

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)」、具体的な物質の「合成 (Synthesis)」、合成された物質を総合的に調べる「評価 (Characterization)」の3つの研究をサイクル (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・機能を持つ物質の開発を目指している。本施設は物質設計部と物質合成・評価部からなり、物質設計部には大型計算機室が、物質合成・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、高压合成室の7実験室がある。物質設計部では、最先端の物性専用の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。これら物質の総合評価の結果は設計および合成にフィードバックされ、DSC サイクルを通して新しい物質の開発が行なわれる。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 with the emphasis on the “DSC cycle”, where DSC represents three functions in developing new materials, Design, Synthesis and Characterization. The MDCL consists of two divisions; Materials Design Division (MD-D) and Materials Synthesis and Characterization Division (MSC-D). The Supercomputer Center of ISSP (SCC-ISSP) belongs to MD-D, while in MSC-D there are 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 MD-D, by making use of its supercomputer system, novel mechanisms behind various cooperative phenomena in condensed matter are explored, and theoretical designs of new materials as well as materials with new nanoscale structures are developed. In MSC-D, various types of new materials are synthesized, single crystals are grown, and the structural, electromagnetic and optic properties of the materials are characterized in various ways. The characterization results are immediately fed back to the synthesis and to the design of materials. Through this DSC cycle we aim to develop new materials with new functions. Almost all the facilities of the MDCL are open to domestic scientists through the User Programs conducted by the Steering Committees of the MDCL.

教授 (施設長) Professor (Director)	廣井 善二 HIROI, Zenji	助教 Research Associate	渡辺 宙志 WATANABE, Hiroshi	技術専門職員 Technical Associate	福田 毅哉 FUKUDA, Takaki
教授 Professor	川島 直輝 KAWASHIMA, Naoki	助教 Research Associate	笠松 秀輔 KASAMATSU, Shusuke	技術専門職員 Technical Associate	浜根 大輔 HAMANE, Daisuke
教授 Professor	上床 美也 UWATOKO, Yoshiya	助教 Research Associate	森田 悟史 MORITA, Satoshi	技術職員 Technical Associate	石井 梨恵子 ISHII, Rieko
教授 Professor	尾崎 泰助 OZAKI, Taisuke	助教 Research Associate	矢島 健 YAJIMA, Takeshi	学術支援専門職員 Technical Associate	荒木 繁行 ARAKI, Shigeyuki
教授* ¹ Professor	杉野 修 SUGINO, Osamu	助教 Research Associate	平井 大悟郎 HIRAI, Daigorou	学術支援職員 Technical Associate	長崎 尚子 NAGASAKI, Shoko
准教授 Associate Professor	野口 博司 NOGUCHI, Hiroshi	助教 Research Associate	郷地 順 GOUCHI, Jun	特任研究員 Project Researcher	サイヤッド シャラレ SAYYAD, Sharareh
特任研究員 (PI)* ² Project Researcher	吉見 一慶 YOSHIMI, Kazuyoshi	助教 Research Associate	樋口 祐次 HIGUCHI, Yuji	特任研究員 Project Researcher	シャヒ プラシャント SHAHI, Prashant
教授 (客員) Visiting Professor	摂待 力生 SETTAI, Rikio	助教 Research Associate	河村 光晶 KAWAMURA, Mitsuaki	特任研究員 Project Researcher	原口 祐哉 HARAGUCHI, Yuya
准教授 (客員) Visiting Associate Professor	石井 史之 ISHII, Fumiyuki	技術専門職員 Technical Associate	小池 正義 KOIKE, Masayoshi	特任研究員 Project Researcher	マキシム ピオトル アンドレイ MAKSYM, Piotr Andrzej
		技術専門職員 Technical Associate	山内 徹 YAMAUCHI, Touru	特任研究員 Project Researcher	本山 裕一 MOTOYAMA, Yuichi
		技術専門職員 Technical Associate	後藤 弘匡 GOTO, Hirokata	特任研究員 Project Researcher	余 珊 YU, Shan
		技術専門職員 Technical Associate	矢田 裕行 YATA, Hiroyuki	特任研究員 Project Researcher	リー ヨンティン LEE, YungTing

*¹ 所内兼務。本務は機能物性研究グループ。/concurrent with Functional Materials Group

*² PCoMS 次世代研究員 (PI)

