

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 12 日現在

機関番号：12601

研究種目：新学術領域研究（研究領域提案型）

研究期間：2010～2014

課題番号：22104007

研究課題名（和文）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

研究課題名（英文）Nanoscale Non-Equilibrium Electric Transport Dynamics Based on Density Functional Theory

研究代表者

渡邊 聡 (WATANABE, Satoshi)

東京大学・工学系研究科・教授

研究者番号：00292772

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 47,000,000円

研究成果の概要（和文）：ナノスケール電気伝導、特にそのダイナミクスのより深い理解に向けて、主に密度汎関数法に基づく計算科学研究に取り組んだ。主な成果は以下の通りである。(1) ナノ構造の交流応答特性を包括的に理解することに成功した。(2) 歪グラフェンをチャンネルとし、優れた性能を有する電界効果トランジスタや、エッジでのスピン偏極と量子ポンプ効果を用いて新たな純粋スピン流生成素子の提案に成功した。(3) グラフェンやシリセンのナノリボンのレーザー刺激電界電子放射特性を明らかにした。(4) 電圧印加を考慮した新しい方法論を開発した。(5) 新規なアルゴリズムの導入により、大規模系の電気伝導計算コードの大幅な高速化に成功した。

研究成果の概要（英文）：Aiming at deeper understanding on nanoscale electric transport phenomena, especially transport dynamics of various aspects, we conducted computational studies mainly based on the density functional theory. Main achievements are as follows. (1) We have got a unified picture of the AC response of nanostructures. (2) We have succeeded in proposing high-performance field-effect transistor using the locally strained graphene channel and a new type of pure spin current generation device utilizing the quantum pumping effect and the edge spin polarization. (3) We have clarified laser-assisted field emission behaviors from graphene nanoribbons and silicene nanoribbons. (4) New method has been developed for the consideration of bias voltage. (5) We have succeeded in drastically speeding up the first-principles transport calculation code for large systems by adopting a novel algorithm.

研究分野：計算材料物理

キーワード：計算物理 物性理論 密度汎関数法 電気伝導 ナノスケール物性

### 1. 研究開始当初の背景

Si デバイス縮小化とポスト Si デバイス探索の両面からナノスケール電子デバイスの研究が活発だが、いずれにおいてもトンネル伝導等の量子効果の顕著な発現は必至である。他方、基礎科学面でもナノスケール電気伝導現象の研究が 1990 年代から活発になった。これら基礎・応用両面の進歩は、ナノスケール電気伝導のより深い理解を求めた。

この要請にこたえて、この分野の計算科学研究も大きく進展した。しかし、ナノデバイスやその実験的研究の場において、界面ラフネスをはじめとした原子配列の詳細、局所高電界場の印加による非平衡過程の出現、高クロック動作に伴う過渡現象の重要性の増大等が絡み合ったダイナミックな過程が発現していることに鑑みると、研究はまだ不十分であった。他方、原子・電子レベルの素過程の計測の困難さを考えると、計算科学的研究の重要性はますます大きくなると考えられた。

### 2. 研究の目的

以上を踏まえて本研究では、ナノスケール電気伝導ダイナミクスに計算科学的にアプローチする方法論・計算コードを開発し、それを用いた解析で、ナノスケール電子伝導における電子・スピンのダイナミクス、電子・スピンと原子ダイナミクスの相関等を解明し、ナノ電子デバイスの量子デザインを目指した。具体的には、下記項目に取り組んだ。

- (1) 時間変化電磁場への応答：電子デバイス動作において電圧の時間変化が不可欠であることに鑑み、ナノ構造の交流応答特性や過渡応答特性の包括的な理解を得ることを目指した。また、光照射への応答も時間変化電磁場が関係する重要な課題であるため、計算・解析を通じてその特性の解明をねらった。
- (2) スピンとの相関：スピン偏極電流やスピン流を利用した電子素子は、次世代デバイスとして期待されている。そこで、グラフェンナノリボン等を対象に、スピン依存電気伝導特性を解析し、その本質を理解した上で、新規なデバイスを提案することを目指した。
- (3) 原子移動ダイナミクスとの相関：抵抗変化素子において原子移動による構造変化が電気抵抗スイッチングに本質的である等、ナノスケール素子においては原子移動ダイナミクスが電気伝導に大きく影響しうる。そこで、両者が絡む現象の解明を目指した。
- (4) 方法論および計算コードの改良・開発：本研究では複雑な状況、複雑な構造、あるいは大規模な構造を扱う必要が生じるので、それに対応する新規方法論開発や、計算コード開発・改良も目的の一つとした。特に、大規模系の電気伝導計算は電子状態計算よりずっと計算負荷が高いため、超並列計算機の性能をフルに利用できる電気伝導計算コードを開発することとした他、電圧・電場印加状態での効率的計算法等の開発を目指した。

