



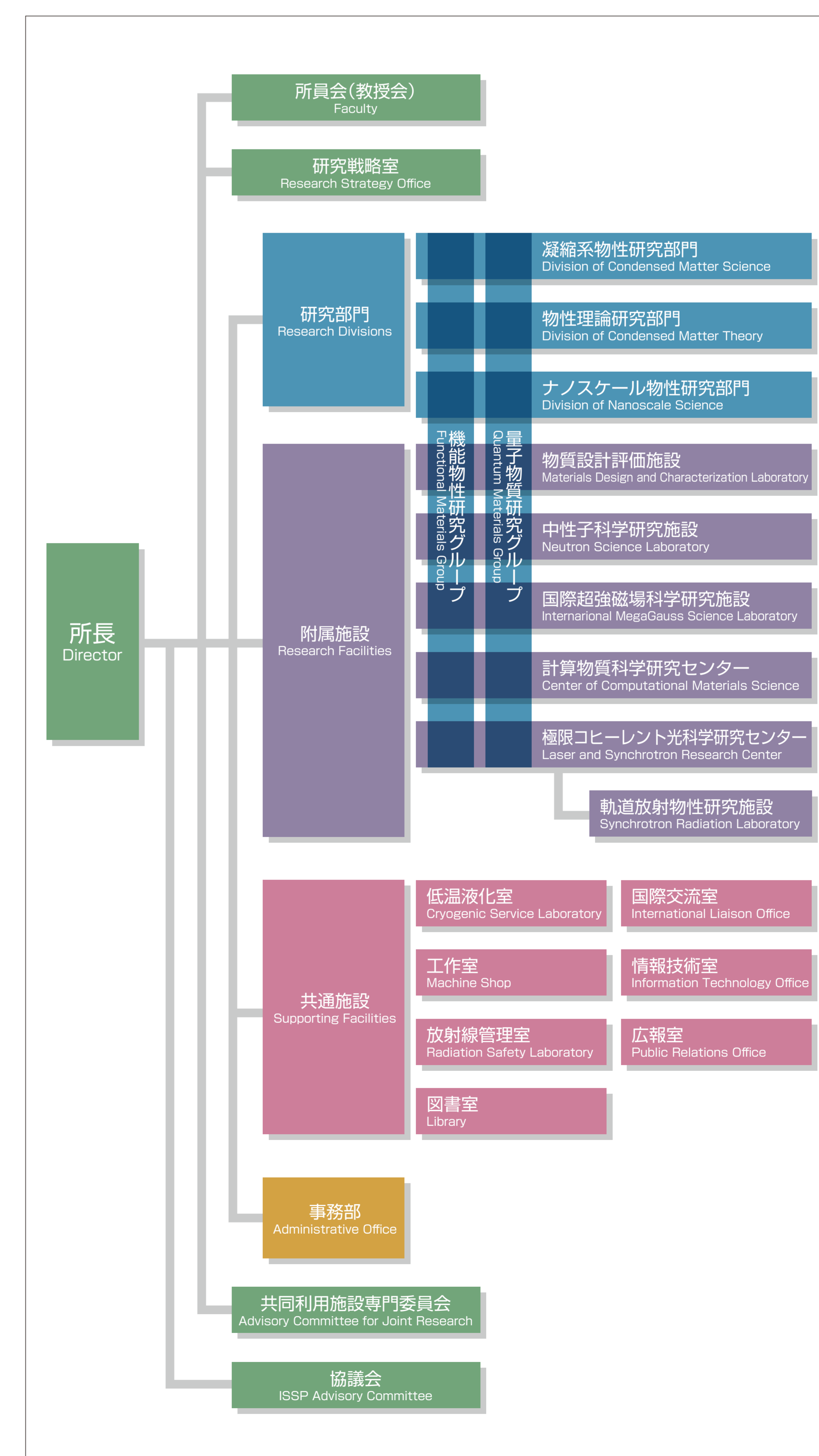
物性研究所へようこそ

現代社会を支える技術はさまざまな物質を使っています。携帯電話やコンピューターの部品となる半導体、ディスプレイに使われる液晶をはじめ、軽くて丈夫な炭素系素材、リニアモーターカーを運ぶ超伝導磁石、太陽電池など、枚挙にいとまがありません。このように色々な物質の性質を制御して我々の生活に役立てることが出来るようになったのは、電子や原子のミクロな法則に基づいて物質の多様な性質を解明する学問として、20世紀前半から発展してきた物性科学の大きな成果です。物性研究所(ISSP)は、日本の物性科学を牽引する全国共同利用研究所として1957年に設立されました。東京大学六本木キャンパスにおける40年の活動を経て2000年に柏キャンパスに移転して以来、物性研究所は、新しい物質を作り、新しい性質を発見し、新しい科学の概念を創造する物性研究のセンターとして世界に広く知られています。

物性研究所長 瀧川 仁

Modern technologies that support our current world are based on various materials. Semiconductors in cellular phones and computers, liquid crystals used in a display, carbon materials that are light and strong, superconductors driving a linear motor car, solar panels ... just to name a few. It is a great achievement of materials science that has developed since early 20th century as a discipline to understand properties of wide variety of materials based on the microscopic principles of electrons and atoms that we are now able to control properties of materials to make them useful for our life. The Institute for Solid State Physics (ISSP) was established in 1957 as a joint-use research institute to advance materials research in Japan. After the activities over 40 years in Roppongi, ISSP moved to Kashiwa in 2000 and is now recognized worldwide as a center of materials research aiming to synthesize new materials, discover new functions, and establish new scientific concepts.

Director TAKIGAWA Masashi

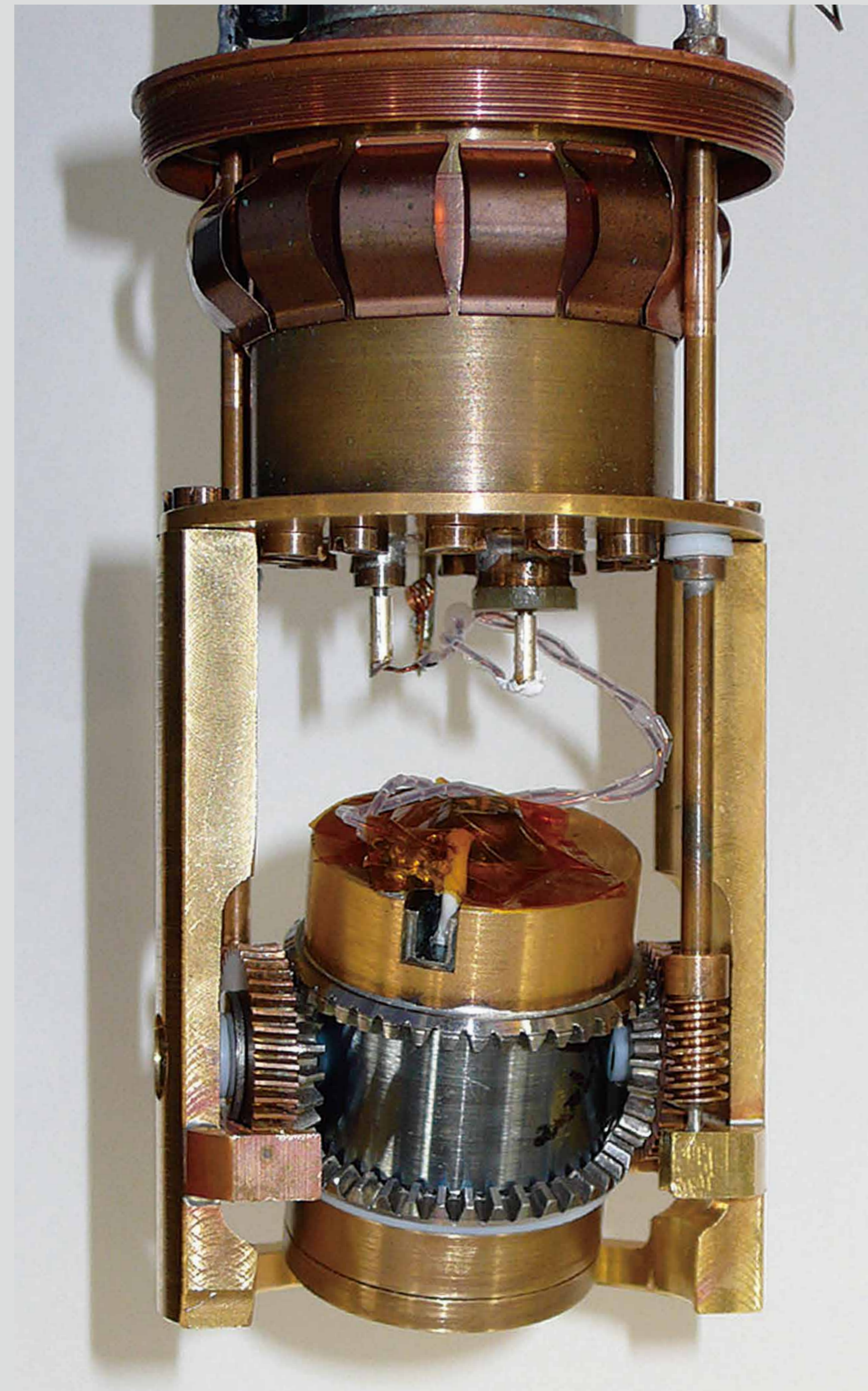


新物質と新現象

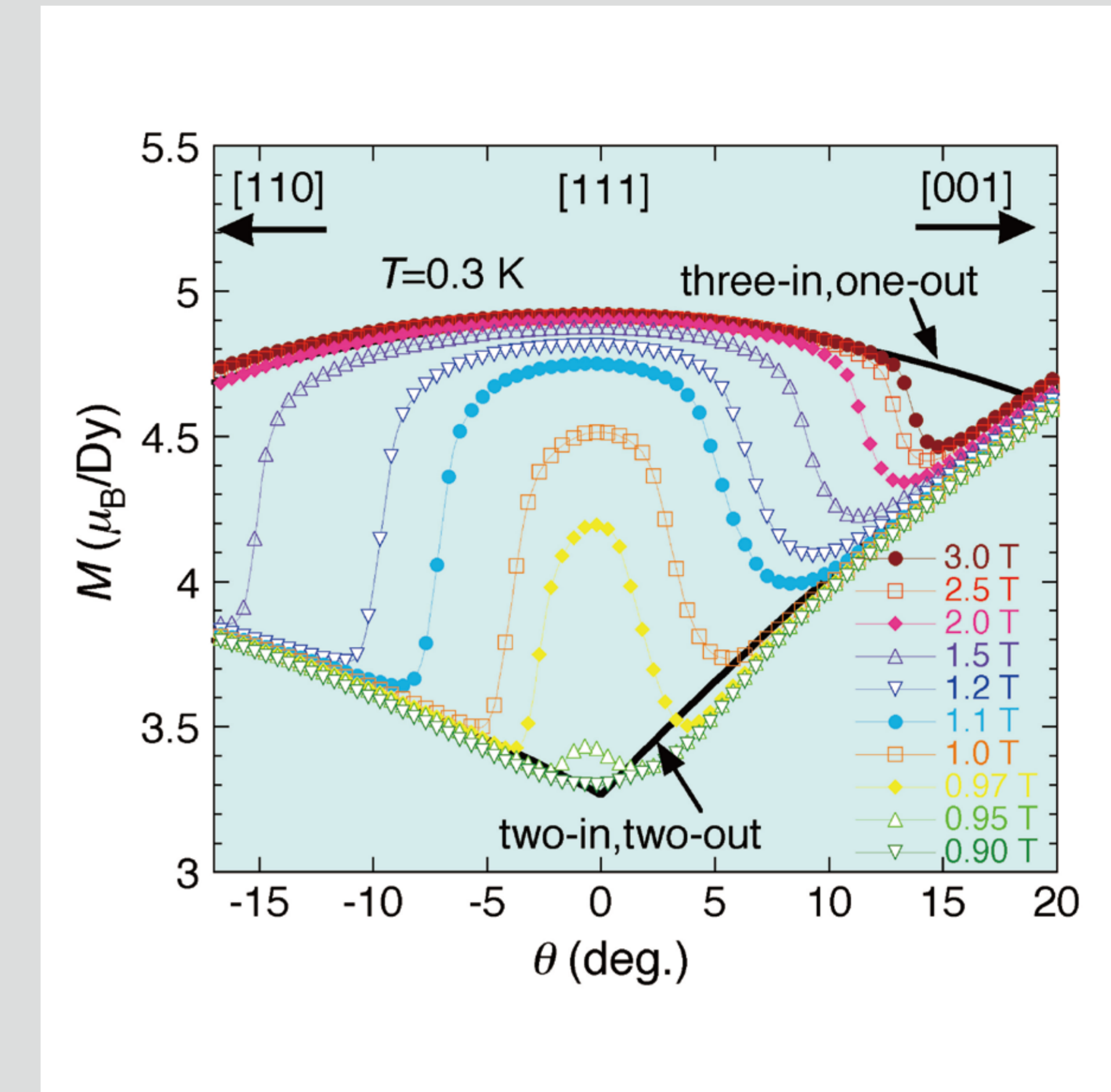
酸化物高温超伝導体、有機伝導体、フラーレン、カーボンナノチューブ、グラフェンなどの例に見られるように、「新物質」の発見はこれまでに何度となく物質科学の新しい局面を開いてきました。また、物質系を超低温、超高压、強磁場など、「極限環境下」に置くと、通常の状態とは全く異なる性質を示す様になります。新奇な物質や物性現象の発見はまた将来の新しい素材やデバイスの開発にもつながります。凝縮系物性研究部門では、遷移金属酸化物、重い電子系物質、有機伝導体など強い電子相関を示し、トポロジー、多極子、分子自由度など新たな自由度が加わった物質における多彩な現象の解明を主要なテーマの1つとしています。多様な物質合成や原子層やナノ構造体の作製、構造解析、常温常圧ばかりでなく、極低温、超高压、強磁場下における輸送測定、精密磁化、熱測定、核磁気共鳴など、高度な実験技術を駆使した研究が進められています。

New materials and new phenomena

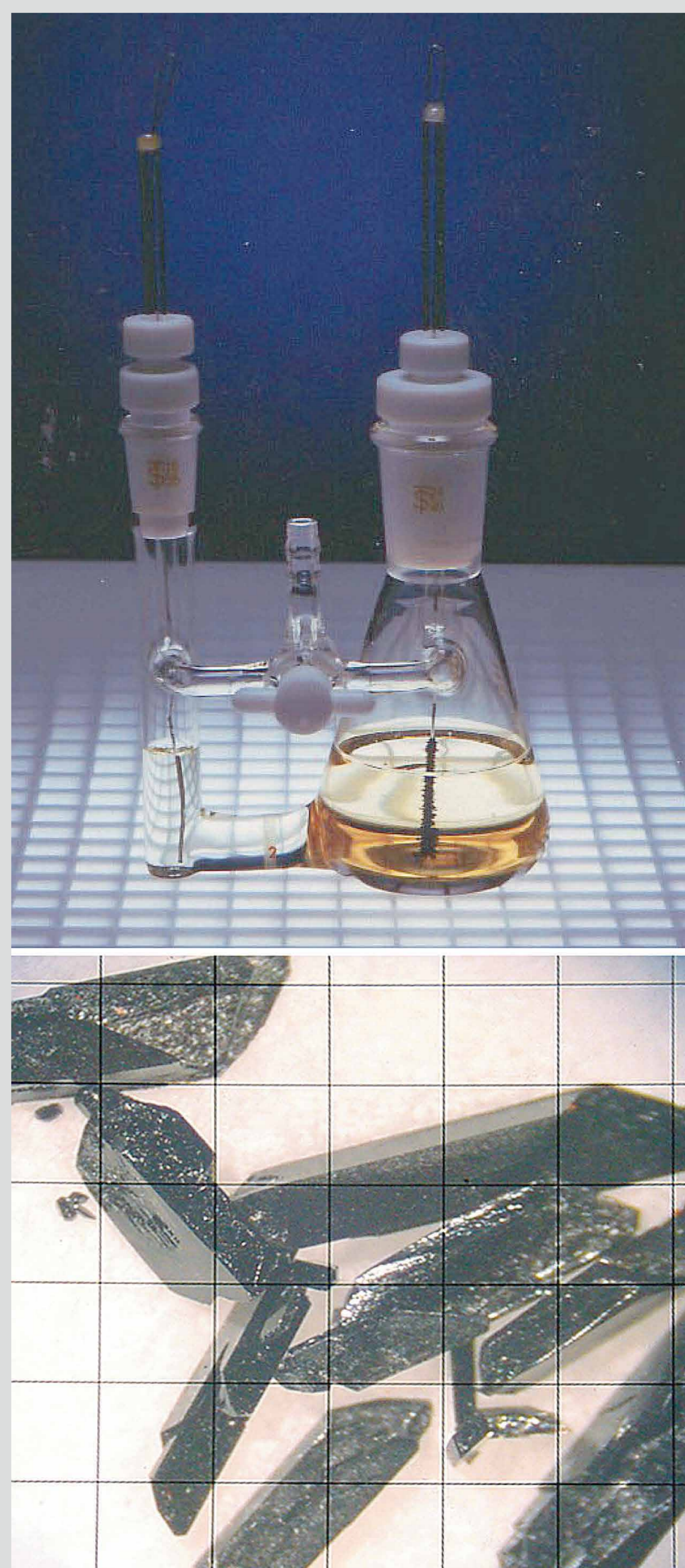
Discoveries of new materials have often opened new horizons in materials science. High temperature oxide superconductors, carbon clusters, nanotubes, graphene, and organic conductors are good examples. Materials under extreme conditions such as low temperatures, high pressure, and high magnetic field demonstrate unusual electronic states. New materials and new phenomena also lead to the future development of new devices and technologies. One of the subjects of our current intensive research is the effects of strong electronic correlation, in particular, novel phenomena related to topological, multipoles, molecular degrees of freedoms in transition metal oxides, heavy electron systems, and organic conductors. Here, various advanced experimental techniques are employed, such as materials syntheses, device fabrication, and transport, magnetic and calorimetric measurements. The goal of the Division is to uncover novel phenomena that lead to new concepts of matter, through combined efforts of search, synthesis and characterization of new materials.



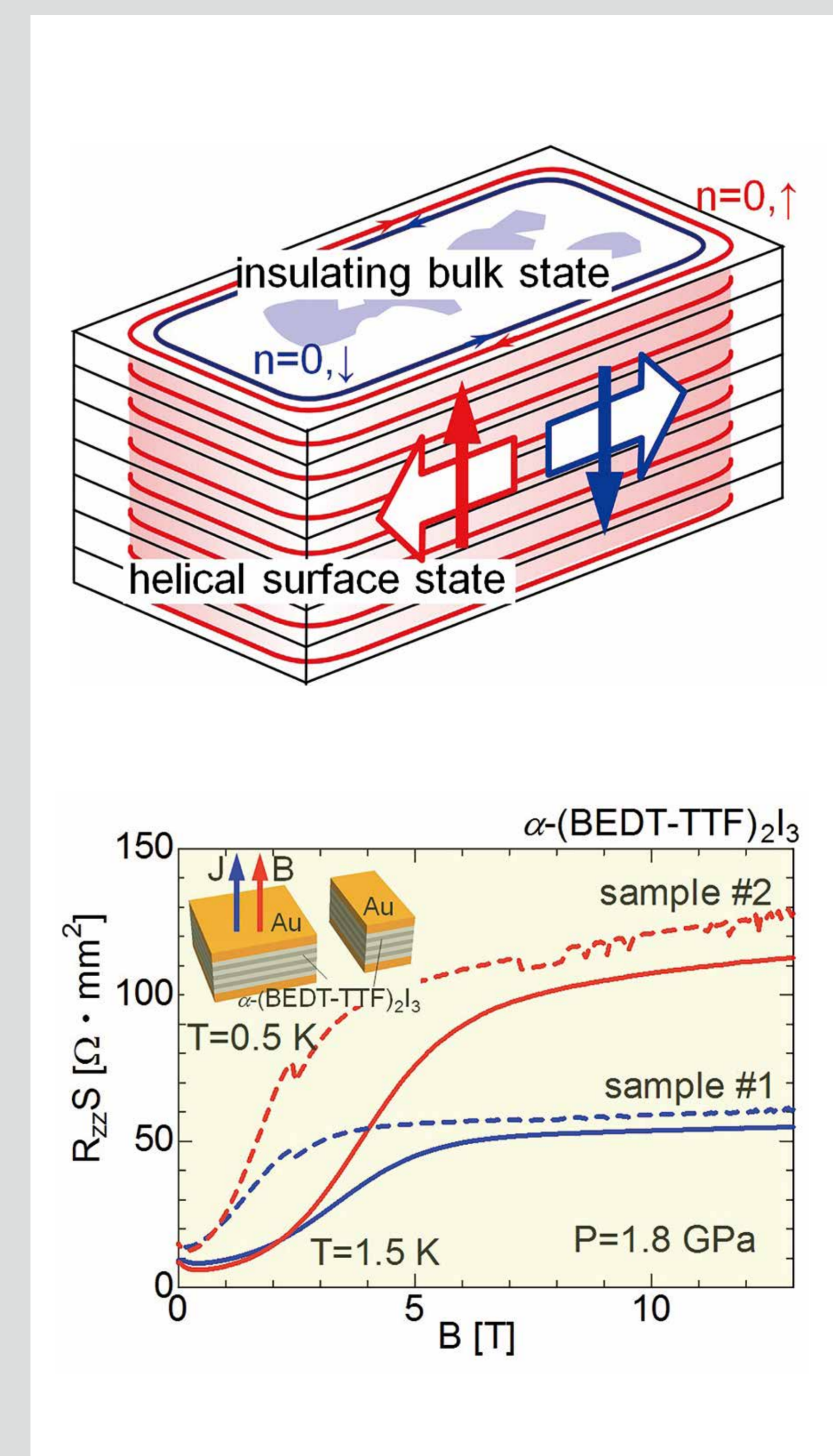
超高压下角度分解NMR測定プローブ。
Angle resolved high pressure NMR probe.



物性研で作製されたスピニアイス化合物 $Dy_2Ti_2O_7$ の磁化の角度変化。
Angular dependence of the magnetization of the spin-ice compound $Dy_2Ti_2O_7$ grown at ISSP.



有機超伝導体 $\kappa-(BEDT-TTF)_2Cu(NCS)_2$ の定電流電解結晶育成とその単結晶。
Electrocrystallization and single crystals of organic superconductor $\kappa-(BEDT-TTF)_2Cu(NCS)_2$.



