

# 附属物質設計評価施設

Materials Design and Characterization Laboratory (MDCL)

物質設計評価施設では、物質の設計 (Design)、物質の合成 (Synthesis)、合成された物質を総合的に調べる評価 (Characterization) の3種類の研究を「DSC サイクル」として有機的に連携させることにより、新しい物性・機能をもつ物質の開発を目指している。本施設は物質設計部 (以下、設計部) と物質合成・評価部 (以下、合成評価部) からなり、設計部には大型計算機室が、合成評価部には物質合成室、化学分析室、X線測定室、電子顕微鏡室、電磁気測定室、光学測定室、高圧合成室の7実験室がある。設計部では、物性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、合成評価部ではさまざまな物質の合成、その化学組成の分析や結晶構造評価を行うとともに、新しく開拓された物質群の電氣的・磁氣的・光学的性質の総合評価を行っている。本施設の全国共同利用は、物質設計評価施設運営委員会により運用されている。

The aim of MDCL is to promote materials science through the cycle of three research phases, Design, Synthesis, and Characterization, which we call the "DSC cycle". The MDCL consists of two divisions; Materials Design Division (MDD) and Materials Synthesis and Characterization Division (MSCD). Supercomputer Center (SCC) of ISSP belongs to MDD, while MSCD has seven sections for joint-use; Materials Synthesis Section, Chemical Analysis Section, X-Ray Diffraction Section, Electron Microscope Section, Electromagnetic Measurements Section, Spectroscopy Section, and High-Pressure Synthesis Section. In MDD, we explore novel mechanisms behind various cooperative phenomena in condensed matter by making use of its supercomputer system, and develop theoretical designs of new materials as well as materials with new nanoscale structures. In MSCD, we synthesize various types of new materials, develop single crystals, and characterize the structural, electromagnetic, and optical properties of the materials by employing various methods. Almost all the facilities of the MDCL are open to domestic scientists through the User Programs conducted by the Steering Committees of the MDCL.

---

施設長 岡本 佳比古  
Leader OKAMOTO, Yoshihiko

---

## 上床研究室 Uwatoko Group

## 研究テーマ Research Subjects

- 1 超高压下における新奇物性現象の探索  
Search for novel physical phenomena under high-pressure
- 2 圧力誘起量子相転移現象の研究  
Study of the pressure-induced quantum phase transition
- 3 超高压力発生装置の開発と多重環境下精密物性測定方法の確立  
Development of high-pressure apparatus and establishment of physical property measurement techniques under the multi extreme conditions

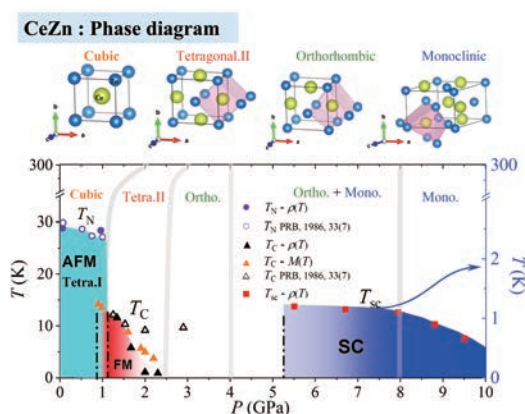


教授 上床 美也  
Professor UWATOKO, Yoshiya

専攻 Course  
理学系物理学  
Phys., Sci.

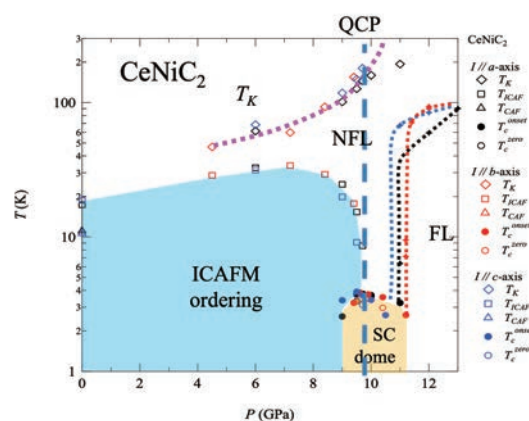
近年、未解決な物性現象の解明や数奇物性現象の発見に欠かせない物理パラメータの1つとなっている各種高压下物性測定は、強相関電子系物質をはじめとする固体物性の研究において多くの成果をもたらしている。当研究室では、超高压力技術を駆使した、各種の物性測定に適応した高压力発生装置の開発を行い、可能な限りよい静水圧環境における多重環境下での物性研究を進めている。強相関電子系物質では、格子振動、電子荷数、スピン、軌道などの基本的自由度と各種相互作用の競合により、結果として種々の興味深い物性が表現している。超高压力を用いた各種相互作用の制御は、どのような新奇物性を露わにしてくれるだろうか？その出現機構はどうなっているのだろうか？現在、熱物性測定、結晶および磁気構造の圧力効果の研究を主とし、上記の研究テーマを進めている。また、共同利用も活発に行っている。

The high-pressure group has been studying various materials under high-pressure conditions in combination with low temperature and/or high magnetic field. Combination of such multiple extreme conditions is becoming popular and indispensable for research in solid state physics. However, the developments of techniques that can realize in-situ measurements under multiple extreme conditions are often challenging and require sophisticated considerations. This group has persistently devoted numerous efforts in developing such advanced high-pressure techniques and in turn have become successful studying the strongly correlated electronic systems, which is one of the most important themes in modern condensed matter physics research. Since many mysterious phenomena in strongly correlated electronic systems results from a delicate interplay of multiple energy scales involving electron-phonon, electron-electron interactions as well as orbital degrees of freedom, we foresee the discovery of many unknown exotic phenomena under multi-extreme conditions. Besides, high pressure offers an effective knob in tuning the inter-atomic distances and the density of electronic states at the Fermi level, which are crucial for controlling the complex interactions present in correlated materials in a much cleaner way.



単純金属であるCeZn(立方晶/CsCl type)の圧力相図と圧力下での誘起された各結晶構造の様子。正方晶構造では、強磁性量子臨界点の存在の可能性を単斜晶構造では、超伝導状態が出現する。

Pressure phase diagram of simple Cubic metal CeZn (CsCl type) and pressure-induced each schematic crystal structure. In the tetragonal structure, the possible existence of a ferromagnetic quantum critical point, and in the monoclinic structure, the superconducting state appears.



