令和元年度　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

令和元年度
「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 2 年 5 月 29 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令和元年度「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．令和元年度（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） 11
（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 21
②サブ課題Ｂ 光・電子融合デバイス 37
③サブ課題Ｃ 超伝導・新機能デバイス材料 44
④サブ課題Ｄ 高性能永久磁石・磁性材料 53
⑤サブ課題Ｅ 高信頼性構造材料 63
⑥サブ課題Ｆ 次世代機能性化学品 76
⑦サブ課題Ｇ 共通基盤シミュレーション手法 82
４－３．活動（研究会等） 98
４－４．実施体制 103
資料１～４

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="9">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（ 58 歳）
※2020 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　主任</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、学校法人早稲田大学、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、国立大学法人京都工芸繊維大学、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．令和元年度（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７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７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。

学校法人早稲田大学は、サブ課題Ｃ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。
国立大学法人京都工芸繊維大学は、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

「京」および「ポスト京」アーキテクチャに最適な第一原理計算手法である、実空間密度汎関数法（コード名：RSDFT）および実空間 Car-Parrinello Molecular Dynamics 法（コード名：RS-CPMD）の高速化、高度化を昨年度に引き続き行い、両者が一体となった RSDFT パッケージを整備する。これによりコデザインチームでの RSDFT 最適化の工数削減に寄与する。

この実空間手法の高速化、高度化により、以下の物質科学の課題を解決する。１）アモルファス SiO_2 は、半導体デバイスのゲート絶縁膜として不可欠のものであるが、そのミクロな構造と電気的性質の関係は明らかではない。未だかって行われたことのない大規模（1000 原子超）、スロー・クエンチング（5K/ps 以下）の RS-CPMD 計算により、アモルファス SiO_2 の物性の第一原理からの解明を行う。２）さらにそうして作成したアモルファス SiO_2 と SiC のパワーデバイス界面の構造とキャリヤートラップと成り得る欠陥構造を明らかにする。３）また GaN の MOCVD 成長に RS-CPMD コードを適用し、成長表面での反応律速過程を同定するとともに、得られた平衡定数から成長装置全体の流体シミュレーションにつなげる方法論を確立する。

・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(RSDFT)法ダイナミクス計算のため、Car-Parrinello Molecular Dynamics (CPMD)プログラムのさらなる高速化のためのチューニングを行い、QM/MM 法のモジュールの高度化を行う。応用計算として、GaN や SiC などの大規模計算ならびに結晶成長に関する第一原理計算を行い、安定構造および反応解析を実行する。

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 での主査として活動しており、31 年度（2019 年度）も引き続き主査を務める。

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

RSDFT と NEGF デバイスシミュレータの統合シミュレータ(RSDFT-NEGF)の開発により、ナノメートルスケール・トランジスタの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。同コードを用いて、Ge および Si ナノシートトランジスタの性能予測を行う。量子流体輸送シミュレータ(Hi-QHD)と現在産業界で用いられている流体型シミュレータ（ドリフト拡散シミュレータ）との連携を図る。メニィコア対応での高速化・高度化を進めたフルバンド・モンテカルロ輸送シミュレータ(FBMC)を用いて、Si ナノシートトランジスタの電気特性を解析し、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。また、同コードと RSDFT-NEGF、Hi-QHD との連成を確立する。

・再委託先３：国立大学法人筑波大学（数理物質系）

界面近傍に局在する乱れ（イオン化不純物）に伴ったポテンシャル揺らぎを導入した自己無撞着モンテカルロシミュレータ(SCMC)を現実的な立体デバイス構造に応用し、特性ばらつき等のデバイス特性へのポテンシャル揺らぎの影響を定量的に評価する。同時に、界面近傍に存在するイオン化不純物に伴った界面での分極電荷の影響を物理的に考察することで、より簡便で実用的なドリフト拡散法(DD)に基づいた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を構築する。構築した物理モデルをドリフト拡散シミュレータ(DD)と自己無撞着モンテカルロシミュレータ(SCMC)に導入してデバイス特性を評価することで、界面近傍に局在する離散不純物の物理モデルの汎用流体デバイスシミュレータにおける有効性を検証する。

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）

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、近接場光励起や高強度パルス光励起を記述することができる計算プログラム SALMON (=Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience)の開発を継続して進める。特に、数千原子からなるナノ構造体や、電磁場と電子ダイナミクスを結合した記述が重要となる問題に対して、メニーコアや GPU を含む多様なプロセッサを搭載した超並列計算機を高効率に利用して、計算を高速に遂行できる機能を発展させる。これを用いて、以下に述べるように光・電子融合デバイス設計やレーザー加工技術に資する基礎を確立する。

東京大学・分子科学研究所と協力して金属ナノ微粒子近傍の近接場光波数励起の解明やシリコンデバイスの光高機能化を目指し、計算コードを整備する。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として、パルス光が斜方入射する場合について、マクスウェル方程式と電子ダイナミクスを多階層結合したシミュレーション法を完成し SALMON に実装するとともに、シリコンにおいてパルス波形が変化するメカニズムを解明する。さらに高強度パルス光が格子振動を誘起する場合にも計算コードを拡張し、ダイヤモンドにおいて原子運動によりパルス波形が変化するメカニズムを明らかにする。これ

により、非線形光物質相互作用を用いて光波波形を整形する多様なメカニズムを明らかにし、新奇な光デバイス原理となることを示す。

・受託者：国立大学法人東京大学

平成 30 年度に実現した、近接場光波数励起によるシリコン受光デバイスの高感度化について、その起源の詳細を明らかにする。これまでは、デバイス全体での感度特性を評価しており、金属ナノ微粒子近傍での特性は明らかになっていない。そこで、顕微分光手法を利用し、さらにはより詳細な波長依存性を評価することで、金属ナノ微粒子近傍での近接場光波数励起の解明を行う。

・再委託先６：大学共同利用機関法人自然科学研究機構

実在系ヘテロ界面における光学応答の第一原理計算から得られる知見に基づき、近接場光を用いた二倍波励起によるエッチング法ならびに、異なる波数を持つバンド間遷移（波数励起）により受光感度を高めたシリコンデバイスの原理を確立する。

③サブ課題Ｃ 超伝導・新機能デバイス材料

（再委託先：学校法人早稲田大学）

・再委託先７：学校法人早稲田大学

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

平成 30 年度に引き続き、バルクの銅酸化物高温超伝導体の第一原理的な計算をさらに進め、水銀化合物の 1 バンド、3 バンドハミルトニアンおよびランタン化合物の 3 バンドハミルトニアンで、超伝導相を定量的に再現し、超伝導の発現メカニズムを解明するとともに、激しい競合の見られるストライプ相との関係を解明する。以上のバルクに関するより深い知見をもとに、薄膜や界面における第一原理ハミルトニアンを導出したうえで、これを低エネルギーソルバーで解き、超伝導相を再現する。またバルクと比較した特徴を抽出する。以上の目的にも使えるように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た高精度の数値計算手法の応用を平成 30 年度に引き続いて進め、量子スピン液体解明に応用する。また、平成 30 年度に開始したプロジェクトである、MACE のアルゴリズムの中に、制限 GW 法を組み込み、RESPACK の改良、多機能化を実装するプロジェクトを完成させて、ii)のトポロジカル相追究に応用する。実験データ解析のために機械学習法を活用する手法を実験研究者とタイアップしてさらに追求するとともに、銅酸化物の実験解析でその有用性を検証し、銅酸化物超伝導の起源となる物理量を抽出する。またこの機械学習手法をより一般的に新たな概念検証の手段として確立する。mVMC 等をもとに、励起スペクトルを計算するアルゴリズムを発展させ、強相関電子系の励起状態を線形応答（一粒子スペクトル関数、スピン、電荷構造因子等）を大規模計算によって解明するためのコードを実装するとともに、これを用いて上記の超伝導相解明に活用する。当初計画を超えたプロジェクトであるレーザー照射で実現しうる非平衡高温超伝導について、平成 30 年度の成果をさらに発展させて特定のフォノン励起による超伝導増強について、機構を解明する。

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

イリジウム酸化物およびルテニウム塩化物を出発点として、電子相関による電子自由度の分割の結果現れる量子スピン液体の実現、および分割化されたスピノンと呼ばれる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の実現のための物質設計指針を策定する。この目標を達成するため、イリジウム酸化物等のモデル系において、量子スピン液体の発現条件を、これまで高度化を行ってきた mVMC、HΦ、およびテンソルネットワーク法を用いて引き続き評価する。スピノンおよびマヨラナ粒子発現の数値的な確証を得るため、開発を行ってきたHΦの有限温度励起スペクトル計算手法の適用、ならびに mVMC の拡張による励起スペクトル計算手法の開発と適用を進める。以上の研究を物質設計へつなげるために、スピン軌道相互作用系へと拡張された RESPACK および i)での先端的な手法開発との連携のもと、イリジウム酸化物とルテニウム塩化物の第一原理有効ハミルトニアンの構成を行い、結晶構造や外部電場・磁場下での電子状態の変化を、mVMC、HΦ、およびテンソルネットワーク法を用いて解析する。これらの解析により、当初の目的である現実物質から出発しスピノンおよびマヨラナ粒子を実現するための方針を策定する。

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、高精度化ならびに機能拡張を達成することで、従来法では十分な精度が得られなかった計算対象である量子スピン液体相へ適用する。

i)と協力し、オープンソースパッケージHΦ、mVMC の機能拡張によるスペクトル計算手法の開発・公開を前述のように推進し、中性子散乱を始めとする大規模実験施設における成果と数値計算結果との比較研究を実験家との連携のもとに進められる体制を構築する。

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８：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、ベイズ最適化とデータ同化手法を組み合わせ、飽和磁化や安定性の観点から優れた高鉄濃度希土類化合物の化学組成を調べる。また、結晶構造探索手法の高度化と応用を行う。具体的には、既存化合物の構造データから局所構造の特徴を抽出し構造探索手法の改良を行うとともに、希土類鉄化合物の新構造を探索する。

・受託者：国立大学法人東京大学

幾何学的に乱れた界面構造を持つ $Nd_2Fe_{14}B$ 系について、大振幅局在フォノンの観点から電子状態計算を行う。遮蔽 KKR 法を用いた巨大スーパーセルを用いた計算を併用することにより計算の正当性を担保しつつ、界面近傍の第一原理電子状態計算を網羅的に行い、乱れた構造における交換結合定数、磁気異方性、磁気モーメントに関するデータ蓄積を進める。これらのデータに対して三宅グループと協力して情報科学的手法を適用して、保磁力機構に対して界面構造が果たす役割を明確にする研究を推進する。

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１０：国立大学法人東京工業大学

局在基底第一原理計算の枠組みでの交換結合定数計算アルゴリズムの改良および OpenMX コードへの実装を行い、交換結合定数計算を高精度化・高速化する。ネオジム磁石材料組織界面として、2-14-1 相とアモルファス Nd-Fe 合金相との界面の第一原理計算を実行し、安定界面構造とその局所磁気特性を理論解析する。開発した交換結合定数計算コードを用いて、界面局所磁気結合を見積もる。

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、国立大学法人京都工芸繊維大学）

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９：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、転位の大規模第一原理計算では、複数種の不純物の存在の効果や添加元素の機械的性質への効果の解析、第一原理局所エネルギー法・局所応力法による機構解明をさらに進め、高精度データとして蓄積する。第一原理計算結果をメゾ・マクロに繋ぐ技術として、新たに乱れた原子配列の局所構造スーパーセル計算から局所エネルギーと機械学習とを組み合わせて、粒界・欠陥のエネルギーを予測する計算技術に発展させ、他グループの大規模分子動力学計算等とも緊密に連携して計算技術として確立する。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深め、マルチスケール計算技術の確立を図る。

・再委託先１３：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「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を完成させる。具体的には、NiAl 合金などの第一原理 Phase Field シミュレーションの詳細な解析を行い、その有効性を示し、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を公表する。

ⅱ）大規模 Phase Field 法計算の実行

・再委託先１１：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、北大・大野グループ、京都工繊大・高木グループと共同して、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を行うことを目指し、凝固理論と相平衡/変態 kinetics、計算モデル、数値解析手法の検討を行う。上述 3 グループのマルチスケール計算の整合性を保持するため、スケール間の効果的な情報伝達について解析を行う。サブ課題Ｅの２つの課題 i)と ii)の連携について検討を進め、効果的な連結を図る。

・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・毛利グループ、京都工芸繊維大学・高木グループ、北海道大学・大野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完成させる。具体的にはこれらのうち大規模分子動力学法計算に関する部分を担当する。前年度に実施した純金属および二元系合金における過冷却融液からの核生成・凝固・粒成長過程の解析結果を初期構造とした Phase Field 計算を行い、異なるスケール間にまたがるクロススケールモデリング計算技術を確立する。また実用合金形成過程の理解に向けた不均質核生成過程を系統的に調査し、微粒子や壁表面が核生成に与える影響を原子スケールの立場から明らかにする。

・再委託先１４：国立大学法人京都工芸繊維大学

凝固組織の高精度予測について、東北大金研・毛利グループ、北大・大野グループ、東大・澁田グループと共同して、大規模 Phase Field 計算によるアプローチを図る。凝固組織において、柱状晶の制御はとりわけ重要である。そこで、柱状晶の成長メカニズムを解明するために、大規模 Phase Field 計算による柱状粒の競合成長を系統的に評価する。定量的 Phase Field モデルの MPI 並列コードを開発し、ポスト「京」コンピュータへの最適化を図る。また、2 結晶二元合金を対象とし、各粒の方位を系統的に変えた大規模 Phase Field 計算により。競合成長のメカニズム解明を行う。ここで、東大・澁田グループが行う分子動力学法計算とのマルチスケール解析の連結を完成させる。

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

ポリマー相溶性の全原子レベルでの解析に向けて、ポリマー伸長の手法を高度化しエネルギー表示溶液理論のソフトウエアである ERmod に実装する。そして、小分子溶媒中でポリマー伸長法のベンチマーク計算を行い、ポリマー融体での解析に展開する。また、共重合系における水やガスなど小分子の溶解自由エネルギーを対象として共重合のトポロジーに対する依存性を検討するともに、樹脂と金属の界面における粘弾性を全原子モデルを用いて解析するための枠組みを構築する。

ⅱ）有機／無機界面の物性に関する計算

・再委託先１５：国立大学法人名古屋工業大学

産業利用上重要な接着・密着等に関係する様々な有機／無機界面について、これまでに蓄積してきた 2 種類の界面モデルでの強度および自由エネルギーに関するシミュレーション結果と関連した最新の実験結果を踏まえ、アミン変性などより適切な官能基を取り入れた新しい原子論的モデルに発展させる。また、界面侵入分子による界面弱化現象等を直接扱う大規模なハイブリッド量子古典シミュレーションコードを構築し、実際に利用する。さらに、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、その反応ダイナミックスの理論的解明を試みるとともに、界面モデルの高精度化に役立てる。

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、これまでに密度汎関数理論とデルタ SCF 法に基づく X 線光電子分光スペクトルの計算手法を開発し、シリセン、ボロフェン、単分散 Pt 原子に適用研究によってその有効性を示してきた。本年度はデルタ SCF 法をさらに発展させ、内殻励起が関与する X 線吸収微細構造スペクトルの高精度計算手法を開発し、OpenMX に実装する。開発した計算手法を二次元物質やナノ構造体に適用し、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を実現するために、局在自然軌道を用い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 に実装する。数十万コアを用いた大規模超並列計算に向けて、プログラムの高度化を実施し、マニュアルとともにプログラムの一般公開を行う。

ⅱ）物質構造と相変化の探索手法の開発

・再委託先１２：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、熱力学手法(CALPHAD)の効率性、汎用性と第一原理自由エネルギー計算の精度を兼備する相図計算ツールを開発する。提案した CALPHAD 法の問題点を改善できる熱力学モデルと DFT 計算データを CALPHAD 法へデータマッチングさせるモジュールを実際の二元合金系に適用して有効性を検証する。さらに、広範な原子相関、格子緩和、磁性、ひずみなど物理効果を自由エネルギーに導入して相図への影響を調べる。また、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、予測手法を実際の材料系に適用を試みる。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１１：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、格子緩和の理論的基礎の構築を行う。Cu-Au 系を対象に、一様緩和、完全緩和、部分緩和などの計算モデルの精緻化を図り、Eshelby cycle に基づいて、Kanzaki force と Born von Karman force による局所緩和のエネルギーを導出する。Eshelby cycle では必ずしも格子緩和に対するエントロピーの寄与が考慮されておらず、これを連続変位クラスター変分法(CDCVM)に基づいて導入する。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１６：国立大学法人鳥取大学

サブ課題Ｃで開発されている量子格子模型計算コードＨΦに実装した大規模量子物質計算向け並列数値計算ライブラリ Kωで課題になっている反復計算処理に置いて残差が大きく振動してしまう問題に対し、シフト型クリロフソルバーとして QMR 型解法を実装し、残差を単調現象させることを目指す。さらに、ポスト「京」活用に直結するメニーコア型 CPU のノード内分散並列自由度など、高速並列アルゴリズムに向けての新たな論点を整理し、系統的性能解析と最適計算への知見を、ソルバー群 Kω、EigenKernel、k-ep の活用の効果とともに課題全体に周知する。

ⅳ）大型実験施設との連携

・再委託先１７：学校法人東京理科大学

強相関物質・材料のスピン・電荷ダイナミクスを測定することができる J-PARC や SPring-8 等の大型実験施設との連携を推進するため、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)プログラムを整備するとともにその有効性を実証する。そのために、低次元量子スピン物質に対する磁場中の動的スピン構造因子を計算し、J-PARC での非弾性中性子散乱実験に対するスペクトル分散・形状の提案を行う。また、梯子型格子形状を持つ強相関物質の動的スピン・電荷構造因子を多軌道性に焦点を当てて計算し、J-PARC での非弾性中性子散乱実験や SPring-8 での共鳴非弾性 X 線散乱実験に対するスペクトル分散・形状の提案を行う。

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 31 年度（2019 年度）、中間評価時に見直した実施計画の最終目標の実現を目指し、研究を推進する。各サブ課題とも、平成 30 年度までに開発してきたアプリを活用し、ポスト「京」で初めて達成される成果目標をより明確にし、その目標を達成するための実験や計測などのグループとの具体的な連携体制を強化する。開発してきたアプリは、物質科学計算アプリ紹介サイト“MateriApps”で公開し、開発グループ以外の方が利用できる環境を整える。汎用が見込まれるアプリは、HPCI 利用支援の一環として整備するアプリケーションソフトウエアとして提供する。研究会やシンポジウム等を通して産官学や実験、計算を問わず物質科学コミュニティに広く研究成果や開発アプリを公表し、その成果の普及発展を図る。

４－２．実施内容（成果）

（１）プロジェクトの総合的推進

令和元年度（2019 年度）は、中間評価時に見直した実施計画の最終目標の実現を目指し、研究を推進した。その結果、大規模計算だけでなく、通常のサーバークラスにおいても使いやすいアプリを開発し、公開することができた。各サブ課題とも、平成 30 年度までに開発してきたアプリを活用し、富岳で初めて達成される成果目標をより明確にし、その目標を達成するための実験や計測などのグループとの具体的な連携体制を強化した。その結果、ほぼすべての課題で計算結果を実験や計測で検証することが可能となった。開発してきたアプリは、物質科学計算アプリ紹介サイト“MateriApps”で公開し、開発グループ以外の方が利用できる環境を整えた。汎用が見込まれるアプリは、HPCI 利用支援の一環として整備するアプリケーションソフトウエアとして提供した。その結果、HPCI アプリをプレインストールした数か所の情報基盤センターにおいてアプリ講習会を実施することができた。研究会やシンポジウム等を通して産官学や実験、計算を問わず物質科学コミュニティに広く研究成果や開発アプリを公表し、その成果の普及発展を図った。公表の際に、開発してきたアプリを一覧で示すアプリ手帳を配布した結果、計算の専門家だけでなく実験の方にも興味を持っていただき、普及促進につながった。以下、詳細を報告する。

１）実施体制

令和元年度は、平成 30 年度と同様に、「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」（略称：CDMSI：Creation of new functional Devices and high-performance. Materials to Support next-generation Industries)ではサブ課題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（図 4-2(1)-1)。

図 4-2(1)-1：CDMSI 実施体制

研究実施のために、令和元年度は、東京大学および、13 の分担機関、39 の協力機関数が連携して実施した（図 4-2(1)-2）。さらに、図 4-2(1)-3 に示す通り、外部の複数のプロジェクトや機関と連携して推進した。

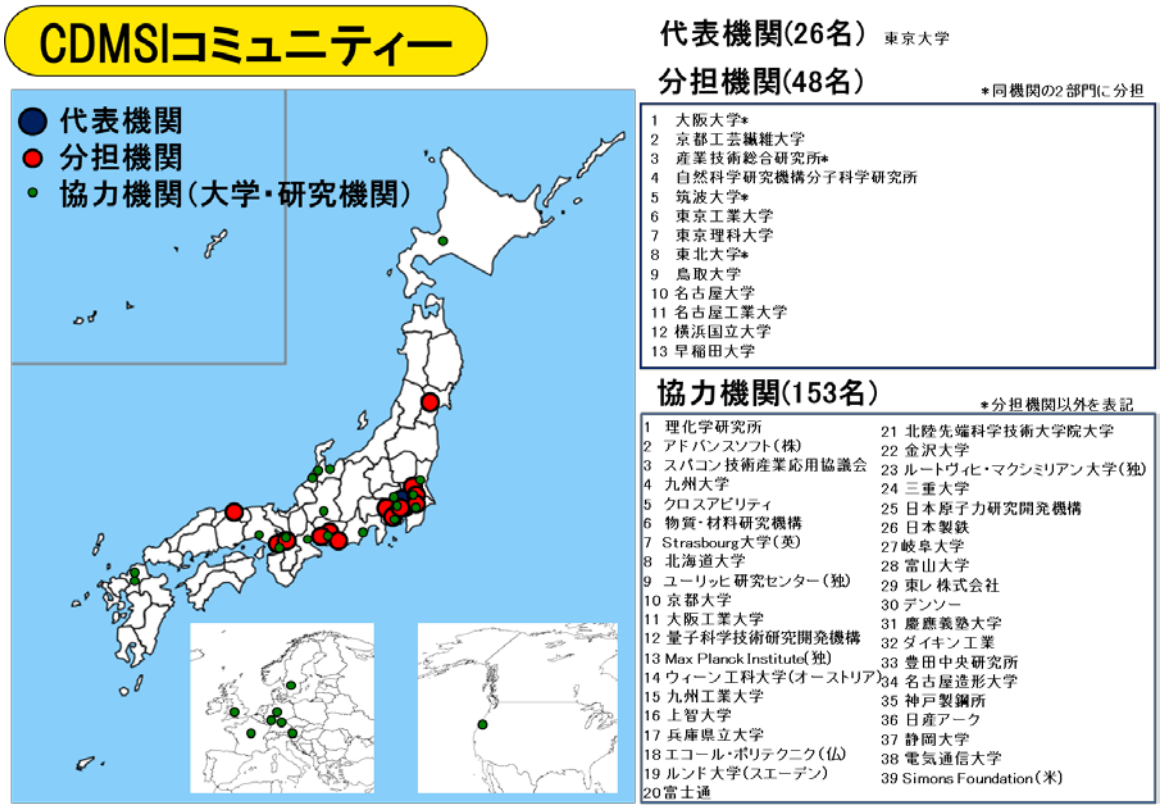


図 4-2(1)-2：CDMSI の分担機関と協力機関

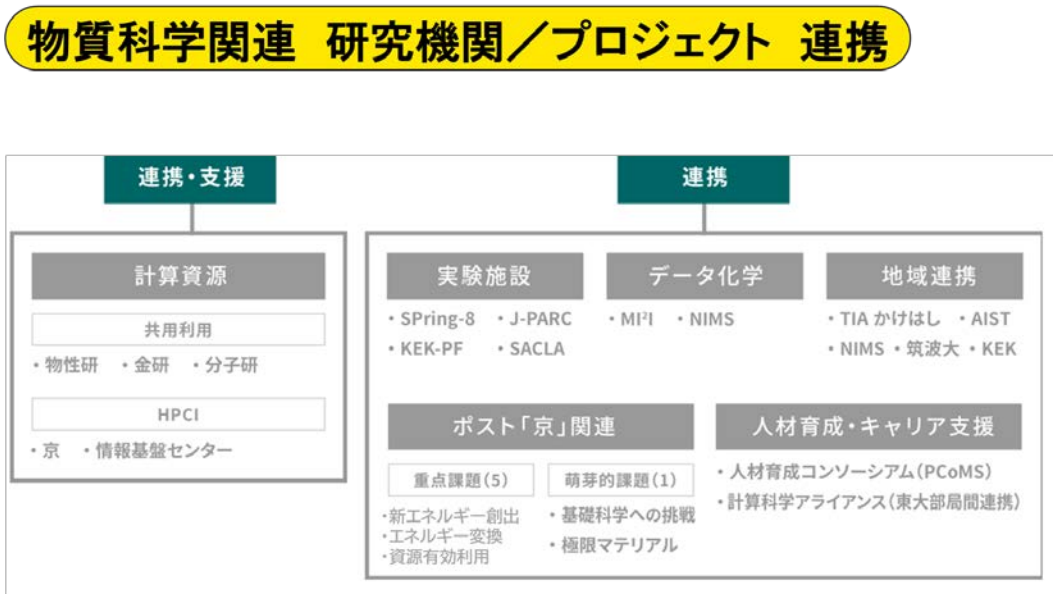


図 4-2(1)-3：CDMSI の連携・支援機関、連携プロジェクト

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下記のメンバーで構成される企画委員会を設け、企画会議を実施した。

＜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（早稲田大学）
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（神戸大学）
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。令和元年度も昨年度に引き続いて下記メンバーに委員を委嘱し、ご意見やコメント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）

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、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。その指摘事項に具体的に対応した事項は下記の通り。

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。

⇒すべてのサブ課題において、産業界と対話する機会を持ち、富岳成果創出加速プログラムへ提案できるレベルに至った。

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。

⇒サブ課題単位での企業、もしくは企業が含まれるプロジェクトとの共同研究とともに、MateriApps への掲載、MateriAppsLIVE!へのインストール等を実施し、産業界も含めた普及活動を促進させた。

ⅲ）計算資源の利用状況

一部利用率の低い課題がある。

⇒令和元年 8 月まで運用された「京」の利用に関しては、図 4-2(1)-4 に示す通り、ほぼ 100%の計算資源が利用された。年度初めから配分されていた HPCI の利用に関しては、「京」がシャットダウンされた令和元年度下期以降の利用が進んだ。しかし、複数の計算資源が割り当てられていたため、特定の計算資源をほぼ使い切った後に他の計算資源を利用するという形態が見られた。最終的には HPCI の計算資源も、8 割程度を有効に活用した。

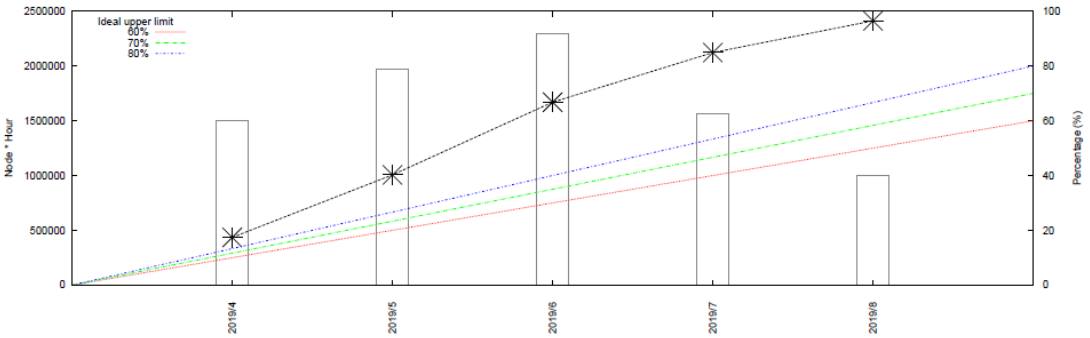


図 4-2(1)-4：「京」の利用率（ノード時間積）

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。

⇒ HPCI 計算資源提供機関(RIST)へ OpenMX、SALMON、HΦのアプリを提供し、RIST が主導して情報基盤センターにアプリを導入した。また、RIST が主導して、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、重点課題(7)との共催で、アプリ講習会を実施し、普及活動を促進した。上記の通り、RIST を中核としたアプリ普及の支援体制が整備された。

ⅴ）総合評価

理論検証、理論予測、AI 活用等の富岳への展開が楽しみである。

⇒富岳成果創出加速プログラムへの提案を、各サブ課題単位（A～F）で実施した結果（サブ課題Ｅは萌芽的課題と、サブ課題Ｇはサブ課題Ｄと合同で提案）、サブ課題Ａ、Ｃ、Ｄ、Ｆが採択さ

れた。採択されなかったサブ課題は、令和 2 年度から開始予定のプログラムに提案する予定である。

3）諮問委員会・企画会議の実施

令和元年度は 2 回の諮問委員会・企画会議合同会議、および、2 回の企画会議を実施した。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・企画会議合同委員会：令和元年 6 月 10 日（火）]

公開されている富岳成果創出加速プログラムに関する情報共有と提案を行うために CDMSI でどのような研究を実施しておくべきかの検討を行った。諮問委員より下記のコメントをいただいた。

・富岳は従来のシミュレーションに加え、データや AI の方々の参加を要望している。重点・萌芽的課題として提案する際にも、データや AI の活用の視点は必要と考える。
・提案が「個別課題」となっても、コミュニティによる分野振興活動は継続して欲しい。
・アプリやデータの継続的な管理は MateriApps の仕組みを利用する等で、企業の方でもアプリを利用しやすく整備していくことが必要。また、開発したアプリで創出されるデータの利用を促進して欲しい。

[第2回企画会議：令和元年9月14日（土）]

9 月 4 日に文科省で実施された富岳成果創出加速プログラム説明会資料を用い、プロジェクトの総額が富岳と比較すると 1/3 になること、提案単位は各サブ課題程度で最大 1 億円までの予算とすることなどの情報を共有した。提案の枠組みをどうするか、サブ課題代表者間や、他の重点萌芽課題とのコラボ提案も含めて検討することとした。

[第3回企画会議：令和元年10月4日（金）]

9 月 4 日以降に文科省から得た富岳成果創出加速プログラムに関する情報の共有を図るとともに、そのプログラムへ提案する研究実施体制と研究概要を各サブ課題代表者から行った。また、今年度実施予定の CDMSI 関連イベントの共有を行った。

[第2回諮問委員会・企画会議合同委員会：令和2年2月18日（火）]

CDMSI から富岳成果創出加速プログラムに提案した課題の結果報告と、今後に向けた取り組みの概要を共有した。富岳プログラムで求められる「データレポジトリ」に関しては、物性研がその仕組みの検討を開始することが伝えられた。また、来年度より金研、物性研、分子研と阪大ナノデザイン教育センターで「計算物質科学協議会」を立ち上げ、分野振興の提言活動を継続する予定であることを共有した。諮問委員からの主要なコメントを下記に示す。

・分野振興活動を産学連携の枠組みで、若手を交えて、データ科学や量子コンピューティング等の新しい分野も含めてより発展させて欲しい。
・プログラム開発を主とする研究者が学界、産業界で活躍できる場を形成し、計算物質科学分野をよりいっそう発展させて欲しい。

４）広報活動

＜第１回第１回 CDMSI アプリ高度化合宿 2019＞

日時：令和元年 6 月 25 日（火）～令和元年 6 月 27 日(木)

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：資料２参照

富岳活用に向けた成果評価環境利用の NDA を締結している方を対象とした高度化合宿を実施した。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している理研の方と富士通の方より、富岳のハードとシステムソフトの開発状況、チューニングのノウハウをお伝えいただいた後、各自が開発するアプリケーションの高速化に対するボトルネック抽出を行い、プログラムの改善を実施した。富士通の方は合宿を通してコンサルとして参加した。課題が生じても、迅速にその解決策を得られる環境を設定し、各プログラムのチューニングを進めることができた。また、CDMSI で開発しているライブラリや手法の紹介を行い、相互利用の促進を行った。

＜ポスト「京」重点課題(7) 第 5 回シンポジウム

「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(CDMSI)」＞

日時：令和元年 8 月 9 日（金）

会場：東京大学本郷キャンパス　伊藤謝恩ホール

プログラム：資料１参照

ノーベル賞受賞者の名大、天野浩先生を招聘して CDMSI 活動のまとめとしてのシンポジウムを開催した。天野先生からは、「プロセスインフォマティックス」という新たなキーワードで、名古屋大の押山淳先生、白石賢二先生と共に進めている GaN の気相結晶成長シミュレーションが、これまで未解決であった成長核種の課題を解決した例をお示しいただき、富岳に対する期待を述べていただいた。常行統括責任者よりプロジェクトの概要を説明した後、全サブ課題責任者から「京」で得られたこれまでの成果と富岳でなければ得られない課題目標に向けた取り組みを伝えた。また、午前中は、サブ課題内の全サブサブ課題の発表をポスターセッションとして実施していただいた。ポスターは原稿にライターの編集を加えてフォーマットを揃え実施したので、計算が専門ではない参加者、特に企業の方々にもご理解いただける内容として紹介し、活発な議論を行うことができた。意見交換会にも参加いただいた天野先生より、基礎科学だけでなく、多くのベンチャー企業と協業し応用に向けてチャレンジしていることをお伝えいただき、交流した研究者は大きな刺激を受けていた。

＜第３回計算物質科学イノベーションキャンプ＞

課題：　『計算科学とデータ科学が紡ぎ出す計算物質科学の新潮流』

日時：　令和元年 10 月 8 日（火）～令和元年 10 月 10 日（木）

場所：　ほほえみの宿滝の湯（山形県天童市）

プログラム：資料３参照

本イベントはプロジェクトに関連する若手研究者が自らも学びたい題材をテーマとして企画し、博士過程の人材も含めた若手研究者 35 名が参加した。NIMS から若手精鋭研究者の田村亮様を講師に招

き、最先端のデータ科学を活用した物質探索手法と、それらを用いたチュートリアルを実施した。また、萌芽的課題実施者の東大明石遼介先生からニューラルネットワーク手法、元素戦略電子材料拠点の東工大熊谷悠先生から欠陥の物理を講義していただき、若手リーダーから新しい物質探査手法を学んだ。今回、計算物質科学人材育成コンソーシアムの卒業生として、博士課程修了後に企業に就職した 3 名の講師より、企業において計算物質科学がどのように活きているのかの講演とパネル討論を行っていただいた。企業においても基礎研究が役に立っていることをお伝えいただき、参加者がそれまで持っていた企業における研究推進のイメージは大きく変化し、キャリアパスの考え方が広がったと想定される。

＜第 9 回材料系ワークショップ　～「富岳」で飛躍へ！計算データの価値～＞
（兼；ポスト「京」重点課題(7)・萌芽的課題(1) 成果報告会）
日時：令和 2 年 2 月 17 日（月）～ 18 日（火）
場所：秋葉原コンベンションホール
プログラム：資料 4 参照
内容：
本イベントは HPCI 主催で実施していたが、今回は、ポスト「京」重点課題(7)と萌芽的課題(1)の最終成果報告会（初日ポスターセッションで実施）を兼ねた企画として、共催で実施した。また、初日には、令和 2 年度の立ち上げ準備を行っている「計算物質科学協議会」の活動計画に関連させたパネルディスカッションを実施し、企業の方も交えて計算物質科学領域を盛り上げてエコシステムを回していこうという意思統一を図った。2 日目午前中はトヨタ庄司哲也様にデータを用いた物質科学研究最前線を実施されている産学連携の仕組みの活用も交えてお話いただいた。また、国内ほぼすべての電池関連企業が入会している「界面科学コンソーシアム」を運営する NIMS の大谷実様に電気化学反応シミュレーションの進展のお話をいただいた。午後からの講演は企業若手研究者の方を中心に実施した。その講演者間でパネルディスカッション「技術と人でつなぐ産学コミュニティの形成」を、東北大寺田弥生先生のモデレータで実施した。本ワークショップでは、特に産学の若手交流が促進された。今後、多くの共同研究が創出されていくことを期待している。

＜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 12 で、のべ 1,769 名の参加、協賛・協力行事数は 18 で、のべ 1,512 名の参加（除、R-CSS 一般公開)があり、精力的に外部への成果発信と普及促進を行った。なお、新型コロナウイルスの関係で 2 月末～3 月末にかけて企画し実施予定であったいくつかの主催、共催、協賛行事が中止となった。プロジェクト最終年度の締めくくりと次へのスタートを検討するためのイベントであったため残念であったが、一刻も早い感染拡大の収束を願い、今回中止となったイベントの開催趣旨を今後も引き継いでいく。

５）アプリケーションソフトウエアの普及活動

令和 2 年 4 月 9 日（火）に平成 31 年度の文部科学大臣表彰の受賞者が発表された。その中の科学技術振興部門において、物質科学シミュレーションのポータルサイト“MateriApps”の構築運用を中軸として活動している「計算物質科学ソフトウエアの開発技術の振興」が表彰された。この活動は現在物性研のメンバーを中心に活動しているが、2011 年から開始した HPCI 戦略プログラム分野 2 の CMSI（計算物質科学イニシアティブ：Computational Materials Science Initiative）振興活動をきっかけとして MateriApps の開発をスタートしており、金研、物性研、分子研を中核とした計算物質科学コミュニティ全体の協力を得ている。令和元年度（2019 年度）末時点で 271 のアプリが登録されており、ユーザー数は約 6,000 人、ページレビューは約 2 万件/月ある。“MateriAppsLIVE！“は国家プロジェクトで開発してきたオープンソフトウエアを含めた物質科学関連のフリーアプリを収納しており、累計ダウンロード数は 6,000 件を超え、USB での配布数は約 1,000 本となり、日本だけでなく世界各国においてアプリの講習会を実施する際に活用されている。

今年度は HPCI アプリとして選定された OpenMX、HΦ、SALMON の講習会を情報基盤センター、RIST と共同で実施するなど、精力的にアプリ普及活動を実施している。本プロジェクトの最終成果物として、各サブ課題で開発し、公開しているアプリケーションソフトを“アプリ手帳”として見やすい形にまとめ、報告として実施した令和元年 8 月 9 日の CDMSI シンポジウム、および、令和 2 年 2 月 17、18 日の第 9 回材料系ワークショップにまとめている。

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や、各サブ課題と協力する企業群は、基盤的ソフトウエア開発に協力した。各サブ課題は、関連する企業の協力機関の協力を得て、アプリケーション開発・研究開発を行った。その結果、学界だけでなく産業界においても利用価値のあるアプリを開発することができた。

６）研究成果の見える化活動

「HPCI フォーラム見える化セッション 2020」Web 展示

日時：令和 2 年 3 月 30 日（月）～公開

場所：HPCI の Web ページ

令和 2 年 3 月 4 日にステーションコンファレンス東京で実施する予定であった HPCI フォーラムの展示会場ステージにおいて、全重点課題と一部の萌芽的課題の協力を得て、「HPCI 見える化セッション」を実施するための企画を主導した。しかし、新型コロナの影響で本行事は中止となってしまったが、主催である RIST 主導で、講演する予定であったコンテンツの Web 展示を実現した。詳細は Web サイトを参照。https://www.hpci-office.jp/pages/mieruka_2020

上記の見える化セッションにおいて、重点課題(7)CDMSI からは、「MatriApps」活動と「透明樹脂を用いた 3D プリンタによる電子雲模型」を主に出展している。3D プリンタは、透明度の高まった新しい樹脂を用いて電子雲を描写する条件出しを行い、研磨方法も平面仕上げからバレル仕上げに変更し、角が丸くなる、デザイン性を高めた仕様とした。また、製造の際に生じる屈折むらを考慮して形状を設計することで、光の多重反射を避けることが可能となる技術を開発した。それらの結果、内部の視認性が飛躍的に高まり、デザイン性も向上し、広報や教育ツールとしてブラッシュアップさせることができ

た。図 4-2(1)-5 には、新透明樹脂と新たな研磨方法を用いて作成したフラーレン電子雲模型を示す。また、図 4-2(1)-6: 磁石の強さに関わる電子構造だけを示した磁石材料の電子雲結晶模型を示す。

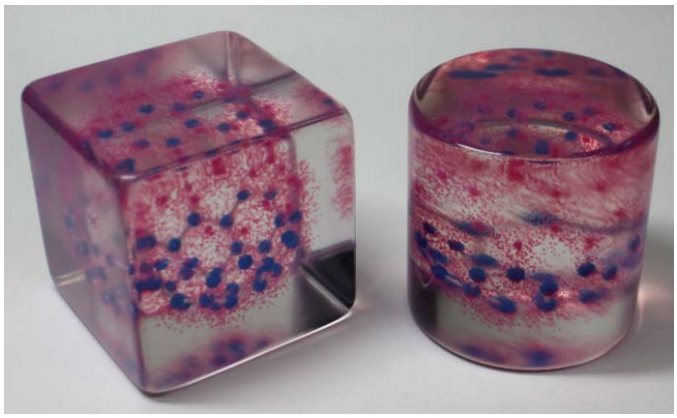


図 4-2(1)-5： 新透明樹脂と新たな研磨方法を用いて作成したフラーレン電子雲模型

図 4-2(1)-6： 磁石の強さに関わる電子構造だけを示した磁石材料の電子雲結晶模型

（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７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７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２つの研究開発課題を遂行している。１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り、物質のダイナミクスをシミュレーション可能な RS-CPMD(Real-Space Car-Parrinello Molecular-Dynamics)コードおよび RSPACE(Real Space DFT)コードである。令和元年度においては、RSDFT と RS-CPMD コードは統合され、構造最適化電子状態計算と有限温度原子ダイナミクス・シミュレーションがこの統合コードで可能となっている。大規模・高速計算の側面では、コデザインチームのターゲットアプリとして設定され（主査：重田）、RSDFT 部分は、富岳において、対「京」比で 30 倍の高速化が見込まれている。RSPACE コードは実空間差分法のオリジナルなコードであり、線形代数の新たな手法を取り入れ、独自の発展を続けている。

これらの先端的手法の開発により、今年度は業務計画書の記載に沿った、以下のような物質科学の成果が得られた。①前人未踏の大規模・現実的溶融クエンチ法によるアモルファス SiO_2 の作成、②SiC/SiO_2 デバイス界面でのキャリヤートラップの同定、③GaN エピタキシャル成長温度での、成長表面 2 次元流体化の発見と成長機構の新たな提唱。また当初の業務計画への具体的な記載はなかったが、開発したアプリケーションを、デバイス科学の重要案件に適用し、以下のような成果が得られた。①パワー半導体 SiC のエピタキシャル成長の舞台となる極性表面でのステップ構造の同定を行い、実験で観測されている表面モルフォロジーの成因を解明したこと、②デバイス作成上の大きな問題であった、GaN エピタキシャル成長中の意図せぬ酸素不純物混入の原因を解明したこと、③GaN 膜中の転位構造を同定し、Mg 不純物との複合体の構造と電子状態を解明し、pn 接合での漏れ電流の理由を明らかにしたこと、④磁気トンネル接合の有望材料系として金属・グラフェン接合を検討し、その可能性を評価したこと。

２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。NEGFコードは上述のRSDFTコードとの統合が行われ、量子論の第一原理からのデバイスシミュレーションが可能となっている。実際、量子伝導の領域における経験的な物質パラメータを用いた従来シミュレーションで得られた電流電圧特性は、我々の量子論第一原理シミュレーションで得られた特性に比べて大きく異なることが示された。一方、より大きいサブミクロンスケールのデバイスシミュレーションでは、Hi-QHDと従来手法のドリフト拡散シミュレータとの統合が進んでいる。同様のラインに沿った別のアプローチとして自己無撞着モンテカルロデバイスシミュレーションがある。今回、界面近傍の不純物によるポテンシャル揺らぎを取り入れた自己無撞着シミュレーションに成功した。

また当初の業務計画への記載はなかったが、RSDFT+NEGFによる実際のナノワイヤーデバイス（東北大学遠藤哲郎グループ）の電流電圧特性シミュレーションを行い、実デバイスの挙動説明に成功した。これはフィッティングパラメータなしのシミュレーションによるものであり、画期的成果と言える。

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

実施者：　Bui Thi Kieu My、白石賢二

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・研究開発]

（実施内容）

「京」および富岳アーキテクチャに最適な第一原理計算手法である、実空間密度汎関数法（コード名：RSDFT）および実空間 Car-Parrinello Molecular Dynamics 法（コード名：RS-CPMD）の高速化、高度化を昨年度に引き続き行い、両者が一体となった RSDFT パッケージを整備した。その結果、RSDFT パッケージにおいては、密度汎関数法構造最適化電子状態計算と CPMD 計算がオプション切り替えで実行できるようになった。また RSDFT 部分では、界面荷電欠陥同定のための生成エネルギー補正がインプリメントされた。これにより、コデザインチームでの RSDFT 最適化の工数削減に寄与した。その結果、RSDFT 部分では、富岳上において対「京」比較で 30 倍の性能向上が見込まれる結果が得られた。

この実空間手法の高速化、高度化により、以下の物質科学の課題を解決した。１）アモルファス SiO_2 は、半導体デバイスのゲート絶縁膜として不可欠のものであるが、そのミクロな構造と電気的性質の関係はあきらかではない。未だかって行われたことのない大規模（1000 原子超）、スロー・クエンチング（5K/ps 以下）の RS-CPMD 計算により、アモルファス SiO_2 の物性の第一原理からの解明を行った。その結果、648 原子系および 1536 原子系の SiO_2 において、50K/s および 5K/ps の降温率でアモルファス構造を作成することに成功した。現在物理量の解明が進んでおり、富岳における成果創出段階へと進んでいる。２）さらにそうして作成したアモルファス SiO_2 と SiC のパワーデバイス界面の構造とキャリヤートラップと成り得る欠陥構造をあきらかにする必要があることがわかった。同時に実験グループとの共同により、計算であきらかにした炭素起因の SiO_2/SiC 界面トラップを EDMR（電気的検出磁気共鳴）実験で同定し、炭素ダングリングボンドのシグナルを初めて検出した。３）また GaN の有機金属気相成長（MOCVD）に RS-CPMD コードを適用し、成長表面での反応律速過程を同定するとともに、得られた平衡定数から成長装置全体の流体シミュレーションにつなげる方法論を確立した。その端緒的結果として、成長温度において、成長フロントでの Ga 原子は 2 次元液体化していることが判明した。従来からの想像を覆す理論的発見である。上記で得られた成果は国内外の会議や論文で発表した。

なお、業務計画書に記載は無かったが、RSDFT コードのチューニング成果を活かした大規模計算の試みとして、パワー半導体 SiC のエピタキシャル成長解明のための表面ステップ構造、および同じくパワー半導体 GaN への不純物取り込み機構、GaN 中の転位構造、の研究を実施した。その結果、SiC 表面モルフォロジーはステップの生成エネルギーの大小で説明できること、GaN 成長中の酸素不純物取り込みは結晶を成長させるための基盤面方位の微傾斜角の設定で制御できること、GaN-pn 接合の漏れ電流は転位に集積した Mg 不純物によるものであることがわかり、国際学会で報告した。

（具体的な成果）

RS-CPMD コードによるアモルファス SiO_2 作成に関しては、異なる計算サイズと昇温―降温過程によるアモルファス作成を行い、計算機上の artifact ではない実際のアモルファス構造の同定を目指している。現時点では、①648 原子モデル、昇温率 200K/ps、降温率 50K/ps、②648 原子モデル、昇温率 200K/ps、降温率 5K/ps、③1536 原子モデル、昇温率 200 K/ps、降温率 50K/ps、のアモルファスが作成されている。第一原理からの密度汎関数理論に基づく従来の MD では 192 原子系が最大規模であったので、シミュレーション技術としては大きな進歩である。また 5K/ps の降温率は前人未到のゆっくりとした降温であり、より現実に近いアモルファス作成が可能になった。現在、各アモルファスでの構造的性質と拡散係数の解析が進んでいる。図 A-1 は、1536 原子系に対する降温過程の実際のシミュレーションであり、Nose-Hoover Chain による温度制御および velocity scaling による温度制御がともに順調であることを示している。

SiC/SiO_2 界面での欠陥構造解明に向け、得られたアモルファス SiO_2 と SiC 界面の構造モデルが現在作成中である。一方、計算で同定した炭素起因の欠陥と実験との比較が行われた。まず計算により、界面における炭素ナノクラスターや炭素ダングリングボンドが安定構造であることを見出した。一方、EDMR 測定から、炭素ダングリングボンドのシグナルが初めて報告された。実験では、界面の炭素ダングリングボンドは<0001>方向を向いている（P_{bC} センター）ことがわかり、理論計算との比較により、この構造が界面におけるアドアトム構造であると、同定することに成功した（図 A-2）。これは SiC/SiO_2 界面において、欠陥構造が計算と実験の共同によって同定された初めての例である。

GaN のエピタキシャル成長に関しては、前年度にソースガスである NH_3 が成長表面テラス上で比較的低いエネルギー障壁で分解する過程を明らかにしたが、今年度、成長表面上での Ga 原子が特異な振る舞いをすることが CPMD 計算で明らかとなった。図 A-3 は成長表面の昇温過程のシミュレーション結果であり、図 A-4 はそれぞれの温度での最表面 Ga 原子（Ga アド原子とよぶ）間の距離相関関数である。1100K までは、Ga の被覆率で決まる距離（およそ 6Å）を維持しているが、エピタキシャル成長温度で

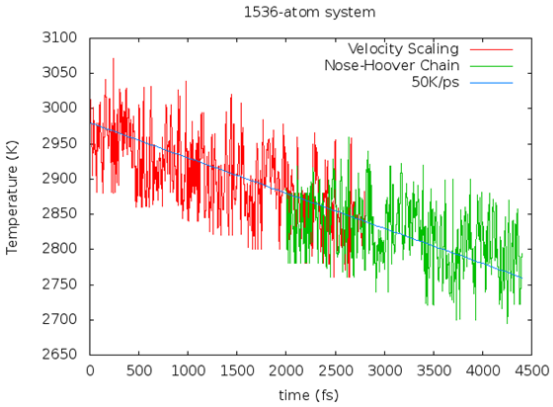


図 A-1：1536 原子からなる SiO_2 系に対する昇温過程。速度スケーリングから Nose-Hoover Chain への温度制御切替が順調に進み、50K/ps の降温制御ができていることを示している。

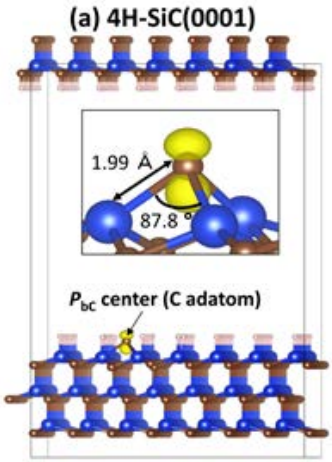


図 A-2：SiC(0001)/SiO_2 界面における Pbc センター

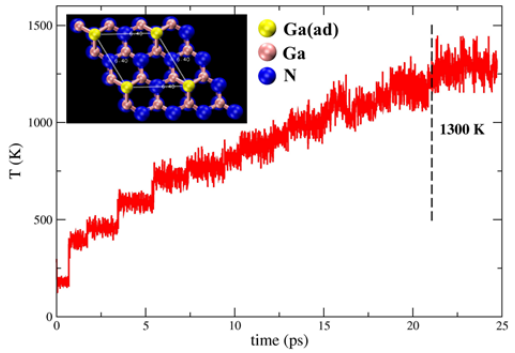


図 A-3:GaN 表面の昇温過程。挿入図は表面を上から見た模式図。表面下の原子は省略。青、ピンク、黄がそれぞれ N、Ga、および Ga アド原子を表している。

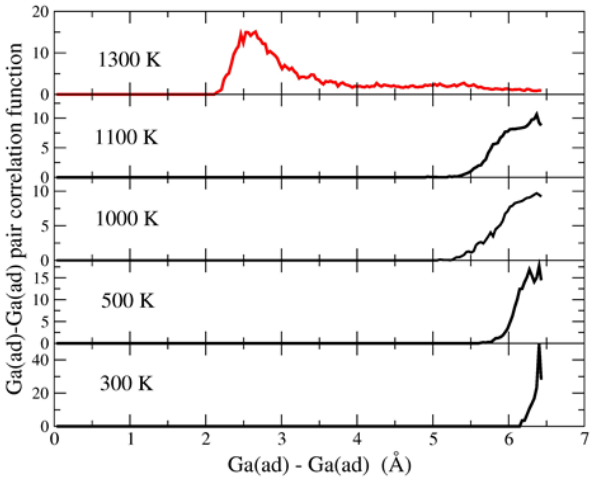


図 A-4: 図 A-3 の昇温過程における Ga アド原子の距離相関関数。

ある 1300K に昇温すると、その距離は約 2Å に縮まることがわかった。Ga アド原子のダイナミクスを調べると、この成長温度で Ga アド原子は突如マイグレートし始めて凝集することがわかった。図 A-4 の相関関数では 2Å でのピークしか出ていない。第 2 近接以降のピークは存在しない。このことはこの凝集体は、固定された構造ではなく流動的な構造であることを示している。実際速度相関関数を計算し、Ga アド原子の拡散係数を求めたのが図 A-5 である。1300K で拡散係数は一桁以上上昇する。すなわちエピタキシャル成長温度では成長表面は 2 次元液体となっていることを示している。未だかって知られていなかった事実であり、エピタキシャル成長素過程の認識を大きく変えるものである。

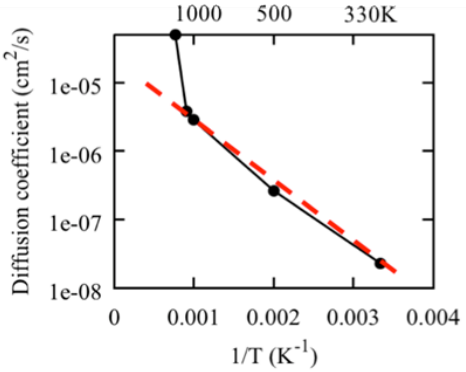


図 A-5:Ga アド原子の表面拡散係数の温度依存性。赤線で示す低温でのアレニウス挙動が、エピ成長温度で激変している。

SiC は GaN と並ぶパワー半導体であり、その MOSFET（電界効果トランジスター）は新幹線の新車両では、Si に代わるパワーモジュールとして搭載される。これは Si に比べて SiC がワイドギャップ半導体であること、また堅牢であることに起因するものである。しかしながら、SiC-MOSFET の性能は、その物性値から期待されるよりもはるかに劣っている。原因はおそらくデバイス薄膜中の欠陥である。エピタキシャル薄膜成長の革新が望まれる。エピ成長は、通常、ステップ・フロー・モードで起こるが、そのステップ構造は誰も知らない。今回 RSDFT 計算により、ステップ構造とその生成エネルギーを決定した。SiC 成長表面では、図 A-6 に示すように、5 種類のステップ構造が可能である。Si と C が両方ともステップ端に現れる SC、Si だけが現れ、かつ構造最適化前は 2 本あるいは 3 本のダングリングボンドがステップ端に生じる Si_2 および Si_3、さらには炭素原子だけがステップ端に現れ構造最適化前のダングリングボンド数が 1 本、2 本の、C_1、C_2、の 5 種類である。これらについて、RSDFT コードによるエネルギー最小化計算（構造最適化計算）を実行した。図 A-7 はそれらステップ端の生成エネルギーである。生成エネルギーは Si あるいは C の化学ポテンシャル（成長雰囲気）に依存するが、それらの振舞が第一原理計算で初めて明らかとなった。これにより、成長条件に依存して、まっすぐなステップ端になる場合

と、zigzag のステップ端になる場合があることが判明し、これは実験的には謎とされてきたステップ・モルフォロジーを見事に説明する。

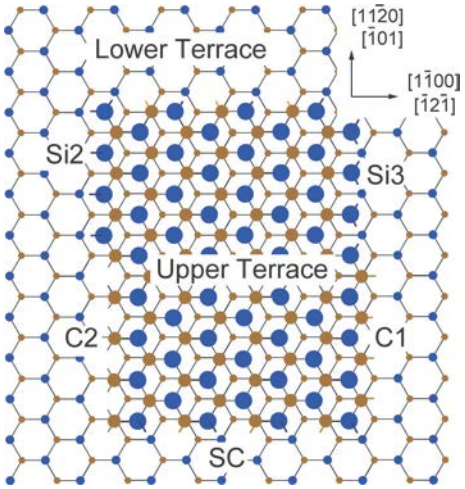


図 A-6：SiC 極性表面での 5 種類のステップ構造の模式図。青丸、茶丸はそれぞれ、Si、C 原子を示している。

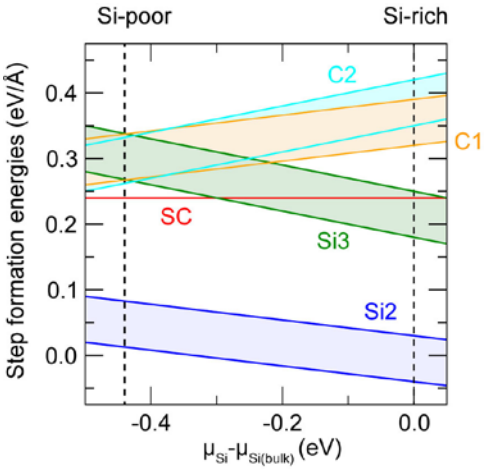


図 A-7：5 種類のステップ端の生成エネルギー。

GaN パワーデバイスではキャリヤー濃度の制御が重要である。薄膜成長中に意図せず混入する酸素不純物が n 型のキャリヤーを生み出し、動作を不安定にすることが知られてきた。最近、名大天野グループの実験では、m(1-100)面を用い、c(0001)軸方向に微傾斜した面での成長により、酸素不純物の混入を一桁減じることが報告されている。今回 RSDFT 計算により、微傾斜 m 面でのステップ構造を決定し、さらにステップ端およびテラスからの酸素混入のエネルギー利得を求めた。その結果、－c 軸方向に 5 度微傾斜した面では、+c 軸方向に 5 度微傾斜した面に比べ、酸素混入がエネルギー的に不利になることが判明した。これは天野グループの実験結果をきれいに説明する。

GaN 中の典型的線欠陥である転位の同定は材料科学、半導体工学の観点からの重要問題であり、計算科学的には高精度大規模計算というチャレンジである。今回、Mg－らせん転位複合体の原子構造と電子構造を計算によって明らかにした。すなわち、Mg 不純物はバーガース・ベクトルが[0001]のらせん転位の近傍に凝集することが見いだされ、これは、天野グループの実験でらせん転位を通じた p 層にドープした Mg 不純物の拡散が n 層中で観測されていることと整合している。次に、Mg－らせん転位複合体の電子構造を解析したところ、Mg 原子が転位芯に近づくにつれ、系の最高占有電子レベルが伝導帯に向かって上昇することが明らかになった。このレベルの上昇は、転位由来のレベルと Mg によるアクセプター・レベルとの間の混成の増加による、反結合性軌道の上昇が原因である。これは、Mg 不純物は通常 p 型形成のドーパントであるにも関わらず、p 型 GaN 中にらせん転位が存在する場合、らせん転位と Mg との複合体が形成されることで n 型となり、リーク電流発生の原因となることを示している。実際、天野グループの実験で観測されている pn ダイオードにおける逆方向リーク電流の起源となっていることが強く示唆される。

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：　朴泰祐、高橋大介、M.H.N. Al Assadi

協力者：　小野倫也（神戸大学）、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・研究開発]

（実施内容）

大規模系における RSDFT 法ダイナミクス計算のため CPMD プログラムのさらなる高速化のためのチューニングを行い、化学反応経路を探索するためのメタダイナミクス法のモジュールの高度化を行った。その結果、CPMD の性能が 8%向上し、また自由エネルギー解析が可能となった。その成果を名古屋大と共有し、応用計算として当初 GaN や SiC の大規模計算ならびに結晶成長に関する第一原理計算を行う予定であったが、SiO_2 の方が適していることがわかり、SiO_2 1536 原子系のテスト計算を実行した。結果として、1000 原子超の第一原理分子動力学計算による反応解析が様々な大型計算機システム上で実現可能となった。

平成 30 年度より、富岳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 での主査として活動しており、令和元年度も引き続き主査を務め、毎月理化学研究所東京オフィスにて WG の会議を行った。

なお、業務計画書に記載は無かったが、協力者の結果を活かすためグラフェンを挿入した際の電極のトンネル磁気抵抗差の研究を協力者の開発するソフトウエア RSPACE で実施した。その結果、Ni-グラフェン-Ni の系で大きな磁気抵抗差が得られ、記憶媒体への応用などで有効であることが初めてわかった。なお、上記で得られた成果は国内外の会議や論文で発表した。

（具体的な成果）

(1) RSDFT および RSCPMD の高度化

RSDFT (Real Space Density Functional Theory)は実空間差分法による第一原理電子状態計算プログラムであり、その一機能として実装されている RS-CPMD(Real Space Car Parrinello Molecular Dynamics)とともに、富岳プロジェクトにおける重点課題アプリの１つとして、コデザインによる開発が進められている。コデザイン開発の成果により計算性能は大幅に向上することが期待されるが、ソフトウエアとしてより一般に普及させるためには、さらなる大規模化・高速化と計算機能の拡充も非常に重要なポイントとなる。

RSDFT には２つのバージョン、すなわち研究開発に使用しているもの（通常版）、ならびに統合版（コデザインの成果を取り込んだ版）がある。通常版と統合版の最も大きな違いは、前者はバンド並列実行時にも、全プロセスがすべてのバンドのデータを格納するだけのメモリを持つ実装となっており、後者はバンド並列時には、分割された分のデータだけを持つ実装となっていることである。令和元年度にはそれらの２つのバージョンの再結合を行い、データに整合性があるかどうかを確認した。

