

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 25 年 5 月 22 日現在

機関番号：12701

研究種目：基盤研究（B）

研究期間：2009～2012

課題番号：21340115

研究課題名（和文）最先端計算技術による新機能分子素子の設計・開発

研究課題名（英文）Design and development of a new functional molecular device by means of a state-of-the-art computational technique

研究代表者

大野 かおる（OHNO KAORU）

横浜国立大学・大学院工学研究院・教授

研究者番号：40185343

研究成果の概要（和文）：オリゴフェニレンビニレンをアンテナとして Zn フタロシアニンをコアとする π 共役デンドリマーと C_{60} の分子接合系で光捕集電荷分離機構が発現することを TDDFT ダイナミクス・シミュレーションにより明らかにした。また、1次元ピーナツ型フルレンポリマーの構造と電子状態の関係も調べ、カーボンナノチューブ内に直線分子が自発的に内包されることを示し、化学反応のシミュレーションや光吸収スペクトル計算も行った。

研究成果の概要（英文）：By means of a TDDFT dynamics simulation, we have clarified that a molecular heterojunction of a π -conjugated dendrimer, composed of oligo-phenylene-vinylene antenna and Zn-phthalocyanine core, and a C_{60} molecule exhibits light-harvesting charge separation behavior. We have also studied the relationship between geometrical and electronic structures of 1D peanut-shaped fullerene polymers, shown the spontaneous encapsulation of linear molecules into carbon nanotubes, and performed simulations of chemical reactions and calculations of photoabsorption spectra.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2009 年度	6,200,000	1,860,000	8,060,000
2010 年度	3,000,000	900,000	3,900,000
2011 年度	3,000,000	900,000	3,900,000
2012 年度	2,600,000	780,000	3,380,000
年度			
総計	14,800,000	4,440,000	19,240,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学、原子・分子・量子エレクトロニクス

キーワード：原子・分子、分子素子

1. 研究開始当初の背景

ナノスケール素子の開発は、IT、環境、バイオなどの応用研究とも深い関係を持ち、わが国における国家戦略の重点項目の一つとして極めて重要な役割を持ち、戦略的な研究推進が求められている。分子素子のアイデアは古くから存在し、これまで様々な研究が行われてきたが、未だにナノテクノロジーへ

の画期的な応用に繋がった成功例は少ない。これは、1個の電子、1個の正孔の移動を精密に制御・解析することが実験的に難しいためである。理論的にも他の計算は電子励起状態に必須な GW や TDDFT を含んでいないため、デバイスを目指すのに不足である。

2. 研究の目的

原子・分子のつくるネットワーク構造でエネルギーギャップを制御することにより、光エネルギー捕集、エネルギー変換、光触媒、トランジスタなどの様々な有用な分子素子機能を発現させるための基盤技術の創出を目指す。本研究では、複雑な系の電子励起状態を扱うことのできる世界最先端の計算技術 (GW + Bethe-Salpeter, TDDFT-LDA) を駆使しながら、それらの新機能発現の可能性と性能をシミュレーション予測し、新機能分子素子を設計・開発することを目的とする。

3. 研究の方法

全電子第一原理 GW + Bethe-Salpeter 計算と時間依存密度汎関数理論の断熱局所密度近似 (TDDFT-LDA) による電子励起ダイナミクス・シミュレーションを用い、

- (A) 光捕集 dendrimer の中心に nano pn 接合を組み込んだ構造による電子・正孔移動と分離。
 - (B) 通常実現しない電子励起化学反応を光捕集中心に移動した電子・正孔でトリガー。
 - (C) 1次元分子接合の n 型ベースのギャップ制御に基づく正孔キャリア輸送制御。
- などの研究を行い、その他の種々の系の計算とも比較検討しながら機能発現の可能性と性能を予測し、新機能分子素子の設計・開発を行い、研究成果を纏める。

本研究では準粒子、短距離電子相関、光吸収・発光のスペクトル計算には第一原理の多体摂動論に基づく GW + Bethe-Salpeter 方程式 (T-matrix) の方法を、電子励起状態でのダイナミクス・シミュレーションには TDDFT-LDA のスペクトル法を用いる。いずれも我々が開発した方法であり、わが国が世界に誇れる我々の全電子混合基底法 (1 電子波動関数を数値的原子軌道関数と平面波の線形結合で表し、孤立分子・クラスターと結晶を統一的に精度よく扱う方法) を基にしている。