廣井研究室

Hiroi Group



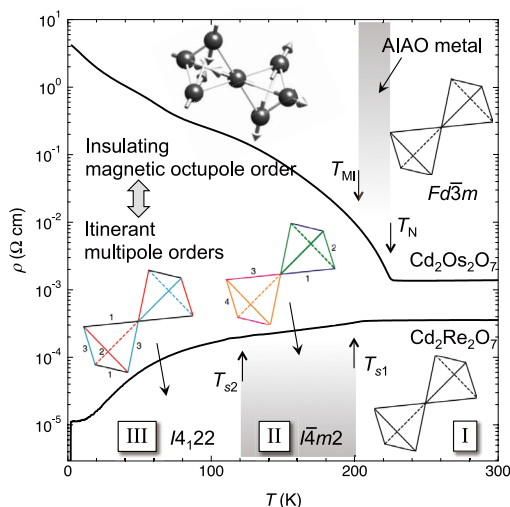
廣井 善二
HIROI, Zenji
教授
Professor



平井 大悟郎
HIRAI, Daigorou
助教
Research Associate

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や磁性と伝導性の興味深い相関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。

遷移金属酸化物は強相関電子系の宝庫である。特に小さなスピン量子数をもつ低次元系(量子スピン系)において、強いクーロン反発によって局在しているd電子がキャリア数やバンド幅の制御によって動き始める時、量子効果による劇的な現象が期待される。本研究室では、様々な遷移金属酸化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。

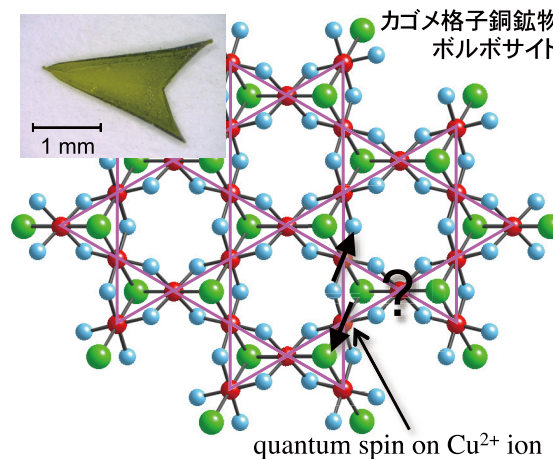


2つの5d遷移金属パイロクロア酸化物の電気抵抗。Cd₂Os₂O₇は230 Kで時間反転対称性を破り、all-in/all-out型の磁気八極子秩序を形成して絶縁体となる。一方、Cd₂Re₂O₇は200 K以下で空間反転対称性を破って遷移拡張多極子秩序を示す。後者はスピン軌道結合金属の典型物質と考えられている。

Two 5d pyrochlore oxides. Cd₂Os₂O₇ exhibits a metal-insulator transition to a magnetic octupole order below 230 K, while an itinerant multipole state is realized in Cd₂Re₂O₇ with spontaneous spatial inversion symmetry breaking below 200 K.

The remarkable discovery of high- T_c superconductivity and the following enthusiastic research in the last decade have clearly demonstrated how the finding of new materials would give a great impact on the progress of solid state physics. Now related topics are spreading over not only superconductivity but also unusual metallic behavior, which are often observed near the metal-insulator transition in the strongly correlated electron systems. We believe that for the next few decades it will become more important to explore novel physics through searching for new materials.

A family of transition-metal oxides is one of the typical systems where Coulomb interactions play a critical role on the magnetic and electronic properties. Especially interesting is what is expected when electrons localized due to the strong Coulomb repulsion start moving by changing the bandwidth or the density of electrons. We anticipate there unknown, dramatic phenomena governed by many-body effects and quantum fluctuations.



スピン 1/2 カゴメ格子反強磁性体のモデル物質となる銅鉱物ボルボサイトの結晶構造と単結晶

Copper mineral volborthite representing a spin-1/2 kagome-lattice antiferromagnet.

研究テーマ Research Subjects

1. 新しい量子スピン系及び強相関電子系物質の開発
Search for new materials realizing quantum spin systems or strongly correlated electron systems
2. スピン 1/2 カゴメ格子反強磁性体の基底状態
Ground state of the spin-1/2 kagome lattice antiferromagnet
3. 高温超伝導体
High- T_c superconductors

