

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 6 月 13 日現在

機関番号：12701

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2013～2015

課題番号：25289218

研究課題名(和文)全電子混合基底法パッケージプログラムの開発と公開

研究課題名(英文)Development and Open source code of all-electron mixed basis package program

研究代表者

大野 かおる (Ohno, Kaoru)

横浜国立大学・工学(系)研究科(研究院)・教授

研究者番号：40185343

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 14,600,000円

研究成果の概要(和文)：TiO₂中のNb不純物準位のG0W0近似計算を行った。自己無撞着GW近似とBethe-Salpeter方程式により、スピン分極した系の光吸収スペクトル計算を可能とした。自己エネルギーのエネルギー依存性の問題を解決し、Ward恒等式を満たす自己無撞着GW近似に基づく光電子スペクトル計算を行った。GW近似に基づいて基底状態の全エネルギー計算を行った。TDLDA電子励起ダイナミクス・シミュレーションにおいて非断熱過程の取り扱いを可能とした。電子状態の自己無撞着計算や構造最適化の収束を早めるために、Broyden法などを導入し、計算の高速化を図った。LDA部分のソースコードをホームページから公開した。

研究成果の概要(英文)：Nb impurity level in TiO₂ was calculated with a G0W0 approximation. Calculation of photoabsorption spectra of spin polarized systems became possible in the self-consistent GW + Bethe-Salpeter equation method. By solving the energy-dependent issue of the self-energy, photoabsorption spectra were calculated with the self-consistent GW method satisfying the Ward identity. Treatment of non-adiabatic process became possible in the TDLDA electronic excited state-dynamics simulations. In order to speed up the self-consistent electronic structure calculations and geometry optimizations, Broyden methods, etc. were introduced. LDA source code was open to the public from our homepage.

研究分野：物性理論、計算物理学

キーワード：第一原理計算 全電子混合規定法 プログラム開発 プログラム公開 GW近似

1. 研究開始当初の背景

現在用いられている殆どの第一原理計算手法は欧米で開発されたものである。それぞれ一長一短があり、万能ではない。例えば、1電子軌道を原子軌道関数基底のみで表す方法には基底の不完全性の問題や基底関数重なり誤差 (BSSE) の問題がつきまとう。平面波基底のみで表す方法には芯電子の取り扱いの不完全性や擬ポテンシャルの不完全性の問題があり、水素のイオン化 (プロトン化) も扱えない。マフィンティンを用いる方法では、結晶以外 (真空領域) を扱うことが出来ない。これに対して研究代表者らが独自に開発してきている『全電子混合基底法』は、我が国が世界に誇ることのできる純国産の第一原理計算手法であり、分子、結晶の芯電子から自由電子までの全軌道を1電子ハミルトニアンで完全固有状態として記述できる他に類を見ない卓越した計算手法である。本手法は、1電子軌道を数値原子軌道関数 (AO) と平面波 (PW) の線形結合として表す。

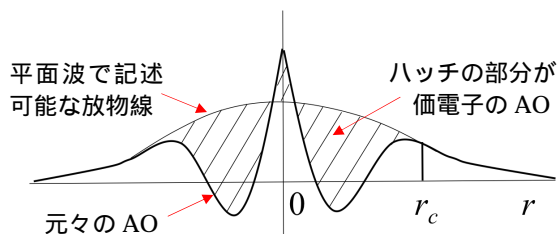


図 1. 価電子 AO の原子球内への制限方法

また、価電子の AO を図 1 のように互いに重ならない原子球の中に制限することにより、重なり積分の計算が必要なくなり、計算が楽になると同時に計算精度が増し、BSSE の問題も無く、オーバーコンプリートネスの問題も回避できるという複数の利点を持つ。それとは別の問題として、第一原理計算で広く用いられている密度汎関数理論 (DFT) に基づく LDA 等はエネルギー・ギャップを過小評価する。本手法は、DFT の枠組みを越えて多体摂動論に基づいてバンド構造を正しく再現できる高度な計算 (GW 近似) が可能であり、高いニーズがある。さらに Bethe-Salpeter 方程式を解く光吸収スペクトル計算も可能な世界的に見ても数少ないプログラムの一つになっている。したがって、全電子混合基底法は他の第一原理計算手法が持つ欠点を克服した計算手法であると言える。本研究は 3 年計画で、このプログラムに有用な機能を加えながらハイブリッド並列化し、ユーザーフレンドリーに仕上げ、公開することを目的とする。本研究は単なるプログラム開発ではなく、開発しながら、それに相応しい目的にプログラムを適用して、数々の研究成果を出していくことを目指す。

