

beyond LDA

量子シミュレータの開発

計算機マテリアルデザイン

次世代量子シミュレータ・
量子デザイン手法の開発と応用

次世代 量子シミュレータ・ 量子デザイン

赤井久純
大阪大学大学院理学研究科

デザイン



- シミュレーションからデザインへ
 - 20世紀基盤技術: シミュレーション (模倣)
 - 与えられた物質に対してそれが実現する物性を予測
 - 21世紀基盤技術: デザイン (創造)
 - 与えられた物性に対してそれを実現する物質を予測
- キーテクノロジーとしてのデザイン
 - 低環境負荷のもとでの高機能材料の効率的開発
 - 新分野としての計算機マテリアルデザイン
 - 工業化社会から知識社会への転換
 - イノベーション
 - 新産業創出

学際とデザインの 階層構造

デザイン概念

人・社会・ものシステムデザイン

デバイスデザイン

マテリアルデザイン

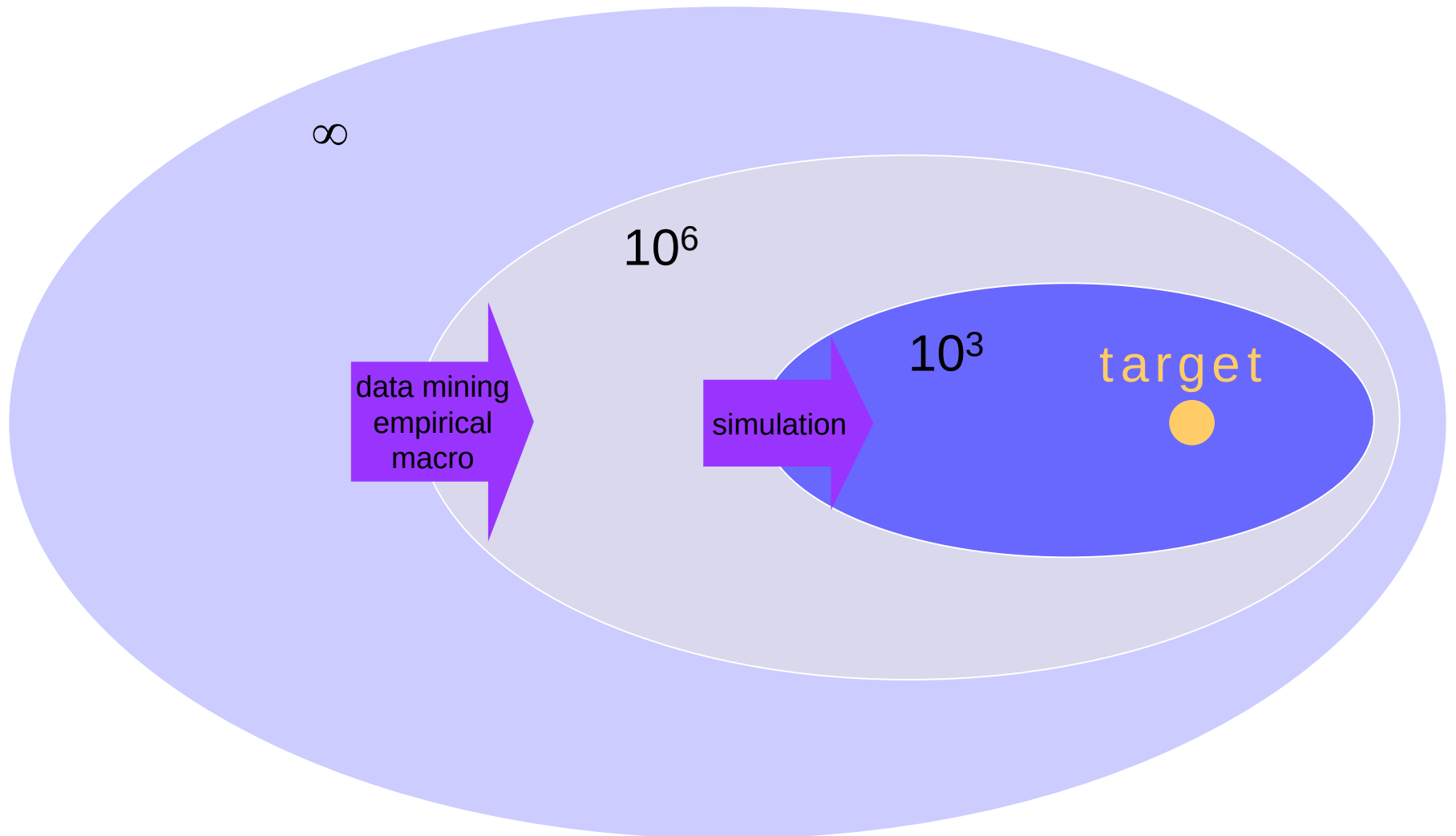