物質設計評価施設

Materials Design and Characterization Laboratory

http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/kawashima_group.html

川島研究室

Kawashima Group



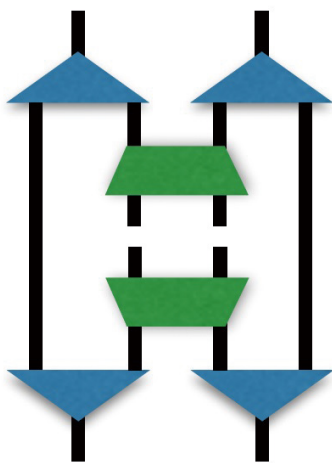
川島 直輝
KAWASHIMA, Naoki
教授
Professor



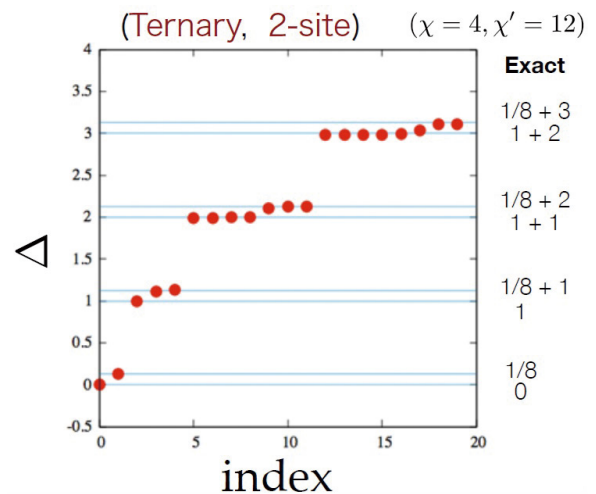
森田 悟史
MORITA, Satoshi
助教
Research Associate

本研究室では物性研究所スパコンや神戸の「京」コンピュータなどの大規模並列計算機を利用して、物性理論で登場する基本的な問題の解明を行っている。また、そのためのアルゴリズムの研究も行っている。最近数年の研究から例をあげると、量子臨界現象に関しては、新しいカテゴリーの転移現象である脱閉じ込め転移を、SU(N) ハイゼンベルクモデルにおけるネール状態からVBS状態への相転移として観測する試みや、光格子にトラップされた極低温原子系やグラファイト表面のヘリウム系における超固体相の存在／不在の研究などがある。また、古典系に関しては、Z2渦の乖離メカニズムによる相転移の有無の数値的検証、危険なイレバント演算子が系の対称性を低下させる場合にみられる異常な臨界現象などがある。最近ではテンソルネットワークなどの新しい方法論の開拓とそれを応用したフラストレート量子系の研究を行っている。

Our group investigates fundamental problems in condensed matter physics through massively parallel computation using ISSP supercomputers and “K-computer” at Kobe. For this purpose, we also develop new algorithms. As for quantum critical phenomena, for example, we are trying to find a “deconfined” critical phenomena, a new category of quantum phase transition, as a transition between Neel state and VBS state in the SU(N) Heisenberg model. Another target in this area of research is the existence/absence of super-solid phase in optical lattices and in He4 systems adsorbed on graphite surfaces. As for classical systems, we investigate the phase transition due to the Z2 vortex dissociation, an unconventional critical phenomena caused by the symmetry-breaking dangerously-irrelevant field, etc. Our most recent activities are focused on developments of tensor network methods and their applications to frustrated spin systems.



2 サイト演算子の繰り込み変換を定義する超演算子。多角形はテンソルを表し、Multi-scale entanglement renormalization ansatz (MERA) を用いて計算される。
A super-operator that defines renormalization transformation of two-site operators. Each tensor represented by a polygon is computed through MERA.



繰り込み超演算子の固有値問題から求められる2次元イジングモデルのスケールング次元。

Scaling-dimensions obtained by solving the eigenvalue problem of the super-operator.

