

領域略称名：物質デザイン
領域番号：2203

平成27年度科学研究費補助金「新学術領域研究
(研究領域提案型)」に係る事後評価報告書

「(研究領域名) コンピューティクスによる物質デザイン：
複合相関と非平衡ダイナミクス」

(領域設定期間)

平成22年度～平成26年度

平成27年6月

領域代表者 (東京大学・工学系研究科・教授・押山 淳)

目 次

1. 研究領域の目的及び概要	8
2. 研究領域の設定目的の達成度	10
3. 研究領域の研究推進時の問題点と当時の対応状況	14
4. 審査結果の所見及び中間評価で指摘を受けた事項への対応状況	15
5. 主な研究成果（発明及び特許を含む）	17
6. 研究成果の取りまとめ及び公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開発表等）	22
7. 研究組織（公募研究を含む）と各研究項目の連携状況	29
8. 研究経費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む）	31
9. 当該学問分野及び関連学問分野への貢献度	35
10. 研究計画に参画した若手研究者の成長の状況	36
11. 総括班評価者による評価	37

研究組織

研究項目	課題番号 研究課題名	研究期間	代表者氏名	所属機関 部局 職	構成員数
X00	22104001 コンピューティクスによる物質デザイン:複合相関と非平衡ダイナミクス	平成 22 年度～ 平成 26 年度	押山 淳	東京大学・工学系研究科・教授	11
A01 計	22104002 超高速・超低消費電力物質科学シミュレーション方式の研究開発	平成 22 年度～ 平成 26 年度	稲葉 真理	東京大学・情報理工学系研究科・准教授	4
A01 計	22104003 大規模並列環境における数値計算アルゴリズム	平成 22 年度～ 平成 26 年度	高橋 大介	筑波大学・システム情報系・教授	6
A01 計	22104004 計算物質科学の基盤となる超大規模系のための高速解法	平成 22 年度～ 平成 26 年度	張 紹良	名古屋大学・工学研究科・教授	6
A02 計	22104005 ナノ構造形成・新機能発現における電子論ダイナミクス	平成 22 年度～ 平成 26 年度	押山 淳	東京大学・工学系研究科・教授	7
A02 計	22104006 第一原理分子動力学法による構造サンプリングと非平衡ダイナミクス	平成 22 年度～ 平成 26 年度	常行 真司	東京大学・理学系研究科・教授	11
A02 計	22104007 密度汎関数法理論に基づく非平衡ナノスケール電気伝導ダイナミクス	平成 22 年度～ 平成 26 年度	渡邊 聡	東京大学・工学系研究科・教授	10
A02 計	22104008 プロトン・ミュオンで探る新物性と量子ダイナミクス	平成 22 年度～ 平成 26 年度	中西 寛	大阪大学・工学研究科・助教	7
A02 計	22104009 多自由度・大規模系にお	平成 22 年度～ 平成 26 年度	倭 剛久	名古屋大学・理学研究科・准教授	3

	ける反応と構造空間探索				
A03 計	22104010 第一原理有効モデルと相 関科学のフロンティア	平成 22 年度～ 平成 26 年度	今田 正俊	東京大学・工学系研究科・教授	8
A03 計	22104011 第一原理系励起状態の 多体論と高転移温度超 伝導物質デザイン	平成 22 年度～ 平成 26 年度	高田 康民	東京大学・物性研究所・教授	5
A03 計	22104012 スピンエレクトロニク ス材料の探索	平成 22 年度～ 平成 26 年度	佐藤 和則	大阪大学・工学研究科・准教授	10
計画研究 計 12 件					
A01 公	23104509 新しい数値手法による 大自由度物理計算アル ゴリズム	平成 23 年度～ 平成 24 年度	星 健夫	鳥取大学・工学系研究科・准教授	1
A02 公	23104501 ファン・デル・ワールス 密度汎関数の開発と応 用	平成 23 年度～ 平成 24 年度	濱田 幾太郎	東北大学・原子分子材料科学高等研 究機構・助教	1
A02 公	23104502 超高速レーザー分光に よるカーボンナノチュ ーブ・蛋白質複合体の実 時間ダイナミクス	平成 23 年度～ 平成 24 年度	長谷 宗明	筑波大学・数理物質系・准教授	1
A02 公	23104503 高強度パルス光の伝播 を記述するマルチスケ ール・シミュレータの開 発	平成 23 年度～ 平成 24 年度	矢花 一浩	筑波大学・数理物質科学系・教授	1
A02 公	23104504 グラフェン構造を持っ たシリコン平面二次元 格子のエピタキシャル 成長	平成 23 年度～ 平成 24 年度	平山 博之	東京工業大学・総合理工学研究科・ 教授	1
A02 公	23104506 理論計算によるコイル ドコイルを用いた機能 性遷移金属蛋白質の演	平成 23 年度～ 平成 24 年度	鷹野 優	大阪大学・蛋白質研究所・助教	2

	繹的デザイン				
A02 公	23104511 高速ロバストラランダム ウォークの設計に基づ く物質デザイン	平成 23 年度～ 平成 24 年度	小野 廣隆	九州大学・経済学研究院・准教授	1
A02 公	23104512 分割統治法に基づく大 規模電子状態計算法の 確立と分子動力学法へ の応用	平成 23 年度～ 平成 24 年度	下條 冬樹	熊本大学・自然科学研究科・教授	2
A02 公	23104513 量子多成分系分子理論 の深化と物質デザイン への展開	平成 23 年度～ 平成 24 年度	立川 仁典	横浜市立大学・生命ナノシステム科 学研究科・教授	2
A02 公	23104514 ナノ接合での非弾性電 流、局所加熱、熱散逸の 第一原理シミュレーシ ョン	平成 23 年度～ 平成 24 年度	中村 恒夫	業技術総合研究所・研究員	2
A02 公	23104515 超短時間領域における グラフェンの電子・格子 結合ダイナミクスの研 究	平成 23 年度～ 平成 24 年度	北島 正弘	防衛大学校・理工学部応用科学群応 用物理学科・教授	3
A03 公	23104505 シリコン中原子空孔の 量子状態シミュレーシ ョン	平成 23 年度～ 平成 24 年度	斎藤 峯雄	金沢大学・理工研究域・教授	2
A03 公	23104507 自己組織化酸化物ナノ スピントロニクス	平成 23 年度～ 平成 24 年度	田中 秀和	大阪大学・産業科学研究所・教授	1
A03 公	23104508 スピノーダル分解を利用 した新規スピントロ ニクス材料及びデバイ ス応用に関する研究	平成 23 年度～ 平成 24 年度	周 逸凱	大阪大学・産業科学研究所・助教	1
A03 公	23104510 ワニエ関数を軸とする 準粒子自己無撞着法の 新しい展開	平成 23 年度～ 平成 24 年度	小谷 岳生	鳥取大学・工学研究科・教授	2

A01 公	25104701 計算量子科学のニーズ に対応した高性能固有 値計算アルゴリズムの 開発	平成 25 年度～ 平成 26 年度	櫻井 鉄也	筑波大学・システム情報系・教授	3
A01 公	25104718 複合数理解原理による超 大規模超並列電子状態 計算	平成 25 年度～ 平成 26 年度	星 健夫	鳥取大学・工学研究科・准教授	1
A02 公	25104702 光と電子のダイナミク スを記述する第一原理 マルチスケールシミュ レーション法の開発	平成 25 年度～ 平成 26 年度	矢花 一浩	筑波大学・数理物質科学系・教授	1
A02 公	25104705 磁性金属におけるハイ ブリッド密度汎関数理 論の新展開	平成 25 年度～ 平成 26 年度	合田 義弘	東京工業大学・総合理工学研究科・ 准教授	1
A02 公	25104710 金属電極に架橋した単 原子・単分子の電子・熱・ スピン輸送ダイナミク スの解明	平成 25 年度～ 平成 26 年度	木口 学	東京工業大学・理工学研究科・教授	1
A02 公	25104712 グラフェン関連物質の 電子・格子結合ダイナミ クスとナノ空間フォノ ン波束の高感度検	平成 25 年度～ 平成 26 年度	武田 淳	横浜国立大学・工学研究院・教授	3
A02 公	25104716 Si ナノドットの非線形 光学特性変化に対する 動力的解析	平成 25 年度～ 平成 26 年度	重田 育照	筑波大学・数理物質系・教授	3
A02 公	25104717 コイルドコイル内の反 応空間制御による人工 銅蛋白質の機能制御に 向けた理論設計	平成 25 年度～ 平成 26 年度	鷹野 優	大阪大学・蛋白質研究所・助教	2
A02 公	25104722 熱電相関物性の非平衡 量子シミュレーション	平成 25 年度～ 平成 26 年度	山本 貴博	東京理科大学・工学研究科・講師	2

A02 公	25104723 次世代密度汎関数理論を用いた物質デザインシステムの構築	平成 25 年度～ 平成 26 年度	今村 穰	理化学研究所・計算科学研究機構・ 研究員	1
A02 公	25104724 ナノ接合での熱電変換と局所加熱、熱散逸の第一原理シミュレーション	平成 25 年度～ 平成 26 年度	中村 恒夫	産業技術総合研究所・ナノシステム 研究部門・主任研究員	2
A02 公	25104720 自己組織化膜とプラズマの反応解析・制御による自己組織化膜への機能付与	平成 25 年度～ 平成 26 年度	篠原 正典	長崎大学・工学研究科・助教	1
A03 公	25104704 磁性半導体における荷電不純物の同時ドーピングによる特性制御と新規材料の開発	平成 25 年度～ 平成 26 年度	黒田 眞司	筑波大学・数理物質系・教授	4
A03 公	25104708 金属・磁性量子井戸ヘテロ構造における表面プラズモンと磁気光学の融合	平成 25 年度～ 平成 26 年度	松井 裕章	東京大学・工学系研究科・講師	1
A03 公	25104709 非平衡動的平均場理論の展開と低次元強相関系への応用	平成 25 年度～ 平成 26 年度	辻 直人	東京大学・理学系研究科・特任助教	3
A03 公	25104711 電子格子相互作用に起因する電子物性解明と物質設計	平成 25 年度～ 平成 26 年度	是常 隆	理化学研究所・創発物性科学研究セ ンター強相関物理部門計算物質科学 研究チーム・上級研究員	2
A03 公	25104713 グリーン関数法に基づく電子励起ダイナミクス計算コードの開発	平成 25 年度～ 平成 26 年度	大野 かお る	横浜国立大学・工学研究院・教授	1
A03 公	25104714 第一原理手法による遷移金属酸化物人工超格子の大規模計算	平成 25 年度～ 平成 26 年度	石井 史之	金沢大学・理工研究域・准教授	

A03 公	25104721 物質デザインへの展開 のための量子多成分系 分子理論の高度化	平成 25 年度～ 平成 26 年度	立川 仁典	横浜市立大学・生命ナノシステム科 学研究科・教授	2
公募研究 計 34 件					

1. 研究領域の目的及び概要（2ページ程度）

研究領域の研究目的及び全体構想について、応募時に記述した内容を簡潔に記述してください。どのような点が「我が国の学術水準の向上・強化につながる研究領域」であるか、研究の学術的背景（応募領域の着想に至った経緯、応募時までの研究成果を進展させる場合にはその内容等）を中心に記述してください。

【学術的背景と応募領域の重要性】

ナノテクノロジーあるいは省エネルギー・環境テクノロジーが、持続する次世代の社会を牽引すると目されている現在、物性科学は新たなチャレンジを要求されている。それは量子論に立脚した、新しいものづくりのパラダイムの提示である。様々な物質創成技術、ナノ加工技術により、人類は所望の元素を所望の構造に作りこむ技術を得つつある。問題は、どの元素をどのように並べれば所望の物性機能が達成できるか、さらには、その新奇構造体は作成可能であるかである。量子論の第一原理に立脚した計算科学的アプローチは、その科学的土台の深遠さと付随する定量性の故に、この基本的な問題、物質デザイン、に対する本質的貢献を成し得る。

「物質がどのような物性・機能を示すか」は物性科学が従来ターゲットとしてきた問題である。しかし、ナノ世界の到来に伴い前世紀に培われた常識は変更を余儀なくされている。そこでは、元素の特質に加え、ナノスケールの形状が電子状態に大きな影響を与え、バルク物質では封印されていた新機能が出現している。共有結合性、イオン性、電子相関等の競合する因子が、ナノ形状と絡み合い、新たな複合相関現象を生み出している。実際の物質を舞台とするこれら複合因子の相関を、量子論の第一原理に基づき非経験的に解明し、新たな物質設計の強固な方法論的基盤を形成することが不可欠である。

「物質・構造体は作成可能か」は、物質生成・加工のダイナミクスに依存している。外部因子として電磁場による電子励起を考えれば、物質生成は、電子励起のアト秒、原子移動のピコ秒、相形成のナノ秒、マイクロ秒に亘る、マルチ時間スケールの複合相関ダイナミクス現象である。そうした物質生成過程の機構を解明・制御することは、時間軸を制御した新たな物質機能の発現には不可欠の要素である。高い定量性を有する第一原理量子シミュレーションは、実験的にはアクセスしにくい時間・空間スケールでの物理的素過程の本質を解明し、非平衡ダイナミクス解明に大きな貢献を成し得る。

JPARC、Spring-8、SACLAにおいて、次世代中性子、ミュオン、X線源を用いた高度な回折・分光実験が開始されている現在、量子論の第一原理に立脚した計算科学的アプローチは、これら実験的研究結果の強固な理論的支柱を与えると同時に、それと相補的な知見を得ることができ、物性科学および物質デザインでのブレークスルーを生み出す起爆剤となることが期待される。

計算科学的アプローチは、理論・実験に対する第三のアプローチとして、1980年代より着実な進展を示し、とくに密度汎関数理論（DFT）を主軸とする第一原理計算の有用性は、理工学の多くの分野で認知されている。しかし、物質デザインに対して真に有用な手法となるためには、既存の手法の格段の高度化とともに、既存手法の射程を越えた豊かな現象を捉える新手法の開拓が欠かせない。同時に高速スーパーコンピュータの開発も重要な要素であり、これについては我が国では、2012年に理論最高性能10ペタフロップスのスーパーコンピュータ「京」が神戸において共用を開始した。

しかしながら、スーパーコンピュータの発展は、計算科学の新たな展開を要求している。電子デバイス開発におけるスケーリング則の崩壊に伴い、単一演算ノードの性能は飽和しており、現在および将来の高性能スーパーコンピュータは超並列アーキテクチャとならざるを得ない。実際、「京」では64万演算コアの超並列アーキテクチャが採用されている。こうした超並列機においては、これまで開発されてきたプログラム群は殆ど有効に働かず、理論最高性能の数%以下の実効性能しか望めない場合が多い。計算機アーキテクチャを十分に理解した、新しい数値計算アルゴリズムの導入、ノード間、コア間並列プログラムの開発・高度化が必須の要件となり、ここ四半世紀の計算科学で行われてきた、計算科学（computational science）分野と計算機科学（computer science）分野での互いに独立な研究開発は、高性能コンピュータの利活用という観点からは、殆ど意味を持たない。さらに次世代エキサフロップス・スーパーコンピュータにおいては、汎用ノードとともに、新たなハードウェアを用いた特殊用途計算エンジンが導入されると予想され、高性能コンピューティング（HPC）は多重階層性を持つことになる。

こうした状況においては、計算科学と計算機科学を統合し、さらには数理科学の知見を縦横に駆使した、新しいアプローチが必要である。我々はこのアプローチをコンピューティクス（Computics）とよび、本領域を5年前に立ち上げた。第三のアプローチとして始まった計算科学は、今、HPCの質的变化に伴い、新たなフェーズに突入している。自然の謎を解き明かし、新たな物質科学の地平を切り開くには、Newtonのプリンキピア以来、はかり知れない貢献を成してきたマセマティクス（Mathematics）に加え、実際の物質での現象を解明・予測し、実験的研究と相補的に共同する、新たな学術分野、コンピューティクスの創成と確立が不可欠である。

【我が国の学術水準の向上・強化につながる本研究領域】

以上を背景に、本学術領域研究では以下を目標とした。

(1) 次世代、次々世代 HPC におけるコンピューティクスの確立：次世代超並列アーキテクチャ、次々世

代多重階層アーキテクチャ、さらには下方展開として整備されていく各研究機関での計算機アーキテクチャを踏まえ、(2)以下の実際の物性科学の諸問題における新数値解法の導入、最適アルゴリズム探索、プログラム高度化を通じ、コンピューティクスを確立する。

(2) ナノスケール構造体での複合相関と非平衡ダイナミクスの解明・予測：密度汎関数理論を主軸とした先端的大規模ダイナミクス計算、非調和項を考慮した統計的サンプリング法、非平衡グリーン関数法などの手法を開拓し、並列アーキテクチャ上で高度化することにより、ナノ構造体の生成機構解明、ナノ界面安定性探索、電子構造・熱輸送・熱電現象解明、過渡的デバイス応答機構解明を行い、ナノ構造体作成可能性とその構造体の機能を明らかにする。

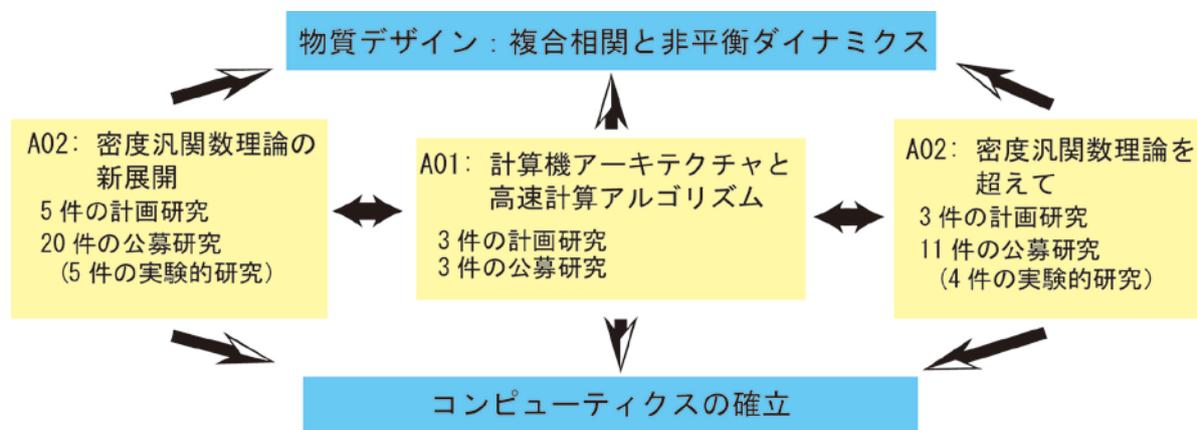
(3) 強相関電子系の物性解明と新量子相の予測：密度汎関数理論とそれを超える計算手法、エネルギーの階層性に着目したダウンフォールディング法、グリーン関数法などを並列アーキテクチャ上で高度化し、強相関系物質の複合相関性、非平衡系の強相関性を第一原理から定量的に解明し、新機能を有する物質群の予測を行う。電子の相転移が生み出す超高速現象に着目し、時間分解光電子分光などの実験的研究の理論的基盤を形成する。

(4) 超伝導転移温度の定量的計算と予測：電子・格子相互作用、電子・電子相互作用を統一的に記述する超伝導理論を構築し、次世代スーパーコンピュータ上での、高効率計算コードを開発し、高い超伝導転移温度を示す物質群を、実験研究者との共同により探索する。

(5) 蛋白質における反応機構のマイクロな同定と非平衡ダイナミクスの解明：生体を温度、圧力、濃度ゆらぎの下での、非平衡反応系と捉え、量子論に立脚した原子スケールでの反応機構解明を行う。同時に高次の電子相関効果であるファン・デル・ワールス力の第一原理による記述を可能にする計算手法を確立する。

