

課題番号：hp150144

有機デバイス材料系の 100 ナノスケール電子状態計算

星健夫(鳥取大学)

1. 研究の背景と目的

Internet of Things (IoT)の主役となるフレキシブル（ウェアラブル）デバイスを出産として、有機デバイス材料系の100ナノスケール(世界最大)量子計算に取り組んでいる。有機材料は原子構造がフレキシブルな(柔らかい)ため、上記大規模計算が必要である。基盤的戦略は、数理アルゴリズムから産業応用までの俯瞰的コデザインである。将来描像として、併行する産業利用実証課題(hp150066)との連携を進展させ、スパコン産業利用を実現する。

Theory and application were investigated in one-hundred-nanometer scale, largest, quantum simulation of organic device materials, for the flexible (wearable) devices or the key devices of Internet of Things (IoT). Since organic materials are flexible (soft) in atomic structure, the large-scale calculation is crucial. Our fundamental strategy is the co-design from mathematical algorithms into industrial applications. As a future outlook, the industrial use of supercomputers will be realized by developing the collaboration with the contemporary Industrial Use Project (hp150066).

2. 結果要旨

独自の超並列電子状態計算ソフト ELSESES (<http://www.elses.jp>)上に、電子波(波束)ダイナミクス法による量子電気伝導計算を実現し、100 ナノスケール(世界最大)有機デバイス材料系を計算した。基盤となるコデザイン戦略として、受賞を含む数理アルゴリズム研究、京全ノードに至る 2 種の強スケーリング性ベンチマーク、高分子学会主催の記者発表など、幅広い分野で活動した。主な結果を示す：(1) 有機高分子(poly-(phenylene-ethynylene),PPE)鎖の実験を対象に、異なる構造間のデバイス性能値(移動度)の違いを再現した。(2) 1 億原子の有機高分子 PPE 集合体(世界最大計算系)について、シミュレーションとデータ解析を組み合わせることにより、小規模高分子ネットワークを介した動的伝導メカニズムを提示した。

One-hundred-nanometer-scale, largest, organic device materials were simulated, when we realized quantum electrical transport calculation in the wavepacket dynamics theory on our original massively-parallel electronic structure calculation software ELSESES (<http://www.elses.jp>). As the fundamental co-design strategy, the research was achieved among various fields, such as research on mathematical algorithm including the award, two-kind strong-scaling benchmarks with upto all the nodes, press release as polymer research. The main results are explained below: (1) We focused on the experiments of organic polymer (poly-(phenylene-ethynylene),PPE) chain and reproduced the difference among structures in device performance value (mobility value). (2)

One-hundred-million-atom, largest, calculation of condensed organic polymers (PPE's) presents a transport mechanism through the dynamical small polymer networks, by combining the simulation and data analysis.

3. 計算モデル

Internet of Things (IoT)の主演となるフレキシブル（ウェアラブル）デバイスを出発点として、有機デバイス材料系の大規模計算モデルを設定した。フレキシブルデバイスの例としては、「巻き取れるディスプレイ」（ソニー）[1]や「貼るディスプレイ・センサー」（東大）[2]があげられる。シリコンなどの無機材料と異なり、原子構造がフレキシブルな(柔らかい)物質である。構造の動的乱雑さ(dynamical disorder)が、デバイス特性に大きな影響をもつ。電子状態計算(電子を波として扱う量子力学的理論)に基づく原子レベルからの物質設計が必須だが、従来法では扱えない、100nm スケールの大規模系が必要となる。

我々は、新しい超並列型数値アルゴリズムを原動力として、1億原子までが扱える大規模電子状態計算コード ELSESES (<http://www.elses.jp>)を開発しており、上記ニーズに応えるに至った[3-16]。

図 1(a)に、デバイスと計算系のスケール比較を示した。100nm スケールの計算が、デバイス(1,000nm スケール)と原子構造(1nm スケール)のスケールギャップを埋めることが分かる。図 2(b)では、代表的な有機高分子である有機高分子(poly-((9, 9) dioctyl-fluorene),PFO)集合体を例にとり、伝導を担う π 電子波を例示した。 π 電子波はベンゼン環などに内在する特徴的な電子波である。図 1(c)には、ベンゼン分子そのものの π 電子波を例示した。図 1(d)は、有機高分子集合体の一部を表した概念図である。ベンゼン環を含む平面にたいして垂直な方向(図中の矢印)に π 電子波が異方的に広がっている。この異方的広がりが、高分子間の量子電気伝導の本質となる。

