

# 物性研究所短期研究会

## 極限コヒーレント光科学研究センター発足記念ワークショップ

### 「レーザー・放射光融合研究領域の開拓」

日時：2012年11月29日(木)・30日(金)

場所：東京大学物性研究所本館6階大講義室(A632)

提案代表者：末元 徹 (東京大学物性研究所)

共同提案者：辛 埴 (東京大学物性研究所)

小森 文夫 (東京大学物性研究所)

松田 巖 (東京大学物性研究所)

吉信 淳 (東京大学物性研究所)

尾嶋 正治 (東京大学工学研究科)

谷村 克己 (大阪大学産業科学研究所)

これまでレーザー分野と放射光分野は独立に進歩を続けてきたが、最近になってレーザー高調波による軟 X 線の発生が可能になり、波長領域における両者の守備範囲が大きな重なりを持つようになってきた。また、放射光の利用でもレーザーと組み合わせた時間分解が一大分野を形成するに至り、もはや光源というハードウェアの観点から別の分野と考えるよりは、両光源を目的に応じて使い分ける時代に突入しつつあると言える。

物性研究所では、かねてよりレーザー技術をベースとする光科学を推進するために「極限コヒーレント光科学研究センター」の設置を計画してきた。一方で、放射光グループは西播磨のアウトステーションを中心に世界最高レベルの装置群を導入し、新たな展開を開始している。そこで、両分野の垣根を取り払って真空紫外、軟 X 線領域での光科学研究を推進するために、先端分光部門と軌道放射物性研究施設を統合し、「極限コヒーレント光科学研究センター」(LASOR: Laser and Synchrotron Research Center)を設置することになり、2012年10月1日に発足の運びとなった。

そこで、計測手法と物質現象を切り口にしたテーマを設定し、両光源を比較しつつ融合の可能性をさぐることを目的として本研究会を企画した。LASOR は世界的に見ても先進的な組織であり、この切り口の下に新たな物性研究の展開が期待される。そこで光源横断的なテーマを設定し、それぞれについてレーザーと放射光の利用経験者を招待して、両光源の特質と分担、融合の可能性を討議した。

本ワークショップでは、LASOR センターの活動報告に続き、レーザーと放射光の両光源にまたがる3つの横断的なテーマ：「高分解能光電子分光」、「時間分解光電子分光」、「時間分解内殻分光」を掲げてセッションを構成した。下記は各セッションで行われた討論の概要である。

物性研究所短期研究会において、この新しい方向性を物性研究所からのメッセージとして物性コミュニティーに発信することに大きな意義があると、われわれは考えている。



講演会場風景

#### LASOR における光源と計測法開発の現状

放射光関係では、SPring8 に整備された最新鋭の測定系の現状と、それをを用いた高分解能発光分光などについて報告があった。レーザー光源に関しては、柏キャンパスで稼働中の超高分解能および超高速時間分解レーザー光電子分光の現

状、長尺外部共振器による高調波ベースの光源開発、アト秒や水の窓を狙う軟 X 線光源の開発状況が紹介された。

### 内殻励起、表面化学、化学結合の実時間追跡

内殻遷移のプロブは元素選択的な化学結合状態の追跡が可能な有力な手法である。ここでは、時間分解の内殻励起分光による電荷移動ダイナミクスの研究や、強励起による内殻遷移の飽和などが紹介された。表面化学関係では、準大気圧下における表面吸着分子の振舞いや、触媒反応における荷電粒子の超高速な移動など、オペラント分光の最近の進展が紹介された。新しい方向性として FEL(自由電子レーザー)へのシーディングによる安定化技術、FEL による新しいサイエンスの可能性などが議論された。

### 高分解能・スピ分解光電子分光

高分解能の光電子分光は、放射光、レーザーいずれの光源でも大きな進展をみせている。このセッションでは、超高分解能光電子分光の超伝導体、強相関物質、トポロジカル絶縁体、極性半導体のバルクなラッシュバ効果など様々の興味ある物性の研究への応用が紹介された。スピン偏極光電子分光では高感度な VLEED などの新手法が紹介された。異色な研究としては、Xe 放電管による実験室光源で、高分解能と高い効率のスピン検出を実現したものがあつた。光電子分光が、強相関電子系の解明に大きな貢献をしたことが強調されると共に、次世代光源への期待としては、高分解能とともに波長可変性の重要性が指摘された。

### 時間分解光電子分光

これまで、過渡吸収や発光と言った、バンド間遷移をプロブとして用いる、レーザー分光の独壇場であつた超高速の世界に、光電子分光が参入し、励起電子のダイナミクスや光誘起相転移などが、非常に明快に捕らえられるようになった。このセッションでは、高調波を用いた 40eV 帯での時間分解光電子分光、レーザーと放射光を組み合わせた時間分解実験、両光源の使い分けなどが総合的に議論された。また、半導体における超高速なホットキャリアのダイナミクスを、運動量空間で鮮やかに捕らえた最新の成果が紹介され、光電子分光の威力があらためて印象付けられた。

ワークショップ全体を通じて、レーザーをベースとした光源技術と、放射光分野で培われた物性計測技術の進展の相乗効果による、新たな展開への期待感が、共有できたのではないかと考えられる。2 日間で延べ 155 名の参加があり、非常に活発な議論が行われた。また、29 日にはカフェテリアにて懇親会、30 日には、D 棟 E 棟の見学会が行われ、親睦と相互理解を深めることができた。今回は、光電子分光と表面化学が中心であつたが、次回は切り口を変えてセッションを構成し、より大きなコミュニティの形成へ向けて努力したいと考えている。



## プログラム

11月29日(木曜)

午前の部： 10:00~12:35

10:00~10:05	所長挨拶	家 泰弘	東京大学物性研究所
10:05~10:15	はじめに	末元 徹	東京大学物性研究所

### LASORにおける光源と計測法開発の現状

座長 末元 徹

10:15~10:45	LASOR センターの概要	辛 埴	東京大学物性研究所
10:45~11:15	SPring8 東大アウトステーションにおける最先端計測	原田 慈久	東京大学物性研究所
<休憩 20分>			

座長 小栗 克弥

11:35~12:05	高平均出力高繰り返し VUV 光源の開発	小林 洋平	東京大学物性研究所
12:05~12:35	1keV 領域を目指した高次高調波によるアト秒軟 X 線光源の開発	板谷 治郎	東京大学物性研究所
<昼休み 12:35~13:50>			

午後の部： 13:50~17:40

### 内殻励起、表面化学、化学結合の実時間追跡

座長 木村 真一

13:50~14:20	時間分解内殻分光を用いた金属錯体における光誘起ダイナミクス	野澤 俊介	高エネルギー加速器研究機構
14:20~14:50	X線及び EUV 自由電子レーザーを用いた内殻電子励起固体の研究	米田 仁紀	電気通信大学レーザー新世代研究センター
14:50~15:20	レーザー高次高調波シード型軟 X 線 FEL 光による原子の多光子イオン化過程	岩崎 純史	東京大学理学系研究科
15:20~15:50	次世代レーザーを用いた内殻分光実験の展望	松田 巖	東京大学物性研究所
<休憩 20分>			