凝縮系シミュレーション・デザイン

物性基礎理論・方法論・計算物理学

従来のマテリアルデザイン

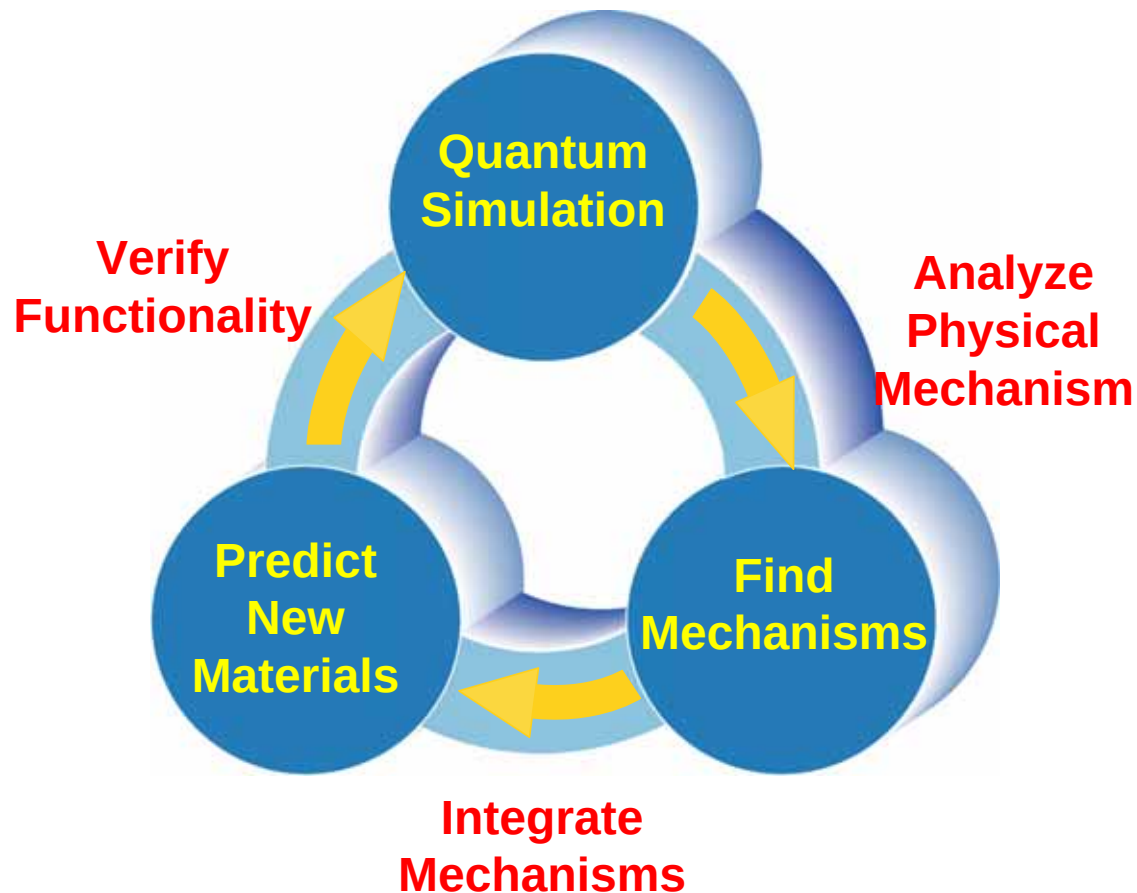
- **コンビナトリアル**
 - 低効率、環境高負荷
- **内挿的、外挿的**
 - 革新性に乏しい、イノベーションに欠く
- **経験的**
 - 系統性に欠く、勘にたよる
- **セレンディピティ (偶然のもたらす発見)**
 - 滅多におこらない、たよれない

マテリアルデザインの例



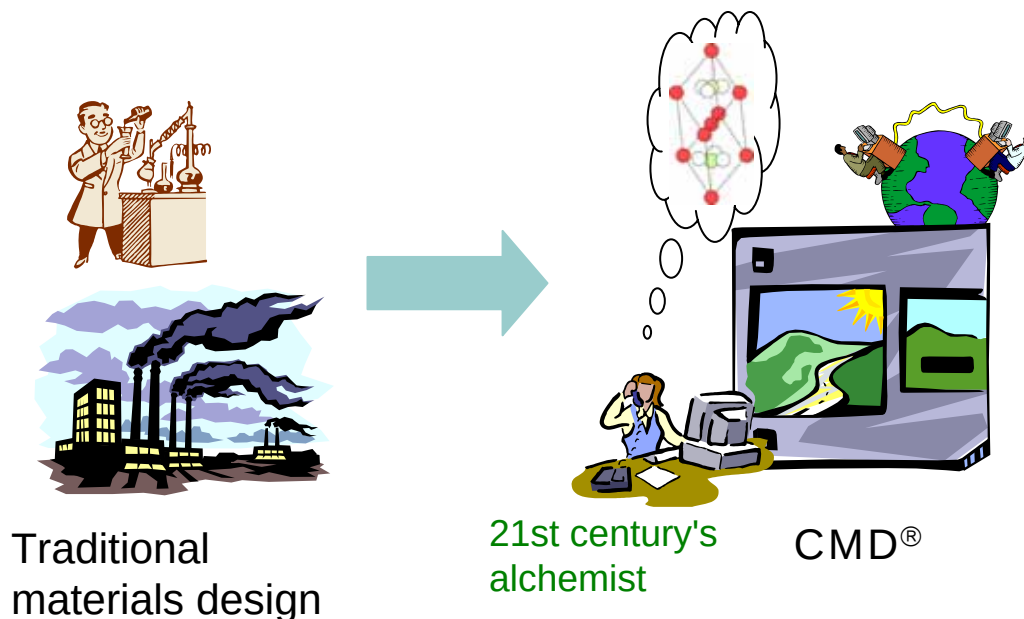
効率的で環境にやさしい マテリアルデザイン？

- A solution: CMD[®]



CMD[®]とは?

- CMD[®]: 計算機マテリアルデザイン
(computational materials design)
- 仮想実験室における物質創成
 - 第一原理電子状態計算を基礎にした物理学的手法