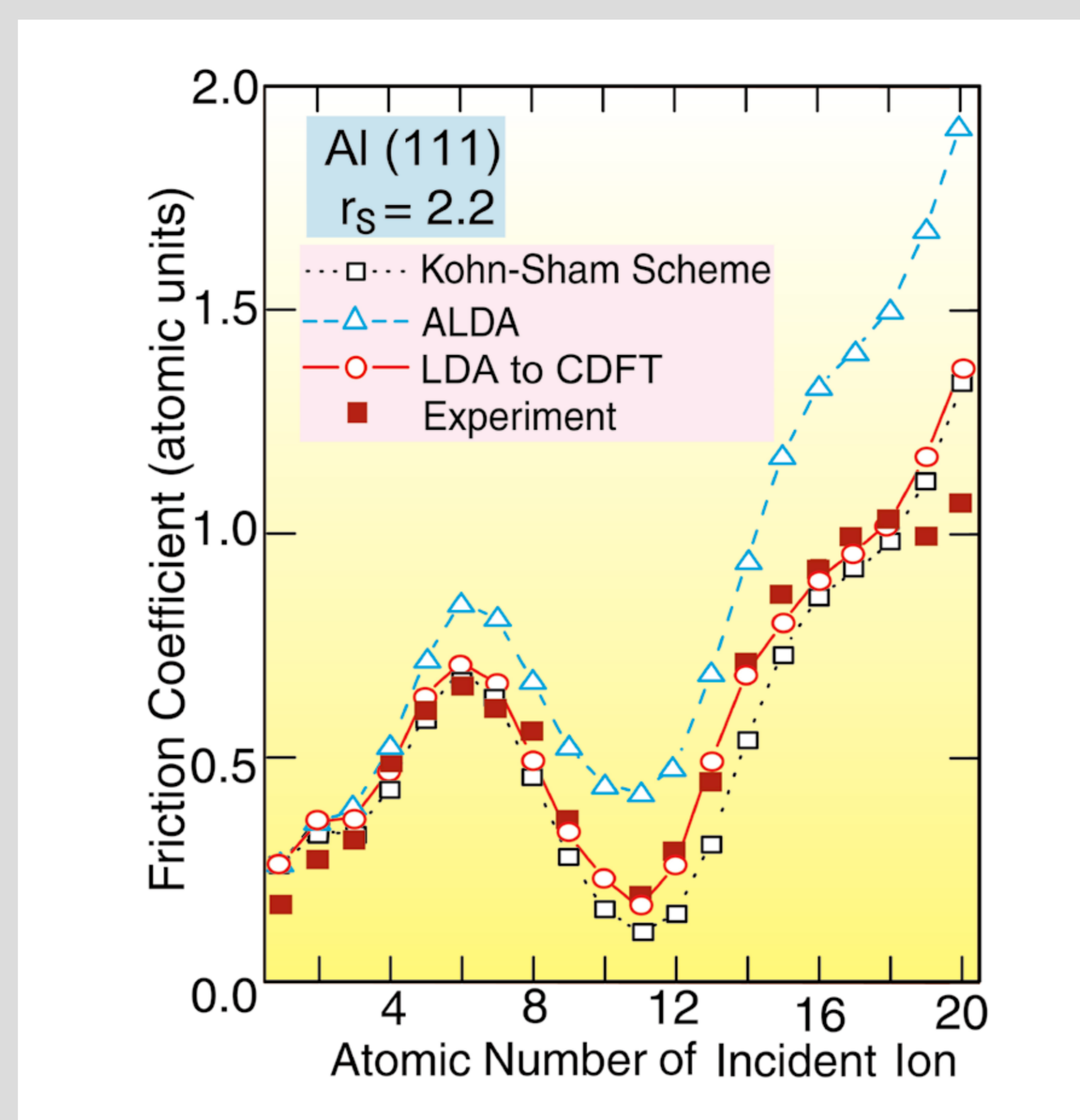
ディラック電子系 $\alpha-(BEDT-TTF)_2I_3$ のヘリカルな表面状態と層間磁気抵抗。
Helical surface state in the $\nu=0$ QH state in the Dirac multilayer and interlayer magnetoresistance scaled by cross sectional area of two samples.

物質の性質の基本原理にもとづくミクロなレベルからの理解

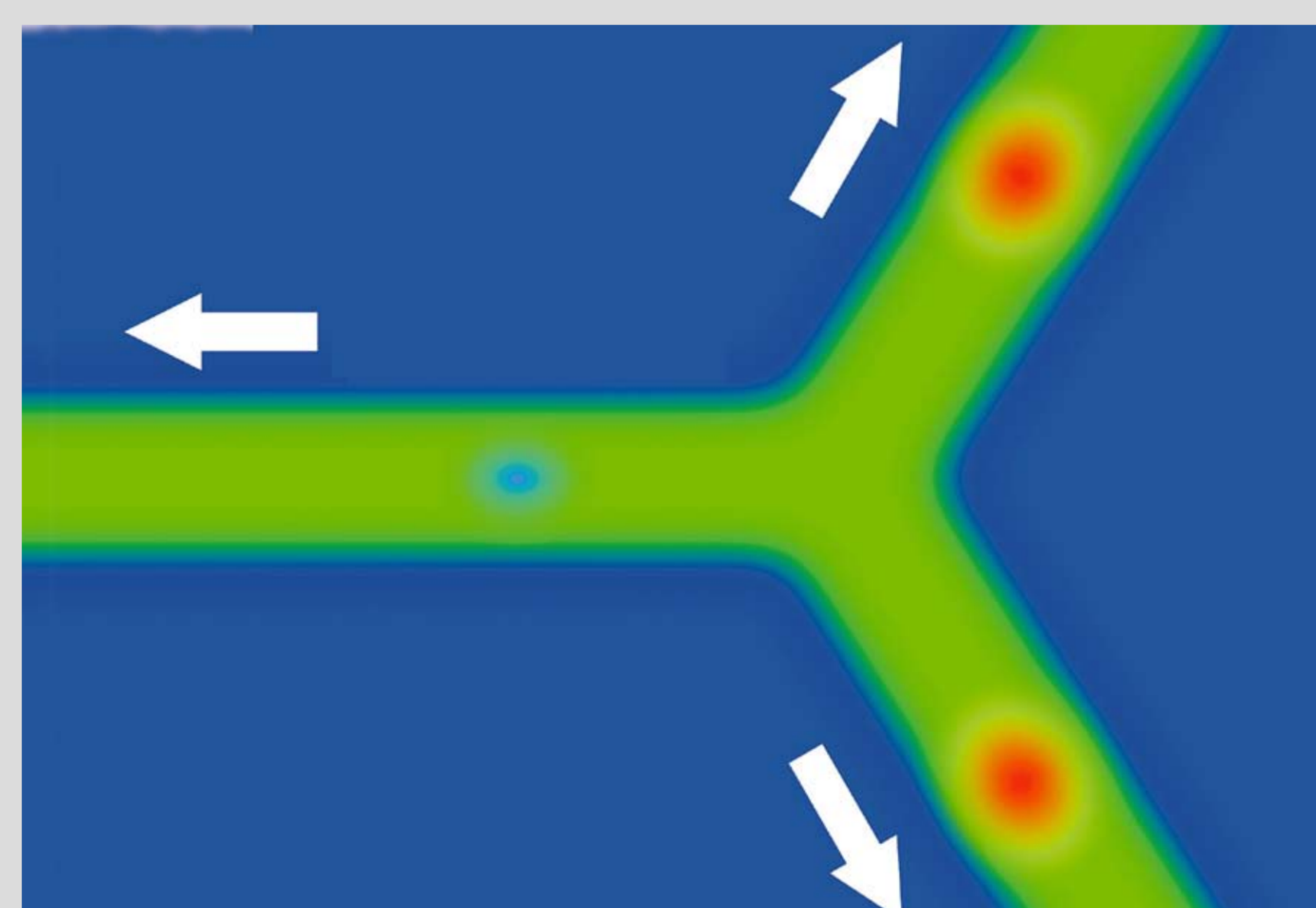
さまざまな性質をしめす物質も、その構造の内部に入り原子レベルまで分け入って考えると量子力学という普遍的な物理法則によって支配されています。単純な物理法則から多様な現象が生じる鍵は 10^{23} 個という天文学的な数の基本粒子がお互いに相互作用をしていることにあります。物性理論の研究者は各人のアイディアに導かれて、理論的枠組みやモデルを構成し、その性質を研究することによってこれまで未知と考えられてきた現象の理解と新しい現象の予言が可能となることを目指しています。理論研究を遂行するに当たっては、数理論理学や場の量子論などの解析的手法や、密度汎関数理論に基づく第一原理計算や量子モンテカルロシミュレーションなどの計算物理的手法などが駆使されています。

Microscopic understanding of the nature of matter from the fundamental laws of physics

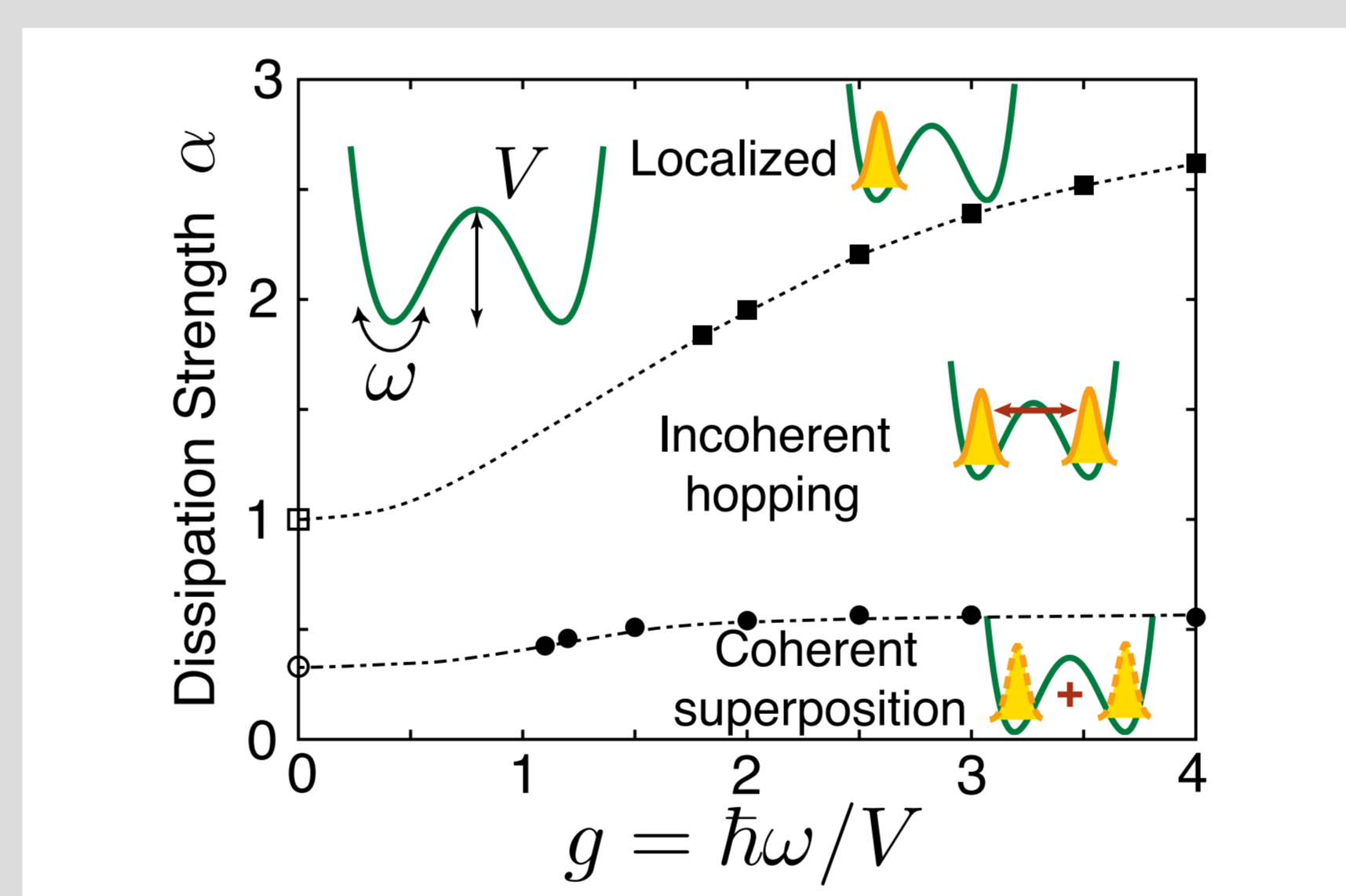
The microscopic basis for understanding the diversity of properties of matter is the law of quantum mechanics, which is the fundamental law of physics governing the motion of electrons and nuclei. The key aspect producing the remarkable complexity from this simple law of physics is the effect of the interaction among an astronomical number of particles on the order of 10^{23} . To understand novel phenomena, a condensed-matter theorist formulates a theoretical model for an interacting many-body system that captures the essential physics of the problem. To conduct a theoretical study on such a model, various approaches developed in theoretical physics are employed: the analytic methods of mathematical physics, field-theoretic methods, and numerical methods including first-principles calculations based on density functional theory and quantum Monte Carlo simulations.



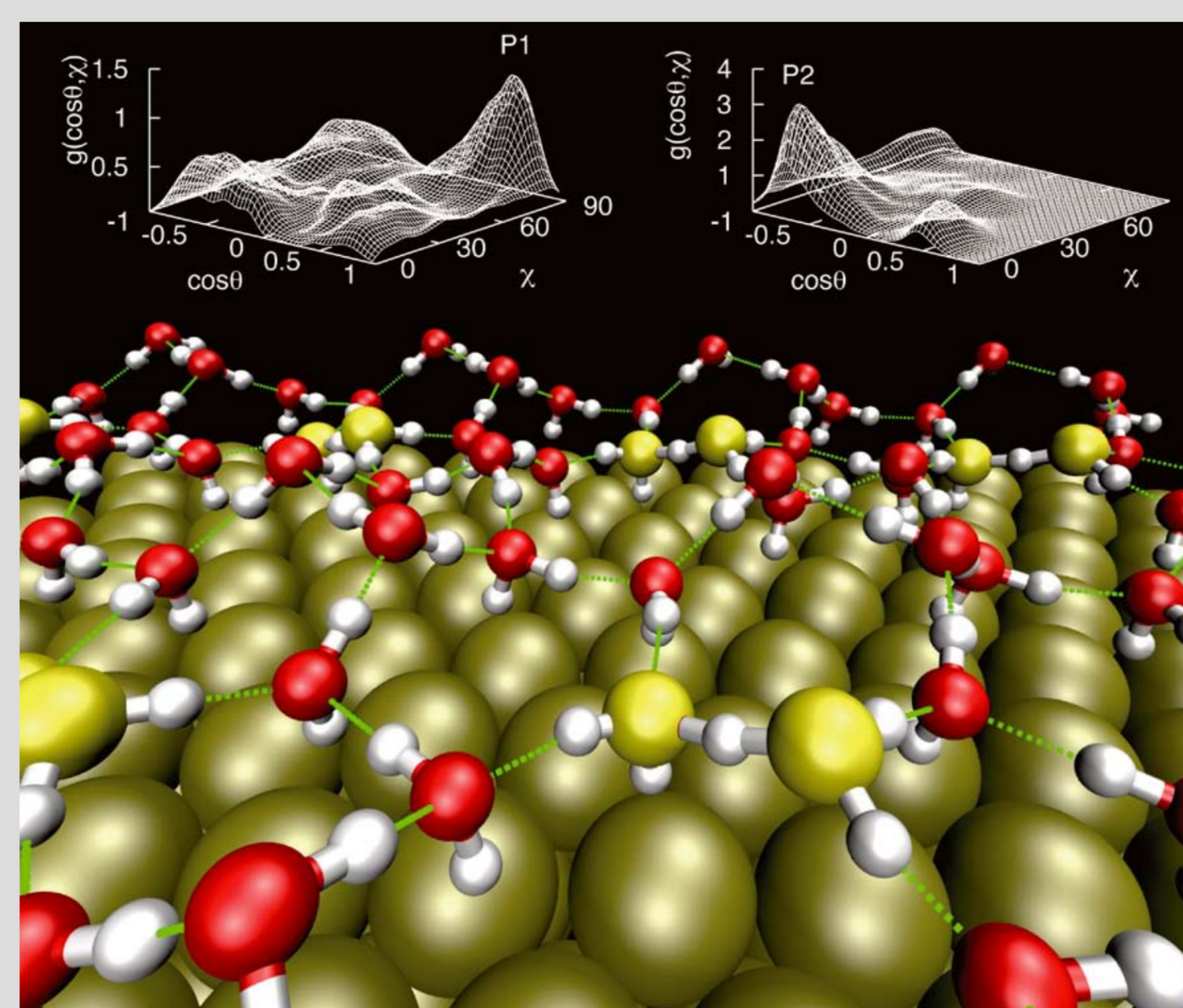
Al薄膜と低速入射イオンの摩擦係数の第一原理計算は殻構造を反映した振動を含めて実験をよく再現する。
First-principles calculations of the friction coefficient between a thin aluminum film and low-energy incident ions reproduce experimental results very well, including the oscillatory behavior reflecting the ionic shell structures.



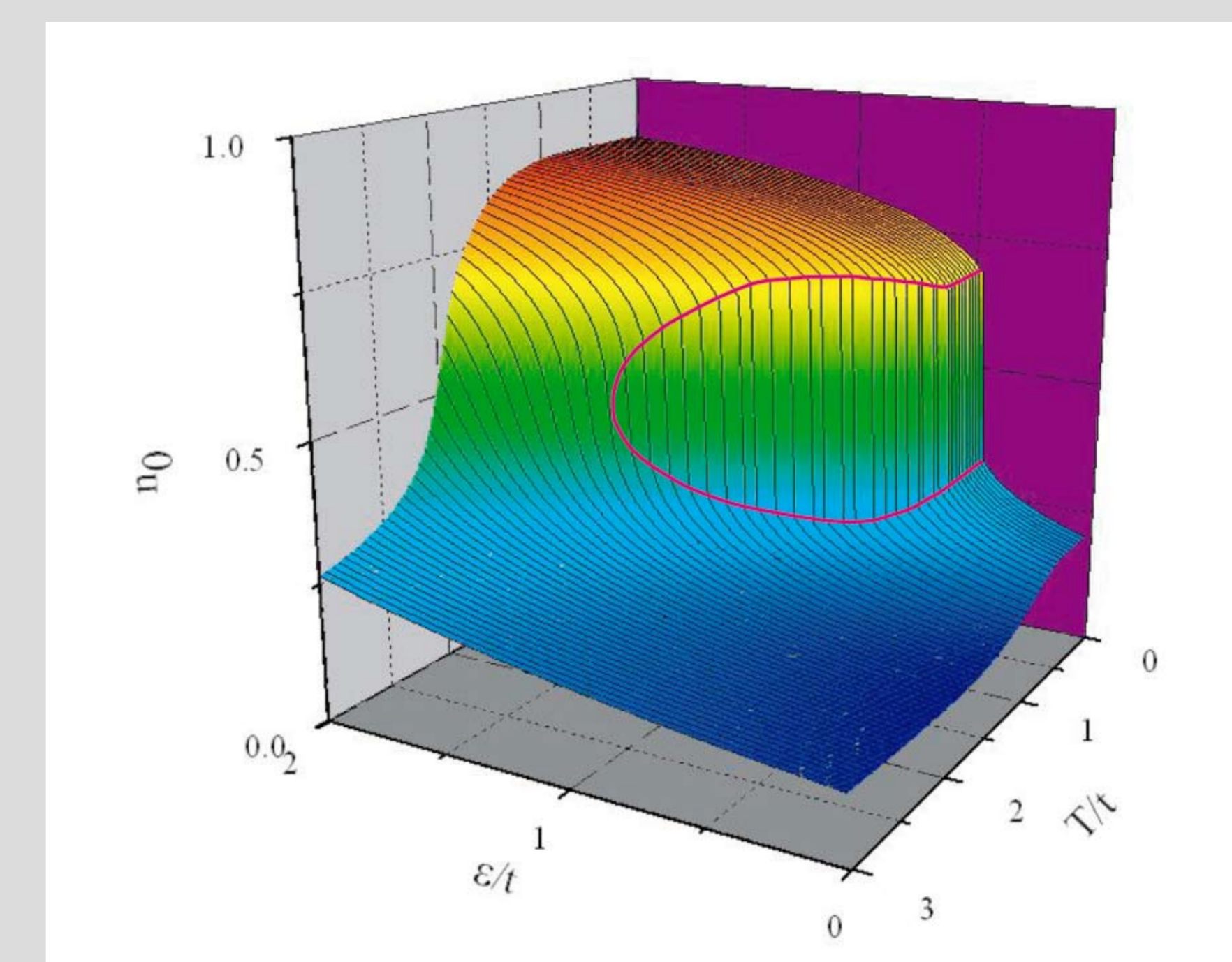
1次元ボース凝縮体のY字型接合における負の密度の反射。
Negative density reflection in Y-junction of one-dimensional Bose condensates.



