

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、高圧合成室の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 (MDD) and Materials Synthesis and Characterization Division (MSCD). The Supercomputer Center of ISSP (SCC) belongs to MDD, while in MSCD 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 MDD, 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 MSCD, 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 Professor	廣井 善二 HIROI, Zenji	助教 Research Associate	森田 悟史 MORITA, Satoshi	技術専門職員 Technical Associate	福田 毅哉 FUKUDA, Takaki
教授 (施設長) Professor (Director)	川島 直輝 KAWASHIMA, Naoki	助教 Research Associate	矢島 健 YAJIMA, Takeshi	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	平井 大悟郎 HIRAI, Daigorou	技術専門職員 Technical Associate	石井 梨恵子 ISHII, Rieko
教授 Professor	尾崎 泰助 OZAKI, Taisuke	助教 Research Associate	郷地 順 GOUCHI, Jun	技術職員 Technical Associate	小池 正義 KOIKE, Masayoshi
教授*1 Professor	杉野 修 SUGINO, Osamu	助教 Research Associate	樋口 祐次 HIGUCHI, Yuji	学術支援専門職員 Technical Associate	荒木 繁行 ARAKI, Shigeyuki
准教授 Associate Professor	野口 博司 NOGUCHI, Hiroshi	助教 Research Associate	河村 光晶 KAWAMURA, Mitsuaki	学術支援職員 Technical Associate	長崎 尚子 NAGASAKI, Shoko
特任研究員 (PI)*2 Project Researcher	吉見 一慶 YOSHIMI, Kazuyoshi	助教 Research Associate	福田 将大 FUKUDA, Masahiro	特任研究員 Project Researcher	浅野 優太 ASANO, Yuta
准教授 (客員) Visiting Associate Professor	本山 岳 MOTOYAMA, Gaku	助教 Research Associate	井戸 康太 IDO, Kota	特任研究員 Project Researcher	岡田 健 OKADA, Ken
		技術専門職員 Technical Associate	山内 徹 YAMAUCHI, Touro	特任研究員 Project Researcher	ボイ ディリップクーマー BHOL, Dilip Kumar
		技術専門職員 Technical Associate	後藤 弘匡 GOTO, Hirotsada	特任研究員 Project Researcher	ホン スーシェン HUNG, Shih Hsuan
		技術専門職員 Technical Associate	矢田 裕行 YATA, Hiroyuki	特任研究員 Project Researcher	本山 裕一 MOTOYAMA, Yuichi
				特任研究員 Project Researcher	余 珊 YU, Shan

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

*2 PASUMS チームリーダー (PI) / Project Researcher (PASUMS)

廣井研究室

Hiroi Group



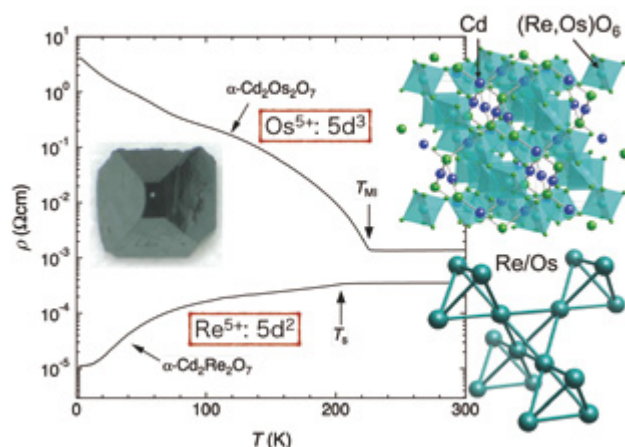
廣井 善二
HIROI, Zenji
教授
Professor



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、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。

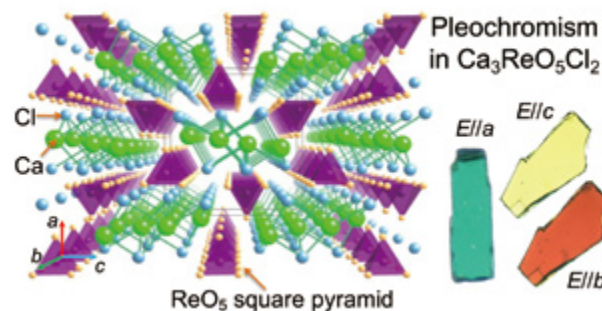


2つの5d遷移金属パイロクロア酸化物の電気抵抗。Cd₂Os₂O₇は230 Kで時間反転対称性を破り、all-in/all-out型の四面体クラスター磁気八極子秩序を形成して絶縁体となる。一方、Cd₂Re₂O₇は200 K以下で空間反転対称性を破って遷移クラスター電気トロイダル四極子秩序を示す。後者はスピン軌道結合金属の典型物質と考えられている。

