次世代エレクトロニクスのための物質科学シミュレーション

平成１１年度プロジェクトの構成

リーダー　今田正俊（東京大学物性研究所）
強相関電子系の大規模量子シミュレーション

常次宏一、浅川仁、中野博生、 Ammon,Beat、求幸年

コアメンバー　高山一（東京大学物性研究所）
強相関電子系におけるランダムネス

福島孝治、藤堂真治、 Bernardi,Lorenzo、安田千寿

コアメンバー　常行真司（東京大学物性研究所）
強相関電子系の量子モンテカルロ法開発

草部浩一、赤木和人

コアメンバー　浜田典昭（東京理科大学理工学部）
第一原理計算法の強相関電子系への拡張

寺倉清之、中村賢、三宅隆

プロジェクトのテーマと背景

相互作用効果が特に重要でない電子系

半導体 Si,Ge,GaAs…

第一原理計算によるバンド構造の解明

↕

20C 半導体エレクトロニクス

互いに強くクーロン相互作用する電子系

「強相関電子系」　遷移金属化合物、希土類化合物、有機化合物

相互作用による
協力現象　相転移
（磁性、超伝導）
強いくりこみ効果
（まわりに引きずられた「重い電子」の出現）

→ エントロピーの解放が低温、低エネルギーまで妨げられる“モラトリアム電子”の出現

↓ 他の要素との絡み合いやカップリングが強まる
格子、ランダムネスなどとの相乗作用、競合

