

「H P C I 戦略プログラム」
分野 2 新物質・エネルギー創成

成果報告書（平成 24 年度）
【添付資料】

平成 2 5 年 5 月 2 9 日

東京大学 物性研究所 計算物質科学研究センター



計算物質科学イニシアティブ 統括責任者

常行真司

【添付資料 目次】

- 添付資料1 平成 24年度 CMSI 支援課題成果報告書
- 添付資料2 平成 24年度 CMSI 研究課題成果のトピックス
- 添付資料3 「京」試験利用成果報告書
- 添付資料4 平成 24年度 外部への成果発表
- 添付資料5 イベント報告書

フラストレート磁性体の計算科学研究
 --空間異方性を持つ三角格子 S=1 ハイゼンベルク反強磁性体--
 Computational-Science Study of Frustrated Magnets
 -- S=1 Heisenberg Antiferromagnet on Spatially Anisotropic Triangular Lattice --

中野博生^A、藤堂眞治^B、坂井徹^{A,C}、兵庫県立大物質理^A、東大物性研^B、原子力機構^C
 Hiroki Nakano^A, Syngye Todo^B, Toru Sakai^{A,C}, Uni. of Hyogo^A; ISSP, Uni. of Tokyo^B; JAEA^C

2次元反強磁性体がフラストレーションを有する系の一つに、三角格子上のハイゼンベルク反強磁性模型があり、かごめ格子反強磁性体などと共に高次元フラストレート系の典型として、多くの磁性研究者に強い関心を持たれている。解析が難しい多体問題である量子ハイゼンベルク模型は、様々な近似を用いて調べられているものの、系の振る舞いについて近似を超えたより良い理解を得る必要性から、近似を用いない直接数値シミュレーションによる知見の重要性が高まっている。しかしながら、系の高次元性とフラストレーションのために密度行列繰り込み群法や量子モンテカルロ法の適用が困難なことから、信頼性の高い知見を得る方法が、(系の大きさが小さいものしか取り扱えない)数値対角化法に限られている状況である。特に、構成スピンの大きさが $S=1/2$ である三角格子反強磁性体は古くから精力的に調べられ、基底状態では隣り合うスピンの角度をなし、3個の副格子のスピンの構造を有する長距離秩序状態が実現していると広く信じられている[1-4]。このような系に対する良い候補物質は、実験的にも見つかった[5]。しかしながら、構成スピンが $S=1$ である場合は、数値対角化法で取り扱える系の大きさが($S=1/2$ の場合と比べても更に)著しく小さいものに制限されてしまうため、数値対角化法による取り組みはほとんど行われていない。

今回、等価な方向として3個の方向がある三角格子上の $S=1$ ハイゼンベルク反強磁性体が空間異方性を持ち、1次元鎖に至るルートで相互作用を制御する場合を調べる。(図1参照。) 等方的な三角格子の場合($J_1=J_2$)には、上で述べた3副格子構造の長距離秩序が $S=1/2$ の場合と同様に形成されていると考えられる一方、1次元鎖直上($J_2=0$)では、ハルデンギャップが発生していることから、長距離秩序は失われる。したがって、相互作用を制御するルートの途中で、3副格子構造の長距離秩序が失われることが予測される。この問題に対して、[6]は、linked-cluster series expansionの近似法を用いて調べ、長距離秩序が消失するのは $J_2/J_1=0.33$ である、という結果を得ている。さらに、coupled cluster methodの近似で調べた[7]は、長距離秩序相がもっと広いという結果を報告している。

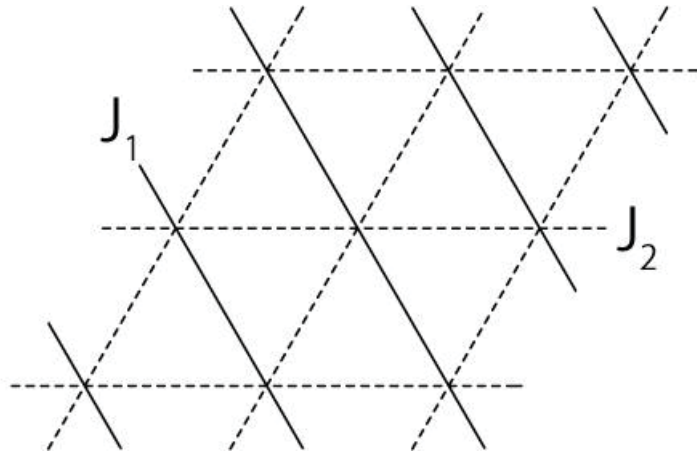


図1:空間異方性を持つ三角格子。頂点に $S=1$ スピンが局在したハイゼンベルク模型を考える。
 実線のスピン間相互作用の強さを J_1 、破線の相互作用の強さを J_2 としている。

添付資料 1

そのような状況で、我々は、かごめ格子反強磁性体の研究[8-10]で培った数値対角化法の大規模並列計算のプログラムと技術を活用して、今回の $S=1$ 三角格子ハイゼンベルク反強磁性体の計算を行った。今回取り扱ったクラスターサイズの中で最大のものは $N_s=27$ であり、その計算は、東大情報基盤センターの FX10 で実施した。(これまで $S=1$ スピン系を数値対角化法で取り扱った最大サイズは、著者らの知る限り、[11] における $N_s=24$ が最大である。) 今回、我々が様々なクラスターサイズで調べた 3 副格子構造の長距離秩序の振る舞いは、秩序相の領域が、[6,7]の近似の結果で得られているものよりもずっと狭いものであることを示唆する結果となった。これにより、近似では捉えることが出来なかった空間異方性を持つ三角格子 $S=1$ ハイゼンベルク反強磁性体の真の振る舞いを捉えることに成功した[12]。

- [1] D. A. Huse and V. Elser: Phys. Rev. Lett. **60**, 2531 (1988).
- [2] Th. Jolicoeur and J. C. Le Guillou: Phys. Rev. B **40**, 2727 (1989).
- [3] R. R. P. Singh and D. A. Huse: Phys. Rev. Lett. **68**, 1766 (1992).
- [4] B. Bernu, P. Lecheminant, C. Lhuillier, and L. Pierre: Phys. Rev. B **50**, 10048 (1994).
- [5] Y. Shirata, H. Tanaka, A. Matsuo, and K. Kindo: Phys. Rev. Lett. **108**, 057205 (2012).
- [6] T. Pardini and R. R. P. Singh: Phys. Rev. B **77**, 214433 (2008).
- [7] P. H. Y. Li and R. F. Bishop: Euro. Phys. J. **85** (2012) 25.
- [8] H. Nakano and T. Sakai: J. Phys. Soc. Jpn. **79**, 053707 (2010).
- [9] T. Sakai and H. Nakano: Phys. Rev. B **83**, 100405(R) (2011).
- [10] H. Nakano and T. Sakai: J. Phys. Soc. Jpn. **80**, 053704 (2011).
- [11] H. Nakano and A. Terai: J. Phys. Soc. Jpn. **78** 014003 (2009).
- [12] H. Nakano, S. Todo, and T. Sakai: J. Phys. Soc. Jpn. **82**, 043715 (2013).

平成24年度 CMSI研究成果報告書

◎第一部会「新量子相・新物質の基礎科学」

- | | | |
|------|---|------------------|
| A-1 | ワームアルゴリズムの並列化 | 正木晶子
(東京大学) |
| A-2 | 脱閉じ込め臨界現象のユニバーサリティ | 原田健自
(京都大学) |
| A-3 | 動的密度行列繰り込み群法による一次元強相関電子系の非線形光学応答の研究 | 曾田繁利
(理化学研究所) |
| A-4 | 多変数変分モンテカルロ法による $\text{EtMe}_3\text{Sb}[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$ 第一原理有効モデルの基底状態解析 | 森田悟史
(東京大学) |
| A-5 | 第一原理電子状態計算法をもとにした高温超伝導体にたいする電子状態計算 | 三澤貴宏
(東京大学) |
| A-6 | 密度行列繰り込み群を用いた量子化学計算 | 柳井毅
(分子科学研究所) |
| A-7 | メニーコアプロセッサと量子化学 | 安田耕二
(名古屋大学) |
| A-8 | 高精度MP2-F12法によるフラーレンの超並列量子化学計算 | 大西裕也
(神戸大学) |
| A-9 | 量子古典対応における特異点の除去:超多体量子力学に向けて | 高塚和夫
(東京大学) |
| A-10 | 三次元溶媒和構造の分布関数理論 | 佐藤啓文
(京都大学) |

◎第二部会「次世代先端デバイス科学」

- | | | |
|-----|--|-------------------------|
| B-1 | RSPACEを用いた電子構造・輸送特性シミュレーション | 小野倫也
(大阪大学) |
| B-2 | シリコン表面上のゲルマニウムハットクラスター成長に対するオーダーN法第一原理計算 | 宮崎剛
(物質・材料研究機構) |
| B-3 | 分割統治型実空間DFTコードを用いたハイブリッド量子古典シミュレーション | 大庭伸子
(豊田中央研究所) |
| B-4 | ナノ構造体における近接場光励起ダイナミクスの第一原理計算 | 信定克幸
(分子科学研究所) |
| B-5 | 高強度パルス光と物質の相互作用を記述する第一原理マルチスケールシミュレーション | 矢花一浩
(筑波大学) |
| B-6 | 界面磁気異方性エネルギーの実証計算と駆動電界閾値の予測 | 小田竜樹
(金沢大学) |
| B-7 | 第一原理電子状態計算コードOpenMXの超並列化及び高精度化 | 尾崎泰助
(北陸先端科学技術大学院大学) |
| B-8 | 多様な結晶におけるフォノンの非調和性に関する直接的計算 | 東後篤史
(京都大学) |
| B-9 | 第一原理トランスコリレイティッド法に基づくジャストロウ因子最適化の新手法 | 越智正之
(東京大学) |

◎第三部会「分子機能と物質交換」

- C-1 光機能分子の物性化学: Direct SAC-CI法による共役系分子の研究 福田良一
(分子科学研究所)
- C-2 ナノスケールの化学反応を取り扱うDC-DFTB法の開発と並列化 西澤宏晃
(早稲田大学/分子科学研究所)
- C-3 分割統治MP2プログラムの最近の展開と性能評価 小林正人
(早稲田大学)
- C-4 分子動力学計算ソフトMODYLASの開発と巨大分子集団系シミュレーションへの展開 安藤嘉倫
(名古屋大学)
- C-5 小児マヒウイルスの全原子シミュレーション 岡崎進
(名古屋大学)
- C-6 フラグメント分子軌道法と溶媒モデルとの融合法とその解析的エネルギー勾配の開発 北浦和夫
(神戸大学)
- C-7 拡張アンサンブル法による分子の構造と機能の解明 岡本祐幸
(名古屋大学)
- C-8 均一および不均一水溶液系における混合溶媒効果の自由エネルギー解析 松林伸幸
(京都大学)
- C-9 ミセルの生成と難溶分子の可溶化の分子動力学シミュレーション 吉井範行
(名古屋大学)

◎第四部会「エネルギー交換」

- D-1 ナノ構造制御によるカルコパイライト型およびII-VI族化合物太陽電池材料の計算機マテリアルデザイン 佐藤和則
(大阪大学)
- D-2 光増感剤の合理的分子設計にむけて: 環境効果と励起エネルギー移動 長谷川淳也
(北海道大学)
- D-3 3D-RISM-SCFによるピロリン酸の加水分解反応解析 吉田紀生
(九州大学)
- D-4 First-Principles Molecular Dynamics under Constant Potential Nicephore Bonnet
(産業技術総合研究所/東京大学)
- D-5 第一原理分子動力学計算コードSTATEの京コンピュータでの計算効率向上を目指した改良 稲垣耕司
(大阪大学)
- D-6 電極界面の解析と拡張アンサンブル法の適用 杉野修
(東京大学)
- D-7 高性能リチウムイオン電池の開発に向けた基礎的研究 大脇創
(日産自動車株式会社)
- D-8 メタンハイドレートの分解過程の分子動力学計算 矢ヶ崎琢磨
(岡山大学)
- D-9 有機・色素増感型太陽電池における光電変換の基礎過程(2) 城野亮太
(東京大学)
- D-10 クラスレートハイドレート基のガス貯蔵材料の理論研究 水関博志
(東北大学)
- D-11 外部電場下におけるC60分子の光励起スペクトル第一原理計算 野口良史
(東京大学)
- D-12 実用材料の飛躍的高性能化にむけたマルチスケール組織設計・評価方法の開発 澤田英明
(新日鐵住金株式会社)

◎材料戦略課題・特別支援課題提案

- | | | |
|-----|-------------------------------------|-------------------|
| E-1 | 合金凝固組織の高精度制御を目指したデンドライト組織の大規模数値計算 | 大野宗一
(北海道大学) |
| E-2 | 超高速分子動力学計算による強誘電体薄膜キャパシタの高性能化 | 西松毅
(東北大学) |
| E-3 | ナノクラスターから結晶までの機能性材料の全電子スペクトルとダイナミクス | 大野かおる
(横浜国立大学) |

◎一般課題

- | | | |
|-----|---|--------------------|
| F-1 | フラストレート磁性体の計算科学研究
- 空間異方性を持つ三角格子S=1ハイゼンベルク反強磁性体 - (支援課題) | 中野博生
(兵庫県立大学) |
| F-2 | ペタスケールコンピュータにおける分子動力学法の可能性 | 渡辺宙志
(東京大学) |
| F-3 | 剪断流下の脂質膜系の構造形成 (支援課題エントリー) | 芝隼人
(東京大学) |
| F-4 | 3d遷移金属化合物におけるL2,3端X線吸収スペクトルの第一原理計算 | 池野豪一
(京都大学) |
| F-5 | 量子ウォーク法による時間依存シュレーディンガー方程式の解法 | 関野秀男
(豊橋技術科学大学) |
| F-6 | フラストレート磁性体におけるトポロジカル相転移の
大規模並列モンテカルロシミュレーション | 大久保毅
(東京大学) |
| F-7 | 量子化学超並列計算基盤プログラムの開発 | 石村和也
(分子科学研究所) |
| F-8 | ポテンシャルスMOOTHINGによるWang-Landauサンプリングの拡張に向けて | 志田和人
(東北大学) |

添付資料 3 「京」試験利用成果報告書 目次

<u>アプリケーション名</u>	<u>代表者</u>	<u>ページ</u>
◎ナノ統合関連		
RSDFT	押山淳 (東京大学)	1
大規模並列量子モンテカルロ法 ALPS/looper	藤堂眞治 (東京大学)	6
modylas	岡崎進 (名古屋大学)	9
DDMRG (動的密度行列繰り込み群法)	遠山貴己 (京都大学)	12
RISM / 3D-RISM	平田文男 (分子科学研究所)	15
MP2-FMO	永瀬茂 (京都大学) 北浦和夫 (神戸大学)	22
DC量子化学計算プログラム (DC-MP2, DC-DFTB)	中井浩巳 (早稲田大学)	29
QMAS (Quantum MAterials Simulator)	石橋章司 (産業技術総合研究所)	34
◎分野2関連		
MACE	今田正俊 (東京大学)	37
GELLAN	天能精一郎 (神戸大学)	42
CONQUEST	宮崎剛 (物質・材料研究機構)	45
RSPACE	小野倫也 (大阪大学)	50
PIQUANDY	信定克幸 (分子科学研究所)	53
CASINO	前園涼 (北陸先端科学技術大学院大学)	56
レプリカ交換法付加機能ソフト:REM	岡本佑幸 (名古屋大学)	59
STATE	杉野修 (東京大学)	63
OpenMX (Open source package for Material eXplorer)	大谷実 (産業技術総合研究所)	67
CPMD	館山佳尚 (物質・材料研究機構)	71

「京」試験利用 最終成果報告フォーム

氏名(全員分)	○押山淳、岩田潤一、内田和之、古家真之介、小泉健一、辻美和子*
所属(全員分)	東京大学大学院工学系研究科、筑波大学計算科学研究センター*
電子メール(代表)	oshiyama@ap.t.u-tokyo.ac.jp
利用期間(代表)	平成 23 年 4 月 1 日 ~ 平成 25 年 3 月 31 日

アプリケーション名	RSDFT
実際に利用した ノード規模	24,576
背景、目的	次世代先端デバイス開発のためにナノ構造体の電子状態を量子論の第一原理に立脚した計算により明らかにする必要がある。またナノ科学の進展のためにも、そうした 10,000 - 100,000 原子群の原子・電子構造の解明は欠かせない。
計算手法、 具体的な利用方法 (図の添付可)	密度汎関数理論に立脚した全エネルギー・電子構造計算を実空間差分法で実行する手法【RSDFT (Real Space Density Functional Theory) コード】. 具体的には、ターゲット実空間をセルに分割し、また各電子状態をグループ化し、並列計算を行う。MPI 並列と OpenMP によるスレッド並列を併用したハイブリッド並列。
開発状況 (単体性能、 並列度、実行性能等を 踏まえた達成状況、現 状の問題点等を定量的 に記載下さい。) (図の添付可)	<p>アルゴリズムとしては、演算負荷の重い、グラムシュミット直交化部分をグループピングによる行列演算化、部分対角化に Divide-and-conquer 法あるいは Eigen(今村俊幸先生 (AICS) 開発)を採用している。また、櫻井-杉浦法による固有値問題解法の実装も行っている。</p> <p>最終的に 24,576 ノードまでのノード拡大の条件をクリアした。12,288 ノードとの比較では並列化効率 76.4%である。また 24,576 ノードでの実行演算性能は 1.24PFLOPS で、ピーク比の 39%を達成している。これらの高い性能は行列積演算によるところが大きい。差分法や非局所ポテンシャル演算部分等の BLAS3 を使えない部分の性能にはまだまだ改良の余地があると思われる。</p>

(1) 100,000 原子系の第一原理計算

理研—筑波大—東大—富士通の共同により、「京」の約3分の2のリソースを使用し、ナノワイヤー100,000 原子規模電子状態計算を実行し、実効性能 3.08 ペタフロップス（実行効率 43.6%）を達成した。これにより、2011年度ゴードンベル賞（最高性能賞）を受賞した。

(2) 数万原子系 Si ナノワイヤの電子状態密度

直径 10nm, 長さ 3nm~10nm というサイズの Si ナノワイヤ, 原子数にして 1 万~4 万原子系の電子状態の自己無撞着計算を達成した。実際に Si ナノワイヤがトランジスタとして利用される世代ではチャンネル長は 10nm 以下となっており, 今回の計算は, 実デバイスサイズでの第一原理電子状態計算が実現したことを示すものである。ワイヤの長さ (チャンネル長) が 3nm から 10nm へと伸びるにつれ, 電子状態は一次元系に特有の構造となることが予想されるが, 実際には 10nm という長さでは一次元的な電子状態密度の発散は見られないことがわかった (図 1)。また直径 10nm の円形, 長軸 14nm・短軸 7nm の楕円形, 直径 10nm の円形で周囲にラフネスを持つ断面 (いずれも長さ 3nm, 約一万原子の系) の Si ナノワイヤの状態密度を比較したところ, これら断面形状の違いが電子状態に大きく影響することがわかった。

試験利用による
成果概要
(図の添付可)

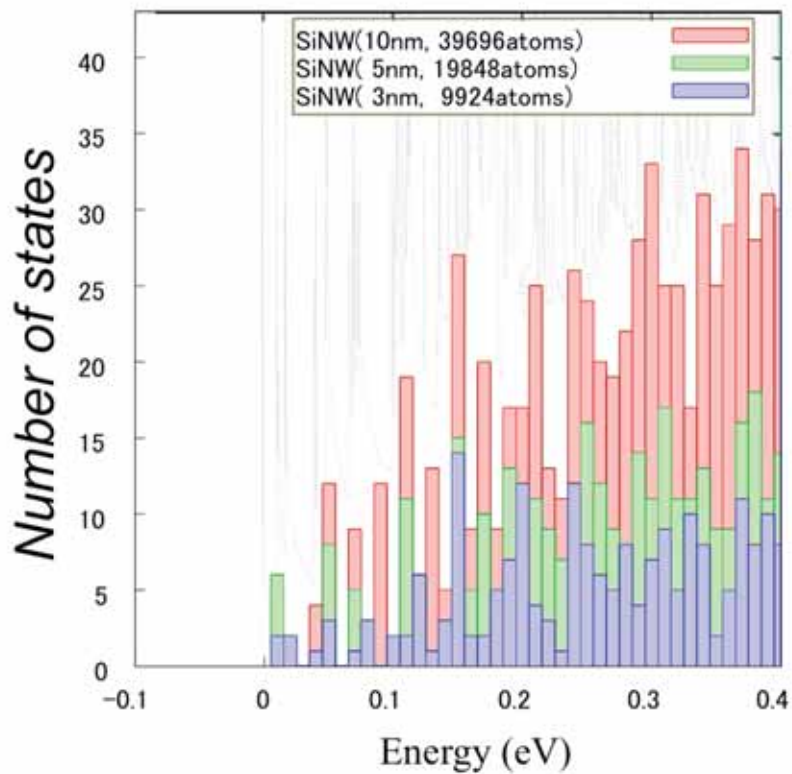


図 1 : 直径 10nm, (110)断面, 長さ 3nm,5nm,10nm の SiNW の状態密度. 黒点線は無限長の SiNW の状態密度.

(3) 櫻井-杉浦法による数万原子系のバンド構造計算

複素周回積分により、積分路の内側にある固有値のみを取り出して計算することができる櫻井-杉浦法の RSDFT 上への実装を行い、これを数万原子規模の Si ナノワイヤのバンド構造計算に応用した。通常バンド構造計算は、自己無道着に求められたポテンシャルを用いて、波数ベクトルというパラメータ変化させながら多数回、固有値問題を解き直すことで行われる。しかしその演算量は自己無道着計算と同じく原子数の3乗に比例して増大し、大規模系でバンドのバンド構造を得る事は非常に困難であった。今回、櫻井-杉浦法を応用し、1万原子規模の Si ナノワイヤのバンド構造を得ることができた (図2)。同手法は今後の解析に多いに役立つと期待できる。

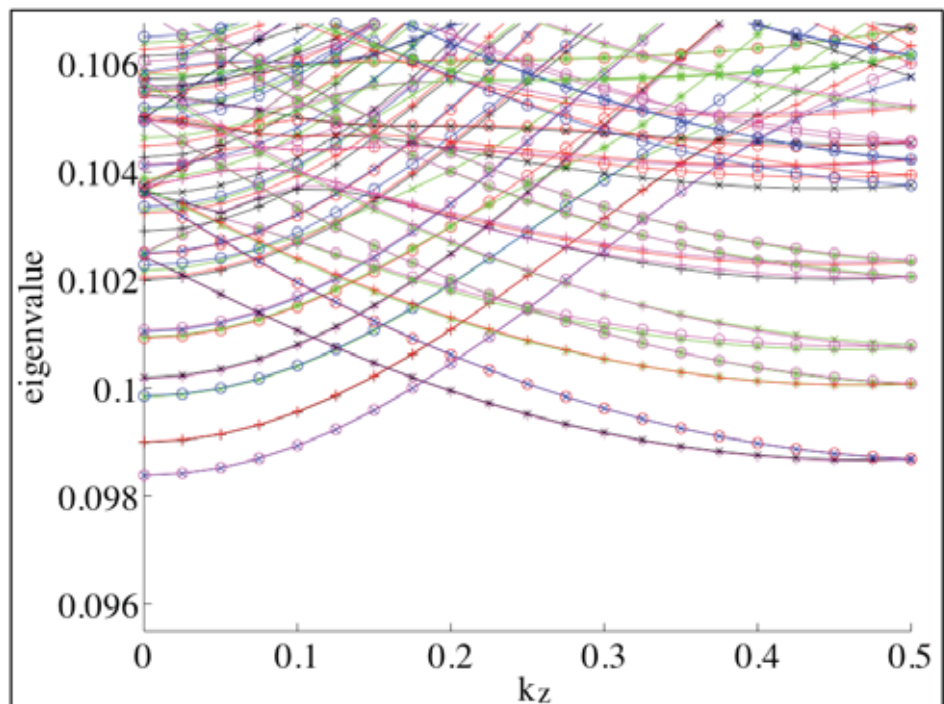


図2 : 直径 10nm、(110)断面 Si ナノワイヤ (約 1 万原子) の伝導帯底付近のバンド構造

今後の計画、展望

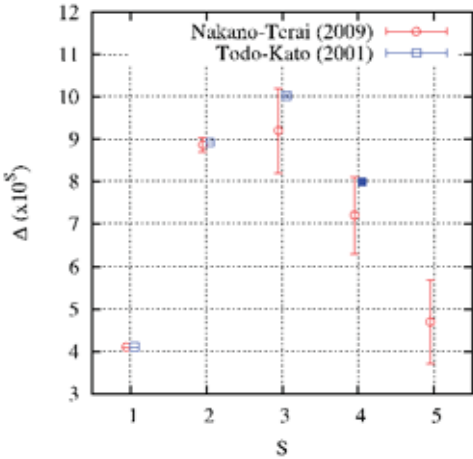
実際のデバイス動作化でのシミュレーションを行うために、バイアス電場下での電子状態計算プログラムの開発と応用が計画されている。

論文、講演、 その他出版物	<p>【学術誌】</p> <p>1) Y. Hasegawa, J.-I. Iwata, M. Tsuji, D. Takahashi, A. Oshiyama, K. Minami, T. Boku, F. Shoji, A. Uno, M. Kurokawa, H. Inoue, I. Miyoshi, M. Yokokawa, "First-principles calculations of electron states of a silicon nanowire with 100,000 atoms on the K computer", SC11 Proceedings of 2011 International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis. (富士通・理研では下記のページにリンクが張っており論文がダウンロードできます http://dl.acm.org/citation.cfm?id=2063386) ゴードンベル賞受賞論文.</p> <p>2) Y. Futamura, T. Sakurai, S. Furuya, J. -I. Iwata, "Efficient Algorithm for Linear Systems Arising in Solutions of Eigenproblems and its Application to Electronic Structure Calculations", VECPAR2012, accepted. (http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/VECPAR2012/)</p> <p>3) 古家真之介、岩田潤一、長谷川幸弘、松下雄一郎、押山淳、賀谷信幸、"シリコンナノワイヤのシミュレーションとπ-CAVE システムによる可視化"、可視化情報学会誌 32, pp10-15 (2012).</p> <p>【講演】</p> <p>1) 岩田潤一、「実空間密度汎関数法コード RSDFT による大規模電子状態計算」、2011 年度理研シンポジウム「世界最速の京と、その次」、2012 年 2 月 16 日、理化学研究所、和光市</p> <p>2) 岩田潤一、「実空間密度汎関数プログラムの開発とナノ構造物質の電子状態計算」、第 74 回情報処理学会全国大会イベント企画「スパコンアプリ開発最前線」、2011 年 3 月 8 日、名古屋工業大学、名古屋市</p> <p>3) A. Oshiyama, "Materials Design though Computics: Nanostructures of Silicon and Carbon", VECPAR2012, (http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/VECPAR2012/)</p> <p>4) J.-I. Iwata, "First-principles electronic structure calculations with K computer", Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC2012), 2-7 Sep, 2012, Pavia, Italy</p> <p>5) Y. Futamura, T. Sakurai, S. Furuya, J. Iwata, "Efficient algorithm for solving linear systems arising from a sparse eigensolver", Parallel Matrix Algorithms and Applications (PMAA2012), 28-30 June 2012, Birbeck University of London, UK</p> <p>6) 古家真之介、「実空間密度汎関数プログラム RSDFT の開発と固体系への適用」、先駆的計算科学に関するフォーラム 2012～京コンピュータの利用に向けた分子科学での取り組み～、2012 年 2 月 24 日、九州大学情報基盤研究開発センター</p>
------------------	--

「京」試験利用 最終成果報告フォーム

氏名(全員分)	○藤堂眞治、松尾春彦、設楽秀之、川島直輝、富田祐介
所属(全員分)	東大物性研、東大院工(現 RIST)、富士通、東大物性研、東大物性研(現芝工大)
電子メール(代表)	wistaria@issp.u-tokyo.ac.jp
利用期間(代表)	平成 23 年 4 月 1 日 ~ 平成 25 年 3 月 31 日

アプリケーション名	大規模並列量子モンテカルロ法 ALPS/looper
実際に利用した ノード規模	24576 ノード
背景、目的	高度に並列化されたループアルゴリズム量子モンテカルロ法により、量子反強磁性体における指数関数的に小さなエネルギーギャップの精密測定や、新奇な量子相転移臨界現象の解明を目指す。
計算手法、 具体的な利用方法 (図の添付可)	連続虚時間ループアルゴリズムを用いた量子スピン系のモンテカルロ計算。連続虚時間経路積分表示にもとづいており、虚時間離散化誤差のない精度の高い計算が可能となっている。また、世界線の更新にはループアルゴリズムを用いている。ループアルゴリズムではループと呼ばれる単位で世界線を更新するが、ループの大きさは系の相関長と直接対応する。そのため、相転移点近傍や極低温領域においても世界線配位の緩和は非常に速い。しかしながらその一方で、ループの構築には大局的な情報が必要であり、その並列化は自明ではない。我々は、虚時間方向には MPI プロセス並列による butterfly union-find algorithm、実空間方向には OpenMP スレッド並列による wait-free union-find algorithm を開発し、大規模な並列化を実現している。
開発状況（単体性能、 並列度、実行性能等を 踏まえた達成状況、現 状の問題点等を定量的 に記載下さい。） (図の添付可)	<ul style="list-style-type: none"> ・ Boost ライブラリ、ALPS ライブラリの京への移植作業を行った。この過程で C++コンパイラの不具合を数多く発見し、コンパイラの向上に貢献した。 ・ 虚時間方向の MPI プロセス並列化について、従来のツリー方式に加え、バタフライ方式、バケツリレー方式などネットワークトポロジーに合わせた通信方式を開発し、京の Tofu ネットワークでの性能測定を行った。 ・ 実空間方向の OpenMP スレッド並列について、wait-free union-find algorithm を京に移植するため、インラインアセンブラにより CAS (compare and swap) を用いたコードを実装し、8 スレッドで 99%以上の並列化率、90%以上の高い並列化効率を実現した。 ・ データメイン TLB ミス、1 次データキャッシュミスにより大きなロードインバランスが生じていることが明らかとなった。この問題を解決するため、reserve 関数を用いた vector の初期メモリ確保、ラージページサイズの最適化などを行った結果、ロードバランスが大きく改善され、モンテカルロステップ全体でも 1.39 倍性能が改善した。 ・ MPI と OpenMP のハイブリッド並列により、24576 ノードと 12288 ノードの比較で 98.66%のウィークスケーリング性能を達成した。 ・ 24576 ノードにおける性能：MIPS 理論ピーク性能の 10.4%、FLOPS 理論ピーク値の 0.24% ・ ループアルゴリズムの特性を考慮し、演算部と通信部に分割して 82944 ノードにおける性能を推定した。

<p>試験利用による 成果概要 (図の添付可)</p>	<p>下図は京および物性研システム B による S=4 反強磁性ハイゼンベルグ鎖のギャップ測定の結果である。非常に精度の高い結果が得られた。24576 ノードまでの十分なスケール性能が確認されたことにより、京全ノード規模での超大型計算による S=5 反強磁性ハイゼンベルグ鎖の計算の目処がたったことになる。</p>  <p>図：S=4 反強磁性ハイゼンベルグ鎖のスピングャップ(■)。従来の上下限の見積り(赤)に比べ2桁以上精密な値が得られた。</p>
<p>今後の計画、展望</p>	<p>京フルノード規模を使ったシミュレーションにより、S=5 ハルデンギャップの精密測定を実現する。また、現在、戦略分野 2 の重点課題として、「脱閉じ込め臨界現象」の数値検証を目指し、SU(N)の対称性をもつ拡張されたハイゼンベルグ模型における、2 体相互作用(J 項)と 4 体相互作用(Q 項)の競合によるネール秩序状態とダイマー秩序状態との間の量子相転移の大規模並列シミュレーションを実行中である。</p>
<p>論文、講演、 その他出版物</p>	<p>松尾春彦、「並列チューニングの進め方 "ALPS/looper を例に"」、CMSI 若手技術交流会、2011 年 7 月、神戸 藤堂眞治、「モンテカルロ法の発展と量子磁性体への応用」、計算物質科学研究センター第 1 回シンポジウム、2011 年 9 月、柏 松尾春彦、「ループアルゴリズム量子モンテカルロ法の MPI/OpenMP による超並列化」、HPCS2012 ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム、2012 年 1 月、名古屋 藤堂眞治、「大規模並列量子モンテカルロ法 ALPS/looper と量子磁性体への応用」、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 シンポジウム、2012 年 3 月、神戸 藤堂眞治、「量子モンテカルロ法による新しい量子相・量子相転移の探求」、戦略プログラム 5 分野合同ワークショップ、2012 年 6 月、神戸 藤堂眞治、「大規模並列量子モンテカルロ法 ALPS/looper と量子磁性体への応用」、スーパーコンピュータワークショップ 2013、2013 年 1 月、岡崎</p>

「京」試験利用 最終成果報告フォーム

氏名(全員分)	安藤嘉倫 1、吉井範行 2、藤本和士 1、山田篤志 1、○岡崎 進 1、岩橋建輔 3、水谷文保 3、川口一朋 4、長尾秀実 4、南 一生 5、市川真一 6、小松秀美 6、石附 茂 6、武田康宏 6、福島正雄 6
所属(全員分)	1 名古屋大学大学院工学研究科、2 名古屋大学大学院工学研究科附属計算科学連携教育研究センター、3 分子科学研究所、4 金沢大学大学院自然科学研究科、5 理化学研究所、6 富士通株式会社
電子メール(代表)	okazaki@apchem.nagoya-u.ac.jp
利用期間(代表)	平成 24 年 4 月 1 日 ~ 平成 24 年 9 月 30 日

アプリケーション名	modylas
実際に利用した ノード規模	65,536
背景、目的	<p>京を用いた全原子シミュレーションにより、物質と生命の境界領域にあるウイルスを計算科学の俎上に乗せ、ウイルスの分子論を展開する。特に、ウイルスが持つRNAを包むカプシドに注目し、カプシドとレセプターとの特異な相互作用、分子認識を自由エネルギーレベルで明らかにし、さらには結合後のカプシド構造の変化など、感染初期過程の分子機構の解明を図る。一方で、構成タンパク質間の接合構造と熱ゆらぎ、また、温度、溶媒など環境に依存した構造の特徴など、カプシドの物理的、化学的性質を明らかにする。</p>
計算手法、 具体的な利用方法 (図の添付可)	<p>長距離力(クーロン相互作用)を含む高並列汎用分子動力学計算プログラム。FORTRAN で書かれており、MPI、OPENMP を用いたハイブリッド並列。クーロン相互作用の計算においてFFTを必要としない高速多極子展開法(FMM)を周期境界条件下の分子系に適用し、京レベルでの高並列化を可能とした世界初のプログラムである。本プログラムは任意の分子系に対して汎用化されており、上述のクーロン相互作用の計算とあわせて、サイエンス研究という意味から重要となる分子系のほとんどをカバーする実用的な大規模汎用分子動力学計算プログラムとなっている。</p>
開発状況(単体性能、 並列度、実行性能等を 踏まえた達成状況、現 状の問題点等を定量的 に記載下さい。) (図の添付可)	<p>本試験期間においても継続してベンチマークテストを実施し、プログラムの詳細な性能評価を行った。その結果、京のフルノードの約80%を使用した65,536ノード並列において、8,000万原子系に対し理論ピーク性能比41.1%、3.45 Pflopsを達成した。対64ノード比での加速率を図に示す。65,536ノードにおいても64ノードと比較して81%の並列化効率を維持しており、十分な性能を達成することができたと考えている。また、研究課題実施に必要な1,000万原子系規模の計算においては、全MD計算1ステップに対して約5msの性能を達成し、実用面においても十分に高い性能を備えていることを実証した。これは、大規模系に対するMD計算においては、世界最速クラスである。</p> <p>次々と現れるホットスポットに対し、今後もさらにチューニングを継続して実施する必要があるのと同時に、自由エネルギー計算のモジュール化や巨大なタンパク質複合体を取り扱う上で必要な様々な機能を強化していく必要がある。</p>

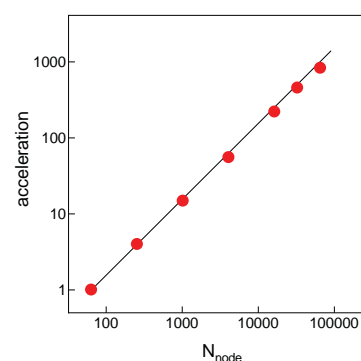


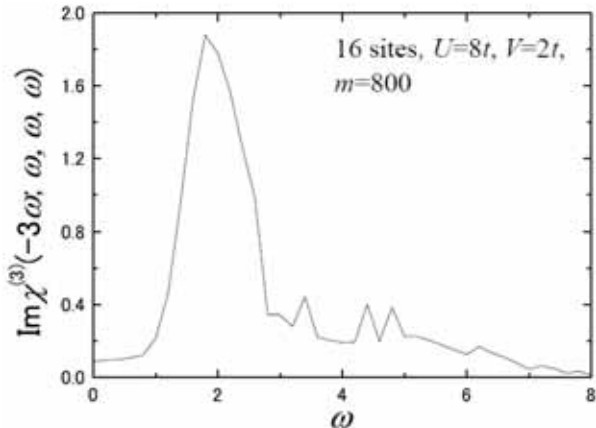
図 全 MD 計算に対する対 64 ノード比の加速率。直線は理想的な並列化効率。

<p>試験利用による 成果概要 (図の添付可)</p>	<p>本試験利用期間においては、水中の小児マヒウイルスカプシドに対し、全原子シミュレーションを開始するに際して必要な初期配置の生成など様々な初期化を経て安定的な熱平衡化を行い、ほぼ終了した。その中で、平衡に至る前の軌跡からではあるが、予備的な解析からウイルスの構造体であるカプシドの構造安定性の実現の仕組みについて、一定の見通しを得た。</p> <p>一方で、レセプターによるウイルス認識の分子機構を明らかにするため、ウイルスと CD155 レセプターとの相互作用に対する平均力、自由エネルギー計算を行う予定であるが、この計算に必要な水中において安定なレセプターの初期構造を得るために、レセプターの構造決定、そしてそれに基づいた平衡化計算を実施した。これにより、熱平衡に到達している安定なレセプター構造を得た。</p> <p>これらの結果は、共用開始後の利用における研究に用いられ、引き続き計算、解析を実施している。</p> <div data-bbox="1121 506 1426 808" data-label="Image"> </div> <p>図 MD 計算から得られた、小児マヒウイルスのスナップショット。</p>
<p>今後の計画、展望</p>	<p>ウイルスカプシドに対する丸ごとシミュレーションを小児マヒウイルスに対して継続実施し、構成タンパク質間の接合構造や熱ゆらぎについて詳細な解析を行い、ウイルスが実現している安定でかつ柔軟な構造の実際の姿を、生物学的な意味も含めて分子レベルで明らかにする。一方で、レセプターによるウイルス認識の分子機構を明らかにするため、ウイルスと CD155 レセプターの距離の関数として自由エネルギー計算を行い、カプシドとレセプターの特異な相互作用を定量的に明らかにする。</p>
<p>論文、講演、 その他出版物</p>	<p>学術雑誌 なし</p> <p>講演</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Y. Andoh, N. Yoshii, K. Fujimoto, A. Yamada, S. Okazaki, K. Kawaguchi, H. Nagao, K. Iwahashi, F. Mizutani, K. Minami, S. Ichikawa, H. Komatsu, S. Ishizuki, Y. Takeda, and M. Fukushima, “Development of highly parallelized general purpose molecular dynamics simulation program MODYLAS for “K computer””, FOMMS12, Portland, July 2012. 2. S. Okazaki, “All-atomistic molecular dynamics calculation of viruses - Large scale computation by K-computer”, International Workshop on Recent Advances in Computational and Theoretical Chemistry, Nagoya, November 2012. <p>その他出版物</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 岡崎 進、「ウイルスの全原子シミュレーションに向けて」、計算工学 17, 2845-2848(2012).

「京」試験利用 最終成果報告フォーム

氏名(全員分)	遠山貴己、曾田繁利、松枝宏明
所属(全員分)	京都大学基礎物理学研究所、仙台高等専門学校
電子メール(代表)	tohyama@yukawa.kyoto-u.ac.jp
利用期間(代表)	平成 23 年 4 月 1 日 ~ 平成 24 年 9 月 14 日

アプリケーション名	DDMRG (動的密度行列繰り込み群法)
実際に利用した ノード規模	12288 ノード
背景、目的	低次元強相関電子系を精密に取り扱う数値的研究手法として、密度行列繰り込み群法(DMRG)が知られている。本手法はこれを動的な物理量の計算手法へ拡張した手法であり、強相関電子系の励起ダイナミクスを調べることを目的とする。
計算手法、 具体的な利用方法 (図の添付可)	DMRG は、一次元強相関系の基底状態の計算のためのスタンダードな手法として確立されている。そこでは、系全体(「スーパーブロック」と呼ぶ)を「システム」と「環境」に分離して、「スーパーブロック」の波動関数(「ターゲット状態」と呼ぶ)から、「環境」の情報を繰り込んだ「システム」に対する密度行列を構築する。密度行列を対角化し、大きな固有値から必要な数だけ状態を確保する。その状態の数を m で表し、計算精度の指標とする。厳密な計算では全ての固有状態を取る必要があり、そのときの密度行列の固有値の総和は 1 となる。DMRG で基底状態を知りたいときは、「スーパーブロック」の波動関数として、「スーパーブロック」の基底状態を採用する。この密度行列繰り込み群法を動的な物理量の計算に拡張したものが DDMRG 法である。
開発状況(単体性能、 並列度、実行性能等を 踏まえた達成状況、現 状の問題点等を定量的 に記載下さい。) (図の添付可)	最も計算コストの大きい行列・ベクトル積部分を行列・行列積に変換して計算を行うことにより、単体性能はこれまでの性能に比べて大きく向上した。並列度については、12288 ノードまでの並列化を実施している。様々な改良により、現状で 12288 ノードにおいて 50%以上の理論性能比を達成している。今後改善すべき点として、これまでの改良により複雑化した並列化を京の 3D トーラスとうまく適合するよう最適化することが挙げられる。また、行列・ベクトル積部分の高性能化を達成した結果明らかとなった別の問題点の改善(例えば多様な演算子の変換過程の高速化)を実行したい。

<p>試験利用による 成果概要 (図の添付可)</p>	<p>下図に、「京」用にチューンされた DDMRG による 1 次元モット絶縁体の 3 次非線形光学応答スペクトルの 16 格子点に対するシミュレーション結果を示す。励起エネルギー ω の分割数が少ないため、ピーク構造が複数見られるが、分割数を多くすればよりなめらかな振る舞いが期待される。$\omega=2$ 付近のピークは三光子による共鳴を示している。一方、$\omega=3.5$ 付近の小さな構造は二光子共鳴によるものである。一次元モット絶縁体の非線形光学応答スペクトルの計算結果の報告はいくつかあるが、このシステムサイズでのスペクトルの全体像の報告はない。試験利用期間では、格子自由度も含めた一次元モット絶縁体の非線形光学応答の計算も一部実行している。</p> 
<p>今後の計画、展望</p>	<p>さらなる性能向上を追求することはもちろんのこと、計算可能な物理量の拡充や、適用可能なモデルの拡張など、本アプリの機能拡張を重点課題として取り組みたい。特に、新しい光スイッチング素子の材料として注目されている 1 次元モット絶縁体の 3 次の非線形光学応答の解析を、格子自由度を含めたモデルで詳細に行い、電子と格子の相互作用による効果を明らかにしたい。そして、この物質系を用いた次世代光スイッチング素子開発の基盤研究としたい。</p>
<p>論文、講演、 その他出版物</p>	<p>曾田繁利、遠山貴巳、「動的密度行列繰り込み群法による反転対称性の破れた 1 次元拡張ハバード模型の非線形光学応答の研究」、第 2 回 CMSI 研究会、ポスター発表、2012 年 1 月 30 日（東北大学金属材料研究所）</p> <p>曾田繁利、遠山貴巳、「Dynamical DMRG の開発と応用」、ナノ・ライフ公開シンポジウム、ポスター発表、2012 年 3 月 6 日（神戸ポートアイランドセンター）</p>

「京」試験利用 最終成果報告フォーム

氏名(全員分)	吉田紀生, 丸山豊, ○平田文男
所属(全員分)	分子科学研究所, 九州大学
電子メール(代表)	hirata@ims.ac.jp
利用期間(代表)	平成 23 年 4 月 1 日 ~ 平成 24 年 3 月 31 日

アプリケーション名	R I S M / 3 D - R I S M
実際に利用した ノード規模	8192
背景、目的	グランドチャレンジ課題・中核アプリケーションの一つである R I S M / 3 D - R I S M コードの超並列化・高速化を行う
計算手法、 具体的な利用方法 (図の添付可)	<p>R I S M / 3 D - R I S M は溶質となる生体高分子の溶媒和構造および溶媒和自由エネルギーを計算するための方法論である。本コードは大きく分けて、溶質溶媒間の相互作用力を計算する部分と、3 D - R I S M 方程式を繰り返し法による解く部分の二つに分けられる。3 D - R I S M 方程式は畳み込み積分を含むため、効率よく積分を行うために 3 次元高速フーリエ変換 (3 D - F F T) を毎繰り返しステップごとに正変換と逆変換を 1 度ずつ行う。</p> <p>3 D - F F T の対象となる配列は $512^3 \sim 2048^3$ 程度の規模であり、効率よく大規模並列化するために筑波大学高橋大介准教授らによって開発された Volumetric 並列 3D-FFT を採用している。</p>
開発状況 (単体性能、 並列度、実行性能等を 踏まえた達成状況、現 状の問題点等を定量的 に記載下さい。) (図の添付可)	<p>これまで、T2K 上で大規模並列化対応を行ってきた。このコードの京上での最適化を行った。</p> <p>行ったチューニング項目は</p> <ul style="list-style-type: none"> ・コンパイルオプションの最適化 ・冗長計算のループ外移動 ・転送回数の低減 ・数学関数の変更 ・Tofu ネットワークとプロセスマッピングの最適化 <p>これらのチューニングにより、256 プロセス並列では前処理部分で 1.3~1.5 倍、転送部分では 1.9 倍程度の高速化を達成した。</p> <p>また、MD や量子化学プログラムとの連成計算の高度化のためのファイル入出力の最適化の検討も行った。ここでは次の 4 つの I/O 方式の検討を行った。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・マスタプロセスに集めて I/O ・各プロセスが必要な値のみを I/O ・演算と I/O を分離 ・MPI-I/O を使用する <p>これらを検討した結果 MPI-I/O を使用する方式が他の方法に比べ 7~20 倍程度早く、また出力されたファイルサイズも小さいことが分かった。このため、RISM/3D-RISM では MPI-I/O によるファイル I/O を採用することとした。</p>

試験利用による
成果概要
(図の添付可)

これまでのチューニングを反映した RISM/3D-RISM コードの性能評価を行った。計算対象はアクアポリン(15096 原子)で、セルのグリッド数(512³、1024³、2048³)及び使用するノード数 (2 のべき数) を変化させて動作確認及び計算時間の測定を行った。

まず初期化部分の速度向上のノード数依存性を図 1 に示す。使用メモリの関係で 512³ は 32 ノード、1024³ グリッドは 128 ノードが最小ノードとなっている。512³、1024³ グリッド共にほぼ 100% の高速化効率を示しているのがわかる。512³ グリッドでは 2048 ノード付近でやや効率の低下が見られるが、これは入力データの読み込みや読み込んだデータを各ノードに通信する部分の割合が増加するためである。

図 2 に繰り返し部分の速度向上のノード数依存性を示す。収束までの繰り返しが増加した場合には計算全体の速度向上が漸近的にこのグラフに近づいていく。計算量の多い 1024³ グリッドはもちろん計算量の少ない 512³ グリッドも 2048 ノードまでスケールしている事がわかる。

最後に 2048³ グリッドにおける全体の計算時間を表 1 に示す。4096 ノードと比較して 8192 ノードでは並列化効率 88% を示している。現時点では京スパコンの運用制限により 16384 ノードを試す事はできないが、十分スケールすると考えられる。これにより RISM/3D-RISM コードの高度化は当初目標を達成したと結論できる。

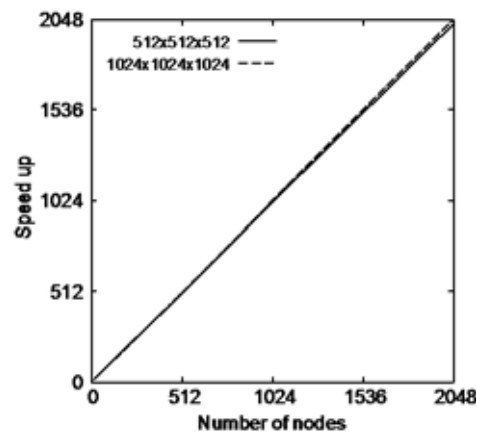


図 1 : 初期化部分の速度向上

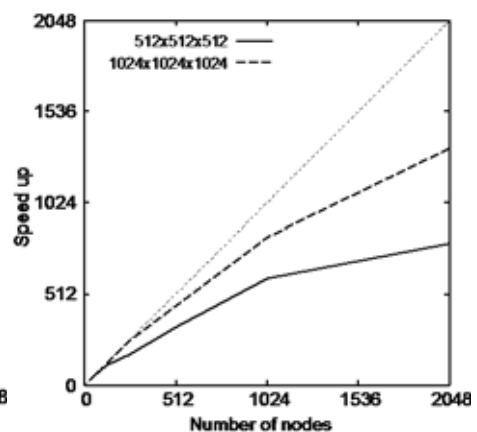


図 2 : 繰り返し部分の速度向上

表1 2048³グリッドにおける計算時間のノード数依存性

ノード数	4096	8192
計算時間[秒]	1866.8	1052.4

今後の計画、展望

RISM/3D-RISM 本体の開発はこれではほぼ終了となる。今後は、新しい計算オプションの追加や、連成計算の高度化を主とした開発を行う。

論文、講演、 その他出版物	<p>原著論文</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) "Placevent: an algorithm for prediction of explicit solvent atom distribution -- application to HIV-1 protease and F-ATP synthase", Daniel Sindhikara, Norio Yoshida, Fumio Hirata, <i>J. Comput. Chem.</i>, 33, (2012) 1536-1543 2) "A new approach for investigating the molecular recognition of protein: Toward structure-based drug-design based on the 3D-RISM theory", Yasuomi Kiyota, Norio Yoshida, Fumio Hirata, <i>J. Chem. Theor. Comput.</i>, 7, (2011) 3803-3815 3) Reply to Comment "Molecular Selectivity in Aquaporin Channels Studied by the 3D- RISM Theory", Saree Phongphanphanee, Norio Yoshida, Fumio Hirata, <i>J. Phys. Chem. B</i>, 115, (2011) 8367-8369 4) "Solvent penetration in photoactive yellow protein R52Q mutant: a theoretical study", Daniel Sindhikara, Norio Yoshida, Mikio Kataoka, Fumio Hirata, <i>J. Mol. Liq.</i>, 164, (2011) 120-122 5) "Free energy calculation using molecular dynamics simulation combined with three dimensional reference interaction site model (3D-RISM) theory. II. Thermodynamic integration along reaction coordinates", Tatsuhiko Miyata, Yasuhiro Ikuta, Fumio Hirata, <i>J. Chem. Phys.</i>, 134, 44127 - 44144 (2011). 6) "Functionality Mapping on Internal Surfaces of Multidrug Transporter AcrB Based on Molecular Theory of Solvation: Implications for Drug Efflux Pathway," Takashi Imai, Naoyuki Miyashita, Yuji Sugita, Andriy Kovalenko, Fumio Hirata, Akinori Kidera, <i>J. Phys. Chem. B</i>, 115, 8288 – 8295 (2011). <p>総説、解説</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) "液体の積分方程式理論と電子状態理論のハイブリッドによる溶液内分子の電子状態理論", 吉田紀生, アンサンブル, 14 (2012) 12-18 2) "Statistical Mechanics Theory of Molecular Recognition and Pharmaceutical Design", Norio Yoshida, Yasuomi Kiyota, Saree Phongphanphanee, Yutaka Maruyama, Takashi Imai, Fumio Hirata, <i>International Review in Physical Chemistry</i>, 30 (2011) 445-478 3) "分子認識の統計力学と生体機能", 吉田紀生, 丸山豊, Saree Phongphanphanee, 清田泰臣, 平田文男, <i>生物物理</i>, 51 (2011), 222-225 4) "Molecular Recognition Explored by a Statistical-Mechanics Theory of Liquids", Saree Phongphanphanee, Norio Yoshida, Fumio Hirata, <i>Current Pharmaceutical Design</i>, 17 (2011), 1740-1757
------------------	--

- 5) "Electrolytes in Biomolecular Systems Studied with the 3D-RISM/RISM Theory", Yutaka Maruyama, Norio Yoshida, Fumio Hirata, Inter disciplinary Sciences: Computational Life Sciences, 4 (2011), 290-307

招待講演 (国内会議)

- 1) 酵素反応解析へ向けた、3D-RISM 理論による分子認識解析, "文部科学省「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ (HPCI)の構築」, 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6回公開シンポジウム", 2012年3月5日~6日(予定), ニチイ学館, 神戸市, 吉田紀生
- 2) バイオマス利用に向けた酵素反応解析, CMSI 研究会, 2012年1月30日~31日(予定), 東北大学金属材料研究所, 仙台市, 吉田紀生
- 3) RISM 理論による生体分子の分子認識と化学反応へ向けた研究, スーパーコンピュータワークショップ2012, 2012年1月24~25日(予定), 岡崎コンファレンスセンター, 岡崎市, 吉田紀生
- 4) 液体の積分方程式理論に基づく溶液内生体分子の電子状態理論, 液体・溶液の微視的構造からダイナミクスまで~最近の研究結果から見えてくるもの~, 2011年11月28~29日, 愛媛大学, 松山市, 吉田紀生
- 5) 液体の積分方程式理論を用いた溶液内化学過程に関する研究, 第34回溶液化学シンポジウム, 2011年11月15~17日, 名古屋大学, 名古屋市, 吉田紀生
- 6) QM/MM/3D-RISM 理論の開発とプログラムの高速化, 第3回 HPCI 戦略プログラム合同研究交流会, 2011年10月3日, 計算科学研究機構, 神戸市, 吉田紀生
- 7) Yutaka Maruyama, "Accelerating 3D-RISM calculation: Graphics Processing Unit and Massive Parallel Machine", (Elemental Processes of Life Phenomena, revealed by the RISM/3D-RISM Theory, 2011年3月, Okazaki, Japan)
- 8) 丸山豊, "液体の積分方程式理論(3D-RISM 理論)の解法と GPU による高速化", (応用数理学会年会, 2011年9月, 京都, 日本)
- 9) 丸山豊, "GPUによる3D-RISMの高速化とMD-3DRISMへの応用", (研究会 液体・溶液の微視的構造からダイナミクスまで ~最近の研究結果から見えてくるもの~, 2011年11月, 松山, 日本)
- 10) 平田文男, 「高速 3D-RISM の開発について」, 「CMSI・計算分子科学研究拠点, 第2回研究会」, 神戸, 2011年8月11, 23日
- 11) 平田文男, "Exploring life phenomena with a Statistical Mechanics of Molecular Solution," 「液体溶液の微視的構造からダイナミクスまで~最近の研究結果から見えてくるもの~」愛媛, 2011年11月28, 29日

招待講演 (国際会議)

- 1) 1) Norio Yoshida, "Development of the QM/MM/RISM theory: Application to the intercalation of proflavine with solvated DNA", Statistical Mechanics Approaches to Nano/Bio-Sciences, 2011 年 6 月 13 日～15 日, "Sookmyung Women's University, Seoul, Korea
- 2) Yutaka Maruyama, "Solvent and Salt Effects on Structural Stability of Human Telomere", (Korea-Japan Symposium on Statistical Mechanics Approaches to Nano/Bio-Sciences, 2011 年 6 月, Seoul, Korea)
- 3) Saree Phongphanphanee, "Binding of small alkali ions and TEA⁺ to KcsA potassium channel study by 3D-RISM" Statistical Mechanics Approaches to Nano/Bio-Sciences, Centennial Hall, Sookmyung Womens' University, Seoul, Korea, June 13-15, 2011,
- 4) D.J. Sindhikara, Norio Yoshida, Mikio Kataoka, and Fumio Hirata, "Solvent penetration in photoactive yellow protein: a theoretical study." (June 2011), Korea-Japan Symposium on Statistical Mechanics Approaches to Nano/Bio-Sciences, Seoul, Korea
- 5) Fumio Hirata, "Theory of Molecular Recognition and its Application to Drug Design," "ICCS2011," Singapore, June 1 ~ 3, 2011.
- 6) Fumio Hirata, "Exploring life phenomena with a theory featuring chemical 'specificity' and physical 'universality'," "Statistical Mechanics Approaches to Biomolecular Applications," Seoul, June 13 ~ June 16, "2011.
- 7) Fumio Hirata, "Collaboration between computer and computational scientists make high performance computing on the K-computer a reality," "ISC'11 HPC in Asia Workshop," Hamburg, Germany, June 18~23, 2011
- 8) Fumio Hirata, "Statistical Mechanics Theory of Molecular Recognition and its Application to Pharmaceutical Design," "Telluride Workshop on Free Energy Simulation," Telluride, Colorado, USA, July 3 ~ 8, 2011.
- 9) Fumio Hirata, "Exploring life phenomena with a Statistical Mechanics of Molecular Solution," "32th International Conference on Solution Chemistry," La Grande Motte, France, August 28~ September 2, 2011.
- 10) Fumio Hirata, "Exploring life phenomena with a theory featuring chemical 'specificity' and physical 'universality'," "Israel -Japan Joint Symposium on Biophysics: Protein Dynamics: From single molecules to whole cell" in Biophysics Society meeting in Japan, Himeji, Sep. 15 ~ 16.
- 11) Fumio Hirata, "Exploring life phenomena with a Statistical Mechanics of Molecular Solution," "The 71st Okazaki International Conference: New perspectives on molecular science of glycoconjugate," Okazaki, October 12~14, 2011.
- 12) Fumio Hirata, "Exploring life phenomena with a Statistical Mechanics of