RS-CPMD 計算では、1 ステップにかかる計算を極力短縮したい。例えば 1 ステップ 1 秒違えば、100000 ステップで 30 時間ほどの変化になる。RS-CPMD については、これまでもかなりのチューニングを行ってきたが、Hartree ポテンシャルとローカルポテンシャルを同時に実行することにより、FFT を 1 回で済ますことができる。また、ハミルトニアン演算と力の計算で、非局所擬ポテンシャルプロジェクターと波動関数の内積について全く同じものを 2 回計算している箇所がある。こちらをまとめ上げることにより、主要ボトルネックのチューニングと異なるが表 1 に示すように、およそ 0.7 秒の時間短縮につながった。

「京」は 2019 年 8 月でシャットダウンされ、次の富岳ができるまでの間は他のスーパーコンピュータを用いて日々の計算を行う必要がある。その予備調査として、名古屋大学情報基盤センターの FX100 および九州大学情報基盤センターの Fujitsu PRIMERGY CX2550 で、「京」で行っていたのと全く同じ RS-CPMD 計算を実行し、計算時間の比較を行った（表 2）。最左列のノード数を用いると、「京」と同程度の計算時間となった。

表 1：　「京」512 ノードを用いた SiO_2 1536 原子系の RS-CPMD 計算 1 ステップに要する時間

ノード数	1 MD	ROTORB	GETFORCE	WF_FORCE	ROTORB2
修正前	9.99	4.51	1.39	0.95	3.01
修正後	9.29	4.53	1.06	0.59	2.97

表 1：　「京」、FX100、CX2550 での RS-CPMD の計算時間の比較（1536 原子アモルファス SiO_2）

ノード数	1 MD	ROTORB	GETFORCE	WF_FORCE	ROTORB2
K 512 nodes, 8 threads, 512 MPI	9.29	4.53	1.06	0.59	2.97
FX100 128 nodes, 8 threads, 512 MPI	7.60	3.50	1.00	0.80	2.17
CX2550 M4 57 noes 2048 cores Flat-MPI	8.76	3.32	2.55	0.50	1.92

また、RS-CPMD における計算機能の拡充を目的として、自由エネルギー計算手法の実装を行った。その際、フリーソフトである PLUMED のモジュールを利用した。PLUMED は分子動力学計算における標準的なサンプリング手法、自由エネルギー計算手法、および各種解析手法を提供するライブラリである。主要な MD コードを計算エンジンとすることで、多様な MD シミュレーションが可能となる。特に、RS-CPMD から、PLUMED の各種ルーチンを呼び出せるようにし、RS-CPMD の機能の拡張を行った。PLUMED は LGPL でライセンスされるソフトウエアである。したがって PLUMED をライブラリとしてリンクするだけの使用に限定するならば、本体（RSDFT および RS-CPMD）のライセンスが特に影響を受けることはない。これらの実装により、メタダイナミクス法を用いた反応解析が可能となった。

(2)トンネル磁気抵抗の理論解析

トンネル磁気抵抗(TMR)効果は1975年にFe/Ge/Co接合系において初めて観測された。その後様々な接合系が、巨大磁気抵抗をもつFe/Cr接合系に匹敵するほどの磁気抵抗比を持つことが明らかとなり、TMRが注目を集めるようになった。従来の酸化物系では、欠陥や不純物ができやすく、理想的な界面を作るのが困難であることから、近年、強磁性金属でグラフェンを挟んだ磁気トンネル接合(MTJ)系が注目を集めている。本研究ではまずNi-Ni間とNi-Co間のトンネル現象について調べるために、第一原理計算により、電極間に真空を挿入した系（Ni/vacuum(vac)/Ni系、Co/vac/Ni系）について伝導特性を理論的に予測した。その結果から同種金属同士の接合系(Ni/vac/Ni)と、異なる金属の接合系(Co/vac/Ni)でのTMR比の違いについて議論した。そして図A-8にあるようなNi/Gr/Ni系、Co/Gr/Ni系（Grはグラフェン）に対して第一原理伝導特性計算を行い、真空を挿入した場合と比較し、MTJ系でのTMR比に与えるグラフェンの影響について議論した。また電極の積層構造の違いがTMR比に与える影響について理論的に予測した。

RSPACEを用いた伝導特性計算の結果、積層構造の違いによる伝導度の差は殆どなく、伝導度から求められるTMR比も積層構造の違いに影響を受けないことがわかった。そして求まった伝導度をもとにTMR比を求めた結果以下の表3のようになった。得られたそれぞれの系のTMR比を比較すると、Ni/Gr/Ni系とCo/Gr/Ni系のTMR比はNi/Gr/Ni系の方が高く、Ni/vac/Ni系とCo/vac/Ni系のTMR比はCo/vac/Ni系のほうが高くなっている。真空を挟んだ系(Ni/vac/Ni,Co/vac/Ni)に関しては、majorityスピンの磁化の向きが平行の場合の伝導度($G_P=G_{\uparrow\uparrow}+G_{\downarrow\downarrow}$)はNi/vac/Ni系の方が高くなっており、反平行の場合($G_{AP}=2G_{\uparrow\downarrow}$)はNi/vac/Ni系の伝導度が高くなっている。このことからTMR比への寄与が大きいのは反平行の伝導度であることがわかる。一方でグラフェンを挟んだ系(Ni/Gr/Ni,Co/Gr/Ni)に関しては、majorityスピンの磁化の向きが平行の場合の伝導度はNi/vac/Ni系の方が高く、反平行の場合はCo/Gr/Ni系の方が伝導度が高くなっている。

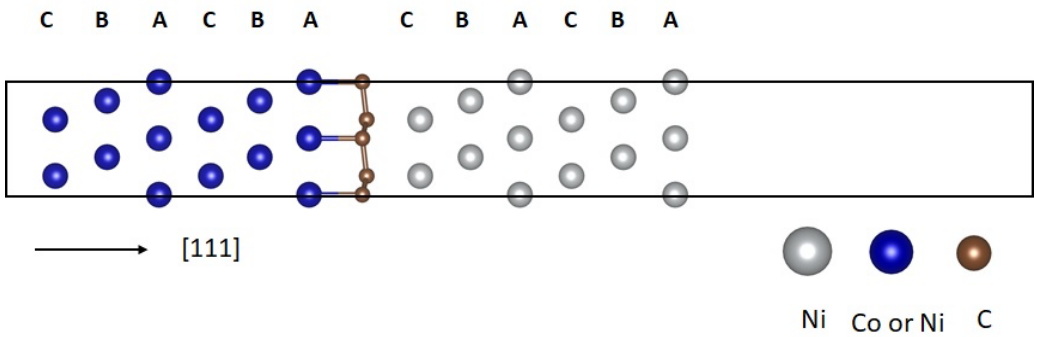


図 A-8： 金属グラフェン接合系に対する計算モデル（真空(vac)モデルでは C 原子を消去した）

表 3: 各系における伝導度と磁気抵抗比

Junction	$G_{\uparrow\uparrow}$	$G_{\downarrow\downarrow}$	$G_{\uparrow\downarrow}$	TMR ratio
Ni/Gr/Ni	17.4	19.3	16.2	13.6
Co/Gr/Ni	18.1	15.5	16.7	0.781
Ni/vac/Ni	3.28	5.70	4.35	3.30
Co/vac/Ni	3.80	4.89	4.02	8.26

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（大阪工業大学）

[アプリケーションソフトウエア・研究開発]

（実施内容）

RSDFT と NEGF（非平衡グリーン関数）デバイスシミュレータの統合シミュレータ(RSDFT-NEGF)の開発により、ナノメートルスケール・トランジスタの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した。その過程で新しい計算手法を開発し、極微細デバイスのシミュレーションを実行した結果、経験的なバルク材料の物質パラメータを援用したシミュレーションではトランジスタ特性を正確に予測できないことがわかった。同コードを用いて、Ge および Si ナノシートトランジスタの性能予測を行った。その結果、Ge ナノシートトランジスタが高いゲート制御性を示すことがわかった。量子流体輸送シミュレータ(Hi-QHD)と現在産業界で用いられている流体型シミュレータ（ドリフト拡散シミュレータ）との連携を図った。その結果、移動度モデルなどの物理モデルの構築が重要であることがわかった。メニィコア対応での高速化・高度化を進めたフルバンド・モンテカルロ輸送シミュレータ(FBMC)を用いて、Si ナノシートトランジスタの電気特性を解析し、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た。その結果、高精度でシミュレーションを行うためには、ポアソンソルバーがボトルネックとなるため、さらなる高速計算手法の開発が必要であることがわかった。また、同コードと RSDFT-NEGF、Hi-QHD との連成を確立する手法の構築を試みた。その結果、Hi-QHD に必要なモデルパラメータのみの調整では高精度の連成が困難であり、Hi-QHD に組み込まれたモデル式を柔軟に変更できる枠組みが必要であることがわかった。

なお、業務計画書に記載は無かったが、開発した RSDFT-NEGF シミュレーション技術を活かすため、東北大学で開発されているナノワイヤトランジスタ構造のシミュレーションを実施した。そして実デバイス特性とシミュレーション結果とを比較した結果、シミュレーション結果はオン電流を高く評価する点を除き概ね良い一致が得られ、本シミュレーション技術が実際のデバイスに適用できることが示唆された。なお、上記で得られた成果は国内外の会議や論文で発表した。

（具体的な成果）

RSDFT-NEGF シミュレータに新しい計算手法を導入した。①デバイスを複数のセクターに分割し、②単一セクターの波動関数を基底関数展開し、③隣り合うセクターを結ぶ界面振幅を反

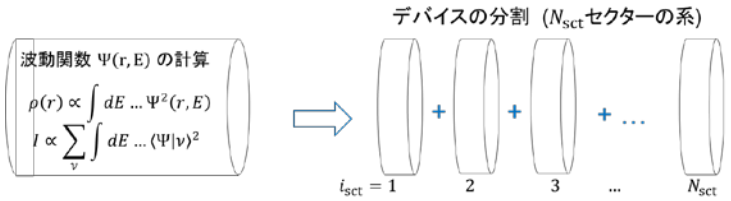


図 A-9：デバイスの分割

復法により計算ことにより実デバイスをシミュレーションできるプログラムを開発した。

計算では、はじめに、図 A-9 に示すように、デバイスを複数のセクターに分割する。そして各セクターの波動関数を基底関数で展開し、それらを接続する界面振幅を R 行列法に基づく反復法により計算することにより、全系の散乱問題の解を得る。その際、反復法の関係式においてチャネルの相互作用の一部のみを保持するなどを行い、さらに計算量を削減した。

図 A-10 にゲート長 10nm のナノシートトランジスタのシミュレーション結果を示す。図の計算は、RSDFT で求めた電子状態を等価モデルで記述してシミュレーションした結果である。ナノシートトランジスタはスタックすることにより電流を稼ぐことができる構造であるが、図の計算では、1 層の構造を仮定して計算した。赤四角が Si チャネル、青四角が Ge チャネルデバイスである。オン電流に大きな違いはないが、サブスレショルド領域において Ge チャネルデバイスの方が良好な特性を示すことがわかった。

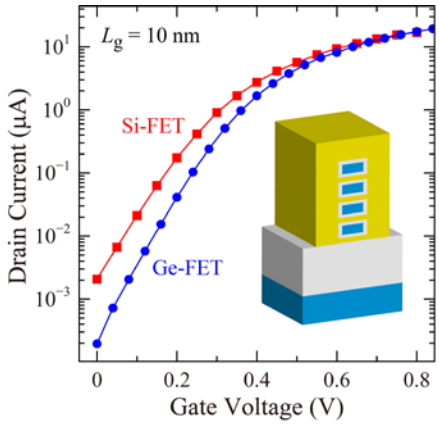
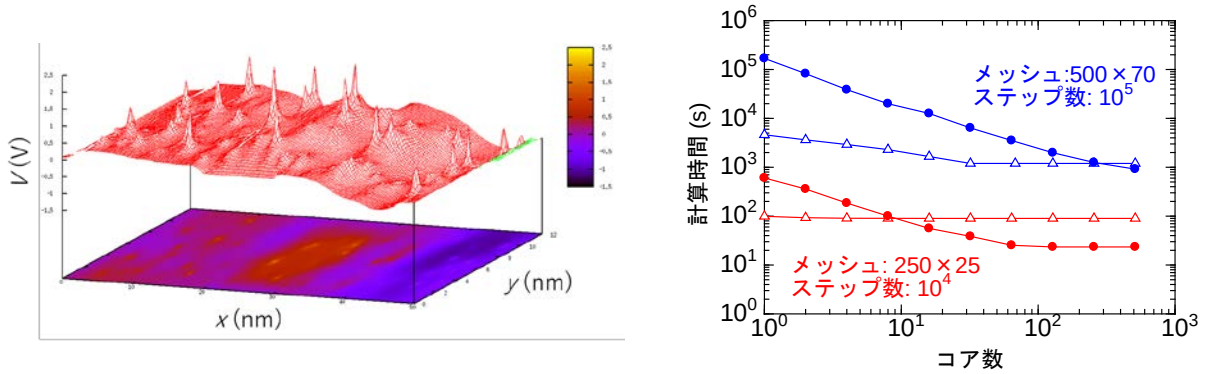


図 A-10：ナノシートトランジスタの伝達特性。Si と Ge の比較。挿入した模式図ではスタックしているが、シミュレーションは 1 層分のみを行った。

図 A-11 にゲートオールアラウンド型 Si トランジスタのモンテカルロシミュレーションの結果を示す。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ためには、短いタイムステップでポアソン方程式を解く必要があり、その計算がボトルネックとなる。①前処理に逆行列演算を 1 回行い、タイムステップ毎の計算は行列積演算によりポアソン方程式を解く手法と、②前処理時に LU 分解を 1 回行い、タイムステップ毎には前進・後退代入によりポアソン方程式を解く手法とを比較した。図 A-11(b)に示したように、コア数が多い場合は①の方が高速となることがわかった。しかし、図

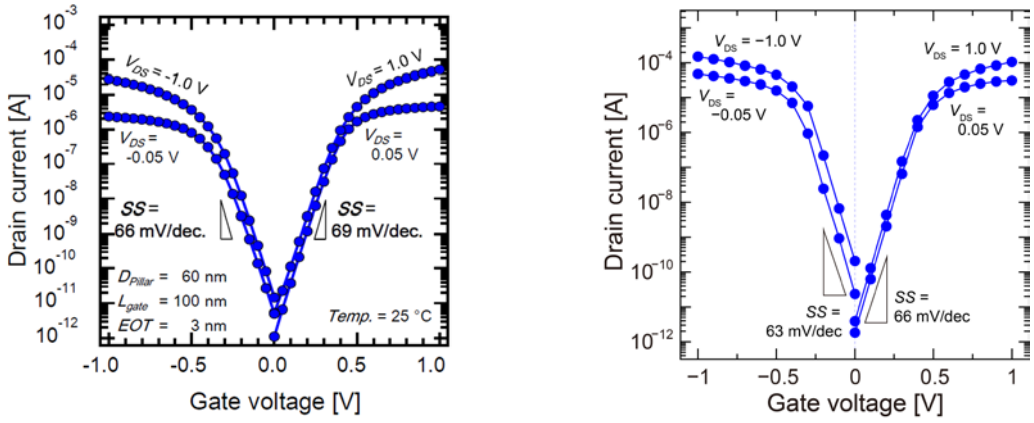


(a) (b)

図 A-11：ゲート長 10 nm のゲートオールアラウンド型 Si トランジスタのモンテカルロシミュレーション結果。(a)は、電位分布のスナップショット。(b)は、計算時間のコア数依存性。赤と青は、空間メッシュ数の違いを表し、閉じた丸はポアソン方程式を解く際、前処理時に逆行列計算を 1 回行い、その結果をメモリ上に格納した場合、開いた三角は前処理時に LU 分解を行った場合。コア数が多くなると前処理時に逆行列計算を行う方が高速化できる。

のように、さらに多くのコアを利用しても、計算時間の短縮が望めないことから、さらなる高速計算手法の開発が必要であることがわかった。

図 A-12 に直径 60 nm、ゲート長 100 nm の Si ナノワイヤトランジスタの伝達特性を示す。ナノワイヤの直径が 60 nm と大きいことから、このシミュレーションでは、有効質量近似に基づく NEGF 法を用いている。東北大学で開発されているナノワイヤトランジスタ構造の実デバイス特性とシミュレーション結果とを比較した結果であり、シミュレーション結果はオン電流を高く評価する点を除き概ね良い一致が得られていることがわかる。このシミュレーションでは、フォノン散乱などの非弾性散乱を考慮していないため、オン電流が高く見積もられたと考えられる。さらに、高精度で実デバイス特性の予測を行うためには、非弾性散乱の導入が必要であることがわかった。



(a) (b)

図 A-12：直径 60 nm、ゲート長 100 nm の Si ナノワイヤトランジスタの伝達特性。(a)測定結果、(b)シミュレーション結果。各図とも左側が p チャネル、右側が n チャネルデバイスの結果。

再委託先：国立大学法人筑波大学（数理物質系）

[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（大阪工業大学）

[アプリケーションソフトウエア・研究開発]

（実施内容）

界面近傍に局在する乱れ（イオン化不純物）に伴ったポテンシャル揺らぎを導入した自己無撞着モンテカルロシミュレータ(SCMC)を現実的な立体デバイス構造に応用し、特性ばらつき等のデバイス特性へのポテンシャル揺らぎの影響を定量的に評価した。その結果、半導体基板とそれを取り囲む絶縁膜との誘電分極に伴ったポテンシャル変調が界面近傍で顕在化することをモンテカルロシミュレーションで初めて実証した。同時に、界面近傍に存在するイオン化不純物に伴った界面での分極電荷の影響を物理的に考察することで、より簡便で実用的なドリフト拡散法(DD)に基づいた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を構築した。その結果、連続体近似のもとで記述されたドリフト拡散シミュレータ(DD)にイオン化不純物の離散性を物理的に整合性の取れたかたちで導入することが可能になった。構築した物理モデルをドリフト拡散シミュレータ(DD)と自己無撞着モンテカルロシミュレータ(SCMC)に導入してデバイス特性を評価することで、界面近傍に局在する離散不純物の物理モデルの汎用流体デバイスシミュレータにおける有効性を検証した。その結果、3 次元 Fin 型 Si-MOSFET 構造のもとで、2 種類の絶縁膜（SiO_2 および HfO_2）で正負逆方向にしきい値電圧がシフトすることをドリフト拡散(DD)シミュレーションで見出した。また、自己無撞着モンテカルロシミュレータ(SCMC)に 2 種類の絶縁膜（SiO_2 および HfO_2）を導入することで、界面近傍で向きが逆の分極場が異なる絶縁膜で生じることを確認し、ドリフト拡散シミュレーション(DD)の結果の正当性を実証した。なお、上記で得られた成果は国内外の学会や論文で発表した。

（具体的な成果）

半導体トランジスタはナノスケールに微細化され、Fin-MOSFET に代表されるような立体ゲート構造を導入することで、さらなる高速化ならびに低消費電力化を実現している。このようなナノスケールデバイスにおいては、トランジスタ動作を実現するために必要不可避な半導体基板へのドーパント（イオン化不純物）の個数が数個程度となり、不純物の位置および個数に対するばらつきでデバイス特性がばらつき、微細化を阻害する最大要因になっている（図 A-13）。一方、デバイス特性解析で最も汎用的かつ重要なシミュレーション手法であるドリフト拡散法(DD)では、キャリアや

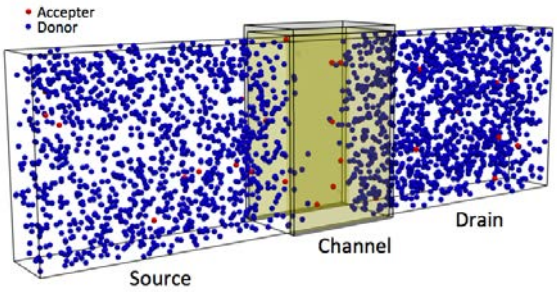


図 A-13：　FinMOSFET 構造での基板の不純物密度に応じてランダム分布させた不純物の典型的な空間分布。

不純物の荷電粒子が連続体近似で定式化されているために、特性ばらつきを引き起こす不純物の離散性をシミュレーションに正しく反映させることができていない。そこで本研究では、離散不純物に伴ったポテンシャル揺らぎをドリフト拡散法(DD)に物理的に整合するかたちで導入する（不純物の）物理モデル構築と、その物理モデルの有効性を自己無撞着モンテカルロ法(SCMC)も併用することで検討した。

バルク形状および界面を有するデバイス構造のもとでの不純物およびキャリアの離散性に伴ったポテンシャル揺らぎの物理機構を明らかにするために、クーロン相互作用を高精度に導入した自己無撞着モンテカルロ法(SCMC)に正しい長さのスケールで離散性を導入し、半導体中および半導体と絶縁酸化膜界面近傍でのポテンシャル揺らぎを定量的に評価した。その結果、荷電粒子の離散性に伴ったポテンシャル揺らぎの主要因が、バルクかつ平衡状態では自由キャリアによる遮蔽で消失するクーロンポテンシャルの長距離成分であること、また界面を有するデバイス構造では、半導体と絶縁膜の誘電率の違いに伴った分極電荷が界面上に誘起されることをシミュレーションで初めて実証した。このときのポテンシャル変調は、界面近傍で顕著であるが、界面から遠ざかるにつれて遮蔽によって無視できることも確認した（図 A-14）。これらの結果から、界面を有するデバイス構造でのポテンシャル揺らぎは、キャリアおよび不純物の鏡像電荷で近似できるアイデアを得た。なお、界面で誘起される分極電荷は荷電粒子の離散性に伴った自己鏡像効果であるため、クーロン相互作用を粒子描像で高精度に扱った本グループの自己無撞着モンテカルロ法(SCMC)を用いることではじめて評価が可能になる現象である。

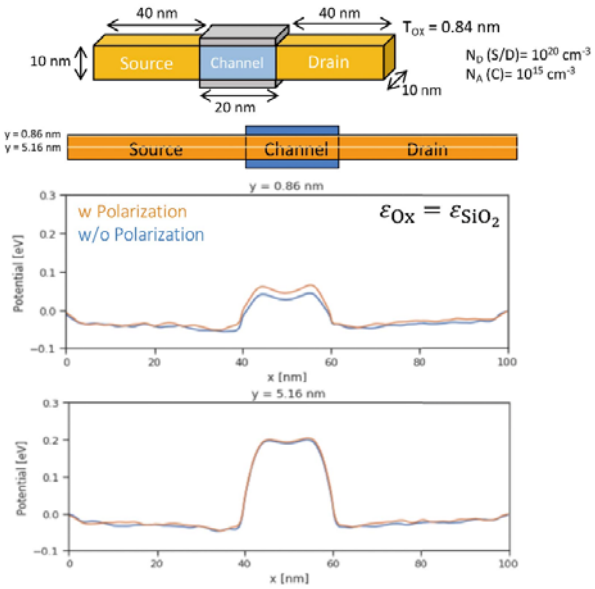


図 A-14： ダブルゲート MOSFET での分極の有無での界面近傍（上図）および基板中心（下図）でのポテンシャル分

うえで得た知見をもとに、界面近傍にあるイオン化不純物で誘起される分極電荷をグリーン関数で求めることで、界面の影響を考慮したポテンシャル揺らぎの計算が可能になること、鏡像電荷を用いることでドリフト拡散法(DD)に適用可能な物理モデルの構築が可能であることを見出した。より具体的には、半導体誘電率に対する絶縁膜誘電率の大きさに伴って界面で誘起される分極電荷の符号が反転すること、界面近傍で生じるポテンシャル揺らぎを再現する離散不純物電荷密度が、遮蔽で誘起されるキャリア電荷密度と（符号を反転することで）等しくなること（図 A-15）、界面の影響のもとでのポテンシャル揺らぎを表す離散不純物モデルが鏡像電荷を用いて精度よく近似できること、を見出した。

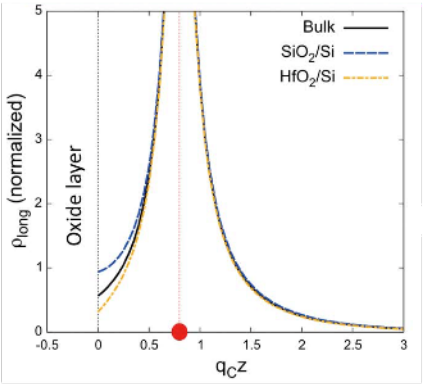


図 A-15： 界面近傍の離散不純物によるポテンシャル揺らぎを生成する離散不純物電荷密度と絶縁膜誘電率の依存性。

界面を有するデバイス構造に適用可能な上述の荷電粒子の離散モデルを自己無撞着モンテカルロシミュレータ(SCMC)に導入して、ダブルゲート MOSFET 構造のもとでシミュレーションを実行し、絶縁膜誘電率の大きさによって誘起される自己鏡像電荷の符号が正しく反転することを確認し、グリーン関数を用いた解析と離散不純物の物理モデルの正当性を検証した。具体的には、Si 基板の誘電率(11.9)に対する絶縁膜の誘電率の大きさは SiO_2: 3.9、HfO_2: 25 であることから、SiO_2 では電子と同符号の鏡像電荷、HfO_2 では電子と異符号の鏡像電荷が生じる結果をシミュレーションで確認できた（図 A-16）。

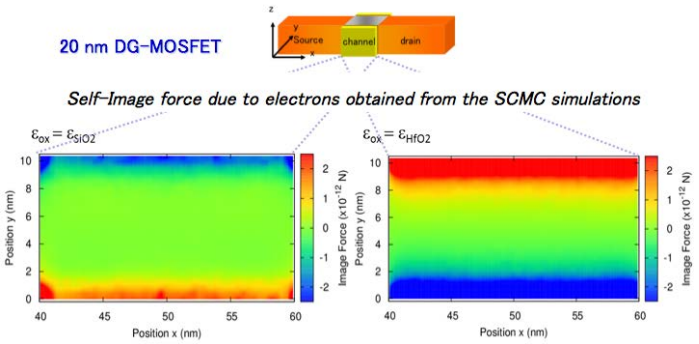


図 A-16： 2 種類の絶縁膜（SiO_2（左）および HfO_2（右））のもとでの界面近傍の離散キャリア（電子）による自己鏡像電荷。Si 基板の誘電率に対する絶縁膜の誘電率の大きさによって自己鏡像電荷の符号が反転する。

構築した離散不純物モデルをドリフト拡散シミュレータ(DD)に導入し、Fin-MOSFET 構造のもとでシミュレーションを実行した。絶縁酸化膜としては、モンテカルロシミュレーションと同様に、SiO_2 と HfO_2 を想定した。界面の影響を考慮するための鏡像電荷を伴った離散不純物モデルを用いた場合、酸化膜の誘電率の違いによって基板の実効的不純物電荷密度の大きさが変調されることを確認した（図 A-17）。しかも、グリーン関数およびモンテカルロシミュレーションの結果と同様に符号が反転していることも確認した。基板内の不純物分布をランダムに変えてドレイン電流-ゲート電圧特性を求め、500 サンプルの結果を統計的に平均したサブスレショルド特性を図 A-18 に示す。絶縁酸化膜の違いに応じて、サブスレショルド特性すなわちデバイスのしきい値電圧が（統計的平均の結果）シフトしていることがわかる。今回のデバイス構造および材料物性ではシフト量は極めて小さいが、材料および構造によっては、誘電率の相違によって大きな分極の影響が生じ得ると言える。

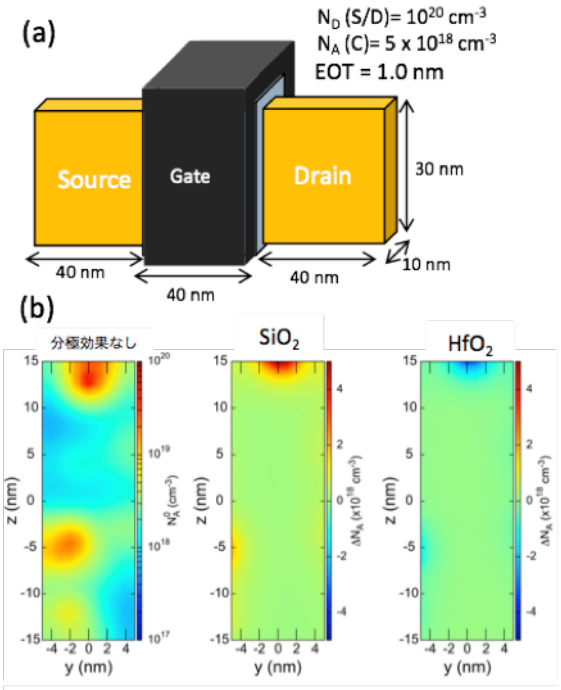
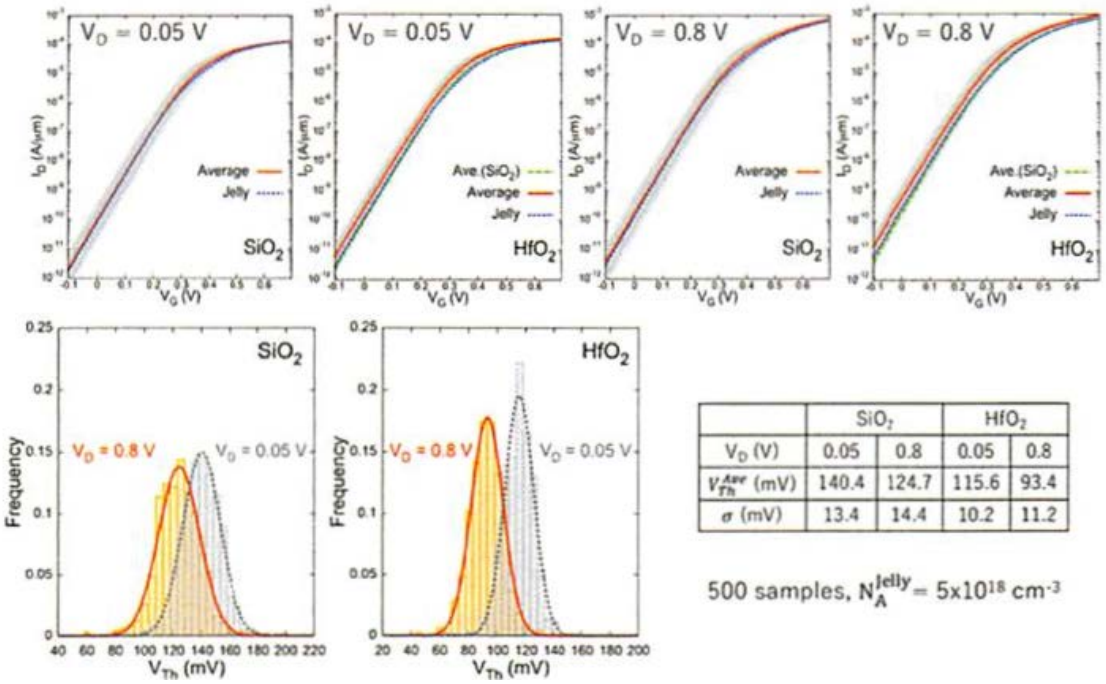


図 A-17： (a) ドリフト拡散法に用いた Fin-MOSFET 構造と（b）実効的な基板不純物密度の絶縁膜依存性。

これらの結果は、デバイスのスイッチ動作を制御するしきい値電圧が不純物の離散性に伴ってシフトすることを示唆しており、デバイス設計において重要な知見となる。しかもこのシフトは、離散不純物に伴った鏡像電荷を反映しているため、連続体近似で記述されるこれまでのドリフト拡散法(DD)では評価することのできなかったデバイス特性である。



	SiO_2		HfO_2	
V_D (V)	0.05	0.8	0.05	0.8
V_{Th}^{Ave} (mV)	140.4	124.7	115.6	93.4
σ (mV)	13.4	14.4	10.2	11.2

500 samples, $N_A^{Jelly} = 5\times10^{18}$ cm^{-3}

図 A-18：(上)ドレイン電流に対するゲート電圧依存性。ドレイン電圧を 0.05V および 0.8V とした。Jelly はチャネル内のアクセプタ密度を一様(5×10^{18}cm^{-3})とした場合の特性を示す。(下)しきい値ばらつきの絶縁膜依存性。

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、物質科学の第一原理計算手法の１つである時間依存密度汎関数理論に基づき、光電磁場・電子・そしてイオンのダイナミクスを同時に記述する計算コードを開発し、近接場光励起や高強度パルス光励起を利用した新奇な光・電子融合デバイス原理を第一原理計算に基づき探究することを目的としている。筑波大学計算科学研究センターの研究者が計算コードの開発と高強度パルス光励起に関する研究を中心に進め、分子科学研究所の飯田助教、東京大学工学系研究科の八井准教授が、近接場光励起を用いた新奇なデバイス開発において、計算と実験的な検証を進めた。ソフトウエア開発に関しては、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) v.1.2.0 を公開しており、本年度はそのコード全体を改変し利便性を格段に向上する v.2 の開発に向けた作業を行った。

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、二倍波励起と波数励起を組み合わせることで受光感度を高めるシリコンデバイスの設計をさらに進めるとともに、顕微分光手法を利用し金属ナノ微粒子近傍での近接場光波数励起の解明を行った。これにより、金微粒子近傍において局所的に電場が増強されることを明らかにした。高強度パルス光が斜方入射する場合のマルチスケール計算により、シリコン薄膜の透過によるパルス波形の変化を計算し、波形変化が動的フランツ・ケルディッシュ効果と同様なメカニズムで起こることを明らかにした。さらに、光電磁場と電子に加え、格子振動を記述できるようシミュレーション法を拡張し、コヒーレントフォノンを介してプローブ光に伴い発生する誘導ラマン光の波形が、ポンプ・プローブ時間差により制御できることを明らかにした。これらの成果は、パルス波形の自在な制御を可能とする方法を示すものであり、新奇な光デバイス原理として有用な知見を与えるものである。

光科学ソフトウエア SALMON の利用を促進するため、ウェブページの整備とともにメーリングリストの整備を進めた。また関係する研究者が集まるグループミーティングを 4 月 3-4 日に開催し、9 月 2-3 日には大阪大学 CMD ワークショップにおいて、また 11 月 28 日には東北大学サイバーサイエンスセンターにおいて、SALMON の講習会を実施した。

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（R1.9 月迄）

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）、
植本光治（神戸大学 R1.10 月～）

[アプリケーションソフトウエア・研究開発]

（実施内容）

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、近接場光励起や高強度パルス光励起を記述することができる計算プログラム SALMON(=Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience)の開発を継続して進めた。特に、数千原子からなるナノ構造体や、電磁場と電子ダイナミクスを結合した記述が重要となる問題に対して、メニーコアや GPU を含む多様なプロセッサを搭載した超並列計算機を高効率に利用して、計算を高速に遂行できる機能を発展させた。その結果、富岳を用いれば数千原子からなる物質の光応答の実時間計算を行えることを示した。これを用いて、以下に述べるように光・電子融合デバイス設計やレーザー加工技術に資する基礎を確立する成果が得られた。

東京大学・分子科学研究所と協力して金属ナノ微粒子近傍の近接場光波数励起の解明やシリコンデバイスの光高機能化を目指し、計算コードを整備した。その結果、波数励起によりシリコンデバイスの受光感度を高めるための指針となる知見が得られた。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として、パルス光が斜方入射する場合について、マクスウェル方程式と電子ダイナミクスを多階層結合したシミュレーション法を完成し SALMON に実装するとともに、シリコンにおいてパルス波形が変化するメカニズムを解明した。計算の結果と実験結果を比較し、パルス波形の変化が精度良く再現されることをあきらかにし、そのメカニズムが動的フランツ・ケルディッシュ効果に関連することを示した。さらに高強度パルス光が格子振動を誘起する場合にも計算コードを拡張し、ダイヤモンドにおいて原子運動によりパルス波形が変化するメカニズムをあきらかにした。その結果、コヒーレントフォノンのプローブ過程において誘導ラマン光の発生と増幅が重要であり、その波形はポンプ・プローブ時間差により大きく変化することをあきらかにした。これにより、非線形光物質相互作用を用いて光波波形を整形する多様なメカニズムをあきらかにし、新奇な光デバイス原理となることを示した。その結果、SALMON が光波波形を用いた新奇なメカニズムに基づく情報処理を発展させるために有用なソフトウエアであることを示すことができた。なお、上記で得られた成果は国内外の学会や論文で発表した。

（具体的な成果）

アプリケーション開発に関しては、前年度の成果に引き続き、富岳に向けて、A64FX プロセッサに対して主たる計算となるステンシル計算についてさらなる最適化を行い、コンパイラによるベクトル化を促進した。富岳共用前評価環境にて 1152 ノードまでの性能評価を行い、その結果とコードの問題点について情報処理学会第 173 回 HPC 研究会にて報告した。この結果からさらなる最適化を行い、通信や計算について実空間グリッドを計算するコミュニケータへ局所化、FFTE を用いた FFT 計算を複数の方程式(Hartree potential + Maxwell FDTD)を並行計算することで実行時間を削減、プロセスマッピングのオーダを切り替えられるようにすることで支

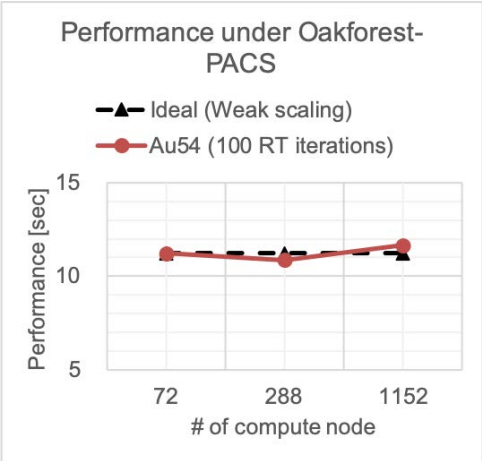


図 B-1：メニーコアプロセッサを用いた電子ダイナミクス計算の実行効率。

配的な通信を局所化可能にする、などを行い、富岳での大規模実行に対応可能なアプリケーションとして整備を進めた。図 B-1 に、富岳において計算を計画している数千原子系を想定した計算の実行効率を、富岳とほぼ同性能を持つメニーコアプロセッサからなる Oakforest-PACS における SALMON の測定結果を示す。コードに対する最適化の実施により、1152 ノードまでの弱スケーリングはほぼ問題ない状況であることが確かめられており、富岳においても高い性能が期待できることを示している。

高強度なパルス光がシリコン薄膜を伝搬する際に、パルス波形がどのように変化するのかを、マックスプランク量子光学研究所のアト秒実験グループと協力して調べる研究を継続した。実験では、反射光が発生しないブリュスター角を入射角としているが、計算においても斜方入射が可能となったことから、シリコン薄膜の透過によるパルス波形の変化を調べた。図 B-2 に、その結果を示す。青線は弱いパルス光が透過した場合を示し、赤線が高強度パルス光が透過した場合を示す。計算結果から明らかなように、光電場が強い部分だけが強く抑制され、弱い電場の部分はそのまま透過していることがわかる。このように、高強度パルス光が薄膜を透過すると強い電場の部分のみを削り取る働きをすることから、波形整形の有力な手段となることがわかった。なお、実験から取得された結果も同様の振る舞いを示しており、計算が高い精度で測定を模擬していることを確認している。強い電場が切削されるメカニズムを解析的手法で分析したところ、動的フランツケルディッシュ効果と類似したメカニズムにより理解できることが明らかになった。これらの結果は、論文にまとめつつある段階にある。

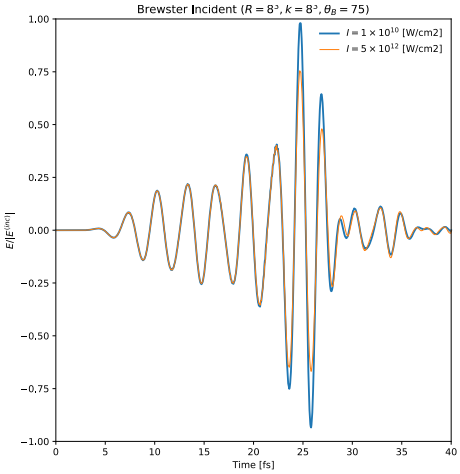


図 B-2：シリコン薄膜を透過した高強度パルス光の波形変化。青線は弱い光・赤線は強い光が透過した場合。

次に、電子の応答に加えて格子振動を伴う記述の開発を進め、例として空間的・時間的に位相がそろったコヒーレントフォノンのポンプ・プローブ分光に対するシミュレーションを行った。これにより、光電磁場、電子、そしてイオンの運動を、第一原理計算により同時に記述する理論と計算法が得られたことになる。ポンプ光により生成される格子振動の時間・空間的な分布や、プローブ光の伝搬、特にプローブ光に伴い生じる誘導ラマン光の生成と増幅の過程を経験的なパラメータを用いることなく記述することが可能となった。図 B-3 に、パルス光によるコヒーレントフォノン生成過程に対する計算結果を示す。赤線で示されたポンプ光電場により電子励起が起こり、電子励起のある時間だけイオンに力が働き、結晶内での格子振動

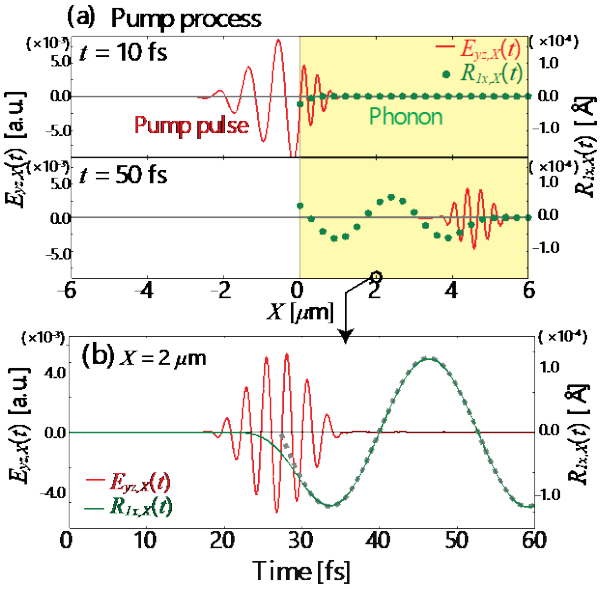


図 B-3：ダイヤモンド表面にパルス光が入射した場合に発生する格子振動に対するマルチスケール第一原理計算。

が起こる。パルス光が通過したのちは減衰のない格子振動が継続している。この格子振動は、波数が 0 の光学フォノンである。図 B-4 に、プローブ光が薄膜を投下した後の波形を示す。赤線は入射したプローブ光と同じ偏光方向の電場を表し、青線はそれに垂直な成分に現れる誘導ラマン光を、ポンプ光との 2 つの時間差の場合について示す。誘導ラマン光は、プローブ光が物質中を伝搬する距離に比例して増幅するのに加え、ポンプ光との時間差により波形が大きく変化することが示された。これは、格子振動の節がプローブ波形を変化させたためである。この知見は、パルス波形を整形する新しい手段として注目される。これらの結果は、Phys. Rev. B 誌に発表した。

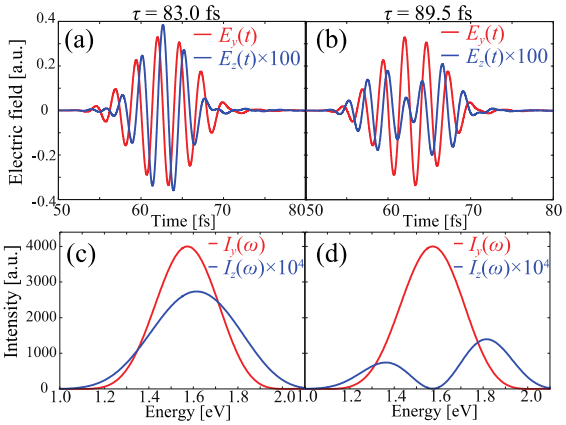


図 B-4：ポンプ・プローブ時間差による誘導ラマン光の波形の比較。下はスペクトル。

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：　八井崇

協力者：　佐藤匠、浅沼将人

[アプリケーションソフトウエア・研究開発]

（実施内容）

平成 30 年度に実現した、近接場光波数励起によるシリコン受光デバイスの高感度化について、その起源の詳細をあきらかにする研究を進めた。これまでは、デバイス全体での感度特性を評価しており、金属ナノ微粒子近傍での特性はあきらかになっていない。そこで、顕微分光手法を利用し、さらにはより詳細な波長依存性を評価することで、金属ナノ微粒子近傍での近接場光波数励起の解明を行った。電子顕微鏡像との対応関係から金微粒子近傍において局所的に電場が増強されることをあきらかにし、SALMON による計算の結果と一致した。なお、上記で得られた成果は国内外の会議や論文で発表した。

（具体的な成果）

昨年度までに pn フォトダイオードに近接場光源として金微粒子を散布し、波数励起を起こすことで受光感度の上昇を確認した。これまでの測定では基板全体での平均的な電場増強効果を測定していた。今年度は、金微粒子近傍での近接場光励起の様子を明らかにするために、pn フォトダイオードの電極間に対し顕微分光法を用いた感度評価を行った（図 B-5）。作製した横型 pn 接合を有する pn フォトダイオードに対して、直径 100nm の金微粒子を塗布し、波長 1.06um 励起時の顕微分光評価を行った（図 B-6 (a)）。その結果、金微粒子存在付近での光電流は確かに増大しているという結果が得られた（図 B-6 (b)）。

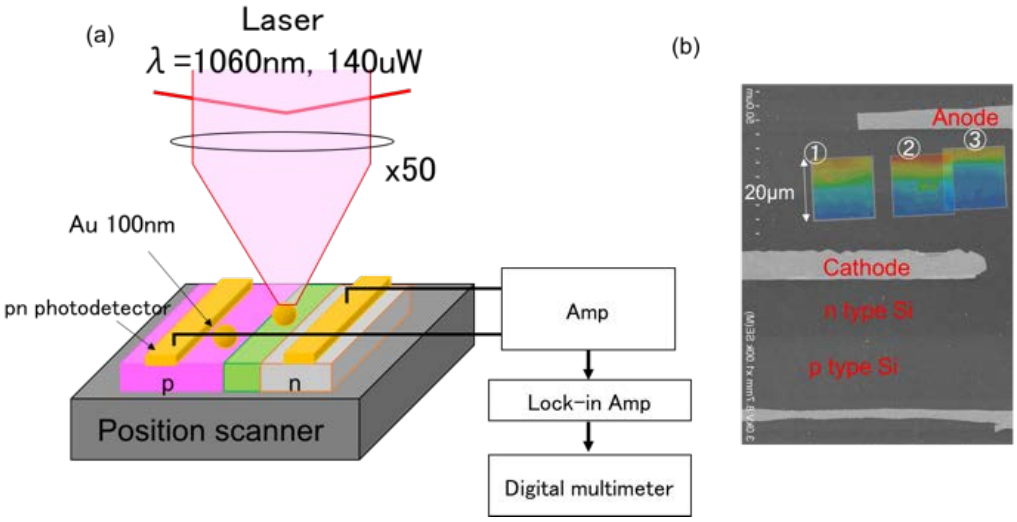


図 B-5(a)：顕微分光測定系。(b) デバイスの電子顕微鏡像

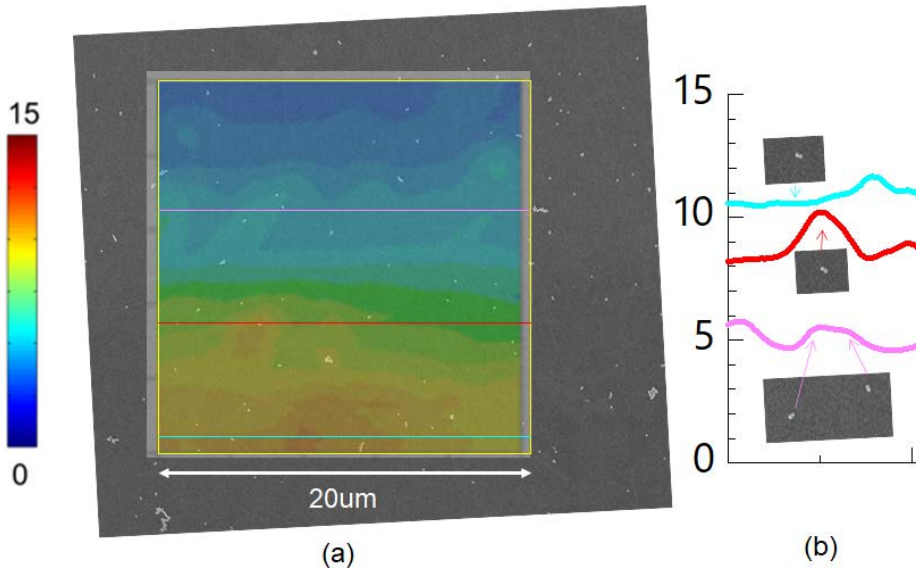


図 B-6(a)：図 B-5(b)における①の領域の拡大像。 (b)：図(a)における強度分布の断面像。

再委託先：大学共同利用機関法人自然科学研究機構

[研究実施体制]

責任者：　飯田健二

[アプリケーションソフトウエア・研究開発]

（実施内容）

実在系ヘテロ界面における光学応答の第一原理計算から得られる知見に基づき、近接場光を用いた二倍波励起によるエッチング法ならびに、異なる波数を持つバンド間遷移（波数励起）により受光感度を高めたシリコンデバイスの原理を確立した。その結果、シリコンを用いた赤外光検出素子について、近接場光源の粒子サイズを決めるための指針となる知見が得られた。なお、上記で得られた成果は国内外の会議や論文で発表した。

（具体的な成果）

これまで我々は、近接場光を用いることで二倍の周波数の励起が高効率に生じること（二倍波励起）と、異なる波数間の遷移をフォノンの介在なしに直接励起できること(波数励起)を明らかにしてきた。シリコンのバンドギャップはおよそ 1.1 eV なので、二倍波励起と波数励起の両者を利用すれば、赤外光でシリコンを励起することができる。そこで、これまでの近接場光励起に対する知見を踏まえて、シリコンを用いた赤外光検出素子の開発に資する知見を得るべく、第一原理計算プログラム SALMON を用いて研究を行った。

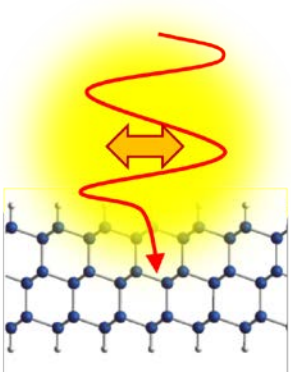


図 B-7：伝搬光と近接場光の両者を用いたシリコン薄膜の光学応答.

対象としたシステムを図 B-7 に示す。近接場光と物質の相互作用に焦点を当ててこれまで研究を進めてきたが、より現実的な系を扱うべく伝搬光も取り込みシミュレーションを行った。近接場光は半径 R の均一な導電体($\varepsilon = \infty$)が作る双極子放射場でモデル化して、その中心は水素末端から $R + 1$ Å 離した位置に置いた。

図 B-8 に、0.7 eV の光を用いたときの 1.35-1.45 eV での波数励起の強度を示す。R^6 に依存して線形に増加していることは、一光子吸収と同じく、近接場光強度に 1 次で比例することを意味する。さらに伝搬光強度に対する依存性を解析したところ、伝搬光のみでは励起されないにも関わらず、1 次で比例していることがわかった。これにより、近接場光強度と伝搬光強度の積によって励起の強度が決定づけられていることが明らかになった。近接場光だけによる 2 次の光励起($\propto R^{12}$)に比べてより小さな近接場光源でも比較的高効率に励起できるという、近接場光源のサイズを決めるうえでの指針となる知見が得られた。

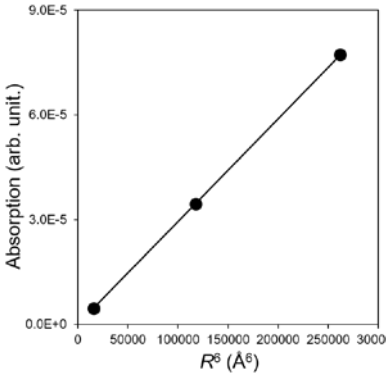


図 B-8：近接場光源のサイズに対する光励起強度の依存性。

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（学校法人早稲田大学）

サブ課題Ｃ総括

サブ課題Ｃではサブサブ課題 i)と ii)が共通の手法で結ばれ、手法開発と高度化について緊密に連携した。また、サブサブ課題 i)のテーマである高温超伝導とサブサブ課題 ii)のテーマ、トポロジカル物質に通底する共通の物理が隠れている可能性もいくつか明らかになってきている。これは今後富岳のプロジェクトでの本格的な追究の対象となる成果である。手法開発においても、富岳での大規模計算への準備が着実に進んだと言える。この連携と、課題間の交流のために 3 か月に 1 回（4 月 4 日、7 月 9 日、9 月 30 日、12 月 23 日、3 月 23 日）、定期的に全体 meeting を行い、進捗の報告を行って、研究の推進に役立てた。またサブサブ課題 i)の主要テーマの 1 つである銅酸化物研究に関して、1 か月に 1 回程度（4 月 18 日、5 月 20 日、6 月 13 日、7 月 16 日、8 月 19 日、9 月 19 日、10 月 16 日、11 月 7 日、11 月 25 日、12 月 23 日、1 月 21 日、2 月 13 日、3 月 23 日）、ミーティングを行い研究推進を行った。

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

再委託先：学校法人早稲田大学

[研究実施体制]

責任者： 今田正俊

実施者： 大越孝洋（R1.9 月迄）、Rico Pohle

協力者： 山地洋平、三澤貴宏、井戸康太（東京大学）、只野央将（物質・材料研究機構）、
酒井志朗、平山元昭、野村悠祐（以上、理化学研究所）

[アプリケーションソフトウエア・研究開発]

（実施内容）

平成 30 年度に引き続き、バルクの銅酸化物高温超伝導体の第一原理的な計算をさらに進め、水銀化合物の 1 バンド、3 バンドハミルトニアンおよびランタン化合物の 3 バンドハミルトニアンで、超伝導相を定量的に再現し、超伝導の発現メカニズムを解明するとともに、激しい競合の見られるストライプ相との関係を解明する研究を進めた。有効ハミルトニアンを、オープンソースパッケージ mVMC（汎用多変数変分モンテカルロ法）を用いて解き、その結果、水銀化合物の 1 バンドハミルトニアンの解では、反強磁性絶縁体、ストライプとの競合、支配的な d 波超伝導相がドーピング濃度の関数として得られ、相図は実験結果と定量的に一致した。この結果をもとに超伝導機構をあきらかにした。

以上のバルクに関するより深い知見をもとに、薄膜や界面における第一原理ハミルトニアンを導出したうえで、これを低エネルギーソルバーで解き、超伝導相を再現する研究を進めた。その結果、界面付近での格子緩和が、第一原理パラメータの急激な変化をなだらかにすることを見出し、バルクと比較した特徴を抽出した。その結果、界面原子層の超伝導を最大化する機構が、格子緩和がないときよりもより確実に働き、界面の機能強化を助けることがわかった。この成果は、30 年来の銅酸化物研究の歴史で初めてである。

以上の目的にも使えるように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

せた高精度の数値計算手法の応用を平成 30 年度に引き続いて進め、量子スピン液体解明に応用した。その結果、幾何学的フラストレーションのある 2 次元量子ハイゼンベルク模型で、量子スピン液体相が熱力学極限で存在することを高精度で確証した。

また、平成 30 年度に開始したプロジェクトである、MACE(Multi-scale Ab initio scheme for Correlated Electrons)のアルゴリズムの中に、電子軌道の自由度の一部を利用しないで計算を速く収束させる制限 GW 法を組み込み、RESPACK（第一原理多体摂動計算）の改良、多機能化を実装するプロジェクトを完成させて、ii)のトポロジカル相追究に応用する研究を進めた。その結果、RESPACK へのスピン軌道相互作用の組み込みや、制限 GW 法の組み込みに成功し、これをもとに典型的なペロブスカイト化合物やイリジウム化合物の有効ハミルトニアン導出を進めた。

実験データ解析のために機械学習法を活用する手法を実験研究者とタイアップしてさらに追求するとともに、銅酸化物の実験解析でその有用性を検証し、銅酸化物超伝導の起源となる物理量を抽出する研究を進めた。その結果、角度分解光電子分光の実験結果だけから、超伝導相における自己エネルギーの正常部分と異常部分を別々に抽出することに成功した。またこの機械学習手法をより一般的に新たな概念検証の手段として確立する研究を進めた。その結果、光電子分光だけでなく、トンネル分光など異なる実験手段も組み合わせて隠れた物理量を抽出する研究へとつながった。

mVMC 等をもとに、励起スペクトルを計算するアルゴリズムを発展させるため、強相関電子系の励起状態を線形応答（一粒子スペクトル関数、スピン、電荷構造因子等）による大規模計算で解明可能なコードを開発し、上記の超伝導相解明に適用した。その結果、mVMC をダイナミクスに拡張して、動的線形応答物理量を計算できるようになり、動的電荷構造因子や 1 電子スペクトル関数を求めて、今後の計算に応用できるようになった。

当初計画を超えたプロジェクトであるレーザー照射で実現しうる非平衡高温超伝導について、平成 30 年度の成果をさらに発展させて特定のフォノン励起による超伝導増強について、機構を解明する研究を進めた。その結果、いくつかのフォノンモードに対して超伝導が増強するかどうかの知見が蓄積し、富岳での解明への基礎が得られている。なお、上記の研究で得られた成果は、国内外の会議や論文で発表した。

（具体的な成果）

バルクの銅酸化物の第一原理ハミルトニアンの解に基づく超伝導機構の解明（Phys. Rev. B 101 (2020) 045124, Phys. Rev. B 99 (2019) 245155）

この研究の当初に、有効ハミルトニアンを導くにあたって、レベル繰り込みを考慮することが重要であることを明らかにしている。この繰り込みで改良した得られた有効ハミルトニアンを mVMC で解くことにより、ランタン化合物の 3 バンドハミルトニアンでは、モット絶縁相でのモットギャップ（電荷ギャップ）~2eV と反強磁性秩序モーメント ~0.6μ_B という計算結果を得た。この結果は実験結果とよく一致した。このような定量的に実験と一致する値が第一原理的に求められたのは 30 年来の銅酸化物研究の歴史で初めてである。また水銀化合物の 1 バンドハミルトニアンを mVMC で解いた結果、反強磁性絶縁相、ストライプとの競合、支配的な *d* 波超伝導相がドーピング濃度の関数として得られ、相図は図 C-1 のように実験結果と定量的に一致した。この結果をもとに超伝導機構を考察し、モット絶縁体が金属化するときに生じる特有の強い有効引力が超伝導の原因であることを突き止め、またこの有効引力がストライプ相との激しい競合の原因であることも明らかにした。さらに超伝導凝縮エネルギーのほとんどが、*d* 波超伝導が対称性から持つ二重占有の排除のために強いクーロン斥力の損が生じないことに起因することも示した。

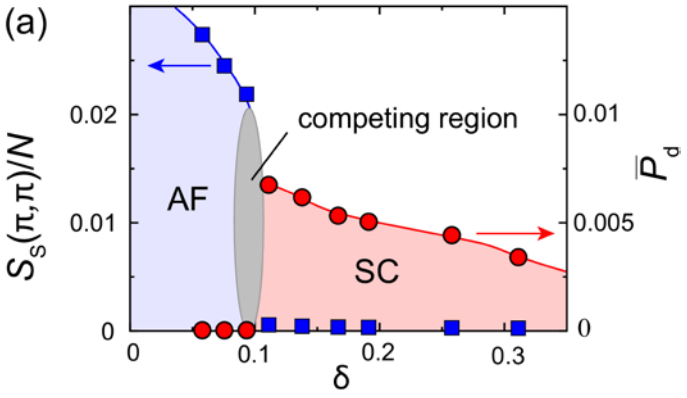


図 C-1：水銀系銅酸化物の第一原理有効ハミルトニアンを mVMC を用いて解いて得られた相図。δはモット絶縁体からのキャリアドーピング濃度、AF は反強磁性状態、SC は *d* 波超伝導相を示す。SS は静的スピン構造因子、P_d は超伝導長距離相関で、それぞれ反強磁性、超伝導の長距離秩序を示す。グレー領域は超伝導とストライプ相の激しい競合を表す。このキャリア濃度依存性の相図は実験結果を定量的に再現している。

界面での格子緩和（Phys. Rev. B 99 (2019) 155148）

銅酸化物モット絶縁体である La_2CuO_4 と過ドープで常伝導である $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ の界面での格子緩和を第一原理的に取り入れた有効ハミルトニアンを導くことに成功し、この有効ハミルトニアンで得られる、界面付近での格子緩和の影響を明らかにした。その結果、格子緩和が、界面での原子組成による第一原理パラメータの急激な変化を、相互作用および一体項パラメータともに緩和し、図 C-2 の例のように変化をなだらかにする役割を果たすことを見出した。パラメータ変化がなだらかになることによって、層内での相分離を抑えて、層間相分離によって、界面の超伝導を最大化する機構が、確実に働くようになり、界面一層での超伝導の最適化（最大化）に有利に働くことがわかった。

