

# 計算物質科学研究センター

## Center of Computational Materials Science

「京」コンピュータに代表される近年のコンピュータハードウェアの発展にともなって、大規模数値計算による物質科学へのアプローチが盛んである。コンピュータを利用した精密な物性予測によって、磁性体・超伝導・超流動における量子臨界現象など物性物理学の基礎的な問題から、半導体デバイス設計や燃料電池における電極反応など近い将来産業応用に結びつくことが期待される応用問題に至るまで、広い範囲において重要な成果が挙げられている。一方、近年のハードウェアの多階層化・並列化により、プログラマには多くのコアに効果的に計算を分業させる工夫が必要であり、このことが計算物質科学研究における挑戦的課題となっている。本センターは、ポスト「京」プロジェクトや元素戦略プロジェクトなど国家プロジェクトを担う拠点として、「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の活用を通じて、これらの課題に組織的に取り組んでいる。さらに、コミュニティソフトウェア開発・普及のためのサイト MateriApps の開発・運用なども行っている。

As symbolized by K-computer, massively parallel computation is actively used for solving problems in materials science in recent years. In fact, computer-aided science has been providing answers to many problems ranging from the most fundamental ones, such as critical phenomena in quantum magnets, superconductors, and superfluids, to the ones with direct industrial applications, such as semiconductor devices and electrode chemical reactions in batteries. Due to the recent hardware trends, it is now crucial to develop a method for breaking up our computational task and distribute it to many computing units. In order to solve these problems in an organized way, we, as the major contractor of several national projects such as Post-K Computer Project and Elements Strategy Initiative, coordinate the use of the computational resources available to our community, including K-computer and ISSP supercomputers. In addition, we also operate the web site, MateriApps, which offers easy access to various existing codes in materials science.

教授(副センター長)* <sup>1</sup> Professor (Deputy Director)	川島 直輝 KAWASHIMA, Naoki	助教* <sup>3</sup> Research Associate	野口 良史 NOGUCHI, Yoshifumi	特任研究員 Project Researcher	白井 達彦 SHIRAI, Tatsuhiko
教授* <sup>1</sup> Professor	尾崎 泰助 OZAKI, Taisuke	助教* <sup>1</sup> Research Associate	渡辺 宙志 WATANABE, Hiroshi	特任研究員 Project Researcher	土居 抄太郎 DOI, Shotaro
教授(センター長)* <sup>2</sup> Professor (Director)	常行 真司 TSUNEYUKI, Shinji	助教* <sup>1</sup> Research Associate	笠松 秀輔 KASAMATSU, Shusuke	特任研究員 Project Researcher	福田 将大 FUKUDA, Masahiro
特任教授 Project Professor	赤井 久純 AKAI, Hisazumi	助教* <sup>1</sup> Research Associate	森田 悟史 MORITA, Satoshi	特任研究員 Project Researcher	ホフマン マルティン HOFFMANN, Martin
准教授* <sup>3</sup> Associate Professor	杉野 修 SUGINO, Osamu	助教* <sup>1</sup> Research Associate	樋口 祐次 HIGUCHI, Yuji	特任研究員 Project Researcher	松本 宗久 MATSUMOTO, Munehisa
准教授* <sup>4</sup> Associate Professor	加藤 岳生 KATO, Takeo	技術専門職員 Technical Associate	山崎 淳 YAMAZAKI, Jun	特任研究員 Project Researcher	本山 裕一 MOTOYAMA, Yuichi
准教授* <sup>1</sup> Associate Professor	野口 博司 NOGUCHI, Hiroshi	学術支援専門職員 Technical Associate	早川 雅代 HAYAKAWA, Masayo	特任研究員 Project Researcher	リー チェン LEE, Chi-Cheng
准教授* <sup>2</sup> Associate Professor	藤堂 眞治 TODO, Syngé	特任研究員 Project Researcher	浅野 優太 ASANO, Yuta	特任研究員 Project Researcher	リー ヒュンヨン LEE, Hyunyoung
特任研究員 (PI)* <sup>5</sup> Project Researcher	三澤 貴宏 MISAWA, Takahiro	特任研究員 Project Researcher	金子 隆威 KANEKO, Ryuui	特任研究員* <sup>3</sup> Project Researcher	山本 良幸 YAMAMOTO, Yoshiyuki
		特任研究員 Project Researcher	古宇田 光 KOUTA, Hikaru	特任研究員* <sup>3</sup> Project Researcher	严 蕾 YAN, Lei