添付資料 3

	<p>Molecular Solution,” Asian Core symposium on “The 4th Japan-Korea Seminar on Biomolecular Sciences: Experiment and Simulation,” Nara, January 9~11, 2012.</p>
--	---

「京」試験利用 最終成果報告フォーム

氏名(全員分)	○永瀬茂 1、石村和也 2、河東田道夫 3、○北浦和夫 4、Dmitri G. Fedorov5、石田豊和 5、千葉真人 5、永田武史 4、梅田宏明 6
所属(全員分)	1 京都大学、2 分子科学研究所、3 理化学研究所、4 神戸大学、5 産業技術総合研究所、6 筑波大学
電子メール(代表)	nagase@ims.ac.jp(永瀬)、kkitaura@people.kobe-u.ac.jp(北浦)
利用期間(代表)	平成 24 年 4 月 1 日 ~ 平成 24 年 7 月 31 日

アプリケーション名	MP2-FMO
実際に利用した ノード規模	24,576
背景、目的	<p>ナノサイエンス、ナノテクノロジーの研究を推進する上で、ナノサイズ物質の構造・機能を解明・予測するための基盤的ツールとして、計算シミュレーションに大きな期待が寄せられている。また、創薬研究においてはタンパク質と医薬候補分子との複合体構造と結合エネルギーを高い精度で計算予測できれば研究の効率化に資すると期待されている。これらに答えるために必要な要素のひとつに、大規模分子系の量子化学計算法の開発がある。我々は、フラグメント分子軌道法(FMO法)を開発し、これにより10万原子規模からなる巨大分子系の電子状態計算を実用的な計算時間で可能とすることを目標に、効率的な超並列計算プログラムの開発を行なっている</p>
計算手法、 具体的な利用方法 (図の添付可)	<p>FMO法は、分子・分子系を小さなフラグメントに分割して、フラグメント(モノマーと呼ぶ)とそれらのペア(ダイマーと呼ぶ)について ab initio MO 計算を行い、全系のエネルギーや電子分布などのプロパティを計算する方法である。モノマーやダイマーはほぼ独立に計算できるため並列計算に適している。電子相関理論にも適用可能で、巨大分子・分子系の実用的計算レベルとしては最も簡便な電子相関理論である MP2 レベルを想定し、高速 MP2 計算法である RI-MP2 のコードを開発し FMO 計算で利用可能とした。FMO 計算コードは、アイオワ州立大で開発され世界中で広く用いられている ab initio MO 計算プログラムである GAMESS (http://www.msg.ameslab.gov/gamess/) に組み込んで公開している。</p> <p>FMO 計算は多数の小さな分子(モノマーとダイマー)について、ab initio MO 計算を行うことにほぼ相当する。フラグメント分割は化学的妥当性に基づいて行わねばならないために、それらのサイズ(基底関数の数)を同一にすることはできない。さらに、たとえサイズが同じであっても、ab initio MO 計算では分子ごとに計算される2電子積分の数が異なり、その上解が求まるまでの繰り返し(SCF)計算回数を事前に知ることができないため、並列計算でロードバランスをとるのが非常に困難である。</p> <p>FMO 計算プログラムは、図1に示す Distributed data interface (DDI) を拡張した Generalized DDI (GDDI) で2階層での並列計算を行なっている。京コンピュータでは、ARMCII-DDI+OpenMP のハイブリッド並列を用いている。FMO 計算の流れは図2に示すように、各計算ステップで複数回の同期が入る。フラグメントの数が CPU グループ数に比べて圧倒的に多数の場合は、図3に示す動的分散処理で効率よく計算を行うことができるが、逆の場合(膨大な CPU コアを持つコンピュータの場合)はロードインバランスによる同期待ちが深刻な実</p>

	<p>行性能の低下をもたらす。京コンピュータでノード数を拡大するにつれてこの問題が顕在化したため、CPU グループの数を減らす（一つのグループにできるだけ多数の CPU コアを割り当てる）対応を行った。すなわち、グループ内の並列度が大きくなるため、可能な限りスレッド並列化を行ない並列計算性能の向上を図った。</p>
<p>開発状況（単体性能、並列度、実行性能等を踏まえた達成状況、現状の問題点等を定量的に記載下さい。） （図の添付可）</p>	<p>以下で示す性能測定に用いたテスト系は約 24,000 原子からなるタンパク質複合体で、量子化学計算のレベルは FMO-RI-MP2/6-31G*である。</p> <p>開発状況：並列化効率（ストロングスケール）は、768 ノードを基準とした 1,536 ノードで 98%、3,840 ノードを基準とした 12,288 ノードでは 93% である。実行性能（FLOPS 値）は、6,144 ノードではピーク性能比で 4.40%、12,288 ノードで 4.40%、24,576 のノードで 3.66%であった。</p> <p>現在の問題点：FMO 計算では、系が巨大になるほど静電ポテンシャル計算の負荷が大きくなり、実行性能の低下が顕在化した。そこで対策として、マルチコア計算機に適したアルゴリズムを用いた(株) クロスアビリティ提供の静電ポテンシャル計算ルーチンを組み込んで性能の改善を図った。これにより、上記の実行性能を達成した。12,288 ノードから 24,576 ノードに拡大した際の実行性能の低下 (4.40%→3.66%) は、ロードインバランスに起因するもので、今後この問題の改善を行う必要がある。</p>
<p>試験利用による 成果概要 （図の添付可）</p>	<p>筑波大学の T2K コンピュータ上でチューニング済のコードを京コンピュータに移植した当初（利用期間 II）の、1,791 原子系の FMO-MP2/6-31G*計算の計算時間（経過時間）は 740 秒であったが、利用期間 IV-2 ではこれが 404 秒となり、1.83 倍の高速化を達成した（768 ノードでのデータ）。主に行なったチューニングは、対角化ルーチンの改良、ARMCI サーバースレッドのコアバインドの調整、DLB 通信時のロック範囲を狭い範囲に限定する、頻繁なメモリ確保・開放を抑止する、制御可能な範囲で I/O のプレを抑止する、などである。</p>
<p>今後の計画、展望</p>	<p>FMO 計算のコードの一部にクロスアビリティ社のコードを導入して性能向上を図ったが、このコードは並列性能を向上させる余地があることが判明し、現在この改良に取り組んでいる。また、FMO 計算は CPU のグルーピングが適切でないと、用いる CPU コア数が数万以上になるとロードインバランスが顕著になり性能低下となることから、事前に対象系ごとに最適な CPU グルーピングを見出す方策を検討している。今後、これらについて改善を行うことで、京コンピュータの全ノード(80,000 CPU コア)を用いて、10 万原子系の RI-MP2-FMO/6-31G*計算を 2 時間程度で行うことが可能となる見込みである</p>
<p>論文、講演、 その他出版物</p>	<p>学術雑誌 なし 講演 1) Dmitri G. Fedorov, "The fragment molecular orbital method as a tool for chemical applications on petascale computers", ACS national meeting, 2011年8月, Denver</p>

	<p>2) Dmitri G. Fedorov, "Recent development of the fragment molecular orbital method", The Seventh Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP-7), 2011年9月, 東京都</p> <p>3) Dmitri G. Fedorov, 「量子化学に基づいた二万原子規模の構造最適化と相互作用解析」、分子科学討論会、2011年9月、札幌市</p> <p>4) Kazuo Kitaura, "Large Scale Computations with the Fragment Molecular Orbital Method", Fukui International Sympojium for Theoretical and Computational Chemistry, 2011年9月, Kyoto</p> <p>5) 北浦和夫、「フラグメント分子軌道法とドラッグデザインへの応用」、ナノ・ライフ合同公開シンポジウム、2012年3月、神戸</p> <p>その他の出版物 なし</p>
--	--

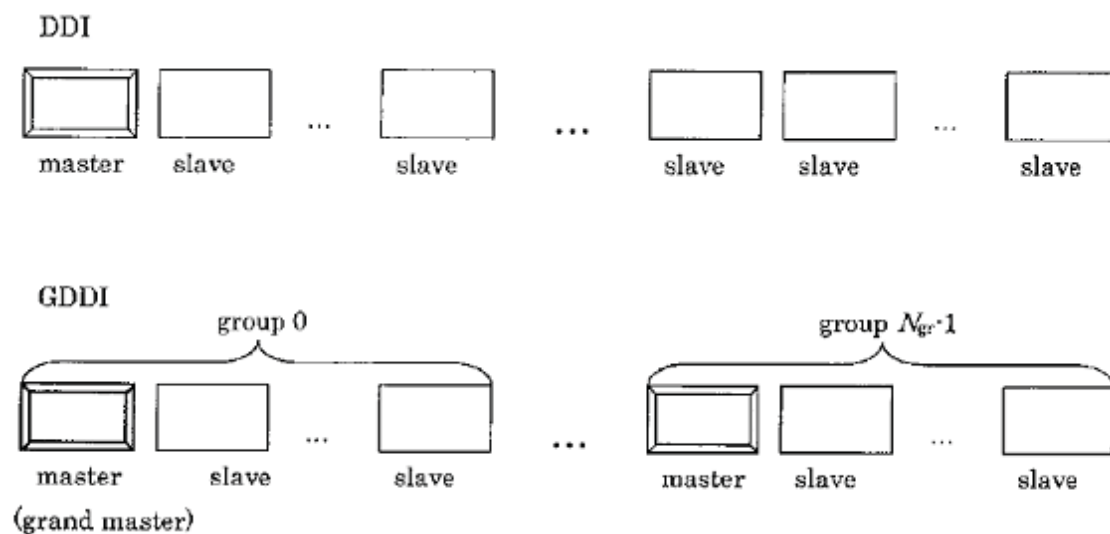


図1 DDI(distributed data interface)とそれを拡張した2階層並列化(GDDI:generalized DDI, D. G. Fedorov et al., J. Comp. Chem. 25, 872 (2004))。矩形はノードを示し、マスターとスレーブは矩形下に表示してある。GDDIでは全ノードを N_{gr} 個のグループに分け、各グループが一つの ab initio MO 計算を実行する。

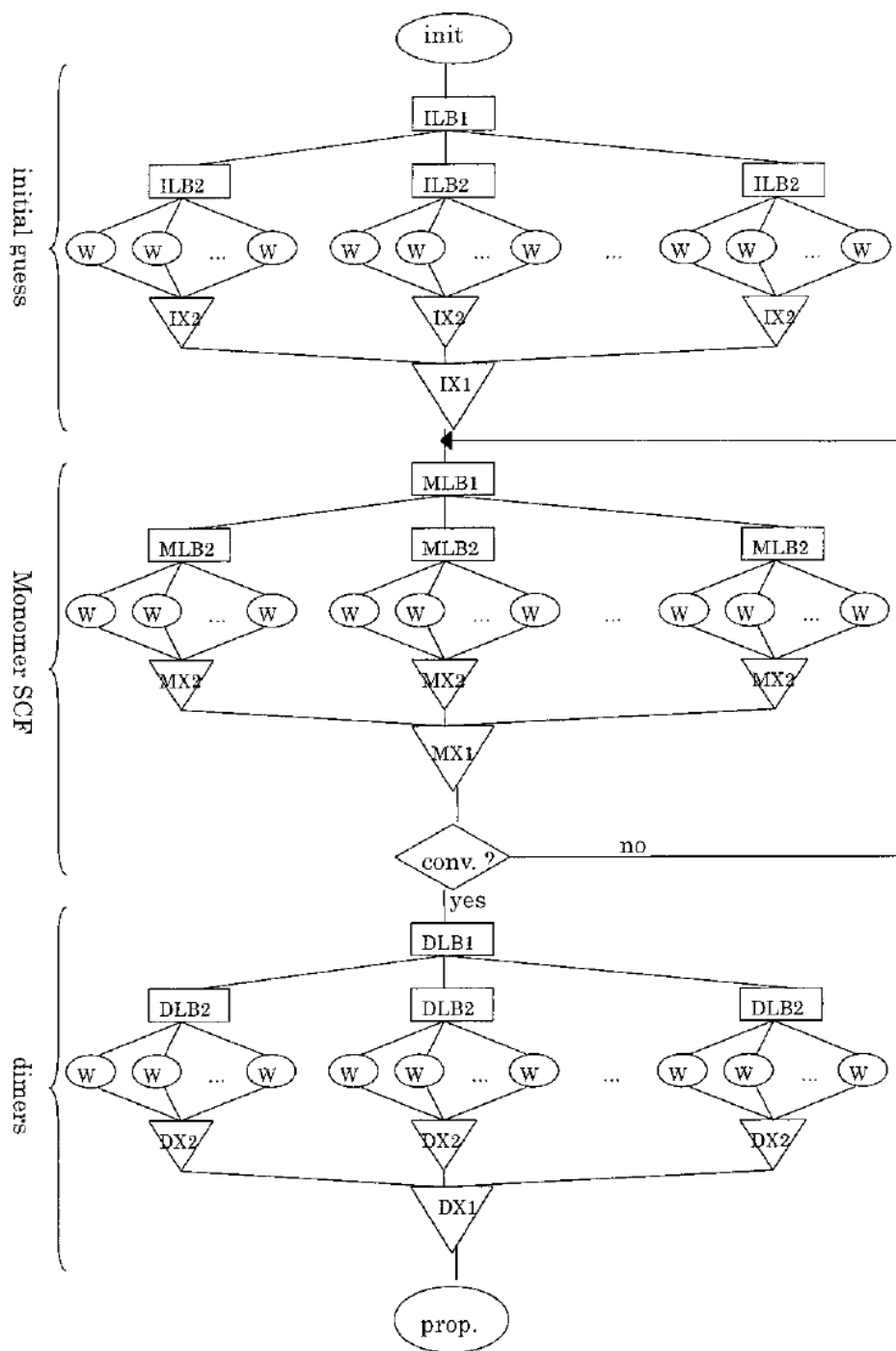


図 2 FMO 計算の 2 階層並列計算の流れ図。'init'は計算の開始を示す。記号 YLB_n は、 Y ステップ ($Y=I$ はモノマーの初期 MO 計算ステップ、 $Y=M$ はモノマー-SCF 計算ステップ、 $Y=D$ はダイマー計算ステップ) の、 n 階層 ($n=1$ はグループ内、 $n=2$ はグループ間) のロードバランス (LB) を示す。 $n=2$ では I ステップを除く全てのステップで SCF の繰り返し計算を含むが、図では省略してある。'W'は 1 ノードの何かの work (2 電子積分の一部の計算など) を示す。 YX_n は、 Y ステップにおける n 階層でのデータ交換を示す。'conv'はモノマー-SCF の収束判定を、'prop'はプロパティ計算を示す。全利用ノードのグループへの分割は、各ステップごとに入力データで自由に指定できる。

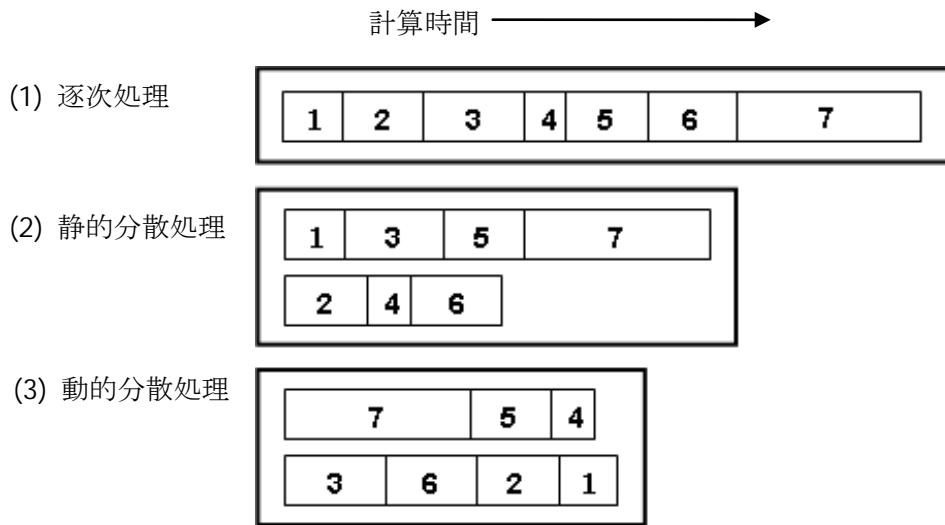


図3 FMO 計算でサポートしている分散処理方法（逐次処理、静的分散処理と動的分散処理）の模式図。7 個のジョブを 2 グループで並列処理する例で、番号付の矩形の横一辺の長さでそれぞれのジョブの計算時間を示す。静的分散処理ではジョブの実行の順番が固定されている。動的分散処理では、大きなフラグメントの計算が優先的に処理される。

「京」試験利用 最終成果報告フォーム

氏名(全員分)	○中井浩巳、小林正人、西澤宏晃、イレ・ステファン、横川大輔、西本佳央
所属(全員分)	早稲田大学、名古屋大学
電子メール(代表)	nakai@waseda.jp
利用期間(代表)	平成 23 年 8 月 11 日 ~ 平成 24 年 9 月 14 日(試験利用最終日)

アプリケーション名	DC 量子化学計算プログラム (DC-MP2, DC-DFTB)																														
実際に利用した ノード規模	1,152 ノード (DC-MP2), 500 ノード (DC-DFTB)																														
背景、目的	これまでに理論化学によってさまざまな化学反応が解明され、それに基づいて設計が行われてきたが、ナノスケールの反応系を精密に解析し、その制御を行うことは現在においても容易ではない。本研究では DC プログラムを用いてナノスケールの分子や分子集合体などの巨大系の反応制御をプロトタイプ研究とし、さまざまな角度から検討を行うことを目的とする。例えば、ナノ分子の分子構造や電子構造を明らかにし、反応性や物性の知見を得る。さらにその生成プロセスを解明する。																														
計算手法、 具体的な利用方法 (図の添付可)	DC プログラムは (1) 電子相関理論を用いた高精度な解析, (2) 電子密度強束縛法を用いた分子動力学計算による反応解析の 2 つの軸により遂行されている。 <u>(1) 電子相関理論を用いた高精度な解析</u> 原子に局在した Gauss 型基底関数を用いた Hartree-Fock (HF), Möller-Plesset2 次摂動 (MP2), 結合クラスター (CC), および密度汎関数理論(DFT) 計算を, 分割統治 (DC) 法に基づいて $O(N)$ で実行する。 <u>(2) 電子密度強束縛法を用いた反応解析</u> 電子密度強束縛 (DFTB) 法に DC 法を適用した DC-DFTB 法の開発を行い, Hybrid 並列化を行った。DC 法では分子全体をいくつかの部分系に分けて計算を行う。それぞれの部分系の計算は独立であるため, この計算を MPI により並列化し, 部分系内部を OpenMP によりスレッド並列化した。																														
開発状況 (単体性能、 並列度、実行性能等を 踏まえた達成状況、現 状の問題点等を定量的 に記載下さい。) (図の添付可)	<u>(1) 電子相関理論を用いた高精度な解析</u> C ₃₀₀ H ₃₀₂ 分子における DC-MP2 法のストロングスケーリング性能を表 1 に示した。 表 1. DC-MP2 のストロングスケーリング性能 (C ₃₀₀ H ₃₀₂ , DC-MP2/6-31G*) <table border="1"> <thead> <tr> <th>N_{node}</th> <th>N_{thread}^*</th> <th>FLOPS</th> <th>Wall time [s]</th> <th>α strong</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>72</td> <td>504</td> <td>6.01%</td> <td>4845</td> <td></td> </tr> <tr> <td>144</td> <td>1008</td> <td>5.80%</td> <td>2478</td> <td>98%</td> </tr> <tr> <td>288</td> <td>2016</td> <td>5.45%</td> <td>1246</td> <td>97%</td> </tr> <tr> <td>576</td> <td>4032</td> <td>3.99%</td> <td>715</td> <td>85%</td> </tr> <tr> <td>1152</td> <td>8064</td> <td>2.36%</td> <td>468</td> <td>65%</td> </tr> </tbody> </table> 288 ノードではストロングスケーリングが 97% と高い並列化効率を達成している。大ノードでの性能劣化は, 計算規模が小さいことに由来するロードイン	N_{node}	N_{thread}^*	FLOPS	Wall time [s]	α strong	72	504	6.01%	4845		144	1008	5.80%	2478	98%	288	2016	5.45%	1246	97%	576	4032	3.99%	715	85%	1152	8064	2.36%	468	65%
N_{node}	N_{thread}^*	FLOPS	Wall time [s]	α strong																											
72	504	6.01%	4845																												
144	1008	5.80%	2478	98%																											
288	2016	5.45%	1246	97%																											
576	4032	3.99%	715	85%																											
1152	8064	2.36%	468	65%																											

	<p>バランスによるもので、系を大きくすることで改善が見込まれる。ピークパフォーマンスに対する性能は 6% 程度しか出ていないが、当初の 2% からかなり改善した。量子科学計算に特有の特殊な積分計算ルーチンがネックであり、ドラスティックな性能改善は難しい。</p> <p><u>(2) 電子密度強束縛法を用いた反応解析</u></p> <p>$C_{10000}H_{10002}$ 分子に対する各計算手続きにおけるストロングスケーリングを図 1 に示した。部分系を C_2H_2 としており、5,000 個の部分系をノード間で並列計算している。</p> <p>500 ノードの場合でも行列要素の計算、分子動力学計算に必要なエネルギー勾配計算は並列化効率 94% 以上を達成している。しかし、DC 計算の手続きである“Fermi 準位の決定”がシングルノードでの計算で行う必要があり、エネルギー計算の並列化効率は低い。500 ノードの場合、全体の計算時間 2.2 秒に対して、Fermi 準位の決定手続きは 0.78 秒と大きな割合を占めており、今後改善が必要である。また、行列要素の計算においても距離をインデックスとした配列から読み込むため、プリフェッチが有効に働かず、ピーク性能は現状 2% 程度である。</p> <div data-bbox="986 651 1453 1104" data-label="Figure"> <table border="1"> <caption>Data for Figure 1: DC-DFTB Parallelization Speed</caption> <thead> <tr> <th>ノード数</th> <th>1電子積分 (H_1, S) の作成</th> <th>2電子積分 (G) の作成</th> <th>エネルギー計算 / iteration</th> <th>エネルギー勾配計算</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>100</td> <td>100</td> <td>100</td> <td>100</td> <td>100</td> </tr> <tr> <td>200</td> <td>200</td> <td>200</td> <td>130</td> <td>200</td> </tr> <tr> <td>500</td> <td>500</td> <td>500</td> <td>200</td> <td>500</td> </tr> </tbody> </table> </div> <p>図 1. DC-DFTB の並列化速度</p>	ノード数	1電子積分 (H_1, S) の作成	2電子積分 (G) の作成	エネルギー計算 / iteration	エネルギー勾配計算	100	100	100	100	100	200	200	200	130	200	500	500	500	200	500
ノード数	1電子積分 (H_1, S) の作成	2電子積分 (G) の作成	エネルギー計算 / iteration	エネルギー勾配計算																	
100	100	100	100	100																	
200	200	200	130	200																	
500	500	500	200	500																	
<p>試験利用による 成果概要 (図の添付可)</p>	<p><u>(1) 電子相関理論を用いた高精度な解析</u></p> <p>DCGAMESS MP2 の OpenMP 化を行った。上欄でも示したように高い並列化効率を達成し、ピーク性能も 2% から 6% と向上した。今後、より大きな系に対しても DC-MP2 を適用し、並列化効率が充分に出ていることを確認する。</p> <p><u>(2) 電子密度強束縛法を用いた反応解析</u></p> <p>今回の試験利用により、DC-DFTB 法の Hybrid 並列化を行った。問題点は残るものの、その他の部分に関しては高い並列化効率を達成することに成功し、20,000 原子の系でも 500 ノードでは 2 秒程度で計算が可能であることが確認された。ノード間の通信は局所的であるため、より大きな系に対しても充分なノード数を用いることで、分子動力学計算を行うことが可能となる。</p>																				
<p>今後の計画、展望</p>	<p>DC 電子相関理論ではさまざまな大規模系を高精度に取り扱うために、現在開発されている MP2 法だけでなく HF, DFT, CC 計算へと拡張していく。</p>																				

	<p>DC-DFTB 理論では現在ボトルネックとなっている Fermi 準位の決定手順を、補間法を用いて簡略化するなどして高度並列化を目指す。同時に、双方の理論においてピーク性能の向上も目指す。</p> <p>これらの DC 理論の開発により研究目的である大規模系の電子状態や反応の解析が可能となり、エネルギー問題や環境問題に対する解決策の糸口を得ることが期待される。</p>
論文、講演、その他出版物	<p><u>注) 謝辞に京の試験利用によるもの、と記載があるものに限定して下さい。具体的には下記の項目を含めて下さい。また、別刷りの電子データがあれば添付下さい。</u></p> <p>学術雑誌 ⇒ 著者、論文題名、誌名、巻、号、頁、発行年月 講演 ⇒ 発表者名、講演題名、会議名、発表年月、場所 その他出版物 ⇒ 書名、出版機関、発行年月</p> <p>京の試験利用による結果を用いた論文はありません。</p> <p><講演></p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 小林正人, 「分割統治 (DC) 量子化学計算方法: その高精度化と高速化、超並列化」, 先駆的計算科学に関するフォーラム 2012 「京コンピュータ利用に向けた分子科学分野での取り組み」, 2012 年 2 月, 福岡 2. 小林正人・中井浩巳, 「分割統治(DC)量子化学計算プログラム: 開発と応用、そして展望」, グランドチャレンジ・アプリケーションの研究開発 公開シンポジウム, 2012 年 3 月, 神戸 3. 小林正人, 「分割統治(DC)法に基づく大規模量子化学計算プログラムの開発と『京』での実装」, 第 4 回 HPCI 戦略プログラム合同研究交流会, 2012 年 7 月, 神戸 4. 小林正人・中井浩巳, 「GAMESS に実装された分割統治(DC)量子化学計算法のハイブリッド並列化」, 第 6 回分子科学討論会, 2012 年 9 月, 東京 5. 小林正人, 「大規模系の量子化学計算: 化学理論と計算機の発展が開いた世界とその近未来」, 第 26 期 CAMM フォーラム 第 2 回例会, 2012 年 11 月, 東京 6. 小林正人・中井浩巳, 「分割統治 MP2 プログラムの最近の展開と性能評価」, 第 3 回 CMSI 研究会, 2012 年 12 月, 岡崎 7. Masato Kobayashi, "Divide-and-conquer quantum chemistry program in GAMESS: Implementation and application," International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Molecular Science, January, 2013, Tokyo 8. 西澤宏晃, 中井浩巳, Stephan Irle, 「大規模分子動力学計算を目指した DC-DFTB 理論の開発」, 第 6 回分子化学討論会, 2012 年 9 月, 東京 9. 西澤宏晃, 中井浩巳, Stephan Irle, 「大規模分子動力学計算を目指した分

	<p>割統治型理論と並列化手法の開発」, 第 3 回 TCCI 研究会, 2012 年 10 月, 岡崎</p> <p>10. 西澤宏晃, 中井浩巳, 西村佳央, 横川大輔, Stephan Irle, 「ナノスケールの化学反応を取り扱う DC-DFTB 法の開発と並列化」第 3 回 CMSI 研究会, 2012 年 12 月, 岡崎</p>
--	--

「京」試験利用 最終成果報告フォーム

氏名(全員分)	○石橋章司、三宅隆、田中真悟、香山正憲、寺倉清之
所属(全員分)	産業技術総合研究所
電子メール(代表)	shoji.ishibashi@aist.go.jp
利用期間(代表)	平成 23 年 11 月 4 日 ~ 平成 24 年 9 月 14 日

アプリケーション名	QMAS (Quantum MAterials Simulator)
実際に利用した ノード規模	最大 3840 ノード
背景、目的	<p>第一原理電子状態計算の分野においては、近年、欧米発の使い勝手の良い計算ソフトの普及により、専門家でなくても手軽に計算を実行し結果が得られるようになってきている。当該分野の裾野の拡大を喜ぶ一方で、ブラックボックスとしてソフトが使用されることによる知識の空洞化を危ぶむ声もある。また、計算技術および計算ソフトは不断の開発・改善への努力がなされるべきものであり、それらの大部分を欧米に依存することは、望ましい事ではないと考えられる。</p> <p>このような状況を背景に、我々は、第一原理材料シミュレータ QMAS (Quantum MAterials Simulator)の開発と応用に取り組んでいる。「計算ツールの提供」に加え、「計算科学に関わる知識・ノウハウ・文化を共有することによる、平面波基底電子状態計算プログラム開発のための能力を維持・発展させるためのプラットフォームの提供」および「自他により開発された最先端の計算技術をいち早く導入するためのプラットフォームの提供」も念頭においている。</p>
計算手法、 具体的な利用方法 (図の添付可)	<p>QMAS は、平面波基底と Projector Augmented-Wave (PAW) 法を用いて、密度汎関数理論に基づき、物質の電子状態および各種物性値を高精度に計算できるツールである。一般的な構造最適化・電子状態計算機能以外に「Berry 位相を用いた電子分極」、「静電場下での電子状態」、「一次元/三次元最局在ワニエ軌道」、「原子スケールでの誘電率分布」、「エネルギー密度・応力密度」、「クーロン・カットオフ/有効遮蔽体 (ESM) 法」、「スピン軌道相互作用・ノンコリニア磁性」、「陽電子状態・消滅パラメータ」、「ELNES/XANES スペクトル」、他の特徴的な計算機能を有する。</p> <p>構造用金属材料の複雑な組織（異相界面、粒界、転位、欠陥、不純物等）の構造と性質を第一原理計算と Phase Field 法を連携させて解明する。特に大規模 DFT 計算により、粒界・界面・欠陥の構造と力学的な応答、そこでの不純物・合金成分の役割を電子レベルから明らかにする。本アプリによる局所応力・局所エネルギー解析が重要となる。</p> <p>電子材料を中心として新材料の構造予測や電子状態解析に広く活用する。さらに最局在ワニエ軌道を用いた有効モデルの構築や、各種スペクトル計算機能を通じて、対象の物性により深く迫る。スピン軌道相互作用・ノンコリニア磁性計算機能により、永久磁石をはじめとする磁性材料の開発に資する。</p>
開発状況（単体性能、 並列度、実行性能等を 踏まえた達成状況、現 状の問題点等を定量的 に記載下さい。）	現時点で、フラット MPI に加え、OpenMP・スレッド並列を用いたハイブリッド並列化、および、k 点並列とバンド・G 点並列の二重化が完了しており、超並列環境に対応した状況になっている。試験ノード数 3840 ノード(n)、参照ノード数 1920 ノード(m)でのテスト計算において、n ノードでの実行時間 5455 秒、m ノードで野実行時間 10314 秒、n ノードでの演算性能 100TFLOPS、m

添付資料 3

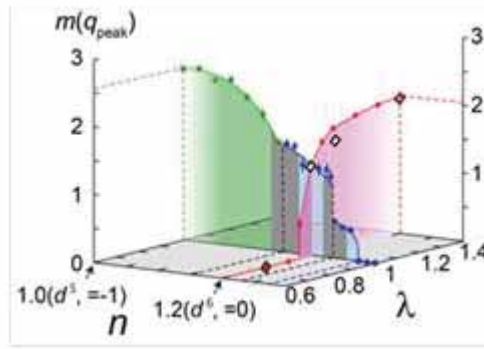
(図の添付可)	ノードでの演算性能53TFLOPSであり、ストロングスケーリング係数 α は0.95であった。3840ノードで十分な並列計算性能を有していることが実証された。
試験利用による 成果概要 (図の添付可)	試験利用期間においては、性能評価のみ。
今後の計画、展望	京の一般利用課題として「新磁石材料探査とその保磁力発現機構の解明」を申請し、採択された。QMASは、この研究課題遂行にあたり、基軸ソフトウェアの一つとして活用されている。また、戦略プログラム分野2の重点課題「金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発」において、異相界面・粒界・転位の局所応力・局所エネルギーの解析のツールとしてQMASを活用する計画である。
論文、講演、 その他出版物	<p>講演</p> <p>石橋 章司, スピン軌道相互作用とノンコリニア磁性, 計算材料科学のフロンティア勉強会, 池田市, 2012.3.7.</p> <p>香山正憲, 平面波基底法における局所エネルギー・局所応力計算法, 計算材料科学のフロンティア勉強会, 池田市, 2012.3.7.</p> <p>香山正憲, 金属中の粒界・界面の第一原理計算: 力学特性の解明に向けて, 平成24年度計算材料科学研究拠点第一回シンポジウム, 東北大学, 2012.6.18</p>

「京」試験利用 最終成果報告フォーム

氏名（全員分）	今田正俊、三澤貴宏、中村和磨、森田悟史
所属（全員分）	東京大学工学系研究科物理工学専攻
電子メール（代表）	imada@ap.t.u-tokyo.ac.jp
利用期間（代表）	平成 24 年 4 月 1 日 ~ 平成 24 年 9 月 30 日

アプリケーション名	MACE
実際に利用した ノード規模	24576 ノード
背景、目的	<p>第一原理的な電子状態計算法は、物質の性質を理解し応用する上で基礎的な重要性を持っている。特に電子相関の強い系—強相関電子系—は近年多くの基礎物理学的に意義の高い現象の発見が続き、新機能や新原理を用いた応用への期待と合わせて、電子状態解明法確立への期待は大きい。このような現象や物性の例として高温超伝導をはじめ、重い電子系や有機導体などでの新機構超伝導、スピン液体などの新奇量子液体、分数量子ホール効果やトポロジカル絶縁体のようなトポロジ効果などがある。しかし密度汎関数法を含め、従来の電子状態計算法は強相関電子系への適用が困難であった。最近ようやく、強相関電子系の持つ特徴的エネルギー階層構造を利用し、電子相関の強い系を第一原理的に解明するための計算「MACE」が可能になった。本プロジェクトの目的はMACEを方法論的に整備し、汎用的手法として確立して、京を含めスーパーコンピュータを用いた大規模計算によって強相関電子系の物性解明、予測に役立てることである。</p> <p>MACEは3段階から成る。第1段階で大局的電子構造を密度汎関数法/GW法に基づき求める。第2段階でフェルミレベルから遠い高エネルギー自由度の部分状態和を取り、消去する操作を繰込み群的に行ない、低エネルギー有効模型を導く。第3段階で有効模型を高精度低エネルギーソルバーで解く。この階層手法により密度汎関数法の抱える困難を克服する。第2段階では最局在ワニエ基底を求め、制限乱雑位相近似(cRPA)により、高エネルギー自由度からの遮蔽効果を取込んだ有効相互作用と運動エネルギーを求める。低エネルギーソルバーは多変数変分モンテカルロ法(mVMC)とクラスタ拡張した動的平均場法(DMFT)を当面採用する。物性物理学の長年の懸案である、電子相関の強い系に対する第一原理計算法がダウンフォールディング法との融合で確立し、複雑な強相関電子系の物性解明が可能になった。この手法を京で実装する。この手法を適用すれば、例えば電子相関効果による、転移温度の高い超伝導や磁性の機構解明、特に鉄系新超伝導体、銅酸化物超伝導体等などの物性解明が期待できる。またトポロジカル絶縁体における電子相関が生む新量子相、有機導体等での量子スピン液体など、新量子相・新量子相転移の存在の検証が進む。さらに強相関効果による新機能などをめざして、パラメタサーチによる物質探索が可能になる。</p>
計算法、 具体的な利用方法 (図の添付可)	<p>ダウンフォールディング法による強相関第一原理有効模型を導出するための制限RPA法と有効模型のソルバーとしての多変数変分モンテカルロ法を複合したMACE(第一原理強相関電子状態計算法)</p> <p>制限RPA法においてはRPAにもとづく誘電関数計算を行ない、多変数変分モン</p>

	<p>テカルロ法においては数千の変分パラメータを最適化しながら、変分波動関数の与える物理量の期待値のモンテカルロ計算による評価をおこなう。</p>
<p>開発状況（単体性能、並列度、実行性能等を踏まえた達成状況、現状の問題点等を定量的に記載下さい。） （図の添付可）</p>	<p>制限 RPA 計算コード部分は 24300 ノードでの測定値が flops/peak = 19%, mips/peak = 26%、 多変数変分モンテカルロ法のコード部分は 24576 ノードで flops/peak = 12%, mips/peak = 19% である。</p>
<p>試験利用による 成果概要 （図の添付可）</p>	<p>強相関電子のもつ特徴的なエネルギー階層構造を利用することによって、電子相関の強い系の電子状態を第一原理的に解明するための計算法が、3 段階の総合的な手法 MACE (Multi-scale Ab initio scheme for Correlated Electrons) として確立した。本プロジェクトでは手法の要素となる、有効模型導出のための制限乱雑位相近似のコード、および模型ソルバーとして多変数変分モンテカルロ計算コードを高度に並列化し、MACE を適用して、鉄系超伝導体、有機導体、スピン軌道相互作用の強い系の物理の第一原理的解明を行なった。</p> <p>2008 年 2 月に発見され、臨界温度が 50 度を超す鉄系超伝導体は発見後数か月で、多くの化合物が独自の超伝導と多様な臨界温度、磁性を示すことが明らかとなった。この化合物群には、LaFeAsO をはじめ、LaFePO、BaFe₂As₂ のようなニクタイト型と FeSe や FeTe のようなカルコゲナイト型の化合物がある。発見後 3 年以上経つが、超伝導機構は解明されていない。電子相関効果がどの程度重要かについての合意も形成されていない。この化合物群に対し、MACE の第一段階で大局バンド構造を求め、第 2 段階のダウンフォールディング法を適用し、定量的な低エネルギー有効模型を以前、世界に先駆けて導出した。</p> <p>鉄系超伝導体は超伝導相近傍の母物質が反強磁性秩序を示すことが多いが、磁気秩序モーメント（秩序パラメータ）は物質群により多様で、秩序のない LaFePO から、モーメントが 2 μ_B 以上の FeTe まで多様であり、その原因が謎であった。我々は第一原理有効模型を、多変数変分モンテカルロ法で解き、物性を解明した。その結果、図のようにこの多様さが有効電子間相互作用の大きさの違いによって定量的にも 10% 以内の精度で説明できること、LaFeAsO では実際に今までの第一原理計算で説明のできなかった小さな磁気モーメントが量子臨界点近傍の現象として説明できることを明らかにした。磁性の多様性の原因が、電子間相互作用の化合物に依存した違い（遡ると共有結合性とイオン性の違い）に由来することを第一原理的に明らかにしたわけである。</p>



さらに、電子濃度 n の関数として磁気秩序パラメタの大きさを今年度計算し、図のように鉄系超伝導体の位置する $n=1.2$, $\lambda=1$ 付近の状態が $n=1$ を中心とするモット絶縁体の巨大な影響下にあることを明らかにした。これは電子相関とモット絶縁体の物理の重要性を示す決定的な証拠であり、今後の超伝導機構解明にとっても鍵となる。

スピン軌道相互作用の大きなイリジウム化合物の第一原理有効模型を導出し、動的平均場理論により電子状態を解明した。この物質がスレータ絶縁体とよばれる物質であることを解明した。

2 種類の有機導体の第一原理有効模型を導き、今後の電子状態解明の基礎を築いた。またこの有効模型を解き、モット転移を含む相図を求め、実験結果を概ね再現することを示した。

今後の計画、展望

京の現実応用を進め、鉄系超伝導体の超伝導機構、有機導体の量子スピン液体とモット転移機構、銅酸化物超伝導機構、スピン軌道相互作用と電子相関の絡む特異物性解明に取り組む。

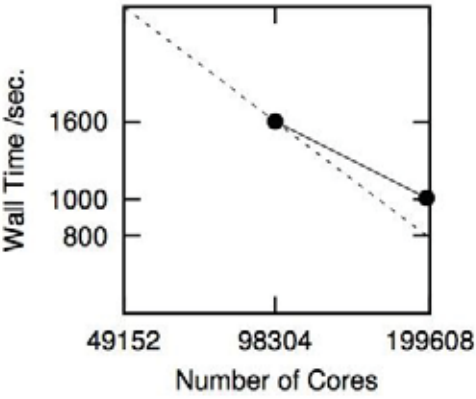
論文、講演、
その他出版物

Kazuma Nakamura, Yoshihide Yoshimoto, and Masatoshi Imada
 “*Ab initio* two-dimensional multiband low-energy models of $\text{EtMe}_3\text{Sb}[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$ and $\kappa\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{Cu}(\text{NCS})_2$ with comparisons to single-band models”
 Phys. Rev. B **86**, 205117 (2012)
 T. Misawa, K. Nakamura and M. Imada, “*Ab initio* Evidence for Strong Correlation Associated with Mott Proximity in Iron-based Superconductors”, Phys. Rev. Lett. **108**, 177007 (2012).
 R. Arita, J. Kunes, A.V. Kozhevnikov, A.G. Eguiluz, M. Imada, “*Ab initio* Studies on the Interplay between Spin-Orbit Interaction and Coulomb Correlation in Sr_2IrO_4 and Ba_2IrO_4 ”, Phys. Rev. Lett. **108**, 086403 (2012).
 Hiroshi Shinaoka, Takahiro Misawa, Kazuma Nakamura, Masatoshi Imada, “Mott Transition and Phase Diagram of $\kappa\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{Cu}(\text{NCS})_2$ Studied by Two-Dimensional Model Derived from *Ab initio* Method, J. Phys. Soc. Jpn., **81**, 034701(2012).
 講演

	<p>Masatoshi Imada, Plenary talk “Quantum Simulation for Real Strongly Correlated Systems” in IUPAP Conference on Computational Physics 2012 (CCP2012) , October 2012, Kobe.</p> <p>その他出版物</p> <p>今田正俊, 「誌上セミナー 第一原理計算手法による強相関電子系の電子状態の解明(その1)概観」, 『固体物理』 46,351 (2011).</p> <p>三宅隆, 今田正俊, 「誌上セミナー 第一原理計算手法による強相関電子系の電子状態の解明(その2)相関の強い電子系のための第一原理計算手法とその展開」, 『固体物理』, 46, 499 (2011).</p> <p>今田正俊, 三宅隆, 「誌上セミナー 第一原理計算手法による強相関電子の電子状態の解明 (その 3) 有効模型へ」, 『固体物理』 ,47, 113 (2012).</p>
--	--

「京」試験利用 最終成果報告フォーム

氏名（全員分）	石村和也 ¹ 、大塚勇起 ² 、大西裕也 ² 、山木大輔 ² 、○天能精一郎 ²
所属（全員分）	1. 分子科学研究所、2. 神戸大システム情報学研究科
電子メール（代表）	tenno@cs.kobe-u.ac.jp
利用期間（代表）	平成 24 年 4 月 1 日 ~ 平成 24 年 9 月 30 日

アプリケーション名	GELLAN						
実際に利用した ノード規模	最大 24576 ノード						
背景、目的	<p>計算機を用いて信頼度の高い分子設計には非経験的分子軌道法のポストハートリー・フォックの手法が不可欠である。本研究では、これらの超並列実装を行い、ナノスケール材料の定量的な理論予言を可能にする。</p>						
計算手法、 具体的な利用方法 (図の添付可)	<p>F12 理論は従来の軌道の概念を超える 2 電子関数 (ジェミナル) を用いて高精度計算を達成するものであり、非経験的分子軌道理論の分野のブレークスルーとして世界中で開発が進められている。F12 計算に必要な全ての多電子積分を分子求積法を用いており、求積点を分散させることにより、ボトルネックとなる積分演算と積分変換が超並列計算環境で効率的に実行される。</p>						
開発状況 (単体性能、 並列度、実行性能等を 踏まえた達成状況、現 状の問題点等を定量的 に記載下さい。) (図の添付可)	<p>ハイブリッド並列 (MPI/OpenMP)、24576 ノード (196608 コア) までのノード拡大を行った。$(C_{150}H_{30})_2$ の 24576 ノードの計算では、OpenMP 使用で 1 ノード (8 コア) 当たり 11.0GB のメモリーを使用し、実効性能は 28.2% であった。12288 ノードから 24576 ノードのストロングスケーリングの並列化効率は 79.6% であった。現状としての問題点として、小規模な行列対角化や行列積が目立って来ており、全てのノード数を用いなくても効率的に働く (冗長表現を含む) 行列演算ライブラリーの整備が必要であると考えられる。</p>  <table border="1"> <caption>Data points from the Wall Time graph</caption> <thead> <tr> <th>Number of Cores</th> <th>Wall Time /sec.</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>98304</td> <td>1600</td> </tr> <tr> <td>199608</td> <td>1000</td> </tr> </tbody> </table>	Number of Cores	Wall Time /sec.	98304	1600	199608	1000
Number of Cores	Wall Time /sec.						
98304	1600						
199608	1000						

<p>試験利用による 成果概要 (図の添付可)</p>	<p>分子求積 MP2 法と MP2-F12 法の超並列実装を行い、ナノスケールの分子系での高精度計算を可能とした。分子求積 MP2 法では巨大なモデルフラフェンシートの相互作用エネルギーを計算した。</p> 
<p>今後の計画、展望</p>	<p>今後は炭素材料を中心に MP2-F12 法を用いた大規模なプロダクションランを行う予定である。又、重元素系の材料設計や、モデルメタルクラスターの計算による希土類の代替合金の探索を目標として、完全配置間相互作用と同一の精度で計算可能な理論の実装を行う。</p>
<p>論文、講演、 その他出版物</p>	<p><u>Kazuya Ishimura</u>, Seiichiro Ten-no. "DEVELOPMENT OF MASSIVELY PARALLEL ALGORITHM FOR MP2-F12 CALCULATIONS" Theory and Applications in Computational Chemistry (TACC) 2012, September 2 - 7 (2012) Pavia, Italy</p> <p>Kazuya Ishimura, Yu-ya Ohnishi, Yuhki Ohtsuka, Daisuke Yamaki, <u>Seiichiro Ten-no</u>, "Recent advances in explicitly correlated electronic structure theory using cusp conditions", the 2012 International Congress of Quantum Chemistry, June 25 - 30 (2012) Boulder, Colorado, USA</p>

「京」試験利用 最終成果報告フォーム

氏名（全員分）	○宮崎剛 ^{1,3,4} 、大塚教雄 ² 、S. Arapan ¹ 、有田通朗 ^{1,3} 、中田彩子 ¹ 、D. R. Bowler ^{1,4}
所属（全員分）	¹ 物質・材料研究機構、 ² 理化学研究所、 ³ 東京理科大学、 ⁴ University College London
電子メール（代表）	MIYAZAKI.Tsuyoshi@nims.go.jp
利用期間（代表）	平成23年 4月 1日 ~ 平成24年 9月30日

アプリケーション名	CONQUEST
実際に利用した ノード規模	24,576 ノード
背景、目的	計算時間、メモリ量が系の含む原子数 N に比例するオーダー N 法を用いることにより、数十万から百万原子を含む超大規模系に対して密度汎関数法にもとづく第一原理計算を実現する。(通常の方法は計算時間が N の 3 乗に比例)
計算手法、 具体的な利用方法 (図の添付可)	<p>通常の第一原理計算手法が Kohn-Sham 方程式の固有波動関数を電子の数だけ求めるのに対して、本手法では密度行列を求めることによって電子状態計算を行う。さらに、密度行列の非対角項に切断半径を導入することによりオーダー N 法を実現している。与えられた原子の種類、原子座標に対して量子論にもとづいた全エネルギー、原子に働く力が得られるので、構造最適化、第一原理分子動力学などを行うことが可能である。</p> <p>具体的な利用方法は、研究対象とする系に対して準備された初期原子座標(何らかの理論モデルや限られた実験結果から類推されるデータ等)、原子の種類によって決まる擬ポテンシャルのデータなどを入力として、セルフコンシステントな電子状態を求め、構造最適化などを行う事によって、エネルギー的に安定な構造、電子状態を計算する。</p>
開発状況(単体性能、 並列度、実行性能等を 踏まえた達成状況、現 状の問題点等を定量的 に記載下さい。) (図の添付可)	<p>並列性能をストロングスケールリングとウィークスケールリングの両方で調べ、効率化向上を行ってきた。並列度としては 24,576 ノードまでのテストを行い、十分な並列化効率が出ている事を確認した。7680 ノードまでの結果を図 1 (次ページ) に示す。左図が約 50 万原子系に対する 1920-7680 ノードのストロングスケールリング、右図はウィークスケールリングの結果である。図から分かるように、ウィークスケールリングの結果は 10,000 ノード程度でもほとんど理想的であることが示された。(24,576 ノードまで確認済。) また、OpenMP+MPI のハイブリッド並列を導入することによって 1 コア当たり 4 原子程度になっても十分な効率を得る事が可能となり、経過時間の大幅な低減に成功した。</p> <p>実行性能に関してもプログラムの高コスト部分の書き直しにより、当初の 10 倍以上の速度向上を得た。(その後、コンパイラの改善もあるので現状は最初の方が速い可能性がある。) 計算条件によるが、演算部分は実行効率が理想値の 20% 強となることを確認している。通信部分を含めても全体で 10% 程度の効率が得られ、これは当初の目標値よりも高い値である。本計算手法では電子状態の局所性を使う為に、パターンが複雑な様々な疎行列を大規模並列計算で行っている。これらを考えると、極めて高い性能と言えると考えている。</p> <p>現状の問題点としては、メモリ量が我々の予想値と異なることがあげられる。また、プロダクションランにおける IO 効率のチェックが今後必要となる。</p>

<p>試験利用による 成果概要 (図の添付可)</p>	<p>ジョブの上限値に制限があったので、プロダクションランを行う事はできなかった。一方、プログラムの並列化効率向上、実行効率向上に関しては、ハイブリッド並列の導入と改善、さらに高コスト部分の京コンピュータ用の書き換えによって、ストロングスケーリングと実行性能に大きな向上が得られた。密度行列最適化を行う為の時間が劇的に少なくなり、プロダクションランの為の準備が整ったと考えている。</p> <p>固体シリコンのテスト系で計算条件が少し緩い場合に対して、100万原子系の計算まで行い、1 MD ステップの時間を十分短くできることを確認した。</p> <div style="text-align: center;"> </div> <p>図1：固体シリコンに対する京速コンピュータでの計算時間。 (左図：strong scaling。 右図：weak scaling の結果)</p>
<p>今後の計画、展望</p>	<p>現実の興味ある系に対する超大規模第一原理計算を実現する。 数万から数十万原子系に対する第一原理計算による構造最適化、分子動力学を行い、百万原子系に対する構造最適化を可能とする。(テスト系ではなく、現実の研究における世界最大の第一原理計算を実現する。)</p>
<p>論文、講演、 その他出版物</p>	<p>学術雑誌</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. D. R. Bowler and T. Miyazaki, "O(N) methods in electronic structure calculations", Reports on Progress in Physics, vol. 75, No. 3, 036503-1-43, 2012 Mar. (+表紙) 2. T. Otsuka and T. Miyazaki, "A quantum chemistry study of Ds-Pa unnatural DNA base pair", International Journal of Quantum Chemistry, 113, 504-509 (2013). 3. L. A. Truflandier, T. Miyazaki, D. R. Bowler, "Linear-scaling implementation of exact exchange using localized numerical orbitals and contraction reduction integrals, submitted. <p>講演</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 有田通朗、宮崎剛、M. Todorovic, 篠田渉、D. R. Bowler, 「イオンチャネル gramicidin A に対するオーダーN 法大規模第一原理計算 II」 日本物

	<p>理学会 2011 年秋季大会、2011 年 9 月 21-24 日、富山大学（富山市）。</p> <p>2. 宮崎剛「オーダーN 法 DFT 計算プログラム CONQUEST による大規模並列計算」、第 2 回「学術計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム、2011 年 9 月 11-13 日、筑波大学（つくば市）</p> <p>3. 宮崎剛「大規模第一原理計算手法の開発と応用計算」NIMS-AIST (NRI) 計測・計算シミュレーション合同 WS、2011 年 10 月 25 日、産業技術総合研究所（つくば市）</p> <p>4. M. Arita, M. Todorovic, W. Shinoda, D. R. Bowler and T. Miyazaki, “Theoretical studies on a gramicidin A channel using a linear-scaling DFT technique”, The 14th Asian Workshop on First-Principles calculations, 2011 年 10 月 31 日-11 月 2 日、東京大学（文京区）</p> <p>5. T. Otsuka, M. Taiji, D. R. Bowler and T. Miyazaki, “Interaction energy and large-scale DFT calculations of DNA with unnatural base pair system”, The 14th Asian Workshop on First-Principles calculations, 2011 年 10 月 31 日-11 月 2 日、東京大学（文京区）</p> <p>6. T. Miyazaki, S. Arapan, A. Nakata and D. R. Bowler, “Recent progress in a linear-scaling DFT code CONQUEST: parallel efficiency and optimization of local orbitals”, The 14th Asian Workshop on First-Principles calculations, 2011 年 10 月 31 日-11 月 2 日、東京大学（文京区）</p> <p>7. 宮崎剛「オーダーN 法を用いた大規模第一原理計算」精密工学会超精密加工専門委員会第 6 3 回研究会「計算科学」、2012 年 1 月 23 日、大阪ガーデンパレス（大阪市）</p> <p>8. 宮崎剛「オーダーN 法による超大規模第一原理計算手法の開発」2012 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム（情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会）、2012 年 1 月 24-26 日、名古屋大学豊田講堂（名古屋市）。</p> <p>9. 宮崎剛「オーダーN 法第一原理計算手法の最近の発展」第 2 5 期 GAMM フォーラム本例会、2012 年 3 月 2 日、表参道アイビーホール（東京）。</p> <p>10. 有田通朗、宮崎剛、D. R. Bowler、「オーダーN 法 DFT 計算プログラム CONQUEST の開発：DFT-D2 法の導入と応用計算」、日本物理学会第 6 7 回年次大会、2012 年 3 月 24-27 日、関西学院大学（西宮市）。</p> <p>11. 中田彩子、宮崎剛「第一原理オーダーN 計算 N プログラム CONQUEST における局在軌道の最適化」、分子科学討論会、2012 年 9 月 18-21 日、東京大学。</p> <p>12. 中田彩子、宮崎剛「第一原理オーダーN 計算 N プログラム CONQUEST における局在軌道の最適化」、日本物理学会 2012 年秋季大会、2012 年 9 月 18-21 日、横浜国立大学。</p> <p>13. Tsuyoshi Miyazaki, David Bowler, “Recent Developments in a</p>
--	--

	<p>linear-scaling DFT code CONQUEST” , ISC-QSD, 2012 年 10 月 11 日-13 日。 大阪大学豊中キャンパス</p> <p>14. M. Arita, D. R. Bowler, T. Miyazaki, ” Parallel efficiency and recent progress of a linear-scaling DFT code CONQUEST” , Conference on Computational Physics (CCP2012), 2012 年 10 月 14-18 日、ニチイ学館 (神戸)。</p> <p>その他出版物</p> <ol style="list-style-type: none">1. 宮崎剛「II. 2. 2 オーダーN を目指して」(「密度汎関数法の発展 -マテリアルデザインへの応用-」赤井久純、白井光雲編著)、シュプリンガー・ジャパン、2011 年 9 月。2. 有田通朗、宮崎剛「オーダーN 法を用いた大規模第一原理計算 : ナノ構造物質、巨大生体分子に対する第一原理計算」、精密工学会専門委員会会誌「超精密」18、p50-55 (2012)。
--	---

「京」試験利用 最終成果報告フォーム

氏名（全員分）	○小野倫也 ¹ 、Marcus Heide ¹ 、齊藤正一郎 ¹ 、江上喜幸 ²
所属（全員分）	1 大阪大学大学院工学研究科、2 長崎大学(現北海道大学)
電子メール（代表）	ono@prec.eng.osaka-u.ac.jp
利用期間（代表）	平成 24 年 2 月 1 日 ~ 平成 24 年 9 月 30 日

アプリケーション名	RSPACE
実際に利用した ノード規模	3840 ノード
背景、目的	<p>近年の半導体デバイスや光通信デバイスは、微細化によって高性能化を達成してきたと言っても過言ではない。これまで微細化の限界が幾度となく懸念されてきたが、その壁を打ち破り高性能化を実現してきた。現在、そのサイズは数ナノメートルに達している。このようなスケールの物理現象を制御するには、ナノスケールサイズでの物質の微視的世界の基本法則に基づき理解することが重要であることは言うまでもない。本研究では、第一原電子状態・量子輸送特性シミュレーションのための新しい計算手法およびそれに基づいた計算コード RSPACE の開発を行い、(1)トランジスタの絶縁膜/基板界面を流れるリーク電流やチャネル電流の解析、(2)分子やナノチューブ、フラーレン鎖などの量子輸送特性の予測、(3)トンネル磁気接合など絶縁体または半導体/強磁性材料界面における界面の電子状態とスピン輸送特性の評価、(4)ナノ構造の持つ新機能の探索や革新的な機能を発現するナノ物質・構造の設計を行う。特に、近年積極的に開発が進められている超並列型スーパーコンピュータでの実行を念頭に置いた計算手法・コードの開発を行い、大規模シミュレーションの実現を目指す。そして、シミュレーションより得られた知見を実験にフィードバックすることにより、新たなナノデバイスの開発に貢献することを目的とする。</p>
計算手法、 具体的な利用方法 (図の添付可)	<p>RSPACE は、密度汎関数理論に基づいて電子状態・輸送特性計算を行う。従来よく使われる方法では波動関数を基底関数で展開しているが、RSPACE では実空間グリッド上の波動関数の値を直接計算する。基底関数による境界条件の制約がないため、計算領域の両端に半無限に続く電極を取り付けた計算モデルを用いた輸送特性計算も可能である。また、計算精度は、グリッド幅を小さくすることにより向上するため、原子波動関数展開法のように基底関数の完全性に関する問題もない。さらに、平面波展開法のようにフーリエ変換を多用しないため、超並列計算に適したアルゴリズムになっている。</p>
開発状況（単体性能、 並列度、実行性能等を 踏まえた達成状況、現 状の問題点等を定量的 に記載下さい。） (図の添付可)	<p>トライアルユース期間のチューニングにより、3840 ノードを用いて 10240 個の原子からなる Si 結晶のモデルを計算した場合、ピーク性能に対する実行効率が 30%、1920 ノードの場合に対するストロング並列化効率が 95%であった。部分空間での波動関数の対角化と直交化に関する計算量は、モデルサイズの 3 乗に比例するため、この部分が大規模計算に向けての課題となる。このうち、多くは DGEMM、ZGEMM の繰り返しであるため、実行効率の向上に貢献する。一方、残りの部分は大規模固有値問題となるため、高速固有値ソルバーの導入が必要である。</p>

<p>試験利用による 成果概要 (図の添付可)</p>	<p>RSPACE を用いて電子デバイス用の SiC/SiO₂ 界面の界面欠陥とリーク・チャネル電流の相関を調べ、高機能界面をデザインすることを最終達成目標としている。熱酸化により形成された SiC/SiO₂ 界面の原子構造については、界面での C 原子の分布に関して相反する実験結果が報告されている。トライアルユース期間中に、SiO₂ バルク中の残留 C 原子の構成エネルギーと CO 分子として気相中に放出される可能性を調べた。計算の結果より、残留 C 原子は気相中に放出される可能性が極めて低いことが分かった。この計算結果は、後の一般利用で行われた界面からの CO 分子放出の計算結果と組み合わせることにより、界面付近に余剰な C 原子が存在しないという実験結果を支持するものである。</p>
<p>今後の計画、展望</p>	<p>SiC はパワーデバイス材料として期待されているが、キャリアの移動度が期待された程大きくないということが問題となっている。RSPACE を用いて界面の大規模電子状態・輸送特性計算を行うことにより、キャリア移動度を低下させる界面欠陥の同定とキャリア移動度を向上させる方法を提案する。また、SiC 以外の材料を用いたデバイスのデザインにも応用していく。</p>
<p>論文、講演、 その他出版物</p>	<ol style="list-style-type: none"> 1. Tomoya Ono: First-principles transport calculation method using real-space finite-difference NEGF scheme, International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design (ISC-QSD), (October 11-13, 2012, 大阪). 2. 齊藤 正一朗, 森川 良忠, 小野 倫也: 第一原理計算による 4H-SiC(0001) 面からの C 原子放出過程の解明, 第 18 回ゲートスタック研究会, (Jan. 25-26, 2013, ニューウェルシティ湯河原).