研究テーマ Research Subjects

1. 新しい量子相と量子相転移の探索
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

上床研究室

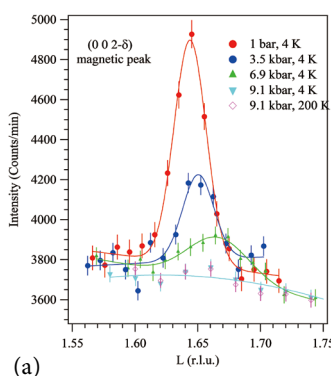
Uwatoko Group

上床 美也
UWATOKO, Yoshiya
教授
Professor郷地 順
GOUCHI, Jun
助教
Research Associate

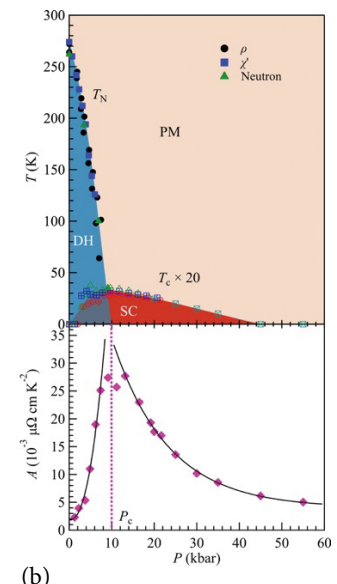
高圧力は、これまで未解決な物性現象の解明や数奇物性現象の発見に欠かせない物理パラメータの1つとなっている。特に、常圧と同程度の静水圧環境下における再現性の良い測定環境は、強相関電子系物質をはじめとする固体物性の研究において多くの成果をもたらす。また、極低温や強磁場といった他のパラメータを組み合わせた多重環境は、新しい物性探求をする上で、より多くの情報が得られる最良の測定環境である。当研究室では、超高圧力技術を駆使した、各種の物性測定に適応した高圧力発生装置の開発を行い、可能な限りよい静水圧環境における多重環境下での物性研究を進めている。結晶固体には格子の振動の自由度と、電子の電荷、スピン、軌道という基本的な自由度があり、強相関電子系物質では、これらが複雑に絡み合いながら種々の相互作用が競合し、結果として種々の興味深い物性を実現している。超高圧力下を用いたこれらの相互作用の制御は、物質にどのような新しい物性を出現させるのだろうか？その出現機構はどうなっているのだろうか？現在、電気抵抗、磁化、比熱、x線回折、中性子回折などの諸物性測定の高圧効果を主な研究手段とし、下記の研究テーマを進めている。また、物性研究所の役割の一つである共同利用も活発に行っている。

CrAsは常圧では $T_N = 265\text{K}$ 以下で反強磁性秩序を示すが僅か1 GPaの高圧下で反強磁性秩序は消失し、非従来型の超伝導($T_c \approx 2\text{K}$)が出現する。各圧力下での電気抵抗の温度依存性、中性子散乱実験より、非従来型の超伝導が磁気揺らぎに起因していることを明らかにした。(a) 中性子散乱実験(at 4 K)で得られた各圧力下での磁気散乱ピーク(0, 0, 2- δ)の様子。(b) 圧力相図と電気抵抗の温度依存性より得られた T_c^2 の係数Aの圧力依存性。(HD: ダブルヘリカル構造, SC: 超伝導, PM: 常磁性)

CrAs adopts the orthorhombic MnP-type structure with a first-order antiferromagnetic transition at $T_N = 265\text{K}$. The first-order T_N can be suppressed quickly by the external pressure or substitution by P. And then, the unconventional bulk superconductivity with $T_c \approx 2\text{K}$ emerges influence of magnetic fluctuation at critical area. (a): The (0, 0, 2- δ) magnetic Bragg peak for CrAs under different pressures at 4 K. (b): An updated T-P phase diagram of CrAs showing the complete suppression of T_c around 45 kbar. The coefficient A for CrAs displays an apparent enhancement around $P_c \approx 10\text{ kbar}$. (DH: double helical order, SC: superconductivity, PM: paramagnetism)



(a)



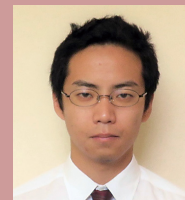
(b)

研究テーマ Research Subjects

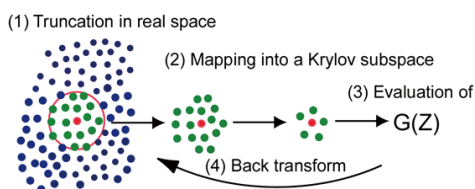
- 多重環境下における新奇物性現象の探索
Search for new physical phenomena under multi extreme conditions
- 伝導現象等の圧力誘起相転移現象の研究
Study of the pressure induced phase transition phenomena as like superconductivity
- 多重環境下における高圧装置開発と精密物性測定方法の確立
Development of high pressure apparatus and confirmation of physical property measurement techniques under the multi extreme conditions