### 3. 研究の方法

前節のように様々なサブテーマに取り組んだため、用いた方法論も多様である。以下に、主な方法論について述べる。

- (1) 過渡応答現象や電界効果トランジスタの特性等、複雑な状況の解析には強結合法に基づく非平衡グリーン関数(NEGF)法を用いた。
- (2) 交流応答特性の詳細な解析や、複雑構造ないし大規模構造の直流伝導特性の解析には、密度汎関数法に基づく NEGF 法を用いた。
- (3) 光照射に対する応答等では、時間依存密度汎関数法やペーテ・サルピータ方程式等、密度汎関数法に基づく高次の方法を用いた。
- (4) 次節の(2)や(7)の他、過渡応答解析プログラムや密度汎関数法に基づく交流応答計算プログラム等を本研究の中で開発した。

### 4. 研究成果

本研究で得られた多数の成果の中から代表的なものを選んで以下に記述する。

#### (1) ナノ構造の交流応答特性の理論解析

まず、高速動作次世代ナノ電子デバイスへの応用が期待されている金属カーボンナノチューブ(CNT)について、NEGF 法を用いてサブ THz 交流応答特性を解析し、エミッタンススペクトルに容量性応答を示すディップのみ見られる欠陥準位(図1左)と、ディップの周囲に誘導性ピークも現れる準位(図1右)があることを見出した[1]。解析の結果、両者は電子寿命の違いによる誘導性ピークの強度の違いとして統一的に理解できることがわかった。次に、金ベンゼンジチオール金架橋について解析し、エミッタンスのピーク・ディップに、金属 CNT の場合と同様にコンダクタンスに対応する特徴が現れる

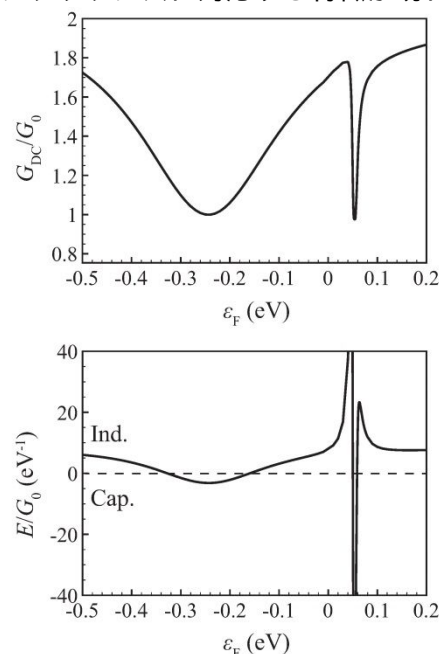


図1：原子空孔1個を含む金属CNTのコンダクタンス(上図)およびエミッタンス(下図)のフェルミ準位依存性の計算結果。

ものと、コンダクタンスには対応する特徴が現れないものがあることを見出した。後者では電極部分の状態密度の振舞いがエミッタンスの振舞いとよく対応するとわかった。これらを含む一連の解析により、ナノ構造の交流応答の統一的な理解を得ることができた。(2) バイアス電圧印加下の電子状態を計算する「軌道分離法」の開発