\*<sup>1</sup> 所内兼務。本務は物質設計評価施設。/concurrent with Materials Design and Characterization Laboratory

\*<sup>2</sup> 理学系研究科物理学専攻と兼務。/ concurrent with Physics Department, Graduate School of Science

\*<sup>3</sup> 所内兼務。本務は機能物性研究グループ。/concurrent with Functional Materials Group

\*<sup>4</sup> 所内兼務。本務は物性理論研究部門。/concurrent with Division of Condensed Matter Theory

\*<sup>5</sup> PCoMS 次世代研究員 (PI)

# 赤井研究室

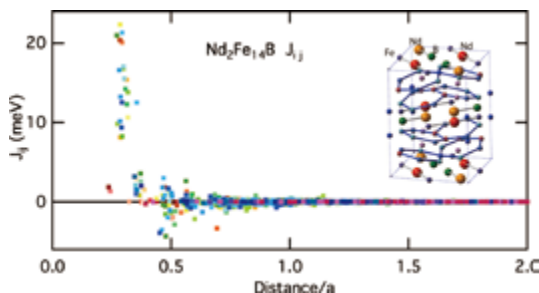
Akai Group



赤井 久純  
AKAI, Hisazumi  
特任教授  
Project Professor

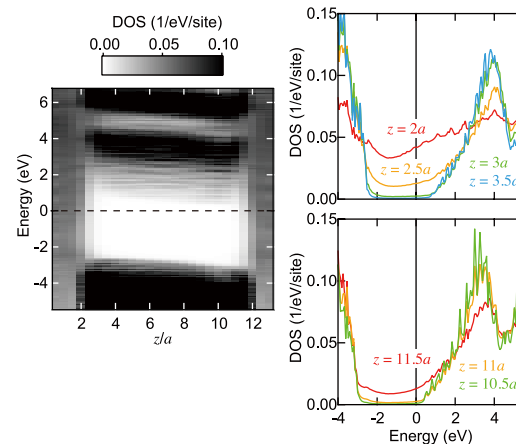
計算機マテリアルデザイン手法を用いた金属、半導体、金属間化合物をおよびそれらのナノ構造を用いた高機能材料の理論的開発を研究テーマとしている。特に、高性能永久磁石の創成が重要な課題の一つである。計算機マテリアルデザインは量子デザイン（量子力学に基づいて、与えられた物性や機能を有する物資・構造を推論すること）によって実行される。このような問題を解く事は一般に困難であるが、量子デザインでは物性発現の機構を量子シミュレーションのくり返しにより明らかにすることによってこの問題を解く。マテリアルズ・インフォーマティクス手法も援用される。量子デザイン、量子シミュレーションにおいては手法の開発も重要な研究課題であり、高精度第一原理計算手法の開発とともに、KKR グリーン関数法に基づいた第一原理非平衡グリーン関数法の開発、オーダー N 計算を実現する遮蔽 KKR 法、密度汎関数法に対するより良い近似的の開発等を推進している。

Our main objective is to predict/discover new functionality materials by means of computational materials design (CMD). In particular, the development of new high-performance permanent magnets is one of our main targets. CMD aims at to design materials and/or structures on the basis of quantum mechanics. This corresponds to the inverse problem of quantum simulation. In general, solving such problems is very difficult. In CMD we solve these problems by making use of the knowledge, which is obtained through quantum simulations, about underlying mechanisms realizing specific features of materials. The technique of materials information also can be exploited. In these regards, the developments of new methods of quantum simulation also are our important themes. Among them are developments of methods of accurate first-principles electronic structure calculations in general, first-principles non-equilibrium Green's function method, order-N screened KKR-method used for huge systems, and the methods beyond LDA.