計算機マテリアルデザイン

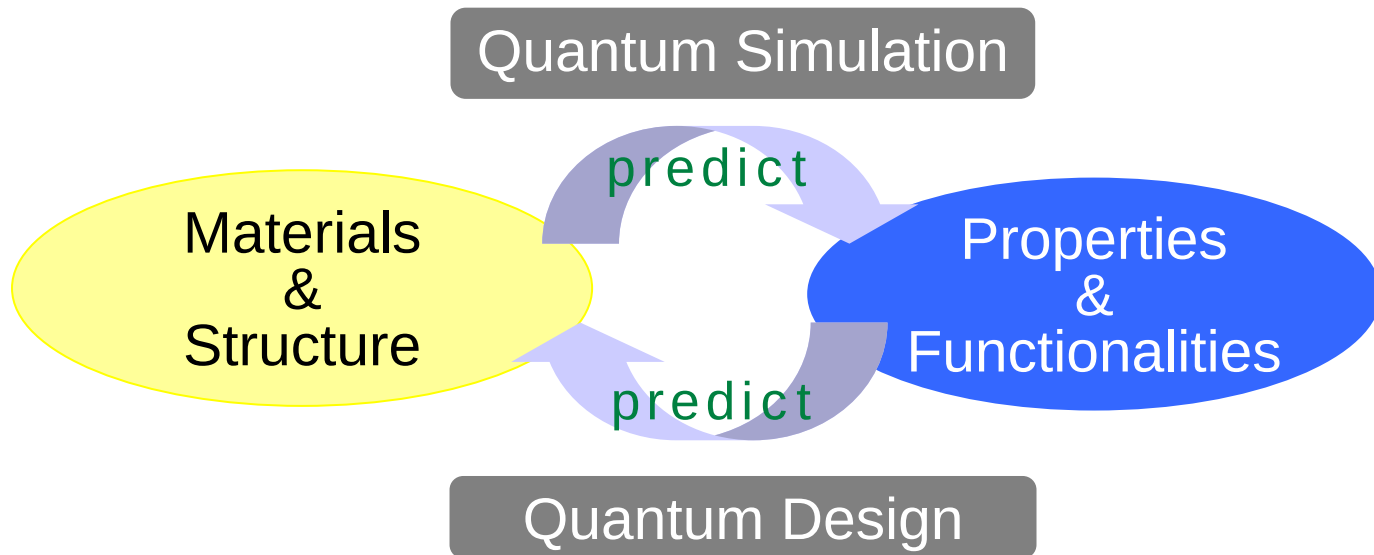
○ 計算機上の仮想実験室において

- 環境調和材料 (窒化物、酸化物等)
- 高効率エネルギー変換材料 (太陽電池・燃料電池材料、超伝導材料等)
- 安全・安心のためのセンサー材料 (スピントロニクス材料等)
- 生体調和材料 (人工関節、人工骨、歯科材料等)

等を効率良く、環境に負荷をかけず開発することのできる手法

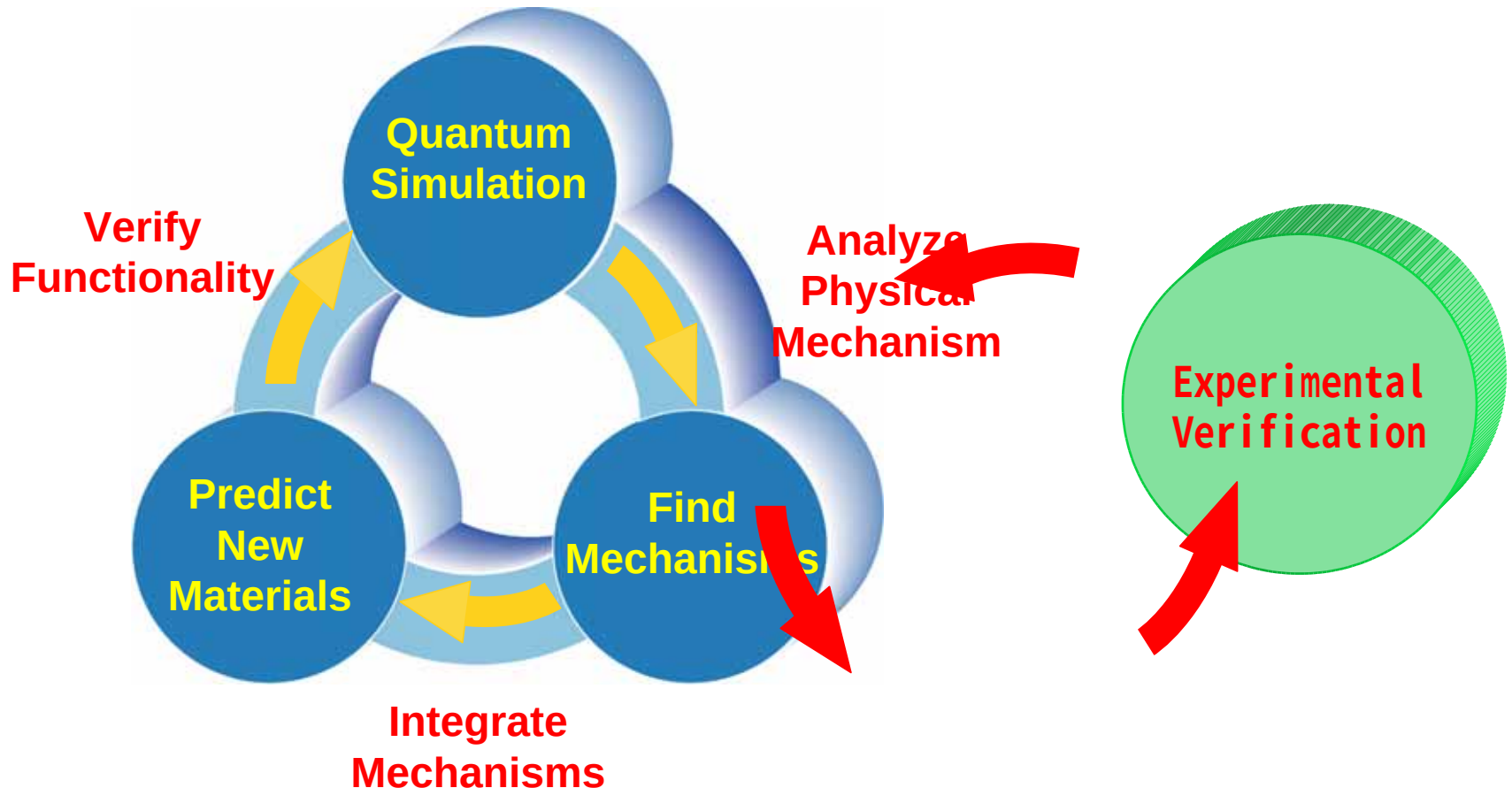
量子シミュレーションと量子デザイン

- デザインの逆問題性



どのようにこの問題を解くか?