鋸歯状ポテンシャルを用いた電子状態計算では金属/絶縁体/金属構造への電場印加を扱えず、他方 NEGF 法は計算負荷が高いことから、新たに「軌道分離法」を開発した [2]。この方法では、金属/絶縁体/金属構造の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準位に基づいて占有させることでバイアス電圧印加を考慮する。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、単純かつ適用範囲が広い。Au/MgO/Au キャパシタや 2 枚の単層グラフェンから構成されるキャパシタに適用してこの方法論の妥当性を確認した後、SrRuO<sub>3</sub> (SRO) 電極で BaTiO<sub>3</sub> (BTO) と SrTiO<sub>3</sub> (STO) を挟み込んだ構造の誘電特性を解析した。計算結果から、界面では誘電率が顕著に低下しているが、BTO 内部では誘電率が負となっており、界面の誘電率低下の影響を相殺していることがわかった。この結果は、負の誘電率を用いたキャパシタンス増強のアイデアの有効性を強く示唆している。

(3) グラフェンリボンとシリセンリボンからのレーザー刺激電子放射

強電界とフェムト秒レーザーパルスをナノ構造に照射すると時空間で局在したコヒーレントな電子パルスが放出される実験が報告されている。この実験結果を理論的に検証し、光による電子励起と電流放出の相関ダイナミクスを明らかにする目的で、グラフェンリボンとシリセンリボンを例に時間依存密度汎関数法シミュレーションを使って電子ダイナミクスを追跡した [3,4]。放出電流は、電子遷移確率、放出電子準位の位置とその対称性によって決まり、仕事関数の大小では決まらないことがわかった。さらに、放出電流の時間的振る舞いはレーザーと共鳴する様子が見られるが (図 2 参照) リボンから離れるにつれて (A B C) 放出電流の共鳴振動が消えることがわかった。

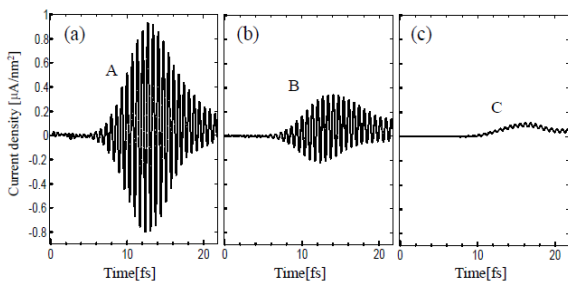


図 2 : シリセンナノリボンからの放出電流の時間発展 [4] .

(4) グラフェンナノリボンにおける純粋スピン流生成に関する研究

スピンを利用した新規素子の実現に向けては、如何にしてスピン偏極した電子の流れ、特に、電流を伴わない純粋なスピンの流れを作るかが重要な課題となっている。そこで、ジグザグ端グラフェンナノリボン (ZGNR) におけるエッジスピン偏極を利用してそのようなスピン偏極電流を得ることを狙い、新規素子の提案と理論計算を行った。具体的には、一般に位相の異なる二種類の振動電場を印加した場合に引き起こされる量子ポンプ効果に着目し、ZGNR に対して時間変化する電場を与えた場合の量子ポンプ効果に起因するスピン依存電気伝導特性を、スピン密度汎関数強結合法と NEGF 法を用いて調べた。ZGNR の対向する端に位相の正負が逆の振動ゲート電圧を与える事で、電荷の流れを伴わないスピンの流れ (純粋スピン流) の生成が可能である事が明らかとなった (図 3 参照) [5]。

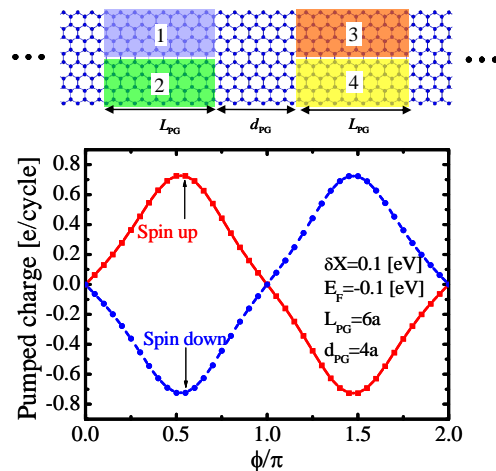


図 3 : 上 : ZGNR スピン流生成素子の模式図。下 : ゲート 1, 2 と 3, 4 で逆位相の振動ゲート電圧を与えた場合のスピン依存電流のポンピング位相依存性の一例。

