

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。一方、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的課題となっている。本センターは、ポスト「京」プロジェクトや元素戦略プロジェクトなど国家プロジェクトを担う拠点として、「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・運用なども行っている。

As symbolized by 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 these problems in an organized way, we, as the major contractor of several national projects such as Post-K Computer Project and Elements Strategy Initiative, coordinate the use of the computational resources available to our community, including K-computer and ISSP supercomputers. In addition, we also operate the web site, MateriApps, which offers easy access to various existing codes in materials science.

教授(副センター長)*¹ 川島 直輝
Professor (Deputy Director) KAWASHIMA, Naoki

教授(センター長)*² 常行 真司
Professor (Director) TSUNEYUKI, Shinji

特任教授 赤井 久純
Project Professor AKAI, Hisazumi

特任教授 尾崎 泰助
Project Professor OZAKI, Taisuke

准教授*³ 杉野 修
Associate Professor SUGINO, Osamu

准教授*¹ 野口 博司
Associate Professor NOGUCHI, Hiroshi

准教授*² 藤堂 眞治
Associate Professor TODO, Syngne

助教*³
Research Associate

助教*¹
Research Associate

助教*¹
Research Associate

助教*¹
Research Associate

技術専門職員
Technical Associate

学術支援専門職員
Technical Associate

特任研究員 (PI)*⁴
Project Researcher

野口 良史
NOGUCHI, Yoshifumi

渡辺 宙志
WATANABE, Hiroshi

笠松 秀輔
KASAMATSU, Shusuke

森田 悟史
MORITA, Satoshi

山崎 淳
YAMAZAKI, Jun

早川 雅代
HAYAKAWA, Masayo

三澤 貴宏
MISAWA, Takahiro

特任研究員 大久保 毅
Project Researcher OKUBO, Tsuyoshi

特任研究員 古宇田 光
Project Researcher KOUTA, Hikaru

特任研究員 趙 滙海
Project Researcher ZHAO, Hui-Hai

特任研究員 土居 抄太郎
Project Researcher DOI, Shotaro

特任研究員 福田 将大
Project Researcher FUKUDA, Masahiro

特任研究員 ホフマン マルティン
Project Researcher HOFFMANN, Martin

特任研究員 松本 宗久
Project Researcher MATSUMOTO, Munehisa

特任研究員 本山 裕一
Project Researcher MOTOYAMA, Yuichi

特任研究員 リー チチェン
Project Researcher LEE, Chi-Cheng

特任研究員*³ 山本 良幸
Project Researcher YAMAMOTO, Yoshiyuki

*¹ 所内兼務。本務は物質設計評価施設。/concurrent with Materials Design and Characterization Laboratory

*² 理学系研究科物理学専攻と兼務。/ concurrent with Physics Department, Graduate School of Science

*³ 所内兼務。本務は機能物性研究グループ。/concurrent with Functional Materials Group

*⁴ PCoMS 次世代研究員 (PI)