- CMD[®] Engine



計算機マテリアルデザインと量子シミュレーション

物質・構造

量子シミュレーション

物性予測

物性・機能

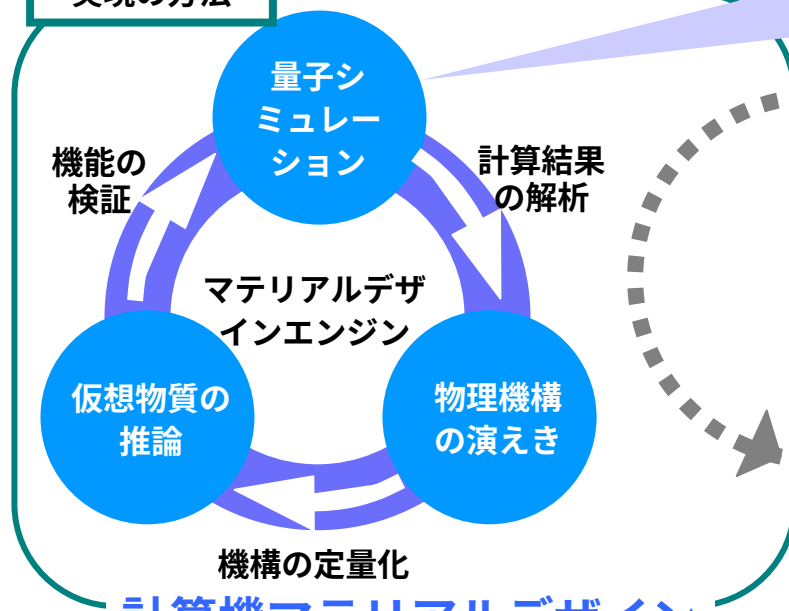
物質予測

量子デザイン

量子デザイン
実現の方法

主要部は量子シ
ミュレーション

計算機マテリアルデザイン
エンジンは3つの過程からなる



実証実験

計算機マテリアルデザイン

次世代量子シミュレータ

● 現在の量子シミュレータ

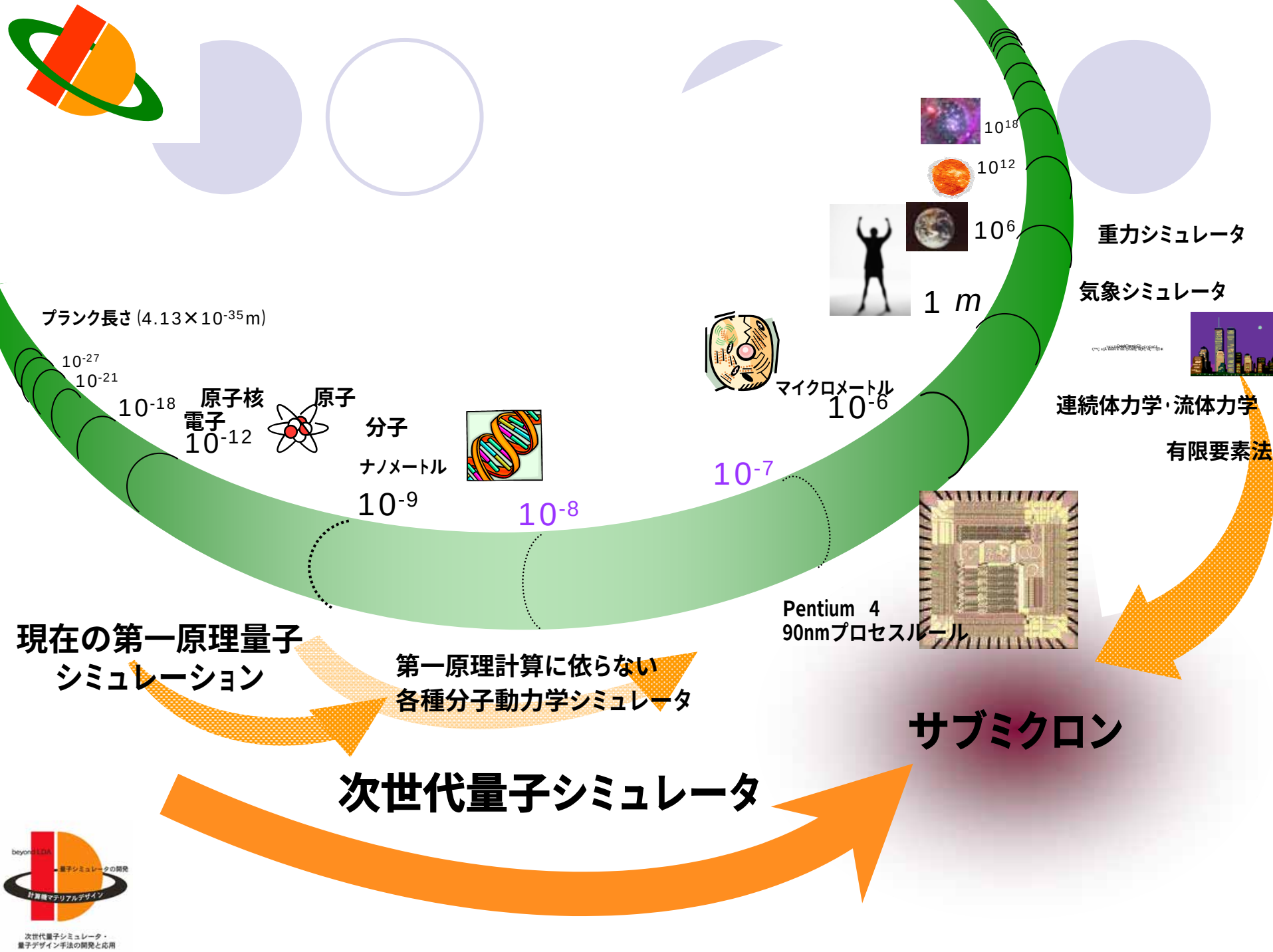
- 凝縮系物質・固体の物性予測
- 局所密度近似に基づく第一原理計算
- 物性物理学で最も成功したアプローチの一つ
- 計算機マテリアルデザインに用いられて大きな成果