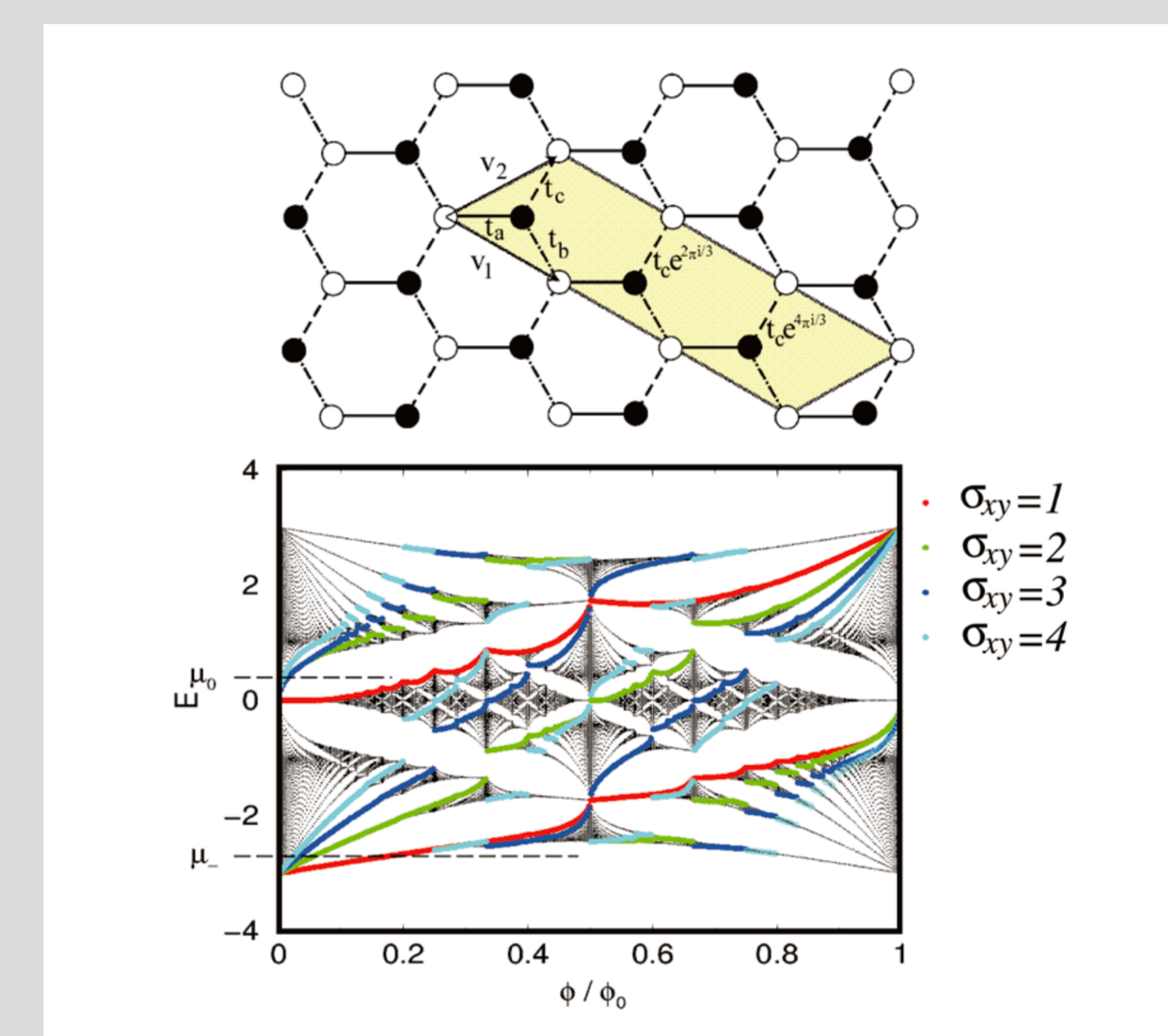
環境と結合した量子二重井戸系のモンテカルロ法による相図。
Phase diagram of quantum dissipative double-well systems obtained by Monte Carlo calculation.



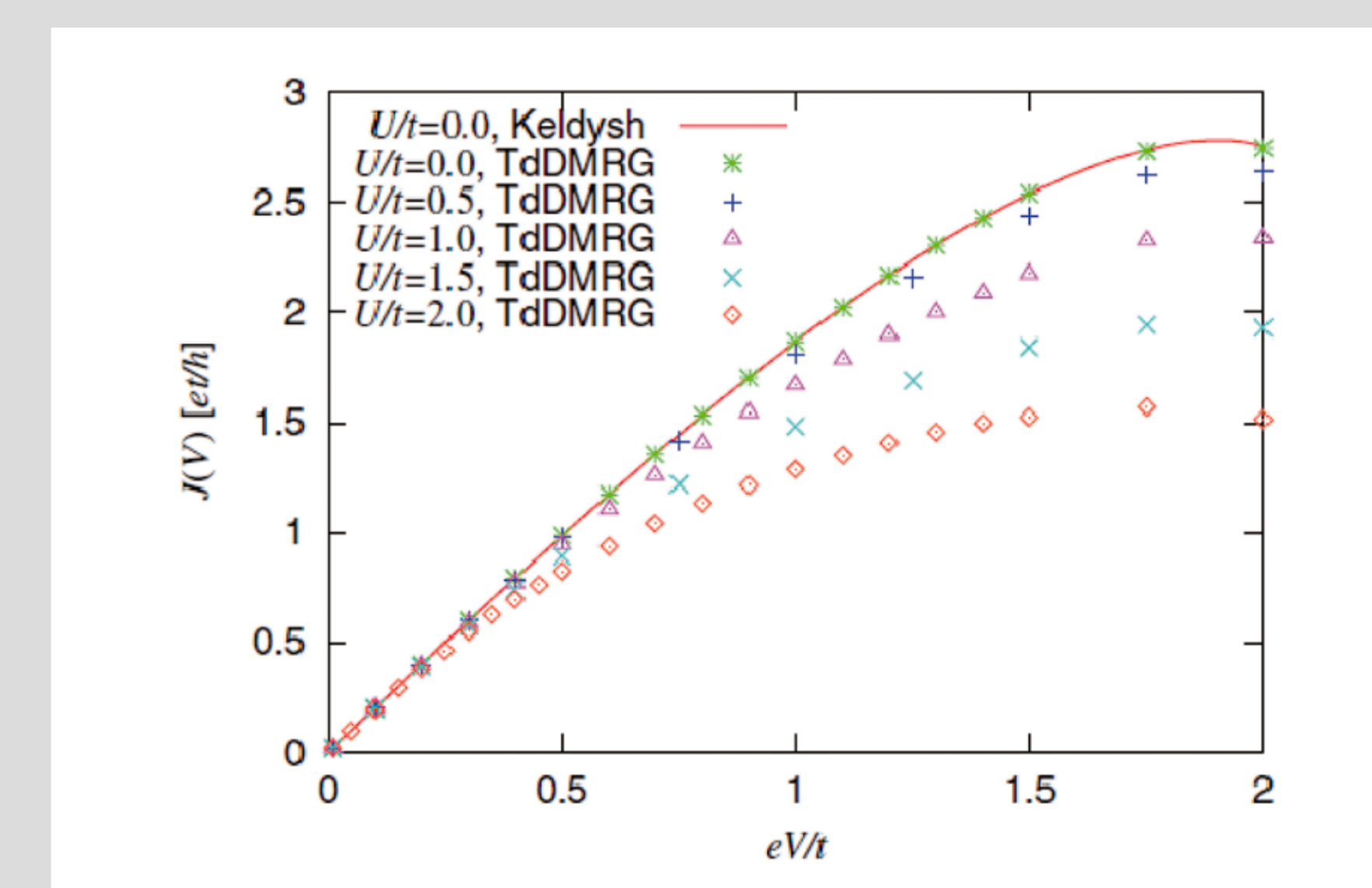
白金電極上の水の構造と分布関数：第一原理分子動力学計算。
Structure and distribution function of water on a Pt electrode : first-principles molecular dynamics simulation.



相互作用する非調和振動子の相転移。原点での振動子の占有率 n_0 の温度 (T/t) ポテンシャルエネルギー (ϵ/t) 依存性。
Phase transition of interacting anharmonic oscillators. Temperature (T/t) and potential energy (ϵ/t) dependences of the occupation (n_0) of the oscillator.



磁場 ϕ の下における2次元六角格子上の電子のエネルギー E と量子ホール係数 σ_{xy} 。
Energy spectrum and the Hall conductance of electrons on a honeycomb lattice under a magnetic field.



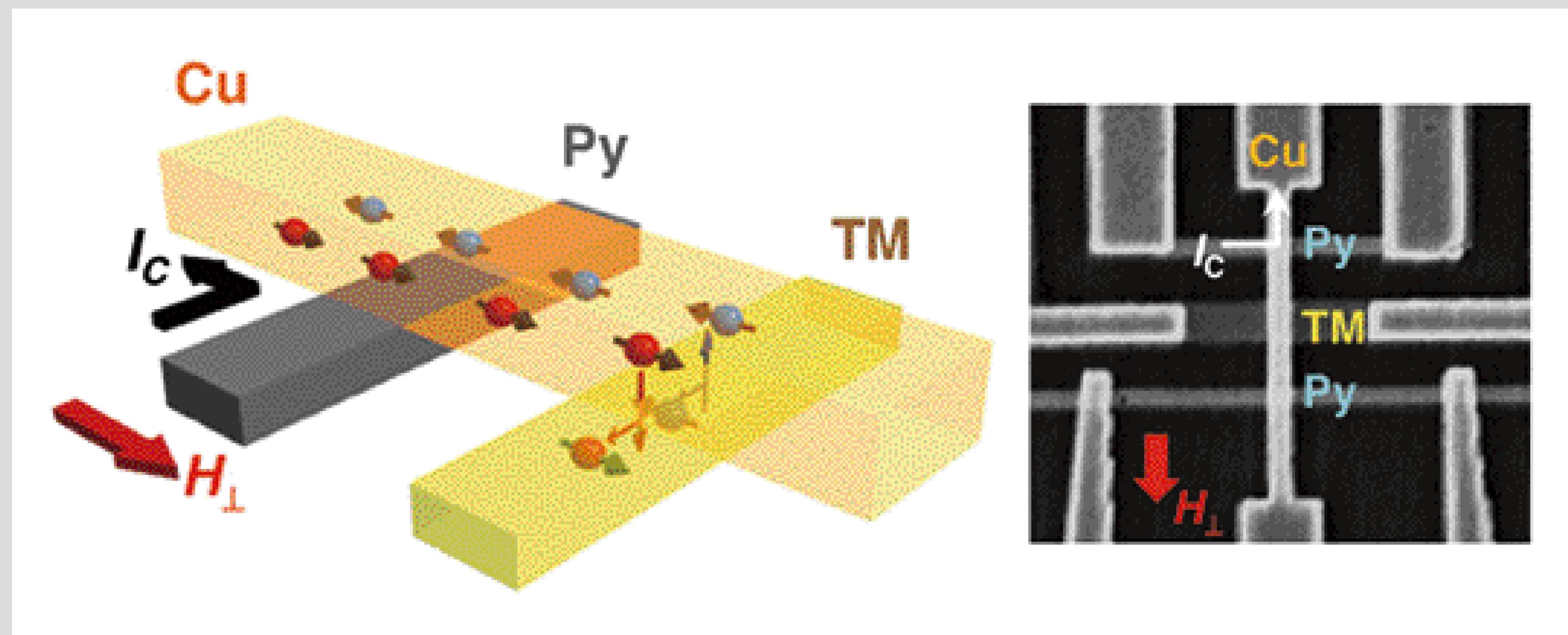
時間依存密度行列繰り込み群を用いて計算した量子ドットを介して流れる非平衡定常状態の電流。
Current through a quantum dot calculated by the time-dependent density matrix renormalization group method.

ナノスケール人工物質・表面・界面の物性

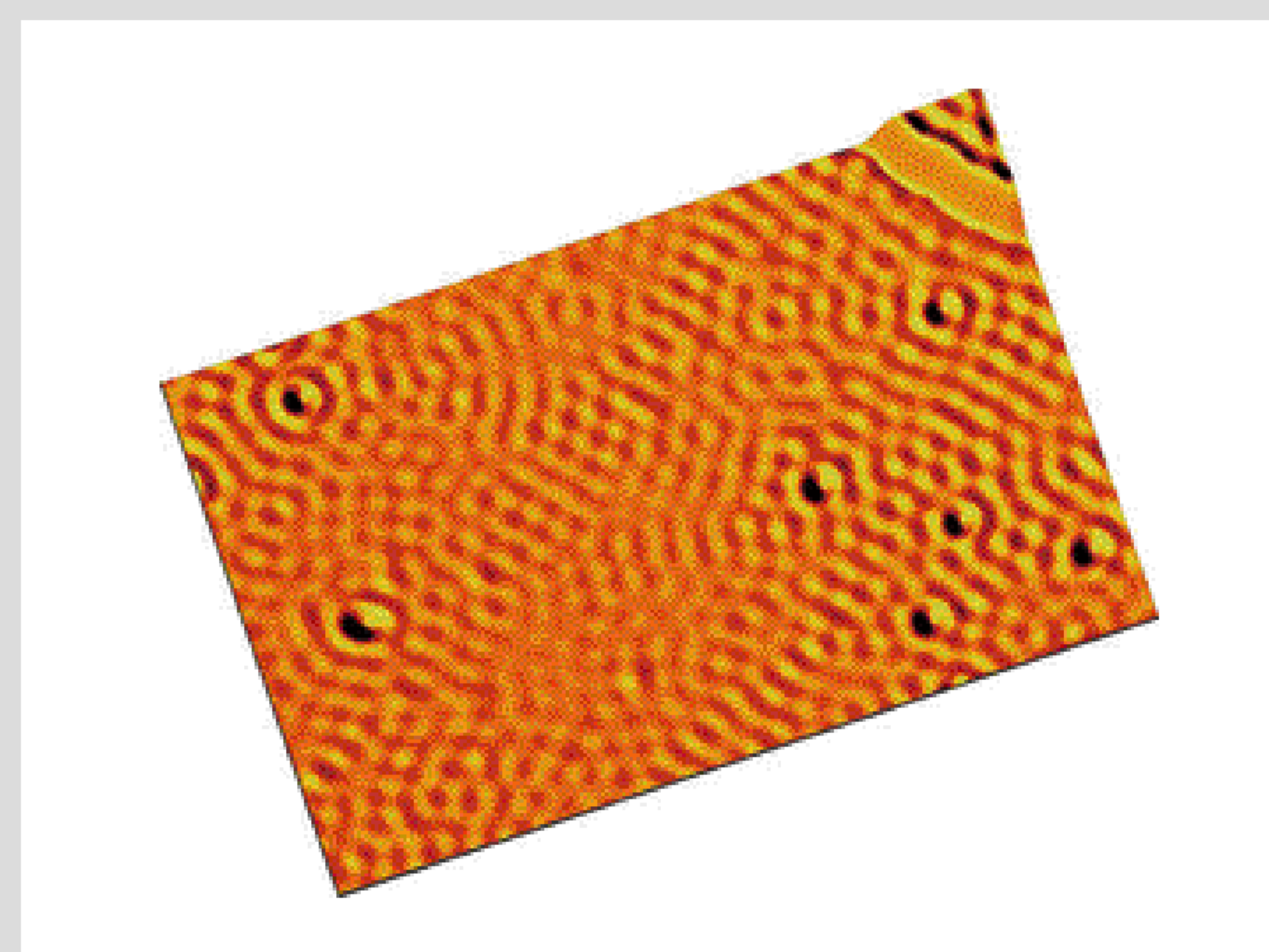
構成原子の種類と並び方を高度に制御した人工低次元系、ナノメートルスケールの周期構造をもつ系、原子レベルで制御された様々な固体表面や界面では、その新奇な構造のために、興味深い電気的磁気的性質や化学反応性が現れてきます。そこで、最新の超高真空技術、微細加工技術、顕微鏡技術などを駆使して、金属、半導体、酸化物からなる新奇な物質を創成し、それが生成される機構やそこに現れる物性の起源をミクロに解明することを目標に研究を行っています。また、そのような研究を推進するための新しい実験手法や観測された物性を利用し役立てるための素子作製方法などの技術開発も行っています。

Nanoscale materials, surfaces, and interfaces

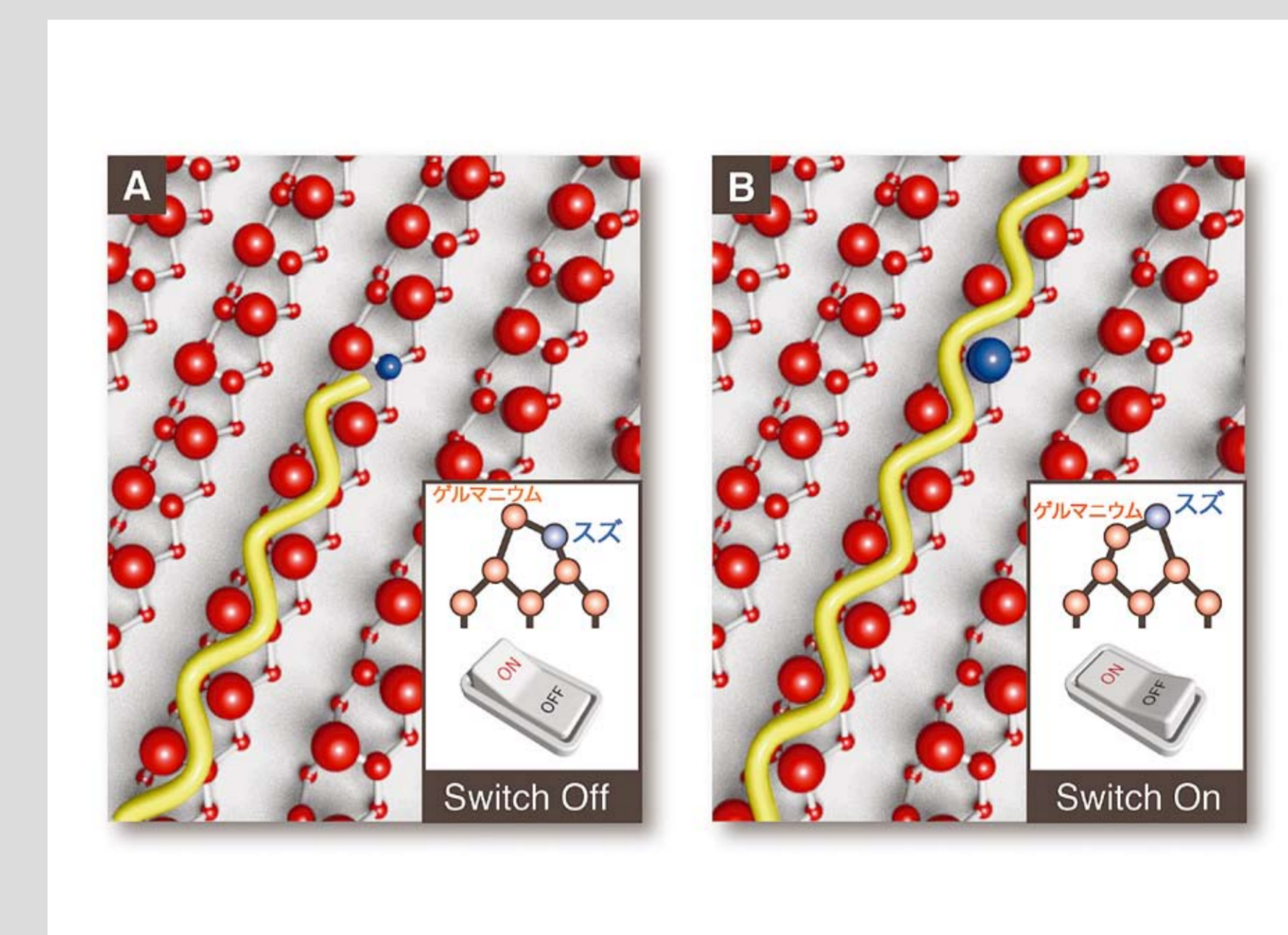
Novel electronic, magnetic, and chemical properties appear in atomically well-defined artificial low-dimensional, nanoscale-periodic, and surface/interface systems because of their unique structures. We are studying these systems of metals, semiconductors, and oxides to elucidate their formation mechanisms and fundamental material properties microscopically using modern ultra high vacuum, micro fabrication, and microscopy technologies, and so forth. We are also developing new experimental methods for these studies and investigating ways to utilize the newly found properties of these systems for fabricating new devices.



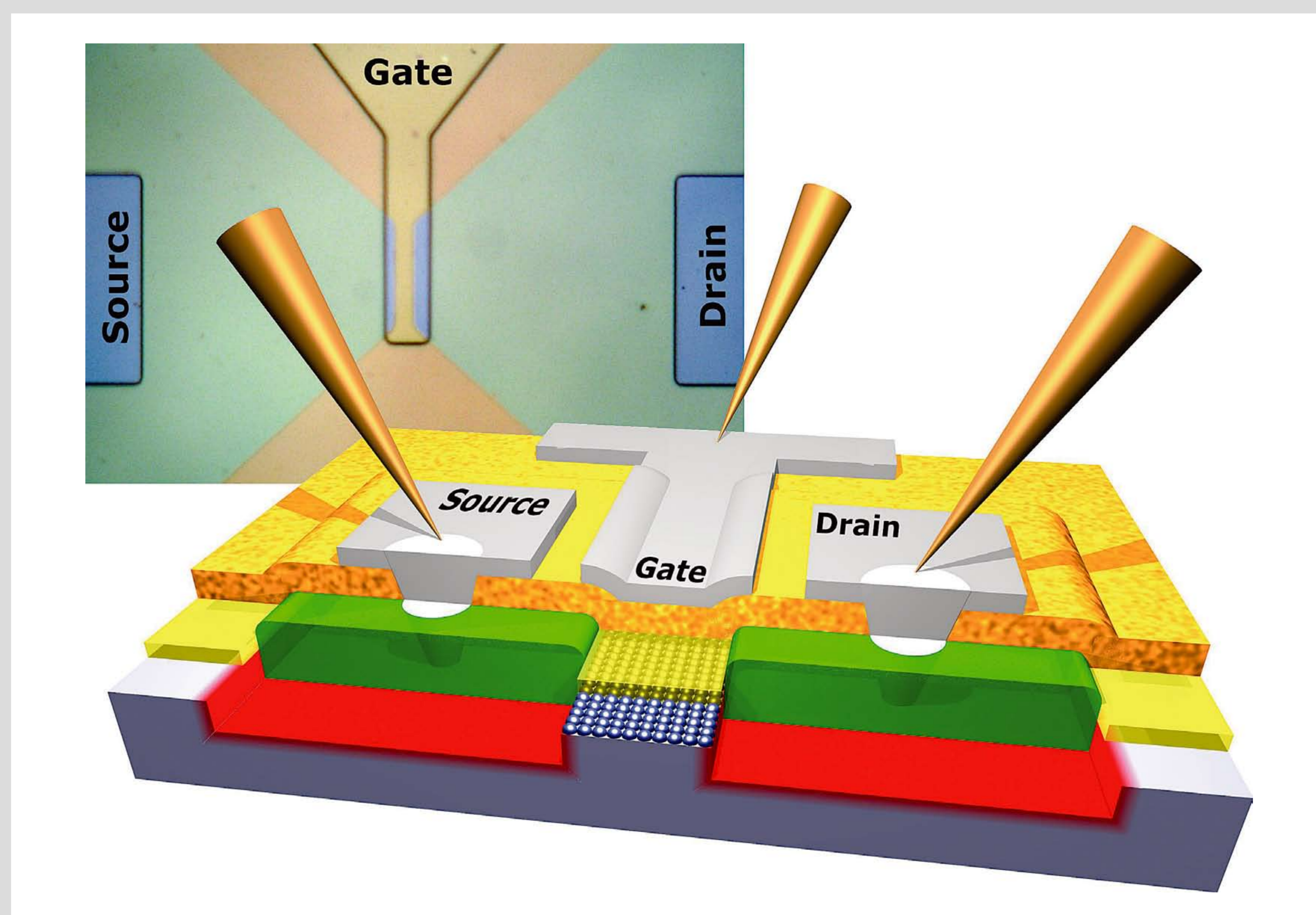
スピン吸収法を用いた遷移金属のスピンホール効果測定。
Measurement of spin Hall effect in transition metal using the spin absorption technique.



