

【部門構成員】

教授：川添 良幸、 助教授：余 京智、 助手：高橋 まさえ、 助手：西松 毅、 助手：佐原 亮二、
COE フェロー：佐々木 健一、 研究支援者：Planichamy Murugan、 研究支援者：安原 洋、
科学技術振興研究員：王 山鷹、Farajian Amir Abbas、 Belosludov Rodion V.、 Kumar Vijay、
Inerbaev Talgat、 Pupysheva Olga、 その他（事務補佐員 3名）

【研究成果】

15年の歳月をかけて開発してきた本部門独自開発の全電子混合基底第一原理シミュレーション計算プログラムを様々なプラットフォーム上で稼動させ、スーパーSINET上に構築したナノテクVPNを活用して東大物性研と本所の2台のスーパーコンピュータの連携実験を行った。我が国独自のITBLを用いた本格的GRID計算として高く評価されている。また、利用者也国内外に広まりつつある。拡散量子モンテカルロ法を用いたクーロン系量子力学方程式の厳密解計算を集中的に行い、例えば下記文献5に示すようにフント則の正しい定量的解釈を得た。局所密度近似の第一原理計算によるナノクラスタの理論設計を単元系及び2元系に対して網羅的にを行い、文献1, 3, 4に示すように魔法数クラスタやバルクとは全く異なる物性の予言に成功した。ナノテクノロジー応用で期待される電気伝導性ポリマーの理論設計を行い、遺伝的アルゴリズム等の活用により多数の候補から最適な分子を選択する方策を確立した。バルク材料の設計では、磁性（文献2）、圧電素子、光学応用、等を対象とし、実験結果の解析から第一原理計算による新物質予言までを行った。非平衡系材料データベース構築・提供では計算材料学センターとの共同で、2元系アモルファスの物性、磁性多層膜、高压等に関するファクトデータ抽出と整備を行った。

1. Kasuya A, Sivamohan R, Barnakov YA, Dmitruk IM, Nirasawa T, Romanyuk VR, Kumar V, Mamykin SV, Tohji K, Jeyadevan B, Shinoda K, Kudo T, Terasaki O, Liu Z, Belosludov RV, Sundararajan V, Kawazoe Y, Ultra-stable nanoparticles of CdSe revealed from mass spectrometry, Nat. Mater., 3 (2):99-102 FEB 2004
2. Wang Q, Sun Q, Jena P, Kawazoe Y Antiferromagnetic coupling driven by bond length contraction near the $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{N}$ film surface, Rhys. Rev. Lett., 93 (15): Art. No. 155501 OCT 8 2004
3. Andersen KE, Kumar V, Kawazoe Y, Pickett WE Origin of spontaneous electric dipoles in homonuclear niobium clusters, Phys. Rev. Lett., 93 (24): Art. No. 246105 DEC 10 2004
4. Kumar V, Singh AK, and Kawazoe Y, Smallest magic caged clusters of Si, Ge, Sn, and Pb by encapsulation of transition metal atom, NANO LETT., 4 (4): 677-681 APR 2004
5. Hongo K, Maezono R, Kawazoe Y, Yasuhara H, Towler MD, and Needs RJ Interpretation of Hund's multiplicity rule for the carbon atom, J. Chem. Phys., 121 (15): 7144-7147 OCT 15 2004

【研究計画】

大規模シミュレーション計算を活用し、量子力学の基礎的な問題を明らかにすることに一つの重点をおいた研究計画を実行している。特に、最近のスーパーコンピュータの高速化と拡散量子モンテカルロ法の計算技法が、従来の様なモデルないしは近似を伴う計算方法を抜本的に改善することに成功した。上記発表論文 **5** に見られるように、従来の教科書を書き換えるレベルの研究成果が得られ、その拡張を計画し、実施している。既に遷移金属を対象とした計算を開始しており、その成果がまとまれば、さらに大きなインパクトが期待できる。もう一つの重要な研究テーマとして、新しい錬金術とも呼ぶべき、新有用材料の計算機シミュレーションによる設計を行っている。今後も、ナノサイズのクラスターからバルク材料まで幅広く研究対象とし、実験家との共同で研究を活性化していく計画である。最後に、本研究部門発足時からの本研究所の要望であった材料データベース構築と提供を継続的に行う予定である。これは計算材料学センターとの共同で実施しており、平成 17 年度中には、非平衡系材料データベースの 2 巻目をランドルト・ボルンシュタインシリーズとして発行予定である。