球以外の太陽系惑星である木星や土星の衛星に対しては、太陽から遠くにあつて質量が小さいので太陽との重力を摂動で扱える。月は太陽に近く、質量もそれなりに大きいため衛星という分類はできないが、地球中心の考え方(時速10万kmもある地球の公転速度を感じないことから生じる)から衛星に分類する誤解を生んでいる。

学校で習った事柄や常識を鵜呑みにし、歴史の教科書では天動説を間違っているとやっているのに、月が地球の衛星であると信じていたのでは、いまだに天動説を脱却していない。太陽と地球と月は、どれも摂動で扱える力関係にはなっていない三体問題の関係にあり、この多体問題は難しい問題の代名詞なのである。常識に基づく分類学ではなく、問題を定量的に扱うことにより正しい理解が得られる。ファインマンは、“What I can not compute, I do not understand.” という名言を残している。

## 原子から分子や結晶ができるときに起こることの真実

物理学および化学の実験的研究が大きな進展をした100年ほど前、無生物・生物によらず、あらゆる物質の性質が電子の状態によって決まることが判明した。そして、量子力学によってその詳細が理解できることが示された。しかし、基盤となる支配

方程式としてのシュレディンガー方程式（ディラック方程式）と構成要素である電子および原子核、およびそれらの間のクーロン相互作用が分かったからと言って、多体の電子が関与する系の構造と物性を精密な数値計算によって解明することは、当時の計算機能力では全く不可能であった。そのため、量子力学に基づくいろいろな模型が登場した。

一番簡単な例を挙げれば、2つの水素原子から構成される水素分子の電子状態模型である。量子力学の入門書に載っている有名なハイトラー・ロンドン模型（以下HL）<sup>3)</sup>では、各水素原子の1s電子軌道をパウリの排他律が成立するように重ね合わせて水素分子の状態を表す。標準的説明として、「電子雲が重なって分子状態ができる」と書いてあり何となく納得させられるが、逆に最初から量子力学が良く分からなくなる最大の原因でもある（電子という実体が雲だと教えるから分からなくなる。雲というのは観測の問題の表現である。古典的な物体は光を当てても変わらず観測できる。一方、電子の場合には約 $10^{-30}$ kgと質量が極めて小さいため光を当てると移動してしまうが、その移動範囲は限られていてそこを雲と呼ぶのである）。この系の電子状態を精密な数値計算によって求めると、質的に異なる結果になる。HLでは、2つの孤立した水素原子が近づいて水素分子が構成されるとき、運動エネルギー $T$ が下がり、ポテンシャルエネルギー $V$ が上昇して、その差として全エネルギー $E=T+V$ が低下して安定化する。しかし、実は、これは以下に示すように「自然の摂理に反する」安定化であることを証明できる。電子同士は負の電荷を持つ粒子であり、斥力を及ぼしあっている。これは古典的な考えというわけではなく、負の電荷を持つ粒子同士が近寄って安定化するというのは量子力学でもあり得ない。自分でよく考えれば、教科書の方がおかしいことに気づいたはずであるが、量子力学は普通と違う世界だからしょうがないと決めつけてしまい、それ以降は思考が停止した人が多い（一般の人はそれでも良いかも知れないが、理論物理学を専門とする人に多いことが問題であ

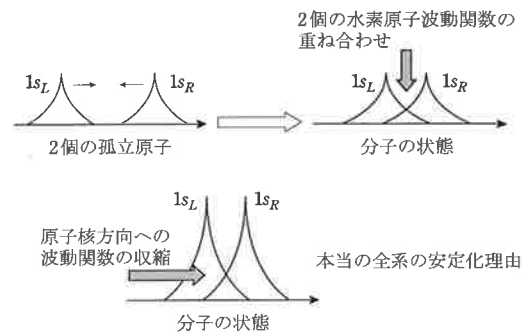


図2 水素原子から水素分子が構成されるときに起こる電子密度分布変化の概念図。

る。もっとも最初に述べたように理科という学問は原理や法則を覚えるものと同じ込まれて以来、長年悩まず、あっさり既存の概念を受け入れる態度が育てられてきてしまっているからというのが根本の問題だと思われる。全エネルギーを低下させて系を安定化させることができるのは、正の電荷を持つ原子核と負の電荷を持つ電子の間のクーロン相互作用のみである。つまり、 $V$ を下げるためには、電子が原子核に近づいて安定化する以外に方策がない。すると、電子は原子核に吸い寄せられてしまわないためにより高速運動するようになって $T$ は上昇する。その差として、全エネルギー $E=T+V$ が低下する。図2に、2つの水素原子から水素分子が構成されるときに起こる電荷密度分布変化の概念図を示す。後述の「ビリアル定理」の節で示すように、平衡状態にある系では $T$ と $V$ は独立ではなく、 $2T+V=0$ という関係（ビリアル定理、クーロン相互作用する多体系の必要条件）が成り立つため、この運動エネルギー $T$ の上昇は $V$ の低下のちょうど半分になり、その差で系の安定化が実現される（水素分子が構成される）。藤永の教科書<sup>4)</sup>にはHLの間違いを含め、分子安定性に関する正しい記述がなされていることは注目すべきである。今回、我々は必要条件であるビリアル定理を満たすか否かで各種理論の正否を確定する手段を得たことにより、理論の正否を確実に判断できるようになった。

表1に2つの水素原子から水素分子が構成される場合に起こるエネルギー変化を示す。運動エネ

ルギーとポテンシャルエネルギーの変化 ( $\Delta T$  と  $\Delta V$ ) を別々に算定すると、HL および分子軌道法 (MO) では、 $T$ が低下し、 $V$ は上昇している。これが自然の摂理に反することは必要条件であるビリアル定理を満たさない(正負が違う)ことから明白である。ハートリー・フォック法 (HF) は電子相関を含まないが、水素分子の安定化の原因が  $V$  の減少であることを正しく記述している。もちろん、シュレディンガー方程式をそのまま解く拡散モンテカルロ法 (DMC) では現象を正しく表し、実験値を精密に再現する<sup>5)</sup>。このビリアル定理とカスプ条件を満たす精密な DMC と HF との差である相関エネルギーの大きさを表 2 に示す。HF の値に比べ、せいぜい数%の大きさであることが分かる。