尾崎研究室

Ozaki Group

尾崎 泰助
OZAKI, Taisuke
教授
Professor河村 光晶
KAWAMURA, Mitsuaki
助教
Research Associate

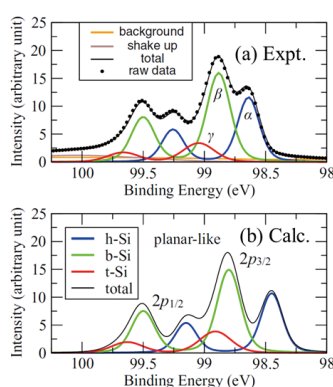
近年の超並列計算機の発展と物質科学の精密化に伴い、第一原理電子状態計算の重要性が増している。我々は密度汎関数理論に基づき、より現実に近い系をより精密に取り扱うための新しい計算手法・ソフトウェアパッケージの開発に取り組んでいる。密度汎関数法の計算量は系に含まれる原子数の三乗に比例するが、電子の近視性に着目し、計算量が原子数に比例する新しいオーダー N 法を開発した。本手法により、これまで取り扱いが困難であったリチウムイオン電池、鉄鋼材料、グラフェンナノリボンデバイスの大規模第一原理シミュレーションが可能となり、実験との直接比較が可能となりつつある。さらに最近、X線光電子分光法で観測される内殻電子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、ポロフェン、単原子分散したPt原子等の表面構造の特定に成功した。また開発した計算プログラムをオープンソースソフトウェア OpenMX (Open source package for Material eXplorer) として無償で一般公開し、基盤ソフトウェアとして国内外で多岐に亘る物質群の研究に広く活用されている。



オーダー N クリロフ部分空間法のアイデア。(1) 原子毎に有限距離内に含まれる原子から構成されるクラスターを構成し、(2) さらに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の射影を行う。(3) クリロフ部分空間内で固有値問題を解き、中心原子に関するグリーン関数を計算した後、元の空間への逆変換を行う。

Underlying idea of the $O(N)$ Krylov subspace method. (1) Construction of truncated cluster for each atom by picking atoms up within a sphere. (2) Projection of the truncated subspace into a Krylov subspace. (3) Solution of the eigenvalue problem in the Krylov subspace, calculation of Green's function associated with the central atom, and back-transformation to the original space.

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, structural materials, and graphene nanoribbon based devices which cannot be easily treated 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, and single atom dispersion of Pt atoms in collaboration with experimental groups. Our continuous methodological developments have been all implemented in OpenMX (Open source package for Material eXplorer), which has been released to public under GNU-GPL, and widely used around world for studies of a wide variety of materials.



ZrB₂ (0001) 面上に生成されたシリセン構造の (a) 実験と (b) 計算による XPS スペクトル。実験で観測された α 、 β 、 γ の三つのピークはそれぞれ hollow サイト、bridge サイト、on-top サイトのシリコン原子に帰属される。ZrB₂ (0001) 面上に生成されたシリセン構造にはバックリングの違いによる多形が考えられるが、planar-like 構造の計算結果が実験と整合している。

XPS spectrum of silicene fabricated on ZrB₂ (0001) surface by (a) experiment and (b) DFT calculation. The α -, β -, γ -peaks observed by the experiment can be identified as those from the hollow, bridge, and on-top sites, respectively. Among polymorphs caused by buckling structures, the DFT result for the planar-like structure is well compared to the experimental result.

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. 二次元物質の第一原理電子状態計算
First-principles calculations of two-dimensional novel structures
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. 第一原理手法による超伝導転移温度の計算
First-principles calculations of superconducting critical temperature
5. OpenMX の開発と公開
Development of the OpenMX software package

野口研究室

Noguchi Group



野口 博司
NOGUCHI, Hiroshi
准教授
Associate Professor



樋口 祐次
HIGUCHI, Yuji
助教
Research Associate

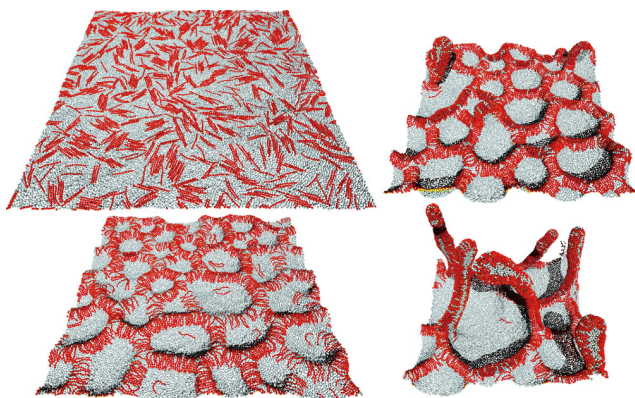
ソフトマター、生物物理を計算機を駆使して研究している。特に、生体膜や細胞のダイナミクスを解明に力を入れている。そのためのシミュレーション手法の開発、改良も行っている。

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、タンパク質の吸着による生体膜の形態変化などを明らかにしている。

