

京都大学教育研究振興財団助成事業 成 果 報 告 書

2019年 11月 20日

公益財団法人京都大学教育研究振興財団
会 長 藤 洋 作 様

所 属 部 局 大学院工学研究科・材料工学専攻

職 名 教授

氏 名 田中 功

助 成 の 種 類	平成31年度(令和元年度) ・ 国際会議開催助成		
国 際 会 議 名	第22回第一原理電子状態計算に関するアジアワークショップ		
開 催 期 間	2019年10月28日 ～ 2019年10月30日		
開 催 場 所	大阪大学会館(豊中市待兼山町1-13)		
参 加 者	総 数 234	内 訳 Bangladesh 1, China 16, Denmark 1, France 1, Germany 1, India 6, Indonesia 15, Italy 2, Japan 102, Korea 42, Malaysia 2, Philippines 12, Singapore 1, Taiwan 23, Thailand 1, Vietnam 8	
成 果 の 概 要	タイトルは「成果の概要／報告者名」として、A4版2000字程度・和文で作成し、添付して下さい。「成果の概要」以外に添付する資料 <input type="checkbox"/> 無 <input checked="" type="checkbox"/> 有(アブストラクト集)		
会 計 報 告	事業に要した経費総額	4,235,047 円	
	うち当財団からの助成額	1,000,000 円	
	その他の資金の出所	<small>(機関や資金の名称) Asia Pacific Center for Theoretical Physics、井上科学振興財団、大阪大学(スピントロニクスセンター、産業科学ナノテクノロジーセンター)、懇親会参加費</small>	
	経 費 の 内 訳 と 助 成 金 の 使 途 に つ い て		
	費 目	金 額 (円)	財団助成充当額 (円)
	旅費	2,244,119	681,500
	会議費	703,978	318,500
	懇親会費	730,000	
消耗品費	16,888		
印刷費	482,222		
その他	57,840		
合計	4,235,047	1,000,000	
当財団の助成について	(今回の助成に対する感想、今後の助成に望むこと等お書き下さい。助成事業の参考にさせていただきます。)		

第 22 回第一原理電子状態計算に関するアジアワークショップ

(The 22nd Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations: ASIAN-22)

第 22 回第一原理電子状態計算に関するアジアワークショップ (略称: ASIAN-22) は、2019 年 10 月 28 日より 30 日の 3 日間にわたり、大阪大学会館において開催された。本ワークショップは、計算物理、計算化学における方法論と基礎的に意義があるだけでなく産業応用にも重要な様々な物質系への応用に関する意見交換と議論を深めるために開催されたものである。1998 年に日韓合同ワークショップとして、K. Terakura (寺倉清之) と K. J. Chang により始められ、その後、第 4 回より台湾が、第 4 回より中国が主たる主催国として参加し、毎年、日台中韓を巡り開催されてきたものである。

第一回ワークショップでの参加者は 30 余名であったが、本 ASIAN-22 での参加総数は 16 の国・地域より 234 名に上り、特に若手の参加者の参加が目立った。3 日間の日程 (厳密には 2 日半) と、欧米からのプレナリと主催 4 カ国を中心とした招待講演者による約 20 件の口頭講演は当初より変わらぬものの、ポスター発表の増加が若手の参加を象徴している。アジアワークショップの名に恥じない、広くアジア各国からの参加が見られたことが主催者としても喜びとするところである。

今回の ASIAN-22 のプログラムは、プレナリ講演 5 件を柱に、主催 4 カ国から推薦された招待講演 18 件に加えて、インドから 1 件、シンガポールから 1 件を加えた 20 件により構成された。

