

藤原毅夫先生退職にあたって

星 健夫

鳥取大学工学部応用数理工学科

[2007年3月：特定領域研究「次世代量子シミュレータ・量子デザイン手法の開発」ニュースレターに寄稿]

本特定領域第1班メンバーである藤原毅夫先生が東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻教授をこの3月で退職される。これにあたり、ニュースレターに寄稿して欲しい、というお話をいただいた。筆者は昨年10月まで藤原先生のもとで助手をしており、現在も共同研究をしているため、お引き受けした。しかしながら、先生のご活躍は非常に多岐にわたるため、さて困ったな、というのが正直な気持ちだった。結局、本特定領域に関わる話を中心に絞り、さらに文献リストをあげることで、内容紹介の代わりとさせていただきますことにした。

近年の藤原研究室 [1] では、本特定領域と密接に関わる、以下の2テーマを中心に取り組んできた。

1. 1電子描像と多電子描像の融合による第一原理電子構造理論の拡張、および、強相関電子系 (主に遷移金属酸化物系) への適用 [2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9]
2. 超大規模 (10^3 - 10^7 原子系) 電子構造計算法、および、ナノ構造の動的プロセスと機能性 [10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19]

これら研究は全て、オリジナルコードによって行われており、それぞれの手法における最大システムサイズ (原子数) 程度の計算が含まれる。そのため、使用メモリを減らすためにコード全体を書き換える、といった、論文からは読み取りにくい部分で苦労することもある。藤原先生は多忙を極めながらも、計算結果の議論はもちろん、コード開発についての議論も行い、ご自身でコードを書かれることも多い。

研究室以外の活動として、固体電子構造理論の教科書 [20] があるほか、放送大学で「物性物理学入門」を担当なさっている [21]。本特定領域に直接関係することとしては、藤原先生が Co-chair となり、昨年11月30日から12月1日に東京大学にて国際会議「International Workshop on First Principles Calculation of Correlated Electrons」(FPCCE) が開かれた。

藤原先生の退職にあたっては、昨年10月に門下生および (元) 共同研究者が集まり、研究会「物性物理・数学・計算科学の融合」を開いた [22]。講演内容があまりに広く、研究会タイトルをつけるのに苦労した。筆者にとっては、藤原先生の研究スペクトルの広さを、改めて知る機会となった。

最終講義は2月28日、「固体電子構造理論について」の題目で、東京大学工学部6号館にて行われた。最初に先

生は、「職を得てから37年が過ぎましたが、研究活動を振り返ると、それほど間違っていないと思っています。今日はそのことをお伝えしたいと思います」と述べられた。講演時間は約1時間であり、以下に、内容を極めて簡単に紹介する。なお、実際の講演は、藤原先生独特のユーモアが随所に入り、笑いがおこる場面もしばしばあったのだが、紙面で再現するのが難しいため、以下では省いている。

最初のスライドには、Hohenberg-Kohn(HK) の原論文 [23] が紹介されていた。藤原先生は修士1年の1967年、学生輪講の際に、HKを紹介されたそうである。ただ、「読んだ時には、どういう風に役に立つのか、良くわからなかった」とのことだった。続いて、研究室助手を勤めた、田辺行人先生の配位子場理論 [24] について触れ、HKとどうつながっているのか、当時から興味があったと述べられた。次に、70年代を通じて親交の厚かった外国研究者の名前を、理論と共にあげられた。V. Heine(Recursion 法 [25])、O. K. Andersen(LMTO 法 [26])、などである (特に、Andersen(アンデルセン) 教授との親交は、今日まで密に続いている。FPCCEでのAndersen教授の招待講演でも、藤原先生との思い出が、写真付きで紹介されている)。

ご自身の研究として最初に紹介されたのは、LMTO-Recursion 法を用いた大規模アモルファス系計算 [27, 28] であった。続く数枚のスライドは、80年代半ばに端を発する準結晶系についての研究に割り当てられていた。[29, 30, 31, 32] また、同じく80年代半ばに端を発する高温超伝導体の計算 [33] を取り上げられ、これが強相関系の研究へとつながっていく、と述べられた。続いて「自分の仕事ではないが」と断って、カーパリネロ法 [34] を「アルゴリズムの変更が、問題を質的に変化させる例」として、また、FMO 法 [35] と ONIOM 法 [36] を「バイオ系へのアプローチ」として、あげられた。

