

令和 4 年 6 月 13 日現在

機関番号：82108

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2018～2021

課題番号：18H01143

研究課題名(和文) 超大規模第一原理分子動力学手法の開発とナノ物質への応用

研究課題名(英文) Development of large-scale first-principles MD and its applications of nano-structured materials

研究代表者

宮崎 剛 (MIYAZAKI, Tsuyoshi)

国立研究開発法人物質・材料研究機構・国際ナノアーキテクトニクス研究拠点・MANA主任研究者

研究者番号：50354147

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,200,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、高精度局在基底による第一原理計算を高効率で実現するマルチサイト法を第一原理分子動力学で高効率に用いる手法を開発し、通常の計算手法では扱うことが不可能であった超大規模系に対する全原子第一原理分子動力学とそれに基づく反応解析などを可能とした。作成されたプログラムはオーダ-N法第一原理計算プログラムCONQUESTに導入された。本計算手法は様々な物質群に適用され、非周期系の構造探索、抗がん剤分子の水溶液中の反応性、強誘電体中における複雑なドメイン構造の原子スケールでの構造と電子状態の解明等に用いられた。プログラムCONQUESTは2020年1月にMITライセンスで一般に公開された。

研究成果の学術的意義や社会的意義

通常の第一原理分子動力学では扱える系が小さいという制約があり、今までは整然と原子が並んだ固体中の現象や比較的単純な分子の反応が主なターゲットであった。本研究によって開発された大規模第一原理分子動力学手法によって、今まで扱うことが困難であった強誘電体の複雑な分域構造やアモルファスなどの非周期構造に対して高精度の第一原理分子動力学にもとづいた研究が可能となったことは学術的意義が高い。また、開発されたプログラムは一般の研究者が無償で使えるように公開された。このことによる波及効果も今後期待できると考えている。

研究成果の概要(英文)：In this project, we developed an efficient method to employ large-scale first-principles molecular dynamics (FPMD) using the multisite method, which enables us to perform large-scale DFT calculations with accurate local basis sets. The subroutines to calculate the free energy profiles with the large-scale FPMD simulations were also implemented to our linear-scaling DFT code CONQUEST. The developed methods were applied to the theoretical studies on various systems, such as nonperiodic amorphous systems, anti-cancer drug molecules in water, complex domain structures of a ferroelectric material and so on. The program CONQUEST was released to public with the MIT license in 2020 January.

研究分野：計算物質科学

キーワード：大規模DFT計算 ナノ物質 ナノ粒子触媒 物性理論 量子化学

1. 研究開始当初の背景

密度汎関数法 (DFT) にもとづく第一原理計算は経験的なパラメータを用いずに、すべて量子論に基づく電子状態計算から求めるという汎用性、信頼性の高い計算手法である。特に、第一原理電子状態計算に基づいた分子動力学 (第一原理分子動力学) やそれに基づいた解析手法 (反応活性化エネルギーの計算等) は、物質、材料の様々な現象を原子スケールで解明することを可能とし、ナノテクノロジー、物質・材料研究に多大な貢献をしてきた。しかし、通常的第一原理計算手法では系の原子数 N に対して計算量が N の 3 乗に比例して急激に増大するので、数千原子を越える系に対する第一原理計算は極めて困難である。この計算サイズの問題により、第一原理分子動力学が研究対象とする物質や現象には大きな制約があり、今までは整然と原子が並んだ固体中の現象や比較的単純な分子の反応が主なターゲットであった。

しかし現実の触媒反応や生体反応では特殊な反応場が形成されていて、周囲の環境の効果を取り入れることが反応メカニズムを理解するために必須であることが多い。また実材料や電子デバイスでも不純物、異種界面などの不均一な場所が材料の示す特性の大部分を決めていることが多い。これら特殊な場においては古典力場の信頼性は低く、第一原理計算に期待がかかるが、上記のサイズに対する制約が大きな障害となっていた。