強相関効果のシミュレーションアルゴリズム

強い不安定性
非線型性
わずかなパラメタ制御による劇的変化

他自由度とのカップリング複雑さのシミュレーションアルゴリズム

↓

多種機能の差別的選択、設計
強相関エレクトロニクス

強相関効果のシミュレーションアルゴリズム

[1] 第一原理計算手法の改良

GW法　　多体効果を電子の自己エネルギーとして取り込んでゆく。

計算量の軽減とセルフコンシステントな計算法

[2] 量子モンテカルロ法、密度行列くり込み群法の改良

動的物理量の計算、運動量依存性の計算

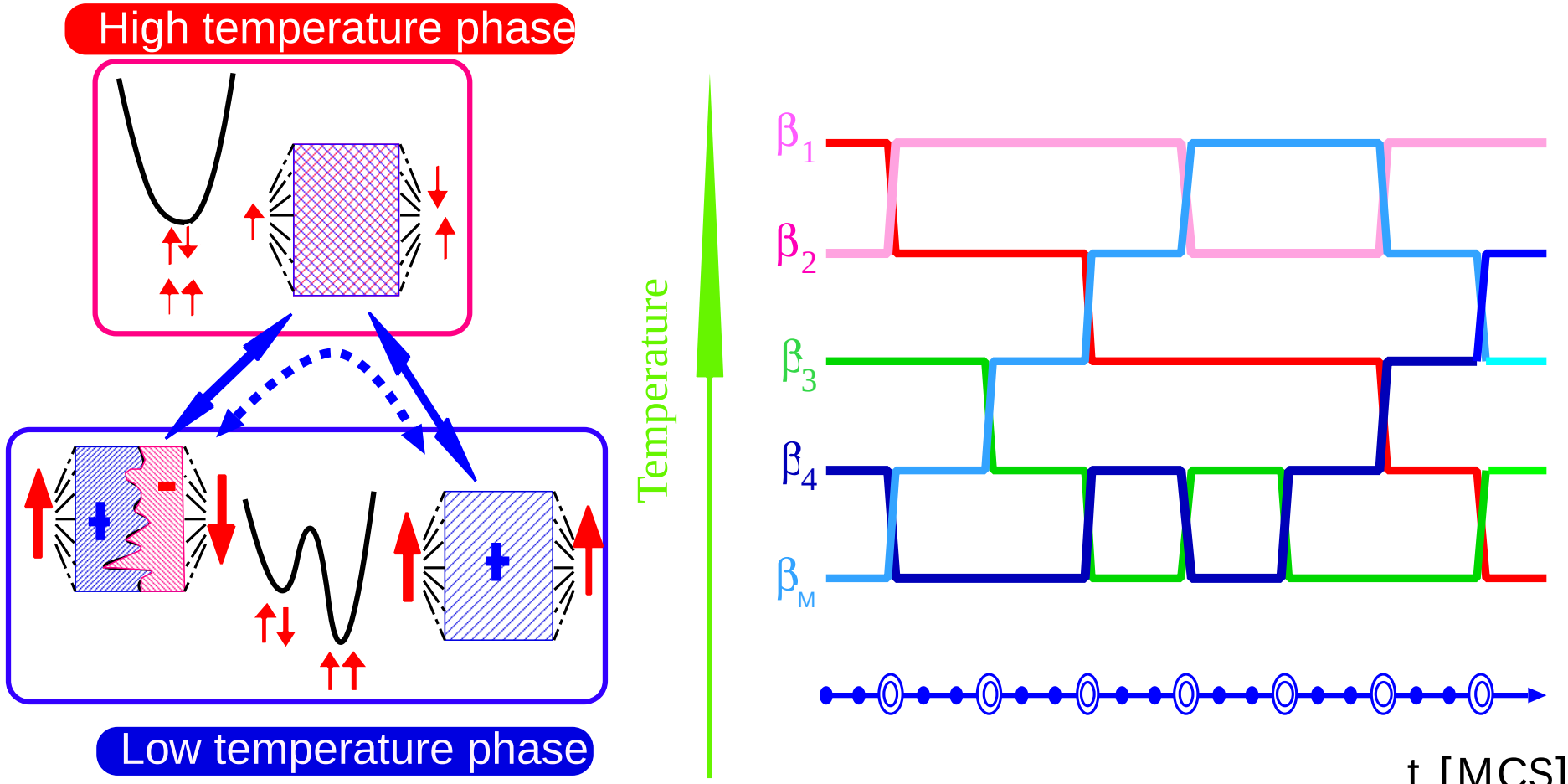
[3] 新たなシミュレーションアルゴリズムの開発

- 負符号問題の困難を持たない
- 空間２，３次元の系に使える

① 経路積分くりこみ群法

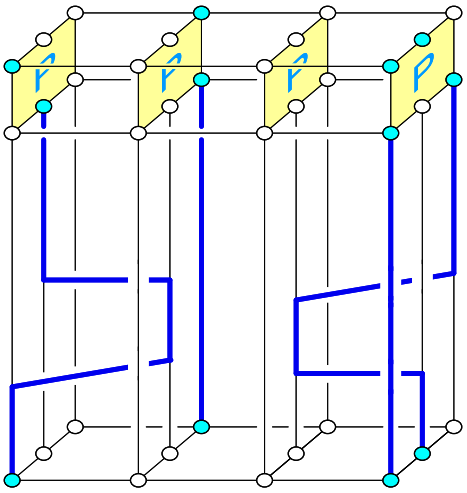
② 変分・拡散モンテカルロ法の改良

Exchange Monte Calro Method and Domain-Wall Free Energy



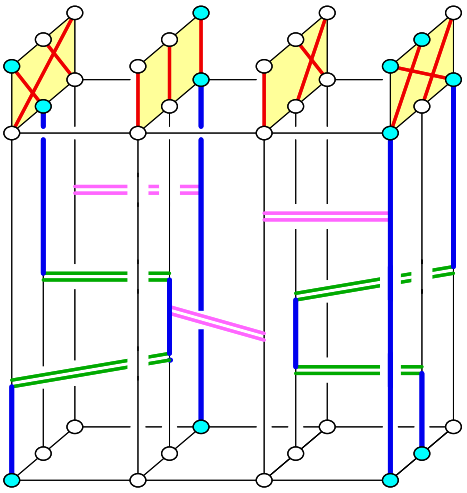
Loop Algorithm

world-line configuration



