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がっている。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・運用を行っている。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行っている。

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 super-computers. 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 are also leading these activities to solutions to problems with more direct social impacts such as substitutions of rare elements.

教 授 *	髙田　康民	助　教 *	野口　良史	特任研究員	古宇田　光
Professor	TAKADA, Yasutami	Research Associate	NOGUCHI, Yoshifumi	Project Researcher	KOUTA, Hikaru
教 授（副センター長）**	川島　直輝	助　教 **	芝　隼人	特任研究員	大久保　毅
Professor (Deputy Director)	KAWASHIMA, Naoki	Research Associate	SHIBA, Hayato	Project Researcher	OKUBO, Tsuyoshi
教 授（センター長）***	常行　真司	助　教 **	渡辺　宙志	特任研究員	河野　貴久
Professor (Director)	TSUNEYUKI, Shinji	Research Associate	WATANABE, Hiroshi	Project Researcher	KOUNO, Takahisa
特任教授	赤井　久純	助　教 **	笠松　秀輔	特任研究員	坂下　達哉
Project Professor	AKAI, Hisazumi	Research Associate	KASAMATSU, Shusuke	Project Researcher	SAKASHITA, Tatsuya
特任教授	尾崎　泰助	助　教 **	森田　悟史	特任研究員	趙 滙海
Project Professor	OZAKI, Taisuke	Research Associate	MORITA, Satoshi	Project Researcher	ZHAO, Hui-Hai
准教授 *	杉野　修	技術専門職員	山崎　淳	特任研究員	吉澤　香奈子
Associate Professor	SUGINO, Osamu	Technical Associate	YAMAZAKI, Jun	Project Researcher	YOSHIZAWA, Kanako
准教授 **	野口　博司	学術支援専門職員	三浦　淳子	特任研究員	五十嵐　亮
Associate Professor	NOGUCHI, Hiroshi	Technical Associate	MIURA, Atsuko	Project Researcher	IGARASHI, Ryo
准教授 ***	藤堂　眞治	学術支援専門職員	早川　雅代	特任研究員	土居　抄太郎
Associate Professor	TODO, Synge	Technical Associate	HAYAKAWA, Masayo	Project Researcher	DOI, Shotaro
				特任研究員	チュオンヴィンチュオン　ズイ
				Project Researcher	TRUONG VINH TRUONG, Duy
				特任研究員	エムディー・モシュール　ラハマン
				Project Researcher	MD. MOSHIOUR, Rahaman
				特任研究員	ファム　ティエンラム
				Project Researcher	PHAM, Tien Lam

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

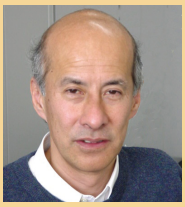
** 物質設計評価施設と併任 /concurrent with Materials Design and Characterization Laboratory

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

計算物質科学研究センター
Center of Computational Materials Science
http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/akai_group.html