「京」試験利用 最終成果報告フォーム

氏名（全員分）	○信定克幸 ¹ 、野田真史 ¹ 、矢花一浩 ² 、佐藤駿丞 ²
所属（全員分）	1) 分子科学研究所、2) 筑波大学
電子メール（代表）	nobusada@ims.ac.jp
利用期間（代表）	平成 23年 7月 21日 ~ 平成 24年 9月 30日

アプリケーション名	PIQUANDY
実際に利用した ノード規模	最大 24,576 ノード (196,608 コア)
背景、目的	光エネルギー伝播、量子データ転送、光触媒作用等の光・電子機能を持つ次世代量子デバイス開発に資する基礎的知見を得るために、ナノ構造体の実時間光誘起電子ダイナミクスの第一原理計算を行う。
計算手法、 具体的な利用方法 (図の添付可)	<p>時間依存 Kohn-Sham 方程式を実時間・実空間グリッドにおいて差分法で解く手法を用いて、光誘起電子ダイナミクスの数値的解明を行う。エネルギー停留値を求めるために、共役勾配法と DIIS 法を併用して収束解を効率的に求める手法を採用し、ポアソン方程式を共役勾配法で解く際の多極子展開の最適化、可変計算グリッドの採用等を行い、効率的な数値計算を実行することが可能である。MPI と OpenMP を併用したハイブリッド並列を採用し、Kohn-Sham 軌道及び計算空間メッシュに関する並列化を行う。</p>
開発状況 (単体性能、 並列度、実行性能等を 踏まえた達成状況、現 状の問題点等を定量的 に記載下さい。) (図の添付可)	<p>最終的には最大 24,576 ノード (196,608 コア) の実機稼働に成功した。1 万ノード程度までであれば 80%程度以上の速度向上率、一部アルゴリズムに関しては 20%程度の実行性能を出すことができた。最大の 24,576 ノードでは、実行性能は 7~8%程度であるが、これはノード数増大に伴い、分割された計算空間の数が増大し、結果的に通信量が増えるためである。具体的には、ポアソン方程式を共役勾配法で解く際に差分法の分点数が多いことと、それに伴う隣接通信の増大、多数個の計算空間に分配されている電子密度を掻き集めるための全体通信の増大が顕著に現れ、超並列化計算に対するボトルネックとなることが分かった。特に、電子密度を掻き集めるために要する全体通信は、ノード数の増加と共に顕在化し、全体計算時間の 30%程度に達するため、最大のボトルネックとなっている。通信方法の最適化を行い、改善に努めている。</p> <p>9 月下旬からの共用開始後の京一般利用枠にも採択され、更なる並列化を進めている途中である。</p>

<p>試験利用による 成果概要 (図の添付可)</p>	<p>平成23年7月から開始した超並列計算に向けたプログラム開発は着実に進んでいる。超並列計算プログラミングのボトルネックとなっている箇所も具体的に突き止めており、今後も一つずつ問題点を改善する目処が見えている。</p> <p>プロダクトランに関しては、20万コアレベルの大規模計算が可能になったために、十数ナノメートルを超えるナノ構造体の光誘起電子ダイナミクスの計算が可能になった。C_{60} 固体に対応する面心立法格子ユニットの光吸収スペクトルの計算を行い、実験値とも十分に比較し得る結果がほぼ出揃っている。この研究結果は、電子ダイナミクスの超並列計算成果として報告するために、学術論文を執筆中である。現状では、最大で数千原子数程度、10,000~20,000 電子数程度のナノ構造体の電子ダイナミクス計算は実行可能な状況であり、このサイズの実在系ナノ構造体の励起状態計算を実行できる研究グループは世界的に見ても非常に限られている。このアドバンテージを最大限に利用して、光・電子機能性デバイスの理論設計の計算を進めている最中である。また、光と物質の相互作用をより正確に記述するために、電子ダイナミクスと電磁場ダイナミクスの露なカップリングを取り込んだ数値計算手法の開発も進めた。具体的には現在進めている電子ダイナミクス法にマクスウェル方程式を解くためのルーチンの実装を進めている。</p>
<p>今後の計画、展望</p>	<p>一番のボトルネックとなっている軌道から電子密度を計算するルーチンに伴う全体通信の増大は、ノード間のロードバランスの平滑化や通信方法の変更を行い、速度向上率及び実効性能の改善を試みる。基本骨格の超並列電子ダイナミクスプログラムは完成しており、更なるチューニングと同時にプロダクトランを増やす予定である。表面プラズモンポラリトンのエネルギー伝播や光エネルギー変換デバイスの理論シミュレーションを行う予定である</p>
<p>論文、講演、 その他出版物</p>	<p>K. Nobusada, "Near-Field Excitation in Nanostructure Arrays: Electron and Electromagnetic Field Fully-Coupled Dynamics", The 2nd Sweden-Japan Workshop on Nanophotonics and Related Technologies, 2012.6.18-19, Kista, Sweden, Invited talk 6.19</p> <p>K. Nobusada, "Near-Field Excitation Dynamics in Nanostructures: Nonuniform and Self-Consistent Light Matter Interaction", Material Simulation in Petaflops era 2012, 2012.7.2, ISSP, Kashiwa, Chiba, Japan, Invited Talk 7.2</p> <p>現在、超並列電子ダイナミクス法の学術論文を執筆中</p>

「京」試験利用 最終成果報告フォーム

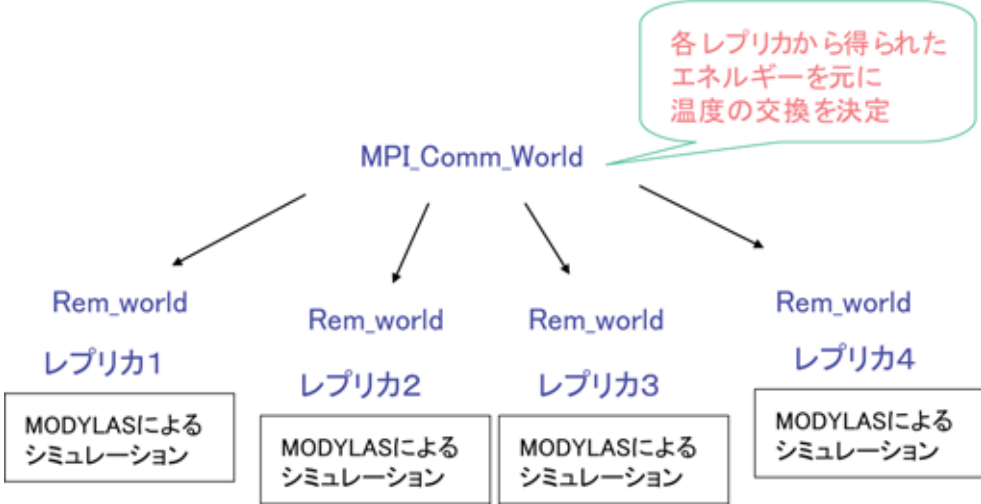
氏名（全員分）	前園涼
所属（全員分）	北陸先端科学技術大学院大学・情報科学研究科
電子メール（代表）	rmaezono@mac.com
利用期間（代表）	平成24年4月1日 ～ 平成24年9月30日

アプリケーション名	CASINO
実際に利用した ノード規模	72 ノード 576 コア
背景、目的	信頼性の高い実用的電子状態計算手法である量子モンテカルロ電子状態計算パッケージ「CASINO」を、京コンピュータ上の数万並列規模で高性能・高並列効率を実現させ、現実物質への適用に高い実用性を達成する事を目的とする。
計算手法、 具体的な利用方法 (図の添付可)	量子拡散モンテカルロ法による電子状態計算法で、模型理論対象ではなく、原子核ポテンシャルの第一原理記述による非一様電子系の多体波動関数理論シミュレーション手法である。固体周期系は、周期境界条件として取り扱われ、平面波基底、あるいはスプライン基底による基底関数展開を用いる。量子モンテカルロ計算は客観的信頼性に優れるものの統計蓄積による手法であり、統計誤差を化学的に要求される精度にまで絞り込む必要がある。何億回という蓄積をシングルスレッドで行う事は事実上不可能で、MPI 大規模並列を用いて近年、実用の域に達した手法である。国際的には 12 万コアのフラット MPI 並列の実績がある。32 並列程度の場合、数ヶ月の統計蓄積（数百万ステップ）を必要とする。
開発状況（単体性能、 並列度、実行性能等を 踏まえた達成状況、現 状の問題点等を定量的 に記載下さい。） (図の添付可)	当該開発期間に先立つ利用期間中には、インストール手順やライブラリの調整など、CASINO の運用に関する下準備を完了し、当該期間中は主に、単体性能に関するチューニングに傾注した。計算の対象としては、より現実的な利用に近い、半導体 TiO ₂ /333 の系で性能計測と調整を行った。並列性能は、当該期間中までに、ストロング・スケーリングにて、95.8~100.0% (578 コア並列で参照値の選定により変化)、ウィーク・スケーリングでは、98.1~100.0%を達成した。単体性能におけるピーク性能比は、当該期間終了までに 40%超を達成しているが、この数値が達成されている算法部分（複素ベクトルの内積計算）の算法構造から考えて、この達成値は高すぎるのではないかという指摘を受け、その調査と検証に傾注した。担当のシステムエンジニアと綿密に相談を重ね、ライブラリの置換や、タイマー挿入、プロファイラの使い分けなど、各種調査を重ねたが、計測されるピーク性能値には大きな変化を見いだす事はなく、以降は此の事には拘泥せず、大並列での性能計測に軸足を移した。

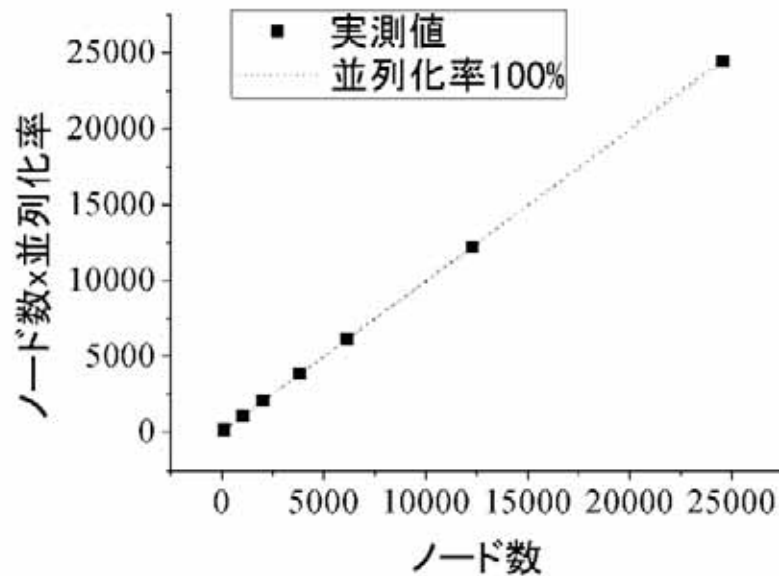
<p>試験利用による 成果概要 (図の添付可)</p>	<p>当該期間中は、上記の通りの経緯にて、単体でのピーク性能値の計測に傾注し、40%超のピーク性能値が単体利用で各種検証から実証されたという事が一つ目の成果としてあげられる。当該期間においては、プロダクトランの投入は行わず、これに向けた環境整備と検証に傾注した。二つ目の成果としては、当該期間中に導入されたステージング運用などに呼応した当該コードの運用体制を確立し、当該期間に続く一般公開利用期間での高い並列性を検証する舞台を整備したという事があげられる。取り組み時点においては、当該コード「CASINO」はステージング運用を想定した運用スクリプトは整備されておらず、これに呼応した大規模な変更を行う必要があった。当該期間中に京コンピュータシステム側で報告された、ジョブ投入オプションなどの指定に関する幾つかのバグに呼応する形で、CASINO の運用スクリプトを随時改訂し、続く一般公開利用期間での高い利便性と、数万並列規模でのプロダクトラン実現に向けた基盤整備が完了した。</p>
<p>今後の計画、展望</p>	<p>当該期間に続く一般公開利用期間では、数万並列規模でのプロダクトランとして、高い計算コストが要求される大規模分子結晶系のマイクロ構造同定への適用に取り組む</p>
<p>論文、講演、 その他出版物</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・ 前園涼「量子モンテカルロ法を用いた電子状態計算」、HPCI 戦略プログラム 分野2 × 分野5 異分野交流研究会、東京大学物性研究所 ・ 前園涼「Electronic Structure Calculations using Quantum Monte Carlo method」、2nd African School on 'Electronic Structure Methods and Applications'、ケニア・チェプコイレル・ユニバーシティ・カレッジ ・ 前園涼「Non-additivity in metallic tri-wire binding」、Taiwan-Japan QMC2012、臺灣、中央研究院・原子・分子科学研究所 ・ 前園涼「Multi-component Monte Carlo method applied to Electron-hole systems」、Third ISIR collaboration workshop on first-principles calculations、兵庫県神戸市・有馬温泉メープル有馬 ・ 前園涼「Non-additivity in metallic tri-wire binding」、International Symposium of Computational Science 2013、金沢大学自然科学 5 号館 2 階第 6 講義室

「京」試験利用 最終成果報告フォーム

氏名（全員分）	岡本祐幸、榮慶丈
所属（全員分）	名古屋大学大学院理学研究科、分子科学研究所
電子メール（代表）	okamoto@phys.nagoya-u.ac.jp
利用期間（代表）	平成 24 年 4 月 1 日 ~ 平成 24 年 9 月 30 日

アプリケーション名	レプリカ交換法付加機能ソフト : REM
実際に利用した ノード規模	24576 ノード
背景、目的	<p>生体分子の機能はその立体構造により決定される。しかしながらこれまでの計算機では演算能力が不十分であったため、計算機による生体分子の立体構造予測は困難であった。我々の提案するレプリカ交換法付加機能ソフト : REM を既存のシミュレーションプログラムに組み込み、京コンピュータをはじめとする大規模並列計算機を用いてシミュレーションをおこなうことで、レプリカ交換法による効率的な構造探索を豊富な計算機資源によって可能とする。その結果として生体分子の立体構造予測を実現する。</p>
計算手法、 具体的な利用方法 (図の添付可)	<p>REM は既存のシミュレーションプログラムに MPI を利用したサブルーチンの形で組み込むことでレプリカ交換法の機能を付加する。近年並列計算機環境に適用するために分子シミュレーションプログラムは MPI を利用した並列化処理が可能であるのは一般的である。これらのプログラムに対し、REM では MPI コミュニケータを複数用意する (MPI_Comm_split を利用)。これらのコミュニケータがそれぞれ各レプリカに対応する。そしてこれらを同時に実行し、シミュレーションのある間隔ごとに用意したサブルーチン (rep_exchange) を呼び出し、温度交換処理をおこなう。今回京コンピュータ上でこれを実現するために分子動力学シミュレーションソフト MODYLAS に REM を組み込んだ (下図)。</p> <p>MPI_Comm_Split を用いて複数のコミュニケータに分割し、一つのコミュニケータを一つのレプリカ(分子動力学法プログラム)に対応させる</p>  <pre> graph TD MPI_Comm_World[MPI_Comm_World] --> Rem_world1[Rem_world レプリカ1] MPI_Comm_World --> Rem_world2[Rem_world レプリカ2] MPI_Comm_World --> Rem_world3[Rem_world レプリカ3] MPI_Comm_World --> Rem_world4[Rem_world レプリカ4] Rem_world1 --- MODYLAS1[MODYLASによるシミュレーション] Rem_world2 --- MODYLAS2[MODYLASによるシミュレーション] Rem_world3 --- MODYLAS3[MODYLASによるシミュレーション] Rem_world4 --- MODYLAS4[MODYLASによるシミュレーション] </pre> <p>各レプリカから得られたエネルギーを元に温度の交換を決定</p> <p>図. REM の概念図 REM では各レプリカに対応するシミュレーションの系ごとに MPI コミュニケータを用意する</p>

現在京コンピュータで十分な並列化効率を出すことを目的としたチューニング及びテスト計算をおこなっている。テスト計算として 1 万個の水分子モデル (TIP3P) の系に対し、ノード数を変えた時の並列化効率を測定している。1 レプリカあたり 8 ノードを用い、最大 3072 レプリカ (24576 ノード) を用いたシミュレーションを並列化効率 99%以上で実現している (下図)。



開発状況 (単体性能、並列度、実行性能等を踏まえた達成状況、現状の問題点等を定量的に記載下さい。)

(図の添付可)

ノード数	レプリカ数	並列化率 (%)
128	16	99.98
1024	128	99.80
2048	256	99.85
3840	480	99.95
6144	768	99.80
12288	1536	99.30
24576	3072	99.30

図表: ノード数を変えた時のノード数×並列化率の変化 (計算条件は, TIP3P 水分子モデルによる 1 万個の水分子, 5,000~30,000 MD ステップ, 290-300K の温度範囲)。また並列化率の基本単位として 2 レプリカ (16 ノード) の計算時間を用いた。

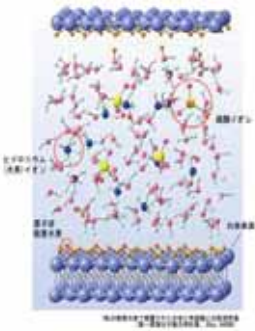
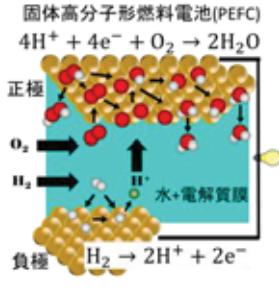
試験利用による
成果概要
(図の添付可)

これまでの利用期間に我々は上記に示したように京コンピュータ上で高い並列化効率を維持したアプリケーションの実行を可能としてきた。特に、1 万個の水分子の系においても高い並列化効率を実現できたのは重要である。(例えば、100 万粒子系などに持って行けば、より高い並列化効率が期待できるからで

	<p>ある。) 本試験利用期間では今後京の一般利用でおこなうことを予定している Protein A の折り畳みシミュレーションに向けた準備もおこなった。具体的には 60101 原子系 (Protein A と水分子) についてそれぞれ異なる初期構造をもつ 256 レプリカの系を準備し, REM による 150,000 ステップのレプリカ交換分子動力学シミュレーションをおこない, 正しく動作することを確認した。</p>
<p>今後の計画、展望</p>	<p>実行速度については、あまり高い数値は得られていないので、それを上げることを目指す。実は、実行速度は、REM を組み込んだ分子動力学シミュレーションプログラム MODYLAS の実行速度で決まるので、実行速度が高い、新しい MODYLAS のバージョンを入手したところであり、これによって、目標は達成できると期待される。</p>
<p>論文、講演、 その他出版物</p>	<p>口頭発表</p> <ul style="list-style-type: none"> * 榮慶丈、「タンパク質の折り畳みシミュレーションに関するこれまでの取り組み」、第3回 TCCI 研究会、2012年10月9,10日、岡崎市 * 岡本祐幸、「拡張アンサンブル法による分子の構造と機能の解明」、第3回 CMSI 研究会「超並列計算が拓く新しい計算物質科学」、2012年12月3-5日、岡崎市

「京」試験利用 最終成果報告フォーム

氏名（全員分）	○ 杉野修 ^a 、森川良忠 ^b 、稲垣耕司 ^b 、木崎栄年 ^b 、塚田捷 ^c 、赤木和人 ^c 、濱田幾太郎 ^c 、洗平昌晃 ^c 、大谷実 ^d 、Nicephore Bonnet ^a 、池庄司民夫 ^d
所属（全員分）	a) 東京大学、b) 大阪大学、c) 東北大学、d) 産総研
電子メール（代表）	sugino@issp.u-tokyo.ac.jp
利用期間（代表）	平成 23 年 4 月 1 日 ~ 平成 24 年 3 月 31 日

アプリケーション名	STATE
実際に利用した ノード規模	2048 ノード。0.2 百万ノード・時間
背景、目的	<p>燃料電池の性能や信頼性の向上のためには、基礎過程を解明し、電極材料開発指針を獲得することが極めて有効であり、それをめざした界面におけるエネルギー変換過程の量子論的シミュレーションを行う。STATE は金属電極と水溶液界面での反応を追うことができる世界有数のアプリであり、性能向上を行ってきた。</p>
計算手法、 具体的な利用方法 (図の添付可)	<p>STATE は、密度汎関数理論のもとで電子を平面波基底で記述し、原子核を古典近似の下で時間発展させる ab initio MD の中でも、界面での電極反応を最も精度よく計算できるアプリである。本計算では、電極で特に重要とされる以下の二点を取り入れた唯一のシミュレーションである。①電位一定の下で電子数が変動しながら起こる化学反応の計算を行うための ESM(有効遮蔽体法)と constant μ とよばれる手法を用いていること、②溶液のエントロピーの効果を、拡張アンサンブル法とよばれる高度な統計物理学の技法を用いていること、が特長である。具体的には、右上図に示すような大規模なモデルを用いて、アノード電極と酸性水溶液界面で水素が酸化されて電子とヒドロニウムイオンに分かれ、それがカソード電極界面で酸素を還元して水を生成する過程(右下図)をシミュレーションする。この電極反応経路を量子論に基づき求め、どの材料系とどの界面構造の下、最も効率良くエネルギー変換を行えるかを調べることができる。</p> <div style="text-align: right;">  <p>電極界面モデル</p> </div> <div style="text-align: right;">  <p>固体高分子形燃料電池(PEFC) $4\text{H}^+ + 4\text{e}^- + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}$ 正極 O_2 H_2 水・電解質膜 負極 $\text{H}_2 \rightarrow 2\text{H}^+ + 2\text{e}^-$</p> </div>
開発状況(単体性能、 並列度、実行性能等を 踏まえた達成状況、現 状の問題点等を定量的 に記載下さい。) (図の添付可)	<p>最も計算量が大きくなる軌道の規格直交化を、RSDFT 等の技法を導入して高速化した。また、最も通信量が大きくなる電子密度の計算部分のチューニングを行ってきた。さらに、エントロピーを取り込み、自由エネルギーを計算するための並列化技法を独自に開発した。これらの改良の結果、24576 ノードでの並列計算の weak scaling 95%超を達成した。これにより、1000 原子規模での全 1 ナノ秒の電極計算ができる段階にある。このアプリを用いて現在、白金のアノード界面の構造のプロダクションランを行い、また、自由エネルギー計算を高速化するための計算条件の探索、さらに、改良型 ESM と constant μ を組み合わせた計算の高精度化を行っている。総合的な電極計算アプリとしての完成に向けて開発が順調に進んでいる。</p> <p>さらに並列化効率を高め、数千原子規模の計算を可能にするために、3 軸並</p>

	<p>列化 (k 点、バンド、G ベクトル) のコードの書き換えを行い、基本的な工程はほぼ終了している。ただ、量子シミュレーションの場合、計算規模の拡大と、自己無撞着計算とよばれる非線形最適化問題の収束性の向上を、同時に行わないと大規模高速化が達成できない。現状は、前者がほぼ解決された段階である。</p>
<p>試験利用による 成果概要 (図の添付可)</p>	<p>一辺の長さが 1.5 ナノメートルの界面模型 (前ページ参照) を用い、2 モルの希硫酸と白金アノードの界面を行い、電位と吸着水素の被覆率・構造に関する知見を得た。計算規模の拡大により新たな知見 (①~④) が多く得られ、今後の電極反応につながる計算となった。①従来の想像と異なり第一水和圏の水の構造は揺らぎが大きい、②水の構造は電位に予想以上に依存する、③吸着水素による完全被覆が可能、④界面付近での電解質イオンは水素被覆率に予想以上に依存する。</p> <p>より大きな界面模型を用いて、界面にステップ構造がある場合の電極反応の様子が解ってきた。従来、酸素還元条件 (電位が、水素標準電極電位と比べて 1V 程度高い条件) で、水は水素を電極と反対方向に向けて吸着すると考えられてきたが、ステップがあると状況は異なり、水が水素を電極側に向けて吸着することが分かった (下図)。テラス上では水素が電極と反対方向に向いているので、ヒドロニウムイオンが酸素分子を還元することは困難であるが、ステップではそれが可能であることを示唆し、酸素還元過程に関するメカニズムの解明に迫る結果となっている。この事をさらに確かめるため、ステップでのヒドロキシル基の吸着エネルギーを調べ、それがテラス状での値よりもかなり大きいことを見出した。この現象を説明する鍵として、水素結合ネットワークの関与があることが解った。</p> <p>このように計算規模の拡大により、これまで暗に仮定してきたことが必ずしも正確でなく、電極界面は複雑な構造を形成していることが解ってきた。従来の界面構造模型の見直しが必要な段階になっていることを示している。</p> <p>この他、Wang-Landau 法に基づく自由エネルギー計算法を用いた計算の最適化、改良型 ESM と constant μ を組み合わせた計算の試験的運用、などについても順調に進んでいる。</p>
<p>今後の計画、展望</p>	<p>これまで電極界面の構造に関する様々な知見を得たので、それに基づき界面の標準模型を構築するのが次の段階である。その模型に基づき、高度な自由エネルギー計算を行うことにより、電極反応が電位に依存してどのように進むかを調べることができる。その計算を様々な材料系や界面指数などに対して行うこ</p>

	<p>とにより、白金および未知の電極上での反応予測を行える様になる。また、界面の安定性の計算も同時に行うことができるので、電極劣化に関する知見を得ることができる。</p>
論文、講演、 その他出版物	<p>杉野修、第一原理に基づく電極反応の量子論、放射光連携ワークショップ、2013年2月14日、東京大学</p> <p>杉野修、Development of a First-Principles Molecular Dynamics Simulation Scheme for Electrochemically Biased Solid-Liquid Interface、IUMRS-ICEM2012、2012年9月24日、横浜</p> <p>杉野修、Microscopic understanding of the electrochemical interfaces、Soches2012、2012年7月25日、仙台</p>

「京」試験利用 最終成果報告フォーム

氏名（全員分）	○ 大谷 実 ⁽¹⁾ 、大脇 創 ⁽²⁾ 、尾崎泰助 ⁽³⁾ 、Truong Vinh Truong Duy ⁽³⁾
所属（全員分）	（1）産総研・ナノシステム研究部門、（2）日産自動車（株）・総合研究所、 （3）北陸先端大・シミュレーション科学研究センター
電子メール（代表）	minoru.otani@aist.go.jp
利用期間（代表）	平成 23 年 7 月 1 日 ～ 平成 24 年 9 月 30 日

アプリケーション名	OpenMX (Open source package for Material eXplorer)
実際に利用した ノード規模	主に以下のようなノード規模の計算を、幾つかの大規模ダイヤモンド結晶モデルに対して行なった（最終試験利用期間）。 ・ 125,000 原子/セル：2500~5000 ノード（1 ノード当り 8 コア、Flat MPI） ・ 160,000 原子/セル：5000~10000 ノード（1 ノード当り 8 コア、Flat MPI）
背景、目的	<p>【背景】 リチウムイオン電池の電極材料と電解質の界面には電池動作に伴い被膜構造形成や、電極材料からのイオン溶出など、電池の充放電特性や劣化に大きな影響を与える現象が起こる。しかし、それら電極表面における現象の発現機構やそれを左右し得る界面構造については未解明であるのが現状である。</p> <p>【目的】 大規模モデルに基づく原子スケールシミュレーションを用いて、界面構造や電気化学反応機構などの基礎的物性を明らかにし、リチウムイオン電池系の固液界面における現象を原子・分子スケールで理解すること</p>
計算手法、 具体的な利用方法 (図の添付可)	<p>【計算手法】 ノルム保存型擬ポテンシャル+数値局在基底に基づく密度汎関数法計算。 Krylov 部分空間法に基づく O(N)第一原理計算が可能。</p> <p>【利用方法】 金属、半導体、絶縁体のあらゆる系に対して適用可能。特に Krylov 部分空間法に基づく O(N)法では、金属、半導体、絶縁体いずれの電子状態計算においても良好な収束性が得られる点が特徴であり、電位印加により系のバンドギャップが変化する電気化学系の大規模第一原理分子動力学計算に有効。</p>
開発状況（単体性能、 並列度、実行性能等を 踏まえた達成状況、現 状の問題点等を定量的 に記載下さい。） (図の添付可)	<p>【高並列、高速化】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ 並列度に対してメモリサイズが non-scalable となる原因を特定し、プログラムの改良を実施（具体的には、並列化のために系を原子クラスタに分割して各プロセスに割り振る際、クラスタ周辺の隣接原子群の情報を各プロセスのバッファ領域に保持させる代わりに、on-the-fly で通信を介して情報を取得するように変更）。それにより、並列度に対するメモリサイズの scalability を実現した。 ・ Krylov 部分空間法に基づく計算で最も計算負荷の高い部分の一つである対角化プロセスにおいて、ループの unrolling 化や SSE によるベクトル化を行った。それにより、該当部分での計算速度をこれまでと比較して 2 倍に高速化した。 ・ 並列化に対応した高速フーリエ変換計算において、プロセス間の通信量が最小になる空間分割法を独自に見出し、大規模計算の更なる高速化を実現した。

	<p>【シミュレーション機能】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ 温度制御機能の拡張：固液界面のように異なる相が共存する系に対する O(N)法での MD 計算を、特に系内における温度分布の点から安定的に実行するために、各相に独立した熱浴を適用できるようにした。 ・ 大規模系における電荷解析を効率的に行うために、Krylov 部分空間法のスキームに基づいて任意の領域で Natural Atomic Population 解析を行うことが可能なツールを開発した。
試験利用による 成果概要 (図の添付可)	「京」試験利用期間中は、「京」における OpenMX のパフォーマンス向上に特化して作業を行ってきたため、「京」でのプロダクトランとしてのシミュレーションの実施は無し。
今後の計画、展望	「京」一般利用課題『高性能蓄電デバイス開発へ向けた理論的基盤研究』において、2000～4000 原子サイズモデルの第一原理 MD 計算に基づき、有機溶媒-電極の固液界面に関する基礎的知見を獲得し、SEI 形成や電極材料の劣化機構を解明する。
論文、講演、 その他出版物	<p>【学術雑誌】</p> <p>(1) Truong Vinh Truong Duy and Taisuke Ozaki, "A three-dimensional domain decomposition method for large-scale DFT electronic structure calculations", Computational Physics Communications (submitted).</p> <p>(2) Truong Vinh Truong Duy and Taisuke Ozaki, "A decomposition method with minimum communication amount for parallelization of multi-dimensional FFTs", Computational Physics Communications (submitted).</p> <p>【講演】</p> <p>(1) Duy Truong Vinh Truong and Ozaki Taisuke, "A three-dimensional domain decomposition method for large-scale ab initio electronic structure calculations", SIAM Conference on Computational Science and Engineering, Feb. 25 - March 1, 2013, Boston, Massachusetts, USA.</p> <p>(2) Taisuke Ozak, "Massively Parallelized Density Functional Calculations for Large-Scale Systems Including a Hundred Thousand Atoms", 2nd International Symposium on Hierarchy and Holism in Natural Sciences, 2012 年 2 月 19 日-21 日, National Center of Sciences, Tokyo.</p> <p>(3) 大谷実, "電極/溶液界面における電気化学反応シミュレーション: 理論の発展と最近の展開", スーパーコンピュータワークショップ 2013, 2013 年 1 月 22 日～23 日, 自然科学研究機構、</p>

(4) Duy Truong Vinh Truong and Ozaki Taisuke, "Massive Parallelization of a Linear Scaling DFT Code OpenMX", ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム、2013年1月15日～16日、東京工業大学 蔵前会館 くらまえホール.

(5) 尾崎泰助、"第一原理電子状態計算コード OpenMX の超並列化及び高精度化"、第3回 CMSI 研究会、2012年12月3-5日、自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター.

(6) 大脇創、大谷実、"高性能リチウムイオン電池の開発に向けた基礎的研究"、第3回 CMSI 研究会、2012年12月3-5日、自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター.

(7) Duy Truong Vinh Truong and Ozaki Taisuke, "A three-dimensional domain decomposition method for large-scale ab initio electronic structure calculations", Conference on Computational Physics (CCP2012), October 14-18, 2012, Kobe, Japan.

(8) Taisuke Ozaki, "Massively parallelized O(N) Krylov subspace method for large-scale DFT Calculations", IUMRS-ISEM 2012, Japan, 2012年9月23-28日, PACIFICO Yokohama, Japan.

(9) "分子シミュレーション科学 ～その概要と材料開発における可能性～"、尾崎泰助、日産自動車総合研究所講演会、2012年9月21日、日産自動車(株) 総合研究所.

(10) 尾崎泰助、"スーパーコンピュータで拓く物質科学の未来"、平成24年度 ISP 交流セミナー、2012年7月26日、石川ハイテク交流センター.

(11) Taisuke Ozaki, "Large-scale electronic structure calculations by OpenMX: Current status and Future", Material Simulation in Petaflops era (MASP) 2012, 2012年7月11日, ISSP, Univ. of Tokyo, Japan.

(12) Taisuke Ozaki, "Low-order Scaling Density Functional Methods Based on Quantum Nearsightedness", SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, Feb. 15-17, 2012, Savanna, USA.

【その他出版物】 なし

「京」試験利用 最終成果報告フォーム

氏名（全員分）	館山佳尚〇、袖山慶太郎、城野亮太
所属（全員分）	（独）物質・材料研究機構、東京大学大学院工学系研究科
電子メール（代表）	TATEYAMA.Yoshitaka@nims.go.jp
利用期間（代表）	平成 24 年 2 月 1 日 ~ 平成 24 年 9 月 30 日

アプリケーション名	CPMD
実際に利用したノード規模	最大512ノード
背景、目的	<p>密度汎関数理論(DFT)による電子状態計算を基にした分子動力学(DFT-MD)は、溶液反応や固液界面反応といった構造揺らぎが平衡状態および活性化状態に重要な役割を果たす反応群に対する電子・原子スケールからの記述に最適な計算手法である。また溶液・固液界面反応はエネルギー・環境問題に最も関連する電池・触媒における最重要素過程でもある。本プロジェクトでは、将来的に電池・触媒系のリアリステイクシミュレーションを実行することを目標に、DFT-MDの中でも計算効率が高いと考えられているCar-Parrinello Molecular Dynamics 法計算コード(GPMD)の京コンピュータ上での最適化を実行した。</p>
計算手法、具体的な利用方法(図の添付可)	<p>Car-Parrinello MD 法は電子状態の時間発展と原子核の時間発展を同時に行うことの出来るラグランジアンを用いて MD サンプリングを実行する手法である。通常のDFT-MD では各原子核ステップごとに電子状態最適化(SCF)を行うのに対して、GPMD ではOn-the-Fly MD を利用することによりそのSCF を回避することができ、高速なMD サンプリングが実行可能となっている。また規格直交化も多く必要ないために、並列計算における通信量を減らすことができ、高い並列効率の計算が実行可能になっている。これらのアドバンテージを利用することにより、化学反応自由エネルギーなどの計算をリーズナブルな計算コストで実行可能となる。</p>
開発状況(単体性能、並列度、実行性能等を踏まえた達成状況、現状の問題点を定量的に記載下さい。)(図の添付可)	<p>(1)CPMD コードの京への移植、(2)小規模計算系を用いた Intel Linux Cluster との比較及び、(3)京上での最適化による高並列効率の実現の3点について実行した。まず京への移植はスムーズに進み、次に Intel Linux Cluster との比較では512 core (京では64 node)でのスピード比較を行うことにより、Intel Cluster の512 core flatmpi よりも京上の64 processes 8 threads (512 core)の方が高速になる所までハイブリッド並列化、コード最適化を実行した。ここでは将来の portability の維持を目標に最低限のコード変更でのちゅーニングとした。最後に並列計算効率の向上についてトライした。下表にあるように、2400原子、8000電子の溶液系に対して512 node (4096 core: 512 MPI process x 8 threads)の計算で並列化ストロングスケーリング0.9を実現した。これは京コンピュータ高度利用の条件であるストロングスケーリング0.75を十分クリアした物となっている。さらにプロファイラによる解析を実行した結果、平均的に6000 GFLOPS、約10%のスピードを実現した。また整数演算でも3650000 MIPS、11%を実現し、SIMD化率50%強を達成した。これらの結果は、今後の更なる大規模系の高効率並列化計算の可能性を示唆するものとなっている。</p>

	<p>$(\text{H}_2\text{O})_{800} = 2400 \text{ atoms (800 O \& 1600 H)} : 8000 \text{ electrons, 4000 orbitals}$ $\text{Unitcell} = (28.8462\text{\AA})^3 : E_{\text{cut}} = 70\text{Ry} : \text{plane waves for WF} = 801075, \text{ for CHG} = 6408324$</p> <table border="1" data-bbox="437 322 1297 423"> <thead> <tr> <th></th> <th>Core</th> <th>Process</th> <th>Threads</th> <th>Nodes</th> <th>SCF(sec)</th> <th>MD(sec)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>K</td> <td>2048</td> <td>256</td> <td>8</td> <td>256</td> <td>26.3</td> <td>30.8</td> </tr> <tr> <td></td> <td>4096</td> <td>512</td> <td>8</td> <td>512</td> <td>14.2</td> <td>17.3</td> </tr> </tbody> </table> <p># Strong scaling K512node vs 256node : $\alpha(\text{SCF})=0.926, \alpha(\text{MD})=0.89$: (profilerを利用した場合)</p>		Core	Process	Threads	Nodes	SCF(sec)	MD(sec)	K	2048	256	8	256	26.3	30.8		4096	512	8	512	14.2	17.3
	Core	Process	Threads	Nodes	SCF(sec)	MD(sec)																
K	2048	256	8	256	26.3	30.8																
	4096	512	8	512	14.2	17.3																
<p>試験利用による 成果概要 (図の添付可)</p>	<p>開発状況に述べた通り、2400 原子規模の溶液系で十分な計算速度、並列化効率を得た。これらの系で 1MD step が 17 秒で計算可能ということから、1 条件のサンプリングに必要な 10 万 MD step の実行が約 3 週間で済むことを示している。これは従来では数ヶ月以上かかっており、格段のスピードアップとなっている。これらの値は今後の電池や触媒のリアリステイクシミュレーションの高効率並列化計算の可能性を示唆する物となっている。</p>																					
<p>今後の計画、展望</p>	<p>1) 並列化効率をキープしながらのさらなる計算規模の増大 : 8000 原子規模の溶液系・固液界面系に対して、リーズナブルな DFT-MD サンプリングが出来るような(数十秒/step)並列化効率向上。 2) 統計サンプリング手法の改良による自由エネルギー計算の高効率化 :</p>																					
<p>論文、講演、 その他出版物</p>	<p>なし (計算コード最適化に焦点を当てたため)</p>																					

添付資料 4 平成24年度 外部への成果発表

添付資料 4

各部会で推進する課題における外部への成果発表件数

部会	種別	研究代表者	課題名	論文	総説 解説	学会発表 招待講演		学会発表 (査読有)		受賞 等	ページ
						国内	国際	国内	国際		
第一部会	重点1	今田正俊	電子相関の強い現実物質の新機構解明と制御法開拓に関する研究	27	4	6	21	1	3	3	1
		遠山貴巳	強相関電子系の励起ダイナミクスの研究	4	0	1	3	3	3	0	7
		川島直輝	量子モンテカルロ法による新しい量子相・量子臨界現象に関する研究	18	3	6	11	1	1	0	9
	重点2	天能 精一郎	超高精度電子状態計算による分子の微細量子構造予測	5	0	0	4	0	0	1	13
		高塚和夫	分子における電子の動的過程と多体量子動力学	12	8	3	8	1	0	0	15
		斉藤真司	凝縮分子科学系における揺らぎとダイナミクス	13	2	5	9	0	0	0	19
合計				79	17	21	56	6	7	4	
第二部会	重点3	押山淳	密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究	11	6	6	13	0	7	1	22
	特別支援	尾形修司	ナノ構造の電子状態から機械的性質までのマルチスケールシミュレーション	2	1	3	1	16	1	1	26
		信定克幸	ナノ構造体における光誘起電子ダイナミクスと光・電子機能性量子デバイスの開発	3	0	0	2	5	0	0	29
		斎藤峯雄	スピントロニクス/マルチフェロイクスの応用へ指向した材料探索	10	1	9	1	0	2	0	31
		常行真司	新材料探索	16	3	15	11	0	0	0	34
合計				42	11	33	28	21	10	2	
第三部会	重点4	岡崎 進	全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開	18	3	6	3	0	0	3	38
	特別支援	岡本祐幸	拡張アンサンブル法による生体分子の高次構造と機能の解明	11	6	5	8	0	0	0	41
		松林伸幸	ポリモルフから生起する分子集団機能	31	2	9	9	4	1	0	44
		中井浩巳	ナノ・生態系の反応制御と化学反応ダイナミクス	18	3	1	4	2	1	0	48
		江原正博	機能性分子設計ー光機能分子と非線形外場応答分子の光物性	38	0	6	7	27	0	5	51
合計				116	14	27	31	33	2	8	
第四部会	重点5	杉野修	燃料電池関連物質における基礎課程の大規模計算による研究	1	0	1	3	0	1	0	57
	重点6	田中秀樹	水素・メタンハイドレート生成、融解機構と熱力学的安定性	11	3	2	4	0	1	0	58
	特別支援	山下晃一	太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算	24	4	2	4	3	4	0	60
		吉田紀生	バイオマス利用に向けた酵素反応解析	11	1	7	6	0	0	1	63
		大谷実	高性能リチウムイオン電池の開発に向けた基礎的研究	0	1	2	0	0	0	0	66
		浅井美博	ナノ構造体材料における高効率非平衡エネルギー変換過程とナノ構造創製の理論シミュレーション	12	1	5	14	7	11	0	67
	香山正憲	金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発	1	0	1	0	3	3	0	71	
合計				60	10	20	31	13	20	1	
支援	中野博生	カゴメ格子反強磁性体の厳密対角化法による研究	4	1	0	1	0	0	0	73	
	合計				4	1	0	1	0	0	0
総計				301	53	101	147	73	39	15	

部会名: 第1部会

課題名: 相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明

項目名: 電子相関の強い現実物質の新機構解明と制御法開拓に関する研究

項目代表者: 今田正俊

所属: 東京大学大学院工学系研究科

[論文]

Kazuma Nakamura, Yoshihide Yoshimoto, Masatoshi Imada, "Ab initio two-dimensional multiband low-energy models of $\text{EtMe}_3\text{Sb}[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$ and $\kappa\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{Cu}(\text{NCS})_2$ with comparisons to single-band models", *Phys. Rev. B* 86, 205117(1-9) (2012).

Ryosuke Akashi, Kazuma Nakamura, Ryotaro Arita, Ryotaro and Masatoshi Imada, "High-temperature superconductivity in layered nitrides $\beta\text{-Li}_x\text{MNCI}$ ($M = \text{Ti, Zr, Hf}$): Insights from density functional theory for superconductors", *Phys. Rev. B* 86, 054513(1-16) (2012).

Yusuke Nomura, Merzuk Kaltak, Kazuma Nakamura, Ciro Taranto, Shiro Sakai, Alessandro Toschi, Ryotaro Arita, Karsten Held, Georg Kresse, and Masatoshi Imada, "Effective on-site interaction for dynamical mean-field theory", *Phys. Rev. B* 86, 085117(1-8) (2012).

Motoaki Hirayama, Takashi Miyake, and Masatoshi Imada, "Ab initio Low-Energy Model of Transition-Metal-Oxide Heterostructure $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ ", *J. Phys. Soc. Jpn.* 81, 084708(1-9) (2012).

Yuto Ito, Youhei Yamaji, and Masatoshi Imada, "Impurity Effects on Superconductivity on Surfaces of Topological Insulators", *J. Phys. Soc. Jpn.* 81, 084707(1-14) (2012).

Takahiro Misawa, Kazuma Nakamura, and Masatoshi Imada, "Ab Initio Evidence for Strong Correlation Associated with Mott Proximity in Iron-Based Superconductors", *Phys. Rev. Lett* 108, 177007(1-5) (2012).

Shiro Sakai, Giorgio Sangiovanni, Marcello Civelli, Yukitoshi Motome, Karsten Held, Masatoshi Imada, "Cluster-size dependence in cellular dynamical mean-field theory", *Phys. Rev. B* 85, 035102(1-10) (2012).

R. Arita, J. Kunes, A.V. Kozhevnikov, A.G. Eguiluz, M. Imada, "Ab initio Studies on the Interplay between Spin-Orbit Interaction and Coulomb Correlation in Sr_2IrO_4 and Ba_2IrO_4 ", *Phys. Rev. Lett.* 108, 086403(1-5) (2012).

Hiroshi Shinaoka, Takahiro Misawa, Kazuma Nakamura, Masatoshi Imada, "Mott Transition and Phase Diagram of $\kappa\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{Cu}(\text{NCS})_2$ Studied by Two-Dimensional Model Derived from Ab initio Method", *J. Phys. Soc. Jpn.* 81, 034701(1-12) (2012).

Toshihiro Sato, Yasuyuki Kato, Takafumi Suzuki, and Naoki Kawashima, “Validity of projected Gross-Pitaevskii simulation: Comparison with quantum Monte Carlo”, Phys. Rev. E 85, 050105(R) (1-4) (2012).

Y. Motoyama, S. Todo, “Path-integral Monte Carlo method for the local Z_2 Berry phase”, Phys. Rev. E 87, 021301(R)(1-5) (2013).

H. Nakano S. Todo, T. Sakai, “Long-Range Order of the Three-Sublattice Structure in the $S=1$ Heisenberg Antiferromagnet on the Spatially Anisotropic Triangular Lattice”, J. Phys. Soc. Jpn. 82, 043715(1-5)(2013).

Takafumi Suzuki and Masahiro Sato, “Edge state and its stability of two-dimensional quantum magnets”, Phys. Rev. B 86, 224411(1-7) (2012).

Takahiro Ohgoe, Takafumi Suzuki, and Naoki Kawashima, “Quantum phase s of hard-core bosons on two-dimensional lattices with anisotropic dipole-dipole interaction”, Phys. Rev. A 86, 063635(1-6) (2012).

Takahiro Ohgoe, Takafumi Suzuki, and Naoki Kawashima, “Ground-state phase diagram of the two-dimensional extended Bose-Hubbard model”, Phys. Rev. B 86, 054520(1-9) (2012).

Takahiro Ohgoe, Takafumi Suzuki, and Naoki Kawashima, “Commensurate Supersolid of Three-Dimensional Lattice Bosons”, Phys. Rev. Lett. 108, 185302(1-4) (2012).

Kenji Harada, “Numerical study of incommensurability of the spiral state on spin-1/2 spatially anisotropic triangular antiferromagnets using entanglement renormalization”, Phys. Rev. B 86, 184421(1-9) (2012).

Tomoaki Nogawa, Nobuyasu Ito, and Hiroshi Watanabe, “Usefulness of an equal-probability assumption for out-of-equilibrium states: a master equation approach”, Phys. Rev. E 86, 41133(1-8) (2012).

Hiroshi Watanabe, Nobuyasu Ito, and Chin-Kun Hu, “Phase diagram and universality of the Lennard-Jones gas-liquid system”, J. Chem. Phys. 136, 204102(1-7) (2012).

Daisuke Yamamoto, Akiko Masaki, Ippei Danshita, “Quantum phases of hardcore bosons with long-range interactions on a square lattice”, Phys. Rev. B 86, 054516(1-17) (2012).

Akiko Masaki, Hiroyuki Mori, “Localization of Bose-Fermi Mixtures in One-Dimensional Incommensurate Lattices”, J. Phys.: Conf. Ser. 400, 012043(1-4) (2012).

Akiko Masaki, Hiroyuki Mori, “Visibility Pattern of Bose-Fermi Mixtures in One-Dimensional Incommensurate Lattices”, to be published in Philosophical Magazine (2013)

Akiko Masaki, Hiroyuki Mori, “Fermion-Induced Decoherence of Bosons in Optical Lattices”, to be published in J. Phys.: Conf. Ser. (2013).

H. Masuda, T. Okubo, and H. Kawamura, “Finite-Temperature Transition of the Antiferromagnetic Heisenberg Model on a Distorted Kagome Lattice” Phys. Rev. Lett. 109, 057201(1-5) (2012).

James S.M. Anderson, Maho Nakata, Ryo Igarashi, Katsuki Fujisawa, Makoto Yamashita, “The second-order reduced density matrix method and the two-dimensional Hubbard model”, Computational and Theoretical Chemistry, 1003, 22-27 (2013).

Takahiro Ohgoe, Takafumi Suzuki, and Naoki Kawashima, “Bimodal Momentum Distribution of the High-Density Supersolid State”, Journal of Low Temperature Physics 171, 309-314 (2013) [QFS2012 proceedings].

Takahiro Ohgoe, Takafumi Suzuki, and Naoki Kawashima, “Double peaks in the momentum distribution of cold polar molecules in the supersolid state”, J. Phys.: Conf. Ser. 400, 012058(1-4) (2012) [LT26 proceedings].

[総説、解説]

今田正俊, 三宅隆, 「誌上セミナー 第一原理計算手法による強相関電子の電子状態の解明(その 4) ダウンフォールディングの吟味とその精緻化」, 『固体物理』, Vol.47, pp.469-474, 2012 年.

藤堂眞治, 「量子モンテカルロ法による新しい量子相・量子臨界現象の探求」, 『計算工学』, Vol. 17, 2841, 2012 年.

諏訪秀磨, 藤堂眞治, 「詳細つりあいを満たさないマルコフ連鎖モンテカルロ法とその一般化」, 『京都大学数理解析研究所講究録』(掲載予定)

渡辺宙志, 「短距離古典分子動力学法の超並列計算に向けて」, 分子シミュレーション研究会会誌『アンサンブル』, Vol. 14, No. 3 (通巻 59 号), pp. 122-125, 2012 年.

[学会発表]

・招待講演(国内会議)

藤堂眞治, 「量子モンテカルロ法による新しい量子相・量子臨界現象の探求」, 京コンピュータ・シンポジウム 2012 および第 2 回戦略プログラム 5 分野合同 WS, 2012 年 6 月 15 日, 神戸大学 統合研究拠点コンベンションホール.

藤堂眞治, 「物性物理におけるモンテカルロ法とその大規模化」, PC クラスタワークショップ in 柏, 2012 年 7

月 6 日, 東京大学柏キャンパス.

藤堂眞治, 「大規模並列量子モンテカルロ法 ALPS/looper と量子磁性体への応用」, スーパーコンピュータワークショップ 2013, 2013 年 1 月 22 日, 自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター.

藤堂眞治, 「次世代の計算物質科学に向けて」, 日本化学会第 93 春季年会, 2013 年 3 月 25 日, 立命館大学びわこ・くさつキャンパス.

原田健自, 「多体問題におけるテンソルネットワーク法」, 京都大学数理解析研究所 研究集会「次世代計算科学の基盤技術とその展開」, 2012 年 10 月 24 日, 京都.

渡辺宙志, 「短距離古典分子動力学計算の高速化と大規模並列化」, 第 6 回分子シミュレーションスクール, 2012 年 12 月 13 日, 岡崎コンファレンスセンター.

・招待講演(国際会議)

Masatoshi Imada, “Ab initio studies of strongly correlated electron systems”, The 19th International Conference on Magnetism with Strongly Correlated Electron Systems (ICM2012), July 11, 2012, Busan, Korea.

Masatoshi Imada, “Spin-Orbit Interactions, Topological Insulators and Topological Transitions”, 12th Japanese-German Symposium Emergent Phenomena in Novel Quantum Phases of Condensed Matter, July 14 – 17, 2012, Izu, Japan.

Masatoshi Imada, “Interplay of electron correlation and spin-orbit interaction”, International Workshop on Spin-Orbit Physics in Correlated Electron Systems, July 20, 2012, Aspen, USA.

Masatoshi Imada, “Theory of Pseudogap in Underdoped Cuprates”, International Conference on Materials & Mechanisms of Superconductivity (M2S 2012), August 2, 2012, Washington, USA.

Masatoshi Imada, “Dynamical mean-field approach on doped Mott insulators and cuprate superconductors”, Dynamical Mean-Field Approach for Strongly Correlated Materials, September 27, 2012, Dresden, Germany.

Masatoshi Imada, “Quantum Monte Carlo for strongly correlated systems”, Conference on Computational Physics (CCP2012), October 15, 2012, Kobe, Japan.

Masatoshi Imada, “Iron-based Superconductors”, Workshop on Novel Materials: Adding material-specific reality in physicists' models, December 11, 2012, Natal, Brazil.

Takahiro Misawa, “Ab initio study of iron-based superconductors -Roles of electron correlations and large Mott proximity-“, International Conference on Heavy Electrons and Novel Quantum Phases (ICHN 2012), July 5, 2012, Gyeongju, Korea.

Youhei Yamaji, "Mott Physics on Edge Transports of Topological Insulators Induced by Strong Spin-orbit Couplings", International Symposium on Computational Science 2013, February 19, 2013, Kanazawa, Japan.

Morita Satoshi, "Many-variable variational Monte-Carlo method", GCOE interdisciplinary workshop on numerical methods for many-body correlations, February 5, 2013, Tokyo, Japan.

Naoki Kawashima, "Superfluidity and Supersolidity of Lattice Models", CQDC12, Oct. 30, 2012, Juelich, Germany.

Naoki Kawashima, "Superfluidity and Supersolidity of Lattice Models", Supersolidity in Nature, Jun. 11, 2012, RIKEN, Wako, Japan.

Naoki Kawashima, "Quantum Monte Carlo study of SU(N) J-Q models", Impurities and Textures in Unconventional Magnets, Apr. 2, 2012, MPIPKS, Dresden, Germany.