重い電子系物質CeNiC<sub>2</sub>(単結晶)の圧力相図。T<sub>N</sub>, T<sub>K</sub>, T<sub>C</sub>に異方性はほぼ見られず、量子臨界点近傍での電気抵抗率の温度依存性( $\rho = \rho_0 + AT^n$ )は、n=1が3軸とも観測され、価数揺らぎによる超伝導の出現が示唆されている。

Pressure phase diagram of heavy electron material CeNiC<sub>2</sub> (single crystal) in which no anisotropy is seen in T<sub>N</sub>, T<sub>K</sub>, and T<sub>C</sub>. The temperature dependence of electrical resistivity ( $\rho = \rho_0 + AT^n$ , n=1) near the quantum critical point is observed, suggesting superconductivity appeared due to valence fluctuations.



# 岡本研究室 Okamoto Group

## 研究テーマ Research Subjects

- 1 特異な量子現象・革新的な電子機能を示す結晶性固体の新物質探索  
Exploration of new materials that exhibit novel quantum phenomena and innovative electronic functions
- 2 新奇  $d$  電子系物質の開拓  
Exploration of novel  $d$ -electron systems
- 3 際立った電子物性を示す物質開拓手法の確立  
Development of methods to find novel materials that exhibit outstanding electronic properties



教授 岡本 佳比古  
Professor OKAMOTO, Yoshihiko

専攻 Course

新領域物質系

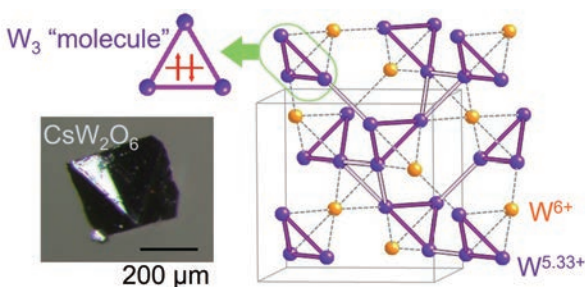
Adv. Mat., Frontier Sci.



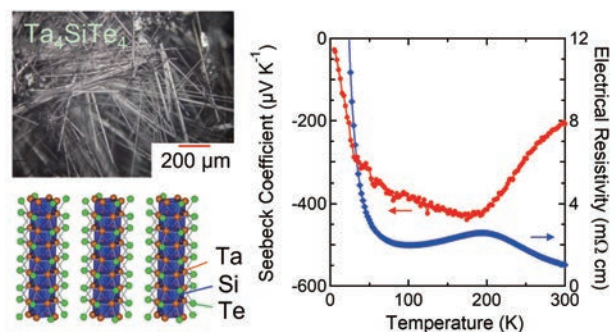
助教 大熊 隆太郎  
Research Associate  
OKUMA, Ryutaro

新物質の発見は、物質の性質を理解する学問：物性物理学の進化に大きく貢献する可能性をもつ。我々の研究グループでは、新奇な量子現象や革新的な電子機能を示す結晶性固体の新物質の発見を目指す。遷移金属を含む無機化合物を中心に、あらゆる元素を含む物質を対象として、超伝導、磁性、エネルギー変換、電子自由度、体積機能、幾何学的フラストレーション、トポロジー、スピン軌道結合といった様々なキーワードを見据えながら、様々な合成手法を組み合わせた物質開拓を行うことによりこの目標を達成する。例えば、非常に高い対称性を有しながら複雑な結晶構造をもつ新物質や、究極の低次元結晶といえる新物質を創ることで、変わった性質を示す新超伝導体、高効率なエネルギー変換材料、これまでにない電子スピンの配列をもつような新奇磁性体を開拓する。

The discovery of a new material has a potential to trigger the evolution of condensed matter physics. We aim at discovering new materials of crystalline solids that exhibit novel quantum phenomena and innovative electronic functions. The main target is inorganic compounds containing transition metal elements. We will explore novel materials by using various synthetic methods with various keywords, such as superconductivity, magnetism, energy conversion, electronic degrees of freedom, volumetric functions, geometrical frustration, topological properties, and spin-orbit coupling in mind. For example, by exploring novel materials with a very high symmetry but a complex crystal structure or those with an ultimate low-dimensional crystal structure, we will find unconventional superconductors, high-performance energy conversion materials, and unique magnetic materials that have an unprecedented spin arrangement.



立方晶物質  $\text{CsW}_2\text{O}_6$  における正三角形の“分子”形成。  
Regular-triangular “molecule” formation in a cubic material  $\text{CsW}_2\text{O}_6$ .



低温で高い熱電変換性能を示す新材料候補：一次元ファンデルワールス結晶  $\text{Ta}_4\text{SiTe}_4$ 。

A thermoelectric material for low temperature applications: one-dimensional van der Waals crystal  $\text{Ta}_4\text{SiTe}_4$ .



## 尾崎研究室 Ozaki Group

## 研究テーマ Research Subjects

- 1 第一原理電子状態計算における効率的計算手法・アルゴリズムの開発  
Development of efficient methods and algorithms for first-principles electronic structure calculations
- 2 OpenMX の開発と公開  
Development of the OpenMX software package
- 3 X線分光スペクトル計算手法の開発  
Development of first-principles methods for X-ray spectroscopies
- 4 二次元物質の第一原理電子状態計算  
First-principles calculations of two-dimensional novel structures



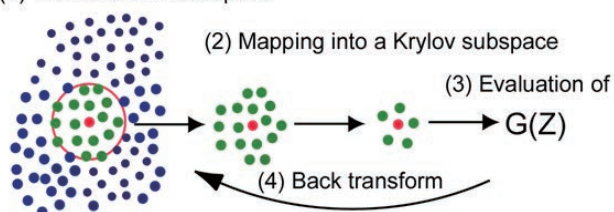
教授 尾崎 泰助  
Professor OZAKI, Taisuke

専攻 Course  
理学系物理学  
Phys., Sci.

