

課題名 (タイトル) :

第一原理電子状態計算による地球惑星物質科学

利用者氏名 : 飯高 敏晃

所属 : 和光研究所 基幹研究所 戎崎計算宇宙物理研究室

1 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

1.1 宇宙生物学

20世紀科学の主演は「物質の根源はなにか、物質の性質はどう決まるのか」を追究する「物理学」と「化学」であった。これらに基づき半導体工業や化学工業が目覚しく発展した。では、21世紀科学の主演は何であろうか。多くの人が「生物学」と答えるであろう。私は、単なる生物学ではなくて「[宇宙生物学](#)」こそが、21世紀の学問であると考えている。20世紀における科学技術の発展の結果、人類はいま始めて「我々の生命」を宇宙に数ある生命の一つとして科学的に研究する段階に達した。宇宙生物学は「宇宙の生命は我々だけか?」「他に地球に似た惑星は存在するか?」という根本問題を追究する。

この十数年間の多数の[太陽系外惑星](#)の発見により、地球は唯一無二のものではなく宇宙に膨大な数ある惑星の一つであると捉えて研究する「[地球惑星科学](#)」が新たな展開を見せている。地球惑星科学によれば、ガス星雲である原始太陽系から 46 億年前に地球などの惑星が急速に形成され、40 億年前には地球表面が徐々に冷えてプレートテクトニクスが始まり、38 億年前ころに有機物から最初の生命への進化が生じた、と考えられる。しかし、原始太陽系からの原始地球の誕生、その地球での生命の誕生、地球と生命の相互作用、地球中心核の形成など、地球や惑星の進化には未知な部分がまだまだ多い。地球惑星科学は、天文学や宇宙物理学はもちろん、物性物理学・化学・生物学・電子工学などのナノから宇宙までの知識を総動員して地球や惑星の形成・現状・未来を総合的に理解しようとする学際領域として急速に発展しつつある。したがって宇宙生物学は、物理と化学の研究所として発足し生物学の研究所へと発展しつつある日本で唯一の自然科学の総合研究所である理化学研究所で行うにもっとも相応しい学問であろう。

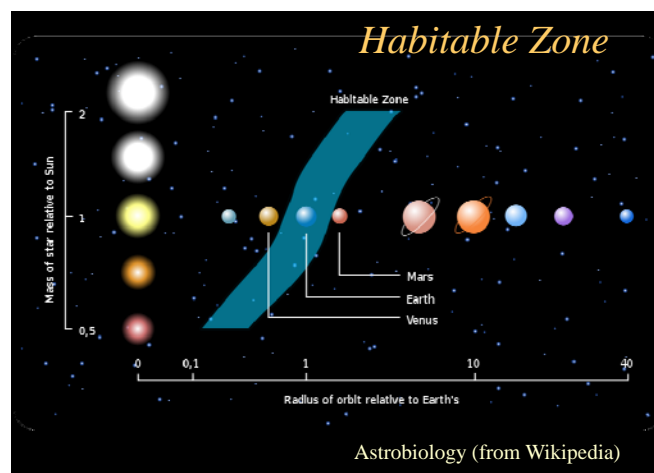


図1 居住可能領域(Habitable Zone)

地球外生命を論ずるうえで基本となるのが居住可能領域という概念である。惑星の恒星からの距離により生命が存在できる領域が限定されるのである。図1に居住可能領域が青い帯で示されている。さらに、同じ距離にあっても惑星を構成する物質によって生命存在の可能性が変わる。惑星の構成物質は観測された惑星の半径から推定することができる(図2)。

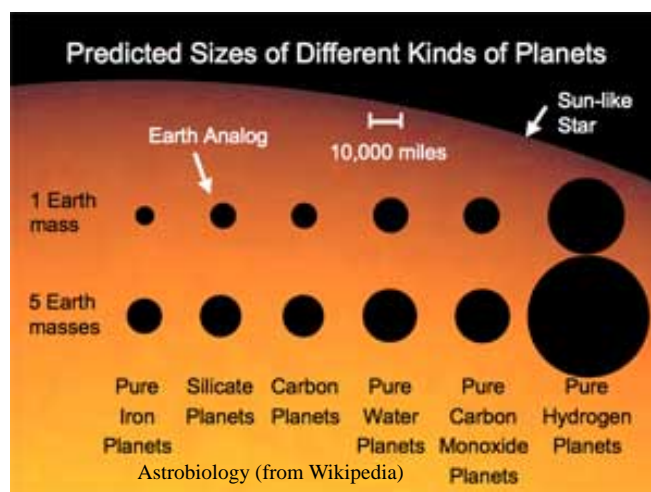


図2 惑星の質量と半径、構成要素の関係

図3に例として 2009 年に Charbonneau らが Nature に報告した GJ 1214b という地球に似た大型惑星内部の予想図を示す[1,2]。Fe, Ni, Ar, MgO, H₂, H₂O, NH₃, CH₄ などの元

素や分子が含まれると考えられる。これらの惑星の研究方法は、観測・探索による天文研究、ダイヤモンドアンビルセルやレーザー加熱を使った実験研究、そして第一原理計算に基づく理論研究からなる(図4)。本研究課題では、これらの元素や分子およびそれらの複合物であるガスハイドレートなどの高圧力下での構造と物性を第一原理計算に基づく理論研究により明らかにすることにより、天文研究者や実験研究者と協力して惑星形成史や惑星の特徴に関する知見を得ることを目的とする。

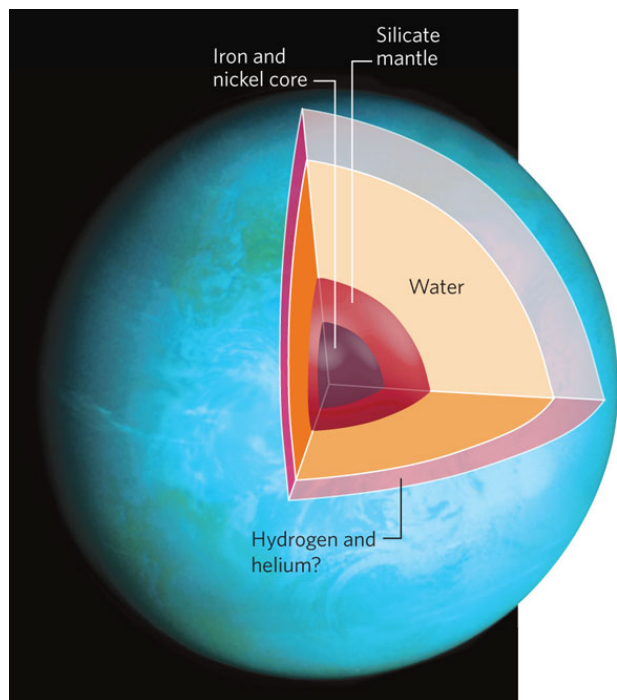


図3 水惑星 GJ 1214b [1,2]