また、高分子材料の破壊過程や気泡形成を伴う流れなど通常のナビエーストックス方程式に従わない流体のダイナミクスをシミュレーションを駆使して研究している。

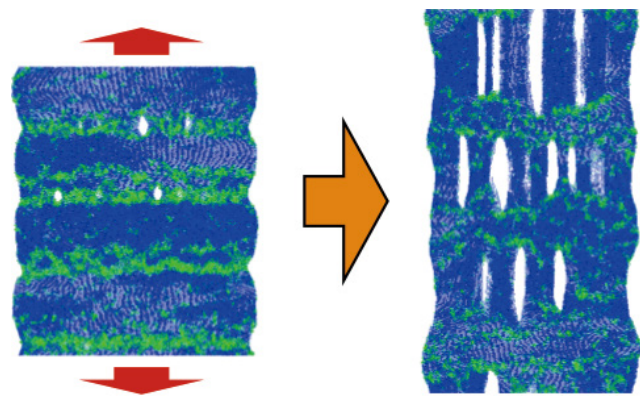
We study soft-matter physics and biophysics theoretically and numerically. Our main target is the physics of biomembrane and cells under various conditions. We develop membrane models and hydrodynamics simulation methods.

We found the shape transitions of red blood cells and lipid vesicles in shear and capillary flows using mesoscale hydrodynamic simulations: discocyte-to-parachute, stomatocyte-to-prolate, and prolate-to-discocyte, etc. We also clarified the membrane tubulation by the BAR proteins and the fracture process of polymer materials.



バナナ状タンパク質分子による膜チューブ形成。条件によっては二次元格子状のネットワーク構造を経る。

Sequential snapshots of membrane tubulation induced by banana-shaped protein rods.



伸長下の結晶性高分子の破壊。アモルファス層に空孔が生成し、破けていく。

Fracture of polymer material under axial extension.

研究テーマ Research Subjects

1. 細胞、脂質ベシクルの形態形成
Shape transformation of cells and lipid vesicles
2. 複雑流体のダイナミクス
Dynamics of complex fluids
3. 高分子材料の破壊
Fracture of polymer materials
4. 流体力学計算手法の開発
Simulation methods of hydrodynamics

物質設計評価施設

Materials Design and Characterization Laboratory

http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/yoshimi_team.html

吉見チーム

Yoshimi Team



吉見 一慶
YOSHIMI, Kazuyoshi
PCoMS 次世代研究員 (PI)
Project Researcher

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、幅広い分野での理論研究（幾何学的電荷フラストレーションが強い系での有限温度物性解析、量子ドット系でのスピン緩和現象解析など）を行っている。最近では、高度化ソフトウェアを活用した研究に加え、近年著しい発展を見せる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解析や、機械学習を用いた新物質探索への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 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, by using the developed software, we theoretically study research subjects in a wide range of fields such as finite temperature properties in solids with strong geometric charge frustration and spin relaxation phenomena in quantum dot systems. In addition to these activities, we focus on the 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 the machine learning method.

物質設計評価施設

Materials Design and Characterization Laboratory

摂待研究室

Settai Group



摂待 力生
SETTAI, Rikio
客員教授
Visiting Professor

ドハース・ファンアルフェン振動を主な観測手段として、極限環境下における強相関電子系のフェルミ面の研究を行っている。フェルミ面は、伝導電子のエネルギーを波数空間で表した時にできる最も高い等エネルギー面であり、結晶構造や価電子数、伝導電子に働く相互作用などにより、その金属に特徴的な形や性質を示すため、金属的な物質を評価する上で大変重要となる。これまで、本研究室では、セリウム化合物やウラン化合物などの量子臨界点近傍でのフェルミ面の変化や、伝導電子の有効質量の発散的な増大を明らかにしてきた。現在、価数揺らぎや多極子の量子臨界点をもつ物質、さらには遷移金属磁性体の量子臨界点や金属絶縁体転移を示す物質のフェルミ面の性質を明らかにするため、上床研究室と共同で、20T 超伝導マグネット付き希釈冷凍機や無冷媒希釈冷凍機、定荷重圧力装置、改良型ブリッジマン型圧力セル、パームトップ・キュービック圧力セルを用いた多重極限下の量子振動の観測システムの開発に取り組んでいる。

We are studying Fermi surface (FS) properties of strongly correlated electron systems under extreme conditions by de Haas-van Alphen oscillation. FS, which is the highest constant-energy surface of conduction electron in reciprocal space, is very important to characterize metallic materials, because it shows the characteristic shape and properties depending on the crystal structure, number of valence electrons and the interactions acting the conduction electrons. We have elucidated the change of FS with diverging mass-enhancement around quantum critical point (QCP) in cerium and uranium magnetic compounds. Recently, we are collaborating with Uwatoko group to develop the observing system for the quantum oscillation under the multiple extreme conditions using dilution refrigerator (DR) with 20T superconducting magnet, helium-free DR with 9T magnet, constant load pressure cell, improved Bridgman cell and palm-top cubic anvil cell in order to investigate the FS properties of valence fluctuating system, multipole QCP system, transition metal compounds showing quantum phase transition or metal-insulator transition.