以降は、本記事冒頭にあげたテーマ1 (強相関)、テーマ2 (大規模・ナノ系) について、現状を少し詳しく述べられた。テーマ2については、動画を交えての紹介となった。シリコンヘキ開における表面形成過程を、10nm スケール系に特有の、弾性論的エネルギーと電子論的エネルギーの競合の例としてあげられた。[13, 19] また、ヘリカル金ナノワイヤ [37] の形成過程シミュレーション [16] も、取り上げられた。一方、テーマ1については、LaMnO₃ 反強磁性相のGWA計算 [7] を、「LDAが(無摂動状態として) 良い例」としてあげられた。さらに準粒子寿命 ($|\text{Im } G|/\pi$) と動的に遮蔽されたクーロン相互作用 ($W(E)$) のグラフを示し、その物理的意味を述べられた。[7] また、非常に駆け足ながら、「LDAが良くない例」としてV₂O₃, NiO, La_{2-x}Sr_xNiO₆ をあげ、LDA+U+GWA, DMFT, 厳密対角化などの計算結果スライドを見せられた。[38, 39, 40, 41]

テーマ1・テーマ2全体のまとめとして、種々の理論の一覧を掲げられ、今後の展望として「GWA+DMFT」などのキーワードを示された。

これら研究関連の話を終え、最後の10分程度を、「工学教育あるいは大学教育一般について - 専門化の進んだ状況における試み - 」と題して、先生が今年度まで機構長を勤める工学部教育推進機構 (<http://ciee.t.u-tokyo.ac.jp>) の活動について説明された。話題は、講義シラバスの構造化・ものづくり実験工房の建設・英語教育など、幅広い分野に及んだ。[42]

質疑応答時間に「なぜ学生輪講でHKを取り上げたのですか?」という質問があり、「当時はPhysical Reviewも薄かったので、色々読んでみて、なんとなく選んだ。今思えば、のどかな時代だった」と答えられていた。最終講義に続いての懇親会では、小宮山宏東京大学総長など、多くの方が祝辞を述べられた。

以上が、はなはだ不完全であるが、藤原先生退職に関連したまとめである。なお藤原先生は来年度から、大学総合教育研究センター (<http://www.he.u-tokyo.ac.jp/>) の特任教授として、形をかえて東京大学に在籍される。本特定領域やリーダーを勤める他研究プロジェクト [43] などを通じて、研究活動も継続されるとのことである。(ちなみに、最近聞いたボヤキは、「4月になったら、もっと研究に時間がさけると思っていたのに…」である)。

藤原先生には、これまでのご指導に感謝するとともに、今後ともご鞭撻を願いながら、筆をおくことにする。

参考文献

- [1] <http://fujimac.t.u-tokyo.ac.jp/FujiwaraLab/>
- [2] A. Yamasaki and T. Fujiwara, ‘Electronic Structure of oxides MO (M=Mg, Ca, Ti, V) in the GW approximation’, Phys. Rev. B **66**, 245108 (2002).
- [3] S. Yamamoto and T. Fujiwara, ‘Charge and spin order in RNiO₃ (R=Nd, Y) by LSDA+U method’, J. Phys. Soc. Jpn. **71**, 1226 (2002).
- [4] S. Kobayashi, A. Yamasaki and T. Fujiwara, ‘Electronic structure and dielectric properties of cubic zirconia’, Jpn. J. Appl. Phys. **42**, 6946 (2003).
- [5] T. Fujiwara, S. Yamamoto and Y. Ishii, ‘Generalization of the iterative perturbation theory and metal-insulator transition in multi-orbital Hubbard bands’, J. Phys. Soc. Jpn. **72**, 777 (2003).
- [6] O. Miura and T. Fujiwara, ‘*k*-dependent spectrum and optical conductivity near metal-insulator transition in multi-orbital Hubbard bands’, J. Phys. Soc. Jpn. **75**, 014703 (2006).
- [7] Y. Nohara, A. Yamasaki, S. Kobayashi, T. Fujiwara, ‘Electronic structure of antiferromagnetic LaMnO₃ and the effects of charge polarization’, Phys. Rev. B **74**, 064417 (2006).
- [8] 藤原毅夫, 「多電子論に基づくLDAを超える第一原理計算手法の基礎と開発」, 固体物理 Vol.39 No.11, 「特集: 計算機ナノマテリアルデザイン」 赤井久純・押山淳・小口多美夫・笠井秀明・常行真司・藤原毅夫・吉田博編, 707-708 頁, アグネ社 (2004).
- [9] 藤原毅夫, 「第一原理計算における動的平均場近似法(DMFT)の展開と応用」, 固体物理 Vol.39 No.11, 「特集: 計算機ナノマテリアルデザイン」 赤井久純・押山淳・小口多美夫・笠井秀明・常行真司・藤原毅夫・吉田博編, 715-721 頁, アグネ社 (2004).
- [10] T. Hoshi and T. Fujiwara, ‘Theory of composite-band Wannier states and order-*N* electronic-structure calculations’, J. Phys. Soc. Jpn. **69**, 3773 (2000); ‘Structure of exact Wannier states of tetrahedral-bonded crystals’ Surf. Sci. **493**, 659 (2001).
- [11] T. Hoshi and T. Fujiwara, ‘Dynamical brittle fractures of nanocrystalline silicon using large-scale electronic structure calculations’, J. Phys. Soc. Jpn. **72**, 2429 (2003).
- [12] R. Takayama, T. Hoshi, and T. Fujiwara, ‘Krylov subspace method for molecular dynamics simulation based on large-scale electronic structure theory’, J. Phys. Soc. Jpn. **73**, 1519 (2004).
- [13] T. Hoshi, Y. Iguchi and T. Fujiwara, ‘Nanoscale structures formed in silicon cleavage studied with large-scale electronic structure calculations: Surface reconstruction, steps, and bending’, Phys. Rev. B **72**, 075323 (2005).
- [14] R. Takayama, T. Hoshi, T. Sogabe, S.-L. Zhang, and T. Fujiwara, ‘Linear algebraic calculation of the Green’s function for large-scale electronic structure theory’, Phys. Rev. B **73**, 165108 (2006).
- [15] T. Hoshi and T. Fujiwara, ‘Large-scale electronic structure theory for simulating nanostructure process’, J. Phys.: Condens. Matter **18**, 10787 (2006).

