

領域略称名：物質デザイン  
領域番号：2203

平成24年度科学研究費補助金「新学術領域研究  
(研究領域提案型)」に係る研究経過等の報告書

「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～平成26年

平成24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	.... 2
2. 研究の進展状況	.... 3
3. 研究を推進する上での問題点と今後の対応策	.... 4
4. 主な研究成果	
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」	.... 5
A02 研究項目「密度汎関数理論の新展開」	.... 6
A03 研究項目「密度汎関数理論を超えて」	.... 13
5. 研究成果の公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開発表等）	
(1) 主な論文等一覧	.... 18
(2) ホームページ	.... 20
(3) 公開発表	.... 21
(4) 国民との科学・技術対話	.... 26
6. 研究組織と各研究項目の連携状況	.... 27
7. 研究費の使用状況	.... 31
8. 今後の研究領域の推進方策	.... 32
9. 総括班評価者による評価の状況	.... 33

## 1. 研究領域の目的及び概要

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

研究期間： 平成 22 年～平成 26 年

領域代表者： 東京大学工学系研究科・教授・押山淳

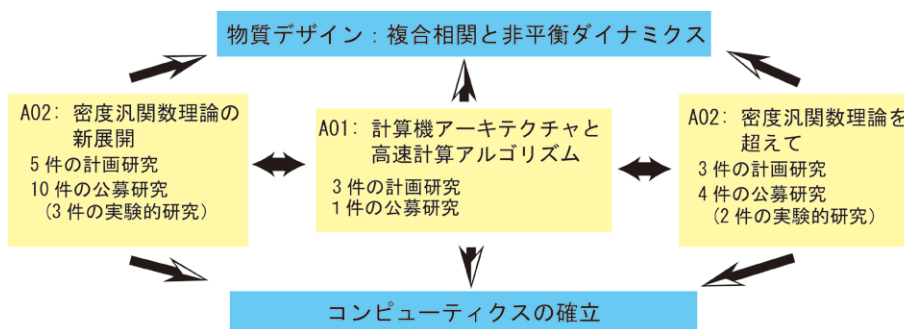
補助金交付額（直接経費：25 年度、26 年度は計画研究の交付内定額、単位 千円）：

平成 22 年度	平成 23 年度	平成 24 年度	平成 25 年度	平成 26 年度
85,600	188,700	169,900	120,800	107,200

ナノテクノロジーが未来の社会を牽引すると目されている現在、物質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提示である。様々な物質創成技術により、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、この物質デザインの課題に対する本質的貢献を成し得る。ナノ構造体においては、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、豊かな複合相関現象を示す。また、物質生成・加工のプロセスは非平衡ダイナミクスの賜物である。

本領域では、計算科学と計算機科学の融合により、従来の計算物理学の枠を打ち破ったコンピューティクス (Computics) という新しい学問領域を確立し、量子論に立脚したアプローチの革新的な飛躍を達成し、さらには実験研究者との有機的連携により、物質デザインの根幹で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的とする。これにより、経験的のものづくりを演繹的なそれへと進化させるパラダイム変換を目指す。これは、超並列化、多重階層化という変革が始まろうとしているコンピュータ環境の中で、従来からの計算科学のアプローチの困難を解決するものであり、一方、ナノテクノロジーの根幹を支える物質デザインの創出を目指すものである。

この目的のために、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」が設定されている。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、それによる強相関係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ている。A01は、高性能計算 (HPC) を、基礎数理科学、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の共同研究が進んでいる。平成23年度からは、それぞれの研究項目に実験的研究を含む公募研究が参画し、計算と実験の共同も開始された。



## 2. 研究の進展状況

### 【研究項目間の共同】

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つの軸での先端的物質科学計算、すなわち、大規模な長時間の高精度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タの確立によって達成しようとしている。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「コンピュータ科学勉強会」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ている。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。「京」コンピュータ上でのSiナノワイヤの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賞を獲得した。

### 【A01: 計算機アーキテクチャと高速計算アルゴリズム】

数理手法の側面では、物質計算にしばしば登場する線形方程式の高速解法が提案され、数千万次元の線形問題解法に道が付けられた。アルゴリズムの側面では、FFT(Fast Fourier Transform)、BLAS(Basic Linear Algebra Subprograms)などの基本的ルーチンが、「京」に代表されるマルチコア超並列コンピュータ、さらにはGP-GPUなどの加速ハードウェア上で、新たなアルゴリズムの導入により高速化された。またFortran、Cに代わり得る新たな言語の高速コンパイラが開発された。

### 【A02: 密度汎関数理論の新展開】

密度汎関数理論(DFT)における標準的な近似を用いた計算では、(1)次世代デバイスを担うと目されているSiナノ構造、炭素ナノ構造の電子状態解明とデバイス機能予測、及び基板との相互作用解明と選択的配列の機構解明、(2)原子拡散、酸化などの物質内原子反応の機構解明と自由エネルギー障壁計算、(3)電池電極反応での電気二重層の形成機構解明、(4)ナノ電気伝導での交流周波数と原子欠陥の影響解明、(5)タンパク質中のガス分子移動機構解明、などの成果が得られている。DFTの交換相関エネルギーに対する改良された近似も導入され、(1)ヴァン・デア・ワールス力を考慮した表面吸着の記述、(2)バンドギャップ問題の改善、などが成された。またDFT計算から古典的有効力場を導出し、それによりミクロンスケールの系に対する大規模計算を実行する処方箋が与えられ、熱伝導率計算に適用された。一方、物質におけるプロトン、ミューオンの量子性を記述するための計算手法Naniwaが開発され、表面吸着系に対する、実験との共同研究が進行している。

### 【A03: 密度汎関数理論を超えて】

強相関系に対しては、DFT計算結果を活用し、電子構造の階層性に着目したダウンフォールディング法が大きな進展を見せ、鉄系超伝導体をはじめとする多くの物質群に適用された。一連の物質に対する計算結果により、電子相関の違いが物性の多様性を決めていること、原子構造の違いが重要な役割を果たしていることが明らかとなってきた。独自開発してきたGWF法はグリーン関数の多体摂動論に立脚した手法であるが、種々の総和則を満たす優れた手法であることが例示された。A02へのフィードバックのひとつとして、高精度拡散モンテカルロ計算の結果から、逆にDFT交換相関エネルギーを導出する試みも始められた。スピンエレクトロニクス材料の探索においては、理論側から提唱してきた双ドーピング(co-doping)を利用した薄膜成長手法が、公募研究の実験グループによって実証されつつある。

### 3. 研究を推進する上での問題点と今後の対応策

コンピューティクスという新しい学術分野の確立には、A01 研究項目と A02 および A03 研究項目の間の連携が不可欠であり、総括班主催の「コンピューティクス勉強会」は大きな役割を果たしている。そうした努力が、RSDFT コードによる Si ナノワイヤー大規模電子状態計算の Gordon Bell 賞受賞に結び付いたが、他のアプリケーションでは、それほどの高性能化は達成されていない。これはひとつの問題点である。

対応策は以下が考えられる。物質科学の進展の観点からの、「空間」、「時間」、「精度」の軸に沿った先端的計算には多くの方法論があり、その数理的構造は RSDFT と同一ではない。それぞれの場合に則した、数理構造、プログラム構造、演算量の解析と、可能ならばハードウェアに則した新手法の導入、新アルゴリズムの導入が必要である。こうした新たなチャレンジを促進させるためには、アプリケーションを特定し、コードの中身を検討する A01 と他のメンバーの合同研究開発チームを作る必要がある。総括班での議論、「コンピューティクス勉強会」での議論を通じ、RSDFT に続く、他のアプリケーション・コードを特定し、合同チームによる高性能化、さらには物質科学でのブレークスルーを目指したい。

こうした物質科学計算法の高度化に加えて、逆方向のフィードバックも重要であろう。すなわち物質科学のブレークスルーを可能にする計算のためには、将来どのようなコンピュータが必要であるか、という視点である。これについては「コンピューティクス勉強会」では、A01 メンバーからの問題提起があったが、物質科学側からの明確なイメージの提示はなかった。これは、計算物質科学側のメンバーが、コンピュータのハード・ソフトウェアについての明確な理解を欠いているためかもしれない。上に述べた、アプリケーションを特定した合同チームによる研究・開発の過程で、そうした知識ギャップを埋めていきたい。また長期的には、両分野に精通した人材の育成が肝要である。東京大学物性研究所を主拠点とする計算物質科学イニシヤティブ [次世代スーパーコンピュータ戦略プログラムの分野 2 (新物質・エネルギー創成) を推進する研究拠点：代表＝常行真司] の人材育成を担う大学院として、東京大学工学系研究科、理学系研究科がある。そこでのカリキュラム構成に寄与することにより、本領域の活動が新世代の人材育成に資することを期待している。

物質科学における実験研究との共同も欠くことのできない重要な側面である。本領域の計画研究においては、理論グループと実験グループを同一班に組織し、不断の共同を促進することを目指している。また、5つの実験的公募研究も開始され共同研究の枠組みは整っている。実際、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、共著論文を公表している。また、A03 佐藤班の提唱する、相分離、双ドーピングを利用した、半導体薄膜成長技術は、A03 周班、田中班の成長実験によって、その有効性が確かめられ始めた。また、A02 押山班でのシリセン (silicene: グラフェン上の Si 膜) に対する原子構造・電子状態計算と、A02 平山班の成長と光電子分光実験との共同なども、徐々に成果が出始めている。より活発な共同研究を促進するため、計算・実験コロキウム等を随時開催する予定である。

次期公募研究においては、コンピュータサイエンス、計算物質科学、実験物質科学の共同研究を促進するような提案を歓迎したい。

#### 4. 主な研究成果

以下、A01、A02、A03の研究項目毎に、それぞれの研究課題での現在までの成果をまとめる。

##### (1) 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」

A01 研究項目においては、3つの計画研究と1つの公募研究が遂行され、物質計算における HPC 技法の開発を、数理手法、アルゴリズム、ソフト・ハードウェアの観点から推進している。

数理手法の側面では、物質の電子構造計算に頻繁に登場するシフト複素対称線形方程式の解法が開発された(張班)。Cu 1568 原子系の電子構造計算に現れる 14112 次元の行列を係数に持つ以下のシフト線形方程式

$$[\sigma_k I - H] \mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{e}_1, \quad [k = 1, 2, \dots, m, \sigma_k = -0.5 + (k-1+i)/1000, \quad m = 101]$$

に対して様々なクリロフ部分空間解法 (solver) が開発され、表1の結果が得られた。これにより、shifted COCR解法の優位性が実証された。

表 1 : (前処理付き) COCR 法と Shifted COCR 法の計算時間の比較

Solver	MV Prec	Sol Its	Time [s]	Prec Time [s]
COCR	7467	-	251.42	-
P1COCR	3848	3848	265.19	58.44
P2COCR	3877	3877	274.45	1.15
ShiftedCOCR	159	-	9.38	-

また複数のベクトルをまとめて解くブロック・クリロフ部分空間解法も検証され(高橋班)、数値的不安定性が抑制されることが明らかとなった。これらのクリロフ部分空間解法は、公募研究星班との共同により、マルチコア・並列アーキテクチャ上で MPI/OpenMP ハイブリッド手法で実装され、1024 演算コアまでであるが、理想的なストロングスケーリングを示した。これにより、周期性を持たない、アモルファス状有機 EL 型共役高分子 poly-(9,9 dioctyl fluorene) の 1000 万原子系に対する強結合ハミルトニアンを用いた分子動力学法計算が可能となった。

アルゴリズムおよびソフトウェアの側面では、基本的計算技法に対して、次世代、次々世代のアーキテクチャを見据えた改良が行われた。高速フーリエ変換 (FFT: Fast Fourier Transform) は多くのアプリケーションに頻繁に登場する計算技法であるが、「京」コンピュータに代表されるマルチコア・超並列アーキテクチャでは、通信量が莫大になるために HPC のネックになる。今回、三次元 FFT に二次元分割を導入した新しいアルゴリズムにより、通信時間を削減すると共に、演算と通信をオーバーラップさせることで、従来の実装に比べて性能を改善した。また、Intel AVX 命令を用いて FFT カーネル部分の性能を向上させると共に、ブロック Six-Step FFT アルゴリズムを用いることで、データがキャッシュに収まらない場合にも高い性能を維持する FFT ライブラリ FFTE を実装した(高橋班)。この FFTE は、「京」コンピュータにも実装され、スーパーコンピューティングの国際会議である SC2011 での HPC Challenge Award での「京」の 4 部門での第一位獲得に貢献した。

次々世代アーキテクチャでは、GPU(Graphics Processing Unit)に代表されるようなハードウェアを、物質計算の律速部分の演算加速装置として取り込むことが目論まれ、実際「東工大 TSUBAME」スパコンはそうしたアーキテクチャで構成されている。今回、この GPU 環境下での、3倍・4倍・8倍精度の BLAS(Basic Linear Algebra Subprograms)

を新たなアルゴリズムで開発し、NVIDIA Tesla C2050 において性能評価し、通常の Intel Core i7 920 に比べて、10 – 20 倍の高速化を確認した[論文リスト 4 番（以下数字のみ記載）]。また既存の GPGPU ソフトウェアの固有値ソルバーである MAGMA に比べて、独自開発した Eigen-sg ソルバーの方が Tesla C2050 上で高速であることが分かった[5]。

ソフトウェア・ハードウェアの側面では、超高速ネットワークを有効に活用するためのデータ転送方式の研究開発、とくに TCP/IP プロトコルによる競合トラフィックの動的推定方式を開発した（稲葉班）。また高生産性言語（プログラムを書き易い言語）である Ruby に着目し、従来の実効速度が遅い問題点を洗い出し、新たな高速コンパイラ HPC-Ruby を開発した（稲葉班）。図 1 にあるように良好な性能を示し、新たなプログラミングの可能性を示している。

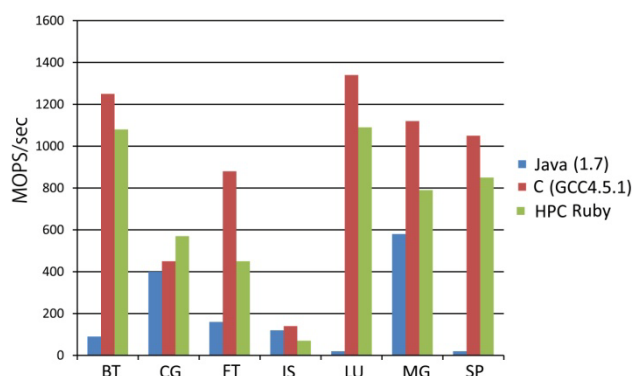


図 1 : HPC-Ruby による NAS Parallel Bench- marks の実行結果。各演算部分（横軸）に対し、HPC-Ruby、C++、JAVA 言語による性能評価が示してある。

