

平成21年10月1日現在

研究種目：特定領域研究
研究期間：2005～2008
課題番号：17064007
研究課題名（和文） サブミクロンサイズ量子シミュレータの開発・公開
研究課題名（英文） Development and opening of quantum simulators for submicron-scale systems
研究代表者
森川 良忠（MORIKAWA YOSHITADA）
大阪大学・産業科学研究所・准教授
研究者番号：80358184

研究成果の概要：

A02班内の連携を強めるとともに、A01, A03班との橋渡しも行うため、A02班が中心となって「大規模・高精度電子状態計算手法に関する研究会」を平成18年7月13, 14日に大阪大学産業科学研究所において、さらに、平成19年7月24, 25日に物質・材料研究機構において開催した。平成20年度は5月31日から6月3日にかけて東京科学館において本特定領域が主催の国際会議QSD2008を開催し、また、平成21年1月16日にA02班のメンバーで電子状態計算手法とその応用に関する研究会を大阪において開催した。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2005年度	1,400,000	0	1,400,000
2006年度	2,300,000	0	2,300,000
2007年度	2,300,000	0	2,300,000
2008年度	2,300,000	0	2,300,000
総計	8,300,000	0	8,300,000

研究分野：量子シミュレーション

科研費の分科・細目：ナノ・マイクロ科学 ナノ材料・ナノバイオサイエンス

キーワード：密度汎関数理論、シミュレーション、分子動力学法、表面、界面、半導体

1. 研究開始当初の背景

第一原理電子状態計算手法は、現在では基礎物質科学において欠かすことのできない手法として、幅広い物質を対象として研究に用いられている。しかしながら、現実物質に適用していくにはまだまだ乗り越えなければならない限界がある。A02班では、従来は困難であったような、有機/金属界面、不均一触媒反応、磁性不純物、遷移金属酸化物、生体物質、といった複雑な物質に

ついて、できる限り現実系に近い計算モデルを用いた高精度な第一原理計算を可能にする次世代量子シミュレータを開発する。そして、作成したシミュレータを現実の物質に応用していくと共に、広く公開して基礎物質科学分野および計算機マテリアルデザインといった応用分野に貢献していく必要がある。

2. 研究の目的

A01 班で開発される電子相関、励起状態に対する新しい計算手法は A02 班で開発する大規模量子シミュレータの信頼性を高めるために非常に重要である。一方、計算機マテリアルデザインに広く応用可能にするためには、A03 班の各グループとの密接な連携が必要である。このように A02 班は A01 班と A03 班を橋渡しする重要な目的を持っている。

3. 研究の方法

A02 班内では以下の四つの研究グループを置いてシミュレータを開発する。

- 1) 超並列大規模量子ダイナミクスシミュレータの開発・公開
- 2) オーダー-N・フルポテンシャル KKR グリーン関数法の開発・公開
- 3) GW 近似に基づくスピン・電荷・軌道偏極量子シミュレータの開発・公開
- 4) 第一原理オーダー-N 手法の開発とナノ物質への応用

シミュレータ開発効率を高めるには、互いの計算手法・経験・知識やプログラムを交換し、共通する部分は協力して開発することなど協力関係が必要である。

このように、A01, A02, A03 各班間、および、A02 班内のグループ間交流を促進し、連携を強化して有機的に結合するために本調整班を置く。

4. 研究成果

A02班が中心となって「大規模・高精度電子状態計算手法に関する研究会」を平成18年7月13日、14日に大阪大学産業科学研究所において開催した。この会議はA02班内のメンバーに限らず、広く電子状態計算にかかわるグループに案内を出し、大規模・高精度電子状態計算に関する最新の知見を交換し、議論する機会とした。口頭発表17件、ポスター25件、73名の参加者があった。プログラムは以下のような内容である。

7月13日(木)

1. 土田 英二(産総研)
オーダー-N法における最近の発展
2. 星 健夫, 藤原毅夫(東大, CREST-JST)
超大規模電子構造計算によるナノ構造系動力学シミュレーター
3. 岩田 潤一, 押山 淳, 白石 賢二, 岡田 晋(筑波大)
実空間法による大規模電子状態計算
4. 小野 倫也(阪大)

実空間差分法に基づく第一原理電子状態・電気伝導特性計算

5. 高橋 大介(筑波大)
並列数値計算アルゴリズムとその性能について

ポスター&懇親会

7月14日(金)

6. マウロ ポエロ(筑波大)
Reactive hybrid QM/MM simulations of biomolecules

7. 館山 佳尚(物材機構)

第一原理MDによる酸化還元反応の自由エネルギー計算

8. 濱田 幾太郎, 森川 良忠, 大谷 実, 杉野 修, 岡本 稔治, 池庄司 民夫(阪大, 東大, NEC, 産総研, JST-CREST)

電極表面反応の第一原理分子動力学シミュレーション

9. 中嶋 隆人(東大)

大規模分子系に対する量子化学からのアプローチ

10. 宮原 友夫, 福田 良一, 中辻 博(京大)

