

Title	固体系拡散モンテカルロ法の開発
Author(s)	前園, 涼
Citation	科学研究費補助金研究成果報告書: 1-6
Issue Date	2009-03-31
Type	Research Paper
Text version	publisher
URL	http://hdl.handle.net/10119/8457
Rights	
Description	研究種目: 特定領域研究, 研究期間: 2005 ~ 2008, 課題番号: 17064016, 研究者番号: 40354146, 研究分野: 物理学, 科研費の分科・細目: 物理学・数理物理・物性基礎

平成 21 年 3 月 31 日現在

研究種目：特定領域研究

研究期間：2005～2008

課題番号：17064016

研究課題名（和文）固体系拡散モンテカルロ法の開発

研究課題名（英文）Diffusion Monte Carlo method for extended systems

研究代表者

前園 涼 (MAEZONO RYO)

北陸先端科学技術大学院大学・情報科学研究科・講師

研究者番号：40354146

研究成果の概要：

以下につき成果を論文に出版した：固体周期系量子モンテカルロ計算によるダイヤモンド固体の基礎物性計算、固体標準模型上のハバードのUパラメタの成因、ポルフィリン遷移金属錯体の擬ポテンシャル高精度計算、フラグメント法と QMC 法を組合わせた方法論の開発。スピン偏極下での多体摂動法による励起スペクトル。以下は進行中の題目である：一様媒質に埋込まれた原子の計算、珪素固体の基礎物性計算。AlN, GaN, InN など窒化物のバンドギャップ評価。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2005年度	9,700,000	0	9,700,000
2006年度	9,700,000	0	9,700,000
2007年度	9,700,000	0	9,700,000
2008年度	1,700,000	0	1,700,000
年度			
総計	30,800,000	0	30,800,000

研究分野：物理学

科研費の分科・細目：物理学・数理物理・物性基礎

キーワード：電子状態、密度汎関数法、量子モンテカルロ法、固体物理、計算科学

1. 研究開始当初の背景

1960年代の密度汎関数理論(DFT)・局所密度近似(LDA)の導入により、結晶の電子状態や物性を第一原理から理論計算のみで導出できるようになった。その結果、多くの物質で高精度に実験を説明することが可能となっている。しかし、遷移金属酸化物などの電子構造や結晶構造で実験とDFT-LDAによる計算が一致しないなど、電子相関に関する近似の限界が明らかになりつつある。従来、電子相関に関する研究は、0.1nm程度以下の非一

様性を捨象し、その最も本質的な部分に対して行われ、その結果、例えば電子ガス理論における電子相関の様相や、イオンの周りに局在した電子間の相関の多彩な様相についても非常に多くの知見が蓄積されてきている。しかし、非一様な系におけるナノメータ領域での電子相関については、これまで殆ど知られておらず、上述のナノ物性を明らかにする上でも高精度な理論手法の開発と物理描像の導出は急務である。

2. 研究の目的

固体中のナノメータ領域での電子相関を第一原理に立脚して明らかにする。特に、LDA など既存の枠組みでは説明が困難であった物性を高精度で導出し、従来理論による問題点の起源（基本的物理量である密度分布の妥当性など）を定量的に明確にするとともに、これに代わる手法の構築を目指す。そのためには、参照となる高精度な理論計算が必要であり、最も高精度な手法の一つであり、最近結晶への応用に成功した拡散モンテカルロ（DMC）法を用いる。

3. 研究の方法

固体系拡散モンテカルロ法の適用対象を更にイオン結晶系に拡げ、これに適した方法論の策定および開発を行う。また、本課題の遂行期間中に成功した共有結合結晶系を対象として、更に固定節緩和やエネルギー値に基づく変分最適化法など、拡散モンテカルロ法の研究分野において開発が進んでいる新しい算法を固体系計算にも応用出来るよう実装開発を進める。最終的には、従来近似理論が困難に直面する典型系として、磁性イオンを含むイオン結晶系 NiO への適用を目指す。また、その成果をもとに、固体電子論の標準的なモデルを第一原理に基づいて精査し、固体物理学において従来の理解では解明不能の問題に新しい知見を還元する事を目標とする。例えば、NiO の物性を特徴づけるフェルミ面近傍の電子的性質につき、異なる結果を予見する基底関数系を用いて試行関数をそれぞれ作成し、拡散モンテカルロ法計算を実行し、変分原理に基づいて、その優劣を判定するといった方策が可能である。こうした方策を実現するために、多様な基底関数系に対して安定かつ高速に稼働する固体系拡散モンテカルロ法の実装を進める。