超並列計算機の発展と物質科学の精密化に伴い、第一原理電子状態計算の重要性が増している。我々は密度汎関数理論に基づき、現実に近い系をより精密に取り扱うための新しい計算手法・ソフトウェアパッケージ OpenMX の開発に取り組んでいる。密度汎関数理論の計算量は系に含まれる原子数の三乗に比例するが、電子の近視性に着目し、計算量が原子数に比例する新しいオーダー N 法を開発した。本手法により、これまで取り扱いが困難であったリチウムイオン電池や鉄鋼材料の大規模シミュレーションが可能となり、実験との直接比較が可能となりつつある。さらに X 線光電子分光法で観測される内殻電子の絶対束縛エネルギーの高精度計算手法を開発し、実験グループと共同してシリセン、ボロフェン、単原子分散した Pt 原子、Ge の二重三角格子等の表面構造と電子状態の特定に成功している。また最密充填原理に基づく結晶構造の探索手法や最近接ワニエ関数の計算手法の開発も進めている。

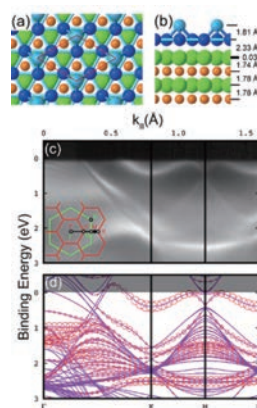
In accordance with development of recent massively parallel computers, first-principles calculations based on density functional theories (DFT) have been playing a versatile role to understand and design properties of a wide variety of materials. We have been developing efficient and accurate methods and software packages to extend applicability of DFT to more realistic systems as discussed in industry. Although the computational cost of the conventional DFT method scales as the third power of number of atoms, we have developed O(N) methods, whose computational cost scales only linearly, based on nearsightedness of electron. The O(N) method enables us to simulate Li ion battery and structural materials which cannot be easily handled by the conventional method, and to directly compare simulations with experiments. In addition to this, we have recently developed a general method to calculate absolute binding energies of core levels in solids, resulting in determination of two-dimensional structures such as silicene, borophene, single atom dispersion of Pt atoms, and bitriangular structure of Ge in collaboration with experimental groups. Our continuous methodological developments have been all implemented in OpenMX (Open source package for Material eXplorer).

## (1) Truncation in real space



オーダー N クリロフ部分空間法。(1) 各原子に対してクラスターを構成。(2) クラスターで定義される部分空間からクリロフ部分空間へ射影。(3) クリロフ部分空間内で固有値問題を解き、元の空間へ逆変換する。

Underlying idea of the O(N) Krylov subspace method. (1) Construction of truncated cluster for each atom. (2) Projection of the truncated subspace into a Krylov subspace. (3) Solution of the eigenvalue problem in the Krylov subspace, and back-transformation to the original space.



(a) 及び (b) 第一原理計算により求められた  $ZrB_2$  上 Ge 層の二重三角格子構造。(c) 角度分解光電子分光の結果と、(d) バンド構造の計算結果が良く一致することから、構造モデルの妥当性が認められる。

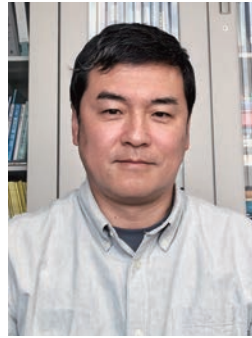
(a), (b) Bitriangular structure of Ge determined by DFT calculations. (c) Angle-resolved photoemission spectrum (ARPES) of the bitriangular structure. (d) Unfolded band structure of the bitriangular structure which well reproduces the ARPES measurement.



# 川島研究室 Kawashima Group

## 研究テーマ Research Subjects

- 1 量子統計力学モデルの物性解明  
Search for novel quantum phases and quantum transitions
- 2 多体問題の数値解法の研究  
Numerical methods for many-body physics
- 3 臨界現象の一般論  
General theory of critical phenomena
- 4 ランダム系と計算量  
Disordered systems and computational complexity

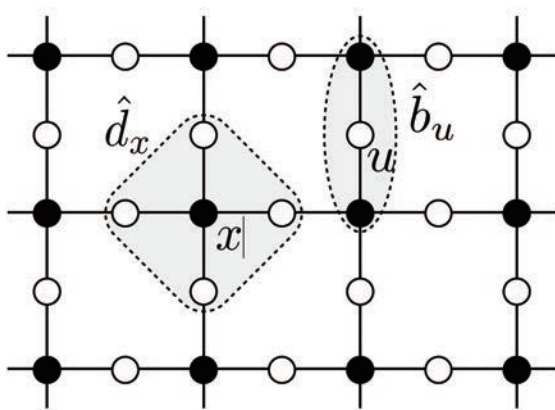


教授 川島 直輝  
Professor KAWASHIMA, Naoki

専攻 Course  
理学系物理学  
Phys., Sci.

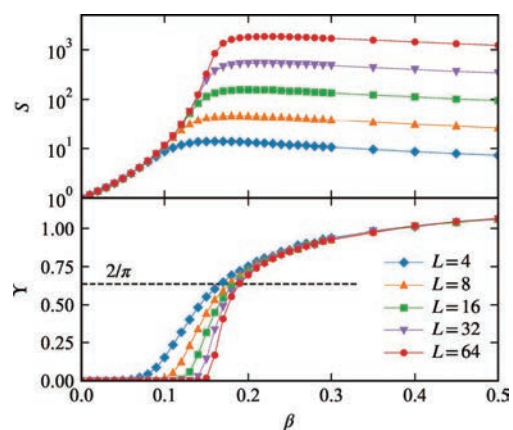
最近、人工知能／機械学習／量子計算などの流行で社会的にも計算機に注目が集まっているが、我々の研究グループでは計算物理、計算統計力学の方法に含まれる数論的コアを明らかにし、新しい手法を開発することを基本に研究を進めている。その応用として、統計力学の未解決問題の解明や相互作用が物性を支配するいわゆる強相関量子系における実験研究との比較計算などを行っている。ここで用いられる量子モンテカルロ法やテンソルネットワーク法はボルツマンマシンやデータ圧縮を通じてデータ科学とも接点を持っている。最近の研究の一例としては、フラットな分散をもつプラストレートボーズ系に関して、その基底状態が古典ループガスモデルと数論的に等価となる例を発見し、さらにその系の量子相転移が古典2次元XYモデルの有限温度転移と同じKT転移となることを数論的に検証した。

Recently, new trends in computation, such as artificial intelligence, machine learning and quantum computation are attracting social attention. Our research group tries to clarify the mathematical core of the methods of computational physics and computational statistical mechanics. We are conducting research based on the development of new methods. As its application, we are elucidating unsolved problems in statistical mechanics and performing comparative calculations with experimental studies in strongly correlated quantum systems, in which interactions dominate physical properties. The quantum Monte Carlo and tensor network methods used here are closely related to data science through Boltzmann machines and data compression. For example, we developed a flat-band frustrated boson system whose ground state can be mathematically related to the loop gas model. We showed by Monte Carlo simulation that its quantum phase transition belongs to the same universality class as the classical XY model.