表 2 は DMC による水素分子の精密計算結果である。HF との差である相関エネルギーの値を各項に対して示している<sup>5)</sup>。HF と DMC の両理論ではビリアル定理が成り立つため、その差として定義される相関エネルギーについても、ビリアル定理が

表 1 2つの水素原子から水素分子が構成される場合に起こるエネルギー変化。ハイトラー・ロンドン模型 (HL), 1s 軌道のみ分子軌道法 (MO), ハートリー・フォック法 (HF), 拡散モンテカルロ法 (DMC), および実験値。

(eV)	条件	HL	MO	HF	DMC	実験値
$\Delta E$	負	-2.48	-2.88	-3.63	-4.75	-4.75
$\Delta T$	正	-5.01	-4.22	3.63	4.8 (1)	
$\Delta V$	負	2.53	1.33	-7.27	-9.6 (1)	
$-\Delta V/\Delta T$	2	0.5	0.3	2.0	2.0 (1)	

精度の問題ではなく、正負が逆  
絶対値で一致

水素原子の 1s 軌道のみ用いた従来の分子結合の説明は空間次元に由来した必要条件であるビリアル定理に反しているため、本質的に誤りである。

成り立つ。この関係より、電子相関を考慮することで、HF理論よりも運動エネルギーは増加し、全ポテンシャルエネルギーはその2倍量だけ減少していることが分かる。この点がビリアル定理から帰結される電子相関の本質である。

この問題は水素分子に限ることではなく、全ての分子、結晶、アモルファス…どんな物質・材料に対しても同様である。HLの拡張であるHLSP(HL-Slater-Pauling)法(原子価結合法)は多原子分子に対して適用されるが、やはり電子雲を広げる( $T$ を下げる)ことで系を安定化させるという間違いをしている。実に深刻な問題で、これまで実験結果が説明できるからという理由で正当化されてきた標準的な量子力学模型の多くが間違っていたという事実が論理的に確実に示された。

多体問題に対する数値計算結果は数字が出てくるだけで分かりにくく、模型は実験結果を端的に表してくれるので重要であるという主張は、「正しい」模型に対して使われるべきものであり、上記のように正負さえ異なる結果を導く模型の場合には全くナンセンスである。この例に代表されるように、電子間相互作用のみで物質の状態を説明する模型が沢山考案されてきた。例えば、電子ガス模型では、原子核は一律な正電荷の分布(uniform background charge)とされ、その上で負電荷を持つ電子間の相関が議論される。原子核のサイズは数ないし10 fm程度であり、オンGSTローム・サイズの原子に比べると5桁も小さい。通常、原子核の影響は芯電子にしか及ばず(局在電子)、原子間の結合を担う価電子は自由電子として系内に広く分布する(遍歴電子)とされるが、全ての電子と原子核を取り込んだ精密計算によれば、芯電子から最外殻電子に至るまで原子核の引力が大きく効いていて、従来の仮定とは異なる状況であることが分かる(最外殻

表 2 DMC による水素分子の精密計算結果。HF との差である相関エネルギーの値を各項に対して示す<sup>5)</sup>。

	$E$	$T$	$V_{en}$	$V_{ee}$	$V_{nn}$	$V$	ビリアル比	$R_{eq}$
HF	-1.13365 (2)	1.1333 (1)	-3.6484 (1)	0.66113 (2)	0.7214	-2.2669 (1)	2.0003 (2)	1.386
DMC	-1.17447 (4)	1.1749 (14)	-3.6535 (17)	0.5880 (4)	0.7137	-2.3518 (19)	2.002 (3)	1.401
相関	-0.04081 (5)	0.0416 (14)	-0.0041 (17)	-0.0731 (4)	-0.077	-0.0848 (18)	2.040 (69)	

電子が原子核に引き寄せられ、芯電子は逆に広がる)。すなわち、定量的に扱わないうちから、局在、遍歴という分類学を適用しては、本質と異なる結論に導いてしまう。

## 原子1個だって多体問題

水素原子の量子状態が厳密に解ける理由は、それが陽子と電子の作る二体問題だからである。周期表で2番目のヘリウム原子になっただけで、そうはいかない。標準的化学の教科書には、1s軌道に2つの電子が入っていると記述されている。しかし、この2つの電子は原子核からの引力だけではなく、電子同士も当然クーロン斥力で相互作用しており(電子間斥力エネルギーは原子核-電子間引力エネルギーの約1/7)、単純に1s軌道に2個入っているとは言えない。つまり、三体問題として扱う必要があり、精密なヘリウム原子の電子状態を求めるには相当の工夫と努力が必要になる。この問題は、分子軌道法で十分に配置間相互作用を取り込んだ(full CI)プログラムをスーパーコンピュータ上で実行すると数秒で収束するが、相当数の基底関数を使っても電子相関の値としては実験値の85%程度に止まる。残りの15%の達成は極めて困難である。その理由は使用した計算手法が悪くだけで、この問題が解けないということの意味しているわけではない。ほぼ100%の電子相関値はDMCで容易に到達できる。以上の問題をまとめて図3に示す。前節で説明した電子数2個の水素分子の計算例も示した。ヘリウム原子と同様に通

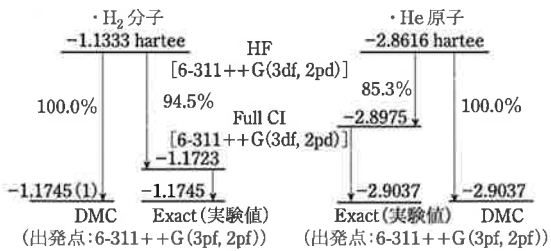


図3 2電子系における電子相関エネルギー評価の比較。従来のCI法では厳密解に到達することは難しく、量子力学的な多体問題の難しさを物語っている。DMC法を用いれば2電子系については容易に厳密解に到達できる。