2. 研究の目的

本研究の目的は、第一原理分子動力学法における計算サイズの問題を克服し、今まで第一原理計算の研究対象にすることができなかった問題に挑戦する計算手法を獲得することである。我々が開発してきた大規模第一原理電子状態計算手法を用いることにより、通常的第一原理手法では扱うことが不可能であった超大規模系、数十～百 nm スケールの物質、材料、デバイスに対する高効率の全原子第一原理分子動力学とそれに基づく反応解析などを可能とする。

具体的には、我々が開発してきたオーダー N 法第一原理分子動力学、また、高精度、高効率の局在軌道を作成する手法であるマルチサイト法を用いることによって効率と精度を両立させた大規模第一原理分子動力学を実現可能とする。これにより、現在多く用いられている平面波第一原理計算と同程度の精度を持った大規模第一原理分子動力学計算に基づく理論研究を実現することを目指す。開発された手法は様々な系に適用し、実際の系に対する応用研究を進めることにより、開発した手法の安定性、有効性を調べる。

3. 研究の方法

本研究には、応募者が英国の研究グループと共に長年開発してきたオーダー N 法第一原理計算プログラム CONQUEST (Concurrent $O(N)$ QUantum Electronic Structure Technique) を用いる。拡張ラグランジアン断熱分子動力学法などの大規模第一原理分子動力学を効率的に行う手法や CONQUEST で開発してきた高精度の局在軌道生成法であるマルチサイト法を用いることにより、高精度基底による信頼性の高い超大規模第一原理分子動力学を高効率で計算可能とする手法の開発を行う。同時に、拘束分子動力学手法にもとづいた自由エネルギー計算などの第一原理分子動力学法を用いた解析手法を CONQUEST に導入する。

また、開発された手法を様々な物質群に適用して、開発した手法の有効性を確認すると共に、さらなる効率化や計算安定性の向上を目指す。

4. 研究成果

(1) プログラム CONQUEST の開発と公開

本研究課題では我々が長年開発してきた大規模第一原理電子状態計算プログラム CONQUEST を用いる。大規模第一原理分子動力学を高精度で行えるようにするため、高精度基底を効率的に使うことを可能とするマルチサイト法と分子動力学の安定性を改善する拡張ラグランジアン断熱近似分子動力学法を用いた手法を、プログラム CONQUEST に導入することが最初の重要なステップである。

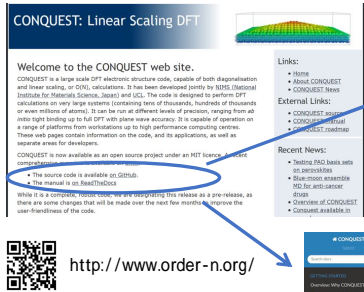
上記の手法を実現するため、分子動力学の途中で時事刻々と変化する原子座標に対してマルチサイト法により最適化された各原子に局在した関数 (サポート関数) の展開係数を新たな原子座標に対しても用いることを可能とするプログラムを作成した。この局在軌道法、さらにオーダー N 法を実現するためには、サポート関数が各原子に局在していることが本質的であり、非零の展開係数を持つ基底関数を担当する近接原子のリストは分子動力学を行なっている際に変更し続ける。さらに、大規模第一原理計算では並列計算効率が極めて重要であるが、分子動力学では各 MPI プロセスが担当する原子も各時刻の座標によって変化する。このため、分子動力学の際に各原子に対する展開係数と近接原子の情報を隣接 MPI プロセス間で通信し、異なるプロセスにおける近接原子リストを自プロセスのリストに変換する手法が必要となる。これらを可能とするプログラムの作成を行った。同時に、長時間の分子動力学は複数回のジョブで行われるので、MPI プロセス数が変わる場合にも前回のジョブで

