

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う、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。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課題となっている。本センターでは、「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を活用して、この課題に組織的に取り組んでいる。そのために、計算物質科学コミュニティの組織である計算物質科学イニシアティブ (CMSI) の活動を支援し、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・運用を開始した。また、こうした大規模並列計算を希少元素の代替や有効活用という社会的問題解決へとつなげる試みも開始された。

As symbolized by the 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 this problem in an organized way, we coordinate the use of the computational resources available to our community, including "K-computer" and ISSP supercomputers. We also support the activities of CMSI, an organization of the materials science community. In particular, we operate the web site, MateriApps, which offers easy access to various existing codes in materials science as well as cooperative code-development environments. In addition, we have started to find ways to lead activities in fundamental science study to solutions to problems with more direct social impacts such as substitutions of rear elements.

教授*	高田 康民 Yasutami TAKADA	助教**	芝 隼人 Hayato SHIBA	特任研究員	大久保 毅 Tsuyoshi OKUBO
教授(副センター長)**	川島 直輝 Naoki KAWASHIMA	助教*	野口 良史 Yoshifumi NOGUCHI	特任研究員	郭 志新 Zhixin GUO
教授(センター長)***	常行 真司 Shinji TSUNEYUKI	助教**	渡辺 宙志 Hiroshi WATANABE	特任研究員	河野 貴久 Takahisa KOUNO
特任教授	藤堂 真治 Synge TODO	助教**	森田 悟史 Satoshi MORITA	特任研究員	坂下 達哉 Tatsuya SAKASHITA
特任教授	赤井 久純 Hisazumi AKAI	助教**	笠松 秀輔 Shusuke KASAMATSU	特任研究員	正木 晶子 Akiko MASAKI
准教授*	杉野 修 Osamu SUGINO	学術支援専門職員	古宇田 光 Hikaru KOUTA	特任研究員	趙 滙海 Hui-Hai ZHAO
准教授**	野口 博司 Hiroshi NOGUCHI	学術支援専門職員	三浦 淳子 Atsuko MIURA	特任研究員	吉澤 香奈子 Kanako YOSHIZAWA
		学術支援専門職員	早川 雅代 Masayo HAYAKAWA	特任研究員	五十嵐 亮 Ryo IGARASHI
				特任研究員	ボネット ニセフォル アーサー フランソワ Nicephore Arthur Francois BONNET
				特任研究員	チュオン ヴィン チュオン スイ Duy TRUONG VINH TRUONG

* 物性理論研究部門と併任 / concurrent with Division of Condensed Matter Theory

** 物質設計評価施設と併任 / concurrent with Materials Design and Characterization Laboratory

*** 理学系研究科物理学専攻と兼任 / concurrent with Physics Department, Graduate School of Science

藤堂研究室

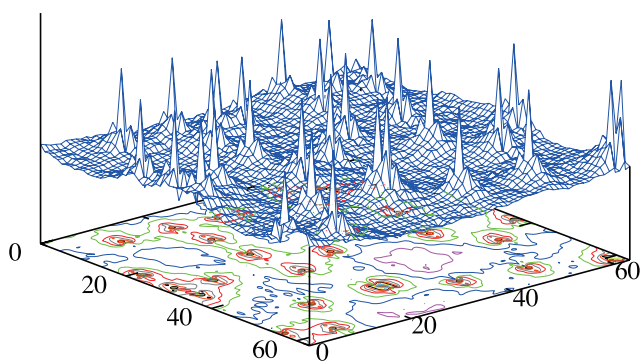
Todo Group



藤堂 眞治
Syngye TODO
特任教授
Project Professor

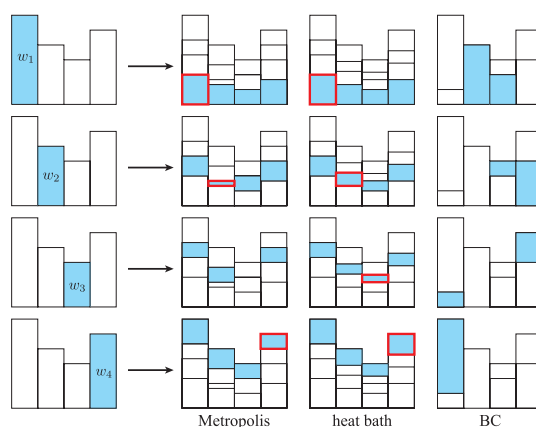
量子モンテカルロ法などの計算物理学の手法を用いて、量子スピン系などに見られる新奇な秩序状態と量子相転移現象を研究している。量子ゆらぎの効果は、細い棒状や薄い膜状の磁性体、ナノ微粒子などにおいて特に顕著である。そこでは、物質の形状効果が特に強く、量子ゆらぎによりスピン同士が共鳴し、互いに揃うことのできない状態が実現する。この「スピン液体」は、非磁性不純物を混ぜると、逆に長距離磁気秩序が出現するなど、通常の磁性体とは極めて異なった特性を示す。我々は、大規模シミュレーションにより、量子ゆらぎと乱れの競合・共存により生じる物性現象の研究を行っている。また、京コンピュータをはじめとする最先端のコンピュータの能力を十分に発揮する計算手法の研究や、オープンソースソフトウェアの開発にも力を注いでいる。

We study novel order states and quantum-phase-transitions, which are looked at the quantum spin system etc., by using the technique of computational physics, such as the quantum Monte Carlo method. The effect of quantum fluctuations is pronounced especially in line-shaped or thin-film magnets, nano particles, etc. There, the geometric effect of substance can be quite strong, and thus spins resonate by quantum fluctuations, and cannot align with each other. When nonmagnetic impurities are introduced into this “spin liquid” state, it shows the extremely different behavior; magnetic long-range order is often induced contrary to the usual magnets. By using the large-scale computer simulation, we study such phenomena elicited by competition and coexistence of quantum fluctuations and disorder. We also study the simulation algorithms, which fully demonstrate the capability of the latest supercomputers including the K-computer, and develop open source software.