赤井研究室

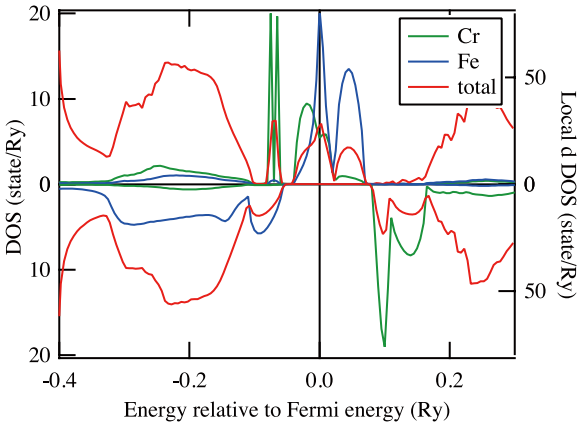
Akai Group



赤井　久純
AKAI, Hisazumi
特任教授
Project Professor

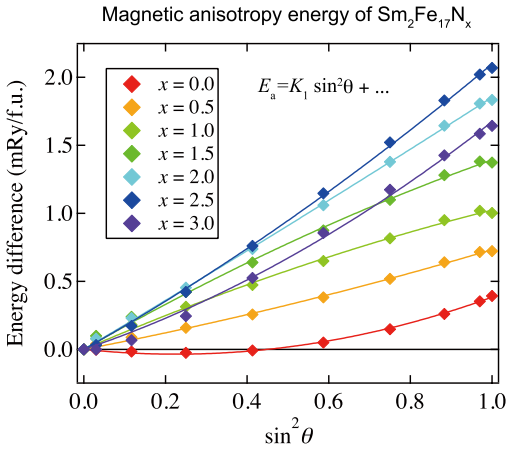
計算機マテリアルデザインは量子デザイン（量子力学に基づいて、与えられた物性や機能を有する物資・構造を推論すること）によって実行される。このような問題を解く事は一般に困難であるが、量子物質デザインの場合、量子シミュレーションを繰り返し、物性発現の機構を計算機実験によって明らかにすることによって解くことができる。計算機マテリアルデザインによる、金属、半導体、金属間化合物をおよびそれらのナノ構造を用いた高機能材料の理論的開発を研究テーマとしている。特に、高性能永久磁石の創成が重要な課題の一つである。このような量子デザイン、量子シミュレーションにおいては手法の開発も重要な研究課題であり、高精度第一原理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、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 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 $CrFeS_2$ 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 is predicted to be a half-metallic antiferromagnet (compensated ferri-magnet) (HM-AF). Also we have predicted that many other intermetallic compounds such as $CrFeS_2$ might be HM-AF.



新しいタイプの永久磁石材料 $Sm_2Fe_{17}N_x$ の磁気異方性の N 濃度の依存性。N を増やすとともに磁気異方性が面内から一軸性に変化して永久磁石材料として使えるようになることが知られているが、第一原理計算によってその振る舞いが再現されている。

The magnetic anisotropy energy (MAE) of a new type of magnet $Sm_2Fe_{17}N_x$. The experimental observation that MAE changes its sign from in-plane to uniaxial anisotropy, which is necessary for permanent magnets, is correctly reproduced by our first-principles calculation.

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

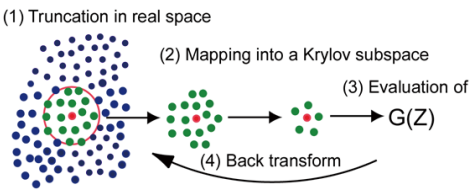
計算物質科学研究センター
Center of Computational Materials Science
http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/ozaki_group.html

尾崎研究室

Ozaki Group

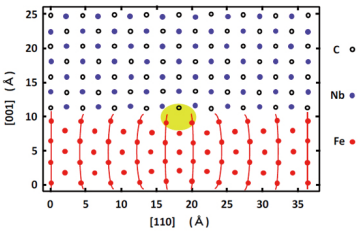
尾崎　泰助
OZAKI, Taisuke
特任教授
Project Professor

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・ソフトウエ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通常、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オーダー N クリロフ部分空間法を開発した。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、実験との直接的な比較が可能となりつつある。さらに我々は実際の実験に先立って所望の化学的・物理的性質を持つ物質を計算機上で設計する物質デザインを目標に掲げ、研究を進めている。そのための第一歩として機械学習の手法を用いて複雑な結晶構造を予測するための方法論の開発に取り組んでいる。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エア OpenMX (Open source package for Material eXplorer) として無償で一般公開し、国内外の研究者により多岐に亘る物質群の研究に広く用いられている。



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、中心原子に関与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 very important role in understanding and designing 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 an O(N) Krylov subspace method, of which 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 are aiming at realization of materials design from first-principles. As a first step towards the materials design, we have been trying to develop a method to predict complicated crystal structures based on machine learning techniques. 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.



オーダー N クリロフ部分空間法で得られた BCC 鉄と NbC の部分整合界面の最適化構造。NaCl 構造の NbC(100) 面と BCC 構造の Fe(100) が Baker-Nutting の関係 $[010]_{NbC}//[011]_{Fe}$, $[001]_{NbC}//[0\bar{1}1]_{Fe}$ の結晶方位で部分整合界面を形成する。炭素原子と鉄原子の強い相互作用のために Fe 原子が C 原子に近づき、歪みが内部に及んでいることが分かる。
Optimized semi-coherent interface structure between BCC Fe and NbC by the O(N) method. BCC Fe (100) and NbC(100) in the NaCl structure forms semi-coherent interface structure in the Baker-Nutting relation: $[010]_{NbC}//[011]_{Fe}$, $[001]_{NbC}//[0\bar{1}1]_{Fe}$. Iron atoms approaches to carbon atom due to strong interaction between carbon and iron atoms, resulting in that structural strain affects into the inner part of iron.

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. 第一原理電気伝導計算手法の開発
   Development of first-principles electronic transport calculations
3. 二次元シリコン構造の第一原理電子状態計算
   First-principles calculations of two-dimensional Si structures
4. 高性能磁石材料の構造・機能の探索
   First-principles exploration of permanent magnet materials
5. OpenMX の開発と公開
   Development of OpenMX