Syngé Todo, "The ALPS project: Open source software for strongly correlated systems", CCP2012: Conference on Computational Physics, Oct. 17, 2012, Kobe, Japan.

Syngé Todo, "Quantum Monte Carlo level spectroscopy", CQDC'12 International Workshop on Cooperative Quantum Dynamics and Its Control, Oct.30, 2012, Julich, Germany.

Syngé Todo, "Next-generation quantum Monte Carlo simulation of strongly correlated materials on peta-scale supercomputer", IEEE CPMT Symposium Japan 2012, Nov. 11-13, 2012, Kyoto, Japan.

Takafumi Suzuki, "Edge states in two dimensional spin and bosonic systems", Current Topics in Theory of Correlated Materials, Sep. 12, 2012, Wako, Japan.

Kenji Harada, "Numerical study of quantum frustrated magnets using entanglement renormalization", International Workshop on Cooperative Quantum Dynamics and Its Control (CQDC'12), October 30, 2012, Jülich Supercomputing Centre (JSC), Germany.

T. Okubo, "Ordering and Dynamics of Topological Excitations in Frustrated Magnets", 26th Annual CSP Workshop "Recent Developments in Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics", Feb. 26, 2013, University of Georgia, Athens, USA.

Takahiro Ohgoe, "Supersolid and quantum phase transitions in cold lattice bosons", International Workshop on Recent Developments of Studies on Phase Transitions 2012, Jun. 19, 2012, Tokyo, Japan.

Takahiro Ohgoe, "Commensurate supersolid of lattice bosons", GCOE International Symposium on

Physical Sciences Frontier, Dec. 8 - 9, 2012, Tokyo, Japan.

・口頭発表(国内会議で査読のあるもの)

鈴木 隆史, 「2次元反強磁性量子スピン系の端状態」, Physics of Quantum Spin Systems, 2012年11月13日, 京都市.

・口頭発表(国際会議で査読のあるもの)

M. Hirayama, T. Miyake, and M. Imada, “Derivation of Static Low-energy Effective Models by ab initio Downfolding Method without Double Counting of Coulomb Correlations”, International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design (ISC-QSD), October 11 - 13, 2013, Osaka, Japan.

S. Morita, R. Kaneko, and M. Imada, “Many-variable variational Monte Carlo calculations of the J1-J2 Heisenberg model”, Conference on Computational Physics (CCP2012), Oct. 15, 2012, Kobe, Japan.

Kenji Harada, "Numerical study of incommensurability of the spiral state on spin-1/2 spatially anisotropic triangular antiferromagnets using entanglement renormalization", Conference on Computational Physics (CCP2012) for Physics, Chemistry, Biology, Engineering and related academic fields and industrial applications, October 15, 2012, Kobe, Japan.

[プレスリリース/取材対応]

[著作物]

今田正俊他, 『岩波科学計算科学3 計算と物質』(岩波書店, 2012) (共著)

S. Todo, “Loop Algorithm”, in “Strongly Correlated Systems: Numerical Methods” (Springer Series in Solid-State Sciences), Ed. A. Avella and F. Mancini (Springer, Berlin, 2013).

[特許等の知的財産取得に関する案件]

[受賞等]

有田亮太郎 2012年4月 文部科学大臣表彰 若手科学者賞

森田悟史 2012年12月 CMSI 若手奨励賞

金子隆威 2012年12月 CMSI ポスター賞

HPCI 戦略プログラム 分野2 CMSI 研究課題
平成24年度 外部への成果発表

部会名: 第一部会

課題名: 関連の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明

項目名: 強相関電子系の励起ダイナミックスの研究

項目代表者: 遠山貴己

所属: 京都大学基礎物理学研究所

[論文]

- 1) Z. Li, R. Laskowski, T. Iitaka, and T. Tohyama, "First-principles calculation of helical spin order in iron perovskite SrFeO_3 and BaFeO_3 ", *Physical Review B* **85**, 134419 (1-5) (2012)
- 2) Z. Li, T. Iitaka, and T. Tohyama, "Pressure-induced ferromagnetism in cubic perovskite SrFeO_3 and BaFeO_3 ", *Physical Review B* **86**, 094422 (1-4) (2012)
- 3) H. Lu, S. Sota, H. Matsueda, J. Bonca, and T. Tohyama, "Enhanced Charge Order in a Photoexcited One-Dimensional Strongly Correlated System", *Physical Review Letters* **109**, 197401 (1-4) (2012)
- 4) K. Kobayashi, M. Okumura, Y. Ota, S. Yamada, M. Machida "Nontrivial Haldane phase of an atomic two-component Fermi gas trapped in a 1d optical lattice", *Physical Review Letters* **109**, 235302(1-5) (2012).

[総説、解説]

[学会発表]

・招待講演(国内会議)

1) 遠山貴己、「強相関電子系の光誘起励起ダイナミックス」、日本物理学会第 68 回年次大会領域 5、理論核物理領域、実験核物理領域合同シンポジウム「非平衡物理 - 物性物理とハドロン物理を結ぶ世界」、2013年3月 広島大学

・招待講演(国際会議)

- 1) T. Tohyama, "Nonequilibrium photo dynamics of low-dimensional strongly correlated electron systems", The Korean Physical Society Meeting, April, 2012, Dajeon, KOREA
- 2) T. Tohyama, " Pressure-Induced Ferromagnetism in Cubic Perovskite AFeO_3 (A=Sr and Ba)", The 6th Asian Conference on High Pressure, August, 2012, Beijing, CHINA
- 3) T. Tohyama, " Nonequilibrium photo dynamics of low-dimensional strongly correlated electron systems", International Conference on Electronic States and Phases Induced by Electric or Optical Impacts, September, 2012, Orsay, FRANCE

・口頭発表(国内会議で査読のあるもの)

- 1) 曾田繁利, 柚木清司, 遠山貴己, "動的密度行列繰り込み群法による一次元 Mott 絶縁体の非線形光学応答の研究", 日本物理学会第 68 回年次大会, 2013. 3, 広島大学
- 2) 小林恵太, 奥村雅彦, 太田幸宏, 山田進, 町田昌彦, "マルチバンドを持つ光学格子中の引力フェルミ原子気体の解析", 日本物理学会 2012 年秋季大会, 2012. 9, 横浜国立大学
- 3) 小林恵太, 奥村雅彦, 山田進, 町田昌彦, "多軌道フェルミ原子気体における強磁性の解析、日本物

添付資料 4

理学会” , 日本物理学会第 68 回年次大会, 2013. 3, 広島大学

・口頭発表(国際会議で査読のあるもの)

- 1) S. Sota, S. Yunoki, and T. Tohyama, "Dynamical density matrix renormalization group study of non-linear optical response of one-dimensional strongly correlated electron system", APS march meeting 2013, 2013/3/19, Baltimore, USA
- 2) H. Lu, S. Sota, H. Matsueda, J. Bonca, and T. Tohyama, "Enhancement of charge and spin orders in a photoexcited one-dimensional strongly correlated system", APS march meeting 2013, 2013/3/19, Baltimore, USA
- 3) K. Kobayashi, Y. Ota, and M. Machida, "Analysis of multi band superconductor: frustrated spin model approach", the 25th International Symposium on Superconductivity, 2012/12/3-5, Tokyo

[プレスリリース/取材対応]

[著作物]

[特許等の知的財産取得に関する案件]

[受賞等]

HPCI 戦略プログラム 分野2 CMSI 研究課題

平成24年度 外部への成果発表

部会名: 第1部会

課題名: 相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明

項目名: 量子モンテカルロ法による新しい量子相・量子臨界現象に関する研究

項目代表者: 川島直輝

所属: 東大物性研

[論文]

- Toshihiro Sato, Yasuyuki Kato, Takafumi Suzuki, and Naoki Kawashima, Validity of projected Gross-Pitaevskii simulation: Comparison with quantum Monte Carlo, Phys. Rev. E 85, 050105(R) (1-4) (2012)

- Y. Motoyama, S. Todo, "Path-integral Monte Carlo method for the local Z₂ Berry phase", Phys. Rev. E 87, 021301(R) (2013).

-H. Nakano S. Todo, T. Sakai, "Long-Range Order of the Three-Sublattice Structure in the S=1 Heisenberg Antiferromagnet on the Spatially Anisotropic Triangular Lattice", J. Phys. Soc. Jpn. 82, 043715 (2013).

-Takafumi Suzuki and Masahiro Sato, Edge state and its stability of two-dimensional quantum magnets, Phys. Rev. B 86, 224411 (2012).

-Takafumi Ohgoe, Takafumi Suzuki, and Naoki Kawashima, Quantum phase s of hard-core bosons on two-dimensional lattices with anisotropic dipole-dipole interaction, Phys. Rev. A 86, 063635 (2012).

-Takafumi Ohgoe, Takafumi Suzuki, and Naoki Kawashima, Ground-state phase diagram of the two-dimensional extended Bose-Hubbard model, Phys. Rev. B 86, 054520 (2012).

-Takafumi Ohgoe, Takafumi Suzuki, and Naoki Kawashima, Commensurate Supersolid of Three-Dimensional Lattice Bosons, Phys. Rev. Lett. 108, 185302 (2012).

- Kenji Harada, "Numerical study of incommensurability of the spiral state on spin-1/2 spatially anisotropic triangular antiferromagnets using entanglement renormalization", Physical Review B, vol. 86, pp. 184421, 2012.

- Tomoaki Nogawa, Nobuyasu Ito, and Hiroshi Watanabe

Usefulness of an equal-probability assumption for out-of-equilibrium states: a master equation approach
Phys. Rev. E **86** 41133 (2012)

-Hiroshi Watanabe, Nobuyasu Ito, and Chin-Kun Hu

Phase diagram and universality of the Lennard-Jones gas-liquid system
J. Chem. Phys. **136** 204102 (2012)

-Daisuke Yamamoto, Akiko Masaki, Ippei Danshita

"Quantum phases of hardcore bosons with long-range interactions on a square lattice"
Physical Review B 86 (2012) 054516

-Akiko Masaki, Hiroyuki Mori

"Localization of Bose-Fermi Mixtures in One-Dimensional Incommensurate Lattices"
Journal of physics: Conference Series 400 (2012) 012043

-Akiko Masaki, Hiroyuki Mori

"Visibility Pattern of Bose-Fermi Mixtures in One-Dimensional Incommensurate Lattices"
to be published in Philosophical Magazine (2013)

-Akiko Masaki, Hiroyuki Mori

"Fermion-Induced Decoherence of Bosons in Optical Lattices"

添付資料 4

to be published in Journal of physics: Conference Series 2013.

- H. Masuda, T. Okubo, and H. Kawamura, "Finite-Temperature Transition of the Antiferromagnetic Heisenberg Model on a Distorted kagome Lattice" Physical Review Letters 109, 057201 (2012).

- James S.M. Anderson, Maho Nakata, Ryo Igarashi, Katsuki Fujisawa, Makoto Yamashita, "The second-order reduced density matrix method and the two-dimensional Hubbard model", Computational and Theoretical Chemistry, 1003, 22-27, (2013)

- Takahiro Ohgoe, Takafumi Suzuki, and Naoki Kawashima
"Bimodal Momentum Distribution of the High-Density Supersolid State"
Journal of Low Temperature Physics **171**, 309 (2013) [QFS2012 proceedings]

-Takahiro Ohgoe, Takafumi Suzuki, and Naoki Kawashima
"Double peaks in the momentum distribution of cold polar molecules in the supersolid state"
J. Phys.: Conf. Ser. **400**, 012058 (2012) [LT26 proceedings]

[総説、解説]

-藤堂眞治, 「量子モンテカルロ法による新しい量子相・量子臨界現象の探求」, 計算工学 17, 2841 (2012)

-諏訪秀磨, 藤堂眞治, 「詳細つりあいを満たさないマルコフ連鎖モンテカルロ法とその一般化」, 京都大学数理解析研究所講究録 (掲載予定)

-渡辺宙志, "短距離古典分子動力学法の超並列計算に向けて"
分子シミュレーション研究会会誌「アンサンブル」, Vol. 14, No. 3, (通巻 59 号), 122--125 (2012)

[学会発表]

・招待講演(国内会議)

-藤堂眞治, 「量子モンテカルロ法による新しい量子相・量子臨界現象の探求」, 京コンピュータ・シンポジウム 2012 および第 2 回戦略プログラム 5 分野合同 WS, 2012 年 6 月, 神戸

-藤堂眞治, 「物性物理におけるモンテカルロ法とその大規模化」, PC クラスタワークショップ in 柏, 2012 年 7 月, 柏

-藤堂眞治, 「大規模並列量子モンテカルロ法 ALPS/looper と量子磁性体への応用」, スーパーコンピュータワークショップ 2013, 2013 年 1 月, 分子研

-藤堂眞治, 「次世代の計算物質科学に向けて」, 日本化学会第 93 春季年会, 2013 年 3 月, 立命館大

-原田健自, 「多体問題におけるテンソルネットワーク法」, 京都大学数理解析研究所 研究集会「次世代計算科学の基盤技術とその展開」, 2012年10月24日, 京都.

-渡辺宙志, 「短距離古典分子動力学計算の高速化と大規模並列化」
第6回分子シミュレーションスクール, 2012 年 12 月 13 日, 岡崎コンファレンスセンター

・招待講演(国際会議)

- Naoki Kawashima, Superfluidity and Supersolidity of Lattice Models, CQDC12, Oct. 30/2012, Juelich, Germany

- Naoki Kawashima, Superfluidity and Supersolidity of Lattice Models, Supersolidity in Nature, Jun. 11/2012, RIKEN, Wako, Japan

- Naoki Kawashima, Quantum Monte Carlo study of SU(N) J-Q models, Impurities and Textures in Unconventional Magnets, Apr. 02/2012, MPIPKS, Dresden, Germany

添付資料 4

- Synge Todo, "The ALPS project: Open source software for strongly correlated systems", CCP2012: Conference on Computational Physics, 2012 Oct., Kobe
- Synge Todo, "Quantum Monte Carlo level spectroscopy", CQDC'12 International Workshop on Cooperative Quantum Dynamics and Its Control, 2012 Oct., Julich
- Synge Todo, "Next-generation quantum Monte Carlo simulation of strongly correlated materials on peta-scale supercomputer", IEEE CPMT Symposium Japan 2012, 2012 Nov., Kyoto
- Takafumi Suzuki, Edge states in two dimensional spin and bosonic systems, Current Topics in Theory of Correlated Materials, Wako, 2012 Sep. 12
- Kenji Harada, "Numerical study of quantum frustrated magnets using entanglement renormalization", International Workshop on Cooperative Quantum Dynamics and Its Control (CQDC'12), 30 October 2012, Jülich Supercomputing Centre (JSC), Germany.
- T. Okubo, "Ordering and Dynamics of Topological Excitations in Frustrated Magnets", 26th Annual CSP Workshop "Recent Developments in Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics", March 2013, University of Georgia, USA
- Takahiro Ohgoe, "Supersolid and quantum phase transitions in cold lattice bosons", International Workshop on Recent Developments of Studies on Phase Transitions 2012, Jun. 2012, Tokyo
- Takahiro Ohgoe, "Commensurate supersolid of lattice bosons", GCOE International Symposium on Physical Sciences Frontier, Dec. 2012, Tokyo

・口頭発表(国内会議で査読のあるもの)

- 鈴木 隆史、2次元反強磁性量子スピン系の端状態, Physics of Quantum Spin Systems, 京都市, 2012年11月13日

・口頭発表(国際会議で査読のあるもの)

- Kenji Harada, "Numerical study of incommensurability of the spiral state on spin-1/2 spatially anisotropic triangular antiferromagnets using entanglement renormalization", Conference on Computational Physics (CCP2012) for Physics, Chemistry, Biology, Engineering and related academic fields and industrial applications, 15 October 2012, Kobe, Japan.

・口頭発表(国内会議で査読のないもの)

- 渡辺宙志、鈴木将、伊藤伸泰、「ペタスケールコンピュータにおける分子動力学法の可能性」、日本物理学会第68回年次大会,2013年3月29日、広島大学 東広島キャンパス
- H. Watanabe, M. Suzuki, and N. Ito, "Huge-Scale Molecular Dynamics Simulation of Cavitation Process" The 3rd Workshop on Computational and Statistical Physics (CSP3),2012年10月20日、Kyoto Research Park, Kyoto, Japan
- 渡辺宙志、「超並列計算機における分子動力学シミュレーションの現状と展望」、MDCLセミナー,2012年7月19日、東京大学物性研究所
- 渡辺宙志、「超並列計算機における分子動力学シミュレーションの現状と展望」、統計力学セミナー,2012年7月3日、東京大学本郷キャンパス理1号館
- 正木晶子、川島直輝、藤堂眞治、原田健自、鈴木隆史、「ワームアルゴリズムの並列化」、日本物理学会第68回年次大会、2013年3月29日、広島大学
- 五十嵐亮、坂下達哉、藤堂眞治、ALPS/diagonalizationのOpenMP/MPI並列化、日本物理学会第68回年次

添付資料 4

大会、2013年3月、広島大学

-Akiko Masaki, Hiroyuki Mori...“Localization of Bose-Fermi Mixtures in One-Dimensional Incommensurate Lattices”, 23rd International Conference on Atomic Physics、2012年7月、Paris, France

-Akiko Masaki, Hiroyuki Mori...“Quantum Monte-Carlo Simulation on Bose-Fermi Mixtures in One-Dimensional Incommensurate Optical Lattices”, Conference on Computational Physics 2012、2012年10月、ニチイ学館、神戸

[プレスリリース/取材対応]

[著作物]

- S. Todo, “Loop Algorithm”, in “Strongly Correlated Systems: Numerical Methods” (Springer Series in Solid-State Sciences) , Ed. A. Avella and F. Mancini (Springer, Berlin, 2013).

[特許等の知的財産取得に関する案件]

[受賞等]

部会名: 第一部会

課題名: 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開

項目名: 超高精度電子状態計算による分子の微細量子構造予測

項目代表者: 天能精一郎

所属: 神戸大学

[論文]

1. Y. Kitagawa, Y. Akinaga, Y. Kawashima, J. Jung, and S. Ten-no, “A QM/MM-MD study on protein electronic properties: Circular dichroism spectra of oxytocin and insulin”
Chem. Phys., (Recent Advances in Electron Correlation Methods and Applications in honor of Debashis Mukherjee) **401** 95-102 (2012).
2. N. Minakuchi, K. Hoe, D. Yamaki, S. Ten-no, K. Nakashima, M. Goto, M. Mizuhata, and T. Maruyama, “Versatile supramolecular gelators that can harden water, organic solvents and ionic liquids”
Langmuir, **28** 9259-9266 (2012).
3. S. Ten-no and D. Yamaki, “Explicitly correlated four-component relativistic second order Møller-Plesset perturbation theory”
J. Chem. Phys. (communications), **137** 131101 (2012) (4 pages).
4. S. Ueno, Y. Tanimura, and S. Ten-no, “Molecular dynamics simulation for infrared spectroscopy with intra-molecular forces from electronic properties of on-the-fly quantum chemical calculations”
Intern. J. Quantum Chem., **113** 330-335 (2012).
5. J. Jung, S. Re, Y. Sugita, and S. Ten-no, “Improved constrained optimization for reaction-path determination in the generalized hybrid orbital quantum mechanical /molecular mechanical calculations”
J. Chem. Phys., **138** 044106 (2013) (10 pages).

[総説、解説]

該当事項無し

[学会発表]

・招待講演(国内会議)

該当事項無し

・招待講演(国際会議)

1. S. Ten-no, “Explicitly correlated perturbation theory using cusp conditions”, Molecular electronic structure at Troy, September 9 - 13 (2012) Canakkale, Turkey
2. S. Ten-no, “The rational generator in explicitly correlated electronic structure theory”, Theory and Applications in Computational Chemistry (TACC) 2012, September 2 - 7 (2012) Pavia, Italy

添付資料 4

3. S. Ten-no, "Recent advances in explicitly correlated electronic structure theory using cusp conditions", the 2012 International Congress of Quantum Chemistry, June 25 - 30 (2012) Boulder, Colorado, USA
4. S. Ten-no, "F12 theory in conjunction with relativity and determinantal-based QMC method", a satellite workshop of the 2012 ICQC "Low-scaling and Unconventional Electronic Structure Techniques" (LUEST), June 18-22 (2012) Telluride, Colorado, USA

・口頭発表(国内会議で査読のあるもの)

該当事項無し

・口頭発表(国際会議で査読のあるもの)

該当事項無し

[プレスリリース/取材対応]

該当事項無し

[著作物]

岩波講座 計算科学3 計算と物質 (第3章担当)「分子デザインと量子化学」(岩波書店、2012年7月)

[特許等の知的財産取得に関する案件]

[受賞等]

国際量子分子科学アカデミー会員 (平成24年6月)

HPCI 戦略プログラム 分野2 CMSI 研究課題

平成24年度 外部への成果発表

部会名： 第一部会

課題名： 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開

項目名： 分子における電子の動的過程と多体量子動力学

項目代表者： 高塚 和夫

所属： 東京大学大学院総合文化研究科

[論文]

Takehiro Yonehara, Kota and Kazuo Takatsuka, Fundamental Approaches to Nonadiabaticity: Towards a Chemical Theory beyond the Born-Oppenheimer Paradigm. *Chemical Reviews*, **112**, 499-542, 2012.

Simona Scheit, Yasuki Arasaki, and Kazuo Takatsuka, Controlled Dynamics at an Avoided Crossing Interpreted in Terms of Dynamically Fluctuating Potential Energy Curves. *J. Phys. Chem. A*, **116**, 2644-2653, 2012.

Michihiro Okuyama and Kazuo Takatsuka, Dynamical electron mechanism of double proton transfer in formic acid dimer. *BCSJ*, **85**, 217-227, 2012.

P. M. Kraus, Y. Arasaki, J. B. Bertrand, S. Patchkovskii, P. B. Corkum, D. M. Villeneuve, K. Takatsuka and H. J. Woerner, Time-resolved high-harmonic spectroscopy of nonadiabatic dynamics in NO₂. *Phys. Rev. A*, **85**, 043409 (5 pages), 2012.

Yasuki Arasaki, K. Wang, V. McKoy and K. Takatsuka, Nuclear and electron dynamics from femto- and subfemto-second time-resolved photoelectron angular distributions. *J Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **45**, 194006 (11 pages), 2012.

Kengo Nagashima and Kazuo Takatsuka, Early-Stage Dynamics in Coupled Proton-Electron Transfer from the π - π^* State of Phenol to Solvent Ammonia Clusters: A Nonadiabatic Electron Dynamics Study. *J. Phys. Chem. A*, **116**(46), 11167-79, 2012.

Takehiro Yonehara and Kazuo Takatsuka, Electron wavepacket dynamics in highly quasi-degenerate coupled electronic states: A theory for chemistry where the notion of adiabatic potential energy surface loses the sense. *J. Chem. Phys.* **137**, 22A520 (13 pages), 2012.

Naoyuki Niitsu, Miyu Kikuchi, Hayato Ikeda, Kaoru Yamazaki, Manabu Kanno, Hirohiko Kono, Koichiro Mitsuke, Mikito Toda, and Katsunori Nakai, Nanosecond simulations of the dynamics of C₆₀ excited by intense near-infrared laser pulses: Impulsive Raman excitation, rearrangement, and fragmentation, *The Journal of Chemical Physics* **136**, 164304 (12 pages), 2012.

Manabu Kanno, Yukari Ono, Hirohiko Kono, and Yuichi Fujimura, Laser-Polarization Effects on

Coherent Vibronic Excitation of Molecules with Quasi-Degenerate Electronic States, *The Journal of Physical Chemistry A* **116**, 11260-11272, 2012.

Kaoru Yamazaki, Naoyuki Niitsu, Kosuke Nakamura, Manabu Kanno, and Hirohiko Kono, Electronic Excited State Paths of Stone-Wales Rearrangement in Pyrene: Roles of Conical Intersections, *The Journal of Physical Chemistry A* **116**, 11441-11450, 2012.

Anant Babu Marahatta, Manabu Kanno, Kunihiro Hoki, Wataru Setaka, Stephan Irle, and Hirohiko Kono, Theoretical Investigation of the Structures and Dynamics of Crystalline Molecular Gyroscopes, *The Journal of Physical Chemistry C* **116**, 24845-24854, 2012.

Tsuyoshi Kato, Takayuki Oyamada, Hirohiko Kono, and Shiro Koseki, Time-Dependent Multiconfiguration Theory and Its Application to Ultrafast Electronic Dynamics of Molecules in an Intense Laser Field, *Progress of Theoretical Physics Supplement* **196**, 16-38, 2012.

[総説、解説]

Manabu Kanno, Hirohiko Kono, Sheng H. Lin, and Yuichi Fujimura, Laser-Induced Electronic and Nuclear Coherent Motions in Chiral Aromatic Molecules, *Progress in Theoretical Chemistry and Physics* **26**, Quantum Systems in Chemistry and Physics: Progress in Methods and Applications, 121-148, 2012.

Naoyuki Niitsu, Miyu Kikuchi, Hayato Ikeda, Kaoru Yamazaki, Manabu Kanno, Hirohiko Kono, Koichiro Mitsuke, Mikito Toda, Katsunori Nakai, and Stephan Irle, Simulation of Nuclear Dynamics of C₆₀: From Vibrational Excitation by Near-IR Femtosecond Laser Pulses to Subsequent Nanosecond Rearrangement and Fragmentation, *Progress in Theoretical Chemistry and Physics* **26**, Quantum Systems in Chemistry and Physics: Progress in Methods and Applications, 149-177, 2012.

Hirohiko Kono, Takayuki Oyamada, Tsuyoshi Kato, and Shiro Koseki, Natural Orbital Analysis of Ultrafast Multielectron Dynamics of Molecules, Multiphoton Processes and Attosecond Physics, *Springer Proceedings in Physics* Vol. **125**, 289-297, 2012.

Manabu Kanno, Hirohiko Kono, Hirobumi Mineo, Sheng H. Lin, and Yuichi Fujimura, Coherent ring currents in chiral aromatic molecules induced by linearly polarized UV laser pulses, *Materials and Applications for Sensors and Transducers II*, 381-384, 2013.

河野裕彦, 菅野 学, 化学反応に及ぼすマイクロ波効果の理論的考察, マイクロ波励起・高温非平衡反応場の科学 –マイクロ波エネルギーの基礎と新しい応用–, 自然科学研究機構核融合科学研究所編, **75-79** (2012).

河野裕彦, 山崎 馨, 新津直幸, 菅野 学, ナノカーボンの光誘起転移・解離反応制御のシミュレーション

ン, 計算科学研究センターレポート **12**, 14-17 (2012).

山崎 馨, 菅野 学, 河野裕彦, 光によって引き起こされる化学反応の量子力学に基づく理論解析 —非断熱遷移を引き起こす円錐交差の取り扱いについて—, 東北大学サイバーサイエンスセンター 大規模科学計算システム広報 (SENAC) **45**, No.4, 1-9(2012).

河野裕彦, C₆₀ の高強度レーザー励起ダイナミクス, レーザーと化学, 化学の要点シリーズ4 (日本化学会編), 共立出版, 96-97 (2012).

[学会発表]

・招待講演 (国内会議)

高塚和夫, 分子内電子ダイナミクスの直接観測について, 物性研究所 計算物質科学研究センター 第2回シンポジウム ~実験・計測・計算連携の新展開~, 2012/10/22-23, 東大物性研

高塚和夫, 量子古典反応における特異点の除去: 超多体量子動力学に向けて, 第3回CMS I研究会~超並列計算が拓く新しい計算物質科学~, 2012/12/3-5, 自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター

河野 裕彦, 計算科学と超高速光励起分子のダイナミクス, 第6回放射光連携研究ワークショップ (第2回RSC/CMSI合同セミナー) —量子秩序研究/創発物質科学/大規模計算科学の協奏—, 2013年2月14日, 東京大学山上会館.

・招待講演 (国際会議)

Kazuo Takatsuka, Dynamics of electrons in molecules and its nonadiabatic coupling with nuclei: observation and control, Festschrift for Prof. Vince McKoy, 2012/6/8-9, California State univ., USA.

Kazuo Takatsuka, Kengo Nagashima & Takehiro Yonehara, Nonadiabatic electron dynamics in chemical reactions, Advances in Quantum Chemistry: Interfacing Electronic Structure with Dynamics, 2012/6/20-22, University of Minnesota, USA.

Kazuo Takatsuka, Theory of Nonadiabatic Electronic and Nuclear Dynamics in Laser Fields; Observation and Control, Frontiers in Optics 2012 Laser Science XXVIII, 2012/10/14-18, Rochester Riverside Convention Center, USA.

Kazuo Takatsuka, Nonadiabatic Electron Dynamics in Electron Transfer, Proton Transfer, Coupled Electron-proton Transfer, An International Conference on: "Electronic Structure and Dynamics of Molecules and Clusters", 2013/2/17-20, Indian Association for the Cultivation of Science, India.

Hirohiko Kono, Naoyuki Niitsu, Kaoru Yamazaki, Akinobu Ikeda, Manabu Kanno, Koichiro Mitsuke, Mikito Toda, Stephan Irle, Simulation of nuclear dynamics of C₆₀ and its derivatives: From

添付資料 4

vibrational excitation by near-IR femtosecond laser pulses to subsequent reactions, the International Symposium on Computational Sciences (ISCS2012), August 15 (2012), Shanghai, China.

Hirohiko Kono, Electron dynamics of molecules beyond the mean field picture: Multiconfiguration time-dependent Hartree-Fock method, International Symposium on Ultrafast Intense Laser Science 11, Oct.23 (2012), Shilla hotel, Jeju, Korea.

Hirohiko Kono, Shu Ohmura, Takayuki Oyamada, Tsuyoshi Kato, and Shiro Koseki, Multielectron Dynamics of Molecules: The Chemical Potentials of Time-Dependent Electron Configurations and Molecular Orbitals 10th Asian International Seminar on Atomic and Molecular Physics, Oct. 25 (2012), Taipei, Taiwan, Republic of China.

Hirohiko Kono, Electronic and reaction dynamics of molecules interacting with intense laser pulses, Dec.15 (2012), Indian Institute of Science Education and Research-Kolkata (IISER-K), Kolkata, India.

・口頭発表（国内会議で査読のあるもの）

高塚和夫・高橋聡, 超多体半古典力学の構築, 第15回理論化学討論会, 2012/5/24-26
仙台市福祉プラザ

・口頭発表（国際会議で査読のあるもの）

[プレスリリース/取材対応]

[著作物]

高塚 和夫. 巨大分子の理論と基礎, 新しい反応動力学 - 電子と原子核の運動の絡み合い -. 巨大分子系の計算化学 - 超大型計算機時代の理論化学の新展開. 12-22, 61-69. 化学同人(京都). 2012.

[特許等の知的財産取得に関する案件]

[受賞等]

部会名: 第一部会

課題名: 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開

項目名: 凝縮分子科学系における揺らぎとダイナミクス

項目代表者: 斉藤真司

所属: 分子科学研究所

[論文]

1. K. Ohta, J. Tayama, S. Saito, and K. Tominaga, Vibrational Frequency Fluctuation of Ions in Aqueous Solutions Studied by Three-Pulse Infrared Photon Echo Method, *Acc. Chem. Res.* **45**, 1982 (2012) (invited).
2. K. Kim and S. Saito, Multiple Length and Time Scales of Dynamic Heterogeneities in Model Glass-Forming Liquids: A Systematic Analysis of Multi-Point and Multi-Time Correlations, *J. Chem. Phys.*, Special Topic: Glass Transition, **138**, 12A506 (2013) (invited).
3. M. Higashi, S. Hirai, M. Banno, K. Ohta, S. Saito, and K. Tominaga, Theoretical and experimental studies on vibrational energy relaxation of the CO stretching mode of acetone in alcohol solutions, *J. Phys. Chem. B*, DOI: 10.1021/jp310621p (invited).
4. S. Imoto, S. Xantheas, and S. Saito, Molecular origin of the difference in the HOH bend of the IR spectra between liquid water and ice, *J. Chem. Phys.*, **138**, 054506 (2013).
5. S. Saito, I. Ohmine, and B. Bagchi, Frequency dependence of specific heat in supercooled liquid water and emergence of correlated dynamics, *J. Chem. Phys.*, **138**, 094503 (2013).
6. K. Iida, H. Sato*, Theoretical study on ionization process in aqueous solution, *J. Chem. Phys.* **136**, 144510 (2012).
7. H. Ando, S. Iuchi, H. Sato*, Theoretical study on ultrafast intersystem crossing of chromium(III) acetylacetonate, *Chem. Phys. Lett.* **535**, 177-181 (2012).
8. K. Kido, D. Yokogawa, H. Sato*, The development of a revised version of multi-center molecular Ornstein-Zernike equation, *Chem. Phys. Lett.* **531**, 223-228 (2012).
9. K. Kido, D. Yokogawa, H. Sato*, A modified repulsive bridge correction to accurate evaluation of solvation free energy in integral equation theory for molecular liquids, *J. Chem. Phys.* **137**, 024106 (2012).
10. K. Iida, H. Sato*, A theory for time-dependent solvation structure near solid-liquid interface, *J. Chem. Phys.* **136**, 244502 (2012).
11. K. Iida, H. Sato*, An extended formula of site-site Smoluchowski-Vlasov equation for electrolyte solution and infinitely dilute solution, *J. Chem. Phys.* **137**, 034506 (2012).
12. A. Ishikawa, Y. Tanimura, Y. Nakao, H. Sato, S. Sakaki*, Complicated Electronic Process of C-C σ -Bond Activation of Cyclopropene by Ruthenium and Iridium Complexes: Theoretical Study, *Organometallics*, **31**, 8189-8199 (2012).
13. S. I. Nishimura, M. Ueda, and M. Sasai, Non-Brownian dynamics and strategy of amoeboid cell locomotion, *Phys. Rev. E* **85**, 041909_1-8 (2012).

[総説、解説]

1. T. Yagasaki and S. Saito, Fluctuations and Relaxation Dynamics of Liquid Water Revealed by Linear and Nonlinear Spectroscopy, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **64**, 55-75 (2013) (invited).
2. 笹井理生、寺田智樹, 生体分子のつくるシステム, 173-219 ページ, ゲノム系計算科学, 美宅成樹編(計算科学講座第7巻)(共立出版 2013)

[学会発表]

•招待講演(国内会議)

1. 佐藤啓文、「水素結合構造とその理論化学」、第6回分子科学会シンポジウム、2012年6月、早稲田大学西早稲田キャンパス
2. 佐藤啓文、「ゆらぎと水の理論化学」、新学術領域研究「揺らぎと生体機能」・「水を主役とした ATP エネルギー変換」合同公開シンポジウム「ゆらぎと水—生命のエネルギーと機能の分子機構を探る」、2012年9月、大阪ガーデンパレス
3. 佐藤啓文、“Molecular theory of chemical processes in solution: Efficient Models for Chemical Reaction and Equilibrium in Solution Phase”、2013 Workshop on 3DRISM/RISM: Present and Future、2013年3月、立命館大学 くさつキャンパス
4. 笹井理生, 蛋白質構造の整合性原理とその拡張, 第50回生物物理学会年会 Sep22-24 (2012), 名古屋大学
5. 笹井理生, Kai 蛋白質振動系における理論的課題, 日本蛋白質科学会年会, June20-22 (2012), 名古屋

•招待講演(国際会議)

1. S. Saito, Dynamics of liquid water: Energy relaxations and fluctuations, 244th ACS National Meeting & Exposition, Aug. 19-23, (2012), Philadelphia, USA.
2. S. Saito, Dynamics of Liquid and Supercooled Water, Indo-Japan Workshop in Recent Advances in Spectroscopy and Microscopy: Fundamentals and Applications to Materials and Biology, Nov. 21-22 (2012), Hyderabad, India.
3. H. Sato, Molecular Theory of Chemical Processes in Solution: Chemical Reaction, Equilibrium and Dynamics, the Institute of Atomic and Molecular Sciences, Academia Sinica, November 2012, Taipei
4. M. Sasai, From "New View" to "A Further View" of Protein Folding. International Symposium on Protein Folding and its Biological Significance. March 4 – 6, (2013), 岡崎コンファレンスセンター.
5. M. Sasai, Structure of free energy landscapes of protein folding and function. iCeMS Symposium on Theoretical and Computational Biology March 1 (2013), 京都大学.
6. M. Sasai, Heterogeneous dynamics and fluctuations in biomolecular networks, RIKEN Quantitative Biology Center Inaugural Symposium "Towards Whole-Cell Modeling", Nov.5-7 (2012), 神戸国際会議場.
7. M. Sasai, Structure of free energy surfaces of protein folding and function, Workshop on “Molecular Functional Dynamics: Fundamental to Life Activity”, October 26 (2012), 分子科学研究所.
8. M. Sasai, Revisiting the consistency principle of protein conformational change, KIAS, "12th KIAS Conference on Protein Structure and Function", October 11-13 (2012), Seoul.
9. M. Sasai, Slow dynamics of chromatin and non-adiabatic gene switches, Characterizing Landscapes: From

添付資料 4

Biomolecules to Cellular Networks, June 11-15 (2012), Telluride, Colorado.

・口頭発表(国内会議で査読のあるもの)

・口頭発表(国際会議で査読のあるもの)

[プレスリリース/取材対応]

[著作物]

1. 齊藤真司、凝縮系の揺らぎ、緩和と分光法、CSJ カレントレビュー 08(分担執筆)、76-81 (2012).
2. 齊藤真司、二次元赤外分光法の理論および水の分子間ダイナミックスの解析、日本赤外線学会誌 80、22-30 (2012).
3. 佐藤啓文、イオン液体の科学-新世代液体への挑戦(分担執筆)丸善株式会社(2012).
4. 佐藤啓文、巨大分子系の計算化学-超大型計算機時代の理論化学の新展開」CSJ カレントレビュー(分担執筆)日本化学会 (2012).
5. 佐藤啓文、井内哲、錯体化学選書6「錯体の溶液化学」(分担執筆)、三共出版 (2012).

[特許等の知的財産取得に関する案件]

[受賞等]

HPCI 戦略プログラム 分野2 CMSI 研究課題

平成24年度 外部への成果発表

部会名: 第二部会「次世代先端デバイス科学」

課題名: 密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究

課題代表者: 押山 淳

所属: 東京大学大学院工学系研究科

[論文]

1. Y. Matsushita, S. Furuya and A. Oshiyama, Floating Electron States in Covalent Semiconductors, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 246404 (2012).
2. K. Koizumi, M. Boero, Y. Shigeta, and A. Oshiyama, Microscopic Mechanisms of Initial Oxidation of Si(100): Reaction Pathways and Free-Energy Barriers, *Phys. Rev. B* **85**, 205314 (2012).
3. Y. Fujimoto and A. Oshiyama, Structural Stability and Scanning Tunneling Microscopy Images of Strained Ge Films on Si(001), *Phys. Rev. B* **87**, 075323 (2013).
4. Yasuteru Shigeta, Tomoya Inui, Takeshi Baba, Katsuki Okuno, Hiroyuki Kuwabara, Ryohei Kishi, Masayoshi Nakano, Quantal cumulant mechanics and dynamics for multidimensional quantum many-body clusters, *International Journal of Quantum Chemistry*, vol. 113, No. 3, pp.348-355, 2013 (DOI: 10.1002/qua.24052).
5. Toru Matsui, Yasutaka Kitagawa, Mitsutaka Okumura, Yasuteru Shigeta, Shigeyoshi Sakaki, "Consistent scheme for computing standard hydrogen electrode and redox potentials", *Journal of Computational Chemistry*, vol. 34, No. 1, pp.21-26. 2013 (DOI:10.1002/jcc.23100)
6. Takashi Kojima and Tomoya Ono, First-principles study on transport property of peapods, *Current Applied Physics* 12(3) S100-S104 (2012).
7. Tomoya Ono, Yoshiyuki Egami, and Kikuji Hirose, First-principles transport calculation method based on real-space finite-difference nonequilibrium Green's function scheme, *Physical Review B* 86(19) 195406 1-13 (2012).
8. Tomoya Ono, First-principles calculation of scattering potentials of Si-Ge and Sn-Ge dimers on Ge(001) surfaces, *Physical Review B* 87(8) 085311 1-6 (2013).
9. T. Otsuka and T. Miyazaki, "A quantum chemistry study of Ds-Pa unnatural DNA base pair", *Int. J. Quantum Chem.* Vol. 113, p504-509 (2013).
10. T. Tsumuraya, H. Seo, M. Tsuchiizu, R. Kato and T. Miyazaki, "Cation dependence of the electronic states in molecular triangular lattice systems beta'-X[Pd(dmit)₂]₂: A first-principles study, *J. Phys. Soc. Jpn.* Vol. 82, 033709-1-4 (2013).
11. T. Kiss, A. Chainani, H. M. Yamamoto, T. Miyazaki, T. Akimoto, T. Shimojima, K. Ishizaki, S. Watanabe, C. -T. Chen, A. Fukaya, R. Kato and S. Shin, "Quasiparticles and Fermi liquid behavior in an organic metal", *Nat. Commun.* 3, 1089-1-5 (2012).

[総説、解説]

1. 押山淳、"第一原理に基づく物質計算の現状と展望" *日本シミュレーション学会誌* **31**, 11 (2012).
2. 岩田潤一、古家真之介、押山淳、"実空間密度汎関数法コードRSDFTによる大規模第一原理計算" *計算工学* **17**, 22 (2012).
3. 古家真之介、岩田潤一、長谷川幸宏、松下雄一郎、押山淳、賀谷信幸、「シリコンナノワイヤのシミュレーション

添付資料 4

オンと π -CAVE システムによる可視化」、可視化情報学会誌, **32**, 138-143 (2012).

4. Tomoya Ono, Yoshitaka Fujimoto, and Shigeru Tsukamoto, First-principles calculation methods for obtaining scattering waves to investigate transport properties of nanostructures, *Quantum Matter* 1(1) 4-19 (2012).
5. 篠原康、乙部智仁、岩田潤一、矢花一浩、「第一原理計算で探るコヒーレントフォノンの生成機構」、日本物理学会誌, 査読有, **67**, 685-689 (2012).
6. 有田通朗、宮崎剛、「オーダーN法を用いた大規模第一原理計算：ナノ構造物質、巨大性対分子に対する第一原理計算」、精密工学会超精密加工専門委員会会誌「超精密」 Vol. 18, 50-55 (2012).

[学会発表]

・招待講演(国内会議)

1. 重田育照、「生体内化学反応解析の基礎」、第2回 量子化学ウィンタースクール、岡崎コンファレンスセンター・分子科学研究所、2012年12月17日～18日
2. 重田育照、「第一原理計算による生体内反応解析」、神戸大学第4回協定講座シンポジウム「計算生物学と材料科学の融合」、神戸大学統合研究拠点 コンベンションホール、2012年12月19日
3. 内田和之、「2層グラフェン系の電子構造」、日本物理学会、2013年3月27日、広島大学
4. 岩田潤一、「第一原理計算による半導体材料設計」、第60回応用物理学会春期学術講演会シンポジウム“半導体モデリング・シミュレーション技術の現状と将来展望”, 2013年3月27日, 神奈川工科大学
5. 宮崎剛、“複雑生体系に対する全原子第一原理計算”, 日本物理学会第68回年次大会、領域11, 9, 7, 12 合同シンポジウム「水素結合と分散力に関する第一原理計算の現状と課題」、広島大学東広島キャンパス 2013年3月26日-29日。
6. 宮崎剛、“複雑生体系に対する全原子第一原理計算”, 分子研研究会「生物物質科学の展望」、分子科学研究所、2013年1月10日-11日。

・招待講演(国際会議)

1. A. Oshiyama, "Materials Design through Computics: Nanostructures of Silicon and Carbon" 10th Int. Meeting on High Performance Computing for Computational Science (VECPAR2012), July 17-20, 2012, Kobe, Japan).
2. A. Oshiyama, "Real-Space Density-Functional Approach to Electronic Properties of Nanostructures" Conference on Computational Physics, (October 14-18, 2012, Kobe, Japan)
3. Yasuteru Shigeta, 「Theoretical Studies on Current-voltage (I-V) Characteristics of Metal Containing Artificial DNA and Ni Complex Based Molecular Devices」、2012 Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems (WINDS)、Hapuna Beach Hotel, Hawaii, USA、2012年12月2日～7日
4. Yasuteru Shigeta, "Design of Nylon Oligomer Hydrolase on the Basis of Simulations", *BIT's 3rd Symposium on Enzymes & Biocatalysis* 2012, Xian, China, 2012年4月25日～28日。
5. Tomoya Ono, First-principles study on transport properties of carbon based nano-systems, *Material Simulation in Petaflops*, (July 12 -13, 2012, Kashiwa, Japan).
6. Tomoya Ono, First-principles study on electron transport property of nanoscale systems, *International Symposium of Computational Science 2013 Special Session [Spintronics: First-Principles Simulation & Measurement]* (February 18-19, 2013, Kanazawa, Japan).

7. Kazuyuki Uchida, "Large-scale DFT calculations for twisted bilayer graphenes", Graphene Workshop, 2012/9/25, Tokyo Institute of Technology
8. J. Iwata, "Real-space grid density functional theory calculations", Material Simulation in Petaflops era (MASP2012), July 12, 2012, Kashiwa, Japan
9. J.-I. Iwata, "First-principles electronic structure calculations with K computer", Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC2012), 2-7 Sep, 2012, Pavia, Italy
10. J.-I. Iwata, "First-principles electronic structure calculations for 100,000-atom systems with real-space density functional theory code", International Union of Material Research Societies – International Conference on Electronic Materials (IUMRS-ICEM 2012), 23-28 Sep, 2012, Yokohama, Japan
11. J.-I. Iwata, "Large-scale electronic structure calculations with real-space grid density functional theory code", International conference on Simulation Technology, Sep. 27-28, 2012, Kobe, Japan
12. J.-I. Iwata, S. Furuya, Y. Futamura, T. Sakurai, "Band Structure Calculations of Large-Scale Systems by Sakurai-Sugiura Method", International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design (ISC-QSD), Oct. 11-13, Osaka University Hall, Japan
13. T. Miyazaki, "Atomic and electronic structures of BEDT-TTF and M(dmit)₂ systems at high pressures: A first-principles study of organic molecular solids", IUCrHP2012/QuBS2012 "Advances in Crystallography at High Pressures" International Symposium of the Quantum Beam Science Directorate, Japan Atomic Energy Agency, HOTEL LAKE VIEW MITO (Mito, Ibaraki, Japan), Sep. 23-27, 2012.

・口頭発表(国内会議で査読のあるもの)

・口頭発表(国際会議で査読のあるもの)

1. Tomoya Ono, Atomic configuration and transport property of electron-beam irradiated C₆₀ film, International Symposium on Carbon Nanotube Nanoelectronics, (June 11-13, 2012, Nagoya, Japan), P53.
2. Tomoya Ono, Fully spin-dependent transport property of graphene nanoflake, International Conference on Nanoscience + Technology (ICN+T2012), (July 23-27, 2012, Paris, France), GT-1.5.
3. Tomoya Ono, First-principles transport calculation method using real-space finite-difference NEGF scheme, International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design (ISC-QSD), (October 11-13, 2012, Osaka, Japan), O-4.
4. Marcus Heide and Tomoya Ono, Efficient Relaxation of Magnetic Moments in Noncollinear DFT Calculations, International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design (ISC-QSD), (October 11-13, 2012, Osaka, Japan), P-33.
5. Marcus Heide and Tomoya Ono, Efficient relaxation of magnetic moments in noncollinear DFT calculations, Conference on Computational Physics 2012, (October 14-18, 2012, Kobe, Japan), 126.
6. Tomoya Ono, First-Principles Study on Scattering Potentials of Defects on Ge(001) Surfaces, 15th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-15), (November 5-7, 2012, Taipei, Taiwan), P13
7. Tomoya Ono, Scattering potentials of defects on Ge(001) surfaces, 16th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods, (January 10-12, 2013, Trieste, Italy).

[プレスリリース／取材対応]

[著作物]

1. 押山淳, “第一原理に基づく物質計算の現状と展望” 日本シミュレーション学会誌 **31**, 11 (2012)
2. (編集)宇川彰、押山淳、小柳義夫、杉原正顯、住明正、中村春木、岩波講座「計算科学」全 6 巻・別巻 1 (2012、岩波書店)
3. 押山淳他、計算と物質(岩波講座「計算科学」第 3 巻) (2012、岩波書店).
4. Yasuteru Shigeta, “Quantal Cumulant Mechanics as Extended Ehrenfest Theorem”, Chapter 17 of Quantum Mechanics 2013, InTech open (ISBN 980-953-307-945-0).

[特許等の知的財産取得に関する案件]

なし

[受賞等]

1. 第 5 回分子科学会奨励賞、重田育照、2012年9月18日

HPCI 戦略プログラム 分野2 CMSI 研究課題

平成24年度 外部への成果発表

部会名: 第2部会

課題名: ナノ構造の電子状態から機械的性質までのマルチスケールシミュレーション

課題代表者: 尾形修司

所属: 名古屋工業大学

[論文]

Nobuko Ohba, Shuji Ogata, Takahisa Kouno, Tomoyuki Tamura, and Ryo Kobayashi: Linear scaling algorithm of real-space density functional theory of electrons with correlated overlapping domains, *Comp. Phys. Commun.* Vol. 183, 1664-1673 (2012).

Yashuhiro Kajima, Miyabi Hiyama, Shuji Ogata, Ryo Kobayashi, and Tomoyuki Tamura: Fast Time-Reversible Algorithms for Molecular Dynamics of Rigid-Body Systems, *J. Chem. Phys.*, Vol. 136, Issue 23, 234105-1-8 (2012).

[総説、解説]

Nobuko Ohba, Shuji Ogata, Takahisa Kouno, and Ryoji Asahi: A hybrid quantum-classical simulation study on the Li diffusion in Li-graphite intercalation compounds, *TSUBAME E-Science Journal*, Vol. 8, pp. 32-39 (2013).

[学会発表]

・招待講演(国内会議)

尾形修司:材料中の電子がどんな働きをしているか, みてみたくはないですか?, 名工大研究協力会第23回技術懇話会, 名古屋工業大学, 2012年5月15日, 名古屋.

尾形修司:ハイブリッド量子古典シミュレーション:その開発と適用例, 第21回CMDワークショップ, 2012年9月4日, 大阪大学.

尾形修司:オーダーN 実空間 DFT 法を用いたハイブリッド量子古典シミュレーション, スーパーコンピュータワークショップ 2013, 2013年1月22日, 岡崎コンファレンスセンター.

・招待講演(国際会議)

Shuji Ogata: Hybridization of Order-N real-space-grid DFT and classical molecular dynamics for nano-systems, The Second International Symposium on Large-Scale Computational Science and Engineering, Science Council of Japan, Nov. 8, 2012, Tokyo.

・口頭発表(国内会議で査読のあるもの)

Shuji Ogata, Nobuko Ohba, Takahisa Kouno: Development of Order-N Real-Space DFT and its Concurrent Hybridization with Molecular Dynamics, MRS2012 Spring Meeting, April 10, 2012, San Francisco.

尾形修司, 河野貴久, 大庭伸子:ハイブリッド量子古典法に適したオーダーN 型の実空間グリッド密度汎関数コードの開発, 第25回計算力学講演会, 2012年10月6日, 神戸.

添付資料 4

島田貴章, 河野貴久, 田村友幸, 小林亮, 尾形修司: シリカ中のクラック生成に対する含有水分子の効果: ハイブリッド量子古典シミュレーション, 第 25 回計算力学講演会, 2012 年 10 月 6 日, 神戸.

服部達徳, 河野貴久, 田村友幸, 小林亮, 尾形修司: ナノサイズの Si 部品間のウェハーボンディング過程に関するハイブリッド量子古典シミュレーション, 第 25 回計算力学講演会, 2012 年 10 月 6 日, 神戸.

大庭伸子, 尾形修司, 河野貴久, 小林亮, 田村友幸, 旭良司: DC-RGDFT を用いたハイブリッド量子古典シミュレーション: グラファイト中 Li 拡散への適用, 第 25 回計算力学講演会, 2012 年 10 月 6 日, 神戸.

田賀浩章, 尾形修司, 大庭伸子, 田村友幸, 小林亮, 河野貴久: ハイブリッド量子-古典シミュレーションによる Li グラファイト層間化合物と電解質との界面での Li 輸送, 第 25 回計算力学講演会, 2012 年 10 月 6 日, 神戸.

塚本耕司, 河野貴久, 大庭伸子, 田村友幸, 小林亮, 尾形修司: 高圧下でのグラファイトのダイヤモンド化反応に対する層間挿入原子の効果, 第 25 回計算力学講演会, 2012 年 10 月 6 日, 神戸.

鍛島康裕, 樋山みやび, 尾形修司, 田村友幸, 小林亮: 大規模な剛体分子集合系のための古典 MD コードの開発, 第 25 回計算力学講演会, 2012 年 10 月 6 日, 神戸.

丹羽洋平, 鍛島康裕, 尾形修司, 樋山みやび, 小林亮, 田村友幸: 大規模な水分子クラスターの外部電場に対する時間応答に関する剛体動力学シミュレーション, 第 25 回計算力学講演会, 2012 年 10 月 6 日, 神戸.

大庭伸子, 河野貴久, 尾形修司: 分割統治型実空間 DFT コードを用いたハイブリッド量子古典シミュレーション, 第3回 CMSI 研究会, 2012 年 12 月 4 日, 岡崎コンファレンスセンター.

田中宏一, 尾形修司, 小林亮, 田村友幸, 狐塚勝司 新聞敦: 分子動力学法を用いた放熱材料のフィラ-樹脂界面での熱伝導率解析, 日本金属学会 2012 年秋季大会, 2012 年 9 月 18 日, 愛媛大学.

尾形修司, 大庭伸子, 河野貴久, 小林亮, 田村友幸: 固体電解質皮膜と電解液との界面を通じた Li イオンの移動に関する数千原子規模の第一原理 MD, 日本物理学会第 68 回年次大会, 2013 年 3 月 28 日, 広島大学.

大庭伸子, 尾形修司, 河野貴久, 小林亮, 田村友幸, 旭良司: グラファイト中複数 Li 拡散に関するハイブリッド量子古典シミュレーション, 日本物理学会第 68 回年次大会, 2013 年 3 月 28 日, 広島大学.

河野貴久, 尾形修司, 大庭伸子, 田村友幸, 小林亮: 空孔欠陥を含むグラファイト中の Li 拡散に関する ハイブリッド量子古典シミュレーション, 日本物理学会第 68 回年次大会, 2013 年 3 月 28 日, 広島大学.

島田貴章, 河野貴久, 田村友幸, 小林亮, 尾形修司: シリカ中での水分子反応に関するハイブリッド量子古典シミュレーション, 日本物理学会第 68 回年次大会, 2013 年 3 月 28 日, 広島大学.

稲吉輝, 田村友幸, 小林亮, 尾形修司: Li イオン二次電池正極材料の酸素脱離シミュレーション, 日本物理学会第 68 回年次大会, 2013 年 3 月 28 日, 広島大学.

・口頭発表(国際会議で査読のあるもの)

Shuji Ogata, Takahisa Kouno, and Nobuko Ohba: Accuracy and Timing of Divide-and-Conquer-Type Real-Space Grid DFT (DC-RGDFT) for Hybrid Quantum-Classical Simulation, MMM2012, Oct. 19th, 2012, Singapore.

[プレスリリース/取材対応]

該当無し

[著作物]

該当無し

[特許等の知的財産取得に関する案件]

該当なし

[受賞等]

大庭伸子: 「分割統治型 DFT コードを用いたハイブリッド量子古典シミュレーション」, 第 3 回 CMSI 研究会 ビジュアル賞, 2012 年 12 月 4 日, 岡崎コンファレンスセンター.