■ 今後の要求 高度なデザイン

- より高精度なシミュレーション
- より大規模なシミュレーション
- 多様な電子相関・エキゾチックな系のシミュレーション
- ダイナミクスのシミュレーション

次世代量子シミュレータには超高速スパコンが必要
超高速スパコン開発には次世代量子シミュレータが必要



基礎科学として 凝縮系の標準理論

宇宙・素粒子・高エネルギー 物理学

「物質の究極の構成要素とその間の相互作用の探求」

物性物理学

構成要素は、既知

構成粒子：原子核と電子
ルール：量子力学

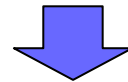


“More is different.”

Nobel Prize winner P.W. Anderson's maxim

「多粒子系となることにより、異なる相 (物理) が出現する。」

量子力学的多粒子系を正確に取り扱う道具：「量子シミュレータ」



凝縮系の標準理論を提供する。

未知物質の探索、物質の個別性の起源の解明

“The rest is infinite.” J. Kanamori

人類の生存圏の物理



世界の情勢

ヨーロッパ

Ψ_k Network

EUによってサポートされた世界最大の
固体表面・電子状態計算コミュニティー

Working Group 15 “Ab-initio Design”
(第一原理デザイン) の立ち上げが進んでいる。

Marie Curie Research Training
Network

EUによってサポートされた研究教育ネットワーク

Computational Materials Designを
キーワードに含むプロジェクトが出てきた。

世界の情勢

アメリカ

NSF National Science Foundation

Materials Design**関連のプロジェクトが第一原理電子状態に関する中心的な研究者達によって始められている。**

Center for Computational Materials Design

Computational Materials Design**のためのセンターやファシリティがCALTEC, Penn State Uni.をはじめ各所で設立されている。**

日本の有利性

日本

CMD研究は日本から発信

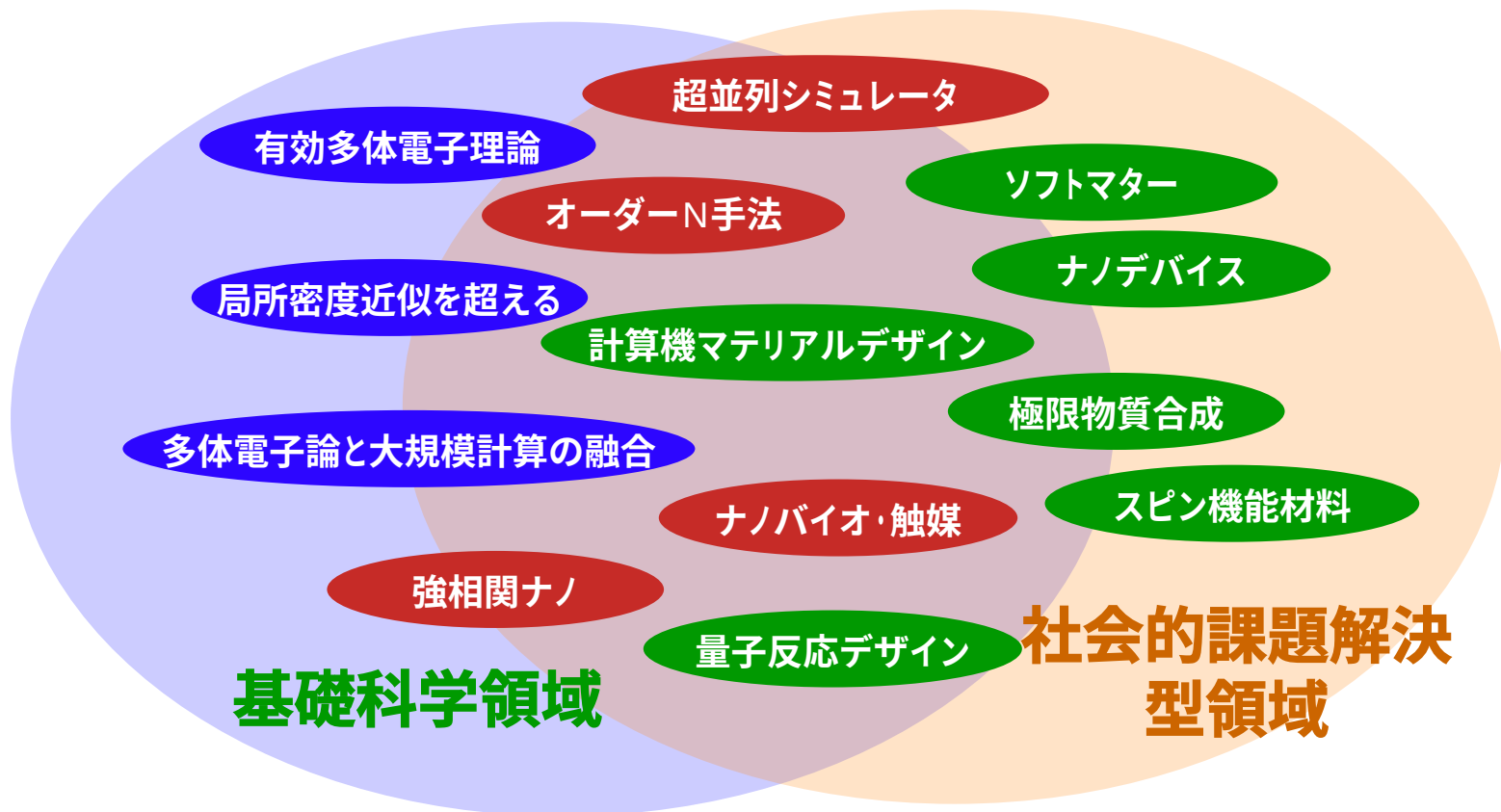
様々なプロジェクトの推進、チュートリアルコース開催などによって、CMDに関して、欧米に先行している。今後世界をリードする必要がある。