得られた情報を使って再スタートできるようにプログラムを作成した。

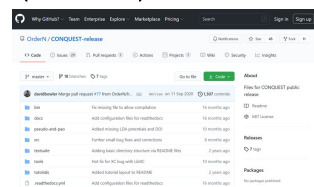
さらに、(2)で示す自由エネルギー計算を行うためのプログラム開発を行った。具体的には、ブルームーン法を用いた計算手法を可能とするための様々な反応座標に対する拘束分子動力学を実現するための計算プログラムの開発を行った。

これらの開発プログラムを取り入れたプログラム CONQUEST の MIT ライセンスによる一般公開を 2020 年 1 月に行った (図 1)。本公開に対しては、プログラムの計算手法と今までの応用計算例をまとめたレビュー論文を英国、フランスの共同研究者と共同で執筆し、発表した。

CONQUESTのウェブサイト



ソースコードはGitHubにて公開 (MITライセンス)



http://www.order-n.org/

マニュアルのウェブサイト



図 1: CONQUEST の公開に関する web page。

(2) 自由エネルギー計算、構造解析

第一原理分子動力学を用いた様々な解析手法の開発と整備を行った。CONQUEST で自由エネルギー計算を行う際の参考とするために、まず古典分子動力学を用いた自由エネルギー計算手法をいくつか検討した。次に CONQUEST における様々な反応座標に対する拘束分子動力学のプログラム作成を行なった後に、ブルームーン法を用いた自由エネルギー計算に対するテスト計算を行った。従来の報告例との比較、さらに低温での結果と Nudged Elastic Band 法の結果を比較し、プログラムが正常に動作することを確認した。

実際の応用例として、白金錯体シスプラチンが抗がん剤として働くための最初のステップである水溶液中におけるシスプラチンとその類似物質のアクア化過程に対する自由エネルギー計算を行った (図 2)。計算の結果、第 1、第 2 段階のアクア化で差がほとんどないこと、錯体の種類による差も小さいこと等を明らかにした。

また、シリコンのアモルファス相の構造モデリングを目的として、溶融急冷過程に対するシリコン 1000 原子系の第一原理分子動力学を実現した。ここで得られた固体相、液体相、アモルファス相の様々なスナップショット構造を用いて、局所構造を教師無し次元削減手法を用いて解析する新しい構造解析手法を提案した。さらに、第一原理電子状態計算によって計算される原子に働く力を再現する機械学習力場を構築し、その精度と汎用性を明らかにした。

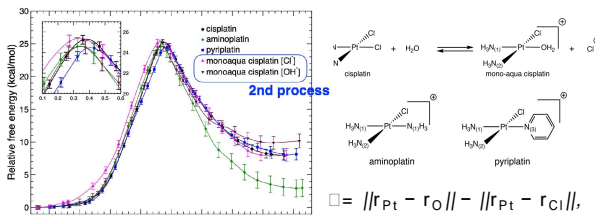


図 2: 水溶液中のシスプラチンと類似物質に対する 2 段階のアクア化過程における自由エネルギー変化。

(3) 様々な物質系に対する適用

応用例としては、シリコンやゲルマニウムの半導体やその酸化物の系、さらに白金抗がん剤シスプラチン、ポリマー、強誘電体 $YMnO_3$ の類似物質である $YGaO_3$ 、金属有機構造体 (MOF) の系に新たに適用した (図 3)。

シリコン/ゲルマニウム混合系に関して、非周期構造の構造モデリングを行った。周期結晶構造に対しても最適化された構造を計算し、これら複数の構造と電子状態の相関関係の解析を行った。一方、シリカ系に対しては結晶、アモルファス、液体の各状態に対して、様々な温度で第一原理分子動力学シミュレーションを行った。さらに、シリコン系、窒