HPCI 戦略プログラム 分野2 CMSI 研究課題

平成24年度 外部への成果発表

部会名: 第2部会

課題名: ナノ構造体における光誘起電子ダイナミクスと光・電子機能性量子デバイスの開発

課題代表者: 信定 克幸

所属: 分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域

[論文]

T. Yasuike and K. Nobusada, "Raman enhancement by plasmonic excitation of structurally-characterized metal clusters: Au₈, Ag₈, and Cu₈", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **15**, 5424-5429 (2013)

A. Das, T. Li, K. Nobusada, Q. Zeng, N. L. Rosi and R. Jin, "Total Structure and Optical Properties of a Phosphine/Thiolate-Protected Au₂₄ Nanocluster", *J. Am. Chem. Soc.*, **134**, 20286-20289 (2012)

M. Noda, T. Yasuike, K. Nobusada and M. Hayashi, "Enhanced Raman spectrum of pyrazine with the aid of resonant electron dynamics in a nearby cluster", *Chem. Phys. Lett.*, **550**, 52-57 (2012)

[総説、解説]

該当無し

[学会発表]

・招待講演(国内会議)

該当無し

・招待講演(国際会議)

K. Nobusada, "Near-Field Excitation in Nanostructure Arrays: Electron and Electromagnetic Field Fully-Coupled Dynamics", The 2nd Sweden-Japan Workshop on Nanophotonics and Related Technologies, 2012.6.19, Kista, Sweden

K. Nobusada, "Near-Field Excitation Dynamics in Nanostructures: Nonuniform and Self-Consistent Light Matter Interaction", Material Simulation in Petaflops era 2012, 2012.7.2, ISSP, Kashiwa, Chiba, Japan

・口頭発表(国内会議で査読のあるもの)

安池智一、野田真史、信定克幸、林倫年、「Naクラスターのプラズモン励起における集団性とラマン増強機構への寄与」、第6回分子科学討論会、平成24年9月19日、東大本郷

安池智一、信定克幸、「貴金属クラスターにおける集団電子運動とラマン増強機構」、日本化学会第93春季年会、平成25年3月23日、立命館大学びわこ・草津キャンパス

飯田健二、安池智一、信定克幸、「有限温度密度汎関数理論と量子開放系クラスターモデルを融合した手法を用いた銀イオンの金(111)電極へのアンダーポテンシャルデポジションに関する理論的研究」、日本化学会第93春季年会、平成25年3月23日、立命館大学びわこ・草津キャンパス

添付資料 4

棟方 健太・藏重 亘・大掛 航・信定 克幸・根岸 雄一、MnAu_{25-n}(SeR)₁₈(M=アルカリ金属)合金クラスターの創製とシナジー効果の解明、日本化学会第93春季年会、平成25年3月23日、立命館大学びわこ・草津キャンパス

信定克幸、野田真史、「ナノ分子構造体における電子・電磁場カップリングダイナミクスの第一原理計算」、第60回応用物理学会春季学術講演会、平成25年3月28日、神奈川工科大学

・口頭発表(国際会議で査読のあるもの)

該当無し

[プレスリリース/取材対応]

該当無し

[著作物]

該当無し

[特許等の知的財産取得に関する案件]

該当無し

[受賞等]

該当無し

部会名: 第2部会

課題スピントロニクス/マルチフェロイクスの応用へ指向した材料探索:

課題代表者: 斎藤峯雄

所属: 金沢大学

[論文]

M. Tsujikawa, S. Haraguchi, T. Oda, "Effect of atomic monolayer insertions on electric-field-induced rotation of magnetic easy axis", *J. Appl. Phys.*, **111**, 083910(1-4), 2012

T. Ueno, M. Sawada, K. Furumoto, T. Tagashira, S. Tohoda, A. Kimura, S. Haraguchi, M. Tsujikawa, T. Oda, H. Namatame, and M. Taniguchi, "Interface atomic structures and magnetic anisotropy of Fe and Pd/Fe monatomic films on Pd(001)", *Phys. Rev. B*, **85**, 224406(1-11), 2012

A. Fleurence, R. Friedlein, T. Ozaki, H. Kawai, Y. Wang, and Y. Yamada-Takamura, "Experimental Evidence for Epitaxial Silicene on Diboride Thin Films", *Phys. Rev. Lett.* **108**, 245501 (1-5), 2012.

Y. Okuno and T. Ozaki, "First-Principles Study of Multiterminal Quantum Interference Controlled Molecular Devices", *J. Phys. Chem. C* **117**, 100–109, 2013.

H. Sawada, S. Taniguchi, K. Kawakami, and T. Ozaki, "First-Principles study of interface structure and energy of Fe/NbC", *Model. Sim. Mat. Sci. Eng.*, in press.

I. Hamada, K. Yamauchi, and T. Oguchi, "Structure and intermolecular bonding in NaBH₄•2H₂O: A density functional theory study", *Phys. Rev. B* **85**, 214119 (1-4), (2012).

N. Nagasako and T. Oguchi, "Stress Formulation in the All-Electron Full-Potential Linearized Augmented Plane Wave Method: II. Accuracy Check in the Generalized Gradient Approximation", *J. Phys. Soc. Jpn.* **82**, 044802(1-10), 2013.

J. Lin., K. Nishida, and M. Saito, "First-Principles Calculations of Adatom-Vacancy Pairs on the Graphene", *Jpn. J. Appl. Phys.* **51**, 125101(1-3), 2012.

H. Kotaka, F. Ishii, and M. Saito, "Rashba Effect on the Structure of the Bi One-Bilayer Film: Fully Relativistic First-Principles Calculation", *Jpn. J. Appl. Phys.*, **52**, 035204(1-5), 2013.

M. S. Alam, F. Muttaqien, A. Setiadi, and M. Saito, "First-Principles Calculations of Hydrogen Monomers and Dimers Adsorbed in Graphene and Carbon Nanotubes", *J. Phys. Soc. Jpn.* **82**, 044702(1-7), 2013.

[総説、解説]

小田竜樹, 原口辰也, 辻川雅人, 「強磁性超薄膜における磁気異方性と電界制御の理論的研究」, 応用電子物性分科会会誌, 18巻5号, 170-175, 2012

[学会発表]

・招待講演(国内会議)

小田竜樹, 「強磁性超薄膜における磁気異方性と電界制御の理論的研究」, 応用物理学会応用電子物性分科会・スピントロニクス研究会 共催研究会「強磁性体のスピン制御技術とその展望」, 2012年11月21日, 首都大学東京・秋葉原サテライトキャンパス(東京都千代田区)

小田竜樹, 「電子添加された TI/Si(111)表面における光電子分光スペクトルへの考察」, 東京大学物性研究所 共同利用スーパーコンピュータ計算物質科学研究センター(CCMS)・元素戦略プロジェクト合同研究会 「計算物性物理学の新展開」, 2013年1月11日, 東京大学物性研究所(千葉県柏市)

小田竜樹, 「相対論的擬ポテンシャル第一原理分子動力学法の開発と応用」, 第3回産業科学研究所共同研究研究会, 2013年2月10日, 有馬温泉メープル有馬(兵庫県神戸市)

小田竜樹, 「磁性の電界制御の現状と将来展」, 東北大学電気通信研究所情報通信共同研究拠点平成24年度共同プロジェクト研究発表会「新世代 ICT の羅針盤」, 2013年2月28日, 学術総合センター(東京都千代田区)

小田竜樹, 「磁性の電場効果について最近の研究から」, CAMMフォーラム「コンピュータによる材料開発・物質設計を考える会」, 2013年3月1日, アイビーホール(東京都渋谷区)

小田竜樹, 「強磁性超薄膜における磁気異方性と電界制御」, 高エネルギー加速器研究機構(KEK)-筑波大学等連携支援事業研究会「磁気異方性の起源と放射光実験」, 2013年3月1日, 筑波大学第3エリア B棟3B213プレゼンテーションルーム(茨城県つくば市)

尾崎泰助, 「原理電子状態計算コード: OpenMX -原理と実際-, 第一原理計算コード OpenMX, QMAS, TOMBO セミナー, 2013年3月14日, 産業技術総合研究所 関西センター

尾崎泰助, 「シミュレーション科学 ~ その概要と材料開発における可能性 ~」, 日産自動車(株) 総合研究所講演会, 2012年9月21日, 神奈川県横須賀市.

尾崎泰助, 「コンピュータで拓く物質科学の未来」, 交流セミナー, 2012年7月26日, 石川ハイテク交流センター

・招待講演(国際会議)

M. Saito, First-Principles Calculations of Carbon Nanomaterials, The Fifth International Symposium on Computational Science, 15, May, 2012, Yogyakarta, Indonesia.

・口頭発表(国内会議で査読のあるもの)

・口頭発表(国際会議で査読のあるもの)

T. Oda, "The origin of electric-field effects on magnetic anisotropy in FePd ultrathin film", The 19th International Conference on Magnetism with Strongly Correlated Electron Systems 2012, 9th July 2012,

Bexco(Busan, Korea)

Tatsuki Oda, “Electric-field effects on magnetic anisotropy in FePd and FePt ultrathin films”, International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design, 12th October 2012, Osaka University Hall (Osaka, Toyonaka)

[プレスリリース／取材対応]

[著作物]

[特許等の知的財産取得に関する案件]

[受賞等]

部会名: 第2部会
課題名: 新材料探索
課題代表者: 常行真司
所属: 東京大学

[論文]

Y. Ando, Y. Gohda and S. Tsuneyuki, Ab initio molecular dynamics study of the Helmholtz layer formed on solid-liquid interfaces and its capacitance, Chem. Phys. Lett. 556, 9-12(2012).

Y. Gohda and S. Tsuneyuki, Optical conductivity of highly mismatched GaP alloys, Appl. Phys. Lett. 102, 023901 (2013).

Y. Iwazaki, T. Suzuki, Y. Mizuno and S. Tsuneyuki, Doping-induced phase transitions in ferroelectric BaTiO₃ from first-principles calculations, Phys. Rev. B86, 214103 (2012).

Y. Ando, Y. Gohda and S. Tsuneyuki, Dependence of the Schottky barrier on the work function at metal/SiON/SiC(0001) interfaces identified by first-principles calculations, Surf. Sci. 606, 1501-1506 (2012).

B. Liu, A. Seko and I. Tanaka, "Cluster expansion with controlled accuracy for the MgO/ZnO pseudobinary system via first-principles calculations", Phys Rev B 86, 245202 (2012).

Y. Kumagai, Y. Soda, F. Oba, A. Seko and I. Tanaka, "First-principles calculations of the phase diagrams and band gaps in CuInSe₂-CuGaSe₂ and CuInSe₂-CuAlSe₂ pseudobinary systems", Phys Rev B 85, 033203 (2012).

Y. Kumagai, A. Seko, F. Oba, and I. Tanaka, "Ground-state search in multicomponent magnetic systems", Phys Rev. B 85, 012401 (2012).

S. Ishibashi and K. Terakura, "Electronic Structure of Cu(tm₂)₂ Studied with First-Principles Calculations", Crystals 2, 1210 (2012).

H. Shinaoka, T. Miyake and S. Ishibashi, "Noncollinear magnetism and spin-orbit coupling in 5d pyrochlore oxide Cd₂Os₂O₇", Phys. Rev. Lett. 108, 247204 (2012).

土田 英二、崔 隆基, "Iterative diagonalization of symmetric matrices in mixed precision and its application to electronic structure calculations", COMPUTER PHYSICS COMMUNICATIONS, 183, pp.980-985, 2012/04.

Kazuma Nakamura, Yoshihide Yoshimoto, and Masatoshi Imada, "Ab initio two-dimensional multiband low-energy models of EtMe₃Sb[Pd(dmit)₂]₂ and κ-(BEDT-TTF)₂Cu(NCS)₂ with comparisons to single-band models", Phys. Rev. B, Vol. 86, Art. No. 205117 (2012)

Kenta Hongo, N.T. Cuong, and Ryo Maezono, "The Importance of Electron Correlation on Stacking Interaction of Adenine-Thymine Base-Pair Step in B-DNA: A Quantum Monte Carlo Study", *J. Chem. Theory Comput.*, 9, pp 1081–1086 (2013).

Yutaka Uejima and R. Maezono, "GPGPU for orbital function evaluation with a new updating scheme", *J. Comput. Chem.*, 34, pp 83–94 (2013).

C.N.M. Ouma, M.Z. Mapelu, N.W. Makau, G.O. Amolo, and R. Maezono, "Quantum Monte Carlo (QMC) study of Pressure-induced B3-B1 phase transition in GaAs", *Phys. Rev. B* 86, pp 104115:1-7' (2012).

M. Abbasnejad, E. Shojaee, M. R. Mohammadzadeh, M. Alaei, and R. Maezono, "Quantum Monte Carlo study of high-pressure cubic TiO₂", *Appl. Phys. Lett.* 100, 26, pp 261902 : 1-4 (2012).

M. Abbasnejad, M. R. Mohammadzadeh and R. Maezono, "Structural, electronic, and dynamical properties of Pca21-TiO(2) by first principles", *Europhys. Lett.* 97, 56003, (2012).

[総説、解説]

三宅 隆、石橋 章司、手塚 明則, 新規磁性材料開発へ向けた第一原理電子状態計算プログラム QMAS, 産総研 TODAY **13**, 3 (2013).

崔 隆基、土田 英二、大谷 実, "燃料電池用高分子材料のシミュレーション", 産総研 Today, 産業技術総合研究所, 2013/02/04

T. Ohkubo, E. Tsuchida(AIST), M. Gobet(CNRS), C. Bessada(CNRS) and Y. Iwodate, "First-principles molecular dynamics simulation and conductivity measurement of molten xLi₂O-(1-x)B₂O₃ system", *Proceedings of 4th Asian Conference on Molten Salt Chemistry and Technology*, 208–215 (2012).

[学会発表]

・招待講演(国内会議)

常行真司, 「CMSI」 計算物質科学イニシアティブ」とは, 第 6 回放射光連携研究ワークショップ, 2013 年 2 月 14 日, 東京大学.

常行真司, 「計算物質科学イニシアティブ(CMSI)の概要と材料研究への取り組み」, 材料戦略委員会 分野融合研究会, 2013 年 1 月 29 日, 東京.

石橋章司, "QMAS の概要", 第一原理計算コード OpenMX, QMAS, TOMBO セミナー, 大阪府池田市, 2013/03/14.

石橋章司, "QMAS 最局在 Wannier 軌道関係を中心として", 第一原理計算コード OpenMX, QMAS, TOMBO セミナー, 大阪府池田市, 2013/03/15.

吉本芳英 「計算物性科学の将来像:次世代 HPC の検討と関連して」(日本物理学会 第 68 回年次大会 シンポジウム 「エクサスケールに向けて歩み出す計算物理学」, 広島大学)

添付資料 4

吉本芳英 「熱力学量と相転移 (拡張アンサンブル法と熱力学的 downfolding)」 (2013. 3. 13 計算材料科学と数学の協働によるスマート材料デザイン手法の探索 —階層構造を解析する—, 東北大学原子分子材料科学高等研究機構)

吉本芳英 「計算物性物理の発展のためのコンピュータ活用の考え方」 (2013. 1. 11 物性研共同利用・CCMS・元素戦略合同研究会「計算物性物理学の新展開」, 物性研究所)

吉本芳英 「GPU を活用した hybrid 型交換相関汎関数の平面波基底第一原理計算プログラムへの実装と水分子系への応用」 (2012. 10. 9 計算分子科学研究拠点 第 3 回研究会, 分子科学研究所)

吉本芳英 「第一原理電子状態計算とマルチカノニカル分子動力学法による物性シミュレーション (2012. 5. 11 CAMM フォーラム [コンピュータによる材料開発・物質設計を考える会], 東京・表参道「アイビーホール」)

前園涼、多成分量子モンテカルロ法を用いた電子正孔系の研究、第 3 回産業科学研究所共同研究研究会、2013/2/10、有馬温泉メープル有馬 (神戸)

前園涼、多成分量子モンテカルロ法を用いた電子正孔系の研究、科研費新学術領域研究「動的相関光科学」最終シンポジウム、2012/12/26、東京大学浅野キャンパス (東京)

前園涼、量子モンテカルロ法による電子状態計算、J A I S T シンポジウム 2 0 1 2、2012/11/16、富士ソフトアキバプラザ (東京)

前園涼、量子モンテカルロ法電子状態計算による計算科学、第 4 回金沢大-JAIST 計算物質科学研究会、2012/9/5、金沢大学 (石川)

前園涼、量子モンテカルロ法を用いた電子状態計算、HPCI 戦略プログラム 分野 2 × 分野 5 異分野交流研究会、2012/5/30、東京大学物性研究所 (千葉)

前園涼、量子モンテカルロ法電子状態計算コード「CASINO」、第 1 回 CMSI 「京」利用情報交換会、2012/5/10、理化学研究所計算科学研究機構(AICS) (兵庫)

・招待講演(国際会議)

S. Tsuneyuki, 'Atomistic Modeling of Materials Based on First-Principles Calculation', the Seventh General Meeting of ACCMS-VO, Nov. 23-25, 2012, Sendai, Japan.

S. Tsuneyuki, 'Transcorrelated method: a feasible and self-consistent wave function theory for solids', Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (Asian-15), Nov. 5-7, 2012, Taipei.

Isao TANAKA, Exploring structures and phase relationships of ceramics at finite temperatures from first principles, Korean Institute of Metals and Materials/Japan Institute of Metals Joint Symposium on Computational Materials Science, 25 Oct 2012, Changwon, Korea

Isao TANAKA, Structure and Dynamics of Oxide Crystals at High Temperatures by First Principles Calculations, MS&T2012. 10 Oct 2012, Pittsburgh, USA

Isao TANAKA, First principles study of anion ordering in oxynitrides. 6th International Workshop on

Spinel-Nitrides and Related Materials, 10 Sept 2012, Ruedesheim am Main, Germany

S. Ishibashi, H. Ohnishi, H. Shinaoka, T. Kosugi, T. Miyake and K. Terakura, "Electronic structure calculation with two-component relativistic formalism", IUMRS-International Conference on Electronic Materials (IUMRS-ICEM2012), Yokohama, 2012/09/26.

Ryo MAEZONO, Non-additivity in metallic tri-wire binding, International Symposium of Computational Science 2013, 2013/2/18, 金沢大学(石川)

Alston Misquitta, Ryo Maezono, Neil Drummond, Richard Needs, Anomalous Three-body dispersion and other curiosities, Towards First-Principles Description of van der Waals Interactions in Complex Materials, 2012/10/17, CECAM-HQ-EPFL (Lausanne, Switzerland)

Ryo MAEZONO, Non-additivity in metallic tri-wire binding, International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design (ISC-QSD), 2012/10/11, Osaka University (Osaka)

Ryo MAEZONO, GPGPU acceleration of CASINO blip routine, Quantum Monte Carlo in the Apuan Alps VII, 2012/8/2, The Towler Institute(Vallico Sotto, Tuscany, Italy)

Ryo MAEZONO, Electronic Structure Calculations using Quantum Monte Carlo method, 2nd African School on 'Electronic Structure Methods and Applications' (ASESMA 2012), 2012/6/5, Chepkoilel University College, Department of Physics (Eldoret, Kenya)

・口頭発表(国内会議で査読のあるもの)

・口頭発表(国際会議で査読のあるもの)

[プレスリリース／取材対応]

北陸中日新聞, 2012/08/08・朝刊, 「高校生がスパコン作り・北陸先端大で「サイエンスキャンプ」」

北國新聞, 2012/08/08・朝刊, 「先端大で高校生がパソコン組み立てサマーキャンプ」

[著作物]

平面波基底第一原理計算ソフトウェア xTAPP 吉本芳英、吉澤香奈子、山内淳、諏訪雄二、TAPP コンソーシアム

[特許等の知的財産取得に関する案件]

[受賞等]

部会名: 第3部会

課題名: 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開

課題代表者: 岡崎 進

所属: 名古屋大学

[論文]

1. Y. Andoh, K. Ono, S. Okazaki, and I. Hatta, A molecular dynamics study of the lateral free energy profile of a pair of cholesterol molecules as a function of their distance in 1-palmitoyl-2-oleoyl-phosphatidylcholine bilayers, *J. Chem. Phys.*, 136, 055104, 1-5, 2012
2. K. Fujimoto, N. Yoshii, and S. Okazaki, Free energy of transfer of alkanes from water to the micelle core by thermodynamic integration method combined with molecular dynamics calculation, *J. Chem. Phys.*, 137, 094902, 1-6, 2012
3. Y. Andoh, S. Okazaki and R. Ueoka, Molecular dynamics study of lipid bilayers modeling the plasma membranes of normal murine thymocytes and leukemic GRSL cells, *Biochim. Biophys. Acta-Biomembranes*, 1828, 1259-1270, 2013
4. Kazuhiro Takemura and Akio Kitao, "Water model tuning for improved reproduction of rotational diffusion and NMR spectral density", *J. Phys. Chem. B*, 1520-5207 (Electronic) • 1520-5207 (Linking), 2012
5. Kazuhiro Takemura, Guo Hao, Shun Sakuraba, Nobuyuki Matubayasi and Akio Kitao, "Evaluation of protein-protein docking model structures using all-atom molecular dynamics simulations combined with the solution theory in the energy representation", *J. Chem. Phys.*, 1089-7690 (Electronic) • 0021-9606 (Linking), 2012
6. Kazuhiro Takemura, Raghunadha Reddy Burri, Takeshi Ishikawa, Takakazu Ishikura, Shun Sakuraba, Nobuyuki Matubayasi, Kazuo Kuwata and Akio Kitao, "Free-energy analysis of lysozyme-triNAG binding modes with all-atom molecular dynamics simulation combined with the solution theory in the energy representation", *Chem. Phys. Lett.*, 0009-2614, 2013
7. Takakazu Ishikura, Raghunadha Reddy Burri, Yuji O. Kamari, Shun Sakuraba, Nobuyuki Matubayasi, Akio Kitao and Kuwata Kazuo, "A theoretical study of the two binding modes between lysozyme and tri-NAG with an explicit solvent model based on the fragment molecular orbital method", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 1463-9084 (Electronic) • 1463-9076 (Linking), 2013
8. Satoshi Omori and Akio Kitao, "CyClus: A fast, comprehensive cylindrical interface approximation clustering/reranking method for rigid-body protein-protein docking decoys", *Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics*, 1097-0134 (Electronic) • 0887-3585 (Linking) 2013 (/2/27online)
9. D. G. Fedorov, K. Kitaura, Energy Decomposition Analysis in Solution Based on the Fragment Molecular Orbital Method, *J. Phys. Chem. A*, 116, 704-719, 2012
10. T. Nagata, D. G. Fedorov, K. Kitaura, Analytic gradient and molecular dynamics simulations using the fragment molecular orbital method with effective potentials, *Theoret. Chem. Acc.*, 131, 1136-(15), 2012
11. Takeshi Nagata, Dmitri G. Fedorov, Hui Li, Kazuo Kitaura, Analytic gradient for second order Møller-Plesset perturbation theory with the polarizable continuum model based on the fragment molecular orbital method, *J. Chem. Phys.*, 136, 204112-14, 2012
12. T. Nagata, D.G. Fedorov, K. Kitaura, Analytic gradient for the embedding potential with approximations in

- the fragment molecular orbital method, Chem. Phys. Lett. 544, 87-93, 2012
13. Naoya Asada, Dmitri G. Fedorov, Kazuo Kitaura, Isao Nakanishi, Kenneth M. Merz, Jr., An efficient method to evaluate intermolecular interaction energies in large systems using overlapping multicenter ONIOM and the fragment molecular orbital method, J. Phys. Chem. Lett., 3, 2604-2610, 2012
 14. T. Nagata, D. G. Fedorov, T. Sawada, K. Kitaura, Analysis of solute-solvent interactions in the fragment molecular orbital method interfaced with the effective fragment potentials: Theory and application to solvated griffithsin-carbohydrate complex, J. Chem. Phys. A, 116, 9088-9099, 2012
 15. H. Nakata, D.G. Fedorov, T. Nagata, S. Yokojima, K. Ogata, K. Kitaura, S. Nakamura, Unrestricted Hartree-Fock based on the fragment molecular orbital method: Energy and its analytical gradient, J. Chem. Phys. 137, 044110, 2012
 16. T. Nagata, D.G. Fedorov, H. Li, K. Kitaura, Analytic gradient for second order Moller-Plesset perturbation theory with the polarizable continuum model based on the fragment molecular orbital method, J. Chem. Phys. 136, 204112, 2012
 17. Y. Alexeev, A. Mahajan, S. Leyffer, G. Fletcher, D. G. Fedorov, Heuristic static load-balancing algorithm applied to the fragment molecular orbital method. Proc. Supercomputing 2012, IEEE Computer Society, Salt Lake City, 2012
 18. S. R. Pruitt, D. G. Fedorov, M. S. Gordon, Geometry optimizations of open-shell systems with the fragment molecular orbital method. J. Phys. Chem. A 116 (2012) 4965-4974.

[総説、解説]

1. 岡崎 進、ウイルスの全原子シミュレーションに向けて、計算工学 17, 2845-2848(2012)
2. Dmitri G. Fedorov, Takeshi Nagata, Kazuo Kitaura, Exploring chemistry with the fragment molecular orbital theory, Phys. Chem. Chem. Phys., 14, 7562-7577 (2012).
3. Y. Alexeev, M. P. Mazanetz, O. Ichihara, D. G. Fedorov, GAMESS As a Free Quantum-Mechanical Platform for Drug Research. Curr. Top. Med. Chem. 12 (2012) 2013-2033.

[学会発表]

・招待講演(国内会議)

1. 北尾彰朗、「水とタンパク質の構造揺らぎの理論解析」、新学術合同交際シンポジウム「ゆらぎと水—生命のエネルギーと機能の分子機構を探る」、2012年9月、大阪
2. 北浦和夫、「タンパク質の量子化学計算」、第6回分子科学討論会、2012年9月、東京
3. 北尾彰朗、「Structure modeling of the stator in bacterial flagellar motor and implication for selective permeation mechanism of proton」、JSPS二国間交流事業 第四回日仏セミナー『細胞内の時間・空間階層構造のイメージング—分子から細胞に至るダイナミクス俯瞰—』、2013年1月、兵庫
4. 岡崎 進、「高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト modylas の開発—ウイルスの全原子シミュレーションに向けて」、12-1 高分子計算機科学研究会、2013年3月、東京
5. 北浦和夫、「タンパク質のリガンド結合における特徴的非結合相互作用」、日本物理学会第68回年次大会、2013年3月、広島
6. 北浦和夫、「大規模分子系の量子化学計算」、第22回CMDワークショップ、2013年3月、神戸

・招待講演(国際会議)

1. Kazuo Kitaura, "Calculations of Binding Free Energy Between Protein and Ligand Using the Fragment Molecular Orbital Method", MSCRS2012, May, 2012, Nagoya

添付資料 4

2. S. Okazaki, "A Molecular Dynamics Study of Real Cell Plasma Membrane", 1st International Conference on Emerging Advanced Nanomaterials(ICEAN 2012), October, 2012, Brisbane
3. S. Okazaki, "Real Cell Plasma Membranes and Virus Capsid", Satellite Workshop of the SCJ-JST International Symposium International Workshop on Recent Advances in Computational and Theoretical Chemistry, November, 2012, Nagoya

・口頭発表(国内会議で査読のあるもの)

・口頭発表(国際会議で査読のあるもの)

[プレスリリース/取材対応]

1. スーパーコンピュータ京が開く未来③/2012年9月28日、神戸新聞

[著作物]

[特許等の知的財産取得に関する案件]

[受賞等]

1. 西原泰孝、北尾彰朗、「細菌べん毛モーター固定子複合体MotA/Bチャンネルの選択的透過メカニズム」、第12回東京大学生命科学シンポジウム(ポスター賞)、2012年6月30日、東京
2. 山守優、「MUSTERMD: Temperature Accelerated MDとReplica 交換法を用いた MultiScale サンプリング手法の開発」、第26回分子シミュレーション討論会学生優秀発表賞、2012年11月26-28日、福岡
3. 山内 隆義(名大院工 M2)、山田 篤志、岡崎 進(名大院工)、大戸 達彦、山下 晃一(東大院工)、渡邊 一也、松本 吉泰(京大院理)、「影響汎関数理論を用いた銅基板表面上に吸着されたセシウム原子のフォノンモードの振動緩和の研究」、第26回分子シミュレーション討論会学生優秀発表賞、2012年11月26-28日、福岡

部会名: 第3部会

課題名: 拡張アンサンブル法による生体分子構造・機能の解明

課題代表者: 岡本祐幸

所属: 名古屋大学 大学院理学研究科

[論文]

- [1] T. Nagai and Y. Okamoto, “Simulated tempering and magnetizing: an application of two-dimensional simulated tempering to two-dimensional Ising model and its crossover,” *Physical Review E* **86**, 056705 (12 pages) (2012).
- [2] T. Nagai and Y. Okamoto, “Replica-exchange molecular dynamics simulation of a lipid bilayer system with a coarse-grained model,” *Molecular Simulation* **38**, 437-441 (2012).
- [3] Y. Mori and Y. Okamoto, “Generalized-ensemble algorithms for studying temperature and pressure dependence of complex systems,” *Molecular Simulation* **38**, 452-457 (2012).
- [4] B.A. Berg, C. Muguruma, and Y. Okamoto, “Residual entropy of ordinary ice calculated from multicanonical Monte Carlo simulations,” *Molecular Simulation* **38**, 856-860 (2012).
- [5] Y. Mori and Y. Okamoto, “Generalized isobaric-isothermal ensemble algorithms,” in *From Computational Biophysics to Systems Biology (CBSB11) – Celebrating Harold Scheraga’s 90th Birthday*, P. Carloni, U.H.E. Hansmann, T. Lippert, J.H. Meinke, S. Mohanty, W. Nadler, and O. Zimmermann (eds.) (John von Neumann Institute for Computing, Juelich, 2012) pp. 139-144.
- [6] T. Nagai and Y. Okamoto, “Simulated tempering and magnetizing simulations of the Ising model,” *Physica Procedia* **34**, 100-104 (2012).
- [7] Y. Sakae and Y. Okamoto, “Improvement of the backbone-torsion-energy term in the force field for protein systems by the double Fourier series expansion,” *Molecular Simulation* **39**, 85-93 (2013).
- [8] Y. Mori and Y. Okamoto, “Free energy calculations of a proton transfer reaction by simulated-tempering umbrella sampling first principles molecular dynamics simulations,” *Physical Review E* **87**, 023301 (4 pages) (2013).
- [9] Y. Sakae and Y. Okamoto, “Amino-acid-dependent main-chain torsion-energy terms for protein systems,” *Journal of Chemical Physics* **138**, 064103 (8 pages) (2013).
- [10] T. Nagai, Y. Okamoto, and W. Janke, “Application of simulated tempering and magnetizing to a two-dimensional Potts model,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* **2013**, P02039 (2013).
- [11] P.H. Nguyen, Y. Okamoto, and P. Derreumaux, “Simulated tempering with fast on-the-fly weight determination,” *Journal of Chemical Physics* **138**, 061102 (4 pages) (2013).

[総説、解説]

- [1] Y. Okamoto, “Generalized-ensemble algorithms for protein folding and unfolding,” *Current Physical Chemistry* **2**, 92-106 (2012).
- [2] A. Mitsutake, Y. Mori, and Y. Okamoto, “Enhanced sampling algorithms,” in *Biomolecular Simulations: Methods and Protocols*, L. Monticelli and E. Salonen (eds.) (Humana Press, New York, 2012) pp. 153-195.
- [3] H. Okumura, S.G. Itoh, and Y. Okamoto, “Generalized-ensemble algorithms for simulations of complex molecular systems,” in *Practical Aspects of Computational Chemistry II: An Overview of the Last Two*

Decades and Current Trends, J. Leszczynski and M.K. Shukla (eds.) (Springer, Dordrecht, 2012) pp. 69-101.

- [4] 榮慶丈, 依田隆夫, 杉田有治, 岡本祐幸, 「タンパク質系分子シミュレーションのための力場関数」, *日本物理学会誌* **67** 巻, 343-349 (2012).
- [5] Y. Okamoto, “Molecular simulations in generalized ensemble,” *Molecular Simulation* **38**, 1282-1296 (2012).
- [6] Y. Sugita, N. Miyashita, P.-C. Li, T. Yoda, and Y. Okamoto, “Recent applications of replica-exchange molecular dynamics simulations of biomolecules,” *Current Physical Chemistry* **2**, 401-412 (2012).

[学会発表]

・招待講演(国内会議)

- [1] 岡本祐幸, 「Study on protein force fields, folding, and unfolding by generalized-ensemble algorithms」, 第12回日本蛋白質科学会年会, 2012年6月, 名古屋市.
- [2] 岡本祐幸, 「スーパーコンピューターでタンパク質の形と働きを探る」, 日本生物物理学会 公開講座, 2012年9月, 名古屋市.
- [3] 岡本祐幸, 「拡張アンサンブルシミュレーションによるバイオ単分子研究」, 2012年度第1回バイオ単分子研究会, 2012年10月, 宮城県大崎市.
- [4] 岡本祐幸, 「スピン系および分子系の拡張アンサンブルシミュレーション」, 物性研共同利用・CCMS・元素戦略合同研究会「計算物性物理学の新展開」, 2013年1月, 柏市.
- [5] 岡本祐幸, 「Generalized-ensemble algorithms for biomolecular simulations」, 理研計算科学研究機構 第4回共通基盤研究に係るワークショップ, 2013年3月, 神戸市.

・招待講演(国際会議)

- [1] Y. Okamoto, “Computational biophysics by generalized-ensemble algorithms,” The 17th Biophysics Conference, May, 2012, Taipei, Taiwan.
- [2] Y. Okamoto, “Molecular simulations in generalized ensemble,” Professor N. Quirke 60th Birthday Symposium, July, 2012, London, England.
- [3] Y. Okamoto, “Generalized-ensemble simulations in materials and biological sciences,” [Plenary Talk] The 5th Japan-Russia International Workshop on Molecular Simulation Studies in Material and Biological Sciences (MSSMBS'12), September, 2012, Dubna-Moscow, Russia.
- [4] Y. Okamoto, “Generalized-ensemble algorithms for simulations of bionanomaterials,” The 1st International Conference on Emerging Advanced Nanomaterials (ICEAN 2012), October, 2012, Brisbane, Australia.
- [5] Y. Okamoto, “Generalized-ensemble algorithms for classical and quantum simulations,” International Workshop on Recent Advances in Computational and Theoretical Chemistry, November, 2012, Nagoya, Japan.
- [6] Y. Okamoto, “Structural fluctuations of proteins in folding, unfolding, and ligand docking studied by generalized-ensemble simulations,” The 6th International Symposium on Molecular Science of Fluctuations toward Biological Functions, December, 2012, Kyoto, Japan.
- [7] Y. Okamoto, “Replica-exchange, simulated tempering, and multicanonical algorithms for simulations of complex systems,” The 5th Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences - Experiments and Simulations, February, 2013, High 1 Resort, Korea.
- [8] Y. Okamoto, “Multidimensional generalized-ensemble simulations of biological systems,” International Symposium on Protein Folding and Its Biological Significance, March, 2013, Okazaki, Japan.

・口頭発表(国内会議で査読のあるもの)

・口頭発表(国際会議で査読のあるもの)

[プレスリリース／取材対応]

[著作物]

[特許等の知的財産取得に関する案件]

[受賞等]

部会名: 第3部会: 分子機能と物質変換

課題名: ポリモルフから生起する分子集団機能

課題代表者: 松林 伸幸

所属: 京都大学 化学研究所

[論文]

- 1 Y. Yasaka, M. L. Klein, M. Nakahara, and N. Matubayasi, Rotational dynamics of benzene and water in an ionic liquid explored via molecular dynamics simulations and NMR T_1 measurements, *J. Chem. Phys.*, **136**, 074508 (12 pages) (2012).
- 2 P.-L. Chau, K. M. Tu, K. K. Liang, I. T. Todorov, S. J. Roser, R. Barker, and N. Matubayasi, The effect of pressure on halothane binding to hydrated DMPC bilayers, *Mol. Phys.*, **110**, 1461–1467 (2012).
- 3 M. Takeuchi, N. Matubayasi, Y. Kameda, B. Minofar, S. Ishiguro, and Y. Umebayashi, Free-Energy and Structural Analysis of Ion Solvation and Contact Ion-Pair Formation of Li^+ with BF_4^- and PF_6^- in Water and Carbonate Solvents, *J. Phys. Chem. B* **116**, 6476–6487 (2012).
- 4 H. Takahashi, A. Omi, A. Morita, and N. Matubayasi, Simple and exact approach to the electronic polarization effect on the solvation free energy: Formulation for quantum-mechanical/molecular-mechanical system and its applications to aqueous solutions, *J. Chem. Phys.*, **136**, 214503 (12 pages) (2012).
- 5 K. M. Tu, N. Matubayasi, K. K. Liang, I. T. Todorov, S. L. Chan, and P.-L. Chau, A possible molecular mechanism for the pressure reversal of general anaesthetics: aggregation of halothane in POPC bilayers at high pressure, *Chem. Phys. Lett.*, **543**, 148–154 (2012).
- 6 M. Shintani, Y. Matsuo, S. Sakuraba, and N. Matubayasi, Interaction of naphthalene derivatives with lipid in membrane studied by ^1H -nuclear Overhauser effect and molecular dynamics simulation, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **14**, 14049–14060 (2012).
- 7 T. Yoshidome, Y. Ito, N. Matubayasi, M. Ikeguchi, and M. Kinoshita, Structural characteristics of yeast F_1 -ATPase before and after 16-degree rotation of the γ subunit: Theoretical analysis focused on the water-entropy effect, *J. Chem. Phys.*, **137**, 035102 (8 pages) (2012).
- 8 H. Kimura, M. Nakahara, and N. Matubayasi, Nuncatalytic Hydrothermal Elimination of the Terminal D-Glucose Unit from Malto- and Cello-Oligosaccharides through Transformation to D-Fructose, *J. Phys. Chem. A* **116**, 10039–10049 (2012).
- 9 H. Kimura, Y. Yasaka, M. Nakahara, and N. Matubayasi, Nuclear magnetic resonance study on rotational dynamics of water and benzene in a series of ionic liquids: Anion and cation effects, *J. Chem. Phys.*, **137**, 194503 (10 pages) (2012).
- 10 K. Yoshida, N. Matubayasi, Y. Uosaki, and M. Nakahara, Density effect on infrared spectrum for supercritical water in the low- and medium-density region studied by molecular dynamics simulation, *J. Chem. Phys.*, **137**, 194506 (10 pages) (2012).
- 11 K. Takemura, H. Guo, S. Sakuraba, N. Matubayasi, and A. Kitao, Evaluation of protein-protein docking model structures using all-atom molecular dynamics simulations combined with the solution theory in the energy representation, *J. Chem. Phys.*, **137**, 215105 (10 pages) (2012).
- 12 Y. Kubota, A. Yoshimori, N. Matubayasi, M. Suzuki, and R. Akiyama, Molecular dynamics study of fast dielectric relaxation of water around a molecular-sized ion, *J. Chem. Phys.*, **137**, 224502 (4 pages) (2012).

- 13 T. Kawakami, I. Shigemoto, and N. Matubayasi, Free-energy analysis of water affinity in polymer studied by atomistic molecular simulation combined with the theory of solutions in the energy representation, *J. Chem. Phys.*, **137**, 234903 (9 pages) (2012).
- 14 Y. Kameda, H. Deguchi, Y. Kubota, H. Furukawa, Y. Yagi, Y. Imai, M. Tatsumi, N. Yamazaki, N. Watari, T. Hirata, N. Matubayasi, High-Energy X-ray Diffraction Study on the Intramolecular Structure of 2-Aminoethanol in the Liquid State, *Bull. Chem. Soc. Japan* **86**, 99–103 (2013).
- 15 K. Takemura, R. R. Burri, T. Ishikawa, T. Ishikura, S. Sakuraba, N. Matubayasi, K. Kuwata, and A. Kitao, Free-energy analysis of lysozyme–triNAG binding modes with all-atom molecular dynamics simulation combined with the solution theory in the energy representation, *Chem. Phys. Lett.*, **559**, 94–98 (2013).
- 16 T. Ishikawa, R. R. Burri, Y. O. Kamatari, S. Sakuraba, N. Matubayasi, A. Kitao, and K. Kuwata, A theoretical study of the two binding modes between lysozyme and tri-NAG with an explicit solvent model based on the fragment molecular orbital method, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **15**, 3646–3654 (2013).
- 17 Y. Karino and N. Matubayasi, Interaction-component analysis of the urea effect on amino acid analogs, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **15**, 4377–4391 (2013).
- 18 H. Kimura, M. Nakahara, and N. Matubayasi, Solvent Effect on Pathways and Mechanisms for D-Fructose Conversion to 5-Hydroxymethyl-2-furaldehyde: In Situ ¹³C NMR Study, *J. Phys. Chem. A* **117**, 2102–2113 (2013).
- 19 Y. Ito, T. Yoshidome, N. Matubayasi, M. Kinoshita, and M. Ikeguchi, Molecular Dynamics Simulations of Yeast F₁-ATPase before and after 16° Rotation of the γ Subunit, *J. Phys. Chem. B* **117**, 3298–3307 (2013).
- 20 K. Yoshida, N. Matubayasi, Y. Uosaki, and M. Nakahara, Effect of heavy hydrogen isotopes on the vibrational line shape for supercritical water through rotational couplings, *J. Chem. Phys.*, **138**, in press (12 pages) (2013).
- 21 W. Shinoda, R. DeVane, M. L. Klein, Computer Simulation Studies of Self-Assembling Macromolecules, *Curr. Opin. Struct. Biol.* **22**, 175 (2012).
- 22 T. Nakamura and W. Shinoda, Method of evaluating curvature-dependent elastic parameters for small unilamellar vesicles using molecular dynamics trajectory, *J. Chem. Phys.*, **138**, in press (2013).
- 23 K. Fujimoto, N. Yoshii, and S. Okazaki, Free energy profiles for penetration of methane and water molecules into spherical sodium dodecyl sulfate micelles obtained using the thermodynamic integration method combined with molecular dynamics calculations, *J. Chem. Phys.* **136**, 014511 (9pages), (2012).
- 24 K. Fujimoto, N. Yoshii, and S. Okazaki, Molecular dynamics study of free energy of transfer of alcohol and amine from water phase to the micelle by thermodynamic integration method, *J. Chem. Phys.* **137**, 094902 (6pages) (2012).
- 25 K. Fujimoto, N. Yoshii, and S. Okazaki, Enthalpy and entropy of transfer of alkanes from water phase to the micelle core, *Molecular Simulation*, **38**, 342-345 (2012).
- 26 Noriyuki Yoshii, Tomomi Emoto, Emiko Okamura, Lateral diffusion of lipids separated from rotational and translational diffusion of a fluid large unilamellar vesicle, *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces* **106**, 22–27 (2013).
- 27 H. Noguchi, Structure formation in binary mixtures of surfactants: vesicle opening-up to bicelles and octopus-like micelles, *Soft Matter* **8**, 8926-8935 (2012).
- 28 H. Noguchi, Structure formation in binary mixtures of lipids and detergents: Self-assembly and vesicle division, *J. Chem. Phys.*, **138**, 024907 (9 pages) (2013).

- 29 Takahiro Murashima, Masatoshi Toda, Toshihiro Kawakatsu, Multiscale simulation for soft matter: Application to wormlike micellar solution. *AIP Conference Proceedings*, 1518 (2013).
- 30 Takahiro Murashima, Masatoshi Toda, Toshihiro Kawakatsu, Multiscale Fluid Dynamics Simulation Applied to Micellar Solution. *NIC Series*, 46 (2013).
- 31 Masatoshi Toda and Toshihiro Kawakatsu, Structure and rheology of wormlike micellar systems, *AIP Conf. Proc.*, 1518 (2013).

[総説、解説]

1. 篠田 渉、脂質膜の粗視化分子シミュレーション、*Colloid & Interface Communication*, 12(2) 55-61 (2013).
2. 野口 博司、脂質膜の構造形成の粗視化シミュレーション、*生物物理* 53(1), 11-14 (2013).

[学会発表]

・招待講演(国内会議)

1. 松林 伸幸、拡張型の溶媒和概念に基づく均一・不均一溶液系の自由エネルギー解析, 第 72 回分析化学討論会, 5 月 19-20 日、鹿児島
2. 松林 伸幸、浴本 亨、狩野 康人、櫻庭 俊, ATP 系およびタンパク質系に対する水和効果の全原子自由エネルギー解析, 新学術領域「揺らぎと生体機能」「水和と ATP」合同公開シンポジウム「ゆらぎと水-生命のエネルギーと機能の分子機構を探る」, 9 月 14-15 日、大阪
3. 松林 伸幸、拡張型の溶媒和概念に基づくソフト分子集団の自由エネルギー解析, 第 2 回 CSJ 化学フェスタ 2012, 10 月 15 日、東京
4. 篠田 渉、オープンソースコードの利用によるリポソームの粗視化分子シミュレーション、第 17 回高分子計算機科学講座、6 月 21 日、東京
5. 篠田 渉、階層的分子シミュレーションによる脂質膜・ベシクルの研究, 第 16 回ペプチドフォーラム, 12 月 21 日、宇治
6. 茂本 勇、川上 智教、松林 伸幸、分子シミュレーションによる高分子機能膜設計の展望, HPCI「グランドチャレンジ・アプリケーションの研究開発」公開シンポジウム, 3 月 11 日、東京.
7. Noriyuki Yoshii, Large scale molecular dynamics calculations of assembly of amphiphilic molecules, 日本化学会第 93 春季年会, 滋賀
8. 野口博司, 生体膜の織り成す多様な形態, 第 7 回学融合ビジュアルライザーションシンポジウム, 7 月 19 日、東京
9. 野口博司, せん断流、細管流中の赤血球、脂質ベシクルの運動, 第 17 回関西大学先端科学技術シンポジウム, 1 月 30 日、大阪

・招待講演(国際会議)

1. Nobuyuki Matubayasi, Extended Concept of Solvation toward Unified Understandings of Molecular Binding in Weakly Ordered Systems, JST International Symposium on Multi-scale Simulation of Condensed-phase Reacting Systems, 5 月 10-12 日、名古屋
2. Nobuyuki Matubayasi, Effects of water and cosolvents on functional molecules in solution, EMLG/JMLG Annual Meeting 2012 "Molecular association in fluid phases and at fluid interfaces, 9 月 5-9 日, Eger, Hungary

添付資料 4

3. Nobuyuki Matubayasi, Free-energy analysis of water and cosolvent effects on biomolecules in the energetic perspective, Mini-Symposium on Modeling, Simulation and Function of Biomolecular Assemblies, 11 月 9 日、東京
4. Nobuyuki Matubayasi, Free-energy analysis of water and cosolvent effects on functional molecules in solution, RCAS Thursday Seminar, 12 月 13 日、台北、台湾
5. W. Shinoda, Coarse Grained Molecular Simulations of Lipid Self-Assembly, ICERM: Bridging Scales in Computational Polymer Chemistry, 8 月 7 日、Providence, RI, USA.
6. W. Shinoda, Coarse-Grained Molecular Simulation of Lipid Self-Assembly, American Physical Society March Meeting 2013, 3 月 19 日、Baltimore, USA.
7. H. Noguchi, Bicelle formation of binary mixtures of surfactants, KITPC workshop “Membrane Biophysics | Theory and Experiment”, 5 月 11 日 KITPC, 北京, 中国
8. H. Noguchi, Coarse-grained membrane simulations for nano- to micro-meter scale, KITPC workshop “Membrane Biophysics | Theory and Experiment”, 5 月 16 日 KITPC, 北京, 中国
9. H. Noguchi, Dynamics of red blood cells and fluid vesicles in flows, Softflow 2012 - Biological Complex Fluids, 7 月 2 日, Cargese, フランス

・口頭発表(国内会議で査読のあるもの)

1. 戸田昌利, 川勝年洋, 剪断流動下における紐状ミセルの粘弾性, 日本物理学会 2012 年秋季大会, 9 月 18-21 日, 横浜
2. 野口博司, バイセル及び蝟状ミセル形成のダイナミクス, 日日本物理学会 2012 年秋季大会, 9 月 18-21 日, 横浜
3. 野口博司, 界面活性剤の構造形成の粗視化シミュレーション, 東大物性研計算物質科学研究センター (CCMS) 第 2 回シンポジウム, 10 月 22 日, 東京
4. 野口博司, 生体膜の分岐構造の形成エネルギー, 日本物理学会第 68 回年次大会, 3 月 28 日, 広島

・口頭発表(国際会議で査読のあるもの)

1. H. Noguchi, Structure formation in surfactant mixtures: membrane self-assembly, bicelle formation, and detergent-adsorption-induced vesicle division, 2nd Tokyo U - Korea U Joint Workshop on Biological & Soft-matter Physics, 3 月 2 日, ソウル, 韓国

[プレスリリース/取材対応]

[著作物]

[特許等の知的財産取得に関する案件]

[受賞等]

部会名: 第3部会

課題名: ナノ・生態系の反応制御と化学反応ダイナミクス

課題代表者: 中井 浩巳

所属: 早稲田大学

[論文]

・論文

1. M. Kunimoto, K. Seki, H. Nakai, T. Homma, "Theoretical analysis of adsorption structure of hydrated hypophosphite ion on Pd (111) surface", *Electrochemistry*, **80** (4), 222–225 (2012)
2. M. Tarumi, M. Kobayashi, H. Nakai, "Accelerating convergence in the antisymmetric product of strongly orthogonal geminals method", *Int. J. Quantum Chem.*, **113** (3), 239–244 (2013).
3. Y. Imamura, R. Kobayashi, H. Nakai, "Linearity condition for orbital energies in density functional theory (IV): determination of range-determining parameter", *Int. J. Quantum Chem.*, **113** (3), 245–251 (2013).
4. T. Yoshikawa, M. Kobayashi, H. Nakai, "Divide-and-conquer-based symmetry adapted cluster method: synergistic effect of subsystem fragmentation and configuration selection", *Int. J. Quantum Chem.*, **113** (3), 218–223 (2013).
5. Y. Ikabata, T. Sato, H. Nakai, "Self-consistent field treatment and analytical energy gradient of local response dispersion method", *Int. J. Quantum Chem.*, **113** (3), 257–262 (2013).
6. H. Nishizawa, Y. Imamura, Y. Ikabata, H. Nakai, "Development of the explicitly correlated Gaussian-nuclear orbital plus molecular orbital theory: incorporation of electron-electron correlation", *Chem. Phys. Lett.*, **533**, 100–105 (2012).
7. P. Sarpapakorn, M. Kobayashi, S. Hannongbua, H. Nakai, "Divide-and-conquer based quantum chemical study for interaction between HIV-1 reverse transcriptase and MK-4965 inhibitor", *Int. J. Quantum Chem.*, **113** (4), 510–517 (2013).
8. M. Tamai, K. Kawahara, H. Tachibana, Y. Imamura, H. Nakai, K. Kuroda, "Direct alkoxylation of alkoxy silanes for the synthesis of explicit alkoxy siloxane oligomers", R. Wakabayashi, *J. Organometallic Chem.*, **716**, 26–31 (2012).
9. J. Seino, H. Nakai, "Local unitary transformation method for large-scale two-component relativistic calculations: case for a one-electron Dirac Hamiltonian", *J. Chem. Phys.*, **136** (24), 244102 (13 pages) (2012).
10. P. Sarpapakorn, M. Kobayashi, H. Nakai, "Divide-and-conquer electronic-structure study on the mechanism of the West Nile Virus NS3 protease inhibitor", *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **86** (1), 67–74 (2013).
11. Y. Ikabata, H. Nakai, "Extension of local response dispersion method to excited state calculation based on time-dependent density functional theory", *J. Chem. Phys.*, **137** (12), 124106 (9 pages) (2012). (**Top 20 Most Downloaded Articles—October & November 2012; Research Highlight**)
12. J. Seino, H. Nakai, "Local unitary transformation method for large-scale two-component relativistic calculations. II. Extension to two-electron Coulomb Interaction", *J. Chem. Phys.*, **137** (14), 144101 (15 pages) (2012).
13. M. Kunimoto, K. Endo, H. Nakai, T. Homma, "Acceleration effect of thiourea on the oxidation reaction of hypophosphite ion on Ni surface", *Electrochimica Acta*, *in press* (2013).
14. M. Tarumi, M. Kobayashi, H. Nakai, "Generalized Møller–Plesset multiconfiguration perturbation theory applied to open-shell antisymmetric product of strongly orthogonal geminals reference wavefunction", *J. Chem. Theory Comput.*, **8** (11), 4330–4335 (2012).
15. S. Ishigami, Y. Goto, N. Inoue, S. Kawazu, Y. Matsumoto, Y. Imahara, M. Tarumi, H. Nakai, N. Fusetani, Y. Nakao, "Cristaxenicin A, an antiprotozoan xenicane diterpenoid from the deep sea gorgonian *Acanthoprimnoa cristata*", *J. Org. Chem.*, **77** (23), 10962–10966 (2012).
16. Y. Ikabata, H. Nakai, "Assessment of local response dispersion method for open-shell systems", *Chem.*

Phys. Lett., **556**, 386–392 (2013).

17. M. Kobayashi, H. Nakai, “An analytical energy gradient method for divide-and-conquer second-order Møller–Plesset perturbation theory”, *J. Chem. Phys.*, **138** (4), 044102 (11 pages) (2013).
18. Y. Imamura, R. Kobayashi, H. Nakai, “Linearity condition for orbital energies in density functional theory (III): Benchmark of total energies”, *J. Comput. Chem.*, *in press* (2013).

・査読付きプロシーディング

1. M. Kobayashi, P. Sarpapakorn, H. Nakai, “Development of divide-and-conquer quantum chemical code for biomolecules and nano materials”, *Proceedings of ‘31st Annual Conference of Japan Society for Simulation Technology (JSST 2012)’* (Kobe, Japan, 27-28 September, 2012), 330–333 (2012).
2. H. Nakai, K. Yoshizawa, K. Ando, T. Nakajima, E.J. Brandas, “Special Issue: Seventh Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics”, *Int. J. Quant. Chem. (Preface)*, **113** (3), 171–172 (2013). (the Special Issue for the 7th Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics)

[総説、解説]

1. M. Kobayashi, H. Nakai, “How does it become possible to treat delocalized and/or open-shell systems in fragmentation-based linear-scaling electronic structure calculation: the case of divide-and-conquer method”, *Phys. Chem. Chem. Phys. (Perspective)*, **14** (21), 7545–7876 (2012).
2. H. Nakai, “化学原理の発見：縮重系励起の対称則”, *J. Comput. Chem. Jpn.*, **11** (1), 1–12 (2012). (Special Issue of the 10th Anniversary 2)
3. Y. Imamura, H. Nakai, “Description of core ionized and excited states by density functional theory and time-dependent density functional theory”, pp. 275–308 in *‘Quantum Systems in Chemistry and Physics: Progress in Methods and Applications’ Progress in Theoretical Chemistry and Physics*, **B 26**, K. Nishikawa, J. Maruani, E. J. Brändas, G. Delgado-Barrio, P. Piecuch, (Eds.) (Springer, 2012).

[学会発表]

・招待講演(国内会議)

1. 小林正人, “大規模系の量子化学計算: 化学理論と計算機の発展が開いた世界とその近未来”, 第26期 CAMM フォーラム (コンピュータによる材料開発・物質設計を考える会) 第2回例会, 2012年11月9日, 東京.

・招待講演(国際会議)

1. H. Nakai, “Linear-scaling divide-and-conquer calculations for nonlocal excited states of large systems”, *17th Quantum Systems in Chemistry and Physics (QSCP-XVII)*, (Turku, Finland), August 19-25, 2012.
2. H. Nakai, “Symmetry rules for electronic excitations between degenerate orbitals in high-symmetry systems”, *XXI International Symposium on The Jahn-Teller Effect: Physics and Chemistry of Symmetry Breaking (JT-XXI)*, (Tsukuba, Japan), August 26-31, 2012.
3. M. Kobayashi, “Quantum chemical calculations of large delocalized molecules with the divide-and-conquer method”, *Asian International Symposium in the 93rd Annual Meeting of the Chemical Society of Japan*, (Kusatsu, Japan), March 24, 2013.
4. H. Nakai, “Expansion and deepening of quantum chemical methods toward real science”, *17th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE17)*, Khon Kaen University (Khon Kaen, Thailand), March 27-29, 2013. (**Keynote**)

・口頭発表(国内会議で査読のあるもの)

1. 小林正人, 中井浩巳, “GAMESS に実装された分割統治(DC)量子化学計算法のハイブリッド並列化”, 第6回分子科学討論会, 2012年9月, 東京
2. 西澤宏晃, 中井浩巳, Stephan Irlle, “大規模分子動力学計算を目指した DC-DFTB 理論の開発”, 第

6回分子化学討論会, 2012年9月, 東京

・口頭発表(国際会議で査読のあるもの)

1. M. Kobayashi, P. Saparpakorn, H. Nakai, “Development of divide-and-conquer quantum chemical code for biomolecules and nano materials”, *JSST 2012 International Conference on Simulation Technology*, (Kobe, Japan), September 27-28, 2012.

