平成 30 年度 文部科学省
ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関する
アプリケーション開発・研究開発

平成 30 年度
「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」
成果報告書

令和元年 5 月 31 日

国立大学法人 東京大学
常行 真司

本報告書は、文部科学省の科学技術試験研究委託事業による委託業務として、国立大学法人東京大学が実施した平成 30 年度「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」の成果を取りまとめたものです。

目次

１．委託業務の題目 1
２．実施機関（代表機関） 1
３．委託業務の目的 1
４．平成 30 年度（報告年度）の実施内容 1
４－１．実施計画 1
４－２．実施内容（成果） 10
（１）プロジェクトの総合的推進
（２）サブ課題のアプリケーション開発・研究開発
①サブ課題Ａ 高機能半導体デバイス 20
②サブ課題Ｂ 光・電子融合デバイス 32
③サブ課題Ｃ 超伝導・新機能デバイス材料 40
④サブ課題Ｄ 高性能永久磁石・磁性材料 47
⑤サブ課題Ｅ 高信頼性構造材料 55
⑥サブ課題Ｆ 次世代機能性化学品 64
⑦サブ課題Ｇ 共通基盤シミュレーション手法 71
４－３．活動（研究会等） 83
４－４．実施体制 88
資料１～５

別添１　学会等発表実績
別添２　実施計画

１．委託業務の題目

「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」

２．実施機関（代表機関）

<table>
<tr><td rowspan="8">代表機関</td><td colspan="2">機関名</td><td colspan="4">国立大学法人　東京大学</td></tr>
<tr><td colspan="2">所在地</td><td colspan="4">〒113-8654　東京都文京区本郷七丁目３番１号</td></tr>
<tr><td rowspan="4">課題責任者</td><td>ふりがな
氏　　名</td><td>つねゆき　しんじ
常行　真司</td><td>生年月日</td><td colspan="2">西暦 1961 年 5 月 16 日（ 57 歳）
※2019 年 4 月 1 日現在</td></tr>
<tr><td>所属部署名</td><td colspan="2">大学院理学系研究科
／物性研究所</td><td>役職</td><td>教授</td></tr>
<tr><td rowspan="2">連絡先</td><td colspan="4">Tel.　03-5841-4127　　Fax.　03-5841-4127</td></tr>
<tr><td colspan="4">E-mail　stsune@phys.s.u-tokyo.ac.jp</td></tr>
<tr><td rowspan="4">事務連絡担当者</td><td>ふりがな
氏　　名</td><td>たかはし　ゆきお
高橋　志生</td><td colspan="3"></td></tr>
<tr><td>所属部署名</td><td colspan="2">物性研究所</td><td>役職</td><td>予算決算係　一般職員</td></tr>
<tr><td rowspan="2">連絡先</td><td colspan="4">Tel.　04-7136-3571　　Fax.　04-7136-3216</td></tr>
<tr><td colspan="4">E-mail　issp-yosan@issp.u-tokyo.ac.jp</td></tr>
</table>

３．委託業務の目的

「京」で培われた量子論に基づくシミュレーション手法や新しいマルチスケールシミュレーション手法をさらに発展させ、現代社会に不可欠な先端電子デバイスや高機能物質・材料の究極的洗練化、新しい物理原理に基づく機能創出、将来のイノベーションの源泉となる学理の追及を通じて、我が国の次世代産業・社会基盤の構築に寄与することを目的とする。

このため、国立大学法人東京大学を中核機関、国立大学法人名古屋大学、国立大学法人筑波大学、国立大学法人大阪大学、国立研究開発法人産業技術総合研究所、大学共同利用機関法人自然科学研究機構、国立大学法人東京工業大学、国立大学法人東北大学、国立大学法人横浜国立大学、国立大学法人名古屋工業大学、国立大学法人鳥取大学、学校法人東京理科大学を分担機関とし、国立研究開発法人理化学研究所、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会や個人参加する研究者が所属する機関（以後、協力機関と総称する）の協力を得て、本業務を実施する。

４．平成 30 年度（報告年度）の実施内容

４－１．実施計画

本業務は、以下ＡからＧの七つのサブ課題のアプリケーション開発・研究開発と、プロジェクトの総合的推進で構成する。Ａ.高機能半導体デバイス、Ｂ.光・電子融合デバイス、Ｃ.超伝導・新機能デバイ

ス材料、D.高性能永久磁石・磁性材料、E.高信頼性構造材料、F.次世代機能性化学品、G.共通基盤シミュレーション手法。

重点課題を構成する七つのサブ課題A～Gに関し、中核機関が中心となり、分担機関、および、協力機関に所属するメンバーの協力を得て、平成27年度に設定し、平成29年度に中間評価を受けて見直した各サブ課題の目標に向けた研究を実施する。

各サブ課題においての研究項目は以下の通りである。各サブ課題代表者には、サブ課題統括業務を含む。

①サブ課題A 高機能半導体デバイス
ⅰ）デバイス構造における乱れの理解と制御そして新機能発現
ⅱ）新材料からの量子論デバイス創製シミュレータ開発
②サブ課題B 光・電子融合デバイス
ⅰ）光励起電子ダイナミクスによる新奇デバイス原理の探求
③サブ課題C 超伝導・新機能デバイス材料
ⅰ）高温超伝導体薄膜・界面の理論設計と超伝導転移温度上昇指針の探究
ⅱ）遷移金属酸化物を含む物質群でのトポロジカル相実現と純粋スピンキャリア創出
④サブ課題D 高性能永久磁石・磁性材料
ⅰ）新規磁性材料開発－電子論と情報統合手法による探索
ⅱ）磁性材料の高性能化－大規模電子状態計算による探索
⑤サブ課題E 高信頼性構造材料
ⅰ）第一原理計算によるデータ構築とメゾ・マクロへの連結
ⅱ）大規模 Phase Field 法計算の実行
⑥サブ課題F 次世代機能性化学品
ⅰ）ポリマーの物質分離機能の解析
ⅱ）有機／無機界面の物性に関する計算
⑦サブ課題G 共通基盤シミュレーション手法
ⅰ）基盤的第一原理電子状態計算ソフトウエアの開発・整備
ⅱ）物質構造と相変化の探索手法の開発
ⅲ）基盤的超並列計算アルゴルリズムの開発
ⅳ）大型実験施設との連携

国立大学法人東京大学は、代表機関として本重点課題のアプリケーション開発・研究開発を主体的に推進し、委託業務全体の統括を行う。また、サブ課題B、C、D、E、Gを行う。

また、分担機関と連携し、再委託によって、以下の①～⑦の研究開発に取り組む。

国立大学法人名古屋大学は、サブ課題Aを行う。

国立大学法人筑波大学は、サブ課題A、Bを行う。

国立大学法人大阪大学は、サブ課題A、Fを行う。

大学共同利用機関法人自然科学研究機構は、サブ課題Bを行う。

国立研究開発法人産業技術総合研究所は、サブ課題Ｄ、Ｅを行う。
国立大学法人東京工業大学は、サブ課題Ｄを行う。
国立大学法人東北大学は、サブ課題Ｅ、Ｇを行う。
国立大学法人横浜国立大学は、サブ課題Ｅを行う。
国立大学法人名古屋工業大学は、サブ課題Ｆを行う。
国立大学法人鳥取大学は、サブ課題Ｇを行う。
学校法人東京理科大学は、サブ課題Ｇを行う。

①サブ課題Ａ 高機能半導体デバイス

（再委託先：国立大学法人名古屋大学、国立大学法人筑波大学、国立大学法人大阪大学大学院工学研究科）

ｉ）デバイス構造における乱れの理解と制御そして新機能発現

・再委託先１：国立大学法人名古屋大学

第一原理実空間計算手法の高機能化、高速化を「京」およびポスト「京」アーキテクチャ上で行う。具体的には、実空間密度汎関数法（コード名：RSDFT）とそのダイナミクス計算への拡張である実空間 Car-Parrinelo Molecular Dynamics 法（コード名：RS-CPMD）において、準粒子スペクトル計算、応答関数計算、フォノン構造計算をインプリメントし、デバイス科学における物理的解釈を可能にする機能を装備する。これら手法の高機能化、高度化により、(1) パワーデバイス材料である炭化珪素、窒化物半導体、(2) 新奇材料と目されている原子層物質、(3) 既存テクノロジーとの高い連続性を有する Si/Ge 系ナノ構造、等を用いたデバイス界面での乱れ（界面構造、不完全性、異種原子混入）と界面形成の機構および電子的特性を調べる。

また、GaN の MOCVD 成長のプロセスシミュレーションコードを開発する。具体的にはオングストームレベルを扱う第一原理計算とミリメートルレベルを扱う流体力学を、成長表面が局所平衡にあることを用いた熱力学的解析を介して「物理的に正確に連結する」マルチフィジックスシミュレーションの方法論を確立する。この方法論に基づく CVD 成長シミュレーションコードを開発し、これまで正確な扱いが不可能だった MOCVD 成長シミュレーションにブレークスルーを与える。

さらに、高度化された実空間手法と下記のデバイスシミュレータ・コードとの連成シミュレーション技術の確立を統括する。

・再委託先２：国立大学法人筑波大学（計算科学研究センター）

大規模系における実空間密度汎関数法ダイナミクス計算のため、Car-Parrinello Molecular Dynamics (CPMD)プログラムの高度化を行い、自由エネルギー解析のためのモジュール、および QM/MM 法のモジュールを新規作成する。応用計算として種々の結晶成長過程の研究に適用し、熱力学的解析と組みわせることで、最適な結晶成長条件を探索する。
平成 30 年度より、ポスト「京」の開発機関である国立研究開発法人理化学研究所が行う計算機科学と計算科学のコデザイン Sub WG での課題代表メンバーとして活動する。

ⅱ）新材料からの量子論デバイス創製シミュレータ開発

・再委託先４：国立大学法人大阪大学大学院工学研究科

量子流体輸送シミュレータ（コード名：Hi-QHD）を用いて化合物半導体電界効果トランジスタの輸送特性解析を行う。フルバンド・モンテカルロ輸送シミュレータ（コード名：FBMC）のメニィコア対応での高速化・高度化を進め、パワーデバイスの輸送特性解析を行う。非平衡グリーン関数輸送デバイスシミュレータと RSDFT とを結合させた量子輸送デバイスシミュレータ（コード名：RSDFT-NEGF）を用いて現実的なサイズのナノワイヤ型およびフィン型の電界効果トランジスタシミュレーションを行う。また、同コードを用いて、半導体/酸化膜界面の乱れが輸送特性に及ぼす影響を解析する。RSDFT-NEGF と Hi-QHD および RSDFT-NEGF と FBMC の連成を確立する。

・再委託先３：国立大学法人筑波大学（数理物質系）

クーロン長距離相関を導入した自己無撞着モンテカルロシミュレータ(SCMC)を局所的な乱れのあるナノ構造デバイスの研究に応用する。具体的には、基盤内のイオン化不純物等の局在する乱れに伴った、遮蔽が不完全なデバイス動作下でのポテンシャル揺らぎの評価、および第一原理計算からの知見をもとにして（局在した乱れの）散乱ポテンシャルの導出を行い、SCMC による高精度な電流電圧特性シミュレーションを進める。そのうえで、汎用流体デバイスシミュレータに適用可能な微細構造での局在した不純物の物理モデルの構築を試みる。

②サブ課題Ｂ 光・電子融合デバイス

（再委託先：国立大学法人筑波大学、共同利用機関法人自然科学研究機構）

ⅰ）光励起電子ダイナミクスによる新奇デバイス原理の探求

・再委託先２：国立大学法人筑波大学（計算科学研究センター）

平成 29 年度に引き続き、ナノ構造体における光と物質の相互作用を記述するための光励起電子ダイナミクス計算プログラムの開発を進める。これを用いて、光・電子融合デバイス設計や光加工技術に資する基礎の確立を試みる。

具体的には、東京大学・分子科学研究所と協力して近接場光励起を解明し近接場光励起に起因する物質の光高機能化を明らかにするため、必要となる計算コードを整備する。また、高強度パルス光と物質の相互作用を記述する計算コードの整備をさらに進める。特にパルス光がシリコン薄膜に斜方入射する場合に対し、3 次元マクスウェル方程式と 3 次元電子ダイナミクスを多階層結合したシミュレーションを行い、薄膜の透過によるパルス波形の変化を明らかにする。シリコン以外の物質からなる薄膜に対しても波形変化を調べ、光波波形を整形するデバイス原理の確立を目指す。

・受託者：国立大学法人東京大学

近接場光波数励起を利用した高い受光感度を持つシリコンデバイスの作製を行う。デバイス界面には金属ナノ粒子を分散し、受光感度を高める。また、界面構造を利用した新たなデバイスの作製を試みる。

・再委託先６：大学共同利用機関法人自然科学研究機構

近接場光を用いた二倍波励起による近接場光エッチング法への展開、異なる波数を持つバンド間遷移（波数励起）を実証し、受光感度を高めたシリコンデバイスの設計を進める。

③サブ課題Ｃ 超伝導・新機能デバイス材料　（再委託先は無し）

・受託者：国立大学法人東京大学

ｉ）高温超伝導体薄膜・界面の理論設計と超伝導転移温度上昇指針の探究

高温超伝導体薄膜や界面においてバルクと比較して、銅酸化物や鉄系超伝導体が優れた特性を示す機構を、第一原理的な大規模計算およびモデル計算を組み合わせての説明を試みる。これをもとに、バルクの超伝導体の機構についても知見を得る。以上の目標を見据えて、すでに導出されている銅酸化物のバルク周期系の第一原理有効ハミルトニアンを変分モンテカルロ計算で詳細に吟味するとともに、有効ハミルトニアンの改良を行う。これをさらに変分モンテカルロ計算で解くフィードバックから、バルク超伝導を定量的に記述できる枠組みを絞り込む。さらに電子格子相互作用などの現実的な効果についても検討する。さらにバルクで定量性の検証された有効ハミルトニアンをもとに、界面を表わす 5 層以上の非周期有効ハミルトニアンの超伝導振幅を変分モンテカルロ計算で詳細に吟味する。またこの目的のために高精度かつ高効率な有効ハミルトニアンの数値計算手法を ii)で開発するテンソルネットワーク法や機械学習法と変分モンテカルロ法を組み合わせることによってさらに開発改良し、応用を進める。また、MACE のアルゴリズムの中に、制限 GW 法を組み込み、RESPACK の改良、多機能化を行う。実験データ解析のための機械学習法の活用を実験研究者とともに追求する。当初計画を超えてレーザー照射で実現しうる非平衡高温超伝導についても、レーザー照射後の超伝導保持の方策や、特定のフォノン励起による超伝導増強の可能性を検討する。実験家とのフォーラム、産業界とのフォーラムでの活動とタイアップして研究を進める。

ⅱ）遷移金属酸化物を含む物質群でのトポロジカル相実現と純粋スピンキャリア創出

ジュール熱を発しない純粋スピンキャリア、およびトポロジカル量子計算の基礎となるマヨラナ粒子が創発的に出現するトポロジカルな量子スピン液体の、パイロクロア構造イリジウム酸化物およびルテニウム塩化物における実現可能性を、数値厳密対角化、大変数変分モンテカルロ法、およびテンソルネットワーク法によって探求する。量子スピン液体が実現する条件の理論的探索を進め、並行して、実験的検証を可能とするためのデータ解析手法を追求する。さらに、我々がイリジウム酸化物において予言し、実験的研究が進む磁壁金属状態を、オスミウム酸化物で実現する可能性や、より稀少性が低い他の遷移金属化合物で実現する方法を引き続き探求するとともに、非平衡状態や超伝導の近接効果を用いた制御性を追求する。

i)および ii)に共通して応用可能なテンソルネットワーク法の開発・整備を引き続き行い、これまでは適用が困難であった量子スピン液体への適用を推進する。さらに、強相関トポロジカル絶縁体への適用を念頭に、機械学習を統合した変分波動関数法の開発を行う。

i)と協力し、オープンソースパッケージ HΦ、mVMC の機能拡張を通じて、産官学連携フォーラムのさらなる推進と実験家および大規模実験施設と連携を進めていく。

④サブ課題Ｄ 高性能永久磁石・磁性材料

（再委託先：国立研究開発法人産業技術総合研究所、国立大学法人東京工業大学）

ｉ）新規磁性材料開発－電子論と情報統合手法による探索

・再委託先７：国立研究開発法人産業技術総合研究所

元素戦略プロジェクト磁性材料理論拠点である産総研を中核として、理論と実験の共創を加速するためサブ課題Ｄ統括を再委託する。第一原理計算と情報統合手法を用いて、与えられた結晶構造に対して、元素の種類やその割合を変えて、最適な磁気物性値を示す化学組成を決定するための手法を開発する。また、高磁気特性物質を有する物質開発のため、結晶構造探索手法を開発する。

・受託者：国立大学法人東京大学

乱れた磁性体界面近傍 10～1000 層の第一原理電子状態計算を、規則度と組成をパラメータ空間にして網羅的に行い、界面生成エネルギーおよび界面磁性（交換結合定数、磁気異方性、軌道磁気モーメント）に関するデータ蓄積を行う。これにより保磁力発現機構の微視的機構解明の基盤を与えるとともに、高精度計算手法と情報科学的手法との統合による新規磁性材料開発を三宅グループと協力して推進する。

ⅱ）磁性材料の高性能化－大規模電子状態計算による探索

・再委託先９：国立大学法人東京工業大学

ネオジム磁石材料組織における副相の一つであるアモルファス 2 粒子粒界相における磁気結合を見積もるための方法論開発を行う。それにより、アモルファス 2 粒子粒界相の原子配置と磁気状態を同定し、界面の大規模第一原理計算の入力データとして活用する。主相・副相界面の大規模第一原理計算を、スーパーコンピューターを高効率に利用するために、並列計算に適した局在基底による OpenMX コードを用いて実施する。

⑤サブ課題Ｅ 高信頼性構造材料

（再委託先：国立研究開発法人産業技術総合研究所、国立大学法人横浜国立大学、国立大学法人東北大学金属材料研究所）

ｉ）第一原理計算によるデータ構築とメゾ・マクロへの連結

・再委託先８：国立研究開発法人産業技術総合研究所

鉄系材料の微細組織の構成要素である粒界、転位と各種の添加元素・不純物との相互作用の大規模第一原理計算を進め、高精度データとして蓄積する。第一原理局所エネルギー法・局所応力法の適用による機構解明を行い、周期表に渡る添加元素の効果の全体像を明らかにする。第一原理計算をメゾ・マクロに繋ぐ技術として、局所エネルギー法と機械学習を組み合わせた粒界エネルギー予測技術を確立する。実験サイドとの議論も行いながら、サブ課題内の各グループとの連携を進め、マルチスケール計算技術の確立に向けた検討を進める。

・再委託先１２：国立大学法人横浜国立大学

「ポテンシャル繰り込み理論」と 4 面体近似の「空孔を擬原子として含むクラスター展開」を用いて、化学ポテンシャルを原子 1 個付け加える自由エネルギーの増加分として第一原理計算により評価し、Phase Field モデル(PFM) へマップする新たな方法論の構築を試みる。具体的には、FePt 合金や NiAl 合金などの PFM のシミュレーションを試行・精査し、世界で初めての第一原理計算からの PFM シミュレーションへの階層的マッピング手法の完成を試みる。

ⅱ）大規模 Phase Field 法計算の実行

・再委託先１０：国立大学法人東北大学金属材料研究所

凝固過程の制御は構造材料の高品質化ならびに高機能化のための重要課題である。凝固過程の計算について、東大・澁田グループらと共同して、大規模分子動力学法計算と大規模 Phase Field 計算によるマルチスケール解析の連結を行うことを目指し、分子動力学計算からのパラメータ導出を行う。具体的には、系統的な大規模分子動力学法計算により純金属および 2 元系合金における固液界面移動度と界面エネルギーを算出する。さらに、2 元系合金の固液界面における溶質分配について検討し、分子動力学法/モンテカルロ法ハイブリット計算による 2 元系状態図の導出を目指す。また、ポスト「京」コンピュータのアーキテクチャを検討し、現行のプログラムの最適化を図るための作業に着手する。

・受託者：国立大学法人東京大学

構造材料生成プロセスの要である凝固・粒成長過程について、東北大金研グループらと連携して、大規模分子動力学法計算と大規模 Phase Field 計算によるマルチスケール解析の連結を行うことを目指す。具体的には大規模分子動力学法計算により、純金属および 2 元系合金における過冷却融液からの核生成・凝固・粒成長過程を解析し、分子動力学法で得られた微細組織構造を初期構造とした Phase Field 計算を試みる。一方、前年度に引き続きデンドライトの発生から競合成長までの組織形成および後続の結晶粒成長までのマルチスケール計算を行うことを試みる。また、現行のプログラムのポスト「京」コンピュータへの最適化を図るために予備計算を行う。

⑥サブ課題Ｆ　次世代機能性化学品

（再委託先：国立大学法人大阪大学大学院基礎工学研究科、国立大学法人名古屋工業大学）

ⅰ）ポリマーの物質分離機能の解析

・再委託先５：国立大学法人大阪大学大学院基礎工学研究科

分岐を持つポリマーや共重合系を対象として、全原子モデルを構築し水やガスなどの小分子の溶解自由エネルギーを解析する。全原子 MD シミュレーションとエネルギー表示溶液理論の融合手法によって溶解自由エネルギーを計算し、ポリマー内セグメントの相互作用解析によって小分子の溶解性を規定する構造単位を同定する。さらに、ポリマーの自由エネルギーを全原子レベルで計算するために、ポリマー伸張の自由エネルギー変化を解析する。

ⅱ）有機／無機界面の物性に関する計算

・再委託先１３：国立大学法人名古屋工業大学

実用面から重要な様々な有機／無機界面について、その原子論的な界面モデルを、これまでのシミュレーション結果と実験結果を踏まえて改良する。マクロな基礎物性値である界面自由エネルギーを高精度で高速に計算する手法を確立し実際に適用する。実際的な界面の接着・密着強度等を理論予測するために、ハイブリッド量子古典シミュレーション法を界面モデルに適用し、その反応過程の解明を試みる。得られたシミュレーション結果を実験結果と照合することで、界面モデルのさらなる改良に役立てる。

⑦サブ課題Ｇ 共通基盤シミュレーション手法

（再委託先：国立大学法人東北大学大学院工学研究科、国立大学法人東北大学金属材料研究所、国立大学法人鳥取大学、学校法人東京理科大学）

ⅰ）基盤的第一原理電子状態計算ソフトウエアの開発・整備

・受託者：国立大学法人東京大学

大型実験施設(SPring-8、SACLA や J-PARC 等)との連携を強化するため、密度汎関数理論とデルタ SCF 法に基づき、X 線光電子分光スペクトルと X 線吸収スペクトルの計算手法のさらなる高精度化に取り組み、新たに開発した手法を OpenMX に実装する。また開発した手法を 2 次元物質系に適用し、計算手法の有効性を示す。さらに数千原子を超える大規模な系の高精度な第一原理全エネルギー計算および電子伝導計算を実現するために、自己エネルギー補正を行った分割統治型のオーダーN 第一原理電子状態計算手法を開発し、OpenMX に実装・整備する。

ⅱ）物質構造と相変化の探索手法の開発

・再委託先１１：国立大学法人東北大学大学院工学研究科

サブ課題Ａ～Ｆに対する共通基盤として、実験データに依存せず相図の理論計算ツールの開発を行う。特に、理論的に厳密な第一原理計算(DFT)と実用的に有用な熱力学手法(CALPHAD)を組み合わせて相図の計算ツールの開発を行い、CALPHAD 法の問題点を改善する新しい計算モジュールの開発を中心的に行う。原子間の相関の対近似、CVM の四面体近似を不規則相に導入した熱力学モデルに対して自由エネルギーの最小化手法の検討を行い、実際の合金系に対して、大規模な系統的 DFT 計算に基づいて、基底状態、エントロピーのモデル、安定相、準安定相、不安定相の取扱い、格子の緩和効果などの相図への影響の詳細を調べ、実用できる有効な相図計算法を確立する。また、機械学習と電子論を用いて新しい物質の結晶構造の探索、予測手法の開発を続ける。東北大学金属材料研究所グループと連携して研究を進める。

・再委託先１０：国立大学法人東北大学金属材料研究所

東北大学大学院工学研究科グループと連携して、格子の局所緩和の理論的基礎の構築を行う。Eschelby cycle に基づく考え方は理論の枠組みを構築するのに有用であるが、全格子点の緩和や局所緩和を具体化するためには連続変位クラスター変分法(CDCVM)が強力である。Cu-Au 系は古くから相平

衡の計算の対象になってきた系であり、我々のグループにおいてもこの系を対象にした計算を行う。また、Fe-系についても十分な計算結果の蓄積があり、計算結果の比較参照のためにこれらの系の計算を行う。東北大学大学院工学研究科グループでは CALPHAD 法に基づく現象論的計算を遂行するために、金研グループの結果を参照のために提供する。

ⅲ）基盤的超並列計算アルゴルリズムの開発

・再委託先１４：国立大学法人鳥取大学

数理・情報科学との融合戦略により、計算物質科学諸分野の共通課題に取り組んでいる。共通接点として、行列の性質（サイズ、疎密性など）および計算機アーキテクチャの特性を利用した新しい効率的な大行列方程式（固有値問題など）むけアルゴリズムが研究されてきた。特に、複数の計算アルゴリズムの性能特性を各計算機上で容易に比較しうる、固有値問題解法のミドルウェアおよびミニアプリケーションを試作し、公開してきた。本年度は、「京」よりも新しい（メニ―コア・アーキテクチャ）コンピュータを想定した特性研究を行い、ポスト「京」コンピュータへの足がかりとする。

ⅳ）大型実験施設との連携

・再委託先１５：学校法人東京理科大学

密度汎関数法に基づく第一原理計算ではその電子状態や励起ダイナミクスが十分記述されない強相関物質・材料に対応するため、多軌道強相関物質系のスピン・電荷ダイナミクスを計算する動的密度行列繰り込み群法(DDMRG)プログラムの改良・整備を進めるとともに、この手法を適用して、大型実験施設（J-PARC,SPring-8 や海外の放射光施設）で行われている新規量子スピン物質に対する非弾性中性子散乱実験や高温超伝導体に対する共鳴非弾性 X 線散乱実験のデータ解析・実験への提案を行い、大型実験施設との連携を強化する。

なお、ポスト「京」の開発機関である国立研究開発法人理化学研究所は、計算機科学と計算科学のコデザインで各サブ課題と協力する。

産業界の窓口となるスーパーコンピューティング技術産業応用協議会は、基盤的ソフトウエア開発に協力する。各サブ課題は、関連する協力機関の協力を得て、アプリケーション開発・研究開発を行う。

⑧プロジェクトの総合的推進

平成 30 年度は、平成 29 年度に実施した中間評価での指摘事項を受けて見直した実施体制で、新たに設定した研究目標の実現を目指した研究を推進する。各サブ課題とも、平成 29 年度までに開発したアプリを活用する具体化な材料やデバイスを明確にし、他の実験プロジェクト、企業等との連携を有効に実施して研究を推進する。研究会やシンポジウムを通して物質科学コミュニティに広く研究の成果、進捗を公表し、有識者から意見をいただき、課題の解決に活かす。企画会議や諮問委員会等を適宜開催し、参画各機関の連携・調整、配分した予算計画を見直して、実行に反映させる。

４－２．実施内容（成果）

（1）プロジェクトの総合的推進

1）実施体制

平成 30 年度は、平成 29 年度に実施した中間評価の指摘事項を受けて見直した実施体制で、見直した研究目標の実現を目指した研究を推進した。具体的には、中核機関である東京大学物性研究所がプロジェクト全体活動の代表となり、各サブ課題の責任者が代表機関と連携しながらサブ課題の研究を実施した。七つのサブ課題に関し、サブ課題Ａ～Ｃを「Gr1：デバイス課題」、サブ課題Ｄ～Ｅを「Gr2：材料課題」、全体の横串を通すサブ課題Ｇを「Gr3：共通基盤」として三つのグループにとりまとめて運営した。研究実施のために、平成 30 年度(当初)は、東京大学および、15 の分担機関、39 の協力機関数が連携し、さらに、外部の複数のプロジェクトや機関と連携して推進した（図 4-2(1)-1)。各サブ課題とも、平成 29 年度までに開発したアプリを活用する具体化な材料やデバイスを明確にし、他の実験プロジェクト、企業等との連携を有効に実施して研究を推進し、より明確な目標を設定した。図 4-2(1)-2 に各サブ課題が連携体制を構築しているプロジェクト、および、企業群を示す。本プロジェクトは、情報共有と課題進捗、問題点の検討等を行う場として企画会議を、下記の企画会議メンバーで実施した。

＜ポスト「京」重点課題(7) 企画会議メンバー＞

全体統括・デバイス Gr 統括責任者：	常行真司（東大物性研、東大院理）
材料 Gr 統括責任者：	赤井久純（東大物性研）
サブ課題Ａ責任者：	押山淳（名古屋大学）
サブ課題Ｂ責任者：	矢花一浩（筑波大学）
サブ課題Ｃ責任者：	今田正俊（東大院工）
サブ課題Ｄ責任者：	三宅隆（産総研）
サブ課題Ｅ責任者：	香山正憲（産総研）
サブ課題Ｆ責任者：	松林伸幸（阪大院基礎工）
サブ課題Ｇ責任者：	尾崎泰助（東大物性研）
物性拠点代表者：	川島直輝（東大物性研）
材料拠点代表者：	毛利哲夫（東北大金研）
産官学連携委員：	小野倫也（筑波大学）
広報委員：	藤堂眞治（東大院理）
産官学連携委員：	茂本勇（東レ・スパコン産応協）
アプリ高度化代表：	重田育照（筑波大学）

また、文科省からの指示により、第三者の視点でプロジェクトの進捗状況の把握・評価・改善提言・指導等を行う機関として、平成 27 年度より実施機関のもとに有識者で構成された「諮問委員会」を設けている。平成 30 年度は下記メンバーに委員を委嘱し、ご意見をいただいて課題解決に活かした。

＜諮問委員＞

秋光純（岡山大学）

幾原雄一（東京大学）

高田章（ロンドン大学特任教授　元旭硝子中央研究所）

福間雅夫（mScience Lab（エムサイエンス研究所）元一般社団法人半導体産業研究所）

塚田捷（東京大学名誉教授）

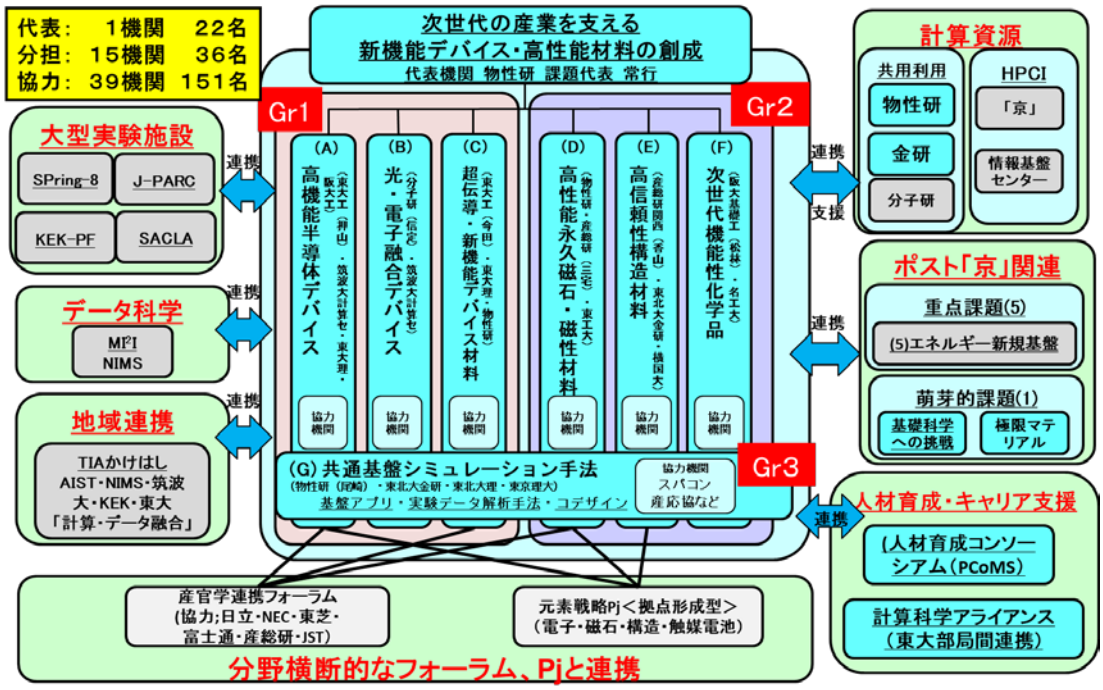


図 4-2(1)-1：CDMSI 実施体制

Gr	ポスト「京」連携	連携Pj		共同研究企業
デバイス	C 萌芽(1)「基礎科学」	A 「パワーデバイス・ロジック・新材料実験Pj」岩井（東工大）・木本（京大）	A 「化合物結晶成長プロセス事業」天野（名大未来材料・システム研究所）	B IHI
	A,B 萌芽「極限材料」	A「デバイスシミュレータ実用検証」福間（旧半導体産業研究所(SIRIJ)）（mScience Laboratory）	B 日本学術振興会拠点形成事業 A. 先端拠点形成型「散逸ゆらぎ制御ナノ電子フォトン国際研究拠点」田畑（東大）	B 光学メーカ
		C 「超伝導実験・理論フォーラム」藤森（東大理）・岩佐（東大工）ほか	C 「情報・計算機科学連携」須田（東大情報理工）今村(理研) TIAかけはし、PCoMS、CCMS、さきがけと連携	C 自動車メーカ
材料	E萌芽(1)「基礎科学」	D「高効率モーター用磁性材料技術研究組合(MagHEM)」尾崎（産総研）	C 「トポロジカル物質実験・理論フォーラム」有馬（東大新領域）大串（東北大）中辻（物性研）ほか	E 新日鉄住金
	F重点(1)「バイオ」	D 「元素戦略磁性材料拠点」広沢（NIMS）	D「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ（MI²I）」伊藤（NIMS）	F 東レ、デンソー、トヨタ、ダイキン
	F重点(5)「エネルギー」	E「構造材料元素戦略研究拠点」田中（京大）	E 戦略的イノベーション創造プロジェクト（SIP）「革新的構造材料」	F デンソー、豊田中研、神戸製鋼
		F ImPACT「タフポリマー」藤本（名大）	F NEDO 超超Pj 八瀬，大谷（産総研）	D 自動車メーカ
				新日鐵住金、富士通研、東芝、富士フイルム、日産アーク、村田製作所、コベルコ科研、日立、ExxonMobil、日本板硝子、クロスアビリティ、アスムス、QuantumWise、アドバンスドアルゴリズム&システムズ、みずほ総研等
共通		G 「SPring-8」石井（量研）、原田（東大物性研）、Baron（理研）	G 「J-PARC」脇本（原研）、藤田（東北大金研）、満田（理科大）	

図4-2(1)-2: プロジェクト、および、企業との連携体制（2019年1月時点）

２）文科省ヒアリング対応

平成 31 年 1 月 17 日に文科省ポスト「京」重点課題推進 WG によるヒアリングが実施された。その際に指摘された事項の対応を検討し、最終年度(令和元年)の実行計画に反映させた。主に改善や加速を求められた主な指摘事項とその主な対応策概要は下記の通り。

ⅰ）研究開発の進捗

産業界との連携が進んでいるとのことで、今後に期待する。

⇒具体化した連携先と成果創出に向けてポスト「京」で解決する研究課題を明確化する。

ⅱ）コデザインを含めたアプリケーションの開発

特に、産業界への普及は重要である。

⇒HPCI 計算資源へのアプリ提供や FOCUS との連携などにより、産業界への普及を促進させる。

ⅲ）計算資源の利用状況

一部利用率の低い課題がある。

⇒各サブ課題の計画的な計算資源利用強化とともに、課題全体での有効利用を促進させる。

ⅳ）目標・実施計画

HPCI にインストールしたアプリの支援体制について考えることも重要である。

⇒アプリをインストールしたスパコンを保有する情報基盤センターとの共同で、アプリ講習会の実施を行い、利用者増を目指す。

ⅴ）総合評価

理論検証、理論予測、AI 活用等のポスト「京」への展開が楽しみである。

⇒ポスト「京」チップ向けのアプリ高度化に特化した合宿を実施し、Pj 全体のレベル UP を図る。

３）諮問委員会・企画会議の実施

平成 30 年度は各 1 回の諮問委員会と企画会議、および、合同の会議 1 回を実施した。各会議のトピックスは下記の通りである。

［第 1 回諮問委員会：平成 30 年 5 月 8 日（火）］

各サブ課題の研究内容の詳細を諮問委員の先生方に 25 分で説明してご理解いただき、その後 25 分かけて深く議論しコメントいただく場を設けた。諮問委員の先生方が、十分に各サブ課題の状況や課題把握を行うことができたため、各サブ課題への有益な多くのアドバイスを受けることができた。会議後、それらのアドバイスを各サブ課題の活動に活かすことができた。

［第1回企画会議：平成29年7月20日（金）］

7 月 19、20 日で開催した CDMSI 研究会の二日目に実施した。諮問委員の先生方にはオブザーバとして参加いただいた。主要議題は研究加速経費の利用項目に関する審議であり、国際会議 2 件と、ソフトウエア開発加速の 1 件の、計 3 件の追加経費を認めた。また、研究成果広報の促進手段として、

HPCI システムへの成果登録、表彰、プレスリリース等の推進、開発アプリのマニュアル整備と MateriApps 登録や講習会実施を促した。

［第1回諮問委員会・企画会議　合同委員会：平成30年12月18日（火）］

12 月 17、18 日に実施された CDMSI シンポジウム二日目の昼と終了後の 2 回に分けて実施した。今田サブ課題Ｃ責任者の早稲田大学異動、サブ課題Ｅ主要アプリ「フェーズフィールド(PF)法」高度化加速に向けた京都繊維工業大学の研究実施体制強化のため、これら 2 機関への再委託追加が承認された。また平成 31 年 8 月の「京」停止に伴う HPCI 計算資源割り当てに関するルールの考え方は、平成 30 年度の「京」計算資源配分割合に準じて配分する方針を説明し、了解を得た。

４）計算資源のマネジメント

各サブ課題に割り当てた「京」の計算資源は、上期、下期で利用資源量が区分されている。各期で 3 ヶ月が経過した時点で計算資源の利用が滞っている課題には利用計画を問い合わせ、割り当てられた計算資源を着実に利用するよう促した。また、期の途中でプログラム開発の課題が発生する等で計算資源をすべて利用できない課題に関しては、サブ課題間での計算資源のシフトを促し、効率的な運用を行った。図 4-2(1)- 3,4 に上期と下期の利用実績を示す。全サブ課題に配分された「京」計算資源の利用率は、上期は 88.9%、下期は 95.1%となり、有効に計算資源が利用された。

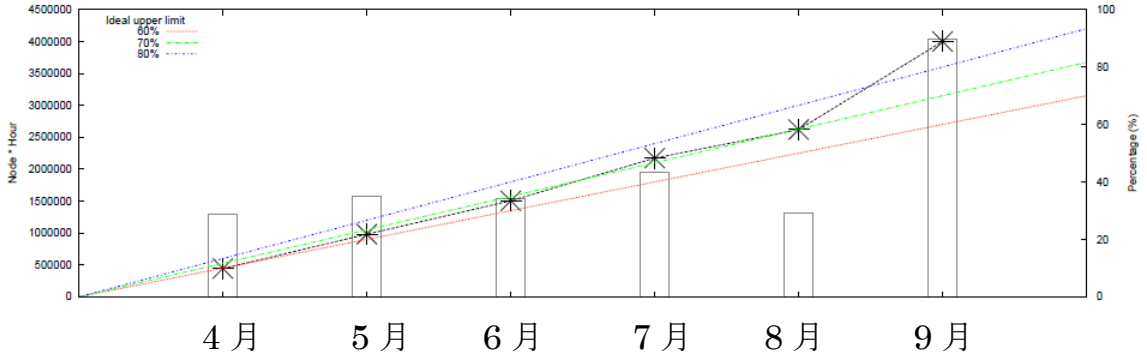


図 4-2(1)-3: 平成 30 年上期の CDMSI 全体の「京」利用推移

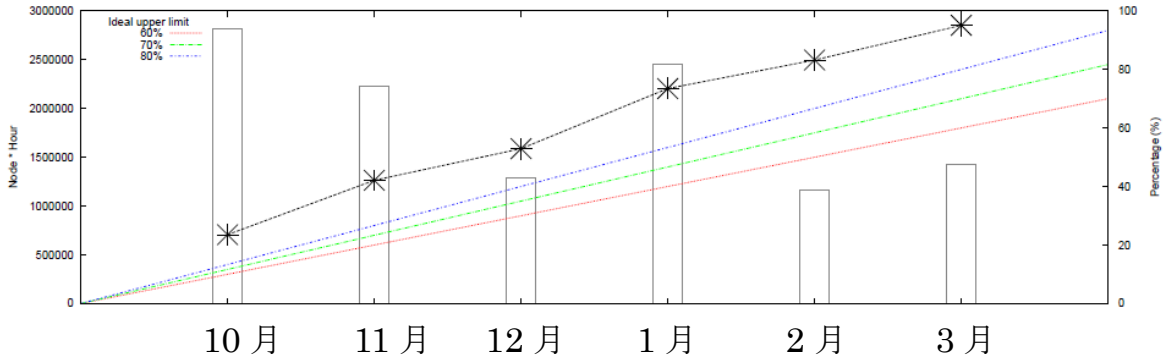


図 4-2(1)-4: 平成 30 年下期の CDMSI 全体の「京」利用推移

５）広報活動

＜第 3 回 CDMSI 研究会　～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～＞

日時：平成 30 年 7 月 19 日（木）～平成 30 年 7 月 20 日(金)

場所：東京大学理学部 1 号館　小柴ホール／本郷キャンパス

プログラム：資料 1 参照

3 回目となる今回の研究会では、サブ課題代表者が課題全体の進捗をサマライズした後、若手の課題実施者を中心に発表することを推奨し、「京」を活用した研究とアプリケーション開発の成果、進捗状況が示された。各サブ課題内で実施するサブサブ課題単位での口頭発表を 19 件、ポスターセッションでの発表を 29 件実施した。2 日間 114 名の参加があり、活発な議論がなされた。また、招待講演として、下記 2 件の発表を実施した。

◆招待講演 1 「マテリアルズインフォマティクスの最前線」　吉田亮（統計数理研究所）

◆招待講演 2 「走査プローブ顕微鏡と分子架橋系をめぐって」　塚田捷（東京大学名誉教授）

吉田先生からは、機械学習等の情報科学手法と計算科学を統合的に用いた、これまでとは異なる材料開発の手法が示され、興味を引いた。また、塚田先生からは、実験と計算のコラボレーションによ物質科学研究の推進に関する体系的な取り組みをお話しいただき、プロジェクト後半に各サブ課題で必要となる実験との連携強化の参考になった。

プロジェクトの本格実施が開始して 2 年 3 ヶ月が経過し、各サブ課題での情報共有がすでになされており、質疑やポスターセッション等では、サブ課題間での連携の検討もなされた。また、アプリケーションの開発がポスト「京」での成果創出に向けて、順調に進んでいることがわかった。

＜CDMSI シンポジウム　～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～＞

平成 30 年 12 月 17 日（月）～平成 30 年 12 月 18 日（火）

会場：東京大学物性研究所 6 階　大会議室／柏キャンパス

プログラム：資料 2 参照

7 つのサブ課題の進捗とトピックスで合計 14 件、招待講演 3 件、ポスター発表 40 件、ポスト「京」とのコデザイン状況 1 件を報告した。2 日間で 118 名の参加があった。年末に行う本シンポジウムは、各サブ課題責任者がサブ課題全体の研究成果の進捗報告を行うとともに、課題内のトピックスを課題実施者が発表する構成とした。トピックスは、特に昨年度の中間評価以降、進捗が見られた課題が報告された。招待講演は、以下に示す通り、本 Pj 実施課題との連携の可能性のある 2 件の実験研究と、開発アプリに対する産業界からの要望 1 件とした。

◆招待講演Ⅰ「ものづくり CPS における計算機科学への期待」　小林洋平（東京大学）

◆招待講演Ⅱ「産業界からの主体的なニーズ発信の試み-産業シミュレーションロードマップの概要」
茂本勇（東レ株式会社）

◆招待講演Ⅲ「水素と電子のカップリングによる新機能材料・デバイスの開発」
森初果（東京大学（物性研究所所長））

小林先生からは、レーザーが物質を切断する仕組みの紹介と、計算科学的な解釈への期待が述べられた。茂本様からは、スパコン産業応用推進協議会で実施されているシミュレーションロードマップが示され、本プロジェクトへの期待が述べられた。森先生からは、機能材料の中で水素の役割が示され、計

算科学との連携可能性が示唆された。シンポジウムの最後に本 Pj の WG 委員、各諮問委員より総評をいただいた。まとめとして、常行課題責任者より、来年度は「京」の運用が上期で終わり次の Pj に向けた評価が 9 月頃に問われることになるので、上期中の成果創出と、ポスト「京」で解決される課題が何であるのかを上期中に明確にして欲しいこと、開発しているアプリのポスト「京」上での動作と公開の準備をして欲しいこと、が伝えられた。

＜アプリケーション高度化合宿＞
第 1 回目　平成 30 年 6 月 11 日（月）～平成 30 年 6 月 13 日（水）
第 2 回目　平成 30 年 11 月 28 日（水）～平成 30 年 11 月 30 日（金）
プログラム：資料 3 参照
場所：理化学研究所計算科学研究センター（R-CCS）
　ポスト「京」向けのシミュレータが NDA 締結者に対して理研より、性能評価ツールが富士通より提供されることになったため、これらのツールを利用した開発アプリ高度化合宿を 2 泊 3 日で 2 回開催した。合宿中、高度化の支援を富士通に依頼し、ツール利用や高度化のノウハウをすぐに解決できる効率的な開発環境を提供した。1 回目の合宿に参加して開発したアプリの中から、高度化が特に進んでいる 4 本のアプリ（OpenMX, HΦ, SALMON, mVMC）を選定し、合宿以降、個別に高度化開発を実施した。2 回目の合宿では、その 4 本のアプリ開発で習得したノウハウを他のアプリにも展開した。これらの取り組みにより、開発しているアプリのほとんどが基本的な高度化を行うことができ、来年度、ポスト「京」の動作に向けたより詳細なチューニングを行う準備が整った。なお、本合宿は計算物質科学を実施する重点課題(7)、萌芽的課題「極限への挑戦」の NDA 締結者の参加も許容し、課題間でのノウハウ共有や人材交流を図った。

＜第 2 回　Innovation Camp for Computational Materials Science (ICCMS)＞
『数値ライブラリを活用した数理科学と計算物質科学の連携』
日時：平成 30 年 10 月 2 日（火）～平成 30 年 10 月 4 日（木）
プログラム：資料 4 参照
場所：皆生シーサイドホテル海の四季
　本キャンプは昨年度より実施しており、計算物質科学分野の若手研究者が他分野の技術を習得することにより、より優れた研究を実施して、ポスト「京」を活用した成果創出に結びつけることを期待している。今回は、数理連携に着目し、数値計算ライブラリを通して最先端の数理アルゴリズムに触れ、その特性および活用方法について学ぶことを目的とした。チームでの実習を通し手法を身に着け、各自の研究やプロジェクトの課題解決に役立てた。また、講師を招き、物性物理学からのニーズや、そこから派生した数理連携による最先端の研究成果に関してそれぞれ講演いただき、これらを例に参加者で議論し、今後の協奏的な研究を行うための土台を構築した。さらに、大学出身の企業研究者、パナソニック藤井様より、大学研究と企業研究の相違点や企業研究の醍醐味等をお伝えいただいた。また、大学教員でありながら地域に根差したベンチャー企業代表取締役も務める鳥取大学伊福先生より、カニ甲羅由来物質を利用した各種製品への展開と今後に関するお話をいただき、イノベーションマインドに触れることができた。

＜講演題名と講演者＞
「スーパーコンピュータにおける計算物質科学と数理科学の連携：数値計算ライブラリとそのアルゴリズム」：星健夫（鳥取大学）
「MateriApps を利用した計算物質科学のソフトウエアの探し方・情報共有」：三澤貴宏（東京大学）
「アカデミアとインダストリーの垣根を超えて」：藤井幹也（パナソニック）
「計算物性物理におけるアルゴリズムとライブラリ」：藤堂眞治（東京大学）
「大規模固有値問題の数値解法と計算物質科学への応用」：曽我部知広（名古屋大学）
「テンソルネットワーク法による情報圧縮と物性物理への応用」：大久保毅（東京大学）
「カニ殻由来の新素材”キチンナノファイバー”の製造とその機能を活かした事業化」：
伊福伸介（鳥取大学）

＜その他の共催・協賛行事＞
上記以外に CDMSI で実施した主催、共催、協賛行事、等を、**４－３．活動（研究会等）**の一覧表に示す。CDMSI の活動は図 4-2(1)-1 に体制図を示したように非常に多くの連携研究で成り立っており、関連機関との共催や協賛で数多くのイベントを実施している。主催・共催行事数は 25 で、のべ 954 名の参加、協賛・協力行事数は 19 で、のべ 1728 名の参加（除、R-CSS 一般公開）があり、精力的に外部への発信を行った。平成 30 年度も、RIST（HPCI）と共催で実施した「材料系ワークショップ」は、産業界の方の参加が約 8 割程度あった。これらの産業界の方々は CDMSI で開発したアプリケーションの利用者になりえるため、本ワークショップはユーザー拡大に対して有効なイベントに成長している。

６）アプリケーションソフトウエアの普及活動
平成 30 年度は、つくば研究機関（産総研、NIMS、筑波大学、KEK）と東大のオープンイノベーション活動の一環として実施している TIA かけはし調査研究、計算物質科学人材育成コンソーシアム（PCoMS）と共同で、ポスト「京」重点課題(7)で開発している各種アプリケーションソフトウエアの講習会を 10 回企画し、合計 106 名（内企業参加 25 名）の参加があり、アプリケーションの利用方法を学んでいただいた。特に、サブ課題Ｇが主体で開発している OpenMX は、平成 29 年度企業の方の参加が多かったので、平成 30 年度は外部講師に依頼して有償での開催を試みた。その結果、7 名の参加があり、有償でも講習会のニーズがあることが伺えた。実施した講習会は、**４－３．活動（研究会等）**に含めて示している。

７）研究成果の見える化活動
「見える化シンポジウム 2019」バーチャルでリアルを超えろ
～難解サイエンスを映像で感覚的につたえる～
日時：平成 31 年 3 月 2 日（土）13:00 ～ 18:30
プログラム：資料５参照
場所：秋葉原 UDA シアター
重点課題(7)が主催として主導し、理化学研究所 R-CCS、他のすべての重点課題の共催、協賛を得て開催した。平成 29 年度に実施した中間評価、および、平成 30 年度の諮問委員会からの研究成果の見え

る化の要請を受け、バーチャル空間を利用した先端的な表現方法を計算科学の成果の見える化、イノベーションの創成、開発したアプリケーションの普及などに結び付けられないかを検討するために企画実施した。プログラムを資料５に示す。バーチャル空間であったとしても、現実の物理法則のいくつかを再現することは可能であり、かつ、リアルでは実現できない空間を表現することが可能である。講演では、元素周期表を、同位体を含めて図にした核図表の各元素のエネルギーレベルを高さで示した「立体核図表」をバーチャル空間に構築し、何故、鉄がすべての元素の中で一番安定なのかなどが、一目瞭然で体感できるデモが示された。また、これからは、バーチャルとリアルの世界の区分が無くなってくること、自分のアバターがプレゼンテーションを実施する環境がすでに出来上がっていることが示された。研究成果を社会で利活用していただくためには、まずは、成果を理解していただくことが必要である。理解を促すツールとして、今回の見える化シンポジウムで学んだ、各種のバーチャルな見える化手法が有効であることがわかった。

「3D プリンタとルッキンググラスによる結晶構造模型製作、表示技術の開発」

PCT 国際特許として出願している、3D プリンタ関連の透明樹脂中への電子雲を含めた結晶模型の作成技術に関し、審査請求を行う国を特定するため、共同出願企業であるクロスアビリティ㈱と市場調査を行った。その結果、本技術を応用した市場増が期待される、日本、米国、シンガポールに対して審査請求することにした。

計算結果の電子雲データを 3D プリンタで出力する際に、研究結果として一番見せたい部分をわかりやすく表記し、かつ、計算結果を忠実に反映させるアルゴリズムを開発した。そのアルゴリズムをプログラム化して計算科学の GUI ソフトである Winmostar に組み込み、3D プリンタに入力が可能な STL ファイルに変換できるようにした。この仕組みを用いて試作した磁石関連の結晶($CeCo_5$)の 3D プリンタ模型を図 4-2(1)-5 に示す。この模型を用いて実験家と議論したところ、磁性にかかわる電子の寄与をわかりやすく伝えることができ、模型提示による説明の有効性が確認された。

ホログラムによる 3D 表記は、従来、特別な装置を用いて行われていた。ところが、2018 年 12 月に Looking glass factory 社が、数百層もの透明な光反射機能を持つプレートを重ねたホログラムディスプレイ、「ルッキンググラス」を開発したとの情報を入手した。この装置を用いると、3D プリンタで結晶模型を試作しなくても、立体的なイメージを掴むことが可能となり、展示会等ではフレキシブルな結晶構造の立体提示が可能となる。また、立体的な見え方の検証を詳細に行ったうえで 3D プリンタの試作を行うことが可能となり、より効果的な形状の結晶模型を作成することも可能となる。そこで、3D プリンタ装置で結晶模型を作成するために必要となる STL データを、ルッキンググラスで表示するために必要となる Unity と呼ばれるデータ形式に変換し、回転等の必要な表記動作を行うことが可能なソフトウエアの開発を行った。そのソフトウエアを用いて、図 4-2(1)-5 に示した結晶構造模型のデータをルッキンググラスで表記した例を図 4-2(1)-6 に示す。ディスプレイ上で自由に回転させる機能も開発したので、リアルな結晶模型に近い感覚で立体表記させることに成功した。見える化シンポジウム 2019 で、このルッキンググラスを展示し、実験家などに見ていただき、意見を聞いたところ、結晶構造に対する理解力が高められるとの反応があり、見える化手法としての効果が検証された。

図 4-2(1)-5: 電子雲表記の新アルゴリズムを適用して 3D プリンタで作成した磁性材料結晶模型

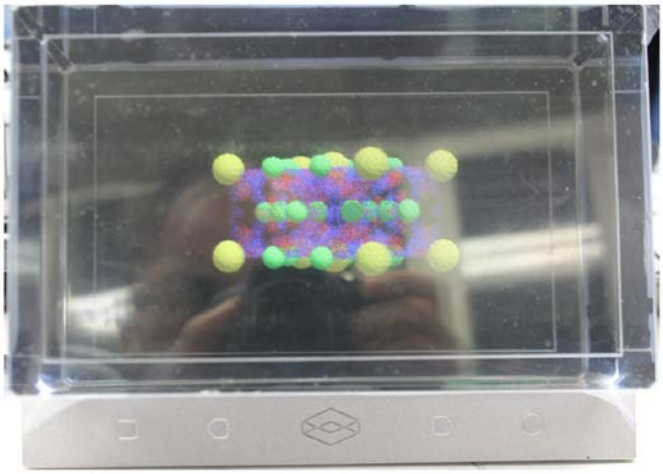


図 4-2(1)-6: ルッキンググラスを用いて表記された結晶模型

（２）サブ課題のアプリケーション開発・研究開発

本業務は、以下の七つのサブ課題のアプリケーション開発・研究開発で構成する。A. 高機能半導体デバイス、B. 光・電子融合デバイス、C. 超伝導・新機能デバイス材料、D. 高性能永久磁石・磁性材料、E. 高信頼性構造材料、F. 次世代機能性化学品、G. 共通基盤シミュレーション手法。

この重点課題を構成する七つのサブ課題Ａ～Ｇに関し、各サブ課題責任者が中心となり、各サブ課題の分担機関、および、協力機関に所属するメンバーの協力を得て、各サブ課題の実施計画に基づいた研究開発を実施した。各サブ課題において、研究を実施した研究項目と特記事項は以下の通りである。

①サブ課題Ａ 高機能半導体デバイス

サブ課題責任者：押山淳（国立大学法人名古屋大学）

サブ課題Ａ総括

本サブ課題では、「デバイス構造における乱れの理解と制御そして新機能発現」および「新材料からの量子論デバイス創製シミュレータ開発」の二つの研究開発課題を遂行している。一つ目の課題での中核アプリケーションは、超並列アーキテクチャのコンピュータ上での、大規模高速な密度汎関数法計算を可能にする RSDFT(Real-Space Density-Functional-Theory)コード、さらにその発展形である RS-CPMD(Real- Space Car-Parrinello Molecular-Dynamics)コードおよび RSPACE(Real Space DFT)コードである。平成 30 年度においては、RS-CPMD コードの高速化が「京」コンピュータ上で行われた。昨年度までのコードでは、十分な並列数を用いたジョブが実行不可能であったので、実空間並列とバンド並列の双方が、効率よくハイブリッド並列できるようにコードを書き換えた。また、ゴードンベル賞を獲得した RSDFT コードに比して、並列時の実行効率が低い原因を解析し、京コンピュータ自身の MPI ソフトウエアの問題と、RS-CPMD のコーディングの問題とに切り分け、後者については、バンド並列を最大限に活用できるコーディングに変更し、現在では 1000-2000 原子群のサブナノ秒シミュレーションが可能となっている。またコデザイン・グループとの共同により、RSDFT/RS-CPMD パッケージを令和元年度には公開できるように作業が進行している。

二つ目の課題での中核アプリケーションは、NEGF(Non-Equilibrium Green’s Function)コード、FBMC(Full Band Monte Carlo)コード、Hi-QHD(Hybrid Quantum HydroDynamic)コードである。デバイスシミュレーションのそれぞれのスケールでの最適手法に対応している。平成 30 年度においては、モンテカルロデバイスシミュレータの並列化が行われ、一定の効率での並列計算が可能となった。

これらのアプリケーションの開発・高度化・高速化により、一つ目の課題での研究成果としては、(1)パワーMOS デバイス SiC/SiO2 界面におけるキャリヤートラップの原因として floating state 起因の伝導帯下端の揺らぎが重要であること、(2)窒化処理により界面構造が変調され、それにより伝導帯揺らぎが抑えられること、(3)酸化膜形成の際に取り残された炭素残留物が C2 のクラスターの形で、界面に存在し、キャリヤートラップとなること、(4)安価な二次電池材料としてアルカリ元素の酸化還元能が量子化学的な見地から明らかになったこと、(5)同じくパワーデバイスの根幹材料である GaN のエピタキシャル成長素過程、特にアンモニアの表面分解過程が明らかになったこと、などの成果が得られた。

また二つ目の課題での研究成果としては、NEGF コードと一つ目の課題の RSDFT コードの結合により、ナノシート・トランジスタの電流電圧特性評価に成功した。Si および Ge チャネルを有するナノシート・トランジスタ構造の電子状態を第一原理的に解明し、デバイス構造での電圧分布と電流分布を自己無撞着に解くことにより、電流電圧特性が明らかとなった。Si と Ge の材料比較の観点からは、オフ時の漏れ電流は Si チャネルの方が大きくなることが判明した。またミクロンスケールデバイスにおけるドリフト拡散シミュレーションへの橋渡しの意味で、産業技術総合研究所(AIST)との共同が開始され、AIST の有する Impulse-TCAD に、RSDFT-NEGF で考慮しているような量子効果を取り入れる手法の開発が進んでいる。またナノ、ミクロンいずれの空間スケールでも、クーロン相互作用の取り扱いは重要であるが、今年度は、独自開発の自己無撞着モンテカルロ(SCMC)輸送シミュレータに長距離及び短距離相互作用効果を取り込むスキームを開発した。

ｉ）デバイス構造における乱れの理解と制御そして新機能発現

再委託先：国立大学法人名古屋大学

[研究実施体制]

責任者：　押山淳（名古屋大学）

実施者：　Bui Thi Kieu My、白石賢二（名古屋大学）

協力者：　岩田潤一（アドバンスソフト）、Mauro Boero（Strasbourg 大学）、
松下雄一郎（東京工業大学）、制野かおり（クロスアビリティ）、井本文裕（東京大学）

[アプリケーションソフトウエア開発]

（実施・検討内容）

第一原理実空間計算手法の高機能化、高速化を「京」およびポスト「京」アーキテクチャ上で行った。高機能化は、実空間密度汎関数法（コード名：RSDFT）とそのダイナミクス計算への拡張である実空間 Car-Parrinelo Molecular Dynamics 法（コード名：RS-CPMD）において、準粒子スペクトル計算、応答関数計算、フォノン構造計算をインプリメントし、デバイス科学における物理的解釈を可能にする機能を装備した。高速化に関しては、今年度当初の RS-CPMD コードでは、(1) 並列化ノード数が占有バンド数で制限されること、(2) MPI 並列性能が 1000～2000 のノード数（MPI プロセス数）で飽和してしまうこと、またスレッド並列の性能も発揮できていないこと、という難点を克服するためであった。この点を改善することにより、10^3 原子系の長時間（サブナノ秒）CPMD シミュレーションを可能にし、乱れた系の構造的・電子的性質を明らかにするという意図である。

（成果）

第一の「並列化ノード数の制限」の理由は Lagnrange 未定乗数を決定するための行列式解法ルーチン（ルーチン名 rotorb_module.f90）に起因していることを明らかにし、ルーチンの書き換えにより、問題を解決した。

第二の「並列化効率の向上」については、基本プロファイラーを用いた詳細な解析を行った。その結果、力の計算関連のルーチン（ルーチン名：GETFORCE および WF_FORCE）における MPI 通信が一因であることがわかり、コードの書き換えを行った。しかし劇的な改善は見られず、さらなるチューニングとして、力計算部分が、バンド並列に関して embarrassingly parallel であることに着目し、力計算のみならず、すべてのルーチンでバンド並列と空間並列の割合が最適化できるように、コードを改善した。

これらのチューニングにより、乱れた系の代表であるアモルファス SiO2 のシミュレーションにおいて、「京」コンピュータ 2000 ノードを用いて、1536 原子系に対し melt-quench 法によるアモルファス作成が現実のものとなった。具体的には、これまでの第一原理シミュレーションでは不可能であった、50K/ns のゆっくりした quenching が可能となっている。

[研究開発]

（実施・検討内容）

独自開発を行っている高機能化、高速化した RSDFT コード、RS-CPMD コードおよび他の DFT 計算コードを用いて、パワーエレクトロニクスを支える SiC および GaN のデバイス表面・界面の構造的性質と電子的性質を明らかにした。具体的には、SiC/SiO2-MOSFET デバイス界面での電子トラップの同定、GaN-MOVPE 成長でのアンモニア分解反応、成長温度での表面ダイナミクスの解明、の 2 点で大きな進展があった。また、二層グラフェンの特異な物性を明らかにした。

（成果）

前年度までに SiC/SiO2 界面における原子積層の変調が伝導帯下端に界面電子状態を生み出し、それがデバイスでの電子トラップの原因となることを示した[Matsushita & Oshiyama: Nano Lett, 17, 6458 (2017)]。検討の結果、これは SiC の伝導帯下端の波動関数が格子間チャネルに広がった状態であり、その広がりが原子積層の変調で変化し、電子準位がシフトするためであることがわかった。この効果は SiC(0001)/SiO2 界面で顕著であるが、他の非極性面ではそれほど顕著ではない。このことは(0001)面以外を用いてデバイスを作成した方がその性能は向上することを示唆している。実際最近の AIST グループ[畠山他]の(0-338)面を用いたデバイスでは、従来デバイスに比べキャリヤー数が 3 倍までに増えてい

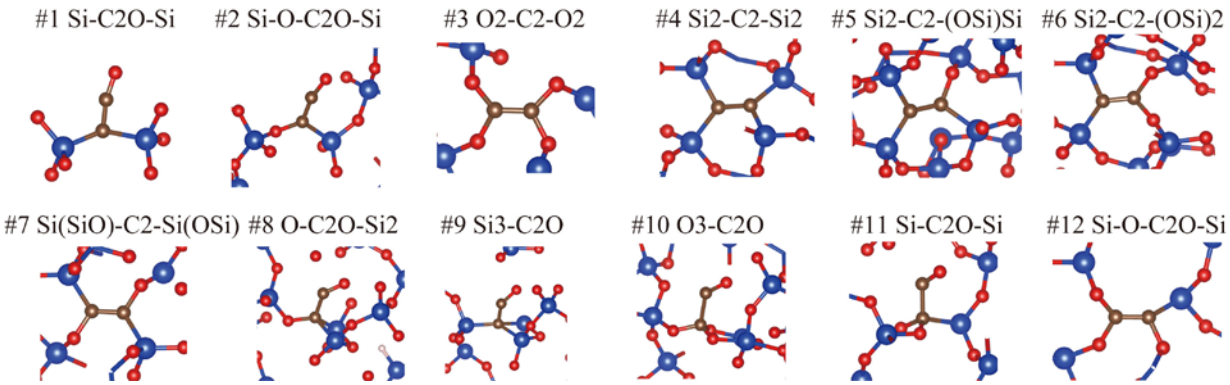


図 A-1: Atomic structures of di-carbon defects obtained by the melt-quench method. Red, blue, and brown balls depict the Si, O, and C atoms, respectively.

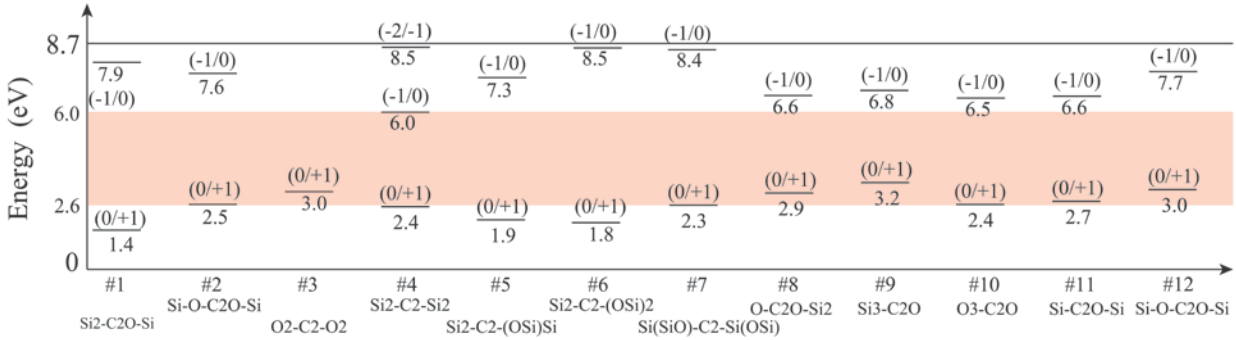


図 A-2: Electron energy levels (charge transition levels) of each di-carbon defect shown in Fig. A-1 obtained by the HSE functional. Orange area represents the SiC band-gap region.

ることが実証された。

残るトラップ準位の候補は、酸化膜形成の際に界面に残るであろう炭素原子起因のものである。今年度、melt-quench 法による非経験的な炭素欠陥構造の探索を行った。45 のアモルファス SiO_2 サンプルの内、8 つの mono-carbon 欠陥と 12 個の di-carbon 欠陥が見出された（図 A-1）。得られたすべての欠

陥構造を alpha-quartz 中に埋め込み、それぞれの欠陥構造の生成エネルギーを求めた。その結果 mono-carbon 構造では Si と炭素が結合した、いわば不完全酸化の形態が、界面近傍では最も生成エネルギーが低いことがわかった。Di-carbon 構造でも同様の傾向が見出された。具体的には、図 A-1 中の #4、#5、#1 欠陥が低い生成エネルギーをもつことがわかった。

これらの欠陥の引き起こす電子準位を求めたのが図 A-2 である。これらは一電子準位ではなく、二つの異なる荷電状態 q と q'の生成エネルギーが等しくなるギャップ中のフェルミ準位の値(q/q')であり、これが実験的に測定されるキャリヤートラップ準位である。生成エネルギーとこの電子準位の値を総合的に判断すると、di-carbon 欠陥#4 が電子トラップとして最も怪しいという結論に至る。

ノーベル賞受賞に象徴されるように、GaN は光エレクトロニクスの主要材料であるが、その広いバンドギャップ、高い絶縁破壊耐性、さらにはそのキャリヤー高易動度により、パワーデバイス材料としても重要である。しかしその際には、パワーデバイス特有の縦型 MOS 構造に適した高品質薄膜が必要であり、エピタキシャル成長の原子スケールの機構解明が必要である。Ga のガスソースとして TMG、N のガスソースとして NH3 を用いる MOVPE エピ成長では、これまでの実験的研究により、TMG が Ga-H に気相で分解することはほぼわかっているが、アンモニアに対しては諸説紛々であった。今回、RSDFT 計算により NH3 が GaN 表面上で分解することが明らかとなった。一つの重要な発見は、成長表面は Ga-rich でありそこに存在する Ga-Ga ボンドは Ga-N ボンドに比較して弱く、その場所がアンモニアの分解と窒素の取り込みのホットスポットになるということである。図 A-3 は、[NH_3 on GaN] → [NH in GaN] + [H_2 in gas phase]なる反応の始状態と終状態、それをつなぐ反応経路でのエネルギー変化を RSDFT コードで計算したものである。アンモニアは Ga アド原子上に吸着し、その後 H 分子がガス中に脱離し、残された NH ユニットが、上で述べた弱い Ga-Ga ボンドを切断し、GaN 薄膜表面に取り込まれていくことが明らかとなった。反応のエネルギー障壁は 0.63 eV と計算され、ボンド切断を伴う反応としては驚くほど小さい。計算は RSDFT コードにインプリメントされた Hyper-Plane-Constraint 法によって行われた。

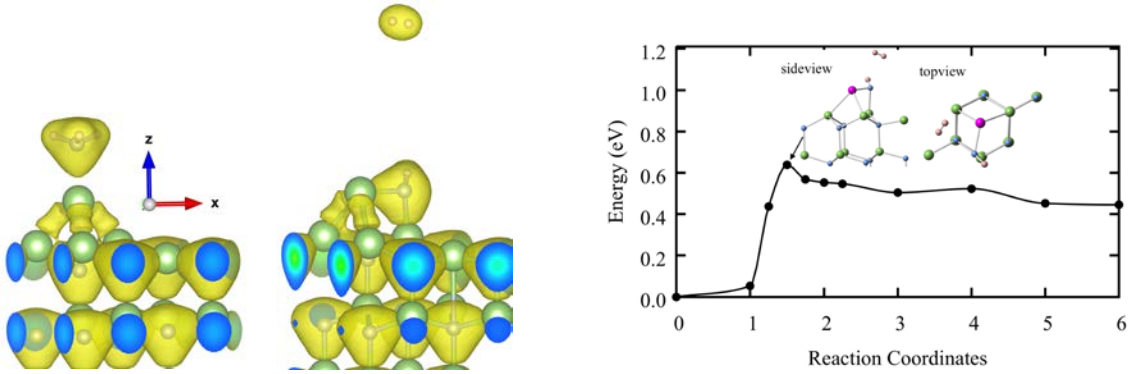


図 A-3: The initial (left) and the final (middle) atomic structures of the decomposition reaction of NH_3 and the corresponding energy profile (right). Large and small balls depict Ga and N atoms, respectively. The electron density in each structure is shown as yellow iso-value surface. Adsorbed NH_3, surrounded by upper yellow surface in the left figure, is decomposed and -Ga-N(H)-Ga unit is formed in the subsurface region and an H_2 is desorbed (right).

また Ga リッチ表面での余剰 Ga 原子は 1300K の成長温度では液状化していることが RS-CPMD シミュレーションで明らかとなった。エピタキシャルル成長表面の同定に関する大きな知見である。

新奇材料と目されている原子層物質に関しては、二層グラフェンにおける微小な原子層捩れがディラック電子の局在化を引き起こすことを二万原子規模 DFT 計算で明らかにし、また準粒子スペクトル計算（unfolding 法）により、この局在化は、異なる原子層のディラックコーンの相互作用によるものであることを明示した。

なお、Si チャネルと Ge チャネルを有する二種のナノシートのトランジスタ特性、および、伝導特性変化に関するシミュレーションの成果は、後述する ii ）のセクションで説明する。

再委託先：国立大学法人筑波大学（計算科学研究センター）

[研究実施体制]

責任者：　重田育照

実施者：　小野倫也、朴泰祐、高橋大介、M.H.N. Al Assadi

協力者：　寒川義裕（九州大学）、白石賢二、洗平昌晃（以上、名古屋大学）
Mauro BOERO（Strasbourg 大学）、岡田晋（筑波大学）

[アプリケーションソフトウエア開発]

（実施・検討内容）

RS-CPMD に関しては、RSDFT Co-desing WG において本格的なアルゴリズム選定およびチューニングの議論を行ってきた。特に、CPMD 計算のボトルネックとなる複数のバンドの重なり（内積）の計算を行う部分、および、バンドの直交化のための行列の反復計算において、並列化における高速化とメモリ共有を検討し、その評価プログラムを完成させた。

小野は RSDFT の機能を補完するために、第一原理電子状態・量子輸送特性シミュレーションのための実空間差分法に基づく計算コード RSPACE の開発を行ってきた。本年度は、RSPACE の伝導計算に用いる自己エネルギー計算部の改良を行った。

（成果）

大規模系における実空間密度汎関数法ダイナミクス計算のため、Car-Parrinello Molecular Dynamics(CPMD)プログラムの高度化を行い、自由エネルギー解析のためのモジュール、および QM/MM 法のモジュールを新規作成した。このモジュールはｉ）で述べた GaN の結晶成長シミュレーションに用いられた。

RS-CPMD に関しては、最終年度に向けてハイブリッド化、および GPU 化を進め、その部分の公開に向けた作業を行った。チュートリアルやサンプルファイル、マニュアル等の整備を進め、平成 31 年度中には公開する予定である。

RSPACE に関しては、伝導計算のボトルネックであった電極自己エネルギー計算部分を改良した。櫻井-杉浦法を用いて電極自己エネルギーを計算する場合、自己エネルギーの要素に急峻なエバネッセント波を取り込む必要がある。しかし、周回積分時に解く連立方程式の計算コストは、ブロッホ係数の絶対値の対数に対して 2 乗に比例して増大することが問題であった。今年度は、周回積分の積分領域を複素平面上でリング状に分割することにより、従来法に対して最大で 6 倍高速化した。この方法を用いて、カーボンナノチューブの複素バンド構造を計算し、改良法の計算効率と精度の高さを実証した(S. Tsukamoto, T. Ono, S. Iwase, S. Blügel, *Phys. Rev. B* 98 195422 (2018))。

[研究開発]

（実施・検討結果）

本グループでは下記の二つのアプリケーションの研究開発を行った。

（1）Na 含有 4d 遷移金属酸化物における可逆的な酸素のアニオン性酸化還元能を密度汎関数法によって評価し、従来予想されてきた電荷補償則ではなく軌道混成が重要であることを提案した。
（2）SiC を用いた MOSFET の移動度が向上しないという問題に対し、阪大、筑波大および産総研の実験グループと連携し、移動度低下の原因解明と高移動度界面のデザインを行っている。本年度は、RSPACE を用いて NO アニール後の MOS 界面の原子構造を調べた。

（成果）

（1）過去 20 年間に亘る二次イオン電池開発の進歩は、家庭用電化製品や電気自動車等の技術的な革命をもたらしてきた。最も一般的な Li イオンバッテリーは、正極材料における遷移金属イオンの複数の酸化状態変化がイオン電荷キャリアとして作用する Li イオンの挿入・抽出を可能とする上で重要となっている。しかしながら新たな材料を設計する上で、高価な Li や、Co などの希少な遷移金属の使用を避ける事が望ましい。前者に対しては、Li を Na のような、より入手しやすいアルカリ金属で置き換えることが急務である。後者に関しても、遷移金属イオンの酸化還元能の限界を超えて容量を増大させるため、他の安価な遷移金属への代替が望まれている。そのためには、Na を含む遷移金属酸化物における、酸化還元能を評価する必要がある。

本研究では、新規かつ優れた電気化学的性質を有する Na 含有 4d 遷移金属酸化物における可逆的な酸素のアニオン性酸化還元能を密度汎関数法によって評価した。図 A-4 に示すように、直感的に遷移金属イオンの酸化還元が支配的であると予想された $Na_{1-x}Pd_2O_3$ や $Na_{3-x}AgO_2$ のような化合物においてさえ、電荷補償機構において酸素原子の酸化状態が大きく変化していることが明らかとなった。これらの化合物における酸素原子の酸化数の変化は、以前の研究で提案された Na イオン過剰メカニズムから生じるのではなく、遷移金属の 4d 軌道と酸素原子の 2p 軌道との間の強い混成の副産物であることを解明した（M. H. N. Al Assadi, M. Fronzi, M. Ford, Y. Shigeta, *J. Mater. Chem. A* 6, 24120-24127 (2018).）。

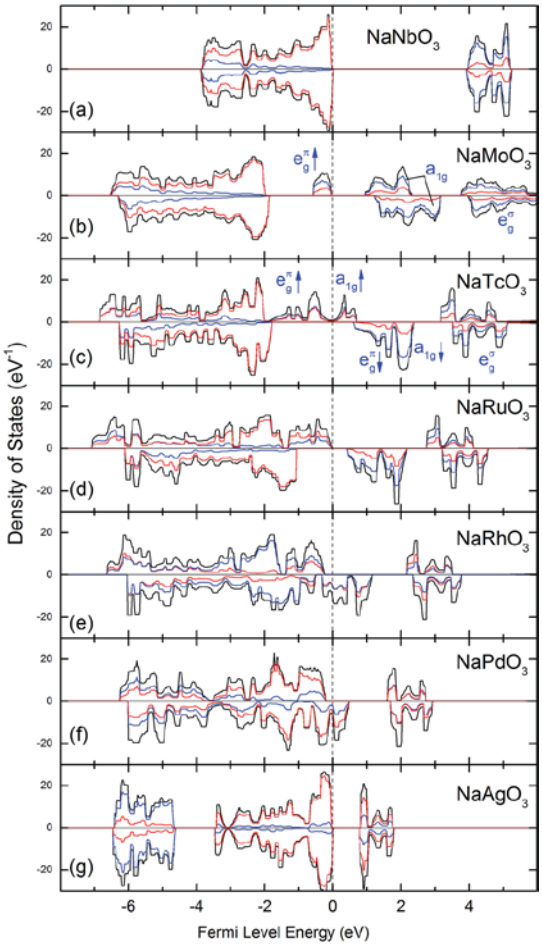


図 A-4: Na 含有遷移金属酸化物の状態密度（黒）全体、（赤）O の 2p 軌道、（青）遷移金属の 4d 軌道

（2）SiC は、次世代パワーエレクトロニクスデバイス用のチャネル材料として期待されているものの、MOSFET のキャリア移動度が SiC バルクよりも大幅に低いことが本格普及への課題となっている。NO アニールによって移動度が向上することがわかっているが、アニールによって導入された N の役割や界面に N が入った原子構造は現在まで明らかになっていない。産総研の共同研究グループが行った SIMS や Atom probe 計測によると、界面の 0.5nm 程度の領域に N が局在していることがわかっているが、N が界面の基板側にいるのか SiO_2 側にいるのかわかっていない。今年度は、基板側に N が局在すると仮定して、界面原子構造を調べた。その結果、N 原子は、基板内部よりも界面第一層に存在する方が安定で、N 原子面密度は SIMS の結果と矛盾しないことがわかった。また、NO アニールをしない SiC/SiO_2 界面では、h 面と k 面の 2 種類の界面の形成エネルギー差が数 meV/unit しかなく、両方が出現することにより伝導帯端が揺らぎキャリア散乱が起こる。一方、(酸) 窒化界面は h 面の形成エネルギーが 0.4 eV/unit 程度低く、h 面界面が優先的に形成されるため、伝導帯端の揺らぎが抑えられることがわかった。

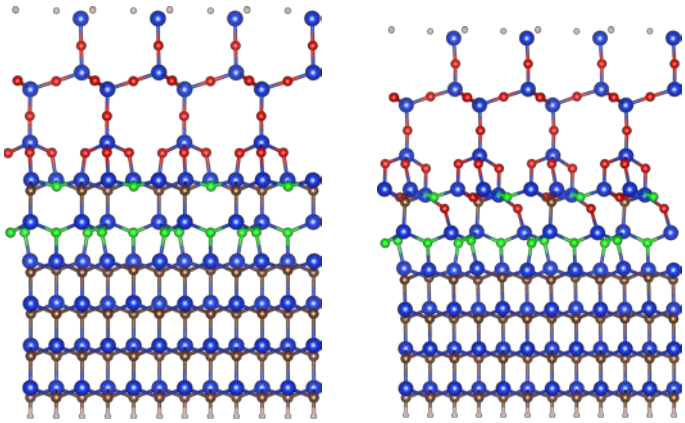


図 A-5: NO アニール後の SiC/SiO_2 界面原子構造。(左)窒化界面。(右)酸化界面。青球、赤球、緑球、茶球は、Si、O、N、C 原子。

表:(酸)窒化界面の形成エネルギー(eV/(3x1)unit)。

	窒化界面		酸窒化界面	
	h 面	k 面	h 面	k 面
結晶モデル	+0.64	+1.02	+1.13	+1.65
界面モデル	0.00	+0.38	0.00	+0.40

ⅱ）新材料からの量子論デバイス創製シミュレータ開発

再委託先：国立大学法人大阪大学大学院工学研究科

[研究実施体制]

責任者：　森伸也

実施者：　美里劫夏南

協力者：　鎌倉良成

[アプリケーションソフトウエア開発]

（実施・検討内容）

Si および Ge チャンネルのナノシートトランジスタのシミュレーションを行うため、RSDFT に基づく第一原理デバイスシミュレータ（コード名：RSDFT-NEGF）を改良した。

量子ドリフト拡散シミュレータ（コード名: Hi-QHD）の計算手法を汎用のシミュレータへ導入するために、産業技術総合研究所によって開発されたドリフト拡散モデルに基づく流体型デバイスシミュレータ Impulse TCAD の利用を開始した。

フルバンド・モンテカルロ輸送プログラム（コード名：FBMC）の並列計算性能評価を行った。

（成果）

RSDFT-NEGF を以下のように改良し、ナノシートトランジスタのシミュレーションを実行した。①周期的境界条件を課して構造最適化を行い、Kohn-Sham ハミルトニアンを計算、②デバイス構造にあわせて境界条件を変更し、Kohn-Sham 状態を計算し、低次元の等価モデルを構築、③等価モデルの範囲において、ポアソン方程式と非平衡グリーン関数方程式との自己無撞着計算を実行。

Impulse TCAD は、物理モデルを組み込み易くするための自動微分機能を備えており、半導体輸送モデル開発者が様々な新規モデルを容易に試行することが可能という特徴を有している。その特徴を利用して、本年度、電子移動度モデルがデバイス特性に与える影響を調べるため、Caughey-Thomas (Proc.IEEE **52**, 2192(1967))の移動度モデルを組み込んだ。

並列化したフルバンド・モンテカルロ（FBMC）シミュレータをスーパーコンピュータ CrayXC40 上で実行し、最大で 512 コアを利用した際の並列化効率を評価した。図 A-6 に、計算時間のコア数依存性を示す。左パネルは全体の計算時間、右パネルは各部の計算時間を表す。図より、電位計算の高速化が必要であることがわかった。今後は、電位計算の高速化を行いドリフト拡散法・非平衡グリーン関数法との比較を行う。

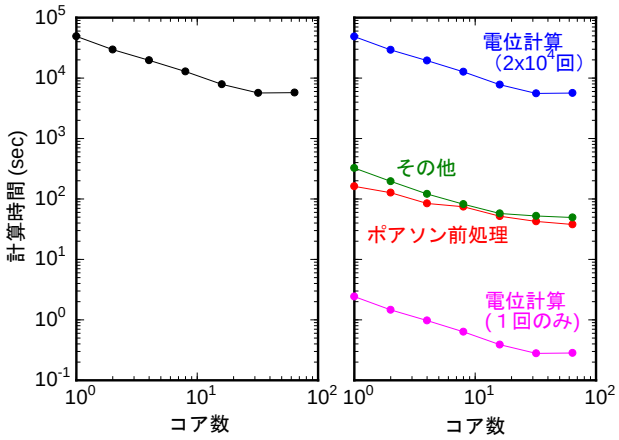


図 A-6: モンテカルロシミュレータの計算時間のコア数依存性。左パネルは全体の計算時間、右パネルは各部の計算時間を表す。

[研究開発]

（実施・検討内容）

RSDFT に基づく第一原理デバイスシミュレータ（コード名：RSDFT-NEGF）を用いて、Si および Ge チャンネルのナノシートトランジスタのシミュレーションを行った。

産業技術総合研究所によって開発されたドリフト拡散モデルに基づく流体型デバイスシミュレータ Impulse TCAD を用いて、Si ナノシートトランジスタのシミュレーションを行い、電子移動度モデルがデバイス特性に与える影響について調べた。

