

(様式 2)

議事録番号

提出 2018 年 1 月 11 日

会合議事録

研究会名：理論研究会

日 時：平成 29 年 12 月 26 日 (火) 12:50~18:00

場 所：東京理科大学葛飾キャンパス

出席者：坂井徹 (兵庫県立大)、筒井健二 (量研)、遠山貴己 (東京理科大)、Alfred Baron (理研)、東後篤史 (京大)、梅本幸一郎 (東工大)、松田巖 (東大)、石井史之 (金沢大)、石井賢司 (量研)、野村拓司 (量研)、池野豪一 (大阪府立大)、曾田繁利 (理研)、福田竜生 (原子力機構)、是常隆司 (東北大)、Lee Chi Cheng (東大)、Lee Youg Ting (東大)、福田将大 (東大)、宮崎遥 (東京理科大)、諏佐匠哉 (東京理科大)、竹内勇輝 (東京理科大)、松林幸宏 (東京理科大)、和田一啓 (東京理科大)、佐々木広太 (東京理科大)、保科安利 (東京理科大)、岸本政徳 (東京理科大)、兵頭俊夫 (KEK)、松下雄一郎 (東大)、杉本貴則 (東京理科大)、森田克洋 (東京理科大)、新城一矢 (東京理科大)

計 30 名

議題：放射光実験と計算科学の協奏による物性科学の進展

議事内容：

オープニング

遠山：放射光技術の進歩に伴って、放射光実験を解析するための理論計算も複雑化しており、実験グループと理論グループの連携はもとより、京コンピューターを中心とする大規模計算物質科学との連携が望まれる状況となっている。とくに、最近になってポスト京コンピューターを利用するための重点課題プロジェクトが始まっており、放射光実験の解析と連携して新しい研究領域を開拓するいい機会となっている。そのような放射光実験及び計算物質科学の連携につながるような理論解析の紹介をしていただくとともに、今後の連携への展望について、各講演者から提案していただきたい。本ワークショップでは、とく

に最近ホットなトピックスとして、「フォノン」「ディラック・フェルミオン」「強相関電子系」に焦点をあて、計算科学と SPring-8 の連携研究の現状と今後の展望を探る。

この後、以下のプログラムに沿って、上述の「フォノン」「ディラック・フェルミオン」「強相関電子系」という 3 つのテーマについて、それぞれ 1 つずつセッションを行い、SPring-8 の実験成果とそれにマッチする理論解析・数値解析の方法を講演していただくとともに、現状と今後の展望について討論した。

プログラム

12:50-13:00 Opening

《Phonons》

13:00-13:25 "Toward proper modeling of phonon spectral response" A.Q.R. Baron

(SPring-8, RIKEN)

13:25-13:50 "Software development of phonon calculation for thousands of users" Atsushi Togo

(Kyoto Univ.)

13:50-14:15 "First-principles study and materials design of conventional superconductivity" Takashi Koretsune

(Tohoku Univ.)

14:15-14:40 "Liquid iron alloys with light elements at the outer core conditions by first principles" Koichiro Umemoto

(ELSI, TIT)

このセッションでは、講演者の都合により、最初の 2 つの講演の順序を入れ替えた。

14:40-15:00 Break

《Dirac electrons》

15:00-15:25 "Novel Dirac Fermions in Borophene" Iwao Matsuda

(ISSP, Univ. of Tokyo)

15:25-15:50 "Broken Dirac cones and new understanding of ARPES spectra in graphene" Chi-Cheng Lee

(ISSP, Univ. of Tokyo)

15:50-16:15 "First-principles study of topological surface states and spin textures" Fumiyuki Ishii

(Kanazawa Univ.)

16:15-16:35 Break

《Correlated electrons》

16:35-17:00 "Resonant inelastic x-ray scattering experiments on correlated electron systems" Kenji Ishii

(Spring-8, QST)

17:00-17:25 "Resonant inelastic x-ray scattering studies with a focus on low-energy magnetic

excitations in cuprates and iron pnictides" Takuji Nomura

(Spring-8, QST)

17:25-17:50 "Ab-initio Configuration Interaction Calculations for RIXS-MCD in Fe oxides" Hidekazu Ikeno

(Osaka Prefecture Univ.)