4. 研究成果

- (1) フェニレン基をもつ π 共役 dendrimer (phDG2) の時間依存密度汎関数理論に基づく電子励起ダイナミクス・シミュレーションを行い、ペリフェリで光を吸収すると、ペリフェリからコアに電子・正孔が自発的に移動し、光捕集機能が実現することを示した。これは、ペリフェリのギャップがコアのギャップを挟むようなエネルギー準位構造をもつことと矛盾しない結果である。
- (2) C_{60} と Zn フタロシアニンの異種分子接合での光吸収によって生じたエキシトンの電荷分離機構を時間依存密度汎関数理論に基づく電子励起ダイナミクス・シミュレーションによって明らかにした。この系は有機薄膜太陽電池における分子 pn 接合部に相当するもので、これは、 C_{60} のギャップが Zn フタロシアニンのギャップに対して階段状に少し

低くなっているエネルギー準位構造をもつことと矛盾しない結果である。

- (3) ナトリウム・クラスターの光吸収スペクトルのクラスター・サイズ依存性を全電子スピンの偏極 GW + Bethe-Salpeter 方程式に基づく精密第一原理計算により求めた。
- (4) 全電子 GW 近似により Si, ダイヤモンド, SiC の芯電子 XPS スペクトルの精密計算を行った。
- (5) 多数の C_{60} が直線状に融合して結びついた 1 次元ピーナツツ型フラレンポリマーの安定構造とエネルギーバンドを第一原理計算し、どのような構造の場合に金属になるかの考察を行い、孤立 8 員環の存在により、フラットバンドと分散性の強いバンドがフェルミ面に出現することを明らかにした。また、これをグラフェンの場合にも応用した。
- (6) 様々な太さの単層カーボンナノチューブにポリインやヘキサンのような直鎖分子が自発的に内包される現象を第一原理計算により解析した。ポリインの両 (片) 端が水素終端していない場合には電子がナノチューブ側からポリイン側に移動する。その他の場合には弱い波動関数の重なりと電気四重極相互作用がエネルギー利得の原因である。
- (7) 高分子鎖が架橋したゴムを高速でモンテカルロ・シミュレーションするプログラムを作成し、ゴム弾性のシミュレーションを行い、論文投稿準備中である。この計算アルゴリズムはネットワークの自己組織化のシミュレーションに応用することができる。
- (8) 第一原理分子動力学シミュレーションにより $CO_2 + 2H \rightarrow HCOOH$ の反応過程のシミュレーションを行った。
- (9) 発光素子として注目されている CdSe クラスターの非常に小さな微粒子として、 $(CdSe)_3$ および $(CdSe)_6$ クラスターを考え、第一原理 GW+Bethe-Salpeter 計算による光吸収スペクトルの計算を行い、エキシトン励起状態を解析した。
- (10) 密度汎関数理論 (TDDFT) に基づくダイナミクス・シミュレーションにより、Ni ダイママーを触媒とする H_2 の解離過程を検討し、弱い励起でスピルオーバーが可能であることを見いだした。(論文印刷中)
- (11) ナノチューブに 7Be が内包されたときに、電子捕獲崩壊確率が増大することを第一原理計算により示した。
- (12) 時間依存密度汎関数理論に基づいて、非断熱過程の動力学シミュレーションプログラムを作成し、 $OC+O+CO \rightarrow OC+OC$ のシミュレーションを行った。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 14 件)