常のCI法では電子相関の値を精密に求めることは極めて困難である。

我々は、数年の歳月をかけ、ニッケル原子に対する精密計算を行い、基底電子配置から生じる全ての定常状態のエネルギー準位を、実験的に知られている順序に再現することに成功した<sup>6)</sup>。原子1個がそんなに難しい? という疑問を持たれると思うが、電子28個と原子核1個の計29体系であるニッケル原子に対する量子力学問題を精密に解くことは容易ではない。遷移金属より重い元素はもっと難しいことになり、厳密計算はいまだに誰も成功していない。21世紀に入っても、原子1個さえ今後の精密計算が必須な事項として科学者に残された基盤的重要問題なのである。分子、結晶、界面を含む多結晶体、有機物、タンパク質、DNA…とまだまだ先は長い。現状のスーパーコンピュータは自然そのものを計算機の中で(in silico)扱うにはまだまだスピード不足ということになる。そこで登場するのが計算量を3N次元(Nは系の電子数)から3次元へと劇的に下げる密度汎関数理論(density functional theory, DFT)であり、縮退していない基底状態に対する厳密な理論である。しかし、その電子の交換相関汎関数は未定である。それを求めたい実験結果と合うように設定し、原子数を増やして計算する方策を第一原理計算と称することが多い現状は打破しなければならない。最近多く見られるファンデルワールス力を交換相関汎関数の調整によって再現しようとする試みは、双方が互いに双極子励起を起こさせ、その双極子同士の相互作用として発現するファンデルワールス力の真の表現にはなっていない。我々は、電子の励起状態計算を基本として双極子分極を算定して筋良くファンデルワールス力を算定する方策を提案している<sup>7)</sup>。実験値の説明に止まらず、有用な物性を持つ新物質を「信頼性を持って」理論的に設計する方策の確立が急務である。適当な交換相関汎関数を用いた計算プログラムを現状の計算機に適合するように並列化することで原子数の大きな系を扱えるようにするというレベルでは、物質に関する本当の理解が得られる現状ではなく、より基盤

的な研究を推進すべきである。

## ビリアル定理

最近の物性理論の教科書では余りお目に掛かる機会は少ないが、物性理論の古典的名著と言われる教科書の多くには、「平衡状態にあるクーロン相互作用する物質系では $T$ と $V$ の間にはビリアル定理が成立する」と記載されている。この定理は、我々の世界が3次元であることから決まるため、それを満たすことは系の必要条件である。クーロン力の関数形は電荷の影響が空間を一様に広がって行くことを意味している(電荷の位置から距離 $r$ 離れたところの球面の面積は $4\pi r^2$ であり、クーロン力はその逆数で減衰する)のでスケール則が成り立つ。 $G=2T+V=3P\Omega$ ( $P$ は圧力、 $\Omega$ は体積)がビリアルと呼ばれる量である。

ビリアル定理は、古典系で良く知られている定理であり、証明は以下のように行う<sup>8)</sup>。ビリアル $G$ は、系を構成する要素 $i$ の全てに関する座標 $r_i$ と運動量 $p_i$ の積和として定義される。

$$G = \sum_i r_i \cdot p_i \quad (1)$$

$G$ の時間微分は、 $T$ を系の運動エネルギー( $(1/2)\sum_i p_i v_i$ )、 $i$ 粒子に働く力を $F_i$ として、ニュートン方程式( $dp_i/dt = F_i$ )を使って

$$\frac{dG}{dt} = 2T + \sum_i r_i \cdot F_i \quad (2)$$

となる。粒子の運動範囲を有限として時間積分を無限大まで行えば、その平均値は0になるので、

$$0 = 2\langle T \rangle + \left\langle \sum_i r_i \cdot F_i \right\rangle \quad (3)$$

が成立する。

ポテンシャルエネルギー $V$ の微分形で各粒子に働く力が定義できる(保存力)とすると、

$$\sum_i r_i \cdot F_i = -\sum_i r_i \cdot \nabla_{r_i} V \quad (4)$$

となる。クーロン力の場合には、そのポテンシャル $V$ は $a$ を係数(MKSA単位系なら電荷を $q_i$ として

$q_i \times q_j / 4\pi\epsilon_0$ ,  $\epsilon_0$ は真空の誘電率)として、

$$V = a/r \quad (5)$$

なので、

$$\left\langle \sum_i r_i \cdot \nabla_{r_i} V \right\rangle = -\langle V \rangle \quad (6)$$

となり、最終的に

$$0 = 2\langle T \rangle + \langle V \rangle \quad (7)$$

が得られる。

量子系では、系のハミルトニアン $\hat{H}$ にスケール則を適用し、変分法によって次のようにビリアル定理を導出できる<sup>4)</sup>。 $\hat{H}$ は運動エネルギー演算子 $\hat{T}$ とポテンシャルエネルギー演算子 $\hat{V}$ の和で

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} \quad (8)$$

$\hat{T}$ は空間座標での2階微分、 $\hat{V}$ は空間座標の逆数であるため、スケールファクター $\lambda$ を導入すれば、 $\lambda$ 倍した電子と原子核座標に対する $\hat{T}(\lambda)$ 、 $\hat{V}(\lambda)$ はもともとの $\hat{T}$ 、 $\hat{V}$ と

$$\hat{T} = \lambda^2 \hat{T}(\lambda), \quad \hat{V} = \lambda \hat{V}(\lambda) \quad (9)$$

という関係にある。すなわち

$$E(\lambda) = \lambda^2 T(\lambda) + \lambda V(\lambda) \quad (10)$$

であり、平衡状態では系の全エネルギー $E$ は極小なはずなので、

$$\delta E / \delta \lambda |_{\lambda=1} = 2T + V = 0 \quad (11)$$

が得られる。

こうして、平衡状態にあるクーロン相互作用する量子力学系に対しても常に $2T+V=0$ が成り立つ。このことは、各平衡状態に対して成り立つので、孤立した2個の水素原子の状態および水素分子状態で成立する。そして、その差も同様である。これは上述の $V$ が下がって $T$ が上昇するが、 $E$ は下がることを明確に示している。つまり