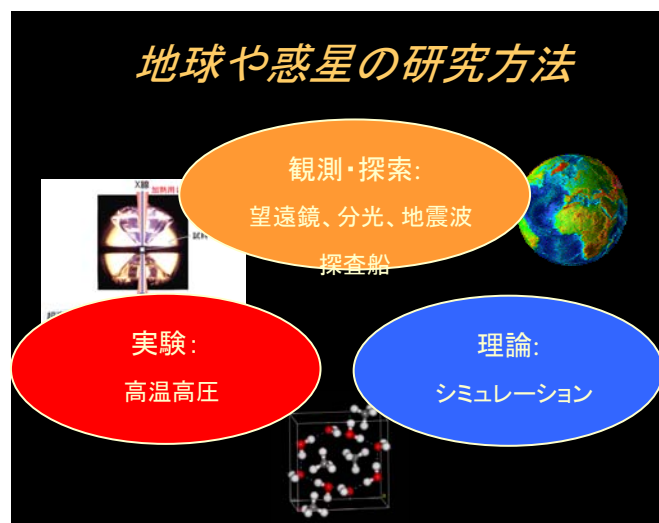


図4 地球や惑星の研究方法

1.2 関連プロジェクト (科研費・新学術領域)



本研究課題に関連したプロジェクトとして、とくに地球内部の研究に重点をおいた文部科学省科学研究費新学術領域「高温高圧中性子実験で拓く地球の物質科学」がある(<http://www.iitaka.org/~neutron/theory.html>)。

このプロジェクトでは『宇宙の塵が集まってできた地球がどう進化して生命が溢れる現在の水惑星が生まれたか、そして将来どうなるか』、という地球と生命の起源と未来に関わる**宇宙生物学**の重要問題に原子レベルから新たな光を当てることを目指す。水素は宇宙最多の元素であるが、地球は小型の惑星なので重力が弱くその形成過程で大気中の水素分子は宇宙へ拡散し、現在では水素は水(H₂O)や含水鉱物(OH基)などの化合物あるいは鉱物やマグマ中の不純物として存在する。この水素は地表から地球最深部の高温高圧領域までのマグマ・鉱物の構造や物性に劇的な影響を与え、原始地球形成・地球深部ダイナミクス・火山噴火ダイナミクスなどに大きく関わる重要元素である。しかし、SPring-8 などでX線測定では水素を直接観測することが困難であった(図5)。そこで平成20年採択の科研費新学術領域研究「**高温高圧中性子実験で拓く地球の物質科学**」(領域代表:八木健彦)では、次世代大強度パルス中性子源を用いた高温高圧実験装置を茨城県東海村J-PARCに2011年完成を目指して建設し、地殻から下部**マントル**最上部相当の高温高圧下における**マグマ**、**鉱物**中の**水素(水)**の重要な役割を解明しようとしている(図6)。また、そのための多結晶ナノダイヤモンド製DACも開発中である。本研究課題では、最先端の量子シミュレーションを用いてこれらの実験の指針を示し、また測定された現象の原子レベルからの包括的理論的理解を実現することを目的とする。そして、その第一歩として既にある**SPring-8**などでX線測定結果などを基に高圧力下における結晶構造予測の計算を行う(図7、図8)。



図5 地球惑星内部の研究手法（現在）



図6 地球惑星内部の研究手法（近い将来）

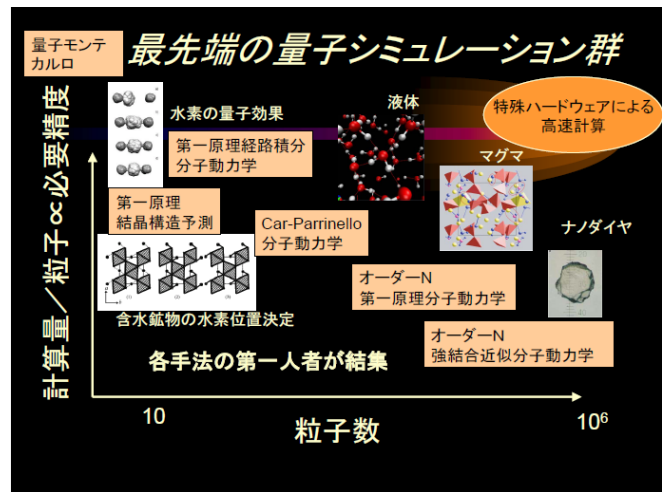


図8 計算の精度と系の大きさのトレードオフ

1.3 結晶構造予測

物質は与えられた温度と圧力のもとでその自由エネルギーを最小にするような構造をとる。たとえば、1気圧のもとで水を冷やすと0°Cで氷になり熱すると100°Cで水蒸気なる。そして構造の変化は物質の物理的・化学的性質を大きく変化させる。温度を制御する実験は古くから行われてきたが、近年の高圧実験技術の進歩により圧力を制御する実験も広く行われるようになってきた。

たとえば、雪の結晶からも分るように氷は常圧で六方晶であるが、室温のもとで水を数GPaまで加圧すると氷VII相という立方晶の氷ができる（図9）。このような高圧相の氷は常温常圧に戻すとまた元の水に戻ってしまうが、物質によっては高圧相の構造をそのまま準安定構造として常温常圧に回収して利用することができる。