モデルを構成する格子。xとuとで構成されるクラスタ内で粒子が白と黒のサイト間でホッピングする。

The lattice considered. Within each cluster specified by x or u, a tuned hopping between the black and the white sites is defined.



静的構造因子  $S$  (上) と、ヘリシティモデュラス (下) のパラメータ  $\beta$  依存性。下図の水平線は KT 転移点に特徴的な普遍ジャンプである  $2/\pi$  を示す。

The static structure factor  $S$  (top) and the helicity modulus (bottom) as functions of  $\beta$ . The horizontal line in the bottom panel indicates the universal jump  $2/\pi$ , the thermodynamic value characteristic to the KT transition point.



## 野口研究室 Noguchi Group

## 研究テーマ Research Subjects

- 1 生体膜の非平衡ダイナミクス  
Non-equilibrium dynamics of biomembrane
- 2 細胞、脂質ベシクルの形態形成  
Shape transformation of cells and lipid vesicles
- 3 複雑流体のダイナミクス  
Dynamics of complex fluids
- 4 アクティブマターの協同現象  
Self-organization of active matter



准教授 野口 博司  
Associate Professor NOGUCHI, Hiroshi

専攻 Course  
理学系物理学  
Phys., Sci.



助教 中野 裕義  
Research Associate  
NAKANO, Hiroyoshi

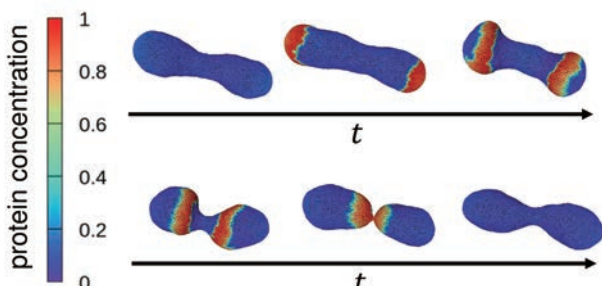
ソフトマター、生物物理を理論、計算機を駆使して研究している。特に、生体膜や細胞の構造形成、複雑流体、アクティブマターのダイナミクスの解明に力を入れている。そのためシミュレーション手法の開発、改良も行っている。

例えば、赤血球や脂質膜からなる小胞のさまざまな環境下での形態変化を調べている。これまで、流れによる赤血球のパラシュート状やスリッパ状への変形や、曲率誘導タンパク質の吸着、化学反応による生体膜の形態変化などを明らかにしている。特に非平衡下でのダイナミクスを研究している。

また、アクティブマターにおける相転移や、高分子溶液や気泡形成を伴う流れなど通常のナビエーストークス方程式に従わない流体のダイナミクスをスパコンを用いた大規模シミュレーションを駆使して研究している。

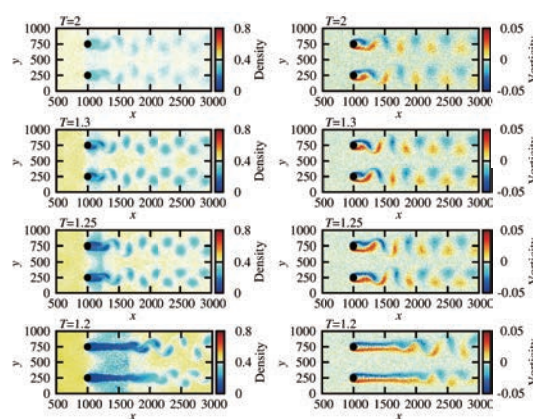
We study soft-matter physics and biophysics using theory and simulations. Our main targets are the structure formation of biomembrane and the dynamics of complex fluids and active matter under various conditions. We develop coarse-grained membrane models, hydrodynamics simulation methods, and the calculation method of material properties.

We found the shape transitions and dynamic modes of red blood cells and lipid vesicles in shear and capillary flows using mesoscale hydrodynamic simulations: discocyte-to-parachute transition, tank-treading, and swinging, etc. We also clarified the shape transformation of membrane induced by curvature-inducing proteins using coarse-grained membrane simulations: membrane tubulation by banana-shaped proteins (BAR superfamily proteins, etc.), budding by laterally isotropic proteins, and the coupling of membrane deformation, chemical reaction, and protein diffusion in membrane (traveling wave and Turing pattern). Membranes exhibit characteristic patterns and fluctuations out of equilibrium. Moreover, we investigated phase transitions of active matter and fluid dynamics of polymer solution and cavitation in the Karman vortex and sound-wave propagation using massively parallel simulations.



曲率誘導タンパク質の反応拡散波に伴うベシクルの形態の時間変化。くびれ形成を周期的に繰り返す。赤色の領域は曲率誘導タンパク質の濃度が高い。

Sequential snapshots of a shape-oscillation vesicle. Budding repeatedly occurs, accompanied by the traveling wave of bound proteins. Color indicates the concentration of the curvature-inducing protein.



周期的に並んだ円筒後方のカルマン渦は上図のように隣り同士で逆位相に同期する。温度Tを下げると、キャビテーションが起こり、気体の層が形成されている。左図は密度、右図は渦度を示す。

Cavitation in Karman vortex behind cylinder arrays.



# 廣井研究室 Hiroi Group

## 研究テーマ Research Subjects

- 1 新しい量子物質の探索  
Search for new quantum materials
- 2 スピン軌道結合金属の研究  
Physics of the spin-orbit-coupled metal
- 3 混合アニオン化合物における物質開発と新奇物性開拓  
Chemistry and physics of mixed-anion compounds



教授 廣井 善二  
Professor HIROI, Zenji

専攻 Course

新領域物質系

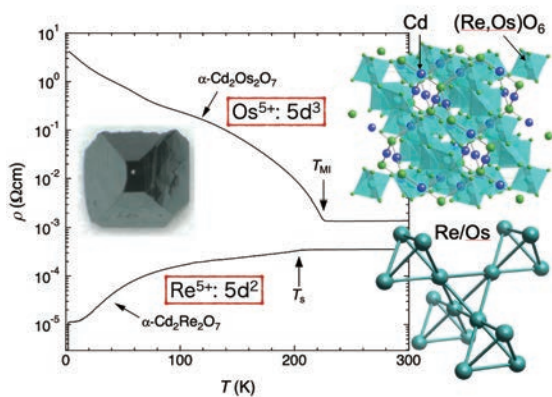
Adv. Mat., Frontier Sci.

