

事後評価に係る報告書

戦略分野名： HPCI 戦略プログラム
分野2
新物質・エネルギー創成

平成 28 年 2 月 15 日

分野2 統括責任者

東京大学

常行 真司

目次

1. 戦略分野概要	1
2. 研究開発目標	2
I. 相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明	
II. 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開に関する研究	
III. 密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究	
IV. 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開	
V. エネルギー変換の界面科学	
VI. 水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性	
VII. 金系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発	
VIII. 計算科学技術推進体制の構築	
3. 課題の達成状況等 (I ~ VIII)	5
(1) 研究開発目標の達成状況等について	5
① 研究開発計画 (平成 28 年 2 月 1 日時点)	5
② 研究開発目標及び研究開発計画の変更理由と対応	10
③ 目標達成状況 (平成 28 年 2 月 1 日時点)	16
④ 中間評価等指摘事項への対応	23
⑤ 研究開発成果 (平成 28 年 2 月 1 日時点)	30
⑥ 独創性・優位性について	52
(2) 研究開発体制について	58
(3) 成果の利活用について	66
4. 今後の展望 (I ~ VIII)	68
5. その他	70

事後評価に係る報告書

戦略分野名: HPCI 戦略プログラム 分野2 新物質・エネルギー創成

1. 戦略分野概要

戦略目標である「基礎科学の源流から物質機能とエネルギー変換を操る奔流へ」の実現に向け、「京」の性能を最大限発揮させて世界最高水準の研究成果を創出するとともに、本分野における計算科学技術推進体制を構築することを目的とする。

分野2の活動は、戦略機関である東京大学物性研究所(代表機関)、自然科学研究機構分子科学研究所、東北大学金属材料研究所を中核とした、計算物質科学、計算分子科学、計算材料科学の各分野の代表者により運営するネットワーク型組織「計算物質科学イニシアティブ(CMSI; Computational Materials Science Initiative)」により推進している。CMSI では、この3分野の連携による相乗効果が発揮されるように構成した5つの研究領域で、部会(第1～第5部会)を設けて研究課題を議論・立案し、運営委員会での合議を経て計算物質科学が取り組むべき社会的、学術的に重要な複数の課題を選定し、さらに進捗状況や社会的要請に応じて毎年研究課題の見直しを行いながら、研究を推進している。

これらの研究課題のうち、特に重要性、緊急性が高く、高並列ソフトウェアの準備も進んでいる7件の課題を、「京」の戦略利用枠を利用できる「重点課題」とし、CMSI 重点研究員(研究グループに所属して個別の研究を推進する研究員)の配置、予算配分など、重点的な資源配分・支援を行っている。一方、「京」を利用するには、さらにソフトウェアの整備が必要な課題、もしくは、分野振興に資する重要な手法開発を含み継続的に支援すべき課題など、13件を「特別支援課題」、6件を「支援課題」に選定し(平成28年2月時点)、分野振興の一環として、CMSI 拠点研究員(戦略機関の3研究所に所属する研究員)によるソフトウェア整備支援や3研究所の共同利用スパコンの計算資源配分等の支援を行っている。

平成28年2月時点での部会と7件の重点課題は以下のとおりである。

第1部会「新量子相・新物質の基礎科学」

重点課題Ⅰ: 相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明

重点課題Ⅱ: 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開に関する研究

第2部会「次世代先端デバイス科学」

重点課題Ⅲ: 密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現

第3部会「分子機能と物質変換」

重点課題Ⅳ: 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開

第4部会「エネルギー変換」

重点課題Ⅴ: エネルギー変換の界面科学

重点課題Ⅵ: 水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性

第5部会「マルチスケール材料科学」

重点課題Ⅶ: 金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発
(特別支援課題・支援課題は p50 参照)

本報告では、「京」を利用する課題として選定された7件の重点課題の研究と、計算科学技術推進体制構築に関して、これまで得られた成果を報告する。

2. 研究開発目標

I. 相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明(平成 25 年 4 月変更)

(課題代表者 東京大学 今田正俊)

多体量子系の示す多様性や階層性の理解は凝縮系物理学の中心課題であり、人類の自然探索の最前線でもある。強相関多体量子系は新しい現象と概念の宝庫であり、高温超伝導、量子ホール効果、巨大応答などの物理を生み出してきたと同時に、新原理の応用は、広範な技術革新へと結びつく。このプロジェクトのめざすものは新奇な量子多体現象の発見・機構解明や新物質探索と制御法の開拓である。第一原理に立脚する強相関量子多体系の高精度な予測・解明と、本質と原理を抽出するための理論模型による大規模計算の有機的な連携により、強相関量子多体系の汎用的大規模計算手法を確立し、高温超伝導、新量子相、新しいタイプの相転移、強い非平衡に伴う高励起ダイナミックスが生み出す新原理、新現象を解明する。

II. 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開に関する研究(平成 26 年 4 月変更)

(課題代表者 神戸大学 天能精一郎)

超並列計算環境を高度に活用する事により、これまで取り扱いが困難であった物質に対する分子理論を発展させ、材料設計・生命・エネルギー問題を基礎原理から解決する事を目的とする。分子の性質を定量的に予言可能な高精度ポスト・ハートリーフォック計算を京コンピュータで実現し、炭素材料分子やかさ高い官能基による新規な物質の発現原理の解明と設計を行う。強く絡み合った電子状態に対しては、その取り扱いが可能となる斬新な電子相関理論を発展させ、光合成系等における反応複合体の原理の解明や新規メタルクラスタの物性探索を行う。更に、動力学と凝縮系での熱揺らぎを考慮し、複数の物理原理が協働する実在系の分子理論を発展させる。

III. 密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現(平成 26 年 4 月変更)

(課題代表者 東京大学 押山淳)

戦略課題「次世代先端デバイス科学」においては、次世代のテクノロジーを支える材料、構造体に対して、量子論の第一原理に立脚した先端的計算を行い、その電子物性・機能を解明・予測することを目的としている。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の高速計算が期待される実空間アプローチ(コード名:RSDFT、RS-CPMD、RSPACE、CONQUEST)を計算手法の軸にすえ、密度汎関数理論における既存の近似法計算を最適化、高速化することに加え、新たな近似法の開拓および密度汎関数理論を超えて電子相関を扱い得る手法の開拓、従来古典論でしか扱えなかった現象への量子論的手法の開拓が手法開発におけるターゲットである。当初設定された重点課題「密度汎関数法によるナノ構造の電子的機能予測に関する研究」においては、さらなる微細化に突入した CMOS 技術および beyond-CMOS 技術を支えるナノドット、ナノワイヤー、ナノチューブ、新材料などの電子機能の解明と予測が重要なターゲットであった。平成 26 年度からは、実空間・実時間の密度汎関数法と電磁場のマクスウェル方程式に依拠した、光励起電子機能の研究を本重点課題内で開始し(コード名:GCEED、ARTED)、重点課題名を標記のように変更した。これにより、Si/Ge 系、パワーエレクトロニクス材料、原子層材料の物性機能の解明に加え、ナノ構造体の光励起ダイナミックス、レーザーパルス加工機構の量子論的解明・予測を目指した。

IV. 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開(平成 25 年 4 月変更)

(課題代表者 名古屋大学 岡崎進)

ウイルスの全原子シミュレーションやウイルスタンパク質の全電子計算等を実行することにより、感染機構や免疫機構、また抗ウイルス剤との相互作用などを自由エネルギーレベルで明らかにし、計算科学によるウ

イルスの分子科学を世界に先駆けて確立する。

V. エネルギー変換の界面科学(平成 25 年 4 月変更)

(課題代表者 東京大学 杉野修)

水素社会・再生可能エネルギー社会の到来に向けて、自然エネルギーを利用可能な形態に変換したり蓄えたりするための技術開発がしのぎを削って行われている。電子移動反応を通して水素の化学結合エネルギーを電気エネルギーに変換する燃料電池や、化学・電気エネルギーの相互変換をリチウムイオンの結合状態の変化を通して行うリチウムイオン二次電池などが典型的な要素技術である。そこで起こるエネルギー変換の原理を正しく理解し、それを次世代の新規技術の創出につなげることは重要である。電池過程は、電子と原子核が量子力学の原理に基づいて複雑に絡み合っ起こる現象であり、固体と電解質の界面構造と性質に敏感に依存性して起こるのであるが、従来の計算機資源でできる研究はかなり限られてきた。本課題では京コンピュータの計算資源を活用してこの依存性を明確化する。本課題で主に取り上げるのは、リチウムイオン二次電池負極の SEI 膜と燃料電池正極の酸化膜である。これらは現行の電池の劣化と効率を決定づける最重要ポイントであるだけでなく、電池一般の界面に普遍的に生じ得る問題であり、電池シミュレーションの有用性を示すのに相応しい課題であると考えている。

VI. 水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性

(課題代表者 岡山大学 田中秀樹)

メタンと水素ハイドレートによるエネルギー創生と貯蔵を目指し、それらの実用化に対する理論面からの支援を行う。具体的には、分子動力学シミュレーションを行い、種々のハイドレートの熱力学的安定性と融解のダイナミクスを調べる。また、ハイドレートの有効利用を実現するために、熱と物質の移動を取り入れた大規模シミュレーションを行い、生成解離過程や熱力学的安定性、融解と生成の過程を明らかにし、ハイドレートの制御可能性に関する科学的知見を確立し、実用に対する指針を得る。

VII. 金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発(平成 24 年 4 月新設)

(課題代表者 産業技術総合研究所 香山正憲)

大規模第一原理計算(オーダーN法)を用いて、金属材料中の異相界面や転位、粒界の安定構造やエネルギー、機械的挙動、さらにそれらへの合金成分や不純物の効果を高精度に解明する。これにより、金属材料の特性を支配する「微細組織」の構造や性質を明らかにする。さらに第一原理計算をフェーズフィールド法に繋げることで、マルチスケールに渡る現象を解明し設計する手法を検討し、優れた構造材料の開発やレアメタル代替の研究に貢献する。金属系構造材料は、産業や社会基盤を支える材料であり、飛躍的な高性能化やレアメタル低減のインパクトは極めて大きい。性能を支配する「微細組織」の構造や機械的性質を原子・電子まで掘り下げて高精度に解明することが最も重要である。微細組織を構成する異相界面・転位・粒界等の大規模第一原理計算を「京」で実行することで、世界で例のない解明が可能となる。さらに、第一原理計算をフェーズフィールド法に繋ぐ手法を検討し、マイクロからメゾ・マクロまで、マルチスケールで「微細組織」の構造や性質、挙動を解明し設計する手法の構築を目指す。後者の取り組みについては第5部会の活動と連携して進める。

VIII. 計算科学技術推進体制の構築

(統括責任者 東京大学 常行真司)

「京」を最大限活用し、材料・エネルギー創成に関する社会的・科学的重要な課題に取り組み、成果を一般社会や学术界の発展に還元するために必要となる研究推進体制を構築し、本戦略プログラムを運営する。また、3つの戦略機関が協力し、最先端の計算機を活用して継続的に世界最高水準の成果を出すための研究支援を実施する。そして、CMSI が物質科学コミュニティの世界の中核拠点になることを目指す。

3. 課題の達成状況等

(1) 研究開発目標の達成状況等について

① 研究開発計画(平成 28 年 2 月 1 日時点)

I. 相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミクスの解明

研究開発項目及び小項目	平成 23 年度	平成 24 年度	平成 25 年度	平成 26 年度	平成 27 年度
I. 相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミクスの解明					
(I-1) 電子相関の強い現実物質の新機構解明と制御法開拓に関する研究	MACE の高度化	高温超伝導・スピン液体の探求		新量子相の発見 MACE の多角適用	
(I-2) 強相関電子系の励起ダイナミクスの研究	DDMRG の高度化	励起スペクトルの評価		非平衡ダイナミクスの評価	
(I-3) 量子モンテカルロ法による新しい量子相・量子臨界現象に関する研究		脱閉じ込め現象の有無の検証		テンソルネットワーク法による新規量子相の解明	
(I-4) スピン軌道相互作用系の解明			MACE, DDMRG, テンソルネットワーク法の総合展開		

II. 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開に関する研究

研究開発項目及び小項目	平成 23 年度	平成 24 年度	平成 25 年度	平成 26 年度	平成 27 年度
(II) 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開に関する研究					
(II-1) 高精度電子状態計算による分子の微細量子構造予測に関する研究	MP2-F12 法の高度化		高次電子相関と相対論の実装		実証試験
(II-2) 光合成酸素発生中心の構造とスピン状態に関する研究				リガンド効果評価	構造とスピン密度解析

III. 密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現

研究開発項目及び小項目	平成 23 年度	平成 24 年度	平成 25 年度	平成 26 年度	平成 27 年度
III 密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現に関する研究					
III-1 RSDFT コードの高速化・高度化と科学計算	京での超並列計算の実現と高速化・高度化	Si ナノワイヤー、グラフェン、シリセン、SiC ナノファセットの電子機能予測			
III-2 RS-CPMD コードの開発と高速化・高度化		基本アルゴリズムの設計と実装		チューニングおよびテスト計算	
III-3 RSPACE コードの高速化・高度化と SiC-MOS 界面でのキャリア伝導計算	京での超並列計算の実現と高速化・高度化		SiC パワーデバイスの MOS 界面電子状態と電気伝導特性予測		
III-4 CONQUEST コードの高速化・高度化と科学計算	京での高速化と高機能化		エピ成長時ハットクラスターの成因解明、Si/Ge コアシェルワイヤーの電子機能予測		
III-5 GCEED コードの高速化・高度化と科学計算			京での高速化及びナノ構造体における光機能予測		
III-6 ARTED コードの高速化・高度化と科学計算		京での超並列計算の実現と高効率化	高強度パルス光と物質の相互作用、パルス光による加工過程の解明		

IV. 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開

研究開発項目及び小項目	平成 23 年度	平成 24 年度	平成 25 年度	平成 26 年度	平成 27 年度
(4) 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開					
(4-1) 小児マヒウイルスカプシドの分子科学	MODYLAS の京への最適化	ウイルスの安定性の分子機構	環境安定性		
		感染初期過程の分子機構 CD155 との相互作用		カプシド構造変化	
			RNAを含むB型肝炎ウイルス抗ウイルス剤のDDS		
(4-2) インフルエンザウイルス阻害剤の分子設計	FMO 高速化機能拡張	水和状態で の計算法	活性化化合物 シード化合物	高活性化化合物	候補化合物

V. エネルギー変換の界面科学

(1-1),(1-2)は達成、(1-3)はほぼ達成

研究開発項目及び小項目	平成 23 年度	平成 24 年度	平成 25 年度	平成 26 年度	平成 27 年度
(1) 電気化学環境下での計算基盤構築に関する研究					
(1-1)電位差を印加する手法開発(ESM 開発)	ESM 再設計	ESM の平滑化		ESM の高度化	
(1-2)電位差制御に関する研究		ポテンシostat MD 設計		白金界面への応用	
(1-3)自由エネルギー計算手法開発	マルチカノニカル法の実装		LogMFD による多次元化		白金への適用
(2)第一原理 MD 高度化に関する研究				(2)は達成	
(2-1)STATE の高並列化に関する研究		FFT、対角化における通信の効率化		レプリカ並列化と白金への応用	
(2-2)stat-CPMD の高並列化に関する研究			レプリカ並列化	反応自由エネルギー計算への適用立	
(2-3)反応力場構築に関する研究		統計学的手法の検討		リチウム空気電池への適用	
(3)電気化学界面への適用				(3-1)は達成見込み。 (3-2),(3-3)は達成	
(3-1)燃料電池	電極反応機構解明			CV の計算と実験との比較検討	
(3-2)リチウムイオン二次電池			還元機構解明	新規電解液探索、界面保護膜計算	
(2-3)リチウム空気電池			反応性、イオン伝導の計算予測		

本課題は(1)電気化学環境下での第一原理計算を可能にするための計算手法の構築、(2)それを京で実現するためのアプリ高度化、(3)さらにアプリを用いた応用計算の3つの項目からなる。計算手法は、(1-1)電極界面に電位差を印加する方法(ESM)と(1-2)それを制御する方法(ポテンシostat)、さらに(1-3)反応自由エネルギー手法の構築で構成されている。

京では金属電極に適したアプリ「STATE」と半導体電極に適したアプリ「stat-CPMD」の両方を用いている。(2-1)STATE の並列化には、FFT の通信などにおける基本的な並列化作業と STATE を並列させて動作させるレプリカ並列化作業を行い、反応自由エネルギーの計算が可能な状況となった。(2-2)Stat-CPMD に関しては、すでに基本的な並列作業ができており、レプリカ並列化作業から始めた。そのため応用計算を先行して行うことができた。(2-3)これら第一原理計算の結果をデータベース化し、統計学的手法を用いて力場計算を行うための手法についても構築した。この手法を用いることにより従来より時間・空間スケールの大きなシミュレーションを行うことが可能になった。

応用計算に関しては、(3-1)燃料電池の正極・負極での反応機構の探求、CV をはじめとする測定量の第一原理シミュレーションを行い、計算の信頼性を向上させた。また、(3-2)リチウムイオン二次電池の負極の耐性に関する計算を行い、実験と共同で新規電解液の開発にも携わった。(3-3)上記力場計算を行い、次世代二次電池として注目されているリチウム空気電池の性能に関する計算予測を行った。

これらの研究により現実的な電気化学環境下でのシミュレーションが可能になり、反応機構などに関する理解が深まると同時に計算の信頼性に対する評価も高まった。

VI. 水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性

研究開発項目及び小項目	平成 23 年度	平成 24 年度	平成 25 年度	平成 26 年度	平成 27 年度
(VII) エネルギー変換 水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性					
(VII-1) 水素ハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性	水素ハイドレートの自由エネルギー計算	水素ハイドレート・氷の相図の完成	生成過程の予備計算	生成過程の大規模計算	
(VII-2) メタンハイドレートの融解機構と熱力学的安定性		融解過程の予備計算	融解過程の大規模計算	塩などの影響の解析	

VII. 金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発

研究開発項目及び小項目	平成 23 年度	平成 24 年度	平成 25 年度	平成 26 年度	平成 27 年度
(VII) 金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発	局所応力・局所エネルギー計算法の確立(QMAS コード)	OpenMX コードの最適化			
(VII-1) 析出物と母相金属の異相界面の大規模第一原理計算		Fe/TiC 界面の第一原理計算、界面歪エネルギーの見積もり			
(VII-2) 転位の構造や転位と固溶原子との相互作用の大規模第一原理計算			Fe 中のらせん転位芯の構造、Si など添加元素との相互作用の第一原理計算		
(VII-3) 添加元素の偏析した粒界の構造や力学挙動の大規模第一原理計算				Fe 粒界の不純物偏析、力学応答の第一原理計算	
(VII-4) フェーズフィールド法に繋げる手法の検討			第一原理計算結果をフェーズフィールド法に繋げる手法の検討		

VIII. 計算科学技術推進体制の構築

研究開発項目及び小項目	平成 23 年度	平成 24 年度	平成 25 年度	平成 26 年度	平成 27 年度
I. 計算科学技術推進体制の構築					
(I-1) 計算資源の効率的マネジメント	分野サーバ提供と階層的資源提供	ハイブリッドマシンによるアプリテスト環境提供		ハード&アプリ資源提供体制構築	
(I-2) 「京」・HPCI 利用の研究支援	戦略機関・神戸拠点での並列化支援	「京」一般枠申請支援・コンサル		エクサスケールに向けた支援体制の構築	
(I-3) 人材育成	ワークショップ、スクール等で超並列スキル UP	各大学特論講義と配信講義準備・実施		リサーチトレーニング NW 構築し、世界に発信	
(I-4) 人的ネットワークの形成	戦略機関で定期的に研究会等開催	元素戦略・大型実験施設との連携会議実施		実験と計算科学の融合による成果創出のための NW 形成	
(I-5) 研究成果の普及	広報誌 TORRENT 発刊で活動周知	アプリホータル MateriApps 公開。講習会実施		産官学の若手研究者へのアプリ利活用・交流促進	
(I-6) 分野を越えた取り組みの推進	他の戦略分野や計算機科学との連携強化	実験研究者、JST の Pj 等との連携推進		実験研究者との新たな連携によるエクサ向け課題の提案	

②研究開発目標及び研究開発計画の変更理由と対応

I. 相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明

変更する事項	変更理由	対応	変更時期
(I-4) スピン軌道相互作用系の解明に関する項目追加	トポロジカル相の研究が新量子相研究の中で大きな意義ある課題であることが明らかとなってきたため独立項目として追加	本項目を追加する	平成25年4月

※ 研究目標やI-4以外の項目に変更はない

II. 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開に関する研究

変更する事項	変更理由	対応	変更時期
(II-2) 光合成酸素発生中心の構造とスピン状態に関する研究	マンガングラスタの構造研究に大きな進展があり、電子状態理論からも意義のある課題であることから研究項目を追加	項目を追加する	平成26年4月

III. 密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現

変更する事項	変更理由	対応	変更時期
III 重点課題に関する計画の変更	新たに光励起電子機能の解明・予測を目標に加えたため	新たに2名の実施メンバー(信定、矢花)を加え、課題名を変更した	平成26年4月

IV. 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開

変更する事項	変更理由	対応	変更時期
(4-1) 小児マヒウイルスカプシドの分子科学に関する計画の変更	研究進展のため	トランスフェリンレセプターならびに抗体によるカプシド認識の分子機構の解明を追加	平成25年4月
(4-1) 小児マヒウイルスカプシドの分子科学に関する計画の変更	実験研究者からの強い要望に応じて、厚生労働省プロジェクトとの連携事業を新規に開始するため	トランスフェリンレセプターならびに抗体によるカプシド認識の分子機構の解明に代えて、B型肝炎ウイルス抗ウイルス剤のDDS分子機構の解明を追加	平成26年4月

V. エネルギー変換の界面科学(平成 25 年 4 月変更)

変更する事項	変更理由	対応	変更時期
(2-1) stat-CPMD の高並列化に関する研究の追加	二次電池研究の高まりに対応するため	事項を追加する	平成 25 年 4 月
(3-2)リチウムイオン二次電池に関する研究の追加	二次電池研究の高まりに対応するため	事項を追加する	平成 25 年 4 月
(2-3)リチウム空気電池に関する研究の追加	次世代二次電池研究の高まりに対応するため	事項を追加する	平成 25 年 4 月

VI. 水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性

変更無し

VII. 金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発

変更無し

VIII. 計算科学技術推進体制の構築

変更無し

<参考>

・事業開始当初の研究開発目標

I. 相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明(平成 25 年 4 月変更)

変更無し

II. 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開に関する研究(平成 26 年 4 月変更)

変更無し

III. 密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現(平成 26 年 4 月変更)

変更無し

IV. 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開(平成 25 年 4 月変更)

変更無し

V. エネルギー変換の界面科学(平成 25 年 4 月変更)

当初、燃料電池研究が特に注目されており燃料電池の基礎過程のシミュレーションをターゲットとする研究目標を掲げ計画を立てた。ところが、二次電池に対する注目度が高まり、企業では基礎研究を除いて二次電池に研究をシフトする事態が起こった。燃料電池も二次電池も電気化学界面という重要な課題を共有しており、用いるアプリにも共通性があるため、目標・計画に二次電池を追加することにより課題遂行をより広い視点から達成することができると判断された。そこで平成 25 年度初めから目標・計画の変更を行った。

VI. 水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性

変更無し

VII. 金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発

変更無し

VIII. 計算科学技術推進体制の構築

変更無し

・事業開始当初の研究開発計画

I. 相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明

変更無し

II. 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開に関する研究

変更無し

III. 密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現

変更無し

IV. 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開(平成 25 年 4 月変更)

研究開発項目及び小項目	平成 23 年度	平成 24 年度	平成 25 年度	平成 26 年度	平成 27 年度
(4) 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開					
(4-1) 小児マヒウイルスカプシドの分子科学	MODYLAS の京への最適化	ウイルスの安定性の分子機構	感染初期過程の分子機構 CD155	環境安定性	カプシド構造変化 CD155 結合阻害剤の分子設計
(4-2) インフルエンザウイルス阻害剤の分子設計	FMO 高速化機能拡張	水和状態での計算法	活性化化合物シード化合物	数十個の高活性化化合物	数個の候補化合物

V. エネルギー変換の界面科学(平成 25 年 4 月変更)

当初の目標は、「電気化学環境下での現実的な数万並列第一原理分子動力学計算をはじめとする総合的シミュレーションを実現する。その計算結果と精密実験との比較を詳細に行うことにより、幅広い利用に耐えるシミュレーションとしての信頼性を確立する。また、電子状態計算の高度化を達成することにより新規材料として候補に挙げられている例えば遷移金属酸化物電極や炭化水素系電解質膜などの計算を可能にし、実験家との協力体制の下で機能性の理論予測等を行う。これらを通じて燃料電池機能に関する理論体系を確立し、実効的な応用を図る。」となっており、それを実現させるために STATE の並列化とそれを用いたシミュレーションを計画していた。

これに代わって二次電池に関する研究に軸足を少しシフトし、電極探索や膜に関する研究をトーンダウンさせた。これによって界面での電気化学過程に関する研究に焦点を当てた研究計画となった。具体的には stat-CPMD の並列化、それを用いたリチウムイオン二次電池の界面のシミュレーション、さらに次世代リチウム空気電池の計算予測が研究計画に追加された。

なお、事業開発時の線表は以下のとおりである。

研究開発項目及び小項目	平成 23 年度	平成 24 年度	平成 25 年度	平成 26 年度	平成 27 年度
(VI)燃料電池の基礎過程					
(VI-1)並列化アプリ作成		STATE 並列化	レプリカ並列	拡張アンサンブル	→
(VI-2)電位差印加手法		手法開発	→		
(VI-3)構造と反応		構造と負極反応		正極反応	→

VI. 水素・メタンハイドレート生成、融解機構と熱力学的安定性

変更無し

VII. 金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発

変更無し

VIII. 計算科学技術推進体制の構築

変更無し

・中間評価時の研究開発目標

I. 関連の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明

変更無し

II. 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開に関する研究

変更無し

Ⅲ. 密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現

変更無し

Ⅳ. 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開

変更無し

Ⅴ. エネルギー変換の界面科学

変更無し

Ⅵ. 水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性

変更無し

Ⅶ. 金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発

変更無し

Ⅷ. 計算科学技術推進体制の構築

変更無し

・中間評価時の研究開発計画

Ⅰ. 関連の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明

変更無し

Ⅱ. 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開に関する研究

研究開発項目及び小項目	平成 23 年度	平成 24 年度	平成 25 年度	平成 26 年度	平成 27 年度
(Ⅲ) 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開に関する研究					
(Ⅲ-1) 高精度電子状態計算による分子の微細量子構造予測に関する研究		MP2-F12 法の高度化	高次電子相関と相対論の実装	実証試験	→

III. 密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現(平成26年4月変更)

研究開発項目及び小項目	平成23年度	平成24年度	平成25年度	平成26年度	平成27年度
III 密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究					
III-1 RSDFT コードの高速化と高度化	京での高速化と高機能化				輸送コードとの統合
III-2 RSDFT コードによる科学計算		Si ナノワイヤー、Si/Ge コアシェル・ナノワイヤー、グラフェン、シリセン、SiCの電子機能予測		デバイス丸ごと性能シミュレーションの試作	
III-3 RSPACE コードの高速化と科学計算		京での高速化と高機能化		SiC、グラフェンの電子機能予測	
III-4 CONQUEST コードの高速化と科学計算	京での高速化と高機能化		エピ成長時ハットクラスターの成因解明、Si/Ge コアシェルワイヤーの電子機能予測		
III-5 RS-CPMD コードの高速化と科学計算		京での高速化と高機能化			ナノ構造体の成因解明と電子機能予測

IV. 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開

研究開発項目及び小項目	平成23年度	平成24年度	平成25年度	平成26年度	平成27年度
(4) 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開					
(4-1) 小児マヒウイルスカプシドの分子科学	MODYLASの京への最適化	ウイルスの安定性の分子機構	環境安定性		
		感染初期過程の分子機構 CD155		カプシド構造変化 CD155 結合阻害剤の分子設計	
			感染初期過程 免疫	トランスフェリン 抗体による認識	
(4-2) インフルエンザウィルス阻害剤の分子設計	FMO 高速化 機能拡張	水和状態での計算法	活性化化合物 シード化合物	数十個の高活性化化合物	数個の候補化合物

V. エネルギー変換の界面科学

変更無し

VI. 水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性

変更無し

VII. 金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発

変更無し

VIII. 計算科学技術推進体制の構築

変更無し

③目標達成状況(平成 28 年 2 月 1 日時点)

I. 相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明

研究開発項目	達成状況
<p>(1) 電子相関の強い現実物質の新機構解明と制御法開拓に関する研究1 高温超伝導機構解明や制御法の開拓に関する研究</p>	<p>◎大幅に達成 鉄系超伝導体の第一原理有効模型を用いて、実験相図の再現に成功し、これをもとに電荷ゆらぎが超伝導を引き起こす機構であることを解明。 銅酸化物の電子構造(ギャップ構造)を超伝導相と常伝導相で解明した。超伝導と常伝導で定説と異なるギャップ構造を発見し、高い超伝導転移温度を生み出す隠れたフェルミオンの存在を発見。 鉄系超伝導体と銅酸化物に共通する双安定構造による超伝導機構を提唱 銅酸化物界面を含む界面・薄膜の実験での超伝導特性がバルクより優れている原因を理論的に解明し、優位性の起源が相分離による不均一性の回避にあることを発見し、今後の超伝導設計指針を提供。 以上、高温超伝導機構、その普遍性を明らかにし、高特性超伝導を得る指針を示して、高温超伝導研究を大きく前進させた。 強相関電子系を第一原理的に解明する方法論を確立し、計算科学的に強相関電子系の難問に答える道筋を用意した。</p>
<p>(2) 電子相関の強い現実物質の新機構解明と制御法開拓に関する研究2 新量子相発見(予言)や機構解明に関する研究</p>	<p>◎大幅に達成 量子スピン液体のプロトタイプが簡単な理論模型で実現できること、定性的に異なる模型で共通して普遍的にスピン液体が実現することを示した。 可動で制御しやすくトポロジカルに保護され金属となる例を界面(磁壁)で初めて予言し、実験で実証された。トポロジカル相の新たな機能の発見と概念の革新で応用の可能性を広げた。 以上、複数の新量子相や今まで知られていなかった新機能を発見した。</p>
<p>(3) 強相関電子系の励起ダイナミックスの研究</p>	<p>○着実に達成 本来効率を下げると思われていた散逸によって、逆説的に太陽電池を高効率化できる原理が存在することを、カーボンナノチューブを例にとり、フェムト秒からナノ秒以上の6桁以上にわたる時間発展を追うことで実証した。ダイナミックスの量子から古典への遷移を数値的にも立証。 今まで解析手法のなかった非占有部分の運動量分解した電子励起スペクトルに関する情報を、ポンプ・プローブによる時間分解光電子分光で得る方法を、実際のポンプ・プローブ実験モデルを解き、提唱した。常識と異なり、速く緩和する励起が平衡での準粒子励起に相当し、これを見つける方法であることを発見</p>

	<p>した。</p> <p>J-PARC や放射光施設での実験と連携を目指して、高温超伝導体の新しい励起ダイナミクス構造を予測し、検証を提案。ポンプ光で誘起される一次元強相関電子系の状態変化や光学伝導度の時間変化の特徴を解明し、実験の説明に成功。</p> <p>一次元銅酸化物モット絶縁体の光励起ギャップ内構造の起源解明や、第三高調波発生の構造を予測。</p> <p>以上、(1)強い非平衡状態に置くことで平衡状態の物性を解明するための新たな実験手法とその解析法の理論を構築した。</p> <p>(2)散逸がエネルギー変換の効率化に寄与する機構の解明で太陽電池探索の新しい方向性を提案したことで非平衡系を計算科学的に追究する新たな道筋を開拓した。</p> <p>(3)大型実験施設の実験解析を進めた。</p>
(4) 量子モンテカルロ法による新しい量子相・量子臨界現象に関する研究	<p>○着実に達成。</p> <p>多くの新奇量子相において重要な役割を演じる分数励起が引き起こす量子相転移として典型的な脱閉じ込め転移の様相、特に転移の次数、臨界指数、隠れた対称性などを前人未踏のサイズの計算により明らかにした。</p>
(5) スピン軌道相互作用系の解明	<p>◎大幅に達成</p> <p>量子スピン液体の典型例であるキタエフスピン液体の候補物質がなぜスピン液体にならずに磁気秩序が生じるかを第一原理的に解明。結果が3通りの異なる数値手法で一致したことで信頼度を確認。これをもとにスピン液体への近さの特徴を実験的に捉える方法を提案。さらにスピン液体実現の指針を提唱。</p>

II. 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開に関する研究

研究開発項目	達成状況
(1) 高精度電子状態計算による分子の微細量子構造予測に関する研究	<p>◎大幅に達成</p> <p>完全基底関数極限に近い結果を与える F12 電子状態理論を、分子求積法を用いることにより高効率な超並列実装を行い、京コンピュータによる世界最大規模のポストハートリー・フォックレベルの計算を可能とした。無触媒で合成が可能なルイス塩基-フラレン複合体に適用し、有機電子材料として有望な物質候補を幾つか発見した。更に、分散力やイオン化ポテンシャル、相対論効果を含んだ高精度 F12 理論への拡張を行い、これまで経験的な計算で示唆されていた分散相互作用による物質の形成機構を高精度量子化学計算で数値的に示した。</p> <p>さらに、高次電子相関手法の整備の一環として、これまで符号問題が顕著で取り扱いが困難であった強相関系や一般的な励起状態のための手法開発を行った。エネルギー依存する有</p>

	効ハミルトニアン ¹ の定式化を用いて、一般的な励起状態が厳密解に収束する全く新しいモデル空間量子モンテカルロ法の開発に成功した。研究機関の後半では、これを用いた未知の励起状態探索研究を推進した。
(2) 光合成酸素発生中心の構造とスピン状態に関する研究	○着実に達成 柳井グループが「京」を用いない密度行列くりこみ群法を用いて光合成酸素発生中心であるマンガングラスタの量子多体計算に成功した。これを受けて「京」を用いた複数の理論研究を行った。フラグメント分子軌道計算では、リガンドタンパク質から活性中心への電子移動量とその部位が特定され、定量的な議論に必要なリガンドの領域も明らかになった。活性中心のみであるがモデル空間量子モンテカルロ法を用いたスピン状態も計算で得られた。又、これまで行われてきたスピン対称性を壊した密度汎関数計算に代わって、スピン射影を施した射影ハートリー・フォック(PHF)法による構造最適化に成功し、スピン混入による顕著な構造変化が存在することを見出した。更に、ENDOR スペクトルによる超微細構造定数の計算を PHF 法により実行し、定量的に正しく実験結果を再現する事を示した。本研究は、人工光合成系の開発にも繋がる成果であり、今後の関連課題と照らしあわせても着実な達成が見られたと言える。

Ⅲ. 密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現

研究開発項目	達成状況
(2) RSDFT コードの高速化・高度化	◎大幅に達成 「京」全ノード(82,944 ノード)を使用した、10 万原子超の Si ナノワイヤモデルに対するベンチマークにおいて実行効率 51.7%を達成。 SCF 計算、原子構造最適化、バンド計算などの基本的な機能に、バンドアンフォールディング計算、孤立系境界条件計算などの追加機能を含めたバージョンを github 上で公開 (https://github.com/j-iwata/RSDFT)。MateriApps にも登録済 (http://ma.cms-initiative.jp/ja/listapps/rsdft/rsdft)。
(3) RS-CPMDコードの開発と高速化・高度化	○着実に達成。 RS-CPMD(Real-Space Car-Parrinello Molecular Dynamics)コードは、「京」1,024 ノードを用いた 1664 原子からなる有機溶媒系の CPMD 計算の 1 タイムステップが 3.23 秒で終了するまでに高度化することができた。
(4) RSPACE コードの高速化・高	○着実に達成

度化とSiC-MOS界面でのキャリア伝導計算	RSPACEコードを「京」用に改良し、SiC-MOS界面のキャリア伝導特性を調べた。計算結果を、SiCパワーデバイス開発研究の方向性を決めるなど、実験グループとの議論に活用している。
(5) CONQUESTコードの高速化と科学計算	○着実に達成 並列化効率向上はほぼ目標通りに達成された。「京」を全ノード用いても十分な効率が得られる並列化効率が得られ、数百万原子系に対する第一原理計算も応用計算を実現するのに十分な速さ(1ステップ5分程度)で計算可能となっている。応用計算に関しては、Ge ナノ構造ハット(小屋型)クラスターの成長における重要な過程を超大規模第一原理計算により明らかにした。こちらは当初予定したよりも時間がかかったが、目標通りに達成された。GeとSiによるコアシェル・ナノワイヤの構造解明と電子機能予測に関しては、いくつかの構造モデルに対する最適化構造計算と電子状態計算を実現したが、まだ研究は続いている。
(6) 光励起電子機能の解明・予測に関する研究	○着実に達成 孤立分子系から3次元周期系、更に表面・界面系に至るまで、種々のナノ構造体における光励起電子ダイナミクスを記述する超並列大規模計算法(GCEED及びARTED)を独自開発した。電子・電磁場ダイナミクスをカップルさせて実在系の光励起電子ダイナミクスを扱うことができるプログラムは殆ど存在せず、世界に先駆けて新奇光・電子機能デバイスのメカニズム提案と理論設計を進めることが期待できる。

IV. 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開

研究開発項目	達成状況
(4-1) 小児マヒウイルスカプシドの分子科学に関する研究	◎大幅に達成。ウイルスカプシドの構造安定性の分子機構を解明し、さらに感染初期過程であるレセプターCD155との引力相互作用を自由エネルギーレベルで明らかにした。さらには、新規に設定したB型肝炎ウイルスについても、RNAを含む系の準備が順調に進んでおり、AMEDでの共同研究、ポスト「京」における重点課題①での研究が円滑にスタートしつつある。
(4-2) インフルエンザウイルス阻害剤の分子設計に関する研究	○着実に達成。新規候補化合物の提案までには至っていないが、化合物との相互作用の全電子計算を可能とし、方法論的には十分目標を達成した。

V. エネルギー変換の界面科学

研究開発項目	達成状況
(1) 電気化学環境下での計算基盤構築に関する研究	○着実に達成。電極界面に電位差を印加する方法(ESM)とそれを制御する方法(ポテンショスタット)に関しては世界に先んじて開発することができ、現在応用計算が進んでいる。反応自由エネルギー計算の並列化が進み計算の効率化に大きく貢献し

	た。
(2)第一原理 MD 高度化に関する研究	△おおむね達成。stat-CPMD, STATE の並列化は着実に達成させた。stat-CPMD を用いた大規模計算を果たしたが、STATE はサイズの増加と共に数値的不安定化するためサイズを縮小しての応用計算となった。
(3)電気化学界面への適用	◎大幅に達成。stat-CPMDを用いたりチウムイオン二次電池の研究が著しく進み、反応機構や膜形成機構に関して想定を上回る成果を創出することができた。

VI. 水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性

研究開発項目	達成状況
(1) エネルギー変換 水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性に関する研究	○着実に達成。水素ハイドレートに関する統計力学的な理論を完成させ、その相図を描くことに成功した。生成過程については、水素の代用としてテトラヒドロフランやエチレンオキドをゲストとした大規模計算を実行しており、それらについての論文を執筆、投稿中である。メタンハイドレートの分解については、主に MODYLAS パッケージを用いて、従来にない大規模な計算を行い、水中でのメタンの泡の生成が融解速度に大きな影響を与えるという機構を解明した。さらに、塩やアルコールなどの溶質が分解機構に与える効果を明らかにした。

VII. 金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発

研究開発項目	達成状況
(VII) 金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発	○着実に達成 平成 24 年 4 月に新設された重点課題であるが、課題遂行メンバーの着実な努力により、鉄鋼材料中の異相界面(鉄/析出物界面構造の整合・非整合遷移)、転位(鉄中のらせん転位芯と添加元素との相互作用)、粒界(鉄粒界における不純物の偏析挙動)の構造や諸現象を大規模第一原理計算により高精度に解明することができた。また、マイクロ情報をフェーズフィールド法でメゾ・マクロに連結する手法開発についても初期段階の定式化を行うことができた。
(VII-1) 析出物と母相金属の異相界面の大規模第一原理計算	◎大幅に達成 Fe/TiC の部分整合界面について、金属系では未曾有の大規模第一原理計算を、わが国独自の OpenMX コードで達成し、整合界面と比較することで整合→部分整合の遷移の臨界サイズを高精度に見積もることに成功した。初めて得られた部分整合界面の水素の捕獲について、新規の情報が得られた。また、局所エネルギー・局所応力法(QMAS コード)により、異相界面の結

	合や misfit 応力の起源について掘り下げた情報が得られた。
(VII-2) 転位の構造や転位と固溶原子との相互作用の大規模第一原理計算	◎大幅に達成 Fe 中のらせん転位芯と添加元素の相互作用の大規模第一原理計算 (OpenMX コード) を systematic に行い、周期表の一連の元素で相互作用が特徴のある変化を示すことを見出した。材料設計上、極めて有益な成果である。
(VII-3) 添加元素の偏析した粒界の構造や力学挙動の大規模第一原理計算	△おおむね達成 Fe 中の粒界での一連の添加元素の偏析について、局所エネルギー・局所応力法 (QMAS コード) を適用し、偏析機構と元素依存性について、従来にない掘り下げた説明に成功した。
(VII-4) フェーズフィールド法に繋げる手法の検討	△おおむね達成 第一原理解析からのミクロ情報をメゾ・マクロのフェーズフィールド法に連結する手法開発について、第一原理から基礎方程式の定式化に成功した。今後の発展に繋がる成果である。

VIII. 計算科学技術推進体制の構築

研究開発項目	達成状況
VIII. 計算科学技術推進体制の構築	
(VIII-1) 計算資源の効率的マネジメント	○着実に達成 3 分野の研究所のスパコン計算資源 20% を本 Pj 課題へ供出し、「京」の計算資源は「京」でなければ実施できない計算に集中可能な研究体制を取った。物性研に 40 ノードの PC クラスタを設置し、Pj メンバーはテスト計算可能とした。また、講習会や若手技術合宿等の際に利用した。CMSI 神戸拠点に「京」利用支援として、プレポストサーバーを設置し「京」利用者に提供した。
(VIII-2) 「京」・HPCI 利用の研究支援	◎大幅に達成 AICS 内に CMSI 分室を設置して高度化支援体制を強化し、「京」の一般や産業利用等の採択に 36 件の課題を導いた。
(VIII-3) 人材育成	◎大幅に達成 計算科学技術特論の配信講義 A~C は講義後のアクセス数が 3 万件を超えた。特任教員が各大学 (東大、名大、阪大、東北大) で、超並列計算に関連した新たな講義を立ち上げた。
(VIII-4) 人的ネットワークの形成	◎大幅に達成 物性、分子、材料の分野を超えた計算物質科学イニシアティブ (CMSI) を結成し、分野融合体制で本プロジェクトに取り組んだ。AICS や戦略プログラム分野 1,4,5 との共催イベントを複数実施。また、RIST とも共催でのアプリ講習会や普及活動を実施した。
(VIII-5) 研究成果の普及	○着実に達成 アプリ普及促進のため物質科学計算アプリのポータルサイトを

	<p>構築し継続的な運営管理を実施。アプリ登録本数 169 件、ユーザー1 万人以上のサイトに育った。開発アプリを PC 動作可能とした MateriApps LIVE!の利用者は着実に増えているが、3 研究所、「京」や情報基盤センター群スパコンでの利用は進んでおらず、今後も努力を続ける。</p>
<p>(Ⅷ-6)分野を越えた取り組みの推進</p>	<p>◎大幅に達成 各種イベントの実施が、元素戦略プロジェクトへの CMSI メンバ一の参画、大規模実験施設との勉強会、電池関連コンソーシアムの設置、多くの企業との共同研究の開始、大型国家 Pj への実験家と共同提案採択等、ネットワークが拡大した。</p>

④中間評価等指摘事項への対応

I. 相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明

中間評価指摘事項	対応
<p>課題 I</p> <p>今後は、本分野の源流として、他の研究開発課題への波及にも取り組むことを期待したい。</p>	<p>平成 27 年 2 月時の対応</p> <p>[波及効果の大きな手法開発とコード公開]</p> <p>1. 電子格子相互作用を扱えるように低エネルギーソルバー(変分モンテカルロ法コード)を拡張し、低エネルギー有効モデルを導出するダウンフォールディングコードを有田グループの協力により導入した。これらによって、電子と格子を含めて第一原理的に強相関関係を扱う手法が確立し、多くの課題に対応して波及効果が期待できる。実際フォノンが重要な役割を果たす強相関電子系の現象への適用を始めた。</p> <p>2. テンソルネットワークの手法開発のために国際会議や分野5と合同の検討会を行なうとともにコードの並列化の検討を開始した。この高精度手法の整備は量子化学、素粒子・原子核分野への波及効果を持つと期待できる。</p> <p>3. アプリケーションのソースコードの公開を進めた。ALPS は MateriAps および http://alps.comp-phys.org/mediawiki/index.php/Main_Page などで MVMC は GitHub 上で公開されている。MVMC については拡張版の MateriAps での公開も今年度末をめどに進めている。テンソルネットワークコードもコードの整備に応じて公開していく。</p> <p>[他分野との連携]</p> <p>4. 分子科学との連携、エネルギー課題との連携を目的として、夏の学校を開催し、若手の交流を進めた。</p> <p>5. 量子多体計算の手法開発は分野を超える波及効果を持つ。分子科学、素粒子原子核分野と合同で 2 月に国際ワークショップを主催し、手法を学際的に議論する。招待講演者 23 名(うち外国人 14 名)とともに、我々のプロジェクトの成果を発信して、議論を深める。</p> <p>[大型実験設備を含む実験分野との連携]</p> <p>6. 時間分解光電子分光の実験技術が急速に発展しているが、顕著に非平衡な現象を扱う理論が必要とされている。この背景のもとにポンプ・プローブ分光の大規模数値計算と理論構築により、今後の実験研究による検証を提唱した。これと関連して高効率太陽電池のための励起子の長寿命化のための原理構築と計算による実証をカーボンナノチューブを例に進めた。今後この設計指針をもとにする実験への刺激と、他の研究開発課題であるエネルギー課題への貢献・波及効果が期待できる。</p> <p>7. 第一原理強相関手法 (MACE) にスピン軌道相互作用を扱えるよう拡張を行なった。適用範囲の拡大によりより広範な需要に応えられるようになった。新たなトポロジカル物質と新たな機能性を発見する目的の研究が進んだ。磁壁がトポロジカルなエッジ状態を生み出す可</p>

	<p>能性が明らかとなり、この提案をもとにした実験検証が進んでいる。強相関トポロジカル物質の第一原理計算を可能にし、実行してイリジウム化合物に適用した。トポロジカル相(量子スピン液体相)実現へ向けた実験結果の謎の解明に貢献した。</p> <p>8. 超伝導およびトポロジカル物質に関する実験家とのフォーラムを立ち上げる作業を始めた。産業界との情報交換も検討している。</p> <p>9. J-PARC や放射光施設で行われた電子ドープ型銅酸化物高温超伝導体の磁気・電荷励起ダイナミクス実験に理論からのサポートを行い、実験研究者との共同研究を実施。</p> <p>[情報発信]</p> <p>10. 高温超伝導機構を解明に成功(鉄系超伝導体)し、論文が出版されたので、プレスリリースした(2104年12月末)。新聞等で取り上げられ、「京算百景」での特集企画も進行中(2014年発行済み)。さらに超伝導の高温化のための要素を抽出することで、実験研究との連携や検証で波及効果が期待できる。</p> <p>11. 強相関電子系の第一原理計算アルゴリズムについて雑誌「固体物理」での解説連載を継続した。</p> <p>平成27年2月以降の進展(平成27年2月のフォローアップ状況の番号と対応)</p> <p>1. 電子格子相互作用と強い電子相関がともに重要である場合について、MACEを用いて第一原理有効モデルを導出する方法を確立し、鉄系超伝導体、銅酸化物について適用を進めた。これにより導出された低エネルギー有効モデルを解き、両者の絡み合いと超伝導への影響の解析が進んでいる。</p> <p>2. 行列の特異値分解に対して乱数を利用したアルゴリズムを新たに導入することによって、テンソルネットワーク法のコードの並列化と高効率化が進み、これの実装を行い、性能を検証した。(計算数理論グループが協力)</p> <p>3. MVMC は理研ミニアプリとして公開 並列計算機に対応した数値厳密対角化法による有効モデルソルバーパッケージ「HΦ」バージョン0.1.1を公開(2015/10/28) 並列化に対応した新しいアルゴリズムに基づく量子モンテカルロ法プログラム(DSQSS)をgithub上で公開した。</p> <p>4. エネルギー課題での連携活動を契機として太陽電池の高効率化に関する論文に結実(“Exciton Lifetime Paradoxically Enhanced by Dissipation and Decoherence: Toward Efficient Energy Conversion of a Solar Cell” Phys. Rev. Lett. 115 (2015) 197701、プレスリリースも行った)。</p> <p>5. 国際ワークショップを2つ開催(2015年2月および2016年1月)。成功裡に終了。実験家との交流が進み、本プロジェクトの成果の発</p>
--	---

	<p>信を行なった。特に界面・薄膜に関わる今後の研究展望の検討が深まった。これを刺激とする手法開発の研究が加速した。</p> <p>平成 28 年度6月には、国内若手研究者の知識レベルの底上げを狙って、この手法に関して国際的に知られる専門家を多く招き、3週間にわたってスクールを開催する予定で、そのための準備を進めている。</p> <p>6. 太陽電池高効率化の指針に関する論文出版(上記項目 4)。時間スケール 6 桁以上の時間発展を解く量子マスター方程式法を開発実装。さらに電荷分離の包括プロセスの解析が進んでいる。</p> <p>7. 磁場などで制御でき、初の可動なトポロジカルな界面である磁壁を初めて予言したが、日米の実験グループによる実証で存在が確認された。さらなる直接検証やトポロジカルな特性を解明し検証を提案。</p> <p>キタエフ型の量子スピン液体を実現するために、現実物質のデータの解析手法を提唱した。</p> <p>8. 超伝導およびトポロジカル物質に関する実験家とのフォーラムを立ち上げ、2015 年 3 月に課題抽出のための研究会を行なった。項目 7 の成果も含め共同研究や連携が進んでいる。また 2016 年 1 月に超低速ミュオン顕微鏡に関する新学術領域研究との共同開催で国際ワークショップを開催、ミュオンに限らず多数の実験研究者との連携を展開。例えば界面高温超伝導に関して実験結果を解明する機構を提唱し、バルクに見られない界面の特異性と優位性を解明し、今後の高温超伝導設計に貢献。産業界とのフォーラム「新機能デバイス・高性能材料のための産官学連携フォーラム」の準備がほぼ終了し、立ち上げへ。</p> <p>9. 電子ドーブ型銅酸化物高温超伝導体の新しい電荷励起構造を予測し、放射光施設での共鳴非弾性 X 線散乱実験による検証を提案。また、鉄系高温超伝導体の軌道軌道励起を区別する非弾性 X 線散乱実験を提案。</p> <p>10. 鉄系高温超伝導体の機構解明については「京算百景」に特集記事掲載。また雑誌「固体物理」に解説記事掲載へ(2016 年 1 月号)。この成果に関係する国際会議招待講演は 2015 年に 5 件(シンガポール、パリ(フランス)、トリエステ(イタリア)、バートゲッギング(ドイツ)、ドレスデン(ドイツ))。口頭講演 1 件(グルノーブル(フランス))</p> <p>日本物理学会誌にトポロジカル稼働磁壁を含むトポロジカル相の解説を掲載予定(2016 年 3 月)表紙図に掲載予定。</p>
--	--

II. 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開に関する研究

中間評価指摘事項	対応
<p>課題 II</p> <p>分子設計という観点では、フラールールイス塩基アダクトに関して、ルイス塩基と原子種を換えた網羅的な研究を行い、生成効率に優れたデバイス材料の予測を行う予定である。第4部会との連携も重要である。更に、植物を模した人工光合成系やルテニウム触媒系での酸素発生の機構を密度行列繰り込み群とモデル空間量子モンテカルロ法を用いて研究を行いたいと考えている。それに伴う実験グループとの連携も進めたい。</p>	<p>平成 27 年 2 月時の対応</p> <p>フラールールイス塩基アダクトに関しては、複数のヘテロ環状カルベンの付加に対するサイト依存性等の興味深い成果が出ている。更に、東北大と連携して C60 とカーボンナノチューブからなる分子ベアリングの高精度 F12 計算を行い、実験から得られる回転障壁との比較を行っている。「京」の追加配分枠を用いた光システム II の課題については、フラグメント分子軌道法とモデル空間量子モンテカルロ法の両面からの研究が進んでおり、リガンド効果や超微細構造定数の結果が得られている。</p> <p>平成 27 年 2 月以降の対応</p> <p>フラールールイス塩基アダクトに関しては、有機電子材料の候補物質が見つかり、実験研究者との共同研究を進めている。分子ベアリングの高精度 F12 では、計算実験研究者と連携して NMR の温度依存性と回転運動のメカニズムを解明した。光システム II の課題については、新たに開発した PHF 法を用いて、正確なスピン状態での構造最適化と ENDOR スペクトル解析を行い、実験結果を定量的に再現した。</p>