巨大分子系のSAC/SAC-CI法の開発と応用

11. 石川 岳志, 望月 祐志, 今村 賢司, 常盤 広明, 中野 達也, 田中 皓, 森寛敏, 三好 永作(立教大, 国立医薬品食品衛生研, アドバンスソフト, 九大)

フラグメント分子軌道法のナノ・表面系への展開

12. 石橋 章司(産総研)

Projector Augmented-Wave 法に基づく第一原理材料シミュレータQMAS(Quantum Materials Simulator)

13. 白井 光雲, 松川 和人, 吉田 博(阪大)

赤外線励起による半導体中の不純物拡散の制御

14. 倉本 圭, 兵頭 志明(豊田中研)

担持金属触媒の電子状態計算

15. 赤井 久純, 小倉 昌子(阪大)

オーダーN・フルポテンシャルKKRグリーン関数法

16. 小倉 昌子, 赤井 久純 (阪大)
フルポテンシャルKKR-CPA法による

La_{1-x}Ca_xMnO₃の電子状態計算

17. 船島 洋紀 (東京理大)

第一原理計算に基づく縮重化合物半導体熱電材料の熱電特性計算

ポスタープログラム

1. 尾上 允敏, 獅子堂 達也, 小口 多美夫 (広大)

FLAPW法による電場勾配の計算

2. 石井 聡, 岩田 昭平, 大野 かおる (横浜国大)

全電子混合基底法によるGW計算プログラム開発とその応用

3. 菊地 彫, 石井 聡, 大野 かおる (横浜国大)

全電子GW近似にもとづくGeクラスターの準粒子エネルギー計算

4. 橋本 侑也 (阪大)

OEP法を用いたKKRグリーン関数法の開発

5. 大塚 順, 小野 倫也, 広瀬 喜久治 (阪大)

第一原理計算によるAlNナノチューブの分極の計算

6. 大下 真広, (阪大)

KKR-CPA法における誘電分極の計算

7. 佐々木 孝, 小野 倫也, 広瀬 喜久治 (阪大)

半無限系を含む第一原理計算

8. 梶田 晴司^{a,b}, 中山 隆史^a, 川合 真紀^b (^a千葉大, ^a理研)

帯電した表面に対する第一原理計算法の開発: 電場誘起ガウシアンシート法

9. 江上 喜幸^a, 佐々木 孝, 小野 倫也, 広瀬 喜久治 (阪大)

Lippmann-Schwinger方程式を用いた電気伝導特性計算手法の開発

10. Kyuho Lee and Y. Morikawa (阪大)

Comparison of the localized basis and planewave basis for the

density-functional calculations of organic molecules on metal

11. 横井 敏宏, 野口 良史, 石井 聡, 大野 かおる (横浜国大)

ラジカル分子 (TTTA) 結晶における電子間クーロン相互作用の第一原理計算

12. 工藤 洋平^a, 平 崇久^a, 石井 聡^a, 森里 嗣生^b, 大野 かおる^a (^a横浜国大, ^bアクセルリス)

(10,0)カーボンナノチューブ入り口付近におけるFe原子のポテンシャルエネルギー第一原理計算

13. 長尾 和多加, 三浦 良雄, 白井 正文 (東北大)

Co₂CrAl/GaAs/Co₂CrAlヘテロ接合の磁気抵抗

14. 高橋 智依, 小倉 昌子, 赤井 久純 (阪大)

ハーフメタリック反強磁性半導体の第一原理計算

15. 平松 雅規, 森川 良忠 (阪大)

TiO₂(110)表面上における水素吸着に関する第一原理電子状態計算

16. 小田 竜樹, 辻川 雅人, 細川 明彦 (金沢大)

Pt(111)表面上Feの磁気異方性

17. 田中 真悟 (産総研)

PAW法を用いたナノ界面の原子・電子構造とその特性

18. 光田 直樹, 森川 良忠, 白井 光雲, 吉田 博 (阪大)

第一原理計算による結晶SiにおけるCN分子の解析

19. 出倉 春彦, 白井 光雲, 吉田 博 (阪大)

高圧下でのボロン結晶の構造変化

20. 岡崎 一行^{a,b}, 森川 良忠^{c,a}, 秋田 知樹^b, 田中 真悟^b, 香山 正憲^{b,a} (^aJST-CREST, ^b産総研, ^c阪大)

グラフェンに担持されたPt10クラスター上への水素原子吸着

21. 山川 俊輔, 宮本 開任, 兵頭 志明 (豊田中研)

分子間相互作用評価によるGauss-FE混合基底の精度検討

22. 名見耶 彰洋, 森川 良忠(阪大)
金(111)表面上チオール系自己組織化膜の第一原理計算による解析

23. 竹内 康祐, 柳澤 将, 森川 良忠(阪大)

