

戦略的創造研究推進事業 CREST
研究領域「シミュレーション技術の革新と
実用化基盤の構築」
研究課題「複合手法を用いた電子構造計算技術の
開発」

研究終了報告書

研究期間 平成16年10月～平成22年3月

研究代表者: 藤原 毅夫
(東京大学大学総合教育研究センター、
特任教授)

§ 1 研究実施の概要

本研究課題では、「強い電子間相互作用のある系に対する第一原理電子構造計算手法の開発」および、「大規模系に対する(第一原理)量子力学に立脚した分子動力学手法の開発」を目的とした。これらは相互に大規模行列の数理的取扱いが重要であるという点で共通していると考え、同じグループとして立案した。研究の過程で、大規模系に対して開発した大規模線形方程式解法(Shifted COCG 法)を強相関多体電子系のスペクトルを求めることに応用し、「軌道縮退のある一般化ハバードモデル」という新しい系を取り扱うことに成功した。

「強い電子間相互作用のある系に対する第一原理電子構造計算手法の開発」では、新しく LSDA+U 法から出発する GW 法(U+GWA)を開発し、また LSDA+DMFT, LSDA+Cluster DMFT, Hedin 方程式の一般化、GWA+DMFT など新しい計算手法を多く開発した。GW 近似を拡張し、自己エネルギーの非対角成分を取り入れることも試みているが、計算時間、メモリの観点から、一般的に適用できる段階ではない。また第一原理電子構造計算から Down-Folding により、遮蔽されたクーロン相互作用を解析する新たな手法を開発した。また遮蔽されたクーロン積分が、遷移金属では大きくエネルギー(遮蔽に寄与する電子の励起エネルギーに依存することを一般的に示すことができた。これらのことは通常議論される静的極限の遮蔽されたクーロン相互作用という量を知るだけでは十分でないことを意味している。第一原理電子構造計算の結果から、Most localized Wannier States を構成し、それらの軌道に対してハミルトニアンをマップする手法も開発した。これらの方法を総合的に駆使することにより、これまでではできなかった強い電子間相互作用を持つ系の研究に対して多くの新しい計算手法を加えることができた。

具体的な対象系としては Fe, Ni などの 3d 遷移金属、エントロピー起動による Ce の α - γ 転移、 V_2O_3 , V_2O , NiO, MnO, などの遷移金属酸化物、ペロブスカイト構造遷移金属酸化物 $LaMO_3$ ($M=Ti\sim Cu$) など多岐に及ぶ。求められる物理量は、励起スペクトル、準粒子バンド、自己エネルギー、グリーン関数、誘電関数、遮蔽されたクーロン相互作用などである。

「大規模系に対する(第一原理)量子力学に立脚した分子動力学手法の開発」では、東京大学ではタイトバインディングハミルトニアンに基づく量子 MD 計算法を中心に、新しい数値手法、数値アルゴリズムの重要性に注目し、種々のクリロフ部分空間法(クリロフ部分空間対角化法、Shifted COCG 法、Seed-Switching 法など)を開発した。また現在、進行中ではあるが、これらのクリロフ部分空間法はより一般的な一般化固有値問題の形式(重なり積分のある系)に対しても拡張が可能であることが、すでに示されておりプログラムに組み込むことを行っている。これらは凝縮系、周期系はもとより、液体系にも適用可能である。使用するハミルトニアンは、第一原理計算から求められるもの(ワニエ軌道、NRL ハミルトニアン等)のほか、Atomic Superposition Electron Delocalization 法を基礎としたものもすでにできており、今後、水溶液系などを対象にすることを念頭に置いている。

一方、北陸先端大では、第一原理 LDA ハミルトニアンに対し、分割統治法を基本に、クリロフ部分空間の特徴をとらえ、安定性と数値収束性に優れた手法を開発した。また基底関数の選択に対して最適手法を種々検討し、凝縮系ばかりでなく、クラスター、有機化合物、生体高分子などを対象にすることができる。これらの手法は、スピン軌道相互作用、ノンコリニアスピンを取り扱う制約条件付密度汎関数法を開発して、マルチフェロイクスの問題を取り扱うことができるよう拡張されている。またこれらのプログラムは OPEN MX として公開されている。

東大グループおよび北陸先端大グループの二つの手法は互いに相補的であるが、現在の段階では具体的にそれぞれの精度や収束性、あるいはより緊密な接合は、残念ながら実行するには至っていない。具体的な対象系としては、半導体の亀裂伝搬と表面再構成、金 Multishell Helical Nanowire、単一分子磁性体 Mn_4 , Mn_{12} 、分子磁性体 $V_n(C_6H_6)_{n+1}$ 、新規シリコンナノワイヤーの電子構造など多岐にわたる。

§ 2 研究構想

(1) 当初の研究構想

「強い電子間相互作用のある系に対する第一原理電子構造計算手法の開発」では研究開始時の基本方針は『1電子バンド描像と多電子描像を融合した第一原理電子構造シミュレーション技術の確立』であり、現実的物質に適用することを目指した。これらの目標に対して、GW近似、LDA+DMFT、GW+DMFTなどを順次開発しながら、具体的な系としてなるべく多くの物質系を対象とすることを計画した。

「大規模系に対する(第一原理)量子力学に立脚した分子動力学手法の開発」では、研究開始時の基本方針は『 $10^4 \sim 10^7$ 原子系、 $10 \sim 100\text{nm}$ の系で金属系、半導体系を問わず一般的に適用できる方法の開発』を目指した。当初の方針は第一原理計算からタイトバインディングハミルトニアンへのマッピング手法の確立と量子力学的ハイブリッド法の利用であり、またOpenMXの完成であった。

(2) 新たに追加・修正など変更した研究構想

「強い電子間相互作用のある系に対する第一原理電子構造計算手法の開発」では、当初の目標をほぼ計画通りのペースで忠実に追い、目標を達成することができた。また当初、予定していなかったU+GWAを開発し、 LaMO_3 系まで計算を実行することができ、あるいは MnO 、 NiO に対して大変良いGW近似の結果を得ることができた。またその過程で、酸素のp準位のエネルギー位置を正しく得ることの困難という第一原理計算の原理的問題点が明らかになった。またHedin方程式の一般化は、今後のマルチフェロイックス系に対するGW近似などを行う上で大きな第一歩となると考えている。U+GWAのプログラムパッケージは公開することを目指している。

「大規模系に対する(第一原理)量子力学に立脚した分子動力学手法の開発」では、当初の方針である、第一原理計算からタイトバインディングハミルトニアンへのマッピング手法の確立は困難であること、量子力学的ハイブリッド法の利用は期待するほどのメリットが得られないことから方針を変更し、新しい数値手法の開発に、グループの多くのエネルギーを注ぎ、また新たなメンバーの参加を仰いだ。その結果、Shifted COCGおよびSeed-Switchingの手法を開発することができた。これは反復解法といわれるものであり、反復回数を重ねれば数値誤差を別として、必ず正しい解にいきつくこと、また計算途中で正しい解に対する誤差の見積もりをすることができるという優れた方法である。標準固有値問題 $((A-E)x=b)$ に対する解析は完成しているが、一般化固有値問題に関しては $(A-ES)x=b)$ に対しては、手法が出来上がったが、解析はこれからであり、研究期間中に完成するかどうかは何とも言えないのは残念である。これらの成果に関してはELSES研究会という産学の組織を作り、今後も産(官)学の協力を進めることになっている。この研究会には国内国外の企業大学等15以上の組織に属する研究者が参加している。

OpenMxは、クリロフ部分空間法を用いることにより、分割統治法が安定に収束させることができ、精度も向上した。また制約条件付密度汎関数法を開発したことにより、スピン軌道相互作用、ノンコリニアスピンなどに適用可能となり、機能も一段と向上した。多くの協力者を得て、プログラム開発も順調に進んでおり、プログラム公開も進んでおり、計算プログラムとして評価も高い。

§ 3 研究実施体制

(1)「東京大学」グループ

① 研究参加者

| | 氏名 | 所属 | 役職 | 参加時期 |
|---|--------|----------------------------|-----------|--------------|
| ○ | 藤原 毅夫 | 東京大学 大学総合教育 研究センター | 特任教授 | H16.10～H22.3 |
| | 星 健夫 | 鳥取大学大学院工学研究 科機械宇宙工学専攻 | 准教授 | H16.10～H22.3 |
| | 尾崎 泰助 | 北陸先端科学技術大学院 大学先端融合領域研究院 | 准教授 | H20.4～H22.3 |
| | 山元 進 | 東京大学工学系研究科 物理工学専攻 | 助手 | H16.10～H19.3 |
| | | 東京大学 大学総合教育 研究センター | CREST 研究員 | H19.4～H20.3 |
| | | 東京大学 大学総合教育 研究センター | 特任研究員 | H20.4～H20.8 |
| | | 東京工科大学コンピュータ サイエンス学部 | 講師 | H20.9～H22.3 |
| | 三浦 沖 | 東京大学工学系研究科 物理工学専攻 | 博士課程 | H16.10～H19.4 |
| | | 東京大学 大学総合教育 研究センター | リサーチフェロー | H19.4～H19.5 |
| | | 東京大学 大学総合教育 研究センター | CREST 研究員 | H19.6～H20.3 |
| | | 東京大学 大学総合教育 研究センター | 特任研究員 | H20.4～H22.3 |
| | 西野 信也 | 東京大学 大学総合教育 研究センター | 特任研究員 | H21.4～H22.3 |
| | 藤 宏輝 | 東京大学 大学総合教育 研究センター | 特任研究員 | H21.8～H22.3 |
| | 戸川 久美子 | 東京大学 大学総合教育 研究センター | 研究補助員 | H20.4～H22.3 |
| | 張 紹良 | 名古屋大学 大学院工学 研究科 計算理工学専攻 | 教授 | H21.4～H22.3 |
| | 曾我部 知広 | 愛知県立大学情報科学部 | 准教授 | H21.4～H22.3 |
| | 田中 宏志 | 島根大学総合理工学部 物質科学科 | 准教授 | H21.4～H22.3 |
| | 豊田 雅之 | 北陸先端科学技術大学院 大学先端融合領域研究院 | 研究員 | H21.4～H22.3 |
| | 野原 善郎 | 東京大学 大学総合教育 研究センター | 特任研究員 | H16.10～H20.9 |
| | 江川 純子 | 東京大学 大学総合教育 研究センター | 研究補助員 | H18.4～H20.3 |
| | 井口 雄介 | 東京大学工学系研究科 物理工学専攻 | 博士課程 | H16.10～H19.3 |
| | | 東京大学工学系研究科 物理工学専攻 | 研究補助員 | H18.4～H19.3 |

| | | | | |
|--|---------------------------|----------------------|-----------|--------------|
| | 張 爽 | 東京大学工学系研究科 物理工学専攻 | CREST 研究員 | H16.10～H19.3 |
| | 品岡 寛 | 東京大学工学系研究科 物理工学専攻 | 修士課程 | H16.10～H18.3 |
| | 石井 衣織 | 東京大学工学系研究科 物理工学専攻 | 研究補助員 | H16.12～H18.3 |
| | Svjetlana Mulaomerovic | 東京大学工学系研究科 物理工学専攻 | CREST 研究員 | H17.7～H17.11 |

②研究項目

東京大学

- a. LSDA+Uから出発したGW近似(U+GWA)の開発とNiO, MnO, V₂O₃, LaMO₃(M=Ti~Cu)への応用
- b. LSDA+DMFT法の開発とNi, Fe, NiOへの応用
- c. LSDA+cluster-DMFT法 とNiOへの応用
- d. 新しい超大規模行列の解法と軌道縮退のある一般化ハバードモデルへの応用
- e. 一般化ワニエ表示を用いた大規模系MD手法(1000万原子系の計算)
- f. クリロフ部分空間対角化法を用いた大規模系MD手法:
 1. Si結晶の亀裂伝搬:
 2. Si結晶の亀裂伝搬表面形成と表面再構成:
 3. Cu結晶の大規模電子構造計算:
- g. Multi-shell helical Gold nanowire の構造と形成プロセス:
- h. 固有値問題((A-E)_{x=b})へのshifted COCG 法およびSeed-Switching 法の開発
- i. ASED(Atomic Superposition Electron Delocalization)および電荷自己無撞着法の大規模系への応用
- j. 一般化固有値問題((A-ES)_{x=b})へのshifted COCG 法およびSeed-Switching 法の開発
- k. 一般化固有値問題としてのASED大規模系のオーダーN手法

北陸先端大

- a. 生体分子用の変分最適化基底の開発
- b. 一般化分割統治オーダー法の開発
- c. 高精度・高効率数値積分のためのプロジェクト展開法の開発
- d. 単一分子磁性体 Mn₄, Mn₁₂ の電子構造と磁気構造
- e. オーダーN クリロフ部分空間法の開発
- f. 制約条件付きノンコリニア密度汎関数法の開発
- g. グリーン関数の高速積分法の開発
- h. 分子磁性体 V_n(C₆H₆)_{n+1} の磁気特性に関する第一原理計算
- i. 新規シリコンナノワイヤーの電子構造に関する第一原理計算
- j. LCPAO 法による最大局在化ワニエ関数の計算手法開発
- k. 数値局在基底による2電子4中心電子反発積分の数値計算手法の開発
- l. オーダーN 密度汎関数計算の OpenMP/MPI ハイブリッド並列コードの開発

(2)「千葉大学(旧産業技術総合研究所)」グループ

①研究参加者

| | 氏名 | 所属 | 役職 | 参加時期 |
|---|-----------------------|---------------------------------|-----|--------------|
| ○ | Ferdi Aryasetiawan | 千葉大学大学院融合科学 研究科ナノサイエンス 専攻 | 教授 | H16.10～H22.3 |
| | 尾崎 泰助 | 北陸先端科学技術大学 | 准教授 | H16.10～H20.3 |

| | | | | |
|--|-----------|-------------------------|-----------|-----------------|
| | | 院大学先端融合領域研究院 | | |
| | 佐久間 怜 | 産業技術総合研究所 | CREST 研究員 | H19.4～H20.3 |
| | | 千葉大学大学院融合科学研究科ナノサイエンス専攻 | 助教 | H20.4～H22.3 |
| | 井上(五味) 広喜 | 産業技術総合研究所 | CREST 研究員 | H17.4～ H19.2 |

②研究項目

- a. $\alpha - \gamma$ transition in Ce
- b. Calculation of Hubbard U by the first principles calculation
- c. Construction of Wannier orbitals
- d. The electronic structure of VO_2
- e. Fully self-consistent temperature-dependent GW approximation
- f. Screened Coulomb interaction in the maximally localized Wannier basis
- g. Generalized Hedin's equations for quantum many-body systems with spin-dependent interactions
- h. First-principles study of correlation effects in VO_2
- i. Downfolded self-energy of many-electron systems
- j. Effective quasiparticle Hamiltonian based on Lowdin's orthogonalisation
- k. Pressure dependence of the Hubbard U

§ 4 研究実施内容及び成果

4. 1 強相関電子系 (東京大学藤原グループ)

(1) 研究実施内容及び成果

① LSDA+U から出発した GW 近似 (U+GWA) の開発と NiO, MnO, V₂O₃, LaMO₃ (M=Ti~Cu) への応用 :

GW 近似 (U+GW 近似) を用いた計算を高速で行うために、①並列化、②新しい分極関数計算アルゴリズム、③積基底の最小化、④結晶対称性の利用など、新しい試みを行いプログラムの加速を行った。多数原子 (単位胞に 40 個程度の原子) を含む系、エネルギー自己無撞着計算などが可能となった。この手法を用い、NiO, MnO, LaMO₃ (M=Ti~Cu) の GW (U+GW) 計算を行った。U+GW 近似の際に不明であったクーロン相互作用 U の決め方を明らかにした。これにより、GW 近似とクラスター近似、分光実験などでまちまちであった U の値の起源を明らかにし、また分光実験結果と良い一致を示した。

NiO に対しては LSDA+U から出発することが重要である (図 1) が、MnO に対してはそのような必要はない (図 2)。2 価 Mn は遮蔽が少ないが、Ni では遮蔽が大きく U が小さく出るためである。実際には Ni ではバンドギャップが開き U は大きくなるので、波動関数、 U の値として、小さな遮蔽から出発することがコンシステントな手順となる。一方、ペロブスカイト系 (図 3) では遷移金属は 3 価であり、酸素の p 状態との混成、遮蔽が大きくなる。そのためいくつかの例外を除いて U+GWA を適用する必要がないというのが結論である。

米国の S. Louie らは深い順位の位置を調整するために類似の方法を用いている。

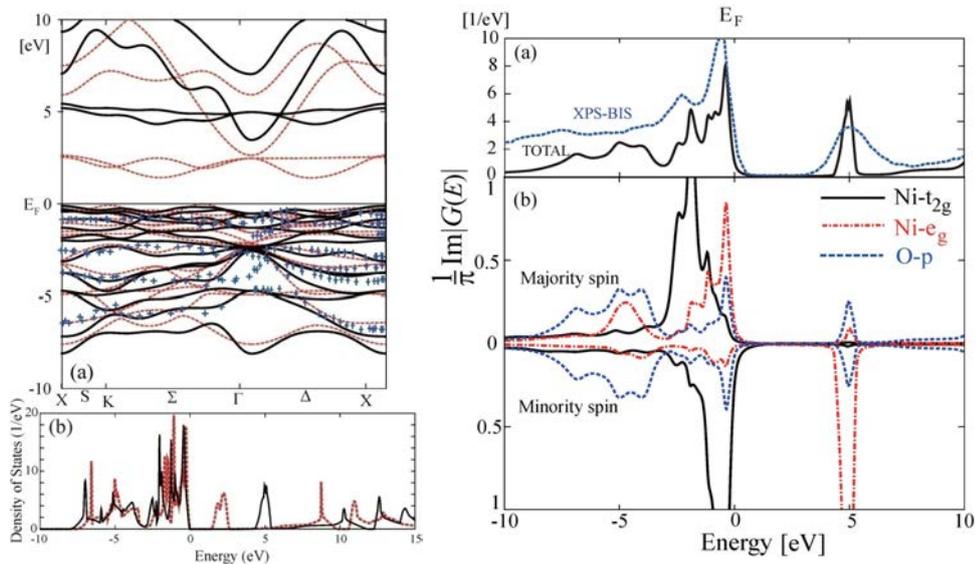


図 1 U+GWA による反強磁性 NiO の結果。左上：電子バンド (赤実線 LSDA ; 黒実線 U+GWA ; 点は実験)、左下：LSDA 状態密度 (赤) と U+GWA 準粒子バンド (黒実線)、右上：実験による結果 (青) と計算 (黒) に比較、右下：計算による各部分成分。 $U=2.5\text{eV}$, $J=0.7\text{eV}$ を使用。計算結果が与える遮蔽クーロン相互作用は $W(0)=6.03\text{eV}$ であり、種々の実験結果と良い一致を示している。占有バンドの酸素占有状態が増加し、NiO が電荷移動型であることを示す。上向きスピン状態では d-d 遷移は起こらないが、下向きスピン状態では可能。

