

提出 2018 年 8 月 28 日

会合議事録

研究会名：理論研究会

日 時：平成 30 年 8 月 27 日（月）10：05～17：00

場 所：SPring-8 萌光館

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）、松田巖（東大）、石井賢司（量研）、野村拓司（量研）、曾田繁利（理研）、石河孝洋（NIMS）、安居院あかね（量研）、山上浩志（京都産業大）、岡田耕三（岡山大）、宮脇淳（東大）、小口多美夫（阪大）、魚住孝幸（大阪府立大）、保井晃（JASRI）、稲見俊哉（量研）、櫻井吉晴（JASRI）、依田芳卓（JASRI）、James Harries（量研）、池本夕佳（JASRI）、篠原康（東大）、池田隆司（量研）、中田謙吾（JASRI）、藤田全基（東北大）、筒井智嗣（JASRI）、谷田肇（JAEA）、町田晃彦（量研）、雀部矩正（JASRI）、河村直己（JASRI）

計 29 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：

はじめに

坂井：

SPring-8 放射光実験と連携できるような理論、及び京コンピューターやポスト京コンピュータープロジェクトの成果を紹介し、今後の実験と理論・計算科学の連携協力を推進する目的で、本研究会を開催します。SPring-8 の実験研究者たちに参加していただくために、SPring-8 においてシンポジウムのサテライト研究会の形で開催することを SPRUC から認めていただきました。まだ理論研究会及び SPRUC に登録してない方は、できるだけ登録してください。

このあと、SPring-8 放射光と深く連携できそうな理論・計算科学の最新の成果並びに、理論・実験の連携の成功例について 3 つのセッションを行い、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

10:05-10:10 はじめに 坂井 徹 (兵庫県立大学)

座長：櫻井 吉晴 (JASRI)

10:10-10:40 篠原 康 (東京大学)

「密度汎関数理論に基づいた電子ダイナミクスシミュレーションで探る
電子状態・電子格子相互作用」

10:40-11:10 松田 巖 (東京大学)

「X線自由電子レーザーによる元素選択的非線形光学応答の検出」

11:10-11:40 小口 多美夫 (大阪大学)

「Theoretical prediction of the RIXS spectra of Mn₂VAl」

11:40-12:10 山上 浩志 (京都産業大学)

「希土類およびアクチノイド系列におけるイオン半径の第一原理的計
算と予測」

昼食

座長：小口 多美夫 (阪大)

13:10-13:40 石河 孝洋 (物質・材料研究機構)

「水素化物高温超伝導体の探索と放射光実験への期待」

13:40-14:10 宮脇 淳 (東京大学)

「軟X線 RIXS の新しい方向 一回折との融合」

14:10-14:40 石井 賢司 (量子科学技術研究開発機構)

「共鳴非弾性X線散乱による銅酸化物の電荷・スピン励起の観測」

14:40-15:00 遠山 貴巳 (東京理科大学)

「銅酸化物高温超伝導体のストライプ秩序と RIXS」

休憩

座長：遠山 貴巳 (東理大)

15:20-15:50 魚住 孝幸 (大阪府立大学)

「不純物模型に基づく X 線分光解析の進展と偏光依存性の理論」

15:50-16:20 岡田 耕三 (岡山大学)

「バナジウム酸化物の内殻光電子分光理論」

16:20-16:40 野村 拓司 (量子科学技術研究開発機構)

「LaCoO₃ における磁性相関と共鳴非弾性 X 線散乱の理論」

16:40-17:00 筒井 健二 (量子科学技術研究開発機構)

「一次元引力型ハバード模型に対する RIXS スペクトルのクラスター計算」

討論の議事録を見出しとともに以下に示す。

篠原：「密度汎関数理論に基づいた電子ダイナミクスシミュレーションで探る電子状態・電子格子相互作用」

レーザー光源技術の進展に伴って、ピコ秒を切ってフェムト秒の量子ダイナミクスを固体中に誘起することが可能となった。こうして誘起された量子ダイナミクスを X 線領域で時間分解測定ができれば、時間軸の導入に伴う豊富な情報が既存の X 線分光に付加され、既存分光では見ることが出来なかった現象を通じて理解の深化が期待される。こうした時間分解 X 線分光の理論的記述に向けた、密度汎関数理論に基づいた電子ダイナミクスシミュレーション法を用いた取り組みについて紹介した。

松田：「X 線自由電子レーザーによる元素選択的非線形光学応答の検出」

X 線自由電子レーザー施設 SACLA を用いた軟 X 線の非線形光学効果 (第 2 次高調波発生) を観測することに成功した。また光物性の量子力学計算によって、この信号発生は内殻共鳴効果が 2 重に発生することで増幅されることも明らかにした。非線形光学効果は物質の界面や対称性の破れた特殊な秩序を観測できるため、元素選択性を持つ軟 X 線を組み合わせた本手法により、今後、界面現象を元素選択的に観測できると考えられる。今後、トポロジカル絶縁体と磁性体の界面で起きる新現象の解明を計画しており、理論・計算科学との密接な連携に期待したい。