現在最強の永久磁石であるネオジム磁石の主相である  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$  の交換結合定数  $J_{ij}$  の値の距離依存性。色の違いは異なった種類の原子対の違いを表す。 $J_{ij}$  の値は KKR グリーン関数法を用いた第一原理電子状態計算によって直接計算されたものである。

The distance dependence of exchange coupling constants  $J_{ij}$  between various atoms in  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ , which is the main component of Nd-based permanent magnets.  $J_{ij}$ 's were calculated directly using first-principles KKR-Green's function method.



Al/GaN 界面におけるショットキー接合付近の非平衡グリーン関数による電子状態計算の結果。左側の図の濃淡は局所状態密度を表し、白い部分はバンドギャップに相当する。左側の接合部でショットキー障壁が形成され、障壁の高さは界面の金属誘起ギャップ状態 (MIGS) で決まることが分かる。

The electronic structure near the Schottky junction formed by Al/GaN calculated by the KKR non-equilibrium Green's function method. The local DOS as a function of the position and the energy relative to the Fermi energy is shown. The white part in the left figure corresponds to the band gap. A Schottky barrier is formed near the interface at the left. The height of the barrier is determined by the metal induced gap state (MIGS).

## 研究テーマ Research Subjects

1. 第一原理電子状態計算  
First-principles electronic structure calculation
2. 計算機マテリアルデザイン  
Computational materials design (CMD)
3. KKR グリーン関数法とその応用  
KKR Green's function method and its applications
4. 磁性と永久磁石の開発  
Magnetism and development of new permanent magnets

計算物質科学研究センター

Center of Computational Materials Science

<http://pcoms.issp.u-tokyo.ac.jp/cultivation/youngresearchersmisawateam>

# 三澤 チーム

Misawa Team



三澤 貴宏  
MISAWA, Takahiro  
PCoMS 次世代研究員 (PI)  
Project Researcher

固体中の電子の振る舞いは量子多体問題の典型例であり、ひとつの電子の振る舞いからは想像もつかない多彩な現象を発現するのが特徴である。本チームでは、この量子多体問題がもつ魅力的な現象の起原を理論的に解明して、さらには新奇現象の予言・制御につなげるための研究を行っている。そのために、量子多体問題を取り扱う数値計算手法の開発を行っており、開発した計算手法をオープンソースソフトウェアとして公開している。今までに、格子上の量子多体問題を数值的に厳密に解くソフトウェア HΦ、高精度な波動関数法である多変数変分モンテカルロ法のソフトウェア mVMC を公開している。

最近の成果として、mVMC を用いて銅酸化物界面の理論モデルの解析を行い、界面では超伝導の転移温度がバルクのドーピング濃度に依らずに常に一定に保たれる機構の起原を解明した。また、HΦを用いて、幾何学的フラストレーションを持つハバード模型における量子スピン液体の有限温度性質の解明、カゴメ格子上の量子ハイゼンベルグにおける磁化プラトーの有限温度効果の解明を行った。

Behavior of electrons in solids is a typical example of quantum-many body systems. In the quantum many-body systems, various exotic phenomena emerge, which is hardly expected from the behavior of single electron. We try to theoretically reveal the origins of the exotic phenomena in the quantum many-body systems, and aim to predict and design the new exotic phenomena. We have been developed numerical methods for treating the quantum many-body systems and some of them are released as open-source software packages, for example, we release HΦ (software for exact diagonalization) and mVMC (software for many-variable variational Monte Carlo method).

By using mVMC, we recently reveal the origin of the anomalous pinning of the superconducting critical temperatures observed at the interfaces of the cuprates. We also clarify the finite-temperature effects of the quantum spin liquids in the frustrated Hubbard model and finite-temperature effects on the one-third magnetic plateau in the quantum Heisenberg model on the kagome lattice.