1. Shota Ono, Riichi Kuwahar, Tsuguo Morisato, and Kaoru Ohno, "Sensitive electron capture and decay rate of 7Be encapsulated in carbon nanotubes: A density functional study", Chem. Phys. Lett. **561-562**, 137-141 (2013). (査読有)
 2. Y. Noguchi, O. Sugino, M. Nagaoka, S. Ishii, and K. Ohno, "A GW +Bethe-Salpeter calculation on photoabsorption spectra of $(\text{CdSe})_3$ and $(\text{CdSe})_6$ clusters", J. Chem. Phys. **137**, 024306;1-5 (2012). (査読有)
 3. 野田祐輔, 大野かおる, 「6員環の幾何学的構造に依存する1次元ピーナッツ型フラーレンポリマーの電子状態」、ナノ学会会報(受賞記事)、Vol.11 (1) 21-25 (2012). (査読無)
 4. Raebiger Hannes and Takeshi Fujita, "Multiple exchange interactions induced by Jahn-Teller distortions in dilute magnetic semiconductors", Phys. Rev. B **84**, 172406 (2011). (査読有)
 5. Y. Noda and K. Ohno, "Metallic and non-metallic properties of one-dimensional peanut-shaped fullerene polymers", Synthetic Metals **161**, 1546-1551 (2011). (査読有)
 6. R. Kuwahara, Y. Kudo, T. Morisato, and K. Ohno, "Encapsulation of Carbon Chain Molecules in Single-Walled Carbon Nanotubes", J. Phys. Chem. A **115**, 5147-5156 (2011). (査読有)
 7. Hannes Raebiger, "Theory of defect complexes in insulators", Phys. Rev. B **82**, 073104 (2010). (査読有)
 8. S. Ishii, S. Iwata, and K. Ohno, "All-Electron GW Calculations of Silicon, Diamond, and Silicon Carbide", Mater. Trans. **51** (12), 2150-2156 (2010). (査読有)
 9. J.-T. Wang, C. Chen, K. Ohno, E. Wang, X.-L. Chen, D.-S. Wang, H. Mizuseki, and Y. Kawazoe, "Atomistic nucleation and growth mechanism for single-wall carbon nanotubes on catalytic nanoparticle", Nanotechnology **21**, 115602;1-5 (2010). (査読有)
 10. Y. Kodama and K. Ohno, "Charge separation dynamics at molecular heterojunction of C_{60} and zinc phthalocyanine", Appl. Phys. Lett. **96**, 034101;1-3 (2010). (査読有)
 11. Y. Kodama, S. Ishii, and K. Ohno, "Dynamics simulation of a π -conjugated light-harvesting dendrimer II: phenylene-based dendrimer (phDG2)", J. Phys.: Condens. Matter **21**, 064217;1-6 (2009). (査読有)
 12. S. Masatsuji, N. Nakagawa, and K. Ohno, "Linear and Nonlinear Elastic Behaviors of Star Polymers", Macromolecules **42** (8), 3170-3178 (2009). (査読有)
 13. S. Masatsuji, Y. Misumi, S. Ishii, and K. Ohno, "A Lattice Gas Model with Tetrahedral 4-Body Interaction of FePt Alloy Clusters", Journal of the Japanese Institute of Metals **73**, 550-554 (2009). (in Japanese) (査読有)
 14. 兒玉泰伸, 大野かおる, 「 π 共役デンドリマーの電子ダイナミクス計算」、ナノ学会会報(受賞記事)、Vol.8 (1), 15-21 (2009). (査読無)
- [学会発表] (計 6 5 件)
(学会)
1. 野田祐輔, 大野かおる, 「孤立 8 員環欠陥による 1 次元ピーナッツ型フラーレンポリマーと非平面状グラフェンの傾斜 Dirac コーン形成」、日本物理学会(広島大学、2013.3.26-29) 28pXP-10.
 2. 小野頌太, 張明, 野田祐輔, 大野かおる, 「ステップ型周期ポテンシャルが印加されたグラフェン超格子のゼーベック係数評価」、日本物理学会(広島大学、2013.3.26-29) 28pXP-8.
 3. 小野頌太, 桑原理一, 大野かおる, 「カーボンナノ構造に内包されたベリリウム同位元素の半減期減少の可能性」日本物理学会秋季大会(横浜、2012.9.18-21) 18pAJ-14.
 4. Nu Thi Pham and Kaoru Ohno, "Adiabatic and non-adiabatic quantum molecular dynamics approaches to chemical reaction", 日本物理学会秋季大会(横浜、2012.9.18-21) 21aAJ-5.
 5. 野田祐輔, 大野かおる, 「1 次元ピーナッツ型フラーレンポリマーにおける Dirac コーンの計算科学的研究」日本物理学会秋季大会(横浜、2012.9.18-21) 21aEC-13.
 6. 野田祐輔, 大野かおる, 「1 次元ピーナッツ型フラーレンポリマーのディラックコーン」ナノ学会第 10 回大会(大阪、2012.6.14-16) P2-51.
 7. 佐原亮二, 水関博志, Marcel Sluiter, 大野かおる, 川添良幸, 「全電子混合基底法プログラム TOMBO の開発と水素貯蔵材料への応用」ナノ学会第 10 回大会(大阪、2012.6.14-16) P2-66.
 8. 野田祐輔, 大野かおる, 「1 次元ピーナッツ型フラーレンポリマーのディラックコーン」ナノ学会第 10 回大会(大阪、2012.6.14-16) P2-51.
 9. 野田祐輔, 大野かおる, 「幾何学的特徴に対するピーナッツ型フラーレンポリマーの電子物性依存性」、第 21 回日本 MRS 学術シンポジウム(横浜市開港記念会館他、2011 年 12 月 19-21 日)、F-17-M.
 10. 野田祐輔, 大野かおる, 「第一原理計算によるピーナッツ型フラーレンポリマーの電子状態解析」、日本物理学会秋季大会(富山、2011.9.21-24) 21aTG-1.
 11. 桑原理一, 野口良史, 大野かおる, 「全電子混合基底法による自己無撞着 GW 計算プログラムの開発」日本物理学会秋季大会(富山、2011.9.21-24) 22pPSA-65.
 12. 野田祐輔, 大野かおる, 「1 次元ピーナツ