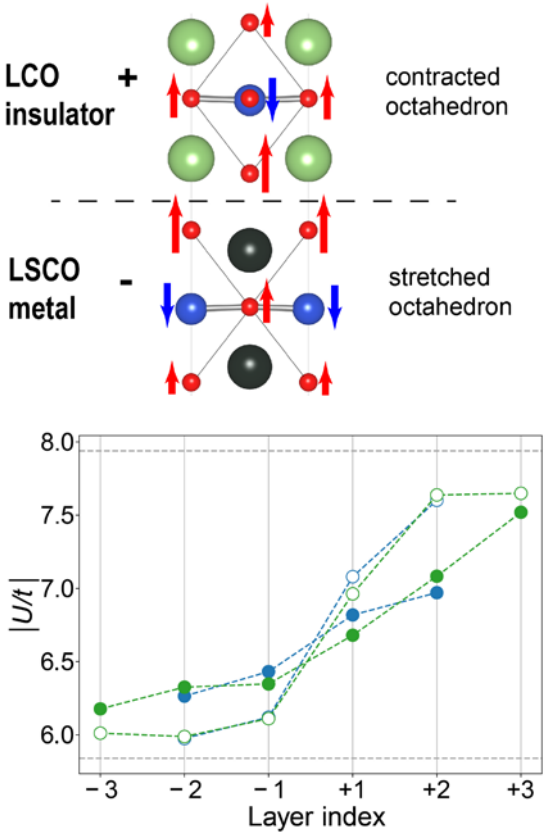


図 C-2：上図：銅酸化物での界面での格子緩和のようす。下図：オンサイト有効相互作用が原子層単位での急激な変化をなだらかにするようす。白抜きのシンボルが格子緩和前、塗りつぶしシンボルは２つの異なる方法で求めた緩和後。横軸は層番号を表し、負の側が $La_{2-x}Sr_xCuO_4$、正の側が La_2CuO_4

フラストレートしたスピン模型に生じるスピン液体

正方格子上の幾何学的フラストレーションのある量子ハイゼンベルク模型で、電子が分数化し、スピノンを分数粒子として持つ量子スピン液体相が熱力学極限で存在することを確証し、この量子スピン液体相を記述するスピン励起がディラック型の線形分散を持つ励起構造を持つことを示した。これはこのスピン液体がギャップのない分数化したスピノンで記述され、Z_2 ディラックスピン液体であることを支持する。このような分数粒子の性質の解明は、この分数粒子集団のもつ未開拓の物性開拓、機能開拓にとって重要な基礎的成果である。

機械学習による銅酸化物超伝導体の電子の自己エネルギーの解析(arXiv:1903.08060)

角度分解光電子分光のスペクトル関数（グリーン関数の虚部）の実験結果だけから、超伝導相における自己エネルギーの正常部分と異常部分を別々に抽出することに成功し、この２つの部分の虚部がいず

れも図 C-3 のように顕著なピーク構造を持つにもかかわらず、その和であるトータルな自己エネルギーではこのピークの寄与が完全に相殺して消えていることを見出すとともに、異常部分のピークが高温超伝導を引き起こしていることも突き止めた。さらにこのピークの裾野は振動数に比例する正常自己エネルギーの虚部を生み出し、実験的に知られていたマージナルフェルミ液体や温度に比例する電気抵抗と関連することも示した。これによってプランク液体と呼ばれる特異な液体の起源が自己エネルギーのピークである可能性も示唆した。一方で、超伝導の転移温度が超流動密度だけでなく、この自己エネルギーピークの構造によって決定されていることも見出した。

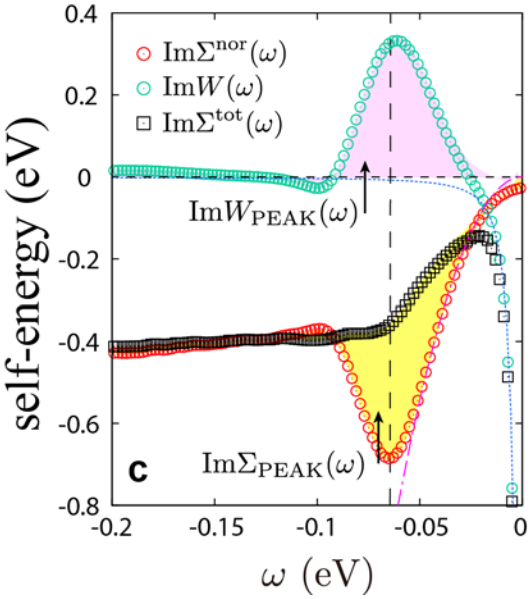


図 C-3：銅酸化物の角度分解光電子分光の実験データを機械学習によって解析し、超伝導相での電子の自己エネルギーの虚部の正常部分の寄与に見られる負のピーク（黄色部分）と異常部分に見られる正のピークの寄与（ピンク部分）の寄与が全体の自己エネルギー（両者の和、黒プロット）で相殺するさま。

スペクトル関数と電荷構造因子(Phys.. Rev. B 101 (2020) 075124, arXiv:191209960)

mVMC の手法をダイナミクスに拡張した。動的電荷構造因子や 1 電子スペクトル関数のエネルギー運動量依存性が厳密に計算できる小さなクラスターでの HΦ での計算結果とよく一致し、この手法が HΦ では手の届かない大きな系にも使えることを示した。ハバード模型に対して超伝導相でのスペクトル関数を求めて、d 波超伝導でのギャップの構造を求めた。得られた結果は銅酸化物と比べて非常に大きなギャップであることを示し、ハバード模型と現実の銅酸化物との差異に関する知見と洞察につながった。

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：　藤堂真治、森田悟史、大久保毅、金子隆威、三澤貴宏

協力者：　川島直輝、LEE Hyunyong、井戸康太（以上、東京大学）

今田正俊、大越孝洋（R1.9 月迄）、Rico Pohle（以上、早稲田大学）

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・研究開発]

（実施内容）

イリジウム酸化物およびルテニウム塩化物を出発点として、電子相関による電子自由度の分割の結果現れる量子スピン液体の実現、および分割化されたスピノンと呼ばれる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の実現のための物質設計指針を策定した。すなわち、有効的なスピン軌道相互作用の大きさの指標となるジャロシンスキ-守谷相互作用が、パイロクロア構造イリジウム酸化物における量子スピン液体実現のための制御パラメータであるという結果が得られた。またオープンソースパッケージ HΦ（汎用量子格子模型ソルバー）を活用した国際共同研究によって、歪みを加えた $CrSiTe_3$ が多フレーバーのマヨラナ粒子発現の舞台であるとの結論が得られた。この物質設計指針を策定する目標を達成するため、イリジウム酸化物等のモデル系において、量子スピン液体の発現条件を、これまで高度化を行ってきた mVMC、HΦ、およびテンソルネットワーク法を用いて引き続き評価した。その結果、パイロクロア構造イリジウム酸化物において、ジャロシンスキ-守谷相互作用が小さな場合に「高次のスピン相関」によって特徴付けられる反転対称性が破れた非磁性相が得られた。これは富岳を用いた数千電子を超えるさらなる大規模計算によってスピノン物質を実現する成果創出加速プログラムの確かな基礎となる成果である。また、萌芽課題「基礎科学の挑戦」サブ課題Dと連携して開発が進められて来たテンソルネットワーク法を応用し、キタエフ模型およびルテニウム塩化物の有効模型の高精度な基底状態が得られた。

スピノンおよびマヨラナ粒子発現の数値的な確証を得るため、開発を行ってきた HΦの有限温度励起スペクトル計算手法の適用、ならびに mVMC の拡張による励起スペクトル計算手法の開発と適用を進めた。その結果、熱輸送係数を HΦによって計算する新しいアルゴリズムが得られた。また、この新アルゴリズムは、サブ課題Gとの連携によって開発されたクリロフ部分空間法の数値ライブラリ Kωに基づくものである。

以上の研究を物質設計へつなげるために、スピン軌道相互作用系へと拡張された RESPACK および i) での先端的な手法開発との連携のもと、イリジウム酸化物とルテニウム塩化物の第一原理有効ハミルトニアンの構成を行い、結晶構造や外部電場・磁場下での電子状態の変化を、mVMC、HΦ、およびテンソルネットワーク法を用いて解析した。その結果、mVMC の拡張によって、パイロクロア構造イリジ

ウム酸化物における磁性相-非磁性相の量子相転移相図、およびキタエフ模型における磁場下でのマヨラナ粒子の存在限界が得られた。さらに萌芽課題「基礎科学の挑戦」サブ課題Dが主導して開発したテンソルネットワーク法を応用した解析によって、ルテニウム塩化物における磁場下相図が得られた。
これらの解析により、当初の目的である現実物質から出発しスピノンおよびマヨラナ粒子を実現するための方針を策定した。すなわち、ルテニウムのハロゲン化物において、イオン半径の大きなハロゲンを導入して格子定数を広げること、およびスピン S>1/2 の蜂の巣構造遷移金属酸化物に歪みを加えることでマヨラナ物質を実現する方針が得られた。

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、高精度化ならびに機能拡張を達成することで、従来法では十分な精度が得られなかった計算対象である量子スピン液体相へ適用した。その結果、上記のキタエフ模型、およびキタエフ-Γ模型の高精度な基底状態波動関数が得られた。

i)と協力し、オープンソースパッケージ HΦ、mVMC の機能拡張によるスペクトル計算手法の開発・公開を推進し、中性子散乱を始めとする大規模実験施設における成果と数値計算結果との比較研究を実験家との連携のもとに進められる体制を構築した。その結果、HΦと実験データをつなぐベイズ推定に基づくハミルトニアン推定アルゴリズムが得られた。なお、上記で得られた成果は、国内外の会議や論文で発表した。

（具体的な成果）

イリジウム酸化物での量子スピン液体追究

強相関トポロジカル相を特徴付ける上で、自発的対称性の破れの検証は必要不可欠である。典型的な強相関電子系では、時間反転対称性の破れによる磁性相が発現する。現在観測データが報告されている A_2IrO_3（A: アルカリ金属）、α-RuH_3（H: ハロゲン）、ならびに $R_2Ir_2O_7$（R: 希土類元素）においても磁性相が発現しているが、「磁気フラストレーション」によって磁性が抑制された量子スピン液体相の近傍にあると期待されている。磁性相が中性子散乱などのスピン-スピン相関を測る実験手法によって検出可能である一方、従来の実験手法では検証が難しい「高次のスピン相関」による秩序相が量子スピン液体相近傍では実現することが予想される。そこで、サブサブ課題 ii)では、mVMC による高次スピン相関関数の計算機能を開発して来た。高次スピン相関の高精度シミュレーションを実現したことによって、網羅的に自発的対称性の破れを検証することが可能となった。

萌芽的な成果として、スピン軌道結合モット絶縁体 $R_2Ir_2O_7$（図 C-4a.）の、ジャロシンスキ-守谷相互作用が 0 となる極限の有効ハミルトニアン、パイロクロア構造ハイゼンベルク模型(図 C-4b.)のスピン構造因子（図 C-4c.）、および mVMC の拡張による典型的な高次スピン相関関数、一重項構造因子（図 C-4d.）の高精度なシミレーションを「京」コンピュータおよび第 2 階層の大規模並列計算機を用いて行った。これまでの研究において最高精度の波動関数を実現し、時間反転対称性が破れない一方で、反転対称性の破れが生じていることを見出した（図 C-4e.）。今後、さらに高精度な波動関数の実現と、スピン軌道相互作用を取り入れた量子スピン液体の実現可能性の検証を行っていく。

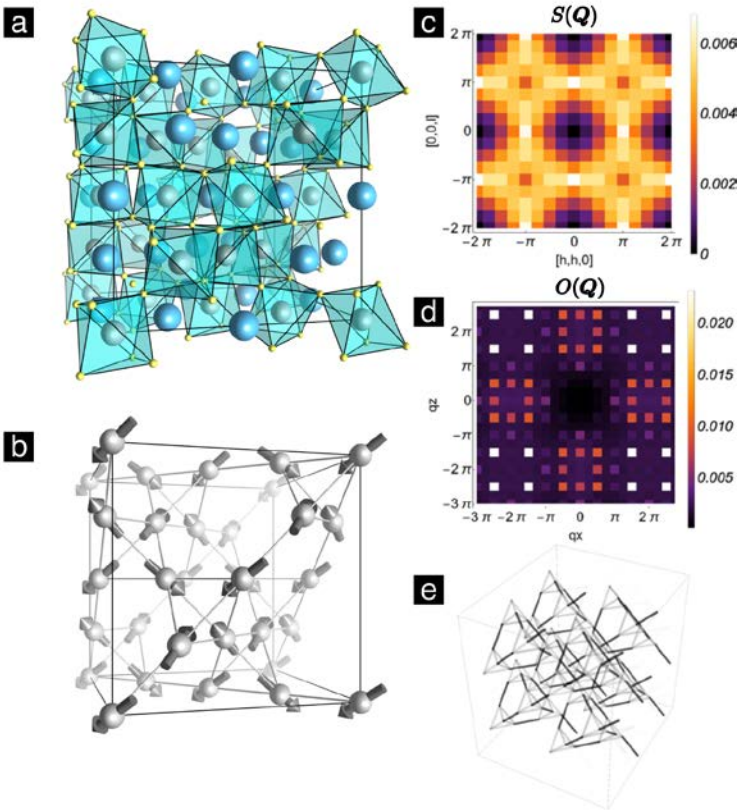


図 C-4：a. $R_2Ir_2O_7$ （R: 希土類元素）の結晶構造. b. $R_2Ir_2O_7$ において磁性を担う Ir のパイロクロア構造ネットワーク（矢印は典型的なスピン配置）. c. パイロクロア構造ハイゼンベルグ模型のスピン構造因子. d. 一重項構造因子. e. 実空間一重項配置[黒（灰色）は振幅の大きな（小さな）一重項のボンド].

マヨラナ粒子の追究

従来、マヨラナ粒子物質の探索は S=1/2 の Ir および Ru 化合物を中心として進められてきた。一方、サブ課題Cサブサブ課題 ii)では、S>1/2 においてもマヨラナ粒子が発現する可能性を比熱の温度依存性から発見した(J. Phys. Soc. Jpn. 88, 115001 (2019))。米国アーカンソー大学との共同研究(Phys. Rev. Lett. 124, 087205 (2020))により、Cr の蜂の巣構造物質の第一原理有効ハミルトニアンを HΦ で解析した結果、歪みを加えた $CrSiTe_3$（図 C-5a.）が S=3/2 の系におけるマヨラナ粒子物質となることを理論的に発見した（図 C-5b.）。

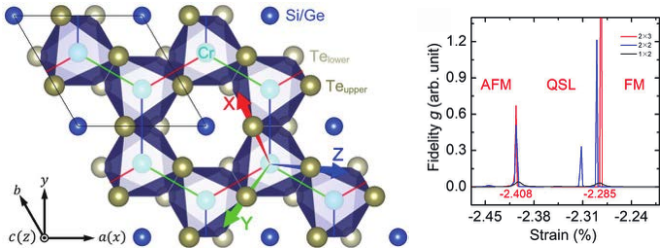


図 C-5：a. $CrSiTe_3$ の結晶構造. b. 歪みを加えた $CrSiTe_3$ の第一原理有効ハミルトニアンを HΦ によって解析し得られた忠実度(fidelity)と呼ばれる相転移の検出に用いられる物理量. 忠実度のピークが相転移の発生を示している。

サブサブ課題 ii)ではこれまで HΦ を用いて、マヨラナ粒子が発現する理想極限を拡げ、物質開発の自由度を高めるためにキタエフ-Γ 模型と呼ばれるルテニウム塩化物の有効ハミルトニアンの解析を推進して来た。令和元年度はさらに、萌芽課題「基礎科学の挑戦」サブ課題Dが開発を主導して来たテンソルネットワーク法を応用することで、キタエフ模型、およびキタエフ-Γ 模型の磁場下における高精度な基底状態波動関数を得ることに成功した。

また、mVMC を拡張し、マヨラナ粒子に基づく波動関数を導入することで、磁場下のキタエフ模型においてマヨラナ粒子が存在できる限界の磁場、および磁場下でのマヨラナ粒子の運動方程式の変化を解明した(Phys. Rev. B 101, 045121 (2020))。

計算手法開発

富岳向けのチューニングが進む HΦ、およびサブ課題Gとの連携によって開発が進められて来た Kω(arXiv:2001.08707)を用いる拡張機能 FTKω (arXiv:1802.02854)によって、強相関電子系の多彩かつ詳細な有効ハミルトニアンに対して、あらゆる温度領域において多岐にわたる観測量のシミュレーションが可能となっている。量子スピン液体を特徴付けるトポロジカル不変量、量子化熱ホール係数のシミュレーションに加え、HΦ+FTKωの柔軟な適用範囲と並列性能を富岳上で最大限に生かし切ることで、比熱や磁化測定などの熱力学的な測定データ、さらには、中性子散乱、共鳴 X 線散乱、光電子分光、電子スピン共鳴など分光学実験データから有効ハミルトニアンを推定することが可能となるであろう。このような展望を実現するため、ベイズ最適化のオープンソースアプリケーション COMBO と HΦ の統合を行い、公開準備を進めている。

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

前年度までに引き続き、CDMSI と元素戦略磁性材料研究拠点(ESICMM)合同の磁石理論ミーティングを開催（R1.5.10, R1.7.18, R1.8.5, R1.10.17, R1.11.14, R1.12.26, R2.1.16）。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（H31.4.13, R1.5.18, R1.6.15, R1.7.20, R1.8.24, R1.9.28, R1.10.19, R1.11.16, H1.12.7, R2.2.15）。毎回 15 名程度が参加し、データ駆動手法について議論した。さらに、ポスト「京」重点課題(7)サブ課題D研究会（令和 2 年 1 月 21−22 日，東京大学柏の葉キャンパス駅前サテライト）を開催した。研究開発においては、希土類磁石を主な対象として、結晶構造探索、化学組成最適化、磁石主相・副相・界面の安定性と磁性を調べるための第一原理計算や情報統合手法の開発と応用を行い、論文発表や学会招待講演を行った。1-12 系希土類磁石化合物の第一原理計算に関する論文で日本物理学会第 25 回論文賞を受賞した。

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、佐藤暢哉

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）、栂裕太（物質・材料研究機構）

[アプリケーションソフトウエア・研究開発]

（実施・検討内容）

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統括を再委託した。第一原理計算、ベイズ最適化とデータ同化手法を組み合わせ、飽和磁化や安定性の観点から優れた高鉄濃度希土類化合物の化学組成を調べた。その結果、希土類サイトと鉄サイトにおける元素置換量に対して、飽和磁化は線形に近い変化を示すのに対して、生成エネルギーは非線形な依存性を示すことを見出し、材料探索の指針を得た。また、結晶構造探索手法の高度化と応用を行った。その結果、ベイズ最適化による結晶構造探索の成功確率が、磁性に対しての支配的な物理パラメータである記述子間の類似度の累積残差エントロピーと相関があることがわかり、希土類磁石化合物やシリコン結晶に対するケーススタディでその相関が実証された。具体的には、既存化合物の構造データから局所構造の特徴を抽出し構造探索手法の改良を行うとともに、希土類鉄化合物の新構造を探索した。その結果、$ThMn_{12}$ 構造より不安定であるものの、キュリー温度が高い C2/m 構造の YFe_{12} 化合物を見つけ、磁性特性の改善の見込みを得た。

なお、業務計画書に記載は無かったが、前年度開発した古典スピン模型の磁化反転解析手法を活かすため $Nd_2Fe_{14}B$ 結晶粒の保磁力の研究を実施した。その結果、$Nd_2Fe_{14}B$ 孤立粒子の保磁力が温度上昇に対して下に凸な依存性を示す、他の結晶とは異なる振る舞いが得られ、特異な結晶であることがわかった。なお、上記で得られた成果は国内外の会議や論文で発表した。

（具体的な成果）

新規高性能磁石の主相として期待されている 1-12 系希土類化合物を対象として、Akai-KKR を用いて化学組成に対する飽和磁化と生成エネルギーのマップを求めた。後者に対しては、前年度に開発したデータ統合手法を用いて、計算値を補正した。図 D-1 に$(Sm_{1-y}Zr_y)(Fe_{1-x}Co_x)_{12}$に対する結果を示す。飽和磁化が x と y に対して線形に近い単調な変化を示す一方で、生成エネルギーは非線形な依存性を示すことがわかった。次に、一連の希土類イオン R に対する RFe_{12} の生成エネルギーを求めた。R の 4f 電子は open core 状態として扱い、3 価の場合と 4 価の場合の両方に対して計算した（図 D-2）。その結果、生成エネルギーが R のイオン半径と価数に依存すること、R が 4 価の方が RFe_{12} に対して有利であることがわかった [Y. Harashima et al., Scripta Materialia **179**, 12 (2020)]。

ベイズ最適化を用いた結晶構造探索の効率を調べた。この方法では、結晶構造を記述子で表現し、活用と探索のバランスを考慮して次の構造候補を決める。通常、記述子にはパラメータが含まれるので、その選択が問題となる。我々は、記述子として F-fingerprint を用い、そこに含まれるパラメータを変化させて結晶構造探索の成功確率を調べた。Y_2Co_{17}, Si, SiO_2 への適用の結果、探索効率がパラメータに強く依存することがわかった。探索効率が記述子の類似度から定義される累積残差エントロピーと相関があるという仮説を立てた。上記の系で調べた結果、確かに相関があり、そこから定義される情報量を極大化する時に探索効率が向上することがわかった。[N. Sato et al., Phys. Rev. Materials (in press)]

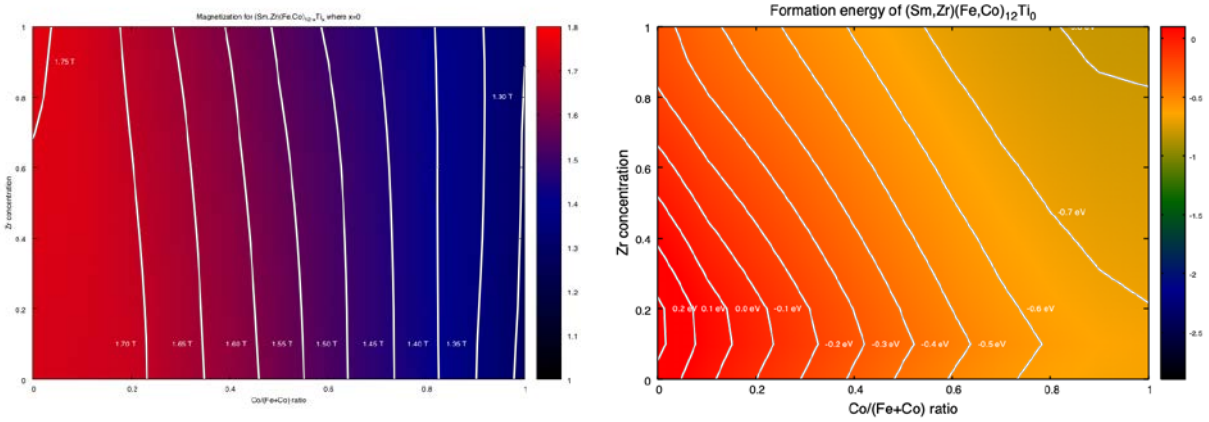


図 D-1：第一原理計算による$(Sm_{1-y}Zr_y)(Fe_{1-x}Co_x)_{12}$の飽和磁化（左）と生成エネルギー（右）。

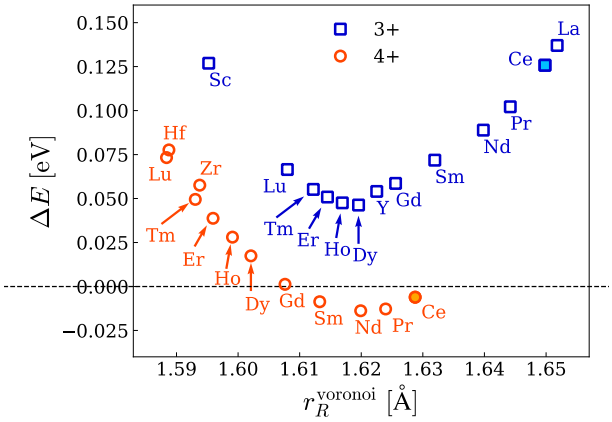


図 D-2：RFe_{12} の生成エネルギー。参照系は、R_2Fe_{17} と bcc-Fe。

また、新規磁石設計の一環として、Y-Fe の 2 元系の結晶構造探索を実行した。その結果、高鉄濃度化合物 YFe_{12} として、これまでに知られていた $ThMn_{12}$ 構造とは異なる C2/m 構造（図 D-3）が見つかった。この構造は、$ThMn_{12}$ 構造より不安定であるものの、キュリー温度が高いことがわかった。

さらに、当初計画になかった特筆すべき成果として、$Nd_2Fe_{14}B$ 結晶粒の保磁力の解析が挙げられる。前年度までに開発した Wang-Landau 法による古典スピン模型に対する磁化反転の解析技術を用いて、$Nd_2Fe_{14}B$ の孤立粒子の保磁力を調べた。磁化反転に伴う自由エネルギー障壁を求め、観測時間 1 秒の間に熱活性により磁化反転する条件として保磁力を算出した。図 D-4 に保磁力の温度依存性を示す。保磁力は、温度上昇とともに下に凸な変化を示すことがわかった。また、双極子相互作用の効果を反磁場項として現象論的に補正すると、保磁力の値が実験と概ね一致することがわかった。

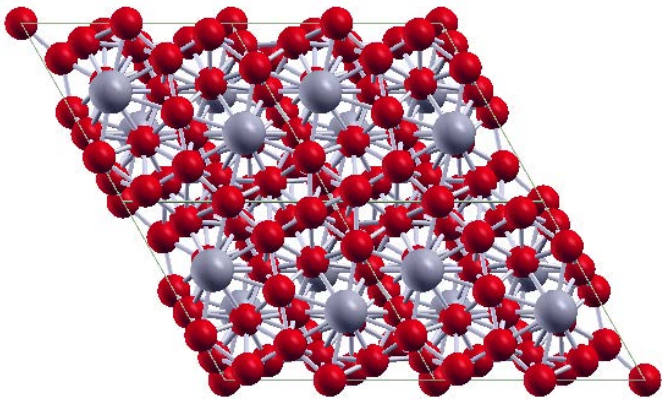


図 D-3：YFe_{12} 化合物に対する結晶構造探索により見つかった C2/m 構造。

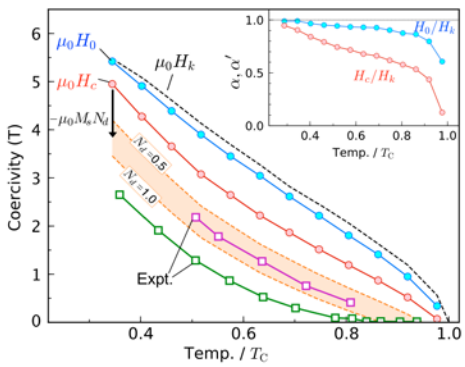


図 D-4：古典スピン模型の解析から求めた $Nd_2Fe_{14}B$ 結晶粒の保磁力の温度依存性。

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：　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）、M. Hoffmann (JKU)

[アプリケーションソフトウエア・研究開発]

（実施内容）

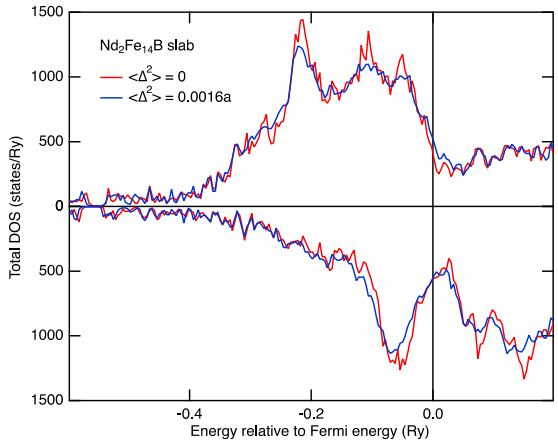
幾何学的に乱れた界面構造を持つ $Nd_2Fe_{14}B$ 系について、大振幅局在フォノンの観点から電子状態計算を行った。その結果、界面付近で可能な大きな変異と伴った乱れは電子状態と磁性に大きな影響を与え、局所磁気モーメントを変化させるだけではなく、交換結合の符号自身を変えるような場合も起こることがわかった。遮蔽 KKR 法を用いた巨大スーパーセルを用いた計算を併用することにより計算の正当性を担保しつつ、界面近傍の第一原理電子状態計算を網羅的に行い、乱れた構造における交換結合定数、磁気異方性、磁気モーメントに関するデータ蓄積を進めた。その結果、乱れによる平均的な変位をパラメータとして与えた時の界面付近での巨視的電子状態と磁性、およびその中で目をつけた特定の原子の局所的な電子状態および磁気状態についてのデータが得られるようになった。これらのデータに対して三宅グループと協力して情報科学的手法を適用して、保磁力機構に対して界面構造が果たす役割を明確にする研究を推進した。その結果、保磁力機構の解析に必要な磁気特性に関して、局所密度汎関数法の不完全性に由来する不定性があり、それらの不定性を埋めるためにデータ同化の手法が必要であることがわかった。

なお、業務計画書に記載は無かったが、有限温度での磁性を議論するために、開発した大振幅局在フォノン計算の手法を用いて、R_2Fe_{17} 系の有限温度における磁性についての研究を実施した。その結果、これらの系においては磁気揺動の効果を取り入れるだけでなく、フォノンによって交換結合自体が再規格化される効果を取り入れる必要があることがわかった。なお、上記で得られた成果は国内外の会議や論文で発表した。

（具体的な成果）

永久磁石材料における保磁力の発現に関して、最初に磁化反転を生じる界面は重要な役割をはたす. 現実の界面は通常の電子状態計算のためのモデルで仮定されるような完全な結晶格子からは大きく乱れていると考えられるが、そのような乱れが界面の磁性に与える影響の評価が、保磁力の発現を解析するためには欠かせない。そのような観点のもとに、幾何学的に乱れた界面構造を持つ $Nd_2Fe_{14}B$ について、このような状況を界面付近において原子変位に伴うランダムな乱れが発生したものとしてモデル化し、それに対して第一原理電子状態計算を行うことによって解析を行った。これは大振幅局在フォノンの観点からの取り扱いとも考えることができ、高温における磁石材料シミュレーションと捉えることもできる。図 D-5(a)に乱れがない界面と、界面付近に乱れが存在する場合のそれぞれについて計算された状態密度(DOS)を示す。乱れの存在によって、DOS の微細な構造が消えている以外には全体的な様相はかわりがないように見えるが、個々の原子の磁気状態には変化が見られる。図 D-5(b)に界面付近の 68

個の原子のつくる全磁気モーメントを示すが、乱れの増加とともに磁気モーメントの大きさが減少し、特に平均二乗変位が 0.0016 のあたりで急激に磁気モーメントの減少が見られる。これは特定の位置（j1 位置）にある原子の一部の磁気モーメントが逆転したことによるものである。乱れの増加にともなって、周辺鉄原子との交換結合定数 J の符号が反転したためと考えられるが、このような符号の反転は突然おこるわけではなく、J が局所的に弱くなるプロセスを伴っており、このようなことは界面での磁化反転において重要な要素になると考えられる。



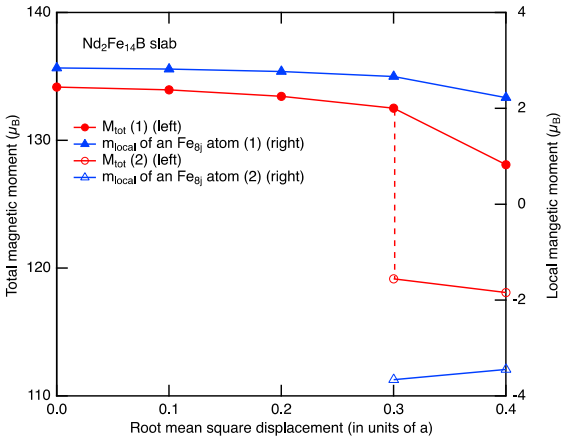


図 D-5：（左）$Nd_2Fe_{14}B$ の界面付近の状態密度。（赤線）乱れを伴わない界面（赤線）および平均二乗変位が格子定数を単位として 0.0016 の乱れがある場合（青線）。（右）界面の乱れの程度（原子の変位の二乗平均平方根）の関数としての 68 原子を含むセルの全磁気モーメント（赤丸）および Fe_{8j} 位置を占める特定の原子の局所磁気モーメント（中空赤丸）。三角印は安定な第 2 の解の結果を示す。変位の二乗平均平方根が 0.3 より大きいところでは第 2 の解がより安定である。

原子のランダムな変位を取り入れた計算は、現在のところ、重い計算となるために多量のデータ蓄積は困難であるが、狙った組成における乱れた系の計算は即座に実施が可能である体制が整った。広範な組成領域における計算の準備として、現在注目を集めている永久磁石材料である$(Sm_{1-x}Zr_x)(Fe_{1-y}Co_y)_{11.5}Ti_{0.5}$ について、重要となる組成領域 $0<x, y<0.5$ を網羅する計算を実施した。図 D-6 に計算された磁化およびキュリー温度の組成依存性を示す。これらの組成領域において、乱れた界面の計算が可能である。端組成や実験的に得られている有限組成での実験との比較において、磁化について理論は良く実験値を再現しているものの、キユリー温度に関しては大きな不一致が見られる。しかし、この不一致については、これまでの希土類磁石材料の電子状態計算および産総研三宅グループとの共同研究等によって、それが理論に含まれる近似（主として局所密度近似）に由来する系統的な不一致であり、実験データよび計算データをデータ科学的な手法によって処理することによって吸収が可能なものであることが示唆されている。このような方向性にしたがったデータ同化を現在試みている。

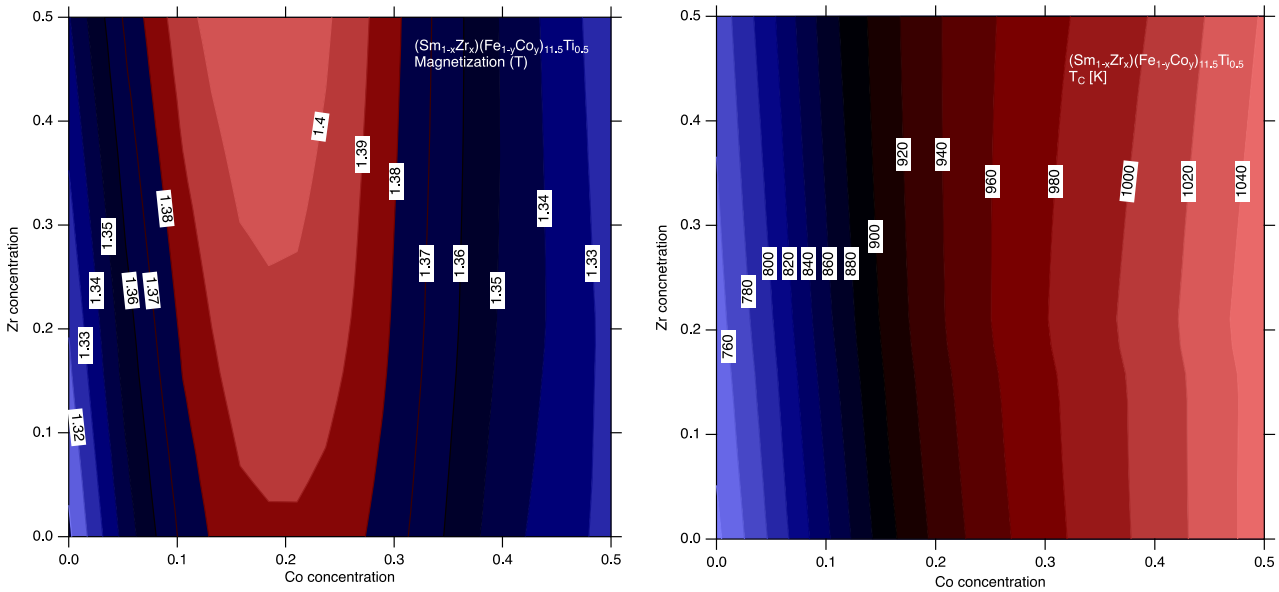


図 D-6：$(Sm_{1-x}Zr_x)(Fe_{1-y}Co_y)_{11.5}Ti_{0.5}$ に対して行った第一原理計算による磁化（左）およびキュリー温度（右）。

業務計画書に記載は無かったが、有限温度での磁性を議論するためにフォノンの効果を取り入れた計算手法の開発とおの試験的な適用を行った。この手法は界面付近で原子配列が乱れた系の計算と共通するものであるが、有限温度で励起されたフォノンによる原子変位がフォノンの第一原理計算によって評価される点が異なっている。この手法を用いて R_2Fe_{17} 系についてフォノンが有限温度で磁性に与える影響を調べた研究を開始した。この系ではキュリー温度について計算値と実験的が大きく違っており、その差を常磁性状態と強磁性状態での交換結合定数の違いで説明することができないことがわかっている。フォノンの効果がこの差を縮める効果を期待しているが、今のところキュリー温度近くの高温での計算が収束していないので結論は下せないが、実験との不一致を解消する程度の効果はないと予想している。

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：国立大学法人東京工業大学

[研究実施体制]

責任者：　合田義弘

実施者：　寺澤麻子

協力者：　高成柱、田中友規

[アプリケーションソフトウエア・研究開発]

（実施内容）

局在基底第一原理計算の枠組みでの交換結合定数計算アルゴリズムの改良および OpenMX（原子局在基底と擬ポテンシャルを用いた第一原理計算プログラム）コードへの実装を行い、交換結合定数計算を高精度化・高速化した。その結果、OpenMX コードによる交換結合定数の現実的な計算が可能となり、bcc Fe に対して実行した交換結合定数の計算結果は KKR 法で得られたものと良好な一致を示した。ネオジム磁石材料組織界面として、2-14-1 相とアモルファス Nd-Fe 合金相との界面の第一原理計算を実行し、安定界面構造とその局所磁気特性を理論解析した。その結果、8500 原子規模の界面系に対し OpenMX コードを実行することに成功し、富岳でさらなる成果を創出するための技術基盤を確立した。開発した交換結合定数計算コードを用いて、界面局所磁気結合を見積もった。その結果、交換結合のネットワークを可視化することにより、主相内部と界面での交換結合の振る舞いが異なることをあきらかにした。なお、上記で得られた成果は国内外の会議や論文で発表した。

（具体的な成果）

永久磁石内部の粒界構造のような、対称性が低く大規模な系に対する高速な磁気特性計算を目的として、リヒテンシュタイン法を用いた交換結合定数計算プログラムの改良実装を行った。フェルミ分布関数の有限極近似を用いた結果、複素積分の計算コストを決定する極の数をおよそ 20 分の 1 に減らすことができた。また MPI による並列化を行い、数百原子規模の系に対しても実用的な時間で交換結合定数を計算することが可能となった。開発したプログラムを用いて計算した bcc Fe の交換結合定数と、Akai-KKR によって計算された交換結合定数を図 D-7 に示す。両者は第一原理計算において局在基底と散乱理論にそれぞれ基づき、異なった数値アルゴリズムを持つが、交換結合定数の一致は非常に良好であり、本研究において開発した手法の信頼性をよく示していると言える。なお、本成果は原著論文[A. Terasawa, M. Matsumoto, T. Ozaki, and Y. Gohda, “Efficient Algorithm Based on Liechtenstein Method for Computing Exchange Coupling Constants Using Localized Basis Set”, J. Phys. Soc. Jpn. 88, 114706 (2019).]として発表した。

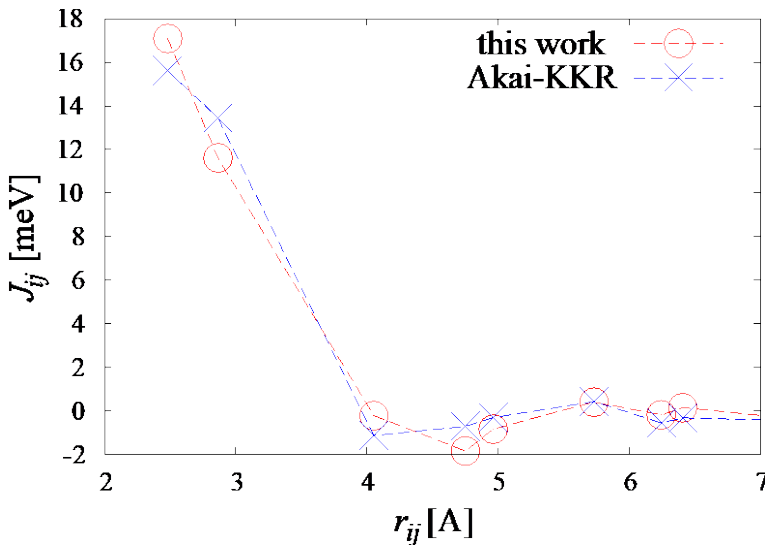


図 D-7：本研究で開発した交換結合定数計算プログラムによる bcc Fe の交換結合定数（赤）と、Akai-KKR による bcc Fe の交換結合定数計算結果の比較。

富岳における大規模計算の実施に向けて、図 D-8 に示すような 8463 原子からなるネオジム磁石主相/アモルファス Nd-Fe 相界面系の計算を行った。京において、OpenMX 3.8 のオーダーN 手法を利用し、MPI 並列数 8463, OpenMP 並列数 8、スピン分極無しで計算した結果、約 8 時間で 25 ループの自己無撞着計算を実行することに成功した。

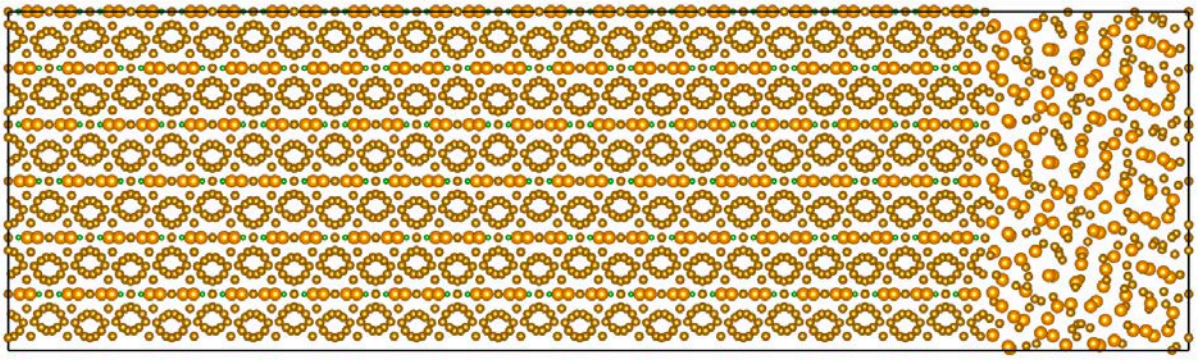
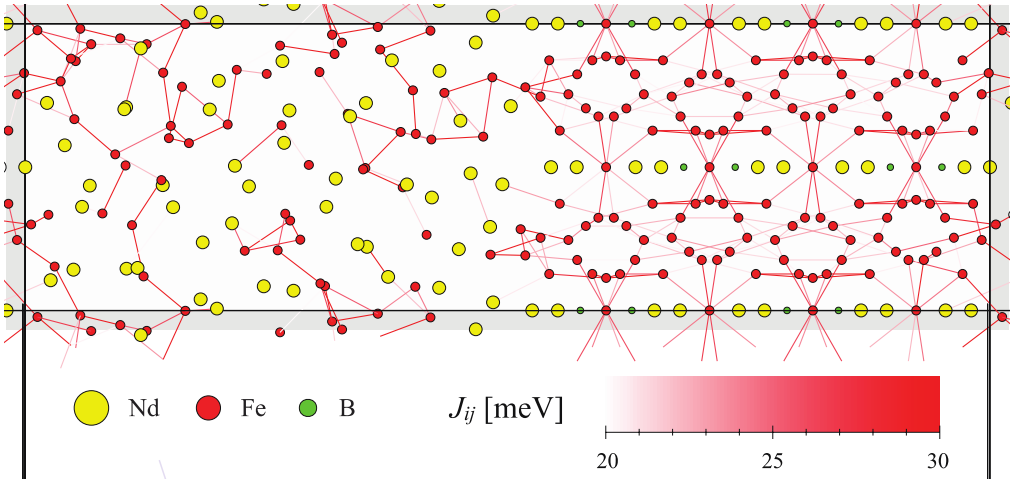
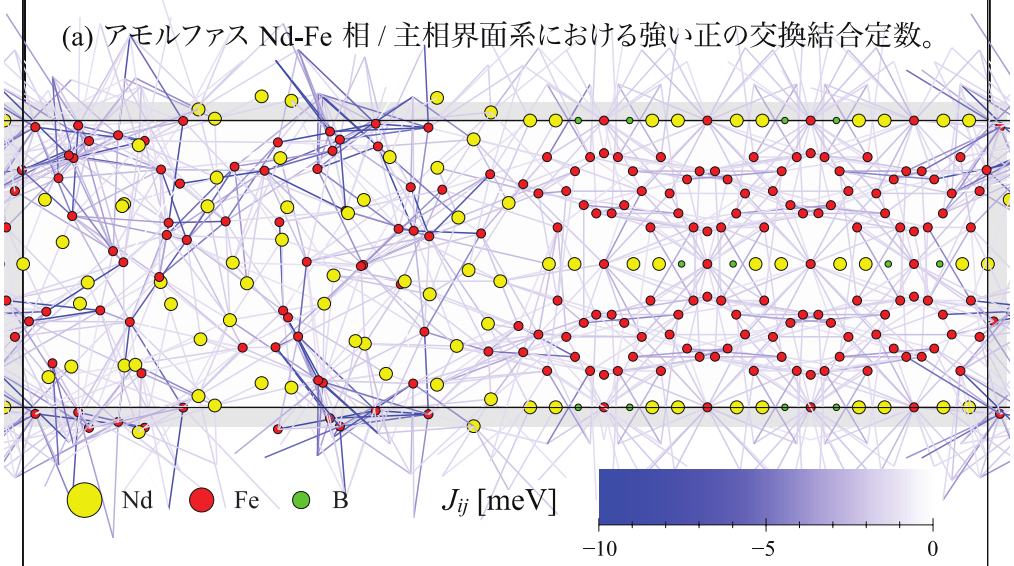


図 D-8：8463 原子からなるネオジム磁石主相/アモルファス Nd-Fe 相界面系の構造。

ネオジム磁石の主相/粒界相界面における交換結合定数の振る舞いの解明のため、図 D-9 に示す主相/アモルファス Nd-Fe 相界面系において、交換結合定数の計算を行った。図 D-9 (a)中、赤線の濃淡が交換結合定数の強さを示しているが、これを見ると、アモルファス Nd-Fe 相において、主相と比べ Fe-Fe 間の交換結合定数が大きくなっていることがわかる。また、図 D-9 (b)中、負の交換結合定数の強さを青線の濃淡によって示す。これを見ると、アモルファス相において非常に強い負の交換結合定数が現れており、これらの結果により交換結合定数がアモルファス系の構造特性に大きく影響されていることを明らかにした。



(a) アモルファス Nd-Fe 相 / 主相界面系における強い正の交換結合定数。



(b) アモルファス Nd-Fe 相 / 主相界面系における負の交換結合定数。

図 D-9：界面の交換結合ネットワーク。

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・マクロまで連結して、高精度に再現・予測・設計するマルチスケール計算の手法・技術の開発を目指している。令和元年度は「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、鉄粒界での 3d 遷移金属溶質偏析の機械的性質への効果の解明で進捗があった。第一原理計算をメゾ・マクロに連結する方策として、局所エネルギー解析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について、鉄の乱れの大きな一般粒界を各種の工夫（レプリカ構造スーパーセル、Active learning による参照原子サンプリング）で高精度に扱う手法の開発に成功した（産総研、名工大ほか）。また、第一原理自由エネルギー計算に基づき、経験的な熱力学パラメータを用いることなく、合金系の微細組織を高精度に予測する第一原理 Phase Field 法の開発に世界で初めて成功し、NiAl 合金等で適用性を実証した（横国大、物材機構）。「大規模 Phase Field 法計算の実行」では、大規模分子動力学法と大規模 Phase Field 法のマルチスケール解析技術で大きな進捗があった。両手法の効率的なデータ連結で、融体からの核生成、凝固組織形成の連続シミュレーションが可能となり、1μm 以上の現実的サイズの鉄の試料で、融体から微細組織までのシミュレーションに成功した。また両手法の同時空間（クロススケール）の実行で、データ同化による、分子動力学法からの Phase Field 法パラメータの動的推定スキームの確立に成功した。さらに、核生成理論の検討、柱状晶の競合成長機構の解明、Phase Field 法コードの富岳にむけた最適化による飛躍的高速化等を達成した（東大、京工繊大、東北大金研、北大）。令和元年度はサブ課題Ｅの研究会を萌芽課題・基礎科学の挑戦Ａ「破壊とカタストロフィ」と共同で 1 回開催した（令和元年 7 月）。全体の進捗状況と本年度計画を確認し、グループ間の具体的な連携について議論した。また、プロジェクト終了後の共同研究や発展方向についても合同で議論を進めた。

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（日本製鉄）、
伊藤一真（日本製鉄）、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・研究開発]

（実施内容）

鉄系材料の微細組織の構成要素である粒界、転位の大規模第一原理計算では、複数種の不純物の存在の効果や添加元素の機械的性質への効果の解析、第一原理局所エネルギー法・局所応力法による機構解明をさらに進め、高精度データとして蓄積した。その結果、機械的挙動を支配する鉄中の転位と添加元素（溶

質元素）との相互作用、鉄中の粒界の機械的応答への溶質元素効果の全体像があきらかとなった。第一原理計算結果をメゾ・マクロに繋ぐ技術として、新たに乱れた原子配列の局所構造スーパーセル計算から局所エネルギーと機械学習とを組み合わせて、粒界・欠陥のエネルギーを予測する計算技術に発展させ、他グループの大規模分子動力学計算等とも緊密に連携して計算技術として確立した。ここでは、乱れた構造の一般粒界を扱うための様々な工夫（レプリカ構造スーパーセル等）が有効であることが判明した。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深め、マルチスケール計算技術の確立を図った。特に鉄系材料を対象に東北大金研の毛利グループと連携が可能となった。

なお、業務計画書に記載は無かったが、局所エネルギーに加え局所応力の第一原理計算が合金特性解明に有効であることが示され、局所応力と機械学習を組み合わせて、合金設計につながる成果が得られた。また、鉄中の粒界に加えて、Mg 中の粒界についても局所エネルギーと機械学習の組み合わせが有望であることが示された。なお、上記で得られた成果は国内外の会議や論文で発表した。

（具体的な成果）

金属系構造材料の高精度マルチスケール計算技術の開発のために、メゾ・マクロでは扱えない現象・性質として、微細組織の構成要素である転位や粒界の原子配列やエネルギー、各種の溶質元素（添加元素）との相互作用が重要である。それらを第一原理から解明し、モデル化・データ蓄積を通じて、メゾ・マクロに連結する方法の開発が求められている。主として、平面波基底 PAW 法コード QMAS を用い、コードに実装された局所エネルギー・局所応力の第一原理計算技術（エネルギー密度、応力密度を計算し、各原子の Bader 領域で積分して求める）を用いて、取り組んだ。

前年度に引き続き、鉄系材料の転位や粒界と溶質元素との相互作用の大規模第一原理計算を行った。鉄中の転位については、従来、転位芯と一連の遷移金属溶質との相互作用エネルギー[1]を明らかにしてきたが、置換型の遷移金属溶質に加え、格子間型の炭素の存在による効果の詳細を明らかにした。鉄中の粒界については、従来、一連の 3d 遷移金属溶質との相互作用エネルギー（偏析エネルギー）を明らかにし、偏析機構を局所エネルギー分析により溶質元素ごとに解明してきた[2]。本年度は、鉄中の粒界に遷移金属溶質が偏析した場合の界面弾性定数の変化を第一原理計算から明らかにし、その機構を局所弾性定数解析から探った（図 E-1）[3]。V や Co が偏析すると界面弾性定数が上昇する。これらの元素偏析では、bcc 鉄の原子間結合を支える minority spin d 電子について、溶質-鉄原子間の混成が大きく、界面結合が強くなるためであることがわかった。

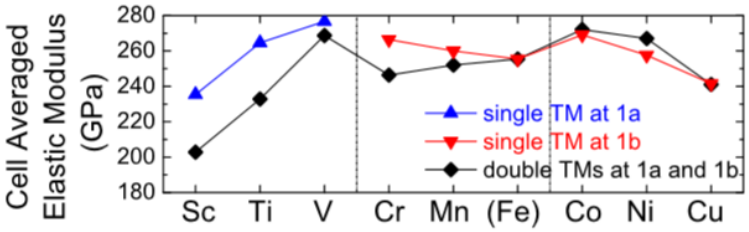


図 E-1：bcc Fe 中の(332)Σ11 粒界に一連の 3d 遷移金属原子が偏析した場合の界面垂直方向の界面弾性定数の第一原理計算結果[3]。Early 遷移金属は 1a site（原子体積の大きな界面サイト）、その他は 1b

site（原子体積の小さい界面サイト）に優先的に偏析する。1a または 1b に偏析した場合の界面弾性定数と両サイトに偏析した場合の値を示す。

第一原理計算をメゾ・マクロの計算に繋ぐ技術として、粒界のような乱れた原子配列の系のエネルギーを「局所エネルギーの第一原理計算と機械学習の組み合わせ」により、高精度に予測する技術を開発する。そのために、様々の粒界について、各原子の局所環境（原子間距離、配位数、方位 etc.）と局所エネルギーとの間の相関を機械学習（線形回帰等）により抽出し、それを任意の粒界の各原子に適用して、それらの和で粒界エネルギーを見積もる方法が有望である。既に対応粒界（周期構造を持つ粒界）で有効性が示されている[4]。今回、東大・澁田らのグループが 100 万原子の鉄の大規模分子動力学法で得た乱れの大きな一般粒界の構造について、こうした方法論の適用を図った。しかし、一般粒界は対応粒界のような周期性がないので、通常の第一原理計算は適用できない。そこで、①粒界の各原子を中心に周囲の構造を凍結してレプリカとして取り出し、それを周期配置して第一原理計算を実行し（レプリカ構造スーパーセル）、中心原子の局所エネルギーを求め、局所環境の記述子(SOAP: Smooth Overlap of Atomic Positions)と局所エネルギーとの相関データを蓄積し、これに線形回帰モデルを適用する。図 E-2 に①の工程を示す。一方、乱れの大きな一般粒界の原子の局所環境は多様で、高精度予測のためには、多数の粒界原子をサンプルして、①によるデータ蓄積が必要となる。そこで、②active learning の技術で、一般粒界の乱れた原子配列から局所環境が特徴的な原子を有効に抽出して①の作業を行うことで、比較的少数のサンプルで効率的に高精度の線形回帰が実現できることが判明した[5]。図 E-3 に検証例を示す。

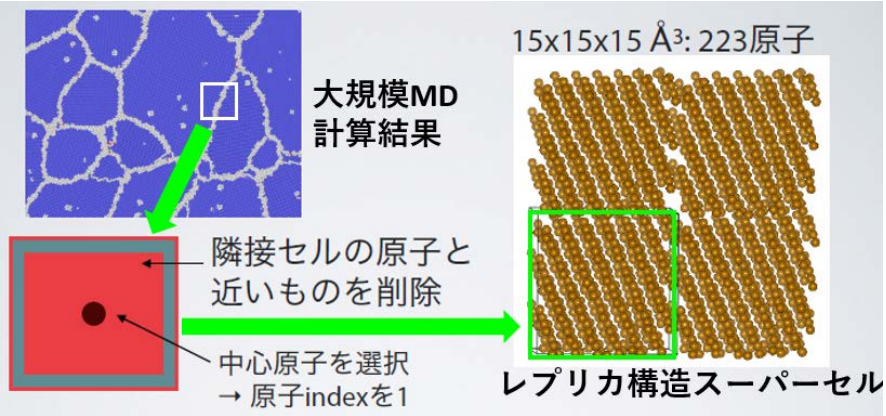


図 E-2： 乱れの大きい原子配列を持つ一般粒界について、大規模分子動力学計算の構造から着目した原子の周囲の構造を抜き出して周期配置し（レプリカ構造スーパーセル）、QMAS による第一原理計算を適用して中心原子の局所エネルギーを求める。様々な粒界原子で繰り返し、粒界原子の局所エネルギーと局所環境情報との相関を機械学習で抽出する[5]。

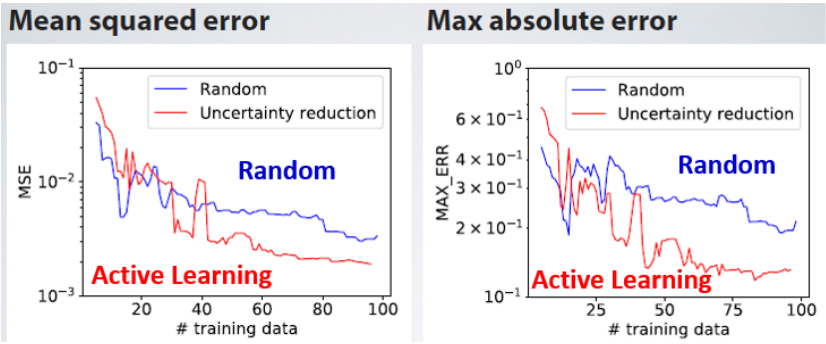


図 E-3： 鉄中の乱れの大きい一般粒界の粒界エネルギー予測技術の開発[5]。大規模分子動力学計算で得られた一般粒界の構造から、各原子の局所エネルギーと局所環境との関係データを図 E-2 の方法で蓄積し、線形回帰で抽出し、未知の粒界構造に適用する（各原子の局所エネルギーを予測する）。データ蓄積のために扱う原子をランダムにサンプルした場合と active learning により効率的にサンプルした場合の予測精度（平均二乗誤差（左）と最大誤差（右））の検証。active learning の方が、データ蓄積の原子数に対して収束が速い。

以上により、鉄系材料について、局所エネルギーの第一原理計算と機械学習を介した、高精度の粒界エネルギー予測技術が実現した。これは、複雑構造の大規模第一原理計算の負荷を回避して、効率的に高精度パラメータをメゾ・マクロ手法に供給する手段である。一方、業務計画書にはなかったが、今後のさらなる発展につながる成果として、局所エネルギーに加えて、局所応力の第一原理計算も、機械学習と連結することで、合金系のメゾ・マクロの特性設計に繋ぐことができることが示された[6]。遷移金属の二元合金から多元の高エントロピー合金まで、合金内の各遷移金属元素種の Bader 領域の原子体積、電子量、局所応力を QMAS コードで計算した結果、それらが互いに相関し、Bader 領域が局所化学環境を有効に反映するものであることが判明した。さらに、近接原子の第一シェル、第二シェルの平均の価電子濃度を用いれば、機械学習（線形回帰）でその原子の局所量（Bader 領域の原子体積、電子量、局所応力）が予測できることが示された。今後のさらなる展開が期待される。また、鉄の粒界に関する適用を中心に進めてきたが、遷移金属以外の軽金属として、金属 Mg の粒界の局所エネルギー分析を行った。鉄の粒界周囲の全体に初めて第一原理計算を適用し、粒界原子の原子体積など局所環境と局所エネルギーの間に相関があることが判明した。鉄粒界等と同様に機械学習を通じた粒界エネルギー予測が有効であることを示している。

[1] M. Wakeda *et al.*, Acta Mater **131** (2017) 445
[2] Z. Xu *et al.*, J. Phys. Condens. Matter **31** (2019) 115001
[3] Z. Xu *et al.*, J. Mater. Sci. **55** (2020) 3056
[4] T. Tamura *et al.*, Modell. Simul. Mater. Sci. Eng. **25** (2017) 075003
[5] T. Tamura *et al.*, arXiv:1912.04596
[6] S. Ishibashi *et al.*, Phys. Rev. Mater. **4** (2020) 023608

再委託先：国立大学法人横浜国立大学

[研究実施体制]

責任者：　大野かおる

実施者：　Pham Thi Nu

協力者：　佐原 亮二（物質・材料研究機構）、小野頌太（岐阜大学）

[アプリケーションソフトウエア・研究開発]

（実施内容）

「ポテンシャル繰り込み理論」と「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を完成させた。その結果、世界で初めて経験的な熱力学的パラメータを用いずに合金の微細構造を予測することが可能となった。具体的には、NiAl 合金などの第一原理 Phase Field シミュレーションの詳細な解析を行い、その有効性を示し、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を公表した。この成果は Nature Communications をはじめ、全世界に報じられるとともに、日本経済新聞などに記事が掲載された。

なお、業務計画書に記載は無かったが、この手法を Ti64(Ti-Al-V)合金、NiTi 合金、TiPt 合金などに適用し、一切のパラメータを使用せずに実験と良く一致する微細構造を再現することに成功した。

（具体的な成果）

従来の Phase Field 法は、連続的な Ginzburg-Landau の自由エネルギー関数を用いるため、局所的な各元素の組成比の違いを表すことができず、相図の全領域を統一的に扱うこともできなかった。我々は空間を単位胞に分割し、第一原理計算を用いて、原子空孔を含むクラスター展開法と格子定数よりも短い長さのスケールを繰り込むポテンシャル繰り込み理論に基づいて、単位胞の局所自由エネルギーを単位胞中の原子組成の離散的関数として計算した。また、化学ポテンシャルを従来法のように自由エネルギーの微分$\partial F/\partial\varphi_X$ではなく、定義通り差分 $\mu_X = F(\varphi_A, ..., \varphi_X + 0.5, ...) - F(\varphi_A, ..., \varphi_X - 0.5, ...)$で求め、化学ポテンシャルの勾配から流束密度 $\boldsymbol{J}_X = -M_X\nabla\mu_X$ を求めた。原子密度 φ_X と流束密度 $\boldsymbol{J}_X$ の間には流れの保存則$\partial\varphi_X/\partial t = -\nabla\cdot\boldsymbol{J}_X = M_X\nabla^2\mu_X$ が成り立ち、第一原理 Phase Field 法の基礎方程式が求まる。本手法では、微細構造と同時に局所自由エネルギー分布 F が求まるので、その勾配である局所応力分布$|\nabla F|$も簡単に求まる（図 E-4a-c）。本手法を NiAl 合金に適用し、1027℃の相図の固相全領域で実験微細構造の再現に成功した（図 E-4d, e）。この成果は 2019 年 8 月 1 日に Nature Communications に on-line 掲載されたが、ScienceDaily, Phys.org, ScienceCodex, PhysicsNews, LiveDailyTimes, Weather herald, GuideChem, bibleo.net, Primeur Magazine CrweWorld-HottestNews, TechnologyNews_nagc, para-llelstate, NAFEMS などで世界に報じられるとともに、鉄鋼新聞（2019 年 8 月 2 日 2 面）、日刊産業新聞（2019 年 8 月 2 日 11 面）、日本経済新聞（2019 年 8 月 26 日朝刊 9 面）に記事が掲載された。この成果は和文で「23 の先端事例がつなぐ計算科学のフロンティア」（中村振一郎ほか編、近代科学社、2020 年 1 月刊）の第 7 章「第一原理フェーズフィールド法で材料組織を予測する」でも紹介した。