17:50-18:00 Closing

討論の議事録を見出しとともに以下に示す。

東後：「数千人規模のユーザに向けたフォノン計算コードのソフトウェア開発」
フォノン計算コード phonopy は多数のユーザを抱え、ユーザサポートを含めたソフトウェア開発を維持するのは容易なことではなくなった。発表者の経験をふまえ、モダンなツールやインターネットサービスを利用することで上手にソフトウェア開発を進める方法について述べ、放射光実験の理論解析に応用していただくよう要望した。

A. Q. R. Baron：「フォノン応答の放射光実験と理論解析・計算科学の連携」

SPring-8 の実験研究者の立場として、理論解析・計算科学には、実験結果の確認（裏づけ）、理解、予測の3点を期待している。これまでの経験から、放射光実験の精度等の高度化だけでなく、計算手法や精度の高度化という両サイドからの努力のおかげでインパクトの高い成果が出た例がいくつもある。例えば、銅酸化物や鉄ニクタイト等の高温超伝導体のフォノンダイナミクスの解明があげられる。今後もこのような、実験・理論（計算）の強力な連携体制を継続することが重要である。

是常：「従来型超伝導体の第一原理計算と物質設計」

新しい従来型超伝導体の理論設計を目指すための研究を二つ紹介した。一つは従来型超伝導体の転移温度をクーロン相互作用まで含めて完全に第一原理から計算する手法についてであり、この手法を硫化水素に対して適用すると、従来考えられていなかった様々な効果を考慮することで実験の転移温度が精度良く再現できることが分かった。一方、データベース上の物質に対しての超伝導転移温度の系統的計算についても紹介し、その結果が機械学習できつつあることを示した。

梅本：「第一原理動力学法を用いた地球外核条件下における液体鉄合金の研究」
地球の外核は液体鉄と軽元素との合金で構成されているが、軽元素の種類と量は未だに確定されていない。これらを確定するための有力な手段として、外核温度圧力条件下における液体鉄合金の密度と音速を、地震波測定と照らし合わせるという方法がある。ここでは、液体鉄合金の密度と音速を第一原理分子動力学法を用いて計算し、実際に外核に存在する軽元素の種類と量を拘束する方法により、放射光実験と照合できる可能性を示した。

松田：「ボロフェンとディラックフェルミオン」

我々は金属表面上にホウ素の単原子シートの作成し、その電子構造を放射光光電子分光法で調べた。本シートにおいてディラックコーンのバンド構造が確認され、計算科学の協力によってその起源が明らかとなった。放射光と計算科学の一つの理想的な連携になったと考えられる。

C. -C. Lee：「バンド計算の高度化によりディラックコーンの破れを立証」

ブリルアンゾーンエッジにおけるバンドの折り返しをしない独自のバンド計算法を確立し、グラフェンの ARPES で観測されているディラック・コーンの破れ

をうまく説明できる計算結果を示した。

石井（史）：「トポロジカル表面状態とスピン構造の第一原理計算」

近年、スピン・角度分解光電子分光実験手法によって、表面における空間反転対称性の破れによって生じるスピン分裂が、貴金属表面からトポロジカル絶縁体表面まで幅広く観測されており、その実験手法の重要性が高まっている。本講演では、第一原理計算によって、表面におけるスピン分裂、運動量空間におけるスピン構造の計算手法と、そのトポロジカル絶縁体表面、ビスマス表面への応用例を紹介した。

石井（賢）：「相関電子系の共鳴非弾性 X 線散乱実験」

共鳴非弾性 X 線散乱の特徴を紹介した後、電荷ドーブされた銅酸化物超伝導体における電荷励起について、理論計算との対比を行いながら実験による研究結果を報告した。

野村：「低エネルギー磁気励起に焦点を置いた銅酸化物と鉄ニクタイトにおける共鳴非弾性 X 線散乱の研究」

遷移金属吸収端における共鳴非弾性 X 線散乱 (RIXS) について、低エネルギーの磁気励起に焦点を当てて講演した。具体的には、銅酸化物 (La_2CuO_4) と鉄ニクタイト (RFeAsO) における L 吸収端 RIXS によるマグノン励起、銅酸化物 (La_2CuO_4) における K 吸収端 RIXS による 2 マグノン励起の理論計算結果を示し、実験結果とよく整合することを説明した。RIXS スペクトルの理論計算を第一原理計算に基づいて大幅に精密化できることを報告した。

池野：「Fe 酸化物における RIXS-MCD の第一原理配置間相互作用計算」

共鳴 X 線非弾性散乱の磁気円二色性 (RIXS-MCD) は物質の磁気構造を調べるための強力な実験手法となり得る新しい分光法である。本研究では、RIXS-MCD から電子状態と磁気構造を抽出するための多電子系電子状態計算手法を開発し、弱強磁性 Fe 酸化物の RIXS-MCD 解析へ応用した例について紹介した。

坂井：「放射光と計算科学の連携についての展望」

フォノンダイナミクス、ディラックフェルミオン、強相関電子系の研究における、SPring-8 放射光と京コンピュータを中心とする計算科学の連携について、いくつか理想的な成果を紹介していただくとともに、今後の具体的な連携の可

能性について提案していただいた。高温超伝導の例を見ても、放射光実験と計算科学の両面からの高度化がうまくかみ合うことにより、インパクトの高い成果があがることも立証された。今後は、本ワークショップで紹介された高度化された計算ソフトを活用するとともに、さらに高度化する放射光実験と連絡を密にとり、より強力な連携体制を構築していきたい。そのためにも、SPring-8 II 計画とポスト京プロジェクトの連携融合が重要な鍵となる。