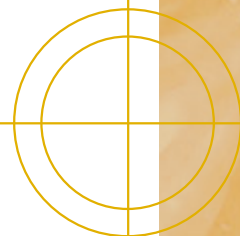


計算物質科学研究センター

Center of Computational Materials Science



「富岳」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、「富岳」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、「富岳」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 the Fugaku 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 Fugaku Computer Project and Elements Strategy Initiative, 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.

| | | | | | |
|---|-----------------------------|--|-----------------------------|-----------------------------|-----------------------------|
| 教授(副センター長)*1 Professor (Deputy Director) | 川島 直輝 KAWASHIMA, Naoki | 助教*1 Research Associate | 森田 悟史 MORITA, Satoshi | 特任研究員 Project Researcher | 河津 励 KAWATSU, Tsutomu |
| 教授(センター長)*1 Professor (Director) | 尾崎 泰助 OZAKI, Taisuke | 助教*1 Research Associate | 樋口 祐次 HIGUCHI, Yuji | 特任研究員 Project Researcher | 櫻井 誠大 SAKURAI, Masahiro |
| 教授*2 Professor | 杉野 修 SUGINO, Osamu | 助教*1 Research Associate | 河村 光晶 KAWAMURA, Mitsuaki | 特任研究員 Project Researcher | 榎 裕太 TOGA, Yuta |
| 教授*3 Professor | 常行 真司 TSUNEYUKI, Shinji | 助教*2 Research Associate | 春山 潤 HARUYAMA, Jun | 特任研究員 Project Researcher | 檜原 太一 HINOKIHARA, Taichi |
| 教授*3 Professor | 藤堂 眞治 TODO, Syngé | 助教*1 Research Associate | 福田 将大 FUKUDA, Masahiro | | |
| 准教授*4 Associate Professor | 加藤 岳生 KATO, Takeo | 助教*1 Research Associate | 井戸 康太 IDO, Kota | | |
| 准教授*1 Associate Professor | 野口 博司 NOGUCHI, Hiroshi | 高度学術専門職員*6 Advanced Academic Specialist | 古宇田 光 KOUTA, Hikaru | | |
| 特任准教授*5 Project Associate Professor | 福島 鉄也 FUKUSHIMA, Tetsuya | 技術専門職員 Technical Associate | 山崎 淳 YAMAZAKI, Jun | | |
| 特任研究員 (PI) Project Researcher | 赤井 久純 AKAI, Hisazumi | | | | |
| 特任研究員 (PI) Project Researcher | 宮下 精二 MIYASHITA, Seiji | | | | |

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

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

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

*4 所内兼務。本務は物性理論研究部門。/concurrent with Division of Condensed Matter Theory

*5 所内兼務。本務はデータ統合型材料物性部門。/concurrent with Division of Data-Integrated Materials Science

*6 リサーチ・アドミニストレーター推進室と兼務。/concurrent with Office for Advancement of Research Administrators

計算物質科学研究センター

Center of Computational Materials Science

https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/akai_team.html

赤井チーム

Akai Team



赤井 久純
AKAI, Hisazumi
特任研究員 (PI)
Project Researcher (PI)

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。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質・構造を推論すること）によって実行される。このような逆問題を解く事は一般に困難であるが、量子デザインでは、量子シミュレーションによる計算機の中での実験を通じて物性発現の機構を明らかにすることによってこの問題を解く。そこで生まれる大量のデータを用いた機械学習手法も援用される。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線形応答、第一原理非平衡グリーン関数法の開発、大規模計算に向けた遮蔽 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 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, corresponding to the inverse problem of quantum simulation. In general, solving such problems is very difficult. In CMD, we solve them by making use of the knowledge, which is obtained through “experiments performed inside computers” using quantum simulations, about underlying mechanisms realizing specific features of materials. The technique of machine learning also can be exploited on the vast data thus created. 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, linear response theory and first-principles non-equilibrium Green’s function both based on the KKR Green’s function method, order-N screened KKR-method for huge systems, and the methods beyond LDA.