

μ SR データ解析への凡密度関数の応用

国際共同研究を通じて感じた日本の研究戦略

理化学研究所核構造研究部

渡邊功雄

凡密度関数(DFT)を活用した μ SR データ解析は、昨今、世界のミュオン科学研究者の間では必須なものになりつつある。これにより物質中のミュオン位置を予想し、その位置から得られる情報をもって物質の電子状態を議論する。一方、計算科学のスキルや大規模計算に耐えるスーパーコンピュータへのアクセスなど、計算科学に不慣れな研究者にとってはアプローチに困る点も多々ある。これを解決するためにヨーロッパグループが Muon Finder というパッケージプログラムを公開し、かなり簡便に物質中のミュオン位置を予想することができるようになりつつある。このプログラムは大体のミュオン位置を点として確定するには極めて有効なパッケージツールであると思う一方、ブラックボックス的プログラムであることと詳細な電子状態の研究にどこまで有効かという疑念が残る感がある。

我々のグループでは、この世界的な潮流が起きる前からミュオン位置計算問題に取り組んでおり、困難と言われた強相関係物質の典型である銅酸化物高温超伝導体における μ SRデータに対してDFT計算を応用することにより、内部の電子状態の詳細を解明する一つの有効な手法を提示した。現在、この手法を別のタイプの強相関係物質であるパイロクロア型酸化物に応用し、 μ SR測定結果と内部電子状態の変化を理解することを進めている。本セミナーでは、我々の最近の最近の計算結果を示し、今後どのような方針で μ SRの測定結果を解析すべきかという点に関して、我々が現在得ている見解を紹介する。

我々の研究グループは外国籍学生で構成されている。その関係もあり東南アジア諸国との連携研究が多い。また、長年にわたるRIKEN-RAL ミュオン施設での研究活動のために、ヨーロッパでのミュオン科学研究の事情もよく耳に入る。概してその流れを見ていると、面白い人材・物質資源の流れが見えてくる。日本は中国やシンガポールに並び科学研究の最先端を行くが、あと20年、30年先を見据えると何が起きるのであろうか。正直あまり明るい未来は感じていない。本講演時間は限られているが、これまでの海外における研究活動を通じて実感している点も併せて報告し、何等かの問題提起としたい。ただし、あくまでも個人的見解に基づくものであり、正しい現状理解であるかどうかは別問題である。あくまでも一個人からの問題提起として今後の研究戦略に役立てばありがたい。