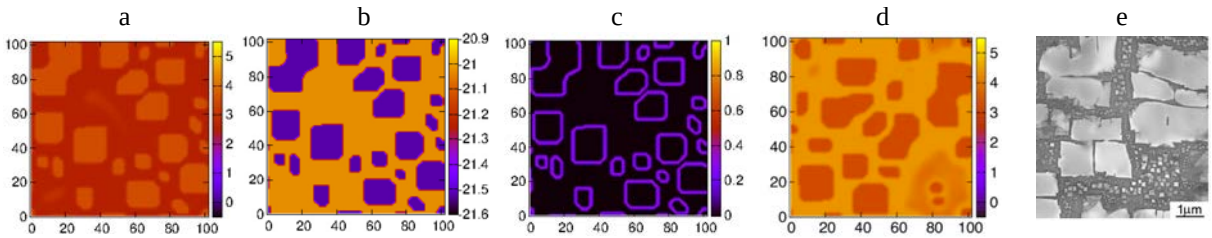


図 E-4： Ni60%の(a) φ_{Ni}, (b) F, (c) |□F|, Ni82%の(d) φ_{Ni}, (e)実験（DQ Li *et al*. Intermetal. **16**, 1317 (2008)）

我々は、続いて、この計算手法を Ti64(Ti-Al-V)合金に適用し、（α 相に Al が、β 相に V が選択的に析出する）元素分配効果が明確に現れることを示した。得られた微細構造は実験で観測されているパターン(S. Huang et al., J. Alloys Comp. 791, 575 (2019))と非常に良く一致している（図 E-5）。この研究成果は J. Phys. Condensed Matter 誌の Multiscale Modelling 特集号 (https://doi.org/10.1088/1361-648X/ab7ad5)に掲載が決まっている。さらに我々は、本研究手法を NiTi 合金、TiPt 合金などに適用し、やはり一切のパラメータを使わずに実験と良く一致する微細構造を得ることに成功している。これは本研究の有効性を実証するものである。

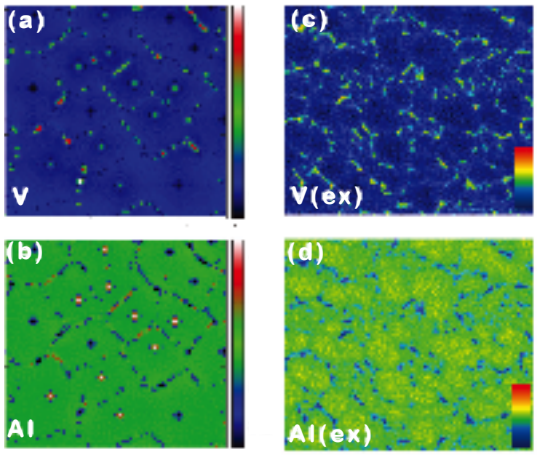


図 E-5：Ti64 の(a) φ_V, (b) φ_{Al}, (c), (d) 対応する実験（S Huang *et al*. J. Alloys Comp. **791**, 575 (2019)）

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：　市坪哲

協力者：　大野宗一（北海道大学）

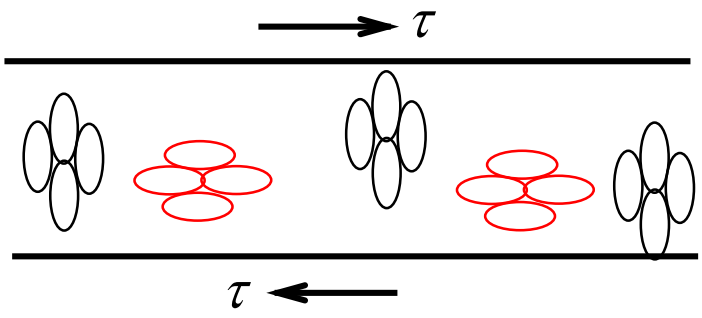
[アプリケーションソフトウエア・研究開発]

（実施・検討内容）

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、北大・大野グループ、京都工繊大・高木グループと共同して、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を行うことを目指し、凝固理論と相平衡/変態 kinetics、計算モデル、数値解析手法の検討を行った。その結果、東大グループとの Ni-Al を対象とした核発生の分子動力学計算においてオストワルトの step rule の妥当性について検証を行い、pure Ni の核生成がこの規則に基づいていることを確認できた。上述 3 グループのマルチスケール計算の整合性を保持するため、スケール間の効果的な情報伝達について解析を行った。その結果、結晶粒の競合的成長に影響を与える要素として、隣接するデンドライト間の相対的な形態・形状や熱流に対する配向性と、よりミクロなスケールにおける溶質原子間の相互作用の２つがあることがあきらかになった。サブ課題Ｅの 2 つの課題 i)と ii)の連携について検討を進め、効果的な連結を図った。その結果、スケール域の異なるフェーズフィールドモデリングに関して、エネルギー勾配係数のスケール依存をあきらかにすることができた。上記で得られた成果は、国内外の会議や論文で発表した。

なお、業務計画書に記載は無かったが、サブ課題Ｅで対象とするマルチケール域に渡る材料強度の発現機構の結果を広いスケール域に検証して活かすため、萌芽的課題「破壊とカタストロフィ」との合同研究会を開催したが、彼らの研究からヒントを得て、合金の材料強度における不安定変形についての研究を実施した。その結果、合金の超塑性変形と地震における slow slip の振る舞いに類似性がみられた。

（具体的な成果）



$$\left.\frac{\partial \dot{s}}{\partial N}\right|_{\dot{\varepsilon}} \propto \left.\frac{\partial \tau}{\partial N}\right|_{\dot{\varepsilon}}$$

図 E-6

成果は、当初から計画していた 1.大規模分子動力学法計算を用いた東大・渋田グループとの共同研究による Ni-Al を対象としたオストワルトの step rule の検証と、2.東大・澁田グループ、北大・大野グループ、京都工繊大・高木グループとの共同研究である結晶粒・デンドライトの競合成長の大規模フェーズフィールドシミュレーションである。これらの成果については渋田グループや、高木グループによって詳細が報告されるので、ここでは業務計画書には記載がなかったが、独自で新たに取り組んだ合金の不安定変形と超塑性変形現象の理論的考察に関して記載する。

不安定変形現象の典型的なものはネッキング破壊であり、この現象の生起は歪速度感受性指数によって予測することができる。即ち、歪速度感受性指数が 1 よりも小さい時には変形に伴う断面歪の現象と共に、歪速度（断面の減少率）が増大し、局所的な変形が加速し破断に至る。地震によるカタストロフィックな破壊を、このような材料の不均一変形とそれに続く破壊現象と類似しているものとして取り扱う傾向があるが、本研究では、ネッキングとは逆の現象である超塑性現象の発現と地震の滑りの類似性に着目した。

特に、岩石の滑り摩擦実験の結果を詳細に検討すると、静摩擦力が固着時間の対数に比例して増大すること、一定速度でのすべりには定常的な動摩擦力が存在し、これが滑り速度の対数に依存すること、さらに、すべり速度をステップ的に増加した場合、瞬間的応答と新たな速度に対応する定常摩擦力に収斂する長期的応答の両者が存在することが確認されているが、これらのスロースリップの地震モードに特徴的な現象が、摩擦の速度依存性項の係数を負に導く。これはまさしく不安定モードの存在を示しているが、あくまでも滑りの不安定モードであり、破壊は滑りを律する機構の直接の延長線上にはない。この点において、加速度的な変形を、破断を帰結するネッキングとは別個のものとして取り扱うべきであり、一様な大規模変形をもたらす超塑性現象こそがスロースリップの地震モードに対応すると主張する根拠である。

本研究では、不均一変形に対する一般的な定式化を行い、歪速度感受性と加工硬化率の２つのパラメータを用いて超塑性現象の生起する条件に付いて検討を行い、超塑性の機構として粒界滑りについて熱力学的な検討を行った。変形に対する熱力学の応用は難しいが、本研究ではエントロピー生成速度に基づく定式化を行い、一定の応力化では、変形速度を最大にするように可動（可回転）結晶粒の密度が決定されるという条件を導き出した。図 E-6 に示すのは黒の結晶粒が、せん断応力 τ の下で赤の結晶粒の

ように回転を生じることを模式的に示している。$\dot{s}$、N、$\dot{\varepsilon}$はエントロピー生成速度、可回転結晶粒の密度、歪速度を表す。歪速度が一定のときには、可回転結晶粒の密度を調整することで外部からの負荷応力を最小にするように粒界滑り（粒回転）が進行する。これがエントロピー生成速度の極値をとることに対応するというのが理論計算の結論である。

この研究は構造材料の超塑性現象を対象に、地震の slow slip mode に関連させながら、広範なスケール域の不安定変形に言及したものである。結晶粒の回転機構を原子の拡散に基づいて定式化することで、エトロピー生成速度の背後にある物理的意義を明らかにすることが可能である。また、⑤サブ課題E 高信頼性構造材料の i)第一原理計算によるデータ構築とメゾ・マクロへの連結においては香山グループによって結晶粒界の第一原理計算が行われているが、彼らの粒界の計算を実材料の強度予測に応用する好個の例が本研究の超塑性であり、multi-phase-field 法の延長線上に大規模 phase field 計算を行うことができることを確認した。

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：　澁田靖

協力者：　大野宗一（北海道大学）

[アプリケーションソフトウエア・研究開発]

（実施内容）

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・毛利グループ、京都工芸繊維大学・高木グループ、北海道大学・大野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完成させた。その結果、新たに開発した原子座標を Phase Field プロファイルに変換する手法を用いて、核生成の分子動力学計算から得られた凝固組織形状を Phase Field プロファイルとして得ることができた。具体的にはこれらのうち大規模分子動力学法計算に関する部分を担当した。その結果、100 億原子の分子動力学計算で得られた一辺 1μm 以上の凝固組織を用いて、10000 以上の結晶粒から構成される Phase Field プロファイルが得られた。前年度に実施した純金属および二元系合金における過冷却融液からの核生成・凝固・粒成長過程の解析結果を初期構造とした Phase Field 計算を行い、異なるスケール間にまたがるクロススケールモデリング計算技術を確立した。その結果分子動力学－Phase Field 計算同時空間に基づき、分子動力学シミュレーション結果を観測データとしたデータ同化による Phase Field 法パラメータの動的推定スキームを得ることができた。また実用合金形成過程の理解に向けた不均質核生成過程を系統的に調査し、微粒子や壁表面が核生成に与える影響を原子スケールの立場からあきらかにした。その結果、Ti 及び Al_3Ti 微粒子を核とした過冷 Al 融液からの不均質核生成における微粒子核生成能の面方位依存性をあきらかにした。なお、上記で得られた成果は国内外の会議や論文で発表した。

（具体的な成果）

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完成させ、クロススケールモデリング計算技術を確立し、分子動力学－Phase Field 計算同時空間に基づき、分子動力学シミュレーション結果を観測データとしたデータ同化による Phase Field 法パラメータの動的推定スキームを構築した。具体的には過冷融液からの純 Ni 単結晶成長の分子動力学計算（約 270 万原子）結果を観測データとして、アンサンブルカルマンフィルタ法を用いてフェーズフィールド法とのデータ同化を行い、固液界面エネルギー異方性パラメータ、結晶回転角、駆動力の同時推定に成功した（図 E-7）。Phase Field モデルに原子スケールの動力学を on the fly で導入する新しい試みであり従来のマルチスケール解析を超えたクロススケールモデリング計算実践の好例である。

また実用合金形成過程の理解に向けた不均質核生成過程の系統的に調査においては、具体的に Ti および Al_3Ti 微粒子を核とした過冷 Al 融液からの不均質核生成の分子動力学計算を行い、Ti 微粒子では稠密面 HCP(0001)表面上のみ固相成長が起こる一方、Al_3Ti 微粒子では同じ稠密面でも $D0_{22}$ および $L1_2$ 構造による原子配列の違いにより、成長様式が平面付着成長から島状成長へと大きく変化することを新たに見出した（図 E-8、Comp. Mater. Sci.に投稿中）。Ni-Al を対象とした核発生分子動力学計算においては、

Ni-50at%Al 融液からは B2 構造の NiAl が直接核生成する一方、純 Ni からは BCC 核が発生した後、FCC 結晶へと段階的に変化することを明らかにした。この段階的変化を従来のオストワルトの step rule と比較検証し、純 Ni の核生成がこの規則に基づいていることを明らかにした（Meter. Trans.に掲載決定）。

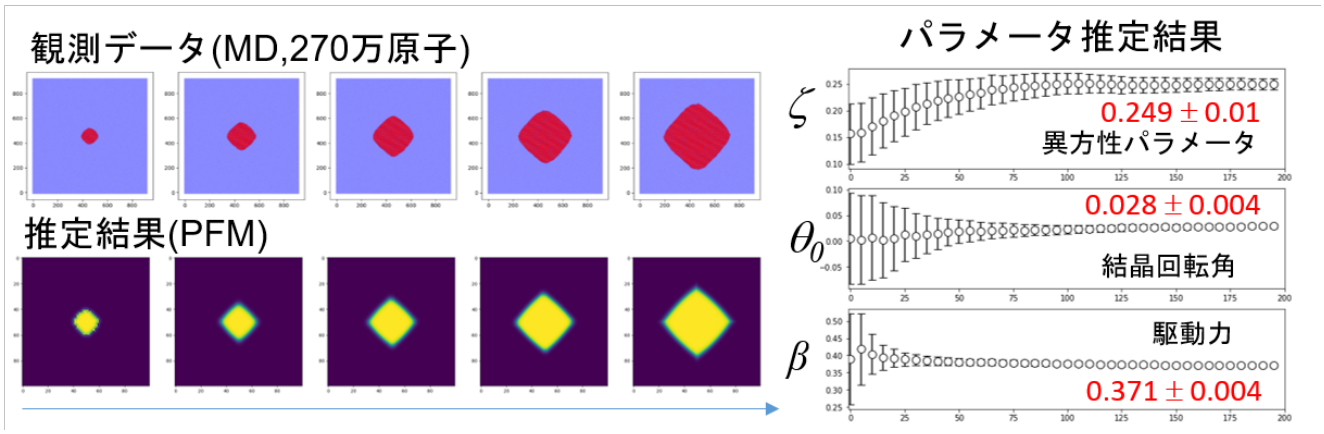


図 E-7：MD-PFM データ同化による Ni 単結晶成長中の固液界面パラメータ動的推定

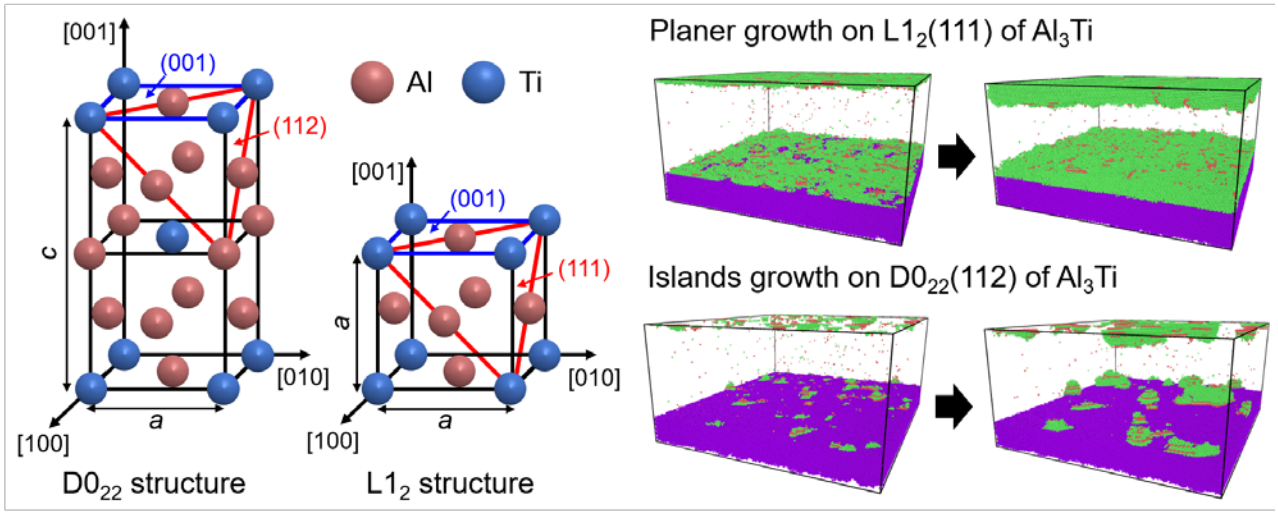


図 E-8：（左）Al_3Ti の結晶構造、（右）稠密面表面原子配列の違いによる Al 結晶成長挙動の違い

再委託先：国立大学法人国立大学法人京都工芸繊維大学

[研究実施体制]

責任者：　高木知弘

実施者：　Chunwen Guo

協力者：　大野宗一（北海道大学）、澁田靖（東京大学）、毛利哲夫（東北大学）

[アプリケーションソフトウエア・研究開発]

（実施内容）

凝固組織の高精度予測について、東北大金研・毛利グループ、北大・大野グループ、東大・澁田グループと共同して、大規模 Phase Field 計算によるアプローチを図った。その結果、以下に示す成果を得た。凝固組織において、柱状晶の制御はとりわけ重要である。そこで、柱状晶の成長メカニズムを解明するために、大規模 Phase Field 計算による柱状粒の競合成長を系統的に評価した。その結果、競合成長現象は隣り合う粒方位の関係に大きく影響を受け、それにより成長の方向が変化することがわかった。定量的 Phase Field モデルの MPI 並列コードを開発し、富岳コンピュータへの最適化を図った。その結果、初期バージョンから 30 倍の計算高速化を達成した。また、2 結晶二元合金を対象とし、各粒の方位を系統的に変えた大規模 Phase Field 計算により、競合成長のメカニズム解明を行った。その結果、複数の成長方向から最終的に生き残る 3 種類の粒界における挙動を初めてあきらかにした。ここで、東大・澁田グループが行う分子動力学法計算とのマルチスケール解析の連結を完成させた。その結果、大規模分子動力学計算によって得られる凝固組織から Phase Field 法で継続の粒成長計算を行う、新しいブリッジングモデルを開発しその優位性を示した。なお、上記で得られた各成果は国内外の会議や論文で発表した。

（具体的な成果）

アプリケーションソフトウエアの開発においては、定量的 Phase Field モデルの MPI 並列コードを開発し、富岳コンピュータへの最適化を図った。二元合金の凝固問題を対象とし、固液状態を区別する Phase Field 変数の時間発展方程式と溶質の拡散方程式を、差分法を用いて離散化し、MPI 並列コードを作成した。次いで、サポートの支援を受けつつプログラムの最適化を図った結果、当初作成コードに比べて 30 倍の計算高速化を達成した。図 E-9 は、作成したコードの弱スケールと強スケールの並列演算性能を評価した結果である。いずれの評価においても、ノード数 20,000 までの範囲において良好なスケーリングが達成できていることがわかる。

作成した並列コードを用いて、二元合金一方向凝固過程の系統的大規模 2 次元シミュレーションを行った。図 E-10 にデンドライト形態の時系列変化を示す。ここでは、白い点線で示す収束粒界における、白い粒（FO 粒）と赤い粒（UO 粒）の淘汰現象に着目した評価を行った。図中の I、II、III は、FO 粒の方位 θ_{FO} が、それぞれ $\theta_{FO} = 0°$ (type I)、$\theta_{FO} > 0°$ (type II)、$\theta_{FO} < 0°$ (type III)の場合。また、1、2、3 は、方位差が $|\theta_{UO} - \theta_{FO}| = 2°$、5°、10°に対応し、合計で 9 通りの計算を行っている。この結果、type I と type II については収束粒界は絶えず FO 粒側に傾き、type III はデンドライト一次アーム間隔に応じて変化することを示した。さらに、UO 粒が FO 粒を淘汰する普通でない淘汰現象

は、type III において最も頻繁に生じ、type II ではほとんど生じないことを明らかにした。以上の成果は、現在 International Journal of Heat and Mass Transfer に投稿中である。

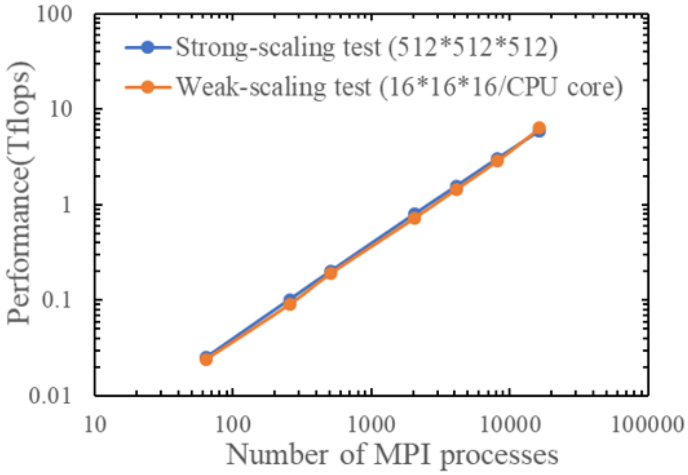


図 E-9： MPI 並列 Phase Field コードの性能評価

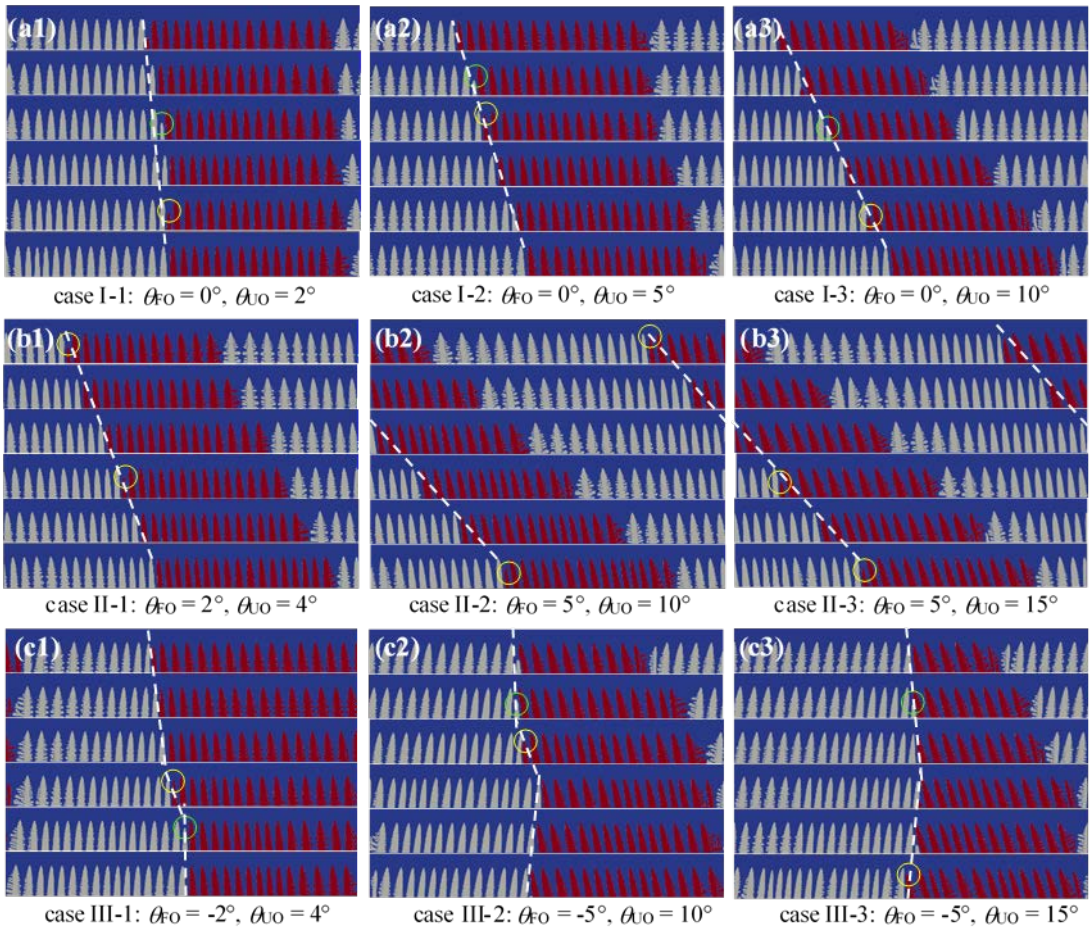


図 E-10： 二結晶二元合金一方向凝固シミュレーションにおけるデンドライト形態変化

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

本サブ課題では、ポリマー材料および有機／無機界面における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。ポリマー系の解析では、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い、ポリマー伸長の手法をエネルギー表示溶液理論のソフトウエアである ERmod に実装した。有機／無機界面の解析では、粘弾性の空間分割解析の枠組みを定式化し産学共同研究論文の発刊に至った。さらに、硬化エポキシ樹脂のモデルに関して、エーテル基およびアミン基の水分子付着による破壊バリアエネルギーを計算し、付着した水分子による低下度の違いを明らかにした。ハイブリッド量子古典コード(hybridQMCL)において、複数個の量子領域を設定可能とすることで、これまでより格段に厚い深さを量子領域として扱えるように改良し、実際に酸化被膜付きの Al 金属と硬化エポキシ樹脂との接着界面に水分子群を侵入させたシミュレーションを行いつつ高度並列化を進めた。研究テーマの遂行やソフトの開発では、メール会議を頻繁に行うとともに多地点テレビ電話サービスを用いた face-to-face の会合を必要に応じて随時行った。

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）、泰岡顕治（慶應大学）、石山達也（富山大学）、藤本和士（名古屋大学）

[アプリケーションソフトウエア・研究開発]

（実施内容）

ポリマー相溶性の全原子レベルでの解析に向けて、ポリマー伸長の手法を高度化しエネルギー表示溶液理論のソフトウエアである ERmod に実装した。その結果、これまで粗視化計算のみが行われてきた伸長自由エネルギーの全原子計算が可能になった。そして、小分子溶媒中でポリマー伸長法のベンチマーク計算を行い、ポリマー融体での解析に展開した。その結果、数十程度の重合度に達すると伸長自由エネルギーの計算値がポリマー全体の重合度に依存しなくなることが見出された。また、共重合系における水やガスなど小分子の溶解自由エネルギーを対象として共重合のトポロジーに対する依存性を検討するともに、樹脂と金属の界面における粘弾性を全原子モデルを用いて解析するための枠組みを構築した。その結果、共重合体における吸水自由エネルギーが共重合比によって規定されることがわかり、さらに、樹脂と金属の接着が強い場合に界面近傍の樹脂が高粘度化することがあきらかになった。なお、上記で得られた成果は国内外の会議や論文で発表した。

（具体的な成果）

ポリマー伸長の手法をエネルギー表示溶液理論のソフトウエアである ERmod に実装することで、全原子モデルによる伸長自由エネルギーの計算を可能にした。この方法は、モノマー１つの伸長に伴う自由エネルギー変化を決定するものであり、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によってエネルギー表示溶液理論を用いた高速自由エネルギー計算を行った。精度検証のために、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純水溶媒中のポリエチレンを取り上げ、近似理論であるエネルギー表示溶液理論が 0.2 kcal/mol 程度の精度を持つことを示した（図 F-1）。さらに、ポリマー伸長の手法をポリエチレン、ポリプロピレン、ポリメチルメタクリレート、および、ポリフッ化ビニリデンの融体に適用し、0.1 kcal/mol の精度でポリマー種の区別が可能であることを示した（図 F-2）。伸長自由エネルギーのポリマー種依存性は、伸長モノマーの周囲との平均相互作用の順序と一致する。極性の高いポリマーほどより負であり、また、無極性のポリマーを比較するとサイズが大きく van der Waals 引力の強いものがより負の伸長自由エネルギーを持つことがわかった。ポリエチレンとポリメチルメタクリレートについては重合度を変えた解析も行い、重合度が数十を超えると伸長自由エネルギーが重合度に依存しなくなることが見出された。数十程度の重合度のポリマー系の計算によって相溶性が判定可能であることを示す。

さらに、ポリエチレンとポリアクリルアミドの共重合体における水の溶解自由エネルギーを、重合トポロジーを様々に変えて検討した。その結果、溶解自由エネルギーを決定する主要因は共重合比であり詳細なトポロジーの寄与は副次的であることがわかった。また、樹脂－金属界面近傍における粘弾性の不均一性と接着性の関係を解析するために、粘弾性の１つである緩和弾性率を対象とし、その空間分割表式を開発した。この表式は、位置座標に依存する局所的な緩和弾性率を導入し、その全空間積分によって粘弾性を表現するものであり、積分の収束挙動から界面効果の局所性を論ずることができる。エポキシオリゴマーとアルミニウムの接着界面を解析し、接着エネルギーが大きい場合は、界面近傍での樹脂は動きが遅く、また、バルクと比較し粘度が高いことを示した。粘性が高い領域は外力を加えた場合の抵抗力が大きくなる。

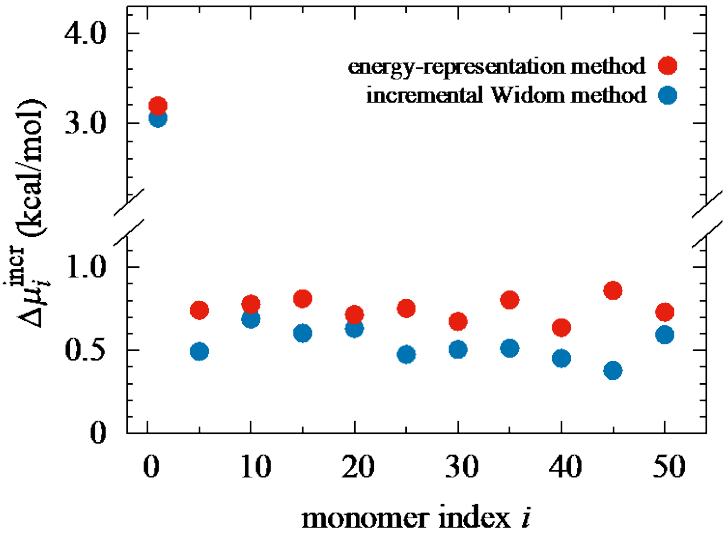


図 F-1：エネルギー表示溶液理論および Widom 粒子挿入法による純水溶媒中のポリエチレンの伸長自由エネルギー$\Delta\mu_i^{\mathrm{incr}}$。ポリエチレンの重合度は 50 であり、横軸はポリエチレン内のモノマー位置。

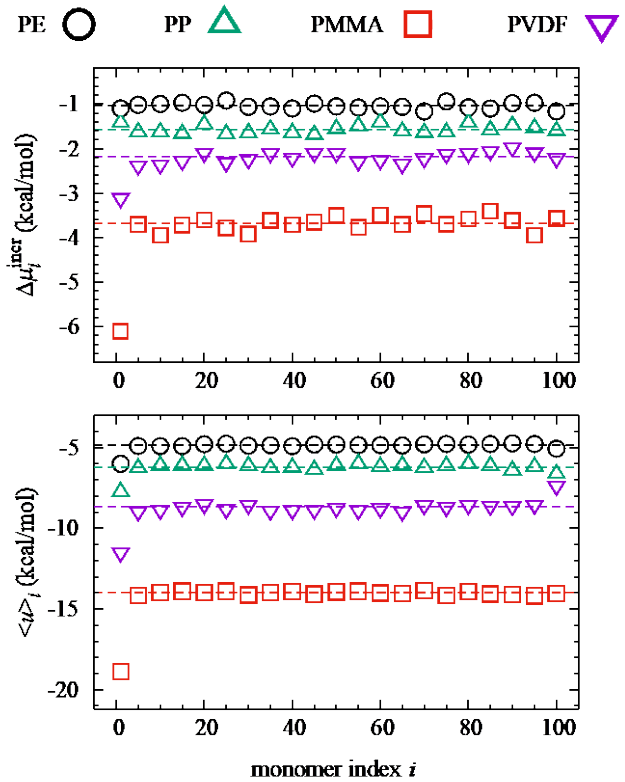


図 F-2：ポリエチレン(PE)、ポリプロピレン(PP)、ポリメチルメタクリレート(PMMA)、および、ポリフッ化ビニリデン(PVDF)の融体における伸長自由エネルギー$\Delta\mu_i^{incr}$と伸長モノマーの周囲との平均相互作用$<u>_i$。重合度は 100 で、計算はエネルギー表示溶液理論によって行った。横軸は各ポリマー内のモノマー位置を示す。

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)、大庭伸子（豊田中研)、田中宏一（デンソー）

[アプリケーションソフトウエア・研究開発]

（実施内容）

産業利用上重要な接着・密着等に関係する様々な有機／無機界面について、これまでに蓄積してきた 2 種類の界面モデルでの強度および自由エネルギーに関するシミュレーション結果と関連した最新の実験結果を踏まえ、アミン変性などより適切な官能基を取り入れた新しい原子論的モデルに発展させた。その結果、硬化したエポキシ樹脂の原子論的モデルに対して、エーテル基 C-O ボンドおよびアミン基 C-N ボンドの水分子が付着した状況での破壊バリアエネルギーの計算を行い、その水分子によるバリア低下度の違いを定量的にあきらかにした。また、界面侵入分子による界面弱化現象等を直接扱う大規模なハイブリッド量子古典シミュレーションコードを、これまでより格段に深い厚さを量子領域として扱えるように改良し、実際に利用した。そこでは、酸化被膜付きの Al 金属と硬化エポキシ樹脂との接着界面に水分子群を挿入した系の試行的シミュレーションの運用を通じて高度並列化を進めた。さらに、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、その反応ダイナミックスの理論的解明を試みるとともに、界面モデルの高精度化に役立てた。実験状況に近づけるためには、酸化被膜表面の終端安定化を施したモデルを用いることが必要であるとわかった。なお、上記で得られた成果は国内外の会議や論文で発表した。

（具体的な成果）

実験での接着剤の破壊は、被着材と接着剤との接触部（界面破壊)、あるいは接着剤の内部（凝集破壊）でよく見られる。凝集破壊に際しては、環境から水分子が硬化エポキシ樹脂に侵入した際に、エーテル基あるいはアミン基をアタックして破壊を促進する可能性がある。そこで、アミン系硬化剤により 5 個のエポキシ分子が架橋した硬化エポキシ樹脂モデルを考えた（図 F-3)。エーテル基 C-O ボンド、アミン基 C-N ボンドに対して、水分子 1 個の OH と H への分離がアシストする化学ボンド破壊過程について、DFT 計算を行った（交換相関汎関数は、PBE-GGA および B3LYP)。エーテル基 C-O ボンドの場合、得られたバリア遷移状態は C-O 長 2.18 Å であり、バリアエネルギーは、水分子が無い場合の 72%に減少し、2.1eV 程度であった。他方、アミン基 C-N ボンドの場合、3 級アミンである N 原子の周囲には大きな分子構造部が接続しているため、水分子が C-N ボンドに近づく際には立体構造障害が顕著である。N 原子の周囲の大きな分子構造部を回転させたモデルでもエネルギーはほとんど同じであり、また水分子が C-N ボンドにアタックする方向も様々に考えられる。様々な場合でバリアエネルギーを評価した結果、バリア遷移状態では C-N 長 2.50Å であり、C-O ボンドの場合での 2.18Å に比べて顕著に長く、最小のバリアエネルギーは 2.4eV 程度であった。立体構造障害のために水分子の C-N ボンドへの影響が少なく、

そのためバリアエネルギーの水分子による低下度も少なくなっていることを見出した。以上から湿潤環境での硬化エポキシ樹脂について、C-N ボンドよりも C-O ボンドが先に破壊されると予想できる。

上の結果を踏まえると、実験では硬化エポキシ樹脂の比較的マイナスに帯電した N 原子によって水分子が集められ、その水分子が C-O ボンドの破壊を促進している可能性が考えられる。また実験では、硬化剤に含まれる N 原子の割合が金属近くで比較的高いこともわかっている。そこで、ハイブリッド量子古典コード(hybridQMCL)を、これまでより格段に深い厚さを複数の量子(QM)領域として扱えるように改良し、高度並列化を進めつつ実際に試行的シミュレーションを行った。その際の対象系は、酸化被膜付きの Al 金属と硬化エポキシ樹脂モデルとの接着界面に、水分子群を異なる 2 つの深さ部位に侵入させ、それらを含む領域を 2 つの QM 領域とした（図 F-4）。シミュレーションの結果、金属表面のアモルファス酸化被膜は終端化していなかったため、金属近くの部位では水分子が拡散より前に反応してしまい、深さ部位による明確な水拡散度の違いを明らかにすることはできなかった。実験との直接比較のためには、適切に終端化した酸化被膜モデルを用いる必要があることが明らかになった。

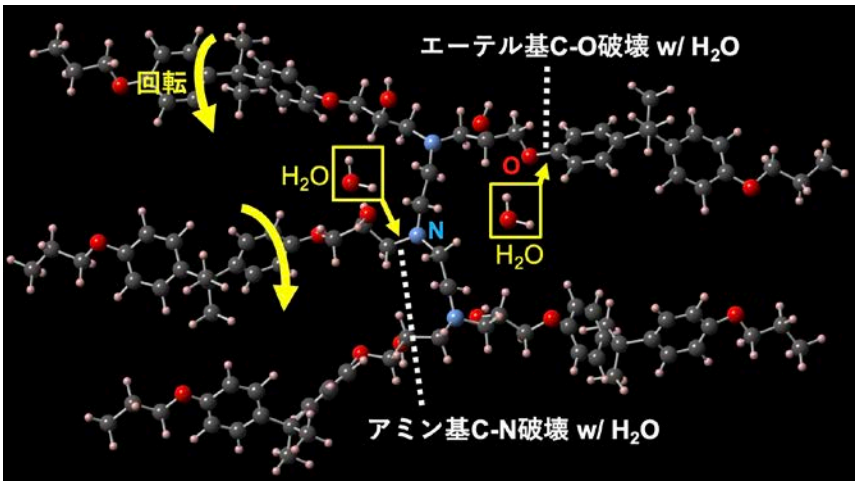


図 F-3：硬化エポキシ樹脂モデルにおける、2 種の官能基の水分子存在下での破壊過程。

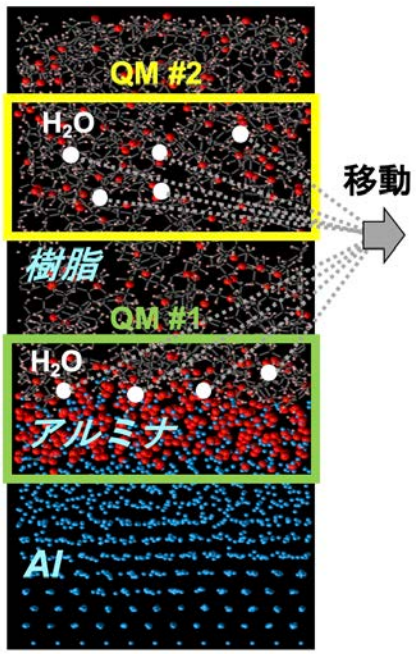


図 F-4：複数の量子(QM)領域として扱う、酸化被膜付 Al と硬化エポキシ樹脂モデルとの界面に侵入させた水分子群の拡散移動に関するハイブリッド量子古典シミュレーション。

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

物質科学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、開発を行った。特に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」が研究の中核をなした。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重点的に進めた。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たことも特徴である。(i)に関してはこれまでに開発した光電子分光スペクトル計算手法およびオーダーN 法第一原理手法のプログラム・日本語/英語マニュアルを整備の上で一般公開し、本プロジェクトの成果を内外の多くの研究者と共有した。(ii)に関してはサブ課題Ａ～Ｆに対する共通基盤として、実験データに依存せず、熱力学手法(CALPHAD)の効率性、汎用性と第一原理(DFT)自由エネルギー計算の精度を兼備する相図計算ツールを開発した。広範な原子相関、空孔、格子緩和、磁性、ひずみなど物理効果を自由エネルギーに導入することで、相図や融点の定量的な予測が可能となった。また基礎研究として CALPHAD 法では明示的に取り扱うことが困難な格子緩和の効果を Eshelby cycle に基づき詳細に解析し、CHALPHAD 法に対する補正の指針を与えた。(iii)では物質科学シミュレーションにおいて共通する基盤的計算アルゴリズムを数理研究グループと共同で開発し、新たに開発された手法をライブラリとして整備を行った。超並列計算機に適した実対称密行列固有値問題の数値計算ルーチン EigenKernel、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、大規模量子物質計算向け並列数値計算ライブラリ Kωの開発を重点的に行い、他サブ課題で開発されたアプリと連携した。特にサブ課題Ａで開発されている大規模第一原理計算コード RSDFT に Kωを接続し、バンド図計算の高速化（約 3 倍）が達成された。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、令和元年 12 月 26 日に「共通基盤シミュレーション手法」連続研究会「放射光実験と計算科学の新たな連携を目指して」を SPring-8 ユーザー協同体(SPRUC)理論研究会との共催で東京理科大にて開催した。実験グループとの連携では、強相関物質・材料のスピン・電荷ダイナミクスを測定することができる J-PARC や SPring-8 等の大型実験施設との連携を推進するため、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)プログラムを整備するとともに、本手法を酸化物高温超伝導体や量子スピン系に適用し、非弾性中性子散乱や共鳴非弾性 X 線散乱の実験結果を定量的に再現することに成功し、その物理機構を解明した。

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（R1.7 月迄）、
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）
　　福田将大、河村光晶、吉本芳英（以上、東京大学）

[アプリケーションソフトウエア・研究開発]

（実施内容）

大型実験施設（SPring-8、SACLA や J-PARC 等）との連携を強化するため、これまでに密度汎関数理論とデルタ SCF(Self-Consistent Field)法に基づく X 線光電子分光スペクトルの計算手法を開発し、シリセン、ボロフェン、単分散 Pt 原子への適用研究によってその有効性を示してきた。本年度はデルタ SCF 法をさらに発展させ、内殻励起が関与する X 線吸収微細構造スペクトルの高精度計算手法を開発し、OpenMX に実装した。その結果、化学的環境、スピン軌道相互作用、磁気的交換相互作用を統一して取り扱うことを可能とする汎用手法の開発に成功した。開発した計算手法を二次元物質やナノ構造体に適用し、計算手法の有効性を示した。その結果、長く論争となっていた ZrB_2 表面上のシリセン構造のバックリング構造の特定に成功した。さらに計算結果と実験結果の比較から、グラフェン上に単一原子で分散した Pt 原子の吸着原子構造とその電子状態を初めてあきらかとし、単分散 Pt 触媒の開発に向けた基礎学理を構築した。また数千原子を超える大規模系の第一原理全エネルギー計算を実現するために、局在自然軌道を用い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 に実装した。その結果、ギャップのある系だけでなく、金属に対しても高精度で安定な汎用オーダーN 第一原理計算手法が確立された。数十万コアを用いた大規模超並列計算に向けて、プログラムの高度化を実施し、マニュアルとともにプログラムの一般公開を行った。その結果、プロジェクト内外の多くのユーザーが本手法による大規模計算を容易に開始できるようになった。また、局在基底法である OpenMX と相補的な関係にある全電子計算手法(HiLAPW)、平面波手法(QMAS, xTAPP)の開発も実施し、サブ課題Ｃ、Ｄ、Ｅ、Ｆと連携し、基盤的ソフトウエアとして活用を進めた。なお、上記で得られた成果は国内外の会議や論文で発表した。

（具体的な成果）

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。

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を開発した。本

手法は密度汎関数理論の枠組みにおいて相対論的擬ポテンシャル、二成分スピノール波動関数、ペナルティ汎関数、厳密クーロンカットオフ法に基づき内殻ホールを明示的に導入した終状態を自己無撞着に計算し、始状態と終状態の全エネルギーの差として励起エネルギーを計算する手法である。化学的環境、スピン軌道相互作用、磁気的交換相互作用を統一して取り扱いが可能であり、内殻電子の絶対束縛エネルギーが高精度で算出され、実験値と直接に比較することができる。また内殻電子励起スペクトル計算用の内殻電子を含んだ高精度擬ポテンシャルの開発も進め、B、Pt、S、Ge の XPS 計算用擬ポテンシャルを作成した。系統的なベンチマーク計算の結果、平均して 0.4 eV 程度の誤差で内殻電子の絶対束縛エネルギーが計算できることが明らかとなった。本手法の適用事例として実験グループと協力し、ZrB_2 表面上のシリセン構造、Ag 基板上のボロフェン、グラフェン上の単原子 Pt 分散に対する様々な構造モデルに対して XPS の内殻電子絶対束縛エネルギー計算を行い、実験値との定量的な比較を行った。その結果、長く論争となっていた ZrB_2 表面上のシリセン構造のバックリング構造の特定に成功した。さらに β_{12} 型のボロフェンのボロン原子の 1s 内殻電子束縛エネルギーを定量的に再現することに成功し、配位数とは相反する特異な結合状態を明らかにした（図 G-1 を参照）。また Pt 触媒における Pt 使用量の低減のために単原子 Pt 分散構造の開発が進められているが、その詳細な原子構造はこれまで不明であった。今回、様々な構造モデルを構築し、それぞれに対してエネルギー安定性と内殻電子束縛エネルギーを計算し、実験値として比較することで、Pt 原子がグラフェンフレークの端に三配位で結合していることを初めて突き止めた（図 G-2 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を実現するために、局在自然軌道(LNO)を用いた分割統治型のオーダーN 第一原理電子状態計算手法（DC-LNO 法）を開発し、OpenMX に実装した（図 G-3）。占有状態空間の射影演算子に対する低ランク近似を経由して局在自然

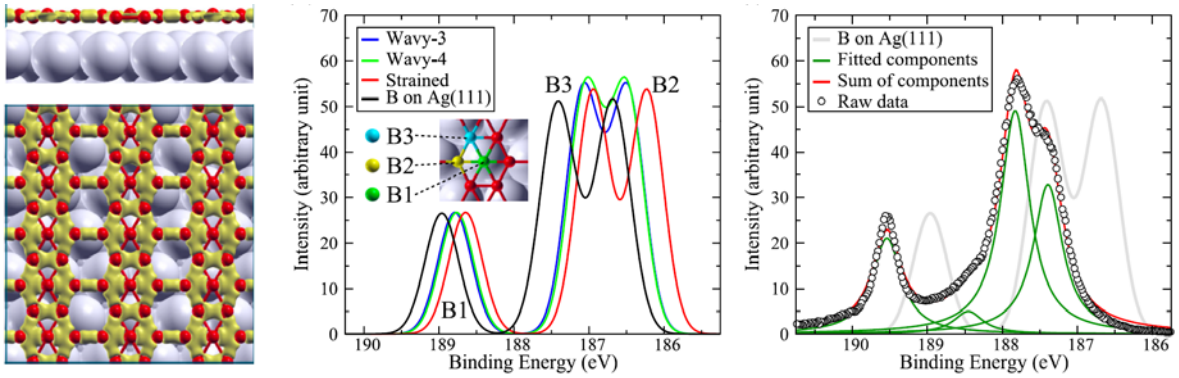


図 G-1：左図: Ag(111)表面上のボロフェン構造とその電子密度。中図: 第一原理計算によるボロフェンの B-1s 状態の XPS スペクトル。黒線が Ag(111)表面上のボロフェンの計算結果。右図: 高エネルギー研究所フォトンファクトリーで測定された Ag(111)表面上のボロフェンの B-1s 状態の XPS スペクトル。

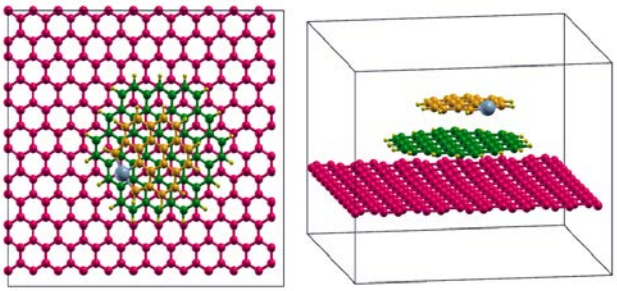


図 G-2：グラフェン上の単原子 Pt 分散構造

軌道を計算する手法を新たに開発したことで、高精度な基底関数を低計算コストで容易に計算できるようになった。本局在自然軌道計算手法と分割統治法を組み合わせることで高精度かつ高速な計算手法の開発に成功した。さらに本手法の多重並列構造に着目し、三段階の並列化を実装した。その結果、系に含まれる原子数の 40 倍程度までスケールする効率的な超大規模並列プログラムを開発した。開発手法はすべて OpenMX に組み込み、英語と日本語のマニュアルを整備したうえで GNU-GPL のライセンスの規約に則り、一般公開を行った。その結果、プロジェクト内外の多くのユーザーが本プロジェクトで開発された新機能の計算を容易に開始できるようになった。

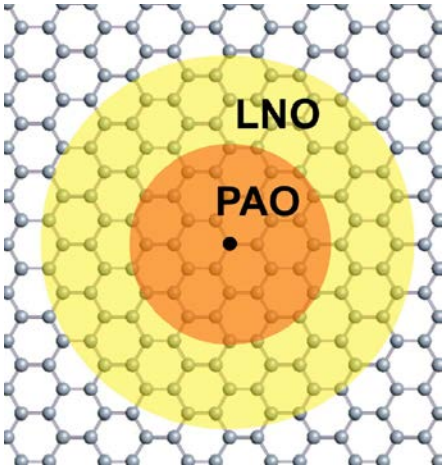


図 G-3： DC-LNO 法の概念図

b） xTAPP の開発

サブ課題Ｃでは、物質の格子模型を高精度な手法で解くことで、その性質を明らかにしているが、この課題との連携として模型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）との連携を継続してきている。元々xTAPP は原子構造の最適化を主な目的として開発されており、擬ポテンシャルライブラリもそのような観点で構築されたが、RESPACK 側から、価電子帯直下の内殻電子軌道を明示的に扱う希望が出たため、このような擬ポテンシャルを構成することができるよう、擬ポテンシャル生成プログラムを同一の角運動量チャネルに２つの束縛状態があっても機能するように改良し、必要となった擬ポテンシャルを作成した。また平成 30 年度と同様に、xTAPP の応用計算として PdH と Pd 間の 111 方向界面について、歪はクーロン力と同様の長距離の影響力があることを考慮して、さらに大規模な計算を行い、前年度の結論を確認した。当初の計画の主要な目的であった xTAPP のスピン軌道相互作用対応についてはすでに完了しており、実用に使われている。また xTAPP の普及についても毎年講習会を開催してきている。サブ課題Ｃとの連携については、主に RESPACK との連携を 5 年間継続してきた。またこの他 Pfaffian を高速に計算するためのプログラム技法を開発しサブ課題Ｃに提供している。

c） QMAS の開発

プロジェクトの最終年度にあたり、これまで QMAS に導入してきた計算機能の実際の問題への適用を進めた。高エントロピー合金を含む 15 種の BCC 耐熱合金について、Bader 電荷分析結果に基づき、原子体積・電荷・応力を評価し、上記合金中ではこれらに大きな揺らぎが見られ、それぞれの間には強い相関があることを明らかにした。また、原子毎の応力は、第 1・第 2 近接サイトの化学種に依存することを見出し、15 種の合金に統一的に適用可能な線形モデルを確立した（図 G-4）。記述子は、構成元素の価電子濃度と原子体積に基づくもので、コストの高い計算を必要としないものである[Phys. Rev. Mater. 4, 023608

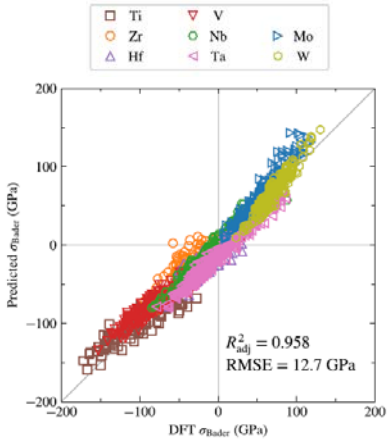


図 G-4：応力（原子毎）の予測

(2020)]。Langevin 熱浴を用いて作成したアモルファス・アルミナおよび不規則合金を含む窒化物半導体中の各種空孔型欠陥について、陽電子状態・消滅パラメータの計算を行い、陽電子消滅実験の解釈に資した[J. Phys.: Condens. Matter 31, 476401 (2019); Acta Physica Polonica A 137, 231 (2020) 等]。有機強誘電体・反強誘電体・圧電体の性能予測にも活用した。PAW 法＋平面波基底という標準的な構成要素のシミュレータとして、計算効率の面での達成度は満足のいくものではないが、いくつかの特徴的な計算機能の導入およびその有効な活用事例の積み重ねは行うことができたと考えられる。

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、精度の高い計算が可能となる。これまで、X 線吸収分光や電子エネルギー損失分光で実現される内殻励起スペクトルを、内殻正孔を考慮して計算可能な手法とコードを開発しきたが、スーパーセルによるエネルギー誤差が問題となっていた。内殻励起エネルギーは、内殻正孔を考慮した励起状態と内殻正孔の無い基底状態との全エネルギー差（ΔSCF 法）から評価される。スペクトルは終状態として、内殻正孔を考慮した電子状態を用いてフェルミ黄金則により計算され、内殻正孔を価電子が遮蔽する効果がセルフコンシステントに含められる。今回、周期的に配置された内殻正孔間の付加的な静電エネルギーをスーパーセルサイズ依存性から見積もることで孤立した内殻正孔系のエネルギーを求めることが可能となった。計算例としてグラフェフェンに適用したところ、期待される内殻正孔間距離に反比例する静電エネルギーが求められ、高い精度で励起エネルギーが評価可能であることが示された。HiLAPW は汎用性の高い高精度の第一原理計算手法を与え、今後とも広く活用が期待される。

e） TOMBO の開発

本年度も引き続き、内殻電子励起エネルギーをより高精度に評価することを目指し、全電子混合基底法プログラムの開発を行った。また実際に本研究課題で開発をしたプログラムを用いて、計算精度の評価するためのテスト計算を行った。過去 5 年間のプログラム開発により、GW 近似の範囲で Bethe-Salpeter 方程式を解くいわゆる GW+Bethe-Salpeter 法をさらなる追加近似なしに「厳密」に実行することができるようになったことは、手法開発の面では大きな進展と言える。計算コスト削減の取り組みとしては一部のサブルーチンに対して CUDA 化も行い、一定の速度向上を達成することに成功した。またこれまでに行ったテスト計算を通じて、既存の手法における問題点を明らかにしたことにより、今後の手法開発に対する準備を整えることができた。

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

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）、Arkapol Saengdeejing（東北大学）

[アプリケーションソフトウエア・研究開発]

（実施内容）

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、熱力学手法(CALPHAD)の効率性、汎用性と第一原理(DFT)自由エネルギー計算の精度を兼備する相図計算ツールを開発した。昨年度に確立された CALPHAD 法の問題点を改善できる熱力学モデルと DFT 計算データを CALPHAD 法へデータマッチングさせるモジュールを展開して、広範な原子相関、空孔、格子緩和、磁性、ひずみなど物理効果を自由エネルギーに導入した。実際の二元合金系 Al-Ni、Fe-Pt、Zr-C に適用して有効性を検証し、各物理効果の相図に及ぼす影響を調べた。その結果、相図計算の制度が向上し、Al-Ni に関して、昨年度の結果に六方晶相、直方晶相と準安定相を取り入れることが可能になった。

また、開発した機械学習（逐次学習）と電子論の組み合わせた手法を用いて融点の高精度予測に成功し、新しい物質の結晶構造の探索に重要な固相-液相境界線の予測手法を、実際の Al-Ni 系に適用することができた。さらに、東北大学金属材料研究所グループの計算を参考にして、連携研究として格子緩和効果を調べた。Fe-Pt に対して、より高精度な計算が可能となるよう磁気効果を CALPHAD 自由エネルギーモデルに導入し、CVM（クラスター変分法）の四面体原子相関を加えて相図を計算することができた。また、Zr-C に対して、空孔を考慮した相図計算が可能となった。なお、上記で得られた成果は国内外の会議や論文で発表した。

（具体的な成果）

(i) 第一原理ベースの新 CALPHAD 相図計算法の研究開発と展開

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。これまで、CALPHAD 法の主な問題点であるエントロピーの点近似を改善して、CALPHAD 法の効率性、汎用性を利用するために、Compound Energy Formalism(CEF)に基づく Order-Disorder（規則相-不規則相）モデルを採用して、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)を確立した。規則相は 4-sublattice 正則溶体、不規則相は Special Quasirandom Structures (SQS)を用い、FCC、BCC 格子に対して Al-Ni 系のテスト計算を行った。今年度はさらに、CEF-DFT-CALPHAD 法の枠組に各物理効果の取り扱いを中心として下記の開発を進め、実際の二元合金系に適用して有効性を検証した。

i) 熱力学モデルの充実。Al-Ni 系に対して、系の特性を支配する FCC、BCC 相を中心とした計算結果（図 G-5(b)）は実験相図（図 G-5(a)）の主な特徴を再現できたが、B2 相の融点の過大評価や単

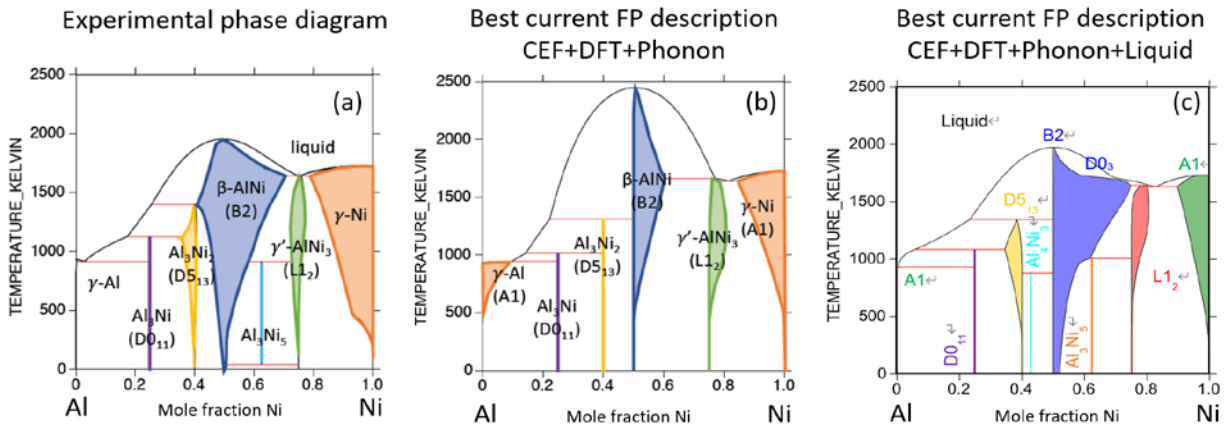


図 G-5：Al-Ni 系の計算相図と実験相図との比較。(a) 実験相図(P. Nash, 1991)；(b) CEF-DFT-Phonon の結果（昨年）；(c) Al_3Ni_2 ($D5_{13}$, hP5)、Al_4Ni_3 (cI112)と Al_3Ni_5 ($D5_{19}$, oS16)相を取り入れて、さらに逐次学習により（図 G-7 参照）最適化された液相モデルも用いた最新計算結果。

相領域の過小評価など改善すべき点がある。今年度は、出現する可能性があるすべての相に対して同じ Order-Disorder モデルを用いて計算を行った。具体的には、これまで line compound として取り扱われた Al_3Ni_2 ($D5_{13}$, hP5)を 2-sublattice で、また、明快な取り扱いのなされていなかった Al_3Ni_5 ($D5_{19}$, oS16)相と、未だ検討が不十分な Al_4Ni_3 (cI112)に対して、line compound に基づく自由エネルギーモデルを構築した。その結果、図 G-5(c)に反映されたように、昨年度の結果（図 G-5(b)）と比べて、Al_3Ni_5 ($D5_{19}$, oS16)相の導入により B2 相領域が大きく改善されて、Al_3Ni_2 ($D5_{13}$, hP5)相領域も実験相図とよく一致した。また、Al_4Ni_3 (cI112)が安定相であることを明らかにした。

ii) 格子緩和効果。東北大学金属材料研究所グループの計算を参考にして格子緩和の効果（間接的にある程度のひずみ効果）を調べた。Al-Ni における 5 種類の FCC-base 規則相(Al-A1, Al_3Ni-$L1_2$, AlNi-$L1_0$, $AlNi_3$-$L1_2$, Ni-A1)に対して、Fixed lattice (Al)、Fix lattice (Ni) と Global relaxation との 3 種類の緩和条件で計算を行い、Fixed lattice(Al)の DFT エネルギーを用いて求めた状態図が一番実験状態図の特徴を再現しているという興味深い結果になった。その原因を現在解析中である。

iii) 磁気の自由エネルギーモデル。磁性のある系に対して、第一原理計算では、Spin-polarization(SP)と Non Spin-polarization(NSP)を別々に計算して相安定性や相変態を議論するのに対して、従来の CALPHAD 法は直接に磁性を取り扱うことができない。そこで、図 G-6(a)のような DFT の SP と NSP を繋ぐ *Partial magnetic ordering* の磁気自由エネルギーモデルを用いて、Inden の磁気過剰比熱モデル（G. Inden, Phys. B, 103, 82, 1981）を援用して、規則相と不規則相のそれぞれに対して第一原理の SP と NSP（FM）エネルギー、フォノン振動効果、CVM の配置エントロピーを求め、Inden モデルのパラメータを決めて、CALPHAD 法の自由エネルギーモデルを構築する手法を提案し、合金系 Fe-Pt に対して