スーパーコンピュータネットワーク

10ペタフロップス・スパコン、グリッド・コンピューティング、ITBL等における先進的ソフトウェア資源開発が急務である。

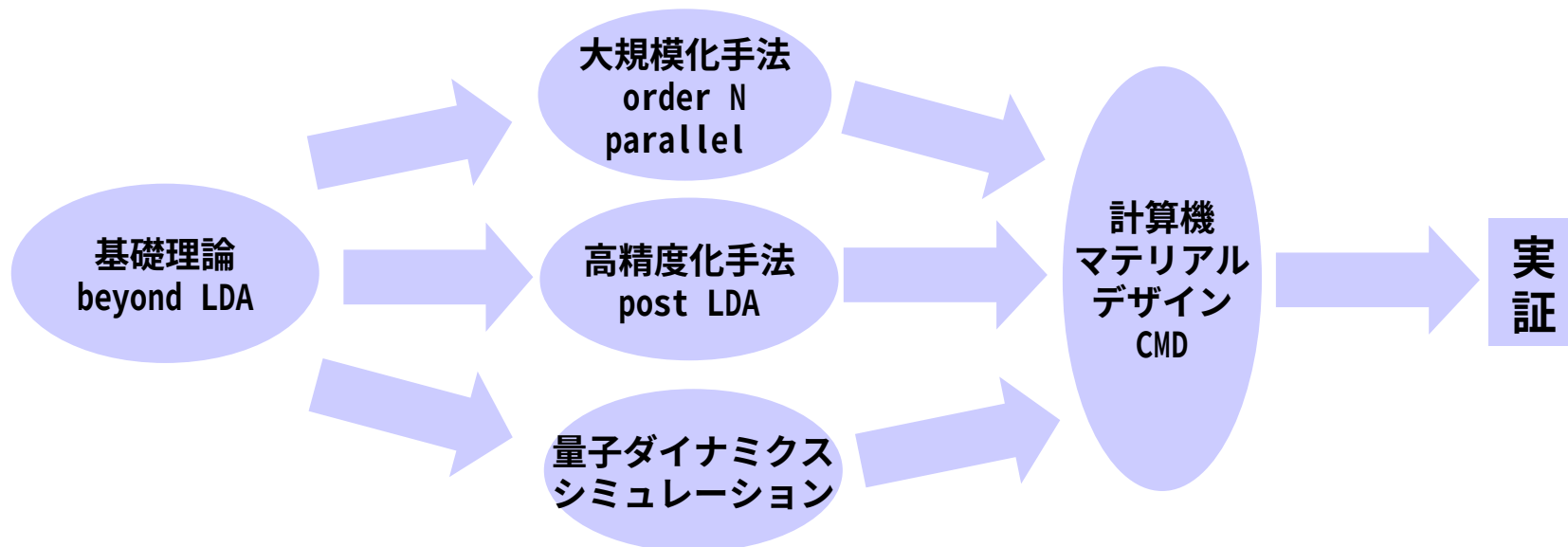
量子シミュレーション・量子デザイン研究

- 先導的でかつ基盤的意義を有する研究
- 社会的課題の解決をめざす研究



研究の方向性

- ナノ構造大規模量子シミュレーション手法 **order N**
- DFT-LDAを超える手法 **beyond LDA**
- 量子ダイナミクスシミュレーション手法
- 計算機ナノマテリアルデザイン (CMD)
- 実用的な新しい量子シミュレーション手法 **post LDA**



LDA: 密度汎関数法における局所密度近似

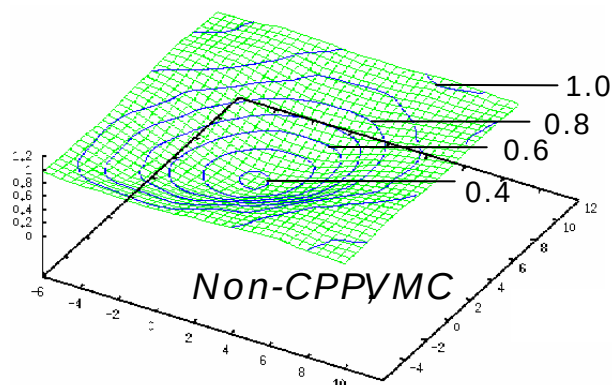
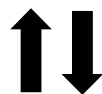
実績と期待1

拡散モンテカルロ法による
超高精度量子多体系シ
ミュレーション

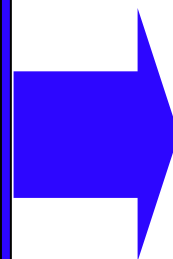
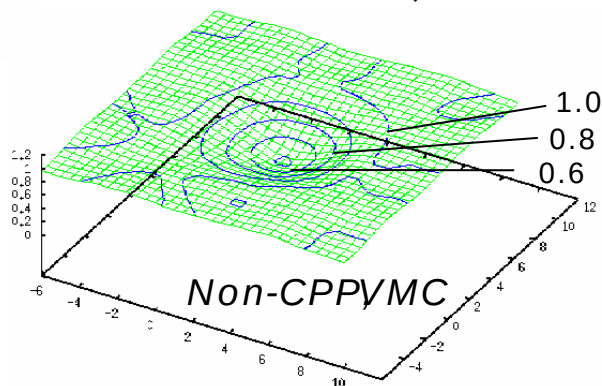
実績