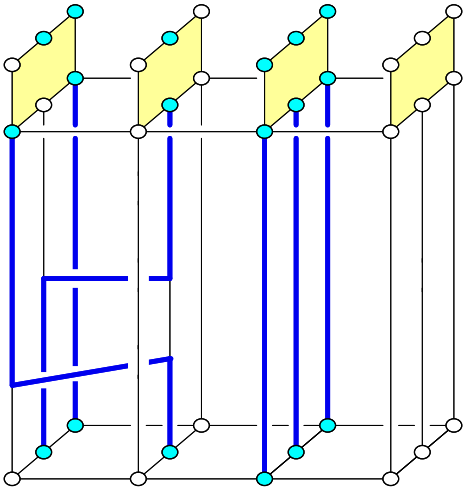
labeling

graph



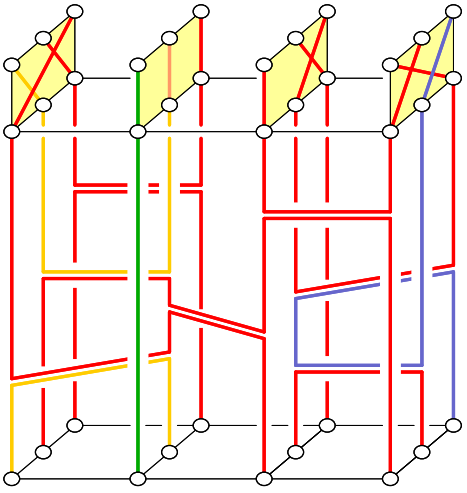
loop identification

next configuration



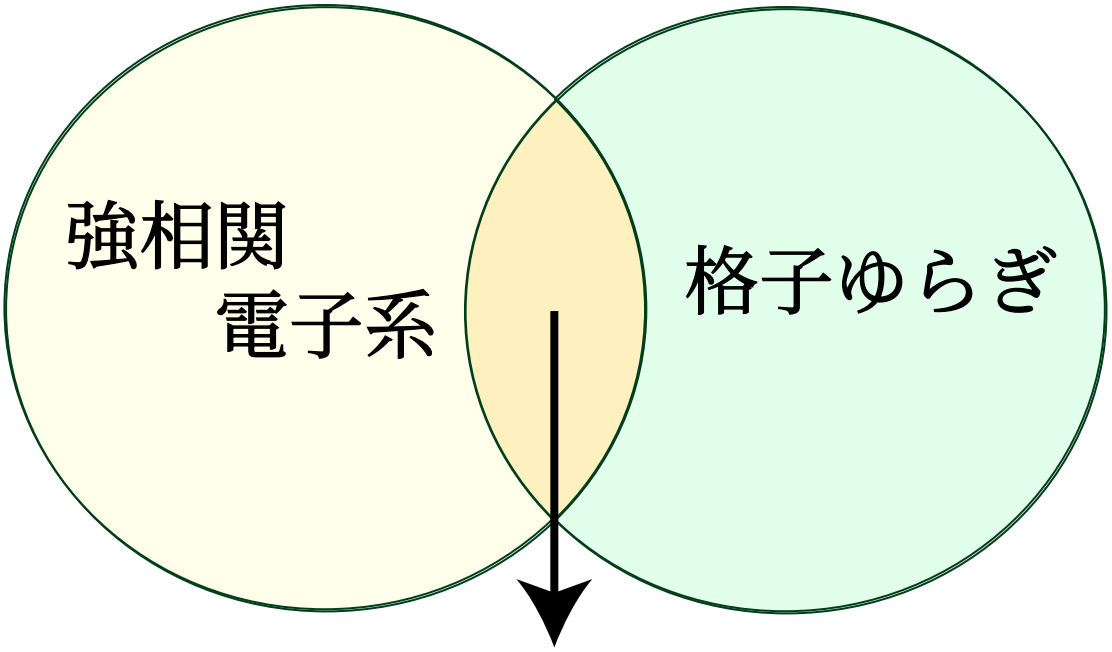
loop flip

loops

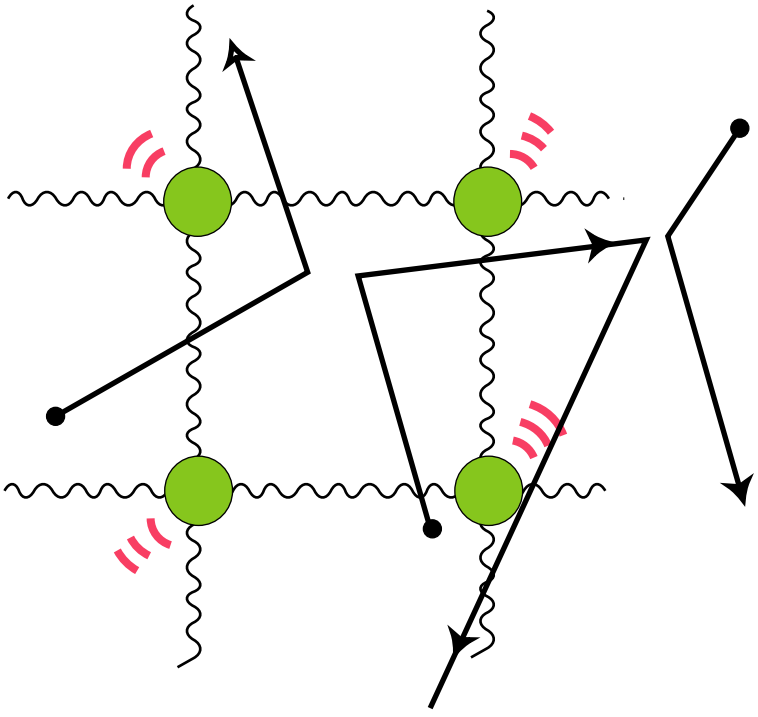


量子シミュレーション
アルゴリズム

古典モンテカルロ
アルゴリズム



相乗作用による
多体効果の増大



複雑さのためのシミュレーションアルゴリズム
格子とのカップリング、乱れ

[1] 乱れがあるときの交換モンテカルロ法

- 多重極小による遅い緩和
- レプリカの温度交換による緩和の促進
- 相互作用パラメタの空間を動くレプリカの手法も開発

[2] ループアルゴリズム

- 長い自己相関時間
- クラスター更新による効率化
- 一般性のあるプログラムのパッケージ化

[3] 格子ひずみやゆらぎとカップルした系の強相関アルゴリズム

- 異なった自由度による相乗作用
- 特徴的な時間スケールの異なる自由度のアルゴリズムを結合させる
- 強相関電子シミュレーションアルゴリズムと格子シミュレーションの結合