以上の目的のために、下図に示すように、領域内に3つの研究項目、A01「計算機アーキテクチャと高速計算アルゴリズム」、A02「密度汎関数理論の新展開」、A03「密度汎関数理論を超えて」が設定された。A02においては、密度汎関数理論の深化と動的手法の結合により、ナノ・バイオ系での複合相関と物質生成・輸送ダイナミクスの解明・予測を行い、A03では、第一原理に立脚した量子多体手法の確立と、それによる強相関系でのダイナミカル励起現象の解明・予測と新超伝導体探索を進めた。A01は、高性能計算(HPC)を、基礎数理学、アルゴリズム、およびソフト・ハードウェアの立場から支え、物質研究進展のためのコンピューティクス・エンジンを担っている。3つの研究項目間では、以下に報告するように、face-to-faceの共同研究が行われた。平成23年度からは第一期の公募研究(全15件)、平成25年度からは第二期の公募研究(全19件)が、それぞれの研究項目で遂行され、計算と計算機、計算と実験の連携研究が行われた。

本新学術領域は、計算科学、計算機工学、数理科学、実験科学の研究者が有機的な共同を行う場を形成するものであり、「異なる学問分野の研究者が連携して領域の発展を目指すもの」に相当している。また、コンピューティクスによる物質デザインは、物質科学全体への貢献も大であるとともに、応用各分野、エレクトロニクス、半導体産業へのインパクトも大であり、「当該領域の研究の発展が大きな波及効果をもたらすもの」にも相当している。さらに、本新学術領域では、第三のアプローチとして登場した計算科学を、他分野との融合により質的に進化させ、コンピューティクスという新しいアプローチを確立し、複合相関と非平衡ダイナミクスに焦点を当て、真に有用な物質デザインの展開を図るものであり、経験的ものづくりを演繹的なそれへと進化させる挑戦である。物性・物質科学の発展に資することは大である。



2. 研究領域の設定目的の達成度（3 ページ程度）

研究期間内に何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか、また、応募時に研究領域として設定した研究の対象に照らしての達成度合いについて、具体的に記載してください。必要に応じ、公募研究を含めた研究項目ごとの状況も記述してください。

【研究項目間の共同とコンピューティクスの確立】

物質を舞台とする複合相関と非平衡ダイナミクスの解明・予測のためには、「空間」、「時間」、「精度」の3つの軸での先端物質科学計算、すなわち、大規模、長時間、高精度のシミュレーションが重要である。本領域では、この先端的計算をコンピューティクスの確立によって達成しようとした。総括班によって随時開催されている、両分野のトピックスを議論しあう「コンピューティクス勉強会」（世話人：A01 稲葉班、A02 渡邊班、常行班）では、計算科学側（A02、A03 研究項目）とコンピュータ科学側（A01 研究項目）双方から課題を提示し、face-to-face の議論により問題解決を目指した。実際そうした議論により、A01 で展開されている HPC におけるアルゴリズムと数理手法が物質側に伝授され、A02、A03 の多くのアプリケーションは格段に高度化されてきた。その先陣が RSDFT(Real Space Density Functional Theory)コードである。A01 高橋班と A02 押山班の緊密な共同により、計算負荷の大きい部分（グラム・シュミット直交化、部分空間対角化）に、マルチコア超並列アーキテクチャに最適な数理手法とアルゴリズムが導入され、高度なハイブリッド並列チューニングが行われた。「京」コンピュータ上でのナノメートルスケールの Si ナノワイヤー密度汎関数法電子状態計算は、その規模の大きさと実行効率の高さで世界中を驚かせ、2011 年度の ACM/IEEE の Gordon Bell 賞（最高性能賞）を獲得した。輸送モデルとの結合により、図 1 にあるように、チャンネル電流密度のワイヤー形状とゲート電圧依存性が明らかとなった。現在、A02 渡邊班との共同で、より精緻な非平衡グリーン関数輸送シミュレーション手法との結合が行われている。

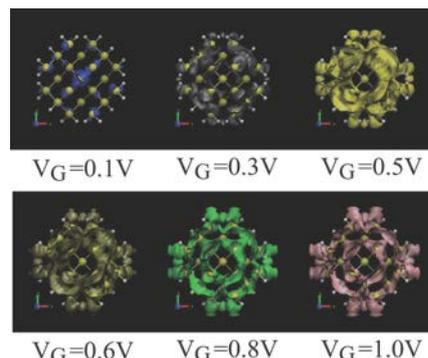


図 1: RSDFT 電子状態計算と電流輸送のコンパクトモデルによって得られた Si ナノワイヤートランジスタ中を流れる電流密度のゲート電圧依存性

こうした異分野間の共同は、研究期間内に大いに進展した。A01 張班と A02 渡邊班の間では、非平衡グリーン関数輸送計算において、新たな数理手法（Shifted Conjugate-Orthogonal Conjugate-Gradient 法）が導入され、現行に比べて 22 倍の高速化が達成された。これにより、多数の入射エネルギーのサンプリングが可能となり、ナノ構造における急激なコンダクタンス変調が明らかとなった。また、A01 公募班として加わった物質計算側の星班では、張班との緊密な共同により、クリロフ部分空間法を機軸とする革新的な線形代数アルゴリズムを導入し、強束縛型モデルではあるが、一億原子群の大規模電子状態計算を可能にしている（ELSESE コード）。これにより、アモルファス状高分子有機 EL(poly-(9,9)-dioctyl fluorine)系でデバイス性能を支配する π 電子系の局在性が明らかとなった。また、A01 高橋班、櫻井班で提唱された、領域選択固有値計算アルゴリズムは、フェルミ準位付近のエネルギースペクトルが重要であるという物性科学の特徴にフィットし、現在では A02、A03 の多くの班のアプリケーションに採用され、従来は計算不可能であった大規模系のエネルギースペクトル解析に活用されている。

また、A02 における密度汎関数法は、A03 のダウンフォールディング法、超伝導転移温度計算、マテリアルデザインの基盤を形成し、逆に A03 における多体系に対するより高度な解法の、実際の物質での高精度計算への応用が、A02 で開始されている。

こうしたコンピューティクス・アプローチの重要性は、本新学術領域研究が開始される以前には、殆ど認識されていなかったといえるが、現在では物質科学分野以外の各分野へも広がり、エクサスケール・コンピュータ開発におけるコデザイン（アプリケーションとハードウェア双方の視点からのコンピュータ・アーキテクチャの設計）活動へと結びついている。

コンピューティクス・アプローチによって高度化されたアプリケーションを公開し、より広範なユーザーに対して提供することも重要と考えている。本新学術領域では、A02 中西班、A03 佐藤班の大阪大学グループを中心に、人材育成の目的で CMD(コンピューテーショナル・マテリアルズ・デザイン)ワークショップ（本新学術領域研究期間内に 10 回開催）、またアジアでの人材育成の目的で Asia CMD Workshop（研究期間内にアジア各地で 15 回開催）が行われ、第一原理計算手法の普及に努めている。また、文部科学省「HPCI 戦略プログラム」分野 2 計算物質科学イニシアティブとも連携し、MateriApps ポータルサイト(<http://ma.cms-initiative.jp/ja>)でのプログラム公開を行っている。実際こうしたワークショップに実験研究者も参加し、後述するように、計算と実験の共同研究も進んだ。

また、この新学術領域での研究活動を契機とした異分野間の人事交流も起きており、項目 10 に記載するように、物質科学分野の研究者が、情報分野の准教授として着任する事例も起きている。コンピュー

ティクスという新たな学問分野が、徐々にではあるが、市民権を得つつある証左と云えよう。

【計算と実験の共同】

計算と実験の共同研究により、現象の本質と定量的側面を明らかにすることは、本新学術領域研究の重要な側面である。11 件の計画研究には、研究分担者あるいは連携研究者として実験家も加わっている。また公募研究には 10 件の実験的研究班も加わり、計算と実験との間の有意義な共同研究が展開された。A02 中西班では、阪大中西グループと東大福谷グループの間で、触媒表面である Pt 面上での水素反応に関して、計算と実験との間での緊密な共同研究が行われた。A02 倭班では、時間分解 X 線結晶解析 (KEK 足立グループ) と分子シミュレーション (名大倭グループ) の比較により、酸素貯蔵蛋白であるミオグロビン内部でのガス分子移動機構が解明された。また、A02 中村班による、ナノ接合での分子構造を考慮した電流応答計算は、A02 木口班のオリゴチオフエン分子を用いた単分子スイッチングの成功に結び付いた (図 2)。A03 今田班では、光電子分光実験との共同で強相関物質の電子状態を解明している。A03 佐藤班の提唱するスピノダル分解、同時ドーピングを利用した半導体成膜技術は、A03 周班、田中班、黒田班の成長実験によって、その有効性が確かめられた。さらには、A02 押山班と A02 平山班でのシリセン (silicene: グラフェン状の Si 膜) に対する計算と実験の相補的研究など、多くの班で建設的な連携が行われた。

また領域を超えた計算と実験との共同も進んだ。物性科学関係の新学術領域研究は合同研究会を毎年開催しているが (本領域が世話人として行った 2013 年度のホームページは <http://www.topological-qp.jp/ryoikioudan2014/>)、その研究会を契機として、A02 中西班が開発したプロトン・ミュオンの量子性を考慮したダイナミクス計算 (コード名: Naniwa) が、「超低速ミュオン顕微鏡が拓く物質・生命・素粒子科学のフロンティア: 鳥養映子代表」新学術領域の、山梨大学および KEK の実験研究者によって行われた。具体的には、上記 CMD ワークショップに若手実験家が参加し、Naniwa コードによる計算と自らの実験結果とを比較し、酸化ケイ素、グラフェン、チトクローム c 膜蛋白などでのミュオン状態の解明を行い、共著論文、招待講演という成果に結びついている。

以下、各研究項目における研究体制と、設定した研究対象に照らしての達成度合いを記す。

【A01: 計算機アーキテクチャと高速計算アルゴリズム】

A01 研究項目では、3 件の計画研究と 3 件の公募研究が行われた。物質科学計算における数理手法とアルゴリズムの開拓の側面では大きな進展があった。物質科学計算で頻りに登場する線型方程式に対する、新たなクリロフ部分空間解法が開発され、従来法に比べて数十倍の高速化が確認された (張班)。これは一億次元の行列に適用され、上述の高分子電子状態計算に適用された (星班)。また A02 渡邊班での輸送計算にも応用された。HPC を支える基本ライブラリの高度化も行われ、FFT (Fast Fourier Transform)、BLAS (Basic Linear Algebra Subprograms)、大規模固有値解法などが、マルチコア超並列アーキテクチャおよび加速ハードウェアである GP-GPU 上で最適化された (高橋班)。京コンピュータ上での最適化 FFT プログラムは、SC11 での京コンピュータの HPC Challenge Award 獲得に貢献している。複素関数論の留数定理を用いた、新たな選択的固有値解法、櫻井・杉浦法、は大規模系のエネルギースペクトル解析に道を拓いたといえる (櫻井班)。一方、消費電力の低減が至上課題である次世代のコンピュータ・アーキテクチャの候補について、系統的な計測が行われ、最適解は組み込み用プロセッサではなく、コアあたりの演算性能が最も高いプロセッサであることが示された (稲葉班)。また、FPGA (Field Programmable Gate Array) ベースのアクセラレータの開発、HPC Ruby 言語の最適化が成された (稲葉班)。

【A02: 密度汎関数理論の新展開】

A02 研究項目では、5 件の計画研究と 20 件の公募研究が組織され研究活動が遂行された。ナノスケール構造体での複合相関と非平衡ダイナミクスの解明・予測の側面では、計画研究において、Si ナノ構造、炭素ナノ構造、表面触媒系を中心に、多岐に亘る構造最適化・電子状態計算が実行された (押山班、中西班)。また、ナノ構造における交流応答計算、第一原理コンダクタンス・電気伝導計算 (渡邊班)、さらにはプロトン・ミュオン・ダイナミクス計算 (中西班) が実行された。Car-Parrinello 分子動力学法などの第一原理分子動力学法計算も多くの系で実行され (押山班)、原子拡散、酸化反応、ナノ構造生成反応などにおける、反応経路と対応する自由エネルギー障壁が求められた。一方、熱伝導計算において、第一原

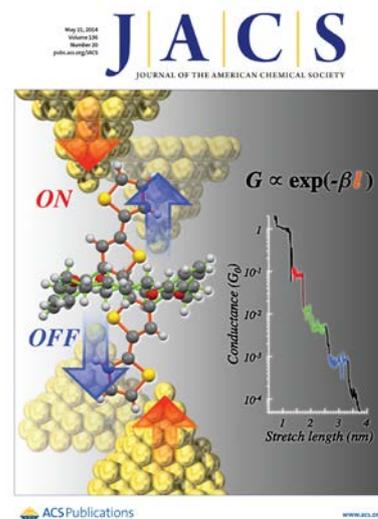


図 2: オリゴチオフエン分子を用いた単分子スイッチ。電極に対する分子の配向を変化させ、伝導度を可逆的にスイッチさせることに成功。

理分子動力学法と古典分子動力学法を巧みに組み合わせ、非調和振動を正しく取り入れることのできる新たな手法開発も行われ、様々な物質や温度での熱伝導率を定量的に計算することに成功した（常行班）。

また計画研究と相補的な活動が公募研究において行われた。時間依存密度汎関数理論(TDDFT)と電磁場のマックスウェル方程式を結合させた、新たな第一原理手法が開発され、レーザーアブレーションなどのナノ加工科学への応用が成された（矢花班）。HPCの側面では、このTDDFT法は、実空間・実時間手法であり、RSDFTと同様に、今日のコンピュータ・アーキテクチャに最適の手法である。さらに、非断熱的分子動力学計算の試み（下條班）、多種類フェルミオン系（電子・陽電子、電子・プロトン・ミュオン）に対するDFT手法の開発とその応用（立川班）も行われ、より広い現象を計算物質科学のターゲットとすることに寄与した。一方、グラフェンなどに象徴されるような低次元系の重要性が高まっている状況で、ファン・デル・ワールス(vdW)力の密度汎関数法による記述は重要な課題である。濱田班では、DFTにおける交換相関エネルギー汎関数を改良し、さらに高速アルゴリズムを開発して、VdW力の記述に成功した。この汎関数は、A02、A03での計算に活用され、また海外の第一原理計算パッケージ(Quantum-ESPRESSO、SIESTA)にも実装された。この交換相関エネルギー汎関数の改良はDFTでの中心的課題のひとつであり、本領域でも精力的に研究された（今村班、合田班等）。また炭素ナノチューブの集合体のモルフォロジーを工夫する（ペーパー化）ことによって熱伝導率を低下させ、熱電素子の開発を行うというユニークな研究も行われ、計算と実験により、実際室温における発電を確認した（山本班）。

上述の大規模DFT計算の例としては、積層振じれを有する二層グラフェン（twisted bilayer graphene: TBLG）の電子状態の解明があげられる（押山班）。層状物質グラファイトは、所謂Bernal Stacking (AB stacking)を示すが、二層グラフェンの積層構造は様々な形態を示すことが、実験的に知られている。グラフェンの層間相互作用は層内の共有結合エネルギーに比べて格段に小さいが、その対称性の破壊により、大きな電子物性の改変を引き起こす可能性がある。積層振じれ角 θ が小さい場合、超周期の存在するコメンシュレート系に限っても、その一超周期内に存在する原子の数は、数万を越え、本新学術領域で開発した大規模計算スキーム無しには、アクセス不能な領域である。図3は、そうしたTBLGのフェルミ準位の電子速度（Dirac速度）を θ の関数として求めたものである。積層の微小振じれによりモアレ干渉縞が発生し、その干渉縞に電子波が捉えられ、Dirac電子の局在化が生じることがわかった。

蛋白質における反応機構のミクロな同定と非平衡ダイナミクスの解明の側面では、時間分解X線結晶解析と分子シミュレーションを相補的に組み合わせた手法を開発し、ミオグロビンに適用し、ガス分子をタンパク質分子内に配置するのに要する平均的なエネルギー（Potential of Mean Force）の3次元マップを求めることに成功し、ガス分子移動機構を明らかにした（倭班）。また蛋白質内遷移金属原子活性中心を介した電子移動の機構（鷹野班）、蛋白質内イオン移動機構（重田班、押山班）などがDFT計算によって調べられ、バイオ科学への貢献も成された。

【A03: 密度汎関数理論を越えて】

A03研究項目では、3件の計画研究と11件の公募研究が組織され研究活動が遂行された。強相関電子系の物性解明と新量子相の予測の側面では、エネルギーの階層性に着目したダウンフォールディング手法(MACE: Multi-scale Ab initio scheme for Correlated Electrons)の開発と応用が大きく進展した（今田班）。低次元物質系に適用可能なダウンフォールディング法の開発、低エネルギー有効モデルソルバーの電子格子相互作用、スピン軌道相互作用を考慮した高度化などが行われ、多岐に亘る物質群に適用された。鉄系超伝導体の母物質での磁気的秩序の解明と予測、イリジウム酸化物でのトポロジカル相の解析と予言、などが代表的成果である。図4は、鉄系超伝導体LAF₂FeAsOの相図をMACEの手法によって

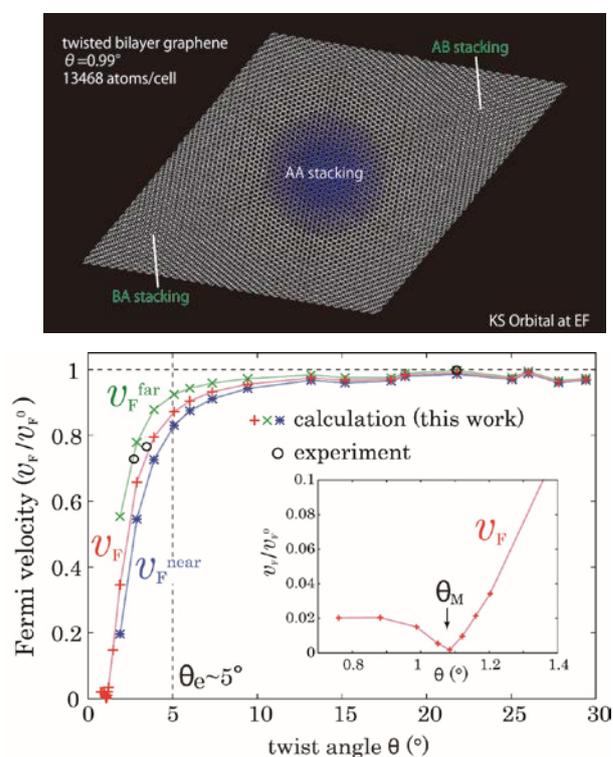


図3: 積層が互いに振れた二層グラフェン（上図）のフェルミ準位の電子状態（Dirac電子）での速度の振れ角 θ に対する依存性。 v_F^0 は単層グラフェンのDirac電子速度。振れ角を小さくしていくと、ある臨界角から急激にフェルミ速度が0に近づく。

明らかにしたものである。超伝導になる前の母物質での磁気秩序の物質依存性が定量的に再現され、さらに電子をドーピングすることによって、反強磁性秩序が消えて1次転移を起こし、超伝導が生じるという実験結果を正しく再現することに成功した。超伝導を特徴付けるクーパー対は多くの実験が示唆する s_{\pm} と呼ばれる対称性を持つことを明らかにし、実験ではまだ十分に理解されていないが、特定の鉄の 3d 軌道のうちの特定の軌道が磁性と超伝導の両方の発現に主要に寄与していること、磁性、超伝導ともこの軌道の持つモット物理の性格に支配されていることが明らかとなった。

また、密度汎関数法による希土類磁石化合物計算が実行され、 NdFe_{12}N が $\text{NdFe}_{11}\text{TiN}$ よりもよい磁気特性をもつことが予測され（今田班）、これは後に、物質材料研究機構の元素戦略プロジェクトで実証された。

多体電子系の基礎理論の発展の側面では、電子ガス中の一陽子系の問題が、密度汎関数法および、多体シュレディンガー方程式を直接解く、拡散量子モンテカルロ(DMC)法により調べられ、誘電電荷共鳴と近藤スピン共鳴の競合系であることが明らかにされ、常圧下での水素合金の高温超伝導の可能性が示された（高田班）。また三体系でのファン・デア・ワールス力の性質が、拡散量子モンテカルロ法により調べられ、力の非加算性が量子論に基づいて明らかとなった。