Two 5d pyrochlore oxides. Cd₂Os₂O₇ exhibits a metal-insulator transition at 230 K to a tetrahedral-cluster magnetic octupole order with losing time reversal symmetry, while a tetrahedral-cluster electric toroidal quadrupole order is realized below 200 K in Cd₂Re₂O₇ with spontaneous spatial inversion symmetry breaking. Cd₂Re₂O₇ is a spin-orbit-coupled metal candidate.

The remarkable discovery of high-*T_c* superconductivity and the following enthusiastic research in the last decades 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 related to various types of magnetism, spin-orbit interactions, and unconventional band structures. We believe that it will become more important to explore novel physics through searching for new materials.

We focus on various kinds of transition metal compounds in terms of structure-property relationship and are searching for new materials based on the solid state chemistry. Recently we study transition metal oxides containing heavy 5d elements such as Re and Os and mixed-anion compounds containing more than two kinds of anions.



多色性を示す混合アニオン化合物 Ca₃ReO₅Cl₂。
Mixed-anion compound Ca₃ReO₅Cl₂ showing pleochroism.

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

川島研究室

Kawashima Group



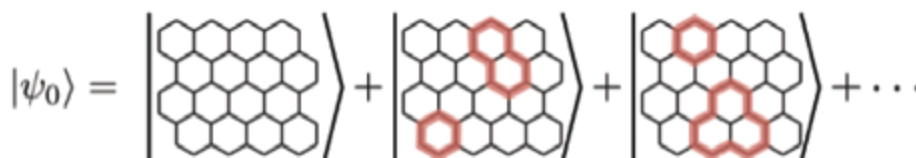
川島 直輝
KAWASHIMA, Naoki
教授
Professor



森田 悟史
MORITA, Satoshi
助教
Research Associate

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論に含まれる数理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情報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、Kitaevスピン液体状態を表す波動関数の簡単な表現の発見がある。Kitaevモデルの基底状態であるギャップレススピン液体状態をできるだけ少ない情報量のテンソルネットワークによって表現する努力をしていたところ、最近になって、古典統計力学モデルであるループガスモデルによってその本質が表現できることを発見した。

Recently, the trend of artificial intelligence / machine learning / quantum computation has attracted 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 information compression. An example of recent research is the discovery of a simple representation of the wave function of the Kitaev spin liquid state. In the pursuit of expressing the ground state of the Kitaev model by using a tensor network with as little information as possible, recently, we found that it can be essentially expressed by the loop gas model, a model of classical statistical mechanics.



臨界的古典ループガスによるKitaevスピン液体状態の表現。

Classical loop-gas at criticality represents the gapless Kitaev spin liquid.

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



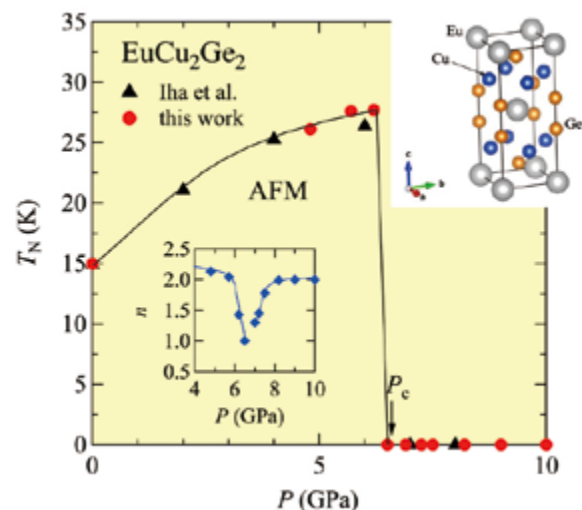
郷地 順
GOUCHI, Jun
助教
Research Associate

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が実現している。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中心に研究手段とし、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。