座長 田中 耕一郎

16:10~16:40	準大気圧光電子分光による触媒反応のオペランド観測	近藤 寛	慶應義塾大学理工学部
16:40~17:10	時間領域分光による表面・界面における電子-格子相互作用の解明	松本 吉泰	京都大学大学院理学研究科
17:10~17:40	スピン分解 ARPES によるトポロジカル絶縁体の電子構造の研究	相馬 清吾	東北大学原子分子材料科学高等研究機構

18:00 懇親会(東京ケータリング カフェテリア)

11月30日(金曜)

午前の部: 9:30~12:20

高分解能、スピン分解光電子分光

座長 辛 埴

- |             |                                |       |                 |
|-------------|--------------------------------|-------|-----------------|
| 9:30~10:00  | 低温高分解能レーザー光電子分光による超伝導ギャップの直接観測 | 岡崎 浩三 | 東京大学物性研究所       |
| 10:00~10:30 | UVSORにおける真空紫外角度分解光電子分光         | 木村 真一 | 分子科学研究所 UVSOR施設 |
| 10:30~11:00 | レーザー光電子分光による極性半導体の電子構造の研究      | 石坂 香子 | 東京大学大学院工学系研究科   |
- <休憩 20分>

座長 腰原 伸也

- |             |                             |       |                 |
|-------------|-----------------------------|-------|-----------------|
| 11:20~11:50 | 低速電子回折を用いた高分解能スピン・角度分解光電子分光 | 奥田 太一 | 広島大学放射光科学研究センター |
| 11:50~12:20 | 強相関係の光電子分光:次世代放射光・レーザーへの期待  | 藤森 淳  | 東京大学大学院理学系研究科   |
- <昼休み 12:20~13:30>

午後の部: 13:30~16:20

時間分解光電子分光

座長 和達 大樹

- |             |   |       |           |
|-------------|---|-------|-----------|
| 13:30~14:00 | 深紫外-極紫外パルスレーザーを用いた時間分解光電子分光                     | 石田 行章 | 東京大学物性研究所 |
| 14:00~14:30 | SPring-8 BL07LSUにおけるレーザーと軟X線放射光を組み合わせた時間分解光電子分光 | 山本 達  | 東京大学物性研究所 |
- <休憩 20分>

座長 藤森 淳

- |             |   |       |             |
|-------------|---|-------|-------------|
| 14:50~15:20 | レーザーと放射光の併用による時間分解光電子分光                     | 鎌田 雅夫 | 佐賀大学工学系研究科  |
| 15:20~15:50 | フェムト秒時間分解光電子分光で「見る」半導体価電子励起系の超高速エネルギー・運動量緩和 | 谷村 克己 | 大阪大学産業科学研究所 |

おわりに

- |             |                       |      |               |
|-------------|-----------------------|------|---------------|
| 15:50~16:20 | 先端光・量子科学技術による物質光科学の展開 | 五神 真 | 東京大学大学院理学系研究科 |
|-------------|-----------------------|------|---------------|

16:30~ 見学会

## LASOR センターの概要

辛 埴 (東京大学物性研究所 LASOR)

平成 24 年 10 月 1 日に、物性研究所の光科学を推進するために、レーザー、放射光、FEL の垣根を取り払って、共通の光科学を推進するために設立された LASOR センターの概要を説明した。超高速分光、超精密分光、オペランド分光の 3 つの分光を中心に、コヒーレント光源科学、軟 X 線物性科学、コヒーレント物性科学の 3 つの光科学を推進する予定である。全国の光科学を推進し、共同利用に貢献したい。

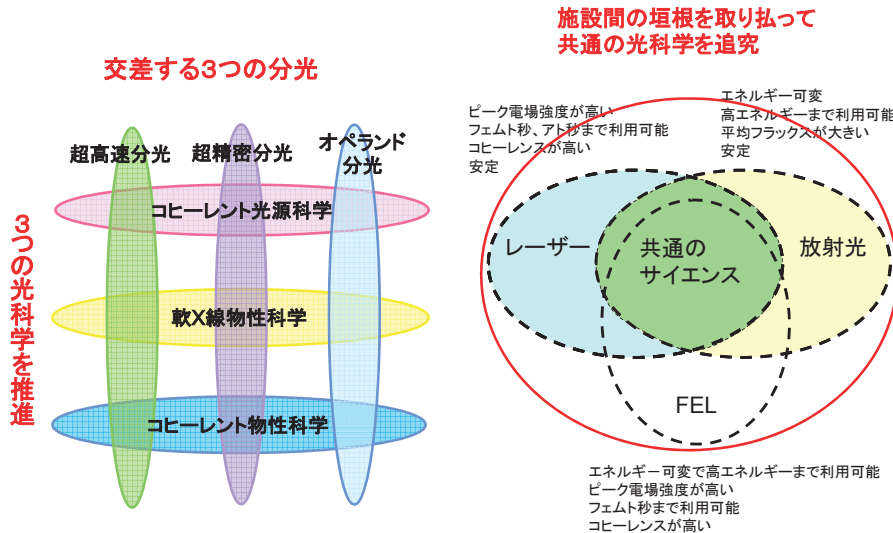


図1 LASOR センターの概要

## SPring8 東大アウトステーションにおける最先端計測

原田 慈久 (東京大学物性研究所 LASOR)

SPring-8 東大アウトステーション BL07LSU は偏光可変の挿入光源を備え、高輝度・高エネルギー分解能の質の高い光を供給する。BL07LSU では 3 つの常設ステーションで研究を展開しているが、ここでは特に軟 X 線発光分光の最近の進展について詳述する。軟 X 線発光分光は元素、軌道を選択して物質の価電子状態を調べるツールとしての役割を超えて、いまや 100 meV オーダーの様々な素励起のダイナミクスを観察することが可能であり、ガス種と流路を選べば 1 気圧下での分光も可能である。本講演では、 $E/\Delta E > 5000$  の超高分解能で初めて観測可能となった結晶場励起や振動励起、1 気圧酸素の吸着に伴う触媒反応中心の電子状態変化、さらに燃料電池触媒の燃料電池発電環境下における電子状態のその場観察などの新しい実験的試みについて紹介する。

- [1] L. J. P. Ament *et al.*, Rev. Mod. Phys. **83**, 705 (2011); 軟 X 線発光の最新レビュー論文
- [2] J. Schlappa *et al.*, Nature **485**, 82 (2011); 検出角依存により素励起の運動量依存性を見た論文
- [3] Y. Harada *et al.*, Rev. Sci. Instrum. **83**, 013116 (2012); 超高分解能軟 X 線発光分光器の論文

## 高平均出力高繰り返し VUV 光源の開発

小林 洋平 (東京大学物性研究所 LASOR)

近年レーザー光電子が目覚ましい発展を遂げている。高分解能では KBBF による波長変換技術による 7eV 光源が主に用いられているが、我々は次の世代の光源として KBBF の性能を極限まで引きだし 8eV コヒーレント光の開発を行っている[1]。また、高繰り返しのフェムト秒 VUV 光源として、Yb ファイバーレーザーをベースとして外部共振器を用いた高次高調波発生(HHG)の研究を行っている。80MHz 繰り返しの HHG は超精密分光の応用に用いている[2]。現在進めている 10MHz 繰り返し HHG 用の長尺共振器の現状について紹介した。

[1] Y. Nomura, *Opt. Lett.* **36**, pp1758-1760 (2011).