（成果）

RSDFT-NEGF を用いて、Si および Ge チャンネルのナノシートトランジスタのシミュレーションを行った。図 A-7 に RSDT により計算したバンド構造を示す。左パネルは幅 8 nm、高さ 4 nm の Ge チャネル、右パネルは幅 10 nm、高さ 4 nm の Si チャネルの計算結果を表す。図 A-8 に、伝達特性の計算結果を示す。ゲート長が 10 nm と 14 nm の 2 種類のデバイス構造について計算した。Ge チャネルと Si チャネルとの結果を比較すると、オン電流には大きな差はみられなかったが、オフリーク電流は、Si チャネルデバイスの方が大きいことがわかった。

今回のシミュレーションでは、非平衡分極電荷およびバンド間トンネルを無視している。今後、それらを考慮したシミュレーションを実行する。

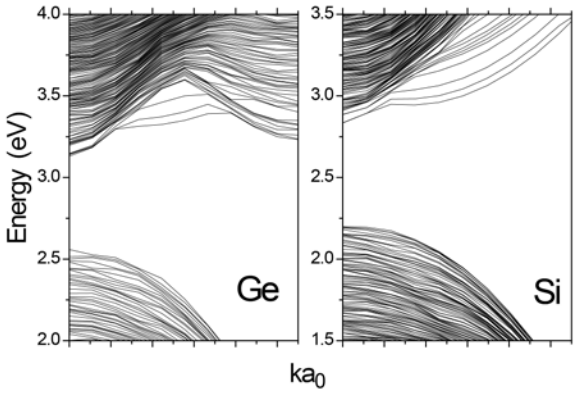


図 A-7: RSDFT により計算したバンド構造。左パネルは幅 8 nm、高さ 4 nm の Ge チャネル、右パネルは幅 10 nm、高さ 4 nm の Si チャネルの計算結果。1,536CPU を用いて、およそ 1 週間程度の計算時間が必要であった。

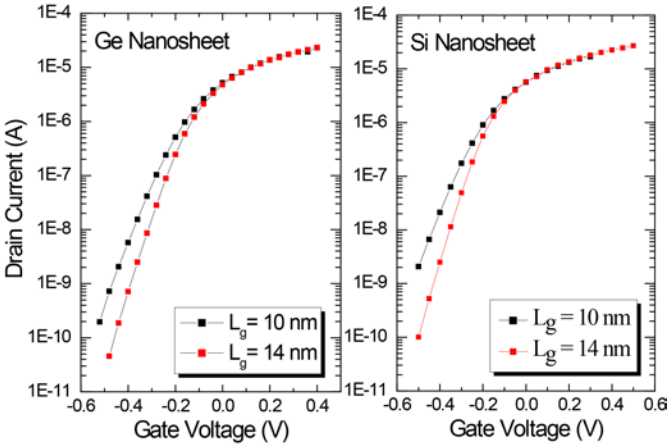


図 A-8: 室温における n 型ナノシートトランジスタの伝達特性の計算結果、ソース・ドレイン領域は、10^{20} cm^{-3} の一様ドーピングを仮定した。1,536CPU を用いて、およそ 1 日程度の計算時間が必要であった。

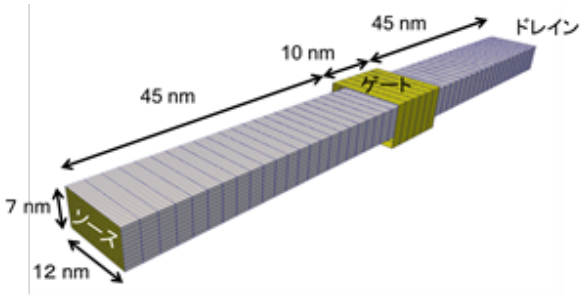


図 A-9: Si ナノシートトランジスタの構造図。幅 12 nm、高さ 7 nm、ゲート長 10 nm とした。

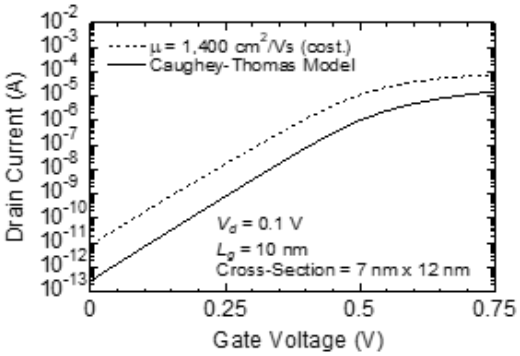


図 A-10: Si ナノシートトランジスタの伝達特性の計算結果。実線は、Caughey-Thomas の移動度モデルを用いた場合、破線は、一定の移動度を用いた場合の結果。

Impulse TCAD を用いて、図 A-9 に示したような幅 12 nm、高さ 7 nm、ゲート長 10nm の Si ナノシートトランジスタのシミュレーションを行った。図 A-10 に伝達特性の計算結果を示す。実線は、Caughey-Thomas (Proc.IEEE **52**, 2192(1967))の移動度モデルを用いた場合、破線は、一定の移動度を用いた場合の結果である。Caughey-Thomas の移動度モデルでは、電界強度の増加に伴い電子エネルギーが増大し、移動度が減少する効果が取り入れられている。今回、Caughey-Thomas の移動度モデルのパラメータは、モンテカルロ法によるドリフト速度の計算結果から抽出した。デバイス内部の電界強度分布を調べた結果、高電界がチャネル部に加わっていることがわかり、そのため速度飽和の効果が電流に強く影響を及ぼし、図 A-10 のような違いとなったことがわかった。

今後、モンテカルロ法によるデバイスの電気特性シミュレーション結果とも比較し、準弾道輸送効果や長距離クーロン相互作用の影響を調べる。さらに将来的には、非平衡グリーン関数法の結果と比較することで量子効果の影響を調べ、それを取り込むためのモデル開発にも応用する。

また、RSDFT-NEGF を用いて、半導体/酸化膜界面の乱れが輸送特性に及ぼす影響を解析し、直径 2nm の Si ナノワイヤトランジスタにおいて、界面乱れにより、オン電流が 10%程度減少することがわかった。

<u>再委託先：国立大学法人筑波大学（数理物質系）</u>

[研究実施体制]

責任者：　佐野伸行

実施者：　吉田勝尚

協力者：　廣木彰（京都工芸繊維大学）、鎌倉良成（大阪大学）

[アプリケーションソフトウエア開発]

（実施・検討内容）

クーロン長距離相関を導入した自己無撞着モンテカルロシミュレータ(SCMC)に、基盤内のイオン化不純物等の局在する乱れに伴った、遮蔽が不完全なマルチゲート立体デバイス構造のもとで半導体基盤と酸化膜との界面近傍に局在する離散電荷（不純物および電子）を導入し、長距離にわたるポテンシャルゆらぎのもとでシミュレーションが安定動作するためにパラメータ最適化を行った。

（成果）

時間ステップを 0.1fs、電荷広がりの分解能を 1nm 以下で設定し、界面での分極の影響を理論解析の結果を反映させて適切に導入することで、界面で囲まれたマルチゲート立体構造での離散電荷（不純物および電子）を導入した自己無撞着モンテカルロシミュレータ(SCMC)を 10ps 程度まで安定動作させることが可能となった。

[研究開発]

（実施・検討内容）

自己無撞着モンテカルロシミュレータ(SCMC)にクーロン長距離相関を高精度に導入するには、集団運動を誘起するクーロンポテンシャルの長距離成分と散乱過程で支配的な短距離成分の分離が不可避となる。バルク形状においてはシミュレータの離散電荷分布に広がりを与えることでこの分離が可能となるが、界面の影響が顕在化するマルチゲート立体構造のもとでのポテンシャルの分離の方法は不明であった。本年度は、クーロン相互作用で生じやすい数値的不安定性を注視しつつ、空間に局在した離散不純物をモンテカルロシミュレータへ導入した。具体的には、基盤内のイオン化不純物等の局在する乱れに伴った、遮蔽が不完全なマルチゲート立体構造デバイス動作下でのポテンシャルゆらぎの評価、および第一原理計算からの知見をもとにして（局在した乱れの）散乱ポテンシャルの導出を行い、SCMC による高精度な電流電圧特性シミュレーションを進めた。

（成果）

自己無撞着モンテカルロシミュレータにクーロンポテンシャル長距離成分を導入するために、界面近傍での離散電荷のポテンシャルを乱雑位相近似で解析し、クーロン長距離成分を表現する電荷分布を導出した。その結果、酸化膜界面に誘起される分極によって、分極に伴った電荷分布の符号が誘電率の違いによって反転することを見出した（図 A-11）。つまり、局在した離散不純物に伴った界面での分極によるポテンシャル変調が生じることを明らかにした。これは、電荷の離散性をシミュレータに反映させることで初めて予測可能となる効果であり、重要なデバイス特性指標であるしきい値電圧が分極によってシフトする可能性を示唆するものである。さらに、自己無撞着モンテカルロシミュレータ(SCMC)にこの分極に伴った電荷分布を離散電荷（電子および不純物）に反映させることで、マルチゲートデバイス構造（チャネル長 20nm; チャネル幅 10nm）のもとでのポテンシャル変調が適切に導入できることを見出した。図 A-12 に自己無撞着モンテカルロシミュレータ(SCMC)によって得られたチャネル領域内での時間平均したポテンシャル分布（界面による分極の影響を考慮した時間平均ポテンシャルから分極の影響を無視した時間平均ポテンシャルを引いたポテンシャル差）を示す。SiO_2 と高誘電体である HfO_2 では、チャネル中央部ではポテンシャル差がゼロであるが、界面近傍においてポテンシャル差の符号が反転していることがわかる。このように、今回、汎用流体デバイスシミュレータに適用可能な微細構造での局在した不純物の物理モデルの構築を試みた結果、離散不純物が界面近傍にあるときのポテンシャル変調を乱雑位相近似で解析的に計算することで、汎用流体デバイスシミュレータに適用可能な物理モデルの構築に向けた道筋を明確にした。

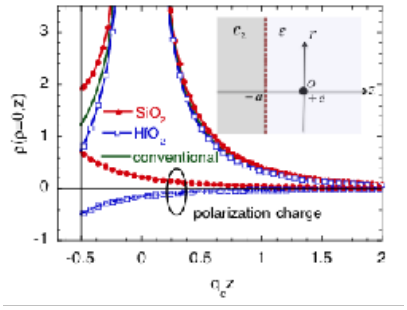
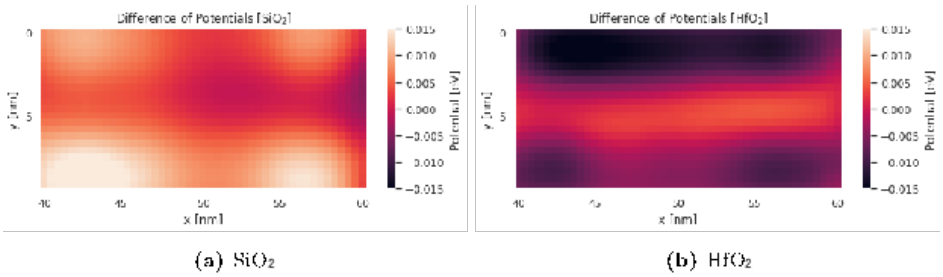


図 A-11: 2 種類の酸化膜（赤: SiO_2；青:HfO_2）と半導体との界面近傍にある離散電荷のポテンシャル長距離成分を表現する離散電荷分布およびそのうちの分極に伴った電荷成分（黒丸で囲まれた二つの曲線）の距離依存性。



(a) SiO_2 (b) HfO_2

図 A-12: 二種類の異なるゲート酸化膜（左: SiO_2；右:HfO_2）を有するダブルゲート構造のもとでの自己無撞着モンテカルロシミュレータ(SCMC)によって得られたチャネル領域内での時間平均したポテンシャル分布。

②サブ課題Ｂ　光・電子融合デバイス

サブ課題責任者：矢花一浩（国立大学法人筑波大学（計算科学研究センター））

サブ課題Ｂ総括

本課題は、時間依存密度汎関数理論に基づき電子ダイナミクスを記述する第一原理計算プログラムの開発、そして近接場光励起や高強度パルス光励起を用いた新奇な光・電子融合デバイス原理を第一原理計算に基づき開拓することを目的としている。本年度より二つのサブサブ課題を統合し単一のサブ課題として研究を遂行した。また東京大学工学系研究科の八井准教授を研究実施者に加え、近接場光励起を用いた新奇なデバイス開発において、その機能に関する実験的な検証を進めた。

ソフトウエア開発に関しては、昨年度、GCEED と ARTED を統合した汎用の光科学ソフトウエア SALMON (Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience)を公開したが、本年度さらに開発を進め平成 30 年 11 月に v.1.2.0 を公開した。また SALMON のコード論文を Comp. Phys. Comm.誌に発表し、プレスリリースを行った。

SALMON を用いた新奇なデバイス原理に関して、次のような研究を行った。近接場光を用いた波数励起に関し、大規模計算による実証とともに受光感度を高めるシリコンデバイスの設計を進めた。さらに近接場光波数励起を利用した高い受光感度を持つシリコンデバイスの作製を行い、金属ナノ粒子の表面被覆率の増大に伴いシリコンバンド端近傍における受光感度が増大することを確認した。また、金とグラフェンからなるナノ物質の光応答を検討した。また、高強度パルス光が斜方入射する場合に有効な新しい計算法を開発し、シリコン薄膜の透過によるパルス波形の変化を計算で調べるとともに実験と比較し、波形変化のメカニズムに関する検討を行った。さらにグラファイトや黒リンなどの層状物質で、パルス光の波形変化に関してシリコンとは異なる様相が現れることを示した。

平成 30 年 11 月 11-12 日に、SALMON の理論的な基礎に関する国際スクールと SALMON を用いたハンズオン・チュートリアルを実施した。このイベントに海外からの参加者 23 名を含む計 57 名が参加した。引き続き 11 月 14-16 日に、SALMON の応用分野である Ab-initio Electron Dynamics Simulations を主要なテーマとする国際シンポジウムを開催した。このシンポジウムには海外からの参加者 38 名を含む 75 名が参加した。この他に、平成 30 年 9 月にサブ課題の実施者・協力者・関係者が集まる研究の報告検討会を行った。

ｉ）光励起電子ダイナミクスによる新奇デバイス原理の探求

再委託先：国立大学法人筑波大学（計算科学研究センター）

[研究実施体制]

責任者：　矢花一浩

実施者：　野田真史、植本光治

協力者：　朴泰祐、仝暁民、廣川祐太（以上筑波大学）、乙部智仁（量研機構）
篠原康（東京大学）、小林亮（名古屋工業大学）、Isabella Floss（ウィーン工科大学）
佐藤駿丞、Angel Rubio（マックスプランク物質構造動力学研）

[アプリケーションソフトウエア開発]

（実施・検討内容）

時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理計算コード SALMON の開発を継続して行い、平成 30 年 11 月に新バージョンである v.1.2.0 を公開した。ユーザ間の連絡用に英語によるメーリングリストを作成し、計算コードの使用方法に関する国際スクール、チュートリアルを実施するなど、コードを国際的に普及することに努めた。

具体的には、東京大学・分子科学研究所と協力して近接場光励起を解明し近接場光励起に起因する物質の光高機能化を明らかにするため、必要となる計算コードを整備した。計算は再委託先である大学共同利用機関法人自然科学研究機構で行った。

電磁場に対するマクスウェル方程式と、電子ダイナミクスに対する時間依存コーン・シャム方程式を同時に解き進める計算手法に関し、新しい計算手法の開発を進めた。電磁場と電子ダイナミクスに異なる空間格子を用いるマルチスケール手法に関して、斜方入射を扱う手法や、格子振動を同時に記述する手法の開発を行った。また、電磁場と電子ダイナミクスを単一の空間格子で記述する新しい手法の開発を行った。これは、単原子層などの極めて薄い薄膜とパルス光の相互作用に対して有用である。

計算コードの維持と開発を容易にするため、コード全体を構造体を用いて書き換える作業を開始した。また、利用環境を整えるため、ウェブとマニュアルの整備を継続して行っており、マニュアルに関しては Sphinx を用いてマニュアルを整備する環境を整えた。

（成果）

SALMON のコード論文を Comp. Phys. Comm.誌に出版し、プレスリリースを行った。論文は、コードの基本的な仕様や使用方法、計算可能な機能、基本的なアルゴリズム、典型的な計算例などを含む網羅的なものであり、新たなユーザが SALMON を利用する上で有益なガイドとなるものである。また、SALMON の利用状況を把握する上でコード論文の統計情報は有用である。

SALMON で行う多くの計算で、最も計算時間を要する軌道関数に対するステンシル計算に関し、Knights Landing 向けに実装していたハンドコーディングによるベクトル化実装をベースとして、ポスト「京」の A64FX プロセッサへの最適化を実施した。A64FX プロセッサでは、Knights Landing や Skylake-SP の AVX-512 SIMD 命令と異なる命令セットの SVE (Scalable Vector Extension)が提供される。SIMD 幅は 512 bit であるため、これまでの実装をベースにして実装時間を短縮した。Knights

Landing 向け実装から A64FX への移植・変換については情報処理学会第 168 回 HPC 研究会で報告している。また、理研 R-CCS が提供するポスト「京」プロセッサシミュレータでの性能評価も実施し、ポスト「京」システムの早期活用のための準備を開始している。

[研究開発]

（実施・検討内容）

（1） シリコン薄膜と高強度超短パルス光の相互作用によるパルス光の波形整形

高強度なパルス光が物質中を透過すると、パルス光の電場と物質中の電子の非線形相互作用によりパルス光の波形が変化する。特に物質を破壊する限界に近い強度のパルス光と物質の相互作用では、極めて強い非線形性のために、マイクロメートル以下の薄膜との相互作用においても特徴的な波形変化を起こすことができる。このような相互作用は、パルス光の波形整形を行うデバイスの基礎原理として注目される。本研究では、実験グループ（ドイツ・マックスプランク量子光学研究所）と共同で、シリコン薄膜によるパルス波形変化を調べている。実験は、薄膜内での反射が起こらないブリュスター角入射で行っているのに対し、計算はこれまで計算が容易な垂直入射の場合に行ってきた。

当初、斜方入射の場合に有限なサイズを持つ薄膜に対して、3 次元的なマクスウェル方程式と第一原理電子ダイナミクス計算を結合した計算を行っていたが、薄膜のサイズに関する計算結果の収束が遅く、正確な結果を得ることが困難であった。研究を進める過程で、斜方入射条件の対称性を利用して、1 次元マクスウェル方程式と電子ダイナミクス計算を結合することにより斜方入射の計算が可能となる新しい方法の開発に成功した（図 B-1）。この方法を用いると、垂直入射の場合と同程度の計算コストで斜方入射の計算が可能となり、斜方入射実験と同一の条件でパルス光の波形変化に対する計算を実施することに成功した。その計算と実験結果の比較により、メカニズムとしてパルス光の高強度な電磁場成分のみが極めて短時間に抑制される波形整形が起こることが明らかになった。現在そのメカニズムをさらに分析しており、計算の手法と波形整形の結果を今後論文としてまとめる予定である。

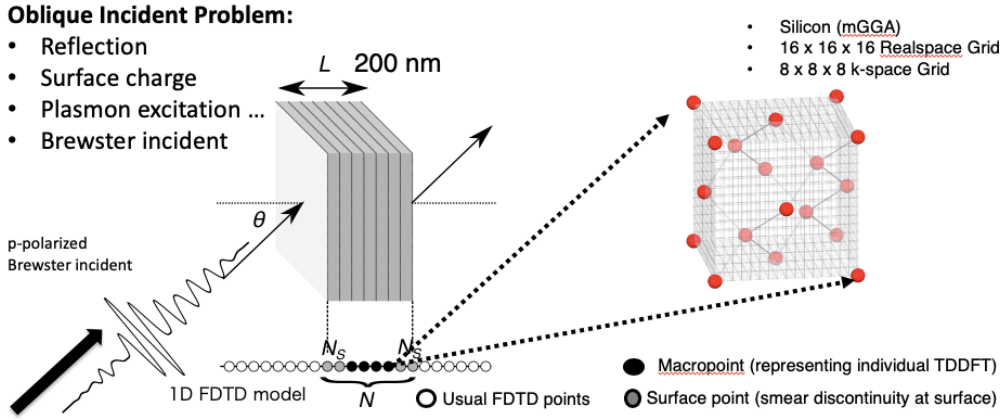


図 B-1: 斜方入射に対する電磁場と電子ダイナミクスを結合したマルチスケール計算のイメージ図。

（2） 可飽和吸収によるパルス光の波形変化

グラフェン・グラファイトや黒リンなどの層状物質では、2 次元的な電子構造により巨大かつ高速な可飽和吸収などの特徴的な非線形光学特性の存在が知られている。この特性は、短パルスレーザー発振器におけるモードロッカーへの応用が試みられている。このような物質群に対して、マクスウェル方程式と結合した時間依存密度汎関数理論を用いた解析を行い、パルス波形の変化やパルス光から電子へのエネルギー移行に対し第一原理計算による理論予測を行った。グラファイトに弱い光が照射する場合、古典電磁気学では 1.55 eV のパルス光に対して侵入長は 32 nm となり、パルス光は侵入長とともに急速な減衰を示す。これに対し時間依存密度汎関数法に基づく計算を行ったところ、強い光（強度が 10^{11} W/cm^2 以上）では可飽和吸収メカニズムによる非線形な吸収率減少が生じ、表面からより深い領域に光侵入が可能になることが明らかにした（図 B-2）。この結果はグラファイト薄膜を用いたパルス光の波形整形や炭素材料のレーザー加工に対し、有益な情報をもたらすものである。

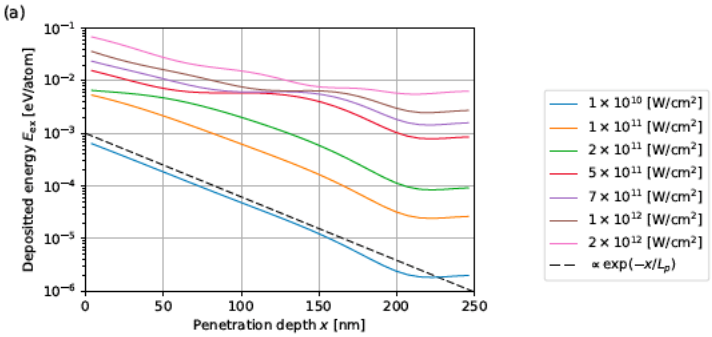


図 B-2: グラファイトに様々な強度のパルス光が入射した時の光から電子へのエネルギー移行。横軸は表面からの距離。

以上の通り、光波波形を整形するデバイス原理の確立に向けた検討を進めることができた。

<u>受託者：国立大学法人東京大学大学院工学系研究科</u>

[研究実施体制]

責任者：　八井崇

協力者：　齋地康太、佐藤匠

[研究開発]

（実施・検討内容）

近接場光波数励起を利用した高い受光感度を持つシリコン光検出器の作製を行った。近接場光波数励起の効果検証のため、プラズモン増強の効果の現れないバンドギャップ波長帯での詳細な波長依存性について検証を行った。

シリコン光検出器における光吸収は、基板表面で発生するが、光吸収層となる p-n 接合界面の空乏層は p 層の基板内部にも発生する。そこで、基板の厚みが薄い SOI 基板を用いたシリコン光検出器の作製を行い、光電流特性の評価を行った。

デバイス実装の加速をはかるため、浜松ホトニクス社と、東京大学、筑波大学、分子科学研究所の 4 社で NDA を締結した。

（成果）

横型 p-n 接合のシリコン光検出器を作製し（図 B-3(a)）、これに近接場光光源となる金微粒子を塗布することで、検出される光電流の増幅度を評価した。波長依存性の詳細を計測するために、本年度白色光源と、複数のバンドパスフィルターを導入し、評価を行った。その結果、バンドギャップ波長帯近傍である波長 1,000nm 近傍で波長が長くなるにつれて増強度が上がる結果が得られた（図 B-3(b)）。金に誘起されるプラズモン増強による、光検出器の効率増強では、プラズモン共鳴波長の 520nm 近傍で

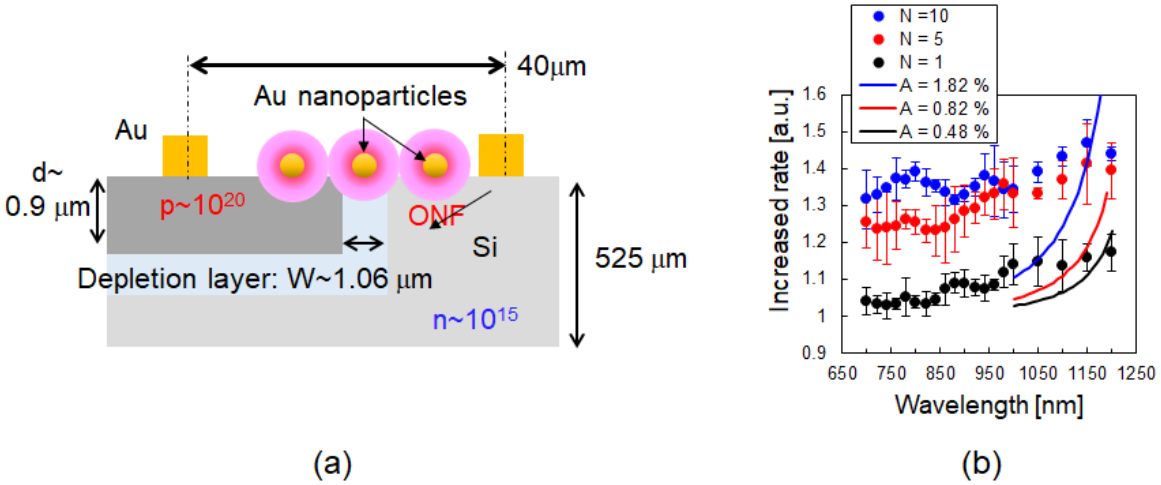


図 B-3:(a) 作製した横型 p-n 接合シリコン光検出器のデバイス構造。(b) 金微粒子のないデバイスに対する金微粒子塗布後に得られた光電流の増幅度の波長依存性。N：金微粒子塗布回数。A：各 N の値に対する被覆率。

最大となり、バンドギャップ波長付近での増大は見られていない。これに対して、本結果で得られた電流増大の効果は、プラズモン増強による効果ではないことを示す結果であると言える。つまり、デバイス界面に金属ナノ粒子を分散させ、その分散回数増（塗布回数増）による表面被覆率の増大に伴い、シリコンバンド端近傍における受光感度も増大することを確認した（最大約 47%増大）。

ボロンドーピングにより作製される p 層の厚みは約 0.9um である。この p 層下側での光吸収を防ぐため、厚み 0.9um の SOI 基板を用いた光検出器デバイスを作製した（図 B-4(a)）。この場合においても、バンドギャップ波長付近において、長波長になるにつれて、光検出効率（受光感度）の増大が確認された（図 B-4(b)）。また、金微粒子の塗布回数を増やすにつれて、光検出効率（受光感度）のさらなる増大を確認した。

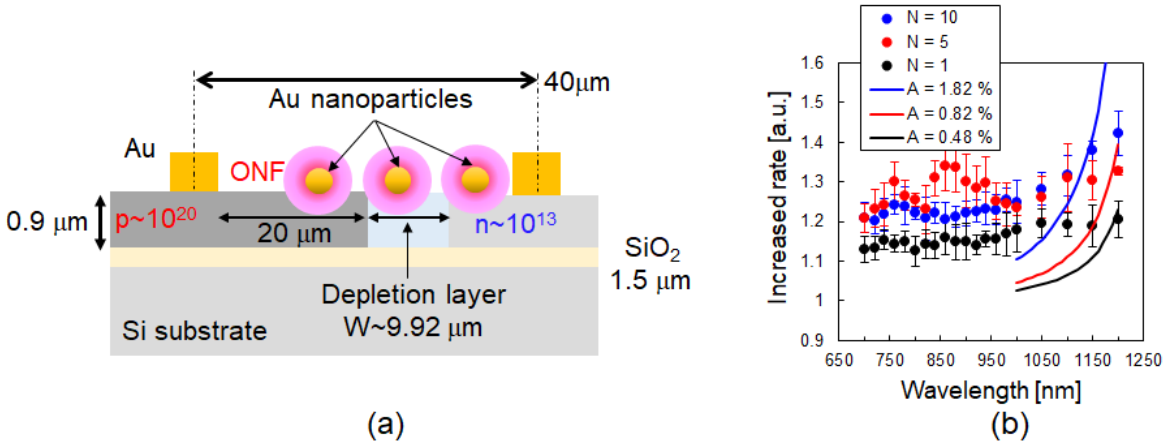


図 B-4: (a) SOI 基板により作製した横型 p-i-n 接合シリコン光検出器のデバイス構造。(b) 金微粒子のないデバイスに対する金微粒子塗布後に得られた光電流の増幅度の波長依存性。N：金微粒子塗布回数。A：各 N の値に対する被覆率。

上記結果の確認のため、東京大学で作製した試料を浜松ホトニクス社にて評価を行った。その結果、東京大学で得られた結果と同様な金微粒子塗布による光検出電流の増大を確認した。

上記の成果普及のため、論文執筆を進め、現在査読コメントに対して改訂中である。

<u>再委託先：大学共同利用機関法人自然科学研究機構</u>

[研究実施体制]

責任者：　飯田健二

[研究開発]

（実施・検討内容）

SALMON を用いて近接場光励起についての応用研究を進めた。近接場光によるシリコンの電子ダイナミクスの計算を筑波大学と共同で行った。計算から得られた光吸収強度のエネルギー依存性について、伝搬光による励起と比較した。そして、シリコンの近接場光励起についての研究成果をまとめ、論文に出した。この得られた成果を踏まえて東京大学と議論をして、高機能シリコン光デバイスを作成するための理論的指針の探索を進めた。

上述の研究を含め、これまでは、近接場光源は双極子放射場にモデル化して、デバイス原理の解明を行ってきた。光電子デバイスのさらなる高機能化に向けて、次の段階として、近接場光源も量子力学的に露わに扱い、原子レベルの理解を深めることが求められる。そこで、ポスト「京」の実稼働も視野に入れて、近接場光源も含めたナノ物質系全体の第一原理計算に筑波大学と共同で取り組んだ。光電子デバイスへの応用が進められている金ナノ粒子とグラフェンからなる系を例にとり、近接場光源である金ナノ粒子も含めた系全体の光励起電子ダイナミクスの計算を進めた。

（成果）

<u>近接場光の高い波数を用いたシリコン半導体の波数励起</u>

間接型半導体であるシリコンについて、近接場光の高い波数を用いることで、フォノンを介在せずに直接可視光励起することを目標にこれまで研究を行ってきた。2017 年から実在系シリコンの近接場光励起の第一原理計算を進めており、得られた知見を踏まえて、2018 年度は近接場光と伝搬光での吸収強度を比較した(図 B-5)。近接場光で励起すると、強度が急激に増加する 1.6 eV 付近において、伝搬光の場合に比べて吸収強度が数桁大きくなっている。これは、実在系の表面は複雑なバンド構造を有するために、異なる波数間の遷移の経路が多数存在することが大きく寄与している。従って、この強度の増大は、従来のプラズモンによる電場増強を用いる場合とは全く異なる機構によるものである。そのため、高エネルギー側になると、同じ波数での遷移も生じやすくなり、伝搬光での方がより大きな吸収が得られる。間接バンドギャップ型半導体を近接場光で励起すると、バンド端近傍の低エネルギー領域で光吸収強度が有意に増大することが示された。つまり、近接場光を用いることでシリコンの受光感度を向上させることが可能であった。この成果は Phys. Rev. Applied 誌にて掲載された。

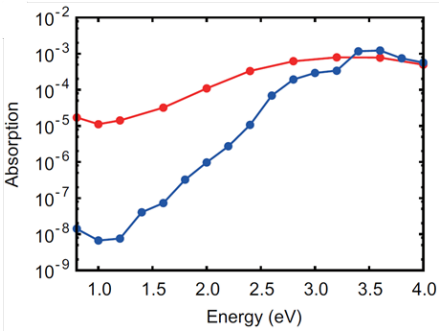


図 B-5: 近接場光（赤）と伝搬光（青）による光励起の強度。

③サブ課題Ｃ 超伝導・新機能デバイス材料

サブ課題責任者：今田正俊（国立大学法人東京大学大学院工学系研究科）

サブ課題Ｃ総括

本サブ課題にはいくつかの推進すべきテーマがある。第一原理的な計算をもとに、強相関電子系を高精度の大規模計算で解明するための手法開発を進めることが第一の課題である。さらにこの手法をオープンソースアプリケーションとして準備するとともに順次公開していくことが第二の課題である。開発する手法も活用しながら、高温超伝導体についてバルクの超伝導体の機構解明を進めるとともに、薄膜や界面において、銅酸化物や鉄系超伝導体が優れた特性を示す機構を明らかにし、新たな機能開発の手掛かりを得るために、「京」を用いて大規模計算を展開し、ポスト「京」に向けたコードの高度化を進めることが第三の課題である。一方開発手法を適用しながら、トポロジカル相の新奇な状態の機構解明、機能開拓を行うためにポスト「京」に向けた準備を進めることが第四の課題である。

第一の課題では今年度制限 GW 法にレベル補正法を組み合わせる手法を開発し、改良された銅酸化物の有効ハミルトニアンを導くことに成功した。開発手法のうち、厳密対角化法と変分モンテカルロ法をオープンソフトウエアとして公開してあるが、この高度化を進めつつ変分モンテカルロ法の手法に関する論文を出版したことは第二の課題の成果である。第一の課題の成果として得られたバルク銅酸化物の改良された第一原理有効ハミルトニアンを、今回改良した高精度ソルバーを用い「京」のために高度化したコードを活用して解いた結果、バルク銅酸化物の絶縁体相でも超伝導相でも実験結果と定量的に一致する結果を得ることに成功したことは第三の課題の成果である。単純なハバード模型についても、ポスト「京」に向けて高度化を進めているコードを活用して計算した結果、超伝導状態に比べて電荷不均一な状態の方が多くのキャリア濃度でエネルギーが低くなるという、実験と一致しない結果が得られ、レベル補正しない旧来の有効ハミルトニアンでも同様な傾向がみられることと合わせ、これらは第一原理有効ハミルトニアンの計算結果とは対照的に異なる結果となった。

さらに 6 層ずつの絶縁体と金属を張り合わせた銅酸化物界面の第一原理有効ハミルトニアンを求めて、界面付近の構造緩和が銅酸化物の超伝導に有利に働くことを示したことも、ポスト「京」に向けて格子緩和を取り入れる手法開発を行うという戦略に従った第三の課題の成果である。機械学習による銅酸化物の角度分解光電子分光の実験データの解析で、超伝導を引き起こしている自己エネルギー構造を発見したことは、実験グループとの共同研究で達成した、当初計画を超える大きな成果であり、データ科学的手法をポスト「京」プロジェクトに取り込んでいくという大方針の推進に貢献する。さらに当初計画を超えて現実的なレーザー照射で実現しうる非平衡高温超伝導を「京」を用いて追求したことは、ポスト「京」で取り組むべき非平衡強相関現象の学理につながる成果として挙げられる。

第四の課題については、高度化を行ってきた変分モンテカルロ法およびテンソルネットワーク法を、強相関トポロジカル物質候補であるパイロクロア構造イリジウム酸化物および蜂の巣格子イリジウム酸化物ならびにルテニウム塩化物の有効ハミルトニアンに適用した。この結果、純粋スピンキャリアおよびマヨラナ粒子励起を示す量子スピン液体相が実現するための必要条件である非磁性の基底状態が「京」を活用することで得られた。また、第四の課題を推進する過程で、厳密対角化オープンソースアプリケーションのポスト「京」向けチューニングおよびテンソルネットワーク法による実験データの解析を行い、ポスト「京」を用いた計算と実験の協働が有効であることを示す成果を得た。

このサブ課題ではサブ課題Gとも連携しながら、平成30年5月24日、7月30日、10月25日、平成31年1月22日に全体会議を開き、研究課題の議論と進行状況の吟味を重ねた。また銅酸化物を中心とする超伝導プロジェクトは平成30年4月19日、5月17日、6月4日、7月2日、7月31日、9月5日、9月27日、10月15日、11月7日、12月10日、1月18日、2月7日、2月27日、3月22日にミーティングを持ち、進捗状況、研究の進め方、成果とりまとめなどで密に議論を繰り返しポスト「京」への展望も検討した。

ｉ）高温超伝導体薄膜・界面の理論設計と超伝導転移温度上昇指針の探究

受託者：国立大学法人東京大学大学院工学系研究科

[研究実施体制]

責任者：　今田正俊

実施者：　山地洋平、大越孝洋、Andrew Darmawan、三澤貴宏、野村悠祐、Rico Pohle

協力者：　酒井志朗（理化学研究所）、只野央将（物質・材料研究機構）、井戸康太（東京大学）、平山元昭（理化学研究所）

[アプリケーションソフトウエア開発]

（実施・検討内容）

低エネルギー有効ハミルトニアンの精度を高めるためにMACEでの導出法を再検討し、制限GW法の組み込みとさらなる改良を追求した。低エネルギー有効ハミルトニアンを導出できるオープンソフトウエアRESPACKへのスピン軌道相互作用の組み込みを行った。界面のような非周期系にMACEを適用して構造緩和の効果を取り入れた有効ハミルトニアンを求める手法を開発した。以上をもとに将来のポスト「京」のプロジェクトで用いる手法の開発が進んだ。

低エネルギーソルバーである変分モンテカルロ法の機能拡張、高度化を進めた。公開されたコードをもとにアルゴリズムと機能などについて論じた論文を公表した。変分モンテカルロ法コードにテンソルネットワーク法とランチョス法を組み合わせ、さらにエネルギー分散外挿を行う改良を検討した。変分モンテカルロ法の主要部とボルツマンマシンによる機械学習法を組み合わせて精度を向上させる方法を提案した。また機械学習法を用いて実験データに隠れている理論的に重要な物理量を推定する手法を検討した。

（成果）

MACEのアルゴリズムの中に、制限GW法を組み込む手法開発を行い、さらにレベル繰り込みという新しい効果を取り入れて有効ハミルトニアンの改良を行い、銅酸化物の有効ハミルトニアンの導出に活用して成果を挙げた。このハミルトニアンをテンソルネットワーク法と組み合わせた変分モンテカルロ法などの改良した低エネルギーソルバーで解くという一貫スキームの開発に成功し、銅酸化物の超伝導解明に応用した。RESPACKの改良、多機能化を進め、スピン軌道相互作用の組み込みに成功した。界面のような非周期系の低エネルギー有効ハミルトニアンの導出法を確立し、特に銅酸化物界面におけ

る結晶構造緩和を取り入れて、低エネルギー有効ハミルトニアンを導くことに成功した。テンソルネットワーク法や機械学習法と従来の変分モンテカルロ法を組み合わせることによって、高精度かつ高効率な低エネルギーソルバーを開発改良することに成功した。これを銅酸化物超伝導体の基本模型であるハバード模型の基底状態解明に応用した。角度分解光電子分光で得られるスペクトル関数の実験データを、機械学習を用いて解析する手法開発に成功した。これらはポスト「京」プロジェクトの始動に当たって基礎となると同時に直接活用できる手法となる。

[研究開発]

（実施・検討内容）

ポスト「京」で推進すべき科学的課題を絞り込むべく、探索を進めた。まず改良された低エネルギーソルバーを基本的な模型であるハバード模型に適用し基底状態相図を求めた。また改良された MACE 手法を用いて得られた銅酸化物の第一原理有効ハミルトニアンを、改良された低エネルギーソルバーで解いて、バルク銅酸化物超伝導体の実験結果との比較と超伝導の機構解明を行った。格子緩和を含む銅酸化物界面の有効ハミルトニアンの導出をもとに、界面の超伝導の特質を検討し、格子緩和の役割を検討した。機械学習法を用いて超伝導の実験データだけから超伝導機構を推定する方法を検討した。現実的なレーザー照射が高温超伝導に与える影響を吟味した。これらによりポスト「京」で系統的に追究すべき課題が明らかになりつつある。

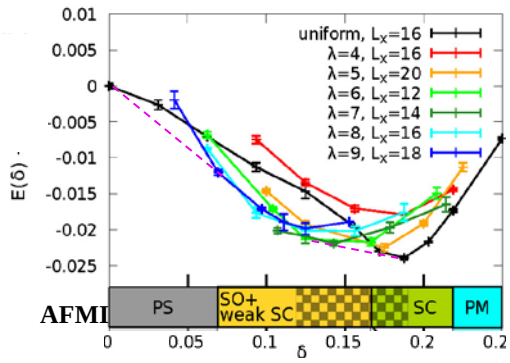


図 C-1: ハバード模型に見られる様々な状態のエネルギー。超伝導状態(黒線)が大半のキャリア濃度(δ)で他のストライプ状態より高いエネルギーになっており、銅酸化物の実験結果は再現しない。

（成果）

改良された低エネルギーソルバーを活用して銅酸化物の模型であるハバード模型を解いた。大半のキャリア濃度で超伝導よりもストライプ状態を含む電荷不均一状態の方が、エネルギーが低くなり、超伝導が支配的である銅酸化物の実験結果を再現しないことが明らかとなり、単純なモデル計算の限界と第一原理的な計算の重要性を示唆する結果となった（図 C-1）。

高温超伝導体薄膜や界面において、バルクと比較して銅酸化物や鉄系超伝導体が優れた特性を示す機構を、第一原理的な大規模計算およびモデル計算を組み合わせて説明することを以前試み、高い機能性を示す実験結果を理解する結果を得たが、この結果をより詳細にかつ根本的に理解するためには、まずバルクの超伝導体の機構を今まで以上に第一原理的に理解する必要があるとの認識に達した。以上の結果を踏まえて、すでに導出されている銅酸化物のバルク周期系の第一原理有効ハミルトニアンを上述の改良された開発手法を用いて再検討し、レベル繰り込み効果を取り入れて有効ハミルトニアンの改良を行った。これにさらに変分モンテカルロ計算で解くフィードバックを行い、バルク超伝導を定量的に記述できる高精度な有効ハミルトニアンを導くことに成功した。

得られた第一原理有効ハミルトニアンを前述の改良された数値手法で解き、実験的に得られているモット絶縁体での電荷ギャップの大きさや反強磁性秩序モーメントの大きさを定量的に再現するとともに、ハバード模型の時とは対照的に、キャリアドープにより実際に超伝導相が広いドーピング濃度域で出現することを示した。このように広範で定量的に実験結果を再現する第一原理的な計算結果は 30 年以上の銅酸化物の研究の歴史の中で初めてのものであり、われわれの改良したハミルトニアンの精度と妥当性を示している。得られた超伝導状態が電荷不均一状態の近傍に生じ、電荷のゆらぎが役割を果たしていることを示しており、これも実験結果と整合する。この成果をもとにポスト「京」で系統的、網羅的に追究して、超伝導発現機構の最終結論を得るための方針も固まりつつある。

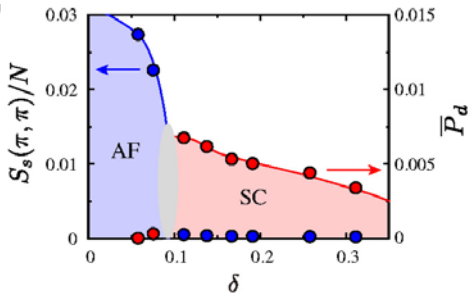


図 C-2: 水銀系銅酸化物の第一原理ハミルトニアンの解は超伝導相(SC)が支配的で実験結果を再現する

さらに界面を含む電子格子相互作用の現実的な効果を第一原理的に検討した。過剰ドープした銅酸化物とキャリアをドープしないそれとの間に形成される界面で、実験的に優れた超伝導状態が報告されているミクロな原因を明らかにするために、第一原理的な有効ハミルトニアンをそれぞれの層が 6 層、合わせて 12 層までの超格子で計算した。その結果、格子緩和の効果を第一原理的に見積もることも含め、非周期有効ハミルトニアンを任意パラメータなしに導出することに成功した。得られた有効ハミルトニアンでは、界面での格子緩和のために、第一原理的なホッピングや相互作用などのパラメータが格子緩和しない時よりも緩やかに変化することを発見した。界面での格子緩和の様子を実験的に測定することはむつかしく、計算による知見は重要である。この緩やかな変化は界面での層間相分離が界面に最適な超伝導状態を自己組織化の機構で作り出すというメカニズムを支持した。これによりポスト「京」で今回開発した手法をもとに、格子緩和を考慮した第一原理有効ハミルトニアンを解き、界面超伝導を解明することの意義が明らかになった。

当初計画になかった成果だが、銅酸化物高温超伝導体において、実験的に直接分離測定できない正常自己エネルギーと異常自己エネルギーの分解に角度分解光電子分光法の実験データを用いた機械学習法を応用して成功した。その結果正常自己エネルギーと異常自己エネルギーがともに顕著なピークを持ち、このピークが実験で測定できるスペクトル関数では相殺して見えないことを示すとともに、異常自己エネルギーのピークが高温超伝導を引き起こしていることを突き止め、30 年来の実験データの謎を解いた。この成果は 2 名の角度分解光電子分光の実験研究者との連携共同研究として行われ、もう 1 名を含むグループが得た高解像度のスペクトル関数のデータを解析することによって得られた成果である。データ科学的手法による実験解析がポスト「京」での意義ある課題であることを示す成果である。

また、これも当初計画にはなかった成果だが、レーザー照射で実現しうる非平衡高温超伝導についても、レーザー照射後の超伝導保持の方策や、特定のフォノン励起による超伝導増強の可能性を検討し、現実的に可能なレーザー強度で超伝導を増幅させられる方策を見つけている。ポスト「京」で重点的に追究することが待ち望まれることが明らかとなった。なお、実験家とのフォーラム、産業界とのフォーラムでの活動とタイアップした研究は、次の ii) において実施した。

ⅱ）遷移金属酸化物を含む物質群でのトポロジカル相実現と純粋スピンキャリア創出

受託者：国立大学法人東京大学大学院工学系研究科

国立大学法人東京大学物性研究所

[研究実施体制]

責任者：　山地洋平

実施者：　今田正俊、藤堂真治、大越孝洋、森田悟史、大久保毅、金子隆威、Rico Pohle

協力者：　川島直輝、LEE Hyunyong（以上、東京大学）

鈴木隆史（兵庫県立大学）、原田健自（京都大学）

只野央将（物質材料・研究機構）

[アプリケーションソフトウエア開発]

（実施・検討内容）

強相関トポロジカル相を特徴付けるためには、磁気秩序に代表される二重極秩序変数を含む一般の多重極秩序変数によって記述される自発的対称性の破れの有無を高精度に検証する必要がある。そこでサブサブ課題ｉ）とともに開発を続けてきた低エネルギーソルバーの一つである多変数変分モンテカルロ法を用いた多重極秩序変数間の相関関数を計算することを検討した。また、多重極秩序変数のモンテカルロ計算において生じる統計的誤差の増大について検証を行った。

スピン軌道相互作用が重要となる強相関トポロジカル相候補物質において、相対論的効果によって結びついた結晶構造とスピン対称性を忠実に再現する初期状態を構成することで、低エネルギーソルバーの一つとして開発してきたテンソルネットワークの高精度化を追求した。

また、ポスト「京」において数値厳密対角化のオープンソースアプリケーション『ＨΦ』の大規模かつ高速な運用のために、ポスト「京」向けのチューニングを検討した。また従来 1%未満であったピーク性能比の向上について検討を行った。加えて、実験データから量子格子ハミルトニアンを導出するアルゴリズムを検討した。

（成果）

多重極秩序変数間の相関関数による多変数変分モンテカルロ法の計算を実装した。また、多重極秩序変数のモンテカルロ計算においては、重み付きサンプリングによって生じる統計誤差が、数学的には等価なサンプリング法に依存することを明らかにした。また、以上の成果を得る過程で、ポスト「京」を用いた網羅的な多重極秩序変数間の相関関数の計算による膨大なデータからクリロフ部分空間法を用いた主成分解析を用いることで、直感に頼らない系統的な秩序変数の抽出が可能なことが明らかとなった。

強相関トポロジカル相研究における試金石として研究が続けられてきたキタエフ模型において、系の対称性を満たす改良された初期状態を用いて、熱力学的極限におけるテンソルネットワーク法の現状での最高精度を達成した。これは、強相関トポロジカル絶縁体への適用を念頭に、機械学習を統合した変分波動関数法の開発を行ったことにより得られた成果である。適用範囲の限られる既存の最高精度の手

法と同等の高精度を達成したことになり、前述の秩序変数の自動抽出とともに、ポスト「京」における高精度な強相関トポロジカル相候補物質の数値検証を可能とする成果である。

数値厳密対角化のオープンソースアプリケーション『HΦ』のポスト「京」向けのチューニングを行い、複数のエネルギー固有値と対応する波動関数を計算するアルゴリズム LOBCG 法の典型的な計算時間を 50%削減することに成功した。また、連続なメモリアクセスが行われるように改良されたアルゴリズムによって強相関トポロジカル相候補系について 10%のピーク性能比を達成した。

さらに、量子スピン液体が実現する条件の理論的探索を進め、並行して、実験的検証を可能とするためのデータ解析手法を追求し、実験データから量子格子ハミルトニアンを導出するアルゴリズムを確立した。具体的には、『HΦ』の計算結果と実験データ・データベースを用いてベイズ最適化によって、量子格子ハミルトニアンの導出、および第一原理計算によって導出された有効ハミルトニアンの最適化するアルゴリズムを確立した。ポスト「京」を用いた実験データから有効ハミルトニアンの導出へつながる成果である。

[研究開発]

（実施・検討内容）

強相関トポロジカル相の候補物質イリジウム酸化物 $R_2Ir_2O_7$ に対する低エネルギー有効ハミルトニアンの基底状態を調べ、強相関トポロジカル相の実現への道筋を多変数変分モンテカルロ法によって追求した。すでに基底状態が明らかな極限から出発することで量子スピン液体相を系統的かつ制御されたアプローチから解明しやすくなるので、基底状態が高精度に決定されているチェッカーボード格子とも呼ばれる一層パイロクロア構造を起点に、多層パイロクロア構造ならびに 3 次元結晶構造へと拡張しながら系統的に計算を進めることを検討した。またパイロクロア構造上のオスミウム酸化物にけるトポロジカル相実現の可能性を追求した。

量子スピン液体が実現する条件の理論的探索を進めるため、蜂の巣格子イリジウム酸化物およびルテニウム塩化物の有効ハミルトニアンの熱力学極限における基底状態を、初期条件を改良することで高精度化したテンソルネットワーク法によって追求した。また、従来の計算科学手法では取り扱いが難しかったフラストレート磁性体に対してテンソルネットワーク法を適用することで実験家との共同研究を推進した。

（成果）

ジャロシンスキ-守谷相互作用を含むスピン軌道モット絶縁体 $R_2Ir_2O_7$ に対する最もシンプルな低エネルギー有効ハミルトニアンについて、「京」コンピュータを用いた多変数変分モンテカルロ法の計算によって非磁性の基底状態を得た。ジャロシンスキ-守谷相互作用を制御することで、一層パイロクロア構造においてはスピン軌道モット絶縁体 $R_2Ir_2O_7$ で観測される all-in-all-out(AIAO)と呼ばれる典型的な磁気秩序相から非磁性の共鳴原子価結合結晶相への相転移が生じることを明らかにした。共鳴原子価結合結晶相が結晶構造と整合しない二層パイロクロア構造と 3 次元パイロクロア構造においても AIAO 相と非磁性相との間の相転移が発見された。すなわち、研究開発計画で予測されていたように、$R_2Ir_2O_7$ の有効ハミルトニアンにおいて、磁気相互作用を制御することでスピン液体相と整合する非磁性相が発現することが確認された。これによって、スピン軌道モット絶縁体 $R_2Ir_2O_7$ に対する最もシンプルな低エ

ネルギー有効ハミルトニアンが量子スピン液体相を示す候補系としてポスト「京」による網羅的検証に値する対象であると示された。また、パイロクロア構造オスミウム酸化物において量子化された電気磁気効果を示すアキシオン絶縁体が発現する可能性を明らかにした。

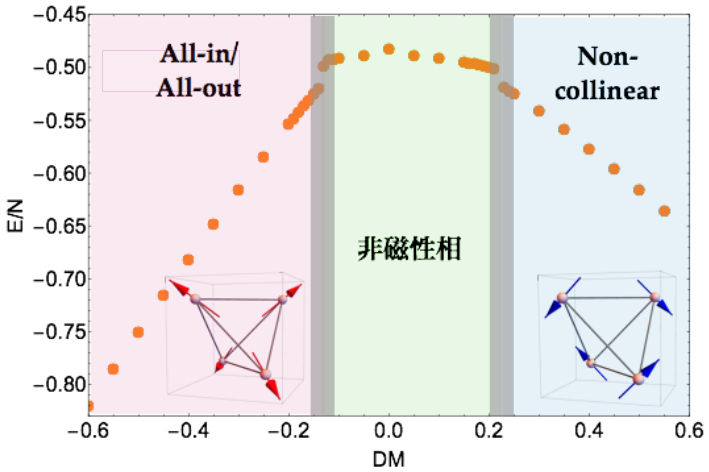
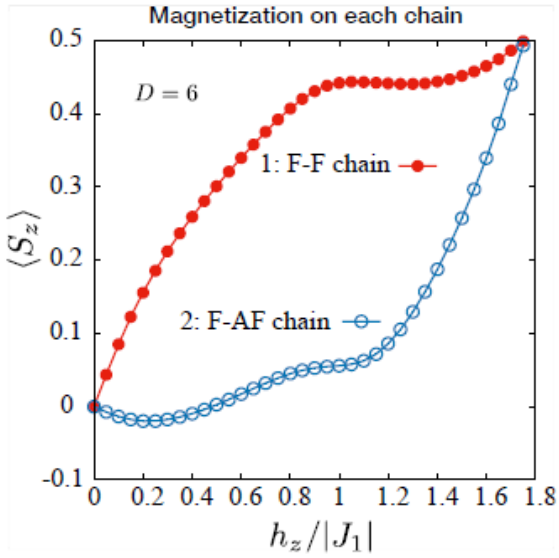


図 C-3: スピン軌道モット絶縁体 $R_2Ir_2O_7$ の有効模型においてジャロシンスキ-守谷(DM)相互作用を制御した際の基底状態のエネルギー密度と量子相転移

キタエフ-ハイゼンベルグ模型およびキタエフ-Γ模型は、蜂の巣格子イリジウム酸化物およびルテニウム塩化物の有効ハミルトニアンとして研究が進められてきた。この二つの模型の熱力学極限における基底状態を、結晶の対称性に忠実な初期状態を用いたテンソルネットワーク法によって高精度に決定した。これによって、スピン液体候補物質 α-$RuCl_3$ の第一原理有効ハミルトニアンの精度検証が可能となり、ポスト「京」プロジェクトにおける、サブサブ課題ｉ）で開発が進んだスピン軌道相互作用の取り込みとレベル繰り込みが導入された MACE による高精度な第一原理有効ハミルトニアンの熱力学極限での高精度な数値解析が可能となった。さらに、この高精度なテンソルネットワーク法による計算結果から、実験で観測される物性を再現するには、従来の第一原理計算手法で導出された有効ハミルトニアンの精度が不十分であることが明らかとなり、ポスト「京」プロジェクトにおける、サブサブ課題ｉ）で開発が進んだ、スピン軌道相互作用の取り込みとレベル繰り込みが導入された MACE による高精度な第一原理有効ハミルトニアンの必要性があらためて実証された。



本プロジェクトにおいて開発を進めてきたテンソルネットワーク法を用いて、従来の量子モンテカルロ法では実験との比較が困難であった磁性体(σ-MePy-V)PF_6 の磁化過程を計算することが可能になった。計算して得られた磁化過程がフラストレーション効果によって支配されていることを明らかにし、今後実験との協働が有効であることを示した。さらに本成果は、ポスト「京」を用いることで有効かつ即応性の高い実験との協働の可能性が広がることを示している。

図 C-4: テンソルネットワーク法によって計算された磁性体(σ-MePy-V)PF_6 の磁化過程

④サブ課題D 高性能永久磁石・磁性材料

サブ課題責任者：三宅隆（国立研究開発法人産業技術総合研究所）

サブ課題D総括

CDMSI、元素戦略磁石拠点(ESICMM)合同の磁石理論のミーティングを開催（H30.5.2, H29.7.11, H30.7.24, H30.8.7, H30.9.5, H30.9.18, H30.10.9, H30.10.23, H30.11.6, H30.12.4, H31.1.8, H31.1.22, H31.2.6, H31.2.26, H31.3.7）。毎回 10 名程度が参加し、第一原理計算、スピン模型の解析、インフォマティクス等の手法開発と磁石応用を議論した。また、CDMSI、ESICMM、情報統合型物質・材料開発イニシアティブ(MI²I)、PCoMS 合同の月例 Working も開催（H30.4.7, H30.5.19, H30.6.16, H30.7.7, H30.8.18, H30.9.15, H30.10.20, H30.11.10, H30.12.8, H31.1.26, H31.2.16, H31.3.23）。毎回 15 名程度が参加。機械学習を活用した磁石開発に関して、日本物理学会や金属学会等複数の招待講演を行った。ESICMM、MI²I との連携課題を含め、研究は順調に進展した。ベイズ最適化を用いた結晶構造予測や化学組成の最適化手法の高度化、ネオジム磁石界面の磁気交換結合の第一原理計算手法の実装、グラフ理論を用いたアモルファス相の解析などを推進した。

ｉ）新規磁性材料開発－電子論と情報統合手法による探索

再委託先：国立研究開発法人産業技術総合研究所

[研究実施体制]

責任者：　三宅隆

実施者：　石橋章司

協力者：　Leonid Pourovskii、Silke Biermann（以上、エコール・ポリテクニク）、Ferdi Aryasetiawan（ルンド大学）、安宅正、田中智大、藤崎淳、古屋篤史（以上、富士通株式会社）、福島孝治（東京大学）

[アプリケーションソフトウエア開発]

（実施・検討内容）

(1) 原子間モデルポテンシャルを用いた結晶構造予測手法の高度化を行う。

(2) 第一原理計算コード QMAS で磁気物性値を計算する機能の高度化を行う。

(3) モンテカルロ法に基づいた古典スピン模型の磁化反転解析手法の高度化を行う。

（成果）

(1) ベイズ最適化を用いた結晶構造探索に用いる記述子として、symmetry function を実装した。また、記述子間の類似性に基づいた累積残差エントロピーの算出機能を実装した。

(2) 結晶磁気異方性をより正確に議論するため、希土類サイトにおける高次の結晶場係数の計算機能を追加した。

(3) Wang-Landau 法を用いたコードの高速化を行い、168 万スピン系の磁化反転に伴う自由エネルギー障壁の計算を可能にした。

[研究開発]

（実施・検討内容）

(1) 第一原理計算と情報統合手法を用いて、$ThMn_{12}$ 構造を有する RFe_{12} 型磁石化合物の化学組成の最適化を実行する。

(2) 高い磁気特性を有する物質開発のため、結晶構造探索手法を開発する。

（成果）

(1) $NdFe_{12}N$ や $Sm(Fe,Co)_{12}$ 等の RFe_{12} 型磁石化合は高い磁気物性値を有するため注目を集めているが、安定なバルク相の形成のためには、Fe の一部を元素置換する必要がある。多くの場合、これに伴い飽和磁化が低下するため、適切な置換元素と置換量を選ぶことが重要になる。前年度は、$(R_{1-\alpha}Z_{\alpha})(Fe_{(1-\beta)(1-\gamma)}Co_{\beta(1-\gamma)}Ti_{\gamma})_{12}$, R=Y, Nd,Sm, Z=Zr, Dy において、(R, Z, α, β, γ)を変えた合計 3,630 個の化学組成に対して、キュリー温度を目的変数としてベイズ最適化の有効性を示した。今年度は目的変数に飽和磁化と生成エネルギーを加えた。データは KKR-CPA による第一原理計算データを用いた。しかし、KKR-CPA は生成エネルギーの絶対値に系統誤差を含む。これを解消するため、データ同化手法を用いた。具体的には、化学量論組成に対して PAW 法の QMAS コードを用いて生成エネルギーを求め、化学量論組成に対する PAW 法のデータと非化学量論組成を含む KKR-CPA 法のデータを用いて、後者の生成エネルギーに対する補正を加えた（図 D-1）。その上で、ベイズ最適化を用いて、飽和磁化、キュリー温度、生成エネルギーを目的変数として、化学組成の最適化を行った。ベイズ最適化を 1000 回行い、3630 組成のうち目的変数がトップ 10 の組成を 50 回の試行回数で見つけられる成功確率を求めた。その結果、成功確率は、ベイズ最適化に用いる記述子に強く依存することがわかった。Co 濃度や Ti 濃度を含む良い記述子を選んだ場合は、ランダムサンプリングよりはるかに効率が高くなることがわかった。

（ESICMM との連携課題）

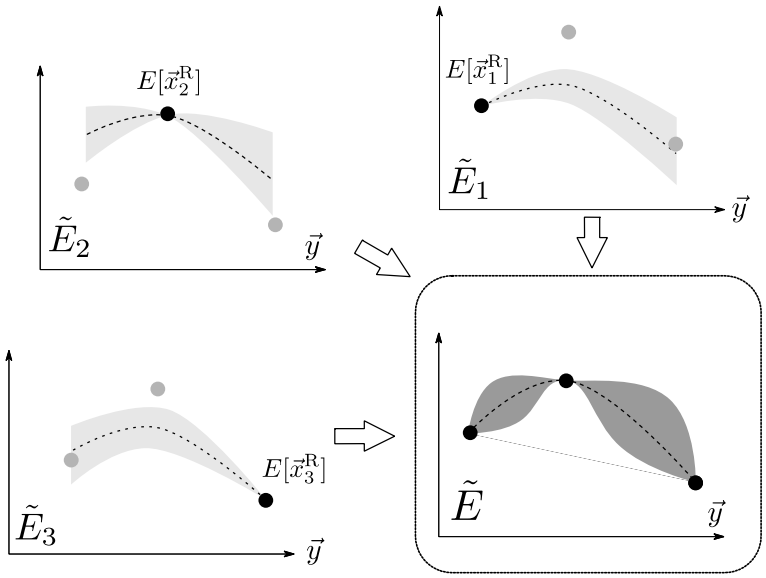


図 D-1: データ同化手法の概念図。化学量論組成（参照点）に対して正確な計算を実行し、その近傍の非化学量論組成に対する組成依存性は KKR-CPA で見積もる。最後に、様々な参照点の周りで得られた予測モデルを統合し、全領域のデータを求める。

(2) 前年度よりベイズ最適化を用いた結晶構造探索の手法開発を行っている。今年度は、ベイズ最適化に用いる記述子の選択の検討を行った。記述子に含まれるパラメータを変えて、最安定な結晶構造を見つける成功確率を調べたところ、上記(1)と同様に、成功確率がパラメータに強く依存することがわかった。さらに、記述子の類似度を用いて定義される累積残差エントロピー(Cumulative Residual Entropy, CRE)と探索効率の間に相関があることがわかった。このことは、ベイズ最適化を行う前に、CRE を最大化するパラメータを選択することにより、ベイズ最適化の効率が向上する可能性を示唆しており、今後、広い物質を対象とした検証が期待される。（MI²I との連携課題）

<u>受託者：国立大学法人東京大学物性研究所</u>

[研究実施体制]

責任者：　赤井久純

協力者：　斎藤峯雄、小田竜樹、石井史之、金川朋賢、村田樹（以上、金沢大学）
　　小倉昌子（ユーリッヒ研究所およびミュンヘン大学）

[アプリケーションソフトウエア開発]

（実施・検討内容）

(1) アプリケーションソフトウエアである KKR グリーン関数法による大規模計算実施のための計算機コード Machikaneyama(AkaiKKR)のハイブリッド並列化を行った。昨年度重点的に開発した OpenMP が高い並列性能を出しているので、この性能を維持して多元合金の組成最適化が格段に効率よく行えるように、MPI 並列を実装した。

(2) 昨年度開発を開始した有限温度におけるフォノン散乱を KKR-CPA 法を用いて電子状態に取り込める KKR-Phonon パッケージによる計算の安定化、Quantum Espresso による phonon 計算と KKR-Phonon をリンクして実験情報なしにフォノンを取り込んだ計算できるシステムの整備を実施した。

（成果）

(1) 様々な合金系、混晶系の電子状態計算に適用されて成果を上げてきた KKR グリーン関数法による電子状態計算機コード Machikaneyama (AkaiKKR)は不規則系の計算を CPA (coherent potential approximation) を用いて高精度にかつ高速に計算できるが、機械学習データ作成のためには、自動運転によるデータの蓄積が必須である。この目的に沿うようにパッケージのハイブリッド並列化を行い、多元合金における組成の最適化を行うための第一原理計算自動運転システム HOFMAN の開発をほぼ完了した。これらの計算から得られたデータを永久磁石材料の最適化に利用した。

(2) 有限温度におけるフォノン散乱波の効果を考慮して有限温度の電子状態を計算する手法を開発して KKR-Phonon としてコード化してきた。このコードを用いて、ハーフメタル・ホイスラー合金の有限温度輸送現象の研究に適用した。

[研究開発]

（実施・検討内容）

(1) HOFMAN システムを用いて想定した組成空間内部の合金組成を持つ磁石材料合金の磁性を計算することによってデータ蓄積を行い磁気特性に関する最適化を行い永久磁石材料としての可能性を評価する。

(2) 電子フォノン散乱の効果を取り入れた第一原理電子状態計算を行い、有限温度における原子位置の揺らぎが電子状態、特にハーフメタルの特性に与える影響を調べる。また、乱れた磁性体界面近傍 10～1000 層の第一原理電子状態計算を、規則度と組成をパラメータ空間にして網羅的に行い、界面生成エネルギーおよび界面磁性（交換結合定数、磁気異方性、軌道磁気モーメント）に関するデータ蓄積を行った。

（成果）

(1) 最近注目を集めている新規永久磁石材料 $SmFe_{12}$ 系合金の一つとして、$Sm(Fe_{1-x}Co_x)_{12}(N_{1-y}M_y)$（M はプニクトゲン、カルコゲン）を考え添加元素 Co および M が磁性と結晶安定性に与える影響を調べた。その結果から磁石特性の改良の可能性を探ったところ Co 添加は磁気特性を改善させることがわかった。また、M については結晶の安定性を高める組成を探索したが十分な組成空間が網羅されていないため、今の所結論は出せない。図 D-2 に例として $Sm(Fe_{1-x}Co_x)_{12}(N_{1-y}S_y)$の場合を示す。

(2) 電子フォノン散乱の効果を取り入れて、ハーフメタル・ホイスラー合金の有限温度におけるハーフメタル性の安定性について研究を行った。Co_2MnSi は特に良好なハーフメタル性を示すことが電子状態計算から予想されている。実験的には低温でハーフメタルであることが確認されているが、それをもいいたデバイス構造をつくると予想したような顕著なハーフメタル性から予想される MR 特性は得られない。いくつかの要因が挙げられているが、有限温度における電子フォノン散乱の影響は重要な要因の一つであること考えられる。そのような予想のもとに Co_2MnSi について、電子フォノン散乱の効果を取

り入れた電子状態計算と線形応答に基づく電子輸送特性の計算を行った。その結果、電子フォノン散乱の影響によって、室温程度でもハーフメタル性は失われることがわかった。しかし、もともとバンドギャップの開いていた少数スピンバンドにおいてはハーフメタル性が失われてフェルミ面が現れるが電子散乱は強く、室温程度ではもともと金属状態であった多数スピンバンドの電気伝導度より相当小さい伝導度しか示さずある程度の MR 特性は期待できることが結論された。図 D-3 に 0K および 300K における Co_2MnSi の状態密度曲線を示す。

また、蓄積されたデータにより、保磁力発現機構の微視的機構解明の基盤として、界面付近での構造の乱れと有限温度におけるフォノンが磁性に影響を与え、このことを考慮した電子状態計算が必要であることを明らかにした。

さらに、高精度計算手法と情報科学的手法との統合による新規磁性材料開発を三宅グループと協力して推進し、遷移金属副格子組成の調整が有限温度特性の改善につながることを指摘した。

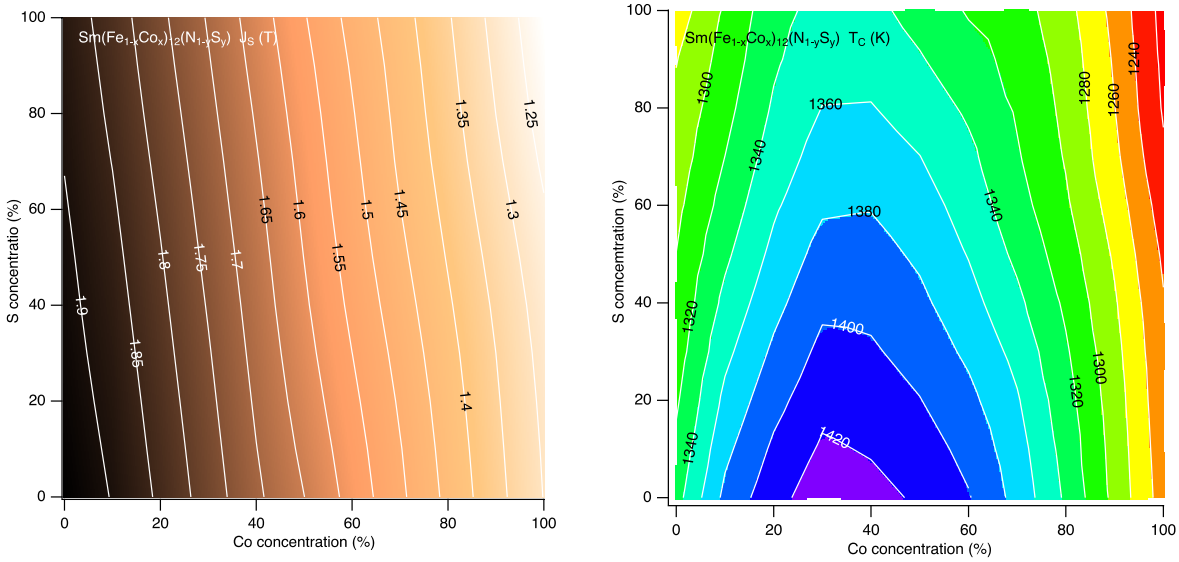


図 D-2: $Sm(Fe_{1-x}Co_x)_{12}(N_{1-y}S_y)$ の磁化 [T] （左）およびキュリー温度 [K]（右）。

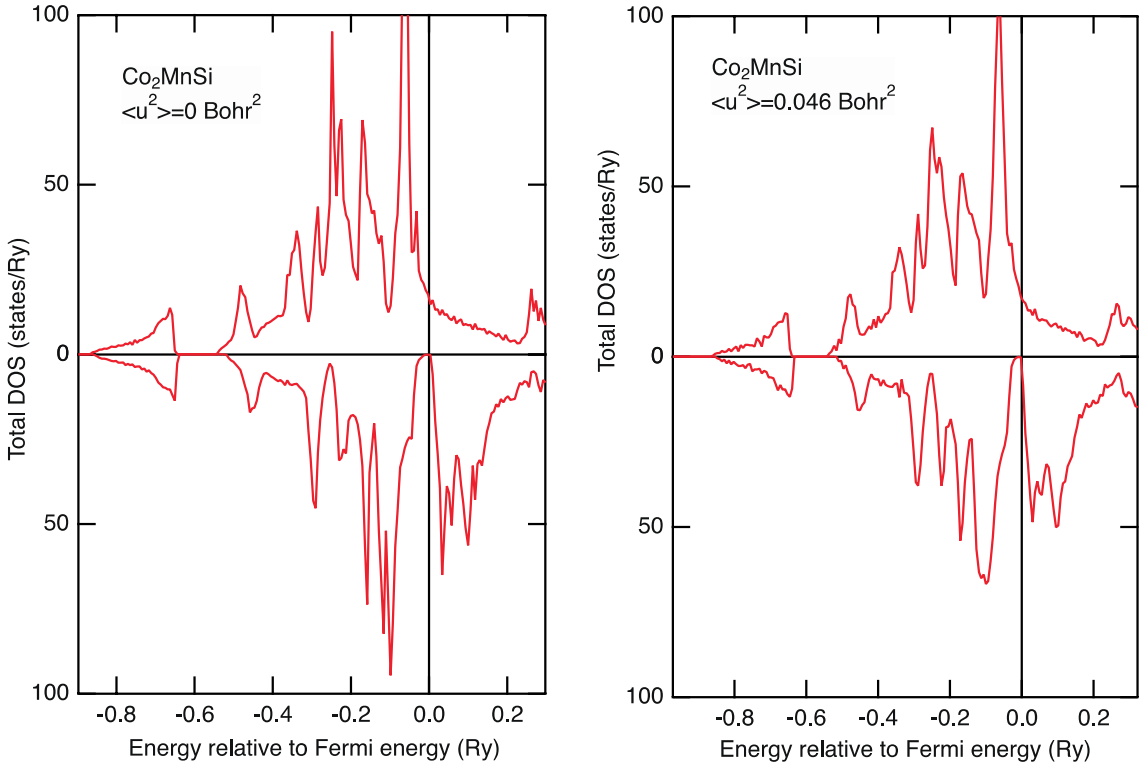


図 D-3: Co_2MnSi の 0K（左）および 300K（右）における状態密度曲線。

ⅱ）磁性材料の高性能化－大規模電子状態計算による探索

<u>再委託先：国立大学法人東京工業大学</u>

[研究実施体制]

責任者：　合田義弘

実施者：　寺澤麻子、塩沢知春、田中友規、ソ・インソン、濱崎恭考、馬場啓太

協力者：　高成柱、相内優太

[アプリケーションソフトウエア開発]

（実施・検討内容）

ネオジム磁石材料組織における副相の一つであるアモルファス 2 粒子粒界相における磁気結合 J_{ij} を見積もるための方法論開発を行い、リヒテンシュタイン法に基づく交換結合定数計算の、OpenMX への ポストプロセス実装を行った。また、主相・副相界面の大規模第一原理計算を、スーパーコンピューターを高効率に利用するために、並列計算に適した局在基底による OpenMX コードを用いた計算を試みた。

（成果）

リヒテンシュタインの式の局在基底表現およびフェルミ分布関数の有限極近似[T. Ozaki, Phys. Rev. B **75**, 035123 (2007)]を用いることで、大きな系に対しても小～中程度の計算コストによる J_{ij}計算が可能になった。また、局在基底による OpenMX コードを用いることで副相の磁性に応じて界面でも磁気結合の変化が得られることがわかった。また、その定量的評価のためには引き続き検討が必要であることがわかった。

[研究開発]

（実施・検討内容）

開発した J_{ij}計算プログラムを用いて、アモルファス Nd-Fe 系の交換結合定数、および平均場近似に基づくキュリー温度を計算した。この系の原子配置はスピン非依存の第一原理分子動力学計算に基づくメルトクエンチ法および構造最適化を用いて同定した。また、計算されたアモルファス Nd-Fe 系の J_{ij}と組成比、および局所構造との相関を調べるため、ガブリエルグラフによるアモルファス Nd-Fe 系のネットワーク構造解析[A. Terasawa and Y. Gohda, J. Chem. Phys. **149**, 154502 (2018)]を活用した。
主相・副相界面の大規模第一原理計算を、スーパーコンピューターを高効率に利用するために、並列計算に適した局在基底による OpenMX コードを用いて実施した。

（成果）

アモルファス Nd-Fe 系の交換結合定数の原子間距離依存性を計算した。その結果を Nd 組成比 41%の場合に対して図 D-4(a)-(c)に示す。この結果から、各原子種の組み合わせにおいて J_{ij}が原子間距離に応じて鋭く減衰していくことがわかった。また、同じ原子間距離でも、J_{ij}の値にばらつきが見られ、注目する 2 原子の原子種と距離だけにとどまらない、周辺環境による J_{ij}の変調が存在することもわかった。さらに Nd 組成比に対するキュリー温度の依存性を計算した。その結果を図 D-4(d)に示す。この結果から、キュリー温度が組成比に対して単調に変化しておらず、Nd 比 50%にて極大値を取るという知見が得られた。

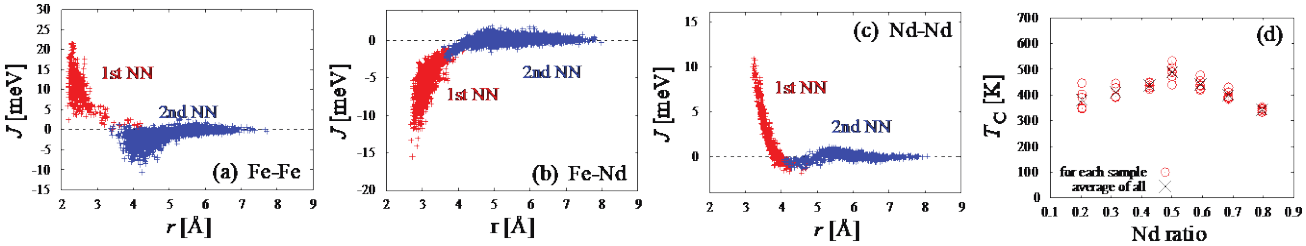


図 D-4: Nd 比 41%のアモルファス Nd-Fe 系の原子間距離と交換結合定数の関係について、(a) Fe-Fe 成分について、(b) Fe-Nd 成分について(c) Nd-Nd 成分についてプロットしたもの。図 (d)はこれらの計算結果より、平均場近似を用いて見積もったキュリー温度。

このような J_{ij}およびキュリー温度の Nd 組成比依存性について、ガブリエルグラフを用いたネットワーク解析を用いてその原因について考察した。図 D-5(a)-(b)に、ガブリエルグラフ上の最近接原子ペア

について平均した配位数および交換結合定数の Nd 組成比依存性を示す。この結果より、配位数、交換結合定数がともに Nd 比に対して大きく変化していることがわかった。また、配位数と交換結合定数の平均値を用いて概算したキュリー温度 $\tilde{T}_C$を図 D-5(c)に示す。図 D-4(d)と図 D-5(c)を比較すると、Nd 比 50%において極大を示すなどの挙動がよく似通っていることがわかる。従って、キュリー温度はガブリエルグラフ上の最近接ペアにおける平均的挙動によってほぼ支配されているということができ、キュリー温度の特異な振る舞いは、配位数および交換結合定数の組成比依存性が原因であると結論できる。

また、組成比依存性の起源を探るために、ネットワーク構造と交換結合定数の関係について考察した。図 D-5(d)に、原子間距離 2.30-2.40 Å について抜き出した、Fe-Fe 間の交換結合定数の Nd 配位数依存性を示す。この結果から、同じような原子間距離では、周囲に Nd 原子が多いほど Fe-Fe 間の交換結合定数は大きくなる傾向があることがわかった。さらに、この結果により、図 D-4(a)-(c)において見られていた同一距離での交換結合定数のばらつきの起源が Nd 配位数であることがわかった。

界面計算では、副相の磁性に応じて界面でも磁気結合の変化が得られたが、その定量的評価のためには引き続き検討が必要であることがわかった。

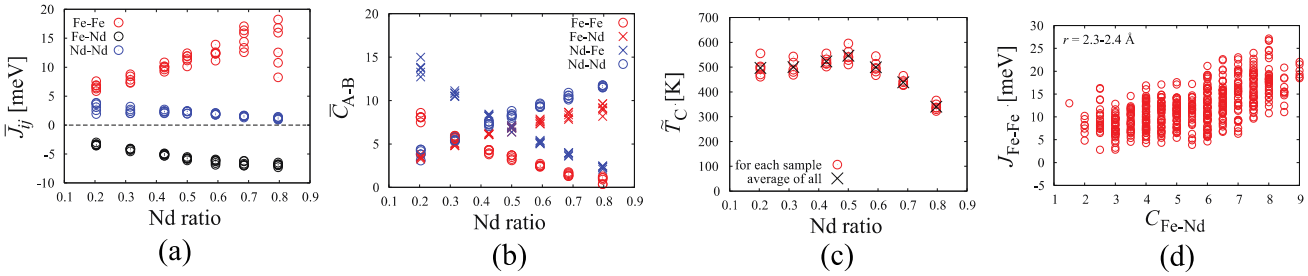


図 D-5: (a)-(b) ガブリエルグラフ上の最近接原子ペア(1NN)について平均した配位数および交換結合定数の Nd 組成比依存性。(c) 1NN における平均値を用いたキュリー温度の概算値の Nd 組成比依存性。(d) 原子間距離 2.30-2.40 Å について抜き出した、Fe-Fe 間の交換結合定数の Nd 配位数依存性。

⑤サブ課題Ｅ　高信頼性構造材料

サブ課題責任者：香山正憲（国立研究開発法人産業技術総合研究所）

サブ課題Ｅ総括

金属系構造材料の微細組織（粒界・析出物・転位・添加元素等）の構造・性質・機械的挙動を、原子・電子レベルからメゾ・マクロまで連携して高精度に再現・予測・設計する理論・手法の開発を目指している。平成 30 年度は「第一原理計算によるデータ構築とメゾ・マクロへの連結」では、鉄中の転位と複数種の溶質元素との相互作用の解明、鉄粒界での一連の 3d 遷移金属溶質の偏析機構の解明で大きな進捗があった。第一原理計算をメゾ・マクロに連結する方策として、第一原理局所エネルギー法と機械学習の組み合わせによる粒界エネルギーの高精度予測があり、乱れの大きな一般粒界をも扱える可能性が示された。また、合金系の局所自由エネルギーを組成に応じて第一原理から計算し、Phase Field 法に繋げることで、第一原理計算のみで合金組織を予測する計算技術が初めて確立できた。「大規模 Phase Field 法計算の実行」では、大規模分子動力学法計算と大規模 Phase Field 計算によるマルチスケール解析の連結において大きな進捗があった。鉄系材料の融体からの核生成、凝固、粒成長による多結晶組織形成の全過程を大規模分子動力学法計算で扱うことに成功し、大規模 Phase Field 計算に直接に連結して同一時空間での粒成長シミュレーションに初めて成功した。また、合金系融体の凝固シミュレーションから Phase Field 法のパラメータを抽出する試み、Lattice-Boltzmann 法を Phase Field 法に連成し、凝固組織形成に自然対流・流動の効果を取り入れること等で進捗があった。平成 30 年度はサブ課題Ｅの研究会を 1 回開催した（平成 30 年 7 月）。全体の進捗状況と本年度計画を確認した。グループ間の連携で、大規模第一原理計算や分子動力学法計算をメゾ・マクロに連結し、高精度の大規模 Phase Fiekd 法計算を実現する方策を議論した。また、年度後半に 9th International Conference on Multiscale Materials Modelling, MMM2018（2018.10.28-11.2、大阪国際会議場）において、当サブ課題とポスト「京」萌芽課題・基礎科学の挑戦Ａ「破壊とカタストロフィ」とで共同でシンポジウム（Symposium K）を組織し、参加メンバーらが研究成果を発表した。

ｉ）第一原理計算によるデータ構築とメゾ・マクロへの連結

再委託先：国立研究開発法人産業技術総合研究所

[研究実施体制]

責任者：　香山正憲

実施者：　田中真悟、石橋章司、徐卓

協力者：　譯田真人（物材機構）、尾方成信（大阪大学）、澤田英明（新日鉄住金）、
伊藤一真（新日鉄住金）、田村友幸（名古屋工業大学）

[アプリケーションソフトウエア開発]

（実施・検討内容）

平面波基底コード QMAS の局所エネルギー・局所応力計算機能について前年度に引き続き整備を進めるとともに、Gauge-independent なエネルギー密度の局所領域積分を可能にする Bader 解析のコードについて、粒界の局所エネルギー分割などに効率的に対応できるように調整を行った。また、機械学習との連携のため、原子配列の乱れの大きな粒界構造への QMAS による局所エネルギー・局所応力計算の適用可能性について検討した。

（成果）

QMAS による粒界構造の局所エネルギー・局所応力計算と Bader 解析による分析がより効率的に行えるようになった。大規模古典分子動力学法により与えられた原子配列乱れの大きな一般粒界について、その局所構造をレプリカとして抜き出し、擬周期構造にして QMAS を適用する計算手順を構築した。

[研究開発]