[プレスリリース/取材対応]

[著作物]

[特許等の知的財産取得に関する案件]

[受賞等]

部会名: 第三部会

課題名: 機能性分子設計—光機能分子と非線形外場応答分子の光物性

課題代表者: 江原正博、中野雅由、太田浩二、藪下聡、小関史朗

所属: 分子研、大阪大、産総研、慶應大、大阪府大

[論文]

1. R. Fukuda, M. Ehara, Electronic Excitations of C₆₀ Fullerene Calculated Using the Ab Initio Cluster Expansion Method, *J. Chem. Phys.* 137, 134304-1-7 (2012).
2. R. Fukuda, R. Chidthong, R. Cammi, M. Ehara, Optical Absorption and Fluorescence of PRODAN in Solution : Quantum Chemical Study Based on the SAC-CI method, *Chem. Phys. Lett.* 552, 53-57 (2012).
3. D. Shimada, R. Kusaka, Y. Inokuchi, M. Ehara, T. Ebata, Nonradiative Decay Dynamics of Methyl 4-Hydroxycinnamate and Its Hydrated Complex Revealed by Picosecond Pump-Probe Spectroscopy, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 14, 8999-9005 (2012).
4. S.K. Padhi, R. Fukuda, M. Ehara, K. Tanaka, Photo-isomerization and Proton-coupled Electron Transfer (PCET) Promoted Water Oxidation by Mononuclear Cyclometalated Ruthenium Catalysts, *Inorg. Chem.* 51, 5386-5392 (2012).
5. S.K. Padhi, R. Fukuda, M. Ehara, K. Tanaka, A Comparative Study of C^N and N^C Type Cyclometalated Ruthenium Complexes with an NAD⁺/NADH Function, *Inorg. Chem.* 51, 8091-8102 (2012).
6. Y. Morisawa, S. Tachibana, M. Ehara, Y. Ozaki, Elucidating Electronic Transitions from σ Orbitals of Liquid *n*- and Branched Alkanes by Far-ultraviolet Spectroscopy and Quantum Chemical Calculations, *J. Phys. Chem. A* 116, 11957-11964 (2012).
7. S. Namuangruk, R. Fukuda, M. Ehara, J. Meeprasert, T. Khanasa, S. Morada, T. Kaewin, S. Jungsuttiwong, T. Sudyoadsuk, V. Promarak, D-D- π -A Type Organic Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells with a Potential of Direct Electron Injection and High Extinction Coefficient: Synthesis, Characterization, and Theoretical Investigation, *J. Phys. Chem. C* 116, 25653-25663 (2012).
8. R. Fukuda and M. Ehara, Mechanism for Solvatochromic Shifts of Free Base Porphyrine Studied with Polarizable Continuum Models and Explicit Solute-Solvent Interactions, *J. Chem. Theo. Comp.* 9, 470-480 (2013).
9. S. Karanjit, K. Bobuatong, R. Fukuda, M. Ehara, H. Sakurai, Mechanism of Aerobic Oxidation of Methanol to Formic Acid on Au₈⁻: A DFT Study, *Int. J. Quantum Chem.* 113, 428-436 (2013).
10. M. Promkatkaew, S. Suramitr, T. Karpkird, M. Ehara, S. Hannongbua, Absorption and Emission Properties of Various Substituted Cinnamic Acids and Cinnamates, Based on TDDFT Investigation, *Int. J. Quantum Chem.* 113, 542-554 (2013).
11. Ryohei Kishi*, Hiroaki Fujii, Shingo Kishimoto, Yusuke Murata, Soichi Ito, Katsuki Okuno, Yasuteru Shigeta, and Masayoshi Nakano*, Development of Calculation and Analysis Methods for the Dynamic First Hyperpolarizability Based on the Ab Initio Molecular Orbital – Quantum Master Equation Method, *J. Phys. Chem. A*, 116, 4371–4380 (2012).
12. Katsuki Okuno, Yasuteru Shigeta, Ryohei Kishi, Hiroshi Miyasaka, Masayoshi Nakano, Tuned CAM-B3LYP functional in the time-dependent density functional theory scheme for excitation energies and properties of diarylethene derivatives, *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 235, 29–34 (2012).

13. Hitoshi Fukui*, Yudai Inoue, Taishi Yamada, Soichi Ito, Yasuteru Shigeta, Ryohei Kishi, Benoît Champagne, and Masayoshi Nakano*, Enhancement of the Third-Order Nonlinear Optical Properties in Open-Shell Singlet Transition-Metal Dinuclear Systems: Effects of the Group, of the Period, and of the Charge of the Metal Atom, *J. Phys. Chem. A*, 116, 5501–5509 (2012).
14. Kyohei Yoneda, Masayoshi Nakano*, Yudai Inoue, Tomoya Inui, Kotaro Fukuda, and Yasuteru Shigeta, Takashi Kubo, Benoît Champagne, Impact of Antidot Structure on the Multiradical Characters, Aromaticities, and Third-Order Nonlinear Optical Properties of Hexagonal Graphene Nanoflakes, *J. Phys. Chem. C*, 116, 17787–17795 (2012).
15. Soichi Ito, Takuya Minami, and Masayoshi Nakano*, Diradical Character Based Design for Singlet Fission of Condensed-Ring Systems with $4n\pi$ Electrons, *J. Phys. Chem. C*, 116, 19729–19736 (2012).
16. Takuya Minami*, Soichi Ito, and Masayoshi Nakano*, Theoretical Study of Singlet Fission in Oligorylenes, *J. Phys. Chem. Lett.*, 3, 2719–2723 (2012).
17. Kyohei Yoneda, Masayoshi Nakano*, Kotaro Fukuda, and Benoît Champagne, The Odd Electron Density Is the Guide toward Achieving Organic Molecules with Gigantic Third-Order Nonlinear Optical Responses, *J. Phys. Chem. Lett.*, 3, 3338–3342 (2012).
18. Masayoshi Nakano*, Kyohei Yoneda, Ryohei Kishi, Hideaki Takahashi, Takashi Kubo, Kenji Kamada, Koji Ohta, Benoît Champagne, and Edith Botek, One- and Two-Photon Absorptions in Open-Shell Singlet Systems, *AIP Conf. Proc.*, 1504, 136-142 (2012).
19. Masayoshi Nakano*, Kyohei Yoneda, Hiroshi Nagai, Takashi Kubo, Kenji Kamada, Koji Ohta, Benoît Champagne, and Edith Botek, Spin Polarization and Third-Order Nonlinear Optical Properties of Open-Shell Singlet Graphene Nanoflakes, *AIP Conf. Proc.*, 1504, 392-398 (2012).
20. Akihiro Shimizu, Yasukazu Hirao, Takashi Kubo*, Masayoshi Nakano, Edith Botek, Benoît Champagne, Theoretical Consideration of Singlet Open-Shell Character of Polyperiacenes Using Clar's Aromatic Sextet Valence Bond Model and Quantum Chemical Calculations, *AIP Conf. Proc.*, 1504, 399-405 (2012).
21. Ryohei Kishi*, Sean Bonness, Kyohei Yoneda, Takashi Kubo, Kenji Kamada, Koji Ohta, Benoît Champagne, Edith Botek, Takao Tsuneda and Masayoshi Nakano*, Long-Range-Corrected UDFT Study on Second Hyperpolarizabilities of Open-Shell Singlet Systems, *AIP Conf. Proc.*, 1504, 651-654 (2012).
22. Takuya Minami, Kyohei Yoneda, Ryohei Kishi, Masayoshi Nakano*, Oscillatory and Rotatory Exciton Recurrence Motions in Double-Ring Molecular Aggregates Controlled by Two- Mode Circular-Polarized Laser Field, *AIP Conf. Proc.*, 1504, 691-694 (2012).
23. Benoît Champagne, Edith Botek, Akihiro Shimizu, Takashi Kubo*, Kenji Kamada, Koji Ohta*, Ryohei Kishi, Hitoshi Fukui, Hideaki Takahashi, and Masayoshi Nakano*, Theoretical Aspects on the Evaluation and Interpretation of the Third-Order Nonlinear Optical Properties of Diradical Compounds, *AIP Conf. Proc.*, 1504, 844-847 (2012).
24. Hitoshi Fukui, Kyohei Yoneda, Edith Botek, Benoît Champagne, and Masayoshi Nakano*, Second Hyperpolarizabilities of Singlet Diradical Compounds and their Radical Ions, *AIP Conf. Proc.*, 1504, 852-855 (2012).
25. Ryohei Kishi*, Takuya Minami, Kyohei Yoneda, and Masayoshi Nakano*, Broken-Symmetry MO-CI Quantum Master Equation Approach to Exciton Dynamics in Open-Shell Singlet Systems, *AIP Conf. Proc.*, 1504, 875-878 (2012).
26. Takashi Kubo*, Mitsuya Aoba, Akihiro Shimizu, Yasukazu Hirao, Kozo Matsumoto, Hiroyuki Kurata, Masayoshi Nakano, Singlet Open-Shell Character of Conjugated Kekulé Molecules, *AIP Conf. Proc.*, 1504,

883-886 (2012).

27. Hideaki Takahashi*, Kazuki Kubota, Hitoshi Fukui, Sean Bonness, Kyohei Yoneda, Ryohei Kishi, Takashi Kubo*, Kenji Kamada, Koji Ohta, Benoît Champagne, Edith Botek, and Masayoshi Nakano*, Electron Donor Solvent Effects on the (Hyper) Polarizabilities of a Solute Presenting Singlet Diradical Character, *AIP Conf. Proc.*, 1504, 899-902 (2012).
28. Takuya Minami, Soichi Ito, Masayoshi Nakano*, Functional dependence of excitation energy for pentacene/C60 model complex in the nonempirically tuned long-range corrected density functional theory, *Int. J. Quantum Chem.*, 113, 252-256 (2013).
29. Yasuteru Shigeta*, Tomoya Inui, Takeshi Baba, Katsuki Okuno, Hiroyuki Kuwabara, Ryohei Kishi, Masayoshi Nakano, Qantal cumulant mechanics and dynamics for multidimensional quantum many-body clusters, *Int. J. Quantum Chem.*, 113, 348-355 (2013).
30. Shabbir Muhammad, Takuya Minami, Hitoshi Fukui, Kyohei Yoneda, Shu Minamide, Ryohei Kishi, Yasuteru Shigeta, Masayoshi Nakano*, Comparative study of diradical characters and third-order nonlinear optical properties of linear/cyclic acenes versus phenylenes, *Int. J. Quantum Chem.*, 113, 592–598 (2013).
31. Masayoshi Nakano*, Ryohei Kishi, Hitoshi Fukui, Takuya Minami, Kyohei Yoneda, Shu Minamide, Yudai Inoue, Taishi Yamada, Soichi Ito, Shabbir Muhammad, Yasuteru Shigeta, Takashi Kubo, Benoît Champagne, Diradicalology in third-order nonlinear optical systems: Second hyperpolarizabilities of acetylene-linked phenalenyl-based superpolyenes, *Int. J. Quantum Chem.*, 113, 585–591 (2013).
32. Kyohei Yoneda, Shu Minamide, Taishi Yamada, Soichi Ito, Takuya Minami, Ryohei Kishi, Yasuteru Shigeta, Masayoshi Nakano*, Antidot effects on the open-shell characters and second hyperpolarizabilities of rectangular graphene nanoflakes, *Int. J. Quantum Chem.*, 113, 605–611 (2013).
33. Kenji Kamada*, Shin-ichi Fuku-en, Shu Minamide, Koji Ohta, Ryohei Kishi, Masayoshi Nakano, Hiroyuki Matsuzaki, Hiroshi Okamoto, Hiroyuki Higashikawa, Katsuya Inoue, Satoshi Kojima, and Yohsuke Yamamoto*, Impact of Diradical Character on Two-Photon Absorption: Bis(acridine) Dimers Synthesized from an Allenic Precursor, *J. Am. Chem. Soc.*, 135, 232-241 (2013).
34. Shabbir Muhammad*, Kotaro Fukuda, Takuya Minami, Ryohei Kishi, Yasuteru Shigeta, Masayoshi Nakano, Interplay between the Diradical Character and Third-Order Nonlinear Optical Properties in Fullerene Systems, *Chem. Eur. J.*, 19, 1677–1685 (2013).
35. Akihito Konishi, Yasukazu Hirao, Kouzou Matsumoto, Hiroyuki Kurata, Ryohei Kishi, Yasuteru Shigeta, Masayoshi Nakano, Kazuya Tokunaga, Kenji Kamada, and Takashi Kubo*, Synthesis and Characterization of Quarteranthene: Elucidating the Characteristics of the Edge State of Graphene Nanoribbons at the Molecular Level, *J. Am. Chem. Soc.*, 135, 1430–1437 (2013).
36. Takuya Minami, Masayoshi Nakano, Quantum Master Equation Study of Electromagnetically Induced Transparency in Dipole-Coupled Dimer Models, *Quantum Systems in Chemistry and Physics*, pp 109-120, Chapter 5, in *Progress in Theoretical Chemistry and Physics*, Vol. 26, K. Nishikawa, J. Maruani, E. J. Brändas, G. Delgado-Barrio, P. Piecuch, (Eds.), Springer (2013).
37. Takuya Minami*, Soichi Ito, and Masayoshi Nakano*, Signature of Singlet Open-Shell Character on the Optically Allowed Singlet Excitation Energy and Singlet–Triplet Energy Gap, *J. Phys. Chem. A*, 117, 2000–2006 (2013).
38. Takahide Matsuoka, Sayo Oonishi and Satoshi Yabushita, “Theoretical Study on Angular Momentum Polarization Parameters, Branching Ratios, and Anisotropy Parameters of Chlorine Atoms from Photodissociation of Iodine Monochloride”, *Int. J. Quantum Chem.*, 113, 375-381 (2013).

[学会発表]

・招待講演(国内会議)

1. 江原正博, 「理論・計算科学による元素戦略」, 分子科学シンポジウム, 2012年6月9日, 東京大学
2. 江原正博, 「Au および Au/Pd クラスターによる多彩な触媒反応の反応経路」, シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア 2012」, 2012年9月22-23日, 東京大学
3. 江原正博, 「理論計算によるルミネッセンスの化学」, 日本化学会第93春季年会特別企画「64-ルミネッセンス化学アンサンブル: 多彩な発光機能の基礎と実用展開」, 2013年3月25日, 2013, 立命館大学びわこ・くさつキャンパス
4. 中野雅由, 「開殻性が拓く新規光機能分子」, 平成24年度大阪大学「物質・材料科学研究推進機構」講演会「物質科学における分野融合」, 2013年3月4日, 大阪大学豊中キャンパス 理学研究科
5. 中野雅由, 「高位電子励起状態に対する理論計算化学のアプローチ」, 日本化学会第93春季年会, 特別企画「複合励起が拓く高度光子利用分子プロセス」, 2013年3月22日, 立命館大学びわこ・くさつキャンパス
6. 藪下 聡, 「重原子分子の光吸収過程、光分解過程の理論計算」, 先端化学・材料技術部会・コンピュータケミストリ分科会・次世代 CCWG 講演会、2012年10月12日、東京

・招待講演(国際会議)

1. Masahiro Ehara, Recent Developments of SAC-CI and Its Applications to Molecular Spectroscopy, The 31st European Congress on Molecular Spectroscopy (EUCMOS), August 26-31, 2012, Romania (Plenary Talk).
2. Masahiro Ehara, Theoretical and Computational Chemistry for Photofunctional Molecules and Nanocluster Catalysis, The 3rd ENSCP-IMS joint symposium, February 12-13, 2013, Japan.
3. Ryoichi Fukuda, Electronic excited states of large conjugated molecules studied by the direct SAC-CI method, Asian International Symposium - Theoretical Chemistry, Chemoinformatics, Computational Chemistry -, March 24, 2013, Japan.
4. Masayoshi Nakano, Diradical Character View of Singlet Fission, Singlet Fission 2012 Workshop, 2012 Jun 17-20, Peaceful Valley Ranch and Conference Center, Lyons, Colorado, USA
5. Ryohei Kishi, Masayoshi Nakano, Development of ab initio molecular orbital - quantum master equation approach and its application to the second-order nonlinear optical responses of molecular systems, 17th Malaysian Chemical Congress (17MCC), 15 October 2012, Putra World Trade Centre Kuala Lumpur, Malaysia
6. Ryohei Kishi, Masayoshi Nakano, Ab initio molecular orbital - quantum master equation approach: Application to the coherent and incoherent exciton dynamics of molecular materials, Cambodian Malaysian Chemical Conference (CMCC), 20 October 2012, Angkor Century Resort & Spa, Siem Reap, Cambodia
7. Masayoshi Nakano, Open-Shell Nonlinear Optical Systems, Orange County Discussion Meeting on Electronic, Optical and Magnetic Molecular Materials: Experiments and Modeling (Sponsored by the Indian Academy of Sciences and Supported by the Indian Institute of Science, November 25-28, 2012, Bangalore and Jawaharlal Nehru Centre for Advanced Scientific Research, Bangalore), Orange County, Coorg, Karnataka, India

・口頭発表(国内会議で査読のあるもの)

1. 福田良一, 江原正博, 「ポルフィリンにおけるソルバトクロミックシフトの起源」, 第15回理論化学討論会, 2012年5月24-26日, 仙台市福祉プラザ
2. 重田育照, 馬場剛史, 奥野克樹, 乾智也, 桑原弘幸, 岸亮平, 中野雅由, キュミュラント変数による変分的自由エネルギー解析, 第15回理論化学討論会, 5月25日, 仙台市福祉プラザ

添付資料 4

3. 岸亮平, 岸本真悟, 村田裕介, 伊藤聡一, 山田大志, 重田育照, 中野雅由, 一置換および二置換ベンゼン誘導体の動的第一超分極率の *Ab initio* MO 量子マスター方程式法による時空間解析, 第 15 回理論化学討論会, 5 月 25 日, 仙台市福祉プラザ
4. 馬場剛史, 神谷克政, 松井亨, 奥野克樹, マウロボエロ, 根来誠司, 中野雅由, 重田育照, ナイロンオリゴマー分解酵素の反応機構に対するアミノ酸変異の効果, 分子科学討論会 2012 東京, 9 月 18 日, 東京大学本郷キャンパス
5. 奥野克樹, 重田育照, 岸亮平, 宮坂博, 中野 雅由, ジアリアルエテン誘導体の光異性化反応に対する理論的研究, 分子科学討論会 2012 東京, 9 月 19 日, 東京大学本郷キャンパス
6. 岸亮平, 岸本真悟, 南出秀, 村田裕介, 福田幸太郎, 米田京平, 鎌田賢司, 太田浩二, 久保孝史, 中野雅由, 多参照励起状態計算法に基づく開殻一重項多環式炭化水素の二光子吸収スペクトルの理論的研究, 分子科学討論会 2012 東京, 9 月 21 日, 東京大学本郷キャンパス
7. 山田大志, 井上雄大, 福田幸太郎, 重田育照, 中野雅由, ヘテロ二核遷移金属系のジラジカル因子と三次非線形光学物性の理論的研究, 分子科学討論会 2012 東京, 9 月 21 日, 東京大学本郷キャンパス
8. 重田育照, 桑原弘幸, 乾智也, 馬場剛史, 奥野克樹, 岸亮平, 中野 雅由, キュミュラント動力学法によるクラスター構造転移の変分的自由エネルギー解析, 分子科学討論会 2012 東京, 9 月 21 日, 東京大学本郷キャンパス
9. 南拓也, 伊藤聡一, 中野雅由, シングレットフィッションを起こす一重項開殻縮環炭化水素の理論設計, 分子科学討論会 2012 東京, 9 月 21 日, 東京大学本郷キャンパス
10. 米田京平, 福田幸太郎, 南出秀, 中野雅由, 開殻一重項グラフェンナノフレークの三次非線形光学物性に対するドナー・アクセプター置換基効果に関する理論的研究, 分子科学討論会 2012 東京, 9 月 21 日, 東京大学本郷キャンパス
11. 馬場剛史, 神谷克政, 松井亨, 西口拓紀, マウロボエロ, 根来誠司, 中野雅由, 重田育, NylB の反応機構に対するアミノ酸変異導入の効果, 創立 90 周年記念 第 64 回日本生物工学会大会, 10 月 26 日, 神戸国際会議場
12. 米田京平, 福田幸太郎, 松井啓史, 岸亮平, 重田育照, 中野雅由, グラフェン内のアンチドット構造に由来する開殻性および三次非線形光学物性に関する理論研究, 日本化学会第 93 春季年会, 3 月 22 日, 立命館大学びわこ, くさつキャンパス
13. 中村亮太, 重田育照, 奥野克樹, 岸亮平, 鈴木修一, 長谷川美貴, 中野雅由, 基底状態三重項ジラジカル分子の光吸収特性に関する理論的研究, 日本化学会第 93 春季年会, 3 月 22 日, 立命館大学びわこ, くさつキャンパス
14. 南出秀, 鎌田賢司, 太田浩二, 米田京平, 岸亮平, 重田育照, 中野雅由, WU Tsun-Cheng, WU Yao-Ting, 北林賢一, 日比大治郎, 清水章弘, 戸部義人, フェニルエチニル基を含むゼトレン誘導体の二光子吸収およびジラジカル性についての研究, 日本化学会第 93 春季年会, 3 月 22 日, 立命館大学びわこ, くさつキャンパス
15. 村田裕介, 岸本真悟, 伊藤聡一, 福田幸太郎, 岸亮平, 中野雅由, 時間依存密度汎関数法に基づく量子マスター方程式法による動的第一超分極率の理論的研究, 日本化学会第 93 春季年会, 3 月 23 日, 立命館大学びわこ, くさつキャンパス
16. 乾智也, 奥野克樹, 馬場剛史, 米田京平, 福田幸太郎, 重田育照, 中野雅由, 実空間密度汎関数法を用いた芳香族炭化水素の非線形光学応答特性の理論的研究, 日本化学会第 93 春季年会, 3 月 23 日, 立命館大学びわこ, くさつキャンパス
17. 桑原弘幸, 乾智也, 奥野克樹, 福田幸太郎, 馬場剛史, 重田育照, 中野雅由, シリコンナノドットの非線形光学特性の電荷依存性についての理論的研究, 日本化学会第 93 春季年会, 3 月 23 日, 立命館大学びわ

こ, くさつキャンパス

18. 伊藤聡一, 南拓也, 中野雅由, 一重項開殻性を有する縮環炭化水素の励起状態の多参照摂動法に基づく研究, 日本化学会第 93 春季年会, 3 月 23 日, 立命館大学びわこ, くさつキャンパス
19. 南拓也, 伊藤聡一, 中野雅由, 一重項開殻性が光学許容励起エネルギーに及ぼす効果: 理論モデル解析とポリアセンについて, 日本化学会第 93 春季年会, 3 月 23 日, 立命館大学びわこ, くさつキャンパス
20. 山田大志, 井上雄大, 重田育照, 中野雅由, Cr を含むヘテロ二核遷移金属系のジラジカル因子と三次非線形光学物性の相関についての理論研究, 日本化学会第 93 春季年会, 3 月 23 日, 立命館大学びわこ, くさつキャンパス
21. 松井啓史, 福田幸太郎, 岸亮平, 重田育照, 中野雅由, 環状チアジルジラジカル化合物における開殻性と三次非線形光学物性の理論的研究, 日本化学会第 93 春季年会, 3 月 23 日, 立命館大学びわこ, くさつキャンパス
22. 中野雅由, 非対称開殻一重項分子系の三次非線形光学効果のジラジカル因子依存性についての理論研究, 日本化学会第 93 春季年会, 3 月 23 日, 立命館大学びわこ, くさつキャンパス
23. 福田幸太郎, CHAMPAGNE Benoit, 中野雅由, 五員環及び六員環からなる一次元縮環共役炭化水素の一重項開殻性と非線形光学物性に関する理論的研究, 日本化学会第 93 春季年会, 3 月 24 日, 立命館大学びわこ, くさつキャンパス
24. 岸亮平, 岸本真悟, 南出秀, 村田裕介, 伊藤聡一, 福田幸太郎, 重田育照, 鎌田賢司, 太田浩二, 久保孝史, 中野雅由, リレン系およびアンテン系の基底および励起状態の電子構造と光学応答物性の理論的研究, 日本化学会第 93 春季年会, 3 月 23 日, 立命館大学びわこ, くさつキャンパス
25. 中條恵理華, 増田友秀, 藪下聡, 「ランタノイド-シクロオクタテトラエン錯体の電子状態に関する理論的研究」, 日本化学会第 93 春季年会, 3 月 22 日, 立命館大学くさつキャンパス
26. 山本拓磨, 藪下聡, 「Axis-Switching 効果を含めた Franck-Condon 因子の計算方法の開発と有機分子への応用」, 日本化学会第 93 春季年会, 3 月 24 日, 立命館大学くさつキャンパス
27. 松岡貴英, 藪下聡, 「ICI 分子の光解離過程における量子干渉効果」, 日本化学会第 93 春季年会, 3 月 25 日, 立命館大学くさつキャンパス

[受賞等]

- ・ 南拓也, (社)生産技術振興協会, H24 年度上半期海外論文発表奨励賞
- ・ 南拓也, 日本化学会第 92 春季年会(2012), 学生講演賞, 「ジラジカル因子に基づく一重項分裂の理論的研究」
- ・ 岸亮平, 第6回分子科学討論会(東京)2012, 分子科学会優秀講演賞「多参照励起状態計算法に基づく開殻一重項多環式炭化水素の二光子吸収スペクトルの理論的研究」
- ・ Shabbir Muhammad, Conference on Computational Physics (CCP2012), Poster Award, "Interplay between diradical characters and third-order nonlinear optical properties in fullerene systems"
- ・ Shabbir Muhammad, The 53rd Sanibel Symposium, IBM-Löwdin Awards for Postdoctoral Associates, "Interplay between Diradical Characters and Third-Order Nonlinear Optical Properties in Fullerene Systems"

HPCI 戦略プログラム 分野2 CMSI 研究課題

平成24年度 外部への成果発表

部会名: 第四部会

課題名: 燃料電池関連物質における基礎課程の大規模計算による研究

課題代表者: 杉野修

所属: 東京大学

[論文] Nicéphore Bonnet, Tetsuya Morishita, Osamu Sugino and Minoru Otani, “First-Principles Molecular Dynamics at a Constant Electrode Potential”, *Physical Review Letters*, 109 266101 (2012).

[総説、解説] なし

[学会発表]

・国内会議

- * 赤木和人、「固液界面の空間スケールと時間スケール」、応用物理学会・埋もれた界面のX線・中性子解析研究会、2012年6月、高エネルギー加速器研究機構（つくば）

・招待講演(国際会議)

- * Ikutaro Hamada, “Density functional theory study of hydrogen evolution reaction at a platinum(111)/water interface”, 11th Spring Meeting of the International Society of Electrochemistry, 2012.05, Georgetown University, Washington DC, USA
- * Osamu Sugino, “First-Principles Molecular Dynamics Simulation for Electrochemically Based Solid-Liquid Interface”, International Workshop on Solar Chemical Energy Storage, 2012.7.23-28, Sendai, Japan
- * Osamu Sugino, “Development of a First-Principles Molecular Dynamics Simulation Scheme for Electrochemically Biased Solid-Liquid Interface”, International Union of Materials Research Societies - International Conference on Electronic Materials, 2012.9.23-28, Yokohama, Japan

・口頭発表(国内会議で査読のあるもの)

・口頭発表(国際会議で査読のあるもの)

- * H. Kizaki, “NO Dissociative Adsorption on LaO (001) Surface of (La,Sr)FeO_{2.75} by *Ab-Initio* GGA Calculations”, NANO 2012 International Conference on Nanostructured Materials, August 26-31, 2012, Rhodes in Greece,

[プレスリリース/取材対応] なし

[著作物] なし

[特許等の知的財産取得に関する案件] なし

[受賞等] なし

部会名: 第4部会

課題名: 水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性

課題代表者: 田中秀樹

所属: 岡山大学大学院自然科学研究科

[論文]

M. Matsumoto and H. Tanaka, Metastable Polymorphs of Clathrate Hydrates. *J. Phys. Soc. Jpn.* **81** SA005 (2012).

L. Hakim, M. Matsumoto, K. Koga, and H. Tanaka, Inclusion of Neon Inside Ice Ic and its Influence to the Ice Structure. *J. Phys. Soc. Jpn.* **81** SA018 (2012).

K. Himoto, M. Matsumoto, and H. Tanaka, Rotational Dynamics of Plastic Ice. *J. Phys. Soc. Jpn.* **81** SA023 (2012).

Y. Yamakawa, M. Matsumoto, and H. Tanaka, Structure and Dynamics of Aqueous Solutions of Electrolytes in Confined Space. *J. Phys. Soc. Jpn.* **81** SA025 (2012).

M. Matsuo, M. Matsumoto, and H. Tanaka, On the Occupancy of Carbon Dioxide Clathrate Hydrates: Grandcanonical Monte Carlo Simulations. *J. Phys. Soc. Jpn.* **81** SA027(2012).

F. Ishii, K. Terada, and S. Miura, First-principles study of spontaneous polarization and water dipole moment in ferroelectric ice XI, *Mol. Sim.* **38**, 369 (2012).

S. Miura, A variational path integral molecular dynamics method applied to molecular vibrational fluctuations, *Mol. Sim.* **38**, 378 (2012).

S. Miura, Molecular dynamics and hybrid Monte Carlo algorithms for the variational path integral with a fourth order propagator”, in: S. Tanaka, S. Rothstein, W. Lester (Eds.), *Advances in Quantum Monte Carlo*, the ACS Symposium Series **1094**, 177 (American Chemical Society, Washington, DC, 2012).

S. Miura, Variational path integral molecular dynamics study of small para-hydrogen clusters, in: K. Nishikawa, J. Marauni, E. J. Brandas, G. Delgado-Barrio, and P. Piecuch (Eds.), *Quantum Systems in Chemistry and Physics*, Progress in Theoretical Chemistry and Physics **26**, 427 (Springer, Dordrecht 2012).

S. Miura, Variational path integral molecular dynamics study of a water molecule, *J. Phys.: Conf. Ser.* (in press).

T. Kawatsu and S. Miura, An efficient computational method for the implementation of a semi-classical instanton approach using discretized path integrals, *J. Phys.: Conf. Ser.* (in press).

[総説、解説]

松本正和、水の核生成と結晶成長のダイナミクス
日本冷凍空調学会「冷凍」28(2012).

松本正和、田中秀樹、メタンハイドレートの物理化学—クラスレートハイドレートの構造を予測する
化学同人「月刊化学」(2012).

C. S. Guritno and S. Miura, “Structural Fluctuation of a Protonated Water Cluster”, Recent Dev. Comput. Sci. 4
(in press).

[学会発表]

・招待講演(国内会議)

松本正和、水の計算物理学とデータマイニング、物性夏の学校 集中ゼミ 2012年8月9日、岐阜

松本正和、過冷却水の微視的描像、阪大タンパク研文月フォーラム、2012年7月30日、大阪

・招待講演(国際会議)

M. Matsumoto, Structure Selectivity of Clathrates, Telluride Workshop on the Microscopic Description of Gas Clathrate, July 10, 2012, Telluride, Colorado, USA.

H. Tanaka, Thermodynamic Stability of Methane and Hydrogen Clathrate Hydrates, International Workshop on Solar-Chemical Energy Storage, July 25, 2012, Sendai, Japan.

M. Matsumoto, Structure Selectivity of Clathrate Hydrates, Workshop on Structure and Dynamics of Water in Gas, Liquid and Solid Phases, November 28, 2012, Taipei, Taiwan.

T. Kawatsu and S. Miura, Development of the *ab initio* instanton method for tunneling processes in molecular systems, International Symposium on Computational Science 2013, February 20, 2013, Kanazawa, Japan.

・口頭発表(国内会議で査読のあるもの)

・口頭発表(国際会議で査読のあるもの)

S. Miura, Development of variational path integral molecular dynamics method with applications to molecular systems, Conference on Computational Physics 2012, October 18, 2012, Kobe, Japan.

[プレスリリース／取材対応]

[著作物]

[特許等の知的財産取得に関する案件]

[受賞等]

部会名: 第4部会

課題名: 太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算

課題代表者: 山下晃一

所属: 東京大学大学院工学系研究科

[論文]

- [1] Ryota Jono and Koichi Yamashita, "Two different lifetimes of charge separated states: A porphyrin-quinone system in artificial photosynthesis", *J. Phys. Chem. C* **116**, 1445-1449 (2012).
- [2] Sergei Manzhos, Hiroshi Segawa, and Koichi Yamashita, "The effect of ligand substitution and water co-adsorption on the adsorption dynamics and energy level matching of amino-phenil acid dyes on TiO₂", *PCCP*, **14**, 1749-1755 (2012).
- [3] Kenji Mishima and Koichi Yamashita, "Decoherence of entanglement in Markov approximation in terms of rotating wave approximation", *J. Comp. Chem. Japan*, **11**, 17-23 (2012).
- [4] H. Kamisaka, N. Mizuguchi, K. Yamashita, "Electron trapping at the lattice Ti atoms adjacent to the Nb dopant in Nb-doped rutile TiO₂", *J. Mater. Sci.* **47**, 7522-7529 (2012).
- [5] Sergei Manzhos, Hiroshi Segawa, and Koichi Yamashita, "Computational dye design by changing the conjugation order: failure of LR-TDDFT to predict relative excitation energies in organic dyes differing by the position of the methane unit", *Chem. Phys. Lett.*, **527**, 51-56 (2012).
- [6] S. Manzhos, J. Nakazaki, H. Segawa, K. Yamashita, "Theoretical analysis of the absorption spectra of organic dyes differing by the conjugation sequence: illusion of negative solvatochromism", *Proc. SPIE* 8435, 84351K (2012)
- [7] S. Manzhos, J. Fujisawa, H. Segawa, K. Yamashita, "Isotopic substitution as a strategy to control non-adiabatic dynamics in photoelectrochemical cells: surface complexes between TiO₂ and dicyanomethylene compounds", *Jpn. J. Appl. Phys.*, **51**, 10NE03 (6 pages) (2012).
- [8] M. Chan, S. Manzhos, T. Carrington, K. Yamashita, "Parameterized bases for calculating vibrational spectra directly from ab initio data using rectangular collocation", *J. Chem. Theory Comput.*, 8(6), 2053-2061 (2012)
- [9] S. Manzhos, J. Fujisawa, H. Segawa, K. Yamashita, "Effect of nuclear vibrations, temperature, and orientation on injection and recombination conditions in amino-phenyl acid dyes on TiO₂", *Proc. SPIE* 8438, 843814 (2012)
- [10] Sergei Manzhos, Makoto Komatsu, Jotaro Nakazaki, Hiroshi Segawa, and Koichi Yamashita, "Theoretical analysis of the solvatochromism of organic dyes differing by the conjugation sequence", *J. Photon. Energy*, **2**, 028001 (2012),
- [11] M. Chan, K. Yamashita, T. Carrington, S. Manzhos, "Towards accurate spectroscopic identification of species at catalytic surfaces: anharmonic vibrations of formate on AuPt", *MRS Proceedings*, **1484** (2012).
- [12] Yasumitsu Suzuki, Koichi Yamashita, "Real-time electron dynamics simulation of charge transfer reactions induced by nuclear motion", *Chem. Phys. Lett.* **531**, 216-222 (2012).
- [13] Maurizia Palummo, Giacomo Giorgi, Letizia Chiodo, Angel Rubio, Koichi Yamashita, "The nature of radiative transitions in TiO₂-based nanosheets", *J. Phys. Chem. C*, **116**, 18495-18503 (2012).
- [14] Sho Furutsuki, Sai-Cheong Chung, Shin-ichi Nishimura, Yusuke Kudo, Koichi Yamashita, and Atsuo Yamada, "Electrochromism of Li_xFePO₄ induced by Intervalence Charge Transfer Transition", *J. Phys. Chem. C*, **116**, 15259-15264 (2012).
- [15] K. Mishima and K. Yamashita, "Alternative Approach of Generating Entanglement in Quantum Dots by Spatial Phase", *Mol. Physics*, **110**, 735-742 (2012).

- [16] Ayaka Kuroki, Hiroshi Ushiyama, Koichi Yamashita, “Theoretical studies of solvation effects on 2-(2'-hydroxyphenyl) benzimidazole”, *Chem. Lett.*, **41**, 672-673 (2012).
- [17] G. Giorgi, P. Belanzoni, T. Asami, K. Yamashita, “Neutron generation via the mechanism adsorption of pressurized deuterium on an electron deficient titanium matrix. An MD-DFT combined analysis on the mechanism of the Ti-D bond formation”, *Int. J. Hydrogen Energy*, **37**, 18959-18971 (2012).
- [18] Ryota Jono, Masato Sumita, Yoshitaka Tateyama, and Koichi Yamashita, “Redox Reaction Mechanisms with Non-triiodide Mediators in Dye-Sensitized Solar Cells by Redox Potential Calculations”, *J. Phys. Chem. Lett.* **3**, 3581-3584 (2012).
- [19] Sergei Manzhos, Hiroshi Segawa and Koichi Yamashita, “Effect of nuclear vibrations, temperature, co-adsorbed water, and dye orientation on light absorption, charge injection and recombination conditions in organic dyes on TiO₂“, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **15**, 1141-1147 (2013).
- [20] Brijender Dahiya, Vinod Prasad, Koichi Yamashita, “Dynamics of interband transitions in triangular quantum wells due to static and laser fields”, *J. Luminescence*, **136**, 240-248 (2013).
- [21] Eriko Watanabe, Hiroshi Ushiyama, Koichi Yamashita, “Theoretical studies on the stabilities and reactivities of Ta₃N₅ surfaces”, *Chem. Phys. Lett.* **561-562**, 57-62 (2013).
- [22] Sergei Manzhos, Hiroshi Segawa^f and Koichi Yamashita, “Effect of Isotopic Substitution on Elementary Processes in Dye-Sensitized Solar Cells: Deuterated Amino-Phenyl Acid Dyes on TiO₂“, *Computation*, **1**, 1-15 (2013).
- [23] Hideyuki Kamisaka, Nanako Mizuguchi, Tetsuya Hasegawa, Koichi Yamashita, “DFT-based first-principle calculation of the carrier activation ratio in the F-doped anatase TiO₂ and the thermodynamic analysis of the formation of the TiOF₂ phase”, *Advanced Chemistry Letters*, in press (2013).
- [24] Jong-Won Song, Koichi Yamashita, and Kimihiko Hirao, “Gaussian attenuation hybrid scheme applied to the Ernzerhof-Perdew exchange hole model (Gau-PBEh)”, *J. Chem. Phys.* in press (2013)

[総説、解説]

1. 藤井幹也、山下晃一、理論化学で迫る有機系太陽電池の電荷分離ダイナミクス化学、化学同人、Vol. 68, 72-73、2013
2. 牛山浩、山下晃一、触媒の第一原理計算および構造最適化、第一原理計算事例集、(株) 情報機構、2013
3. 城野亮太、山下晃一、色素増感型太陽電池、第一原理計算事例集、(株) 情報機構、2013
4. 椿山健太、山下晃一、Li₂MSiO₄、高性能リチウムイオン電池開発最前線～5 V級正極材料の現状と高エネルギー密度化への挑戦、NTS、2013

[学会発表]

・招待講演(国内会議)

1. 山下晃一、Theoretical Study on Electron Injection and Recombination in Organic Solar Cells、NIMS Green シンポジウム、2012年6月26日、物材研(つくば)
2. 山下晃一、理論計算化学による酸化チタンの基礎科学、RATO 有機系太陽電池ワークショップ、2012年12月12日、東大先端研(東京)

・招待講演(国際会議)

1. Sergei Manzhos, Koichi Yamashita, A Theoretical Study on Electron Injection and Recombination of Surface Complexes with TiO₂, Energy Materials Nanotechnology, April 16-20 2012, Orland (Florida, USA)
2. Koichi Yamashita, Theoretical studies on photoinduced charge separation of dye-sensitized solar cells, ACS, Aug. 20-23 2012, Philadelphia (Penn. USA)
3. Hideyuki Kamisaka, Nanako Mizuguchi, Koichi Yamashita, Electron trapping at the lattice Ti atoms adjacent to the Nb dopant in Nb-doped rutile TiO₂, International Symposium on Transparent Conductive Materials, Oct. 21-25 2012, Creta (Greece)
4. Koichi Yamashita, Theoretical study on Nb-doped TiO₂ as transparent conducting materials, Energy Materials Nanotechnology West, Jan. 7-10 2013, Houston (USA)

・口頭発表(国内会議で査読のあるもの)

1. 城野亮太、藤沢潤一、瀬川浩司、山下晃一、励起状態と溶媒効果: 界面錯体を用いた理論科学的研究、分子科学討論会、2012年9月18日—21日、東京
2. 星野聖良、藤井幹也、山下晃一、有機薄膜太陽電池(PCBM/P3HT)のπ共役長と分子配向に関する理論的研究、日本化学会第93年会(2013)、2013年3月22日、大津
3. 祖母井諒・椿山健太・山下晃一、第一原理計算を用いたNaイオン電池正極材料Na₂FePO₄Fに関する研究、日本化学会第93年会(2013)、2013年3月22日、大津

・口頭発表(国際会議で査読のあるもの)

1. Koichi Yamashita, A Theoretical Study on Electron Injection and Recombination of Surface Complexes with TiO₂, Energy & Materials Research Conference, 20-22 June 2012, Torremolinos (Malaga, Spain)
2. Mikiya Fujii, Koichi Yamashita, Packing Effects in Organic Donor-Acceptor Molecular Heterojunctions, XXI International Materials Research Congress, 12-17 Aug. 2012, Cancun (Mexico)
3. Koichi Yamashita, Charge Transfer States of Organic Donor/Acceptor Solar Cells and Photosynthesis Systems, CECAM, 10-14 Sept. 2012, Cagliari (Italy)
4. M. Fujii and K. Yamashita, Packing effects in charge transfer dynamics in organic molecular heterojunctions consisting of TFB and F8BT, American Physical Society March Meeting 2013, March 19 2013, Baltimore (USA)

[プレスリリース/取材対応]

[著作物]

[特許等の知的財産取得に関する案件]

[受賞等]

部会名: 第4部会

課題名: バイオマス利用に向けた酵素反応解析

課題代表者: 吉田紀生

所属: 九州大学大学院理学研究院

[論文]

1. Kazuya Shiratori, Shoichi Yamaguchi, Tahei Tahara, and Akihiro Morita, "Computational Analysis of the Quadrupole Contribution in the Second-Harmonic Generation Spectroscopy for the Water/Vapor Interface" *J. Chem. Phys.* **138**, 064704. 2013.
2. Daiki Suzuoka, Hideaki Takahashi, Tatsuya Ishiyama, and Akihiro Morita, "Development of a Methodology to Compute Solvation Free Energies on the Basis of the Theory of Energy Representation for Solutions Represented with a Polarizable Force Field" *J. Chem. Phys.* **137**, 214503. 2012.
3. Tatsuya Ishiyama, Hideaki Takahashi, and Akihiro Morita, "Origin of Vibrational Spectroscopic Response at Ice Surface" *J. Phys. Chem. Lett.* **3** /20, 3001-3006. 2012.
4. Kazuya Shiratori and Akihiro Morita, "Theory of Quadrupole Contributions from Interface and Bulk in Second-Order Optical Processes" *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **85** /10, 1061-1076. 2012.
5. Tatsuya Ishiyama, Yuji Sato, and Akihiro Morita, "Interfacial Structures and Vibrational Spectra at Liquid/Liquid Boundaries: Molecular Dynamics Study of Water/Carbon Tetrachloride and Water/1, 2-Dichloroethane Interfaces" *J. Phys. Chem. C* **116** /40, 21439-21446. 2012.
6. Suguru Sakaguchi and Akihiro Morita, "Mass Accommodation Mechanism of Water through Monolayer Films at Water/Vapor Interface" *J. Chem. Phys.* **137**, 064701. 2012.
7. Tatsuya Ishiyama, Hideaki Takahashi, and Akihiro Morita, "Molecular Dynamics Simulations of Surface-Specific Bonding of the Hydrogen Network of Water: A Solution to the Low Sum-Frequency Spectra" *Phys. Rev.* **B86**, 035408 (10 pages). 2012.
8. Tatsuya Kawaguchi, Kazuya Shiratori, Yuki Henmi, Tatsuya Ishiyama, and Akihiro Morita, "Mechanisms of Sum Frequency Generation from Liquid Benzene: Symmetry Breaking at Interface and Bulk Contribution" *J. Phys. Chem. C* **116**, 13169-13182. 2012.
9. Hideaki Takahashi, Atsushi Omi, Akihiro Morita, and Nobuyuki Matubayasi, "Simple and Exact Approach to the Electronic Polarization Effect on the Solvation Free Energy: Formulation for Quantum-Mechanical / Molecular-Mechanical System and its Applications to Aqueous Solutions" *J. Chem. Phys.* **136**, 214503. 2012.
10. Takako Imamura, Yuri Mizukoshi, Tatsuya Ishiyama, and Akihiro Morita, "Surface Structures of NaF and Na₂SO₄ Aqueous Solutions: Specific Effects of Hard Ions on Surface Vibrational Spectra" *J. Phys. Chem. C* **116**, 11082-11090. 2012.
11. Nobuaki Kikkawa, Tatsuya Ishiyama, and Akihiro Morita, "Molecular Dynamics Study of Phase Transfer Catalyst for Ion Transfer through Water-Chloroform Interface" *Chem. Phys. Lett.* **534**, 19-22. 2012.

[総説、解説]

1. 森田明弘 "SFG スペクトルのシミュレーション" 分光研究 61 /6, 236-242. 2012.

[学会発表]

•招待講演(国内会議)

1. 吉田紀生, 「生体分子の溶媒和とリガンド認識:3D-RISMによるアプローチ」, 情報計算化学生物学会・第335回CBI研究講演会, 2013年3月14日, 東京大学山上会館(東京都)
2. 吉田紀生, 「生体高分子と水の理論化学」, コロイド&界面科学研究会 第2回セミナー, 2012年12月21日, 信州大学工学部 信州科学技術総合振興センター, 長野市
3. 吉田紀生, 「生体分子の水和と機能~RISM理論によるアプローチ~」, 新化学技術推進協会 先端化学・材料技術部会 コンピュータケミストリ分科会 次世代CCWG 講演会, 2012年11月9日, 公益社団法人 新化学技術推進協会 会議室, 千代田区
4. 吉田紀生, 「3D-RISM を中心とした生体機能解析:理論時計への実装そして応用~京スパコンで可能になること~」, サイエнтиフィックシステム研究会 HPC フォーラム2012 エクサスケールコンピューティングに向けて, 2012年8月20日, 汐留シティセンター, 港区
5. 森田明弘, "柔らかな界面の構造と機能の理論解析", シンポジウム「複雑系のための分子科学-複雑さと柔らかさ」, 日本化学会第93春季年会, 2013. 3. 22-25. 草津
6. 森田明弘, 界面和周波分光の理論と解析手法の新展開、日本表面科学会学術講演会「電極表面科学の深化と進化を目指す計測と理論の新展開」、2012. 11. 20-22. 仙台
7. 森田明弘, "界面和周波発生分光の理論の開発と液体界面への応用", 平成 24 年度化学系学協会東北大会, 2012. 9. 15-16. 秋田

•招待講演(国際会議)

1. 吉田紀生, 「3D-RISMによるKcsAチャネル中のカチオン結合モード解析」, アジア連携分子研研究会「実験及び理論研究手法の開拓と新規物性探索への展開/Recent development of experimental and theoretical methodology on liquids and soft matters: Basic properties and applications to novel devices」, 2012年6月2日, 分子科学研究所(岡崎市)
2. A. Morita, "Water and Ice Surfaces studied by Combination of Nonlinear Spectroscopy and Molecular Dynamics Simulation" Campus Asia Sendai Symposium, Dec. 17-18, 2012. Sendai, Japan.
3. A. Morita, "Computational analysis of sum frequency generation spectroscopy" University of Akron, Aug. 24, 2012. Akron, OH, USA.
4. A. Morita, "Mechanisms of Sum Frequency Generation from Liquid Benzene: Symmetry Breaking at Interface and Bulk Contribution", ACS National Meeting, Symposium on "Recent Advances in Studies of Molecular Processes at Liquid Interfaces", Aug. 19-23, 2012. Philadelphia, PA, USA.
5. A. Morita, "Computational analysis of SFG spectroscopy and application to liquid interfaces", Pacific Northwest National Laboratory, Jun. 22, 2012. Richland, WA, USA.
6. A. Morita, "Analysis of SFG Spectra of Organic Liquid Surfaces", Telluride Science Research Conference on Nonlinear Optics at Interfaces, Telluride, CO, USA, Jun. 17-21, 2012.

・口頭発表(国内会議で査読のあるもの)

・口頭発表(国際会議で査読のあるもの)

[プレスリリース／取材対応]

[著作物]

[特許等の知的財産取得に関する案件]

[受賞等]

1. 平成 24 年度化学系学協会東北大会 優秀ポスター賞
今村貴子(D2)、2012 年 9 月

HPCI 戦略プログラム 分野2 CMSI 研究課題

平成24年度 外部への成果発表

部会名: 第4部会

課題名: 高性能リチウムイオン電池の開発に向けた基礎的研究

課題代表者: 大谷 実

所属: 産業技術総合研究所ナノシステム研究部門

[論文]

[総説、解説]

[1] 崔 隆基、土田 英二、大谷 実, "燃料電池用高分子材料のシミュレーション", 産総研 Today, 産業技術総合研究所, 2013/02/04

[学会発表]

・招待講演(国内会議)

[1] 大谷 実, "電極表面での触媒作用の電子論", 触媒討論会, 2012/09/25, 九州大学, 福岡

[2] 大谷 実, "電極/溶液界面における電気化学反応シミュレーション: 理論の発展と最近の展開", スーパーコンピュータワークショップ 2013, 自然科学研究機構, 愛知

・招待講演(国際会議)

・口頭発表(国内会議で査読のあるもの)

・口頭発表(国際会議で査読のあるもの)

[プレスリリース/取材対応]

[著作物]

[特許等の知的財産取得に関する案件]

[受賞等]

HPCI 戦略プログラム 分野2 CMSI 研究課題

平成24年度 外部への成果発表

部会名:第4部会

課題名:ナノ構造体材料における高効率非平衡エネルギー変換過程とナノ構造創製の理論シミュレーション

課題代表者:浅井美博

所属:産業技術総合研究所・ナノシステム研究部門

[論文]

1. Yoshihiro Asai, "Length and energy gap dependences of thermoelectricity in nanostructured junctions", **J. Phys. Cond. Matt.** 25, 155305-1-5 (2013).
2. Thomas Hines, Ismael Díez-Pérez, Hisao Nakamura, Tomomi Shimazaki, *Yoshihiro Asai and *Nongjian Tao, "Controlling Formation of Single-Molecule Junctions by Electrochemical Reduction of Diazonium Terminal Groups", **J. Am. Chem. Soc.** 135, 3319-3322 (2013): **Communication**.
3. Yoshihiro Asai, "Theory of zero-bias anomaly in low-temperature inelastic tunneling spectroscopy", **Phys. Rev. B** 86, 201405(R)-1-4 (2012): **Rapid Communications**.
4. See Kei Lee, Ryo Yamada, Shoji Tanaka, Gap Soo Chang, *Yoshihiro Asai, and *Hirokazu Tada, "Universal Temperature Crossover Behavior of Electrical Conductance in a Single Oligothiophene Molecular Wire", **ACS Nano**, 6, 5078-5082 (2012).
5. Ryuji Matsushita, Masayo Horikawa, Yasuhisa Naitoh, Hisao Nakamura, and Manabu Kiguchi, Conductance and SERS Measurement of Benzenedithiol Molecules Bridging Between Au Electrodes, **J. Phys. Chem. C** 117 1791-1795 (2013)
6. Hisao Nakamura, Tatsuhiko Ohoto, and Y. Nagata, Polarizable Site Charge Model at Liquid/Solid Interfaces for Describing Surface Polarity: Application to Structure and Molecular Dynamics of Water/Rutile TiO₂(110) Interface, **J. Chem. Theor. Comp.** 9, 1193-1201 (2013)
7. Yoshimasa Tani, Kazunori Sato, Hiroshi Katayama-Yoshida, "First-principles materials design of CuInSe₂-based high-efficiency photovoltaic solar cells", **Physica B: Condensed Matter**, Vol. 407, Issue 15, Pages 3056-3058, 1 August (2012) (DOI: 10.1016/j.physb.2011.08.076)
8. K. Sato, S. Fujimoto, H. Fujii, T. Fukushima, H. Katayama-Yoshida, "Computational materials design of filled tetrahedral compound magnetic semiconductors", **Physica B: Condensed Matter**, Vol. 407, Issue 15, Pages 2950-2953, 1 August (2012) (DOI: 10.1016/j.physb.2011.09.036)
9. Akitaka Nakanishi, Hiroshi Katayama-Yoshida, "Theoretical study of band gap in CuAlO₂: Pressure dependence and self-interaction correction", **Physica B: Condensed Matter**, Vol. 407, Issue 15, Pages 2861-2863, 1 August (2012) (DOI: 10.1016/j.physb.2011.08.012)
10. Masayoshi Seike, Van An Dinh, Kazunori Sato, Hiroshi Katayama Yoshida, "First-principles study of the magnetic properties of nitrogen-doped alkaline earth metal oxides", **Physica B: Condensed Matter**, Vol. 407, Issue 15, Pages 2875-2878, 1 August (2012) (DOI: 10.1016/j.physb.2011.08.044)
11. Masayoshi Seike, Van An Dinh, Tetsuya Fukushima, Kazunori Sato, Hiroshi Katayama-Yoshida, "Self-Organized Nanostructures and High Blocking Temperatures in MgO-based d0 Ferromagnets", **Jpn. J. Appl. Phys.**, Vol. 51, 050201(3 pages) (2012) (DOI: 10.1143/JJAP.51.050201)
12. Yoshimasa Tani, Kazunori Sato, and Hiroshi Katayama-Yoshida, "Computational Nano-Materials Design of Low Cost and High Efficiency Cu₂ZnSn[Se_{1-x}S_x]₄ Photovoltaic Solar Cells by Self-Organized Two-Dimensional Spinodal Nanodecomposition", **Jpn. J. Appl. Phys.**, Vol. 51, 050202 (3 pages) (2012) (DOI: 10.1143/JJAP.51.050202)

[総説、解説]

1. 吉田博、谷義政、佐藤和則 第一原理計算 ～構造最適化にむけた材料・デバイス別事例集～ 第一原理計算と多階層連結シミュレーションによる高効率低コスト太陽電池の計算機ナノマテリアルデザインと実証 ～自己修復する不老不死のスピノダルナノ超構造～ (株)情報機構(2012年出版)

[学会発表]

- 招待講演(国内会議)

添付資料 4

1. 中村恒夫、“ナノ接合系でのエネルギー交換過程”研究会「化学反応のポテンシャル曲面とダイナミクス」、京都、2012年3月30日
2. 佐藤 和則、“ナノ構造制御によるカルコパイライト型および II-VI 族化合物 太陽電池材料の計算機マテリアルデザイン”第3回 CMSI 研究会 ～超並列計算が拓く新しい計算物質科学～自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター, December 3 - December 5, 2012
3. 吉田博、“計算機ナノマテリアルデザインと実証第 17 回コロイド・界面実践講座 世界に誇る日本のマテリアルエンジニアリング - 高付加価値を生むナノ材料 -“ 関西大学, 大阪, November 5, 2012
4. 中西 章尊、“電子格子相互作用による超伝導転移温度の第一原理計算予測と負の有効電子相関エネルギー探索による高温超伝導体の探索”山田科学振興財団 山田超伝導研究会「室温超伝導の可能性を探る」東京, September 22 - September 23, 2012
5. 谷 義政, 佐藤 和則, 吉田 博*、“計算機科学による創エネルギーマテリアルデザイン ～デザインと実証～2012 ナノ理工学セミナー「グリーンナノテクノロジー第3弾 ～創エネ科学技術の新展開～」”大阪大学豊中キャンパス, October 22, 2012

・招待講演(国際会議)

1. Yoshihiro Asai, “Non-equilibrium transport theory applied to thermal physics problems at nanoscale”, **Joint Dresden-Japan Workshop on Molecular Scale and Organic Electronic Materials (jaDEWS)**, Dresden, Germany, 2012/12/13.
2. Yoshihiro Asai, “Non-equilibrium transport theory applied to thermal physics problems at nanoscale”, **15th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-15)**, Taipei, Taiwan, 2012/11/5.
3. Hisao Nakamura, “Energy Conversion Processes by First Principles Nonequilibrium Transport Calculation”, **Joint Dresden-Japan Workshop on Molecular Scale and Organic Electronic Materials, Dresden, Germany**, 2012/12/11.
4. Takehide Miyazaki, Hisao Nakamura, Kengo Nishio, Hisashi Shima, Hiroyuki Akinaga, and Yoshihiro Asai, “Theoretical modeling for resistive switching of nanoscale metal oxides”, EMN (Energy, Materials, Nanotechnology) 2013 Spring Meeting, Orland, USA, 2013/04/08
5. Kazunori Sato*, Yoshimasa Tani, Hiroshi Katayama-Yoshida. Materials Design of CIGS- and CZTS-based Photovoltaic Materials with Self-organized Nano-structures **8th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium** - Nanoscience and Nanotechnology for Energy Harvesting and Saving - Icho-Kanikan, Osaka University, December 10 - December 11, 2012
6. Hiroshi Katayama-Yosida. Computational Nano-materials Design for Spinodal Nanotechnology as a New Class of Bottom-up Nanotechnology: **Design vs. Realization TMS 2013 142nd ANNUAL MEETING & EXHIBITION** San Antonio, Texas, USA, March 3 - March 7, 2013
7. Kazunori Sato. Computational Design of Oxide-Based Spintronics Materials **15th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-15)** 台湾, November 5 - November 7, 2012
8. Hiroshi Katayama-Yoshida. Computational Nano-materials Design of d0 Ferromagnetism in MgO and ZnO: Beyond LDA and Multi-scale Simulations **日印セミナー2012** Bangalore, インド, October 18 - October 20, 2012
9. Kazunori Sato. Computational Nano-materials Design and Realization for Semiconductor Spintronics: Control of Defect and Spinodal Nano-Decomposition 2012 **Gordon Research Conference on Defects in Semiconductors** University of New England, USA, August 12 - August 17, 2012.
10. H. Katayama-Yoshida*, Nguyen Dang Vu, T. Fukushima, M. Seike, Y. Tani, A. Nakanishi, H. Funashima and K. Sato, Computational Nano-materials Design for Self-organized and High-efficiency Spin Caloritronics Materials **4th International Workshop on Spin Caloritronics** IMR Tohoku University, Sendai, June 2 - June 5, 2012.
11. Hiroshi Katayama-Yosida, Computational Nano-Materials Design for Spintronics: Design vs. Realization **Keio Topical Workshop on Semiconductor Spintronics** Keio University Yagami Campus, January 24, 2013.
12. Hiroshi Katayama-Yosida, Design of d0 ferromagnetism in MgO, CaO, BaO, SrO and ZnO:

添付資料 4

- beyond LDA and multi-scale simulations **International Symposium on Non-ergodic behavior in martensites** University of Duisburg-Essen, Germany, January 28 - January 30, 2013
13. K. Sato, computational nano-materials design and realization for semiconductor spintronics: control of defect and spinodal nano-decomposition **International Symposium on Non-ergodic behavior in martensites** University of Duisburg-Essen, Germany, January 28 - January 30, 2013
 14. Hiroshi Katayama-Yosida, Computational Nano-materials Design for Spinodal Nanotechnology as a New Class of Bottom-up Nanotechnology: Design vs. Realization **TMS 2013 142nd ANNUAL MEETING & EXHIBITION** San Antonio, Texas, USA, March 3 - March 7, 2013

・口頭発表(国内会議で査読のあるもの)

1. 中村恒夫、“表面分極効果を記述する分子モデル方法の構築と水／酸化チタン界面の分子動力学による和周波分光シミュレーション”、日本物理学会第68回年次大会、広島 2013年3月27日
2. 小西優祐、福島鉄也、佐藤和則、浅井美博、吉田博。“ナノ構造を持つ合金における伝導シミュレーション” 日本物理学会 2012年秋季大会、京都産業大学、September 11 - September 14, 2012
3. 小西優祐、福島鉄也、佐藤和則、吉田博、浅井美博。“合金系熱電材料におけるフォノン熱伝導シミュレーション” 日本物理学会第68回年次大会、広島大学東広島キャンパス、March 26 - March 29, 2013
4. 佐藤和則*, Vu Nguyen Dang, 藤井 将, 福島鉄也, 吉田 博 LiZnAsを母体とする磁性半導体の計算機マテリアルデザイン2012年 秋季 第73回応用物理学会学術講演会 愛媛大学, September 11 - September 14, 2012
5. 佐藤和則*, 谷 義政, 吉田 博 ナノ構造制御によるカルコパイライト型太陽電池材料の計算機マテリアルデザイン2012年 秋季 第73回応用物理学会学術講演会 愛媛大学, September 11 - September 14, 2012
6. 西田 翔*, 船島洋紀, 中西章尊, 佐藤和則, 吉田 博 第一原理計算を用いた電子励起による窒化ホウ素の構造相転移のシミュレーション2012年 秋季 第73回応用物理学会学術講演会 愛媛大学, September 11 - September 14, 2012
7. 佐藤和則*, 押谷昌宗, 吉田 博 自己組織化ナノ構造を用いた II-VI 族化合物半導体ベース太陽電池材料の計算機マテリアルデザイン2012年 秋季 第73回応用物理学会学術講演会 愛媛大学, September 11 - September 14, 2012

・口頭発表(国際会議で査読のあるもの)

1. Yoshihiro Asai, Theory of zero-bias anomaly in low-temperature inelastic tunneling spectroscopy, APS March Meeting 2013 Baltimore, Maryland, USA, March 18 - March 22, 2013
2. Hisao Nakamura, Takao. Ishida, and Yoshihiro Asai “Superior Long range Electric Transport of Organometallic Wire via Stepping Stone mechanism and First Principles Study of Length dependence of Thermoelectric Effects”, APS March Meeting, Baltimore, USA, 2013/3/22
3. Takehide Miyazaki, Hisao Nakamura, Kengo Nishio, Hisashi Shima, Hiroyuki Akinaga, and Yoshihiro Asai, Effect of metallic buffer at electrode-oxide interface on current-voltage characteristics of resistive random access memories (ReRAMs): A first-principles study, APS March Meeting 2013 Baltimore, Maryland, USA, March 18 - March 22, 2013
4. Takehide Miyazaki, Hisao Nakamura, Kengo Nishio, Hisashi Shima, Hiroyuki Akinaga, and Yoshihiro Asai, “First-Principles Modeling for Current-Voltage Characteristics of Resistive Random Access Memories”, 2013 MRS Spring Meeting & Exhibit, San Francisco, USA, 2013/04/04.
5. Yusuke Konishi, Tetsuya Fukushima, Kazunori Sato, Hiroshi Katayama-Yoshida, Yoshihiro Asai. Simulation of Nanostructure and Thermal Conductivity in Binary Alloys, APS March Meeting 2013, Baltimore,

添付資料 4

Maryland, USA, March 18 - March 22 2013

6. Masayoshi Seike*. Design of Self-Organized Nanostructures to Achieve High Blocking Temperatures in MgO-based δ -Fe₂O₃ 19th International Conference on Magnetism (ICM 2012) Busan, Korea, July 8 - July 13, 2012
7. Nguyen Dang Vu, Sato Kazunori*, Katayama-Yoshida Hiroshi. Self-organized Quasi-one-dimensional Nano-structure in Cu-Ni and Fe-Cu Alloys 2012 MRS Spring Meeting San Francisco, USA, April 9 - April 13, 2012
8. Masamune Oshitani, Hiroshi Katayama-Yoshida*, Kazunori Sato. Self-Organized Cd(Te,S) and Cd(Te,Se) Type II Nanowire (Konbu-phase) by Two-dimensional Spinodal Nano-decomposition for High-efficiency Photovoltaic Solar-cells 2012 MRS Spring Meeting San Francisco, USA, April 9 - April 13, 2012.
9. Masayoshi Seike*, Tetsuya Fukushima, Kazunori Sato, Hiroshi Katayama-Yosida, Self-Organized Defects of Half-Metallic Nanowires in MgO-Based Magnetic Tunnel Junctions APS March Meeting 2013 Baltimore, Maryland, USA, March 18 - March 22, 2013
10. Hitoshi Fujii*, Tetsuya Fukushima, Kazunori Sato, Hiroshi Katayama-Yosida, Magnetism of IV-VI compound based DMSAPS March Meeting 2013 Baltimore, Maryland, USA, March 18 - March 22, 2013
11. Vivian Tran*, Masayoshi Seike, Tetsuya Fukushima, Kazunori Sato, Hiroshi Katayama-Yosida. Achieving Room-temperature Ferromagnetism in N-doped ZnO with Inhomogeneity APS March Meeting 2013 Baltimore, Maryland, USA, March 18 - March 22, 2013

[プレスリリース／取材対応]

[著作物]

[特許等の知的財産取得に関する案件]

[受賞等]

HPCI 戦略プログラム 分野2 CMSI 研究課題

平成24年度 外部への成果発表

部会名: 第4部会

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

課題代表者: 香山正憲

所属: 産業技術総合研究所 ユビキタスエネルギー研究部門

[論文]

Hideaki Sawada, Shunsuke Taniguchi, Kazuto Kawakami, Taisuke Ozaki, "First-principles study of interface structure and energy of Fe/NbC", Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 2013年6月出版予定

[総説、解説]

[学会発表]

・招待講演(国内会議)

香山正憲、田中真悟、椎原良典、石橋章司、「金属中の粒界・界面の第一原理解析」、日本金属学会 2012 秋期大会、2012年9月、愛媛大学/松山市

・招待講演(国際会議)

・口頭発表(国内会議で査読のあるもの)

Vikas Sharma、香山正憲、田中真悟、椎原良典、石橋章司、「First-Principles Local Energy and Local Stress Study of bcc Fe/TiC Interfaces」、日本金属学会 2012 秋期大会、2012年9月、愛媛大学/松山市

香山正憲、田中真悟、Somesh Bhattacharya、Vikas Sharma、Hao Wang、椎原良典、石橋章司、「局所エネルギー・局所応力の第一原理解析:金属粒界や異相界面への適用」、日本物理学会第 68 回年次大会、2013年3月、広島大学/東広島市

Vikas Shama、香山正憲、田中真悟、椎原良典、石橋章司、「First-Principles Study of Fe/TiC Interfaces:Local-Stress and Local-Energy Distribution」、日本金属学会 2013 年春期大会、2013年3月、東京理科大/東京都

・口頭発表(国際会議で査読のあるもの)

Hideaki Sawada, Shunsuke Taniguchi, Kazuto Kawakami, Taisuke Ozaki, "First-principles study of interface structure and energy of Fe/NbC", IUMRS-International Conference on Electronic Materials (IUMRS-ICEM 2012), 2012/09, Yokohama/Japan

香山正憲、田中真悟、王昊、Somesh Bhattacharya、Vikas Shama、椎原良典、石橋章司、「First-principles Local-energy and Local-stress Calculations of Grain Boundaries and Interfaces», Materials Research Society 2012 Fall Meeting, 2012/11, Boston/USA

香山正憲、田中真悟、Somesh Bhattacharya、Vikas Shama、王昊、椎原良典、石橋章司、「Ab Initio

添付資料 4

Local Energy and Local Stress in Materials Interfaces”, 1st ESISM Workshop on Fundamental Issues of Structural Materials, 2013/01, Kyoto/Japan

[プレスリリース／取材対応]

[著作物]

[特許等の知的財産取得に関する案件]

[受賞等]

HPCI 戦略プログラム 分野2 CMSI 研究課題

平成24年度 外部への成果発表

部会名: 支援課題

課題名: カゴメ格子反強磁性体の厳密対角化法による研究

課題代表者: 中野博生

所属: 兵庫県立大学大学院物質理学研究科

[論文]

Makoto Isoda, Hiroki Nakano, and Toru Sakai, "A Consistent Description of Magnetic Properties of the Triangulated-Kagome System $\text{Cu}_9\text{X}_2(\text{cpa})_6\text{nH}_2\text{O}$ "

Journal of the Physical Society of Japan Vol.81 pp.053703 (1-4) (2012)

Tokuro Shimokawa and Hiroki Nakano, "Ferrimagnetism of the Heisenberg models on the quasi-one-dimensional kagome strip lattices"

Journal of the Physical Society of Japan Vol. 81 pp.084710(1-8) (2012)

Susumu Okubo, Tomonari Ueda, Hitoshi Ohta, Weimin Zhang, Takahiro Sakurai, Nozomi Onishi, Masaki Azuma, Yuichi Shimakawa, Hiroki Nakano, and Toru Sakai, "Dzyaloshinsky-Moriya Interaction and Field Induced Magnetic Order Phase in an Antiferromagnetic Honeycomb Lattice Compound $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$ Studied by High-Field ESR"

Phys. Rev. B Vol. 86 pp.140401(R)(1-4) (2012)

Hiroki Nakano, Synge Todo, and Toru Sakai, "Long-Range Order of the Three-Sublattice Structure in the $S = 1$ Heisenberg Antiferromagnet on a Spatially Anisotropic Triangular Lattice"

Journal of the Physical Society of Japan Vol.82 pp. 043715(1-5) (2013)

[総説、解説]

中野博生、藤堂眞治、坂井徹、"2次元フラストレート系の計算科学的研究" スーパーコンピューティングニュース Vol.15 特集号 1 pp.33-45 (2013年2月)

[学会発表]

・招待講演(国内会議)

なし

・招待講演(国際会議)

Hiroki Nakano, "Two-Dimensional Frustrated Antiferromagnets by Large-Scale Parallel Calculations of Numerical Diagonalizations", JAEA Synchrotron Radiation Research Symposium "Magnetism in Quantum Beam Science" (2013年3月) SPring8, Hyogo

・口頭発表(国内会議で査読のあるもの)

なし

・口頭発表(国際会議で査読のあるもの)

なし

[プレスリリース/取材対応]

なし

[著作物] なし

[特許等の知的財産取得に関する案件] なし

[受賞等] なし

添付資料 5 イベント報告書 目次

報告書番号	イベント名	ページ
報告書1	TCCIウインターカレッジ-分子シミュレーション 第6回分子シミュレーションスクール-基礎から応用まで	1
報告書2	TCCIウインターカレッジ-量子化学 第2回量子化学ウインタースクール~基礎理論と生体系の理論~	3
報告書3	第2回超並列化技術国際ワークショップ	5
報告書4	OCTA講習会&トレーニング	7
報告書5	計算材料科学研究拠点 (CMRI) 第1回シンポジウム	8
報告書6	ISSP-CMSI国際ワークショップMASP2012	11
報告書7	第1部会「新物質新量子相の基礎科学」夏の学校	14
報告書8	計算分子科学研究拠点(TCCI) 第3回研究会	16
報告書9	第1回CMSI元素戦略シンポジウム	18
報告書10	計算物性科学シンポジウム(SPring-8、J-PARC連携)	19
報告書11	TCCI第2回実験化学との交流シンポジウム	21
報告書12	第3回CMSI 研究会 - 超並列計算が拓く新しい計算物質科学	23
報告書13	物性共同利用・CCMS・元素戦略合同研究会 - 計算物性物理学の新展開	25
報告書14	MPIプログラミング講習会	27
報告書15	計算材料科学研究拠点 (CMRI) 第2回シンポジウム	28
報告書16	TCCI第2回産学連携シンポジウム	30
報告書17	第4回産官学連続研究会 - 産業界におけるOCTA活用の現状	32
報告書18	第5回産官学連続研究会 - 原子スケールシミュレーションからTCADへ	33
報告書19	第6回産官学連続研究会 - 熱マネジメント技術を支える材料シミュレーション	34
報告書20	HPCI戦略プログラム 分野2 x 分野5 異分野交流研究会 - 量子モンテカルロ計算	36
報告書21	第1回RSC-CMSI合同セミナー マルチスケール構造科学を拓く	37
報告書22	第1回 計算物質科学“見える化”シンポジウム (TUT-CMSI)	39
報告書23	第1回 「京」物性セミナー 量子スピン系のトピックス	41
報告書24	第1回 CMSI 「京」利用情報交換会	42
報告書25	第2回 「京」物性セミナー 物質中の双極子相互作用とその大規模高速計算	43
報告書26	第3回 「京」物性セミナー Real-Space DFT calculations on BlueGene/Q	44
報告書27	第6回 若手技術交流会合宿 - 京利用に向けた技術・情報の共有 第4回 「京」物性セミナー	45
報告書28	2次元フラストレーション系研究の現状と将来: 実験家の視点から見た数値計算への期待	47
報告書29	第5回 「京」物性セミナー 分数量子ホール状態を記述する厳密に解ける一次元格子模型	48
報告書30	第6回 「京」物性セミナー 量子モンテカルロ法によるハニカム格子ハバード模型の大規模数値	49
報告書31	第7回 「京」物性セミナー ALPSプロジェクト: 現状と将来	50
報告書32	第8回 「京」物性セミナー せん断流、細管流中の赤血球、脂質ベシクルのダイナミクス	51
報告書33	第1回CMSI神戸ハンズオン FMO講習会	52
報告書34	第7回 若手技術交流会合宿 - 京の効率利用のための技術習得と共有	53
報告書35	第2回CMSI神戸ハンズオン ALPSチュートリアル	55
報告書36	GCOE分野横断研究会 - 多体相関の数値解法	56

添付資料 5

配布先 関係各位	報告書 1	作成日 2012年12月17日	
	TCCI ウィンターカレッジ-分子シミュレーション 第6回分子シミュレーションスクール -基礎から応用まで	No. CMSI-12-20	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

- 日程: 2012年12月11日(火)~12月14日(金)
 会場: 岡崎コンファレンスセンター2階 小会議室
 参加費: 無料
 懇親会: 12月12日(水)18:30~自然科学研究機構 職員会館1階 食堂ホール
 懇親会費 (一般)5,000円/(学生)4,000円
 主催: 自然科学研究機構 分子科学研究所、計算分子科学研究拠点(TCCI)
 共催: 分子シミュレーション研究会、計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

【プログラム】

12月11日(火)

- 13:00-13:45 受付開始
 13:45-14:00 開会式 樋渡保秋先生(金沢大学名誉教授)
 「シミュレーションスクールについて(挨拶)」
 14:00-15:30 松本充弘先生(京都大学)
 「シミュレーションの全体像・概論」
 15:40-17:10 吉井範行先生(名古屋大学)
 「力学、解析力学、数値解法、拘束動力学」
 17:20-18:50 松林伸幸先生(京都大学)
 「統計熱力学の概要」

12月12日(水)

- 9:00-10:30 古石貴裕先生(福井大学)
 「MD計算の解析」
 10:40-12:10 三上益弘先生(筑波大学)
 「原子間・分子間相互作用エネルギー関数と長距離力計算法」
 13:30-15:00 奥村久士先生(分子科学研究所)
 「各種統計アンサンブルの生成法、拡張アンサンブル法」
 15:10-16:40 岡崎進先生(名古屋大学)
 「分子シミュレーションに基づいた自由エネルギー計算」
 16:50-18:20 長岡正隆先生(名古屋大学)
 「化学反応と分子シミュレーション—気相反応から溶液化学反応へ—」
 18:30-20:30 懇親会

12月13日(木)

- 9:00-10:30 篠田渉先生(産業技術総合研究所)
 「階層的分子モデルによるMD -全原子モデルを元にした粗視化分子モデルの構築-」
 10:40-12:10 渡辺宙志先生(東京大学)

添付資料 5

「短距離古典分子動力学計算の高速化と大規模並列化」

- 13:30-15:00 泰岡顕治先生(慶應義塾大学)
「核生成・相転移・界面張力の化学物理」
- 15:10-16:40 池口満徳先生(横浜市立大学)
「生体系の分子シミュレーション」
- 16:50-18:20 川上智教先生(東レ㈱)
「高分子材料設計における分子シミュレーション—高分子電解質膜の例を中心に—」

12月14日(金)

- 9:00-10:30 三浦伸一先生(金沢大学)
「経路積分分子動力学法」
- 10:40-12:10 甲賀研一郎先生(岡山大学)
「溶液・界面の統計力学とシミュレーション」
- 12:10-12:30 修了書授与および閉会式

【お問い合わせ】

〒444-8585 岡崎市明大寺町西郷中 38
分子科学研究所 計算分子科学研究拠点事務局
E-mail: tcci-office@yfep2.ims.ac.jp

以上

添付資料 5

配布先 関係各位	報告書 2	作成日 2012年12月19日	
	TCCI ウインターカレッジ-量子化学 第2回量子化学ウインタースクール -基礎理論と生体系の理論-	No. CMSI-12-21	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

開催日 平成24年12月17日(月)～18日(火)

(懇親会:12月17日(月) 18:00～、場所:分子科学研究所 職員会館 1F、会費:3,000円(学生2,000円))

場 所 岡崎コンファレンスセンター 2F 小会議室(愛知県岡崎市)

主 催 分子科学研究所

共 催 TCCI、CMSI、計算科学研究機構、計算科学研究センター

世話人 江原正博(分子研・計算セ)、柳井毅(分子研)、中嶋隆人(計算科学研究機構)、天能精一郎(神戸大学)

参加費 無料

【開催主旨】

近年、高精度な電子状態理論が進展し、分光学的精度の精緻な理論研究が可能となりました。また、大規模系の理論によって、生体系の酵素反応や光電子過程についても、その起源を明らかにする研究が可能となっています。そこで、今回のスクールでは基礎理論と生体系の理論に焦点をあて、関連する電子状態理論を広く学んでいただける講習会を企画しました。最先端の研究を行っておられる先生方を講師としてお招きし、基礎から分かりやすく解説していただきます。

また、講師陣との意見交換や交流もできるように、参加者によるポスター発表も企画しました。電子状態理論を志している学部学生や大学院学生、若手研究者、実験研究者の方々など、電子状態理論に興味を持っている方を対象とした。

【プログラム】

2012年12月17日(月)

13:30 - 13:40 はじめに 大峯巖分子研所長

司会:福田良一(分子研)

13:40 - 15:30 重田育照(大阪大学)「生体内化学反応解析の基礎」

15:30 - 15:40 休憩

15:40 - 17:30 中辻 博(量子化学研究協会研究所)「量子化学の基礎理論と生物学への応用理論」

18:00 - 19:30 懇親会

2012年12月18日(火)

司会:大塚勇起(神戸大)

9:00 - 10:50 長谷川淳也(北海道大学)「光機能性生体分子の励起状態に関する量子化学」

10:50 - 11:00 休憩

11:00 - 12:00 受講者の研究発表(poster)

12:00 - 13:30 昼食

司会:大西裕也(神戸大)

13:30 - 15:20 吉澤一成(九州大学)「大規模量子化学計算による金属酵素の構造と反応の研究」

15:20 - 15:30 休憩

15:30 - 17:20 倉重佑輝(分子科学研究所)

「新段階を迎える多参照電子状態理論～密度行列繰込み群との融合を中心に～」

17:20 - 17:30 おわりに

【お問い合わせ】

〒444-8585 岡崎市明大寺町西郷中 38
分子科学研究所 計算分子科学研究拠点事務局
E-mail: tcci-office@yfep2.ims.ac.jp

以上

配布先 関係各位	報告書3	作成日 2013年1月29日	
	第2回超並列化技術国際ワークショップ International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Molecular Science	No. CMSI-12-27	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時: 2013年1月28日(月)10:20~16:10

場所: 早稲田大学西早稲田キャンパス 55号館 N棟 1階 大会議室

参加費: 無料

主催: 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)/計算分子科学研究拠点(TCCI)

後援: 早稲田大学高等研究所

【プログラム】

[International session chaired by]

10:20-10:25 Opening remarks

(TUT) Prof. Hideo Sekino

10:25-10:30 Opening remarks

(Univ. of Tokyo/IMS) Prof. Kazuo Takatsuka

10:30-11:30 Algorithms and Software for Quantum Chemistry at Petascale and Beyond

(ANL) Dr. Jeff Hammond

11:30-12:00 Parallel implementation of the fragment molecular orbital method in GAMESS

(AIST) Dr. Dmitri G. Fedorov

12:00-13:30 lunch break

[Japan session chaired by]

13:30-14:00 Divide-and-conquer quantum chemistry program in GAMESS:Implementation and application

(Waseda Univ.) Dr. Masato Kobayashi

14:00-14:30 Performance improvement of FMO program for effective massively parallel execution on K-computer

(Kyushu Univ.) Dr. Yuichi Inadomi

14:30-15:00 Development of massively parallel molecular dynamics simulation software

including long-range Coulomb force calculation on K computer

(Nagoya Univ.) Dr. Yoshimichi Ando

15:00 - 15:20 coffee break

[Discussion session chaired by Prof. Hideo Sekino (TUT)]

15:20-16:00 Free Discussion

16:00-16:10 Closing remarks

(TUT) Prof. Hideo Sekino

<招待講演者>

Dr. Jeff Hammond, Assistant Computational Scientist, ANL

Dr. Dmitri G. Fedorov, 産総研ナノシステム研究部門主任研究員

小林正人博士、早稲田大学高等研究所助教

稲富雄一博士、九州大学情報基盤研究開発センター学術研究員(特任准教授)

安藤嘉倫博士、名古屋大学大学院工学研究科研究員

【お問い合わせ】

分子科学研究所 計算分子科学研究拠点事務局

電話:0564-55-7074(発信音の後、暫くお待ちください)

Fax: 0564-54-2254(代表), 0564-55-7074(発信音の後)53

E-mail: tcci-office@yfep2.ims.ac.jp

以上

配布先 関係各位	報告書4	作成日 2013年3月8日	
	OCTA講習会&トレーニング	No. CMSI-12-33	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日程： 平成25年3月7日(木) 10:00～17:00

会場： (独) 産業技術総合研究所 臨海副都心センター
バイオ・IT 融合研究棟(別館) 会議室 1

参加費： 無料 (意見交換会参加費:3000円)

定員： 50名

主催： 主催団体:計算物質科学イニシアティブ(CMSI)、(独)産業技術総合研究所

【プログラム】

10:00-10:05 挨拶 (東北大 川勝 年洋)

10:05-10:35 OCTA の概要 (JSOL 小沢 拓)

10:35-11:20 COGNAC の機能と事例紹介 (旭化成 青柳 岳司)

11:20-12:05 SUSHI の機能と事例紹介 (日本ゼオン 本田 隆)

13:00-15:00 OCTAトレーニング 1 (JSOL 小沢 拓)

15:00-15:15 休憩

15:15-16:30 OCTAトレーニング 2 (JSOL 小沢 拓)

16:30-17:00 総合質疑応答

【お問い合わせ】

計算物質科学イニシアティブ事務局

〒277-8581 千葉県柏市柏の葉 5-1-5

TEL: 04(7136)3279 / FAX: 04(7136)3441

Email: adm-office[at]cms-initiative.jp

以上

配布先 関係各位	報告書5		作成日 2012年8月10日	
	計算材料科学研究拠点(CMRI) 第1回シンポジウム		No. CMRI-12-07	
				作成
			CMRI 事務局 門脇	

【開催】

日程:平成 24 年 6 月 18 日(月)、6 月 19 日(火)

場所:東北大学 金属材料研究所 2号館講堂

参加費: 無料 (18 日 懇親会 ※参加費 4000 円)

【概要】

材料課題が重点化されてから初の研究会であり、重点課題の遂行の為に具体的な方策の検討と、特別支援課題の設置に向けて候補課題の選定に焦点を置いたシンポジウムを開催した。材料科学関連者を主体とするこれまでよりも小規模なシンポジウムであったが内容は極めて密であった。又、CREST, JST, 新学術領域、さらには新元素戦略で計算材料科学のプロジェクトが始まっており、今後の連携に向けた情報交換の為に発表を行った。

【プログラム】

6月18日(月)

10:30 「開会にあたって」毛利 哲夫 計算材料科学研究拠点 (CMRI) 拠点長

【重点課題】司会 松宮 徹

10:45 重点課題の overview

「金属中の粒界・界面の第一原理計算：力学特性の解明に向けて」

香山 正憲 産業技術総合研究所

11:15 「OpenMX によるオーダーN 超並列第一原理計算の現状と展望」

尾崎 泰助 北陸先端科学技術大学院大学

11:55 「Fe/NbC の構造とエネルギーの第一原理計算」

澤田 英明 新日本製鐵(株)

12:25 ***** 昼 食 *****

13:30 「第一原理計算による粒界脆化の研究：鉄の焼戻し脆性と水素脆性」

山口 正剛 日本原子力研究開発機構 (JAEA)

【特別支援課題の構築に向けて I】司会 尾方 成信

14:00 特別支援課題の構築に向けて

「界面の第一原理計算からフェーズフィールド法へのマッピングについて」

大野かおる 横浜国立大学 大学院工学研究院

14:30 「凝固組織の高精度・大規模計算を目指したフェーズフィールド・モデリング」

大野 宗一 北海道大学 大学院工学研究院

「スパコン TSUBAME2.0 によるデンドライト凝固成長の超大規模計算」

高木 知弘 京都工芸繊維大学 大学院工芸科学研究科

「大規模分子動力学法による凝固過程の固液界面挙動解析と高温物性値導出」

澁田 靖 東京大学 大学院工学系研究科

15 : 30 * * * * * コーヒーブレイク * * * * *

【材料科学の大型プロジェクトとの連携 I】 司会 田中 功

16 : 00 科研費・新学術領域プロジェクト「バルクナノメタル 一常識を覆す新しい構造材料の科学」の紹介

辻 伸泰 京都大学 大学院工学研究科

【特別支援課題の構築に向けて II】 司会 大野 かおる

16 : 30 「物質中の双極子相互作用とその大規模高速計算～強誘電体メモリや強力磁石のシミュレーション～」

西松 毅 東北大学 金属材料研究所

「超大規模第一原理計算によるハイドレートを用いた新規ガス貯蔵材料の評価」

水関 博志 東北大学 金属材料研究所

「全電子混合基底法プログラム TOMBO による水素貯蔵材料開発」

佐原 亮二 東北大学 金属材料研究所

17 : 30 「Fe-Si 二元合金系の力学と熱力学特性の第一原理計算」

陳 迎 東北大学工学研究科

「第一原理計算手法を用いたナノ材料界面の機能特性の研究」

田中 真悟 産業技術総合研究所

【平成 23 年度 CMRI 若手海外派遣報告】 司会 毛利 哲夫

18 : 20 「1 次元ピーナッツ型フラレンポリマーの計算科学シミュレーション」

野田 祐輔 横浜国立大学 大学院工学府

19 : 00 * * * * * 懇親会 (ホテルベルエア) * * * * *

6 月 19 日 (火)

【特別支援課題の構築に向けて III】 司会 毛利 哲夫

9 : 35 「La-Ni 系水素吸蔵合金中の空孔形成に関する理論計算」

水野 正隆 大阪大学大学院工学研究科

「鉄基合金における結晶磁気異方性エネルギーの第一原理計算」

榎木 勝徳 九州工業大学マテリアル工学科

【特別講演】 司会 川添 良幸

10 : 35 「界面の運動を解析する数学的手法」

大塚 岳 群馬大学 大学院工学研究科

【材料科学の大型プロジェクトとの連携 II】 司会 香山 正憲

11 : 20 JST-CREST 研究「軽元素戦略に基づく鉄鋼材料のマルチスケール設計原理の創出」の紹介

古原 忠 東北大学 金属材料研究所

12:00 ***** 昼 食 *****

12:45 「第一原理計算に基づく金属結晶の相転移経路」

田中 功 京都大学 大学院工学研究科

13:15 「ハミルトニアンからの材料強度設計」と計算材料科学

毛利 哲夫 北海道大学 大学院工学研究院／東北大学 金属材料研究所

13:45 「大型プロジェクトでシミュレーション計算に期待されること」

川添 良幸 東北大学未来科学技術共同研究センター

【旅費】

旅費は、CMRI 関係者に対し予算の範囲内で援助した。

【お問い合わせ】

CMRI 事務局

email: cmri@imr.tohoku.ac.jp

主催: 計算材料科学研究拠点 (CMRI)

以上

配布先 関係各位	報告書6	作成日 2012年7月15日	
	MAterial Simulation in Petaflops era (MASP2012)	No. CMSI-12-08	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時: <ワークショップ> 2012年6月25日(月)~7月1日(日)、7月3日(火)~11日(水)

<シンポジウム> 2012年7月2日(月)、7月12日(木)~13日(金)

※懇親会: 7月2日(月)、7月12日(木)

会場: <ワークショップ> 東大物性研 セミナールーム A615

<シンポジウム> 東大物性研6F 大講義室

※懇親会: 柏キャンパス カフェテリア

参加費: 無料 (懇親会参加費 4,000円)

【プログラム】

<ワークショップ 10:00-11:30, 14:00-15:30>

講演者:

Yasutami Takada (ISSP)

Jun-ya Hasegawa (Kyoto University)

Lubos Mitas (North Carolina State University)

Hardy Gross (Max Planck Institute of Microstructure Physics)

Kazuhiro Yabana (University of Tsukuba)

Andrea Marini (National Research Council)

Michael Rohlfing (University of Osnabruck)

O. Anatole von Lilienfeld (Argonne National Laboratory)

John Dobson (Griffith University)

Minoru Otani (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology)

Tadashi Ogitsu (Lawrence Livermore National Laboratory)

Marc Koper (Leiden University)

Yoshitaka Tateyama (National Institute for Materials Science)

Michiel Sprik (University of Cambridge)

Junichiro Shiomi (The University of Tokyo)

Takahiro Yamamoto (Tokyo University of Science)

Massimiliano Di Ventra (University of California)

Hisao Nakamura (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology)

Joost VandeVondele (Eidgenössische Technische Hochschule Zürich)

Mårten Björketun (Technical University of Denmark)

Ryosuke Jinnouchi (TOYOTA Central R&D lab., Inc)

Francois Gygi (University of California)

Taisuke Ozaki (Japan Advanced Institute of Science and Technology)

<シンポジウム 7月2日>

Theme: excited state, superconductivity, and quantum monte carlo

9:30 L. Mitas (North Carolina State University)

- Spins as quantum variables in electronic structure quantum Monte Carlo calculations
- 10:00 I. Solovyev (National Institute for Materials Science)
Magnetic inversion symmetry breaking and ferroelectric activity in perovskite manganese oxides
- 10:30 H. Gross (Max Planck Institute for Materials Physics)
Reduced-density-matrix functional theory of weakly and strongly correlated systems
- 11:00 R. Arita (The University of Tokyo)
High-temperature Superconductivity in Layered Nitrides: Insights from Density-functional Theory for Superconductors
- 11:30 S. Shin (ISSP)
Laser-ARPES study on Fe-pnictide superconductors

LUNCH

- 13:30 C. Hu (Tokyo University of Science)
Nonadiabatic couplings from time-dependent density functional theory: Progress and challenges
- 14:00 K. Nobusada (Institute for Molecular Science)
Near-Field Excitation Dynamics in Nanostructures:
Nonuniform and Self-Consistent Light Matter Interaction
- 14:30 K. Misawa (Tokyo University of Agriculture and Technology)
Vibrational wave-packet control in cyanine dye molecules
- 15:00 T. Tahara (RIKEN)
Nuclear dynamics of reacting molecules studied by ultrafast spectroscopy with 10-fs pulses
- 15:30 BREAK
- 16:00 M. Rohlfing (University of Osnabruck)
Many-body perturbation theory: from molecular adsorbates to paired nanotubes
- 16:30 A. Marini (National Research Council)
Excitonic collapse in solids driven out-of-equilibrium by ultra-strong laser pulses
- 17:00 Y. Noguchi (ISSP)
Massively parallel all-electron GW+Bethe-Salpeter calculations: development and application
- 17:30 K. Yamauchi (Osaka University)
Charge-order-induced multiferroicity in transition-metal oxides
- 18:00 Banquet

<シンポジウム 7月12日>

Theme: dissipation, van der Waals interaction, and interface

- 13:00 M. Di Ventra (University of California)
Stochastic Time-Dependent Current-DFT: a functional theory of open quantum systems
- 13:30 K. Ando (Kyoto University)
Electron transfer pathway analysis in large biomolecules
- 14:00 Y. Gohda (The University of Tokyo)
First-principles interface science: Structures and electronic states
- 14:30 H. Katayama-Yoshida (Osaka University)
Computational Nano-Materials Design of High-Efficiency Photovoltaic Solar Cells in Cu(In,Ga)Se₂ and Cu₂ZnSn(Se,S)₄ by Two-dimensional Spinodal Nano-decomposition: Beyond-LDA and Multi-scale Simulation
- 15:00 BREAK

- 15:30 J. Dobson (Griffith University)
Some 5th rung correlation energy functionals
- 16:00 O. Anatole von Lilienfeld (Argonne National Laboratory)
Fast and accurate modeling of interatomic energies with machine learning
- 16:30 T. Ono (Osaka University)
First-principles study on transport properties of carbon based nano-systems
- 17:00 POSTER Session
- 18:00 Banquet

<シンポジウム 7月13日>

Theme: interface and large scale simulation

- 9:40 M. Sprik (University of Cambridge)
Density functional theory modelling of transition metal oxide-water interfaces
- 10:10 M. Bjorketun (Technical University of Denmark)
Atomic-scale modeling of the electrochemical interface
- 10:40 T. Ogitsu (Lawrence Livermore National Laboratory)
Improving performance of electrochemical devices: How can ab-initio simulations help?
- 11:10 BREAK
- 11:30 F. Gygi (University of California)
Acceleration of Hartree-Fock and Hybrid Density Functional Simulations using Recursive Subspace Bisection
- 12:00 J. Iwata (The University of Tokyo)
Real-space grid density functional theory calculations
- 12:30 I. Hamada (Tohoku University)
Van der Waals density functional applied to adsorption systems

【お問い合わせ】

CMSI 事務局

email: adm-office@cms-initiative.jp

TEL: 04-7136-3279

以上

配布先 関係各位	報告書7	作成日 2012年8月27日	
	第1部会「新物質新量子相の基礎科学」 夏の学校	No. CMSI-12-11	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日 時: 2012年8月20日(月)~25日(土)
 会 場: タカミヤビレッジホテル樹林 (山形県蔵王)
 宿泊費: 1泊 11,000円 (3食付、2~3人部屋利用の場合)
 13,000円 (3食付、1人部屋利用の場合)
 定員: 50名

【開催主旨】

この夏の学校は、CMSI第1部会の研究テーマ新量子相・新物質の基礎科学を中心として、新たな研究手法の開発や、そこから得られる物理や化学について分野を超えて交流を深め、今後の研究に資するために、特に年齢制限は設けませんが、若手(と自覚する)研究者を中心に寝食を共にして、突っ込んだ議論を行なうためのものです。

興味があるが、具体的な計算方法を知りたいとか、実際の計算の精度や限界を知りたいなど、論文だけからでは得られないような問題についても議論を推奨し、またここで新たな共同研究の芽が育つことも期待しています。

テーマは非平衡および強相関で、それぞれ前半と後半の期間に焦点を当てる予定です。

滞在型で1日のレクチャーの数は少数に限定して、参加者同士での議論の時間を十分にとり、ネットアクセスのあるオフィススペースを設けて、研究と議論を並行して行える環境を設定する予定です。講義時間外の議論は講義のテーマだけにとらわれず、広く共通の興味について自由に相手を見つけて議論していただくことを推奨します。興味の集まる課題があればスペシャルセッションで議論の場を設けることも考えられます。

【プログラム】

<8月20日(月)>

- 13:00-13:10 はじめに (天能精一郎 神戸大学)
 13:10-14:10 分子系の電子相関理論の基礎と多参照摂動理論(1) (講師: 中野晴之先生 (九州大学))
 15:30-16:30 分子系の電子相関理論の基礎と多参照摂動理論(2) (講師: 中野晴之先生 (九州大学))
 17:00-18:00 電子とプロトンのダイナミクス(1) (講師: 安藤耕司先生 (京都大学))

<8月21日(火)>

- 09:30-10:30 電子とプロトンのダイナミクス(2) (講師: 安藤耕司先生 (京都大学))
 11:00-12:00 量子化学計算における相対論効果(1) (講師: 中嶋隆人先生 (計算科学研究機構))
 15:00-16:00 ディスカッション (リーダー: 天能) 「量子化学計算諸手法の比較と展望」
 20:00-21:00 ショートトーク1 (10分) ※※ショートトークは研究発表というよりも話題提供のスタンス。
 ショートトーク2 (10分)
 ショートトーク3 (10分)
 ディスカッション(30分)

<8月22日(水)>

- 09:30-10:30 量子化学計算における相対論効果(2) (講師: 中嶋隆人先生 (計算科学研究機構))
 11:00-12:00 強相関電子系の非平衡相転移と非平衡動的平均場理論(1) (講師: 岡隆史先生 (東京大学))
 14:00-17:00 自由討論

20:00-21:00 ショートトークス1 (10分)
 ショートトークス2 (10分)
 ショートトークス3 (10分)
 ディスカッション(30分)

<8月23日(木)>

09:30-10:30 強相関電子系の非平衡相転移と非平衡動的平均場理論(2) (講師: 岡隆史先生(東京大学))
11:00-12:00 テンソルネット(英語による講義) (講師: Tao Xiang 先生(北京))
15:00-16:00 テンソルネット(英語による講義) (講師: Tao Xiang 先生(北京))
20:00-21:00 ショートトークス1 (10分)
 ショートトークス2 (10分)
 ショートトークス3 (10分)
 ディスカッション(30分)

<8月24日(金)>

09:30-10:30 第一原理 MD の基礎と応用(1) (講師: 森川良忠先生(大阪大学))
11:00-12:00 第一原理 MD の基礎と応用(2) (講師: 森川良忠先生(大阪大学))
14:00-15:00 ディスカッション (リーダー:遠山) 「非平衡の計算科学—手法と応用最前線・これからを探る—」
20:00-21:00 ショートトークス1 (10分)
 ショートトークス2 (10分)
 ショートトークス3 (10分)
 ディスカッション(30分)

<8月25日(土)>

09:30-10:30 共鳴 HF 法で見る電子と格子の量子揺らぎ(1) (講師: 富田憲一先生(山形大学))
11:00-12:00 共鳴 HF 法で見る電子と格子の量子揺らぎ(2) (講師: 富田憲一先生(山形大学))
13:00-14:00 ディスカッション (リーダー:今田) 「強相関電子系の新しい方法論」
 終わりに (今田)

【お問い合わせ】

CMSI 事務局

email: adm-office@cms-initiative.jp

TEL: 04-7136-3279

以上

配布先 関係各位	報告書8	作成日 2012年10月11日	
	計算分子科学研究拠点 TCCI 第3回研究会	No. CMSI-12-13	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

主催： 分子科学研究所 計算分子科学研究拠点
 日時： 2012年10月9日(火)13:30～17:55 及び懇親会
 2012年10月10日(水)9:30～16:25
 場所： 自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター 大会議室
 参加費： 無料（但し、懇親会は5,000円）
 懇親会： 自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター 中会議室

【プログラム】

第1日目:2012年10月9日(火)

★セッション1:ご挨拶、特別講演、招待講演、CMSI 研究員発表

13:30-13:40 (東大院総合文化/分子研)高塚 和夫 開会の辞、拠点報告

13:40-13:45 (分子科学研究所長) 大峯 巖 ご挨拶

13:45-13:50 (文部科学省研究振興局情報課計算科学推進室長)

林 孝浩 様 ご挨拶

13:50-14:35 (京大院工) 田中 庸裕 特別講演

「触媒化学で解きたいことー光触媒のメカニズムとナノ粒子創成のダイナミクス」

14:35-15:05 (横浜市大院総合理工)池口 満徳 招待講演1

「F1 分子モーターの分子シミュレーション」

15:05-15:25 (東大院総合文化/東大院工)城野 亮太 講演1

「有機・色素増感型太陽電池の基礎過程の研究」

15:25-15:45 (名大院工) 藤本 和士 講演2

「ミセルの理論的研究:生成、構造安定性、可溶化」

★セッション2:将来のHPCIについて

16:05-16:35 (理研 AICS) 富田 浩文 招待講演2

「将来の HPCI のあり方調査研究についてーアプリケーション分野の立場からー」

16:35-17:05 (理研 AICS) 杉田 有治 招待講演3

「ライフサイエンス分野での将来の HPCI のあり方について」

17:05-17:55 (分子研) 信定 克幸、(分子研) 石村 和也、(名大院工)安藤 嘉倫

TCCI 内報告「将来の HPCI のあり方調査研究に対する取り組み」

18:10-20:00 ☆懇親会 @自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター 中会議室 (会費¥5000)

第2日目:2012年10月10日(水)

★セッション3:CMSI 研究員発表

9:30-9:50 (神戸大院システム情報)大西 裕也 講演3

「露わに相関した三次の摂動エネルギーに関する理論的研究」

9:50-10:10 (神戸大院システム情報) 大塚 勇起 講演4

「スレーター行列式を使用した量子モンテカルロ法:F12 法との組み合わせによる高精度計算」

10:10-10:30(分子研/名大院工) Qing-Miao Nie 講演5

「Free energy landscapes of interacting myosin II and actin filament in the coupled sliding and binding processes of force-generation: A parallel molecular dynamics study」

★セッション4:CMSI 研究員発表

10:50-11:10 (分子研) 野田 真史 講演6

「実時間・実空間電子ダイナミクス法プログラムの開発の現状」

11:10-11:30 (分子研/名大院理) 榮 慶丈 講演7

「タンパク質の折り畳みシミュレーションに関するこれまでの取り組み」

11:30-11:50 (分子研/京大化研) 水口 朋子 講演8

「膜貫通タンパク質の膜内配置に関する自由エネルギー解析」

★セッション5:招待講演

13:20-13:50 (鳥取大院工) 吉本 芳英 招待講演4

「GPUを活用した hybrid 型交換相関汎関数の平面波基底第一原理計算プログラムへの実装と水分子系への応用」

★セッション6:将来のHPCIについて

13:50-14:30 自由討論「将来の HPCI と分子科学について」

★セッション7:CMSI 研究員発表、まとめ

14:50-15:10 (分子研/早大院先進理工) 西澤 宏晃 講演9

「大規模分子動力学計算を目指した分割統治型理論と並列化手法の開発」

15:10-15:30 (岡山大院自然科学) 矢ヶ崎 琢磨 講演10

「水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性」

15:30-15:50 (分子研/金沢大理工) 河津 励 講演11

「インスタントンを用いたトンネル分裂の計算」

15:50-16:10 (東大院総合文化) 米原 丈博 講演12

「密集した励起状態を遍歴する電子の動力学と光化学過程における波束の非断熱分岐の記述」

16:10-16:25 (東大院総合文化/分子研) 高塚 和夫

まとめ、閉会の辞

【お問い合わせ】

お問い合わせ先: 〒444-8585 岡崎市明大寺町西郷中 38

分子科学研究所 計算分子科学研究拠点事務局

電話:0564-55-7074(発信音の後、暫くお待ちください)

Fax: 0564-54-2254(代表), 0564-55-7074(発信音の後)53

E-mail: tcci-office@yfep2.ims.ac.jp

以上

配布先 関係各位	報告書9	作成日 2012年10月22日	
	第1回 CMSI 元素戦略シンポジウム	No. CMSI-12-14	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時： 2012年10月20日(土) 13:00 - 17:10 (17:30 - 19:00 懇談会)

会場： TKP 東京駅八重洲カンファレンスセンター ホール 5A

参加費： 無料 (懇談会参加費 2,000 円)

【開催主旨】

平成24年6月にスタートした文科省元素戦略プロジェクト(研究拠点形成型)において、CMSIは各拠点に共通となる基盤的計算機シミュレーション手法を検討する役割を担っています。

今回はその一環として、磁石材料、構造材料、電子材料、触媒・電池材料の4拠点の電子論グループリーダーより各拠点の計画と課題をお話いただく機会を設け、理論研究の拠点共通課題の抽出と共有を図ります。実験研究者も含めた幅広い領域の方々にご参加いただき、現実と理想を結ぶ計算物質科学の新手法の開拓を目指して、議論を深めます。

【プログラム】

13:00 Opening

13:15-14:00 電子材料拠点

「電子材料拠点電子論グループの計画と課題 I」 東工大 神谷利夫

「電子材料拠点電子論グループの計画と課題 II」 京大 大場史康

14:00-14:45 磁石材料拠点

「磁石材料拠点電子論グループの計画と課題」 産総研 三宅隆

14:45-15:00 Coffee Break

15:00-15:45 構造材料拠点

「フォノン計算の構造材料研究への応用」 京大 田中 功

「構造材料中の粒界・界面の局所エネルギー・局所応力解析」 産総研 香山正憲

15:45-16:30 触媒・電池拠点

「触媒・電池材料拠点電子論グループの計画と課題 I」 分子研 江原正博

「触媒・電池材料拠点電子論グループの計画と課題 II」 産総研 大谷実

16:30-17:10 全体討論(共通基盤研究について)

17:30-19:00 懇談会

【お問い合わせ】

CMSI 事務局

email: adm-office@cms-initiative.jp

以上

配布先 関係各位	報告書10		作成日 2012年10月24日	
	物性研究所 計算物質科学研究センター		No. CMSI-12-15	
	第2回シンポジウム			作成
	～実験・計測・計算連携の新展開～			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時: 2012年10月22日(月) 13:30 - 17:30

(18:00～ 懇親会 東大柏キャンパス内レストラン”カフェテリア”にて)

23日(火) 9:30 - 17:30

会場: 東京大学物性研究所 6階大講義室

参加費: 無料 (懇親会参加費 4,000円)

【概要】

SPring-8、J-PARC、SACLA 等の大型計測施設がもたらす最新の研究成果と、「京」等の HPCI を利用する計算物質科学のテーマを取り上げ、元素戦略プロジェクトに代表される国家的・社会的な課題の解決を加速するための実験・計測・計算が連携して取り組むべき新しい基礎理論等を議論いたします。

【プログラム】

[10月22日(月)]

- 13:30-13:40 挨拶 (家泰弘 東大・物性研究所)
- 13:40-13:50 挨拶 (林孝浩 文部科学省 情報課)
- 13:50-14:00 計算物質科学研究センターの活動 (常行真司 東大院・理/物性研究所)
- 14:00-14:30 超高速コヒーレント制御実験における大規模計算への期待
(三沢和彦 東京農工大 工学研究院)
- 14:30-15:00 軟X線分光による水の価電子状態観測と局所構造の議論 (原田慈久 東大・物性研究所)
- 15:00-15:30 界面活性剤の構造形成の粗視化シミュレーション (野口博司 東大物性研究所)
- 15:30-16:00 コーヒーブレイク
- 16:00-16:30 逆モンテカルロ法とDFT/MD 計算を組み合わせた高速相変化材料の相変化メカニズムの解明
(小原真司 JASRI/SPring-8)
- 16:30-17:00 先端スペクトロスコープと連携した強相関電子系の励起ダイナミクス研究 (遠山貴己 京都大)
- 17:00-17:30 Ta₂O₅ の構造と酸素空孔 (杉野修 東大・物性研究所)
- 18:00 懇親会 (カフェテリアにて開催予定)

[10月23日(火)]

- 09:30-10:00 分子内電子ダイナミクスの直接観測について (高塚和夫 東大)
- 10:00-10:30 液体の超高速光電子分光 (鈴木俊法 京都大)
- 10:30-11:00 量子磁性状態の非磁性制御 (宮下精二 東大)
- 11:00-11:30 コーヒーブレイク
- 11:30-12:00 第一原理計算による磁石材料の物性解明 (三宅隆 産総研・ナノシステム)
- 12:00-12:30 パルス中性子を用いた新しい中性子イメージング法の開発
(篠原武尚 原研・J-PARC センター)
- 12:30-13:30 昼食

添付資料 5

- 13:30-14:00 強誘電体中の双極子相互作用の高速計算 (西松毅 東北大)
- 14:00-14:30 GPU スパコンにおけるフェーズフィールド法による樹枝状凝固成長の大規模シミュレーション (青木尊之 東工大)
- 14:30-15:00 アモルファス固体の力学物性 - レプリカ法+液体密度汎関数法による第一原理的計算 (吉野元 大阪大)
- 15:00-15:30 J-PARC, MLF 中性子実験装置におけるデータと求められる計算環境 (稲村泰弘 原研・J-PARC センター中性子利用)
- 15:30-16:00 コーヒーブレイク
- 16:00-16:30 ランダム系物質の動的構造因子の理解に向けて (川北至信 原研利用セク)
- 16:30-17:00 ナノ粒子充填ゴムの辞空間構造解析とシミュレーション応用 (岸本浩通 住友ゴム)
- 17:00-17:30 コヒーレントX線回折イメージングによる非結晶粒子の構造解析 (中迫雅由 慶応大)
- 17:30 closing

【お問い合わせ】

CMSI 事務局

email: adm-office@cms-initiative.jp

TEL: 04-7136-3279

以上

配布先 関係各位	報告書11		作成日 2012年11月19日	
	TCCI 第2回実験化学との交流シンポジウム	No. CMSI-12-17		
			作成	
			CMSI事務局 三浦	

【開催要項】

日時: 2012年11月16日(金) 13:30~18:55 (19:10-20:40 懇親会)

2012年11月17日(土) 9:30~17:15

場所: 京都大学福井謙一記念研究センター

(懇親会会場: ホテルアバンシエル京都(旧ホリデイ・イン京都))

主催: 分子科学研究所 計算分子科学研究拠点

共催: 財団法人計算科学振興財団 スーパーコンピューティング技術産業応用協議会

【開催主旨】

平成24年6月にスタートした文科省元素戦略プロジェクト(研究拠点形成型)において、CMSIは各拠点に共通となる基盤的計算機シミュレーション手法を検討する役割を担っています。

今回はその一環として、磁石材料、構造材料、電子材料、触媒・電池材料の4拠点の電子論グループリーダーより各拠点の計画と課題をお話しいただく機会を設け、理論研究の拠点共通課題の抽出と共有を図ります。実験研究者も含めた幅広い領域の方々にご参加いただき、現実と理想を結ぶ計算物質科学の新手法の開拓を目指して、議論を深めます。

【プログラム】

座長 武次 徹也(北大院理)

<第1日目:11月16日(金) 13:30~18:55>

セッション1:

13:30-13:40 開会の辞

拠点報告 高塚 和夫(東大院総合文化/分子研)

13:40-14:05 TCCI 報告1

「ハイドレートの多形と安定限界」 田中 秀樹(岡山大院自然科学)

14:05-14:55 招待講演1

「クラスレートハイドレートの結晶構造と熱物性:実験からわかること計算からわかること」

大村 亮(慶大理工)

14:55-15:45 招待講演2

「有機系太陽電池の高効率化に向けて」 瀬川 浩司(東大先端研)

15:45-16:35 招待講演3

「超高速光電子分光による気相および液相の非断熱化学ダイナミクスの研究」 鈴木 俊法(京大院理)

16:35-16:50 休憩

座長 北尾 彰朗(東大分生研)

セッション2:

16:50-17:15 TCCI 報告2

「ポリオウイルスカプシドの分子動力学計算」 岡崎 進(名大院工)

17:15-18:05 招待講演4

添付資料 5

「ポリオウイルス感染と生体分子(仮題)」 野本 明男(微生物化研)

18:05-18:55 招待講演 5

「多機能性エンベロープ型ナノ構造体の創製とナノ医療への展開」 原島 秀吉(北大院薬)

18:55-19:10 休憩・移動

19:10-20:40 懇親会(場所:ホテル アバンシエル京都)

<第2日目:11月17日(土)9:30~17:15>

座長 吉澤 一成(九大先導物質化研)

セッション 3:

9:30-9:55 TCCI 報告 3

「相界面における電荷移動状態と太陽光エネルギー変換」 山下 晃一(東大院工)

9:55-10:20 TCCI 報告 4

「近接場光ナノ空間反応場形成と光エネルギー変換」 信定 克幸(分子研)

10:20-11:10 招待講演 6

「高配位および低配位典型元素の実験研究と計算化学」 山本 陽介(広島大院理)

11:10-12:00 招待講演 7

「固液界面の電子移動に起因する新しい物性化学」 阿波賀 邦夫(名大院理)

19:10-20:40 昼食・休憩

座長 高塚 和夫(分子研/東大院総合文化)

セッション 4:

13:30-13:55 TCCI 報告 5

「高周期元素の結合と構造」 永瀬 茂(京大福井センター)

13:55-14:45 招待講演 8

「多孔性金属錯体によるメゾスコピック配位空間の化学」 北川 進(京大 iCeMS)

14:45-15:35 招待講演 9

「電子顕微鏡による単分子・実時間イメージング(SMRT-TEM)で拓く新科学」 中村 栄一(東大院理)

15:35-15:50 休憩

座長 中野 雅由(阪大院基礎工)

セッション 5:

15:50-16:15 TCCI 報告 6

「光物性化学と微粒子触媒における実験との協力研究」 江原 正博(分子研)

16:15-17:05 招待講演 10

「蓄電池用電極/電解質界面での電荷移動反応ーリチウムイオン電池を中心にー」 安部 武志(京大院工)

17:05-17:15 まとめ、閉会の辞 榊 茂好(京大福井センター)

【お問い合わせ】

分子科学研究所 計算分子科学研究拠点事務局

電話:0564-55-7074 Fax: 0564-54-2254(代表), 0564-55-7074(発信音の後)53

E-mail: tcci-office@yfep2.ims.ac.jp

以上

配布先 関係各位	報告書12		作成日 2012年12月6日	
	第3回 CMSI 研究会 ～超並列計算が拓く新しい計算物質科学～		No. CMSI-12-18	
				作成
			CMSI 事務局 三浦	

【開催要項】

日時: 2012年12月3日(月)10:00～5日(水)17:10

(12月4日(火)18:00から懇親会)

会場: 自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター

参加費: 無料(懇親会参加費 4,000円程度)

【プログラム】

<12月3日(月)>

- 10:00-12:05 戦略課題1「新量子相・新物質の基礎科学」・部会全体 (20分)・研究課題 (15分 x 7件)
 12:05-13:45 昼休み(コーヒーブレイク)
 13:45-14:15 戦略課題1「新量子相・新物質の基礎科学」・研究課題 (15分 x 2件)
 14:15-15:35 戦略課題2「次世代先端デバイス科学」・部会全体 (20分)・研究課題 (15分 x 4件)
 15:35-15:50 コーヒーブレイク
 15:50-17:05 戦略課題2「次世代先端デバイス科学」・研究課題 (15分 x 5件)
 17:05-17:20 戦略課題1「新量子相・新物質の基礎科学」・研究課題 (15分 x 1件)
 17:20-17:50 招待講演 「超並列でFFTは高速に動かせるか？」 黒田明義(理化学研究所)
 17:50-18:00 コーヒーブレイク
 18:00-19:00 討論会 「将来のスパコンのありかた検討会」(HPCIコンソーシアム共催)

<12月4日(火)>

- 9:00-10:35 戦略課題3「分子機能と物質変換」・部会全体 (20分)・研究課題 (15分 x 5件)
 10:35-10:50 コーヒーブレイク
 10:50-11:50 戦略課題3「分子機能と物質変換」・研究課題 (15分 x 4件)
 11:50-12:20 戦略課題4「エネルギー変換」・研究課題 (15分 x 2件)
 12:20-13:50 昼休み(コーヒーブレイク)
 13:50-15:05 一般課題 (15分 x 5件)
 15:05-15:20 コーヒーブレイク
 15:20-16:05 分野拠点課題・研究課題(15分 x 3件)
 16:05-16:20 戦略課題4「エネルギー変換」・研究課題 (15分 x 1件)
 16:20-16:50 招待講演 「第一原理計算に基づいたマテリアルズ・インフォマティクス」田中功(京都大学)
 16:50-18:15 ポスターセッション&コーヒーブレイク
 18:30～ 懇親会

<12月5日(水)>

- 9:00-10:35 戦略課題4「エネルギー変換」・部会全体 (20分)・研究課題 (15分 x 5件)
 10:35-10:50 コーヒーブレイク
 10:50-11:50 戦略課題4「エネルギー変換」・研究課題 (15分 x 4件)
 11:50-13:20 昼休み(コーヒーブレイク)
 13:20-14:25 材料戦略課題・特別支援課題提案・部会全体(20分)・研究課題(15分 x 3件)