無限次元摂動展開も多体系の電子状態解明に有用であるが、自己無撞着 GW 近似さらには GW² 近似の手法開発が行われ（高田班、大野班、小谷班）、有機導体 $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ の実験スペクトルを精度よく再現した。また、非平衡での電子相関を扱う手法開発も進んだ（辻班）。

超伝導転移温度の定量的計算と予測の側面では、固体ホウ素、黒鉛層間化合物 BaC_6 、酸化物 SrTiO_3 などの転移温度が、第一原理計算とモデル計算によって調べられ、実験をよく説明することがわかった（高田班）。また近年、密度汎関数理論による超伝導転移温度計算のスキームが開発されているが、これを C_{60} 超伝導体に適用したところ、実験の転移温度と有為な差があることがわかった。そこで MACE を用いたダウンフォールディング法により、電子格子相互作用、電子電子相互作用の双方を考慮した低エネルギー有効モデルを導き転移温度を求めると、実験をよく再現することがわかった（今田班）。

スピントロニクス材料の探索の側面では、密度汎関数理論に立脚したコヒーレント・ポテンシャル法計算により、磁性半導体への同時ドーピングを行うと、固溶限界を超えた磁性不純物の導入が可能であることが示された（佐藤班）。また磁性元素を含まない MgO 半導体での Mg 空孔あるいは N 不純物による磁性発現 (d^0 磁性) の予測も行われた（佐藤班）。金属系スピントロニクス材料の物質デザインでは、上述の VdW 交換相関エネルギー汎関数が活用され、薄膜接合における電圧印加による磁気異方性の制御の可能性が探索された（佐藤班）。これは同班における磁気光学カー効果によって実証されている。

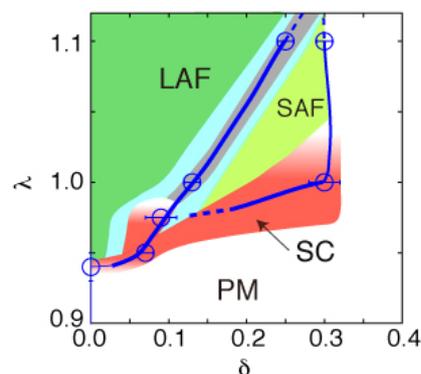


図 4: 鉄系超伝導体 LaFeAsO の相図。ドーピング量 δ 、相互作用強さ λ の空間で、超伝導相 (SC)、反強磁性相 (AF)、常磁性相 (PM) が隣接している。

3. 研究領域の研究推進時の問題点と当時の対応状況（1 ページ程度）

研究推進時に問題が生じた場合には、その問題点とそれを解決するために講じた対応策等について具体的に記述してください。また、組織変更を行った場合は、変更による効果についても記述してください。

本新学術領域の大きな目的は、コンピューティクスという新しい学術分野の確立である。そのためには、A01 研究項目と A02 および A03 研究項目の緊密な連携が欠かせない。中間評価の時点では、RSDFT コードを用いた、Si ナノワイヤー電界効果トランジスタ電子状態計算による Gordon Bell 賞受賞という快挙はあったものの、コンピューティクスの確立という水準には至っていなかった。しかし、その後の総括班主催による「コンピューティクス勉強会」では、電子状態計算に加えて輸送計算、拡散モンテカルロ計算のアルゴリズム検討、加速装置 GP-GPU の活用法、複数の固有値ソルバーの開発状況説明とその活用、今後のコンピュータ・アーキテクチャの動向、などの多岐に亘るトピックスについての、face-to-face の議論が行われ、コンピューティクス確立に大きな貢献をした。また、2012 年大阪、2014 年東京の 2 度に亘って、本新学術領域が開催した International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design における、国内外の研究者の親密な議論も有益であった (<http://computics-material.jp/ISC-QSD2014/>、<http://computics-material.jp/ISC-QSD2012/>)。さらには平成 25 年度からの第二期の公募研究において、よりコンピューティクスに重点を置く研究課題の採択ができたことも重要であった。

現時点での、具体的な融合研究の成果としては、1) 新アルゴリズム開発による RSDFT コードの大規模高速化、2) 密度行列最適化 DFT 計算（コード名：CONQUEST）と櫻井・杉浦固有値ソルバーの結合による大規模構造最適化・電子状態計算の実現、3) 非平衡グリーン関数輸送計算（コード名：RSPACE）でのクリロフ部分空間法による 22 倍の高速化、4) 同じくクリロフ法による巨大次元線形方程式解法の確立と、それによる強束縛モデル一億原子系電子状態計算実行、などがあげられる。

さらに他の研究プロジェクトとの連携も重要であった。「京」コンピュータの利活用を目指した、文部科学省高性能汎用計算機高度利用事業「HPCI 戦略プログラム：分野 2 新物質・エネルギー創成」を担当する「計算物質科学イニシャティブ（CMSI）」の研究開発活動は、平成 22 年～27 年に亘って展開されたが、本新学術領域研究のメンバーの多くはこの HPCI 戦略プログラムに参画し、より“出口を明らかにする”スタンスで開発活動を重ねた。本新学術領域研究は、その意味で、HPCI 戦略プログラムの基礎部分を担い、コンピューティクス・アプローチの有用性を実証したと云える。さらに、このアプローチは、今年度から準備研究が開始された文部科学省『ポスト「京」重点課題アプリケーション開発』プロジェクトに引き継がれ、またそれを裏打ちする、エクサスケール・コンピュータ開発を目指した「フラッグシップ 2020」プロジェクトにおけるコデザインへと結びついたことは上述のとおりである。

物質科学における計算と実験の連携も欠くことのできない重要な要素である。中間評価の時点でも、いくつかの共同研究が行われ、共著論文などの成果が得られていた。しかし、プロジェクト開始時はどうしても計算手法の開発、マルチコア超並列アーキテクチャへの対応に重点が置かれており、そのこと自体は、本新学術領域研究の性格上、致し方のないことであった。プロジェクト後半においては、チュートリアルなワークショップの開催、領域横断研究会の開催、また、より応用指向の強い公募研究の開始などで、計算と実験の連携は大いに進んだ。とくに、A02 中村班、木口班の両公募研究における、単分子スイッチングの達成という計算と実験の共同研究の成果は、アメリカ化学会の Journal of the American Chemical Society の表紙を飾っている。また、前述したように、他の新学術領域「超低速ミュオン顕微鏡が拓く物質・生命・素粒子科学のフロンティア」参加の実験研究者が、A02 中班開発の量子論ダイナミクス計算 Naniwa コードを用い、自らのミュオン実験データの解析を行い、論文発表、招待講演を行ったことは、今後の物質科学分野を超えたコンピューティクス・アプローチの広がりを期待させる。

4. 審査結果の所見及び中間評価で指摘を受けた事項への対応状況（2 ページ程度）

審査結果の所見及び中間評価において指摘を受けた事項があった場合には、当該コメント及びそれへの対応策等を記述してください。

＜審査結果の所見において指摘を受けた事項への対応状況＞

採択時の審査結果の所見においては、『本研究領域は、計算物質科学と計算機科学の連携により、抜本的アルゴリズムの改良や超並列計算に対応するプログラミング開発を行い、精緻な物質機能予測手法の確立を目指すものである。ハードウェアの発展に即した数理手法の開発を、複合相関と非平衡ダイナミクスという明確な問題設定のもと推進することで、従来の計算物理学の枠組みを超えた「コンピューティクス」と言うべき新しい学術分野の構築が期待される。建設中のスーパーコンピュータの戦略的活用法としても重要な意義を持つ、まさに時宜を得た研究領域の提案であり、今後の画期的な進展が期待される。実験研究者との緊密な連携は極めて重要であるが、実質的な連携の成果が上がるための、具体的方策を考える必要がある。単なる研究費のばらまきにならぬよう、必要なトピックスの選定方法や計算からのメッセージをなるべく多くの実験研究者に共有してもらうためのネットワーク構築など、運営上の工夫が必要である』、とのご指摘を受けた。

計算と実験との連携は物質科学において極めて重要であることは、もとより我々も認識していた点であった。そのため、初年度の研究体制では、物質科学分野 A02、A03 研究項目の 8 件の計画研究班のうち 7 件において、実験研究者を分担研究者あるいは連携研究者として加えた。これは具体的な研究ターゲットを可能なかぎり揃えるという意図であった。詳しくは、押山班での層状シリセン、渡邊班でのナノ接合、中西班での金属表面上水素、倭班での計算・実験融合アプローチ構築、今田班での強相関電子系の分光、高田班での超伝導物質探索、佐藤班でのスピントロニクス材料成長、という具体的なターゲットを念頭に置いた。さらに次年度には、これら実験研究者の一部は本領域での公募研究を開始し、予算の裏打ちのある連携が行われた。超並列アーキテクチャ上でのアルゴリズム改良、プログラム開発という時間を取られる開発活動にも関わらず、早期からある程度の連携の成果が出てきたことに結びついていると考えている。

＜中間評価で指摘を受けた事項への対応状況＞

中間評価の総合所見では、『本研究領域は、計算科学と計算機科学の融合により、従来の枠を打ち破った「コンピューティクス」という新しい学術領域を確立し、物質デザインの根幹にある複合相関と非平衡ダイナミクスの解明・予測を行うことを目指している。高性能コンピュータ技術の進展に呼応した時宜を得た領域設定であり、計算機の能力の向上を物質科学の進展に結びつけて大きな展開を図りつつある。物性研究のための計算科学的研究手法の開発、その共有化、応用に対して多数の重要な成果が得られており、「コンピューティクス」という新規な分野の確立に向けて順調に推進している。領域内の共同研究も有機的で、実験との連携も必要に応じて検討されているが、今後は領域内にとらわれず、実験研究グループとの共同研究を積極的に推進することも、他領域への波及効果を高める上でも必要と思われる。若手の人材育成と新しい方向性の取組も含め、今後の更なる拡がりに期待する』、とのご指摘を受けた。

これは審査結果の所見とも通じるものがあり、より広範な領域での計算と実験の連携を推奨いただいたものと考えている。これの対応としては、すでに述べたように、物性科学関係の新学術領域研究の合同研究会の開催などにより連携の機会を模索した。また本新学術領域主催のシンポジウムなどにより成果の発信に努めた。その成果として、新学術領域「超低速ミュオン顕微鏡が拓く物質・生命・素粒子科学のフロンティア」参加の山梨大学および高エネルギー加速器研究機構の実験研究者が、A02 中西班開発 Naniwa コードによる計算と実験データの解析により、物質中でのミュオンの量子性を定量的に明らかにしたことは、コンピューティクス・アプローチの科学他分野への有用性を示した点で特筆に価する。今後の展開として、JPARC、SACL A などの巨大実験施設の研究活動との連携、各科学研究分野における重要課題に対する、実験アプローチとコンピューティクス・アプローチの共同プロジェクトなどが期待される。

若手の人材育成の側面においては、「コンピューティクス勉強会」、「CMD ワークショップ」などを通じ、コンピューティクス・アプローチの重要性を強調した。また、文部科学省「HPCI 戦略プログラム」分野 2 計算物質科学イニシヤティブ (CMSI) とも連携し、「計算科学技術特論」などの講義を東京大学、大阪大学を拠点としてネットワーク配信した。後述の項目 10 にあるように、本新学術領域研究に従事した多くの若手研究者が、その後のキャリアパスを実現していることは喜ばしい。特筆すべき例として、A02 常行班の研究分担者であった物質科学分野の研究者が、コンピュータ科学専攻情報科学科の教員 (東京大学) として着任したことがあげられる。コンピューティクス分野を担う若手のさらなる成長を期待したい。

中間評価の (b) 研究成果の項目では、『「異なる学術分野の研究者が連携して行う共同研究等の推進により、当該研究領域の発展を目指すもの」としては、計算機技術と計算科学及び物性科学の連携による共同研究が進展しつつあり、物質科学に大きく寄与しうる高水準の成果が出ている。特に「京」を用いた成果など、大きな成果が一部現れ始めており、「当該領域の研究の発展が他の研究領域の研究の発展に大きな波及

効果をもたらすもの』としても物性科学のみならず一般への大きな波及効果をもたらしており、高く評価できる。但し、計画研究A02及びA03の多岐にわたる研究成果の多くは優れているものの、一部を除いてはまだ個別的な研究段階と見受けられる。今後、更に広い分野連携を通じて、本研究領域の活動の真価を示すことを期待する』、とのご指摘を受けた。

本新学術領域での成果の発信および関連分野との連携をはかる目的で、2度の国際シンポジウム (International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design, 2012年大阪大学、2014年東京大学) を主催し、また4回の物性科学領域横断研究会 (2011年東北大学、2012年東京大学、2013年東京大学、2014年大阪大学) を共催した。コンピューティクスという学術分野の認知度は高まったと考えている。また領域内A02、A03の研究項目の連携という観点からは、各班が有するアプリケーション・プログラムの活用が進んでいる。例えば、A03今田班でのダウンフォールディング手法には、A02押山班、常行班で開発された密度汎関数法コードによる大域的エネルギー帯計算が欠かせない。一方A03高田班での拡散量子モンテカルロ計算による相関エネルギーのデータから、密度汎関数理論における交換相関エネルギー汎関数の新たな形を開発する試みも行われた。そうした複合的なアプローチによる成果の一例としては、アルカリドーブC₆₀超伝導体の転移温度の計算があげられる。まず最初に、超伝導密度汎関数理論による電子格子相互作用を考慮した転移温度の第一原理計算と実験との詳細な比較により、電子相関の役割が明確化された。次にダウンフォールディング法による低エネルギーモデルが導出され、電子格子相互作用および電子相関の双方を考慮すると、転移温度が実験と定量的に一致することが示された。個別のアプリケーション・プログラムだけでなく、いろいろな手法を総合的に活用していくことが、今後ますます重要になると思われる。その方向の活動として、現在、押山班のRSDFTコードと渡邊班のNEGF (非平衡輸送グリーン関数) 法との統合プログラムが開発中である。これは将来的には、量子論に基づく半導体デバイスシミュレータの開発につながるものである。

中間評価の(e)今後の研究領域の推進方策の項目では、『本研究領域では、これまでも計算だけでなく実験を取り入れる努力はなされてきているが、まだ十分にその成果が現れていないと思われる。引き続き共同研究、連携研究を推進するとともに、今後、計算新手法など他の計算科学分野の発展にも資するように、他研究領域への成果の発信及び交流も望まれる。「京」の戦略分野を含めた様々な計算科学への波及、他分野 (地球、宇宙、生命等) との連携、協力など、更に広い分野連携を視野に入れた取組が行われることを期待したい』、とのご指摘を受けた。

実験との連携の側面では、中間評価以後、大きな進展が見られた。上述した、単分子接合でのスイッチング機能発見、物質中ミュオンの量子性解明などの他にも、実験と計算の共同研究が領域内および領域間で行われ大きな成果が得られた (5 主な研究成果参照)。他研究領域への成果の発信及び交流は、物性科学領域横断研究会などの機会を捉えて行われ、実際いくつかの共同研究へと結びついた。また「京」の戦略分野2計算物質科学イニシャティブ (CMSI) とは緊密な連携が行われ、計算手法の開発、HPC技術の共有化など、多くの実りある結果が得られた。戦略他分野 (地球、宇宙、生命等) とは、研究会等を通じた情報交換のレベルにとどまっており、計算手法に関する共同研究は行われなかった。しかし、本新学術領域のA01班の研究者は戦略他分野にも加わっており、それを通じた情報の共有は成されている。さらに今年度から準備研究が開始された、文部科学省「ポスト「京」重点課題アプリケーション開発」プログラムにおいては、本新学術領域研究の主要メンバーが、「重点課題(7)次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」および「重点課題(5)エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」の推進に参画しており、コンピューティクス・アプローチは大きな広がりを見せている。

5. 主な研究成果（発明及び特許を含む）[研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に整理する]

（3 ページ程度）

本研究課題（公募研究を含む）により得られた研究成果（発明及び特許を含む）について、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、図表などを用いて研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に整理し、具体的に記述してください。なお、領域内の共同研究等による研究成果についてはその旨を記述してください。

（参照番号は「6. 研究成果の取りまとめおよび公表の状況」のリストの番号に対応）

A01 研究項目「計算機アーキテクチャと高速計算アルゴリズム」

計画研究

消費電力の提言は今後の計算機における喫緊の課題である。稲葉班においては、アーキテクチャの候補として、1) 高性能汎用プロセッサ、2) 低消費電力汎用プロセッサ、3) 数値計算用アクセラレータ、を考へ、約 100 システムに対し、系統的な電力あたりの性能を計測した。その結果、最も省電力性の高いプロセッサは、組み込み用の低電力プロセッサではなく、コアあたりの演算性能が最も高いプロセッサであることを明確に示した[2]。また、エクサさらにはゼタフロップス・コンピュータで重要になると考えられる FPGA(Field Programmable Gate Array)の開発、動的シミュレーションに適した新言語 HPC Ruby の最適化が行われた。

高橋班においては、物質科学計算で頻繁に登場する線形計算、固有値計算におけるブロック・クリロフ部分空間法の精度向上がなされた[4]。また基本的なサブプログラム群である、固有値ソルバー（コード名 **eigen**）[6]、FFT(Fast Fourier Transform)[8]、BLAS(Basic Linear Algebra Subprogram)[9]、がマルチコア超並列アーキテクチャ上および GPU 上で開発・チューニングされた。FFT においてはブロック二次元アルゴリズム、**eigen** においては **atomic** アルゴリズム、**L+U** アルゴリズムなどの新アルゴリズムが導入され、従来のサブプログラムに比して格段の高速化が達成された。

張班においては、強スケーリングを実現する超並列アーキテクチャ向けの固有値解法を開発した[3]。ブロックヤコビ法を京コンピュータ上で最適化し、通常のライブラリ **ScaLAPACK** に比して、1 万次元問題で、1.5 倍の高速化を達成した。また、大規模電子構造計算に頻繁に登場する一般化シフト線形方程式、 $(\mathbf{A} + \sigma_k \mathbf{B})\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{b}$ の新たな解法が提案された[7]。クリロフ部分空間法のひとつである **COCG** (Conjugate Orthogonal Conjugate Gradient)法が従来の解法であったが、今回、大自由度系を有効な小自由度系に縮約する線形(ヒルベルト)空間射影手法を導入し、新たな解法族 (**GSCOG** 法、**GSQMR** 法、**SQMRB** 法) が提案された。**COCG** 法に比べて、31~48 倍の高速であることが実際の電子構造計算で実証された。クリロフ部分空間法は、A02 渡邊班での非平衡グリーン関数計算でも活用され、22 倍の高速化を達成した。

公募研究

星班においては、張班との共同で、上記線形方程式の解法を応用し、超並列オーダーN 電子状態計算が実現された（コード名 **ELSES**）。強束縛型モデルではあるが、1 億原子(100 ナノメートルスケール)系の電子構造計算が、「京」全ノードを用いて高い並列効率(強スケーリング性)で実行された[3]。図 1 は、アモルファス状高分子有機 **EL**(poly-((9,9)-dioctyl fluorine))系での、デバイス性能を支配する局在 π 電子状態を示したものである[3,4]。

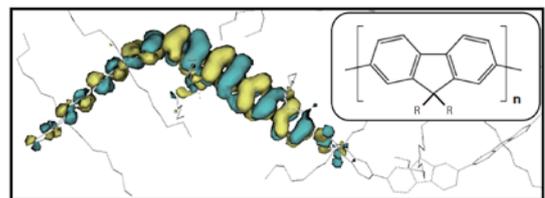


図 1 : poly-((9,9)-dioctyl fluorine)での局在化した π 電子状態

櫻井班においては、特定の必要な固有値のみを求める櫻

井・杉浦法が開発され[1,2]、A02、A03 の多くのアプリケーションに実装され、フェルミ準位付近のエネルギー・スペクトルの計算に活用された。A02 のオーダーN 手法 **CONQUEST** (押山班宮崎)にも実装され、20 万原子から構成される界面ナノ構造のフェルミ準位付近のスペクトルを求めることに成功した。