（実施・検討内容）

鉄系材料の微細組織の構成要素である転位、粒界の原子配列や各種の溶質元素（添加元素）との相互作用について、大規模第一原理計算による高精度の解明を進めるとともに、メゾ・マクロに繋げる技術の検討を進めた。鉄粒界について主要な遷移金属・典型元素の溶質原子との相互作用エネルギー（偏析エネルギー）、鉄中の転位については複数の溶質原子の存在する場合の相互作用エネルギーの各々の高精度データを蓄積した。第一に、Fe 中の転位と溶質の相互作用について、OpenMX による第一原理計算を進めてきたが、本年度は複数種の溶質元素による固溶強化機構を解明するため、転位芯に 2 種の添加元素（置換型や侵入型）が近接する系の大規模第一原理計算を総合的に行い、相互作用の起源を検討した。第二に、Fe 粒界と溶質元素の相互作用について、前年度に引き続き、典型的な対応粒界の原子体積の異なる 2 種のサイト(looser site, tighter site)への一連の 3d 遷移金属溶質（及び一部典型元素溶質）の偏析の計算を進め、QMAS による第一原理局所エネルギー・局所応力法による偏析エネルギー利得の物理的起源の分析、局所状態密度(LDOS)による電子挙動の分析を組み合わせ、偏析機構の解明を試みた。第三に、こうした第一原理計算をメゾ・マクロに有効に繋ぐ技術として、QMAS による第一原理局所エネルギー法と機械学習を組み合わせた粒界エネルギー予測を検討してきたが、従来扱われてきた規則的な粒界だけでなく、原子配列乱れの大きな一般粒界をも扱える方法論を検討した。

（成果）

蓄積されたデータからメゾ・マクロ手法を通じて材料特性を導出し、実験と比較することでそのデータが有用であることがわかった。具体的な例を下記に示す。

Fe 転位芯と置換型溶質、侵入型の炭素、水素の各種モデル構造のエネルギー、電荷密度分布、局所状態密度の詳細解析を行い、相互作用機構の知見を得た（図 E-1）。侵入型元素同士の場合、相互作用は電荷密度分布に基づき説明できるが、置換型と侵入型の場合、状態密度の詳細解析から局所的電子構造が重要であることが明らかになった。

Fe 粒界と 3d 遷移金属溶質の相互作用について、局所エネルギー分解（図 E-2）と LDOS 解析から以下の機構が判明した：Early TM (Sc, Ti, V)は looser site に偏析し、粒界の周囲の Fe 原子を d-d 混成に

より安定化させること（T3 項）が偏析の起源。Late TM (Co, Ni, Cu)は、バルク Fe 結晶中で溶質周囲の Fe 原子との d-d 混成が安定でなく、周囲の Fe 原子を不安定化させ（T4 項）、溶質原子自体は tighter site で安定化すること（T2 項）が偏析の起源。3d 周期の中央の Mn は偏析エネルギーが特異的に大きい（カスプになる）。その原因は、Fe 結晶中で Mn d 電子が周囲の Fe d 電子と混成するより高スピン状態で原子周囲に局在化した方が安定になり（Hund 則）、結晶中で周囲の Fe を不安定化する（T4 項）が、粒界では周囲の Fe d 電子と普通に混成するので偏析エネルギー利得が大きくなることである。一方、偏析エネルギーの計算値について、熱力学モデルを介して、遷移金属の偏析した Fe 粒界の粒界移動等の実験との比較を行い、実験サイドの研究者との議論も行いながら検討した結果、実験結果を良好に説明できることが判明した。また、典型元素溶質 Al、Si、P、S の偏析エネルギー計算と同様の機構解明も行い、特に S について Fe 結晶中での不安定性（T4 項）が効いており特異であることが見いだされた。つまり、鉄粒界と一連の遷移金属・典型元素の溶質との相互作用（粒界偏析）の全体像ついて、第一原理局所エネルギー法・局所応力法の適用による機構解明を行った結果、周期表の位置により機構や大きさが予想できること、Mn や S 等、効果が他と異なる特異な元素種も存在することが見出された。

こうした第一原理計算をメゾ・マクロに有効に繋ぐ技術として、第一原理局所エネルギー法と機械学習を組み合わせた粒界エネルギー予測技術について、乱れの大きな一般粒界をも扱う方法として、大規模分子動力学法による乱れた構造の粒界の各局所構造を抜き出して擬周期構造（レプリカセル）にして QMAS の第一原理局所エネルギー法を適用することで、原子の周囲環境と局所エネルギーを機械学習で結びつけることが可能であることが示された。これにより、サブ課題内の大規模古典分子動力学法・Phase Field 法による多結晶体や粒成長の計算の取り組みと連携し、高精度化に寄与できる展望が開け、マルチスケール計算技術の確立に向けて前進した。

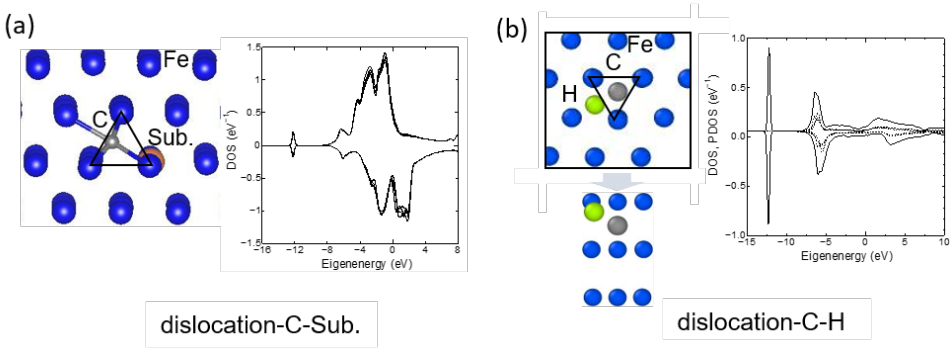


図 E-1: (a) bcc Fe 中の転位-炭素-置換型元素(Sub)の相互作用解析用原子構造と、炭素と置換型元素の影響下での鉄原子の局所状態密度。(b) 転位-炭素-水素の相互作用解析用原子構造と、転位と水素の影響下での炭素原子の局所状態密度。

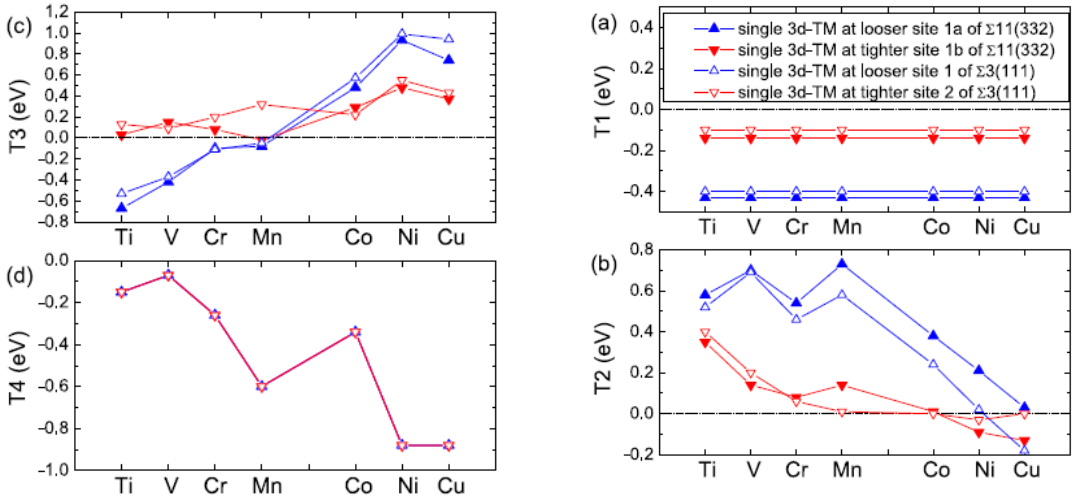


図 E-2: bcc Fe 中の 2 種の対応粒界への 3d 遷移金属原子の偏析エネルギーの局所エネルギー分解。偏析エネルギーを T1~T4 の四項に分解、各成分から偏析利得の起源を解明。各粒界ごと、体積の大きなサイト（looser site、青色）と小さなサイト（tighter site、赤色）への偏析を扱っている。

<u>再委託先：国立大学法人横浜国立大学</u>

[研究実施体制]

責任者：　大野かおる

実施者：　Swastibrata Bhattacharyya（11 月迄）、Pham Thi Nu（1 月～）

協力者：　佐原 亮二（物質・材料研究機構）

[アプリケーションソフトウエア開発]

（実施・検討内容）

原子空孔および侵入型原子を含むクラスター展開法と格子定数よりも短い原子変位の自由度を繰り込むポテンシャル繰り込み理論を併用し、第一原理計算から局所自由エネルギーを計算する全工程を計算機に自動投入するプロトコルを作成する。

（成果）

FCC の場合に、原子空孔および侵入型原子を含むクラスター展開法と格子定数よりも短い原子変位の自由度を繰り込むポテンシャル繰り込み理論を併用し、第一原理計算から局所自由エネルギーを計算する全工程を計算機に自動投入するプロトコルの作成に成功した。今後、BCC, HCP の場合にも自動計算できるように順次整備していく予定である。

[研究開発]

（実施・検討内容）

異なる組成に対しては異なる結晶構造に対するクラスター展開を用い、格子定数よりも短い原子変位の自由度を繰り込むポテンシャル繰り込み理論を併用し、第一原理計算から局所組成の関数として局所

自由エネルギーを計算する方法論を構築する。この方法を Phase Field 法に適用することにより。パラメータを一切含まない第一原理 Phase Field 法を完成させる。

（成果）

Ni_nAl_m 合金の通常のクラスター展開の四面体近似では原子空孔や侵入型原子を含まず $m + n = 4$ を仮定するが、$m + n < 4$ の原子空孔を含む場合や、$m + n > 4$ の侵入型原子を含む場合にも系統的に拡張した。さらに、$m = n = 2$ に対しては正しく BCC 構造を用いるように改良し、それ以外の $m + n = 4$ の組成では FCC 構造を用い、ポテンシャル繰り込みを行うことで、図 E-3 の局所自由エネルギー・マップを第一原理計算により求めた。得られた自由エネルギーを Phase Field 法に適用し、パラメータを一切含まない第一原理 Phase Field シミュレーションに成功した。得られた微細構造（図 E-4）は相図の各領域で実験的に観測されているパターンをとても良く再現しており、これらの研究成果をまとめて論文投稿した。

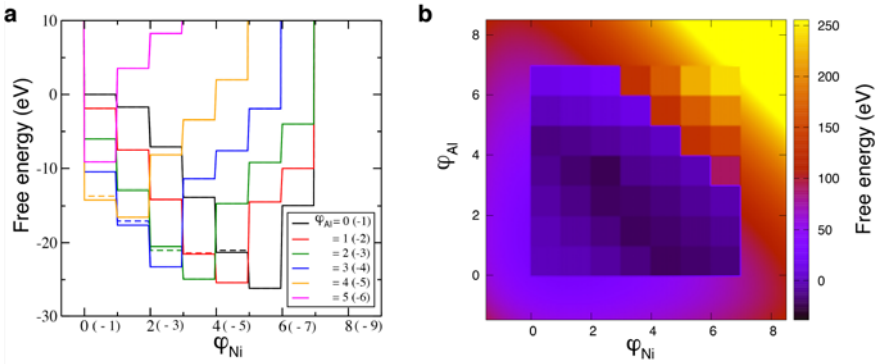


図 E-3: クラスター変分法とポテンシャル繰り込み理論を併用して第一原理計算によって得られた NiAl 合金の局所自由エネルギー。

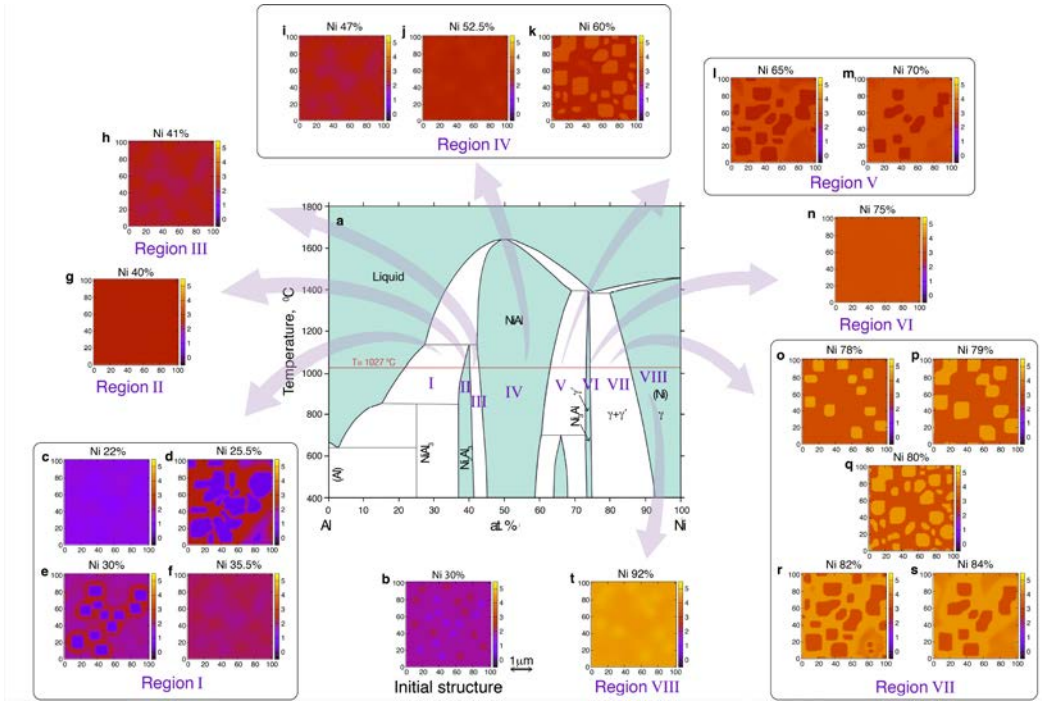


図 E-4: NiAl 合金の局所自由エネルギー（図 E-3）を用いて実行した第一原理 Phase Field シミュレーションの結果。Ni_2Al_2 組成は BCC 構造であることを新しく考慮した。

ⅱ）大規模 Phase Field 法計算の実行

再委託先：国立大学法人東北大学金属材料研究所

[研究実施体制]

責任者：　毛利哲夫

実施者：　Sankar Kumar Deb Nath（12 月迄）、Chunwen Guo（1 月～）、市坪哲

協力者：　大野宗一（北海道大学）、高木知弘（京都工芸繊維大学）

[アプリケーションソフトウエア開発]

（実施・検討内容）

大規模 MD シミュレーションと大規模 Phase Field シミュレーションを連結するために、MD シミュレーションからパラメータの導出が必要である。これを行うために LAMMPS を用いた分子動力学シミュレーションやモンテカルロ/分子動力学ハイブリッドシミュレーションを行い、界面移動速度等のパラメータ導出のためのプログラムの開発を行った。また、ポスト京コンピュータのアーキテクチャを検討し、現行のプログラムの最適化を図るための作業を具体化した。

（成果）

LAMMPS を用いた分子動力学シミュレーションやモンテカルロ/分子動力学ハイブリッドシミュレーションの後処理のためのプログラム開発はほぼ完成したが、固相内における融解を効果的に処理するアルゴリズムは未開発である。2019 年 1 月より新しいポスドクを雇用し、大規模 Phase Field 計算を目的としたプログラム開発・チューニングの具体化に取り組み、予備計算を行った。

[研究開発]

（実施・検討内容）

高信頼性構造材料の実現のためには素材の製造時の凝固過程の制御が必須である。大規模 Phase Field 法の計算グループでは、ミクロスケールにおいて大規模 MD シミュレーションを実行する東大・渋田グループ、Phase Field モデリングを担当する北大・大野グループ、大規模 Phase Field シミュレーションを遂行する京都工繊大・高木グループ、そしてこれらを統括する東北大金研グループから構成されている。平成 30 年度から東大・渋田グループは構成上、金研グループとは独立したが、研究においてはこれら 4 者が密に連携を取りあって遂行してきた。特に金研グループでは、大規模分子動力学法計算と大規模 Phase Field 計算によるマルチスケール解析の連結を行うことを目指し、分子動力学計算から固液界面移動度と界面エネルギーの導出を試みた。加えて、Al-Cu 合金を対象にして、MD+MC ハイブリッド計算により、2 元状態図（固液相境界線）を導出し、固液界面における溶質原子の分配に対して検討を行い、分子動力学法/モンテカルロ法ハイブリット計算による 2 元系状態図の導出を目指した。また、これまでの大規模 Phase Field 計算のコードをポスト「京」用にチューニングする作業に着手した。

（成果）

Al-Cu 合金を対象にして、濃度を変えながら、液相、固相の安定な温度域において MD+MC ハイブリッド計算を実行した。図 E-5 に示すのは Cu-24.2%Al 合金のスナップショットの一例であり、灰色部分が液相、緑の領域が固相に相当する。初期状態は、300K に保持して固相状態とし、その後で、中央の 50%の原子を 2000K に昇温して液相状態とした(NVT)。そして、固液共存状態の全領域を融点の上下の温度に昇温、降温して、各温度での固液界面の変位から界面移動速度や kinetic coefficient を求めた(NPT)。計算結果は平均濃度や温度に依存するが、界面の移動が Cu と Al が固液界面を介して液相・固相に拡散することで生じていること、<100>と<110>の二つの結晶方位では界面移動速度に差があることなどを見出した。これは<110>が最密方位であり、原子の拡散速度に差があることに起因していると考えられる。また、Common Neighbor Analysis から icosahedral 相の存在についても検討を加えた。さらに、界面の移動速度を温度の一次関数にフィッティングし、固相領域、および液相領域の傾きを求めると凝固および融解の kinetic coefficient を求めることができるが、kinetic coefficient の濃度依存性にも二つの方位で有意な差がみられた。これらのシミュレーションの結果から、2 元系状態図導出の基盤となる、Al-Cu 合金の固液相境界線を算出した。

1 月に着任した新しいポスドクは、アーキテクチャや必要となるプログラミング技術に関する予備的な知識の習得に務め、加えて、3 次元のデンドライトの競合成長過程における non-uniplanr 成長や突発的な側枝の成長モード(side-branching)に関しての検討を始めるに至った。

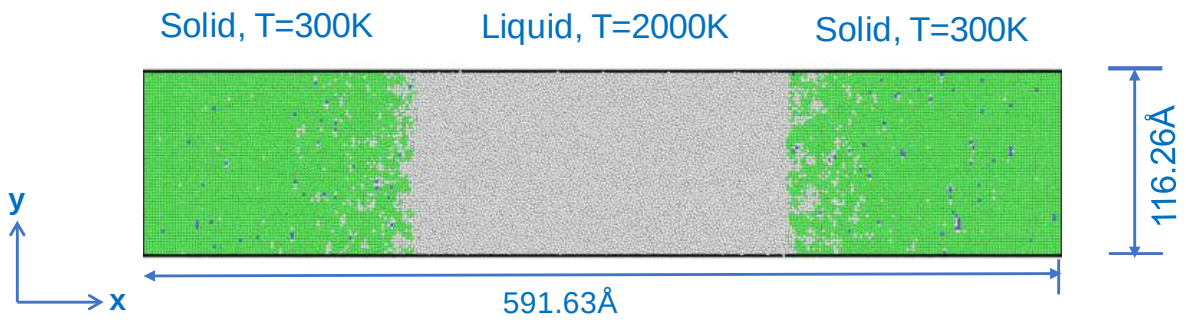


図 E-5: Cu-24.2%Al 合金の固液界面の MD+MC ハイブリッド計算のスナップショット

<u>受託者：国立大学法人東京大学大学院工学系研究科</u>

[研究実施体制]

責任者：　澁田靖

協力者：　大野宗一（北海道大学）、高木知弘（京都工芸繊維大学）

[アプリケーションソフトウエア開発]

（実施・検討内容）

大規模分子動力学法計算と大規模 Phase Field 計算によるマルチスケール解析の連結を行うことを目指し、分子動力学法シミュレーションで得られた原子座標に対して Common Neighbor Analysys(CNA)およびクラスター解析を行うことで結晶粒構造を同定し、さらに結晶粒情報を連続体格子にマッピングするプログラムを作成した。

（成果）

100 億原子からなる結晶粒構造を連続体格子にマッピングし、マイクロメートルスケールでの分子動力学法と Phase Field 法計算との完全同一時空間スケール粒成長計算を世界に先駆け実践した。なお、東北大学金属材料研究所と協力し、現行のプログラムのポスト「京」コンピュータへの最適化を図るための予備計算として、これまで単一および複数 GPU を用いて実行してきた大規模 Phase Field シミュレーションを「京」コンピュータ上で実行できるようプログラムを改良した。

[研究開発]

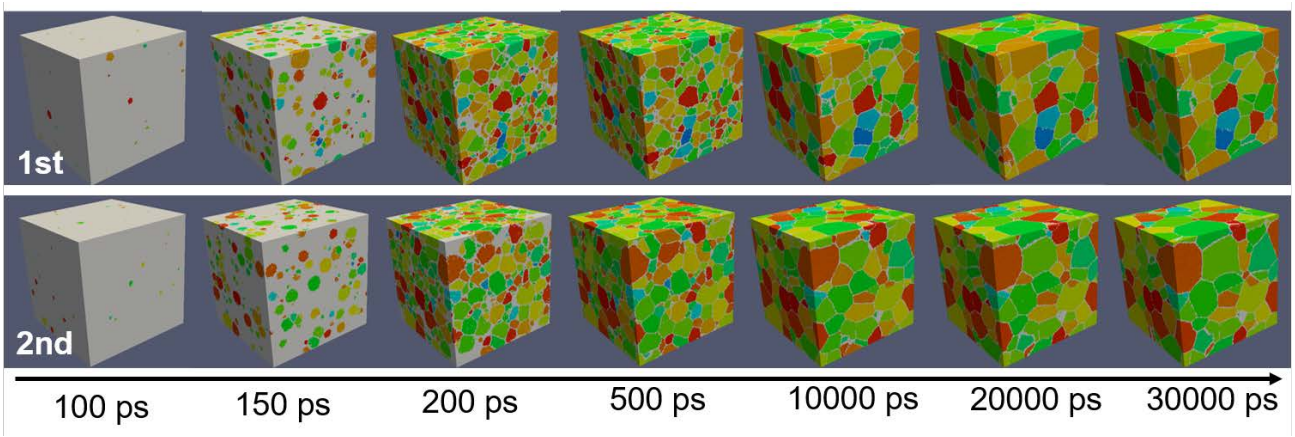
（実施・検討内容）

Phase Field 法の実践には界面物性パラメータが不可欠であるが、異方性も含めた精度の良いパラメータはまだ確立していない。また粒成長計算に用いられる Multi Phase Field 法では、異方性の強い界面物性値を入れると数値不安定が生じるなどの問題も多い。そこで界面物性パラメータフリーな大規模分子動力学法を長時間実践することで、パラメータ精度に依存しない粒成長解析を行った。また、上記で開発したソフトウエアを用い、分子動力学シミュレーションで得られた擬 2 次元凝固組織に関して粒成長過程の Multi Phase Field シミュレーションを実践した。また、デンドライトの発生から競合成長までの組織形成および後続の結晶粒成長までの Phase Field 計算を重力の影響を含めて行った。大規模 Phase Field 法の計算グループを統括する東北大学・毛利グループと密に連携を取り、成果の位置づけについて逐次議論した。

（成果）

図 E-6 は、約 1 億原子からなる鉄過冷融液からの核生成・凝固・粒成長過程の大規模分子動力学シミュレーション結果である。均質核生成により多数の微細粒からなる凝固組織が形成され、その後の長時間熱緩和により結晶粒淘汰が起きる過程を解析することができた[1]。粒成長指数に影響を与える指数を特定するため、幾何学因子および有効界面モビリティ(粒界エネルギーとモビリティの積)の時間発展を原子情報から直接抽出することに成功した(図 E-7)。幾何学因子が時間非依存なのに対し、有効界面モビリティは粒成長が進むにつれ大きく減少することを明らかにした[1]。また分子動力学法シミュレーションにより得られた擬 2 次元凝固組織に関して粒成長過程の Multi Phase Field シミュレーションを重力の影響を含めて実践した。初期構造の平均粒サイズはシミュレーションセルよりも小さいため、粒成長初期過程は 3 次元粒成長が起こり、平均粒サイズがセルサイズを超えるあたりから、粒成長モードが 3 次元から 2 次元へと変化した。粒サイズの時間変化より粒成長モードの次元変化について議論し、粒サイズ時間変化の傾きの定量解析より、変遷過程の知見が得られた（図 E-7)。またデンドライトの発生から競合成長までの組織形成に関して、Phase Field 法と Lattice-Boltzmann 法を連成させ、また、重

力 g を 0 や-g に変化させて計算することで、凝固過程において自然対流・流動が凝固組織形成に与える影響についての知見が得られた。これらの結果をまとめ論文投稿した。



図E-6: 大規模分子動力学シミュレーションによる鉄過冷融液からの核生成・凝固・粒成長過程解析[1]

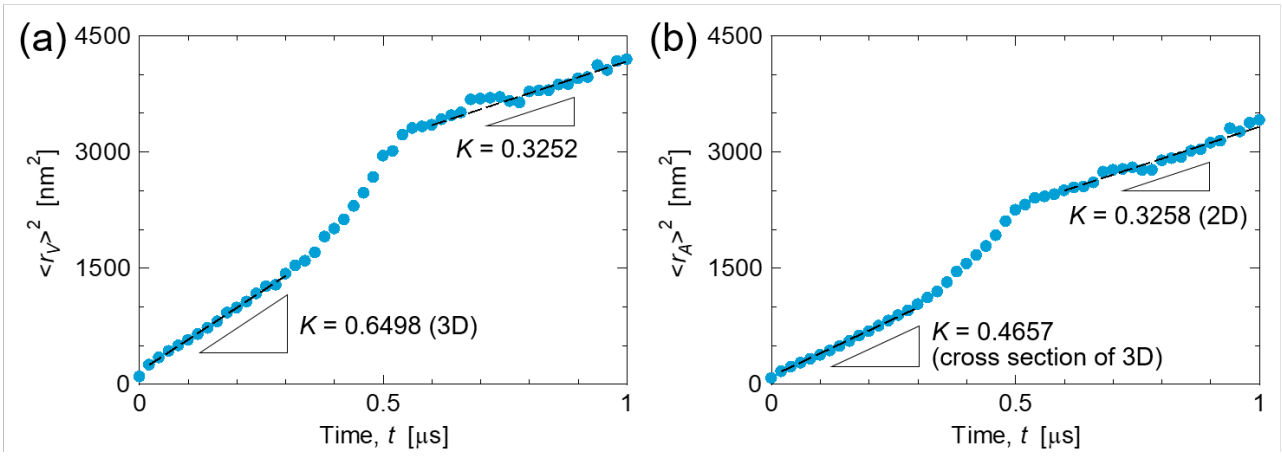


図 E-7: 擬二次元セルを用いた粒成長 Multi Phase Field シミュレーションにおける平均粒半径の時間変化[2]。(a) 体積等価半径基準、(b) 面積等価半径基準

[1] S. Okita, *et al.*, Acta Mater. 153 (2018) 108.
[2] Y. Shibuta *et al.* Model. Simul. Mater. Sci. Eng., Submitted.

⑥サブ課題Ｆ　次世代機能性化学品

サブ課題責任者：松林伸幸（国立大学法人大阪大学大学院基礎工学研究科）

サブ課題Ｆ総括

本サブ課題の目的は、ポリマー材料および有機／無機界面を研究対象として、それらの物質分離機能や強度・輸送特性を原子レベルの分解能で解析することである。ポリマー系の研究では、全原子モデルを用いた大規模MD計算とエネルギー表示溶液理論に基づく自由エネルギー解析を行っており、小分子吸収を規定するポリマー内構造単位を探るためのセグメント化法やポリマーの相溶性判定を行うための逐次導入法を自由エネルギー計算ソフトERmodに実装し高度化を行っている。有機／無機界面の研究では、ハイブリッド量子古典コード(hybridQMCL)をより複雑な計算モデルも扱えるように改良し、接着強度に関して実験結果と直接比較可能な精度のシミュレーションが可能となっている。複雑な固体表面形状に沿った仮想外場の導入・削除過程での熱力学積分により固体表面の液体付着自由エネルギーを高精度に計算する計算モジュール(FE-CLIP)については、ユーザーによる試行錯誤が必要であった仮想外場形状を特徴付ける内部パラメータを、on-the-flyで自動調整する手法を新たに導入しその利便性を高めた。研究テーマを展開しソフトを開発するに当たっては、頻繁なメール会議や週に1回程度のface-to-faceの会合によって企業研究者との緊密な連携を図っており、企業研究者との共著論文も出版された。また、平成31年3月28日には、ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」サブ課題Ａ「破壊とカタストロフィ」およびサブ課題Ｂ「相転移と流動」との共催で、「原子・分子レベルから連続体レベルに至るマルチスケールの理論構築と実際運用」研究会を開催した。電子スケールから分子集合体スケール、さらに、流体力学スケールにおける理論や計算手法の構築とそれらの実際問題への運用について研究発表と突っ込んだ議論を行った。

ｉ）ポリマーの物質分離機能の解析

再委託先：国立大学法人大阪大学大学院基礎工学研究科

[研究実施体制]

責任者：　松林伸幸

実施者：　山田一雄

協力者：　茂本勇、川上智教、北畑雅弘、山本海（以上、東レ）、森穂高（デンソー）、山本育男（ダイキン工業）、石山達也（富山大学）、藤本和士（名古屋大学）、長谷川健（京都大学）

[アプリケーションソフトウエア開発]

（実施・検討内容）

エネルギー表示溶液理論に基づく自由エネルギー計算ソフト ERmod に実装されたセグメント化手法を高度化した。本課題では、全原子ポテンシャルを用いた MD シミュレーションを行い、小分子の吸収自由エネルギーを ERmod によって計算している。エネルギー表示溶液理論では、小分子吸収を規定するポリマー内構造単位を決定し、また、自由エネルギー計算の効率を上げるために、いくつかのモノマ

ーからなるセグメントを一つの粒子としてみなし、その相互作用エネルギーの分布関数から吸収自由エネルギーの汎関数を構成することが可能である。セグメント化の技法を共重合体に展開し、ポリエチレンとポリアクリルアミドのブロック共重合体およびグラフト共重合体の吸水自由エネルギーを全原子モデルで計算した。さらに、ポリマーの相溶性判定を行うために、ポリマー丸ごとの自由エネルギーを算出する逐次導入法を ERmod に実装した。モノマー一つを伸長するのに伴う自由エネルギー変化を、モノマーの相互作用エネルギーの分布関数から計算する手法であり、ポリマー鎖がモノマーの繰り返し構造であることを使うと、相溶性を規定する自由エネルギーの主要項が算出できる。ポリエチレンやポリメチルメタクリレートなどの自由エネルギー計算を全原子モデルで行った。

（成果）

異なる相互作用を行うモノマー単位を同一分子内に配置することのできる共重合体を対象として、ERmod による吸水自由エネルギーの全原子計算を行った。ポリエチレンとポリアクリルアミドからなるブロック共重合体とグラフト共重合体に対する水分子の吸収自由エネルギーを計算し、セグメント化によって自由エネルギーを規定する構造単位を解析した。また、ポリマー全体の化学ポテンシャルを全原子モデルで求めるために、モノマー一つの伸長をモノマーの「溶解」とみなし、伸長に伴う自由エネルギー変化をモノマーの溶解としてエネルギー表示溶液理論の枠内で計算する逐次導入法を開発した。この手法をポリエチレンやポリメチルメタクリレートなどに適用し、数十モノマーからなるポリマー分子を取り扱えば、末端効果を除去し、相溶性を規定する自由エネルギーの主要項が算出できることを見出した。

[研究開発]

（実施・検討内容）

分岐を持つポリマーや共重合系であるポリエチレンおよびポリアクリルアミドのブロック共重合体とグラフト共重合体を対象とし、そこへの水の吸収自由エネルギーを、重合組成と重合構造を幅広く変えて全原子 MD シミュレーションとエネルギー表示溶液理論の融合手法で計算した。さらに、モノマー一つの伸長に伴う自由エネルギー変化を求める逐次導入法（図 F-1）をポリエチレンやポリメチルメタクリレートに適用し、ポリマー全体の過剰化学ポテンシャルの重合度に対する依存性を検討した。

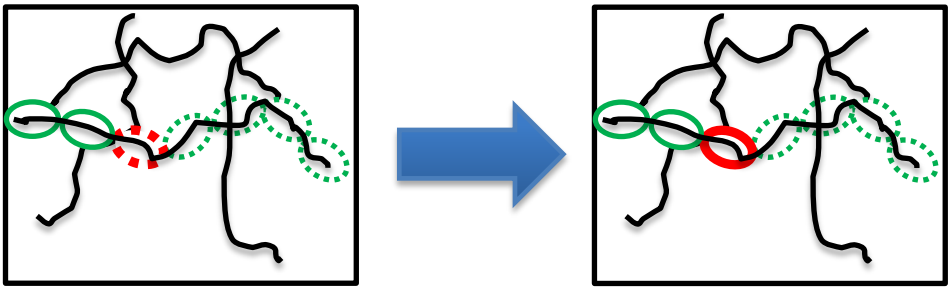


図 F-1: 逐次導入法によるポリマー分子丸ごとの全原子自由エネルギー計算。楕円は着目したポリマーをモノマー単位に分けて示している。もともと存在していた伸長前のモノマーが点線で、伸長したモノ

マーが実線。着目した赤のモノマーがもともと存在していた場合（左）と、新たに伸長した場合（右）の自由エネルギーの変化を計算することが可能。すべてのモノマーは類似した状態で存在するため、少数のモノマーの計算で全原子自由エネルギーを見積もることが可能。そこからポリマーの相溶性を調べることができる。

（成果）

疎水的なポリエチレンと親水的なポリアクリルアミドの共重合体では、後者の組成が高いほど吸水自由エネルギーがより負となることが見出された。重合組成を固定すると、自由エネルギーは疎水部と親水部の並べ方に強く依存せず、また、共重合体がブロックかグラフトであるかにも依存しなかった。つまり、吸水性は、重合組成によってほぼ決定され、力学特性など重合のトポロジーに関わる問題との切り分けが可能であることが示された。さらに、十分に長いポリマー分子全体の過剰化学ポテンシャルの主要項を全原子モデルで計算する逐次導入法によって、ポリエチレンやポリメチルメタクリレートの導入に伴う自由エネルギー変化を算出した。逐次導入法では、伸長によって追加されるモノマーを溶質、他の分子を溶媒とみなすことで、エネルギー表示溶液理論によってモノマー伸長の自由エネルギー変化を求める。図 F-2 に、メルト系におけるポリエチレンおよびポリメチルメタクリレートの分子丸ごとの導入の自由エネルギー変化を重合度の関数として示す。MD シミュレーションが可能な数十程度のモノマーの重合度で、自由エネルギーが重合度に対して線形に変化することがわかった。つまり、モノマーがひとつ増えた際に変化する伸長自由エネルギーは、そのモノマーの集合からなるポリマー全体のサイズには依存しないことを見出した。また、ベンチマークとして、伸長モノマーを Widom の粒子挿入法で厳密に取り扱うことのできるヘキサン中でのポリエチレンの計算を行った。その結果、近似理論であるエネルギー表示溶液理論が 0.1 kcal/mol 程度の精度を持つことがわかり、逐次導入法に基づく近似計算の有効性が示された。また、分岐を持つポリマーに対しても共重合系のポリマーと同様の有効性を確かめている。

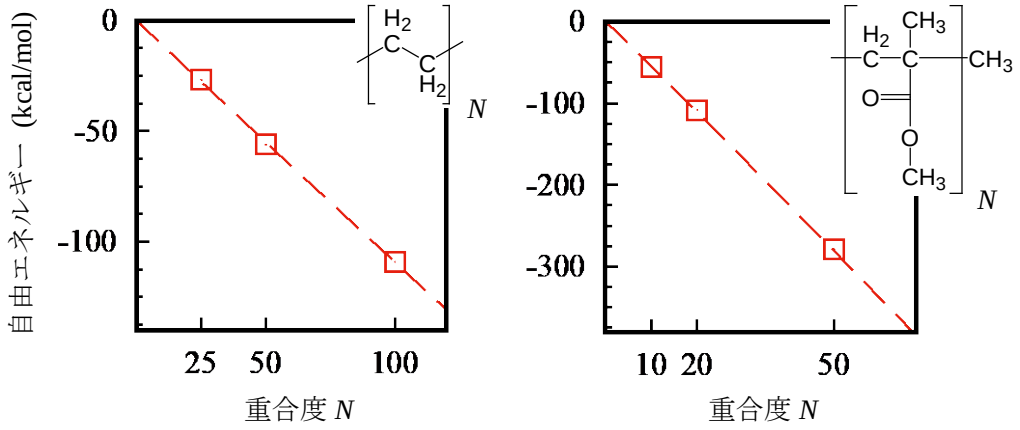


図 F-2: ポリエチレン分子（左）およびポリメチルメタクリレート（右）の導入に伴う自由エネルギー変化。逐次導入法で計算した値を重合度に対してプロット。

ⅱ）有機／無機界面の物性に関する計算

再委託先：国立大学法人名古屋工業大学

[研究実施体制]

責任者：　尾形修司

実施者：　浦長瀬正幸

協力者：　岸智弥（神戸製鉄所)、田中宏一（デンソー）

[アプリケーションソフトウエア開発]

（実施・検討内容）

以下 2 種のソフトウエアについて開発を進めた。

(1) 有機／無機界面のシミュレーションにおいて、これまでの計算モデルでは実験での接着強度等を再現できていなかった。そこで我々は 2 年程かけてハイブリッド量子古典コード(hybridQMCL)において、種々の官能基を含む比較的長い有機高分子を扱うモデル、有機分子群の配置・配向が実際的となる広い界面モデル、有機／無機接触部において特に高分子を内部ブロック単位で量子領域に設定することで化学反応を DFT で直接扱える規模に抑えること、さらに量子領域を担当するオーダーN 型実空間 DFT エンジンのメニーコア環境での高速化を進めてきた。平成 30 年度は、上記改良の成果を確かめるために、エポキシ樹脂と表面酸化金属との接着界面の改良した計算モデル（量子領域は 1500 原子規模）に対して大規模なハイブリッド量子古典シミュレーションを行い、その接着強度と水分による弱化が、実験結果と定量的に比較可能な、実用に耐える精度で初めて計算可能となることを実証した（図 F-3 参照)。

(2) 固体表面の濡れ性等に直接関係する有機／無機界面での液体付着（接着）自由エネルギーを原子論的シミュレーションで得ることは、特に有機系高分子（例えば、self-assembled monolayer）で複雑に装飾された無機固体表面の場合に容易ではなかった。平成 29 年度には、その複雑な固体表面形状に沿った仮想外場の導入・削除過程での熱力学積分を実現する計算モジュール(FE-CLIP)を提案した。平成 30 年度は、FE-CLIP の利用に際して、ユーザーによる試行錯誤が必要であった仮想外場形状を特徴付ける内部パラメータ値を、on-the-fly で自動調整する手法を新たに考案し、その利便性を高めた（図 F-4 参照)。

（成果）

(1) hybridQMCL を超並列計算環境で用いて、様々な計算モデル（エポキシ分子長、種々の官能基の有無、界面の広さ等）での表面酸化 Al 金属との有機／無機界面の接着強度とその水分含有による弱化のシミュレーションを実行し，結果を比較検討できるようになった。また実験では直接観測しにくい接触部での化学反応過程をシミュレーションで発見できるようになった。

(2) 新たに考案した内部パラメータ値を自動調整する手法を用い、実際的な有機分子装飾金属表面の液体付着エネルギーに適用し、その実用性を明らかにした。具体的には、複雑固体表面の液体付着自由エネルギーを、装飾高分子の動的形状に合わせた仮想外場を MD シミュレーションの進行に応じて導入・削除する際の熱力学積分により得る方法において、仮想外場の内部パラメータを on-the-fly に自動

調整するように改良した FE-CLIP を、実際に poly (ethylene oxide)で有修飾された Au と水との界面に適用し、その安定的な利用を実証した。

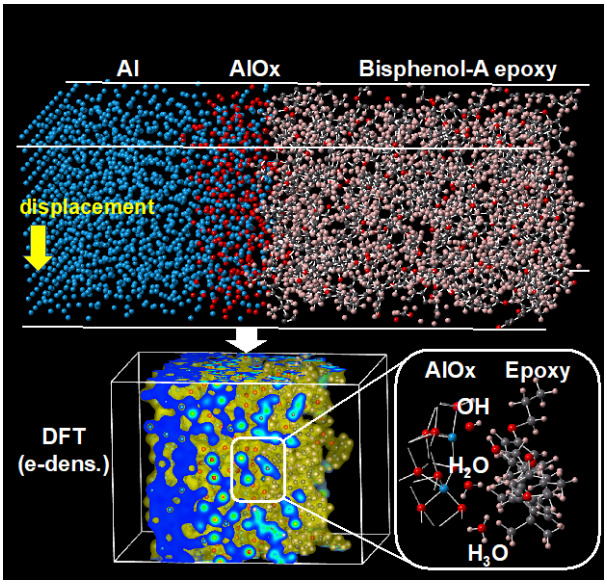


図 F-3：アモルファスな表面酸化 Al 金属とエポキシ樹脂との接着強度とその弱化に関するハイブリッド量子古典シミュレーション

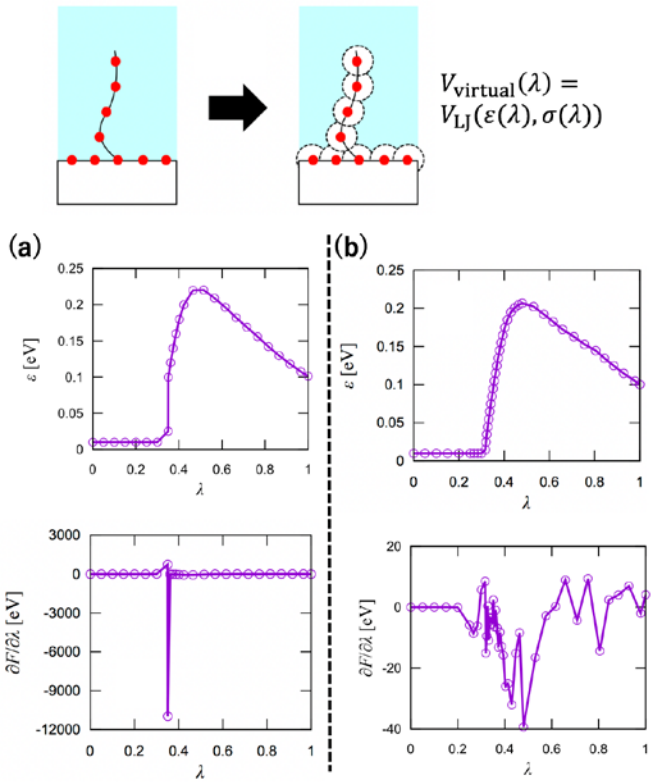


図 F-4: 有機高分子で修飾された金属表面の液体付着自由エネルギーを計算するための、改良された FE-CLIP での内部パラメータ(λ)の自動調整。調整されていない(a)では熱力学積分カーネル値が大きく変化する。自動調整されている(b)では変化が小さく安定的に運用できる。

[研究開発]

（実施・検討内容）

(1) アモルファスな自然酸化皮膜を持つ Al 金属とエポキシ樹脂との界面を対象に、その接着強度の含有水分依存性を調べるハイブリッド量子古典シミュレーションを、様々な計算モデルを設定して大規模に行った。エポキシ樹脂の分子サイズ、様々な官能基（エーテル基，エポキシ基，ヒドロキシ基）の存在により、接着強度の計算値がどの程度変化するかを調べた。計算モデルを実験状況に近づけるためのキーポイントを明らかにした。シミュレーションを通じて得た原子ダイナミックスから、接着強度弱化に影響する化学反応過程を調べた。

(2) 有機／無機界面の接着に関連して、複雑に装飾された固体表面の液体付着自由エネルギーを MD シミュレーションにおいて利用者によるパラメータ調整の必要無く計算できるように改良した計算モジュール FE-CLIP を、poly (ethylene oxide)から成る SAM で装飾された Au と水との界面モデル系に適用し、その SAM 被覆率依存性を再現できることを確認した。

（成果）

(1) アモルファスな自然酸化皮膜を持つ Al 金属とエポキシ樹脂との界面の接着強度に関して、様々な計算モデルに対してハイブリッド量子古典シミュレーションを行った。様々な計算モデルでのシミュレーション結果と実験結果を比較検討することで、より大規模で複雑な設定（長い分子長、ヒドロキシル

基の存在、広い界面、アモルファス酸化膜）の計算モデルの場合に、実験と似た結果になることがわかった。またシミュレーションでの原子ダイナミックスから、含有水分により接着強度が低下するメカニズムに関係する、接触部での表面 Al 原子-水分子群-エポキシ分子の三者が相互反応する、実験からは解析困難なミクロな過程を発見した。また、実験ではアミン系などの硬化剤がエポキシ樹脂に含まれていることが良くあり、そのアミン基の近傍に水分子が集まりやすくなる可能性があることからアミン基を導入した計算モデルの考案に成功した。

(2) 改良した計算モジュール FE-CLIP を実際に MD コードに導入し、poly (ethylene oxide) (PEO)で装飾された Au 表面と水との界面系に適用した結果、改良前の計算法を用いた場合に示されていた、Au 表面での PEO 密度に依存して付着自由エネルギーは変化し中間的な PEO 密度で最大となることが再現できた。中間的な PEO 密度の場合に液体分子は最も良く PEO 分子群に纏わりつくことから物理的に妥当な結果であり、改良した計算モジュール FE-CLIP の安定的な利用性能を示している。

⑦サブ課題G 共通基盤シミュレーション手法

サブ課題責任者：尾崎泰助（国立大学法人東京大学物性研究所）

サブ課題G総括

マテリアルシミュレーションにおいて共通してニーズの高い基盤的手法がある。本サブ課題ではサブ課題A-Fと連携しながら、これらの共通する部分を見極め、基盤的シミュレーション手法・アプリケーションの確立を目指し、開発を進めている。特にマテリアルシミュレーションの出発点となる(i)「基盤的第一原理電子状態計算ソフトウエアの開発・整備」が研究の中核をなす。またマテリアルデザインの出発となる(ii)「 物質構造と相変化の探索手法の開発」は共通性が高く、基盤的手法として開発を進めている。またシミュレーション手法の高速化・高精度化と基礎となる(iii)「基盤的超並列計算アルゴルリズムの開発」をアルゴリズムの専門家と協力しながら進めている。(i)に関しては昨年度に開発した光電子分光スペクトル計算手法の適用範囲を拡げるため、擬ポテンシャルの整備を進めた。また実証計算を実験グループと共同で進め、グラフェン上の単分散Pt原子構造を特定することに成功した。(ii)に関しては第一原理計算とCALPHAD法の連結による相図計算ソフトウエアの開発を進めた。特に広範な材料系への応用を志向し、前年度に引き続きCompound Energy Formalism（以下CEF）に基づく熱力学モデルの構築を進め、第一原理計算の結果を、CEFの相互作用パラメータを介してCALPHAD法に連動させる効率的な相図計算法、即ち、DFT(CEF)-CALPHAD法の開発を行った。本年度は多種類の結晶格子への拡張とSpecial Quasirandom Structures (SQS)による非規則相モデルの改善を進めた。実証計算としてAl-Ni合金系を系統的に計算し、実験の相図における主な特徴を再現出来るようなった。今後は多元系や複雑な結晶系への応用が期待される。(iii)では数理研究グループと共同で、シルベスター慣性定理を利用した中間固有値問題ソルバーk-epを整備し、ワークステーションにてM=200万次元系までの大規模行列の単一中間固有対計算が可能であることを実証した(D. Lee, et al., J. Comp. Phys. 371, 618-632 (2018))。従来型計算（密行列ソルバー）では、「京」全体を使ってもM=100万次元が上限であるため、画期的な成果と言える。本手法とオーダーN法を組み合わせることで、フェルミエネルギー近傍の波動関数を低計算量で計算できるようになる。また高速計算（固有値問題）とデータ駆動科学の融合として、望月出海・兵頭俊夫(KEK)らの陽電子回折実験を用いた表面構造解析の高速解析を行った。関連して、研究会「データ駆動科学と高速計算科学」（2018年7月17日、主催：CDMSI、場所：東大駒場キャンパス）を開催した。本サブ課題Gでは(iv)「大型実験施設との連携」の窓口を務めており、実験グループとの連携を積極的に進めるため、SPring-8での放射光実験と計算科学の連携と交流の促進のため、8月27日に第9回「共通基盤シミュレーション手法」連続研究会「計算科学による分光理論の進展～SPring-8との連携を目指して～」をSPring-8ユーザ協同体(SPRUC)理論研究会との共催でSpring-8にて開催した。実験グループとの連携ではホールキャリア型銅酸化物高温超伝導体の格子非整合な磁気励起がエネルギー上昇とともに格子整合になるという特徴的なスピン励起分散の解析を進め、梯子の足の数を増やしたより定量的なDDMRG計算を実施することで、非弾性中性子散乱実験を詳細に理解できることを示した。

ｉ）基盤的第一原理電子状態計算ソフトウエアの開発・整備

受託者：国立大学法人東京大学物性研究所

[研究実施体制]

責任者：　尾崎泰助

実施者：　Lee ChiCheng、福田将大

協力者：　小口多美夫（大阪大学）、野口良史（静岡大学）、石橋章司（産業技術総合研究所）
吉本芳英（東京大学）

[アプリケーションソフトウエア開発]

（実施・検討内容）

サブ課題Ｇで開発を進める基盤的第一原理電子状態ソフトウエアは全電子計算手法(HiLAPW)、平面波手法(QMAS, xTAPP)、局在基底法(OpenMX)に大別され、計算精度と計算効率の観点から相補的な関係にあり、相互に情報交換を行いながら開発を行っている。これらの基盤的第一原理電子状態ソフトウエアはサブ課題Ｃ、Ｄ、Ｅ、Ｆの研究においても基盤的な役割を果たしているため、各サブ課題におけるニーズの調査を継続的に実施し、開発項目を明確にした上でソフトウエアの開発・整備を実施した。特に数値局在基底法である OpenMX と平面波基底法である xTAPP および QMAS の高精度化・多機能化に集中し開発を進めている。各ソフトウエアの本年度の開発成果を以下にまとめる。

（成果）

a） OpenMX の開発

大型実験施設（SPring-8、SACLA や J-PARC 等）との連携を強化するため、密度汎関数理論とデルタ SCF 法に基づき、X 線光電子分光(XPS)スペクトルと X 線吸収スペクトルの計算手法のさらなる高精度化に取り組んだ。特に内殻電子を含んだ高精度擬ポテンシャルの開発を進め、新たに B、Pt、S、Ge の XPS 計算用擬ポテンシャルを作成した。また開発した手法をグラフェン上の単分散 Pt 原子構造に適用し、実験結果を定量的に再現することに成功し、これまで未知であった Pt の配位構造を特定し、その電子状態を明らかとした（右下図 G-1 を参照）。さらに数千原子を超える大規模な系の高精度な第一原理全エネルギー計算および電子伝導計算を実現するために、局在自然軌道法を用い自己エネルギー補正を行った分割統治型のオーダーN 第一原理電子状態計算手法を新たに開発し、超並列計算に向けた多重並列化プログラムを OpenMX に実装・整備した。系統的なベンチマーク計算から本手法が並列性に優れた高精度・高速計算手法であることが判明し、さらなる大規模並列化に向けてチューニングを進めている。また LCPAO 法の枠組みで線形応答理論に基づき複素光学伝導度テンソルを計算する手法を定式化し、新たにプログラムを開発した。これらの開発はサブ課題Ｄ、Ｅ、Ｆとの連携のもとに進められた。

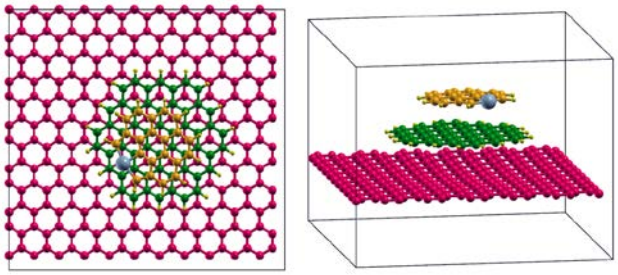


図 G-1:

b） xTAPP の開発

xTAPP は密度汎関数による第一原理電子状態計算を行う汎用プログラムであるが、サブ課題Cとの連携として、そこで用いられている変分モンテカルロ法や厳密対角化法など電子相関を高精度に取り扱う手法が必要とする格子モデルパラメータを第一原理的に決定するプログラム RESPACK（九工大 中村氏）に必要な計算データを提供することが期待されている。平成 30 年度も RESPACK とのインターフェース整備を含め様々な技術協力を中村氏と行ったが、これに加えて xTAPP の開発で得た知識を活用して、変分モンテカルロ法で必要とされていたパフィアンの高速計算ライブラリの開発を行って提供した。このライブラリはパフィアンの計算アルゴリズムの中核となる行列演算を、明示的な SIMD 命令の活用とキャッシュを明示的に意識したプログラミングの組み合わせで、既存のものの約 3 倍の性能を達成している。またこの他に xTAPP による応用計算として、PdH と Pd 間の 111 方向界面の歪依存性を第一原理計算で解析している。

c） QMAS の開発

Bader 電荷分析に基づき分割された空間を用いた解析機能の改良を行った。具体的には、メモリ利用の効率化を図り、固有状態毎の空間分割を可能とした。局所状態密度計算などに応用ができる。Langevin 熱浴を追加し、アモルファス構造などをより効率的にモデリングできるようにした。得られた構造モデルにおける陽電子状態・消滅パラメータの計算が遂行中である。昨年度に引き続き、vdW-DFT と静電場下での電子状態計算機能を組み合わせた、有機固体の誘電・圧電特性の計算機能の整備・応用を行った。

d） HiLAPW の開発

HiLAPW はフルポテンシャル線形化補強平面波(FLAPW)法に基づく汎用的で精度の高い密度汎関数理論電子状態計算を実現する第一原理計算コードである。全電子計算であり、擬ポテンシャルを用いないこと、また内殻の電子状態計算も SCF 計算の中で同時に解かれるため、スピン分極の系に対して高い精度の計算が期待される。平成 30 年度は磁性薄膜系に対して最近注目を浴びている電場による磁性の制御に関して、周期スラブモデルを仮定した際に薄膜に垂直方向に電場を加えることができるようにプログラムの開発を行った。ここでは、周期境界条件を満たすため外部電場に対応したノコギリ型のポテンシャルを付加し、薄膜の周期的配置に伴い現れる電気双極子場を取り除く補正を行っている。計算精度の評価のため、Fe、Co、Ni の単層膜に対する結晶磁気異方性エネルギーにおける電場の効果を計算し、Nakamura らによる二次元スラブモデルの計算［Phys. Rev. Lett. 102, 187201 (2009)］を定量的にもよく再現する結果を得た。

e） TOMBO の開発

本年度も引き続き、内殻束縛エネルギーの絶対値評価を目指し全電子混合規定法プログラムの開発を行った。昨年度の段階で自己無撞着 GW(SCGW)および該当部分の CUDA 化を完了している。本年度は、SCGW 法をいくつかの少数分子系へ適応し、計算速度の向上および one-shot GW からの計算精度の改善が確認できた一方、未だに数 eV 程度の誤差が存在することも確認した。これまでの GW 計算では計算コスト削減の目的で、GW 自己エネルギー演算子の評価に必要なオメガ積分を generarized

plasmon pole(GPP)モデルを用いて解析的に行ってきたが、内殻電子励起状態に関してはGPPモデルを使用する正当性は明らかになっていない。そこで本年度は、より厳密にGW自己エネルギー演算子を評価すること目的に、（GPPモデルを使用する代わりに）オメガ積分を数値的に実行するプログラムを開発した。プログラムの実装はすでに完了しており、現在テスト計算を実行しているところである。今後は、性能評価を実施するとともに、肥大化してしまった計算コストの削減を検討していく予定である。

ⅱ）物質構造と相変化の探索手法の開発

再委託先：国立大学法人東北大学大学院工学研究科

[研究実施体制]

責任者：　陳迎

実施者：　Theresa Davey、Tran Nguyen Dung（平成30年10月31日迄）

協力者：　大野宗一（北海道大学）、三宅隆（産業技術総合研究所）、大野かおる（横浜国立大学）、佐原亮二、木野日織（以上、物質・材料研究機構）、福島孝治、常行真司（以上、東京大学）

[アプリケーションソフトウエア開発]

（実施・検討内容）

実験データに依存せず、第一原理計算(DFT)と熱力学手法(CALPHAD)の連携による相図計算ソフトウエアの開発。物質の構造予測・探索プログラムの開発。

（成果）

第一原理計算とCALPHAD法の連結による相図計算ソフトウエアの開発：下記の「研究開発」(i)に記載したように、合金の短範囲規則度(Short Range Order, SRO)を反映するCompound Energy Formalism(CEF)ベースの熱力学モデルを確立して、電子構造計算から算出した各相のエネルギーからCEFの自由エネルギーを算出する計算コードと、CEFデータをCALPHAD法へデータマッチングさせるモジュールを開発した。機械学習と電子論を用いて新しい物質の結晶構造の探索、予測手法の開発：下記の「研究開発」(ii)に記載したように、データ同化を利用した結晶構造予測手法を開発した。スパースモデリングを用いて実験データからモデルのハミルトニアンを推定するアルゴリズムを開発した。

[研究開発]

（実施・検討内容）

サブ課題Ａ～Ｆに対する共通基盤として、前年度に引き続き、第一原理計算に基づく物質構造と相変化の探索手法の研究開発を行った。

(i) 第一原理ベースの新CALPHAD相図計算法の検討、確立して、実際の2元合金系のテスト計算を実施した。計算ソフトウエアの開発を行った。

(ii) 機械学習と電子論を用いて、データ同化構造探索法を開発し、結晶系の計算に成功した。また、スパースモデリングを用いて実験データからモデルのハミルトニアンの推定方法を提案してその加速計算法を開発した。

（成果）

(i) 第一原理ベースの新 CALPHAD 相図計算法の研究開発

CALPHAD 法の主な問題点はエントロピーの点近似にあるのがよく知られて原子間の相関にクラスター変分法(CVM)四面体近似を導入して点近似を改善することを検討した。しかし、通常の CALPHAD 法は点近似に基づいているために自由エネルギー式が複雑となり、CALPHAD 法ソフトウエアが利用できないという困難に直面した。CALPHAD 法の効率性、汎用性と最適化ツールを利用するために、昨年度には CALPHAD 法のエントロピーモデルを直接に修正することを回避して、Compound Energy Formalism(CEF)に基づいて、第一原理計算データから抽出された reciprocal interaction parameter との補正項により自由エネルギーの高精度化を図る方法(CEF-DFT-CALPHAD)を考案して、FCC のモデル系に対してテスト計算を行った。今年度は CEF-DFT-CALPHAD 法の本格的な展開を中心として下記の開発を進めてきた。

i) 熱力学モデルの進化。CEF に基づく Order-Disorder（規則相-非規則相）モデルを採用して、合金の短範囲規則度を反映できる熱力学モデルを構築した。具体的に、規則相と非規則相に対して下記の設定を行い自由エネルギーを定式化した。
   規則相：4-sublattice 正則溶体
   非規則相：single-sublattice 正則溶体
ii) 多種類の結晶格子の取り入れ。
   昨年度に開発した FCC 格子モデルから FCC、BCC、HCP、BCT など結晶格子に拡張した。
iii) 非規則相モデルの改善。典型的な合金濃度において Special Quasirandom Structures(SQS)の自由エネルギーを用いていることで非規則相の熱力学モデルが改善され自由エネルギーの精度が向上させた。

原子間の相関の対近似、CVM の四面体近似を不規則相に導入した熱力学モデルに対して自由エネルギーの最小化手法の検討を行い、実際の 2 元合金系 Al-Ni に対するテスト計算を実行し、CEF-DFT-CALPHAD 法の適用性を検討した。

FCC, BCC 等の全ての出現する相に対して電子構造、フォノン振動および電子励起エントロピーの計算を行い、その計算結果により全 DFT ベースの自由エネルギーを得て相図を算出した（図 G-2）。図 G-2 (a)は実験相図、図 G-2 (b)は上記 i)の設定の場合の計算相図である。計算相図は実験相図と比べて見ると、B2 相の融点の過大評価や単相領域の過小評価など一致しないところがあるが、実験相図の主な特徴が再現されていることがわかった。計算相図の精度を向上するため、熱力学モデルの高精度化、準安定相、不安定相の取扱い、格子の緩和効果などの相境界への影響の詳細を調べた。図 G-2 (b)の Al-rich 側相境界は正確に再現されないことに対して、図 G-2 (c)は、Al-rich 側の非規則相(Al-A1)を着目して SQS の自由エネルギーを用いて計算した結果であり、Al-rich 側相境界が改善され実験相図とよく一致したことを示している。

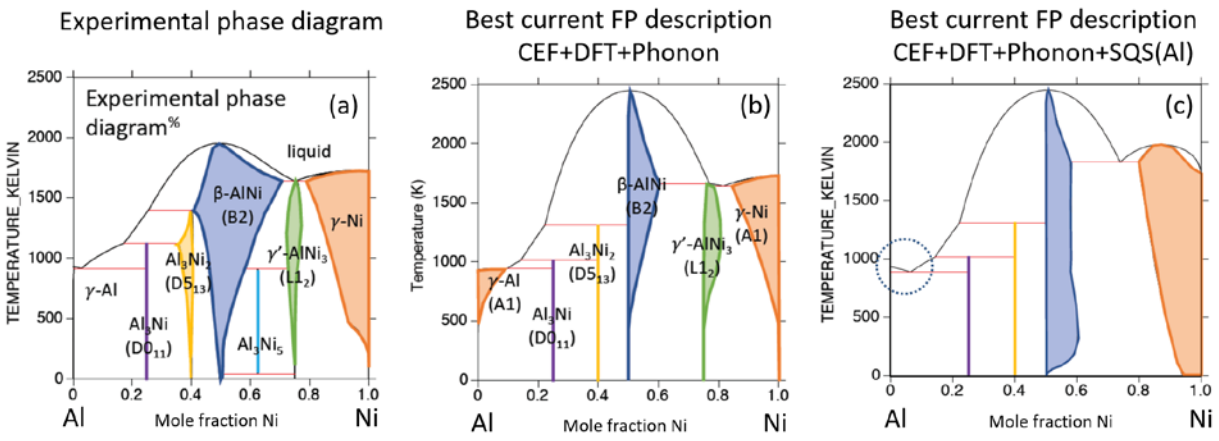


図 G-2：Al-Ni 系の計算相図実験相図との比較。(a) 実験相図(P. Nash, 1991)；
(b) CEF+DFT+Phonon の結果；(c)CEF+DFT+Phonon+SQS(Al)の Al-rich 側の結果。

今回開発した CEF-DFT-CALPHAD 法では、空孔の導入、磁性の取り扱い、CVM 計算の導入などさらに改善すべき点であるが、CEF-DFT の自由エネルギーモデルを経由して CALPHAD 法の計算ソフトを援用できるのが大きな利点であり、今後、多元系や複雑な結晶系への応用が期待できる。（格子の緩和効果の計算に関して東北大学金研グループとの協力して行った。これから CVM 計算にも金研グループの助力を得て進める予定。）

(ii) 機械学習と電子論を用いて新しい物質の結晶構造の探索、予測手法の開発。

データ同化構造探索手法の開発が続いて、実験で測定された粉末回折パターンを活用して SiO_2 の多形構造の予測に成功した(N. Tsujimoto, D. Adachi, R. Akashi, S. Todo, and S. Tsuneyuki, Phys. Rev. Materials **2**, 053801 2018)。さらに、第一原理 MD も使えるようになり、H_3S、Y_2CH_3、Nd_2Fe_{17} などでテストが進行中。また、スパースモデリングを用いて、実験データから様々な物質構造特性の推定、解析アルゴリズムの開発を行った。例えば、STM トポ像の解析を半自動的にピーク分解するアルゴリズムの開発（M.J. Miyama, K. Hukushima、JPS 87 ,044801 (2018)；実験的に得られる磁化曲線を再現するモデルハミルトニアンを推定する枠組みをベイズ推定に基づいて提案して開発した（R.Tamura, K. Hukushima, PloS one 13 (3), e0193785, 2018)。

<u>再委託先：国立大学法人東北大学金属材料研究所</u>

[研究実施体制]

責任者：毛利哲夫

[アプリケーションソフトウエア開発]

（実施・検討内容）

物質の相変化の第一原理からの探索手法として、クラスター変分法に基づくプログラム群の開発を行った。特に、連続変位クラスター変分法のプログラムの開発を継続し、今年度は格子緩和の理論計算・シミュレーションを重点的に遂行した。

（成果）

Cu-Au 系の不規則相を対象にして、格子の global relaxation, thermal relaxation, full relaxation, partial relaxation, local relaxation なる 5 種類の緩和を取り扱った。Partial relaxation のプログラムは不規則相の有限温度における生成エネルギーの傾向を再現した。

[研究開発]

（実施・検討内容）

格子緩和が相平衡に及ぼす影響を系統的に取り扱った。従来の global relaxation では各格子点においても結晶全体の対称性を維持することを仮定している。従って、組成とともに一様な膨張や収縮が許されるのみであり、構成元素のサイズ差に起因する格子の局所的な緩和は導入されていない。これは不規則相の安定性を過小評価することを意味しており、その結果として、相対的に規則相が過度に安定化されて規則－不規則変態温度が実験値よりも高く予測される。このような問題を解決するために、構成元素の原子サイズ差が極めて大きな Cu-Au 系を対象にして、thermal relaxation, full relaxation, partial relaxation, local relaxation の 4 種類の緩和を個々に導入してそれぞれの影響を調べた。また、Fe-系についても十分な計算結果の蓄積があり、計算結果の比較参照のためにこれらの系の計算を行った。Thermal relaxation では格子振動の効果を陽に考慮するが、これは有限温度下での格子の軟化を間接的に導入することに等しく、サイズの異なる構成元素は温度が高くなると混じりやすくなることが期待される。Full relaxation では、不規則相中の種々の特徴的なクラスターの原子間距離を、対応する規則相の平衡格子定数から帰結される値に固定した上で熱力学量を求める。Partial relaxation では、構成元素である Cu と Au のサイズを、全系の自由エネルギーが最小になるように決定した上で、熱力学量を算出する。これら 4 種類の緩和では格子の局所緩和が陽には考慮されていないのに対して、local relaxation では各格子点の周囲に原子が変位し得る付加的な格子点（準格子点）を導入する。不規則相形成の Eshelby cycle でも local relaxation を導入しており、これとの比較検討を行った。

（成果）

上述のように、Cu-Au 系は構成元素のサイズ差が極めて大きいために格子緩和の研究の格好の系である。また、本研究では計算を不規則相の生成エネルギーに絞ったが、これは規則相よりも不規則相において格子緩和の影響が顕在化されるためである。我々のグループでは、相平衡計算を含む第一原理熱力学計算を多くの合金系に対して実行してきたが、それらの計算で導入しているのは global relaxation のみである。Cu-Au 系についてもすでに global relaxation の計算結果を公表しているが、今年度の計算においても過去の計算を再現し、不規則相の安定性が過小にしか評価されない（生成エネルギーの絶対値が実験値よりも極めて小さい）ことを確認した。次に、Debye-Gruneisen モデルに基づいて格子振動の効果を自由エネルギーに導入し、温度の上昇に伴う格子膨張と bulk modulus の低下を確認した。しかし、この系では thermal relaxation の有無が生成エネルギー及ぼす効果は小さく、熱緩和による Cu-Au 系の不規則

相の安定化は極めて小さいことがわかった。Full relaxation では、規則相の深い生成エネルギーに引っ張られるように不規則相のそれも低下するが、これは格子緩和による不規則相の安定化ではない。Partial relaxation では、図 G-3 に示すように、不規則相の 720K における自由エネルギーの最小状態での Cu と Au、および平均の原子サイズを算出することができる（図 G-3 に示した値は fcc の格子定数に換算している）。しかし注意すべきは、不規則相固溶体における構成元素のサイズという概念は必ずしも自明な物理的意味を有するものではない。実験的には部分モル体積を測定すれば原子サイズを決定できるが、一体、電子状態まで含めてサイズをどのように決定するのかの議論は今後の重要な課題であろうと思われる。Full relaxation の計算は 2 次元格子や、低近似（対近似）の計算以外は完全に終了していない。これは 3 次元実格子に対する高近似度の計算では、格子点の周囲の準格子点を多くとると計算が収束しないからであり、アルゴリズムの改良とともに計算の大規模化が必須である。しかし、これまでにも報告してきたように、2 次元正方格子では局所緩和を導入することで大きく不規則相が安定化することを確認でき、また、Lennard-Jones ポテンシャル系の 2 元系 fcc 格子に対しては原子の局所分布がほぼ gaussian 分布で記述できることがわかり、さらに局所変位に伴う散漫散乱強度の計算も実行した。

また、Eshelby cycle との比較・検討を行うべく、Kanzaki force の計算と dynamical matrix の計算を行った。ただ、Eshelby cycle ではエネルギーは厳密に取り扱っているが、原子の変位（分布）に伴うエントロピーの効果は必ずしも導入していない。これを扱い得るのは CDCVM である。

なお、上記の研究結果や考察には、計算結果の比較参照のために実施した Fe-系の計算結果を活用している。

また、東北大学大学院工学研究科グループで CALPHAD 法に基づく現象論的計算を遂行するために、金研グループの結果を参照のために提供し、工学研究科グループのクラスター変分法計算の一助として活用された。

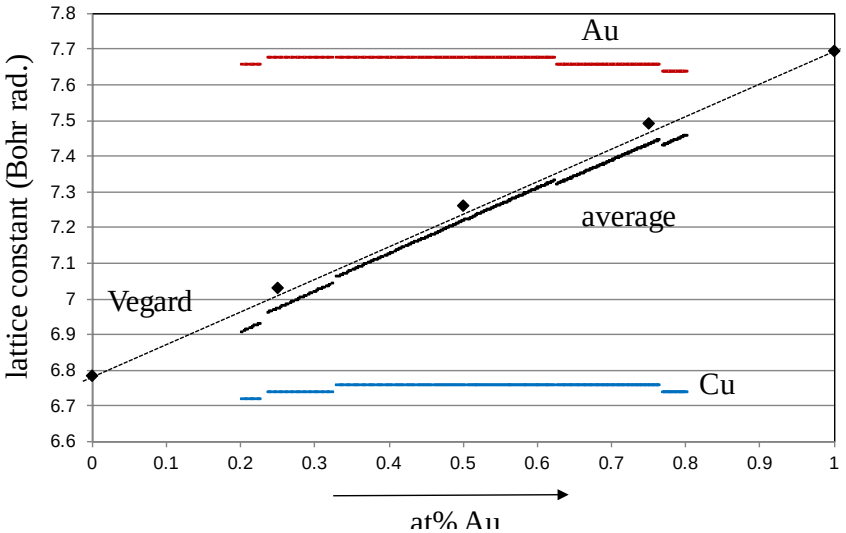


図 G-3:Cu-Au 系合金の格子定数の変化

ⅲ）基盤的超並列計算アルゴルリズムの開発
再委託先：国立大学法人鳥取大学

[研究実施体制]
責任者：　星健夫
実施者：　原田祐希
協力者：　山本有作（電気通信大学）、須田礼仁（東京大学）、角田皓亮、桑田亨成、
田中和幸（鳥取大学）、張紹良、李東珍（名古屋大学）、吉見一慶（東京大学）

[アプリケーションソフトウエア開発]
（実施・検討内容）
(A) 星・原田・山本・桑田・田中らは、前年度までに開発してきた革新的（ハイブリッド型超並列密行列アルゴリズムを利用した）固有値問題ソルバーEigenKernel(https://github.com/eigenkernel/)を強化し、「京」より新しいメニーコア型スーパーコンピュータである Oakforest-PACS での特性研究、および、ベイズ推定による性能予測を行った。
(B) 星・吉見らは、前年度までに開発してきた革新的（シフト型クリロフ部分空間を利用した）グリーン関数計算ソルバーKω(https://github.com/issp-center-dev/Komega)と、サブ課題Ｃでの中核アプリである格子多体模型ソルバーHΦ(https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp/app/339)との連携を強化した。
(C) 星・角田・桑田・李・張らは、前年度までに開発してきた革新的（シルベスター慣性定理を利用した）中間固有値問題ソルバーk-ep(https://github.com/lee-djl/k-ep)の高度化、および、CDMSI アプリとの連携についての調査を行った。

（成果）
(A) 研究をまとめた論文が、印刷中となった(Tanaka et al, Japan J. Indust. Appl. Math, in press; Preprint: https://arxiv.org/abs/1806.00741)。マルコフ連鎖モンテカルロ型ベイズ推定を用いた性能予測については、ソースコードの数理（線形計算）アルゴズムに基づいた（ノード数 P の関数としての）数理モデルを行うことで、性能外挿（ノード数 P が小さい計算でのベンチマークから、ノード数が大きい計算の計算時間を予測すること）にも用いられることが示された。さらに、Oakforest-PACS での特徴として、ノード内 MPI 並列が有用であるとの予備的知見をえた。これはメニーコア CPU での特徴であり、ポスト「京」での高速計算に向けて、有用な手がかりとなった。
(B) Kω と HΦの連携における典型例として、多体問題で現れる疎行列系（拡張ハバード模型など）における、(i)励起（光学）スペクトル計算、(ii)複素平面での経路積による物理量の計算、を見出した。エネルギー点ごとの精度を観測できるが、従来法（ランチョス型手法）との優位性であり、広く物性理論計算に寄与することがわかった。開発・公開した計算ソルバーKωを、CDMSI の中核アプリである量子格子も京計算ソフト HΦと接続し、線形方程式群求解速度の約 100 倍高速化機能を実施した。これらは、HΦ講習会（2019 年 3 月 18 日、主催：東京大学物性研究所計算物質科学研究センター、九州大学情報基盤研究開発センター、会場：九州大学 伊都キャンパス）にて紹介された（論文執筆中）。
(C) これまでの成果である、単一中間固有対計算手法についての論文が出版された(D. Lee, et al., J. Comp. Phys. 371, 618-632 (2018))。そこでは、ワークステーションにおいても M=200 万次元系までの

大規模行列の計算例が示された。従来型計算（密行列ソルバー）では、「京」全体を使っても M=100 万次元が上限であるため、画期的な成果と言える。さらに、対象固有対を複数にした新バージョンがテストされ M=500 万次元までの大規模行列の計算例が示された（Hoshi、招待講演、International Workshop on Massively Parallel Programming for Quantum Chemistry and Physics、RIKEN-CCS、Kobe、2019 年 1 月 15 日；論文執筆中）。CDMSI アプリとの連携調査としては、数理的特徴（分離型非局所擬ポテンシャルの実空間グリッド計算）から、サブ課題Aでの中核アプリである RSDFT が特に有用との知見を得て、次年度に詳細を検討することとなった。

[研究開発]

（実施・検討内容）

(A) 星・角田・桑田らは、前年度からの継続課題として、開発した数理ソルバーEigenKernel および k-ep の応用計算で、有機（ペンタセン）薄膜の大規模（10nm スケール）電子状態計算を行った。

(B) 星・田中らは、高速計算（固有値問題）とデータ駆動科学の融合として、望月出海・兵頭俊夫(KEK)らの陽電子回折実験を用いた表面構造解析の高速解析を行った。関連して、研究会「データ駆動科学と高速計算科学」（2018 年 7 月 17 日、主催：CDMSI、場所：東大駒場キャンパス）を開催した。

(C) 山本らは、電子状態計算むけ固有値計算アルゴリズムの研究を行った。

(D) 須田らは、ポスト「京」向け基盤アルゴリズム（通信回避 CG 法・枢軸選択なし LU 分解）の数理的研究を行った。

（成果）

(A) EigenKernel 利用計算のこれまでの成果が出版予定となった(Hoshi et al, Japan J. Indust. Appl. Math, in press; Preprint: https://arxiv.org/abs/1808.02027)。さらに、k-ep 計算によるさらなる大規模系計算がおこなわれ、数十分子に広がりを持つ準局在状態が得られ、松井弘之（山形大）の ESR 実験と整合した結果が得られた（角田他、CDMSI シンポジウム、2018 年 12 月 17 日；論文執筆中）。EigenKernel 計算だけではサイズの小ささから、人為的な（スーパーセル型計算からくる）1 次元的に広がった波動関数と、2 次元的に局在した波動関数を区別することができなかった。k-ep 計算（M=100 万次元行列以上）の計算により、上記区別が可能となった。

(B) Si(001)-Mn ワイヤ系などの表面構造についてのテスト計算を行い、有用性を確認した（田中他、CDMSI シンポジウム、2018 年 12 月 17 日；論文執筆中）。探索型逆問題解析手法としては、局所探索（Nelder-Mead 法）および、グリッド型大域探索を利用した。グリッド型大域探索は超並列計算との相性が良いものの、全体としての計算量が多いため、展望として、次年度からはモンテカルロ法を用いた大域探索を行うこととした。本計算の発展として、科研費基盤 B 課題が 2019 年度からスタートした（代表：星、「超並列マシンを用いた計算統計と測定技術の融合」、19H04125）。

(C) 量子化学計算などで要求される高精度固有値計算向けに、微小な特異値を高い相対精度で計算できるブロックヤコビ法のアルゴリズムが構築され、並列実装が行われた。

(D) 通信回避 CG 法のコアとなる行列冪カーネルの性能評価を行い、ボトルネックを分析した。また LU 分解で通信・同期を必要とする枢軸選択を回避するアルゴリズムの研究を行い、行列の特性に適応するアルゴリズムを開発した。

ⅳ）大型実験施設との連携

再委託先：学校法人東京理科大学

[研究実施体制]

責任者：　遠山貴巳

実施者：　杉本貴則、森田克洋

協力者：　柚木清司、曽田繁利、大塚雄一（以上、理研）、白川知功（SISSA）

[アプリケーションソフトウエア開発]

（実施・検討内容）

昨年度に引き続き、密度汎関数法に基づく第一原理計算ではその電子状態や励起ダイナミクスが十分記述されない強相関物質・材料に対応するため、大型実験施設で実施されている励起ダイナミクス実験を解析可能な動的密度行列繰り込み群法(DDMRG)プログラムの改良・整備を実施した。特に、多軌道性が重要な役割を果たす梯子型鉄系超伝導体を念頭に、軌道間のペアホッピング項も含む多軌道クーロン相互作用項を正確に記述する DDMRG プログラムを整備した。

（成果）

複数の軌道が同一格子点にある量子格子模型に焦点を当てて開発を進めた。その結果、異なる格子点間の複数の軌道に飛び移る電子のホッピング項とともに、クーロン相互作用に起因する、同一格子点内の異なる軌道間の電子ペアのホッピングを記述する項を正確に取り込むことが可能となった。この DDMRG プログラムを用いて、先ずは基底状態を正しく記述されることを、厳密対角化法の結果と比較することで確認した。梯子型鉄系超伝導体に対する基底状態の予備計算を行い、他のグループの先行研究が電子密度を半充填から変化させた時の電子状態を正しく記述していないことが明らかとなった。今回の、多軌道強相関電子系に対する DDMRG の整備により、最終年度に計画している梯子型鉄系超伝導体の中性子非弾性散乱スペクトルの本格計算が可能となる。DDMRG は他のサブ課題で開発されている DFT 計算よりも、強相関電子系に対して高い精度で励起ダイナミクスが計算可能なので、サブ課題Ｃで実施している超伝導物質関連の研究とも連携しながら開発を実施している。

[研究開発]

（実施・検討内容）

J-PARC での非弾性中性子散乱実験との連携を進めるため、新規正方カゴメ格子量子スピン物質 $KCu_6AlBiO_4(SO_4)_5Cl$ の動的スピン構造因子を DDMRG で計算して、J-PARC で実施された非弾性中性子散乱実験と比較した。

銅酸化物高温超伝導体におけるスピン・電荷励起の解明は高温超伝導の起源を理解するためにも重要な課題である。昨年に引き続き t-t'-J 模型における動的スピン・電荷構造因子の DDMRG による大規模計算を実施した。特に、昨年度の 4 本の足を持つ梯子型格子（24 格子点×4=96 格子点）から 8 本の足を持つ系（12 格子点×8=96 格子点）へと足の数を変化させることによって動的構造因子がどのように変化するか調べ、既存の実験データとの対比を行った。

SPring-8 での放射光実験と計算科学の連携と交流の促進のため、8 月 27 日に第 9 回「共通基盤シミュレーション手法」連続研究会「計算科学による分光理論の進展　～SPring-8 との連携を目指して～」を SPring-8 ユーザ協同体(SPRUC)理論研究会との共催で Spring-8 にて開催した。

（成果）

開発を進めている DDMRG の計算により、J-PARC などで得られた実験結果の解析が可能になり新たな知見が得られたので具体的な事例を下記に示す。

東京理科大学の実験グループによって新しく合成された正方カゴメ格子量子スピン物質 $KCu_6AlBiO_4(SO_4)_5Cl$ の磁化率と磁化曲線に対する実験と、ランチョス法・DMRG による磁化率・磁化曲線の計算結果の比較から、同物質のスピン間相互作用の値を決定した。その値を用いて DDMRG により動的スピン構造因子を計算した（図 G-4 参照）。しかし、図の M 点付近の低エネルギー構造は J-PARC で行われた多結晶体に対する非弾性中性子散乱スペクトルとは一致していないことが判明した。これは同物質を記述する模型を一部修正しなければいけないことを示唆しており、現在その解析を進めている。

ホールキャリア型銅酸化物高温超伝導体では、格子非整合な磁気励起がエネルギー上昇とともに格子整合になるという特徴的なスピン励起分散が J-PARC などで実施されてきた非弾性中性子散乱により報告されている。昨年度、DDMRG により計算した 4 本足梯子格子 t-t'-J 模型の動的スピン構造因子は、これらの実験の特徴を定性的には捉えてはいたが、定量的な不一致点があった(T. Tohyama *et al.*, Phys. Rev. B **97**, 235137 (2018))。そこで、梯子の足の数を増やした、16×6、12×8 格子点のシリンダー形状 t-t'-J 模型の動的スピン構造因子を DDMRG で計算した。x=12/96=0.125 のときの 12x8 格子点の結果を図 G-5 に示す。24x4 格子点で見られた実験との二つの不一致点が解消された。すなわち、格子非整合点 **q**～(0.75π,π)から **q**=(0,π)へ向かう励起構造が逆方向に比べて弱くなること、**q**=(π,π)でのエネルギーがω～0.2t～50meV であることが、非弾性中性子散乱実験と定量的にもよく対応している。この成果は現在投稿準備中である。

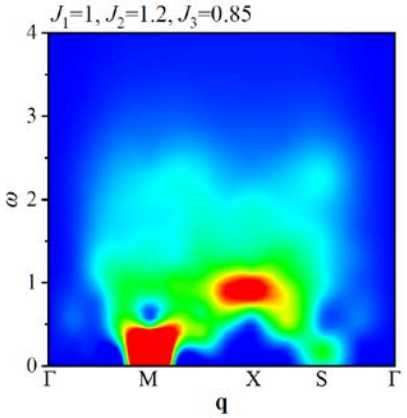


図 G-4：DDMRG による 48 格子点正方カゴメ格子の動的スピン構造因子（赤色が最大強度）。スピン間相互作用は磁化率と磁化過程の実験結果から評価した。

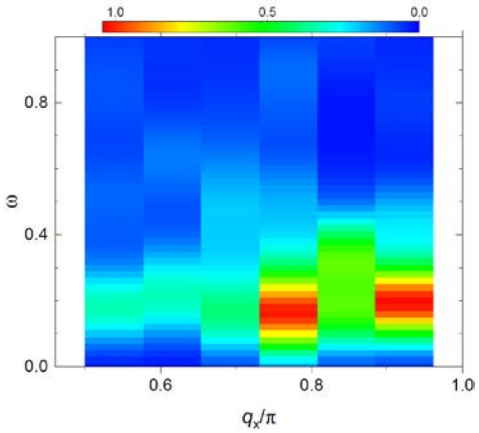


図 G-5：DDMRG による 12x8 格子点のシリンダー形状 t-t'-J 模型における動的スピン構造因子の強度マップ。ホールキャリア濃度 x=12/96=0.125 で q_y=π に固定。

４－３．活動（研究会等）

日付	活動名称	場所	参加者
I. 主催・共催			
H30.6.11～6.13	第 1 回ポスト「京」に向けたアプリ高度化合宿	理化学研究所計算科学研究センター	33 名
H30.7.2～7.12	The International Summer workShop 2018 on First-Principles Electronic Structure Calculations in ISSP (ISS2018)	東京大学物性研究所	第一部: 27 名 第二部: 37 名 第三部: 54 名 (参加者実数: 67 名)
H30.7.17	ポスト「京」重点課題(7)サブ課題Ｇ 第 8 回「共通基盤シミュレーション手法」連続研究会「データ駆動科学と高速計算科学」	東京大学駒場キャンパス内駒場ファカルティハウス	38 名
H30.7.19～7.20	第 3 回 CDMSI（ポスト「京」重点課題(7)）研究会	東京大学本郷キャンパス小柴ホール	7/19: 111 名 7/20: 91 名 (参加者実数: 123 名)
H30.7.30	CCMS ハンズオン: DCore 講習会（TIA“かけはし”連携講座）	東京大学物性研究所 6 階 A612 セミナー室	9 名
H30.8.27	ポスト「京」重点課題(7)サブ課題Ｇ第 9 回「共通基盤シミュレーション手法 」連続研究会「計算科学による分光理論の進展～SPring-8 との連携を目指して～」	SPring-8 萌光館	29 名
H30.8.28	CCMS ハンズオン: MateriApps LIVE!講習会（TIA“かけはし”連携講座）	東京大学柏の葉キャンパス駅前サテライト 205 号室	6 名
H30.10.2～10.4	第 2 回計算物質科学イノベーションキャンプ	皆生シーサイドホテル 海の四季	31 名
H30.10.12	第 6 回材料系ワークショップ	秋葉原 UDX 4 階 NEXT- 1	91 名
H30.10.19	CCMS ハンズオン : xTAPP 講習会（TIA“かけはし”連携講座）	東京大学柏の葉キャンパス駅前サテライト 205 号室	6 名