III. 密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現

中間評価指摘事項	対応
<p>課題 III</p> <p>今後は、半導体テクノロジー関連の企業活動への情報発信や、企業からの要望引き出しを行い、社会的にインパクトの強い課題遂行を期待したい。</p>	<p>日本のメーカーが優位性を保っている、パワーデバイス材料である広ギャップ半導体(炭化珪素、窒化物)に着目し、絶縁膜形成の機構解明、それに基づく界面構造欠陥と電子機能の相関解明の計算に着手した。また、産業界でのニーズの聞き取りのために、富士通研究所、半導体産業研究所との交流を行った。</p>

IV. 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開

中間評価指摘事項	対応
<p>課題 IV</p> <p>今後は、分野1「予測する生命科学・医療および創薬基盤」との積極的な連携を期待したい。</p>	<p>分野1との連携は、これまで国際会議サテライトミーティングや国内研究会等において共催等一定の連携の下でプロジェクトの推進を行って来ているところであるが、さらに一步踏み込んで、分野1の後継課題ですでに研究・開発が開始されているポスト「京」重点課題①「生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築」のサブ課題B「次世代創薬計算技術の開発」において、本課題をさらに発展させ、「ウイルス標的創薬</p>

	計算技術」の構築により共同で重点課題の解決にあたっている。ソフト開発という側面からも、課題①のターゲットアプリ GENESIS を対象としたコデザインに正式に参加している。
--	--

V. エネルギー変換の界面科学

中間評価指摘事項	対応
<p>課題V</p> <p>今後は、本分野における位置づけを明確にするとともに、エネルギー課題をより俯瞰的に検討し、エネルギー問題へのより強いインパクトを与える取組を期待したい。</p>	<p>化学結合エネルギーと電気エネルギーの変換という広い観点にたつて、研究対象をいくつかの二次電池にも拡張し、それらの電気化学界面で起こる電池過程をシミュレーションから明らかにするという課題設定を行った。電位による電気二重層の形成、酸化・還元雰囲気での化学反応や構造変化、物質輸送といった特徴的な物質科学量を計算し、既存の電池過程の説明だけでなく新型電池の機能予測につなげられるように軌道修正を行った。具体的には新規電解液やリチウム空気電池の計算からその特性に関する非自明な知見を獲得し、実験家に対してフィードバックをかけるようなアピールを行うことができた。</p>

VI. 水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性

中間評価指摘事項	対応
<p>課題VI</p> <p>※各テーマごとの指摘事項を記載</p> <p>今後は、本分野の中における位置づけやエネルギー・資源問題にどのように貢献できるかを明確にして取り組む必要がある。</p>	<p>石油産業におけるハイドレートに関する諸問題に直結するシミュレーションを精力的に行った。メタンハイドレートを採掘する過程において、ハイドレートの分解は海水中で起こる。そのため、塩が分解に及ぼす効果の理解が不可欠である。また、分解を効率的に進めるために、アルコールなどを投入するという提案もされている。我々は、塩ならびにメタノール存在下におけるハイドレート分解の大規模シミュレーションを行い、これらの溶質が分解速度に及ぼす効果を明らかにした。また、メタンハイドレートの生成が、採掘過程、ならびにその後のメタンの輸送過程を妨げるという問題が古くから知られている。石油産業では、この問題の解決のために、速度論的阻害剤と呼ばれるポリマーが用いられている。我々は自由エネルギー計算を行い、速度論的阻害剤の機能に関する従来の機構が誤りであることを示した。我々が見出した新機構により、今後、より高性能な速度論的阻害剤が開発されることが期待される。</p>

VII. 金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発

中間評価指摘事項	対応
<p>今後は、材料科学でのマルチスケール解析への取組を具体化することや、鉄鋼材料の重要性に鑑みて有限温度の磁性への関わりについて取り組むことも期待したい。</p>	<p>以下のように本重点課題および第5部会(CMRI)で検討を進めた。</p> <p>○マルチスケール解析: Ginzburg-Landau 理論で得られる自由エネルギー表式とBCS理論から導かれる第一原理的なエネルギー表式が等価であるように、第一原理計算で用いる全エネルギー表式からフェーズフィールド法の基礎方程式を直接導くことを検討し、FFTを用いた完全に新しい定式化が可能であることを見いだした。このことについて数回の研究会や国内会議、国際会議等で報告し、議論を重ねており、又、液体からの固体の核生成の問題にも適用しつつある。</p> <p>○有限温度の磁性: 連続変位クラスター変分法の考え方を拡張して、合金の内部自由度を超多元素合金の配列の自由度に変換する一般的な考え方を構築した。この考え方は磁気スピンの配向自由度に対しても適用することができ、有限温度の磁性の問題を取り扱うことができる。CMRI研究会で報告し、国際会議や国内学会でも数回発表している。</p>

VIII. 計算科学技術推進体制の構築

中間評価指摘事項	対応
<p>【必要性】 今後さらに、三分野の密接な情報交換を行い、三分野の研究者が合同で推進する重要課題を検討していくことが必要である。</p>	<p>ポスト「京」重点課題(5)のエネルギーの課題と、重点課題(7)の材料デバイスの課題に対し、分野2で取り組んできた分野の連携を保ってそれぞれの提案を行い、採択された。</p>
<p>【有効性】 成果が最終的にどのように国民に還元されるのかといった成果目標の位置付けが分かりにくい面もあり、今後は、専門外の人間にも理解されるような説明の努力が必要である。</p>	<p>分野2で発行しているTORRENTだけでなく、AICSの発行する計算科学の世界、RISTの発行する計算百景、FOCUSの発行する機関誌に投稿し、一般の方にわかりやすい記事を書くよう心がけた。また、平成27年度にTORRENT特集号として「計算・物質・科学」というムック本を制作した。</p>
<p>【有効性】今後、若手研究者のキャリアパスの可能性を広げる努力が一層必要である。</p>	<p>約半数の雇用者がキャリアアップした。平成27年度より、文科省から、「科学技術人材育成コンソーシアム」構築事業の委託を金研を中心に物性研、分子研、阪大教育ナノセンターで開始することとなり、博士人材のキャリアアップを継続して図る。</p>
<p>【効率性】 今後は、実験グループや産業界との</p>	<p>新たにImPACTやSIP、NEDO等の実験プロジェクトとの共同研究がスタートした。また、企業との共同研究もスタート</p>

<p>連携を更に深め、実験グループや産業界から吸い上げたニーズを研究開発課題に取り込むための仕組み作りが必要である。</p>	<p>し、出口に近い方々とのコラボレーションが進んでいる。また、産総研において、課題Ⅴのメンバを中核とした界面化学シミュレーションコンソーシアムを形成し19社の参加が得られた。</p>
<p>【その他】 各課題の成果が統合されて分野としての成果に昇華していく構図が見えにくいことや、各課題が内向き傾向にあることが懸念点である。 各課題で大規模計算が増えて今以上に計算時間が確保しづらくなることが想定される中では、「京」以外の計算機の活用も進めるとともに、分野として戦略目標を達成するという観点で全体を見通し、トップダウンで、課題間連携を重点的取組とすること、課題間の進捗に優先順位を付けて実計算時間を有効利用することなども検討する必要がある。</p>	<p>平成27年度に物性研に「京」の3/10となる3ペタのマシンが導入された。この20%を分野2の研究課題に提供しているので、「京」以外の計算資源は確保されている。研究課題間で意見交換できるよう、CMSI研究会やシンポジウム等を開催、実施している。重点課題Ⅱと重点課題Ⅴが連携して、人工光合成の課題に取り組んでいる。</p>
<p>・最先端の実験活動との連携体制の構築を目指し、元素戦略プロジェクトへの貢献、大型実験施設との合同研究会などが行われている。</p>	<p>プロジェクト連携は上述したが、SPring-8やJ-PARC、KEK-PFとの連携シンポジウムは、具体的な課題を提示してその解決を検討する勉強会に発展している。</p>
<p>・各拠点機関を中心に成果報告会や研究会が精力的に行われている。一方、本分野全体としてイベント開催回数が多すぎるようにも見受けられ、イベント開催の有効性を検証するとともに、開催するイベントの絞り込みも併せて必要である。</p>	<p>予算の削減とともに、開催行事も少なくなる。ただし、平成27年度はポスト「京」プロジェクトが開始されたため、あらたなプロジェクトの行事も実施している。そのため、行事数は以前多くなっている。来年度には、CMSIのイベント等の活動資金は無くなるので、必然的に行事は絞り込まれる。</p>
<p>・他の戦略機関との連携については、分野5「物質と宇宙の起源と構造」と複数回の合同研究会を開催し、特に研究手法に関してのノウハウの交換を図るなど、適切に進められている。</p>	<p>分野5とは常に連携検討会議を開いており、具体的な共同研究にも発展してきている。分野1とは分子動力学計算や量子化学計算でのアプリの相互利用が進んでいる。</p>

⑤研究開発成果(平成 28 年 2 月 1 日時点)

I. 関連の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明

(1)電子相関の強い現実物質の新機構解明と制御法開拓に関する研究1

高温超伝導機構解明や制御法の開拓に関する研究

(要旨)

「強相関電子系の電子構造を第一原理的に解明する」という目的に適した包括的数値計算手法 MACE(Multiscale Abinitio Scheme for Correlated Electrons)を開発、改良、実装し、応用を推進した。この手法から導かれる第一原理有効モデルを解くソルバーを種々開発実装して大規模計算に応用し、強相関電子系の電子構造解明のための汎用手法を提供した。これを用いて「京」を含むスーパーコンピュータでの研究を推進した。次に有効モデルを網羅的にパラメタ探索することによって、現実のパラメタで起きる現象の機構解明が可能になることを利用して、「京」による網羅探索での超伝導機構解明に成功した。これら2つの手法を用い、2種類の高伝導体である銅酸化物と鉄系超伝導体の第一原理的な考察も含めた大規模計算を行なった。この結果、高温超伝導の物理と発現機構について互いに関連するいくつかの新しい発見をし、検証した。この発見をもとに機構解明を大きく前進させ、さらに今後の高機能超伝導素子の機能開拓への指針を得た。

(詳細)

- ・ 4種類の鉄系超伝導体の第一原理有効モデルを初めて導出し、それまでの単純な予想に反し、鉄系超伝導体において電子相関の大きさが相当に大きいことを見いだした。さらに LaAsPO から FeSe にかけて多種の化合物で共有結合性からイオン性へと化合物の性格が遷移することに伴い、系統的に電子相関が 5 割以上増大し、化合物による物性の多様性を生み出していることを定量的に示した[1]。FeSeで電子相関が大きいこと[2]はその後の実験研究などで立証された。

- ・ この第一原理有効モデルを用いてまず4種類の母物質の磁気秩序と秩序モーメントの大きさを、変分モンテカルロ法を用いて第一原理的に求め、実験値をほぼ定量的に再現することを示した[3]。特にこれらの物質群が量子臨界点に近いことが、磁気モーメントが小さい原因であることを示し、実験値が密度汎関数法の予測よりも小さいという通常見られない傾向の謎を解いた。

- ・ 続いて、この物質群は銅酸化物と異なり母物質が絶縁体ではなく金属であるという、実験結果の差異について分析した[4]。まず、母物質は鉄の d 軌道が 6 つ埋められているが、d 軌道が 5 つ埋められている仮想物質では、銅酸化物同様のギャップの大きなモット絶縁体が発現することを示した。これは実験的にもマンガン化合物で検証されている。軌道の絡み合いの大きな鉄化合物では d 軌道が 5 つ埋められている時に、ちょうどハーフフィリングとなる。銅酸化物のときに孤立した dx^2-y^2 軌道がハーフフィリングになることとの共通点を指摘した。さらに現実の鉄系超伝導体物質群は 5 つの d 軌道が埋められたモット絶縁体に少量のキャリアをドーピングしていると見なせることから、銅酸化物との共通点を指摘した。一方鉄系の場合のフント則の効果は銅酸化物との差異を生み出していることについて、先行研究の解析を深めた。

- ・ 続いてキャリアをドーピングして超伝導が生じている系の第一原理有効モデルを多変分モンテカルロ法で解き、ドーピング量の増大に伴って、反強磁性相、不均一相、超伝導相へと移り変わる相図を、LaFeAsOを例にとり定量的に再現した[5](図 1)。さらに実験では不可能な網羅的なパラメタ制御を行なった計算を行ない、ここで再現できた超伝

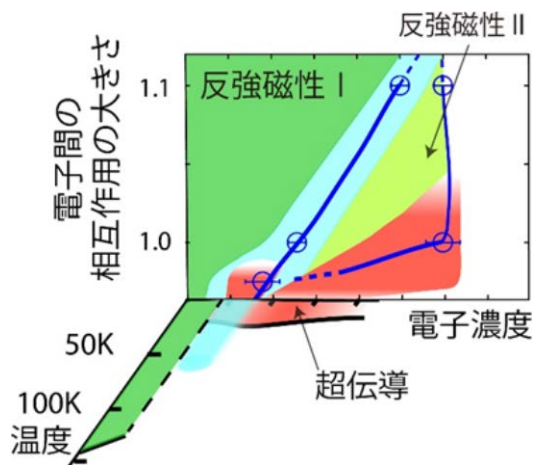


図 1: 鉄系超伝導体で一致する計算・実験相図

導が生じる機構を突き止めた。すなわち超伝導が電子相分離ないし電荷ゆらぎの増大と連動していることをさまざまなパラメタでの一対一対応による証拠で示した。超伝導の定量的な再現は、この超伝導が電子機構によって、電子相関を主因として生じていること、電子格子相互作用の役割が副次的であることを支持した。このことはその後の研究で検証・確認が進みつつある。また超伝導機構に対する磁気ゆらぎの寄与が間接的に過ぎないことを示し、多数の、特に摂動論的な先行研究の限界を指摘した。

- ・ 鉄系超伝導体と並ぶ高温超伝導体である銅酸化物の理論模型についても同様の数値手法を用いて、超伝導が電荷ゆらぎと連動し、相分離域の近傍に生じていることを、相互作用、バンド構造の網羅的なパラメタ制御による一対一対応によって示した[6]。これについても磁気ゆらぎが副次的な役割にとどまることを一対一対応で示した。

- ・ 銅酸化物の電子構造(ギャップおよび励起スペクトル)を超伝導相と常伝導相の両方で解明し、定説と異なり、超伝導と常伝導で励起構造が異なることを発見した[7]。すなわち超伝導相での d 波動的なギャップ構造と異なり、常伝導相で示す擬ギャップは等方 s 波動的な対称性を持つことを示し、さらにその後、実験研究者との共同研究で、ラマン散乱実験との整合性を示した[8]。この s 波動的な擬ギャップは定説を覆す結果である。さらに、まだ発見されていない未知の隠れたフェルミ粒子が存在すると考えないと計算結果が説明できないことを示した。まず、隠れたフェルミオンが従来の準粒子とカップルすることによって、正常状態で生じる擬ギャップと、超伝導相でのギャップがともに生み出されることを示した[9]。次に準粒子が隠れたフェルミ粒子とカップルする現象論を用いて、擬ギャップ相の性質を再現した。さらに超伝導相も解析し、隠れたフェルミ粒子の存在が、超伝導相で驚くべき結果に導くことを予言し、並行して本プロジェクトで行なわれた計算での発見を完全に説明することに成功した。この驚くべき発見は以下のようなものである。銅酸化物理論模型に対するクラスター動的平均場計算によれば、ギャップ関数の虚部がギャップエネルギーより少し高いエネルギーに巨大なピークを持ち、この巨大なピークがクラマースクローニッチ関係を介して、実際のゼロエネルギーの超伝導ギャップの 8 割以上を担っている。すなわち高温超伝導の主因はこの虚部での巨大なピークにある。従ってこのピークの成因を解明することは銅酸化物超伝導の機構解明に直接つながる。一方一体グリーン関数を解析すると、このギャップ関数は異常自己エネルギーの虚部にも同じ原因で同様のピークを作り出す。驚くべきことにこの異常部の寄与は正常部の自己エネルギーの大きな寄与と完全に相殺し、一体グリーン関数だけを見ていると、この高温超伝導の主因は見えなくなる構造があることを発見した。これが数十年間、光電子分光やトンネル分光などの実験手段で、ピークが見逃されてきている原因であることも示した。さらに、準粒子とカップルする隠れたフェルミ粒子が存在するという仮定が、この超伝導の主因であるピークの存在のみならず、一体グリーン関数での完全な相殺もすべて定量的にも説明することを示した。さらに計算結果を説明するために、高温超伝導を引き起こしている主因である隠れたフェルミオンの励起子的な性格を持つ物理的な実体についての仮説を提案した。この驚くべき結果を、どのように実験的に検証するかの検討、また、隠れたフェルミオンが励起子的な性格を持つことの詳細な解析などが進みつつある。銅酸化物高温超伝導の主因の特定という意味で、計り知れない波及効果がある。また隠れたフェルミ粒子の存在は、鉄系超伝導体と銅酸化物に共通して存在する相分離領域と並んで、励起の双安定構造が生む超伝導機構という同一の物理の 2 つの側面であることが明らかになりつつある。

まず、隠れたフェルミオンが従来の準粒子とカップルすることによって、正常状態で生じる擬ギャップと、超伝導相でのギャップがともに生み出されることを示した[9]。次に準粒子が隠れたフェルミ粒子とカップルする現象論を用いて、擬ギャップ相の性質を再現した。さらに超伝導相も解析し、隠れたフェルミ粒子の存在が、超伝導相で驚くべき結果に導くことを予言し、並行して本プロジェクトで行なわれた計算での発見を完全に説明することに成功した。この驚くべき発見は以下のようなものである。銅酸化物理論模型に対するクラスター動的平均場計算によれば、ギャップ関数の虚部がギャップエネルギーより少し高いエネルギーに巨大なピークを持ち、この巨大なピークがクラマースクローニッチ関係を介して、実際のゼロエネルギーの超伝導ギャップの 8 割以上を担っている。すなわち高温超伝導の主因はこの虚部での巨大なピークにある。従ってこのピークの成因を解明することは銅酸化物超伝導の機構解明に直接つながる。一方一体グリーン関数を解析すると、このギャップ関数は異常自己エネルギーの虚部にも同じ原因で同様のピークを作り出す。驚くべきことにこの異常部の寄与は正常部の自己エネルギーの大きな寄与と完全に相殺し、一体グリーン関数だけを見ていると、この高温超伝導の主因は見えなくなる構造があることを発見した。これが数十年間、光電子分光やトンネル分光などの実験手段で、ピークが見逃されてきている原因であることも示した。さらに、準粒子とカップルする隠れたフェルミ粒子が存在するという仮定が、この超伝導の主因であるピークの存在のみならず、一体グリーン関数での完全な相殺もすべて定量的にも説明することを示した。さらに計算結果を説明するために、高温超伝導を引き起こしている主因である隠れたフェルミオンの励起子的な性格を持つ物理的な実体についての仮説を提案した。この驚くべき結果を、どのように実験的に検証するかの検討、また、隠れたフェルミオンが励起子的な性格を持つことの詳細な解析などが進みつつある。銅酸化物高温超伝導の主因の特定という意味で、計り知れない波及効果がある。また隠れたフェルミ粒子の存在は、鉄系超伝導体と銅酸化物に共通して存在する相分離領域と並んで、励起の双安定構造が生む超伝導機構という同一の物理の 2 つの側面であることが明らかになりつつある。

- ・ 高温超伝導体はしばしば薄膜や界面において、バルク以上の優れた特性を示す。特に過剰ドーピングして超

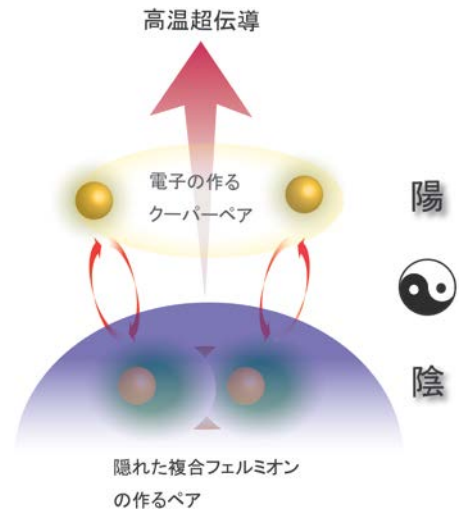


図 2: 複合フェルミオンが引き起こす高温超伝導機構の模式図

伝導でない金属と反強磁性モット絶縁体を貼り合わせた界面で、金属相のドーピング濃度に関係なく、界面のみがバルクでの最高転移温度にほぼ等しい超伝導を示し続けるという最近の実験結果は、大きな驚きであり、誰も説明に成功していない。本プロジェクトでは界面の理論模型の大規模数値計算によって、実際に界面の原子層1層のみでバルクでの最大の超伝導が安定に実現し続けることを定量的に示した。さらにこの驚くべき結果が超伝導機構を生み出す相分離によって引き起こされることを発見し、界面がバルクでは不可避な不均一性を回避する優れた自己組織化機構を持つことを示した。今後、この知見が高特性を持つ高温超伝導体およびデバイスの開発設計への重要な指針になると期待される。

以上、高温超伝導機構とその普遍性を明らかにし、高特性超伝導を得る指針を示して、高温超伝導研究を大きく前進させた。

強相関電子系を第一原理的に解明する方法論 MACE を確立し、計算科学的に強相関電子系の難問に答える道筋を用意、前進させて、汎用手法を提供したことは、以上の成果を得るにあたって不可欠な前提であり、方法論開発、実装も大きな成果である[10]。

(2)電子相関の強い現実物質の新機構解明と制御法開拓に関する研究2

新量子相発見(予言)や機構解明に関する研究

(要旨)

量子スピン液体のプロトタイプが簡単な理論模型で実現できること、定性的に異なる模型で共通して普遍的にスピン液体が実現することを示した。

界面(磁壁)が可動で制御しやすくトポロジカルに保護された金属となる例をイリジウム酸化物絶縁体で初めて予言した。これはその後の実験で実証された。トポロジカル相の新たな機能の発見により、応用の可能性を開いた。

これらを含め、複数の新量子相や今まで知られていなかった新機能を発見した。

(詳細)

・量子スピン液体は何十年来に亘って追求されている凝縮系物理学の難問であるが、いまだその機構や本質はよく解明されていない。この課題に対して次近接相互作用を持つ三角格子、および正方格子という2次元での比較的簡単な全く異なる格子構造の理論模型(ハイゼンベルク模型)を、今までにない大規模なサイズの網羅計算により解析し、両者があるパラメタ領域でともによく似たスピン液体状態を持つことを発見した[11,12]。特にこのスピン液体状態がギャップを持たず、励起スペクトルも特異な低エネルギー励起を持つこと、異なる磁気秩序状態に挟まれた領域に生まれる、という共通点と定量的特徴を明らかにした。

・パイロクロア型の格子構造を持つイリジウム酸化物で、磁気秩序に伴って絶縁体になっているはずにもかかわらず、絶縁性があまりよくない(悪い絶縁体と称する)奇妙な伝導性が知られていた。この物質群はオールイン・オールアウト型と呼ばれる反強磁性秩序を示す。この磁性状態と、磁性に伴う2つの対称性の破れから生じるドメインを隔てる、ドメイン磁壁(図3)を解析した。その結果、この物質群はバルクも表面も普通の絶縁体でありながら、ドメイン磁壁だけがトポロジカルに保護された金属状態になることを予言した

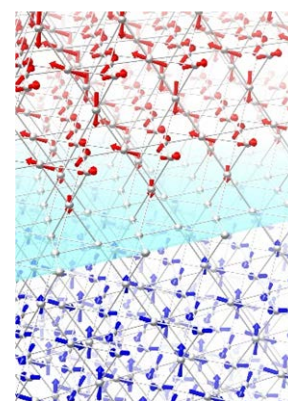


図3：トポロジカル金属となるイリジウム酸化物の磁壁

[13]。バルクが絶縁体であるにもかかわらず、表面だけが金属になるトポロジカル絶縁体が最近の大きな注目を浴び、金属的な表面のデバイスへの応用可能性が盛んに検討されている。しかしこの従来のトポロジカル絶縁体は金属状態が物質の表面に限定されるため、可動性や制御性に欠けている。しかし本プロジェクト

で発見・予言したトポロジカルな金属磁壁は磁場などで容易に動かし、制御できるという他にない特長を持つ。今まで固定された界面・表面は半導体ヘテロ結合やトポロジカル絶縁体で研究と応用が進んだ。一方磁壁はバブルメモリとして異なる応用が展開された。しかしながら今回の予言はどちらも異なる概念的に新しいものであり、原子層レベルでの界面(磁壁)のみが伝導に寄与するという点で微細性があり、可動性など制御性に他にない優れた特性がある。この予言はマイクロ波顕微鏡による可視化によって、日米の共同実験で、実際に検証追認された。さらに我々は、この可動トポロジカル界面は単純な金属ではなく、ヘリカル金属であることを本研究で予言し、円二色性、異常ホール効果による疑いない実験検証を提案した[14]。今後この特異なトポロジカルな金属磁壁の基礎科学とエンジニアリングや応用可能性の追求が展開されると期待される。

(3)強相関電子系の励起ダイナミクスの研究

(要旨)

(1)強い非平衡状態に置くことで、逆に平衡状態の物性を解明することができるという、新たな実験手法とその解析法の理論を構築した。(2)散逸がエネルギー変換の効率化に寄与する機構の解明で、太陽電池探索の新しい方向性を提案した。以上、非平衡系を計算科学的に追究する新たな道筋を開拓した。

(3)大型実験施設の実験解析を進めた。

(詳細)

・光合成において「暗い励起子」がエネルギー変換効率の上昇に寄与しているらしいことは先行研究で推測されている。今回の研究では、このような研究に適した量子マスター方程式という適切なモデルを、6桁以上の時間スケールにわたって実際に解く手法を初めて開発した。この手法は量子状態と古典状態間のクロスオーバーや散逸の効果によるコヒーレンスとデコヒーレンスの間の遷移を計算するのに適する。さらにそれを応用してカーボンナノチューブの現実的なモデルでの励起子生成とダイナミクスを追いかけた。その結果、ス

ピン三重項という対称性のためにルミネッセンスを起こさない「暗い励起子」への遷移が、励起子の寿命を50倍以上に延ばして電荷分離過程への移行を助けることを見いだした。この過程がカーボンナノチューブで見られるエネルギー変換効率の上昇に寄与していることを初めて示した[15]。実際にカーボンナノチューブのルミネッセンスの実験結果は誰も説明できていなかったが、この計算によって3段階の指数関数減衰など定量的な説明まで可能にした。発光効率が低い物質は量子力学的な逆過程である吸収効率も低いと推定され、太陽電子に適さない候補と考えられてきたが、暗い励起子の役割を定量的に解明することにより、この常識とは異なる探索指針と実験解析法を採用すべきであることを示した。この結果は、変換効率を高めるために積極的に暗い励起子をうまく設計する方向の研究を刺激する点で、波及効果が大きい。

・ポンプ・プローブ分光による時間依存の光電子分光によって、物質のダイナミクスを究明するという手段は新しい、急速に発展しつつある実験手法である。しかしながら実験結果を解析するための理論的なサポートが少なく、実験結果の解析に困難を生じていた。しかしポンプ・プローブ分光は物質の非占有側の電子状態という、今までの実験では測定困難な領域の解明にも役立つと期待されている。本研究は、強相関電子系のポンプ・プローブ分光の大規模計算によって、非占有側の準粒子状態を選択的に抽出する方法を提案したという点で世界に例を見ない[16]。特に、緩和の速い状態を求めることが、熱平衡での準粒子状態を抽出すること

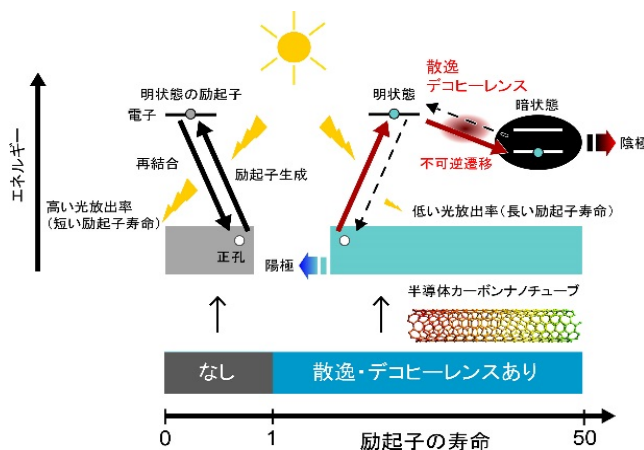


図4：太陽電池高効率化を生む暗励起子の機構

になるという一見常識に反する結果を得ることに成功した。この提案に基づいた実験の解析が始まりつつある。熱平衡からの外れの小さな線形応答領域で擾乱を加えることによって生じる応答を、熱平衡での物質の性質を解明するために役立てるといふ、揺動散逸定理に基づく線形応答理論での実験は広く行なわれている。しかし熱平衡から大きく外れた強励起状態も熱平衡での性質解明に役立ちうるといふことを示した研究は大変少なく、この研究は新しい領域の可能性を提示した意義が大きい。

- ・ 最近の共鳴非弾性X線散乱実験の発展と歩調を合わせて電子ドーピング型銅酸化物高温超伝導体に対するスピン・電荷励起ダイナミクスを、二次元動的密度行列繰り込み群法(DDMRG)を用いて計算し、共鳴非弾性X線散乱スペクトルで見られる新しい電荷励起構造を予測し検証を提案した[17]。その結果、大規模量子ビーム施設での実験との連携を加速させた。

- ・ 銅酸化物一次元モット絶縁体の光学応答を理解するため、電子相関とともに電子・格子相互作用を考慮した模型に対してDDMRGを適用し、線形・非線形光学応答を計算した。そして、ポンプ・プローブ分光の実験グループと共同で、 Ca_2CuO_3 にポンプ光照射直後に出現するギャップ内状態がフォノン媒介スピン励起に対応することを解明するとともに[18]、三次高調波発生(THG)では電子・格子相互作用がなくても、スピン励起に伴う構造が現れることを予測し実験に対する提案を行った[19]。

- ・ ポンプ・プローブ分光で得られる時間依存光学伝導度を計算するための時間依存ランチョス法を開発し、一次元拡張ハバード模型に適用して、スピン密度波状態と電荷密度波状態での光誘起ギャップ内励起の初期緩和過程を調べた。スピン密度波状態では光学許容・光学禁制エキシトン間の励起に対応する振動が、時間依存光学伝導スペクトルに現れること、それが最近のET-F₂TCNQに対する実験に対応することを示した[19]。

(4)量子モンテカルロ法による新しい量子相・量子臨界現象に関する研究

- ・ 多くの新奇量子相において重要な役割を演じる分数励起が引き起こす量子相転移の典型例について、その様相を明らかにした。具体的には、磁性体中でスピン-重項対が乖離することによって生じる脱閉じ込め転移を研究の対象とした。この種の相転移では、反強磁性状態から価電子対結晶状態や超伝導状態などへの転移のように異なる秩序相間の転移が期待されるが、そのような場合、伝統的な転移論では不連続転移(1次転移)が期待されるのに対して、本研究では、転移が連続的(2次転移)であることを強く示唆する結果を得た[20]。また、2次転移を特徴づける臨界指数や転移点において現れる隠れた対称性などを明らかにした。脱閉じ込め転移は、ハドロン状態からクォーク・グルーオンプラズマへの転移など量子色力学の分野などでも研究されており、本研究の結果、その典型例の特性が高精度で明らかになり、今後多くの研究の基礎的なデータとして活用されることが期待される。

(5)スピン軌道相互作用系の解明

この研究課題は本プロジェクト期間中に急速に発展してきた領域に対応するために3つの研究グループが協力して研究推進することで成果を得た。

- ・ キタエフ型の量子スピン液体が Na_2IrO_3 に対して予言された。量子スピン液体は実現例が少ないが、物質中の電子の存在様式の新しい形態として注目され、有機導体などで活発に研究されている。中でもキタエフ型液体の場合は理論的に厳密解を得られることと、この厳密解によってマヨラナ粒子が形成されることが理論的に示されており、量子計算を行えるプラットフォームの候補であることから大きく注目されている。本プロジェクトではその中でもキタエフ型液体を実現しうる候補として大きな注目を浴びている、イリジウム酸化物 Na_2IrO_3 に対して、強相関系に適したMACEに基づく第一原理計算を行ない、現実の物質でキタエフ液体ではなく磁気

秩序が生じる原因を定量的に明らかにした[21]。さらにこの第一原理模型に対して、数値対角化、テンソルネットワーク法、密度行列繰り込み群法などの高精度手法を総動員して、現実物質の周辺の物性を網羅的に求め、すべての手法で整合する結果を得た。さらに実験結果の中からキタエフ液体の兆候を得る方法や、よりキタエフ液体に近い物質を得る物質設計指針を得た[22]。

・ スピン軌道相互作用の効果を取り入れた量子スピン系の有効模型(拡張されたキターエフ・ハイゼンベルグ模型)に対して本プロジェクトで開発した二次元密度行列繰り込み群法 2D-DMRG を適用し、ハニカム格子上のキタエフスピン液体の周辺の量子相を決定した[23]。そして、波動関数を特徴付けるエンタングルメント・スペクトルが、キタエフスピン液体と量子相との境界を決める手段となることを示した。

<引用文献>

- [1] T. Miyake, K. Nakamura, R. Arita, and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn.,79 (2010) 044705.
- [2] M. Aichhorn , S. Biermann, T. Miyake, A. Georges, M. Imada, Phys. Rev. B82 (2010) 064504.
- [3] Takahiro Misawa, Kazuma Nakamura, Masatoshi Imada , J. Phys. Soc. Jpn.80 (2011-01) 023704.
- [4] Takahiro Misawa, Kazuma Nakamura, and Masatoshi Imada , Phys. Rev. Lett.108 (2012-04) 177007.
- [5] Takahiro Misawa, Masatoshi Imada, Nature Commun.5 (2014-12) 5738.
- [6] Takahiro Misawa, Masatoshi Imada , Phys. Rev. B90 (2014-09) 115137.
- [7] S. Sakai, Y. Motome, M. Imada , Phys. Rev. B82 (2010-10) 134505
- [8] S. Sakai, S. Blanc, M. Civelli, Y. Gallais, M. Cazayous, Marie-Aude Measson, J. Wen, Z. Xu, G. Gu, G. Sangiovanni, Y. Motome, K. Held, A. Sacuto, A. Georges, and M. Imada , Phys. Rev. Lett.111 (2013-9) 107001.
- [9] S. Sakai, M. Civelli, and M. Imada Phys. Rev. Lett. (in press), arXiv:1411.4365.
- [10] M. Imada, T. Miyake , J. Phys. Soc. Jpn.79 (2010-11) 112001
- [11] Ryui Kaneko, Satoshi Morita, Masatoshi Imada, J. Phys. Soc. Jpn. 83 (2014-09) 093707
- [12] Satoshi Morita, Ryui Kaneko, Masatoshi Imada, J. Phys. Soc. Jpn.84 (2015-02) 024720
- [13] Youhei Yamaji, Masatoshi Imada, Phys. Rev. X 4 (2014-05) 021035.
- [14] Youhei Yamaji, Masatoshi Imada, arXiv:1507.04153.
- [15] Yasuhiro Yamada, Youhei Yamaji, and Masatoshi Imada, Phys. Rev. Lett. 115 (2015-11) 197701
- [16] Youhei Yamaji, Masatoshi Imada, arXiv:1509.05597.
- [17] T. Sugimoto, M. Mori, T. Tohyama, and S. Maekawa, Phys. Rev. B 92 (2015-07) 014515(1-8)
- [18] H. Matsuzaki, H. Nishioka, H. Uemura, A. Sawa, S. Sota, T. Tohyama, and H. Okamoto, Phys. Rev. B 91 (2015-02) 081114(R).
- [19] S. Sota, S. Yunoki, and T. Tohyama, J. Phys. Soc. Jpn.,84 (2015-04) 054403.
- [20] Kenji Harada, Takafumi Suzuki, Tsuyoshi Okubo, Haruhiko Matsuo, Jie Lou, Hiroshi Watanabe, Synge Todo, Naoki Kawashima, Phys. Rev. B 88, (2013) 220408(R).
- [21] Youhei Yamaji, Yusuke Nomura, Moyuru Kurita, Ryotaro Arita, Masatoshi Imada, Phys. Rev. Lett. 113 (2014-09) 107201
- [22] Takafumi Suzuki, Takuto Yamada, Youhei Yamaji, and Sei-ichiro Suga, Phys. Rev. B92 (2015-11) 184411
- [23] K. Shinjo, S. Sota, and T. Tohyama, Phys. Rev. B 91 (2015-02) 054401.

II. 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開に関する研究

(1) 高精度電子状態計算による分子の微細量子構造予測に関する研究

(1)-1 高精度電子状態計算によるフラレーン誘導体の計算

露わに相関した二次の摂動論(MP2-F12法)と分子求積MP2法に関して、GELLANプログラムへの超並列実装を行い、100原子を超える分子のMP2-F12計算を、十分な精度を与えるサイズの基底関数で実行することが可能となった。本プログラムを用いたときにC60フラレーンのMP2-F12計算は6000ノード規模の京コンピュータを用いれば20分間足らずで完了するため、ナノサイズ分子の高精度量子化学計算を手早く数多く実行することができる環境を構築したと言える[1]。MP2-F12法は非経験的に分子間に働く分散相互作用を計算することができるが、ベンゼンやアントラセンといった多環芳香族炭化水素の間に働く分散相互作用を過大評価することが知られていた。そこで、新たに分子間相互作用エネルギーを正確に計算するための分母を制限した二次の摂動論(RD-MP2法)を開発し、露わに相関した電子状態理論と組み合わせることで、大きな分子の間に働く分散相互作用エネルギーを正確に計算できるようになった[2]。これらと密度汎関数理論を併用して、N-ヘテロ環状カルベンによるフラレーンの外部修飾に関する計算を行った。この系では、嵩高い置換基とフラレーンとの間の引力的な分散相互作用が立体反発を上回るという興味深い系であり、フラレーンの新しい外部修飾の方法であると期待される。相互作用エネルギーと電子状態の解析により、一つのフラレーン分子には、最大で三箇所にN-ヘテロ環状カルベンが結合しうることが計算によって示唆され、複数のカルベンを結合させることでHOMOやLUMOのエネルギーを段階的に上昇させられることが明らかとなった。また、二つや三つのN-ヘテロ環状カルベンを一つの分子内に保有する分子の設計も試みた。架橋部にケイ素などを用いて距離をうまく設計すれば、二箇所や三箇所ですらフラレーンに結合できるN-ヘテロ環状カルベン分子を設計できる見通しとなった。他にも、ベンゼン環を挟むように二つのカルベンを配置することで、二つのフラレーンをカルベンで架橋させられる可能性などが示唆された。通常のフラレーン誘導体は、低いLUMOレベルのために有機電子材料で電子のアクセプターとして働くが、これらの複数のカルベンが結合したフラレーンは、軌道エネルギー準位の観点からはポリチオフェンやポルフィリンに近く、むしろドナー性を有する可能性も計算で示唆された。このように本結果は、多様な電子的な性質をもつフラレーン誘導体を精密に合成できる可能性を示したと言える。また、上記の研究課題に加えて、分子のイオン化ポテンシャルを二次の摂動論に基づいて正確に計算する露わに相関した二次のグリーン関数法の開発も行った。多環芳香族炭化水素やチオフェン分子、ポルフィリン分子など、有機電子材料として使われるいくつかの分子に適用したところ、密度汎関数理論やHartree-Fock法よりも実験値に近い良好な結果が得られた。

[1] Y.-y. Ohnishi, K. Ishimura, and S. Ten-no, *Int. J. Quantum Chem.*, 115, 333-341 (2015).

[2] Y.-y. Ohnishi, K. Ishimura, and S. Ten-no, *Int. J. Chem. Theory Comput.*, 10, 4857-4861 (2014).

(1)-2 モデル空間量子モンテカルロ法の並列プログラム開発

配置空間の量子モンテカルロ法の励起状態や擬縮退状態への応用を目的として、モデル空間量子モンテカルロ(MSQMC)法は開発された[1]。MSQMC法では、配置空間をモデル空間(P空間)とQ空間に分割し、P空間とQ空間の関係を、モンテカルロ法によってサンプリングする。Q空間の寄与を含んだP空間を対角化することによって、任意の状態の精密な計算が可能である。量子モンテカルロ法は、ウォーカーを各ノードに分散することによって容易に並列化が可能であるが、MSQMC法では、P空間に含まれる個々の電子配置(スレーター行列式)とQ空間の関係を独立にシミュレーション出来るために、さらに効率的な並列実装が可能になる。今回の実装では、MPIを使用して、P空間に含まれる電子配置とQ空間をサンプリングするウォーカーの2段階に分けて並列化を行った。各ノード内でのウォーカーの計算については、OpenMPを使用して並列化されている。cc-pVTZ基底を使用したC₂分子計算では、4096CPUコアを使用して3221.9倍の加速が得られた[2]。

ウォーカーの通信量は、系の大きさには比例しないため、系が大きくなるにつれて並列化効率が向上する。また、MSQMC計算におけるサンプリング効率の向上のために、FCIQMC計算で用いられているイニシエーター近似の導入を行った。超並列実装とイニシエーター近似の導入によって、現在の最高精度の理論であるDMRG法と同等の計算が可能となった。小分子のポテンシャル曲線では、励起状態や結合解離状態は、平衡構造における基底状態と同等の精度で計算された。光化学反応で重要なconical intersectionにも、MSQMC法が応用可能であることも確かめている。また、配置空間の量子モンテカルロ法の問題点である計算精度の基底関数に対する依存性については、F12法と組み合わせることにより、基底関数に対する収束性を劇的に向上させることによって解決することに成功している。[3]

[1] S. Ten-no, J. Chem. Phys. 138, 164126 (2013).

[2] Y. Ohtsuka and S. Ten-no, J. Chem. Phys. 143, 214107 (2015).

[3] Y. Ohtsuka and S. Ten-no, AIP Conf. Proc. 1456, 97 (2012).

(1)-3 自在回転部位を有するナノ複合分子の構造と動力学(河野)

新規な動的機能を発現する分子の創製およびその制御はナノテクノロジーやナノマシンの中心的課題である。剛性の高いフレーム中に自由に回転する部位(回転子)を持つ分子はナノマシンの重要なパーツ(分子ベアリング)として大きな役割を担うことが期待されている。有望な分子ベアリングとして有限長カーボンナノチューブに化学修飾したフラーレン(回転子)を詰め込んだ世界最小のカーボンナノチューブベアリングが東北大学磯部寛之教授のグループによって作り出され、外枠(ベアリング)に捕らわれた回転子が2種類の回転をしていることが、NMRスペクトルから示唆されている。本研究では、このような大きな回転子とベアリングの分子間相互作用はどの程度か、また、それによって決まる障壁の高さや回転頻度はどのくらいかを、京のGELLAN量子化学プログラムなどの高精度の電子状態計算や計算負荷の軽い密度汎関数強束縛法(DFTB)を使った動力学(DFTB/MD)によって調べた。その結果、フラーレンのピロリジニウム軸がナノチューブの縁を周回する“旋回運動”と軸を中心として回る自転運動(主軸回り)が存在することがわかった。動力学計算を使って得たアレニウスプロットからそれぞれの活性化エネルギーを4.0 kcal/mol、5.3 kcal/molと算出した。遷移状態計算から得た回転障壁は、DFTB計算では、旋回に対して3.3 kcal/mol、自転に対しては4.6 kcal/molであり、それぞれの活性化エネルギーに対応していた。GELLANに実装されたRD-MP2-F12法を使って得たさらに精密な障壁の高さは、旋回に対して2.4 kcal/mol、自転に対して5.9 kcal/molであった。これらの値を使うと213 Kでは、旋回が $10^{10}/s$ と高速回転しているが、自転は $10^6/s$ とNMRの応答時間より遅く、これらが実験で観測されている2種類の運動に対応していることが明らかになった。

我々は動的機能分子の1つとして有望視される分子ジャイロスコープの構造や動力学についても第一原理研究を進めた。分子ジャイロスコープは外部骨格(固定子)によって保護された環(回転子)を持ち、それが両者の間の化学結合を軸として回転する。分子間力を評価できるDFT法に加えて、分散力も取り扱えるDFTB法に基づく電子状態計算と分子動力学計算を行い、結晶性分子ジャイロスコープの構造とダイナミクスを調べた。フッ素置換のフェニレン環回転子が頑強な3つのシラルカン鎖(ケイ素含有固定子)で囲まれた結晶性分子ジャイロスコープでは、室温では安定構造間の回転障壁を約3 nsに1回の頻度で越えるという回転の時間スケールの算出に成功した。また、双極子モーメントを有する回転子が振動電場存在下でどのように振る舞うかを回転制御も視野に入れて調べた。まず、DFTB法を用いてテラヘルツ波駆動の回転動力学に関する理論計算を行った。分子内のエネルギー移動を解析するために、分子の全エネルギーを各原子の成分和として表す原子分割エネルギー解析法を開発した。解析結果から、フッ素置換による双極子モーメントの効果によって回転子が電場から注入されるエネルギーの半分以上の獲得に寄与していることがわかった。その大部分は周囲の固定子に移動するが、実験的に可能な強度(< 2 GV/m)では数ns経過すれば室温でも連続回転に至

ると考えられる。テラヘルツ波による回転により、その結晶の光学的・誘電的特性を高速制御できる可能性を示している。

(2) 光合成酸素発生中心の構造とスピン状態に関する研究(上島)

光システムII(PS II)の活性生中心(OEC)であるマンガクラスト(CaMn_4O_5)には第二配位圏からのアミノ酸残基や水分子が存在し複雑なクラスター構造を形成している。OECは強相関電子系であり、非常に複雑なスピン状態を有する。このような系に静的電子相関効果を取り込むためにスピン対称性を壊したBroken-Symmetry(BS)法が適用されるが、高次スピン多重項の混入による影響が大きい。射影Hartree-Fock(PHF)法の一種であるSUHF法は平均場近似レベルの計算量でありながら従来とは異なる厳密なスピン射影であり、さらに静的電子相関も取り込まれるので非常に有用である。本研究ではSUHF法を開発し、各スピン状態でマンガクラストの構造最適化を行った。BS法で二重項状態を求めるためには低スピン解を用いるが、スピン混入が大きく二重項の寄与が全体の20%にも満たないことがわかった。SUHF法とBS-UHF法で最適化構造を比較しても差異が大きく、スピン混入の除去は重要であることが分かった。SUHF法では S_2 状態の最適化構造において基底状態は二重項であり、電子スピン共鳴(ESR)測定での帰属と一致した。さらに超微細構造定数の計算を行った。スピン密度はいずれもマンガクに局在しており、His332が配位したマンガクの超微細構造定数が最大であった。各マンガクの超微細構造定数は電子-核二重共鳴(ENDOR)測定結果と定量的にほぼ一致した。このことからPHF法はマンガクラストの計算に対して、定量的に正しく実験結果を再現する方法であることが分かった。

また、OECの周辺タンパク質の影響を解析するために、高分解能X線回折(XRD)構造ならびにF. Neeseの最適化構造を基にしたOECと第二配位圏の周辺アミノ残基から成るモデル系に対して酸化状態 S_2 の並列フラグメント分子軌道(FMO)計算を行った。ペア相互作用解析を行うことによって周辺タンパク環境がOECに与える影響を定量的に評価することができた。周囲3Å程度離れたアミノ残基(Glu329, Val330, Ala351, Leu352など)までがOECに電子的影響を与えており、5Å程度以上離れたアミノ残基(Arg357, Cl679, Thr316, Lys317など)も静電相互作用による影響があることが示された。このことから酸素発生過程において第二配位圏のアミノ残基の寄与は重要であると考えられる。

更に、数千の電子配置(スレーター行列式)からなるP-空間を使用してMSQMC法によるOECのモデル系について、様々なスピン状態のテスト計算を行った。最低でもマンガクd軌道と酸素2p軌道(合計35軌道)を考慮してP-空間に主配置を生成しなければならないが、これらの全ての軌道を含めて初期P-空間を決定することは不可能であるので、MSQMC計算中にQ-空間に存在するスレーター行列式の中で多数のウォーカーを持つようになったものを、P-空間に移動させる“プロモーション”が本質的になる。今回の計算では、限られたd軌道内の励起のみを含むスレーター行列式からなる初期P-空間を使用してMSQMC計算を開始し、プロモーションによって全てのd軌道と酸素2p軌道間の励起を含むスレーター行列式を追加することにより、P-空間の改善を行った。様々なd軌道間の励起を含む多数のスレーター行列式が生成され、MSQMC計算の結果からは、Broken-Symmetry(BS)DFT法では計算できない4重項スピン状態が、低エネルギー領域に存在することが示唆された。MSQMC法で得られた結果はOECのモデル系に対するものであるため、直接SUHF法との比較は出来ないが、今後リガンドとの相互作用を取り込んだ実装を行うことにより、酸素発生中心のような多核遷移金属錯体触媒の機能解明に有効な手段へと発展すると考えられる。

本研究からPHF法を開発し、その有用性が示された。これはマンガクラストに限らず人工光合成で扱われる光触媒での電子状態計算でも適用可能であり、精密な理論予測が可能であると考えられる。また、FMO計算からPSIIの酸素発生機構をさらに定量的に解析するためには第二配位圏の周辺アミノ残基までを高精度な量子化学計算で取り扱うべきであるという今後の研究指針を確立した。

Ⅲ. 密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現

科学的成果

ナノサイエンスが次世代のテクノロジーを支えると標榜されて久しい。ナノの世界は量子論の世界であり、そこには未知の現象が山積している。それを量子論に基づく科学の力で解明し、その後、既存のテクノロジーとの連続性を考慮した、新たな技術を開発することが必要だろう。本研究課題では、量子論に基づく計算科学の手法を、京コンピュータで開発し、ナノ世界のからくりを明らかにすることを、目標に据えた。成果としては、前人未踏の 10 ナノメートル構造体の安定構造探索計算、第一原理電子状態計算、1 ナノメートル電子構造・輸送係数計算などが可能になり、既存の半導体ナノ構造、パワーエレクトロニクス材料デバイス界面、次世代材料としての原子層物質などにおける、ナノスケール原子構造と電子機能の相関が明らかとなった。

実用的成果

これらの科学計算は、半導体産業におけるデバイスシミュレーション、プロセスシミュレーションの現代化、量子化を支えるものであり、次世代のテクノロジーにおける TCAD を形造るものである。そのための基盤技術が開発されたといえる。また、計算科学の第一線の手法を、「誰もが使える」ツールとして公表したことの意義は大きい。

以下に成果を詳述する。

(1) 実空間手法の開発と京コンピュータ上での高度化・高速化

RSDFT/RS-CPMDコード:

「京」上での新アルゴリズム導入を含む高速チューニングを行った。その結果、107,292 個の Si 原子から構成されるナノワイヤー構造に対し、82,944 ノードを用いた計算に成功し、実効性能 5.48 ペタフロップス(実行効率 51.7%)を記録した。(2011 年度 IEEE ゴードンベル賞受賞) RSDFT の高度化により、DFT の標準的近似(局所密度近似、一般化勾配近似)の範囲での、10,000 原子群の構造最適化と電子状態解明は、「京」の 1000 ノード程度のリソース(全ノードの 1.25%)を用い、数十時間で行うことが可能となった。またこの RSDFT コードは、github (<http://ma.cms-initiative.jp/ja/listapps/rsdft/rsdft>)、MateriApps (<http://ma.cms-initiative.jp/ja>)でソースコードが公開された。

RS-CPMD (Real-Space Car-Parrinello Molecular Dynamics)コードは、「京」1,024 ノードを用いた 1664 原子からなる有機溶媒系の CPMD 計算の 1 タイムステップが 3.23 秒で終了するまでに高速化され、大規模第一原理 MD 計算が可能になった。同じ系に対して従来の平面波基底 CPMD (PW-CPMD) では、512 ノードを用いた計算で 11.9 秒(同じリソースで RS-CPMD では 5.54 秒)である。PW-CPMD は全体通信を伴う FFT を多数回計算することから、これ以上のノードを用いても有意な高速化ができないのに対し、RS-CPMD に関しては 2048 ノードを用いても 1 タイムステップあたり 2.18 秒であり、実行効率の大幅な低下はみられないことから、今後より多くのリソースを用いてさらなる大規模系への展開が見込まれる。