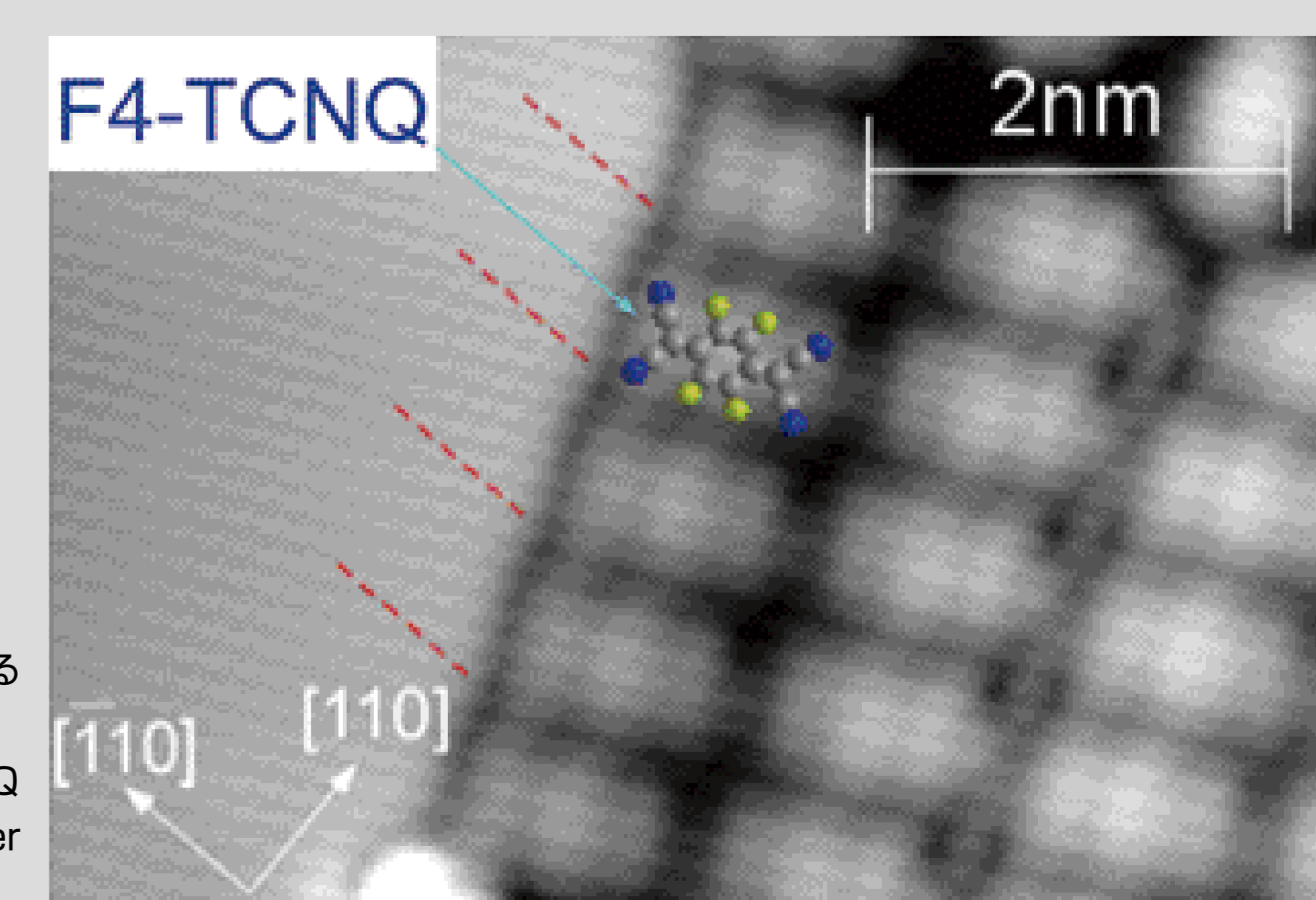
走査型トンネル顕微鏡を用いて銅表面で観察される電子定在波。
Electron standing waves on a Cu surface observed by scanning tunneling microscopy (STM).



半導体表面上の原子対の傾きをパルス電流を用いて局所的に変化させ、表面を流れる電流をスイッチする。
One-dimensional electronic conduction is switched by locally changing the tilting direction of a pair of surface atoms using a pulsed current.



酸化物極薄膜電界効果トランジスタ
Oxide thin film FET



Cu(100)表面のステップ下端に選択的に吸着する強力なアクセプター分子F4-TCNQのSTM像。
STM image of strong acceptor F4-TCNQ molecules preferentially adsorbed at a lower step edge on Cu(100).

機能物性の基礎科学

機能物性研究グループは、物性研究所内の数研究室が連携し、物質の基底状態・平衡状態の固体物性や化学物性を基盤として、励起状態・非平衡状態、さらには化学反応や生体系に至る動的な性質にまで踏み込み、マルチスケール・階層的複合構造をもつ物質システムにおける機能発現のメカニズムや複合物質システムの構築などを研究対象としています。

Basic science in functional materials

The Functional Materials Group, which consists of several current faculty and staff members of ISSP, is one of two new trans-divisional and interdisciplinary research groups. They deal with excited states and dynamics in systems with hierarchical and inhomogeneous structures, including chemical reactions and dynamical processes in biological systems, based on the knowledge of solid state physics and chemical physics.

分野融合による新しい量子相と機能の創出

物性物理はこれまで新しい物質、新しい現象、新しい概念の発見によって、大きく発展してきました。その研究のブレークスルーは多くの場合、分野の融合によっています。本研究グループでは、バルクの物質合成、精密測定、スピントロニクスの実験および理論チームが互いに強く連携しながら、強相関電子系の新しい量子相や新しい機能性材料、スピントロニクス機能の発見を目指した研究を進めています。

Interdisciplinary studies to discover novel quantum phases and functions

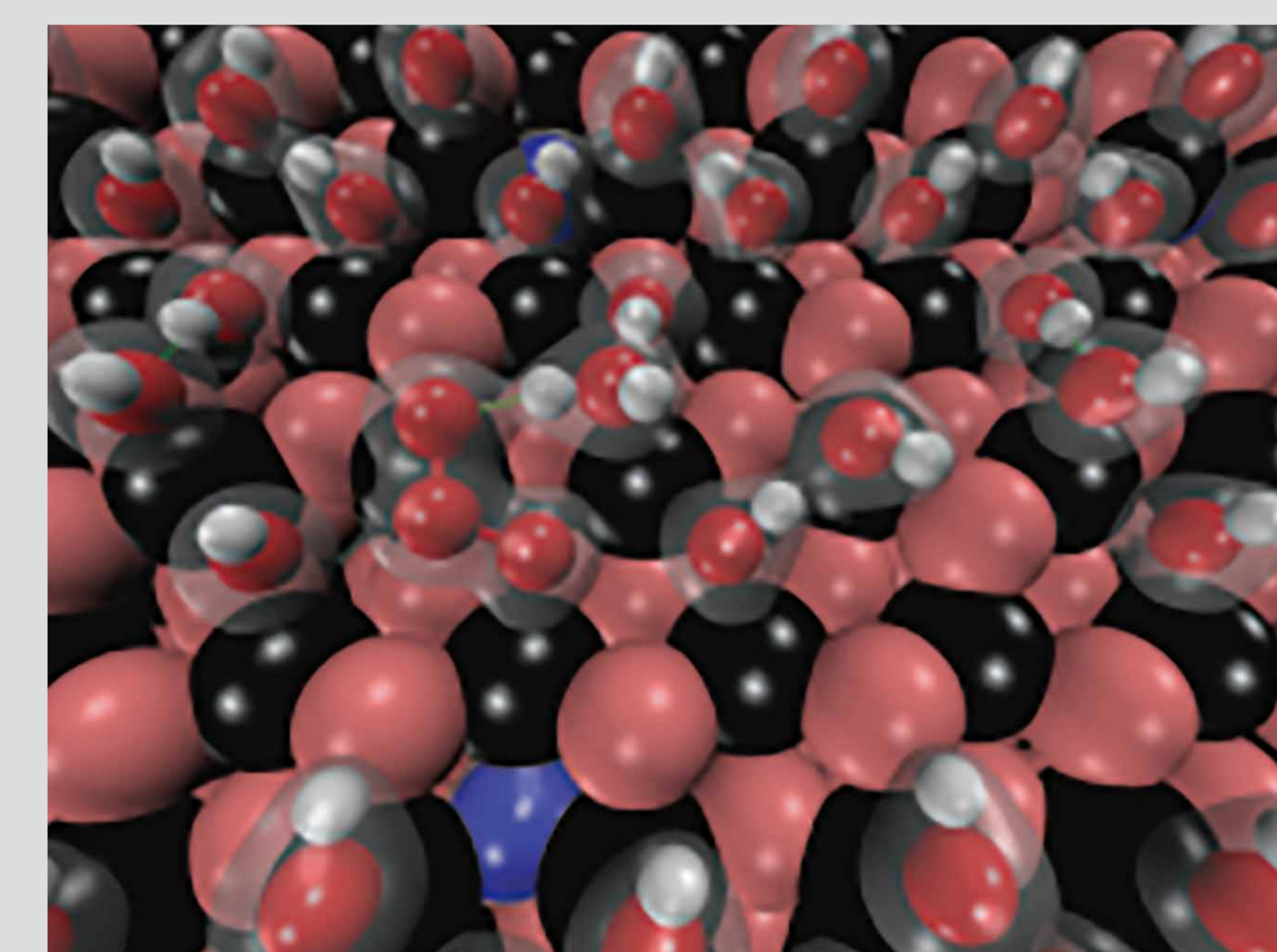
Discovery of new materials, new phenomena, and new concepts has progressed condensed matter physics. The breakthroughs have been often made at an intersection of various different research fields. Our group promotes interdisciplinary studies based on the collaboration between theory and experiment focusing on bulk synthesis, characterization through state-of-art measurements and spintronics application, to discover novel quantum topological phases, functional materials, and spintronic functions in correlated electron/spin systems.

Functional Materials Group

機能物性研究グループ



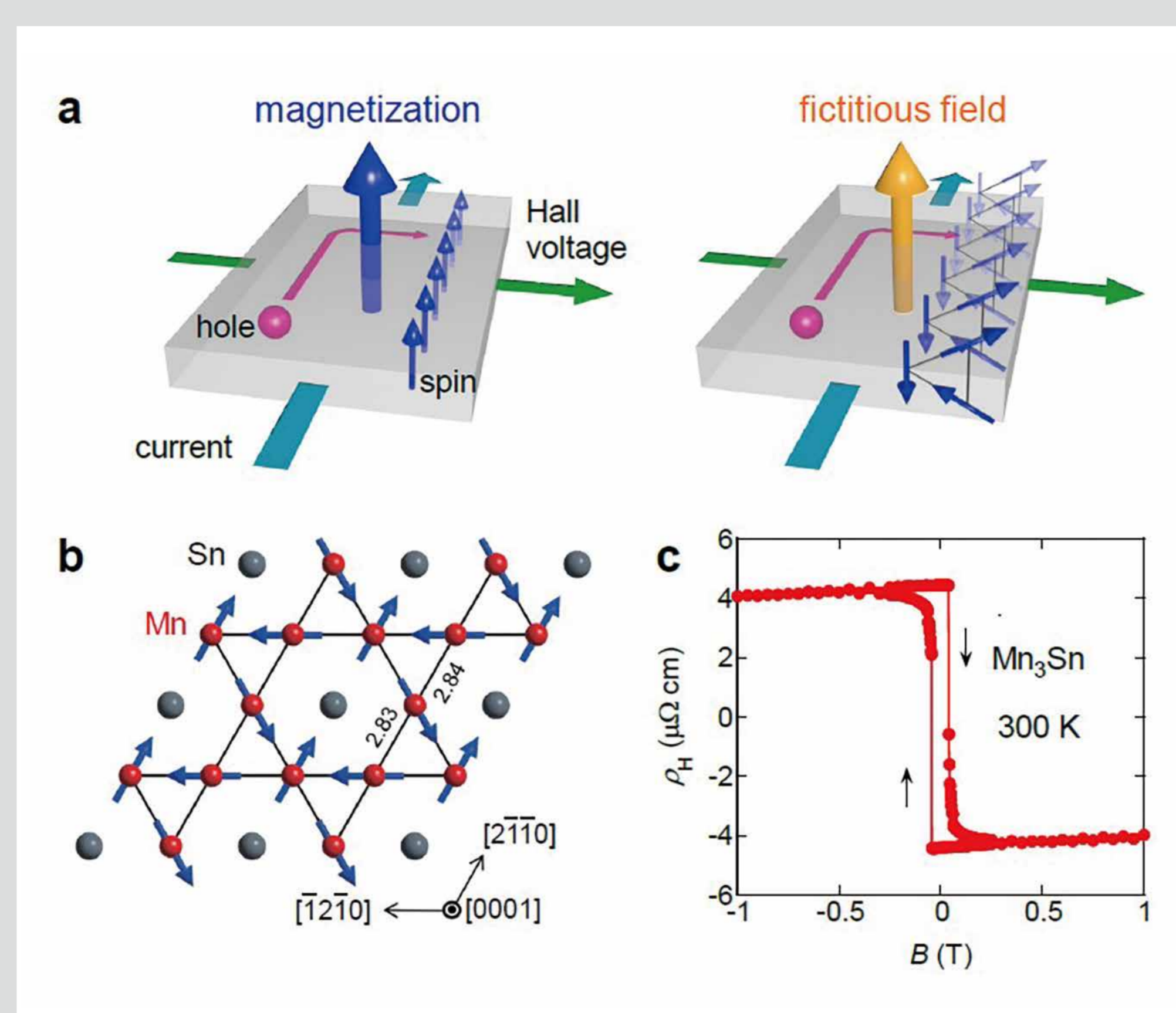
ホタル生物発光酵素ルシフェラーゼと発光分子。ミュータント酵素で発光色が変化する。
Enzyme and luminescent molecule in firefly bioluminescence. Mutation changes bioluminescence color.



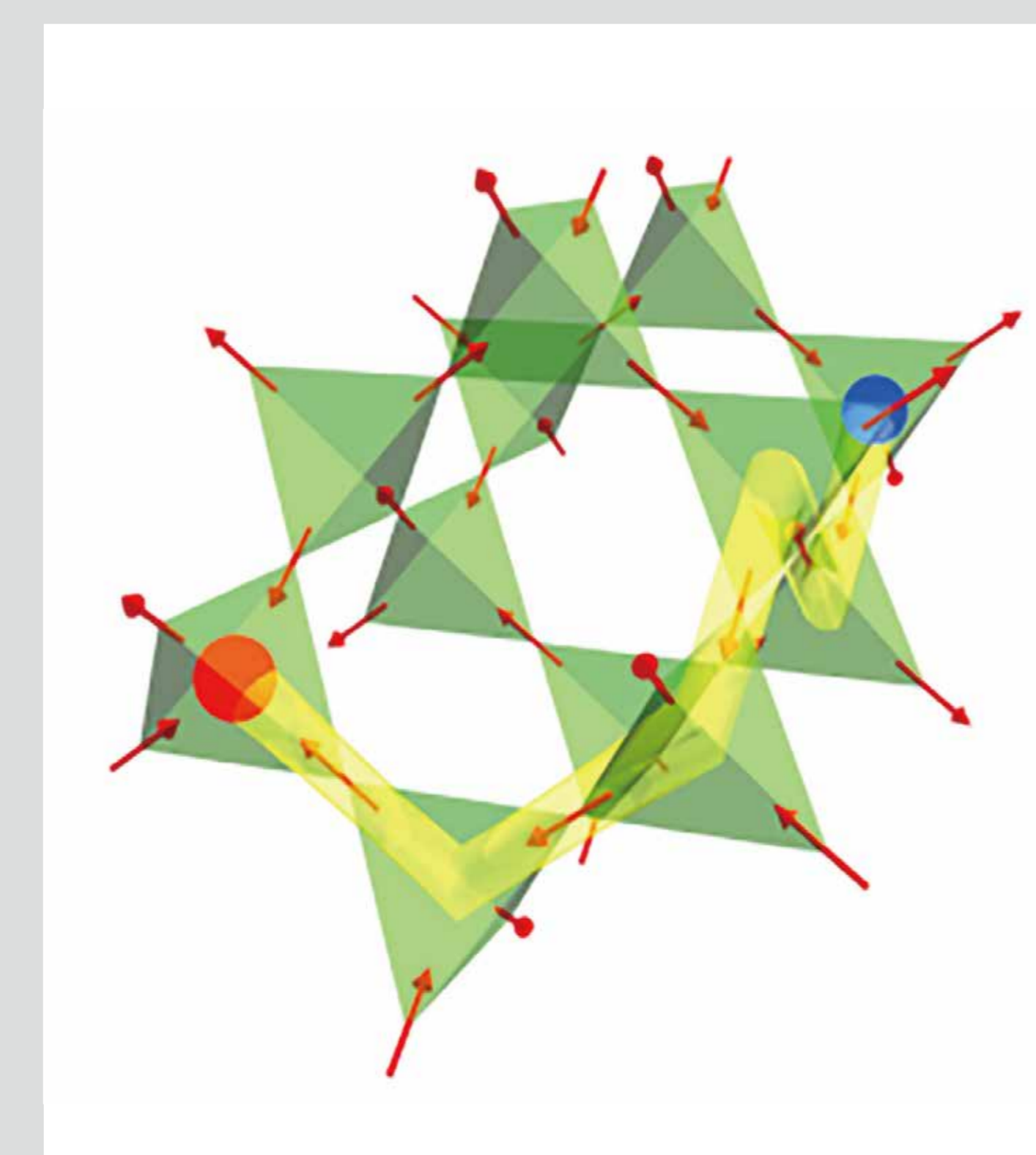
ジルコニア表面での燃料電池反応に関する第一原理分子動力学シミュレーション。窒素不純物原子(青球)の影響を受けて酸素分子(青球のすぐ上の赤球)の還元反応が活性化されることがわかった。
Doped nitrogen atom (blue ball) activating the electrochemical reduction of an oxygen molecule (red balls located above the blue ball), as revealed from the first principles molecular dynamics simulation of the zirconia-solution interface.

Quantum Materials Group

量子物質研究グループ



a. 強磁性体(左図)と反強磁性体 Mn_3Sn (右図)における異常ホール効果。
b. Mn_3Sn のカゴメ格子上の反強磁性構造
c. Mn_3Sn における室温でのホール抵抗率の磁場依存性。
Large Anomalous Hall Effect found in an Antiferromagnet
a. Anomalous Hall effect in ferromagnets (left) and in noncollinear antiferromagnets (right)
b. Crystal and spin structure of the antiferromagnet Mn_3Sn .
c. Magnetic field dependence of the Hall resistivity in Mn_3Sn at room temperature.



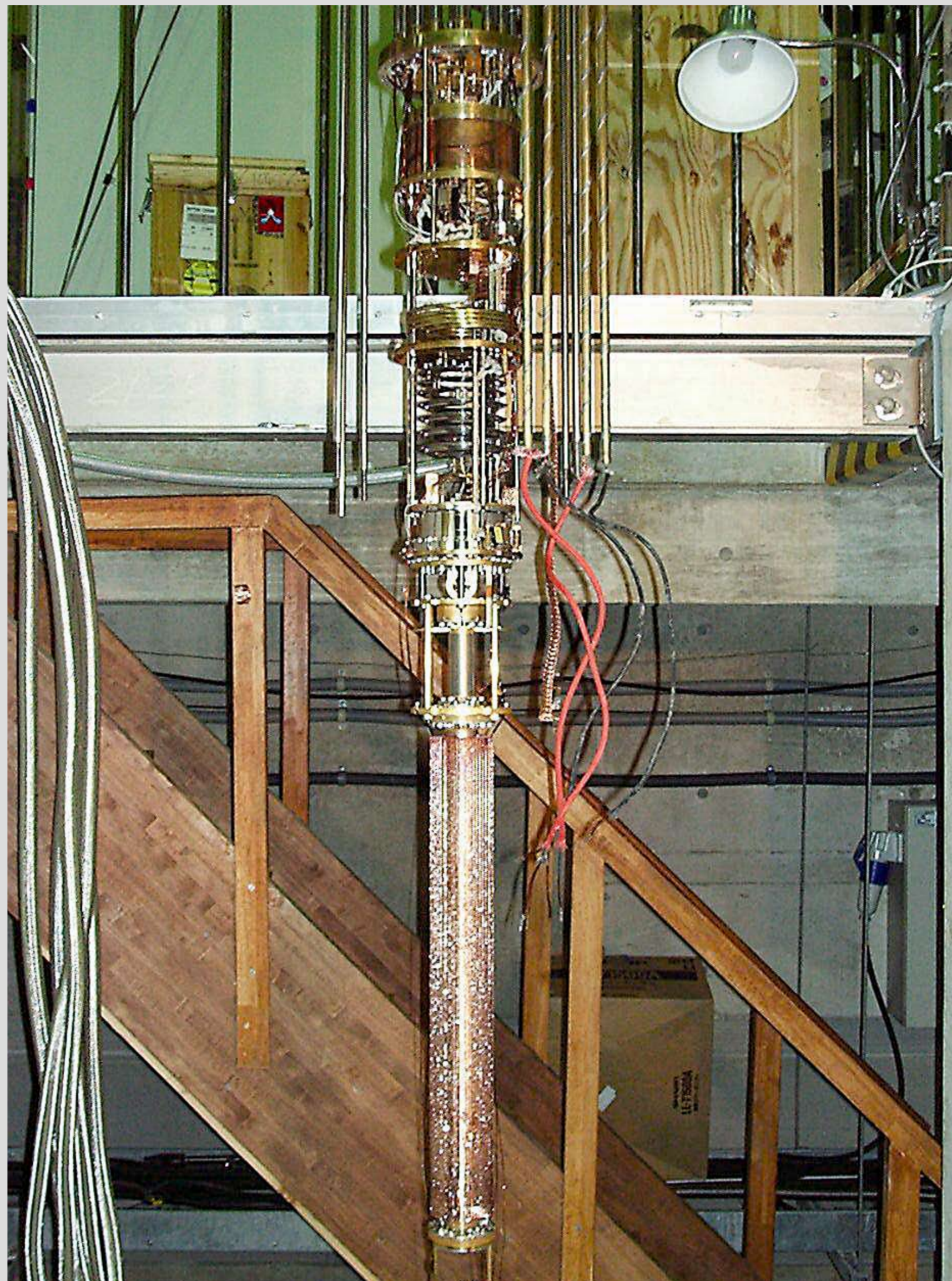
量子スピニアイスにおける磁気モノポールのコヒーレントな量子伝導を示す概念図。
Schematic picture showing the coherent propagation of magnetic monopoles in a quantum spin ice.