日付	活動名称	場所	参加者
I. 主催・共催			
H30.11.12～11.13	国際スクール＋SALMON ハンズオンチュートリアル International School on Time-Dependent Density Functional Theory and SALMON Hands-on Tutorial	筑波大学計算科学研究センター	57 名
H30.11.14～11.16	国際シンポジウム International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations	つくば国際会議場 EPOCHAL TSUKUBA	75 名
H30.11.14	CCMS ハンズオン: DDMRG 講習会	東京大学柏の葉キャンパス駅前サテライト 205 号室	19 名
H30.11.28～11.30	第 2 回ポスト「京」に向けたアプリ高度化合宿	理化学研究所計算科学研究センター	27 名
H30.12.12	CCMS ハンズオン: HΦ 講習会	東京大学柏の葉キャンパス駅前サテライト 205 号室	9 名
H30.12.17～12.18	第 4 回 CDMSI（ポスト「京」重点課題(7)）シンポジウム	東京大学物性研究所 6 階大講義室	12/17：97 名 12/18：81 名 (参加者実数：122 名)
H31.1.25	OpenMX 講習会（基礎）～第一原理計算の基礎を学ぼう～	東京大学柏の葉キャンパス駅前サテライト 205 号室	延期
H31.2.8	第 7 回材料系ワークショップ～第一原理計算と実験のデータ同化による材料開発手法～	秋葉原 UDX 4 階 NEXT-1	86 名
H31.2.25	RSDFT 講習会（中級）～第一原理計算で半導体の物性を計算しよう～	東京大学柏の葉キャンパス駅前サテライト 205 号室	延期
H31.3.1	CCMS ハンズオン: RESPACK 講習会（TIA“かけはし”連携講座）	東京大学柏の葉キャンパス駅前サテライト 205 号室	8 名
H31.3.2	見える化シンポジウム 2019 バーチャルでリアルを超えろ～難解サイエンスを映像で感覚的につたえる～	秋葉原 UDX シアター	122 名

日付	活動名称	場所	参加者
I. 主催・共催			
H31.3.18	情報基盤研究開発センターハンズオン : HΦ 講習会−ITO を用いたハンズオン−	九州大学伊都キャンパス（福岡県福岡市）情報基盤研究開発センター2 階 多目的教室	13 名
Ⅱ. 協賛・協力・後援			
H30.4.2～4.3	物性研究所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会「計算物質科学の今と未来」	東京大学物性研究所 6 階大講義室	4/2: 85 名 4/3: 78 名
H30.7.2～7.4	RIKEN International HPC Summer School FY2018	理化学研究所計算科学研究センター6 階講堂	27 名
H30.7.3	第 2 回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開シンポジウム	東北大学金属材料研究所講堂	94 名
H30.8.6～8.8	計算物質科学人材育成コンソーシアム PCoMS 合宿セミナー2018「―計算材料科学と実験材料科学をつなぐ　マテリアルズ・インフォマティクス―」	奥州秋保温泉蘭亭	24 名
H30.8.6～8.10	KOBE HPC サマースクール（初級）	兵庫県立大学大学院応用情報科学研究科 624 実習室	36 名
H30.9.14	OpenMX 講習会（基礎）～第一原理計算の基礎を学ぼう～	東京大学柏の葉キャンパス駅前サテライト 205 号室	6 名
H30.9.20～9.21	3rd International Symposium on Research and Education of Computational Science (RECS)	東京大学本郷キャンパス小柴ホール	79 名
H30.10.22～10.23	PCoMS シンポジウム&計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業報告会 2018	東北大学（片平キャンパス）金属材料研究所 2 号館講堂	74 名
H30.11.23	2018 年度 計算科学研究センター一般公開（理化学研究所）	理化学研究所計算科学研究センター6 階講堂	延べ 4404 名、ブース来場者約 500 名

日付	活動名称	場所	参加者
Ⅱ．協賛・協力・後援			
H30.12.11～12.12	ポスト「京」重点課題５ 第２回実験・産業との連携シンポジウム テーマ:化学エネルギーの有効利用（11 日午後） 第５回公開シンポジウム（11 日午前、12 日）	北海道大学フロンティア化学教育研究センター2F レクチャーホール（鈴木章ホール）	110 名
H31.1.10	第２回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開ワークショップ	ステーションコンファレンス東京	69 名
H31.1.15～1.17	International Workshop on Massively Parallel Programming for Quantum Chemistry and Physics 2019	理化学研究所計算科学研究センター	47 名
H31.2.15～2.17	The 3rd RIKEN R-CCS HPC Youth Workshop	理化学研究所計算科学研究センター6 階講堂	38 名
H31.2.18～2.19	The 1st R-CCS International Symposium	神戸国際会議場	270 名
H31.2.27	PCoMS TOMBO seminar PCoMS ソフトウェア講習会―TOMBO 講習会―	オフィス東京	22 名
H31.2.28	計算物質科学人材育成コンソーシアム（PCoMS）東北大学計算物質科学セミナー -機能性分子材料設計のための電子状態計算実習-	東北大学青葉山キャンパスサイバーサイエンスセンター5 階端末機室	8 名
H31.3.13～3.15	KOBE HPC スプリングスクール（中級）	神戸大学計算科学教育センター208 セミナー室 兵庫県立大学神戸情報科学キャンパス312 演習室	18 名

Ⅲ. 会議・委員会など			
H30.5.8	平成 30 年度 第 1 回 CDMSI（ポスト「京」重点課題(7)）諮問委員会	ステーションコンファレンス東京	21 名
H30.7.20	平成 30 年度 第 1 回 CDMSI（ポスト「京」重点課題(7)）企画会議	東京大学小柴ホール第 4 会議室	17 名
H30.7.19	平成 30 年度 第 1 回 CDMSI（ポスト「京」重点課題(7)）意見交換会	東京大学工学部 2 号館展示室	51 名
H30.12.18	平成 30 年度 第 2 回 CDMSI（ポスト「京」重点課題(7)）企画会議・諮問委員会 合同会議	東京大学物性研究所 6 階大講義室	19 名
H30.5.24 H30.7.30 H30.10.25 H31.1.22	サブ課題Ｃミーティング（超伝導・新機能デバイス）	東京大学工学部 6 号館大会議室	
H30.6.7 H30.9.13 H30.11.19 H31.2.1	QMC/TN（量子モンテカルロ法/テンソルネットワーク）ミーティング	東京大学物性研研究所 (9.13 のみ京都大学)	
H30.4.3 H30.5.7 H30.6.4 H30.7.2 H30.8.6 H30.9.3 H30.10.2 H30.11.12 H30.11.30 H30.12.7 H31.1.7 H31.2.4 H30.3.4 H31.3.29	フラッグシップ 2020 プロジェクト/アプリケーション検討会/重点課題アプリ⑦ WG（RSDFT）ミーティング	理化学研究所計算科学研究センター 神戸、東京分室	

４－４．実施体制

業務項目	担当機関	担当責任者
①サブ課題Ａ 高機能半導体デバイス	国立大学法人名古屋大学	未来材料・システム研究所 特任教授　押山　淳
	国立大学法人筑波大学	計算科学研究センター 教授　重田　育照
	国立大学法人大阪大学	大学院工学研究科 教授　森　伸也
	国立大学法人筑波大学	数理物質系 教授　佐野　伸行
②サブ課題Ｂ 光・電子融合デバイス	国立大学法人筑波大学	計算科学研究センター 教授・部門長　矢花　一浩
	国立大学法人東京大学	大学院工学系研究科 准教授　八井　崇
	大学共同利用機関法人 自然科学研究機構	分子科学研究所 助教　飯田　健二
③サブ課題Ｃ 超伝導・新機能デバイス材料	国立大学法人東京大学	大学院工学系研究科 教授　今田　正俊
	国立大学法人東京大学	大学院工学系研究科 特任准教授　山地　洋平
	国立大学法人東京大学	物性研究所 特任研究員　三澤　貴宏
	国立大学法人東京大学	大学院理学系研究科 准教授（～H30.6.30） 教授（H30.7.1～）藤堂　眞治
④サブ課題Ｄ 高性能永久磁石・磁性材料	国立研究開発法人産業技術総合研究所	材料・化学領域機能材料コンピュテーショナルデザイン研究センター 主任研究員（～H30.9.30） 研究チーム長（H30.10.1～）三宅　隆
	国立大学法人東京大学	物性研究所 特任研究員　赤井　久純
	国立大学法人東京工業大学	物質理工学院 准教授　合田　義弘

⑤サブ課題Ｅ 高信頼性構造材料	国立研究開発法人産業技術総合研究所 関西センター	エネルギー・環境領域電池技術研究部門　招聘研究員　香山　正憲
	国立大学法人東北大学	金属材料研究所 特任教授　毛利　哲夫
	国立大学法人東京大学	大学院工学系研究科 准教授　澁田　靖
	国立大学法人横浜国立大学	大学院工学研究院 教授　大野かおる
⑥サブ課題Ｆ 次世代機能性化学品	国立大学法人大阪大学	大学院基礎工学研究科 教授　松林　伸幸
	国立大学法人名古屋工業大学	大学院工学研究科 教授　尾形　修司
⑦サブ課題Ｇ 共通基盤シミュレーション手法	国立大学法人東京大学	物性研究所 教授　尾崎　泰助
	国立大学法人東北大学	大学院工学研究科 教授　陳　迎
	国立大学法人東北大学	金属材料研究所 特任教授　毛利　哲夫
	国立大学法人鳥取大学	大学院工学研究科 准教授　星　健夫
	東京理科大学	理学部第一部 教授　遠山　貴巳
⑧プロジェクトの総合的推進	国立大学法人東京大学	大学院理学系研究科/物性研究所 教授 常行　真司

＜資料１＞

第 3 回 CDMSI(ポスト「京」重点課題(7))研究会
「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」

【日時】平成 30 年 7 月 19 日（木）～ 7 月 20 日（金）
【場所】東京大学　本郷キャンパス　小柴ホール

【プログラム】
7 月 19 日（木）

13:00-13:05　開会のご挨拶

重点課題（７）代表者：常行　真司（東京大学）

文部科学省　坂下　鈴鹿

サブ課題Ａ：高機能半導体デバイス

13:05-13:10　押山　淳（名古屋大学）　代表者発表

13:10-13:30　松下　雄一郎（東京工業大学）

SiC/SiO2 界面における残留炭素の消失過程：POCl3 界面処理の有効性解明

13:30-13:50　Kieu My Bui（名古屋大学）

A Reaction Pathway of Surface-Catalyzed Ammonia Decomposition and Nitrogen Incorporation in Epitaxial Growth of Gallium Nitride

13:50-14:10　Gennady Mil’nikov（大阪大学）

The RSDFT-EM Representation and Large Scale First Principle Transport Simulations of Realistic Nanowire

サブ課題Ｆ：次世代機能性化学品

14:10-14:15　松林　伸幸（大阪大学）　代表者発表

14:15-14:35　山田　一雄（大阪大学）

全原子 MD シミュレーションを用いた長鎖高分子の化学ポテンシャル評価の開発

14:35-14:55　田中　宏一（デンソー）　有機/無機界面での接着性シミュレーション

14:55-15:10　Coffee Break

招待講演

15:10-15:50　吉田　亮（統計数理研究所）　マテリアルズインフォマティクスの最前線

サブ課題Ｃ：超伝導・新機能デバイス材料

15:50-15:55　今田　正俊（東京大学）　代表者発表

15:55-16:15　野村　悠祐（東京大学）

Development of machine-learning solvers for analyzing strongly-correlated electron systems

16:15-16:35　山地　洋平（東京大学）

Exploration of topological spin liquids

16:35-18:20　ポスターセッション

18:30-20:20　意見交換会（工学部 2 号館展示室）

7 月 20 日（金）

サブ課題 D：高性能永久磁石・磁性材料

9:30-9:35　三宅　隆（産業技術総合研究所）　代表者発表

9:35-9:55　佐藤　暢哉（産業技術総合研究所）

Bayes 最適化を用いた結晶構造探索

9:55-10:15　山口　直也（金沢大学）

スピン流-電流変換制御に向けた界面スピン分裂の第一原理計算

10:15-10:35　寺澤　麻子（東京工業大学）

永久磁石アモルファス粒界相の第一原理計算およびグラフ理論を用いた解析手法の提案

10:35-10:50　Coffee Break

サブ課題 E：高信頼性構造材料

10:50-10:55　香山正憲（産業技術総合研究所）　代表者発表

10:55-11:15　香山正憲（産業技術総合研究所）

鉄中の粒界-添加元素相互作用の第一原理計算とデータ構築

11:15-11:35　Swastibrata Bhattacharyya（横浜国立大学）

Microstructure evolution in Ni-Al alloy for changing alloy composition from first-principles based phase field method

11:35-11:55　澁田靖（東京大学）

凝固・粒成長プロセスに係る原子・組織スケール大規模シミュレーション

11:55-13:20　Lunch Break

招待講演

13:20-14:00　塚田捷（東京大学名誉教授）　走査プローブ顕微鏡と分子架橋系をめぐって

サブ課題Ｂ：光・電子融合デバイス

14:00-14:05　矢花一浩（筑波大学）　代表者発表

14:05-14:25　野田真史（筑波大学）

表面-金クラスター複合系における光誘起電子ダイナミクス

14:25-14:45　植本光治（筑波大学）

第一原理電子ダイナミクス計算によるナノフォトニクスシミュレーション

14:45-15:00　Coffee Break

サブ課題Ｇ：共通基盤シミュレーション手法

15:00-15:05　尾崎泰助（東京大学）　代表者発表

15:05-15:25　吉本芳英（東京大学）

平面波基底型電子状態計算ソフトウエア xTAPP の開発状況

15:25-15:45　Theresa Davey（東北大学）

第一原理ベースの新 CALPHAD 相図計算手法の探索

15:45-16:05　李東珍（名古屋大学）

大規模一般化固有値問題の指定番目の固有対の計算

16:05-16:25　曽田繁利（理化学研究所）

三角格子量子スピン系 Ba3CoSb2O9 の非弾性中性子散乱の解析

16:25-16:45　諮問委員コメント

【ポスター発表】　7 月 19 日　16:35-18:20

サブ課題Ａ：高機能半導体デバイス

P1　Mohammad Hussein Naseef Al Assadi　（物質・材料研究機構）

Understanding the effects of distortions and crystal symmetry on the Na ion cathode potential based on O3 NaTMO2

P2　小野　倫也（筑波大学）

Improvement of wave-function-matching technique for large-scale first-principles electron-transport calculation

P3　吉田　勝尚（筑波大学）

ナノスケールデバイス構造のもとでの不完全遮蔽に伴った局在不純物の長距離ポテンシャルゆらぎ

サブ課題Ｂ：光・電子融合デバイス

P4　飯田　健二（分子科学研究所）

電圧を印加した MoS2-Graphene ヘテロ構造における光誘起電子移動

P5　矢花　一浩（筑波大学）

汎用光科学第一原理計算ソフトウェア SALMON の開発と応用

サブ課題Ｃ：超伝導・新機能デバイス材料

P6　　金子　隆威（東京大学）

テンソルネットワーク手法を用いたハニカム格子上のスピン 1/2 ガンマ模型の基底状態探索

P7　　酒井　志朗（理化学研究所）

モット絶縁体と高温超伝導体の電子構造における直接の関係

P8　　原田　健自（京都大学）

1 次元確率過程のテンソルネットワークシミュレーション

P9　　森田　悟史（東京大学）

テンソルネットワークくりこみ群を用いた高次モーメントの計算

サブ課題 D：高性能永久磁石・磁性材料

P10　　見波　将（金沢大学）

強磁性ハーフホイスラー化合物 CoMnSb における熱電特性の第一原理計算

サブ課題 E：高信頼性構造材料

P11　　徐　卓（産業技術総合研究所）

Segregation properties of 3d-transition-metal solutes in bcc Fe grain boundaries

P12　　Sankar Deb Nath（東北大学）

Solid and liquid phases of Al-Cu alloys by Monte Carlo/Molecular dynamics (MC/MD) simulations

サブ課題Ｆ：次世代機能性化学品

P13　　浦長瀬　正幸（名古屋工業大学）

高分子修飾表面−液体間の接着性の定量的評価手法の開発

サブ課題G：共通基盤シミュレーション手法

P14　桑田　亨成（鳥取大学）

乱れたペンタセン薄膜系の大規模電子状態計算

P15　遠山　貴巳（東京理科大学）

大型実験施設との連携: 銅酸化物高温超伝導体のスピン・電荷励起

P16　福田　将大（東京大学）

自己エネルギー補正を含む分割統治法を用いた非平衡グリーン関数法による O(N)電子伝導計算

P17　星　健夫（鳥取大学）

陽電子回折むけ解析ソフトの高度化

P18　星　健夫（鳥取大学）

ベイズ推定を用いた並列固有値ソルバーの性能予測

P19　CHICHENG LEE　（東京大学）

Derivation of tight-binding representation of momentum matrix elements in atomic-orbital basis: Anomalous Hall conductivity in bcc Fe

一般

P20　足立　大樹（東京大学）

重ね合わせ最適化法による実験データとエネルギー計算を組み合わせた構造推定

P21　岸本　政徳（東京理科大学）

ハニカムー三角格子におけるキタエフ・ハイゼンベルク模型の基底状態相図

P22　辻本　直人（東京大学）

不完全な実験データを利用した結晶構造予測

P23　中嶋　武（横浜国立大学）

LDA/oneshot-GW + スピン軌道相互作用の Si2p 準位計算

P24　吉澤　香奈子（高度情報科学技術研究機構）

GUI 支援ツール C-Tools の分析：DFT コードの連携を見据えて

P25 Iurii Nagornov（東京大学）

Stochastic Non-empirical approach to the reaction path seeking

P26 Hengyu Li（Jilin University）

Mutual Influence of Different Hydrogen Concentration on Energy and Electric Structure in α-Zirconium System with Vacancies

＜資料２＞

第 4 回 CDMSI（ポスト「京」重点課題(7)）シンポジウム
～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～

【日時】平成 30 年 12 月 17 日（月）～ 12 月 18 日（火）
【場所】東京大学　柏キャンパス　物性研究所講堂

【プログラム】
12 月 17 日（月）

13:00-13:10　開会のご挨拶

重点課題（７）代表者：常行　真司（東京大学）

サブ課題Ａ：高機能半導体デバイス

13:10-13:40　押山　淳（名古屋大学）　代表者発表

13:40-14:00　白石　賢二（名古屋大学）

GaN の MOCVD 成長のマルチフィジックスシミュレーション

サブ課題Ｂ：光・電子融合デバイス

14:00-14:30　矢花　一浩（筑波大学）　代表者発表

14:05-14:25　廣川　祐太（筑波大学）

電子動力学アプリケーション"SALMON"の各先端プロセッサへの実装状況

14:50-16:40　ポスターセッション、Coffee Break

招待講演

16:40-17:10　小林　洋平　（東京大学）　ものづくり CPS における計算機科学への期待

サブ課題Ｃ：超伝導・新機能デバイス材料

17:10-17:40　今田　正俊（東京大学）　代表者発表

17:40-18:00　大久保　毅（東京大学）

テンソルネットワーク法の開発とキタエフスピン液体への適用

18:00-20:00　　意見交換会（プラザ憩い）

12 月 18 日（火）

サブ課題 D：高性能永久磁石・磁性材料

9:30-10:00　　三宅　隆（産業技術総合研究所）　代表者発表

10:00-10:20　　合田　義弘（東京工業大学）

磁性材料における単相・表面・界面の構造と局所磁気特性

サブ課題Ｅ：高信頼性構造材料

10:20-10:50　　香山　正憲（産業技術総合研究所）　代表者発表

10:55-11:15　　譯田　真人（物質・材料研究機構）

大規模第一原理計算に基づく鉄合金中の転位－侵入型・置換型元素の相互作用解析

招待講演

11:10-11:30　　茂本　勇（スーパーコンピューティング技術産業応用協議会、東レ株式会社）

産業界からの主体的なニーズ発信の試み－産業シミュレーションロードマップの概要－

11:30-13:00　　Lunch Break

招待講演

13:00-13:30　　森　初果（東京大学）

水素と電子のカップリングによる新機能材料・デバイスの開発

サブ課題Ｇ：共通基盤シミュレーション手法

13:30-14:00　　尾崎　泰助（東京大学）　代表者発表

14:00-14:20　　星　健夫（鳥取大学）

超並列計算物質科学と数理・情報科学との融合

14:20-14:35　　Coffee Break

サブ課題Ｆ：次世代機能性化学品

14:35-15:05　　松林　伸幸（大阪大学）　代表者発表

15:05-15:25　　浦長瀬　正幸（名古屋工業大学）

有機/無機界面のシミュレーションに関するトピックス

共通課題

15:25-15:40　　森田　悟史（東京大学）　ポスト「京」とのコデザインに関する現状報告

15:40-16:15　　諮問委員コメント

16:15　　重点課題（７）責任者：　常行　真司（東京大学）

閉会の挨拶

【会議】

12 月 18 日

11:30-13:00　　第 2 回　企画会議・諮問委員会　合同会議

16:30-18:00　　第 2 回　諮問委員会

【ポスター発表】　12 月 17 日（月）　14:50-16:40

サブ課題Ａ：高機能半導体デバイス

P1　「TCAD デバイスシミュレーションによる Si ナノシートトランジスタの解析」

鎌倉　良成（大阪大学）

P2　「SiC 表面ステップの原子構造」

制野　かおり（クロスアビリティ、名古屋大学）

P3　「RSDFT に基づいた Si/Ge ナノシートの第一原理輸送シミュレーション」

美里劫　夏南（大阪大学）

P4　「ナノスケールデバイス構造のもとでの不完全遮蔽に伴った局在不純物の長距離ポテンシャルゆらぎ(II)」

吉田　勝尚（筑波大学）

P5　「Acceleration of computation of self-energy matrices for large-scale first-principleselectron-transport calculation」

小野　倫也（筑波大学）

サブ課題Ｂ：光・電子融合デバイス

P6　「TDDFT による非線形光学応答の時空間空間解析」

植本　光治（筑波大学）

P7　「表面 - 金クラスター複合系における光誘起電子ダイナミクスの解析」

野田　真史（筑波大学）

サブ課題Ｃ：超伝導・新機能デバイス材料

P8　「物質科学シミュレーションのポータルサイト MateriApps の紹介」

井戸　康太（東京大学）

P9　「ファインマン・ダイアグラム展開に基づく量子モンテカルロ法の開発と応用」

大越　孝洋（東京大学）

P10　「ギャップレス Kitaev スピン液体の効率的なテンソル積状態表示の数値的探索」

金子　隆威（東京大学）

P11 「擬一次元 S=1 反強磁性スピン模型における離散磁気励起」

鈴木　隆史（兵庫県立大学）

P12 「(1+1)次元有向浸透現象のエントロピー」

原田　健自（京都大学）

P13 「クリロフ部分空間法による有限温度スペクトル計算」

山地　洋平（東京大学）

P14 「Quantum Spin Liquids in materials with strong spin-orbit coupling-

from 2D Checkerboard to 3D Pyrochlore -」

Rico Pohle（東京大学）

サブ課題Ｄ：高性能永久磁石・磁性材料

P15 「酸化物及びビスマス表面合金におけるワニア関数を用いたスピン分裂の第一原理的解析」

石井　史之（金沢大学）

P16 「Bayes 最適化を用いた結晶構造探索における記述子のパラメータ選択」

佐藤　暢哉（産業技術総合研究所）

P17 「第一原理計算を用いた永久磁石のアモルファス粒界相および主相 -アモルファス

相界面の磁性解析」

寺澤　麻子（東京工業大学）

P18 「強磁性 Heusler 合金/BaTiO3(001)界面構造における電気磁気結合の第一原理的評価」

濱崎　恭考（東京工業大学）

P19 「ThMn12 型希土類 -鉄化合物の熱力学的安定性に対する希土類元素置換と圧力の効果」

原嶋　庸介（産業技術総合研究所）

サブ課題Ｅ：高信頼性構造材料

P20 「Thermodynamic properties of bcc Fe grain boundaries with segregation of

3d-transition-metal solutes」

徐　卓（産業技術総合研究所）

サブ課題Ｆ：次世代機能性化学品

P21 「分子動力学シミュレーションを用いた長鎖高分子化学ポテンシャルの効率的な計算手法の開発」

山田　一雄（大阪大学）

サブ課題Ｇ：共通基盤シミュレーション手法

P22 「四角酸における反強誘電－強誘電転移のシミュレーション」

石橋　章司（産業技術総合研究所）

P23 「有機トランジスタ界面系の大規模電子状態計算と準局在波動関数」

角田　皓亮（鳥取大学）

P24 「単体金属における超伝導汎関数理論の精度評価」

河村　光晶（東京大学）

P25 「新しい大行列数理アルゴリズムの京・Oakforest-PACS における超並列性能」

桑田　亨成（鳥取大学）

P26 「クリープ特性向上を目指した耐熱鋼中炭化物の相安定性解明の新展開」

佐原　亮二（物質・材料研究機構）

P27 「多次元強相関量子系のための時間依存密度行列繰り込み群法の改良と応用」

曽田　繁利（理化学研究所）

P28 「高速化データ駆動科学としての陽電子回折」

田中　和幸（鳥取大学）

P29 「ベイズ推定による超並列計算の性能予測の検討」

原田　祐希（鳥取大学）

P30 「網羅的 DFT 計算による AB2 型単一層構造の探索」

福田　将大（東京大学）

P31 「産業展開を目指した有機高分子材料の大規模量子シミュレーション」

星　健夫（鳥取大学）

P32 「正方カゴメ格子反強磁性体 Cu6AlBiO4(SO4)5･KCl の磁気解析」

森田　克洋（東京理科大学）

P33 「エネルギー保存型並列数値解法 MB4 の 2 次元波束ダイナミクスへの適用」

山本　有作（電気通信大学）

P34 「シフト型クリロフ部分空間解法を用いた大規模疎行列向け並列化数値計算ルーチン Kω の利用方法・シミュレーション事例の紹介」

吉見　一慶（東京大学）

P35 「A method to calculate Kohn-Sham response function using pseudo atomic orbitals:Hyperbolic dispersion in perovskites」

Chi-Cheng Lee（東京大学）

P36 「第一原理ベースの新 CALPHAD 相図計算手法の探索(II)」

Theresa Davey（東北大学）

一般

P37 「ポスト「京」萌芽 極限マテリアル サブ課題Ｃ 進捗報告：強光子場に駆動される非線形電子ダイナミクス」

篠原　康（東京大学）

P38 「ポテンシャル平面における様々な脱出経路を非経験的に探索する方法の開発」

Iurii Nagornov（東京大学）

P39 「Coupled-cluster singles and doubles (CCSD) self-energy for Wannier interpolation of one-particle Green’s functions」

小杉　太一（東京大学）

＜資料３＞

第一回ポスト「京」に向けたアプリ高度化合宿

【日時】平成 30 年 6 月 11 日（月）～ 6 月 13 日（水）
【場所】理化学研究所　計算科学研究センター6 階講堂

【プログラム】
6 月 11 日（月）

12:30～13:00　受付

13:00～13:15　藤堂眞治（東京大学）「合宿の目的とスケジュール説明」
古宇田光（東京大学）「シミュレータ NDA の説明」

13:15～14:00　佐藤三久（理化学研究所）「ポスト「京」のアーキテクチャ説明」

14:00～14:45　南一生（理化学研究所）「ポスト「京」性能推定ツール説明」

14:45～15:30　富士通株式会社「アプリケーション診断の進め方説明」

15:30～18:00　実習（コンサル）

18:00～19:00　夕食

19:00～20:00　重田育照（筑波大学）
「第一原理計算における性能チューニング：コデザインとは？」

20:00～21:00　情報交換会

6 月 12 日（火）

9:10～9:40　「京」コンピュータ見学

9:40～12:00　グループ実習（類似アプリでグループを設けて相互学習）

12:00～13:00　昼食

13:00～14:00　今村俊幸（理化学研究所）
招待講演「数値ライブラリ開発状況とチューニング」

14:00～17:30　グループ実習

17:30～19:00　夕食

19:00～21:00　実習（コンサル）

6 月 13 日（水）
9:00～12:00　診断結果グループ内発表（ノウハウ共有）

12:00～13:00　昼食

13:00～15:00　富士通株式会社、藤堂眞治（東京大学）
「課題抽出、課題解決に向けた合宿後の取り組み指針まとめ」

15:00　終了

第二回ポスト「京」に向けたアプリ高度化合宿

【日時】平成 30 年 11 月 28 日（水）～11 月 30 日（金）
【場所】理化学研究所　計算科学研究センター6 階講堂

【プログラム】
11 月 28 日（水）
12:30～13:00　受付

13:00～13:15　藤堂眞治（東京大学）「合宿の目的とスケジュール説明」

13:15～14:00　児玉祐悦（理研 R-CCS）「Arm&SVE エミュレータの最新情報」

14:00～15:00　富士通株式会社「ツールによるボトルネック解析と一般的な高度化手法」

15:00～18:00　実習・コンサル：高度化手法によるチューニング

18:00～19:00　夕食

19:00～19:30　山地洋平（東京大学）「アプリ高度化進捗報告：HΦ」

19:30～20:00　大越孝洋（東京大学）「アプリ高度化進捗報告：mVMC」

20:00～21:00　情報交換会

11 月 29 日（木）
9:00 ～12:00　実習・コンサル：高度化手法によるチューニング

12:00～13:00　昼食

13:00～14:00　星健夫（鳥取大学）
「並列数値計算ライブラリに見る、高度化とコデザイン戦略の潮流」

14:00～17:30　実習・コンサル：高度化手法によるチューニング

17:30～19:00　夕食

19:00～19:30　福田将大（東京大学）「アプリ高度化進捗報告：OpenMX」

19:30～20:00　野田真史（筑波大学）「アプリ高度化進捗報告：SALMON」

11 月 30 日（金）

9:00 ～11:00　実習・高度化結果まとめ

11:00～12:00　発表 （参加者全員　10 分/人以内）

12:00～13:00　昼食

13:00～14:00　発表 （参加者全員　10 分/人以内）

14:00～15:00　富士通株式会社「課題抽出、課題解決に向けた合宿後の取り組み指針まとめ」

15:00　終了

＜資料４＞

第 2 回計算物質科学イノベーションキャンプ

【日時】　平成 30 年 10 月 2 日（火）～ 10 月 4 日（水）
【場所】　鳥取県米子市　皆生シーサイドホテル 海の四季

【プログラム】
10 月 2 日（火）
13：30-14：00　ガイダンス

14：00-15：00　講義 1：「スーパーコンピュータにおける計算物質科学と数理科学の連携：数値計算ライブラリとそのアルゴリズム」星健夫（鳥取大学）

15：10-16：10　講義 2：「MateriApps を利用した計算物質科学のソフトウエアの探し方・情報共有」三澤貴宏（東京大学）

16：10-18：00　ソフトウエアのインストール・チュートリアル実施

20：00-21：00　招待講演 1：「アカデミアとインダストリーの垣根を超えて」藤井幹也（パナソニック）

10 月 3 日（水）
9：00-10：00　講義 3：「計算物性物理におけるアルゴリズムとライブラリ」藤堂眞治（東京大学）

10：00-12：00　実習 1：課題選定

14：00-15：00　講義 4：「大規模固有値問題の数値解法と計算物質科学への応用」曽我部知広（名古屋大学）

15：10-16：10　講義 5：「テンソルネットワーク法による情報圧縮と物性物理への応用」大久保毅（東京大学）

16：10-18：00　実習 2：課題への取り組み

20：00-21：00　招待講演 2：「カニ殻由来の新素材”キチンナノファイバー”の製造と
その機能を活かした事業化」伊福伸介（鳥取大学）

10 月 4 日（木）
9：00-12：00　実習：課題への取り組み・成果の整理

13：00-14：30　成果発表・情報共有　チーム代表者

14：30-14：45　総括および今後の課題等議論

＜資料５＞

見える化シンポジウム

見える化シンポジウム 2019　バーチャルでリアルを超えろ

～難解サイエンスを映像で感覚的につたえる～

【日時】平成 31 年 3 月 2 日（土）13:00 ～ 18:30

【場所】秋葉原 UDX シアター

【プログラム】

12:30-13:00　受付

13:00-13:05　「分子と結晶のランデブー」

岡山大学異分野基礎科学研究所理論化学研究室　准教授　松本正和

13:05-13:15　挨拶

東京大学大学院理学系研究科/物性研究所　教授

ポスト「京」重点課題(7)課題責任者　常行真司

文部科学省研究振興局計算科学技術推進室　室長　坂下鈴鹿

13:15-13:30　課題提起 1　「進歩したか、物質科学の見える化」

東京大学大学院理学系研究科/物性研究所 教授　藤堂眞治

13:30-13:45　課題提起 2　「アニメなら伝わる？スーパーコンピュータの価値」

理化学研究所計算科学研究推進室　桑原のどか

13:45-14:00　課題提起 3　「若年層に向けた科学広報」

筑波大学計算科学研究センター広報室　矢田雅哉

14:00-14:40　招待講演 1　「VTuber による計算科学の啓蒙にむけて」

株式会社クロスアビリティ　松原庄吾

14:40-15:00　コーヒーブレイク（秋葉原 UDX 内 STYLE ROOM）

15:00-15:40　招待講演 2　「図表や模型の上をみんなで歩くこと」

番匠カンナバーチャル建築設計事務所　番匠カンナ

15:40-16:25　特別招待講演　「現実を科学する」

株式会社ハコスコ 代表取締役/デジタルハリウッド大学大学院　専任教授　藤井直敬

16:25-16:40　　コーヒーブレイク（秋葉原 UDX 内 STYLE ROOM）

16:40-17:40　　パネルディスカッション「バーチャル物質をリアルに届けるには」
パネリスト：株式会社クロスアビリティ　代表取締役　古賀良太
坂下鈴鹿、番匠カンナ、藤井直敬、藤堂眞治、矢田雅哉
モデレータ：東京大学物性研究所計算物質科学研究センター　古宇田光

17:40-17:45　　エンディング

17:45-18:30　　情報交換会　参加者間や講演者との交流タイム（秋葉原 UDX 内 STYLE ROOM）

[見える化シンポジウム2019]

バーチャルでリアルを超える
難解サイエンスを映像で感覚的に伝える

2019年3月2日（土）
13：00-18：30（受付開始：12：30）

秋葉原UDXシアター
東京都千代田区外神田4-14-1、4F
http://www.udx-t.jp/access.html

[Program]

オープニング映像 13:00 → 13:05	分子と結晶のランデブー	松本正和　岡山大学 異分野基礎科学研究所 理論化学研究室 准教授
あいさつ 13:05 → 13:15	常行真司　東京大学大学院理学系研究科 / 物性研究所 教授、重点課題（7）課題責任者 坂下鈴鹿　文部科学省 研究振興局 計算科学技術推進室 室長	
課題提起 1 13:15 → 13:30	進歩したか、物質科学の見える化	藤堂眞治　東京大学大学院理学系研究科 / 物性研究所 教授
課題提起 2 13:30 → 13:45	アニメなら伝わる？スーパーコンピュータの価値	桑原のどか　理化学研究所 計算科学研究推進室
課題提起 3 13:45 → 14:00	若年層に向けた科学広報	矢田雅哉　筑波大学計算科学研究センター 広報室
招待講演 1 14:00 → 14:40	VTuber による計算科学の啓蒙にむけて	松原庄吾　株式会社クロスアビリティ
コーヒーブレイク（20 分）（秋葉原 UDX 内 STYLE ROOM）		
招待講演 2 15:00 → 15:40	図表や模型の上をみんなで歩くこと	番匠カンナ　番匠カンナ バーチャル建築設計事務所
特別招待講演 15:40 → 16:25	現実を科学する	藤井直敬　株式会社ハコスコ代表取締役／デジタルハリウッド大学大学院 専任教授
コーヒーブレイク（15 分）（秋葉原 UDX 内 STYLE ROOM）		
パネルディスカッション 16:40 → 17:40	バーチャル物質をリアルに届けるには	パネリスト：古賀良太　株式会社クロスアビリティ代表取締役、 番匠カンナ、藤井 直敬、藤堂眞治、矢田雅哉 モデレータ（全体司会）：古宇田光　東京大学 物性研究所 計算物質科学研究センター
エンディング 17:40 → 17:45		
情報交換会 17:45 → 18:30	参加者間や講演者との交流タイム（秋葉原 UDX 内 STYLE ROOM）	

[Profile]

松本正和
岡山大学 異分野基礎科学研究所 理論化学研究室 准教授
「水」研究のスペシャリスト。スパコンで「水」の不思議を紐解いている。科学の面白さを映像や分子模型で一般の方に伝えるアーティストでもある。

藤堂眞治
東京大学大学院理学系研究科 / 物性研究所 教授
博士（理学）。1996 年東京大学大学院理学系研究科博士課程修了。専門は計算物理、量子統計力学。趣味は学生のプログラムのデバッグ。HPCI 戦略分野 2、ポスト「京」重点課題（7）で広報代表者を務める。

桑原のどか
理化学研究所 計算科学研究推進室
2018 年 3 月　理化学研究所入所。計算科学研究推進室広報グループに着任して初めての仕事がアニメ制作。前職は小学生向け教材の編集者で、計算科学の世界は全くの門外漢。文系による文系のための理系広報ができれば、と模索中。

矢田雅哉
筑波大学計算科学研究センター 広報室
ポスト「京」重点課題（9）での広報担当。専門は素粒子物理学。高エネルギー科学の啓蒙が目標。趣味はアニメ鑑賞とビデオゲーム。

松原庄吾
株式会社クロスアビリティ
東京藝術大学卒、株式会社バンダイナムコゲームス（現バンダイナムコスタジオ）、株式会社ネクソン等を経てフリーランスデザイナーに。クロスアビリティでは次世代研究者の育成を目的とした CG コンテンツ開発、Winmostar のリブランディング等に取り組んでいる。

古賀良太
株式会社クロスアビリティ代表取締役
2008 年 1 月に大学発ベンチャー創業。材料科学・バイオ分野の会社開発計算化学 GUI ソフトソフト Winmostar を開発しライセンス事業を展開。シミュレーション、可視化、並列化・高速化に関する受託も実績。科学とアートの融合領域事業を検討中。東京工業大学 非常勤講師。

番匠カンナ
番匠カンナ バーチャル建築設計事務所
2018 年 4 月生まれ。xR 時代の「新しい空間」を建築の視点から開拓するバーチャル建築家。VRChat にてアンビルト建築や立体模型等の VR 化などを行う。xR × 建築の技術者コミュニティ「xRArchi」の委員長を務める。

藤井直敬
株式会社ハコスコ代表取締役／
デジタルハリウッド大学大学院 専任教授
東北大学医学部卒、医学博士。MIT、理化学研究所脳科学総合研究センター 適応知性研究チーム・リーダーを経て 2014 年株式会社ハコスコ設立。主要研究テーマは、適応知性および社会的脳機能解明。主な著書『つながる脳』『拡張する脳』等。

お問合せ：東京大学　物性研究所　計算物質科学研究センター　〒277-8581　千葉県柏市柏の葉5-1-5　TEL: 04-7136-3207　EMAIL: adm-office@cms-initiative.jp

様式第２１　　別添１

学 会 等 発 表 実 績

委託業務題目:「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」

機　関　名:国立大学法人東京大学

1. 学会等における口頭・ポスター発表

＊ポスト「京」重点課題(7)研究会、シンポでの発表は除く　　*国外＝日本で開催の国際会議も含む

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（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
サブ課題Ａ				
計算物質科学と上村先生（口頭発表）	押山淳	「物質科学シンポジウム　半導体物理、２次元物質科学の半世紀―シリコン、炭素材料、高温超伝導、表面物理」（東京）	H30.5.12	国内
First-principle study of ammonia decomposition and nitrogen incorporation on the GaN surface in Metal Organic Vapor Phase Epitaxy（口頭発表）	K.M. Bui, J.-I. Iwata, Y. Kangawa, K. Shiraishi, Y. Shigeta and A. Oshiyama	19th International Conference on Metalorganic Vapor Phase Epitaxy (ICMOVPE-XIX) (Nara)	H30.6.4	国外
Real-Space Density-Functional-Theory (RSDFT) Code for Large-Scale Calculations in Condensed Matter Physics（口頭発表）	Jun-Ichi Iwata	The Platform for Advanced Scientific Computing Conference (PASC18) (Basel, Switzerland)	H30.7.3	国外
Computics approach to power semiconductors: Reactions in GaN epitaxial growth and carrier traps near SiC/SiO$_2$ Interfaces（口頭発表）	Atsushi Oshiyama	37th Electronic Materials Symposium (Nagahama, Shiga)	H30.10.11	国外
Incorporation of Nitrogen-related Species on Ga-rich GaN (0001) Surfaces（口頭発表）	K.M. Bui, J.-I. Iwata, Y. Kangawa, K. Shiraishi, Y. Shigeta and A. Oshiyama	International Workshop on Nitride Semiconductors (IWN2018) (Kanazawa)	H30.11.12	国外
Electronic Properties of Nanometer-Scale Surfaces and Interfaces through Computics Approach（口頭発表）	押山淳	日本真空表面学会学術講演会（神戸）	H30.11.20	国内
SiC/SiO2界面でのキャリヤートラップの正体：積層変調による伝導帯下端のゆらぎと炭素関連欠陥の同定（口頭発表）	押山淳	応用物理学会「電子デバイス界面テクノロジー研究会－材料・プロセス・デバイス特性の物理」（三島）	H31.1.24	国内
Reaction Pathway of Surface-Catalyzed Ammonia Decomposition and Nitrogen Incorporation in Epitaxial Growth of Gallium Nitride（口頭発表）	K.M. Bui, M. Boero, K. Shiraishi and A. Oshiyama	APS March Meeting 2019 (Boston, U.S.A)	H31.3.5	国外
Large-scale density-functional calculations in real space and its application to bilayer graphene and semiconductor epitaxial growth（口頭発表）	Atsushi Oshiyama	APS March Meeting 2019 (Boston, U.S.A)	H31.3.6	国外
DFT calculation for electronic structure of SiC/SiO2 after nitridization（ポスター発表）	Tomoya Ono	European Conference on Silicon Carbide and Related Materials 2018 (Birmingham, UK)	H30.9.5	国外
DFT Study on Atomic and Electronic Structures of SiC/SiO2 after NO Annealing（ポスター発表）	Tomoya Ono	49th IEEE Semiconductor Interface Specialists Conference, (San Diego, U.S.A)	H30.12.7	国外
Triplet-Triplet Annihilation Up-conversion Processes of9,10-diphenylanthracene in solution and solid phases（口頭発表）	Y. Shigeta	10th Asian Photochemistry Conference (Taipei, Taiwan)	H30.12.16-12.20	国外
Evolution of ab-initio calculation based on real-space finite-difference method for massively parallel computers（口頭発表）	Tomoya Ono	International Workshop on Massively Parallel Programming for Quantum Chemistry and Physics 2019 (RIKEN-CCS, Kobe)	H31.1.15	国外

1. 学会等における口頭・ポスター発表

＊ポスト「京」重点課題(7)研究会、シンポでの発表は除く　　*国外＝日本で開催の国際会議も含む

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（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
Theoretical Insight into Triplet-Triplet Annihilation Up-conversion Processes in Solution and Solid Phases（口頭発表）	Y. Shigeta	International Workshop of Photofunctional Materials Using Spin Degrees of Freedom: Interplay among synthesis, measurement, and theory (Osaka, Japan)	H31.1.24	国内
Theoretical Studies on Triplet-Triplet Annihilation Up-conversion Processes in Solution and Solid Phases（口頭発表）	Y. Shigeta	Theoretical Chemistry Symposium 2019 (Pilani, India)	H31.2.13-2.16	国外
ドリフト拡散シミュレーションにおける基盤不純物の離散性に伴った分極効果（口頭発表）	塚原浩平、吉田勝尚、佐野伸行	第66回応用物理学会春季学術講演会（東京工業大学大岡山キャンパス）	H31.3.10	国内
酸化膜界面近傍に局在する不純物による散乱ポテンシャルの乱雑位相近似（口頭発表）	菅吉朗、吉田勝尚、佐野伸行	第66回応用物理学会春季学術講演会（東京工業大学大岡山キャンパス）	H31.3.10	国内
Quantum transport device simulation based on real-space density functional theory and non-equilibrium Green's function method（口頭発表）	N. Mori, G. Mil'nikov, J. Iwata, and A. Oshiyama	International Union of Materials Research Societies - International Conference on Electronic Materials 2018 (Daejeon, Korea)	H30.8.23	国外
大規模並列計算によるモンテカルロデバイスシミュレーションの高速化（口頭発表）	山下大輝、鎌倉良成、森伸也	第79回応用物理学会秋季学術講演会（名古屋国際会議場）	H30.9.21	国内
Anomalous phonon diffusion in isotopically disordered armchair-edge graphene nanoribbons（口頭発表）	N. Mori, T. Kamioka and G. Mil'nikov	31st International Microprocesses and Nanotechnology Conference (Sapporo)	H30.11.14	国外
電子とフォノンのマルチフィジクスシミュレーション（口頭発表）	森伸也	第212回シリコンテクノロジー分科会研究集会（応物会館，東京）	H30.11.26	国内
サブ課題Ｂ				
Ab-initio simulations for ultrashort laser-pulse irradiation on nanomaterials（口頭発表）	K. Yabana	SPIE Defense + Commercial Sensing 2018 (Florida, U.S.A)	H30.4.15	国外
第一原理計算光・物質科学の創成(口頭発表)	矢花一浩	光極限第５回領域会議（柏の葉カンファレンスセンター）	H30.4.21	国内
Ab-initio large-scale simulation for initial stage of laser damage in transparent nano-materials（口頭発表）	K. Yabana, M. Uemoto, S.A. Sato, Y. Hirokawa, T. Boku	3rd Smart Laser Processing Conference 2018 (Yokohama)	H30.4.24	国外
電子ダイナミクスの第一原理計算を巡って（口頭発表）	矢花一浩	光とナノ物質の相互作用：分子科学の未来に向けて（岡崎コンファレンスセンター）	H30.6.10	国内
Ab-initio large-scale computational approach for ultrafast dynamics in nano-structures（口頭発表）	M. Uemoto, S. A. Sato, Y. Hirokawa, T. Boku, K. Yabana	EXCON2018 (Nara)	H30.7.9	国外
A first-principles simulation method for ultrafast nano-optics（ポスター発表）	K. Yabana, M. Uemoto, S.A. Sato, Y. Hirokawa, T. Boku	XXI International Conference on Ultrafast Phenomena, (Hamburg, Germany)	H30.7.15	国外
高強度超短パルス光と誘電体の相互作用を記述する第一原理計算(口頭発表)	矢花一浩	BRLセミナー（NTT物性科学基礎研究所）	H30.8.20	国内
Ab-initio multiscale simulation method for ultrafast nano-optics,15th Int. Conf. on Near-Field Optics（ポスター発表）	K. Yabana, M. Uemoto, S.A. Sato, Y. Hirokawa, T. Boku	Nanophotonics and Related Techniques (Troyes, France)	H30.8.26	国外

1. 学会等における口頭・ポスター発表

＊ポスト「京」重点課題(7)研究会、シンポでの発表は除く　　*国外＝日本で開催の国際会議も含む

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（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
First principles calculations for wave vector excitations of silicon induced by optical near fields（ポスター発表）	M. Noda, M. Yamaguchi, K. Iida and K. Nobusada	NFO15（Troyes, France）	H30.8.27	国外
第一原理電子ダイナミクス計算による半導体微細構造の斜方向光伝搬シミュレーション（口頭発表）	植本光治、矢花一浩	日本物理学会2018年秋季大会（同志社大学京田辺キャンパス）	H30.9.10	国内
Spatio-Temporal Analysis of Nonlinear Optical Responses by Time-Dependent Density Functional Theory(口頭発表)	M. Uemoto, Y. Kuwabara, S. A. Sato and K. Yabana	International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations（Tsukuba）	H30.11.14	国外
Direct wave vector excitations of silicon induced by optical near fields（口頭発表）	M. Noda, K. Iida, M. Yamaguchi, T. Yatsui and K. Nobusada	International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations（Tsukuba）	H30.11.14	国外
Maxwell+TDDFT Ab initio Multiscale Simulation and Application to Nano-optics（口頭発表）	M. Uemoto, S. A. Sato, Y. Hirokawa, T. Boku and K. Yabana	International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations（Tsukuba）	H30.11.16	国外
Maxwell+TDDFT マルチスケール計算のための 斜め方向光入射の取り扱いについて（口頭発表）	植本光治、矢花一浩	第29回光物性研究会（京都大学宇治おうばくプラザ）	H30.12.8	国内
First-Principles Simulations for Extreme Light-Matter Interaction（口頭発表）	K. Yabana	50th Reimei Workshop on Universal Physics in Many-Body Quantum Systems - From atoms to Quarks （Ibaraki Quantum Beam Research Center, Tokai）	H30.12.12	国外
誘電体の超高速光応答～第一原理計算からのアプローチ～ （口頭発表）	矢花一浩	レーザー学会学術講演会シンポジウム「固体におけるアト秒・強光子場科学の最前線(東海大学高輪キャンパス)	H31.1.13	国内
Ab-initio large-scale computational approach for ultrafast dynamics in Nano-Optics(口頭発表)	M. Uemoto	International Workshop on Massively Parallel Programming for Quantum Chemistry and Physics 2019 (RIKEN-CCS, Kobe)	H31.1.16	国外
固体超高速現象に対する数値実験手法の開発と応用（口頭発表）	矢花一浩	日本光学会光波シンセシス研究グループ研究会「光の絶対位相制御と分光計測・物質操作への応用」（東京大学生産技術研究所）	H31.2.12	国内
第一原理電子ダイナミクス計算に基づくナノフォトニクスシミュレーション(口頭発表)	植本光治	MI2Iマテリアルズ探索グループ拡大合同Working「ナノテクノロジーにおけるマテリアルズ・インフォマティクス・ネットワーク」（浜松）	H31.2.17	国内
Massively-parallel first-principles calculations for near field optics: wave vector excitations in silicon（ポスター発表）	M. Noda, K. Iida, M. Yamaguchi, K. Ishimura, T. Yatsui, K. Nobusada and K. Yabana	The 1st R-CCS International Symposium (Kobe International Conference Center)	H31.2.18	国外
Large-scale ab-initio simulation for nano-optics based on time-dependent density functional theory（ポスター発表）	M. Uemoto, K. Yabana	The 1st R-CCS International Symposium (Kobe International Conference Center)	H31.2.18	国外
Maxwell+TDDFT multiscale simulation for optical response of nanomaterials(口頭発表)	M. Uemoto, K. Yabana	APS March Meeting 2019 (Boston, U.S.A)	H31.3.5	国外
Massively-parallel time-dependent density functional theory calculations for optical near-field excitations in silicon（口頭発表）	M. Noda, K. Iida, M. Yamaguchi, K. Ishimura, T. Yatsui, K. Nobusada, K. Yabana	APS March Meeting 2019 (Boston, U.S.A)	H31.3.5	国外
Maxwell+TDDFTマルチスケール計算によるナノフォトニクスシミュレーション(口頭発表)	植本光治、矢花一浩	日本物理学会第74回年次大会(2019)(九州大学伊都キャンパス)	H31.3.15	国内

1. 学会等における口頭・ポスター発表

＊ポスト「京」重点課題(7)研究会、シンポでの発表は除く　　*国外＝日本で開催の国際会議も含む

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（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
Novel chemical reactions using a non-uniform optical field（口頭発表）	T. Yatsui	JSPS Core-to-Core Japan Workshop 2018（東京大学本郷キャンパス）	H30.7.5	国外
Massively-parallel time-dependent density functional theory calculations for optical near-field excitations in silicon （口頭発表）	Masashi Noda, Kenji Iida, Maiku Yamaguchi, Kazuya Ishimura, Takashi Yatsui, Katsuyuki Nobusada, Kazuhiro Yabana	APS March Meeting 2019 (Boston, U.S.A)	H31.3.4-3.8	国外
近接場光援用光吸収によるシリコン受光感度の高効率化（口頭発表）	竹森達也、齋地康太、佐藤匠、大鋸本達郎、千足昇平、丸山茂夫、野田真史、矢花一浩、飯田健二、信定克幸、八井崇	第66回応用物理学会春季学術講演会（東京工業大学大岡山キャンパス）	H31.3.9	国内
Control of Photoinduced Electron Transfer in MoS2-Graphene Heterostructure by Applied Bias Voltage（口頭発表）	Kenji Iida, Masashi Noda, Katsuyuki Nobusada	International Workshop on Nanoscale electron-phonon interactions via energy dissipation and fluctuation 2018 (The University of Tokyo, Hongo)	H30.7.5	国外
First-Principles Computational Simulation of Optical Response of a Gold-Thiolate Nanoparticle（口頭発表）	Kenji Iida, Masashi Noda, Katsuyuki Nobusada	15th International conference of Near-field Optics and Nanophotonics (Troyes, France)	H30.8.27	国外
電圧の印加による二次元層状物質界面での光誘起電子移動の制御（口頭発表）	飯田健二、野田真史、信定克幸	第12回分子科学討論会（福岡国際会議場）	H30.9.12	国内
Photoinduced Electron Dynamics of Heterointerface Systems Simulated by Massively Parallel Calculations（口頭発表）	Kenji Iida, Masashi Noda, Katsuyuki Nobusada	International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations （Tsukuba）	H30.11.16	国外
サブ課題C				
機械学習を用いた量子多体系の基底状態計算（口頭発表）	野村悠祐	物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の今と未来」（東京大学物性研究所）	H30.4.3	国内
Machine learning in condensed matter physics(口頭)	M. Imada	International Workshop on Machine Learning and Many-Body Quantum Physics (New York, U.S.A)	H30.4.26	国外
Dark Fermion Theory of Cuprate Superconductors(口頭発表)	M. Imada	Ljubljana Corr'18 Correlated electron systems in, near, and far from equilibrium (Ljubljana, Slovenia)	H30.6.7	国外
Ab initio studies and dark fermion theory of cuprate superconductors(口頭発表)	M. Imada	International workshop on QUANTUM COMPLEX MATTER (Rome,Italy)	H30.6.11	国外
Tensor network combined with variational Monte Carlo method and application to itinerant fermion systems(口頭発表)	M. Imada	International Workshop on Optimising, Renormalising, Evolving and Quantising Tensor Networks (Dresden, Germany)	H30.6.21	国外
Machine Learning to analyze High-Tc Experimental Data and Boltzmann Machine for Quantum Many-Body Problems(口頭発表)	M. Imada	International Workshop on Machine Learning for Quantum Many-body Physics (Dresden, Germany)	H30.6.26	国外
Resummation of diagrammatic series with zero convergence radius for the unitary Fermi gas(ポスター発表)	T. Ohgoe	The 26th International Conference on Atomic Physics (Barcelona, Spain)	H30.7.23	国外
Rejuvenated Understanding of Cuprate High-Tc Superconductors(口頭発表)	M. Imada	New Frontiers of Strongly Correlated Electron Materials workshop (Beijing, China)	H30.8.16	国外
Dark Fermion Theory and Ab Initio Studies on Cuprate Superconductors(口頭発表)	M. Imada	12th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity and High Temperature Superconductors (Beijing, China)	H30.8.20	国外

1. 学会等における口頭・ポスター発表

＊ポスト「京」重点課題(7)研究会、シンポでの発表は除く　　*国外＝日本で開催の国際会議も含む

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（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
Machine learning using Boltzmann machines for solving strongly correlated systems（口頭発表）	Y. Nomura	Computational Approaches to Magnetic Systems (CAMS 2018) (Pohang, Korea)	H30.8.27	国外
Machine-learning solvers for quantum many-body systems(口頭発表)	Y. Nomura	日本物理学会2018年秋季大会（同志社大学京田辺キャンパス）	H30.9.10	国内
ダイアグラム展開に基づく量子モンテカルロ法を用いたユニタリー フェルミ気体の運動量分布及びTanのコンタクトの解析(口頭発表)	T. Ohgoe	日本物理学会2018年秋季大会（同志社大学京田辺キャンパス）	H30.9.10	国内
Resummation of diagrammatic series with zero convergence radius for the unitary Fermi gas（ポスター発表）	T. Ohgoe	3rd International Symposium on Research and Education of Computational Science (RECS2018) (The University of Tokyo, Hongo)	H30.9.21	国外
ファインマン・ダイアグラム展開に基づく量子モンテカルロ法による冷却フェルミ原子系の高精度数値計算(口頭発表)	T. Ohgoe	新学術領域「量子クラスターで読み解く物質の階層構造」キックオフシンポジウム(東京)	H30.11.20	国内
Solving quantum many-body Hamiltonians with artificial neural networks(口頭発表)	Y. Nomura	Tensor Network States: Algorithms and Applications (TNSAA) 2018-2019 (Kobe)	H30.12.3	国外
制限付きボルツマンマシンを用いた量子多体系の機械学習ソルバーの開発（口頭発表）	野村悠祐	第8回「強相関電子系理論の最前線」（熱海）	H31.2.4	国内
Refurbished and Rejuvenated Understanding of Cuprate High-Tc Superconductors(口頭発表)	M. Imada	APCTP-KIAS Quantum Materials Symposium 2019 (YongPyong, Korea)	H31.2.11	国外
物性物理のグランドチャレンジに対する重回帰分析と機械学習(口頭発表)	M. Imada	日本物理学会第74回年次大会(2019)(九州大学伊都キャンパス)	H31.3.16	国内
電子格子相互作用のある系に対する機械学習ソルバーの開発(口頭発表)	Y. Nomura	日本物理学会第74回年次大会(2019)(九州大学伊都キャンパス)	H31.3.17	国内
テンソルネットワーク法を用いたキタエフ模型の基底状態の記述（口頭発表）	金子隆威、大久保毅、山地洋平、川島直輝	物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の今と未来」（東京大学物性研究所）	H30.4.2	国内
平衡および非平衡条件で電子相関により誘起される超伝導と空間不均一性（口頭発表）	井戸康太	基研研究会「電子相関が生み出す新規な秩序と超伝導現象：トポロジー、液晶状態、動的現象」(京都大学基礎物理学研究所)	H30.5.7	国内
「多変数変分モンテカルロ法のオープンソースソフトウェアmVMCの強相関超伝導への適用」(口頭発表)	三澤貴宏	基研研究会「電子相関が生み出す新規な秩序と超伝導現象：トポロジー、液晶状態、動的現象」(京都大学基礎物理学研究所)	H30.5.7-5.9	国内
量子多体問題の計算科学と量子スピン液体への応用（口頭発表）	山地洋平	ImPACT 未来開拓研究会（富山）	H30.5.31	国内
Spin and Thermal Excitations in Kitaev-type Frustrated Magnets （口頭発表）	Youhei Yamaji	KIAS-KAIST Workshop on Topology and Correlation (Seoul, South Korea)	H30.6.8	国外
Asymmetric melting of one-third plateau in kagome quantum antiferromagnets(ポスター発表)	三澤貴宏、本山裕一、山地洋平	International Conference on Highly Frustrated Magnetism 2018 (Davis, U.S.A)	H30.7.8-7.14	国外
Inverse Spin Hall Effect and Magnetization Switching in Topological Dirac Semimetals(ポスター発表)	三澤貴宏、野村健太郎	International Conference on Magnetism (IMC2018) (San Francisco, U.S.A)	H30.7.16-7.20	国外
テンソルネットワーク法を用いた非対角相互作用を持つハニカム格子模型の基底状態の探索（口頭発表）	金子隆威、大久保毅、山地洋平、川島直輝	日本物理学会2018年秋季大会（同志社大学京田辺キャンパス）	H30.9.12	国内
Tensor-product-state description of a gapless Kitaev spin liquid revisited（ポスター発表）	R. Kaneko, T. Okubo, H.-Y. Lee, Y. Yamaji, and N. Kawashima	3rd International Symposium on Research and Education of Computational Science (RECS2018) (The University of Tokyo, Hongo)	H30.9.19	国外

1. 学会等における口頭・ポスター発表

＊ポスト「京」重点課題(7)研究会、シンポでの発表は除く　　*国外＝日本で開催の国際会議も含む

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（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
Origin of high-temperature superconductivity as a non-linear inverse problem studied by machine learning（口頭発表）	Youhei Yamaji	3rd International Symposium on Research and Education of Computational Science (RECS2018) (The University of Tokyo, Hongo)	H30.9.21	国外
Assessing the numerical accuracy of tensor-network representation of the Kitaev spin liquid（ポスター発表）	R. Kaneko, T. Okubo, H.-Y. Lee, Y. Yamaji, and N. Kawashima	Topological Phases and Functionality of Correlated Electron Systems (TPFC2019) (Kashiwa)	H31.2.18	国外
Semi-Quantized Pumping and Spin-Orbit Torque in Topological Dirac Semimetals （口頭発表）	三澤貴宏、野村健太郎	APS March Meeting 2019 (Boston, U.S.A)	H31.3.4-3.8	国外
Quantum spin liquids in the pyrochlore S=1/2 Heisenberg model with Dzyaloshinskii-Moriya interactions（口頭発表）	Rico Pohle, Youhei Yamaji, Masatoshi Imada	日本物理学会第74回年次大会(2019)(九州大学伊都キャンパス)	H31.3.14	国内
Numerical search for tensor-network representation reproducing the critical behavior of the Kitaev spin liquid（口頭発表）	R. Kaneko, T. Okubo, H.-Y. Lee, Y. Yamaji, and N. Kawashima	日本物理学会第74回年次大会(2019)(九州大学伊都キャンパス)	H31.3.14	国内
トポロジカルディラック電子系におけるポンピングの半量子化と スピン軌道トルク（口頭発表）	三澤貴宏、野村健太郎	日本物理学会第74回年次大会(2019)(九州大学伊都キャンパス)	H31.3.14-3.17	国内
サブ課題Ｄ				
First-principles study of spin-wave dispersion in Sm(FeCo)_12（口頭発表）	Taro Fukazawa, Hisazumi Akai, Yosuke Harashima and Takashi Miyake	Intermag 2018 (Mariana Bay Sands Convention Center, Singapore)	H30.4.25	国外
A combined computational and machine-learning study of rare-earth-lean magnet compounds（口頭発表）	Takashi Miyake	Santorini Workshop “Future Perspectives on Novel Magnetic Materials (Santorini Palace Hotel, Santorini, Greece)	H30.5.31	国外
First-principles study on stability and magnetism of ZFe12 (Z from K to Rn) compounds（口頭発表）	Zhufeng Hou, Taro Fukazawa, Yosuke Harashima, Kiyoyuki Terakura and Takashi Miyake	The 25th International Conference on Rare-Earth Permanent Magnets and Their Applications (REPM2018) (Peking University, Beijing, China)□	H30.8.29	国外
Machine learning in computational magnetic materials discovery（口頭発表）	Takashi Miyake	日本物理学会2018年秋季大会（同志社大学京田辺キャンパス）	H30.9.10	国内
磁気双極子相互作用下での局所磁化反転時における自由エネルギー障壁（口頭発表）	栂裕太、檜原太一、三宅隆、佐久間昭正、宮下精二	日本物理学会2018年秋季大会（同志社大学京田辺キャンパス）	H30.9.11	国内
Bayes最適化を用いた結晶構造探索における記述子（口頭発表）	佐藤暢哉、山下智樹、小口多美夫、福島孝治、三宅隆	日本物理学会2018年秋季大会（同志社大学京田辺キャンパス）	H30.9.11	国内
情報統合手法による磁石物質開発（口頭発表）	三宅隆	日本金属学会2018年秋期(第163回)大会（東北大学）	H30.9.20	国内
First-principles study of chemical substitution effects in NdFe12 and NdFe12N （ポスター発表）	Yosuke Harashima, Taro Fukazawa and Takashi Miyake	NIMS学術シンポジウム「磁性材料イノベーション（東京国際フォーラム）	H30.10.15	国内
Search for magnet compounds using Bayesian optimization（ポスター発表）	Taro Fukazawa, Yosuke Harashima and Takashi Miyake	NIMS学術シンポジウム「磁性材料イノベーション」（東京国際フォーラム）	H30.10.15	国内
Free energy landscape at the magnetization reversal of permanent magnets（ポスター発表）	Y. Toga, S. Miyashita, A. Sakuma and T. Miyake	NIMS学術シンポジウム「磁性材料イノベーション」（東京国際フォーラム）	H30.10.15	国内
Computational magnetic materials discovery（口頭発表）	Takashi Miyake	「学際研究科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム″CCS International Symposium 2018″ （筑波大学）	H30.10.16	国外

1. 学会等における口頭・ポスター発表

＊ポスト「京」重点課題(7)研究会、シンポでの発表は除く　　*国外＝日本で開催の国際会議も含む

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（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
Computational exploration of strong permanent magnet compounds（口頭発表）	Takashi Miyake	The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2018) (Osaka International Convention Center)	H30.11.2	国外
電子論と機械学習による磁石物質・材料開発（口頭発表）	三宅隆	MagHEM-ESICMM磁性材料合同シンポジウム「永久磁石モーター　技術開発の進展」（SYDホール、東京都）	H30.12.6	国内
Data-driven discovery and analysis of magnetic materials（口頭発表）	Takashi Miyake	Computational Sciences Workshop 2019 (CSW2019) (KFC Hall and Rooms、東京都)	H31.1.16	国外
Curie temperature of Sm2Fe17 and Nd2Fe14B: a first-principles study（口頭発表）	Taro Fukazawa, Hisazumi Akai, Yosuke Harashima and Takashi Miyake	2019 Joint MMM-INTERMAG Meeting (Washington Marriott Wardman Park, Washington D.C., U.S.A)	H31.1.18	国外
Machine learning approach for prediction and understanding of magnetic properties（口頭発表）	Takashi Miyake	The 8th Indo-Japan Seminar “Designing Emergent Materials (The University of Tokyo, Hongo)	H31.1.31	国外
First-principles study of rare-earth magnet compounds（ポスター発表）	Takashi Miyake	The 1st R-CCS International Symposium “K and Post-K: Simuklation, BigData and AI supporting Society 5.0 (Kobe International Conference Center) □	H31.2.18	国外
進化的アルゴリズムによる化学組成探索（口頭発表）	石河孝洋、三宅隆	日本物理学会第74回年次大会(2019)(九州大学伊都キャンパス)	H31.3.15	国内
データ駆動手法による相関物質の予測と理解（口頭発表）	三宅隆	日本物理学会第74回年次大会(2019)(九州大学伊都キャンパス)	H31.3.16	国内
ベイズ最適化と第一原理計算を用いた磁石化合物の探索手法（口頭発表）	深澤太郎、原嶋庸介、Zhufeng Hou、三宅隆	日本物理学会第74回年次大会(2019)(九州大学伊都キャンパス)	H31.3.17	国内
Bayes最適化を用いた結晶構造探索の効率と記述子のパラメータ（口頭発表発表）	佐藤暢哉、山下智樹、小口多美夫、福島孝治、三宅隆	日本物理学会第74回年次大会(2019)(九州大学伊都キャンパス)	H31.3.17	国内
First-principles study of spin-wave dispersion in Sm(FeCo)12(ポスター発表)	T. Fukazawa, H. Akai, Y. Harashima, T. Miyake	Intermag 2018 (Mariana Bay Sands Convention Center, Singapore)	H30.4.23-4.27	国外
Origin of magnetocrystalline anisotropy of Sm2Fe17N3 permanent magnet materials(ポスター発表)	H. Akai	International Conference on Magnetism (IMC2018) (San Francisco, U.S.A)	H30.7.15-7.20	国外
Calculated Seebeck coefficient of transition-metal elements（口頭発表）	S. Kou and H. Akai	CCP2018, Davis, U.S.A	H30.7.31	国外
Effects of electron-phonon scattering on half-metallicity of Co2MnSi（口頭発表）	H. Akai	PASPS10 (Linz, Austria)	H30.8.6	国外
Possible highest performance of permanent magnet materials（口頭発表）	H. Akai	JEMS2018 (Mainz, Germany)	H30.9.3	国外
First-principles calculation of transition-metal Seebeck coefficients（口頭発表）	H. Akai and S. Kou	TPS-34 (Bodrum, Turkey)	H30.9.7	国外
広い組成空間における希土類磁石の第一原理にもとづく探索の手法（口頭発表）	松本宗久、赤井久純、Martin Hoffmann	日本物理学会第74回年次大会(2019)(九州大学伊都キャンパス)	H31.3.15	国内
Ga添加型Nd焼結磁石界面に対する第一原理的研究（ポスター発表）	立津 慶幸、合田義弘	物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の今と未来」（東京大学物性研究所）	H30.4.2	国内
第一原理計算による一次元 Rashba 効果を示す新たな表面系の探索（ポスター発表）	田中友規、合田義弘	物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の今と未来」（東京大学物性研究所）	H30.4.2	国内

1. 学会等における口頭・ポスター発表

＊ポスト「京」重点課題(7)研究会、シンポでの発表は除く　　*国外＝日本で開催の国際会議も含む

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（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
Electronic states and magnetic properties around the grain boundary in Nd-Fe-B sintered magnets studied by first-principles calculations （口頭発表）	Y. Tatetsu and Y. Gohda	Intermag 2018 (Mariana Bay Sands Convention Center, Singapore)	H30.4.24	国外
Ab-initio simulation of Ga-doped Nd-Fe-B magnets （口頭発表）	Y. Tatetsu and Y. Gohda	IcAUMS 2018 (Jeju, Korea)	H30.6.7	国外
Surface-science studies by OpenMX （口頭発表）	Y. Gohda	The International Summer Workshop 2018 on First-Principles Electronic Structure Calculations (ISS2018) (ISSP, Kashiwa)	H30.7.10	国外
First-principles study on typical elements in Nd2Fe14X (X = B, C, N, O, F) （口頭発表）	Y. Tatetsu, Y. Harashima, T. Miyake, Y. Gohda	ICM2018 (San Fransisco, U.S.A)	H30.7.20	国外
First-principles prediction of ferromagnetism in MnB and MnC monolayer films on nonmagnetic transition-metal surfaces （口頭発表）	Y. Gohda and S. Nakamura	ECOSS34 (Aarhus, Denmark)	H30.8.29	国外
Ab-initio study on Ga-added Nd-Fe-B sintered magnets（口頭発表）	Y. Tatetsu and Y. Gohda	REPM2018 (Beijing, China)	H30.8.30	国外
Nd2Fe14Bの表面構造に対する第一原理計算（口頭発表）	塩沢知春、合田義弘	日本物理学会2018年秋季大会（同志社大学京田辺キャンパス）	H30.9.9	国内
ガブリエルグラフを用いたアモルファスNd-Fe合金の構造特性解析（口頭発表）	寺澤麻子、合田義弘	日本物理学会2018年秋季大会（同志社大学京田辺キャンパス）	H30.9.10	国内
Gabriel Graph Analysis of Amorphous Nd-Fe Alloys and Relationship with Their Magnetism（口頭発表）	A. Terasawa and Y. Gohda	ACSIN-14 & ICSPM26 (Sendsai)	H30.10.23	国外
ネオジム磁石内アモルファス粒界相に対する第一原理シミュレーション （口頭発表）	寺澤麻子、合田義弘	2018年日本表面真空学会学術講演会（神戸国際会議場）	H30.11.20	国内
磁性材料の第一原理電子論（口頭発表）	合田義弘	第28回日本MRS年次大会（北九州国際会議場、福岡県）	H30.12.20	国内
Bi原子吸着したIn原子鎖における新奇1次元Rashba効果の第一原理計算（口頭発表）	田中友規、合田義弘	第28回日本MRS年次大会（北九州国際会議場、福岡県）	H30.12.20	国内
New spin filtering mechanism through atomic chains without magnetic field: first-principles study（口頭発表）	T. Tanaka and Y. Gohda	APS March Meeting 2019 (Boston, U.S.A)	H31.3.4	国外
ネオジム磁石のアモルファス粒界相の磁気結合の第一原理計算および解析（口頭発表）	寺澤麻子、合田義弘	日本物理学会第74回年次大会(2019)(九州大学伊都キャンパス)	H31.3.14	国内
強磁性Heusler合金/BaTiO3(001)界面構造における電気磁気結合の第一原理的評価（口頭発表）	濱﨑恭考、合田義弘	日本物理学会第74回年次大会(2019)(九州大学伊都キャンパス)	H31.3.17	国内
SmFe12 磁石主相の結晶粒表面に対する第一原理計算（口頭発表）	塩沢知春、合田義弘	日本金属学会2019年春期(第164回)講演大会（東京電機大学）	H31.3.22	国内
サブ課題Ｅ				
鉄中の侵入型元素間の相互作用に関する電子論解析（ポスター発表）	譯田真人	第3回マルチスケール材料力学シンポジウム（高知工科大学永国寺キャンパス）	H30.5.25	国内
鉄粒界への3d遷移金属元素の偏析の第一原理計算：磁性と機械的性質への効果（口頭発表）	徐卓、香山正憲、田中真悟、椎原良典	日本物理学会2018年秋季大会（同志社大学京田辺キャンパス）	H30.9.9	国内

1. 学会等における口頭・ポスター発表

＊ポスト「京」重点課題(7)研究会、シンポでの発表は除く　　*国外＝日本で開催の国際会議も含む

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（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
Overall features of grain-boundary segregation of 3d transition-metal solutes in bcc Fe: ab-initio local-energy approach（口頭発表）	徐卓、香山正憲、田中真悟	日本金属学会2018年秋期(第163回)大会（東北大学）	H30.9.19	国内
Atomistic study of dislocation-solute interaction in iron alloys based on ab initio calculation（口頭発表）	Masato Wakeda	International Symposium on Atomistic Processes of Crystal Plasticity -Toward quantitative understanding of crystal strength- (APCP2018) (The University of Tokyo, Hongo)	H30.10.25-10.27	国外
First-Principles Study of Grain-Boundary Segregation of 3d-Transition Metal Solutes in bcc Fe: Local-Energy Analysis（口頭発表）	Zhuo Xu, Shingo Tanaka and Masanori Kohyama	International Symposium on Atomistic Processes of Crystal Plasticity -Toward quantitative understanding of crystal strength- (APCP2018) (The University of Tokyo, Hongo)	H30.10.26	国外
Thermodynamic properties of bcc Fe grain boundaries with segregation of 3d-transition-metal solutes（口頭発表）	Zhuo Xu, Shingo Tanaka and Masanori Kohyama	The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2018) (Osaka International Convention Center, Osaka)	H30.10.28-11.2	国外
Effects of a bulk-region size in the first-principles tensile test of a grain boundary（口頭発表）	Masanori Kohyama, Hao Wang and Shingo Tanaka	The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2018) (Osaka International Convention Center, Osaka)	H30.10.28-11.2	国外
Grain-Boundary Segregation of 3d-Transition Metal Solutes in bcc Fe: Ab Initio Local-Energy Approach（口頭発表）	Zhuo Xu, Shingo Tanaka and Masanori Kohyama	第28回日本MRS年次大会（西日本総合展示場、北九州）	H30.12.18-12.20	国内
Segregation properties of 3d transition-metal solutes in bcc Fe grain boundaries: ab-initio local-energy approach（ポスター発表）	Zhuo Xu, Shingo Tanaka and Masanori Kohyama	Computational Sciences Workshop 2019 (CSW2019) (KFC (Kokusai Fashion Center) hall, Ryogoku)	H31.1.16-1.18	国内
First-principles local-energy and local-stress schemes to understand and design micro-structures of structural materials（ポスター発表）	Masanori Kohyama, Zhuo Xu and Shingo Tanaka	1st R-CCS International Symposium（神戸国際会議場）	H31.2.18-2.19	国外
Atomic configurations of Mg symmetric tilt grain boundaries: ab initio simulations（口頭発表）	徐卓、田中真悟、香山正憲	日本金属学会2019年春期(第164回)講演大会（東京電機大学）	H31.3.20-3.22	国内
局所エネルギー・局所応力の第一原理計算法開発と金属粒界への最近の応用（口頭発表）	香山正憲、徐卓、王昊、田中真悟	日本金属学会2019年春期(第164回)講演大会（東京電機大学）	H31.3.20-3.22	国内
マテリアルズ・インフォマティクスを材料設計開発ツールとするための高信頼性データベース構築（口頭発表）	川添良幸、水関博志、大野かおる、佐原亮二、本郷研太、南里豪志	ナノ学会第１６回大会（東京大学、武田ホール）	H30.5.11	国内
GW without BSE 法による光吸収スペクトルの計算:GWΓ 法の適用(ポスター発表)	磯部智遥、桑原理一、大野かおる	ナノ学会第１６回大会（東京大学、武田ホール）	H30.5.11	国内
分子と水クラスター間の吸着エネルギーのクラスターサイズ依存性(ポスター発表)	桑畑和明、大野かおる	ナノ学会第１６回大会（東京大学、武田ホール）	H30.5.11	国内
TOMBO Tutorial: Lecture II（口頭発表）	Kaoru Ohno	The 12th Conference of Asian Consortium of Computational Materials Science - Theme Meeting (ACCMS-TM)(Hanoi, Vietnam)	H30.9.7	国外
First-principles calculations of hyperfine structures of some atoms and radicals（ポスター発表）	Hiroyuki Terada and Kaoru Ohno	The 12th Conference of Asian Consortium of Computational Materials Science - Theme Meeting (ACCMS-TM)(Hanoi, Vietnam)	H30.9.8	国外

1. 学会等における口頭・ポスター発表

＊ポスト「京」重点課題(7)研究会、シンポでの発表は除く　　*国外＝日本で開催の国際会議も含む

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（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
Excited state force calculation in TOMBO code（ポスター発表）	Yoshihito Maeda and Kaoru Ohno	The 12th Conference of Asian Consortium of Computational Materials Science - Theme Meeting (ACCMS-TM)(Hanoi, Vietnam)	H30.9.8	国外
LDA/ oneshot-GW + spin-orbit coupling calculation for Si2p level（ポスター発表）	Takeru Nakashima and Kaoru Ohno	The 12th Conference of Asian Consortium of Computational Materials Science - Theme Meeting (ACCMS-TM)(Hanoi, Vietnam)	H30.9.8	国外
Development of First-principles Phase Field Model（口頭発表）	Kaoru Ohno	The 12th Conference of Asian Consortium of Computational Materials Science - Theme Meeting (ACCMS-TM)(Hanoi, Vietnam)	H30.9.9	国外
準粒子方程式における自己エネルギーのエネルギー依存性の効果(ポスター発表)	磯部智遥, 大野かおる	日本物理学会2018年秋季大会（同志社大学京田辺キャンパス）	H30.9.12	国内
準粒子方程式の線形化の効果（ポスター発表）	磯部智遥、大野かおる	第14回ナノテク交流シンポジウム（横浜市立大学、横浜）	H31.3.8	国内
全電子混合基底法による超微細構造の理論計算手法の開発(ポスター発表)	寺田裕之、大野かおる	第14回ナノテク交流シンポジウム（横浜市立大学、横浜）	H31.3.8	国内
全電子混合基底法を用いた原子間力及び分子振動計算(ポスター発表)	鰐部翔太、大野かおる	第14回ナノテク交流シンポジウム（横浜市立大学、横浜）	H31.3.8	国内
Theoretical study on phase equilibria and phase transition of ZrO2（口頭発表）	Tetsuo MOHRI and Ying CHEN	10th Korea-Japan Berkeley Symposium on Advanced Materials Graduate Institute of Ferrous Technology, POSTECH (Pohang, Korea)	H30.6.20-6.22	国外
Post-K supercomputer project in Japan and first-principles multiscale calculation on phase transformation (口頭発表)	Tetsuo MOHRI	International Frontier Workshop on Advanced Metallic Materials (School of Materials Science and Engineering, Central South University China)	H30.9.9-9.10	国外
Cu-Auの熱力学特性の第一原理計算(口頭発表)	毛利哲夫	日本金属学会2018年秋期(第163回)大会（東北大学）	H30.9.19-9.21	国内
Cluster Expansion Method Study on the Effective Interacdtion in Fe-C Alloys(口頭発表)	Tien Quang Nugyen, Kazuhiro Sato, Yoji Shibutani, Tamio Oguchi and Tetsuo Mohri	日本金属学会2018年秋期(第163回)大会（東北大学）	H30.9.19-9.21	国内
Post-K supercomputer project in Japan and first-principles multiscale calculation for phase transition(口頭発表)	Tetsuo MOHRI	Department seminar (Deaprtment of Materials Science and Engineering, Research Institute for Advanced Materials, Seoul National University, Korea)	H30.10.16	国外
Grain boundary sliding within the entropy production rate theory(口頭発表)	Tetsuo Mohri	The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2018) (Osaka International Convention Center, Osaka)	H30.10.28-11.2	国外
Microstructure formation in alloys studied by First-principles Phase Field calculations(口頭発表)	Tetsuo Mohri	Seminar at Wigner Research Centre for Physics, Hungarian Academy of Sciences (Budapest, Hungary)	H31.1.17	国外
First-principles Cluster Variation, Path Probability and Phase Field calculations to investigate microstructure formation under SIP project(口頭発表)	Tetsuo Mohri	Seminar at Institute of Physics, Slovak Academy of Sciences (Bratislava, SR)	H31.2.26	国外
Re-visit to Cu-Au First-principles Thermodynamics(口頭発表)	Tetsuo Mohri	TMS2019 (Henry B. González Convention Center, San Antonio, Texas, U.S.A)	H31.3.10-3.14	国外

1. 学会等における口頭・ポスター発表

＊ポスト「京」重点課題(7)研究会、シンポでの発表は除く　　*国外＝日本で開催の国際会議も含む

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（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
Cluster Expansion Simulations of Fe-C Alloys with Point Defects:Atomic and Effective Cluster Interactions	Tien Quang NGUYEN, Mary Clare Sison Escano, Kazuhiro Sato, Yoji Shibutani, Tamio Oguchi and Tetsuo Mohri	日本金属学会2019年春期(第164回)講演大会（東京電機大学）	H31.3.20-3.22	国内
Cu-Au系の格子緩和の理論計算（口頭発表）	毛利哲夫	日本金属学会2019年春期(第164回)講演大会（東京電機大学）	H31.3.20-3.22	国内
Incorporation of Short-Range Correlations within the Steepest-Entropy-Ascent quantum Thermodynamics Model(口頭発表)	山田亮、毛利哲夫	日本金属学会2019年春期(第164回)講演大会（東京電機大学）	H31.3.20-3.22	国内
High-performance phase-field lattice Boltzmann modelling and simulationof multiple dendrite growth with motion（口頭発表）	T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta	55th Annual Technical Meeting of the Society of Engineering Sciences (University Carlos III of Madrid, Madrid,, Spain)	H30.10.10-10.12	国外
Quantitative phase-field modelling and simulations of alloy solidification with two-sided asymmetric diffusion Solidification microstructure formation by phase-field （口頭発表）	M. Ohno, T. Takaki, Y. Shibuta	55th Annual Technical Meeting of the Society of Engineering Sciences (University Carlos III of Madrid, Madrid,, Spain)	H30.10.10-10.12	国外
Microstructure formation in large-scale molecular dynamics simulation（口頭発表）	Y. Shibuta, S. Okita, S. Sakane, E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno	The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2018) (Osaka International Convention Center, Osaka)	H30.10.28-11.2	国外
Solidification microstructure formation by phase-field simulation withmulti-GPU acceleration Solidification microstructure formation by phase-field （口頭発表）	T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Aoki	The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2018) (Osaka International Convention Center, Osaka)	H30.10.28-11.2	国外
Phase-field 法と格子ボルツマン法による柱状デンドライト垂直流れの透過率評価（口頭発表）	高木知弘、坂根慎治、大野宗一、澁田靖、青木尊之	日本鉄鋼協会第176回秋季講演大会（東北大学川内キャンパス）	H30.11.1	国内
等軸晶形成のphase-fieldモデリングと2次元大規模シミュレーション Solidification microstructure formation by phase-field （口頭発表）	高木知弘、坂根慎治、佐藤遼太郎、大野宗一、澁田靖、青木尊之	日本鉄鋼協会第177回春季講演大会（東京電機大学）	H31.3.20-3.22	国内
超大規模分子動力学法シミュレーションによる核生成・凝固・粒成長過程の統一的理解（口頭発表）	澁田靖、大喜多慎、三好英輔、坂根慎治、高木知弘、大野宗一	日本鉄鋼協会第177回春季講演大会（東京電機大学）	H31.3.20-3.22	国内
サブ課題Ｆ				
オーダーN法を用いたMD/DFT自己無撞着法による分子力場構築（口頭発表）	石塚良介、尾崎泰助、松林伸幸	第21回理論化学討論会（岡崎コンファレンスセンター）	H30.5.15-5.17	国内
MDシミュレーションを用いたβシート凝集の自由エネルギー解析（ポスター発表）	増谷佳一、山守優、金鋼、松林伸幸	第21回理論化学討論会（岡崎コンファレンスセンター）	H30.5.15-5.17	国内
自由エネルギー曲面の鞍点を通らない反応経路の検出：水中における水素結合破断の非アレニウス的挙動（ポスター発表）	菊辻卓真、金鋼、松林伸幸	第21回理論化学討論会（岡崎コンファレンスセンター）	H30.5.15-5.17	国内
ジペプチドの構造変化における反応経路と反応座標（ポスター発表）	森勇介、金鋼、松林伸幸	第21回理論化学討論会（岡崎コンファレンスセンター）	H30.5.15-5.17	国内
分子動力学シミュレーションによるアミロイドβ凝集の構造およびエネルギー解析（ポスター発表）	新田孝志、増谷佳一、松林伸幸	第21回理論化学討論会（岡崎コンファレンスセンター）	H30.5.15-5.17	国内