$$E = T + V = -T = V/2 \quad (12)$$

となる。この $V/T=-2$ をビリアル比と呼び、変分原理に基づく平衡状態における電子状態計算の信頼性を評価する指標となる<sup>5)</sup>。

この比は各平衡状態で成立するので、分子結合形成の前後の差は

$$\Delta E = \Delta T + \Delta V = -\Delta T = \Delta V/2 \quad (13)$$

となる。

前節の水素分子の計算で、運動エネルギー $T$ は

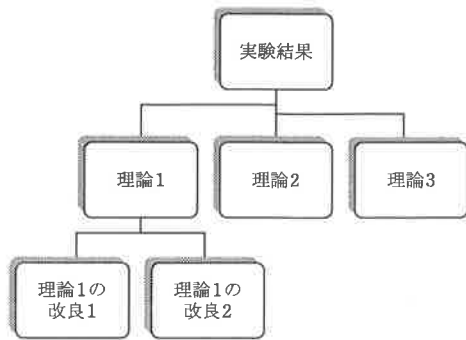


図4 実験の説明は何通りでも可能。正しい理論には、自己保証が必要。

上昇し、そのちょうど2倍だけポテンシャルエネルギー  $V$  が下がる理由が上の式 (13) で明らかになった。このクーロン多体系の平衡状態で常に成立するピリアル比をチェックすることが「第一原理計算の品質保証」になる。物理現象を表すモデルはいくらでも作れ、パラメーターを調整すれば実験で観測される現象を説明することができる。しかし、計算結果に対する保証がない場合が多い。特に、クーロン力で相互作用している物質系に対する必要条件であるピリアル定理と矛盾したモデル（たまにあるのではなく、たくさん存在する）は自然現象に対応する表現をしていないために間違ったモデルであると断言できる。図4に示すように実験結果を説明する理論、モデルはいくつでも作れる。さらに既存の理論で不都合な新発見があれば、パラメーターを増やして説明し続けられる。これでは理論の正当性の証明はない。少なくとも必要条件を全て満たす必要があることは当然であり、今回、ピリアル定理の遵守を提案することで、既存モデルの正否の判断を可能とした。将来に構築される新モデルはピリアル定理を遵守することが必須である。

## 磁性はハイゼンベルグの交換相互作用では説明できない —原子に対するフント則の解釈—

物質の重要な性質である磁性の説明は、ハイゼ

ンベルグ模型によってなされてきた<sup>9)</sup>。これは、磁性が電子状態によることが分かり、量子力学がその基礎方程式であることが認識された1920年代には「電子は皆同じ粒子であり、交換しても位相以外は変わらない」という、従来の古典的な「個」の概念が成り立たない量子力学の新発見に驚き、精密な数値計算が不可能であったため、「電子の交換相互作用で磁性を説明してしまった」ことに由来する。上述のように遷移金属原子1個の状態でさえ、厳密に解こうとすると数十体問題を扱わなければならず、これまではモデル計算によらざるを得なかった。スーパーコンピューターを活用した数値計算により、最近、やっとこの問題が解けた。その結果、電子相関はハートリー・フォック法によるフント則の解釈を定性的には変えず、原子核と電子間の引力相互作用が主要因となって基底状態のフント則が成り立っていることが判明した。

フントは量子力学成立以前の1925年に、基底電子配置から生じる原子の準位に対して、2つの経験則を見出した<sup>10)</sup>。すなわち、①フント第一経験則：同一電子配置から生じる  $LS$  項（縮重度は  $(2S+1) \times (2L+1)$ ）において全スピン角運動量  $S$  のより大きな項がより安定である。②フント第二経験則：同じ  $S$  の項が2つ以上ある場合には全軌道角運動量  $L$  のより大きな項がより安定である。この法則は原子のみならず、分子に対しても適用できる。

磁性の根源は原子核の作るクーロンポテンシャル中にある多数の電子がスピン状態をそろえることによって、「より原子核近くに寄れる状態を実現する」ことで系のエネルギーを減少させて安定化させることに由来しており、電子間の相互作用のみで説明してきた「伝統的解釈」で解決できる問題ではない。Davidson<sup>11)</sup>に始まる「新解釈」（その後、Katriel-Pauncz<sup>12)</sup>, Boyd<sup>13)</sup>と続く、Slaterの摂動論の誤りの指摘）の正当性は以下のように証明できる。まず、ピリアル定理を満たすように計算すれば、電子間斥力エネルギーは安定な状態ほど、むしろ増加している。最も重要な要素である原子核と電子の相互作用の準位ごとの違いを無視した結果として、これまでは自然の摂理に反する全く逆の

説明に終始していたことになる。図5にこの状況を示す。Boyd<sup>13)</sup>の提案したless screening機構によりフント第一則は以下のように説明される。揃ったスピンの電子対は短距離で避け合うので、Hartree項による核遮蔽が交換項により短電子間距離で弱められ、原子核の引力場をより有効に感受できる。その結果として、最外殻電子が原子核に向けて収縮して安定化する。磁性の根源理解の困難さは、すでに久保の教科書の最後の節「57 磁性の本質論の困難」に極めて注意深く述べられている<sup>14)</sup>。しかし、その後に出版され多用されている教科書には残念ながらこの検討は受け継がれなかった。

式(14)は教科書に標準的に書いてあるスピン状態のエネルギー表式である。2倍の交換エネルギー $K$ が異なるスピン状態間のエネルギー差を表現するという分かりやすい式であり、量子力学の入門問題として良く使われる。しかし、この式は致命的な誤解の上での磁性の解釈となっている。

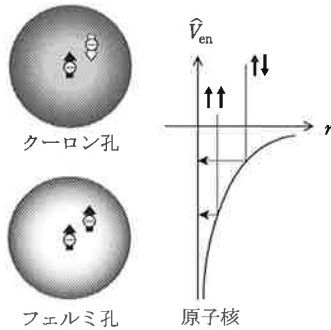


図5 Less screening機構によるフント則の正しい成立理由の概念図。詳細は本文を参照。フント則の正しい解釈は、磁性の根源理解のために重要である。

$$\hat{H} = \sum_i^{N_e} \left( -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i>j}^{N_e} \frac{1}{r_{ij}} \quad \begin{array}{c} \uparrow \downarrow \\ \uparrow \downarrow \end{array}$$

$$\therefore E^{\uparrow\uparrow} - E^{\uparrow\downarrow} = -2K_{12} < 0 \quad (\text{Exchange energy}) \quad (14)$$

我々はこの問題の詳細な解析を行ったが、その結果は驚愕すべきものであった<sup>15)~19)</sup>。すなわち、85年もの長きにわたって標準的教科書に採用されてきたスレーターの摂動論は全くの間違いであることを証明したからである。標準的教科書に記載されている交換エネルギー利得によるフント則の伝統的解釈は全くの間違いで、2つの電子状態は、電子の運動エネルギーと原子核と電子、および電子間のクーロン相互作用の差で決まる。ピリアル定理を満たす高精度計算では、伝統的解釈とは反対に、交換エネルギーの利得分を超えて、電子間のクーロン斥力エネルギーが増加する。

