

附属計算物質科学研究センター

Center of Computational Materials Science

「富岳」スーパーコンピュータに代表される近年の計算機の発展に伴って、大規模計算や網羅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。本センターは、データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクトや「富岳」プロジェクトなどを担う拠点として、「富岳」や物性研究所共同利用スパコンを始めとする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・運用と博士課程人材の育成のために計算物質科学高度人材育成・産学マッチングプログラムを進めている。

As symbolized by the Fugaku computer, massively parallel and exhaustive 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 Fugaku Computer Project and the DxMT project, coordinate the use of the computational resources available to our community, including Fugaku and ISSP supercomputers. In addition, we also operate the web site, MateriApps, which offers easy access to various existing codes in materials science, and in order to develop human resources for the doctoral program, we promote the Advanced Human Resource Development and Industry-Academia Matching Program for Computational Materials Science.

センター長 尾崎 泰助
Leader OZAKI, Taisuke

三澤研究室 Misawa Group

研究テーマ Research Subjects

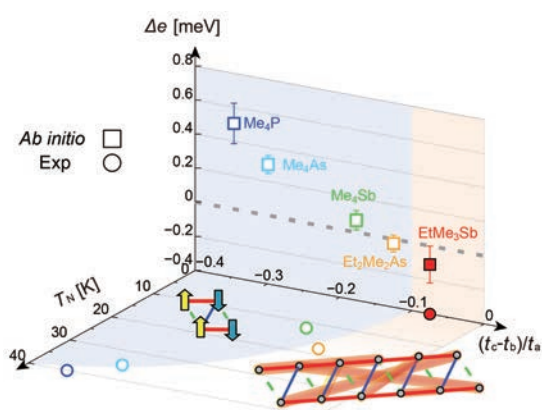
- 1 量子多体系を取り扱う数値計算手法の開発
Development of numerical methods for quantum many-body systems
- 2 トポロジカル物質における量子輸送現象
Quantum transport phenomena in topological materials
- 3 量子スピン液体・高温超伝導
Quantum spin liquid・High-Tc superconductivity
- 4 強相関電子系に対するデータ駆動型研究
Data-driven research for strongly correlated electron systems



特任准教授 三澤 貴宏
Project Associate Professor MISAWA, Takahiro

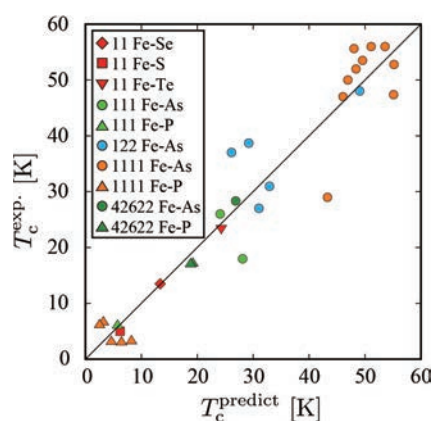
量子多体系の典型例である固体中の強相関電子系では、高温超伝導・量子スピン液体に代表される新奇量子相が数多く発現する。これらの現象を支配している基礎学理を解明して、新現象・新機能を創出することは凝縮系物理学の大きな目標である。本研究室では、この挑戦的な課題に対して、最先端の理論手法とスーパーコンピュータを用いた大規模数値計算を駆使することで取り組んでいる。特に、第一原理計算と高精度量子格子模型解析を組み合わせた第一原理強相関計算手法の開発を行っており、この手法を用いることで、高温超伝導・量子スピン液体・相関トポロジカル相などの新奇量子相の研究を行っている。最近の研究例としては鉄系高温超伝導体の第一原理有効ハミルトニアンデータの科学的解析、分子性固体における量子スピン液体の研究などがある。さらに、第一原理強相関計算手法を用いたデータ創出及びデータを利活用したデータ駆動型の研究も進めている。

In strongly correlated electron systems in solids, which are typical examples of quantum many-body systems, many exotic quantum phases, such as high-temperature superconductivity and quantum spin liquids, emerge. It is a grand challenge of condensed matter physics to elucidate a deep understanding of the physics behind these exotic phenomena and to predict new phenomena and functions based on the understanding. In our laboratory, we tackle this challenging issue by combining state-of-the-art theoretical methods with large-scale numerical calculations using powerful supercomputers. In particular, we have developed an ab initio method for treating strongly correlated electron systems, which combines ab initio calculations with highly-accurate methods for solving quantum lattice models. By using this method, we have studied exotic quantum phases such as high-temperature superconductivity, quantum spin liquids and correlated topological phases. Recent examples of our work include the data analysis of ab initio effective Hamiltonians for iron-based superconductors and the study of quantum spin liquids in molecular solids. In addition, we are now conducting data-driven research using the ab initio method for strongly correlated electron systems.



β -X[Pd(dmit)₂] (Xはカチオン)の第一原理有効模型の解析を行った結果、第一原理計算で求めた反強磁性相(AF)と量子スピン液体相(QSL)のエネルギー差 $\Delta e = E_{QSL} - E_{AF}$ (壁面)、は $X = EtMe_3Sb$ での量子スピン液体発現を含む実験相図(底面)をよく再現している。

Results of the ab initio effective model analysis of β -X[Pd(dmit)₂] (X represents a cation). From the ab initio calculations, we obtain the energy difference between the antiferromagnetic (AF) and quantum spin liquid (QSL) phases, $\Delta e = E_{QSL} - E_{AF}$ (shown at wall surface). We find that the theoretical results well reproduce the experimental phase diagram (shown at bottom surface) including the quantum spin liquid phase at $X = EtMe_3Sb$.



鉄系超伝導体の第一原理ハミルトニアンの微視的パラメータから構築された回歸モデルから得られた実験で得られた転移温度 (T_c^{exp}) と理論予測した転移温度 ($T_c^{predict}$) の比較。回歸モデルが実験結果をよく再現できていることがわかる。

Experimental T_c (T_c^{exp}) vs. predicted T_c ($T_c^{predict}$) obtained from the regression model, which is constructed from the microscopic parameters of ab initio Hamiltonians for iron-based superconductors. We can see the regression model reproduce the experimental results well.