RSPACEコード:

RSPACE コードを「京」で効率的に実行できるようチューニングした。それにより、Si 原子が 10240 個からなる系の電子状態計算において、「京」の 3840 ノードを用いてストロングスケーリング 94%、実行効率 31%を達成した。また、数理グループ(名大・張グループ)と協力し、伝導計算のボトルネックであった散乱領域の摂動グリーン関数の計算にシフト共役勾配法を適用した。この方法により、グリーン関数の計算が最大 22 倍高速化され、SiC-MOS 界面でのキャリア伝導特性の解明が可能になった。

CONQUESTコード:

「京」におけるチューニングにより、数万から百万原子系に対するオーダー N 法第一原理計算の計算時間が格段に早くなった。百万原子系に対する第一原理構造最適化計算や第一原理分子動力学における 1 ステ

ップの計算時間が「京」以前は2時間程度かかっていたのに対して、「京」を用いることにより5分程度で計算可能となった。実際の応用計算においても20万原子系の構造最適化計算を「京」1000ノードを用いて実現した。さらに、数フェムト秒の時間刻みが可能な断熱近似第一原理分子動力学を高精度、高効率で実現する計算手法をオーダー N 法に導入し、3万原子系に対する第一原理分子動力学が「京」の1000ノードで実現できることを示した。また、オーダー N 法第一原理計算で得られた最適化構造、セルフコンシステント電荷密度を用いて計算されるハミルトニアン行列に対して、重要なエネルギー範囲にあるエネルギー固有値を計算する手法(櫻井・杉浦法)を導入した。その結果、構造最適化された20万原子系に対するフェルミ準位付近のバンド構造を計算することに成功した。(筑波大櫻井グループとの共同研究)

GCEED コード:

電子ダイナミクスは時間依存コーン・シャム方程式、電磁場ダイナミクスはミクロスコピックなマクスウェル方程式に基づき、いずれの方程式も実時間・実空間上で差分法を用いて解く手法(GCEED)である。固有値対角化や高速フーリエ変換、特殊なライブラリ等を使用せず、主要なアルゴリズムは簡便な差分法のみであるために、超並列計算に適している。「京」において高度なチューニングを行った。四則演算の部分はほぼ完全に並列化できているが、膨大な量のデータ通信がボトルネックとなる点は今後の改善事項である。我々の研究で扱うデータ量の転送を加味して、標準的な差分法アルゴリズムを用いた場合の「京」の理論実行性能はおよそ15%程度と見積もったが、GCEEDは2万~3万ノードで10%前後の実行性能を出しており、相応の超並列チューニングができたと考える。

ARTEDコード:

ARTEDは、光電場が加えられた結晶中の単位セル内の電子ダイナミクス計算を主要な要素とする計算コードである。これと光電磁場の伝播を記述するマクスウェル方程式の時間領域差分法を多階層結合することにより、ミクロな量子論に基づき光と物質の相互作用を記述することができる。この計算は、物質中の多数の位置でミクロな電子ダイナミクス計算を並列実行することが必要であり、極めて大きな計算リソースを必要とする。京コンピュータを用いることで初めて実験が行われている現実的な状況に対応する計算が可能となる。ARTEDに対し、京コンピュータで高効率な計算が可能となるよう整備を行い、すでに実験解析のためのプロダクトランが可能となっている。例えば10 μ mのSiO₂薄膜をフェムト秒パルス光が透過する実験に対する解析計算を行ったが、薄膜の空間領域を1000点に分割した差分法を行い、6000ノードで24時間による結果を得ることができた。

(2) ナノ構造時空場に対する実空間手法の適用

RSDFTによるSiナノワイヤー電界効果トランジスター(FET)における電流分布解明

図1はRSDFTコードで求めたバンド構造と波動関数を用い、Siナノワイヤーでの弾道輸送における電流密度分布を表したものである。ゲート電圧の変化に応じて、ワイヤー断面の電流密度の位置が変化し、これにより実際の側面ラフネスがあるFETでの電流電圧特性が推測される。RSDFTの開発により直径10nmを超えるSiナノワイヤー(数千~数万原子系)の電子状態が量子論に基づいて計算できるようになった。現在、より精緻なコンダクタンス計算(非平衡グリーン関数計算)と結合し、量子論的デバイスシミュレーションを目指してい

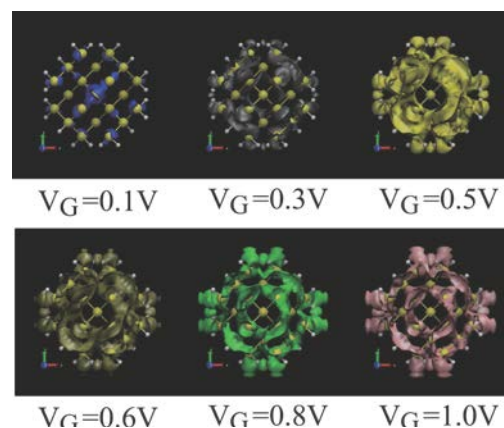


図1: Siナノワイヤー型トランジスター(数ナノメートルの直径)でのゲート電圧を変えたときのワイヤー内電流分布。電流分布の等値面がワイヤー断面上で図示されている。ワイヤー軸は(110)結晶軸方向。

る。

RSDFTによる二層グラフェンでの積層ずれによるディラック電子の局在化発見

層状物質グラファイトは、所謂 Bernal Stacking (AB stacking) を示すが、二層グラフェンの積層構造は様々な形態を示すことが、実験的に知られている。グラフェンの層間相互作用は層内の共有結合エネルギーに比べて格段に小さいが、その対称性の低下により、大きな電子物性の改変を引き起こす可能性がある。積層ずれ角 θ が小さい場合、一超周期内に存在する原子の数は、数万を越え、RSDFT コード以外では実効不可能な大規模系である。図 2 は、そうした積層がずれた二層グラフェンのフェルミ準位の電子速度 (Dirac 速度) を θ の関数として求めたものである。積層の微小ずれによりモアレ干渉縞が発生し、その干渉縞に電子波が捉えられ、Dirac 電子の局在化が生じることがわかった。

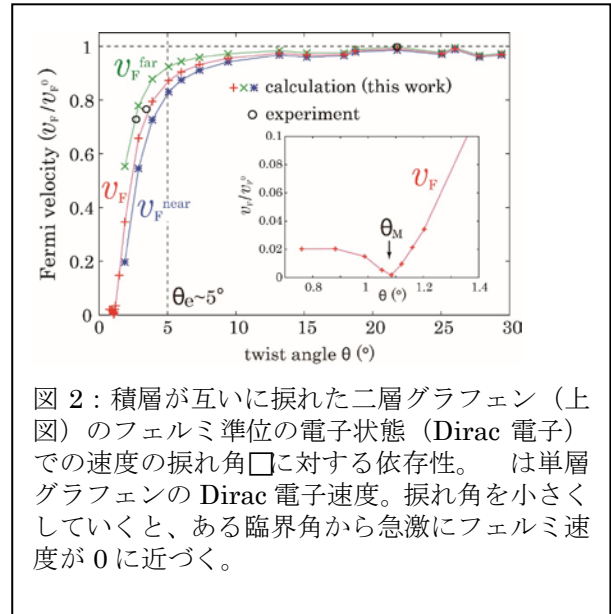


図 2：積層が互いにずれた二層グラフェン（上図）のフェルミ準位の電子状態（Dirac 電子）での速度のずれ角 θ に対する依存性。 v_F^0 は単層グラフェンの Dirac 電子速度。ずれ角を小さくしていくと、ある臨界角から急激にフェルミ速度が 0 に近づく。

RSDFT計算によるその他の成果

RSDFT コードを活用した物質科学計算により、様々な系でのナノ構造と電子物性の相関が明らかとなった。成果を列挙すると、1) パワーエレクトロニクス材料として重要な SiC のバルク結晶での固有欠陥の構造とそれによって引き起こされるトラップ準位を明らかにしたこと、2) 同じく SiC 表面でのナノファセットの自己組織化のミクロな機構を明らかにしたこと、3) その SiC ナノファセットでは、ファセットを形成する原子層ステップの方向に広がった特異な電子状態が出現し、新機能としての磁性が発現すること(図 3)、4) シリセン(グラフェン状 Si 単層/数層膜)においては、基板との相互作用が重要であり、現在使われている Ag 基板においてはディラック電子が消失すること、ヴァンデアワールス的な相互作用をもつ基板の導入によりディラック電子が回復すること、などがあげられる。

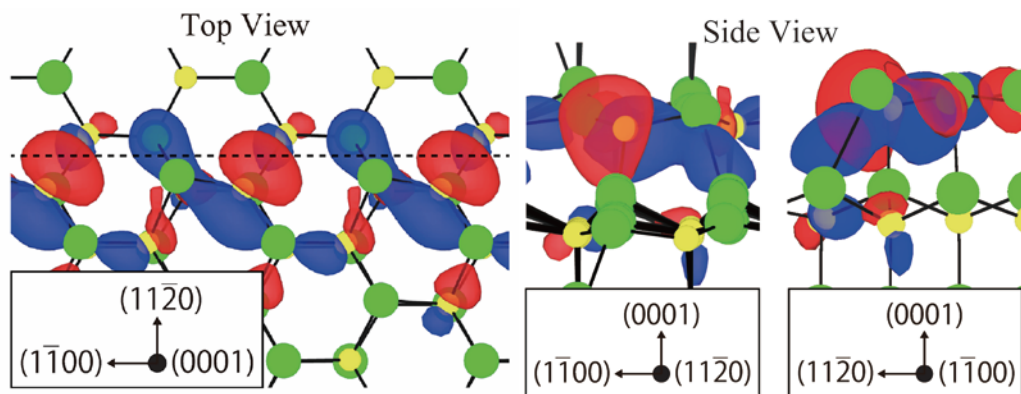


図 3: SiC(0001)面上に形成されたナノファセットの1双原子層ステップエッジに沿って広がった電子状態 (左: 上面図、右(側面図))。黄色、緑色の丸が炭素原子、Si 原子の位置を示し、左の上面図の点線がステップエッジの位置を示す。電子状態の波動関数の正と負の等値面が赤と青で示されている。波動関数は黄色の炭素原子のダングリング・ボンド(赤色)と Si との背後のボンド(青色)との線形結合となっていることがわかる。

RSPACEによるSiCデバイス物性の解明

SiC は省電力パワーデバイス用の材料として期待されているが、SiC-MOS の電子移動度は SiC バルクに

比べ 10%程度しかない。これは、バルク比 90%を超える Si-MOS に比べたときの最大の欠点であり、移動度向上が SiC デバイス実現の鍵である。移動度低下は、SiC のバンドギャップ中にできる欠陥準位が原因である。しかし、ギャップ中の欠陥準位密度が Si-MOS と大差ないことや電子状態の実験的 direct 観察が困難であることから、実験的手法のみで移動度を低下させる欠陥を特定することは容易でない。RSPACE コードを用いた計算により、SiC 基板のスタッキング構造の違いがチャンネルとなる伝導帯端に欠陥準位を作ることと、スタッキング構造の違いにより伝導帯端にできる欠陥準位は従来のギャップ中に準位を作る欠陥よりも高密度に生成されることが明らかとなった。さらに、この欠陥は、キャリアを顕著に散乱することを、第一原理伝導計算により明らかにした。この欠陥は、SiC 特有の自由電子的な振舞いをする伝導帯端準位が関わっており、本研究の結果は、伝導帯端準位の制御が移動度向上に重要であることを意味する。SiC デバイス開発に関係する SIP プロジェクトと連携し、自由電子的な振舞いをする伝導帯端準位の影響を受けにくい面方位を用いた MOS の機能評価を現在進めている。このように計算量の多い MOS 界面でのキャリア移動の評価は、京コンピュータのような大規模計算機と電気伝導特性計算が可能な RSPACE があって実現したものである。

CONQUESTによる半導体ナノ構造の決定

CONQUEST は、系のサイズ N に比例する計算量で密度汎関数法計算が実行できるオーダー N 手法である。図 4 は、Ge ナノ構造の典型であるハット(小屋型)・クラスターについて、成長時の新たな原子の吸着位置と、それによるナノ・モルフォロジーの変化が、数万原子規模の多数の構造最適化計算によって明らかにされた。具体的には、ハット・クラスターの小さなファセット面の上部に新たな Ge アドアトムが吸着しやすいことがわかった。さらに、新たなファセット面が成長する過程における島構造に対する構造最適化計算を行い、ファセット上の島形成は上部から下部へ成長が進みやすいことを示した。今までの第一原理計算が対象としてきた、局所構造を取り出したモデル系ではなく、現実のサイズで計算することによって、初めて明らかにすることができた結果と言える。また、Ge/Si (もしくは Si/Ge) のコアシェルナノワイヤに対しても複数の構造モデルに対して構造最適化計算と電子状態計算を行った。現実の(小さな)ナノワイヤのサイズと同程度の半径数十ナノメートルまでの構造モデルに対して構造最適化を行い、格子緩和の場所依存性に対する解析を行った。また、櫻井杉浦法を用いてフェルミ準位付近の固有エネルギー、固有状態を計算し、伝導が起きる領域がエネルギーレベルによってコアやシェル領域に閉じ込められている状況を明らかにした。

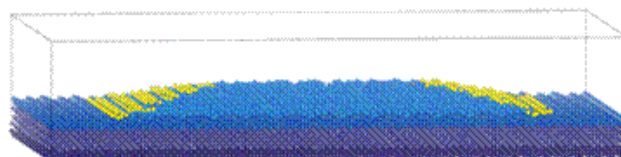


図 4: Si(001)基板上の Ge ハット・クラスターの原子レベルでの構造。黄色いファセット面が新たな吸着および成長面となることがわかった。

GCEEDによる光励起電子ダイナミクス計算

GCEEDを用いて、 C_{60} アレイナノ構造体(十数ナノメートルサイズ)の光吸収の計算を行った。実在系分子としては、世界最大規模のサイズである。また同様に、金クラスター(直径 4 nm)のプラズモン励起のクラスターサイズ依存性を明らかにした。更に、大規模な三次元周期系を対象としてその光励起電子ダイナミクスを記述するために方法論の拡張を行った。その他、電極上分子の表面増強ラマン散乱、近接場光励起による二光子励起の計算を行った。通常の量子化学計算やバンド計算と異なり、孤立系、三次元周期系、表面・界面を問わず種々の物質系を対象として光励起電子ダイナミクスの計算を実行することが可能となった。

IV. 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開

(1) 小児マヒウイルスカプシドの分子科学

京コンピュータで高い性能を発揮できる高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト MODYLAS の開発を進め、これを用いて小児マヒウイルスカプシドの全原子シミュレーションを実施し、カプシドの物理化学的性質や感染の初期過程であるレセプターとの結合等を分子レベルで明らかにしてきた。これらの研究を通して確立した抗ウイルス剤との相互作用計算手法を基盤に、厚生労働省プロジェクトとの共同研究として、B型肝炎ウイルスの抗ウイルス剤開発に欠かせない抗ウイルス剤のカプシド透過の分子機構の計算へと展開している。

MODYLAS は、京コンピュータにおける超並列計算に対応するために、長距離力の計算に並列化効率を大幅に低下させる FFT を用いず、FMM を用いている。65,536 ノード (524,288 コア) を用いた計算では、1,000 万原子系の MD 計算 1 ステップの実行を 5 ms で終える性能を有している。MODYLAS は、自由エネルギー計算をはじめとして分子シミュレーションに関わる様々な機能を備えており、京コンピュータ等を用いたナノ分野、バイオ分野における分子集団系の研究に用いることができる。なお、本ソフトはソース公開している。

本アプリを京コンピュータ上で使用し、大規模計算により以下のことを明らかにした。

カプシドの物理化学的性質として、熱平衡状態において、水分子はカプシドの内部と外部とを行き来する。水の移動速度は速く、約 25 マイクロ秒でカプシド内のすべての水分子を自発的に交換する。このことは、小児マヒウイルスは数千気圧にも耐える圧力耐性を有する一方で、乾燥に対して容易に不活化するといったことをよく説明している。一方で、少なくともシミュレーション時間内では電解質は透過させていない。つまり、カプシドは浸透膜として機能する。生理的条件下での電解質濃度において浸透圧はさほど高くはなく、カプシドの安定性に影響するほどではないだろう。事実、真水中でもウイルスは長時間活性を保つ。

カプシド内外の電解液の状態はさらに興味深い。カプシド内の電解液圧力は負の値を示す。負圧はバルクにおいては存在し得ないが、小さな空間であるカプシド内では保たれる。小児マヒウイルスや口蹄疫ウイルスなどピコルナ科のウイルスにおいては自然界でも多く empty capsid が生成されるが、これらは RNA を含む完全なウイルスと比べ不安定である。負圧はこの不安定性の一因となっていると考えられる。

一方で、感染の初期過程であるレセプターとウイルスの結合において、両者の相互作用を自由エネルギーレベルで解析した。MD 計算からは、CD155 レセプターと小児マヒウイルスとの間に働く平均力は比較的近距离において引力として働き得ることが示されているが、これは小さいものでしかなく、このような巨大な構造体間でもわずかに水中のメタン-メタン間の相互作用と同程度でしかない。これは、レセプターがウイルスを認識する際に、かなり確率論的な過程が含まれていることを意味する。

(2) インフルエンザウイルス阻害剤の分子設計に関する研究

インフルエンザウイルスの新規阻害剤の分子設計に向けて、FMO法を創薬研究に応用する上で有用な、FMO法と古典力学の融合法(FMO/MM法)と、高速に構造最適化計算が行える部分構造最適化法(FMO/FD法)の開発を行い、創薬に必要な方法論的に高度な計算機能確立した。これにより、構造最適化した複合体で、溶媒分子をあからさまに考慮して結合自由エネルギー計算を行うことが可能となった。またFMO計算ソフトにおいては、CPUコアをグループ分けし、フラグメントやフラグメントペアをグループに割り当て、グループ内では通常のab initio MO計算とほぼ同じ並列計算を行っているが(2段階並列化)、2電子積分ルーチンを組み込むなどして7.3%の実行性能を実現している。このように、阻害剤開発に必要な方法論について、従来不可能であった多くの計算を可能にし、これを確立した。さらには、FMO法の創薬研究への応用を容易にするために、FMO計算の入力データの作成と結果をグラフ化するためのGUIプログラムFUを開発した。

V. エネルギー変換の界面科学

(1)電極界面のモデリングとして用いられている独自の手法に改良を加え、電極界面をよりの確に計算することを可能にした。下記の成果創出に貢献した。具体的には、連続誘電体を用いて電極界面に電位差を与えるための ESM 法に改良を加え、水分子と ESM 領域の間に真空領域が表れるという不自然さを解消し計算の信頼性を高めた。また、計算の不安定要因を取り除くことにもつながった。[1]

(1-2)電極界面での電位差を制御するための新規手法を開発し、下記の成果創出に貢献した。具体的には、拡張ラグランジュ法を用いて電子数を制御し電位差を一定に保つための手法を開発し、ESM による計算の適用性を高めた。[2]

(1-3)一次元の反応経路に沿った自由エネルギー計算手法は確立しているが、多次元の反応経路に沿った計算は確立していない。それを可能にするための最新の手法をアプリに組み込んで計算可能にした。電流電圧曲線の予測計算に適用し、アプリの適用範囲を拡大させた。

(2-1)金属系に対応した第一原理分子動力学計算アプリ「STATE」を5重並列化し、多自由度系の反応経路探索を一気に計算することを可能にした。下記の成果創出に貢献した。

(2-2)非金属系で特性を発揮する第一原理分子動力学計算アプリ「stat-CPMD」を並列化し、数千原子系における自由エネルギー曲線を計算する基盤を構築した。

(2-3)第一原理分子動力学計算結果から原子間力を抽出する統計学的方法(遺伝的アルゴリズムなど)を開発し、それを用いて第一原理的には扱えないような空間・時間スケールでの電池過程(核成長など)を計算するための基盤を構築した。

(3-1)白金電極での酸素還元反応機構の解明は電気化学の重要な問題として残されており、それを解明することは電極触媒の開発に大きなインパクトを与える。そこで、モデル触媒 Pt(111)での正極反応に対してシミュレーションを行い、実験結果と組み合わせて反応論に基づき解析することにより酸素還元機構を決定した。[3]またナノサイズの実触媒の重要な因子として、メソスコピック系特有の溶媒揺らぎがあり、反応促進機構が強く働くことを示した。[4]

(3-2)リチウムイオン二次電池の劣化機構を解明すること、劣化を妨げる要因を突き止めることは電池開発への貢献につながる。また、界面保護膜の形成や特性に関する知見獲得も同様に重要な貢献となる。そこで、負極での電解液の分解過程のシミュレーションを行い還元劣化に対する溶媒分子と添加剤の役割を明らかにした。[5]また、充電速度を高められる新規の電解液においてリチウムイオンがなぜ高速拡散するのか、還元耐性の向上がいかに実現されているのかに対する知見を獲得した。[6,7]。さらに、全固体電池の内部抵抗の要因を突き止めた。[8]

(3-3)次世代二次電池として有望視されているリチウム空気電池の実験例は少なく、理論予測を行うことは開発への重要な貢献となる。第一原理計算と古典分子動力学計算をつないで時空スケールの異なる電子状態変化と構造変化の非平衡過程を的確に反映した新規シミュレーションを構築し、電解液の組成と電池過程(核生成反応過程とリチウムイオン輸送過程)の関連を明らかにした。

<参考文献>

[1] Improved modeling of electrified interfaces using the effective screening medium method, I. Hamada, O. Sugino, B. Nicephore, and M. Otani, Phys. Rev. B 88 155427 (2013).

[2] First-Principles Molecular Dynamics at a Constant Electrode Potential, N. Bonnet, T. Morishita, O. Sugino, and M. Otani, Phys. Rev. Lett. 109, 266101 (2012).

[3] Self-Poisoning Dynamical Effects in the Oxygen Reduction Reaction on Pt(111) from a Top-Down Kinetic Analysis, N. Bonnet, O. Sugino, and M. Otani, J. Phys. Chem. C, 118, 13638 (2014).

[4] Effect of thermal motion on catalytic activity of nanoparticles in polar solvent, N. Bonnet, O. Sugino, and M. Otani, J. Chem. Phys. 140, 044703 (2014).

[5] Additive Effect on Reductive Decomposition and Binding of Carbonate-Based Solvent toward Solid Electrolyte Interphase Formation in Lithium-Ion Battery, K. Ushirogata, K. Sodeyama, Y. Okuno, and Y. Tateyama, J. Am. Chem. Soc., 135, 11967 (2013).

[6] Unusual Stability of Acetonitrile-Based Superconcentrated Electrolytes for Fast-Charging Lithium-Ion Batteries, Y. Yamada, K. Furukawa, K. Sodeyama, K. Kikuchi, M. Yaegashi, Y. Tateyama, and A. Yamada, J. Am. Chem. Soc., 136, 5039 (2014).

[7] Sacrificial Anion Reduction Mechanism for Electrochemical Stability Improvement in Highly concentrated Li-Salt Electrolyte, K. Sodeyama, Y. Yamada, K. Aikawa, A. Yamada, and Y. Tateyama, J. Am. Chem. Soc., 118, 14091 (2014).

[8] Space-Charge Layer Effect at Interface between Oxide Cathode and Sulfide Electrolyte in All-Solid-State Lithium-Ion Battery, J. Haruyama, K. Sodeyama, L. Han, K. Takada, and Y. Tateyama, Chem. Materials, 26, 4248 (2014).

(3-2)の成果に関しては、ゴットフリード・ワグネル賞(エネルギーとインダストリー分野)「スパコンの高効率利用によるリチウムイオン電池電解質界面反応の理論的機構解明」が技術革新を重視するドイツ企業と在日ドイツ商工会議所により 2008 年に創設された財団から与えられた。(3-2)で得られた成果に関しては、それぞれプレスリリースが行われた。

(3-2)の成果に関連して、スーパーコンピュータ「京」のプロモーションビデオ「リチウムイオン電池の研究成果」(<https://www.youtube.com/watch?v=9dnYgA5eQaY>)の監修を行い、AICS から情報発信がなされた。また、スーパーコンピュータ「京」を知る集い in 熊本(2014/2/15@熊本テルサ)にて講演を行った。

(2-1)、(3-1)の成果に関連して、電気化学コンソーシアム(<http://eisconsortium.org/>)を設立してアプリの普及に努めている。現時点で 19 企業の会員参加があり、講習会や勉強会が定期的に行われている。

VI. 水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性

水素ハイドレートや filled ice は、水素貯蔵手段の一つとして期待されている。我々は実験家、理論家の双方が利用する標準理論である van der Waals-Platteeuw (vdWP)理論を拡張、さらに Grand Canonical Monte Carlo 法を活用することにより、籠構造内の水素の多重占有なども考慮された新しい理論手法を構築した。これにより、実験測定が容易ではない、極めて高い圧力における水素ハイドレートの物性予測を、比較的簡易に行うことが可能となった。

日本近海の海底には、メタンを主成分とする多量の天然ガスがハイドレートの形で存在しており、これは未来のエネルギー資源の一つとして注目を集めている。海底からの天然ガスの回収や、ハイドレートを利用したガスの保存・輸送過程を効率的に進めるためには、ハイドレート分解過程の理解が欠かせない。我々は、主として MODYLAS パッケージを用いて、京コンピュータ上で大規模並列計算を行い、実験に近い穏やかな条件でのメタンハイドレートの分解のシミュレーションを行った。これにより、ハイドレートから放出されたメタンの泡の生成により、分解速度が上昇するという機構が明らかになった。また、海水中に存在する NaCl や、メタンハイドレート生成抑制剤として石油産業で広く利用されているメタノールにより、分解機構がどのように変化するかを、分解の中間状態の自由エネルギーの観点から明らかにした。

天然ガスの輸送にはパイプラインが用いられるが、そこに水が混入し、ハイドレートが生成して詰まってしまうという問題が古くから知られている。これを防ぐ手段の一つが速度論的阻害剤である。速度論的阻害剤は水溶性ポリマーであり、ハイドレートの表面に吸着することで、その部位周辺の結晶成長を抑制する効果がある。従来、この吸着力の起源は、阻害剤のアミド基とハイドレート表面との水素結合であると言われていた。我々はアンブレラ法を用いた自由エネルギー計算を行い、この従来の機構が実は誤りであり、エントロピー的な引力が起源であることを明らかにした。

VII. 金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発

基礎研究面

金属系構造材料の特性を支配する「微細組織」、すなはち、異相界面、転位、粒界、不純物・合金成分の集合体の微視的な構造や機械的性質を理解するには、原子・電子挙動まで掘り下げた第一原理計算の適用が不可欠である。しかし、数千原子を超えるスーパーセルの大規模計算が必要となり、金属系ではほとんど実行されていない。本研究では、局在基底オーダーN法のOpenMXコードを適用することで、金属系大規模構造の第一原理計算を遂行し、微細組織の構成要素の構造や性質を高精度に解明することに成功した。まず、Feの典型的な析出強化用のTiC相のFe/TiC界面について、整合界面に加えて、初めて部分整合界面の構造とエネルギーを高精度に求めることで、析出TiC粒子の成長時の整合界面⇒部分整合界面の遷移の臨界サイズを明らかにした。これは最近の実験を裏づける結果で、析出強化の設計上、極めて重要な知見である。さらに、部分整合界面の水素捕獲能の第一原理計算を行い、界面C原子との静電反発が捕獲水素の安定性を支配することを見出した。

次に、Fe中のらせん転位芯と添加元素(一連の遷移金属や典型元素)との相互作用の第一原理計算を行い、Feの機械的性質への添加元素の効果を探った。得られた計算結果は、添加元素の固溶強化能や転位易動度への効果の実験をよく説明し、また添加元素の周期表での位置に依存した傾向が見られた。Feの転位挙動への添加元素効果をリアルな転位芯構造での原子・電子挙動から初めて統一的に説明する成果で、基礎科学的な意義は極めて大きい。

また、平面波基底PAW法計算のQMASコードでは、局所エネルギー・局所応力の第一原理解析が初めて可能となった。エネルギーや応力は、従来のコードではセル内の積分値や平均値としてしか求まらない。Fe/TiCの異相界面に適用することで、界面近傍の原子毎の局所エネルギーや局所応力が明らかになり、界面結合の機構や界面misfit応力の起源を詳細に解明した。Fe中の粒界についても、同様の見地から、添加元素偏析についての局所エネルギー・局所応力の解析を進め、偏析機構について、これまでに見えなかった知見を得た。

さらに、こうした第一原理計算結果をメゾ・マクロのフェーズフィールド法に繋ぐ手法を確立するため、第5部会の協力のもと、第一原理に基づくフェーズフィールド法の定式化について検討を進め、第一原理からの基礎方程式の導出に成功した。

実用的成果

Fe/TiC界面の整合界面・部分整合界面の遷移の臨界サイズの解明は、TiC析出相の成長サイズを制御することで効率的に析出強化を達成する設計技術に繋がる成果である。また、Feの転位芯と各種添加原子の相互作用の解明は、効率的に固溶強化を達成する設計技術に繋がる。また、様々な遷移金属や典型元素で周期表の位置に依存する相互作用の傾向が示されたことは、希少元素の代替を進める上で非常に有用な知見である。

金属材料の電子状態は、半導体等と異なり、ワニエ関数のような局在波動関数への変換がうまくいかないため、通常のオーダーN法の適用は容易ではなく、金属系の大規模構造の第一原理計算は事実上、皆無であった。局所的に電子構造を解くクラスターのサイズを調整するOpenMXコードは、金属系も扱える、ほとんど唯一のオーダーN法であり、本研究により、その威力が実証された。本研究の成果や方法論は、今後の金属系材料の「微細組織」の構造、機械的性質の高精度の解明や設計の道を切り開くもので、大きな波及効果が期待できる。

(1) 析出物と母相金属の異相界面の大規模第一原理計算

鉄鋼材料では、Feに固溶させた遷移金属元素やC、NをNaCl型の遷移金属炭化物や窒化物で析出させ、転位の障壁にして強化することが行われる(析出強化)。析出初期には、 $\{001\}_{\text{Fe}}//\{001\}_{\text{MX}}$ 、 $[100]_{\text{Fe}}//[110]_{\text{MX}}$ のBaker-Nutting関係の整合界面を持って板状で析出するが、成長すると格子misfitのため界面周囲の歪エネルギー(主にFe側の歪エネルギー)が大きくなり、界面構造は部分整合界面に遷移する。転位との相互作用が変わるため、遷移の臨界サイズを理解することが求められる。整合界面は短周期なので第一原理計算で容易に扱えるが、部分整合界面は格子misfitをそのまま含めるので、スーパーセルの原子数が数千、数万オーダーとなる。そのため第一原理計算は皆無である。今回、Fe/TiC界面を取り上げ、OpenMXコード(局在基底オーダーN法第一原理計算)を用いることで、大規模構造の高精度計算(4319 原子/セル)を実現し、部分整合界面の原子配列や界面エネルギーを高精度に求めた。整合界面では、Fe原子がTiC{001}面のC上に来て安定な界面構造が形成されるが、部分整合界面では、局所的にFe原子がTiC{001}面のTiに近接する転位芯様の乱れた構造が不可避免的に生じ、界面エネルギーは高くなる。一方、整合界面では、格子misfitのため、粒子サイズに従って主にFe側の歪エネルギーが増加する。この値を適当に見積もり、界面エネルギーと歪エネルギーの和から臨界サイズを検討した。サイズが小さいと歪エネルギーが小さいため、界面エネルギーの低い整合界面が安定だが、ある程度大きくなると、整合界面では歪エネルギーが大きくなりすぎるため、界面エネルギーは大きい歪エネルギーの小さな部分整合界面に移行する。計算の結果、臨界サイズが2.3nm程度であることが判明した。これは最近の実験観察結果を裏付けるものである。Fe/NbC界面についても、同様の手法で遷移の臨界サイズを見積もったが(部分整合界面のスーパーセルは 1463 原子/セル)、約1.4nmであり、かなり小さい。これは、NbCの格子定数がTiCより大きく、Feとのmisfitがより大きいためである。

鉄鋼材料中のこうした析出物は、材料中の固溶水素をトラップすることで、水素脆化(水素が欠陥や粒界に集まることで容易に破壊してしまう現象)を防ぐ効果が期待されるが、水素のトラップ状態やそのエネルギー(捕獲率を支配)は未解明である。そこで、今回初めて求めた部分整合界面について、様々なサイトに水素が捕獲された構造の第一原理計算を行った。転位芯様の乱れた局所構造では、界面のC原子(負の局所電荷)に近接するため水素は安定ではなく、少しずつれたところが比較的安定であった。

なお、OpenMX コードを用いた「京」における大規模計算の実行に当たっては、実空間の領域分割と各ノードへの分配など、効率的な並列化に向けて、各種新規の調整を行っている。

一方、高精度の平面波基底 PAW 法の QMAS コードにおいては、局所エネルギー・局所応力の第一原理計算開発が進展しており、異相界面への適用が興味深い。Fe/TiC の整合界面の原子毎のエネルギー分布・応力分布の第一原理解析を行い、界面結合や misfit 応力の起源の解明を試みた。TiC{001}面のC原子直上にFe原子があるFe_on_C界面の方がFe_on_Ti界面より安定であること、前者では界面Fe原子とC原子の局所エネルギーが大きく低下して顕著な界面形成利得が生じ、界面の数原子層が結合エネルギー利得に関わること、界面の2-3原子層で応力がtension(Fe側)からcompression(TiC側)に変化し、結合の強固なFe_on_C界面の方がスムーズに遷移すること等が明らかになった。

(2) 転位の構造や転位と固溶原子との相互作用の大規模第一原理計算

Feの機械的性質を支配する「らせん転位芯」の安定構造と、一連の遷移金属や典型元素などの添加原子(合金原子)との相互作用をOpenMXコードによる大規模第一原理計算で求めた。まず、逆向きの転位芯が四重極配置になるスーパーセルを用いることで、転位間の長距離相互作用を打ち消して、良好に安定転位芯構造が求まることを確認した。安定構造の転位芯と添加原子(置換型)との相互作用では、周期表の位置による傾向が見いだされた。Siなど典型元素や周期表の左と右の遷移金属元素について引力相互作用が大きく、そういう傾向と離れてMnについても引力が見いだされた。これらの結果は、各種添加元素の固溶強化能

(転位の固着や摩擦)の実験とよく合致する。また転位芯の移動過程の準安定構造との相互作用では、典型元素等が安定構造と準安定構造とのエネルギー差を減らす現象が見いだされ、転位移動のパイエルス応力を減らす効果を持つと考えられる。元素による相互作用の違いの機構を局所エネルギー解析等を用いて検討中である。以上のように、転位と添加元素との相互作用を現実的な転位芯構造の原子・電子挙動から解明し、また添加元素の周期表の位置による傾向を systematic に明らかにした研究は初めてであり、基礎科学的な価値は極めて大きい。

(3) 添加元素の偏析した粒界の構造や力学挙動の大規模第一原理計算

Fe 中の粒界について、周期表の左から右の一連の典型元素の偏析について QMAS コードで第一原理計算を行い、偏析エネルギー(粒界と添加原子の相互作用エネルギー)を求め、局所エネルギー分解を行うことで、偏析機構を検討した。これは、偏析によるエネルギー変化を不純物原子、周囲の母相金属原子、不純物と入れ替わる母相金属原子の各々局所的な寄与に分けることで、偏析利得の起源を解析するものである。各添加元素毎に、粒界の各サイトでの偏析エネルギーや偏析の起源が変化している。転位芯との相互作用と同様に、各添加元素の Fe 中の乱れた局所構造における振る舞いが、添加原子と周囲の Fe との間の結合状態や相互作用で整理できることが初めて見出された。

(4) フェーズフィールド法に繋げる手法の検討

微細組織のメゾ・マクロの構造を全て原子・電子レベルで扱うことは不可能であり、粗視化によりフェーズフィールド法等で取り扱わねばならない。マイクロ情報を取り入れた高精度のフェーズフィールド法を実現するため、以上の第一原理計算結果や得られたデータ、知見を、メゾ・マクロのフェーズフィールド法に繋ぐ手法について、第5部会の研究者と連携、協力して、検討を進めた。Ginzburg-Landau 理論で得られる自由エネルギー表式と BCS 理論から導かれる第一原理的なエネルギー表式が等価であるように、第一原理計算で用いる全エネルギー表式からフェーズフィールド法の基礎方程式の導出が可能であることが示された。具体的には、高速フーリエ変換(FFT)を用いた、これまでにない全く新しい基礎方程式が導出された。数回の研究会や国内会議、国際会議等で報告し、議論を重ね、液体からの固体の核生成の問題にも適用しつつある。

VIII. 計算科学技術推進体制の構築

(1)CMSI 体制

CMSI は分野2の活動とリンクさせて形成したコミュニティであるため、その活動は平成27年度末で終了する。しかし、分子研:ポスト「京」重点課題(5)、物性研・金研:ポスト「京」重点課題(7)、3研究所+阪大:「科学技術人材育成コンソーシアム」をそれぞれ受託し、引き続きプロジェクト間連携を継続することになっている。

(2)計算資源効率的マネジメント

CMSI で実施してきた物性研、分子研、金研のスパコン計算資源20%を、上記のプロジェクトに引き続き提供する仕組みを3研究所で継続する体制を構築。また、講習会等に利用するPCクラスターも平成27年度中に更新しており、継続して利用可能となる。

(3) 高並列計算研究支援

CMSI で開発している計算物質科学アプリケーションポータル「MateriApps」は、ユーザー数1万人以上のサイトに発展した。現在、160本以上のアプリが登録されており、改良した検索システムでニーズに合わせたアプリを選定することが可能となった。尚、物性研はアプリ高並列化支援人員2名を平成27年度より増員。

平成 23 年度より支援してきた重点課題、特別支援課題と支援課題の一覧を下記に示す。

会部	別種	部会内 No	研究代表者	課題名
第一部会	重点 I	i	今田正俊	相関の強い量子系の新量子相探索とダイナミックスの解明
		①	今田正俊	電子相関の強い現実物質の新機構解明と制御法開拓に関する研究
		②	遠山貴巳	強相関電子系の励起ダイナミックスの研究
		③	川島直輝	量子モンテカルロ法による新しい量子相・量子臨界現象に関する研究
	重点 II	ii	天能 精一郎	電子状態・動力学・熱揺らぎの緩和と物質理論の新展開
		①	天能 精一郎	超高精度電子状態計算による分子の微細量子構造予測
		②	高塚和夫	分子における電子の動的過程と多体量子動力学
③		斉藤真司	凝縮分子科学系における揺らぎとダイナミクス	
第二部会	重点 III	i	押山淳	密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究
	特別支援	ii	尾形修司	ナノ構造の電子状態から機械的性質までのマルチスケールシミュレーション
		iii	信定克幸	ナノ構造体における光誘起電子ダイナミクスと光・電子機能性量子デバイスの開発
		iv	斎藤峯雄	スピントロニクス／マルチフェロイックスの応用へ指向した材料探索
		v	常行真司	新材料探索
第三部会	重点 IV	i	岡崎 進	全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開
	特別支援	ii	岡本祐幸	拡張アンサンブル法による生体分子の高次構造と機能の解明
		iii	松林伸幸	ポリモルフから生起する分子集団機能
		iv	中井浩巳	ナノ・生態系の反応制御と化学反応ダイナミクス
		v	江原正博	機能性分子設計－光機能分子と非線形外場応答分子の光物性
第四部会	重点 V	i	杉野修	エネルギー変換の界面科学
	重点 6	ii	田中秀樹	水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性
	特別支援	iii	山下晃一	太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算
		iv	吉田紀生	バイオマス利用に向けた酵素反応解析
		v	浅井美博	ナノ構造体材料における高効率非平衡エネルギー変換過程とナノ構造創製の理論シミュレーション
第五部会	重点 7	i	香山正憲	金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発
	特別支援	ii	大野宗一	合金凝固組織の高精度制御を目指した dendrite 組織の大規模数値計算
		iii	西松毅	超高速分子動力学計算による強誘電体薄膜キャパシタの高性能化
		iv	大野かおる	ナノクラスターから結晶までの機能性材料の全電子スペクトルとダイナミクス
築構制体進推			藤堂真治	計算科学推進体制構築
支援課題	i		中野 博生	フラストレート磁性体の計算科学的研究
	ii		芝 隼人	界面活性剤系のマルチラメラ高次構造形成の大規模粗視化分子動力学計算
	iii		大久保 毅	フラストレート磁性体におけるトポロジカル励起の秩序化
	iv		土居 抄太郎	Screened KKR 法による永久磁石材料の第一原理電子状態計算
	v		石村 和也	ナノサイズ分子の新規構造及び機能の探索
	vi		今井 英人	HPCを用いた次世代電池の反応機構の解明
	vii		立川 仁典	物質デザインのための確率論的手法に基づく多成分系量子化学の高度化
	viii		渡辺宙志	多重気泡生成過程における気泡間相互作用の数値的解析

(4) 人材育成

AICS+5 分野で人材育成 TF を設置し、平成 28 年度以降の超並列計算技術に関する教育体制の継続を検討中。実施してきた配信講義を分野全体に展開予定。配信講義のビデオやテキストへのアクセス数が、1 万件を超えており、社会人も含めた教育ツールとして普及している。

(5) 人的ネットワークの形成

・元素戦略プロジェクト〈研究拠点形成型〉の立ち上げと電子論グループ形成に貢献し、実験研究者との共同研究促進。SPring-8、J-PARC、KEK-PF との連携シンポ実施が、具体的課題に対する勉強会に発展。

(6) 研究成果普及

・コミュニティ誌「TORRENT」を 11 巻発行。特集号として、「ケイサン・ブシツ・カガク」のムック本出版。CMSI アプリの講習会を各研究所で実施。USB1 本で科学技術計算が開始できる「MateriApps LIVE!」を開発し、導入・教育ツールとして活用。これまでアメリカで開催されるコンピュータの学会 SC に東大情報基盤センターと共同で出展している。平成 28 年 3 月には、同様のアジア唯一の国際会議がシンガポールへのプロジェクト成果のブース展示を実施し、アプリケーションの普及を海外へも展開する。

(7) 分野を超えた取組の推進

5 分野連携課題としてポスト「京」萌芽的課題への提案を検討中。また、情報統合型物質・材料研究拠点とマテリアルズインフォマティクスとの連携を強化する。

⑥独創性・優位性について

I. 相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明

(1)電子相関の強い現実物質の新機構解明と制御法開拓に関する研究1

高温超伝導機構解明や制御法の開拓に関する研究

・第一原理的に強相関電子系を研究する手法として MACE は本プロジェクトの研究者を含む国際共同研究の中でその骨格が 2004 年に提唱され、その後普及した。我々はこの骨格を精緻化し、大規模計算に適する手法として発展させる点で、世界的な研究の潮流を牽引した。本プロジェクトはこれを「京」を含めて大規模展開し、その実用性、精度、汎用性を、複数の物質に応用しながら世界に先駆けて示した。現在この手法は強相関電子系を第一原理的に解明するための最も強力な手法として位置づけられる。

・まず鉄系超伝導体の 5 軌道有効模型を実際に導いて、電子相関が大きいことを明らかにしたのは他に先駆けた成果である。また第一原理的に導かれた鉄系超伝導体の有効模型で、実験的な磁気秩序モーメントが再現されることを示したのも世界初であり、その後の Yin-Haule-Kotliar の論文に対しても 1 年ほど先んじた。我々の結果は空間相関、ゆらぎを十分に取り込める手法であるのに対して、Yin 達の研究は動的平均場近似を用いている点で、空間相関効果が入り込まれておらず、ゆらぎの考察が十分ではない。また第一原理模型で、鉄系超伝導体が 5 個の d 電子を持つ、強いモット絶縁体の浸みだし効果の現われる領域に属することを示したのも、Liebsch たちの理論模型だけの考察と独立に行なわれた先駆的な研究である。

・鉄系超伝導体で第一原理有効模型の計算で超伝導になることを示したこと、さらに実験とよく一致する相図が得られることを示したのも初めてである。この研究は「京」による大規模計算によってはじめて可能になった。さらにこの計算結果をもとに超伝導機構に電荷ゆらぎと相分離が関わっていることを初めて提唱した。この解明にあたって、実験では不可能なパラメタ領域まで計算を行ない、相分離近傍にのみ例外なく超伝導が生じることを示す網羅的な証拠を提示したが、これには「京」による大規模計算が必須であった。いずれも前例のない大規模計算を要することから、出版後 1 年以上を経た今も追検証が行える研究者は現われていない。そのみならず第一原理的な高精度数値計算で鉄系超伝導体の超伝導相を再現した研究すら、まだ存在しない。全般に鉄系超伝導体を数値的に研究する研究者は多いが、絡み合っている 5 軌道を、第一原理的に強相関効果を忠実に取り入れ、強相関係で必須な空間ゆらぎの効果を取り入れて計算する計算負荷は大きく、他には匹敵する計算グループは現われていない。

・銅酸化物の有効模型(ハバード模型)で相分離が生じることはいくつかの先行計算で示されていたが、網羅的なパラメタサーチによってこの相分離も例外なく強い相関を持って、近傍に超伝導を引き起こすことを示したのは初めてであり、Kivelson らによって単なる理論的な可能性として提示されていた相分離の役割を定量的に明らかにしたのも初めてである。実際先行研究と異なる様相が計算によって初めて明らかとなった。これらに対し、出版から 1 年半以上を経た今も追計算を行なえたグループはない。

・銅酸化物の超伝導でいくつかの発見を行なった。すなわち 1. 超伝導相で高温超伝導を生み出すギャップ関数や異常自己エネルギーのピークが、一体グリーン関数で、正常自己エネルギーと完全に相殺して寄与が見えないこと、2. この機構が正常相での擬ギャップも生むこと、3. 従来から多くの研究で仮定された準粒子と何らかのボソンがカップルして、異常部のピークを生んでいるという推測が否定されること、4. 磁気ゆらぎのようなボソンではなく、隠れたフェルミオンとカップルすることで完璧に数学的構造が再現されること、を示したのは世界で初めてであり、他に例を見ない独創的な理論を生んだ。この結果を得るために計算技術的には有限温度での対角化(ランチョス)法を初めて超伝導状態に適用した。これらは銅酸化物高温超伝導の機構解明に欠かせない成果であり、波及効果が大きい。

・界面のみが超伝導になり、バルクの超伝導の最適状態が自己組織的に生み出されること、このことが翻って界面の実験結果が、バルクの超伝導に相分離が関与していることを強く支持することを示したのは初め

てである。また 5 層にも及ぶ理論模型の網羅的な大規模計算も世界初である。これは数万の変分パラメタの同時最適化を要し、「京」の利用がなければ不可能であった。

(2)電子相関の強い現実物質の新機構解明と制御法開拓に関する研究2

新量子相発見(予言)や機構解明に関する研究

次近接相互作用を持つ三角格子という比較的簡単な理論模型で量子スピン液体状態が存在していることを示したのは初めてである。正方格子についてはいくつもの先行計算があったが、本研究は系のサイズなどの点ですべての先行研究を上回る。実際、本研究のあとに密度行列繰り込み群による計算結果がアメリカのグループから現われたが、密度行列繰り込み群の精度の高さにもかかわらず、小さなサイズの計算しか行っていない。また我々の計算での小さなサイズの計算のみに依拠すると、間違っただ判定する可能性のある、ギャップのあるスピン液体を予想しており、我々の成果を越える研究は現われていない。大きなサイズでの計算をもとにサイズ外挿を行なってギャップのないスピン液体を示した点で、我々の結果は他に例を見ない。

・パイロクロア型のイリジウム酸化物で磁壁のみがトポロジカルに保護された金属界面になることを予言したのは初めてである。イリジウム酸化物に限らず、磁壁のような可動性制御性のある界面がバルクや表面と異なって金属的になる場合があることを指摘したのも初めてであり、概念の上で革新的である。1次元ではポリアセチレンのソリトンがトポロジカルに保護されたギャップ内状態を持つことが示されていたが、これはそれ自体では局在状態であり、金属的なフェルミ面を持つことは不可能であった。今回の予言はポリアセチレンで起きていたことの2次元への拡張と見なせなくもないが、伝導性などの特性で今までにない概念的に新しい発見である。なおこの予言がマイクロ波顕微鏡によって確認され、実験的に確認されつつあることも、実験への予言と検証のサイクルを進める上で大きな成果である。

(3)強相関電子系の励起ダイナミクスの研究

・量子マスター方程式を6桁の時間スケールにまで亘って解く手法を開発したのは初めてであり、これを適用して暗い励起子の役割を定量的に明らかにしたのも初めてである。

・ポンプ・プローブ分光法で非占有側の電子状態を明らかにする方法を初めて提案した。

・DDMRGを一次元系だけでなく二次元系にも適用できるようプログラムの高度化を行ったが、これは世界で初めての試みである。その結果、銅酸化物高温超伝導体のスピン・電荷励起ダイナミクスを36サイト系で計算して、電子型の電荷励起に特徴的な低エネルギー励起があることを突き止めることができた。また、格子と結合した一次元モット絶縁体の第三高調波発生の計算も「京」を用いたDDMRGによって初めて可能になった。

(4)量子モンテカルロ法による新しい量子相・量子臨界現象に関する研究

本研究に対応する研究は海外でもいくつかのグループで行われている。例えばアメリカボストン大学のAnders Sandvikとその共同研究者は、正方格子上で定義されたSU(2)モデルに対してその臨界現象を評価したが、我々の研究では、格子を正方格子とハチの巣格子の2種類、対称性についてもSU(2), SU(3), SU(4)の3つのケースについて系統的に臨界現象を評価することによって、より高い信頼度の結論を得た。

(5)スピン軌道相互作用の物理に関する研究

スピン軌道相互作用の大きな物質を第一原理的に解く手法を開発したのは我々が最初である。この手法を用いてNa₂IrO₃の物性解明に第一原理的に成功したのも初めてである。

II. 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開に関する研究

(1) 高精度電子状態計算による分子の微細量子構造予測に関する研究

(1)-1 高精度電子状態計算によるフラレン誘導体の計算

MP2 法に代表されるポスト・ハートリーフォック法は、高精度な量子化学計算として物理化学のみならず、すべての化学の分野で広く用いられ、その有用性は確立されているが、その高い計算コストのために、100 個以上の原子からなるナノサイズ分子への適用は一般には困難である。我々が開発・実装を行った GELLAN に実装されている超並列 MP2-F12 法は、並列性能と単体性能の両面で優れており、100 原子以上からなる分子の計算も容易に行うことができ、次世代の超並列計算機においてもその有用性が期待できる。

このプログラムを用いることで、フラレン誘導体の構造や安定性について、より信頼のできる結果を得ることができ、ドナー性を有するフラレン誘導体などの存在が示唆されている。さらに、外部修飾基の形状を設計することで、フラレン層のモルフォロジーを制御するなど様々な応用が期待できる。このように我々のプログラムを用いることでナノサイズ分子の分子設計を高精度計算で行うことができる。

(1)-2 モデル空間量子モンテカルロ法の並列プログラム開発

高精度計算のために、様々な量子モンテカルロ法が利用されているが、我々の知るところでは、MSQMC 法のように励起状態を安定に計算できる方法は他に存在しない。光合成に利用される多核金属錯体の計算のためには、全ての金属の d 軌道を考慮に入れる必要があるが、CAS 法に基づく理論では、金属の個数が増加すると、計算に含まれる電子配置の数が階乗で増加するため、すぐに計算不可能になる。このような系でも、MSQMC 計算中に Q-空間に存在する電子配置（スレーター行列式）の中で多数のウォーカーを持つようになったものを、P-空間に移動させる“プロモーション”を利用することによって、全ての d 軌道を含んだ電子配置の中でも重要なものを選択することが可能である。実際の計算でも、初期の P 空間に含まれていない電子配置がプロモーションによって追加され、最初に目的とした状態よりも低いエネルギー領域に新しい状態が現れることがあるため、多核金属錯体の計算においても未知の電子状態を発見することが期待される。

(1)-3 自在回転部位を有するナノ複合分子の構造と動力学（河野）

有限長カーボンナノチューブに化学修飾したフラレン（回転子）を詰め込んだ世界最小のカーボンナノチューブベアリングでは、外枠（ベアリング）に捕らわれた回転子が 2 種類の回転をしていることが、NMR スペクトルから示唆されていた。本研究では、大きな回転子とベアリングの分子間相互作用やそれによって決まる障壁の高さや回転頻度を、京の GELLAN 量子化学プログラムなどの高精度の電子状態計算や密度汎関数緊密結合法(DFTB)を使った動力学(DFTB/MD)によって明らかにした。とくに、実験で観測されている回転の 2 つの異なる挙動が、旋回と自転（主軸回り）であることを明らかにしたことは、計算科学がナノテクノロジーの将来性を広げる上で不可欠であることを示している。その成果は Chem. Science 6, 2746 (2015)に EDGE ARTICLE として掲載され、日刊工業新聞 H27 年 4 月 21 日に「ナノサイズの分子がコマのように回転する仕組みを解明」した研究として紹介された。