2. 研究の目的

完全独自開発の第一原理計算プログラム『全電子混合基底法』TOMBO を LDA,

LSDA, Hartree-Fock, TDLDA, GoW₀, GW, GW, Bethe-Salpeter 方程式などのあらゆる最高精度電子状態計算手法を揃えたハイブリッド並列化したユーザーフレンドリーな all-in-one package として完成させ、広く公開することを目的とする。構造最適化やフォノン計算は勿論のこと、付加機能として、光電子スペクトル計算、光吸収スペクトル計算、XPS スペクトル計算、反磁性帯磁率計算、NMR 化学シフト計算、熱伝導度計算、電気伝導度計算、電子励起ダイナミクス・シミュレーション等の高度な計算をあらゆる並列計算機で実行できるパッケージ・プログラムの開発と公開、そして幅広い応用を目指す。

具体的には上述の計算手法を揃えた FORTRAN90 + OpenMX + MPI ハイブリッド並列化した all-in-one package として完成させ、プログラムを公開する。また、それと並行して、開発したプログラムを用いて以下の種々の新しい研究成果を出していく。

- (1) one-shot GW 近似による半導体結晶中の不純物準位 (特に、2 酸化チタン中の酸素欠陥やニオブなどの不純物元素による不純物準位) の高精度計算。
- (2) Baym-Kadanoff の保存近似に基づいた自己無撞着 GW + Bethe-Salpeter 方程式によるスピン磁気モーメントを持つクラスターの光吸収スペクトル計算。
- (3) 自己エネルギーのエネルギー依存性の問題を解決し、Ward 恒等式を満たす新しい自己無撞着 GW 近似の開発と、その近似によるスピン偏極した分子やクラスターの光電子スペクトル計算。
- (4) GW 近似に基づく基底状態の精密全エネルギー (相関エネルギー) 計算。
- (5) one-shot GW 近似による芯電子 XPS コアレベルシフト計算
- (6) スピン磁気モーメントを持つ複雑な分子やクラスターの構造最適化 (Broyden アルゴリズム) 計算と化学反応第一原理分子動力学計算。
- (7) 自己無撞着収束ループにおける電子密度混合へ Broyden アルゴリズムを導入。
- (8) 共役勾配 (CG), RMM-DIIS, Davidson 法などの iterative 対角化手法の導入。
- (9) 光化学反応や励起電子移動に関する TDDFT 電子励起ダイナミクス・シミュレーション (非断熱過程の取扱いを含む)。
- (10) ポテンシャルの関数フィッティング法の導入による行列要素計算の高速化。

3. 研究の方法

研究代表者を中心に研究組織のメンバーが一丸となって FORTRAN77 で書かれていた旧バージョンの全電子混合基底法プログラムの有用な機能を公開用の FORTRAN90+OpenMP+MPI ハイブリッド並列コードに移植するとともに、多数の有用な新機能をインプリメントし、ユーザーフレンドリーな第一原理計算プログラムとして完成させる。具体的には、

半導体結晶中の不純物準位、光吸収スペクトル、光電子スペクトル、電子相関エネルギー、半導体の反磁性帯磁率、XPS コアレベル、電子励起ダイナミクス、van der Waals 相互作用、金属結晶の電子状態などの様々な高度な第一原理計算が容易にできるように、必要なルーチンの移植や新規作成を行う。

具体的には次の各項目を実施する。

- (1) ハイブリッド並列コードの GoW₀ 近似の部分に結晶に適用できるように旧バージョンのプログラムを移植し、 k 点、 q 点サンプリングを可能とし、物質中の不純物準位、特に、2酸化チタン中のニオブ不純物による不純物準位の大規模並列計算を行う。
- (2) Baym-Kadanoff[1]流にきちんと自己無撞着 GW 近似から出発して Bethe-Salpeter 方程式を解くことにより、スピン磁気モーメントを持つクラスターの正しい光吸収スペクトル計算を行えるようにプログラムを整備し、計算結果を他の方法と比較する。
- (3) 自己エネルギーのエネルギー依存性の問題を解決し、Ward 恒等式を満たす自己無撞着 GW 近似に基づく光電子スペクトル計算を行う。
- (4) GW 近似に基づいて基底状態の全エネルギー、相関エネルギー、運動エネルギーなどの計算をインプリメントし、ピアアル比の確認を行う。
- (5) TDLDA 電子励起ダイナミクス・シミュレーションにおいて、非断熱過程が扱えるようにする。
- (6) 電子状態の自己無撞着計算や構造最適化の収束を早めるために、Broyden アルゴリズムなどを Marcel Sluiter 氏作成の TOMBO 別バージョンから移植し、計算の高速化を行い、種々の研究目的の計算の便を図る。