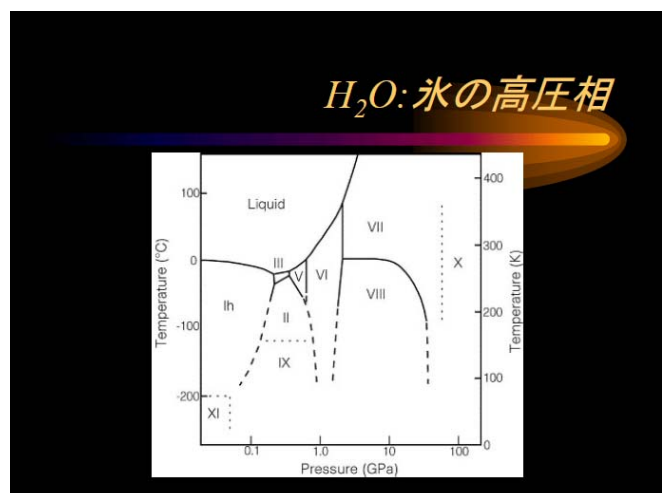


図9 H2O 氷の相図

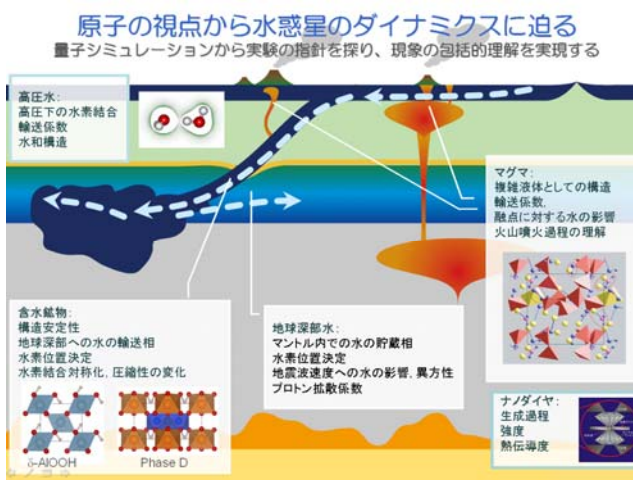


図7: 高温高圧中性子実験で拓く地球の物質科学

<http://www.iitaka.org/~neutron/>

その典型が地球内部の高温高圧で生成されるダイヤモンドである。ダイヤモンドは黒鉛（グラファイト）、フラー

gレン(C₆₀)、[カーボンナノチューブ](#)(CNT)、カーボンクラスレート(C₆₀ [ポリマー](#)) [3]などと共に炭素の同素体である。常温常圧ではダイヤモンドは準安定状態であるが、エネルギー障壁が非常に大きいため最安定状態であるグラファイトには転移しない(図10)。

高圧物理学の創始者である[ハーバード大学](#)[4]のブリッジマン教授[5]は、sp²型共有結合を持つ黒鉛を圧縮してsp³型共有結合を持つダイヤモンドに転換することを夢見て生涯実験を続けた。ブリッジマン教授の没後 40 年余、愛媛大学の入船徹男教授は黒鉛からの多結晶ナノダイヤモンド(NPD)生成に成功した[6]。NPDは超高压中性子散乱実験用[ダイヤモンドアンビルセル](#)の材料として注目されており、鳥取大学の星健夫准教授は、自ら開発した大規模電子状態計算プログラムELSE[7]を用いてNPDの破壊特性の研究を行っている[8]。



図10 炭素の同素体 (a) 黒鉛 と (b) ダイヤモンド

<http://ja.wikipedia.org/>

いっぽう、山中昭司教授らは2006年に3次元C₆₀ポリマーの合成に成功した[9]。C₆₀分子は、常温常圧ではファンデルワールス力により凝集したfcc構造の分子結晶を形成し、超高压力をかけると潰れて多結晶ダイヤモンドやダイヤモンド状物質あるいは黒鉛状物質に変換する。しかし、山中らは適度な圧力と温度下でC₆₀分子内の結合の一部を sp²型共有結合からsp³型共有結合へ転換させてC₆₀分子間にも共有結合を形成することにより3次元C₆₀ポリマーネットワークを合成したのである。ただちに [Yangら](#)は、3次元C₆₀ポリマーおよびBaをドーピングした3次元C₆₀ポリマーの最適構造および電子状態を計算し、その特異なフェルミ面について議論した[10,11]。その後いくつかの多形について最適構造、電子状態、基準振動などが理論的に研究されたが[12-14]、実験で観測されたデータは十分に理解されているとは未だ言いがたく今後の研究が待たれる。

C60 ポリマーの場合には実験により結晶構造に関する情報がある程度得られるが、太陽系外惑星内部の物

質の場合はその結晶構造を観測することは甚だ困難である。それならば温度と圧力の二つの情報だけを使って第一原理から惑星内部の物質の結晶構造を予測できれば良い。原子の位置や結晶の形を変数として結晶のエネルギーを最小にする結晶構造を求めるのである。そのために多変数関数の大域的最適化問題を[遺伝アルゴリズム](#)などの計算手法を用いて解くことになる。これは非常に計算量の大きな計算であるが、近年の計算機の急速な発展によりそのような第一原理結晶構造予測が可能になりつつある。実際、私たちも水素化スズの未知の高圧相の結晶構造を予測しその超伝導転移温度を計算することに成功している[15]。

いったん結晶構造が決定されると、それをもとに結晶の各種物性を計算し、実験や観測結果と比較して議論することができるようになる。その一例が、超高压固体アルゴンの弾性定数の第一原理計算とブリルアン散乱による音速測定である[16,17]。図11に計算結果と測定結果の比較を示す。この研究により弾性定数の第一原理計算により超高压固体アルゴン中の音波の伝播速度が正確に予測できることが明らかになった。

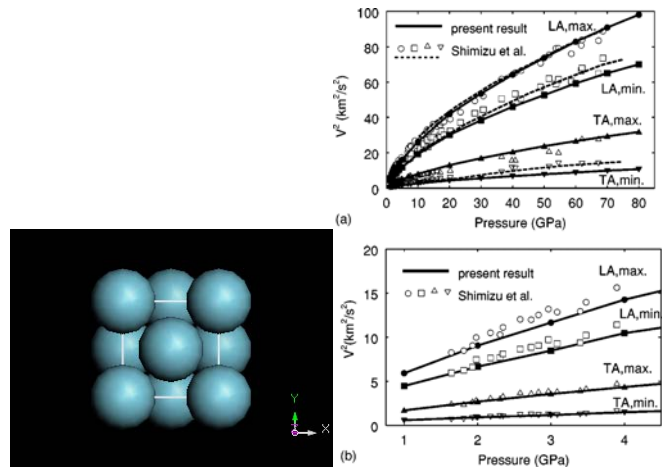


図11 固体アルゴンの結晶構造と音波の伝播速度 [16]

弾性定数の第一原理計算が活躍したのが、2004年に東京工業大学のグループによってMgSiO₃[ポストペロブスカイト](#)が発見されたときである[18]。この発見は、兵庫県に建設された最先端放射光施設 [SPring-8](#)(図12) およびレーザー加熱ダイヤモンドアンビルセル(LHDAC)を活用した、地球最深部の温度圧力を実験室内に再現し超高温高压下でX線結晶構造解析を行う技術の活用によってなされた。筆者らは第一原理電子状態計算を使って「MgSiO₃ ペロブスカイト」と「MgSiO₃ ポス

トペロブスカイト」(図13)の弾性テンソルを計算し、その結果「MgSiO₃ ポストペロブスカイト」の存在によりD層(図14)における地震波伝播速度の不連続性・異方性など種々の観測結果を矛盾無く説明できることを明らかにした[19]。また、MgSiO₃ ポストペロブスカイトは常温常圧に回収できないが、MgSiO₃ と同様にポストペロブスカイト構造をもつCaIrO₃ の高圧相は常温常圧に回収でき、その新奇な物性が詳細に研究できるようになった[20]。



図12 SPring-8(理研播磨研究所)