4. 研究成果

2005 年度から 2007 年度までには、平面波基底試行関数を用いた量子モンテカルロ計算の基盤を確立し、ダイヤモンド固体の基礎物性計算を行い、これを研究成果としてとりまとめた。平面波基底計算では基底系の系統的改良が容易になるものの、そのドローバックとして計算コストが著しく増加する。これを解消するため一旦精度検証された平面波基底を数値的にスプライン基底に変換しコストの改善を図った。2006 年度には、固体系拡散モンテカルロ法による研究知見を固体物性の標準モデルに還元するという発展的課題を見据えて、これら模型上に現れる「ハバードの U パラメ

タ」の成因を第一原理計算から定量的に精査した。この結果、従来考えられている単純な描像とは異なり、原子核-電子相互作用が決定的な役割を担っている事が明らかになり、論文成果として出版した。2007 年度からは、ダイヤモンド固体に引き続き、シリコン結晶のエネルギー体積曲線計算を基とした基礎物性に関する精密計算に着手し、ダイヤモンド構造から β スズ構造への転移圧のより精密な定量的再現が得られつつある。この研究では、バックフローと称する自由度を導入し、これを変分的に最適化することで、従前のスレータ行列式による節固定近似を超えた電子相関の扱いを実現した。2005 年度から「beyond LDA」へのより直接的な貢献を念頭に置き、非一様性を考慮した交換相関ポテンシャル構築を最終的な狙いとして、一様媒質に埋め込まれた孤立原子系の計算も進めている。現在、埋込系の試行関数生成、DMC 計算、DMC 電荷密度からの交換相関ポテンシャル構築という一連の基盤が全て構築を完了し、計算成果が蓄積されつつある。QMC 計算の基盤に関連した研究成果としては、ポルフィリン遷移金属錯体をベンチマークとした擬ポテンシャルの高精度キャリブレーション計算を行い、研究成果が論文として出版された。また生体分子系のような空間的に疎な物質系を効率良く扱う方策であるフラグメント法を QMC 法に組み合わせた方法論を開発し、その成果を発表した。励起状態に関係した研究成果としては、電子相関を摂動論により考察する際にスピン分極の自由度をも含め、励起スペクトルの導出することに成功し、論文成果として出版された。ここでの対象は種々の大きさを持つアルカリ金属クラスターで、原子が奇数個の場合にはスピン分極が重要である事が明らかになった。2008 年度中までに、軌道関数のスプライン化、バックフロー自由度の最適化、擬ポテンシャルの局所近似の改良といった重要な要素技術が確立された。これらを受け、現在、AlN, GaN, InN といった一連の窒化物のバンドギャップ評価に対する拡散モンテカルロ法計算を進行中である。

5. 主な発表論文等

（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計 17 件）

1. “Quantum Monte Carlo study of porphyrin transition metal complexes”, Jun Koseki, Ryo Maezono, Masanori Tachikawa, M.D. Towler, and