近年様々な結晶性分子ジャイロスコープが合成され、複屈折性などの光応答や誘電応答が回転子の運動によって大きく変化することがわかってきた。我々は分子間力を評価できる DFT 法に加えて、計算負荷が軽いながらも分散力も取り扱える DFTB 法に基づく電子状態計算と分子動力学計算を行い、ケイ素骨格を持つ固定子とフェニレン回転子からなる分子ジャイロスコープの結晶構造とナノ秒スケールの回転子の挙動を明らかにしてきた(J. Phys. Chem. C 116 (2012) 24845)。それまで、結晶性分子ジャイロスコープの構造や動的性質を第一原理的に説明した研究は無く、極めて独創的なものであった。その後、この手法を様々な結晶性分子ジ

ジャイロスコープに適用し、理論的手法の有効性を検証し、新規結晶性分子ジャイロスコープ合成への指針を与え、その動的性質の解明につなげてきた(J. Org. Chem. 79 (2014) 8288)。たとえば、合成されたフッ素置換回転子を有する結晶性分子ジャイロスコープの電磁場に対する応答を理論的に調べ、回転子が効率よくテラヘルツ波を吸収し、室温でも連続的な回転を示すようになることを明らかにした。これは、テラヘルツパルスによって回転子運動のオン・オフの高速スイッチングが可能であることを示した全く独創的な研究である。なお、分子のどの部位がどの程度のエネルギーを吸収して全系に散逸させていくかについて、新規に開発した全エネルギーを原子ごとに分割する原子分割エネルギー法を用いたことによって、エネルギーの収支を詳細に解析できるようになった。

以上の研究は、分子のダイナミクスの計算科学をナノテクノロジーやナノマシンの世界に展開したもので、独創性・将来性の極めて高い研究として国内外で評価されている。

(2) 光合成酸素発生中心の構造とスピン状態に関する研究 (上島)

従来法である Broken-Symmetry(BS)法とは異なり本研究で適用した射影 Hartree-Fock(PHF)法は厳密なスピン固有状態での構造最適化や高精度のENDOR スペクトル解析が可能である。また PHF 法は並列計算への拡張が容易であり今後の超並列計算による系の拡大や高精度化の可能性を有している。PHF 法によって光合成酸素発生中心(OEC)でスピン固有状態での最適化構造が得られたことや従来法よりも ENDOR スペクトル実験を再現する微細構造定数の計算を得られたことは本研究の特長である。また、京コンピュータの超並列 FMO 計算によって OEC と周辺アミノ残基の相互作用を解析できるのも独自性があり、優位性がある。

III. 密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現

(1) 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における実空間手法 RSDFT の高度化・高速化とその物質計算への応用

O(N³)の標準的アルゴリズムに基づく第一原理計算は、物質科学の広範な分野で有用な道具となっているが、その多くは平面波基底を用いた実装となっており、高速フーリエ変換を多用するため、超並列計算機において非常に不利なものとなっている。一方、我々が開発を行った RSDFT は実空間グリッドを基底とし、FFT が不要なため高並列計算に向いており、実際「京」フルノードを用いる計算で実行効率 50%を越える性能を達成し、ゴードンベル賞を獲得した。RSDFT は、「京」および次世代の超並列計算機において有用な計算コードとなることが期待される。また、RS-CPMD (Real-Space Car-Parrinello Molecular Dynamics)コードは、「京」において、従来の平面波基底 CPMD(PW-CPMD)よりも高速、かつ多くのリソースを用いても実行効率の大幅な低下はみられないことから、RS-CPMD を用いることで PW-CPMD では実現不可能であった大規模系の第一原理分子動力学計算が可能となった。

(2) 実空間手法による物質計算の高度化とデバイス科学への応用

第一原理伝導特性計算のコードは、原子波動関数基底を用いたものが市販されているが、このようなコードは「京」のような超並列計算機を用いた大規模計算に適していない。並列計算に適した実空間差分法を用いて、大規模な計算モデルを必要とする MOS 界面のキャリア伝導特性計算を行い、キャリア散乱の原因となる界面欠陥を電子レベルで示した例は、本研究が初めてである。

(3) 超大規模計算を目指すオーダー-N 手法の実現

オーダー-N 法第一原理計算手法は進展が著しく状況は変化し続けているが、プログラム CONQUEST は並列化効率、計算サイズ、計算安定性等において世界で最も進んだプログラムの一つである。例えば、PRL 112, 046401(2014) の論文で報告されている計算時間と比べると、CONQUEST は10倍大きな原子数を半分のコア数で同じ計算時間で計算できていることになる。また、構造最適化計算や安定した第一原理分子動力学も可能となっている。

(4) 光励起電子ダイナミクス現象解明の新手法開拓

GCEED の優位性：実在系物質を対象として電子ダイナミクスと電磁場ダイナミクスの両方を自己無撞着に解き、光と電子の相関を露わに取り込める数値計算プログラムは世界的にも殆ど存在しない。また、実時間・実空間グリッド法を用いているために、孤立系、三次元周期系、表面・界面を問わず種々の物質系を対象とし、かつ電場、磁場、電圧等の外場を自由に印加できる利点を持っている。

IV. 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開

ウイルスの丸ごと計算が可能なグループは世界的にもごく少数である。しかしながら、そこで行われている計算のほとんどは植物に関わる小さなウイルスであったり、一方で大きなウイルスであっても単に電子顕微鏡像との比較を行っているのみであり、デモンストレーション的な報告が多く見られ、物理化学としてウイルスの分子論を展開するには至っていない。本研究においては、小児マヒウイルス、B型肝炎ウイルスといった人類にとって重要なウイルスに対する分子科学を展開してきており、さらにはそこで開発した手法を抗ウイルス剤の開発に活用する試みも開始している。このように、科学的基盤を持って研究を展開できている研究グループは他にはほとんどない。

V. エネルギー変換の界面科学

海外での理論的電池研究は基礎的研究と応用的研究のギャップが大きく、酸化還元準位の高精度第一原理計算による電池の溶液側に注目した研究と、第一原理計算アプリをパッケージとして利用した電極材料の探索的研究にピークがある。本課題のように電気化学界面のモデリングに注力した電池過程の研究や、溶液側の動力学的な側面を反映させながら電極側と溶液側をバランスさせて行う研究はあまり例がない。本研究は近似的ながらも信頼性が高く時間のかかる計算手法を用いて電池過程を掘り下げるタイプの研究を行っており、その独自性を高く評価されて国際学会での招待講演依頼が年に数件の割合で来ている。国内では、企業等ではできない規模の先進的な計算を期待する民間企業からの声が寄せられており、それが例えば電気化学コンソーシアムの注目の高さにつながっている。

VI. 水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性

相転移は、系が大規模に変化する非常に遅い現象である。しかしながら、従来の研究では、限られた計算機資源のために、少数分子で短時間のシミュレーションしか行われていなかった。本課題では、京コンピュータの莫大な計算資源を活用することで、現実に近い環境のシミュレーションを行っている。我々は 10 万分子を超える系を用いて、100 ナノ秒程度の時間をかけてメタンハイドレートがゆっくりと分解する過程を解析した。これは、典型的な従来研究と比べ、分子数について時間についても一桁から二桁ほど規模の大きな計算である(従来のシミュレーション研究では、非現実的な高温条件で爆発的に分解する過程しか観察されていない)。これによりはじめて、泡の生成とそれに伴う水和メタンの濃度変化、さらには、その結果としてのハイドレート分解の促進機構が明らかになった。また、純水中の現象だけでなく、塩やアルコールが存在する、より産業利用の現場に近い条件のシミュレーションを行い、これらの溶質が分解速度に与える効果を明らかにした。加えて、我々は、当研究グループが有する統計力学的手法を活用して、ガス貯蔵・輸送に関する諸問題に取り組んだ。その結果、広く用いられている標準理論を拡張することにより、従来は不可能であった水素ハイドレートの物性予測を可能とした。さらに、ハイドレートの生成阻害剤について、これまでの機構を覆す発見を成し遂げた。

VII. 金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発

金属系構造材料は、複雑な「微細組織」(異相界面・析出相、粒界、転位、添加元素・合金元素等の集合体)を形成させることで、最適な強度や延性を実現する。それらの構造や機械的性質を原子・電子レベルから解明することが必要である。しかし、構造乱れや歪・応力がナノやマイクロンまで広範囲に広がる場合が多く、最低でも数千～数万原子の大規模セルの扱いが必要になる。原子間ポテンシャルを用いた経験的な計算がメインであり、第一原理計算の適用は世界的にも例がなかった。異相界面や添加元素の効果を扱うには電子挙動の解明が不可欠で、第一原理計算の適用が求められる。

一方、最近のオーダーN法と大規模並列計算機の組み合わせにより、大規模構造の第一原理計算の可能性も開けてきた。しかし、金属系の場合、半導体等と異なり、電子状態を局在したワニエ関数に変換して扱うことがうまくいかないため、通常オーダーN法は金属系には適用できない。このことも金属系材料の微細組織の高精度計算を困難にしてきた。

本研究では、OpenMXコードを用いることで、世界で初めて金属系の大規模構造の第一原理計算に成功した。OpenMXは、金属系でもオーダーN法の第一原理計算を可能にする、ほとんど唯一のコードであり、電子状態を局所的に解くクラスターのサイズを調整することで、精度と効率を調整しながら金属系を扱うことができる。今回、Fe/TiC界面の部分整合界面、Fe中の転位芯と添加原子の相互作用など、(i)本質的に大規模構造であり、尚且つ(ii)電子挙動がカギを握る、典型的な系の高精度計算に成功した。第一原理計算でなければ得られない知見であり、基礎科学的にも実用的にも、極めて重要な成果である。

また、平面波基底のQMASコードによる局所エネルギー・局所応力解析も世界初であり、Fe/TiCの整合界面、Fe粒界の不純物偏析に適用した。従来の平面波基底の第一原理計算では、エネルギーや応力は、スーパーセル内の積分値や平均値としてしか求まらなかった。今回の手法では、各原子、領域毎にエネルギーや応力が得られ、未曾有の掘り下げた解明が可能となった。Fe/TiC界面では、エネルギーと応力の局所分布から、界面結合とmisfit応力の起源が明らかになり、Fe粒界の不純物偏析では、元素種や偏析サイトに依存した偏析機構の変化が明らかとなった。

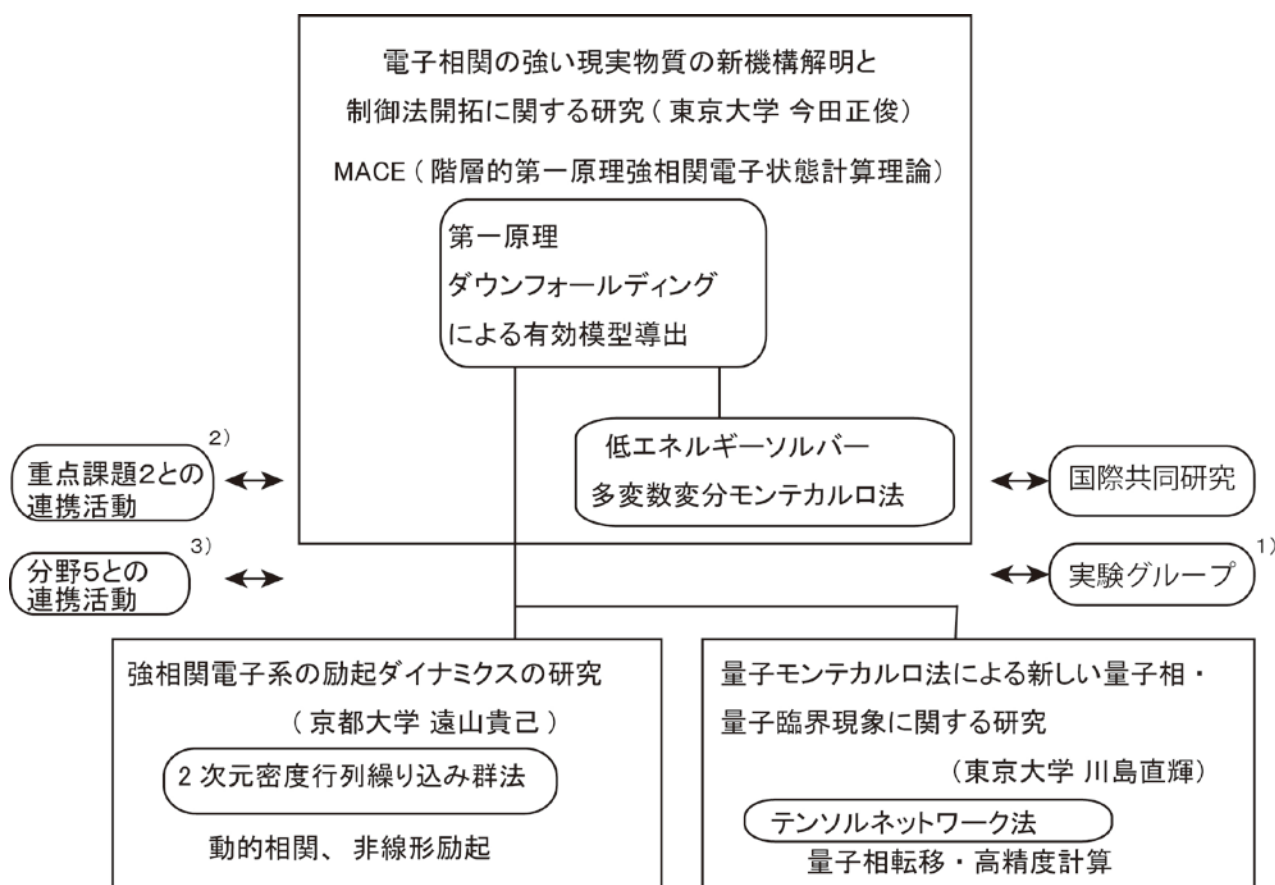
もちろん、実際の微細組織を全て原子・電子レベルで扱うことは事実上不可能であり、粗視化によりフェーズフィールド法等で取り扱わねばならない。第一原理解析の結果をうまく連結させ、高精度のフェーズフィールド法を実現し、マルチスケール計算として確立することが求められるが、両者を連結させる基礎理論や具体的な計算技術は未確立である。現実的な計算技術確立に向けて、今回、理論的な面での大きな進展があった。

VIII. 計算科学技術推進体制の構築

「京」を用いて研究開発してきたアプリケーションソフトウェアは、大規模化に関して優位性がある。とくに、ハイスペックなCMSIアプリを搭載したUSB「MateriApps LIVE!」は、バーチャルbox上でwindowsでもmacでも動くため、迅速に導入が可能となる。教育ツールに最適で、既に数名の先生方が授業の際に用いている。

(2) 研究開発体制について

I. 相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミクスの解明



備考 1):

実験グループとの連携・共同研究には研究課題実施での連携に加えて、国際ワークショップ “International USMM & CMSI Workshop: Frontiers of Materials and Correlated Electron Science –from Bulk to Thin Films and Interfaces” (物質と強相関電子科学の最前線ーバルク物質から薄膜・界面へ)を新学術領域研究「超低速ミューオン顕微鏡が拓く物質・生命・素粒子科学のフロンティア」と共同開催したこと(2016年1月5-9日、東大本郷)および国内研究会「実験と計算科学の協奏が拓く物質科学・物質開発のフロンティア——超伝導とトポロジカル物質の新展開」(2015年3月18-19日)を開催したことなどのコミュニティ形成、共同研究育成、成果発信などでの協力連携を含む。

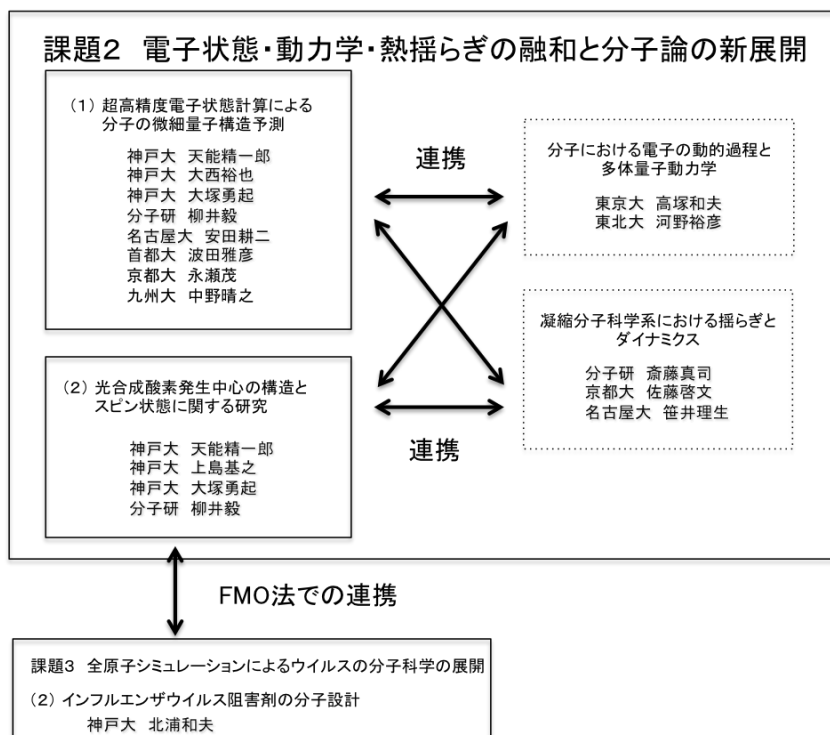
備考 2)

重点課題 2 との連携には、3 度にわたる合同サマースクール(2012, 2013, 2014)による若手研究者交流と育成、共同研究育成を含む。

備考 3)

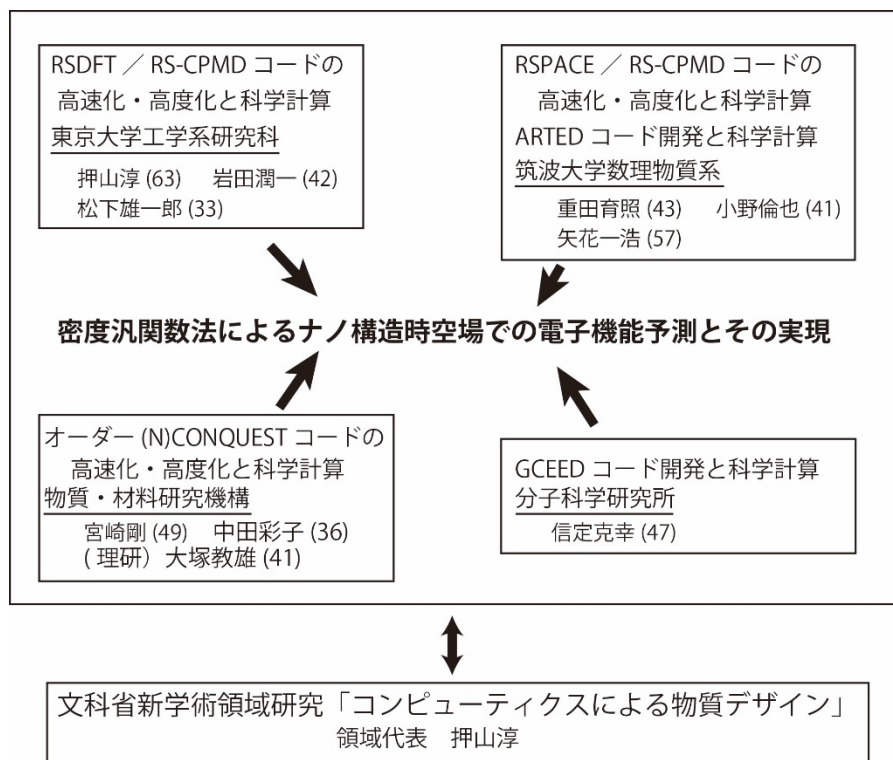
International Workshop on “New Frontier of Numerical Methods for Many-Body Correlations — Methodologies and Algorithms for Fermion Many-Body Problems”(2015年2月東大本郷)を分野 5 と共同開催し、共通する方法論課題を追求し、共通コミュニティ形成を進めたことを含む。

II. 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開に関する研究

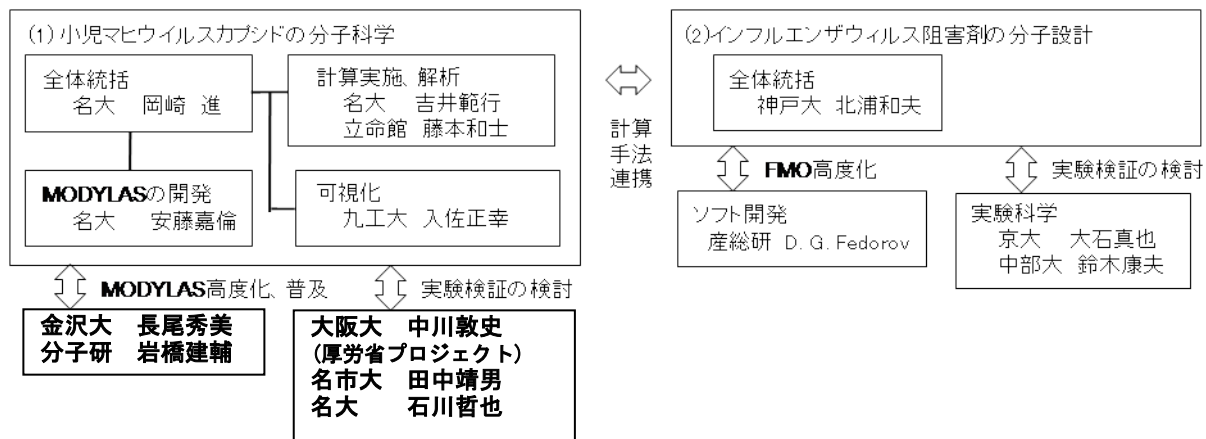


Ⅲ. 密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現

本課題は、主に東京大学、筑波大学、物質材料研究機構、分子科学研究所の4機関において遂行された。それぞれの機関では、独自開発された上述の実空間アプローチを発展させ、京コンピュータ上で高速化・高度化を行い、物質科学計算が実行された。RSDFTとRSPACE、さらにはGCEED、ARTEDは、共通する数学的構造を有す部分があり、HPC(High Performance Computing)技術が共有された。また、計算機科学／情報科学分野との連携も重要であり、文科省新学術領域研究「コンピューティクスによる物質デザイン」参加メンバーをととして、その連携が促進された。



IV. 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開

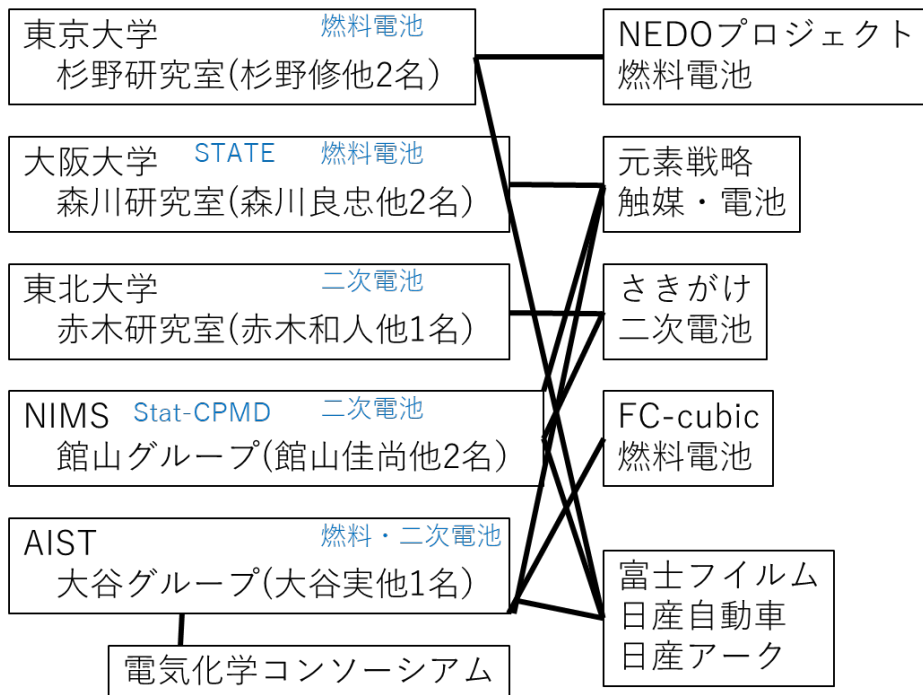


V. エネルギー変換の界面科学

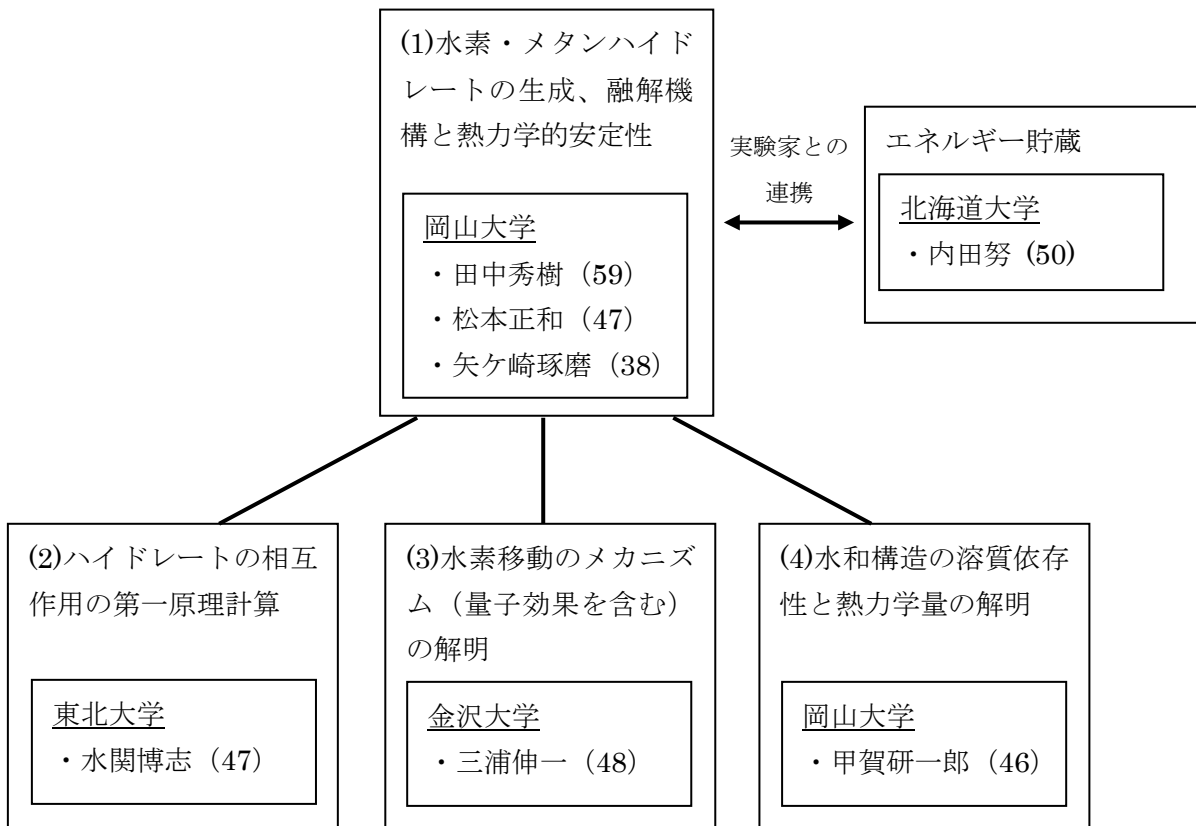
- ・NEDO: 固体高分子形燃料電池実用化推進技術開発、固体酸化物電極
- ・NIMS/GREEN: ナノ材料環境拠点、電極のシミュレーション
- ・JST: エネルギー高効率利用と相界面、リチウムイオン二次電池のシミュレーション
- ・元素戦略: 非水溶媒／遷移金属酸化物界面の平衡構造・電子状態解析

連携プロジェクトの説明

- (1) 燃料電池研究は NEDO「固体高分子形燃料電池実用化推進技術開発、固体酸化物電極」にて、本プロジェクトで開発したシミュレーション手法を白金代替物質に適用している。プロジェクトを通して参加企業との連携研究が進んでいる。NIMS/GREEN「ナノ材料環境拠点」においても白金代替物質の研究を行っている。また「電気化学コンソーシアム」を立ち上げシミュレーションの普及を組織的に行っている。
- (2) Li イオン二次電池研究は JST「エネルギー高効率利用と相界面」および元素戦略「非水溶媒／遷移金属酸化物界面の平衡構造・電子状態解析」にて連携研究を行っている。富士フィルム、日産アークの研究者が京の一般課題・産業利用課題を担当して、本課題と連携して共同研究を行っている。



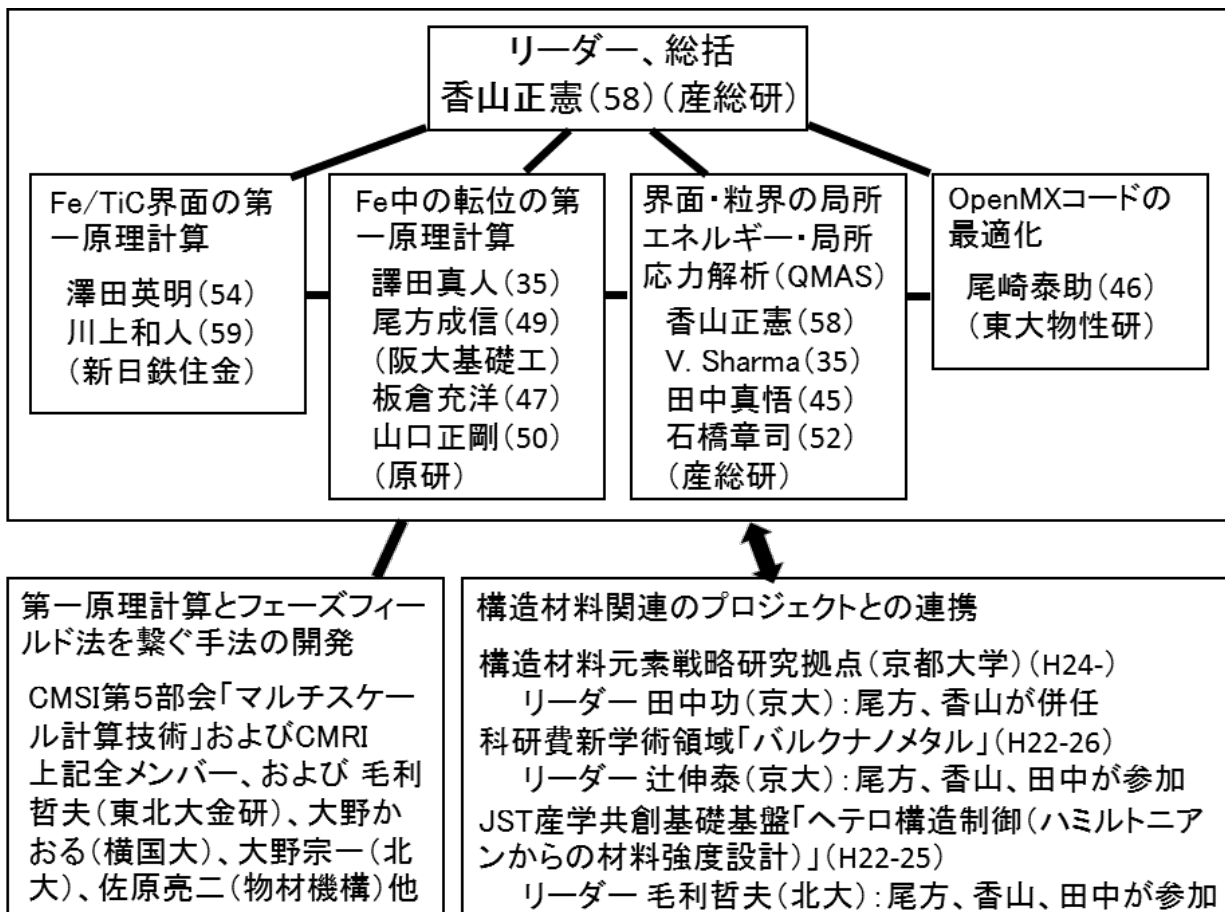
VI. 水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性



VII. 金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発

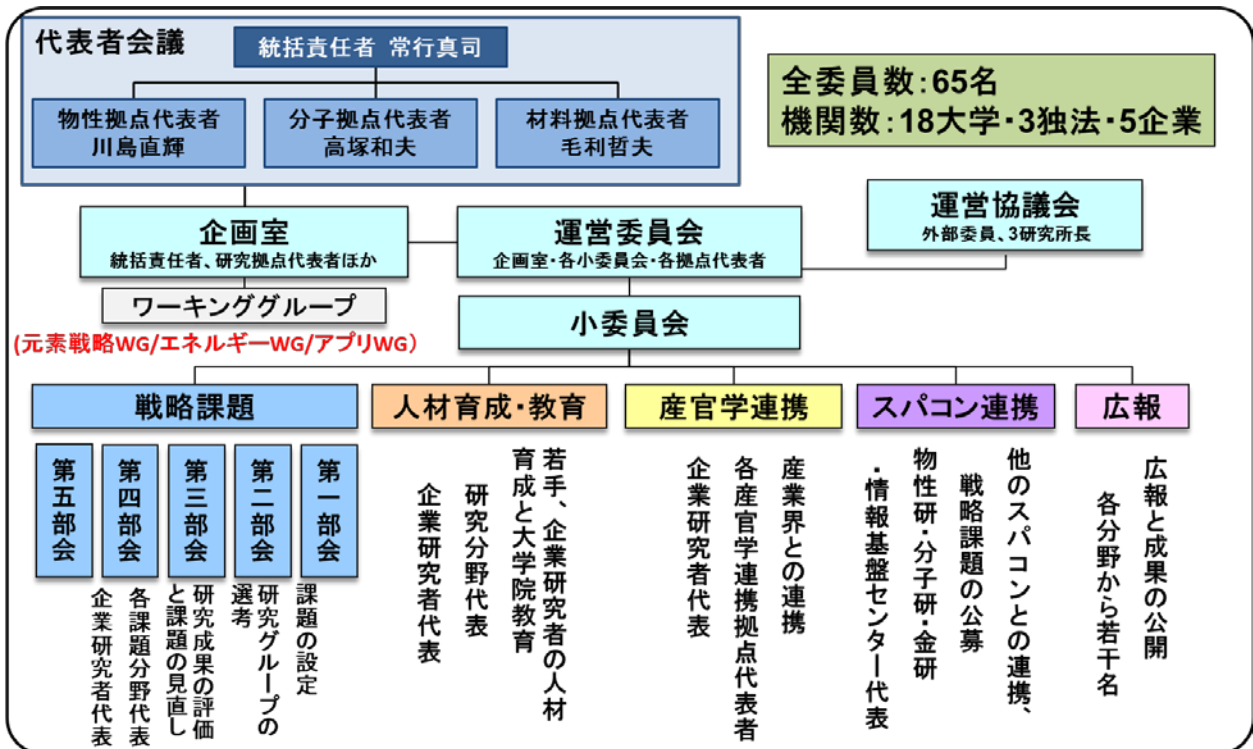
定期的に全体会議を開き、各グループ間の詳細な情報交換、議論を進めてきた。また、第5部会や CMRI (東北大金研拠点) 全体の会合で、研究交流、勉強会を行ってきた。第一原理計算をフェーズフィールド法に繋ぐ手法やマルチスケールの計算技術等については、第5部会の他の課題のメンバーと研究会を開催し、情報交換、議論を進めてきた。

また、金属系構造材料の第一原理計算やシミュレーション、微細構造制御に関する各種関連プロジェクトと緊密に連携し、計算手法や計算結果、実験結果の情報交換や議論を行いながら進めてきた。構造材料元素戦略研究拠点(京都大学)について、香山、尾方が併任している。同じく、香山、尾方、田中が、科研費新学術領域「バルクナノメタル」(H22-26)、JST 産学共創基礎基盤 PJ「革新的構造用金属材料創製を目指したヘテロ構造制御に基づく新指導原理の構築(ハミルトニアンからの材料強度設計)」(H22-25)にメンバーとして参画している。第5部会や CMRI(東北大金研拠点)で、これら関連プロジェクトとも連携した研究会を開催している。



VIII. 計算科学技術推進体制の構築

計算物質科学イニシアティブによる分野2の活動のマネジメントは下記体制で実施している。



(3) 成果の利活用について

I. 関連の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明(平成 25 年 4 月変更)

- ・実験家との共同研究会や国際ワークショップの共同主催を行ない、我々の発見、解明に基づく実験提案を進めている。また実験家とのフォーラム、産業界とのフォーラム(「新機能デバイス・高性能材料のための産官学連携フォーラム」)を立ち上げ、連携を進めている。
- ・HΦ や MVMC、量子モンテカルロ法などのコード公開、普及促進を行なった。ALPS は MateriAps および http://alps.comp-physics.org/mediawiki/index.php/Main_Page などで、MVMC は理研ミニアプリとして公開
並列計算機に対応した数値厳密対角化法による有効モデルソルバーパッケージ「HΦ」バージョン 0.1.1 を公
(2015/10/28) 並列化に対応した新しいアルゴリズムに基づく量子モンテカルロ法プログラム(DSQSS) を
github 上で公開した。
- ・J-PARC や SPring-8 を使って強相関電子系を研究している実験研究者との連携を強め、銅酸化物高温超
伝導体に対する課題での共同研究を実施している。
- ・我々が予言し実験で実証されたトポロジカルな金属磁壁のさらなるエンジニアリングと応用可能性の追求、
新機能開拓は今後実験グループとの連携で進めていく。
- ・ポスト「京」のプロジェクトで本プロジェクトの成果を継承し、最大限活用することができる

II. 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開に関する研究(平成 26 年 4 月変更)

- ・実装を行った GELLAN 量子化学プログラムはリクエストによるバイナリ公開であり、それを通じた成果の普及
を行う。ポスト「京」重点課題⑤でもアプリ、アルゴリズムの継承を行う。
- ・PHF 法により OEC の厳密なスピン固有状態での構造最適化や高精度の ENDOR スペクトル解析が
可能である。
- ・分子同士の配向や分子間の距離が重要となる有機薄膜太陽電池や微妙なエネルギー差が重要な分子
機械・分子スイッチなどの微視的な構造を決定するために、MP2-F12 法が活用できる。

III. 密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現(平成 26 年 4 月変更)

開発した RSDFT を非常に自由度の高いライセンスで公開し、コンピューティクス(計算機・情報・数理科学と計算
物質科学の融合)による、前人未到大規模・高速計算として活用がみこまれる。

IV. 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開(平成 25 年 4 月変更)

1,000 万原子規模の大規模系に対する効率的な自由エネルギー計算は本課題においてのみ可能。汎用ア
プリである MODYLAS により様々な問題に展開可。下記の通り、MODYLAS のアプリケーションソフトを活用した研
究は下記の共同研究をもたらしている。

<他プロジェクトへの発展>

- ・AMED B型肝炎プロジェクト ・総理府 ImPACT「しなやかタフポリマー」

<企業との共同研究>

- ・大日本住友製薬・日東電工・東レ・旭硝子・住友化学・ブリヂストン・三菱樹脂

V. エネルギー変換の界面科学(平成 25 年 4 月変更)

電気化学コンソーシアムなどを通して民間企業の研究者にも普及が進められ、開発の現場での利用が進む
ものと考えられる。今後、データベース化を進めることにより、アプリだけでなく計算結果そのものの普及も進

められるものと考えている。電極や溶液の片方に焦点を当てた研究は多いが、界面での動的過程を扱った研究としては先駆的。未知の電極物質への適用可能性の面で優位性が高い。

VI. 水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性

クラスレートハイドレートに関する、これまで未解決だった様々な統計熱力学的問題を解決。大規模計算の優位を生かし、実験を強く意識した現実に近い問題設定の分子シミュレーションを実行可能。

VII. 金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発

火力発電プラント(Ni 基合金、鉄鋼等)の高効率・長寿命化、橋梁など大型構造物(鉄鋼他)の高信頼性化、輸送車両機器(Al 基、Mg 基、Ti 基の各合金、鉄鋼他)の高強度軽量化など、飛躍的に優れた金属系構造材料の開発への社会的要請は極めて大きい。また、金属系構造材料では、希少元素の使用量も多く、代替等による低減化は大きな効果を持つ。

これらの金属系構造材料の強度や靱性、耐久性は、微細構造に支配される。構造の複雑さやミクロのみならずメゾ・マクロのスケールに渡る現象がカギを握るため、原子・電子レベルからの解明は、他の材料に比べて遅れていた。今回、OpenMX により未曾有の大規模構造の第一原理計算が達成されたこと、転位と周期表の一連の元素との相互作用が systematic に解明できたこと、QMAS で粒界・界面に局所エネルギー・局所応力解析が適用できたことで、金属系構造材料の科学を新たなステージに引き上げる突破口を切り開いた。今後、こうしたアプローチをさらに深め、多くの研究者やグループに広げていくことが期待される。鉄鋼材料においても、未解明の現象がまだ多数残されている。また、鉄鋼以外の金属材料への適用も期待される。

もちろん、微細組織の構造や機能を十分に理解するには、第一原理計算によるミクロ情報をメゾ・マクロに連結し、マルチスケール計算を実現する必要がある。今回、この問題での議論を深め、第一原理からのフェーズフィールド法の基礎付けにおいて大きな進捗があった。今後、この点をさらに深めていくことが必要である。

一方、微細組織の構造や機能の解明に加えて、その形成過程についても、ミクロ情報を取り入れた高精度のマルチスケール計算を実現することが望まれる。通常、熱処理や加工を加えることで、相変態や転位の蓄積、微細粒化などが行われる。融体からの組織形成については、既に第5部会の特別支援課題として、熔融金属の凝固過程を大規模フェーズフィールド法計算(「合金凝固組織の高精度制御を目指したデンドライト組織の大規模計算」)が行われており、今後の発展が期待される。

以上のように、引き続き、①大規模第一原理計算の実行、②第一原理計算をメゾ・マクロのフェーズフィールド法に連結する手法の開発、③製造や組織形成過程まで含めたフェーズフィールド法計算の技術開発と実行を、連携して進めることで、マルチスケール計算技術が確立されると言える。こうした取り組みを、実験観察や製造技術の研究者、各種プロジェクトと連携することで、HPC を中心にした研究のコミュニティーを形成し、若手の育成も進めてきた。この方向を今後も発展させることで、研究や実際の材料開発の飛躍的な発展が期待できる。

VIII. 計算科学技術推進体制の構築

計算科学技術推進体制を構築し、その体制をできる限り既存の組織に組み込んで残すことで、継続的な分野振興活動を実施することが可能となる。その結果、計算物質科学に興味を持ち、その分野で学びたいという若手が増えることが期待される。

4. 今後の展望

I. 関連の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明

・超伝導機構解明や新しいトポジカルな界面の予言、発見はポスト京プロジェクト(重点課題7「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」サブ課題 C、超伝導新機能デバイス材料の研究)として、引き継がれ、デバイス応用の可能性の検討など、さらに大きく展開される予定である。さらに産業界とのフォーラム、実験研究者とのフォーラムで連携を強める。また新たな解明や概念的な革新をもとに基礎科学的な究明を進めることもポスト京のプロジェクトに含まれている。特に本プロジェクトで解明の始まった界面、表面、薄膜に焦点が絞られることになったが、この方針は本プロジェクトでの成果をもとに導き出された戦略である。

・初の可動トポジカル金属界面として注目されるイリジウム酸化物の磁壁を含む、トポジカル高機能現象の開発が実験と連携しながら大きく進展すると予想される。

・実時間ダイナミックス計算法が本プロジェクトで開発され、非平衡状態を利用した新機能開拓(例えば非平衡下での高温超伝導や高機能太陽電池設計)への展望が開けている。ポンプ・プローブ分光をはじめとする超短時間実時間解析実験手段の進展と連携して、この分野の大きな進展が期待できる。

・J-PARC や SPring-8 などの大型研究施設を使った強相関電子系の励起ダイナミックスの実験研究との連携、共同研究を推進する。

・本研究でその様相が明らかとなった脱閉じ込め転移は、異なる対称性を持った相の間に起こる一般的な現象であるため、今後、反強磁性-超伝導転移など磁性体以外での実現の可能性や、素粒子・高エネルギー物理学(ハドロン状態からクォーク・グルーオンプラズマへの転移など)をはじめとする物性理論を超えたさらに広い分野において、本研究の成果が基礎的なデータとして活用されることが期待される。また、本研究の課程で開発された量子モンテカルロ法のプログラムは大部分が

github など、一般的な公開手段によってソースコードのレベルで公開されているだけでなく、マニュアルやチュートリアルなどのドキュメントも充実しているため、今後多くの研究者に利用され、それによって、物性研究の諸分野の発展に貢献することが期待される。

II. 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開に関する研究

PHF 法や MSQMC 法は強相関電子系ソルバとして有用である。人工光合成においては、多核遷移金属錯体が光触媒の候補物質として検討されており、今後、PHF や MSQMC をこれらの系に適用することによってメカニズムを解明し、人工光合成触媒の理論設計に繋がると期待できる。

III. 密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現

RSDFT は超並列計算環境において、従来の平面波基底に基づくコードよりも優位性があり、今後も計算機の発展に追随するよう開発を進め、最先端の計算機上で効率的に動作する第一原理計算コードであり続けることを目指す。第一原理計算は学術的な研究分野だけに止まらず、産業応用の分野でも非常に強力なツールとなっており、RSDFT を非常に自由度の高いライセンスで公開したことは、今後様々な形で経済的・社会的効果へとつながることが期待される。

本プロジェクトで開発してきた RS-CPMD(Real-Space Car-Parrinello Molecular Dynamics)コードは、従来の平面波基底 CPMD では計算が困難であった規模の第一原理分子動力学計算が可能であることから、より現実的な規模の実時間シミュレーションへ展開していきたい。例えば、第一原理シミュレーションによる表面や界面における乱れた構造のサンプリングや、さらには結晶成長過程などが視野に入ってくる。これらの計算の情報から現実的なデバイスにおける性能劣化の原因の究明や、デバイス試料調整における実験条件の提案など、

産業界へ大きなインパクトをもたらすことが期待できる。

RSDFT および RS-CPMD の新たな具体的展開としては、ポスト京重点課題⑦「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」サブ課題 A「高機能半導体デバイス」研究課題において、非平衡グリーン関数法、フルバンド・モンテカルロ法、量子流体法と連成させた、量子論に基づくデバイス・プロセスシミュレータの開発が計画されている。

GCEED については、主として超並列プログラムの開発を行った。新奇光・電子機能デバイス設計のプロダクトランを実行できる準備が十分に整った。

IV. 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開

本課題における研究をさらに発展させ、AMED プロジェクトであるB型肝炎抗ウイルス剤開発へと展開中であり、今後の成果の創出が期待される。また、本課題で開発したアプリを高分子系へと適用し、総理府 ImPACT「しなやかタフポリマー」におけるシミュレーションへと活用している。特に後者は、オールプラスチックカーの開発を目指したものであり、その中で破壊機構の分子論の解明という開発樹脂の実用化に際して極めて重要な役割を担っている。開発が成功すれば、大きな経済効果が見込まれる。さらには、ポスト京プロジェクト(重点課題1「生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築」)に引き継がれ、さらに展開されることが期待されている。

V. エネルギー変換の界面科学

事業終了後は、その多くがポスト京での研究で継続され、より出口志向の研究が展開される予定である。電気化学コンソーシアムでの活動を通して、アプリの電池開発現場での利用を促進する。また、本事業の成果に基づき企業との共同研究が増え、電池開発により貢献できるような研究につながるものと考えている。

VI. 水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性

本課題では、水素ハイドレートを記述するための統計力学的理論を確立した。これは、実験の難しい高圧におけるハイドレートによる水素貯蔵の実用性の評価に役立つだろう。また、本理論は、水素と同様に多重占有が重要なネオンハイドレートにも適用できる。近頃、実験によりネオンハイドレートからネオンだけを抜き出すことで占有率の極めて低いハイドレートを作ることが可能であることが報告されている。この技術を応用することで、新しいガス貯蔵手段が得られるかもしれない。我々が開発した理論は、このような特殊なハイドレートの物性予測に応用することも可能である。

天然ガスの採掘、輸送過程において、ハイドレートの分解、ならびに(再)生成の阻害は大きな問題となっている。本課題により、泡の生成によるハイドレート分解の促進機構と、それに対する塩やアルコールの効果が明らかになった。これらの知見は、産業的な現場における分解過程の速度論的モデルの構築に役立つだろう。また、泡生成を活用した効率的な分解プロセス(泡を吹き込む等)の開発に繋がる可能性もある。

従来は、ハイドレートの速度論的生成阻害剤にはアミド基が不可欠であると考えられていたが、我々の研究により、それが誤りであることが明らかになった。今後の実験研究により、アミド基に拘らず、より自由な発想の元で新規な阻害剤が開発されることが期待される。パイプライン中のハイドレート生成阻害のために、世界中で年間数百億円が投じられているといわれている。もし、従来よりも効率的で安価な阻害剤が開発されたのなら、その経済効果は非常に大きいだろう。

本課題では、クラスレートハイドレートの統計熱力学的な性質に比較的重きが置かれている。分解過程は

動的過程であるが、その機構は自由エネルギーの観点から説明されている。現実の分解過程は、他の動的過程、例えば熱移動や分子拡散の影響を受ける。これらの効果は、結晶生成過程においても重要である。今後は、これら動的過程により重きを置いた解析も行っていく。

セミクラスレートハイドレートは、クラスレートハイドレートと同様に、ガス貯蔵や輸送、さらには冷媒としての利用が期待されている物質である。セミクラスレートハイドレートの構造はクラスレートハイドレートに似ているが、本質的により複雑であり、未だにその理論研究が全く存在しない状態である。本課題で得られた知見や技術は、このセミクラスレートハイドレートの分子機構の解明に役立つであろう。

VII. 金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発

異相界面の整合・部分整合遷移や転位と添加元素の相互作用問題を電子挙動に基づいて解明する成果は、金属の材料科学を新たなステージに引き上げる。第一原理計算の高精度データに基づいた高精度のフェーズフィールド法の展開が期待できる。これらを通じて材料設計や希少元素代替の技術に繋げていくことが期待できる。

VIII. 計算科学技術推進体制の構築

HPCI 戦略プログラムは平成 27 年度に終了するが、ポスト「京」重点課題 Pj が、本年から開始されている。重点課題(5)のエネルギー課題は分子研、重点課題(7)のデバイス・材料課題は物性研と金研が受託している。また、文科省の「科学技術人材育成コンソーシアムの構築」事業が金研を中核機関として、物性研、分子研、阪大ナノセンターの4拠点で採択された。これらのプロジェクト間で、引き続き物性、分子、材料の分野融合による研究を推進していく。また、物性研、分子研、金研のスパコン資源をプロジェクトに供用する仕組みを既存の組織間の連携で検討を開始しており、可能となる見込みである。

以上のように、HPCI 戦略プログラムの活動の特徴であった分野振興活動の一部は組織に吸収されて、組織活性化につながっていく。

5. その他

5年間で40名の博士人材雇用し、約半数が下記ポジションにキャリアアップすることができた。

- ◆企業： 4名(アルゴグラフィック・日産アーク・ソフトベンダー・ベンチャー)
- ◆助教 10名
- ◆特任講師 4名
- ◆准教授 4名

参考1 研究成果の発表

研究開発課題 I : 電子相関の強い現実物質の新機構解明と制御法開拓に関する研究

代表者氏名 今田正俊

1. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会誌・雑誌名）	発表した時期（左記）	国内・国	査読（有）
1	Time-dependent many-variable variational Monte Carlo method for nonequilibrium strongly correlated electron systems	Kota Ido, Takahiro Ohgoe, and Masatoshi Imada	Phys. Rev. B92 (2015-12) 245106 (1-11)		国際	○
2	Hidden fermionic excitation in the superconductivity of the strongly attractive Hubbard model	Shiro Sakai, Marcello Civelli, Yusuke Nomura, and Masatoshi Imada	Phys. Rev. B92 (2015-11) 180503 (1-7)		国際	○
3	Electron Correlation Effects on Topological Phases	Masatoshi Imada, Youhei Yamaji, Moyuru Kurita	J. Phys. Soc. Jpn. 83 (2014-06) 061017 (1-9)		国際	○
4	Metallic Interface Emerging at Magnetic Domain Wall of Antiferromagnetic Insulator: Fate of Extinct Weyl Electrons	Youhei Yamaji, Masatoshi Imada	Phys. Rev. X 4 (2014-05) 021035 (1-27)		国際	○
5	Variational Monte Carlo Method for Electron-Phonon Coupled Systems	Takahiro Ohgoe, Masatoshi Imada	Phys. Rev. B 89 (2014-05) 195139 (1-10)		国際	○
6	Atomically resolved spectroscopic study of Sr2IrO4: Experiment and theory	Qing Li, Guixin Cao, Satoshi Okamoto, Jieyu Yi, Wenzhi Lin, Brian C. Sales, Jiaqiang Yan, Ryotaro Arita, Jan Kunes, Anton V. Kozhevnikov, Adolfo G. Eguiluz, Masatoshi Imada, Zheng Gai, Minghu Pan, David	Scientific Reports3 (2013-10) 3073 (1-7)		国際	○
7	Improved Multi-Variable Variational Monte Carlo Method Examined by High-Precision Calculations of One-Dimensional Hubbard Model	Ryui Kaneko, Satoshi Morita, Masatoshi Imada	J.Phys.Conf.Ser.454 (2013) 012046(1-9)		国際	○