4. 研究成果

(1) 平成 25 年度の研究成果

プログラムの統合に向けて、任意の斜方結晶に適用できる TOMBO の MPI + OpenMP ハイブリッド並列バージョンに、共役勾配法 + RMM-DIIS 法 + Davidson 法による iterative diagonalization ルーチン、電子状態収束ループにおける Broyden 法による電子密度混合ルーチン、Broyden 法による構造最適化ルーチン、状態密度とフェルミ準位を計算するルーチン、斜方格子の one-shot GW 近似計算ルーチン、自己無撞着 GW 近似における全エネルギー計算ルーチン、2nd exchange などのパーテックス補正を取り入れた自己無撞着 GW 法などの実装を行った。また、原子球内のポテンシャルを Chebyshev 多項式によってフィッティングし、ポテンシャル行列要素の計算を高速化し、斜方格子系に対して三角関数の計算を多用する 3 次元 (Fourier 成分) 1 次元 (動

径方向) フーリエ変換を高速化した。この内、
は、以前東北大学金属材料研究所の助教教授だった Marcel Sluiter 氏 (現: デルフト工科大学准教授) が TOMBO の開発のために独自に作成していたものを移植する作業で、別予算の支援を受けて企業委託により行った。具体的には日立ソリューションズ東日本に委託し、同社の安達斉氏との共同で移植作業を進め、平成 25 年 8 月末には作業が完了した。さらに LDA 部分のプログラム設計を見直したことにより大幅なパフォーマンス向上に成功した。QUANTUM ESPRESSO (pseudo potential PAW, block Davidson, Broyden charge mixing) と同程度のパフォーマンスを得られるまでになった。これにより、Broyden 法を用いた電子状態の収束と構造最適化が可能となり、計算効率が大幅にアップした。は旧バージョンから大野が移植したが、これにより金属のバンド計算が出来るようになり、Al, Cu, Ni などのバンド計算を行い、計算精度を確かめた。は旧バージョンから大野が学生の協力を得て移植し、ルチル構造の TiO₂ 結晶および Nb 不純物を含む TiO₂ 結晶の GW バンド計算に成功した。については、社会人ドクターコースに在籍中の桑原が作業を行った。は Galitskii-Migdal 法による全エネルギー計算ルーチンのインプリメントが完了し、様々な結合長に対する Li₂ の GW 全エネルギー計算を行い、最適結合長の場合に virial 定理 (ポテンシャルエネルギーと運動エネルギーの比が -2 になるという定理) を 0.04% の誤差で満たすことを確認した。はパーテックス補正を取り入れた GW 法のプログラムがほぼ完成しつつあり、Na クラスターの計算を行っている。しかし、まだ一部の計算部分に不具合があり、平成 26 年度末までには完成させる予定である。は小野が新規に多数のサブルーチンを作成してインプリメントし、平成 25 年 11 月頃までにはほぼ完了した。TOMBO の普及活動としては、7 月 5 日に TOMBO セミナー (東京駅八重洲北口サピアタワー 10 階「東北大学」東京オフィス) 7 月 22-2 日に TOMBO Workshop (タイ、スラナリ工科大学) 8 月 22 日に TOMBO 20 周年記念研究会 (東北大学) 11 月 8 日に TOMBO Tutorial (ACCMS-VO8、東北大学) などを開催した。

また、新規水素貯蔵材料の高密度化の研究をおこない、TDDFT により水素分子解離過程への金属クラスターの効果を明らかにした。

(2) 平成 26 年度の研究成果

密度汎関数理論を超えて、多体摂動論の Green 関数法に基づく one-shot GW 近似に基づいて、TiO₂ や ZnO の TOMBO によるバンド計算を行い、ルチル型の TiO₂ については Nb 原子を不純物として導入した系の電子状態を計算した。自己無撞着 GW 近似の TOMBO へのインプリメントを成功させるとともに、von der Linden-Horsch のプラズモン・ポール近似の範囲内で、Luttinger-Word

