

(様式 2)

議事録番号

提出 2020 年 1 月 10 日

## 会合議事録

研究会名：理論研究会

日 時：令和元年 12 月 26 日（木）12：55～17：30

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）、遠山貴己（東京理科大）、石井賢司（量研）、兵頭俊夫（KEK）、星健夫（鳥取大）、福島孝治（東京大学）、若林裕助（東北大学）、山地洋平（東京大学）、新城一矢（東京理科大学）、和達大樹（兵庫県立大学）、筒井健二（量研）、瀬戸山寛之（パナソニック）、池内一成（パナソニック）植木悠二（量研）、松野信也（旭化成）、田中佳織（University of Saskatchewan）、Rasoul Ghadimi（東京理科大）、杵渕幸（藤田医科大）、井垣恵美子（パナソニック）、上村かおり（北九州高専）、奥島駿（量研）、大道正明（量研）、山寄悟（LIXIL）、杉本貴則（東京理科大）、曾田繁利（理研）、渡辺弘達（東工大）、望月出海（KEK）、土屋公亮（東京理科大）、堀真弘（東京理科大）駒野目ゆう子（東京理科大）、渡邊拓海（東京理科大）、野々村樹（東京理科大）、後藤啓嗣（東京理科大）、大塚健太郎（東京理科大）、諏佐匠哉（東京理科大）、田中和幸（鳥取大）

計 36 名

議題：放射光実験と計算科学の新たな連携を目指して

議事内容：

はじめに

遠山：

放射光等の量子ビームを用いた表面・界面・ナノ系・強相関係の多彩な実験データを精密に解析し、その背後のある本質を見極める理論研究が求められている現在、従来の第一原理計算や多体電子系計算による大規模数値シミュレーションのほか、機械学習やデータ駆動科学による研究が大きく発展しています。

本研究会ではこの新しい展開とともに、今後の放射光実験との新たな連携について様々な角度から議論することで放射光実験と計算科学の連携・交流を促進したいと思います。まだ理論研究会及び SPRUC に登録していない方は、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

12:55-13:00 はじめに 遠山貴巳（東京理科大学）

### セッション1 【陽電子回折による表面構造解析と超並列データ駆動科学】

座長：遠山 貴巳

13:00-13:30 兵頭俊夫（KEK）

「全反射高速陽電子回折（TRHEPD、トレプト）による結晶表面の原子配列解析」

13:30-14:00 星 健夫（鳥取大）

「2次元物質構造測定データ解析における AI/HPC 融合」

14:00-14:30 福島孝治（東京大学）

「データ駆動科学のための（非マルコフ連鎖）モンテカルロ法」

## 休憩

### セッション2 【機械学習を用いた表面構造・スペクトル・波動関数解析】

座長：星 健夫

14:45-15:15 若林 裕助（東北大学）

「表面 X 線回折による界面構造解析---解析手法の進展」

15:15-15:45 山地 洋平（東京大学）

「ボルツマン機械による銅酸化物高温超伝導体の自己エネルギー解析」

15:45-16:00 新城一矢（東京理科大学）

「機械学習を援用した1次元拡張ハバードモデルにおける光励起状態の研究」

休憩

セッション3 【放射光による物性科学の新展開】

座長：坂井 徹

16:15-16:45 和達大樹（兵庫県立大学）

「X線による元素分解超高速スピンドイナミクス観測」

16:45-17:15 石井賢司（量子科学技術研究開発機構）

「共鳴非弾性X線散乱実験の現状と将来」

17:15-17:30 遠山貴巳（東京理科大学）

「共鳴非弾性X線散乱理論の現状と将来」

討論の議事録を見出しとともに以下に示す。

兵頭：「全反射高速陽電子回折（TRHEPD、トレプト）による結晶表面の原子配列解析」

低速陽電子ビームによる表面の電子構造観測、異原子を吸着した場合の構造解析により、放射光より精度の高い二次元系（表面・表面直下）の構造解析技術を提供し、放射光との相補的な連携を目指す。Total-reflection High-energy Positron Diffraction (TRHEPD) 全反射高速陽電子回折と呼ばれる、表面および表面から2, 3層くらいまでの構造決定に強力な手法を用いた最新の成果を紹介した。