テスト計算を行った。計算結果(G-6(b))と実験相図(G-6(a))と比較したところ、Fe_3Pt-$L1_2$、FePt-$L1_0$、$FePt_3$-$L1_2$ の 3 つの相の相変態温度が過小評価されたが、実験状態図の主な特徴が再現されていることが分かった。

vi) 空孔の導入。DFT で各種の空孔(single, pair)形成エネルギーを算出して、CALPHAD 法の自由エネルギーに加えて、空孔の影響が大変重要と考えられる Zr-C 系に対して状態図計算を実施した。

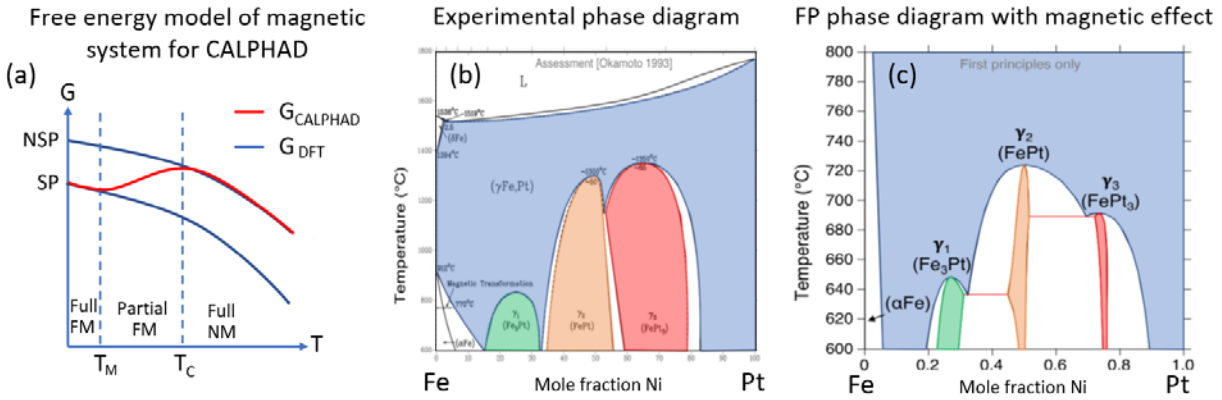


図 G-6：(a) DFT の計算結果を利用する CLAPHAD 法の磁性自由エネルギーモデル。
(b) Fe-Pt 系の実験相図； (c) 磁性効果を考慮した Fe-Pt 系の計算相図。

(ii) 機械学習と第一原理を用いて固相-液相境界線の予測

これまで開発した CEF-DFT-CALPHAD 法の問題点の 1 つは液相の取り扱いである。第一原理で簡単に液相の自由エネルギー計算ができないため、図 G-5(b)の計算に使われた Al-Ni の液相の自由エネルギーは少数の実験データに基づいて assessment されたデータ(N. Dupin, 2001)を援用している。これは B2 相の融点の過大評価の主な原因とみられる。そこで、第一原理計算と機械学習（逐次学習）ツール ESPEI(B. Bocklund, 2019)を組み合わせて固相-液相境界線の予測を試た。Al-Ni 系の計算状態図（図 G-5(b)）を出発点とし、少数の液相実験データ（あるいは MD データ）（図 G-7 にある紫のシンボル）を参考にして、液相自由エネルギーの reciprocal interaction parameter を 10 個設定し、それぞれの組み合わせにガウス確率分布で 100 サンプルを得て不確実性の定量化を行う。不確実性が一番低いサンプルに対応する parameter set を用いて最後に固相-液相境界線を求めた。G-7(b)は 500 回の循環後の相図であり、B2 相の相境界から得た融点は実験値とよく一致して、融点の予測は成功した。その液相モデルを用いて算出した相図（図 G-5(c)）は実験相図を高精度で再現した。

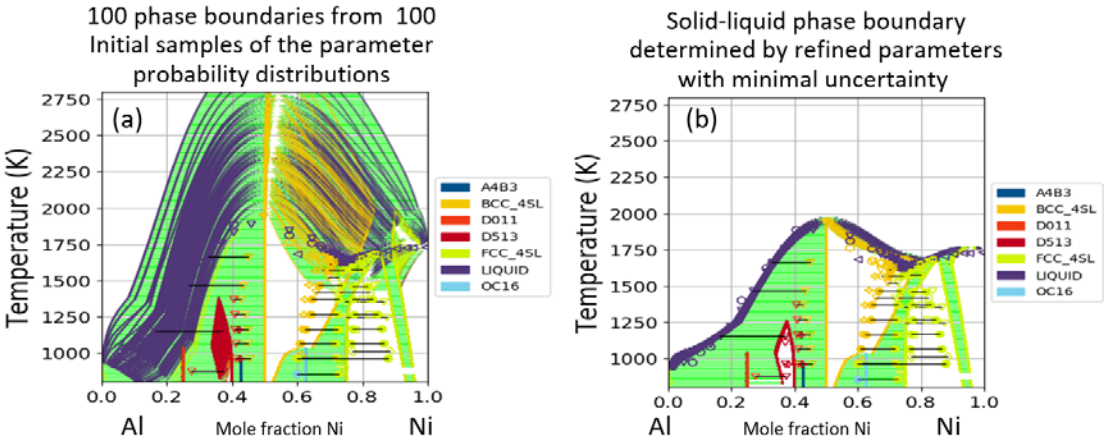


図 G-7：(a) 100 個初期パラメータ確率分布に対応する 100 個の固相-液相境界線；(b) 逐次学習により不確実性の定量化を行い、不確実性が一番低いパラメータを得て計算した固相-液相境界線。

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

[アプリケーションソフトウエア・研究開発]

（実施内容）

東北大学大学院工学研究科グループと連携して、格子緩和の理論的基礎の構築を行った。その結果、従来から論じている Eshelby cycle の考え方で格子緩和のエネルギーが見積れることを確認した。Cu-Au 系を対象に、一様緩和、完全緩和、部分緩和などの計算モデルの精緻化を図り、Eshelby cycle に基づいて、Kanzaki force と Born von Karman force による局所緩和のエネルギーを導出した。その結果、ダイナミカルマトリックスの計算を行い、また、原子変位の相対値も導出することができた。Eshelby cycle では必ずしも格子緩和に対するエントロピーの寄与が考慮されておらず、これを連続変位クラスター変分法(CDCVM)に基づいて導入した。その結果、格子緩和に対するエントロピーの効果が相平衡に及ぼす影響を議論できるようになった。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した。その結果、CHALPHAD 法に対する補正の指針を与えることができた。なお、上記で得られた成果は国内外の会議や論文で発表した。

（具体的な成果）

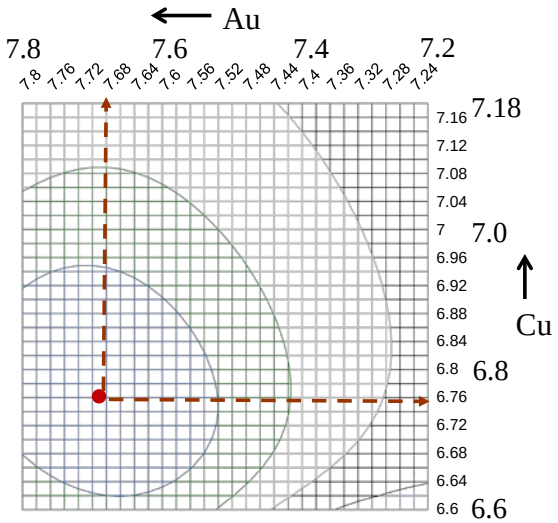


図 G-8

クラスター変分法と Eshelby cycle に基づいて格子の局所緩和の理論計算および数値計算を行った。まず、クラスター変分法の四面体近似を Cu-Au 系に適用し、部分緩和のモデルを用いると不規則相の生成エネルギーの組成依存性が実験をよく再現することを確認した。図 G-8 に示すのは 720K において一定の化学ポテンシャルの下で不規則相の自由エネルギーを Cu と Au の原子サイズ（等価な面心立方晶の格子定数）の関数として算出した等高線図である。このように自由エネルギーを全系の格子定数で微分極小化する(global relaxation)のではなく、構成元素の原子サイズで極小化を行うのが部分緩和(partial relaxation)である。自由エネルギーの最小値に対応する Cu と Au の格子定数が、平衡状態となる原子サイズを与える。化学ポテンシャルを変えながら同様な計算を行うと平衡状態となる原子サイズや生成エネルギーの濃度依存性を求めることができる。

図 G-8 は不規則相に対する計算結果であるが、同様な計算を Cu_3Au-$L1_2$ 規則相に対しても実行した。これまでと同様に、不規則相中では全濃度域において、それぞれの原子種が純金属のときと同じサイズを維持していることを確認した。これに対して、Cu_3Au-$L1_2$ 規則相に関する系統的な計算は、Cu と Au がほぼ同じサイズを有し、そのサイズが Cu_3Au-$L1_2$ 規則相の格子定数と一義的に関連付けられていることを見出した。それぞれの原子種のサイズが、不規則相では平均値をとらずに純金属の値を維持し、逆に、規則相では平均的な値を取るのは予想しなかったことであり、その起源については電子論的な考察も含めてさらに検討が必要である。

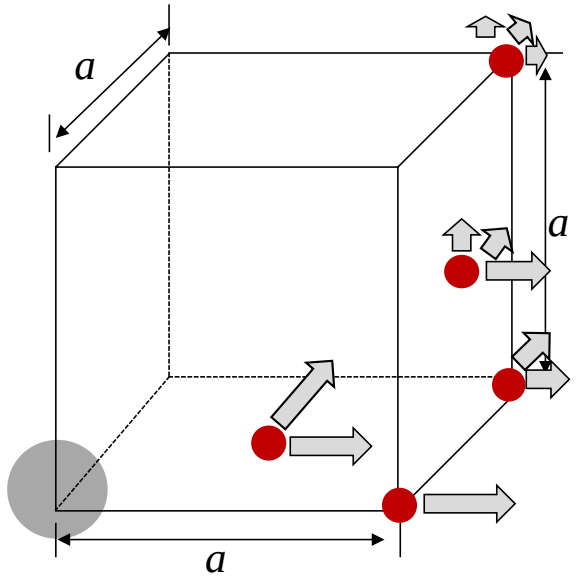


図 G-9

次に、Eshelby cycle に基づいて格子緩和の理論的な定式化を行った。まず、Cu-Au の格子緩和を一様な緩和(global relaxation)と局所的緩和に分離する。局所緩和に付随する 2 体の相互作用エネルギーのフーリエ変換を行うことで dyanmical matrix を求めることができる。さらに、Kanzaki force を定式化し、ブリルアン積分を行うと原子の局所的な変位を算出することができる。ブリルアン積分の精度の問題で変位の絶対値を求めることはできていないが、原点に Au を置いたときの周囲の Cu の変位の計算結果を図 G-9 に示した。ベクトルの大きさが相対的変位量を表す。

しかし、Eshelby cycle では原子配列のエントロピーも変位に伴うエントロピーも厳密には考慮されていない。配列のエントロピーの寄与は固溶に伴う自由エネルギーの変化として論じられているだけであり、この自由エネルギーには配列のみならず振動の自由エネルギーの寄与も含まれるはずである。工学研究科グループとは定期的な検討会・セミナーを行い、振動のエントロピーの算出方法について議論を行い、CALPHAD 法の補正計算の 1 つの指針を与えた。一方、Eshelby cycle に基づく本計算では、振動自由エネルギーを Debye-Gruneisen モデルの範疇で取り入れ、相平衡に及ぼす格子振動の物理的意味について明らかにした。局所的な原子変位（格子変位）に起因する付加的なエントロピーの寄与は連続変位クラスター変分法を用いて算出できるが、振動の自由エネルギーと不可分の関係にあり、完全に分離する形での算出は行っていない。

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
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（以上、鳥取大学）、李東珍（中央大学）、福島孝治（東京大学），
吉見一慶（東京大学）、岩田潤一（アドバンスソフト社）、小西優祐（アカデメイヤ社）、
藤田貴敏(分子研)、松井弘之(山形大)

[アプリケーションソフトウエア・研究開発]
（実施内容）
サブ課題Ｃで開発されている量子格子模型計算コード ＨΦに実装した大規模量子物質計算向け並列数値計算ライブラリ Ｋω で課題になっている反復計算処理に置いて残差が大きく振動してしまう問題に対し、シフト型クリロフソルバーとして QMR(Quasi Minimal Residual)法を実装し、残差を単調減少させることを目指した。その結果、残差の単調減少性が確認され、高速・高信頼で自動最適性のあるソルバーが実現した。さらに、富岳活用に直結するメニーコア型 CPU のノード内分散並列自由度など、高速並列アルゴリズムに向けての新たな論点を整理し、系統的性能解析と最適計算への知見を、ソルバー群 Ｋω、EigenKernel、k-ep の活用の効果とともに課題全体で開催した高度化合宿で周知した。その結果、サブ課題Ａで開発されている大規模第一原理計算コード RSDFT に Ｋω を接続し、バンド図計算の高速化（約 3 倍）が達成された。
なお、業務計画書に記載は無かったが、成果物ソルバー群 Ｋω、k-ep、EigenKernel の有用性を示すために、以下の研究も行った;(i)有機トランジスタ界面系（ペンタセン・パリレン C）の大規模電子状態計算：グリーン関数法計算（Ｋω 型計算）において、世界最大（3 億原子）系において、スパコン Oakforest-PACS 全ノードに至るまでの高い並列効率（強スケーリング性能において α=0.86）を得た。固有対（波動関数）計算については、直接法(EigenKernel)限界の 10 倍（1000 万次元、100 ナノメートルスケール系）までの計算が、k-ep 法で可能であることを得た。(ii)全反射高速陽電子回折実験(KEK 物構研)のデータ解析：表面構造解析向けの新しい実験手法である当該実験のデータ解析に、直接法(EigenKernel)計算を用いた。グリッド型大域探索と反復型局所探索を組み合わせた超並列型 2 段階解析法を開発した。テスト計算、および、実験データ解析で有用性を確認した。これら(i)(ii)は、富岳において、新たなキラーアプリになりうるもので、その先駆となる成果と言える。なお、上記で得られた成果は国内外の会議や論文で発表した。

（具体的な成果）
昨年度までに、成果物である数値計算ライブラリ Ｋω（シフト型クリロフ部分空間による大規模グリーン関数計算）は、サブ課題Ｃで開発されている量子格子模型計算コード ＨΦに実装され、フラストレート系における、有限温度効果を取り入れた動的構造因子計算（Gohlke, *et al.*, Phys. Rev. B 97, 075126 (2018)）などに使われている。オープンソースライブラリとしても正式に公開し、論文を投稿した（プレプリント：http://arxiv.org/abs/2001.08707）。ただし、反復計算処理において残差が大きく振動してしま

い現象が報告され、改善希望があがった。これは共役勾配法(CG)系列の解法(shifted BiCG,sBiCG)を使っていることに起因する。本年度は、上記振動現象を解決するために、準最小残差(QMR)型解法(shifted QMR_SYM,sQMR_SYM; Sogabe *et al.*, Electron. Trans. Numer. Anal. 31, 126 (2008))を実装した。QMR 型解法は、クリロフ部分空間における最小化を数理原理とするため、残差が準単調現象性を持つ。図 G-10(a)に、14 サイトハイゼンベルグ模型でのテスト計算を示した。残差（グリーン関数点のうち最大の残差）Rを、反復回数nの関数としてプロットした。従来法（sBiCG 法）と異なり、QMR 型解法(sQMR_SYM)では、残差が実効的に単調減少していることが確認できた。上記より、高速・高信頼で自動最適性を持った反復解法が実現され、今後の HΦでの実研究に活かしていく。さらに、富岳活用に直結するメニーコア型 CPU のノード内分散並列自由度など、高速並列アルゴリズムに向けての新たな論点を整理し、系統的性能解析と最適計算への知見を、成果物ソルバー群 Kω、EigenKernel、k-ep の活用の効果とともに課題全体に周知した。その結果、サブ課題Aで開発されている大規模第一原理計算コード RSDFT に Kωを接続し、バンド図計算の高速化が達成された。具体的には、単結晶シリコンのバンド図計算において約 3 倍の高速化が得られた。

なお、業務計画書に記載は無かったが、成果物ソルバー群 Kω、k-ep、EigenKernel の有用性を示すために、以下の研究も行った; (i) 有機トランジスタ界面系（ペンタセン・パリレン C、図 G-10(b)左図内図）の大規模電子状態計算（Hoshi et al., J. J. Indust. Appl. Math 36, 685 (2019); Tanaka et al., J. J. Indust. Appl. Math 36, 719 (2019)；論文準備中）：自作電子状態計算コード(第一原理に基づくモデル化理論による、コード名 ELSES)を用いて、表題界面系研究を行った。シフト型クリロフ部分空間法(Kω型アルゴリズム)を用いて、極限的大規模計算を行った。富岳と類似するメニーコア CPU を搭載した Oakforest-PACS 全ノード計算にて、世界最大（3 億原子）系計算を行い、高い並列効率（強スケーリング効率で 86%）を得て、手法の超並列性を示した（図 G-10(b)左図）。また、EigenKernel・k-ep による固有対（波動関数）計算を行った（図 G-10(b)右図）。電子スピン共鳴実験(Matsui, et al., Phys. Rev. Lett. 104, 056602 (2010))で示唆された準局在（分子数十個に広がった）波動関数を得た。また、本年度は k-ep を複数固有対計算に対応させ、「京」全体を使った直接法計算(EigenKernel)で計算できる限界（100 万次元行列）の 10 倍サイズの固有値問題計算（1000 万次元行列）が、k-ep(選択的中間固有対計算法)を使えば東大物性研スパコン 1 ノードで計算できることがわかった。また、10 並列程度までの並列計算において、有用な並列計算が確認された。有機デバイス材料に必要な 100 ナノメートル計算が可能となったことを示し、数理アルゴリズムを起点として、大きなブレークスルーと言える。(ii) 全反射高速陽電子回折実験（KEK 物構研）のデータ解析（Tanaka et al, Acta. Phys. Pol., in press, preprint: http://arxiv.org/abs/1910.05743/ ; Tanaka et al, submitted, preprint:https://arxiv.org/abs/2002.12165/ ; 投稿準備中）: 表面構造解析向けの新しい実験手法である当該実験（図 G-10(c)上図）のデータ解析に、直接法(EigenKernel)計算を用いた。グリッド型大域探索と反復型局所探索を組み合わせた超並列型 2 段階解析法を開発した。テスト計算として、Ge(001)表面構造（図 G-10(c)下図内図）が得られることを確認した。実験系研究者との共同で、実験（$Si_4O_5N_3$ / 6H-SiC (0001)-(√3×√3) R30° 表面系）でのデータ解析も行い、他実験と符合する結果を得た。これら(i)(ii)は、富岳において、新たなキラーアプリになりうるもので、その先駆となる成果と言える。

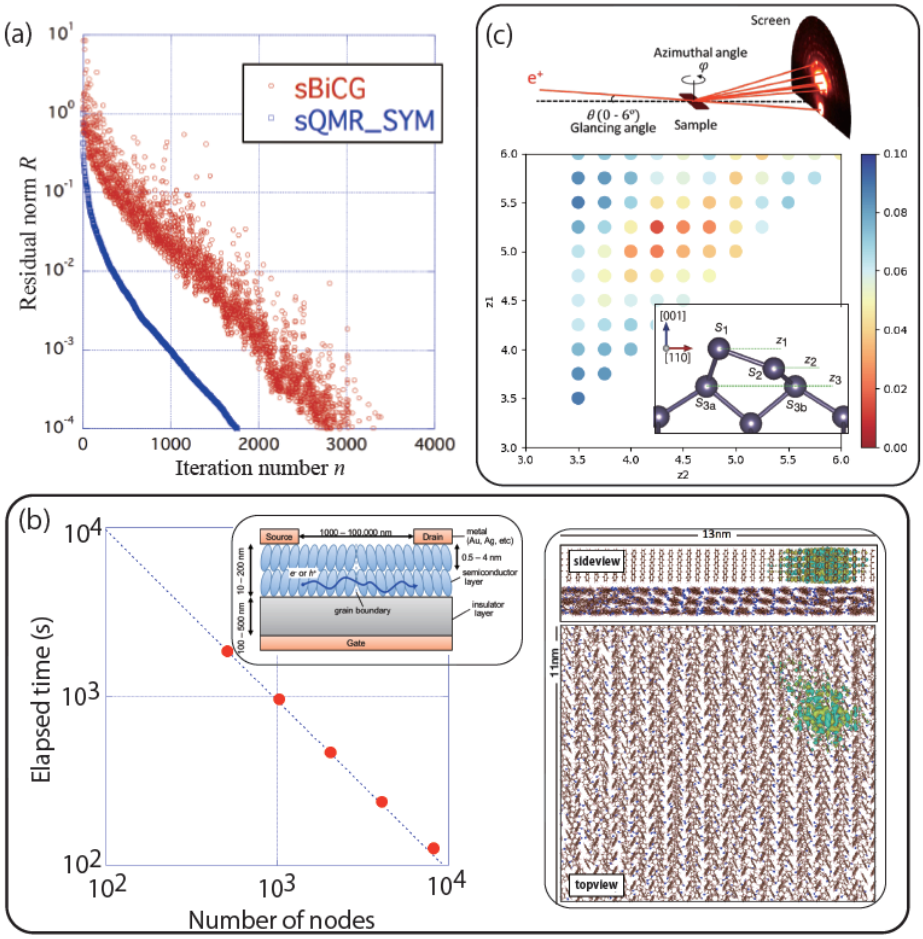


図 G-10：
(a)Kω での反復計算における収束挙動：新解法 (sQMR_SYM) と従来法(BiCG)との比較。
(b)有機トランジスタ界面（ペンタセン・パリレン C）の大規模電子状態計算。
(c)全反射高速陽電子回折実験に対する実験データ解析。

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（R1.11 月迄）

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・研究開発]

（実施内容）

強相関物質・材料のスピン・電荷ダイナミクスを測定することができる J-PARC や SPring-8 等の大型実験施設との連携を推進するため、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)プログラムを整備するとともにその有効性を実証した。その結果、幾何学的フラストレーションを持つ量子スピン系や強相関物質の複数軌道を取り入れた系で、任意の演算子に対する動的相関関数の計算が可能になり、論文で発表した。また、低次元量子スピン物質に対する磁場中の動的スピン構造因子を計算し、J-PARC での非弾性中性子散乱実験に対するスペクトル分散・形状の提案を行った。その結果、ストリップ型カゴメ構造を持つ系の磁場中磁気スペクトルの特異な性質があきらかとなり、対応する物質系の実験を効率的、かつ、効果的に行うための指針が得られた。また、梯子型格子形状を持つ強相関物質の動的スピン・電荷構造因子を多軌道性に焦点を当てて計算し、J-PARC での非弾性中性子散乱実験や SPring-8 での共鳴非弾性 X 線散乱実験に対するスペクトル分散・形状の提案を行った。その結果、梯子型鉄系超伝導体のブロック型と呼ばれる磁気構造での磁気励起の計算に基づいて、非弾性中性子散乱実験に対する情報を提供できるようになり、さらに、実験研究者が効率的、効果的に実験を行えるようになった。なお、上記で得られた成果も国内外の会議や論文で発表した。

（具体的な成果）

これまでの DDMRG では動的相関関数を計算する際、その物理量に対応する演算子は１つだけであった（例えばスピンの z 成分演算子や、スピンの反転演算子など）。例えば、スピン・ネマティック状態などの性質を明らかにするためには、２つの演算子の積からなるより複雑な演算子を用いた物理量の計算を行わなければいけない。本年度は、任意の数の演算子の積（例えば２つのスピン反転演算子の積）による動的相関関数の計算ができるように DDMRG の改良を行った。その結果、量子スピン系における動的ネマティックスピン相関関数等の複雑な物理量の計算が可能となった。

DDMRG を用いた具体的な研究では、第一に、カゴメ構造を単位とするストリップ状の格子上で定義されるスピン 1/2 の量子スピン系（ハイゼンベルグ模型）を設定し、その系に磁場を加えたとき生じる「磁化プラトー」と呼ばれる磁化が磁場に依存しない領域での動的スピン構造因子を調べた。あるパラメータ領域では、飽和磁化の 1/5 である磁化プラトー状態の基底状態が、朝永・ラッティンジャー液体となっていることがわかった。そのときの動的スピン構造因子の縦成分と横成分を計算した（図 G-11）。縦成分には朝永・ラッティンジャー液体とコンシステントなギャップレス励起がみられる。一方、横成分には有限のギャップが生じている。エンタングルメント・スペクトルにも特異な縮退状態が

現れており、これまでに見つかっていない新奇量子状態となっている可能性がある。このようなカゴメ・ストリップ形状を持つ量子スピン物質はすでに発見されており、今後、磁場中での非弾性中性子散乱実験を行えば様々な磁気プラトー状態で特異なスピン励起が発見されると期待される。この成果は現在論文執筆中である。

第二に、鉄系超伝導の研究で発見された、梯子型格子形状を持つ $BaFe_2Se_3$ に関する研究を行った。各格子点に 2 軌道を持つハバード型有効模型の基底状態の決定と、そこに現れるブロック型スピン構造での動的スピン構造因子の計算を進めた。その結果、先行研究(J. Herbrych *et al.*, Nat. Commun. **9**, 3736 (2018))と同等の計算が可能な状況になった。この系に対する国内での非弾性中性子散乱実験の結果も報告（未出版）されており、それらの解析に対して情報を提供できるようになった。今後は、格子点当たり 3 軌道の計算を進めて実験とのより定量的な比較を目指す。

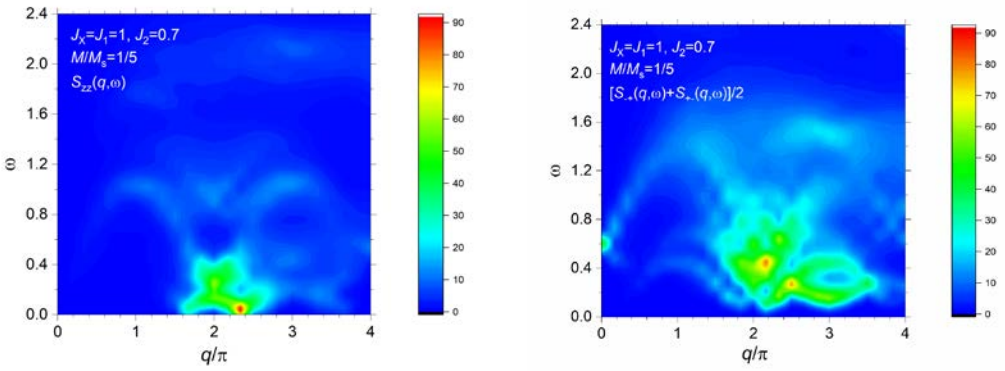


図 G-11：カゴメ・ストリップ格子ハイゼンベルグ鎖の 1/5 磁気プラトー状態における動的スピン構造因子の計算結果。左側が縦成分、右側が横成分の結果。

４－３．活動（研究会等）

日付	活動名称	場所	参加者
I. 主催・共催			
R1.5.29～5.31	International Conference on Frontiers of Correlated Electron Sciences	東京大学本郷キャンパス小柴ホール	412 名
R1.6.25～6.27	第 1 回 CDMSI アプリ高度化合宿 2019	理化学研究所計算科学研究センター6 階講堂	23 名
R1.7.8	サブ課題 G 「共通基盤シミュレーション手法 」連続研究会「データ駆動科学と次世代計算科学」	東京大学駒場キャンパス内駒場ファカルティハウス	33 名
R1.7.16～8.8	Computational Approaches to Quantum Many-body Problems (CAQMP2019)	東京大学物性研究所	延べ 538 名
R1.8.9	ポスト「京」重点課題(7) 第 5 回シンポジウム「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(CDMSI)」	東京大学本郷キャンパス伊藤国際学術研究センター伊藤謝恩ホール	207 名
R1.10.8～10.10	第 3 回計算物質科学イノベーションキャンプ	ほほえみの宿滝の湯（山形県天童市）	35 名
R1.10.18	第 8 回材料系ワークショップ～「富岳」時代の材料系シミュレーションの最前線～	秋葉原 UDX4 階 NEXT-1	88 名
R1.11.28	SALMON 講習会–並列コンピュータ LX 406Re-2 を用いたハンズオン–	東北大学サイバーサイエンスセンター本館 5 階	9 名
R1.12.2	OpenMX 講習会 –スーパーコンピュータ CrayXC40 を用いたハンズオン–	京都大学 学術情報メディアセンター北館 3 階 305 室	8 名
R1.12.26	サブ課題 G「共通基盤シミュレーション手法 」連続研究会 「放射光実験と計算科学の新たな連携を目指して」	東京理科大学葛飾キャンパス講義棟 4 階 403 教室	36 名
R2.1.21～1.22	サブ課題 D 研究会	東京大学柏の葉キャンパス駅前サテライト	21 日 22 名 22 日 19 名

日付	活動名称	場所	参加者
I. 主催・共催			
R2.2.17～2.18	第 9 回材料系ワークショップ ポスト「京」重点課題(7)・萌芽的課題(1) 成果報告会	秋葉原コンベンションホール	17 日 184 名 18 日 155 名
~~R2.3.9～3.11~~	~~第 2 回 CDMSI アプリ高度化合宿~~	~~理化学研究所計算科学研究センター6 階講堂~~	中止
Ⅱ. 協賛・協力・後援			
H31.4.2～4.3	物性研究所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会「計算物質科学の新展開」	東京大学物性研究所大講義室	2 日 85 名 3 日 72 名
R1.5.17	企業人材ニーズ vs 博士人材シーズマッチングワークショップ 2019	東京大学物性研究所大講義室	53 名
R1.7.17	ソフトウエア講習会- OCTA 講習会＆トレーニング 2019-	NATULUCK 八丁堀駅前店大会議室	29 名
R1.8.1	第 3 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	99 名
R1.8.23～8.25	計算物質科学人材育成コンソーシアム (PCoMS) 合宿セミナー2019	果実の山あづま屋(山形県上山市)	23 名
R1.8.25～8.29	KOBE HPC サマースクール(初級)―スーパーコンピュータで並列計算の基礎を学ぼう―	理化学研究所 計算科学研究センター	32 名
R1.9.17	第 6 回大型実験施設とスーパーコンピュータとの連携利用シンポジウム– 物質構造の階層性とフォノン物性の理解 –	秋葉原 UDX4 階 NEXT-1	102 名
R1.10.2	4th International Symposium on Research and Education of Computational Science (RECS 2019)	東京大学本郷キャンパス小柴ホール	59 名
R1.10.24～10.25	計算物質科学人材育成コンソーシアム (PCoMS) シンポジウム＆計算物質科学スーパーコンピュータ事業報告会 2019	東北大学片平キャンパス金属材料研究所 2 号館講堂	75 名
R1.11.1	第 6 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会～スーパーコンピュータ「富岳」の胎動、計算科学、AI の融合に向けて～	THE GRAND HALL(品川)	281 名
R1.11.7	CCMS/NIMS 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	8 名

日付	活動名称	場所	参加者
Ⅱ. 協賛・協力・後援			
R1.11.9	2019 年度理化学研究所計算科学研究センター一般公開	理化学研究所計算科学研究センター	-
R1.12.6	“TIA かけはし” ポスター交流会 2019「-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-」	東京大学柏の葉キャンパス駅前サテライト	参加者 45 名 ポスター発表 20 名
R1.12.10	PCoMS TOMBO hands-on seminar 2019	東北大学片平キャンパス金属材料研究所国際教育研究棟 2 階セミナー室 1	12 名
R2.2.17～2.18	The 2nd R-CCS International Symposium	ニチイ学館 大会議室＆R-CCS	参加者 176 名 ポスター発表 投稿 64 件、採録 64 件
R2.2.18～2.20	The 4rd 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、会議室	16 名
R2.2.3～2.4	「第 4 回元素戦略シンポジウム」～産学連携研究新展開～	東京大学伊藤謝恩ホール	3 日 202 名 4 日 131 名
R2.2.14	PCoMS OpenMX Hands-on Seminar2020	東北大学片平キャンパス金属材料研究所 2 号館 1 階ラウンジ	12 名
~~R2.3.4~~	~~HPCI フォーラム~~	~~ステーションコンファレンス東京 6 階~~	中止
~~R2.3.9~~	~~KOBE HPC スプリングスクール（中級）~~	~~兵庫県立大学神戸情報科学キャンパス 312 演習室（講義）~~	中止
~~R2.3.10~~	~~重点課題 5 第 6 回公開シンポジウム（最終報告会）~~	~~自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンター~~	中止

日付	活動名称	場所	参加者
Ⅲ. 会議・委員会など			
R1.6.10	第 1 回 CDMSI 諮問委員会・企画会議合同委員会	ステーションコンファレンス東京	19 名
R1.9.14	第 2 回 CDMSI 企画会議	ステーションコンファレンス東京	17 名
R1.10.4	第 3 回 CDMSI 企画会議	フクラシア東京ステーション E 会議室	15 名
R2.2.18	第 2 回 CDMSI 諮問委員会・企画会議合同委員会	秋葉原コンベンションホール 5 階カンファレンスフロア 5A-2	16 名
H31.4.4 R1.7.9 R1.9.30 R1.12.23 R2.3.23 (Web)	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	
H31.4.18 R1.5.20 6.13, 7.16 8.19, 9.19 10.16, 11.7 11.25, 2.23 R2.1.21 2.13, 3.23 (Web)	銅酸化物会議（サブ課題 C 関連）	東京大学工学部 6 号館大会議室	
R1.6.4 R1.7.2 R1.11.11 R2.1.30	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	

日付	活動名称	場所	参加者
R1.5.7 R1.8.5 R1.9.2 R1.10.4 R1.12.2	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（1月～准教授）　飯田　健二
③サブ課題Ｃ 超伝導・新機能デバイス材料	学校法人早稲田大学	理工学術院総合研究所 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 教授　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 研究チーム長　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

業務項目	担当機関	担当責任者
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
	国立大学法人横浜国立大学	大学院工学研究院 教授　大野かおる
	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
	国立大学法人京都工芸繊維大学	機械工学系 教授　高木　知弘
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＞

ポスト「京」重点課題(7) 第５回シンポジウム
「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(CDMSI)」
（特別講演：名古屋大学　天野 浩 教授）

【日時】令和元年８月９日（金）
【場所】東京大学　本郷キャンパス　伊藤国際学術研究センター　伊藤謝恩ホール

【プログラム】

9:30～10:0　　受付

10:00　　開会の辞　CDMSI 課題責任者　常行　真司（東京大学）

プロジェクトで取り組む全研究課題の成果をポスターで報告

10:00～10:30　フラッシュトーク（1 分間のポスタープレゼンテーション）

10:30～11:50　ポスターセッション（会場：多目的スペース）

11:50～13:00　休憩

13:00～13:10　挨拶
文部科学省、東京大学総長　五神　真、東京大学物性研究所長　森　初果

13:10～13:30　プロジェクト概説　常行　真司（東京大学）

座長：常行　真司（東京大学）

13:30～14:30　特別講演：天野　浩（名古屋大学）
「産業競争力の鍵を握るプロセスインフォマティクスの展開とスパコン『富岳』の役割」

14:30～15:00　【サブ課題Ａ】高機能半導体デバイス　押山　淳（名古屋大学）
「第一原理物質計算と量子論デバイス・プロセスシミュレーション」

15:00～15:15　休憩

座長：毛利　哲夫（東北大学）

15:15～15:35　【サブ課題Ｂ】光・電子融合デバイス　矢花　一浩（筑波大学）
「第一原理計算に基づく光科学ソフトウエア SALMON の開発と応用」

15:35～15:55　【サブ課題Ｃ】超伝導・新機能デバイス材料　今田　正俊（早稲田大学）

座長：赤井　久純（東京大学）

15:55～16:15　【サブ課題Ｄ】高性能永久磁石・磁性材料　三宅　隆（産業技術総合研究所）
「大規模シミュレーションと機械学習による永久磁石開発」

16:15～16:35　【サブ課題Ｅ】高信頼性構造材料　香山　正憲（産業技術総合研究所）
「金属材料の微細組織の高精度マルチスケール計算技術」

座長：川島　直輝（東京大学）

16:35～16:55　【サブ課題Ｆ】次世代機能性化学品　松林　伸幸（大阪大学）
「ポリマー系の物質分配と相溶性の全原子解析」

16:55～17:15　【サブ課題Ｇ】共通基盤シミュレーション手法　尾崎　泰助（東京大学）
「汎用第一原理大規模電子状態計算ソフトウエア OpenMX の開発と応用」

17:15～17:20　総括　高田　章（ロンドン大学）
クロージング　常行　真司（東京大学）

17:20～19:20　意見交換会（計算物質科学の「見える化」技術を展示）

【ポスターセッション】

サブ課題Ａ：高機能半導体デバイス

A1　小野　倫也（神戸大学）
RSPACE を用いた電子デバイス用高機能界面のデザイン

A2　宮崎　剛（物質・材料研究機構）
オーダーN 法第一原理計算による Si/Ge コアシェルナノワイヤの理論研究

A3　原嶋　庸介（名古屋大学）
転位および不純物がある GaN の第一原理計算とリーク電流モデルの構築

A4　大河内　勇斗（名古屋大学）
第一原理計算と熱力学的解析による GaN MOVPE 成長中の炭素取り込みの考察

A5　小川　湧太郎（名古屋大学）
第一原理計算による超格子型相変化メモリのスイッチング機構の考察

A6　中野　崇志（名古屋大学）
第一原理計算による GaN らせん転位中の Mg 不純物の研究

A7　森　伸也（大阪大学）
量子輸送デバイスシミュレータ開発

A8　鎌倉　良成（大阪工業大学）
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

A9　吉田　勝尚（筑波大学）
ナノスケールデバイスにおける離散不純物モデルの構築とその実装

サブ課題Ｂ：光・電子融合デバイス

B1　野田　真史（筑波大学）

第一原理計算によるシリコンの波数励起

B2　植本　光治（筑波大学）

大規模計算をもちいた極限パルス光･固体物質相互作用の第一原理シミュレーション

B3　廣川　祐太（筑波大学）

A64FX プロセッサに対する電子動力学アプリケーション SALMON のコデザイン

サブ課題Ｃ：超伝導・新機能デバイス材料

C1　大越　孝洋（早稲田大学）

高精度量子多体計算手法を用いた銅酸化物高温超伝導体の第一原理的研究

C2　山地　洋平（東京大学）

ボルツマン機械で迫る高温超伝導の起源

C4　山地　洋平（東京大学）

強相関トポロジカル物質の励起スペクトル

C5　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

C6　Rico Pohle（早稲田大学）

パイロクロア格子上のイリジウム酸化物における量子スピン液体の数値的研究

サブ課題Ｄ：高性能永久磁石・磁性材料

D1　佐藤　暢哉（産業技術総合研究所）

ベイズ最適化を利用した高効率な結晶構造探索

D2　合田　義弘（東京工業大学）

磁性材料の高性能化－大規模電子状態計算による探索

サブ課題Ｅ：高信頼性構造材料

E1　徐　卓（産業技術総合研究所）

大規模第一原理計算による鉄中の粒界特性の解明と機械学習との連携

E2　PHAM Thi Nu（横浜国立大学）

第一原理（FP）フェーズフィールド（PF）法の開発

E3　Chunwen Guo（京都工芸繊維大学）

一方向凝固過程における柱状粒の競合成長：フェーズフィールド法による研究

サブ課題Ｆ：次世代機能性化学品

F1　山田　一雄（大阪大学）

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高速計算手法の開発

F2　浦長瀬正幸（名古屋工業大学）

有機／無機界面シミュレータの接着への適用

サブ課題Ｇ：共通基盤シミュレーション手法

G1　小口　多美夫（大阪大学）

全電子 FLAPW 計算コード HiLAPW の開発

G2　吉川　誠司（東京大学）

不完全な実験データを用いたデータ同化による結晶構造探索

G3　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と開発

G4　星　健夫（鳥取大学）

コデザインに基づく数理アルゴリズムとライブラリの開発

G5　星　健夫（鳥取大学）

超並列 100 ナノメートル電子状態計算と有機デバイス材料研究の産業展開

G6　星　健夫（鳥取大学）

革新的表面構造解析に向けた超並列データ駆動科学と測定技術の融合

G7　遠山　貴巳（東京理科大学）

大型実験施設との連携―強相関電子系・量子スピン系の磁気・電荷励起―

＜資料２＞

第１回 CDMSI アプリ高度化合宿 2019

【日時】令和元年 6 月 25 日（火）～ 6 月 27 日（木）
【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 25 日（火）

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　小田嶋（理化学研究所）
情報提供：高度化ノウハウ最新情報提供

14:00～15:00　富士通株式会社　井上／石附
講義：ポスト「京」コンパイラの評価方法と結果解析

15:00～17:30　実習/コンサル：高度化手法によるチューニング、
ポスト「京」向けコンパイル

17:30～18:30　夕食

18:30～19:30　藤堂眞治（東京大学）
課題提起：計算物質科学アプリ普及とデータ収集に関して

19:30～20:30　意見交換会

6 月 26 日（水）

9:00～10:00　先行アプリのポスト「京」向けコンパイル事例
ＨΦ、OpenMX、SALMON、mVMC、RSDFT（RSCPMD）（各 10 分）

10:00～12:00　実習/コンサル：高度化手法によるチューニング、ポスト「京」向けコンパイル

12:00～13:00　昼食

13:00～13:30　実習/コンサル：高度化手法によるチューニング、ポスト「京」向けコンパイル
（13:30～14:30 「京」見学　※希望者のみ）

13:30～16:50　実習/コンサル：高度化手法によるチューニング、ポスト「京」向けコンパイル

16:50～17:30　星 健夫（鳥取大学）
講演：物質科学アプリと数値計算ライブラリのコデザイン状況

17:30～18:30　夕食

18:30～19:30　森田 悟史（東京大学）
技術紹介：テンソルネットワーク入門

19:30～20:30　意見交換会

6 月 27 日（木）
9:00～11:00　実習・高度化・コンパイル結果まとめ

11:00～12:00　発表（参加者全員、10 分/人程度）

12:00～13:00　昼食

13:00～15:30　幹事･富士通株式会社
今後の課題抽出、課題解決に向けた合宿後の取り組み指針まとめ

＜資料３＞

第 3 回計算物質科学イノベーションキャンプ

【日時】　令和元年 10 月 8 日（火）～ 10 月 10 日（木）
【場所】　ほほえみの宿滝の湯（山形県天童市）

【プログラム】
10 月 2 日（火）
13:10～13:30　受付

13:30～13:50　ガイダンス　尾崎 泰助（東京大学）、幹事一同
PCoMS イノベーション創出人材育成（IPD)事業の説明
キャンプスケジュールの説明

13:50～15:00　チュートリアル「ベイズ最適化による有効モデルパラメータ推定」
田村亮（NIMS）

15:20～18:00　講義 1 :「有効モデル推定とベイズ最適化」
田村 亮（NIMS）

20:00～21:00　IPD プログラム特別講演「大人向け数学塾の起業」
堀口 智之（和から株式会社　代表取締役）

10 月 3 日（水）
9:00～10:00　講義 2 :「ニューラルネットワークによる Kohn-Sham 交換相関
ポテンシャルの構成」　明石 遼介（東京大学）

10:00～12:00　実習 1 : 各チームにおける課題の選定および課題への取り組み

14:00～15:00　講義 3 :「酸素空孔の大規模計算とその機械学習」
熊谷 悠（東工大）

15:20～18:00　実習 2 : 課題への取り組み

20:00～21:30　IPD プログラム座談会「IPD プログラムフェローOB による座談会」
モデレーター : 尾崎 泰助（東京大学)

「物理屋と自動運転」堀田 俊樹（トヨタ自動車）
「企業ポスドクという選択肢（企業での研究を通して感じたこと）」
田中 悠太（日本製鉄）
「博士課程から民間企業へ」石野 誠一郎（日産アーク）

10 月 4 日（木）

9:00～12:00　実習 3：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　チーム代表者による発表

14:30～14:40　総括および今後の課題等議論

＜資料４＞

第 9 回材料系ワークショップ

～「富岳」で飛躍へ！計算データの価値～

ポスト「京」重点課題(7)・萌芽的課題(1) 成果報告会

【日時】令和 2 年 2 月 17 日（月）～ 18 日（火）

【場所】秋葉原コンベンションホール

【プログラム】

2 月 17 日(月)

司会：吉澤 香奈子(高度情報科学技術研究機構)

10:00-10:05　開会挨拶　草間 義紀(高度情報科学技術研究機構)

10:05-10:40　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」
久保 百司(東北大学)

10:40-11:00　高精度第一原理計算手法の開発
– 量子コンピュータ・新物質構造探索・レーザー加工への展開
松下 雄一郎(東京工業大学)

11:00-11:35　重点課題(6)における材料・分子系のシミュレーション事例、
ならびにデータ科学との連携事例　望月 祐志(立教大学)

11:35-12:50　＜ランチタイム＞

12:50-14:20　ポスター発表(ポスト「京」重点課題(7)・萌芽的課題(1)で創出された成果紹介)

14:20-14:55　重点課題(5)「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の
新規基盤技術の開発」　岡崎 進(名古屋大学)

14:55-15:30　重点課題(7)「次世代の産業を支える新機能デバイス、高性能材料の開発」
常行 真司(東京大学) 15:30-15:50　＜休憩＞

15:50-16:10　HPCI 利用環境と利用支援：HPCI における産業利用推進の取り組み
塩原 紀行(高度情報科学技術研究機構)

16:10-16:45　鉄鋼材料の高強度化に向けた基礎研究と産学連携
澤田 英明(日本製鉄株式会社)

16:45-16:50　＜休憩＞

16:50-18:00　パネルディスカッション 「計算物質科学におけるエコシステムの構築は可能か」
モデレータ：古宇田 光(東京大学物性研究所)
パネリスト：江原 正博(分子科学研究所) / 久保 百司(東北大学) /
森川 良忠(大阪大学)/ 尾崎 泰助(東京大学物性研究所) /
茂本 勇(東レ株式会社, 産応協) / 奥田 基(高度情報科学技術研究機構)

18:00-20:00　意見交換会(希望者のみ)
HPCI・アプリケーション利用相談、情報交換(希望者のみ)

2 月 18 日(火)

司会：杉山 肇(三菱ケミカル株式会社, 産応協)

10:00-10:50　データを中心とした研究開発の課題と将来への期待
庄司 哲也(トヨタ自動車株式会社)

10:50-11:40　固体と液体の界面における電気化学反応シミュレーションに関するチュートリアル
大谷 実(産業技術総合研究所)

11:40-13:00　＜ランチタイム＞

13:00-13:35　地震現象に類似した固体塑性挙動に対する原子スケール解析
新山 友暁(金沢大学)

13:35-14:10　ボルツマン機械で迫る高温超伝導の発現メカニズム
山地 洋平(東京大学)

14:10-14:45　パナソニックにおける材料開発のデジタライゼーションについて
藤井 幹也(パナソニック株式会社)

14:45-15:20　JSR におけるマテリアルズ・インフォマティクスと量子コンピューティングの取組
大西 裕也(JSR 株式会社)

15:20-15:40　＜休憩＞

15:40-17:00　パネルディスカッション 「技術と人でつなぐ産学コミュニティの形成」
モデレータ：寺田 弥生(東北大学)
パネリスト：新山 友暁(金沢大学) / 山地 洋平(東京大学) /
大西 裕也(JSR 株式会社) / 藤井 幹也(パナソニック株式会社) /
吉澤 香奈子(高度情報科学技術研究機構)

17:00-17:30　HPCI・アプリケーション利用相談、情報交換(希望者のみ)

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、成果報告会での発表は除く

*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　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				
再委託先１：国立大学法人名古屋大学		担当責任者　特任教授　押山淳		
Gallium Diffusion and Ammonia Decomposition on Growing GaN Surface: First Principles Molecular Dynamics Simulations（口頭発表）	K. M. Bui, M. Boero, K. Shiraishi, and A. Oshiyama	International Conference on Solid State Devices and Materials (Nagoya University, Aichi)	R1.9.2-9.5	国外
Microscopic Reason for the Leakage Current due to the Mg-Attached Dislocation in GaN（口頭発表）	T. Nakano, K. Chokawa, Y. Harashima, M. Araidai, K. Shiraishi, A. Oshiyama, A. Kusaba, Y. Kangawa, A. Tanaka, Y. Honda, H. Amano	International Conference on Solid State Devices and Materials (Nagoya University, Aichi)	R1.9.2-9.5	国外
Theoretical approach to oxygen incorporation mechanism in vicinal m-GaN MOVPE　（ポスター発表）	F. Shintaku, Y. Kangawa, J. I. Iwata, A. Oshiyama, K. Shiraish, A. Tanaka, H. Amano	International Conference on Solid State Devices and Materials (Nagoya University, Aichi)	R1.9.2-9.5	国外
Modeling of the Leakage Current in GaN mediated through the Dislocation-Impurity Complex　（ポスター発表）	Y. Harashima1, T. Nakano, A. Oshiyama, K. Shiraishi	International Conference on Solid State Devices and Materials (Nagoya University, Aichi)	R1.9.2-9.5	国外
Computics Approach toward Clarification of Microscopic Mechanisms of Epitaxial Growth of Gallium Nitride（口頭発表）	K. M. Bui, M. Boero, K. Shiraishi and A. Oshiyama	International Conference on Materials and Systems for Sustainability 2019 (ICMaSS2019), (Nagoya University, Aichi)	R1.11.1-11.3	国外
α-Ga2O3中固有点欠陥の局所構造と電子状態（ポスター発表）	小林拓真、我毛智哉、熊谷悠、大場史康、松下雄一郎	第80回応用物理学会秋季学術講演会（北海道大学、北海道札幌）	R1.9.18	国内
Microscopic identification of surface steps of SiC by the density-functional calculations（口頭発表）	K. Seino and A. Oshiyama	International Conference on Silicon Carbide and Related Materials 2019 (Kyoto)	R1.9.30	国外
The Pbc center at 4H-SiC(0001)/SiO2 interface: A first-principles study	Takuma Kobayashi, Takahide Umeda, and Yu-ichiro Matsushita	International Conference on silicon carbide and related materials 2019 (Kyoto)	R1.9.30	国外
Systematic investigation of carbon-related defects in SiC(0001)/SiO2 systems: A hybrid functional study	Takuma Kobayashi and Yu-ichiro Matsushita	International Conference on silicon carbide and related materials 2019 (Kyoto)	R1.10.2	国外
The Pbc center at 4H-SiC(0001)/SiO2 interface: An EDMR study	Takahide Umeda, Takuma Kobayashi, Yu-ichiro Matsuhsita, Eito Higa, Hiroshi Yano, Mitsuru Sometani, Shinsuke Harada	International Conference on silicon carbide and related materials 2019 (Kyoto)	R1.10.2	国外
実空間密度汎関数法によるSiC表面ステップの構造と安定性の解明（口頭発表）	制野かおり、押山淳	日本物理学会第75回年次大会（名古屋大学、愛知）[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.16-3.19	国内
機械学習による軌道フリー密度汎関数理論とその応用（口頭発表）	井本文裕、今田正俊、押山淳	日本物理学会第75回年次大会（名古屋大学、愛知）[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.16	国内
第一原理計算によるSiC表面のステップモフォロジーの検討（口頭発表）	制野かおり、押山淳	第67回応用物理学会春季学術講演会（上智大学四谷キャンパス、東京）[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.12-3.15	国内
HCl環境下でのSiC CVD成長における気相反応と表面構造の予測（口頭発表）	長川健太、醍醐佳明、水島一郎、依田孝、白石賢二	第67回応用物理学会春季学術講演会（上智大学四谷キャンパス、東京）[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.13	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、成果報告会での発表は除く

*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
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）		**担当責任者　教授　重田育照**		
Theoretical Investigation on Photofunctional π-electron Materials（口頭発表）	Y. Shigeta	π-system figuration European-Japanese workshop 2019（π-EJ 2019）(Zabrze, Poland)	R1.11.12-15	国外
第一原理ダイナミクスによる材料の物性・反応解析（口頭発表）	重田育照	第8回材料系ワークショップ～「富岳」時代の材料系シミュレーションの最前線～（秋葉原UDX、東京）	R1.10.18	国内
Theoretical studies on triplet-triplet annihilation based photon up-conversion in solution and solid（口頭発表）	Y. Shigeta	2nd Global Forum on Advanced Materials and Technologies for Sustainable Development (GFMAT-2)(Toronto, Canada)	R1.07.21-25	国外
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		**担当責任者　教授　森伸也**		
NEGF analysis of classical Hall effect in two-dimensional systems（ポスター発表）	H. Tanaka and N. Mori	International Conference on Electron Dynamics in Semiconductors, Optoelectronics and Nanostructures (Nara, Japan)	R1.7.16	国外
The first-principle models of quantum transport and atomistic device simulations of realistic semiconductor devices（口頭発表）	G. Mil'nikov, J. Iwata, N. Mori, and A. Oshiyama	International Conference on Electron Dynamics in Semiconductors, Optoelectronics and Nanostructures (Nara, Japan)	R1.7.17	国外
Monte Carlo Simulation of Hall Mobility in 4H-SiC MOS Inversion Layers（ポスター発表）	H. Tanaka and N. Mori	International Conference on Silicon Carbide and Related Materials (Kyoto, Japan)	R1.10.2	国外
Atomistic Green function simulation of thermal conductance in isotopically disordered armchair-edge graphene nanoribbons(口頭発表)	N. Mori, T. Kamioka, and G. Mil'nikov	International Symposium on Hybrid Quantum Systems (Matsue, Japan)	R1.12.2	国外
RSDFT-NEGF quantum transport simulation of ultra-small field-effect transistors（口頭発表）	N. Mori, G. Mil'nikov, J. Iwata, and A. Oshiyama	The 4th IEEE Electron Devices Technology and Manufacturing (Penang, Malaysia)	R2.3.16	国外
ニューラルネットワークを用いた強束縛近似ハミルトニアンの圧縮（口頭発表）	岡田丈、森伸也	第67回応用物理学会春季学術講演会（上智大学四谷キャンパス、東京）[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.17	国内
再委託先３：国立大学法人筑波大学（数理物質系）		**担当責任者　教授　佐野伸行**		
Polarization Effect Induced by Discrete Impurity at Semiconductor/Oxide Interface in Si-FinFET（口頭発表）	K. Yoshida, K. Tsukahara, N. Sano	2019 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD)（Udine, Italy）	R1.9.4-6	国外
ドリフト拡散法における離散不純物モデルの移動度に関する考察（口頭発表）	塚原浩平、吉田勝尚、佐野伸行	第80回応用物理学会秋季学術講演会（北海道大学、北海道札幌）	R1.9.18	国内
3次元デバイス構造における単原子層MoS2のモンテカルロシミュレーション（口頭発表）	岡田崇太、吉田勝尚、佐野伸行	第80回応用物理学会秋季学術講演会（北海道大学、北海道札幌）	R1.9.18	国内
不純物の離散性に伴った半導体デバイスモデリングの基本的側面 II -半導体ナノ構造でのランダム不純物（口頭発表）	佐野伸行	電子情報通信学会 シリコン材料・デバイス(SDM)研究会集会（機械振興会館、東京）	R1.11.8	国内
3次元デバイス構造における単原子層MoS2のモンテカルロシミュレーション II（口頭発表）	岡田崇太、吉田勝尚、佐野伸行	第67回応用物理学会春季学術講演会（上智大学四谷キャンパス、東京）[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.12	国内
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				
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）		**担当責任者　教授･部門長　矢花一浩**		
Ab-initio theory for propagation of extreme optical pulses in solids（口頭発表）	K. Yabana	2nd Int. Workshop on Ultrafast Dynamics and Metastability（Georgetwon Univ., Washingdon DC, USA）	R1.4.15	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、成果報告会での発表は除く

*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
TDDFT による第一原理電子ダイナミクス計算とナノフォトニクスへの適用に向けて（口頭発表）	植本光治	光量子科学連携研究機構（UTripl)セミナー（東京大学、東京）	R1.7.1	国内
Ab-initio theory for propagation of strong optical pulse in solids（口頭発表）	K. Yabana	XXXIst Int. Conf. on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions (ICPEAC2019) (Deauville, France)	R1.7.23	国外
Time-dependent density functional theory for solids under strong laser field（口頭発表）	K. Yabana	24th Int. Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology (Odessa, Ukraine)	R1.8.18	国外
第一原理計算によるパルス光とグラファイト薄膜の相互作用（口頭発表）	植本光治、 蔵田真太郎、河口紀仁、 矢花一浩	日本物理学会2019年秋季大会（岐阜大学、岐阜）	R1.9.12	国内
Maxwell+TDDFT multiscale method for light-propagation in solids（口頭発表）	M. Uemoto, A. Yamada and K. Yabana	27th International Conference on Advanced Laser Technologies (Prague, Czech Republic)	R1.9.15	国外
大規模計算による光電磁場・電子・フォノンの第一原理シミュレーション（口頭発表）	矢花一浩	第６回大型実験施設とスーパーコンピュータとの連携利用シンポジウム―物質構造の階層性とフォノン物性の理解―（秋葉原UDX、東京）	R1.9.17	国内
サブnmギャップを有するプラズモニックメタ表面の屈折率変動機構の解明（口頭発表）	矢花一浩、 竹内嵩、野田真史	第80回応用物理学会秋季学術講演会（北海道大、北海道札幌）	R1.9.18	国内
Ab-initio large-scale calculation of laser interactions with nanoscale materials（ポスター発表）	M. Uemoto, S. Yamada, T. Takeuchi, Y. Hirokawa and K. Yabana	MCRP-62, 11th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences （International Congress Center EPOCHAL TSUKUBA、Ibaraki)	R1.10.5	国外
Development of Multiscale First-Principles Approach for Optical Response in Nanostructure（口頭発表）	M. Uemoto and K. Yabana	The International Symposium on Plasmonics and Nano-photonics (iSPN2019) (Ikuta Shrine Hall、Hyogo)	R1.11.11	国外
Direct wave vector excitations of silicon with optical near fields（ポスター発表）	M. Noda, K. Iida, M. Yamaguchi, T. Yatsui, and K. Nobusada	The International Symposium on Plasmonics and Nano-photonics (iSPN2019) (Ikuta Shrine Hall、Hyogo)	R1.11.11	国外
Ab-initio Simulations for Propagation of Intense and Ultrashort Optical Pulse（口頭発表）	K. Yabana	OptoX-Nano 2019（岡山大学、岡山）	R1.12.3	国内
電子動力学アプリケーションSALMONのスーパコンピュータ「富岳」に向けた最適化と性能評価（口頭発表）	廣川祐太、野田真史、山田俊介、山田篤志、朴泰祐、矢花一浩	第173回HPC研究会（北海道大学、北海道札幌） [新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.17	国内
受託者：国立大学法人東京大学		**担当責任者 准教授 八井崇**		
Applications of novel optical near-field reactions based on a special non-uniformity（口頭発表）	T. Yatsui	The 12th Asia - Pacific Conference on Near - field Optics (APNFO12)) (Xiamen, China)	R1.7.17	国外
Recent development of the photochemical reactions and the opto-electric（口頭発表）	T. Yatsui	The International Symposium on Plasmonics and Nano-photonics (iSPN2019) (Ikuta Shrine Hall, Kobe, Hyogo, Japan)	R1.11.14	国外
顕微分光法による近接場光励起Si受光器の評価（口頭発表）	浅沼将人、藤原弘康、飯田健二、野田真史、矢花 一浩、八井崇	Optics & Photonics Japan 2019（大阪大学コンベンションセンター、大阪府吹田市）	R1.12.5	国内
表面ナノ構造によるSi受光器の高効率化（口頭発表）	浅沼将人、藤原弘康、飯田健二、野田真史、矢花一浩、八井崇	第67回応用物理学会春季学術講演会（上智大学四谷キャンパス、東京） [新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.14	国内
再委託先６：大学共同利用機関法人自然科学研究機構		**担当責任者 准教授 飯田健二**		
ナノ構造体における光誘起電子ダイナミクスの第一原理計算（ポスター発表）	飯田健二	国際光デーシンポジウム2019（日本学術会議講堂、東京）	R1.6.28	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、成果報告会での発表は除く