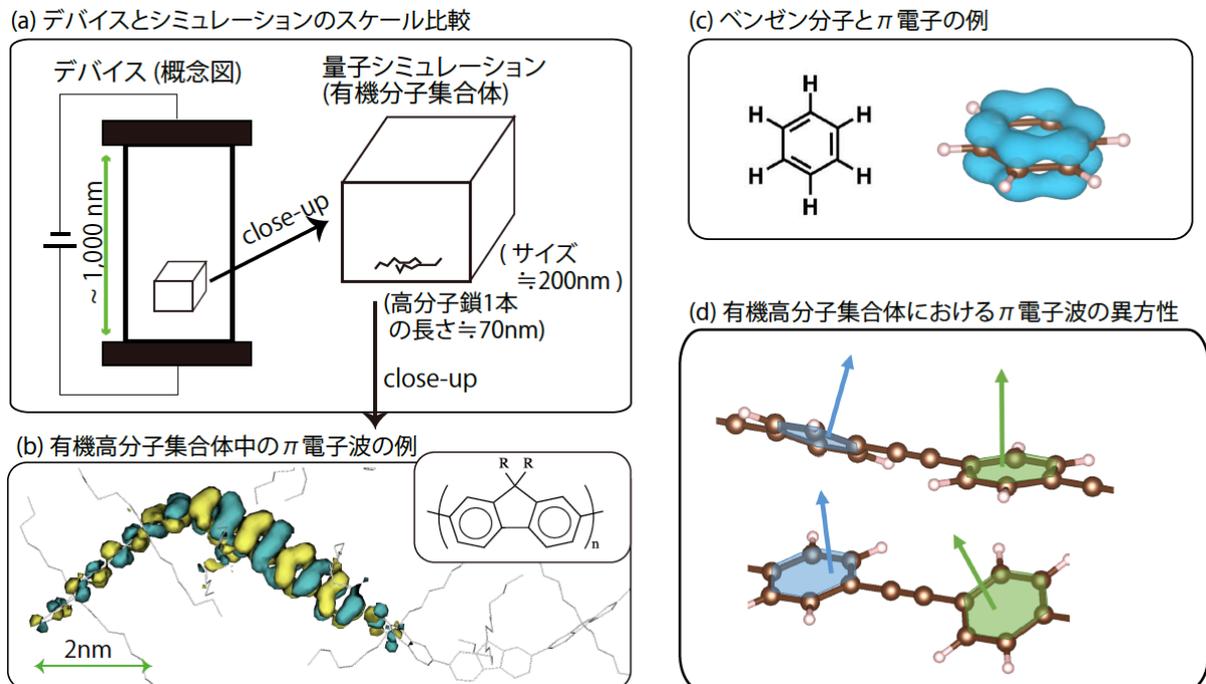


図 1 (a)有機デバイスと計算系のスケール比較。(b) 有機高分子(poly-((9, 9) dioctyl-fluorene),PFO) 集合体における π 電子波(固有状態)の例。正負 2 値の等値面で描画したもの。(c) ベンゼン分子と π 電子波(電荷分布)の例。(d)有機高分子集合体における π 電子波の異方的広がり(概念図)。

4. 並列計算の方法と効果（性能）

4-1. 総論：ソフトウェア群とコデザイン戦略

超並列ソフトウェアとして、ELSES(Sec. 4-2 参照)・EigenKernel(Sec. 4-3 参照)・WaveTool(Sec. 4-4 参照)、の3つを開発しており、これらの連携により材料研究が成し遂げられている。ELSES は中核をなす電子状態計算シミュレーターであり、1 億原子(世界最大)系が扱える。EigenKernel・WaveTool は、汎用性があるツールであるため、単独で公開することで計算物質科学全体への波及が期待できる。上記3ソフトの他、既存ソフト GROMACS(Sec. 4-5)を補助的に用いている。

本課題超並列計算の根源は、数理から産業応用までを俯瞰するコデザイン戦略にある。数理アルゴリズム研究は主に、大規模疎行列むけの線形計算アルゴリズム研究をさす。本年度特筆事項として、応用数学会での受賞[11]、研究会企画(予算:数学協働プログラム)[13]、がある。

4-2. ELSES (=Extra Large Scale Electronic Structure calculation, <http://www.elses.jp>)

Fortran を用いて独自開発している、超並列オーダー N 型電子状態計算シミュレーターである(代表論文[3])。オーダー N 型計算とは、原子数 N に計算時間が比例する手法の総称である。通常の電子状態計算は一般化固有値問題を数理的基礎とするが、演算コスト・並列性の両面において、限界がある。我々は独自の数理手法(シフト型クリロフ部分空間解法)を考案し、大規模かつ超並列性をもった計算を実現した。上記手法は数理的に汎用であるため、半導体・金属など、様々な物質に適用できる。特に産業利用を目指して開発されており、近年の応用例として、住友化学との有機デバイス材料研究 ([3,5,9,10],本研究)、および、トヨタ自動車との電池材料研究[17,18]がある。第一原理に基づくモデル化(汎用 tight-binding 型)理論を用いており、必要に応じて電荷セルフコンシステント理論やファンデアワールス力などを取り込んでいる。