不純物誘起相転移の量子モンテカルロシミュレーション結果。サイト希釈により誘起された磁気モーメントの空間分布を示す。

The results of quantum Monte Carlo simulation of impurity-induced phase transition. Spatial distribution of magnetic moments induced by site dilution is shown.



マルコフ連鎖モンテカルロ法における幾何学的カーネル構成法。我々の新しい方法 (BC) では棄却率 (赤) が完全に零となっている。

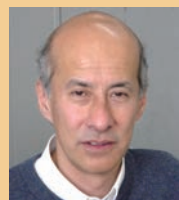
The geometric construction of transition kernel in Markov-chain Monte Carlo. In our new algorithm (BC), the rejection rate (red boxes) is eliminated completely.

研究テーマ Research Subjects

1. 低次元量子スピン系における量子液体状態
Quantum liquid state in low-dimensional quantum spin systems
2. 次元性、量子ゆらぎ、乱雑さの競合による新奇な量子相
Novel quantum phases created by competition of dimensionality, quantum fluctuations, and disorder
3. 新たなシミュレーション手法の開発
Development of new simulation algorithms
4. シミュレーションソフトウェアの高並列化とライブラリ開発
Parallelization of simulation software and development of libraries

赤井研究室

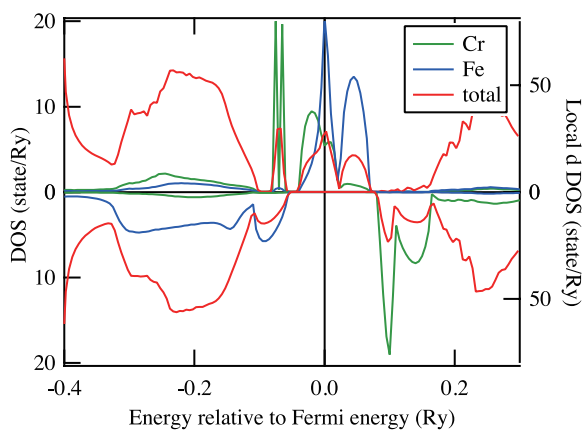
Akai Group



赤井 久純
Hisazumi AKAI
特任教授
Project Professor

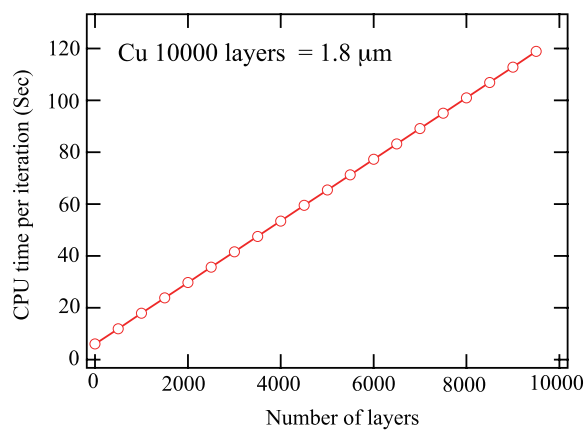
計算機マテリアルデザインは量子シミュレーションの逆問題に相当する量子デザイン（量子力学に基づいて、与えられた物性や機能を有する物資・構造を推論すること）によって実行される。このよう問題を解く事は一般に困難であるが、量子デザインの場合、量子シミュレーションを繰り返し、物性発現の機構を計算機実験によって明らかにすることによって解くことができる。計算機マテリアルデザインによる、金属、半導体、金属間化合物をおよびそれらのナノ構造を用いた高機能材料の理論的開発を研究テーマとしている。特に、高性能永久磁石を創成が重要な課題の一つである。このような量子デザイン、量子シミュレーションにおいては手法の開発も重要な研究課題であり、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 法の開発等を推進している。

Our main objective is to theoretically produce 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 a problem is very difficult, but in the case of CMD we can solve this by making use of the knowledge, which is obtained through quantum simulations, about underlying mechanisms that realize a specific feature of materials. In this regards, the developments of new methods of quantum simulation are also our very important subjects. Among them are developments of methods of accurate first-principles electronic structure calculations in general, first-principles non-equilibrium Green's function method, screened KKR-method that realizes exact order-N calculation for huge systems, and the methods beyond LDA.



ZnS に Cr と Fe を固溶させると磁化がゼロであるにもかかわらずハーフメタルになるという特別な磁気状態が実現する。CMD によってデザインされたが、このほかにも CrFeS₂ 等の多くの金属間化合物系で出現が予言されている。

ZnS doped with Cr and Fe



遮蔽 KKR 法による銅薄膜の第一原理電子状態計算に要する CPU 時間（シングルプロセッサ）と膜数関係。オーダー N が実現されていることがわかる。

The relation between CPU time (single processor) and the layer number of a Cu thin layer calculated by the screened-KKR method. Order-N performance is realized.

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