
日本原子力研究開発機構・システム計算科学センター・シミュレーション技術開発室
Simulation Technology R&D Office, Center for Computational Science and e-Systems,
Japan Atomic Energy Agency

(1) 研究室構成 (H26 年 9 月 22 日現在):

室長: 町田昌彦研究主席、研究系職員9名、任期付研究員2名、博士研究員1名

(2) 研究室の簡単な説明:

当該研究室は日本原子力研究開発機構(原子力機構)のシステム計算科学センター(スパコン運用やITに係る業務等を実施)に所属し、原子力研究開発分野における最先端の計算科学技術(シミュレーション技術)を開発し、原子力の安全且つ効果的な利用に貢献すべく研究開発を行っています。原子力研究開発分野は広範囲に及ぶこともあり、様々なシミュレーション研究を実施していますが、特に力を入れているのは材料シミュレーション研究です。原子炉や加速器等は構造材料、核燃材料、機能材料等の様々な先端的材料から構成されていることもあり、各材料に対し、中期計画を立案し最新のシミュレーション技術を開発しています。中でも、機能材料である超伝導材料は最も有用で革新的な材料の一つと見做し、室長を始めとして、主に2~3人の研究員が常時シミュレーション研究に従事しています。

(3) これまでの成果:

これまでに、当室では超伝導の基礎や超伝導応用を目指した新型デバイス開発に寄与するため、シミュレーション技術の開発を進めてきました。基礎分野では、超伝導発現機構解明を目標とし、スパコン上で超並列計算が可能な厳密対角化法、密度行列繰り込み群法を開発し、地球シミュレータを有効活用する研究成果では、スパコンの高度利用研究分野にて最も権威ある賞と言われているゴードンベル賞に2年連続(2005、2006年)でノミネートされた他、応用数学会からは2011年に業績賞を頂くことができました。一方、超伝導応用に対しては、高温超伝導体が層状超伝導体であり、結晶構造そのものがジョセフソン接合となっている固有ジョセフソン効果の理論及びシミュレーション研究を進め、積層ジョセフソン接合間の結合様態やその電流電圧特性において現れる多重ブランチ構造の起源[1]を明らかにした他、ジョセフソン磁束によるTHz発振機構を提唱する[2]等の成果を挙げて来ました。

(4) 最近のトピックス:

21世紀に入り、様々な特徴を有する超伝導体が次々と発見されてきましたが、それらの物性を系統的に明らかにする研究に最近は力を入れて取り組んでいます。特に、計算機の発達と共に様々な材料分野で第一原理計算を用いた材料設計が行われ始めていますが、当室では、超伝導物性予測を目標として、第一原理計算による電子状態[3]やフォノン計算[4]等の研究を実施しています。また、最近では、鉄系超伝導体の多バンド超伝導の特異な物性[5]やスピン軌道相互作用が重要な役割を果たすトポロジカル超伝導体の物性についても研究を進めています[6]。

(5) 特徴ある研究方法:

超伝導体の物性解明や材料特性の予測等を目指すため、最新のスパコンを使いこなす大規模シミュレーション技術を開発することが、特徴ある研究方法となっています。今後、スパコンは益々巨大化し、高速性能が向上しますが、その分、使い勝手が悪くなると考えられます。しかし、上手に利用することができれば、超伝導体の材料設計も夢ではないかもしれません。

(6) 参考文献:

- [1] M. Machida, T. Koyama, and M. Tachiki, Phys. Rev. Lett. **83**, 4618(1999).
- [2] M. Machida, T. Koyama, A. Tanaka, and M. Tachiki, Physica C **330** 85(2000).
- [3] H. Nakamura, M. Machida, T. Koyama, and N. Hamada, J. Phys. Soc. Jpn. **78**, 123712(2009).
- [4] H. Nakamura, N. Hayashi, N. Nakai, and M. Machida, Physica C **469**, 1024 (2009).

[5] Y. Ota, M. Machida, T. Koyama, and H. Matsumoto, Phys. Rev. Lett. **102**, 237003 (2009).

[6] Y. Nagai, H. Nakamura, and M. Machida, J. Phys. Soc. Jpn. **83** 064703 (2014).

(7)連絡先:

〒277-0871 千葉県柏市若柴 178-4-4

E-mail: machida.masahiko@jaea.go.jp

TEL:04-7135-2349, FAX:04-7135-2382