

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名： 複合手法を用いた電子構造計算技術の開発

2. 研究代表者名： 藤原 毅夫（東京大学大学総合教育研究センター 教授）

3. 研究概要

本研究は2つの課題からなる。必要な計算資源が取り扱う系の大きさに比例して増大する計算手法（オーダーN電子構造手法）を新たに構築し、具体的なナノスケール系のプロセスに応用することが第一の目的である。本研究グループではKrylov部分空間に基づいた、Krylov部分空間対角化法、shifted-COCG法、分割統治法（Devide and Conquer）とKrylov部分空間法の融合による手法、という複数の方法を開発し本目的を達成しつつある。

第二の課題は近年発展してきたモデルに基づいた強相関係の理解を現実的物質系に適用する新たな手法を開発することである。すなわちGW近似、動的平均場近似（DMFT）を局所密度近似（LDA）を用いた第一原理電子構造理論に基づいて再構築し、第一原理電子構造理論と多電子理論の融合手法を構築することである。本研究グループではGW近似の並列化、新アルゴリズム開発、LDA+DMFT法、GWA+DMFT法など多数の新たな手法を開発し多くの強相関物質に適用しつつある。

4. 中間評価結果

4-1. 研究の進捗状況と今後の見込み

大規模系電子状態計算と多体電子状態計算の2本立てになっているが、それぞれにおいて順調に成果が出ている。大規模電子状態計算の手法開発一つとっても、世界的にもトップの水準にある。多体電子状態計算手法の開発についてもオリジナリティーの高い成果が得られている。

研究体制について本研究チームは主として東大グループと産総研グループの共同研究であるが、頻繁に合同の検討会を開き情報の交流に努めている。また研究員の機関の異動もあったようだがそれに対応した予算の移動も適切に行われている。

国内外の動きを的確に捉えて軌道修正を常に行いながら研究を遂行しており、今後も引き続き成果が期待できる。また研究チーム主催のシンポジウム等をすでに開催し、成果を広く普及しようという努力も見られる。

4-2. 研究成果の現状と今後の見込み

多体系と第一原理シミュレーションの統合の基にシミュレーションを行う方向は適当である。また新しい手法を古典的手法と比較してその有効性を確認しており、成果の公表も積極的に行っている。その結果として産業界との連携が始まりつつあることは大きな成果である。特に、1000万原子のシリコンの計算など大規模シミュレーションの実用化が期待される。

4-3. 今後の研究に向けて

大規模系シミュレーションにおいて手法をさらに広げて、企業で使えるような実用的な問題まで扱えるシミュレーションシステムの開発を行ってほしい。北陸先端科学技術大学院大学グループにてOPEN MXで数百～千原子を扱っているが、中国、韓国、台湾などでも好評であるとの報告を受けており、このような汎用システムはさらに国際的な観点でシミュレーション技術を広めてほしい。またマルチフェロイクスの分野への展開など適用分野の拡大を図ってほしい。

4-4. 戦略目標に向けての展望

大規模系の電子構造計算・分子動力学計算に対する新たな手法を開発・応用すること、そして多電子理論と第一原理電子構造理論の融合手法の開発を行うことは、特に当領域の戦略達成目標であるマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション技術の確立という方針に沿うものであり更なる展開を期待する。

4-5. 総合的評価

「大規模系電子構造計算手法の開発」と「多電子理論と第一原理電子構造理論の融合手法の開発」いう凝縮系電子論においてもっとも難しく先鋭的な二つのテーマに対して、現時点においてそれぞれに順調に成果が挙がっている。特に、shifted COCG法による大規模系計算と多体電子状態計算はユニークなものである。また大規模系電子構造解法として開発されたOPEN MXで、強相関電子系を主に発展してきたマルチフェロイックスを取り扱い、機能を開発・追加し応用したことも高く評価できる。