[2] A. Cingöz *et al.* *Nature*. **482**, 68 (2012), A. Ozawa *et al.* CLEO2012 PD

## 1keV 領域を目指した高次高調波によるアト秒軟 X 線光源の開発

板谷 治郎 (東京大学物性研究所 LASOR)

高強度レーザーをガス媒質に集光して得られる高次高調波は、アト秒領域でのコヒーレントな短波長極短パルス光源として分光応用が始まっている。高次高調波の短波長限界(カットオフ)は、ポンデロモーティブポテンシャル  $U_p$  とイオン化ポテンシャル  $I_p$  を用いて  $3U_p+I_p$  となることが知られている。代表的な高強度レーザーであるチタンサファイアレーザーは波長が可視域にあるため  $U_p$  の最大値は 60 eV 程度となり、高次高調波のカットオフは 200 eV 程度までにとどまっている。より長波長での高強度レーザーを実現できれば、 $U_p$  が波長の二乗に比例することから、高次高調波のさらなる短波長化が可能となり、軽元素や遷移金属の吸収端を利用した超高速分光法や「水の窓」における時分割イメージングなどへの応用が期待できる。これまでに、われわれは光パラメトリック増幅にもとづく高強度極短パルス赤外光源の開発を行い[1]、「水の窓」領域まで広がるコヒーレント軟 X 線(最大光子エネルギー約 300 eV)発生と、明瞭な位相依存性を観測した[2]。

[1] N. Ishii *et al.*, *Appl. Phys. Express* **4**, 022701 (2012).

[2] N. Ishii *et al.*, *Opt. Lett.* **37**, 4182 (2012).

## 時間分解内殻分光を用いた金属錯体における光誘起ダイナミクス

野澤 俊介 (高エネルギー加速器研究機構)

電子状態の超高速スイッチングは、高速動作デバイスに対する将来性から研究者を魅了し、近年、精力的に研究が行われてきた[1]。金属錯体における高速な構造・電子状態変化に関する知見を得ることは、次世代の高速分子メモリデバイス開発に向けた基礎研究のみならず、太陽電池の増感剤や光触媒に利用される金属錯体の項間交差を含んだ励起活性状態についての研究等、グリーンイノベーションの推進においても極めて重要である。

本研究では、レーザーポンピングによって繰り返し作り出される励起状態を、パルス放射光硬 X 線でプローブし、時間分解内殻分光を行うことで、元素選択性を持った局所的な実時間情報を得た。光機能性金属錯体の反応中間体について本手法を用いることで、その機能生成について構造変化と電子状態変化の両面から詳細に議論することが可能となった。さらには、フェムト秒時間領域におけるダイナミクス研究を目指し、本システムを X 線自由電子レーザー光源[3]に適応させた場合の優位性についても議論を行った。

[1] P. Gutlich *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **33**, 2024 (1994).

[2] S. Nozawa *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **61**, 132 (2010).

[3] T. Ishikawa *et al.*, *Nature Photonics* **6**, 505 (2012).

## X線及び EUV 自由電子レーザーを用いた内殻電子励起固体の研究

米田 仁紀 (電気通信大学レーザー新世代研究センター)

X線領域で 10keV までの範囲で波長可変レーザーが発振できるようになってきた[1]。わが国では高い集光技術を用い、50nm までの集光が可能になり照射強度は  $10^{20}\text{W}/\text{cm}^2$  に迫るものが実現されてきている。本講演では、このような高い X線場と物質が相互作用した場合において初めて実現される物質状態、すなわち内殻電子励起状態が固体原子のほとんどになっているような状態についての実験研究[2]を紹介した。また、このような内殻電子励起が高密度で起きれば、吸収端のエネルギーシフトなどが起き、これまで実現できなかった X線領域における能動光学素子の開発も可能性が出てきている。その一例として可飽和吸収現象について真空紫外自由電子レーザーを用いた事例と X線自由電子レーザー SACLA で行われた最近の研究について紹介した。

[1] Focusing of X-ray free electron laser pulses with reflective optics, H. Yumoto, *et al.*, *Nature Photonics*, **7**, 43 (2013)

[2] 固体における X線領域の非線形光学現象とその応用の可能性、米田仁紀、*レーザー研究*、40(9), 694-700 (2012)

## レーザー高次高調波シード型軟 X線 FEL 光による原子の多光子イオン化過程

岩崎 純史 (東京大学大学院理学系研究科化学専攻)

自発光増幅(SASE: self-amplification of spontaneous emission)方式による自由電子レーザー(FEL: free electron laser)によって、輝度の高いパルス光を極端紫外光、軟 X線、硬 X線領域にわたって発生することができるため、単一パルス X線回折や短波長領域における非線形光学効果など、高輝度パルス光を生かした新たな研究が行われている。しかし、SASE-FEL 光は、光発生過程に起因して時間領域において複数のスパイク状のピークを持ち、その時間コヒーレンスは低い。我々は、超短パルスレーザー光の高次高調波を、シード光として FEL のアンジュレーター部に導入し、時間コヒーレンスの高いシード化 FEL 光(波長 61.5 nm、パルスエネルギー20  $\mu\text{J}$ )を発生させた [1]。そのシード化された高強度極端紫外域パルスパルスを He, Ne, Ar, Xe に集光照射し、イオン化収率を計測した。SASE-FEL 光とシード FEL 光照射によるイオン化収率の比較から、シード FEL 光のパルス時間幅が SASE-FEL パルス光の約 37%であることが示された。また、パルス時間幅に起因するイオン化過程の違いについて明らかにした。

[1] T. Togashi *et al.*, *Optics Express*, **19**, 317 (2011)

## 次世代レーザーを用いた内殻分光実験の展望

松田 巖 (東京大学物性研究所 LASOR)

軟 X線～X線の利用実験では、これまで蓄積リング型の放射光光源が多用されてきたが、最近自由電子レーザーや高次高調レーザーなどの「次世代」レーザーの開発が進み、その利用実験も始められつつある。本波長領域の光を物質に照射すると内殻励起に伴う吸収端共鳴が存在し、そこにレーザーの超短パルス性を合わせると超高速時間分解実験を元素選択的に実施できるだけでなく、光学遷移理論に基づく物質のスピン・電子状態の直接解析も可能である。そこで我々はこれらの特徴を活かした共鳴カー効果測定システムを立ち上げ、時間分解測定による超高速スピンドYNAMIXのリアルタイム観測を実施している。そして SASE 型自由電子レーザーSCSS[1]において、Ni 薄膜のスピンダイナミクスを Ni M 殻共鳴カー効果の shot-by-shot の時間分解測定に成功した。本手法は photon-in & photon-out 測定なので外場印加下の in situ 実験も可能であり、時間分解もフェムト秒スケールから追跡できる。今後、次世代レーザーの利用実験として重要なものになると期待される。

[1] T. Shintake *et al.*, *Nat. Photonics* **2**, 555 (2008).

