

様式 C-19

科学研究費補助金研究成果報告書

平成22年 6月 4日現在

研究種目：特定領域研究

研究期間：2005～2008

課題番号：17064003

研究課題名（和文） 新しい第一原理計算手法の開発

研究課題名（英文） Development of new methods of first-principles calculation

研究代表者 常行 真司 (Tsuneyuki Shinji)

東京大学・大学院理学系研究科・教授

研究者番号：90197749

研究成果の概要（和文）：

A01 班の3つの計画研究グループは、「密度汎関数法(DFT)」と「局所密度近似(LDA)」に基づく従来の第一原理電子状態計算手法より格段に精度・信頼性の高い、新しい第一原理電子状態計算手法を開発することを目指している。この目的を達成するため本調整班では、広範ではあるが相互に関連が深いこれらの課題の間に立って情報交換と連携をはかり、さらに A02,A03 班との連携を推進した。

研究成果の概要（英文）：

Three research projects in A01 group aim at developing new first-principles electronic structure calculation methods with much more precision and reliability than conventional methods based on density functional theory (DFT) and local-density approximation (LDA). To this end, in this project for research coordination, we encouraged collaboration and an exchange of information among the three research projects, which are widely spread but closely related with each other, and also promoted cooperation with research projects in A02 and A03 groups.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
17年度	1,800,000円	0円	1,800,000円
18年度	2,300,000円	0円	2,300,000円
19年度	2,300,000円	0円	2,300,000円
20年度	2,300,000円	0円	2,300,000円
年度			
総計	8,700,000円	0円	8,700,000円

研究分野：物性理論

科研費の分科・細目：物理学 数理物理・物性基礎

キーワード：①第一原理計算、②密度汎関数理論、③電子相関、④多体問題、⑤局所密度近似

科学研究費補助金研究成果報告書

1. 研究開始当初の背景
遷移金属化合物や有機化合物に見られる変化に富んだ軌道秩序状態、特異な量子液体状態、金属絶縁体転移などは、基礎と応用の両面で物質科学の重要なテーマである。これらの物質群（いわゆる強相関電子系）では、これまで固体のシミュレーションに広く用いられてきた第一原理電子状態理論「密度汎関数理論 (DFT)」+「局所密度近似 (LDA)」が定性的な記述にすら不十分であることが明らかとなっている。一方、従来 LDA が良い近似であるとされてきた半導体においても、材料設計に向けた欠陥準位の定量的な取り扱いには、電子相関をより精密に取り入れた電子状態計算手法が不可欠である。これらの研究分野では、新しい第一原理電子状態計算手法の開発が強く望まれている。

2. 研究の目的

A01 班は、「密度汎関数法(DFT)」+「局所密度近似(LDA)」に基づく従来の第一原理電子状態計算手法より格段に精度・信頼性の高い、新しい第一原理電子状態計算手法を開発することを目指している。A01 班で開発された新しい第一原理計算手法や電子相関に関する知見を、A02 班で開発される実用的な量子シミュレータ、あるいは A03 班で実践されるマテリアルデザインに反映させることにより、従来の計算手法の適用限界を超えた物質群におけるマテリアルデザインが可能になると期待される。

A01 班を構成する 3 つの計画研究課題

(i) 「多様な電子相関を示す現実物質のための多体電子状態計算手法の開発」
(ii) 「密度汎関数法に基づく新しい有効多電子理論の開発」
(iii) 「固体系拡散モンテカルロ法の開発」
をあわせると、固体の第一原理電子状態計算として有望な計算手法の大部分をカバーする。本調整班の第一の目的は、広範ではあるが相互に関連が深いこれらの課題の間に立って情報交換と連携を深め、4 年間という短期間にもっとも効率の良い方法で A01 班の計画研究を推進させることにある。十分な討論時間をもうけた班内研究者会議や、海外著名研究者の招聘を通じて、ともすれば自分の得意な方法論にだけ目を向けがちな研究者をまとめ、実質的協力体制を築くことが期待されている。

調整班の第二の目的は、A02,A03 班との連携である。方法論開発に当たっては、理論としての精密さの重要性もさることながら、現実物質のマテリアルデザインの現場において何が問題となり、どのような手法が求められているかを知ることが重要である。本調整

班は A01 班の成果を応用側である A02,A03 班に積極的に伝え、新手法の実用化を推進するだけでなく、応用側の要求を A01 班にフィードバックする。場合によっては、領域設定当初に想定していなかった新しい方法論開発を主導するなど、A01 班の弾力的な運営を推進する。