- ツ型フラーレンポリマーの電子状態」、ナノ学会第9回大会（北海道大学、2011年6月2日～4日：発表は6月2日）ポスターセッション1、P03.
13. 佐原亮二、水関博志、Marcel Sluiter、大野かおる、川添良幸、「全電子混合基底法プログラム TOMBO の開発と水素貯蔵材料への応用」、ナノ学会第9回大会（北海道大学、2011.6.2-4）P64.
 14. 池岡幹裕、大野かおる、「水素原子と二酸化炭素の全電子混合基底第一原理分子動力学シミュレーション」、ナノ学会第9回大会（北海道大学、2011.6.2-4）P68.
 15. 野田祐輔、大野かおる、「1次元ピーナツ型フラーレンポリマーの第一原理計算」、第20回日本 MRS 学術シンポジウム、D-P32-M、横浜、2010年12月20-22日
 16. 鳥海優人、大野かおる、「実在鎖を架橋したゴムのモデルのモンテカルロ・シミュレーション (Monte Carlo simulations of a rubber model cross-linked with ideal chains)」、第20回日本 MRS 学術シンポジウム、J-20-M、横浜、2010年12月20-22日
 17. 田所洋一、石井聡、野口良史、大野かおる、「全電子混合基底法による二次摂動計算プログラムの開発と孤立原子への応用」、日本物理学会（大阪府立大）26aTF-1、大阪府堺市、2010年9月23-26日
 18. 鳥海優人、大野かおる、「理想鎖を架橋したゴムの粗視化モデルのモンテカルロ・シミュレーション」、日本物理学会（大阪府立大）26aPS-14、大阪府堺市、2010年9月23-26日
 19. 野田祐輔、大野かおる、「金属性ピーナツ型フラーレンポリマーの電子状態」日本物理学会（大阪府立大）24aPS-107、大阪府堺市、2010年9月23-26日
 20. 野田祐輔、大野かおる、「金属性ピーナツ型フラーレンポリマーの電子状態」、ナノ学会第8回大会、P2-38、分子研（愛知県岡崎市）、2010年5月13-15日
 21. 鳥海優人、大野かおる、「理想鎖を架橋したゴムの粗視化モデル」、ナノ学会第8回大会、P1-32、分子研（愛知県岡崎市）、2010年5月13-15日
 22. 大野かおる、兒玉泰伸、「時間依存密度汎関数理論に基づく電子励起ダイナミクスの有効性について」、日本金属学会（2010年、Mar. 28-30、筑波大学）予稿集 629.
 23. 佐原亮二、亀掛川理、水関博志、Marcel H. F. Sluiter、大野かおる、川添良幸、「全電子混合基底法プログラム TOMBO による水素貯蔵材料の結合エネルギー計算」、ナノ学会（2009年、May 9-11 東京大学・武田ホール）予講集 P.3-30.
 24. 政辻悟、中川奈津、大野かおる、「2高分子の線形・非線形弾性挙動」、ナノ学会（2009年、May 9-11 東京大学・武田ホール）予講集 P.2-25.
 25. 兒玉泰伸、石井聡、大野かおる、「 π 共役 dendrimer の電子ダイナミクス計算」、ナノ学会（2009年、May 9-11 東京大学・武田ホール）予講集 P.2-23.
 26. 桑原理一、森里嗣生、石井聡、大野かおる、「 $C_{10}H_n@SWCNT$ の第一原理計算」、ナノ学会（2009年、May 9-11 東京大学・武田ホール）予講集 P.2-34.
- (国際会議)
27. Kaoru Ohno, "Linear-dispersive and flat bands near the Fermi level in fused fullerene polymers", ACCMS-WGM (Taipei, Jan. 2013) [INVITED TALK].
 28. Mikihiro Ikeoka and Kaoru Ohno, "First-principles molecular dynamics simulations using parallelized TOMBO: $2H + CO_2$ yielding $HCOOH$ ", ACCMS-VO7 (Sendai, 23-25 Nov. 2012).
 29. Shota Ono, Riichi Kuwahara and Kaoru Ohno, "Half-life of the 7Be atom encapsulated in carbon nanotubes: A first-principles study", ACCMS-VO7 (Sendai, 23-25 Nov. 2012).
 30. Riichi Kuwahara, Yoshifumi Noguchi, and Kaoru Ohno, "Efficient self-consistent GW program based on the all-electron mixed basis approach", ACCMS-VO7 (Sendai, 23-25 Nov. 2012). (Best Poster Presenter Award 受賞)
 31. Ming Zang, Kaoru Ohno, and Lei Miao, "Carrier concentration-dependent thermoelectric properties of titanium dioxide from Boltzmann transport calculations", ACCMS-VO7 (Sendai, 23-25 Nov. 2012).
 32. Yusuke Noda and Kaoru Ohno, "Linear-dispersive and flat bands in band structures of one-dimensional peanut-shaped fullerene polymers", ACCMS-VO7 (Sendai, 23-25 Nov. 2012). [INVITED TALK]
 33. Kaoru Ohno, "All-electron Mixed Basis Approach as An Accurate First-Principles Method", KIM-JIM Conference (Changwon, Korea, 25 Oct. 2012) [INVITED TALK].
 34. Kaoru Ohno, "Monte Carlo Simulations for Real Materials", 6th Int. Conf. on Multiscale Materials Modeling, MMM2012 (Singapore, 15-19 October 2012)E4-1. [INVITED TALK]
 35. Ming Zhang, Kaoru Ohno, and Lei Miao, "First-principles Study of Geometrical and Electronic Structures of Oxygen Vacancies in TiO_2 ", IUMRS-ICEM2012 (Yokohama, 23-28 Sep. 2012) A-4-O26-002.
 36. Nu Thi Pham and Kaoru Ohno, "Adiabatic and non-adiabatic quantum molecular dynamics approaches to chemical reactions", IUMRS-ICEM2012 (Yokohama, 23-28 Sep.