図 2(a)に、オーダー N 型計算による 1 億原子系(世界最大)計算の強スケーリング型ベンチマークを載せた[10]。本プロジェクトで用いた有機高分子(poly-(phenylene-ethynylene), PPE) 集合体の 100 ナノメートルスケール計算である。1 億原子系計算自体は他物質ですでに実現している[5,6]が、本年度は南一生(AICS)らと連携し、コード全般のチューニングを行った[10](H28 年度も継続)。図 2(a)では、プロセッサノード数 $P=2,592, 5,184, 10,368, 20,736, 41,472, 82,944$ (フルノード)に対して、電子状態計算部分全体(Tot), バリア時間(Barr)(他プロセッサを待つ時間を含む), MPI 通信時間(バリア時間を除く)(Comm)、を示した。 $P=2,592$ を基準としたフルノードでの強スケーリング型並列効率 α は $\alpha=0.72$ であり、高い並列性能をもっていることが分かる。また図より、MPI 通信時間(Comm)よりバリア時間(Barr)がより大きいことが分かる。バリア時間は、物質が非理想的構造(Sec.5 参照)であることを起源とする、ロードインバランスからくると考えられる。

新機能として本年度は、電子波(波束)ダイナミクス法による量子電気伝導計算が実現され、デバイス材料としての性能値(移動度)が計算可能となった[9,10]。有機デバイス材料の場合、2 種の量子伝導機構(バリスティック・非バリスティック伝導)の双方が扱える、電子波(波束)ダイナミクス計算が必須となる。数理的には、電子波(典型的にはホール型波束) $\Psi \equiv \Psi(\mathbf{r}, t)$ (複素スカラー場)に対するシュレーディンガー型有効方程式 ($i \partial_t \Psi = H\Psi$)の実時間発展計算であり、非平衡・非定常シミュレーションである。シミュレーション結果から、「電子の動きやすさ」に相当する移動度

(mobility)が得られ、デバイス材料としての性能値となる。上記数値手法は汎用であり、低分子・高分子やそれらの集合体に適用できる。

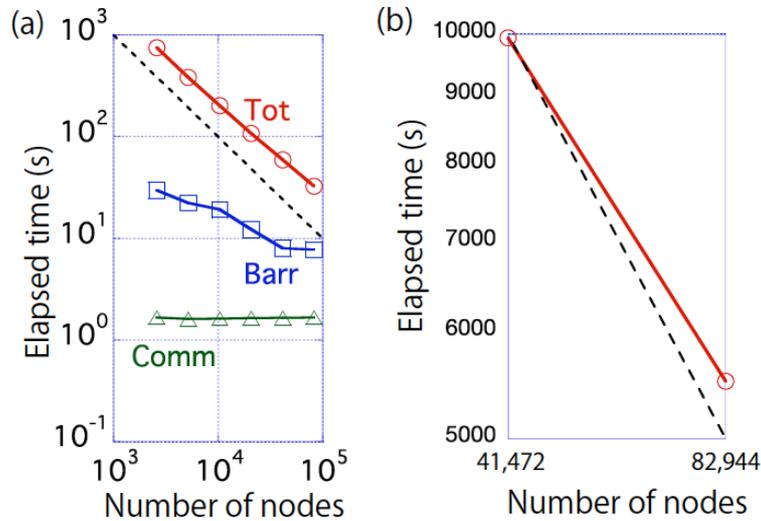


図2 フルノード(82,944 ノード)までの強スケーリング型ベンチマーク。理想的な強スケーリング性を点線で示した。(a) ELSES におけるオーダー N 型電子状態計算[10]。世界最大となる $N=101,606,400$ 原子系(100 ナノメートルスケール)の有機高分子 (poly-(phenylene-ethynylene), PPE) 集合体計算。プロセッサノード数 $P=2,592, 5,184, 10,368, 20,736, 41,472, 82,944$ (フルノード)に対して、電子状態計算部分全体(Tot), バリア時間(Barr), MPI 通信時間(Comm)、を描画した。(b) EigenKernel における実対称一般化固有値問題[8,10]。世界最大となる 100 万次元行列計算。プロセッサノード数 $P=41,472, 82,944$ (フルノード)、で実行した。

4-3. EigenKernel (<https://github.com/eigenkernel/>)

Fortran を用いて独自開発している、実対称一般化固有値問題($A\mathbf{y} = \lambda B\mathbf{y}$)の全固有対を計算する、汎用数値計算ルーチンである[8]。ELSES 計算の一部で利用している。CREST ポストペタ領域プロジェクト(H22-27,代表:櫻井鉄也(筑波大))で主に開発してきた。内部的には、新しい超並列型固有値問題ライブラリ EigenExa (今村俊幸(AICS)ら)[19]および ELPA[20]のルーチンを最適複合化している。 $M=43$ 万次元行列問題に対して、1 万ノードを用いた比較計算では、従来ライブラリ (ScaLAPACK)より約 4.1 倍高速となった。

図2(b)に、世界最大となる $M=100$ 万次元行列問題の強スケーリングベンチマークを示した[10]。ノード数 $P=41,472$ (フルノードの半分), $82,944$ (フルノード)での経過時間は、それぞれ、 $T=9,939$ s、 $T=5,516$ s(≈ 1.53 h)、となった。「100 万次元行列の固有値問題(全固有対計算)が 1.5 時間で解ける」ことは、現在のスーパーコンピュータの到達点を表している。