(5) 歪みを印加したグラフェン電界効果トランジスタの特性の研究

グラフェンに歪みを印加した事によって歪み/無歪み界面に発生する擬似的な磁場を電界効果トランジスタ (FET) に応用した場合の特性を調べた。グラフェンのアームチェア方向にそって有限長のチャンネル部分にのみ局所的に引っ張り歪みを与え、そのチャンネル領域にゲート電圧を印加、その左右の無歪み領域は n 型あるいは p 型にドーピングされていると仮定した場合の電流のゲート電圧依存性を、強結合法とグリーン関数法を用いて調べた [6]。10% 以下の小さな歪み印加によって、界面での擬似磁場に起因するディラック点のずれにより、バンドギャップが存在しないにも関わらず 4 桁を超える電流のオン/オフ比が実現される事、スイッチング性能の指標の一つであるサブスレッショルド係数が、通常の FET では室温で 60mV/decade で

あるのに対し、提案構造では 20mV/decade 程度の値となり、通常の FET より優れたスイッチング性能を示す事が明らかとなった。

(6) Ge(001)表面欠陥の散乱ポテンシャルの第一原理計算

走査型トンネル分光顕微鏡観察により、Ge(001)表面の表面原子のひとつを Si や Sn に置き換えると、表面の伝導帯状態密度の空間分布に定在波が見られることが分かっている。この波の位相は欠陥の散乱ポテンシャルを反映するが、従来の平面波展開法で用いられるような欠陥が周期的に並んだモデルでは正確に扱えない。そこで、実空間差分法と Overbridging boundary-matching (OBM) 法を組み合わせた計算コード RSPACE を用い、状態密度の空間分布を描くことにより、Ge(001)表面上にひとつだけ埋め込まれた Si や Sn の不純物欠陥原子による散乱ポテンシャルを調べた[7]。Si がダイマーの上側もしくは Sn がダイマーの下側にあるときは散乱ポテンシャルが土手型、反対の場合は井戸型になることが分かった。この方法を MOS 界面などに応用することにより、顕微鏡では観察が困難な電子デバイス界面での欠陥によるキャリア散乱の予測が可能になる。

(7) 輸送特性計算における高速グリーン関数ソルバーの開発

OBM法やNEGF法を用いて輸送特性を求める際、半無限電極に挟まれた散乱領域のグリーン関数の計算がボトルネックのひとつである。そこで、数理グループ(張班)と協力し、グリーン関数計算の高速ソルバーの開発に取り組んだ[8]。具体的には、エネルギーの異なる複数のグリーン関数を効率的に計算することが高速化のポイントとなるため、数理グループで開発された Shifted COCG 法を利用することで、精度を一切落とさずにグリーン関数の計算の高速化を図った。従来の CG 法では、エネルギーを変える度にクリロフ部分空間を作成するため、計算コストの大きい行列ベクトル積が多数行われていた。Shifted COCG 法は、エネルギーのシフトだけ異なる行列のクリロフ部分空間は全て同じになるという数学的性質を利用した計算アルゴリズムであり、部分空間を作成のための行列ベクトル積の大幅な削減が期待できる。

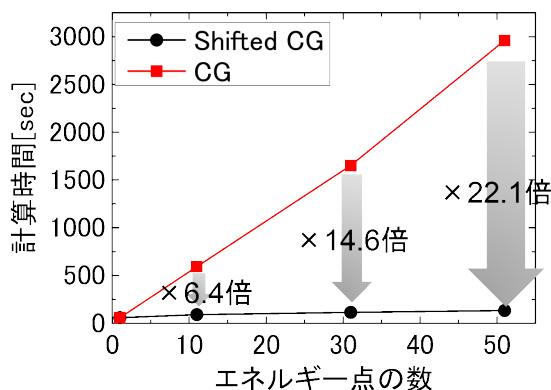


図4: Shifted CG 法と CG 法の計算時間の比較

この方法を第一原理伝導計算コード RSPACE に組み込み、Na 単原子鎖のグリーン関数の計算時間を従来法と比較した。従来の CG 法では、図4に示すように計算時間はエネルギー点数にほぼ比例して増加する。一方、Shifted COCG 法では、エネルギー点数に対する計算時間の増加がほとんどなく、エネルギー50点に対して約 22 倍の高速化が達成された。これにより、多数のエネルギーサンプリングができ、コンダクタンスが急激に変化する部分の詳細な解析が可能になった。