<http://www.harima.riken.go.jp/jpn/synchrotron/institution.html>

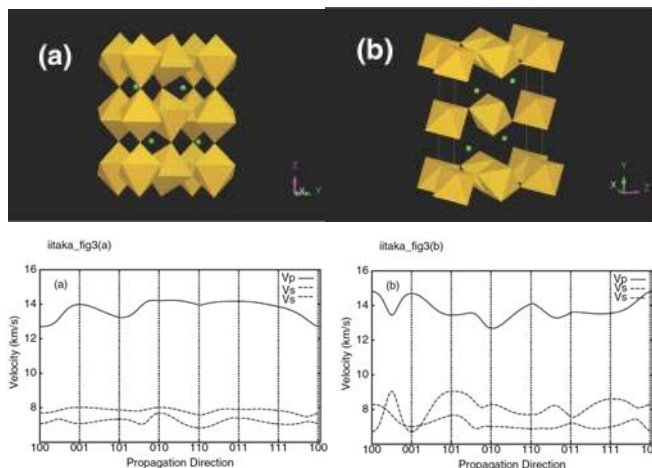


図13 MgSiO₃ の結晶構造および地震波速度の異方性の計算値:(a) ペロブスカイト (b) ポストペロブスカイト。[19]

<http://www.iitaka.org/ppj.html>

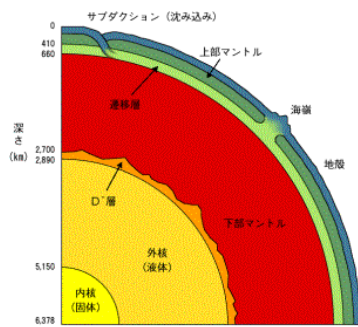


図14 地球の内部

<http://www.edu.pe.ca/southernkings/compositionch.htm>

1.4 GPGPU

1.4.1 GPUとは

このような結晶構造予測の計算は、いろいろな結晶構造パラメータに対して第一原理計算によるエネルギー計算を行う必要があり、膨大な計算を高速に実行する必要がある。この要請に答えるために我々は、GPUなどの演算加速装置(アクセラレータ)[21]と並列計算機を組み合わせ第一原理計算を高速処理する方法を提唱した[22]。GPUとは本来パソコンの画像処理用計算装置であるが、近年の驚異的なゲーム機の発達の結果、科学計算に応用してもCPUを凌駕する計算速度を持つようになった(図15)。GPUは特に行列計算やフーリエ変換が得意なので、第一原理計算のような量子シミュレーションの高速化に最適である[22-25]。

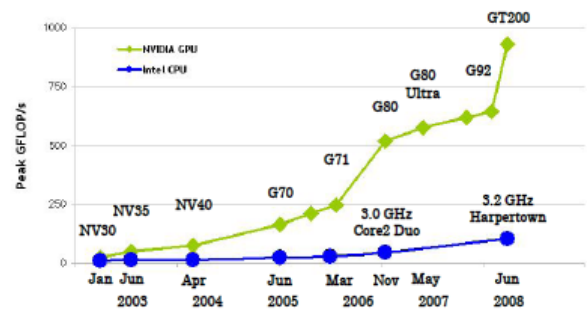


図15 GPUとCPUの計算能力

http://developer.download.nvidia.com/compute/cuda/2.1/toolkit/docs/NVIDIA_CUDA_Programming_Guide_2.1.pdf

1.4.2 理研ハーバード連携シンポジウム (HaRiken09)



2009年8月28日、29日に大河内記念ホールにて「理研ハーバード大学連携シンポジウム: 脳科学、量子科学、天文学、流体力学等へのGPU計算の応用」を開催した(図16)。

開催の経緯は簡単に述べよう。2008年3月にハーバード大学において、次世代の高性能演算装置の候補であるGPUによる超並列科学計算に関するハーバード大・理研連携シンポジウム(HaRiken08)が開催され幾つかの連携研究が芽生えた。今回は開催地を理研和光

キャンパスとして第二回シンポジウムを開き、前回ハーバード大を訪問しなかった研究者も巻き込み、この流れをさらに促進しようとするものである。

当日は、理研の基幹研究所、脳科学総合研究センター、次世代計算科学研究開発プログラムをはじめ、理研外の大学、企業、研究所等から、総計70名を超える参加者があった。詳細については、シンポジウムのホームページ(<http://www.iitaka.org/hariken09.html>)をご覧ください。



図 16 シンポジウムにおける講演

1.5 本研究の目的・目標

このような高圧合成法を利用した材料開発はいま急速に発展しつつある。どのような圧力でどのような結晶構造が安定になるのかを予測できれば、黒鉛をダイヤモンドに変えるような材料開発[6]が飛躍的に加速されることが期待される。そこで本研究では、SPring-8 におけるX線回折実験、J-PARC(図17)における中性子回折実験と第一原理電子状態計算の統合研究による高圧下における結晶構造予測研究を目指す。その中でも、本申請では特にエネルギー関連、地球環境関連物質として注目されている、氷、メタン水ドレート(図18)、水素水ドレート、CO₂水ドレートなどの氷系物質およびグラファイト、ダイヤモンド、ナノダイヤモンド、フラーレン(C₆₀)、カーボンナノチューブ(C₆₀ポリマー)などの炭素系物質の物性解明に重点を置く。



図 17 J-PARC、物質・生命科学実験施設(高エネルギー加速器研究機構、日本原子力研究開発機構)

<http://www.j-parc.jp/>

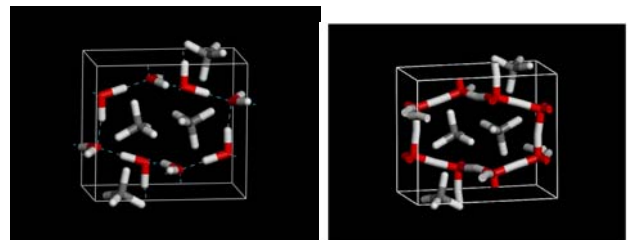


図 18 メタン水ドレート III 相における水素結合対称化

<http://www.iitaka.org/mh.html>

2 具体的な利用内容、計算方法、結果

2.1 氷 Ih 相の秩序相

1972 年以來の常識をくつがえして、氷 XI 相は純粋な氷 Ih 相の低温秩序相ではなく、氷 Ih 相の真の秩序相は未解明であることを第一原理電子状態計算に基づいたモデルにより示した。

水分子は、太陽系内外の各種惑星を構成する物質のひとつとして知られている[26,27]。水分子は単純な形状を持つにもかかわらず、その固体である氷は非常に複雑な相図を持つことが知られている。この複雑さの原因は水素結合ネットワークの複雑性に起因すると考えられる。なかでも氷 Ih 相は地球上でもっともよく見かける氷であり、六対称性を持つ結晶構造と、正四面体構造をもち「Ice Rule」[28]を満たすランダムな水素結合により特徴付けられる。氷 Ih を絶対零度へと冷やしていくと、水素結合のランダムネスに起因する 3.5(J/mol K)の残留エントロピー $-S_0$ が観測される。これは一見、絶対零度の極限でエントロピーがゼロになるという熱力学の第 3 法則に反するよう見える。そこで、長年にわたって氷 Ih 相の低温秩序相、氷 XI 相の探究が行