異なるライブラリ間のルーチンを最適複合化していく戦略は、実応用推進の立場から実際的である。技術的論点としては、分散データの変換ルーチンが必要になる場合があり、本件も該当した。具体的には、ELPA はブロックサイクリック型、EigenExa はサイクリック型(ブロックサイズ=1)で行列データを分散格納している。データ変換ルーチンを自作する必要があったが、このルーチンが経過時間のボトルネックにはならなかった。行列サイズ M に対して演算量は $O(M^3)$ であるが、データ量は $O(M^2)$ ですむからである。複合化ルーチンが一般に有用であることを示唆する。

4-4. WaveTool (公開予定)

Python を用いて独自開発している、電子波ダイナミクスシミュレーションの後処理(post simulation)解析ソフトで。電子波ダイナミクス ($i\partial_t\Psi = H\Psi$) の後処理解析を行い、デバイス性能値(移動度)などの各種物理量を計算する。ノード間・ノード内でそれぞれ並列化されている。各時系列データ ($\Psi(\mathbf{r}, t_1), \Psi(\mathbf{r}, t_2), \Psi(\mathbf{r}, t_3), \dots$) がノードに割り振られるため、ノード間並列性は自明である。数千ノード程度での並列計算が主に行われている。ノード間並列は mpi4py (<https://bitbucket.org/mpi4py/mpi4py>) で実現され、ノード内並列は multiprocessing module (Python 2.6以降の標準ライブラリ) で実現された。

なお、本ソフトウェアは電子波可視化機能(図 1(b)などに利用)も備えており、可視化部分は公開されている(VisBAR WaveBatch; https://github.com/visbar/visbar_wb)。ただし、基盤となる 3 次元可視化モジュール(OpenGL)が京上でビルドできない(ヘルプデスクに相談したが未解決)ため、可視化処理だけは、他の(インテル系)スパコン上で行っている。

4-5. GROMACS (<http://www.gromacs.org/>)

既存の並列化古典 MD シミュレーターであり、補助的に利用している。一般に古典 MD は量子 MD より高速であるため、ELSESES 用入力データ(初期原子構造データ)を生成するために一部系で用いられた。GROMACS は並列性能にすぐれ、生体系・有機系に良く用いられる。他の京利用課題での利用実績もあることから、当プロジェクトでは並列効率の調査は行っていない。

ただし、古典 MD 計算では電子波の取り扱いはなく、量子電気伝導によるデバイス性能値を計算するには ELSESES が必須となる。

5. 研究成果

5-1. 総論：有機デバイス材料の伝導メカニズム

超並列電子状態計算ソフト ELSESES 上に、電子波(波束)ダイナミクス理論による量子電気伝導計算を実現し、100 ナノスケール(世界最大)有機デバイス材料系を計算した。有機デバイス材料系の量子電気伝導計算は、非理想構造中を電子波が伝搬する非平衡・非定常シミュレーションである。図 3(a)に数式をまとめた。

京のパワーと我々の超並列型数値手法があって初めて可能となった、「京ならでは」の大規模計算である。研究は注目され、高分子学会主催の記者発表[12]や招待講演[14-16]となっている。

5-2. 有機高分子 poly-(phenylene-ethynylene) (PPE)における量子電気伝導の構造依存性

寺尾潤(京大)らによる実験・理論の共同研究[21]を対象に、有機高分子 poly-(phenylene-ethynylene) (PPE)を取り上げた[9,10]。計算系の空間スケール(高分子長)は最大 $L=700\text{nm}$ で、時間スケールは数ピコ秒である。論文[21]では、ベンゼン環同士の 2 面体角(ねじれ角)に動的乱雑が入ることに着目し、高性能(高移動度)分子を得るための新しい分子デザイン原理が提案された。論文[21]では多田朋史(東工大,本課題参加者)による、 π 電子のみのモデル系のダイナミクスが示されている。本研究は、それを一般化した理論計算に相当する。図 3(b)に、PPE でのシミュレーション結果例を示した。(ホール)電荷分布 $\rho(\mathbf{r}, t) \equiv |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ の時間変化を等値面で表現している。特徴的な知見として、くりかえし単位(モノマー)数個から数十個にわたる広がりをもつ、準局在 π 電子

波(semi-localized π electron)が得られた。準局在 π 電子の理解と制御が、デバイス設計の核心である。電荷分布の空間的広がり(平均二乗変位)の時間変化から、移動度が計算できる。構造や条件が異なる多数の系でシミュレーションを実行し、扱った高分子の最大長は、繰り返し単位 1000 個分(約 700nm)である。論文[21]にあげられた、直線型構造(図 3(b))・ジグザグ型構造に対して、シミュレーションを行った。共通した結果として、高分子骨格方向軸に対するベンゼン環の回転角(ねじれ角)に大きな乱雑さがある場合、波の広がりがおさえられた。予備的結果として、直線型構造よりジグザグ型構造が高移動度となる場合が得られ、論文[21]の実験結果が再現された。