14:25-14:40 コーヒーブレイク
14:40-15:40 計算物質科学分野振興
15:40～ 閉会挨拶
16:00-18:10 企画室会議(担当者のみ)

【お問い合わせ】

CMSI 事務局

email: adm-office@cms-initiative.jp

TEL: 04-7136-3279

以上

添付資料 5

配布先 関係各位	報告書13		作成日 2013年1月14日	
	物性研究所共同利用スーパーコンピュータ		No. CMSI-12-23	
	計算物質科学研究センター(CCMS)			作成
	元素戦略プロジェクト 合同研究会 「計算物性物理学の新展開」			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時: 2013年1月10日(木) 13:00-18:00

11日(金) 10:00-17:30

会場: 東京大学物性研究所(柏キャンパス) 6階大講義室

懇親会: 1月10日(木) 18:00- 柏キャンパス内カフェテリアにて

(参加費: 4,000円 [学生 2,000円])

【開催主旨】

本年度は共同利用スパコン (System A,B) の導入後3年目を迎えると共に京コンピュータが共用を開始し、多くの成果が上がっている。来季からの System C の稼働、約2年後の System A,B の更新、将来のエクサコンピュータの出現によりそれがさらに加速されようとしている。元素戦略プロジェクトの発足という形で応用との結びつきが強まっている。これから先、計算物性物理学はどのような発展を遂げるのであろうか。共同利用、元素戦略、エクサコンピューティング等のプロジェクトで活躍中の研究者から現状とこれからの展開について講演していただき、これからの展開を考えるための短期研究会としたい。本研究会は、共同利用スパコン成果報告会を兼ねる。

【プログラム】

<1月10日(木)>

- 13:00-13:30 [特別講演] 松岡 聡(東京工業大学学術国際情報センター)
我が国初のペタフロップススパコン TSUBAME2.0 と 3.0 への進化
- 13:30-13:50 宮崎 州正(筑波大学)
ガラス転移とジャミング転移の平均場描像
- 13:50-14:10 川崎 猛史(京都大学)
過冷却液体における動的不均一性の階層性: 構造再配置運動と低周波振動運動
- 14:10-14:30 沖津 康平(東京大学)
実験とシミュレーションによる 3,4,5,6,8,12 波X線ピンホールトポグラフ
- 14:30-14:50 岡本 祐幸(名古屋大学)
スピン系および分子系の拡張アンサンブルシミュレーション
- 14:50-15:10 - 休憩 -
- 15:10-15:30 藤井 慎太郎(東京工業大学)
グラフェンナノ構造のプローブ顕微鏡計測と電子状態計算
- 15:30-15:50 笠松 秀輔(東京大学物性研究所)
軌道分離法によるナノキャパシタの第一原理シミュレーション
- 15:50-16:10 只野 央将(東京大学)
第一原理に基づくI型クラスレート化合物の格子熱伝導解析
- 16:10-16:30 吉澤 香奈子(東京大学物性研究所)
平面波基底第一原理計算コードの開発とソースコードの公開へ向けて
- 16:30-18:00 ポスターセッション
- 18:00- 懇親会(柏キャンパスカフェテリア、参加費 4,000円 [学生 2,000円])

<1月11日(金)>

- 10:00-10:30 [元素戦略特別講演] 大場 史康(京都大学)
酸化物半導体における点欠陥の原子・電子構造と機能
- 10:30-11:00 [元素戦略特別講演] 東後 篤史(京都大学)
第一原理フォノン計算と自動計算環境
- 11:00-11:10 - 休憩 -
- 11:10-11:30 渡邊 聡(東京大学)
酸化タンタル原子スイッチに関する第一原理計算
- 11:30-11:50 小田 竜樹(金沢大学)
電子添加された Ti/Si(111)表面における光電子分光スペクトルへの考察
- 11:50-12:10 [特別講演] 吉本 芳英(鳥取大学)
計算物性物理の発展のためのコンピュータ活用の考え方
- 12:10-13:10 - 昼食 -
- 13:10-13:40 ディスカッション
- 13:40-14:00 宇田川 将文(東京大学)
スピニアイス伝導系の異常ホール効果
- 14:00-14:20 柳瀬 陽一(新潟大学)
スピン三重項超伝導体のスピン軌道相互作用とdベクトル
- 14:20-14:40 堀田 貴嗣(首都大学東京)
電子・フォノン系の近藤効果の数値繰り込み群法による研究
- 14:40-15:10 - コーヒーブレイク -
- 15:10-15:30 柳澤 孝(産業技術総合研究所)
二次元ハバードモデルの電子状態の数値的研究
- 15:30-15:50 佐藤 年裕(東京大学物性研究所)
クラスタ動的平均場理論を用いた強相関電子系における光学伝導度の数値的研究
- 15:50-16:00 - 休憩 -
- 16:00-16:30 [特別講演] Roderich Moessner (Max Planck Institute for the Physics of Complex Systems)
Dipolar order by disorder in the classical kagome Heisenberg antiferromagnet
- 16:30-17:00 [元素戦略特別講演] 土浦 宏紀(東北大学)
永久磁石材料の保磁力機構に関する計算物理学的アプローチ
- 17:00-17:30 [元素戦略特別講演] 安藤 康伸(産業技術総合研究所)
次世代二次電池開発に向けた ab initio MD 及び Informatics による取り組み

【主催】

物性研究所スーパーコンピュータ共同利用
物性研究所附属計算物質科学研究センター(CCMS)
文部科学省元素戦略プロジェクト

【お問い合わせ】

CMSI 事務局
email: adm-office@cms-initiative.jp
TEL: 04-7136-3279

以上

配布先 関係各位	報告書14	作成日 2013年1月16日	
	MPI プログラミング講習会	No. CMSI-12-24	
			作成
			CMRI 事務局 門脇

【開催】

日時: 平成 25 年 1 月 15 日(火)9:30~17:30

場所: 九州大学 情報基盤研究開発センター 3 階多目的講習室(福岡市東区箱崎 6-10-1 箱崎キャンパス)

定員: 50-60 名程度(先着順)

講師: 青山幸也氏 高度情報科学技術研究機構(RIST)神戸センター

受講料: 無料

主催: 東北大学金属材料研究所 計算材料科学研究拠点(CMRI)

共催: 九州大学情報基盤研究開発センター、高度情報科学技術研究機構(RIST)

世話人: 西田晃先生(九州大学), 眞山剛先生(熊本大学), 徳永辰也先生(鹿児島大学)、大谷博司先生(九州工業大学)

【テキスト】

- ・「チューニング技法入門」(旧「チューニング技法虎の巻」)
- ・「並列プログラミング入門 MPI 版」(旧「並列プログラミング虎の巻 MPI 版」)
- ・「京」の産業利用に関するご紹介

【お問い合わせ】

CMRI 事務局

email: cmri@imr.tohoku.ac.jp

主催: 計算材料科学研究拠点(CMRI)

以上

配布先 関係各位	報告書15	作成日 2013年1月23日	
	計算材料科学研究拠点 第2回シンポジウム	No. CMSI-12-25	
			作成
			CMRI 事務局 門脇

【開催】

日程:平成 25 年 1 月 21 日(月)、1 月 22 日(火)

場所:東北大学 金属材料研究所 2 号館講堂

懇親会:1 月 21 日(月) 於、東北大学金属材料研究所 2 号館会議室 ※参加費 4000 円

【プログラム】

1 月 21 日 (月)

13:00 【開会の挨拶】

新家光雄 東北大学金属材料研究所所長

【来賓の挨拶・講演】「京」を中核とした HPCI の構築と HPCI 戦略プログラムの概要

林 孝浩 文部科学省 計算科学技術推進室

●セッション：凝固の数理

13:30 Phase-field 法による dendrite 競合成長の超大規模計算

高木知弘 京都工芸繊維大学 大学院工芸科学研究科

14:00 フェーズフィールド法による Mg-Y-Zn 合金凝固偏析計算

大出真知子 物質・材料研究機構 理論計算科学ユニット

14:30 EBSD による三次元粒選択過程の解析

江阪久雄、荒尾友香、篠塚計 防衛大学校 機能材料工学科

●セッション：セラミックス材料のマルチスケール設計・制御

15:20 強誘電体の電気熱量効果の直接的な分子動力学計算

西松 毅 東北大学金属材料研究所

15:50 第一原理計算と原子分解能ナノ構造解析の連携による Li イオン電池材料の研究

森分博紀 ファインセラミックスセンター

16:20 A サイト設計による ABO₃ 型ペロブスカイト構造非鉛圧電体の開発

符 徳勝 静岡大学 若手グローバル研究リーダー育成拠点

16:50 電子ドーピングによる強誘電性の消失と強誘電性の起源に関する第一原理計算

岩崎誉志紀 太陽誘電(株) 開発研究所

17:40 【特別講演】スピン流とスピントロニクス ー材料学的視点からー

高梨弘毅 東北大学金属材料研究所

18:25 【重点課題現状報告】

澤田英明 新日鐵住金(株)

18:40 懇親会 金研 2 号館 1 階会議室

1月22日(火)

●セッション：全電子スペクトルとダイナミクス

- 9:00 TOMBOによる全電子スペクトル計算
大野かおる 横浜国立大学大学院工学研究院
H2 spill-over
佐原亮二 東北大学金属材料研究所
- 9:30 第一原理計算によるLiイオン二次電池正極材料の充放電機構の解明
田村友幸 名古屋工業大学 若手研究イノベータ養成センター
- 10:00 第一原理計算を用いたELNESおよびXANESの理論解析
溝口照康 東京大学 生産技術研究所
- 10:30 スピン分解ARPESによるディラック電子系の研究
相馬清吾、高橋隆 東北大学 WPI

●セッション：鉄鋼材料の磁性

- 11:20 鉄鋼材料における磁性の重要性について
寺倉清之 北陸先端科学技術大学院大学
- 12:00 鉄鋼材料研究における第一原理計算の利用の現状と将来展望
大塚秀幸 物質・材料研究機構 強磁場ステーション
- 13:30 【特別講演】腐食防食分野での計算科学の現状と将来展開
藤本慎司 大阪大学大学院工学研究科

●国際セッション

- 14:15 Phase-field formulation for heterogeneous systems and its implementation
into the OpenPhase library
Ingo Steinbach & Oleg Shchyglo ICAMS, Ruhr-University, Germany
- 15:00 Down to the core of TOMBO: Hyperfine interactions and beyond
M. Sluiter, Delft Univ. of Technology
- 15:45 Ab initio simulations of paramagnetic state: effects of temperature and electron correlations.
Igor Abrikoso, Department of Physics and Measurement Technology (IFM), Linköpings University
- 16:30 閉会の挨拶
毛利哲夫 計算材料科学研究拠点長 北海道大学／東北大学金属材料研究所

【お問い合わせ】

CMRI 事務局
email: cmri@imr.tohoku.ac.jp

主催: 計算材料科学研究拠点 (CMRI)

以上

配布先 関係各位	報告書16	作成日 2013年1月25日	
	TCCI 第2回産学連携シンポジウム	No. CMSI-12-26	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日 時: 2013年1月24日(木) 13:30~17:35 及び懇親会

場 所: 大阪大学中之島センター10階 佐治敬三メモリアルホール

参加費: 無料 (但し、懇親会は5,000円)

懇親会: 9階 会議室1、2

主 催: 分子科学研究所 計算分子科学研究拠点

共 催: 財団法人計算科学振興財団 スーパーコンピューティング技術産業応用協議会

【プログラム】

座長: 太田 浩二(京大 触媒・電池元素戦略)

セッション1: 京利用と企業の期待と人材

13:30-13:35 開会の辞

高塚 和夫(東大院総合文化/分子研)

13:35-13:40 ご挨拶

高田 章(スーパーコンピューティング技術産業応用協議会/旭硝子株式会社)

13:40-14:10 「大規模分子系の量子化学計算」

北浦 和夫(神戸大院システム情報)

14:10-14:40 「DSPにおけるスパコン京の利用」

山崎 一人(大日本住友製薬株式会社)

14:40-15:10 「FOCUS ～スパコン産業利用への取り組み～」

安井 宏(財団法人計算科学振興財団)

座長: 高塚 和夫(東大院総合文化/分子研)

セッション2: 大学の何が役に立ったか?

15:30-15:50 「企業における計算化学研究を通して感じたこと—大学で学んだことをいかに役立てるか—」

北畑 雅弘(東レ株式会社)

15:50-16:10 「企業の研究開発と計算化学」

越智 紀章(新日鉄住金化学株式会社)

16:10-16:30 「計算科学は企業で役に立つ」

澤田 敏彦(富士フイルム株式会社)

16:30-16:50 「産学連携の現場から大学教育を振り返る」

大脇 創(日産自動車株式会社)

16:50-17:20 全体質疑

17:20-17:35 本日のまとめ (TCCI)

17:50-19:20 懇親会(場所:大阪大学 中之島センター 9階 会議室1、2)

【お問い合わせ】

分子科学研究所 計算分子科学研究拠点事務局

電話:0564-55-7074(発信音の後、暫くお待ちください)

Fax: 0564-54-2254(代表), 0564-55-7074(発信音の後)53

E-mail: tcci-office@yfef2.ims.ac.jp

以上

配布先 関係各位	報告書17		作成日 2012年5月9日	
	第4回 CMSI 産官学連続研究会 「産業界における OCTA 活用の現状」		No. CMSI-12-02	
				作成
				CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日程： 平成24年5月8日(火) 13:00～17:00

会場： 秋葉原ダイビル5階 カンファレンスフロア5B

参加費： 無料

【開催主旨】

今回の研究会は、ソフトマテリアルシミュレーション分野で活用されている OCTA を取り上げました。2002 年、経済産業省出資の「高機能材料設計プラットフォームの研究開発(通称 土井プロジェクト)」終了時に公開された OCTA は、10 年経った現在でもメンテナンス、バージョンアップが継続されており、多くのユーザーが利用しています。これは、これまでに国家プロジェクトの成果物として公開されたソフトウェアの中では、一つの成功例であるといえます。その OCTA を支えてきたコンセプト、組織、人材を紹介することにより、今後のソフトウェアの維持、発展に対する取り組みの参考にできればと思います。皆様奮ってご参加ください。

【プログラム】

- 13:00-13:45 OCTA:オープンな計算科学ツールをめざして
土井 正男 ((財)豊田理化学研究所)
- 13:45-14:30 企業研究者による OCTA 活用のための活動紹介
山本 智 ((株)豊田中央研究所)
- 15:00-15:45 商用版 J-OCTA の現状とユーザー動向
小沢 拓 ((株)J-SOL)
- 15:45-16:30 SUSHI(C++コード)の並列化 -- C++コードは並列化に向いている --
本田 隆 (日本ゼオン(株))
- 16:30-17:00 討論とまとめ
青柳 岳司 (旭化成(株))

【お問い合わせ】

CMSI 事務局

email: adm-office@cms-initiative.jp

主催: 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

企画: 産官学連携小委員会

以上

配布先 関係各位	報告書18		作成日 2012年12月25日	
	第5回 CMSI 産官学連続研究会 ～原子スケールシミュレーションから TCAD へ～		No. CMSI-12-22	
				作成
			CMSI 事務局 三浦	

【開催要項】

日時： 2012年12月21日(金) 13:30 - 17:00

会場： 秋葉原ダイビル5階 カンファレンスフロア 5A

会費： 無料

主催： 計算物質科学イニシアティブ (CMSI)

企画： 産官学連携小委員会

【開催主旨】

半導体デバイスの構造や作成条件の最適化を行なう TCAD (Technology CAD (Computer Aided Design)) は、シミュレーション技術の産業利用の一つの典型例です。その基本的な考え方や企業での具体的な利用例に触れることは、半導体分野外の研究者にとっても、シミュレーションの産業応用を考えるうえで大いに参考になると思われます。

半導体分野においては、デバイスの微細化と新材料の導入が進み、さらに新機能・新構造デバイスの研究開発が進む中、原子スケールまで包括した CAD への期待は以前にも増して大きくなっています。しかし、企業での利用にあたっては、計算時間、計算規模の問題、マルチスケール、マルチフィジクスへの取り込みなど、課題は山積しています。

今回の産官学連続研究会では、企業でナノデバイスに比較的近い領域で活躍していらっしゃるシミュレーション分野の専門家の方々にご講演をお願いし、計算物質科学分野の研究者との議論を通じて、課題克服のための方策や、将来の産業応用に向けたシミュレーションツールの連携、統合、体系化などについて考える機会を設けました。

【プログラム】

13:30-13:35 企画の趣旨

産官学連携小委員会委員 / (株)富士通研究所 金田 千穂子

13:35-14:20 産業界からみた半導体シミュレーションのニーズ

富士通セミコンダクター(株) 佐藤 成生

14:20-15:05 第一原理計算とナノデバイスにおける界面エンジニアリング

(株)東芝 石原 貴光

15:05-15:25 (休憩)

15:25-16:10 フルバンド・デバイスシミュレーションによるキャリア輸送特性解析

ルネサスエレクトロニクス(株) 竹田 裕

16:10-16:55 意見交換

(司会) (株)富士通研究所 金田 千穂子

16:55 - 17:00 まとめ

産官学連携小委員会委員長 / (独)産業技術総合研究所 浅井 美博

【お問い合わせ】

CMSI 事務局

email: adm-office@cms-initiative.jp

TEL: 04-7136-3279

以上

配布先 関係各位	報告書19	作成日 2013年3月8日	
	第6回 CMSI 産官学連続研究会	No. CMSI-12-34	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日程： 平成25年3月12日(火) 10:30～17:15
 会場： 秋葉原 UDX カンファレンス (UDX 南ウイング6階)
 参加費： 無料 (意見交換会参加費:3000円)
 定員： 120名

【開催主旨】

省エネ技術は随分と進歩していますが、それでもなお未利用のエネルギーが社会に多く排熱されています。100℃前後の回収が難しい低温・低質な排熱も含めると社会全体では膨大な排熱量になると言われています。それを回収利用する技術、例えば熱電技術、蓄熱技術、断熱技術、ヒートポンプ技術等は古くから知られていますが、広く普及している訳ではありません。これらの技術の飛躍的な性能向上を実現するには、革新的な部材の創出が必要です。このように、部材開発に大きなロードがかかる場合、従来の模索的な実験材料探索のみでは困難が予想されます。この様に、この分野では計算シミュレーションによる材料スクリーニングに対する期待が大きく高まっています。

本研究会ではこれらの問題に直面している企業の実験開発現場の研究者と理論・シミュレーション研究を行っている大学・研究機関の研究者の対話を促し、計算シミュレーションによる材料スクリーニングの展望を議論するきっかけにしたいと思います。

【プログラム】

- 10:30-10:35 「はじめに」 浅井 美博 (CMSI 産官学連携小委員会・委員長)
- 10:35-10:50 「未利用熱の革新的利用に向けて—材料シミュレーションへの期待—」
小原 春彦 (産業技術総合研究所・エネルギー技術 RI)
- 10:50-11:20 「自動車における熱技術」 志満津 孝 (豊田中央研究所)
- 11:20-11:50 「富士フィルムの熱マネジメント技術と高機能材料」 青合 利明 (富士フィルム)
- 13:15-13:45 「熱・温度を制御できるエラストマー系蓄熱材」 但木 稔弘 (JSR)
- 13:45-14:15 「産業分野にみる排熱実態と蓄熱材/熱媒による熱回収のポテンシャル」
石田 豊和 (産業技術総合研究所・ナノシステム RI)
- 14:15-14:45 「クラスレートハイドレートの多形と冷媒としての可能性」 田中 秀樹 (岡山大学・理学部)
・・・コーヒーブレイク・・・
- 15:00-15:30 「環境低負荷熱電変換材料ホイスラー合金薄膜の熱電性能」
早川 純 (日立製作所・中央研究所)
- 15:30-16:00 「ナノ結晶材料の熱伝導シミュレーション」 塩見 淳一郎 (東京大学・大学院工学系研究科)
- 16:00-16:30 「クラスレート化合物 BGG, BGS の熱伝導シミュレーション」
常行 真司 (東京大学・大学院理学系研究科)
- 16:30-17:00 「非平衡量子伝導理論シミュレーションの立場から見た熱電材料の最適設計」
浅井 美博 (産業技術総合研究所・ナノシステム RI)
- 17:00-17:15 「コメント」
寺倉 清之 (産業技術総合研究所・名誉リサーチャー)
- 17:30-18:45 意見交換会 (会費:3000円)

【お問い合わせ】

計算物質科学イニシアティブ事務局

〒277-8581 千葉県柏市柏の葉 5-1-5

TEL: 04(7136)3279 / FAX: 04(7136)3441

Email: adm-office[at]cms-initiative.jp

以上

配布先 関係各位	報告書20	作成日 2012年5月31日	
	HPCI 戦略プログラム 分野2×分野5 異分野交流研究会 －量子モンテカルロ計算－	No. CMSI-12-05	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時：2012年5月30日(水) 10:30～17:30

会場：東京大学柏キャンパス 物性研究所 6F 第1会議室

【開催主旨】

量子系の構造やダイナミクスに対する大規模計算は、基礎科学・応用科学を問わず、多くの分野で中心的な課題となつています。HPCI(革新的ハイパフォーマンス・コンピューティングインフラ)戦略プログラム分野2「新物質・エネルギー創成」と分野5「物質と宇宙の起源と構造」では、物質科学分野(分野2)と素・核・宇宙分野(分野5)で物質階層は異なりますが、量子系の計算に類似した方法が用いられ、共通する多くの課題があります。

本研究会は、物質科学分野と素・核・宇宙分野の研究者、そして数理科学の研究者を交え、異分野の研究者がインフォーマルな雰囲気の中で議論をする機会を設けることを目的としています。

今回は、モンテカルロをテーマに取り上げました。

【プログラム】

10:30-10:40 はじめに

10:40-11:25 中村純(広大情報)

「符号問題とモンテカルロ計算 ー 格子 QCD の場合」

11:25-12:10 今田正俊(東大工)

「物性物理における量子多体系のためのいくつかのアルゴリズム」

13:15-13:45 藤堂真治(東大物性研)

「クラスターアルゴリズム量子モンテカルロ法とその並列化」

13:45-14:15 江尻信司(新潟大自然)

「有限密度格子 QCD における符号問題の解決に向けた状態密度法による試み」

14:15-14:45 立川仁典(横浜市国際総合科学)

「量子多成分系分子理論の最近の展開:水素系および陽電子系化合物の理論的解析」

14:45-15:15 武田真滋(金沢大理工)

「有限密度 QCD におけるフェルミオン行列式の位相について」

15:45-16:30 三浦謙一(国立情報学研究所)

「並列疑似乱数発生アルゴリズムとペタスケール時代のモンテカルロ法の展望」

16:30-17:00 阿部喬(東大 CNS)

「非相対論的量子多体系における量子モンテカルロ法を用いた格子計算」

18:00-19:30 懇親会 (場所:カフェテリア)

【世話人】

矢花一浩(筑波大)、藏増嘉伸(筑波大/AICS)、櫻井鉄也(筑波大)、杉野修(東大物性研)、信定克幸(分子研)

以上

配布先 関係各位	報告書21		作成日 2012年9月17日	
	第1回 RSC-CMSI 合同セミナー		No. CMSI-12-35	
	マルチスケール構造科学を拓く			作成
	高エネルギー光科学と計算科学の戦略的協奏			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時: 2012年9月15日(土)13:00 - 16:50

会場: 理化学研究所 播磨研究所 SACLA 実験研究棟 2階 大会議室

主催: (独)理化学研究所 播磨研究所 放射光科学総合研究センター (RSC)
計算物質科学イニシアティブ (CMSI)

【開催概要】

電子のプロブである放射光は、物質中の機能を担う電子の分布を可視化できることから、機能のプロブであるとも言える。X線自由電子レーザー「SACLA」の登場は、構造と機能の相関を明らかにする構造物性の研究を大きく転換しようとしている。これまで、SPring-8 は、構造物性の研究を従来の周期系物質である結晶材料の構造解析の高度化として、電子分布マッピングやポテンシャルイメージングなどにより機能可視化への構造科学として展開してきた。しかし、SACLA はコヒーレンスという特性が加わることで、構造科学に革新をもたらす。それは、これまで未踏であった階層構造を持つ物質のマルチスケールでの機能可視化である。物質科学における身近な例では、高分子材料や相変化材料などの非周期系が考えられる。しかし、このマルチスケール構造科学を機能可視化にまで到達できるものにするためには、従来の構造可視化、XFEL の先端計測、データマネージメント、大規模シミュレーションの間での技術開発の有機的な協奏が必要不可欠である。

その起点とするべく、スーパーコンピュータ「京」と SACLA のコヒーレント X 線の利活用を視野に入れた「マルチスケール構造科学を拓く高エネルギー光科学と計算科学の戦略的協奏」をテーマに、CMSI との共催で、第1回 RSC-CMSI 合同セミナーを企画した。本セミナーでは、周期系・非周期系それぞれの分野で放射光科学と計算科学の融合を図っている研究者に講演を行っていただき、マルチスケール構造科学の展開を具体化するための、SPring-8/SACLA/京の大型研究施設の協奏的な利活用と協奏的共同研究の方向性について議論を行う。

【プログラム】

座長:加藤 健一 (RSC)

13:00~13:05 開会の辞:石川 哲也 (RSC センター長)

13:05~13:15 高田 昌樹 (RSC)

「マルチスケール構造科学の展開に向けて」

13:15~13:40 常行 真司 (CMSI, 東大)

「大規模計算による計算物質科学の現状と未来」

13:40~14:05 小原 真司 (JASRI/SPring-8)

「逆モンテカルロ法と DFT 計算を駆使したナノスケール相変化現象の機構可視化」

14:05~14:30 西堀 英治 (名大)

「周期系への遺伝的アルゴリズム/MEM の適用による未知構造と機能の可視化」

14:30~14:50 休憩座長:三宅 隆 (CMSI, 産総研)

14:50~15:15 岸本 浩通 (住友ゴム工業(株))

「USAXS データに基づく大規模シミュレーションによる低燃費タイヤの設計開発」

15:15~15:40 乗添 祐樹 (JST/ERATO)

「ポリマーブラシ 2 次元マイクロ構造のモンテカルロシミュレーション」

15:40~16:05 城地 保昌 (JASRI/XFEL)

「SACLA と HPC の融合による生体超分子イメージング」

- 16:05～16:45 福山 秀敏(東京理科大)
「課題解決型研究における大型研究施設の役割」
- 16:45～16:50 閉会の辞:高田 昌樹 RSC 副センター長
- 17:00～17:50 SACLA 見学ツアー
- 18:00～19:30 懇親会(SPring-8 特別食堂, 会費:3,000 円)

【お問い合わせ】

計算物質科学イニシアティブ事務局

〒277-8581 千葉県柏市柏の葉 5-1-5

TEL: 04(7136)3279 / FAX: 04(7136)3441

Email: adm-office[at]cms-initiative.jp

以上

配布先 関係各位	報告書22	作成日 2013年3月6日	
	第1回“見える化”シンポジウム “見えない”科学から“見える”科学へ	No. CMSI-12-31	
			作成
		CMSI 事務局 三浦	

【開催要項】

日時: 2013年3月5日(火)
 場所: 秋葉原 UDX シンポジウムおよび展示会
 時間: 11:00～16:50 フロア展示 (会場: UDX NEXT-3)
 12:40～13:00 映像と音楽の競演 (会場: UDX シアター)
 13:00～18:00 シンポジウム (会場: UDX シアター)
 参加者数: 136名 (事前申込者数 151名)

【開催趣旨および概要】

原子や分子の振る舞いを大規模計算で明らかにする計算物質科学。次世代の新デバイスや薬剤、燃料電池などの開発への応用が期待されているにもかかわらず、一般社会からは「難しい」と敬遠されがちだ。目に「見えない」ナノの科学を「見える」科学としてわかりやすく伝えるにはどうしたらいいのか？計算物質科学と社会を密につなぐためにどうすればよいか？「見える化」の新しい手法を拓くことを目的として、本シンポジウムを開催。「伝える」技術の専門家を交えて参加者と共に考えた。

当日は、展示フロアとシアター形式のシンポジウムが並行して行われた。展示フロアでは、HPCI 戦略 5 分野、理研 AICS、および主催者の豊橋技術科学大学が日立製作所と共同で、各ブースに 52 インチモニターを置き映像を中心としたブース展示を行った。

シンポジウムのイベントとして、「純粋氷結+メタンハイドレート均一核生成過程シミュレーション」の 3D 映像と琴の生演奏のコラボレーションを行った。シンポジウムでは、主催者から開催目的が語られ、続く招待講演では、植松氏(NHK)、伊藤教授(千葉大)、横山教授(東大)の3氏から、「見える化」の現状とヒントが語られた。

パネルディスカッションでは、会場からも多くの発言があり、会場とパネラーが丁々発止でディスカッションを繰り広げ、継続的な開催の期待が盛り上がるなか閉会した。参加総数は 136 名(事前申込者 151 名)。



【プログラム】(敬称略)

<フロア展示 会場:NEXT-3 >

11:00～12:50 「計算科学広報と教育活動」
 豊橋技術科学大学(TUT)、CMSI、理化学研究所計算科学研究機構
 HPCI 戦略プログラム5分野によるブース展示

<シアターイベント 会場:シアター >

12:40～13:00 “計算科学映像と音楽の競演”～心に響くサイエンス～
(純粋氷結+メタンハイドレート均一核生成過程シミュレーションの 3D 映像と
琴演奏のコラボレーション)

13:00～13:20 「“見えない”科学から“見える”科学へ」
挨拶: 榊 佳之 (TUT 学長)
下間康行 (文部科学省情報課長)
活動紹介: 常行真司 (東京大学/CMSI 統括責任者)
稲垣康善 (TUT 副学長)

13:20～13:40 「計算物質科学広報の現状と課題」 藤堂眞治 (東京大学/CMSI 広報代表)

<招待講演>

13:40～14:30 「理解と感覚」 植松秀樹 (NHK)
14:50～15:40 「可視化とシナリオで科学を面白く伝える」 伊藤智義 (千葉大学)
15:40～16:30 「“見える化”は決め手になるか?
～分野外からみた物質計算科学の強みは～」 横山広美 (東京大学)

<パネルディスカッション>

16:50～17:40 「“見えない”科学と社会をつなぐために」
モデレーター: 後藤仁志 (TUT ADSIM 幹事)
パネラー : 植松秀樹、伊藤智義、横山広美、関野秀男 (TUT/CMSI 人材育成担当)、
辛木哲夫 (理研 AICS 広報国際室長)

<まとめ>

17:40～18:00 「見えぬ世界を魅せるには」 関野秀男 (TUT/CMSI 人材育成担当)

【講演者概要】

<植松秀樹> NHK ディレクター。NHK スペシャル『コンピュータ革命 最速×最強の頭脳誕生』を担当。NHK
スペシャル『素数の魔力に囚われた人々 リーマン予想・天才たちの 150 年の闘い』で、2010 年科学ジャーナリスト
大賞受賞。映像になりにくい科学の世界を、CG を駆使して巧みに可視化し、科学の魅力を伝えている。

<伊藤智義> 千葉大学大学院 工学研究科人工システム科学専攻 教授。2012 年「ホログラフィ専用計算機に
よる次世代3次元映像技術の研究」で文部科学大臣表彰科学技術賞受賞。著書『スーパーコンピューターを 20 万
円で創る』や、漫画『BRAINS～コンピュータに賭けた男たち～』の作家としても活躍中。

<横山広美> 東京大学大学院理学系研究科准教授/広報室副室長。社会と科学を結ぶ「科学コミュニケーション」
が専門。Nikon の Web ページ連載中の『光と人の物語～見るということ』で 2007 年科学ジャーナリスト賞受賞。大
学院教育過程に科学コミュニケーションを基礎学問として位置付け、先駆的な講義を実施中。

以上

配布先 関係各位	報告書23	作成日 2012年4月19日	
	第1回「京」物性セミナー	No. CMSI-12-01	
			作成
			CMSI事務局 三浦

【開催要項】

日時:2012年4月18日(水) 16:00-17:30

場所:理化学研究所 計算科学研究機構 1F R104-2 会議室

講師:坂井 徹 Toru Sakai (SPring-8)

タイトル:量子スピン系のトピックス (Topics of Quantum Spin Systems)

【開催概要】

低次元量子スピン系の中から、我々のグループで研究を進めているスピントラップ、スピンドラダー、次近接相互作用のあるボン
ド交代鎖などに焦点を絞り、最近の成果として理論的に予測された興味深い新奇な量子現象について紹介する。

具体的には、

- (1) 3本鎖スピントラップのスピングャップ形成・消失量子相転移
- (2) 3本鎖スピンドラダー系の新奇スピン液体相
- (3) 次近接相互作用のあるボン
ド交代鎖の磁場誘起スーパソリッド
などを中心に、時間の許す限り紹介する。

【お問い合わせ】

計算物質科学イニシアティブ事務局

〒277-8581 千葉県柏市柏の葉 5-1-5

TEL: 04(7136)3279 / FAX: 04(7136)3441

Email: adm-office[at]cms-initiative.jp

以上

配布先 関係各位	報告書24		作成日 2012年5月11日	
	第1回 CMSI 「京」利用情報交換会		No. CMSI-12-03	
			作成	
			CMSI 事務局 三浦	

【開催要項】

日時：2012年05月10日(木) 11:00 - 17:00

場所：計算科学研究機構 6階講堂

【開催主旨】

「京」の一般利用申請に関する情報、富士通の方から CMSI の支援状況、「京」利用者間でのノウハウの共有、大規模アカウント希望者のヒアリングを行います。皆様、奮ってご参加下さい。

【プログラム】

- ・「京」一般利用枠の申請等(藤堂)
(共用開始後に重点課題以外のテーマの「京」利用に関して説明)
- ・CMSI 研究課題支援状況(富士通)
Q&A、高度化支援の内容と共通課題等
- ・「京」利用者からの話題提供
前園先生(CASINO)、大脇様(OpenMX)、他
苦勞している点、うまくいった点等
- ・大規模アカウント希望者ヒアリング
CONQUEST 卒業のため、新規に大規模アカウント 5 枠の配分が可能となりました。
現在トライアル枠を利用されている方で、大規模アカウント取得をご希望の方は、
本検討会にご出席いただき、以下の項目に関する並列化状況をご報告ください。(10分程度)
- ・ハイブリッド並列化の完了状況
- ・72 ノードまでのストロング/ウィークスケーリング状況
- ・72 ノードでの CPU 性能指標値(FLOPS・MIPS)
- ・大規模並列におけるボトルネックの特定と対策の検討状況
- ・大規模並列(~10000 ノード規模)での性能推定とその妥当性

※大規模アカウント希望者で当日参加できない方は、別途ヒアリングの日程調整をいたします(藤堂)

・質問受付・回答

「京」利用に関する技術的、事務的なご質問をお受けいたします。

【お問い合わせ】

CMSI 事務局 神戸

email: adm-kobe@cms-initiative.jp

TEL: 078-940-7851

以上

配布先 関係各位	報告書25	作成日 2012年5月24日	
	第2回「京」物性セミナー	No. CMSI-12-04	
			作成
			CMSI事務局 三浦

【開催要項】

日時: 2012年5月23日(水) 16:00-17:30

場所: 理化学研究所 計算科学研究機構 1F R104-2 会議室

講師: 西松 毅 Takeshi Nishimatsu (東北大学金研 IMR, Tohoku University)

タイトル: 物質中の双極子相互作用とその大規模高速計算

(Dipole-dipole interactions in materials and their large and high-speed calculations)

【開催概要】

双極子相互作用は物質中に普遍的にみつけることができる。電気双極子と磁気双極子はよく知られているし、ボルン有効電荷は絶縁体のフォンの分散関係の解析に便利である。近年の計算機の高速度化と物性理論の発展により、電気双極子の集まりである強誘電体のドメイン構造の分子動力学シミュレーションが可能になりつつある[1,2]。計算機の大規模化によってさらに可能になるであろう双極子相互作用の関連する物性とその計算手法についても考察する。

【お問い合わせ】

計算物質科学イニシアティブ事務局

〒277-8581 千葉県柏市柏の葉 5-1-5

TEL: 04(7136)3279 / FAX: 04(7136)3441

Email: adm-office[at]cms-initiative.jp

以上

配布先 関係各位	報告書26	作成日 2012年6月14日	
	第3回「京」物性セミナー	No. CMSI-12-06	
			作成
			CMSI事務局 三浦

【開催要項】

日時: 2012年6月13日(水) 16:00-17:30

場所: 理化学研究所 計算科学研究機構 1F R104-2 会議室

講師: Paul Baumeister (Jülich)

タイトル: Real-Space DFT calculations on BlueGene/Q

【開催概要】

Atomistic simulation of complex structures have moved into the focus of current research. Calculations in the framework of density functional theory can provide answers to many interesting challenges such as defect structures, magnetic surface phenomena, adsorbed molecule and other systems which are promising candidates for functional nano-devices. In many of these scenarios the extends of the supercell are large and the system contain a vast number of atoms. Therefore, a parallel DFT application is indispensable. The real-space finite-difference approach [1] with a domain decomposition of the real-space grid has shown excellent scaling behavior on massively parallel machines of the top 10 world list. The projector-augmented wave method for the proper treatment of the atomic scattering properties and energy contributions allows for all-electron accuracy, also with 3d- and 4d-transition metals [2]. Results of a structural relaxation study of the crystalline phase of GeSbTe, a phase-change material, with more than 3000 atoms in the supercell will be shown.

In the last years supercomputers as the IBM Blue Gene/P and now also BG/Q [3] have posed the necessity of a hybrid programming scheme. Besides scaling behavior of various levels of MPI parallelization a roadmap to an efficient hybrid scheme for the real-space DFT application will be discussed.

[1] Hirose et. al., First-Principles Calculations in Real-Space Formalism, Imperial College Press 2005, London

[2] Ono et. al., PRB 82, 205115 (2010)

[3] http://www.fz-juelich.de/ias/jsc/EN/Expertise/Supercomputers/JUQUEEN/JUQUEEN_node.html

【お問い合わせ】

計算物質科学イニシアティブ事務局

〒277-8581 千葉県柏市柏の葉 5-1-5

TEL: 04(7136)3279 / FAX: 04(7136)3441

Email: adm-office[at]cms-initiative.jp

以上

配布先 関係各位	報告書27	作成日 2012年7月20日	
	第6回 CMSI 若手技術交流会 「京利用に向けた技術・情報の共有」	No. CMSI-12-09	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時：2012年7月17日(火)～19日(木)

・17日(火) 13:00 開始 (現地集合)

・19日(木) 15:00 閉会 (現地解散)

会場：ヤマハリゾート つま恋 (掛川)

定員：40名

【開催主旨】

CMSI 若手技術交流会は、今回で第6回目、合宿形式第2弾の開催となります。今回は「京利用に向けた技術・情報の共有」をテーマに、富士通から講師をお呼びして、「京及び FX10 でのコンパイル、チューニング」についての講義を予定しています。これを受けて、各自で持ち寄ったプログラムを FX10 でコンパイル・実行し、コンパイル時に生じる問題・チューニング箇所について広く共有を図ります。

分野振興の観点から、多くのプログラムを京で実行できるようにするため、すでに京もしくは FX10 を利用している参加者には、他の参加者のプログラムあるいは交流会幹事が用意するプログラムのコンパイルに挑戦していただきます。

【プログラム】

[1日目]

13:00-15:30 「京及び FX10 でのコンパイル、チューニングについて」
(富士通)

15:30-16:00 休憩

16:00-18:00 「実習1 コンパイル」

18:00-19:30 夕食＋休憩

19:30-21:30 「新メンバー研究紹介」(石村和也、坂下達哉)
「固有値計算ルーチンについての意見交換会」
進行：坂下達哉 (物性研)

[2日目]

9:00-10:30 「実習2 チューニングもしくはコンパイル」

10:30-11:00 休憩

11:00-12:30 「実習3 チューニングもしくはコンパイル」

12:30-13:30 昼食＋休憩

13:30-15:30 「実習4 チューニングもしくはコンパイル」

15:30-16:00 休憩

16:00-18:00 「実習5 チューニングもしくはコンパイル」

18:00-19:30 夕食＋休憩

19:30-21:00 「座談会 超並列時代のプログラム整備・継続開発」
話題提供 北浦和夫先生(神戸大)

[3 日目]

- 9:00-10:30 「実習 6 チューニングもしくはコンパイル」
10:30-11:00 休憩
11:00-12:00 「発表スライド作り」
12:00-13:00 昼食+休憩
13:00-14:00 「新メンバー研究紹介」(大久保毅、西澤宏晃、水口朋子:順不同)
14:00-15:00 「成果発表」

【お問い合わせ】

CMSI 事務局

email: adm-office@cms-initiative.jp

TEL: 04-7136-3279

以上

配布先 関係各位	報告書28	作成日 2012年8月1日	
	第4回「京」物性セミナー	No. CMSI-12-10	
			作成
			CMSI事務局 三浦

【開催要項】

日時: 2012年7月26日(木) 16:00-17:30

場所: 理化学研究所 計算科学研究機構 1F R104-2 会議室

講師: 太田 仁 (神戸大分子フォトサイエンス研究センター)

タイトル: 2次元フラストレーション系研究の現状と将来: 実験家の視点から見た数値計算への期待

【開催概要】

2次元フラストレーション系の中でも $S=1/2$ カゴメ格子反強磁性体は、理論的に最もフラストレーションが強い系と考えられており、実験的にも強い興味を持たれている。最近、Herbertsmithite、Volborthite、Vesignieite など $S=1/2$ カゴメ格子反強磁性体のモデルが多数合成され、実験的な研究が進められているが、その磁化率測定や磁化過程の実験結果は必ずしも理論の予想とは一致するものにはなっていない。そこで、我々の強磁場電子スピン共鳴(ESR)を含めた実験の現状を概観するとともに、理論や数値計算の結果との比較を行い、今後数値計算への期待を実験家の立場から考えてみたい。また、時間が許せば、フラストレーションを持つハニカム格子反強磁性体研究の現状にもふれたい。

【お問い合わせ】

計算物質科学イニシアティブ事務局

〒277-8581 千葉県柏市柏の葉 5-1-5

TEL: 04(7136)3279 / FAX: 04(7136)3441

Email: adm-office[at]cms-initiative.jp

以上

配布先 関係各位	報告書29	作成日 2012年9月25日	
	第5回「京」物性セミナー	No. CMSI-12-12	
			作成
			CMSI事務局 三浦

【開催要項】

日時: 2012年9月24日(月) 16:00-17:30

場所: 理化学研究所 計算科学研究機構 1F R104-2 会議室

講師: 中村正明 (東工大)

タイトル: 分数量子ホール状態を記述する厳密に解ける一次元格子模型

【開催概要】

我々は、最低ランダウ準位の占有率が $\nu=1/q$ となる分数量子状態(ラフリンシリーズ)を記述する、厳密に解ける一次元格子模型を見出した。得られる厳密基底状態はラフリンの波動関数と大きなオーバーラップを持ち、その性質をよく記述する。また、行列積の方法により、密度関数、相関関数、エンタングルメントスペクトルなどの物理量が解析的に計算される。厳密に解ける模型はラフリンの波動関数と等価な Trugman-Kivelson 型擬ポテンシャルと同じ解析的構造を持ち、ラフリンの波動関数の一般的な性質、たとえば占有率の分母の偶奇による性質の違い、フェルミ系とボーズ系の対応関係などを自然に導くことができる。

【お問い合わせ】

計算物質科学イニシアティブ事務局

〒277-8581 千葉県柏市柏の葉 5-1-5

TEL: 04(7136)3279 / FAX: 04(7136)3441

Email: adm-office[at]cms-initiative.jp

以上

配布先 関係各位	報告書30	作成日 2012年11月7日	
	第6回「京」物性セミナー	No. CMSI-12-16	
			作成
			CMSI事務局 三浦

【開催要項】

日時: 2012年11月6日(火) 16:00-17:30

場所: 理化学研究所 計算科学研究機構 1F R104-2 会議室

講師: 大塚雄一 (理研 AICS)

タイトル: 量子モンテカルロ法によるハニカム格子ハバード模型の大規模数値計算

【開催概要】

ハニカム格子上のハバード模型はハーフフィルドの場合、弱相関側で半金属、強相関側で反強磁性モット絶縁体となる。最近、これらの中間の比較的広い領

域においてスピン液体相が存在することを示唆する報告があった。それに対し我々はより大きな系まで計算を行い詳細な有限サイズスケリングを行う事で、スピン液体相は少なくともそのような広い領域には存在しえず、半金属から反強磁性モット絶縁体への単一のモット転移であることを示す結論を得た。

【お問い合わせ】

計算物質科学イニシアティブ事務局

〒277-8581 千葉県柏市柏の葉 5-1-5

TEL: 04(7136)3279 / FAX: 04(7136)3441

Email: adm-office[at]cms-initiative.jp

以上

配布先 関係各位	報告書31	作成日 2012年12月12日	
	第7回「京」物性セミナー	No. CMSI-12-19	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時: 2012年12月11日(火) 16:00-17:30
 場所: 理化学研究所 計算科学研究機構 1F R104-2 会議室
 講師: 藤堂眞治 (物性研)
 タイトル: ALPS プロジェクト: 現状と将来

【開催概要】

強相関格子模型のシミュレーション手法は、過去 20 年の間に大きく発展してきた。一方、理論家が様々なアイデアを試すツールとして、あるいは実験家が実験結果を解析するツールとして、信頼性が高く使いやすいシミュレーションソフトウェアへの要望が高まっている。しかしながら、他の分野と異なり、強相関格子系の分野においては、今のところ「コミュニティーコード」は存在しておらず、計算科学の専門家がプロジェクト毎に何週間もかけて個々のコードを開発・修正を行うこともしばしばである。

ALPS (Algorithms and Libraries for Physics Simulations)プロジェクトは、量子磁性体、格子ボゾン系、強相関フェルミオン系など強相関量子格子模型のシミュレーションのためのオープンソースソフトウェアの開発を目指す国際共同プロジェクトである。本プロジェクトでは XML や HDF5 に基づく共通入出力ファイル形式の提案、ソフトウェア開発の基盤となるライブラリ、解析や可視化のためのツール、シミュレーションプログラムなどの開発などを行っている。ALPS では、古典/量子モンテカルロ法、厳密対角化、DMRG、動的平均場近似のための QMC ソルバなど、基本的かつ重要なアルゴリズムに基づくシミュレーションプログラムが用意されており、計算物理の専門家でなくとも手軽にシミュレーションを始めることができる。本セミナーでは、ALPS プロジェクトの現状を紹介し、今後の課題について議論したい。

【お問い合わせ】

計算物質科学イニシアティブ事務局
 〒277-8581 千葉県柏市柏の葉 5-1-5
 TEL: 04(7136)3279 / FAX: 04(7136)3441
 Email: adm-office[at]cms-initiative.jp

以上

配布先 関係各位	報告書32	作成日 2013年1月29日	
	第8回「京」物性セミナー	No. CMSI-12-28	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時: 2013年1月28日(月) 16:00-17:30
 場所: 理化学研究所 計算科学研究機構 1F R104-2 会議室
 講師: 野口博司 (物性研)
 タイトル: せん断流、細管流中の赤血球、脂質ベシクルのダイナミクス

【開催概要】

赤血球は変形することで自身の直径より細い毛細血管をながれることができる。糖尿病などの病気等で赤血球の変形能が落ちると血流に支障が生じる。従って、細胞の変形と運動の仕組みを理解することは、医学的な見地からも重要である。そこで、粒子猫像の計算手法のひとつである multi-particle collision dynamics (MPC)を用いて、流れによる赤血球、脂質ベシクルのダイナミクスを研究した。

単純せん断流において、せん断強度、膜の粘度、ベシクルの体積などに依存して、脂質ベシクルの運動状態(tank-treading, tumbling, swinging)が変わると共に、ベシクルの形態転移が起こる。流れによって、円盤状のベシクルが棒状に引き延ばされたり、また逆に縮められたりする。これらのダイナミクスは2変数の微分方程式で理解することができる。

細管中を流れる赤血球は、低密度では流速の増加に伴い、円盤状からパラシュート状へ形態転移する。それに伴い、溶液の流体抵抗は減少する。これらの結果は赤血球の実験とよい一致をする。高密度になると、スリッパ状に変形して、2列でジグザグに並ぶことが明らかとなった。この密度では熱揺らぎによって、一列に並んだパラシュート状態は不安定化する。

【お問い合わせ】

計算物質科学イニシアティブ事務局
 〒277-8581 千葉県柏市柏の葉 5-1-5
 TEL: 04(7136)3279 / FAX: 04(7136)3441
 Email: adm-office[at]cms-initiative.jp

以上

配布先 関係各位	報告書33	作成日 2013年2月8日	
	第1回 CMSI 神戸ハンズオン:FMO 講習会	No. CMSI-12-29	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時: 平成25年2月7日(木) 13:00 - 18:00

場所: CMSI 神戸分室(理化学研究所・計算科学研究機構・5階 501号室)

受講人数: 8名(先着順)

講師: 北浦和夫(神戸大学)、Dmitri G. Fedorov(産業技術総合研究所)

【プログラム】

13:00-14:00 FMO法の基礎と応用例

14:00-15:00 GAMESSについて(FMO法の実装と使い方)

(休憩)

15:10-17:00 入力データの作成と計算実習

17:00-18:00 計算結果の可視化と質疑応答

※計算実習は64コアを持つワークステーションで行う。

※計算実習のためにネットワークに接続できるWindowsノートパソコンを持参する。

※持参するノートパソコンには、端末ソフト(PuTTYなど)とファイル転送ソフト(WinSCPなど)をインストールしておく。さらに、FMO計算の結果を可視化するために分子モデリングソフトFacioをインストールしておく。

【お問い合わせ】

計算物質科学イニシアティブ事務局(神戸拠点)

Tel: 078-940-5681

E-mail: adm-kobe[at]cms-initiative.jp

以上

配布先 関係各位	報告書34	作成日 2013年2月18日	
	CMSI 若手技術交流会(合宿) [第七回] 「京の効率利用のための技術習得と共有」	No. CMSI-12-30	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時：2013年2月14日(木)13:00～16日(土)15:00(予定)

会場：キャッスルイン金沢 [アクセス]

定員：40名

主催：計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

共催：高度情報科学技術研究機構(RIST)

【開催主旨】

第7回CMSI若手技術交流会では、「京の効率利用のための技術習得と共有」をテーマに、理化学研究所の南先生による京でのチューニングに関する講演と、富士通から講師をお呼びして、プロファイラの使い方とデータの読み方についての講義を予定。これを受けて、分子研のFX10を使って各自のプログラムのチューニング、新規参加者(学生の方大歓迎!)には富士通CPU搭載マシンに慣れるためコンパイルに挑戦する。実習中はRIST、富士通の方々にもいつでも質問することができる。

チューニングに取り組む方は、あらかじめ取得したプロファイラのデータもしくは希望を基に、重点的に取り組む内容(SIMD化率向上、キャッシュミス削減、スレッド並列効率向上、通信効率向上など)ごとにグループに分かれて、各グループ内で議論と情報共有をしながら進める。そのため、1月中旬に各自のプログラムの基本プロファイラのデータをFX10で取得し、CMSI事務局に提出すること。コンパイルに取り組む方は、現在研究で使用しているプログラムを交流会当日に持参する。

<交流会までのスケジュール>

12月28日 参加締切

1月初め FX10アカウント発行

1月末 基本プロファイラのデータ提出(チューニングに取り組む方)

2月14-16日 若手技術交流会

※CMSI 拠点研究員の方は参加必須です。(特別な理由で不参加の場合は、その旨連絡)

※CMSI 重点研究員の方も参加できるよう、雇用責任者の方と日程調整をする。

【プログラム】

[第1日:2月14日]

13:00-15:00 講演 (南一生 理化学研究所)

15:00-15:30 講義 (富士通)

15:30-16:00 休憩

16:00-18:00 「実習 チューニングもしくはコンパイル」

18:00-19:30 夕食

19:30-21:00 座談会 (将来 HPCI 調査研究の説明と今後の計算科学について(仮))

[第2日:2月15日]

9:00-12:00 実習+休憩

12:00-13:30 昼食

13:30-18:00 実習+休憩

18:00-20:00 夕食

20:00-21:30 アプリ開発・公開に関する意見交換会

ソフトウェアの公開とは? ~アプリ café の活用法~

[第3日:2月16日]

9:00-12:00 実習+休憩

12:00-13:30 昼食

13:30-14:30 実習

14:30-15:00 成果発表

【お問い合わせ】

CMSI 事務局

email: adm-office@cms-initiative.jp

TEL: 04-7136-3279

以上

配布先 関係各位	報告書35	作成日 2013年3月7日	
	第2回 CMSI 神戸ハンズオン: ALPS チュートリアル	No. CMSI-12-32	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時: 平成 25 年 3 月 6 日(水) 13:00-18:00
 場所: CMSI 神戸拠点 (理化学研究所・計算科学研究機構・5 階 R501)
 受講人数: 8 名 (先着順)
 講師: 藤堂眞治 (東大物性研)、松尾春彦 (RIST)、五十嵐 亮 (東大物性研)
 主催: 計算物質科学イニシアティブ (CMSI)
 共催: 高度情報科学技術研究機構 (RIST)

【本講習の対象者】

- ・ALPS ライブラリを用いた並列アプリケーションに関心をお持ちの方
- ・C++あるいは Fortran によるシミュレーションコード開発の経験のある方
- ・UNIX でのファイル操作、編集、コマンドの実行等に慣れている方
(並列計算、並列プログラミングの経験は問いません)

【プログラム】

13:00-13:10 演習環境設定
 13:10-14:00 ALPS の概要
 14:00-15:00 ALPS のインストールと実行 (実習)
 (休憩)
 15:30-16:30 ALPS スケジューラの概要
 16:30-18:00 ALPS ライブラリ・スケジューラを用いた並列アプリケーションの開発 (実習)

※計算実習は 64 コアを持つワークステーションで行う。

※計算実習のためにネットワークに接続できる Windows ノートパソコンを持参する。

※持参するノートパソコンには、端末ソフト(PuTTY など)とファイル転送ソフト(WinSCP など)をインストールしておく。さらに、FMO 計算の結果を可視化するために分子モデリングソフト Facio をインストールしておく。

【お問い合わせ】

計算物質科学イニシアティブ事務局 (神戸拠点)

Tel: 078-940-5681

E-mail: adm-kobe[at]cms-initiative.jp

以上

配布先 関係各位	報告書36	作成日 2013年2月8日	
	国際ワークショップ	No. CMSI-12-36	
	GCOE interdisciplinary workshop on numerical methods for many-body correlations		作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時： 2013年2月5日(火)～6日(水)

場所： 東京大学本郷キャンパス 理学部4号館3階 1320号室

主催： 分子科学研究所 計算分子科学研究拠点

【開催主旨】

近年の計算機性能の飛躍的向上に伴い、様々な量子多体系において、多体相関による効果を正面から数値的に取り扱うことが可能となっています。このような背景には、計算機の進展だけでなく、計算手法に関する発展も大いに寄与しています。原子核、量子化学、固体物理などの多岐にわたる学問分野で、対象とする物理系に応じたさまざまな手法が独立に開発されているため、これらの手法や共通する課題を検討し、今後の展望を議論することを目的とします。

【プログラム】

[第1日： 2月5日]

13:30 - 13:50 M. Imada (U. Tokyo)

Opening

13:50 - 14:30 S. Tsuneyuki (U. Tokyo)

Recent development in the transcorrelated method for condensed matter

14:30 - 15:10 J. Anderson (McMaster U.)

GKCI approach to solving the nuclear structure Schrodinger equation

15:10 - 15:40 --- break ---

15:40 - 16:20 T. Mizusaki (Senshu U.)

Variational Monte Carlo for shell model

16:20 - 17:00 S. Morita (U. Tokyo)

Many-variable variational Monte-Carlo method

17:30 ---- Reception ---

[第2日： 2月6日]

10:30 - 11:10 K. Yabana (Tsukuba U.)

A hybrid density functional + configuration mixing approach for light nuclei

11:10 - 11:50 S. Sakai (U. Tokyo)

Dynamical mean-field theory and its cluster extensions

--- lunch ---

13:30 - 14:10 C. J. Umrigar (Cornell U.)

Semistochastic quantum Monte Carlo: pros and cons relative to diffusion Monte Carlo

14:10 - 14:50 M. Nakata (RIKEN)

Direct variational calculation of second-order reduced density matrix:

application to the two-dimensional Hubbard model

14:50 - 15:30 H. Nakano (U. Hyogo)

Numerical-diagonalization study of two-dimensional frustrated magnets by huge-scale parallelization

- 15:30 - 15:50 --- break ---
- 15:50 - 16:30 N. Tomita (Yamagata U.)
Resonating Hartree-Fock method and its application to the Hubbard and Lipkin models
- 16:30 - 17:10 N. Shimizu (U. Tokyo)
Energy-variance extrapolation in the Monte Carlo shell model
- 17:10 - 17:20 T. Otsuka (U. Tokyo)
Closing

【お問い合わせ】

CMSI 事務局

email: adm-office@cms-initiative.jp

TEL: 04-7136-3279

以上

本報告書は、平成 24 年度に、文部科学省の高性能汎用計算機高度利用事業による補助金で推進した「HPCI 戦略プログラム」（代表機関；東京大学物性研究所）の実施に関する成果報告書である。