## 準大気圧光電子分光による触媒反応のオペランド観測

近藤 寛 (慶應義塾大学理工学部)

触媒反応が進行する表面をその場で観測するオペランド観測が最近活発に行われている。我々は、準大気圧下で光電子分光を測定する装置をフォトン・ファクトリーに立ち上げ[1]、触媒の作動条件に近い準大気圧下で起こる触媒反応を調べる研究に用いている。このようなアプローチで触媒反応が進行する表面を測定してみると、これまで考えられていたのとは異なる触媒活性構造が見えてくる。ここでは、白金族金属上での CO 酸化反応を取り上げ、Pd と Ir の単結晶表面における CO 酸化反応の活性度と表面の化学状態の相関について調べた結果について紹介する。Pd(111)および Pd(100)表面では最も活性が高いときには、表面酸化物が表面を覆っているのに対し[2,3]、Ir(111)表面では金属状態を保っていることが分かり、同じ白金族金属でも反応機構に大きな違いがあることを明らかにした。さらに、準大気圧下での反応ダイナミクスの理解に向けた今後の発展の方向についても述べる。

- [1] 近藤 寛、触媒 **53** 巻 3 号, 183 (2011).
- [2] R. Toyoshima *et al.* J. Phys. Chem. C **116**, 18691 (2012).
- [3] R. Toyoshima *et al.* J. Phys. Chem. Lett. **3**, 3182 (2012).

## 時間領域分光による表面・界面における電子-格子相互作用の解明

松本 吉泰 (京都大学大学院理学研究科化学専攻)

金属表面をはじめとする固体表面における電子-格子相互作用、およびこれに基づく原子核のダイナミクスを理解することは光誘起表面過程を理解する上で重要である。このためには、超短パルス励起光により誘起された核のダイナミクスを時間領域分光により観測することが有効である。本講演では、これに関する 2 つのトピックスについて議論する。第一は、Cu(111)表面に吸着した Cs におけるコヒーレントフォノンとその励起メカニズムである[1]。この実験では、時間分解第二高調波発生分光により基板に対する Cs の伸縮振動を検出した。特に、そのコヒーレントフォノンの初期位相が励起波長に依存することを見だし、どのような表面電子状態励起がこの振動モードに強く結合しているかを明らかにした。第二は、光応答水分解触媒能を示す BiVO<sub>4</sub> におけるホールトラップが関わる電子状態遷移についてである。BiVO<sub>4</sub> 微結晶の電子励起に伴う過渡吸収分光をピコ秒からマイクロ秒にわたる広い範囲で観測した。その結果、吸収端近傍の波長において Bi の振動に起因するコヒーレントフォノンが観測され、この振動モードからホールトラップサイトの情報を引き出せる可能性を示した。

- [1] K. Watanabe, *et al.*, J. Phys. Chem. A, **115**, 9528-9535 (2011)

## スピン分解 ARPES によるトポロジカル絶縁体の電子構造の研究

相馬 清吾<sup>1</sup>、佐藤 宇史<sup>2</sup>、小松 誠<sup>2</sup>、野村 円香<sup>2</sup>、高山 あかり<sup>2</sup>、  
高橋 隆<sup>1,2</sup>、江藤 数馬<sup>3</sup>、M. Kreiner<sup>3</sup>、瀬川 耕司<sup>3</sup>、安藤陽一<sup>3</sup>  
(<sup>1</sup>東北大学 WPI-AIMR、<sup>2</sup>東北大学大学院理学研究科、<sup>3</sup>大阪大 ISIR)

トポロジカル絶縁体はバルク絶縁体でありながら表面においてスピン偏極したギャップレス金属状態(ディラック電子状態)を形成する物質である。強いスピン軌道相互作用と時間反転対称性により、表面状態のスピン偏極は運動方向に依存したヘリカル型のスピン偏極構造を示す。我々は、高輝度キセノンプラズマ放電管や高効率モット検出器などの要素技



術で構成した高分解能スピン分解光電子分光装置[1]を開発し、トポロジカル絶縁体の表面状態の研究を行った。その結果、 $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  においてフェルミ面のワーピング効果によりスピン面直成分が誘起される事[2]、 $\text{TlBi}(\text{S},\text{Se})_2$  の固容系において  $x=0.5$  付近のトポロジカル量子相転移において有限質量のディラック状態が発現する事[3,4]などを見出した。得られた知見を元に、トポロジカル表面状態に起源する特異物性やスピントロニクス素子の開発が進んでいくものと期待される。

[1] S. Souma *et al.*, RSI **78**, 123104 (2007), RSI **81**, 095101 (2010).

[2] S. Souma *et al.*, Phys. Rev. Lett. **106**, 216803 (2011).

[3] T. Sato *et al.*, Nature Phys. **7**, 840 (2011).

[4] S. Souma *et al.*, Phys. Rev. Lett. **109**, 186804 (2012).

## 低温高分解能レーザー光電子分光による超伝導ギャップの直接観測

岡崎 浩三 (東京大学物性研究所 LASOR)

我々は、擬連続波真空紫外レーザーを励起光に用いた光電子分光装置の開発、改良を進め、最高エネルギー分解能  $70\mu\text{eV}$ 、最低測定温度 1K を達成した。この低温高分解能レーザー光電子分光装置による、超伝導転移温度が低い単体金属である  $\text{Sn}(T_c = 3.7 \text{ K})$ 、 $\text{Re}(T_c = 1.7 \text{ K})$ 、 $\text{Al}(T_c = 1.2 \text{ K})$  などの超伝導ギャップの直接観測結果について紹介した。さらに、鉄系超伝導体  $\text{KFe}_2\text{As}_2(T_c = 3.4 \text{ K})$  の超伝導ギャップにおける 8 本のノード構造の観測について報告し、 $\text{FeTe}_{0.6}\text{Se}_{0.4}$  における BCS 的超伝導と BEC 的超伝導が共存している可能性について議論した。

[1] K. Okazaki *et al.* Science **337**, 1314 (2012).

[2] 岡崎浩三「低温超高分解能レーザーARPES 装置の開発と鉄系超伝導体  $\text{KFe}_2\text{As}_2$  における超伝導ギャップの観測」、FSST NEWS No. 135 (2012).

## UVSOR における真空紫外角度分解光電子分光

木村 真一 (分子科学研究所 UVSOR 施設)

21 世紀に入ってから UVSOR は 2 度アップグレードされ、電子ビームのエミッタンスは紫外光の回折限界に達している[1]。その結果、1 GeV 以下の小型放射光源に分類される中では、最も輝度が高い光源の 1 つになった。そこでは、現在 4 本の角度分解光電子分光ビームラインが稼働中であり、それぞれ特徴を持った電子構造研究が進められている。中でも低エネルギーリングの特徴を生かしたビームライン BL7U-SAMRAI では、励起光の可変偏光性と可変エネルギー性を使うことで電子軌道の対称性を分離して 3 次元運動量空間でバンド分散を高分解能で決定できるため、活発に研究が進められている[2]。例えば、鉄系超伝導体や擬一次元有機伝導体の電子構造[3]や HOPG グラファイトの表面電荷密度波[4]などが最近研究された。また現在進行中のものとして、放射光とパルスレーザーを組み合わせたテラヘルツと真空紫外領域の新たなコヒーレント光源の開発も行われており、準粒子を励起した際の電子構造変化を追う時間分解光電子分光も計画されている[5]。

[1] 加藤政博、放射光 **24**, 175 (2011).