- [16] Y. Iguchi, T. Hoshi and T. Fujiwara, ‘Two-stage formation model and helicity of gold nanowires’, Preprint (cond-mat/0611738).
- [17] 品岡寛, 星健夫, 藤原毅夫, 「ナノメートルスケール金属ワイヤにおける非平衡電流の構造依存性」, 日本物理学会 2006 年秋季大会 26pYH-5; H. Shinaoka, T. Hoshi and T. Fujiwara, in preparation.
- [18] 藤原毅夫, 「大規模電子構造計算法の開発—マルチスケール材料物性学と亀裂伝搬過程」, 「知識・構造化ミッション—大学は表現する」 松本洋一郎・小宮山宏監修, 藤原毅夫・丸山茂夫・伊東乾編, 69-82 頁, 日経 BP 社 (2005).
- [19] 星健夫, 藤原毅夫, 「超大規模電子構造計算と 10nm スケール系の物理」 日本物理学会誌第 61 巻第 4 号, 256-259 頁, (2006).
- [20] 藤原毅夫, 「固体電子構造—物質設計の基礎—」, 朝倉書店 (1999).
- [21] 藤原毅夫, 「物性物理学入門 — 固体からソフトマターまで」 放送大学教育振興会 (2004).
- [22] 研究会「物性物理・数学・計算科学の融合」, 世話人: 初貝安弘, 山元進, 星健夫, 東京大学, 2006 年 10 月; プロシーディング (編: 初貝安弘, 新井正男, 山元進, 2007 年 2 月);
研究会講演題目: 伊藤聡 (東芝) 「ものづくりにおける計算材料科学」/ 時弘哲治 (東京大学) 「超離散系に関する最近の話題」/ 常次宏一 (東京大学) 「準結晶からフラストレーション系まで」/ 山本有作 (名古屋大学) 「大規模固有値解法の最近の進展 — 密行列向け解法を中心に —」
プロシーディング目次: 新井正男 (物質・材料研究機構) 「フェルミ面の異方性が超伝導体の上部臨界磁場に与える影響」/ 初貝安弘 (東京大学) 「新しい秩序相としての量子液体相」/ 星健夫 (鳥取大学) 「電子構造理論からナノテクノロジーへ— 藤原毅夫先生との共同研究を中心として —」/ 石井靖 (中央大学) 「準結晶の電子構造—第一原理計算が教えること—」/ 伊藤聡 (東芝) 「ものづくりにおける計算材料科学」/ 三上昌義 (三菱化学) 「一化学企業における第一原理計算 —無機蛍光体を中心に—」/ Stephan Roche (CEA/DSM/DRFMC/SPSMS/GT, France) 「Efficient Linear Scaling Approaches for Computing Quantum Transport in low-dimensional systems」/ 田中宏志 (島根大学) 「A method to evaluate electrostatic potential from X-ray diffraction data by using MEM」/ Guy Trambly (CNRS, France) 「Effect of transition-metal elements on the electronic properties of quasicrystals and complex aluminides」/ 山元進 (東京大学) 「計算物理と計算機科学との距離」/ 山本有作 (名古屋大学) 「共有メモリ型並列計算機向け対称密行列固有値解法の性能評価」
- [23] P. Hohenberg and W. Kohn, ‘Inhomogeneous electron gas’, Phys. Rev. **136** B864 (1964).
- [24] Y. Tanabe and S. Sugano, ‘On the absorption spectra of complex ions I’, J. Phys. Soc. Jpn **9**, 753 (1954); ‘On the absorption spectra of complex ions II’, 同誌同号, 766 (1954); 上村 洸・菅野 暁・田辺行人 「配位子場理論とその応用」 裳華房 (1969).
- [25] R. Haydock, V. Heine and M. J. Kelly, ‘Electronic structure based on the local atomic environment for tight-binding bands’, J. Phys. C **5**, 2845 (1972).
- [26] O. K. Andersen, ‘Linear methods in band theory’, Phys. Rev. B **12** 3060 (1975).
- [27] T. Fujiwara, ‘Electronic structure calculation for amorphous alloys’, J. Non-Crys. Solid, **61-62**, 1039, (1984).
- [28] H. J. Nowak, O. K. Andersen, T. Fujiwara, O. Jepsen and P. Vargas, ‘Electronic-structure calculations for amorphous solids using the recursion method and linear muffin-tin orbitals: Application to Fe₈₀B₂₀’, Phys. Rev. B, **44**, 3577 (1991).
- [29] H. Tsunetsugu, T. Fujiwara and K. Ueda, ‘Eigenstates in 2-Dimensional Penrose Tiling’, J. Phys. Soc. Jpn. **55**, 1420 (1986).
- [30] T. Fujiwara, ‘Electronic structure in the Al-Mn alloy crystalline analog of quasicrystals’, Phys. Rev. B **40**, 942 (1989).
- [31] T. Fujiwara, T. Mitsui and S. Yamamoto, ‘Scaling properties of wave functions and transport coefficients in quasicrystals’, Phys. Rev. B **53**, R2910 (1996).
- [32] 準結晶系は、藤原先生が書かれた解説記事や編集された本が多い。例えば、T. Fujiwara and T. Ogawa (Eds.), ‘Quasicrystals’, Springer-Verlag (1990); 二宮敏行, 竹内伸, 藤原毅夫 (編集) 「準結晶」物理学論文選集、日本物理学会 (1992). 退職記念研究会プロシーディング [22] にも該当記事があるので、そちらもご覧いただきたい。