高温超伝導の発見とその後の研究の流れは、新物質の発見が如何に物性物理学に大きなインパクトを与えるかを如実に示した。その波紋は超伝導研究のみならず、強相関電子系一般における局在 - 非局在の概念の確立、磁性と伝導性の興味深い相関、スピン軌道相互作用を起源とする様々な現象、特殊なバンド構造に起因する非対角応答などの研究へと大きな広がりを見せている。新物質探索を通して未知の物理現象を見出し、物性物理学の新しい方向を切り開くことは今後ますます重要になると考えられる。

本研究室では、様々な遷移金属化合物の構造と物性の間にみられる相関に着目しながら、新物質探索を行い、強相関電子系の物質科学の面白さを研究している。特に最近では、重い 5d 電子系や複数の陰イオンを含む混合アニオン化合物を中心に研究を展開している。

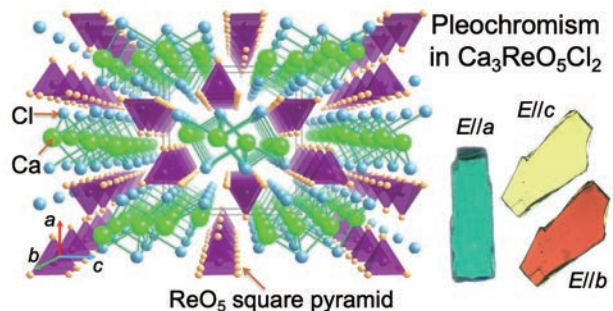
The discovery of high-temperature superconductivity and the subsequent flow of research clearly show how the discovery of new materials has a great impact on condensed matter physics. The ripples are not limited to superconductivity research, but expanded greatly to the establishment of the concept of itinerant-localization in strongly correlated electron systems and interesting correlations between magnetism and conductivity. Moreover, various phenomena originating from spin-orbit interaction and off-diagonal responses due to specific band structures have been focused. It will be more important in the future to discover unknown physical phenomena through the search for new materials and to open up new directions in condensed matter physics.

In our laboratory, we are searching for new materials while paying attention to the correlation between the structure and physical properties of various transition metal compounds, and are enjoying the fantastic materials science. In particular, recently, we have been focusing on heavy 5d electron systems and mixed anion compounds containing multiple anions.



5d 金属パイロクロア酸化物  $\text{Cd}_2\text{Os}_2\text{O}_7$  は 230 K で時間反転対称性を破り、四面体クラスター磁気八極子秩序を形成して絶縁体となる。 $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$  は 200 K 以下で空間反転対称性を失って遍歴クラスター電気トロイダル四極子秩序を示す。

Two 5d pyrochlore oxides.  $\text{Cd}_2\text{Os}_2\text{O}_7$  exhibits a metal-insulator transition at 230 K to a tetrahedral-cluster magnetic octupole order with losing time reversal symmetry, while an itinerant electric toroidal quadrupole orders are realized below 200 K in  $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$  with spontaneous spatial inversion symmetry breaking.  $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$  is a spin-orbit-coupled metal candidate.



多色性を示す混合アニオン化合物  $\text{Ca}_3\text{ReO}_5\text{Cl}_2$ 。  
Mixed-anion compound  $\text{Ca}_3\text{ReO}_5\text{Cl}_2$  showing pleochroism.



# 山浦研究室

Yamaura Group

## 研究テーマ Research Subjects

- 1 結晶構造の観点から行う物性研究  
Research of physical properties from the viewpoint of crystal structure
- 2 量子ビームを用いたマルチプローブ・マルチスケール解析  
Multi-probe and multi-scale analysis using quantum beams
- 3 新機能性材料の学理と探索  
Science and exploration of new functional materials



准教授 山浦 淳一  
Associate Professor YAMAURA, Jun-ichi

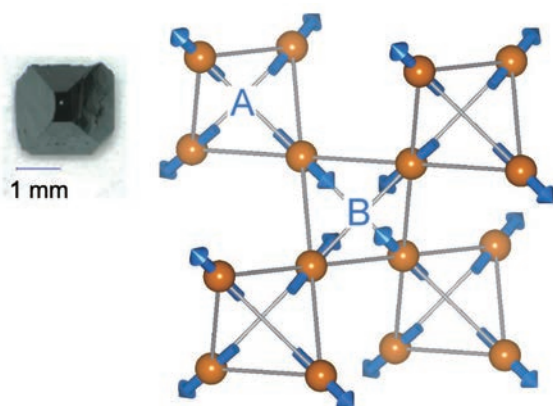
専攻 Course

新領域物質系

Adv. Mat., Frontier Sci.

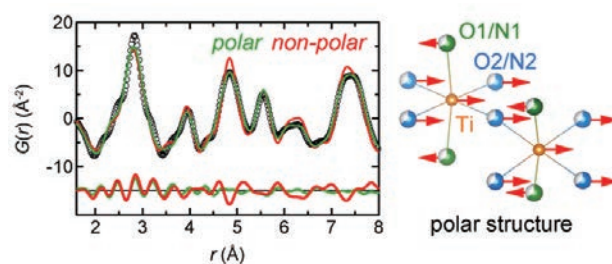
私たちの研究室では、機能性材料の構造物性研究を行なっている。構造物性とは、物質研究の出発点となる結晶構造をベースに物質の性質を明らかにする分野である。実験室系だけでなく、放射光や中性子などの様々な量子ビームを多角的に活用し、かつ、幅広い原子スケールで物質の様々な側面を明らかにする量子マルチプローブ・マルチスケール解析を行い、機能発現機構の本質を理解することに努めている。扱う対象は、新規の超伝導体や磁性体などの基礎材料から、誘電体、半導体、太陽電池などの応用材料までを幅広く手掛けている。機能解明だけでなく、より高い性能を引き出すにはどうすればよいかも考えつつ、「作って測って楽しい研究」をモットーに日々の研究を進めている。

Our laboratory conducts research on the structural physics of functional materials. Structural physics is a field that clarifies the properties of materials based on the crystal structures, which are the starting point for materials research. By utilizing not only laboratory systems but also various quantum beams like synchrotron radiation and neutrons from multiple perspectives, we work to understand the fundamentals of the mechanism of functional expression through quantum multi-probe and multi-scale analysis that reveals various aspects of materials on a wide range of atomic scales. We focus on a broad range of topics, including practical materials like dielectrics, semiconductors, and solar cells as well as fundamental materials like new superconductors and magnetic materials. Under the guiding principle of "research that is pleasant to create and measure," we do our everyday research while considering how to clarify functions and achieve improved performance.