A02 研究項目「密度汎関数理論の新展開」

計画研究

押山班では、実空間手法を軸にした密度汎関数法(DFT)コードが開発され、マルチコア超並列コンピュータ上で最適化された。実空間密度汎関数法コード **RSDFT**[5,30,32]、オーダーN 密度行列最適化法コード **CONQUEST**[2,10]、オーダーN 局在基底密度汎関数法コード **OpenMX**[招待講演 26]が中核コードであり、いずれも世界最高レベルの並列化効率と実行性能を示している。さらに **Car-Parrinello** 分子動力学法(CPMD)を実空間で行う **RS-CPMD** コードも開発され、ダイナミクスに対する大規模高速計算が可能になった。**RSDFT** 計算では、前述の捩れた二層グラフェンでのディラック電子の変調[9]に加え、1) SiC 表面で自己組織化されるナノファセット構造は、原子層ステップのバンチングによって形成されること[6]、さらにステップに沿った特異な平坦バンドが出現し、水素原子でテラスを終端することにより、磁性が発現すること、2) 銀表面でのシリセン(層状シリコン)の構造は、DFT 計算と **STM** 実験できれいな一致を示すが、下地との相互作用によりディラック電子がフェルミ準位付近から消失していること[8,20]、3) シリコンナ

ノワイヤの電子状態、とくにチャネルとして有効なバンドの数は、ノワイヤの断面形状と面方位に大きく依存すること[18]、などが明らかになった。CPMD 計算では、グラフェンの酸素プラズマエッチング[19]、表面酸化[24]、半導体中の原子拡散、に対して原子反応経路の同定と対応する自由エネルギー障壁が計算され、それぞれのミクロな機構が明らかとなった。

CONQUEST 計算では、Si 基板上での Ge ナノ構造（いわゆるハット・クラスター）の原子構造が 20,000–200,000 原子規模の DFT 計算で明らかにされ、さらに櫻井・杉浦法によりエネルギー・スペクトルも計算された[2]。

OpenMX コードは、様々なコンピュータの工夫がほどこされ、その高い機能と高速性能により、日本随一の計算パッケージになっている（開発者：尾崎泰助）。OpenMX 計算の成果としては、1) ZrB₂ 上のシリセンの電子状態計算とその unfolding により、ARPES 実験との定量的な比較を行ったこと[11,25]、2) SiO₂ 基板上のグラフェン・ナノリボンの大規模輸送計算が可能になり、実験的に知られているリボン表面の酸化状態がコンダクタンスに及ぼす影響が明らかになったこと[12]、3) ノンコリニア DFT 計算により、ジグザグ・グラフェン・ナノリボンのネール磁壁構造を解明し、電子透過率の変調を明らかにしたこと、などがあげられる。

平面波基底を用いた電子状態計算手法も標準的かつ重要な方法であるが、そうした標準計算からも重要な物質科学的知見が得られる。図 2 は、SiC の伝導帯の波動関数であり、これは原子軌道の重ねあわせでは記述できない、格子間に広がった floating 状態であることが計算から初めてわかった[23]。このため同じ 4 配位の共有結合半導体でも、原子層スタッキング（結晶多型）の違いにより、格子間チャネルの長さが変わり、バンドギャップが大きく変化すること、実際それは SiC で観測されていることが明らかとなった[7]。

常行班では、格子熱伝導率の第一原理計算手法が確立された。格子熱伝導率は、熱電材料の性能やナノ構造デバイスの熱的安定性の鍵となる物性値である。格子熱伝導率を予測するには、経験パラメータを含まない第一原理電子状態計算を用いることが望ましいが、通常はフォノンの散乱長が結晶格子に比べてはるかに大きいため、数千から数十万という多数の原子を用いた大規模な分子動力学シミュレーション、もしくは同程度に多数の逆格子点を用いたフォノン緩和時間の見積もりが必要となり、これまで計算が困難であった。今回、少数原子の第一原理分子動力学シミュレーションから非調和原子間相互作用パラメータを決定し、そこから大規模分子動力学シミュレーションや高精度の緩和時間計算を行って、現実的な計算時間で精度よく熱伝導率を計算する手法を開発した[4]。その結果、様々な物質や温度で 4 桁の範囲で異なる熱伝導率を定量計算することに成功した(図 3)。またクラスレート化合物 Ba₈Ga₁₆Ge₃₀ の第一原理非調和格子モデルを作成して熱伝導率の定量解析を行い、かご内イオンのラットリング運動によるフォノン散乱が、この物質の低い熱伝導の主要因であることを明らかにした[4]。

平面波基底を用いた第一原理電子状態計算手法は物質科学計算の標準ともいえるが、常行班ではそのひとつである xTAPP コードを、次世代アーキテクチャに備えて高速化・高度化して公開を行った。また外部電場下での第一原理計算においては、常行班において開発された電子状態計算手法である有効遮蔽媒質法が有効であるが、今回、実際の実験条件に則した一定化学ポテンシャルのスキームに拡張し、電池電極反応に応用した[29]。

渡邊班では、非平衡グリーン関数法を用いたナノ構造の電流応答、とくにサブ THz 交流応答特性が計算された。カーボン・ナノチューブ、金-ベンゼンジチオール-金架橋を例に、コンダクタンスとエミッタンスの振舞いと原子構造の関連が明らかにされた。構造起因の電子寿命の違いにより、交流応答が大きく異なることが解明された[17]。さらに、非平衡グリーン関数計算により、純粋スピン流生成の可能性が示された。具体的には、ジグザグ端を有するグラフェンナノリボンにおけるエッジスピン偏極に対して、二種類の位相の異なる振動電場を印加して量子ポンプ効果を生み出し、純粋スピン流が生じることが見出された[15]。また、バイアス電圧印加時の電子状態計算のための「軌道分離法」が開発され酸化物界面、SrRuO₃/BaTiO₃/SrTiO₃、に適用され局所誘電率が計算された。その結果、負の誘電率を用いたキャパシタンス増強の機構が提唱された。

表面 STM 実験は表面原子構造、電子状態を原子スケールで解明する有力な手段であるが、表面欠陥が電子波に対してどのような影響を及ぼすかはそれほどわかっていない。Ge(001)表面上での Si および Sn 置換

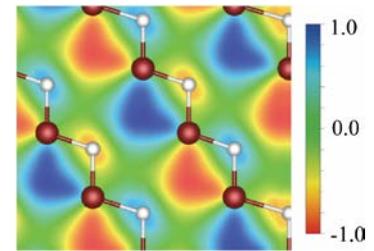


図 2: 立方対称 SiC の M 点での伝導帯最下端の波動関数の分布

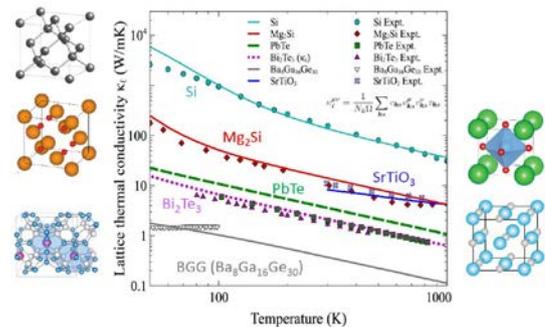


図 3: 様々な物質の熱伝導の温度依存性実測値(シンボル)と、第一原理非調和格子モデルによる計算値(線)

原子系に対して、実空間手法（コード名 **RSPACE**）により局所状態密度を計算した結果、どの表面 Ge 原子を置換したかによって、電子は引力あるいは斥力ポテンシャルを感じるということがわかった。これは置換原子の電子親和力で説明でき、元素種の違いを決定する有力な方法とな成りうるということがわかった[21]。

計算手法開発の側面では、**A01** 張班との共同で、**shifted COCG** 法によるグリーン関数計算のソルバーを開発し、**Na** 単原子鎖のコンダクタンス計算を実行し、**22** 倍の高速化を達成した。

中西班では、プロトン、ミュオンのダイナミクスに対する第一原理量子力学計算が実行された。これは独自開発の **Naniwa** コード（特許第 **4774523** 号、**US8140467**）によるもので、コンピューティクス・アプローチによるさらなる効率化（特願 **2012-16133**）が達成されている。様々な金属表面における、水素同位体の量子状態について計算が実行され、振動励起エネルギーで、**EELS** 等実験結果との差がフィッティングパラメータ無しに **10%** 以内に収まることが明らかになっている。図 4 は、**SiO₂** 中の正ミュオンの波動関数である。**μSR** 実験では、中性水素原子状のミュオニウムになると報告されているが、ミュオンの量子性を考慮しない従来の第一原理計算では、この中性原子状態は不安定とされていた。今回の量子論計算で、初めて自己束縛中性原子状の量子状態を見出すことができ、超微細相互作用も実験結果と良い一致が得られた[招待講演 9]。Naniwa による計算としてはさらに、グラフェン上および金属表面での軽水素(**H**)、重水素(**D**)、三重水素(**T**)、ミュオニウム(**Mu**)の吸着エネルギー、表面下への吸収過程解明などが行われた。**Mu** では、量子トンネル効果が顕著で、吸収反応が促進されること、表面格子振動は逆に **H**、**D**、**T** の反応が促進されることが明らかとなった[13]。尚、グラフェン上の計算は「超低速ミュオン顕微鏡：鳥養映子代表」新学術領域との共同研究である。

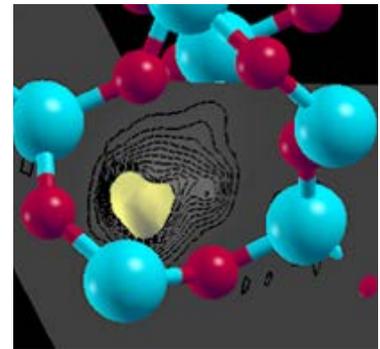


図 4: **SiO₂** 中の正ミュオンの波動関数（薄黄）。超微細相互作用は、**4470MHz** とミュオニウムになっていることを示している。青球：Si、赤球；O。

さらに中西班においては、水素貯蔵、水素精製などの応用上重要な、金属表面上での水素添加触媒反応機構の計算による解明[14]、水素雰囲気中に晒した金属表面での水素輸送機構の実験的解明[3]、などの研究が推進された。

倭班では、バイオ系へのコンピューティクス・アプローチが行われた。時間分解 X 線結晶解析と分子シミュレーションを相補的に組み合わせた手法を開発し、酸素貯蔵タンパク質ミオグロビン中のガス分子移動機構を調べた。ミオグロビンに光照射すると、ヘム鉄とガス分子の結合が切断される。その結果ガス分子はミオグロビン中をいくつかの疎水性空洞を経て移動し、外部に放出されるか、もしくはヘム鉄に再結合する。ミオグロビン内部では疎水原子が密に充填されているため、ガス分子移動の機構が問題になっている。今回、ガス分子をタンパク質の各部分に配置するのに要する平均的なエネルギー (potential of mean force) の 3 次元マップが、光照射によって変化することが明らかとなり、分子移動機構が解明された[27]。また、高分子分野で開発された緩和モード解析を初めてタンパク質系に導入し、揺らぎの動的性質が調べられた[31]。

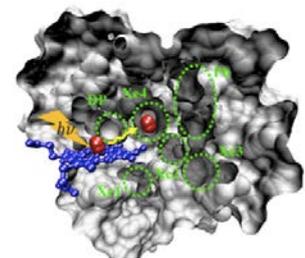


図 5: ミオグロビンの分子内空洞

公募研究

公募研究では計画研究と相補的な研究活動が展開された。密度汎関数理論での多体効果を現す交換相関エネルギー汎関数の改良という側面では、**濱田班**によるファン・デル・ワールス(VdW)汎関数[13,14]、**合田班**によるハイブリッド汎関数[10]、**今村班**によるエネルギー直線性を満たす軌道特定汎関数[3]などが検討された。とくに vdW 汎関数は独自の改良が加えられ（汎関数名：vdW-DF2^{C09x}）、グラフェン上水素などの分子吸着系で、乱雑位相近似、拡散モンテカルロ計算、などの高精度多体計算に匹敵する結果を与えている[14]。

矢花班では、時間依存密度汎関数理論とマックスウェルの方程式を結合させた、強い外場下での物質応答を調べる新たな手法を開発した（コード名 **ARTED**）。電子の波長と光の波長という異なるスケールを扱うためのマルチスケール手法であり、超並列アーキテクチャに適した実空間・実時間解法が行われている。高強度なパルス光と物質の相互作用は、素過程に対する興味とともに、新奇デバイス、レーザー加工などの観点からも重要である。最近、高強度パルス光を照射した α -**SiO₂** の表面に超高速

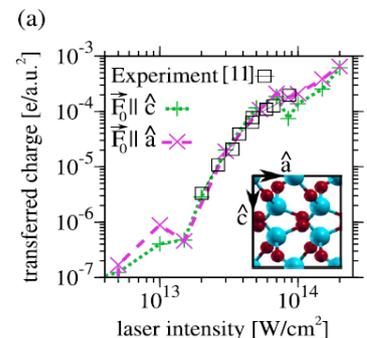


図 6: **SiO₂** に照射したレーザーパルスによって誘起された超高速表面電流によって移動した電荷量とレーザー強度の関係。

電流が生成される実験が報告されている [Schiffirin *et al.*, Nature 493, 70 (2013)]. この系に対して ARTED 計算が実行され (図 6)、得られた誘起電流量は、光の強度とともに指数関数的に増大し、測定値を良く再現することがわかった。計算によれば、移行電荷は結晶軸と光の偏光方向の角度に敏感に依存しており、電流の発生が電子構造の非等方性に強く依存していることを示唆している [7]。

中村班では、ナノ接合での局所加熱、熱散逸および非弾性電流の振舞いを非平衡グリーン関数法と密度汎関数法により調べてきた。一方、木口班では、単分子に素子機能を付与させる実験的研究を重ねてきた。実験的に単分子を観測することは困難なので、今回、実験で得られた応答を理論計算と比較するというアプローチで単分子素子の構造と機能を明らかにし、単分子スイッチ、ダイオードの開発に成功した [5]。

単層カーボンナノチューブ (SWCNT) は機械的に柔軟かつフレキシブル、熱的にも安定である。もし SWCNT の熱電変換効率が大きければフレキシブルな熱電材料の有力候補となる。山本班では、半導体 CNT (s-SWNT) をペーパー状に凝集した SWNT 薄膜に注目し、薄膜中の 2 本の s-SWNT が側面で接触したモデルのゼーベック係数 S とパワーファクター $P=S^2/R$ を NEGF+DFT 法によって計算した。パワーファクター P が $R=5\sim 8$ ($h/2e^2$) 程度で最大値を示すことが分かり、実際実験で実証された [4, 特願 2014-209402]。

A03 研究項目「密度汎関数理論を越えて」

計画研究

今田班では、強相関電子系の電子構造解明をひとつの大きなターゲットとしている。そのために、強相関電子系がフェルミ・エネルギー付近で階層的なエネルギー構造を持つ特徴を利用して、階層的な第一原理強相関電子状態計算手法 (MACE) を発展させてきた。本新学術領域研究においても、この手法の適用範囲を拡大するとともに、計算精度を向上させた。また、低次元第一原理有効モデルの導出を可能にし、有機導体に適用した。特に電子格子相互作用の扱い、スピン軌道相互作用の扱いなど従来適用範囲外であった課題についても取り扱いができるように手法を拡張し、またこの手法で導出される低エネルギー有効モデルを解くためのソルバーもこれに対応して、電子格子相互作用 [12] とスピン軌道相互作用を扱える枠組みに拡張した。この拡張はイリジウム酸化物でのトポロジカルな物質相の解析や予言 [13,24]、アルカリドーピングしたフラレーンの超伝導機構解明 [15,25] などに活用された。また前述したように、鉄系超伝導体の磁気秩序および超伝導相の問題に適用し、磁気秩序の物質依存性を定量的に再現することに成功し、超伝導の機構を明らかにした [11,23]。さらに電子をドーピングすることによって、反強磁性秩序が消えて 1 次転移を起こし、超伝導が生じるという実験結果を正しく再現することに成功した。

強力磁石には大きな磁化と高い保磁力が要求され、後者は結晶磁気異方性と強い正の相関を持つ。この条件を満たす磁石化合物の探索のため、第一原理コード QMAS を用いて $\text{NdFe}_{11}\text{TiN}$ を調べた (図 7)。その結果、窒化により Nd と N の間の電子密度が増加することがわかった。そのクーロン反発を感じ、Nd-f 電子が ab 方向に伸び、一軸異方性が誘起される。このことは結晶場係数 A_2^0 の計算により半定量的に確かめられる。窒化により磁化も増加する。一方、Ti 置換により磁化が顕著に減少するが、 A_2^0 の変化は小さい。これらの結果は、 NdFe_{12}N が $\text{NdFe}_{11}\text{TiN}$ よりもよい磁気特性をもつことを示唆する [5,14]。(本研究の計算ののち、 MgO 基盤上の W 下地層の上に NdFe_{12}N 膜が合成され、室温からキュリー温度にいたる広い温度領域で $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ を超えることが、実験グループから報告された)。

高田班では、第一原理からの多体理論とそのフェルミオン系への応用、超伝導機構解明と物質探索が行われた。金属中の不純物点電荷 $+Ze$ に対する遮蔽においては、デバイ・ヒュッケル理論以来の誘電電荷共鳴という概念が一般的であるが、 Z が奇の正整数では近藤スピン共鳴と電荷共鳴の競合が問題になることを初めて指摘した。具体的に $Z=1$ の陽子を電子ガス系に挿入した場合の近藤スピン共鳴状態の出現条件と出現時の近藤温度 T_K を LDA 計算と DMC 計算を組み合わせ定量的に決定した [招待講演 1]。この結果は金属遮蔽におけるパラダイムシフトの発見といえるが、同時に、重い電子系の物理において近藤格子系では約 $T_K/10$ の温度での超伝導出現が周知の事実であることから、 $T_K\sim 2,000\text{K}$ である $r_s\sim 4$ の状態でマクロな数の陽子が規則的に挿入されると室温超伝導が望みうることを示している。これは超高压下で $r_s<2$ である固体水素や H_2S と違って、常圧下の水素合金での高温超伝導発見への期待につながる。

1 次元電子系では、高励起状態で成り立つ自由電子描像とそれが全く破綻する低励起状態での電荷スピン分離描像の相互関係・相互変遷の詳細が興味深い。これは一電子スペクトル関数 $A(p,\omega)$ を波数 p やエネルギー ω を広範囲に変化させて調べればよいが、今回、1 次元電子系でペーテ仮説法と GWT 法を組み合わせ $A(p,\omega)$ を初めて定量的に計算した。その結果、低励起状態では電荷とスピンの自由度が分離すること

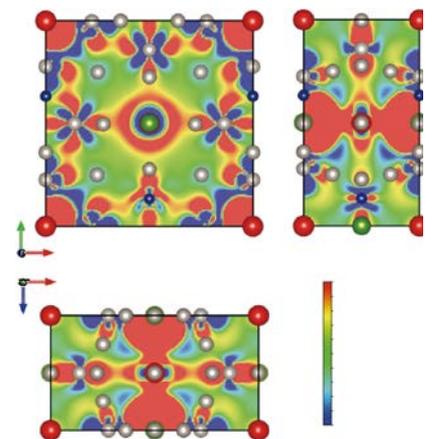


図 7: 窒化による $\text{NdFe}_{11}\text{TiN}$ の電子密度

に伴うスピノンとホロンというボゾン励起が $A(\mathbf{p}, \omega)$ に主ピーク構造を与えるが、同時に、この系の本質的な素励起としてスピノンとホロンの衣をまとった擬電子励起の副構造を発見した。この擬電子概念に対応する構造は高励起状態では主ピークに成長していくことから、この新概念を通して、スピン電荷分離から自由電子へという定性的に異なる2つの描像間の変遷の全容が明らかにされた[4,10]。