われてきた。宇宙における氷 XI 相の存在や[29,30]氷 XI が惑星形成に果たす役割[31,32]なども論じられた。実験では、KOH などの不純物をドーピングした氷 Ih を 72K 以下に冷やすと、水素結合が秩序相にあり強誘電性をもった氷 XI 相に転移することが知られている。これまでの一般的な見方は、純粋な氷 XI 相は低温で熱力学的に安定であり、不純物の役割は触媒であるというものであった。しかし、我々はこの 1972 年以來の常識をくつがえして氷 XI 相は純粋な氷 Ih 相の真の低温秩序相ではないことを第一原理電子状態計算に基づいたモデルにより示した。氷 XI 相は一定量以上の不純物が入った場合のみエネルギー的に安定なのである。

2.2 氷の高圧物性

氷は水分子 H_2O から成るが、水素原子 H はその質量が非常に軽いため H の運動に関する量子効果が物性に大きな影響を与える。Benoit ら[33] は高圧下の氷について加圧により「水素結合対称化」という量子相転移が起こることを [第一原理経路積分分子動力学法](#) により示した。飯高ら[34] は第一原理分子動力学法によりメタンハイドレートにおいても加圧により水素結合対称化が起こることを示した(図 18)。SPring-8 の BL10XU ビームラインにおける最新の高圧 H_2O 氷の X 線回折測定では、水素結合対称化の様子が氷 VII 相の状態方程式(P-V 曲線)に現れているらしいことが示唆されている[35]。そこで、本研究では、水素原子の量子効果を取り入れた氷 VII 相の状態方程式を求めるために、量子相転移が起こると考えられている圧力範囲を中心に第一原理経路積分分子動力学法による大規模計算を行ったが、経路積分分子動力学で十分な収束を得るに至らなかった。

2.3 水素ハイドレート

水素ハイドレートの高圧相は、水素と水が共存する惑星内部で重要な役割を果たす可能性がある。本研究では、水素ハイドレート C2 相の結晶構造およびフォノンスペクトル等の物性について第一原理計算を行った(図 19-図 21)。これにより、最新の高圧実験結果[36]が示すところの物理を明らかにした。

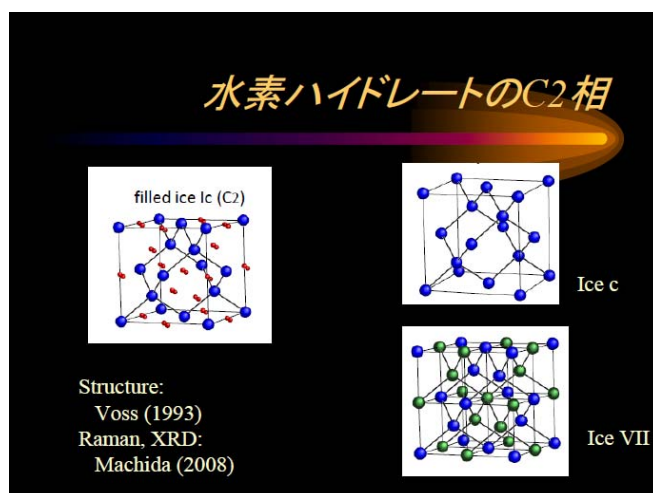


図 19 水素ハイドレート C2 相の結晶構造 (Machida et al.)

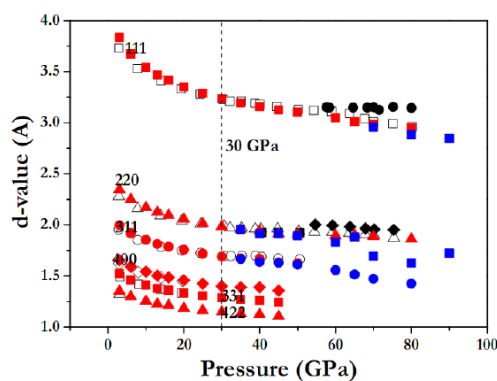


Fig. 2 Comparison of calculated d-values (red and blue symbols) with experimental data (empty and black solid symbols) as a function of pressure.

図 20 水素ハイドレート C2 相の格子定数の圧力依存性

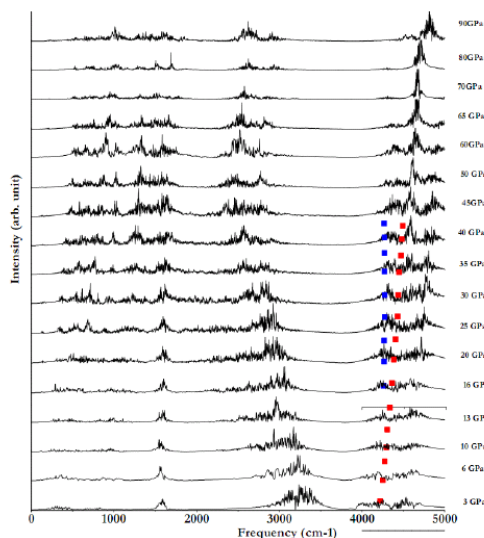


Fig. 3 Calculated phonon density of state together with experimental data.

図 21 水素ハイドレート C2 相のフォノンスペクトル

2.4 水素化スズ高圧相の超伝導

高圧下での水素化合物は超伝導物質になる可能性があり、

その探索に多大な興味を持たれている。水素化スズ (SnH4)は高圧下で高温超電導体になる可能性が指摘されてきたが、超伝導を理解するために不可欠な高圧下での結晶構造は未解明であった。我々は第一原理結晶構造予測法を用いて水素化スズの二つの高圧相(結晶群: Ama2 および P63/mmc)を提案した(図22)。Ama2 相は 96-180GPa、P63/mmc 相は 180GPa 以上であってであることがエンタルピー計算により明らかになった。96GPa 以下では、SnH4 は各元素に分解してしまう。

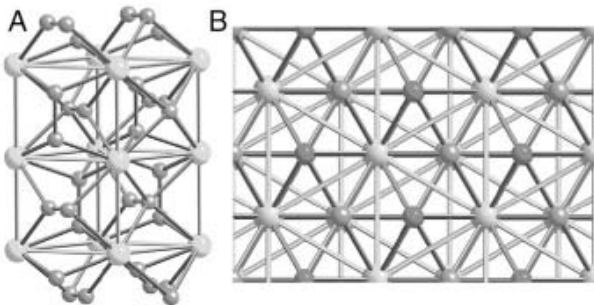


Fig. 1. (color online). (A) and (B) Ama2 and P6₃/mmc structures. For Ama2 structure at 120 GPa, the lattice parameters are $a = 5.381 \text{ \AA}$, $b = 5.421 \text{ \AA}$, $c = 3.074 \text{ \AA}$ with atomic positions of Sn at 4a (0, 0, 0.0001) and three inequivalent H atoms at 4b (0.75, 0.58823, 0.00586), 4b (0.75, 0.73278, 0.98835) and 8c (0.87773, 0.32159, 0.99613). For P6₃/mmc structure at 200 GPa the lattice parameters are $a = b = 2.9024 \text{ \AA}$, $c = 5.3274 \text{ \AA}$, and $\gamma = 120^\circ$ with atomic positions of Sn at 2c (2/3, 1/3, 3/4) and H at 4e (0, 0, 0.92278) and 4f (1/3, 2/3, 0.57982), respectively. The large and small spheres represent Sn and H atoms, respectively.