8	Theory of Pseudogap in Underdoped Cuprates	M. Imada, S. Sakai, Y. Yamaji and Y. Motome	J. Phys. Conf. Ser.449 (2013) 012005(1-10)		国際	○
9	Raman-scattering measurements and theory of the energy-momentum spectrum for underdoped $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCuO}_{8+\delta}$ superconductors: Evidence of an s-wave structure for the pseudogap	S. Sakai, S. Blanc, M. Civelli, Y. Gallais, M. Gazayous, Marie-Aude Measson, J. Wen, Z. Xu, G. Gu, G. Sangiovanni, Y. Motome, K. Held, A. Sacuto, A. Georges, and M. Imada	Phys. Rev. Lett.111 (2013-9) 107001 (1-5)		国際	○
10	Phase diagram structure of topological Mott transition for zero-gap semiconductors beyond conventional Landau-Ginzburg-Wilson scenario	Moyuru Kurita, Youhei Yamaji, and Masatoshi Imada	Phys. Rev. B88 (2013-9) 115143(1-21)		国際	○
11	Ab initio two-dimensional multiband low-energy models of $\text{EtMe}_3\text{Sb}[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$ and $\kappa\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{Cu}(\text{NCS})_2$ with comparisons to single-band models	Kazuma Nakamura, Yoshihide, Yoshimoto, Masatoshi, Imada	Phys. Rev. B86 (2012-11) 205117 (1-9)		国際	○
12	High-temperature superconductivity in layered nitrides $\beta\text{-Li}_x\text{MNCI}$ ($M = \text{Ti, Zr, Hf}$): Insights from density functional theory for superconductors	Ryosuke Akashi, Kazuma Nakamura, Ryotaro Arita, Ryotaro and Masatoshi Imada	Phys. Rev. B86 (2012-08) 054513(1-16)		国際	○
13	Effective on-site interaction for dynamical mean-field theory	Yusuke Nomura, Merzuk Kaltak, Kazuma Nakamura, Ciro Taranto, Shiro Sakai, Alessandro Toschi, Ryotaro Arita, Karsten Held, Georg Kresse, and Masatoshi Imada	Phys. Rev. B86 (2012-08) 085117(1-8)		国際	○
14	Ab initio Low-Energy Model of Transition-Metal-Oxide Heterostructure $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$	Motoaki Hirayama, Takashi Miyake, and Masatoshi Imada	J. Phys. Soc. Jpn81 (2012-08) 084708 (1-9)		国際	○
15	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 (2012-04) 177007(1-5)		国際	○

16	Ab initio Studies on the Interplay between Spin-Orbit Interaction and Coulomb Correlation in Sr ₂ IrO ₄ and Ba ₂ IrO ₄	R. Arita, J. Kunes, A. V. Kozhevnikov, A. G. Eguiluz, M. Imada	Phys. Rev. Lett.108 (2012-02) 086403 (1-5)		国際	○
17	Mott Transition and Phase Diagram of κ -(BEDT-TTF) ₂ Cu(NCS) ₂ Studied by Two-Dimensional Model Derived from Ab initio Method	Hiroshi Shinaoka, Takahiro Misawa, Kazuma Nakamura, Masatoshi Imada	J. Phys. Soc. Jpn.81 (2012-02) 034701(1-12)		国際	○
18	Cluster-size dependence in cellular dynamical mean-field theory	Shiro Sakai, Giorgio Sangiovanni, Marcello Civelli, Yukitoshi Motome, Karsten Held, Masatoshi Imada	Physical Review B85 (2012-01) 035102(1-10)		国際	○
19	Theory of pseudogap and superconductivity in doped Mott insulators	Masatoshi Imada, Youhei Yamaji, Shiro Sakai and Yukitoshi Motome	ANNALEN DER PHYSIK523 (2011-08) 629-637		国際	○
20	Stability of Unconventional Superconductivity on Surfaces of Topological Insulators	Youhei Yamaji and Masatoshi Imada	J. Phys. Soc. Jpn. 80 (2011-06) 063704(1-4).		国際	○
21	Mott physics on helical edges of two-dimensional topological insulators	Youhei Yamaji and Masatoshi Imada	Phys. Rev. B 83 (2011-05) 205122 (1-5).		国際	○
22	Topological Insulators from Spontaneous Symmetry Breaking Induced by Electron Correlation on Pyrochlore Lattices	Moyuru Kurita, Youhei Yamaji, and Masatoshi Imada	J. Phys. Soc. Jpn.80 (2011-04) 044708(1-7)		国際	○
23	Magnetic Properties of Ab initio Model for Iron-Based Superconductors LaFeAsO	Takahiro Misawa, Kazuma Nakamura, Masatoshi Imada	J. Phys. Soc. Jpn.80 (2011-01) 023704(1-4)		国際	○

24	Composite-Fermion Theory for Pseudogap, Fermi Arc, Hole Pocket, and Non-Fermi Liquid of Underdoped Cuprate Superconductors	Y. Yamaji and M. Imada	Phys. Rev. Lett.106 (2011-01) 016404(1-4)		国際	○
25	Ab initio Low-Dimensional Physics Opened Up by Dimensional Downfolding: Application to LaFeAsO	K. Nakamura, Y. Yoshimoto, Y. Nohara, M. Imada	J. Phys. Soc. Jpn.79 (2010-12) 123708(1-4)		国際	○
26	Electronic Structure Calculation by First Principles for Strongly Correlated Electron Systems	M. Imada, T. Miyake	J. Phys. Soc. Jpn.79 (2010-11) 112001(1-42)		国際	○
27	Doped high-Tc cuprate superconductors elucidated in the light of zeros and poles of electronic Green's function	S. Sakai, Y. Motome, M. Imada	Phys. Rev. B82 (2010-10) 134505(1-16)		国際	○
28	Electronic and Magnetic Properties of Metallic Phases under Coexisting Short-Range Interaction and Diagonal Disorder	H. Shinaoka and M. Imada	J. Phys. Soc. Jpn. 79 (2010-09) 094711(1-3)		国際	○
29	Theoretical evidence for strong correlations and incoherent metallic state in FeSe	M. Aichhorn , S. Biermann, T. Miyake, A. Georges, M. Imada	Phys. Rev. B82 (2010-08) 064504(1-5)		国際	○
30	Unconventional Quantum Criticality Emerging as a New Common Language of Transition-Metal Compounds, Heavy-Fermion Systems, and Organic Conductors	M. Imada, T. Misawa and Y. Yamaji	J. Phys.: Condens. Matter22 (2010-03) 164206(1-9)		国際	○
31	Comparison of Ab initio Low-Energy Models for LaFePO, LaFeAsO, BaFe2As2, LiFeAs, FeSe and FeTe: Electron Correlation and Covalency	T. Miyake, K. Nakamura, R. Arita, and M. Imada	J. Phys. Soc. Jpn.,79 (2010-03) 044705(1-20)		国際	○

32	Magnetization plateaus by reconstructed quasispinons in a frustrated two-leg spin ladder under a magnetic field	K. Tsutsui, E. Kaneshita, and T. Tohyama	Phys. Rev. B 92 (2015-09) 125114 (1-6)		国際	○
33	Enhanced charge excitations in electron-doped cuprates by resonant inelastic x-ray scattering	T. Sugimoto, M. Mori, T. Tohyama, and S. Maekawa	Phys. Rev. B 92 (2015-07) 014515(1-8)		国際	○
34	Photoinduced in-gap excitations in the one-dimensional extended Hubbard model	T. Sugimoto, M. Mori, T. Tohyama, and S. Maekawa	Phys. Rev. B 91 (2015-06) 245117(1-5)		国際	○
35	Resonant inelastic X-ray scattering in strongly correlated electron systems	T. Tohyama	J. Elec. Spectro. Related Phenomena 200 (2015-06) 209-215		国際	○
36	Density-Matrix Renormalization Group Study of Third Harmonic Generation in One-Dimensional Mott Insulator Coupled with Phonon	S. Sota, S. Yunoki, and T. Tohyama	J. Phys. Soc. Jpn., 84 (2015-04) 054403 (1-4)		国際	○
37	Density-matrix renormalization group study of the extended Kitaev-Heisenberg model	K. Shinjo, S. Sota, and T. Tohyama	Phys. Rev. B 91 (2015-02) 054401 (1-10)		国際	○
38	Ultrafast charge and lattice dynamics in one-dimensional Mott insulator of CuO-chain compound Ca ₂ CuO ₃ investigated by femtosecond absorption spectroscopy	H. Matsuzaki, H. Nishioka, H. Uemura, A. Sawa, S. Sota, T. Tohyama, and H. Okamoto	Phys. Rev. B 91 (2015-02) 081114(R) (1-5)		国際	○
39	Magnetic Raman Scattering Study of Spin Frustrated Systems, -(BEDT-TTF) ₂ X	Y. Nakamura, N. Yoneyama, T. Sasaki, T. Tohyama, A. Nakamura, and H. Kishida	J. Phys. Soc. Jpn., 83 (2014-07) 074708 (1-5)		国際	○

40	High-energy spin and charge excitations in electron-doped copper oxide superconductors	K. Ishii, M. Fujita, I. Sasaki, M. Minola, G. Dellea, C. Mazzoli, K. Kummer, G. Ghiringhelli, L. Braicovich, T. Tohyama, K. Tsutsumi, K. Sato, R. Kajimoto, K. Ikeuchi, K. Yamada, M. Yoshida, M.	Nat. Communi. 5, (2014-04) 3714 (1-8)		国際	○
41	Persistent spin excitations in doped antiferromagnets revealed by resonant inelastic light scattering	C. J. Jia, E. A. Nowadnick, K. Wohlfeld, C.-C. Chen, S. Johnston, T. Tohyama, B. Moritz, and T. P. Devereaux	Nat. Communi. 5, (2014-02) 3314(1-7)		国際	○
42	Double-pulse deexcitations in a one-dimensional strongly correlated system	H. Lu, J. Bonca, and T. Tohyama	EPL 103 (2013-09) 57005 (1-5)		国際	○
43	Effects of frustration on magnetic excitations in a two-leg spin-ladder system	T. Sugimoto, M. Mori, T. Tohyama, and S. Maekawa	Phys. Rev. B 87 (2013-04) 155143 (1-7)		国際	○
44	Spin dynamics and resonant inelastic x-ray scattering in chromium with commensurate spin-density wave order	K. Sugimoto, Z. Li, E. Kaneshita, K. Tsutsui, and T. Tohyama	Phys. Rev. B 87 (2013-04) 134418 (1-8)		国際	○
45	Enhanced Charge Order in a Photoexcited One-Dimensional Strongly Correlated System	H. Lu, S. Sota, H. Matsueda, J. Bonca, and T. Tohyama	Phys. Rev. Lett. 109 (2012-11) 197401 (1-4)		国際	○

46	Spin Excitation Assisted by Non-Softening Phonon for Spin-Peierls Model	T. Sugimoto, S. Sota, and T. Tohyama	J. Phys. Soc. Jpn.,81 (2012-03) 034706 (1-8)		国際	○
47	Relaxation Dynamics of Photocarriers in One-Dimensional Mott Insulators Coupled to Phonons	H. Matsueda, S. Sota, T. Tohyama, and S. Maekawa	J. Phys. Soc. Jpn.,81 (2012-01) 013701 (1-4)		国際	○
48	SU(N) Heisenberg model with multicolumn representations	Tsuyoshi Okubo, Kenji Harada, Jie Lou, Naoki Kawashima	Phys. Rev. B 92 134404(1-5) (2015)		国際	○
49	Scaling relation for dangerously irrelevant symmetry-breaking fields	Tsuyoshi Okubo, Kosei Oshikawa, Hiroshi Watanabe, Naoki Kawashima	Phys. Rev. B 91 174417(1-4) (2015)		国際	○
50	Thermal phase transitions to valence-bond-solid phase in the two dimensional; generalized SU(N) Heisenberg models	Takafumi Suzuki, Kenji Harada, Haruhiko Matsuo, Syngge Todo and Naoki Kawashima	generalized SU(N) Heisenberg models, J. Phys.:Conf. Ser. 592, 012114(1-8)(2015)		国際	○
51	Thermal phase transition of generalized Heisenberg models for SU(N) spins on square and honeycomb lattices	Takafumi Suzuki, Kenji Harada, Haruhiko Matsuo, Syngge Todo and Naoki Kawashima	Phys. Rev. B 91, 094414(1-7) (2015)		国際	○

52	Snapshot Spectrum and Critical Phenomenon for Two-Dimensional Classical Spin Systems	Yukinari Imura, Tsuyoshi Okubo, Satoshi Morita, and Kouichi Okunishi	CMSI International Workshop 2015: Tensor Network Algorithms in Materials Science, 012114		国際	○
53	Symmetry-protected topological order and negative-sign problem for SO(N) bilinear-biquadratic chains	Kouichi Okunishi and Kenji Harada	Phys. Rev. B 89, 134422 (2014)		国際	○
54	Tensor Network Studies of Quantum Frustrated Magnet	Kenji Harada	JPS Conf. Proc. --- Proceedings of the 12th Asia Pacific Physics Conference (APPC12) 3, 014031[7 pages] (2014)		国際	○
55	Kagome-Triangular Lattice Antiferromagnet NaBa ₂ Mn ₃ F ₁	H. Ishikawa, T. Okubo, Y. Okamoto, and Z. Hiroi	J. Phys. Soc. Jpn 83, 043703 (2014)		国際	○
56	Parallelized Quantum Monte Carlo Algorithm with Nonlocal Worm Updates	Akiko Masaki-Kato, Takafumi Suzuki, Kenji Harada, Synge Todo, and Naoki Kawashima	Phys. Rev. Lett. 112, 140603 (5 pages) (2014)		国際	○
57	Phase Transitions with Discrete Symmetry Breaking in Antiferromagnetic Heisenberg Models on a Triangular Lattice	Ryo Tamura, Shu Tanaka, and Naoki Kawashima	JPS Conf. Proc. --- Proceedings of the 12th Asia Pacific Physics Conference (APPC12), 012125 (5 pages)-2014		国際	○

58	Possibility of Deconfined Criticality in SU(N) Heisenberg Models at Small N	Kenji Harada, Takafumi Suzuki, Tsuyoshi Okubo, Haruhiko Matsuo, Jie Lou, Hiroshi Watanabe, Syngge Todo, Naoki Kawashima	Phys. Rev. B 88, 220408(R)(4 pages) (2013)		国際	○
59	Long-distance entanglement in one-dimensional quantum systems under sinusoidal deformation	Toshiya Hikihara, Takafumi Suzuki	Phys. Rev. A 87, 042337(5 pages) (2013)		国際	○
60	Fermion-Induced Decoherence of Bosons in Optical Lattices	Akiko Masaki, and Hiroyuki Mori	Journal of Physics: Conference Series 454, 012048 (4pages) (2013)		国際	○
61	Mott Transition of Bose-Fermi Mixtures in Optical Lattices Induced by Attractive Interactions ,	Akiko Masaki, and Hiroyuki Mori	J. Phys. Soc. Jpn 82, 074002 (4 pages) (2013)		国際	○
62	Visibility Pattern of Bose-Fermi Mixtures in One-Dimensional Incommensurate Lattices	Akiko Masaki, and Hiroyuki Mori	Journal Philosophical Magazine Letters 93, 422-430 (2013)		国際	○
63	Second-Order Phase Transition in Heisenberg Model on Triangular Lattice with Competing Interactions, Phys. Rev. B 87, 214401(5pages) (2013)	Ryo Tamura, Shu Tanaka and Naoki Kawashima	Phys. Rev. B 87, 214401(5pages) (2013)		国際	○
64	Path-Integral Monte Carlo for the Gauge-Fixed Berry Connection and the Local Z2 Berry Phase	Yuichi Motoyama, and Syngge Todo	JPS Conference Proceedings (Proceedings of the 12th Asia Pacific Physics Conference) 1, 12130 (2013)		国際	○

65	Path-integral Monte Carlo method for the local Z2 Berry phase	Yuichi Motoyama, and Synge Todo	Phys. Rev. E 87, 021301(R)[5 pages] (2013)		国際	○
66	Long-Range Order of the Three-Sublattice Structure in the S=1 Heisenberg Antiferromagnet on the Spatially Anisotropi	H. Nakano, S. Todo, and T. Sakai	J. Phys. Soc. Jpn. 82, 043715(5pages) (2013)		国際	○
67	Geometric Allocation Approaches in Markov Chain Monte Carlo	Synge Todo, Hidemaro Suwa	J. Phys.: Conference Series, 473 (2013)		国際	○
68	Huge-scale Molecular Dynamics Simulation of Multibubble Nuclei	H. Watanabe, M. Suzuki, and N. Ito	Comput. Phys. Commun. 184 (10pages) (2013)		国際	○
69	Monte Carlo simulation with aspect ratio optimization: Anomalous anisotropic scaling in dimerized antiferromagnet	Shinya Yasuda, and Synge Todo	J. Phys. Soc. Jpn. Suppl. 61301(5pages) (2013)		国際	○
70	Numerical Analysis of Quantum Phase Transitions with Dynamic Control of Anisotropy	Shinya Yasuda, and Synge Todo	JPS Conference Proceedings (Proceedings of the 12th Asia Pacific Physics Conference) 1, 12127(5pages)-2013		国際	○
71	Various regimes of quantum behavior in an S=1/2 Heisenberg antiferromagnetic chain with fourfold periodicity	H. Yamaguchi, T. Okubo, K. Iwase, T. Ono, Y. Kono, S. Kittaka, T. Sakakibara, A. Matsuo, K. Kindo, and Y. Hosokoshi	Phys. Rev. B 88, 174410 (2013)		国際	○

72	Numerical study of incommensurability of the spiral state on spin-1/2 spatially anisotropic triangular antiferromagnets using entanglement renormalization	Kenji Harada	Phys. Rev. B 86, 184421 (2012)		国際	○
73	Localization of Bose-Fermi Mixtures in One-Dimensional Incommensurate Lattices	Akiko Masaki, and Hiroyuki Mori	J. Phys.: Conf. Series 400, 012043(4pages) (2012)		国際	○
74	Finite-Temperature Transition of the Antiferromagnetic Heisenberg Model on a Distorted Kagome Lattice	H. Masuda, T. Okubo, and H. Kawamura	Phys. Rev. Lett. 109, 057201(5pages) (2012)		国際	○
75	Usefulness of an equal-probability assumption for out-of-equilibrium states: a master equation approach	Tomoaki Nogawa, Nobuyasu Ito, and Hiroshi Watanabe	Phys. Rev. E 86, 41133(8pages) (2012)		国際	○
76	Quantum phases of hard-core bosons on two-dimensional lattices with anisotropic dipole-dipole interaction	Takahiro Ohgoe, Takafumi Suzuki, and Naoki Kawashima	Phys. Rev. A 86, 063635 (6pages) (2012)		国際	○
77	Ground-state phase diagram of the two-dimensional extended Bose-Hubbard model	Takahiro Ohgoe, Takafumi Suzuki, and Naoki Kawashima	Phys. Rev. B 86, 054520(9pages) (2012)		国際	○
78	Bimodal Momentum Distribution of the High-Density Supersolid State	Takahiro Ohgoe, Takafumi Suzuki, and Naoki Kawashima	Journal of Low Temperature Physics 171, 309-314 (2012)		国際	○
79	Validity of projected Gross-Pitaevskii simulation: Comparison with quantum Monte Carlo	Takahiro Ohgoe, Takafumi Suzuki, and Naoki Kawashima	Phys. Rev. E 85, 050105(R) (1-4) (2012)		国際	○
80	Gapless edge states and their stability in two-dimensional quantum magnets	Takafumi Suzuki, and Masahiro Sato	Phys. Rev. B 86, 224411 (7 pages) (2012)		国際	○
81	Quantum phases of hardcore bosons with long-range interactions on a square lattice	Daisuke Yamamoto, Akiko Masaki, Ipei Danshita	Phys. Rev. B 86, 054516(17 pages) (2012)		国際	○
82	Commensurate supersolid of three-dimensional lattice bosons	T. Ohgoe, T. Suzuki, and N. Kawashima	Phys. Rev. Lett. 108, 185302 (1-4) (2012)		国際	○
83	Critical temperature and correlation length of an elastic interaction model for spin-crossover materials	T. Nakada, T. Mori, S. Miyashita, M. Nishino, S. Todo, W. Nicolazzi, and P. A. Rikvold	Phys. Rev. B 85, 054408(8pages) (2012)		国際	○

84	Ordering and Excitation in Orbital Compass Model on a Checkerboard Lattice	J. Nasu, S. Todo, and S. Ishihara	Phys. Rev. B 85, 205141 (12pages)-2012		国際	○
85	Phase diagram and universality of the Lennard-Jones gas-liquid system	Hiroshi Watanabe, Nobuyasu Ito, and Chin-Kun Hu	J. Chem. Phys. 136, 204102 (7 pages) (2012)		国際	○
86	The ALPS project release 2.0: Open source software for strongly correlated systems	B. Bauer, L. D. Carr, A. Feiguin, J. Freire, S. Fuchs, L. Gamper, J. Gukelberger, E. Gull, S. Guertler, A. Hehn, R. Igarashi, S.V. Isakov, D. Koop, P.N. Ma, P. Mates, H. Matsuo, O. Parcollet, G. Pawłowski, J.D. Picon, L. Pollet, E. Santos, V.W. Scarola, U.	J. Stat. Mech. 2011 May, P05001(34pages) (2011)		国際	○
87	Finite-Temperature Transition of the Antiferromagnetic Heisenberg Model on a Distorted kagome Lattice	H. Masuda, T. Okubo, and H. Kawamura	Phys. Rev. Lett 109, 057201(5pages) (2012)		国際	○
88	Successive phase transitions and phase diagrams for the quasi-two-dimensional easy-axis triangular antiferromagnet Rb ₄ Mn(MoO ₄)	R. Ishii, S. Tanaka, K. Onuma, Y. Nambu, M. Tokunaga, T. Sakakibara, N. Kawashima, Y. Maeno, C. Broholm, D. P. Gautreaux, J. Y. Chan, S. Nakatsuji	Lett. 94, 17001(1-5) (2011)		国際	○
89	Dimensional crossover in the quasi-two-dimensional Ising-O(3) model	Y. Kamiya, N. Kawashima, and C. D. Batista	Phys. Rev. B 84, 214429 (1-12) (2011)		国際	○

90	Entanglement spectra of the two-dimensional Affleck–Kennedy–Lieb–Tasaki model: Correspondence between the valence–bond–solid state and conformal field theory	J. Lou, S. Tanaka, H. Katsura and N. Kawashima	Phys. Rev. B 84, 245128 (9 pages) (2011)		国際	○
91	Evaporation–condensation transition of the two–dimensional Potts model in the microcanonical ensemble	T. Nogawa, N. Ito, and H. Watanabe	Phys. Rev. B 84, 061107 (6pages) (2011)		国際	○
92	Quantum Monte Carlo method for pairing phenomena: Supercounterfluid of two–species Bose gases in optical lattices	T. Ohgoe and N. Kawashima	Phys. Rev. A 83, 023622 (1–4) (2011)		国際	○
93	Novel Mechanism of Supersolid of Ultracold Polar Molecules in Optical Lattices	T. Ohgoe, T. Suzuki, and N. Kawashima	J. Phys. Soc. Jpn. 80, 113001 (4 pages)–2011		国際	○
94	Random Fan–Out State Induced by Site–Random Interlayer Couplings	R. Tamura, N. Kawashima, T. Yamamoto, Cedric Tassel, and Hiroshi Kageyama	Phys. Rev. B 84, 214408 (1–11) (2011)		国際	○
95	First–Order Phase Transition with Breaking of Lattice Rotation Symmetry in Continuous–Spin Model on Triangular Lattice	R. Tamura and N. Kawashima	J. Phys. Soc. Jpn. 80, 074008 (1–10) (2011)		国際	○
96	Double–q Order in a Frustrated Random Spin System	R. Tamura and N. Kawashima	J. Phys.: Conf. Series 320, 012013 (1–5) (2011)		国際	○
97	Phase Transition of Generalized Ferromagnetic Potts Model — Effect of Invisible States —	S. Tanaka, R. Tamura, and N. Kawashima	J. Phys.: Conf. Series 297, 012022 (1–7) (2011)		国際	○
98	Critical and Glassy Phases in Non–Disordered Antiferromagnetic Heisenberg Model on Triangular Lattice	Y. Tomita and N. Kawashima	J. Phys. Soc. Jpn. 80, 054001 (5 pages) (2011)		国際	○

99	Molecular Dynamics Study of Rotating Nanodroplets: Finite-size Effects and Nonequilibrium Deformatio	H. Watanabe, N. Mitsuda, T. Nogawa, and N. Ito	J. Phys. : Conf. Ser. 297, 012023 (14pages) (2011)		国際	○
100	Efficient Implementations of Molecular Dynamics Simulations for Lennard-Jones Systems	H. Watanabe, M. Suzuki, and N. Ito	Prog. Theor. Phys. 126, 203-235 (2011)		国際	○
101	Experiment and Theory of Pb(In _{1/2} Nb _{1/2})O ₃ : Antiferroelectric, Ferroelectric, or Relaxor State Depending on Perovskite B-Site Randomness	K. Ohwada, and Y. Tomita	J. Phys. Soc. Jpn. 79, 011012 (1-10) (2010)		国際	○
102	Monte Carlo Study of Relaxor Systems: A Minimum Model of Pb(In _{1/2} Nb _{1/2})O ₃	Y. Tomita, T. Kato, K. Hirota	J. Phys. Soc. Jpn. 79, 023001(1-4) (2010)		国際	○
103	Finite-size scaling for quantum criticality above the upper critical dimension: Superfluid Mott-insulator transition in three dimensions	Y. Kamiya, N. Kawashima, C. D. Batista	Phys. Rev. E 81, 011123(1-7) (2010)		国際	○
104	Entanglement in valence-bond-solid states on symmetric graphs	Hosho Katsura, Naoki Kawashima, Anatol N. Kirillov, Vladimir E. Korepin, Shu Tanaka	Journal of Physics A 43, 255303 (28 pages) (2010)		国際	○
105	Universal characteristics of nonuniform quasi-two-dimensional cold atom systems	T. Sato, T. Suzuki and N. Kawashima	Phys. Rev. A 81, 025601(1-4) (2010)		国際	○
106	Magnetic properties of S=1/2 antiferromagnetic XXZ model on the Shastry-Sutherland lattice	Takafumi Suzuki, Yusuke Tomita, Naoki Kawashima	J. Phys.: Conf. Series 200, 022060 (1-4) (2010)		国際	○
107	Phase Transition in Potts Model with Invisible States	Ryo Tamura, Shu Tanaka, Naoki Kawashima	Prog. Theor. Phys. 124, 381-388 (2010)		国際	○
108	Nonmonotonic dynamics in a frustrated Ising model with time-dependent transverse field	Shu Tanaka and Seiji Miyashita	Phys. Rev. E 81, 051138(1-8) (2010)		国際	○

2. 学会等における口頭・ポスター発表

No.	発表した成果（発表題目、口頭・ポスター発表の別）	発表者氏名	発表した場所（学会名等）	発表した時期	国内・国際の別	招待講演（○を記入）
1	Superconducting Mechanisms of Iron-Based and Cuprate Superconductors	Masatoshi Imada	M. Imada, 9th International Conference on Computational Physics, Singapore,	January 7-11, 2015	国際	○
2	High temperature superconductivity emerging from strongly correlated electrons	Masatoshi Imada	Symposium on Strongly Correlated Physics and Heavy Fermions, University of Tokyo, Tokyo	May 10, 2015.	国際	○
3	Superconducting Mechanisms of Iron-Based and Cuprate Superconductors	Masatoshi Imada	The 4th Super-PIRE REIMEI Workshop on Frontiers of Condensed Matter Physics', Vancouver, Canada	May 16, 2015	国際	○
4	Superconducting Mechanisms of Iron-Based and Cuprate Superconductors	Masatoshi Imada	International workshop on Strong Correlation and Angle Resolved Photonemission Spectroscopy (CORPES15), Paris, France	2015/7/9	国際	○
5	First principles and accurate numerical studies on strongly correlated electrons – case of high-Tc superconductors and materials with strong spin orbit interaction	Masatoshi Imada	Workshop on Interacting Fermions: Precision Theory and Experiment', Trieste, Italy	2015/7/9	国際	○
6	Topological Nature of Two Iridium Oxides	Masatoshi Imada	International Workshop on Novel States in Spin-Orbit Coupled Quantum Matter: from Models to Materials, Santa Barbara, U.S.A.	July 30, 2015.	国際	○
7	Insight from Computational Approaches into Superconductors and Spin Liquids in Molecular Solids	Masatoshi Imada	11th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Magnets, Bad Goepping, Germany	September 8, 2015	国際	○

8	Superconducting mechanism of high-temperature superconductors	Masatoshi Imada	2nd International Workshop on 'Dynamical Mean-Field Approach for Strongly Correlated Materials', Dresden, Germany	2015/10/1	国際	○
9	Mechanism of Superconductivity for Iron-Based Superconductors	Masatoshi Imada	International Symposium on "Novel States in Correlated Condensed Matter - From Model Systems to Real Materials", Koenigstein, Germany	April 8-10, 2014.	国際	○
10	Ab initio Studies on Mechanism for Iron-based Superconductors	Masatoshi Imada	ISSP International Workshop, New Horizon of Strongly Correlated Physics, ISSP, Kashiwa	June 26, 2014.	国際	○
11	Superconducting mechanisms of iron-based and cuprate superconductors	Masatoshi Imada	Novel Quantum States in Condensed Matter 2014', Kyoto, Japan	November 20, 2014.	国際	○
12	Effects of electron correlation on topological materials	Masatoshi Imada	7th International Symposium, Emergent Quantum Phases in Correlated Matter - from topological to first principles approaches, ISSP, Kashiwa	June 13, 2013.	国際	○
13	Electron Correlation Effects on Topological Phases	Masatoshi Imada	International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES2013), University of Tokyo, Japan	August 5-9, 2013	国際	○
14	Iridates as Playgrounds of Topological Physics	Masatoshi Imada	International Workshop on Electronic Properties of Spin-Orbit Driven Oxides, Dresden	September 4-7, 2013.	国際	○

15	Ab Initio Studies of Strongly Correlated Electron Systems	Masatoshi Imada	the 19th International Conference on Magnetism with Strongly Correlated Electron Systems, Busan, Korea	July 11, 2012.	国際	○
16	Spin-Orbit Interactions, Topological Insulators and Topological Transitions	Masatoshi Imada	the 12th Japanese-German Symposium, Emergent Phenomena in Novel Quantum Phases of Condensed Matter, Izu,	July 15, 2012.	国際	○
17	Correlation Effects and Spin-Orbit Interaction	Masatoshi Imada	the 2012 Summer Program of the Aspen Center for Physics, Spin-Orbit Physics in Correlated Electron Systems, Aspen, U.S.A.,	July 20, 2012.	国際	○
18	Theory of Pseudogap in Underdoped Cuprates	Masatoshi Imada	the 12th International Conference on Materials & Mechanisms of Superconductivity, Washington D.C., U.S.A.	August 2, 2012.	国際	○
19	Dynamical mean-field approach on doped Mott insulators and cuprate superconductors	Masatoshi Imada	Dynamical Mean-Field Approach for Strongly Correlated Materials, Dresden, Germany	September 27, 2012.	国際	○
20	Quantum Monte Carlo for Strongly Correlated Systems	Masatoshi Imada	Conference on Computational Physics (CCP2012), Kobe, Japan,	October 15, 2012.	国際	○
21	Iron-Based Superconductors	Masatoshi Imada	International Workshop on Novel Materials: Adding Material-Specific Reality in Physicists' Models, Natal, Brazil	December 11, 2012.	国際	○

22	Renewed Understanding on Mott Transitions	M. Imada	American Physical Society March meeting, Dallas, U.S.A.	March 21–25, 2011.	国際	○
23	Topological Transitions and Topological Insulators	Masatoshi Imada	Tokyo–Cologne Workshop on Strongly Correlated Transition–Metal Compounds, the University of Cologne, Germany	September 7–10, 2011.	国際	○
24	Electron–Correlation Physics of Iron–Based Superconductors	Masatoshi Imada	International Workshop on Electronic Correlations in Models and Materials, Augsburg, Germany	September 15, 2011.	国際	○
25	Topological Transitions and Topological Insulators	Masatoshi Imada	the 26th Nishinomiya–Yukawa Memorial International Workshop “Novel Quantum States in Condensed Matter 2011 (NQS2011)”, Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, Japan,	November 22, 2011.	国際	○
26	Topological Transitions and Topological Insulators	Masatoshi Imada	the 16th International Conference on Recent Progress in Many Body Theories (RPMBT16), Bariloche, Argentina	November 28–December 2, 2011.	国際	○
27	Topological Insulators and Topological Transitions	Masatoshi Imada	the FIRST–QS2C Workshop on “Emergent Phenomena of Correlated Materials”, Okinawa, Japan	December 12–15, 2011.	国際	○
28	Electronic Structure of Correlated Electron Systems Revealed by First Principles Method: Fe–Based Superconductors and Organic Conductors	M. Imada	International Symposium on ‘Novel States in Correlated Condensed Matter – from Model Systems to Real Materials’, Berlin, Germany	March 2, 2010.	国際	○

29	Two Families of Superconductors, Cuprates and Iron-Based Superconductors	M. Imada	International Workshop on "Properties of high temperature superconductors", Munich, Germany	April 13–15, 2010.	国際	○
30	Low-Energy Excitations around Novel Quantum Phase Transitions and Novel Quantum Phases	M. Imada	International Workshop on Statistical Physics of Quantum Systems, Tokyo, Japan	August 2–4, 2010.	国際	○
31	Emergent Mott Physics	M. Imada	Opening Symposium of QS2C Theory Forum, RIKEN, Saitama, Japa	September 27–30, 2010.	国際	○
32	Optical conductivity out of equilibrium in strongly correlated electron systems	Takami Tohyama	Nonequilibrium Phenomena in Complex Matter: new observations and new theories, Krvavec, SLOVENIA	December 13–16, 2015	国際	
33	Enhanced charge excitations in electron-doped cuprates by resonant inelastic X-ray scattering	Takami Tohyama	The 9th International Conference on Inelastic X-ray Scattering (IXS2015), Hsinchu, TAIWAN	November 22–26, 2015	国際	
34	Enhanced charge excitations in electron-doped cuprates by resonant inelastic X-ray scattering	Takami Tohyama	International Conference on Electron Correlation in Nanostructures (ECN-2015), Odessa, UKRAINA	September 3–6, 2015	国際	
35	Nonequilibrium Charge Dynamics in One-Dimensional Extended Hubbard Model	Takami Tohyama	39th Condensed Matter and Materials Meeting, Wagga Wagga, AUSTRALIA	February 3–6, 2015	国際	

36	Photo-induced electron dynamics in one-dimensional extended Hubbard model	Takami Tohyama	The ISSP International Workshop, "New Horizon of Strongly Correlated Physics" (NHSCP2014), Kashiwa, JAPAN	2014/6/17	国際	
37	Photo-induced electron dynamics in one-dimensional extended Hubbard model	Takami Tohyama	5th International Conference on Photoinduced Phase Transitions and Cooperative Phenomena (PIPT5), Bled, SLOVENIA	June 9-13, 2014	国際	
38	Asymmetric doping dependence of L-edge RIXS spectrum in hole- and electron-doped cuprates	Takami Tohyama	5th Gordon Godfrey Workshop on "Spins and Strong Electron Correlations", Sydney, AUSTRALIA	November 25-29, 2013	国際	
39	Electronic excitations in 3d transition-metal compounds revealed by simulated resonant inelastic x-ray scattering", Light and Particle Beams in Materials Science 2013, Tsukuba	Takami Tohyama	Light and Particle Beams in Materials Science 2013, Tsukuba, JAPAN	August 28-31, 2013	国際	
40	Resonant Inelastic X-ray Scattering in Chromium	Takami Tohyama	The 8th International Conference on Inelastic X-ray Scattering (IXS2013), Stanford, USA	August 11-16, 2013	国際	
41	Nonequilibrium photo dynamics of low-dimensional strongly correlated electron systems	Takami Tohyama	Electronic States and Phases Induced by Electric or Optical Impacts, Orsay, FRANCE	September 10-14, 2013	国際	
42	Tensor Network Study of Frustrated Heisenberg Magnets	Naoki Kawashima	APW-CEMS joint workshop, RIKEN, Wako, Japan	Jan. 26, 2016	国際	

43	Quantum Monte Carlo Study of Deconfined Criticality	Naoki Kawashima,	International USMM & CMSI Workshop: Frontiers of Materials and Correlated Electron Science –from Bulk to Thin Films and Interfaces”, Hongo, Tokyo	Jan. 7, 2016	国際	
44	Quantum Monte Carlo study of Quantum Criticality on SO(N) Bilinear Biquadratic Chains	Kenji Harada	The 9th International Conference on Computational Physics (ICCP9)		国際	
45	Quest for Deconfined Criticality in Two-Dimensional Heisenberg Model	Naoki Kawashima	The 9th International Conference on Computational Physics (ICCP9), National University of Singapore, Singapore	Jan. 9, 2015	国際	
46	Numerical attempts to observe deconfined criticality	Naoki Kawashima	New Horizon of Strongly Correlated Physics (NHSCP2014), Kashiwa, Japan	2014/6/26	国際	
47	Ground state calculation of the generalized Kitaev–Heisenberg model using PEPS tensor network method	Tsuyoshi Okubo	CMSI International Workshop 2014: Tensor Network Algorithms in Materials Science, Kobe, Japan,	Japan, Oct. 1, 2014	国際	
48	Deconfined quantum criticality in SU(N) Heisenberg models: Finite size scaling analysis based on Bayesian inference	Kenji Harada	Taipei Tensor Network Workshop, Taipei, Taiwan	Dec. 4–13, 2013	国際	
49	Quantum Phase Transitions in SU(N) J–Q Heisenberg Model	Naoki Kawashima	Statistical Physics of Quantum Matter, GIS NTU Convention Center, Taipei	2013/7/30	国際	

50	Many-variable variational Monte Carlo calculations of the J1-J2 Heisenberg model	Satoshi Morita	Trends in Theory of Correlated Materials 2013, Lausanne, Switzerland		国際	
51	Tensor network renormalization study of the distorted Kitaev-Heisenberg model	T. Okubo	CMSI Kobe International Satellite Meeting 2013:Recent Progress in Tensor Network Algorithms, Kobe, Japan	Oct. 16, 2013	国際	
52	Multiple-Q states and the skyrmion lattice of the triangular-lattice Heisenberg antiferromagnet under magnetic fields	T. Okubo	Trends in Theory of Correlated Materials 2013, Lausanne, Switzerland,	Oct. 5, 2013	国際	
53	Large-scale Monte Carlo Study for Exotic Phase Transitions of Strongly Correlated Quantum Magnets	S. Todo	Collaborative Conference on Materials Research 2013, Jeju, Korea	Jul. 26, 2013	国際	
54	Quantum Phase Transition and Universality of Quantum Spin Models with Strong Spatial Anisotropy	S. Todo	Taipei Tensor Network Workshop 2013, Taipei, Taiwan	Dec. 4, 2013	国際	
55	Massively Parallel Molecular Dynamics Simulations: Implementations and Applications	H. Watanabe	International Workshop on Quantum Chemistry Massively Parallel Programming Now in Supercomputers Tokyo, Japan	Feb. 28, 2012	国際	
56	Quantum Monte Carlo study of SU(N) J-Q models	Naoki Kawashima	Impurities and Textures in Unconventional Magnets, MPIPKS, Dresden, Germany	Apr. 02, 2012	国際	

57	Superfluidity and Supersolidity of Lattice Models	Naoki Kawashima	CQDC12, Juelich, Germany	Oct. 30, 2012	国際	
58	Superfluidity and Supersolidity of Lattice Models	Naoki Kawashima	Supersolidity in Nature, RIKEN, Wako, Japan	Jun. 11, 2012	国際	
59	Edge states in two dimensional spin and bosonic systems Current Topics in Theory of Correlated Materials	Takafumi Suzuki	RIKEN, Wako, Japan	Sep. 2012	国際	
60	Huge-scale molecular dynamics simulation of gas-liquid two-phase flow	H. Watanabe	ICCES'11, Nanjing, China	Apl. 18, 2011	国際	
61	Mixed State and Novel Transitions in Quasi-2D Frustrated Magnets	Naoki Kawashima	International Workshop on Recent Developments of Studies on Phase Transitions, Hongo, Tokyo	2011/6/9	国際	
62	Monte Carlo Simulations on Deconfined Critical Phenomena	Naoki Kawashima	ICTP Workshop on Synergies between Field Theory and Exact Computational Methods in Strongly Correlated Quantum Matter, ICTP, Trieste, Italy	2011/7/25	国際	
63	Quantum Monte Carlo and Non-Ginzburg-Landau Type Phase Transition NTU Colloquium	Naoki Kawashima	NTU, Taipei	Dec. 27, 2011	国際	

64	Quantum Monte Carlo simulation on SU(N) Heisenberg model	Naoki Kawashima	SMQS-IP2011, Juelich	Dec. 18, 2011	国際	
65	Quantum Phase Transitions from Neel State to VBS State	Kanji Harada	SPQS2010, IIS, Komaba	Aug. 4, 2010	国際	

3. 受賞等

No.	名称	受賞者氏名	授賞機関(学会名等)	受賞した時期	国内・国際の別	備考
1	第10回(2016年)日本物理学会 若手奨励賞	酒井志朗	日本物理学会	2016年	国内	
2	第19回久保亮五記念賞(2015)	有田亮太郎	公益財団法人井上科学振興財団	2015年	国内	
3	第6回CMSI研究会「ポスター賞」(2015)	井戸康太	計算物質科学イニシアティブ	2015年	国内	
3	第8回(2014年)日本物理学会若手奨励賞	大久保毅	日本物理学会	2014年	国内	
4	第3回CMSI研究会若手奨励賞(2013)	森田悟史	計算物質科学イニシアティブ	2013年	国内	
5	第3回CMSI研究会ポスター賞(2013)	金子隆威	計算物質科学イニシアティブ	2013年	国内	
6	文部科学大臣表彰 若手科学者賞(2012)	有田亮太郎	文部科学省	2012年	国内	
7	第1回CMSI最優秀ポスター賞(2011)	三澤貴宏	計算物質科学イニシアティブ	2011年	国内	

4. メディアへの情報発信、ウェブサイト等での情報公開

No.	名称	日付	説明	備考
1	京算百景 (2015) Vol. 09, pp. 2-4.		超伝導の仕組みに、「京」で挑	今田正俊, 三澤貴宏
2	固体物理, 49 (2014) No. 8, pp. 473-481.		誌上セミナー 第一原理計算手法による強相関電子系の電子状態の解明 (その6) 低エネルギーソルバー II	今田正俊

3	工業材料, 2014年1月号, Vol. 62 No. 1.		次代を拓く—工業材料キーワード 32 高温超伝導が生まれる過程に新しい電子構造を発見	酒井志朗, 求 幸年, 今田正俊
4	学術の動向 19 (2014) p. 8		特集 科学・公益・社会 —情報発信のあり方を考える	
5	固体物理, 48 (2013) No. 10, pp. 515-521.		誌上セミナー 第一原理計算手法による強相関電子系の電子状態の解明 (その5) 低エネルギーソルバー I	今田正俊, 三宅隆
6	シミュレーション2013年12月号		巻頭言	
7	固体物理, 47 (2012) No. 10, pp. 469-474.		誌上セミナー 第一原理計算手法による強相関電子系の電子状態の解明 (その4) ダウンフォルディングの吟味とその精緻化	今田正俊, 三宅隆
8	固体物理 47 (2012) No. 3, pp. 113-119.		誌上セミナー 第一原理計算手法による強相関電子系の電子状態の解明 (その3) 有効模型へ	今田正俊, 三宅隆

9	固体物理 46 (2011) No. 10, pp. 499-506.		誌上セミナー 第一原理計算手法による強相関電子系の電子状態の解明 (その2) 相関の強い電子系のための第一原理計算手法とその展開	三宅隆, 今田正俊
10	固体物理 46 (2011) No. 7, pp. 351-356.		誌上セミナー 第一原理計算手法による強相関電子系の電子状態の解明 (その1) 概観	今田正俊
11	日本物理学会誌 66 (2011) No. 2, pp. 88-96.		量子相転移と量子臨界の科学	今田正俊
12	固体物理 48 (2013) No. 12, pp. 711-719.		トピックス モット絶縁体の光励起状態と緩和ダイナミクスの理論的研究	遠山貴己
13	計算工学17, 2841-2844 (2012)		量子モンテカルロ法による新しい量子相・量子臨界現象の探求	藤堂真治

14	情報処理学会研究報告 HPC-139(4), 1-9 (2013)		レイテンシコアの高度化・高効率化による将来のHPCIシステムに関する調査研究のためのアプリケーション最適化と異機種計算機環境での性能評価	片桐孝洋, 大島聡史, 中島研吾, 米村崇, 熊洞宏樹, 樋口清隆, 橋本昌人, 高山 恒一, 藤堂眞治, 岩田潤一, 内田和之, 佐藤正樹, 羽角博康, 黒木聖夫
15	情報処理学会研究報告 HPC-137(2), 1-12 (2012)		レイテンシコアの高度化・高効率化による将来のHPCIシステムに関する調査研究のためのアプリケーションと性能評価	片桐孝洋, 大島聡史, 中島研吾, 米村崇, 熊洞宏樹, 樋口清隆, 橋本昌人, 高山恒一, 藤堂眞治, 岩田潤一, 内田和之, 佐藤正樹, 羽角博康, 黒木聖夫
16	岩波講座 計算科学3 計算と物質 (共著)		岩波書店, 2012.	押山 淳, 天能 精一郎, 杉野

5. 広報活動等(ワークショップ・研究会等の開催)

No.	名称	開催日時	開催場所	参加者 (人数)
1	International Workshop on New Frontier of Numerical Methods for Many-Body Correlations — Methodologies and Algorithms for Fermion Many-Body Problems	2015年2月18日(水) ~ 2015年2月21日(土)	Hongo Campus, The University of Tokyo	110
2	International USMM & CMSI Workshop: Frontiers of Materials and Correlated Electron Science -from Bulk to Thin Films and Interfaces, Hongo Campus, The University of Tokyo 国際ワークショップ 「物質と強相関電子科学の最前線ーバルク物質から薄膜・界面へ」	2016年1月5日(火) ~ 2016年1月9日(土)	東京大学本郷小柴ホール、山上会館および工学部4号館 (東京都文京区)	140

3	CMSI Kobe International Satellite Meeting 2013: Recent Progress in Tensor Network Algorithms	2013 年 10月16日~10月18日	AICS, Kobe	
4	CMSI International Workshop 2014: Tensor Network Algorithms in Materials Science	2014年10月20日~10月22日	AICS, Kobe	

参考1 研究成果の発表

研究開発課題Ⅱ：電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開に関する研究

代表者氏名 天能精一郎

1. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会誌・雑誌名等）	発表した時期	国内・国際 の別	査読（有りの 場合○を記 す）
1	Explicitly correlated electronic structure theory from R12/F12 ansätze	S. Ten-no and J. Noga	Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science, 2 114–125 (2012)	2012年1月	国際	○
2	MPI/OpenMP hybrid parallel implementation of second-order Møller-Plesset perturbation theory using numerical quadratures	K. Ishimura and S. Ten-no	Theor. Chem. Acc. 130 (2) 317–321 (2011)	2012年1月	国際	○
3	Explicitly correlated wave functions: summary and perspective	S. Ten-no	Theor. Chem. Acc., 131 1070 (2012) (11 pages)	2012年1月	国際	○
4	Explicitly correlated projector Monte Carlo method based on Slater determinants (PMC-SD-F12 method)	Y. Ohtsuka and S. Ten-no	AIP Conf. Proc., 1456, 97 (2012)	2012年9月	国際	
5	Explicitly correlated four-component relativistic second order Møller-Plesset perturbation theory	S. Ten-no and D. Yamaki	J. Chem. Phys. (communications) 137, 131101 (2012) (4 pages)	2012年10月	国際	○
6	Stochastic determination of effective Hamiltonian for the full configuration interaction solution of quasi-degenerate electronic states	S. Ten-no	J. Chem. Phys., 138 164126 (2013) (7 pages)	2013年4月	国際	○
7	Alternative formulation of explicitly correlated third-order Møller-Plesset perturbation theory	Y.-y. Ohnishi and S. Ten-no	Mol. Phys., 111 2516–2522 (2013)	2013年5月	国際	○
8	Conformational flexibility of loops of myosin enhances the global bias in the actin-myosin interaction landscape	Qing-Miao Nie(Institute for Molecular Science & Nagoya University), Masaki Sasai(Nagoya University), Tomoki P. Terada(Nagoya Univ)	Phys. Chem. Chem. Phys. 16, 6441	2014年3月	国際	○

9	Coupling of Lever Arm Swing and Biased Brownian Motion in Actomyosin	Qing-Miao Nie(Institute for Molecular Science & Nagoya University), Akio Togashi(Nagoya University), Takeshi N. Sasaki(Aichi Shukutoku University), Mitsunori Takano(Waseda University), Masaki Sasai(Nagoya University), Tomoki P. Terada(Nagoya University)	PLoS Comput Biol 10, e1003552	2014年4月	国際	○
10	Interaction energy of large molecules from restrained denominator MP2-F12	Y.-y. Ohnishi, K. Ishimura, and S. Ten-no	J. Chem. Theor. Comp., 111 4857-4861 (2014)	2014年6月	国際	○
11	Photoinduced Electron Transfer in a Dynamic Supramolecular System with Curved p-Structures	S. Hitosugi, K. Ohkubo, R. Iizuka, Y. Kawashima, K. Nakamura, S. Sato, H. Kono, S. Fukuzumi, and H. Isobe	Org. Lett. 16	2014年6月	国際	○
12	Massively parallel MP2-F12 calculations on the K computer	Y.-y. Ohnishi, K. Ishimura, and S. Ten-no	Int. J. Quantum Chem., 115 333-341 (2015)	2014年11月	国際	○
13	Theoretical studies on a carbonaceous molecular bearing: association thermodynamics and dual-mode rolling dynamics	H. Isobe, K. Nakamura, S. Hitosugi, S. Sato, H. Tokoyama, H. Yamakado, K. Ohno and H. Kono	Chem. Sci. 6	2015年2月	国際	○
14	Modulation of Energy Conversion Processes in Carbonaceous Molecular Bearings, Chemistry	S. Hitosugi, K. Ohkubo, Y. Kawashima, T. Matsuno, S. Kamata, K. Nakamura, H. Kono, S. Sato, S. Fukuzumi, and H. Isobe	An Asian Journal, 10	2015年8月	国際	○
15	A study of potential energy curves from the model space quantum Monte Carlo method	Y. Ohtsuka and S. Ten-no	J. Chem. Phys., 143 214107 (2015) (8 pages)	2015年12月	国際	○
16	Configuration interaction combined with spin-projection for strongly correlated molecular electronic structures"	T. Tsuchimochi and S. Ten-no	J. Chem. Phys. (communications), 144 011101 (2016) (5 pages)	2016年1月	国際	○

