

Atomistic Simulation of Materials

Alloy【合金】

Anfinsen's dogma【アンフィンセンのドグマ】

タンパク質の自然の立体構造がそのアミノ酸配列の情報と周りの溶媒条件のみで決まっていることを意味する。試験管内の実験で変性剤を添加することによりタンパク質をランダムコイルにした後に、変性剤を取り除くことによって、タンパク質が自然の立体構造へ折り畳まれることを示した、所謂アンフィンセンの実験の示唆するところに基づく。

Atomistic simulation【原子論的シミュレーション】

原子一個ずつをあらわにとりあつたシミュレーション。非原子論的シミュレーションには、固体や液体を連続体として扱う有限要素法などがある。

Density Functional Theory (DFT)【密度汎関数理論，密度汎関数法】

多電子からなる系のエネルギーは、基底状態に関する多電子の波動関数がわかれば厳密に計算できる。ところが P. Hohenberg と W. Kohn は、電子系の基底状態エネルギーが電子密度分布の普遍的な汎関数として記述されること、すなわち必ずしも多電子の波動関数を知る必要がないことを証明した(Hohenberg-Kohn の定理)。さらに Kohn と L.J. Sham は、交換相関(exchange-correlation)ポテンシャルと呼ばれる有効ポテンシャルの下で、互いにクーロン相互作用することなく独立に動く仮想的な電子の波動方程式(Kohn-Sham 方程式)を解くことによって、基底状態の電子密度分布とエネルギーを計算する、具体的な手順を示した。この一連の理論を密度汎関数理論と呼ぶ。実際には交換相関ポテンシャルの厳密な式は知られておらず、いくつかの近似式が使われている。もっともよく使われる近似が局所密度近似(Local Density Approximation)である。

Dipole【双極子】

中性の分子などで、あるひとつの向き生じた電荷の偏り。遠方から見たとき、その分子のつくる電場は、位置をわずかにずらした正負点電荷のペアがつくる電場とみなすことができる。

Dynamical mean-field theory【動的平均場理論】

自分以外の電子の分布を時間・空間平均した分布に置き換えて有効相互作用を計算する理論を、平均場理論と呼ぶ。このとき時間・空間揺らぎは無視される。これに対して動的平均場理論は、時間揺らぎまで考慮する平均場理論である。

Effective interaction【有効相互作用】

考えている電子以外の他の電子の効果を近似的に取り入れて簡単化した相互作用

Electron propagation【電子の伝播】

Electron spin【電子スピン】

素粒子としての電子が持つ磁気モーメントを決める自由度で、外部磁場との相互作用の符号や大きさに関係する。上向きと下向きの2つの状態を取り得る。

Electrostatic interaction【静電相互作用】

荷電粒子が電場から受ける相互作用、荷電粒子間のクーロン相互作用など

Energy gap【エネルギーギャップ】

量子化されたエネルギーのとび、すなわち量子力学的に安定な状態が存在しないエネルギー範囲。

Ensemble【統計的集団、アンサンブル】

問題とする系が時間発展とともに実現する状態の集合のこと。よく知られている統計的集団の例としては、粒子数・体積・エネルギー一定の系を表すミクロカノニカルアンサンブル、粒子数・体積・温度一定のカノニカルアンサンブル、化学ポテンシャル・体積・温度一定のグランドカノニカルアンサンブルなどがある。

Epitaxy【エピタキシー】

ある結晶が別の結晶の上で、原子配列の特定の方位関係を保って成長すること。吸着原子の量を精密に制御して一層ずつ結晶をエピタキシー成長させる手法を、分子線エピタキシー(Molecular Beam Epitaxy)という。

Exchange and correlation【交換と相関】

電子のようなフェルミ粒子では、位置、運動量、スピンなどで指定される単一の状態を2粒子が同時に占めることができない(パウリ原理)。この量子力学的な制約のため、同じ向きのスピンを持った電子は空間的に遠ざかりあって分布し、一様分布する場合に比べてクーロン斥力が減少する。その結果生じるエネルギーの利得分を、交換エネルギーと呼ぶ。スピンの異なる2電子の場合には交換エネルギーの利得はないが、クーロン斥力をなるべく減らすように分布することで、やはり一様分布する場合に比べてエネルギーが減少する。パウリ原理とは無関係にクーロン相互作用によって電子が互いに遠ざかりあって分布する効果を電子相関効果、そのエネルギー利得を相関エネルギーと呼ぶ。

Excited state【励起状態】

基底状態(Ground state)とは独立な、エネルギーの高い量子力学的状態。

Generalized-ensemble algorithm【拡張アンサンブル法】

自然界には存在しない人工の(一般化された)アンサンブルに基づいた計算機シミュレーション手法のこと。ポテンシャルエネルギー空間上のランダムウォークを実現することによって、シミュレーションがエネルギー極小状態に留まってしまふのを効率よく避けることができる。これによって、従来の自然のアンサンブルを再現するシミュレーションでは越えることが困難な高いエネルギー障壁をも越えて幅広い状態空間をサンプルすることを可能にする。