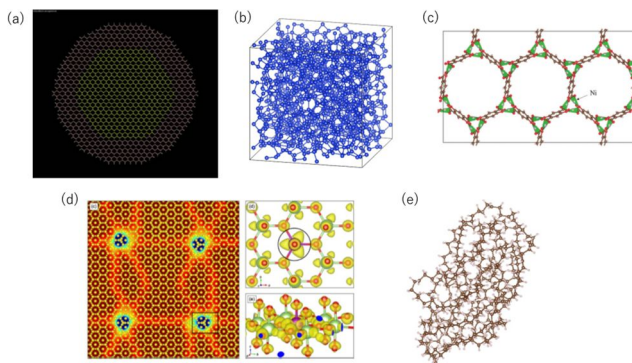


図 3: 大規模第一原理計算手法が適用された系。(a) シリコンゲルマニウムの高温での第一原理分子動力学のスナップショット構造、(b) 溶融急冷法によって得られたシリコンのアモルファス構造、(c) 金属有機構造体 (MOF) におけるメタン分子吸着、(d) 強誘電体 $YGaO_3$ における 6 個のドメイン領域が隣接して作られるボルテックス分域構造の構造と電子状態、(e) 水素欠陥を含むポリエチレン系に対する古典力場の精度検証。

化ガリウム系に対して格子欠陥を含む系、表面系に対して大規模第一原理分子シミュレーションによる研究を行った。

強誘電体 YGaO_3 についての研究では、複数のドメイン構造に対する構造最適化をマルチサイト法で行った。特に、6つのドメイン領域が隣接して作られるトポロジカルな欠陥であるボルテックス分域構造に対しては3600原子から構成される構造モデルに対する構造最適化と電子状態解析を行い、フェルミ準位付近の電子状態がこの分域構造によって影響を受けることを示した。

トリチウムが取り込まれたDNAのテスト系としてポリマーに対する第一原理計算も行った。水素欠陥を含むポリエチレン系に対するMDのスナップショット構造に対して、様々な力場の妥当性を大規模第一原理計算によって明らかにした。