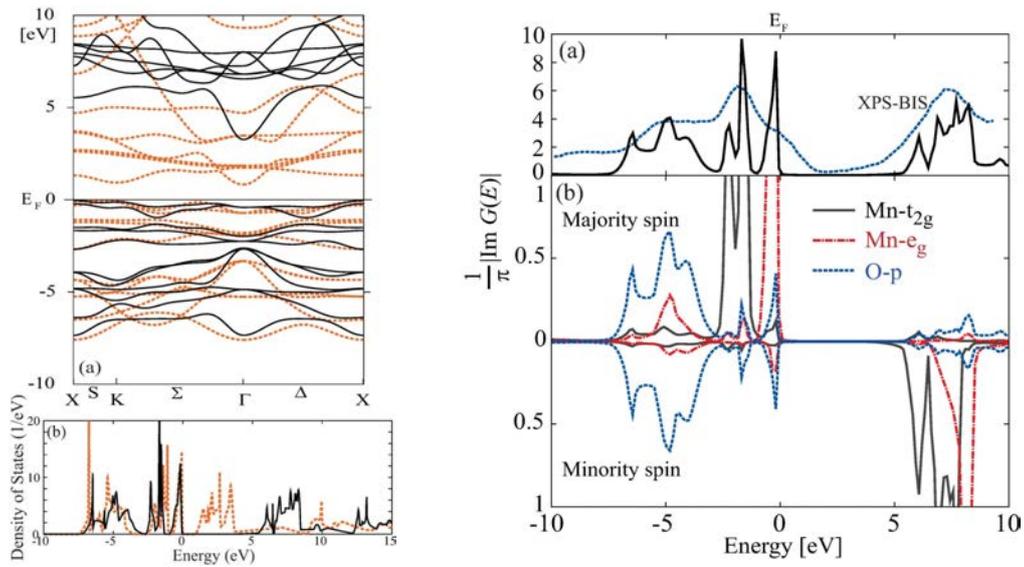


図 2 GW による反強磁性 MnO の結果。左上：電子バンド（赤実線 LSDA；黒実線 U+GWA；点は実験）、左下：LSDA 状態密度（赤）と U+GWA 準粒子バンド（黒実線）、右上：実験による結果（青）と計算（黒）に比較、右下：計算による各部分成分。計算結果が与える遮蔽クーロン相互作用は $W(0)=7.07$ eV であり、種々の実験結果と良い一致を示している。上向きスピン状態、下向きスピン状態ではともに d-d 遷移は起こらない。

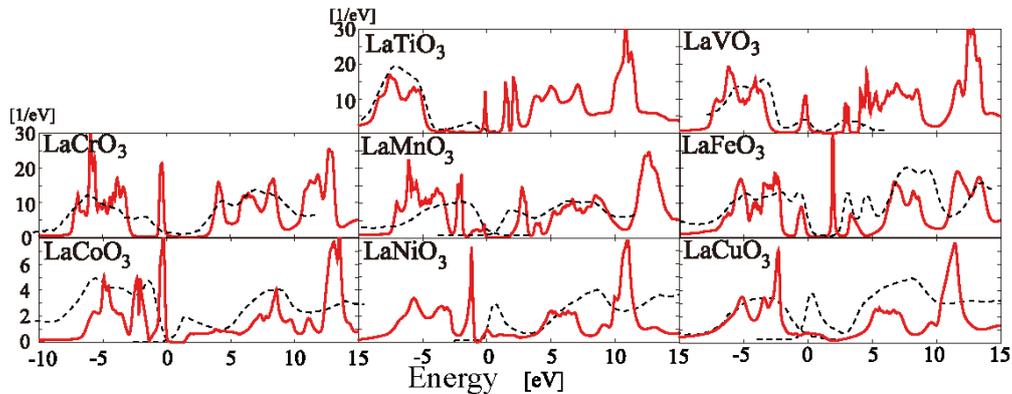


図 3 GW 近似による LaMO_3 ($M=\text{Ti}\sim\text{Cu}$) のスペクトル。実線：計算、点線：実験。両者の一致は注目に値する。

② LSDA+DMFT 法の開発と Ni, Fe, NiO への応用：

現実的な物質系を対象として、IPT（逐次摂動近似）を用いた LDA+DMFT 法を開発した。ワニエ表示に射影することなく、ハミルトニアンは L(S)DA のものを採用する。そのため、ワニエ表示に射影するために、遷移金属 d 軌道と酸素 p 軌道の混成を固定する必要がなく、電荷移動や電子相関のための L(S)DA からの変化が本質的に重要な系において、大変有用である。

これを Fe, Ni, NiO に適用した。Fe, Ni では、Ni の 2 正孔サテライト（フェルミエネルギーより下約 6eV）を含め、従来の LDA+DMFT とよく一致する結果を得た。

NiO ではクーロン相互作用により Ni-d, O-p の混じりが大きく変化し、分光実験の結果とよく一致する結果を得た (図 4、図 5)。

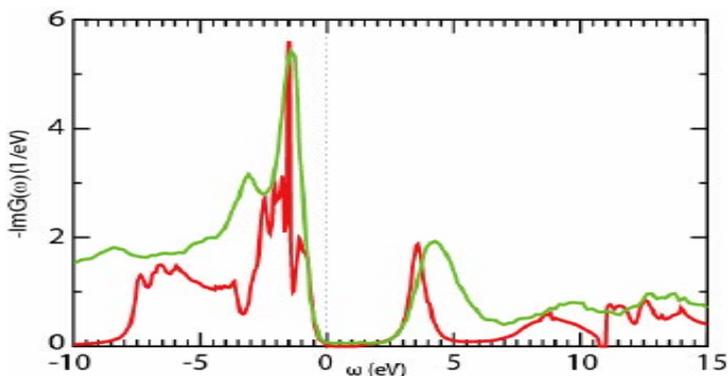


図 4 LSDA+DMFT による NiO のスペクトル。緑：実験、赤：計算。

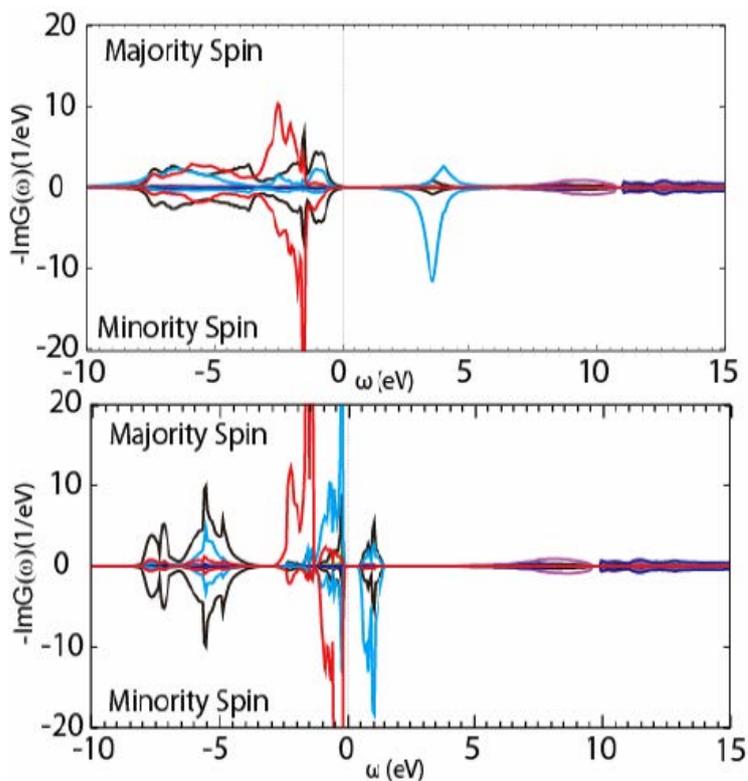


図 5 上：LSDA+DMFT の結果を各成分で分割。赤：Ni t_{2g} 成分、黒：Ni e_g 成分、青：酸素 p 成分。下は LSDA の結果について同様の成分を示した。バンドギャップの増加、Ni 各成分の変化、酸素 p 成分の占有状態トップにおける変化に注目をすべき。

③ LSDA+cluster-DMFT 法 と NiO への応用：

LDA+DMFT を行う際、現実の物質は化合物であり、孤立不純物モデルでは原子間の軌道混成や電荷移動の点で取り扱いが不十分で問題があることが多い。遷移金属化合物の場合に、遷移金属をとりかこむ配位子の環境が重要であり、これまで十分にこの効果が検討されてはこなかった。現実的な物質系を対象として、IPT (逐次

摂動近似)を用いた LDA+DMFT 法をクラスター系に拡張している。予備的結果は国際会議(The 11th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculation)で発表し Outstanding Poster Award を得た。系の対称性をより忠実に反映したクラスター計算を行うこと、そのために、グリーン関数計算の精度向上が重要であり、現在進行中である。

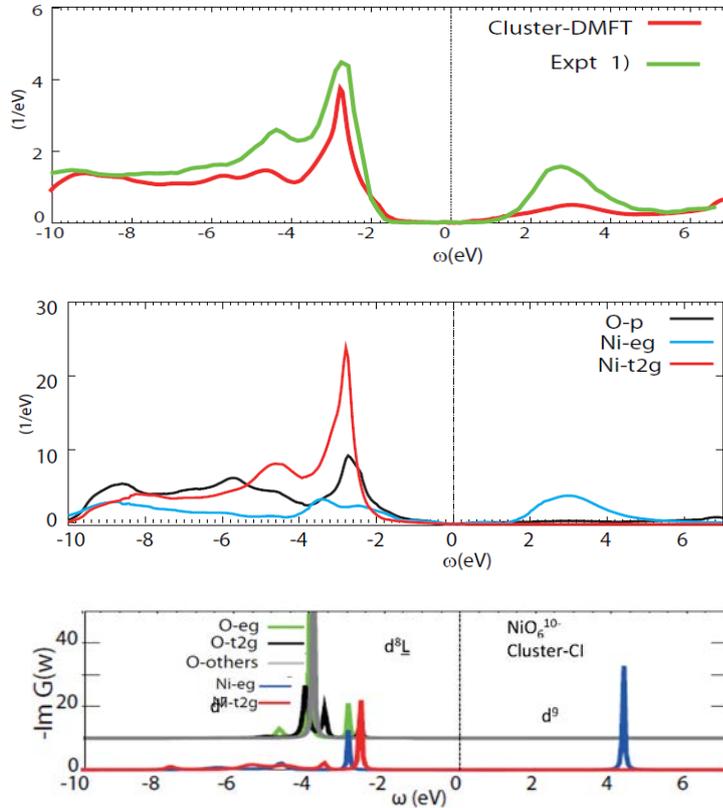


図6 上：LDA+クラスターDMFT による NiO のスペクトルおよび実験結果。中：計算によるスペクトルを各成分に分解したもの。下：クラスターNiO6 における CI を考慮したスペクトル。これを用いて DMFT の計算がおこなわれている。したがって、上、中の計算には d^8L 、 d^7 、 d^9 が考慮されている。

- ④ **新しい超大規模行列の解法と軌道縮退のある一般化ハバードモデルへの応用、 $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_4$ ($x=1/3, 1/2$) の磁気状態の解析 (一億次元の行列の厳密対角化) :** 大規模系のために開発した巨大連立方程式の解法である shifted COCG法に加えて seed-switching 技術を開発し、計算のさらなる高速化を図った。これを用いて、 $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_4$ ($x=1/3, 1/2$) の秩序状態をより広いパラメータスペースで解析した。軌道縮重がある場合、必要な状態数は急激に (指数関数的に) 増大し、一般に用いられている厳密対角化の方法は使用できない。この例では必要なヒルベルト空間の次元 (使用している状態の数) は、基底状態に対しては、 $S_z=0$ に限っても、 $(16C_6) \times (16C_6) = 64, 128, 064$ 、Affinity レベルに対して $(16C_7) \times (16C_6) = 91, 611, 520$ 、イオン化レベルに対して $(16C_5) \times (16C_6) = 34, 978, 944$ という大変大きな次元のものである。そのため、従来の大規模行列厳密対角化の方法では、ここで対象としている系を取り扱い事は不可能である。本方法を用いることにより、 $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_4$ ($x=1/2$) で観測されている電荷・スピン秩序に対して重要な知見を得

た。すなわち、電荷のストライプ構造は原子間クーロン相互作用の効果であり、一方、特異なスピン反強磁性的ストライプ構造は、軌道縮重および電子移動の異方性が本質的な（単一スレーター行列式では表現できない）多体相関により初めて実現された状態であることを明らかにした。

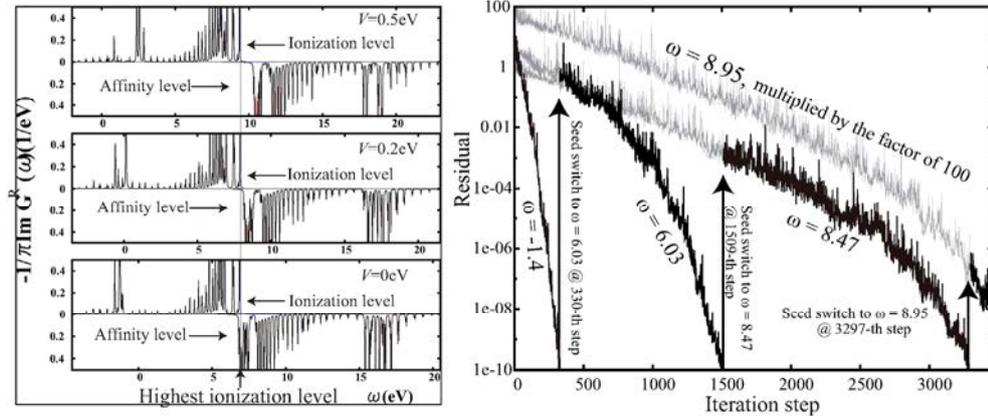


図7 拡張ハバードモデル(2次元正方格子)における励起スペクトル(左)およびshifted COCGおよびseed-switching の振舞い。

(2)研究成果の今後期待される効果

これまでの GW 法では、遷移金属(化合物)の場合、クーロン相互作用が小さく(遮蔽が大きい)、NiO, MnO などの 2 価の場合、適用が困難であると考えられてきた。我々は U+GWA を開発し、詳細にスペクトルの U 値依存性を調べ、また自己無撞着計算(G₀W₀タイプ)を信頼できる精度を維持しながら実行した。この結果、なぜ 2 価の場合、かつ Ni と Mn では状況が大きく異なるのか、3 価のペロブスカイト系ではなぜ小さな U でうまくいくのかなどを明らかにした。また、さまざまな新しいアルゴリズムを開発し、OpenMP と MPI のハイブリッド並列を行うことにより、計算精度を向上させて、計算時間、メモリ規を大きく縮小させた。我々の開発した U+GW は簡便にこれまでの GW 法の欠点を除いただけでなく、プログラムを公開することにより広く利用されると期待している。

一般には、LDA+DMFT などの計算には、量子モンテカルロ法が用いられる。我々はそのれに対して上記②③では逐次摂動法 (Iterative Perturbation Method) を用いた。IPT は、電子系のグリーン関数を摂動論に基づいて再帰的に求める方法であり、量子モンテカルロ法が、「厳密解法」であるのに対して近似的解法である。IPT の結果は、有限温度で共鳴ピークの幅が狭い、あるいは金属-絶縁体転移温度が低く見積られるなどの欠点が指摘されている。一方で、量子モンテカルロ法は一般に計算時間が大変多くかかり、特に軌道縮退度が大きい時には計算時間が実行可能なものを超える、スピントラップ過程が正しく取り扱われないことが多い、最小エントロピー法でスペクトルを計算するため既知の形に依存する、などの問題点がある。本解法で逐次摂動法を採用した理由は、計算の負荷を少なくすること、また軌道の数に制限を設けずに計算を遂行すること、を主たる目的としている。またワニエ状態に射影する場合には金属と配位子の間の混成を固定しなくてはならないがこれを避ける、などを配慮した。これらにより、現実的な系を対象にした計算が多くの物質に対して可能になる。また LSDA+Cluster DMFT は、2 量体化を引き起こす V₂O₃ における計算(千葉大グループ)を除くと、現実物質での例はほとんど無い。我々の開発した手法を使うことにより、原子数、軌道数などによる計算可能性の制限をなくし一般的な可能性を広げること、および NiO で生じる電荷移動を表現できる(電荷移動により、混成が変化する状況に対応できる)などの利点がある。計算科学としてのこのような側面が今後の発展には必要であり、

広く用いられる可能性が高いと考えている。

軌道祝中のあるハバード模型の研究は多くない。これは多体系として考慮すべきヒルベルト空間の次元が軌道数に依存して指数関数的に増大するため、既存の大次元行列計算アルゴリズムでは処理能力をはるかに超えてしまうからである。クリロフ部分空間法、Shifted COCG + Seed Switching 法は一般的に大行列に対する新しいアルゴリズムである。この結果、実験で得られた磁気構造の理論的理解が可能となり、サイト間クーロン相互作用、ホッピングの微小な異方性が、電荷およびスピンのストライプ構造を起こしている可能性が高い。また本研究により、量子多体系に対する新しい厳密対角化の方法が与えられ、より大規模な問題を取り扱うことができるようになった。

本課題を通じて、大きな系を取り扱う方法として、大型計算システムあるいは(自動)並列計算にのみ頼るのではなく、新しいアルゴリズムを開発することが、大変重要であること示すことができた。特に、産業界でのニーズは、大型計算機に頼るのではなく、標準的な計算機で(16 並列程度の並列度で)十分な計算を行うことであり、その意味でも本研究(4)での計算手法は重要である(大規模系でより詳細に記述する)。

4. 2 大規模系の量子力学分子動力学法の開発(東京大学藤原グループ)

(1)研究実施内容及び成果

① 一般化ワニエ表示を用いた大規模系 MD 手法 (1000 万原子系の計算) :

Si 等を対象とした一般化ワニエ表示を用いた分子動力学手法と他の手法をハイブリッドした手法を開発した。この方法により並列計算を併用することにより 1000 万 Si 原子系の計算が可能であることを示した。この系は 100nm スケールの系に相当し、現在のナノテクノロジーの最小限界 (45nm プロセス) より大きな系の計算が可能であることを示したことになる。量子力学計算の例としては世界記録であろう。

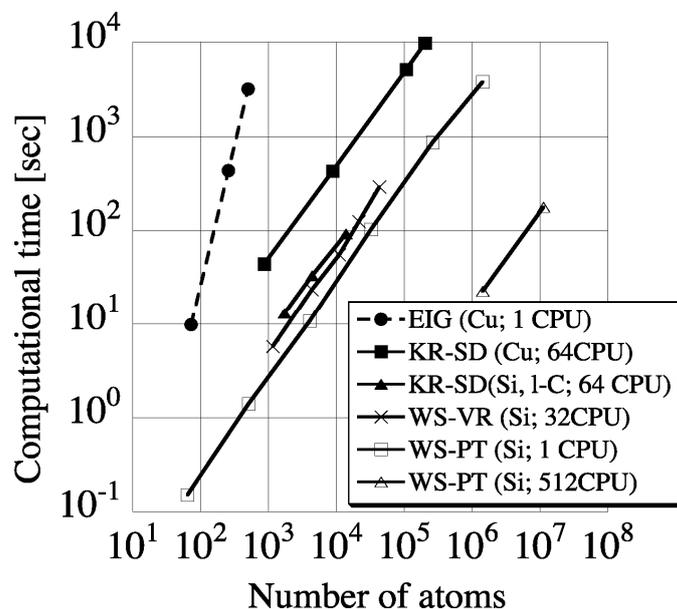


図8 原子数 vs 1 MD-step のための計算時間。破線は従来の行列対角化法 (EIG)、他は本研究成果の種々の方法 (ワニエ関数法 WS、PT=摂動法、VR=変分法)、クリロフ部分空間対角化法 (KR-SD)。1 CPU は単一プロセッサ、32 CPU, 64 CPU, 512 CPU は其々の数に基づく並列化計算。

② クリロフ部分空間対角化法を用いた大規模系 MD 手法 :

与えられたハミルトニアンからクリロフ部分空間を生成し、それを対角化することによりオーダーN法を形成した。

a. Si 結晶の亀裂伝搬 :

Si の各種表面の安定構造を議論し、また表面非対称ダイマー形成の動力学を議論した。特に Si (100) 表面の安定構造の形成と歪場の相互作用、動力学を明らかにし、亀裂伝搬の異方性が生じることを見出した。

b. Si 結晶の亀裂伝搬表面形成と表面再構成 :

Si を適当に割ると多くの場合に現れる安定表面は (111) (110) として得られる。15 nm の大きさの単結晶に対するMDを実行し、(100) 面が現れるように強制的に入れた亀裂の方向が変化し、化学結合と歪の相互作用により、(110) 面または (111) 面が現れるようになることを示した。