表3は、炭素原子の基底状態のフント第一則について、我々が初めて実施したDMC法による精密計算の結果である<sup>20)</sup>。これは基底状態の三重項と励起状態の一重項のみを扱うフントの第一経験則の範囲での計算結果であったが、伝統的な教科書に書いてある磁性状態発現の根源であるスレーターの摂動論的な説明の誤りを、炭素原子の基底状態のフント第一則について、電子相関まで高精度に取り込んだ上で定量的に示した最初の結果である。

表4に、フントの第二経験則へと拡張した精密計算結果を示す<sup>21)</sup>。上段は、従来の教科書に従って、 $^3P$ ,  $^1D$ ,  $^1S$ の3準位に同じ空間軌道関数を想定した場合の結果で、全エネルギーの並び順に限れば説明できる(伝統的解釈の基になる結果)。しか

表3 DMCによる炭素原子のフント第一則に関する精密計算結果。エネルギーの単位はhartree。

DMC	$E$	$V_{en}$	$V_{ee}$	$T$	$-V/T$
三重項	-37.8267 (4)	-88.231 (29)	12.538 (6)	37.811 (26)	2.002 (2)
一重項	-37.7623 (6)	-88.062 (45)	12.464 (9)	37.763 (41)	2.002 (2)

電子相関を高精度評価したDMC計算の結果から、伝統的なフント則の解釈が誤りであることが確かめられる：伝統的解釈とは反対に電子間斥力エネルギー $V_{ee}$ は、三重項の方で大きく、フント則の正しい成立理由は原子核-電子間引力エネルギー $V_{en}$ の低下である。伝統的解釈と自己無撞着なハートリー・フォック計算の結果は、表4を参照。



表4 炭素原子のフントの第一、第二則についての (I) 伝統的解釈と (II) 自己無撞着なハートリー・フォック計算による正しい解釈の比較。電子相関を考慮した結果は、文献 21) を参照。

(I) 伝統的なフント則解釈： $^3P$  項について最適化した各軌道を  $^1D$ ,  $^1S$  項へ適用

状態	$E$	$V_{en}$	$V_{ee}$	$T$	$-V/T$
$C(^3P)$	-37.6886	-88.1369	12.7596	37.6886	2.0000
$C(^1D)$	-37.6302		12.8180		1.9985
$C(^1S)$	-37.5426		12.9056		1.9961

(II) 自己無撞着なハートリー・フォック計算： $^3P$ ,  $^1D$ ,  $^1S$  項の各々について各軌道を最適化

状態	$E$	$V_{en}$	$V_{ee}$	$T$	$-V/T$
$C(^3P)$	-37.6886	-88.1369	12.7596	37.6886	2.00000004
$C(^1D)$	-37.6313	-87.9910	12.7283	37.6313	2.00000004
$C(^1S)$	-37.5496	-87.7662	12.6670	37.5496	2.00000004

(I) では、 $^3P$ ,  $^1D$ ,  $^1S$  の3準位に同じ空間軌道関数を仮定している。

(II) では、 $^3P$ ,  $^1D$ ,  $^1S$  の3準位のそれぞれに対し、空間軌道関数を最適化している。

表3と同様にビリアル定理を満たす (II) の結果から、フント第一、第二則成立の主要因は、原子核と電子間の引力の低下によることが分かる。電子間斥力の並び順は、軌道緩和効果により (I) と (II) で逆転する。(I) と (II) のどちらも、電子相関効果は含まないことに注意。エネルギーの単位は hartree。

し、各々の定常状態についてビリアル定理を満たすように、運動エネルギー  $T$  とポテンシャルエネルギー  $V$  を計算すれば、当然、状態ごとに異なる値になる。ここで重要なことは、下段に示すビリアル定理を満たすハートリー・フォック法の結果では、原子核電子間引力エネルギーの低下の方が、電子間斥力エネルギーの増加よりもずっと大きい。さらに、よく見ると電子間斥力エネルギーは、安定な状態ほど大きくなっている。つまり、伝統的な交換エネルギー利得によるフント則の解釈とは全く逆の関係になっている。

## 分子に対する磁性の精密計算

化学ではあまり磁性が扱われることがなかったが、1987年にミラーらが電荷移動塩の一種が強磁性を示すことを見出し<sup>22)</sup>、研究が活発化した。ただし、キュリー温度が10~20Kと低く、実用化とはかけ離れた存在であった。二重架橋鎖方向に1次元の強磁性を示す鎖状分子等が創成され<sup>23)</sup>、金属の磁性体と比べて透明性等の特徴を有しているため、磁気イメージング等の先端デバイス用に期待されている。最近では、室温で強磁性を示す分子磁性体も多く作られ、従来の磁性体とは異なる複

合的物性を示す興味ある材料系として認識されるようになった。

我々は、メチレン分子  $\text{CH}_2$  に関するフント則の検討を行った。メチレン分子に関しては、Darveshらによって理論計算がなされている<sup>24)</sup>。彼らの第一原理計算は、電子間斥力の利得による「伝統的解釈」を支持する結果を与え、Davidson<sup>11)</sup> 以来の新解釈に対する例外としてメチレン分子を位置付けてきた。しかし、彼らの計算におけるビリアル比を確認したところ、本来-2となるべき値が大きく逸脱しており、定性的にも信頼できない理論計算であることが判明した。その原因は、当時の計算機性能の制約から分子構造の変分最適化は難しく、彼らは実験で得られたメチレン分子の原子配置を用いて計算したが、実はその実験精度が悪く、平衡位置から大きくずれていたためである。我々は、メチレン分子の基底状態電子配置から生じる、高スピンと低スピンの2状態に対して、電子相関を高精度で記述するMRCI (Multireference Configuration Interaction) 法の理論レベルで、原子配置の変分最適化を実行し、各スピン状態でビリアル定理を高精度で満たす電子状態計算の実施に成功した。図6に今回決定した準位ごとの最安定原子配置、表5に各項に分けたエネルギーとビリアル比を示す。