多重極限下での物性研究

物質を超低温、超高圧、強磁場、などの極限環境におくと、通常の状態とはまったく異なる性質を示します。超低温での超流動や超伝導現象、超高圧での構造相転移や絶縁体・金属転移、強磁場での磁気相転移などが良く知られた例です。このような極限環境下での物性変化は、しばしば従来の理論の枠組みの変更を促し、物性研究の新しい局面を切り開くものです。当部門では、多年にわたり各種の技術開発を行い、12万気圧を越える超高圧、数十マイクロケルビンにおよぶ超低温、毎秒2回転の核冷凍システムなど世界最高水準の極限環境の実現に成功し、それらの下で多くの新しい現象を見出してきました。現在、これまで蓄積された技術を発展させ、極限的な領域での物性を開拓するとともに、これらの極限環境と超伝導磁石による定常強磁場を組み合わせた多重極限環境での新しい物性研究を行っています。

Physics under multiple extreme conditions

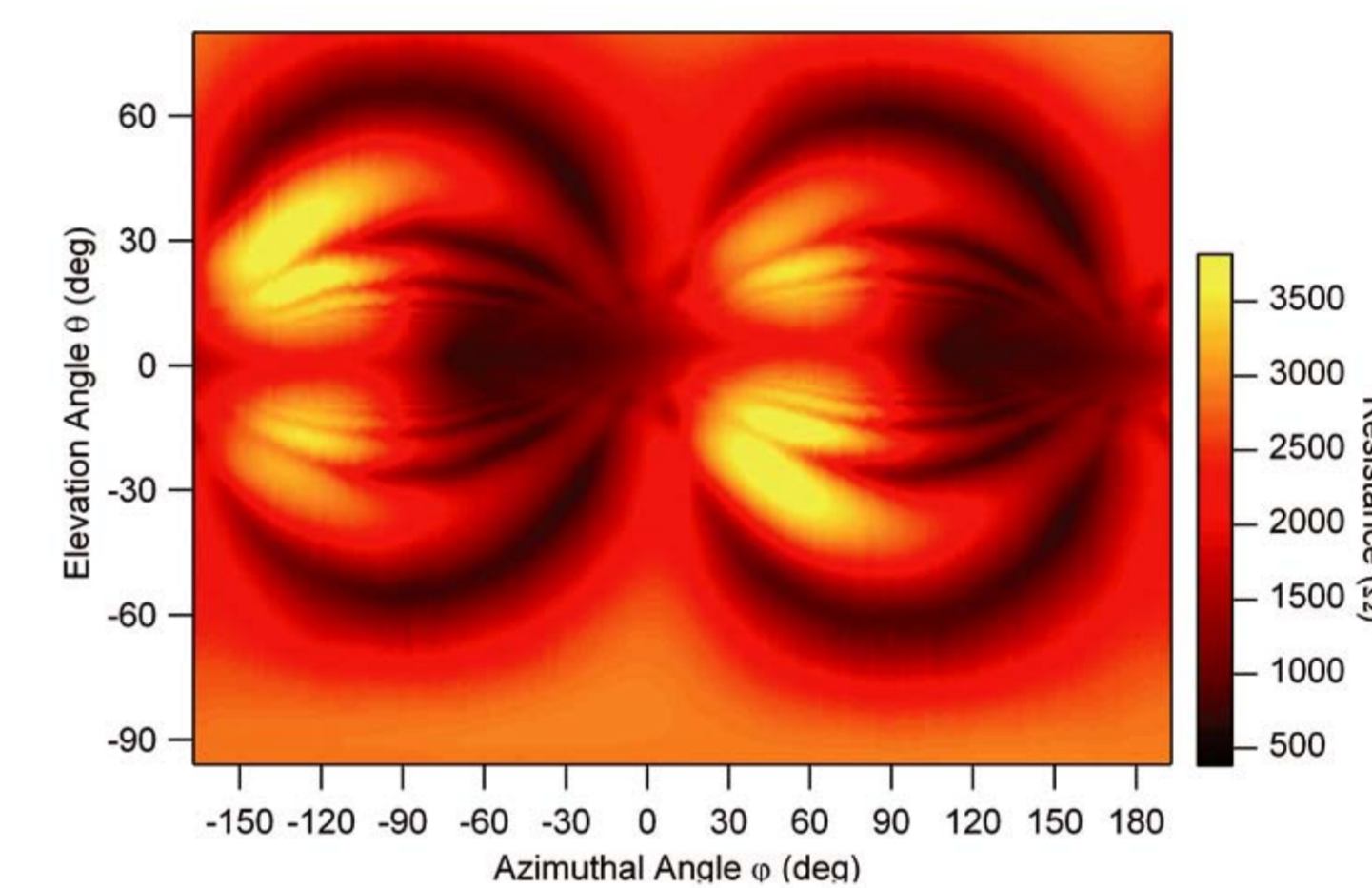
This division studies the physical properties of condensed matter under extreme conditions such as ultra low temperatures, and ultra high pressures combined with steady high magnetic fields up to 20 T. In addition to individual extreme conditions, physics under multiple extreme conditions is also focused on. Under these conditions, novel phenomena, which cannot be understood in terms of existing theories and thus stimulate the creation of new concepts, are expected to occur. Discoveries of such phenomena have often opened up new horizons in materials science. Many noteworthy instruments developed in this division include are those which produce low temperatures down to a few tens of μK , high pressure up to 12 GPa, and high speed rotation of cryostats at over 12 rad/sec. These machines are frequently used in collaboration with many scientists from throughout Japan and abroad.



核断熱消磁法による超低温生成装置。この装置によって10⁶ K、15 Tという世界最高水準の極限環境が得られる。
Large nuclear demagnetization refrigerator for experiments in world-record-class extreme condition, down to 10⁶ K and up to 15 T.



毎秒2回転までの定常回転状態の下で数百マイクロケルビン迄の超流動観測が行われている世界最高速の「ISSP超低温回転クライオスタット」。
ISSP ULT rotating cryostat with world's highest rotation speed. The physics of vortices and textural transitions in superfluid ³He is being studied under steady rotation with the speed up to 12 rad/s.



磁気抵抗の全方位磁場依存性パターンの測定。
Measurement of angle-dependent pattern of magnetoresistance over entire range of magnetic field orientations.



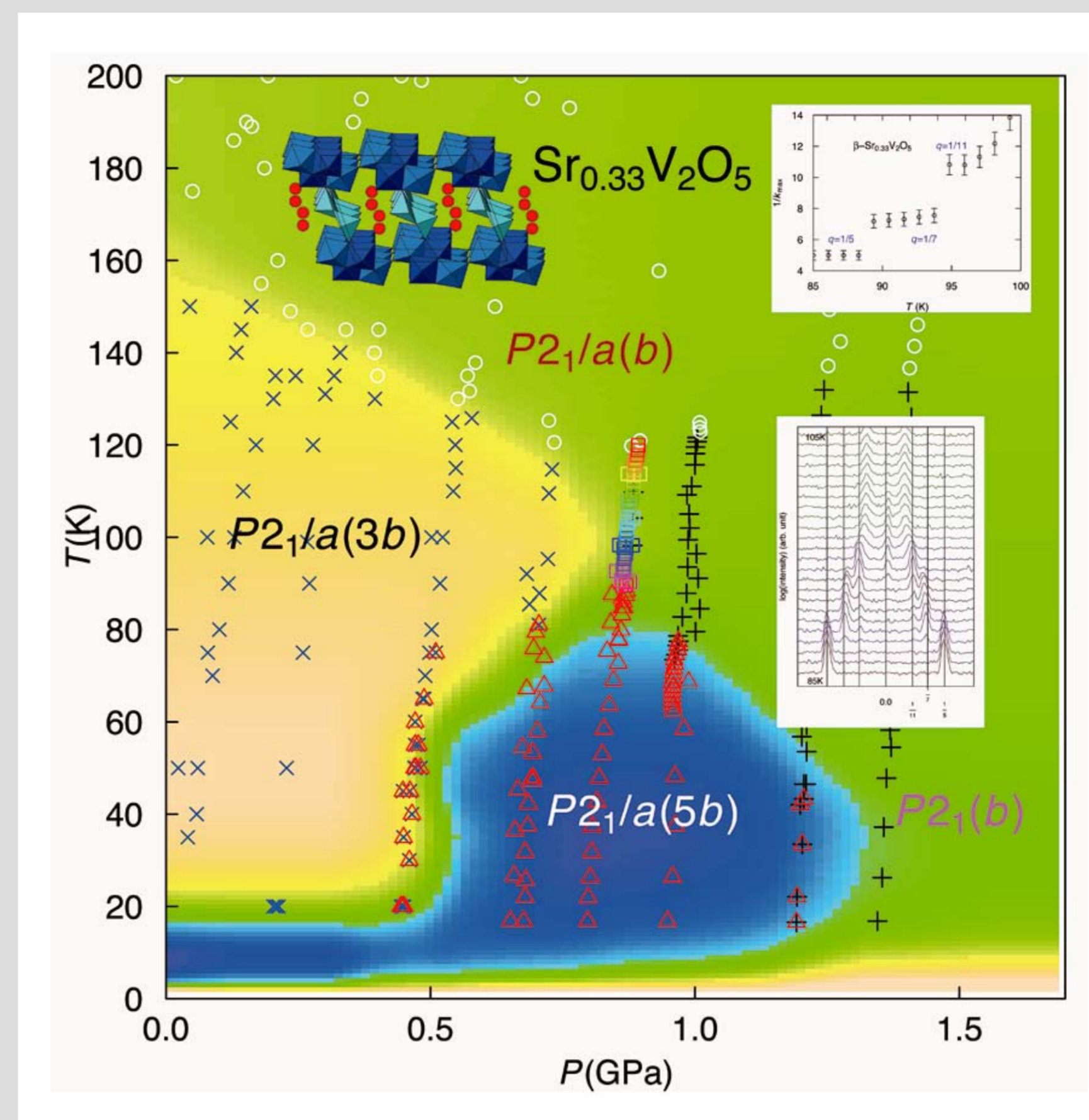
キュービックアンビル圧力発生装置。12万気圧以上の超高圧を低温強磁場と組み合わせた多重極限環境下での物性測定を行う事が出来る。
Cubic anvil high-pressure apparatus. Cryostat for experiment under multiple extreme conditions of low temperature, high magnetic field, and high pressure.

物性物理学をリードする 物質合成とスーパーコン ピュータによる 仮想物性実験

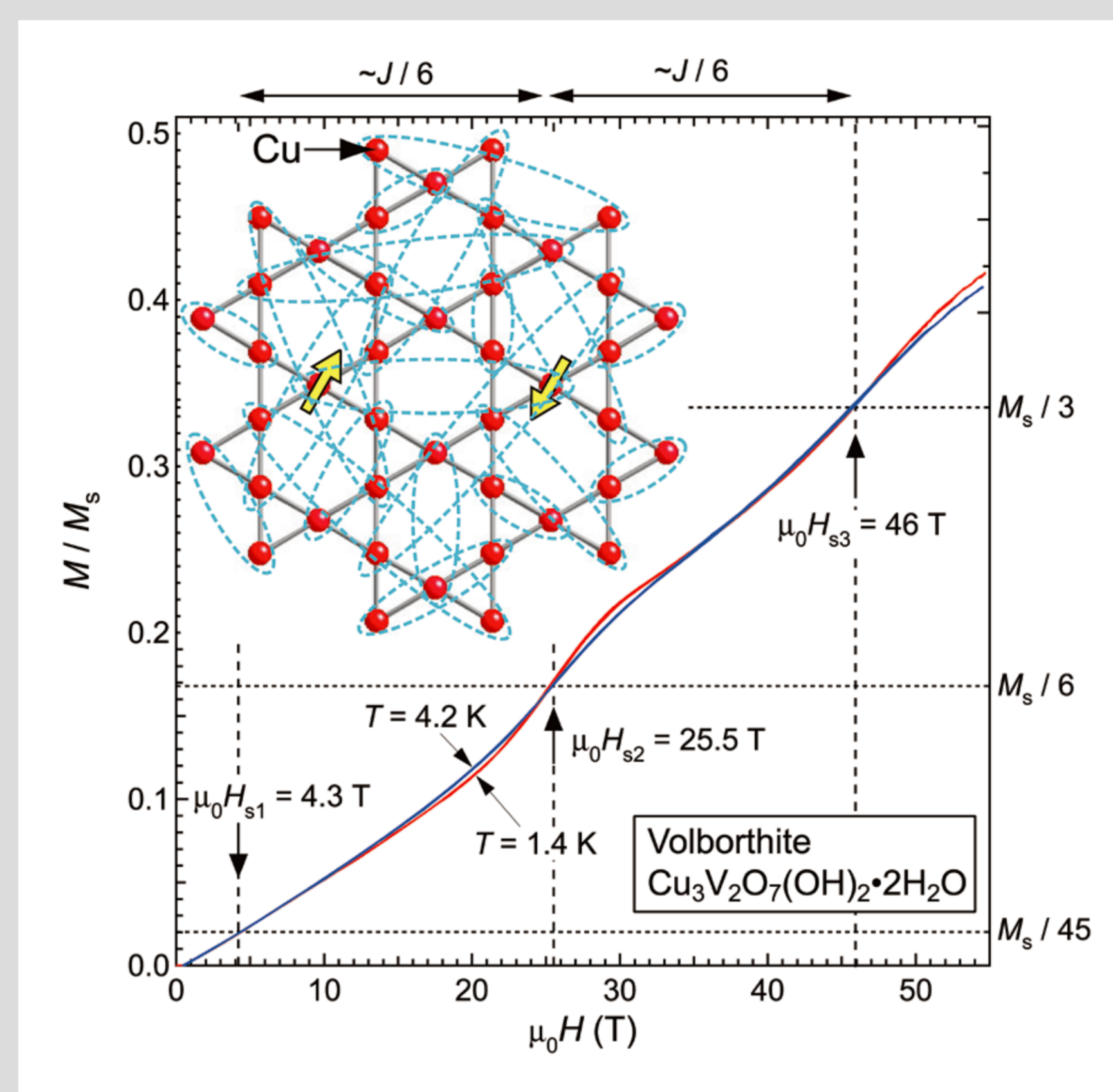
物質設計評価施設では、物質の「設計(Design)」、「合成(Synthesis)」、合成された物質を総合的に調べる「評価(Characterization)」の3つの研究を有機的に連携させる(DSCサイクル)ことにより、新しい物性・機能を持つ物質の開発を目指しています。物質設計部では、最先端の物性研究専用スーパーコンピュータを駆使して、原子間の相互作用によって生み出される様々な協力現象を解明しつつ新物質の設計を行い、物質合成・評価部では物質の合成、単結晶育成およびその組成分析や結晶構造解析を行うとともに、新しく開拓された物質群の電気的・磁氣的・光学的性質の総合評価を行っています。また、施設の機器は全国の研究者も利用できるよう維持・運営されています。

Materials synthesis and virtual experiments using a supercomputer for solid state physics

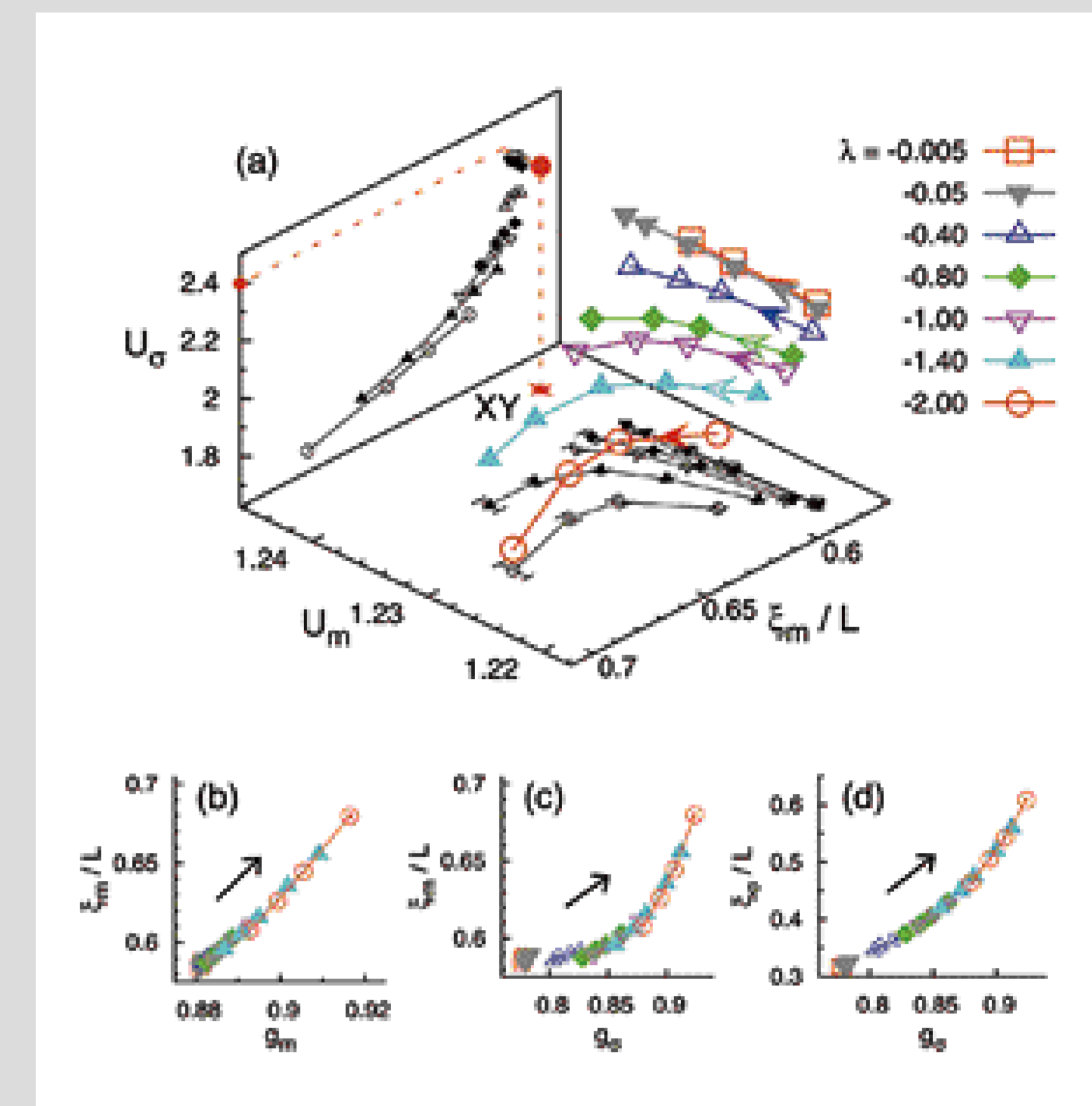
The aim of the Materials Design and Characterization Laboratory (MDCL) is to promote materials science with the emphasis on the DSC cycle, where DSC represents the three processes involved in developing new materials; design, synthesis, and characterization. A modern supercomputer is used to reveal novel mechanisms behind various cooperative phenomena in condensed matter and for theoretical design of new materials as well as materials with novel nano scale structures. Various types of new materials are being synthesized and single crystals are being grown for physical measurements. The structural, electromagnetic, and optical properties of the materials are characterized in various ways. The results are immediately feedback to the synthesis and design of materials. Almost all the facilities of the MDCL are open to domestic scientists through the User Program conducted by the Steering Committee of the MDCL.



バナジウムブロソスの劇的な帯磁率変化と狭い温度圧力領域で現れる長周期構造。Drastic change of magnetic susceptibility and long-period structures within a very narrow pressure-temperature region found in a vanadium bronze.

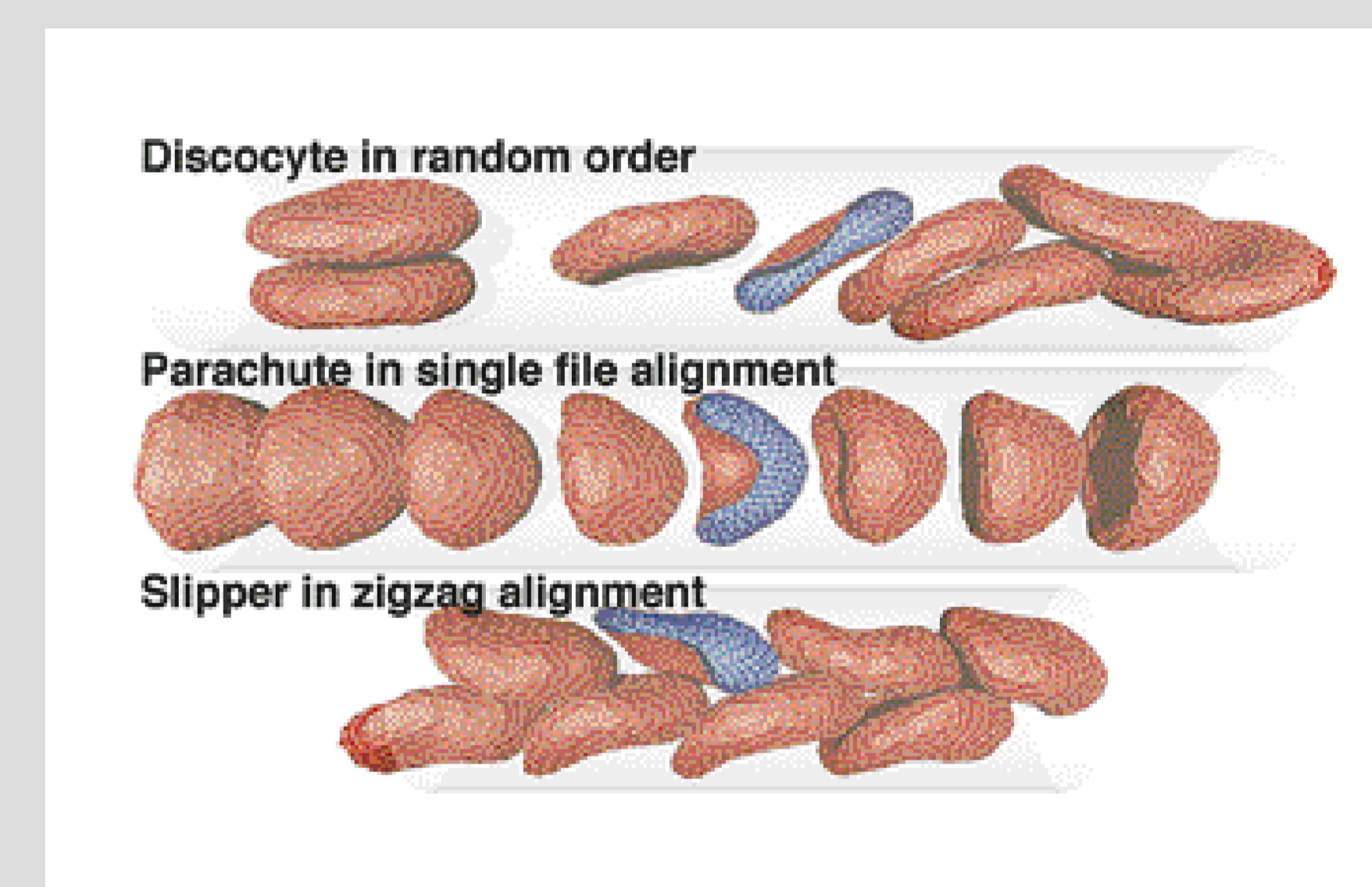


スピン1/2カゴメ格子反強磁性体Volborthiteに現れる磁化ステップ現象。"Magnetization steps" observed in the spin-1/2 kagome antiferromagnet Volborthite.