汎関数 [G]を勘弁に計算する方法を発見し、それをインプリメントし、より正確な全エネルギー計算を可能とした。そして、そのプログラムを用いて、孤立原子に対して LDA, HFA, GWA 計算での virial 定理の検証を行った (J. Chem. Phys. 掲載)。さらに、この計算手法を用いて、 B_2 , Al_2 , Si_2 の基底状態の最安定スピン配置を求めることに成功した (Mod. Phys. Journal B 掲載)。自己無撞着 GW 近似において、一般に自己エネルギーはエネルギー依存性を持つことから、非エルミートであり、取り扱いが難しい。そこで、この問題を扱うべく、我々は自己エネルギーをエネルギーについて線形化する全く新しい計算手法 (linearized GW, LGW 法) を提案し、インプリメントするとともに、このプログラムを用いて幾つかの具体的な計算を行った (Phys. Rev. A 掲載)。さらに、バーテックス補正を分極関数および 2nd exchange 自己エネルギーにも入れた自己無撞着 LGW 法のインプリメントもかなり進行した。

TOMBO の公開に関しては、Computer Physics Communication 誌に TOMBO プログラムの詳細を記述した論文を掲載した。

(3) 平成 27 年度の研究成果

前年度に引き続いて、one-shot GW 近似に基づいて、 TiO_2 や ZnO の TOMBO によるバンド計算を行った。ルチル型、アナターゼ型の TiO_2 のバンドギャップはプラズモン・ポール・モデルを用いると実験値を過大評価するが、 ω 積分を用いると実験と良い一致を得た。一方、閃亜鉛鉱型およびウルツ鉱型の ZnO では実験値との一致を得ることは出来なかったが、既存の理論値と良く一致する結果を得た (Phys. Rev. B 掲載)。この方法で、Nb 不純物を含むルチル型の TiO_2 ($Ti_{0.75}Nb_{0.25}O_2$) のバンド計算をやり直し、2つの不純物準位を求めることにも成功した (図 2)。ギャップ

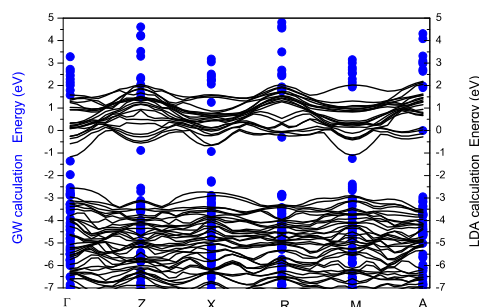


図2. TOMBO の one-shot G_0W_0 近似で計算された $Ti_{0.75}Nb_{0.25}O_2$ のエネルギーバンド (エネルギー 0 は不純物準位に相当する価電子帯トップ)。(Phys.Rev.B より)

深くの占有不純物準位と価電子帯直下の非占有不純物準位の 2 つの不純物準位が現れ、酸素欠損などにより、後者の不純物準位は容易に電子占有されるので、UPS の実験結果 [D. Morris, et al., Phys. Rev. B **61**, 13445 (2000)]お

よび半導体的な電気電導性を示す実験結果 [S. X. Zhang, et al., J. Appl. Phys. **102**, 013701 (2007)] をともによく説明する結果となっている。(Phys. Rev. B 掲載)