初日午前は、ユーリッヒ研究センターから Stefan Blügel を迎え、スピン軌道相互作用により発現するスキルミオンを応用に展開する講演がなされた。Ashis Kumar Nandy による招待講演は、同じくスピン軌道相互作用に起源をもつ反転対称性の破れた反強磁性体での Rashba 効果を議論した研究であり、共にデバイスへの応用が期待されている物性現象である。続く招待講演の 3 件の招待講演は物質のトポロジを議論した研究であり、Chi-Hsuan Lee は不純物により変調を受けた薄膜系の表面状態を、Chen Fang は第一原理計算によるトポロジ物質の探索加速化手法を、Mikito Koshino は角度をもった二層グラフェンの特異な電子状態を論じた。

初日午後、テキサス大学オースチン校より、Feliciano Giustino が第一原理から取り扱ったポーラロンに関する手法開発の状況を示し、最近の成果を発表した。ポーラロン問題は旧くより半導体や超伝導体で活発に議論されてきていたが、第一原理からの取組は希有であった。招待講演では、Osamu Sugino が電極表面上での水素の問題、Chi-Cheng Lee は内殻準位の精度良い計算方法の提案、Jian Sun は極限環境下での新規物質探索、Seungwu Han はニューラルネットワークポテンシャルを用いたエネルギーマッピング手法の開発に関する最近の研究成果を発表した。

二日目午前は、イタリア CNR-SPIN の Silvia Picozzi による磁性と強誘電性が共存したマルチフェロ物質に関する最近の話題を紹介した。マルチフェロ物質では磁性と誘電性の交差効果が期待されており、スピントランジスタ等へのデバイス応用が期待されている。続く招待講演では、Heung-Sik Kim が Ni_3TeO_6 で観測された動的磁気光学効果について、Tetsuya Fukushima が KKR グリーン関数法によるスピントロニクス物質のデザインについて、Hornng-Tay Jeng が遷移金属カルコゲナイドによる二次元磁性半導体について、Gil Young Cho が Bi 薄膜のステップ端におおける特異な電子状態について、それぞれ第一原理計算から論じた。

二日目午後は、Laurent Chaput により格子熱伝導度の第一原理計算に関する最近の成果が紹介された。格子熱伝導度は調和近似を超える格子振動の効果であり第一原理計算で如何に効率よく、精度高く計算がなされるか詳細に説明がなされた。Chee Kwan Gan はグリュウナイゼン定数を計算することにより、効率よく熱膨張係数が計算できることを示した。Jin Zhao は時間依存非平衡分子動力学計算によるキャリアダイナミクスを、Yasushi Shinohara は強いレーザーパルスにより引き起こされた結晶の実時間シミュレーションを、Sooran Kim は高温超伝導銅酸化物における電子状態の頂点酸素の影響を論じた。

最終日午前は、Bjørk Hammer による結晶構造予測手法の開発に関して現況が詳細された。結晶構造は物性研究におけるあらゆる出発点であり、その予測手法の有効性が議論された。招待講演において、Takahiro Ishikawa はオリジナルに開発した遺伝的アルゴリズムによる構造予測手法と遺伝的プログラミングによる物性予測手法を紹介した。Hyoung Joon Choi は高温超伝導体 FeSe の電子相関における表面ドーピングの効果を、Shiyong Chen は多元低対称性半導体における輻射を伴わない再結合中心欠陥の効果を、Yoshitaka Tateyama は全固体 Li イオン電池における界面イオン現象を論じた。

初日・二日目午後にポスターセッションが開かれ、137 件の事前登録のうち 134 件が発表するたいへん高い出席率で特に若手・学生による発表がなされ、活発な討論がなされた。

第一原理電子状態計算の分野は当初、実験結果を解釈することが主目的で研究が進められていたが、最近の手法の高精度化や計算機資源の充実により計算主導での物質デザイン・探索や物性予測が多く報告されるようになり、今後は自動化計算により各種物性データの生成によるデータ駆動型の研究に発展するものと期待される。今回のプレナリ・招待講演やポスター発表においてもその先駆的な研究発表が複数見受けられた。

最後に、本 ASIAN-22 の開催がこの様に成功に導かれたのは多くの機関、財団からの支援があったからであり、この場を借りて感謝すると共に、今後とも継続的に支援を受けられるように切に願うものである。