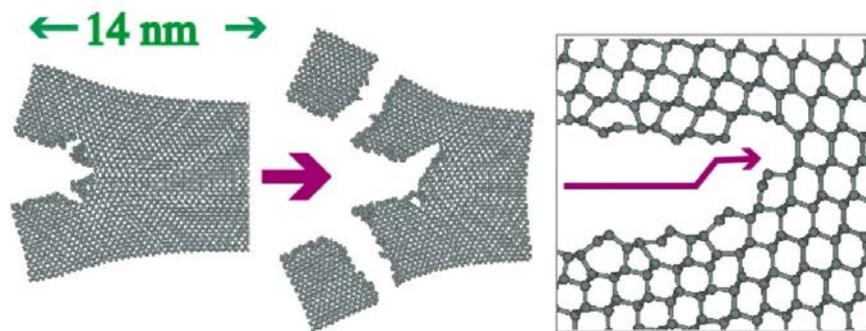


図 9 Si 単結晶の亀裂展開ダイナミクス。14nm にシリコンの(001)面で亀裂を発生させると、やがて(111)、(110)面に亀裂の方向が変化していく。右図は(111)2×1面が生成させるプロセスシミュレーションの結果を示している。

c. Cu 結晶の大規模電子構造計算 :

クリロフ部分空間対角化法および shifted COCG が金属系でもよく機能することを示した。この例は、我々が開発した手法が、一般にそうであるような半導体、絶縁体に限るものではなく、金属系に適用できるものであることを示したものである。

③ Multi-shell helical Gold nanowire の構造と形成プロセス :

金属系に対し分子動力学を適用するための強結合ハミルトニアンを種々試みた。金属系では電氣的な局所中性が重要である。特に金のナノワイヤに関し量子力学的分子動力学を行い、シェル構造、魔法数の発生機構を明らかにした。多重シェル螺旋ナノワイヤに対する2段階形成モデルを提案した。最初、最外シェルと内側シェルの乖離が起り、次に表面(001)面の原子が滑って全体の表面が(111)-like構造に変わり、同時に全体的にナノワイヤ軸方向に螺旋が導入される。またより大きな系で導入される欠陥などについても議論を行った。

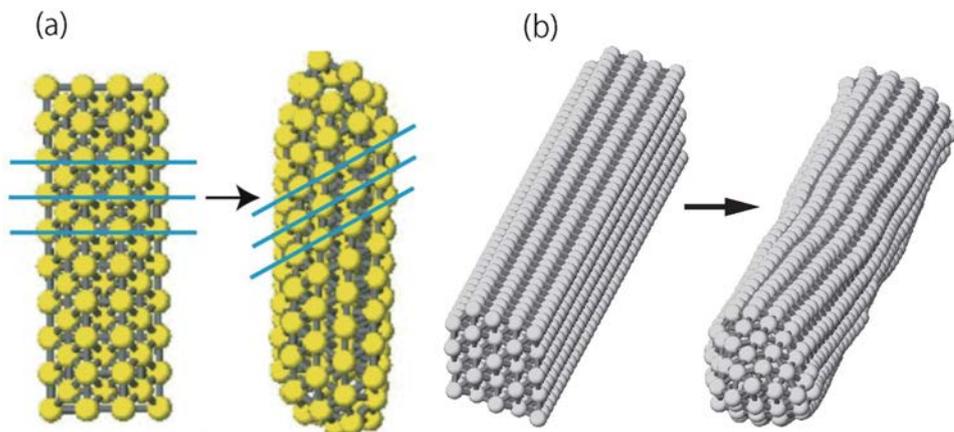


図 10 金ヘリカルナノワイアの形成。(a) 金単結晶から $[110]$ 軸方向に切り出したロッドの(110)面が(111)構造に変形し、ナノワイアの安定構造が形成される。その結果、ナノワイアの軸は捩じれる。(b)はより長い系で同様なプロセスをシミュレーションした結果。(111)面の形成と一緒に、様々な欠陥が導入される。

- ④ 固有値問題 $((A-E)x=b)$ への shifted COCG 法および Seed-Switching 法の開発：固有値問題を行列の対角化手法として取り扱おうと原子数あるいは全軌道数を N として、 N^3 に比例して計算時間が増える。一方、 $(A-E)^n x_0$ ($n=1,2,\dots$ 、 x_0 は任意ベクトル) によって生成されるベクトル空間は、エネルギー E に依存しないため、線形方程式をエネルギーのシフトとして逐次的に解くことにより、オーダー N (計算時間が N に比例して増大する) アルゴリズムを構成した (シフト方程式系)。また最初にどのようなエネルギーを選んでこの方程式系を解くかという選択に依存せずに、効率的に買いを得ることが可能になった (Seed-Switching)。

この解法は極めて一般的なものであり、大規模線形方程式系の解法として大変有効である。したがって、大規模電子系の分子動力的取り扱いのみならず、多体系に現れる巨大線形方程式の解法としても、使用することができる。現在、我々の経験した最大の行列次元は一億である。

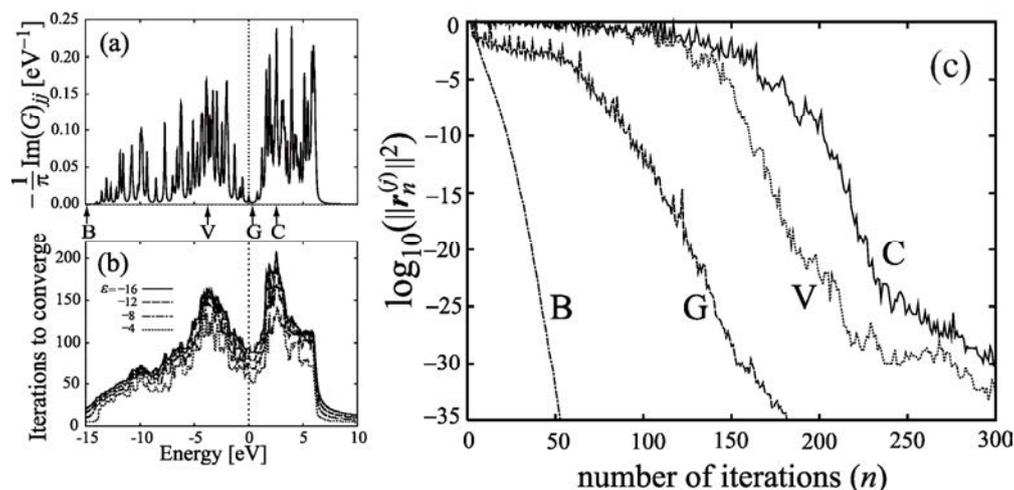


図 11 (a) Si 単結晶の状態密度。(b) 各エネルギーでの収束判定 (ϵ) に対する収束回数。状態密度と比較して、それが大きいエネルギーに対し、収束回数は大きくなる。各エネルギー毎に、収束を行うのでは、オーダー N アルゴリズムを作ることはできない。(c) 状態密度の各エネルギー (B,V,G,C) に対する反復回数と残差。

またこのままでは B を出発エネルギーとして選んだ場合、ほかのエネルギーに対する誤差は極めて大きいこととなり、小さな残差まで行くには計算をやり直さなくてはならないように見える。しかし、seed-switching の技術を用いれば、B から G などに移る場合、それまでの計算結果をすべて活かしながら行うことができる。

⑤ **ASED (Atomic Superposition Electron Delocalization) および電荷自己無撞着法の大規模系への応用 :**

凝縮系ばかりでなく、広い範囲の溶液系を対象とすることを念頭に置き、ASED アルゴリズムに電荷自己無撞着を組み合わせたプログラムを作成した。ASED は量子化学で古くから用いられているヒュッケル近似あるいは、任意の基底を用いた LDA に基礎を置き、したがって広い物質系に対して、あるいは凝縮系ばかりでなく、気体や液体にも適用可能であり、制限が少ない方法であり、タイトバインディング形式にすることは容易である。しかし一般的にタイトバインディング近似は電荷移動によるクーロン相互作用に対応しないため、化合物それぞれに対して新たにタイトバインディングパラメータを構成する以外、汎用なパラメータセットを作るのが困難であるという問題点を持っている。この点に関しては、電荷自己無撞着法 (CSC) により、2 次摂動の形で、電子間クーロン相互作用を考慮する方法を併用している。

⑥ **一般化固有値問題 $(A-ES)x=b$ への shifted COCG 法および Seed-Switching 法の開発 :**

ASED アルゴリズムにおいて基底関数 (スレーター軌道) は非直交である。重なり積分 S が有るためにこれまで開発した標準固有値問題では $S^{-1/2}$ を計算しなくてはならず、オーダー N の解法にはならない。ここでは一般化固有値問題に対してもオーダー N 手法を作ることができることが示された。

⑦ **一般化固有値問題としての ASED 大規模系のオーダー N 手法 :**

一般化固有値問題 *shifted COCG* 法および Seed-Switching 法を ASDE アルゴリズムに組み込む。

(2) 研究成果の今後期待される効果

本研究ではタイトバインディングハミルトニアンを用いている。大規模系の計算では一般に、ハミルトニアンの精度と、計算時間、メモリ容量がトレードオフの関係にある。本研究では、タイトバインディングの精度を安易に落としてしまうのではなく、第一原理計算からタイトバインディングハミルトニアンを導くこと(あるいは LDA 計算を再現するタイトバインディングパラメータを系統的に探索しつつ電荷無撞着法を導入する、)などの方法でタイトバインディングハミルトニアンの欠点を補っている。数理構造の明確さのためにも、タイトバインディング形式を採用している。これらの枠の中で、一般化ワニエ表示、NRL(米国 Naval Research Lab.)のタイトバインディングパラメータ、TB-LMTO などに加え、一般化ヒュッケル近似などを使用している。これらの方法は、Si 単結晶の亀裂伝搬と表面再構成、金マルチシェル・ヘリカル・ナノワイアの形成メカニズムの解明、Cu、などの系に応用されている。ナノ系の量子力学 MD シミュレーションにより、結合の再構成、電子構造と歪場の相互作用、など古典系や小さな系の量子 MD シミュレーションでは得られない重要な知見が得られている。

産業界では、精度の高い計算よりも、使いやすさ、いろいろ試すことができる、などの特徴がはるかに強く求められるものであり、我々の手法開発はそれに応える一面を持っている。特に、企業の研究で、大学の研究者に相談しなくても、物理化学的側面からパラメータの意味が明確で、企業研究者がパラメータ調整を自分でできるということは、企業研究における知財保護という観点からも見落とせない点である。このような意味から、タイトバイ

ンディングハミルトニアンや一般化ヒュッケル近似など、物理的・化学的に意味が明瞭で、具体的なイメージを得やすい方法は予想を超えて重要である。

また大規模線形計算手法として、標準固有値問題に対応したクリロフ部分空間対角化法、Shifted COCG 法、Seed Switching などを開発した。またこれらの手法を完全に一般化固有値問題に拡張した。後者に関しては、このアルゴリズムの特徴は現在解析中であるが、おおむね期待した通りの機能を発揮しており、精度の面からも特に問題点はないように期待できる。

大規模線形問題をオーダー N で解く方法は永く期待されてきたが、これまで大きな進展は見られなかった。本研究で開発した新しい手法は、繰り返し計算であり、繰り返し計算の特徴である「有限回数の計算で必ず真の解に到達することを保証」し、また計算途中で真の解との誤差(残差)を見積もることができるなど、おおきな特徴を持っている。特に、これを一般化固有値問題に拡張できたことで、工学上の可能性は計り知れない。この意味で今後一般的に広い計算分野で使用されるべき方法であり、大規模計算に大きな変革をもたらすものであると確信している。

一般的に、数値計算手法として、大きな計算機システムや大きな並列計算に頼らず、しかも数理論のしっかりした新しい数値アルゴリズムが重要である。

大規模系 MD のプログラムを、部分的には CREST グループに属さない、外部の複数企業に所属する研究者と共同で開発してきた。またこの作業を行うために、我々は ELSESES (Extra-Large Scale Electronic Structure calculation) 研究会を設立し、参加者の著作権および知識財産権を侵害しない方法を模索してきた。ELSESES 研究会の規約としては、共同作業の成果の非独占、各会員が開発したプログラムを全参加者に還元(著作権の規定)、会員がプログラムを再配布することの禁止、などが決められている。これらの規定により、共同作業の結果を無償で使うことができ、情報を共有し、またさまざまな議論に参加することを保証する。またプログラムに新しい機能を付加したとき、もしその成果を独占したければ、プログラムを再配布しない範囲で可能である。会員としては国内外の大学所属研究者、独立行政法人所属の研究者、国内企業、米国企業などに所属する研究者などがある。このような、共同で多企業研究者がプログラムを開発し、議論を行う組織は、世界的にも珍しく、今後の発展が注目される。また一般的に産学、産産の連携を深め、我が国の技術基盤を共通的に盤石にする一つの有力な方策となり得るものである。ELSESES 研究会を特定非営利活動法人(NPO)として正式法人とするべく、現在準備中である。

4.3 大規模系(北陸先端大学院大学 尾崎グループ)

(1) 研究実施内容及び成果

① 生体分子用の変分最適化基底の開発

生体高分子の大規模な密度汎関数法を実現するために新しい変分最適化基底を開発した。43 分子で構成されたモデル物質群(DNA, 小タンパク質、脂質等)に対して、軌道最適化法により動径成分を変分原理に基づき最適化した。さらにモデル物質群に含まれていない任意の 31 分子群に対し構造最適化を行い、変分最適化基底と非最適化基底における分子構造の収束特性を比較した。その結果、変分最適化基底は広範囲の物質群に対して、少ない基底関数で高い収束特性を持っていることが分かった。特定物質群に対する最適化基底の構築は、生体分子に対し効率的な基底関数を新たに開発しただけでなく、有機分子の波動関数(電子特性)が官能基によってほぼ決定されていると言う化学的直感を第一原理計算によって確かめたものでもある。

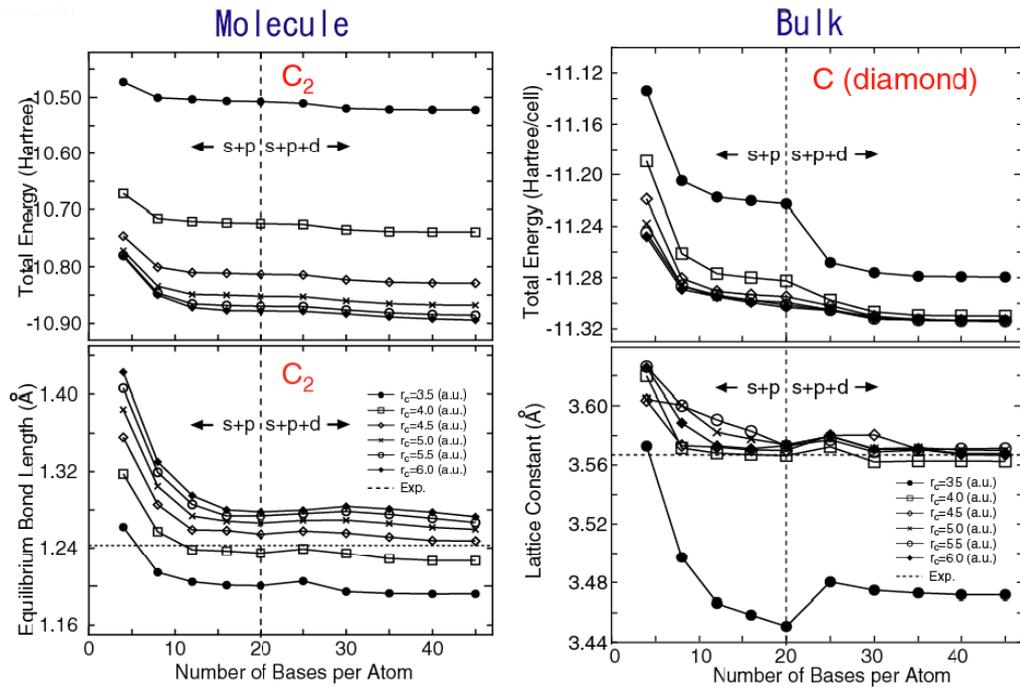


図 12 様々な分子に対する既定関数と収束性。

② 一般化分割統治オーダー法の開発

Two steps mapping of the whole Hilbert space into subspaces

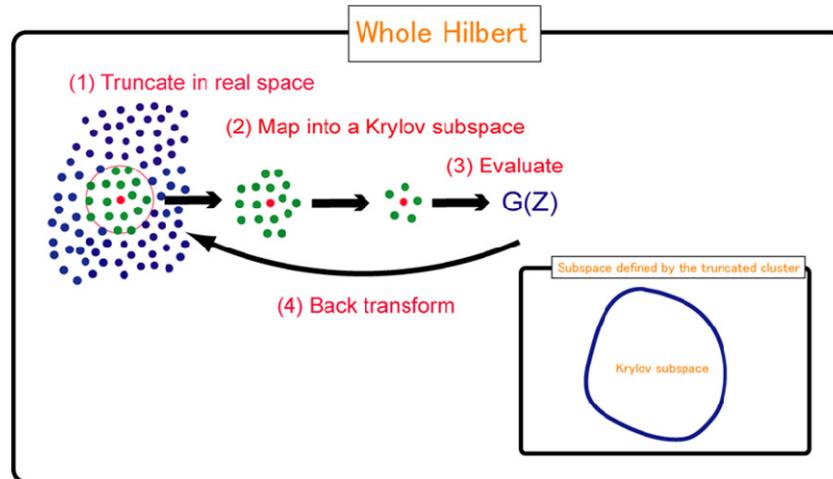


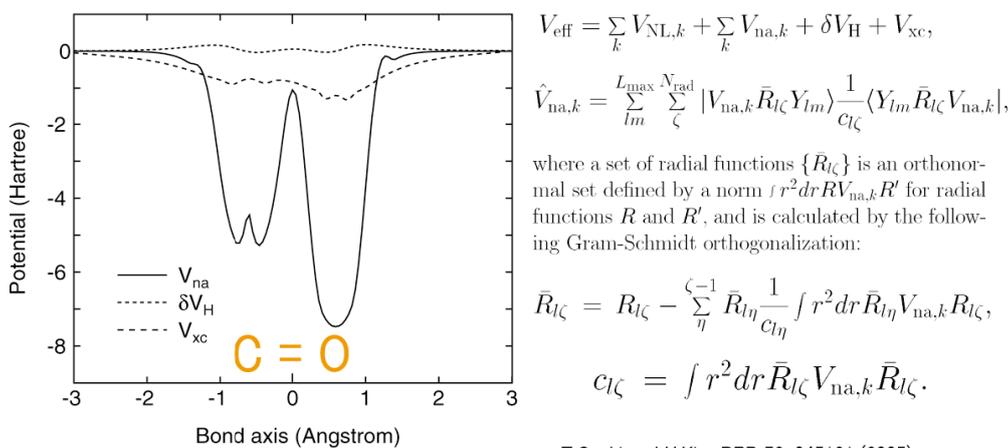
図 13 分割統治法の概念。

分割統治法は数値的に安定したオーダーN法であるが、計算の冗長性のためプレファクターが大きい。そこで計算効率を向上させるために、コア領域サイズを最適化した一般化分割統治法を新たに開発した。我々はまず始めに、モデル格子系において計算時間に対するコアサイズの最適値は系の次元性によらず、バッファサイズの半分であることを解析的に示した。その結果に基づき、密度汎関数計算においても

コアサイズをバッファサイズの半分にとることにより、同一の計算精度で単純分割統治法と比較し、およそ3倍の計算効率となること分かった。

③ 高精度・高効率数値積分のためのプロジェクト展開法の開発

数値局在基底を用いた密度汎関数計算において計算の律速段階の一つは行列要素算出における数値積分である。我々は効率的かつ高精度に数値積分を行うために、空間的に変化する激しいポテンシャル項はフーリエ空間で高精度に積分を行い、その他の比較的緩やかに変化するポテンシャル項だけを実空間内の一様メッシュ上で数値積分する手法を新たに開発した。とりわけ原子核付近で空間変化の大きい中性分子ポテンシャルを分離形プロジェクトで表現することにより、弱い相互作用である水素結合などに対しても高精度・高効率で計算が出来るようになった。



Three center integrals with VNA can be transformed to products of two center integrals by the projector expansion method.