石井研究室

Ishii Group



石井 史之
ISHII, Fumiya
客員准教授
Visiting Associate Professor

密度汎関数法に基づく第一原理計算手法を用い、スーパーコンピュータを用いて大規模な並列計算をおこなうことで、複雑な物質の電子状態や物性を研究するとともに、スピントロニクス応用や熱電変換材料として有用な物質の計算デザインを行っている。特に電子のもつ磁気的な自由度であるスピンに注目した研究をおこなっている。Bloch 電子の波数空間でのスピン構造（ラッシュバ効果等）、実空間でのスピン構造（スカーミオン結晶等）は、結晶構造や界面の構造によって、多彩な非自明な渦構造を示すことが知られており、電子の輸送現象はこれらのスピン構造の影響を強く受ける。本研究室ではそれらについて、現実の物質をより忠実にコンピュータの中に再現することにより、スピン構造の起源と期待される物性について調べ、その知見から理学的に興味深い現象の提案および、工学的にも重要である物質のデザインをめざしている。

By using the first-principles density functional calculations with massive parallel computation using large supercomputer, we study the electronic structures and physical properties of complex materials. We perform computational materials design of candidate materials for spintronics applications and thermoelectric materials. In particular, we focus on spin, magnetic freedom of electrons. For example, Rashba spin texture is known for the vortex spin structure in the momentum space (wave number space of Bloch electrons) and the skyrmion crystal is known for the vortex spin structure in real space. These non-trivial spin structures originate in the crystal structure and structure of materials interface. The electron transport phenomenon is strongly affected by these spin structures. In our laboratory, we study the origin and expected physical properties of the materials with peculiar spin structures by realistic computer simulation. We try to propose physically interesting phenomena and design materials that are important for engineering.

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
 助 教 渡辺 宙志 Research Associate : WATANABE, Hiroshi
 助 教 笠松 秀輔 Research Associate : KASAMATSU, Shusuke

技術専門職員 矢田 裕行 Technical Associate : YATA, Hiroyuki
 技術専門職員 福田 毅哉 Technical Associate : FUKUDA, Takaki
 学術支援専門職員 荒木 繁行 Technical Associate : ARAKI, Shigeyuki



渡辺 /WATANABE



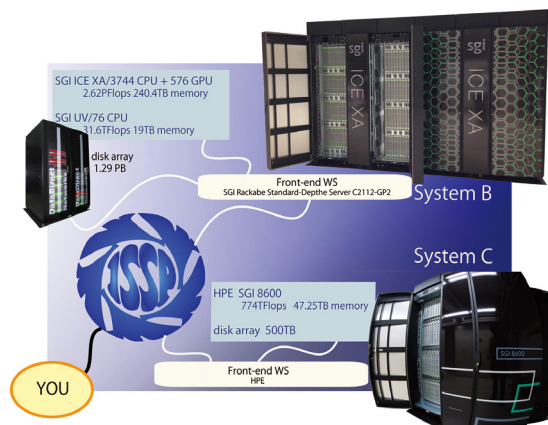
笠松 /KASAMATSU

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。スパコンシステムは2015年7月に更新された大規模並列計算機(SGI ICE XA/UV ハイブリットシステム、3820 CPU (Intel Xeon) + 576GPU (Nvidia Tesla K40)) に、2018年1月に稼働を開始した大規模並列計算機(HPE SGI 8600、504 CPU) を加えた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(<http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/supercom/>) を参照されたい。また、2015年度から上記スパコン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を開始した。さらに、計算物質科学スパコン共用事業を通じてポスト「京」重点課題、萌芽課題、元素戦略プロジェクト、計算物質科学人材育成コンソーシアム(PCoMS)などの大型プロジェクトをサポートしている。

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: SGI ICE XA/UV hybrid system (3820 CPU (Intel Xeon) + 576GPU(Nvidia Tesla K40)) and HPE SGI 8600 (504 CPU). The former and the latter systems were renewed in July 2015 and in January 2018, respectively. In addition to maintaining high performance of the system in cooperation with the vendors, the SCC also responds to questions and inquiries from users on a daily basis. In 2015, we started a new program for developing application programs aiming at more efficient usage of the supercomputer systems. We also support national projects, such as post-K computer projects, element strategy projects, professional development consortium for computational materials science (PCoMS), etc. software development projects. We support software development projects for post-K computer, Elements Strategy Initiative, and PCoMS by providing and managing computer resources.