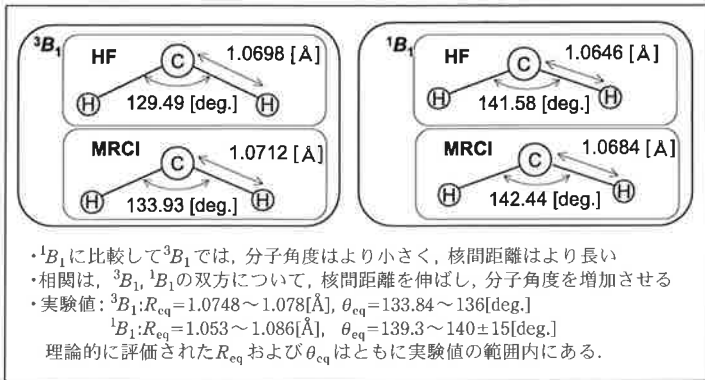


図6 理論的に評価されたメチレン分子の原子配置. 多電子の関与する分子系の正しい理解には、準位ごとに最適化した原子配置を用いることが肝要である。

表5 メチレン分子に対する我々のMRCI計算のエネルギー各項(上段). 下段には三重項と一重項のエネルギー差について、本研究のMRCI計算とDarveshらの計算結果の比較を示す. フント則の伝統的解釈を支持するDarveshらの結論は、ピリアル定理を満たさない計算( $-\Delta V/\Delta T=5.508 \neq 2$ )から導かれた. 高精度でピリアル定理を満たす我々のMRCI計算( $-\Delta V/\Delta T=2.0009$ )は、この結論の誤りを明らかにした.

状態	$E$	$T$	$V$	$-V/T$	$V_{ee}$	$V_{en}$	$V_{nn}$
${}^3B_1$	-39.1256	39.1229	-78.2488	2.0001	18.5764	-103.0217	6.1965
${}^1B_1$	-39.0733	39.0703	-78.1436	2.0001	18.5281	-103.8767	6.2051
${}^3B_1-{}^1B_1$ splitting	$\Delta E$	$\Delta T$	$\Delta V$	$-\Delta V/\Delta T$	$\Delta V_{ee}$	$\Delta V_{en}$	$\Delta V_{nn}$
Present study	-0.0526	0.0526	-0.1052	2.0009	0.0483	-0.1449	-0.0086
Darvesh ら <sup>8)</sup>	-0.0625	0.0150	-0.0775	5.1508	-0.0799	0.1425	-0.1401

本研究:  $-\Delta V/\Delta T=2.0009$   $\longrightarrow$   $\Delta V_{ee}>0, \Delta V_{en}<0, \Delta V_{nn}<0,$   
 エネルギー差に対するピリアル定理  $|V_{en}+V_{nn}|>|\Delta V_{ee}|,$   
 を高精度で満たしている  $\Delta E=\frac{1}{2}(\Delta V_{ee}+\Delta V_{en}+\Delta V_{nn})<0$

相関はHFの解釈を定性的には変えない

Darvesh ら:  $-\Delta V/\Delta T=5.1508$   $\longrightarrow$   $\Delta V_{ee}<0, \Delta V_{en}>0$   
 分子の幾何学的構造を理論的には最適化していないため  $\Delta V_{nn}(\text{exp.})<0$   
 正しい解釈に必要な計算精度には達していない

この計算によって、メチレン分子は伝統的解釈に従う例外ではなく、Davidson 以来の新解釈に従うことが示された<sup>25)</sup>. この研究は、自然の摂理を理解する上で、ピリアル定理が如何に重要であるかを如実に示す好例である。

磁性発現の根源を電子の交換相互作用の利得によるとする間違いを犯していた従来解釈は、量子力学の導入によって初めて登場する概念に基づいているという安心感から不幸にして30年近くも放置されてきた. しかし、我々の精密計算結果により、今や、従来解釈の誤りは明白となった. 異なるスピン状態の差異は、交換相関相互作用の違いに

起因するが、それは単に交換相互作用の利得として、電子間斥力の差異を生むだけではなく、電荷密度分布、ひいては、原子核配置の違い(ヘルマン・ファインマンの定理)を引き起こす点に、交換相関相互作用の本質がある. こうして、スピン状態ごとに、エネルギー成分(電子間、電子・原子核間、原子核間相互作用)のバランスが大幅に変化する. 多くの場合、従来解釈とは異なり、高スピン状態で電子間斥力は増加する. それを補って余りある、原子核・電子間引力の利得に、磁性発現を理解するための本質があったのである. 自然は、人間の想像以上に、高度に自己無撞着な変分計算を実行している、

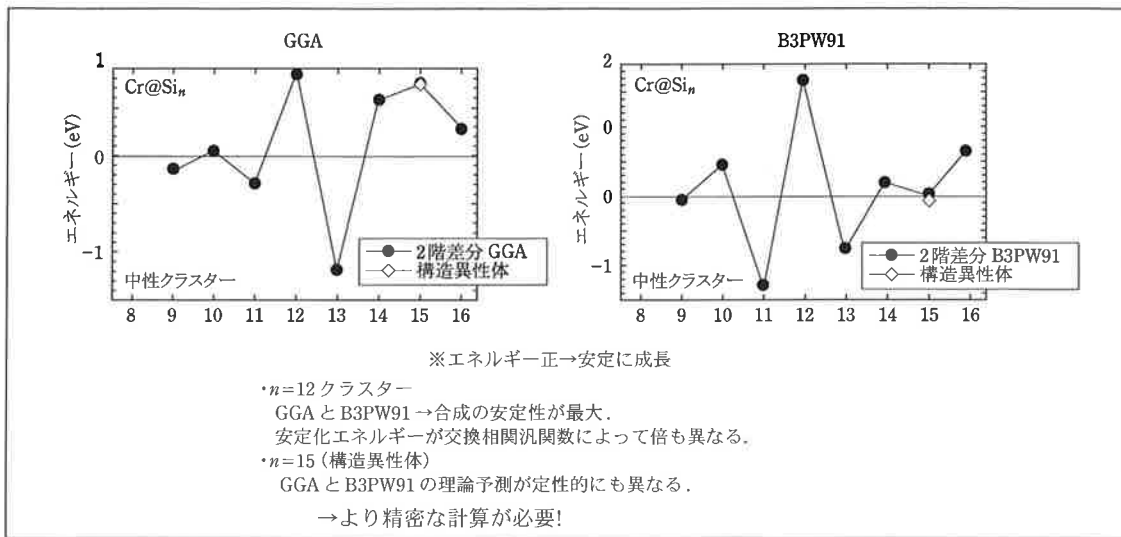


図7 Cr@Si<sub>n</sub> クラスタの安定性. 交換相関汎関数として GGA と B3PW91 (本文参照) を使用した場合の結果を比較すると, 安定化エネルギー (シリコン数に関する 2 階差分エネルギー) には大きな違いが見られることが分かり, より良い計算方策が必須である. 我々は  $n=12$  クラスタに対して, 拡散モンテカルロ法計算を適用し, 実験結果のない本クラスタに対する化学的安定性の結論を得た.