[4] 第一原理経路積分分子動力学法

- 軽い結晶原子などの量子効果
- 多電子系に対する第一原理計算と軽い原子に対する経路積分を結合させる
- 大規模並列化

応用の推進

[1] 強相関物質探索指針の追求

量子モンテカルロ法による解明

強相関電子系では電子の運動量、エネルギーの違いによる差別化、多様化が進む。

- “ 弱者 ” と “ 強者 ” への分裂と強相関効果の集中化
- 電子の個性の出現
  スピン、軌道、電荷

差別化、多様化の選択促進

単純な一電子としての一様な運動の抑制
望んでいる集団運動や不安定性の選択的制御

↓

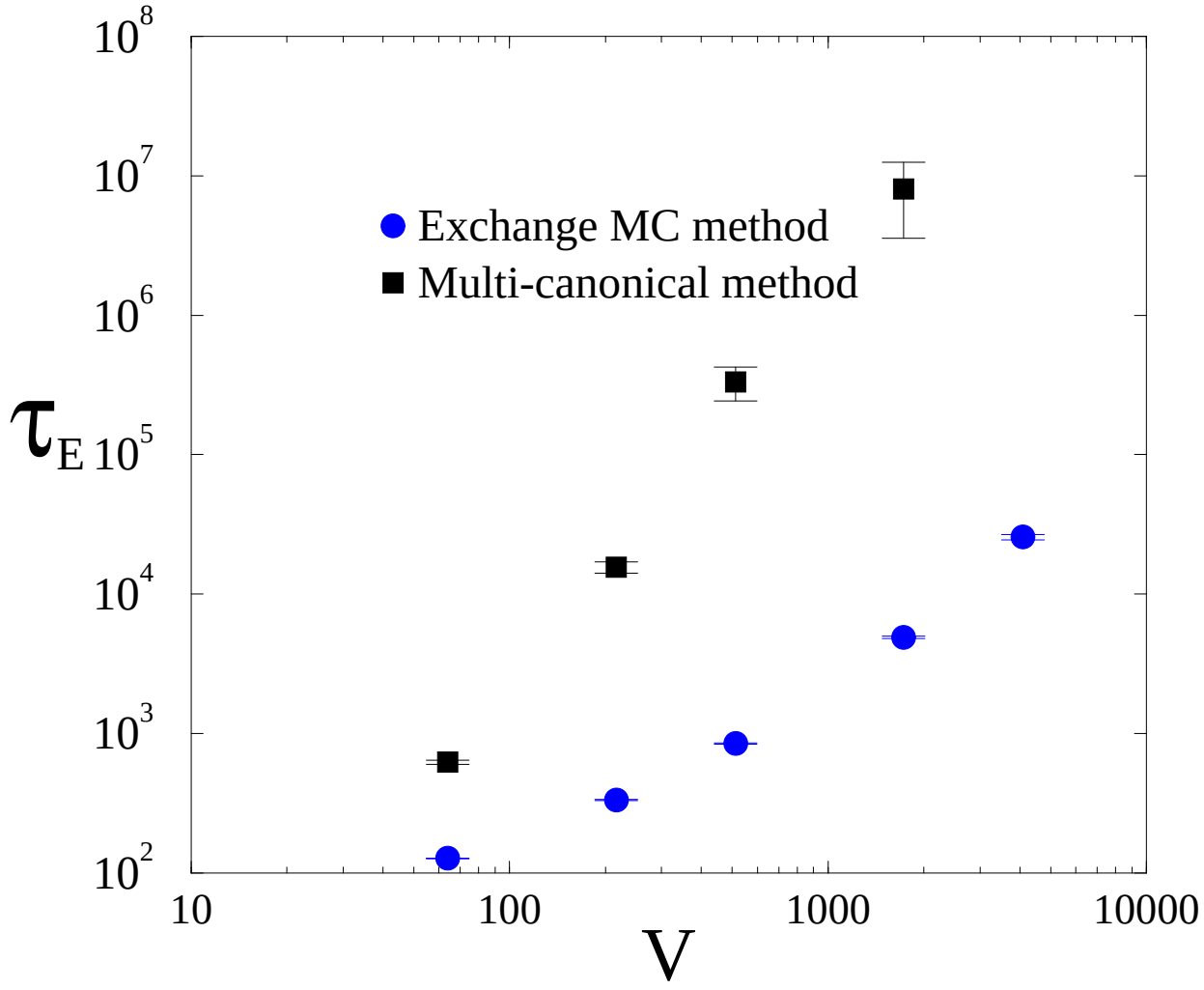
構造や物質パラメタのチューニング、設計