3. 研究の方法

上記の目的を達成するため、A01 班内の討議を活性化するための研究会、A02,A03 班と合同の研究会、国際会議等を企画した。また学会のインフォーマルミーティング等も利用して、研究者間の意思疎通と情報交換に努めた。

平成 17 年度から 20 年度までに開催もしくは共催した研究会、国際会議、国際ワークショップは、以下のとおりである。

- (1) 研究会「札幌電子相関研究会」(札幌, 2006 年 1 月 26 日, 27 日) (A01 班のみ、主催)
- (2) ミニワークショップ「Beyond LDA としての新しい電子状態計算手法」(東京, 2006 年 2 月 22 日, 23 日) (A01 班のみ、主催)
- (3) 第 1 回成果報告会議 (国際高等研究所、奈良, 2006 年 3 月 10 日, 11 日) (領域全体、共催)
- (4) 国際会議 International Workshop on First Principles Calculation of Correlated Electrons (東京大学本郷キャンパス, 2006 年 11 月 30 日, 12 月 1 日) (主として A01 班、共催)
- (5) 国際会議 International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD2006) (広島大学, 2006 年 12 月 3 日~6 日) (領域全体、共催)
- (6) 「札幌電子相関研究会」(北海道大学, 2007 年 2 月 15 日, 16 日) (A01 班のみ、主催)
- (7) 第 2 回成果報告会議 (国際高等研究所、奈良, 2007 年 3 月 23 日, 24 日) (領域全体、共催)
- (8) ISSP International Workshop and Symposium: Foundations and

Applications of the Density Functional Theory (東京大学柏キャンパス、2007年7月19日～8月10日)(主としてA01班、共催)

(9) 「電子状態計算における電子相関の諸問題」研究会(北陸先端大学院大学、2007年12月10日、11日)(主としてA01班、主催)

(10) 第3回成果報告会議 (国際高等研究所、奈良、2008年3月18日、19日)(領域全体、共催)

(11) 国際会議 International Conference on Quantum Simulators and Design 2008 (日本科学未来館、東京、2008年5月31日～6月3日)(領域全体、共催)

(12) 第4回成果報告会議 (大阪大学、2009年3月23日、25日)(領域全体、共催)

このほか、日本物理学会(毎年春と秋)のインフォーマルミーティングや領域全体の成果報告会(毎年3月)の機会を利用して調整班会議を行った。

4. 研究成果

数多くの研究会活動を通じて班内の議論を活性化させ、A01班内研究グループ間の情報交換と連携、A02、A03班との連携を図ることによって、A01班の3つの班の研究を推進することができた。その中で、モデルハミルトニアンを用いた強相関電子系研究と第一原理計算をつなぐ共同研究、2成分量子系に関する共同研究など、いくつかの共同研究が生まれた。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

本研究班は調整班であるため、成果は原則として計画班で報告済みである。以下では調整班の繰越金から印刷費を支出した国際会議プロシーディングスについてのみ報告する。

[雑誌論文] (計 1件)

K. Kusakabe, A quadratic form of the Coulomb operator and an optimization scheme for the extended Kohn-Sham

models, J. Phys. Cond. Matt., 査読有, Vol. 21, 2009, 64212-1-4.

[学会発表] (計 0件)

[図書] (計 1件)

H. Akai and S. Tsuneyuki (eds.), Journal of Physics Condensed Matter, Special issue, Proceedings of the 2nd International Conference on Quantum Simulators and Design (Tokyo, Japan 31 May-3 June 2008) (IOP Publishing), 2009, 264.

[産業財産権]

○出願状況 (計 0件)

○取得状況 (計 0件)

[その他]

ホームページ等

A01班研究会ホームページ

<http://white.phys.s.u-tokyo.ac.jp/beyondLDA/>

領域ホームページ

<http://ann.phys.sci.osaka-u.ac.jp/tokutei/index.html>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

常行 真司 (Tuneyuki Shinji)

東京大学・大学院理学系研究科・教授

研究者番号：90197749

(2) 研究分担者

前園 涼 (Maezono Ryo)

北陸先端科学技術大学院大学・情報科学研究科・講師

研究者番号：40354146

草部 浩一 (Kusakabe Koichi)

大阪大学・大学院基礎工学研究科・准教授

研究者番号：10262164

(3) 連携研究者

該当なし。