ということを中心に留めておいていただきたい. ピリアル定理が教えてくれたことである.

## Cr @ Si<sub>n</sub> クラスタ

炭素系ではフラーレンのように対称性の良いクラスタが見出されたが, シリコンのクラスタでは対称性の低いものしか知られておらず, 理論的および実験的な探索が行われた. 初めての成功例は, 筑波大の研究グループによる Cr@Si<sub>12</sub> の発見であった<sup>26)</sup>. 我々はさらに対称性の高いシリコンクラスタを理論的に探索し, 金属原子内包シリコンクラスタでフラーレン型等が安定化することを確認した. 密度汎関数理論を適用した計算を実施したが, 用いる交換相関汎関数  $E_{xc}$  に関する近似の種類によって全く異なる結果が得られることがある. Cr@Si<sub>n</sub> クラスタの計算結果を図7に示す<sup>27)</sup>. この図から探索範囲の全シリコン数に対して一般化勾配近似 GGA と B3PW91 ハイブリッド汎関数の結果が全く異なっていることが分かる. 例えば, 上記 12 量体に対して, GGA では 1eV, ハイブリッド汎関数では 2eV 程度の安定化エネ

ギー値 (正確には 2 階差分エネルギー;  $n=11, 13$  と比較したときの  $n=12$  クラスタの安定性を評価する指標) を示す. 理論的根拠の薄い交換相関汎関数  $E_{xc}$  の違いを克服して, このクラスタの化学的安定性に関する結論を出すため, 我々は拡散量子モンテカルロ法を適用した<sup>28)</sup>. その結果は B3PW91 の結果を支持した.  $E_{xc}$  をパラメーター化し, 実験結果を再現することはある程度可能であるが, 現象論に止まり, この例のように未知の物質の存在を予言する真の意味の第一原理計算にはなっていない (実験結果があればそれと合う方を使って満足するが, 実験結果がない場合には何も言えない. 15 量子体を見れば分かるように系の安定, 不安定の違いさえ発現する).

## 結語 — 十分条件を求めて —

スーパーコンピュータの進展により, クーロン多体系に対して, その必要条件であるピリアル定理を満たすレベルの精密な数値計算が可能となってきた. ピリアル定理を満たすことを基準にして各種理論の評価を試みる. ハートリー・フォッ

ク理論は電子相関を含まないが、自己無撞着な変分法ゆえにピリアル定理を原理的には満たしている。電子相関を扱う理論階層では、多電子波動関数法、グリーン関数法、密度汎関数法は、それぞれ独立した変分原理に基づき、原理的にはピリアル定理を満たし得る。しかしながら、その実装段階における不備のため、高精度にピリアル定理を遵守する手法は極めて限定的である。例えば、電子相関の扱いで典型的な配置間相互作用法は、軌道指数の非線形な最適化を伴わないため、ピリアル定理を高精度で遵守することは難しく、現行法では多配置自己無撞着場の方法 (MCSCF) の実施が必要となる。また、多くの化学者が利用している Gaussian プログラム<sup>29)</sup>では、密度汎関数法の結果でもピリアル比を表示しているが、これは DFT における本来のピリアル定理<sup>30)</sup>が実装されているわけではなく、注意が必要である (DFT の  $T$  と  $V$  は現実系の電子の運動エネルギーとポテンシャルエネルギーではない)。HOMO-LUMO ギャップを合わせるために電子の交換相関相互作用をいじり (最近よく使われるハイブリッド汎関数等)、(DFT のピリアル定理の意味で) ピリアル比が  $-2$  とならない場合には、ある意味では、現象論的模型と言わざるを得ないが、ピリアル定理を始めとして、正しい理論が満たすべき各種保存則の成立をチェックせずに第一原理計算と称する主張が横行していることは憂慮しなければならない。一方、前出のハイトラ・ロンドン模型のように、基本的に運動エネルギーを下げる (電子雲を広げる) ことで系の安定化を図るという自然の摂理に反するモデルは明らかに間違っている。このカテゴリーには、超伝導等のモデルに多用されているハバード模型が入る。こうして必要条件であるピリアル定理が、多体電子系量子力学理論の正当性の判断基準になることが明らかになった。最後に、クーロン力で相互作用する多体系を解く場合の十分条件とは何かを考える。交換相関相互作用は系の全エネルギーに比べて数値的には小さいが各種物性に対しては重要な働きをする。それを如何に精密に計算するかが十分条件に近づく唯一の方策である。

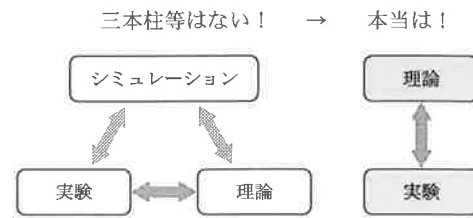


図8 多電子系の量子力学は極めて困難な問題であり、簡単な模型では、その重要な性質を正しく表せない。すでに理論は確立し、スーパーコンピュータを活用したシミュレーション計算は第3の方法であると喧伝されるが、いまだにそのような状況は達成されておらず、より基盤的な研究を推進し、それによって伝統的な理論の間違いを正し、信頼性ある新有用材料設計を実現する。

分子性結晶や強相間電子系などの固体周期系を取り扱う場合、計算手法の信頼性、すなわち、電子相関の取り扱いという観点で言えば、DFT 計算では、現在でも、汎用的な交換相関汎関数は開発されておらず、信頼性の高い結果を系統的に得ることは難しい。それに対して、電子相関の取り扱いに信頼性の高い各種電子相関法 (最も有望な手法の一つに量子モンテカルロ法が挙げられる) では、計算コストの問題から、ごく小さなサイズに限定された周期的シミュレーションセル内の電子状態計算に限定され、固体周期性の長距離部分を記述することはできないが、それでも、有限サイズ誤差を慎重に見積もったシミュレーションを行うことで、電子状態の重要な振る舞いを理解できることが多い<sup>31)</sup>。電子相関と有限サイズ補正の精緻な取り扱いが、第一原理計算分野における、今後に残された重要な課題のひとつである。20 世紀で基礎は確立し、21 世紀は応用の時代に入った、科学の方法論は従来の理論、実験にシミュレーションを加えた三本柱から構築される、等と喧伝する向きもあるが、事、量子多体問題に関しては図8に示すようにまだまだそんなことを言える状況ではなく、理論の基盤研究が重要な段階である。

