

第2回 計算科学による知の発見、統合、創出シンポジウム
「計算科学の戦略とスーパーコンピュータ」
2006年4月4日(火)～4月5日(水)

モデルと物質と次世代コンピュータ

次世代強相関物質科学と
シミュレーション

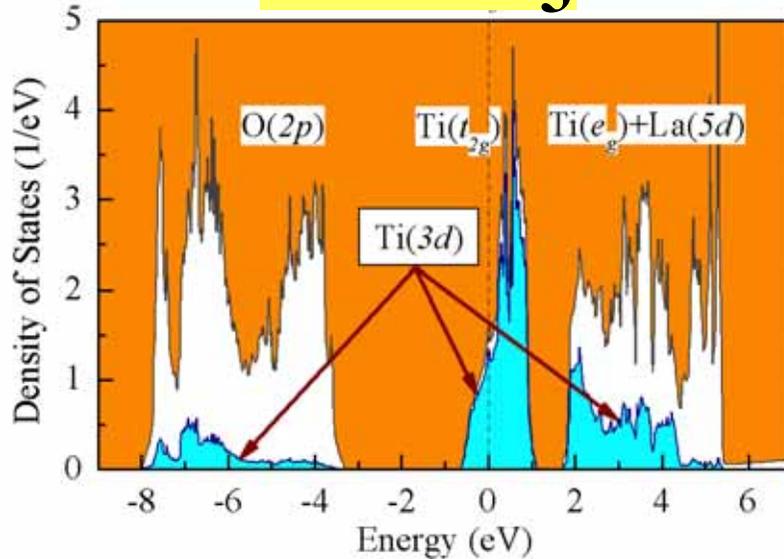
2006年4月4日

東京大学
今田正俊

局所密度近似 (LDA) を超える必要性：
強相関物質に対して絶縁体を金属と誤って予測

LMTO-LDA

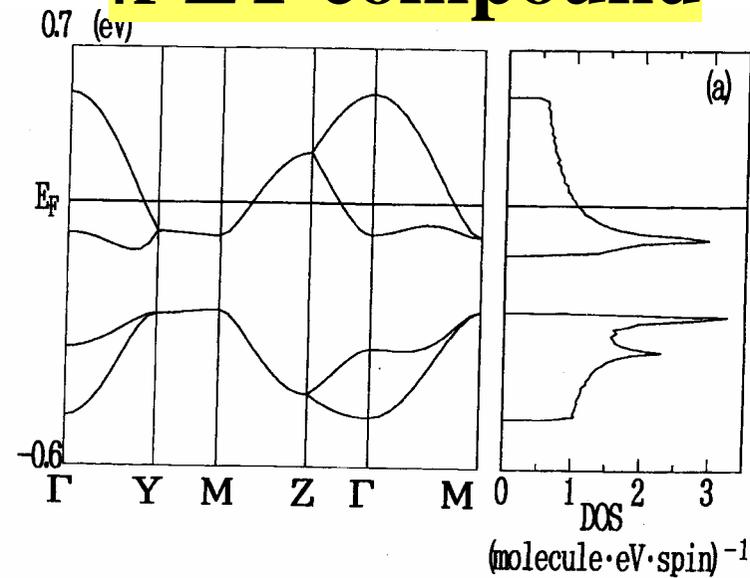
LaTiO₃



遷移金属化合物,
希土類化合物

拡張ヒュッケル近似

κ -ET compound



有機化合物

フェルミ面付近のバンドが孤立している

beyond LDA: 強相関物質に対する戦略

第一原理計算手法

密度汎関数法

LDA、GGA
GW

低エネルギー有効模型 のための数値手法

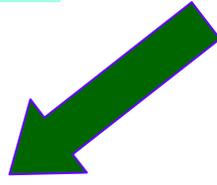
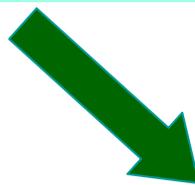
量子モンテカルロ法

経路積分繰り込み群法 (PIRG)

動的平均場 (DMFT)