- 2012) D-5-P25-040.
37. Shota Ono and Kaoru Ohno, “A systematic investigation of electron capture decay rate of ^7Be encapsulated in carbon nanostructures”, IUMRS-ICEM (Yokohama, 23-28 Sep. 2012) D-5-P24-005.
 38. Yusuke Noda and Kaoru Ohno, “Electronic properties of one-dimensional peanut-shaped fullerene polymers with generalized Stone-Wales transformation”, ACCMS-VO6 (Sendai, 10-12 Feb. 2012), PS36.
 39. Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Marcel Sluiter, Kaoru Ohno, and Yoshiyuki Kawazoe, “Development of all-electron mixed-basis ab initio program TOMBO and application for hydrogen storage materials”, ACCMS-VO6 (Sendai, 10-12 Feb. 2012), PS27.
 40. Yoshifumi Noguchi, Osamu Sugino, Momoko Nagaoka, Soh Ishii, and Kaoru Ohno, “Optical absorption spectra of CdSe clusters by all-electron first-principles GW+Bethe-Salpeter method”, ACCMS-VO6 (Sendai, 10-12 Feb. 2012), PS24.
 41. Kaoru Ohno, “All-electron Mixed Basis Approach For Accurate First Principles Calculations”, ACCMS-VO6 (Sendai, 10-12 Feb. 2012), 19 [**Invited Talk**].
 42. Yuto Toriumi and Kaoru Ohno, “Monte Carlo Simulation of Rubber Elasticity”, ACCMS6, 6-9 Sept. 2011 Singapore (P076).
 43. Yusuke Noda and Kaoru Ohno, “First-Principles Calculations of One-Dimensional Peanut-Shaped Fullerene Polymers”, ACCMS6, 6-9 Sept. 2011 Singapore (P031)
 44. Mikihiro Ikeoka and Kaoru Ohno, “First-Principles Molecular Dynamics Simulations of $2\text{H} + \text{CO}_2$ Yielding HCOOH ”, ACCMS6, 7 (6-9) Sept. 2011 Singapore (P006).
 45. Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Marcel Sluiter, Kaoru Ohno, and Yoshiyuki Kawazoe, “Development of All-Electron Mixed-Basis ab initio Program TOMBO and Application for Developing Hydrogen Storage Materials”, ACCMS6, 6-9 Sept. 2011 Singapore (11B.2).
 46. Ryoji Sahara, Marcel F. Sluiter, Kaoru Ohno, Hiroshi Mizuseki, and Yoshiyuki Kawazoe, “Tohoku Mixed Basis Orbitals ab initio Program (TOMBO)”, ACCMS6 6 Sept. 2011 Singapore (Short Course II). [**Invited Lecture**]
 47. Kaoru Ohno, “All-Electron Mixed Basis Approach – DFT and Beyond”, ACCMS6, 6-9 Sept. 2011 Singapore (11B.3). [**Invited Talk**]
 48. Ryoichi Sahara, Hiroshi Mizuseki, Marcel F. Sluiter, Kaoru Ohno, and Yoshiyuki Kawazoe, “Theoretical study of hydrogen storage materials using all-electron mixed-basis program TOMBO”, The Fifth General Meeting of ACCMS-VO, Oral-31, Tohoku Univ. (Sendai, Japan, 10-13, December 2010).
 49. Yoichi Tadokoro, Soh Ishii, Yoshifumi Noguchi, and Kaoru Ohno, “Second-order and GW corrections to Hartree-Fock approximation for atoms: All-electron mixed basis approach”, The Fifth General Meeting of ACCMS-VO, PS-32, Tohoku Univ. (Sendai, Japan, 10-13, December 2010). *Best Poster Presenter Award*.
 50. Yuto Toriumi and Kaoru Ohno, “A simple rubber model corss-linked with ideal chains”, The Fifth General Meeting of ACCMS-VO, PS-30, Tohoku Univ. (Sendai, Japan, 10-13, December 2010).
 51. Yusuke Noda and Kaoru Ohno, “Electronic states of metallic peanut-shaped fullerene polymers”, The Fifth General Meeting of ACCMS-VO, PS-36, Tohoku Univ. (Sendai, Japan, 10-13, December 2010).
 52. Ryoji Sahara, N. S. Venkataramanan, Hiroshi Mizuseki, Marcel Sluiter, Kaoru Ohno, and Yoshiyuki Kawazoe, “Binding energy estimation of hydrogen storage materials by all-electron mixed basis program TOMBO”, Ψ_k Conference 2010 (Berlin, 自由大学, Sept. 12-16, 2010) P658.
 53. Kaoru Ohno, “Light-harvesting charge separation dynamics simulation at molecular heterojunction of C_{60} and zinc phthalocyanine-oligophenylenevinylene by means of the time-dependent density functional theory”, Ψ_k Conference 2010 (Berlin, 自由大学, Sept. 12-16, 2010) P395.
 54. Momoko Nagaoka, Yoshifumi Noguchi, Soh Ishii, and Kaoru Ohno, “First-principles GW + Bethe-Salpeter calculation of photoabsorption spectra for small CdSe clusters” The Fourth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization (ACCMS-VO) (Sendai, Jan. 12-14, 2010) Abstract P.S-54. *Best Poster Presenter Award*
 55. Yoichi Tadokoro, Soh Ishii, Yoshifumi Noguchi, and Kaoru Ohno, “Development of the all-electron mixed basis Hartree-Fock calculation code satisfying virial theorem” The Fourth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization (ACCMS-VO) (Sendai, Jan. 12-14, 2010) Abstract P.S-45.
 56. Riichi Kuwahara, Tsuguo Morisato, and Kaoru Ohno, “Encapsulation of Carbon Chains in Single-Walled carbon Nanotubes: A First-Principles Study” The Fourth General Meeting of Asian Consortium on