1. 学会等における口頭・ポスター発表

＊ポスト「京」重点課題(7)研究会、シンポでの発表は除く　　*国外＝日本で開催の国際会議も含む

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（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
溶媒和自由エネルギー解析における空間分割法の導入（ポスター発表）	北村美玖、石井良樹、松林伸幸	第21回理論化学討論会（岡崎コンファレンスセンター）	H30.5.15-5.17	国内
メゾ不均一性をもつ3成分系とミセル系の溶解性と拡散性の比較（ポスター発表）	原健太、石井良樹、松林伸幸	第21回理論化学討論会（岡崎コンファレンスセンター）	H30.5.15-5.17	国内
結晶界面への分子吸着に対して溶媒が及ぼす効果のエネルギー論（ポスター発表）	山本直樹、松林伸幸	第21回理論化学討論会（岡崎コンファレンスセンター）	H30.5.15-5.17	国内
多元溶液系における輸送ダイナミクスの全原子解析（ポスター発表）	石塚良介、松林伸幸	ESICB電池・電子論合同検討会	H30.5.30	国内
How do hydrogen bonds break in supercooled water? : Detecting pathways not going through the saddle point of two- dimensional potential of mean force （ポスター発表）	Takuma Kikutsuji, Kang Kim, and Nobuyuki Matubayasi	Designer Soft Matter 2018 (Singapore)	H30.6.6-6.8	国外
Molecular dynamics study of water structure in contact with PMEA（ポスター発表）	Nobuhiro Yasoshima, Nobuyuki Matubayasi, Makoto Gemmei-Ide, and Tatsuya Ishiyama	International Symposium on Water on Materials Surface 2018 (WMS 2018)（東京理科大学葛飾キャンパス）	H30.7.25-7.27	国外
ナノ粒子が示す流体力学的挙動の全原子分子シミュレーションによる解析（口頭発表）	金鋼、水田圭亮、石井良樹、松林伸幸	日本流体力学会年会2018（大阪大学豊中キャンパス）	H30.9.3-9.6	国内
Extended concept of solvation toward unified treatment of binding functions of molecular aggregates（口頭発表, 招待/依頼）	Nobuyuki Matubayasi	33rd Computational Materials Design (CMD) Workshop （大阪大学豊中キャンパス）	H30.9.3-9.7	国外
Effective charge of ionic liquid determined through MD/DFT self-consistent scheme（口頭発表）	Ryosuke Ishizuka and Nobuyuki Matubayasi	8th International Symposium on Molecular Thermodynamics and Molecular Simulation (MTMS '18)（日本大学津田沼キャンパス）	H30.9.4-9.7	国外
長鎖高分子化学ポテンシャルの効率的な計算手法開発とその応用（口頭発表）	山田一雄、松林伸幸	日本物理学会2018年秋季大会（同志社大学京田辺キャンパス）	H30.9.9-9.12	国内
ナノ流体の流体力学半径に対する溶媒和構造による特徴付け（口頭発表）	水田圭亮、石井良樹、金鋼、松林伸幸	日本物理学会2018年秋季大会（同志社大学京田辺キャンパス）	H30.9.9-9.12	国内
ジペプチドの構造変化を記述する反応座標の選択（口頭発表）	森勇介、金鋼、松林伸幸	日本物理学会2018年秋季大会（同志社大学京田辺キャンパス）	H30.9.9-9.12	国内
高分子粗視化モデルにおけるガラス転移点でのセグメント密度（口頭発表）	友重直也、金鋼、松林伸幸	日本物理学会2018年秋季大会（同志社大学京田辺キャンパス）	H30.9.9-9.12	国内
遷移状態理論から解析する過冷却水中における水素結合破断：透過係数の温度依存性と活性化エネルギーの物理的実態（口頭発表）	菊辻卓真、金鋼、松林伸幸	第12回分子科学討論会（福岡国際会議場）	H30.9.10-9.13	国内
分子動力学法による長鎖イミダゾリウムイオン液体の小分子吸収能と輸送物性解析（ポスター発表）	石井良樹、石塚良介、松林伸幸	化学工学会第50回秋季大会　（鹿児島大学）	H30.9.18-9.20	国内
分子動力学シミュレーションを用いた長鎖高分子の相溶性評価手法の開発（ポスター発表）	山田一雄、松林伸幸	化学工学会第50回秋季大会　（鹿児島大学）	H30.9.18-9.20	国内
分子動力学シミュレーションを用いたポリマー系における吸水能の自由エネルギー解析（ポスター発表）	半田和也、山田一雄、松林伸幸	化学工学会第50回秋季大会　（鹿児島大学）	H30.9.18-9.20	国内

1. 学会等における口頭・ポスター発表

＊ポスト「京」重点課題(7)研究会、シンポでの発表は除く　　*国外＝日本で開催の国際会議も含む

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（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
メゾ不均一溶媒を用いた新規可溶化システムの探索（ポスター発表）	原健太、石井良樹、松林伸幸	化学工学会第50回秋季大会　（鹿児島大学）	H30.9.18-9.20	国内
溶媒効果を取り入れた結晶界面への分子吸着の分子動力学シミュレーションによる解析（ポスター発表）	山本直樹、松林伸幸	化学工学会第50回秋季大会　（鹿児島大学）	H30.9.18-9.20	国内
Free energy analysis of b-sheet aggregation by molecular dynamics simulation（ポスター発表）	Keiichi Masutani, Yu Yamamori, Kang Kim, and Nobuyuki Matubayasi	CBI学会2018年大会（タワーホール船堀）	H30.10.9-10.11	国外
大規模分子シミュレーションと溶液理論の融合によるソフト分子集合系の自由エネルギー解析（口頭発表，招待/依頼）	松林伸幸	第6回材料系ワークショップ ～大規模シミュレーションと機械学習の新展開～（秋葉原UDX ）	H30.10.12	国内
「溶ける／溶けない」から探るソフト分子集合系の物質分配機能（口頭発表，招待/依頼）	松林伸幸	公益社団法人高分子学会 高分子同友会関西勉強会	H30.10.17	国内
溶媒和概念の普遍化に基づくソフト分子集合系の物質分配機能の解析（口頭発表，招待/依頼）	松林伸幸	岡山大学大学院自然科学研究科講演会	H30.10.25	国内
分子動力学シミュレーションを用いた分子集合系のミクロ解析　（口頭発表，招待/依頼）	松林伸幸	ナノサイエンスデザイン教育研究センター　H30年度社会人教育プログラム コース3 超分子・ナノバイオ学　（大阪大学豊中キャンパス）	H30.10.31	国内
タンパク質構造に対する共溶媒効果のエネルギー相関分析（ポスター発表）	山守優、松林伸幸	第5回「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題 成果報告会　（品川）	H30.11.2	国内
Kinetic pathways of hydrogen bonds break in supercooled water（口頭発表）	Kang Kim, Takuma Kikutsuji, and Nobuyuki Matubayasi	Joint Conference of IEMLG/JMLG Annual Meeting 2018 and 41th Symposium on Solution Chemistry of Japan "Understanding of Molecular Liquids and Its Extension to New Fields" (Nagoya University)	H30.11.4-11.8	国外
Transport properties of ionic liquids with advanced non-polarizable force fields based on first-principles calculations（ポスター発表）	Yoshiki Ishii, Ryosuke Ishizuka, and Nobuyuki Matubayasi	Joint Conference of IEMLG/JMLG Annual Meeting 2018 and 41th Symposium on Solution Chemistry of Japan "Understanding of Molecular Liquids and Its Extension to New Fields" (Nagoya University)	H30.11.4-11.8	国外
Development of efficient calculation method of long-polymer chain’s chemical potential and its application（ポスター発表）	Kazuo Yamada and Nobuyuki Matubayasi	Joint Conference of IEMLG/JMLG Annual Meeting 2018 and 41th Symposium on Solution Chemistry of Japan "Understanding of Molecular Liquids and Its Extension to New Fields" (Nagoya University)	H30.11.4-11.8	国外
Molecular dynamics simulation of water sorbed to poly(2-methoxyethyl acrylate)（ポスター発表）	Nobuhiro Yasoshima, Nobuyuki Matubayasi, Makoto Gemmei-Ide, and Tatsuya Ishiyama	Joint Conference of IEMLG/JMLG Annual Meeting 2018 and 41th Symposium on Solution Chemistry of Japan "Understanding of Molecular Liquids and Its Extension to New Fields" (Nagoya University)	H30.11.4-11.8	国外
Connecting hydrogen-bond network rearrangements and diffusional molecular motions in supercooled water（ポスター発表）	Takuma Kikutsuji, Kang Kim, and Nobuyuki Matubayasi	Joint Conference of IEMLG/JMLG Annual Meeting 2018 and 41th Symposium on Solution Chemistry of Japan "Understanding of Molecular Liquids and Its Extension to New Fields" (Nagoya University)	H30.11.4-11.8	国外

1. 学会等における口頭・ポスター発表

＊ポスト「京」重点課題(7)研究会、シンポでの発表は除く　　*国外＝日本で開催の国際会議も含む

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（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
Free energy analysis of amyloid aggregation by molecular dynamics simulation（ポスター発表）	Keiichi Masutani, Yu Yamamori, Kang Kim, and Nobuyuki Matubayasi	Joint Conference of IEMLG/JMLG Annual Meeting 2018 and 41th Symposium on Solution Chemistry of Japan "Understanding of Molecular Liquids and Its Extension to New Fields" (Nagoya University)	H30.11.4-11.8	国外
Free-energy analysis of water absorption in polymer systems with branched structures（ポスター発表）	Kazuya Handa, Kazuo Yamada, and Nobuyuki Matubayasi	Joint Conference of IEMLG/JMLG Annual Meeting 2018 and 41th Symposium on Solution Chemistry of Japan "Understanding of Molecular Liquids and Its Extension to New Fields" (Nagoya University)	H30.11.4-11.8	国外
Intermolecular interaction of water and polytetrafluoroethylene (PTFE) analyzed by molecular dynamics simulation and a theory of solutions（ポスター発表）	Kensuke Kihara and Nobuyuki Matubayasi	Joint Conference of IEMLG/JMLG Annual Meeting 2018 and 41th Symposium on Solution Chemistry of Japan "Understanding of Molecular Liquids and Its Extension to New Fields" (Nagoya University)	H30.11.4-11.8	国外
All-atom analysis of adsorption onto a variety of crystal surfaces using MD simulation with explicit solvent（ポスター発表）	Naoki Yamamoto and Nobuyuki Matubayasi	Joint Conference of IEMLG/JMLG Annual Meeting 2018 and 41th Symposium on Solution Chemistry of Japan "Understanding of Molecular Liquids and Its Extension to New Fields" (Nagoya University)	H30.11.4-11.8	国外
Analysis of solubility and diffusivity in ternary solution with mesoscale inhomogeneity by molecular dynamics simulation（ポスター発表）	Kenta Hara, Yoshiki Ishii, Seishi Shimizu, and Nobuyuki Matubayasi	Joint Conference of IEMLG/JMLG Annual Meeting 2018 and 41th Symposium on Solution Chemistry of Japan "Understanding of Molecular Liquids and Its Extension to New Fields" (Nagoya University)	H30.11.4-11.8	国外
溶液中における生体関連分子複合系の自由エネルギー解析（口頭発表，招待/依頼）	松林伸幸	神戸大学計算科学教育センター　遠隔講義「計算生命科学の基礎Ｖ」	H30.11.21	国内
Blöchl 電荷解析とForce Fitting 法を用いたイオン液体の非分極力場の開発（ポスター発表）	石井良樹、石塚良介、松林伸幸	第32回分子シミュレーション討論会（産総研つくば）	H30.11.28-11.30	国内
分子動力学シミュレーションを用いた長鎖高分子化学ポテンシャルの効率的な計算手法の開発（口頭発表）	山田一雄、松林伸幸	第32回分子シミュレーション討論会（産総研つくば）	H30.11.28-11.30	国内
高分子/水界面の構造とアミノ酸吸着自由エネルギーの側鎖依存性（ポスター発表）	八十島亘宏、松林伸幸	第32回分子シミュレーション討論会（産総研つくば）	H30.11.28-11.30	国内
動的不均一性から探る過冷却水に内在する協調的運動（ポスター発表）	菊辻卓真、川崎猛史、金鋼、松林伸幸	第32回分子シミュレーション討論会（産総研つくば）	H30.11.28-11.30	国内
溶媒中ナノ粒子の流体力学挙動と溶媒和構造：物理化学と流体力学の融合による横断的解析（ポスター発表）	水田圭亮、石井良樹、金鋼、松林伸幸	第32回分子シミュレーション討論会（産総研つくば）	H30.11.28-11.30	国内
分子動力学シミュレーションによるβシート凝集の自由エネルギー解析（ポスター発表）	増谷佳一、山守優、金鋼、松林伸幸	第32回分子シミュレーション討論会（産総研つくば）	H30.11.28-11.30	国内
分子動力学シミュレーションを用いた高分子における吸水能のエネルギー解析（ポスター発表）	半田和也、山田一雄、小嶋秀和、松林伸幸	第32回分子シミュレーション討論会（産総研つくば）	H30.11.28-11.30	国内
分子動力学シミュレーションと溶液理論による水とポリテトラフルオロエチレン（PTFE）の分子間相互作用の解析（ポスター発表）	木原健輔、松林伸幸	第32回分子シミュレーション討論会（産総研つくば）	H30.11.28-11.30	国内
溶媒効果を取り入れた結晶界面への分子吸着の解析（口頭発表）	山本直樹、松林伸幸	第32回分子シミュレーション討論会（産総研つくば）	H30.11.28-11.30	国内

1. 学会等における口頭・ポスター発表

＊ポスト「京」重点課題(7)研究会、シンポでの発表は除く　　*国外＝日本で開催の国際会議も含む

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（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
メゾスケールの過渡的凝集体を形成する3成分溶媒における疎水溶質の溶解性と拡散性（ポスター発表）	原健太、石井良樹、松林伸幸	第32回分子シミュレーション討論会（産総研つくば）	H30.11.28-11.30	国内
分子動力学シミュレーションを用いたアミロイドβ凝集に関する構造および自由エネルギー解析（ポスター発表）	新田孝志、増谷佳一、松林伸幸	第32回分子シミュレーション討論会（産総研つくば）	H30.11.28-11.30	国内
粗視化分子動力学シミュレーションを用いた高分子溶融体のガラス転移温度の解析（ポスター発表）	友重直也、金鋼、松林伸幸	第32回分子シミュレーション討論会（産総研つくば）	H30.11.28-11.30	国内
コミッター解析を用いたジペプチドの構造異性化を記述する反応座標の選択に関する考察（ポスター発表）	森勇介、金鋼、松林伸幸	第32回分子シミュレーション討論会（産総研つくば）	H30.11.28-11.30	国内
Polymer as a Medium for Water Absorption: All-Atom Analysis toward Rational Design （口頭発表, 招待/依頼）	Nobuyuki Matubayasi	Hong Kong-Osaka University 2nd Joint Symposium on Materials Research	H30.12.3-12.4	国外
How do hydrogen bonds break in supercooled water?: Detecting pathways not going through the saddle point of two-dimensional potential of mean force（ポスター発表）	Takuma Kikutsuji, Kang Kim, and Nobuyuki Matubayasi	Hong Kong-Osaka University 2nd Joint Symposium on Materials Research	H30.12.3-12.4	国外
溶液中ナノ粒子の流体力学的挙動と溶媒和構造：物理化学と流体力学の横断的解析（ポスター発表）	水田圭亮、石井良樹、金鋼、松林伸幸	第8回ソフトマター研究会（首都大学東京）	H30.12.7-12.8	国内
粗視化分子動力学シミュレーションを用いた高分子溶融体のガラス転移温度の解析（ポスター発表）	友重直也、金鋼、松林伸幸	第8回ソフトマター研究会（首都大学東京）	H30.12.7-12.8	国内
溶媒和概念の普遍化に基づくソフト分子集合系の物質分配機能の解析（口頭発表, 招待/依頼）	松林 伸幸	新潟大学理学部コロキウム	H31.1.8	国内
多元溶液系における輸送ダイナミクスの全原子解析（口頭発表）	石井 良樹、松林 伸幸	ESICB電池・電子論合同検討会	H31.1.24	国内
エネルギー表示溶液理論の開発とその応用展開（口頭発表, 招待/依頼）	松林伸幸	ダイセル講演会	H31.2.22	国内
生体分子の凝集に対する共溶媒効果の全原子解析（口頭発表）	松林伸幸	「水和とATP エネルギー」研究会	H31.3.10-3.12	国内
イオン液体の輸送特性解析に最適化した分子動力学モデルの開発（口頭発表）	石井良樹、石塚良介、松林伸幸	化学工学会第84年会　（芝浦工業大学）	H31.3.13-3.15	国内
自由エネルギー解析によるポリマー/水界面へのアミノ酸アナログの吸着能評価（ポスター発表）	八十島亘宏、松林伸幸	化学工学会第84年会　（芝浦工業大学）	H31.3.13-3.15	国内
固液界面への吸着の平衡と速度に関する分子動力学シミュレーションを用いた研究（ポスター発表）	山本直樹、松林伸幸	化学工学会第84年会　（芝浦工業大学）	H31.3.13-3.15	国内
メゾ不均一溶液における疎水溶質の溶解性と拡散性のMDによる解析（ポスター発表）	原健太、石井良樹、松林伸幸	化学工学会第84年会　（芝浦工業大学）	H31.3.13-3.15	国内
分子動力学シミュレーションを用いたアミロイドβ凝集の構造と自由エネルギー解析（ポスター発表）	新田孝志、増谷佳一、松林伸幸	化学工学会第84年会　（芝浦工業大学）	H31.3.13-3.15	国内
高効率な二成分長鎖高分子溶融体の相溶性評価手法の開発（口頭発表）	山田一雄、松林伸幸	日本物理学会第74回年次大会(2019)(九州大学伊都キャンパス)	H31.3.14-3.17	国内

1. 学会等における口頭・ポスター発表

＊ポスト「京」重点課題(7)研究会、シンポでの発表は除く　　*国外＝日本で開催の国際会議も含む

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（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
粗視化分子動力学シミュレーションを用いた高分子溶融体の振動状態密度解析（口頭発表）	友重直也、水野英如、金鋼、松林伸幸	日本物理学会第74回年次大会(2019)(九州大学伊都キャンパス)	H31.3.14-3.17	国内
ジペプチドの構造変化を記述する反応座標とコミッター（口頭発表）	森勇介、岡崎圭一、金鋼、松林伸幸	日本物理学会第74回年次大会(2019)(九州大学伊都キャンパス)	H31.3.14-3.17	国内
エネルギー表示溶液理論の開発とソフト分子集合系への応用（口頭発表）	松林伸幸	日本化学会第99春季年会（2019）（甲南大学）	H31.3.16-3.19	国内
第一原理DFT計算を用いて構築したイオン液体の非分極力場：開発と輸送物性への応用（口頭発表）	石井良樹、石塚良介、松林伸幸	日本化学会第99春季年会（2019）（甲南大学）	H31.3.16-3.19	国内
ポリマー/水界面へのアミノ酸アナログの吸着の自由エネルギー解析（口頭発表）	八十島亘宏、松林伸幸	日本化学会第99春季年会（2019）（甲南大学）	H31.3.16-3.19	国内
溶媒効果を取り入れた分子動力学シミュレーションによる結晶界面への分子吸着のエネルギー論（口頭発表）	山本直樹、松林伸幸	日本化学会第99春季年会（2019）（甲南大学）	H31.3.16-3.19	国内
メゾ不均一溶液における疎水性溶質の溶解性と拡散性のMDシミュレーションにおける解析（口頭発表）	原健太、石井良樹、松林伸幸	日本化学会第99春季年会（2019）（甲南大学）	H31.3.16-3.19	国内
アミロイドb凝集に関する構造および自由エネルギーの分子動力学シミュレーションを用いた解析（ポスター）	新田孝志、増谷佳一、松林伸幸	日本化学会第99春季年会（2019）（甲南大学）	H31.3.16-3.19	国内
分子集合系における物質分配機能の溶媒和理論による全原子解析（口頭発表）	松林伸幸	「原子・分子レベルから連続体レベルに至るマルチスケールの理論構築と実際運用」研究会（大阪大学基礎工）	H31.3.28	国内
Large-scale hybrid quantum-classical simulation of metal-epoxy resin bonding in moist environment（口頭発表）	S. Ogata and M. Uranagase	MSAM2018（北九州市、福岡）	H30.4.12	国外
Large-Scale First-Principles Molecular Dynamics Simulation of Organic Molecules@SWCNT for Novel Cathode Material of Li-Ion Battery（口頭発表）	S. Ogata, T. Tsuzuki, and M. Uranagase	60th Electronic Materials Conference (UCSB, U.S.A)	H30.6.27	国外
Hybrid Quantum-Classical Dynamics Simulation of Moisture-Induced Weakening of Metal-Resin Adhesion（口頭発表）	S. Ogata and M. Uranagase	EMN Meeting on Computation and Theory (San Sebastian, Spain)	H30.9.5	国外
Large-Scale DFT Molecular-Dynamics Simulation of Organic Molecules@SWCNT for Li-ion Battery Electrode （口頭発表）	S. Ogata and T. Tsuzuki	EMN Meeting on Computation and Theory (San Sebastian, Spain)	H30.9.5	国外
分子動力学シミュレーションによる金基板自己組織化単分子膜の振動解析 （口頭発表）	浦長瀬正幸, 尾形修司	日本物理学会2018年秋季大会（同志社大学京田辺キャンパス）	H30.9.11	国内
Efficient evaluation of adhesion free energy between a liquid and polymer-grafted substrate （口頭発表）	M. Uranagase and S. Ogata	The 9th Multiscale Materials Modeling (MMM2018) (Osaka International Convention Center)	H30.10.31	国外
Unveiling the chemical reactions involved in moisture-induced weakening of adhesion between aluminum and epoxy resin: a hybrid quantum-classical simulation study（口頭発表）	S. Ogata and M. Uranagase	The 9th Multiscale Materials Modeling (MMM2018) (Osaka International Convention Center)	H30.10.31	国外
Large-scale electronic-level simulation of adhesion strength between Al and epoxy in a moist environment （口頭発表）	S. Ogata	GREEN 2018 (Taipei, Taiwan)	H30.12.22	国外
サブ課題G				

1. 学会等における口頭・ポスター発表

＊ポスト「京」重点課題(7)研究会、シンポでの発表は除く　　*国外＝日本で開催の国際会議も含む

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（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
有限要素法を用いた解析接続によるグリーン関数の評価方法（ポスター発表）	福田将大、尾崎泰助	物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の今と未来」（東京大学物性研究所）	H30.4.2-4.3	国内
DFTによる原子間力顕微鏡の探針と結晶表面の原子間の化学結合力評価（口頭発表）	福田将大，馮凌瑜，籔押慶祐，小野田穣，杉本宜昭，尾崎泰助	第21回理論化学討論会（岡崎コンファレンスセンター）	H30.5.15-5.17	国内
パフィアン計算の高速化(口頭発表)	今野裕大、吉本芳英	HotSPA2018（たかみや瑠璃倶楽リゾート（蔵王））	H30.6.14	国内
Peculiar bonding allowing great atomic-scale engineering in two-dimensional borophene（口頭発表）	Chi-Cheng Lee, Baojie Feng, Marie D'angelo, Ryu Yukawa, Ro-Ya Liu, Takahiro Kondo, Hiroshi Kumigashira, Iwao Matsuda, and Taisuke Ozaki	16th Workshop on First-Principles Computational Materials Physics (National Tsing Hua University, Hsinchu, Taiwan)	H30.6.25-6.26	国外
Unfolding band structure into a conceptual Brillouin zone（口頭発表）	Chi-Cheng Lee	The International Summer Workshop 2018 on First-Principles Electronic Structure Calculations (ISS2018) (ISSP, Kashiwa)	H30.7.2-7.12	国外
Tight-binding representation of momentum matrix element（口頭発表）	Chi-Cheng Lee	The International Summer Workshop 2018 on First-Principles Electronic Structure Calculations (ISS2018) (ISSP, Kashiwa)	H30.7.2-7.12	国外
First-principles tight-binding calculations of optical conductivity using non-orthogonal atomic basis functions（口頭発表）	Chi-Cheng Lee and Taisuke Ozaki	日本物理学会2018年秋季大会（同志社大学京田辺キャンパス）	H30.9.9-9.12	国内
First-principles study of anomalous Hall conductivity in bcc iron using pseudo atomic orbitals（ポスター発表）	Chi-Cheng Lee	The International Summer Workshop 2018 on First-Principles Electronic Structure Calculations (ISS2018) (ISSP, Kashiwa)	H30.7.2-7.12	国外
Non-equilibrium Green's function method for order N electronic transport calculation（ポスター発表）	Masahiro Fukuda, Taisuke Ozaki	The International Summer Workshop 2018 on First-Principles Electronic Structure Calculations (ISS2018) (ISSP, Kashiwa)	H30.7.2-7.12	国外
Efficient O(N) Method with Localized Natural Orbitals（口頭発表）	T. Ozaki, M. Fukuda, and G. Jiang	The 3rd OpenMX developer's meeting (ISSP, Kashiwa)	H30.7.8	国外
Carbon nanocage異性体の安定性と光吸収スペクトル（ポスター発表）	野口良史、杉野修	第12回分子化学討論会（福岡国際会議場）	H30.9.12	国内
第一原理計算による原子間力顕微鏡の探針とシリセン表面の原子間の化学結合力評価（口頭発表）	福田将大、馮凌瑜、籔押慶祐、小野田穣、杉本宜昭、尾崎泰助	日本物理学会2018年秋季大会（同志社大学京田辺キャンパス）	H30.9.9-9.12	国内
Ag(111)表面上のシリセンの高分解能AFMイメージング（口頭発表）	馮凌瑜、籔押慶祐、小野田穣、杉本宜昭、福田将大、尾崎泰助	日本物理学会2018年秋季大会（同志社大学京田辺キャンパス）	H30.9.9-9.12	国内
オーダーN第一原理電子状態計算手法の開発とその応用（口頭発表）	尾崎泰助	京都大学（触媒・電池元素戦略研究拠点第13回公開シンポジウム）	H30.10.24	国内
密度汎関数法を用いた原子間力顕微鏡探針と結晶表面の原子間の化学結合力評価（口頭発表）	福田将大	第二回琉球大学計算科学シンポジウム“量子論の物理・化学的アプローチで迫る物質・自然界の謎”	H30.10.19-10.21	国内
Revisiting Anomalous Hall Conductivity in BCC Iron via First-Principles Tight-Binding Calculations using Pseudo Atomic Orbitals（ポスター発表）	Chi-Cheng Lee, Yung-Ting Lee, Masahiro Fukuda, and Taisuke Ozaki	The 21st Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (KAIST, Daejeon, Korea)	H30.10.29-10.31	国外

1. 学会等における口頭・ポスター発表

＊ポスト「京」重点課題(7)研究会、シンポでの発表は除く　　*国外＝日本で開催の国際会議も含む

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（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
Structure exploration for AB2 type monolayers by high-throughput DFT calculations（ポスター発表）	Masahiro Fukuda, Jingning Zhang, Taisuke Ozaki	The 21st Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (KAIST, Daejeon, Korea)	H30.10.29-10.31	国外
Benchmark of density functional theory for superconductors in elemental materials（ポスター発表）	M. Kawamura and T. Ozaki	The 21st Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (KAIST, Daejeon, Korea)	H30.10.30	国外
Structure search for AB2 type monolayers by high-throughput DFT calculations（ポスター発表）	福田将大、张静宁、尾崎泰助	“TIAかけはし”ポスター交流会2018「-計算と計測のデータ同化による革新的物質材料解析手法の調査-」（東京大学柏キャンパス）	H30.12.3	国内
Benchmark of density functional theory for superconductors in elemental materials（ポスター発表）	河村光晶、尾崎泰助	“TIAかけはし”ポスター交流会2018「-計算と計測のデータ同化による革新的物質材料解析手法の調査-」（東京大学柏キャンパス）	H30.12.3	国内
First-principles studies of binding energies of core electrons in silicene, borophene, and Pt on graphene（ポスター発表）	Chi-Cheng Lee and Taisuke Ozaki	“TIAかけはし”ポスター交流会2018「-計算と計測のデータ同化による革新的物質材料解析手法の調査-」（東京大学柏キャンパス）	H30.12.3	国内
First-Principles Studies of Momentum Distribution of Dirac/Weyl Fermions in Condensed Matter（ポスター発表）	Chi-Cheng Lee	Workshop on Recent Developments in Chiral Matter and Topology (National Taiwan University, Taipei, Taiwan)	H30.12.6-12.9	国外
Benchmark of density functional theory for superconductors in elemental materials（ポスター発表）	M. Kawamura and T. Ozaki	19th International Workshop on Computational Physics and Material Science: Total Energy and Force Methods, ICTP (Trieste, Italy)	H31.1.9	国外
Efficient O(N) divide-conquer method with localized natural orbitals（ポスター発表）	T. Ozaki, M. Fukuda, and G. Jiang	19th International Workshop on Computational Physics and Material Science: Total Energy and Force Methods, ICTP (Trieste, Italy)	H31.1.9-1.11	国外
First-principles study of dielectric permittivity in (C4H9NH3)2PbI4 using atomic basis functions （ポスター発表）	Chi-Cheng Lee and Taisuke Ozaki	19th International Workshop on Computational Physics and Material Science: Total Energy and Force Methods, ICTP (Trieste, Italy)	H31.1.9-1.11	国外
High-throughput DFT calculations to explore structures of AB2 type monolayers（ポスター発表）	Masahiro Fukuda, Jingning Zhang, Taisuke Ozaki	19th International Workshop on Computational Physics and Material Science: Total Energy and Force Methods, ICTP (Trieste, Italy)	H31.1.9-1.11	国外
Computational Simulation of Electric-Field-Induced Antiferroelectric-to-Ferroelectric Transition（ポスター発表）	Shoji Ishibashi, Sachio Horiuchi, and Reiji Kumai	Computational Sciences Workshop 2019 (CSW2019) (KFC (Kokusai Fashion Center) hall, Ryogoku)	H31.1.16	国外
第一原理計算と機械学習（口頭発表）	小口多美夫	第66回応用物理学会春季学術講演会（東京工業大学大岡山キャンパス）	H31.3.11	国内
PdHとPdの(111)方向界面の第一原理計算（ポスター発表）	吉本芳英	日本物理学会第74回年次大会(2019)(九州大学伊都キャンパス)	H31.3.14	国内
High-throughput DFT calculations for structure exploration of AB2 type 2D materials（口頭発表）	福田将大、张静宁、尾崎泰助	日本物理学会第74回年次大会(2019)(九州大学伊都キャンパス)	H31.3.14-3.17	国内
局在自然軌道を用いた第一原理O(N)分割統治法の開発（口頭発表）	尾崎泰助、福田将大、G. Jiang	日本物理学会第74回年次大会(2019)(九州大学伊都キャンパス)	H31.3.15	国内

1. 学会等における口頭・ポスター発表

＊ポスト「京」重点課題(7)研究会、シンポでの発表は除く　　*国外＝日本で開催の国際会議も含む

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（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
単体金属における超伝導密度汎関数理論の精度検証（口頭発表）	河村光晶、尾崎泰助	日本物理学会第74回年次大会(2019)(九州大学伊都キャンパス)	H31.3.15	国内
OpenMX: “物質探検者”のプラットフォームを目指して（口頭発表）	尾崎泰助	電気化学界面シミュレーションコンソーシアム 2018年度第4回研究会（文京シビックセンター）	H31.3.25	国内
First-principles Study of Oxygen Self-diffusion in Zirconia（口頭発表）	Ying Chen, Hubin Luo, Lei Wang and Tetsuo Mohri	CALPHAD 2018(Querétaro, México)	H30.5.27-6.2	国外
Exploring first principles-based phase diagrams using a modified CALPHAD approach(口頭発表)	T. Davey, N-D. Tran and Ying Chen	CALPHAD 2018(Querétaro, México)	H30.5.27-6.2	国外
Thermodynamic and dynamic stability of ThMn12-type permanent magnets（口頭発表）	A. Saengdeejing and Ying Chen	CALPHAD 2018(Querétaro, México)	H30.5.27-6.2	国外
Full first-principles calculation of oxygen self-diffusion and thermal expansion in Zirconia（口頭発表）	Ying Chen, Hubin Luo, Lei Wang and Tetsuo Mohri	ICM3-2018 (Xi'an, China)	H30.7.1-7.5	国外
First-principles analysis of stability in RFe12-based compounds(口頭発表)	Ying Chen and Arkapol Saengdeejing	REPM2018 (Beijing, China)	H30.8.26-8.30	国外
ZrO2 の酸素空孔拡散の第一原理計算（口頭発表）	陳迎、毛利哲夫	日本セラミックス協会第31回秋季シンポジウム（名古屋工業大学）	H30.9.5-9.7	国内
ZrO2の酸素原子の自己拡散係数と熱膨張の完全第一原理計算（口頭発表）	陳迎、王蕾、毛利哲夫	日本金属学会2018年秋期(第163回)大会（東北大学）	H30.9.19-9.21	国内
Phase stability study of NdFe12 and SmFe12 compound: thermodynamic, electronic and dynamic stability from first-principles（口頭発表）	Arkapol Saengdeejing and Ying Chen	日本金属学会2018年秋期(第163回)大会（東北大学）	H30.9.19-9.21	国内
Oxygen Diffusion in Zirconia with Kinetic Monte Carlo(1)（口頭発表）	Thomas Schablitzki, Ying Chen and Tetsuo Mohri	日本金属学会2018年秋期(第163回)大会（東北大学）	H30.9.19-9.21	国内
Electronic Structure Analysis of Fermi Level Instability in Fe-rich Si Alloy（口頭発表）	Ying Chen, Arkapol Saengdeejing and Tetsuo Mohri	The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2018) (Osaka International Convention Center, Osaka)	H30.10.28-11.2	国内
「セラミックス材料MI の展望ージェットエンジン用コーティングを例にー」(2)ZrO2の酸素空孔拡散の第一原理計算(口頭発表)	陳迎、毛利哲夫	第13 回SIP「革新的構造材料コロキウム」（東京）	H31.3.1	国内
Oxygen Diffusion in Zirconia with Kinetic Monte Carlo（口頭発表）	Thomas Schablitzki,Ying Chen and Tetsuo Mohri	TMS2019 (Henry B. González Convention Center, San Antonio, Texas, U.S.A)	H31.3.11-3.14	国外
Thermodynamic stability of alloying elements in NdFe12 and SmFe12 using special quasirandom structures(口頭発表)	Arkapol Saengdeejing and Ying Chen	日本金属学会2019年春期(第164回)講演大会（東京電機大学）	H31.3.20-3.22	国内
Oxygen Diffusion in Zirconia with Kinetic Monte Carlo(2)（口頭発表）	Thomas Schablitzki, Ying Chen and Tetsuo Mohri	日本金属学会2019年春期(第164回)講演大会（東京電機大学）	H31.3.20-3.22	国内
First principles-based phase diagram for the Al-Ni system（口頭発表）	Theresa Davey, Nguyen-Dung Tran, Ying Che	日本金属学会2019年春期(第164回)講演大会（東京電機大学）	H31.3.20-3.22	国内
Integrated Computational Approach for Materials Genome(口頭発表)	Ying Chen	MGI Seminar at Materials Genome Institute (Shanghai University, China)	H31.3.20	国外

1. 学会等における口頭・ポスター発表

＊ポスト「京」重点課題(7)研究会、シンポでの発表は除く　　*国外＝日本で開催の国際会議も含む

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（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
Theoretical study on phase equilibria and phase transition of ZrO2（口頭発表）	Tetsuo Mohri and Ying Chen	10th Korea-Japan Berkeley Symposium on Advanced Materials Graduate Institute of Ferrous Technology, POSTECH (Pohang, Korea)	H30.6.20-6.22	国外
Post-K supercomputer project in Japan and first-principles multiscale calculation on phase transformation（口頭発表）	Tetsuo MOHRI	International Frontier Workshop on Advanced Metallic Materials (School of Materials Science and Engineering, Central South University China)	H30.9.9-9.10	国外
Cu-Auの熱力学特性の第一原理計算(口頭発表)	毛利哲夫	日本金属学会2018年秋期(第163回)大会（東北大学）	H30.9.19-9.21	国内
Cluster Expansion Method Study on the Effective Interacdtion in Fe-C Alloys(口頭発表)	Tien Quang Nugyen, Kazuhiro Sato, Yoji Shibutani, Tamio Oguchi and Tetsuo Mohri	日本金属学会2018年秋期(第163回)大会（東北大学）	H30.9.19-9.21	国内
Post-K supercomputer project in Japan and first-principles multiscale calculation for phase transition(口頭発表)	Tetsuo Mohri	Department seminar (Deaprtment of Materials Science and Engineering, Research Institute for Advanced Materials, Seoul National University, Korea)	H30.10.16	国外
Grain boundary sliding within the entropy production rate theory(口頭発表)	Tetsuo Mohri	The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2018) (Osaka International Convention Center, Osaka)	H30.10.28-11.2	国外
Microstructure formation in alloys studied by First-principles Phase Field calculations(口頭発表)	Tetsuo Mohri	Seminar at Wigner Research Centre for Physics, Hungarian Academy of Sciences (Budapest, Hungary)	H31.1.17	国外
First-principles Cluster Variation, Path Probability and Phase Field calculations to investigate microstructure formation under SIP project(口頭発表)	Tetsuo Mohri	Seminar at Institute of Physics, Slovak Academy of Sciences (Bratislava, SR)	H31.2.26	国外
Re-visit to Cu-Au First-principles Thermodynamics(口頭発表)	Tetsuo Mohri	TMS2019 (Henry B. González Convention Center, San Antonio, Texas, U.S.A)	H31.3.10-3.14	国外
Cluster Expansion Simulations of Fe-C Alloys with Point Defects:Atomic and Effective Cluster Interactions（口頭発表）	Tien Quang NGUYEN, Mary Clare Sison Escano, Kazuhiro Sato, Yoji Shibutani, Tamio Oguchi and Tetsuo Mohri	日本金属学会2019年春期(第164回)講演大会（東京電機大学）	H31.3.20-3.22	国内
Cu-Au系の格子緩和の理論計算（口頭発表）	毛利哲夫	日本金属学会2019年春期(第164回)講演大会（東京電機大学）	H31.3.20-3.22	国内
Incorporation of Short-Range Correlations within the Steepest-Entropy-Ascent quantum Thermodynamics Model(口頭発表)	山田亮、毛利哲夫	日本金属学会2019年春期(第164回)講演大会（東京電機大学）	H31.3.20-3.22	国内
エネルギー保存型並列解法MB4に基づく2次元量子ダイナミクス計算(ポスター発表)	酒井翼、藤周平、井町宏人、宮武勇登、星健夫、山本有作	第47回数値解析シンポジウム（あわら温泉まつや千千）	H30.6.7	国内
分散メモリシステム上における枢軸選択のないLU分解の評価（口頭発表）	小林昇平、松本正晴、須田礼仁	第23回計算工学講演会（ウィンク愛知）	H30.6.7	国内
Application of an Energy-preserving Integrator to Quantum-mechanical Wavepacket Dynamics（口頭発表）	Yusaku Yamamoto, Tsubasa Sakai, Shuhei Kudo, Hiroto Imachi, Yuto Miyatake and Takeo Hoshi	13th SIAM East Asian Section Conference 2018 (The University of Tokyo, Hongo)	H30.6.24	国外

1. 学会等における口頭・ポスター発表

＊ポスト「京」重点課題(7)研究会、シンポでの発表は除く　　*国外＝日本で開催の国際会議も含む

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（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
Organic device material research by the combination of large-scale massively-parallel electronic state calculation and data-driven science（口頭発表）	Takeo Hoshi	International Symposium on Materials Genome Towards Exascale (Spetses, Greece)	H30.6.10	国外
HPC challenge in material science（口頭発表）	Takeo Hoshi	International HPC Summer School 2018 (Ostrava, Czech Republic)	H30.7.8	国外
ベイズ推定を用いた並列数値計算ライブラリの性能予測(ポスター発表)	原田祐希、田中和幸、福本智哉、星健夫、深谷猛、山本有作	日本応用数理学会2018年度年会(名古屋大学)	H30.9.3	国内
荻田・相島の固有ベクトル反復改良法における重複固有値の扱いについて（口頭発表）	白間久瑠美、工藤周平、山本有作	日本応用数理学会2018年度年会(名古屋大学)	H30.9.4	国内
Bayesian Inference Based Performance Prediction For Massively Parallel Numerical Solver(ポスター発表)	Yuki Harada, Kazuyuki Tanaka, Takeshi Fukaya, Yusaku Yamamoto, Takeo Hoshi	3rd International Symposium on Research and Education of Computational Science (RECS2018) (The University of Tokyo, Hongo)	H30.9.19	国外
Orthogonalization Algorithms and Dense Symmetric Eigenvalue Solvers Optimized for Strong Scaling（口頭講演）	Yusaku Yamamoto	3rd International Symposium on Research and Education of Computational Science (RECS2018) (The University of Tokyo, Hongo)	H30.9.20	国外
荻田・相島の固有ベクトル反復改良法に基づく実対称行列の固有値分解追跡手法（口頭講演）	山本有作	RIMS共同研究（公開型）「次世代の科学技術を支える数値解析学の基盤整備と応用展開」（京都大学数理解析研究所）	H30.11.14	国内
Novel linear algebraic solvers for massively parallel quantum material simulations（口頭発表）	Takeo Hoshi	International Workshop on Massively Parallel Programming for Quantum Chemistry and Physics 2019 (RIKEN-CCS, Kobe)	H31.1.15	国外
Generalized Diamond type Matrix Powers Kernel on OpenMP（口頭発表）	Reiji SUDA	2019 Conference on Advanced Topics and Auto Tuning in High-Performance Scientific Computing(National Sun Yat-sen University, Kaohsiung, Taiwan)	H31.2.15	国外
有機半導体材料における大規模量子計算とデータ駆動科学の融合（口頭発表）	星健夫	スーパーコンピューティング技術産業応用協議会セミナー「材料・化学分野における将来のシミュレーション技術の展望」（ワイム貸会議室四谷三丁目（東京））	H31.2.18	国内
4本足梯子t-t'-J模型のスピン励起と電荷ストライプ（口頭発表）	遠山貴巳	基研研究会「電子相関が生み出す新規な秩序と超伝導現象：トポロジー、液晶状態、動的現象」(京都大学基礎物理学研究所)	H30.5.8	国内
Theory of RIXS in strongly correlated electron systems（口頭発表）	T. Tohyama	Correlated electron systems in, near, and far from equilibrium (Ljubljana, Slovenija)	H30.6.6	国外
Spin and charge excitations along the direction perpendicular to charge stripes in cuprates（口頭発表）	T. Tohyama	Workshop on Resonant Inelastic and Elastic X-Ray Scattering 2018 (Diamond Light Source, UK)	H30.6.30	国外
Cluster-Based Haldane State with Finite Magnetization（ポスター発表）	T. Sugimoto, K. Morita and T. Tohyama	International Conference on Magnetism (IMC2018) (San Francisco, U.S.A)	H30.7.15-7.20	国外
Magnetization plateaus of the spin-1/2 antiferromagnetic Heisenberg model on a square-kagome lattice with three nonequivalent exchange interactions(ポスター発表)	K. Morita and T. Tohyama	International Conference on Magnetism (IMC2018) (San Francisco, U.S.A)	H30.7.15-7.20	国外
Theory of Resonant Inelastic X-Ray Scattering in Cuprate Superconductors（口頭発表）	T. Tohyama	The 12th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity (Beijing, China)	H30.8.22	国外

1. 学会等における口頭・ポスター発表

＊ポスト「京」重点課題(7)研究会、シンポでの発表は除く　　*国外＝日本で開催の国際会議も含む

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（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
銅酸化物高温超伝導体のストライプ秩序とRIXS（口頭発表）	遠山貴巳	ポスト「京」重点課題(7) サブ課題G 第9回「共通基盤シミュレーション手法 」連続研究会「計算科学による分光理論の進展～SPring-8との連携を目指して～」(Spring-8)	H30.8.27	国内
スピン1/2反強磁性fcc格子の磁化過程（口頭発表）	森田克洋、遠山貴巳	日本物理学会2018年秋季大会（同志社大学京田辺キャンパス）	H30.9.9-9.12	国内
Tsai型近似結晶Au-Al-GdにおけるRKKY相互作用による磁気秩序構造（口頭発表）	宮崎遥、森田克洋、杉本貴則、遠山貴巳	日本物理学会2018年秋季大会（同志社大学京田辺キャンパス）	H30.9.9-9.12	国内
正方カゴメ格子反強磁性体Cu6AlBiO4(SO4)5・KClの磁気解析（口頭発表）	森田克洋、藤原理賀、満田節生、松尾晶、金道浩一、曽田繁利、遠山貴巳	日本物理学会2018年秋季大会（同志社大学京田辺キャンパス）	H30.9.9-9.12	国内
正方カゴメ格子反強磁性体Cu6AlBiO4(SO4)5・KClにおけるスピン液体の可能性（口頭発表）	藤原理賀、森田克洋、満田節生、遠山貴巳、桑井智彦、岡部博孝、幸田章宏、RichardMole、矢野真一郎	日本物理学会2018年秋季大会（同志社大学京田辺キャンパス）	H30.9.9-9.12	国内
奇数個スピンで構成されるクラスタ単位ハルデン状態（口頭発表）	杉本貴則、森田克洋、遠山貴己	日本物理学会2018年秋季大会（同志社大学京田辺キャンパス）	H30.9.9-9.12	国内
三角格子キタエフ K1-K2 模型の基底状態相図（ポスター発表）	岸本政徳、森田克洋、遠山貴巳	日本物理学会2018年秋季大会（同志社大学京田辺キャンパス）	H30.9.9-9.12	国内
カゴメ格子キタエフハイゼンベルグ模型の基底状態相図（口頭発表）	森田克洋、岸本政徳、遠山貴巳	日本物理学会2018年秋季大会（同志社大学京田辺キャンパス）	H30.9.9-9.12	国内
多次元強相関量子系のための時間依存密度行列繰り込み群法の改良と応用（口頭発表）	曽田繁利、新城一矢、柚木清司、遠山貴己	日本物理学会2018年秋季大会（同志社大学京田辺キャンパス）	H30.9.12	国内
Ground state phase diagrams of Kitaev-Heisenberg model on kagome lattice（ポスター発表）	K. Morita	Trends in Theory of Correlated Materials (Geneva)	H30.10.8-10.10	国外
カゴメ格子キタエフハイゼンベルグ模型の基底状態（口頭発表）	森田克洋	基研研究会「スピン系物理の最前線」(京都大学基礎物理学研究所)	H30.10.31-11.2	国内
Dynamical DMRG study of excitation dynamics of triangular lattice antiferromagnetic Heisenberg models（ポスター発表）	曽田繁利、白川知功、柚木清司、遠山貴己	TNSAA 2018-2019（理化学研究所計算科学研究センター）	H30.12.4	国外
Spin and Charge Excitations along the Direction Perpendicular to Charge Stripes in Cuprates（口頭発表）	T. Tohyama	The 31st International Symposium on Superconductivity (Tsukuba)	H30.12.14	国外
Development of massively parallel density matrix renormalization group method algorithm for two-dimensional strongly correlated systems and its applications（口頭発表）	曽田繁利、柚木清司、遠山貴己	The 1st R-CCS International Symposium (Kobe International Conference Center)	H31.2.18	国外
カゴメ・三角格子積層系CaBaFe4O7における中性子散乱研究（口頭発表）	左右田稔、Vilmos Kocsis、益田隆嗣、伊藤晋一、森田克洋、遠山貴巳、田口康二郎、古川はづき	日本物理学会第74回年次大会(2019)(九州大学伊都キャンパス)	H31.3.14-3.17	国内
三角格子反強磁性Heisenberg模型における量子スピン液体状態とスピン励起ダイナミクス（口頭発表）	曽田繁利、柚木清司、遠山貴己	日本物理学会第74回年次大会(2019)(九州大学伊都キャンパス)	H31.3.15	国内
理論から見た銅酸化物高温超伝導体の未解決問題（口頭発表）	遠山貴巳	日本物理学会第74回年次大会(2019)(九州大学伊都キャンパス)	H31.3.15	国内
総合的推進				
物理量を表現するAdditive Manufacturingとボクセルファイル形式FAVの 今後の活用について（口頭発表）	山崎淳、古宇田光、長代新治、千田範夫、古川祐貴、古賀良太	Conference on 4D and Functional Printing 2018(慶應義塾大学三田キャンパス)	H30.10.11	国内

1. 学会等における口頭・ポスター発表

＊ポスト「京」重点課題(7)研究会、シンポでの発表は除く　　*国外＝日本で開催の国際会議も含む

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（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
Additive Manufacturingを使った物理量の表現（口頭発表）	山崎淳	第13回駒場キャンパス技術発表会（東京大学駒場キャンパス）	H30.10.16	国内

様式第２１　　別添１

学　会　等　発　表　実　績

委託業務題目：「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」

機　　関　　名：国立大学法人東京大学

２．学会誌・雑誌等における論文掲載

掲載した論文（発表題目）〔eRad:論文表題〕	発表者氏名〔eRad:著者名〕	発表した場所（学会誌・雑誌等名）〔eRad:記載誌名〕	発行した時期〔e-Rad:発行年月〕	国内・外の別（論文機関の所在国）
サブ課題Ａ				
Structural stability and energy levels of carbon-related defects in amorphous SiO2 and its interface with SiC	Y.-i. Matsushita and A. **Oshiyama**	Japanese Journal of Applied Physics	H30.11	国内
Microscopic mechanism of carbon annihilation upon SiC oxidation due to phosphorus treatment: Density functional calculations combined with ion mass spectrometry	T. Kobayashi, Y.-i. Matsushita, T. Okuda, T. Kimoto and A. **Oshiyama**	Applied Physics Express	H30.11	国内
Reaction Pathway of Surface-Catalyzed Ammonia Decomposition and Nitrogen Incorporation in Epitaxial Growth of Gallium Nitride	K. M. Bui, J.-I. Iwata, Y. Kangawa, K. Shiraishi, Y. **Shigeta** and A. **Oshiyama**	Journal of Physical Chemistry C	H30.10	国内
First-Principle Study of Ammonia Decomposition and Nitrogen Incorporation on the GaN Surface in Metal Organic Vapor Phase Epitaxy	K. M. Bui, J.-I. Iwata, Y. Kangawa, K. Shiraishi, Y. **Shigeta** and A. **Oshiyama**	Journal of Crystal Growth	H30.11	国内
Structural determination of phosphosilicate glass based on first-principles molecular dynamics calculation	T. Kobayashi, Y.-i. Matsushita, T. Kimoto and A. **Oshiyama**	Japanese Journal of Applied Physics	H30.11	国内
Development of Orbital-Free Density Functional Theorywith Machine Learning and its Applications	F. Imoto		H31.3	
First-principles study on leakage current caused by oxygen vacancies at HfO2/SiO2/Si interface	K. Takagi, T. Ono	Japanese Journal of Applied Physics	H30.6	国内
Contour integral method for obtaining the self-energy matrices of electrodes in electron transport calculations	S. Iwase, Y. Futamura, A. Imakura, T. Sakurai, S. Tsukamoto, T. Ono	Physical Review B	H30.5	国外
Complex band structure calculations based on the overbridging boundary matching method without using Green's functions	S. Tsukamoto, T. Ono, S. Iwase, S. Bluegel	Physical Review B	H30.11	国外
Dominant role of orbital splitting in determining cathode potential in O3 NaTMO2 compounds	M. H. N. Al Assadi, Y. **Shigeta**	Journal of Power Sources	H30.4	国外
The effect of octahedral distortions on the electronic properties and magnetic interactions in O3 NaTMO2 compounds (TM = Ti-Ni & Zr-Pd)	M. H. N. Al Assadi, Y. **Shigeta**	RSC Advances	H30.4	国外
High-performance Na ion cathodes based on the ubiquitous and reversible O redox reaction	M. H. N. Al Assadi, M. Fronzi, M. Ford, Y. **Shigeta**	Journal of Materials Chemistry A	H30.9	国外
Synergetic Effects of Triplet-Triplet Annihilation and Triplet-Triplet Energy Transfer Processes on Photon Up-conversion in Crystalline Systems	R. Sato, H. Kitoh-Nishioka, K. Kamada, Y. **Shigeta**	The Journal of Physical Chemistry Letters	H30.11	国外

２．学会誌・雑誌等における論文掲載

掲載した論文（発表題目）〔eRad:論文表題〕	発表者氏名〔eRad:著者名〕	発表した場所（学会誌・雑誌等名）〔eRad:記載誌名〕	発行した時期〔e-Rad:発行年月〕	国内・外の別（論文機関の所在国）
Parallel domain decomposition methods for a quantum-corrected drift-diffusion model for MOSFET devices	Shohiro Sho and Shinji Odanaka	Computer Physics Communications	H30.4	国外
Physics of Discrete Impurities under the Framework of Device Simulations for Nanostructure Devices	Nobuyuki **Sano**, Katsuhisa Yoshida, Chih-Wei Yao, and Hiroshi Watanabe	Materials	H30.12	国外
サブ課題Ｂ				
Energy transfer from intense laser pulse to dielectrics in time-dependent density functional theory	A. Yamada, K. **Yabana**	European Physical Journal D	H30.7	国外
Nonlinear polarization evolution using time-dependent density functional theory	M. Uemoto, Y. Kuwabara, S. A. Sato, and K. **Yabana**	Journal of Chemical Physics	H31.3	国外
SALMON: Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience	M. Noda, S.A. Sato, Y. Hirokawa, M. Uemoto, T. Takeuchi, S. Yamada, A. Yamada, Y Shinohara, M. Yamaguchi, K. **Iida**, I. Floss, T. Otobe, Kyung-Min Lee, K. Ishimura, T. Boku, George F. Bertsch, K. Nobusada, K. **Yabana**	Computer Physics Communications	H31.2	国外
Time-dependent density functional theory for interaction of ultrashort light pulse with thin materials	S. Yamada, M. Noda, K. Nobusada, and K. **Yabana**	Physical Review B	H30.12	国外
Photoinduced Electron Transfer at the Interface between Heterogeneous Two-Dimensional Layered Materials	K. **Iida**, M. Noda, K. Nobusada	Journal of Physical Chemistry C	H30.8	国外
Improving the electron spin properties of nitrogen-vacancy centres in nanodiamonds by near-field etching	F. Brandenburg, R. Nagumo, K. Saichi, K. Tahara, T. Iwasaki, M. Hatano, F. Jelezko, R. Igarashi, and T. **Yatsui**	Scientific Reports	H30.10	国外
サブ課題Ｃ				
Resummation of Diagrammatic Series with Zero Convergence Radius for Strongly Correlated Fermions	R. Rossi, T. Ohgoe, K. Van Houcke, and F. Werner	Physical Review Letters	H30.9	国外
Contact and Momentum Distribution of the Unitary Fermi Gas	R. Rossi, T. Ohgoe, E. Kozik, N. Prokof’ev, B. Svistunov, K. Van Houcke, and F. Werner	Physical Review Letters	H30.9	国外
Ab initio effective Hamiltonians for cuprate superconductors	Hirayama, Motoaki and **Yamaji**, Youhei and **Misawa**, Takahiro and **Imada**, Masatoshi	Physical Review B	H30.10	国外
Direct connection between Mott insulators and d-wave high-temperature superconductors revealed by continuous evolution of self-energy poles	Sakai, Shiro and Civelli, Marcello and **Imada**, Masatoshi	Physical Review B	H30.11	国外
Stripe and superconducting order competing in the Hubbard model on a square lattice studied by a combined variational Monte Carlo and tensor network method	Andrew S. Darmawan, Yusuke Nomura, Youhei **Yamaji**, and Masatoshi **Imada**	Physical Review B	H30.11	国外

２．学会誌・雑誌等における論文掲載

掲載した論文（発表題目）〔eRad:論文表題〕	発表者氏名〔eRad:著者名〕	発表した場所（学会誌・雑誌等名）〔eRad:記載誌名〕	発行した時期〔e-Rad:発行年月〕	論文機関の所在国 国内・外の別
Constructing exact representations of quantum many-body systems with deep neural networks	Giuseppe Carleo, Yusuke Nomura, and Masatoshi **Imada**	Nature Communications	H30.12	国外
Diagrammatic Monte Carlo algorithm for the resonant Fermi gas	K. Van Houcke, F. Werner, T. Ohgoe, N. V. Prokof' ev and B. V. Svistunov	Physical Review B	H31.1	国外
Excitons and Dark Fermions as Origins of Mott Gap, Pseudogap and Superconductivity in Cuprate Superconductors – General Concept and Basic Formalism Based on Gap Physics	Masatoshi **Imada** and Takafumi J. Suzuki	Journal of the Physical Society of Japan	H31.1	国内
mVMC - Open-source software for many-variable variational Monte Carlo method	T. **Misawa**, S. Morita, K. Yoshimi, M. Kawamura, Y. Motoyama, K. Ido, T. Ohgoe, M. **Imada**, and T. Kato	Computer Physics Communications	H31.2	国外
Effective model with strong Kitaev interactions for ¥alpha-RuCl3	T. Suzuki and S. Suga	Physical Review B	H30.4	国外
Field-enhanced quantum fluctuation in an S=1/2 frustrated square lattice	H. Yamaguchi, Y. Sasaki, T. Okubo, M. Yoshida, T. Kida, M. Hagiwara, Y. Kono, S. Kittaka, T. Sakakibara, M. Takigawa, Y. Iwasaki, and Y. Hosokoshi Yuichi Motoyama, Kota Ido, Takahiro Ohgoe, Masatoshi **Imada**, Takeo Kato	Physical Review B	H30.9	国外
A series of magnon crystals appearing under ultrahigh magnetic fields in a kagomé antiferromagnet	R. Okuma, D. Nakamura, T. Okubo, A. Miyake, A. Matsuo, K. Kindo, M. Tokunaga, N. Kawashima, S. Takeyama and Z. Hiroi Yuichi Motoyama, Kota Ido, Takahiro Ohgoe, Masatoshi **Imada**, Takeo Kato	Nature Communications	H31.3	国外
Field dependence of THz spectra of effective models for alpha-RuCl3	T. Suzuki and S. Suga	AIP Advances	H30.9	国外
Path to stable quantum spin liquids in spin-orbit coupled correlated materials	Andrei Catuneanu, Youhei **Yamaji**, Gideon Wachtel, Yong Baek Kim, Hae-Young Kee	npj Quantum Materials	H30.4	国外
Crystal structure prediction supported by incomplete experimental data	Naoto Tsujimoto, Daiki Adachi, Ryosuke Akashi, Synge **Todo**, and Shinji Tsuneyuki	Physical Review Materials	H30.5	国外
Classical and quantum spin dynamics of the honeycomb Γ model	Anjana M Samarakoon, Gideon Wachtel, Youhei **Yamaji**, DA Tennant, Cristian D Batista, Yong Baek Kim	Physical Review B	H30.7	国外
Fast algorithm for generating random bit strings and multispin coding for directed percolation	Hiroshi Watanabe, Satoshi Morita, Synge **Todo**, and Naoki Kawashima	Journal of the Physical Society of Japan	H31.1	国内

２．学会誌・雑誌等における論文掲載

掲載した論文（発表題目）〔eRad:論文表題〕	発表者氏名〔eRad:著者名〕	発表した場所（学会誌・雑誌等名）〔eRad:記載誌名〕	発行した時期〔e-Rad:発行年月〕	国内・外の別（論文機関の所在国）
Parallel loop cluster quantum Monte Carlo simulation of quantum magnets based on global union-find graph algorithm	Synge **Todo**, Haruhiko Matsuo, and Hideyuki Shitara	Computer Physics Communications	H31.1	国外
Search for common minima in joint optimization of multiple cost functions	Daiki Adachi, Naoto Tsujimoto, Ryosuke Akashi, Synge **Todo**, and Shinji Tsuneyuki	Computer Physics Communications	H31.2	国外
サブ課題Ｄ				
Effect of R-site substitution and the pressure on stability of RFe12: A first-principles study	Yosuke Harashima, Taro Fukazawa, Hiori Kino, and Takashi **Miyake**	Journal of Applied Physics	H30.10	国外
Learning structure-property relationship in crystalline materials: A study of lanthanide-transition metal alloys	Tien-Lam Pham, Nguyen-Duong Nguyen, Van-Doan Nguyen, Hiori Kino, Takashi **Miyake**, and Hieu-Chi Dam	The Journal of Chemical Physics	H30.5	国外
Anisotropy of exchange stiffness based on atomic-scale magnetic properties in the rare-earth permanent magnet Nd2Fe14B□	Yuta Toga, Masamichi Nishino, Seiji Miyashita, Takashi **Miyake** and Akimasa Sakuma	Physical Review B	H30.8	国外
First-principles study of spin-wave dispersion in Sm(Fe1-xCox)12	Taro Fukazawa, Hisazumi **Akai**, Yosuke Harashima and Takashi **Miyake**	Journal of Magnetism and Magnetic Materials	H31.1	国外
Important Descriptors and Descriptor Groups of Curie Temperatures of Rare-earth Transition-metal Binary Alloys□	Hieu Chi Dam, Viet Cuong Nguyen, Tien Lam Pham, Anh Tuan Nguyen, Kiyoyuki Terakura, Takashi **Miyake**, and Hiori Kino□	Journal of the Physical Society of Japan	H30.10	国内
Ab initio Study of High-field NMR Shift of Co in the Ferromagnetic Heusler Alloy Co2TiGa	H. Nishihara, H. **Akai**, K. Sato, T. Kanomata, M. Geshi, T. Sakon, and T. Wada	Journal of the Physical Society of Japan	H31.3	国内
First-principles study of magnetoelectric coupling at Fe/BiFeO3 (001) interfaces	K. Fujita and Y. **Gohda**	Physical Review Applied	H31.2	国外
First-principles prediction of one-dimensional giant Rashba splittings in Bi-adsorbed In atomic chains	T. Tanaka and Y. **Gohda**	Physical Review B	H30.12	国外
First-principles study on substitution effects in Nd2(Fe, X)14B	Y. Tatetsu, S. Tsuneyuki, Y. **Gohda**	Materialia	H30.11	国外
Hidden order in amorphous structures: Extraction of nearest neighbor networks of amorphous Nd-Fe alloys with Gabriel graph analyses	A. Terasawa and Y. **Gohda**	The Journal of Chemical Physics	H30.10	国外
Role of typical elements in Nd2Fe14X (X=B, C, N, O, F)	Y. Tatetsu, Y. Harashima, T. Miyake, Y. **Gohda**	Physical Review Materials	H30.7	国外

２．学会誌・雑誌等における論文掲載

掲載した論文（発表題目）〔eRad:論文表題〕	発表者氏名〔eRad:著者名〕	発表した場所（学会誌・雑誌等名）〔eRad:記載誌名〕	発行した時期〔e-Rad:発行年月〕	国内・外の別（論文機関の所在国）
サブ課題Ｅ				
Failure mode in first-principles computational tensile tests of grain boundaries: effects of a bulk-region size, dominant factors, and local-energy and local-stress analysis	Hao Wang, Masanori **Kohyama**, Shingo Tanaka, JinKai Wang and Ying Chen	Journal of Physics: Condensed Matter	H31.1	国外
Grain-boundary segregation of 3d-transition metal solutes in bcc Fe: ab initio local-energy and d-electron behavior analysis	Zhuo Xu, Shingo Tanaka and Masanori **Kohyama**	Journal of Physics: Condensed Matter	H31.1	国外
マテリアルズ・インフォマティクスによる材料開発と活用集」第４章 第４節 局所エネルギー・局所応力第一原理計算法開発と金属粒界への適用	**香山**正憲、田村友幸、田中真悟、椎原良典	マテリアルズ・インフォマティクスによる材料開発と活用集（技術情報会）	H31.1	国内
Accurate quasiparticle calculation of X-ray photoelectron spectra of solids	Tsubasa Aoki and Kaoru **Ohno**	Journal of Physics: Condensed Matter	H30.5	国外
“GW(Γ) methods without the Bethe-Salpeter equation for photoabsorption energies of spin-polarized systems	Tomoharu Isobe, Riichi Kuwahara, and Kaoru **Ohno**	Physical Review A	H30.6	国外
Modelling of a displacive transformation in two-dimensional system within four-body approximation of Continuous Displacement Cluster Variation Method	Naoya Kiyokane and Tetsuo **Mohri**	Philosophical Magazine	H30.11	国外
Sharp Phase Field Method	Alphonse Finel, Yann Le Bouar, Benoit Dabas, Benoit Appolaire, Yasunori Yamada and Tetsuo **Mohri**	Physical Review Letters	H30.7	国外
Grain growth kinetics in submicrometer-scale molecular dynamics simulation	S. Okita, E. Miyoshi, S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, Y. **Shibuta**	Acta Materialia	H30.4	国外
Competitive grain growth during directional solidification of a polycrystalline binary alloy: Three-dimensional large-scale phase-field study	T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. **Shibuta**, T. Aoki, C.-A. Gandin	Materialia	H30.5	国外
Bridging molecular dynamics and phase-field methods for grain growth prediction	E. Miyoshi, T. Takaki, Y. **Shibuta**, M. Ohno	Computational Materials Science	H30.5	国外
Correlation between three-dimensional and cross-sectional characteristics of ideal grain growth: large-scale phase-field simulation study	E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno, Y. **Shibuta**, S. Sakane, T. Shimokawabe, T. Aoki	Journal of Materials Science	H30.7	国外
Advent of cross-scale modeling: High-performance computing of solidification and grain growth	Y. **Shibuta**, M. Ohno, T. Takaki	Advanced Theory and Simulations	H30.9	国外
Permeability prediction for flow normal to columnar solidification structures by large-scale simulations of phase-field and lattice Boltzmann methods	T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. **Shibuta**, T. Aoki	Acta Materialia	H30.10	国外

２．学会誌・雑誌等における論文掲載

掲載した論文（発表題目）〔eRad:論文表題〕	発表者氏名〔eRad:著者名〕	発表した場所（学会誌・雑誌等名）〔eRad:記載誌名〕	発行した時期〔e-Rad:発行年月〕	国内・外の別（論文機関の所在国）
Multi-phase-field modeling of transformation kinetics at multiple scales and its application to welding of steel	M. Ohno, Y. **Shibuta**, T. Takaki	Materials Transactions	H31.2	国外
Estimation of thermodynamic and interfacial parameters of metallic materials by molecular dynamics simulations	Y. **Shibuta**	Materials Transactions	H31.2	国外
A parametric study of morphology selection in equiaxed dendritic solidification	G.W. Kim, T. Takaki, Y. **Shibuta**, S. Sakane, K. Matsuura, M. Ohno	Computational Materials Science	H31.3	国外
サブ課題Ｆ				
Free-Energy Analysis of Peptide Binding in Lipid Membrane Using All-Atom Molecular Dynamics Simulation Combined with Theory of Solutions	Tomoko Mizuguchi, Nobuyuki **Matubayasi**	The Journal of Physical Chemistry B	H30.4	国外
The Excess Chemical Potential of Water at the Interface with a Protein from End Point Simulations	Bin W. Zhang, Di Cui, Nobuyuki **Matubayasi**, and Ronald M. Levy	The Journal of Physical Chemistry B	H30.5	国外
Statistical thermodynamic foundation for mesoscale aggregation in ternary mixtures	Seishi Shimizu, Nobuyuki **Matubayasi**	Physical Chemistry Chemical Physics	H30.5	国外
Spatial Distribution of Ionic Hydration Energy and Hyper-Mobile Water	George Mogami, Makoto Suzuki, Nobuyuki **Matubayasi**	The Role of Water in ATP Hydrolysis Energy Transduction by Protein Machinery	H30.5	国外
All-Atom Analysis of Free Energy of Protein Solvation Through Molecular Simulation and Solution Theory	Nobuyuki **Matubayasi**	The Role of Water in ATP Hydrolysis Energy Transduction by Protein Machinery	H30.5	国外
Novel Intermolecular Surface Force Unveils the Driving Force of the Actomyosin System	Makoto Suzuki, George Mogami, Takahiro Watanabe, Nobuyuki **Matubayasi**	The Role of Water in ATP Hydrolysis Energy Transduction by Protein Machinery	H30.5	国外
Structure and permeability of ionomers studied by atomistic molecular simulation combined with the theory of solutions in the energy representation	Tomonori Kawakami, Isamu Shigemoto, Nobuyuki **Matubayasi**	The Journal of Chemical Physics	H30.6	国外
How do hydrogen bonds break in supercooled water?: Detecting pathways not going through saddle point of two-dimensional potential of mean force	Takuma Kikutsuji, Kang Kim, Nobuyuki **Matubayasi**	The Journal of Chemical Physics	H30.6	国外
Free-energy analysis of physisorption on solid-liquid interface with the solution theory in the energy representation	Naoki Yamamoto, Ippei Nakakuki, Nobuyuki **Matubayasi**	The Journal of Chemical Physics	H30.7	国外
Resin filling into nano-sized pore on metal surface analyzed by all-atom molecular dynamics simulation over a variety of resin and pore sizes	Hodaka Mori, Nobuyuki **Matubayasi**	Polymer	H30.7	国外

２．学会誌・雑誌等における論文掲載

掲載した論文（発表題目）〔eRad:論文表題〕	発表者氏名〔eRad:著者名〕	発表した場所（学会誌・雑誌等名）〔eRad:記載誌名〕	発行した時期〔e-Rad:発行年月〕	国内・外の別（論文機関の所在国）
The mechanism of salt effects on starch gelatinization from a statistical thermodynamic perspective	Thomas W. J. Nicol, Noriyuki Isobe, James H. Clark, Nobuyuki **Matubayasi**, Seishi Shimizu	Food Hydrocolloids	H30.9	国外
Statistical thermodynamics of regular solutions and solubility parameters	Seishi Shimizu, Nobuyuki **Matubayasi**	Journal of Molecular Liquids	H30.10	国外
Refining evERdock: Improved selection of good protein-protein complex models achieved by MD optimization and use of multiple conformations	Ai Shinobu, Kazuhiro Takemura, Nobuyuki **Matubayasi**, Akio Kitao	The Journal of Chemical Physics	H30.11	国外
A Molecular Thermodynamics Approach to Capture Non-specific Flavour-Macromolecule Interactions	Seishi Shimizu, Steven Abbott, Nobuyuki **Matubayasi**	Encyclopedia of Food Chemistry	H30.12	国外
計算科学によるポリマー材料の解析と設計	**松林** 伸幸	デンソーテクニカルレビュー	H31.1	国内
Structure and Dynamics of the Hydration Shell: Spatially Decomposed Time Correlation Approach	Eva Pluhařová, Pavel Jungwirth, Nobuyuki **Matubayasi**, Ondrej Marsalek	Journal of Chemical Theory and Computation	H31.2	国外
Efficient scheme for calculating work of adhesion between a liquid and polymer-grafted substrate	M. Uranagase, S. **Ogata**, K. Tanaka, H. Mori, and S. Tajima	The Journal of Chemical Physics	H30.8	国外
Unveiling the Chemical Reactions Involved in Moisture-Induced Weakening of Adhesion between Aluminum and Epoxy Resin	S. **Ogata** and M. Uranagase	The Journal of Physical Chemistry C	H30.8	国外
サブ課題Ｇ				
Computational findings of metastable ferroelectric phases of squaric acid	S. Ishibashi, S. Horiuchi, and R. Kumai	Physical Review B	H30.5	国外
パフィアン計算の高速化	今野 裕大, 吉本 芳英	情報処理学会研究報告	H30.6	国内誌
Optical properties of six isomers of three dimensionally delocalized π-conjugated carbon nanocage	Y. Noguchi, D. Hirose, and O. Sugino	The European Physical Journal B	H30.6	国外
Realization of intrinsically broken Dirac cones in graphene via the momentum-resolved electronic band structure″	C-C. Lee, M. Fukuda, Y-T. Lee, and T. **Ozaki**	Journal of Physics: Condensed Matter	H30.6	国外
Tight-binding calculations of optical matrix elements for conductivity using nonorthogonal atomic orbitals: Anomalous Hall conductivity in bcc Fe	C-C. Lee, Y-T. Lee, M. Fukuda, and T. **Ozaki**	Physical Review B	H30.9	国外

２．学会誌・雑誌等における論文掲載

掲載した論文（発表題目）〔eRad:論文表題〕	発表者氏名〔eRad:著者名〕	発表した場所（学会誌・雑誌等名）〔eRad:記載誌名〕	発行した時期〔e-Rad:発行年月〕	国内・外の別（論文機関の所在国）
Structural identification of silicene on the Ag(111) surface by atomic force microscopy	L. Feng, K. Yabuoshi, Y. Sugimoto, J. Onoda, M. Fukuda, and T. **Ozaki**	Physical Review B	H30.11	国外
Efficient O(N) divide-conquer method with localized single-particle natural orbitals	T. **Ozaki**, M. Fukuda, and G. Jiang	Physical Review B	H30.12	国外
Atomic Structure and Local Electronic States of Single Pt Atoms Dispersed on Graphene	K. Yamazaki, Y. Maehara, C-C Lee, J. Yoshinobu, T. **Ozaki**, K. Gohara	The Journal of Physical Chemistry C	H30.11	国外
Optical properties of dense lithium in electride phases by first-principles calculations	Zheng Yu, Hua Y. Geng, Y. Sun and Ying **Chen**	Scientific Reports	H30.4	国外
Interaction Energies Among Rh Impurities in Pd and Solvus Temperatures of Pd-Rich PdRh Alloys	Chang Liu, Mitsuhiro Asato, Nobuhisa Fujima, Toshiharu Hoshino, Ying **Chen** and Tetsuo **Mohri**	Materials Transactions	H30.6	国内
Computational phase diagrams for the Nd-based magnets based on the combined ab initio/ CALPHAD approach	Taichi Abe, Ying **Chen**, Arkapol Saengdeejing and Yoshinao Kobayashi	Scripta Materialia	H30.9	国外
Real Space Cluster Expansion for Total Energies of Pd-Rich PdX (X=Rh, Ru) Alloy, Based on Full-Potential KKR Calculations: An Approach from a Dilute Limit	Chang Liu, Mitsuhiro Asato, Nobuhisa Fujima, Toshiharu Hoshino, Ying **Chen** and Tetsuo **Mohri**	Materials Transactions	H30.11	国内
Failure mode in first-principles computational tensile tests of grain boundaries: effects of a bulk-region size, dominant factors, and local-energy and local-stress analysis	Hao Wang, Masanori Kohyama, Shingo Tanaka, JinKai Wang and Ying **Chen**	Journal of Physics: Condensed Matter	H31.1	国外
Accuracy of Real Space Cluster Expansion for Total Energies of Pd-rich PdX (X=Rh, Ru) Alloys, based on Full-Potential KKR Calculations for Perfect and Impurity Systems	Mitsuhiro Asato1, Chang Liu, Nobuhisa Fujima, Toshiharu Hoshino, Ying **Chen** and Tetsuo **Mohri**	MATEC Web of Conferences 264, 03002 (2019)	H31.1	国外
Data-driven diagnosis for compressed sensing with cross validation	Y.Nakanishi-Ohno, K.Hukushima	Physical Review E	H30.11	国外
Real-space analysis of scanning tunneling microscopy topography datasets using sparse modeling approach	M.J. Miyama, K. Hukushima	Journal of the Physical Society of Japan	**H30.3**	国内
Bayesian optimization for computationally extensive probability distributions	R.Tamura, K. Hukushima	PloS one	**H30.3**	国外
Crystal structure prediction supported by incomplete experimental data	Naoto Tsujimoto, Daiki Adachi, Ryosuke Akashi, Synge Todo, and Shinji Tsuneyuki	Physical Review Materials	H30.5	国外
Modelling of a displacive transformation in two-dimensional system within four-body approximation of Continuous Displacement Cluster Variation Method	Naoya Kiyokane and Tetsuo **Mohri**	Philosophical Magazine	H30.11	国外

２．学会誌・雑誌等における論文掲載

掲載した論文（発表題目）〔eRad:論文表題〕	発表者氏名〔eRad:著者名〕	発表した場所（学会誌・雑誌等名）〔eRad:記載誌名〕	発行した時期〔e-Rad:発行年月〕	国内・外の別（論文機関の所在国）
Sharp Phase Field Method	Alphonse Finel, Yann Le Bouar, Benoit Dabas, Benoit Appolaire, Yasunori Yamada and Tetsuo **Mohri**	Physical Review Letters	H30.7	国外
Temperature Dependent Interaction Energies among X (=Ru, Rh) Impurities in Pd-Rich PdX Alloys	M. Asato, C. Liu, N. Fujima, T. Hoshino, Y. **Chen**, T. **Mohri**	International Journal of Materials and Metallurgical Engineering	H30	国外
Atomic interactions in C15 Laves phases	J.-C. Crivello J.-M. Joubert T. **Mohri**	Journal of Materials Science	H31.1	国外
Thousand-atom ab initio calculations of excited states at organic/organic interfaces: toward first-principles investigations of charge photogeneration	Takatoshi Fujita, MD Khorshed Alam, and Takeo **Hoshi**	Physical Chemistry Chemical Physics	H30.9	国外
Solution of the k-th eigenvalue problem in large-scale electronic structure calculations	Dongjin Lee, Takeo **Hoshi**, Tomohiro Sogabe, Yuto Miyatake, Shao-Liang Zhang	Journal of Computational Physics	H30.6	国外
On Using the Shifted Minimal Residual Method for Quantum-mechanical Wave Packet Simulation	Hiroaki Seito, Takeo **Hoshi** and Yusaku Yamamoto	JSIAM Letters	H31.3	国外
Asymptotic Quadratic Convergence of the Parallel Block-Jacobi EVD Algorithm with Dynamic Ordering for Hermitian Matrices	Gabriel Oksa, Yusaku Yamamoto, Martin Becka and Marian Vajtersic	BIT Numerical Mathematics	H30.12	国外
Performance of the Parallel Block Jacobi Method with Dynamic Ordering for the Symmetric Eigenvalue Problem	Shuhei Kudo, Kousuke Yasuda and Yusaku Yamamoto	JSIAM Letters	H30.8	国外
荻田・相島の固有ベクトル反復改良法に基づく実対称行列の固有値分解追跡手法	白間久瑠美，工藤周平，山本有作	日本応用数理学会論文誌	H31.3	国内
Ground state phase diagram of Kitaev-Heisenberg model on honeycomb-triangular lattice	M. Kishimoto, K. Morita, Y. Matsubayashi, S. Sota, S. Yunoki, and T. **Tohyama**	Physical Review B	H30.8	国外
Ground-state phase diagram of the Kitaev-Heisenberg model on a kagome lattice	K. Morita, M. Kishimoto, and T. **Tohyama**	Physical Review B	H30.10	国外
Accuracy of the microcanonical Lanczos method to compute real-frequency dynamical spectral functions of quantum models at finite temperatures	S. Okamoto, G. Alvarez, E. Dagotto, and T. **Tohyama**	Physical Review E	H30.4	国外
Magnetic phase diagram of a frustrated spin ladder	T. Sugimoto, M. Mori, T. **Tohyama**, and S. Maekawa	Physical Review B	H30.4	国外
Dynamical density matrix renormalization group study of spin and charge excitations in the four-leg t-t'-J ladder	T. **Tohyama**, M. Mori, and S. Sota	Physical Review B	H30.6	国外
Ultrafast transient interference in pump-probe spectroscopy of band and Mott insulators	K. Shinjo and T. **Tohyama**	Physical Review B	H30.10	国外

２．学会誌・雑誌等における論文掲載

掲載した論文（発表題目） 〔eRad:論文表題〕	発表者氏名 〔eRad:著者名〕	発表した場所（学会誌・雑誌等名） 〔eRad:記載誌名〕	発行した時期 〔e-Rad:発行年月〕	論文機関の所在国 国内・外の別
Syntheses and first-principles calculations of the pseudobrookite compound AlTi2O5	T. Tohyama, R. Ogura, K. Yoshinaga, S. Naito, N. Miyakawa, and E. Kaneshita	Journal of Physics and Chemistry of Solids	H30.12	国外
Photoinduced charge carrier dynamics in Hubbard two-leg ladders and chains	C. Shao, T. Tohyama, H.-G. Luo, and H. Lu	Physical Review B	H31.1	国外

別添２

「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」
実施計画

令和元年 5 月 31 日
国立大学法人　東京大学
常行真司

【改訂履歴】

版	項目	ページ	主な改訂内容（概要）
1.0 (2016.2.29)	―	―	初版発行
2.0 (2016.5.24)	３	47	採択時の留意事項への対応状況を追記
3.0 (2017.5.29)	２－１（５）	19	分担機関　大阪大学サイバーメディアセンター削除
	改訂履歴	―	新規追加
4.0 (2017.12.22)	―	―	中間評価指摘事項を受け、版数変更して対応。
	目次	―	「中間評価における指摘事項への対応状況」目次項目追加。
	１（６）	7	サブ課題Ａの年次計画更新
	１（８）	15	「京」の計算資源量更新
	４	～	中間評価における指摘事項への対応状況を追記。
5.0 (2018.5.27)	４	51,58	サブ課題Ｂのサブ課題責任者変更
6.0 (2019.2.13)	５	73,74	平成 30、31 年度の実施体制の変更

目次

１．実施概要.....1
（１）目的・意義.....1
（２）研究開発内容.....1
（３）目標・期待される成果.....2
（４）周辺領域への波及効果、課題全体における計算科学やシミュレーションの位置づけ.....3
（５）分野振興（人材育成・教育，アプリ普及）.....6
（６）年次計画.....7
（７）実施体制.....13
（８）必要計算資源.....14
２．研究開発内容詳細.....15
２－１．サブ課題Ａ．高機能半導体デバイス.....15
（１）目的・意義.....15
（２）実施内容.....15
（３）目標・期待される成果.....16
（４）「京」でできていること、ポスト「京」でなければできないこと.....17
（５）実施体制.....17
２－２．サブ課題 B．光・電子融合デバイス.....20
（１）目的・意義.....20
（２）実施内容.....20
（３）目標・期待される成果.....21
（４）「京」でできていること、ポスト「京」でなければできないこと.....23
（５）実施体制.....23
２－３．サブ課題 C．超伝導・新機能デバイス材料.....25
（１）目的・意義.....25
（２）実施内容.....25
（３）目標・期待される成果.....25
（４）「京」でできていること、ポスト「京」でなければできないこと.....27
（５）実施体制.....27
２－４．サブ課題 D．高性能永久磁石・磁性材料.....29
（１）目的・意義.....29
（２）実施内容.....29
（３）目標・期待される成果.....30
（４）「京」でできていること、ポスト「京」でなければできないこと.....30
（５）実施体制.....31
２－５．サブ課題 E．高信頼性構造材料.....32

（１）目的・意義.....32
（２）実施内容.....32
（３）目標・期待される成果.....33
（４）「京」でできていること、ポスト「京」でなければできないこと.....34
（５）実施体制.....34
２－６．サブ課題Ｆ．次世代機能性化学品.....37
（１）目的・意義.....37
（２）実施内容.....37
（３）目標・期待される成果.....39
（４）「京」でできていること、ポスト「京」でなければできないこと.....39
（５）実施体制.....40
２－７．サブ課題Ｇ．共通基盤シミュレーション手法.....42
（１）目的・意義.....42
（２）実施内容.....42
（３）目標・期待される成果.....44
（４）「京」でできていること、ポスト「京」でなければできないこと.....45
（５）実施体制.....45
３．採択時の留意事項への対応状.....48
４．中間評価における指摘事項への対応状況.....49
（１）指摘事項と対応概要.....49
（２）実施計画と最終目標の見直し（指摘事項１、３）.....51
（３）実施体制の見直し（指摘事項１、３）.....56
（４）論文、学会発表の取組み強化（指摘事項２）.....69
（５）開発アプリのデファクトスタンダード戦略（指摘事項４）.....70
（６）体制の整理（指摘事項５）.....73
５．平成 31 年度からの実施体制変.....74
＜改訂履歴＞..... 表紙裏