2. 学会等における口頭・ポスター発表

No.	発表した成果（発表題目、口頭・ポスター発表の別）	発表者氏名	発表した場所（学会名等）	発表した時期	国内・国際 の別	招待講演 (○を記入)
1	F12 theory in conjunction with relativity and determinantal-based QMC method(口頭)	S. Ten-no(Kobe University)	a satellite workshop of the 2012 ICQC "Low-scaling and Unconventional Electronic Structure Techniques" (LUEST)	2012年6月	国際	○
2	Recent advances in explicitly correlated electronic structure theory using cusp conditions(口頭)	S. Ten-no(Kobe University)	the 2012 International Congress of Quantum Chemistry (ICQC)	2012年6月	国際	○
3	Explicitly correlated perturbation theory using cusp conditions(口頭)	S. Ten-no(Kobe University)	Molecular electronic structure at Troy	2012年9月	国際	○
4	The rational generator in explicitly correlated electronic structure theory(口頭)	S. Ten-no(Kobe University)	Theory and Applications in Computational Chemistry (TACC) 2012	2012年9月	国際	○
5	4成分相対論的MP2-F12法のHe様原子とAuH系への適用(口頭)	山木大輔, 天能精一郎(神戸大学)	第6回分子科学討論会	2012年9月	国内	
6	Determinantal-based quantum Monte Carlo method(口頭)	Y. OHTSUKA(Kobe university), S. TEN-NO(Kobe university)	17th Malaysian Chemical congress	2012年10月	国際	○
7	Determinantal-based quantum Monte Carlo method(口頭)	Y. OHTSUKA(Kobe university), S. TEN-NO(Kobe university)	Cambodian Malaysian Chemical Conference	2012年10月	国際	○
8	高精度 MP2-F12 法によるフラレーンの超並列量子化学計算(口頭)	大西裕也、天能精一郎（神戸大学）	第3回 CMSI 研究会 ～超並列計算が拓く新しい計算物質科学～	2012年12月	国内	
9	Stochastic determination of effective Hamiltonian for the full CI solution of quasi-degenerate electronic states(口頭)	S. Ten-no(Kobe University)	7th Molecular Quantum Mechanics 2013, Electron Correlation: The Many-Body Problem at the Heart of Chemistry	2013年6月	国際	○
10	Model space quantum Monte Carlo method for full CI solutions of quasi-degenerate electronic states(口頭)	S. Ten-no(Kobe University)	Second Brock-Kobe Bilateral Workshop on Scientific Computation	2013年8月	国際	○

11	Model space quantum Monte Carlo method for full CI solutions of quasi-degenerate electronic states (口頭)	S. Ten-no(Kobe University)	246th ACS National Meeting & Exposition	2013年8月	国際	○
12	モデル空間量子モンテカルロ法II hybrid並列実装といくつかの応用例(口頭)	大塚勇起(神戸大学), 天能精一郎(神戸大学)	分子科学討論会	2013年9月	国内	
13	モデル空間量子モンテカルロ法 I 基本的なアイデアと予備的计算(口頭)	天能精一郎(神戸大学)	分子科学討論会	2013年9月	国内	
14	超並列MP2-F12法による巨大分子の高精度計算(ポスター)	大西裕也, 天能精一郎(神戸大学), 石村和也(分子科学研究所)	分子科学討論会	2013年9月	国内	
15	アクトミオシンモーターの計算分子科学(口頭)	Qing-Miao Nie(分子科学研究所, 名古屋大学), 笹井理生(名古屋大学), 寺田智樹(名古屋大学)	第4回TCCI研究会	2013年9月	国内	
16	超並列MP2-F12法による巨大分子の相互作用エネルギーの計算(口頭)	大西裕也, 天能精一郎(神戸大学システム情報学研究所)	第4回TCCI研究会	2013年9月	国内	
17	MP2-F12 Study of Interaction Energies of Large Molecule(口頭)	Yu-ya Ohnishi, Seiichiro Ten-no(Kobe University)	CMSI International Symposium 2013	2013年10月	国際	
18	Dynamical energy landscape theory for the force-generation process in actomyosin motor(ポスター)	Qing-Miao Nie(Institute for Molecular Science & Nagoya University), Masaki Sasai(Nagoya University), Tomoki P. Terada(Nagoya University)	Annual Meeting of Biophysical Society Japan	2013年10月	国内	
19	Dynamical energy landscape theory of protein functioning(口頭)	Masaki Sasai(Nagoya University)	Large-Scale Molecular Simulations in Biology, Chemistry, and Physics	2013年11月	国際	○
20	MP2-F12 study of intermolecular energies of large molecules with K computer(ポスター)	Yu-ya Ohnishi, Seiichiro Ten-no(Kobe University), Kazuya Ishimura(Institute of Molecular Science)	5th JCS International Symposium on Theoretical Chemistry	2013年12月	国際	

21	Model Space Quantum Monte Carlo method Hybrid Parallel Implementation and Some Applications(ポスター)	Yuhki Ohtsuka(Kobe university), Seiichiro Ten-no(Kobe university)	5th JCS International Symposium on Theoretical Chemistry	2013年12月	国際	
22	Model space quantum Monte Carlo method: Basic ideas and applications(口頭)	S. Ten-no(Kobe University)	Recent Advances in Correlation Problem 2013	2013年12月	国際	○
23	アクトミオシンモーターの動作機構(口頭)	Qing-Miao Nie(分子科学研究所、名古屋大学), 笹井理生(名古屋大学), 寺田智樹(名古屋大学)	第4回CMSI研究会	2013年12月	国内	
24	Dynamical energy landscape theory for the force-generation process in actomyosin motor(ポスター)	Qing-Miao Nie(Institute for Molecular Science & Nagoya University), Masaki Sasai(Nagoya University), Tomoki P. Terada(Nagoya University)	4th CMSI workshop	2013年12月	国内	
25	アクトミオシンモーターの動作機構(口頭)	笹井理生(名古屋大学)	HPCI戦略プログラム 分野1×分野2シンポジウム	2013年12月	国内	○
26	エネルギー分母を修正した二次の摂動論と分散相互作用系への適用(口頭)	大西裕也(神戸大学), 石村和也(分子科学研究所), 天能精一郎(神戸大学)	第17回理論化学討論会	2014年5月	国内	
27	モデル空間量子モンテカルロ法による基底・励起状態のポテンシャル曲線の計算(口頭)	大塚勇起(神戸大学システム情報), 天能精一郎(神戸大学システム情報)	第17回理論化学討論会	2014年5月	国内	
28	Some results from restrained denominator MP2-F12 and model space quantum Monte Carlo(口頭)	S. Ten-no(Kobe University)	Low-scaling and Unconventional Electronic Structure Techniques (LUEST) 2014, Telluride, Colorado, USA	2014年6月	国際	○
29	Model space quantum Monte Carlo method: Basic ideas and applications(口頭)	S. Ten-no(Kobe University)	IAQMS meeting, Villa Maria Serena in Menton, France	2014年7月	国際	○

30	Dynamics and control of the internal rotations in molecular systems: Crystalline molecular gyroscopes (oral presentation)	Hirohiko Kono	Telluride, Colorado, USA(Telluride Science Research Center (TSRC) Workshop on Molecular Rotors, Motors, and Switches)	2014年7月	国際	○
31	Fundamental aspects of explicitly correlated F12 electronic structure theory(口頭)	S. Ten-no(Kobe University)	Current Topics in Theoretical Chemistry, Nha Trang Workshop 2014, Nha Trang, Viet Nam	2014年8月	+国際	○
32	モデル空間量子モンテカルロ法による高精度計算 (口頭)	大塚勇起(神戸大学システム情報), 天能精一郎(神戸大学システム情報)	第8回分子科学討論会	2014年9月	+国内	
33	分子ベアリングの動力学シミュレーション -有限ナノチューブ中のフラーレンの回転-	中村 公亮	広島大学, 東広島市(第8回分子科学討論会)	2014年9月	国内	
34	露わに相関した二次のダイソン自己エネルギーによるイオン化ポテンシャルの計算 (口頭)	大西裕也(神戸大学), 天能精一郎(神戸大学)	第9回分子科学討論会	2014年9月	+国内	
35	モデル空間量子モンテカルロ法の開発と応用(口頭)	大塚勇起(神戸大学システム情報), 天能精一郎(神戸大学システム情報)	第2回CUTEシンポジウム	2014年10月	+国内	○
36	露わに相関した二次のダイソン自己エネルギーによる有機電子材料のイオン化ポテンシャルの高精度計算(口頭)	大西裕也(神戸大学), 天能精一郎(神戸大学)	第5回TCCI研究会	2014年10月	+国内	
37	原子分割エネルギーによる反応動力学解析 -電場応答への応用-(口頭発表)	河野 裕彦	岡崎コンファレンスセンター, 岡崎市(計算分子科学研究拠点(TCCI)第5回研究会)	2014年10月	国内	○
38	A Density-Functional Based Tight-Binding (DFTB) Approach on the Structure and Dynamics of Crystalline Molecular Gyroscopes(posterior presentation)	CHUNG, Wilfredo Credo	岡崎コンファレンスセンター, 岡崎市(計算分子科学研究拠点(TCCI)第5回研究会)	2014年10月	国内	

39	The structures and dynamics of nanocarbon bearings (poster presentation)	Kosuke Nakamura	Kyoto, Japan (International Symposium on the Synthesis and Application of Curved Organic π -Molecules and Materials (CURO- π))	2014年10月	国際	
40	A study of potential energy curves from the model space quantum Monte Carlo method(口頭)	Yuhki Ohtsuka(Kobe University), Seiichiro Ten-no(Kobe University)	Vietnam Malaysia International Chemical Congress	2014年11月	+国際	○
41	Model space quantum Monte Carlo method: Hybrid parallel implementation and some applications(口頭)	Yuhki Ohtsuka(Kobe University), Seiichiro Ten-no(Kobe University)	18th MALAYSIAN INTERNATIONAL CHEMICAL CONGRESS	2014年11月	+国際	○
42	分子ジャイロスコープの設計とダイナミクス(口頭発表)	河野 裕彦	学士会館, 東京 (GRRM誕生十周年・GRRM14 発表記念講演会「GRRMで拓く化学のニューフロンティア」)	2014年11月	国内	○
43	有機電子デバイス材料分子のための露わに 관련된 電子状態理論	大西裕也(神戸大学), 石村和也(分子科学研究所), 天能精一郎(神戸大学)	第5回CMSI研究会	2014年12月	+国内	
44	自在回転部位を有するナノ複合分子の構造とダイナミクス: 結晶性分子ジャイロスコープと分子ベアリング(口頭発表)	河野 裕彦	東北大学さくらホール, 仙台市(第5回 CMSI 研究会)	2014年12月	国内	○
45	フラグメント分子軌道法を用いた光システムIIの全電子計算(ポスター)	上島 基之(神戸大学大学院 システム情報学研究科), 北浦 和夫(神戸大学大学院 システム情報学研究科), 天能 精一郎(神戸大学大学院 システム情報学研究科)	第5回CMSI研究会	2014年12月	+国内	
46	Massively Parallel Implementation of F12 Electronic Structure Methods(ポスター)	Seiichiro Ten-no(Kobe University)	A Voyage From Molecules to Materials with Numerical Methods for Quantum Chemistry	2015年1月	+国際	○
47	An Atom Resolved View of Chemical Reactions: Application to the Dynamics of Nanocarbons and Crystalline Molecular Gyroscopes (oral presentation)	Hirohiko Kono	Hsinchu, Taiwan (国立交通大学应用化学系講演会)	2015年1月	国際	○

48	超並列計算環境によるF12電子状態理論の最近の発展(口頭発表)	天能精一郎(神戸大学)	スーパーコンピュータワークショップ 自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター	2015年1月	国内	○
49	Model space quantum Monte Carlo method: Hybrid parallel implementation and some applications(ポスター)	Yuhki Ohtsuka(Kobe University), Seiichiro Ten-no(Kobe University)	International Workshop on New Frontier of Numerical Methods for Many-Body Correlations – Methodologies and Algorithms for Fermion Many-Body Problems	2015年2月	+国際	
50	Accurate Calculation of Ionization Potential by Explicitly Correlated Quasi-particle Energy(口頭)	Yu-ya Ohnishi(Kobe University), Seiichiro Ten-no(Kobe University)	11TH INTERNATIONAL CONFERENCE OF COMPUTATIONAL METHODS IN SCIENCES AND ENGINEERING	2015年3月	+国際	
51	高精度F12電子状態理論の発展(口頭発表)	天能精一郎(神戸大学)	先端化学・材料技術部会 コンピュータケミストリ分科会講演会 新化学技術推進協会(JACI)	2015年3月	国内	○
52	Model space quantum Monte Carlo method for degenerate and quasi-degenerate electronic states(口頭)	S. Ten-no(Kobe University)	Stochastic Wavefunction Methods in Quantum Chemistry, Electronic Structure Theory and Condensed Matter Physics, Lausanne (CECAM HQ EPFL) Switzerland	2015年4月	+国際	○
53	Model space quantum Monte Carlo method for degenerate and quasi-degenerate electronic states(口頭)	S. Ten-no(Kobe University)	Recent advances in electronic structure theory (RAEST2015), Nanjing, China.	2015年6月	+国際	○
54	The impact of explicitly correlated F12 theory on modern electronic structure calculations(口頭)	S. Ten-no(Kobe University)	Hylleraas Symposium, the Norwegian Academy of Science and Letters, Oslo, Norway	2015年8月	+国際	○
55	THz-Driven Internal Rotation in Crystalline Molecular Gyroscopes: Density-Functional-Based Tight-Binding Simulation (oral presentation)	Manabu Kanno	Hsinchu, Taiwan (International workshop “Photo-induced Molecular Functioning”)	2015年11月	国際	○
56	Dynamics of Crystalline Molecular Gyroscopes Driven by Terahertz Radiations (poster presentation)	CHUNG, Wilfredo Credo	東京大学, 東京(5th International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Quantum Chemistry and Physics)	2015年11月	国際	

57	Recent Advances in F12 Molecular Electronic Structure Theory(口頭)	S. Ten-no(Kobe University)	The 2015 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem), Honolulu, Hawaii, USA	2015年12月	国際	○
58	Model space quantum Monte Carlo method for degenerate and quasi-degenerate electronic states(口頭)	S. Ten-no(Kobe University)	The 2015 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem), Honolulu, Hawaii, USA	2015年12月	国際	○
59	モデル空間量子モンテカルロ法の並列プログラムの開発と励起状態への応用(ポスター発表)	大塚勇起(神戸大学システム情報), 天能精一郎(神戸大学システム情報)	第6回CMSI研究会, 東京大学 小柴ホール	2015年12月	国内	
60	光システムIIマンガクラスタの電子状態計算および解析(ポスター発表)	上島 基之(神戸大学大学院 システム情報学研究科), 北浦 和夫(神戸大学大学院 システム情報学研究科), 天能 精一郎(神戸大学大学院 システム情報学研究科)	第6回CMSI研究会, 東京大学 小柴ホール	2015年12月	国内	
61	露わに相関した電子状態理論の超並列実装による有機電子材料の高精度計算(ポスター発表)	大西裕也(神戸大学), 石村和也(分子科学研究所), 天能精一郎(神戸大学)	第6回CMSI研究会, 東京大学 小柴ホール	2015年12月	国内	
62	ナノ・バイオ分子の動力学: 分子ベアリング内部 回転とDNA鎖切断(ポスター発表)	河野 裕彦	東京大学, 東京(第6回 CMSI 研究会)	2015年12月	国内	
63	Rotational dynamics of a crystalline molecular gyroscope driven by an external terahertz field (poster presentation)	CHUNG, Wilfredo Credo	東京大学, 東京(第6回 CMSI 研究会)	2015年12月	国内	
64	Model space quantum Monte Carlo: Theory and applications(口頭)	S. Ten-no(Kobe University)	the Seventh Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 7), Kaohsiung, Taiwan	2016年1月	国際	○

3. 受賞等

No.	名称	受賞者氏名	授賞機関(学会名等)	受賞した時期	国内・国際 の別	備考
1	理論化学研究会 優秀ポスター賞	中村 公亮	理論化学研究会(第17回理論化学討論会)	2014年6月	国内	
2	国際量子分子科学アカデミー 会員	天能精一郎	International Academy of Quantum Molecular	2014年7月	国際	

4. メディアへの情報発信、ウェブサイト等での情報公開

No.	名称	日付	説明	備考
1	「分子の回転解明」	2015年4月21日		日刊工業新聞 (19面)
2	「ナノのごまも歳差と自転の運動で回る」	2015年3月2日		Science Portal
3	「人工光合成研究に熱視線」	2015年1月15日		神戸新聞、YAHOOニュース

5. 広報活動等(ワークショップ・研究会等の開催)

No.	名称	開催日時	開催場所	参加者(人 数)
1	ICQC 2015 Satellite Symposium in Kobe, Novel Computational Methods for Quantitative Electronic Structure Calculations	2015 年6月16-20日	Kobe University, Port Island Convention Hall, RIKEN Advanced Institute for Computational Science	122
2				
3				

参考1 研究成果の発表

研究開発課題Ⅲ：密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現

代表者氏名 押山 淳

1. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会誌・雑誌名等）	発表した時期	国内・国際 の別	査読（有りの 場合○を記
1	Real-space method for first-principles electron-transport calculations: Self-energy terms of electrodes for large systems	Tomoya Ono and Shigeru Tsukamoto	Physical Review B	2016年1月	国際	○
2	First-principles study on interlayer states at the 4H-SiC/SiO ₂ interface and the effect of oxygen-related defects	Christopher Kirkham and Tomoya Ono	Journal of Physical Society of Japan	2016年1月	国際	○
3	Structural evolution and optoelectronic applications of multilayer silicene	Z.-X. Guo, Y.-Y. Zhang, H. Xiang, X.-G. Gong and A. Oshiyama	Physical Review B	2015年11月	国際	○
4	Controlling ultrafast currents by the non-linear photogalvanic effect	G. Wachter, S.A. Sato, C. Lemell, X.M. Tong, K. Yabana, J. Burgdoerfer	New Journal of Physical	2015年12月	国際	○
5	Nonlinear electronic excitations in crystalline solids using meta-generalized gradient approximation and hybrid functional in time-dependent density functional theory	S.A. Sato, Y. Taniguchi, Y. Shinohara, K. Yabana	Journal of Chemical Physics	2015年12月	国際	○
6	Time-dependent density functional theory of high-intensity, short-pulse laser irradiation on insulators	S.A. Sato, K. Yabana, Y. Shinohara, T. Otobe, K.M. Lee, G.F. Bertsch	Physical Review B	2015年12月	国際	○
7	Electron doping through lithium intercalation to interstitial channels in tetrahedrally bonded SiC	Y. Sakai and A. Oshiyama	Journal of Applied Physics	2015年11月	国際	○

8	Nonlinear optical response induced by a second-harmonic electric-field component concomitant with optical near-field excitation	Maiku Yamaguchi, Katsuyuki Nobusada, and Takashi Yatsui	Phys. Rev. A	2015年10月	国際	○
9	Electron and Hole Confinement in Hetero-Crystalline SiC Superlattice	Y. Sugihara, K. Uchida and A. Oshiyama	Journal of Physical Society of Japan	2015年8月	国際	○
10	Numerical solver for first-principles transport calculation based on real-space finite-difference method	Shigeru Iwase, Takeo Hoshi, and Tomoya Ono	Physical Review E	2015年6月	国際	○
11	Reaction Pathway and Free Energy Landscape of Catalytic Oxidation of Carbon Monoxide Operated by a Novel Supported Gold-Copper Alloy Cluster	Kenichi Koizumi, Katsuyuki Nobusada, and Mauro Boero	J. Phys. Chem. C	2015年6月	国際	○
12	Control of optical response of a supported cluster on different dielectric substrates	Kenji Iida, Masashi Noda, and Katsuyuki Nobusada	J. Chem. Phys.	2015年6月	国際	○
13	Structural Stability and Energy-Gap Modulation through Atomic Protrusion in Freestanding Bilayer Silicene	Y. Sakai and A. Oshiyama	Physical Review B	2015年5月	国際	○
14	Large-Scale Real-Space Density-Functional Calculations: Moire-Induced Electron Localization in Graphene	A. Oshiyama, J.-i. Iwata, K. Uchida and Y. Matsushita	Journal of Applied Physics	2015年5月	国際	○
15	Crossover between silicene and ultra-thin Si atomic layers on Ag (111) surfaces	Z.-X. Guo and A. Oshiyama	New Journal of Physical	2015年4月	国際	○

16	Optimized multi-site local orbitals in the large-scale DFT program CONQUEST	A. Nakata, D. Bowler, T. Miyazaki	Phys. Chem. Chem. Phys.	2015年3月	国際	○
17	First-principles study on the effect of SiO ₂ layers during oxidation of 4H-SiC	Tomoya Ono and Shoichiro Saito	Applied Physics Letters	2015年2月	国際	○
18	Energetics, Electron States, and Magnetization in Nearly Zigzag-Edged Graphene Nano-Ribbons	S. Suda and A. Oshiyama	Journal of Physical Society of Japan	2015年2月	国際	○
19	Automatic detection of hidden dimension in Outlier FLOODing (OFLOOD) method	R. Harada, T. Nakamura, Y. Shigeta	Chemical Physics Letters	2015年	国際	○
20	Efficient conformational sampling of proteins based on a multi-dimensional inverse histogram: An application to folding of chignolin in explicit solvent	R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta	Chemical Physics Letters	2015年	国際	○
21	Simple, Yet Powerful Methodologies for Conformational Sampling of Proteins	R. Harada, Y. Takano, T. Baba, Y. Shigeta	Physical Chemistry Chemical Physics (invited feature article)	2015年	国際	○
22	Enhanced Conformational Sampling Method for Proteins Based on the TaBoo SeArch (TBSA) Algorithm: Application to the Folding of a Mini-protein, Chignolin	R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta	Journal of Computational Chemistry	2015年	国際	○
23	Unraveling the degradation of artificial amide bonds in nylon oligomer hydrolase: from induced-fit to acylation processes	T. Baba, M. Boero, K. Kamiya, H. Ando, S. Negoro, M. Nakano, Y. Shigeta	Physical Chemistry Chemical Physics,	2015年	国際	○

24	Protein folding pathways extracted by Outlier FLOODing method (OFLOOD)	R. Harada, T. Nakamura, Y. Takano, Y. Shigeta	Journal of Computational Chemistry	2015年	国際	○
25	Car Parrinello Molecular Dynamics	M. Boero and A. Oshiyama	Encyclopedia of Nanotechnology (Springer)	2015年	国際	○
26	Attosecond band-gap dynamics in silicon	M. Schultze, K. Ramasesha, C.D. Pemmaraju, S.A. Sato, D. Whitmore, A. Gandman, J.S. Prell, L.J. Borja, D. Prendergast, K. Yabana, D.M. Neumark, S.R. Leone	Science	2014年12月	国際	○
27	Stable and Efficient Linear Scaling First-Principles Molecular Dynamics for 10000+ Atoms	M. Arita, D. Bowler, T. Miyazaki	J. Chem. Theory Comput	2014年11月	国際	○
28	Maxwell+TDDFT multi-scale simulation for laser-matter interactions	S.A. Sato, K. Yabana	Journal of Advanced Simulation in Science and Engineering	2014年10月	国際	○
29	Atomic corrugation and electron localization due to Moire patterns in twisted bilayer graphenes	K. Uchida, S. Furuya, J.-I. Iwata and A. Oshiyama	Physical Review B	2014年10月	国際	○
30	Large-scale DFT simulations with a linear-scaling DFT code Conquest on K-computer	M. Arita, S. ARAPAN, D. Bowler, T. Miyazaki	JOURNAL OF ADVANCED SIMULATION IN SCIENCE AND ENGINEERING	2014年10月	国際	○
31	Electron Confinement due to Stacking Control of Atomic Layers in SiC Polytypes: Role of Floaing States and Spontaneous Polarization	Y.-i. Matsushita S. Furuya, and A. Oshiyama	Journal of Physical Society of Japan	2014年9月	国際	○
32	Efficient Calculations with Multisite Local Orbitals in a Large-Scale DFT Code CONQUEST	A. Nakata, D. Bowler, T. Miyazaki	J. Chem. Theory Comput 10, 4813	2014年9月	国際	○

33	Ab Initio Simulation of Electrical Currents Induced by Ultrafast Laser Excitation of Dielectric Materials	G. Wachter, C. Lemell, J. Burgdoerfer, S.A. Sato, X.-M. Tong, K. Yabana	Physical Review Letters	2014年8月	国際	○
34	Electronic Structures and Magnetic Anisotropy Energies of Graphene with Adsorbed Transition-Metal Adatoms	Huy Duy Nguyen and Tomoya Ono	Journal of Physical Society of Japan	2014年8月	国際	○
35	Performance evaluation of ultra-largescale first-principles electronic structure calculation code on the K computer	. Hasegawa, J.-I. Iwata, M. Tsuji, D. Takahashi, A. Oshiyama, K. Minami, T. Boku, H. Inoue, Y. Kitazawa, I. Miyoshi, M. Yokokawa	International Journal High Performance Computing Applications	2014年8月	国際	○
36	Surface energy of Si(110)- and 3C-SiC(111)-terminated surfaces	E. K. K. Abavare, I.-I. Iwata, A. Yaya and A. Oshiyama	Physica Status Solidi B	2014年7月	国際	○
37	Structural Tristability and Deep Dirac States in Bilayer Silicene on Ag(111) Surfaces	Z.-X. Guo and A. Oshiyama	Physical Review B	2014年4月	国際	○
38	Interstitial Channels that Control Band Gaps and Effective Masses in Tetrahedrally Bonded Semiconductors	Y. Matsushita and A. Oshiyama	Physical Review Letters	2014年4月	国際	○
39	Magic Angle and Height Quantization in Nanofacets on SiC(0001) Surfaces	K. Sawada, J.-I. Iwata and A. Oshiyama	Applied Physics Letters	2014年2月	国際	○
40	Diameter-Selective Alignment of Carbon Nanotubes on Si(001) Stepped Surfaces	B. Enkhtaivan, M. Yoshimura, J.-I. Iwata, and A. Oshiyama	Journal of Chemical Physics	2014年1月	国際	○
41	On the induced-fit mechanism of substrate-enzyme binding structures of Nylon-oligomer hydrolase	T. Baba, R. Harada, M. Nakano, Y. Shigeta	Journal of Computational Chemistry	2014年	国際	○

42	A Nylon-oligomer Hydrolase Promoting Cleavage Reactions in Unnatural Amide Compounds	K. Kamiya, T. Baba, M. Boero, T. Matsui, S. Negoro, Y. Shigeta	Journal of Physical Chemistry Letters	2014年	国際	○
43	Fluctuation Flooding Method (FFM) for accelerating conformational transitions of proteins	R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta	Journal of Chemical Physics	2014年	国際	○
44	Doping Effect on Magnetism and Transport Property of Heterojunction between Carbon and Boron Nitride Nanotubes	Huy Duy Nguyen and Tomoya Ono	The Journal of Physical Chemistry C	2013年10月	国際	○
45	Convergence of the Broyden density mixing method in noncollinear magnetic systems	Marcus Heide and Tomoya Ono	Journal of Physical Society of Japan	2013年10月	国際	○
46	Density-functional theory study of gramicidin A ion channel geometry and electronic properties	M. Todorovic, D. Bowler, Michael J. Gillan, T. Miyazaki	JOURNAL OF THE ROYAL SOCIETY INTERFACE 10, 20130547	2013年9月	国際	○
47	Absence and Presence of Dirac Electrons in Silicene on Substrates	Z.-X. Guo, S. Furuya, J.-I. Iwata and A. Oshiyama	Physical Review B	2013年6月	国際	○
48	Atomic Reconstruction and Electron States at Interfaces between 3C-SiC(111) and Si(110)	E. K. K. Abavare, J.-I. Iwata and A. Oshiyama	Physical Review B	2013年6月	国際	○
49	Absence of Dirac Electrons in Silicene on Ag(111) Surfaces	Z.-X. Guo, S. Furuya, J.-I. Iwata and A. Oshiyama	Journal of Physical Society of Japan	2013年6月	国際	○
50	Atom-Scale Reaction Pathways and Free-Energy Landscapes in Oxygen Plasma Etching of Graphene	K. Koizumi, M. Boero, Y. Shigeta, and A. Oshiyama	Journal of Physical Chemistry Letters	2013年5月	国際	○

51	New identification of Metallic Phases of In Atomic layers on Si(111) Surfaces	K. Uchida and A. Oshiyama	Physical Review B	2013年4月	国際	○
52	Relation between nanomorphology and energy bands of Si nanowires	S. Kyogoku, J.-I. Iwata and A. Oshiyama	Physical Review B	2013年4月	国際	○
53	Structural Stability and Scanning Tunneling Microscopy Images of Strained Ge Films on Si(001)	Y. Fujimoto and A. Oshiyama	Physical Review B	2013年2月	国際	○
54	First-principles calculation of scattering potentials of Si-Ge and Sn-Ge dimers on Ge(001) surfaces	Tomoya Ono	Physical Review B	2013年2月	国際	○
55	A quantum chemistry study of Ds-Pa unnatural DNA base pair	T. Otsuka, T. Miyazaki	Int. J. Quantum Chem. 113, 504	2013年2月	国際	○
56	Atom-Scale Reaction Pathways and Free-Energy Landscapes in Oxygen Plasma Etching of Graphene	K. Koizumi, M. Boero, Y. Shigeta, A. Oshiyama	Journal of Physical Chemistry Letters	2013年	国際	○
57	結晶性半導体エピタキシャル成長の量子論	押山淳	ポストシリコン半導体:ナノ成長ダイナミクスと基盤・界面(エヌ・ティー・エス)	2013年	国内	○
58	First-principles transport calculation method based on real-space finite-difference nonequilibrium Green's function scheme	Tomoya Ono, Yoshiyuki Egami, and Kikuji Hirose	Physical Review B	2012年11月	国際	○
59	オーダーN法を用いた大規模第一原理計算:ナノ構造物質、巨大生体分子に対する第一原理計算	有田通朗、宮崎剛	精密工学会超精密加工専門委員会会誌「超精密」18, 50	2012年12月	国内	○

60	Floating Electron States in Covalent Semiconductors	Y. Matsushita, S. Furuya and A. Oshiyama	Physical Review Letters	2012年6月	国際	○
61	Microscopic Mechanisms of Initial Oxidation of Si(100): Reaction Pathways and Free-Energy Barriers	K. Koizumi, M. Boero, Y. Shigeta, and A. Oshiyama	Physical Review B	2012年5月	国際	○
62	Theoretical Insight into Stereoselective Reaction Mechanisms of 2,4-Pentanediol-Tethered Ketene-Olefin [2+2] Cycloaddition	K. Kamiya, T. Matsui, T. Sugimura, Y. Shigeta	Journal of Physical Chemistry A	2012年	国際	○
63	シリコンナノワイヤのシミュレーションと π -CAVE システムによる可視化	古家真之介、岩田潤一、長谷川幸宏、松下雄一郎、押山淳、賀谷信幸	可視化情報学会誌	2012年	国際	○
64	実空間密度汎関数法コードRSDFT による大規模第一原理計算	岩田潤一、古家真之介、押山淳	計算工学	2012年	国内	○
65	第一原理に基づく物質計算の現状と展望	押山淳	日本シミュレーション学会誌	2012年	国内	○
66	計算と物質	押山淳他	岩波講座「計算科学」第三巻	2012年	国内	○
67	Self-diffusion in crystalline silicon: Car-Parrinello molecular dynamics study	K. Koizumi, M. Boero, Y. Shigeta, and A. Oshiyama	Physical Review B	2011年11月	国際	○
68	Fully spin-dependent transport of triangular graphene flakes	Tomoya Ono, Tadashi Ota, and Yoshiyuki Egami	Physical Review B	2011年12月	国際	○

69	Selective Alignment fo Carbon Nanotubes on Supphire Surfaces: Bond Formation between Nanotubes and Substrates	S. Jeong and A. Oshiyama	Physical Review Letters	2011年8月	国際	○
70	Comparative study of hybrid functionals applied to structural and electronic properties of semiconductors and insulators	Y. Matsushita, K. Nakamura andn A. Oshiyama	Physical Review B	2011年8月	国際	○
71	Self-diffusion in Crystalline Silicon: A Car-Parrinello Molecular Dynamics Study	K. Koizumi, M. Boero, Y. Shigeta, A. Oshiyama	Physicla Review B	2011年	国際	○
72	First-principles Molecular Dynamics Studies on the Atomistic Behavior of His503 in Bovine Cytochrome c Oxidase	K. Kamiya, Y. Shigeta	Biochim Biophys Acta	2011年	国際	○

2. 学会等における口頭・ポスター発表

No.	発表した成果（発表題目、口頭・ポスター発表の別）	発表者氏名	発表した場所（学会名等）	発表した時期	国内・国際 の別	招待講演 (○を記入)
1	第一原理計算によるレーザー加工初期過程解明への取り組み(口頭)	矢花一浩	レーザー学会学術講演会第36回年次大会	2016年1月	国内	○
2	Ab initio investigations for interface electronic structures of SiC-MOS(口頭)	T. Ono and C. Kirkham	International Workshop on Dielectric Thin Films for Future Electron Devices - Science and Technology -	2015年11月	国際	○
3	Optoelectronic Functional Fields Induced by Near-Field Light Excitation(口頭)	K. Nobusada	Sweden-Japan Workshop on Nanoscale: Electron-Photon Interactions via Energy Dissipation and Fluctuation	2015年11月	国際	○
4	Optical near-field excitation in nanostructures with novel functions due to light and electron dynamical correlations(口頭)	K. Nobusada	第2回CMRI研究会	2015年10月	国内	○
5	Time-dependent density functional theory for strong laser pulses in dielectrics(口頭)	K. Yabana	CECAM-HQ-EPFL, Lausanne (CECAM workshop on Exploration of ultra-fast time scales using time dependent density	2015年9月	国際	○
6	Time-dependent density functional theory for extreme nonlinear optics(口頭)	K. Yabana	San Sebastian, Psi-K 2015	2015年9月	国際	○
7	Linear scaling first-principles molecular dynamics for very large systems with the CONQUEST code	Tsuyoshi Miyazaki	Boston (250th アメリカ化学会年会)	2015年8月	国際	○
8	SiC酸化過程とMOS界面電子状態の第一原理シミュレーション(口頭)	小野倫也	応用物理学会先進パワー半導体分科会 第1回個別討論会「SiC酸化メカニズムと界面欠陥」	2015年8月	国内	○
9	Large-scale first-principles molecular dynamics study on Si/Ge core-shell nanowires using a linear-scaling technique.	Tsuyoshi Miyazaki	Bremen (CECAM Workshop: Next generation quantum based molecular dynamics)	2015年7月	国際	○

10	First-Principles Calculations using Real-Space Finite-Difference Method(口頭)	T. Ono	Advances in Modeling of Nano Materials	2015年6月	国際	○
11	Static and Dynamical Density-Functional Calculations for Nano-Materials: Moire-Induced Electron Localization in Graphene and Laser-Triggered Crystallization in SiO2	A. Oshiyama	Tsukuba (MANA International Symposium 2015)	2015年3月	国際	○
12	近接場光励起に基づく光・電子機能性ナノ物質の理論設計	信定克幸	日本物理学会	2015年3月	国内	○
13	Theoretical studies on triplet-triplet annihilation processes of diphenylanthracene derivatives in solution	重田育照	Pacificchem 2015	2015年	国際	○
14	Large-Scale Real-Space Density-Functional Calculations: Moire-Induced Electron Localization in Graphene and Floating States in SiC	A. Oshiyama	Austin, USA (32nd International Conference on the Physics of Semiconductors)	2014年8月	国際	○
15	Large-Scale First-Principles Electronic Structure Calculations with Real-Space Density Functional Theory code	J. I. Iwata	Tsukuba(International workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms, Software and Applications, in petascale computing)	2014年3月	国際	○
16	A Molecular Design of Nonlinear Optical Properties and Conductivity Switches on the Basis of Open-shell Nature、口頭	重田育照	2014 Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems (WINDS)	2014年	国際	○
17	First-principles study on electronic structures of defects on surface and interface(口頭)	T. Ono	International Conference on Small Science	2013年12月	国際	○
18	Large-Scale Electronic-Structure Calculations in the Real-Space Scheme: Bilayer Graphene and Silicene	A. Oshiyama	Kyoto (JSAP-MRS Joint Symposium)	2013年9月	国際	○
19	Large-Scale Calculations in the Real-Space Scheme: Absence and Presence of Dirac Electrons in Silicene	Z.-X. Guo, J.-I. Iwata and A. Oshiyama	Cancun, Mexico (22th Int. Materials Research Congress)	2013年8月	国際	○
20	Large-Scale Density-Functional Calculations in the Real-Space Scheme: Graphene and Silicene	A. Oshiyama	Nakhon Ratchasima, Thailand (7th Conf. Asian Consortium on Computational Materials Science)	2013年7月	国際	○
21	大規模第一原理計算による半導体デバイス・材料設計の可能性	岩田潤一	東京(応用物理学会シリコンテクノロジー分科会)	2013年7月	国内	○
22	Materials Design through Computics: Large-Scale Density Functional Calculations for Nanomaterials in the Real-Space Scheme	A. Oshiyama	New York City, USA (Int. Summer School on HPC Challenges in Computational Sciences)	2013年6月	国際	○
23	First-principles study on electron transport property of nanoscale systems	T. Ono	International Symposium of Computational Science 2013 Special Session [Spintronics: First-Principles Simulation & Measurement]	2013年2月	国際	○
24	Free Energy Analyses on Cluster Deformations by Cumulant Mechanics	重田育照	8th Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics	2013年	国際	○
25	Real-Space Density-Functional Approach to Electronic Properties of Nanostructures	A. Oshiyama	Kobe (Conference on Computational Physics)	2012年10月	国際	○
26	Band Structure Calculations of Large-Scale Systems by Sakurai-Sugiura Method	J. I. Iwata	Osaka (International Symposium on Computics)	2012年10月	国際	○

27	First-principles electronic structure calculations with K computer	J. I. Iwata	Pavia, Italy (Theory and Applications of Computational Chemistry)	2012年9月	国際	○
28	First-principles electronic structure calculations for 100,000-atom systems with real-space density functional theory code	J. I. Iwata	Yokohama (International Union of Material Research Societies)	2012年9月	国際	○
29	Materials Design through Computics: Nanostructures of Silicon and Carbon	A. Oshiyama	Kobe (10th Int. Meeting on High Performance Computing for Computational Science)	2012年7月	国際	○
30	Theoretical Studies on Current-Voltage (I-V) Characteristics of Metal Containing Artificial DNA and Ni Complex Based Molecular Devices、口頭	重田育照	2012 Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems (WINDS)	2012年	国際	○
31	Materials Design through Computics: nanowires and Nanotubes”	A. Oshiyama	Dresden, Germany (International Focus Workshop on Quantum Simulations and Design)	2011年9月	国際	○

3. 受賞等

No.	名称	受賞者氏名	授賞機関(学会名等)	受賞した時期	国内・国際 の別	備考
1	第5回分子科学会奨励賞	重田育照	分子科学会	2012年	国内	
2	Gordon Bell Prize (Peak Performance)	岩田潤一、押山淳他	ACM / IEEE	2011年7月	国際	

4. メディアへの情報発信、ウェブサイト等での情報公開

No.	名称	日付	説明	備考
1	RSDFTコード公開	2015年12月25日	開発したソースコードをgithubで公開	http://ma.cms-
2	第一原理計算の規模向上 100万原子も視野 (物材研な)	2014年12月9日	日刊工業新聞	NIMS プレスリリースを受けて
3	NIMS、巨大分子の第一原理シミュレーションの実現	2014年12月1日	INTERNET COM 等で紹介	http://internetcom.jp/webtech/20141210
4	日経バイオテク Online	2014. 4. 19	神奈川工科大と阪大、筑波大、兵庫県立	

5. 広報活動等(ワークショップ・研究会等の開催)

No.	名称	開催日時	開催場所	参加者(人数)
1				
2				
3				

参考1 研究成果の発表

研究開発課題IV:全原子シミュレーションによるウィルスの分子科学の展開

代表者氏名 岡崎 進

1. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会誌・雑誌名等）	発表した時期	国内・国際 の別	査読（有りの 場合○を記
1	All-atom molecular dynamics calculation study of entire poliovirus empty capsids in solution	Y. Andoh, N. Yoshii, A. Yamada, K. Fujimoto, H. Kojima, K. Mizutani, A. Nakagawa, A. Nomoto, S. Okazaki	J. Chem. Phys., 141, 165101, 1-11 (2014)	2014年10月	国際	○
2	Molecular dynamics study of changes in physico-chemical properties of DMPC lipid bilayers by addition of nonionic surfactant C12E10	Y.Andoh, S.Muraoka, S.Okazaki	Mol. Simul., 41, 955-960(2015)	2014年7月	国際	○
3	MODYLAS: A highly parallelized general-purpose molecular dynamics simulation program for large-scale systems with long-range forces calculated by fast multipole method (FMM) and highly scalable fine-grained new parallel processing algorithms	Yoshimichi Andoh, Noriyuki Yoshii, Kazushi Fujimoto, Keisuke Mizutani, Hidekazu Kojima, Atsushi Yamada, Susumu Okazaki, Kazutomo Kawaguchi, Hidemi Nagao, Kensuke Iwahashi, Fumiyasu Mizutani, Kazuo Minami, Shin-ichi Ichikawa, Hidemi Komatsu, Shigeru Ishizuki, Yasuhiro Takeda, Masao Fukushima	J. Chem. Theory Comp., 9, 3201-3209 (2013)	2013年6月	国際	○
4	Molecular dynamics study of lipid bilayers modeling the plasma membranes of normal murine thymocytes and leukemic GRSL cells	Y. Andoh, S. Okazaki, R. Ueoka	Biochim. Biophys. Acta, Biomembr. 1828, 1259-1270 (2013)	2013年1月	国際	○
5	Molecular dynamics study of free energy of transfer of alcohol and amine from water phase to the micelle by thermodynamic integration method	K. Fujimoto, N. Yoshii, S. Okazaki	J. Chem. Phys., 137, 094902, 1-6(2012)	2012年9月	国際	○

2. 学会等における口頭・ポスター発表

No.	発表した成果（発表題目、口頭・ポスター発表の別）	発表者氏名	発表した場所（学会名等）	発表した時期	国内・国際 の別	招待講演 (○を記入)
1	A molecular dynamics calculation study of entire poliovirus empty capsids using K-computer(口頭)	Susumu Okazaki	Pacificchem 2015, Honolulu, Hawaii, USA	2015年12月	国際	
2	高速多重極展開法における圧力テンソル(ポスター)	吉井範行、安藤嘉倫、岡崎 進	第29回分子シミュレーション討論会、新潟市	2015年11月	国内	
3	電解質水溶液中において同じ符号を持つ2つの大きな帯電粒子間に働く力の分子動力学法による研究—ウイルス-レセプター間相互作用の理解に向け(ポスター)	小嶋秀和、Nurul Najwa、遠藤祐太、藤本和士、篠田渉、岡崎進	第29回分子シミュレーション討論会、新潟市	2015年11月	国内	
4	汎用MDソフトウェアMODYLASの異方的なMPIプロセス分割および基本セル分割への拡張(ポスター)	安藤嘉倫、吉井範行、岡崎進	第29回分子シミュレーション討論会、新潟市	2015年11月	国内	
5	脂質膜間距離による膜の物性変化(ポスター)	井上未知子、安藤嘉倫、篠田渉、岡崎進	第29回分子シミュレーション討論会、新潟市	2015年11月	国内	
6	分子動力学法を用いた生体膜の水透過における自由エネルギー解析(ポスター)	山崎隼也、伊藤太一、安藤嘉倫、篠田渉、岡崎進	第29回分子シミュレーション討論会、新潟市	2015年11月	国内	

7	高速多重極展開法における圧カテンソル(口頭)	吉井範行、安藤嘉倫、岡崎 進	第29回分子シミュレーション討論会、新潟市	2015年11月	国内	
8	ポリオウィルス-CD155レセプター結合初期過程の分子動力学法による研究(口頭)	遠藤裕太、水谷圭佑、小嶋秀和、藤本和士、山田篤志、安藤嘉倫、吉井範行、篠田渉、中川敦史、岡崎進	第29回分子シミュレーション討論会、新潟市	2015年11月	国内	
9	分子動力学計算による小児マヒウィルス感染初期過程の分子論的研究-ウィルスカプシド・レセプター間の相互作用(口頭)	遠藤裕太、水谷圭佑、小嶋秀和、藤本和士、山田篤志、安藤嘉倫、吉井範行、篠田 渉、中川敦史、岡崎 進	第38回溶液化学シンポジウム、高知	2015年10月	国内	
10	All-atom molecular dynamics simulation study of entire poliovirus empty capsids in solution(口頭)	Yoshimichi Andoh	CECAM workshop "Virus as a whole: meso- and macroscopic structure and dynamics at all atom resolution", Lausanne, Switzerland	2015年10月	国際	
11	Potential of Mean Force between Poliovirus Capsid and its Receptor CD155 Based on Large-Scale and All-Atomistic Molecular Dynamics Calculations(口頭)	Susumu Okazaki	6th JCS International Symposium on Theoretical Chemistry (JCS-2015), Slovakia	2015年10月	国際	
12	Large-Scale All-Atom Molecular Dynamics (MD) Simulations of Biomolecular Systems Using a General Purpose MD Simulation Program, MODYLAS(口頭)	Yoshimichi Andoh	2nd International Symposium on Computational Materials and Biological Sciences, Nagoya, Japan	2015年9月	国際	
13	Potential of mean force between two likely charged particles in electrolyte solution(ポスター)	Nurul Najwa、遠藤 裕太、小嶋秀和、岡崎 進	第9回分子科学討論会、東京	2015年9月	国内	

14	分子動力学法を用いた生体膜の水透過における自由エネルギー解析(ポスター)	山崎 隼也、伊藤 太一、安藤 嘉倫、篠田 渉、岡崎 進	第9回分子科学討論会、東京	2015年9月	国内	
15	ポリオウィルス-CD155 レセプター間の相互作用の分子動力学法による研究(ポスター)	遠藤 裕太、水谷 圭佑、小嶋 秀和、藤本 和士、山田 篤志、安藤 嘉倫、吉井 範行、篠田 渉、中川 敦史、野本 明男、岡崎 進	第9回分子科学討論会、東京	2015年9月	国内	
16	A Highly Parallelized General-Purpose Molecular Dynamics Simulation Program, MODYLAS, and Its Application to Large-Scale systems (ポスター)	Yoshimichi Andoh, Noriyuki Yoshii, Kazushi Fujimoto, Hidekazu Kojima, Atsushi Yamada, Kensuke Iwahashi, Fumiyasu Mizutani and Susumu Okazaki	FOMMS 2015, Oregon, USA	2015年7月	国際	
17	A Molecular Dynamics Calculation Study of Poliovirus and Poliovirus Receptor CD155 (ポスター)	Yuta Endo, Keisuke Mizutani, Noriyuki Yoshii, Atsushi Yamada, Yoshimichi Andoh, Kazushi Fujimoto, Hidekazu Kojima, Wataru Shinoda, Atsushi Nakagawa, Akio Nomoto and Susumu Okazaki	FOMMS 2015, Oregon, USA	2015年7月	国際	
18	分子動力学計算ソフトウェアMODYLASのメニーコアアーキテクチャ対応並列化に関する研究(ポスター)	安藤 嘉倫	JHPCN:学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 第7回シンポジウム、東京	2015年7月	国内	
19	ウィルスカプシドをモデル化した荷電球殻内における電解質水溶液の物理化学的研究(ポスター)	藤本和士、Faten Hakim、小嶋秀和、安藤嘉倫、吉井範行、篠田 渉、岡崎 進	第18回理論化学討論会、大阪	2015年5月	国内	
20	高並列対応汎用分子動力学シミュレーションソフトMODYLASによる大規模分子動力学計算(ポスター)	安藤嘉倫、吉井範行、藤本和士、小嶋秀和、山田篤志、岩橋建輔、水谷文保、岡崎 進	HPCS2015(2015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)、東京	2015年5月	国内	

21	All-atom molecular dynamics calculation study of entire poliovirus empty capsids in solution (口頭)	Noriyuki Yoshii	2015 International Workshop on Computational Science and Engineering, Nagoya, Japan	2015年5月	国際	
22	全原子分子動力学計算によるポリオウイルスカプシドの溶液内安定性についての研究(口頭)	安藤嘉倫、吉井範行、山田篤志、藤本和士、小嶋秀和、水谷圭佑、中川敦史、野本明男、篠田 渉、岡崎 進	日本膜学会第37年会、東京	2015年5月	国内	
23	A molecular dynamics calculation study of poliovirus empty capsids in solution (口頭)	S. Okazaki	IMS Symposium "Architecture, dynamics, and functionality of molecular biosystems", Okazaki, Japan	2015年3月	国内	
24	SDSミセルにおけるメタンの結合数の分布に関する分子動力学シミュレーションによる研究(口頭)	高林宏彰、藤本和士、吉井範行、岡崎 進	第28回分子シミュレーション討論会、仙台市	2014年11月	国内	
25	スフィンゴミエリン/ コレステロール/ DOPC 3成分膜の Lo,Ld 相の分子動力学計算(ポスター)	柴山総一郎、篠田 渉、安藤嘉倫、岡崎 進	第28回分子シミュレーション討論会、仙台市	2014年11月	国内	
26	スフィンゴ脂質膜の構造とダイナミクス -コレステロール含有による変化-(ポスター)	永山日菜、安藤嘉倫、篠田 渉、岡崎 進	第28回分子シミュレーション討論会、仙台市	2014年11月	国内	
27	ポリオウィルス- CD155レセプター間の相互作用の分子動力学法による研究(ポスター)	遠藤裕太、水谷圭佑、小嶋秀和、藤本和士、山田篤志、安藤嘉倫、吉井範行、篠田 渉、中川敦史、野本明男、岡崎 進	第28回分子シミュレーション討論会、仙台市	2014年11月	国内	

28	マウス正常肝臓細胞および癌化細胞膜の分子動力学シミュレーション(口頭)	安藤嘉倫、青木則之、岡崎 進	第28回分子シミュレーション討論会、仙台市	2014年11月	国内	
29	電解質中にポリオウイルスカプシドが作る電場の全原子シミュレーションによる解析(ポスター)	小嶋秀和、遠藤裕太、藤本和士、安藤嘉倫、吉井範行、山田篤志、中川敦史、野本明男、岡崎 進	第28回分子シミュレーション討論会、仙台市	2014年11月	国内	
30	汎用分子動力学ソフトウェア「MODYLAS」(口頭)	安藤嘉倫	第1回「京」と大型実験施設との連携利用シンポジウム、東京	2014年9月	国内	
31	SDS の会合体間相互作用および会合機構に関する分子動力学計算による研究(口頭)	河田真治、藤本和士、吉井範行、岡崎進	第17回理論化学討論会、名古屋市	2014年5月	国内	
32	An all-atomistic molecular dynamics calculation study of virus using K-computer(口頭)	S. Okazaki	5th JCS International Symposium on Theoretical Chemistry, Nara, Japan	2013年12月	国際	○
33	Large-Scale and All-Atom Molecular Dynamics Simulation of Viruses Using the K Computer(口頭)	S. Okazaki	3rd International Conference on Molecular Simulation (ICMS2013), Kobe, Japan	2013年11月	国際	
34	Large-scale and all-atom molecular dynamics simulation of viruses using the K-computer: 2. Development of a highly parallelized general-purpose molecular dynamics simulation program, MODYLAS(ポスター)	Y. Andoh, N. Yoshii, K. Fujimoto, K. Mizutani, H. Kojima, A. Yamada, S. Okazaki, K. Kawaguchi, H. Nagao, K. Iwahashi, F. Mizutani, K. Minami	3rd International Conference on Molecular Simulation (ICMS2013), Kobe, Japan	2013年11月	国際	