スーパーコンピュータ システム B (SGI ICE XA/UV hybrid system)
The supercomputer system B (SGI ICE XA/UV hybrid system).



物性研究所共同利用スーパーコンピュータシステム構成図
The Supercomputer System at the SCC-ISSP.

物質設計評価施設

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

物質合成室 Materials Synthesis Section

担当所員 廣井 善二 Contact Person : HIROI, Zenji
技術職員 石井 梨恵子 Technical Associate : 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）、真空蒸着装置（ 10^{-6} Torr）、グローブボックス、ボックス炉

Main Facilities

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



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

化学分析室 Chemical Analysis Section

担当所員 廣井 善二 Contact Person : HIROI, Zenji
技術専門職員 小池 正義 Technical Associate : KOIKE, Masayoshi
技術職員 石井 梨恵子 Technical Associate : ISHII, Rieko

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、各種顕微鏡、電子天秤、電位差滴定装置、純水製造装置

Main Facilities

ICP-AES, microscopes, Automatic balances, Potentiometric titration apparatus, 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

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 廣井 善二 Contact Person : HIROI, Zenji
 助教 矢島 健 Research Associate : YAJIMA, Takeshi



矢島 / YAJIMA

興味深い物性を示す物質の開発や評価において、結晶構造解析は極めて重要な位置を占める。本室では、X線回折を用いて、新規物質の結晶構造や温度による構造変化など物質構造の研究を行うと共に、所内外の研究者に対して施設利用の提供、依頼研究を行っている。

The main purposes of the X-Ray Diffraction Section are structural analysis and identification of powder and single crystal specimens for solid state physics. By using the Powder X-ray diffractometer equipped with a refrigerator, the structural analysis is performed in the temperature range of 4-300 K.

主要設備

粉末X線回折装置、単結晶構造解析用 CCD システム、極低温X線回折装置、湾曲イメージングプレート型X線回折計、ラウエカメラ、イメージングプレート読み取り装置

Main Facilities

Powder X-ray diffractometer, CCD system for the single-crystal structure analysis, Powder X-ray diffractometer with a refrigerator, Warped imaging plate type diffractometer, Monochromated Laue camera, and Imaging plate reader.



極低温用イメージングプレート型X線回折計
Imaging plate type X-ray diffractometer for low temperature application

電子顕微鏡室 Electron Microscope Section

担当所員 廣井 善二 Contact Person : HIROI, Zenji
 技術専門職員 浜根 大輔 Technical Associate : HAMANE, Daisuke

電子顕微鏡は物質の微細構造評価の有力な手段である。本室では、格子像レベルでの透過像を観察するため、高分解能形と電界放射形分析電子顕微鏡を備え、物質の微細構造研究を行うと共に、設備を所内外の利用に供し、共同利用研究や依頼研究を行っている。

The Electron Microscope Section supports electron diffraction measurements, lattice image observations and microscopic analyses of various solid materials in both crystalline and non-crystalline forms with the atomic-scale resolution by using a high-resolution electron microscope equipped with an x-ray micro-analyzer.

主要設備

200kV 電界放射形分析電子顕微鏡、低温・高温ホルダー、薄膜試料作製のための種々の装置

Main Facilities

200 kV 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

物質設計評価施設

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

電磁気測定室 Electromagnetic Measurements Section

担当所員 瀧川 仁 Contact Person : TAKIGAWA, Masashi
担当所員 廣井 善二 Contact Person : HIROI, Zenji
担当所員 森 初果 Contact Person : MORI, Hatsumi
担当所員 勝本 信吾 Contact Person : KATSUMOTO, Shingo
技術専門職員 山内 徹 Technical Associate : YAMAUCHI, Touru

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)

光学測定室 Spectroscopy Section

担当所員 秋山 英文 Contact Person : AKIYAMA, Hidefumi
助教 挟間 優治 Research Associate : HAZAMA, Yuji

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、波長可変パルスレーザー光源

Main Facilities

UV/VIS absorption spectrometer, IR spectrometer, Micro-Raman spectrometer with Ar and He-Ne lasers, Pulsed YAG laser equipped with tunable OPPO and a laser-machining unit, Ar ion laser, Cryostat.



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

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

高压合成室 High-Pressure Synthesis Section

担当所員 廣井 善二 Contact Person : HIROI, Zenji
技術専門職員 後藤 弘匡 Technical Associate : GOTOU, Hirotada

本室では、百万気圧、数千度までの高温高压下において様々な(新)物質の合成を行うと共に、高压力下における物質の挙動を調べている。さらに各種の高压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 までの高温高压合成実験用。

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