[2] S. Kimura *et al.*, Rev. Sci. Instrum. **81**, 053104 (2010).

[3] 例えば, Y. Zhang *et al.*, Nat. Mater. **10**, 273 (2011).

[4] S. Tanaka *et al.*, Phys. Rev. B **84**, 121411(R) (2011).

[5] S. Kimura *et al.*, AIP Conf. Proc. **1234**, 63 (2010).

## レーザー光電子分光による極性半導体の電子構造の研究

石坂 香子（東京大学大学院工学系研究科）

層状極性半導体 BiTeI は積層方向の極性構造と強いスピン軌道相互作用により、ラシュバ型の巨大なスピン分裂を示す[1]。巨大ラシュバ効果を示す物質は高効率スピン流生成・変換材料として高く期待されている。我々はこれまでに、SPring-8(BL17SU)の波長依存軟 X 線光電子分光によりバルクのバンド構造に 3 次元ラシュバ型のバンド分裂を確認[2]するとともに、KEK-PF(BL28)の波長依存光電子分光により 3 次元バルクと 2 次元表面電荷蓄積層の電子構造の分離観測に成功した[3]。また、スピン配向については HiSOR のモット検出型スピン分解光電子分光によりラシュバ型であることを確認した[1]。一方物性研のレーザー光電子分光を用いた高分解能測定により、ラシュバ型バンド分裂と表面電荷蓄積に伴う 2 次元量子化サブバンドという微細構造をそれぞれ明瞭に観測することができた[3]。様々な光源と検出器を網羅的に用いた光電子分光法は、新奇物質の電子構造の解明や機能の開拓に有用である。

[1] K. Ishizaka *et al.*, Nature Mater. 10, 521 (2011).

[2] M. Sakano *et al.*, Phys. Rev. B 86, 085204 (2012).

[3] M. Sakano *et al.*, arXiv:1212.1552.

## 低速電子回折を用いた高分解能スピン・角度分解光電子分光

奥田 太一（広島大学放射光科学研究センター）

ラシュバ効果やトポロジカル絶縁体などスピン軌道相互作用に起因する表面スピン電子状態の研究が盛んになってきており、固体のスピン電子状態を直接観測できるスピン分解光電子分光法の高度化が世界で進められている。我々は従来のモット型スピン検出器に比べ二桁近く高いスピン検出能力を有する低速電子回折を用いたスピン検出器を開発し[1]、従来の 5~10 倍の高分解能スピン角度分解光電子分光測定を可能とした( $\Delta E < 8\text{meV}$ ,  $\Delta\theta \sim \pm 0.2^\circ$ )[2]。これによりこれまで困難であった詳細なラシュバスピン分裂状態の観測[3]や、トポロジカル表面状態のスピン偏極度の定量的な解析[4]などが可能となった。さらに、最近スピン検出器を二台に増設し、高分解能スピンベクトル解析を可能とする改造を行ったので報告する。

[1] T. Okuda *et al.*, Rev. Sci. Instrum. 79, 123117 (2008).

[2] T. Okuda *et al.*, Rev. Sci. Instrum. 82, 103302 (2011).

[3] T. Okuda *et al.*, Phys. Rev. B 82, 161410 (2010).

[4] K. Miyamoto *et al.*, Phys. Rev. Lett. 109, 166802 (2012).

## 強相関系の光電子分光：次世代放射光・レーザーへの期待

藤森 淳（東京大学理学系研究科）

光電子分光の光源として、エネルギー線幅の非常に狭いレーザー光とエネルギーが連続可変な放射光の役割は相補的で、両者を組み合わせることで強相関電子系の研究に大きな威力を発揮している。その顕著な例として、銅酸化物高温超伝導体における“2 ギャップ”構造の同定[1]、鉄系高温超伝導体  $\text{BaFe}_2(\text{As,P})_2$  における超伝導ギャップ・ノードの検出が挙げられる[2]。とくに後者では、ブリュアン域角にあるフェルミ面も含めた 3 次元的なフェルミ面におけるノードの有無は、光のエネルギーを広い範囲で変えて調べる必要がある。遷移行列要素効果、終状態効果による光電子放出強度の抑制

を避けるためには[3]、狭い範囲でもエネルギー可変が非常に有効であり、このようなレーザー光源は近い将来利用可能になる。また、軟 X 線領域のレーザーが実現すれば、パルス性のみではなくコヒーレンスを利用した光子相関分光などの新しい内殻分光実験が可能となる。

[1] T. Yoshida *et al.*, arXiv:1208.2903.

[2] T. Shimojima *et al.*, Science 332, 564 (2011); Solid State Commun. 152, 695 (2012).

[3] S. Ideta *et al.*, Phys. Rev. Lett. 104, 227001 (2010).

## 深紫外-極紫外パルスレーザーを用いた時間分解光電子分光

石田 行章 (東京大学物性研究所 LASOR)

深紫外および極紫外域のパルスレーザーを光源とした時間分解光電子分光装置を建設し、非平衡電子状態やそのダイナミクスの直接観測を通して物性研究を行っている。これまで、グラファイトの初期ダイナミクスにおいて非熱的電子が光学フォノンと連動する様子や[1]、 $1T\text{-TaS}_2$ の電荷密度波を超高速融解する際に Ta サイトの電荷密度がコヒーレント振動を伴いながら過渡変化をすることを報告してきた[2]。現在、極紫外光電子と大強度ポンプ光により生じる多光子光電子バンチとの間のクーロン反発を利用して、ポンプとプローブを時空間で精度よく一致させる方法を確立し、安定的に時間分解 ARPES 測定を行うことが可能となっている。講演では、新物性発現やスピントロニクスデバイスの舞台として注目されるトポロジカル絶縁体の時間分解 ARPES を紹介した。 $\text{Cu}_{0.05}\text{Bi}_2\text{Se}_3$ の非平衡からの光電子の出やすさが異常な過渡変化を示したことから、表面分極を介した表面特有の光電効果 ( $\text{div}\mathbf{A}$ ) の存在を議論した。表面分極のダイナミクスに追従して  $\text{div}\mathbf{A}$  が過渡変化をすること、また、表面分極の発達が  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  で報告されている表面 Rashba 分裂に必須であることを述べ、表面分極を介した Rashba 型スピン分裂の光制御を提案した。

[1] Y. Ishida *et al.*, Sci. Rep. 1, 64 (2011).

[2] Y. Ishizaka *et al.*, PRB 83, 081104(R) (2011).