図22 水素化スズ高圧相の結晶構造

2.5 GPGPU による超並列高速計算

GPUを活用した科学計算についてシンポジウムを開催するとともに、大規模量子分子動力学へのGPU計算の適用を行った。RICCのGPUクラスタを利用したベンチマークテストも行った。

2.5.1 3次元C₆₀ポリマーの量子分子動力学

大規模電子状態計算プログラム ELSES[7] を rsc あるいは GPU クラスタ「Heisenberg Machine 2009」(図23) [21-25,37]を用いて加速し、3次元C₆₀ポリマーの有限温度シミュレーションを実現した。

図24はこのELSESで計算したダイヤモンドの状態方程式と実験値[38]である。実験値と良く一致している。図25は、実験で決定された結晶構造[38]を出発点として行った有限温度分子シミュレーションの結果である。常温常圧で離れていたC₆₀分子同士を300K、25GPaの条件で3ps圧縮すると、C₆₀分子間に共有結合が形成されることが分る。



図23 GPU クラスタ「Heisenberg Machine 2009」

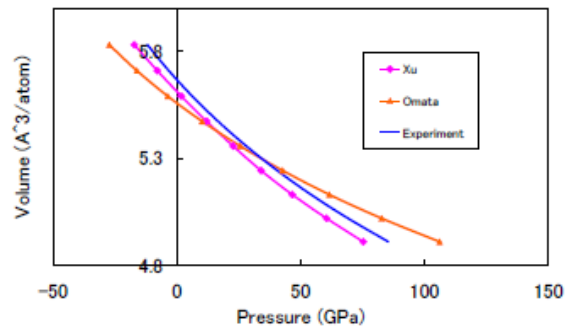


図24 立方晶ダイヤモンドの状態方程式

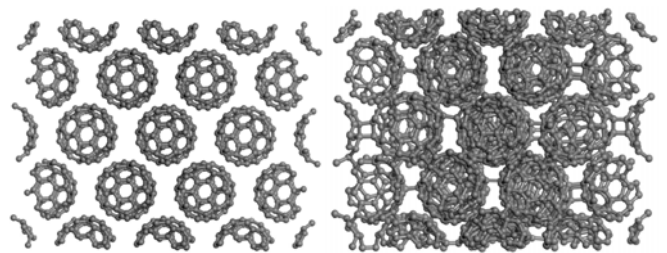


図25: C₆₀クラスタの有限温度分子シミュレーション
左図は初期状態。右図は300K、25GPaで3ps後。

2.6 新炭素結晶“K4”

2008年から2009年にかけて、ダイヤモンド、グラファイトに次ぐ第3の炭素結晶“K4”(図26)が提唱された[39-41]。ダイヤモンドはsp³結合のみからなる3次元ネットワークであり、グラファイトはsp²結合のみからなる2次元ネットワークであるが、“K4”は、もし存在するとすれば、sp²結合のみからなる3次元ネットワークを持つ結晶である。我々は、密度汎関数線形応答理論に基づき、この新結晶のフォノンの分散関係を計算して、“K4”の結晶構造は不安定であり結晶として存在し得ないことを指摘した[42]。

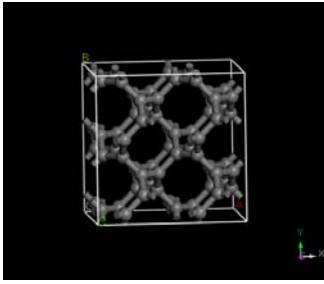


図26 新炭素結晶”K4”の結晶構造

3 結果

前節、「2. 具体的な利用内容、計算方法、結果」にまとめて記載した。

4 まとめ

前々節、「2. 具体的な利用内容、計算方法、結果」にまとめて記載した。

5 今後の計画・展望

今後の研究では、最先端の量子シミュレーションを駆使することにより、地表環境から高温高压領域までの鉱物、マグマ、水の構造と物性に対する水素や水素結合の影響、及び高压力下での中性子散乱実験を進展させる新素材「多結晶ナノダイヤモンド」の物性研究を推進する。

具体的には、氷の秩序無秩序相転移における「記憶効果」を理論的に解明する。水素ハイドレートについて C2 相の他に、水素吸蔵物質候補として注目されている籠状のクラスレート相についても研究したい。また、大規模量子分子動力学をシリコンクラスレートの高圧物性の謎の解明に適用したい。

さらに、新アルゴリズムや演算加速装置などの技法を進展させ、計算物質科学の手法を地球科学のみならず、エネルギー関連、地球環境関連の材料開発、宇宙生物学[43]への適用も開拓していきたい。

6 RSCG の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況(どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか)や、継続して利用する際に行う具体的な内容

今年度は氷 XI 相の安定性に関する研究をまとめ論文を投稿した。継続利用では氷の秩序無秩序相転移における「記憶効果」を理論的に解明したい。今年度は Filled Ice 型の水素ハイドレートの高圧物性を研究した。継続利用では、水素吸蔵物質候補としても重要な籠型

水素ハイドレートの各種物性を研究したい。昨年度は GeH₄、今年度は SnH₄ 高压相の構造と物性を明らかにした。継続利用においては、メタン (CH₄) の高压相の構造と物性を探究する。メタンはガス惑星の主要構成要素であり、地球惑星科学的にも重要な問題である。