標準の提供

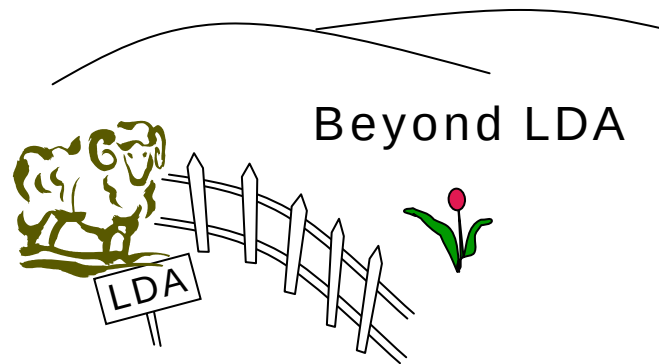
スピン



↑↑
スピン



局所密度近似
を超える手法
の開発



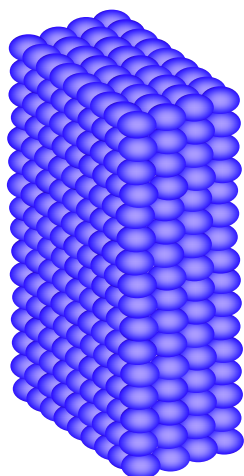
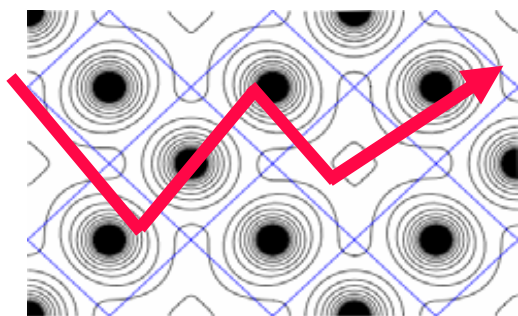
実績と期待2

大規模・高精度量子シミュレーション手法の開発

実績

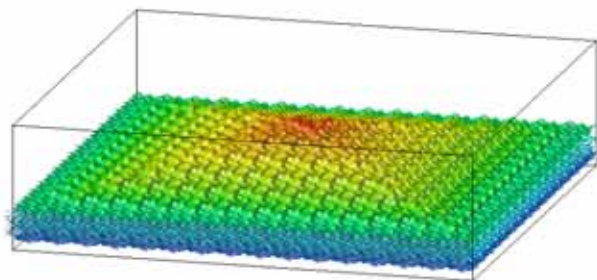
Full Potential KKR

Screened KKR



Ni
1000層

200nmの量子シミュレーション



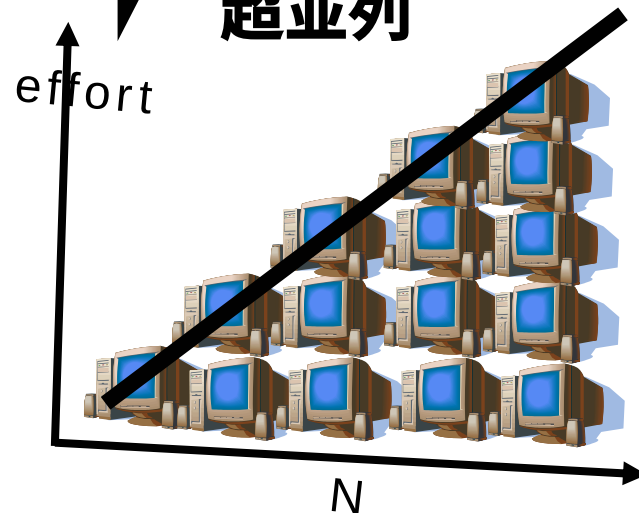
Ge/Si(110)

サブミクロンサイズ

オーダN法

大規模

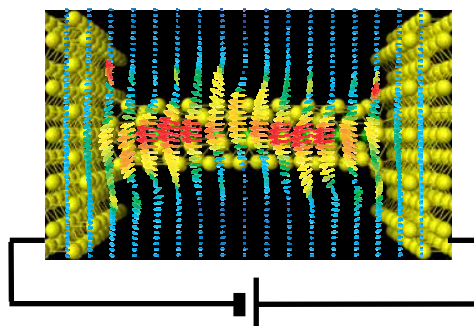
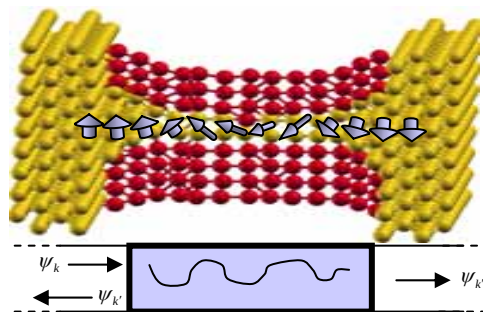
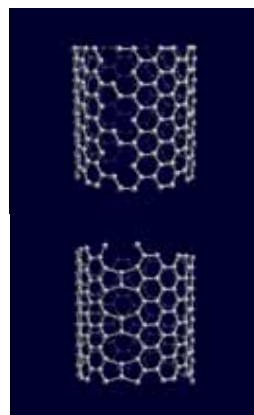
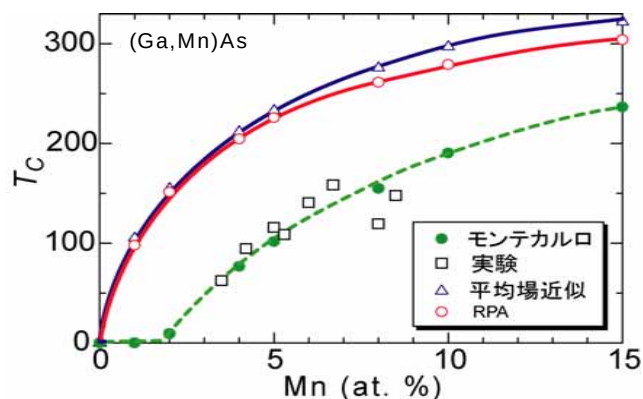
超並列