- Computational Materials Science – Virtual Organization (ACCMS-VO) (Sendai, Jan. 12-14, 2010) Abstract P.S-43.
57. Ryoji Sahara, Hisoshi Mizuseki, Kaoru Ohno, Marcel Sluiter, and Yoshiyuki Kawazoe, “Theoretical Study on Metal Organic Frameworks by All-Electron Mixed-Basis Program TOMBO” The Fourth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization (ACCMS-VO) (Sendai, Jan. 12-14, 2010) Abstract P.S-33.
58. Yoshifumi Noguchi and Kaoru Ohno, “First-principles GW + Bethe-Salpeter calculation of photoabsorption spectra of Na clusters” The Fourth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization (ACCMS-VO) (Sendai, Jan. 12-14, 2010) Abstract P.S-18.
59. Momoko Nagaoka, Yoshifumi Noguchi, Soh Ishii, and Kaoru Ohno, “Optical Properties of Small $(\text{CdSe})_n$ Clusters by First-Principles GW + Bethe-Salpeter Approach” International Symposium of Electronic Structure Calculations – Theory, Correlated and Large Scale Systems and Numerical Methods - (Yayoi Auditorium, Univ. of Tokyo, Dec. 7-9, 2009) Abstract P-5.
60. Momoko Nagaoka, Yoshifumi Noguchi, Soh Ishii, and Kaoru Ohno, “First-Principles Analysis of Photoabsorption Spectra of $(\text{CdSe})_{34}$ Clusters in Pearl-Necklace Geometry”, The 5th Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS5) (Hanoi, Sep. 7-11, 2009) Abstract P-99.
61. Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Kaoru Ohno, Marcel Sluiter, and Yoshiyuki Kawazoe, “Binding Energy Estimation of Hydrogen Storage Materials by All-Electron Mixed-Basis Program TOMBO”, The 5th Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS5) (Hanoi, Sep. 7-11, 2009) Abstract P-74.
62. Yoichi Tadokoro, Kaoru Ohno, Soh Ishii, and Yoshifumi Noguchi, “Development of the All-electron Mixed Basis Hartree-Fock Calculation Code”, The 5th Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS5) (Hanoi, Sep. 7-11, 2009) Abstract P-7.
63. Kaoru Ohno, “Lattice Monte Carlo method as a powerful tool”, The 5th Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS5) (Hanoi, Sep. 7-11, 2009) [Short Course Program] Abstract 4. **Invited**