<引用文献>

- [1] D. Hirai, T. Yamamoto and S. Watanabe, J. Appl. Phys. 115, 174312 (2014).
- [2] S. Kasamatsu, S. Watanabe and S. Han, Phys. Rev. B 84, 085120 (2011).
- [3] T. Higuchi, C. Hu, and K. Watanabe, e-J. Surf. Sci. Nanotech. 13, 115 (2015).
- [4] D. Utsugi, C. Hu, and K. Watanabe, Appl. Phys. Express 5, 105101 (2012).
- [5] S. Souma and M. Ogawa, Appl. Phys. Lett. 104, 183103 (2014).
- [6] S. Souma, M. Ueyama, and M. Ogawa, Appl. Phys. Lett. 104, 213505 (2014).
- [7] T. Ono, Phys. Rev. B 87, 085311 (2013).
- [8] S. Iwase, T. Hoshi, and T. Ono, Phys. Rev. E, in press.

## 5. 主な発表論文等

[雑誌論文](計 24 件)

1. 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, Appl. Phys. Express, 査読有, 4, 075103 1-3 (2011). DOI:10.1143/APEX.4.075103
2. Orbital-separation approach for consideration of finite electric bias within density-functional total-energy formalism, S. Kasamatsu, S. Watanabe, and S. Han, Phys. Rev. B, 査読有, 84, 085120 1-11 (2011). DOI:10.1103/PhysRevB.84.085120
3. Mechanism for the optical activation of dark spin-triplet excitons in hydrogenated single-walled carbon nanotubes, S. Konabe and K. Watanabe, Phys. Rev. B, 査読有, 83, 045407 1-4 (2011). DOI:10.1103/PhysRevB.83.045407
4. Parity induced edge-current saturation and current distribution in zigzag-edged graphene nano-ribbon devices, S. Souma, M. Ogawa, T. Yamamoto, K. Watanabe, J. Comp. Electron., 査読有, 10, 35-43 (2011). DOI:10.1007/s10825-011-0352-0
5. Real-space electronic-structure calculations with full-potential all-electron precision for