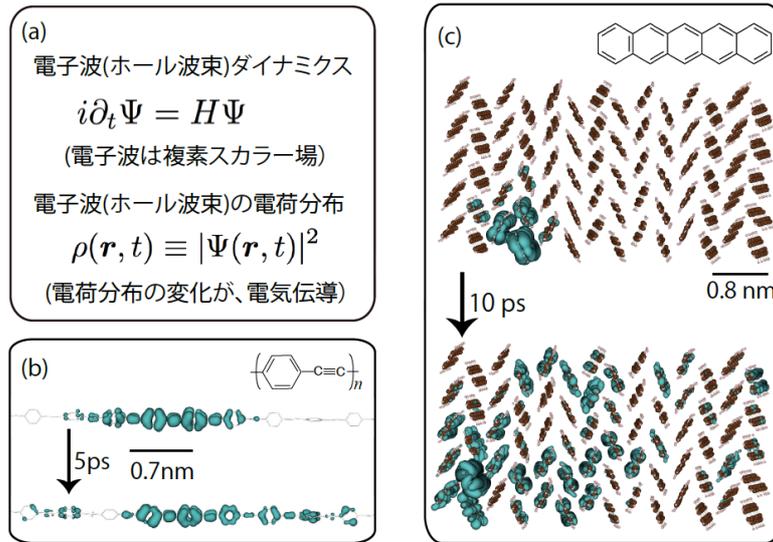


図 3 (a) 電子波(波束)ダイナミクスにおける数式の概要。(b) 有機高分子鎖である直線型 poly-(phenylene-ethynylene) (PPE)における、電子波ダイナミクスの例。電荷分布を描画。図は系の一部。(c) 有機低分子ペンタセン薄膜(1 原子層)における、電子波ダイナミクスの例。

5-3. 有機分子集合体にたいする量子電気伝導の予備的計算

図 3(c)に、典型的な有機低分子であるペンタセンの薄膜(1 原子層)系量子電気伝導計算を示した。分子集合体に対するテスト計算である。電子波の分子間伝搬は、分子内伝搬より遥かに微弱であり、詳細な取り扱いが必要になる。モデル化理論(汎用 tight-binding 型ハミルトニアン)のカットオフ半径を典型的分子間距離より大きくとることで、分子間伝導が扱える事を得た。図 3(c)の計算系は、図の上下方向には周期系であるが、左右方向には非周期系である。電子波が分子間を飛び移って広がっていく様子が見てとれる。

他に、有機高分子 PFO 集合体(図 1(b))に対しても、量子電気伝導計算を行っている[9]。

5-4. 1 億原子系を含む有機分子集合体の量子電気伝導メカニズム研究

実行可能最大サイズ(世界最大サイズ)である 1 億原子系を用いて、有機高分子集合体の量子電気伝導メカニズム研究に挑戦した。

図 4(a)(b)に、計算系の一部を示す。得られた結果をもとに提示した伝導メカニズム(次節以降を参照)は、「小規模な動的な高分子ネットワークを介して伝導する」というものであり、図 4(c)(d)に概念図を示した。ただし、1 億原子系で有意義な量子 MD 計算(例えば 10ps のダイナミクス)を常時行うことは、京をもってしても現実的でない(今日の計算機をもちいた量子 MD 計算の例とし

て、10万原子系に対して1万コアを使った計算が論文[9]にある)。本課題では、「次世代スパコンでの研究を先取りする」立場として、古典MD(GROMACS)で生成した現実的(非理想構造)分子集合体に対して、伝導メカニズム研究を行うことにした。