64. Kaoru Ohno and Yasunobu Kodama, “Charge Separation Dynamics at Molecular Heterojunction of C_{60} and Zn-Phthalocyanine”, The Fifth Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS5) (Hanoi, Sep. 7-11, 2009) Abstract O11-2. **Invited**
65. Yoshifumi Noguchi, Kaoru Ohno, Igor Solovyev, and Taizo Sasaki, “Spin-Polarized all-electron GW + T -Matrix Calculation for Single and Double Quasiparticle Energies of Al Clusters”, The Fifth Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS5) (Hanoi, Sep. 7-11, 2009) Abstract O1-1.

〔図書〕 (計 2 件)

1. 押山淳、天能精一郎、杉野修、大野かおる、今田正俊、高田康民、岩波講座「計算科学」第3巻『計算と物質』(岩波書店、2012) 第6章「光励起と物質応答の量子論」pp.141-173, 付録 D pp.280-283 担当。
2. 大野かおる、他 18 名、『密度汎関数法の発展—マテリアルデザインへの応用』赤井久純、白井光雲 編 (丸善、2012) 「GW 近似」の後半と「GW 近似の展開」pp.96-103 担当。

〔産業財産権〕

- 出願状況 (計 0 件)
- 取得状況 (計 0 件)

〔その他〕

ホームページ等

<http://www.ohno.ynu.ac.jp/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

大野 かおる (OHNO KAORU)
横浜国立大学・大学院工学研究院・教授
研究者番号：40185343

(2) 研究分担者

レービガー ハンネス (RAEBIGER HANNES)
横浜国立大学・大学院工学研究院・助教
研究者番号：20531403
野口 良史 (NOGUCHI YOSHIFUMI)
東京大学・物性研究所・助教
研究者番号：60450293
石井 聡 (ISHII SOH)
横浜国立大学・大学院工学研究院・特別研究教員
研究者番号：90377094

(3) 連携研究者

なし