孤立系に対しては、 Na , Na_3 , B_2 , C_2H_2 (アセチレン) などの光電子スペクトルおよび光吸収スペクトル計算を行った。従来の one-shot GW 近似を用いると、光電子スペクトルは実験値と良く一致するものの、その後 Bethe-Salpeter 方程式を解いて光吸収スペクトルを計算すると、そのピーク位置は実験値を大幅に (2-4 eV) 過小評価する。この問題を解決するために、線形化された自己無撞着 LGW 法および LGWT 法でこれらの系を扱い、特に、 Na や Na_3 に対しては、バーテックスとして、裸のクーロン相互作用を用いたもの (LGW v) および遮蔽クーロン相互作用を用いたもの (LGW v) による光吸収スペクトル曲線は実験のスペクトル曲線に大幅に近づくという結果を得ることに成功した。 B_2 , C_2H_2 に対しても、多参照 singles & doubles 配置間相互作用 (MRSDCI) 法による過去の計算結果よりも実験値との一致が良い結果となっている。この研究成果は、現在論文投稿中である。上記の計算とは別に one-shot GW+Bethe-Salpeter 法の問題点を洗い出すことを目的に、二原子分子 (Phys. Rev. B 掲載)、 $M^+@C_{60}$ ($M=H, Li, Na, K$) (J. Phys. Chem. C 掲載)、ホタルルシフェリン (J. Chem. Phys. 掲載)、うねったナノグラフェン (J. Chem. Phys. 掲載) などの計算を行ってきた。またアセトンや酢酸分子の酸素 1s X 線吸収スペクトル計算にも適応し、全電子法の優位性を示した (J. Chem. Theory Compt. 掲載)。TOMBO を用いたダイナミクス計算としては、一酸化炭素と 4 個の水素分子からメタノール生成反応の時間依存の第一原理分子動力学シミュレーションを行った (J. Chem. Phys. に掲載)。また、鉄分子と水、酸素分子からの水酸化鉄 ()、さらに水酸化鉄 () 生成反応などに関する第一原理分子動力学シミュレーションも行った (論文投稿予定)。TOMBO の普及活動としては、11 月 3 日に ACCMS-VO10 (東北大学さくらホール) で TOMBO Ver.2 Tutorial を開催し、ホームページ (下記参照) から、LDA 部分のソースコードの一般公開を行った。

(4) まとめ

以上のように、本科学研究費基盤研究 B の研究課題は、研究期間内に予定通りに TOMBO のプログラムを整備することが出来、多くの研究成果を挙げる事が出来た。また、目的の一つであった、プログラムの公開も行うことが出来た。これは大変多くの方々の協力があってはじめて実現できたことである。一人一人のお名前は挙げませんが、この場をかりて、関係の方々に深く御礼申し上げます。

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)

〔雑誌論文〕(計 26 件)

1. Thi Nu Pham, Shota Ono, and Kaoru Ohno, “Ab initio molecular dynamics simulation study of successive hydrogenation reactions of carbon monoxide producing methanol”, *J. Chem. Phys.* **144**, 144309;1-6 (2016). 査読有 DOI: 10.1063/1.4945628
2. Ming Zhang, Shota Ono, Naoki Nagatsuka, and Kaoru Ohno, “All-electron mixed basis GW calculations of TiO₂ and ZnO crystals”, *Phys. Rev. B* **93**, 155116;1-9 (2016). 査読有 DOI: 10.1103/PhysRevB.93.155116
3. Miyabi Hiyama, Yoshifumi Noguchi, Hidefumi Akiyama, and Kenta Yamada, “Vibronic Structure in Absorption and Fluorescence Spectra of Firefly Oxyluciferin in Aqueous Solutions”, *Photochem. Photobiol.*, **91**, 819-827 (2015). 査読有 DOI: 10.1111/php.12463
4. Daichi Hirose, Yoshifumi Noguchi, and Osamu Sugino, “All-electron GW+Bethe-Salpeter calculations for small molecules”, *Phys. Rev. B*, **91**, 205111/1-8 (2015). 査読有 DOI: 10.1103/PhysRevB.91.205111
5. Yoshifumi Noguchi, Miyabi Hiyama, Hidefumi Akiyama, Yoshihisa Harada, and Nobuaki Koga, “First-Principles Investigation of Strong Excitonic Effects in Oxygen 1s X-Ray Absorption Spectra”, *J. Chem. Theory Comput.*, **11**, 1668-1673 (2015). 査読有 DOI: 10.1021/acs.jctc.5b00082
6. Yoshifumi Noguchi and Osamu Sugino, “Symmetry breaking and excitonic effects on optical properties of defective nanographenes”, *J. Chem. Phys.*, **142**, 064313/1-7 (2015). 査読有 DOI: 10.1063/1.4907751
7. Ming Zhang, Shota Ono, and Kaoru Ohno, “All-electron GW calculation of rutile TiO₂ with and without Nb impurities”, *Phys. Rev. B* **92**, 035205:1-7 (2015). 査読有 DOI: 10.1103/PhysRevB.92.035205
8. Shota Ono, Yoshifumi Noguchi, Ryoji Sahara, Yoshiyuki Kawazoe, and Kaoru Ohno, “TOMBO: All-electron mixed-basis approach to condensed matter physics”, *Computer Physics Communications* **189**, 20-30 (2015). 査読有 DOI: 10.1016/j.cpc.2014.11.012
9. 佐原亮二, 小野頌太, 大野かおる, “全電子混合基底法プログラム TOMBO を活用した材料科学”, *まてりあ* **53**, 400-404 (2014). (解説) 査読なし
10. Yoshifumi Noguchi, Miyabi Hiyama, Hidefumi Akiyama, and Nobuaki Koga, “First-Principles Investigation on Rydberg and Resonance Excitations: A Case Study of