【参考文献】

- [1] Geoffrey Marcy, “Water world larger than Earth”, Nature 462, 853 (2009).
- [2] David Charbonneau, “A super-Earth transiting a nearby low-mass star”, Nature 462, 891 (2009).
- [3] S. Yamanaka, A. Kubo, K. Inumaru, K. Komaguchi, N.S. Kini, T. Inoue, and T. Irifune, Phys. Rev. Lett. 96, 076602 (2006).
- [4] http://www.iitaka.org/harvard_mou.html
- [5] http://en.wikipedia.org/wiki/Percy_Bridgman
- [6] T. Irifune, A. Kurio, S. Sakamoto, T. Inoue, H. Sumiya, Nature 421, 599 (2003).
- [7] <http://www.elses.jp>; R. Takayama, T. Hoshi, T. Fujiwara, JPSJ73, 1519 (2004); R. Takayama, T. Hoshi, T. Sogabe, S.-L. Zhang, and T. Fujiwara, PRB 73, 165108 (2006); T. Hoshi, and T. Fujiwara, JPCM 18, 10787 (2006); 21, 064233 (2009).
- [8] http://www.iitaka.org/~neutron/20081111_HighPressure_Hoshi.pdf
星健夫、飯高敏晃、マリア・フィタ、「多結晶ナノダイヤモンドの大規模量子シミュレーション」、第 49 回高压討論会 (2008);
Takeo Hoshi, Toshiaki Iitaka, Maria Fyta, "Large scale simulation of quantum-mechanical molecular dynamics for nano-polycrystalline diamond", ([arXiv:0908.4469](https://arxiv.org/abs/0908.4469)).
- [9] S. Yamanaka, A. Kubo, K. Inumaru, K. Komaguchi, N.S. Kini, T. Inoue and T. Irifune, Phys. Rev. Lett. 96, 076602 (2006).
- [10] J. Yang, J.S. Tse, and T. Iitaka, J. Chem. Phys. 127, 134906 (2007).
- [11] J. Yang, J.S. Tse, Y. Yao, and T. Iitaka, Angewandte Chemie International Edition 46, 6275 (2007);
<http://www.rikenresearch.riken.jp/research/310/>
- [12] F. Zipoli and M. Bernasconi, Phys. Rev. B 77, 115432

- (2008).
- [13] T. Kosugi and S. Tsuneyuki, (unpublished).
- [14] Y. Yamagami and S. Saito, Phys. Rev. B 79, 045425 (2009).
- [15] Guoying Gao, Artem R. Oganov, Peifang Li, Zhenwei Li, Hui Wang, Tian Cui, Yanming Ma, Aitor Bergara, Andriy O. Lyakhov, Toshiaki Iitaka, and Guangtian Zou, "High-pressure crystal structures and superconductivity of Stannane (SnH₄)", Proceedings of the National Academy of Sciences 107, 1317 (2010). (journal)
- [16] T. Iitaka and T. Ebisuzaki, Phys. Rev. B 65, 012103 (2001).
- [17] 清水宏晏、飯高敏晃: 日本物理学会誌 57 巻 8 号
<http://www.iitaka.org/butsuri200208.pdf>
- [18] M. Murakami, K. Hirose, K. Kawamura, N. Sata, Y. Ohishi, Science 304, 855 (2004).
- [19] T. Iitaka, K. Hirose, K. Kawamura, M. Murakami, Nature 430, 442 (2004).
- [20] N. Miyajima, K. Ohgushi, M. Ichihara, T. Yagi, Geophys. Res. Lett. 33, L12302 (2006); K. Ohgushi, H. Gotou, T. Yagi, Y. Kikuchi, F. Sakai, Y. Ueda, Phys. Rev. B 74, 241104 (2006). H. Kojitani, A. Furukawa, M. Akaogi, American Mineralogist 92, 229 (2007).
- [21] T. Hamada and T. Iitaka, (astro-ph/0703100).
<http://uk.arxiv.org/abs/astro-ph/0703100>
- [22] 飯高敏晃、山本浩史、山田太郎、平成19年度戦略的研究展開事業研究計画書「量子ダイナミクスのための異種マルチコア型超並列計算法」【採択課題無し】
http://www.iitaka.org/doc/20070116president_s.pdf
- [23] HaRiken08 <http://www.iitaka.org/hariken08.html>;
- [24] 飯高敏晃、日本計算工学会誌「計算工学」(2007-2008). <http://www.jsces.org/>
- [25] 伴野秀和、青木優、飯高敏晃、円谷和雄、日本物理学会第 64 回年次大会(28aRC-9).
- [26] G. Tinetti, et al., Nature 448, 169 (2007).
- [27] D. Charbonneau, et al., Nature 462, 891 (2009).
- [28] L. J. Pauling, Am. Chem. Soc. 57, 2680 (1935).
- [29] W.B. McKinnon, A.M. Hofmeister, BAAS, 37, 732 (2005).
- [30] H. Fukazawa, A. Hoshikawa, B.C. Chakoumakos, J.A. Fernandez-Baca, Astr. Phys. J. 652 , L57 (2006).
- [31] M.J. Iedema, M.J. Dresser, D.L. Doering, J.B. Rowland, W.P. Hess, A.A. Tsekouras, J.P. Cowin, J. Phys. Chem. B 102, 9203 (1998).
- [32] H. Wang, R.C. Bell, M.J. Iedema, A.A. Tsekouras, J.P. Cowin, Astr. Phys. J. 620, 1027 (2005).
- [33] Benoit et al., Nature 392, 258 (1998).
- [34] T. Iitaka and T. Ebisuzaki, Phys. Rev. B 68, 172105 (2003).
- [35] E. Sugimura, T. Iitaka, K. Hirose, K. Kawamura, N. Sata, and Y. Ohishi, Phys. Rev. B 77, 214103 (2008).
- [36] Machida et al., J. Chem. Phys. 129, 224505 (2008).
- [36] Guoying Gao, Artem R. Oganov, Aitor Bergara, Miguel Martinez-Canales, Tian Cui, Toshiaki Iitaka, Yanming Ma, and Guangtian Zou, Phys. Rev. Lett. 101, 107002 (2008).
- [37] Toshiaki Iitaka, "GPU-accelerated large-scale quantum molecular dynamics simulation of 3-dimensional C60 polymers", ([arXiv:0910.4497](https://arxiv.org/abs/0910.4497)).
- [38] Agnès Dewaele, Frédéric Datchi, Paul Loubeyre, and Mohamed Mezouar, Phys. Rev. B 77, 094106 (2008).
- [39] T. Sunada, Not. Am. Math. Soc. 55, 208 (2008).
- [40] M. Itoh, M. Kotani, H. Naito, T. Sunada, Y. Kawazoe, T. Adschiri, Phys. Rev. Lett. 102, 055703 (2009).
- [41] 日経産業新聞 2009年3月12日「新構造の炭素物質」
- [42] Y. Yao, J. S. Tse, J. Sun, D. D. Klug, R. Martoňák, and T. Iitaka, "Comment on "New Metallic Carbon Crystal", Phys. Rev. Lett. 102, 229601 (2009). (journal).
- [43] 飯高敏晃、「太陽系外生命の第一原理計算をめざして」、低温科学, 64 巻 47-55 頁(2006).
<http://eprints.lib.hokudai.ac.jp/dspace/bitstream/2115/8314/1/TEION047-55.pdf>

平成 21 年度 RICC 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

著者名	論文標題			
Y. Yao, J. S. Tse, J. Sun, D. D. Klug, R. Martoňák, and T. Iitaka	Comment on “New Metallic Carbon Crystal”			
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁
Phys. Rev. Lett.	有	102	2009	229601