図 14 様々な計算効率向上の試み。プロジェクト展開法により、3 中心積分が 2 中心積分の積で書かれ、全体の計算効率の向上が得られる。

④ 単一分子磁性体 Mn4, Mn12 の電子構造と磁気構造

密度汎関数法に基づく第一原理計算によって単一分子磁性体 Mn4, Mn12 の電子構造と磁気構造を詳細に検討した。とりわけ磁気構造に対するリガンド分子の役割に着目し、リガンド分子による磁気構造のファインチューニングの可能性を議論した。Mn4 においては架橋炭素原子上の不对電子は Mn-d 軌道と反強磁性的に相互作用し、全磁気モーメントを小さくする傾向があるが、Mn12 では架橋炭素原子上の不对電子間で反強磁性的にオーダーし、全磁気モーメントには影響を及ぼさないことを見出した。これらの知見に基づき、さらにリガンド分子の電気陰性度の大きさとチャージドープングによる磁気構造の変化を議論した。

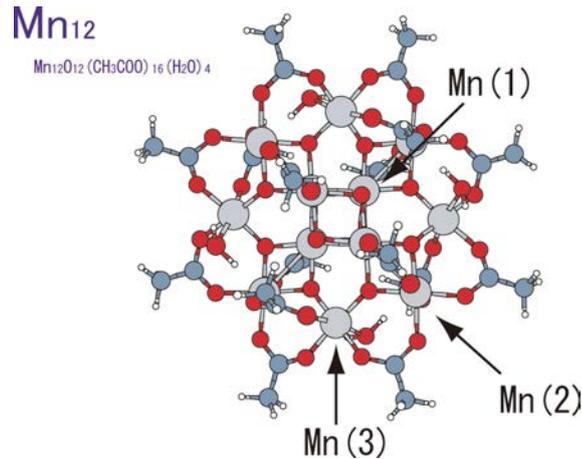


図 15 Mn 原子 12 個をふくむ単分子磁性体の構造。

⑤ オーダー-N クリロフ部分空間法の開発

密度汎関数理論を大規模な系に適用するために計算量・計算メモリが原子数に比例した新しい安定で高速なオーダー法を開発した。クリロフ部分空間に基いた本手法は各原子に対して定義されたクリロフ部分空間内で有効ハミルトニアンを対角化する手法であり、これまで提案されたリカージョン法と分割統治法の利点を併せ持つ手法である。有効ハミルトニアンを近距離の詳細な寄与と遠距離の寄与に分離し、固定されたクリロフ部分空間内で埋め込まれたクラスター問題を解くことによって、分割統治法の安定性とリカージョン法の高い収束性を実現することが可能となった。金属から半導体、分子に至る広範囲な物質群に適用可能な手法であり、オーダー(N)密度汎関数法の適用範囲を拡大するものである。しかしながら原子数に比例して計算誤差は大きくなるため、大規模系におけるわずかなエネルギー変化の取り扱いにはまだ多くの問題点を残している。現時点での計算精度は一原子当たり数 mHartree 程度であり、通常対角化法に取って変わるためにはさらに二桁の精度向上が必要である。

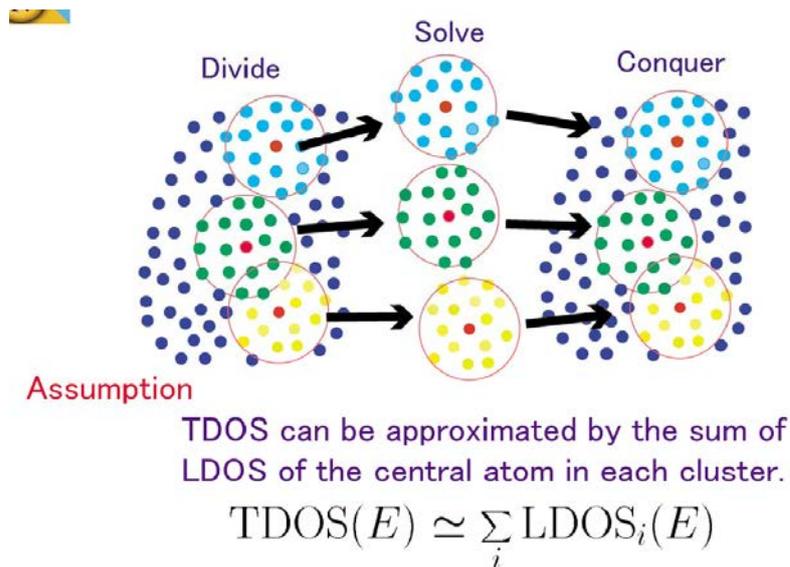


図 16 分割統治法概念図。大きな系を分割(divide)し、それぞれの小部分について解いた(solve)あと、再び全系に戻し(conquer)全体の物性を理解する。

⑥ 制約条件付きノンコリニア密度汎関数法の開発

磁化、電気分極、格子歪み等の複数の秩序変数が共存し、強磁性、強誘電性、強弾性等の強制的秩序を示すマルチフェロイック系は新奇機能の発現に関して多くの注目を集めている。特にその秩序変数間に強い相関があれば、磁場、電場により複数の秩序変数を制御することが可能となる。その点で興味深いのは、古くから知られている電気磁気効果(ME 効果)を示す物質群である。ME 効果とは、磁性体に電界 E に比例して磁化 M が現れる現象、および逆に磁界 H に比例して電気分極 P が現れる現象である。長い研究の歴史があるにも関わらず、ME 効果が発現するメカニズムについてはよく理解されていない。我々はこの ME 効果の第一原理からの理解を目指し、スピン軌道モーメントと軌道磁気モーメントのノンコリニア磁性を制御する制約条件付密度汎関数法を開発した。各原子サイトに射影されたスピン、軌道モーメントのそれぞれに異なる制約条件を課し、自己無撞着に計算する手法を開発した。この手法を用いて磁気モーメントの方位を順次変化させ、ノンコリニア磁気秩序のもとでの巨視的分極率を Berry 位相の方法によって計算した。超格子モデル $(\text{LaMO}_3)_2/\text{LaAlO}_3$ (M=Ti, V, Cr, Fe) に原子変位がなくてもスピンの傾きがあると、その角度に依存して最大 $\sim 0.01 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ 程度の電気分極が発生することを見出した。これは電気磁気効果を示す物質において実験的に観測された値と同じオーダーである。S=3/2(Cr)、5/2(Fe) の場合には電気分極はスピンの相対角度に対して正弦波的振舞いを示し、これは桂らのモデル計算で説明できるものである。一方、軌道磁気モーメントが発現する S=1/2(Ti)、S=1(V) では電気分極は正弦波的振舞いを示さず、軌道磁気モーメントが電気分極発現に重要な役割を果たしていることが強く示唆された。ノンコリニアな軌道磁気モーメントと電気分極との関係はこれまで十分には検討されておらず、そのメカニズムの解明は今後の大きな課題である。

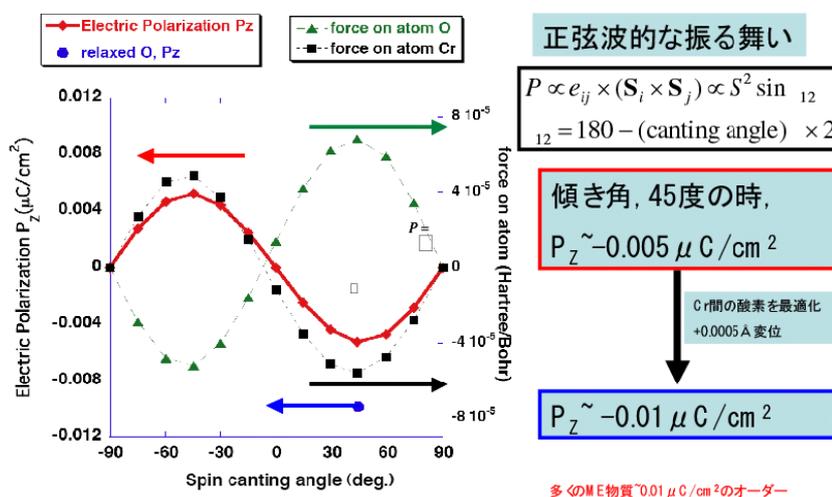


図 17 $(\text{LaCrO}_3)_2/\text{LaAlO}_3$ の S=3/2 の場合の電気分極の正弦波的振舞。

⑦ グリーン関数の高速積分法の開発

有限温度下でのグリーン関数法に基づく第一原理計算を大規模系に適用するために、フェルミ分布関数の連分数表示による Green 関数の高速・高精度積分法を開発した。従来法と比較し、5～10 倍程度の高速化が可能となった。本手法は特異点の分布の観点から松原和の自然な拡張であり、第一原理電子構造計算だけでなく、広範囲な分野での応用が期待される。

⑧ 分子磁性体 $V_n(C_6H_6)_{n+1}$ の磁気特性に関する第一原理計算

慶応大学・中島敦教授等により $V_n(C_6H_6)_{n+1}$ と関連する物質群の強磁性が報告されている。いくつかの理論計算がこれまでになされているが、その強磁性発現機構に関しては、未だに詳細は明らかとなっていない。そこで我々は GGA+U 法を用いて、この分子磁性体の計算を行い磁気構造のエネルギー差に関して詳細な解析を行い、その解析に基づき強磁性発現機構を説明しうる最小強結合モデルを提案した。その結果、(a) ベンゼン $p\pi-Vd\pi$ 結合はその分子構造を保つために重要であるが、磁気エネルギー差に関与しないこと、(b) $p\sigma-d\sigma$ 結合は弱く、 $d\sigma$ 電子は局在するために完全スピン分極すること、(c) $p\delta-d\delta$ 結合は中間的な強さを持ち $d\sigma$ 電子とのフロント結合のため、 $d\sigma$ 電子と強磁性相互作用すること、(d) $p\delta-d\delta$ 結合のために $p\delta$ 電子は $d\delta$ 電子と反強磁性相互作用し、エネルギー利得を得ること、を明らかとした。特に上記(d)が強磁性発現の機構であり、反強磁性の場合には(d)による利得エネルギーは得られない。この強磁性発現機構は金森-寺倉により提案されたものであり、 $V_n(C_6H_6)_{n+1}$ はその一つの例であることが明らかとなった。

⑨ 新規シリコンナノワイヤーの電子構造に関する第一原理計算

正20面体構造を持つ Si100 ナノドットが数珠状に繋がったシリコンナノワイヤーはこれまで実験的に合成に成功してない。しかし最近、産業技術総合研究所・計算科学研究部門・西尾憲吾博士等は分子動力学法により、ナノシリンドラー中でのシリコン融液からの徐冷により、この新規シリコンナノワイヤーの構造が自発的に生成することを理論的に予測している。この新規シリコンナノワイヤーの構造上の特徴は大きな空隙を持つ Si20 構造が Si100 ドットの中心に存在することである。この空隙中に様々な元素を導入することで、電子特性の調整が可能であることが期待される。そこで我々は産総研グループと共同で、新規シリコンナノワイヤーの電子構造と光学特性に関する第一原理計算を行った。その結果、(a) ゲストフリーナノワイヤーは 1.2 eV の直接ギャップ半導体であること、(b) Si20 ケージへの Na 及び I ドープにより、パイエルズ転移を起こすことなしに金属となること、(c) Na 及び I ドープナノワイヤーの発光放射再結合係数は発光無定形シリコン構造とほぼ同等であること、を見出した。

⑩ LCPAO 法による最大局在化ワニア関数の計算手法開発

OpenMX において用いられている LCPAO 法の枠組みで最大局在化ワニア関数を計算する手法を開発し、プログラムコードを作成した。異なる k 点に属する1電子軌道間の重なり積分は平面波を 4 次展開し、高精度に計算出来るようにした。また最大局在化ワニア関数はしばしば初期値依存性が大きいことが知られているが、初期値の波動関数を与えるために、任意の混成軌道を実空間上での任意の位置に置くことが出来るようにし、初期値依存性を詳細に調べることが出来るようにした。

⑪ 数値局在基底による 2 電子 4 中心電子反発積分の数値計算手法の開発

ハイブリッド汎関数法は Hartree-Fock(HF)法の交換項と一般化密度勾配近似(GGA)による交換項を混合する汎関数法であり、分子系において実験結果をよく再現する手法として、広範に用いられている。また最近では遮蔽された HF-交換項を用いて固体系への応用も行われ、バンドギャップの実験値を良く再現することが知られている。現在、このハイブリッド汎関数法の OpenMX への実装を目指し研究を進めているが、数値局在基底による 2 電子 4 中心電子反発積分の高精度数値計算は容易ではない。そこで Talman によって開発された手法を数値局在基底に拡張する方法を開発した。この手法は Lowdin の α 展開法と球ベッセル変換法を用いる手法であり、任意の数値原子様基底へ応用できるものである。今回、任意の数値原子様基底に対し、2 電子 4 中心電子反発積分とその微分を計算するプログラムを開発した。

⑫ オーダーN 密度汎関数計算の OpenMP/MPI ハイブリッド並列コードの開発

OpenMX に実装されているオーダーN 法はこれまで MPI によって並列化されていたが、メモリ使用量が大きくなるという問題があった。この原因は MPI 並列において、プロセッサ間でデータ並列を行った際、通信を最小化するためにバッファ領域を付加する必要があるためである。このバッファ領域の付加により、分割メモリのサイズは完全には 1/N でスケールせず、コア数が多いプロセッサ上では使用メモリが増大する原因となっていた。今年度、OpenMP/MPI ハイブリッド並列コードを開発し、メモリ使用量を従来の半分以下に削減することに成功した。その理由はノード内において OpenMP を使用することで、バッファ領域を付加する必要がなくなったためである。

Parallelization:
actual performance

diamond (512 atoms)
SMM (148 atoms)
diamond (64atoms,
k-points=3x3x3)

Cray-XT3,
2.4GHz Opterons,
7.68GB/s networks

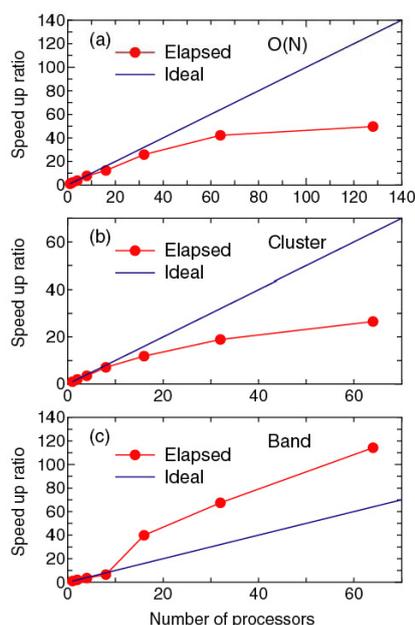


図 18 並列化効率をいくつかの計算手法に関して比較した。横軸が並列度 (cpu の数)、縦軸が並列化効率。それぞれ下から、バンド計算、クラスター計算、オーダーN 計算である。直線が並列度に比例した理想的な効率を示す。

(2)研究成果の今後期待される効果

北陸先端大学院大学のグループでは OpenMX の開発と機能強化を中心として大規模系第一原理電子構造計算手法を開発してきた。したがって、この方法は東京大学グループのものとは多くの共通点を持ちつつ、相補的な解法となっている。OpenMX における固有値問題の計算手法は分割統治法とクリロフ部分空間法の両者の利点を兼ね備えたものであり、計算安定性と効率性のバランスの取れた手法が開発されている。基底関数としては数値局在基底を用いており、基底関数の動径関数を変分的に最適化できることも精度向上の上で重要な利点となっている。さらに OpenMP/MPI のハイブリッド並列化を行うことにより、メモリ使用量の大きな低減と超並列計算における高い実行効率が実現されている。これらの様々な手法開発により OpenMX はナノマテリアルシミュレーターとして、高いレベルで研究期間内に完成した。第一原理電子構造計算の精度を保ちつつ、高い計算効率を実現することに成功したことに加え、以下に列挙される物性解析手法が開発に成功した。(i) スピン軌道相

相互作用を含んだ制約条件付きノンコリニア密度汎関数法の開発を行い、今後大きなブレークスルーが予想されるマルチフェロイック材料を第一原理計算により取り扱うことを可能とした。(ii) 非平衡グリーン関数法による電気伝導計算手法を開発し、グラフェンナノリボンや遷移金属酸化物超格子構造などの電気伝導特性の取り扱いを可能とした。これらの計算手法の開発により、適用範囲が一段と広がりつつある。開発された手法は全て OpenMX に実装され、GNU-GPL の規約の下で無償公開されており、すでに国内外の 20 程度(大学、国立研究所、企業)のグループによって OpenMX による応用研究が進められており、多数の研究成果が出版されている。また OpenMX に関する三回の workshop を開催し、開発者及びユーザーグループのコミュニティも形成されつつある。今後も計算効率及び計算精度のさらなる改良が必要であるが、大学・産業界において OpenMX を用いて磁性体、ナノ電気伝導体、誘電体等の大規模系に対して一層の適用研究が進むことが期待される。

4. 4 強相関電子系(千葉大学 Aryasetiawan グループ)

(1)研究実施内容及び成果

① α - γ transition in Ce :

We have studied the α - γ phase transition of cerium using the LDA+DMFT method. Using a new implementation of multiple LMTO scheme, which allows the treatment of semi-core and valence states on equal footing, as well as a new formulation of total energy, we have succeeded in performing accurate total energy calculations. Unlike previous studies, we found that the electronic total energy alone is not sufficient to explain the transition at least down to temperature of 400 K. The inclusion of entropy is crucial to explain the α - γ phase transition. Our results are consistent with experimental data and support the Kondo-Volume-Collapse picture, confirming the stabilization energy of the α - γ phase the quasi-particle Kondo resonance develops.

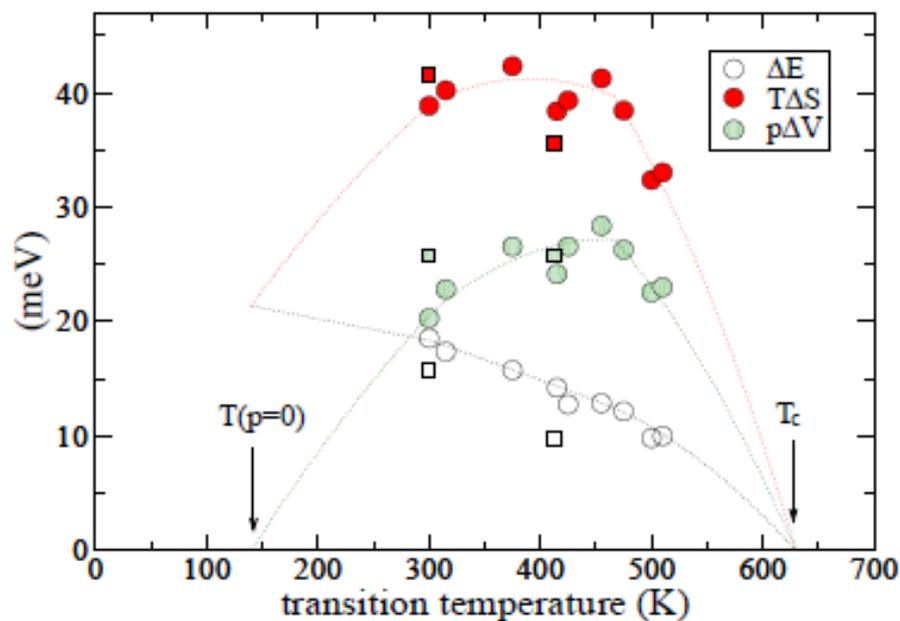


図19 Ceの内部エネルギー ΔE 、エントロピー項 $T\Delta S$ および圧力項 $p\Delta V$ 。 α - γ 転移はエントロピーによる。

② **Calculation of Hubbard U by the first principles calculation :**

The Hubbard U of the 3d transition metal series as well as SrVO₃, YTiO₃, Ce and Gd has been estimated using a recently proposed scheme based on the random-phase approximation. The values obtained are generally in good accord with the values often used in model calculations but for some cases the estimated values are somewhat smaller than those used in the literature. We have also calculated the frequency-dependent U for some of the materials. The strong frequency dependence of U in some of the cases considered in this paper suggests that the static value of U may not be the most appropriate one to use in model calculations. We have also made comparison with the constrained LDA method and found some discrepancies in a number of cases. We emphasize that our scheme and the constrained LDA method theoretically ought to give similar results and the discrepancies may be attributed to technical difficulties in performing calculations based on currently implemented constrained LDA schemes.