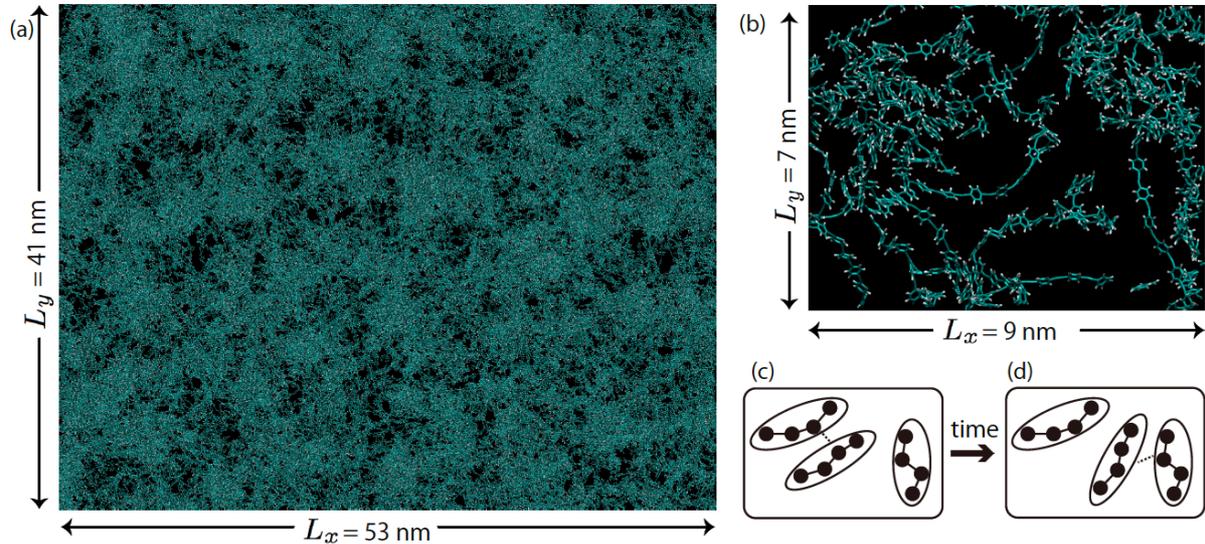


図 4 (a) (b) 1 億原子からなる有機高分子(PPE)集合体計算の一部領域を可視化。計算系全体は、265nm x 206nm x 239nm の周期セル系。(c)(d) 伝導機構の概念図：動的に変わる、小規模なポリマーネットワーク。

5-4-a. 高分子集合体のネットワーク型解析

オーダー N 型電子状態計算を行うことで、複数の高分子からなる電子波伝搬可能なネットワークを検出した。具体的には、電子のグリーン(伝搬)関数から得られる量子結合解析(COHP 解析)[22,4]を行った。結果として、原子をindexとする量子結合行列(ICOHP 行列) B_{IJ} が得られる。 B_{IJ} はI番目とJ番目の原子間に働く量子的な結合エネルギーを表し、I番目からJ番目に電子波(ホール波束)が伝搬しうることを意味する。 B_{IJ} の総和($\sum_{I,J} B_{I,J}$)は電子状態エネルギー(1電子エネルギーの和)に一致する。各原子は高分子のいずれかに所属するので、高分子ごとに部分和をとることができて、高分子間の量子的結合を表す行列として、 $B_{PQ}^{(poly)} = \sum_I^{EP} \sum_J^{EQ} B_{IJ}$ 、が計算される。ここで

I, J の和は、それぞれ、 P, Q 番目の高分子に所属する原子についての和である。計算系では1高分子は約 10^3 原子を含み、高分子数は $N_{poly} = 10^8 / 10^3 = 10^5$ となる。すなわち、 $B_{PQ}^{(poly)}$ は約10万(10^5)次元の実対称行列となり、これは粗視化した量子モデルのハミルトニアン行列とみなせる。10万次元の実対称行列 $B_{PQ}^{(poly)}$ の固有値問題に対して、固有値ソルバーEigenKernel(Sec.4-3)で全固有対を計算した。ある固有ベクトルが複数の非ゼロ要素をもつ場合、それら高分子群は量子的ネットワークを作っており、そのネットワークを通じて電子波が伝導しうることを意味する。

上記解析の結果、2~3個の高分子からなる小規模ネットワークの存在が分かった。

5-4-b. 高分子ネットワークにおける電子波伝搬シミュレーション

前項で得られた小規模高分子ネットワークに対して、電子波ダイナミクス計算を行い、高分子間を電子波が伝搬することが確認された。

図 5 に典型的ネットワーク系として、3 本の高分子鎖からなる系での電子波ダイナミクス計算を示す。(ホール)電荷分布 $\rho(\mathbf{r}, t) \equiv |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ の時間変化を等値面で表現している。全体としては、初期構造・初期電子波($\Psi(\mathbf{r}, t = 0)$)をかえた、数十通りの電子波ダイナミクス計算を行った。図 5 は約 1ps のダイナミクス計算例であり、128 ノードで約 6 時間を要した。

図 5 から、初期状態で局在していた電子波が、まずは同一高分子内で伝搬し((a)→(b))、次に他高分子へも伝搬していく((b)→(c))様子が見て取れる。分子間の電子(量子)結合は、分子内のそれに比べて格段に弱いため、上記結果は妥当である。また、上記結果は、Sec.5-4-a での量子結合解析が、高分子ネットワーク検出に有用であることを示している。