１．実施概要

（１）目的・意義

「京」で培われた量子論に基づくシミュレーション手法や新しいマルチスケール・シミュレーション手法をさらに発展させ、現代社会に不可欠な先端電子デバイスや高機能物質・材料の究極的洗練化、新しい物理原理に基づく機能創出、将来のイノベーションの源泉となる学理の追及を通じて、我が国の次世代産業・社会基盤の構築に寄与することを目的とする。

ポスト「京」を生かした大規模・高精度シミュレーションによるデバイス・材料の特性予測と最適化、最先端大型実験施設等と連携しての物性解明、新しい物理概念の発見など、応用につながる基礎研究のブレークスルーと国際貢献を図る。またマテリアルズインフォマティクスの新手法も取り入れつつ、産業界との連携を図ることにより、国際競争の激しい新デバイス・新材料の研究開発を加速する。国の「元素戦略プロジェクト」で研究開発が進められている希少元素を用いない磁石材料、電子材料、構造材料、「科学技術イノベーション総合戦略 2014」で基礎的な分野横断技術として位置づけられた小型デバイス技術、パワーエレクトロニクス材料、構造材料、革新的電子デバイス等を主要な研究対象とし、産業界が参加する各種プロジェクトとも連携して早期実用化を目指す。

（２）研究開発内容

ポスト「京」により、これまで不可能だった多様な大規模構造体や材料に対する系統的計算とそれに基づくデバイスデザイン、光励起ダイナミクスのシミュレーション、強相関物質の高精度計算、複雑な界面や不均一性を考慮した実在系の計算を実現することにより、次世代の産業を支える新機能デバイス・高機能材料の創成技術を確立する。主要な参加機関である物性研究所、金属材料研究所の共同利用スーパーコンピュータも併用しつつ、以下の 3 グループに A～G のサブ課題を設けて研究開発を推進する。

グループ１【大規模系の電子状態計算を基幹技術として、界面・薄膜のサイエンスから新デバイス開発を目指すもの】

(A) 高機能半導体デバイス　　(B) 光・電子融合デバイス

(C) 超伝導・新機能デバイス材料

グループ２【マルチスケール手法とインフォマティクスを用いて材料開発を目指すもの】

(D) 高性能永久磁石・磁性材料

(E) 高信頼性構造材料　　(F) 次世代機能性化学品

グループ３【上記 2 グループに共通する構造シミュレーション手法や数理科学的手法などの開発】

(G) 共通基盤シミュレーション手法

このうち(A),(C),(E)は HPCI 戦略プログラム分野 2「新物質・エネルギー創成」からの継続テーマであり、戦略プログラムで整備した大規模並列計算用プログラムをさらに高速化、高機能化することで、本課題の目標達成に資すると判断されたものである。(B),(D),(F)は戦略プログラムの分野振興活動や他プロジェクトとの連携の中でアプリ開発や大規模計算を用いた研究が進められており、社会的要請も極めて強いことから、新たにサブ課題として取り上げることとした。これらのサブ課題は電子論・原子論に立脚して物質・材料のシミュレーションを行うという共通点を有するが、とくに同一グループ内のサブ課題はポスト「京」で実現する基幹技術や目標に共通性が高く、成果創出に向けて、本プ

ロジェクトによる研究者間の密接な交流・連携が大きな効果を生むと期待される。またこれら(A)～(F)のうち複数のサブ課題から要請のある共通基盤シミュレーション手法の開発を、コンピュータサイエンスの研究者も交えて効果的に実施するため、グループ(3)としてサブ課題(G)を設けた。

［ベース目標］

サブ課題 A～F では、研究開発するデバイスや材料のターゲットを明確に設定し、目標を実現するための課題を解決するシミュレーション手法の開発、および、研究開発を実施する。サブ課題 G では、サブ課題間で共通に利用が可能となる、基盤的シミュレーション手法の開発を行う。特に各サブ課題と連携を推進する課題の目標を［サブ課題間連携目標］として下記に提示する。

［サブ課題間連携目標］

(A)マルチスケール・シミュレーション活用パワーデバイス系デバイス・シミュレータ開発。
(B)密度汎関数理論を越える信頼性の高い高精度量子多体系ダイナミクス手法の開発。
(C)第一原理電子状態計算ソフトと低エネルギーソルバーの高度連携・整備、公開、普及。
(D)超並列大規模第一原理電子状態計算による複合組織構造を持つ磁石材料のシミュレーション。
(E)構造材料における最適の添加元素や化合物相の効率的探索と材料設計・制御技術の確立。
(F)超並列ハイブリッド量子古典シミュレーション手法確立と超大規模分子吸着シミュレーション。

［コデザイン］

コデザインの最初のターゲットアプリとしては、サブ課題（A）の主要アプリである RSDFT を選定した。これにより、RSDFT と同じ差分法を用いたサブ課題（B）の主要アプリは、コデザインの成果を直ちに反映させることができる。サブ課題(C)および(D),(E),(G)の主要アプリ開発者（2 名）も、RSDFT 開発者とともに、重点課題(7)のコデザインサブ WG に参加する。またサブ課題(F)の主要アプリ開発者は、重点課題(5)のコデザインサブ WG に参加する。以上のコデザインサブ WG 参加者は，情報公開が可能になり次第、基盤的シミュレーション手法の開発を担当するサブ課題(G)の研究会を通じて、本プロジェクトメンバー全員に情報を展開する。このように、複数の主要アプリ開発者がコデザインに貢献するだけでなく、すべてのサブ課題がコデザインの成果を適切にアプリ開発に反映できる体制をとる。

（３）目標・期待される成果

本研究の目標は、新しい半導体デバイス、光・電子デバイス、超伝導材料、磁性材料、構造材料、ナノ構造デバイス、機能性化学品等において、我が国の産業競争力を一層強化し、社会基盤を形成するための、高機能物質・材料創成技術を確立することである。下記に期待される主な成果をベース目標として示す。詳細は２．研究開発内容詳細で説明する。

［ベース目標］

＜アウトプット成果＞

（本格実施フェーズ終了時）

・高度化した実空間第一原理シミュレーション手法でナノ界面構造と電子物性の相関を解明。
・ナノ構造体光・電子動的結合ダイナミクス計算法を開発し、光・電子融合デバイスを基本設計。
・銅酸化物ならびに鉄系高温超伝導体の転移温度上昇のための予備計算を完了。

・第一原理計算で希土類磁石の有限温度における飛躍的な性能向上のための組成・構造を提案。
・金属材料の特性を決める転位の挙動の解明を可能とする基本的計算技術・方法論を確立。
・高分子集合様態分離性能に及ぼす影響、無機・ポリマー間結合強度や熱伝導性の計算手法確立。
・大規模複雑構造第一原理計算汎用ソフト」、「機械学習及び進化的構造探索プログラム」など開発。

（ポスト「京」運用開始５年後）

・高度化された実空間第一原理シミュレーション手法による実在系デバイスの設計。
・光・電子融合デバイスの理論設計指針提案とその実験的検証。
・トポロジカル新機能物質および高転移温度かつ安定な界面・薄膜超伝導の機構解明・予言・設計
・低希土類濃度新磁石のための素材開発とそれらを用いた保磁力制御永久磁石実現方法の提案。
・鉄系、Ni 系他、各種合金で特性と転位の挙動解明に関するシミュレーションと設計例の提示。
・共重合系への生体分子結合や結合剤分子両端での無機・有機結合シミュレーションの実現。
・第一原理スペクトル計算汎用ソフト、三元系及び非立方晶系構造・相図計算プログラム汎用化。

＜アウトカム成果＞

（ポスト「京」運用開始５年後）

・ナノメートル構造のダイナミクスの量子論的取り扱いを可能へ。
・実在系デバイス丸ごとシミュレーションで産業界でのデバイス開発時間・費用大幅な削減に寄与。
・バルク結晶より転移温度の高い超伝導薄膜・界面の設計および実現。
・トポロジカル新機能の量子デバイスへの応用が期待
・温度特性が格段に改良された自動車、発電機用永久磁石の実用化。
・鉄系金属材料等で強度・信頼性の向上、希少元素低減化の開発が計算と実験の連携で可能。
・海水淡水化や透析に用いる高分子分離膜の分離性能や機械的強度の向上。
・3 次元半導体や自動車等のパワー半導体の冷却に必須な高熱伝導性封止材料の理論設計。
・大型実験施設とポスト「京」シミュレーション研究の協力関係構築による新規材料開発の進展。

（ポスト「京」運用開始 10 年後）

・量子論デバイスおよびプロセス・シミュレータで世界のものづくりの新パラダイム形成が期待。
・従前デバイスを質的量的に凌駕する光・電子融合デバイス実験検証で産業界開発を順に実現。
・ダイヤモンド NV センターを利用した光磁気応答センサー設計、開発寄与で脳磁図関連に活用。
・高温超伝導薄膜・界面の量子ビット等の量子デバイス応用が期待。
・用途に適した保磁力をもった小型軽量な希少元素フリー永久磁石を開発。
・磁気デバイスの高密度化、高速化でメモリーデバイス等の省エネに大きく寄与。
・計算と実験の連携で各種金属系材料の強度・信頼性の向上、希少元素低減化を実現。
・生体膜匹敵分離能保持人工腎臓開発への貢献、メッキ・防食塗装等ものづくり産業基盤技術の革新。
・デバイス・材料産業に対して最適な組成設計やプロセス設計のツールを提供。

（４）周辺領域への波及効果、課題全体における計算科学やシミュレーションの位置づけ

［周辺領域への波及効果］

本提案が対象とするナノテクノロジー・材料科学技術は、資源・エネルギーの制約や社会インフラの老朽化対策等、社会的課題の解決に資する課題として大きな期待を背負う国家基盤技術であり、「科

学技術イノベーション総合戦略 2014」でもその重要性が明記されている。わが国はこの分野で世界の先頭集団を走ってきたが、アジア諸国の追い上げ等国際的な研究開発競争が激化する中、新たな指導原理に基づくデバイス・材料開発により世界をリードし続けることが求められている。そこで本提案では、ポスト「京」の圧倒的な計算機資源を活用し、「京」で培ってきたデバイス・材料シミュレーション技術をさらに発展させることで、計算機シミュレーションが主導するデバイス・材料開発の実現を目指す。建物や車両の設計に数値シミュレーションが果たすと同様の役割を、デバイス・材料のシミュレーションが果たすことにより、ナノテクノロジー・材料科学技術が大きく進展し、産業競争力の強化につながるだけでなく、環境、ライフサイエンスなど、新たな分野の先端を切り拓くことができる。

［課題全体における計算科学やシミュレーションの位置づけ］

１）社会的・国家的見地からの意義【必要性の観点】

①我が国を取り巻く社会的・科学的課題の解決に貢献できること。

本提案は、我が国の総合的・基本的な科学技術・イノベーション政策として策定された「科学技術イノベーション国家戦略 2014」に沿って、材料関連の課題解決を目指す提案である。とくにサブ課題(a)-(c)は基礎的な分野横断技術や省エネのための「小型デバイス技術」、「パワーエレクトロニクス」、「革新的電子デバイス」、(d)はモータ用「高性能新規磁石」、(e)は「構造材料」、(f)は分離膜による「資源循環・再生技術」の課題解決を図るものである。

また我が国の資源制約の克服、産業競争力の強化を目指しすすめられている「元素戦略プロジェクト＜研究拠点形成型＞」においてとりあげられた 4 つの対象領域のうち、「電子材料」、「磁石材料」、「構造材料」の 3 つが、それぞれ本提案のサブ課題 (a)-(c), (d), (e)のターゲットである。各元素戦略拠点の電子論グループメンバーが本提案に多数参加しており、各元素戦略拠点との連携を通じて革新的な成果が期待できる。

２）世界を先導する成果の創出が期待できる。【有効性の観点】

①科学的なブレークスルーや我が国の産業・経済への波及効果が期待されること。

本提案グループは、「京」で高いパフォーマンスを示すアプリを開発し実績を上げてきた研究者を核に、分野２戦略機関の分野振興活動等を通じて高並列計算の準備を進めてきた研究者を加えて組織したものである。各サブ課題は「京」の自然な発展としてポスト「京」で社会的・科学的課題の解決を目指す研究と、新たに 10-20 年後の社会や産業に寄与できるかもしれない基礎科学のブレークスルー、いわば「遠くの星」の提示を目指す研究とを含み、そのいずれも産業界のみでは取り組むことができない先端的研究である。したがって本提案は、終了時点から 20 年後にかけてわが国の産業競争力の強化や科学技術の進展に資するものである。

②成果創出に向けて、計算科学者や理論科学者に加え、計算機科学者、応用数学者社会科学者、実験・観測科学者、産業界や自治体等の関係者等が連携・協調した開発体制を構築できる見通しがあること。

本提案グループは、HPCI 戦略プログラム分野２戦略機関（統括責任者：常行）、科研費新学術領域「コンピューティクスによる物質デザイン：複合相関と非平衡ダイナミクス(H22-H26)」（領域代表：押山）、元素戦略プロジェクト＜研究拠点形成型＞（香山、常行、三宅が PI、赤井がアドバイザリとし

て参加）を通じて計算機科学者、応用数学者と連携して「京」で高効率に動作する超並列アプリを開発し、また実験科学者と連携して実験の解析やシミュレーションの検証を行ってきた実績がある。また各サブ課題の実施者は、元素戦略プロジェクト等を通じて個別もしくはサブ課題単位で実験研究者と共同研究をすでに進めている。これらの実績を元に、本提案では多数の計算機科学者や実験科学者と一層の研究協力を進める。実験やシミュレーションで得られる大量のデータを利用する物質・材料開発手法（マテリアルズインフォマティクス、機械学習など）は、サブ課題(g)「共通基盤シミュレーション手法」の中で新たに取り入れる。また多くのサブ課題には産業界もしくは産業に近い応用分野の研究者が分担者もしくは研究協力者として参加し、産業界との連携を図るほか、スーパーコンピューティング産業応用協議会と協力し、開発したアプリの産業界への普及について協議を進める予定である。

３）ポスト「京」の戦略的な活用が期待できる。【戦略的活用の観点】

①ポスト「京」により初めて可能となる超大規模計算・データ解析であること。

「京」では Si ナノワイヤーや銅酸化物高温超電導体、構造材料の析出物界面など、いくつかの物質・材料についてかつてない大規模かつ精密なシミュレーションが本提案グループのメンバーによって行われ、その電子状態や物理現象の解明・理解が進んだが、多様な構造体、材料、複雑界面や不均一系など、高機能物質・材料創成に必要な計算を行うには計算資源が不足しており、計算は理想的な界面を有するナノ構造モデルや特定の理想結晶に限られていた。ポスト「京」では、これまで不可能だった複雑な界面や不均一性を考慮した実在系の精密、大規模、長時間シミュレーション、さらには多数の化学組成、多様な条件に対する系統的シミュレーションを行うことで、高機能物質・材料の設計やデバイスデザインを実現することができる。また大規模実験施設で得られる膨大な実験データの解釈や総合的な理解にも、ポスト「京」の利用が不可欠である。

②俯瞰的にみてポスト「京」の十分な活用が期待できること。

本提案で開発されるアプリは、ポスト「京」のみならず、第 2 階層スパコンや PC クラスターなど、問題の規模にあわせて様々な計算機システムで利用できる汎用性の高いものである。またポスト「京」により初めて可能となる電子論に基づく超大規模計算により、材料の不均一性やデバイスの界面効果の学理が構築される。また多数の化学組成、多様な条件に対する系統的シミュレーションとマテリアルズインフォマティクス手法により、材料特性を決定する主要なパラメータが明らかになる。これらの抽象化、一般化を通じて、物理的直感に基づく材料探索、簡便な計算やデータベースを利用した材料開発、連続体モデルによる材料組織予測等、より小規模な計算機によるデバイス・材料シミュレーションが大きく発展する。

③ポスト「京」の利用による投資効果が明確であること。

サブ課題Ａに関連する研究では、国際会議 SC11 においてゴードンベル賞(アプリの最高性能賞）を受賞した第一原理計算ソフト RSDFT を活用し、10 万原子レベルの計算を「京」で高い実行効率で実施している。この RSDFT を利用しても、現実系により近づくためには原子数増大や熱輸送の問題の考慮が必要であり、「京」での計算限界を打破するためにポスト「京」が必要となる。他のサブ課題も同様に「京」で動作するアプリを主として利用するため、「京」の限界を把握たうえで、ポスト「京」ではじめて達成しうる研究計画を策定することが可能である。尚、ポスト「京」向けチューニング技術を

サブ課題間で共有してアプリ開発に活かし、課題全体として計算資源を有効に活用する体制を構築する予定。

（５）分野振興（人材育成・教育、アプリ普及、産業界への成果普及等）

シミュレーション手法の開発と新機能デバイス・高性能材料創成のための研究実施に当たり、5 年間という実施期間中だけでなく、それ以降の波及効果も併せた長期的なアウトカムの最大化を果たすには、継続的な人材育成・教育と、開発したアプリケーション（ソフトウェア）の普及活動が不可欠である。そこで本提案グループは、HPCI 戦略プログラム分野２戦略機関（計算物質科学イニシアティブ(CMSI): 物性研、分子研、金研および 11 の協力機関）で培われた経験と人的ネットワークを活かし、本提案と関連の深い重点課題 (5)や(9)をはじめとする他の重点課題とも協力しつつ、以下の活動を実施する。

①人材育成・教育

計算科学手法や高並列化に関する勉強会、講義、講習会など、若手研究者（大学院生を含む）の人材育成・教育に資する活動を企画・実施する。本課題で雇用する研究者のうち若干名は特任教員として採用し、研究実施に加えて人材育成・教育を分担してもらう予定である。実施に当たっては、研究上関連の深いポスト「京」重点課題（5）提案グループ（課題責任者：分子科学研究所／名古屋大学　岡崎進 教授)、文科省の「科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業」で平成 27 年度に採択された計算物質科学人材育成コンソーシアム（東北大金研、東大物性研、分子研、阪大ナノサイエンスデザイン教育研究センター)、理化学研究所計算科学研究機構（AICS）と連携する。

②アプリ普及、産業界への成果普及等

CMSI で立ち上げ運用してきた計算物質科学のアプリポータルサイト”MateriApps”等を利用して、本課題で開発するアプリの公開と普及を図る。とくにユーザ増が期待できる主要アプリについては、企業研究者、実験研究者、若手研究者を想定したアプリ講習会・説明会を企画し、普及とあわせてユーザからの要望を吸い上げるためにも役立てる。とくに産業界への普及や要望の吸い上げについては、サブ課題(G)を窓口として、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会（産応協）と連携する。

また、p7 サブ課題 A、C、D を中心として「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、展開する。

③計算資源の効率的マネジメント

課題 7 を実施する物性研と金研、課題 5 を実施する分子研は、それぞれの持つ共同利用スパコンの一部を HPCI 戦略プログラム課題 2 の実施に供出しており、来年度からはポスト「京」の重点課題 5,7 にもその仕組みを適用することを検討している。その枠組みの中で、アプリケーションの高度化に関する研究会を共同開催で実施する予定で検討が進んでいる。

（６）年次計画

【ベース目標】

課題全体	中間目標（平成29年度）	本課題で中核として利用するアプリを少なくても3本、ポスト「京」をフルに動作させて計算可能な見込みを得る。
	最終目標（平成31年度）	各サブ課題の中核として利用するアプリ７本と、課題全体で活用するサブ課題Gのアプリを少なくても2本、計９本をポスト「京」のフル活用計算可能な状態に整備し、科学的、社会的成果の得られる準備を完了させる。

サブ課題名 （分担機関・責任者）	調査研究・準備研究フェーズ		本格実施フェーズ			
	平成26年度	平成27年度	平成28年度	平成29年度	平成30年度	平成31年度
サブ課題Ａ 高機能半導体デバイス （名古屋大学大学院工学系研究科・押山淳）	（目標） フィーザビリティ調査 （実施内容） 実空間第一原理計算手法とデバイス・シミュレータの統合方針策定	（目標） 実空間手法のチューニングとデバイス・シミュレータでのHPC （実施内容） RSDFT, RSPACE, CONQUESTのポスト京アーキテクチャ（pKat）でのチューニング。 NEGFと実空間手法の連成 FB-MC、量子流体手法のハイブリッド並列化	（目標） 実空間手法のチューニングとデバイス・シミュレータでのHPC （実施内容） RSDFT, RSPACE, CONQUESTのpKatでのチューニングと高機能半導体材料での物質科学計算。NEGF+実空間手法デバイス・シミュレータの構築。FB-MCの並列化。量子流体手法のpKatでのチューニング	（目標） 実空間手法による高機能半導体物質計算とデバイス・シミュレータの高機能化および新材料デバイス解析 （実施内容） RSDFT, RSPACE, CONQUESTのpKatでのチューニングと高機能半導体材料での物質科学計算。FB-MCと実空間手法の連成。FB-MCのpKatでのチューニング。新材料FETのデバイス解析	（目標） 実空間手法の高機能化とデバイス・シミュレータのpKatでのチューニングおよび新材料デバイス解析 （実施内容） 実空間3コードにより高度な近似をインプリメント。NEGF、FB-MC、量子流体デバイス・シミュレータのpKatでのチューニング。新材料FETのデバイス解析	（目標） 高機能実空間手法による高機能半導体物質計算と量子デバイス・シミュレータのプロダクション・ラン （実施内容） 実空間3コードの高機能化による新たな物質計算。デバイス・シミュレーション3コードのpKatでのプロダクション・ラン

サブ課題Ｂ 光・電子融合デバイス （自然科学研究機構分子科学研究所・信定克幸）	（目標） ・光・電子融合デバイスの現状把握 （実施内容） ・GCEED, ARTEDの超並列化継続	（目標） ・光・電子融合デバイス候補確定 ・コードの共有化 （実施内容） ・メニーコアに向けたコードの最適化準備	（目標） ・メニーコア対応のプログラムを開発 ・GW+BSE開発に関する連携 （実施内容） ・近接場光励起ダイナミクス計算 ・高強度パルス光励起ダイナミクス計算	（目標） ・実在系プロダクトラン ・超微細光加工の基盤技術の開拓 （実施内容） ・発光デバイスの計算	（目標） ・実在系プロダクトラン （実施内容） ・実験グループとデバイスモデル設計の協力開始 ・光磁気相互作用の計算	（目標） ・実験G、産業界との連携を行いプロトタイプデバイス設計 ・高精度量子多体系ダイナミクス計算法の開発 （実施内容） ・十～数十nmサイズのナノ構造体シミュレーション ・磁場センサーのモデル設計
サブ課題C 超伝導・新機能デバイス材料 （東京大学大学院工学系研究科・今田正俊）	（目標） 強相関第一原理計算法（MACE）の要素新規アルゴリズム開発 （実施内容） 多変数変分モンテカルロ法(mVMC)がトポロジカル相を取り扱えるよう拡張。革新的な有限温度・ダイナミクス計算手法を開発。テンソルネットワーク(TNW)ソルバの開発。	（目標） MACE各要素の並列高度化とコードの多機能化。TNWソルバの開発 （実施内容） 計算コスト増大克服のための分散メモリ化とさらなる並列化。TNW法と有限温度・ダイナミクス計算手法の組み込み開始。	（目標） TNW、mVMCを含むMACEの多機能化実装と実応用開始 （実施内容） 「京」におけるテスト計算の開始。前年度までに改良を行ったコードを、実行可能な限界である5原子層銅酸化物高温超伝導体でテスト。	（目標） 銅酸化物、トポロジカル物質での実証計算。コードの高度化並列化続行 （実施内容） 5原子層銅酸化物高温超伝導体とスピン軌道相互作用系での弱スケーリングと実行効率の改良。拡張された密度汎関数理論や動的平均場理論の組み込み検討開	（目標） 多原子層銅酸化物とポスト「京」での界面計算の可能性を実証。 高度化コードの実適用 （実施内容） 効率化されたコードによる、ポスト「京」で実行可能となる多原子層銅酸化物高温超伝導体計算へ向けた界面超伝導の予備的	（目標） 第一原理的なトポロジカル界面薄膜の実証計算 （実施内容） ポスト「京」における5000格子点以上の実計算に向けた、3次元トポロジカル相候補物質の2000格子点までの予備的第一原理高精度計算。

				始。	計算を実施。	
サブ課題D 高性能永久磁石・磁性材料 （東京大学物性研究所・三宅隆）	（目標） 研究体制基盤の構築 （実施内容） 数万原子を含む永久磁性材料の計算を可能にする手法の確立に着手する。デバイス応用を目指した磁性材料にむけた研究体制を確立する。	（目標） 1,000原子規模の磁性材料シミュレーションにより界面基礎物性を明らかにする。 （実施内容） オーダN法を用い希土類磁石材料界面のシミュレーションを行い、その磁気特性の空間プロファイルを明らかにする。	（目標） 1000原子規模の磁性材料に対する第一原理計算と磁化反転シミュレーション技術を高度化し、界面改良の指針を見いだす。 （実施内容） LLGシミ ュレーションに より磁化反転の 解析を行い、モデ ル界面の改良を 行う。また系統的な物質探索、分子 動力学シミュレーション技術を 開発する。	（目標） 1000原子規模の磁性材料に対する探索のシミュレーション技術を開発し、新規磁性材料を探る。 （実施内容） 希土類磁石界面とともに遷移金属化合物薄膜およびヘテロ界面の計算を実行する。分子動力学シミュレーションによる構造探査に着手する。	（目標） 3000原子規模の磁性材料に対する複雑界面シミュレーション技術を開発し、磁性を解明する。新規磁性材料の提案。 （実施内容） 磁性体界面の計算を行い、界面の微視的状態と磁気特性の関係を解明する。系統的物質探索、分子動 力学シミュレーションにより新物質・構造の探索を行う。	（目標） ポスト「京」で実施可能な5000～1万原子規模の磁石シミュレータを開発。新規磁性材料特性の理論的評価の実施。 （実施内容） 格子歪み、欠陥や乱れと磁石・磁気 デバイスの特性の関連を調べ、高性能化への指針を与える。また新物質・構造の探索を継続し、磁気特性と相安定性に基づき新材料の提案を試みる。

サブ課題E 高信頼性構造材料 （産業技術総合研究所・香山正憲）	（目標） 各要素技術の詳細、最新の研究開発動向、克服すべき技術課題、具体的な開発の手順・進め方について、調査・検討する。 （実施内容） (1)大規模構造用の第一原理計算手法の調査・検討 (2)粗視化手法の調査・検討 (3)大規模Phase Field法計算の調査・検討 (4)金属系構造材料の微細組織の実験・開発の最新動向の調査	（目標） 引き続き、各要素技術の研究開発動向、克服すべき技術課題、研究開発手順について、調査・検討する。 （実施内容） (1)大規模第一原理計算法、第一原理計算を適用する構造モデル等の調査・検討 (2)粗視化手法の調査・検討 (3)大規模Phase Field法計算の調査・検討 (4)金属系構造材料の微細組織の実験・開発の最新情報の収集	（目標） 大規模第一原理計算、大規模Phase Field法計算の実行・試行を進めながら、コードの開発・整備を進める。粗視化手法の検討・開発を進める。 （実施内容） (1)転位・界面・粒界・合金等のモデルの大規模第一原理計算の実行、コードの開発・整備 (2)粗視化手法の検討・開発 (3)大規模Phase Field法計算の試行、コードの開発・整備 (4)実験・開発との比較・検討	（目標） 大規模第一原理計算、大規模Phase Field法計算を実行しながら、コードの開発・整備を進める。粗視化手法の検討・開発を進める。実験観察との比較を進め、現象の解明を行う。 （実施内容） (1)転位・界面・粒界・合金等のモデルの大規模第一原理計算の実行、コードの開発・整備 (2)粗視化手法の検討・開発 (3)大規模Phase Field法計算の試行、コードの開発・整備 (4)実験・開発との比較・検討	（目標） 金属中の複雑構造の大規模第一原理計算を進める。その結果を粗視化手法により大規模Phase Field法計算に繋げて実行する。得られた結果を実験観察と比較検討し、現象の解明と計算技術の検証を進める。 （実施内容） (1)転位・界面・粒界と合金成分の相互作用の大規模第一原理計算の実行 (2)第一原理計算の結果の粗視化の実行 (3)連携したPhase Field法計算の実行 (4)実験・開発との比較・検討	（目標） 引き続き、複雑構造の大規模第一原理計算を進める。その結果を粗視化手法により大規模Phase Field法計算に繋げて実行する。得られた結果を実験観察と比較検討し、現象の解明と計算技術の確立を進める。 （実施内容） (1)各種複雑構造の大規模第一原理計算の実行 (2)第一原理計算の結果の粗視化の実行 (3)連携したPhase Field法計算の実行 (4)実験・開発との比較・検討

サブ課題F 次世代機能性化学品 （大阪大学大学院基礎工学系研究科・松林伸幸）	(目標) 高分子系の物質分配の解析に向けたERmodの高機能化 固液界面のハイブリッド計算に向けたhybridQMCLの高機能化 (実施内容) プログラム開発と検証	(目標) 直鎖高分子系への水・イオン・ガスの分配挙動の解析 実験状況にあわせた有機／無機界面モデルの構築 (実施内容) MDとエネルギー表示溶液理論による高分子系の解析 セラミックスと樹脂との界面モデル系の熱伝導解析	(目標) 分岐を持つ高分子系への小分子の分配 hybridQMCLの有機／無機界面モデルへの試行的な適用 (実施内容) レプリカ交換MDとエネルギー表示溶液理論による高分子系の解析 金属と樹脂との接着強度とその劣化挙動に関する解析	(目標) 架橋を持つ高分子系への小分子の分配 時間スケールを拡大する手法のhybridQMCLへの導入 (実施内容) 粗視化モデリングに基づくMDとエネルギー表示溶液理論による高分子系の解析 hyperdynamics法のhybridQMCLへの導入	(目標) 多孔性の高分子系への小分子の分配 hybridQMCLでのQM計算部分の高速化と大規模並列化 (実施内容) 粗視化モデリング基づくレプリカ交換MDとエネルギー表示溶液理論による高分子系の解析 メニーコア環境にあわせたDFTコードの改良	(目標) トポロジー制御共重合体のモデリングとそれに基づく全原子MD 時間スケール拡大法に基づく架橋形成機構の解析 (実施内容) 全原子MDと粗視化モデリングを双方向的に連結した手法による高分子系の解析 メッキ、表面粗化のモデル化
サブ課題G 共通基盤シミュレーション手法 （東京大学物性研究所・尾崎泰助）	(目標) ニーズ調査を行い共通基盤シミュレーション手法のターゲットを確定。 (実施内容) 基盤的アプリ・計算手法の調査と選定。実施・連携体制の構築。	(目標) 基盤的第一原理電子状態計算ソフトウェアの基本性能の強化。相図・相平衡計算手法の開発。 (実施内容) 基盤アプリの計算ボトルネックの解析。格子の局所緩和の計算プログラムの構築。基盤的超並	(目標) 基盤的第一原理電子状態計算ソフトウェアの並列性能の強化。相図計算プログラム、結晶構造探索手法の開発。 (実施内容) 基盤アプリに対するアルゴリズム改良及びプログラムの高度チ	(目標) 基盤的第一原理電子状態計算ソフトウェアへのスペクトル計算機能の実装。結晶構造探索、相変化計算手法の開発。 (実施内容) XAFSやNMRのスペクトル計算手法の開発・実装と相図計算プログ	(目標) 高度チューニングされた基盤的第一原理電子状態計算ソフトウェアの一般公開と結晶構造探索プログラムの統合、第一原理フェーズフィールド法プログラムの統合 (実施内容) 基盤ソフトウェ	(目標) 結晶構造、基底状態・相平衡・内部組織の統合プログラム開発と数値ライブラリのパッケージ化と公開 (実施内容) 第一原理フェーズフィールド法プログラムの統合。 数値ライブラリのマニュア

		列計算アルゴリズム開発。	ューニングと相図計算プログラムのモヂュールの整備、構築、結晶構造探索手法開発の準備。基盤的超並列計算アルゴリズムの実装。	ラムモヂュールの統合。結晶構造探索のプログラム、第一原理フェーズフィールド法プログラムの開発。 基盤的超並列計算アルゴリズムの実装と性能評価。	アのwebとマニュアル整備及び一般公開。 粗視化マッピング手法の開発。	ルの整備と公開。

（７）実施体制

本プロジェクトは、東京大学物性研究所を代表機関とし、そのもとで実施する A～G の７つのサブ課題から成り立つ。サブ課題 G は各サブ課題の共通基盤となるシミュレーション手法を開発するため、サブ課題 A～F と連携して課題を推進する。各サブ課題には課題を実施するために必要なメンバーとして、計算科学者に加え、応用数学者、実験研究者、産業界の関係者が課題実施者、協力者として参画する。また、それぞれのサブ課題は、SPring-8 や J-PARC 等の実験施設との連携、「元素戦略プロジェクト」や「ImPACT タフポリマー」等との国家戦略プロジェクトと連携して実施する。また、開発するアプリケーションの企業利用を促進するため、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会がサブ課題 G に協力機関として参画する。さらに、計算環境支援としてスパコンを保有する東京大学物性研究所、東北大学金属材料研究所の協力を得る。図１に本プロジェクトの実施体制を示す。平成 26 年度末時点で分担機関数は 12 機関で実施者 33 名、協力機関数は 27 機関で協力者 89 名で推進しており、同体制を平成 27 年度も継続する。

尚、本プロジェクトで雇用する研究員は、下記サブ課題の実施体制の規模や開発するアプリケーションソフトウェアの汎用性等を考慮して、サブ課題ごとに２～５名程度、ベース課題実施で合計２０名程度を採用する予定である。尚、その内の何名かの経費は必要に応じプログラム開発などの外部委託とする場合もある。また、サブ課題の研究実施リーダークラスの教員も２名採用予定である。採用の際に、アカデミック志向のキャリアパスを望む研究者だけでなく、産業界やソフトウェア利用支援機関などへキャリアパスを志向する研究者も採用する。特に後者の研究者は企業との共同研究を実施するとともに、共同研究先企業へのキャリアパスも視野に入れて研究を推進する。

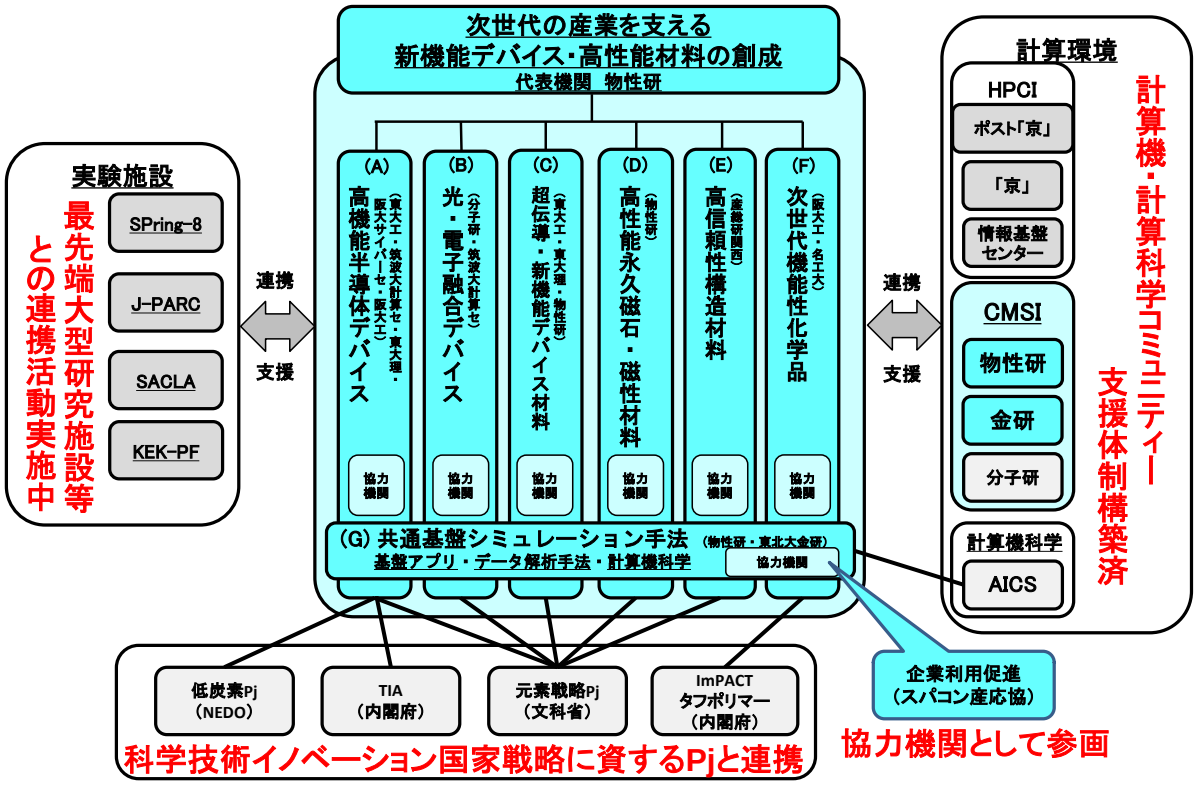


図１　本プロジェクトの実施体制（H27.3 時点）

（８）必要計算資源

「京」の計算資源量　（単位：ノード時間/年）

	H27 年度	H28 年度	H29 年度	H30 年度	H31 年度
ベース目標	1,086,531	26,339,424	26,339,424	26,339,424	26,339,424

「京」以外の計算資源量　（単位：ノード時間/年）

	H27 年度	H28 年度	H29 年度	H30 年度	H31 年度
ベース目標	26,050,000	29,050,000	31,200,000	32,500,000	31,600,000

２．研究開発内容詳細

２－１．サブ課題Ａ．高機能半導体デバイス

（１）目的・意義

次世代高機能半導体デバイスを支える材料・構造体の物性解明・予測のための量子論に立脚した先端的計算を、ポスト「京」・アーキテクチャ上で可能にする新たな数理手法とアルゴリズムを開拓し、科学的工学的に最重要な諸現象の解明・予測を行う。得られた知見と直接連動した、量子論に基づくデバイス・シミュレーション技術を確立する。これにより計算物性科学の最先端を切り開き、次世代高機能半導体デバイスの設計技術さらにはデバイス作成のプロセス技術の進展に寄与し、新たな産業の発展に資する。また、計算物性科学・量子シミュレーション分野の振興のためのアプリケーションソフトの公開を行うとともに、分野振興を支える人材の育成を目指す。

［ベース目標］

ベース目標としては、研究開発目標の第一は、すでに「京」コンピュータ上で高度に洗練化した申請者グループによる実空間手法をポスト「京」アーキテクチャで高度化すること、それによる先端的計算物性科学を推進すること、さらに、既存のデバイス・シミュレーション技法と組み合わせることにより、第一原理デバイス・シミュレーション技術を確立することである。さらに、次世代デバイスでは､新材料の取り込みが必要となり､またナノスケールの新たな現象の探求も必要となることから、様々な物質の静的および動的物性を解明する、密度汎関数理論の標準近似を越えた新たな計算手法の開発もターゲットとする。

（２） 実施内容

上記目的を達成するために、二つの研究項目を立てる。第一は「デバイス構造における乱れの理解と制御そして新機能発現」、第二は「新材料からの量子論デバイス創製シミュレータ開発」である。

［ベース目標］

対応する研究項目の実施内容は以下のとおりである。

①デバイス構造における乱れの理解と制御そして新機能発現

この研究項目においては、申請者グループが「京」コンピュータ上で高速化高度化に成功した第一原理実空間計算手法を、ポスト「京」アーキテクチャ上でさらに発展させ、世界をリードするシミュレーション技術を開発するとともに、それを用いた計算物質科学のブレークスルーを目指す。具体的には、実空間密度汎関数法とそのダイナミクス計算への拡張（東大工学系、筑波大)、実空間密度汎関数+輸送計算手法の洗練化（筑波大）を「京」およびポスト「京」上で実施する。開発した手法を用いて、(1)パワーデバイス材料である窒化物半導体、炭化珪素、ガリウム酸化物 (2)新奇材料と目されているグラフェン、シリセン、遷移金属カルコゲナイド等の超薄膜伝導体、(3) テクノロジーとの高い連続性を有する Si/Ge 系ナノワイヤー・ドット構造、にフォーカスし、それらを用いたデバイス界面での乱れ（界面構造、不完全性、異種原子混入）と界面形成の物理的化学的本質と電子的特性を解明し、今世紀におけるデバイス科学を確立する。

第二の実施内容として、「電子状態計算の高度化」をすえる。電子相関の強い系など、密度汎関数理論の標準近似では精度が不足している物質群は多々存在する。密度汎関数法の枠内での近似向上、無

限次元多体摂動論の応用、多体波動関数論の応用など、ポスト京でフィーザブルな手法の開拓を目指す（東大理学系、工学系）。

②新材料からの量子論デバイス創製シミュレータ開発

この研究項目においては、上記研究項目における量子論的計算の知見を直接入力とする、デバイス特性シミュレータおよびデバイス作成シミュレータの開発を行い、前世紀における TCAD（Technology Computer Aided Design）技術の革新を行う。具体的には、実空間密度汎関数法と散乱過程を含んだ非平衡グリーン関数法を連成し（阪大、東大工学系）、さらにフルバンド・モンテカルロ法とも連成した（筑波大、阪大）シミュレーション技法を確立する。また、電子ベース輸送物理のミクロ・マクロモデルの開発と量子流体デバイス・シミュレーション技法の開発（阪大、筑波大）を実施する。さらに、デバイス構造における乱れの理解と制御の研究を受けて、材料特性のみならずプロセス過程を取り込んだ第一原理的プロセスシミュレーションの研究（名大）を行う。

以上、いずれの研究項目においても、数理科学分野、計算機科学分野との密接な共同（筑波大、理研）が不可欠であり、申請者らが科研費新学術領域「コンピューティクスによる物質デザイン（H22-H26）：領域代表 押山淳」で培ってきた知見と技術が活用できる。また、そうした融合分野振興のための、大学院レベルの講義、ワークショップを行い、人材の育成を目指す。

［サブ課題間連携目標］

上記研究開発課題においては、大規模固有値問題解法とマルチスケール・シミュレーション技術が必要になる。とくに後者は、パワーデバイスにおける縦型トランジスターでのデバイス・シミュレーションには不可欠の技術となるはずである。サブ課題 G における研究開発課題と連携する。

（３）目標・期待される成果

デバイス機能の発現は、異種物質ヘテロ接合界面での物理現象の活用といえる。本サブ課題では、進展著しい量子論に基づく先端的計算手法と開発現場で活用されてきたデバイスおよびプロセスシミュレーション技術を統合し、界面の科学的理解と工学的制御を行い、それにより産業の技術的基盤形成を目指す。

［ベース目標］

ベース目標は、今までのプロジェクトで培ったアプリケーションの統合とそのポスト京コンピュータでの成果創出である。アウトプット成果として、本格実施フェーズ終了時には、実空間第一原理シミュレーション手法の高度化により、SiC、GaN などのパワーデバイス材料、グラフェン等新奇二次元伝導体、Si/Ge 系ナノ構造での、ナノ界面構造と電子物性の相関解明が行われる。とくに、界面欠陥によるギャップ中電子準位の定量的決定を行い、電子輸送現象の解明と易動度向上の指針を与える。これを達成するための中間目標として、実空間第一原理シミュレーション手法（RSDFT、RS-CPMD）のポスト「京」アーキテクチャ上での高速化を行い、「京」で達成された 50%超の高い実行効率を、ポスト「京」でも現実のものとする。また、この実空間手法とデバイス・シミュレータの統合により、高精度・大規模系の量子論デバイス・シミュレータのベータ版の開発が行われる。さらにアウトカム成果としては、ポスト京での実空間手法の HPC 技術開発は、2030 年頃には現実のものとなるゼータフロップス級スーパーコンピュータでの HPC 技術開発へと繋がる重要な橋頭堡となる。物質科学分野におけるアウトカム成果としては、ポスト「京」の運用開始 5 年後には、そのリソースの十分な活用により、

ナノメートル構造の構造、ダイナミクスを量子論で取り扱うことが可能になると予想される。

また、十分な人的資源が投入できれば、密度汎関数理論を越えた、より高精度の量子多体物性論に立脚したシミュレーション手法が開発され、強相関電子系物質等への応用範囲が広がる。さらにアウトカム成果としては、ポスト「京」運用開始後5年を目処に、ベース目標で開発された「新材料からの量子論デバイス創製シミュレータ」を、ポスト京以外のプラットフォームで、より簡便に実行可能なものにバージョン・アップする。これにより、パワーデバイス、ナノデバイス開発のスループット向上に資する。こうした、計算科学を活用した新たな物性基礎科学の確立とデバイス・シミュレーション高度化~~は~~、さらにはそれを支える人材の育成は、物理学、化学、材料科学と計算機科学とを融合したコンピューティクス学術領域の進展をもたらすことが期待される。さらには、ポスト京運用開始10年後には、量子論デバイスおよびプロセス・シミュレータの活用により、世界のものづくりの新たなパラダイムが形成されることが期待される。

［サブ課題間連携目標］

本課題におけるデバイス・シミュレータにおいては、とくにパワーデバイス系において、マルチスケール・シミュレーション技術が必要になると予想される。その数理手法開拓はサブ課題EおよびFと共通の課題であり、サブ課題 G「共通シミュレーション技法」との連携により目標の達成が期待される。

（４）「京」でできていること、ポスト「京」でなければできないこと

申請者グループは「京」コンピュータ上での実空間密度汎関数理論手法の高度化を達成しており、RSDFT (Real Space Density Functional Theory)コード、RSPACE (Real Space)コード、CONQUEST(Concurrent O(N) Quantum Electronic Simulation Technique)コード、RS-CPMD(Real Space Car Parrinello Molecular Dynamics)コードは、マルチコア・超並列アーキテクチャコンピュータ上での最先端コード群と云え、現在では100,000原子群での第一原理計算も可能となっており、実際2011年のゴードンベル賞(最高性能賞)を獲得している。またそれによる物性科学領域での貢献も顕著であり、数多くの原著論文の発表と招待講演を行っている。しかしナノデバイスにおける、産業に役立つシミュレーションの実行のためには、100,000原子計算の日常化、10,000原子系のコンビナトーリアル探索、界面原子反応と電子・熱輸送の実デバイス構造での解明予測と、それによる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重要課題であり、これら未踏領域の開拓には、ポスト「京」が不可欠である。

（５）実施体制

研究項目「デバイス構造における乱れの理解と制御そして新機能発現」においては、ポスト「京」コンピュータに最適な実空間手法に基づき、最先端の大規模電子状態計算、長時間分子動力学法計算を遂行する。代表機関である東大工学系研究科（押山淳、岩田潤一)、分担機関である筑波大計算科学研究センター（小野倫也、重田育照)、協力機関である物材機構（宮崎剛）は、RSDFT、RSPACE、CONQUESTという最先端の実空間コードを開発してきており、世界の最先端を走っている。また、協力機関であるStrasbourg 大IPCMSのMauro Boero はCar-Parrinello 分子動力学法の開発者であり、定期的に

東大工学系に長期滞在している。これらのメンバーは過去において、文部科学省戦略プログラム「計算物質科学イニシアティブ（CMSI)」、科研費新学術領域研究「コンピューティクスによる物質デザイン」等のプロジェクトにおいて、緊密な共同研究を行ってきた。さらにこうした最先端計算を支える数理およびコンピュータ分野の研究者として、分担機関の筑波大学から朴泰祐、高橋大介、櫻井鉄也、協力機関の理研から今村俊幸が参加し、融合学術分野としてのコンピューティクスを、ポスト京のアーキテクチャで開花させる準備は万全である。さらに東大理学系研究科（常行真司）を分担機関として加え、大規模電子状態計算、長時間分子動力学計算に加えて、熱輸送計算というデバイス科学の喫緊の課題、新材料高精度電子状態計算という次世代デバイスに不可欠の課題に取り組む。また、理研計算科学研究機構コデザイン推進チームとは、RSDFT コードおよび RS-CPMD コードをターゲットアプリとしてポスト京コンピュータのコデザイン共同開発を推進する。

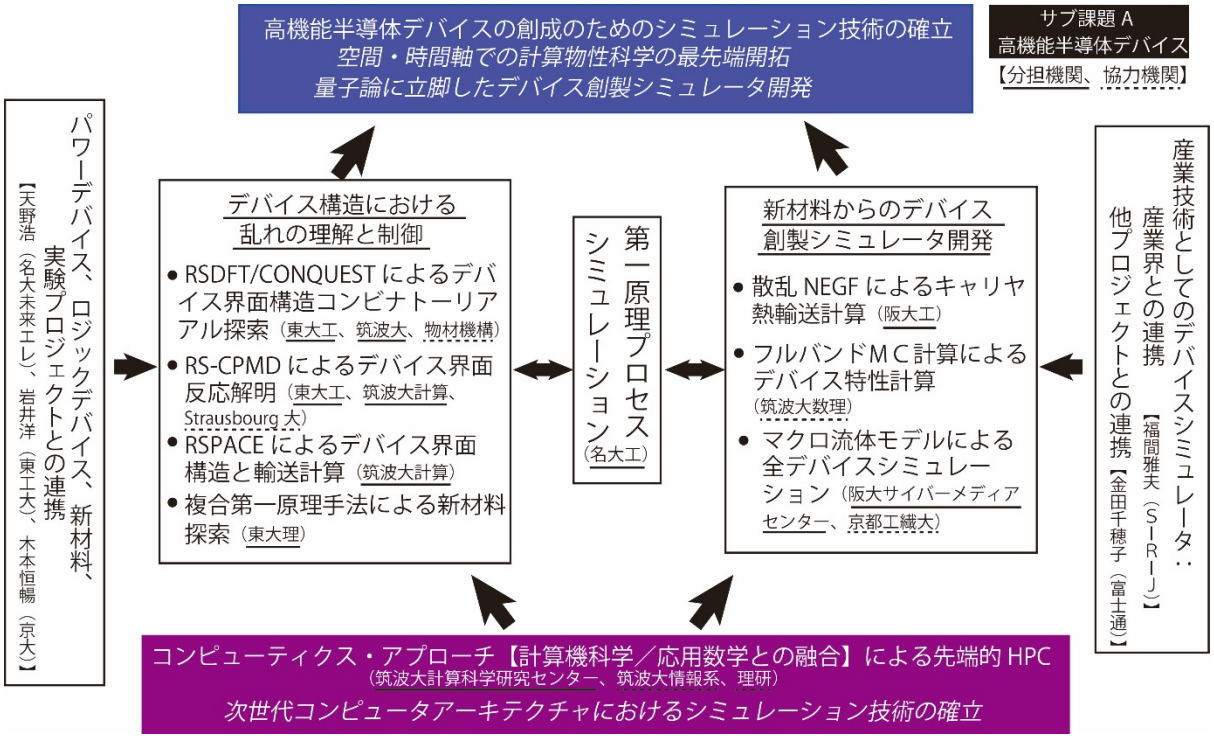
研究項目「新材料からの量子論デバイス創製シミュレータ開発」においては、非平衡グリーン関数法、フルバンド・モンテカルロ法、量子流体法を三本の軸として、研究項目①のアプリケーションと結合した、新たな量子シミュレータを構築する。分担機関である阪大サイバーメディアセンター（小田中紳二)、阪大工学研究科（森伸也、鎌倉良成)、協力機関である筑波大数理物質系（佐野伸行)、京都工繊大（廣木彰）は、上記三手法のデバイス・シミュレータコードを開発・応用してきており、JST-CREST プロジェクト「次世代エレクトロニクスデバイスの創出に資する革新材料・プロセス研究：原子論から始まる統合シミュレータの開発」等を通じ、緊密な共同研究体制を築いてきた。

二つの研究項目間の密な連携と互いへのフィードバックが本サブ課題の重要な側面であり、それを分担機関である名大工学研究科（白石賢二）のイニシアティブによって推進する。白石は研究項目①に関連した深いバックグラウンドと研究項目②に関連した応用上の知見を有しており、両者を結合させるのに最適な人材である。またデバイス・シミュレーションに加え、デバイス製造におけるプロセスシミュレーションに展開するために、名大拠点を中心として、①の RSDFT、CPMD コードと従来型のプロセス・シミュレータとの結合可能性をも探索する。

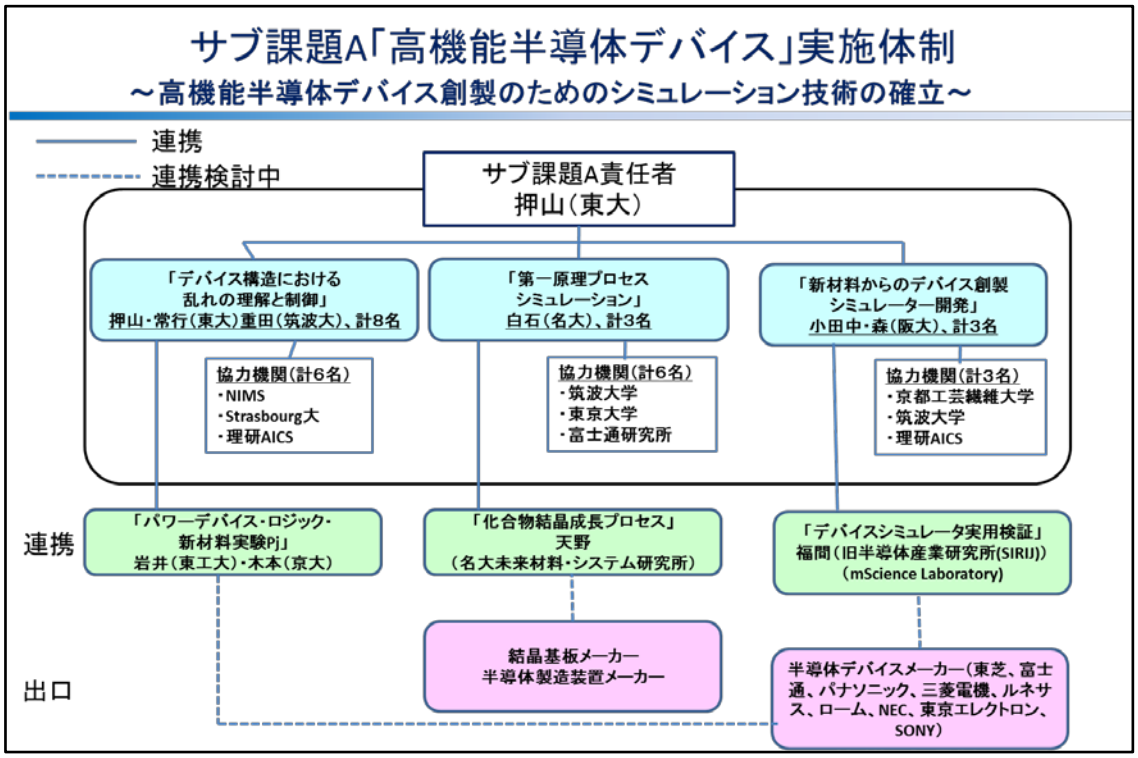
実験科学との共同においては、Si/Ge 系では東工大岩井洋教授グループとの連携を密にする。すでに同グループとは Si ナノワイヤーの RSDFT 計算とデバイス設計における共同研究があり、共著の論文として発表されている[Iwai, Shiraishi, Iwata, Oshiyama *et al.*, Science China - Information Sciences 54, 1004 (2011)]。また窒化物パワーデバイスでは名大天野浩教授グループとの連携、炭化珪素パワーデバイスでは京都大学木本恒暢教授グループからのアドバイスを受ける、天野教授および名城大学赤崎勇教授と、押山および白石は、学術振興会未来開拓学術研究推進事業「原子スケール表面界面ダイナミクス：推進委員長 西永頌」においてエピタキシャル成長の計算と実験での共同研究の実績がある。

本サブ課題は成果の産業界での活用が十分期待できるものであり、産業界との連携が重要である。そのために、長年半導体メーカーでデバイスシミュレータの開発と活用に従事してきた福間雅夫（現 m-science lab）と連携する。福間と押山はかつて NEC 研究所に所属し、デバイス・シミュレーションについて日常的に議論を行っていた。また、開発製造プロセス一般に関しては、富士通研究所（金田千穂子専任研究員）からのアドバイスを受ける。金田研究員とは、彼女および名大関係者が主宰する他プロジェクトと本サブ課題との連携を行うことで合意している。本サブ課題研究で開発される量子論デバイス創製シミュレータは、論理デバイス関連では東芝、パワーデバイス関連では三菱電機、富

士電機等での活用が期待される。この産業界とのリエゾン活動のためには、シミュレータ・インターフェースの開発が不可欠であり、本ポスト「京」事業あるいは他の事業による人材の手当が有効である。



下記に、組織体制、連携関係を示した運営体制組織図を示す。



２－２．サブ課題 B. 光・電子融合デバイス

（１）目的・意義

光と電子の動的な相互作用を露わに扱うことにより、従前の電子デバイスや光デバイスとはその動作原理が本質的に異なる、高効率・広帯域・超高速・非線形光応答特性や新奇光化学反応誘起特性を持った“光・電子融合デバイス”を理論・計算科学的手法を用いて提案・設計し、更には実験グループや産業界とも連携し、ポスト「京」稼働後に実現化することを目的とする。当該サブ課題で推進する理論・計算科学的手法は、光と電子の自由度を露わに取り扱うナノ光応答理論と独自の超並列大規模計算手法に基づく計算科学に立脚しており、従前のデバイス開発で生じている問題へ直接的かつ新しい方向から解決策を与え得るものであり、デバイス科学や産業レベルでのデバイス開発の現状を大きく進展させる意義を持つ。また、孤立系・無限系バルク・界面表面系等の様々なターゲット物質を対象として、広範囲な光強度領域の線形・非線形光学応答を扱うことができる革新的計算機シミュレーションプログラムとして GCEED 及び ARTED を確立し、計算機科学の専門家だけではなく、実験研究室や産業界でのデバイス開発の現場において広く利用できるプログラムとして整備する。

（２）実施内容

［ベース目標］

① ナノ構造体近接場光励起ダイナミクス：GCEED（分子科学研究所）

従前の電子デバイスや光デバイスとはその動作原理が質的に異なる光・電子融合デバイス、具体的には、広帯域・高効率光エネルギー変換デバイス、間接バンドギャップ半導体（ダイヤモンド、シリコン等）発光デバイス、光化学反応場誘起デバイス、光磁気応答デバイスの計算科学的設計を行う。この目標達成のために、ナノ構造体（電子系）と光の露な相互作用の結果生じる近接場光励起ダイナミクスを扱うためのナノ光応答理論及びその理論に基づく第一原理計算手法の開発を進める。理論開発においては、近接場光の特徴である２次高調波電場成分及び高波数成分の効果を取り込み、従前の双極子近似に基づく光応答理論を超えたナノ光応答理論を構築する。計算手法開発では、これまで「京」において開発してきた実時間・実空間グリッド法を用いた超並列第一原理光励起電子ダイナミクス法の更なる拡張を行う。特に、ポスト「京」を意識したメニーコア対応や通信の根本的改善を図る。この計算手法を用いて光・電子融合デバイスの理論設計、すなわち、２次高調波電場成分に起因する２光子励起を利用した広帯域・高効率光エネルギー変換デバイスや光化学反応場誘起デバイス、高い波数成分を利用した（フォノンの介在を必要としない）電子励起による間接バンドギャップ半導体発光デバイス、空間対称性を破った局所励起を活かした光磁気応答デバイス等の理論設計を行う。いずれも通常の伝播光にはその効果が含まれていない近接場光の特徴を電子ダイナミクスの自由度と露にカップルさせる概念を用いる。この理論デバイス設計を進めつつ、積極的に実験グループ（東大工）、産業界（化学メーカー）及び産応協とも協力し、光・電子融合デバイスの実現化に向けたプロトタイプデバイス設計を行う。

② ナノ界面高強度パルス光励起ダイナミクス：ARTED（筑波大学）

高強度パルス光によりバルク物質や表面・ナノ界面に生じる超高速キャリアダイナミクスと、その光波へのフィードバックを記述するマルチスケール第一原理計算法を発展させる。また同時に、精巧な高次ナノ構造を持つデバイス設計の為のレーザー加工技術の開拓を行い、デバイスの理論設計のみ

ならず、技術面からもデバイスの実現化を支援・促進する。具体的な課題としては、高強度パルス光と基本的な光学材料である酸化物や炭素系材料との相互作用を調べ、非線形光学効果を利用した従来の光デバイスの高速化・微細化をもたらす材料と構造の検討を行うとともに、新奇な光デバイス原理を与えると期待される高次非線形光学応答の特徴を明らかにする。また、非熱的なレーザー加工の初期過程で起こるパルス光から電子へのエネルギー移行メカニズムを解明する。同時に大学や企業の実験研究者と協力して、非熱的なレーザー加工過程を微視的に記述するシミュレーション法を完成させ、フェムト秒パルスレーザーを利用したナノ加工技術の原理を明らかにする。更にデバイス作成に必要となる３次元的なナノ加工に最適なパルス光の時間・空間波形デザインを行うソフトウェアの開発を目指す。これらの計算を実現するため、計算機科学者との連携によりメニーコア技術等を高度に活用した計算コードの作成を進める。また、高強度パルス光を用いた光・電子融合デバイスの実現のため、国内外の光科学実験グループ（マックスプランク量子光学研究所等）や企業（IHI）と密接に協力する。

［サブ課題間連携目標］

実在系の光･電子融合デバイスを理論設計するためには､その計算精度の確保は極めて重要である。実在系ナノ構造体を対象として光と電子の動的相関を取り込むことを考慮に入れると、現状では計算精度と計算コストの兼ね合いから､時間依存密度汎関数理論に基づく計算手法が事実上唯一であるが、緩和効果が十分入らないなどの不満足な面もある。そこでこのサブ課題間連携では、時間依存密度汎関数理論に基づく計算手法を超える試みとして、より高精度な量子多体系ダイナミクス手法の開発を進める。サブ課題 G で開発が進む振動数領域での励起スペクトル解析の方法は、本課題で発展させる実時間電子ダイナミクス計算と相補的な関係にあり、線形応答に関しては同等の物理現象を記述することができる。光・電子ダイナミクスを記述する第一原理計算手法として、時間依存密度汎関数理論よりも高精度な記述が可能となる量子多体摂動論に基づく記述を、サブ課題 G との連携により発展させる。また、光磁気応答の課題に関連して、サブ課題 D の磁性材料研究のノウハウを参考にする。

（３）目標・期待される成果

電子の量子ダイナミクスと光波の電磁場ダイナミクスの結合を露わに扱うシミュレーション法を確立し、ナノサイズの物質の量子性を積極的に活かした新奇な光・電子融合デバイスの理論的・計算科学的設計を世界に先駆けて行う。シミュレーションによる理論設計だけではなく、同時に実験グループや産業界とも連携し、デバイスの実現化を目指す。この結果、従来の電子デバイスや光デバイスに比べると、サイズの縮小、消費電力の軽減、動作クロックの向上、光応答の広帯域化や非線形化、光磁気応答の高感度化等の質的にも量的にも優れたデバイス開発の可能性が高まり、最終的には産業界レベルでのデバイスの高機能化とコスト削減に寄与すると期待できる。

［ベース目標］

<u>アウトプット成果</u>：H29 年度終了時には、GCEED の課題においては、数～十 nm 程度のナノ構造体孤立系及び同サイズのユニットセルを持つ周期系の光励起電子ダイナミクスを扱うことが出来る様に超並列化プログラミングを進める。本格実施フェーズ終了時には、孤立系、バルク系、界面系問わず数十 nm 程度以上のナノ構造体の光・電子動的結合ダイナミクスを記述する超並列第一原理計算法の開発を

終了し、同時に実験グループと協力して光・電子融合デバイスの基本設計を行い、そのプロトタイプモデルを開発する。より具体的には、２光子励起を利用した光エネルギー変換デバイス、近接場光の高波数励起による間接バンドギャップ半導体（ダイヤモンド、シリコン等）発光デバイス、新規光化学反応場誘起デバイス等である。一方、ARTED の課題においては、平成 29 年度終了時には、酸化物や炭素系材料を対象として、新奇な光デバイス原理を与えると期待される高次非線形光学応答の特徴に関する知見を獲得する。本格実施フェーズ終了時には、実験グループとの密接な連携により、高強度パルス光とバルク物質やナノ構造の高次非線形過程を利用した新奇な光デバイス原理を提案し、光の振動数で駆動する超高速光エレクトロニクス創成に向けた基盤研究に着手する。同時に３次元ナノ加工に必須の最適パルス光の時間・空間波形デザインシミュレーターを開発する。GCEED、ARTED の両課題共に、ポスト「京」運用５年後には、それまで進めてきた計算機シミュレーション及び実験グループとの共同で得られたプロトタイプデバイスを、産業界レベルで実現可能な程度にまで具体的設計を行う。また、孤立系・無限系バルク・界面表面系等の様々なターゲット物質を対象として、太陽光程度の低強度からフェムト秒レーザー加工に使用する高強度に至る広範囲の光強度領域において、線形・非線形光学応答を問わず、通常のレーザー伝播光励起から近接場光による局所励起に至る迄、非常に広範囲な領域の光学応答を扱うことができる革新的計算機シミュレーションプログラムとして GCEED 及び ARTED を確立し、計算機科学の専門家だけではなく、実験研究室や産業界でのデバイス開発の現場において広く利用できるプログラムとして整備する。また、当該計算プログラムの計算ノウハウが、ポスト「京」や「京」のみならず、大学情報基盤センターレベルのスパコンから研究室レベルのクラスターマシンでも活かせる様に下方展開する。

<u>アウトカム成果</u>：ポスト「京」運用５年後には、実在系光・電子融合デバイスを丸ごとシミュレーションする計算科学的手法を提案することで、実験、特に産業界レレベルでのデバイス開発時間・費用の大幅な削減に寄与することができる。更にポスト「京」稼働１０年後には、従前の電子デバイスを質的にも量的にも超える特性（超微細、超高速、超高感度、超低消費）を持った光・電子融合デバイスを理論設計・実験検証・産業界開発を順に実現し、多大な経済的波及効果を伴う次世代産業基盤構築に寄与することが期待できる。また、ダイヤモンド NV センターを利用した光磁気応答センサーは、生体親和性が高く、脳磁図・心磁図等のイメージング技術や生体内センサーとの関連性が非常に強い。このことから、医療分野への寄与もポスト「京」運用後開始１０年後のアウトカム効果として期待できる。

［サブ課題間連携目標］

計算精度の観点から密度汎関数理論に基づく計算手法の限界はしばしば指摘されており、それを超える試みは世界的にも多く行われている。しかし、数 nm を超える実在系ナノ構造体の光励起電子ダイナミクスを高精度に計算できるレベルには達していない。サブ課題 B の実時間・実空間電子ダイナミクス法にサブ課題 G の高精度励起スペクトル計算手法のノウハウを融合することによって、高精度量子多体系ダイナミクス手法の開発が可能となる。

（４）「京」でできていること、ポスト「京」でなければできないこと

① ナノ構造体近接場光励起ダイナミクス（分子科学研究所）

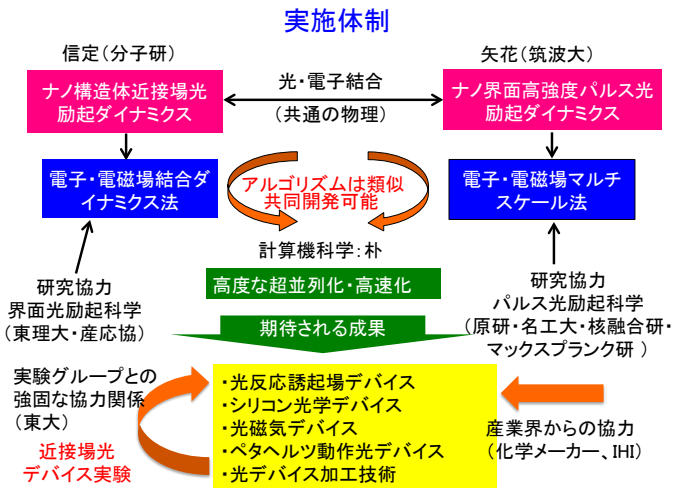
現状の「京」において、光・電子機能が真に発現し得る数 nm 以上のナノ構造体の光励起電子ダイナミクス第一原理計算を実行し、光・電子融合デバイスの基礎光物性には極めて重要な局在表面プラズモン共鳴のダイナミクスを解明した。実在系ナノ構造体における光励起では世界最大規模の第一原理計算である。しかし現状の「京」では、ナノ構造体やナノ界面の一部を切り出した部分系での理解に留まり、複数の異種物質から構成され、かつ周りの環境を含めた実在系ナノ構造体界面をターゲットにすることは困難である。ポスト「京」において初めて、実在系ナノ構造体界面の光励起電子ダイナミクスの第一原理計算を行い、光･電子動的機能を有するナノデバイスの理論設計が実現可能となる。また、間接バンドギャップ半導体の異なる波数励起を近接場光で直接的に励起することをシミュレーションするためには、従前の波数 k 毎に独立に解くバンド計算手法は使うことが出来ず、異なる境界条件を課したバンド計算が必須となる。この場合、ユニットセルのサイズが非常に大きくなるために、ポスト「京」のリソースが必要不可欠となる。

② ナノ界面高強度パルス光励起ダイナミクス（筑波大学）

周期的な結晶中の光電子ダイナミクスに対する第一原理計算は、通常のスパコンで実施可能であるが、マルチスケール手法を用いて電子ダイナミクス計算と巨視的電磁気学を結合するシミュレーションは少なくとも 100 倍を越える計算量となり、「京」が必要である。「京」では、一様な物質の表面にパルス光が垂直に入射し１次元的に伝播する場合において、高次の非線形光応答や非熱レーザー加工の初期過程を解明することができた。しかし計算量の制約から、応用上重要となるパルス光の自己収束など、パルス光の多次元伝播を記述することはできなかった。ポスト「京」を用いることで、パルス光の多次元伝播、特に光渦などの空間波形が重要となるパルス光と物質の相互作用を記述することが可能になる。また、３次元的なナノ構造体とパルス光の相互作用を記述することが可能になる。このように、実社会で応用が期待されているさまざまなパルス光と物質の相互作用を第一原理から解明するために、ポスト「京」を用いた計算が必須である。

（５）実施体制

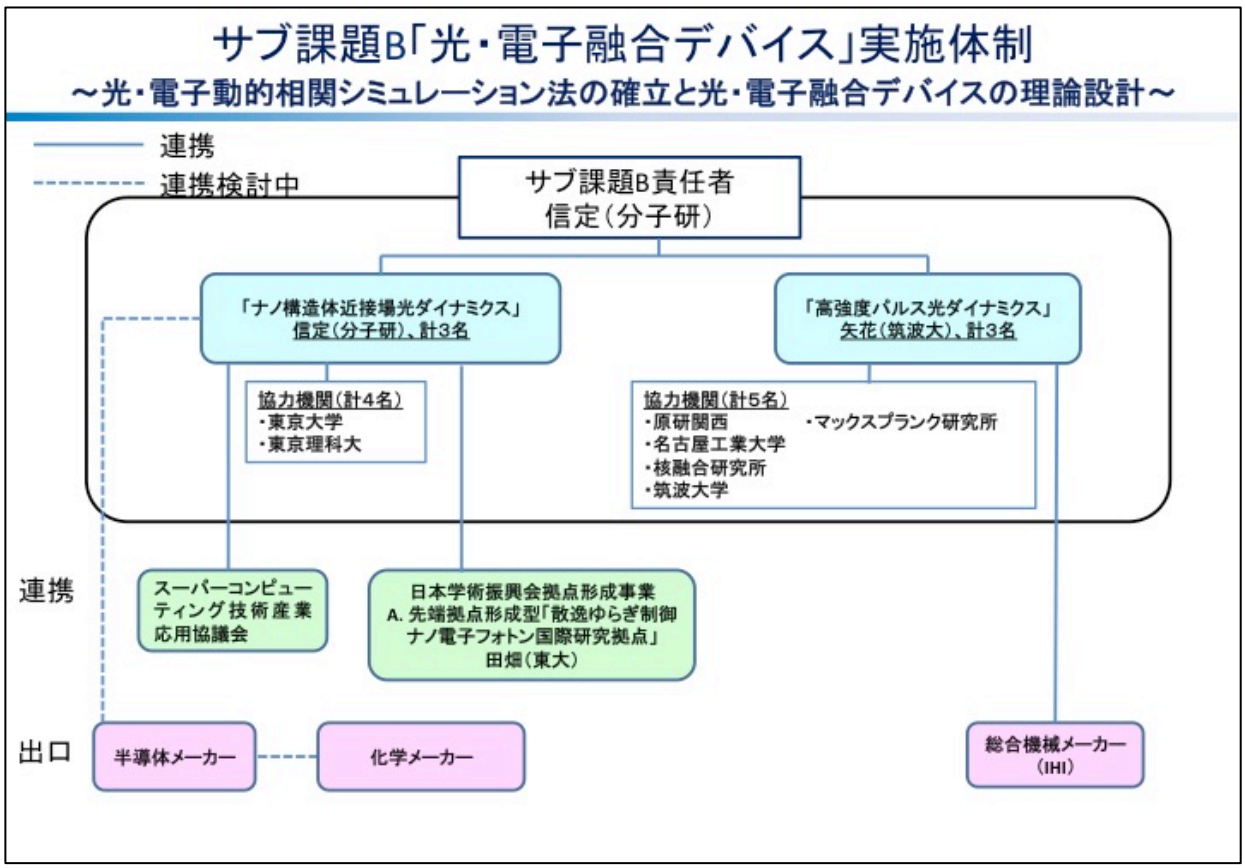
本サブ課題は、分子科学研究所と筑波大学の２つを実施機関として進める。分子科学研究所においては、主としてナノ構造体界面・表面を対象として光励起ダイナミクス、筑波大学においては、バルク界面･表面を対象として高強度パルス光励起ダイナミクスの研究を行う。実施する研究課題の基礎物理は共通しており、特に光と物質の相互作用をより厳密に理解することを主題としている。また、用いる計算手法は、時間依存密度汎関数理論に基づく実時



間・実空間光励起電子ダイナミクス法であり、アルゴリズムにも共通する部分が多い。これらの利点を活かし、常時、理論及びプログラム開発に関する情報交換を行い、研究を着実かつ迅速に進める体制を整える。また、以前からプログラム開発に関して、計算科学の専門家との協力研究を進めているが、当該サブ課題においても同様に協力を継続する。実施機関以外の協力機関からは、表面科学やパルス光励起ダイナミクスを専門とする研究者が国内外から参加する体制を作る。また、近接場光励起ダイナミクスを利用したデバイス設計には、実験グループや産業界からの支援協力の承諾も得ている。近接場光励起ダイナミクスに関する実験グループとの協力関係は以前から進めており、研究打合せも頻繁に行っており、着実に本課題を遂行する体制が整っている。レーザー加工技術開発に関しては、産業界との協力を既に開始している。以上をまとめた体制図を上図に示す。また、当該サブ課題と関連する他プロジェクトとしては、特に近接場光を用いた半導体発光デバイスや光磁気センサー設計に関する実験との協力研究を進める上で有用な以下のプロジェクトが有り、今後も積極的に連携を進める。

【日本学術振興会拠点形成事業（Core-to-Core Program）A. 先端拠点形成型「散逸ゆらぎ制御ナノ電子フォトン国際研究拠点」（平成 26 年度～）日本側コーディネーター：田畑仁教授（東京大学）】。

また、組織体制、連携関係を示した運営体制組織図は下記の通りである。



２－３．サブ課題 C. 超伝導・新機能デバイス材料

（１）目的・意義

次世代量子デバイスとスピントロニクス基盤創出を目的とする。実験研究と連携して第一原理的理論物質設計を推進し、(1)高温超伝導機構をもとに転移温度上昇指針、(2)強相関トポロジカル相表面での純粋スピンキャリア実現指針を明らかにする。薄膜・界面が持つ高い制御性に焦点を当てる。超伝導転移温度上昇と純粋スピンキャリア実現の指針はデバイス内電力損失の劇的な改善をめざす将来の超省電力量子デバイス・スピントロニクス実現の基盤となる。

（２）実施内容

［ベース目標］

上記目的を達成するため、「京」で実績を挙げた数値手法を継承・発展させる。次世代超高並列環境を最大限利用して、強相関系の薄膜・界面の非周期構造がもたらすバルク周期系に比べた計算コスト増大を克服し、革新的な新手法の開発による高精度物性予測・物質設計を実現する。同時に、多数の実験研究者とフォーラムを形成し、連携して界面・物質開発を推進するとともに個別企業との検討会、ニーズと成果の意見交換を通じて界面、薄膜開発の応用を共同で追求する。

より具体的には、数値手法開発と実験研究との連携により、以下のように実施する。

①高温超伝導体薄膜・界面の理論設計と超伝導転移温度上昇指針の探究

第一原理高精度数値計算により銅系および鉄系高温超伝導の機構解明をもとに、薄膜と界面の物質設計を行う。バルク固体では難しい乱れやキャリア密度、電子間の有効クーロン相互作用の制御による超伝導の安定性向上のための理論物質設計を行い、実現のために実験研究と連携する。高精度量子多体計算手法である多変数変分モンテカルロ法(mVMC)の開発および高温超伝導体薄膜・界面への適用を今田、三澤、大越(東大工)が分担し、励起状態計算のための動的平均場理論の開発・適用を今田、求(東大工)、酒井(理研)、第一原理計算手法の開発・適用を中村(九工大)がそれぞれ協力する。薄膜・界面の電子状態の実験的解明と界面作成および機能検証を、藤森(東大理)、岩佐(東大工)およびほかの実験研究者と連携協力して行う。このプロジェクトに対して１名のポスドクを雇用し、実験家との密接な連携も含め、超伝導理論およびデバイス開発の将来の専門家としての人材育成も行なう。

②遷移金属酸化物を含むトポロジカル相実現による純粋スピンキャリア創出

第一原理高精度数値計算による遷移金属酸化物強相関トポロジカル相の理論的予測により、従来強相関系のエレクトロニクス応用を妨げていたバルクキャリアが局在しやすいという困難に対する逆転の発想で、表面高移動度の（スピン）キャリアとバルクとのコントラストを利用し、新機能開拓を実験的研究と連携し実現する。また量子フラストレート磁性体、スピン軌道相互作用系について、量子統計物理の見地から物性予測を行い、スピン液体相を実現するルートを提案して、将来的に量子シミュレータに繋がりうる特異磁性物質の物質探索の指針を得る。遷移金属酸化物トポロジカル相の理論予測のための mVMC の開発・適用と物質探索を山地(東大工)が、第一原理手法の開発・適用を有田(理研)が分担する。スピン液体実現へ向けた革新的数値手法の開発・適用を川島(物性研)、藤堂(東大理)が分担する。有馬(東大新領域)、大串(東北大)、中辻(物性研)と物質設計・物質合成、分光・物性測定について連携協力を行う。このプロジェクトに対して１名のポスドクを雇用し、実験家との密接な連携も含め、トポロジカル層の理論およびデバイス開発の将来の専門家としての人材育成も行なう。

課題実施と並行し、数値手法の高並列化（実施者: 山地、三澤、大越、協力者: 須田礼仁(東大情報理工))、テンソルネットワーク法等を用いた高精度化(実施者: 川島(物性研)、藤堂(東大理))、および新たな第一原理計算手法の整備(中村 (九工大)が協力)を推進する。上記 2 つの研究課題を達成するための高効率な MACE の数値アルゴリズム開発のためにポスドクを１名雇用し、専門家として人材育成する。 この手法を適用して有効となるサブ課題 A,D の課題を検討し、共同して取り組む。

③MACE 高度効率化コードのメタパッケージ化と公開普及

本課題で開発する予定の多変数変分モンテカルロ法など新手法に基づくアプリケーションソフトウェア群は適用範囲が広く、本課題の遂行にとって必須のツールであるだけでなく、強相関電子物性研究の広範な領域でブレークスルーをもたらしうるものである。このような基盤的ソフトウェアが研究アクティビティの活性化と非常に密接に結びついている現状を考え、われわれは、本プロジェクトで開発する予定の革新的ソフトウェアをグループ外の物性科学研究者にも簡便に利用できるように整備する。これには、開発者以外でも利用可能とするためにユーザインターフェースを改良するとともに、マニュアルやチュートリアルなどドキュメント類を整備する作業を含む。また、これら新しいソフトウェアのベンチマークとして、単一バンドハバードモデルなど強相関電子系で最も基本的とされるモデルについて相図などの基本的物性を高精度に解明し、公開する。

強相関電子状態の解明とその応用、さらにはそれと不可分であるが、より広く計算科学を通じて基礎科学とを推進する教員による計算科学教育など、人材育成・教育に努力する。

［サブ課題間連携目標］

ここで開発する手法の応用をもとにサブ課題 A とは界面の電子状態解明に電子相関効果を取り入れる手法の開発と組み込みで連携する。D とは永久磁石の高性能化に果たしうる電子相関の効果の役割の解明、およびスピントロニクス材料の設計に関して連携する。

（３）目標・期待される成果

［ベース目標］

中間目標：新規アルゴリズムの高度化多機能化を完成させポスト「京」での実証可能性を明らかにする。5 原子層銅酸化物第一原理模型の実証計算を達成。

最終(平成 31 年度)目標：ポスト「京」で、銅酸化物、トポロジカル物質での薄膜、界面の 5000 格子点第一原理高精度計算が可能であることを 2000 格子点予備計算で実証。

京での成果をもとに、高温超伝導機構解明をさらに進める。特に電子格子相互作用の取り込みを本格化させ電子と格子を含む第一原理的な扱いで強相関系の超伝導機構解明手法を確立し、銅酸化物の超伝導機構を解明する。並行して、転移温度上昇等の指針、界面、薄膜デザインについて検討を開始する。またトポロジカル物質相の実現のためにスピン軌道相互作用の大きな 4d,5d 化合物でのトポロジカル相実現の探索と非平衡状態も利用した新機能の開拓を行う。希少元素を含まないトポロジカル物質の実現についての理論探索を進める。これら２つのプロジェクトに対し、実験家集団との緊密な情報交換、連携の場を確立しながら推進し、共同研究による理論物質設計実現可能性を追求する。産業界とどのような連携が可能かの検討を 2 テーマ両方についてそれぞれ行う。

（期待される成果）

銅酸化物ならびに鉄系高温超伝導体の転移温度上昇のための薄膜・界面組成、および遷移金属酸化

物トポロジカル相の化学組成の理論的設計のための「京」における予備計算を完了することを本格実施フェーズ終了時のアウトプット目標とし、理論設計指針提案とその実験的検証をポスト「京」運用開始５年後のアウトプット目標とする。ポスト「京」運用開始５年後のアウトカムとして、バルク結晶よりも転移温度の高い超伝導薄膜・界面の設計および実現と強相関トポロジカル相表面の純粋スピンキャリア観測が期待される。１０年後には、高温超伝導薄膜・界面の量子ビット等の量子デバイス応用と強相関トポロジカル表面を用いた超低電力損失スピン伝導実現・応用開始が期待される。

［サブ課題間連携目標］

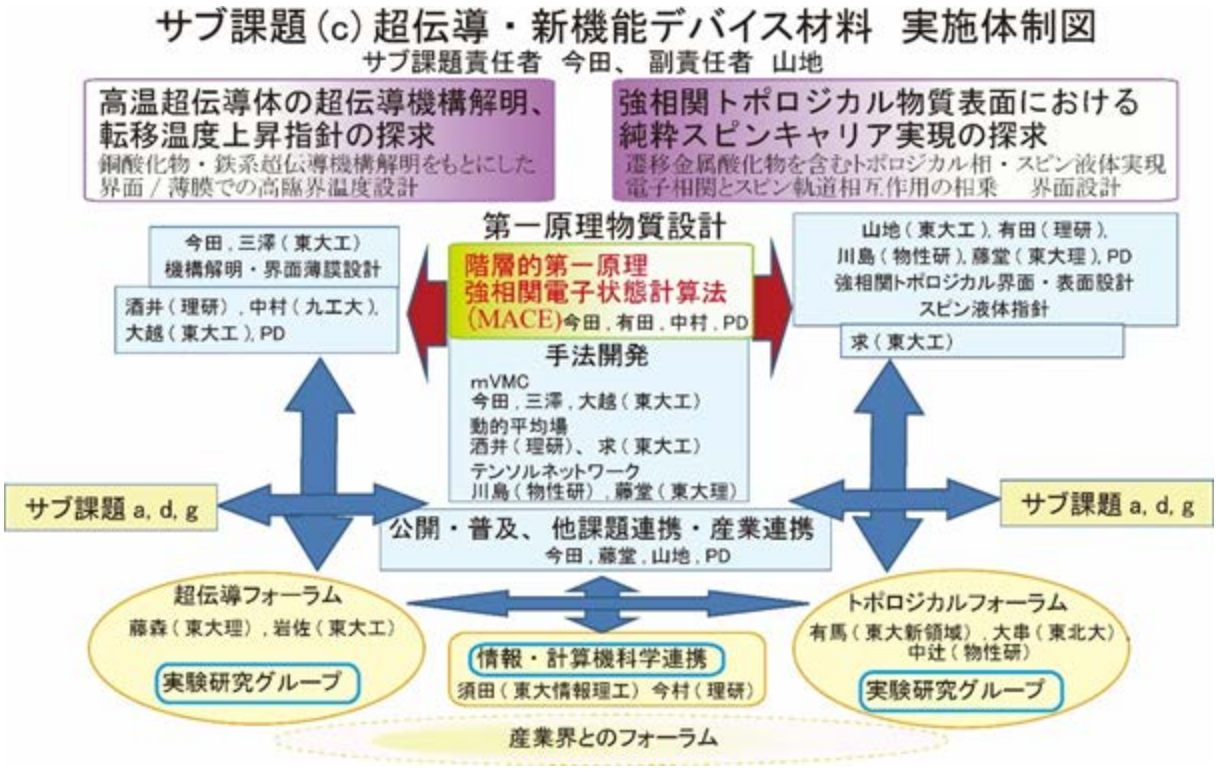
サブ課題Ｇとの連携でメタパッケージの整備、公開、普及が促進される。またここで開発する手法の応用をもとにサブ課題Ａとの連携で界面の電子状態解明に電子相関効果を取り入れる手法が開発されるとともに、界面電子状態解明のための汎用的パッケージが提供される。これをもとにデバイス・シミュレーションが進展し産業応用の可能性の追求に資する。Ｄとの連携によって永久磁石の高性能化に果たしうる電子相関の効果の役割を第一原理的に理解することが可能になり、新材料設計も貢献する。