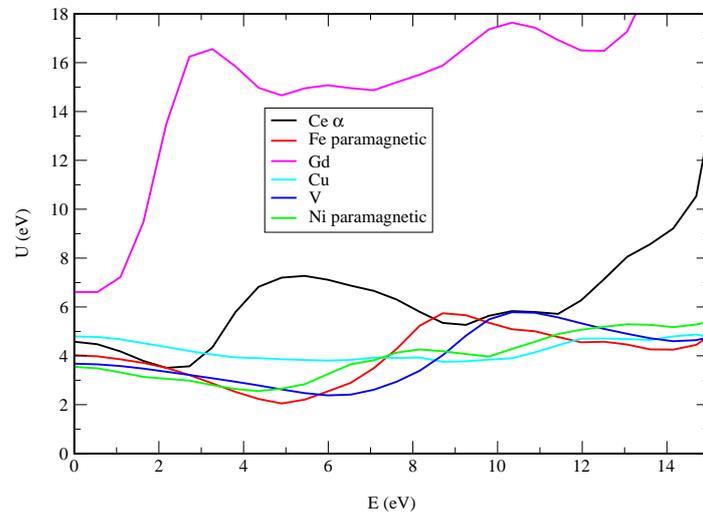


図20 c-RPAにより計算されたクーロン相互作用 U 。

③ **Construction of Wannier orbitals:**

Following the recently proposed scheme of Marzari and Vanderbilt we have developed a scheme to construct maximally localized Wannier functions using all-electron full-potential LMTO method. We have used them also to calculate the Hubbard U . We have also developed a different method of constructing Wannier orbitals based on maximizing the on-site Hubbard U .

④ **The electronic structure of VO₂:**

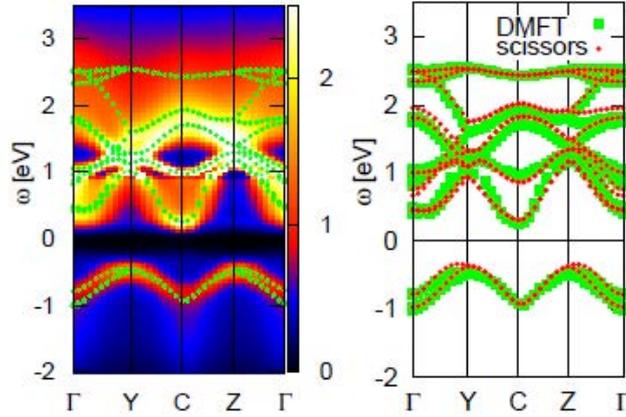


FIG 21 (color online) M1 VO₂ : (a) spectral function $A(k, \omega)$. (green) dots (in (a) & (b)) are solutions of the QPE. (b) The (red) dots represent the eigenvalues of the LDA Hamiltonian plus the effective potential. See text for discussion.

We have calculated the electronic structure of VO₂ both in the metallic and insulating phase using the so-called cluster LDA+DMFT (Dynamical Mean-Field Theory). We have found that while the metallic state cannot be described in terms of a one-particle picture, the insulating phase can be well reproduced by a one-particle Hamiltonian. Thus, our scenario may be called “many-body Peierls” in the sense that the excitation spectra is one-particle-like whereas the ground state is nevertheless highly correlated.

- ⑤ **Fully self-consistent temperature-dependent GW approximation:** Most GW calculations are performed in one shot. Apart from some semi-self-consistent calculations very few calculations have taken into account self-consistency fully. We have developed a finite-temperature fully self-consistent GW scheme based on an all-electron LMTO-ASA band structure method. Our preliminary results on transition metals indicate that fully self-consistent GW may worsen the one-shot results.
- ⑥ **“Screened Coulomb interaction in the maximally localized Wannier basis” :** Using the constrained random-phase approximation (cRPA) method that we have developed, we have studied systematically the effective screened interactions or the Hubbard U for the 3d transition metal series calculated in the maximally localized Wannier functions.. The values of the Hubbard U so obtained are generally quite close to the values commonly used in model calculations, indicating the soundness of our procedure. The frequency dependenc of the Hubbard U can be significant in some cases, casting doubt on the validity of model Hamiltonians which use a static U . We have also calculated the Hubbard U by a new method whereby the on-site U is maximized. Very surprisingly the values so obtained are very close to the those calculated using the maximally localized Wannier functions.

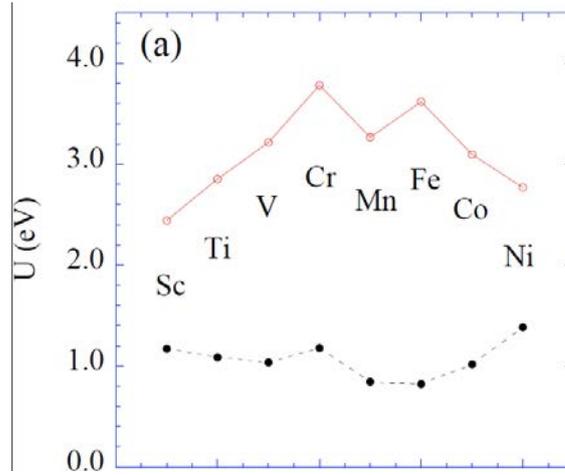


図 22 c-RPA を用いて計算された鉄族遷移金属におけるクーロン相互作用 $U(0)$ および遮蔽されたクーロン相互作用 $W(0)$ 。

⑦ “Generalized Hedin’s equations for quantum many-body systems with spin-dependent interactions” :

The original Hedin’s equations were derived for the self-energy of electrons interacting with the Coulomb interaction without the possibility of spin interactions. In recent years it has been increasingly recognized that spin interactions play a major role in determining many physical properties of systems such as nanoscale magnets and quantum dots. We have derived a generalized set of Hedin’s equations for quantum many-body systems with spin-dependent interactions. Unlike model Hamiltonian approaches, this allows first-principles study of many physical phenomena involving spin interactions. Effective spin-spin interactions such as Dzyaloshinsky-Moriya and Rashba effects should be encompassed in the spin Hedin’s equations. It also provides formalism for studying electron-magnon coupling from first-principles.

$$\begin{aligned} \Sigma_{\alpha\beta}^I(1,2) &= -\sigma_{\alpha\eta}^I G_{\eta\gamma}(1,4) \Lambda_{\gamma\beta}^J(4,2,5) W_{JL}(5,1) \\ W_{IJ}(1,2) &= v_{IJ}(1,2) + v_{IK}(1,3) P_{KL}(3,4) W_{LJ}(4,2) \\ P_{IJ}(1,2) &= \sigma_{\alpha\beta}^I G_{\beta\gamma}(1,3) \Lambda_{\gamma\eta}^J(3,4,2) G_{\eta\alpha}(4,1^+) \\ \Lambda_{\alpha\beta}^I(1,2,3) &= \delta(1-2)\delta(2-3)\sigma_{\alpha\beta}^I - \frac{\delta\Sigma_{\alpha\beta}^I(1,2)}{\delta G_{\gamma\eta}(4,5)} G_{\eta\eta'}(4,6) \Lambda_{\eta'\kappa}^J(6,7,3) G_{\kappa\gamma}(7,5) \end{aligned}$$

図 23 スピンに依存したヘディン方程式。この方程式により、スピンの依存した多電子相関、輸送現象その他への応用が可能になる。

⑧ “First-principles study of correlation effects in VO₂” :

The electronic structure of VO₂ has been a subject of controversy for many years. Experimentally it is an insulator but the local density approximation (LDA) yields a metal. On the one hand there is the view that VO₂ is a conventional insulator and the failure of the LDA is attributed to a well known shortcoming of the LDA. On the other hand there is a view that VO₂ is a strongly correlated insulator or a Mott-Hubbard insulator. Our semi-self-consistent GW calculations yield the correct insulating gap and suggest that VO₂ is not a truly Mott-Hubbard insulator. In agreement with previous calculations, we have found that self-consistency is crucial in opening up the gap.

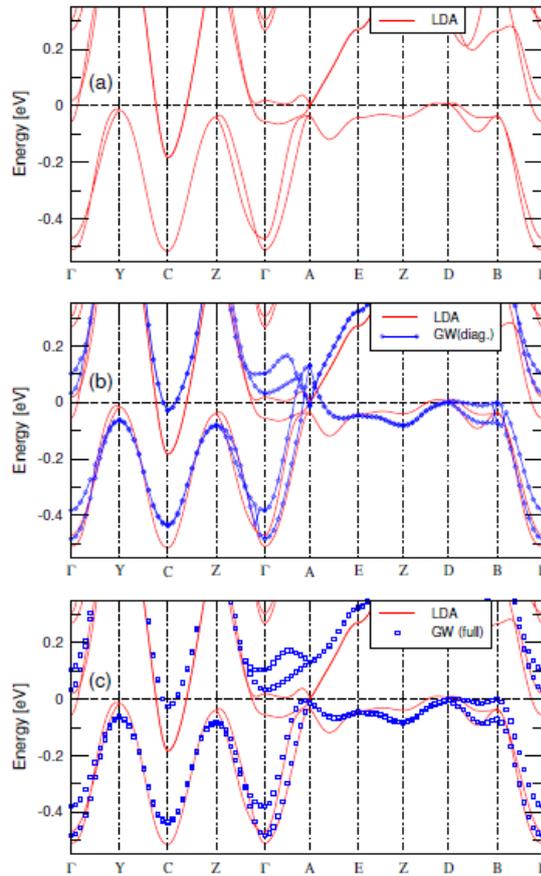


図 24 上 : LDA、中 : GW 近似、下 : フェルミエネルギー近傍のバンドに関し、自己エネルギーの非対角成分を導入したもの。

⑨ “Downfolded self-energy of many-electron systems”:

Starting from the full many-body Hamiltonian of interacting electrons the effective self-energy acting on electrons residing in a subspace of the full Hilbert space is derived. This subspace may correspond to, for example, partially filled narrow bands, which often characterize strongly correlated materials. The formalism delivers naturally the frequency-dependent effective interaction (the Hubbard U) and provides a general framework for constructing theoretical models based on the Green's function language. It also furnishes a general scheme for first-principles calculations of complex systems in which the

main correlation effects are concentrated on a small subspace of the full Hilbert space.

- ⑩ **“Effective quasiparticle Hamiltonian based on Löwdin’s orthogonalisation”:**
Recently several schemes have been proposed to perform self-consistent GW calculations within a one-particle (quasiparticle) approximation. These so-called quasiparticle self-consistent GW schemes have been found to be successful in reproducing band gaps of semiconductors, but there is some arbitrariness in the choice of the "effective" one-particle hamiltonian in these schemes and their validity have not been assessed. To avoid ambiguity in choosing the one-particle hamiltonian, we propose a scheme which is based on Löwdin's method of symmetric orthogonalization. In our approach we first calculate the true quasiparticle wavefunctions and energies with the real part of the frequency-dependent self-energy, and then orthonormalize these states using Löwdin's procedure to construct the effective quasiparticle hamiltonian. Löwdin's procedure ensures that the obtained orthonormal orbitals are the closest to the original non-orthogonal quasiparticle wavefunctions in the least-square sense and uniquely defines the one-particle hamiltonian with the same eigenvalues as the quasiparticle energies. Unlike previous approaches, this approach takes into account the full frequency dependence and the off-diagonal elements of the self-energy without ambiguity. As test cases, we perform quasiparticle self-consistent GW calculations on NiO and Gd. We find that previous results obtained using a different effective hamiltonian compare well with our results.

- ⑪ **“Pressure dependence of the Hubbard U”**
We have studied the pressure dependence of the effective interaction (Hubbard U) in MnO. We have found a surprising result, namely, contrary to expectation the Hubbard U increases as the pressure is increased. Using a model system, we are able to understand the origin of this phenomemo. This result from the fact that although the Wannier orbital does become more extended with increasing pressure, the weight of the orbital at the central atom increases resulting in a larger U. To confirm that our explanation is correct we have also studied a simple but realistic model of hydrogen atoms in an fcc lattice where the change in the Hubbard U can be readily analysed. We find that our explanation also holds well in this case.

(2)研究成果の今後期待される効果

- ① **Merging first-principles and model approaches:**
Two main approaches have been pursued for merging first-principles and model approaches. The first is the combination of the GW method and the dynamical mean-field theory (DMFT), which we call the GW+DMFT method. We have implemented this method using a suitable common basis which is chosen to be the maximally localized Wannier functions. A number of approximations are now being tested. For example, to treat the high-energy effective Coulomb interaction within the DMFT scheme is a difficult task and we have devised an approximate way of including this energy dependence. Test calculations are now being performed on SrVO₃. We expect that after successful implementation and testing, we can study many interesting phenomena associated with correlated materials. One of our first targets is to study the metal-insulator

transition in the system Sr/CaVO₃ and La/YTiO₃ which have not been studied fully from first-principles.

The second approach is direct calculations of the effective Coulomb interaction or the Hubbard U from first-principles. We have been developing our constrained random-phase approximation (cRPA) method to calculate the Hubbard U within the maximally localized Wannier functions. This U can then be used in a model Hamiltonian which can be solved using sophisticated techniques such as the DMFT or the quantum Monte Carlo technique. The cRPA method has by now been applied to a number of systems. We have also extended the method to treat materials where the narrow band is entangled with more extended bands, a long-standing problem in the field of correlated materials. A recent application is the calculation of the Hubbard U in the superconductor iron pnictides. In the future we expect this method to be applied to complex systems where mapping to a model Hamiltonian is essential. For example, some insight may be gained into the still unresolved superconducting problem in the cuprates from the precise knowledge of the Hubbard U.

② **Generalized Hedin's equations:**

We have derived a generalization of the famous Hedin's equations to treat many-electron systems with explicit spin-dependent interactions. This derived set of equations allow us to study the correlation effects on for example, the spin-orbit coupling, a subject which is gaining great interest in recent years due to the possibility of utilizing the spin-degree of freedom in device applications. Recently a novel spin-orbit coupling induced Mott state was discovered in Sr₂IrO₄ where the insulating state is not driven solely by a strong Coulomb correlation but rather by an interplay between spin-orbit coupling and Coulomb correlations. We expect a number of projects to result from the generalized Hedin's equations. Currently, in collaboration with the group of Prof. Biermann at the Ecole Polytechnique, we are trying to derive Rashba's interaction and other known interactions from the generalized Hedin's equations. We believe these interactions are contained in this set of equations.

③ **Construction of low-energy models from first-principles:**

We have considered a general problem of downfolding the many-electron self-energy onto a given arbitrary subspace and derived a closed set of equations for the effective self-energy in which the Hubbard U appears naturally. The motivation for this work is based on the fact that in many physical problems the correlation effects are to a large extent confined in a certain subspace. A well-known example of this is provided by correlated materials where most of the correlations effects determining the properties of the materials are confined to a partially filled narrow band. We expect that the closed set of equations provides a starting point for construction of low-energy models from first-principles. We also expect that the formal equations provide a practical means for simplifying computationally demanding GW calculations. Our proposal is to divide the GW calculations into two parts, one for the subspace where accurate calculations are needed and the rest where approximations can be made.

§ 5 成果発表等

(1)原著論文発表 (国内(和文)誌 4件、国際(欧文)誌 64件)

- 1) "Ab initio studies on chemical bonding in Cd- and Zn- quasicrystals", Y. Ishii and T. Fujiwara, *J. Non-Cryst. Solids*, vol.**334**, 336-341 (2004). (Published Mar. 15, 2004)
- 2) "Krylov subspace method for molecular dynamics simulation based on large-scale electronic structure theory", R. Takayama, T. Hoshi, T. Fujiwara, *J. Phys. Soc. Jpn*, vol.**73**, pp.1519-1524 (2004). (Published Jun. 15, 2004)
- 3) "Frequency-dependent local interactions and low-energy effective models from electronic structure calculations", Aryasetiawan F, Imada M, Georges A, Kotliar G, Biermann, S, Lichtenstein AI, *Phys. Rev. B* vol.**70**, 195104 (2004). (Published Nov. 11, 2004)
- 4) "Electronic structure, magnetic interactions, and the role of ligands in Mn_n (n = 4,12) single-molecule magnets", M. J. Han, T. Ozaki, and J. Yu, *Phys. Rev. B* vol.**70**, 184421 (2004). (Published Nov. 15, 2004)
- 5) 「第一原理計算における GW 近似の適用と QPscGW 理論」, 小谷岳生, Aryasetiawan F, 固体物理<計算機ナノマテリアルデザイン>特集号 vol.39, 731-741 (2004). (Published Nov. 15, 2004)
- 6) 「第一原理計算における動的平均場近似 (DMFT) の展開と応用」, 藤原毅夫, 固体物理<計算機ナノマテリアルデザイン>特集号 vol.39, 715-721 (2004). (Published Nov. 15, 2004)
- 7) 「多体電子論に基づく LDA を超える第一原理電子構造計算方法の基礎と開発」, 藤原毅夫, 固体物理<計算機ナノマテリアルデザイン>特集号 vol.39, 707-708 (2004). (Published Nov. 15, 2004)
- 8) "Variational optimized basis orbitals for biological molecules", T. Ozaki and H. Kino, *J. Chem. Phys.* Vol.**121**, 10879 (2004). (Published Dec. 4, 2004)
- 9) "Orbital Nature of Ferromagnetic Magnons in Manganites", Y. Endoh, H. Hiraka, Y. Tomioka, Y. Tokura, N. Nagaosa, and T. Fujiwara, *Phys. Rev. Lett.* vol.**94**, 017206 (2005). (Published Jan. 13, 2005)
- 10) "The electronic structure around As antisite near (110) surface of GaAs", Y. Iguchi, T. Fujiwara, A. Hida, K. Maeda, *Phys. Rev. B***71**, 125328 (2005). (Published Mar. 25, 2005)
- 11) "Theory of large-scale electronic structure calculation and nanostructures formed in silicon cleavage simulation: surface reconstruction, step and bending" T. Hoshi, Y. Iguchi, and T. Fujiwara, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* 832, Warrendale, PA, F.7.9, (2005) (Published Apr. 1, 2005)
- 12) "Theory for large scale electronic structure calculations : fracture and surface reconstruction of silicon" T. Fujiwara, T. Hoshi, R. Takayama, *CURRENT TOPICS IN PHYSICS -In Honor of Sir Roger J Elliott*, edited by R A Barrio and K. K. Kaski, Imperial College Press, London, pp. 299-310, (2005) (Published Jun. 30, 2005)