第一原理分子動力学シミュレーションによるAl/Alq₃界面の構造と電子状態の解明

24. 柳澤 将(阪大)
Alq₃/Al界面の電気二重層に関する理論的研究

25. 佐久間 玲, 常行 真司(東大)
希土類水素化物の圧力誘起電子相転移

平成19年度は「大規模・高精度電子状態計算手法に関する研究会II」を平成19年7月24, 25日に物質・材料研究機構において開催した。この会議はA02班内のメンバーに限らず、広く電子状態計算にかかわるグループに案内を出し、大規模・高精度電子状態計算に関する最新の知見を交換し、議論する機会とした。プロジェクト内外からの発表を合わせて口頭発表17件があった。会議の詳細に関しては、以下のホームページにある。

<http://www.nims.go.jp/ws-qsqd/>
平成20年度は5月31日から6月3日にかけて東京科学館において本特定領域が主催の国際会議 QSD2008 を開催し、A02調整班の研究に関連する招待講演者の旅費を支出した。また、2009年1月16日にA02班のメンバーで電子状態計算手法とその応用に関する研究会を大阪において開催した。

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)

[学会発表](計16件)

1. 森川 良忠, “STATE-Senri による最近の研究の進展, 特定領域「量子デザイン」A02班ワークショップ特定領域, 2009年1月16日, 大阪大学産業科学研究所
2. 濱田 幾太郎, “Rh(111)表面に吸着した水の密度汎関数法による研究, 特定領域「量子デザイン」A02班ワークショップ特定領域, 2009年1月16日, 大

阪大学産業科学研究所

3. 柳澤 将, “GW 近似の有機/金属界面系への適用に向けて”, 特定領域「量子デザイン」A02班ワークショップ特定領域, 2009年1月16日, 大阪大学産業科学研究所
4. 白井光雲, “Osaka-2kによる最近の研究の進展”, 特定領域「量子デザイン」A02班ワークショップ特定領域, 2009年1月16日, 大阪大学産業科学研究所
5. 赤井 久純, “Introductory remarks”, 特定領域「量子デザイン」A02班ワークショップ特定領域, 2009年1月16日, 大阪大学産業科学研究所
6. 小倉 昌子, “Order-N full-potential KKR method and its applications”, 特定領域「量子デザイン」A02班ワークショップ特定領域, 2009年1月16日, 大阪大学産業科学研究所
7. Nguyen Hoang Long, “Half-metallic antiferromagnets and possible device applications”, 特定領域「量子デザイン」A02班ワークショップ特定領域, 2009年1月16日, 大阪大学産業科学研究所
8. 獅子堂 達也, “LAPW kp法”, 特定領域「量子デザイン」A02班ワークショップ特定領域, 2009年1月16日, 大阪大学産業科学研究所
9. 浜田 典昭, “光誘起相転移系RbMnFe(CN)₆の電子状態”, 特定領域「量子デザイン」A02班ワークショップ特定領域, 2009年1月16日, 大阪大学産業科学研究所
10. 船島 洋紀, “AgTeAl系熱電材料の電子状態計算”, 特定領域「量子デザイン」A02班ワークショップ特定領域, 2009年1月16日, 大阪大学産業科学研究所
11. 田中 新, “パイロクロア格子における複素数軌道秩序”, 特定領域「量子デザイン」A02班ワークショップ特定領域, 2009年1月16日, 大阪大学産業科学研究所
12. 大野隆央, “班報告と分子接合系における量子伝導特性解析”, 特定領域「量子デザイン」A02班ワークショップ特定領域, 2009年1月16日, 大阪大学産業科学研究所
13. Milica Todorovi, “Large-scale density-functional theory study of gramicidin A ion channel geometry and electronic properties”, 特定領域「量子デザイン」A02班ワークショップ特定領域, 2009年1月16日, 大阪大学産業科学研究所

14. 木野日織, “ 静水圧下での alpha-(BED-TTF)₂I₃ の電子構造”, 特定領域「量子デザイン」A02 班ワークショップ特定領域, 2009 年 1 月 16 日, 大阪大学産業科学研究所
15. 館山 佳尚, “ 電解質溶液中電子移動反応の第一原理シミュレーション”, 特定領域「量子デザイン」A02 班ワークショップ特定領域, 2009 年 1 月 16 日, 大阪大学産業科学研究所
16. 星野 公三, “ ハイブリッド分子動力学シミュレーション法”, 特定領域「量子デザイン」A02 班ワークショップ特定領域, 2009 年 1 月 16 日, 大阪大学産業科学研究所

〔その他〕

ホームページ等

<http://www.cmp.sanken.osaka-u.ac.jp/MiniWS0607/index.htm>

<http://www.nims.go.jp/ws-qsqd/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

森川 良忠 (MORIKAWA YOSHITADA)
大阪大学・産業科学研究所・准教授
研究者番号: 80358184

(2) 研究分担者

赤井 久純 (AKAI HISAZUMI)
大阪大学・大学院理学研究科・教授
研究者番号: 70124873

城 健男 (JYO TAKEO)
広島大学・大学院先端物質科学研究科・教授
研究者番号: 20093487
(平成 17~19 年度)

大野 隆央 (ONO TAKAHISA)
物質・材料研究機構 計算材料科学研究センター・センター長
研究者番号: 30344435
(平成 17~19 年度)

(3) 連携研究者

該当なし