著者名	論文標題			
Guoying Gao, Artem R. Oganov, Peifang Li, Zhenwei Li, Hui Wang, Tian Cui, Yanming Ma, Aitor Bergara, Andriy O. Lyakhov, Toshiaki Iitaka, and Guangtian Zou	High-pressure crystal structures and superconductivity of Stannane (SnH ₄)			
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁
Proceedings of the National Academy of Sciences	有	107	2010	1317

著者名	論文標題			
Jianjun Yang, John S Tse and Toshiaki Iitaka	First-principles studies of liquid lithium under pressure			
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁
J. Phys.: Condens. Matter	有	22	2010	095503

【国際会議、学会などでの口頭発表】

発表者名	発表標題	
Toshiaki Iitaka	GPU-accelerated Quantum Molecular Dynamics Simulation of 3-dimensional C60 Polymers	
学会等名	発表年月日	発表場所
International Conference on Materials for Advanced Technologies 2009 (ICMAT 2009)	2009年6月28日	Singapore Singapore

発表者名	発表標題	
Toshiaki Iitaka	GPU-accelerated large-scale quantum molecular dynamics simulation of 3-dimensional C60 polymers	
学会等名	発表年月日	発表場所
International Conference on High Pressure Science and Technology, Joint AIRAPT-22 & HPCJ-50	2009年7月28日	Tokyo Japan

発表者名	発表標題	
John Tse, Toshiaki Iitaka, Eunja Kim, Yansun Yao	Structural search with evolution algorithm: The structure of solid H ₂ S at high pressure	
学会等名	発表年月日	発表場所
International Conference on High Pressure Science and Technology, Joint AIRAPT-22 & HPCJ-50	2009年7月28日	Tokyo Japan

発表者名	発表標題	
Guoying Gao, Artem Oganov, Yanming Ma, Aitor Bergara, Toshiaki Iitaka	Novel high pressure phases of SnH4	
学会等名	発表年月日	発表場所
International Conference on High Pressure Science and Technology, Joint AIRAPT-22 & HPCJ-50	2009年7月28日	Tokyo Japan

発表者名	発表標題	
Masaru Aoki, Hidekazu Tomono, Toshiaki Iitaka, Kazuo Tsumuraya	Acceleration of orbital-free first principles calculation with GPU	
学会等名	発表年月日	発表場所
International Conference on High Pressure Science and Technology, Joint AIRAPT-22 & HPCJ-50	2009年7月28日	Tokyo Japan

発表者名	発表標題	
Hidekazu Tomono, Masaru Aoki, Toshiaki Iitaka, Kazuo Tsumuraya	GPU based acceleration of first principles calculation	
学会等名	発表年月日	発表場所
International Conference on High Pressure Science and Technology, Joint AIRAPT-22 & HPCJ-50	2009年7月28日	Tokyo Japan

発表者名	発表標題	
Toshiaki Iitaka	GPU-accelerated Computing for Earth and Planetary High Pressure Science	
学会等名	発表年月日	発表場所
Harvard-Riken Joint Symposium: Application of GPU Computation to Brain Science, Quantum Science, Astronomy, Fluid Dynamics and other sciences (HaRiken 09)	2009年8月27日	Wako Japan

発表者名	発表標題	
Masaru Aoki, Hidekazu Tomono, Toshiaki Iitaka, Kazuo Tsumuraya,	Accelerating Orbital-Free First Principles Calculation with Graphics Processing Unit	
学会等名	発表年月日	発表場所
Harvard-Riken Joint Symposium: Application of GPU Computation to Brain Science, Quantum Science, Astronomy, Fluid Dynamics and other sciences (HaRiken 09)	2009年8月27日	Wako Japan

発表者名	発表標題	
Hiroshi Tanaka, Tomonori Hattori, Toshiaki Iitaka, Masaki Takata	MEM charge density analysis by using GPU	
学会等名	発表年月日	発表場所
Harvard-Riken Joint Symposium: Application of GPU Computation to Brain Science, Quantum Science, Astronomy, Fluid Dynamics and other sciences (HaRiken 09)	2009年8月27日	Wako Japan

発表者名	発表標題	
Hidekazu Tomono, Masaru Aoki, Toshiaki Iitaka, Kazuo Tsumuraya	GPU Based Acceleration of First Principles Calculation	
学会等名	発表年月日	発表場所
Harvard-Riken Joint Symposium: Application of GPU Computation to Brain Science, Quantum Science, Astronomy, Fluid Dynamics and other sciences (HaRiken 09)	2009年8月27日	Wako Japan

発表者名	発表標題	
Toshiaki Iitaka	GPU-accelerated Massive Parallel Quantum Molecular Dynamics Simulation	
学会等名	発表年月日	発表場所
5th Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-5)	2009年9月7日	Hanoi Viet Nam

発表者名	発表標題	
Jingyun Zhang, Jer-Lai Kuo, Toshiaki Iitaka	Hydrogen hydrate under high pressure	
学会等名	発表年月日	発表場所
4th General Meeting of ACCMS-VO Asian Consortium on Computational Materials Science-Virtual Organization	2010年1月12日	Sendai Japan

発表者名	発表標題	
伴野 秀和, 青木 優, 飯高 敏晃, 圓谷 和雄	GPUによる平面波基底第一原理計算の高速化	
学会等名	発表年月日	発表場所
第28回日本シミュレーション学会大会	2009年6月11日	東京 日本

発表者名	発表標題	
青木 優, 伴野 秀和, 飯高 敏晃, 圓谷 和雄	第一原理計算の高速化	
学会等名	発表年月日	発表場所
第28回日本シミュレーション学会大会	2009年6月11日	東京 日本

発表者名	発表標題	
飯高 敏晃	大規模量子分子動力学のGPUによる加速	
学会等名	発表年月日	発表場所
東京大学 理学部 第一原理勉強会	2009年10月20日	東京 日本

発表者名	発表標題	
飯高 敏晃	GPU-Accelerated Massively Parallel Quantum Molecular Dynamics Simulation	
学会等名	発表年月日	発表場所
核融合科学研究所連携研究推進センター客員セミナー	2009年11月20日	土岐 日本

発表者名	発表標題	
飯高 敏晃	量子分子動力学の並列GPU計算による高速化	
学会等名	発表年月日	発表場所
日本応用数理学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会 第8回研究会	2009年11月26日	東京 日本

発表者名	発表標題	
飯高 敏晃	量子分子動力学の並列GPU計算による高速化	
学会等名	発表年月日	発表場所
東京工業大学 量子物理学・ナノサイエンス第22回セミナー	2009年11月30日	東京 日本

発表者名	発表標題	
飯高 敏晃	GPGPUは「次世代スパコン」の敵か味方か	
学会等名	発表年月日	発表場所
東京大学物性研究所 短期研究会 計算物理学	2009年12月11日	柏 日本