*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
Massively Parallel Calculations for Photoexcited Electron Dynamics in Nanostructures（口頭発表）	Kenji Iida	二国間共同研究 オープンセミナー「Theoretical and Computational Chemistry of Complex Systems」（岡崎、愛知）	R1.7.18	国外
First-Principles Study of Heterostructures Consisting of Two-Dimensional Layered Materials under Light and Voltage Bias（口頭発表）	Kenji Iida	17th Japan-Korea Symposium on Molecular Science 'Advances in Materials and Molecular Sciences'(名古屋、愛知)	R1.7.30	国外
貴金属ナノ粒子と半導体薄膜の間の光励起電子移動ダイナミクス（口頭発表）	飯田健二、野田真史	第13回分子科学討論会（名古屋大学、愛知）	R1.9.20	国内
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				
再委託先７：学校法人早稲田大学		**担当責任者　教授　今田正俊**		
Dark Fermion and High Temperature Superconductivity(口頭発表)	今田正俊	KAIST Workshop, Quantum Many-Body Systems 2019 (Daejong, Korea)	R1.5.9	国外
Laser-controlled superconductivity in correlated electron systems（ポスター発表）	井戸康太、大越孝洋、今田正俊	International Workshop on Frontiers of Correlated Electron Systems (FCES19) (University of Tokyo, Tokyo)	R1.5.30	国外
Perspectives on Descriptions of Correlated Electron Phenomena（口頭発表）	今田正俊	International Workshop on Frontiers of Correlated Electron Systems (FCES19) (University of Tokyo, Tokyo)	R1.5.31	国外
物質が見せるひしめきあいともつれあい～超伝導から大気乱流までの流体の魅力～（口頭発表）	今田正俊	物理科学の最前線（東北大学、宮城）	R1.7.12	国内
Variational Monte Carlo method and applications to strongly correlated systems(口頭発表)	今田正俊	International Workshop on Computational Approaches to Quantum Many-body Problems (CAQMP2019) (The University of Tokyo, ISSP, Kashiwa, Chiba)	R1.7.26	国外
電子相関が生み出す超伝導の姿（口頭発表）	今田正俊	第64回物性若手夏の学校（ぎふ長良川温泉ホテルパーク、岐阜）	R1.8.6	国内
鉄系超伝導体に対する第一原理有効Hamiltonianの系統的な導出（ポスター発表）	井戸康太、三澤貴宏、本山裕一、吉見一慶	日本物理学会2019年秋季大会（岐阜大学、岐阜）	R1.9.11	国内
多変数変分モンテカルロ法を用いた動的構造因子の計算方法（口頭発表）	井戸康太、今田正俊、三澤貴宏	日本物理学会2019年秋季大会（岐阜大学、岐阜）	R1.9.11	国内
How can we estimate normal and anomalous self-energies in strongly correlated systems?— Insight into the superconducting mechanism（口頭発表）	今田正俊	CCQ Informal Seminar at Flatiron Institute (New York, USA)	R1.10.15	国外
多変数変分モンテカルロ法を用いた電荷動的構造因子の計算方法（ポスター発表）	井戸康太	計算物質科学人材育成コンソーシアム（PCoMS）シンポジウム＆計算物質科学スーパーコンピュータ事業報告会 2019 ＆計算物質科学スーパーコンピュータ事業報告会 2019 （東北大学、宮城）	R1.10.24	国内
銅酸化物超伝導体の超伝導相図と相競合(口頭発表)	今田正俊	基研研究会「電子相関が生み出す超伝導現象の未解決問題と新しい潮流」(京都大学基礎物理学研究所、京都)	R1.10.29	国内
多変数変分モンテカルロ法を用いた銅酸化物高温超伝導体の 第一原理ハミルトニアンの解析（口頭発表）	三澤貴宏	基研研究会「電子相関が生み出す超伝導現象の未解決問題と新しい潮流」(京都大学基礎物理学研究所、京都)	R1.10.29	国内
変分モンテカルロ法を用いた電荷動的構造因子の計算方法（口頭発表）	井戸康太	基研研究会「電子相関が生み出す超伝導現象の未解決問題と新しい潮流」(京都大学基礎物理学研究所、京都)	R1.10.29	国内
物理のグランドチャレンジに機械学習は役立つか？—量子多体問題と高温超伝導(口頭発表)	今田正俊	2019年度 材研オープンセミナー 「機械学習とマテリアルズインフォマティクスに立脚した物性研究と材料探索の新潮流」(早稲田大学、東京都新宿区)	R1.11.11	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、成果報告会での発表は除く

*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
Numerical Studies on High-Tc Cuprate Superconductors（口頭発表）	今田正俊	Theoretical Physics Symposium 2019 (Hamburg, Germany)	R1.11.13	国外
Pseudogap and Superconductivity in Cuprate Superconductors Solved by ab initio and Machine Learning Studies（口頭発表）	今田正俊	The 32nd International Symposium on Superconductivity (Kyoto)	R1.12.5	国外
多体波動関数法を用いた強相関電子系における動的構造因子の計算法（口頭発表）	井戸康太	第9回「凝縮系理論の最前線」（イマジンホテル&リゾート函館、北海道）	R2.2.6	国内
（若手奨励賞）鉄系超伝導体および銅酸化物超伝導体における高温超伝導発現機構の理論研究（口頭発表）	三澤貴宏	日本物理学会第75回年次大会（名古屋大学、愛知）[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.16	国内
機械学習による軌道フリー密度汎関数理論とその応用（口頭発表）	井本文裕、今田正俊、押山淳	日本物理学会第75回年次大会（名古屋大学、愛知）[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.16	国内
変分モンテカルロ法で非対角相関を取り入れる新たな方法（ポスター発表）	井戸康太、三澤貴宏	日本物理学会第75回年次大会（名古屋大学、愛知）[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.18	国内
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		**担当責任者　特任准教授 山地洋平、(特任研究員 三澤貴宏、教授 藤堂眞治)**		
グランドカノニカルアンサンブルにおける多変数変分モンテカルロ法の開発とKitaev 模型における磁化過程への応用（ポスター発表）	井戸康太、三澤貴宏	物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の新展開」（東京大学物性研究所、千葉）	H31.4.2	国内
Hidden self-energy structures of high-temperature cuprate superconductors（口頭発表）	Youhei Yamaji	Spectroscopies in Novel Superconductors (Ito International Research Center, The University of Tokyo, Tokyo)	R1.6.19	国外
Hidden origin of high-temperature superconductivity revealed by Boltzmann machine self-energy inference（口頭発表）	Youhei Yamaji	The 5th Conference on Condensed Matter Physics (HENTIQUE Hotels & Resorts, Liyang, China)	R1.6.29	国外
Tensor network technique for stochastic process（口頭発表）	Kenji Harada	Computational Approaches to Quantum Many-body Problems（東京大学柏キャンパス、千葉）	R1.7.17	国内
Informational aspect of directed percolation problem（口頭発表）	Kenji Harada	Computational Approaches to Quantum Many-body Problems（東京大学柏キャンパス、千葉）	R1.7.22	国内
強く非等方的な臨界点における不変性（口頭発表）	原田健自	日本物理学会2019秋季大会（岐阜大学、岐阜）	R1.9.15	国内
銅酸化物の自己エネルギーと高温超伝導の起源（口頭発表）	山地洋平	京都大学基礎物理学研究所研究会「電子相関が生み出す超伝導現象の未解決問題と新しい潮流」（湯川記念館パナソニック国際交流ホール、京都）	R1.10.29	国内
Origin of High-Temperature Superconductivity Revealed by BoltzmannMachine Learning（口頭発表）	Youhei Yamaji	Deep Learning and Physics DLAP2019 (Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto)	R1.11.2	国外
Finite-temperature dynamics of spin-orbit coupled Mott insulators（口頭発表）	Youhei Yamaji	The 3rd Asia-Pacific workshop on Quantum Magnetism (Tsung-Dao Lee Institute, Shanghai, China)	R1.11.27	国外
New numerical approaches for directed percolation（口頭発表）	Kenji Harada	Tensor Network States: Algorithms and Applications (TNSAA) 2019-2020 (Taipei, Taiwan)	R1.12.4	国外
ボルツマン機械による銅酸化物高温超伝導体の自己エネルギー解析（口頭発表）	山地洋平	ポスト「京」重点課題(7)「 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成 」サブ課題G 「共通基盤シミュレーション手法 」連続研究会「放射光実験と計算科学の新たな連携を目指して」（東京理科大学葛飾キャンパス、東京）	R1.12.26	国内
テンソルネットワーク中のエンタングルメント最適化(口頭発表)	原田健自	日本物理学会2020年次大会（名古屋大学、愛知）[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.18	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、成果報告会での発表は除く

*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Ｄ　高性能永久磁石・磁性材料				
ｉ）新規磁性材料開発ー電子論と情報統合手法による探索				
再委託先８：国立研究開発法人産業技術総合研究所		担当責任者　研究チーム長　三宅隆		
Magnetocrystalline anisotropy of rare-earth magnets（口頭発表）	Takashi Miyake	International Conference on “Frontiers of Correlated Electron Sciences” (FCES2019) (Koshiba Hall, Univ. Tokyo, Tokyo)	R1.5.30	国外
Searching Efficiency of Bayesian Optimization and Evolutionary Algorithm in Crystal Structure Prediction（口頭発表）	Tomoki Yamashita, Shinichi Kanehira, Nobuya Sato, Hiori Kino, Koji Tsuda, Takashi Miyake and Tamio Oguchi	10th International Conference on Materials for Advanced Technologies (ICMAT2019) (Marina Bay Sands, Singapore)	R1.6.25	国外
Coercivity analysis by free energy landscape in the atomistic spin model of Nd-Fe-B magnet（口頭発表）	Yuta Toga, Seiji Miyashita, Akimasa Sakuma and Takashi Miyake	Joint European Magnetic Symposia (Uppsala, Sweden)	R1.8.29	国外
自由エネルギーランドスケープにもとづく保磁力の配向度依存性に関する理論解析（口頭発表）	栂裕太、宮下精二、佐久間昭正、三宅隆	日本物理学会2019年秋季大会（岐阜大学、岐阜）	R1.9.10	国内
結晶構造探索におけるベイズ最適化と進化的アルゴリズムのハイブリッドアルゴリズム（口頭発表）	山下智樹、兼平慎一、佐藤暢哉、木野日織、津田宏治、三宅隆、小口多美夫	日本物理学会2019年秋季大会（岐阜大学、岐阜）	R1.9.13	国内
形成エネルギー凸包の進化的探索（口頭発表）	石河孝洋、三宅隆	日本物理学会2019年秋季大会（岐阜大学、岐阜）	R1.9.13	国内
Theoretical study on the magnetization reversal of rare-earth magnets at finite temperature（口頭発表）	A. Sakuma, Y. Toga, T. Miyake and S. Miyashita	第43回日本磁気学会学術講演会（京都大学吉田キャンパス、京都）	R1.9.25	国内
Parameter in a Descriptor for Efficient Crystal Structure Search Using the Bayesian Optimization（ポスター発表）	Nobuya Sato, Tomoki Yamashita, Tamio Ocughi, Koji Hukushima, and Takashi Miyake	The 22nd Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-22) (Osaka University, Osaka)	R1.10.29	国外
Spin-wave dispersion in magnetic compounds: RFe11Ti (R=Y, Nd, Sm) and Nd2Fe14B（ポスター発表）	Taro Fukazawa, Hisazumi Akai, Yosuke Harashima and Takashi Miyake	The 22nd Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-22) (Osaka University, Osaka)	R1.10.29	国外
Computational screening of hard magnetic materials（口頭発表）	Takashi Miyake	14th Asia-Pacific Physics Conference (APPC2019) (Kuching, Malaysia)	R1.11.21	国外
機械学習で挑む永久磁石の予測と理解（口頭発表）	三宅隆	2019年度早稲田大学材研オープンセミナー（早稲田大学、東京）	R1.11.11	国内
Computational exploration of rare-earth transition-metal materials（口頭発表）	Takashi Miyake	7th Japan-U.S. Bilateral Meeting on Rare Metals (Hotel Mielparque Yokohama, Kanagawa)	R1.12.11	国外
Search for superconductivity in compressed hydrides by first-principles calculations and evolutionary algorithms（口頭発表）	Takahiro Ishikawa, Akitaka Nakanishi, Katsuya Shimizu and Takashi Miyake	Materials Research Meeting (MRM) 2019 (Yokohama, Kanagawa)	R1.12.11	国外
Hybrid Algorithm of Bayesian Optimization and Evolutionary Algorithm in Crystal Structure Prediction（口頭発表）	T. Yamashita, S. Kanehira, N. Sato, T. H. Kino, K. Tsuda, T. Miyake and T. Oguchi	Materials Research Meeting (MRM) 2019 (Yokohama, Kanagawa)	R1.12.11	国外
First-principles calculation of (R,Zr)(Fe,Co,Ti)12 (R=Y, Nd, Sm)（ポスター発表）	Taro Fukazawa, Yosuke Harashima, and Takashi Miyake	Materials Research Meeting (MRM) 2019 (Yokohama, Kanagawa)	R1.12.12	国外
Search for stable compounds in Y-Fe binary systems: Application of evolutionary construction technique of formation energy convex hull（ポスター発表）	T. Ishikawa and T. Miyake	Materials Research Meeting (MRM) 2019 (Yokohama, Kanagawa)	R1.12.12	国外
Ensemble learning reveals dissimilarity between materials（口頭発表）	Hieu-Chi Dam, Nguyen-Duong Nguyen, Viet-Cuong Nguyen, Hiori Kino, Takashi Miyake	Materials Research Meeting (MRM) 2019 (Yokohama, Kanagawa)	R1.12.12	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、成果報告会での発表は除く

*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
Descriptor for efficient crystal structure prediction using the Bayesian optimization（ポスター発表）	N. Sato, T. Yamashita, T. Oguchi, K. Hukushima and T. Miyake	Materials Research Meeting (MRM) 2019 (Yokohama, Kanagawa)	R1.12.12	国外
Temperature dependence of coercivity in Nd2Fe14B atomistic spin model（口頭発表）	Y. Toga, S. Miyashita, Sakuma, T. Miyake	Materials Research Meeting (MRM) 2019 (Yokohama, Kanagawa)	R1.12.13	国外
Atomistic Approach to the Nd2Fe14B Magnet（口頭発表）	S. Miyashita, Y. Toga, M. Nishino, T. Hinokihara, I.E. Uysal, A. Sakuma, T. Miyake and S. Hirosawa	Materials Research Meeting (MRM) 2019 (Yokohama, Kanagawa)	R1.12.13	国外
マテリアルズ・インフォマティクスによる高性能磁石の開発（口頭発表）	三宅隆	第９回電子光技術シンポジウム「機能性マテリアルの設計と実証 -電子・光デバイスのイノベーション開拓に向けて-」（秋葉原UDXカンファレンス、東京）	R1.12.20	国内
第一原理電子状態計算に基づく磁石化合物におけるスピン波分散の計算手法（口頭発表）	深澤太郎、赤井久純、原嶋庸介、三宅隆	日本物理学会2020年次大会（名古屋大学、愛知）[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.16	国内
マクロ保磁力解析に向けたエネルギーランドスケープに基づくマルチ・グレインモデルの構築（口頭発表）	栂裕太、宮下精二、檜原太一、佐久間昭正、三宅隆	日本物理学会2020年次大会（名古屋大学、愛知）[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.19	国内
ベイズ最適化を用いた磁石化合物の探索手法と第一原理計算に基づくデータへの適用（口頭発表）	深澤太郎、原嶋庸介、三宅隆	日本金属学会2020年春期講演大会（東京工業大学大岡山キャンパス、東京）[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.19	国内
進化的アルゴリズムによるY-Fe及びY-Co系の安定相探索（口頭発表）	石河孝洋、三宅隆	日本金属学会2020年春期講演大会（東京工業大学大岡山キャンパス、東京）[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.19	国内
受託者：国立大学法人東京大学		**担当責任者　赤井久純**		
Ab initio inspection on the metallicity trends among rare-earth permanent magnet compounds（ポスター発表）	M. Matsumoto and H. Akai	Joint Eusopean Magnetic Symposium (Uppsala, Sweden)	R1.8.28	国外
Remarks -in view of first-principles calculation（口頭発表）	H. Akai	Toyota Japan-Europe meeting (Exeter, UK)	R1.9.9	国外
Spin-wave dispersion in magnetic compounds: RFe11Ti (R=Y, Nd, Sm) and Nd2Fe14（ポスター発表）	T.Fukazawa, H.Akai, Y.Harashima, and T.Miyake	The 22nd Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-22) (Osaka University, Osaka)	R1.10.29	国外
Effects of Electron-phonon Scattering on Temperature Dependence of Half-metallicity of Co2MnSi（ポスター発表）	N. Hirayama and H. Akai	Materials Research Meeting (MRM) 2019 (Yokohama, Kanagawa)	R1.12.10-12.14	国外
Atomistic Approach to the Nd2Fe14B magnet（口頭発表）	S. Miyashita1, Y.Toga, M. Nishino, T. Hinokihara. E.Uysal6, A. Sakuma, T. Miyake, H. Akai and S.Hirosawa	Materials Research Meeting (MRM) 2019 (Yokohama, Kanagawa)	R1.12.10-12.14	国外
Effects of electron-phonon scatterings on half-metallic Heusler alloys（口頭発表）	H. Akai	3rd International Conference on Materials and Environmental Science (ICMES 2019) (Agadir, Morocco)	R1.12.19	国外
第一原理電子状態計算に基づく磁石化合物におけるスピン波分散の計算手法（口頭発表）	深澤太郎、赤井久純、原嶋庸介、三宅隆	日本物理学会2020年次大会（名古屋大学、愛知）[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.16	国内
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１０：国立大学法人東京工業大学		**担当責任者　准教授　合田義弘**		
Relationship between magnetism and structure of amorphous grain boundary phases of Nd-based permanent magnets: First principles study（口頭発表）	寺澤麻子、尾崎泰助、合田義弘	Joint Europian Magnetic Symposia 2019 (Uppsala, Sweden)	R1.8.26	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、成果報告会での発表は除く

*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
第一原理計算によるネオジム磁石の主相・粒界相界面の磁気結合解析（口頭発表）	寺澤麻子、塩沢知春、合田義弘	日本物理学会2019秋季大会（岐阜大学、岐阜）	R1.9.12	国内
First-principles study of interface magnetism in materials structures of Nd-Fe-B sintered magnets（口頭発表）	寺澤麻子、塩沢知春、合田義弘	Materials Research Meeting (MRM) 2019 (Yokohama Symposia, Kanagawa)	R1.12.12	国外
局在基底密度汎関数法による磁性金属の交換結合定数計算（口頭発表）	寺澤麻子、相内優太、尾崎泰助、合田義弘	日本金属学会2020年春期講演大会（東京工業大学大岡山キャンパス、東京）[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.19	国内
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				
再委託先９：国立研究開発法人産業技術総合研究所		**担当責任者　招聘研究員　香山正憲**		
マグネシウム対称傾角粒界の原子構造の第一原理局所解析（口頭発表）	徐卓、香山正憲	軽金属学会第136回春期大会（富山国際会議場、富山）	R1.5.12	国内
Mechanism of Grain-Boundary Segregation of 3d Transition-Metal Solutes in bcc Fe: Ab Initio Local-Energy Analysis（口頭発表）	Zhuo Xu, Shingo Tanaka, and Masanori Kohyama	International Conference on Intergranular and Interphase Boundaries in Materials, iib 2019 (Paris, France)	R1.7.1	国外
First-Principles Computational Tensile Tests of Grain Boundaries: Effects of a Bulk-Region Size and Local-Energy and Local-Stress Analysis（ポスター発表）	Hao Wang, Masanori Kohyama, Shingo Tanaka, JinKai Wang, and Ying Chen	International Conference on Intergranular and Interphase Boundaries in Materials, iib 2019 (Paris, France)	R1.7.2	国外
局所エネルギー・局所応力の第一原理計算法開発：類似手法との比較と金属粒界への適用（口頭発表）	香山正憲、徐卓、田中真悟、椎原良典	日本物理学会2019年秋季大会（岐阜大学、岐阜）	R1.9.12	国内
Ab initio local analysis on the stability of Mg symmetric tilt grain boundaries（口頭発表）	徐卓、香山正憲、田中真悟	日本金属学会2019年秋期講演大会（岡山大学、岡山）	R1.9.12	国内
第一原理局所エネルギー・局所応力法の開発と金属粒界への適用（口頭発表）	香山正憲、徐卓、田中真悟、椎原良典	PCoMSシンポジウム（東北大学、宮城）	R1.10.25	国内
Ab Initio Local-Energy and Local-Stress Schemes and Application to Metallic Grain Boundaries （ポスター発表）	香山正憲、徐卓、田中真悟、椎原良典	Materials Research Meeting (MRM) 2019 (Yokohama, Kanagawa)	R1.12.11	国外
再委託先１３：国立大学法人横浜国立大学		**担当責任者　教授　大野かおる**		
Time dependent GW molecular dynamics simulation（口頭発表）	Thi Nu Pham and Kaoru Ohno	Vietnam - Japan Science and Technology Symposium (VJST2019) (Hanoi, Vietnam)	R1.5.4	国外
任意の電子励起固有状態計算のための拡張準粒子理論（口頭発表）	大野かおる、小野頌太、磯部智遥	ナノ学会第１７回大会（かごしま県民交流センター、鹿児島）	R1.5.9	国内
準粒子方程式のエネルギー依存性に関する研究（ポスター発表）	磯部智遥、大野かおる	ナノ学会第１７回大会（かごしま県民交流センター、鹿児島）	R1.5.10	国内
全電子混合基底法によるスピン軌道相互作用の評価（ポスター発表）	中嶋武、大野かおる	ナノ学会第１７回大会（かごしま県民交流センター、鹿児島）	R1.5.10	国内
Application of First-Principles Potential Renormalization Theory to a Phase Transition between bcc and fcc Fe crystals（ポスター発表）	Thi Nu Pham, Ryoji Sahara, Riichi Kuwahara, and Kaoru Ohno	ナノ学会第１７回大会（かごしま県民交流センター、鹿児島）	R1.5.10	国内
GW(Γ) calculation for photoabsorption energies of spin polarized systems（ポスター発表）	Tomoharu Isobe, Riichi Kuwahara, and Kaoru Ohno	10th Triennial Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (Tromsø, Norway)	R1.7.12	国外
TOMBO Tutorial: Lecture II（口頭発表）	Kaoru Ohno	10th International Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-10) (Hong Kong)	R1.7.23	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、成果報告会での発表は除く

*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 Structures and Energy Conversion Efficiency of Heterojunction C60/CH3NH3PbI3 Perovskite Solar Cells（口頭発表）	Khian-Hooi Chew, Riichi Kuawahara, and Kaoru Ohno	10th International Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-10) (Hong Kong)	R1.7.24	国外
Effect of linear extrapolation of self-energy in GW approximation（ポスター発表）	Tomoharu Isobe, and Kaoru Ohnno	10th International Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-10) (Hong Kong)	R1.7.24	国外
Electromechanical (actuator) properties of Mxenes（ポスター発表）	Mohammad Khazaei, Nguyen Tuan Hung, Keivan Esfarjani, and Kaoru Ohno	10th International Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-10) (Hong Kong)	R1.7.24	国外
Spin-orbit coupling in all-electron mixed basis approach（ポスター発表）	Takeru Nakashima and Kaoru Ohno	10th International Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-10) (Hong Kong)	R1.7.24	国外
Feasibility of the Γ Point Only GW Calculation for Periodic Systems Using TOMBO（口頭発表）	Kaoru Ohno and Tsubasa Aoki	10th International Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-10) (Hong Kong)	R1.7.25	国外
Ab-initio calculation of interatomic forces and molecularvibrations in all-electrons mixed basis approach（ポスター発表）	Wanibe Shota and Kaoru Ohno	10th International Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-10) (Hong Kong)	R1.7.25	国外
Extended Quasiparticle Theory and Its Applications（口頭発表）	Kaoru Ohno	Workshop on Density Functionals for Many-Particle Systems: Mathematical Theory and Physical Applications of Effective Equations (National University of Singapore)	R1.9.2-9.6	国外
多体摂動論に基づいたGW近似の高精度化（ポスター発表）	磯部智遥、大野かおる	日本物理学会2019秋季大会（岐阜大学、岐阜）	R1.9.12	国内
全電子混合基底法によるスピ底軌道相互作用の評価（ポスター発表）	中嶋武、大野かおる	日本物理学会2019秋季大会（岐阜大学、岐阜）	R1.9.12	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	日本物理学会2019秋季大会（岐阜大学、岐阜）	R1.9.12	国内
GW+BSE法によるX線発光スペクトルの第一原理計算（ポスター発表）	青木翼、大野かおる	日本物理学会2019秋季大会（岐阜大学、岐阜）	R1.9.13	国内
GW近似の系統的高精度化の研究（ポスター発表）	磯部智遥、大野かおる	日本物理学会2020年次大会（名古屋大学、愛知）[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.9	国内
TOMBOのGW計算におけるエネルギー依存性の自己無撞着化（ポスター発表）	後藤潔成、磯部智遥、大野かおる	第15回ナノテク交流シンポジウム(横浜国立大学、神奈川)[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.9	国内
経路積分分子動力学法によるNO3-(H2O)の構造に関する理論研究（ポスター発表）	岡村優詩、桑畑和明、大野かおる	第15回ナノテク交流シンポジウム(横浜国立大学、神奈川)[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.9	国内
NiTi合金の第一原理フェーズフィールドシミュレーション（ポスター発表）	土屋萌南、PHAM Thi Nu、大野かおる	第15回ナノテク交流シンポジウム(横浜国立大学、神奈川)[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.9	国内
第一原理フェーズフィールド法による合金組織の予測技術（口頭発表）	大野かおる、Swastibrata Bhattacharyya、佐原亮二、Thi Nu Pham、桑原理一	日本金属学会2020年春期講演大会（東京工業大学大岡山キャンパス、東京）[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.17-3.19	国内
Study of alloying element effects on the microstructure in Ti alloys using first-principles phase field method（口頭発表）	Thi Nu Pham、Kaoru Ohno, Riichi Kuwahara, Ryoji Sahara, and Swastibrata Bhattacharyya	日本金属学会2020年春期講演大会（東京工業大学大岡山キャンパス、東京）[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.17-3.19	国内

ⅱ）大規模Phase Field法計算の実行

再委託先１１：国立大学法人東北大学金属材料研究所　　担当責任者　特任教授　毛利哲夫

該当なし

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、成果報告会での発表は除く

*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
受託者：国立大学法人東京大学		**担当責任者　准教授　澁田靖**		
Bridging the gap between atomistic and microstructure-scale simulations of solidification: From a perspective of large-scale molecular dynamics simulation （口頭発表）	Y. Shibuta	5th International Conference on Advances in Solidification Processes (ICASP-5) 5th International Symposium on Cutting Edge of Computer Simulation of Solidification, Casting and Refining (CSSCR-5) (Imlauer hotel Pitter, Salzburg, Austria)	R1.6.18	国外
Grain growth kinetics by large-scale molecular dynamics simulation （口頭発表）	Y. Shibuta, S. Okita, E. Miyoshi, S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno	The 7th International Conference on Recrystallization and Grain Growth (7th ReX&GG) (Univ. Ghent, Ghent, Belgium)	R1.8.8	国外
金属過冷融液からの非熱的核生成に関する分子動力学（口頭発表）	藤永拓也、澁田靖	日本金属学会2019年秋期講演大会（岡山大学、岡山）	R1.9.11	国内
凝固・組織形成に関する分子動力学研究の現状と展望（口頭発表）	澁田靖	軽金属学会第137回秋期大会（東京農工大学、東京）	R1.11.1	国内
Microstructure formation from atomistic viewpoint（口頭発表）	Y. Shibuta	149th Annual Meeting & Exhibition of the Minerals, Metals and Materials Society (TMS2020) (San Diego Convention Center, San Diego, CA, USA)	R2.2.24	国外
再委託先１４：国立大学法人京都工芸繊維大学		**担当責任者　准教授　高木知弘**		
Multi-phase-field lattice Boltzmann simulations during formation process of equiaxed structure considering dendrite motion （口頭発表）	T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta	5th International Conference on Advances in Solidification Processes (ICASP-5) & 5th International Symposium on Cutting Edge of Computer Simulation of Solidification, Casting and Refining (CSSCR-5) (Imlauer Hotel Pitter Salzburg, Salzburg, Austria)	R1.6.17-21	国外
High-performance phase-field computing of solidification and grain growth（口頭発表）	T. Takaki	The 4th International Symposium on Phase-Field Modelling in Materials Science (PF-19) (Conference Centre of the Ruhr-Universitat Bochum, Bochum, Germany)	R1.7.22-25	国外
Phase-field Lattice Boltzmann Simulations of Dendrite Growth with Melt Flow（口頭発表）	T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta	TMS 2020 Annual Meeting & Exhibition (TMS2020) (San Diego Convention Center and Marriott Marquis & Marina San Diego, California, USA)	R2.2.23-27	国外
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				
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		**担当責任者　教授　松林伸幸**		
分子動力学シミュレーションを用いた二成分高分子ブレンドの相溶性評価手法の開発（口頭発表）	山田一雄、松林伸幸	第22回理論化学討論会（北海道大学、北海道札幌）	R1.5.27-5.29	国内
第一原理DFT 計算を用いたイオン液体の非分極力場の開発（口頭発表）	石井良樹、松林伸幸	第22回理論化学討論会（北海道大学、北海道札幌）	R1.5.27-5.29	国内
同一組成で構造が異なる共重合体の吸水に対する自由エネルギー解析（ポスター発表）	小嶋秀和、半田和也、山田一雄、松林伸幸	第22回理論化学討論会（北海道大学、北海道札幌）	R1.5.27-5.29	国内
高分子/水界面へのアミノ酸アナログの吸着自由エネルギー評価（ポスター発表）	八十島亘宏、松林伸幸	第22回理論化学討論会（北海道大学、北海道札幌）	R1.5.27-5.29	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固液界面への分子吸着の平衡論と動力学的解析（ポスター発表）	山本直樹、松林伸幸	第22回理論化学討論会（北海道大学、北海道札幌）	R1.5.27-5.29	国内
3成分溶媒における疎水性分子の拡散性と溶解性の分子論（ポスター発表）	原健太、石井良樹、松林伸幸	第22回理論化学討論会（北海道大学、北海道札幌）	R1.5.27-5.29	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、成果報告会での発表は除く

*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
ジペプチドの異性化過程を記述する反応座標の探索：コミッターと最尤推定法の融合（ポスター発表）	森勇介、岡崎圭一、金鋼、松林伸幸	第22回理論化学討論会（北海道大学、北海道札幌）	R1.5.27-5.29	国内
分子動力学シミュレーションを用いたPVAハイドロゲルの分子レベル解析（ポスター発表）	大隅理佐、山田一雄、松林伸幸	第22回理論化学討論会（北海道大学、北海道札幌）	R1.5.27-5.29	国内
疎水ポリマーおよび親水ポリマーにおける吸水性の微視的集合様態への依存性（ポスター発表）	阪口敦哉、山田一雄、松林伸幸	第22回理論化学討論会（北海道大学、北海道）	R1.5.27-5.29	国内
小ペプチドのスタック構造形成に対する共溶媒効果の相互作用解析（ポスター発表）	諏訪原一輝、松林伸幸	第22回理論化学討論会（北海道大学、北海道札幌）	R1.5.27-5.29	国内
分子動力学シミュレーションによるシリカガラスの振動状態密度解析（ポスター発表）	大門翔太、水野英如、金鋼、松林伸幸	第22回理論化学討論会（北海道大学、北海道札幌）	R1.5.27-5.29	国内
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と応用（ポスター発表）	山田一雄、松林伸幸	第68回高分子学会年次大会（大阪府立国際会議場、大阪）	R1.5.27-5.29	国内
緩和弾性率の空間分割表式による樹脂ー金属界面の局所的な粘弾性の解析（ポスター発表）	森穂高、松林伸幸	第68回高分子学会年次大会（大阪府立国際会議場、大阪）	R1.5.27-5.29	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）	石井良樹、松林伸幸	ESICB電池・電子論合同検討会（京都大学工学研究科イノベーションプラザ、京都）	R1.6	国内
Diffusion dynamics of supercooled water modeled with the cage-jump motion and hydrogen-bond rearrangement（ポスター発表）	Takuma Kikutsuji, Kang Kim, and Nobuyuki Matubayasi	Roma Tre Congress on Water under Extreme Conditions(Università degli Studi Roma Tre, Roma, Italy)	R1.6.12-6.16	国外
自由エネルギー計算（口頭発表、依頼）	松林伸幸	「第13回分子シミュレーションスクールー基礎から応用までー」「ポスト「京」重点課題５　オータムカレッジ　ー分子シミュレーションー」「計算物質科学人材育成コンソーシアム　分子シミュレーションスクール」（自然科学研究機構、愛知）	R1.9.2.-9.5	国内
Energetics of Cosolvent Effect on Structure Formation of Biomolecule Studied through Variational Principle（口頭発表, 招待/依頼）	Nobuyuki Matubayasi	10th Toyota RIKEN International Workshop on Science of Life Phenomena Woven by Water and Biomolecules (Toyota Physical and Chemical Research Institute, Aichi)	R1.9.4-9.6	国外
コロイド分散系における分子動力学から流体力学への橋渡し：溶媒和自由エネルギーとロングタイムテール（口頭発表）	金鋼、水田圭亮、石井良樹、松林伸幸	日本物理学会2019秋季大会（岐阜大学、岐阜）	R1.9.10-9.13	国内
溶媒中のイオン解離を特徴づける反応座標の探索（ポスター発表）	森勇介、菊辻卓真、森俊文、岡崎圭一、金鋼、松林伸幸	日本物理学会2019秋季大会（岐阜大学、岐阜）	R1.9.10-9.13	国内
シリカガラスのモデル依存性の分子動力学解析（ポスター発表）	大門翔太、水野英如、金鋼、松林伸幸	日本物理学会2019秋季大会（岐阜大学、岐阜）	R1.9.10-9.13	国内
水中において多数の分子が関与し引き起こされる水素結合破断の評価手法（ポスター発表）	菊辻卓真、金鋼、松林伸幸	第13回分子科学討論会　（名古屋大学、愛知）	R1.9.17-9.20	国内
ジペプチドの異性化を特徴づける反応座標：コミッターと最尤推定法による解決（口頭発表）	森勇介、岡崎圭一、森俊文、金鋼、松林伸幸	第13回分子科学討論会　（名古屋大学、愛知）	R1.9.17-9.20	国内
CO2分離に向けた高分子材料の全原子MD解析（口頭発表, 招待/依頼）	松林伸幸	文部科学省 ポスト「京」重点課題５「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」連携推進ワークショップ サブ課題Ｃ エネルギー・資源の有効利用（TKP東京駅八重洲カンファレンスセンター、東京）	R1.9.21	国内
Advanced Molecular Force Fields of Ionic Liquids for Transport Property Analysis: Development on the Basis of First-Principles DFT Calculation（口頭発表）	Yoshiki Ishii and Nobuyuki Matubayasi	18th Asian Pacific Confederation of Chemical Engineering Congress (APCChE 2019) (Sapporo Convention Center, Hokkaido)	R1.9.23-9.27	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、成果報告会での発表は除く

*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
Transport Property Analysis of Ionic Liquids and Their Mixtures by using MD simulation with Advanced Non-Polarizable Force Field（ポスター発表）	Yoshiki Ishii and Nobuyuki Matubayasi	18th Asian Pacific Confederation of Chemical Engineering Congress (APCChE 2019) (Sapporo Convention Center, Hokkaido)	R1.9.23-9.27	国外
All-Atom analysis of adsorption free energy of amino-acid analogs to polymer/water interface（ポスター発表）	Nobuhiro Yasoshima and Nobuyuki Matubayasi	18th Asian Pacific Confederation of Chemical Engineering Congress (APCChE 2019) (Sapporo Convention Center, Hokkaido)	R1.9.23-9.27	国外
分子動力学計算による高分子分離膜の構造および透過性解析（ポスター発表）	川上智教、中田克、志村晴季、岡田一幸、木村将弘、馬場剛史、茂本勇、松林伸幸	第68回高分子討論会（福井大学、福井）	R1.9.25-9.27	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ガラスの振動状態密度解析（ポスター発表）	友重直也、水野英如、金鋼、松林伸幸	第68回高分子討論会（福井大学、福井）	R1.9.25-9.27	国内
第一原理DFT 計算を用いたイオン液体の非分極分子力場の開発（口頭発表）	石井良樹、Lukman Hakim、松林伸幸	第42回溶液化学シンポジウム（東北大学、宮城）	R1.10.30-11.1	国内
メゾスケール不均一性を有する3成分溶液のMD による溶解性と拡散性の解析（口頭発表）	原健太、石井良樹、SHIMIZU Seishi、HORINEK Dominik、松林伸幸	第42回溶液化学シンポジウム（東北大学、宮城）	R1.10.30-11.1	国内
溶媒効果を取り入れた固液界面における物理吸着の分子動力学シミュレーション解析：速度論と平衡論（ポスター発表）	山本直樹、松林伸幸	第42回溶液化学シンポジウム（東北大学、宮城）	R1.10.30-11.1	国内
MD シミュレーションを用いたPVAハイドロゲルの分子レベル解析（ポスター発表）	大隅理佐、山田一雄、松林伸幸	第42回溶液化学シンポジウム（東北大学、宮城）	R1.10.30-11.1	国内
小ペプチドのスタック構造形成に対する共溶媒効果の相互作用解析（ポスター発表）	諏訪原一輝、松林伸幸	第42回溶液化学シンポジウム（東北大学、宮城）	R1.10.30-11.1	国内
アクトミオシンの力発生機構ー水和測定と高電場下の水和自由エネルギーからー（ポスター発表）	鈴木誠、最上譲二、松林伸幸	第42回溶液化学シンポジウム（東北大学、宮城）	R1.10.30-11.1	国内
All-Atom Simulation of Polymer toward Rational Design of Separation Membrane（口頭発表、招待/依頼）	Nobuyuki Matubayasi	The 5th International Conference on Molecular Simulation (ICMS 2019)(Lotte Hotel Jeju, Jeju, Korea)	R1.11.3-11.6	国外
Bridging the gap between molecular dynamics and hydrodynamics in nanoscale Brownian motions（口頭発表）	Kang Kim, Keisuke Mizuta, Yoshiki Ishii, and Nobuyuki Matubayasi	The 5th International Conference on Molecular Simulation (ICMS 2019)(Lotte Hotel Jeju, Jeju, Korea)	R1.11.3-11.6	国外
Force-Fitted Potential of Ionic Liquids Determined by Self-Consistent Scheme Combining MD and DFT methods（ポスター発表）	Yoshiki Ishii and Nobuyuki Matubayasi	The 5th International Conference on Molecular Simulation (ICMS 2019)(Lotte Hotel Jeju, Jeju, Korea)	R1.11.3-11.6	国外
Transport properties of ionic liquids for Na+ secondary battery from MD simulations with a self-consistent partial charge determination（ポスター発表）	Lukman Hakim, Yoshiki Ishii, and Nobuyuki Matubayasi	The 5th International Conference on Molecular Simulation (ICMS 2019)(Lotte Hotel Jeju, Jeju, Korea)	R1.11.3-11.6	国外
Development of an Efficient Method to Compute the Chemical Potential of Polymer with All-Atom Model（ポスター発表）	Kazuo Yamada and Nobuyuki Matubayasi	The 5th International Conference on Molecular Simulation (ICMS 2019)(Lotte Hotel Jeju, Jeju, Korea)	R1.11.3-11.6	国外
All-atom segmentation of polymer in connection to the free-energy calculation of water absorption with all-atom molecular dynamics simulation and the theory of solutions in the energy representation（ポスター発表）	Hidekazu Kojima, Kazuya Handa, Kazuo Yamada, and Nobuyuki Matubayasi	The 5th International Conference on Molecular Simulation (ICMS 2019)(Lotte Hotel Jeju, Jeju, Korea)	R1.11.3-11.6	国外
Adsorption free energy of amino-acid analogs to polymer/water interface（ポスター発表）	Nobuhiro Yasoshima and Nobuyuki Matubayasi	The 5th International Conference on Molecular Simulation (ICMS 2019)(Lotte Hotel Jeju, Jeju, Korea)	R1.11.3-11.6	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、成果報告会での発表は除く

*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
Diffusion dynamics of supercooled water modeled with the cage-jump motion and hydrogen-bond rearrangement（ポスター発表）	Takuma Kikutsuji, Kang Kim, and Nobuyuki Matubayasi	The 5th International Conference on Molecular Simulation (ICMS 2019)(Lotte Hotel Jeju, Jeju, Korea)	R1.11.3-11.6	国外
All-Atom Analysis of Kinetics and Free Energy of Physisorption onto Solid-Liquid Interface Using MD Simulation with Explicit Solvent（ポスター発表）	Naoki Yamamoto and Nobuyuki Matubayasi	The 5th International Conference on Molecular Simulation (ICMS 2019)(Lotte Hotel Jeju, Jeju, Korea)	R1.11.3-11.6	国外
Molecular Dynamics Analysis of Solubility and Diffusivity in Ternary Solvent with Mesoscale Inhomogeneity（ポスター発表）	Kenta Hara, Yoshiki Ishii, and Nobuyuki Matubayasi	The 5th International Conference on Molecular Simulation (ICMS 2019)(Lotte Hotel Jeju, Jeju, Korea)	R1.11.3-11.6	国外
Free-Energy Analysis of Salt Effects on Protein Structures with Explicit Solvent（ポスター発表）	Takashi Nitta and Nobuyuki Matubayasi	The 5th International Conference on Molecular Simulation (ICMS 2019)(Lotte Hotel Jeju, Jeju, Korea)	R1.11.3-11.6	国外
Exploring reaction coordinates for alanine dipeptide isomerization: Committor and likelihood maximization（ポスター発表）	Yusuke Mori, Kei-ichi Okazaki, Toshifumi Mori, Kang Kim, and Nobuyuki Matubayasi	The 5th International Conference on Molecular Simulation (ICMS 2019)(Lotte Hotel Jeju, Jeju, Korea)	R1.11.3-11.6	国外
Boson peak, elasticity, and glass transition temperature in polymer glasses: Effects of rigidity of chain bending（口頭発表）	Naoya Tomoshige, Hideyuki Mizuno, Tatsuya Mori, Kang Kim, and Nobuyuki Matubayasi	The 5th International Conference on Molecular Simulation (ICMS 2019)(Lotte Hotel Jeju, Jeju, Korea)	R1.11.3-11.6	国外
分子シミュレーションと溶液理論の組み合わせによるポリマー共重合体膜への低分子の吸収自由エネルギーの評価（ポスター発表）	小嶋秀和、半田和也、山田一雄、松林伸幸	膜シンポジウム2019（大阪大学、大阪）	R1.11.12-11.13	国内
高分子/水の境界面近傍におけるアミノ酸アナログの吸着自由エネルギー解析（ポスター発表）	八十島亘宏、松林伸幸	膜シンポジウム2019（大阪大学、大阪）	R1.11.12-11.13	国内
Exploring Diverse Classes of Partitioning through Extended Concept of Solvation（口頭発表，招待/依頼）	Nobuyuki Matubayasi	1st UCD-COE/OU-ES Joint Symposium on "Chemical Engineering Science (c-ES)"（Osaka University、Osaka）	R1.11.15	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」（神戸大学、兵庫）	R1.11.20	国内
第一原理計算と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、松林伸幸	第10回イオン液体討論会（大阪大学、大阪）	R1.11.21-11.22	国内
水素結合ネットワークに基づくケージ・ジャンプモデルの開発とその過冷却水における拡散ダイナミクスへの応用（口頭発表）	菊辻卓真、金鋼、松林伸幸	第9回ソフトマター研究会（名古屋大学、愛知）	R1.11.26-11.27	国内
水中でのイオン解離のダイナミクスを特徴づける反応座標の探索：コミッターと最尤推定法の融合（ポスター発表）	森勇介、菊辻卓真、岡崎圭一、森俊文、金鋼、松林伸幸	第9回ソフトマター研究会（名古屋大学、愛知）	R1.11.26-11.27	国内
高分子カガラスにおけるボゾンピークに潜んだ普遍性：デバイ理論と弾性力学に基づく振動状態密度のスケーリング（ポスター発表）	友重直也、水野英如、金鋼、森龍也、松林伸幸	第9回ソフトマター研究会（名古屋大学、愛知）	R1.11.26-11.27	国内
ガラス形成液体の振動状態密度とフラジリティ依存性（ポスター発表）	大門翔太、水野英如、金鋼、松林伸幸	第9回ソフトマター研究会（名古屋大学、愛知）	R1.11.26-11.27	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　2019年度社会人教育プログラム　コース１：ナノマテリアル・ナノデバイスデザイン学、コースＢ：ナノ機能化学、コース３： 超分子・ナノバイオ学（大阪大学、大阪）	R1.12.4	国内
全原子MDを用いた高分子ブレンド相溶性評価（ポスター発表）	山田一雄、松林伸幸	第33回分子シミュレーション討論会（名古屋市公会堂、愛知）	R1.12.9-12.11	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、成果報告会での発表は除く

*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
ポリマーのセグメント化によるコポリマー膜の吸水の自由エネルギー解析（ポスター発表）	小嶋秀和、半田和也、山田一雄、松林伸幸	第33回分子シミュレーション討論会（名古屋市公会堂、愛知）	R1.12.9-12.11	国内
Force-Fitting 法で構築したイオン液体の非分極力場とその輸送物性（ポスター発表）	石井良樹、HAKIM Lukman、松林伸幸	第33回分子シミュレーション討論会（名古屋市公会堂、愛知）	R1.12.9-12.11	国内
Transport properties of ionic liquids for Na+ secondary battery from MD simulations with a self-consistent partial charge determination（ポスター発表）	Lukman Hakim, Yoshiki Ishii, and Nobuyuki Matubayasi	第33回分子シミュレーション討論会（名古屋市公会堂、愛知）	R1.12.9-12.11	国内
高分子/水界面におけるアミノ酸アナログの吸着能解析（ポスター発表）	八十島亘宏、松林伸幸	第33回分子シミュレーション討論会（名古屋市公会堂、愛知）	R1.12.9-12.11	国内
水中において多数の分子が関与し引き起こされる水素結合破断の評価手法（ポスター発表）	菊辻卓真、金鋼、松林伸幸	第33回分子シミュレーション討論会（名古屋市公会堂、愛知）	R1.12.9-12.11	国内
溶媒効果を取り入れた固液界面における物理吸着の解析: 速度論と平衡論（口頭発表）	山本直樹、松林伸幸	第33回分子シミュレーション討論会（名古屋市公会堂、愛知）	R1.12.9-12.11	国内
メゾ不均一性を有する新規可溶化システムのMD 解析（ポスター発表）	原健太、石井良樹、SHIMIZU Seishi、HORINEK Dominik、松林伸幸	第33回分子シミュレーション討論会（名古屋市公会堂、愛知）	R1.12.9-12.11	国内
タンパク質の天然構造と熱変性構造の相対安定性に対する塩効果のMD解析（ポスター発表）	新田孝志、松林伸幸	第33回分子シミュレーション討論会（名古屋市公会堂、愛知）	R1.12.9-12.11	国内
複雑な分子系の自由エネルギーを特徴づける反応座標の探索：コミッターと最尤推定法の融合（口頭発表）	森勇介、岡崎圭一、森俊文、金鋼、松林伸幸	第33回分子シミュレーション討論会（名古屋市公会堂、愛知）	R1.12.9-12.11	国内
高分子ガラスのボゾンピーク：粗視化分子動力学シミュレーションによる起源解明（ポスター発表）	友重直也、水野英如、金鋼、松林伸幸	第33回分子シミュレーション討論会（名古屋市公会堂、愛知）	R1.12.9-12.11	国内
MDシミュレーションによるPVAハイドロゲルの分子レベル解析（ポスター発表）	大隅理佐、山田一雄、松林伸幸	第33回分子シミュレーション討論会（名古屋市公会堂、愛知）	R1.12.9-12.11	国内
疎水ポリマーおよび親水ポリマーにおける吸水性の微視的集合様態への依存性（ポスター発表）	阪口敦哉、山田一雄、松林伸幸	第33回分子シミュレーション討論会（名古屋市公会堂、愛知）	R1.12.9-12.11	国内
小ペプチドのスタック構造形成に対する共溶媒効果の相互作用解析（ポスター発表）	諏訪原一輝、松林伸幸	第33回分子シミュレーション討論会（名古屋市公会堂、愛知）	R1.12.9-12.11	国内
ガラス形成液体の振動状態密度とそのフラジリティ依存性（ポスター発表）	大門翔太、水野英如、金鋼、松林伸幸	第33回分子シミュレーション討論会（名古屋市公会堂、愛知）	R1.12.9-12.11	国内
粘着付与剤と粘着剤のバルクおよび基材界面における親和性の全原子解析（ポスター発表）	洲上唯一、廣瀬由貴、矢原和幸、松林伸幸	第33回分子シミュレーション討論会（名古屋市公会堂、愛知）	R1.12.9-12.11	国内
Predicting Transport Properties of Ionic Liquids by Using Molecular Dynamics Simulation with DFT-based Force Field（ポスター発表）	Yoshiki Ishii and Nobuyuki Matubayasi	Materials Research Meeting (MRM) 2019 (Yokohama Symposia, Kanagawa)	R1.12.10-12.14	国外
アクトミオシンの力発生と蛋白質水和自由エネルギーの電場摂動（口頭発表）	鈴木誠、最上譲二、松林伸幸	筋生理の集い（東京慈恵会医科大学、東京）	R1.12	国内
アクトミオシンATP分解ステップの熱力学量を考慮した新たな駆動モデル（口頭発表）	鈴木誠、最上譲二、松林伸幸	生体運動研究合同班会議 2020（京都産業大学、京都）	R1.1.10-1.12	国内
分子動力学シミュレーションは流体力学をどこまで記述できるのか？:流体力学半径の分子論的な描像（口頭発表）	金鋼、水田圭亮、石井良樹、松林伸幸	化学工学会第85年会 （関西大学、大阪）[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.15-3.17	国内
分子シミュレーションと溶液理論の組み合わせによるポリマー共重合体膜の分子吸収の自由エネルギー評価（ポスター発表）	小嶋秀和、半田和也、山田一雄、松林伸幸	化学工学会第85年会 （関西大学、大阪）[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.15-3.17	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、成果報告会での発表は除く

*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
ポリマー／水界面に対するアミノ酸アナログおよび残基の吸着自由エネルギー解析（ポスター発表）	八十島亘宏、松林伸幸	化学工学会第85年会　（関西大学、大阪）［新型コロナウィルス影響により現地開催は中止］	R2.3.15-3.17	国内
疎水ポリマーおよび親水ポリマーにおける吸水性の微視的集合様態への依存性（ポスター発表）	阪口敦哉、山田一雄、松林伸幸	化学工学会第85年会　（関西大学、大阪）［新型コロナウィルス影響により現地開催は中止］	R2.3.15-3.17	国内
小ペプチドのスタック構造形成に対する共溶媒効果の相互作用解析（ポスター発表）	諏訪原 一輝、松林伸幸	化学工学会第85年会　（関西大学、大阪）［新型コロナウィルス影響により現地開催は中止］	R2.3.15-3.17	国内
ナノ構造イオン液晶の分子動力学研究：吸水性と拡散性（口頭発表）	石井良樹、渡辺豪、松林伸幸、加藤隆史、鷲津仁志	化学工学会第85年会　（関西大学、大阪）［新型コロナウィルス影響により現地開催は中止］	R2.3.15-3.17	国内
分子動力学シミュレーションを用いたポリマーブレンド自由エネルギー計算手法（口頭発表）	山田一雄、松林伸幸	日本物理学会第75回年次大会（名古屋大学、愛知）［新型コロナウィルス影響により現地開催は中止］	R2.3.16-3.19	国内
ガラス形成液体の振動状態とそのフラジリティ依存性（口頭発表）	大門翔太、水野英如、金鋼、松林伸幸	日本物理学会第75回年次大会（名古屋大学、愛知）［新型コロナウィルス影響により現地開催は中止］	R2.3.16-3.19	国内
Free energy analysis of adsorption of amino-acid analogs onto polymer/water interface（口頭発表）	Nobuhiro Yasoshima and Nobuyuki Matubayasi	日本化学会第100春季年会　(2020)　（東京理科大学、東京）［新型コロナウィルス影響により現地開催は中止］	R2.3.22-3.25	国内
PVAハイドロゲルのMDシミュレーションによる分子レベル解析（口頭発表）	大隅理佐、山田一雄、松林伸幸	日本化学会第100春季年会　(2020)　（東京理科大学、東京）［新型コロナウィルス影響により現地開催は中止］	R2.3.22-3.25	国内
Molecular Modeling of Nano-Structured Ionic Liquid Crystal: Structural and Water Adsorption Properties（口頭発表）	Yoshiki Ishii, Go Watanabe, Nobuyuki Matubayasi, Takashi Kato, and Hiroshi Washizu	日本化学会第100春季年会　(2020)　（東京理科大学、東京）［新型コロナウィルス影響により現地開催は中止］	R2.3.22-3.25	国内
Exploring diverse classes of solvation through endpoint density-functional for free energy（口頭発表，招待/依頼）	Nobuyuki Matubayasi	American Chemical Society National Meetings & Expositions(Pennsylvania Convention Center, PA, USA)［新型コロナウィルス影響により現地開催は中止］	R2.3.22-3.26	国外
ⅱ）有機／無機界面の物性に関する計算				
再委託先１５：国立大学法人名古屋工業大学		**担当責任者　教授　尾形修司**		
Microscopic Mechanisms of Weakening of Adhesion Strength at Aluminum-Epoxy Resin Interface under Moist Condition（ポスター発表）	Masayuki Uranagase, Shuji Ogata	Interphase Boundaries in Materials (Paris, France)	R1.7.3	国外
Hybrid Quantum-Classical Dynamics Simulation of Adhesion Strength Between Al and Epoxy in a Moist environment（口頭発表）	Shuji Ogata	The 7th Global Conference on Polymer and Composite Materials 2019 (Bangkok, Thailand)	R1.7.10	国外
Electronic-Level Dynamics Simulation of Adhesion Strength between Al and Epoxy in a Moist Environment（口頭発表）	Shuji Ogata	Advanced Materials Sciences and Engineerings 2019 (Osaka)	R1.7.23	国外
大規模なシミュレーションによる金属と樹脂あるいは液体との接着力，接着仕事（口頭発表）	尾形修司	接着・接合技術コンソーシアム 第6回企業ワークショップ（東京）	R1.11.8	国内
A Free-Energy Calculation Package for Polymer-Grafted Solid-Liquid Interface: Methodology and Application（口頭発表）	Masayuki Uranagase, Shuji Ogata	Okinawa Colloids 2019 (Okinawa)	R1.11.8	国外
Unveiling the Chemical Reactions for Weakening the Aluminum-Epoxy Resin Adhesion Strength: Large-Scale, Hybrid Quantum-Classical Dynamics Simulation（口頭発表）	Shuji Ogata, Masayuki Uranagase	International Conference and Expo on Nanotechnology & Nanomaterials (Nano 2019) (Osaka)	R1.11.15	国外
高分子修飾基板表面-液体間の接着性評価のための自由エネルギー計算手法の構築（口頭発表）	浦長瀬正幸、尾形修司	第33回分子シミュレーション討論会（名古屋、愛知）	R1.12.10	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、成果報告会での発表は除く

*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				
受託者：国立大学法人東京大学		担当責任者　教授　尾崎泰助		
網羅的DFT計算によるAB2型2次元物質の構造マップの作成（ポスター発表）	福田将大、张静宁、 尾崎泰助	物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の新展開」（東京大学物性研究所、千葉）	H31.4.2	国内
Optimized Pfaffian Computation（ポスター発表）	Yudai Konno and Yoshihide Yoshimoto	The 3rd cross-disciplinary Workshop on Computing Systems, Infrastructures, and Programming （xSIG 2019） （慶応大学日吉キャンパス、神奈川）	R1.5.27-5.29	国内
Ab-Initio Exploration of Heusler Alloys for Spintronic Applications（口頭発表）	Tamio Oguchi	10th International Conference on Materials for Advanced Technolofies (Singapore)	R1.6.25	国外
Local atomic stress, charge, and volume distributions in equiatomic multicomponent bcc alloys（口頭発表）	S. Ishibashi, F. Kö rmann, Y. Ikeda, B. Grabowski, and J. Neugebauer	The fourth International Symposium on Atomistic and Multiscale Modeling of Mechanics and Multiphysics (ISAM^4 2019)(FAU Erlangen-Nürnberg, Germany)	R1.8.6	国外
Calculation of positron states and annihilation parameters in gamma and amorphous Al2O3（口頭発表）	S. Ishibashi and A. Uedono	15th International Workshop on Slow Positron Beam Techniques & Applications (SLOPOS-15)(Czech Republic)	R1.9.3	国外
Ag/Au(111)の量子井戸状態におけるRashba効果の第一原理的研究（口頭発表）	河村光晶、野口亮 、黒田健太、尾崎泰助、近藤猛	日本物理学会2019秋季大会（岐阜大学、岐阜）	R1.9.11	国内
物質表面における場の量子論に基づく局所物性評価方法（口頭発表）	福田将大、瀬波大土、立花明知、尾崎泰助	日本物理学会2019秋季大会（岐阜大学、岐阜）	R1.9.13	国内
Ab initio study of local atomic stress, charge and volume distributions in disordered equiatomic multicomponent bcc alloys（ポスター発表）	S. Ishibashi, F. Kö rmann, Y. Ikeda, B. Grabowski, and J. Neugebauer	Conference on Theory of Complex Disorder in Materials (TCDM2019) (Linköping, Sweden)	R1.9.16	国外
Computational Simulation of Electric-Field-Induced Antiferroelectric-to-Ferroelectric Transition（ポスター発表）	S. Ishibashi, S. Horiuchi, and R. Kumai	The 13th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Magnets (ISCOM2019) (Tomar, Portugal)	R1.9.24	国外
Electronic stress tensor density based on the quantum field theory in surface material systems(ポスター発表）	Masahiro Fukuda, Masato Senami, Akitomo Tachibana	The 22nd Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-22) (Osaka University, Osaka)	R1.10.28	国外
First-principles study of Rashba effect in quantum well states of Ag/Au(111) （ポスター発表）	M. Kawamura, R. Noguchi, K. Kuroda, T. Kondo, T. Ozaki	The 22nd Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-22) (Osaka University, Osaka)	R1.10.28	国外
Structural Investigation on Ternary PdRuM (M=Pt, Rh or Ir) Nanoparticles Using First-Principles Calculations（ポスター発表）	Shih-Hsuan Hung	The 22nd Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-22) (Osaka University, Osaka)	R1.10.28	国外
Strongly Fluctuating Atomic Volumes, Charges, and Stresses in BCC Multicomponent Alloys（ポスター発表）	S. Ishibashi, Y. Ikeda, F. Körmann, B. Grabowski, and J. Neugebauer	The 22nd Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-22) (Osaka University, Osaka)	R1.10.28	国外
Computational Approaches for Studying Organic Ferro-, Antiferro- and Piezoelectric Materials（口頭発表）	S. Ishibashi, S. Horiuchi, R. Kumai, and K. Terakura	The 2019 MRS Fall Meeting (Boston, MA, USA)	R1.12.4	国外
Benchmark of Density Functional Theory for Superconductors in Elemental Materials（ポスター発表）	M. Kawamura and T. Ozaki	Materials Research Meeting (MRM) 2019 (Yokohama Symposia, Kanagawa)	R1.12.10	国外
Structural Investigation on Ternary PdRuM (M=Pt, Rh or Ir) Nanoparticles Using First-Principles Calculations（ポスター発表）	Shih-Hsuan Hung	Materials Research Meeting (MRM) 2019 (Yokohama Symposia, Kanagawa)	R1.12.10	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、成果報告会での発表は除く

*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 map for AB2 type 2D monolayers by high-throughput DFT calculations（口頭発表）	Masahiro Fukuda, Jingning Zhang, Yung-Ting Lee, Taisuke Ozaki	Materials Research Meeting (MRM) 2019, Recent Advances in Computational Materials Science: Bridging Computations and Experiments (HOTEL Monterey Yokohama, Kanakawa)	R1.12.11	国外
Exploration of Heusler Alloys for Spintronics Applications	F. Kuroda, H. Fujii, T. Fukushima, T. Oguchi	3rd International Conference on Materials and Environmental Science (ICMES 2019) (Agadir, Morocco)	R1.12.18-12.20	国外
Development of Low-order Scaling DFT Methods（口頭発表）	尾崎泰助	淡江大学物理学系講演会（台湾）	R1.12.24	国外
エネルギー区間ごとに見る電子ストレステンソル密度の描像（口頭発表）	福田将大、瀬波大土、立花明知	日本物理学会2020年次大会（名古屋大学、愛知）[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.16	国内
ii）物質構造と相変化の探索手法の開発				
再委託先１２：国立大学法人東北大学大学院工学研究科		担当責任者 教授 陳 迎		
First-principles-only phase diagram for the Al-Ni system（口頭発表）	Theresa Davey, Nguyen-Dung Tran, Arkapol Saengdeejing, Ying Chen	International Conference on Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry (CALPHAD2019) (Singapore)	R1.6.3	国外
First-principles study of oxygen self-diffusion and thermal expansion in Zirconia（口頭発表）	Ying Chen, Hubin Luo, Lei Wang and Tetsuo Mohri	International Conference on Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry (CALPHAD2019) (Singapore)	R1.6.3	国外
Thermodynamic Stability of Substitutional Elements in Potential New Permanent Magnet Compounds R(Fe,X)12 using Special Quasirandom Structures（口頭発表）	Arkapol Saengdeejing, Ying Chen	International Conference on Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry (CALPHAD2019) (Singapore)	R1.6.3	国外
First-principles analysis of structure and stability in RFe12-based compounds（口頭発表）	Ying Chen and Arkapol Saengdeejing	9th International Conference on Materials Structure & Micromechanics of Fractue (MSMF9) (Brno, Czech Republic)	R1.6.27	国外
Effects of Random Mixing & High Entropy on Stability of Promising New Permanent Magnets（口頭発表）	Ying Chen and Arkapol Saengdeejing	Tne 10th Biennial International Conference of The Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-10) (City University of Hongkong)	R1.7.24	国外
A Modified-CALPHAD Approach for Phase Diagrams without Experimental Data（口頭発表）	Theresa DAVEY, Nguyen-Dung TRAN, Ying CHEN	International Conference on Materials for Advanced Technologies (ICMAT2019) (Singapre)	R1.6.27	国外
Fermi Surface Stability Analysis in Fe-rich Si Alloy（口頭発表）	Ying Chen, Arkapol Saengdeejing, Tetsuo Mohri	The 10th Pacific Rim International Conference on Advance Materials and Processing (PRICM-10) (Xi' an, China)	R1.8.21	国外
RFe12系化合物におけるハイエントロピー合金の構造安定化効果（口頭発表）	陳迎、Arkapol Saendeejing	日本金属学会2019年秋期講演大会（岡山大学、岡山）	R1.9.11-9.13	国内
Playing with Elements for Stability of New Permanent Magnets（口頭発表）	Ying Chen	International Workshop on Materials Genomics (IWMG 2019) (Shanghai, China)	R1.10.13-10.16	国外
A prototype first-principles only phase diagram: Al-Ni（口頭発表）	Theresa Davey, Nguyen-Dung Tran, Arkapol Saengdeejing, Ying Chen	Materials Research Meeting (MRM) 2019 (Yokohama, Kanagawa)	R1.12.11	国外
Thermodynamic Stability Study of Substitutional Elements in (R,M)(Fe,X)12 Structure using Special Quasirandom Structures（口頭発表）	Arkapol Saengdeejing, Ying Chen	Materials Research Meeting (MRM) 2019 (Yokohama, Kanagawa)	R1.12.12	国外
High Entropy Alloy Effect on Stability of Potential Permanent Magnets（口頭発表）	Ying Chen, Arkapol Saengdeejing	TMS 2020 Annual Meeting & Exhibition (TMS2020) (San Diego Convention Center and Marriott Marquis & Marina San Diego, California, USA)	R2.2.23-2.27	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、成果報告会での発表は除く