3次元2重XYモデル(2つのXYモデルを双二次相互作用で結合させたモデル)の数値くり込み群の流れ図。2つのXYモデルの間の相互作用(λ)が有限のとき、くり込みの流れは独立XY固定点から系統的に遠ざかり、一次相転移が確かめられている領域($\lambda = -2$)に至る。このことは常磁性相から秩序相への相転移が一次転移となることを意味する。

A flow diagram of the 3D double-XY model obtained by numerical simulation. The flow starting around the decoupled XY fixed point (indicated by a large filled circle) systematically deviates from it, evolving toward the region where a clear first order signature has been obtained ($\lambda = -2$). No separatrix is found and it strongly suggests that the transition is always of the first order for this model.



細管を流れる赤血球型ベシクルのシミュレーション。流速と密度によって異なる性格のダイナミクスが見られる。上図:低密度、低速 中図:低密度、高速 下図:高密度

Simulation of red blood cells in capillary flow. We observe different dynamics for different flow rate and density of the cells. Upper: low density, small flow rate Middle: low density, high flow rate Bottom: high density



スーパーコンピュータ システムA NEC SX-9/64 cpu
Supercomputer System A NEC SX-9/64 cpu



スーパーコンピュータ システムB SGI Altix ICE 8400EX/3840 cpu
Supercomputer System B SGI Altix ICE 8400EX/3840 cpu

物質の構造と運動を調べる中性子散乱

物質を構成する最小基本粒子である中性子は、透過力に優れ、微小磁石(スピン)の性質を持つので、原子の中心にある原子核やその周りにある電子のつくる磁場(磁気モーメント)と力を及ぼし合います。この性質を利用して多数の中性子を物質に当て、その散乱の仕方(方向・スピード・スピンの向きの変化)を測り、物質内での原子や磁気モーメントの配列や運動の様子を知る実験方法を「中性子散乱」と言います。

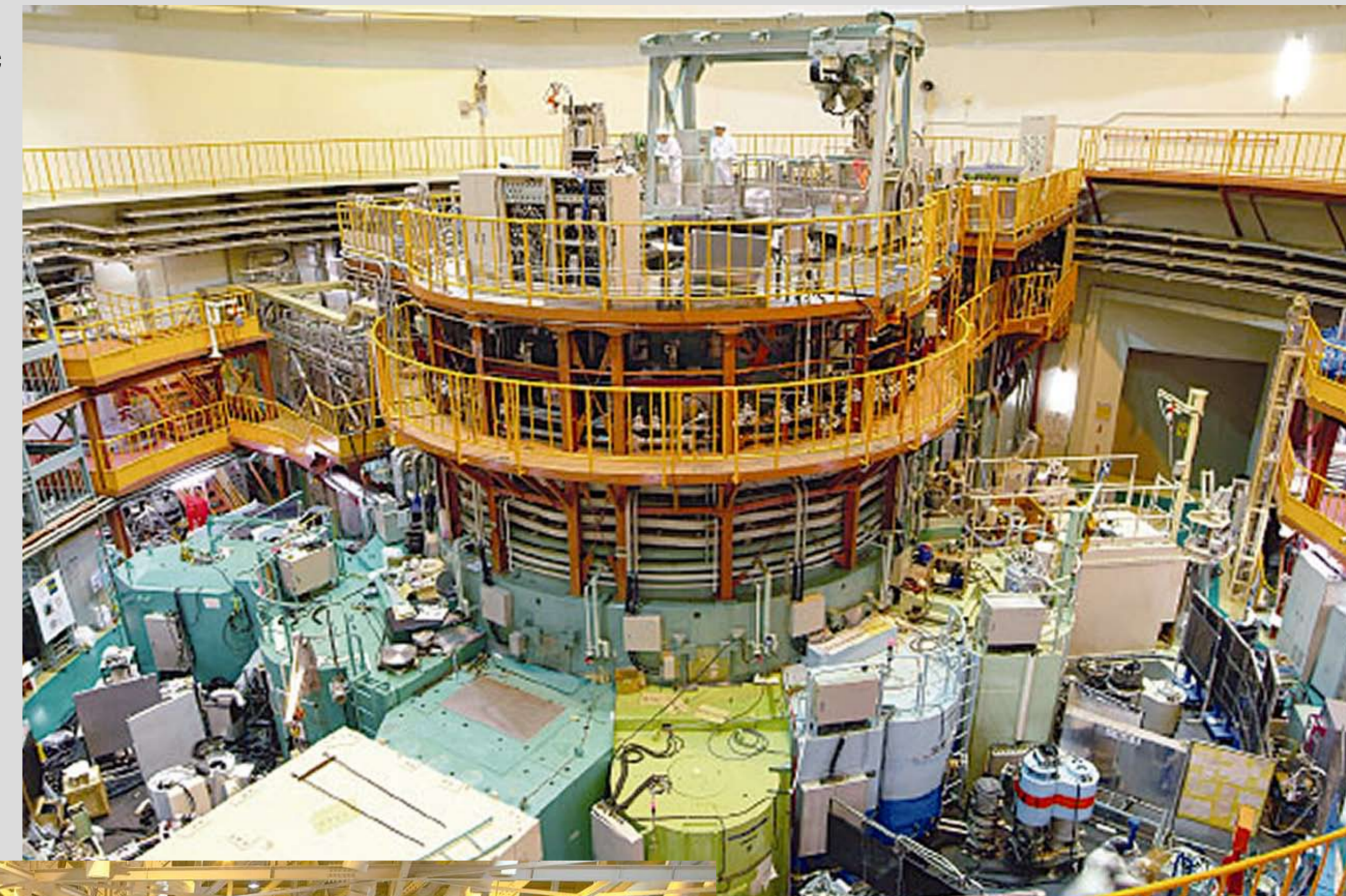
この方法により物質の性質や機能が、原子・分子の配列や運動状態とどのように関わっているかを解明することができます。そのため、物性物理のみならず、化学・高分子科学・生物学・材料科学などの広い分野で研究に応用されています。当施設では、中性子の線源である研究用原子炉(日本原子力研究開発機構, JAEA)に大規模な実験装置を多数設置して中性子散乱の全国共同利用を進めるとともに、高温超伝導をはじめとする物性発見の機構解明の研究に取り組んでいます。

Neutron scattering - a unique tool to study the structure and dynamics of matter

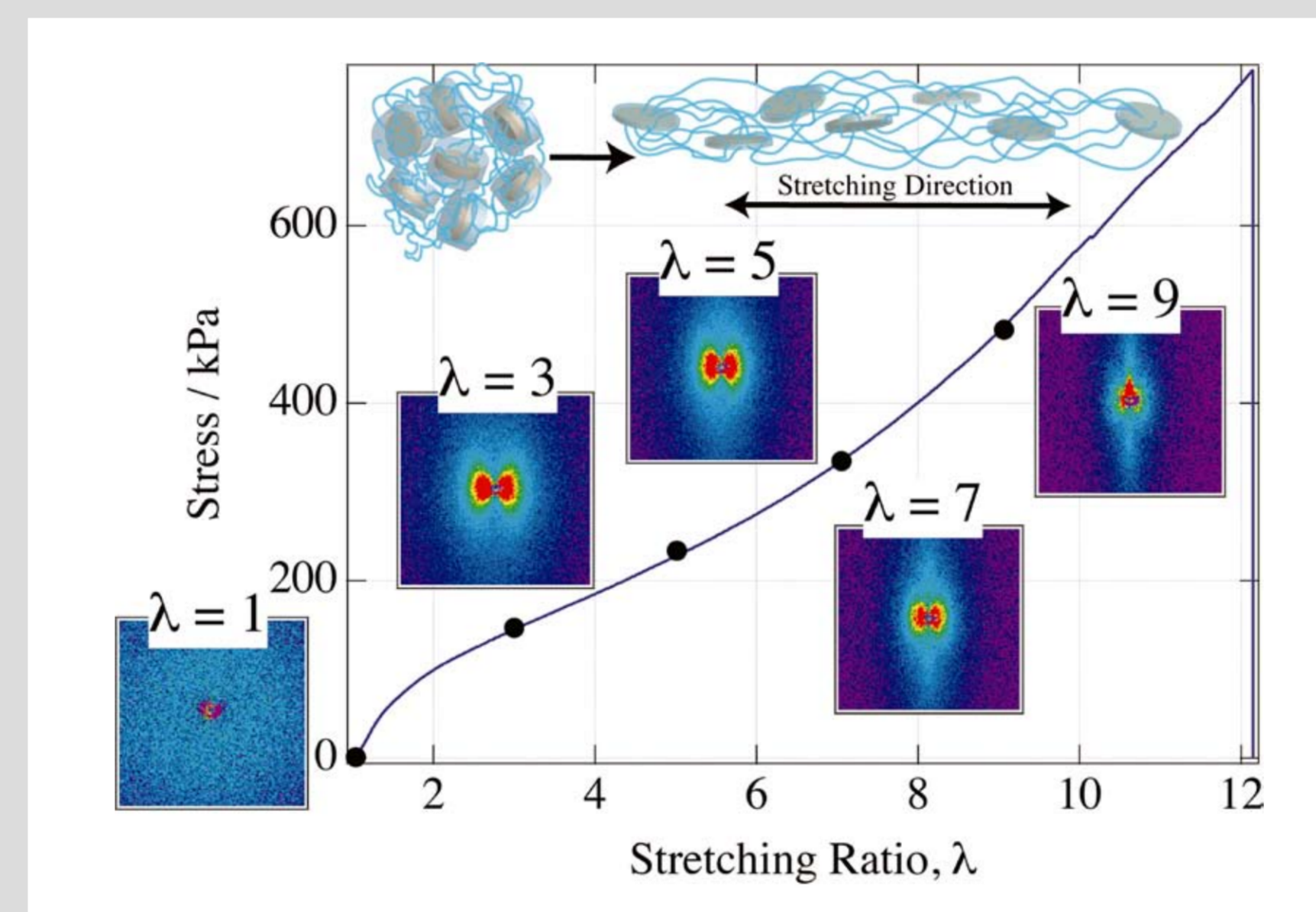
Neutron is one of ingredients which form nuclei or atoms. It can penetrate deep inside of materials and interact with a nucleus or magnetic fields created by electrons which surround the nucleus. To utilize such neutron properties, crystal and magnetic structures in the materials are investigated by neutrons, and this method is called "Neutron Scattering".

The Neutron Science Laboratory (NSL) provides a large scale General User Program for Neutron Scattering. Under this program, close to 300 proposals are submitted each year, and the number of visiting users under this program reaches over 6000 (person-day/year). Major research areas include solid state physics (strongly correlated electron systems, high-Tc superconductors, heavy fermion systems, low dimensional magnetism, high-pressure physics etc.), fundamental physics and neutron beam optics, polymer, chemistry, biology, and materials sciences.

日本原子力研究開発機構所有研究用原子炉JRR-3。Research Reactor, JRR-3, at Japan Atomic Energy Agency (JAEA).

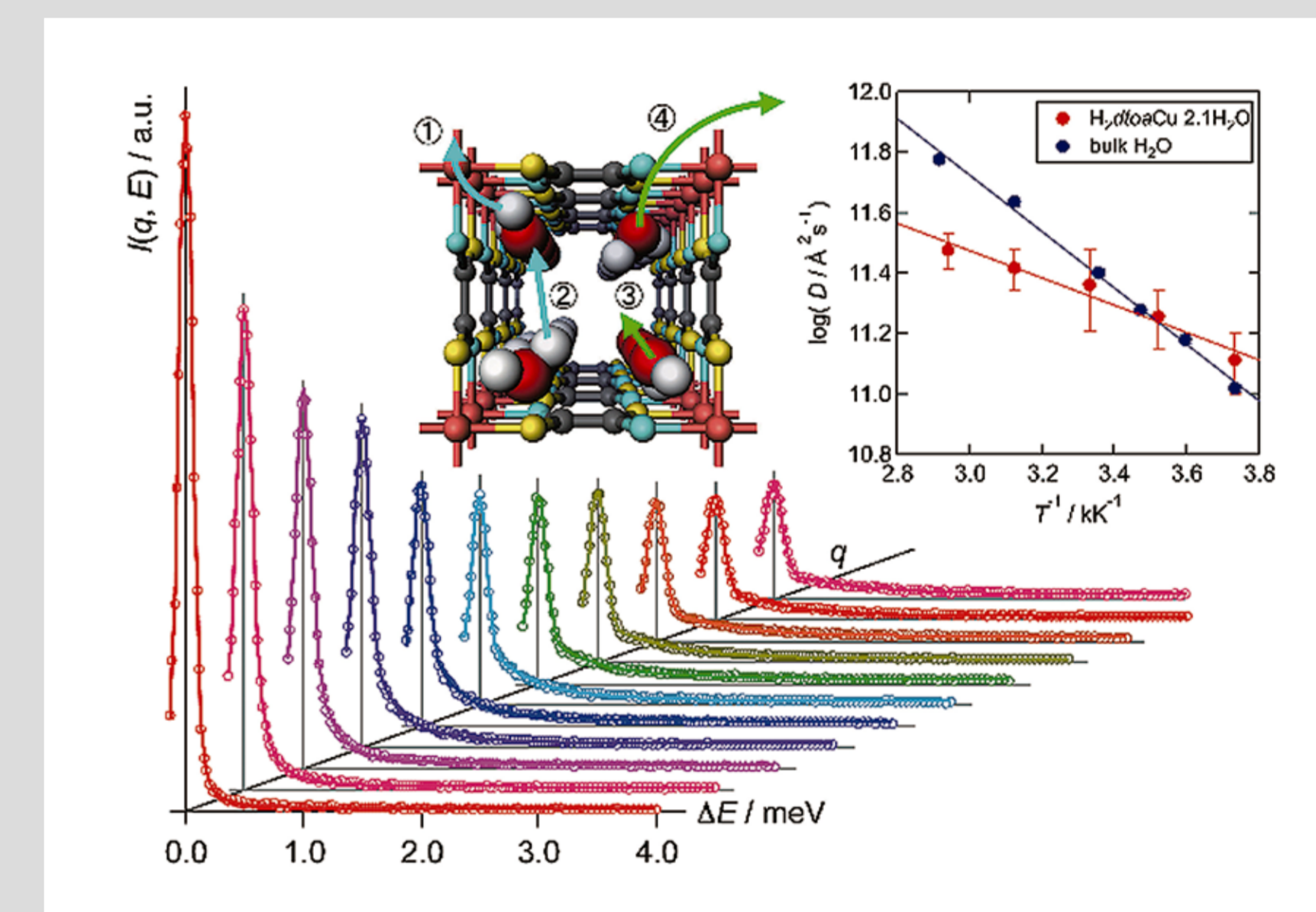


JRR-3 ガイドホールの中性子分光器群。Neutron scattering spectrometers in the guide hall of JRR-3.



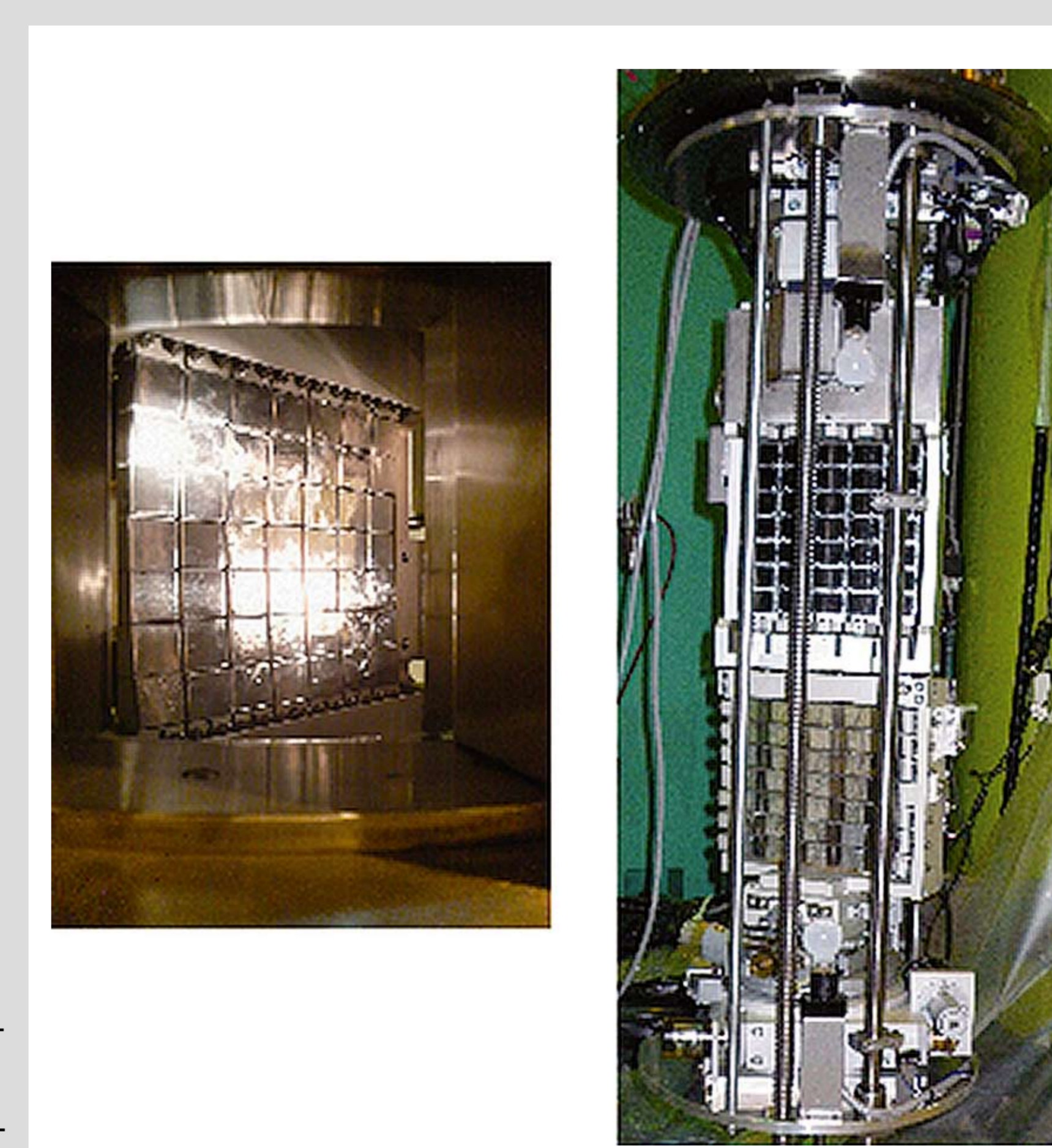
中性子小角散乱によるナノコンポジットゲルの変形機構の研究。図は応力-延伸比曲線と対応する2次元中性子散乱パターン。水分率が90%にもおよぶゲルにもかかわらず、10倍以上の延伸が可能。その秘密は厚み1nm 直径30nmの板状粘土鉱物と高分子の架橋構造にある。

Small-angle neutron-scattering study on deformation mechanism for nanocomposite polymer gels. Stress vs stretching-ratio plot with two-dimensional scattering patterns. Although the water content is more than 90%, the gel can be stretched to more than 10 times its original length owing to network structure of polymer chains and clay platelets of 1 nm thickness and 30 nm diameter.



パルス冷中性子分光器(AGNES)によるルベアン酸銅水和物のプロトン伝導の研究。準弾性散乱スペクトル(左下)から拡散係数(右上)を計算し、プロトン伝導モデル(左上)との比較を行う。

Study on proton conductivity of copper rubenate hydrates using a pulse cold-neutron spectrometer (AGNES, JRR-3). The diffusion coefficients (upper right) were calculated from the quasielastic spectra (lower left) and compared with the model of proton conduction (upper left).