35	Large-scale and all-atom molecular dynamics simulation of viruses using the K-computer: 3. Equilibration of the system and the stable structure of poliovirus capsid in solution(ポスター)	H. Kojima, N. Yoshii, A. Yamada, Y. Andoh, K. Fujimoto, K. Mizutani, A. Nakagawa, A. Nomoto, S. Okazaki	3rd International Conference on Molecular Simulation (ICMS2013), Kobe, Japan	2013年11月	国際	
36	Large-scale and all-atom molecular dynamics simulation of viruses using the K-computer: 4. Negative pressure inside the poliovirus empty capsid(ポスター)	K. Fujimoto, Y. Andoh, N. Yoshii, A. Yamada, H. Kojima, K. Mizutani, S. Okazaki, A. Nakagawa, A. Nomoto	3rd International Conference on Molecular Simulation (ICMS2013), Kobe, Japan	2013年11月	国際	
37	Large-scale and all-atom molecular dynamics simulation of viruses using the K-computer: 5. Molecular designs for a stable viral capsid(ポスター)	N. Yoshii, Y. Andoh, A. Yamada, K. Fujimoto, H. Kojima, K. Mizutani, A. Nakagawa, A. Nomoto, S. Okazaki	3rd International Conference on Molecular Simulation (ICMS2013), Kobe, Japan	2013年11月	国際	
38	Large-scale and all-atom molecular dynamics simulation of viruses using the K-computer: 6. Exchange of water molecules across the poliovirus capsid(ポスター)	A. Yamada, N. Yoshii, Y. Andoh, K. Fujimoto, H. Kojima, K. Mizutani, A. Nakagawa, A. Nomoto, S. Okazaki	3rd International Conference on Molecular Simulation (ICMS2013), Kobe, Japan	2013年11月	国際	
39	Large-scale and all-atom molecular dynamics simulation of viruses using the K-computer: 7. Interaction with poliovirus receptor CD155(ポスター)	K. Mizutani, N. Yoshii, A. Yamada, Y. Andoh, K. Fujimoto, H. Kojima, A. Nakagawa, A. Nomoto, S. Okazaki	3rd International Conference on Molecular Simulation (ICMS2013), Kobe, Japan	2013年11月	国際	
40	Molecular Dynamics Study on Simplified Model Membranes for Normal Murine Thymocytes and Leukemic GRSL Cell Plasma Membranes(ポスター)	S. Shibayama, Y. Andoh, S. Okazaki	3rd International Conference on Molecular Simulation (ICMS2013), Kobe, Japan	2013年11月	国際	
41	Molecular dynamics study of biomembranes: A challenge to plasma membrane simulation(口頭)	Y. Andoh	Satellite Meeting of ICMS2013 in Nagoya, Japan	2013年10月	国際	

42	Large-Scale and All-Atom Molecular Dynamics Simulation of Viruses Using the K Computer(口頭)	S. Okazaki	CMSI International Symposium 2013, Tokyo, Japan	2013年10月	国際	
43	Development of a Highly Parallelized General-Purpose Molecular Dynamics Simulation Program, MODYLAS, on the K computer(口頭)	Y. Andoh	CMSI International Symposium 2013, Tokyo, Japan	2013年10月	国際	
44	Large MD Simulation(口頭)	N. Yoshii	CMSI International Symposium 2013, Tokyo, Japan	2013年10月	国際	
45	Large-Scale Molecular Dynamics Calculation Studies from Micelle to Viruses(口頭)	S. Okazaki	2013 JSAP-MRS Joint Symposia, Kyoto, Japan	2013年9月	国際	○
46	Large-Scale Molecular Dynamics Calculation Studies from Micelle to Viruses(口頭)	S. Okazaki	The 10th Asian Thermophysical Properties Conference, Jeju, Korea	2013年9月	国際	○
47	京コンピュータを用いたウイルスの全原子分子動力学シミュレーション(口頭)	岡崎 進	第7回分子科学討論会、京都	2013年9月	国内	○
48	京コンピュータを用いたウイルスの全原子シミュレーション: 2. 高並列汎用分子動力学シミュレーションソフトMODYLASの開発(口頭)	安藤 嘉倫、吉井 範行、藤本 和士、水谷 圭佑、小嶋 秀和、山田 篤志、岡崎 進、川口 一朋、長尾 秀実、岩橋 建輔、水谷 文保、南 一生、市川 真一、小松 秀実、石附 茂、武田 康宏、福島 正雄	第7回分子科学討論会、京都	2013年9月	国内	

49	京コンピュータを用いたウイルスの全原子シミュレーション: 4. カプシド内水相の負の圧力(口頭)	安藤 嘉倫、吉井 範行、山田 篤志、藤本 和士、小嶋 秀和、水谷 圭佑、岡崎 進、中川敦史、野本明男	第7回分子科学討論会、京都	2013年9月	国内	
50	京コンピュータを用いたウイルスの全原子シミュレーション 3. 溶液中のカプシドの安定構造(ポスター)	小嶋 秀和、吉井 範行、山田 篤志、安藤 嘉倫、藤本 和士、水谷 圭佑、岡崎 進、中川敦史、野本明男	第7回分子科学討論会、京都	2013年9月	国内	
51	京コンピュータを用いたウイルスの全原子シミュレーション 5. カプシドを横切る水分子の交換(ポスター)	山田 篤志、吉井 範行、安藤 嘉倫、藤本 和士、小嶋 秀和、水谷 圭佑、岡崎 進、中川敦史、野本明男	第7回分子科学討論会、京都	2013年9月	国内	
52	分子動力学シミュレーションによるミセル・生体膜からウイルスへ向けた分子解析(口頭)	岡崎 進	日本分析化学会第62年会、大阪	2013年9月	国内	○
53	京コンピュータを用いたウイルスの全原子分子動力学シミュレーション(口頭)	岡崎 進	スーパーコンピュータ「京」と生命科学 第2回～生命科学に取り組む異分野の融合と交流の推進～、岡山市	2013年7月	国内	○
54	タンパク質のリガンド結合における特徴的非結合相互作用(口頭)	北浦和夫	日本物理学会第68回年次大会、広島市	2013年3月	国内	○
55	Development of massively parallel molecular dynamics simulation software including long-range Coulomb force calculation on K computer(口頭)	Y. Andoh	International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Molecular Science, Tokyo, Japan	2013年1月	国際	

56	分子動力学シミュレーションを用いたポリオウイルスレセプターCD155の水における構造の解析(ポスター)	水谷圭佑、藤本和士、安藤嘉倫、山田篤志、吉井範行、中川敦史、岡崎 進	第26回分子シミュレーション討論会、福岡市	2012年11月	国内	
57	ポリオウイルスカプシドの分子動力学計算(口頭)	岡崎 進	TCCI第2回実験化学との交流シンポジウム、京都	2012年11月	国内	
58	Large Scale Quantum Chemical Calculations on Biomolecule(口頭)	Kazuo Kitaura	Conference on Computational Physics(CCP2012)	2012年10月	国際	○

3. 受賞等

No.	名称	受賞者氏名	授賞機関(学会名等)	受賞した時期	国内・国際 の別	備考
1						
2						
3						

4. メディアへの情報発信、ウェブサイト等での情報公開

No.	名称	日付	説明	備考
1	Yahoo!JAPANニュース (qBiz 西日本新聞経済電子版) 2014. 7. 11 (金) 11:05配信	2014年7月	記事見出し: 「京」を活用、体内でのウイルスの動き3D化	
2	西日本新聞 2014. 7. 11	2014年7月	記事見出し: ウイルスの動き3D化 世界初、「京」活用 薬や治療法の開発に道	
3	福井新聞 2013. 10. 8	2013年10月	記事見出し: ポリオウイルスの殻 再現 - 名古屋大学教授ら-	
4	中国新聞 2013. 10. 2	2013年10月	記事見出し: 「京」で計算 ウイルスの殻	
5	大分合同新聞 2013. 9. 30	2013年9月	記事見出し: ポリオウイルスの殻再現 - 10万分の3ミリ、スパコンで -	
6	日本経済新聞 2013. 9. 24	2013年9月	記事見出し: 1000万原子を計算 名大が新ソフト 新薬開発に活用	
7	新潟日報 2013. 9. 23	2013年9月	記事見出し: 1000万個の原子で構成 ポリオウイルスの殻 グラフィックスで再現	

5. 広報活動等(ワークショップ・研究会等の開催)

No.	名称	開催日時	開催場所	参加者(人数)
1				

参考1 研究成果の発表

研究開発課題V: エネルギー変換の界面科学

代表者氏名 杉野修

1. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会誌・雑誌名等）	発表した時期	国内・国際 の別	査読（有りの 場合○を記
1	Improved modeling of electrified interfaces using the effective screening medium method	I. Hamada, O. Sugino, B. Nicephore, and M. Otani	Phys. Rev. B 88 155427 (2013).	2013年	国際	○
2	First-Principles Molecular Dynamics at a Constant Electrode Potential	N. Bonnet, T. Morishita, O. Sugino, and M. Otani	Phys. Rev. Lett. 109, 266101 (2012)	2012年	国際	○
3	Self-Poisoning Dynamical Effects in the Oxygen Reduction Reaction on Pt(111) from a Top-Down Kinetic Analysis	N. Bonnet, O. Sugino, and M. Otani	J. Phys. Chem. C, 118, 13638 (2014)	2014年	国際	○
4	Effect of thermal motion on catalytic activity of nanoparticles in polar solvent	N. Bonnet, T. Morishita, O. Sugino, and M. Otani	J. Chem. Phys. 140, 044703 (2014)	2014年	国際	○
5	Additive Effect on Reductive Decomposition and Binding of Carbonate-Based Solvent toward Solid Electrolyte Interphase Formation in Lithium-Ion Battery	K. Ushirogata, K. Sodeyama, Y. Okuno, and Y. Tateyama	J. Am. Chem. Soc., 135, 11967 (2013)	2013年	国際	○
6	Unusual Stability of Acetonitrile-Based Superconcentrated Electrolytes for Fast-Charging Lithium-Ion Batteries	Y. Yamada, K. Furukawa, K. Sodeyama, K. Kikuchi, M. Yaegashi, Y. Tateyama, and A. Yamada	J. Am. Chem. Soc., 136, 5039 (2014).	2014年	国際	○
7	Sacrificial Anion Reduction Mechanism for Electrochemical Stability Improvement in Highly concentrated Li-Salt Electrolyte	K. Sodeyama, Y. Yamada, K. Aikawa, A. Yamada, and Y. Tateyama	J. Am. Chem. Soc., 118, 14091 (2014)	2014年	国際	○
8	Space-Charge Layer Effect at Interface between Oxide Cathode and Sulfide Electrolyte in All-Solid-State Lithium-Ion Battery	J. Haruyama, K. Sodeyama, L. Han, K. Takada, and Y., Tateyama	Chem. Materials, 26, 4248 (2014)	2014年	国際	○

2. 学会等における口頭・ポスター発表

No.	発表した成果（発表題目、口頭・ポスター発表の別）	発表者氏名	発表した場所（学会名等）	発表した時期	国内・国際 の別	招待講演 （○を記入）
-----	--------------------------	-------	--------------	--------	-------------	----------------

1	Additive Effect on Reductive Decomposition and Binding of Carbonate-Based Solvent toward Solid Electrolyte Interphase Formation in Lithium-Ion Battery ポスター	Y. Tateyama(NIMS, JST-PRESTO, Kyoto Univ.) K. Ushirogata(FUJIFILM Co.) K. Sodeyama(Kyoto Univ., NIMS) Y. Okuno(FUJIFILM Co.)	CPMD2013	2013年9月 2013年9月 2013年9月	国際	
2	Additive effect on reductive decomposition and binding of carbonate-based electrolyte in Lithium ion battery: A DFT free energy analysis 口頭	Y. Tateyama(NIMS, JST-PRESTO, JST-CREST, Kyoto Univ.)	TNT Japan 2014	2014年1月	国際	O
3	DFT studies on adsorption and excitation of TiO ₂ /Ru dye/CH ₃ CN interfaces 口頭	Y. Tateyama(NIMS, JST-PRESTO, JST-CREST, Kyoto Univ.)	International Conference on Dye-Sensitized Solar Cel	2013年11月	国際	O
4	DFT-MD Analysis of Redox Reaction at Solid-Electrolyte Interface in Battery and Solar Cell 口頭	Y. Tateyama(NIMS, JST-PRESTO, JST-CREST, Kyoto Univ.)	One Day Workshop on Chemical Reactions at Surfaces and Interface	2014年1月	国際	O
5	DFT-MD Analysis of Redox Reaction at Solid-Electrolyte Interface in Battery and Solar Cell 口頭	Y. Tateyama(NIMS, JST-PRESTO, JST-CREST, Kyoto Univ.)	The 16th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (Asian-16)	2013年10月	国際	O
6	DFT-MD Studies on Redox Reactions on Solid-Solution Interfaces in Battery and Solar Cell 口頭	Y. Tateyama(NIMS, JST-PRESTO, JST-CREST, Kyoto Univ.)	5th JCS International Symposium on Theoretical Chemistry	2013年11月	国際	O
7	Novel mechanism of reductive decomposition of electrolyte in LIB: A DFT free energy analysis on K computer 口頭	Y. Tateyama(NIMS, JST-PRESTO, JST-CREST, Kyoto Univ.)	MANA International Symposium 2014	2013年12月	国際	O

8	Redox Reacton Mechanisms at TiO-water interfaces: A DFT Molecular Dynamics Study 口頭	Y. Tateyama(NIMS, JST- PRESTO, Kyoto Univ.) K. Aikawa, M. Sumita(NIMS)	The 64th annual meeting of the ISE	2013年9月	国際	
9	Theoretical study on structures and electronic states of boron-doped diamond (BDD) electrode/water interfaces 口頭	Y. Tateyama(NIMS, JST- PRESTO, JST-CREST, Kyoto Univ.)	International Symposium on Diamond Electrochemi	2014年3月	国際	○

3. 受賞等

No.	名称	受賞者氏名	授賞機関(学会名等)	受賞した時期	国内・国際 の別	備考
1	ゴットフリード・ワグネル賞(エネルギーとインダストリー分野)	館山佳尚、袖山慶太郎	ドイツ企業と在日ドイツ商工会議所により2008年に 創設された財団	2015年	国際	

4. メディアへの情報発信、ウェブサイト等での情報公開

No.	名称	日付	説明	備考
1	京コンピュータを用いてリチウムイオン電池電解液の還元反応機構を解明	2013年8月1日	プレスリリース	
2	濃い液体が秘める新機能を発見、新世代の電解液へ	2014年3月24日	プレスリリース	
3	次世代蓄電池の正極-固体電解質界面のリチウムイオン状態シミュレーションに成功	2014年7月3日	プレスリリース	

5. 広報活動等(ワークショップ・研究会等の開催)

No.	名称	開催日時	開催場所	参加者(人数)
1	電気化学界面シミュレーションコンソーシアム研究会	2015年4月15日、9月15日	秋葉原ダイビル	
2				
3				

参考1 研究成果の発表

研究開発課題VI:水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性

代表者氏名 田中秀樹

1. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会誌・雑誌名等）	発表した時期	国内・国際 の別	査読（有りの 場合○を記
1	Effects of thermodynamic inhibitors on the dissociation of methane hydrate: a molecular dynamics study	T. Yagasaki, M. Matsumoto, and H. Tanaka,	Phys. Chem. Chem. Phys. 17, 32347 (2015).	2015年	国際	○
2	Adsorption Mechanism of Inhibitor and Guest Molecules on the Surface of Gas Hydrates	T. Yagasaki, M. Matsumoto, and H. Tanaka	J. Am. Chem. Soc. 137, 12079 (2015)	2015年	国際	○
3	包接水和物の分子シミュレーション	矢ヶ崎琢磨	化学と工業 68, 808 (2015).	2015年	国内	
4	Dissociation of Methane Hydrate in Aqueous NaCl Solutions	T. Yagasaki, M. Matsumoto, Y. Andoh, S. Okazaki, and H. Tanaka	J. Phys. Chem. B 118, 11797 (2014).	2014年	国際	○
5	Effect of Bubble Formation on the Dissociation of Methane Hydrate in Water: A Molecular Dynamics Study	T. Yagasaki, M. Matsumoto, Y. Andoh, S. Okazaki, and H. Tanaka	J. Phys. Chem. B 118, 1900 (2014).	2014年	国際	○
6	Structure, dynamics and thermodynamic stability of high-pressure ices and clathrate hydrates	T. Yagasaki, K. Himoto, T. Nakamura, M. Matsumoto, and H. Tanaka	Molecular Simulation 41, 868 (2014).	2014年	国際	○
7	水素を含む高圧氷の構造と熱力学的安定性	L. Hakim, 矢ヶ崎琢磨, 松本正和, 田中秀樹	高圧力の科学と技術 24, 265 (2014).	2014年	国内	○
8	On the thermodynamic stability of hydrogen hydrates in the presence of promoter molecules	T. Nakayama, M. Matsumoto, H. Tanaka	AIP Conf. Proc. 1568, 46 -52 (2013)	2013年	国際	○
9	クラスレートハイドレートの熱力学的安定性について	田中秀樹, 松本正和	高圧力の科学と技術 23, 94 (2013).	2013年	国内	○

10	立体フラーレン型化合物の構造選択則	松本 正和, 田中秀樹	低温科学 (Low Temperature Science) 71, 161 (2013).	2013年	国内	○
11	プラスチック氷の構造とダイナミクス	樋本和夫, 松本正和, 田中秀樹	低温科学, 71, 131 (2013)	2013年	国内	○
12	Statistical mechanical approach to the thermodynamic stability of clathrate hydrates	H. Tanaka and M. Matsumoto	Adv. Chem. Phys. 152, 421 (2013)	2013年	国際	
13	Metastable Polymorphs of Clathrate Hydrate	M. Matsumoto and H. Tanaka	J. Phys. Soc. Jpn. 81, SA005 (2012).	2012年	国際	○
14	Inclusion of Neon Inside Ice Ic and Its Influence to the Ice Structure	L. Hakim, M. Matsumoto, K. Koga, and H. Tanaka	J. Phys. Soc. Jpn. 81, SA018 (2012).	2012年	国際	○
15	On the Occupancy of Carbon Dioxide Clathrate Hydrates: Grandcanonical Monte Carlo Simulations	M. Matsuo, Y. Takii, M. Matsumoto, and H. Tanaka	J. Phys. Soc. Jpn. 81, SA027 (2012).	2012年	国際	○
16	Rotational Dynamics of Plastic Ice	K. Himoto, M. Matsumoto, H. Tanaka	J. Phys. Soc. Jpn. 81, SA023 (2012)	2012年	国内	○
17	Structure and Dynamics of Aqueous Solutions of Electrolytes in Confined Space	Y. Yamakawa, M. Matsumoto, H. Tanaka	J. Phys. Soc. Jpn. 81, SA025 (2012)	2012年	国内	○

2. 学会等における口頭・ポスター発表

No.	発表した成果（発表題目、口頭・ポスター発表の別）	発表者氏名	発表した場所（学会名等）	発表した時期	国内・国際 の別	招待講演 (○を記入)
1	Structure, Dynamics, and Thermodynamic Stability of Clathrate Hydrates and High Pressure Filled Ice	Hideki Tanaka	The 5th Annual Basic Science International Conference	2015年	国際	○
2	[口頭]「京」を用いたメタンハイドレート融解	矢ヶ崎琢磨	第14回メタンハイドレート研究アライアンス講演会	2014年	国内	○
3	[口頭]氷、ハイドレートの核生成	松本正和	第14回メタンハイドレート研究アライアンス講演会	2014年	国内	○
4	[口頭]ゲストによるハイドレート構造の選択性の理論	松本正和	第14回メタンハイドレート研究アライアンス講演会	2014年	国内	○
5	Structure, Dynamics, and Thermodynamic Stability of High Pressure Ices and Clathrate Hydrates	Hideki Tanaka	3th International Conference on Molecular Simulation	2013年	国際	○
6	Evaluation of Stability of Hydrogen Hydrates	Takato Nakayama, Masakazu Matsumoto, and Hideki Tanaka	SoIChES 2012	2012年	国際	○

3. 受賞等

No.	名称	受賞者氏名	授賞機関(学会名等)	受賞した時期	国内・国際 の別	備考
1						
2						
3						

4. メディアへの情報発信、ウェブサイト等での情報公開

No.	名称	日付	説明	備考
1	メタンハイドレートの分解の3Dビデオ上映	2015年10月17日	分子科学研究所の一般公開	
2	スパコンで水を研究する ～シミュレーションによる水・氷・ハイドレートの科学～	2015年2月15日	一般向け講演会「スパコンを知る集いin島根～「京」、そしてその先へ～」	
3	メタンハイドレート ガス発生仕組み解明	2014年5月1日	山陽新聞	
4	「燃える水」メタンハイドレート 秘密明らかに 岡山大 ガス発生仕組み スパコン解析	2014年4月1日	朝日新聞	

5. 広報活動等(ワークショップ・研究会等の開催)

No.	名称	開催日時	開催場所	参加者(人 数)
1				

参考1 研究成果の発表

研究開発課題Ⅶ: マルチスケール材料科学: 金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発

代表者氏名 香山正憲

1. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会誌・雑誌名等）	発表した時期	国内・国際 の別	査読（有りの 場合○を記
1	Cluster Variation Method	T. Mohri	The Journal of The Minerals, Metals & Materials Society (TMS)	2013年	国際	○
2	First-principles cluster variation calculations of tetragonal-cubic transition in ZrO ₂	Tetsuo Mohri, Ying Chen and Naoya Kiyokane	J. Alloys and Compounds	2013年	国際	○
3	First-principles study of interface structure and energy of Fe/NbC	H. Sawada, S. Taniguchi, K. Kawakami and T. Ozaki	Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering	2013年4月	国際	○
4	A Quantitative Evaluation of Phase Field Microstructure by the Spectral Analysis	Kenji Iiseya, Seiji Miura and Tetsuo Mohri	J. Phase Equilibria and Diffusion	2014年	国際	○
5	Ternary eutectic dendrites: Pattern formation and scaling properties	Laszlo Ratkai, Attila Szallasi, Tamas Pusztai, Tetsuo Mohri and Laszlo Granasy	The Journal of Chemical Physics	2015年	国際	○
6	First-principles calculations of stability and phase equilibria in the Fe-Ni system	Tetsuo Mohri	J. Mater. Sci.	2015年	国際	○
7	Analysis of non-monotonic temperature behavior of the Coefficient of Thermal Expansion in Fe-Ni Alloys Studied by First-Principles Cluster Variation Method	Ryo Yamada, Ying Chen and Tetsuo Mohri	Materials Trans.	2015年	国際	○
8	Computational study of positron-monovacancy interaction in <i>d</i> -block metals	Shoji Ishibashi	J. Phys. Soc. Jpn. 84 , 083703 (2015) (4 pages)	2015年7月21日	国際	○
9	A decomposition method with minimum communication amount for parallelization of multi-dimensional FFTs	Truong Vinh Truong Duy, Taisuke Ozaki	Computer Physics Communications 185, 153-164 (2014).	2014年	国際	○
10	原子論に基づくFe-Si 合金中のらせん転位とSi 原子の相互作用の評価	譯田真人, 君塚 肇, 尾方成信	日本金属学会誌	2013年10月(77巻10号)	国内	○
11	鋼中析出物界面の第一原理計算	澤田英明	ふえらむ	2014年11月	国内	○

12	原子論に基づく鉄合金のマクロ降伏強度予測のための理論モデルの構築	新里秀平, 譚田真人, 尾方成信	日本金属学会誌	2016年3月予定(80巻3号)	国内	○
13	計算材料科学の現状と展望: 材料界面への適用を中心に	香山正憲	表面技術	2013年10月	国内	
14	Fe-PtのL10相の相安定性、相平衡の第一原理計算	毛利哲夫、陳迎	日本鉄鋼協会会報「ふえらむ」	2014年	国内	
15	スピノーダルオーダーリングの第一原理計算	毛利哲夫	まてりあ	2014年	国内	
16	局所エネルギー・局所応力の第一原理計算法開発と材料界面への適用	香山正憲、田中真悟、椎原良典	まてりあ	2014年9月	国内	
17	第一原理計算の鉄鋼材料への適用	澤田英明	金属	2015年11月	国内	

2. 学会等における口頭・ポスター発表

No.	発表した成果 (発表題目、口頭・ポスター発表の別)	発表者氏名	発表した場所 (学会名等)	発表した時期	国内・国際 の別	招待講演 (○を記入)
1	Development of a First-Principles Code for Materials Science: Local Energy-Density and Stress-Density Calculations and XANES/ELNES Calculations by the PAW Method (依頼講演)	香山正憲, 田中真悟, 田村友幸, 椎原良典, 石橋章司	3rd International Symposium on Advanced Microscopy and Theoretical Calculations (AMTC3) (長良川国際会議場、岐阜県)	2012年5月	国際	○
2	First-Principles Local-Energy and Local-Stress Calculations of Metallic Grain Boundaries	香山正憲, 田中真悟, 王昊, Bhattacharya Kumar Somesh, 椎原良典	KIM-JIM symposium in 2012 Fall Conference of the Korea Institute of Metals and Materials (釜山、韓国)	2012年10月	国際	○
3	Cluster Variation Method and its Applications to Materials Science	Tetsuo Mohri	International Workshop on Materials Design Process Thermodynamics, Kinetics and Microstructure Control, June 3-4, 2013, IMDEA Materials Institute, Madrid, Spain	2013年	国際	○
4	First-principles Calculation of Spinodal Ordering for Fe-based Alloys	Tetsuo Mohri	TMS2013	2013年	国際	○
5	Local-Energy and Local-Stress Calculations and XANES/ELNES Calculations by the PAW Method	香山正憲, 田中真悟, 田村友幸, 椎原良典, 石橋章司	10th Pacific Rim Conference on Ceramic and Glass Technology (サンディエゴ、米国)	2013年6月	国際	○

6	Development of a first-principles code for materials science: local-energy and local-stress calculations and XANES/ELNES calculations by the PAW method	香山正憲, 田中真悟, 椎原良典, 田村友幸	14th International Conference on Intergranular and Interphase Boundaries in Materials, iib2013 (ハルキディキ、ギリシャ)	2013年6月	国際	○
7	First-Principles Local-Energy and Local-Stress Calculations of Materials Interfaces (口頭発表)	香山正憲, 田中真悟, Bhattacharya Kumar Somesh, 王昊, Sharma Vikas, 椎原良典	7th International Conference on Materials Structure and Micromechanics of Fracture (ブルノ、チェコ)	2013年7月	国際	○
8	Ab Initio Local Energy and Local Stress Calculations of Materials Interfaces (口頭発表)	香山正憲, 田中真悟, Bhattacharya Kumar Somesh, Sharma Vikas, 王昊, 椎原良典	8th Pacific Rim International Congress on Advanced Materials and Processing, PRICM-8 (ハワイ、米国)	2013年8月	国際	○
9	An Image Restoration Procedure to Evaluate Phase Field Microstructure	Kenji Iseya and Tetsuo Mohri	Cooperation of Computational Materials Science and Mathematics toward Smart Materials Design II -What Materials Informatics brings in? - JST Tokyo Headquarters K's Gobancho	2014年	国際	○
10	Progress of First-principles Study on Phase Equilibria by Cluster Variation Method	Tetsuo Mohri and Ying Chen	TMS2014 February 16-20, 2014, San Diego, USA	2014年	国際	○
11	Multiscale Materials Phenomena	Tetsuo Mohri	Challenge to a New Phase of Materials Science August 4- 8, 2015 Kyoto University, Kyoto, Japan	2014年	国際	○
12	Ab Initio Local Energy and Local Stress: Essence of the Method and Recent Applications to Surfaces, Defects, and Interfaces (口頭発表)	香山正憲, Bhattacharya Kumar Somesh, 王昊, Sharma Vikas, 田中真悟, 椎原良典	The 4th International Symposium on Advanced Microscopy and Theoretical Calculations, AMTC4 (アクトシティ浜松コンgresセンター、浜松市)	2014年5月	国際	○
13	Local Energy and Local Stress in Density-Functional Theory Calculations of Materials	香山正憲	RIMS International Conference: Mathematical Challenge to a New Phase of Materials Science (京大、京都市)	2014年8月	国際	○
14	Ab Initio Local Energy and Local Stress Applied to Materials Interfaces (口頭発表)	香山正憲, Bhattacharya Kumar Somesh, 田中真悟, 王昊, Sharma Vikas, 椎原良典	The 15th IUMRS International Conference in Asia (IUMRS-ICA2014) (福岡大、福岡市)	2014年8月	国際	○
15	Atomistic Prediction of Solute Hardening and Softening in Fe-Si Alloys	Masato Wakeda, Hajime Kimizuka, Shigenobu Ogata	IUMRS-ICA 2014	2014年8月24-30日	国際	○

16	Recent Development of Phase Equilibria Calculations by CVM	Tetsuo Mohri	TMS 2015, Walt Disney World, Orlando, USA March 16, 2015	2015年	国際	○
17	Towards First-principles Continuous Displacement Cluster Variation Method within computational materials science projects in Japan	Tetsuo Mohri	Colloquim of MPIE, Max-Planck-Institut für Eisenforschung Düsseldorf, Germany Feb. 9, 2015	2015年	国際	○
18	Cluster Variation Method as a Theoretical Tool for the Study of Phase Transformation	Tetsuo Mohri	PTM 2015 Solid-Solid Phase Transformations I Inorganic Materials	2015年	国際	○
19	Conversion of internal freedom of an alloy to configurational freedom within CVM	Tetsuo Mohri	CDSM 2015 Shenyang, China	2015年	国際	○
20	First principles study of interface between iron and precipitate	H. Sawada, S. Taniguchi, K. Kawakami and T. Ozaki	The 3rd OpenMX/QMAS workshop	2015年5月	国際	○
21	First-Principles Local-Energy and Local-Stress Calculations of Materials Interfaces	香山正憲, 田中真悟, 椎原良典	Materials Science and Technology 2015 (MS&T 15) (コロンバス, 米国)	2015年10月	国際	○
22	First-principles Local-energy and Local-stress Calculations of Grain Boundaries and Interfaces (口頭発表)	香山正憲, 田中真悟, 王昊, Bhattacharya Kumar Somesh, Sharma Vikas, 椎原良典, 石橋章司	Materials Research Society 2012 Fall Meeting (ボストン, 米国)	2012年11月	国際	
23	Ab Initio Local Energy and Local Stress in Materials Interfaces (依頼講演)	香山正憲, 田中真悟, Bhattacharya Kumar Somesh, Sharma Vikas, 王昊, 椎原良典, 石橋章司	1st ESISM Workshop on Fundamental Issues of Structural Materials (京大, 京都市)	2013年1月	国際	
24	First-principles calculations of iron/transition-metal carbide interfaces: local stress and local energy distribution (口頭発表)	Sharma Vikas, 田中真悟, 椎原良典, 香山正憲	14th International Conference on Intergranular and Interphase Boundaries in Materials, iib2013 (ハルキディキ, ギリシャ)	2013年6月	国際	
25	Local stress and local energy distribution in iron/transition metal carbide interfaces using first-principles calculations (口頭発表)	Sharma Vikas, 田中真悟, 椎原良典, 香山正憲	International Symposium on Atomistic Modeling for Mechanics and Multiphysics of Materials, ISAM4 (東大, 東京都目黒区)	2013年7月	国際	

26	Large-Scale First-Principles Calculations for the Understanding and Design of Micostructures in Metals (依頼講演)	澤田英明, 譯田真人, Sharma Vikas, 尾崎泰助, 田中真悟, 尾崎成信, 川上和人, 香山正憲	CMSI International Symposium 2013, Extending the power of computational materials sciences with K-computer (東大、東京都目黒区)	2013年10月	国際	
27	Atomistic Evaluation of Interaction between Screw Dislocation and Solute Si in Fe-Si alloy	Masato Wakeda, Hajime Kimizuka, Shigenobu Ogata	Materials Research Society (MRS) 2013 Fall Meeting	2013年12月1-6日	国際	
28	Ab-Initio Local-Energy and Local-Stress Analysis of Materials Interfaces and Defects (依頼講演)	香山正憲, Bhattacharya Kumar Somesh, 王昊, Sharma Vikas, 田中真悟, 椎原良典	CMRI International Symposium 2014 (東北大、仙台市)	2014年1月	国際	
29	Atomistic Estimation of Critical Resolved Shear Stress in Fe-Si alloy	Shuhei Shinzato, Masato Wakeda, Hajime Kimizuka, Shigenobu Ogata	MRS Spring Meeting & Exhibit 2014	2014年4月21-25日	国際	
30	Iron/precipitate interfaces: First principles investigation through local stress distribution (口頭発表)	Sharma Vikas, 田中真悟, 椎原良典, 香山正憲	The 15th IUMRS International Conference in Asia (IUMRS-ICA2014) (福岡大、福岡市)	2014年8月	国際	
31	First principles study of interface between iron and precipitate	H. Sawada, S. Taniguchi, K. Kawakami and T. Ozaki	IUMRS-ICA 2014	2014年8月	国際	
32	Study of Energy Barrier for Screw Dislocation in Fe-Si alloys Using Line Tension Model	Shuhei Shinzato, Masato Wakeda, Hajime Kimizuka, Shigenobu Ogata	IUMRS-ICA 2014	2014年8月24-30日	国際	
33	Prediction of Solid Solution Strengthening and Softening of Fe-Si Alloy based on Electronic and Atomistic Modelling	Masato Wakeda, Hajime Kimizuka, Shigenobu Ogata	International Workshop on Multiscale Computational Materials Science	2014年11月10-11日	国際	
34	Ab Initio Local-Energy and Local-Stress Calculations: Applications to Materials Interfaces (口頭発表)	香山正憲, Bhattacharya Somesh Kr, 王昊, Sharma Vikas, 田中真悟, 椎原良典	Materials Research Society 2014 Fall Meeting (ボストン、米国)	2014年12月	国際	
35	Ab Initio Local-Energy and Local-Stress Calculations in Materials (口頭発表)	香山正憲, Bhattacharya Somesh Kr, 王昊, Sharma Vikas, 田中真悟, 椎原良典	The 9th General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization) (沖縄科学技術大学院大、沖縄県)	2014年12月	国際	

36	First principle study of interaction between solute Si and screw dislocation in Fe-Si alloy	Masato Wakeda, Shigenobu Ogata	The 9th General Meeting of ACCMS-VO	2014年12月20-22日	国際	
37	Local Energy and Local Stress in Density-Functional Theory Calculations of Materials (口頭発表)	香山正憲, Bhattacharya Somesh Kr, 王昊, Sharma Vikas, 田中真悟, 椎原良典	The 9th International Conference on Computational Physics (ICCP9) (シンガポール)	2015年1月	国際	
38	Essence of Projector Augmented Wave Method (依頼講演)	香山正憲	The 3rd OpenMX/QMAS Workshop 2015 (東大、柏市)	2015年5月	国際	
39	Local Energy and Local Stress by QMAS: Application to Materials Interfaces (依頼講演)	香山正憲, Somesh Kr. Bhattacharya, 王昊, Sharma Vikas, 田中真悟, 椎原良典	The 3rd OpenMX/QMAS Workshop 2015 (東大、柏市)	2015年5月	国際	
40	Local-Energy and Local-Stress Study of Fe(001)/TiC(001) Coherent Interface (ポスター発表)	Sharma Vikas, 田中真悟, 椎原良典, 香山正憲	The 3rd OpenMX/QMAS Workshop 2015 (東大、柏市)	2015年5月	国際	
41	Multiscale modeling of solute atom effect on critical resolved shear stress of Fe	Masato Wakeda, Shigenobu Ogata	12th International Conference on the Mechanical Behavior of Materials	2015年5月10-14日	国際	
42	First principles study of interface between iron and precipitate	H. Sawada, S. Taniguchi, K. Kawakami and T. Ozaki	3rd World Congress on Integrated Computational Engineering	2015年6月	国際	
43	The First-principles Mapping onto the Phase Field Crystal Model(口頭)	Swastibrata Bhattacharyya, Kaoru Ohno, Ryoji Sahara	ACCMS-8 (Taipei)	16-18 June 2015	国際	
44	Two-component density functional study of positron-monovacancy interaction (ポスター)	石橋章司	The 1st Symposium of Strategic Innovation Pr	2015年9月29日	国際	
45	Ab-Initio Local-Energy and Local-Stress Analysis of Fe/Precipitate Interfaces (依頼講演)	Sharma Vikas, 香山正憲, 田中真悟, 椎原良典	平成27年度第2回CMRI研究会、International Workshop on Multiscale Computations on Mechanical Properties (東北大、仙台市)	2015年10月	国際	

46	First principles study on the effect of substitutional solute atom on screw dislocation properties in bcc Iron	Masato Wakeda, Shigenobu Ogata	International Workshop on Multiscale Computational Materials Science	2015年10月13-14日	国際	
47	Ab Initio Local-Energy and Local-Stress Calculations: Applications to Materials Interfaces (口頭発表)	香山正憲, Somesh Kr. Bhattacharya, 王昊, Sharma Vikas, 田中真悟, 椎原良典	Materials Research Society 2015 Fall Meeting (ボストン、米国)	2015年11月	国際	
48	The First-principles Mapping onto the Phase Field Crystal Model(口頭)	Swastibrata Bhattacharyya, Kaoru Ohno, Ryoji Sahara	ACCMS-VO10(仙台)	1-3 Nov 2015	国際	
49	Atomistic understanding and prediction of alloying effect of Si on yield strength of steel	Shuhei Shinzato, Masato Wakeda, Hajime Kimizuka, Shigenobu Ogata	2015 MRS Fall meeting & exhibit	2015年11月29-12月4日	国際	
50	第一原理計算の鉄鋼材料への適用	澤田英明	材料の微細組織と機能性第133委員会 第219回研究会	2014年1月	国内	○
51	鋼中析出物界面の第一原理計算	澤田英明、谷口俊介、川上和人、尾崎泰助	日本鉄鋼協会第167回春季講演大会	2014年3月	国内	○
52	第一原理計算の鉄鋼材料への適用	澤田英明	日本鉄鋼協会第219・220回西山記念講座	2014年11月	国内	○
53	鉄鋼材料における第一原理計算の現状と課題	澤田英明	第10回産官学連続研研究会「構造用金属(鉄鋼)材料における計算科学」	2014年12月	国内	○
54	金属中の粒界・界面の第一原理計算:力学特性の解明に向けて(依頼講演)	香山正憲	計算材料科学研究拠点(GMR)第一回シンポジウム(東北大、仙台市)	2012年6月	国内	
55	金属中の粒界・界面の第一原理解析(依頼講演)	香山正憲, 田中真悟, 椎原良典, 石橋章司	日本金属学会2012秋期大会(愛媛大、松山市)	2012年9月	国内	

56	First-Principles Local Energy and Local Stress Study of bcc Fe/TiC Interfaces (口頭発表)	Sharma Vikas, 香山正憲, 田中真悟, 椎原良典, 石橋章司	日本金属学会2012年秋期大会 (愛媛大、松山市)	2012年9月	国内	
57	半導体中の結晶粒界の原子・電子構造の理論解析 (依頼講演)	香山正憲	金属学会セミナー「材料科学的アプローチによる太陽電池研究の最前線 (エッサム神田ホール、東京都)	2012年10月	国内	
58	構造材料中の粒界・界面の局所エネルギー・局所応力解析 (依頼講演)	香山正憲	第1回 CMSI元素戦略シンポジウム ~理論研究における共通課題の抽出と共有~ (八重洲カンファレンスセンター、東京)	2012年10月	国内	
59	First-Principles Study of Fe/TiC Interfaces: Local-Stress and Local-Energy Distribution (ポスター発表)	Sharma Vikas, 田中真悟, 椎原良典, 香山正憲	第3回 CMSI研究会「超並列計算が拓く新しい計算物質科学」(自然科学研究機構、岡崎市)	2012年12月	国内	
60	局所エネルギー・局所応力の第一原理解析: 金属粒界や異相界面への適用 (口頭発表)	香山正憲, 田中真悟, Bhattacharya Kumar Somesh, Sharma Vikas, 王昊, 椎原良典, 石橋章司	日本物理学会第68回年次大会 (広島大、東広島市)	2013年3月	国内	
61	First-Principles Study of Fe/TiC Interfaces: Local-Stress and Local-Energy Distribution (口頭発表)	Sharma Vikas, 香山正憲, 田中真悟, 椎原良典	日本金属学会2013年春期大会 (東京理科大、東京都新宿区)	2013年3月	国内	
62	局所エネルギー・局所応力計算の数値解析技術の確立: 粒界・異相界面への適用 (口頭発表)	香山正憲, 王昊, Bhattacharya Kumar Somesh, Sharma Vikas, 田中真悟, 椎原良典	第18回分子動力学シンポジウム (東京工大、東京都目黒区)	2013年5月	国内	
63	Fe-Si合金におけるらせん転位の運動の解析	譯田真人, 林雄一郎, 君塚肇, 尾方成信	日本材料学会第18回分子動力学シンポジウム	2013年5月17日	国内	
64	粒界・界面計算の新展開: 局所エネルギー・局所応力解析の適用 (依頼講演)	香山正憲, 田中真悟, Bhattacharya Kumar Somesh, Sharma Vikas, 王昊, 椎原良典	日本学術振興会 第124委員会 第143回研究会 (東大、東京都文京区)	2013年7月	国内	
65	Local Mechanical Properties of Iron-Precipitate Coherent Interfaces Using First-Principles Calculations (口頭発表)	Sharma Vikas, 香山正憲, 田中真悟, 椎原良典	日本金属学会2013年秋期大会 (金沢大、金沢市)	2013年9月	国内	

66	鋼中NaCl型析出物界面の構造とエネルギーの第一原理計算	澤田英明, 谷口俊介, 川上和 人, 尾崎泰助	日本金属学会第153回秋期講演大会	2013年9月	国内	
67	Fe-Si合金中の転位挙動の原子論的評価	新里秀平, 譚田真人, 君塚肇, 尾方成信	M&M2013材料力学カンファレンス	2013年10月12-14日	国内	
68	局所エネルギー・局所応力の第一原理計算法の開発: 材料界面 への適用 (口頭発表)	香山正憲, Bhattacharya Kumar Somesh, Sharma Vikas, 王昊, 田中真悟, 椎原 良典	第57回日本学会議材料工学連合講演会 (京都市)	2013年11月	国内	
69	第一原理局所エネルギー・局所応力法の開発と金属の粒界・欠 陥・表面への適用 (依頼講演)	香山正憲	日本学術振興会第133委員会 第219回研究会 (京都テルサ, 京都市)	2014年1月	国内	
70	Investigation of Precipitate/Iron Interfaces using First- Principles Local Energy and Local Stress (口頭発表)	Sharma Vikas, 田中真悟, 香 山正憲, 椎原良典	日本金属学会2014年春季講演大会 (東京工 大, 東京都目黒区)	2014年3月	国内	
71	局所エネルギー・局所応力計算法による金属中の格子欠陥特 性の解明 (依頼講演)	香山 正憲, Bhattacharya Kumar Somesh, 王 昊, 田中 真 悟, 椎原良典	日本物理学会第69回年次大会 (東海大, 平 塚市)	2014年3月	国内	
72	Line tensionモデルによるFe-Si合金中のらせん転位運動の解析	新里秀平, 井上祐太郎, 譚田 真人, 君塚肇, 尾方成信	日本金属学会 春季(第154回)講演大会	2014年3月21-23日	国内	
73	粒界・界面の計算科学: これまでの発展と今後の展望 (依頼講 演)	香山正憲	第24回格子欠陥フォーラム	2014年9月	国内	
74	Analyses of Interfaces between Iron and MX (M=Ti, Nb; X=C, N) using the First-Principles Local Stress and Local Energy Distribution (口頭発表)	Sharma Vikas, 香山正憲, 田 中真悟, 椎原良典	日本金属学会2014年秋期講演大会 (名古屋 大, 名古屋市)	2014年9月	国内	
75	離散転位動力学法によるFe-Si合金の転位挙動解析	田中枢伎, 譚田真人, 君塚肇, 尾方成信	日本金属学会2014年秋期講演大会	2014年9月24-26日	国内	

76	材料の粒界・界面の計算科学（依頼講演）	香山正憲	CMRIセミナー「金属の計算材料物性—マルチスケールのアプローチ」	2014年10月	国内	
77	電子論に基づくFe-Si合金中のらせん転位と固溶Siの相互作用の評価	譯田真人, 尾方成信	日本機械学会 第27回計算力学講演会	2014年11月22-24日	国内	
78	局所エネルギー・局所応力の第一原理計算法開発と材料界面への適用（口頭発表）	香山正憲, Bhattacharya Simesh Kr, Sharma Vikas, 王昊, 田中真悟, 椎原良典	第5回CMSI研究会（東北大、仙台市）	2014年12月	国内	
79	材料界面の原子・電子レベル解析と可視化（依頼講演）	香山正憲	第1回「可視化ものづくり」シンポジウム～接合プロセスを例として～（豊橋市）	2015年3月	国内	
80	Local-Energy and Local-Stress Study of Fe/TiC Coherent Interfaces（口頭発表）	Sharma Vikas, 香山正憲, 田中真悟, 椎原良典	日本金属学会第156回春期講演大会（東大、東京都目黒区）	2015年3月	国内	
81	bcc-Fe/TiC部分整合界面での水素捕捉	澤田英明, 川上和人, 尾崎泰助	日本鉄鋼協会第169回春季講演大会	2015年3月	国内	
82	kinetic Monte Carlo法によるFe-Si合金中のらせん転位ダイナミクスの評価	山口貴司, 田中柁伎, 譯田真人, 君塚肇, 尾方成信	日本機械学会 関西学生会平成26年度学生員卒業研究発表講演会	2015年3月14日	国内	
83	第一原理計算に基づくFeの表面エネルギーと転位運動に対する固溶SiとNiの影響評価	堀裕多, 竹内宏和, 石井明男, 譯田真人, 君塚肇, 尾方成信	日本機械学会 関西学生会平成26年度学生員卒業研究発表講演会	2015年3月14日	国内	
84	金属粒界の局所エネルギー・局所応力解析（依頼講演）	香山正憲	平成27年度第一回CMRI研究会「—腐食問題および構造材料の解明と設計のための大規模計算科学の課題—」（東北大、仙台市）	2015年6月	国内	
85	計算材料科学の到達点と課題：第一原理計算と材料界面への適用を中心に（依頼講演）	香山正憲	マテリアル設計学・特別講義（東大、本郷）	2015年6月	国内	

86	d ブロック金属における単空孔と陽電子の 相互作用の理論計算 (口頭)	石橋章司	平成27年度第1回CMRI研究会	2015年6月23日	国内	
87	第一原理計算によるFeのパイエルス・ポテンシャルに対する固溶元素の影響評価	譯田真人, 尾方成信	第20回分子動力学シンポジウム	2015年8月9日	国内	
88	Fe/TiC整合界面の局所エネルギー・局所応力の第一原理解析 (口頭発表)	Sharma Vikas, 香山正憲, 田中真悟, 椎原良典	日本金属学会2015年秋期大会 (福岡大、福岡市)	2015年9月	国内	
89	Fe/TiC界面の局所エネルギー・局所応力の第一原理解析 (口頭発表)	香山正憲, Sharma Vikas, 田中真悟, 椎原良典	日本機械学会第28回計算力学講演会 (横浜国大、横浜市)	2015年10月	国内	
90	鉄合金中のらせん転位ダイナミクスのkinetic Monte Carlo解析	譯田真人, 田中柁伎, 新里秀平, 尾方成信	日本機械学会 第28回計算力学講演会 (CMD2015)	2015年10月11日	国内	
91	第一原理計算の鉄鋼材料への適用	澤田英明	素材工学研究懇談会	2015年11月	国内	
92	金属・半導体中の陽電子-単空孔相互作用に関わる2成分DFT計算 (口頭)	石橋章司	京都大学原子炉実験所専門研究会「陽電子科学とその理工学への応用」	2015年11月26日	国内	
93	第一原理材料シミュレータQMASへの2成分DFT法の導入 (ポスター)	石橋章司	第6回 CMSI 研究会 (HPCI戦略プログラム分野)	2015年12月7日	国内	
94	Derivation of first principles phase field crystal model (ポスター)	Swastibrata Bhattacharyya, Kaoru Ohno, Ryoji Sahara	第6回CMSI研究会 最終報告会	2015年12月7日-8日	国内	

3. 受賞等

No.	名称	受賞者氏名	授賞機関 (学会名等)	受賞した時期	国内・国際 の別	備考
1						
2						
3						

4. メディアへの情報発信、ウェブサイト等での情報公開

No.	名称	日付	説明	備考
1				
2				
3				

5. 広報活動等(ワークショップ・研究会等の開催)

No.	名称	開催日時	開催場所	参加者(人数)
1	The 3rd OnenMX/QMAS Workshop 2015	May 11-13, 2015	ISSP, University of Tokyo	80
2				
3				

参考2 特許出願・取得・利活用状況

分野2 研究開発課題

氏名

実施 年度	発明の名称	発明者	出願登録 区分	出願番号（出願日）	出願 区分	出願国	登録番号（登録日）	利活用状況
	無し							

中間評価指摘事項への対応状況(分野2)

●分野全体

指摘事項	対応案(平成26年2月時)	フォローアップ状況(平成27年2月時)
<p>【必要性】 今後さらに、三分野の密接な情報交換を行い、三分野の研究者が合同で推進する重要課題を検討していくことが必要である。</p>	<p>研究課題を推進する5つの部会は、分野ではなく戦略課題単位の部会で構成しており、各分野の研究者がそれぞれの部会に参加し情報の共有は進んでいる。「京」が稼働して1.5年を経過し、「京」で動作するプログラム開発は順調に進んでいる。プロジェクト後半は、分野や部会を越えて、物質・エネルギー関連課題を加速、推進していく。平成26年度は、第1部会の天能グループと、第3部会の岡崎グループ内北浦課題との計算手法連携、第2部会内の押山物理課題と信定分子課題の連携課題の提案が行われている。</p>	<p>平成25年度末に提案した、第1部会の天能グループと、第3部会の岡崎グループ内北浦課題との計算手法連携、第2部会内の押山物理課題と信定分子課題の連携課題をH26年度推進中。平成26年度から平成27年度にかけては、各課題ともプロダクトランによる成果の刈り取り時期にあたるため、課題入れ替え等は実施しないが、H27.2スタート予定のポスト「京」PJ提案時には、「エネルギー課題」と「材料・デバイス課題」に対して、三分野が連携した体制でそれぞれの課題に提案し、採択された。</p>
<p>【有効性】 成果が最終的にどのように国民に還元されるのかといった成果目標の位置付けが分かりにくい面もあり、今後は、専門外の人間にも理解されるような説明の努力が必要である。</p>	<p>平成26年度も引き続き社会発表を強化促進していく。研究成果を社会に理解していただくためにどうすればよいかを検討する、見える化シンポジウムをH26年度も開催し、専門家を交えて議論する。AICSや物性研の一般公開、SC14会議に参画し、「京」で行っている成果を紹介する。また、AICSの広報活動にはとくにリチウムイオン電池関連の成果としてNIMS館山氏に協力いただき、一般国民を対象とした「京の集いでの講演」、「京」成果ビデオ制作」を実施中。さらに、平成26年春の応用物理学会、物理学会の展示会にMateriAppsを出展し、CMSIアプリの利用促進普及をめざしている。この活動を平成26年度も継続する。</p>	<p>AICS広報と協力して作成したリチウムイオン電池広報ビデオは、「京」の成果を国民に説明する際に多用され成果を上げている。また、スパコン議員連盟勉強会でリチウムイオン電池を取り上げられ、スパコン予算確保に向けた政治家、役人への説明を実施した。AICS主催のスパコンを知る集いなどで、リチウムイオン電池、計算物質科学全般、水の科学を講演している。また、エネルギー関連課題の記者勉強会を開催し、記事に結びついた。一般公開では、3Dプリンタによる分子模型の作成等を活用し、スパコン成果の親しみやすい公開方法を試みている。第3回見える化シンポジウムは「物質と社会をつなぐ」というテーマで実施し、一般の方も交えて議論する予定。平成27年度に「京」が拓いた計算物質科学を一般国民向けの冊子としてまとめる企画を開始している。</p>
<p>【有効性】今後、若手研究者のキャリアパスの可能性を広げる努力が一層必要である。</p>	<p>コミュニティー誌のTORRENTを平成26年度も継続して出版し、若手研究者を主体で記事として取り上げ、活動を広く紹介する。TCCIでは、第3回産学連携シンポジウム「HPCの利用と成果と人材」を開催し、若手が活躍できる場を産官学の広い視野で検討した。平成26年度も若手が培った研究開発成果を社会貢献につなげるための、セミナー等を実施予定である。</p>	<p>共同研究を実施している企業等もキャリアパスの候補とし、企業に滞在して研究を推進する等の人材交流を促進していく。アプリ講習会等を通しアプリニーズ発掘とともに、人材ニーズも吸い上げていきたい。インターンシップやキャリアアップ研修受講等の仕組みを、プロジェクト雇用ポスドクに適用できるようにする等の仕組みを提言していく。アプリケーションの普及活動として、大学学部や大学院の教育への展開も推進している。教育ニーズが高まれば、計算科学が基礎科学教育の中に取り込まれ、教員のニーズも増加することが想定される。人材育成教育活動に携わる各機関において、計算科学教育教員の増員要望を継続して実施する。</p>
<p>【効率性】 今後は、実験グループや産業界との連携を更に深め、実験グループや産業界から吸い上げたニーズを研究開発課題に取り込むための仕組み作りが必要である。</p>	<p>元素戦略拠点に多くの計算物質科学研究者が参加して、企業を含めた連携を可能としている。平成25年度はエネルギーWGを実施し、物質とエネルギーの関係において計算物質科学が成すべき課題を、各種の国家プロジェクトと連携して検討し、電池の根本的な課題である界面のエネルギー科学に産官学の連携体制で取り組んでいる。CMSIやTCCI、CMRIでは、産業界を交えたシンポジウムを開催し、課題を共有する産官学研究者が席を交えて議論する。平成26年度はMateriApps登録アプリの利用講習会や普及活動から得られるアプリケーションニーズより、共同研究への発展や社会ニーズの課題への取り組み等を、具体的に実施していく。</p>	<p>継続してきたエネルギー関連研究課題や産官学連続研究会活動が実を結び、平成27年度より産総研にて企業の方を中心とした電池関連のコンソーシアムを立ち上げる。培ってきた計算技術を広く産業界に紹介して利活用を促進し、同時に社会ニーズに即した研究開発を推進していく。元素戦略各拠点とCMSIの共同研究として、磁石材料は物性研内にサブ拠点を設けてよりタイトな連携を推進している。触媒・電池拠点にはCMSIメンバーが多く参加し、理論分野を支えている。電子材料拠点とは、計算結果を繁栄させた実験を実施する等、具体的な連携が開始されている。構造材料拠点とは研究とともにアプリケーション利用の観点で、アドバイスやチューニング等で連携している。計算物質科学ポータルMateriApps活動は、毎月1回の講習会やWEBからのQ&A対応等の実施で、順調にアプリ利用者を増やし、ニーズが把握されつつある。「京」動作アプリのPCでの試験利用を可能とした「Materiapps Live!」の教育利用ニーズも急増している。</p>
<p>【その他】 各課題の成果が統合されて分野としての成果に昇華していく構図が見えにくいことや、各課題が内向き傾向にあることが懸念点である。各課題で大規模計算が増えて今以上に計算時間が確保しづらくなるのが想定される中では、「京」以外の計算機の活用も進めるとともに、分野として戦略目標を達成するという観点で全体を見直し、トップダウンで、課題間連携を重点的取組とすること、課題間の進捗に優先順位を付けて実計算時間を有効利用することなども検討する必要がある。</p>	<p>プロジェクト当初にスタートした重点6課題に関し、第1部会の2課題とも、3つの項目を束ねて1つの課題に集約し、方向性を絞った。第2部会は次世代のデバイスとして、実験科学の方からのフィードバックを基にし、パワー系の半導体など、今後日本が勝てる領域で貢献していく方向性に舵をきっている。ウイルスは順調に開発したアプリケーションが多く企業で活用されており、MODYLAS、FMOを中核としたコミュニティーが形成されている。エネルギーは電池課題を統合した取り組みは上記に述べた。メタンハイドレートは実社会での開発への貢献を模索中である。あらたに設けた材料科学の重点課題は、元素戦略PJとタイトに連携しながら推進しており、計算物質科学の次の世代をマテリアルズインフォマティクスも含めて発展させる。計算物質科学は幅が広く、どれも「京」を必要とする重要課題に発展している。戦略課題内で優先順位をつけるとともに、分野2内で提供している計算資源を含めた計算リソースの効果的活用を強化する。</p>	<p>平成27年度の「京」計算資源配分は、これまでの実績とともに、最終年度に得られる成果に対する必要な計算資源をヒアリングし、成果の実現性や重要性を分野内で評価し、プライオリティーをつけて、配分案を作成した。CMSIで提供している計算資源のうち、物性研スパコンは更新にともなう計算容量増大が見込まれる。また、「京」以外のHPCI資源の性能も「京」に近づいてくる。それらの配分も考慮して、分野2として最大限の成果が得られるよう、検討する。最終年度は、個々の重点課題目標の達成とともに、分野全体への貢献として、開発されたアプリケーションを分野の基盤アプリケーションとして昇華していく活動も実施する。</p>

