

Hofstadter の蝶

志村昂輝

2026 年 1 月 8 日

一級品として表れる諸々の技術や芸当は、その自由自在さで我々を驚かせますが、その背後には膨大なルールと型があります。研究も例外ではなく、よりよい研究で発揮される個性はまずある一定の型やルールを身に着けた後に生まれています。研究における型を身に着ける最初的手段は、例えば学部生のうちには標準的な教科書を読んで知識を増やすことですが、これは全くもって序の口にすぎず、一人前となるためには配属された研究室で師弟関係を結び、その研究室が売りとするスタイルを吸収していかなければなりません。

ところで問題となるのが、この研究室の売りは一朝一夕に掴めるものではないということです。まず師弟関係の下で、弟子として師匠の警咳に接しているかどうか、素人とそうでない人とを分ける最初の分水嶺となります。将来自分の同業者になると見込んだ人間に対して、師匠はその分野の共通言語や常識を叩き込みますが、一人前とみなされるにはその量と厳しさをもってしても数年を要します。修士と博士合わせて5年かかるのは、この修行が並大抵のものではなく、素人から業界人へと決定的に変化させる重大なプロセスであることを示唆しているでしょう。

本稿は以上2つの困難を克服するために作成されています。つまり、加藤研内部で共有されている重要だがインアクセシブルな技術をまとめ、研究を始める際に典型的に出くわす困難とその対処法を示すこと、及び内容を極力端的に整理し、一学生から研究者になるための経路を効率よく整備することです。ただし、私の特殊なバックグラウンドに起因する限界について読者にお断りしなくてはなりません。まず加藤雄介研究室で扱われるテーマと技術は広く、私がここで示す内容はそのほんの一部にすぎないことです。もとより本研究室の強みは数値計算よりも微分方程式の求解や特殊関数の操作といった解析計算に存在しており、本稿の内容はむしろ傍流といえるかもしれません。主流といえるそちらの技術については、読者の皆様が教員との長い議論や共同研究の中で少しずつ身に着けたり、あるいは今後誰かが同様にドキュメント化してくれることを期待いたします。

第1章では、数値計算や解析の作業に適したプログラミング言語の紹介と簡単な文法の解説、及び環境構築の仕方について述べます。

強相関物質の研究スタイルにはかなり決まった型が存在していますが、出発点として死活的に重要なのがハミルトニアン構築とその対角化です。第2章では、強束縛模型について軽く説明した後、ハミルトニアンを実装する方法、及びその対角化の方法について述べます。ハミルトニアン対角化により得られた固有値がエネルギー分散ですが、実際に研究したり論文を書いたりするうえで必要なバンド図やフェルミ面の書き方についてもここで解説します。

第3章ではグリーン関数の実装方法について述べます。グリーン関数の虚部から得られる状態密度の描画方法もここで述べます。

第1章 プログラミング言語の選択と環境構築

1.1 数値計算向きの言語 (C++, Fortran)

数値計算という目的に絞ってもプログラミング言語の選択肢は多岐にわたりますが、物性物理で格子模型や多体問題を扱う場合、計算量は系の大きさや自由度の増加とともに急激に増大します。したがって、実行速度やメモリ配置を意識する必要があり、C++やFortran が便利な選択肢の一つとして挙げられます。

1.2 補助としての言語 (Python)

数値計算を補助する言語として Python3 も非常に有用です。C++やFortran に比べると、Python3 はライブラリが充実していて、可視化やデータ解析を迅速に行える利点もあります。¹ 型指定もないので、簡単な計算を行いたいだけなら C++やFortran よりも圧倒的に便利です。

Python3 はスクリプト言語であり、実行速度やメモリ制御の面ではコンパイル型言語に劣るために、大規模数値計算の中核を担うのには不適切である場合もあります²。しかしながら、C++やFortran で実行した本計算の出力を Python で読み込み、プロットや解析を行うといった使い方は広く行われています。

1.3 近年注目されている言語 (Julia)

¹可視化には matplotlib, 数値計算やデータ解析には numpy や scipy といったライブラリが便利でしばしば使われます。

²厳密には計算効率を上げるための工夫が様々に存在するようですが、その工夫に割くコストを考えると最初から C++やFortran で実装した方がよいという意見が専門家の間では散見されます。

関連図書

- [1] Hofstadter, Douglas R., Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields, Phys. Rev. B **14**, 2239(1976).
- [2] C R Dean 1, L Wang, P Maher, C Forsythe, F Ghahari, Y Gao, J Katoch, M Ishigami, P Moon, M Koshino, T Taniguchi, K Watanabe, K L Shepard, J Hone, P Kim, Hofstadter's butterfly and the fractal quantum Hall effect in moiré superlattices, Nature 497(7451), (2013)