- 13) "Efficient projector expansion for the ab initio LCAO method", T. Ozaki and H. Kino, Phys. Rev. B **72**, 045121 (2005). (Published Jul. 14, 2005)
- 14) "Electronic structure and magnetic properties of small manganese oxide cluster", M. J. Han, T. Ozaki, and J. Yu, J. Chem. Phys. **123**, 034306 (2005). (Published Jul. 28, 2005) (Published 9 Aug. 2005)
- 15) "Nanoscale structures formed in silicon cleavage studied with large-scale electronic structure calculations: Surface reconstruction, steps, and bending", T. Hoshi, Y. Iguchi, and T. Fujiwara, Phys. Rev. B **72**, 075323 (2005). (Published Aug. 9, 2005)
- 16) "*k*-dependent spectrum and optical conductivity near metal-insulator transition in multi-orbital Hubbard bands", O. Miura and T. Fujiwara, J. Phys. Soc. Jpn. **75**, 014703 (2006). (Published Dec. 26, 2005)
- 17) "Large-scale electronic-structure theory and nanoscale defects formed in cleavage process of silicon", T. Hoshi, R. Takayama, Y. Iguchi and T. Fujiwara, Physica B **376-377**, 975 (2006) (Available Online Jan. 18, 2006)
- 18) "Non-icosahedral ordering of transition elements in Zn-TM-Sc quasicrystals", Y. Ishii, K. Nozawa and T. Fujiwara, Philos. Mag. **86**, 693 (2006). (Available Online Jan. 21, 2006)
- 19) "O(N) LDA+U electronic structure calculation method based on the non-orthogonal pseudo-atomic orbital basis", M. J. Han, T. Ozaki, and J. Yu, Phys. Rev. B **73**, 045110 (2006) (Published Jan. 31, 2006)
- 20) "The alpha-gamma phase transition of cerium is entropy-driven", B. Amadon, S. Biermann, A. Georges, F. Aryasetiawan, Phys. Rev. Lett. **96**, 066402 (2006). (Published Feb. 15, 2006)
- 21) "First-principles calculations of quantum transport in a single molecule", N. Kobayashi, T. Ozaki, K. Tagami, M. Tsukada, and K. Hirose, Jap. J. App. Phys. **45**, 2151 (2006). (Published Mar. 27, 2006)
- 22) "Draw out Carbon Nanotube from Liquid Carbon", S. Zhang, T. Hoshi, and T. Fujiwara, cond-mat/0604043. (Submitted Apr. 3, 2006)
- 23) "Linear algebraic calculation of the Green's function for large-scale electronic structure theory", R. Takayama, T. Hoshi, T. Sogabe, S.-L. Zhang and T. Fujiwara, Phys. Rev. B **73**, 165108, (2006). (Published Apr. 7, 2006)
- 24) "Contact-structure dependence of transport properties of a single organic molecule between Au electrodes", H. Kondo, H. Kino, J. Nara, T. Ozaki, and T. Ohno, Phys. Rev. B **73**, 235323 (2006). (Published Jun. 13, 2006)
- 25) "Electronic structure of antiferromagnetic LaMnO₃ and the effects of charge polarization", Y. Nohara, A. Yamasaki, S. Kobayashi, T. Fujiwara, Phys. Rev. B **74**, 064417 (2006). (Published Aug. 17, 2006)
- 26) "Calculations of Hubbard U from first-principles", F. Aryasetiawan, K. Karlsson, O. Jepsen, and U. Schonberger, Phys. Rev. B **74**, 125106 (2006). (Published Sep. 13, 2006)

- 27) "Large-scale electronic structure theory for simulating nanostructure process", T. Hoshi and T. Fujiwara, *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, 10787 (2006) (Published Nov. 17, 2006)
- 28) "O(N) Krylov subspace method for large scale ab initio electronic structure calculations of metals", T. Ozaki, *Phys. Rev.* **B74**, 245101 (2006). (Published Dec. 1, 2006)
- 29) "Electronic structures of Pt clusters adsorbed on (5, 5) single wall carbon nanotube", D. H. Chi, N. T. Cuong, N. A. Tuan, Y.-T. Kim, T. Mitani, T. Ozaki, and H. Nagao, *Chem. Phys. Lett.* **432**, 213 (2006). (Published Dec. 4, 2006)
- 30) "Continued fraction representation of the Fermi-Dirac function for large-scale electronic structure calculations", T. Ozaki, *Phys. Rev.* **B75**, 035123 (2007). (Published Jan. 23, 2007)
- 31) "Magnetic ordering and exchange interactions in multiferroic GaFeO₃", M. J. Han, T. Ozaki, and J. Yu, *Phys. Rev. B* **75**, 060404 (R) (2007). (Published Feb. 7, 2007)
- 32) "A numerical method for calculating the Green's function arising from electronic structure theory", T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, and T. Fujiwara, *Proc. International Symposium of Computational Science 2005 (FCS2005)*. (Published Aug. 17, 2007)
- 33) "Accuracy control in ultra-large-scale electronic structure calculation", T. Hoshi, *J. Phys.: Condens. Matter* **19**, 365243 (2007). (Published Aug. 24, 2007)
- 34) "Two-stage formation model and helicity of gold nanowires", Y. Iguchi, T. Hoshi and T. Fujiwara, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 125507 (2007). (Published Sep. 21, 2007)
- 35) "Electronic structure of charge and spin stripe order in La_{2-x}Sr_xNiO₄ (x=1/3, 1/2)", S. Yamamoto, T. Fujiwara, and Y. Hatsugai, *Phys. Rev.* **B76**, 165114 (2007). (Published Oct. 11, 2007)
- 36) "Introduction: Quasicrystals", T. Fujiwara, Y. Ishii, in *Quasicrystals*, Edit. T. Fujiwara, Y. Ishii, (Elsevier, 2007), pp.1-9. (Published Dec. 17, 2007)
- 37) "Electronic Structures and Stability Mechanisms of Quasicrystals", Y. Ishii, T. Fujiwara, in *Quasicrystals*, Edit. T. Fujiwara, Y. Ishii, (Elsevier, 2007), pp.171-208. (Published Dec. 17, 2007)
- 38) "Theoretical analysis of magnetic coupling in sandwich clusters V_n(C₆H₆)_{n+1}", H. Weng, T. Ozaki, K. Terakura, *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 014301 (2008). (Published Dec. 25, 2007)
- 39) "Screened Coulomb interaction in the maximally localized Wannier basis", T. Miyake and F. Aryasetiawan, *Phys. Rev.* **B77**, 085122 (2008) (Published Feb. 27, 2008)
- 40) "Electronic and optical properties of polyicosahedral Si nanostructures: A first-principles study", K. Nishio, T. Ozaki, T. Morishita, W. Shinoda, and M. Mikami, *Phys. Rev.* **B77**, 075431 (2008). (Published Feb. 27, 2008)

- 41) "Generalized Hedin's equations for quantum many-body systems with spin-dependent interactions", F. Aryasetiawan and S. Biermann, Phys. Rev. Lett. Vol.100, 116402 (2008) (Published Mar. 19, 2008)
- 42) "Formation of silicon-fullerene-linked nanowires inside carbon nanotubes: A molecular-dynamics and first-principles study", K. Nishio, T. Ozaki, T. Morishita, and M. Mikami, Phys. Rev. B Vol.77, 201401(R) (2008)(Published May. 12, 2008)
- 43) "Tailoring Magnetic Properties in Transition Metal-Benzene Sandwich Clusters: Ways to Design Molecular Magnets", H. Weng, T. Ozaki, and K. Terakura J. Phys. Soc. Jpn. Vol.77, 064301 (2008)(Published May. 26, 2008)
- 44) "Electronic structure of ferromagnetic bcc-Fe, fcc-Ni and antiferromagnetic NiO in the LDA+DMFT method", O. Miura and T. Fujiwara, Phys. Rev. B Vol.77, 195124 (2008)(Published May. 29, 2008)
- 45) "Theory of large-scale matrix computation and applications to electronic structure calculation", T. Fujiwara, T. Hoshi and S. Yamamoto, J. Phys.: Condens. Matter Vol.20, 294202 (2008)(Published Jun. 24, 2008)
- 46) "First-principles study of correlation effects in VO₂", R. Sakuma, F. Aryasetiawan, and T. Miyake, Phys. Rev. B Vol.78, 075106 (2008)(Published Aug. 8, 2008)
- 47) "GW studies of core-valence correlation effects on quasiparticle electronic structure: GaAs and CdTe", H.C. Choi, S. K. Kwon, B. I. Min, and F. Aryasetiawan, Journal of the Korean Physical Society Vol.53, 967 -972(2008)(Published Aug. 14, 2008)
- 48) "The effective bandstructure in the insulating phase versus strong dynamical correlations in metallic VO₂", J. Tomczak, F. Aryasetiawan, and S. Biermann, Phys. Rev. B Vol.78, 115103 (2008)(Published Sep. 3, 2008)
- 49) "On an application of the QMR_SYM method to complex symmetric shifted linear systems", T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, and T. Fujiwara, PAMM. Proc. Appl. Mech. 7, 2020081-2020082(2007)(Published Online Sep. 18, 2008)
- 50) "Large-scale electronic structure calculation theory and applications to nanostructure materials", T. Fujiwara and T. Hoshi, Appl. Surf. Sci. Vol.254, 7781-7785 (2008)(Available online 26 Feb. 2008, Published Sep. 30, 2008)
- 51) "GW approximation with LSDA+U method and applications to NiO, MnO and V2O3", S. Kobayashi, Y. Nohara, S. Yamamoto and T. Fujiwara, Phys. Rev. B Vol.78, 155112 (2008)(Published Oct. 13, 2008)
- 52) "Shifted Conjugate-Orthogonal-Conjugate-Gradient Method and Its Application to Double Orbital Extended Hubbard Model", S. Yamamoto, T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang and T. Fujiwara, J. Phys. Soc. Jpn. Vol.77, 114713 (2008)(Published Nov. 10, 2008)
- 53) "Ill-Contact Effects of d-Orbital Channels in Nanometer-Scale Conductor", H. Shinaoka, T. Hoshi and T. Fujiwara, J. Phys. Soc. Jpn. Vol.77, 114712 (2008)(Published Nov. 10, 2008)
- 54) "Development of simulation package 'ELSES' for extra-large-scale electronic

- structure calculation", T. Hoshi and T. Fujiwara, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 064233 (2009) (Published Jan. 20, 2009)
- 55) "Quasiparticle band structure of vanadium dioxide", R. Sakuma, T. Miyake, and F. Aryasetiawan, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 064226(2009)(Published Jan. 20, 2009)
- 56) "On a weighted quasi-residual minimization strategy of the QMR method for solving complex symmetric shifted linear systems", T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, and T. Fujiwara, *Electron. Trans. Numer. Anal.* **31**, 126(2008)(Published Feb. 16, 2009)
- 57) "Substrate-mediated interactions of Pt atoms adsorbed on single-wall carbon nanotubes: Density functional calculations", H.-C. Dam, N.-T. Cuong, A. Sugiyama, T. Ozaki, A. Fujiwara, T. Mitani and S. Okada, *Phys. Rev. B* **79**, 115426 (2009) (Published Mar. 20, 2009)
- 58) "Numerical evaluation of electron repulsion integrals for pseudoatomic orbitals and their derivatives", M. Toyoda, and T. Ozaki, *J. Chem. Phys.* **130**, 124114 (2009) (Published Mar. 25, 2009)
- 59) 「電子励起の定量的記述:GW 近似とベレーテ・サルピータ方程式」、T. Miyake and F. Aryasetiawan, *日本物理学会誌* **64**, 276 (2009) (Published Apr. 5, 2009)
- 60) "Downfolded self-energy of many-electron systems", F. Aryasetiawan, J. M. Tomczak, T. Miyake, and R. Sakuma, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 176402(2009) (Published Apr. 30, 2009)
- 61) "Electronic structure of perovskite-type transition metal oxides LaMO_3 ($M=\text{Ti}\sim\text{Cu}$) by U+GW approximation", Y. Nohara, S. Yamamoto, T. Fujiwara, *Phys. Rev. B* **79**, 195110 (2009) (Published May. 12, 2009)
- 62) "Domain boundary formation in helical multishell gold nanowire", T. Hoshi, T. Fujiwara, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 272201 (2009) (Published Jun. 4, 2009)
- 63) "Revisiting magnetic coupling in transition-metal-benzene complexes with maximally localized Wannier functions", H. Weng, T. Ozaki, and K. Terakura, *Phys. Rev. B* **79**, 235118, (2009) (Published Jun. 10, 2009)
- 64) "Effective Coulomb interactions in solids under pressure", J. M. Tomczak, T. Miyake, R. Sakuma, and F. Aryasetiawan, *Phys. Rev. B* **79**, 235133 (2009) (Published Jun. 30, 2009)
- 65) "Evolution of the electronic structure of a ferromagnetic metal: Case of SrRuO_3 ", P. Mahadevan, F. Aryasetiawan, A. Janotti, and T. Sasaki, *Phys. Rev. B* **80**, 035106 (2009) (Published Jul. 2, 2009)
- 66) "Beyond the GW approximation: Recent Developments and Future Perspectives", F. Aryasetiawan and T. Miyake, *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience* (review article, in press)
- 67) "Large scale simulation of quantum mechanical molecular dynamics for

nano-polycrystalline diamond", T. Hoshi, T. Iitaka, M. Fyta, J. Phys. Conf. Ser. (in press)

- 68) "Novel Algorithm of large-scale linear equations", T. Fujiwara, T. Hoshi, S. Yamamoto, T. Sogabe, and S.-L. Zhang, J. Phys.: Condensd. Matters. (in press)

(2) その他の著作物(総説、書籍など)

- 1) 「超大規模電子構造計算と 10nm スケール系の物理」, 星健夫, 藤原毅夫, 日本物理学会誌、2006年4月号、pp.256-259.
- 2) "*Quasicrystals*", Edit. T. Fujiwara and Y. Ishii (Elsevier, 2007).
- 3) "Ultra-large-scale electronic structure theory and numerical algorithm", T. Hoshi, 数理解析研究所講究録 1614, 計算科学の基盤技術としての高速アルゴリズムとその周辺, pp40-52, 京都大学数理解析研究所, 京都, 2008
- 4) "Ultrathin gold nanowires", T. Hoshi, Y. Iguchi and T. Fujiwara, Handbook of Nanophysics, Ed. Klaus D. Sattler, Taylor&Francis Publisher (in press)

(3) 国際学会発表及び主要な国内学会発表

① 招待講演 (国内会議 19 件、国際会議 54 件)

- 1) 「大規模電子構造計算による半導体破壊プロセスのナノメカニクス」, 星健夫, 井口雄介, 藤原毅夫 (東大工)、2004年格子欠陥フォーラム、秋田、Sep. 30 - Oct. 2. 2004
- 2) "Combination of LDA and Ligand Field Theory by DMFT", T. Fujiwara, O. Miura, and Y. Ishii (U.Tokyo, Chuo U), NAREGI Workshop on Electronic Transport, Excitation and Correlation in Nano-Science, Hokkaido University, Oct 4-6, 2004
- 3) "Large-scale electronic structure calculations and molecular dynamics simulation", T. Fujiwara, T. Hoshi, Y. Iguchi and R. Takayama (U Tokyo), Third Japan-China Symposium on Materials and Molecular Design, Tokyo University, Oct. 24-26, 2004
- 4) "First-principles approaches for correlated electrons and the Hubbard U", F.Aryasetiawan (産総研), International Workshop on Physics of Strongly Correlated Electron Systems, Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, Nov.1-19, 2004.
- 5) "Order-N density functional calculations with optimized local orbitals", T. Ozaki (AIST), The 7th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, 淡水大学、台湾、2004.Nov.2
- 6) 「分子・固体のオーダーNの電子状態計算法—OpenMX—の開発とその応用」, 尾崎泰助 (産総研)、第9回高分子計算機科学研究会講座、東京工業大学、2004. Nov.16
- 7) "First-principles approaches for correlated electrons and the Hubbard U", F. Aryasetiawan (AIST), International Workshop on Electronic Structure of Correlated Materials, Institut Henri Poincare, Paris, France, Dec. 8-10, 2004.

- 8) "Order-N density functional calculations with optimized local orbitals", 尾崎泰助 (産総研), サムソン高等研究所講演会, スオン(韓国), Dec.13, 2004.
- 9) "First-principles approaches for correlated electrons and the Hubbard U", F. Aryasetiawan (AIST), Seminar at University of Strasbourg, France, Dec.14, 2004.
- 10) 「大規模電子構造計算の理論と応用」、星健夫(東大工、CREST-JST)、日本原子力研究所 計算科学技術推進センター 平成16年度ステンシル専門部会、東京、Mar. 10, 2005.
- 11) "Development of Large-Scale O(N) Density Functional Code: OpenMX", 尾崎泰助 (産総研計算科学), Computational Science Workshop 2005, つくば, 2005.3.22.
- 12) "Development of large-scale density functional code: OpenMX", 尾崎泰助(AIST), an invited talk at UK Atomic Energy Authority, Oxford, UK, Apr.26,2005.
- 13) "Large-scale Electronic Structure Calculations and Molecular Dynamics Simulations, UT Forum 2005-Challenges in Materials Science and e-Sciences", 藤原毅夫(東大), Tsinghua Univ., Beijing, China, Apr. 28, 2005.
- 14) 「A-型反強磁性体 LaMnO_3 の電子構造(GW 近似の応用)」、藤原毅夫(東大)、応用物理学会北海道支部講演会、札幌、Jul.22, 2005.
- 15) "Electronic Structure of LaMnO_3 by GW Approximation and the electron-electron interaction", 藤原毅夫(東大)、Telluride Workshop on Physics of Novel Oxides, Telluride, Colorado, USA, Aug. 2-6, 2005.
- 16) F. Aryasetiawan (AIST) , "Merging first-principles and model approaches: GW+DMFT", 40 years of the GW approximation for the electron self-energy: Achievements and challenges", Bad Honnef, Germany, Sep.12, 2005.
- 17) "Linear scaling DFT with variationally optimized atomic orbitals", 尾崎泰助(AIST)、木野日織 (NIMS) ,Psi-k 2005 Conference, Schwaebisch Gmuend, Germany, Sep. 17-21, 2005.
- 18) "Calculating the Hubbard U from first-principles", F. Aryasetiawan (AIST) , Psi-k 2005 Conference, Schwaebisch Gmuend, Germany, Sep.17-21, 2005.
- 19) "Merging first-principles and model approaches: GW+DMFT", F. Aryasetiawan (AIST), Hokkaido University Creative Research Initiative "Sousei" (CRIS) workshop, Hokkaido, Nov.21-22, 2005.
- 20) "A numerical method for calculating the Green's function arising from electronic structure theory",曾我部知広(名古屋大)、星健夫(東大)、張紹良(名古屋大)、藤原毅夫(東大), International Symposium on Frontiers of Computational Science 2005, Nagoya, Dec.12-13, 2005.
- 21) "Electronic Structure of LaMnO_3 by GW Approximation and the electron-electron interaction",藤原毅夫(東大), Computational Nanomaterials Design/Collaboration EU-Japan, CECAM, Lyon, France, Dec.12-14, 2005.

- 22) "Electronic Structure of LaMnO_3 by GW Approximation and the electron-electron interaction", 藤原毅夫(東大), Invited Seminar Talk in Max-Planck Institute for Solid State Physics, Dec.15, 2005.
- 23) "Large scale electronic structure calculation and molecular dynamics", 藤原毅夫(東大)、星健夫(東大), Computational Nanomaterials Design/Present Status and Future Planning for the Collaboration in EU-Japan Research Training Network, CNRS, Orsay, France, Mar. 20-21, 2006.
- 24) 「超大規模電子構造計算とナノ構造プロセス」、星健夫(東大)、日本物理学会年会(愛媛大学)講演番号 28aXC-7 領域 4 領域 11 合同シンポジウム「次世代第一原理量子シミュレーションによる量子デザイン手法の展開」、Mar.27-30, 2006.
- 25) 「バンド理論からみた遍歴磁性の諸問題- 一体電子構造理論と多体電子論との接合-」、藤原毅夫(東大)、日本物理学会年会(愛媛大学)講演番号 28pSB-2 領域 3 シンポジウム「遍歴電子磁性の理論的諸問題-弱い相関から強い相関へ-」、Mar. 27-30, 2006.
- 26) "Large scale electronic structure calculation and molecular dynamics", T. Fujiwara and T.Hoshi, Computational Nanomaterials Design/Present status and Future Planning for the Collaboration in EU-Japan Research Training Network, CNRS, Orsay, France, Mar. 20-21, 2006.
- 27) "Electronic structure of antiferromagnetic LaMnO_3 and lifetime of quasiparticles", T. Fujiwara and Y. Nohara, Computational Science Workshop 2006 (CSW2006) *Computational Materials Science: Frontier of applications of DFT and beyond*, Tsukuba, Japan, Mar. 17-19, 2006.
- 28) 「クリロフ部分空間理論と超大規模電子構造計算」、星健夫、宮下-伊藤-藤堂研セミナー(東京大学理学部), Mar. 18, 2006.
- 29) 「超大規模電子構造計算によるナノ構造系動力学シミュレーター」星健夫、藤原毅夫、科学研究費補助金 特定領域研究「次世代量子シミュレータ・量子デザイン手法の開発」ミニワークショップ大規模・高精度電子状態計算手法に関する研究会、(大阪、大阪大学産業科学研究所), Mar. 13-14, 2006.
- 30) "Future prospects for treating correlated materials from first-principles", Materials Science Workshop, F.Aryasetiawan, Hokkaido University Creative Research Initiative "Sousei" (CRIS), Hokkaido, Jul. 26, 2006.
- 31) 「GW 近似の最近の進歩」藤原毅夫 特別セミナー、埼玉大理学部、Jul. 26, 2006.
- 32) Introduction to time-dependent density functional theory, "GW-Dynamical mean-field theory: an overview", F.Aryasetiawan, Mini-school on Time-Dependent Density-Functional Theory, National Taiwan University, Taipei, Taiwan, Sep. 4-5, 2006.
- 33) 「シフト複素対称線形方程式に対するクリロフ部分空間法～Shifted COCG 法を中心に～」、曾我部知広、星健夫、張紹良、藤原毅夫、日本応用数理学会「行列・固有値問題の解法とその応用」第2回研究会、Nov. 16, 2006.
- 34) "Finite temperature GW method: towards GW+D", H. Miyake, H. Inoue, F.