*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
Direct consideration of vacancies in CALPHAD modelling of zirconium carbide（口頭発表）	Theresa Davey, Ying Chen	TMS 2020 Annual Meeting & Exhibition (TMS2020) (San Diego Convention Center and Marriott Marquis & Marina San Diego, California, USA)	R2.2.23-2.27	国外
Reduction of uncertainty in a first-principles-based CALPHAD-type phase diagram via sequential learning of phase equilibrium data（口頭発表）	Theresa Davey, Brandon J. Bocklund, Zi-Kui Liu, Ying Chen	TMS 2020 Annual Meeting & Exhibition (TMS2020) (San Diego Convention Center and Marriott Marquis & Marina San Diego, California, USA)	R2.2.23-2.27	国外
Finite Temperature Thermodynamic Properties of (R,X)(Fe,M)12 Compounds from First-principles Calculations（口頭発表）	Ying Chen, Arkapol Saengdeejing	日本金属学会2020年春期講演大会（東京工業大学大岡山キャンパス、東京）[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.19-3.21	国内
再委託先１１：国立大学法人東北大学金属材料研究所		**担当責任者　特任教授　毛利哲夫**		
固溶体中の原子サイズに関する理論（口頭発表）	毛利哲夫	日本金属学会2019年秋期講演大会（岡山大学津島キャンパス、岡山）	R1.9.11-9.13	国内
Theoretical Calculation of Atomic Size in a Solid Solution （口頭発表）	Tetsuo Mohri	149th Annual Meeting & Exhibition of the Minerals, Metals and Materials Society (TMS2020) (San Diego Convention Center, San Diego, CA, USA)	R2.2.23-2.27	国外
SiO2におけるCristobalite構造の安定性に関する第一原理計算（口頭発表）	陳迎、Tran Ngyyen-Dung, 北岡諭、毛利哲夫	日本金属学会2020年春期講演大会（東京工業大学大岡山キャンパス、東京）[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.17-3.19	国内
Cluster Variation Calculations of Pair Probabilities in Multicomponent Alloy: Application to the FCC Cr-Fe-Mn-Ni System（口頭発表）	Tien Quang Nguyen, Mary Clare SisonEscano, Kazunori Sato, Tamio Oguchi and Tetsuo Mohri	日本金属学会2020年春期講演大会（東京工業大学大岡山キャンパス、東京）[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.17-3.19	国内
第一原理クラスター変分法を用いたX-Al-Ti)X: Fe, Co and Ni)合金におけるB2規則相とL21規則相の二相共存領域の解析（口頭発表）	山田亮、毛利哲夫	日本金属学会2020年春期講演大会（東京工業大学大岡山キャンパス、東京）[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.17-3.19	国内
ⅲ）基盤的超並列計算アルゴルリズムの開発				
再委託先１６：国立大学法人鳥取大学		**担当責任者　准教授　星健夫**		
超並列電子状態計算に対するベイズ推定型計算性能解析（口頭発表）	星健夫、 角田皓亮、 田中和幸、 桑田亨成、 深谷猛、 山本有作	日本応用数理学会2019年度年会（東京大学駒場、東京）	R1.9.3	国内
陽電子回折実験に対する高速化データ駆動科学（口頭発表）	星健夫	第9回極限物質科学研究会-動力学的回折理論による結晶構造解析（東京）	R1.9.30	国内
Fusion of massively parallel data-driven science and novel measurement technology for surface structure analysis（口頭発表）	Takeo Hoshi	11th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (Tsukuba, Ibaraki)	R1.10.15	国外
高速化データ駆動科学を用いた先端量子ビーム回折実験のデータ解析 （口頭発表）	星健夫	計算物質科学人材育成コンソーシアム（PCoMS）シンポジウム＆計算物質科学スーパーコンピュータ事業報告会（東北大学、宮城）	R1.10.25	国内
Novel linear algebraic solvers and numerical libraries for computational material science （ポスター発表）	Takeo Hoshi	“TIAかけはし”ポスター交流会2019「-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-」Innovation in materials analysis by data assimilation of simulation and measurement（東京大学、柏、千葉）	R1.12.6	国内
大規模電子状態計算における中間固有対計算 （口頭発表）	桑田亨成、 李東珍、 星健夫	日本応用数理学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会 第28回研究会（法政大学、東京）	R1.12.2	国内
2次元物質構造測定データ解析におけるAI/HPC融合（口頭発表）	星健夫	研究会「放射光実験と計算科学の新たな連携を目指して」（東京理科大、東京）	R1.12.26	国内
Diamond Matrix Powers Kernel（口頭発表）	Emil Vatai, Utsav Sighal and Reiji Suda	HPC Asia 2020:International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (Fukuoka)	R2.1.16	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、成果報告会での発表は除く

*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
ピーク検出型数値複素積分と電子状態計算ソフトRSDFTへの応用（口頭発表）	星健夫、 小橋恒士、 吉見一慶、 田中健一郎	日本応用数理学会2019年研究部会連合発表会（筑波大学、茨城）	R2.3.4	国内
ⅳ）大型実験施設との連携				
再委託先１７：学校法人東京理科大学		担当責任者 教授 遠山貴巳		
大規模並列密度行列繰り込み群法の開発と量子ダイナミクスへの応用（口頭発表）	曽田繁利	物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の新展開」（東大柏キャンパス、千葉）	H31.4.2	国内
Ground-state phase diagrams of the Kitaev-Heisenberg model on a kagome lattice（ポスター発表）	Katsuhiro Morita, Masanori Kishimoto, and Takami Tohyama	Frontiers of Correlated Electron Sciences (Koshiba hall, Hongo campus, University of Tokyo, Tokyo)	R1.5.30	国外
Dynamical spin and charge structure factors in cuprate superconductors（口頭発表）	T. Tohyama	The 11th International Conference on Inelastic X-ray Scattering (IXS2019) (Stony Brook, USA)	R1.6.24	国外
Spin and Charge Excitations along the Direction Perpendicular to Charge Stripes in Cuprates（口頭発表）	T. Tohyama	The 11th International Conference on Magnetic and Superconducting Materials (MSM19) (Seoul, Korea)	R1.8.21	国外
Spin and Charge Excitations along the Direction Perpendicular to Charge Stripes in Cuprates（口頭発表）	T. Tohyama	The 11th International Conference on Magnetic and Superconducting Materials (MSM19) (Seoul, Korea)	R1.8.21	国外
カゴメ格子キタエフハイゼンベルグ模型の有限温度特性（口頭発表）	森田克洋、遠山貴巳	日本物理学会2019秋季大会（岐阜大学、岐阜）	R1.9.11	国内
動的密度行列繰り込み群法によるt-t′-J 模型のスピン励起の研究（口頭発表）	遠山貴己、曽田繁利、柚木清司	日本物理学会2019秋季大会（岐阜大学、岐阜）	R1.9.10	国内
Finite-temperature properties of the Kitaev-Heisenberg model on a kagome lattice（ポスター発表）	Katsuhiro Morita and Totakami Tohyama	Strongly Correlated Electoron Systems (Okayama Convention Center, Okayama)	R1.9.27	国外
Dynamical DMRG Study of Spin Excitation Dynamics on the Triangular Lattice Antiferromagnetic Heisenberg model（ポスター発表）	S. Sota, T. Shirakawa, S. Yunoki, T. Tohyama	International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2019 (Okayama)	R1.9.26	国外
Spin and Charge Excitations in Stripe-Ordered Cuprates（口頭発表）	T. Tohyama	nternational Conference on Electron Correlation in Superconductors and Nanostructures (ECSN-2019) (Odessa, Ukraina)	R1.10.7	国外
4本足梯子t-t′-J模型のスピン励起と電荷ストライプ(ポスター発表)	遠山貴己	基研研究会「電子相関が生み出す超伝導現象の未解決問題と新しい潮流」（京都大学基礎物理学研究所、京都）	R1.10.28	国内
Quantum dynamics simulation towards Fugaku（口頭発表）	S. Sota	The 2nd R-CCS International Symposium (Kobe, Hyogo)	R2.2.17	国外
Spin Excitations in Doped Mott insulators（口頭発表）	T. Tohyama	The 60th REIMEI International Workshop "New excitations for spintronics seen with quantum beams" (Tohoku University, Miyagi)	R2.2.27	国外
Dynamical DMRG study of spin excitation dynamics in triangular lattice spin-1/2 antiferromagnet（口頭発表）	S. Sota, T. Shirakawa, S. Yunoki, T. Tohyama	APS March Meeting 2020 (Denver, USA) [新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.2	国外
一次元拡張ハバード模型の時間分解一粒子スペクトル関数の解析（口頭発表）	遠山貴巳, Can Shao, Hong-Gang Luo, Hantao Lu	日本物理学会第75回年次大会（名古屋大学、愛知）[新型コロナウィルス影響により現地開催は中止]	R2.3.16-3.19	国内
総合的推進				
空間に物理量を表現するAdditive Manufacturingと３Dホログラム（ポスター発表）	山崎淳、古宇田光	Conference on 4D and Functional Fabrication 2019（慶應義塾大学三田キャンパス、東京）	R1.10.10	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　　on-line以降　　論文機関の所在国

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
サブ課題Ａ　高機能半導体デバイス				
self-forming and self-decomposing gallium oxide layers at the GaN/Al2O3 interfaces	K. Chokawa and K. Shiraishi	Applied Physics Express	R1.5	国外
Chemical vapor deposition condition dependence of reconstructed surfaces on 4H-SiC (0001), (000-1), and (1-100) sufaces	K. Chokawa, E. Makino, N. Hosokawa, S. Onda, Y. Kangawa, K. Shiraishi	Japanese Journal of Applied Physics	R1.10	国内
Energetics of the surface step and its morphology on the 3C-SiC(111) surface clarified by the density-functional theory	K. Seino and A. Oshiyama	Applied Physics Express	R1.12	国外
A two-dimensional liquid-like phase on Ga-rich GaN (0001) surfaces evidenced by first principles molecular dynamics	K. M. Bui, M. Boero, K. Shiraishi and A. Oshiyama	Japanese Journal of Applied Physics	R2.2	国内
Theoretical prediction of strain-induced carrier effective mass modulation in 4H-SiC and GaN	Yuichiro Kuroiwa, Yu-ichiro Matsushita, Kou Harada, and Fumiyasu Oba	Applied Physics Letters	R1.9	国外
Energetics and electronic structure of native point defects in α-Ga_2O_3	Takuma Kobayashi, Tomoya Gake, Yu Kumagai, Fumiyasu Oba, and Yu-ichiro Matsushita	Applied Physics Express	R1.8	国外
Structure and energetics of carbon-related defects in SiC(0001)/SiO_2 systems revealed by first-principles calculations: Defects in SiC, SiO_2, and just at their interface	Takuma, Kobayashi and Yu-ichiro Matsushita	Journal of Applied Physics	R1.10	国外
Carbon dangling-bond center (carbon Pb center) at 4H-SiC(0001)/SiO2 interface	Takehide Umeda, Takuma Kobayashi, Mitsuru Sometani, Hitoshi Yano, Yu-ichiro Matsushita, and Shinsuke Harada	Applied Physics Letters	R2.2	国外
Accessing the Accuracy of Density Functional Theory through Structure and Dynamics of the Water-Air Interface	T. Ohto, M. Dodia, J. Xu, S. Imoto, F. Tang, F. Zysk, T. D. Kühne, Y. Shigeta, M. Bonn, X. Wu, Y. Nagata	The Journal of Physical Chemistry Letters	R1.8	国外
Intramolecular Mode Coupling of the Isotopomers of Water: A Non-Scalar Charge Density-Derived Perspective	T. Tian, T. Xu, S. Kirk, I.T. Rongde, S. Manzhos, Y. Shigeta, S. Jenkins	Physical Chemistry Chemical Physics	R2.1	国外
Electron mobility calculation for two-dimensional electron gas in InN/GaN digital alloy channel high electron mobility transistors	T. Hoshino and N. Mori	Japanese Journal of Applied Physics	R1.5	国内
Intra-collisional field effect in one-dimensional GaN nanowires	S. Makihira and N. Mori	Japanese Journal of Applied Physics	R1.5	国内
Nonequilibrium Green function simulation of coupled electron-phonon transport in one-dimensional nanostructures	Y. Kajiwara and N. Mori	Japanese Journal of Applied Physics	R1.5	国内
半導体トランジスタの第一原理デバイスシミュレーション	森伸也	サイバーメディア HPC ジャーナル	R2.1	国内
Monte-Carlo simulation of random dopant fluctuation in CV-characteristics using image charge model and adequately determined length scale	C-W. Yao, N. Sano, H. Watanabe	Japanese Journal of Applied Physics	R1.8	国内

２．学会誌・雑誌等における論文掲載

on-line以降　論文機関の所在国

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
Polarization Effect due to Discreteness of Dopants in Nano-Scale MOSFETs	K. Yoshida, K. Tsukahara, N. Sano	IEEE Tranactions on Electron Devices	R1.10	国外
Polarization Effect Induced by Discrete Impurity at Semiconductor/Oxide Interface in Si-FinFET	K. Yoshida, K. Tsukahara, N. Sano	2019 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD), Udine, Italy, 2019	R1.9	国外
不純物の離散性に伴った半導体デバイスモデリングの基本的側面 II -半導体ナノ構造でのランダム不純物	佐野伸行	電子情報通信学会 シリコン材料・デバイス(SDM)研究会集会（機械振興会館/東京） 技術研究報告	R1.11	国内
サブ課題Ｂ　光・電子融合デバイス				
Direct Wave-Vector Excitation in an Indirect-Band-Gap Semiconductor of Silicon with an Optical Near-field	M. Noda, K. Iida, M. Yamaguchi, T. Yatsui and K. Nobusada	Physical Review Applied	H31.4	国外
Enhanced photo-sensitivity in a Si photodetector using a near-field assisted excitation	T. Yatsui, S. Okada, T. Takemori, T. Sato, K. Saichi, T. Ogamoto, S. Chiashi, S. Maruyama , M. Noda, K. Yabana, K. Iida, K. Nobusada	Communications Physics	R1.6	国外
Multiscale time-dependent density functional theory for a unified description of ultrafast dynamics: Pulsed light, electron, and lattice motions in crystalline solids	A. Yamada and K. Yabana	Physical Review B	R1.6	国外
Attosecond timing of the dynamical Franz-Keldysh effect	M. Lucchini, S.A. Sato, F. Schlaepfer, K. Yabana, L. Gallmann, A. Rubio, U. Keller	Journal of Physics: Photonics	R2.2	国外
Enhanced photo-sensitivity in a Si photodetector using a near-field assisted excitation	Takashi Yatsui, Syunsuke Okada, Tatsuya Takemori, Takumi Sato, Kota Saichi, Tatsuro Ogamoto, Shohei Chiashi, Shigeo Maruyama, Masashi Noda, Kazuhiro Yabana, Kenji Iida, and Katsuyuki Nobusada	Communications Physics	R1.6	国外
Recent improvement of silicon absorption in opto-electric devices	Takashi Yatsui	Opto-Electronic Advances	R1.10	国外
Electron transfer governed by light-matter interaction at metal-semiconductor interface	Kenji Iida, Masashi Noda	npj Computational Materials	R2.1	国外
サブ課題Ｃ　超伝導・新機能デバイス材料				
Charge dynamics of correlated electrons: Variational description with inclusion of composite fermions	Kota Ido, Masatoshi Imada, Takahiro Misawa	Physical Review B	R2.2	国外
Ab initio study of superconductivity and inhomogeneity in a Hg-based cuprate superconductor	Takahiro Ohgoe, Motoaki Hirayama, Takahiro Misawa, Kota Ido, Youhei Yamaji, Masatoshi Imada	Physical Review B	R2.1	国外
Effective Hamiltonian for cuprate superconductors derived from multiscale ab initio scheme with level renormalization	Motoaki Hirayama, Takahiro Misawa, Takahiro Ohgoe, Youhei Yamaji, Masatoshi Imada	Physical Review B	R1.6	国外
Ab initio derivation of an effective Hamiltonian for the La2CuO4/La1.55Sr0.45CuO4 heterostructure	Terumasa Tadano, Yusuke Nomura, Masatoshi Imada	Physical Review B	H31.4	国外

２．学会誌・雑誌等における論文掲載　　on-line以降　論文機関の所在国

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
Magnetic-field Induced Quantum Phases in Tensor Network Study of Kitaev Magnets	H.-Y. Lee, R. Kaneko, L. E. Chern, T. Okubo, Y. Yamaji, N.Kawashima, and Y. B. Kim	Nature Communications	R2.2	国外
Possible Kitaev Quantum Spin Liquid State in 2D Materials with S = 3/2	C. Xu, J. Feng, M. Kawamura, Y. Yamaji, Y. Nahas, S. Prokhorenko, Y. Qi, H. Xiang, and L. Bellaiche	Physical Review Letters	R2.2	国外
Temperature Dependence of Heat Capacity in the Kitaev-Heisenberg Model on a Honeycomb Lattice	T. Suzuki and Y. Yamaji	Journal of the Physical Society of Japan	R1.10	国内
Correlation effects on the magnetization process of the Kitaev model	K. Ido and T. Misawa	Physical Review B	R2.1	国外
サブ課題Ｄ　高性能永久磁石・磁性材料				
Cerium as a possible stabilizer of ThMn12-type iron-based compounds: A first-principles study	Yosuke Harashima, Taro Fukazawa, and Takashi Miyake	Scripta Materialia	R2.1	国外
Adjusting the descriptor for a crystal structure search using Bayesian optimization	Nobuya Sato, Tomoki Yamashita, Tamio Oguchi, Koji Hukushima and Takashi Miyake	Physical Review Materials	R2.3	国外
Materials informatics based on evolutionary algorithms: Application to search for superconducting hydrogen compounds	Takahiro Ishikawa, Takashi Miyake and Katsuya Shimizu	Physical Review B	R1.11	国外
Thermal decomposition of ThMn12-type phase and its optimum stabilizing elements in SmFe12-based alloys	I. Dirba, Y. Harashima, H. Sepehri-Amin, T. Ohkubo, T. Miyake, S. Hirosawa, K. Hono	Journal of Alloy Compounds	R1.9	国外
Bayesian optimization of chemical composition: a comprehensive framework and its application to RFe12-type magnet compounds	Taro Fukazawa, Yosuke Harashima, Zhufeng Hou and Takashi Miyake	Physical Review Materials	R1.5	国外
Ensemble learning reveals dissimilarity between rare-earth transition-metal binary alloys with respect to the Curie temperature	Duong-Nguyen Nguyen, Tien-Lam Pham, Viet-Cuong Nguyen, Hiori Kino, Takashi Miyake, Hieu-Chi Dam	Journal of Physics: Materials	R1.6	国外
Curie temperature of Sm2Fe17 and Nd2Fe14B: a first-principles study	Taro Fukazawa, Hisazumi Akai, Yosuke Harashima and Takashi Miyake	AIP Advances and IEEE Transactions on Magnetics	R1.7	国外
Calculating Curie temperatures for rare-earth permanent magnets: Ab initio inspection of localized magnetic moments in d-electron ferromagnetism	M. Matsumoto and H.Akai	Physical Review B	R2.3	国外
Curie temperature of Sm2Fe17 and Nd2Fe14B: a first-principles study	T. Fukazawa, **H. Akai**, Y. Harashima, and T. Miyake	IEEE Transactions on Magnetics	R1.7	国外
Efficient Algorithm Based on Liechtenstein Method for Computing Exchange Coupling Constants Using Localized Basis Set	A. Terasawa, M. Matsumoto, T. Ozaki, and Y. Gohda	Journal of the Physical Society of Japan	R1.10	国内
Enhancement of magnetoelectric coupling by insertion of Co atomic layer into Fe3Si/BaTiO3(001) interfaces identified by first-principles calculations	Y. Hamazaki and Y. Gohda	Journal of Applied Physics	R1.12	国外
First-principles study of crystalline Nd-Fe alloys	Y. Ainai, Y. Tatetsu, A. Terasawa, and Y. Gohda	Applied Physics Express	R2.1	国外
First-principles study on surface stability and interface magnetic properties of SmFe12	Y. Ainai, T. Shiozawa, Y. Tatetsu, and Y. Gohda	Applied Physics Express	R2.3	国外

２．学会誌・雑誌等における論文掲載

on-line以降

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　高信頼性構造材料				
Influence of the segregation of 3d transition metal solutes on the elastic modulus of a tilt grain boundary in bcc Fe: ab initio local analysis	Zhuo Xu, Shingo Tanaka, and Masanori Kohyama	Journal of Materials Science	R1.10	国外
Correlation analysis of strongly fluctuating atomic volumes, charges, and stresses in body-centered cubic refractory high-entropy alloys	Shoji Ishibashi, Yuji Ikeda, Fritz Körmann, Blazej Grabowski, and Jörg Neugebauer	Physical Review Materials	R2.2	国外
計算ナノ科学 -第一原理計算の基礎と高機能ナノ材料への適用	大野かおる、中村振一郎、水関博志、佐原亮二	ナノ学会編シリーズ：未来を創るナノ・サイエンス＆テクノロジー（近代科学社）	R1.8	国内
第一原理フェーズフィールド法で材料組織を予測する	大野かおる	中村振一郎、牧野内昭武、安達泰治、杉本学 監修「23の先端事例がつなぐ計算科学のフロンティア」（近代科学社）第７章	R1.12	国内
Spin-orbit coupling in all-electron mixed basis approach	Takeru Nakashima and Kaoru Ohno	Annalen der Physik	R1.5	国外
First principles calculations of surface dependent electronic structures: a study on β-FeOOH and γ-FeOOH	Yuki Sakamoto, Yusuke Noda, Kaoru Ohno, Kayo Koike, Katsushi Fujii, Tomiko M. Suzuki, Takeshi Morikawa, and Shinichiro Nakamura	Physical Chemistry Chemical Physics	R1.5	国外
Implementation of hyperfine coupling in all-electron mixed basis approach	Hiroyuki Terada, Shota Kanno, and Kaoru Ohno	Journal of Physics B: Atomic, Molecular and.Optical Physics	R1.7	国外
A first-principles phase field method for quantitatively predicting multi-composition phase separation without thermodynamic empirical parameter	Swastibrata Bhattacharyya, Ryoji Sahara, and Kaoru Ohno	Nature Communications	R1.8	国外
Ab initio simulations and exciton analysis of x-ray emission spectroscopy with the GW+Bethe-Salpeter equation	Tsubasa Aoki and Kaoru Ohno	Physical Review B	R1.8	国外
Mass production of low-boiling point solvent- and water- soluble graphene by simple salt-assisted ball milling	Yoshihiko Arao, Riichi Kuwahara, Kaoru Ohno, Tanks Jonathon, Kojiro Aida, Masatoshi Kubouchi, Shin-ichi Takeda	Nanoscale Advances	R1.11	国外
Clear evidence of element partitioning effects in a Ti-6Al-4V alloy by the first-principles phase field method	Thi Nu Pham, Kaoru Ohno, Riichi Kuwahara, and Swastibrata Bhattacharyya	Journal of Physics: Condensed Matter	R2.3	国外
Molecular Dynamics Simulation of Nucleation from Undercooled Melt of Nickel-Aluminum Alloy and Discussion on Polymorphism in Nucleation	Shunsuke Orihara, Yasushi Shibuta, Tetsuo Mohri	Materials Transactions	R2.2	国内
Large-scale phase-field lattice Boltzmann study on the effects of natural convection on dendrite morphology formed during directional solidification of a binary alloy	T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Aoki	Computational Materials Science	R2.1	国外
Molecular dynamics simulation of athermal heterogeneous nucleation of solidification	T. Fujinaga, Y. Shibuta	Computational Materials Science	R1.6	国外
Micrometer-scale molecular dynamics simulation of microstructure formation linked with multi-phase-field simulation in same space scale	Y. Shibuta, S. Sakane, E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno	Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering	R1.5	国外

２．学会誌・雑誌等における論文掲載　　on-line以降

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）
Molecular dynamics simulation of nucleation from undercooled melt of nickel-aluminum alloy and discussion on polymorphism in nucleation	S. Orihara, Y. Shibuta, T. Mohri	Materials Transactions	R2.2	国内
サブ課題Ｆ　次世代機能性化学品				
Free-energy analysis of the hydration and cosolvent effects on the β-sheet aggregation through all-atom molecular dynamics simulation	Keiichi Masutani, Yu Yamamori, Kang Kim, Nobuyuki Matubayasi	The Journal of Chemical Physics	H31.4	国外
Spatial-Decomposition Analysis of Electrical Conductivity	Nobuyuki Matubayasi	The Chemical Record	H31.4	国外
Spatially-Decomposed Free Energy of Solvation Based on the Endpoint Density-Functional Method	Yoshiki Ishii, Naoki Yamamoto, Nobuyuki Matubayasi	Journal of Chemical Theory and Computation	R1.5	国外
Diffusion dynamics of supercooled water modeled with the cage-jump motion and hydrogen-bond rearrangement	Takuma Kikutsuji, Kang Kim, Nobuyuki Matubayasi	The Journal of Chemical Physics	R1.5	国外
Bridging the gap between molecular dynamics and hydrodynamics in nanoscale Brownian motions	Keisuke Mizuta, Yoshiki Ishii, Kang Kim, Nobuyuki Matubayasi	Soft Matter	H31.4	国外
Consistency of geometrical definitions of hydrogen bonds based on the two-dimensional potential of mean force with respect to the time correlation in liquid water over a wide range of temperatures	Takuma Kikutsuji, Kang Kim, Nobuyuki Matubayasi	Journal of Molecular Liquids	R1.11	国外
Local viscoelasticity at resin-metal interface analyzed with spatial-decomposition formula for relaxation modulus	Hodaka Mori, Nobuyuki Matubayasi	The Journal of Chemical Physics	R1.9	国外
Energy-Representation Theory of Solutions: Its Formulation and Application to Soft, Molecular Aggregates	Nobuyuki Matubayasi	Bulletin of the Chemical Society of Japan	R1.11	国内
Energetics of cosolvent effect on peptide aggregation	Nobuyuki Matubayasi, Keiichi Masutani	Biophysics and Physicobiology	R1.11	国外
Boson peak, elasticity, and glass transition temperature in polymer glasses: Effects of the rigidity of chain bending	Naoya Tomoshige, Hideyuki Mizuno, Tatsuya Mori, Kang Kim, Nobuyuki Matubayasi	Scientific Reports	R1.12	国外
Self-Consistent Scheme Combining MD and Order-N DFT Methods: An Improved Set of Nonpolarizable Force Fields for Ionic Liquids	Yoshiki Ishii, Nobuyuki Matubayasi	Journal of Chemical Theory and Computation	R2.1	国外
Chain-Increment Method for Free-Energy Computation of a Polymer with All-Atom Molecular Simulations	Kazuo Yamada, Nobuyuki Matubayasi	Macromolecules	R2.2	国外
FE-CLIP: A tool for the calculation of the solid-liquid interfacial free energy	M. Uranagase and S.Ogata	Computer Physics Communications	R2.3	国外
サブ課題Ｇ　共通基盤シミュレーション手法				
FermiSurfer: Fermi-surface viewer providing multiple representation schemes	M. Kawamura	Computer Physics Communications	R1.6	国外
Computational study of positron annihilation parameters for cation mono-vacancies and vacancy complexes in nitride semiconductor alloys	S. Ishibashi, A. Uedono, H. Kino, T. Miyake, and K. Terakura	Journal of Physics: Condensed Matter	R1.8	国外

２．学会誌・雑誌等における論文掲載　　on-line以降　論文機関の所在国

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
Asymmetric phosphorus incorporation in homoepitaxial P-doped (111) diamond revealed by photoelectron holography	T. Yokoya, K. Terashima, A. Takeda, T. Fukura, H. Fujiwara, T. Muro, T. Kinoshita, H. Kato, S. Yamasaki, T. Oguchi, T. Wakita, Y. Muraoka, T. Matsushita	Nano Letters	R1.8	国外
Formation of a two-dimensional single-component correlated electron system and band engineering in the nickelate superconductor NdNiO2	Yusuke Nomura, Motoaki Hirayama, Terumasa Tadano, Yoshihide Yoshimoto, Kazuma Nakamura, and Ryotaro Arita	Physical Review B	R1.11	国外
Microscopic characterization of the superconducting gap function in Sn1-xInxTe	T. Nomoto, M. Kawamura, T. Koretsune, R. Arita, T. Machida, T. Hanaguri, M. Kriener, Y. Taguchi, and Y. Tokura	Physical Review B	R2.1	国外
Spectroscopic evidence of quasi-one-dimensional metallic Rashba spin-split states on the Si(111)5x2-Au surface	Kazuaki Taguchi, Kazuki Sumida, Yuki Okuda, Koji Miyamoto, Akio Kimura, Tamio Oguchi, and Taichi Okuda	Physical Review B	R2.1	国外
Possible Kitaev Quantum Spin Liquid State in 2D Materials with S=3/2	Changsong Xu, Junsheng Feng, Mitsuaki Kawamura, Youhei Yamaji, Yousra Nahas, Sergei Prokhorenko, Yang Qi, Hongjun Xiang, and L. Bellaiche	Physical Review Letters	R2.2	国外
Correlation analysis of strongly fluctuating atomic volumes, charges, and stresses in body-centered cubic refractory high-entropy alloys	S. Ishibashi, Y. Ikeda, F. Körmann, B. Grabowski, and J. Neugebauer	Physical Review Materials	R2.2	国外
Study of Phonon Dispersion of Iridium Oxide Ca5Ir3O12 with Strong Spin-orbit Interaction	Hiroki Hanate, Takumi Hasegawa, Satoshi Tsutsui, Kazuma Nakamura, Yoshihide Yoshimoto, Naohiro Kishigami, Sho Haneta and Kazuyuki Matsuhira	Journal of the Physical Society of Japan	R2.2	国内
Manipulation of Saturation Magnetization and Perpendicular Magnetic Anisotropy in Epitaxial Co$_{x}$Mn$_{4-x}$N Films with Ferrimagnetic Compensation	Keita Ito, Yoko Yasutomi, Siyuan Zhu, Munisa Nurmamat, Masaki Tahara, Kaoru Toko, Ryota Akiyama, Yukiharu Takeda, Yuji Saitoh, Tamio Oguchi, Akio Kimura, Takashi Suemasu	Physical Review B	R2.3	国外
Calculation of Positron States and Annihilation Parameters in Gamma and Amorphous Al2O3	S. Ishibashi and A. Uedono	Acta Physica Polonica A	R2.3	国外
Benchmark of density functional theory for superconductors in elemental materials	M. Kawamura, Y. Hizume, and T. Ozaki	Physical Review B	R2.3	国外
Black phosphorene exhibiting negative thermal expansion and negative linear compressibility	Lei Wang, Cong Wang and Ying Chen	Journal of Physics: Condensed Matter	R1.8	国外
First-principles analysis of the inhibitive effect of interstitial carbon on an active dissolution of martensitic steel	Mariko Kadowaki, Arkapol Saengdeejing, Izumi Muto, Ying Chen, Hiroyuki Masuda, Hideki Katayama, Takashi Doi, Kaori Kawano, Hideo Miura, Yu Sugawara, Nobuyoshi Hara	Corrosion Science	R2.2	国外
Anisotropic Lattice Vibration, Motion of Atoms, and Local Structure in Pure Zirconia Crystals with Vacancies	Yayoi Terada and Tetsuo Mohri	Journal of the Physical Society of Japan	H31.4	国内

２．学会誌・雑誌等における論文掲載

on-line以降　論文機関の所在国

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
Conversion of Magnetic Freedoms into Atomic Configurational Freedoms within the Cluster Variation Method	Ryo Yamada and Tetsuo Mohri	Materials Transactions	R1.6	国内
Atomistic relaxation process in a Ni3Al ordered phase using path probability method with vacancy mechanisms	Ryo Yamada and Tetsuo Mohri	Computational Materials Science	R1.9	国外
Application of Cluster Variation and Path Probability Methods to the Tetragonal-Cubic Phase Transition in ZrO2	Ryo Yamada and Tetsuo Mohri	Journal of the Physical Society of Japan	R1.6	国内
Atomic and Effective Pair Interactions in FeC Alloy with Point Defects: A Cluster Expansion Study	T.Q. Nguyen, M.C.S Escano, K. Sato, Y. Shibutani, T. Oguchi, T. Mohri	ISIJ International	R1.12	国内
Full-Potential KKR Calculations for Interaction Energies in Al-Rich AlX (X=H~Sn) Alloys: I. Fundamental Features and Thermal Electronic Contribution due to Fermi-Dirac Distribution	Mitsuhiro Asato, Chang Liu, Nobuhisa Fujima, Toshiharu Hoshino, Tetsuo Mohri	Materials Transactions	R2.1	国内
Origin of the Phase Separation into B2 and L21 Ordered Phases in X-Al-Ti (X: Fe, Co, and Ni) Alloys based on the First-principles Cluster Variation Method	Ryo Yamada and Tetsuo Mohri	Journal of Physics: Condensed Matter	R2.1	国外
Numerical aspect of large-scale electronic state calculation for flexible device material	Takeo Hoshi, Hiroto Imachi, Akiyoshi Kuwata, Kohsuke Kakuda, Takatoshi Fujita, Hiroyuki Matsui	Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics	H31.4	国内
EigenKernel - A middleware for parallel generalized eigenvalue solvers to attain high scalability and usability	Kazuyuki Tanaka, Hiroto Imachi, Tomoya Fukumoto, Akiyoshi Kuwata, Yuki Harada, Takeshi Fukaya, Yusaku Yamamoto, Takeo Hoshi	Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics	H31.4	国内
Charge-Transfer Excited States in the Donor/Acceptor Interface from Large-Scale GW Calculations	Takatoshi Fujita , Yoshifumi Noguchi, and Takeo Hoshi	Journal of Chemical Physics	R1.9	国外
An a posteriori verification method for generalized Hermitian eigenvalue problems in large-scale electronic state calculations	Takeo Hoshi, Takeshi Ogita, Katsuhisa Ozaki, Takeshi Terao	Journal of Computational and Applied Mathematics	R1.10	国外
Development of data-analysis software for total-reflection high-energy positron diffraction (TRHEPD)	Kazuyuki Tanaka, Takeo Hoshi, Izumi Mochizuki, Takashi Hanada, Ayahiko Ichimiya, Toshio Hyodo	Acta Physica Polonica A	R2.2	国外
Asymptotic Quadratic Convergence of the Two-Sided Serial and Parallel Block-Jacobi SVD Algorithm	Gabriel Oksa, Yusaku Yamamoto, Martin Becka and Marian Vajtersic	SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications	R1.5	国外
Efficient Implementations of the Modified Gram-Schmidt Orthogonalization with a Non-standard Inner Product	Akira Imakura and Yusaku Yamamoto	Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics	H31.4	国内
Shifted Cholesky QR for Computing the QR Factorization of Ill-Conditioned Matrices	Takeshi Fukaya, Ramaseshan Kannan, Yuji Nakatsukasa, Yusaku Yamamoto and Yuka Yanagisawa	SIAM Journal on Scientific Computing	R2.2	国外
Fixed-point analysis of Ogita-Aishima's symmetric eigendecomposition refinement algorithm for multiple eigenvalues	K. Shiroma and Y. Yamamoto	JSIAM Letters	R2.3	国内
Diamond Matrix Powers Kernel□	Emil Vatai, Utsav Sighal and Reiji Suda□	HPCAsia2020: Proceedings of the International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region	R2.1	国外

２．学会誌・雑誌等における論文掲載

on-line以降　論文機関の所在国

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
Magnetization plateau and supersolid phases in the spin-1/2 antiferromagnetic Heisenberg model on a tetragonally distorted fcc lattice	K. Morita and T. Tohyama	Physical Review B	H31.4	国外
Machine Learning Phase Diagram in the Half-filled One-dimensional Extended Hubbard Model	K. Shinjo, K. Sasaki, S. Hase, S. Sota, S. Ejima, S. Yunoki and T. Tohyama	Journal of the Physical Society of Japan	R1.5	国内
Analysis of time-resolved single-particle spectrum on the one-dimensional extended Hubbard model	C. Shao, T. Tohyama, H.-G. Luo, and H. Lu	Physical Review B	R2.1	国外
Finite-temperature properties of the Kitaev-Heisenberg models on kagome and triangular lattices studied by improved finite-temperature Lanczos methods	K. Morita and T. Tohyama	Physical Review Research	R2.2	国外
Magnetic excitations in magnetization plateaus of a frustrated spin ladder	K. Sasaki, T. Sugimoto, S. Sota, and T. Tohyama	Physical Review B	R2.3	国外
Vanishing Wilson ratio as the hallmark of quantum spin-liquid models	P. Prelovšek, K. Morita, T. Tohyama, and J. Herbrych	Physical Review Research	R2.3	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 2 年 5 月 29 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
			令和元年度は変更なし

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。

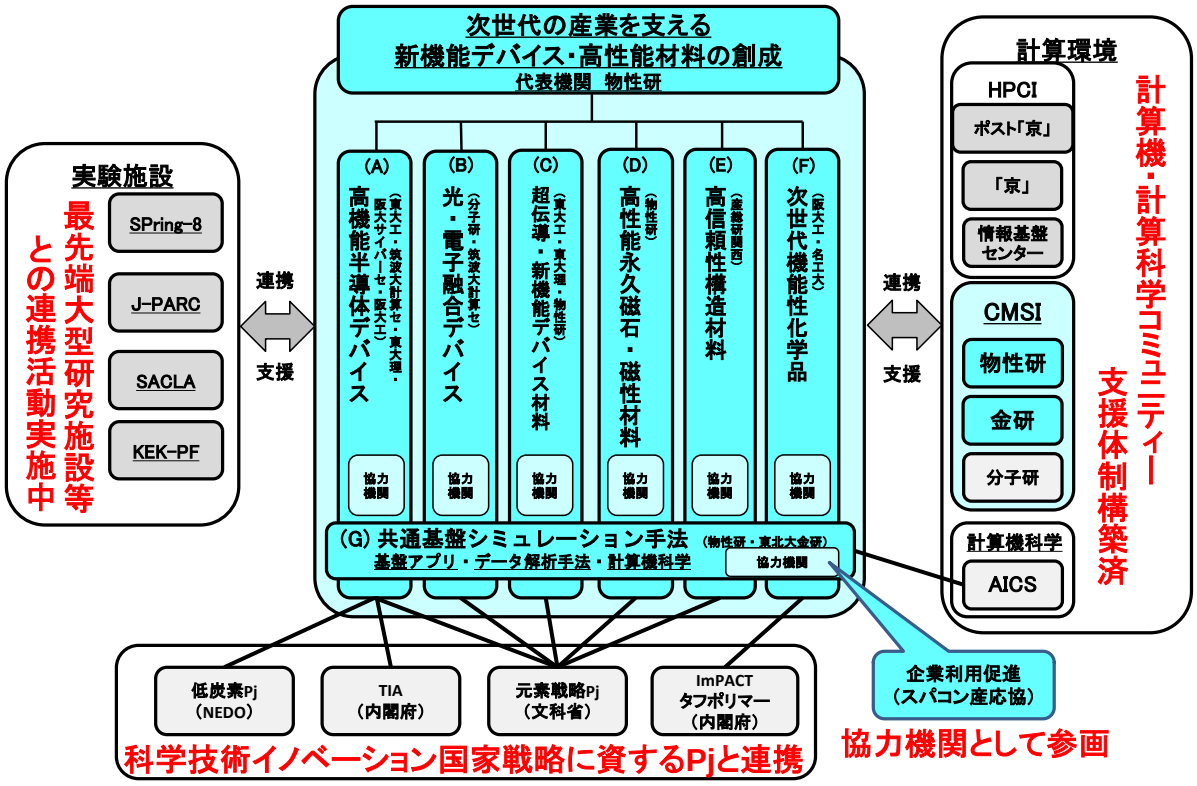


図１　本プロジェクトの実施体制（H27.3 時点）

（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。

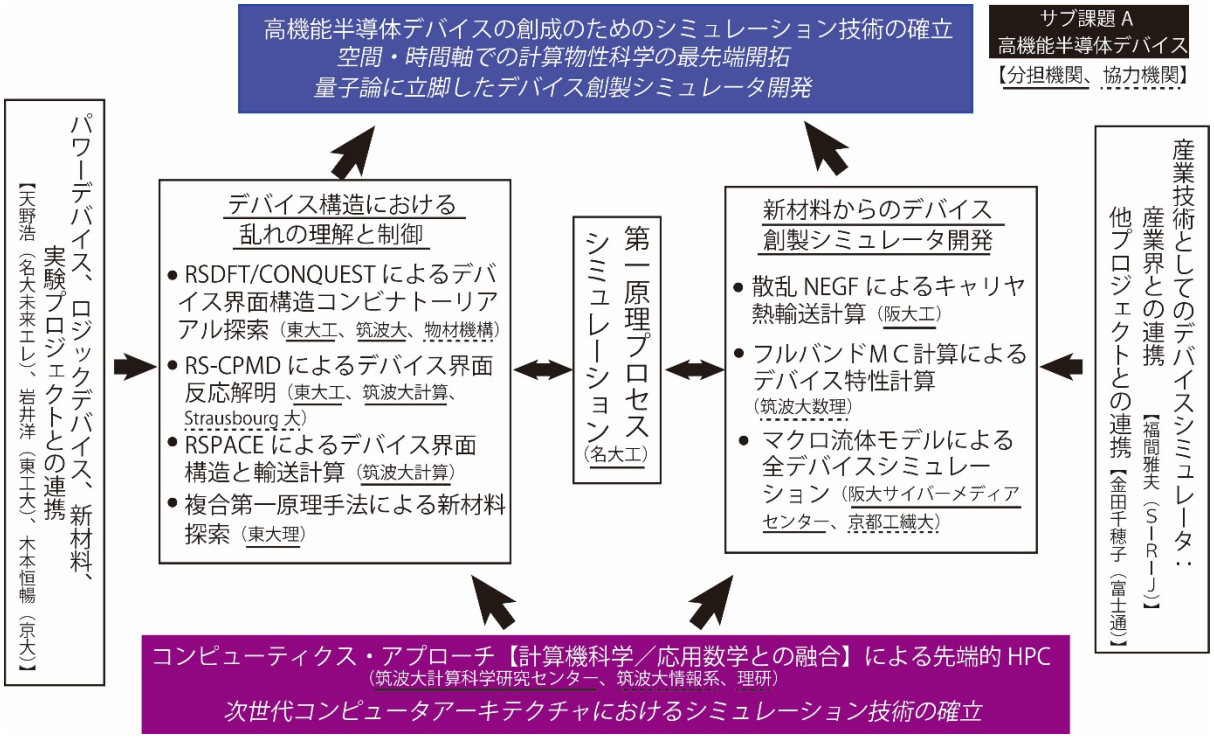
研究項目「新材料からの量子論デバイス創製シミュレータ開発」においては、非平衡グリーン関数法、フルバンド・モンテカルロ法、量子流体法を三本の軸として、研究項目①のアプリケーションと結合した、新たな量子シミュレータを構築する。分担機関である阪大サイバーメディアセンター（小田中紳二)、阪大工学研究科（森伸也、鎌倉良成)、協力機関である筑波大数理物質系（佐野伸行)、京都工繊大（廣木彰）は、上記三手法のデバイス・シミュレータコードを開発・応用してきており、JST-CREST プロジェクト「次世代エレクトロニクスデバイスの創出に資する革新材料・プロセス研究：原子論から始まる統合シミュレータの開発」等を通じ、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

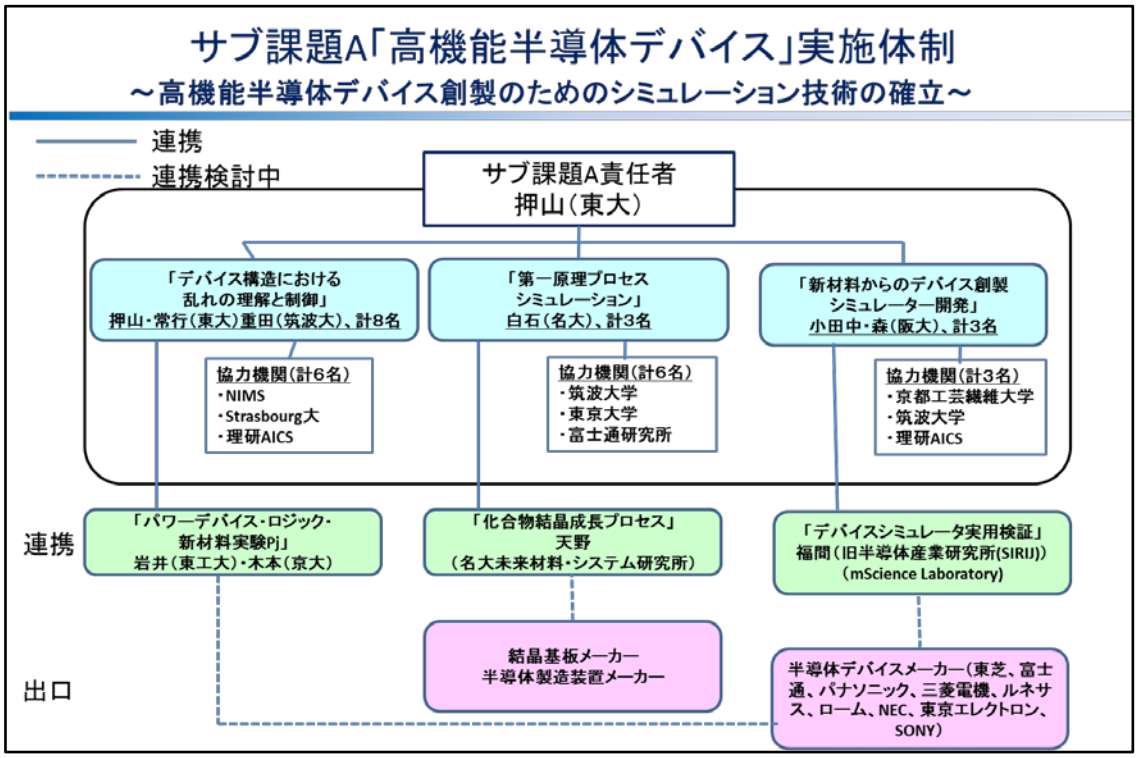
実験科学との共同においては、Si/Ge 系では東工大岩井洋教授グループとの連携を密にする。すでに同グループとは Si ナノワイヤーの RSDFT 計算とデバイス設計における共同研究があり、共著の論文として発表されている[Iwai, Shiraishi, Iwata, Oshiyama *et al.*, Science China - Information Sciences 54, 1004 (2011)]。また窒化物パワーデバイスでは名大天野浩教授グループとの連携、炭化珪素パワーデバイスでは京都大学木本恒暢教授グループからのアドバイスを受ける、天野教授および名城大学赤崎勇教授と、押山および白石は、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）

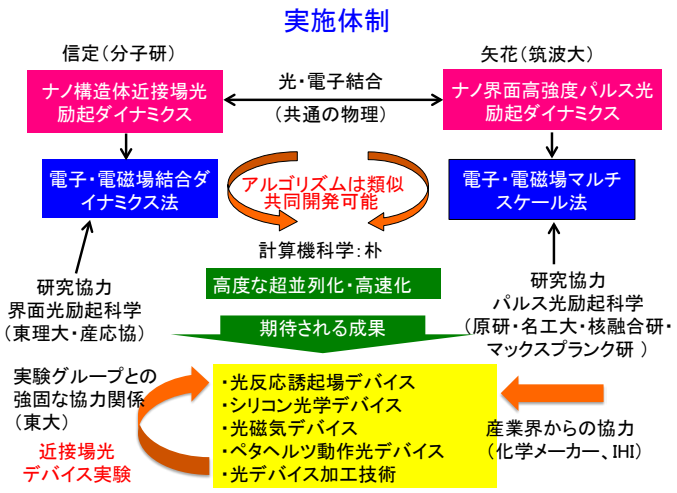
現状の「京」において、光・電子機能が真に発現し得る数 nm 以上のナノ構造体の光励起電子ダイナミクス第一原理計算を実行し、光・電子融合デバイスの基礎光物性には極めて重要な局在表面プラズモン共鳴のダイナミクスを解明した。実在系ナノ構造体における光励起では世界最大規模の第一原理計算である。しかし現状の「京」では、ナノ構造体やナノ界面の一部を切り出した部分系での理解に留まり、複数の異種物質から構成され、かつ周りの環境を含めた実在系ナノ構造体界面をターゲットにすることは困難である。ポスト「京」において初めて、実在系ナノ構造体界面の光励起電子ダイナミクスの第一原理計算を行い、光･電子動的機能を有するナノ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

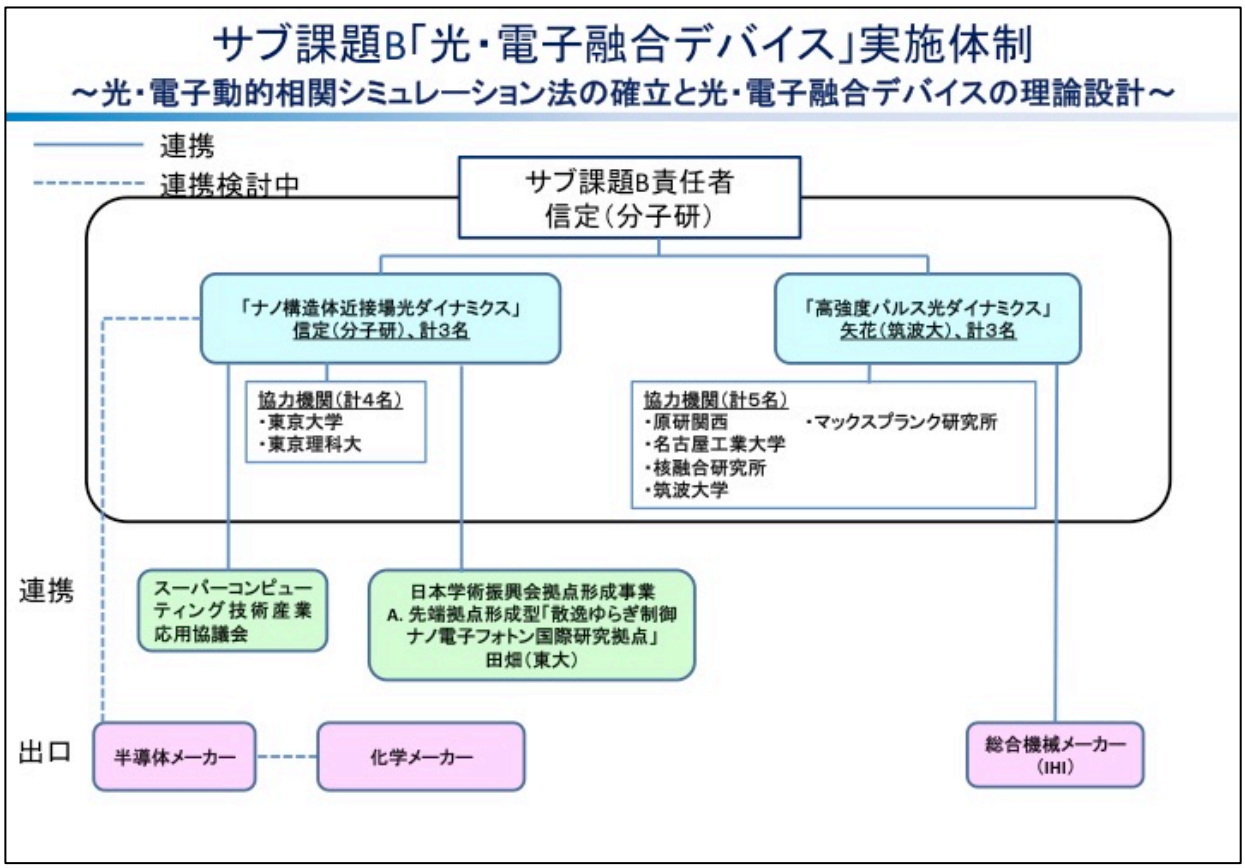
本サブ課題は、分子科学研究所と筑波大学の２つを実施機関として進める。分子科学研究所においては、主としてナノ構造体界面・表面を対象として光励起ダイナミクス、筑波大学においては、バルク界面･表面を対象として高強度パルス光励起ダイナミクスの研究を行う。実施する研究課題の基礎物理は共通しており、特に光と物質の相互作用をより厳密に理解することを主題としている。また、用いる計算手法は、時間依存密度汎関数理論に基づく実時



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］

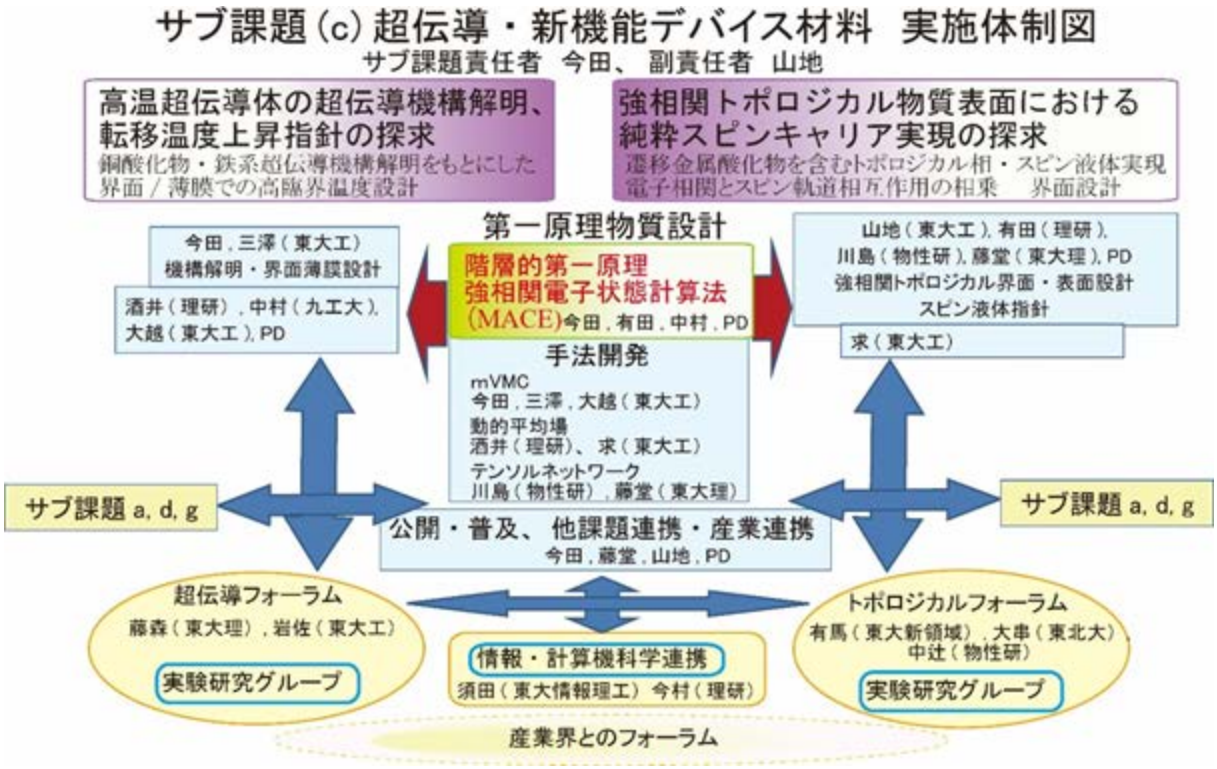
サブ課題Ｇとの連携でメタパッケージの整備、公開、普及が促進される。またここで開発する手法の応用をもとにサブ課題Ａとの連携で界面の電子状態解明に電子相関効果を取り入れる手法が開発されるとともに、界面電子状態解明のための汎用的パッケージが提供される。これをもとにデバイス・シミュレーションが進展し産業応用の可能性の追求に資する。Ｄとの連携によって永久磁石の高性能化に果たしうる電子相関の効果の役割を第一原理的に理解することが可能になり、新材料設計も貢献する。

（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

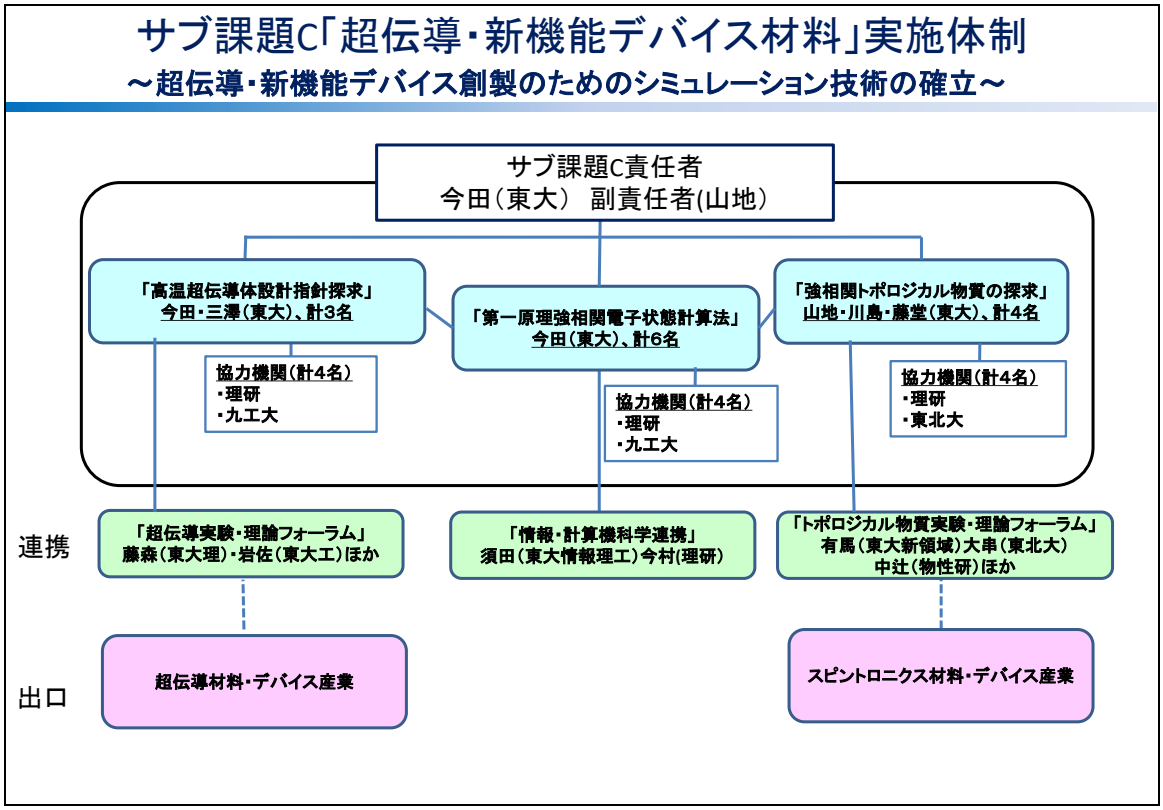
銅酸化物および鉄系高温超伝導体において主に超伝導を担うとされている２次元原子層一層における高精度計算が「京」によって可能となり、電子間クーロン相互作用が果たす役割が解明され論文が出版・公開されている。しかし、薄膜・界面を利用した超伝導転移温度上昇と界面電子状態の解明が鍵となるトポロジカル相の理論物質設計では、薄膜・界面における非周期構造がもたらす百から千倍程度の計算コスト増大が見込まれるため「京」では実施不可能であり、「京」の百倍の演算能力を持つポスト「京」の活用によって初めて可能となる。