<https://www2.kek.jp/imss/spf/>

チタニア (TiO<sub>2</sub>)、グラフェン上の遷移金属、アルミ表面上のゲルマネン、インターカレートした2層のグラフェンの超伝導

星：「2次元物質構造測定データ解析におけるAI/HPC融合」

量子ビームによる二次元構造解析データに対して、超並列計算を利用した量子散乱問題という逆問題を解くアルゴリズムにより、データとの一致を最適化する構造を決定する手法を確立した。陽電子回折 (RHEPD) 実験データに適用した成果を報告した。次世代スパコンを利用することにより、超高次元の測定データ解析が実現するため、高速エックス線の時系列解析などにも応用可能になると考えられる。

福島：「データ駆動科学のための（非マルコフ連鎖）モンテカルロ法」

実験・理論・シミュレーションという3つのカテゴリーすべてと連携し、新しいデータを作ったり、それを解析して予測をしたりする作業を組織する「データ駆動科学（data driven science）」が重要である。その際に、数値解析により与えられた予測に対して、その精度を与える必要がある。その精度や誤差を求める一つの最適な方法として、Population annealing という手法を提案した。

若林：「表面 X 線回折による界面構造解析——解析手法の進展」

表面・界面では興味深い現象が数多くみられるが、表面の X 線回折の解析は、バルクの場合と異なり、単純なフーリエ解析だけでは不十分である。21世紀になって、位相回復法による電子密度解析の発展があり、X 線による表面の構造解析が可能となってきた。最近、ベイズ推定とモンテカルロ法を導入することにより、高精度の表面構造解析ができる手法を開発したので、その成果を報告した。表面層の厚み等、まだ確定できない要素もあり、今後の情報科学・計算科学のエキスパートとの連携が望まれる。

山地：「ボルツマン機械による銅酸化物高温超伝導体の自己エネルギー解析」

銅酸化物高温超伝導体の超伝導メカニズムを、実験データと情報科学・計算科学の連携によって解明することを目指す。グリーン関数の自己エネルギー部分のスペクトルを、理論的仮定なしに、ARPES のデータに機械学習を適用することにより推定する方法を開発した。その結果、最近提唱されているダークフェルミオンシナリオを支持した。将来、QPI・STS・EELS・RIXS 等の解析にも応用したい。

新城：「機械学習を援用した 1 次元拡張ハバード模型における光励起状態の研究」

一次元有機モット絶縁体の光物性について、拡張ハバード模型により解析した。機械学習により、光励起状態として、ボンド・スピン密度波が出現することがわかった。機械学習が光物性研究に有効であることを示した。

和達：「X 線による元素分解超高速スピンドYNAMICS 観測」

時間分解 X 線測定において、Spring-8 を用いたナノ秒・ピコ秒の解析と SACLA を用いたフェムト秒の解析を連携した研究の成果を紹介した。XMCD により、強

磁性体 FePt における Pt の時定数  $\tau = 0.6\text{ps}$  と Fe の  $\tau = 0.1\text{ps}$  を決定した。また  $\text{EuNi}_2(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)_2$  の光照射による Eu の価数変化をとらえた。国際的な連携が重要である。時間分解に加えて、空間分解解析も実現することが目標である。計算科学との連携が望まれる。

石井：「共鳴非弾性 X 線散乱実験の現状と将来」

LIXS のエネルギー分解能の高度化が進み、精度の高いスペクトルが得られるようになった。最近の成果として、京コンピュータの計算と連携することにより、銅酸化物高温超伝導体におけるホールドープ系の電荷励起スペクトルを決定した。また、圧力下の RIXS 実験と LDA 計算の連携により、5d 遷移金属化合物  $\text{Li}_2\text{IrO}_3$  の d 電子状態の大きな圧力変化のメカニズムを解明した。以前から計算科学との連携が成功している典型例となっている。

遠山：「共鳴非弾性 X 線散乱理論の現状と将来」

銅酸化物高温超伝導体の RIXS は理論計算で再現できるようになった。将来は、時間分解 RIXS を理論解析できる理論を構築し、計算科学と放射光との連携をより深めていきたい。

坂井：

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。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。