- R. J. Needs, J. Chem. Phys. **129**, 085103:1-5 (2008), 査読有
2. "Quasiparticle energy spectra of alkali-metal clusters: All-electron first-principles calculations", Yoshifumi Noguchi, Soh Ishii, Kaoru Ohno, and Taizo Sasaki, J. Chem. Phys. **129**, 104104 (2008), 査読有
 3. "First principles T-matrix calculations for Auger spectra of hydrocarbon systems", Yoshifumi Noguchi, Soh Ishii, Kaoru Ohno, Igor Solovjev, and Taizo Sasaki, Phys. Rev. **B77**, 035132-1--035132-7 (2008), 査読有
 4. "ab initio calculation of chain structures in chalcogenide glasses", Shigeru Suehara, Olivier Noguera, Takashi Aizawa, Taizo Sasaki, and Jacques Lucas, J. NON-CRYSTALLINE SOLIDS, **354**, 168-172 (2008), 査読有
 5. "High temperature ferromagnetism in single crystalline dilute Fe-doped BaTiO₃", Sugata Ray, Priya Mahadevan, Suman Mandal, S. R. Krishnakumar, Carlos Seiti Kuroda, Taizo Sasaki, Tomoyasu Taniyama, and Mitsuru Itoh, Phys. Rev. **B77**, 104416 (2008), 査読有
 6. "Effects of deformation on the electronic structure of a single-walled carbon nanotube bundle", Dong Chen, Taizo Sasaki, Jie Tang, and Lu-Chang Qin, Phys. Rev. **B77**, 125412 (2008), 査読有
 7. "Quantum Hall effects of graphene with multiple orbitals: Topological numbers, Boltzmann conductance, and semiclassical quantization", M. Arai and Y. Hatsugai, Physical Review **B79**, 075429-1 - 075429-5 (2008), 査読有
 8. "Equation of state and Raman frequency of diamond from quantum Monte Carlo simulations", R. Maezono, A. Ma, M. D. Towler, and R. J. Needs, Phys. Rev. Lett., **98**, 025701 (2007), 査読有
 9. "Fragmentation method combined with Quantum Monte Carlo calculations", R. Maezono, H. Watanabe, S. Tanaka, M. D. Towler, and R. J. Needs, J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 064301:1-5 (2007), 査読有
 10. "Ab initio study of monoclinic iridium nitride as a high bulk modulus compound", Yuan Xu Wang, Masao Arai, Taizo Sasaki and Chang Zeng Fan, Phys. Rev. **B75**, 104110 (2007), 査読有
 11. S. Balamurugan, K. Yamaura, Masao Arai, E. Takayama-Muromachi, "Charge transport and ferromagnetic critical behavior of the correlated 3d perovskite Sr_{1-x}Ce_xCoO₃", Phys. Rev. **B 76**, 014414-1 - 014414-6 (2007), 査読有
 12. Y. X. Wang, Masao Arai, "First-principles study of the (001) surface of cubic SrZrO₃", Surf. Sci., *601*, 4092-4096 (2007), 査読有
 13. K. Yamaura, Masao Arai, A. Sato, A. B. Karki, D. P. Young, R. Movshovich, S. Okamoto, D. Mandrus, and E. Takayama-Muromachi, "NaV₂O₄: A Quasi-1D Metallic Antiferromagnet with Half-Metallic Chains", Phys. Rev. Lett., **99**, No. 19, 196601-1 - 196601-4 (2007), 査読有
 14. "First-principles study of the (001) surface of cubic CaTiO₃", Yuan Xu Wang, Masao Arai, Taizo Sasaki, and Chun Lei Wan, Phys. Rev. **B 73**, 035411 (2006), 査読有
 15. "Equation of state and Raman frequency of diamond from quantum Monte Carlo simulations", R. Maezono, A. Ma, M. D. Towler, and R. J. Needs, Phys. Rev. Lett., **98**, 025701 (2006), 査読有
 16. 前園 涼, 「ナノ・クラスタ科学における精密電子状態計算」、ナノ学会会報、第3巻2号、87-95 (2005), 査読有
 17. "Dielectric Property and Electronic Structure of LaNbO₄", Masao Arai, Y. X. Wang, S. Kohiki, M. i Matsuo, H. Shimooka, T. Shishido and M. Oku, Japanese Journal of Applied Physics, **44**, 6596-6599 (2005), 査読有
- [学会発表] (計 93 件)
1. 佐々木泰造, Dong Chen, The Role of the Coulomb Interactions in the Absolute Hardness, The 11th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, 2008. 11. 3-11. 5, 高雄市/台湾
 2. 前園涼、本郷研太、New Random Number generators tested on Ab-initio Quantum Monte Carlo Calculations, The 11th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, 2008. 11. 4, 高雄市/台湾
 3. M. Isobe, E. Takayama-Muromachi, M.