金属有機構造体(MOF)と呼ばれる物質に対しては、メタン分子が多数吸着した系に対する研究を行った。さらに、金属微粒子、シリコン/ゲルマニウム系の非周期構造、水溶媒中のイオンの水和現象についての理論研究に対しても本研究で開発した手法を適用した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計13件（うち査読付論文 13件 / うち国際共著 7件 / うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Hirakawa Teruo, Bowler David R., Miyazaki Tsuyoshi, Morikawa Yoshitada, Truflandier Lionel A.	4. 巻 41
2. 論文標題 Blue moon ensemble simulation of aquation free energy profiles applied to mono and bifunctional platinum anticancer drugs	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 1973 ~ 1984
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.26367	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Smabraton Didrik R., Nakata Ayako, Meier Dennis, Miyazaki Tsuyoshi, Selbach Sverre M.	4. 巻 102
2. 論文標題 First-principles study of topologically protected vortices and ferroelectric domain walls in hexagonal YGaO3	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 144103/1 ~ 13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/physrevb.102.144103	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Li Haolun, Fujiwara Susumu, Nakamura Hiroaki, Mizuguchi Tomoko, Nakata Ayako, Miyazaki Tsuyoshi, Saito Shinji	4. 巻 60
2. 論文標題 Structural change of damaged polyethylene by beta-decay of substituted tritium using reactive force field	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SAAB06/1 ~ 7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/abdc8	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Nakata Ayako, Baker Jack S., Mujahed Shereif Y., Poulton Jack T. L., Arapan Sergiu, Lin Jianbo, Raza Zamaan, Yadav Sushma, Truflandier Lionel, Miyazaki Tsuyoshi, Bowler David R.	4. 巻 152
2. 論文標題 Large scale and linear scaling DFT with the CONQUEST code	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 164112/1 ~ 23
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0005074	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Baker Jack S, Miyazaki Tsuyoshi, Bowler David R	4. 巻 2
2. 論文標題 The pseudoatomic orbital basis: electronic accuracy and soft-mode distortions in AB ₃ perovskites	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Electronic Structure	6. 最初と最後の頁 025002/1 ~ 16
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/2516-1075/ab950e	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Ishikawa Hiroya, Sheng Min, Nakata Ayako, Nakajima Kiyotaka, Yamazoe Seiji, Yamasaki Jun, Yamaguchi Sho, Mizugaki Tomoo, Mitsudome Takato	4. 巻 11
2. 論文標題 Air-Stable and Reusable Cobalt Phosphide Nanoalloy Catalyst for Selective Hydrogenation of Furfural Derivatives	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Catalysis	6. 最初と最後の頁 750 ~ 757
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscatal.0c03300	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nakamura Hiroaki, Miyanishi Hisanori, Yasunaga Takuo, Fujiwara Susumu, Mizuguchi Tomoko, Nakata Ayako, Miyazaki Tsuyoshi, Otsuka Takao, Kenmotsu Takahiro, Hatano Yuji, Saito Shinji	4. 巻 59
2. 論文標題 Molecular dynamics study on DNA damage by tritium disintegration	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SAAE01/1 ~ 5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/1347-4065/ab460d	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Bowler David R., Baker Jack S., Poulton Jack T. L., Mujahed Shereif Y., Lin Jianbo, Yadav Sushma, Raza Zamaan, Miyazaki Tsuyoshi	4. 巻 58
2. 論文標題 Highly accurate local basis sets for large-scale DFT calculations in conquest	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 100503/1 ~ 7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/1347-4065/ab45af	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Nakata Ayako, Baker Jack S., Mujahed Shereif Y., Poulton Jack T. L., Arapan Sergiu, Lin Jianbo, Raza Zamaan, Yadav Sushma, Truflandier Lionel, Miyazaki Tsuyoshi, Bowler David R.	4. 巻 152
2. 論文標題 Large scale and linear scaling DFT with the CONQUEST code	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 164112/1 ~ 23
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0005074	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Ryo Tamura, Jianbo Lin, and Tsuyoshi Miyazaki	4. 巻 88
2. 論文標題 Machine Learning Forces Trained by Gaussian Process in Liquid States: Transferability to Temperature and Pressure	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 044601/1 ~ 10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.88.044601	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 T. Miyazaki	4. 巻 86
2. 論文標題 Large-Scale DFT Study of Ge/Si 3D Nanoislands and Core-Shell Nanowires	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 ECS TRANSACTIONS	6. 最初と最後の頁 269 ~ 279
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1149/08607.0269ecst	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tamura Ryo, Matsuda Momo, Lin Jianbo, Futamura Yasunori, Sakurai Tetsuya, Miyazaki Tsuyoshi	4. 巻 105
2. 論文標題 Structural analysis based on unsupervised learning: Search for a characteristic low-dimensional space by local structures in atomistic simulations	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 075107/1 ~ 18
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.105.075107	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yeh Chen-Hao, Khan Abdul Hannan, Miyazaki Tsuyoshi, Jiang Jyh-Chiang	4. 巻 23
2. 論文標題 The investigation of methane storage at the Ni-MOF-74 material: a periodic DFT calculation	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 12270 ~ 12279
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d1cp01276b	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計15件 (うち招待講演 7件 / うち国際学会 11件)