（４）「京」でできていること、ポスト「京」でなければできないこと

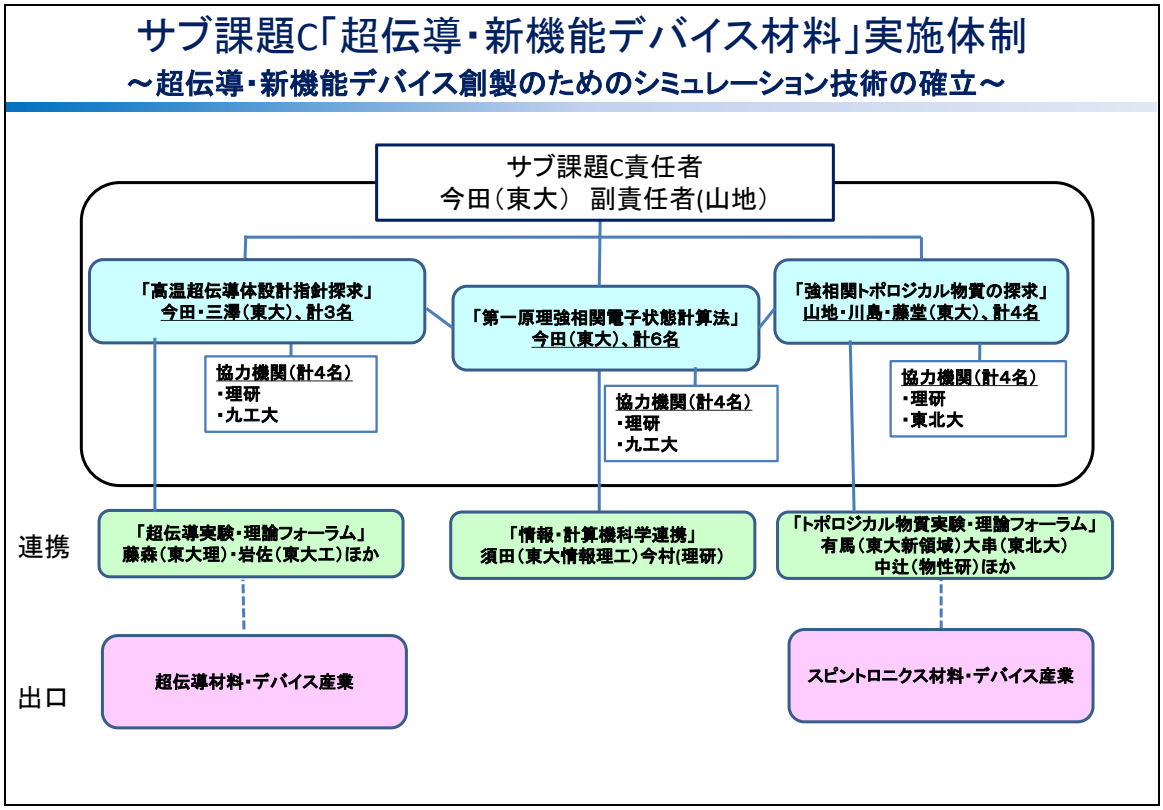
銅酸化物および鉄系高温超伝導体において主に超伝導を担うとされている２次元原子層一層における高精度計算が「京」によって可能となり、電子間クーロン相互作用が果たす役割が解明され論文が出版・公開されている。しかし、薄膜・界面を利用した超伝導転移温度上昇と界面電子状態の解明が鍵となるトポロジカル相の理論物質設計では、薄膜・界面における非周期構造がもたらす百から千倍程度の計算コスト増大が見込まれるため「京」では実施不可能であり、「京」の百倍の演算能力を持つポスト「京」の活用によって初めて可能となる。

（５）実施体制

超伝導材料、トポロジカル物質材料ともに、実験研究者とのフォーラムを形成し共同研究を進める。また、産業界とのフォーラムを形成し、産業応用の可能性を追求する。さらに、電子相関が重要になる他サブ課題に対し手法連携と研究協力を行なう。計算機科学分野とは、須田礼仁東大教授、今村俊幸理化学研究所チームリーダーと連携する。各分担、協力機関の役割、連携に基づく研究内容とその流れを示した研究体制図は下の通りである。



また、組織体制、連携関係を示した運営体制組織図は下記の通りである。



２－４．サブ課題 D. 高性能永久磁石・磁性材料

（１）目的・意義

国内電力の 50%以上はモータに消費されており PM 化（回転子の永久磁石化とインバータ駆動）によりそれらの効率をあげるため高性能磁石の開発に期待がかけられている。とりわけハイブリッド車の駆動用モータに用いる強力磁石の使用量が近年急増しており、今後の電気自動車の普及とともに更なる需要増が見込まれる。最強磁石のネオジム磁石は耐熱性が弱点で、自動車の動作温度(約 200° C まで)での保磁力を増強する ためジスプロシウム(Dy)を添加する。しかし Dy は希少元素であるため資源リスクを抱える。 また耐熱性と引き換えに磁石性能を低下させる。そのため希少元素に頼らない高性能磁石の開発が強く望まれている。

一方、磁気抵抗効果(GMR)やトンネル磁気抵抗効果(TMR)を利用した不揮発性メモリや磁気センサーにおいては、微小化に伴う磁化の熱揺らぎから来る不安定性問題とメモリ書換え 時の熱発生問題を根本的に解決するために、垂直磁化膜材料の磁気異方性の増大と外場による制御性能の向上が求められている。本サブ課題では、磁気異方性の制御を課題として高精度・大規模な第一原理計算シミュレーション技術を開発し、電子論に基づいて永久磁石・磁性材料の高性能化の指針を示すとともに、系統的な新材料探索を行い、産業競争力の強化につなげていく。

（２）実施内容

上記目的を達成するため、「京」での実績を発展させて、以下二つの研究項目を実施する。

［ベース目標］

① 磁性材料の高性能化

磁石化合物と副成分の界面の状態が磁石性能に大きく影響することが知られている。「京」での理想に近い界面の計算をベースに、ポスト「京」では１万原子規模の現実に近い界面の第一原理計算を実行し、磁石界面の構造と磁性(磁化と結晶場係数)を明らかにする(東工大、東北大)。この結果を反映した原子論的 LLG 方程式と粗視化した連続体 LLG 方程式の手法開発を行い、マルチスケールの磁化反転シミュレーションにより磁石性能の支配要因を特定する(東大、NIMS、東北大金研)。また、磁気デバイスにおいては界面電子状態がデバイス特性を決めるということが、理論と実験での共通認識となりつつある。界面構造、構成要素(磁性層、酸化物層、ヘテロ接合等)、外場、膜厚が結晶磁気異方性と形状磁気異方性に与える影響を評価し、磁気異方性の増大と外場による制御性向上を目指す(金沢大、東北大)。

② 新規磁性材料探索

過去 32 年間ネオジム磁石をこえる磁石は現れていないが、つい先日、ネオジム磁石の主相である $Nd_2Fe_{14}B$ と同等以上の磁気特性をもつ新磁石化合物 $NdFe_{12}N$ が報告され(平成 26 年 10 月 20 日に JST プレスリリース)、新規磁石に対する期待が高まっている。申請者グループは、この下地となる第一原理計算を発表済みで、端緒的研究を開始している。組成や構造を変えたコンビナトリアルケミストリー的な第一原理計算や分子動力学シミュレーションにより系統的な物質探索を行い、磁気特性と相安定性の理論計算に基づき新材料の提案を目指す(東大物性研、産総研)。研究項目①によって与えられた指針をもとに熱力学的に安定で合成可能な希少元素フリーな化合物金属磁石を提案し，実験グループと協力してその有効性を検証する(東大物性研、産総研、阪大)。以上の課題における基盤技術とし

て、強い電子間相互作用やスピン軌道相互作用を考慮した磁性の高精度計算手法を開発する(東大物性研、産総研、北陸先端大、広島大、三重大)。

［サブ課題間連携目標］

サブ課題Eと連携して、材料科学的手法により現実の永久磁石材料の結晶粒、粒界の構造と形成プロセスを明らかにする。サブ課題Gと連携して1万原子程度を扱うことのできる汎用性のある電子状態コードを開発し磁石シミュレータに組み込む。

（３）目標・期待される成果

アウトプット成果： H29年度末までに、サブ課題Gと連携して4,000原子を含む磁性材料の界面構造と磁気特性を第一原理電子状態計算によって評価できるようにする。本プロジェクト終了時(平成 31 年度)には1万原子を含む磁性材料・構造について、その磁気異方性、磁化、磁気転移温度等、有限温度磁性を含む磁気特性を第一原理電子状態計算によって評価ができることを可能にする。また、JST イノベーションハブ事業「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ」と協力して新規磁性材料の探索に用いるマテリアルズインフォマティクス手法を開発する。それらの手法を用いて、希土類磁石の有限温度における飛躍的な性能向上のための組成･構造を提案する。これらの成果をもとに、ポスト「京」運用開始 5 年後までに,希土類濃度の低い新磁石のための素材の開発、およびそれらを用いた保磁力を制御することのできる永久磁石実現の方法を提案ができることが目標である。新規磁性材料は「元素戦略磁性材料研究拠点」等での実験検証を経て、プロジェクトの連携企業に提案する。

アウトカム成果：これらの成果の社会的波及効果として、ポスト「京」運用開始5年後には温度特性が格段に改良された自動車、発電機用永久磁石が実用化され省エネルギー、グリーンエネルギーのための基盤をあたえることができる。また、磁気異方性の効率的な制御が可能となり、様々な磁気デバイスで活用されることとなる。さらに長期的な展望として、ポスト「京」運用開始10年後には希少元素フリーな永久磁石材料が、計算機主導のマテリアルデザインによって開発可能となり、それぞれの用途に適した保磁力をもった小型で軽量な永久磁石が利用可能となる。また磁気デバイスにおいては高密度化、高速化に寄与し、メモリーデバイス等において省エネルギーに大きく寄与する。

［サブ課題間連携目標］

サブ課題Eおよびサブ課題Gとの連携により、5年後までに希土類濃度の低い新磁石のための素材の開発、およびそれらを用いた保磁力を制御することのできる永久磁石実現に用いることのできる、材料化学的、計算科学的に妥当な磁石シミュレータが開発される。10年後には計算機主導のマテリアルデザインによる希少元素フリーな永久磁石材料開発を実現する磁石シミュレータが開発される。

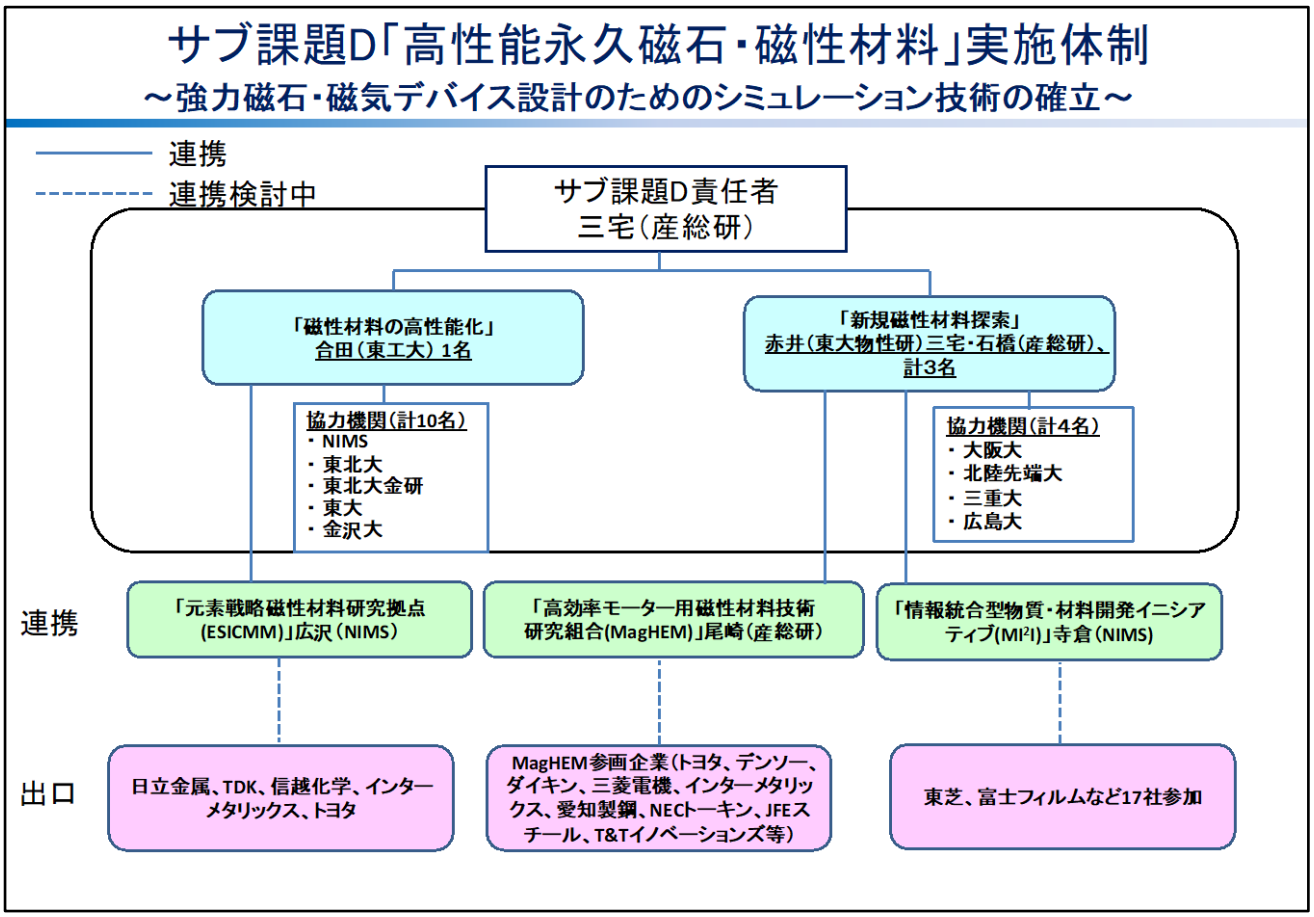
（４）「京」でできていること、ポスト「京」でなければできないこと

遷移金属や希土類を主成分とする磁石、磁性材料の第一原理計算は大きな計算資源を要する。申請者グループは「京」一般利用課題「新磁石材料探査とその保磁力機構の解明」(平成 24-25 年度、hp120086)、「永久磁石のマルチスケール解析」(平成 26 年度、hp140150)にお いてネオジム磁石界面の第一原理計算に着手し、これまでに200原子規模の計算を行った。さ らにOpenMXコードを改良し、2,000原子を超える計算が可能になりつつある。実際の磁石材料はアモルファスを含む多様な粒界相、

副相を含み、それらの違いが大きな関心事である。ポスト「京」では、OpenMX の開発者であるサブ課題 G 責任者（尾崎泰助・東大物性研特任教授）と連携して OpenMX コードの高度化に注力し、ポスト「京」上で界面の大規模第一原理電子状態計算が実行可能になるようにする。また Akai-KKR による磁気異方性と交換結合の計算や CPA を用いた不規則系の記述、CPVO による電界下の磁気異方性の計算、QMAS による構造最適化を含んだ磁性物質の高精度な取り扱いは、OpenMX と相補的な役割を担う。これらの手法により、界面状態の違いが磁気物性値に与える影響を議論できるようになり、永久磁石、さらに膜厚 数 nm 程度の磁気デバイスもターゲットに入る。またマテリアルズインフォマティクス手法は、基盤技術の開発が急務の課題である。 プロジェクト前期で技術開発を用い、ポスト「京」運用開始後に系統的に新材料探索を行う。

（５）実施体制

若手リーダー育成を目指して全体の統括を東大物性研から産総研に移す。研究項目①磁性材料の高性能化，②新規磁性材料探索に対応して 2 個の研究グループを構成する。産総研の統括のもとで、前者は東工大(主力協力機関に金沢大)、後者は東大物性研と産総研が実施機関となり、このほかに 9 協力機関(10 名)が参画する。チームの構成は固定したものではなく，進捗状況や連携の可能性に応じて，常に最適な構成になるように統括会議が調整を行う。実施に当たっては SPring-8,高エネルギー研究所，J-PARC との連携をとり理論的に基づく知見が即座に大型実験施設において検証され，また、それらの結果の理論的解析がスムーズになされるようなプラットフォームを構築していく。組織体制、連携関係を示した運営体制組織図は下記の通りである。



２－５．サブ課題 E. 高信頼性構造材料

（１）目的・意義

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。本サブ課題は、大規模計算機資源の活用と計算科学の方法論の革新により、金属材料の高精度の計算技術・設計技術を構築し、飛躍的に優れた金属系構造材料の開発を実現することを目的とする。

金属系構造材料では、ミクロの原子間結合（Å、10^{-10}m 程度）の強度や性質に加えて、粒界や析出相、合金元素や転位網等からなる「微細組織」（ナノからサブミクロン、10^{-9}m～10^{-4}m 程度）を形成させ、転位（線状の原子列の乱れ）や欠陥の動きを制御することで、優れた強度・靭性（粘り強さ）・加工性を実現する。従って、原子・電子からメゾ・マクロのマルチスケール（大きく異なる長さのスケール）での現象の解明と設計・制御が必要となる。微細組織の全体を全て第一原理計算で扱うことは、どのように計算機が発達しても事実上困難で、「マルチスケール計算」が必須であるが、計算機資源の制約や方法論の未確立のため、実現していない。本サブ課題では、ポスト「京」を活用し、微細組織の「構成要素」やそこでの「転位・欠陥・添加元素の挙動」など、典型的な大規模構造に第一原理計算を適用し、原子・電子の挙動を通じた解明を深めるとともに高精度データとして蓄積する。それらを粗視化手法でメゾ・マクロのスケールの計算に連結し、高精度の大規模 Phase Field 計算を実現する。こうして飛躍的に高性能な材料の開発や添加希少元素の低減・代替化を実現するマルチスケールの計算技術・設計技術を構築する。

（２）実施内容

［ベース目標］

① 大規模第一原理計算の実行

鉄系材料を中心に、異相界面・粒界・転位・欠陥・不純物の安定構造と互いの相互作用、応力下の転位挙動や変形過程、有限温度での自由エネルギー等を大規模第一原理計算で明らかにする（産総研、新日鐵住金、阪大基礎工、原研、横国大工、物材機構、東大物性研、東大工）。特に微細構造の構成要素である複雑な異相界面・粒界、微細組織での転位・欠陥の挙動、界面・粒界・転位と合金成分や不純物との相互作用について、集中して解明を進める。原子・電子まで掘り下げて局所的な構造や性質を理解するとともに、高精度データとして蓄積する。また、これらの取り組みを通じて、金属系の大規模第一原理計算、高精度第一原理計算のための手法、コードをポスト「京」に向けて高効率化、高精度化を図る（OpenMX：東大物性研、QMAS：産総研、TOMBO：横国大工）。これらは、局在基底法（OpenMX）、平面波基底法（QMAS）、混合基底法（TOMBO）であり、対象により使い分ける。

②粗視化手法への連結法の確立

そうした第一原理計算データを Phase Field 法など各種粗視化手法に連結する方法論を検討し、確立する（横国大工、物材機構、阪大基礎工、産総研、東北大金研、東大工、北大工、京繊大工）。第一原理や自由エネルギー計算に基づく厳密な Phase Field 法の formalism の確立、様々なアプローチからの高精度、高信頼性の粗視化手法を検討し、確立する。

③大規模 Phase Field 法計算の実行

これらを用いて、凝固から相変態・加工による組織形成や最終的な組織、さらに高温・応力下での組織変化を大規模 Phase Field 法でシミュレートする（担当：北大工、京繊大工、東大工、東北大金

研)。多相系・多結晶系の組織形成を高精度・高効率に計算するアルゴリズムの開発・検証、その大規模計算の高効率に大規模計算を行うコードの開発・最適化をポスト「京」に向けて進めるとともに、粗視化手法を介したパラメータ等の導出法についての検証を行う。

④実験・材料開発や関連プロジェクトとの連携による検証と設計技術の確立

実験観察・材料開発サイド（新日鉄住金、東北大金研）や材料開発関連プロジェクト（京大工「構造材料元素戦略研究拠点」、新学術領域「シンクロ型 LPSO 構造の材料科学」、新学術領域「ナノ構造情報のフロンティア開拓－材料科学の新展開」等）とも緊密に連携しながら、①～③を行い、計算結果を実験観察と比較検討し、フィードバックすることを繰り返す。こうして、微細組織の構造や諸性質、形成過程、高温・応力下での変化等をも高精度にシミュレートする計算技術、設計技術として確立する。参画企業（新日鉄住金）や関連業界の企業とも連携し、開発したコードや技術の普及を図る。また、東北大学を代表機関とする「計算物質科学人材育成コンソーシアム」（平成 27 年度～34 年度）と連携し、計算材料科学の若手人材との共同や彼らへのコード・技術の普及を通じて、人材育成に貢献する。

［サブ課題間連携目標］

本サブ課題で扱う各種プログラムや計算技術（OpenMX、QMAS、TOMBO、大規模 Phase Field 法、粗視化手法等）の研究開発は、サブ課題 G との間の連携により、効率的に進める。第一原理計算や超並列計算の高度化、高効率化を連携して進めるとともに、サブ課題 G における「物質構造と相変化の探索手法の開発」と緊密に連携し、最適の合金添加元素や析出化合物相の探索を試みる。本サブ課題での計算技術と探索手法を組み合わせることで、構造材料の飛躍的高性能化、添加希少元素の低減・代替化を図る。

（３）目標・期待される成果

［ベース目標］

金属材料の強度・靭性・加工性は、転位の挙動で決まり、それは微細組織に支配される。材料毎に、(a)応力下での基本的な転位挙動を制御するための最適の微細組織（析出相・界面・粒界・欠陥・合金成分・不純物等）を明らかにし、(b)その微細組織を形成させるための添加元素、熱処理、加工処理等を明らかにすることが求められる。また、(c)高温や高応力など様々な環境下での耐久性は、同様に微細組織での転位や粒界・界面、点欠陥・不純物・合金元素の挙動が支配している。一方、(d)微細組織の化合物相や合金成分に希少元素を用いることが多いが、その役割を真に理解することで、低減化や代替策を講じることが可能となる。本研究課題は、大規模第一原理計算の遂行とそれをメゾ・マクロの計算に繋げることにより、以上の(a)～(d)の問題を解明し、設計・制御の端緒を得ること、そのためのマルチスケール計算技術を構築すること、さらにポスト「京」の本格運用を通じて上記の問題の設計・制御技術を確立することを目標とする。

<u>アウトプット成果</u>：①中間評価（平成29年度末）までに、鉄系など金属材料の転位、粒界、異相界面と各種添加物・不純物の間の相互作用を大規模第一原理計算で明らかにし、高精度データとして蓄積する。第一原理計算をPhase Field法に繋ぐため、第一原理に基づき粒成長・相変態等を扱う基礎方程式を確立する。従来コードを発展させ、凝固と粒成長が扱える大規模Phase Field法計算コードを開発する。②本格実施終了（平成31年度末）までに、鉄系など金属材料の微細組織の構成要素（転位、粒界、異相界面、各種添加物・不純物）の間の相互作用を大規模第一原理

計算で解明し、高精度データとして蓄積する。第一原理に基づくPhase Field法の計算コードを完成させ、高精度計算と比較・検討する。こうした微視的情報を取り入れた大規模Phase Field法計算により、凝固から粒成長、組織形成の全過程を一貫して扱うシミュレーションを実現させる。
③ポスト「京」本格運用5年後までに、開発したマルチスケール計算技術を産業界や大学、国研の研究者に普及させ、各種の金属材料の微細組織シミュレーションの実行と実験・観察との連携を通じて、微細組織の設計・制御技術として確立する。

アウトカム成果：①ポスト「京」本格運用5年後までに、開発した計算技術を用いた研究により、鉄系材料等で、強度や信頼性の向上や希少元素低減化のための微細組織や製造プロセスの設計・制御法が明らかになり、高信頼性構造材料の開発が飛躍的に進展する。②運用10年後までに、開発した計算技術を用いた研究により、鉄系、Ni系、軽金属系（Al、Mg、Ti系）材料で、強度や信頼性の向上や希少元素低減化のための微細組織や製造プロセスの設計・制御法が明らかになり、高信頼性構造材料の開発が飛躍的に進展する。

［サブ課題間連携目標］

また、サブ課題Gにおける「物質構造と相変化の探索手法の開発」と緊密に連携し、本課題での計算技術と組み合わせることで、最適の添加元素や化合物相の効率的探索を含めた設計・制御技術の確立を図る。

（4）「京」でできていること、ポスト「京」でなければできないこと

鉄中の異相界面や転位芯について、数100～数1000原子/セルの第一原理計算が「京」で実現した。しかし、実際の微細組織には、さらに複雑な構造が存在する。また、微細組織の安定構造に加え、さらに応力下や高温での微細組織挙動のマルチスケール計算を実現する必要がある。そのために、さらなる大規模第一原理計算が求められる。界面・粒界・添加元素と転位との相互作用、転位の移動過程、転位同士の相互作用などの第一原理計算が本質的に必要であり、数万～数十万原子/セルの大規模第一原理計算をポスト「京」で実現することが期待される。第一原理計算のデータを粗視化してPhase Field計算を行うが、ここでも、ポスト「京」を使うことで、複雑な微細組織の形成・変形過程等の扱いが初めて可能となる。

（5）実施体制

大規模第一原理計算の実行：

産総研（分担機関）、新日鉄住金、阪大基礎工、原研、横国大工、物材機構、東大物性研、東大工が主に担当する。併せて、使用するコード：OpenMX（東大物性研）、QMAS（産総研）、TOMBO（横国大工）の高度化、最適化をポスト「京」に向けて推進する。この項目の取りまとめ（リーダー）は、産総研（香山正憲）が担当する。

粗視化手法への連結法の確立：

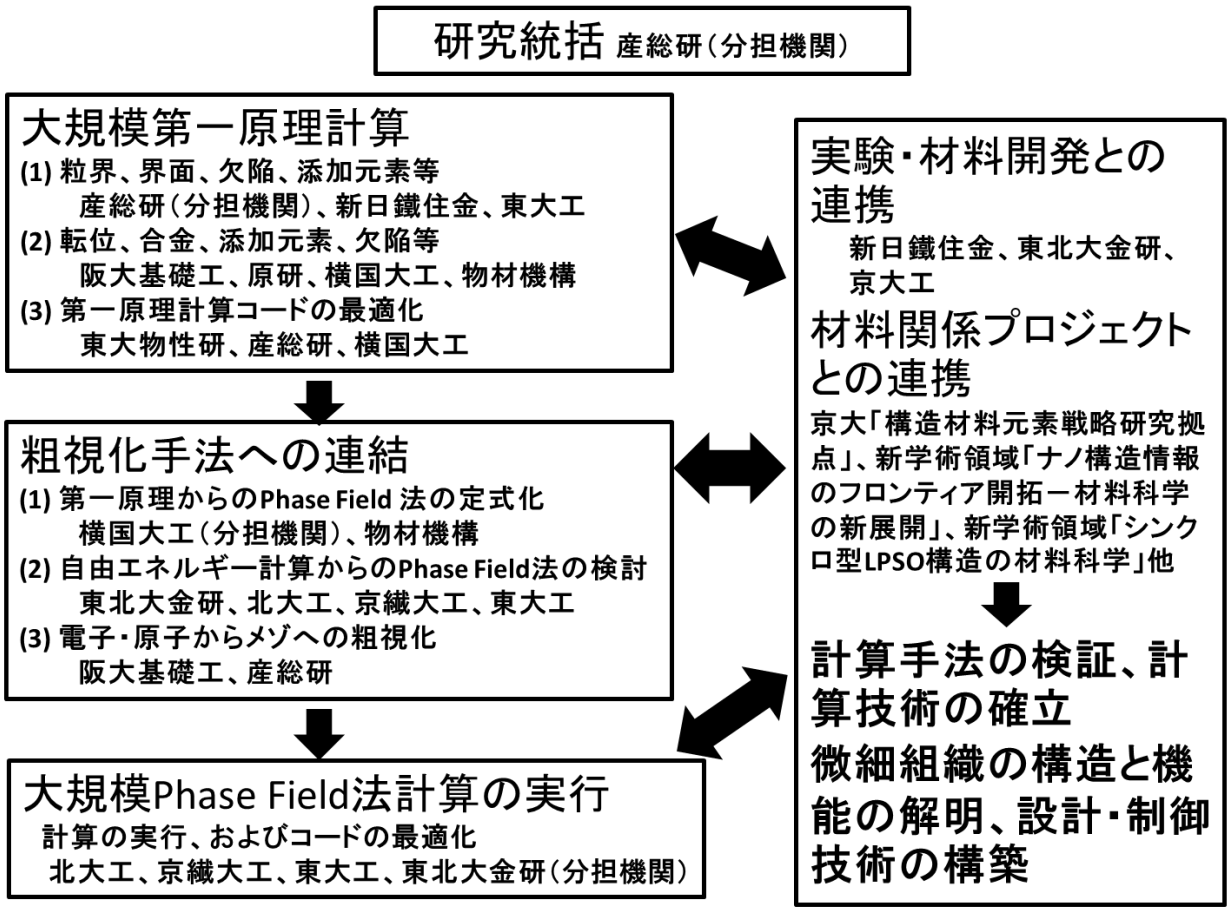
横国大工（分担機関）、物材機構、阪大基礎工、産総研、東北大金研、北大工、京繊大工、東大工が主に担当する。第一原理からのPhase Field法の定式化、自由エネルギー計算からの定式化、各種の方法論の検討を行う。この項目の取りまとめ（リーダー）は、横国大工（大野かおる）が担当する。

大規模Phase Field法計算の実行：

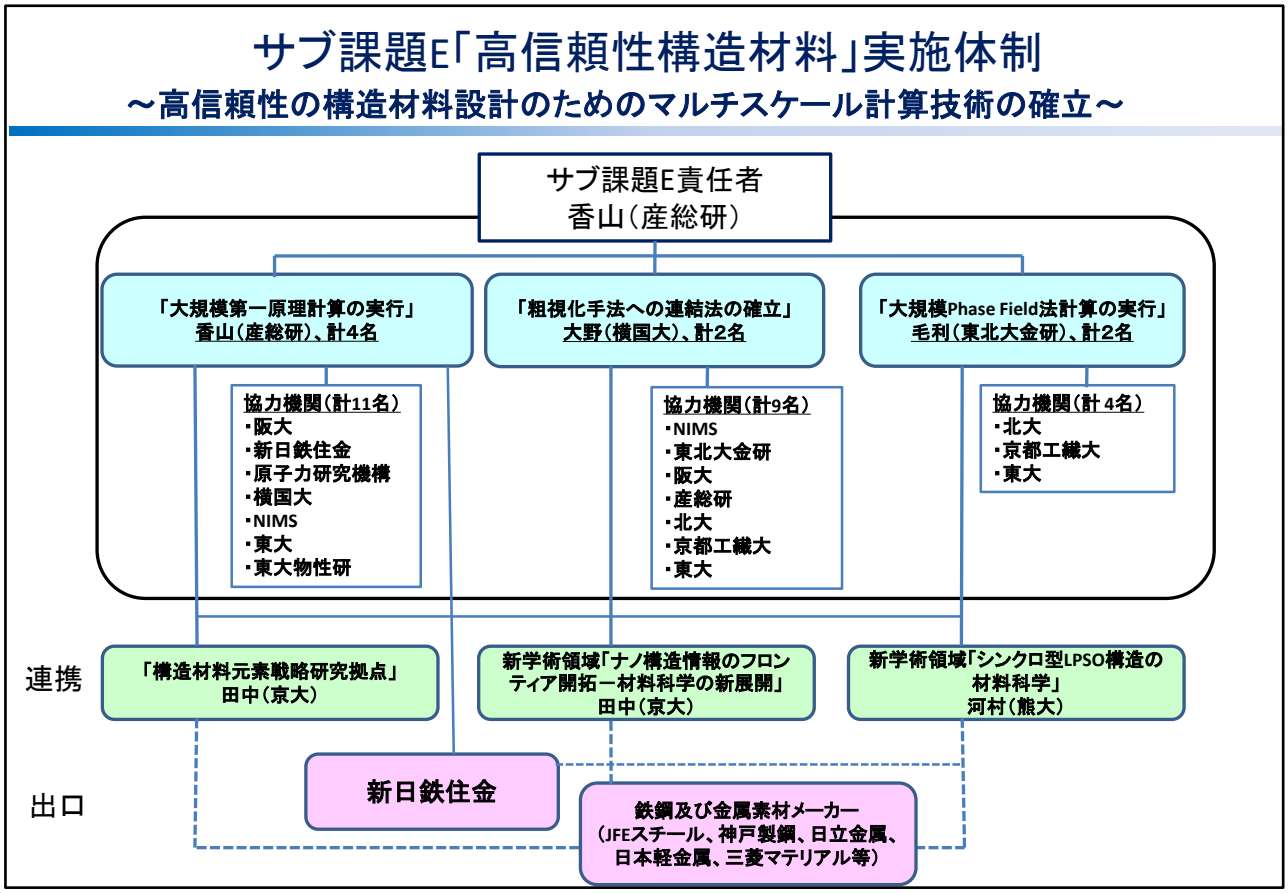
北大工、京繊大工、東大工、東北大金研（分担機関）が主に担当する。そのための効率的なコード開発もポスト「京」に向けて推進する。この項目の取りまとめ（リーダー）は、北大工（大野宗一）が担当する。

実験・材料開発や関連プロジェクトとの連携による検証と設計技術の確立：

上記の参画の全グループが、京大工や東北大金研、新日鉄住金等の実験・開発や各種材料関連のプロジェクト（京都大学「構造材料元素戦略研究拠点」、新学術領域「シンクロ型 LPS0 構造の材料科学」、新学術領域「ナノ構造情報のフロンティア開拓ー材料科学の新展開」等）と連携して進める。また、マテリアルインフォマティックスの手法による元素探索、化合物探索の試みも組み合わせて行う。上記の三項目のリーダー、香山正憲（産総研）、大野かおる（横国大工）、大野宗一（北大工）が、リーダーシップを発揮して進める。



また、組織体制、連携関係を示した運営体制組織図は下記の通りである。



２－６．サブ課題Ｆ．次世代機能性化学品

（１）目的・意義

本サブ課題の目的は、ディスプレイや半導体関連、および、海水淡水化や透析等で広く使われるソフト材料の設計指針を策定することである。ポリマーや有機／無機界面からなるソフト材料は、原子レベルの相互作用およびメゾレベルの集合様態の両方に依存して、分離性・撥水性・密着性・放熱性のような多様な特性を発現し、分離性を活用した脱塩処理・水質浄化・ガス精製、あるいは界面の高機能化による軽量構造材料や冷却材料の機械的・熱的特性の向上など、環境・医療・省エネ等に直結する幅広い応用分野を持つ。現在、化学・素材系産業では、ポリマー重合におけるトポロジー制御や異素材界面の調製における有機／無機接合のような最先端の精密合成技術と連携しつつ、現実の物性・機能発現に大きな役割を果たす多孔性や皮膜などのメゾスケール構造を合理的に設計することで、今後望まれる新機能にテーラーメードで対応することが強く望まれている。これらの研究課題は、省エネルギーかつ低環境負荷な「真の持続社会の実現」を通じて、我が国の産業競争力の向上に資するものであり（産業競争力懇談会・平成 26 年度プロジェクト報告書「革新的高機能分離素材の開発」)、計算科学によるソフト材料の構造や機能・特性の全原子解析は、我が国の機能性化学品の競争力強化に寄与するものとして意義深い。

（２）実施内容

ポリマーや有機／無機界面が主要な役割を果たすソフト材料の物質分配機能と界面物性、輸送特性が、本サブ課題の主たる実施内容である。下記の①と②をベース目標、③をサブ課題連携目標とする。

［ベース目標］

①ポリマーの物質分配機能の解析

原子レベルの分子間相互作用およびメゾレベルの凝集構造の知見に立脚し、分子サイズの空隙もしくは多孔構造、さらには、機能性表面をもつ高分子の微細構造および分離対象との分子間相互作用を、MD 計算と粗視化モデルの連携によって検討する(阪大基礎工を中心とするグループ、東レ、東北大理、理研 AICS、名大工、京大工の協力を得る)。脱塩処理・水質浄化・ガス精製という明確な出口に向けて、高分子素材産業とともに追求することになる。架橋芳香族ポリアミドのようなサブナノスケールの空孔をもつポリマーの水・ガス・イオンの分離機能を解析し、ポリオレフィンやポリアクリレート、ポリアミド、ポリイミド等からなり、トポロジーを制御した共重合体（ブロック共重合体など）のナノ構造や多孔構造の計算に進む。また、分離膜素材の実用化に当たっては、生産性や耐久性の上で膜の機械的強度も重要となるので、高分子の微細構造および機械的物性の解析も実施する。実験と比較可能な物理量の計算は、主に、全原子モデルを用いた MD と溶液理論の組み合わせによって行う。MD には、「京」に最適化された MODYLAS およびポスト「京」のターゲットアプリとなっている GENESIS を用いる。緩和の遅いポリマー系のサンプリング効率を上げるために、レプリカ交換法を多用する。MODYLAS や GENESIS の開発チームは本サブ課題の協力者に名を連ね、実施責任者と「言いたいことを言える」関係を構築している。温度交換レプリカ交換法だけではなく、メゾスケールの構造を規定するオーダーパラメータを保存した形のレプリカ交換法をも用いることで、トポロジー共重合体や多孔構造の計算を行う。また、全原子 MD の初期構造の作成の際は、粗視化シミュレーションと連携することで、メゾスケール構造の効率的探索を図る。物質分配機能は、自由エネルギーで決定されるが、自由エネル

ギー計算にはエネルギー表示溶液理論を用いる。エネルギー表示法のソフトであるERmodを、ポリマーを対象として高度化する。具体的には、粗視化技法の導入である。エネルギー表示法では、ポリマーを概念上のセグメントに分割することで、溶質―溶媒相互作用のサンプリング効率を向上させることが可能であり、セグメントを粗視化単位に同定することで、自由エネルギー計算の高速化を行う。この技法は、サブ課題間連携目標で述べるフッ素系長鎖化合物の解析にも有効である。

②有機／無機界面の物性に関する計算

有機／無機界面の強度や輸送特性、さらに、外場に促進された皮膜等の界面構造の生成過程の解析を行う。(名工大を中心とするグループ、デンソー、豊田中研、神戸製鋼所、名造大の協力を得る) 電気自動車などのパワーICの需要拡大に対応するため、電気絶縁性が高く密着性も高い樹脂をベースとする放熱性が高い材料や、高効率な冷却液の開発が求められている。数nmのアルミナ粒子(フィラー)を樹脂に分散させることで樹脂の実効的な熱伝導度を上げる実験的試行にあわせ、高充填状況においてフィラー間に挟まれた薄い樹脂層の実効的熱伝導度を、自動車・鉄鋼業界の中核産業と共同して解析する。本質的に異質な原子から構成される固液および固固界面では、電子レベルの界面での差に対応して酸化・還元反応が顕著に見られることがある。その結果生じる皮膜や界面結合度は、希望する界面特性に向けて外部電場によりコントロールできる可能性がある。そこで実際的状況にあわせて、自然酸化膜を有する金属に樹脂をコーティングさせた界面モデルを構築する。その密着性、接着強度、侵入分子に対する腐食耐久性を、hybridQMCLによるハイブリッド量子古典シミュレーション法を適用することで、電子論的な物理描画精度を保ちつつ実際的な大規模系として解析可能とする。計算結果を実験で得るデータと照合することで、シミュレーションと実験との連携による界面機能向上の研究開発を可能とする。hybridQMCLで用いるDFTによるQM計算には、尾形らが開発しているオーダーN型の電子状態計算コード (DC-RGDFT) を用いるが、ポスト京の仕様を視野に入れて、サブ課題AやGでのソフト開発とも連携して、より大規模な並列化と高速化を行う。また、hybridQMCLにおいて、空間スケールはハイブリッド法により拡大しているが、実験データとの直接的な比較には、時間スケールについても拡大することが望ましい。そこでhyperdynamics法をハイブリッド法に取り入れることで、新しいhybridQMCLコードを開発する。これらの改良により、より実際的な複雑界面をhybridQMCLで扱うことを可能とし、分子間の架橋反応、金属のメッキ処理、表面粗化効果、プラズマ処理等をスパコンで解析可能とする。グラファイトに付着した有機分子液体中で電場印加により促進されて生じる固体電解質皮膜、無機表面に長鎖化合物をグラフトしたポリマーブラシ等、自己組織化膜についても適用対象とする。

［サブ課題間連携目標］

サブ課題連携目標として、フッ素系長鎖化合物の界面物性に関する計算を実施する。

ラングミュア膜や無機基板上にグラフトしたフッ素系長鎖化合物を対象とし、小分子の吸着・撥水性・撥油性・濡れ性をMD 計算と溶液理論の融合手法によって解析する (阪大基礎工を中心とするグループ、東北大理、北大触媒、慶応大理工、京大化研の協力を得る)。解析のポイントは、フッ素系長鎖化合物の鎖長依存性と集合様態依存性である (集合様態は、フッ素化合物の面積濃度などで制御可能)。全原子モデルによる解析をコアとして、粗視化モデリングを組合せ、実験グループとの共同研究で、構造解析から機能解析に進む。

（３）目標・期待される成果

［ベース目標］

H29 年度末(中間評価)には、直鎖高分子だけではなく、分枝や架橋を持つ高分子系への小分子の分配を計算可能とし、時間スケールを拡大する手法を hybridQMCL に導入する。本格実施フェーズ終了時には、結晶／非晶のような高分子の集合様態が分離性能に及ぼす影響、および、無機基材とその表面膜を介して接するポリマー系との結合強度や熱伝導性が計算可能になるというアウトプットが期待され、ポスト「京」運用開始５年後にはトポロジー制御共重合系への生体分子の結合や結合剤分子の両端での無機材料および有機材料との結合がシミュレーション可能になるというアウトプットが見込まれる。これらのアウトプット成果に立脚し、ポスト「京」運用開始５年後に、海水淡水化や透析に用いる高分子分離膜の分離性能や機械的強度の向上、および、素子が高密度に集積された 3 次元半導体や自動車等のパワー半導体の冷却に必須な高熱伝導性封止材料の理論設計がアウトカムとして期待され、ポスト「京」運用開始１０年後には、生体膜に匹敵する分離能をもつ人工腎臓の開発への貢献やメッキ・防食塗装等ものづくり産業の基盤技術の革新が、アウトカムとして展望される。上記の目標の達成過程で、トポロジーを制御した共重合体（ブロック共重合体など）のナノ構造や多孔構造の取扱いが可能となるように、自由エネルギー計算ソフト ERmod を高度化し公開する。ERmod は、「京」プロジェクトで開発され 2012 年に公開されたソフトである。ドキュメントやサンプルデータも含め、1 年に 500 回程度ダウンロードされている。ポリマー系の物質分配機能の解析と予測に向けた高度化を進めることで、我が国発のソフトの適用可能性をより広範なものとするとともに、ポリマー素材産業における開発基盤への貢献が期待される。そのために、ソフトウェア会社も巻き込んだソフト開発・支援体制を構築する。

［サブ課題間連携目標］

本格実施フェーズ終了時には、フッ素系長鎖化合物を中心とするヘテロ原子含有化合物の気液界面および固液界面の小分子吸着挙動が計算可能になるというアウトプットが期待され、ポスト「京」運用開始５年後には、撥水・撥油・濡れ性のような吸着物質自体の分子集団特性を考慮に入れる必要がある界面物性がシミュレーション可能になるというアウトプットが見込まれる。これらのアウトプット成果に立脚し、ポスト「京」運用開始５年後に、フッ素系長鎖化合物で修飾された機能性界面の化学的耐久性の向上がアウトカムとして期待され、ポスト「京」運用開始１０年後には、衣服材料やディスプレイ材料の機能革新がアウトカムとして展望される。上記の目標の達成には、高精度量子計算およびハイブリッド量子古典シミュレーションが必要となり、サブ課題７G で開発される第一原理電子状態計算ソフトウェアとの連携によって成果創出を加速する。

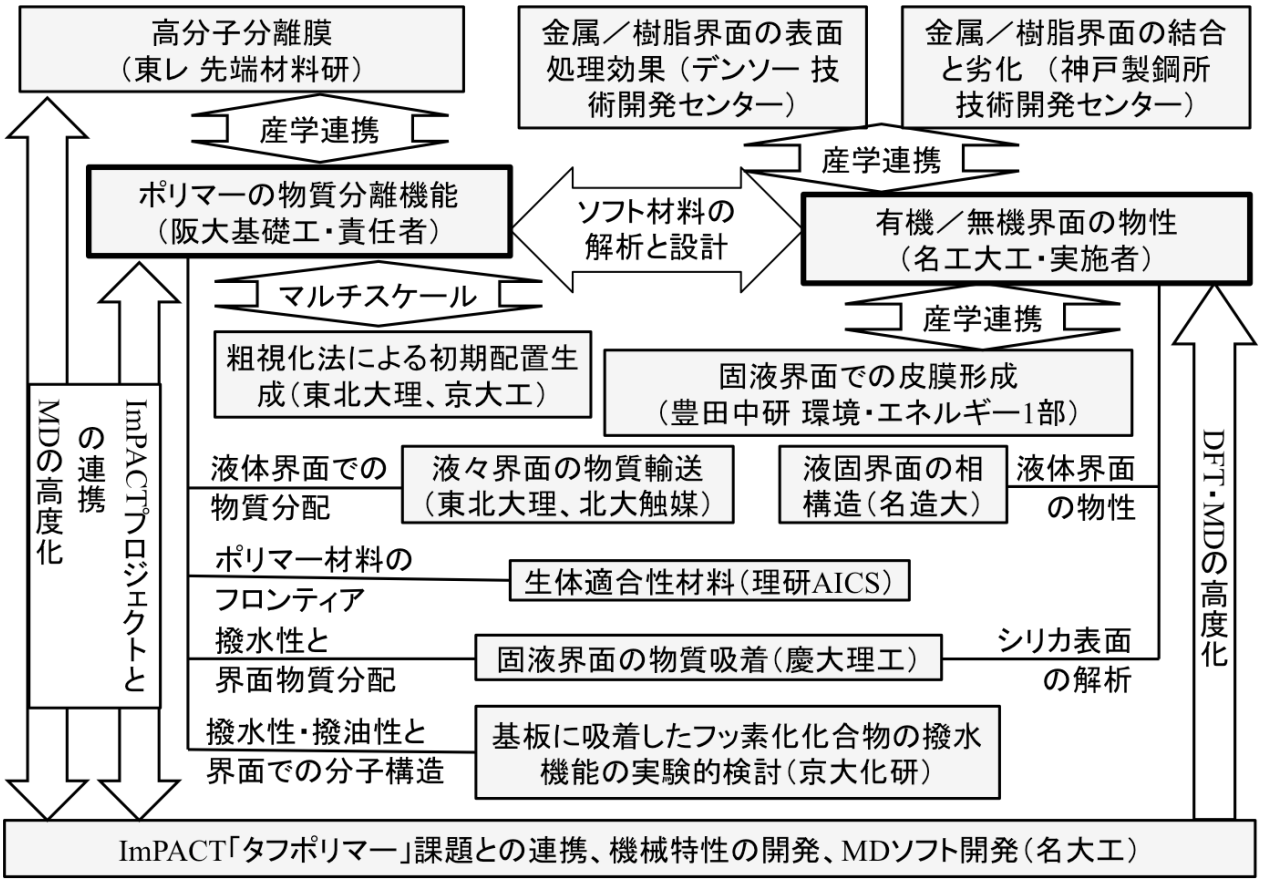
（４）「京」でできていること、ポスト「京」でなければできないこと

「京」では、鎖状高分子の非晶系をもちいた水とイオンの分離を対象とし、全原子モデルをもちいた MD と溶液分布関数理論の融合手法によって、分離膜の機能を表現する基本物性である透過係数の計算が可能になっている。また、電子状態計算で得た原子間相互作用ポテンシャルを用いることで、アルミナ／エポキシ樹脂界面の熱伝導率が、簡略化した界面結合材の効果も含めて、MD により定量的に計算可能となっている。ポスト「京」で、結晶／非晶質混合系、ブロック共重合体、有機／無機界面における物質分配や構造ダイナミクス、界面結合剤反応、分子間架橋反応、および、それに伴う不

均一構造生成のリアル計算が可能になると見込まれる。

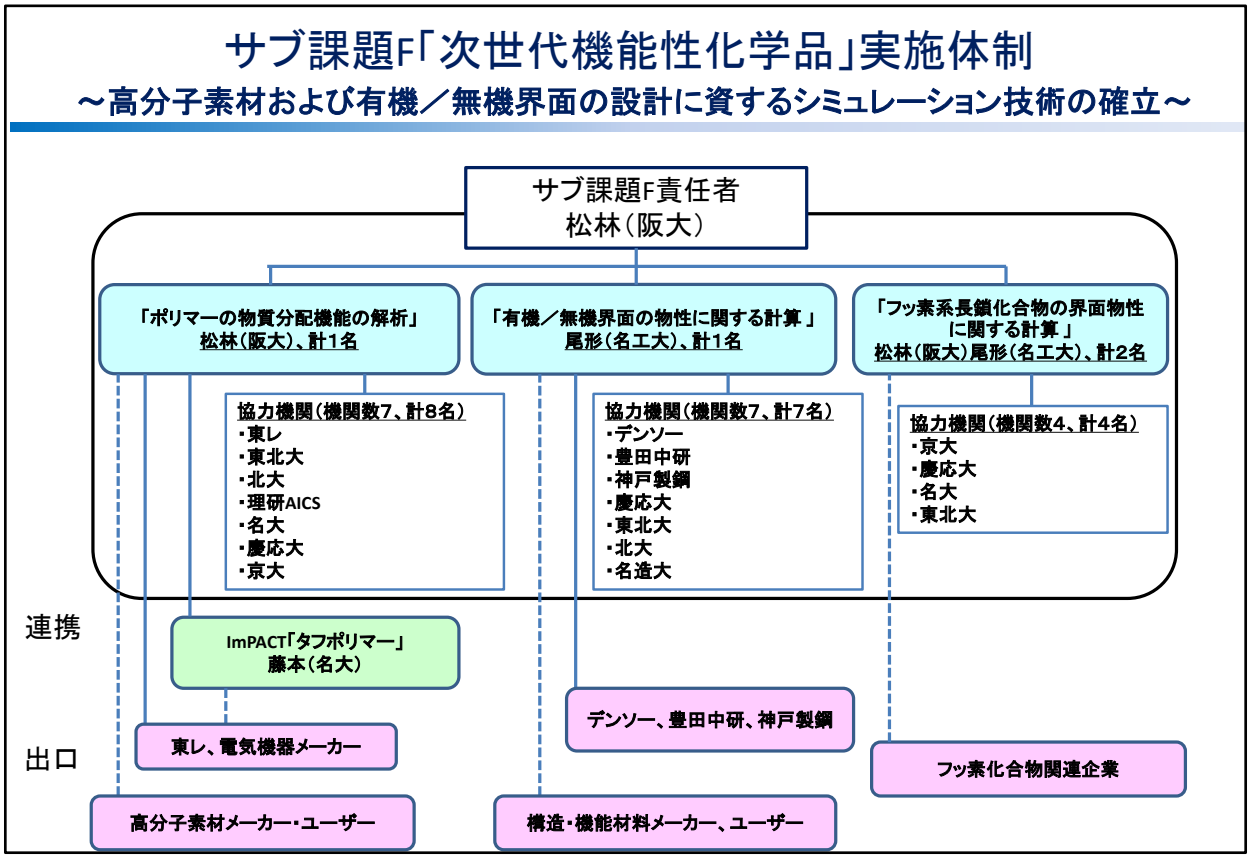
（５）実施体制

本サブ課題の推進体制・役割分担を下図にまとめる。



本サブ課題の研究は、阪大基礎工および名工大を中心とするグループが、それぞれ、東レおよびデンソー・豊田中研・神戸製鋼所の協力を得て遂行する。前者のグループは、ポリマーの物質分離機能を対象とし、MD 計算と統計力学理論による解析を主として行う。阪大基礎工グループは、化学工学領域に属して同僚の分離工学者の協力を得ることができ、また、東レのグループの協力を通して海水淡水化の社内の実機開発グループとの連携を取ることができる。また、協力機関として、東北大理・京大工が参画しており、特に、トポロジー制御共重合ポリマー系の粗視化モデリングを行い、全原子 MD の初期構造を提供する。さらに、フッ素系長鎖化合物の界面物性の検討も行う。この際に実験サイドから協力を行うのが京大化研であり、固液界面が関係する場合のモデリングでは慶応大理工が協力し、液々界面における物質輸送では東北大理が理論・計算、北大触媒が実験の立場から協力機関として参画する。後者のグループは、有機／無機界面の物性を対象とし、DFT と MD を融合させたハイブリッド量子古典シミュレーションによる解析を主として行う。神戸製鋼所はシミュレーションに直接対応させた実験についての協力も予定している。本プロジェクトの遂行では、MD 計算が重要な役割を果たすが、そこで、「京」での使用のために高度化された MODYLAS、および、ポスト「京」プロジェクトのターゲットアプリである GENESIS を用いる。これらの MD ソフトと自由エネルギー計算ソフトである

ERmod の連携を行っており、そのために、理研計算科学機構と名大工を協力機関としている。さらに、名大工グループは、ImPACT「タフポリマー」に参画しており、長鎖化合物系の機械強度の計算の立場からも連携を行う。
尚、組織体制、連携関係を示した運営体制組織図は下記の通りである。



２－７．サブ課題 G. 共通基盤シミュレーション手法

（１）目的・意義

光・電子デバイス材料、磁石材料、構造材料、機能性化学品等の材料シミュレーションにおいて共通してニーズの高い基盤的シミュレーション手法・アプリケーションがある。これらの手法をサブ課題毎に個別に開発するのではなく共通する部分を見極め、基盤的シミュレーション手法・ソフトウェアとして開発することにより、課題間の横串的な役割を果たすことができる。さらにサブ課題毎に開発された個別的手法と併用することで、次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成に向けて産業応用に即した現実系の材料シミュレーションが可能となり、実質的な課題解決に繋がることが期待される。また関連する産業界や国家プロジェクト等の現課題解決に対して、「京」で動作するアプリ活用を促進しながら新たなニーズや課題を汲み上げ、汎用性の高い基盤的ソフトウェアを開発し、産業競争力の強化に貢献する。

（２）実施内容

サブ課題 A-F への大きな波及効果が期待され、さらに産業界の研究現場への開発ソフトウェアの普及を図るため、以下の三つの共通基盤シミュレーション手法を開発・整備する。

① 基盤的第一原理電子状態計算ソフトウェアの開発・整備:(分担機関 東大物性研)

［ベース目標］

基盤的な汎用第一原理電子状態計算ソフトウェアを開発することにより、多岐に亘る物質の材料特性を統一した枠組みで系統的に調べることが可能となる。汎用第一原理計算ソフトウェアに求められる要件は高精度計算、高速計算、様々な物理量が計算できる多機能性、ユーザービリティ等である。複雑な界面構造や非周期構造の構造決定をポスト「京」を用いて比較的、容易に実現するために超並列化オーダーN 計算アルゴリズムに基づくソフトウェア開発及び高度チューニングを実施する。また大型実験施設(SPring-8、SACLA や J-PARC 等)との連携を強化するため、X 線吸収微細構造(XAFS)や NMR 等の各種スペクトルの計算手法を開発・実装する。「京」上での運用実績があり、ポスト「京」でも高並列性能が期待される OpenMX の開発を重点的に実施する。特に X 線吸収スペクトル、NMR スペクトル等の計算機能の付加及び OpenMP/MPI による多重超並列化を行う。また相補的な役割を担う高精度計算が可能な全電子計算手法と標準的な平面波基底に基づく第一原理電子状態計算手法、また超大規模計算が可能な強結合法も開発・整備し、材料科学の多岐に亘る実問題に対応できるようにする。基盤的ソフトウェア開発を通して産業界からのニーズを汲み上げ、産業競争力の強化に対して実用的に役立つソフトウェアを開発する。

② 物質構造と相変化の探索手法の開発:（分担機関 東北大金研、東北大学工学研究科、東大物性研）

［ベース目標］

計算物質科学において、新たな機能の発現を図り、機能の最適化、実用化を行う為には、新規な相の探索手法や、平衡相や競合相の予測を高精度で行う計算手法の確立が必須である。サブ課題 A～F に対する共通基盤として、物質構造と相変化の探索手法の開発を行う。第一原理計算を起点として、

(i)有限温度の相平衡や相安定性予測のため、熱力学・統計力学手法と組み合わせ相図の計算、相変化や組織発展過程を記述するための理論手法の構築と計算モジュールの開発。

(ii) 相平衡や相安定性予測のため相図の計算を行い、機械学習や進化的構造探索などの手法を開発し、新たな構造探査法を開発すること

(iii)実験データにリバースモンテカルロ法やデータ同化法を適用し構造の探査や決定を行うことが主たる実施内容である。特に(i)においては高精度な自由エネルギーの計算が必須であるが、格子の局所変位の効果を陽に導入する為に連続変位クラスター変分法の開発を行う。

③基盤的超並列計算アルゴルリズムの開発:（分担機関 東大物性研）

［ベース目標］

ポスト「京」上での超並列シミュレーションを実現するために、重点課題⑦における複数のアプリケーションに共通して適用可能な基盤的超並列計算アルゴリズム・ライブラリを開発・整備する。第一原理電子状態計算において特に重要である固有値解法、直交化、線形一次方程式解法、3 次元高速フーリエ変換等に対して超並列化に適したアルゴリズム及び実装方法を開発する。またライブラリとして一般公開し、さらに実アプリケーションへの実装も併せて行う。

上記の三つの共通基盤の開発・整備に加えて、大型実験施設との連携を強力に推進する以下の課題④を実施し、実験と歩調を合わせながらシミュレーションの観点から新しい物性物理の地平を開拓する。また重点課題⑦に参画する計算科学者と大型実験施設との連携窓口となり、計算と実験の連携促進に広く貢献する。

④大型実験施設との連携:（分担機関 東京理科大理学部、東大物性研）

［ベース目標］

密度汎関数法に基づく第一原理計算ではその電子状態や励起ダイナミクスが十分記述されない強相関物質・材料に対応するため、強相関物質系のスピン・電荷ダイナミクスや非平衡ダイナミクスを計算する動的密度行列繰り込み群法(DDMRG)プログラムを開発・整備する。この手法を活用して、大型実験施設（J-PARC, Spring-8, SACLA）で行われる非弾性中性子散乱実験、非弾性 X 線散乱実験、自由電子レーザー実験などのデータ解析や新しい実験の提案を行い、大型実験施設との連携を強化する。また上記課題①で開発を進める第一原理電子状態計算に基づくスペクトル計算手法の適用研究を産業界と連携して実施し、本重点課題⑦、産業界、大型実験施設間との連携を促進する。さらに大型実験施設の実験研究者との研究会を定期的に実施することで連携窓口としての役割を担う。中期目標：強相関電子系のスピン・電荷ダイナミクスを計算するため DDMRG 法の開発および高度化を行う。J-PARC や SPring-8 で行われる高温超超伝導物質等の実験と歩調を合わせながら、対応する励起スペクトルの計算を実行して共同研究を推進する。最終目標：超高速非平衡ダイナミクス計算も含んだ DDMRG 法の強相関系励起ダイナミクス計算パッケージを完成させる。大型実験施設との連携を強化する中で、二次元強相関系に対する J-PARC、SPring-8、SACLA での実験の提案を行う。

［サブ課題間連携目標］

サブ課題 A-F とサブ課題 G とのサブ課題間連携実施内容を以下にまとめる。

- サブ課題 A

現実のデバイス構造に対する第一原理デバイス・シミュレーションを実現するためには、超大規模固有値問題に対する効率的計算手法の開発が不可欠である。サブ課題 G で開発を進める超大規模並列計算向け Sakurai-Sugiura 法をサブ課題 A で開発するデバイス・シミュレーションに実装する。

- サブ課題 B

より高精度で信頼性の高い光・電子ダイナミクス・シミュレーションを実現するために、サブ課題 G と連携し、時間依存密度汎関数理論よりも高精度な記述が可能となる量子多体摂動論に基づく次世代の高精度シミュレーション手法を開発する。

- サブ課題 C

サブ課題 G で開発を実施する平面波基底法に基づく第一原理電子状態計算ソフトウェア xTAPP の計算機能を連携して開発する。特にサブ課題 C において必要となるスピン軌道相互作用やフォノン分散の計算機能の実装において連携する。

- サブ課題 D

永久磁石材料における界面、欠陥、不純物等の組織構造までを考慮した現実的なシミュレーションを実現するために、局在基底関数法に基づく第一原理電子状態計算ソフトウェア OpenMX の超並列化を連携して実施する。またサブ課題 G で開発される物質構造や相変化の探索手法を活用し、新規磁石材料の探索を行う。

- サブ課題 E

高機能構造材料研究に必要な各種プログラムや計算技術（OpenMX、QMAS、TOMBO、大規模 Phase Field 法、粗視化手法等）の研究開発をサブ課題 G との間の連携により、効率的に進める。特に大規模第一原理計算、大規模 Phase Field 法計算や超並列計算の高度化、高効率化を連携して進める。また材料設計・制御技術を確立するため、サブ課題 G で開発される物質構造や相変化の探索手法を活用し、最適の添加元素や特徴的な析出化合物相の探索を行う。

- サブ課題 F

無機基板上での分子吸着シミュレーションで活用するハイブリッド量子古典シミュレーションの開発においては、サブ課題 G での第一原理電子状態計算グループと密接に情報交換を行い、効率的に実施する。

（３）目標・期待される成果

［ベース目標］

本格実施フェーズ終了時のアウトプット：大規模複雑構造の第一原理計算が可能な汎用ソフトウェア。基底状態の構造を網羅的に探索し得る機械学習及び進化的構造探索プログラム。局所格子緩和を考慮した二元系相図計算プログラム。基盤的超並列計算アルゴリズムを実装したライブラリ。ポスト「京」運用開始 5 年後のアウトプット：大規模系の第一原理スペクトル計算が可能な汎用ソフトウェア。構造探索・相図計算プログラムの三元系及び非立方晶系への汎用化。ポスト「京」運用開始 5 年後のアウトカム：大型実験施設とポスト「京」によるシミュレーション研究の協力関係構築による新規材料開発の進展。同 10 年後のアウトカム: サブ課題 A～F のデバイス・材料の産業実用化に際して、最適な組成設計やプロセス設計のツールを提供。開発した計算手法やソフトウェアを産業応用に役立てるために、ソフトウェア及びマニュアルを整備・公開する。また使用方法に関する講習会を開催し、普及を図ると共にさらに産業界のニーズや課題を汲み上げ、産業応用と一体となった研究開発体制を構築する。

1（4）「京」でできていること、ポスト「京」でなければできないこと

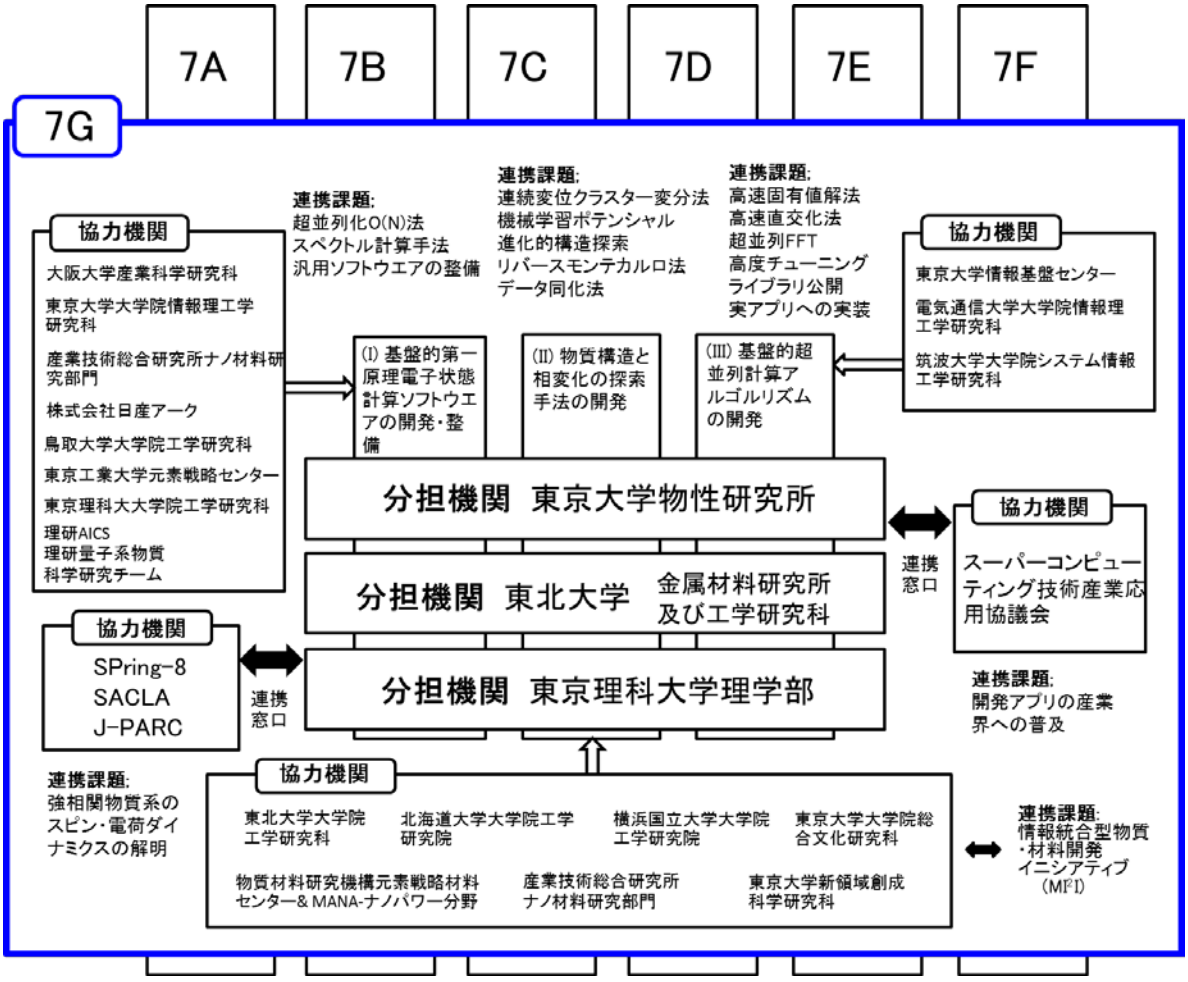
「京」上で汎用第一原理電子状態計算ソフトウェア OpenMX を用いて 4000 原子からなる系の鉄鋼材料の構造最適化が可能である。鉄鋼材料や磁石材料中の実材料に観測される複雑組織構造をモデル化するためには 5 万原子程度の取り扱いが必要となる。各原子の計算を MPI 並列化(5 万プロセス)し、さらに原子内のループを 10 スレッド並列する(計 50 万コア)ことで 1 週間程度で構造最適化が可能であると推定されるが、材料設計のためには同様な計算を繰り返し実施することが必要であるため、ポスト「京」が必要となる。また物質構造と相変化の探索手法を用いて網羅的な探索計算を実行するためはキャパシティ計算(100 万回程度)を実行する必要があり、「京」では数年を要する計算となるため、ポスト「京」の使用が必須である。ポスト「京」で活用するアプリの準備状況を以下に説明する。局在基底法による第一原理計算ソフトウェア OpenMX は「京」上での 13 万並列において 68%の並列化効率を達成しており、さらにオーダーN 法における内側のループを並列化することで 100 万並列でもスケールすると予測されるため、開発を進めている。また平面波基底法の xTAPP と QMAS は FFT を多用することから並列特性は数万並列で頭打ちになると予測されるため、この規模での高速計算が実現されるようにチューニングを進めている。

（5）実施体制

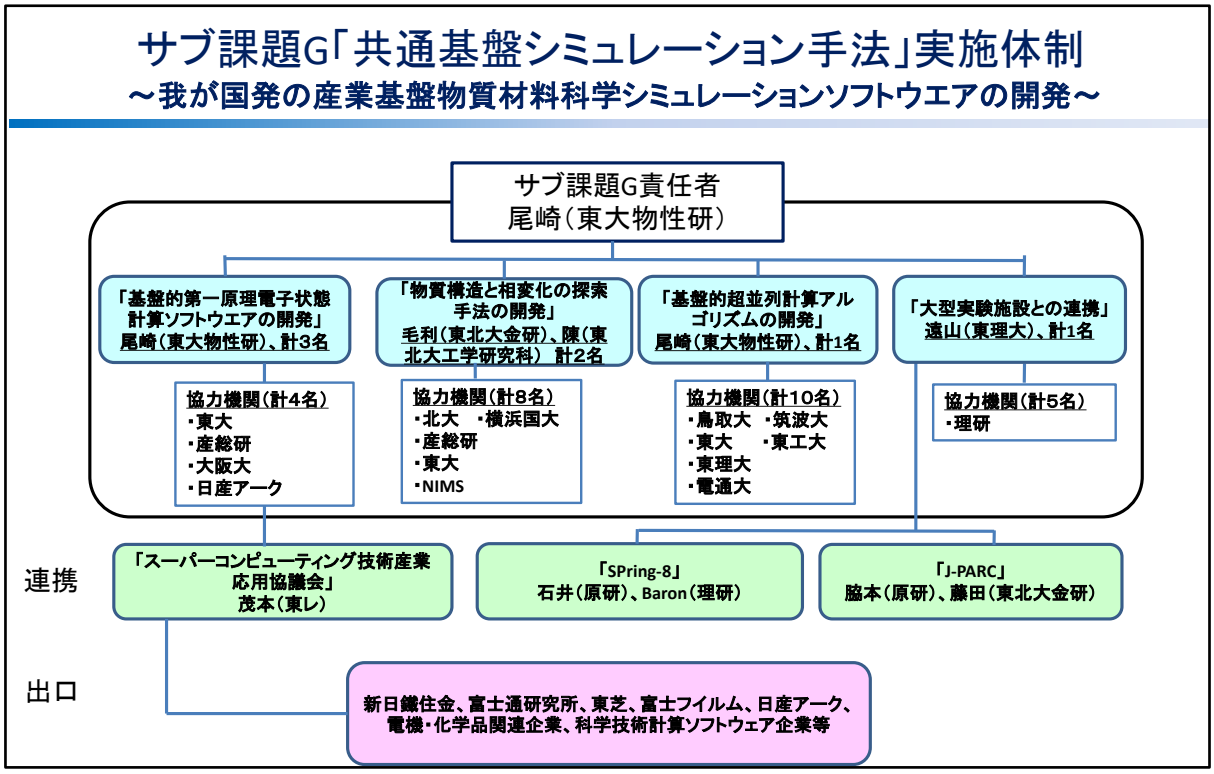
サブ課題 G の三つの共通基盤手法・ソフトウェアの開発・整備計画に対して、東京大学物性研究所は分担機関として「①基盤的第一原理電子状態計算ソフトウェアの開発・整備」と「③ 基盤的超並列計算アルゴルリズムの開発」を主に担当する。同機関はスーパーコンピューティング技術産業応用協議会（以下、産応協）との連携窓口を務め、ソフトウェアの産業界への普及活動にも共同で取り組む。サブ課題 D、E の課題解決に向けて、第一原理電子状態計算ソフトウェア OpenMX の開発を、またサブ課題 C の課題解決に向けて、他の協力機関との連携の下で第一原理電子状態計算ソフトウェア xTAPP の開発を進める。東北大学金属材料研究所及び大学院工学研究科は分担機関として「② 物質構造と相変化の探索手法の開発」を主に担当する。東京理科大学理学部は分担機関として「①基盤的第一原理電子状態計算ソフトウェアの開発・整備」の一部と「④大型実験施設との連携」を担当する。また同機関は大型実験施設との連携窓口の役割を務め、実験と理論の共同研究による科学的成果の創出を担う。課題「①基盤的第一原理電子状態計算ソフトウェアの開発・整備」に対し、協力機関として 10 グループ（大学 6、国立研究開発法人 2、企業 1、産応協）が参加し、産業界からのニーズを汲み上げた上で組織的に計算手法やソフトウェアの開発を進める。また産業界との密接な連携体制を構築し、開発ソフトウェアの産業界への普及をはかる。課題「② 物質構造と相変化の探索手法の開発」に対し、協力機関として 6 グループ（大学 4、国立研究開発法人 2）が参加し、連携して主に新規計算手法の開発に取り組む。またサブ課題 D、E 及び元素戦略プロジェクトとも連携し、新規磁石材料や新規構造材料の探索に向けて開発した計算手法の適用研究を進める。課題「③基盤的超並列計算アルゴルリズムの開発」に対し、協力機関として計算機科学を専門とする 3 グループ（大学 3）が参加し、超並列計算アルゴリズムの開発と実アプリケーションへの組み込みを担当する。また後述する第３班の班長を星健夫准教授(鳥取大学)が務め、計算機科学者と計算科学者の連携促進を担当する。 本サブ課題 G は全体としての参画者は総勢 33 名を数え、全体としての統制を取ることが難しいと考えられる。そこで各課題の実施体制を明確化し、課題遂行を加速する枠組みとして、以下の 4 つの班を構成する。

①基盤的第一原理電子状態計算ソフトウェア開発班　班長：尾崎泰助（東大）
②物質構造と相変化の探索手法開発班 班長：陳迎(東北大)
③基盤的超並列計算アルゴリズム開発班 班長：星健夫(鳥取大)
④大型実験施設連携班　班長：遠山貴己（東京理科大）

分担研究者及び協力研究者は重複することなしにいずれかの班員を構成する。適切な規模の班構成を行うことで、班員一体となり成果創出へ向けて課題に取り組む体制を構築する。



尚、組織体制、連携関係を示した運営体制組織図は下記の通りである。



３．採択時の留意事項への対応状況

（１）課題全体として達成すべき成果を明確にするとともに、その成果実現に向けた定量的・定性的な目標（年間目標及び最終目標）を明確にすること。その際、シミュレーションによる成果を効果的に展開できるように、実験研究者や産業界との連携のタイミングについても明確にすること

各サブ課題の目標に記載しており、反映済である。

（２）マルチスケール・シミュレーションについては、関連分野で実現されている方法論も広く参考にして実現に至るシナリオを明確にすること

マルチスケール・シミュレーションに関連している課題では、すでに実現されている手法を考慮しつつ、目標を実現に至るシナリオを研究計画の中で明確化しており、反映済である。

（３）相乗効果が期待される他プロジェクト等と効果的に連携して取り組むとともに、役割分担を明確にすること

全てのサブ課題が、国家重要プロジェクト、産業界、もしくは、大型研究施設との連携課題で推進する計画であり、それらのメンバーと議論がなされて役割分担が明確化されており、反映済である。

（４）人件費の占める割合が大きいが、本プロジェクトで雇用する研究者（ポスドク等）の人員計画を明確にするとともに、将来のステップアップまで見据えた登用、人材育成の取り組みの計画を明確にすること。

人員計画に関しては、１．実施概要（６）実施体制に反映済である。

（５）当該全体提案は、全体提案の方針に沿った形で、サブ課題（G）共通シミュレーション手法等に、当該部分提案を取り組むように調整すること。その際、当該部分提案については、成果目標及び成果がどのように産業に役立っていくのかのシナリオを明確にするとともに、実験研究者や産業界等の応用先の関係機関からのニーズを十分に把握し、研究開発に反映できる体制を明確にすること。

全てのサブ課題の実施計画の中に、サブ課題(G)と推進する連携課題の実施内容と目標、期待される成果が記載されており、反映済である。

４．中間評価における指摘事項への対応状況

（１）指摘事項と対応概要

指摘事項１）

課題全体として達成すべき成果を明確にするとともに、その成果実現に向けた定量的・定性的な目標（年間目標及び最終目標）を明確にすること。その際、シミュレーションによる成果を効果的に展開できるように、実験研究者や産業界との連携のタイミングについても明確にすること。

＜対応概要＞

Pj 前半では、ポスト「京」の利活用に適した様々なシミュレーション手法、基盤技術を開発してきた。後半では、コデザインで得られた知見を許される限り早期にグループ内に展開し、ポスト「京」向けのアプリケーションソフトウェア（アプリ）開発を加速する。実験研究者や産業界との連携については、これまでも産官学連携フォーラムや大型研究施設との連携研究会などを通じて広く課題抽出に努めてきたが、今後各サブ課題で実験研究者や産業界との連携テーマをより具体化し、早期の成果創出につなげる。

指摘事項２）

情報科学技術分野における研究開発の論文数、学会発表数は、事業の成果を議論する上で１つの指標となりうるため、分野の特性を考慮の上、論文数、学会発表数の達成目標値を設定すること。

＜対応概要＞

Pj 前半(2015 年 4 月～2017 年 7 月)では、学術論文は全体で 205 件、学会発表は 652 件行っている。Pj 後半は、ポスト「京」向けのアプリチューニングに注力する必要があるため，短期的成果は得られにくくなることも予想されるが，その中でも前半の数値を上回ることができるよう、着実に成果の論文化を進め、国内外での学会発表を通じてプレゼンスの向上と分野振興を図る。

指摘事項３）

予備計算などを通じて、サイエンス的な目標を明確にすること。その目標に対して、ポスト「京」でいつまでに何をどこまで明らかにすることを目指すのかを明確にすること。その時点でポスト「京」で初めてできる画期的な利活用について具体的に説明すること。

＜対応概要＞

今後、コデザイン成果をグループ内で展開し、アプリ開発と性能予測を進めることに加え、実験研究者や産業界との連携テーマを絞り込むことで、最終年度までに、ポスト「京」で初めてできるシミュレーションの具体的な内容、規模をサブ課題ごとに明確化する。

指摘事項４）

従来できなかった統合シミュレータの開発に成功しており、世界的にも先導的成果が期待できる。後の発展のために、これらをデファクトスタンダードにするための戦略と取り組みを検討すること。

＜対応概要＞

ポータルサイト MateriApps（日本語版、英語版があり，より使いやすいサイトを目指して現在リニューアル中）によるアプリ公開とあわせて、活用事例を公表し、各種の人材育成プログラムや HPCI

を運営するRIST等と連携して講習会を実施することで、国内外のユーザ増を図る。各アプリ開発グループに対しては、アプリに関する論文執筆を推奨する。また、講習会で利用するアプリをアカデミックだけでなく商用のクラウドサービスにもプレインストールし、企業研究者の講習会後のアプリ利用を促進する仕組みを構築することも開始している。

指摘事項５）

整理されてきたとはいえ、サブ課題、サブサブ課題がまだ多い。体制の整理をなお検討すること。

＜対応概要＞

諮問委員やスパコン産応協等からの開発要請もあり、サブ課題の数はこれ以上減らすことはできないと考えるが、予算や計算機資源が限られることから、今後もサブサブ課題の見直し・重点化を継続して実施する。なお各サブ課題とも、ポスト「京」での開発課題を中核として、他のプロジェクトとの連携や科研費などを活用して研究開発を行っている。そのため、サブ課題が多いことが計算物質科学分野のコミュニティー拡大につながっており、総合的なメリットは大きいことをご理解いただきたい。

（２）実施計画と最終目標の見直し（指摘事項１、３）

中間評価における指摘事項１、および、３を受けて、ポスト「京」で達成すべき成果を実現するために、平成 30 年度、および、最終年度となる平成 31 年度の具体的な目標を下記の通りに見直した。

１）サブ課題Ａ（押山）

（平成 30 年度目標）

「デバイス構造における乱れの理解と制御そして新機能発現」課題においては、RSDFT および RS-CPMD を軸にしたアプリケーション群を用いた、SiC デバイス界面の原子スケールの構造決定と電子物性の解明・予測を第一の目標とする。酸化現象のミクロな機構解明、実験と対比可能なアモルファス SiO_2 の計算機内作成と構造・電子状態の特徴解明を通じ、実際の SiC/SiO_2 界面の原子構造、構造的不完全性と電子状態の相関解明、トランジスターのキャリヤートラップの原子スケールの同定を試みる。またプロセス・シミュレーションの一環として、窒化物半導体エピタキシャル成長のシミュレーション技術を開発する。RSDFT、RS-CPMD による成長表面原子反応機構の解明、成長ガスフローの流体シミュレーション、両者をつなぐ局所熱平衡の概念導入により、第一原理・マルチスケール成長シミュレータの開発を目指す。

「新材料からの量子論デバイス創製シミュレータ開発」課題においては、中間評価で報告した RSDFT+NEGF の統合量子輸送シミュレーションコードを、京およびポスト京アーキテクチャ上でチューニングし、より大規模高速なデバイス・シミュレーションを現実のものにする。ナノワイヤー型 FET におけるナノ形状と分極効果の関係を明らかにし、最適デバイス形状への指針を与えることを目指す。またボルツマン輸送方程式をフルバンド・モンテカルロ法で解く手法をさらに深化させ、ナノデバイスにおける揺らぎ効果を取り入れるシミュレーション技術を開発する。

（平成 31 年度最終目標）

最終目標にあげた実空間シミュレーション手法の高度化によるパワーデバイス材料、新奇二次元伝導体、Si/Ge 系ナノ構造での界面構造と電子物性の相関解明は、半導体科学とテクノロジー分野での喫緊の世界的課題である。RSDFT、RS-CPMD による大規模・長時間のシミュレーションにより、パワー半導体である SiC、GaN の表面、デバイス界面での構造的、電子的性質を明らかにし、ナノ界面科学の進展に資する。また RSDFT と NEGF デバイス・シミュレータとの統合シミュレータの開発により、ナノメートルスケールのデバイス性能を量子論の第一原理からシミュレートする技術を開発する。さらにキャリア散乱効果、デバイス形状ゆらぎ、ドーパント位置ゆらぎを取り入れた、ボルツマン方程式に基づくモンテカルロ・シミュレーション手法を開発し、RSDFT と連成することにより、微細デバイスおよびパワーデバイスの第一原理シミュレーションを行う。現在産業界で用いられている流体シミュレーション（キャリアのドリフトと拡散模型）との連携をはかる。第一原理マルチスケール MOCVD 成長シミュレータを開発し、名古屋大学 GaN 成長実験グループとの共同で、新たな薄膜成長技術の進展に寄与する。

２）サブ課題Ｂ（矢花）

（平成 30 年度目標）

近接場光励起に起因する二倍波励起や波数励起を用いて、物質の光高機能化、シリコンの受光感受率の増大など、これまでは殆ど考えられていなかった、もしくは不可能と思われていた物質の高機能化を第一原理計算に基づいて実証し、実験グループと共同でその機能物質の作成を試みる。また、二倍波励起や波数励起は、物質の高機能化だけではなくエッチングにも応用することが可能であり、近接場光を用いた新たなエッチング技法の確立を試みる。

高強度のパルス光と物質の相互作用を記述する光励起電子ダイナミクスプログラムの開発を行う。光励起電子ダイナミクスだけではこの相互作用を記述することができず、光波のダイナミクス、すなわちマクスウェル方程式に基づくダイナミクスを電子ダイナミクスと結合させなければならない。本年度は、特に３次元マクスウェル方程式と３次元電子ダイナミクスを多階層結合したシミュレーションを行い、薄膜の透過によるパルス波形の変化を明らかにする。