（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。

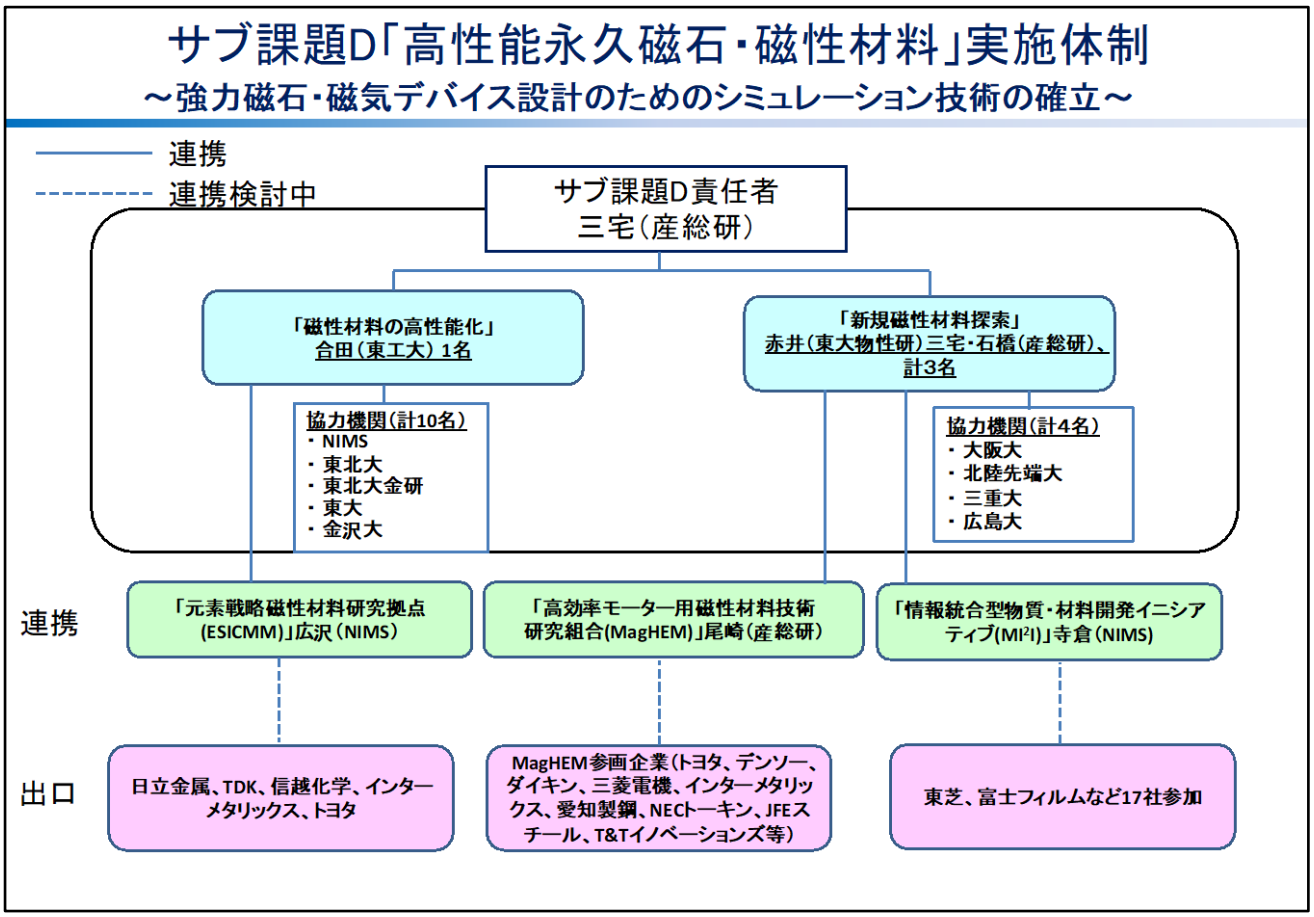
（４）「京」でできていること、ポスト「京」でなければできないこと

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：

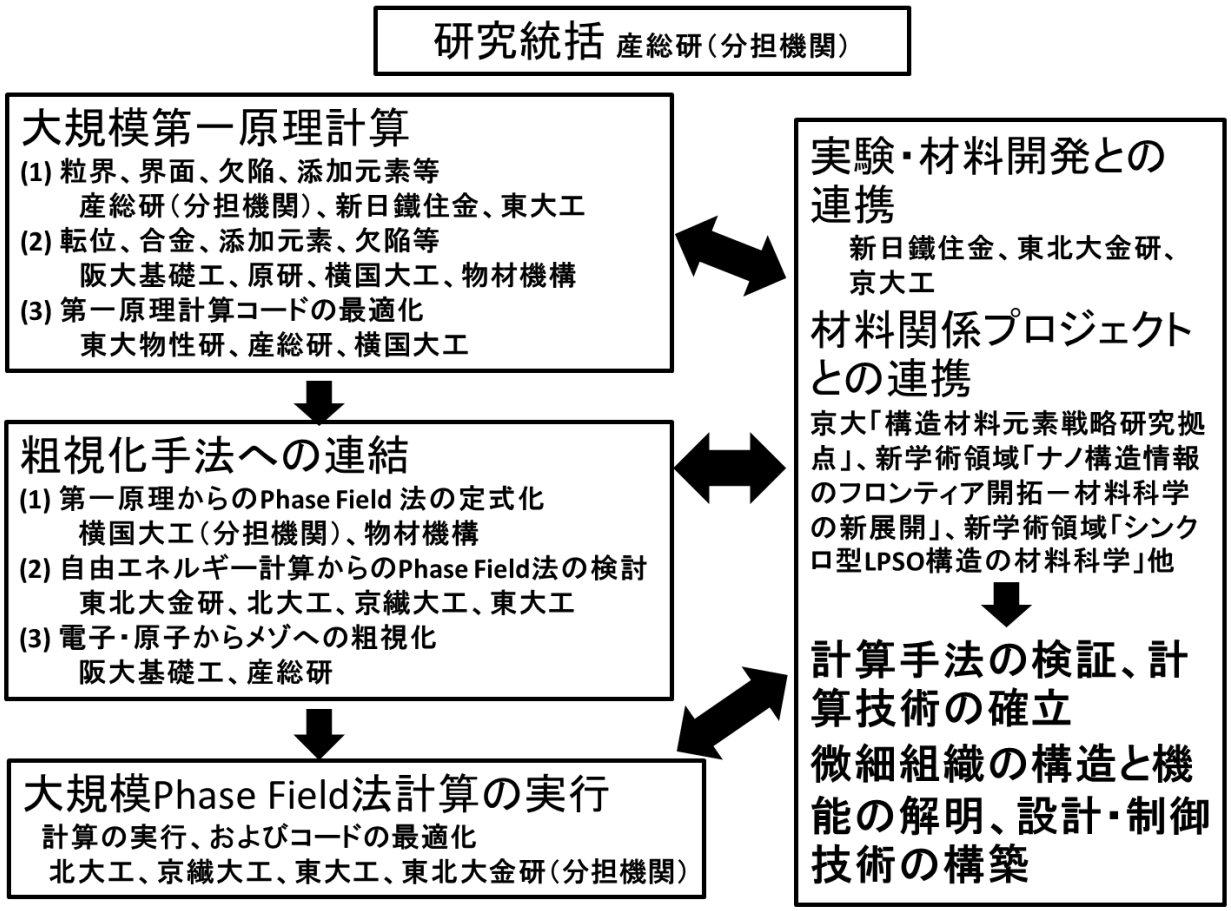
横国大工（分担機関）、物材機構、阪大基礎工、産総研、東北大金研、北大工、京繊大工、東大工が主に担当する。第一原理からのPhase Field法の定式化、自由エネルギー計算からの定式化、各種の方法論の検討を行う。この項目の取りまとめ（リーダー）は、横国大工（大野かおる）が担当する。

大規模Phase Field法計算の実行：

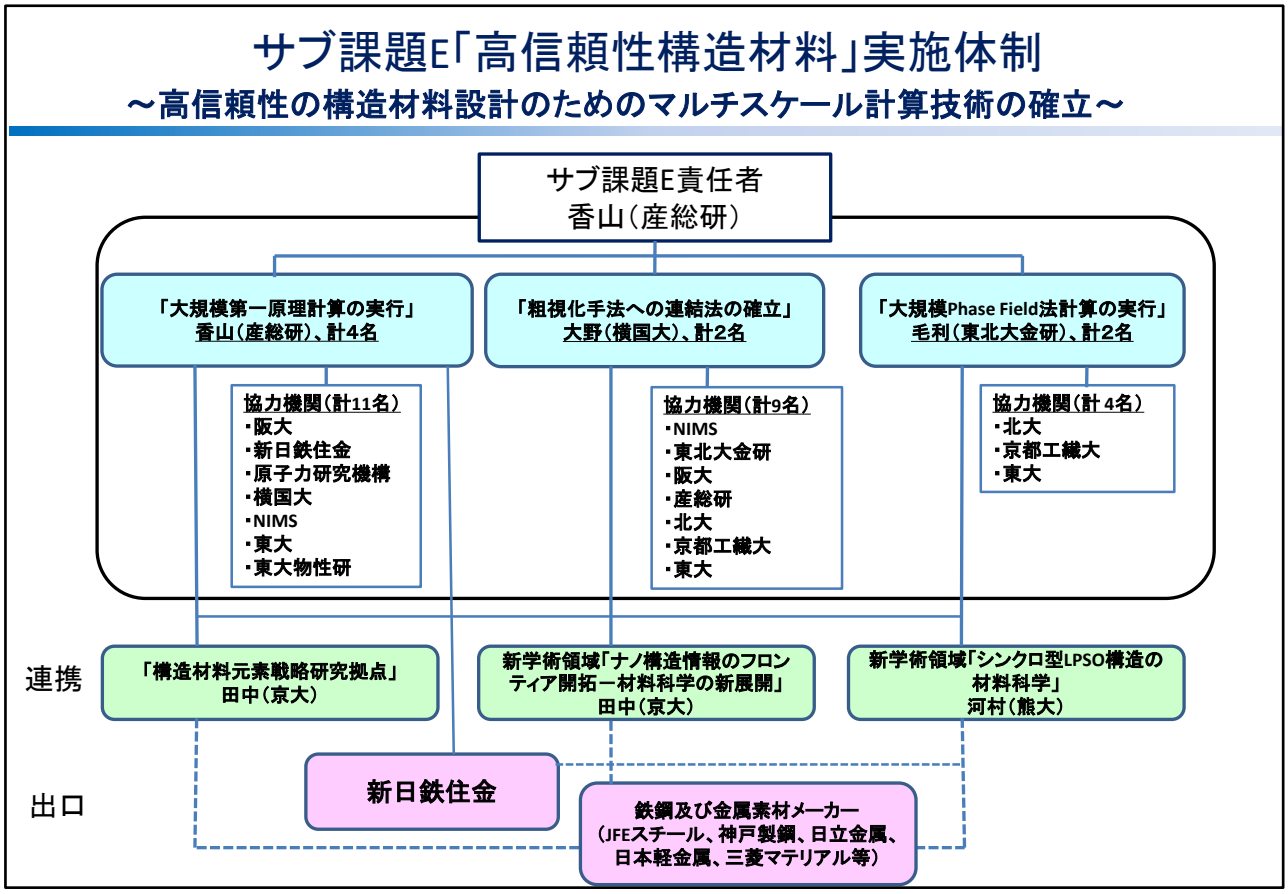
北大工、京繊大工、東大工、東北大金研（分担機関）が主に担当する。そのための効率的なコード開発もポスト「京」に向けて推進する。この項目の取りまとめ（リーダー）は、北大工（大野宗一）が担当する。

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。

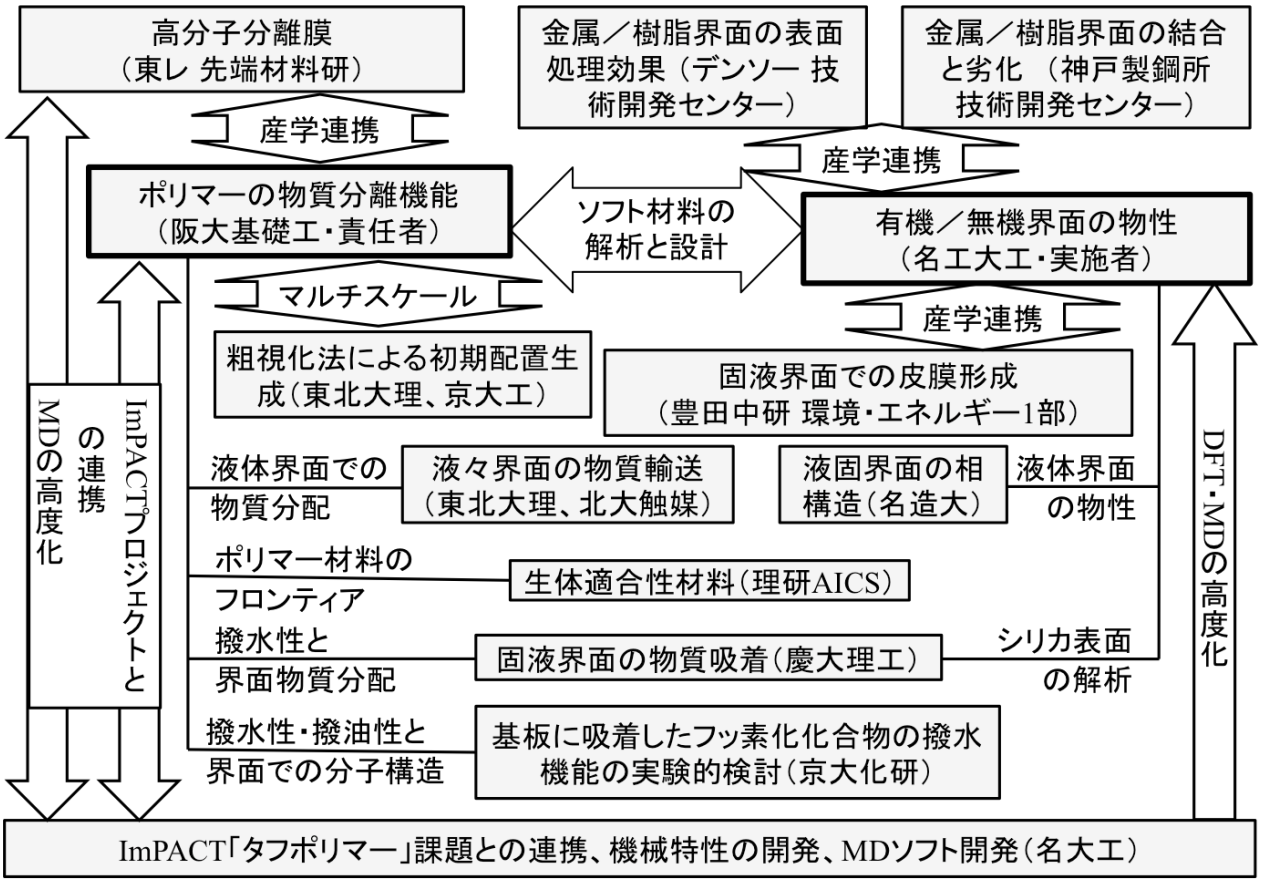
（４）「京」でできていること、ポスト「京」でなければできないこと

「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。

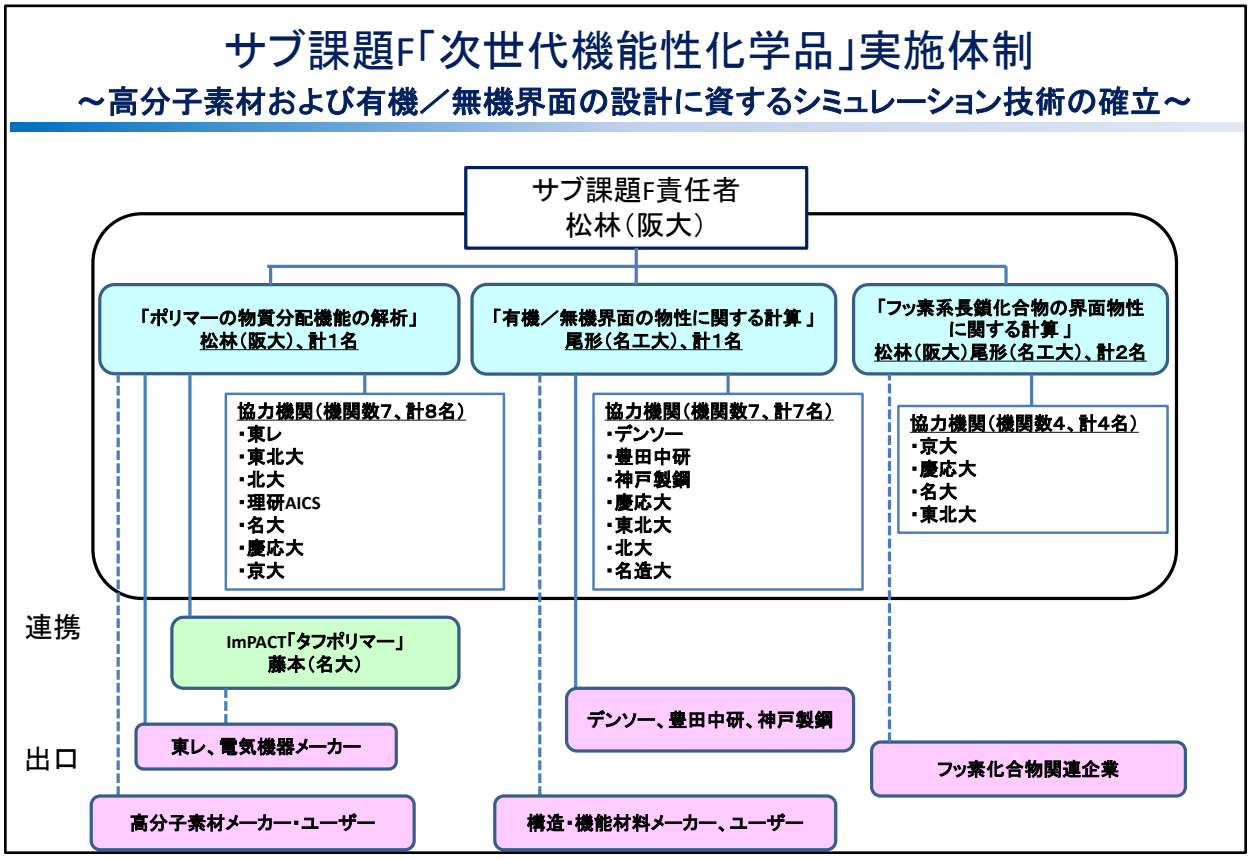
（５）実施体制

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

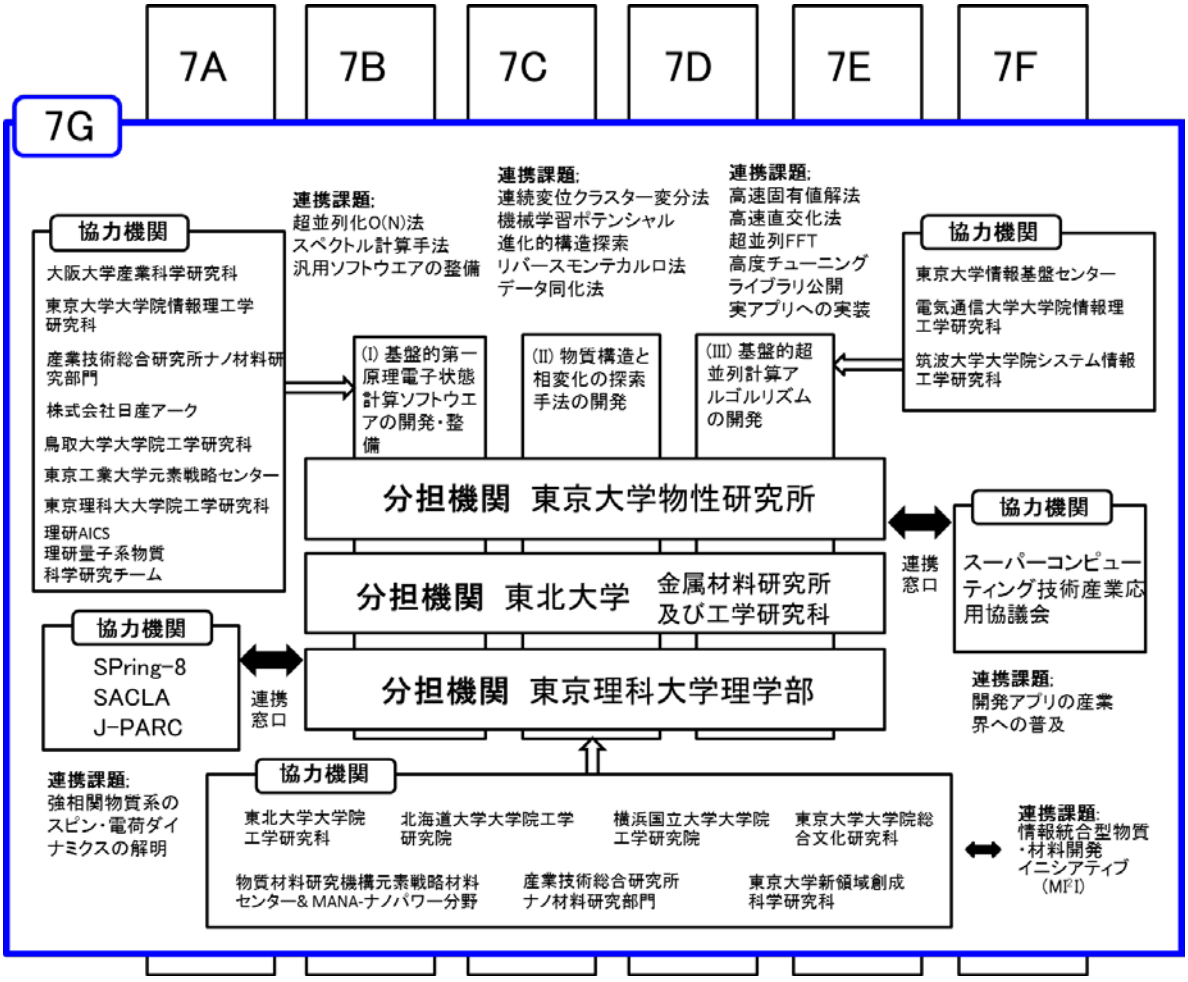
「京」上で汎用第一原理電子状態計算ソフトウェア OpenMX を用いて 4000 原子からなる系の鉄鋼材料の構造最適化が可能である。鉄鋼材料や磁石材料中の実材料に観測される複雑組織構造をモデル化するためには 5 万原子程度の取り扱いが必要となる。各原子の計算を MPI 並列化(5 万プロセス)し、さらに原子内のループを 10 スレッド並列する(計 50 万コア)ことで 1 週間程度で構造最適化が可能であると推定されるが、材料設計のためには同様な計算を繰り返し実施することが必要であるため、ポスト「京」が必要となる。また物質構造と相変化の探索手法を用いて網羅的な探索計算を実行するためはキャパシティ計算(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

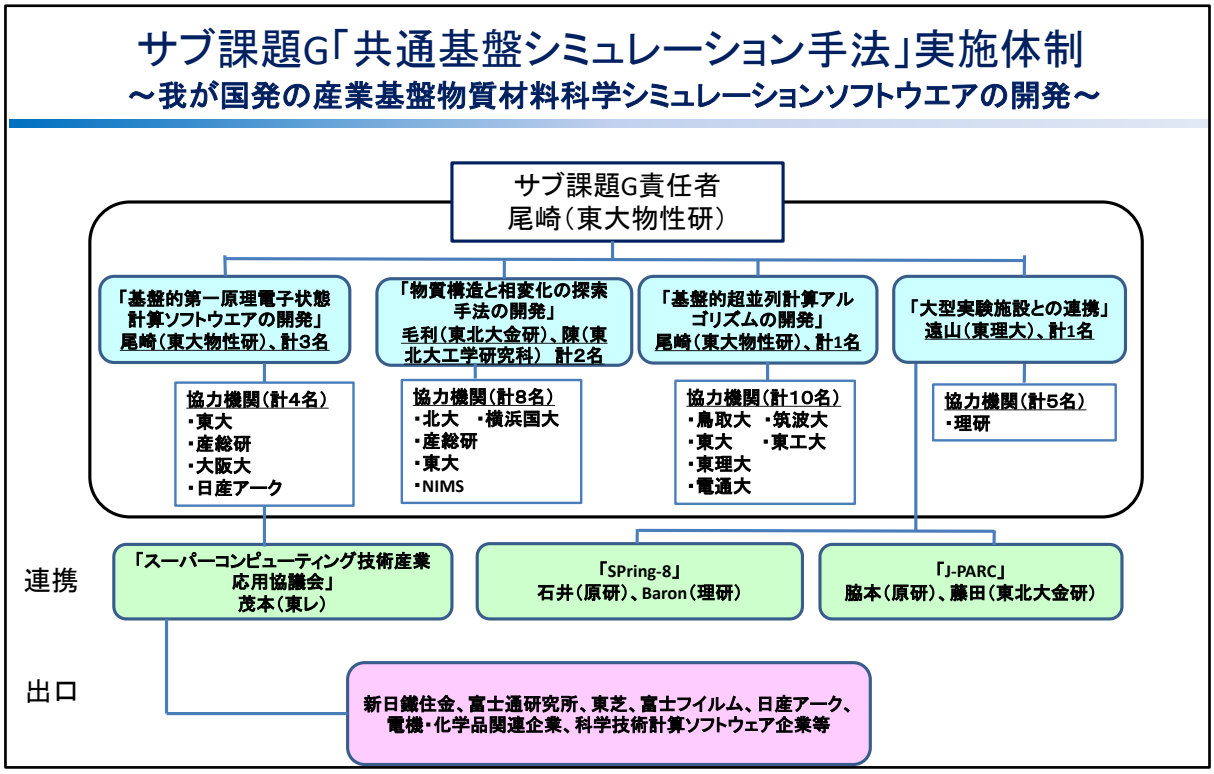
サブ課題 G の三つの共通基盤手法・ソフトウェアの開発・整備計画に対して、東京大学物性研究所は分担機関として「①基盤的第一原理電子状態計算ソフトウェアの開発・整備」と「③ 基盤的超並列計算アルゴルリズムの開発」を主に担当する。同機関はスーパーコンピューティング技術産業応用協議会（以下、産応協）との連携窓口を務め、ソフトウェアの産業界への普及活動にも共同で取り組む。サブ課題 D、E の課題解決に向けて、第一原理電子状態計算ソフトウェア OpenMX の開発を、またサブ課題 C の課題解決に向けて、他の協力機関との連携の下で第一原理電子状態計算ソフトウェア xTAPP の開発を進める。東北大学金属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

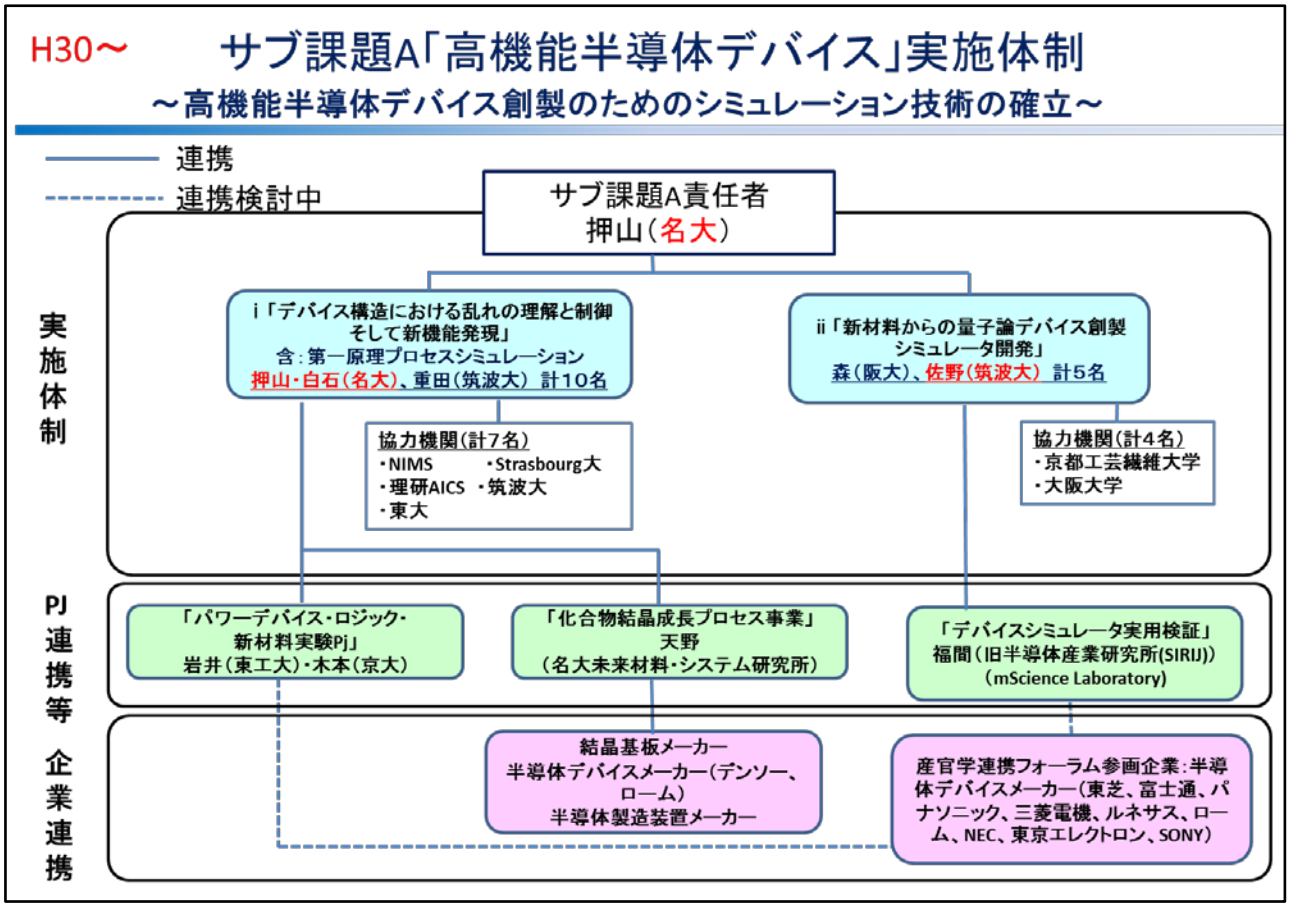
サブサブ課題「デバイス構造・・・」においては、RSDFT、RS-CPMD コードの開発と応用に関して、Strasboug 大学、筑波大に直接の連携をお願いし、また、計算機科学の側面で、理研 AICS、筑波大学からのサポートを受けている。また、実空間手法全般について NIMS、筑波大学と連携している。またエピタキシャル成長シミュレーションに関しては、名古屋大学天野浩グループと密接に共同し、実験データからのフィードバックにより、精密なシミュレーションを実現する。サブサブ課題「新材料から・・・」においては、FBMC、QHD コードの開発と応用に関して、京都工芸繊維大学、筑波大学に直接の連携をお願いし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

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

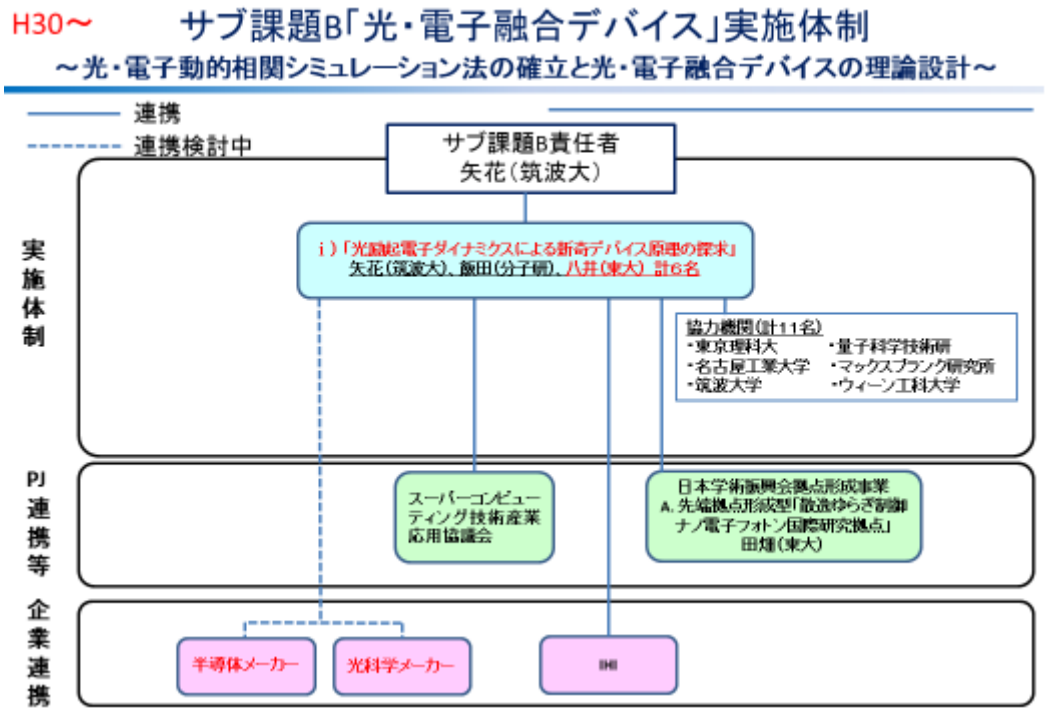
八井准教授（東京大学））実験グループとの共同で近接場光励起デバイスの開発を進めており、2018 年度から八井氏を課題実施者に加える。スウェーデン KTH と導波路設計の共同研究を進めている。朴泰佑教授（筑波大学）のグループとの密接な連携により、Xeon-Phi などの最新のアーキテクチャに基づくプロセッサにおいて効率的な計算が可能となるようコードのチューニングを進めている。マックスプランク研とアト秒光科学に関する共同研究を進めている。ウィーン工科大と高次高調波の物質中の伝播に関する共同研究を進めている。

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

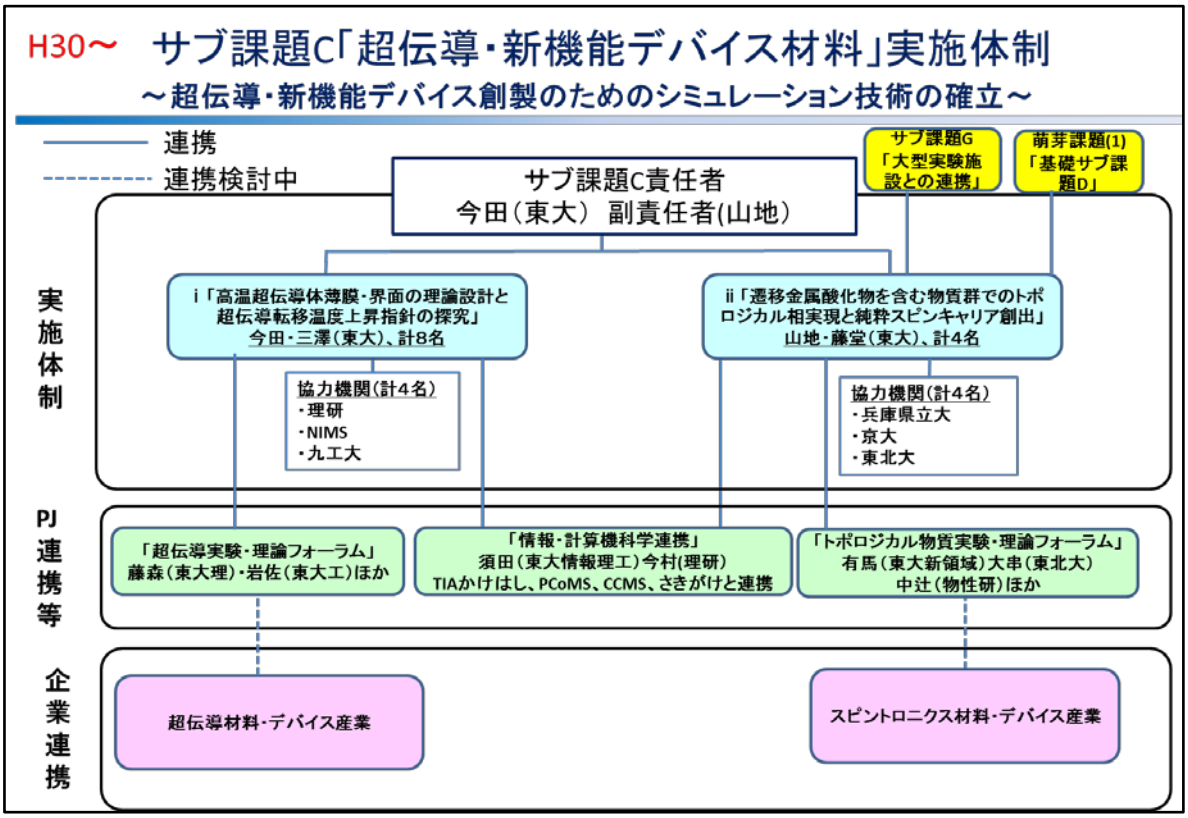
物性研ソフト高度化プロジェクトに加わり連携している。協力機関の実験研究室と共同研究・連携を進めている。

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

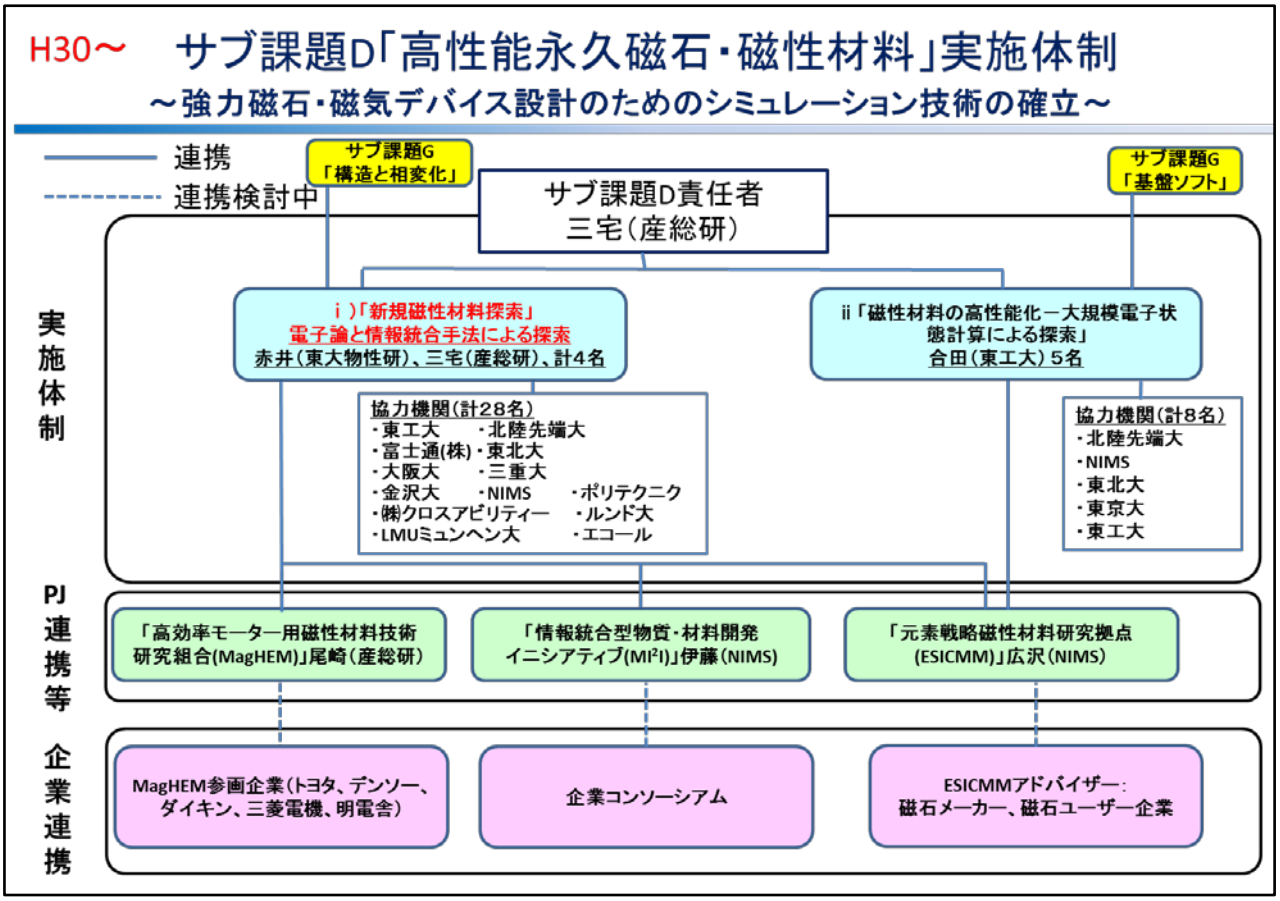
磁石、磁性の問題は、第一原理計算による構造と磁性の計算のみならず、磁化反転シミュレーション、電子相関やスピン軌道相互作用に関する理論整備など、総合的な理論計算手法が必要である。原子論的 LLG（東京大、NIMS、東北大）、および連続体 LLG（富士通、NIMS）の磁化反転シミュレーション、表面・界面の相対論的第一原理計算（北陸先端大、金沢大）、beyond LDA の高精度第一原理計算の手法開発と磁性への応用（ルンド大、エコール・ポリテクニク、LMU ミュンヘン）などの課題を協力機関と連携している。また、磁気デバイスやスピントロニクス等の課題の推進について大阪大、東北大、三重大、金沢大に協力を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

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

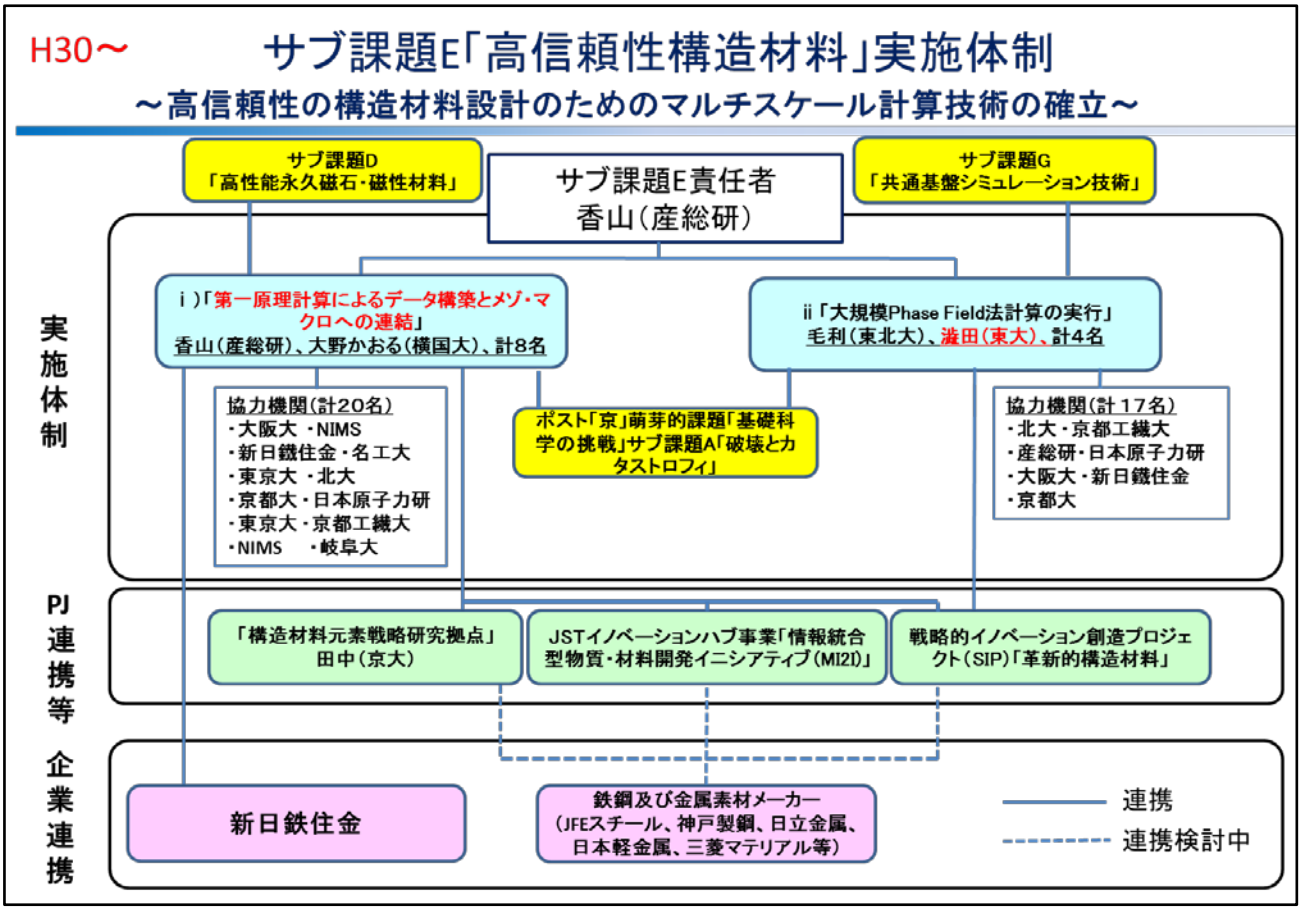
ｉ）第一原理計算によるデータ構築とメゾ・マクロへの連結（産総研、横国大）は、阪大基礎工、NIMS、新日鉄住金、名工大等と緊密に連携して進めている。ⅱ） 大規模 Phase Field 法計算の実行（東北大金研、東大）は、北大、京都工繊大等と特に緊密に連携して進めている。

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。

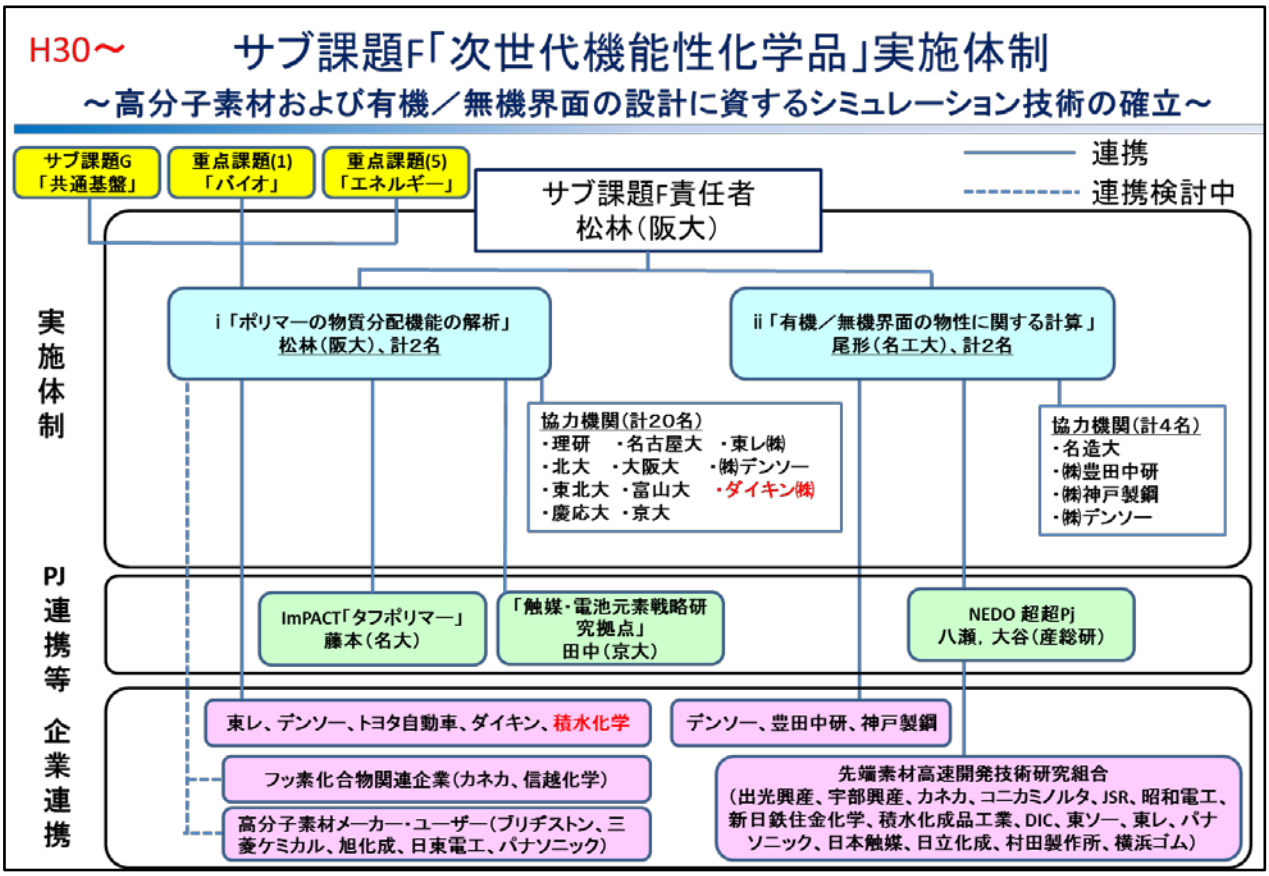
ⅲ）Pj 間連携、フォーラム連携、分野振興活動等

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

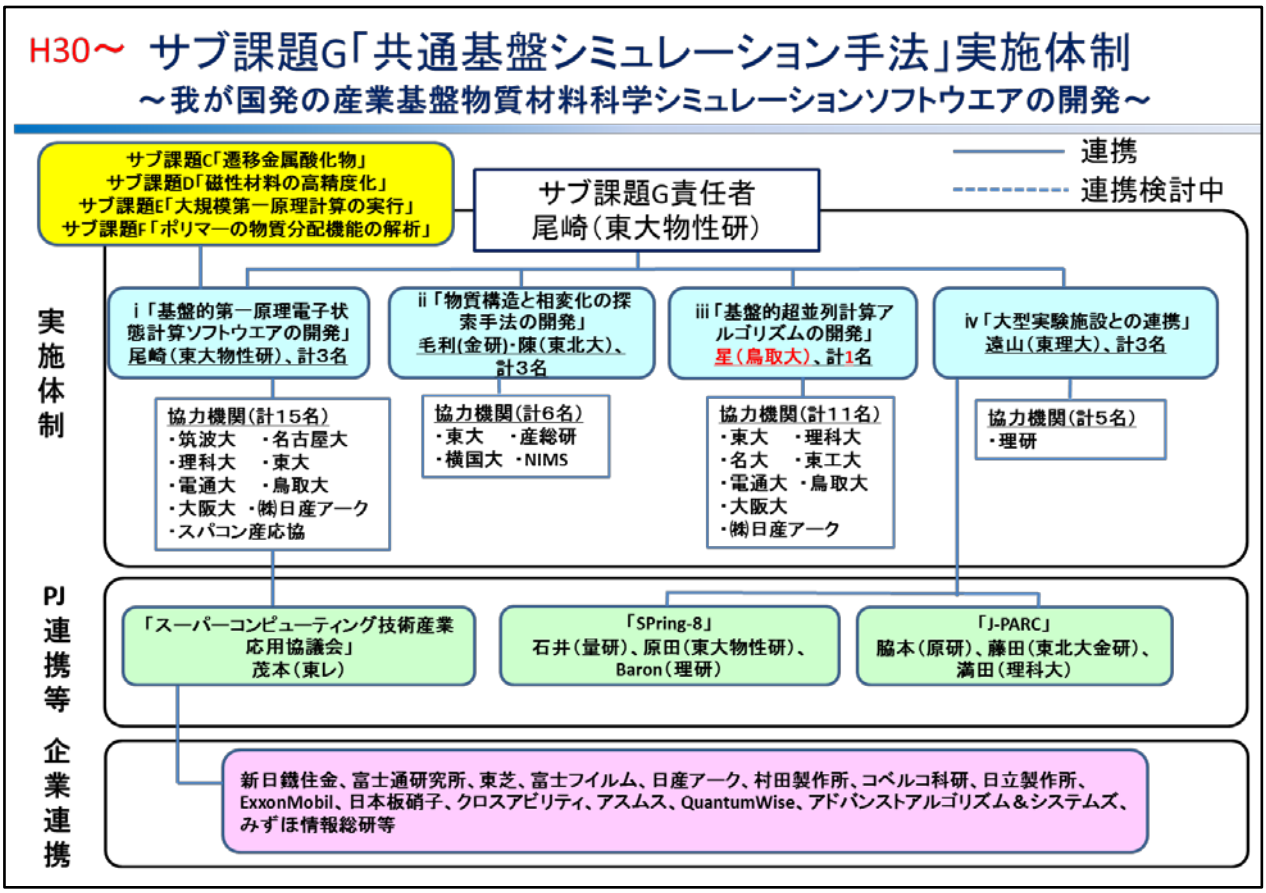
める。

(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。

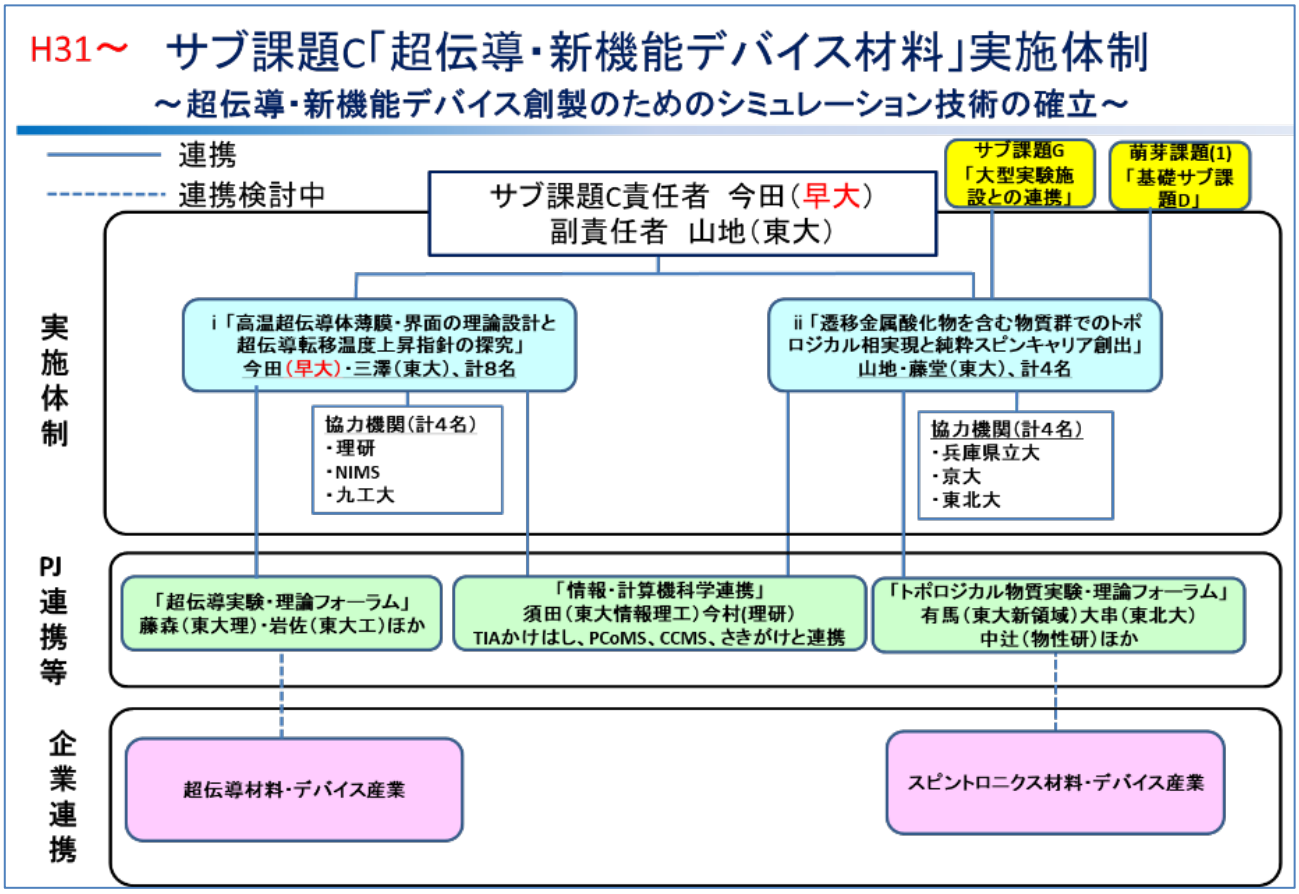
５．平成 30 年度、および、31 年度からの実施体制変更

（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。)

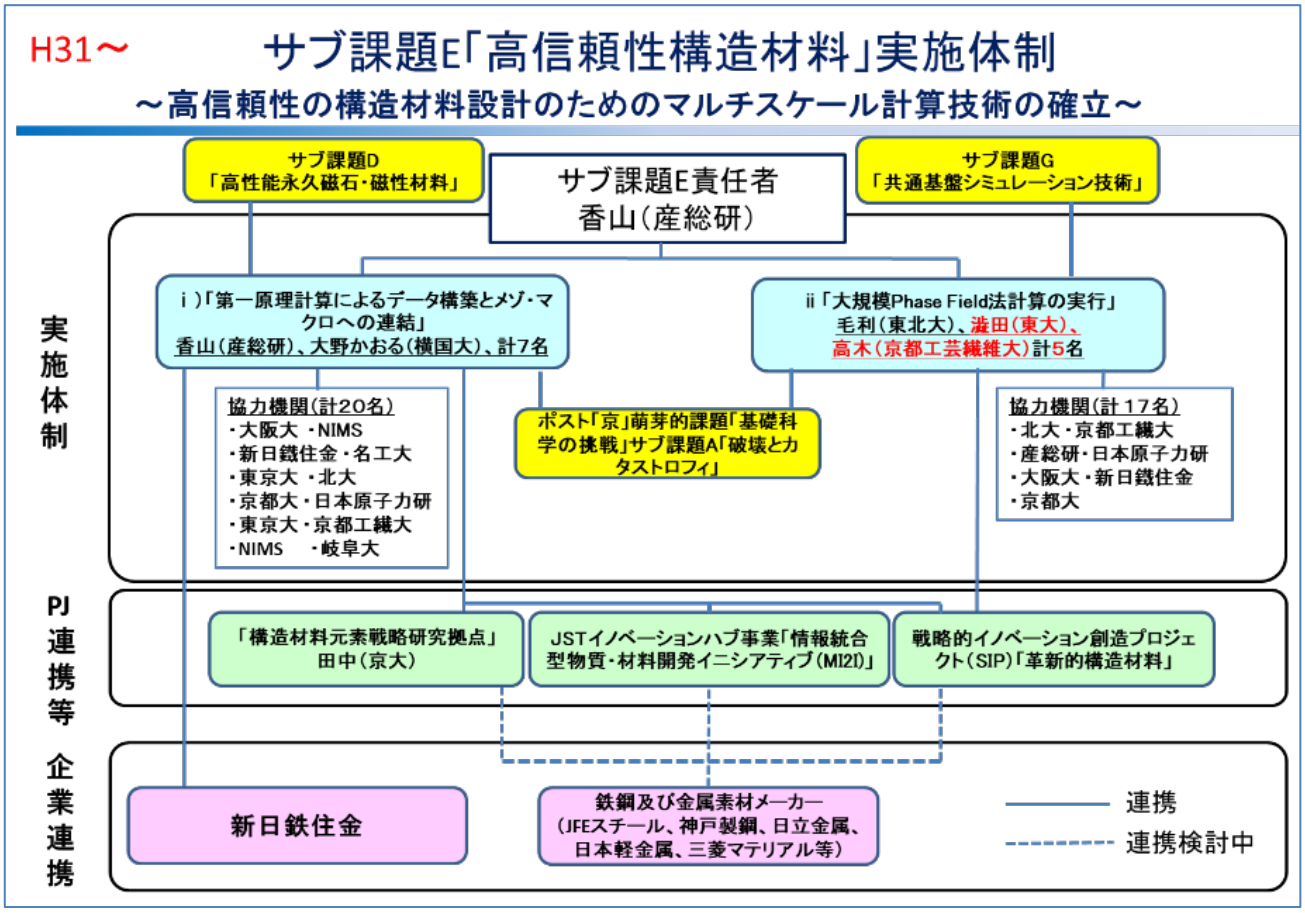
（２）サブ課題Ｃ「超伝導・新機能デバイス材料」の実施体制変更

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年度のみ）
	3	東北大学	協力機関（31年度のみ）
	66	神戸大学	協力機関（31年度のみ）
	2	北海道大学	協力機関（31年度のみ）
	67	大阪工業大学	協力機関（31年度のみ）
	50	Harvard大学	協力機関（31年度のみ）
	~~53~~	~~University of Illinois at Urbana-Champaign~~	協力機関（30年度のみ）
	68	Forschungszentrum Jülich	協力機関（31年度のみ）
追	16	金沢大学	協力機関（31年度のみ）
追	71	富士電機株式会社	協力機関（31年度のみ）
追	72	株式会社ニューフレアテクノロジー	協力機関（31年度のみ）
追	73	University of Toronto	協力機関（31年度のみ）
	79	早稲田大学	協力機関（31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）
追	66	神戸大学	協力機関（31年度のみ）
追	28	Max Planck Institute of Quantum Optics	協力機関（31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
	69	上智大学	協力機関（31年度のみ）
	40	富士通株式会社	協力機関（31年度のみ）
	~~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）

（別紙1） 実施機関一覧

別添2

		実施機関	備考
	51	Simons Foundation	協力機関（31年度のみ）
追	74	Shanghai Jiaotong University	協力機関（31年度のみ）
追	75	University of Kentucky	協力機関（31年度のみ）
	88	近畿大学	協力機関（31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、31年度）
	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
	70	Johannes Kepler University Linz	協力機関（31年度のみ）
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⇒日本製鉄株式会社	協力機関
	41	日鉄住金総研株式会社⇒日鉄総研株式会社	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～）
	79	早稲田大学	協力機関（30年度～）
追	76	株式会社日立製作所	協力機関（31年度のみ）

（別紙1） 実施機関一覧

別添2

		実施機関	備考
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)
追	61	高エネルギー加速器研究機構	協力機関(30年度～)
	~~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)
	17	北陸先端大学大学院大学	協力機関(31年度のみ)
追	77	情報・システム研究機構	協力機関(31年度のみ)
追	49	アドバンスソフト株式会社	協力機関(31年度のみ)
追	78	株式会社アカデメイア	協力機関(31年度のみ)
追	79	早稲田大学　他	協力機関(31年度のみ)
追	80	住友化学株式会社	協力機関(31年度のみ)
追	81	自然科学研究機構　他	協力機関(31年度のみ)
追	82	山形大学	協力機関(31年度のみ)
追	83	高度情報科学技術研究機構	協力機関(31年度のみ)
追	84	中央大学	協力機関(31年度のみ)
追	85	学芸大学	協力機関(31年度のみ)
追	22	兵庫県立大学	協力機関(31年度のみ)
追	3	東北大学	協力機関(31年度のみ)
追	86	量子科学技術研究開発機構	協力機関(31年度のみ)
追	87	The University of Warsaw	協力機関(31年度のみ)
追	28	Max Planck Institut für Eisenforschung GmbH	協力機関(31年度のみ)
	89	Tamkang University	協力機関(31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	
		物質・材料研究機構	(28年まで)
		東北大学	(29年度～30年度4月まで)
		旭硝子	(28年度～30年度10月まで)
		ロンドン大学	(30年度10月～)
		エムサイエンス研究所	
		岡山大学	

（*協力機関は部局・部署名を省いて表示）
全体シンポでの招待講演者のみの有識者の所属機関は除く

H30年度協力機関　計52
H31年度協力機関　計79