- transition-metals, T. Ono, M. Heide, N. Atodiresei, P. Baumeister, S. Tsukamoto, and S. Blügel, *Phys. Rev. B*, 査読有, **82**, 205115 1-10 (2010).  
DOI:10.1103/PhysRevB.82.205115
6. Fully spin-dependent transport of triangular graphene flakes, T. Ono, T. Ota, and Y. Egami, *Phys. Rev. B*, 査読有, **84**, 224424 1-7 (2011).  
DOI:10.1103/PhysRevB.84.224424
  7. Elastic transient energy transport and energy balance in a single-level quantum dot system, W. Liu, K. Sasaoka, T. Yamamoto, T. Tada, and S. Watanabe, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 査読有, **51**, 094303 1-6 (2012).  
DOI:10.1143/JJAP.51.094303
  8. First-principles molecular dynamics simulation of biphenyl under strong laser pulses by time-dependent density-functional theory, J. Haruyama, C. Hu, and K. Watanabe, *Phys. Rev. A*, 査読有, **85**, 062511 1-5 (2012).  
DOI:10.1103/PhysRevA.85.062511
  9. Laser-Driven Field Emission from Graphene Nanoribbons: Time-Dependent Density-Functional Theory Simulations, D. Utsugi, C. Hu, and K. Watanabe, *Appl. Phys. Express*, 査読有, **5**, 105101 1-3 (2012).  
DOI:10.1143/APEX.5.105101
  10. Influence of geometrical deformation and electric field on transport characteristics through carbon nanotubes, M. Mouri, M. Ogawa, and S. Souma, *J. Appl. Phys.*, 査読有, **114**, 114328 1-5 (2012).  
DOI:10.1063/1.4768449
  11. First-principles transport calculation method based on real-space finite-difference nonequilibrium Green's function scheme, T. Ono, Y. Egami, and K. Hirose, *Phys. Rev. B*, 査読有, **86**, 195406 1-13 (2012).  
DOI:10.1103/PhysRevB.86.195406
  12. Nonadiabatic couplings from time-dependent density functional theory: Formulation by the Kohn-Sham derivative matrix within density functional perturbation theory, C. Hu, T. Tsukagoshi, O. Sugino, and K. Watanabe, *Phys. Rev. B*, 査読有, **87**, 035421 1-7 (2013).  
DOI:10.1103/PhysRevB.87.035421
  13. First-principles calculation of scattering potentials of Si-Ge and Sn-Ge dimers on Ge(001) surfaces, T. Ono, *Phys. Rev. B*, 査読有, **87**, 085311 1-6 (2013).  
DOI:10.1103/PhysRevB.87.085311
  14. Design principle for increasing charge mobility of pi-conjugated polymers using regularly localized molecular orbitals, J. Terao, A. Wadahama, A. Matono, T. Tada, S. Watanabe, S. Seki, T. Fujihara, Y. Tsuji, *Nat. Commun.*, 査読有, **4**, 1691 1-9 (2013).  
DOI:10.1038/ncomms2707
  15. Wavelet Analysis of Quantum Transient Transport in a Quantum Dot, K. Sasaoka, T. Yamamoto, and S. Watanabe, *Appl. Phys. Lett.*, 査読有, **102**, 233107 1-4 (2013).  
DOI:10.1063/1.4811247
  16. Effect of lateral strain on gate induced control of electrical conduction in single layer graphene device, S. Souma, Y. Ohmi, M. Ogawa, *J. Comp. Electron.*, 査読有, **12**, 170-174 (2013).  
DOI:10.1007/s10825-013-0451-1
  17. Conduction paths in Cu/amorphous-Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>/Pt atomic switch: First-principles studies, B. Xiao, T. Gu, T. Tada, and S. Watanabe, *J. Appl. Phys.*, 査読有, **115**, 034503 1-7 (2014).  
DOI:10.1063/1.4861724
  18. Performance of Tamm-Dancoff approximation on nonadiabatic couplings by time-dependent density functional theory, C. Hu, O. Sugino and K. Watanabe, *J. Chem. Phys.*, **140**, 査読有, 054106 1-9 (2014).  
DOI:10.1063/1.4862904
  19. Pure spin current induced by adiabatic quantum pumping in zigzag-edged graphene nanoribbons, S. Souma and M. Ogawa, *Appl. Phys. Lett.*, 査読有, **104**, 183103 1-4 (2014).  
DOI: 10.1063/1.4873580
  20. Simulation-based design of a strained graphene field effect transistor incorporating the pseudo magnetic field effect, S. Souma, M. Ueyama, and M. Ogawa, *Appl. Phys. Lett.*, 査読有, **104**, 213505 1-4 (2014).  
DOI:10.1063/1.4880579
  21. Oxygen vacancy effects on an amorphous-TaO<sub>x</sub>-based resistance switch: a first principles study, B. Xiao and S. Watanabe, *Nanoscale*, 査読有, **6**, 10169-10178, (2014).  
DOI:10.1039/C4NR02173H
  22. Anomalous satellite inductive peaks in alternating current response of defective carbon nanotubes, D. Hirai, T. Yamamoto and S. Watanabe, *J. Appl. Phys.*, 査読有, **115**, 174312 1-6 (2014).  
DOI:10.1063/1.4874937
  23. First-principles study on the effect of SiO<sub>2</sub> layers during oxidation of 4H-SiC, T. Ono and S. Saito, *Appl. Phys. Lett.*, 査読有, **106**, 081601 1-4 (2015).  
DOI:10.1063/1.4913598
  24. Electron-transport properties of ethyne-bridged diphenyl zinc-porphyrin molecules, H. D. Nguyen and T. Ono, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 査読有, **54**, 055201 1-4 (2015).  
DOI:10.7567/JJAP.54.055201

〔学会発表〕(計 7 件)