実績と期待3

量子シミュレーションと計算機マテリアルデザイン

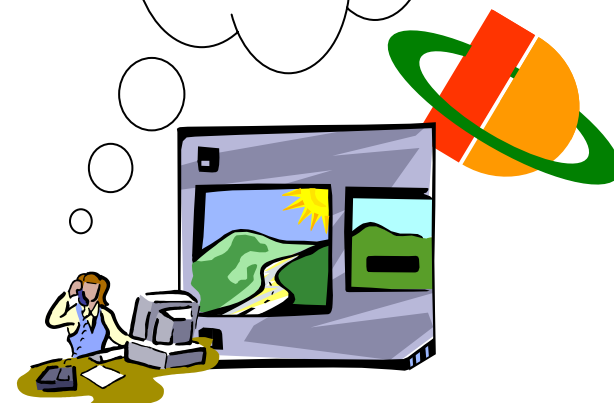
実績



金螺旋原子鎖中を流れる電流により誘導される磁場

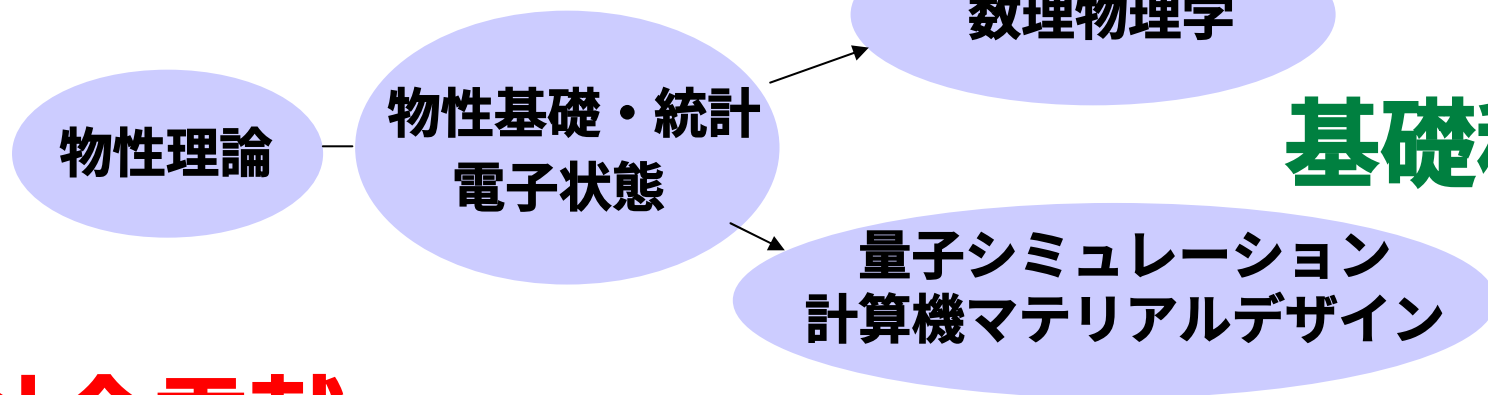
計算機ナノマテリアルデザイン

表面・界面
スピントロニクス
量子輸送
ナノバイオ物質



展望

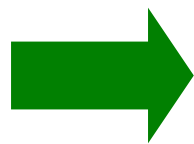
● 10年後



基礎科学

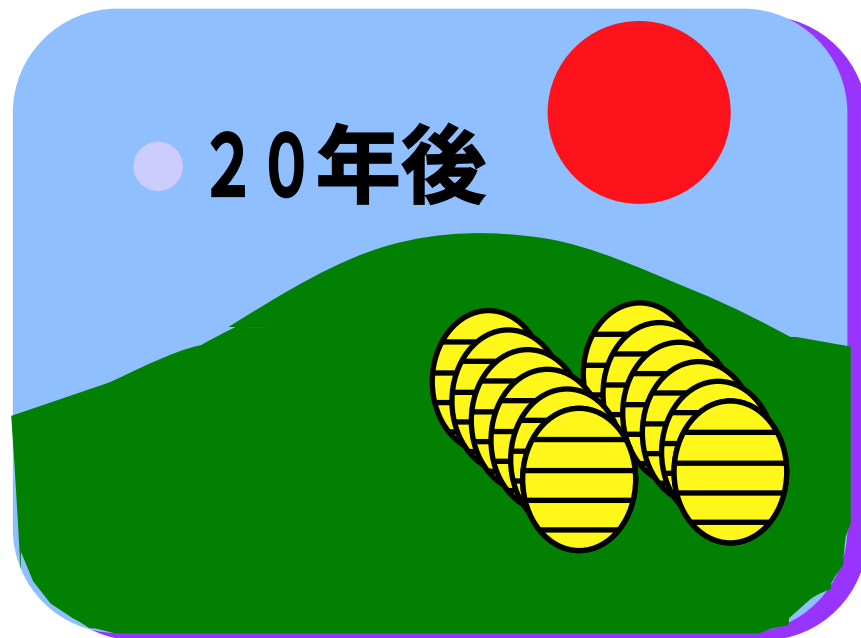
社会貢献

次世代量子シミュレータに支えられた
計算機マテリアルデザインは高効率・
環境低負荷の、新しい材料・デバイス
開発手法を提供



工程大分業時代における
知価創造工程の基盤技術

● 20年後





まとめ

学問的に新しく、かつ社会に対するインパクトの大きい量子シミュレーション、量子デザイン

- **新しい学問領域「計算機マテリアルデザイン」の確立**
- **次世代規模量子シミュレータの開発**
- **次世代量子デザイン手法の開発・公開・普及**
- **計算機マテリアルデザインの現実物質への応用**

**Towards Post LDA
&
Computational Materials Design**