

国際共同研究交通費補助 研究成果報告書

(適宜行追加可)

所属・職・氏名	理工学部・教授・小笠原一禎
共同研究者 所属・職・氏名	Department of Physics and Astronomy, University of Missouri - Kansas City, Assistant Professor, Paul Rulis
研究課題	第一原理多電子状態計算プログラムOLCAO-CIの開発
共同研究 実施期間	派遣期間： 2017年 9月 5日 ～ 2017年 9月 14日 招聘期間： 年 月 日 ～ 年 月 日
共同研究 実施場所	Department of Physics and Astronomy, University of Missouri - Kansas City

1. 研究の成果（本共同研究によって得られた新たな知見、成果等を簡潔に記述してください。該当しない場合は「該当なし」と記載してください。）

(1) 学術的価値（本研究により得られた新たな知見や概念の展開等、学術的成果）

申請者が独自に開発したDVMEプログラムは多重項スペクトルの非経験的な予測が可能なプログラムであるため、新規発光材料の理論設計に有用であるが、計算精度がやや低いことが問題となっている。一方、Rulis教授らが独自に開発したOLCAOプログラムは計算精度の高いプログラムであるが、多重項状態の計算ができない。本共同研究では、OLCAOプログラムをDVMEプログラムと組み合わせることにより、高い精度で多重項状態の計算が可能なOLCAO-CIプログラムを新たに開発した。これにより、発光材料の特性をこれまでよりも高い精度で理論的に予測することが可能となるため、発光材料の開発研究を飛躍的に加速することが可能であると期待される。

(2) 相手国との交流（海外の研究者と学術交流することによって得られた効果）

本共同研究では、申請者と共同研究者がそれぞれ独自に開発しているプログラムを組み合わせることにより、新規プログラムの開発を行った。プログラムの検証時には、頻りにデータのやり取りが必要となるため、以前は電子メールでデータをやり取りして計算を行い、その結果を電子メールでフィードバックするという方法でプログラム開発を進めてきたが、日本と米国では時差もあるため、1日1回しかやり取りができず、極めて効率が悪かった。本共同研究では、申請者が共同研究者の研究室に滞在することにより、毎日同じ部屋で一緒に議論しながらデバッグを進めることができたため、一日に何度もフィードバックすることが可能となり、効率よくプログラムの検証・デバッグが進み、プログラム開発が一気に進展し、OLCAO-CIプログラムが完成した。

(3) 社会貢献（社会の基盤となる文化の継承と発展、社会生活の質の改善、現代的諸問題の克服と解決に資する等の社会的貢献）

省エネルギーかつ環境に優しい次世代の照明として期待されている白色LEDの普及には、高効率で安価な新規蛍光体の開発が不可欠である。本共同研究において開発したOLCAO-CIプログラムは、結晶中の遷移金属イオンにおけるエネルギー準位やスペクトルを精度よく予測することが可能な計算プログラムであるため、新規蛍光体の開発において極めて有用なツールとなる。したがって、本研究の成果はエネルギー問題や環境問題の解決に貢献することができる。

(4) 若手研究者養成への貢献（若手研究者養成への取り組み、成果）

新規プログラム開発において必要となった二電子積分計算プログラムは、Rulis教授の研究室の博士後期課程学生であるBenjamin A. Walker氏が最近開発したものである。本共同研究において、申請者とWalker氏は毎日一緒に議論しながら、OLCAO-CIプログラムの開発を行い、多くのテスト計算を行った。得られた成果の一部はWalker氏の博士学位論文に含まれる予定である。このように、本共同研究で申請者がRulis教授の研究室に滞在することにより、若手研究者育成にも貢献できた。

(5) 将来発展可能性（本研究を実施したことにより、今後どのような発展の可能性が認められるか）

DVMEプログラムには4成分の相対論的波動関数を用いる完全相対論版プログラムがある。現在、Rulis

教授の研究室の博士後期課程学生であるPatrick R. Thomas氏が、OLCAOプログラムの相対論版の開発を行っており、このプログラムが完成すれば、相対論DVMEプログラムと組み合わせることにより、将来的には完全相対論版OLCAO-CI計算プログラムの開発が可能となる。相対論OLCAO-CIプログラムが完成すれば、結晶中の希土類イオン・アクチニドイオンなどの重元素における多重項スペクトルの正確な計算が可能な世界で唯一のプログラムとなり、希土類イオン・アクチニドイオンに基づく発光材料の開発において極めて有用なツールになると期待される。

(6) その他(上記(1)～(5)以外に得られた成果があれば記述してください。)

例：大学間協定の締結、他事業への展開、受賞、産業財産権の出願・取得等

該当なし

2. 研究発表(本共同研究の一環として発表(予定含む)したものについて記述してください。なお、印刷物がある場合は1部添付してください。)

例：共著論文、口頭発表、出版、ポスター発表

該当なし