1. “Ab Initio Based Simulations on Electronic

- and Atomic Transport in Solid Electrolyte/Metal Junction Systems” (invited talk), S. Watanabe, T. Tada, S. Kasamatsu and T. Gu, Materials Research Society 2011 Spring Meeting April 27, 2011, San Francisco, U.S.A
2. “Spin-polarized current through graphene nanoflake” (invited talk), T. Ono, The 6th Japan-Sweden Workshop on Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications, November 23-26, 2011, Kagaonsen, Ishikawa, Japan.
  3. “Nonadiabatic couplings from time-dependent density functional theory: Progress and challenges” (invited talk), C. Hu, O. Sugino, Y. Tateyama, and K. Watanabe, ISSP-CMSI international symposium on MAterial Simulation in Petaflops era, Kashiwa, Japan, July 2, 2012.
  4. “Theoretical Study on AC Electronic Transport Properties of Nano- structures” (invited talk), S. Watanabe, D. Hirai and T. Yamamoto, The 16th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, Beijing, China, October 28, 2013.
  5. “First-principles electronic-structure and transport calculation formalism using real-space grid based method” (Plenary talk), T. Ono, Computational and theoretical analysis of grid-based quantum many-body theory, Rhodes, Greece, September 21-27, 2013.
  6. “Density Functional Studies on Electric and Dielectric Properties of Metal-Oxide Heterostructures in Nanoscale Devices” (invited talk), S. Watanabe, B. Xiao, and S. Kasamatsu, First International Conference on Nanoenergy and Nanosystems 2014, Beijing, China, December 10.
  7. “Density Functional Study concerning Tantalum Oxide based Resistive Switching Devices” (keynote talk), S. Watanabe and B. Xiao, 9th International Conference on Computational Physics, Singapore, January 7-11, 2015.

〔図書〕(計 3 件)

1. Atomistic tight-binding simulation of spin-orbit coupled semiconductor devices, S. Souma, in “Spintronics in Nanoscale Devices” edited by E. R. Hedin and Y. S. Joe (Pan Stanford Publishing), p. 101 (20 pages) (2013).
2. Nonequilibrium Phonon Green’s Function Simulation and Its Application to Carbon Nanotubes, T. Yamamoto, K. Sasaoka, S. Watanabe, in “Nanoscale Energy Transport and Harvesting: A Computational Study” edited by Gang Zhang (Pan Stanford Publishing), pp. 59-90 (2014).
3. “第 2 章 表面界面物性シミュレーション”

ン”, 小野倫也, “超精密加工と表面科学”, 大阪大学出版会, 19 (14 pages) (2014).

6 . 研究組織

(1)研究代表者

渡邊 聡 (WATANABE, Satoshi)  
 東京大学・大学院工学系研究科・教授  
 研究者番号：00292772

(2)研究分担者

渡辺 一之 (WATANABE, Kazuyuki)  
 東京理科大学・理学部・教授  
 研究者番号：50221685

相馬 聡文 (SOUMA, Satofumi)  
 神戸大学・大学院工学研究科・准教授  
 研究者番号：20432560

小野 倫也 (ONO, Tomoya)  
 筑波大学・計算科学研究センター・准教授  
 研究者番号：80335372

(3)連携研究者

酒井 明 (SAKAI, Akira)  
 京都大学・大学院工学研究科・教授  
 研究者番号：80143543

多田 朋史 (TADA, Tomofumi)  
 東京工業大学・元素戦略研究センター・准教授  
 研究者番号：40376512

山本 貴博 (YAMAMOTO, Takahiro)  
 東京理科大学・工学部・准教授  
 研究者番号：30408695

小鍋 哲 (KONABE, Satoru)  
 東京理科大学・総合研究院・講師  
 研究者番号：40535506

胡 春平 (HU, Chunping)  
 東京理科大学・理学部・助教  
 研究者番号：00512758

笹岡 健二 (SASAKA, Kenji)  
 神戸大学・自然科学系先端融合研究環重点研究部・特命助教  
 研究者番号：20516364

安藤 康伸 (ANDO, Yasunobu)  
 東京大学・大学院工学系研究科・助教  
 研究者番号：00715039

南谷 英美 (MINAMITANI, Emi)  
 東京大学・大学院工学系研究科・助教  
 研究者番号：00457003