FPGA(Field-Programmable Gate Array)を用いた演算アクセラレータについては、平成 22 年度は、超高速ネットワーク上を通信する多用なトラフィックの測定および成分分析の研究を実施し、今後試作を予定している FPGA ベース演算アクセラレータ設計の基盤を構築するとともに、超高速ネットワークを有効に活用するために必須である、バースト性を持つネットワークトラフィックに対する、バンド幅予測技術を確立した。

## (2) A02 研究項目「密度汎関数理論の新展開」

A02 研究項目においては、5 つの計画研究に加えて、理論分野からの 7 つの公募研究、さらには実験分野からの 3 つの公募研究が遂行されている。A01 の HPC 技法の開発と連携し、また A03 研究項目の量子多体論の新手法を視野に入れ、実験研究とも連携し、密度汎関数理論の新展開と更なる手法の開発を基盤として、物質科学への貢献を目指している。

ナノ物質・構造体の安定性と電子機能を解明・予測するためには、ナノ構造体を構成する数万原子群に対する定量的な量子論的計算を行うことが重要になってくる。密度汎関数理論 (DFT) の局所密度近似 (LDA)、一般化密度勾配近似 (GGA) は、現在のテクノロジーを支える物質群に対して、そうした定量性を有している。押山班では、この LDA/GGA 計算を数万原子群に対して行うための実空間 (RSDFT: Real Space Density Functional Theory) 手法を開発した。これは従来からの平面波基底展開 (PW) 手法に比べて、計算ノード間の通信を局所的範囲に抑えることが可能な手法であり、次世代、次々世代のコンピュータ・アーキテクチャに最適と考えられる。A01 高橋班との共同研究により、グラム・シュミット直交化演算の新しいアルゴリズム、固有値解法の新アルゴリズム (今村法、櫻井・杉浦法) などを採用し、MPI/OpenMP ハイブリッド並列コードを完成させた。「京」コンピュータ上で最適化を行い、「京」全体のリソースの 70% 程度を利用し、前人未踏の 100,000 個の Si 原子から成るナノワイヤー構造に対する DFT 電子状態計算を行った。実行効率は 44% であり、数学的に複雑な構造を持つ DFT 計算においては驚異的な高効率を達成した。また 10,000 原子群に対しては、



「京」全体のリソースの1%程度の利用により、1日足らずで電子状態を求めることが可能になっている[13]。

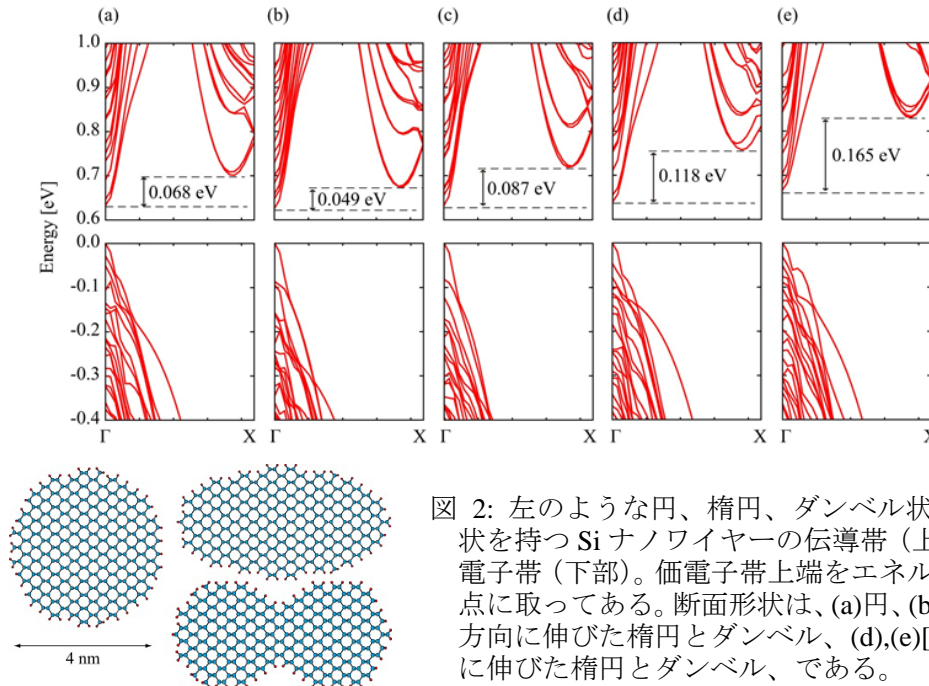


図 2: 左のような円、楕円、ダンベル状の断面形状を持つ Si ナノワイヤーの伝導帯 (上部) と価電子帯 (下部)。価電子帯上端をエネルギーの原点に取っている。断面形状は、(a)円、(b),(c) [001] 方向に伸びた楕円とダンベル、(d),(e)[1-10] 方向に伸びた楕円とダンベル、である。

図 2 は、RSDFT を用いて、東京大学物性研究所の SGI Altix 上で計算された様々な断面形状を有する Si ナノワイヤーの電子状態である[12]。Si ナノワイヤーはポストスケールリング時代の電界効果トランジスタ (FET) の切り札と目されている構造であり、ナノスケールの形状と電気特性の相関解明は、デバイス設計にとって本質的に重要な情報となる。今回の RSDFT 計算で、バリスティック伝導の場合には、[110]方向をワイヤー軸とし、断面形状が楕円でその長軸方向が[001]方向であるナノワイヤーが、バイアス電圧印可時のチャンネル数が最も多く、FET 材料として有利であることがわかった。

より大規模な、10,000 – 500,000 原子系に対しては、密度行列の局所性を活用したオーダー $N$ 手法<sup>1</sup>が有効である。押山班宮崎グループで開発された CONQUEST コードは、マルチコア・超並列アーキテクチャのコンピュータ上での、数十万原子系に対する構造最適化計算において、ストロング・スケーリングで 90% 程度の良好な並列化効率を示している。イオンチャンネル・タンパク質 gramicidinA に対する構造最適化計算が実行され、古典力場を用いた計算の問題点が明らかとなった。

LDA/GGA 計算による新たな知見は、物質科学に対して大きな貢献がある。ここでは、そうした計算例をひとつだけ紹介する。凝縮物質の電子状態は、第一義的には原子軌道の重ね合わせで構成されているというのが固体物理学の常識であろう。しかしながら、原子軌道の集合は基底関数系として完備ではない。実際、層状物質であるグラファイト、中空構造をもつ炭素ナノチューブでは、層間あるいはチューブ内に高い確率振幅をもつ特異な電子状態が存在することが知られており、それらは通常の原子軌道の重ね合わせでは記述することができない。こうした特異な電子状態が、通常の凝縮物質には存在できる余地がない、というのがこれまでの認識であった。今回 LDA/GGA による詳細な解析の結果、多くの共有結合半導体の伝導帯の下端は原子軌道の重ね合

<sup>1</sup> 計算時間が計算対象のサイズ  $N$  に比例して増加する計算手法。通常の DFT 計算は  $N^3$  あるいは  $N^2 \ln N$  のスケーリングを示すので、オーダー $N$ 手法は大規模計算では大きな利点がある。

わせではなく、格子間チャンネルに広がった floating state であること、結晶多型に依存したチャンネルの広がりや形状により、floating state のエネルギーレベルが大きく変化し、これが結晶多型に敏感なバンドギャップの変化の起因であることが突き止められた [15]。図 3 は、3C-SiC、2H-SiC での伝導帯下端の波動関数の確率振幅が格子間チャンネルに広がっていることが見て取れる。

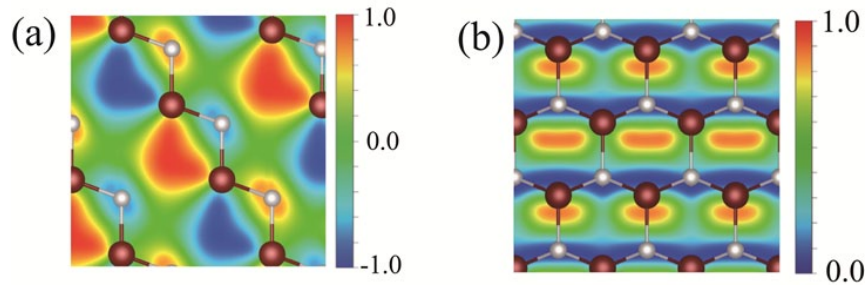


図 3 : SiC の伝導帯下端の波動関数 (コーン・シャム軌道)。(a)3C-SiC の伝導帯下端である M 点の波動関数の(011)面上での等高線プロット。(b) 2H-SiC の伝導帯下端である K 点の波動関数の 2 乗の(110)面上での等高線プロット。

物質内での非平衡ダイナミクスを調べるために、量子論の第一原理に立脚した分子動力学法計算は有用な手法である。Car-Parrinello 分子動力学 (CPMD) 法とメタダイナミクス法、ブルームーン法を結合させた計算が実行され、物質内の原子反応の機構解明と自由エネルギー障壁が得られた。図 4 は Si 結晶中の Si 原子の拡散の様子と対応する拡散係数を求めたものである [14]。現在まで多くの計算が行われてきたが、拡散機構の同定と拡散係数の定量的計算は行われていなかった。今回、十分長時間、大規模な CPMD 計算を実行し、拡散は格子間原子を媒介として起こること、拡散係数は LDA では大きく過大評価するが、GGA に近似を進めると、定量的に実験値を再現することが判明した。

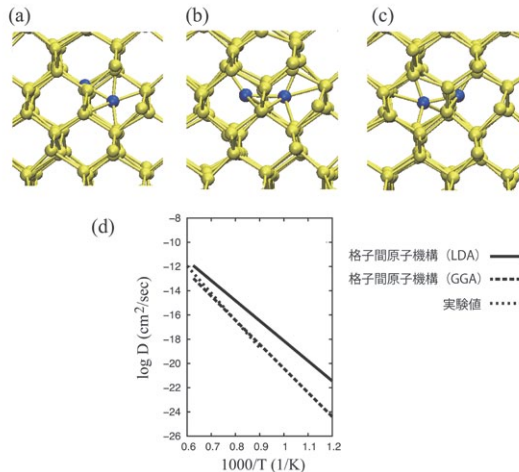


図 4 : Si 結晶中の自己拡散のミクロな機構。(a) 6 員環の真ん中に位置していた格子間 Si 原子 (濃丸) が、(b) 隣接原子とボンドを形成し、(c) 別の Si 原子が隣の格子間位置に押し出される。(d) このような格子間原子機構による拡散係数  $D$  の温度  $T$  に対する依存性の LDA および GGA による計算値と実験値。

LDA/GGA では定量的に記述することが難しい物性として、半導体、絶縁体のバンドギャップの過小評価の問題がある。これは LDA/GGA における自己相互作用 (Self Interaction) の問題と捉えることができ、DFT の交換相関エネルギーに対して、LDA/GGA とハートリー・フォック近似 (HFA) をハイブリッドさせた近似の有用性が期待されてきた。今回、平面波基底展開法にこのハイブリッド近似を実装し、様々な半導体、絶縁体のバンドギャップが計算された [10]。相互作用の短距離部分と長距離部分の取り扱いの異なる 2 つのハイブリッド近似 (HSE 近似と LC 近似) の妥当性を検証した結果、

バンドギャップの小さい共有結合性の比較的強い物質に対しては HSE 近似が有効であり、バンドギャップの大きいイオン性の強い物質に対しては LC 近似が有効であることがわかった。いずれにしてもハイブリッド近似は LDA/GGA の問題点を改善することがわかった。

LDA/GGA の他の問題点として、ファン・デル・ワールス力などの弱い相互作用の記述があげられる。濱田班では、そうした相互作用を記述するための vdW-DF 交換相関エネルギー汎関数に改良を加えた vdW-DF2C09x を提案し、様々な系に適用を行った[47]。単一分子トランジスターの素子としての C<sub>60</sub>分子を取り上げ、中性ならびにゲート電圧により負に帯電した C<sub>60</sub>分子の金電極上での吸着エネルギーを計算し、その吸着距離に関する依存性は LDA/GGA による結果とは大きく異なり、実験とよい一致を示すことが判明した。

平面波基底展開法は高精度の標準手法として重要であり、次世代、次々世代コンピュータでの高速化、高機能化は重要である。常行班では、アクセラレータ Grape-DR (A01-1 稲葉班) や市販の GP-GPU の利用、アルゴリズム改良により、平面波基底 DFT コード xTAPP の高速化を行った。また電極反応のような電場下のシミュレーションを実現する有効遮蔽媒質 (ESM: Effective Screening Medium) 法を xTAPP に実装し、電気二重層のシミュレーションを実現した。ESM 法については手法の拡張を行い(smooth ESM 法)、より現実に近い電気化学系のシミュレーションを可能にした。これにより、電気化学分野において経験的に認識されてきたヘルムホルツ層に対しての新しい微視的描像を与えた。

また、密度汎関数理論を越えて高次の電子相関を取り入れる手法のひとつにトランス・コリレイテッド (TC: TransCorrelated) 法があるが、そこでの有効一電子方程式は三体演算子を含み、計算コストは膨大となる。今回、独自開発してきた TC 法のコード TC++のアルゴリズムを見直し、大幅な高速化を実現して実用化への道を開いた[18]。

常行班では、熱伝導度の汎用的な第一原理計算手法の開発に取り組んでいる。半導体材料を用いたナノ構造熱電変換デバイス、あるいは極限的な微細加工が施された電子デバイスでは、熱伝導率の低減、異種界面の熱膨張などが重要な設計要素となっている。半導体中の熱輸送は主に格子振動によって担われている。格子熱伝導率を高精度に予測するためには、格子振動の非調和性を精密に記述する必要がある。とくに界面を含むナノ構造の熱伝導率計算手法としては、異種材料界面でも原子間相互作用を正確に記述できる第一原理分子動力学 (FPMD) が汎用性も高く最適である。しかし、熱伝導率計算において要求される空間 (数万~数十万原子) および時間スケール (数~数十ナノ秒) が非常に大規模であるため、すべてを FPMD で実行することは計算コスト上不可能なのが実情である。そこで図 5 のように、短時間の FPMD 用いた非調和格子モデル (ALM) の構築、および ALM を用いた格子熱伝導率の応用計算を行った。ALM は原子間ポテンシャルを原子変位に関するテイラー展開で記述したものであり、原子変位が小さい限り非常に汎用性が高く、表面・界面系へも適用可能であると期待される。熱伝導だけでなく熱膨張の記述も可能である。ALM を特徴付ける調和および非調和の結合係数 (IFC) は FPMD を用いて決定する。熱伝導率を評価するナノ構造体の大規模分子動力学計算は、第一原理計算を ALM で代用することで現実的な時間で計算可能になり、第一原理に立脚した格子熱伝導率の高精度計算が実現される。また、調和および非調和 IFC はボルツマン輸送方程式と組み合わせることも可能であり、分子動力学法と相補的な役割を果たすと期待される。今回 FPMD を用いた ALM の構築手法を開発し、シリコンの熱伝導率の定量的な実証計算に成功した。今後は適用対象を熱電材料や表面・界面などを備えるナノ構造まで広げ、本手法の妥当性検証と界面を含むナノ構造体でのフォノン伝導特性の、よりミクロスコピックな側面からの理解