超伝導転移温度の定量的計算の側面では、固体ホウ素[9,22]、黒鉛層間化合物 BaC_6 [書籍2] (実験は東北大谷垣グループ)、 SrTiO_3 [書籍2]などの転移温度が、第一原理計算とモデル計算によって調べられ、電子密度、フェルミ面の形状、印可圧力等のパラメータと超伝導転移温度との関係が明らかになった。実験データは高田による標準模型と整合している。

佐藤班では、金属系および半導体系のスピンエレクトロニクス材料の物質デザインが行われた。省電力スピノ・エレクトロニクスでは、電圧による磁気異方性の制御が重要な課題である。それは計算科学的には、電場下の高精度計算を必要とする。金属系材料ターゲットとしては、金属薄膜(真空/M/Fe/M(001), M=Pt, Pd)、接合薄膜(MgO/Fe/M(001), M=Au, Pt)、二重界面薄膜(MgO/Fe/MgO)を取り上げ、全エネルギーの磁化方向依存性から磁気異方性エネルギー(MAE)の電界効果を計算した。2重界面薄膜におけるMAEの電界依存性の非線形的振舞い[1]、接合薄膜における金属合金化による垂直磁化減少、界面への不純物注入による磁気異方性と電界変調効果の制御などが明らかとなった。これらの計算に基づき、超薄膜Feの磁気光学カー効果が生野の野崎により測定され、磁気異方性エネルギーが決定された。計算と実験との定量的一致は完全ではなく、界面での偏析等の効果が検討された。またA02濱田班との共同で、vdW-DFT汎関数が実装され、より広範囲な物質探索が可能となった。

半導体系材料としては、磁性半導体を取り上げられた。1) (Ga,Mn)Asでの磁性不純物Mn濃度を増加させるための、Cu、Liなどの同時ドーピング法の提唱[7,8,26,27]、2) MgOベースの半導体における、Mg空孔、N不純物起因の局在電子状態を利用した d^0 磁性半導体の探索と、そのスピノダル分解を用いた磁性の制御法の提唱[27]、3) 第一原理電子状態計算とモンテカルロ計算を結合させた磁気特性のシミュレーションによる新奇磁性半導体とくにTe化合物の探索、が行われた。スピノダル分解を用いたIV-VI族磁性半導体の磁気特性制御については、実証実験がA03公募研究黒田班において進められつつあり、磁性半導体一般についてスピノダル分解を用いたデザインとその実証の現況が纏められつつある。

公募研究

黒田班においては、窒素ドープ(Zn,Cr)Teにおける磁性制御が可能であること、四元混晶半導体(Zn,Cr,Fe)Teの遷移元素間の相互作用による保持力の増大を見出した。A03佐藤班との連携という点では、黒田班以外でも、周班での、GaGdN薄膜でのスピノダル分解による自然超格子の形成と、同時ドーピングによる高濃度のGd添加、また田中班での、自己組織化ナノ相分離成長法による強磁性半導体 $(\text{Fe,Zn})_3\text{O}_4$ と巨大自発分極を有する BiFeO_3 のナノヘテロ構造作成の成功、に結びついている。後者はさらに、3次元ナノシード自己組織化法へと発展した。

公募研究においては、計画研究と相補的に理論研究が遂行された。大野班においては、電子励起現象をターゲットとし、自己無撞着GW近似を発展させた。Latinger-Ward汎関数の簡便な評価法の発見による、全エネルギー計算が行われた[4]。また、自己エネルギー部分の周波数依存性を線形化する手法により、イオン化ポテンシャル、電子親和力をGW近似の枠内で計算するスキームを開発し、原子系に対して応用した[3]。是常班においては、エネルギー・バンド構造に対する電子格子相互作用の効果が調べられた。実験的に知られている、同位体効果によるダイヤモンドのギャップの変化が説明された[7]。立川班では、多成分密度汎関数理論が発展した。水素原子のような軽い原子核の量子効果を、Born-Oppenheimer近似を超えた、多成分密度汎関数理論で取り扱うことが進められて来たが、そこでの、電子と核の相関効果を評価するための物理的意味付けのされた電子-核相関汎関数は、これまで確立されていなかった。今回、非物理的な仮定を一切含まないColle-Salvetti(CS)型の電子相関汎関数を基に、高次のTaylor展開を適用して相関因子の有効範囲を拡大することで、電子-核相関汎関数を開発した。開発した電子-核相関汎関数は、種々の水素分子を含む系の電子-プロトン相関エネルギーを精度良く評価できることがわかった[A02項目の11]。

6. 研究成果の取りまとめ及び公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開発表等）（5ページ程度）

本研究課題（公募研究を含む）により得られた研究成果の公表の状況（主な論文、書籍、ホームページ、主催シンポジウム等の状況）について具体的に記述してください。論文の場合、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に記載し、研究代表者には二重下線、研究分担者には一重下線、連携研究者には点線の下線を付し、corresponding author には左に*印を付してください。また、一般向けのアウトリーチ活動を行った場合はその内容についても記述してください。また、別添の「(2) 発表論文」の融合研究論文として整理した論文については、冒頭に◎を付してください。

主な発表論文

本新学術領域研究において査読付きの学術雑誌に発表された論文は全 884 篇（A01: 88 篇、A02: 506 篇、A03: 290 篇）である。以下に主なものを記す。

【A01】計画研究

1. “Community Branching for Parallel Portfolio SAT Solvers”, T. Sonobe, S. Kondoh and *M. Inaba, The International Conferences on Theory and Applications of Satisfiability Testing (SAT2014) pp. 188-196 (2014)
2. Preservation of Historical Computer Systems: Computer Zoo, H. Tomari and *K. Hiraki, Information Processing, 55(2), 168-175, 2014
3. Convergence analysis of the parallel classical block Jacobi method for the symmetric eigenvalue problem, *Y. Yamamoto, S.-L. Zhang and S. Kudo, JSIAM Letters, Vol. 6, pp. 57--60 (2014)
4. Development of the Block BiCGSTAB(l) method for solving linear systems with multiple right hand sides, S. Saito, *H. Tadano and A. Imakura, JSIAM Letters, Vol. 6, pp. 65-68, (2014).
5. A numerical approach to surface Green's functions via generalized eigenvalue problems, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, T. Miyata, S. Honda, R. Naito and *S.-L. Zhang, Vol.30, 2013, pp.653-660
6. A High Performance SYMV Kernel on a Fermi-core GPU, *T. Imamura, S. Yamada, and M. Machida, Proc. 10th International Meeting on High-Performance Computing for Computational Science (VECPAR 2012), Lecture Notes in Computer Science, Vol. 7851, pp. 59-71, Springer-Verlag, (2013).
7. Solution of generalized shifted linear systems with complex symmetric matrices, T. Sogabe, T. Hoshi, *S.-L. Zhang, and T. Fujiwara, J. Comput. Phys., 231, pp. 5669-5684, (2012).
8. An Implementation of Parallel 2-D FFT Using Intel AVX Instructions on Multi-Core Processors, *D. Takahashi, Proc. 12th International Conference on Algorithms and Architectures for Parallel Processing (ICA3PP 2012), Part II, Lecture Notes in Computer Science, Vol. 7440, pp. 197-205, Springer-Verlag, (2012).
9. Implementation and Evaluation of Quadruple Precision BLAS Functions on GPUs, D. Mukunoki and *D. Takahashi, Proc. 10th International Conference on Applied Parallel and Scientific Computing (PARA 2010), Part I, Lecture Notes in Computer Science, Vol. 7133, pp. 249-259, Springer-Verlag, (2012).

【A01】公募研究

1. Error bounds of Rayleigh-Ritz type contour integral-based eigensolver for solving generalized eigenvalue problems, A. Imakura, L. DU, *T. Sakurai, Numerical Algorithms, (accepted)
2. A block Arnoldi-type contour integral spectral projection method for solving generalized eigenvalue problems, A. Imakura, L. Du, *T. Sakurai, Applied Mathematics Letters, Vol. 32, 2014, pp.22-27
- ◎ 3. ‘Novel linear algebraic theory and one-hundred-million-atom quantum material simulations on the K computer’, *T. Hoshi, T. Sogabe, T. Miyata, D. Lee, S.-L. Zhang, H. Imachi, Y. Kawai, Y. Akiyama, K. Yamazaki, S. Yokoyama, PoS 202, 065, 13.pp (2014)
4. “An order-N electronic structure theory with generalized eigenvalue equations and its application to a ten-million-atom system”, *T. Hoshi, S. Yamamoto, T. Fujiwara, T. Sogabe, S.-L. Zhang, J. Phys.: Condens. Matter 24, 165502 (2012)

【A02】計画研究

1. “Structural Stability and Energy-Gap Modulation through Atomic Protrusion in Freestanding Bilayer Silicene”, Y. Sakai and *A. Oshiyama, Phys. Rev. B 91, 201405(R) (2015).
2. “Optimized multi-site local orbitals in the large-scale DFT program CONQUEST”, *A. Nakata, D. R. Bowler and *T. Miyazaki, Phys. Chem. Chem. Phys., published online (DOI: 10.1039/C5CP00934K), (2015).
3. Desorption Temperature Control of Palladium-Dissolved Hydrogen through Surface Structural Manipulation, *S. Ohno, *M. Wilde, and K. Fukutani, Journal of Physical Chemistry C, **119**, Article ASAP in press.
4. “Impact of Rattlers on Thermal Conductivity of a Thermoelectric Clathrate: A First-Principles Study”, T. Tadano, *Y. Gohda, and *S. Tsuneyuki, Phys. Rev. Lett. **114**, 095501 (2015).
- ◎ 5. Performance evaluation of ultra-large-scale first-principles electronic structure calculation code on the K computer, International Journal of High Performance Computing Applications, Y. Hasegawa, *J.-I. Iwata, M. Tsuji, D. Takahashi, A. Oshiyama, K. Minami, T. Bokū, H. Inoue, Y. Kitazawa, I. Miyoshi and M. Yokokawa, Vol. 28, pp. 335-355, (2014).
6. “Magic Angle and Height Quantization in Nanofacets on SiC(0001) Surfaces”, K. Sawada, J.-I. Iwata and *A. Oshiyama Appl. Phys. Lett. 104, 051605 (2014).
7. “Interstitial Channels that Control Band Gaps and Effective Masses in Tetrahedrally Bonded Semiconductors”, Y. Matsushita and *A. Oshiyama, Phys. Rev. Lett. 112, 136403 (2014).

8. "Structural Tristability and Deep Dirac States in Bilayer Silicene on Ag(111) Surfaces", Z.-X. Guo and *A. Oshiyama, Phys. Rev. B 89, 155418 (2014).
9. "Atomic corrugation and electron localization due to Moiré patterns in twisted bilayer graphenes", *K. Uchida, S. Furuya, J.-I. Iwata and A. Oshiyama, Phys. Rev. B 90, 155451 (2014).
10. "Efficient Calculations with Multisite Local Orbitals in a Large-Scale DFT Code CONQUEST", *A. Nakata, D. R. Bowler and *T. Miyazaki, J. Chem. Theory Comput., Vol. 10, 4813-4822 (2014).
- ©11. "Band structure of silicene on zirconium diboride (0001) thin-film surface: Convergence of experiment and calculations in the one-Si-atom Brillouin zone", C.-C. Lee, A. Fleurence, Y. Yamada-Takamura, *T. Ozaki, and R. Friedlein, Phys. Rev. B 90, 075422 (7 pages) (2014).
12. "First-principles electronic transport calculations of graphene nanoribbons on SiO₂/Si", H. Jippo, *T. Ozaki, and M. Ohfuchi, Appl. Phys. Express 7, 025101 (4 pages) (2014).
13. "Dynamics of Mu, H, D, and T absorption into Pd(111): Isotope effects", K. Shimizu, W. A. Dino, *H. Kasai, Journal of the Physical Society of Japan, Vol.83, pp.13601, (2014).
14. "First principles investigation of the initial stage of H-induced missing-row reconstruction of Pd(110) surface", A. A. B. Padama, *H. Kasai, Journal of Chemical Physics, Vol.140, pp.244707(2014).
15. Pure spin current induced by adiabatic quantum pumping in zigzag-edged graphene nanoribbons, S. Souma* and M. Ogawa, Applied Physics Letters, **104**, 183103 (2014).
16. Alternating current response of carbon nanotubes with randomly distributed impurities, D. Hirai*, T. Yamamoto and S. Watanabe, Appl. Phys. Lett., **105**, 173106 (2014).
17. Anomalous satellite inductive peaks in alternating current response of defective carbon nanotubes, D. Hirai*, T. Yamamoto and S. Watanabe, J. Appl. Phys., **115**, 174312 (2014).
18. "Relation between nanomorphology and energy bands of Si nanowires", S. Kyogoku, J.-I. Iwata and *A. Oshiyama, Phys. Rev. B 87, 165418 (2013).
19. "Atom-Scale Reaction Pathways and Free-Energy Landscapes in Oxygen Plasma Etching of Graphene", K. Koizumi, M. Boero, Y. Shigeta, and *A. Oshiyama, J. Phys. Chem. Letters 4, 1592 (2013).
20. "Absence and Presence of Dirac Electrons in Silicene on Substrates", Z.-X. Guo, S. Furuya, J.-I. Iwata and *A. Oshiyama, Phys. Rev. B 87, 235435 (2013).
21. First-principles calculation of scattering potentials of Si-Ge and Sn-Ge dimers on Ge(001) surfaces, T. Ono*, Phys. Rev. B, **87**, 085311 1-6 (2013).
22. Wavelet Analysis of Quantum Transient Transport in a Quantum Dot, K. Sasaoka*, T. Yamamoto, and S. Watanabe, Appl. Phys. Lett., **102**, 233107 1-4 (2013).
23. "Floating Electron States in Covalent Semiconductors", Y. Matsushita, S. Furuya and *A. Oshiyama, Phys. Rev. Lett. 108, 246404 (2012).
24. "Microscopic Mechanisms of Initial Oxidation of Si(100): Reaction Pathways and Free-Energy Barriers", K. Koizumi, M. Boero, Y. Shigeta, and *A. Oshiyama, Phys. Rev. B 85, 205314:1-4 (2012).
- ©25. "Experimental evidence for epitaxial silicene on diboride thin films", A. Fleurence, R. Friedlein, *T. Ozaki, H. Kawai, Y. Wang, and Y. Yamada-Takamura, Phys. Rev. Lett. 108, 245501 (5 pages) (2012).
- ©26. Nonneutral evolution of volume fluctuation in lysozymes revealed by normal-mode analysis of compressibility, S. Mimura, T. Yamato, T. Kamiyama, *K. Gekko, *Biophys. Chem.* **161** 39-45, (2012).
- ©27. Ligand migration in myoglobin: A combined study of computer simulation and X-ray crystallography. T. Tsuduki, A. Tomita, S. Koshihara, S. Adachi, *T. Yamato, *J. Chem. Phys.* **136** 165101 (9 pages) (2012).
28. Excited-state forces on adiabatic potential-energy surfaces by time-dependent density-functional theory, J. Haruyama*, T. Suzuki, C. Hu, and K. Watanabe, Physical Review A, **85**, 012516 1-7 (2012)
29. "First-principles molecular dynamics at a constant electrode potential", N. Bonnet, T. Morishita, *O. Sugino, and M. Otani, Phys. Rev. Lett. **109**, 266101 (2012).
- ©30. "First-principles calculations of electron states of a silicon nanowire with 100,000 atoms on the K computer", Y. Hasegawa, *J.-I. Iwata, M. Tsuji, D. Takahashi, A. Oshiyama, K. Minami, T. Boku, F. Shoji, A. Uno, M. Kurokawa, H. Inoue, I. Miyoshi, M. Yokokawa, Proceedings of 2011 International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC2011)
31. Relaxation mode analysis of a peptide system: comparison with principal component analysis. *A. Mitsutake, H. Iijima, *H. Takano, *J. Chem. Phys.* **135** 164102 (15 pages) (2011).
- ©32. "A massively-parallel electronic-structure calculations based on real-space density functional theory", *J.-I. Iwata, D. Takahashi, A. Oshiyama, B. Boku, K. Shiraiishi, S. Okada and K. Yabana, J. Comp. Phys. 229, 2339 (2010).

[A02] 公募研究

1. "Simple, Yet Powerful Methodologies for Conformational Sampling of Proteins", H. Harada, Y. Takano, T. Baba, *Y. Shigeta, *Physical Chemistry Chemical Physics (invited feature article)* **17**, 6155-6173 (2015).
2. "Terahertz-Field-Induced Nonlinear Electron Delocalization in Au Nanostructures", K. Yoshioka, Y. Minami, K. Shudo, T. D. Dao, T. Nagao, M. Kitajima, *J. Takeda, and J. Katayama, *Nano Lett.* **15**, pp. 1036-1040 (2015).
3. Linearity condition for orbital energies in density functional theory (V): Extension to excited state calculations, *Y. Imamura, K. Suzuki, T. Iizuka, and H. Nakai*, Chem. Phys. Lett. **618**, 30 (2015).
- ©4. Giant Seebeck Coefficient in Semiconducting Single-Wall Carbon Nanotube Film, *Y. Nakai, K. Honda, K. Yanagai, H. Kitaura, T. Kato, T. Yamamoto and Y. Maniwa, Appl. Phys. Express 7, 025103 (2014).

- ◎5. "Single molecular resistive switch obtained via sliding multiple anchoring points and varying effective wire length", M. Kiguchi*, T. Ohto, S. Fujii, K. Sugiyasu*, S. Nakajima, M. Takeuchi, and H. Nakamura*, *J. Am. Chem. Soc.* **136**, 7327–7332 (2014). selected as *Spotlight, Cover picture*
- ◎6. "Additive Electron Pathway and Non-additive Molecular Conductance by Using a Multipodal Bridging Compound", M. Kiguchi*, Y. Takahashi, S. Fujii, M. Takase, T. Narita, M. Iyoda, M. Horikawa, Y. Naitoh, and H. Nakamura, *J. Phys. Chem. C* **118**, 5275-5283 (2014).
7. Ab Initio Simulation of Electrical Currents Induced by Ultrafast Laser Excitation of Dielectric Materials, G. Wachter, C. Lemell, J. Burgdoerfer, S.A. Sato, X.-M. Tong, *K. Yabana, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 087401 (5 pages) (2014)
8. Massively-parallel electron dynamics calculations in real-time and real-space: Toward applications to nanostructures of more than ten-nanometers in size, *M. Noda, K. Ishimura, K. Nobusada, K. Yabana, T. Boku, *J. Comput. Phys.* **265**, 145-155 (2014).
9. "A divide-conquer-recombine algorithmic paradigm for large spatiotemporal quantum molecular dynamics simulations", *F. Shimojo, S. Hattori, R. K. Kaila, M. Kunaseth, W. Mou, A. Nakano, K. Nomura, S. Ohmura, P. Rajak, K. Shimamura, and P. Vashishta, *J. Chem. Phys.* **140**, (2014) 18A529.
10. "Strain effects on the magnetic anisotropy of Y₂Fe₁₄B examined by first-principles calculations", Z. Torbatian, T. Ozaki, S. Tsuneyuki, and *Y. Gohda, *Appl. Phys. Lett.* **105**, 242403 (2014).
11. "Electron-nucleus correlation functional for multicomponent density-functional theory", T. Udagawa, T. Tsuneda, and *M. Tachikawa, *Phys. Rev. A*, **89**, 052519 (5pages) (2014).
12. "Binding of a positron to nucleic-acid base molecules and their pairs", K. Koyanagi, Y. Kita, Y. Shigeta, *M. Tachikawa, *ChemPhysChem.* **14**, 3458-3462 (2013).
13. "Gate-tunable large tunneling magnetoresistance in Ni-C₆₀-Ni single molecule transistors", K. Yoshida, *I. Hamada, S. Sakata, A. Umeno, M. Tsukada, and K. Hirakawa, *Nano Lett.* **13**, 481-485 (2013).
14. "Origin of nanomechanical motion in a single-C₆₀ transistor", I. Hamada*, M. Araidai, and M. Tsukada, *Phys. Rev. B* **85**, 121401(R) (2012).
15. "Ultrafast optical excitation of coherent phonons in a one-dimensional metal at the photoinduced metal-insulator transition", J.D. Lee*, P. Moon, and M. Hase, *Phys. Rev. B*, Vol. **84**, 195109 (2011).