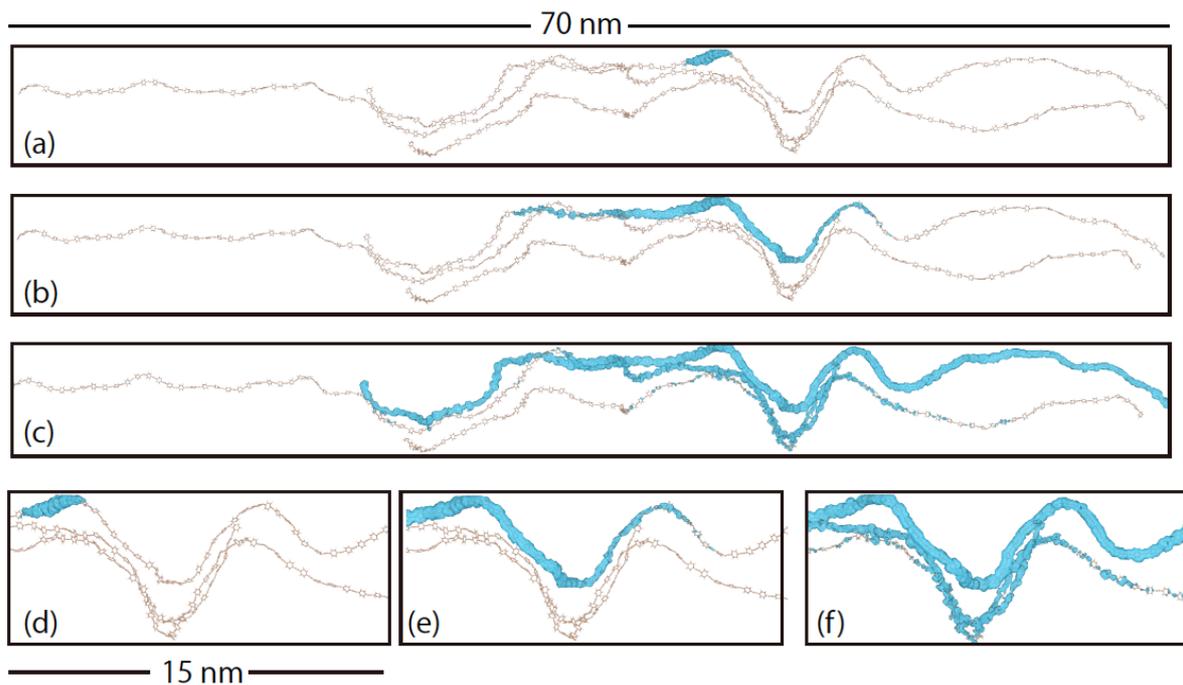


図 5 有機高分子(PPE)集合体における電子波ダイナミクス。電子波(ホール型波束)の電荷分布を時刻(a) $t=0$, (b) $t=50\text{fs}$, (c) $t=948\text{fs}$ でそれぞれ可視化。図(d)(e)(f)は、それぞれ、図(a)(b)(c)の拡大図。

得られた計算結果をもとに、伝導メカニズムを提示した[10]。有機デバイス材料はフレキシブルな(柔らかい)原子構造をもち、有限温度での動的乱れ(dynamical disorder)が本質である。Sec. 5-4-a で解析した小規模ネットワークは、有限温度の動的効果により、その構造や所属分子を変えていく。そのため図 4(c)(d)のように、小規模高分子ネットワーク自身が揺らぐことにより、(バケツリレーのように) 電子波が材料中を伝搬していくことが可能となる。

6. まとめと今後の課題

独自の数理手法を基盤に、独自開発シミュレーションコード ELSESES(<http://www.elses.jp/>)を用いて、100 ナノメートルスケール(1 億原子・世界最大)有機デバイス材料研究を行った。京のもつ計算パワーとオンリーワン型数理手法によって初めて可能になった、「京ならではの」研究である。計算速度としては、実問題である有機高分子集合体に対して、京全体までの強スケーリング性が確認された。本年度新規開発の量子電気伝導計算(電子波ダイナミクス法)を導入することにより、高分子集合体における電気伝導メカニズムを提示した。

展望としては、以下の3点がある；(i)本課題は次年度(H28)課題「100 ナノ電子状態計算とデータ科学による有機デバイス材料研究」(hp160066)に引き継がれた。対象物質を拡大すると同時に、データ科学をプレスクリーニング解析として活用し、実用的なデバイス設計へとつなげていきたい。有機デバイス材料は動的乱れ(dynamical disorder)が本質であるため、物性値の議論には統計的取り扱いが必要となる。多数のシミュレーションからなる材料探索データを解析(「学習」)し、得られた知見から効率的探索を行っていききたい。(ii)産学連携を強化し産業利用を目指す。本課題成果コードは、住友化学による産業利用実証研究(hp150066, hp160087)に導入されている。本課題代表者(星)は hp160087 の課題メンバー(ただし計算機使用権なし)である。高速性だけでなく、ユーザビリティの向上も目指していく。(iii) 中期的課題として、シミュレーション・データ解析(可視化含む)をスパコン上でクラウドサービスの的に一体化し、ものづくりにおけるスパコン産業利用を成し遂げたい。

謝辞

石田雅也(住友化学)から、いくつかの原子構造データの提供を受けた。本研究の一部は、下記プロジェクトとの連携である；JST-CREST(ポストペタ領域)「ポストペタスケールに対応した階層モデルによる超並列固有値解析エンジンの開発」、科研費「超大規模超並列電子状態理論による100ナノスケール系デバイス研究」、科研費「電子状態計算への応用を指向した行列計算ライブラリの機能拡張とメニーコア向け最適化」、ポスト京プロジェクト重点課題7「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」サブサブ課題「基盤的超並列計算アルゴリズム」班。