本稿は、筆者が東北大学金属材料研究所に在籍当時からの、安原洋東北大学名誉教授 (平成 26 年逝去)、本郷研太 (現 北陸先端科学技術大学院大

学), 小山田隆行(現 横浜市立大学), 丸山洋平(現 仙台高等専門学校)の仕事の一部をまとめたものである。電子多体系の必要条件であるビリアル定理を遵守するレベルの数値計算法のアイデアは安原名誉教授が提案したもので, 今後の物性物理, 理論化学, 材料系理論計算が標準として採用すべきものである。本稿は磁性の根源理解に関して極めて重大な指摘を行うものであり, 完成するには本郷, 小山田, 丸山の全面的協力を得て完璧を期した。

#### 参考文献

- 1) J. C. Slater: Phys. Rev., **34** (1929), 1293-1322.
- 2) ロゲルギスト:『第五 物理の散歩道』中の日月問答, 岩波書店, (1972), pp.154-170 .
- 3) W. Heitler and F. London: Z. Phys., **45** (1927), 455-472.
- 4) 藤永茂:『分子軌道法』, 岩波書店, (1980), 『入門分子軌道法』, 講談社サイエンティフィック, (1990) .
- 5) K. Hongo, Y. Kawazoe and H. Yasuhara: Int. J. Quantum Chem., **107** No.6 (2007), 1459-1467.
- 6) T. Oyamada: unpublished.
- 7) V. Belosludov: unpublished.
- 8) G. Marc and W. G. McMillan: Adv. Chem. Phys., **58** (1985), 209-361.
- 9) W. Heisenberg: Z. Phys. **49** (1928), 619-636.
- 10) F. Hund: Z. Phys., **33** (1925), 345-371; F. Hund: Z. Phys., **34** (1925), 296-308; F. Hund: "Linienspektren und Periodisches System der Elemente", Springer-Verlag, Berlin, (1927).
- 11) E. R. Davidson: J. Chem. Phys., **41** (1964), 656-658; J. Chem. Phys., **42** (1965), 4199-4200.
- 12) J. Katriel and R. Pauncz: Adv. Quantum. Chem. **10** (1977), 143-185.
- 13) R. J. Boyd: Nature, **310** (1984), 480-480.
- 14) 久保亮五:『磁性』, 岩波書店, (1956)
- 15) K. Hongo, T. Oyamada, Y. Maruyama, Y. Kawazoe and H. Yasuhara: Mater. Trans., **48** No.4 (2007), 662-665.
- 16) K. Hongo, T. Oyamada, Y. Maruyama, Y. Kawazoe and H. Yasuhara: J. Magn. Magn. Mater., **310** No.2 (2007), e560-e562.
- 17) K. Hongo, Y. Kawazoe and H. Yasuhara: Mater. Trans., **47** No.11 (2006), 2612-2616.
- 18) T. Oyamada, K. Hongo, Y. Kawazoe and H. Yasuhara: J. Chem. Phys., **125** No.1 (2006), 014101-(1-9).
- 19) 本郷研太, 小山田隆行, 川添良幸, 安原 洋: 日本物理学会誌, **60** No.10 (2005), 799-803; 川添良幸, 本郷研太, 小山田隆行, 丸山洋平, 安原 洋: ナノ学会会報 **5** No.1 (2006) 3-7; 安原 洋, 小山田隆行, 本郷研太, 丸山洋平: 物性研究, 物性研究刊行会, **92** No.5-6 (2009), 483-493.
- 20) K. Hongo, R. Maezono, Y. Kawazoe, H. Yasuhara, M. D. Towler and R. J. Needs: J. Chem. Phys., **121** No.15 (2004), 7144-7147.
- 21) T. Oyamada, K. Hongo, Y. Kawazoe and H. Yasuhara: J. Chem. Phys., **133** No.16 (2010), 164113-(1-19).
- 22) J. S. Miller, J. C. Calabrese, H. Rommelmann, S. R. Chittipeddi, J. H. Zhang, W. M. Reiff and A. J. Epstein: J. Am. Chem. Soc., **109** (1987), 769-781.
- 23) M. Verdaguer, A. Gleizes, J. P. Renard and J. Seiden: Phys. Rev., **B29** (1984), 5144-5155.
- 24) K. V. Darvesh and R. J. Boyd: J. Chem. Phys., **87** (1987), 5329-5332.
- 25) Y. Maruyama, K. Hongo, M. Tachikawa, Y. Kawazoe and H. Yasuhara: Int. J. Quantum Chem., **108** No.4 (2008), 731-743.
- 26) H. Hiura, T. Miyazaki and T. Kanayama: Phys. Rev. Lett. **86** (2001), 1733-1736.
- 27) H. Kawamura, V. Kumar and Y. Kawazoe: Phys. Rev. **B70** (2004) 245433:1-10.
- 28) K. Hongo, V. Kumar, Y. Kawazoe and H. Yasuhara: Mater. Trans., **47** No.11 (2006), 2617-2619.
- 29) Gaussian, Gaussian Inc.
- 30) F. W. Averill and G. S. Painter: Phys. Rev., **B24** (1981), 6795; M. Levy and J. P. Perdew: Phys. Rev., **A32** (1985), 2010.
- 31) K. Hongo, M. A. Watson, R. S. Sánchez-Carrera, T. Iitaka and A. Aspuru-Guzik: J. Phys. Chem. Lett. **1** (2010), 1789-1794.

かわぞえ・よしゆき KAWAZOE Yoshiyuki

東北大学大学院理学研究科原子核理学博士課程修了, 東北大学で助手, 助教授, 金属材料研究所教授を務め, 現在は名誉教授として研究を継続。2013からロシア政府メカグラント・リーダー, アジア計算材料科学コンソーシアム創立, NPO科学協力学際センター主催。