反強磁性化合物 EuCu_2Ge_2 (正方晶: $I4/mmm$) の圧力状態図。圧力の上昇に伴い、反強磁性秩序温度 (T_N) が上昇し、6.2 GPa で約 27 K で最大値を示す。6.5 GPa で T_N は急速に消失し、Eu の価数が 2+ から 3+ に変化する価電子転移による量子臨界点 (QCP) が $P_c = 6.5 \text{ GPa}$ 付近で発生している。挿入図は、電気抵抗率 $\rho(\text{mag}) = \rho_0(\text{mag}) + BT^n$ のべき乗指数 n に対する圧力効果である。低温における指数 n の圧力依存性を示している。臨界圧力に近づく、指数 n は圧力の関数として減少し、 $n = 1$ に近づく。この現象は、価数転移に起因した QCP 出現の良い例であることを示唆している。これは、Eu 化合物の中で初めて観測された現象である。

The pressure-temperature phase diagram of the antiferromagnetic compound EuCu_2Ge_2 (Tetragonal: $I4/mmm$). With increasing pressure, antiferromagnetic ordering temperature (T_N) increases and shows maximum with $T_N \sim 27 \text{ K}$ at 6.2 GPa. At critical pressure, $P_c = 6.5 \text{ GPa}$, T_N disappears abruptly due to the valence transition of Eu ions from 2+ to 3+ states suggesting a underlying quantum critical point (QCP). Inset figure shows the pressure dependence of exponent, n , of the power law dependence of the $\rho(\text{mag}) = \rho_0(\text{mag}) + BT^n$. On approaching the critical pressure, the exponent n decreases as a function of pressure and move toward $n = 1$. This provides a good example of a QCP arising from the valence transition. Besides, this is also first observation of such valence transition QCP among the Eu compounds.

The high-pressure group has been studying various materials under high-pressure conditions in combination with low temperature and/or strong magnetic field. Nowadays, the techniques combining these multi-extreme conditions have become popular and indispensable for researches in solid state physics. However, the developments of these techniques that can realize in-situ measurements under multiple extreme conditions are often challenging and require sophisticated considerations. This group has devoted numerous efforts in developing such advanced high-pressure techniques and in studying the strongly correlated electronic systems, which is one of the most important themes in modern solid state physics. Considering the fact that many mysterious phenomena in strongly correlated electronic systems result from the electron-phonon and electron-electron interactions, we foresee the discovery of many unknown phenomena under multi-extreme conditions because high pressure offers an effective knob in tuning the inter-atomic distances and the density of electronic state that controls the degree of complex interactions.



研究テーマ Research Subjects

1. 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
2. 超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
3. 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

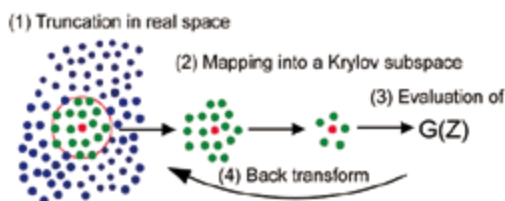


尾崎 泰助
OZAKI, Taisuke
教授
Professor



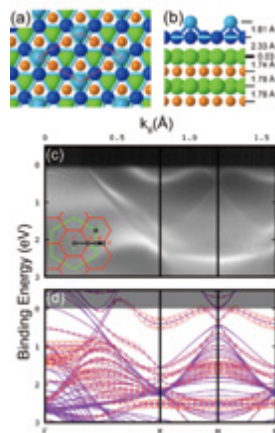
河村 光晶
KAWAMURA, Mitsuaki
助教
Research Associate

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、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, 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), which has been released to public under GNU-GPL, and widely used around world for studies of a wide variety of materials.



(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.