●研究開発課題

指摘事項	対応案(平成26年2月時)	フォローアップ状況(平成27年2月時)
<p>課題1: 関連の強い量子系の新量子相探求とダイナミクスの解明</p> <p>今後は、本分野の源流として、他の研究開発課題への波及にも取り組むことを期待したい。</p>	<p>成果が非専門の人にも伝わっていくよう、努力を続ける。最終項目にもあるように、国際会議での成果発表など専門家への情報発信はもとより、より啓蒙的な解説誌での紹介執筆、さらには分野外の研究者との交流、記者発表などを通じての一般への情報発信はこれから一層進める。この基礎課題で得られた成果に注目してさらなる発展を生み出していくよう、他部会への働きかけを続ける。これは開発された計算手法と解明された物理を展開していくという2つの面で両方必要であると考えている。</p> <p>計算手法については、高精度の計算を追求する一方で、多くの人々が簡便に使える手法、汎用性の高いパッケージの開発も進められるよう、プロジェクト提案を行なう。プロジェクトのスタートによって、階層的な第一原理強相関電子状態計算法(MACE)の普及を計画する。MACEの基本理念は研究代表者らが10年程前に提唱し、電子相関の強い系の第一原理的な研究という物性科学の世界的な潮流を生み出した。この手法には計算負荷がまだ重いという課題があるので、簡便にも使えるバージョンの開発を行ない、より広範な普及と汎用的に使えるようにすることによって、この分野の発展に資するところは大きい。また電子だけでなく、格子(原子)も同時に第一原理的に扱うことの意義は大きく、手法の開発を進めており、開発を加速する。これらが他課題への波及効果を増やすと考えている。</p> <p>テンソルネットワーク(密度行列繰り込み群を特殊な場合として含む)は物性基礎論研究と量子情報理論研究の接点から生まれ、量子系の物性に対して量子エンタングルメントという新しい視点を提示しただけでなく、基底状態計算として実用に耐えることが近年になって示され、従来計算が困難であった多くの物理系に対するブレイクスルーとなる期待がもたれている。この方法は、最近では分子科学計算にも用いられ成果を挙げつつある。FMOなど他部会で利用されている方法に対して、量子エンタングルメント効果の系統的な取り込みが可能な発展形を示唆している。第一部会では、現在十分にはその特性が理解されていないこの新しい方法論に対して、分子科学計算などへの展開も視野にいれつつ、スピン軌道相互作用系に対する応用などを通じて精度検証などを進め、波及効果の大きな成果を挙げることができると期待している。成果の共有化・深化を促進するための、分子科学計算分野などとの合同研究会・合宿などにも従来以上に力を注ぐ。</p> <p>また今までも行っているが、量子多体計算の手法は素粒子、原子核、量子化学と共通の課題があり相互に方法論の交流は役に立つことも多い。既に原子核分野との国際ワークショップを開催するなど、交流に努めているが、今後も続ける。</p> <p>解明された物理の展開については、超伝導、磁性など実験研究者との議論交流(各種散乱実験、光電子分光、物質開発など多岐にわたる)をさらに積極的に進める。源流としてエネルギー課題への取り組みを始める。他項目も参照。</p>	<p>波及効果の大きな手法開発とコード公開</p> <ol style="list-style-type: none"> 電子格子相互作用を扱えるように低エネルギーソルバー(変分モンテカルロ法コード)を拡張し、低エネルギー有効モデルを導出するダウンフォールディングコードを有田グループの協力により導入した。これらによって、電子と格子を含めて第一原理的に強相関関係を扱う手法が確立し、多くの課題に対応して波及効果が期待できる。実際フォノンが重要な役割を果たす強相関電子系の現象への適用を始めた。 テンソルネットワークの手法開発のために国際会議や分野5と合同の検討会を行なうとともにコードの並列化の検討を開始した。この高精度手法の整備は量子化学、素粒子・原子核分野への波及効果を持つと期待できる。 アプリケーションのソースコードの公開を進めた。ALPSはMateriApsおよびhttp://alps.comp-phys.org/mediawiki/index.php/Main_PageなどでMVMCはGitHub上で公開されている。MVMCについては拡張版のMateriApsでの公開も今年度末をめどに進めている。テンソルネットワークコードもコードの整備に応じて公開していく。 <p>他分野との連携</p> <ol style="list-style-type: none"> 分子科学との連携、エネルギー課題との連携を目的として、夏の学校を開催し、若手の交流を進めた。 量子多体計算の手法開発は分野を超える波及効果を持つ。分子科学、素粒子原子核分野と合同で2月に国際ワークショップを主催し、手法を学際的に議論する。招待講演者23名(うち外国人14名)とともに、我々のプロジェクトの成果を発信して、議論を深める。 <p>大型実験設備を含む実験分野との連携</p> <ol style="list-style-type: none"> 時間分解光電子分光の実験技術が急速に発展しているが、顕著に非平衡な現象を扱う理論が必要とされている。この背景のもとにポンププローブ分光の大規模数値計算と理論構築により、今後の実験研究による検証を提唱した。これに関連して高効率太陽電池のための励起子の長寿命化のための原理構築と計算による実証をカーボンナノチューブを例に進めた。今後この設計指針をもとにする実験への刺激と、他の研究開発課題であるエネルギー課題への貢献・波及効果が期待できる。 第一原理強相関手法(MACE)にスピン軌道相互作用を扱えるよう拡張を行なった。適用範囲の拡大によりより広範な需要に応えられるようになった。新たなトポロジカル物質と新たな機能性を発見する目的の研究が進んだ。磁壁がトポロジカルなエッジ状態を生み出す可能性が明らかとなり、この提案をもとにした実験検証が進んでいる。強相関トポロジカル物質の第一原理計算を可能にし、実行してイリジウム化合物に適用した。トポロジカル相(量子スピン液体相)実現へ向けた実験結果の謎の解明に貢献した。 超伝導およびトポロジカル物質に関する実験家とのフォーラムを立ち上げる作業を始めた。産業界との情報交換も検討している。 J-PARCや放射光施設で行われた電子ドーパ型銅酸化物高温超伝導体の磁気・電荷励起ダイナミクス実験に理論からのサポートを行い、実験研究者との共同研究を実施。 <p>情報発信</p> <ol style="list-style-type: none"> 高温超伝導機構を解明に成功(鉄系超伝導体)し、論文が出版されたので、プレスリリースした(2104年12月末)。新聞等で取り上げられ、「京算百景」での特集企画も進行中。さらに超伝導の高温化のための要素を抽出することで、実験研究との連携や検証で波及効果が期待できる。 強相関電子系の第一原理計算アルゴリズムについて雑誌「固体物理」での解説連載を継続した。
<p>課題2: 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開</p> <p>今後は、開発された手法を基盤技術として、現実的に問題となっている系への展開や分野横断への展開を期待したい。</p>	<p>分子設計という観点では、フラレーンールイス塩基アダクトに関して、ルイス塩基と原子種を換えた網羅的な研究を行い、生成効率に優れたデバイス材料の予測を行う予定である。第4部会との連携も重要である。更に、植物を模した人工光合成系やルテニウム触媒系での酸素発生機構を密度行列繰り込み群とモデル空間量子モンテカルロ法を用いて研究を行いたいと考えている。それに伴う実験グループとの連携も進めたい。</p>	<p>フラレーンールイス塩基アダクトに関しては、複数のヘテロ環状カルベンの付加に対するサイト依存性等の興味深い成果が出ている。更に、東北大と連携してC60とカーボンナノチューブからなる分子ベアリングの高精度F12計算を行い、実験から得られる回転障壁との比較を行っている。「京」の追加配分枠を用いた光システムIIの課題については、フラグメント分子軌道法とモデル空間量子モンテカルロ法の両面からの研究が進んでおり、リガンド効果や超微細構造定数の結果が得られてい</p>
<p>課題3: 密度汎関数理論によるナノ構造の電子機能予測に関する研究</p> <p>今後は、半導体テクノロジー関連の企業活動への情報発信や、企業からの要望引き出しを行い、社会的にインパクトの強い課題遂行を期待したい。</p>	<p>複数ソフトウェアの連携については、一例として、IV族ナノワイヤーのゲート酸化膜に対する10万原子規模のCONQUESTによる構造決定とその安定構造に対するRSDFT電子状態計算が計画されている。デバイス構造丸ごと計算の例である。</p> <p>関連企業活動との相互作用については、複数チャンネル(東京大学産学連携本部、つくばイノベーションアリーナ、第二分野作業部会等)を活用した情報収集・発信に努めたい。</p>	<p>パワーエレクトロニクス基幹材料と目されており、日本のメーカーがまだ優位性を保っている炭化珪素に傾注し、そのデバイス界面での欠陥の特定を行っている。情報交換については、つくばイノベーションアリーナ主催の研究会における、メーカー側からの情報収集の段階にとどまっている。</p>
<p>課題4: 全原子シミュレーションによるウィルスの分子科学の展開</p> <p>今後は、分野1「予測する生命科学・医療および創薬基盤」との積極的な連携を期待したい。</p>	<p>これまでも分野1の分子に関わる課題と分野2の生体物質に関わる課題間では、国際会議サテライトミーティングや国内研究会等において共催等一定の連携の下でプロジェクトの推進を行って来ている。今後はさらに積極的に働きかけ、プログラム開発や研究等においてもより深く協力しながら研究を推進する。連携については分野1の該当する課題との間ですでに共通認識となつてはいるが、具体化について早急に協議を始めたい。</p>	<p>連携のあり方については、分野1の分子に関わるシミュレーショングループと協議、検討を進めてきており、「京」の次のステップとして位置付けられているポスト「京」においては、連携、協力からさらに一歩踏み込んで、分野間連携の下、共同で重点課題の解決にあたる準備を進めている。具体的には、ポスト「京」の重点課題①「生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築」のサブ課題B「次世代創薬計算技術の開発」において、本課題をさらに展開し「ウィルス標的創薬計算技術」の構築をはかる。さらには、ソフト開発という側面からも、課題①のターゲットアプリGENESISを対象としたCo Designに課題間連携として協力する。</p>

<p>課題5: エネルギー変換の界面科学</p> <p>今後は、本分野における位置づけを明確にするとともに、エネルギー課題をより俯瞰的に検討し、エネルギー問題へのより強いインパクトを与える取組を期待したい。</p>	<p>第四部会での課題設定はご指摘のように限定的です。エネルギー創生に関連した研究が他部会でも始動しており、これらを総合的な活動に束ねていくことを考えています。これにはエネルギーWG等と連携して体制を作り、その下での第四部会の役割を拡張するようなことが必要になります。その方向での活動が後半の課題です。</p>	<p>■本分野における位置づけ: 物質科学とエネルギー変換(本課題では電池)の関連、すなわち、化学反応や物質移動、物質変化などの起電力(電位)との関わりを、電子論・統計物理学に基づき解明し、電池技術につなげるべく取り組んでいる。■エネルギー課題をより俯瞰的: 燃料電池やリチウムイオン二次電池から次世代型の電池に研究対象を広げると共に、アプローチの幅も広げて取り組んでいる。</p> <p>■より強いインパクトを与える: より汎用的かつ実効的な研究手法の開発、実験との連携の強化により、より強いインパクトを与えられるよう取り組んでいる。</p>
<p>課題6: 水素・メタンハイドレート生成、融解機構と熱力学的安定性</p> <p>今後は、本分野の中における位置づけやエネルギー資源問題にどのように貢献できるかを明確にして取り組む必要がある。</p>	<p>メタンハイドレートは、将来の主要なエネルギー資源の候補であり、試掘も開始されている。シミュレーションが関与していくことは、エネルギー・環境問題の解決につながると考えられる。日本で試掘を行なっているグループとの情報交換等のために、シンポジウムなどを計画している。</p>	<p>ハイドレートの生成・融解過程は、準安定状態も深く関与しているが、ハイドレートが共存する溶液の性質、また熱伝導やその他の境界条件に、大きく依存している。そのために、より実在に近い共存系についてのシミュレーションおよび大規模なシミュレーションを実施することは、実用化に寄与する。特に、本年は共存する溶液の性質による解離の機構と速度に関する知見を得ることができた。</p> <p>産総研メタンハイドレート研究センターとは、共同でシンポジウムを開催し、またメタンハイドレートの研究会などに相互に参加している。これにより、実用面での課題に関する情報を得て、京によるシミュレーションとその解析法に活かしている。</p>
<p>課題7: 金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発</p> <p>今後は、材料科学でのマルチスケール解析への取組を具体化することや、鉄鋼材料の重要性に鑑みて有限温度の磁性への関わりについて取り組むことも期待したい。</p>	<p>・第一原理計算をPhase Field法に繋げることでマルチスケールの計算技術を構築していく方策について、第5部会のPhase Field法の専門家を含めたメンバーで、11月25日、1月10日に2回の勉強会を行った。継続して、第5部会全体の主要課題として、検討を行っていく。</p> <p>・鉄鋼材料のfcc高温相の磁性の取扱い等について、現在、元素戦略構造材料拠点(京大)においても検討をスタートしており、連携して議論を進める。なお、本重点課題に含めるよりも、可能ならば第5部会の新規の特別支援課題として推進する方向で議論している。</p>	<p>大規模第一原理計算をPhase Field法に繋げる手法について、10月6日の重点課題研究会、11月10-11日の東北大金研でのCMRI Workshopで、最新動向の調査、手法確立の検討を進めた。第五部会全体でも研究開発を進めるため、横浜国大拠点に第一原理Phase Field法を専門とするポストクを雇用し、12月8-10日のCMSI meetingで議論を進めた。</p>

●計算科学技術推進体制の構築

指摘事項	対応案(平成26年2月時)	フォローアップ状況(平成27年2月時)
<p>・最先端の実験活動との連携体制の構築を目指し、元素戦略プロジェクトへの貢献、大型実験施設との合同研究会などが行われている。</p>	<p>元素戦略PJに加わっているCMSIメンバーは、「京」やHPCIで得られた研究成果を迅速に実験、計測研究者にフィードバックできる環境を活かし、成果を創出する。</p>	<p>平成26年度は、RISTと共催、JASRI、GROSS、KEKの協力で、連携シンポジウムを開催し、連携利用課題紹介とアプリ紹介を実施した。その会議での議論の結果、「計算科学勉強会」の実施に発展し、H27.2に実験家の課題に応える公開コンサルティング的イベントを開催する。平成27年度も、研究者間と同時に施設支援者間での交流も促進し、大型施設連携利用による成果創出を導く活動を継続する。</p>
<p>・各拠点機関を中心に成果報告会や研究会が精力的に行われている。一方、本分野全体としてイベント開催回数が多すぎるようにも見受けられ、イベント開催の有効性を検証するとともに、開催するイベントの絞り込みも併せて必要である。</p>	<p>イベントが多いことによる研究推進の遅れがないよう、イベントの目的と効果を吟味しながら実施していく。平成26年度予算が10%削減されたことに伴い、国際会議や協賛関連イベントの回数は減る。</p>	<p>イベント実施による効果を見極めながら、予算削減に見合ったイベントを実施している。一般社会に対して広く効果的、効率的に示すイベントやアプリの普及活動に関するイベントは、できる限り実施していく予定。</p>
<p>・他の戦略機関との連携については、分野5「物質と宇宙の起源と構造」と複数回の合同研究会を開催し、特に研究手法に関するノウハウの交換を図るなど、適切に進められている。</p>	<p>分野5とは一般からのQ&Aサイトの共同運用、合同研究会を実施。また、分野2主催の若手技術交流会、配信講義に分野5の若手が参加しており、H26年度も継続する。分野1とは記者勉強会や合同研究会も開催しており、H26年度も継続する予定。</p>	<p>平成26年度は、従来から開催していた分野5との連携研究会を国際WSIに発展させて開催する。また、若手技術交流会、アプリケーション講習会、大規模実験施設シンポをRISTと共催で実施し、超並列計算の普及促進を加速して実施した。また、今年度は、次の世代のスパコンに向けた萌芽的課題に対する分野連携課題の検討会を分野2が中心となって実施。基礎課題分野間連携の検討を平成27年度も継続する。</p>

HPCI戦略プログラム 中間評価指摘事項への対応状況

中間評価での指摘事項	対応案(平成26年3月時)	フォローアップ状況(平成27年3月時)	フォローアップ状況(平成28年2月時)
(2)各観点の再評価と今後の研究開発の方向性			
<p>【必要性】統括責任者等の更なるリーダーシップの下に、分野内の連携はもちろんのこと、必要に応じて分野を越えた連携や他の研究開発プロジェクトの活用も図りながら、本質的に新しい現象の解明や真に革新的な技術開発等を通じて、戦略目標の達成や社会的・科学的課題の解決に資する、「京」や本プログラムならではの成果を創出していく必要がある。その際、「京」でなければ成し得ない成果はどの部分か、どこまで超並列化を進めるとどの様な成果が期待できるのか、という視点をこれまで以上に強く意識する必要がある。</p>	<p>・戦略プログラム全体ならびに各分野において以下の取組を進め、分野内連携、分野を越えた連携、他の研究開発プロジェクトの活用、「京」や本プログラムならではの成果を創出する取組を進める。</p> <p>【戦略プログラムとしての取組】</p> <ul style="list-style-type: none"> 重点課題追加配分枠や加速枠の選定において、従来以上にメリハリをつけた課題選定や資源配分を行う。 実験系研究者との連携を含め、他の研究開発プロジェクトとの連携強化を促す取組を進める。 <p>【分野1】多様な動作原理、多階層のシミュレータを連成し、臓器、全身レベルのシミュレーションを実現することで、医療応用につなげるなど、各課題において階層を越える試みを進める。</p> <p>【分野2】物性課題と分子課題の融合による電子機能予測に関する研究の推進等、物質・エネルギー関連課題を加速、推進する。</p> <p>【分野3】気象気候分野については、雲のモデル化が共通テーマであり、それに関する連携をすでに進めているが、さらに強化する。地震津波分野では、各課題が連携して「統合地震シミュレーション」の開発を進める。</p> <p>【分野4】多目的設計探査の課題については、先進的な設計最適化の手法であることとその応用範囲が極めて広いことから、他の課題と連携した取組を実施することにより、より効果的に適用事例を増やすことを検討する。</p>	<p>【戦略プログラムとしての取組】</p> <ul style="list-style-type: none"> 戦略プログラム全体としては、「京」や本プログラムならではの成果を創出できる課題に追加資源を配分できるように、H26年度加速枠選定の申請条件及び選定基準の見直しを行った。具体的には、申請条件として「京」の利用実績(申請時点の消費率35%以上:当初配分を使い切る見込みとなる目安)を追加しつつ、選定基準として直接的な成果(アウトプット)だけではなく、波及効果(産業競争力強化、経済や社会への波及効果、科学技術のプレゼンス向上等のアウトカム)が期待できるかどうかについても評価の観点に加えた。 また、H27年度については、戦略プログラムの事業最終年度であることから、戦略プログラム利用率の全てを分野配分枠(各分野の裁量で資源を配分)に設定し、各分野・各課題の最終目標達成に向けて各分野の裁量分を多くするとともに、追加配分の申請に係る研究者の負担を削減した。 他の研究開発プロジェクトとの連携強化を促すため、他の研究開発プロジェクトにおいて戦略プログラムの計算資源を利用することを可能とした。 各分野の取組状況は以下のとおり。 <p>【分野1】生命科学における最大の課題は、生命現象における階層を越えた理解、予測、操作であり、「京」レベルの大規模な計算資源を要求する。課題2の創薬と課題4のデータ解析は、分子レベルから疾病などの巨視的現象を扱おうとするものであるが、そのほかの課題でも以下の取組を行っている。</p> <p>(課題1) 細胞内混雑: マイコプラズマを模した1億原子系でのシミュレーションで原子レベルから細胞レベルへの接続を試みている。 クロマチン: マルチスケールモデルを用いて、全原子シミュレーションでヌクレオソームを、粗視化モデルで多数ヌクレオソームを扱い、構造と転写因子との相互作用のシミュレーションを行い、原子モデルをクロマチンの高次構造レベルに接続している。</p> <p>(課題3) 心臓: 分子レベルのモデルに基づいた心臓シミュレーターにおいて、サルコメア動力学モデルの高度化、線維構造のリモデリング機構の組み込みなどによりさらなる精緻化を行っている。 脳神経-筋骨格: 脳から筋骨格、全身を接続したモデルが完成し、パーキンソン病の解明に向けた統合シミュレーションに取り掛かっている。</p> <p>【分野2】</p> <p>(物性課題と分子課題の融合による課題の推進)</p> <p>課題3(押山)に特別支援課題(信定)を統合して課題融合によりノウハウを共有し、2万~3万電子系規模について、実効効率10~11%(参考:理論限界値14~15%)の実時間・実空間光励起電子ダイナミクスを計算可能にした。これにより、触媒効果等が期待される4-メルカプトビリジンSERSスペクトルの銅電極表面上の電極電位依存性計算が可能となり、電圧印加環境下での光応答や機能制御の可能性を示した。 (量子化学計算連携による新たな取組の推進)</p> <p>課題2(天能)と課題4(岡崎)とで計算手法連携を図り、光合成複合体の構造と電子状態に関する研究を推進。</p> <p>【分野3】</p> <p>(分野内の連携)</p> <p>「地球規模の気候」課題の研究者が「メソスケール気象」課題の研究会に参加して、発表・議論を行うとともに、2014年9月国際非静力学ワークショップ等の機会を通じて、連携の可能性を探った。 地震・津波・都市災害の課題では、各課題が連携して「統合地震シミュレーション」の開発を進めている。2014年8月には分野3全体の成果報告会を開催し、連携を促進した。今後も継続して課題間や分野全体としての連携を図る。</p> <p>(分野を越えた連携)</p> <p>分野4との連携は、定期的に会合を設け議論を進めている。 (他の研究開発プロジェクトの活用)</p> <p>上記のプロジェクトなどに加え、ポスト「京」重点課題とも連携を図る。 (「京」ならではの成果)</p> <p>上述の成果のほか、「台風発生2週間予測が実現可能であることを実証」、「高解像度大気海洋結合モデルにより台風強度の予測精度が大きく向上することを実証」といった「京」ならではの成果を創出した。</p> <p>【分野4】</p> <p>(課題4と課題1との連携)</p> <p>高迎角時の翼周流れのプラズマアクチュエータによる制御方法に関する設計探査を実施。有益な知見を得ること成功し、日本機械学会第11回最適化シンポジウム、アメリカ航空宇宙学会国際会議Scitechなどで成果を発表済み。(現在ジャーナル論文を準備中。)</p> <p>(課題4と課題3との連携)</p> <p>自動車タイヤのフィン形状の空力多目的設計探査を実施中である。2015年度中に成果をあげ、横浜ゴムからプレスリリースを出すことが目標。</p>	<p>【分野2】</p> <p>(「京」でなければ成し得ない基礎物理の振興)</p> <p>課題1(今田)の強相関電子研に関して、実験家とのコンソーシアムを設置し、第一原理計算アプローチによる超伝導やスピン等の研究に関する新基軸を構築。ポスト「京」のプロジェクトにつなげる。研究成果としては、これまで説明が困難であった、鉄系や銅系の高温超伝導の仕組みを説明する新理論を打ち立てている。また、絶対0度でも生じる量子相転移現象を紐解く新たな計算手法の開発にも成功している。 (産業界を取り込んだ大規模計算の振興)</p> <p>課題5(杉野)で実施している電池電極上の界面化学の計算手法を産業界に広めるためのコンソーシアムをH27年4月に産総研が設置し、19社の参加を得ている。超並列計算ではじめて実現しうる界面の化学反応を広く普及させて、HPCIの利用を促す。</p>

中間評価での指摘事項	対応案(平成26年3月時)	フォローアップ状況(平成27年3月時)	フォローアップ状況(平成28年2月時)
	<p>【分野5】素粒子・原子核・宇宙の融合研究(QCDからハドロン相互作用、ハドロン相互作用から原子核の性質・核物質状態方程式、原子核の性質・核物質状態方程式から超新星爆発・元素合成)を実現するための土台となる実証研究の完成を優先させるよう、統括責任者がリーダーシップを発揮するよう努力するとともに、課題間連携については、研究会等を充実し、共同研究や相互の計算結果データの利用促進を図る。</p>	<p>【分野5】今年度は、「京」の計算資源の重点課題2課題(課題1・2)に対し、進捗の加速を支援し、「京」の追加資源の獲得を後押しした結果として、審査の結果、研究開発課題2に今年度880万ノード時間が追加配分された。また、全体予算から東大FX10の計算機利用料を付与して、研究の加速を図った。また、体制構築で研究会やレクチャーを通じて、重点的取組として課題間連携を行っている。</p>	
<p>得られた成果の情報発信については、社会に分かりやすく伝えることはもちろんのこと、時には社会の期待や研究者の士気を高めるための大きな目標を示しながら、「京」や本プログラムが社会の「役に立つ」、「役に立った」という国民の実感が得られるようにしていく必要がある。その際、特に、国民の生命・健康や安全・安心に直結する分野については、反動を生みかねない過剰な期待を防ぐため、現在「京」を用いて到達可能な成果とその限界も正確に社会に伝える必要がある。</p>	<p>・各分野において以下の取組等を進めるとともに、戦略プログラム全体としても、最終年度に成果報告会を開催し、その際は指摘事項を踏まえた内容とする。</p> <p>【分野1】課題間を超えた問題解決を図るべく、少人数の関係者による議論をする場を設け、対話を重ねることで、新たな研究方向を探り、解決すべき問題点を明らかにする活動を進める。また、医療及び創薬における現場との連携を密に進めているが、現場の意見を踏まえつつ、慎重かつ適切な情報発信に努める。</p> <p>【分野2】研究成果を社会に理解してもらうためにどうすれば良いかを検討する、見える化シンポジウムを今後も開催し、専門家を交えて議論する。</p> <p>【分野3】研究活動と広報活動のバランスに配慮するとともに、成果発表については等身大の発表を心がける。</p> <p>【分野4】分野4の最新情報をタイムリーに分かりやすく広報する仕組み(アウトリーチ専用サイト:計算工学ナビ)を構築済みであり、今後は、PR効果の高い情報(「京」による先端的事例を含む具体的解析事例、ベンチマーク結果等)の蓄積を継続的に実施し発信して行く。</p> <p>【分野5】これまで、ホームページ上に若手研究者の研究を特集する「月刊JICFuS」や「月刊JICFuSムービー」を掲載してきたが、今後は戦略課題の「京」による成果を動画つきで掲載するなど、充実を図る。</p>	<p>・最終年度に各分野個別の成果報告会(一部、分野共通の統一企画を検討中)を実施するとともに、5分野合同の成果報告会を開催予定(詳細検討中。別紙を参照)。</p> <p>・各分野の取組状況は以下のとおり。</p> <p>【分野1】課題間を超えた問題解決を図るべく、少人数の関係者による議論をする場を設定し、以下の議論を行った。 課題1ー課題3:神経細胞シミュレーション(一分子粒度シミュレーションと脳神経系シミュレーション) 課題1ー課題4:脂肪細胞の褐色化(一分子粒度シミュレーションとネットワーク解析) 課題2ー課題4:エピゲノム創薬(自由エネルギー計算と網羅的エピゲノム解析) 特に、課題1と課題3の連携によるサルコメア分子レベルモデルの構築とその心臓シミュレータへの応用では、心臓の拍動時のATP消費をより正確に見積もるためのモデル構築を行うなど、一定の成果を挙げるに至った。</p> <p>また、広報活動については、研究活動を進めている研究者(含む医療従事者)や製薬企業の研究者等の意見を踏まえつつ進めている。特に、基礎研究の成果から医療現場や創薬現場での利活用に至る道は長く、各現場からの意見を十分に踏まえることが必須と考えている。</p> <p>【分野2】見える化シンポジウムを開催し、広報の専門家を交え、最先端の技術を社会にどのように伝えていくかを検討。引き続き正確かつ分かりやすい成果発信を心がける。(見える化シンポジウム等での専門家の主な意見) ・受け取る側の気持ちを考えて伝える ・正しくデフォルメする ・感情に訴えて情報を受け入れるきっかけを作る ・伝えるメディアの深化を把握し、ターゲットに合わせた戦略を練る</p> <p>【分野3】(安全・安心に直結する分野での過剰な期待)成果報告会、プレスリリース等では、等身大の発表を心がけ、国民に過剰な期待を抱かせないように配慮している。この後もこの点に注意して、成果の発信を行う。(研究活動と広報活動の両立)引き続き、研究者の過度の負担にならないよう、引き続き、研究者の研究活動と広報活動のバランスに配慮しながら成果発信に取り組む。</p> <p>【分野4】解析結果については、すでに「京」を中核とするHPCI利用成果をわかりやすく解説した事例約200件をDB化し、順次アウトリーチサイトにて発信している。今までに、5000人程度のアクセス数があり、社会から大きな関心が寄せられている。</p> <p>また、広報活動については、上記以外に、比較的一般向けのシンポジウムと、技術分野別に分類した専門家向けワークショップの両方を開催するなど、研究者自らが社会の多様なレベルに対して理解が得られるように配慮した取り組みを実施している。</p> <p>【分野5】今年度、若手研究者の研究を特集するウェブマガジン「月刊JICFuS」を5本制作。うちホームページ上に3本を掲載(2/25時点)。動画「月刊JICFuSムービー」を2本制作。うち1本を掲載した(2/25時点)。</p>	<p>【分野2】平成27年度、見える化シンポの最終回を実施予定。計算と社会のつながりを、若手や一般社会からの意見も交えて議論する。また、これまで制作してきた計算物質科学のコミュニティー誌「TORRENT」の特集号として、「ケイサン・ブシツ・カガク」というムック本を作成中。これは、計算科学を易しく解説した本がこれまで出版されていないという、見える化シンポジウムでの指摘を受けて作成に取り組んだ。</p> <p>平成27年度は、これまでは難しいので一般への説明を半ばあきらめていた量子論を易しく伝えるためにどうすればよいかの取組を開始。AICSのコミュニティー誌や一般向け講演会の話題として量子論を取り上げてもらっている。</p>
<p>【有効性】「京」を用いて予測された結果、あるいは、理解された結果を実証するため、実験系研究者との連携を図りつつ、結果の検証作業も強化していく必要がある。</p>	<p>・分野別作業部会においても同旨の指摘がなされている分野1及び分野2を中心として、以下のような実験系研究者との連携を進めるとともに、各分野において、他の研究開発プロジェクトを活用するなどして、指摘を踏まえた取組を進める。</p> <p>【分野1】血栓シミュレーションでは実験情報を取り込む体制を課題内に作ることや、パーキンソン病シミュレーションでは臨床データを取り込む体制を作るなど、医療応用を目指して実験系研究者との連携を図る。</p> <p>【分野2】元素戦略PJの各拠点に多くの計算物質科学研究者が参加し、実験系研究者と連携しながら課題を進めている。今後も引き続き連携を図り、実証研究を進める。</p>	<p>・分野別作業部会においても同旨の指摘がなされている分野1と分野2の取組状況、及び他の分野の取組状況は以下のとおり。</p> <p>【分野1】実験、臨床研究者との連携が、プロジェクトの体制として定着し、以下のような成果が出てきている。 課題1:クロマチン・ヌクレオソーム研究における連携、細胞内混雑、信号伝達におけるNMR、一分子計測等での連携などで着実に成果をあげている。 課題2:製薬企業との密接な連携により、数例について前臨床試験に進むことができた。 課題3:心臓シミュレーションでは先天性心疾患外科手術のシミュレーション解析、拡張型心筋症に対する新たな治療法の解析など着実に成果を重ねている。脳神経ー筋骨格連成系では、臨床研究による患者の観測データの再現を目指している。 課題4:がん研究での臨床からのがんゲノムデータによる連携、脂肪細胞研究での実験家との連携によって、新たなメカニズムを解明するなどの成果が得られている。</p> <p>【分野2】引き続き、元素戦略PJ等での実験系研究者との連携を通じて、結果の検証作業を強化するとともに、大規模研究施設連携として計算科学勉強会等も開催し、実験・計算連携のコンサルができる場を設定している。</p> <p>【分野3】運営委員会に、気象庁数値予報課長、田中淳センター長(東京大学大学院情報学環 総合防災情報研究センター)に参画してもらい、本プロジェクトを通じて得られた成果を防災・減災にどう役立てていくかの議論を深めている。</p>	<p>【分野2】元素戦略プロジェクトとの連携活動の一環として、物質科学研究における実験、計算、計測連携で得られた成果を発表する機会としてシンポジウムを開催。300名を超える参加者があり、100名近い企業からの参加者があった。着実にその連携の重要性が社会に認知されてきていることを実感した。SPring-8やJ-PARCと実施してきた連携シンポジウムはRISTも主催のイベントに発展し、さらに、課題解決型の計算科学勉強会に発展している。</p>

中間評価での指摘事項	対応案(平成26年3月時)	フォローアップ状況(平成27年3月時)	フォローアップ状況(平成28年2月時)
		<p>【分野4】各課題で利用しているソフトウェアごとに、産業界と連携して信頼のおける実験結果の取得と精度の検証を行っている。また、大規模データのポスト処理ソフトウェアについては、理研AIGSの可視化チームと連携した取り組みを実施し、その機能をHPC/PFに実装した。すでに、HPC/PFハンズオンセミナーを通して産業界ユーザーの高い評価を得ている。高精度なHPC対応アプリと大規模データポスト処理ソフトウェアの連携が進んでおり、「次世代ものづくり」を支えるスピーディーで完成度の高い設計を可能にするシステムの装備が整いつつある。</p> <p>【分野5】 課題1: 原子核の多体理論を専門とするヨーロッパの研究者チームと、格子QCDによる第一原理核力・ハイペロン力を用いた原子核の構造計算の共同研究を開始した。 課題2: 理研RIBF加速器を始めとして世界各地で得られた新しいデータの解析や研究方針の策定にさらに深く関与し、共同の論文も出版された。 課題3: 属する研究者の多くは、日本の重力波検出計画KAGRAに参画し、重力波の理論波形の提供、重力波源に対する電磁波対応天体の予言、およびデータ解析研究を通じて側面支援を行っている。 課題4: ダークマターシミュレーションについて、理論および観測研究で利用するためのハローカタログを整備し、公開の用意をしている。</p>	
<p>研究開発及び計算科学技術推進体制は共に、分野全体から見た位置付け、社会的・科学的要請、科学技術動向、国内の計算資源、海外との比較優位性等を意識し、プロジェクト後半における成果の取りまとめに向けて、マイルストーン目標の設定を含めた進捗管理をこれまで以上に行っていく必要がある。</p>	<p>・分野別作業別部会の開催頻度(現状、年一回程度)を増やすとともに、分野別作業部会や戦略プログラム推進委員会において、指摘事項の観点からのフォローアップを行う。</p>	<p>・分野別作業部会の開催頻度を増やすことによって、実施者側の負担が増すことを避けるため、分野別作業部会の開催頻度を増やすことはせずに、分野マネージャ等が分野の運営委員会等に出席し進捗状況の確認を行った。また、分野別作業部会(H27年2月)、戦略プログラム推進委員会(H27年3月)において、中間評価指摘事項に対する対応のフォローアップを実施。</p>	
<p>本プログラムに参画する研究者等の育成に関しては、プロジェクト後半に入る中で、統括責任者等は、本プログラムを通じた研究者等のキャリアアップをこれまで以上に意識していく必要があり、特に、本プログラムで雇用している研究者等のその後のキャリアパスを明確化していく必要がある。</p>	<p>・今後、分野別作業部会や戦略プログラム推進委員会において、フォローアップを行う。</p>	<p>・セミナーや広報誌等での若手研究者の登用や、若手主導での分野間交流、分野内での若手研究者のキャリアパスについての意見交換等を通じて、優れた研究者を積極的に押し上げる取組を行っている。また、アカデミアだけではなく、共同研究を実施している企業等もキャリアパスの候補として、人材交流を促進している。 ・後継プロジェクト(ポスト「京」重点課題)においても、同様の指摘を受け、実施機関にて具体的な計画を検討しているところであり、本プロジェクト終了後についても引き続き検討・対応を行っていく。</p>	
<p>【効率性】大学・研究機関のスーパーコンピュータ、さらには民間のクラウドサービス等のコンピュータの性能が向上していることも認識し、「京」や本プログラムならではのインパクトのある成果を迅速に創出する観点に立って、本プログラムに割り当てられた「京」の計算資源をこれまで以上に重点的に配分するとともに、「京」以外の計算資源の更なる有効活用を図る必要がある。</p>	<p>・各分野において以下の取組等を進めるとともに、戦略プログラム全体としても、重点課題追加配分枠や加速枠の選定において、従来以上にメリハリをつけることにより、指摘事項を踏まえた資源配分を行う。 ・平成27年度の戦プロ利用枠の配分設定の見直しについても検討する。</p> <p>【分野1】これまで、課題内のサブテーマの整理、集約化を行い、研究内容の集中化を図ってきた。今後も、計算法としては十分に実績があり、目的としての研究対象としてはチャレンジングなものに取り組む方針で研究を進める。「京」の計算資源については、年度途中で柔軟に再配分できるようにするために、当初配分を調整した。また、「京」を必ずしも使う必要のない準備計算等に関しては、積極的に他の計算資源を活用するため、HPCI資源への応募を積極的に行う。</p> <p>【分野2】研究内容の進捗等を考慮し、毎年度、課題の見直しを実施しており、これまででも、エネルギー研究における電池課題を統合した取組を行っているが、今後、物性課題と分子課題の融合による研究推進、量子科学計算連携も実施していく。また、計算資源については、戦略課題内で優先順位をつけるとともに、分野内で提供している計算資源を含めた計算リソースの効果的活用を強化する。</p> <p>【分野3】これまでの利用実績や計画の進捗状況を考慮し、提供される計算資源を最大限活用できるように配分を決める。分野3の研究者は、地球シミュレータをはじめ、他の大学等の大型計算機も積極的に利用しており、今後も積極的な活用を行う。</p> <p>【分野4】各課題の準備状況や今までの解析の実績、更に今後の計画を踏まえて、計算機資源のより効果的な利用法について抜本的な見直しをしており、その結果をH26年度からの計画に反映させる。各課題は独自の技術課題を有しており、基本的な研究開発体制そのものは維持するが、課題間のより効率的・効果的な連携(例えば課題4と課題1、課題3)については今後一層積極的に進める。</p>	<p>・戦略プログラム全体としては、「京」や本プログラムならではの成果を創出できる課題に追加資源を配分できるように、H26年度加速枠選定の申請条件及び選定基準の見直しを行った。具体的には、申請条件として「京」の利用実績(申請時点の消費率35%以上:当初配分を使い切る見込みとなる目安)を追加しつつ、選定基準として直接的な成果(アウトプット)だけではなく、波及効果(産業競争力強化、経済や社会への波及効果、科学技術のプレゼンス向上等のアウトカム)が期待できるかどうかについても評価の観点に加えた。 ・また、H27年度については、戦略プログラムの事業最終年度であることから、戦略プログラム利用枠の全てを分野配分枠(各分野の裁量で資源を配分)に設定し、各分野・各課題の最終目標達成に向けて各分野の裁量分を多くするとともに、追加配分の申請に係る研究者の負担を削減した。</p> <p>・各分野の取組状況は以下のとおり。</p> <p>【分野1】計算資源の重点的配分については、重点課題追加配分枠や加速枠の制度を利用しつつ、毎月の運営委員会での決定に基づいて年度途中での効果的な資源再配分を行っている。また、「京」以外の計算資源についても、各所属機関の計算資源などを準部研究や分割可能な計算内容などで有効に活用している。</p> <p>【分野2】これまでの進捗や最終年度の成果等も踏まえ、課題間の優先順位をつけて「京」の計算資源を配分するとともに、戦略機関側のスパコン更新に伴う計算資源増加も有効に活用しながら、計算リソースの効果的活用を図っている。</p> <p>【分野3】(計算資源の重点的な配分) これまでの利用実績や計画の進捗状況を考慮し、提供される計算資源を最大限活用できるように配分を決めている。平成26年度は「地球規模の気候・環境変動予測に関する研究」、「超高精度メソスケール気象予測の実証」を重点課題として設定し、重点課題追加配分枠を得たほか、下期には戦略プログラム加速枠を取得している。 (「京」以外の計算資源) 分野3の研究者は、地球シミュレータをはじめ大学等の大型計算機も積極的に利用しており、今後も積極的な活用を予定している。</p> <p>【分野4】重点課題追加配分枠、加速枠を戦略的に活用したメリハリある取り組みを実施している。その成果も創出されつつあり、今後論文発表、プレス発表を強化するとともに、事例DBを作成・公開して広く利活用の拡大にむけて貢献して行く。また、「京」以外の計算資源の活用については、特にFOCUSスパコンを利用して、HPC対応人材の育成施策(トライアル利用、ハンズオンセミナー等)を積極的に実施している。</p>	<p>【分野2】平成27年度に物性研に3PFLOPSのスパコンが導入され、この20%の計算資源を本戦略プログラムの課題に提供される。それにともない、「京」ではより大規模な計算を実施することを促し、計算資源の有効活用を図っていく。</p>

中間評価での指摘事項	対応案(平成26年3月時)	フォローアップ状況(平成27年3月時)	フォローアップ状況(平成28年2月時)
	<p>【分野5】運営委員会や課題報告会等によりプロジェクト進捗状況の把握を行い、上期・下期の途中で「京」の計算資源配分見直しや、分野として借用している基盤センター等の計算資源の追加配分を行い、計算資源の重点化と進捗による優先化を図る。</p>	<p>【分野5】今年度は、「京」の計算資源の重点課題2課題(課題1・2)に対し、進捗の加速を支援、「京」の追加資源の獲得を後押しし、審査の結果、研究開発課題2に今年度880万ノード時間が追加配分、全体予算から東大FX10の計算機利用料を付与して研究の加速を図った。また、「京」の下期追加配分140万ノード時間中、課題1に100万ノード時間を割り当て、進捗による優先化を行っている。 課題間の連携の基礎となる課題1のハドロン間相互作用の決定をより進めるために、ゲージ配位生成に尽力した蔵増氏からハドロン間相互作用の決定の中心にいる初田氏に課題責任者を交代し、課題間連携を加速させる予定。</p>	
<p>分野によっては企業参加の状況は限定的であることから、実用化と応用へ向けた展開のために企業との更なる連携を深める必要があるが、その際、企業のHPC利用を促進する観点から、「京」や本プログラムが企業活動をどの様に効率化したのか、あるいは今後効率化するのかを定量的に評価し、トップマネジメント層等に示していくことを心がけるべきである。</p>	<p>・各戦略機関において、企業からのHPC利用に関する相談に応じる取組を行う。 ・文部科学省において、経済団体等との意見交換会や勉強会を実施する。 ・成果報告会では、産業界向けのセッションを設ける。 ・産業界との関係が深い分野(分野1、2、4)において、指摘事項を踏まえた対応を進め、企業トップマネジメント層等への効果的なアピールを推進する。</p> <p>【分野1】課題内における産業界との連携をさらに深めるとともに、製薬企業コンソーシアムへの支援を通して参画企業の拡大を図る。</p> <p>【分野2】元素戦略PJ等の各種国家プロジェクトも活用し、実用化に向けた企業との連携促進に取り組むとともに、開発したアプリの普及・展開活動を通じて、企業からのニーズも取り込み、産業界との連携強化を図る。また、産業界を交えたシンポジウムを今後も開催し、課題を共有する産官学研究者が席を交えて議論する場を設け、人材交流や共同研究への発展を図る。</p> <p>【分野4】経営的な視点を考慮したPR活動の強化については、まずは実際の設計業務に活用した場合の具体的な効果を明確にすることが重要で、現在それを評価するための設計システムを検討中であり、これを構築する部品群の整備や機能評価の準備を実施している。今後、企業での利用シナリオを想定した設計システムを構築し、まずその利活用により得られるメリットなどをより明確にする。その上で、開発提供システムのメリットや展開シナリオの説明資料を整理し、企業の意思決定マネジメント層にフォーカスした効果的な情報発信を検討する。</p>	<p>・企業も含め、「京」や「京」以外のHPCI資源を利用している(利用しようと考えている)一般ユーザに対して、各戦略機関が各研究分野個別の専門的な支援ができるような取組を登録機関(RIST)と協力して開始。 ・文部科学省において、経済団体等との意見交換会や勉強会の実施、企業が多く参加するイベントでの講演等を通じて、スパコン活用事例やHPCIの利用について情報発信を行った。 ・最終年度に開催予定の成果報告会(戦略プログラム全体または各分野で実施するもの)については、産業界への効果的なアピールができる内容となるように検討を行う。 ・産業界との関係が深い分野(分野1、2、4)における取組状況は以下のとおり。</p> <p>【分野1】分野1では2つの創業コンソーシアムの立ち上げとその研究支援を進めている。一つは「京」の産業利用枠で研究開発が進められている「新薬開発を加速する「京」インシリコ創業基盤の構築」であり、参加製薬企業数は2013年度の11社から、2014年度には23社にまで拡大し、日本において新薬開発を行っているほとんどの企業を巻き込んだ活動となってきている。 また、2015年度からは、「京」の産業利用枠で新たに「HPCIを活用したFMO創業プラットフォームの構築」が製薬企業のコンソーシアムを形成して推進されることになっている。(現時点での参加製薬企業数は11社。) これらの2つの研究に参加している製薬企業の研究者らは、その研究成果を評価し、その結果を社内で展開しており、上層部へボトムアップ方式で研究成果の評価結果が上がっていくものと考えている。</p> <p>【分野2】開発したアプリを「京」以外のユーザも使えるように、Webサイトの整備を進めている。その際、ユーザが解析したことからアプリを検索できるような工夫も行っている。また、企業との共同研究も進んでおり、企業内での製品開発に貢献している事例が産まれつつある。</p> <p>【分野4】「京」を利用した成果がどのように企業活動を変革するか等については、経営層等を意識し、成果を平易に解説したコンテンツや事例DBを多数作成して、専門のアウトリーチサイト(「計算工学ナビ」)より積極的に発信しており、すでに多数のアクセス数を得ている。例えば、自動車のエンジンルーム内熱設計システムにおいて時間短縮効果を実証するなど、具体的な事例を示しつつある。</p>	<p>【分野2】「京」で開発したアプリをPCでも試せる「MateriApps live!」の開発を継続しており、平成27年度はその講習会を3回実施。企業の方も参加している。同様のアプリは物性研、分子研、金研のスパコンにもインストールされており、その利用促進を図っている。現在、RISTとも連携し、HPCIのサービスとしてアプリの普及を介したHPCIの利活用促進を検討中。</p>

行政事業レビュー公開プロセス(取りまとめコメント)	回答
●成果指標の達成度合が不明瞭なため、個々の研究開発目標の評価・分析において工夫すべき	研究のフェーズには、基礎、応用、実用とある。基礎フェーズの研究に数値や達成時期の明確な目標を設定することは困難。その場合、世界の研究とのベンチマークとして、論文数や引用数、インパクトファクター、学会での招待講演数等で示し、最先端で注目される研究であるかどうかを評価指標とすることができる。応用研究は機能としての数値目標とその達成時期、実用研究は信頼性等の数値目標を加えて設定することが可能。ただし、計算科学者だけの研究は基礎研究に留まる。成果指標の明確化のためには、研究フェーズを進展させ、実験家や企業等との共同研究を推進していく必要がある。
●国民に対し、コストパフォーマンスを含めた事業成果についてわかりやすく表示すること	研究フェーズとして、上記の応用、実用研究に進まないと、コストパフォーマンスを示すことは難しい。大型プロジェクトの場合は、社会からの要請がある課題や、将来の日本を支える課題であることをわかりやすく示していくことが必要。基礎課題であったとしても、最終的にその課題がどのように社会にインパクトを与えるのかの説明を常に意識して行う。
●官と民の適切な役割分担により、民の活力を活用すべき	HPCIに関わる産官学の関連事業を全て土俵に乗せ、どのように発展させていくことでHPCが社会インフラとしての基盤技術となっていくのか、大きなシナリオを構築することが必要。その上で、フラグシップマシンやHPCIマシン、附置研や情報基盤センターの役割を定義し、産業界とのかかわりも明確にして役割分担を検討していく必要がある。
●ポスト京に向け、これまでの課題分析、官民の役割分担、成果を見えるようにして、次の事業展開につなげるべき	アプリを自分で開発するユーザーとともに、高度なアプリを利用したい産学連携のユーザーコミュニティの支援を強化する必要がある。ハードとアプリをインフラとして一体化させた重要課題解決のための計算枠を構築、提供することで、次のHPCIの形が見えてくる。フラグシップ利用の成果をアピールし、実用的な計算は他のHPCIや自前のPCクラスター、クラウドの計算資源で実施する流れを構築する。高度な支援はHPCIで実施し、それ以外は民間の支援サービスを得る等のHPC全体のビジネスモデルを構築する必要もある。

行政事業レビュー	回答
●スーパーコンピュータ「京」の開発・整備に1,000億円を超える国費が投入されていることに鑑み、投入予算に見合った成果が得られているか、成果を基礎研究面での科学的な成果と、実用的成果とに分けて、国民に分かりやすく説明すべきである。	上記に主な回答は記載。科学的成果では、国民に「夢」を与える成果が期待され、国家を支える科学技術への興味を引き付ける成果を創出していくための環境を整備する必要がある。実用的成果は、計算だけでなく、実験や計測技術と合わせた形でのインパクトを示す必要がある。計算を行った場合と行わない場合の比較を常に実施し、計算の効果をわかりやすく示す手順を確立する必要がある。