the Firefly Luciferin Anion”, *J. Chem. Phys.*, **141**, 044309/1-6 (2014). 査読有

DOI: 10.1063/1.4890730

11. Riichi Kuwahara and Kaoru Ohno, “Linearized self-consistent GW approach satisfying the Ward identity”, *Phys. Rev. A* **90**, 032506;1-9 (2014). 査読有 DOI: 10.1103/PhysRevA.90.032506
12. Riichi Kuwahara, Yoichi Tadokoro, and Kaoru Ohno, “Validity of virial theorem in all-electron mixed basis density functional, Hartree-Fock, and GW calculations”, *J. Chem. Phys.* **141**, 084108;1-6 (2014). 査読有 DOI: 10.1063/1.4893477
13. Riichi Kuwahara and Kaoru Ohno, “Stable spin states of boron, aluminum, and silicon dimers in a self-consistent GW calculation”, *Mod. Phys. Lett. B* **28** (No.20) 1450166; 1-9 (2014). 査読有 DOI: 10.1142/S0217984914501668
14. Yoshifumi Noguchi, Osamu Sugino, Hiroshi Okada, and Yutaka Matsuo, “First-Principles Investigation on Structural and Optical Properties of M⁺@C₆₀ (Where M = H, Li, Na, and K)”, *J. Phys. Chem. C*, **117**, 15362-15368 (2013). 査読有 DOI: 10.1021/jp4041259
15. Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Marcel H. F. Sluiter, Kaoru Ohno, and Yoshiyuki Kawazoe, “Effect of nickel dimer on the dissociation dynamics of hydrogen molecule”, *RSC Advances* **3**, 12307-12312 (2013). 査読有 DOI: 10.1039/C3RA40928G

他 11 件 (全て査読有)

〔学会発表〕(計 98 件)

1. 野口良史, 杉野修, 「第一原理 GW+Bethe-Salpeter 法による CPP 分子の励起子解析」, 日本物理学会第 79 回年次大会 (東北学院大学、2016.3.19-22) 22aBR-11
2. Yoshifumi Noguchi, “All-electron first-principles GW + Bethe-Salpeter Method”, The 18th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (Kashiwa/Chiba, 2015.11.9.11) [INVITED TALK].
3. Shota Kanno, Shota Ono, and Kaoru Ohno, “Implementation of hyperfine tensor in TOMBO Ver.2”, ACCMS-VO10 (Sendai, 1-3 Nov. 2015). (PS-21).
4. Tomoharu Isobe, Shota Ono, and Kaoru Ohno, “Application of extended quasiparticle equation to isolated atoms”, ACCMS-VO10 (Sendai, 1-3 Nov. 2015). (PS-20).
5. Pham Thi Nu, Kazuaki Kuwahata, Shota Ono, and Kaoru Ohno, “Hydrogen adsorption reactions of carbon mono-oxide producing methanol”, ACCMS-VO10 (東北