## SPring-8 BL07LSU におけるレーザーと軟 X 線放射光を組み合わせた時間分解光電子分光

山本 達 (東京大学物性研究所 LASOR)

光電子分光法は物質表面の電子・化学・スピン状態を分析する上で非常に強力な手法である。放射光は数十ピコ秒の時間巾を持ったパルス光であり、第 3 世代放射光施設から得られる高輝度放射光により時間分解光電子分光法が近年可能になってきた。

本講演では、我々が東京大学アウトステーション SPring-8 BL07LSU において新たに建設したレーザーと軟 X 線放射光を組み合わせた時間分解光電子分光システム[1-2]について紹介する。本システムは 2 次元角度分解飛行時間型電子分析器による 2 次元波数空間における電子状態の同時測定が可能である。また、50 ピコ秒以下の時間分解能でピコ～ミリ秒の広い時間範囲における電子状態の過渡的变化を追跡することが可能になっている。測定例として、代表的な半導体表面 Si(111)において観察された高強度レーザー場における表面光起電力効果の特異な振動緩和現象[3]について報告する。

[1] M. Ogawa, S. Yamamoto, Y. Kousa, F. Nakamura, R. Yukawa, A. Fukushima, A. Harasawa, H. Kondoh, Y. Tanaka, A. Kakizaki, I. Matsuda, Rev. Sci. Instrum., 83, 023109 (2012).

[2] S. Yamamoto, I. Matsuda, J. Phys. Soc. Jpn., accepted (2012).

[3] M. Ogawa, S. Yamamoto, R. Yukawa, R. Hobara, C.-H. Lin, R.-Y. Liu, S.-J. Tang, and I. Matsuda, submitted (2012).

## レーザーと放射光の併用による時間分解光電子分光：いままでの経験と将来発展

鎌田 雅夫（佐賀大学大学院工学系研究科）

筆者がレーザーと放射光の組合せによる放射光ポンプ+レーザープローブ、レーザーポンプ+放射光プローブ、放射光とレーザーの2光子実験を始めてから10数年が経った[1]。この間に、放射光もレーザーも進化し、実験手法も大きく進歩した。講演では、時間分解光電子分光に限定して、実験手法ならびに研究成果を紹介した。九州シンクロトロン光施設の佐賀大学ビームラインでは、レーザーと放射光による真空紫外から軟X線領域の30ピコ秒から数百マイクロ秒の範囲とチタンサファイヤレーザーの倍波3倍波を用いた500フェムト秒から2ナノ秒の範囲での角度分解+時間分解光電子分光が可能である。研究成果としては、SiやGaAsの表面光誘起起電力効果[2]、Ti<sub>4</sub>O<sub>7</sub>の光誘起相転移、グラフェンの励起状態分析、Si/Ag表面の基底および励起状態のバンド分散、InAsの励起電子のエネルギー緩和[3]、および分子性凝縮相であるNaNO<sub>2</sub>の2光子光電子分光などを紹介した。

[1] 鎌田等、放射光学会誌 **12**, 48 (1999). 高橋等、レーザー学会誌 **34**, 544 (2006).

[2] K.Takahashi, *et. al.*, J. Appl. Phys. **110**, 113711(2011); S. Tokudomi, *et. al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **77**, 014711 (2008).

[3] J. Azuma, *et.al.*, Phys. Rev. B **81**, 113203 (2010).

## フェムト秒時間分解光電子分光で見る半導体価電子系の超高速エネルギー・運動量緩和

谷村 克己（大阪大学 産業科学研究所）

フェムト秒レーザーによってGaAsおよびSiの価電子系を励起し、発生した伝導電子のエネルギー・運動量空間における超高速緩和過程を、時間分解光電子分光によって研究した[1]。この直接的な知見から、今まで光学的手法による実験結果に基づいて理解されていた極性半導体中の励起電子の緩和過程[2]は、以下の諸点で大きく変革された。①光励起で発生した励起電子の非平衡初期分布は運動量空間における電子波束として直接観測され、励起後100fs以内ではその状態を維持している。②電子間相互作用は非平衡電子分布のbroadeningを誘起するが熱化には寄与しない。③励起電子系のエネルギー緩和はLOフォノン放出によって支配され、励起後300fs以後にのみ電子温度が定義され得る準熱平衡状態になる。④GaAsにおいては、以前提案されていた電子・正孔プラズマによる電子格子相互作用のshieldingは、励起密度が $8 \times 10^{17}$ 以上でも生じない。これらの新たな知見とともに、intervalley scatteringの超高速動力学が直接的に観測された。

[1] T. Ichibayashi *et al.*, Phys. Rev. B **84**, 235210 (2011).

[2] L. Rota *et al.*, Phys. Rev. B **47**, 4226 (1993).

## 先端光・量子科学技術による物質光科学の展開

五神 真（東京大学大学院理学系研究科物理学専攻、工学系研究科量子科学研究センター）

光は振動数が $10^{14} \sim 10^{15}$ ヘルツの電磁波である。近年のレーザー技術の革新により、超高周波数の電波である光波を、その位相や振幅を精緻に制御する技術が完成した[1]。特に、モード同期超短パルスレーザーの位相制御技術により、アト秒パルス光、深紫外から軟エックス線領域におよぶコヒーレント光源の技術が大きく進展している。これらのレーザーをベースとする新光源を、これまで放射光源をもとに培われたX線吸収分光や光電子分光といった物性計測に応用する技術が急速に進歩している。本研究会ではそのような新しい流れを意識した物性研究の最前線が紹介された。本講演ではそのまとめとして、光源技術の技術革新の背景と動向を俯瞰し、光源開発についての我々の取り組み[2]についても紹介し、さらに、光源革新の今後の展開と物性科学へのインパクトについて議論した。

[1] 五神真「加速する光科学」科学、(2006)Vol.76. No.10, 1004-1010.

[2] J. Omachi, K. Yoshioka, and M. Kuwata-Gonokami, Optics Express **20**, 23542 (2012).

# 物性研究所短期研究会

## 計算物性物理学の新展開

期 間：2013年1月10日、11日

共 催：CCMS(計算物質科学センター)・元素戦略プロジェクト

参 加 者：一日目78名、二日目90名

開催場所：東京大学物性研究所(柏キャンパス) 6階大講義室

世話人：杉野 修・川島 直輝・野口 博司・藤堂 眞治・渡辺 宙志・笠松 秀輔・野口 良史・芝 隼人

①物性研スーパーコンピュータ(物性研スパコン)の共同利用者の成果報告会、②CCMSの活動報告、③元素戦略プロジェクトの現状報告、④物性研スパコンの機種更新に関する議論、を行うための短期研究会が上記日程で年明け後すぐに行われた。①の共同利用成果報告会は毎年この時期に行われているものであり、当該年度の大規模クラス申請者が中心として大規模計算の実施例について報告を行い、物性研スパコンの利用法についての情報を交換する目的で行われる。今回も15件の発表があり、先進の大規模計算手法や大規模計算による研究の進展などについて活発な議論が行われた。③の元素戦略プロジェクトは2012年度秋にスタートしたものであり、これからの研究の進め方を中心に発表が行われた。物性研究と材料研究の境界領域でそれぞれの専門家がどのように連携・協力をしながら進めるべきかなどについて議論が行われた。また(④)、物性研スパコンは2013年度から新たにsystem Cが京コンピュータの練習機の目的のために導入され、また、2015年度にsystem A, Bに更新を迎える。これからの物性研究を進めるうえで、どのような計算機を導入し、どのように利用技術を発展させるべきかについて議論を行った。その参考となると思われる二つの講演を企画した。東工大での新型計算機導入例についての松岡先生に講演していただき、また、鳥取大の吉本先生にエクサコンピュータに向けた準備状況などについて報告していただいた。以下に、研究会のプログラムと特別講演の要旨について記載する。他の講演の要旨については物性研のホームページからダウンロードして閲覧可能である。