参考文献

- [1] Sony Corporation, 'Sony develops a "rollable" OTFT-driven OLED display that can wrap around a pencil', News Release, 26. May. 2010.
- [2] T. Yokota, et al., 'Ultra-flexible organic photonic skin', Science Advances 2, e1501856 (2016); 記者発表「超柔軟有機LEDの大気安定動作に成功～貼るだけで人の肌がディスプレイに～」, 主催:東京大学, 2016年4月.
- [3] T. Hoshi, S. Yamamoto, T. Fujiwara, T. Sogabe, S.-L. Zhang, 'An order- N electronic structure theory with generalized eigenvalue equations and its application to a ten-million-atom system', J. Phys.: Condens. Matter 24, 165502, 5pp. (2012)
- [4] T. Hoshi, Y. Akiyama, T. Tanaka and T. Ohno, 'Ten-million-atom electronic structure calculations on the K computer with a massively parallel order- N theory', J. Phys. Soc. Jpn. 82, 023710 (2013).
- [5] T. Hoshi, K. Yamazaki and Y. Akiyama, 'Novel linear algebraic theory and one-hundred-million-atom electronic structure calculation on the K computer', JPS-CP. 1, 016004, 4pp. (2014).
- [6] T. Hoshi, T. Sogabe, T. Miyata, D. Lee, S.-L. Zhang, H. Imachi, Y. Kawai, Y. Akiyama, K. Yamazaki and S. Yokoyama, 'Novel linear algebraic theory and one-hundred-million-atom quantum material simulations on the K computer', PoS 202, 065, 13pp. (2014).
- [7] S. Iwase, T. Hoshi, T. Ono, 'Efficient numerical solver for first-principles transport calculation based on real-space finite-difference method', Phys. Rev. E 91, 063305, 9pp. (2015).

- [8] H. Imachi and T. Hoshi, 'Hybrid numerical solvers for massively parallel eigenvalue computation and their benchmark with electronic structure calculations', *J. Inf. Process.* 24, pp. 164-172 (2016).
- [9] H. Imachi, S. Yokoyama, T. Kaji, Y. Abe, T. Tada, T. Hoshi, 'One-hundred-nm-scale electronic structure and transport calculations of organic polymers on the K computer', *AIP Conf. Proc.*, in press; Preprint: <http://arxiv.org/abs/1603.09616>.
- [10] T. Hoshi, H. Imachi, K. Kumahata, M. Terai, K. Miyamoto, K. Minami and F. Shoji, '100,000,000 atom quantum material simulation for flexible electronic devices on the full system of the K Computer', submitted.
- [11] (受賞) 星健夫, 日本応用数学会研究部会連合発表会優秀講演賞「厳密な物理的保存則を持つクリロフ部分空間解法の構築」, 2015年6月.
- [12] (記者発表) 星健夫, 「高分子上を走る電子の波 ～京スーパーコンピュータで目指す、21世紀のものづくり～」, 主催:日本高分子学会, 2015年11月.
- [13] (研究会企画) 「数理解保存を接点とした数学・HPC・実科学のクロスオーバー」, 2015年11月, 電通大, 企画:山本有作(電通大), 星健夫, 井町宏人(鳥取大), 主催:数学協働プログラム.
- [14] (招待講演) T. Hoshi, 'Massively parallel electronic structure calculations and transport property of organic materials', *Computational Chemistry Symposium of 12th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE 2016)*, Mar., 2016, Athens.
- [15] (招待講演, 予定) T. Hoshi, '100M atom electronic structure calculation of organic device materials on full system of K Computer', *ISC2016*, Jun., 2016, Frankfurt.
- [16] (招待講演, 予定) 星健夫, 「高分子有機半導体の100ナノスケール電子状態計算」, シンポジウム「有機半導体の柔らかい固体物理に対する計算科学と実験の最先端」, 日本物理学会, 2016年9月, 金沢大学.
- [17] S. Nishino, T. Fujiwara, H. Yamasaki, S. Yamamoto, and T. Hoshi, 'Electronic structure calculations and quantum molecular dynamics simulations of the ionic liquid PP13-TFSI', *Solid State Ionics* 225, 22–25 (2012).
- [18] S. Nishino, T. Fujiwara, H. Yamasaki, 'Nanosecond quantum molecular dynamics simulations of the lithium superionic conductor $\text{Li}_{4-x}\text{Ge}_{1-x}\text{P}_x\text{S}_4$ ', *Phys. Rev. B* 90, 024303 (2014).
- [19] T. Imamura, 'The EigenExa library - high performance & scalable direct eigensolver for large scale computational science', *ISC 2014, Leipzig* (2014); <http://www.aics.riken.jp/labs/lpnctr/EigenExa.html>
- [20] A. Marek, et al., 'The ELPA Library -- Scalable Parallel Eigenvalue Solutions for Electronic Structure Theory and Computational Science', *J. Phys. Condens. Matter* 26, 213201 (2014); <http://elpa.rzg.mpg.de/>
- [21] J. Terao, A. Wadahama, A. Matono, T. Tada, S. Watanabe, S. Seki, T. Fujihara and Y. Tsuji, 'Design principle for increasing charge mobility of π -conjugated polymers using regularly localized molecular orbitals', *Nat. Commun.* 4, 1691 (2013).
- [22] R. Dronskowski and P. E. Blochl, 'Crystal orbital Hamilton populations (COHP): energy-resolved visualization of chemical bonding in solids based on density-functional calculations', *J. Phys. Chem.* 33, 97 (1993); <http://www.cohp.de/>