- 大学さくらホール, Sendai, 1-3 Nov. 2015). (PS-19).
6. Kaoru Ohno, “TOMBO Ver.2 Tutorial”, ACCMS-VO10 (東北大学さくらホール, Sendai, 1-3 Nov. 2015). (Invited-22)
 7. Yoshifumi Noguchi, and Osamu Sugino, “GW+Bethe-Salpeter calculations of optical properties of defective nanographenes”, Psi-K2015 (San Sebastian/Spain, 2015.9.6-10).
 8. 野口良史, 杉野修, 「第一原理 GW+Bethe-Salpeter 法によるうねったナノグラフェンの光学特性」, 日本物理学会秋季大会, (早稲田大, 2015.3.21-24) 24pAF-2
 9. Yoshifumi Noguchi, “All-electron First-principles GW+Bethe-Salpeter Calculations of X-ray Absorption Spectra”, International Workshop on Multiscale Computational Materials Science Institute for Materials Research, (Sendai/Miyagi, 2014.11.10-11).
 10. 野口良史, 樋山みやび, 秋山英文, 原田慈久, 古賀伸明, 「第一原理 GW + Bethe-Salpeter 法によるアセトンと酢酸分子の X 線吸収スペクトル計算」, 日本物理学会秋季大会, (中部大, 2014.9.7-10). 10aAQ-5
 11. Ming Zhang, Shota Ono, and Kaoru Ohno, “Accurate electronic band structure of transition metal oxide with doping using GW calculation: Nb-doped rutile TiO₂”, 日本物理学会秋季大会 (中部大, 2014.9.7-10) 9pPSA-2.
 12. Yoshifumi Noguchi, “First-Principles Investigation on Optical Properties of Firefly Luciferin Anion”, 18th Int. Symp. on Bioluminescence and Chemiluminescence 2014 (Uppsala, Sweden, 2014.6.23-28). P0052
 13. Yoshifumi Noguchi, Miyabi Hiyama, Hidefumi Akiyama, Yoshihisa Harada, and Nobuaki Koga, “All-electron first-principles calculations for XAS of acetone and acetic acid”, 30th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics, (Himeji/Hyogo, 2014.6.4-6). 1P29
 14. R. Sahara, H. Mizuseki, M. H. F. Sluiter, K. Ohno, and Y. Kawazoe, “Development of Hydrogen Storage Materials Using All Electron Mixed Basis Program TOMBO” International Conference on Materials Engineering for Resources (International Conference on Materials Engineering for Resources, 2013.11.20-23, Akita) [INVITED TALK]
 15. Kaoru Ohno, “Accurate first-principles calculation of electronic excitation energy spectra of molecules and nanoclusters: quasiparticle wave function approach in many-body perturbation theory”, The 4th International Workshop on Nanotechnology and Application (IWNA 2013, Vung Tau, Vietnam, 2013.11.14-16) [INVITED TALK].
 16. R. Sahara, H. Mizuseki, M. H. F. Sluiter, K. Ohno, and Y. Kawazoe, “Effect of a nickel cluster on the dissociation dynamics of a hydrogen molecule”, (ACCMS-VO8, Sendai/Matsushima, 2013.11.7-9) [INVITED TALK].
 17. 野口良史, 杉野修, 岡田洋史, 松尾豊 「M⁺@C₆₀ (M = H, Li, Na, K)の安定性と光学特性に関する第一原理計算」, 日本物理学会秋季大会 (徳島大, 2013.9.25-28) 25pDF-5
 18. 佐田健太郎, 大野かおる, 「全電子混合基底法による水酸化鉄の生成ダイナミクス」, 日本金属学会 (金沢大学, 2013.9.17-19) (9.18) 計算科学・材料設計 286.
 19. Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Marcel Sluiter, Kaoru Ohno, Yoshiyuki Kawazoe, “Development of hydrogen storage materials using TOMBO”, (ACCMS7, Nakhon Ratchasima, Thailand, July 23-28, 2013).
 20. 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) [INVITED TALK].
 21. Yoshifumi Noguchi, “Development of all-electron first-principles GW+Bethe-Salpeter program”, Green's function methods: the next generation, (Toulouse, France, 2013.6.4-7).
- 他 77 件
- 〔図書〕(計 1 件)
1. 佐原亮二, 水関博志, Marcel Sluiter, 大野かおる, 川添良幸, 「水素利用技術集成 Vol. 4」(エヌ・ティー・エス, 2014) pp. 1-300 「全電子混合基底法プログラムを用いた水素貯蔵材料設計」担当.
- 〔その他〕
- ホームページ等
<http://www.ohno.ynu.ac.jp/>
<http://www.ohno.ynu.ac.jp/tombo/index.html>
- 6 . 研究組織
- (1)研究代表者
 大野かおる (OHNO, Kaoru)
 横浜国立大学・大学院工学研究院・教授
 研究者番号 : 40185343
- (2)研究分担者
 佐原亮二 (SAHARA, Ryoji)
 物質・材料研究機構・元素戦略材料センター・主幹研究員
 研究者番号 : 30323075
- 野口良史 (Yoshifumi Noguchi)
 東京大学・物性研究所・助教
 研究者番号 : 60450293