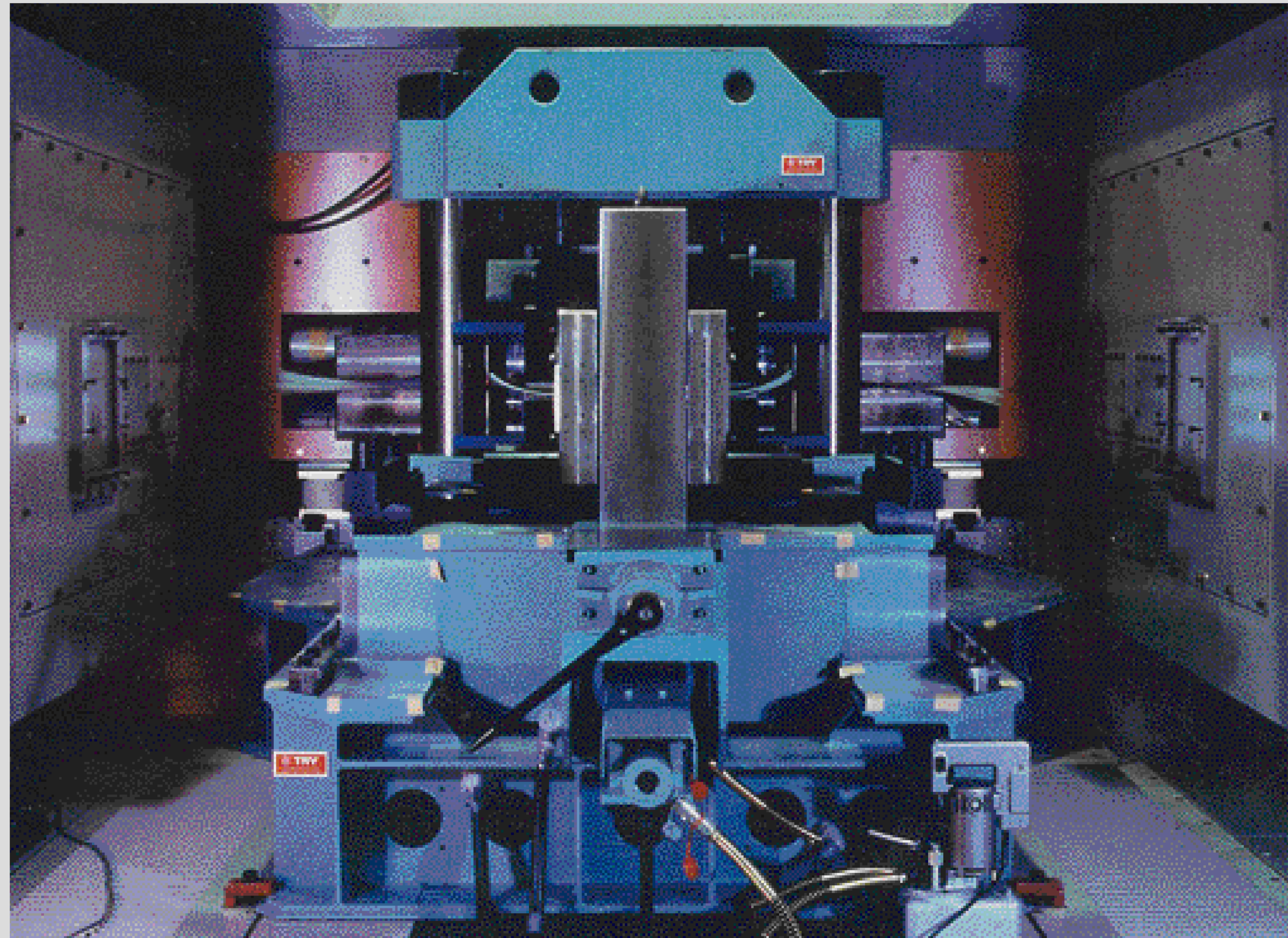
中性子散乱用2方向フォーカシングアナライザー、モノクロメータ。Doubly focusing analyzer and monochromator for neutron scattering.

世界最強のマグネットによる物質極限機能の解明

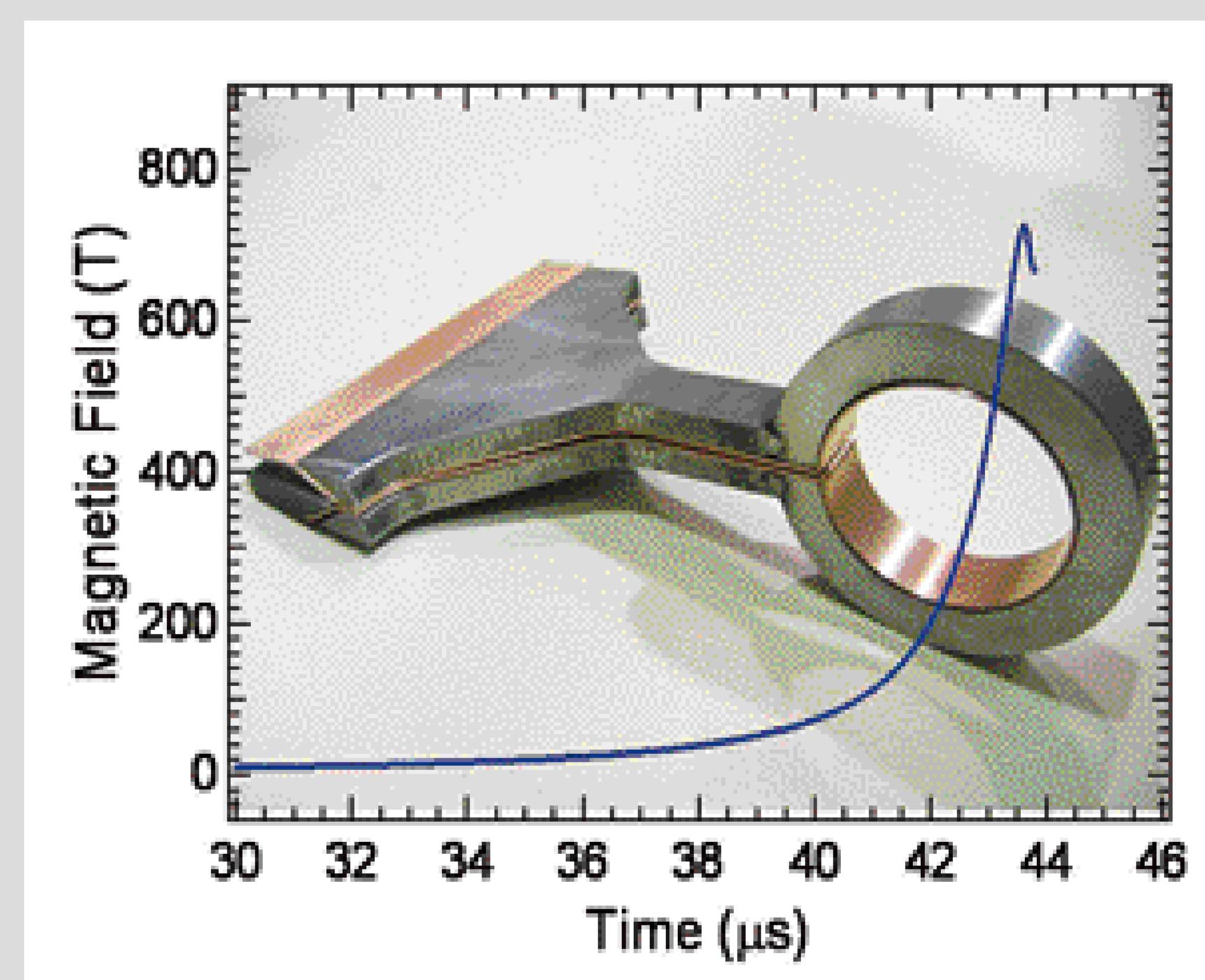
強磁場を半導体、磁性体、新奇な金属、超伝導物質などに適用し、極限状態における電子状態を調べています。また、より強い磁場発生のためのマグネット開発も行っています。非破壊型長時間パルスマグネットでは、電気伝導、光学、磁化測定などの精密な物性計測に用いられるだけでなく、高圧、低温環境と組み合わせた実験にも使用されます。これらは、強い磁場を必要とする国内外の多くの物性研究者に利用されています。世界最大の直流発電機(210メガジュール)によって駆動されるロングパルスマグネットとして100テスラ磁場発生へ向けた研究開発も進めています。また、電磁濃縮法、および、一巻きコイル法による破壊的手法にて100テスラ以上の超強磁場発生とそれを用いた物性研究をおこなっています。

Investigation of extreme material functions using the world's strongest magnets

Strong pulse magnets are being developed, and the electronic states in semiconductors, magnetic materials, novel metals, and superconducting materials are under study in extreme physical conditions. The measuring techniques by use of the non-destructive and long-pulse magnets are available for electric transport, optical, and magnetization measurements at low temperatures and/or high pressures. The facilities are offered for use by not only domestic users but also those from overseas. It is planned to establish long pulse magnets energized by the world's largest 210 MJ-DC flywheel generator to explore the 100 T regime. Magnetic fields above 100 T are achieved by destructive electro-magnetic flux compression and the single-turn coil techniques, and are used for research in solid-state physics.



爆破保護室内に設置された「電磁濃縮法」による超強磁場発生装置。
An ultra high-magnetic-field generation system using the electro-magnetic flux compression method has been installed at ISSP inside protection housing.



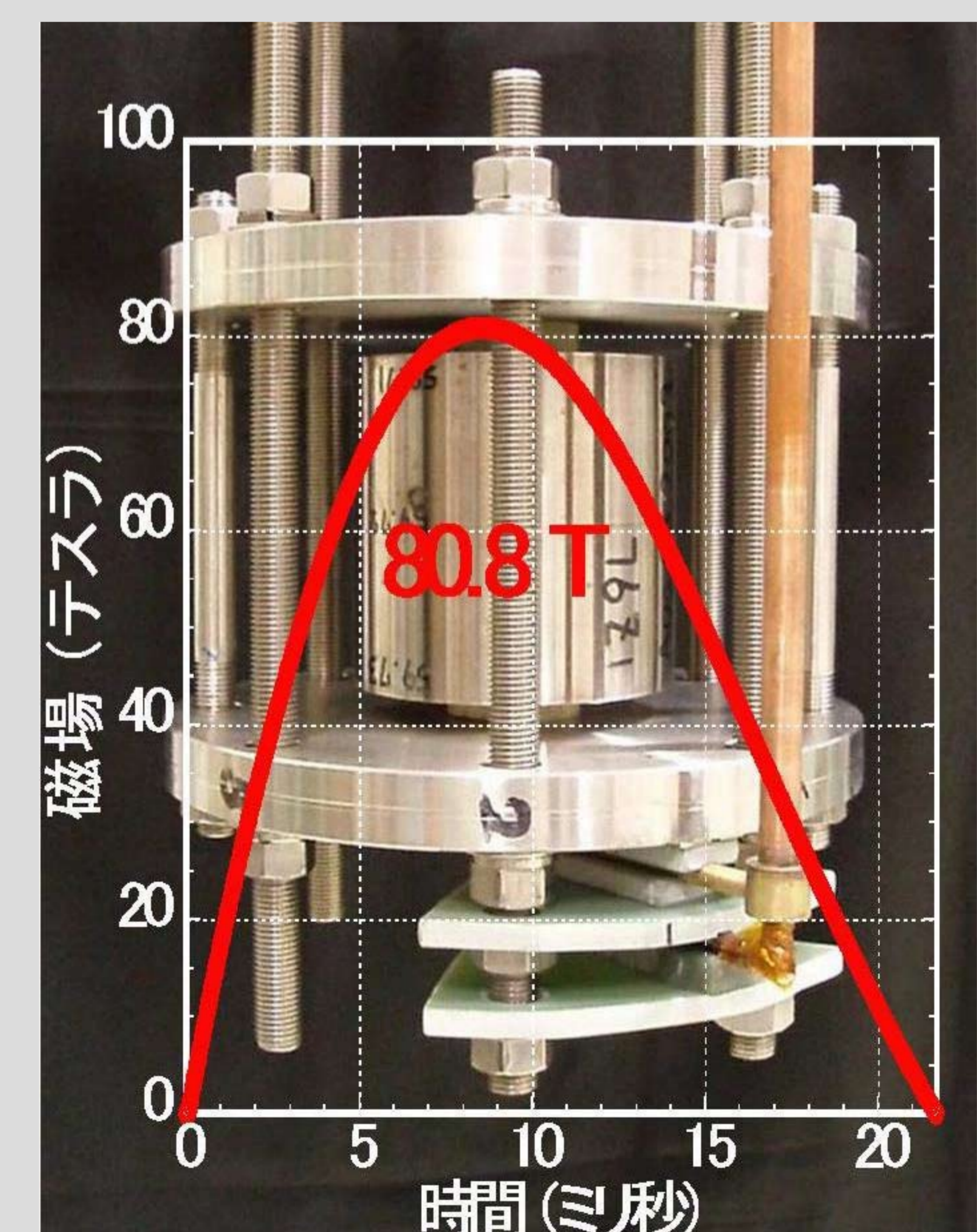
電磁濃縮磁場発生に用いる主コイルと磁場濃縮時間発展。
The primary coil used for electro-magnetic flux compression with the time profile during the magnetic field compression.



平成20年に完成した国際強磁場コラボラトリー棟。
View of the new buildings of the "International High Magnetic Field Collaboratory" completed in 2008.



世界最大の直流電源: 回転蓄積エネルギー 210MJのフライホイール発電機。
The world's largest DC electric power generator; a flywheel generator capable 210 MJ stored by a rotation energy.



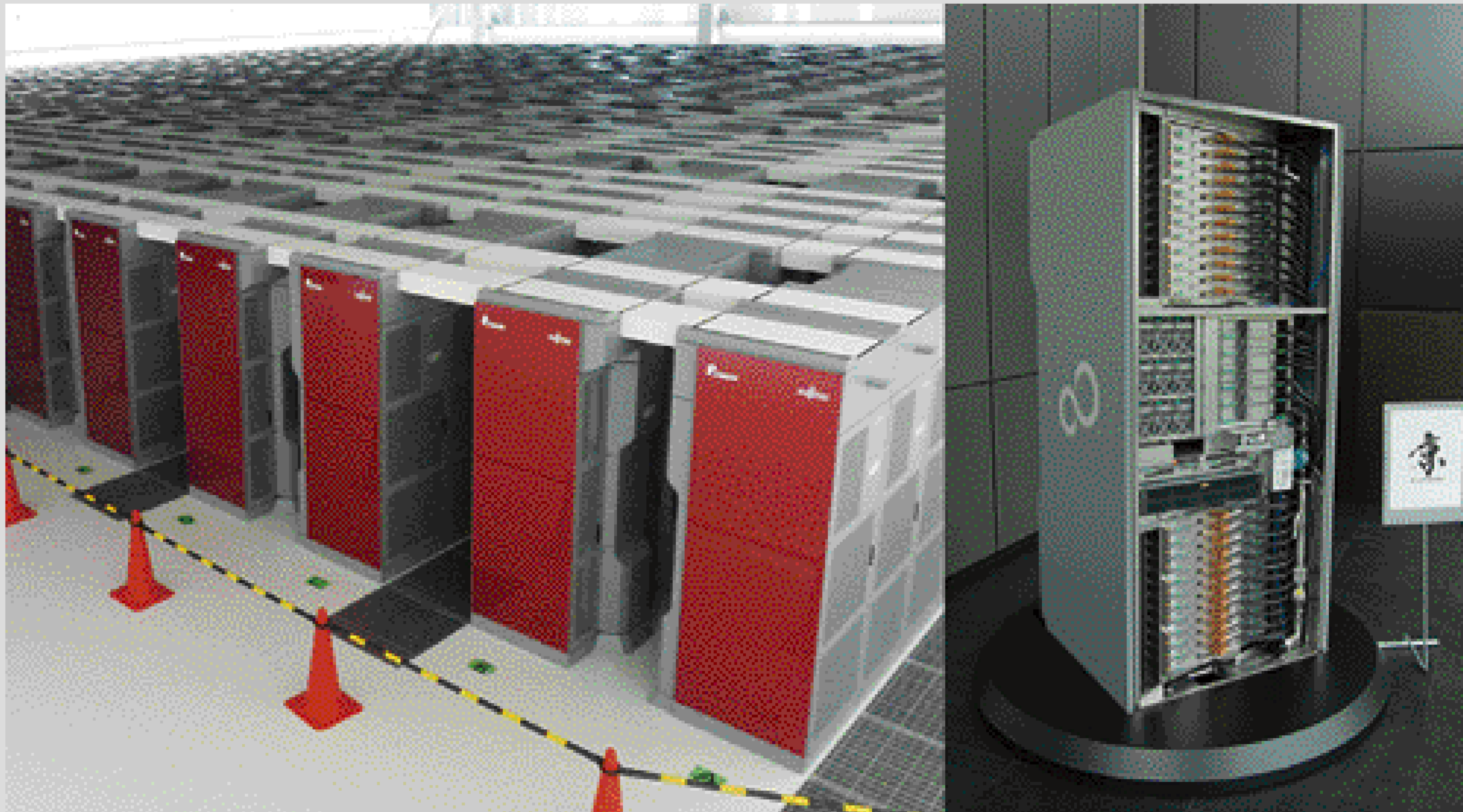
非破壊長時間パルスマグネットと磁場波形。
The non destructive long-pulse magnet with the waveform of a magnetic field.

超並列計算で切り拓く 新しい物質科学

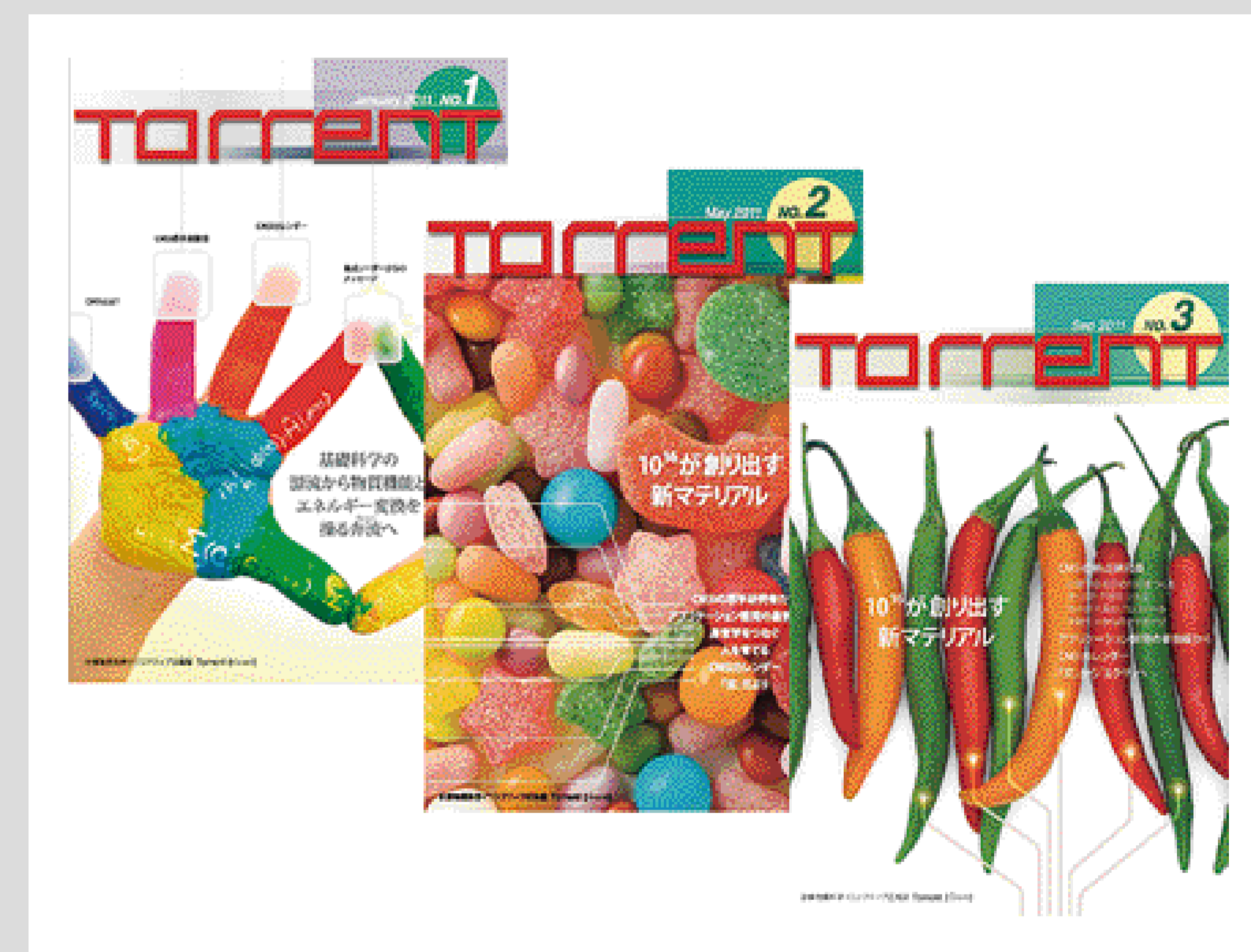
物質科学の目的は、本来的に非常に多数の構成要素からなる物理系の性質を解き明かすことにあります。そのような問題に対する完全な解答を人間の頭脳だけで導くことは不可能であり、近年、大規模数値計算によるアプローチが盛んになったのは当然のことといえます。コンピュータを利用した精密な物性予測によって、物性物理学の基礎的な問題から、産業応用に結びつく応用問題に至るまで、広い範囲で重要な成果が挙がっています。一方で、近年のハードウェア開発のトレンドは並列化(=演算器の多数化)であり、多くのコアにいかにも効果的に計算を分業させるかが計算物質科学の挑戦的課題となっています。本センターでは、「京」や、物性研究所共同利用スパコンを始めとする様々な計算資源を活用して、この課題に組織的に取り組んでいます。たとえば、京コンピュータのある神戸に分室を設け、教員や研究員が常駐する体制をとっています。また、本センターは計算物質科学コミュニティの組織である計算物質科学イニシアティブ(CMSI)の活動の本部拠点ともなっています。

Exploring new frontiers in materials science with massively parallel computing

The goal of the materials science is to understand and predict properties of complicated physical systems with a vast number of degrees of freedom. Since such problems cannot be solved with bare hands, it is quite natural to use computers in materials science. In fact, computer-aided science has been providing answers to many problems ranging from the most fundamental ones to the ones with direct industrial applications. In the recent trends of the hardware developments, however, the growth of computer power is mainly due to the growth in the number of the units. This fact thrusts a very challenging problem before us --- how can we parallelize computing tasks? In order to solve this problem in an organized way, we coordinate the use of the computational resources available to our community. For example, we established a branch office of the center at Kobe, where ISSP researchers are stationed. The center also plays the role of the headquarters of the CMSI, an organization for massively parallel computation in the materials science community.