例：フェルミ面近傍の電子のみのフラット分散化による超伝導

↓

適した格子構造の探索指針

Examples: Ergodicity time τ_{E} of 3D $\pm J$ Ising spin glass model



［2］ランダムネスと遅い緩和の扱い

交換モンテカルロ法による解明

スピングラスの臨界特性の解明

境界の“ねじれ”による相転移特性の
解明法の開発

ループアルゴリズムによる解明

ランダムに希釈した量子スピン模型の
新しいタイプの相転移の発見

［3］格子のゆらぎとカップルした電子系

格子モンテカルロ＋電子シミュレーションによる解明

マンガン酸化物の「悪い金属化」
（小さなドルーデ重みの生ずる機構）の解明

||

強相関効果＋軌道ゆらぎ＋格子ひずみゆらぎ
相乗作用

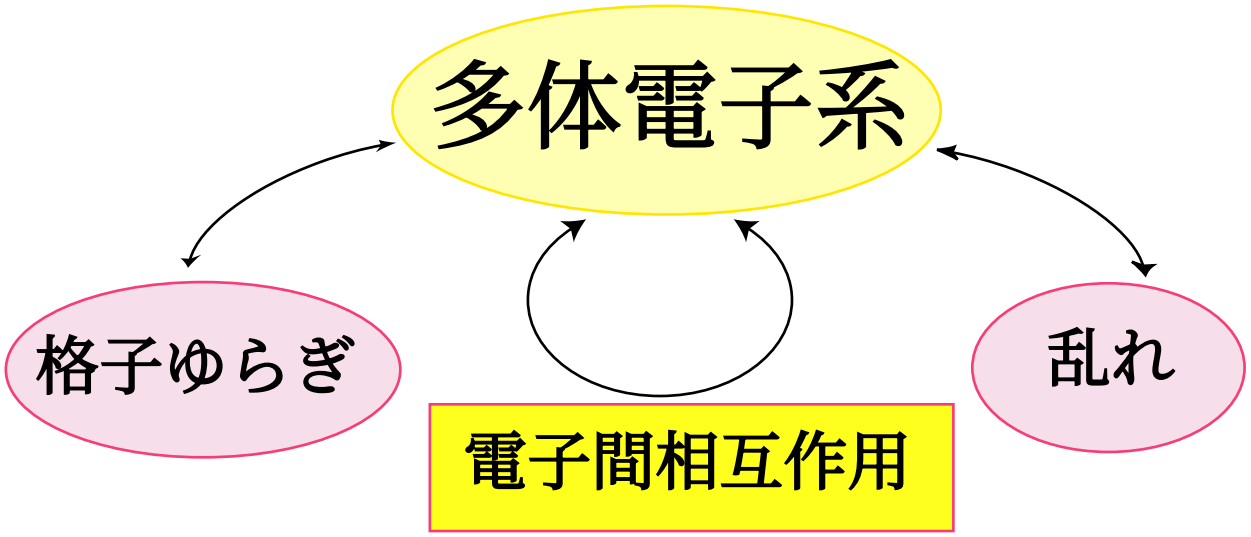
［4］原子や格子の量子ゆらぎの効果

第一原理経路積分分子動力学法による解明

高圧下水素の固体化と構造相転移

水素原子の量子ゆらぎがむしろ原子核の
局在化を引き起こし構造を決定する。

プロジェクトの展望



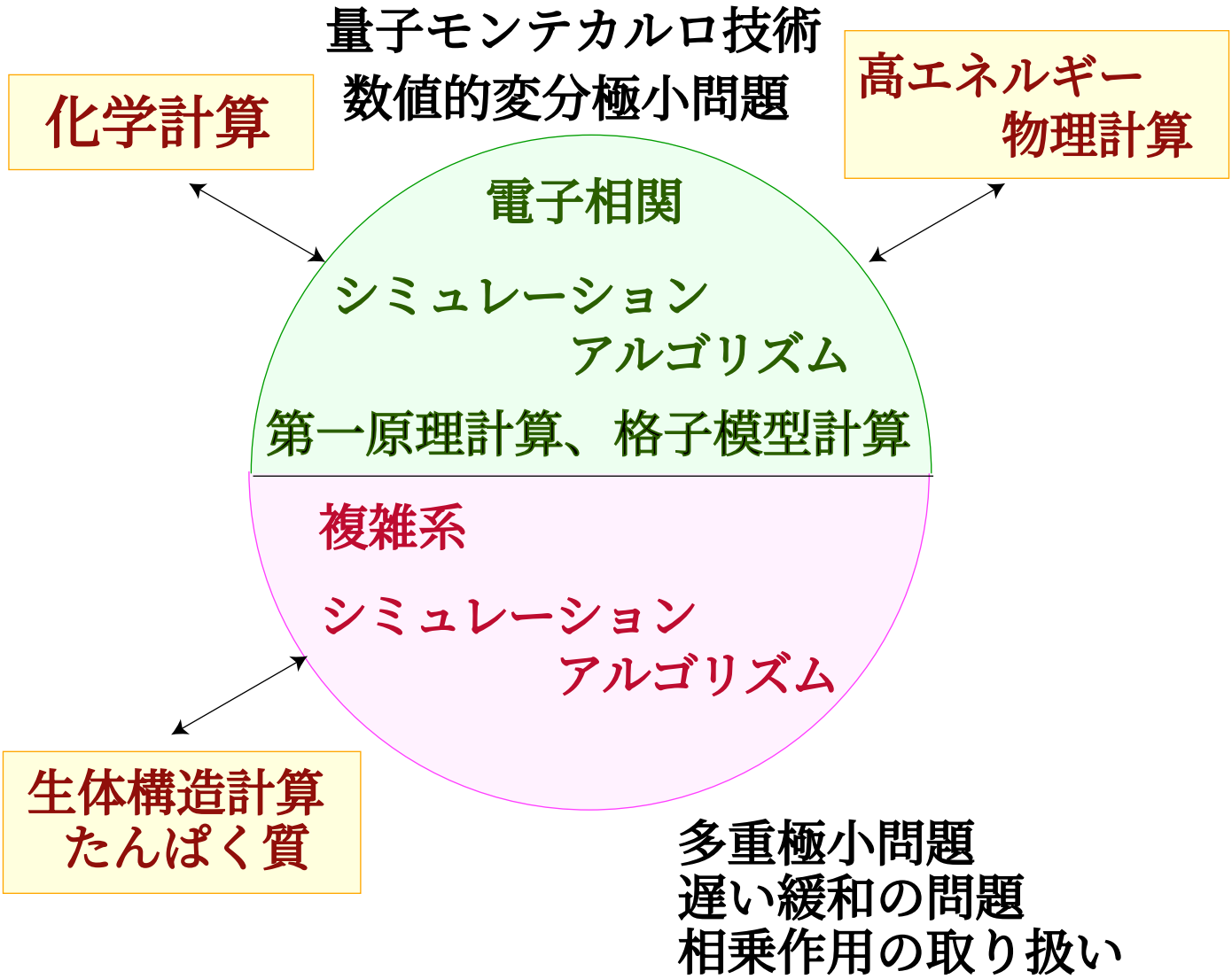
強相関複雑電子系
シミュレーションアルゴリズム

個性の出現

電子の差別化

運動量依存性　　軌道、スピン

差別化、多様化を選択的に利用した
次世代の電子技術開発指針の探求

遷移金属酸化物、有機化合物、希土類化合物

「計算科学」としての基盤技術