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

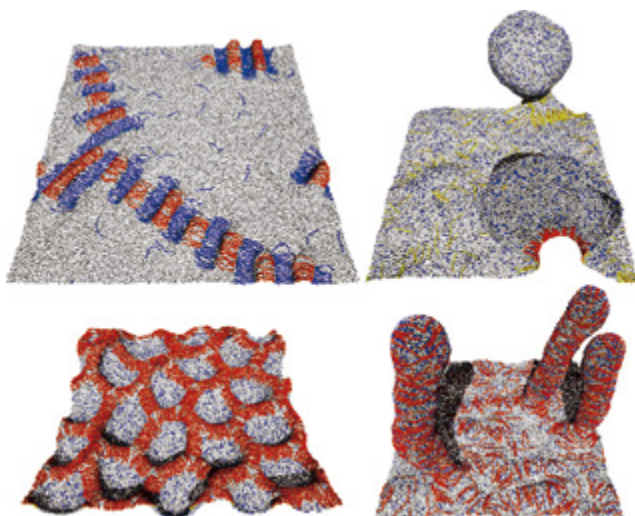


樋口 祐次
HIGUCHI, Yuji
助教
Research Associate

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、複雑流体のダイナミクスの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、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。

また、高分子材料の破壊などの不可逆現象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ッ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。

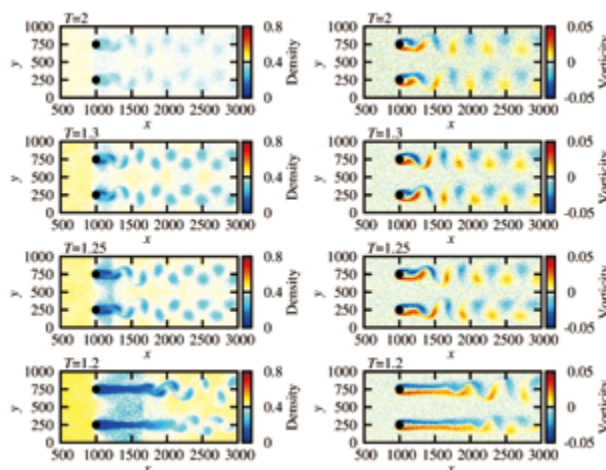


バナナ状タンパク質分子の吸着による膜変形。条件によって、様々な構造を形成する。左図：1次元、2次元の格子状の構造。右図：球状のコブ、円柱状の膜チューブの突起形成。

Membrane structures induced by banana-shaped protein rods: periodical bumps, hexagonal network, spherical bud, and cylindrical tubules.

We study soft-matter physics and biophysics theoretically and numerically. Our main target is the structure formation of biomembrane and dynamics of complex fluids 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. Moreover, we investigated the fracture process of polymer materials and cavitation in Karman vortex using massively parallel simulations.



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.

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

https://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
PASUMS チームリーダー
Project Researcher (PASUMS)

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に、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、幅広い分野での理論研究 (有機伝導体を中心とした第一原理計算と組み合わせた有効模型の構築とその解析、量子ドット系でのスピン緩和現象の解析など) 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 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 derivation and analysis of low-energy effective Hamiltonian of organic conductors 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

本山研究室

Motoyama Group



本山 岳
MOTOYAMA, Gaku
客員准教授
Visiting Associate Professor

点接合分光 (PCS) 測定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超伝導化合物の研究を行っている。超伝導秩序変数が顕在化したものに超伝導ギャップがあり、その構造により超伝導状態を分類できるため、超伝導状態のエネルギースペクトルは重要な情報を有している。またいくつかの強相関係超伝導化合物が極限環境下において顕著な変化を示すことはよく知られている。電子状態をエネルギー軸に映し出すことができかつ極限環境下においても測定可能なPCS測定法は重要な実験手法である。現在、興味深い圧力依存性を示す超伝導体や磁場中で興味深い超伝導状態を示す物質などにおいてPCS測定を行っている。極限環境下における超伝導状態のスペクトルの観測やスペクトルの変化を見出すため、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キュービック圧力セルを用いた多重極限下のPCS測定システムの開発に取り組んでいる。

We are conducting Point-Contact Spectroscopic (PCS) study of superconductivity on strongly correlated electron systems under extreme conditions. The electron energy spectrum of the superconducting state contains some important hints to reveal the state, because the superconducting gap function is the order parameter and it is possible to classify superconductors by their superconducting gap structure. Some of superconductors in the systems appear remarkable changes in their superconductivity under extreme conditions. PCS measurement can project the electronic state onto the energy spectrum and we have developed a new method for PCS measurement to perform even under extreme conditions. Recently, we are collaborating with Uwatoko group to observe the point-contact spectrum of the superconducting state, which appears an interesting change under the multiple extreme conditions, using dilution refrigerator with 20 T superconducting magnet and cubic anvil cell.