を目指す。

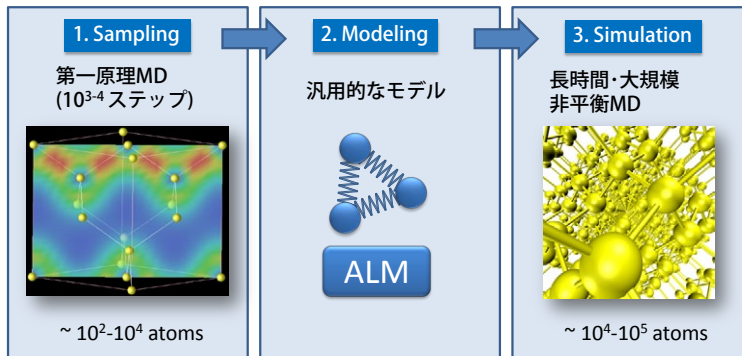


図 5: 第一原理による熱伝導度の汎用計算手法。比較的少数の原子を用いた短時間の第一原理 MD シミュレーションを使って定量的な非調和格子モデル (ALM) を決定し、大規模長時間の非平衡古典 MD で熱伝導度を求める。

渡邊班では、ナノスケール電気伝導現象について、ダイナミクス、スピンや電子励起等との絡み合い、複雑なナノ構造、といった観点を中心に、計算・解析と方法論の開発・改良を行った。まず、高速動作を狙う次世代ナノ電子デバイスの材料として有力な金属カーボンナノチューブ (CNT) について、サブ THz 交流電気伝導を解析した。欠陥がない金属 CNT では電極 - CNT 接触強度の増大と共に容量性サセプタンスから誘導性サセプタンスへの転移が起き、またこの転移点は直流コンダクタンスがちょうど量子化コンダクタンスになる時であることがわかった。

次に、原子空孔を含む金属 CNT では、電極との界面が電子波の反射の無い理想的な接続の場合、直流コンダクタンスは原子空孔の位置に依らないのに対し、交流印加時の電流電圧位相差 (エミッタンス) は原子空孔の位置に強く依存することを明らかにした (図 6) [19]。

さらに、よりデバイスに即した伝導特性理解という観点から、ジグザグ端グラフェンナノリボン (GNR) による、ドーパされた電極/ノンドープ・チャンネル/ドーパされた電極、という構造の伝導特性を解析した。GNR の幅が偶数個の時には電界効果トランジスタに類似した電流飽和特性の出現が知られていたが、この特性に対する原子欠陥の影響を調べたところ、リボン端に導入した原子欠陥がドレイン電極近くにある場合には影響が強く現れるのに対し、ソース電極近くにある場合にはほとんど現れない事を見出した。

また、複雑な構造の例として C<sub>60</sub> 堆積膜について解析した。この膜では、電子線照射により、絶縁体的から金属的な電子状態の変化を伴った C<sub>60</sub> の重合が起こることが報告されている。計算の結果、金属的な伝導特性を示すポリマー化構造を明らかにし、その構造が走査トンネル分光の実験結果と整合することを示した。

方法論の開発という点では、まず金属/絶縁体/金属構造の電圧印加下の電子状態を計算できる新たな方法である「軌道分離法」を開発した[20]。この方法では、フェルミ準位近傍の Kohn-Sham 軌道を 2 つの電極に分離し、それらを異なるフェルミレベルに基づいて占有させることでバイアス電圧印加効果を取り入れられる。既存の密度汎関数法プログラムに容易に組み込みことができ、適用範囲の広い方法である。また、輸送計算では従来の方法では計算量の多さから Jellium 電極を用いなければ大規模なモデルを取り扱えなかったが、計算時間を大幅に増やすことなく結晶電極を用いても大規模なモデルを取り扱うことのできる方法を開発した。

中村班では、非平衡グリーン関数法と密度汎関数法 (NEGF-DFT) を用いて、バイアス極性による非平衡電子状態由来の整流作用、散乱領域での伝導電子-フォノン相互作用による非弾性電流、局所加熱、基板電極への熱散逸といった過程を計算する第一原理計算プログラム HiRUNE を開発した。p 型分子ブロックと n 型分子ブロックを直接

結合させた diblock 分子を伝導体を用いると、pn 接合と全く同じ整流作用が低バイアス領域でもおこることが最近計測により示された。HiRUNE を用いた計算により、低バイアス領域での整流性を再現し、非平衡グリーン関数から逆に有効ハミルトニアンを導出し、伝導性軌道を用いた  $S$  行列の共鳴構造を評価しその整流特性の物理を明らかにした[50]。また、同じ有効ハミルトニアンをもとに extended Hubbard 模型を作り非平衡での GW 計算(screened RPA)を適用して電圧による非対称電流が電子相関により増強される可能性を示した。一方で、電子-フォノン散乱による非弾性電流は、単純な線形応答から期待される増強された整流性が、低バイアス領域でもおこらないことをシミュレーションから示し、計測でもこれが確認された。

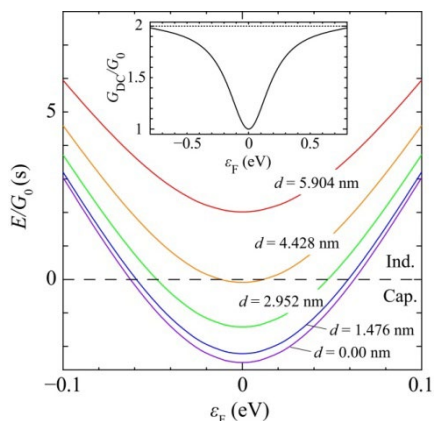


図 6: 原子空孔を含む CNT のエミッタンス。挿入図は直流コンダクタンス。d は試料中央からの距離。

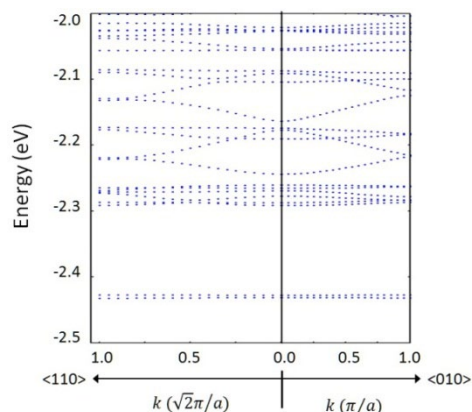


図 7: Pd(001)表面でのミュオンバンド。コードの高速化によりバンド分散も計算可能となった。

物質内におけるプロトン及びその軽い同位体として振る舞う正ミュオンは、量子効果が強く、従来の電子系のみでの第一原理シミュレーションでは、取り扱い難い。中西班牙は、物質環境下でプロトン、ミュオンと電子の双方を、第一原理で扱う量子シミュレーションコードを開発するとともに、実験手法も交えて、様々な物質系における軽い核の量子論的振る舞いを探り、新奇物性を探索している[23,24]。これまで開発してきた第一原理量子シミュレーションコード Naniwa は特許第 4774523 号、US8140467 を獲得している。今回、計算機科学的見地から見直し、速度を落とさず広範囲の様々な物質環境に対応する改良したコードを開発し特許出願を行った(特願 2012-16133)。水素を含む様々な物質系、反応系を探索し、多様な水素の振る舞いを明らかにした。また、物質内でのミュオンの位置情報を与えることができる本手法は、超低速ミュオン顕微鏡法開発への寄与も大きい。図 7 は Pd 金属表面でのミュオンバンド図であり、今後のミュオン計測との共同研究が期待される。

高压系での物性探索では、純粋水素よりも水素化合物の方が、実現しやすい高压領域で転移が期待できると示唆され、 $\text{AlH}_3$  を主体として調査してきた。第一原理計算の結果、構造は 300GPa 付近で金属から非金属への転移し、このとき水素は完全にヒドリド ( $\text{H}^-$ ) になることを確認した。これまでの計算では  $\text{AlH}_3$  の構造は 500GPa までは安定で、これよりエンタルピーが低い構造も見つけられないことから、この現象を実験で確認出来る可能性が高いと考えられる。

表面反応系での物性探索では、同位体で弁別した水素(H,D)の吸脱着実験と水素深さプロファイリングで、パラジウム単結晶表面からの水素吸収機構を調べた。その結果、気相から飛来する水素分子が原子に解離してホットアトムが供給され、あらかじめ吸着していた水素原子と入れ替わり、吸着していた水素原子が 0.1eV 未満の活性化障壁で

表面内へ吸収されることが分かった。これら反応機構の解明は、水素付加反応の触媒材料開発やクリーン水素エネルギー活用の為の水素精製の技術開発にも寄与するものである。

量子シミュレーションに電子多体効果を高精度に取り入れる高速な計算手法の開発では、共鳴ハートリーフォック法における非直交スレーター行列式による基底関数系を用いる方法を応用・改良した。配置間相互作用展開において、収束性が大幅に改善された[26]。

バイオ系に対するコンピューティクスのアプローチとして倭班では、タンパク質中のガス分子移動機構を調べた。酸素貯蔵タンパク質として有名な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、ガス分子移動に対するタンパク質の構造変化と熱揺らぎの効果を調べるため、時間分解X線結晶解析と分子シミュレーションを融合し、タンパク質中にガス分子を配置する平均力ポテンシャル(PMF)を計算した[28]。その結果、光照射によるタンパク質の構造変化に応じてPMFマップが変化している様子が明らかになった(図8)。例えば、Xe1では分子外部に気体分子が放出され易くなっている様子がよく分かる。なお、ミオグロビンの分子中で一酸化炭素が移動する際に、分子内の各地点でCOが感じる平均力ポテンシャル(PMF)の3次元マップをCGで可視化するツールを作成した。VMDというCGソフトを用いて描画できるようになっている。下記URLからダウンロード可能である。

説明書：<http://www.tb.phys.nagoya-u.ac.jp/~yamato/PMF3D.pdf>

可視化ツール：<http://www.tb.phys.nagoya-u.ac.jp/~yamato/PMF3D.zip>

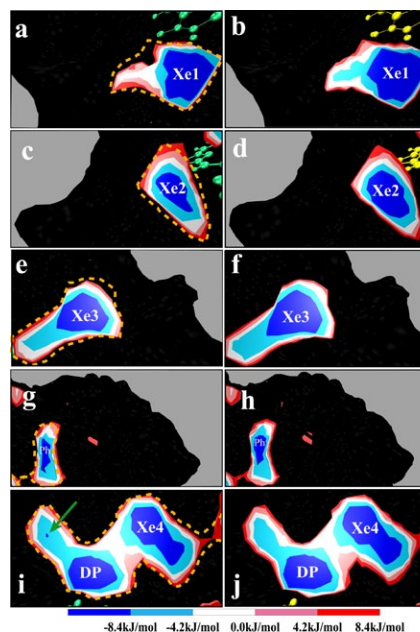
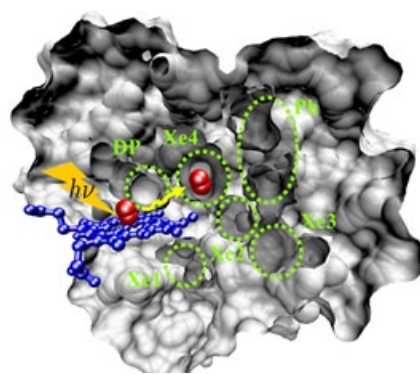


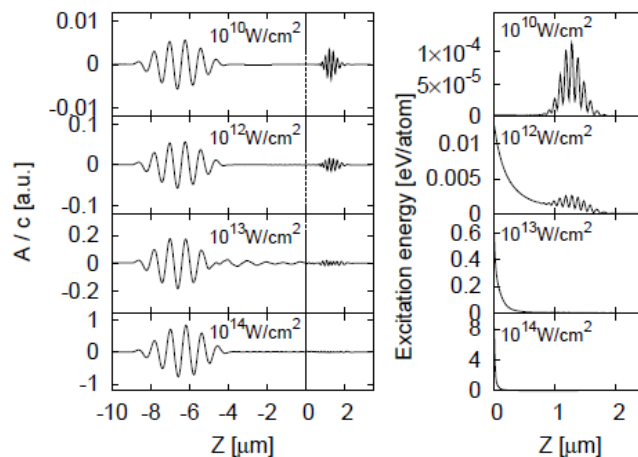
図8：ミオグロビンの分子内空洞(上図)。ミオグロビン分子内にガス分子を配置する平均力ポテンシャルのマップ(右図)。acegi(bdfhj)はそれぞれ光照射前(後)に対応。

また、高分子の分野で開発された緩和モード解析をタンパク質系に適用することを試みた。蛋白質系のシミュレーションの解析手法として主成分解析が広く使われているが、これは揺らぎの静的性質を調べることができる。緩和モード解析は主成分解析の拡張版で、揺らぎの動的性質を調べることができる。今後、長時間シミュレーションが可能となってくる際、機能に重要なゆっくりとした動きを抜き出す解析手法は重

要であり、この手法は広く使われる可能性がある[29]。

非平衡ダイナミクスを追跡する有力な理論的枠組みとして、時間依存密度汎関数理論 (TDDFT: Time Dependent DFT) がある。強い外場下での物質応答を調べるためには、TDDFT とマックスウェル方程式を結合させる必要がある。そこでは、電子の波長と光の波長という異なる長さスケールが存在する。矢花班では、そうしたマルチスケール計算の定式化を行い、最初の例として、1次元パルス光が Si 結晶に入射する場合に応用した[48]。図9に、様々な強度のパルス光が入射した場合に、結晶表面を通過した後の、反射波と透過波の様子を示す。誘電率で表現されるような線形光応答では、電磁波の時間変化は光の強度に依存することは無いが、ここに示されているような高強度パルス光の場合は、多光子吸収に伴う減衰により透過波の様子が強度とともに大きく異なっていることが分かる。また、物質中での電子励起も、強度が  $10^{10}\text{W/cm}^2$  では透過波が通過後は基底状態に戻っていたのに対し、強度が増すにつれて表面の波長程度の領域に光から電子への大きなエネルギー移行をもたらしていることが分かる。

図9：様々な強度のパルス光が Si 結晶に入射した場合の、光が反射波と透過波に分かれた後の様子。左はベクトルポテンシャル、右は電子の励起エネルギーの分布。



### (3) A03 研究項目「密度汎関数理論を超えて」

A03 研究項目においては、3件の計画研究に加えて、理論分野から2件、実験分野から2件の公募研究が遂行されている。A01のHPC技法の開発と連携し、また本研究項目で開発深化された量子多体論の知見をA02研究項目にフィードバックしつつ、実験研究とも連携し、密度汎関数理論を超えた新手法の開発を行いながら、物質科学への貢献を目指している。