- Arai, New One-Dimensional Cobalt Oxide CaCo2O4; A Potential Thermoelectric Material, The 6th International Conference on Inorganic Materials, 2008. 9. 28-9. 30, ドレスデン/ドイツ連邦共和国
4. 新井正男、初貝安弘、マルチバンドモデルによるグラフェンの量子ホール効果、日本物理学会 2008 年秋季大会、2008. 9. 22、岩手大学
 5. 白子雄一、糀谷浩、赤荻正樹、山浦一成、新井正男、室町英治、ロジウム酸化物 CaRhO3 のポストペロブスカイト相転移、日本物理学会 2008 年秋季大会、2008. 9. 20、岩手大学
 6. 磯部雅朗、新井正男、室町英治、(Ca_{1-x}Nax)Co2O4 の合成と物性、日本物理学会 2008 年秋季大会、2008. 9. 20、岩手大学
 7. 前園涼、A. Ma, M. D. Towler, R. J. Needs、高圧条件下におけるダイヤモンド結晶のラマン周波数計算、日本物理学会 2008 年秋季大会、2008. 9. 20、岩手大学
 8. 前園涼、Quantum Monte Carlo studies of chromium dimer Cr₂, 8th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists、2008. 9. 14、シドニー/オーストラリア
 9. 前園涼、Quantum Monte Carlo calculations of NiO²⁺, International Conference on Quantum Simulators and Design 2008, 2008. 6. 2, 東京
 10. M. Arai, M. Isobe, E. Takayama-Muromachi、Electronic Structure and Thermoelectric Property of CaCo2O4, International Conference on Quantum Simulators and Design 2008, 2008. 6. 2, 東京
 11. 前園涼、Fragmentation method combined with Quantum Monte Carlo calculations, Conference on Molecular Simulations in Biosystems and Material Science, 2008. 4. 2, コンスタンツ/ドイツ連邦共和国
 12. 新井正男、北孝文、空間反転対称性のない超伝導体の上部臨界磁場、日本物理学会第 63 回年会、2008. 3. 24、近畿大学
 13. 拡散モンテカルロ法による NiO の基底状態計算、前園涼、マイク・タウラー、リチャード・ニーズ、日本物理学会第 63 回年会、2008. 3. 23、近畿大学
 14. Quantum Monte Carlo calculations of NiO, Ryo Maezono, M. D. Towler, and R. J. Needs, APS March Meeting 2008 2008. 3. 13, ニューオリンズ/アメリカ合衆国
 15. 拡散モンテカルロ法によるポルフィリンの第一原理計算、前園涼、菅野シンポジウム (第 2 期第 4 回)「配位子場の科学が明かす先端物質の特性 一触媒・磁性・生理現象一」、2008. 3. 8、中央大学
 16. 遷移金属イオンを含む生化学分子の電子論的精密計算、前園涼、H19 年度シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築 CREST・さきがけシンポジウム、2007. 11. 20、アルカディア市ヶ谷
 17. Electronic structure calculations using Quantum Monte Carlo method, Ryo Maezono, Kenta Hongo, Kosei Tsusima, Yu Yaguchi. International Conference on High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis 2007, 2007. 11. 16, リノ/アメリカ合衆国
 18. Ryo MAEZONO, Electronic structure calculations using Quantum Monte Carlo method, Cray Technical Workshop 2007, 2007. 10. 10, 明治記念館
 19. 野口良史、石井聡、大野かおる、ソロビヨフ、イゴール、佐々木泰造、第一原理 T-matrix 計算による CH₄ 分子のオーブレスペクトル、日本物理学会 第 62 回年次大会、2007. 9. 22、北海道大学
 20. Yoshifumi Noguchi, Soh Ishii, Kaoru Ohno, Igor V. Solovyev, and Taizo Sasaki, First principles calculations of C(KVV) Auger spectra of small hydrocarbon molecules using T-matrix theory, the 4th Asian Cortium on computational Materials Science, 2007. 9. 12-9. 16 ソウル/大韓民国
 21. 前園涼、Many-body wave function method by diffusion Monte Carlo calculation". d- π 系に関するパイオマテリアル科学研究会、2007. 9. 13、北陸先端科学技術大学院大学
 22. Ryo Maezono, Fragmentation method combined with Quantum Monte Carlo calculations Hirofumi Watanabe, Shigenori Tanaka, Mike Towler, Richard Needs, Advances in continuum quantum Monte Carlo methods, 2007. 8. 27, リヨン/フランス共和国
 23. Ryo MAEZONO, Pseudo potential QMC calculations of Porphyrin complexes, ISSP International Workshop/Symposium on Foundations and Applications of the Density Functional Theory, 2007. 7. 30, 東京大学物性研究所
 24. Ryo MAEZONO, Pseudo potential QMC calculations of Porphyrin complexes. Quantum Monte Carlo in the Apuan Alps III, 2007. 7. 21, バリコ・ソット/イタリア