【A03】 計画研究

- ◎ 1. "Review on distorted face-centered cubic phase in yttrium via genetic algorithm", T. Ishikawa, *T. Oda, N. Suzuki, and K. Shimizu, *High Pressure Research*, **35**, 37-41, 2015.
2. "Possible origin of non-linear magnetic anisotropy variation in electric field effect in a double interface system", D. Yoshikawa, M. Obata, Y. Taguchi, S. Haraguchi, and *T. Oda, *Appl. Phys. Express*, **7**, 113005(1-4), (2015).
3. Weyl node and spin texture in trigonal tellurium and selenium, *M. Hirayama, R. Okugawa, S. Ishibashi, S. Murakami and T. Miyake, *Phys. Rev. Lett.* (in press)
4. "Generic Features of an Electron Injected into the Luttinger Liquid", H. Maebashi and *Y. Takada, *J. Supercond. Nov. Magn.* **28**, 1331-1335 (2015).
5. First-Principles Study of Structural and Magnetic Properties of R(Fe,Ti)₁₂ and R(Fe,Ti)₁₂N (R=Nd, Sm,Y), *Y. Harashima, K. Terakura, H. Kino, S. Ishibashi and T. Miyake, *JPS Conf. Proc.* **5**, 011021 (1-8) (2015).
6. One-dimensional edge states with giant spin splitting in a bismuth thin film, *A. Takayama, T. Sato, S. Souma, T. Oguchi, and T. Takahashi, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 066402 (1-5) (2015).
7. "First-principles study of magnetic interactions in 3d transition metal-doped phase-change materials", *T. Fukushima, H. Katayama-Yoshida, K. Sato, H. Fujii, E. Rabel, R. Zeller, P. H. Dederichs, W. Zhang and R. Mazzarello, *Phys. Rev. B* **90**, 144417 (7 pages) (2014).
8. "Computational materials design of defect-induced ferrimagnetic MnO", *M. Seike, T. Fukushima, K. Sato and H. Katayama-Yoshida (invited article), *J. of Phys.: Cond. Matt.*, **26**, 104205-1-7 (2014).
9. "Theoretical study of the structure of boron carbide B₁₂C₂", *K. Shirai, K. Sakuma, and N. Uemura, *Phys. Rev. B* **90**, 064109:1-10 (2014).
10. "Structural evolution of the one-dimensional spectral function from the low- to the high-energy limit", H. Maebashi and *Y. Takada, *Phys. Rev. B* **89**, 201109(R):1-4 (2014).
11. Superconductivity and its mechanism in an ab initio model for electron-doped LaFeAsO, *T. Misawa, M. Imada, *Nature Commun.*, **5** 5738 (1-11) (2014).
12. Variational Monte Carlo Method for Electron-Phonon Coupled Systems, *T. Ohgoe, M. Imada, *Phys. Rev. B* **89**, 195139 (1-10) (2014).
13. First-Principles Study of the Honeycomb-Lattice Iridates Na₂IrO₃ in the Presence of Strong Spin-Orbit Interaction and Electron Correlations, *Y. Yamaji, Y. Nomura, M. Kurita, R. Arita, M. Imada, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 107201 (1-5) (2014).
14. First-principles study of Magnetocrystalline Anisotropy and Magnetization in NdFe₁₂, NdFe₁₁Ti and NdFe₁₁TiN, *T. Miyake, K. Terakura, Y. Harashima, H. Kino and S. Ishibashi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **83**, 043702(1-4) (2014).
15. Effect of electron-phonon interactions on orbital fluctuations in iron-based superconductors, *Y. Nomura, K. Nakamura and R. Arita, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 027002 (1-5) (2014).
16. "Excitons and biexcitons in symmetric electron-hole bilayers", *R. Maezono, P. L. Rios, T. Ogawa, and R.J. Needs, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 216407:1-5 (2013).
17. Derivation of Static Low-Energy Effective Models by ab initio Downfolding Method without Double Counting of Coulomb Correlations: Application to SrVO₃, FeSe and FeTe, *M. Hirayama, T. Miyake and M. Imada, *Phys. Rev. B* **87**, 195144 (1-22) (2013).

18. Raman-scattering measurements and theory of the energy-momentum spectrum for underdoped $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCuO}_{8+\delta}$ superconductors: Evidence of an s-wave structure for the pseudogap, *S. Sakai, S. Blanc, M. Civelli, Y. Gallais, M. Cazayous, Marie-Aude Measson, J. Wen, Z. Xu, G. Gu, G. Sangiovanni, Y. Motome, K. Held, A. Sacuto, A. Georges and M. Imada, Phys. Rev. Lett. **111**, 107001 (1-5) (2013).
19. Development of density functional theory for plasmon-assisted superconducting state: Application to Lithium under high pressures, *R. Akashi and R. Arita, Phys. Rev. Lett. **111**, 057006 (1-5) (2013).
20. “Electric-field induced ferromagnetic resonance excitation in an ultrathin ferromagnetic metal layer”, *T. Nozaki, Y. Shiota, S. Miwa, S. Murakami, F. Bonell, S. Ishibashi, H. Kubota, K. Yakushiji, T. Saruya, A. Fukushima, S. Yuasa, T. Shinjo, and Y. Suzuki, Nature Physics 8, 491-496 (2012).
21. “Effect of atomic monolayer insertions on electric-field-induced rotation of ferromagnetic easy axis”, M. Tsujikawa, S. Haraguchi, *T. Oda, J. Appl. Phys. **111**, 083910 (1-4) (2012).
22. “Why does a metal get an insulator? -- Consequences of unfilled bands on boron crystals --”, *K. Shirai and N. Uemura, Solid State Sciences 14, 1609-1616 (2012).
23. Ab Initio Evidence for Strong Correlation Associated with Mott Proximity in Iron-Based Superconductors, *T. Misawa, K. Nakamura and M. Imada, Phys. Rev. Lett. **108** 177007(1-5) (2012).
24. Ab initio Studies on the Interplay between Spin-Orbit Interaction and Coulomb Correlation in Sr_2IrO_4 and Ba_2IrO_4 , *R. Arita, J. Kuneš, A.V. Kozhevnikov, A.G. Eguluz, M. Imada, Phys. Rev. Lett. **108**, 086403(1-5) (2012).
25. Ab initio derivation of electronic low-energy models for C_{60} and aromatic compounds, *Y. Nomura, K. Nakamura, R. Arita, Phys. Rev. B **85**, 155452(1-12) (2012).
26. “Computational Materials design for high-TC (Ga, Mn)As with Li-codoping”, *L. Bergqvist, K. Sato, H. Katayama-Yoshida and P. H. Dederichs, Phys. Rev. B **83**, 165201 (6 pages) (2011).
27. “First-principles theory of dilute magnetic semiconductors”, *K. Sato, L. Bergqvist, J. Kudrnovsky, P. H. Dederichs, O. Eriksson, I. Turek, B. Sanyal, G. Bouzerar, H. Katayama-Yoshida, V. A. Dinh, T. Fukushima, H. Kizaki, R. Zeller, Rev. Mod. Phys. **82**, 1633-1690 (2010).

【A03】公募研究

1. “Quasiparticle Self-Consistent GW Method Based on the Augmented Plane-Wave and Muffin-Tin Orbital Method”, *T. Kotani, *J. Phys. Soc. Jpn.*, vol. 83, no. 9, p. 094711 [11 Pages], Sep. 2014.
2. First-principles study of carrier-induced ferromagnetism in bilayer and multilayer zigzag graphene nanoribbons, K. Sawada, *F. Ishii, and M. Saito, Appl. Phys. Lett. **104**, 143111 (2014).
3. “Validity of virial theorem in all-electron mixed basis density functional, Hartree-Fock, and GW calculations”, R. Kuwahara, Y. Tadokoro, and *K. Ohno, J. Chem. Phys. **141**, 084108;1-6 (2014).
4. “Linearized self-consistent GW approach satisfying the Ward identity”, R. Kuwahara and *K. Ohno, Phys. Rev. A **90**, 032506;1-9 (2014).
5. Coupling of Er light emissions to plasmon modes on In_2O_3 : Sn nanoparticle sheets in the near-infrared range *H. Matsui, W. Badalawa, T. Hasebe, S. Furuta, W. Nomura, T. Yatsui, M. Ohtsu and H. Tabata *Appl. Phys. Lett.* **105**, 041903 (2014).
6. Effect of acceptor co-doping on magnetism and electronic states in ferromagnetic semiconductor (Zn,Cr)Te, K. Zhang, R. Akiyama, K. Kanazawa, *S. Kuroda, H. Ofuchi, phys. stat. sol. (c) **7-8**, 1312-1315 (2014).
7. “Isotope composition dependence of the band-gap energy in diamond”, *H. Watanabe, *T. Koretsune, S. Nakashima, S. Saito, and S. Shikata, Phys. Rev. B **88** 205420 (2013)
8. Nonthermal antiferromagnetic order and nonequilibrium criticality in the Hubbard model, *N. Tsuji, M. Eckstein, and P. Werner, Phys. Rev. Lett. **110**, 136404 (2013)

主な発表書籍

本新学術領域研究に関連して 42 篇の書籍が出版された。以下に主なものを記す。

1. “Car-Parrinello Molecular Dynamics”, B. Mauro and A. Oshiyama, in *Encyclopedia of Nanotechnology* (Springer 2015).
2. “Theory for Reliable First-Principles Prediction of the Superconducting Transition Temperature”, Y. Takada, in “Carbon-Based Superconductors: Toward High-Tc Superconductivity” (Pan Stanford Publishing, Singapore), edited by J. Haruyama, Chap. 8, pp.193-230 (2015).
3. ナノテクによる新しい有機・炭層系デバイス”、石田敬雄、中村恒夫 「熱エネルギー高度有効利用と省エネルギー技術」 2015
4. Chapter 2: Nonequilibrium Phonon Green’s Function Simulation and Its Application to Carbon Nanotubes, T. Yamamoto, K. Sasaoka, S. Watanabe, in “Nanoscale Energy Transport and Harvesting: A Computational Study” edited by Gang Zhang (Pan Stanford Publishing), pp. 59-90 (2014).
5. First-principles calculations for laser induced electron dynamics in solids, K. Yabana, Y. Shinohara, T. Otobe, J.-I. Iwata, G.F. Bertsch, Advances in Multi-Photon Processes and Spectroscopy Vol.21, pp.209-244, (2014), Eds. S.H. Lin, A.A. Villaeys, Y. Fujimura, World Scientific Co.
6. 金属錯体の量子・計算化学：山口兆、増田秀樹、榊茂好 編、錯体化学選書 10、三共出版、「第 4-1 章担当」(2014) 重田育照
7. “第 6 章 活性部位の量子力学計算”，倭 剛久，ゲノム系計算科学 (美宅・金田・笹井編) 共立出版，東京，pp. 145-171 (総頁数 235)，(2013).

8. "Computational Materials Design of d^0 Ferromagnetism in Metal Oxides", M. Seike, T. Fukushima, K. Sato, H. Katayama-Yoshida, (invited chapter contribution in New Developments in Metal Oxides Research) Nova Science Publishers Inc., 2013 ISBN: 978-1-62808-148-0
9. 岩波講座「計算科学」全6巻, 宇川彰、押山淳、小柳義夫、杉原正顯、住明正、中村春木、別巻1 (2012、岩波書店)
10. 計算と物質 (岩波講座「計算科学」第3巻) 押山淳、今田正俊、高田康民、大野かおる、杉野修、天能精一郎、(2012、岩波書店)。
11. 大阪大学新世紀レクチャー 計算機マテリアルズデザイン先端研究事例II「抵抗変化メモリの知的材料設計」、大阪大学出版会、2012、笠井秀明(分担)
12. "Quantum Monte Carlo study of the binding of a positron to polar molecules", Y. Kita and *M. Tachikawa, (Advances in Quantum Monte Carlo, ACS symposium series 1094, by S. Tanaka, S. M. Rothstein, and W. A. Lester, Jr.), 157-173 (2012).

主な招待講演

本新学術領域研究の代表者、分担者、連携研究者による学会での招待講演は、国際会議 335 件、国内会議 163 件の計 498 件を数え、本新学術領域研究における活発な研究活動の証左となっている。以下にその一部を示す。

1. Y. Takada, "Spin-singlet resonance state in proton-embedded metals: Discovery of novel high-T_c system leading to high-T_c superconductivity", Condensed Matter Physics 2015 (Boston, USA, 22-24 June, 2015).
2. Y. Takada, "Light fermion problem in the low-density electron gas", International Conference Superstripes 2015 (Ischia, Italy, 13-18 June, 2015).
3. S. Watanabe and B. Xiao, "Density Functional Study concerning Tantalum Oxide based Resistive Switching Devices", 9th International Conference on Computational Physics (ICCP9), Singapore, 2015 年 1 月 7-11 日。
4. A. Oshiyama, "Large-Scale Real-Space Density-Functional Calculations: Moiré-Induced Electron Localization in Graphene and Floating States in SiC" 32nd International Conference on the Physics of Semiconductors (Austin, Texas, USA, August 2014).
5. Y. Shigeta, "A Molecular Design of Nonlinear Optical Properties and Conductivity Switches on the Basis of Open-shell Nature", 2014 Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems (WINDS), Nov. 30th-Dec. 5th 2014, Hawaii, USA.
6. Y. Takada, "Mechanism of Superconductivity in Polar Crystals", Workshop at ESPCI Paris Tech (Paris, France, 6 February 2014).
7. M. Imada, Ab initio Studies on Mechanism for Iron-based Superconductors, International Symposium on "Novel states in correlated condensed matter - from model systems to real materials", Frankfurt am Main, Germany, 2014 年 04 月 08 日～10 日
8. Y. Yamamoto, A nonlinear eigenvalue problem arising in theoretical fluid dynamics and its solution using signed singular values, The Fifth China-Japan-Korea Conference on Numerical Mathematics, 2014 年 08 月 25 日～2014 年 08 月 28 日, Yinchuan, China
9. H. Nakanishi, "Quantum states of impurity hydrogen isotopes in covalent crystals", 10th International Conference on Diffusion in Solids and Liquids (DSL-2014), June 23-27, 2014, Paris, France
10. K. Yabana, First-principles description of strong electromagnetic fields in solids, Focus session: Computer Simulation of Interaction of Electromagnetic fields and Nanostructures, APS Meeting 2014, Colorado Convention Center, Denver, USA, Mar. 3-7, 2014.
11. S. Watanabe, X. Bo, and S. Kasamatsu, "First-Principles Simulations on Electric and Dielectric Properties of Metal-oxide Heterostructures for Novel Nanoscale Devices", IUMRS International Conference in Asia 2013 (IUMRS-ICA-2013) (December 19, 2013, Bangalore, India).
12. T. Sakurai, Y. Futamura, Y. Maeda, T. Yano, L. Du, A. Imakura and H. Tadano, "A Scalable Parallel Eigensolver using Contour Integral-based Spectral Projection", 2013 NCTS Workshop on Numerical Linear Algebra and High Performance Computing (2013 NLA-HPC), National Tsinghua University, Hsinchu, Taiwan, Dec. 9-12, 2013
13. K. Sato, "Computational Nano-materials Design and Realization for Semiconductor Spintronics: Control of Defect and Spinodal Nano-Decomposition", International Symposium on Non-ergodic behavior in martensites, Duisburg, Germany, 28-30, Jan. 2013.
14. T. Nozaki, "Electric-field induced ferromagnetic resonance in magnetic tunnel junctions", 58th Magnetism and Magnetic Materials Conference, Denver, Colorado, USA, 8 Nov. 2013.
15. Y. Takada, "Superconductivity in Carbon-Based Materials", Superstripes 2013 Quantum Phenomena in Complex Matter (Ischia, Italy, 29 May, 2013).
16. T. Ono, "First-principles electronic-structure and transport calculation formalism using real-space grid based method (Plenary talk)", Computational and theoretical analysis of grid-based quantum many-body theory (September 21-27, 2013, Rhodes, Greece).
17. Markus Wilde, "Subsurface Hydride Formation Mechanisms at Pd(110)", 9th International Conference on Diffusion in Solids and Liquids (DSL-2013) (Madrid, Spain, June 24-28, 2013)
18. Eiji Tsuchida, Adaptive Finite Element Method for Ab Initio Molecular Dynamics Simulations, 12th U.S. National Congress on Computational Mechanics, U.S.A., 2013/07/22.

19. [A. Oshiyama](#), "Materials Design through Computics: Large-Scale Density-Functional Calculations for Nanomaterials in the Real-Space Scheme" Int. Summer School on HPC Challenges in Computational Sciences (New York City, USA, June 2013).
20. [T. Yamato](#), T. Tsuduki, A. Tomita, [S. Adachi](#), S. Koshihara, "Ligand migration in myoglobin: A combined study of computer simulation and x-ray crystallography", 4th France-Japan Joint Seminar, Imaging of spatiotemporal hierarchies in living cells – an overview of dynamics from molecules to cells –, Jan 6–11, 2013, Hyogo, Jpn.
21. [I. Katayama](#), K. Shudo, [J. Takeda](#), and M. Kitajima, "Nanoscale and Femtosecond Phonon Dynamics Observed with Surface Enhanced Raman Scattering", Ultrafast Surface Dynamics 2013, (May 28-31, 2013, Colorado, USA).
22. [M. Tachikawa](#) (Invited), "Multi-component molecular methods for hydrogen bonded systems and positronic compounds", ISTCP-VIII (The VIIIth Congress of the International Society of Theoretical Chemical Physics), (Budapest, Hungary, on 25-31, August, 2013)
23. [S.-L. Zhang](#), D. Lee, T. Miyata and T. Sogabe, "An intermediate eigenvalue problem in electronic structure calculation", The 4th Workshop on Numerical Algebra and High Performance Computation (招待講演), 2012年12月08日~2012年12月12日, University of Macau, Macau, China
24. [S.-L. Zhang](#), A. Imakura and T. Sogabe, "Look-Back GMRES(m) for solving large nonsymmetric linear system, Numerical Linear Algebra ---Algorithm, Applications, and Training, an NOW-JSPS joint seminars (招待講演), 2012年04月10日~2012年04月12日, Delft University of Technology, Delft, Netherlands
25. [A. Oshiyama](#), "Real-Space Density-Functional Approach to Electronic Properties of Nanostructures" Conference on Computational Physics, (October 14-18, 2012, Kobe, Japan)
26. [T. Ozaki](#), "Large-scale electronic structure calculations by OpenMX: Current status and future", Material Simulation in Petaflops era (MASP) 2012, ISSP, Univ. of Tokyo, Japan, 11th July, 2012.
27. [J.-I. Iwata](#), Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC2012), "First-principles electronic structure calculations with K computer", 2-7 Sep, 2012, Pavia, Italy
28. [S. Tsuneyuki](#), "Transcorrelated method: a feasible and self-consistent wave function theory for solids", Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (Asian-15), Nov. 5-7, 2012, Taipei.
29. [K. Sato](#), "Computational Nano-materials Design and Realization for Semiconductor Spintronics: Control of Defect and Spinodal Nano-Decomposition", Gordon Research Conference on Defects in Semiconductors, Biddeford, ME, USA, 12-17 Aug. 2012.
30. [M. Imada](#), Quantum Monte Carlo for strongly correlated systems, Conference on Computational Physics (CCP2012), Nichii Gakkan, Hyogo, 2012年10月15日
31. [K. Ohno](#), R. Kuwahara, S. Ono, Y. Noguchi, R. Sahara, H. Mizuseki, and Y. Kawazoe, "The almighty first-principles program, TOMBO", The 7th Conference of the Asian Consortium on Computational materials Science (ACCMS7, Nakhon Ratchasima, Thailand, July 23-28, 2013).
32. [N. Tsuji](#), "Nonthermal fixed point in the antiferromagnetic Hubbard model", Non-equilibrium dynamics of correlated electron-systems, Krvavec, Slovenia, December 19, 2013.
33. [H. Matsui](#), Crystal growth and optoelectronics in quantum nanostructures on nonpolar oxides, The 3th Collaborating conference on Crystal Growth (3CG2013), Cancun, Mexico, 12, June 2013