今田班では、第一原理的に強相関電子系の電子状態を明らかにする計算手法を開発し、広範に応用する研究を進めている。電子構造の階層性を利用して自由度を縮減するダウンフォールディング法により、着目するエネルギースケールのための少数自由度のみの有効モデルが非経験的に導出され、有効モデルを精緻な低エネルギーソルバーで解くことにより、従来までの密度汎関数法では困難な強相関電子系を高精度、低負荷で取り扱える新手法—階層的な第一原理強相関電子状態計算法 (MACE: Multi-scale Ab-initio scheme for Correlated Electrons)—を確立し、現実の多彩な物質群への広範な実証研究の展開を進めた。方法論的には、低次元有効モデルを求めるための次元縮約法の開発、動的遮蔽クーロン相互作用の扱い、スピン軌道相互作用を扱うための実装[33]などが進展した。進展した応用は、超伝導体(鉄系、銅酸化物、フラレン、芳香族、窒化物)に対するもの[31,34,37]、有機導体[33]、ゼオライト[35]やスピン軌道相互作用の強い系[33]など広範であり、特徴ある物性を示す物質群の解析を進めている。また光電子分光実験との共同による強相関電子系の解析も超伝導体などを中心に進んだ[37,38]。さらに、この研究課題の最重要項目の一つである MACE の開発応用について、総合報告をまとめた[30]。

以下、鉄系超伝導体に例をとって、その手法、応用の展開を述べる。次元縮約も含めて第一原理的に導出された4種の鉄系超伝導体 (LaFeAsO, LaFePO, BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>, FeTe) の有効模型に対して、多変数変分モンテカルロ法を適用し、磁性秩序構造、秩序磁気モーメントの両方とも定量的にこれら4つの物質の実験結果を再現することを示した (図10)。この結果は、電子相関の違いが物性の多様性を決める原因であることを明確に示している。また、得られている LaFeAsO の第一原理有効模型に対して電子濃度を変化させた結果、図11のように、現実物質がホールキャリアを100%ドープした d<sup>5</sup> 状態 (Fe の 3d 軌道を平均5個の電子が占めるハーフフィリング状態) に生じる巨大なモット絶縁体の辺縁部に位置することがわかり、現実物質が大規模な電子相関の中で位置づけられることが明らかとなった[31]。

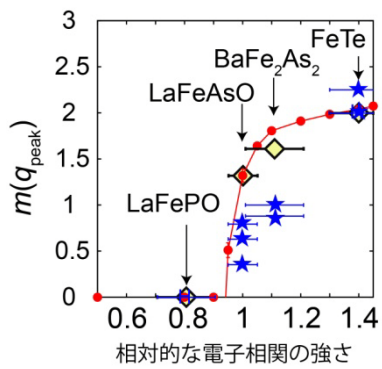


図10: 4種の鉄系超伝導体の秩序磁気モーメントの計算値 (★印は実験値)。

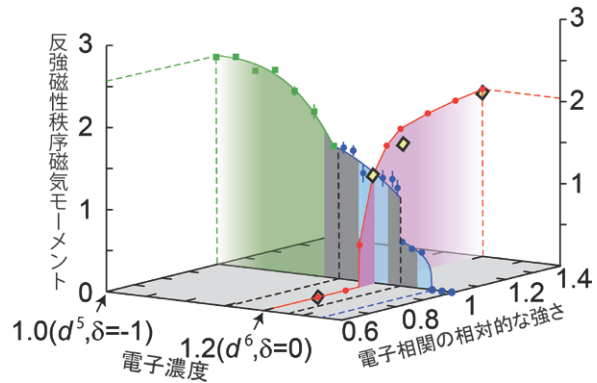


図11: 電子濃度と電子相関を変化させたときの磁気秩序モーメントの変化。d<sup>5</sup>のモット絶縁体の大局構造が見える。

また鉄系超伝導体研究の初期より構造と超伝導の相関が指摘されてきた。とりわけ、陰イオン (ニクトゲン、もしくはカルコゲン) と鉄原子面の距離  $h$ 、あるいは陰イオン—鉄—陰イオンのなす結合角  $\alpha$  と超伝導転移温度にユニバーサルな関係があり、中間領域で転移温度が最高に達することが知られている。鉄砒素超伝導体のなかで最小の  $\alpha$  をもつ Ca<sub>4</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>6</sub>Fe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> や Ca<sub>4</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>6</sub>Fe<sub>2</sub>P<sub>2</sub> の電子構造を調べ、幾何構造 ( $h$  や  $\alpha$ ) の違いからフェルミ面のポケットの数の違いや、超伝導転移温度の変化を系統的に理解できることを示した。さらに顕著な不純物効果を理解するための第一原理計算を進めた[34]。

高田班の研究課題は「第一原理からの多体問題」であり、密度汎関数理論 (DFT) やその時間依存版 (TDDFT) の基礎理論開発に伴って、一層深化している解析的研究を基盤にして、強力な多体理論手法であるグリーン関数法で第一原理系の多電子問題を励起状態も含めて忠実に解くことが目標である。具体的には、「第一原理系励起状態の多体論」というテーマで、局所電子数保存則を満たす自己無撞着な GWI 法を発展させ、そのコードを開発し、フェルミ流体とラッティンジャー流体の相違に注意しながら、励起状態の交換相関効果と正常状態での準粒子像の詳細を定量的に調べている。これらに関連して、拡散モンテカルロ法を駆使して、電子ガス中の1原子問題を詳細に調べることで DFT における交換相関ポテンシャルを研究し、局所密度近似を超える汎関数形を追求している。また、「高転移温度超伝導物質デザイン」というテーマで、正常状態だけでなく超伝導状態もそれと整合的に取り扱うことを目指している。特に、超伝導の微視的機構の本質に迫るために、密度汎関数超伝導理論 (SCDFT) との対応を重視しつつ、信頼に足る超伝導転移温度  $T_c$  の評価法の構成に努めている。同時に、実



験状況に注意を払いつつ、物質・材料の観点から興味深い超伝導体を理論的に探索している。

これ迄の研究成果として、まず、GWF法に関連して運動量積分と松原振動数の和を含む多重積分ルーチンを全並列化したコードを作成した。その結果、これまでは金属密度領域の電子ガス系(電子密度径数  $r_s$  は 1 から 5 まで)でしか自己エネルギー $\Sigma$ の収束解が得られていなかったものが、誘電異常を起こす密度(圧縮率が発散する  $r_s=5.25$ )を大きく超えて低密度の  $r_s=8$  まで $\Sigma$ と運動量分布関数  $n(\mathbf{k})$ の収束解が得られた(図 12) [39]。さらに低密度では、誘電異常が大変強くなり、フェルミ準位近傍にいわば「自己誘起された励起子状態」が生成され、系全体の不安定化が示唆された。

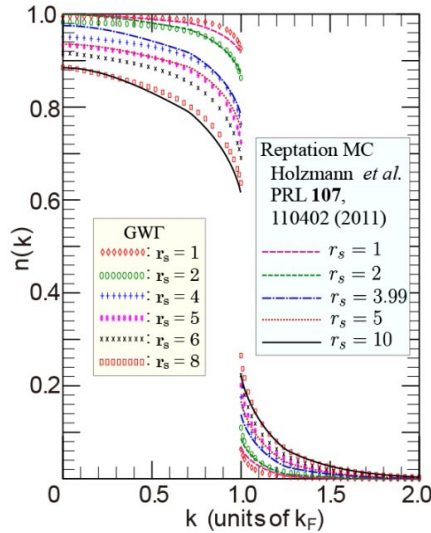


図 12 : 電子ガス系の運動量分布関数。RMC の結果とは異なり、GWF 法の結果は種々の総和則を高精度で満足する。

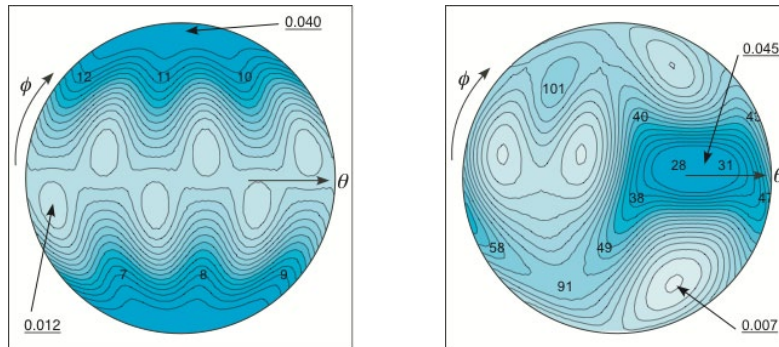


図 13 : 同じ Li ドープでも  $\alpha$  相では金属化し、 $\beta$  相では電氣的には不活性となることを説明したもの。Li 原子を中心にしたときの電子密度分布の方位 ( $\phi, \theta$ ) 依存性。 $\alpha$  相 (左図) では電荷密度分布は比較的一様で金属的となっているのに対し、 $\beta$  相 (右図) では特定方向に限られ方向性を持った共有性結合となっていることが原因である。

次に、超伝導に関連してホウ素系と炭素系で超伝導物質探索を行った[40-42]。そもそも、軽い半導体は固いものが多く、十分なドーピング量が達成できるならばフォノン機構でも  $T_c$  が 50K を上回る超伝導出現の可能性はある。そのような硬い半導体の候補として多数の結晶構造を持つホウ素・ホウ素系半導体を取り上げ、高圧でのホウ素の安定構造は  $\alpha$  相であると理論予言した。これは実証され、金属化により  $T_c \sim 6K$  の超伝導を得た。 $T_c$  をより高めるには、より高濃度ドーピングが必要である。従来、 $\beta$  相へはドーピングは容易だが金属化しない、 $\alpha$  相はドーピングが困難という問題があったが、これを理論的に解明した[42]。その視覚的な説明が図 13 である。この理解を基礎にして高圧ドーピ

ング法の有効性を見だし、それによって 1 atomic %を上回るドーピングが可能であることを実験家に提唱している。

佐藤班では、計算科学と実験科学双方のアプローチで、スピントロニクス材料の探索を進めている。半導体スピントロニクス材料である磁性半導体の合成において、一般に半導体への磁性不純物の添加は相分離のため非常に実現が難しく、高いキュリー温度の実現を阻んでいる。我々は、KKR-CPA 法による混合エネルギーの計算から、(Ga, Mn)As の場合、Li を Mn と同時に添加すると相図中に均一添加が可能な領域が現れ固溶限が大きく上昇することを見出した (図 14) [43]。最近では、従来から研究されている III-V 族磁性半導体のほかに酸化物を母体とする磁性半導体の開発が盛んに行われている。我々は、母体材料としてとくに MgO に注目し、N 添加や Mg 空孔の導入により強磁性発現の可能性を示した。さらに、スピントロニクスデバイスのシミュレーションを目指して層数に対してオーダー  $N$  計算が可能な遮蔽 KKR 法の開発および久保公式による電気伝導率計算コードの開発をおこなった。

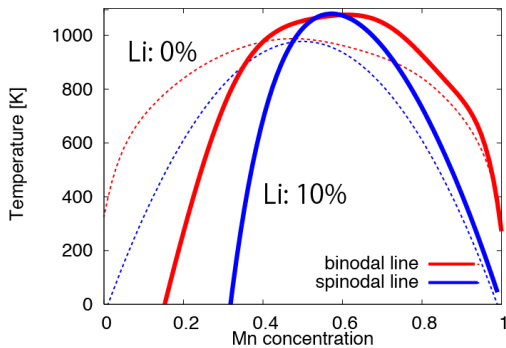


図 14: Li をドーピングした(Ga,Mn)As の相図

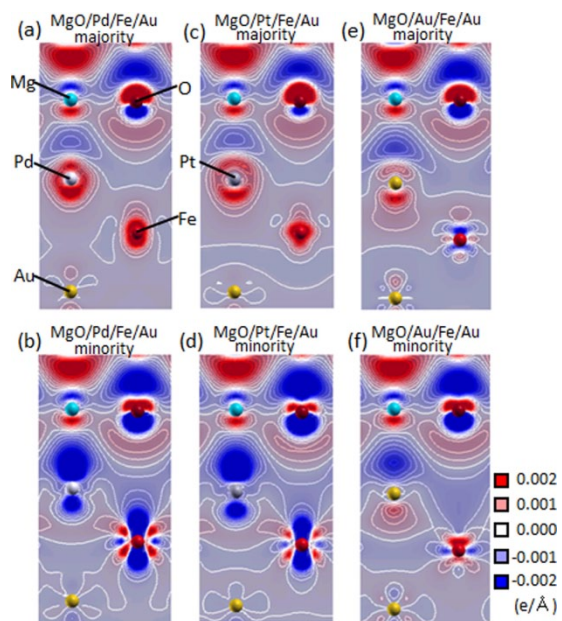


図 15: MgO/M/Fe/Au(001) (M=Pd, Pt, Au)界面における電界誘起スピン依存電子密度分布

金属系スピントロニクスのデザインについては、外部電界下での磁性薄膜の磁気状態を、密度汎関数理論に基づいた相対論的 2 成分擬ポテンシャル第一原理電子状態計算法を用いて研究した。金属薄膜 (真空/M/Fe/M(001), M=Pt, Pd) においては実験結果を半定量的に説明でき[45]、接合薄膜(MgO/Fe/M(001), M=Au, Pt)では Au にくらべ Pt 基板の系で電界効果が大きいことがわかった[44]。誘電体と磁性金属の界面に Au, Pt, Pd 等の単層金属の挿入により磁気異方性エネルギーやその電界効果が可変にできることも明らかとなった。図 15 に界面でのスピン依存の電子密度を示す。

佐藤班では、実証実験として、Ag/超薄膜 Fe/MgO、および Pd/超薄膜 Fe/MgO 接合における電圧誘起磁気異方性変化の測定を行い、Au バッファと同様に、電圧印加による明瞭な垂直磁気異方性変化を観測し、その変化量が Au の場合の約 3 倍に増大することを見出した。また、これまでに最適化した電界効果用多層構造を応用した Au / 超薄膜 FeCo / MgO / Fe 積層からなる強磁性トンネル接合素子を作製し、高周波電圧の印加による強磁性共鳴ダイナミクスの励起、およびその電気検出に成功した。

金属磁性材料のデザインとして Fe ベース永久磁石材料のデザインも行った。KKR グリーン関数法による電子状態計算の結果、Cr や V を Fe に添加することで磁性の増大が

おこることを見いだした。この効果のため Fe と Cr の積層構造においては交換異方性のメカニズムから大きな保磁力が期待できる。

田中班では、佐藤班のこれまでの成果を踏まえ、遷移金属酸化物を用いた高機能・高効率ナノヘテロデバイスを作製しうる方法として有望である自己組織化ナノ相分離成長法を用い、高い強磁性転移温度を有する強磁性半導体 $(\text{Fe,Zn})_3\text{O}_4$ と巨大自発電気分極を有する  $\text{BiFeO}_3$  とのスピンの電界制御が期待されるナノヘテロ構造の作製に成功した。さらに、ナノヘテロ構造を直接デバイス応用できるよう、人工種結晶アレイを成長起点としてナノスケール相分離成長させる「3次元ナノシード自己組織化法」へと発展させた。この独自の手法により、人工的に規定された位置に望みのナノヘテロ構造を作製することが可能となり、完全位置制御された強磁性半導体 $(\text{Fe,Zn})_3\text{O}_4$  ドット- 強誘電体  $\text{BiFeO}_3$  母相ナノヘテロ構造、および強磁性金属 Fe ドット-絶縁性  $\text{LaSrFeO}_4$  ナノヘテロ構造の作製に成功した (図 16)。