- ア共和国
25. 新井正男, 北孝文, 反転対称性のない超伝導体の上部臨界磁場に対するパウリ常磁性効果, 2007年日本物理学会春季大会, 2007. 3. 19, 鹿児島大学
 26. クロム・ダイマーの結合に関する拡散モンテカルロ計算, 前園涼, Lucus Wagner, Michal Bajdich, Lubos Mitas, 日本物理学会 2007年春季大会, 2007. 3. 18, 鹿児島大学
 27. Diffusion Monte Carlo study on Chromium dimer, Ryo Maezono, Lucas K. Wagner, Michal Bajdich, Jindrich Kolorenc, Lubos Mitas, APS March Meeting 2007, 2007. 3. 6, デンバー/アメリカ合衆国
 28. My recent collaborations/QMC calculation on Cr dimer, Ryo MAEZONO, 2nd workshop on Correlation issues in electronic structure calculations, 2007. 2. 15, 北海道大学
 29. Biomolecular calculations using Ab Initio Quantum Monte Carlo technique combined with Fragment Molecular Orbital Method, Ryo Maezono, Hirofumi Watanabe, Shigenori Tanaka, M. D. Towler, and R. J. Needs, International Conference on Quantum Simulators and Design, 2006. 12. 5, 広島大学
 30. M. Arai, K. Kobayasi, and T. Takemura, First-principles study of solid mercury under high pressure, International Conference on Quantum Simulators and Design, 2006. 12. 3-12. 6, 広島大学
 31. 佐々木泰造, 安原洋, The Role of the Coulomb Interactions in the Absolute Hardness, International Conference on Quantum Simulations and Design, 2006. 12. 3-12. 6, 広島大学
 32. 佐々木泰造, 安原洋, The Coulomb interactions and the chemical hardness in ions, The 9th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, 2006. 11. 6-11. 8, ソウル/大韓民国
 33. Y. X. Wang, M. Arai, and T. Sasaki, First-principles study of the transition metal nitrides, the 9th Asian Workshop, 2006. 11. 6-11. 8, ソウル/大韓民国
 34. Biomolecular calculations using Ab Initio Quantum Monte Carlo technique combined with Fragment Molecular Orbital Method, Ryo Maezono, Hirofumi Watanabe, Shigenori Tanaka, M. D. Towler, and R. J. Needs, The 9th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, 2006. 11. 6-11. 8, ソウル/大韓民国
 35. 小林一昭, 新井正男, LiB₂ 及びその関連物質の第一原理計算, 日本物理学会秋季大会, 2006. 9. 23, 千葉大学
 36. The Fragment method in QMC, Ryo MAEZONO, Quantum Monte Carlo in the Apuan Alps II, 2006. 7. 28, バリコソット/イタリア共和国
 37. Recent trend in ab-initio QMC studie, Ryo MAEZONO, Computational Science Workshop 2006 (CSW2006), 2006. 4. 19, 産業技術総合研究所
 38. Ab-initio Quantum Monte Carlo method on next generation supercomputer, Ryo MAEZONO, 2nd symposium: "Discovery, Synthesis and Emergence of Novel Knowledge through Computational Science" - Strategy of Computational Sciences and Next Generation, 2006. 4. 4, つくば国際会議場
 39. 量子拡散モンテカルロ法による電子状態計算, 前園涼, 日本物理学会第61回年次大会, 2006. 3. 28, 松山大学
 40. The equation of state of diamond from quantum Monte Carlo calculations, Ryo Maezono, A. Ma, N. D. Drummond, M. D. Towler, R. J. Needs., APS March Meeting 2006, 2006. 3. 16, メリーランド/アメリカ合衆国
 41. 第一原理量子拡散モンテカルロ法, 分子科学計算を中心とした最近の進展, 前園涼, スーパーコンピュータワークショップ 2006 超高速シミュレーターが切り開く分子科学の諸相: 若手研究者による理論・方法論展開とその展望, 2006. 3. 6, 岡崎コンファレンスセンター
 42. Biomolecular calculations using Ab Initio Quantum Monte Carlo technique combined with Fragment Molecular Orbital Method, Ryo Maezono, Hirofumi Watanabe, Shigenori Tanaka, PACIFICHEM 2005, 2005. 12. 19, ハワイ/アメリカ合衆国
 43. 小林一昭, 新井正男, 山本一雄, First-principles study of C₆B₂ and related compounds, International Workshop on Superconductivity (IWSDRM2005), 2005. 12. 8, 物質・材料研究機構
 44. Y. X. Wang, 新井正男, 佐々木泰造, First-principles study of the (001) surface of cubic PbZrO₃ and PbTiO₃, The 8th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure 2005. 10. 31-11. 2, 上海/中国