ホームページ

本新学術領域ホームページは領域発足後まもなくの、平成22年9月16日から一般公開された。URLは<http://computics-material.jp/>であり、日本語版および英語版が用意され、わかりやすい情報提供を目指している。各ページでは、各研究課題の説明、過去に開催された研究集会のプログラム、プレゼンテーション・ファイル、アブストラクト、開催した関連国際会議の内容、また年1回冊子形式で発行している成果報告書、英文の最終報告書、ニュースレターなどが掲載され、本学術領域の意義・目的と研究活動状況が公開されている。現時点(2015年6月13日)までの訪問者数は61,770人となっている。

また、「コンピューティクス勉強会」のwikiも作成されており、1)勉強会のアナウンス、各講演のアブストラクトと発表資料、2)物理系アプリケーションの非公開ソースコードの配布案内、3)物理系の計算科学プログラマから情報系コンパイラ研究者への要望、4)物性研のスパコンユーザ向けアンケート紹介、5)計算物理学初心者のための資料および書籍紹介、などが掲載されている。さらに各種アプリケーションも対応するホームページ上で公開されている。

主催シンポジウム

本新学術領域研究の総括班の主催による公開の国際シンポジウム、International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design が2012年大阪大学、2014年東京大学で開催された。URLはそれぞれ、<http://computics-material.jp/ISC-QSD2012/>、<http://computics-material.jp/ISC-QSD2014/>である。それぞれの参加人数は150-200人程度であり、その内、30名程度が国外からの参加者であった。コンピューティクスによる物質デザインについての活発な議論が繰り広げられた。アブストラクト・ブック、プログラムはウェブページで公開されている。関連国際会議としては、総括班メンバーが実行委員会・国際諮問委員会メンバーとして参画している Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations [第14回 (ASIAN-14) は、2011年10月31日~11月2日に東京大学武田ホール(東京)にて参加者188名で開催。渡邊聡と常行真司が共同実行委員長] があげられる。これ以外にも各研究項目、各研究班で個別に研究集会が開催されており、平成26年度に限っても、8件の国際研究集会が開催され、延

べ 371 名の参加実績がある。

受賞

新学術領域研究の期間内、研究代表者、研究分担者、連携研究者が対象となった受賞は 27 件。以下に一部を記す。

- 岩田潤二、高橋大介、押山淳、朴泰祐他、2011 年 ACM ゴードン・ベル賞（最高性能賞）受賞論文：“First-principles calculations of electron states of a silicon nanowire with 100,000 atoms on the K computer”
- 則竹渚宇、今倉暁、山本有作、張紹良、日本応用数学会、平成 23 年度日本応用数学会論文賞、「行列の指数関数に基づく連立線形常微分方程式の大粒度並列解法とその評価」、2011 年 9 月 15 日
- 小野倫也、第 5 回（2011 年）日本物理学会若手奨励賞
- 笠井秀明、平成 24 年度科学技術分野の文部科学大臣表彰科学技術賞(研究部門)、「量子ダイナミクス理論の提唱と知的材料設計手法の開拓的研究」、2012 年 4 月 9 日
- Susan Meñez Aspera、日本真空学会 第 22 回 真空進歩賞 2013 年 11 月 28 日
- 笠井秀明、バンドン工科大学"Ganesa Widya Jasa Adiutama" Award 2014 年 7 月 3 日

情報発信

研究成果の新聞報道も行われた。以下はその一部である。

1. 読売新聞（2011 年 11 月 18 日）：“スパコン「京」に最高栄誉のゴードン・ベル賞”；朝日新聞（2011 年 11 月 18 日）：“スパコン「京」にゴードン・ベル賞 実計算でも最速証明”；毎日新聞（2011 年 11 月 18 日）：“スパコン「京」が米国計算機学会のゴードン・ベル賞受賞”；ゴードンベル賞関連は、上記以外に日本経済新聞、産経新聞、日刊工業新聞等に掲載
2. 科学新聞（2011 年 11 月 4 日）：“クロムやバナジウム添加で鉄の磁性が増大 阪大グループが解明 第一原理電子状態計算を利用 永久磁石材料に応用期待”
3. 読売新聞（2013 年 3 月 4 日）「燃料電池 発電の仕組み解明 トンネル効果働く 阪大グループ」
4. 北国新聞（2013 年 6 月 29 日）「情報伝達のエネルギー抑制 高効率化に期待、半導体デバイスで世界初 金大・小田教授ら国際研究チーム」
5. 東京新聞（2013 年 7 月 5 日）「スマホ充電回数が激減！？ 千葉大坂本准教授ら スピン流制御に成功 電化製品省エネなど期待」
6. 日刊工業新聞（2013 年 10 月 2 日）「SOFC の酸素イオン伝導 量子トンネル効果要因 阪大」
7. 日経産業新聞（2013 年 10 月 2 日）「燃料電池、小型化メド 固体酸化物型セ氏 300 度で作動 阪大など」
8. 日刊工業新聞（2014 年 11 月 19 日） ``単分子メカスイッチ：抵抗値三段階出力”
9. Superconductor Week（2015 年 3 月 10 日）：U Tokyo Creates Theoretical SC Model for Iron-Based Compounds
10. 日刊工業新聞（2015 年 1 月 16 日）：“「電子密度のゆらぎ」増大が鉄系超伝導の原因に - 東大が理論計算で証明”

アウトリーチ活動としては以下があげられる。

- 押山、岩田：日経コンピュータ 2012 年 1 月 5 日号 特集記事「京速コンピュータ：スパコンが創る新たな社会」
- 稲葉：「主要大学説明会」で高校生向け講演。札幌 2014/8/24 広島 2013/9/8 福岡 2012/8/10 大坂 2011/8/9。また最先端の情報技術を実践的に活用することができる人材育成を目指し、全国 15 大学が中心となって行っている enPiT(分野・地域を越えた実践的情報教育協働ネットワーク)の講師として活動。
- 常行：2012 年 7 月 31 日(火)、東大理学部「高校生のための夏休み講座 2012」(東京大学理学部 1 号館)「コンピュータ上に『物質』をつくる」<http://www.s.u-tokyo.ac.jp/ja/event/highschool-program/2012summer/>。
2012 年 9 月 22 日(土)、日本物理学会主催 市民科学講演会(横浜情報文化センター)「コンピュータ上に『物質』をつくる—スーパーコンピュータを用いた物質科学研究入門」<http://jps2012au.ynu.ac.jp/index/>。
2011 年 7 月 13 日(水) 埼玉県立総合教育センター研修(於 東大情報基盤センター)(情報基盤センターの報告書 PDF 添付)「コンピュータの中に『物質』をつくる—シミュレーションを使った物質科学研究の最前線—」
- 中西：大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センター「ナノ高度学際教育研究訓練プログラム」で行われる「社会人教育プログラム」(http://www.sigma.es.osaka-u.ac.jp/pub/nano/02_shakaijin/index.html)に、講師として参加し、科学研究への理解を促し、プロジェクトに関するアウトリーチ活動を行っている。計算機マテリアルデザインのエキスパート養成講座である CMD ワークショップで自らのコードを提供し、講師を務めている。
- 前園涼：金沢地区でコンピュータを用いた科学について、高校生向け授業・実験・実習の講座を 22-26 年度に 6 件開催。内容は北国新聞、北陸中日新聞、文教ニュース等で多数報道

7. 研究組織（公募研究を含む）と各研究項目の連携状況（2 ページ程度）

領域内の計画研究及び公募研究を含んだ研究組織と領域において設定している各研究項目との関係を記述し、どのように研究組織間の連携や計画研究と公募研究の調和を図ってきたか、組織図や図表などを用いて具体的かつ明確に記述してください。

本新学術領域研究においては、

A01: 計算機アーキテクチャと高速計算アルゴリズム（計画研究 3 班、公募研究 3 班）

A02: 密度汎関数理論の新展開（計画研究 5 班、公募研究 20 班）

A03: 密度汎関数理論を越えて（計画研究 3 班、公募研究 11 班）

の 3 つの研究項目を立てて研究活動を推進してきた。各計画研究と公募研究の研究題目と代表者は p2-p7 に表としてまとめられている。

Hohenberg、Kohn、Sham によって創始された密度汎関数理論（Density Functional Theory: DFT）は、物質の全エネルギーが密度の汎関数として表されるという深遠な科学的発見と、電子交換相関エネルギーに対する比較的簡便な近似（Local Density Approximation: LDA および Generalized Gradient Approximation: GGA）の導入により、20 世紀後半より大きな発展を遂げた。実際の物質の構造的性質、電子的性質が経験パラメータを含まない計算（第一原理計算）により驚くほどの精度で再現され、またそれにより、未知の物質、構造体における信頼性の高い物性予測が可能になってきた。これにより現在では、密度汎関数理論は物理・化学分野のみならず、理工学の広い分野で、その有用性が認識されている。

一方、DFT の LDA 近似、GGA 近似では記述できない現象も数多く存在することが知られている。半導体のエネルギーギャップが過小評価される問題、高温超伝導体の母物質（キャリアドーピング前の物質）の磁気的秩序状態が記述できない問題など、主に電子相関の強い物質群における LDA 近似、GGA 近似の限界は明らかである。一方そうした強相関電子系に対しては、従来からのモデルハミルトニアンが導入され、モデルのパラメータ空間内での定性的議論が行われてきた。この両方のアプローチを、より高いレベルで統合していくこと、それにより、物質中の複合相関と非平衡ダイナミクスを明らかにしていくことが重要である。

A02 および A03 研究項目での活動は、空間、時間、精度 の 3 つの軸に沿ったチャレンジと云える。今世紀のテクノロジーを支えるナノ構造・物質は数万から数十万の原子から構成されている。そうした系に対する量子論に基づく計算は前人未到の領域であり、空間軸におけるチャレンジである。また電子遷移のサブフェムト秒から原子振動のピコ秒、相転移のナノ秒、マイクロ秒までのダイナミクス解明は、時間軸におけるチャレンジである。また物質は量子多体系であり、信頼できる計算結果を得るためには精度軸での高度化が欠かせない。



図：計画研究課題は下線あるいは横線。A01（赤）、A02（青）、A03（緑）研究項目は色で区別。

A02、A03 研究項目の各班の研究活動を、この 3 本の軸にそって示すと図のようになる。A02 研究項目の 5 計画研究は、主に空間軸と時間軸に沿って位置づけられる。ナノ構造、バイオ物質に対する大規模 DFT 計算と Car-Parrinello 分子動力学計算（押山）、新たなモデル化による高精度熱伝導率ダイナミクス計算（常行）、ナノ接合での直流・交流電流応答（渡邊）、軽元素軽粒子の量子論ダイナミクス計算（中西）、多自由度系としてのタンパク質での反応探索（倭）がそれである。A02 の公募研究は、それとは相補的な

課題となっている。このふたつの軸に沿った補完的な研究テーマとしては、時間依存 DFT+電磁場（矢花）、ナノドットにおける非線形光学応答（重田）、タンパク質内遷移金属原子（鷹野）、多成分（電子、陽電子、核子）DFT（立川）があげられる。分子接合系での輸送現象は、計算（中村）、実験（木口）の双方で追求された。また、分割統治法による大規模長時間シミュレーションの試みもなされた（下條）。DFTにおける交換相関エネルギー汎関数の改良も行われ（合田、今村）、これは精度軸での高度化の意味がある。熱電物質の探索と実験的実証（山本）は、密度汎関数法のターゲット範囲を広げる試みとも云える。

A02 研究項目での主なる手法である DFT は A03 研究項目でも活用されている。スピントロニクス材料の探索（佐藤）、半導体中欠陥の同定（斎藤）、酸化物超格子の物性（石井）、電子格子相互作用によるギャップ変調（是常）では、DFT 電子状態計算がその基盤を形成している。またダウンフォールディング法による低エネルギー有効モデルの導出（今田）の出発点は DFT 計算である。

A03 研究項目での計画研究における密度汎関数法を越えるアプローチは二つに分けられる。ひとつは DFT 計算からダウンフォールディングにより低エネルギー有効モデルを導き、それを高精度に解くことにより、新たな量子相を探索するものであり（今田）、もうひとつは、ターゲット物質の直接の高精度計算を行うものである（高田）。後者の範疇には、実際の合金・不規則系への DFT 計算の拡張と他の手法のハイブリッド・アプローチも含まれる（佐藤）。いずれの場合も、無限次元摂動展開、量子モンテカルロ手法などの高精度解法が行われた。A03 の公募研究は、この二つのアプローチのいずれかに区分できる。低エネルギー有効モデルの非平衡ダイナミクスを調べる研究（辻）は前者であり、無限次元摂動展開のひとつである GW 近似による物質計算（小谷、大野）は後者である。

図中の各研究課題の位置づけからも明らかなように、A02、A03 の区分は必ずしも明確なものではなく、これは現代の計算物質科学が手法のハイブリッド化という新たなフェーズに突入していることを示している。

すでに「2. 研究領域の設定目的の達成度」でも述べたように、A02、A03 の研究項目には、10 班の実験的研究も加わり、領域内での計算と実験の共同研究も行われた。

コンピューティクス分野の確立という観点からは、A01 研究項目と A02 および A03 研究項目の連携は欠くことのできない重要なファクターである。本新学術領域では、両分野のトピックスを議論しあう「コンピューティクス勉強会」が総括班（世話人：A01 稲葉班、A02 渡邊班、常行班）により随時開催され、計算科学側（A02、A03 研究項目）とコンピュータ科学側（A01 研究項目）双方から具体的な課題を提示し、face-to-face の議論により問題解決を目指した。実際そうした議論により、A01 で展開されている HPC におけるアルゴリズムと数理手法が物質側に伝授され、A02、A03 の多くのアプリケーションは格段に高度化された。すでに述べたように、RSDFT コードによる ACM/IEEE の Gordon Bell 賞（最高性能賞）受賞、非平衡輸送グリーン関数計算でのクリロフ部分空間法による 20-30 倍の高速化、ELSES コードによる一億原子群超大規模電子状態計算、櫻井・杉浦法によるエネルギー・スペクトル計算などが代表的な例である。

8. 研究経費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む）（1ページ程度）

領域研究を行う上で設備等（研究領域内で共有する設備・装置の購入・開発・運用・実験資料・資材の提供など）の活用状況や研究費の効果的使用について総括班研究課題の活動状況と併せて記述してください。

本新学術領域研究での研究経費は、主に、①博士研究員およびリサーチアシスタントの雇用、②クラスター計算機の導入、③外部スーパーコンピュータの使用料、④実験的実証のための実験設備導入の補助、の四点に用いられた。

①については18名の博士研究員が雇用された。この中には他の研究プロジェクトとの合算により雇用された研究員も含まれる。また大学院生を約50名、リサーチアシスタントとして雇用した。これら若手研究者は、本新学術領域の中核を担い、大きな貢献を成した。「10. 研究計画に参画した若手研究員の成長の状況」に記載のとおり、全員、次のポジションを得て新たな研究あるいは教育活動を開始している。本新学術領域研究の目的はコンピューティクス分野の確立であるが、その実体はこうした若手研究者の育成であると考えている。

②のクラスター計算機は、メニーコア・超並列アーキテクチャのスーパーコンピュータでの、それぞれのアプリケーションの最大限の高性能化をはかる、作業マシンである。超並列機の導入は不可能であるので、同一あるいは類似の計算ノードを有する数十ノード規模のクラスターマシンが各班で導入され、プログラム開発、新数理手法・アルゴリズムの検証、性能評価に活用された。またポスト「京」コンピュータを意識した実験的なマシン、具体的にはGP-GPU加速装置を用いたクラスター計算機、も導入され、物質科学計算におけるアプリケーションとの適合性の検証、新たなプログラミング言語でのアプリケーション開発、さらにそれを支える数学サブプログラム群が開発された。これらのクラスター計算機は、ネットワーク上でつながっており、必要に応じて領域内他の研究班の使用に供せられた。

③は物質科学のプロダクション・ランのためのマシンであり、計算物質科学の推進には欠かせない。我が国には神戸の「京」コンピュータ、また全国共同利用センターのスーパーコンピュータが運転中であり、これらの計算リソースは、大抵は研究提案をもとに配分されている。しかしながら、いくつかの全国共同利用センターでは課金システムによる運営を行っている。本新学術領域研究の研究経費の一部は、その計算機使用料として使われた。

④の実験グループへの補助は、二つに分けられる。ひとつは計画班に参画している実験グループへの補助であり、もうひとつは公募班として参画した実験的研究班の経費執行である。実験的研究の重要性はいうまでもないが、本新学術領域研究の性格上、実験設備の導入に対しては、補助的役割を果たしたにすぎない。

総括班経費は、領域内で開催する各種研究会開催費用、国際シンポジウムの開催費用、国内外旅費に主に使われた。領域内の連携に役だったと考えている。

・研究費の使用状況

(1) 主要な物品明細(計画研究において購入した主要な物品(設備・備品等。実績報告書の「主要な物品明細書」欄に記載したもの。)について、金額の大きい順に、枠内に収まる範囲で記載してください。)

年度	品名	仕様・性能等	数量	単価(円)	金額(円)	設置(使用)研究機関
2 2	計算機装置	HPC-ProServer DPeR610)	一式	4,725,000	4,725,000	東京大学
	並列計算機システム	ビジュアルテクノロジー株式会社製 VT64FileServer7500X-RM316	一式	3,557,400	3,557,400	名古屋大学
	HPC コンピューター式	4 ノード 24 コア	1	2,999,376	2,999,376	東京大学物性研究所
	PC クラスタ	物質デザインシミュレータ	一式	2,617,000	2,617,000	産業技術総合研究所
2 3	量子ダイナミクスシミュレータ	TS2iR1-C7(33)L-01a/M640	1	9,019,080	9,019,080	大阪大学
	計算機装置	HPC-ProServer DPeR910	一式	5,911,000	5,911,000	東京大学
	HPC システムズ社製 GPGU 計算機サーバ	EvoHG3-SIP-i(3.46M12-6/2-48G500G/1+2090x2)	1	4,846,527	4,846,527	東京大学
	計算機クラスタ	リアルコンピューティング製、RCA2500/GTX, 6CPU/36Core, 4GPU	一式	3,535,000	3,535,000	金沢大学
2 4	大規模並列数値計算用機器一式	VT64 Servern E5-2S、2TS	1	9,995,000	9,995,000 (8,000,000)	東京大学
	GPGPU ラックマウントタイプ計算機システム一式	HPC テック	1	4,987,000	4,987,000	東京大学
	計算機装置	HPC-ProServer DPeR620	一式	4,494,000	4,494,000	東京大学
	クラスタエレメント	(株)コンカレントシステムズ社製 TS2R1-E56(33)	1	4,423,650	4,423,650	大阪大学
	ハイパフォーマンスコンピュータ一式	HPC-5000-XS2UTwin-SIP	1	3,885,000	3,885,000	東京大学
2 5	計算機クラスタ	コンカレントシステムズ、TS3DR2-E510(28)	1	4,235,000	4,235,000	金沢大学
2 6	低速電子線回折装置 LEED/AES	ICF152, 4 グリッド, 背面・BDL600IR	1	2,799,360	2,799,360	東京大学 大阪大学
	VT6 サーバシステム	ビジュアルテクノロジー株式会社製 VT64 FileServer E3-3S (V3)	一式	2,540,000	2,540,000	名古屋大学

(2) 計画研究における支出のうち、旅費、人件費・謝金、その他の主要なものについて、年度ごと、費目別に、金額の大きい順に使途、金額、研究上必要な理由等を具体的に記述してください。

主なる経費は、コンピューティクス学術分野を確立し計算物性科学を推進する人材である、博士研究員の雇用にあてられた。また、同じく大学院生も RA などの形態で雇用された。

【平成 22 年度】

- ・旅費
1,259,280 円 (研究成果発表)
1,220,000 円 (外国人准教授滞在費)