金属絶縁体転移を起こす  $\text{Cd}_2\text{Os}_2\text{O}_7$  おいて  $-46^\circ\text{C}$  以下で出現する all-in-all-out と呼ばれる非常に対称性の高い美しいスピン配列。放射光を用いた共鳴 X 線磁気散乱で明らかにされた。

A highly symmetric and beautiful spin arrangement called all-in-all-out appears below  $-46^\circ\text{C}$  in  $\text{Cd}_2\text{Os}_2\text{O}_7$ , which undergoes a metal-insulator transition. Resonant X-ray magnetic scattering using synchrotron radiation revealed this spin arrangement.



中性子を用いた 2 体相関分布関数解析 (左) から導き出した高誘電体  $\text{LaTiO}_2\text{N}$  の極性 (polar) ナノ構造 (右)。矢印は非極性 (non-polar) 構造からの変位を示している。

Two-body correlation distribution function analysis using neutrons (left). Polar nano-region of high-k dielectric  $\text{LaTiO}_2\text{N}$  (right). The arrows indicate the displacement from the non-polar structure.





## 吉見チーム Yoshimi Team



特任研究員 (PI) 吉見 一慶  
Project Researcher (PI) YOSHIMI, Kazuyoshi

大規模計算機室では、物性研究所が管理・運用しているスーパーコンピュータをより簡便に活用できるよう、2015年度よりソフトウェア開発・高度化プロジェクト (PASUMS) を開始している。本チームでは、本プロジェクトに採択されたプログラムの開発・高度化を実施し、オープンソースソフトウェアとして公開するとともに、講習会支援などの普及活動を行っている。また、高度化されたソフトウェアを活用し、有機伝導体を中心に第一原理計算と組み合わせた有効モデルの構築とその解析や、ベイズ最適化・モンテカルロ法を活用した実験データ解析や有効モデルパラメータの推定などに取り組んでいる。また、高度化ソフトウェアを活用した研究に加え、情報処理技術に着目し、スパースモデリングを活用した量子モンテカルロ法で得られたデータの解析や、機械学習を用いた新物質探索に向けた応用研究などにも取り組んでいる。

From the 2015 fiscal year, the supercomputer center has started the project for the advancement of software usability in materials science to enhance the usability of the supercomputer system of ISSP. We develop and enhance the usability of programs adopted in this project, release them as open-source software, and support dissemination activities such as supporting hands-on lectures. In addition to these activities, using the developed software packages, we theoretically study research subjects such as the derivation and analysis of experimental data and the estimation of effective model parameters using Bayesian optimization and Monte Carlo methods. We also focus on information processing and have been trying to apply this technique to materials science such as analyzing data obtained by the quantum Monte Carlo method by the sparse modeling method and searching new materials using machine learning methods.

[https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/yoshimi\\_team.html](https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/yoshimi_team.html)



## 星研究室 Hoshi Group



客員教授 星 健夫  
Visiting Professor HOSHI, Takeo

近年、先端計測実験とスーパーコンピュータの融合が、大きく脚光を浴びている。一般に先端計測は高い実験技術を必要とし、得られる情報量が限られている。このような状況を、スーパーコンピュータと超並列型数値アルゴリズムをもちいたデータ駆動科学（主に、ベイズ推定・最適化などの逆問題解析）により打破し、「見えないものを見る」（従来は検出できなかったものが検出できるようになる）ことを目指している。ISSP ソフトウェア高度化プロジェクトなどにより、データ解析フレームワーク「2DMAT」を開発・公開している (<https://github.com/issp-center-dev/2DMAT>)。特に、物性科学フロンティアの1つである2次元物質にたいする、全反射高速陽電子回折 (TRHEPD、トレプト) をもちいた原子構造解析に注力している。

In recent years, the fusion of advanced measurement experiments and supercomputers has attracted a great deal of attention. In general, advanced measurement requires advanced experimental techniques and the amount of information obtained is limited. The present study aims to overcome the situation through data-driven science (mainly inverse problem analysis such as Bayesian estimation and optimisation) using supercomputers and massively parallel numerical algorithms, and to "see the invisible" (to be able to detect what was previously undetectable). Our data analysis framework "2DMAT" has been developed and released through the support of the Project for advancement of software usability in materials science by ISSP (<https://github.com/issp-center-dev/2DMAT>). In particular, it focuses on atomic structure analysis using total-reflection high-energy positron diffraction (TRHEPD) for two-dimensional materials, which is one of the frontiers of condensed matter science.

## 物質設計部 (Materials Design Division)

## 大型計算機室

Supercomputer Center

## 担当所員 川島 直輝

Chairperson  
KAWASHIMA, Naoki

## 担当所員 尾崎 泰助

Contact Person  
OZAKI, Taisuke

## 担当所員 杉野 修

Contact Person  
SUGINO, Osamu

## 担当所員 野口 博司

Contact Person  
NOGUCHI, Hiroshi

## 特任研究員 (PI) 吉見 一慶

Project Researcher (PI)  
YOSHIMI, Kazuyoshi

## 技術専門職員 矢田 裕行

Technical Specialist  
YATA, Hiroyuki

## 技術専門職員 福田 毅哉

Technical Specialist  
FUKUDA, Takaki

## 技術専門職員 本山 裕一

Technical Specialist  
MOTOYAMA, Yuichi

## 学術専門職員 荒木 繁行

Project Academic Specialist  
ARAKI, Shigeoyuki

## 特任研究員 青山 龍美

Project Researcher  
AOYAMA, Terumi

助教 福田 将大

Research Associate  
FUKUDA, Masahiro

助教 井戸 康太

Research Associate  
IDO, Kota

大型計算機室では計算物性物理学専用のスーパーコンピュータシステムを、スーパーコンピュータ共同利用委員会の審議に基づき全国の物性研究者の共同利用に供している。現有システムは、2020年10月に運用開始した主システム(システムB (ohtaka))、および2022年6月に運用開始した副システム(システムC (kugui))からなる複合システムである。システムのベンダーとの密な連絡によって高度なシステム性能を維持するとともに、全国ユーザからの相談にきめ細かく応じながら、システムの管理運用を行っている。スーパーコンピュータの利用申請については、ホームページ(<https://mdcl.issp.u-tokyo.ac.jp/scc/>)を参照されたい。また、2015年度から上記スーパーコンピュータシステムのより高度な利用を促進するためソフトウェア開発・高度化支援プログラム(PASUMS)を実施し、ユーザからの提案に基づき毎年2、3件のソフトウェア開発を行っている。

