

## 実施報告書

### 山田科学振興財団 若手研究者の分野交錯研究推進プログラム研究会 「ナノスケールの原子構造および電子状態とその変化の理論的設計」

会 場： 国際高等研究所（京都府木津川市木津川台）

会 期： 2010年8月31日（火）～9月1日（水）

参会者： 17名

近年、電子状態の第一原理計算は、次世代スパコンに象徴されるような計算機の進歩と新しい計算手法の開発によるその柔軟な適用性と予測能力を反映して、物性物理学や材料科学分野に留まらず、電気化学から次世代ナノエレクトロニクス分野まで広範囲な研究領域で利用され、多大な成功を収めています。一方、各研究分野で活躍している中堅・若手研究者は、参加しているプロジェクトの狭義の専念義務に束縛され、プロジェクト指向の視野の狭い研究対象のみに専念する傾向が著しくなり、研究者の探究心に基づいた広い視野からの異なる研究分野にまたがる新規研究領域の開拓が疎かになりがちです。もちろん新規研究領域の開拓には、従来の理論的枠組みに捉われない斬新な計算手法の開発が重要な役割を果たすことは云うまでもありません。

以上のような背景を踏まえて、本研究会は、多体電子論の基礎研究から新材料の理論設計まで幅広い研究領域で第一原理計算に携わっている中堅・若手研究者が集まり、各研究分野における最新の研究成果に関する知見を共有することを目的として開催されました。研究会では、参加者が取り組んでいる研究テーマの意義や掲載手法の詳細について、活発な議論が交わされました。また、10年後および20年後に取り組むべき研究テーマについて、参加者各人の将来展望を語っていただく機会を設け、これについても非常に有意義な意見交換ができました。

この研究会を今後も継続的に開催することにより、新規研究領域の創製につながる共同研究の芽や広い視野に立った新しい学問領域の開拓精神を育むことができれば幸いです。また、中堅・若手研究者の独自の志を育てる新規なシステムがデザインされ、さらには、本研究会の参加者の中から、次世代のリーダーとなる人材が育つことを期待しています。本研究会の開催に尽力していただいた山田科学振興財団の皆さまに深く感謝いたします。

代表者： 白井 正文（東北大学 電気通信研究所）

## プログラム

8月31日(火)  
開 会 (13:30)

### セッション (1) 量子伝導現象・光学応答

1. ナノスケール伝導現象の第一原理計算 — 実空間計算手法と大規模計算 —  
大阪大学 大学院工学研究科 小野 倫也
2. ノンコリニア磁気構造有する磁気接合系の電気伝導に関する第一原理計算  
東北大学 電気通信研究所 三浦 良雄
3. 磁性半導体の磁気円二色性の第一原理計算  
大阪大学 大学院理学研究科 小倉 昌子

### セッション (2) 結晶成長・表面反応

4. 有機/金属界面の構造と電子状態  
大阪大学 大学院工学研究科 森川 良忠
5. 磁性制御による表面反応デザインと量子ダイナミクス  
大阪大学 大学院工学研究科 中西 寛
6. 熱力学的ダウンフォールディング法とその結晶の融解への応用  
鳥取大学 大学院工学研究科 吉本 芳英

9月1日(水)

### セッション (3) 電子相関効果

7. 多体相転移理論としての密度汎関数理論  
大阪大学 大学院基礎工学研究科 草部 浩一
8. 拡張された制限付き探索理論  
信州大学 理学部 樋口 雅彦
9. 対密度汎関数理論  
広島大学 大学院先端物質科学研究科 樋口 克彦
10. 空間次元を縮約するための第一原理 Downfolding 法の開発：  
LaFeAsO および  $\kappa$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>X への応用  
東京大学 大学院工学系研究科 中村 和磨
11. 量子モンテカルロ法による電子状態計算  
北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科 前園 涼

#### セッション（４）エキゾチック物質設計

12. 半導体スピントロニクス材料のマテリアルデザインと将来展望  
大阪大学 大学院基礎工学研究科 佐藤 和則
13. 遷移金属薄膜における磁性：第一原理計算による理論的予測  
三重大学 大学院工学研究科 中村 浩次
14. 磁気異方性制御に向けた取り組み：構造と電界  
金沢大学 理工研究域 小田 竜樹
15. 導電性三角格子反強磁性体  $\text{PdCrO}_2$  の伝導電子  
広島大学 大学院先端物質科学研究科 獅子堂 達也
16. feram コードによる強誘電体薄膜キャパシタの分子動力学シミュレーション  
— 科学計算フリーソフトウェアの一例 —  
東北大学 金属材料研究所 西松 毅

閉 会 (16:00)