- ・人件費・謝金
3,440,053 円 (PD 雇用)
2,302,679 円 (PD 雇用)

- ・その他
997,000 円 (プログラムチューニングコンサルテーション作業)

【平成 23 年度】

- ・旅費
1,350,547 円 (研究成果発表)

- ・人件費・謝金
5,884,256 円 (PD 雇用)
5,585,000 円 (PD 雇用)
5,484,880 円 (PD 雇用)
5,271,633 円 (PD 雇用)
5,000,000 円 (PD 雇用)
4,148,405 円 (PD 雇用)
3,000,000 円 (PD 雇用)
2,415,622 円 (研究サポート人員雇用)
1,800,000 円 (PD 雇用)
888,000 円 (RA 謝金)
- ・その他
1,050,000 円 (大型計算機利用料)

【平成 24 年度】

- ・旅費
804,110 円 (研究成果発表)

- ・人件費・謝金
7,721,000 円 (PD 雇用)
6,000,000 円 (PD 雇用)
5,930,475 円 (PD 雇用)
5,465,520 円 (PD 雇用)
5,084,773 円 (PD 雇用)
5,000,000 円 (PD 雇用)
4,152,459 円 (PD 雇用)
1,964,740 円 (PD 雇用)
1,200,000 円 (準博士研究員謝金)

- ・その他
525,000 円 (大型計算機利用料)

【平成 25 年度】

- ・旅費
1,592,360 円 (外国出張)
1,514,591 円 (外国出張)
1,038,879 円 (外国出張)
1,001,936 円 (研究成果発表)

- ・人件費・謝金
6,000,000 円 (PD 雇用)

5,948,924 円 (PD 雇用)
5,672,000 円 (PD 雇用)
5,609,151 円 (PD 雇用)
5,446,045 円 (PD 雇用)
5,222,064 円 (PD 雇用)
4,783,675 円 (PD 雇用)
3,156,000 円 (サポート職員雇用)
3,000,000 円 (PD 雇用)
1,200,000 円 (準博士研究員謝金)

・その他
525,000 円 (大型計算機利用料)

【平成26年度】

・旅費
918,540 円 (国際会議出張旅費)
760,813 円 (研究成果発表)
576,385 円 (研究成果発表)
514,660 円 (外国出張)

・人件費・謝金
6,039,280 円 (PD 雇用)
5,532,000 円 (PD 雇用)
5,482,630 円 (PD 雇用)
5,079,991 円 (PD 雇用)
3,702,747 円 (PD 雇用)
3,600,000 円 (PD 雇用)
3,000,000 円 (PD 雇用)
3,000,000 円 (PD 雇用)
2,916,106 円 (研究員給与)
2,139,000 円 (サポート職員雇用)
1,316,368 円 (サポート職員雇用)
1,017,167 円 (PD 雇用)
994,049 円 (サポート職員雇用)

(3) 最終年度(平成26年度)の研究費の繰越しを行った計画研究がある場合は、その内容を記述してください。

9. 当該学問分野及び関連学問分野への貢献度（1 ページ程度）

研究領域の研究成果が、当該学問分野や関連分野に与えたインパクトや波及効果などについて記述してください。

計算物理学あるいは計算化学（量子化学）は、実験、理論に代わるあるいはそれを補完する第三のアプローチとして 1980 年代から発展してきた。それは物理・化学における理論的アプローチが、ともすれば現象の定性的理解にとどまり、実際の物質でのリアルな現象の定量的理解や新現象の予測につながっていなかったことと、物理学・化学における基本方程式をコンピュータ上で数値的に解くことが現実的に可能になってきたことに起因する。こうした計算のアプローチは、その後大きな広がりを持ち、物理学・化学にとどまらず、理工学全般、さらには社会科学にまで、その有用性は認識されてきた。

一方、1980 年代に数百 MFLOPS であったスパコンの性能は、現在ではその一億倍を超える 10 Peta FLOPS が達成され、さらに 2020 年の日本ではその百倍の 1EFLOPS マシンの開発がロードマップにのっている。一方、スパコンを支える単体ロジックデバイスの性能は、ムーアのスケーリング則の破綻により、すでに飽和している。現代のスパコンは、したがって、莫大な数の演算ノードを高速ネットワークで結合し、さらに特定の計算のためのハードウェア加速装置を備えたアーキテクチャとなっている。

こうした現代および将来のスパコンを使いこなして、新たな科学の地平を切り開くためには、スパコンのハードウェアを熟知し、科学の基本方程式の数学的構造を理解し、ハードウェアに適合した数理手法とアルゴリズムを導入する、新たな計算科学が必要である。それを我々はコンピューティクスとよんだ。

計算科学の新たなフェーズとも言うべきコンピューティクスの確立は、世界的に見ても、本新学術領域が先鞭をつけたものである。本新学術領域研究期間内の 2012 年と 2014 年に開催された **International Workshop on Computics** は国内外の多くの参加者を得て、コンピューティクス分野の確立に寄与した。

また、我が国における主要な研究開発プログラムとして、京コンピュータの利活用を目指した、文科省による **HPCI(High Performance Computing Infrastructure)** 戦略プログラムがあるが、本新学術領域研究の主要メンバーは、分野 2「新物質・エネルギー創成」の中核を担い、また領域代表者は分野 4「次世代ものづくり」のアドバイザーの任にある。そこでのコンピューティクス・アプローチの基礎科学的基盤を本新学術領域が担っている。さらには 2020 年を目途にした文科省ポスト京（エクサスケール）コンピュータの開発において採用されている、アプリケーションとハードウェアの双方の立場からのコデザインのアプローチは、明らかに本新学術領域のコンピューティクス・アプローチの延長線上にある。

一方、物質科学の側面では、本新学術領域におけるコンピューティクス・アプローチによる、空間・時間・精度の三つの軸に沿った研究活動の深化は、大きなインパクトを与えている。理論研究の側面では、実際の物質での現象を扱うことが可能になる計算科学アプローチの有用性は疑い得ない。一方、計算科学による予測に基づく実験的検証も本新学術領域で行われた。互いにアクセスし難い、空間と時間の領域で、実験と計算が互いに補完し得る、新たな物質科学の地平が開かれたと云える。

こうしたコンピューティクス・アプローチの産業界への波及効果も大である。「ものづくり」を従来からの経験の範疇にとどめておく時代は終わったと考える。ターゲットとする「ものづくり」の素過程に本質的な基本方程式を明らかにし、その方程式を高精度で解くコンピューティクス・アプローチの有用性が期待される。実際、文科省ポスト京プロジェクト重点課題⑦「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」では、量子論デバイス・プロセスシミュレータの開発がスタートしている。

さらにコンピューティクス学術分野を含むさらなる発展として、新たな学術分野が形成されつつあることを指摘したい。新学術領域研究に限っても、「スパースモデリングの深化と高次元データ駆動科学：岡田領域代表」がスタートし、HPC に加えてデータ科学という新たなアプローチも始まってきた。本新学術領域研究の先進性の証左といえる。

10. 研究計画に参画した若手研究者の成長の状況（1 ページ程度）

研究領域内での若手研究者育成の取組及び参画した若手研究者の研究終了後の動向等を記述してください。

本新学術領域には、34名の若手教員および研究員（40歳未満、教員の多数は助教クラス、7名の准教授、研究員は理化学研究所、産業技術総合研究所、物質材料研究機構所属）が分担研究者、連携研究者、研究協力者および公募研究の代表者として参画した。また20名の博士研究員が雇用され研究活動を推進した。また、50名の大学院博士課程在籍者が、本新学術領域研究に参画した。大学院生はおおむねRAとして雇用された。これら若手研究者は、総括班主催の「コンピューティクス勉強会」の主要なメンバーであり、物質科学、計算機科学の両方の側面で発表を行い、議論を活発化させた。また、CMDワークショップ、配信講義などに積極的に参加し、コンピューティクス分野確立のために大きな寄与を成した。さらには、International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design (2012年大阪大学、2014年東京大学)では、良く準備された口頭あるいはポスター発表を行い、彼ら自身にとっても自信になったと思われる。

34名の若手教員/研究員の内17名は、本新学術領域研究終了時には、大学の教授、准教授、理化学研究所上席研究員として転出した。18名の博士研究員の内12名は、大学教員、研究所研究員のパーマネントな職を得た。そのうち4名は母国であるアジア諸国での大学教員の職を得ている。残りの6名は博士研究員として新たな場所で活躍している。50名の博士課程在籍者は全員学位を取得し、大学教員（助教）、大学研究所での博士研究員などのポジション、あるいは産業界での職を得ている。

11. 総括班評価者による評価（2ページ程度）

総括班評価者による評価体制や研究領域に対する評価コメントを記述してください。

寺倉 清之 氏（物質・材料研究機構 フェロー）

科研費「新学術領域研究」の本グループの活動が昨年度に終了し、ちょうど3年前に書いた中間評価の際の感想を読み直してみた。基本的な感想は今も変わらないが、3年間の研究活動によって、3年前の感想と指摘事項がどのように変わったかを記すことによって、プロジェクト終了に際しての感想としたい。

1.

- ・3年前の感想：「京」プロジェクトが、ややもするとトップダウン的な傾向を強く持って進められている一方で、本プロジェクトでは、自然体で計算科学の基盤的な研究活動が進められつつあることは、学問の進展の上で大変望ましいことである。2つのプロジェクトが相互により影響を与えつつ進行していくことに期待している。
- ・今回の感想：基本的に、上記と変わらない感想を持つ。事後評価報告書に記されているように、本プロジェクトの活動は、「京」プロジェクトでのCMSIの活動の基盤としての役割を果たした、というのは妥当な評価であると思う。一方、「京」プロジェクトの存在が本プロジェクトの活動の強い動機になったこともあり、両者が相互により影響をもたらしたと思われる。

2.

- ・3年前の感想：一昔前の計算科学プロジェクトとの顕著な違いとして、計算科学分野と計算機科学分野の連携が重視されていることが印象深い。
- ・今回の感想：計算科学分野と計算機科学分野の連携は、著しく進んだことを評価したい。いくつかの新しいアルゴリズムの開発による計算効率の飛躍的増大が実現し、いくつもの実際の計算プログラムに実装された。具体的には、新たな高速クリロフ部分空間法、並列化3次元FFT、領域選択固有値計算法などがある。これらの開発は、本プロジェクトでの連携がなければなされなかったかも知れない。この連携は、領域代表者が熱意を持って推進したものであり、「コンピューティクス勉強会」が有効に働いた。

3.

計算科学分野固有の活動においても、いくつかの顕著な進展があった。例えば、電子相関が重要な役割を果たす超伝導体の起源の解明や転移温度の評価などに対する、手法開発とソフト開発が進められて著しい進展がみられる。電子相関の問題に対しては、多体問題の正攻法の1つである、GWT法における進展もあった。また、時間依存密度汎関数法とマクスウェル方程式を結合させた手法の開発によるレーザーアブレーションによるナノ加工の機構を解析すること、非断熱的分子動力学法の試みなど、いくつかの新しい試みがあった。

4.

- ・3年前の感想：本プロジェクトで実験研究との連携を強く進めようとしている姿勢が感じられる。プロジェクトがスタートしてようやくほぼ2年が経ったので、そろそろ実験研究との共同研究の顕著な成果が具体的に見えてくることを期待したい。
- ・今回の感想：実験との連携にはかなりの努力がなされた。公募研究としていくつかの提案を取り入れたり、領域横断研究会などの機会を活用したりすることにより、具体的な成果が得られた。

5.

- ・3年前の感想：本プロジェクトでは表だって言われていない、理論研究との連携にも配慮して欲しい。計算が大規模になると、得られた結果の背景にある基本的な物理の理解が困難になる傾向がある。
- ・今回の感想：本プロジェクトには、理論研究にカテゴライズされる研究者も複数参加しており、実質的には上記のことは実行されてきたと認識している。しかし、上に指摘したように、計算が大規模になる

に従って、理論研究との連携は一層必要になると考えており、今後の類似のプロジェクトにおいて、考慮されることが望まれる。

全体として、本プロジェクトは多くの優れた成果を生み出したと認識しており、代表者をはじめ、関わった研究者の努力を高く評価したい。

塚田 捷 氏 (東北大学原子分子材料科学高等研究機構・特任教授)

計算科学による物質材料の研究は、次世代から次々世代へと続くコンピュータの画期的な進歩とともに、その可能性を飛躍的に拡大しつつある一方、従来の計算理論・計算手法の単なる改良ではない画期的な方法論の構築と、それを駆使する野心的な課題の発掘が必要とされている。本新学術領域では、計算科学と計算機科学分野の協働による新規な超並列型計算アルゴリズムの開発を中心目標に掲げ、第一原理法を基盤とする計算理論の革新とこれを実現するチャレンジングな計算手法の開拓をめざした。さらに、このような革新的計算方法を用いて、従来にない物質現象の把握や、計算物性科学のあらたな適用領域の開拓など様々な課題へと挑んだ。

5年間にわたる研究活動によって計算科学の地平を拓く優れた成果が数多く得られたことは、本新学術領域の最終報告書に記載されている内容から明らかであり高く評価できる。それらの成果は本新学術領域の各研究グループが上記の目標に向かって、切磋琢磨しながらたゆまぬ努力を傾け十分な到達点に達したことを証明している。さらに、計算科学者と計算機科学者の協働作業の積み重ね（「コンピューテックス勉強会」）とその成功経験から「次世代 HPC におけるコンピューテックス」のコミュニティの形成が実現されたことは、大きな成功と言える。本新学術領域における膨大な成功例を列挙することはできないが、非平衡グリーン関数輸送計算における高速化、膨大な原子数の系の大規模計算を可能とする ELSES コード、領域選択固有値計算アルゴリズムなど、計算手法上の多くの画期的な改良がすすめられたことは印象的である。また、時間依存密度汎関数法と Maxwell 方程式を連立した第一原理法の開発、あらたな交換相関エネルギー項の導入によるファンデアワールス力の第一原理的計算法の開発など、計算物質科学の分野における最前線を牽引する多くの成果が得られたことも重要な成果と言える。

小柳 義夫 氏 (神戸大学計算科学教育センター・特命教授)

新学術領域研究「コンピューテックスによる物質デザイン：複合相関と非平衡ダイナミクス」は、大規模コンピュータシミュレーションによる物質科学の研究を、コンピュータ科学の専門家と密接な連携を保ちつつ行おうとするプロジェクトで、私はコンピュータ科学からの助言をすることでアドバイザーの任を頂いた。

コンピュータを用いた計算科学の特徴は、従来の諸分野とは異なり、学際性がきわめて高いことである。この学際性には2つの側面がある。この二重の学際性こそが、計算科学の大きな特徴である。一つは、物理、科学、工学などの違った分野間で、モデル化、計算手法、数値アルゴリズム、計算結果の解析などで共通する面が非常に多いことである。ここに、大規模計算を駆使する計算科学の特徴がある。

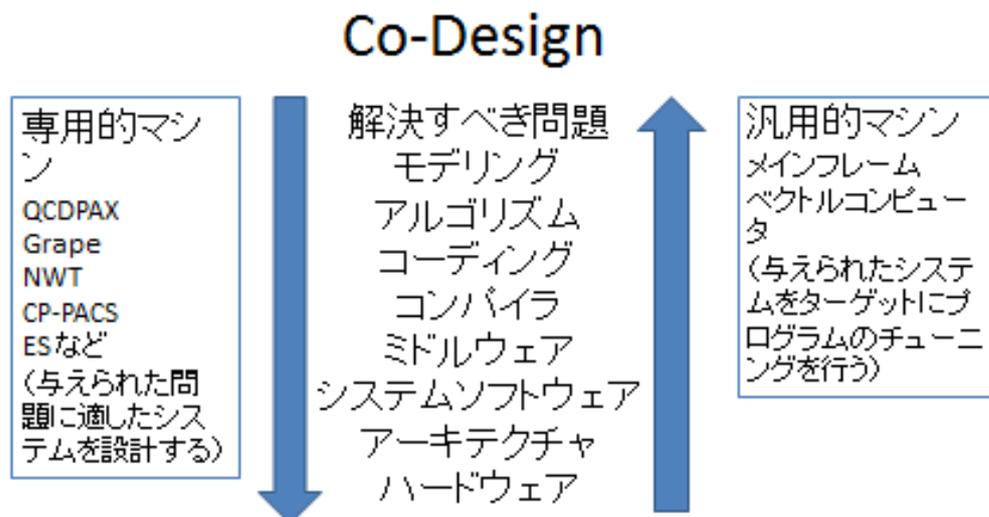
もう一つは、計算科学諸分野とコンピュータ科学（あるいはコンピュータ工学）との関係である。これまで、コンピュータセンターには「汎用コンピュータ」あるいは「汎用のスーパーコンピュータ」が設置され、ユーザは自分のプログラムをその与えられたコンピュータ上でチューニングするという方法論であった。他方、専用のコンピュータ（私の周辺だと、QCD-PAX, CP-PACS, GRAPE, 数値風洞、地球シミュレータなど）は、目的のアプリが分かっているので、それにふさわしいコンピュータ・システムを構築することになる。

「京」コンピュータの開発で分かったことは、この二つの方向性（下図参照）のどちらも必要だという

ことである。「ポスト京」ではコデザインが強調されているが、そのポイントは図の下から上と上から下の両方向が必要だということである。実は、CP-PACSや数値風洞や地球シミュレータは、それぞれSR2201, VPP500, SX-6という汎用コンピュータと同じ技術を用いており、逆説的であるが、特定のアプリをターゲットに設計したので、実はよい汎用コンピュータが生まれたとも言える。単に「汎用」というだけでは、「あれもほしい、これもほしい」ということになって、よい設計はできない。

その意味で、この新学術領域研究は計算科学の学際性を戦略的に推進している模範的な研究プロジェクトである。典型的な成果として、SC11のゴードン・ベル賞を取ったRSDFTは、この連携が大きく実った好例と言えよう。私も、この研究グループのために「計算科学者のためのコンピュータの基本原則」という連続講義を行ったが、物理研究者、コンピュータ科学者を交えて活発な議論が行われたことは強く印象に残っている。

ただ、分野間の交流は双方向的であるべきで、決して「直流」となってはならない。物理研究者がコンピュータ科学の成果を活用して研究を進展させることは重要であるが、物理学からコンピュータ科学へのフィードバックも必要である。とくに、「京」コンピュータ計画の初期や、現在のエクサスケールコンピュータの戦略を議論するときには、自分たちの計算をもっとも効率よく実行できるコンピュータをデザインする（あるいはそれに協力する）ことが必要になる。今後、本領域研究がそのような場面で活躍する人材を育てていくことを期待する。



『京』の計画の初期は、「汎用だから下から上の方向だけで十分」と主張されたが、私などが強硬に反対し、上から下の方向も重要であると力説。→コデザイン
『ポスト京』では、コデザインが当初からスローガンとなった。

藤原 毅夫 氏 (東京大学大学総合教育研究センター・教授)

本計画は、これまで個別に研究がすすめられてきた物質計算科学と大規模線形計算科学およびコンピュータアーキテクチャ科学とが、「京」を核として集合した記念すべきプロジェクトである。その成果にも、超大規模系への BLAS および FFT 開発と GP-CPU 上での最適化、実空間計算による有効な大規模系計算法の開発と Gordon Bell 賞受賞、1 億原子系での ELSSES コードの有効性実証、shifted COCG 等の線形計算手法の電気伝導計算への適用、大規模ダウンフォールディング法の開発、OpenMX パッケージの大規模計算への発展など、多くの成果を上げた。その意味で、本プロジェクトは成功であった。ただ、これで、本プロジェクトが当初掲げた課題が解決・完了したか、あるいはこの種の研究の在り方や有効な研究グルー

プが上記異分野間に定着したかという点、そのように理解して安心してはならない。上記の成果の多くが、もともとそれぞれの個別分野で発展されてきたものの延長にあるからである。本プロジェクトの中で芽生え発展させたものは何か、あるいは本プロジェクト終了後、求心力となり得る核は何かという点についての検討と纏めが重要であり、本プロジェクトの成果がポスト京へつながるためにも必要である。