「京コンピュータ」(理化学研究所計算科学研究機構, 神戸)
"K-computer" (AICS/RIKEN, Kobe)



CMSI 広報誌「Torrent」
CMSI periodicals "Torrent"



物性研究所計算物質科学研究センターのスタッフ
Staff members of CCMS



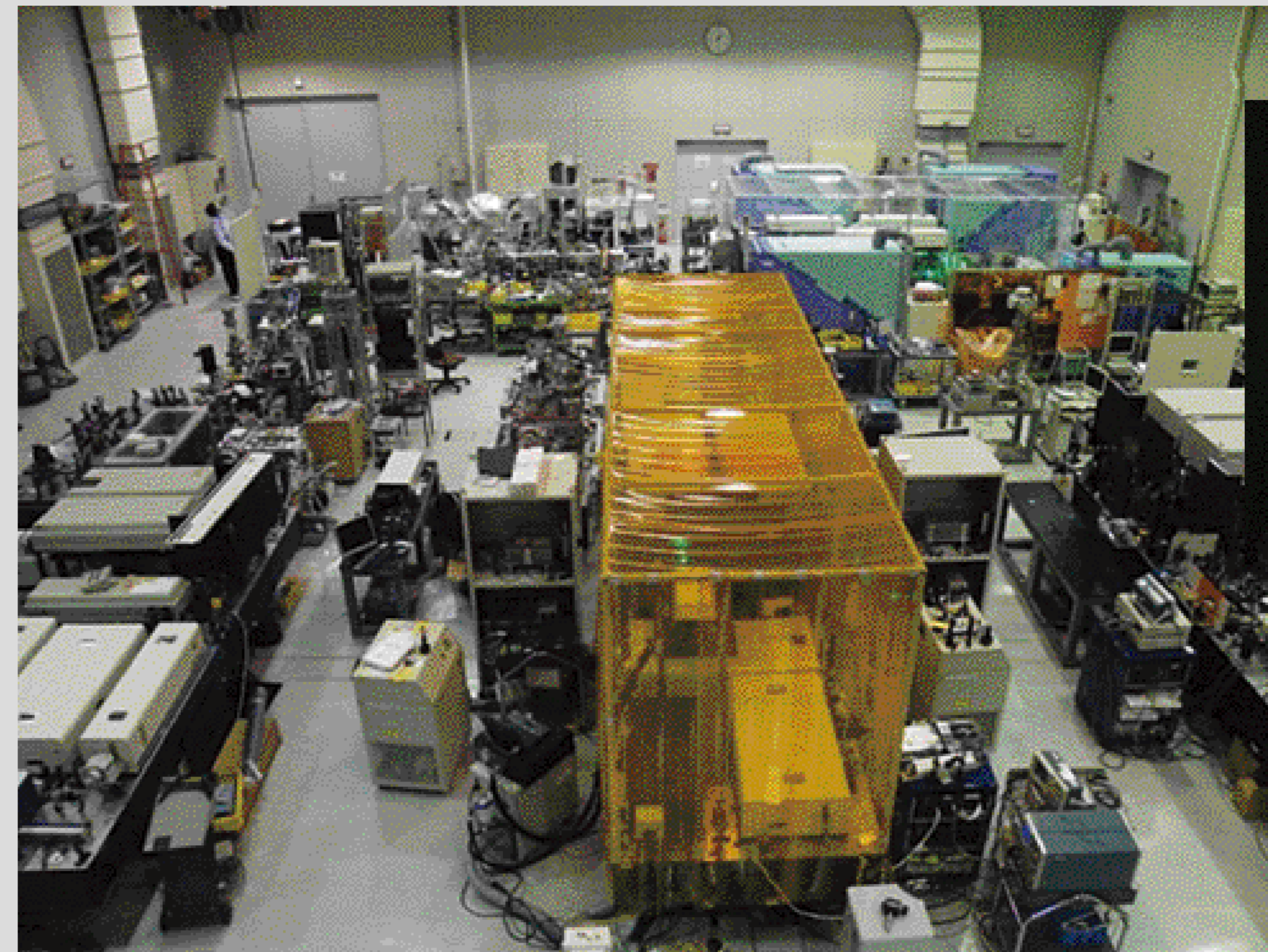
センター神戸分室
The Kobe branch of CCMS

物性科学を先導する 極限光

二十世紀初頭に量子力学や相対論を生み出すきっかけを作ったのは光でしたが、現在ではレーザーや放射光により高度に制御された多彩な光の発生が可能になり、物性研究において活躍しています。当センターでは、レーザーを用いて極限的な光を発生させる技術により、軟X線などの高エネルギー光や超高速現象を捉えるためのアト秒 (10^{-18} 秒)光を開発しています。また、SPring-8では世界最高輝度の放射光ビームラインを使用した軟X線科学を研究しています。これらの最先端光を用いて、各種の分光計測法を開発し、超伝導体、強相関系物質、液体、生体物質、半導体ナノ構造、固体表面界面、光誘起相転移物質などに適用し、幅広く物性研究を展開しています。

Materials science using extreme light

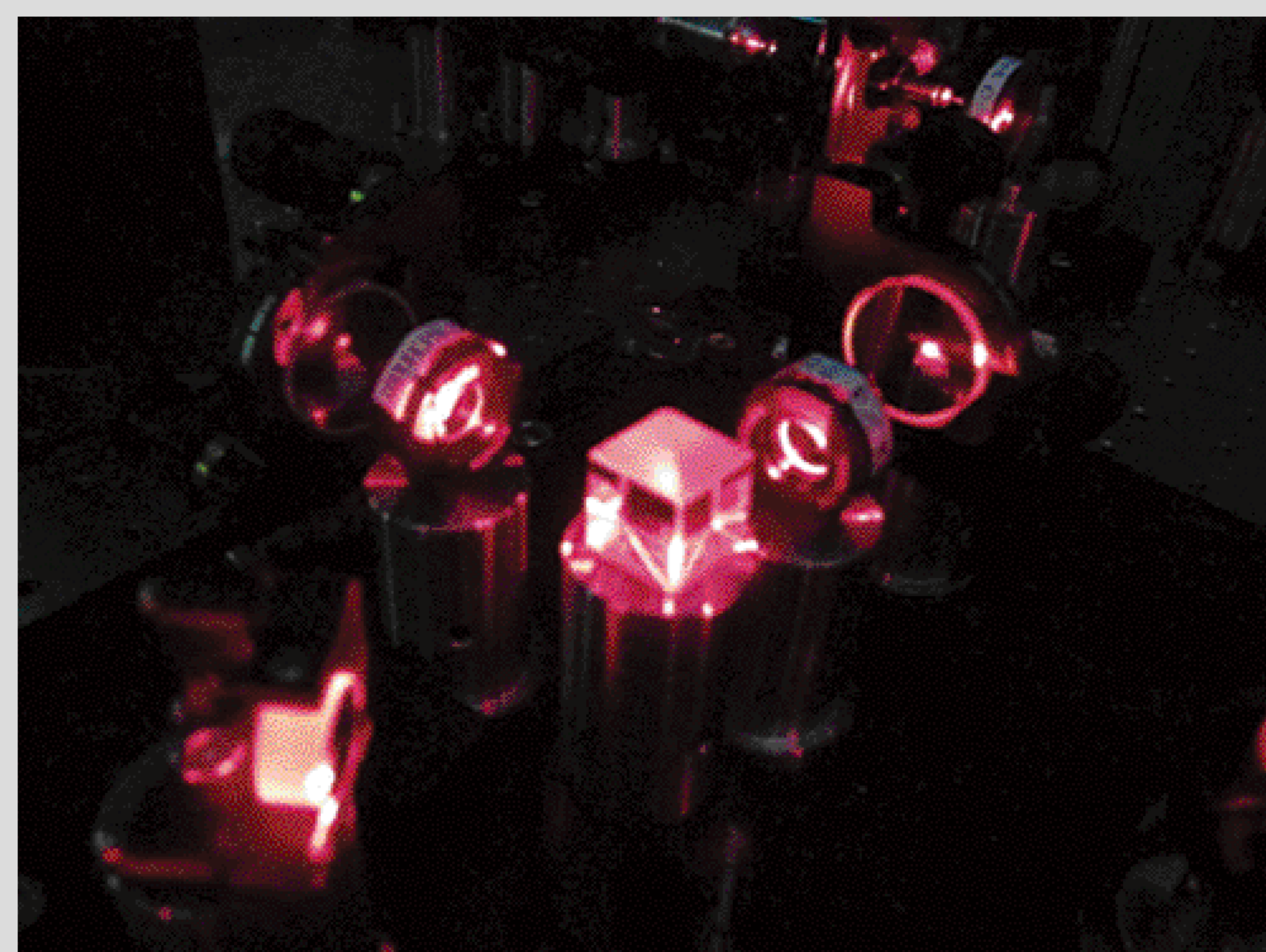
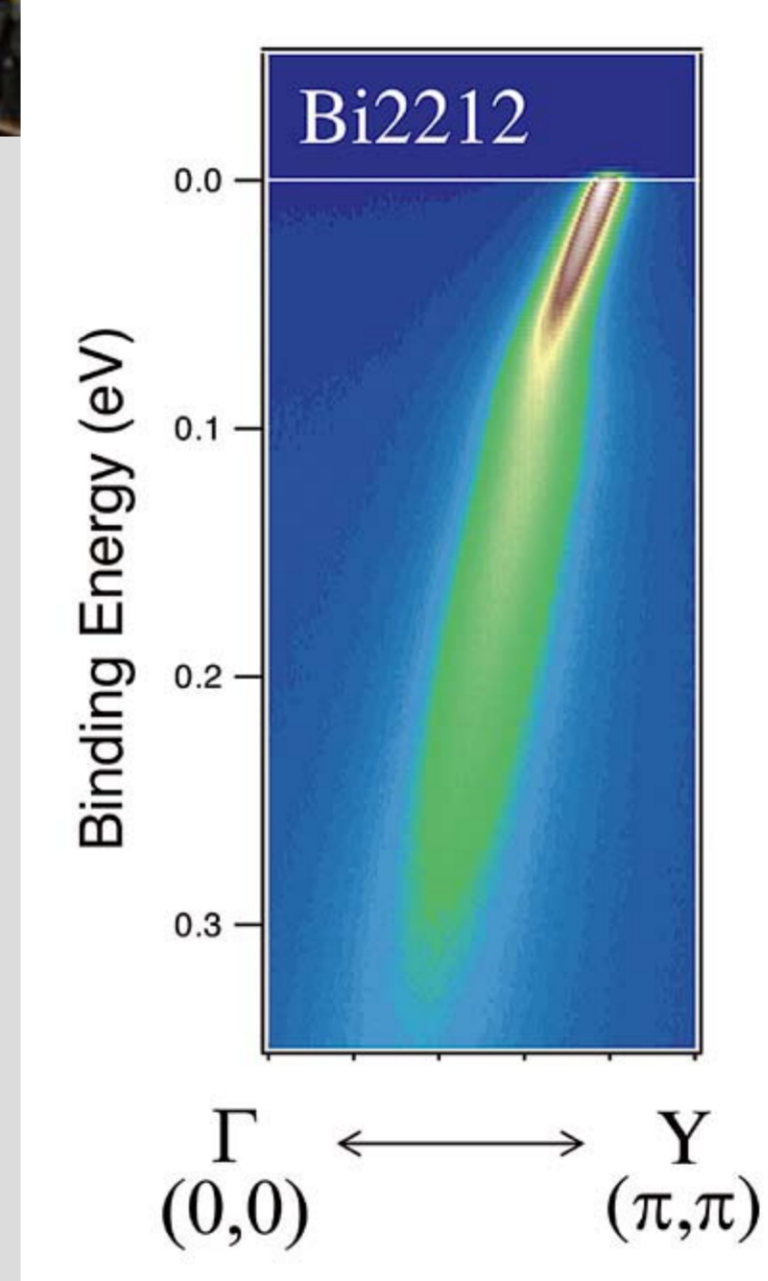
Understanding the nature of light played an important role in establishing the theories of relativity and quantum mechanics at the beginning of the 20th century. These two theories have not only made modern physics but have also been crucial to the development of modern optical technologies such as synchrotron radiation and lasers. It is now possible to produce extremely short bursts of laser light with attosecond (10^{-18} sec) time scales. The range of available spectral windows of laser-based light sources has also expanded significantly, and now ranges from terahertz frequencies to soft-X rays. In SPring-8, we are studying soft X-ray sciences using the most brilliant synchrotron beamline. We are developing both extreme light sources and various spectroscopic techniques to explore wide ranges of novel materials and phenomena including high-Tc superconductors, strongly correlated materials, photo-induced phase transitions, biological molecules, solid surfaces/interfaces, and semiconductor nanostructures.



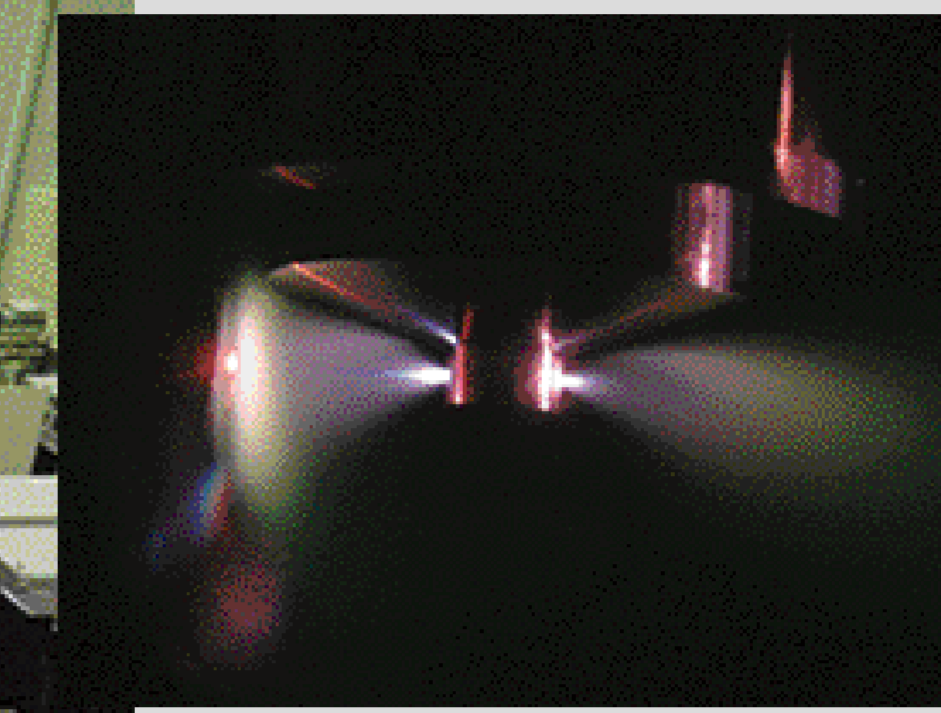
高強度チタンサファイアレーザーによるコヒーレント軟X線光源(高次高調波)。
High-power Ti:sapphire lasers and high harmonic generation to produce attosecond soft X-ray pulses.



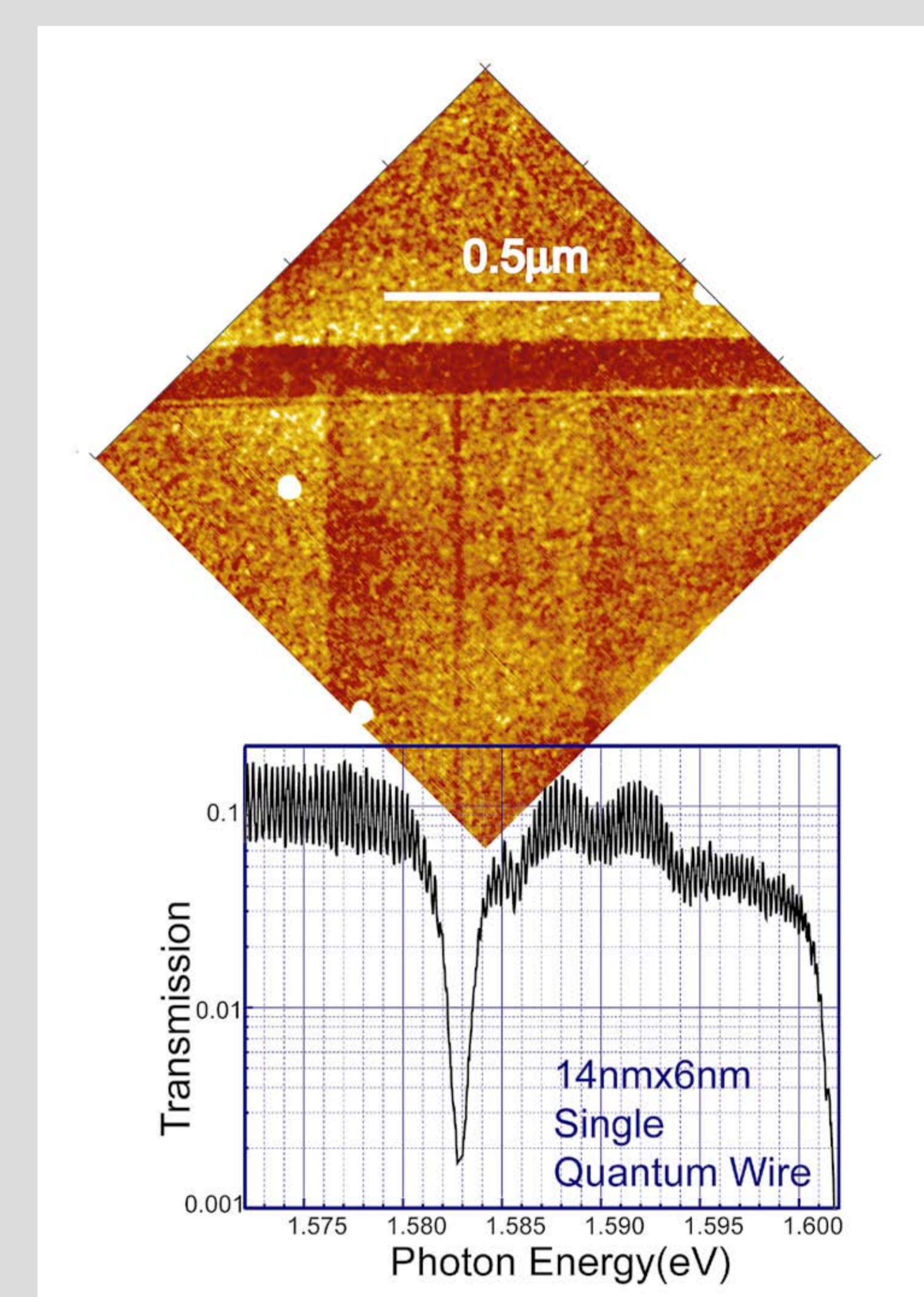
世界最高の分解能を持つレーザー光電子分光装置と高温超伝導体のバンド分散。
Laser-based photoemission spectrometer with the world's highest energy resolution. The inset shows the observed band dispersion of a high-Tc superconductor.



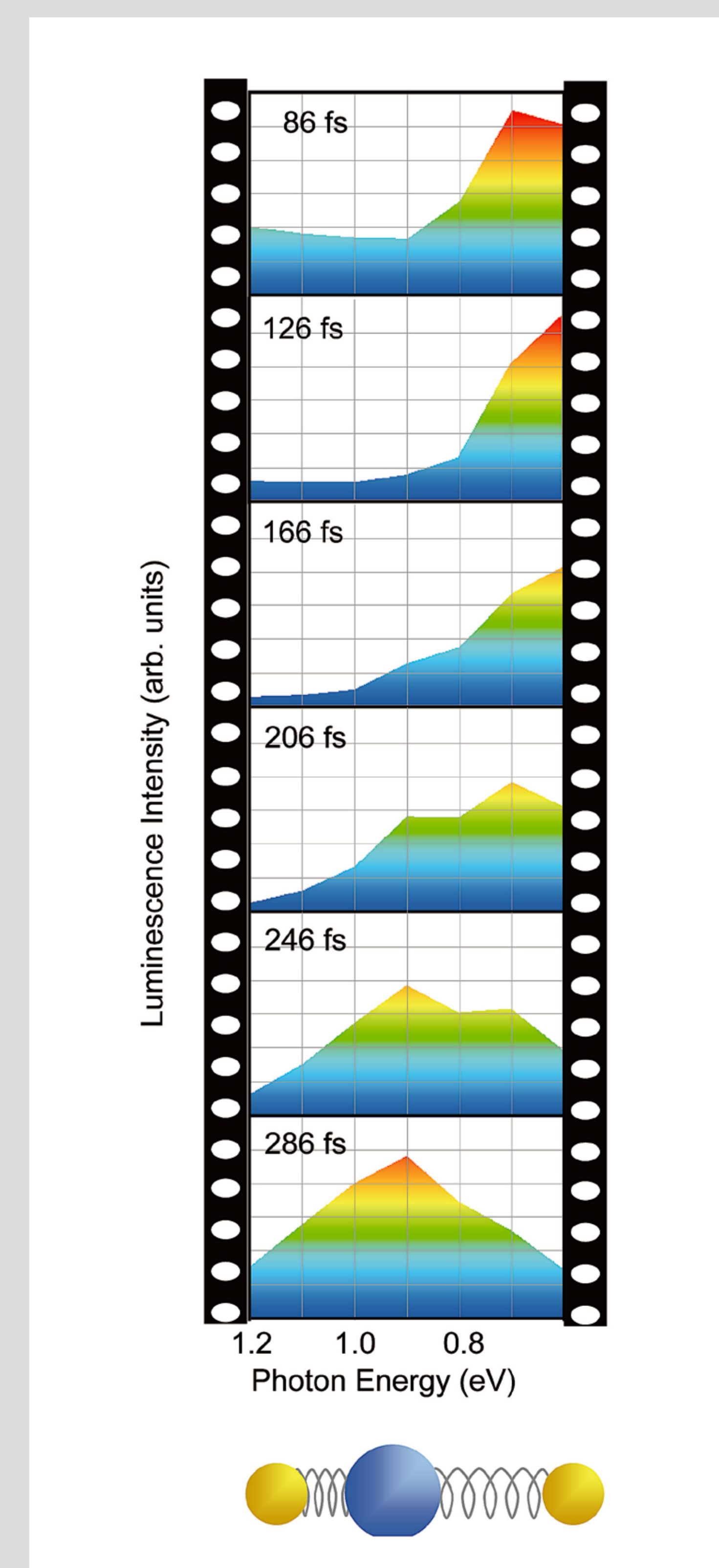
Ybファイバーレーザーを用いた光周波数コムの様子。
The optical frequency comb made by an Yb-fiber laser.



高次高調波を発生するArガス。
Argon gas emitting high harmonics.



単一量子細線での光透過吸収実験。
Optical absorption spectrum of a single quantum wire.



固体におけるイオンの運動に対応する核波束のフェムト秒ムービー。
"Femtosecond movie" of a nuclear wave packet directly mapped by time-resolved photoluminescence spectra. This wave packet motion corresponds to ionic vibration in solids.