小口：「Theoretical prediction of the RIXS spectra of Mn₂VAl」

Heusler 合金は、基本組成 X₂YZ (X, Y=遷移金属元素、Z=sp 典型元素) を有する三元金属間化合物で、X の一つのサイトが空孔になったハーフ Heusler 合金 XYZ、X が二種の元素となる四元 Heusler 合金 XX'YZ を含めると莫大な数の組み合わせ

が可能で、磁性、熱電性等々多岐にわたる物性を呈することから、新規物質探索・機能開拓の対象として注目されている。最近、フェリ磁性を有する Mn_2VA_1 に対して共鳴非弾性 X 線散乱 (RIXS) の実験が行われ、そのハールメタル性を含む電子状態の議論がなされている。ここでは、第一原理 DFT 計算の範囲で RIXS スペクトルを求め、実験スペクトルの解釈を試みた。今後の実験との連携により、その有効性を明らかにしたい。

山上：「希土類およびアクチノイド系列におけるイオン半径の第一原理的計算と予測」

最近、SPring8 で 重元素の Es のイオン半径の測定が世界で初めて観測され、そのイオン半径が収縮していることがわかった。第一原理を基にした解析で、ある仮定のもとで定量的に説明と予測することができることを見つけた。その仮定の下で、希土類元素のイオン半径も定量的に解釈することができた。実験・計算科学の連携による成功例である。

石河：「水素化物高温超伝導体の探索と放射光実験への期待」

2015 年に高圧力下における硫化水素で 203 K の高温超伝導が発見され、他の水素化物でも加圧によって同様の超伝導性が得られると期待されている。水素化物は圧力誘起による分解・生成や構造変化が多様に起こるため、放射光実験を利用した結晶構造特定が超伝導を探索する上で不可欠となる。今後の計算による新物質設計と放射光実験による検証の可能性について提唱した。

宮脇：「軟 X 線 RIXS の新しい方向 一回折との融合」

SPring-8 BL07LSU の共鳴非弾性軟 X 線散乱 (SX-RIXS) ステーションでの分光器回転の開発が完了し、RIXS 分光器を用いた (回折光をエネルギー分解した) 回折実験が可能となった。そこで、本装置を用いた RIXS の新たな方向として、周期構造を捉える共鳴 X 線回折と電子状態を調べる RIXS を融合させた非弾性散乱の回折の可能性、実証について紹介した。理論・計算科学のサポートを期待する。

石井：「共鳴非弾性 X 線散乱による銅酸化物の電荷・スピン励起の観測」

共鳴非弾性 X 線散乱による電子ドープ型銅酸化物超伝導体の実験的研究として、電荷・スピン励起の電子ドープ量依存性、還元アニール効果の二点に注目して発表した。とくに還元アニール効果については、新しい進展につながる可能性があり、理論・計算科学の連携に期待したい。

遠山：「動酸化物高温超伝導体のストライプ秩序と RIXS」

最近、銅吸収端の共鳴非弾性 X 線散乱 (RIXS) によってストライプ秩序が存在する場合の磁気励起の特徴が明らかとなってきた。その特徴を理論的に明らかにするため、銅酸化物高温超伝導体を記述する $t-t'$ - J 模型を採用し、ストライプ秩序が基底状態として出現する梯子型格子系に対して、動的密度行列繰り込み群法によって動的スピン構造因子の計算を行ったところ、実験結果をうまく説明することに成功した。

魚住：「不純物模型に基づく X 線分光解析の進展と偏光依存性の理論」

SPring-8 との連携を目指して、高分解能スペクトル微細構造解析のための理論枠組みとして動的平均場を考慮した不純物模型による光電子分光解析について最近の具体例を交えて紹介した。また、偏光活用の観点から共鳴 X 線発光分光における遷移過程の既約テンソル分解表式とその応用について議論した。

岡田：「バナジウム酸化物の内殻光電子分光理論」

内殻光電子分光法は局所的な電子状態を調べる手段として長い歴史を持つが、近年では大域的な電子状態に関する情報を得る手段としてもその有用性が確立しつつある。ここでは、主に NaV₂O₅ や V₂O₂ の V2p 内殻スペクトルに着目し、拡張ハバード模型による数値計算結果を基にスペクトル形状と電子状態の関連について議論した。

野村：「LaCoO₃ における磁性相関と共鳴非弾性 X 線散乱の理論」

古くから研究されている LaCoO₃ について、最近の中性子実験により、新奇な強磁性が発見された。これを、独自の理論模型の計算により説明することにより、インパクトの高い実験との共同研究に結びつけるとともに、SPring-8 を利用した RIXS によってメカニズム解明する方法について紹介した。

筒井：「一次元引力型ハバード模型に対する RIXS スペクトルのクラスター計算」

一次元引力型ハバード模型の基底状態において、相互作用強度に依存して超伝導状態や電荷密度波状態等が実現される。それら状態に対する共鳴非弾性 X 線散乱スペクトルを数値的厳密対角化法による大規模数値計算により求め、その特徴を系の素励起の 1 つである電荷励起スペクトルと比較しながら議論した。

SPring-8 放射光を利用した RIXS により得られるスペクトルを理論予測し、今後

の実験結果の解釈への重要な指針を示した。

坂井：

SPring-8 放射光と京コンピューター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。今後は、本ワークショップで紹介された高度化された大規模計算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。

*A4 縦

*会合で使用した 資料（差し支えないもの）を添付してください。
特にありません。