## 主要設備

System B (ohtaka): Dell PowerEdge C6525/R940 (1680 CPU nodes of AMD EPYC 7702 (64 cores) and 8 FAT nodes of Intel Xeon Platinum 8280 (28 cores) 総理論演算性能 6.881 PFLOPS)

System C (kugui): HPE Apollo 2000 Gen10 Plus/HPE Apollo 6500 Gen10 Plus (128 CPU nodes of AMD EPYC 7763 (128 cores) and 8 ACC nodes of AMD EPYC 7763 (64 cores) 総理論演算性能 0.973 PFLOPS)



物性研究所共同スーパーコンピュータシステム構成図

The Supercomputer System at the SCC-ISSP.

The Supercomputer Center (SCC) operates a supercomputer system available to all researchers of condensed matter physics in Japan. One can submit a proposal for a User Program to the Supercomputer Steering Committee, and once granted he/she can use the facility with no charge. The supercomputer system consists of two systems: The main system (System B (ohtaka)), which started operation in Oct. 2020, and the sub-system (System C (kugui)), which started operation in June 2022. Information about project proposals can be found in the center's web page (<https://mdcl.issp.u-tokyo.ac.jp/scc/>). In addition to maintaining high performance of the hardware in cooperation with the vendors, the SCC also responds to questions and inquiries from users on a daily basis. In 2015, aiming at more efficient usage of the supercomputer systems, we started a new program PASMUS for developing a few applications annually based on proposals from the ISSP supercomputer users.

## Main Facilities

System B (ohtaka): Dell PowerEdge C6525/R940 (1680 CPU nodes of AMD EPYC 7702 (64 cores) and 8 FAT nodes of Intel Xeon Platinum 8280 (28 cores) with total theoretical performance of 6.881 PFLOPS)

System C (kugui): HPE Apollo 2000 Gen10 Plus/HPE Apollo 6500 Gen10 Plus (128 CPU nodes of AMD EPYC 7763 (128 cores) and 8 ACC nodes of AMD EPYC 7763 (64 cores) with total theoretical performance of 0.973 PFLOPS)



ソフトウェア開発・高度化プロジェクト (PASUMS) で開発したソフトウェア群

Software developed by "Project for Advancement of Software Usability in Materials Science" (PASUMS)

<https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/computer.html>

## 物質合成室

Materials Synthesis Section

担当所員 岡本 佳比古

Contact Person : OKAMOTO, Yoshihiko

技術専門職員 石井 梨恵子

Technical Specialist : ISHII, Rieko

## 化学分析室

Chemical Analysis Section

担当所員 岡本 佳比古

Contact Person : OKAMOTO, Yoshihiko

技術専門職員 石井 梨恵子

Technical Specialist : ISHII, Rieko

本室では、新物質の合成、既知物質の良質化、単結晶育成など研究用試料の合成を行っている。また、各種高温電気炉や単結晶育成炉、試料調整加工機などを所内外の共同利用研究機器として供している。

The main purposes of the Materials Synthesis Section are to synthesize new compounds and to prepare well-characterized samples and single crystals of various materials. Various kinds of furnaces are provided for crystal growth experiments.

### 主要設備

フローティングゾーン単結晶育成炉、各種電気炉（抵抗加熱式ブリッジマン炉、フラックス炉、アーク溶解炉、シリコニット炉、ボックス炉）、真空蒸着装置（ $10^{-6}$  Torr）、グローブボックス

### Main Facilities

Floating-zone furnaces, Bridgman-type furnace, Ar-arc furnace, Furnace for flux method, Ultra-high vacuum deposition apparatus, glove box.



試料調整用グローブボックス  
Glove box for sample preparation

本室では、物性研究に有用な物質についての化学分析や新しい物質の分析方法の検討および化学的手法による材料の精製および調整を行うと共に、秤量・分析・化学処理に関わる各種機器を所内外の共同利用に供している。

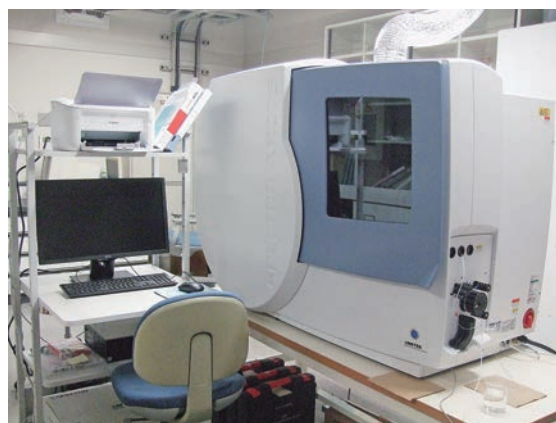
The Chemical Analysis Section is engaged in determining the chemical composition of specimens and in purifying chemical reagents for preparation of high quality specimens. The analytical equipments, several types of automatic balance and a system for preparation of ultra-high purity water are provided for chemical analysis experiments.

### 主要設備

誘導結合高周波プラズマ発光分光分析装置、電子天秤、超純水製造装置

### Main Facilities

ICP-AES, Automatic balances, and the system for preparation of ultra-high purity water.



誘導結合高周波プラズマ発光分光分析装置  
ICP-AES



<https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/synthesis.html>



[https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/chemical\\_analysis.html](https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/chemical_analysis.html)

物質合成・評価部 (Materials Synthesis and Characterization Division)

## X線測定室

X-Ray Diffraction Section

担当所員 山浦 淳一

Contact Person : YAMAURA, Jun-ichi

結晶構造は、物質科学研究の最も基本的な情報である。本室では、X線回折を用いて、結晶学をベースにした物性研究である構造物性研究を行うと共に、所内外の研究者に対して各種回折計の施設利用を提供している。

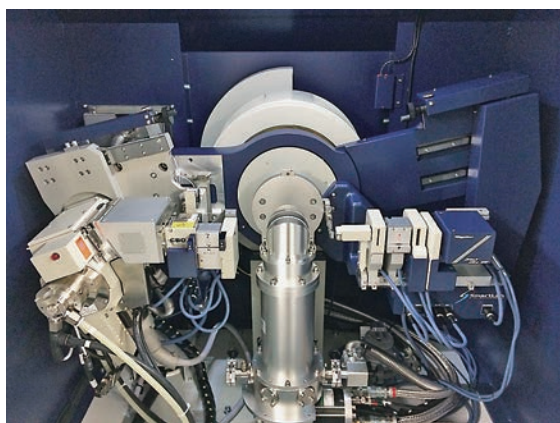
Crystal structure is the most fundamental information for studying materials science. This laboratory uses X-ray diffraction to conduct structural properties research, which is the study of physical properties based on crystallography, and also offers the use of its various diffractometer facilities to researchers both inside and outside the institute.