45. 新井正男, 北孝文, Theoretical Study on Upper Critical Fields of MgB₂: ab-initio Fermi Surface and Impurity Scatterings, The 8th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structures, 2005. 10. 31-11. 2、上海/中国
46. Yudong Liu, 佐々木泰造, 「First-principles study on the microscopic mechanism of the Al self-diffusion in corundum」, The 8th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure, 2005. 10. 30-11. 2、上海/中国
47. 量子拡散モンテカルロ法による固体周期系計算の現状、前園涼, A Workshop on Nation-wide Cooperative Research Projects in Research Institute of Electrical Communication (RIEC)、2005. 10. 27、東北大学
48. 小林一昭, 新井正男, 山本一雄, Lattice dynamics of C6B₂ and related materials, 第18回国際超電導シンポジウム (ISS2005), 2005. 10. 24-10. 26、つくば国際会議場
49. 末原茂, 相澤俊, 菱田俊一, 大谷茂樹, 新井正男, MB₂ (0001) (M=Zr, Nb) 表面の XPS 内殻準位シフトの第1原理計算, 日本セラミックス協会 第18回秋季シンポジウム, 2005. 9. 28、大阪府立大学
50. 佐々木泰造, 前園涼, 安原洋, 「ハバードUの起源」, 日本物理学会 2005年秋季大会, 2005. 9. 22、同志社大学
51. 新井正男, 北孝文, MgB₂ の上部臨界磁場に対する不純物効果, 日本物理学会 2005年秋季大会, 2005. 9. 22、同志社大学
52. Y. X. Wang, 新井正男, 佐々木泰造, C. L. Wang, W. L. Zhong, Surfaces properties of the cubic perovskites, PbZrO₃, PbTiO₃, and CaTiO₃, American Chemical Society Meeting and Exposition, 2005. 8. 28-9. 1、ワシントン/アメリカ合衆国
53. 新井正男, 吉尾里司, 北孝文, Anisotropy of Upper Critical Fields from Fermi Surface Geometry, 24th International Conference on Low Temperature Physics, 2005. 8. 10-8. 17、オーランド/アメリカ合衆国
54. 古曳重美, 堀恭子, 村川祐亮, 佐々木正邦, 下岡弘和, 田尻隆之, 出口博之, 奥正興, 宍戸統悦, 三留正則, 新井正男, 板東義雄, Doping of Fe to In₂O₃, ICMAT & IUMRS-ICAM 2005, 2005. 7. 3-7. 8、シンガポール
55. 竹村謙一, 新井正男, 小林一昭, 佐々木泰

造, Bulk modulus of Os by experiments and first-principles calculations, AIRAPT-20, 2005. 6. 27-7. 1、カールスルーエ/ドイツ連邦共和国

56. 小林一昭, 新井正男, 山本一雄, B系、C系超伝導体の第一原理電子状態計算, 化合物新磁性材料研究会, 日本応用磁気学会専門研究会, 2005. 6. 15、青山学院大学

6. 研究組織

(1) 研究代表者

前園 涼 (MAEZONO RYO)

北陸先端科学技術大学院大学・情報科学研究科・講師

研究者番号：40354146

(2) 研究分担者

佐々木 泰造 (SASAKI TAIZO)

独立行政法人物質・材料研究機構・

計算科学センター・グループリーダー

研究者番号：60343852

新井 正男 (ARAI MASAO)

独立行政法人物質・材料研究機構・

計算科学センター・主幹研究員

研究者番号：40222723

(3) 連携研究者