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
 助 教 福田 将大 Research Associate : FUKUDA, Masahiro
 助 教 井戸 康太 Research Associate : IDO, Kota

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



福田 将大
FUKUDA, Masahiro



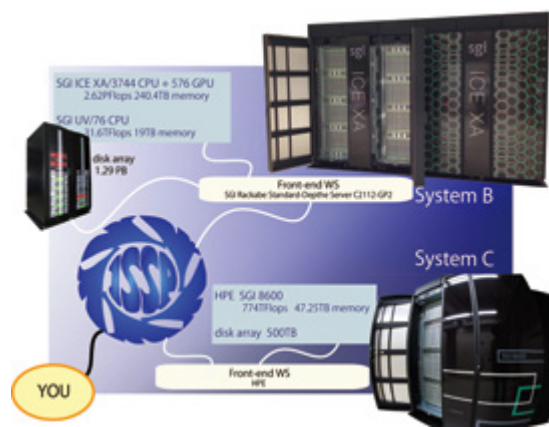
井戸 康太
IDO, Kota

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。2015年7月から運用されてきた主システム(システムB = SGI ICE XA/UV ハイブリットシステム、3820 CPU (Intel Xeon) + 576GPU (Nvidia Tesla K40))は2020年10月に更新される予定。現有システムは、これに、2018年1月に稼働開始したシステム(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)を実施している。さらに、計算物質科学スパコン共用事業を通じて「富岳」成果創出加速プログラム課題、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) + 576 GPU(Nvidia Tesla K40)) and HPE SGI 8600 (504 CPU). The former was installed in July 2015 and will soon be replaced by a new system in October 2020, whereas the latter systems were installed in January 2018. 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 PASMUS for developing application programs aiming at more efficient usage of the supercomputer systems. We also support national projects, including MEXT “Fugaku”-related projects, Element-Strategy Initiative projects, and professional development consortium for computational materials science (PCoMS).



スーパーコンピュータ システム B (SGI ICE XA/UV hybrid system)
 (2020年10月に新システムに更新される予定。)
 The supercomputer system B (SGI ICE XA/UV hybrid system)
 (To be replaced by a new system on October 2020)



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
 (システムBは2020年10月に更新予定。)
 The Supercomputer System at the SCC-ISSP.
 (System B will be replaced on October 2020.)

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
技術専門職員 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、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, 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 石井 梨恵子 Technical Associate : ISHII, Rieko
技術職員 小池 正義 Technical Associate : KOIKE, Masayoshi

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 健
YAJIMA, Takeshi

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。

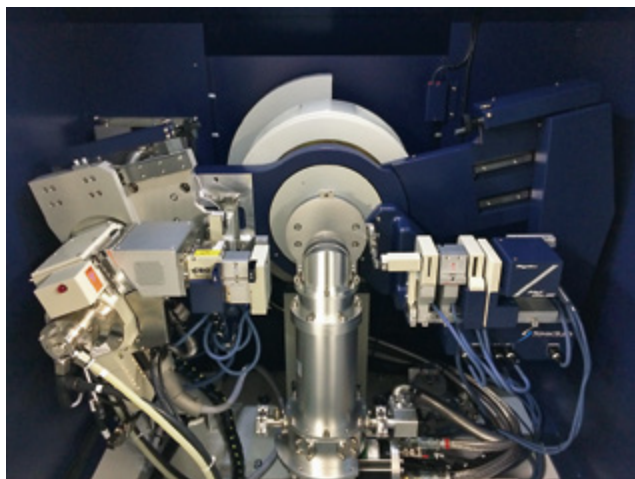
The main purposes of the X-Ray Diffraction Section are structural analysis and identification of powder and single crystal specimens for solid state physics. By using the Powder X-ray diffractometer equipped with a refrigerator, the structural analysis is performed in the temperature range of 4-300 K.

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 X 線回折装置
Powder 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
担当所員 松永 隆佑 Contact Person : MATSUNAGA, Ryusuke

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)

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 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.



若槻型 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.