## 主要設備

汎用粉末X線回折計、極低温  $K\alpha 1$  粉末X線回折計、迅速低温高圧単結晶X線回折計、汎用単結晶X線回折計、ラウエカメラ

## Main Facilities

General-purpose powder X-ray diffractometer, Cryogenic  $K\alpha 1$  powder X-ray diffractometer, Rapid low-temperature/high-pressure single-crystal X-ray diffractometer, General-purpose single-crystal X-ray diffractometer, Laue camera.

極低温  $K\alpha 1$  粉末X線回折計Cryogenic  $K\alpha 1$  powder X-ray diffractometer

## 電子顕微鏡室

Electron Microscope Section

担当所員 山浦 淳一

Contact Person : YAMAURA, Jun-ichi

技術専門職員 浜根 大輔

Technical Specialist : HAMANE, Daisuke

本室では物質の化学組成や微細構造を評価するために走査型電子顕微鏡と透過型電子顕微鏡を備え、ミクロからナノスケールでの観察・分析を行い、所内における研究を強力に下支えすると共に、各種機器を学内外の共同利用に供している。

The Electron Microscope Section supports measurements such as electron diffraction, lattice image observations and chemical analyses for various solid materials in both crystalline and non-crystalline forms by using TEM and SEM equipped with EDX analyzer.

## 主要設備

電界放射形透過型電子顕微鏡、低温・高温・分析ホルダー、鏡面・薄膜試料作成のための種々の装置

## Main Facilities

200 kV TEM and SEM with EDX analyzer, high and low-temperature holders, and various apparatuses for sample preparation. electron microscope with an x-ray micro-analyzer, High- and low-temperature holders, and various apparatuses for sample preparation.



200 kV 電界放射形分析電子顕微鏡

200 kV electron microscope with an X-ray micro-analyzer


<https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/xray.html>

[https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/electron\\_microscope.html](https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/electron_microscope.html)

# 電磁気測定室

Electromagnetic Measurements Section

担当所員 岡本 佳比古

Contact Person : OKAMOTO, Yoshihiko

担当所員 山下 穰

Contact Person : YAMASHITA, Minoru

担当所員 森 初果

Contact Person : MORI, Hatsumi

技術専門員 山内 徹

Senior Technical Specialist : YAMAUCHI, Toru

# 光学測定室

Spectroscopy Section

担当所員 秋山 英文

Contact Person : AKIYAMA, Hidefumi

担当所員 松永 隆佑

Contact Person : MATSUNAGA, Ryusuke

本室では、物質の基本的性質である電氣的磁氣的性質を、温度および磁場の広い範囲にわたって測定するとともに、磁気特性測定装置、物理特性測定装置、超伝導磁石などの設備を所内外の共同利用に供している。

The Electromagnetic Measurements Section offers various facilities for measurements of electric and magnetic properties of materials. The followings are types of experiments currently supported in this section: electrical resistivity, magnetoresistance and Hall effect, d.c.susceptibility, a.c. susceptibility, and NMR.

### 主要設備

15/17 テスラ超伝導マグネット、16/18 テスラ高均一超伝導マグネット (NMR)、SQUID 磁化測定装置 (MPMS)、汎用物性測定装置 (PPMS)

### Main Facilities

Superconducting magnet (15/17 T), High homogeneity superconducting magnet (16/18 T) for NMR experiments, MPMS (SQUID magnetometer, 7 T), and PPMS (physical properties measurement system, 9 T).



磁気特性測定装置  
SQUID magnetometer (MPMS)

汎用性のある光学測定機器やレーザー光源を備え、所内外の共同利用に供している。可視・紫外・赤外領域の吸収・反射スペクトル、顕微ラマン分光などの測定が可能である。

The Spectroscopy Section offers joint-use facilities for standard optical measurements. The facilities can be used for measurements of conventional absorption/reflection spectrum in the UV, visible and IR regions and Raman scattering.

### 主要設備

可視紫外分光光度計、赤外分光光度計、ラマン分光光度計

### Main Facilities

UV/VIS absorption spectrometer, IR spectrometer, Micro-Raman spectrometer.



赤外およびラマン分光装置  
IR and Raman Spectrometers (Room A468)



<https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/electromagnetic.html>



[https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/spectroscopy\\_section.html](https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/spectroscopy_section.html)

物質合成・評価部 (Materials Synthesis and Characterization Division)

# 高圧合成室

High-Pressure Synthesis Section

担当所員 岡本 佳比古

Contact Person : OKAMOTO, Yoshihiko

技術専門職員 後藤 弘匡

Technical Specialist : GOTOU, Hirokata

本室では、百万気圧、数千度までの高温高圧下において様々な(新)物質の合成を行うと共に、高圧力下における物質の挙動を調べている。さらに各種の高圧力発生装置や関連する実験設備を所内外の共同利用に供している。

The main purposes of the High-Pressure Synthesis Section are to synthesize various (new) compounds and to investigate the behavior of some materials at extreme conditions of high pressures up to 100 GPa or more and high temperatures up to several thousand °C. Various types of high-pressure apparatuses and related experimental equipments are provided to joint research and internal use.

## 主要設備

500/700 トン油圧プレス装置、ダイヤモンドアンビルセル、X線回折装置、顕微ラマン分光装置、YAG レーザー加工機、その他(放電加工機、ダイヤモンド研磨装置、旋盤、NC モデリングマシン)

## Main Facilities

500/700 ton press, Diamond Anvil Cell, X-ray diffractometer, Micro-Raman spectrometer, YAG laser cutting machine, and others including Electric discharge machine, Grinding machine for diamond, Lathe machine, and Modeling machine.



若機型 700ton キュービックプレス。4GPa までの高温高圧合成実験用。

Wakatsuki-type 700 ton cubic press for high pressure and high temperature synthesis experiments up to 4 GPa.



<https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/highpressure.html>