1. 発表者名 Tsuyoshi Miyazaki and Masato Oda
2. 発表標題 Development of a large-scale DFT code CONQUEST and its applications on GaN systems
3. 学会等名 International Symposium of Wide Gap Semiconductor Growth, Process and Device Simulation 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Ayako Nakata, Tsuyoshi Miyazaki, David R. Bowler
2. 発表標題 Large-Scale DFT Calculations for Materials with Complicated Structures
3. 学会等名 MANA International Symposium 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 中田彩子
2. 発表標題 複雑、不規則材料のための大規模第一原理計算
3. 学会等名 日本物理学会 第76回年次大会(2021年) (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 中田彩子、宮崎剛
2. 発表標題 大規模DFT計算によるPd@Agコアシェルナノ粒子触媒の構造・電子状態解析
3. 学会等名 第22回理論化学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tsuyoshi Miyazaki
2. 発表標題 Linear-scaling First-principles Molecular Dynamics Simulations of Complex Nano-structured Materials with the CONQUEST Code
3. 学会等名 4th International Workshop on Models and Data for Plasma-Material Interaction in Fusion Devices (MoD-PMI 2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tsuyoshi Miyazaki
2. 発表標題 Linear-scaling DFT simulations of complex nano-structured materials with the CONQUEST code
3. 学会等名 10th International Conference on Materials for Advanced Technologies (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Ayako Nakata, Tsuyoshi Miyazaki
2. 発表標題 Atomic and electronic structure analysis of Pd@Ag core-shell nanoparticles by large-scale DFT calculations
3. 学会等名 10th Congress of the International Society of Theoretical Chemical Physics (ISTCP-X) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1 . 発表者名 J. Lin, Z. Raza, D. R. Bowler and T. Miyazaki
2 . 発表標題 Linear-scaling ab initio molecular dynamics study of complex structure of materials with the CONQUEST code
3 . 学会等名 The 10th International Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 Ayako Nakata, David R. Bowler, Tsuyoshi Miyazaki
2 . 発表標題 Large-scale DFT study on Pd@Ag core-shell nanoparticles
3 . 学会等名 The 22nd Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 Ayako Nakata, David R. Bowler, Tsuyoshi Miyazaki
2 . 発表標題 Site- and size-dependence of atomic and electronic structures of metallic nanoparticles by large-scale DFT calculations
3 . 学会等名 14th International Conference on the Structure of Non-Crystalline Materials (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 T. Miyazaki
2 . 発表標題 Large-scale DFT study of complex nano-structured materials with the CONQUEST code
3 . 学会等名 Materials Meeting 2019 (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1. 発表者名 Ayako Nakata, Tsuyoshi Miyazaki
2. 発表標題 Atomic and electronic structure analysis of metallic nanoparticle catalysts by large-scale DFT calculations
3. 学会等名 Materials Meeting 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Miyazaki
2. 発表標題 Large-scale DFT study of complex surfaces and interfaces with the CONQUEST code
3. 学会等名 The 43rd International Conference and Exposition on Advanced Ceramics and Composites (ICACC 2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 宮崎剛
2. 発表標題 大規模第一原理計算プログラムCONQUESTの開発とナノ構造物質への応用
3. 学会等名 触媒・電池元素戦略研究拠点 第14回公開シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 宮崎剛、中田彩子
2. 発表標題 大規模第一原理計算プログラム CONQUESTの開発と公開: ナノ構造物質の原子と電子の振る舞いをコンピュータで解明
3. 学会等名 SATテクノロジー・ショーケース
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 T. Miyazaki, A. Nakata, D. R. Bowler	4. 発行年 2022年
2. 出版社 Springer, Tokyo	5. 総ページ数 338
3. 書名 Large-Scale First-Principles Calculation Technique for Nanoarchitectonics: Local Orbital and Linear-Scaling DFT Methods with the CONQUEST Code (System-Materials Nanoarchitectonics)	

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>CONQUEST https://ordern.github.io CONQUEST release https://github.com/OrderN/CONQUEST-release First-Principles Simulation Group https://www.nims.go.jp/cmsc/fps1/</p>

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	中田 彩子 (NAKATA Ayako) (20595152)	国立研究開発法人物質・材料研究機構・国際ナノアーキテクトニクス研究拠点・主任研究員 (82108)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関		
英国	University College London		
フランス	University of Bordeaux		
その他の国・地域	National Taiwan Univ. of Sci. and Tech.		

共同研究相手国	相手方研究機関			
ノルウェー	Norwegian University of Sci. and Tech.			