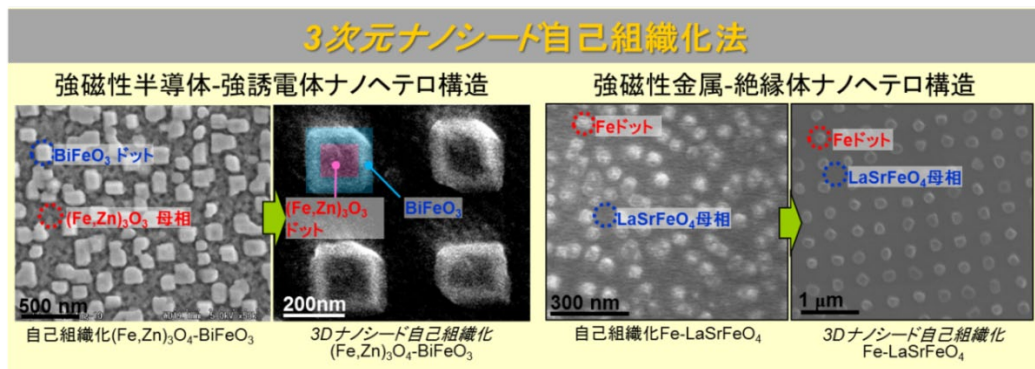


図 16

同じく実験的アプローチの周班では、スピノーダル分解に起因する自然超格子の形成を初めて発見した (図 17)。自然超格子の形成により、更なる強い室温強磁性が観察され、佐藤・吉田らのスピノーダル分解理論を用いることで解釈できた。この結果は今後のスピノーダル分解を利用した新機能デバイスの作製に大いに貢献できる。また、分子線エピタキシー(MBE)法による窒化物半導体ナノロッド構造において、高濃度の Gd 添加に成功した。

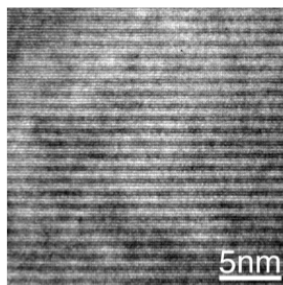


図 17: GaGdN 単層膜の電子顕微鏡観察から、スピノーダル分解による自然超格子の形成が初めて確認された。より強い室温強磁性を示すことから、佐藤・吉田らの理論計算結果と一致したことがわかった。

## 5. 研究成果の公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開発表等）

### (1) 主な論文等一覧

本新学術領域研究において査読付きの学術雑誌で発表された論文は全331篇である。  
以下に主なものを記す。

1. Cache Replacement Policy Using Map-based Adaptive Insertion, Yasuo Ishii, Mary Inaba, Kei Hiraki, JWAC-1: 1st JILP Workshop on Computer Architecture Competitions: cache replacement championship, pp.41-44, (2010)
2. Voronoi Diagrams on Periodic Graphs, N. Fu\*, H. Imai and S. Moriyama, 2010 International Symposium on Voronoi Diagrams in Science and Engineering(ISVD'10), pp.189-198, (2010)
3. MPI-GPU Monte Carlo Tree Search, Kamil Rocki\*, Reiji Suda, IEEE 2011 International Conference on Information and Computer Applications(ICICA), (2011)
4. Optimization of Sparse Matrix-Vector Multiplication by Auto Selecting Storage Schemes on GPU, \*Yuji Kubota and Daisuke Takahashi, Proc. 11th International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2011), Part II, Lecture Notes in Computer Science, No. 6783, pp. 547—561, Springer-Verlag (2011)
5. Modified block BiCGSTAB for lattice QCD, \*Y. Nakamura, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, T. Sakurai and H. Tadano, Computer Physics Communications, Vol. 183, pp. 34—37 (2012)
6. 一般化固有値問題に対するArnoldi(M,W,G)法, 山下達也, 宮田考史, 曾我部知広, 星健夫, 藤原毅夫, 張紹良, 日本応用数理学会論文誌, vol.21(3), pp.241-254, (2011)
7. Backward error analysis of the AllReduce algorithm for householder QR decomposition, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, D.Mori, Y.Yamamoto and S.-L.Zhang, vol.29, pp.111-130, (2012)
8. 非対称線形方程式のためのLook-Back GMRES(m)法, 今倉暁, 曾我部知広, 張紹良, 日本応用数理学会論文誌, Vol.22, No.1, pp.1-22, (2012).
9. 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, 5pp. (2012).
10. Comparative study of hybrid functionals applied to structural and electronic properties of semiconductors and insulators, Y. Matsushita, K. Nakamura and A. Oshiyama, Phys. Rev. B **84**, 075205 (2011).
11. Selective Alignment fo Carbon Nanotubes on Supphire Surfaces: Bond Formation between Nanotubes and Substrates, S. Jeong and A. Oshiyama, Phys. Rev. Lett. **107**, 065501 (2011).
12. First-principle Study of Energy-Band Control by Cross-Sectional Morphology in [110]-Si Nanowires, S. Kyogoku, J.-I. Iwata, and A. Oshiyama, Proc. IEEE Int. Conf. Nanotechnology (Portland, August 2011) pp1322-1326.
13. 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).
14. Self-diffusion in crystalline silicon: Car-Parrinello molecular dynamics study, K. Koizumi, M. Boero, Y. Shigeta and A. Oshiyama, Phys. Rev B **84**, 205203 (2011).
15. Floating Electron States in Covalent Semiconductors, Y. Matsushita, S. Furuya adn A. Oshiyama, Phys. Rev. Lett. **108**, 246404 (2012).
16. Identification of boron clusters in silicon crystal by B1s core-level X-ray photoelectron spectroscopy: a first-principels study, J. Yamauchi, Y. Yoshimoto, and Y. Suwa, Appl. Phys. Lett. **99**, 191901 (2011).
17. Two-Dimensional Intrinsic Ferromagnetism at Nitride-Boride Interfaces, Y. Gohda and S. Tsuneyuki, Phys. Rev. Lett. **106**, 047201 (2011).
18. Efficient algorithm of the transcorrelated method for periodic systems”, M. Ochi, K. Sodeyama, R.

- Sakuma, and S. Tsuneyuki, *J. Chem. Phys.* **136**, 094108 (2012).
19. Theoretical Analysis of AC Transport in Carbon Nanotubes with a Single Atomic Vacancy: Sharp Contrast between DC and AC Responses in Vacancy Position Dependence, D. Hirai\*, T. Yamamoto, and S. Watanabe, *Applied Physics Express*, **4**, 075103 1-3 (2011)
  20. Orbital-separation approach for consideration of finite electric bias within density-functional total-energy formalism, S. Kasamatsu\*, S. Watanabe, and S. Han\*, *Physical Review B*, **84**, 085120 1-11 (2011)
  21. Parity induced edge-current saturation and current distribution in zigzag-edged graphene nano-ribbon devices, S. Souma\*, M. Ogawa, T. Yamamoto, K. Watanabe, *Journal of Computational Electronics*, **10**, 35-43 (2011)
  22. Fully spin-dependent transport of triangular graphene flakes, Tomoya Ono\*, Tadashi Ota, and Yoshiyuki Egami, *Physical Review B*, **84**, 224424 1-7 (2011).
  23. A First Principles Study on Dissociation and Adsorption Processes of H<sub>2</sub> on Pd<sub>3</sub>Ag(111) Surface, H. K. Dipojono, A. A. B. Padama, N. Ozawa, H. Nakanishi, H. Kasai\*, *Japanese Journal of Applied Physics*, Vol. 49, pp. 115702 (2010).
  24. Interactions of Hydrogen with Solid Surfaces, N. Ozawa, M. Sakaue, H. Kasai\*, *Journal of Vacuum Society of Japan*, Vol. 53, No. 10, pp. 592 (2010).
  25. Structural properties of ferromagnetic CaN in a CsCl-type and rock salt structure: A first-principles study, M. Geshi\*, *Physica B*, Vol.405, pp.517(2010) .
  26. Electron-electron correlation energy calculations by superposition of nonorthogonal Slater determinants, A. Sasaki, K. Hirose, H. Goto\*, *Curr. Appl. Phys.* (2012) in press.
  27. Current Understanding of the Transport Behavior of Hydrogen Species in MOS Stacks and Their Relation to Reliability Degradation, Z. Liu\*, S. Fujieda, H. Ishigaki, M. Wilde, and K. Fukutani, *ECS Transactions*, Vol. 35, pp. 55-77 (2011).
  28. Ligand migration in myoglobin: A combined study of computer simulation and X-ray crystallography, T. Tsuduki, A. Tomita, S. Koshihara, S. Adachi, and \*T. Yamato, *J. Chem. Phys.* **136**, 165101 (9 pages) (2012).
  29. Relaxation mode analysis of a peptide system: comparison with principal component analysis, \*A. Mitsutake, H. Iijima, and H. Takano, *J. Chem. Phys.* **135**, 164102 (15 pages) (2011).
  30. Electronic Structure Calculation by First Principles for Strongly Correlated Electron Systems", Masatoshi Imada, Takashi Miyake, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 79, 112001 (2010).
  31. *Ab initio* Evidence for Strong Correlation Associated with Mott Proximity in Iron-Based Superconductors, Takahiro Misawa, Kazuma Nakamura, and Masatoshi Imada, *Phys. Rev. Lett.*, 108, 177007 (2012).
  32. *Ab initio* Studies on the Interplay between Spin-Orbit Interaction and Coulomb Correlation in Sr<sub>2</sub>IrO<sub>4</sub> and Ba<sub>2</sub>IrO<sub>4</sub>, R. Arita, J. Kuneš, A.V. Kozhevnikov, A.G. Eguiluz, M. Imada, *Phys. Rev. Lett.*, 108, 086403 (2012).
  33. Mott Transition and Phase Diagram of κ-(BEDT-TTF)<sub>2</sub>Cu(NCS)<sub>2</sub> Studied by Two-Dimensional Model Derived from *Ab initio* Method, Hiroshi Shinaoka\*, Takahiro Misawa, Kazuma Nakamura, Masatoshi Imada, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 81, 034701 (2012).
  34. First-Principles Electronic Structure of Superconductor Ca<sub>4</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>6</sub>Fe<sub>2</sub>P<sub>2</sub>: Comparison with LaFePO and Ca<sub>4</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>6</sub>Fe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>", Taichi Kosugi, Takashi Miyake, and Shoji Ishibashi, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 81, 014701 (2012).
  35. *Ab initio* Derivation of Correlated Superatom Model for Potassium Loaded Zeolite A", Yoshiro Nohara\*, Kazuma Nakamura, Ryotaro Arita, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 80, 124705 (2011).
  36. Role of van der Waals interaction in crystalline ammonia borane", K. Yamauchi, I. Hamada\*, H. B. Huang, and T. Oguchi, *Appl. Phys. Lett.*, 99, 181904 (2011).
  37. Two-Dimensional and Three-Dimensional Fermi Surfaces of Superconducting BaFe<sub>2</sub>(As<sub>1-x</sub>P<sub>x</sub>)<sub>2</sub> and Their Nesting Properties Revealed by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy", T. Yoshida, I. Nishi, S. Ideta, A. Fujimori, M. Kubota, K. Ono, S. Kasahara, T. Shibauchi, T. Terashima, Y. Matsuda, H. Ikeda, R. Arita, *Phys. Rev. Lett.*, 106, 117001 (2011).

38. Orbital-Independent Superconducting Gaps in Iron Pnictides", T. Shimojima\*, F. Sakaguchi, K. Ishizaka, Y. Ishida, T. Kiss, M. Okawa, T. Togashi, C.-T. Chen, S. Watanabe, M. Arita, K. Shimada, H. Namatame, M. Taniguchi, K. Ohgushi, S. Kasahara, T. Terashima, T. Shibauchi, Y. Matsuda, A. Chainani and S. Shin\*, *Science*, **332**, 564 (2011).
39. Analysis of exact vertex function for improving on the GW $\Gamma$  scheme for first-principles calculation of electron self-energy", H. Maebashi and Y. Takada, *Phys. Rev. B* **84** 245134: 1-13 (2011).
40. Theory of superconductivity in graphite intercalation compounds", Y. Takada, in *Comprehensive Semiconductor Science and technology*, Vol.1, ed. by P. Bhattacharya, R. Fornari, and H. Kamimura, Elsevier, pp. 410-426 (2011).
41. Structural study of  $\alpha$ -boron at high pressure", K. Shirai, H. Dekura, Y. Mori, Y. Fujii, H. Hyodo and K. Kimura, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **80**, 084601: 1-13 (2011).
42. Efficient method for Li doping of  $\alpha$ -rhombohedral boron", H. Dekura, K. Shirai, and A. Yanase, *Phys. Rev. B* **84**, 094117: 1-13 (2011).
43. Computational Materials design for high- $T_C$  (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).
44. Electric-field effects on magnetic anisotropy in Pd/Fe/Pd(001) surface, S. Haraguchi, M. Tsujikawa, J. Gotou and \*T. Oda, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **44** 064005 (8pages) (2011).
45. First-principles calculation of magnetic circular dichroism spectra of magnetic semiconductors, \*M. Ogura and H. Akai, *Phys. Rev. B* **82** 184426 (9 pages) (2010).
46. 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** 492-497 (2012).
47. Origin of nanomechanical motion in a single-C<sub>60</sub> transistor, I. Hamada\*, M. Araidai, and M. Tsukada, *Phys. Rev. B* **85**, 121401(R) (2012).
48. Time-dependent density functional theory for strong electromagnetic fields in crystalline solids, K. Yabana, T. Sugiyama, Y. Shinohara, T. Otobe, G.F. Bertsch, *Phys. Rev. B* **85**, 045134 (2012).
49. Quantum Interference of Rashba-type Spin-split Surface State Electrons, H. Hirayama, Y. Aoki, C. Kato, *Physical Review Letters*, **107**, 0277204(1)-(4) (2011).
50. Switch of conducting orbital by bias-induced electronic contact asymmetry in bipyrimidinyl-biphenyl diblock molecule: Mechanism to achieve pn directional molecular diode", H. Nakamura, Y. Asai\*, J. Hihath, C. Bruot, and N.J. Tao\*, *J. Phys. Chem. C*, **115**, 19931 (2011).
51. Coordination effects on the electronic structure of the Cu<sub>A</sub> site of cytochrome *c* oxidase, K. Koizumi, Y. Shigeta, O. Okuyama, H. Nakamura, Y. Takano\*, *Chem. Phys. Lett.* **531**, 197-201 (2012).
52. Large-scale atomistic simulations of nanostructured materials based on divide-and-conquer density functional theory, \*F. Shimojo, S. Ohmura, A. Nakano, R. K. Kalia, and P. Vashishta, *The European Physical Journal - Special Topics*, **196**, 53 (2011).
53. Bound states of positron with nitrile species with configuration interaction multi-component molecular orbital approach, \*M. Tachikawa, Y. Kita, R. J. Buenker, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **13**, 2701-2705 (2011)
54. High Frequency Coherent Phonons in Graphene on Silicon S. Koga, I. Katayama, S. Abe, H. Fukidome, M. Suemitsu, M. Kitajima, J. Takeda, *Appl. Phys. Exp.* **4**, 45101-1-3(2011).
55. Large magneto-optical effect in low-temperature-grown GaDyN, Y.K. Zhou\*, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi, *Phys. Stat. Sol. C*, **8** (7-8) 2173-2175 (2011)