- Aryasetiawan, International Workshop on First Principles Calculation of Correlated Electrons, University of Tokyo, Japan, Nov. 30-Dec.1, 2006
- 35) "Electronic structures in correlated systems and novel GW approximation", T. Fujiwara, International Workshop on First Principles Calculation of Correlated Electrons, University of Tokyo, Japan, Nov. 30-Dec.1, 2006.
 - 36) "Ultra-large-scale electronic structure calculation and nanostructure process", T. Hoshi and T. Fujiwara, International Conference on Quantum Simulators and Design, Hiroshima University, Japan, Dec. 3-6, 2006.
 - 37) "O(N) Krylov subspace method for large-scale ab initio electronic structure calculations", T. Ozaki(AIST), International Conference on Quantum Simulators and Design, Hiroshima University, Japan, Dec. 3-6, 2006.
 - 38) 「新しいGW近似と NiO, V₂O₃の電子構造」 藤原毅夫、物性研究所短期研究会、東大物性研究所、柏、Dec. 11-13, 2006.
 - 39) "Ultra-large-scale quantum mechanical calculation and nanostructure process", T. Hoshi, International Symposium on Plasticity 2007 and its current applications, Alaska, USA, Jun. 2-6, 2007.
 - 40) 「ナノ材料物性に挑む計算機科学 -超大規模量子力学計算と産学連携-」、星健夫、日本金属学会・日本鉄鋼協会中国四国支部第100回記念金属物性研究会、Jun. 22-23, 2007.
 - 41) "Large-scale MD simulation and Two-Step Model for Gold Helical Multi-shell Nanowire", T. Fujiwara, Seminar Lecture in Naval Research Laboratory, Washington DC, USA, Jun. 25, 2007.
 - 42) "Development of Quantum Mechanical MD Simulator for 100nm-scale Materials", T. Fujiwara, Seminar Lecture in Corning, Corning, USA, Jun. 27, 2007.
 - 43) "Large-scale electronic structure calculation and silicon cleavage dynamics; Surface reconstruction, steps, and bending", T. Hoshi, Seminar Lecture in Corning, Corning, USA, Jun. 27, 2007.
 - 44) "Large scale electronic structure calculation theory and its application", T. Fujiwara, ISSP International Workshop on Foundations and Applications of the Density Functional Theory, ISSP, University of Tokyo, Jul. 9-Aug. 10, 2007.
 - 45) "Merging first-principles and model approaches", F. Aryasetiawan, ISSP International workshop on Foundations and Applications of the Density Functional Theory, ISSP, University of Tokyo, Jul. 19-Aug. 10, 2007.
 - 46) "First Principles Electronic Structure Calculations for Strongly Correlated Systems – GW approximation and LDA+DMFT–", T. Fujiwara, ISSP International Symposium on Foundations and Applications of the Density Functional Theory, ISSP, University of Tokyo, Aug. 2-4, 2007.
 - 47) "Principles and Implementations in the OpenMX package Mini-school on Fast O(N) Electronic Structure Calculations", Taisuke Ozaki, National Taiwan University, Aug. 27- 28, 2007.

- 48) "O(N) Krylov subspace method for large-scale ab initio electronic structure calculations", T.Ozaki, International Workshop on Linear-scaling ab initio calculations: applications and future directions, Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire, Lyon, France, Sep. 3-6, 2007.
- 49) "Large scale electronic structure calculation theory and several applications", T.Fujiwara, International Workshop on Linear-scaling ab initio calculations: applications and future directions, Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire, Lyon, France, Sep. 3-6, 2007.
- 50) "O(N) Krylov subspace method for large-scale ab initio electronic structure calculations", Taisuke Ozaki, The 9th High Performance Computing International Conference and Exhibition, Lotte Hotel, Seoul, Korea, Sep. 9-12, 2007.
- 51) "Merging first-principles and model approaches: Combining the GW method and Dynamical Mean-Field theory", F. Aryasetiawan, The 10th IUMRS International Conference on Advanced Materials, Bangalore, India, Oct. 8-10, 2007.
- 52) "Large scale electronic structure calculation theory and application to nanostructure materials", T. Fujiwara and T. Hoshi, The 9th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures (ACSIN9), University of Tokyo, Nov. 11-15, 2007.
- 53) 「LDA+DMFT 法による反強磁性 NiO の電子構造」、三浦沖、物質材料研究機構(NIMS) 計算科学センター主催 CMS セミナー、物質材料研究機構・計算科学センター(つくば千現地区)、Nov.14, 2007.
- 54) 「超大規模電子構造理論と数値計算アルゴリズム」、星健夫、計算科学の基盤技術としての高速アルゴリズムとその周辺、京都大学数理解析研究所、Nov.14-16, 2007.
- 55) 「超大規模電子構造計算とナノ構造プロセス」、星健夫、曾我部知広、山元進、新田仁、渡辺尚貴、張紹良、藤原毅夫、計算物質科学フォーラム研究会、日本大学文理学部自然科学研究所、Dec.8, 2007.
- 56) "Excitation spectra of a stripe ordered many-electron system - applications of the shifted COCG method to very large matrices", S. Yamamoto, International Workshop on Large-scale Matrix Computation and Applications in Physics and Engineering Science, University of Tokyo, Dec. 13, 2007.
- 57) "Novel algorithms in large-scale quantum-mechanical calculation and their application to nano-material processes", T. Hoshi, International Workshop on Large-scale Matrix Computation and Applications in Physics and Engineering Science, University of Tokyo, Dec. 13, 2007.
- 58) "Calculating the Hubbard U from first-principles: Constrained RPA", F. Aryasetiawan, International Workshop on Computational Physics and Materials Science, Bonn, Germany, Jan.11, 2008.
- 59) "Novel linear-algebraic algorithm and large-scale electronic structure calculation", T. Hoshi, T. Sogabe, S.-L. Zhang, S. Yamamoto, H. Nitta, N. Watanabe, Y. Zempo and T. Fujiwara, Riken-Harvard GPU Symposium 2008, Harvard University (USA),

Mar. 10-11, 2008

- 60) 「ナノマテリアルシミュレーション-超大規模電子構造計算からのアプローチ」星健夫、第2回分子科学会シンポジウム「計算化学の夢と現実-ナノ・バイオへの挑戦-」、大阪大学、May.23,2008
- 61) "Bridging the gap between first-principles and model approaches", F. Aryasetiawan, "The 1st International Conference of the Grand Challenge to Next-Generation Integrated Nanoscience, Tokyo Academic Park, Jun.3-7,2008
- 62) "Constrained RPA calculations of the Hubbard U", F. Aryasetiawan, *International Workshop on Recent Developments in Electronic Structure*, University of Illinois at Urbana-Champaign, USA, Jun.18-20, 2008
- 63) "First-principles methods in materials science", F. Aryasetiawan, *MP2 Summer School 2008*, University of Gothenburg, Sweden, Aug.18-23, 2008
- 64) 「超大規模電子構造計算とクリロフ部分空間アルゴリズム」星健夫、山元進、曾我部知広、張紹良、藤原毅夫、先駆的科学計算に関するフォーラム 2008～線形計算を中心に～、アクロス福岡 6階 601 会議室、Sep.3-4,2008
- 65) "GWA method with LSDA+U(U+GWA) and applications to transition metal oxides", T. Fujiwara, 物質材料研究機構(NIMS)計算科学センター主催 CMS セミナー, 物質材料研究機構・計算科学センター(つくば千現地区), Nov.10, 2008
- 66) "GWA method with LSDA+U (U+GWA) and applications to transition metal oxide", T. Fujiwara, Max-Planck Institute for Solid State Physics (Stuttgart, Germany), Solid State Lecture, Jan. 9, 2009.
- 67) "Nobel Algorithm of Large-scale Simultaneous Linear Equations", T. Fujiwara, MSL (Materials Simulation Laboratory) workshop '*Accessing large length and time scales with accurate quantum methods*', University College, London, Jan. 12-13, 2009.
- 68) "Effective Coulomb interaction and downfolded self-energy of many-electron systems", F. Aryasetiawan, "*From basic concepts to real materials*", Kavli Institute, University of California, Santa Barbara, USA, Nov. 2-6, 2009.
- 69) "Constrained RPA method for calculating the Hubbard U", F. Aryasetiawan, "*Conference on Computational Physics*", Kaohsiung, Taiwan, Dec. 15-19, 2009.
- 70) "The Hubbard U and downfolded self-energy of many-electron systems", F. Aryasetiawan, "Materials by Design", Kavli Institute, University of California, Santa Barbara, USA, Feb. 24-28, 2010.
- 71) "Mapping the many-electron problem to a model Hamiltonian", F. Aryasetiawan, "*Theoretical Spectroscopy: density functional theory and beyond for real materials*", Regensburg, Germany, Mar. 22-26, 2010.
- 72) 「弱相関遷移金属化合物の問題と第一原理電子構造計算」、藤原毅夫、日本物理学会 2009 年秋季大会、講演番号 27aRE-9、領域 3、熊本大学、Sep.25-28, 2009

- 73) "Large-scale Electronic Structure Calculation Theory and Applications", T. Fujiwara, S. Yamamoto, T. Hoshi, T. Sogabe, S.-L. Zhang, M. Ikeda, M. Nakashima, T. Mizuno, N. Watanabe, S. Nishino, The 3rd Theory Meets Industry International Workshop TMI2009, Nagoya, Nov. 11-13, 2009

② 口頭発表 (国内会議 38 件、国際会議 18 件)

- 1) "The combination method of the dynamical mean field theory with the first principle electronic structure theory", O. Miura and T. Fujiwara, International Symposium on Applied Physics on Strong Correlation, University of Tokyo, Oct. 6-8, 2004.
- 2) "Electronic Structure around As Ansite near GaAs (110) Surface", Y. Iguchi, T. Fujiwara, A. Hida, K. Maeda, International Symposium on Applied Physics on Strong Correlation, University of Tokyo, Oct. 6-8, 2004.
- 3) "Nanostructures in cleavage process simulation of silicon on the basis of large-scale electronic structure calculations; surface reconstruction, anisotropic strain and step formation", T. Hoshi, Y. Iguchi and T. Fujiwara, MRS Fall Meeting, Boston, USA, Nov. 29- Dec. 03, 2004.
- 4) "The Many-Body Problem in Materials Science", F. Aryasetiawan, The first Japanese-German Frontiers of Science Symposium : organized jointly by Japan Society for the Promotion of Science (JSPS) and the Alexander von Humboldt Foundation., Mainz, Germany, Jan.27-30, 2005.
- 5) "Development of Large-Scale O(N) Density Functional Code: OpenMX", T. Ozaki (AIST), Computational Science Workshop 2005, つくば, Mar. 22, 2005.
- 6) 「第一原理電子構造理論と動的平均場理論の複合手法による金属－絶縁体転移の転移点と縮重度の関係の解析」、三浦沖、藤原毅夫(東大工)、日本物理学会年会、千葉、Mar. 24-27, 2005.
- 7) 「大規模電子構造計算における局所状態密度:半導体表面ステップ構造への応用」、星健夫、高山立、藤原毅夫(東大工、CREST-JST、ACT-JST)、日本物理学会年会、千葉、Mar. 24-27, 2005.
- 8) 「一般化分割統治法によるオーダーN 密度汎関数法の開発」、尾崎泰助(産総研)、日本物理学会年会、千葉、Mar. 24-27, 2005.
- 9) "Large-scale electronic structure calculation and nanoscale structure formed in dynamical brittle fracture simulation of silicon", T. Hoshi, R. Takayama, Y. Iguchi and T. Fujiwara, MRS Spring Meeting, San Francisco, USA, Mar. 28-Apr. 01, 2005.
- 10) 「シフト線形方程式を解くためのシードの切り替えについて」、曾我部知広、星健夫、張紹良、藤原毅夫(東大)、第34回数値解析シンポジウム－NAS2005－静岡 Jun.28-30,2005.
- 11) "Large-scale electronic-structure theory and nanoscale defects formed in cleavage process of silicon",星健夫^{A,B}、高山立^B、井口雄介^A、藤原毅夫^{A,B}、(CREST-JST^A、東大院工^B)、ICDS-23/The 23rd International Conference on Defects in Semiconductors,

Awaji, Japan, Jul.26,2005.

- 12) "10-nm-scale molecular dynamics simulation by linear-scaling electronic structure calculation", 星健夫(東大)、藤原毅夫(東大)、Psi-k 2005 Conference, Schwaebisch Gmuend, Germany, Sep.17-21, 2005.
- 13) "Electronic Structure of A-type Antiferromagnetic LaMnO_3 by GW Approximation", 野原善郎(東大)、山崎敦嗣(MPI)、藤原毅夫(東大)、Psi-k 2005 Conference, Schwaebisch Gmuend, Germany, Sept.17-21, 2005.
- 14) 「 $\text{La}_{1.5}\text{Sr}_{0.5}\text{NiO}_4$ の電荷・スピン秩序」、山元進、丹下正章、初貝安弘、藤原毅夫(東大院工)、日本物理学会分科会(京都、同志社大学)講演番号 22aYP-1 領域 8 (強相関係分野-高温超伝導、強相関 f 電子系など) Sep.19-22,2005
- 15) 「第一原理電子構造理論と動的平均場理論の複手法—s, p, d 軌道全ての取り込み及び交換相互作用の効果—」、三浦沖 A、藤原毅夫^{A,B}(東大工 A、CREST-JST^B)、日本物理学会分科会(京都、同志社大学)講演番号 22aXL-3 領域 11 (統計力学、物性基礎論、応用数学、力学、流体物理分野) Sep.19-22,2005
- 16) 「非平衡 Green 関数を用いた金属ワイヤの電極効果の電子構造計算」、品岡寛、井口雄介、星健夫、藤原毅夫(東大)、日本物理学会分科会(京都、同志社大学)講演番号 20aYE-11 領域 9(表面・界面、結晶成長分野) Sep.19-22,2005.
- 17) 「オーダーN 法による 10nm スケール系の動的プロセスと電子物性」、星健夫(東大)、藤原毅夫(東大)、平成 17 年度東北大学電気通信研究所共同プロジェクト研究会「次世代ナノ・エレクトロニクスのための光・スピン・電化制御の理論」、Oct.26-17,2005.
- 18) 「GW 近似による A-type 反強磁性 LaMnO_3 の電子構造」、野原善郎(東大)、藤原毅夫(東大)、平成 17 年度東北大学電気通信研究所共同プロジェクト研究会「次世代ナノ・エレクトロニクスのための光・スピン・電化制御の理論」、Oct.26-27,2005.
- 19) 「GW 近似を用いた LaMnO_3 の電子構造計算と電子-正孔 励起の効果」、野原喜郎、藤原毅夫(東大)、東京大学物性研究所短期研究会「次世代ナノ・エレクトロニクスのための電子状態計算の基礎理論」Dec.26-27,2005.
- 20) 「 $\text{La}_{1.5}\text{Sr}_{0.5}\text{NiO}_4$ の電荷・スピン秩序状態」、山元進、丹下正章、初貝安弘、藤原毅夫(東大)、東京大学物性研究所短期研究会「次世代ナノ・エレクトロニクスのための電子 状態計算の基礎理論」Dec.26-27,2005.
- 21) 「大規模電子構造計算による分子動力学シミュレーション」、星健夫、張爽、藤原毅夫(東大)、東京大学物性研究所短期研究会「次世代ナノ・エレクトロニクスのための電子 状態計算の基礎理論」、Dec.26-27,2005.
- 22) 「オーダーN 密度汎関数法の開発」、尾崎泰助(AIST)、日本物理学会第 61 回年次大会、講演番号 30XH-8 領域 11、愛媛大学、Mar. 27-30. 2006
- 23) 「 $\text{La}_{1.5}\text{Sr}_{0.5}\text{NiO}_4$ の電荷・スピン秩序」、山元進^{A,B}、丹下正章^A、初貝安弘^A、藤原毅夫^{A, B}、(東大院工^A、CREST-JST^B)、日本物理学会第 61 回年次大会、講演番号 28aUE-2 領域 8 (強相関係分野—高温超伝導、強相関 f 電子系など)、愛媛大学、Mar.27-30,2006.

- 24) 「反強磁性 LaMnO_3 の電子構造と電子-空孔励起の効果」、野原善郎^A, 山崎敦嗣^B, 藤原毅夫^{A,C} (東大工^A, Max-Planck Institut^B, CREST-JST^C)、日本物理学会第 61 回年次大会、講演番号 28pXH-3 領域 11、愛媛大学、Mar. 27-30,2006.
- 25) 「ナノメートルスケール金属ワイヤを流れる非平衡電流の電子構造計算」、品岡寛^A, 山元進^{A,B}, 星健夫^{A,B}, 藤原毅夫^{A,B} (東大工^A, CREST-JST^B)、日本物理学会第 61 回年次大会、講演番号 30pXJ-9 領域 9、愛媛大学、Mar.27-30,2006.
- 26) 「クリロフ部分空間によるオーダーN 密度汎関数法の開発」、尾崎泰助 (産総研計算科学)、日本物理学会第 61 回年次大会、愛媛大学、Mar.27-30,2006.
- 27) "Draw out carbon nanotube from liquid carbon", S. Zhang, T. Hoshi, and T. Fujiwara, Nagano, Japan, Jul. 18-23, 2006.
- 28) 「大規模密度汎関数法コード:OpenMX の開発と応用」、尾崎泰助、日立製作所-産総研合同研究会、日立製作所、勝田、Aug. 2006.
- 29) 「ナノ構造量子力学計算における QMR 法の適用について」、曾我部知広、星健夫、張紹良、藤原毅夫、日本応用数学会2006年度年会、茨城、筑波大学、Sep. 16-18, 2006.
- 30) 「ナノメートルスケール金属ワイヤにおける非平衡電流の構造依存性」品岡寛、星健夫、藤原毅夫、日本物理学会秋季大会、千葉、千葉大学、Sep. 23-26, 2006.
- 31) 「第一原理電子構造理論と動的平均場理論の複合手法—s, p, d 軌道全ての取り込みと交換相互作用及びスピン分極の効果—」、三浦沖、藤原毅夫、日本物理学会秋季大会、千葉、千葉大学、Sep. 23-26, 2006.
- 32) 「2 軌道拡張ハバード模型における電荷・スピン秩序:1 軌道との相似点及び相違点」、山元進、藤原毅夫、日本物理学会秋季大会、千葉、千葉大学、Sep. 23-26, 2006.
- 33) "O(N) Krylov subspace method for large-scale ab initio electronic structure calculations", 尾崎泰助, International Conference on Quantum Simulators and Design, 広島大学, Dec. 2006.
- 34) 「大規模密度汎関数法コード:OpenMX の開発と応用」、尾崎泰助、100nm スケール材料の量子力学的分子動力学法シミュレータの開発研究会、東京大学、Jan. 2007.
- 35) 「Shifted-COCCG 法を用いたスペクトル関数の解析」、山元進、藤原毅夫、日本物理学会講演番号 22aWA-7 領域 11 (統計力学、物性基礎論、応用数学、力学、流体物理分野)、北海道大学、Sep. 21-24, 2007.
- 36) 「遷移金属酸化物における d-d 遷移による効果」、野原善郎、藤原毅夫、日本物理学会講演番号 22aWA-10 領域 11 (統計力学、物性基礎論、応用数学、力学、流体物理分野)、北海道大学、Sep. 21-24, 2007.
- 37) 「第一原理電子構造理論と動的平均場理論の複合手法による反強磁性 NiO の電子構造」、三浦沖、藤原毅夫、日本物理学会講演番号 22aWA-12 領域 11 (統計力学、物性基礎論、応用数学、力学、流体物理分野)、北海道大学、Sep. 21-24, 2007.
- 38) 「ヘリカル金ナノワイヤ形成過程の 2 段階モデルとシミュレーション」、井口雄介、星健夫、藤