### プログラム

#### 1月10日(木)

13:00-13:30 [特別講演] 松岡 聡(東京工業大学学術国際情報センター)

我が国初のペタフロップススパコン TSUBAME2.0 と 3.0 への進化

13:30-13:50 宮崎 州正(筑波大学)

ガラス転移とジャミング転移の平均場描像

13:50-14:10 川崎 猛史(京都大学)

過冷却液体における動的不均一性の階層性：構造再配置運動と低周波振動運動

14:10-14:30 沖津 康平(東京大学)

実験とシミュレーションによる 3,4,5,6,8,12 波 X線ピンホールトポグラフ

14:30-14:50 岡本 祐幸(名古屋大学)

スピン系および分子系の拡張アンサンブルシミュレーション

14:50-15:10 - 休憩 -

15:10-15:30 藤井 慎太郎(東京工業大学) グラフェンナノ構造のプロブ顕微鏡計測と電子状態計算

15:30-15:50 笠松 秀輔(東京大学物性研究所)

軌道分離法によるナノキャパシタの第一原理シミュレーション

15:50-16:10 只野 央将(東京大学)

第一原理に基づく I 型クラスレート化合物の格子熱伝導解析

16:10-16:30 吉澤 香奈子(東京大学物性研究所)

平面波基底第一原理計算コードの開発とソースコードの公開へ向けて

16:30-18:00 ポスターセッション

後藤 広志(東京理科大学)	時間依存密度汎関数法による窒化ホウ素ナノ構造物質の誘電関数の計算
田中 宗(東京大学)	2次元量子系におけるエンタングルメントスペクトル
荒川 直也(東京大学)	$\text{Ca}_{2-x}\text{Sr}_x\text{RuO}_4$ における重い電子に関する FLEX 解析
荒川 直也(東京大学)	Ru 酸化物における $\text{RuO}_6$ の tilting に関する FLEX 解析
荻宿 俊風(東京大学)	ピセン超伝導体の 4 バンド有効模型の FLEX による解析
金尾 太郎(東京大学)	ディラック電子系 $\alpha$ -(BEDT-TTF) $_2\text{I}_3$ における欠陥誘起ゼロエネルギー局在状態
佐藤 駿丞(筑波大学)	パルス光による固体表面の超高速誘電関数変化の第一原理計算
合田 義弘(東京大学)	GaP 固溶体太陽電池材料の物質デザイン
小杉 太一(産業技術総合研究所)	平面波基底+PAW 法による相対論的第一原理電子状態計算の実装と L10 型合金の結晶磁気異方性の計算
野口 良史(東京大学物性研究所)	全電子第一原理グリーン関数法によるフラーレン分子の光励起スペクトル
Tran Thi Thu Hanh(東京大学物性研究所)	Ab initio Modelling of the Hydrogen Adsorption on Pt(111)
植村 渉(東京大学物性研究所)	Symmetric Tensor Decomposition Description of Fermionic Many-Body Wavefunctions
城野 亮太(東京大学)	色素増感型太陽電池における酸化還元対に関する考察
越智 正之(東京大学)	トランスコリレイティッド法と乱雑位相近似に基づく相関波動関数の最適化とその固体バンド計算への適用
大塚 教雄(理化学研究所)	非天然型塩基対を含んだ DNA 系に対するオーダーN 法第一原理計算
中田 彩子(物質・材料研究機構)	第一原理 O(N)計算プログラム CONQUEST における局在軌道の最適化
Krzysztof Moorthi(三井化学株式会社)	Monte Carlo Simulations of Structure and Properties of Polyolefins
田村 亮(物質・材料研究機構)	歪んだ三角格子ハイゼンベルクモデルにおける相転移
坂下 達哉(東京大学物性研究所)	スピン系の厳密対角化パッケージの並列化と高精度化
五十嵐 亮(東京大学物性研究所)	ALPS/diagonalization の並列化とそのフェルミオン系への応用の試み
安田 真也(東京大学)	動的異方性制御を用いた量子相転移の数値的解析
本山 裕一(東京大学)	局所 Z2 ベリー位相の量子モンテカルロ計算
浅野 優太(愛媛大学)	Lennard-Jones 系の融解曲線
芝 隼人(東京大学物性研究所)	剪断流下の脂質膜系の構造形成
坂下 あい(お茶の水女子大学)	球状ベシクルに内包されたベシクルの形状決定機構の解明
前園 涼(北陸先端科学技術大学院大学)	Quantum Monte Carlo study of high-pressure cubic $\text{TiO}_2$
品岡 寛(産業技術総合研究所)	パイロクロア酸化物 $\text{Y}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ におけるスピン軌道物理の第一原理計算
胡 春平(東京理科大学)	時間依存密度汎関数法と密度汎関数摂動論による非断熱結合係数の高精度計算
國貞 雄治(大阪大学)	計算機マテリアルデザインの役割—固体表面・界面ナノ領域における反応解析—
岡 耕平(大阪大学)	第一原理量子シミュレーションによる表面・界面ナノ領域における反応解析
田口 裕作(金沢大学)	磁性薄膜の電子状態及び磁気異方性とその電界効果の第一原理計算
鈴木 隆史(兵庫県立大学)	トラップポテンシャル中のボーズ格子モデルにおける絶縁体領域の端状態
原田 健自(京都大学)	テンソルネットワーク変分法の開発
小畑 修二(東京電機大学)	ナノ構造磁性とバルクハウゼン効果
隅田 真人(物質・材料研究機構)	アナターゼ $\text{TiO}_2(101)$ 表面に吸着したアセトニトリル分子の電子状態
南谷 英美(理化学研究所)	吸着構造と分子骨格が生み出す分子における近藤効果
高木 紀明(東京大学)	銀表面に創成した新奇ハニカム物質—シリセン—
坂井 徹(日本原子力研究開発機構)	カゴメ格子反強磁性体の数値対角化による研究

18:00- 懇親会 (柏キャンパスカフェテリア、参加費 4,000 円 [学生 2,000 円])

1月11日(金)