## (2) 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/> である。日本語版および英語版が用意されている。「領域概要」、「組織と研究戦略」、「計画研究」、「公募研究」、「会議・シ

ンポジウム」、「研究成果」等のバナーが用意され、より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の pdf ファイル、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。本年6月19日までの訪問者数は17,852、ページアクセス数は59,241件となっている。また本年6月1日より、ホームページ上にアクセス・カウンターを掲載することとした。

### (3) 公開発表

#### 1) 本学術領域主催及び共催の研究会、国際会議、ワークショップ等の開催状況

年月日	活動状況、場所、参加者数等
2010年9月18日	新学術領域「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」キックオフ・ミーティング、東京大学工学部（本郷）、約150名
2010年11月13日－15日	第4回物性科学領域横断研究会「凝縮系科学の最前線」東京大学武田ホール、約200名
2011年3月4日－5日	新学術領域「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年度研究会、東京大学工学部（本郷）、約150名
2011年9月26日－27日	2領域合同若手研究会「コンピューティクスによる物質デザイン」＋「半導体における動的相関電子系の光科学（五神代表）」大阪大学理学部（豊中）、約70名
2011年9月27日－29日	Int. Workshop on Quantum Simulations and Design (Max Planck Institute, Dresden, Germany)、約70名
2011年10月7日－8日	新学術領域「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23年度第1回研究会、東京大学工学部（本郷）、約180名
2011年10月30日－11月2日	The 14th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-14)、東京大学武田ホール、188名
2011年11月19日－20日	第5回物性科学領域横断研究会「凝縮系科学の最前線」東北大学金属材料研究所、約200名
2012年3月16日－17日	新学術領域「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23年度第2回研究会、東京大学工学部（本郷）、約180名
2012年10月11日－13日（予定）	International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design (ISC-QSD)、大阪大学ホール

#### 2) 国内および国際会議での招待講演

各研究課題の代表者、分担者による学会での招待講演は、国際会議82件、国内会議88件、計170件を数え、本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。以下にその招待講演の一部を示す。

1. 平木敬、「将来のHPCアーキテクチャ」、2012年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム(HPCS2012)、名古屋大学、Jan.24-26, 2012
2. S.-L.Zhang, A. Imakura and T. Sogabe, GMRES(m) Method with Look-Back-type Restart for Solving Nonsymmetric Linear Systems, the 7th International Conference on Scientific Computing and Application, Dalian P.R China, Jun. 13-16, 2010
3. S.-L.Zhang, T.Miyata, T.Sogabe and T.Yamashita, An Arnoldi-like Approach for Generalized Eigenvalue Problem, the 8th International Conference on Numerical Optimization and

- Numerical Linear Algebra, Xiamen China, Nov. 9-11, 2011
4. T. Ozaki, "Numerically exact low-order scaling method for large-scale electronic structure calculations", Psi-k 2010 Conference, Henry Ford Building, Berlin, Sept. 12 - 16, 2010.
  5. A. Oshiyama, "Current Status of Density-Functional-Theory-Based Calculations for Nano- and Bio-Materials", Int. Sympo. "Nanoscience and Quantum Physics 2011" (Tokyo, January 26-28, 2011).
  6. A. Oshiyama, "Materials Design through Computics: Nanowires and Nanotubes" International Focus Workshop on Quantum Simulations and Design (September 27, 2011, Dresden, Germany)
  7. 宮崎剛, "オーダーN法による超大規模第一原理計算手法の開発", 2012年ハイパフォーマンソコンピューティングと計算科学シンポジウム, 名古屋大学豊田講堂, 2012年1月24日-26日。
  8. 常行真司「熱伝導現象の第一原理計算」(2011.9.23 日本物理学会2011年秋季大会シンポジウム(富山大学・国内))
  9. 大谷 実「第一原理シミュレーションで観る固液界面の構造および電気化学反応」(2012.1.18 2012年表面科学技術研究会・国内)
  10. S. Watanabe, W. Liu, D. Hirai, K. Sasaoka, and T. Yamamoto, Simulations on time-varying nanoscale electronic transport, Asian Consortium for Computational Materials Science the third Working Group Meeting (ACCMS-WGM3) on Advances in Nano-device Simulation, March 31 -April 2, 2011, Jeju Island, Korea
  11. S. Watanabe, T. Tada, S. Kasamatsu and T. Gu, Ab Initio Based Simulations on Electronic and Atomic Transport in Solid Electrolyte/Metal Junction Systems, Materials Research Society 2011 Spring Meeting April 27, 2011, San Francisco, U.S.A
  12. T. Ono, Spin-polarized current through graphene nanoflake, The 6th Japan-Sweden Workshop on Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications, November 23-26, 2011, (Ishikawa, Japan)
  13. Markus Wilde, Surface/subsurface transitions of hydrogen on metallic single crystals and nanoparticles", International Conference on Diffusion in Solids and Liquids (DSL-2010) Paris, France, July 5-7, 2010
  14. 中西寛, "プロトン・ミュオンのための次世代第一原理計算手法", 東北大通研共同プロジェクト研究「次世代第一原理計算手法の開発・応用」東北大学電気通信研究所, 日本, 2010年11月10-11日
  15. 中西寛, ミュオンがみる固体表面・サブ表面, 領域10シンポジウム「超低速ミュオン顕微鏡: その限りない可能性を探る」, 日本物理学会2011年秋季大会, 富山大学, 日本, 2011年09月21-24日
  16. Hiroshi Nakanishi, Quantum simulation for hydrogen atom motion on solid surfaces, Workshop on Physics of Hydrogen in Materials, ISIR, Osaka University, Osaka, JAPAN, Jan. 30-31, 2012
  17. Markus Wilde, Novel Insight into the Microscopic Mechanism of Hydrogen Absorption at Palladium Single Crystal Surfaces, 8th International Conference on Diffusion in Solids and Liquids (DSL-2012), Istanbul, Turkey, June 25-29, 2012.
  18. T. Yamato, "Computational Biophysics of Proteins: Flow of Particles, Energy and Signals", Crosstalk Discussion between Theory and Experimental Studies on the Future of Protein Science, *Institute for Protein Research Seminar*, Osaka University, Osaka, Japan. Nov. 21-22, 2011.
  19. T. Yamato, "Intramolecular Communication Chart of Proteins: Computational Analysis of Energy Transfer Pathways", *Thermal Transport at the Nanoscale, Telluride Science Research Center Workshop*, Telluride, CO, USA, Jun. 21-25, 2010.
  20. A. Mitsutake, "Multidimensional Generalized-ensemble Algorithms for Protein Folding and Binding Simulations" The Fourth Shanghai International Conference on Biophysics and Molecular Biology (2010SICBM); Shanghai Society of Biophysics; Shanghai and Jiashan in China, Aug. 8-12 (2010).
  21. M. Imada, "Electron-correlation physics of iron-based superconductors", International Workshop on Electronic Correlations in Models and Materials, Augsburg, Germany, September 15, 2011.



22. T. Misawa, "Ab initio low-energy models in iron-based superconductors studied by variational Monte Carlo method: Role of electron correlation and origin of small magnetic ordered moment in LaFeAsO", Villa Conference on Iron Pnictide Superconductors, Las Vegas, USA, April 21-25, 2011.
23. T. Miyake, "Electronic structure and correlation effects in iron-based superconductors", The 14th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, Univ. Tokyo, Nov.1, 2011.
24. T. Miyake, "Constrained RPA method for electronic states of correlated materials", Joint CECAM/Psi-k Workshop on "Challenges and solutions in GW calculations for complex systems", Lausanne, June 7, 2011.
25. 石橋 章司, 「第一原理電子状態計算による鉄系超伝導体関連物質の研究」, 日本物理学会第 67 回年次大会, 西宮市, 2012 年 3 月 27 日.
26. K. Nakamura, R. Arita, Y. Nohara, T. Nakano, Y. Nozue, "Ab initio Derivation of Correlated Superatom Model for Potassium Loaded Zeolite A", 16th International Symposium on Intercalation Compounds, Czech Republic, May 23, 2011.
27. R. Arita, "Mechanism of high  $T_c$  superconductivity in layered nitride superconductors: Insights from DFT for superconductors", Tokyo-Cologne Workshop on Strongly Correlated Transition-Metal Compounds, Cologne, Germany, Sep. 7-9, 2011.
28. A. Fujimori, "Fermi surfaces, electron correlation, and superconducting gap in Fe pnictides studied by ARPES", Workshop on Search for New Physics in Transition Metal Compounds by Spectroscopies, Sendai, July 28-30, 2011.
29. S. Shin, "Laser-ARPES study on Fe-pnictide superconductors", International Workshop on Strong Correlations and Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy (CORPES11), Berkeley, California, July 18-22, 2011.
30. M. Imada, "Ab initio studies of strongly correlated electron systems", International Conference on Magnetism (ICM), Pusan, Korea, July 9-13, 2012
31. Y. Takada, "Nonperturbative Self-Consistent Calculation of the Self-Energy: Electron-Hole Asymmetric Excitations and Possibility of a Self-Induced Excitonic State in Low-Density Electron Liquids", Superstripes 2012 Quantum Phenomena in Complex Matter (Erice, 12-17 July, 2012).
32. 高田康民, "GWI法の開発と低密度電子液体への応用: 電子正孔非対称励起のフェルミ流体", 物性研究所短期研究会「計算科学の課題と展望」(東京大学物性研究所, 2012年2月21日) .
33. Y. Takada, "Theory for reliable first-principles prediction of the superconducting  $T_c$ ", 13th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (Pohang, 1-3 November, 2010).
34. Y. Takada, "On the first-principles determination of  $T_c$ ", Superstripes 2010 Quantum Phenomena in Complex Matter (Erice, 19-25 July, 2010).
35. 高田康民, "低密度電子ガス系での負の誘電関数: その物理的起源と帰結", 京都大学大学院理学研究科物理学教室談話会 (2010年5月27日) .
36. 前橋英明, "低密度電子ガス系とナノスケール相分離", (第 3 回DYCE 若手道場, 大阪大学豊中キャンパス, 2011年9月26日-27日).
37. K. Shirai and H. Dekura, "Superconductivity research on semiconducting boron", 14th Int. Conf. on High Pressure Semiconductor Physics (Jilin, China, August 1-4 2010).
38. K. Sato, T. Fukushima, M. Oshitani, Y. Tani and H. Katayama-Yoshida, "*Computational Materials Design of Spinodal Nanotechnology*", International Union Materials of Research Societies – International Conference on Electronic Materials (IUMRS-ICEM) (Seoul, Korea, 22-27 Aug., 2010).
39. K. Sato, "Spinodal decomposition and magnetic properties of dilute magnetic semiconductors", European Materials Research Society (EMRS) fall meeting, Warsaw, (Poland, 13-17 Sep., 2010).
40. M. Ogura, "First-principles calculation of the magneto-optical effects of magnetic semiconductors", International Conference on Core Research and Engineering Science of Advanced Materials (Osaka, Japan, 30 May – 4 Jun. 2010).
41. T. Oda, "Toward a Computer Modeling in Magnetic Anisotropy and its

Electric-Field-Control for Nano-Structures”, European Materials Research Society (EMRS) fall meeting, Warsaw, (Poland, 13-17 Sep., 2010).

42. T. Oda, “Magnetic anisotropy and its electric field effect in the nano-structures”, The 13<sup>th</sup> Asian Workshop on First-Principles Electronic structure Calculations (Asian13) (Pohang, Korea, 1-3 Nov. 2010).
43. T. Nozaki, “Voltage-induced magnetic anisotropy change in ultrathin Fe(Co)/MgO junctions”, 2011 MRS Spring Meeting and Exhibit (San Francisco, April 26, 2011).
44. M. Tachikawa (Invited), "Path integral simulation for hydrogen bonded systems: Protonic quantum nature and H/D isotope effect", ISOTOPES2011, (Provence-Alpes-Côte d'Azur, FRANCE, on June 20-24, 2011)
45. M. Saito, First-Principles Calculations of Carbon Nanomaterials, 5-th International Symposium of Computational Science, 15, May, 2012, Universitas Gadjah Mada, Yogyakarta, Indonesia.
46. H. Tanaka, Surface Nanopatterning for Spintronics, The Nanotech Conference and Expo 2011 (The Hynes Convention Center, S.A) Boston, USA.

