

附属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計算機の発展に伴って、大規模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、「富岳」プロジェクトや元素戦略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 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, 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

赤井チーム Akai Team



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

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力学に基づいて、望む物性や機能を有する物資・構造を推論する（量子デザイン）。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中の仮想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も強力な手法として援用される。量子シミュレーションにおける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、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グリーン関数法、密度汎関数法に対するより良い近似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.



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