- 10:00-10:30 [元素戦略特別講演] 大場 史康 (京都大学)  
酸化物半導体における点欠陥の原子・電子構造と機能
- 10:30-11:00 [元素戦略特別講演] 東後 篤史 (京都大学)  
第一原理フォノン計算と自動計算環境
- 11:00-11:10 - 休憩 -
- 11:10-11:30 渡邊 聡 (東京大学) 酸化タンタル原子スイッチに関する第一原理計算
- 11:30-11:50 小田 竜樹 (金沢大学) 電子添加された  $\text{Ti/Si}(111)$  表面における光電子分光スペクトルへの考察
- 11:50-12:10 [特別講演] 吉本 芳英 (鳥取大学) 計算物性物理の発展のためのコンピュータ活用の考え方
- 12:10-13:10 - 昼食 -
- 13:10-13:40 ディスカッション
- 13:40-14:00 宇田川 将文 (東京大学) スピンアイス伝導系の異常ホール効果
- 14:00-14:20 柳瀬 陽一 (新潟大学) スピン三重項超伝導体のスピン軌道相互作用と  $d$  ベクトル
- 14:20-14:40 堀田 貴嗣 (首都大学東京) 電子・フォノン系の近藤効果の数値繰り込み群法による研究
- 14:40-15:10 - コーヒーブレイク -
- 15:10-15:30 柳澤 孝 (産業技術総合研究所) 二次元ハバードモデルの電子状態の数値的研究
- 15:30-15:50 佐藤 年裕 (東京大学物性研究所) クラスタ動的平均場理論を用いた強相関電子系における光学伝導度の数値的研究
- 15:50-16:00 - 休憩 -
- 16:00-16:30 [特別講演] Roderich Moessner (Max Planck Institute for the Physics of Complex Systems)  
Dipolar order by disorder in the classical kagome Heisenberg antiferromagnet
- 16:30-17:00 [元素戦略特別講演] 土浦 宏紀 (東北大学)  
永久磁石材料の保磁力機構に関する計算物理学的アプローチ
- 17:00-17:30 [元素戦略特別講演] 安藤 康伸 (産業技術総合研究所)  
次世代二次電池開発に向けた *ab initio* MD 及び Informatics による取り組み

## 特別講演の要旨

### 我が国初のペタフロップススパコン TSUBAME2.0 と 3.0 への進化

松岡 聡 (東京工業大学)

現代のスーパーコンピュータはペタフロップスからエクサフロップスに向かおうとしている。しかし、その原動力であった過去よりの「10年で1000倍」の性能のスケラビリティの達成が困難になっている。その律速要因は主に電力の限界と、メモリ・ネットワーク・ストレージのバンド幅の欠落、つまり、半導体/VLSIのフィーチャースケーリングによる計算能力の向上に対してシステムの転送バンド幅の相対的な縮退に起因する。これらを今後解決していかななくては、スパコンの大幅な性能向上は不可能である。

東京工業大学・学術国際情報センター(GSIC)が各社と共同で開発し、2010年11月にわが国初のペタフロップススパコンとして稼働したTSUBAME2.0[1]では、その諸問題を解決するために、JST Ultra Low Power HPCなどの研究成果を応用し、メニーコアプロセッサであるGPUによる百万並列レベルの超並列化と高メモリバンド幅の確保や、最新のシリコンフォトニックデバイスによる220テラビットの高バイセクションバンド幅ネットワークの構築、更にはシリコンストレージであるSSDによる高バンド幅・低レーテンシI/Oなどの活用など、最新技術を駆使して世界トップレベルの省電力とコンパクト化、低コスト化を実現した。またそれらハードウェア有効活用できるシステムソフトウェア・ライブラリ・プログラミング環境を研究開発・整備することにより、ペタフロップス級へ多くのアプリケーションがスケラリングする事を達成した。

過去二年以上のTSUBAME2.0の運用において、全国共同利用やHPCIを含む登録ユーザは数千人にのぼり、マシン全体は高い利用率を示しており、GPUの利用率も50%を超えている。企業の利用も累積で100社にも上る。のみならずペタフロップスのスケールの性能を示すアプリケーションは10以上もあり、物性・医療・環境など数々の分野をカバーしている。これにより、TSUBAME2.0は世界のリーディングスパコンと認知され、2011年11月のACMゴードンベル賞や2012年の文部科学大臣表彰を含む、数々の賞を受賞し、東工大の技術エクセレンスを示すシンボルの一つにもなっていて、多くの見学者が訪れている。

今後は2020年近辺のエクサフロップスのスパコンは今の1000倍の10億プロセッサのマシンとなると言われており、そのようなスパコンの性能目標達成は従来と比較して決して容易ではなく、多くの技術課題に現在直面している。我々は、これらの解決のために、更なる省電力化・高信頼化・超並列のプログラミング・超高速I/Oなどに関する研究を推し進めるだけでなく、その成果をいち早くTSUBAME2.0の後継であるTSUBAME2.5, 3.0などに適用し、実証を進めていく計画である。

#### 文献

[1] [http://www.gsic.titech.ac.jp/TSUBAME\\_ESJ](http://www.gsic.titech.ac.jp/TSUBAME_ESJ).



## 計算物性物理の発展のためのコンピュータ活用の考え方

吉本 芳秀 (鳥取大学)

計算物理学はコンピュータの発展の恩恵を受け続けてきた。特に Intel Pentium(1993年 60MHz)から Intel Pentium4 (2004年 3.8GHz)までの発展は、計算物理学の目的に使える CPU が安価な一般向けとして提供され、しかもその進歩がクロックの高速化という、プログラム開発者の負担のない形で実現していた状況を作り出した。しかしながら 2004 年以降、クロック速度の上昇は打ち止めとなり、代わって CPU の性能向上が、マルチコア化など開発者に負担を求める形で実現するようになった。また、同じくスーパーコンピュータにおいても 1994 年では TOP500 にリストされたシステムの合計計算能力の 50%が分散並列によるものだったが、2001 年ですでに 95%以上が分散並列によるものとなり[1]、時期が早まっているがやはり開発の負担が増大してきた。

本講演ではこの様な状況を踏まえて、今後の計算物性物理の発展のためにコンピュータを活用する上での考え方をコストをキーワードに提示したい。

一つは、計算機アーキテクチャの物理的実態から決まるコスト(処理に必要な時間)を理解することである。算術演算のコストを考えることはもちろんであるが、たとえ同一ノードの中であってもデータ移動に距離とその複雑さに応じたコストが必要になることも重要である。例として、この観点から  $O(N)$  第一原理計算と  $O(N^3)$  第一原理計算を比べると、実は  $O(N^3)$  計算は、その中核の行列積計算が単純かつ「近接した」データ移動でできるために安く、一方で  $O(N)$  計算に必要な複雑で飛び飛びのデータ移動はハードウェア的に高いということが分かり、 $O(N^3)$  計算がしぶとい理由の一端が理解できる。

次に、コンピュータ製造のコスト(経済)を考える。ここで重要なことは社会的な汎用性(コモディティ)の有無がこのコストを大きく左右することである。GPGPU はコモディティ利用によって大きな演算能力を作り出した重要な一例である。また PC クラスタもその前の重要な一例と言える。次世代の計算機システムや計算手法(アルゴリズム)を考える際には、このコモディティ活用、つまりサイエンスドリブンの逆も一度は検討する価値があると考えている。ただし、コモディティがスマートフォンなど小型機器の方向に向かう可能性があり、こうなるとコモディティ活用は困難になるし、コモディティで実現することが困難であるが、科学的に重要な課題があることも事実である。

最後に可能ならば、これらの観点から次の物性研究におもいて、明るくなると思われる方向、そのままでは困難であると思われる方向など研究の方向性についても議論したい。

### 文献

[1] TOP500: <http://www.top500.org>.