Ground state 【基底状態】

量子力学的状態のうち，絶対零度でもっとも安定な（エネルギーの低い）状態。

Image potential 【鏡像力ポテンシャル】

金属の表面に電子やイオンなどの荷電粒子が近づくと，金属表面をはさんで反対の位置（鏡像位置）に逆の電荷を持った粒子が存在するかのような引力ポテンシャル，すなわち鏡像力ポテンシャルを感じる。

Island 【島】

平坦な表面に原子を吸着させてエピタキシー成長させる過程で生じる，吸着原子の集合体。

Kinetic energy 【運動エネルギー】

Kinetic Monte Carlo simulation 【動的モンテカルロシミュレーション】

通常のモンテカルロシミュレーションは熱平衡分布を実現させる手段にすぎず，系の時間発展には意味がないとされる。動的モンテカルロシミュレーションは，確率過程の頻度に意味を持たせ，ダイナミクスを近似的に取り扱えるようにした手法。

Local Density Approximation (LDA) 【局所密度近似】

密度汎関数法の基礎方程式(Kohn-Sham 方程式)にあらわれる交換相関ポテンシャルが，一様な電子密度をもった系の交換相関ポテンシャルと同じであるとする近似。この近似に基づけば，交換相関ポテンシャルの強さは，その位置での局所的な電子密度だけの関数になるため，局所密度近似と呼ばれる。局所密度近似は単純でありながら多くの物質で非常に良い計算結果を与えることが経験的に示されており，またKohn-Sham 方程式の数値解法がきわめて簡単になるため，広く使われている。

Local interaction 【局所相互作用】

ある瞬間の粒子の位置だけで決まる相互作用。 非局所相互作用 (Non-local interaction)

Mesoscopic 【メソスコピックな】

巨視的(macroscopic)と微視的(microscopic)の中間の空間スケールのこと。個々の原子や結晶構造はさほど問題にならないほど大きい，電子の量子力学的な性質は顕著に観測されるほど小さい空間スケール。

Molecular simulation algorithm 【分子シミュレーション手法】

モンテカルロ法や分子動力学法に基づいて，分子の集合の様々な統計的集団を再現する計算機シミュレーションの方法のこと。最も基本的な形において，モンテカルロ法はカノニカルアンサンブル、分子動力学法はミクロカノニカルアンサンブルをそれぞれ再現する。

Non-local interaction 【非局所相互作用】

ある瞬間の粒子の位置だけでは決まらない相互作用。 局所相互作用 (Local interaction)

Optical absorption【光学吸収】**Potential energy**【ポテンシャルエネルギー】

位置エネルギー。電子論ではほとんどの場合、原子核と電子、あるいは電子と電子の間のクーロンエネルギーのこと。

Protein【タンパク質】

生命現象を司る最も基本的な分子の一つ。アミノ酸が鎖状につながったもので、自然界に存在する最も複雑な分子とすることができる。細胞内では、DNA 核酸の塩基配列の情報がタンパク質のアミノ酸配列の情報に翻訳されて、タンパク質が合成される。

Protein folding problem【タンパク質の折り畳み問題】

タンパク質が自然界で生物学的機能を発揮するためには、ある一定の形（立体構造）を持っている必要があるが、ランダムコイルに変性したタンパク質がどのような物理的原理に従って折り畳み、自然の立体構造に到達するかを研究する問題のこと。

Self-assembly【自己組織化】

固体表面への原子・分子吸着や高分子の水溶液などで、条件をうまく選ぶと分子が自発的に集合し、構造体（組織）を形成すること。

Self-energy【自己エネルギー】

一個の電子のもつエネルギーのうち、他の電子からのクーロン相互作用を起源とする部分。

Strongly correlated materials【強相関物質】

高温超電導体、遷移金属酸化物、ある種の分子性固体など、強い電子相関(electron correlation, 'Exchange and correlation'の項を参照)によって特異な電子物性を示すと考えられている物質。

Structural properties【構造物性】

結晶構造や結晶構造に直接関係する物質の性質。体積弾性率、弾性定数など。

van der Waals interaction【ファン・デル・ワールス相互作用】

電子密度の量子力学的なゆらぎにより、原子や分子の電荷が（瞬間的に）偏ることで生じる引力相互作用。例：希ガス原子間の引力相互作用。

Weakly correlated materials【弱相関物質】

何らかの一電子近似（平均場近似）がよく成り立つ、電子相関の弱い通常の物質。
強相関物質(Strongly correlated materials)