### 3) 受賞

本新学術領域に参加している研究代表者、分担者に対して以下のような授賞があった。

- 岩田潤一(A02), 押山淳(A02), 高橋大介(A01), 朴泰祐(A01) 他、2011 年度 ACM/IEEE Gordon Bell Prize (Peak Performance) 「First-principles calculations of electron states of a silicon nanowire with 100,000 atoms on the K computer」
- 今倉暁, 曾我部知広, 張紹良, 「GMRES(m)法のリスタートについて」日本応用数学会, 平成 22 年度日本応用数学会論文賞, 2010 年 9 月 7 日
- 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
- 渡邊聡 日本表面科学会フェロー 2011 年 5 月
- 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

### 4) 新聞報道

- 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
- 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”

### 5) 研究代表者・分担者主催の研究会・ワークショップ等の開催状況

#### 張班

1. 数値解析研究集会、2010/8/30-9/1、国立信州高遠青少年自然の家(長野県伊那市)、62 名

2. 数値解析シンポジウム 2011, 2011/6/20-6/22, 鳥羽シーサイドホテル (三重県鳥羽市)、92 名

#### 中西班

1. International Conference on Diffusion in Solids and Liquids の special session 'Hydrogen- Related Kinetics in Materials' を Markus Wilde が組織している。第 10 回 (July 5-7, 2010, Paris, France, 参加者 24 名)、第 11 回 (June 26-30, 2011, Algarve, Portugal, 参加者 22 名)、第 12 回 (June 25-29, 2012, Istanbul, Turkey, 参加者 26 名) .
2. International Workshop on Quantum Design and Realization - Quantum behavior of hydrogen, 27 February 2012, Japan, Science and Engineering Library, Osaka University, 参加者 : 45 人

#### 中西班と佐藤班

1. 人材育成の目的で、コンピューショナル・マテリアルズ・デザイン (CMD®) ワークショップが中西班と佐藤班を中心に開催されている。第 17 回 (2010/9/6-10, 大阪大学、参加者・受講生 50 人)、第 18 回 (2011/3/8-12, 国際高等研究所、日本原子力研究開発機構 関西光科学研究所、参加者・受講生 33 人)、第 19 回 (2011/9/5-9, 大阪大学、参加者・受講生 76 人)、第 20 回 (2012/3/6-10, 国際高等研究所、参加者・受講生 44 人)。
2. アジアでの人材育成の目的で、Asia Computational Materials Design Workshop が中西班と佐藤班を中心に開催されている。
  - 19-22 July, 2010, Institut Teknologi Bandung, Indonesia, 参加者 : 受講生約 40 人
  - 27-30 September, 2010, De La Salle University-Manila, Philippines, 参加者 : 受講生約 40 人
  - 16-18 December, 2010, Hue College of Education, Hue University, Hue City, Vietnam, 参加者 : 受講生約 40 人
  - 15-17 February, 2011, Mahidol University, Thailand, 参加者 : 受講生約 40 人
  - 19-22 July, 2011, Pekanbaru, Riau, Indonesia, 参加者 : 受講生約 40 人
  - 10-12 October, 2011, De La Salle University-Manila, Phillipines, 参加者 : 受講生約 40 人
  - 9-11 December, 2011, Saigon University, Ho Chi Minh city, Vietnam, 参加者 : 受講生約 40 人
  - 16-19 February, 2012, Mahidol University, Thailand, 参加者 : 受講生約 40 人

#### 今田班・高田班合同研究会

1. 電子相関のある系に対する第一原理計算手法の開発と応用ならびに関連する実験研究の進展に関する研究会、2010 年 11 月 16 日-17 日、東京大学、30 名強の参加者。

#### 佐藤班

1. 東北大学電気通信研究所平成 22 年度共同プロジェクト研究研究会「電気磁気および磁気弾性効果の計算機物質設計とデバイス応用」、東北大学電気通信研究所、平成 22 年 12 月 17 日 (金)
  2. 東北大学電気通信研究所平成 23 年度共同プロジェクト研究研究会「電気磁気および磁気弾性効果の計算機物質設計とデバイス応用」、東北大学電気通信研究所平成 23 年 12 月 26 日 (月)
- 6) ニュースレターの刊行
- 年 1 回のペースでニュースレターを作成し、ホームページ上で公開している。2011 年度に第一号、2012 年 6 月に第 2 号が刊行された。年 1 回発行の報告書に比べて、より一般的な読者に向けての記述を心掛けている。今後は年 2 回程度の刊行を予定し、研究成果のわかりやすい好評を目指す。

#### (4) 国民との科学・技術対話

本新学術領域全体としてのアウトリーチ活動は未だ行っていないが、領域代表者、研究代表者による以下のような活動が行われた。

- 押山：「計算科学による Si ナノワイヤー電子状態計算と次世代テクノロジー」に関するビデオを作成し、DVD として 470 部を関係方面に配布（次世代ナノ統合シミュレーションプロジェクトとの共同）。配布先には、計算科学振興財団（100 部）、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会（20 部）、化学・薬品業界を中心とした民間企業（203 部）、開催した京コンピュータシンポジウム 2011 参加者（70 部）が含まれる。
- 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」
- 押山他：岩波書店より、「岩波講座 計算科学」全 7 巻を編集出版（2012）。
- 稲葉：研究グループの Web ホームページを用いて、研究成果を公開し国民への技術啓蒙活動を行った。東京大学のオープンキャンパスにおいて、本研究テーマをやさしく解説する特別講義を実施した。
- 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/>
- 常行：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/>
- 常行：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](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。
- 中西：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。

## 6. 研究組織と各研究項目の連携状況

本新学術領域研究では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」、のもとに、11の計画研究と15の公募研究が遂行されている。各研究課題名、メンバーは以下のとおりである。

### 総括班

領域代表者	押山 淳 東京大学 工学系研究科・教授
-------	------------------------

### 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

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

研究代表者	稲葉 真理 東京大学情報理工学系研究科・准教授
研究分担者	今井 浩 東京大学情報理工学系研究科・教授
研究分担者	須田 礼二 東京大学情報理工学系研究科・准教授
連携研究者	平木 敬 東京大学情報理工学系研究科・教授

大規模並列環境における  
数値計算アルゴリズム

研究代表者	高橋 大介 筑波大学 システム情報系・准教授
研究分担者	今村 俊幸 電気通信大学情報理工学系研究科・准教授
研究分担者	多田野 寛人 筑波大学 システム情報系・助教
連携研究者	佐藤 三久 筑波大学 システム情報系・教授
連携研究者	朴 泰祐 筑波大学 システム情報系・教授
連携研究者	櫻井 鉄也 筑波大学 システム情報系・教授

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

研究代表者	張 紹良 名古屋大学 工学研究科・教授
研究分担者	阿部 邦美 岐阜聖徳学園大学経済情報学部・教授
研究分担者	曾我部 知広 愛知県立大学情報科学研究科・准教授
研究分担者	今堀 慎治 名古屋大学 工学研究科・准教授
研究分担者	山本 有作 神戸大学 システム情報学・教授
研究分担者	宮田 考史 名古屋大学 工学研究科・助教
連携研究者	杉原 正顕 東京大学情報理工学系研究科・教授

### 公募研究

新しい数理手法による  
大自由度物理計算アルゴリズム

研究代表者	星 健夫 鳥取大学 工学研究科・准教授
-------	------------------------

### A02 密度汎関数理論の新展開

#### 計画研究

ナノ構造形成・新機能発現における  
電子論ダイナミクス

研究代表者	押山 淳 東京大学 工学系研究科・教授
研究分担者	岩田 潤一 東京大学 工学系研究科・特任講師
研究分担者	宮崎 剛 物質・材料研究機構・主幹研究員
研究分担者	尾崎 泰助 北陸先端科学技術大学院大学先端融合領域研究院・准教授
研究分担者	土田 英二 産総研ナノシステム研究部門・研究員
連携研究者	内田 和之 東京大学 工学系研究科・助教
連携研究者	重田 育照 大阪大学 基礎工学研究科・准教授

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

研究代表者	常行 真司 東京大学 理学系研究科・教授
研究分担者	吉本 芳英 鳥取大学 工学研究科・准教授
研究分担者	山内 淳 慶応義塾大学 理工学部・准教授
研究分担者	大谷 実 産総研 ナノシステム研究部門・研究グループ長
連携研究者	森川 良忠 大阪大学 工学研究科・教授
連携研究者	赤木 和人 東北大学 原子分子材料科学研究機構・准教授
連携研究者	館山 佳尚 物質・材料研究機構 MANA・独立研究者
連携研究者	中山 隆史 千葉大学 理学研究科・教授
連携研究者	諏訪 雄二 日立製作所 中研・主幹研究員
連携研究者	合田 義弘 東京大学 理学系研究科・助教

連携研究者	杉野 修 東京大学 物性研究所・准教授
-------	------------------------

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

研究代表者	渡邊 聡 東京大学 工学系研究科・教授
研究分担者	渡辺 一之 東京理科大学 理学部・教授
研究分担者	相馬 聡文 神戸大学 工学研究科・准教授
研究分担者	小野 倫也 大阪大学 工学研究科・助教
連携研究者	多田 朋史 東京大学 工学系研究科・特任准教授
連携研究者	山本 貴博 東京理科大学 工学部・講師
連携研究者	胡 春平 東京理科大学 理学部・助教
連携研究者	酒井 明 京都大学 工学研究科・教授

プロトン・ミュオンで探る  
新物性と量子ダイナミクス

研究代表者	中西 寛 大阪大学 工学研究科・助教
研究分担者	下司 雅章 大阪大学 ナノサイエンス教育センター・特任准教授
研究分担者	後藤 英和 大阪大学 工学研究科・准教授
研究分担者	Markus Wilde 東京大学 生産技術研究所・准教授
連携分担者	福谷 克之 東京大学 生産技術研究所・教授
連携研究者	笠井 秀明 大阪大学 工学研究科・教授
連携研究者	Dino Wilson 大阪大学 工学研究科・准教授

多自由度・大規模系における反応と  
構造空間探索

研究代表者	倭 剛久 名古屋大学 理学研究科・准教授
研究分担者	光武 亜代理 慶応義塾大学 理工学部・専任講師
連携研究者	岡本 祐幸 名古屋大学 理学研究科・教授
連携研究者	足立 伸一 KEK 物質構造科学研究所・准教授

公募研究

高速ロバスタランダムウォークの  
設計に基づく物質デザイン

研究代表者	小野 廣隆 九州大学 経済学研究院・准教授
-------	--------------------------

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

研究代表者	北島 正弘 防衛大学校 理工学部応用科学群・教授
-------	-----------------------------

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への応用

研究代表者	下條 冬樹 熊本大学 自然科学研究科・教授
-------	--------------------------

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繹的デザイン

研究代表者	鷹野 優 大阪大学 蛋白質研究所・助教
-------	------------------------

量子多成分系分子理論の深化と  
物質デザインへの展開

研究代表者	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
-------	----------------------------------

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

研究代表者	中村 恒夫 産業技術総合研究所・研究員
-------	------------------------

超高速レーザー分光によるカーボンナノ  
チューブ・蛋白質合体の  
実時間ダイナミクス

研究代表者	長谷 宗明 筑波大学 数理解物質系・准教授
-------	--------------------------

ファン・デル・ワールス密度汎関数の  
開発と応用

研究代表者	濱田 幾太郎 東北大学 原子分子材料科学研究機構・助教
-------	--------------------------------

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

研究代表者	平山 博之 東京工業大学総合理工学研究科・教授
-------	----------------------------

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

研究代表者	矢花 一浩 筑波大学計算科学研究センター・教授
-------	----------------------------

A03 密度汎関数理論を超えて

計画研究

第一原理有効模型と  
関連科学のフロンティア

研究代表者	今田 正俊 東京大学 工学系研究科・教授
研究分担者	三宅 隆 産総研 ナノシステム研究部門・主任研究員
研究分担者	中村 和磨 東京大学 工学系研究科・助教
連携研究者	小口 多美夫

	大阪大学 産業科学研究所・教授
連携研究者	石橋 章司 産総研 ナノシステム研究部門・研究グループ長
連携研究者	有田 亮太郎 東京大学 工学系研究科・准教授
連携研究者	藤森 淳 東京大学 理学系研究科・教授
連携研究者	辛 埴 東京大学 物性研究所・教授

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

研究代表者	高田 康民 東京大学 物性研究所・教授
研究分担者	白井 光雲 大阪大学 産業科学研究所・准教授
研究分担者	前園 涼 北陸先端科学技術大学 情報科学研究科・准教授
研究分担者	前橋 英明 東京大学 物性研究所・助教
連携研究者	秋光 純 青山学院大学 理工学研究科・教授
連携研究者	上田 寛 東京大学 物性研究所・教授
連携研究者	大野 かおる 横浜国立大学 工学研究院・教授
連携研究者	斎藤 晋 東京工業大学 理工学研究科・教授
連携研究者	春山 純志 青山学院大学理工学研究科・准教授
連携研究者	是常 隆 東京工業大学 理工学研究科・助教
連携研究者	吉澤 香奈子 東京大学 理学系研究科・拠点研究員

スピンエレクトロニクス材料の探索

研究代表者	佐藤 和則 大阪大学基礎工学研究科・ 特任准教授
研究分担者	小田 竜樹

	金沢大学 数物科学系・准教授
研究分担者	小倉 昌子 大阪大学 理学研究科・助教
研究分担者	野崎 隆行 産総研 ナノスピントロニクス研究センター・研究員
連携研究者	黒田 眞司 筑波大学数理物質科学研究科・教授
連携研究者	吉田 博 大阪大学 基礎工学研究科・教授
連携研究者	朝日 一 大阪大学産業科学研究所・特任教授
連携研究者	鈴木 義茂 大阪大学 基礎工学研究科・教授
連携研究者	赤井 久純 大阪大学 海外拠点本部・特任教授
連携研究者	下司 雅章 大阪大学 ナノサイエンス教育センター・特任准教授

公募研究

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

研究代表者	小谷 岳生 鳥取大学 工学研究科・教授
-------	------------------------

シリコン中原子空孔の  
量子状態シミュレーション

研究代表者	斎藤 峯雄 金沢大学 理工研究域・教授
-------	------------------------

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

研究代表者	周 逸凱 大阪大学 産業科学研究所・助教
-------	-------------------------

自己組織化酸化物ナノスピントロニクス

研究代表者	田中 秀和 大阪大学 産業科学研究所・教授
-------	--------------------------

コンピューティクスという新しい学術分野の確立には、A01 研究項目と A02 および A03 研究項目の間の連携が不可欠である。異なる分野間の共同研究のためには、異なる術語の相互理解がまず重要であり、それにより議論の深化が初めて達成される。そうした相互理解のために、本新学術領域では「コンピューティクス勉強会」を開催している。A01 のメンバーと A02 および A03 のメンバーからそれぞれトピックスを提供し、時間をかけた議論を続けている。これまでに行われた勉強会の講演者とタイトルは以下のようなものである。内容の詳細は、

<http://grape-dr.adm.s.u-tokyo.ac.jp/firstP/index.php?2011-3-3-%CA%D9%B6%AF%B2%F1>  
にアップロードしてある。

日時	講演者とタイトル
2010-10-27	高橋(A01)：ペタスケール計算環境における FFT アルゴリズム 中村(A03)：第一原理 RPA 分極関数計算の詳細：擬ポテンシャル＋ 平面波基底計算プログラムへの実装
2010-12-8	前園(A03)：GPU 利用によるフラグメント分子軌道法 QMC 計算の

	高速化 張(A01)：固有値計算の実用的なニーズに関する数値解法
2011-3-3	吉本(A02)：平面波基底 第一原理計算プログラムとその課題 須田(A01)：京とエクサのアーキテクチャ
2011-5-9	前園(A03)：量子モンテカルロ法電子状態計算からの話題： 最小印影探索の問題と、多体波動関数の節トポロジ 重田(A02)：実空間(Grid)基底での Car-Parrinello MD と 実時間 TDDFT に関して 越智(A02)：GPU によるトランスコリレイティッド法計算
2011-11-7 2011-11-8	小柳 (領域アドバイザー)： 計算科学者のための“コンピュータの基本原理”