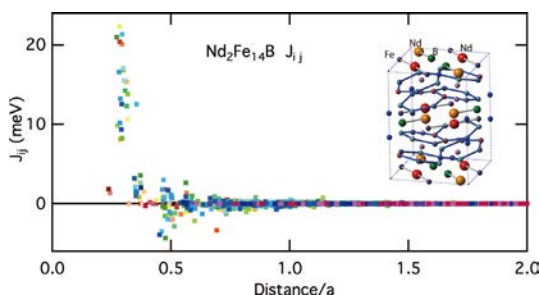
赤井研究室

Akai Group



赤井 久純
AKAI, Hisazumi
特任教授
Project Professor

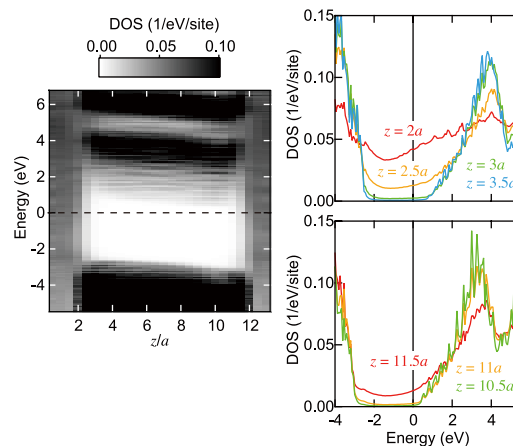
計算機マテリアルデザイン手法を用いた金属、半導体、金属間化合物をおよびそれらのナノ構造を用いた高機能材料の理論的開発を研究テーマとしている。特に、高性能永久磁石の創成が重要な課題の一つである。計算機マテリアルデザインは量子デザイン（量子力学に基づいて、与えられた物性や機能を有する物資・構造を推論すること）によって実行される。このような問題を解く事は一般に困難であるが、量子デザインでは物性発現の機構を量子シミュレーションのくり返しにより明らかにすることによってこの問題を解く。マテリアルズ・インフォーマティクス手法も援用される。量子デザイン、量子シミュレーションにおいては手法の開発も重要な研究課題であり、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。



現在最強の永久磁石であるネオジム磁石の主相である $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ の交換結合定数 J_{ij} の値の距離依存性。色の違いは異なった種類の原子対の違いを表す。 J_{ij} の値は KKR グリーン関数法を用いた第一原理電子状態計算によって直接計算されたものである。

The distance dependence of exchange coupling constants J_{ij} between various atoms in $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$, which is the main component of Nd-based permanent magnets. J_{ij} 's were calculated directly using first-principles KKR-Green's function method.

Our main objective is to predict/discover 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 problems is very difficult. In CMD we solve these problems by making use of the knowledge, which is obtained through quantum simulations, about underlying mechanisms realizing specific features of materials. The technique of materials information also can be exploited. In these regards, the developments of new methods of quantum simulation also are our important themes. Among them are developments of methods of accurate first-principles electronic structure calculations in general, first-principles non-equilibrium Green's function method, order-N screened KKR-method used for huge systems, and the methods beyond LDA.



Al/GaN 界面におけるショットキー接合付近の非平衡グリーン関数による電子状態計算の結果。左側の図の濃淡は局所状態密度を表し、白い部分はバンドギャップに相当する。左側の接合部でショットキー障壁が形成され、障壁の高さは界面の金属誘起ギャップ状態 (MIGS) で決まっていることが分かる。

The electronic structure near the Schottky junction formed by Al/GaN calculated by the KKR non-equilibrium Green's function method. The local DOS as a function of the position and the energy relative to the Fermi energy is shown. The white part in the left figure corresponds to the band gap. A Schottky barrier is formed near the interface at the left. The height of the barrier is determined by the metal induced gap state (MIGS).

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

尾崎研究室

Ozaki Group



尾崎 泰助

OZAKI, Taisuke

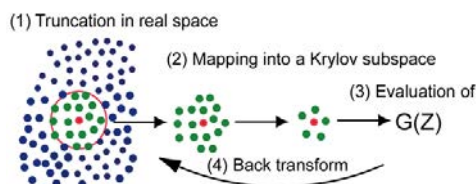
特任教授

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。

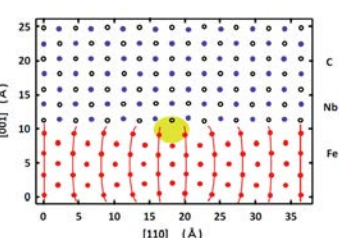
オーダー N クリロフ部分空間法のアイデア。(1) 原子毎に有限距離内に含まれる原子から構成されるクラスターを構成し、(2) さらにクラスターで定義される部分空間からクリロフ部分空間への射影を行う。(3) クリロフ部分空間内で固有値問題を解き、中心原子に関するグリーン関数を計算した後、元の空間への逆変換を行う。

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 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 $[010]_{\text{NbC}} // [011]_{\text{Fe}}$, $[001]_{\text{NbC}} // [011]_{\text{Fe}}$ 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: $[010]_{\text{NbC}} // [011]_{\text{Fe}}$, $[001]_{\text{NbC}} // [011]_{\text{Fe}}$. 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. 光電子分光スペクトル計算手法の開発
Development of first-principles methods of core-level binding energies in solids
5. OpenMX の開発と公開
Development of the OpenMX software package