- [33] T. Fujiwara and Y. Hatsugai, ‘Electronic structure of high T_C superconducting layered perovskite, La-Cu-O and Y-Ba-Cu-O by LMTO method’, Jpn. J. Appl. Phys. **26**, L716 (1987).
- [34] R. Car and M. Parrinello, ‘Unified approach for molecular dynamics and density-functional theory’, Phys. Rev. Lett. **55**, 2471 (1985).
- [35] K. Kitaura, S. Sugiki, T. Nakano, Y. Komeiji, M. Uebayasi, ‘Fragment molecular orbital method: analytical energy gradients’, Chem. Phys. Lett., **336**, 163 (2001).
- [36] T. Matsubara, F. Maseras, N. Koga and K. Morokuma, ‘Application of the New “Integrated MO + MM” (IMOMM) Method to the Organometallic Reaction: $\text{Pt}(\text{PR}_3)_2 + \text{H}_2$ ($\text{R}=\text{H}$, Me, t-Bu and Ph), J. Phys. Chem., **100**, 2573 (1996).
- [37] K. Kondo and K. Takayanagi, ‘Synthesis and characterization of helical multi-shell gold nanowires’, Science, **289**, 606 (2000).
- [38] T. Fujiwara, ‘Electronic structures in correlated systems and novel GW approximation’, FPCCE, University of Tokyo, November, 2006.
- [39] S. Yamamoto and T. Fujiwara, ‘Co-operation of *ab initio* calculation and exact diagonalization’, FPCCE, University of Tokyo, November, 2006.
- [40] O. Miura and T. Fujiwara, ‘The combination method of the dynamical mean field theory with the first principle electronic structure theory’, FPCCE, University of Tokyo, November, 2006.
- [41] Y. Nohara and T. Fujiwara, ‘Electronic structure of NiO by the LSDA+U+GWA method’, FPCCE, University of Tokyo, November, 2006.
- [42] 藤原先生の工学教育についての発言として；「変革する大学 東京大学工学部 2005-2006 年版」, p.27, 日経 BP 社 (2005).
- [43] JST-CREST 「複合手法を用いた電子構造計算技術の開発」／JST シーズイノベーション「100nm スケール材料の量子力学的分子動力学シミュレータの開発」
- [44] 蛇足：藤原先生というと、「いつも口を『へ』の字にしている、怖いイメージがある」（某教授）というような発言が多かったので、(比較的?) そうでない写真を選びました。



図 1: 藤原先生ご自宅にての研究室新年会で、奥様と。[44]