こうした勉強会は、次の段階として、A01 メンバーと他のメンバーの研究開発チームにより、具体的な計算コードをターゲットとして、数理論理構造、計算構造を解析し、HPC の技術によりプログラムコードの高速化に至れば成功といえよう。実際、A02 押山班と A01 高橋班は、実空間密度汎関数法コード (RSDFT コード) をターゲットとし、数理論理構造と計算負荷解析を行い、コードの改良に取り組んできた。ベクトル・スカラー演算をマトリクス・マトリクス演算に変換する新しいアルゴリズムの導入、高橋班で開発された固有値問題解法のための新しい計算手法の導入などにより、現在「京」コンピュータの 1000 ノード程度を使用し、1 万原子系の LDA 電子状態計算が 1 日程度で実行可能となっており、その際の計算実行効率は 50%を超えている。この高効率率は「京」の数万ノードを使用した、100,000 原子から構成される Si ナノワイヤー計算で明確に示され、2011 年度の ACM/IEEE Gordon Bell 賞を受賞した。

他にもこうした共同は、A01 張班と A01 公募研究星班で行われ、論文として発表されている[9]。また、CONQUEST (A02 押山班宮崎グループ)、OpenMX (A02 押山班尾崎グループ)、RSPACE (A02 渡邊班小野グループ)、TAPP (A02 常行班)、MACE (A03 今田班) などの、異なる近似法と機能を持つ複数の第一原理計算コードに対して、A01 メンバーとの共同が進行中である。

実験研究との共同も、もうひとつの重要な側面である。本領域の計画研究においては、理論グループと実験グループを同一班に組織し、不断の共同を促進することを目指している。とくに今田班においては、光電子分光実験との共同研究が進んでおり、強相関物質に対して大きな成果が得られている[37,38]。また公募研究として 5 つの実験研究も参加している。A03 佐藤班の提唱する、co-doping による半導体への磁性不純物の高濃度注入は、A03 公募研究周班、田中班の成長実験によって、その有効性が確かめられつつある。また、A02 押山班でのシリセン (silicene: グラフェン上の Si 膜) に対する原子構造・電子状態計算と、A02 公募研究平山班の成長と光電子分光実験との共同が進行中である。



## 7. 研究費の使用状況

研究費は主に、マルチコア計算サーバおよび加速装置 GP-GPU 付きの計算サーバの導入と、若手研究員の雇用費に充てられている。300 万円以上の中型／大型設備の使用状況は以下のとおりである。

装置名	使用状況
GP-GPU 計算サーバ (485 万円)	東京大学工学系研究科に平成 23 年度に納入され、現在順調に稼働中。演算加速装置が DFT 計算にどのように効率的に活用できるかのパイロット計算に活用されている。
並列計算機システム一式 [VT64 File Server 7500 X-RM316] (約400万円)	名古屋大学に導入され、新アルゴリズムの検証に活用されている。
並列計算機システム +GP-GPU (635 万円)	鳥取大学工学系研究科に平成 23 年度に導入され、その後 CPU を増強し、現在 8 ノードで稼働中。GPU を活用した交換相互作用の厳密計算コードの開発、ESM 法による電極溶液界面の研究等に活用中。
量子ダイナミクスシミュレータ (902 万円)	大阪大学に平成 23 年度に納入・設置され、現在順調に稼働中。物質中でのミューオン・プロトンの断熱ポテンシャルエネルギー曲面 (PES) の第一原理電子状態計算および、第一原理量子シミュレーション Naniwa コードの開発に活用中。
クラスター計算機 (約 400 万円)	金沢大学に平成 23 年度に納入され、現在常時稼働中。電界印加第一原理分子動力学法の開発と応用の研究に活用されている。共同利用施設の大型計算機を高効率で使用するための計算コード開発に大いに役立っている。

若手研究者の雇用に関しては、本領域発足後、延べ 10 名の博士研究員を雇用している。年齢層は 27 歳～34 歳であり、平均年齢は 30.1 歳である。雇用期間中の論文発表件数は 13、国内外での学会発表件数は 24 件、そのうち招待講演が 1 件ある。また 1 名は、フラーレン・ナノチューブ学会より 2012 年 3 月に若手奨励賞を受賞している。本研究分野における人材育成に、本新学術領域研究が貢献していることを示している。

総括班経費は、領域内研究会の会議費、若手の旅費、主催および共催の国際会議、国内合同シンポジウムの開催費に、有効に使われている。共催した国際会議としては、

- International Workshop on Quantum Simulations and Design, (September 27 – 29, 2011, Max Planck Institute, Dresden, Germany)
- The 14th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-14), (October 20 – November 2, University of Tokyo, Tokyo, Japan)

があげられる。

## 8. 今後の研究領域の推進方策

我々が提案しているコンピューティクスを基軸とする新学術領域研究は、世界的にも類を見ないものであり、今世紀の科学を支える土台になることを期待している。コンピュータ・サイエンス（情報）分野との共同により、既存の理論手法に基づくアプリケーション・コードをマルチコア超並列コンピュータ上で高速化する研究開発は、RSDFT で大きな成功をおさめ、現在、他のアプリケーションでも共同研究が進行中である。こうした共同研究は異分野間の不断の接触が必要であり、そのための場「コンピューティクス勉強会」をこれまで提供してきたし、今後もその充実をはかる

しかし、本学術領域ではその先を目指すことも考えたい。それは既存の手法を超えた新手法の開拓である。物質科学のターゲットに挑むための新理論手法の開拓において、コンピュータのハード・ソフトウェアの特質を生かした手法を開拓することが重要になってくるはずである。次世代、次々世代のコンピュータが得意とする演算を視野に入れた新理論手法の開拓を目指したい。

逆に、物質科学計算の立場から、未来のコンピュータ像を描くことも重要である。それらをコンピュータ・サイエンス側に投げかけることにより、未来のコンピュータ開発に資するとともに、「コンピューティクスによる物質デザイン」をより現実的なものにするができる。

若手の人材育成も新学術領域研究の重要なミッションと考えている。上記のようなコンピューティクスの確立のためには、両分野に精通し、両者をつなぐ人材が必要である。計算物質科学イニシャティブとの連携により、当該大学院での教育とも連携し、人材育成に努力したい。幸い領域内研究会には毎回 200 名弱の参加者があり、彼らの多くは若い世代である。彼らの研究活動を総括班でサポートすると同時に、彼らが前面に出て活躍したくなるようなコミュニティを形成したい。

国外との連携も重要な因子である。欧州には Psi-k2 と称する第一原理計算のコミュニティがある (Chair: Risto Nieminen, Finland)。実際、昨年 10 月には Dresden において、共催の国際シンポジウムを開催した。またアジア地域では、本領域代表者らにより、Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations が開始され、昨年はその第 14 回目が東京大学において開かれた。アジア、欧州、さらにはアメリカを含むコミュニティが形成されている。こうした国際的な場に、日本の研究者とくに若手研究者が積極的に参加していくことを奨励したい。本年 10 月には大阪大学において、International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design (ISC-QSD)が開催予定である。

物質科学において理論（計算）研究と実験研究の共同あるいは相互作用は不可欠のものである。本領域内でのそうした相互作用は着実に行われているが、量的には不十分かもしれない。参加している実験研究グループの数が少ないことにも起因しているが、それでも共同を促進させるために、A02 および A03 研究項目に参加しているグループ、さらには領域外の実験グループ、理論グループも交えた、実験・計算コロキウムの定期的な開催が有効と考えられる。今年度以降、こうした機会を設ける予定である。

## 9. 総括班評価者による評価の状況

本新学術領域では、研究活動および領域運営に関して評価・助言を受けるため、下記の方々に領域アドバイザーをお願いし、総括班ミーティング・領域研究会にお招きして有益なご助言をいただくとともに、分野横断的レクチャーをもお願いし、それを研究活動に反映させてきた。今回、中間評価の機会に改めて本新学術領域研究のこれまでの活動と今後について、以下のコメントをいただいた。原文のまま掲載する。

寺倉 清之 氏（北陸先端大学シニアプロフェッサー、産総研名誉リサーチャー）

科研費「新学術領域研究」の本グループの活動は、一言で云って、活発に、かつ伸び伸びと進められている。「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。

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。本プロジェクトは3つの班からなっているが、第1班は「計算機アーキテクチャと高速計算アルゴリズム」であることにも顕著にそのことが見受けられる。こうした方向への発展は、「京」プロジェクトがもたらした影響によるところが大きい。超並列計算の必要から、基本的なアルゴリズムの見直しが必要になり、効率的な超並列計算のために計算機アーキテクチャにまで踏み込んだ、プログラムのチューニングの必要性が認識されてきた。とはいえ、計算科学と計算機科学の連携は、実際にはそれほどは広く行われている訳ではない。そこで、本プロジェクトでは、プロジェクト全体の研究報告会の折に、計算機科学の最先端の講演を組み込むだけでなく、「勉強会」をかなり頻繁に開いて、計算科学と計算機科学の情報交流の場としている。こうした活動は、「京」の次に登場すると期待されているエクサスケールコンピュータへの対応まで見込んだものであり、代表者の押山教授が熱意を持って進めている。

計算科学と実験科学の連携は、これまでの計算科学においても重要視されてきたことである。しかし、例えば今年の3月に開かれた研究会では、全29件の口頭発表のうち、3件が計算機科学関連、4件が実験関連であったことから、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。

従来、研究を実験、理論、計算科学の鼎立とみなす考えがあったが、ここに計算機科学が加わると4本の柱になる。最後に注文を述べるとすると、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。

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）

本新学術研究領域は京計算機など新世代コンピュータの画期的な進展状況を受けて、計算物質科学とコンピュータ科学の連携を強固にしつつ、各分野における基礎研究を飛躍的に向上させるという野心的な企画を実現すべく形成された。計算物質科学分野では電子相関、ナノ形状効果、動的非平衡現象などを研究する「複合相関・非平衡ダイナミクス」という課題が設定され、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、密度汎関数理論を超える計算手法の開発、強相関係への計算アプローチの他、結晶成長、生体反応、光励起などダイナミカルな現象の計算科学的な研究が力強く推進されている。その多くは従来の計算資源によっては、十分な研究に踏み込

めなかったものであり、新世代コンピュータを積極的に活用する時宜にかなった意欲的な研究である。今年度も前年度の活動をさらに発展させた興味深い独創的な結果が生み出されており、参加研究者のすぐれた能力が発揮されている状況が認められる。

また大規模計算の推進においては、計算機の特性を有効に利用して計算目的を効率よく達成するための、最適なアルゴリズムの研究がますます重要性を増している。本新学術領域研究では新世代、次世代 HPC における新しい超並列アーキテクチャなどの研究と共に、物性科学の諸問題における新規な数値解法が試みられ、最適アルゴリズムが探索されている。本新学術領域研究では、計算物質科学者と計算機科学者という異分野の研究者が緊密な情報交流をしながら、共通の問題意識で計算科学の将来的な課題を研究するという、従来試みられなかった新しい取り組みを行っていることでも高く評価できる。

#### 小柳 義夫 氏 (神戸大学システム情報学研究科・特命教授)

新学術領域研究「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」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。物理、科学、工学などの違った分野で、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。そのみならず、諸分野とコンピュータ科学との間にも共通する問題が多く、この二重の学際性こそが、計算科学の大きな特徴である。

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・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、けっして「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発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。

#### 藤原 毅夫 氏 (東京大学大学総合教育研究センター・教授)

本新学術領域研究の主要課題は、物質科学を中心に据えた、計算理論と計算物質科学の共通基盤の形成という面であると考えられる。

これまでの計算物理学の発展の過程では、初期の段階では物理研究者が自身でコンパイラを意識しながらプログラムを書くことに努力してきたし、その後はコンパイラの発展により特別に高度な工夫を要求しなくなった。しかし今後の超大型計算の中では、計算の規模によりアルゴリズムを変えていかななくてはならないということが、かなり明瞭になっており、計算物理の研究者の負担が、これまでに比べて非常に大きくなっている。

このような観点から、研究項目 A01 における「超大規模計算アルゴリズムの形成」

に関する成果に、最も興味深く注目している。自動チューニング、さらにはコンパイラまで議論が進むことを期待する。大規模線形計算に関しては、Krylov 部分空間法の議論が計算理論として大きく発展している。今後、GPU の活用などを含めて、一般的に使い易い手法開発などの面で議論が進むことを期待している。計算機アーキテクチャとアルゴリズムに関する研究の一つの発展として、RSDFT (Real Space Density Functional Theory) コードの開発およびその成果としての 2011 年 11 月ゴードン・ベル賞受賞は、本課題の成果として大変ふさわしいものといえる。また多体問題と第一原理計算の融合手法の発展については、世界をリードするものであり、合わせて本新学術領域の成果として高く評価すべきである。

全体として、研究成果は当初の期待を超えたものであるといえよう。

#### 飯島 澄男 氏 (名城大学教授、産総研ナノチューブ応用研究センター長)

評者は新物質材料の生成やそれらの物性評価にかかわる実験研究にかかわっていますが、その立場から本プロジェクトの進捗状況を拝見しています。材料の特性はすべて第一原理に基づき理解できる、という程度に計算科学をとらえている材料研究者であることをお断りしておきます。本プロジェクトでは新物質のデザインとして、特に複合相間と非平衡ダイナミックスを取り上げ、より現実に近い物質及びその現象の理解を強調しておりますが計算科学の発展過程では当然の流れのように思います。扱う領域の多様性から、いくつかの課題を中心に研究班を設定し、それぞれの分野の最適研究者を結集しておりこのプロジェクトの研究体制から新奇な研究成果が生み出されることは自明のように思います。

さて、プロジェクト全体を改めて拝見して、評者に関わる研究課題が実施されていることを再認識し、計算科学と評者の研究分野が極めて近いことを再認識する次第です。これらについて以下に列記してみます。

最新の電子顕微鏡を駆使すると原子一個の内殻電子エネルギー損失スペクトル (EELS) が観測可能になっています。さらに最近の実験では、EELS と同時に一個の原子から XPS を観測することに世界で初めて成功しています。この場合、孤立原子はカーボンナノチューブ内にドーピングされたものです。XPS は半導体中の不純物同定に使われていますが、ナノチューブに閉じ込められた試料ではバルク中の不純物の観測に比較し、より簡単環境なのでより詳細な検討ができるのではないかと期待しました。

本プロジェクトでは、複雑なたんぱく質ロドプシン内に置かれたレチナール分子の光吸収機構の解明に取り組んでおられますが、われわれの実験では、カーボンナノチューブ内にレチナール分子一個を閉じ込めることもできるので、ロドプシンより簡単なシステム中におかれたレチナール分子の、光吸収機構のアナロジーとして検討できるのではないかと思います。

もう一つの例は、生体内に埋め込まれたナノカーボンクラスターの赤外線による加熱機構の解明です。Photo-thermal-therapy と呼ばれる温熱療法では生体内の腫瘍などの特定部位に金クラスターを配置し、これに近赤外線照射しその部位の温度を制御してがん細胞などの増殖を阻止するというものです。われわれの実験では金クラスターよりナノ炭素クラスターがより優れているという結果を得ています。近赤外線照射でクラスター温度を正確に制御することが望まれています。ナノ構造体の熱拡散の問題として、コンピューティクスから貢献できる分野ではないかと思いました。