（平成 31 年度最終目標）

孤立系、ナノ構造体、周期系バルク、表面・界面等、様々な系を対象として、近接場光励起ダイナミクスの解明を行い、近接場光励起に起因する新奇量子デバイスの作成を実験グループと共同で進める。特に、表面やヘテロ界面での近接場光励起は未知の部分が多く、その解明は急務であるが、そもそも表面やヘテロ界面での近接場光励起を記述するための理論とその理論に基づく第一原理計算プログラムの開発が殆ど行われていない。その一方で、特にヘテロ界面での光励起は量子デバイス設計に密接に関係している。そこで我々は、ヘテロ界面での光応答を記述する理論と実在系ヘテロ界面の光応答を扱うための第一原理計算手法の開発を行う。この計算手法をさらに拡張し、３次元マクスウェル方程式と３次元電子ダイナミクスを多階層連結により解くプログラムを完成させ、高強度パルス光が多様な薄膜状物質と相互作用することで起こる光波の波形変化や、波長以下の局在した空間領域で起こる光から電子へのエネルギー移行過程を明らかにする。これにより、光波波形を自在に整形する薄膜状物質や、波長限界を超えた３次元微細光加工を可能にするナノ構造体の設計を可能にする、世界に類のないシミュレーション手法を確立する。

多様な物質の様々な光応答が記述できる計算プログラムは、世界的に見て我々以外には、１、２グループが開発を進めているが、専門的な計算科学の知識を必要とするレベルで開発をしているに過ぎず、一般的なエンドユーザーが使える光科学汎用シミュレータに関しては、現状では我々が開発している SALMON 以外には事実上存在しない。SALOMON の開発があって、はじめて上記した様な近接場光励起や高強度超短パルス光励起に起因する新奇光応答の物理が明らかになり、その物理メカニズムを利用した光高機能デバイスや超高速エレクトロニクスの計算科学的設計、光エッチングや３次元非熱レーザナノ加工の提案などが可能となる。試作可能な実験グループや企業と共同研究を行うことで、世界に先駆けた新奇デバイスの開発や光加工技術の獲得を先導する。その一方で、SALMON は、一般的なエンドユーザーが様々な系の様々な光応答を解明するための手軽に使える汎用シミュレータである。上記した様に、光応答の汎用プログラムは事実上存在しない。この機会を逃さず、SALMON を光科学汎用シミュレータのデファクトスタンダードにすることを目標とする。

３）サブ課題Ｃ（今田）

（平成 30 年度目標）

バルクの銅酸化物高温超伝導体の第一原理計算によって物性の定量的な再現を最大限追求する。この目的のために制限 GW 法を RESPACK の中に組み込むとともに、テンソルネットワーク法やニューラルネットワーク法を組み込んだ低エネルギーソルバーの開発、実装と応用を進める。電子格子相互作用の効果も解明する。非平衡高温超伝導の現実的な可能性を提案する。量子スピン液体が実現する条件の理論的探索を進める。さらに、我々がイリジウム酸化物において予言し、実験的研究が進む磁壁金属状態を、より稀少性が低い他の遷移金属化合物で実現する方法を引き続き探求するとともに、非平衡状態や超伝導の近接効果を用いた制御性を追求する。実験解析のためのデータ科学手法と機械学習の組合せ手法を確立し、銅酸化物超伝導体の実験データ解析、量子スピン液体探索に応用する。

（平成 31 年度最終目標）

当初の計算規模を中心とした最終目標は、実際に手法開発が進んで扱いうる科学的課題が見えてきた現時点で、科学的意義のより高い、より具体的な科学的成果への目標へと以下のように深化させる。ポスト「京」ならではの大規模計算で初めて計算可能になる、強相関電子系に電子格子相互作用も取り込んだ第一原理計算手法や、非周期系、非平衡系を扱える一貫手法を開発・確立し、関連ソフトを公開普及するとともに、これの準備活用から、第一原理的に、超伝導、トポロジカル物質等の物性発現機構を解明、予言して、新機能を提案する研究を開始してポスト「京」での大規模展開につなげる。

４）サブ課題Ｄ（三宅）

（平成 30 年度目標）

OpenMX コードを用いたネオジム磁石の界面の第一原理計算は、平成 29 年度までに 3,000 原子規模の計算を達成した。引き続き、サブ課題 G と連携して、5000-10000 原子規模の計算に向けた準備をする。また、マテリアルズ・インフォマティクスの急速な発展に対応して、第一原理計算と情報統合手法を活用した新磁石化合物の探索手法を主要課題に加えた。平成 30 年度は、与えられた結晶構造に対して、2000 種類程度の化学組成から最適な磁気物性値を決定する手法を開発し、希土類磁石化合物に適用する。

（平成 31 年度最終目標）

ネオジム磁石の界面の第一原理計算を実行するため、サブ課題 G と連携して OpenMX コードを整備し、5000-10000 原子の大規模計算のための計算技術を開発する。磁石材料における不均一で複雑な原子配列がもたらす効果を第一原理計算で解明する試みは世界的に例がない。最新の実験データを反映し、計算モデルを随時改良する。また、各種の磁気特性に対する第一原理電子状態計算と情報統合手法を連携させた、物質探索手法を開発。平成 30 年度までに開発した手法を発展させ、異なる結晶構造を含む 4000 種類程度の構造・組成空間に対する第一原理計算に基づいて物質探索を実行する。高精度な理論手法を要する磁石物質のハイスループット計算探索手法は世界的にも確立されていない。Pj 連携で強化した体制で課題に対応する。

５）サブ課題Ｅ（香山）

（平成 30 年度目標）

金属材料の微細組織の構成要素（転位、粒界等）と添加物・不純物の間の相互作用を大規模第一原理計算で解明し、局所エネルギー法・局所応力法による機構解明を行い、高精度データとして蓄積する。第一原理計算をメゾ・マクロに繋ぐ高精度の粗視化手法として、機械学習手法による粒界エネルギー予測技術、ポテンシャル繰り込み理論等に基づく第一原理計算からの Phase Field Model の構築を行う。高精度で大規模のマルチスケール計算として、純金属、合金の凝固から粒成長の過程を大規模分子動力学法と大規模 Phase Field 法計算の連携で高精度にシミュレートする技術を確立する。

（平成 31 年度最終目標）

金属材料の微細組織の構成要素（転位、粒界、異相界面等）と各種添加物・不純物の間の相互作用を大規模第一原理計算で解明し、高精度データとして蓄積する。第一原理計算をメゾ・マクロに繋ぐ高精度の粗視化手法を構築する。こうした微視的情報を取り入れた高精度の大規模 Phase Field 法計算により、凝固から粒成長、組織形成の全過程を一貫して扱うシミュレーションを実現する。これにより、鉄鋼材料等の開発・特性制御に大きな指針を与える。

６）サブ課題Ｆ（松林）

（平成 30 年度目標）

分岐を持つポリマーや共重合系への小分子吸収の自由エネルギー変化を全原子モデルによって計算する手法を開発し、そのためのソフトウェアを公開する。また、ポリマーの自由エネルギーの全原子計算に向けて、ポリマー伸張の自由エネルギー変化を解析するための手法をエネルギー表示溶液理論に基づいて開発する。さらに、マクロな基礎物性値である界面付着自由エネルギーを高精度で高速に計算する手法を確立し、そのソフトウェアを公開し、実際に適用して実験結果と比較する。実際的な界面の接着・密着強度等を理論予測するために、界面モデルを実験状況に合わせて高度化した上で、ハイブリッド量子古典シミュレーション法を適用し、その反応過程の解明を目指す。

（平成 31 年度最終目標）

ポリマーの集合様態やトポロジーが分離性能に及ぼす影響を原子レベルで解析するための手法を開発し、官能基レベルの相互作用の知見を取り入れた自由エネルギー計算を遂行可能とすることで、ポリマー素材の設計指針策定に資する。これまでは実験との比較が定性的にも不可能であった有機／無機界面での接着・密着について、自由エネルギー及び電子レベル精度での原子ダイナミックスの両観点から、界面侵入分子による弱化を含めて、理論予測できるシミュレータをポスト「京」での運用に向けて開発する。

７）サブ課題Ｇ（尾崎）

（平成 30 年度目標）

大型実験施設(SPring-8、SACLA や J-PARC 等)との連携を強化するため、密度汎関数理論とデルタ SCF 法に基づき、X 線光電子分光スペクトルと X 線吸収スペクトルの計算手法のさらなる高精度化に取り組み、新たに開発した手法を OpenMX に実装する。また開発した手法を二次元物質系に適用し、実験研究者と連携して計算手法の有効性を示す。また数千原子を超える大規模な系の高精度な第一原理全エネルギー計算及び電子伝導計算を実現するために、自己エネルギー補正を行った分割統治型のオーダーN 第一原理電子状態計算手法を開発し、OpenMX に実装・整備する。さらに固有値問題解法のミドルウェアおよびミニアプリケーションに対して、京よりも新しい（メニ―コア・アーキテクチャ）コンピュータを想定した特性研究を行い，ポスト京コンピュータへの足がかりとする。

（平成 31 年度最終目標）

1 万原子系の大規模計算やスペクトル計算を可能する基盤的第一原理計算ソフトウェア OpenMX の一般公開を行う。大規模複雑構造の第一原理計算が可能な汎用ソフトウェアとして、基底状態の構造を網羅的に探索し得る機械学習及び進化的構造探索プログラム、世界的に用いられている Calphad 法の汎用性と第一原理 CVM の精度を兼備する相平衡状態図計算プログラム、基盤的超並列計算アルゴリズムを実装したミドルウエアライブラリを開発し、提供可能とする。

（３）実施体制の見直し（指摘事項１、３）

各サブ課題の中間評価時点での実施体制をベースに、2018 年度からの変更分を含めて見直した実施体制図の案を示す。尚、2018 年度から変更するサブサブ課題は下記の通りである。

1）サブ課題B「光・電子融合デバイス」

ⅰ)ナノ構造体近接場光励起ダイナミクス
ⅱ)ナノ界面高強度パルス光励起ダイナミクス

▶ ⅰ)光励起電子ダイナミクスによる新奇デバイス原理の探求

2）サブ課題D「高性能永久磁石・磁性材料」

ⅰ)新規磁性材料開発－高精度計算手法による探索
ⅱ)新規磁性材料開発－電子論と情報統合手法による探索

▶ ⅰ)新規磁性材料開発－電子論と情報統合手法による探索

3）サブ課題E「高信頼性構造材料」

ⅰ)大規模第一原理計算の実行
ⅱ)粗視化手法への連結法の確立

▶ ⅰ)第一原理計算によるデータ構造とメゾ・マクロへの連結

１）サブ課題 A：高機能半導体デバイス（押山）

ｉ）サブサブ課題間、サブ課題間の連携等

サブ課題 A では、2 件のサブサブ課題、「デバイス構造における乱れの理解と制御そして新機能発現」、「新材料からの量子論デバイス創製シミュレータ開発」が遂行されている。「デバイス構造・・・」においては RSDFT コード、RS-CPMD コードを主要アプリとし、重点課題全体で推進しているコデザイン WG とも密接に協力して、ポスト「京」におけるアプリの高度化、高速化とそれによる物質実証計算を行っている。「新材料から・・・」ではサブミクロンスケール、ナノスケールの実際のデバイス構造での輸送シミュレータを、量子流体(QHD)法、フルバンド・モンテカルロ(FBMC)法、および非平衡グリーン関数(NEGF)法により開発している。NEGF の結果は、FBMC、QHD に引き渡され、連成シミュレータへと発展させる予定である。一方、二つのサブサブ課題間では、RSDFT と NEGF が接続され、RSDFT-NEGF 第一原理デバイス・シミュレータが開発された。今後は「デバイス構造・・・」課題で得られる材料特性を「新材料から・・・」課題のシミュレ―タの入力とするシステムの開発も試みる。また、新たな展開として、名古屋大学グループの参画を得て、エピタキシャル成長のマルチスケール・シミュレーション手法を開発する。

ⅱ）サブサブ課題と協力機関の連携等

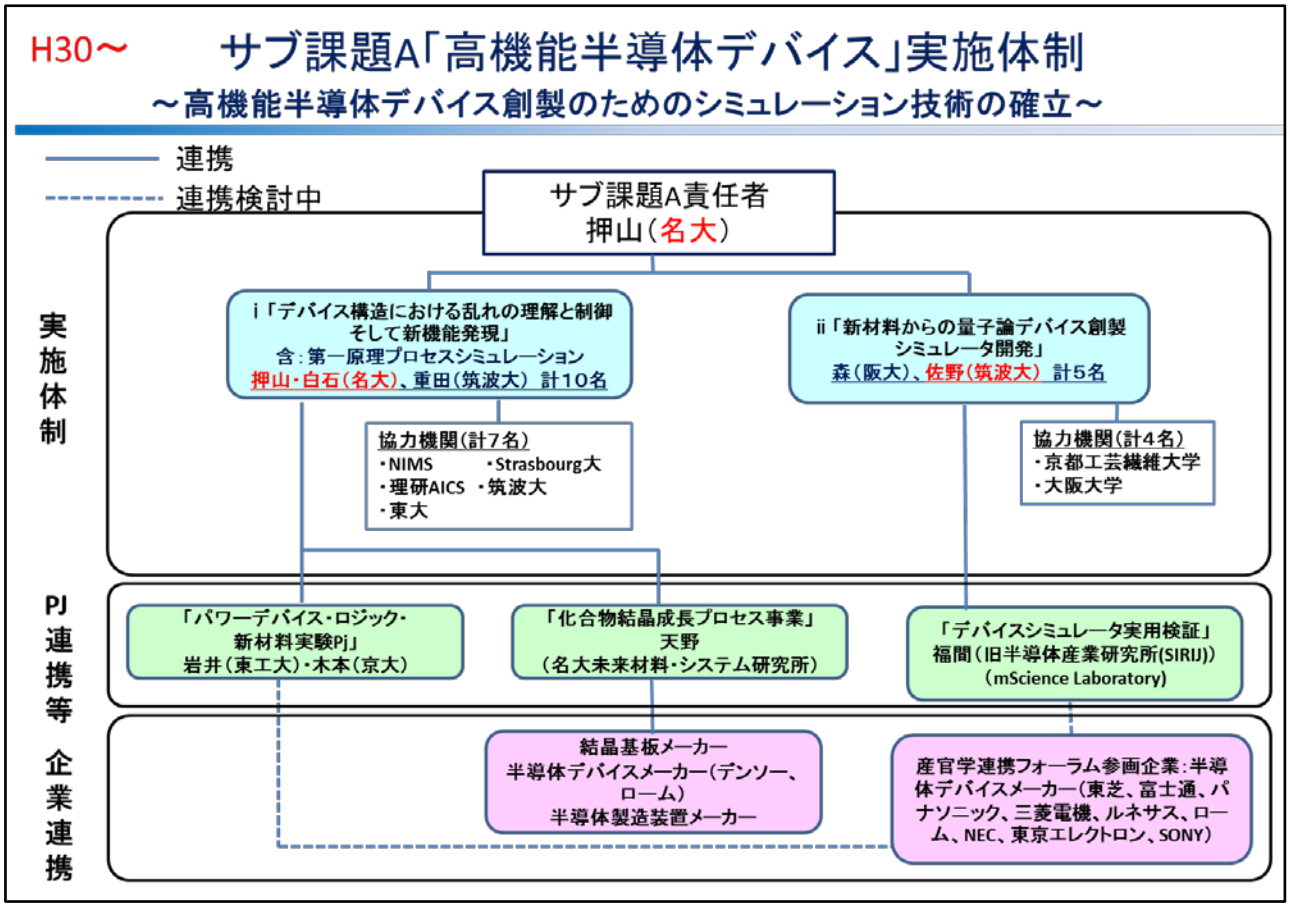
サブサブ課題「デバイス構造・・・」においては、RSDFT、RS-CPMD コードの開発と応用に関して、Strasboug 大学、筑波大に直接の連携をお願いし、また、計算機科学の側面で、理研 AICS、筑波大学からのサポートを受けている。また、実空間手法全般について NIMS、筑波大学と連携している。またエピタキシャル成長シミュレーションに関しては、名古屋大学天野浩グループと密接に共同し、実験データからのフィードバックにより、精密なシミュレーションを実現する。サブサブ課題「新材料から・・・」においては、FBMC、QHD コードの開発と応用に関して、京都工芸繊維大学、筑波大学に直接の連携をお願いしている。

ⅲ）Pj 間連携、フォーラム連携、分野振興活動等

コデザイン WG において、ポスト「京」での RSDFT の目標 FLOPS 値をターゲットに、アルゴリズムの開発とアーキテクチャ・デザインを行っている。文科省「省エネルギー社会の実現に資する次世代半導体研究開発」事業との共同により、GaN の薄膜成長マルチスケール・シミュレーション技術開発の一環として、RSDFT、RS-CPMD コードによる反応素過程解明を行っている。また、パワーデバイス等に新材料を適用する実験 Pj を実施する研究者との共同研究も実施し、論文執筆等に結びついている。

ⅳ）企業との共同研究、標準化活動等

福間諮問委員の協力を得て、東芝（株)、東芝メモリ（株)、産業技術総合研究所のグループとの微細デバイス、パワーデバイスでの諸問題の共同研究を開始する予定。一方、サブ課題 A、B、D が連携して立ち上げた企業（東芝、日立、NEC 等が参加）の方を含む産官学連携フォーラムにおいても、具体的な共同研究先を検討中である。


H30～
サブ課題A「高機能半導体デバイス」実施体制
～高機能半導体デバイス創製のためのシミュレーション技術の確立～
連携
連携検討中
サブ課題A責任者
押山（名大）
実施体制
i「デバイス構造における乱れの理解と制御そして新機能発現」
含：第一原理プロセスシミュレーション
押山・白石（名大）、重田（筑波大） 計10名
ii「新材料からの量子論デバイス創製シミュレータ開発」
森（阪大）、佐野（筑波大） 計5名
協力機関（計7名）
・NIMS ・Strasbourg大
・理研AICS ・筑波大
・東大
協力機関（計4名）
・京都工芸繊維大学
・大阪大学
PJ連携等
「パワーデバイス・ロジック・新材料実験Pj」
岩井（東工大）・木本（京大）
「化合物結晶成長プロセス事業」
天野
（名大未来材料・システム研究所）
「デバイスシミュレータ実用検証」
福間（旧半導体産業研究所(SIRIJ)）
（mScience Laboratory）
企業連携
結晶基板メーカー
半導体デバイスメーカー（デンソー、ローム）
半導体製造装置メーカー
産官学連携フォーラム参画企業：半導体デバイスメーカー（東芝、富士通、パナソニック、三菱電機、ルネサス、ローム、NEC、東京エレクトロン、SONY）

２）サブ課題Ｂ：光・電子融合デバイス（矢花）

ｉ）サブサブ課題間、サブ課題間の連携等

ナノ構造の光応答に優れた GCEED と、結晶の光応答に優れた ARTED を統合し、孤立系、ナノ構造体、周期系バルク、表面・界面等、多様な構造に適用可能な統合コード SALMON の開発を推進している。これにより、低次元物質や表面・界面の研究が加速する。2018 年度からは、それまでの２つのサブサブ課題を１つに統合して実施する。

ⅱ）サブサブ課題と協力機関の連携等

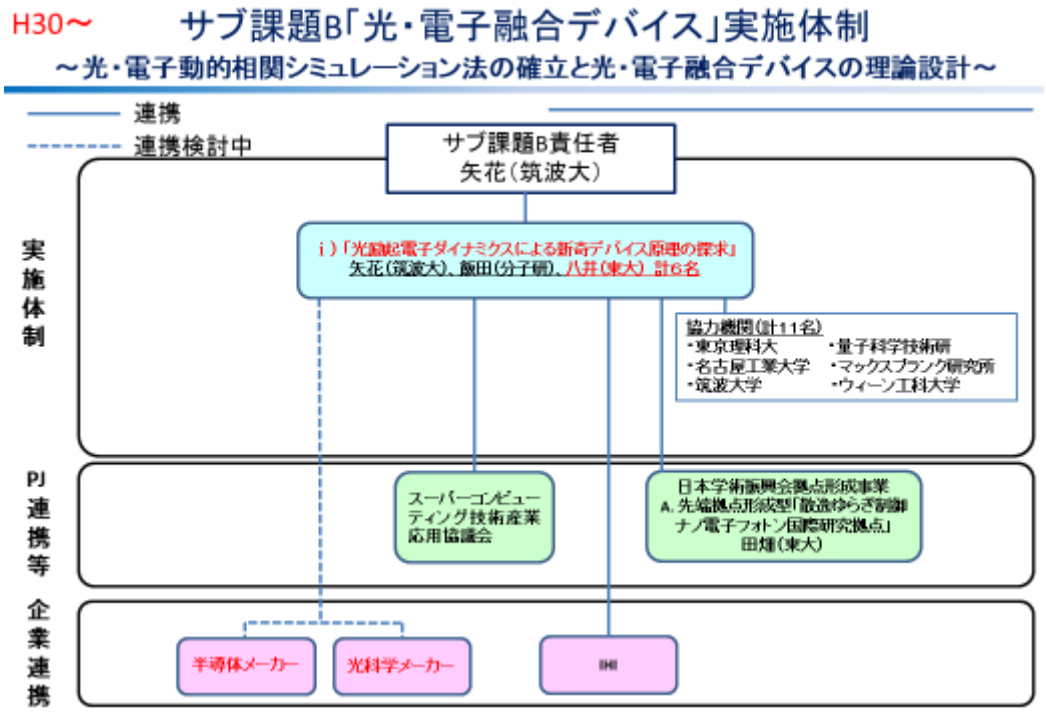
八井准教授（東京大学））実験グループとの共同で近接場光励起デバイスの開発を進めており、2018 年度から八井氏を課題実施者に加える。スウェーデン KTH と導波路設計の共同研究を進めている。朴泰佑教授（筑波大学）のグループとの密接な連携により、Xeon-Phi などの最新のアーキテクチャに基づくプロセッサにおいて効率的な計算が可能となるようコードのチューニングを進めている。マックスプランク研とアト秒光科学に関する共同研究を進めている。ウィーン工科大と高次高調波の物質中の伝播に関する共同研究を進めている。

ⅲ）Pj 間連携、フォーラム連携、分野振興活動等

日本学術振興会拠点形成事業（Core-to-Core Program）-A. 先端拠点形成型-「散逸ゆらぎ制御ナノ電子フォトン国際研究拠点」と連携している。

ⅳ）企業との共同研究、標準化活動等

株式会社 IHI との連携を進めている。炭素物質（グラファイト、グラフェン）の非線形光応答に関して成果を挙げつつある。企業研究者がコードを利用し計算を行うことができるよう指導している。



３）サブ課題Ｃ：超伝導・新機能デバイス材料（今田）

ｉ）サブサブ課題間、サブ課題間の連携等

手法開発において密接に連携している。開発ソフトＨφと mVMC は共通のインターフェースで一貫利用できるようにコード整備した。

サブサブ課題連携のために定期会合を行っている。サブ課題Ｇおよび萌芽課題１サブ課題Ｄと連携している。

ⅱ）サブサブ課題と協力機関の連携等

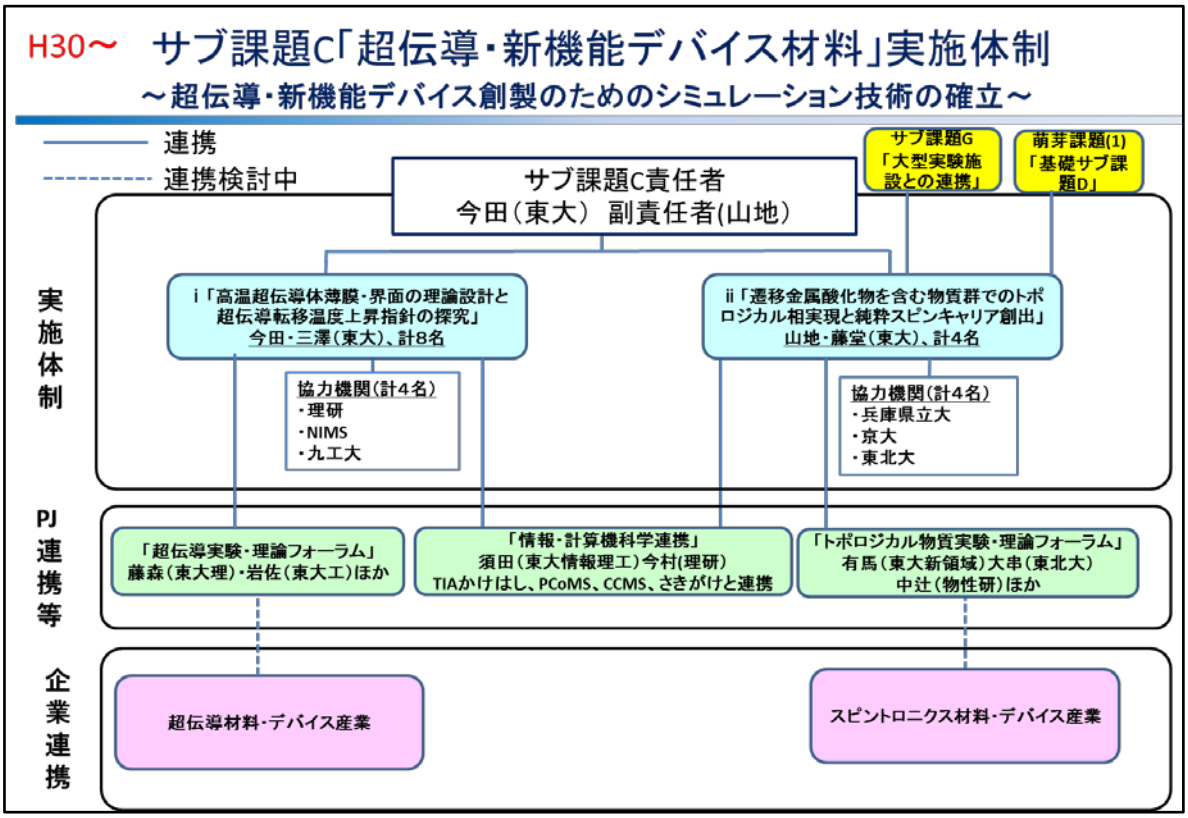
物性研ソフト高度化プロジェクトに加わり連携している。協力機関の実験研究室と共同研究・連携を進めている。

ⅲ）Pj 間連携、フォーラム連携、分野振興活動等

サブ課題Ａ、Ｄとの連携で産業界と連携するための産官学連携フォーラムを立ち上げた。分野振興、人材育成のための東京大学における教育活動「計算科学アライアンス」に貢献している（全体連携図に記載）。また、JST さきがけ、PCoMS などの外部プロジェクトと連携している。さらに、超伝導実験・理論に関するフォーラム、トポロジカル物質の実験・理論フォーラムを立ち上げ、実験研究者と議論しながら研究を推進している。

ⅳ）企業との共同研究、標準化活動等

階層的第一原理強相関電子状態計算法(MACE)の世界標準化を目指す。



４）サブ課題Ｄ：高性能永久磁石・磁性材料（三宅）

ｉ）サブサブ課題間、サブ課題間の連携等

界面計算とインフォマティクスは、それぞれ東工大と産総研が主担当であるが、両課題ともに東大を含めた３機関が連携して実施している。前者については、構造や磁性の高精度計算について、後者については元素置換効果、化学的不規則相などについて残りの２機関も計算を実行し、データを共有している。サブサブ課題にまたがる discussion meeting を、年に数度開催している。サブ課題Ｇとはソフト開発等で連携している。平成 30 年度より産総研と東大のサブサブ課題を統合し、連携を強化する。

ⅱ）サブサブ課題と協力機関の連携等

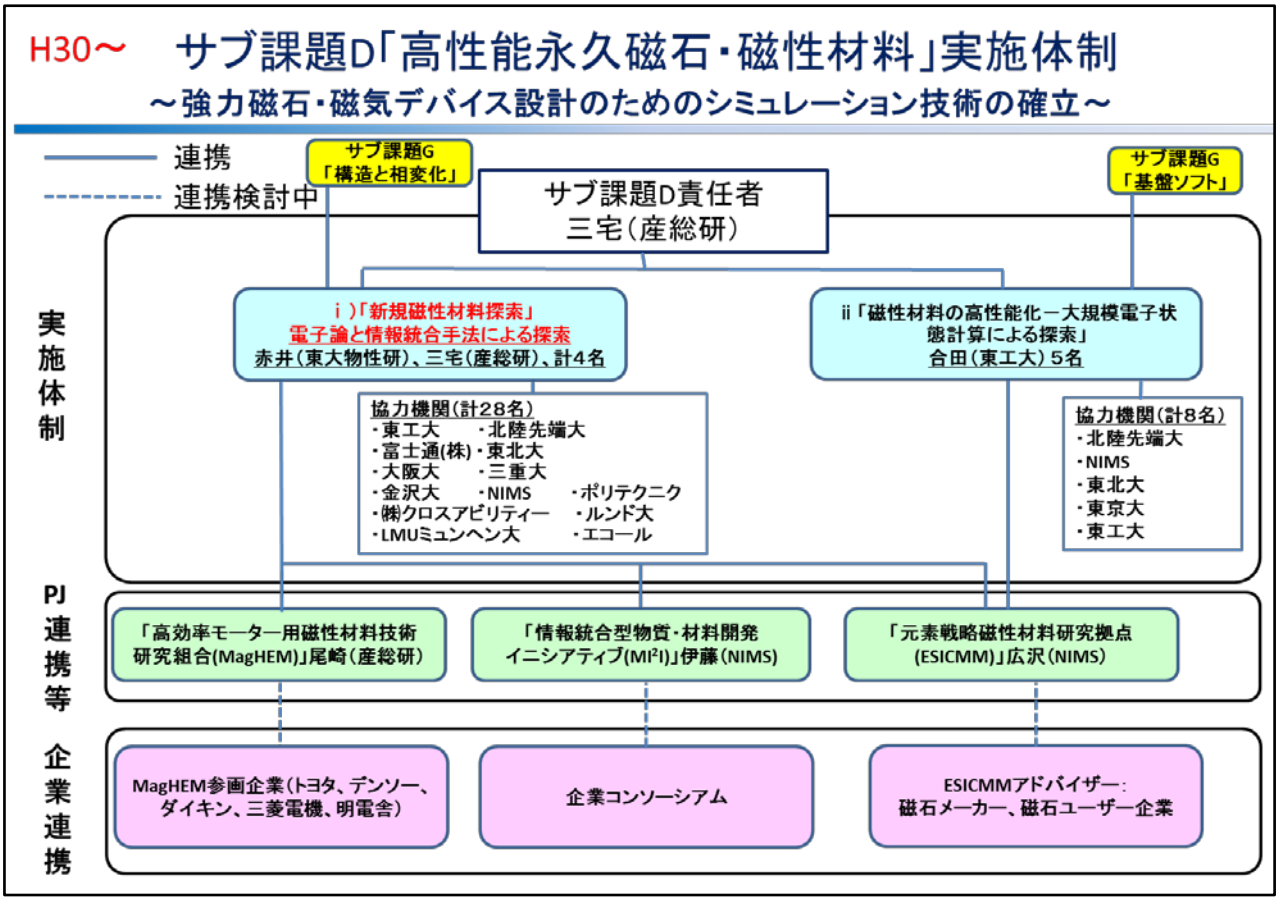
磁石、磁性の問題は、第一原理計算による構造と磁性の計算のみならず、磁化反転シミュレーション、電子相関やスピン軌道相互作用に関する理論整備など、総合的な理論計算手法が必要である。原子論的 LLG（東京大、NIMS、東北大）、および連続体 LLG（富士通、NIMS）の磁化反転シミュレーション、表面・界面の相対論的第一原理計算（北陸先端大、金沢大）、beyond LDA の高精度第一原理計算の手法開発と磁性への応用（ルンド大、エコール・ポリテクニク、LMU ミュンヘン）などの課題を協力機関と連携している。また、磁気デバイスやスピントロニクス等の課題の推進について大阪大、東北大、三重大、金沢大に協力を仰いでいる。

ⅲ）Pj 間連携、フォーラム連携、分野振興活動等

元素戦略 Pj 磁石拠点（ESCIMM）、MI^2I と強く連携している。磁石の実材料開発は ESICMM で行うが、ここで抽出された計算技術課題を本 Pj で取り組んでいる。特に、ESICMM での最新の実験データを念頭に、界面計算のモデル構築を行っている。インフォマティクス（組成を変えた系統的探索、および結晶構造探索）については MI^2I と協力して手法開発を行っている。具体的な活動として、CDMSI、ESICMM、MI^2I、PCoMS の合同の月例ミーティングを開催している。出口戦略については MagHEM とも意見交換している。また、サブ課題 D、E、F 合同のマルチスケール計算に関する国際会議、金沢大と共催の磁気デバイスに関する国際会議特別セッションを開催した。サブ課題 A、C と産官学連携フォーラム、TIA かけはしとポスター交流会などの各種イベントを共催し、今後も継続予定である。

ⅳ）企業との共同研究、標準化活動等

関連課題について企業共同研究を推進し、産業界と直接の意見交換を行っている。また、MI^2I の企業コンソーシアム、ESICMM のアドバイザー企業など、連携 Pj や学振 147 委員会第２分科会を通じて産官学の交流を行い、情報収集している。


H30～ サブ課題D「高性能永久磁石・磁性材料」実施体制
～強力磁石・磁気デバイス設計のためのシミュレーション技術の確立～
連携
連携検討中
サブ課題G「構造と相変化」
サブ課題D責任者
三宅（産総研）
サブ課題G「基盤ソフト」
実施体制
ｉ）「新規磁性材料探索」
電子論と情報統合手法による探索
赤井（東大物性研）、三宅（産総研）、計4名
ii「磁性材料の高性能化ー大規模電子状態計算による探索」
合田（東工大）5名
協力機関（計28名）
・東工大 ・北陸先端大
・富士通(株) ・東北大
・大阪大 ・三重大
・金沢大 ・NIMS ・ポリテクニク
・㈱クロスアビリティー ・ルンド大
・LMUミュンヘン大 ・エコール
協力機関（計8名）
・北陸先端大
・NIMS
・東北大
・東京大
・東工大
PJ連携等
「高効率モーター用磁性材料技術研究組合(MagHEM)」尾崎（産総研）
「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ(MI²I)」伊藤（NIMS）
「元素戦略磁性材料研究拠点(ESICMM)」広沢（NIMS）
企業連携
MagHEM参画企業（トヨタ、デンソー、ダイキン、三菱電機、明電舎）
企業コンソーシアム
ESICMMアドバイザー：磁石メーカー、磁石ユーザー企業

５）サブ課題Ｅ：高信頼性構造材料（香山）

本サブ課題はｉ） 大規模第一原理計算の実行、ⅱ） 粗視化手法への連結法の確立、ⅲ） 大規模 Phase Field 法の３つのサブサブ課題で構成されていたが、中間評価に関わる検討の結果、ｉ） 第一原理計算によるデータ構築とメゾ・マクロへの連結、ⅱ） 大規模 Phase Field 法計算の実行、という２つのサブサブ課題に集約を図った。従来のサブサブ課題の遂行において、サブサブ課題間の連携・協働が弱い弱点が認められたからである。従来のｉ）第一原理計算の実行とⅱ）粗視化手法への連結法の確立は、緊密に連携して進めることでこそ優れた成果に繋がると期待されるため、これらのサブサブ課題を統合した。従来のⅲ）はⅱ)として継続するが、東北大学金属材料研究所に加えて東京大学を実施機関に加えていっそうの強化を図る。

ｉ）サブサブ課題間、サブ課題間の連携等

・年に２度、サブ課題独自の研究会を開催し、サブサブ課題間で詳細な議論を行い、連携を進めている。
・ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」サブ課題 A 「破壊とカタストロフィ」 （東北大・久保教授）と連携し、年に一度、研究会を共催。
・サブ課題間連携： サブ課題 G、サブ課題 D と連携。サブサブ課題 ii)のメンバーがサブ課題 G のメンバー、協力員を兼任。サブサブ課題 i）のメンバーがサブ課題 D のメンバーを兼任（QMAS の活用)。また、 サブサブ課題 i）の研究で、サブ課題 G の OpenMX を活用。

ⅱ）サブサブ課題と協力機関の連携等

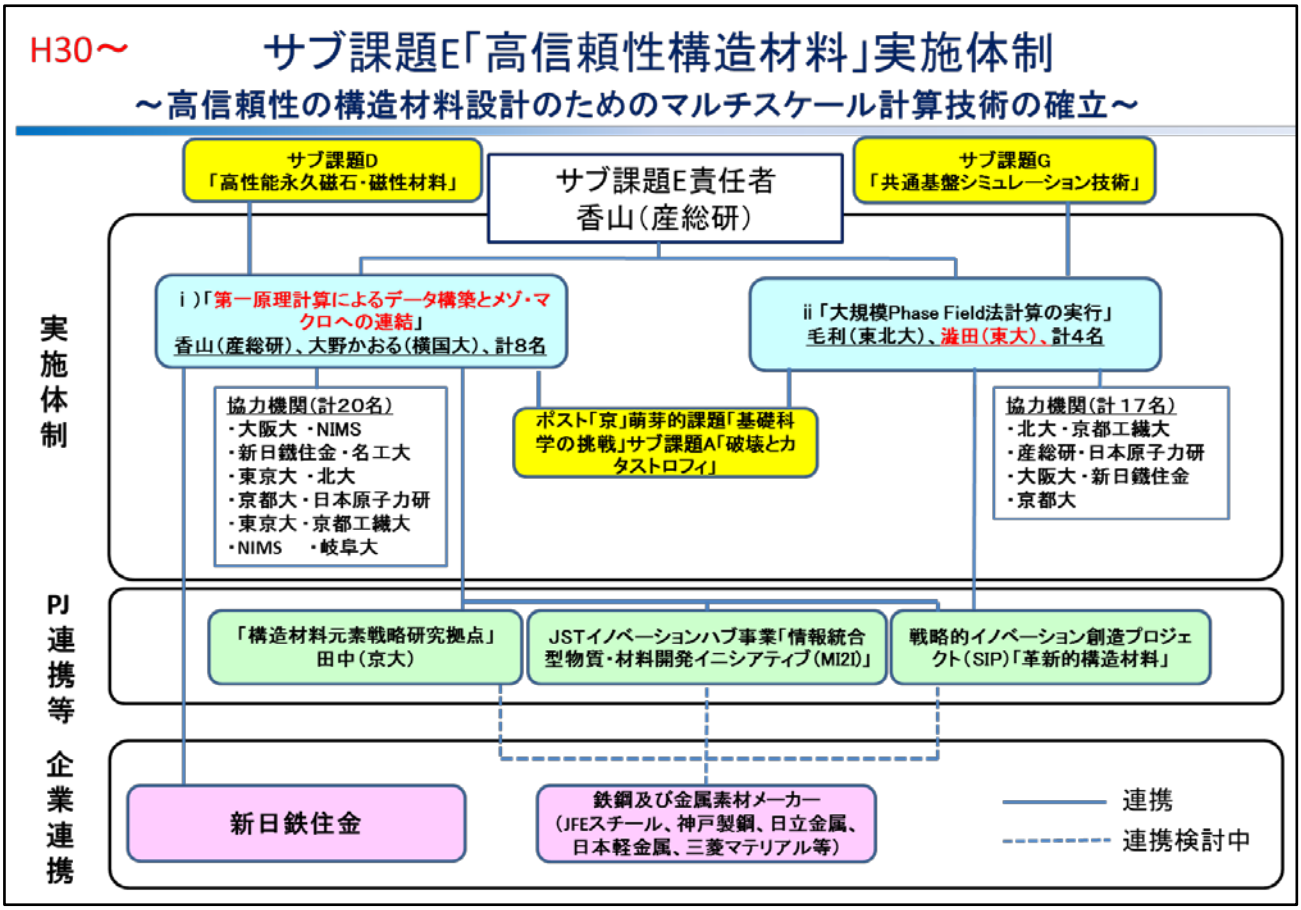
ｉ）第一原理計算によるデータ構築とメゾ・マクロへの連結（産総研、横国大）は、阪大基礎工、NIMS、新日鉄住金、名工大等と緊密に連携して進めている。ⅱ） 大規模 Phase Field 法計算の実行（東北大金研、東大）は、北大、京都工繊大等と特に緊密に連携して進めている。

ⅲ）Pj 間連携、フォーラム連携、分野振興活動等

・構造材料元素戦略研究拠点（京大）と連携、研究会への参加、discussion、情報交換を進めてきた。
・JST イノベーションハブ構築支援事業「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (MI2I)」の研究者とインフォマティックス活用について連携。
・SIP プロジェクト「革新的構造材料」(MI インテグレーションシステムの開発）との連携も進めている。
・計算物質科学人材育成コンソーシアム事業（東北大金研）と連携している。

ⅳ）企業との共同研究、標準化活動等

・新日鉄住金の研究者と OpenMX、QMAS の鉄系材料への活用を通じた共同、連携を進めている。鉄系材料の実験観察について各種情報を得ている。


H30～
サブ課題E「高信頼性構造材料」実施体制
～高信頼性の構造材料設計のためのマルチスケール計算技術の確立～
サブ課題D
「高性能永久磁石・磁性材料」
サブ課題E責任者
香山（産総研）
サブ課題G
「共通基盤シミュレーション技術」
実施体制
ｉ）「第一原理計算によるデータ構築とメゾ・マクロへの連結」
香山（産総研）、大野かおる（横国大）、計8名
ii「大規模Phase Field法計算の実行」
毛利（東北大）、澁田（東大）、計4名
協力機関（計20名）
・大阪大 ・NIMS
・新日鐵住金・名工大
・東京大 ・北大
・京都大・日本原子力研
・東京大・京都工繊大
・NIMS ・岐阜大
ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」サブ課題A「破壊とカタストロフィ」
協力機関（計17名）
・北大・京都工繊大
・産総研・日本原子力研
・大阪大・新日鐵住金
・京都大
PJ連携等
「構造材料元素戦略研究拠点」
田中（京大）
JSTイノベーションハブ事業「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ（MI2I）」
戦略的イノベーション創造プロジェクト（SIP）「革新的構造材料」
企業連携
新日鉄住金
鉄鋼及び金属素材メーカー
（JFEスチール、神戸製鋼、日立金属、日本軽金属、三菱マテリアル等）
連携
連携検討中

６）サブ課題Ｆ：次世代機能性化学品（松林）

ｉ）サブサブ課題間、サブ課題間の連携等

MD によるポリマー研究には、分子間相互作用のモデル（力場）が必要となるが、従来の力場は水溶液系に合わせた開発がなされてきた。本サブ課題内にて、金属表面での相互作用も含めた長鎖化合物の相互作用モデリングに向けた討議を重ねている。また、サブ課題 7G とは、力場作成での OpenMX 利用で連携するとともに、そこでのコード高速化の取り組みを参考に、ポスト「京」での運用に向けてハイブリッド量子古典コードの高速化に取り組む。

ⅱ）サブサブ課題と協力機関の連携等

サブサブ課題 7F-i では、分岐ポリマー系におけるガス分離について東レ、ナノサイズ空孔をもつ金属表面における樹脂の接着挙動についてデンソー、非水系へのイオンの選択的溶解についてトヨタ自動車、フッ素系ポリマーの吸水能についてダイキン、可塑剤添加効果について積水化学と、それぞれ共同研究を行っている。理研とは MD ソフト GENESIS、京大とはフッ素化長鎖化合物の界面挙動、慶應大とはシリカ界面のモデリング、名大とは MD ソフト MODYLAS、北大・東北大とは界面における相互作用の実験的検証、富山大とはポリマーの動的挙動の解析について、それぞれ連携している。サブサブ課題 7F-ii では、神戸製鋼所及びデンソーとの間で個別に共同研究契約を行っていたが、ポスト「京」に関連する別テーマを新たに設定して共同研究を進めている。神戸製鋼所からは人材育成のために 2 名の研究者を受け入れ、豊田中央研究所、神戸製鋼所、およびデンソーには、hybridQMCL コードを１年程度の期間をかけてその中身と利用法を説明してから譲渡している。今後は更に、これらの企業等の実験研究者との連携で取り組むべき、ポスト「京」で初めてできるテーマを明確化し、早期の成果創出につなげる。

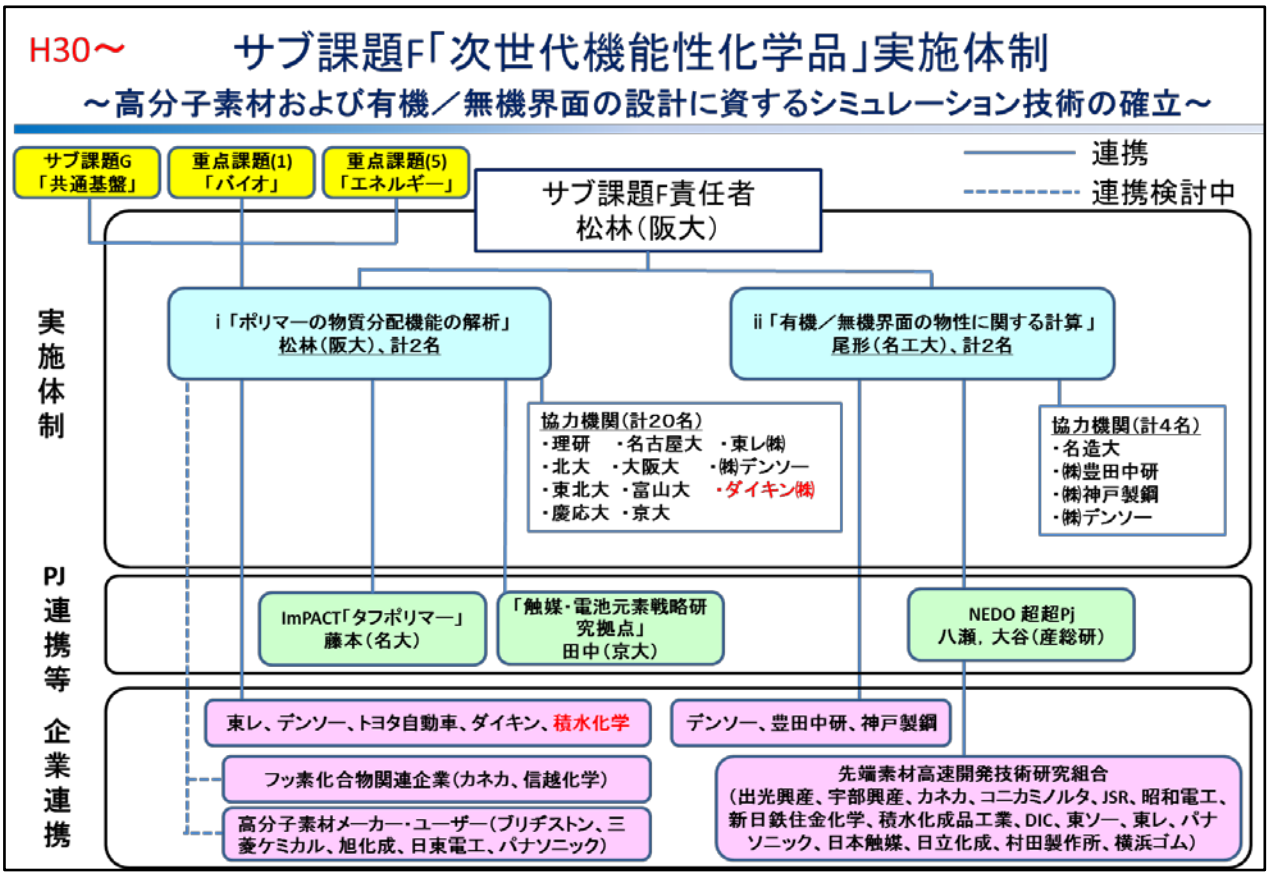
ⅲ）Pj 間連携、フォーラム連携、分野振興活動等

ポリマー系の相互作用モデリング手法は、DFT 計算と MD 計算を組合せて力場を作成する際に、元素戦略「触媒・電池」との連携の下で開発を行なっている。また、ImPACT「タフポリマー」と MD の大規模化について連携するとともに、スパコンプロジェクト内では、ERmod のバイオ系への多機能化に向けた連携が重点課題（１）との間で進んでいる。さらに、先端素材高速開発技術研究組合（１６社の企業連合） が参加している NEDO の超超 Pj とは、対象系に類似性があるため主に計算手法について連携している。また、尾形（名工大）は H27-28 年度に公益財団法人科学技術交流財団の助成を受け、近隣の 10 程度の企業研究者も参加する研究会「スパコンを利用する“ものづくり”シミュレーション技術の開発と産官学ネットワーク形成」を企画し計７回の研究会を開催した。

ⅳ）企業との共同研究、標準化活動等

デンソーと実施している共同研究「樹脂接着の研究」は、2016 年 11 月に特許出願に至った。さらに、計算化学に関わる業界団体である「コンピュータによる材料開発・物質設計を考える会」では、ポリマー研究で用いる自由エネルギー計算ソフト ERmod の勉強会が継続して組まれ、東レ医薬研との共同研究で開発された Fragment ER 法はクロスアビリティ社より販売されている。また、有機／無機界面系に関連して、H27-28 年度には、上記の豊田中央研究所、神戸製鋼所、デンソーに加え、トヨタ自動車と不凍タンパク質の作用機構についての大規模シミュレーションによる共同研究を行った。今後は、これらの企業

に止まらず多くの企業に役立つように、新たに開発する界面付着自由エネルギーの高速計算法のコードをソースレベルで公開する予定である。



７）サブ課題Ｇ：共通基盤シミュレーション手法（尾崎）

サブ課題 G は以下の 4 つのサブサブ課題から構成されているため、サブサブ課題の番号を付記して以下、回答する。(i) 基盤的第一原理電子状態計算ソフトウェアの開発・整備、(ii) 物質構造と相変化の探索手法の開発、(iii) 基盤的超並列計算アルゴリズムの開発、(iv) 大型実験施設との連携。また連携研究者として参加していた星健夫（鳥取大学）が平成 30 年度より研究実施者としてサブサブ課題(iii)の責任者を務め、情報科学分野の研究者との連携を促進する。

ｉ）サブサブ課題間、サブ課題間の連携等

(i)重点課題(7)のサブ課題 C の[遷移金属酸化物]、サブ課題 D の「磁性材料の高精度化」サブ課題 E の「大規模第一原理計算実行」、サブ課題 F の「ポリマーの物質分配機能の解析」に関して連携して研究を推進している。

(iii)で開発を進める複合型固有値ソルバや線形ソルバは(i)の第一原理電子状態計算ソフトウェアにおいても活用可能であり、研究会において情報交換を行っている。

(iv)で主催した連続研究会で(i)で開発された X 線光電子分光の計算手法を実験研究者に紹介しつながりを深めた。

ⅱ）サブサブ課題と協力機関の連携等

(i)では X 線吸収スペクトル計算手法の開発において協力機関である日産アークと密に連携。

(ii) 第一原理相図計算コードの開発における対近似および四面体近似を導入した CALPHAD 法のモデル計算に関して NIMS と連携している。

(iii)星健夫(鳥取大、7G アルゴリズム班)と福島孝治（東大、7G 探索手法班）との「京」利用での連携。特に非理想構造有機高分子を対象とした、大規模電子状態計算とデータ科学(主成分解析)の融合研究を実施。 (iv)では、SPring-8 で実験を行っている石井（量研)、原田（物性研）と高温超伝導体の非弾性共鳴 X 線散乱に関する共同研究を実施(今年度 Phys. Rev. B に出版済)、Baron（理研）とは高温超伝導体の非弾性 X 線散乱、コンプトン散乱で連携を強化。また、J-PARC で実験を行っている満田（理科大）と新規量子スピン系の非弾性中性子散乱に関する共同研究を実施（今年度 Scientific Report に出版済)、藤田（東北大金研)、脇本（原研）とは高温超伝導体の非弾性中性子散乱で連携を強化。

ⅲ）Pj 間連携、フォーラム連携、分野振興活動等

(i) OpenMX の開発を進めるために韓国にて開発者会議を開催。また普及活動のために中国科学院にて Winter School を、さらに TIA と連携して実験研究者のための第一原理計算講座を開催。

(ii) 物質構造と相変化の探索手法の開発: Post「京」萌芽的課題　基礎科学の挑戦 A「破壊とカタストロフィ」及び SIP プロジェクト「MI インテグレーションシステムの開発」と連携、MI^2I プロジェクト「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ」　結晶構造を予測するプログラム開発に関して連携、元素戦略プロジェクト「磁性材料」第一原理相図計算に関して連携。

(iii) 星健夫(鳥取大、7G アルゴリズム班)と望月祐志(立教大、重点課題 6)との「京」利用での連携。特に生体模倣分子ペプトイド系での、エキシトン(2 体)波束ダイナミクス計算において共同研究を進

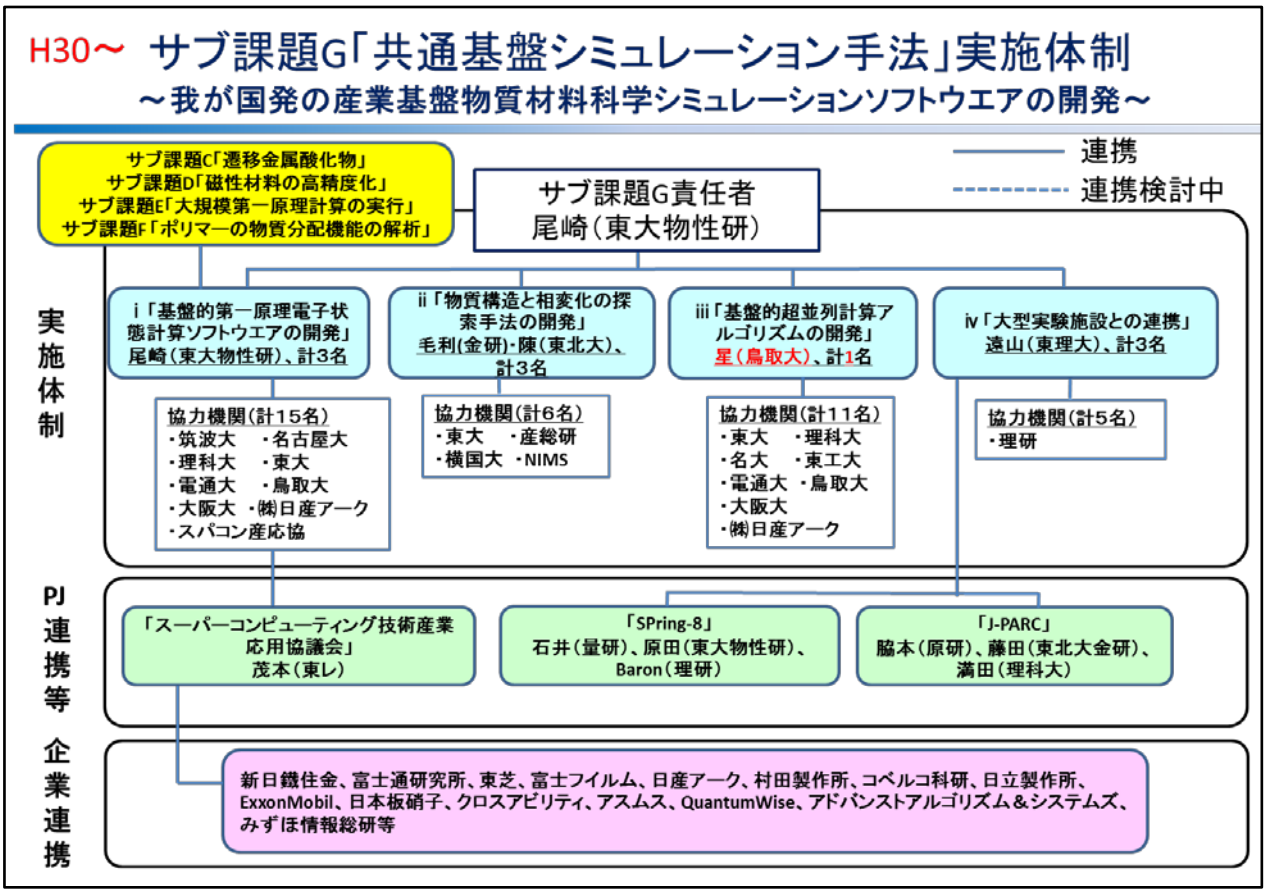
める。

(iv) 大型実験施設との連携：大型実験施設との連携を主題とした連続研究会を 2 回開催し、SPring-8、 J-PACR で活躍する実験研究者との交流、情報交換、連携を強化。また 2017 年 12 月 26 日に連続研究会「放射光実験と計算科学の協奏による物性科学の進展」を SPring-8 ユーザ協同体(SPRUC)理論研究会と共同開催して、放射光実験と計算科学との連携を図る予定である。

iv）企業との共同研究、標準化活動等

(i) 新日鐵住金と鉄鋼材料の大規模電子状態計算手法の開発・応用に関して共同研究。富士通研究所と第一原理大規模電子伝導計算手法の開発と応用に関して共同研究。日産アークと X 線スペクトル計算手法の開発に関して共同研究。

(iv) 星健夫(鳥取大、7G アルゴリズム班)と石田雅也(住友化学)との「京」産業利用での連携。特に高分子有機半導体材料のホール波束ダイナミクス計算において共同研究を実施。



（４）論文、学会発表の取組み強化（指摘事項２）

プロジェクト前半(2015 年 4 月～2017 年 7 月)の論文発表、学会発表、受賞、メディアへの発信、広報活動（主としてイベント)、特許出願の件数を下記の表 1 にまとめた。プロジェクト後半（2017 年 8 月～2020 年 3 月）は、ポスト「京」のアーキテクチャ適用に向けて、各サブ課題のアプリケーションをチューニングしていかなければならないため、短期的に論文や学会発表にはつながりにくい研究開発内容にシフトしていく必要がある。しかしその中でも、前半の数値を上回ることができるよう、着実に成果の論文化を進め、国内外での学会発表を通じてプレゼンスの向上と分野振興を図る。機会があれば、ポスターセッションやイベント併設の展示会等でも研究成果とアプリを紹介する機会を設け、ポスト「京」時代の超高並列計算技術を多くの方に理解していただき、その活用に興味を持ってもらうよう、努力していく。

表１　プロジェクト前半(2015 年 4 月～2017 年 7 月)の成果件数一覧

項目	共通	サブ課題A	サブ課題B	サブ課題C	サブ課題D	サブ課題E	サブ課題F	サブ課題G	合計
1. 学会誌・雑誌等における論文掲載	1	38	24	27	11	25	30	49	205
2. 学会等における口頭・ポスター発表	3	31	38	109	34	84	145	208	652
3. 受賞等	0	3	0	2	0	3	3	0	11
4. メディアへの情報発信、ウェブサイト等での情報公開	2	1	2	3	0	0	0	1	9
5. 広報活動等(ワークショップ・研究会等の開催)	23	2	0	2	1	3	0	10	41
6. 特許出願	1	0	0	0	0	0	0	0	1

（５）開発アプリのデファクトスタンダード戦略（指摘事項４）

１）“MateriApps”への掲載による認知

本プロジェクトで開発する基礎科学に基づいた最先端の物質科学計算に関するアプリケーションソフトウェア（以下、最先端ソフト）は、物性研が運用している物質科学計算アプリケーションソフトウェアのポータルサイト“MateriApps”を利用して、公開する仕組みを取っている。このサイトでは、無償有償を問わず、物質科学に関連する主要なソフトの機能を紹介しており、利用希望者が必要とするソフトを検索する機能が備わっている。例えば、ユーザが必要とする計算機能と計算対象物質で、ソフトを検索することが可能である。このサイトで紹介しているソフトは下記の表 2 の公開区分がなされている。この“MateriApps”サイトは、日本の中では月間 1 万件のページビューのある中核的 WEB サイトとなっている。平成 29 年が、7 月 1 日時点で“MateriApps”で公開されている本プロジェクト開発ソフトを下記の表 3 に示す。

デファクトスタンダード戦略として、まず、このサイトを世界的に認知させることが必要である。2017 年度中にこのサイトのほぼ全てのコンテンツの英語化を終了しており、2017 年度中には、機能 UP のために、WEB サイトのマネジメントシステムを変更し、より、使い勝手よく、ビジュアルなサイトに変更する。また、MateriApps-Wiki による計算物質科学用語の運用も開始しており、世界からのアクセスを増やすトリガーになっている。さらに、本プロジェクト開発者が公開レベルを認識するとともに、世界標準となるようそのレベルを上げていくことを求めていく。

表 2　質科学計算ポータル　“MaterApps”　におけるソフトの公開度の指標

「公開度」		
0	☆☆☆	非公開・商用
1	★☆☆	使用には事前相談が必要
2	★★☆	バイナリファイルを配布
3	★★★	オープンソースコードを配布
「ドキュメント充実度」		
0	☆☆☆	アプリに関する説明が特にない状態で、アプリが公開されている状態。
1	★☆☆	アプリに関して、以下の簡単な説明がある状態。(1)アプリの概要 (2)開発者の連絡先 (3)ライセンス (4)動作環境 (5)インストール・アンインストール方法
2	★★☆	アプリに関して、以下のものがある状態。 (1)使用説明書 (2)チュートリアル
3	★★★	アプリに関して、以下のものを含む充実した使用説明書/チュートリアルがある状態。(1)インストール手順　(2)実行方法　(3)サンプル

表 3　“MateriApps”で公開している各サブ課題のアプリケーションソフトの一覧

サブ課題名	アプリ名
サブ課題 A	RSDFT　・　RSCPMD　・　RSPACE
サブ課題 B	SALMON
サブ課題 C	*Hφ　・*mVMC　・　RESPACK
サブ課題 D	*AkaiKKR
サブ課題 F	*ERmod
サブ課題 G	*OpenMX　・　*xTAPP　・　EigenKernel

*は MateriApps LIVE!搭載済ソフト

２）MateriApps LIVE!による利用促進

“MateriApps LIVE!”は、手持ちのノート PC などを用いて、気軽に計算物質科学アプリケーションを試せる環境を提供する、ワンパッケージソリューションである。「公開度」および、「ドキュメント充実度」の星が 2 個以上になったら開発者から許可を得て搭載している。本重点課題(7)で開発していてすでに“MateriApps LIVE!”に搭載されているソフトを、表 2 に示す。開発したアプリ以外の物質科学計算ソフトや、OS (Debian GNU/Linux)、エディタ、可視化ツールなども搭載している。大学の講義やアプリケーションソフトのチュートリアルを実施する際に必要な環境が、ひとつのパッケージに集約されており、1 本の USB メモリに収めて配布も行っている。

この MateriApps LIVE！は、海外からのダウンロード数も多いため、MateriApps の WEB サイトからこの LIVE!利用に導く工夫を行うことで、開発したアプリが利用される可能性が高まる。また、国際的な学会や展示会に参加する機会を利用して、MateriApps LIVE!を宣伝していく予定である。

３）ソフト利用講習会実施によるユーザーコミュニティーの形成

平成 23～27 に実施された「HPCI 戦略プログラム」では、分野振興活動経費が充実していたため、アプリケーションの講習会を頻繁に実施していた。しかし、ポスト「京」重点課題プロジェクトにはソフトの普及に関わる十分な経費が手当されていない。そのため、プロジェクト以外の資金も活用して、アプリケーションソフトの講習会を実施している。平成 29 年からは、筑波地区の研究機関である、NIMS、産総研、筑波大、KEK と東大の 5 機関連携で実施している TIA（つくばイノベーションアリーナ）の調査研究事業“かけはし”に「計算科学とデータ科学の連携による実験データ高度解析手法の社会実装」という課題名で採択されており、この TIA と、ポスト「京」重点課題(7)、物性研計算物質科学研究センターとの共催でこれまでに実施した講習会を表 4 に示す。

この講習会を何度か繰り返すことにより、ユーザーコミュニティーの形成を目指す。コミュニティー人数が増えればアプリの WEB を介しての Q&A が活性化され、アプリも機能アップされていく。そのような、よい循環を、国際的に築くことを目標とする。また、講習会を行った際のプレゼン資料や、チュートリアル等の資料を日英両方で準備し、国内外でタイムラグの無い普及活動を目指す。

表４　プロジェクトで開発している最先端ソフト講習会実施実績

No	日時	イベント
1	2016/3/8	RSDFT 講習会
2	2016/7/26	HΦ講習会
3	2016/9/8	xTAPP 講習会
4	2016/12/1	HΦ講習会
5	2017/12/13	HΦ講習会
6	2017/1/15	第一原理計算講座（OpenMX）
7	2017/6/29	HΦ講習会
8	2017/7/20	ALPS 講習会
9	2017/8/30	mVMC 講習会
10	2017/10/3	MateriApps LIVE!講習会
11	2017/10/13	OpenMX 講習会（基礎）
12	2017/10/26	xTAPP 講習会(2017)
13	2017/12/20	RESPACK 講習会
14	2018/1/26	OpenMX 講習会（基礎）

４）イベントを活用したアプリの紹介と意見徴収

研究成果をプロジェクト外の方に向けて発信し、参加者と意見交換する機会を設け、現在推進している研究の方向性の確認や修正、共同研究の検討や開始、促進に活用するため、課題全体の年間行事として、下記のイベントを開催しており、今後も継続する。

ｉ）CDMSI 研究会：若手のポスドクを中心としたプロジェクトの進捗報告会を兼ねた研究会。毎年７月に実施。

ⅱ）CDMSI シンポジウム：年度の報告会として、毎年 12 月初旬に実施予定。

ⅲ）サブ課題 G の連続研究会：サブ課題で実施する課題を他のサブ課題に普及させることを目的とした会議。年に４回程度実施。

ⅳ）産官学連携シンポジウム：他の重点課題と RIST、スーパーコンピュータ産応用推進部会と連携し、年に２回開催。アカデミックソフトのエコシステム構築のためのパネルディスカッションも実施している。

ⅴ）元素戦略・大型研究施設連携シンポジウム：元素戦略４拠点と SPring-8、J-PARC、KEK-PF、「京」の大型研究施設と連携し、年に１回程度開催。データ科学を取り込んで推進。実験、計算、計測、データの連携で物質材料開発をどのように推進していくかを、トピックス講演や政策担当者、有識者からの講演を交えて議論している。２年に１回は 300 名程度の会場を借りて大々的に実施している。

（６）体制の整理（指摘事項５）

H23～27 に実施された HPCI 戦略プログラム分野２「新物質・エネルギー創成」のプロジェクトにおいては、「京」コンピュータを活用した物質科学系アプリの開発を、東大物性研を中核機関として東北大金研、分子研の連携で実施していた。ポスト「京」の公募において、物質材料課題は、材料・デバイス課題とエネルギー課題に分離された。物性研は金研と協力して、材料・デバイス課題への提案を行う際に、提案に向けたワークショップを全国の関連した産官学研究者を集って数回実施した。その際に、ポスト「京」時代のスパコンで達成しうる材料・デバイス関連の課題が何であるかを十分に議論し、６つの個別課題と１つの共通課題に絞って提案したのが、現在の重点課題(7)で実施しているサブ課題である。

その後、ポスト「京」WG からの指摘事項として、「サブ課題が多い」との指摘を何度か受けている。その指摘事項への対応として、重点課題(7)の諮問委員会や業界団体であるスーパーコンピューティング技術産業応用協議会等において議論を重ねているが、計算科学やインフォマティクスに対する産業界の期待が高まる中、現状のサブ課題に関しては数が多いということはないこと、プロジェクト後半では、前半で培ったアプリの成果を具体的な応用に向けて道筋を示すことを趣旨とするコメントを得ている。

さらに、「（３）実施体制の見直し」で説明したように、各サブ課題においてはアプリケーションの開発を各種の国家プロジェクトや実験・企業との共同研究、科研費等の経費と合わせて実施しており、ポスト「京」のプロジェクトの実施をきっかけとして、開発したアプリの普及を考慮した開発を実施している。結果として、サブ課題が多いことが計算物質科学分野のコミュニティー拡大につながっており、総合的なメリットは大きいと考えている。

そこでプロジェクト後半の計画見直しに当たっては，サブ課題の数は当初計画のままとする一方、ポスト「京」利用に向けてサブ課題の内容をさらに先鋭的かつ具体的なものにするため、プロジェクト前半の総括に基づき、サブサブ課題の統廃合・重点化を行うこととした。今後もプロジェクトの進捗に合わせ、サブサブ課題の見直しを継続して実施する。

また、以前、ポスト「京」WG から、計算機科学との連携が弱いとの指摘を受けていた。プロジェクト前半は、ポスト「京」のアーキテクチャがまだ公開されていなかったが、2017 年に AICS が開発しているポスト「京」シミュレータ等を活用し、ポスト「京」向けにアプリをチューニングしていく状況が整いつつある。そこで、2018 年度からは共通基盤課題を実施するサブ課題 G で情報科学分野の分担機関を鳥取大学に設置し、情報科学分野を専門とするポスドクを１名採用して、ポスト「京」向けの基盤的超並列計算アルゴリズムの開発を強化する予定である。

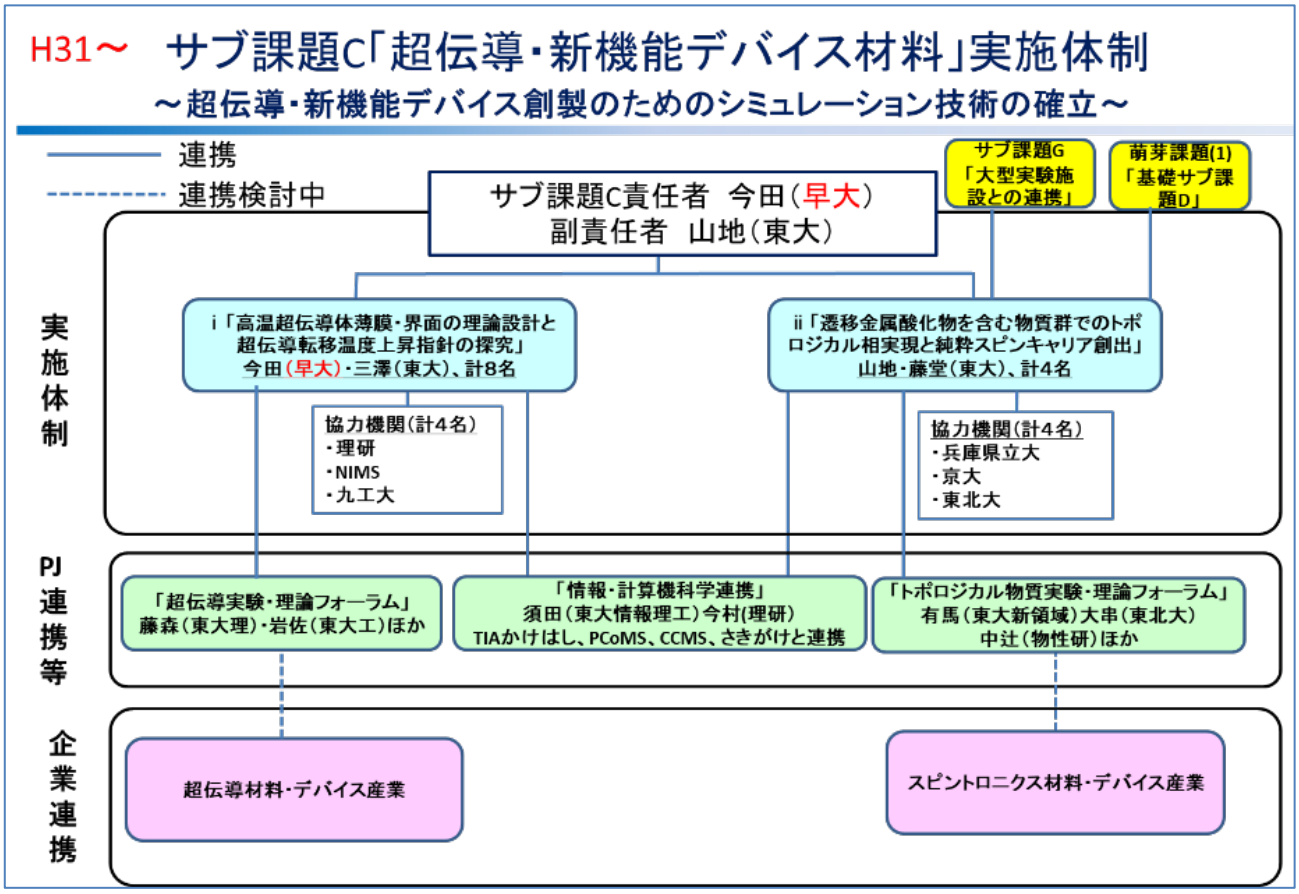
５．平成 30 年度、および、31 年度からの実施体制変更

（１）サブ課題 B「光・電子融合デバイス」実施体制の変更

平成 29 年度までに分子科学研究所で開発していた GCEED と、筑波大学で開発していた ARTED を SALMON として統合した。平成 30 年度より、統合した SALMON のポスト「京」に向けた高度化を効率的に実施するため、サブ課題責任者の所属機関を計算機科学のアクティビティの高い筑波大に変更する。(P51, 58 に反映済。)

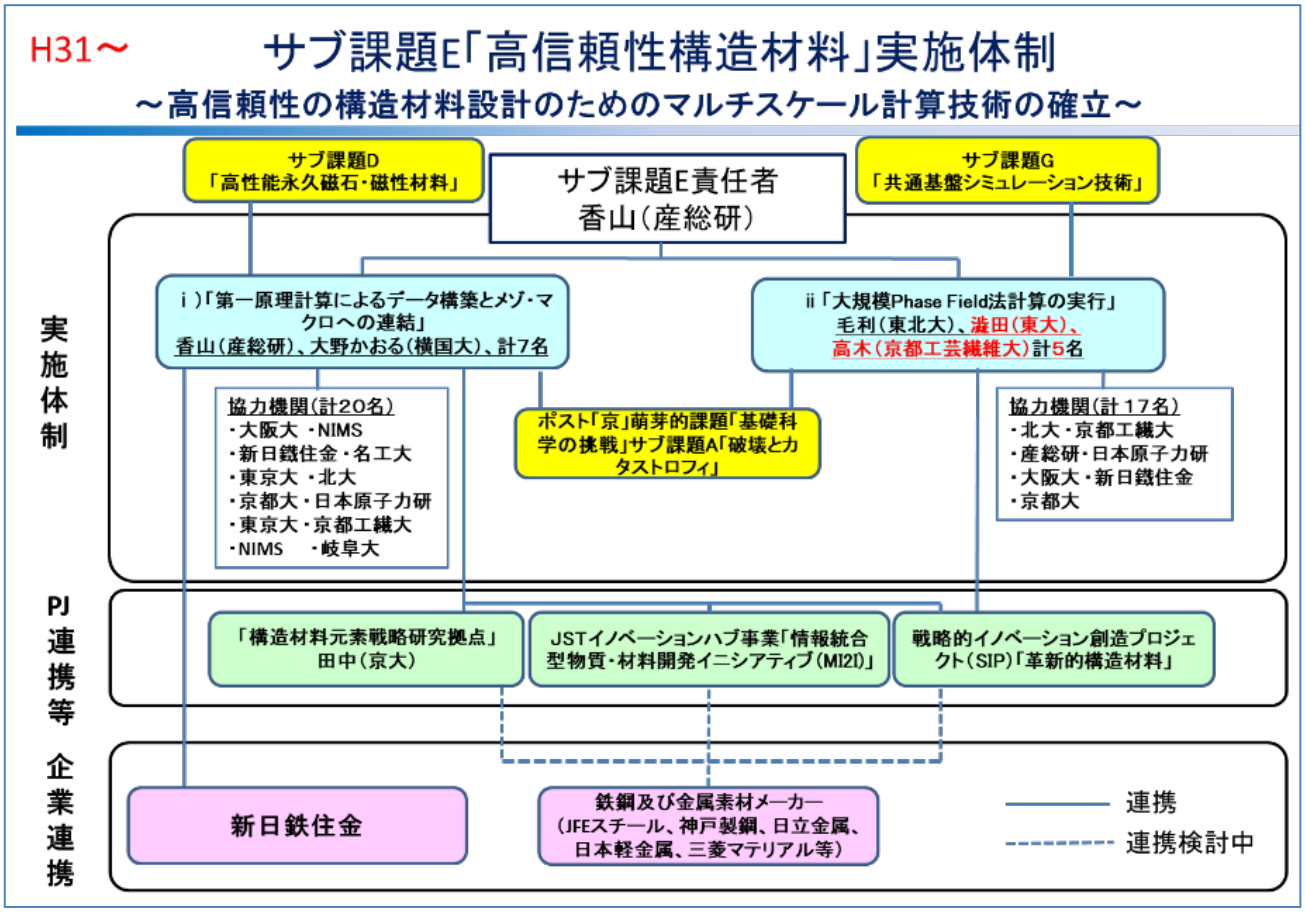
（２）サブ課題Ｃ「超伝導・新機能デバイス材料」の実施体制変更

平成 30 年度までに実施してきたサブ課題 C の２つのサブサブ課題である、(1)高温超伝導体の超伝導機構解明をもとにする転移温度上昇指針の探求と、(2)強相関トポロジカル物質表面における純粋スピンキャリア実現のための第一原理的理論物質設計のそれぞれの課題に関して理論と実験の連携が進んだ。平成 31 年度は理論と実験の検証をさらに機械学習の手法等用いて実施する必要がある。サブ課題全体に関連する平成 31 年度の研究実施を、迅速、かつ、効率的に行うことが可能な早稲田大学を実施機関に追加する。下記に変更後の実施体制を示す。



（３）サブ課題Ｅ「高信頼性構造材料」の実施体制変更

サブ課題Ｅのサブサブ課題「大規模 Phase Field 法計算の実行」に関し、平成 30 年度に大規模 MD 計算と Phase Field 法の連結に成功した。平成 31 年度はポスト「京」動作に向けたソフトウエアの高度化に関する開発を加速して実施する必要がある。その高度化技術で世界水準の実績を保持する京都工芸繊維大学を実施機関に追加する。下記に変更後の実施体制を示す。



（別紙1） 実施機関一覧

別添2

		実施機関	備考
		東京大学	**代表機関**（課題責任者：常行真司）
サブ課題A	①	名古屋大学大学院未来材料・システム研究所	協力機関（29年度まで）、**分担機関**（サブ課題責任者：押山淳 30年度～）
	1	東京大学大学院工学系研究科	分担機関（サブ課題責任者：押山淳 29年度まで）→**協力機関**
	②	筑波大学計算科学研究センター	**分担機関**
	③	筑波大学数理物質系	**分担機関**(30年度～)
		大阪大学サイバーメディアセンター	**分担機関**(28年度まで)
	④	大阪大学大学院工学研究科	**分担機関**
	4	筑波大学　他	協力機関
	11	名古屋大学　他	協力機関
	20	京都工芸繊維大学 他	協力機関
	24	九州大学	協力機関
	34	理化学研究所	協力機関
	33	物質・材料研究機構	協力機関
	26	Strasbourg大学	協力機関
	39	株式会社クロスアビリティ	協力機関
	49	アドバンスソフト株式会社	協力機関（30年度～）
	8	東京工業大学	協力機関（31年度～）
	3	東北大学	協力機関（31年度～）
	50	Harvard大学	協力機関（31年度～）
	53	University of Illinois at Urbana-Champaign	協力機関（30年度のみ）
サブ課題B	②	筑波大学計算科学研究センター	**分担機関**（サブ課題責任者：矢花一浩　H30.1～）
	⑥	自然科学研究機構分子科学研究所	**分担機関**（サブ課題責任者：信定克幸　H30.1まで）
		東京大学大学院工学系研究科	協力機関（29年度まで）、**分担機関**（30年度～）
	4	筑波大学　他	協力機関
	6	東京理科大学	協力機関
	12	名古屋工業大学	協力機関
	35	量子科学技術研究開発機構	協力機関
	27	ウィーン工科大学	協力機関
	28	Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter	協力機関
	54	NTT物性科学基礎研究所	協力機関（30年度のみ）
サブ課題C		東京大学大学院工学系研究科	**分担機関**（サブ課題責任者：今田正俊30年度迄）
		東京大学物性研究所	**分担機関**
		東京大学大学院理学系研究科	**分担機関**
	⑰	早稲田大学	**分担機関(31度～、サブ課題責任者今田)**
	1	東京大学　他	協力機関
	3	東北大学	協力機関
	19	京都大学	協力機関
	22	兵庫県立大学	協力機関
	25	九州工業大学	協力機関
	34	理化学研究所	協力機関
	33	物質・材料研究機構	協力機関
	55	Ecole Normale Superieure	協力機関（30年度のみ）
	56	Sapienza University of Rome	協力機関（30年度のみ）
	57	Institute for Complex Systems	協力機関（30年度のみ）
サブ課題D	⑦	産業技術総合研究所	**分担機関**（サブ課題責任者：三宅隆）
		東京大学物性研究所	**分担機関**
	⑪	東京工業大学物質理工学院	**分担機関**
	1	東京大学 他	協力機関（29年度迄）
	3	東北大学	協力機関
	16	金沢大学	協力機関
	17	北陸先端大学大学院大学	協力機関
	21	大阪大学	協力機関
	15	三重大学	協力機関
	33	物質・材料研究機構	協力機関（29年度迄）
	29	エコール・ポリテクニク（フランス）Centre de Physique Théorique	協力機関
	30	ルンド大学（スウェーデン）Division of Mathematical Physics	協力機関
	31	LMUミュンヘン大学化学（ドイツ）	協力機関
	40	富士通株式会社	協力機関
	39	株式会社クロスアビリティ	協力機関

（別紙1） 実施機関一覧

別添2

		実施機関	備考
サブ課題E	⑧	産業技術総合研究所（関西）	**分担機関**（サブ課題責任者：香山正憲）
	⑨	東北大学金属材料研究所	**分担機関**
	⑫	横浜国立大学大学院工学研究院	**分担機関**
		東京大学大学院工学系研究科	協力機関（29年度まで）,**分担機関**（30年度～）
	⑯20	京都工芸繊維大学	協力機関（30年度まで）,**分担機関**（31年度～）
	1	東京大学　他	協力機関
	2	北海道大学	協力機関
	12	名古屋工業大学	協力機関
	14	岐阜大学	協力機関
	19	京都大学	協力機関
	21	大阪大学	協力機関
	36	日本原子力研究開発機構	協力機関
	33	物質・材料研究機構	協力機関
	42	新日鉄住金株式会社	協力機関
	41	日鉄住金総研株式会社	協力機関（29年度～）
サブ課題F	④	大阪大学大学院基礎工学研究科	**分担機関**（サブ課題責任者：松林伸幸）
	⑬	名古屋工業大学大学院工学研究科	**分担機関**
	2	北海道大学	協力機関
	3	東北大学	協力機関
	18	富山大学	協力機関
	5	慶應義塾大学	協力機関
	11	名古屋大学	協力機関
	13	名古屋造形大学	協力機関
	19	京都大学	協力機関
	32	産業技術総合研究所	協力機関
	34	理化学研究所	協力機関
	37	日本学術振興会	協力機関（29年度～）
	43	東レ株式会社	協力機関
	44	株式会社デンソー	協力機関
	45	株式会社豊田中央研究所	協力機関
	46	株式会社神戸製鋼所	協力機関
	48	ダイキン工業株式会社	協力機関（29年度～）
	⑰	早稲田大学	協力機関（30年度のみ）
サブ課題G		東京大学物性研究所	**代表機関**（サブ課題責任者：尾崎泰助）
	⑩	東北大学大学院工学研究科	**分担機関**
	⑨	東北大学金属材料研究所	**分担機関**
	⑮	東京理科大学理学部	**分担機関**
	⑭	鳥取大学大学院工学研究科	協力機関（29年度まで）,**分担機関**（30年度～）
	1	東京大学　他	協力機関
	23	鳥取大学　他	協力機関
	2	北海道大学	協力機関
	4	筑波大学	協力機関
	8	東京工業大学	協力機関
	6	東京理科大学　他	協力機関
	7	電気通信大学	協力機関
	9	横浜国立大学	協力機関
	10	静岡大学	協力機関（30年度～）
	11	名古屋大学	協力機関
	21	大阪大学	協力機関
	32	産業技術総合研究所	協力機関
	34	理化学研究所	協力機関
	33	物質・材料研究機構	協力機関
	47	株式会社日産アーク	協力機関
	38	スーパーコンピューティング技術産業応用協議会	協力機関
	51	Simons Foundation	協力機関(30年度～)
	52	上海大学	協力機関(30年度のみ)
	58	岡山大学	協力機関(30年度のみ)
	59	大阪府立大学	協力機関(30年度のみ)
	60	京都産業大学	協力機関(30年度のみ)
	61	高エネルギー加速器研究機構	協力機関(30年度のみ)
	62	東京女子大学	協力機関(30年度のみ)
	63	関西大学	協力機関(30年度のみ)
	64	National Cheng Kung University	協力機関(30年度のみ)
	65	National Sun Yat-sen University	協力機関(30年度のみ)
諮問委員（参考）		東京大学　他	協力機関
		物質・材料研究機構	協力機関（28年まで）
		東北大学	協力機関(29年度～30年度4月まで)
		旭硝子	協力機関(28年度～30年度10月まで)
		ロンドン大学	協力機関(30年度10月～)
		エムサイエンス研究所	協力機関
		岡山大学	協力機関

（*協力機関は部局・部署名を省いて表示）

H30年度協力機関　計52