- 原毅夫、日本物理学会講演番号 24aXK-3 領域 9(表面・界面、結晶成長分野)、北海道大学、Sep. 21-24, 2007.
- 39) 「超大規模電子構造計算を中核としたボトムアップ型理論アプローチ」、星健夫、谷川雅一、小田泰丈、石井晃、新田仁、渡辺尚貴、藤原毅夫、関西薄膜・表面物理セミナー、大阪府交野市、Nov. 30 - Dec. 1, 2007.
 - 40) 「クリロフ部分空間に基づく第一原理オーダー(N)密度汎関数法の開発」、尾崎泰助、文部科学省「最先端・高性能汎用スーパーコンピューターの開発利用」プロジェクト次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発、第二回公開シンポジウム、岡崎コンファレンスセンター、Mar. 4-5, 2008.
 - 41) "Evanescent-wave current through nanometer-scale conductor with generalized channel decomposition in non-equilibrium Green's function theory", H. Shinaoka, T. Hoshi, T. Fujiwara, *March Meeting of American Physical Society*, New Orleans (USA), Mar.10-14, 2008.
 - 42) "All-electron GW calculation of vanadium dioxide", R. Sakuma, T. Miyake, and F. Aryasetiawan, *March Meeting of American Physical Society*, New Orleans (USA) Mar.10-14, 2008.
 - 43) 「GW 近似による立方ペロブスカイト型遷移金属酸化物の電子構造」、野原善郎、藤原毅夫、第63回日本物理学会年次大会、近畿大学、Mar.22- 26, 2008.
 - 44) 「第一原理計算による Si(111)-2x1 表面ステップ構造とバイアス依存 STM 像」、谷川雅一、小田泰丈、星健夫、石井晃、第63回日本物理学会年次大会、近畿大学、Mar.22- 26, 2008.
 - 45) "Overview of OpenMX: Implementation and practical aspects", T. Ozaki, OpenMX/QMAS Workshop 2008, JAIST, Apr. 21-23, 2008
 - 46) "Constrained non-collinear density functional theory implemented in OpenMX", T. Ozaki, OpenMX/QMAS Workshop 2008, JAIST, Apr. 21-23, 2008
 - 47) "Linear scaling Krylov subspace method implemented in OpenMX", T. Ozaki, OpenMX/QMAS Workshop 2008, JAIST, Apr. 21-23, 2008
 - 48) "The usage of OpenMX", T. Ozaki, OpenMX/QMAS Workshop 2008, JAIST, Apr. 21-23, 2008
 - 49) 「LDA+クラスターDMFT 法による遷移金属化合物の解析」三浦沖、藤原毅夫、日本物理学会 2008 年秋季大会、講演番号 20pVC-3 領域 11 (統計力学、物性基礎論、応用数学、力学、流体物理分野)、岩手大学、Sep.20-23,2008
 - 50) 「OpenMX におけるオーダーN 第一原理シミュレーション」尾崎泰助、日本物理学会 2008 年秋季大会、講演番号 20pVC-3 領域 11、領域 3、領域 4、領域 9 合同シンポジウム、主題: 第一原理計算に基づくマルチスケールシミュレーションの展望、岩手大学、Sep.20-23,2008
 - 51) 「多結晶ナノダイヤモンドの大規模量子シミュレーション」星健夫、飯高敏晃、フィタ・マリア、第 49 回高圧討論会、姫路商工会議所、Nov.12-14,2008
 - 52) "Domain boundary formation in helical multishell gold nanowire, " T. Hoshi and T.

Fujiwara, 2009 APS March Meeting, A26.00007, Pittsburgh, Pennsylvania, USA, Mar. 16-20, 2009

- 53) 「ナノ多結晶ダイヤモンドの大規模電子構造計算」星健夫、飯高敏晃、M. Fyta、日本物理学会第 64 回年次大会、27aTE-8、立教大学、Mar.27-30, 2009
- 54) 「数値局在基底に対する二電子反発積分の計算」、豊田雅之、尾崎泰助、日本物理学会第 64 回年次大会、立教大学、Mar.27-30, 2009
- 55) 「大規模界面系計算における局所結合スペクトル解析」、星健夫、日本物理学会 2009 年秋季大会、熊本大学、Sep.25-28, 2009
- 56) 「LDA+cluster DMFT 法による NiO の電子状態:ニッケル-酸素間クーロン相互作用と NiO6 クラスタの効果」、三浦 沖、藤原毅夫、日本物理学会 2009 年秋季大会、講演番号 27pQF-7、領域 11、熊本大学、Sep.25-28, 2009

③ ポスター発表 (国内会議 6 件、国際会議 32 件)

- 1) 「一般化分割統治法によるオーダー-N 密度汎関数法の開発」、尾崎泰助 (産総研計算科学)、日本物理学会第 60 回年次大会、東京理科大学、Mar. 27, 2005.
- 2) "O(N) Krylov subspace method for large-scale ab initio electronic structure calculations",尾崎泰助, The 9th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, KIAS(ソウル), 韓国, Nov. 2006.
- 3) "Continued fraction representation of the Fermi-Dirac function for large-scale electronic calculations", 尾崎泰助, The 9th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, KIAS(ソウル), 韓国, Nov. 2006.
- 4) "Electronic structure of NiO by the LSDA+U+GWA method", Y. Nohara and T. Fujiwara, International Workshop on First Principles Calculation of Correlated Electrons , University of Tokyo, Japan, Nov. 30-Dec.1, 2006.
- 5) "Co-operation of ab initio calculation and exact diagonalization", S. Yamamoto and T. Fujiwara, International Workshop on First Principles Calculation of Correlated Electrons , University of Tokyo, Japan, Nov. 30-Dec.1, 2006.
- 6) "The combination method of the dynamical mean field theory with the first principle electronic structure theory", O. Miura and T. Fujiwara, International Workshop on First Principles Calculation of Correlated Electrons , University of Tokyo, Japan, Nov. 30-Dec.1, 2006.
- 7) "Two-stage formation model and helicity of gold nanowires", Y. Iguchi, T. Hoshi and T. Fujiwara, International Conference on Quantum Simulators and Design , Hiroshima University, Japan, Dec. 3-6, 2006.
- 8) "The combination method of the dynamical mean field theory with the first principle electronic structure theory", O.Miura and T.Fujiwara, International Conference on Quantum Simulators and Design. Hiroshima University, Japan, Dec. 3-6, 2006.

- 9) "Co-operation of ab initio calculation and exact diagonalization", S. Yamamoto and T. Fujiwara, International Conference on Quantum Simulators and Design , Hiroshima University, Japan, Dec. 3-6, 2006.
- 10) "Electronic structure of NiO by the LSDA+U+GWA method", Y. Nohara and T. Fujiwara, International Conference on Quantum Simulators and Design , Hiroshima University, Japan, Dec. 3-6, 2006.
- 11) "Continued fraction representation of the Fermi-Dirac function for large-scale electronic calculations", T.Ozaki, International Conference on Quantum Simulators and Design , Hiroshima University, Japan, Dec. 3-6, 2006.
- 12) "LDA+DMFT method with Iterative Perturbation Theory and its application to anti-ferromagnetic NiO", O.Miura and T.Fujiwara, *The 10th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations(ASIASN10)*, Hiroshima University, Oct. 29-31, 2007.
- 13) "Role of inter-site Coulomb interaction on charge and stripe order of $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_4$ " (Poster), S. Yamamoto and T. Fujiwara, *The 10-th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIASN10)*, Hiroshima University, Oct. 29-31, 2007.
- 14) "Large-scale electronic structure calculation and physics of nanostructure process", T. Hoshi and T. Fujiwara, *The 10-th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIASN10)*, Hiroshima University, Oct. 29-31, 2007.
- 15) "Ab initio study of a predicted step structure on Si(111)-2x1 surface and its bias-dependent STM image", M. Tanikawa, Y. Oda, T. Hoshi and A. Ishii, *The 9th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures (ACSIN9)*, University of Tokyo, Nov. 11-15, 2007.
- 16) "Development of simulation package for atomic processes of ultra-large-scale system based on electronic structure theory", H. Nitta, N. Watanabe, T. Hoshi and T. Fujiwara, *The 9-th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures (ACSIN9)* , University of Tokyo, Nov. 11-15, 2007.
- 17) 「有限要素法による原子の超高精度 LDA 計算とビリアル定理」尾崎泰助, 文部科学省次世代スーパーコンピュータプロジェクト/次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発、次世代ナノ情報機能・材料成果報告会、お茶のビジネスセンター、Feb. 25-26, 2008.
- 18) 「VO₂ の第一原理計算」佐久間怜, 三宅隆, F. Aryasetiawan、第 63 回日本物理学会年次大会、近畿大学、Mar.22-26, 2008
- 19) "Ab initio study of predicted step structure on Si and Ge(111)-2x1 surfaces and its bias-dependent STM image (Poster)", M. Tanikawa, Y. Oda, T. Hoshi and A. Ishii, International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD) 2008, National Museum of Emerging Science and Innovation (Miraikan), May.31-Jun.3,2008
- 20) "Large-scale quantum-mechanical simulation and nano-material process", T. Hoshi, H. Nitta, N. Watanabe, and T. Fujiwara, International Conference on Quantum

Simulators and Design (QSD) 2008, National Museum of Emerging Science and Innovation (Miraikan), May.31-Jun.3,2008

- 21) "Extra large size linear problem solver and its application to the excitation spectra in the many- electron problem (Poster)", S. Yamamoto, T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, and T. Fujiwara, International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD) 2008, National Museum of Emerging Science and Innovation (Miraikan), May.31-Jun.3,2008
- 22) "Trend of Screening effects in LaMO_3 (M=Ti~Cu) by GW approximation", Y. Nohara and T. Fujiwara, International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD) 2008, National Museum of Emerging Science and Innovation (Miraikan), May.31-Jun.3,2008
- 23) "LDA+DMFT method with Iterative Perturbation Theory and its application to antiferromagnetic NiO", O. Miura and T. Fujiwara, International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD) 2008, National Museum of Emerging Science and Innovation (Miraikan), May.31-Jun.3,2008
- 24) "Quasiparticle band structure of vanadium dioxide", R. Sakuma, T. Miyake and F. Aryasetiawan, International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD) 2008, National Museum of Emerging Science and Innovation (Miraikan), May.31-Jun.3,2008
- 25) "LARGE-SCALE MATRIX COMPUTATION AND APPLICATIONS TO ELECTRONIC STRUCTURE CALCULATION", T. Fujiwara, T. Hoshi and S. Yamamoto, The 1st International Conference of the Grand Challenge to Next-Generation Integrated Nanoscience, Tokyo Academic Park, Jun.3-7,2008
- 26) "Energy spectra of antiferromagnetic NiO by LDA+cluster DMFT with IPT", O. Miura and T. Fujiwara, The 11th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations(ASIAN11), National Sun Yat-Sen University, Kaohsiung, Taiwan, Nov.2-5, 2008
- 27) "GWA with LSDA+U and applications to NiO, MnO and V_2O_3 ", T. Fujiwara, Y. Nohara, K. Shoji and S. Yamamoto, The 11th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations(ASIAN11), National Sun Yat-Sen University, Kaohsiung, Taiwan, Nov.2-5, 2008
- 28) "Electronic structure of LaMO_3 (M=Ti~Cu) by GW approximation",Y. Nohara, S. Yamamoto and T. Fujiwara, The 11th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations(ASIAN11), National Sun Yat-Sen University, Kaohsiung, Taiwan, Nov.2-5, 2008
- 29) "Nano-scale energy competition in nanomaterial processes and large-scale electronic structure calculation",T. Hoshi, S. Yamamoto, T. Iitaka, M. Fyta and T. Fujiwara, The 11th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations(ASIAN11), National Sun Yat-Sen University, Kaohsiung, Taiwan, Nov.2-5, 2008
- 30) "Implementation of the non-equilibrium Green function method with the density functional theory for electronic transport calculations in OpenMX", T. Ozaki and H. Kino, The 11th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure

Calculations(ASIAN11), National Sun Yat-Sen University, Kaohsiung, Taiwan, Nov.2-5, 2008

- 31) "Implementation of hybrid functionals in OpenMX", M. Toyoda and T. Ozaki, The 11th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN11), National Sun Yat-Sen University, Kaohsiung, Taiwan, Nov.2-5, 2008
- 32) 「複合手法を用いた電子構造計算技術の開発」、藤原毅夫、山元進、星健夫、三浦沖、第4回シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築シンポジウム、慶応義塾大学、東京、Nov.12,2008
- 33) 「スピン・軌道方位制約条件付き密度汎関数理論の開発とその応用」尾崎泰助、第4回シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築シンポジウム、慶応義塾大学、東京、Nov.12,2008
- 34) "Generalised Hedin's equations and GW approximation for quantum many-body systems with spin-dependent interactions", F. Aryasetiawan, 第4回シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築シンポジウム、慶応義塾大学、東京、Nov.12,2008
- 35) "Numerical evaluation of four-center integrals for pseudoatomic orbitals", M. Toyoda and T. Ozaki, The 14th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force methods, The Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics, Trieste, Italy, Jan. 8-10, 2009
- 36) "Novel algorithms for large-scale shifted linear equations based on Krylov subspace theory", T. Hoshi, S. Yamamoto, T. Sogabe, S.-L. Zhang and T. Fujiwara, Supercomputing in Solid State Physics, ISSP, University of Tokyo, Feb. 16-19, 2009
- 37) "A hierarchical investigation of ultra-large-scale and ab initio electronic structure calculations - Silicon cleavage process and resultant stepped surface - ", T. Hoshi, M. Tanikawa, A. Ishii, 14th International Conference on Modulated Semiconductor structures (MSS-14), Kobe, Jul. 19-24, 2009
- 38) "Large scale simulation of quantum mechanical molecular dynamics for nano-polycrystalline diamond", T. Hoshi, T. Iitaka and M. Fyta, Joint AIRAPT-22 & HPCJ-50 (International Conference on High Pressure Science and Technology), Tokyo, Jul. 26-31, 2009

(4)知財出願

①国内出願 (0 件)

②海外出願 (0 件)

(5)受賞・報道等

①受賞

- 1) Outstanding Poster Award for the work on "Energy spectra of antiferromagnetic NiO by LDA+cluster DMFT with IPT", O. Miura and T. Fujiwara, The 11th Asian

Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN11),
National Sun Yat-Sen University, Kaohsiung, Taiwan, Nov.2-5, 2008

- 2) Institute of Physics (IOP) 「IOP Select」(重要論文選集)の 2009 年 8 月期分に選出
"Domain boundary formation in helical multishell gold nanowire", T. Hoshi, T.
Fujiwara, J. Phys.: Condens. Matter **21**, 272201 (2009) (Published Jun. 4, 2009)

(6)成果展開事例

①実用化に向けての展開

- 成果として得られた ELSES Program Package は、ELSES 会員に対して公開、無償使用許諾している(対象企業 15 社)。
- 成果として得られた U+GWA program package UT-LMTO GWA は公開準備中。
- 成果として得られた Open MX は公開している。

②社会還元的な展開活動

- ELSES 研究会を NPO 法人「科学技術ソフトウェア研究センター」として設立する準備中。

§ 6 研究期間中の主な活動 (ワークショップ・シンポジウム等)

| 年月日 | 名称 | 場所 | 参加人数 | 概要 |
|-----------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------|---------|-----------------------------------------------------------------------------------------------|
| 平成 17 年 10 月 8 日 | チームミーティング | 東京大学 | 14 名 | 研究報告・発表 |
| 平成 17 年 12 月 3 日 | チームミーティング | 産業総合研究所 | 17 名 | 研究報告・発表 |
| 平成 18 年 11 月 30 日～ 12 月 1 日 | International Workshop on First Principles Calculation of Correlate Electrons | 東京大学 小柴ホール | 約 100 名 | CREST チームと科学研究費 特定領域研究との共催で、 強い多電子相関を扱う研究 成果を発表し、又海外での 成果の報告を求める |
| 平成 19 年 7 月 13 日 | チームミーティング | 東京大学 | 7 名 | 研究報告・討論 |
| 平成 19 年 8 月 29 日 | チームミーティング | 産業技術総合研究所 | 7 名 | 研究報告・討論 |
| 平成 19 年 12 月 13 日 | International Workshop on Large-scale Matrix Computation and Applications in physics and Engineering Science | 東京大学 | 60 名 | 物性、工学、情報科学、数 理を中心としてアルゴリズム の重要性を意識した計算と その応用 について研究成果を発表 し、又海外での成果の報告 を求める。 |
| 平成 20 年 3 月 27 日 | チームミーティング | 千葉大学 | 7 名 | 研究報告・討論 |

| | | | | |
|------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------|------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 平成 20 年 4 月 5 日 | ELSES 研究会 | 東京大学 | 23 名 | 研究報告・討論 |
| 平成 20 年 4 月 21 日～ 23 日 | 第一原理電子状態計算 に 関 す る OpenMX/QMAS ワーク ショップ 2008 | 石川ハイテ ク交流セン ター | 64 名 | 第一原理電子状態計算手 法及び分子磁性体、マルチ フェロイック物質、界面構 造、シリコンナノワイヤー、カ ーボンナノチューブ触媒等 の応用計算を議論。又、プ ログラムパッケージの使用法 に関するチュートリアルコー スも開催。 |
| 平成 20 年 7 月 31 日 | ELSES 研究会 | 東京大学 | 15 名 | 研究報告・討論 |
| 平成 20 年 9 月 15 日 | 大規模系会合 研究連絡 | 東京大学 | 6 名 | 研究報告・討論 |
| 平成 20 年 9 月 16 日 | ELSES 研究会 | 東京大学 | 9 名 | 研究報告・討論 |
| 平成 20 年 11 月 24 日 | ELSES 研究会 | 東京大学 | 15 名 | 研究報告・討論 |
| 平成 20 年 12 月 1 日 | チームミーティング | 東京大学 | 5 名 | 研究報告・討論 |
| 平成 20 年 12 月 12 日 | 大規模系会合 研究連絡 | 東京大学 | 5 名 | 研究報告・討論 |
| 平成 21 年 1 月 30 日 | チームミーティング | 東京大学 | 5 名 | 研究報告・討論 |
| 平成 21 年 4 月 24 日 | チームミーティング | 東京大学 | 10 名 | 研究報告・討論 |
| 平成 21 年 12 月 7 日 ～9 日 | International Symposium of Electronic Structure Calculations-Theory, Correlated and Large Scale Systems and Numerical Methods- | 東京大学 一条ホール | 89 名 | 研究課題「複合手法を用い た電子構造計算技術の開 発」について、大規模系、強 相関、数理の3領域の研究 成果を発表し、議論する。 |

§ 7 結び

本研究プロジェクトが発足して5年間に過ぎる。研究代表者として当初の研究計画が大きな変更もなく、計画以上の成果をあげることができたことを、この上もなくうれしく感じている。ちょうど代表者の東京大学退職と時期が重なっていたが、この研究経費があったために、研究のペースを乱さず、また研究が興に乗っている時期とも重なり大変ありがたかった。深くお礼を申し上げたい。経費の使い方に対して、代表者の裁量が大きく認められているため、計画の変更や調整に困難を感じることなく、また最終年度の半年間の延長に伴う経費も承認していただき、大変感謝申し上げます。これにより、研究がいかに助けられたかは一言で述べるのは難しい。若手の海外出張も認められ大変ありがたかった。ただ一つ難を言えば、海外での会議の前後数日の自由を、若手に認めていただきたい。若い人たちが研究を離れて海外の文化に触れることは、長い目で見れば研究、さらには文化交流に大きな意義を持つと信じるからである。研究期間中に何度かの国際シンポジウムを開かせていただいた。これらの機会から、若い研究者たちが得るものもきっと大きかったであろうと考える。それらの機会のスナップ写真を以下に添付しておこう。