計算時間

精度



ハイブリッド手法

現実的な物質で
正確に電子相関と
ゆらぎを取り入れる

M. IWADA

ハイブリッド手法；エネルギー階層性を意識した戦略

フェルミ面から離れたバンド、高エネルギー領域
LDAないしGW近似

100eV

- (1) 遮蔽されたクーロン相互作用
フェルミ面から離れたバンドによる遮蔽効果
低エネルギーでのクーロン相互作用
- (2) 自己エネルギー
低エネルギーバンド構造への繰り込み

**down-
folding**

**繰り込み群
の考え方**

少数バンドによる有効ハミルトニアン

low-energy solver

~1eV

経路積分繰り込み群法による電子相関の厳密な扱い
量子数射影の併用

少数バンド多体ハミルトニアンの厳密な解

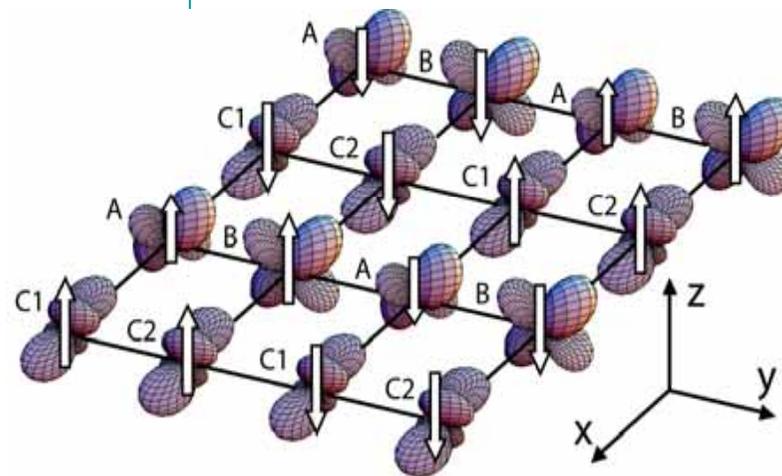
~0.01eV

DFT-PIRGが予測する電子状態 I

| Sr_2VO_4 | 伝導性 | ギャップ | 磁気構造 |
|--------------------------|--------------------|------------|------------------|
| LDA(局所密度近似) | metal | 0 | 常磁性 |
| ハートレー・フォック | insulator | 0.3eV | 強磁性 |
| 実験結果 | わずかに絶縁体的 (転移近傍) | ~ 0-0.15eV | 反強磁性? 詳細不明 |
| DFT-PIRG の結果 | 転移近傍 (わずかに絶縁体) | ~ 0-0.1eV | 複雑な反強磁性、 軌道秩序 |

軌道液体ではなくて
長周期構造

YVO_3



戦略は何か？

電子相関効果の大きな物質群、構造

(遷移金属化合物、有機化合物、ナノ物質)

フェルミ面付近のバンド構造は比較的単純で孤立している
しかし、基底状態では、多数の相の競合、新奇な相の出現、
ゆらぎの効果が多彩

これを正確に表わせなければ次世代の計算科学を担えない

競合 わずかな摂動によるドラマチックな変化、
量子相転移: 超伝導、金属絶縁体転移、磁気転移

強相関エレクトロニクスへの期待; 実験科学の先行

精度への要請 \longleftrightarrow **新機能、エキゾチックな機構**
新概念

高精度計算をめざすときの京速に対する期待

戦略は何か？

- (1) すべてのエネルギー領域を一緒に解こうとするのは無謀
階層性を意識したアルゴリズムが必要: **ダウンフォールディング**
ハイブリッドアルゴリズム
- (2) **低エネルギーソルバー開発は現時点で最も挑戦度の高い分野**
十年一日、既存の手法（「厳密対角化」, LDA+U, 変分モンテ
カルロ.....）の応用に終始して、手法開発の努力を怠って
は、次世代コンピュータの戦略は生まれない

低エネルギーソルバー開発; 主戦場

動的平均場 (DMFT)からのアプローチ

cluster DMFT, cellular DMFT, DCA, CPM

k 点の数を増やすことが困難

経路積分繰り込み群 (PIRG)

計算時間

変分波動関数 (VMC)

系統的改良が可能か？

量子モンテカルロ法 (QMC)

Gaussian basis (phase space) QMC

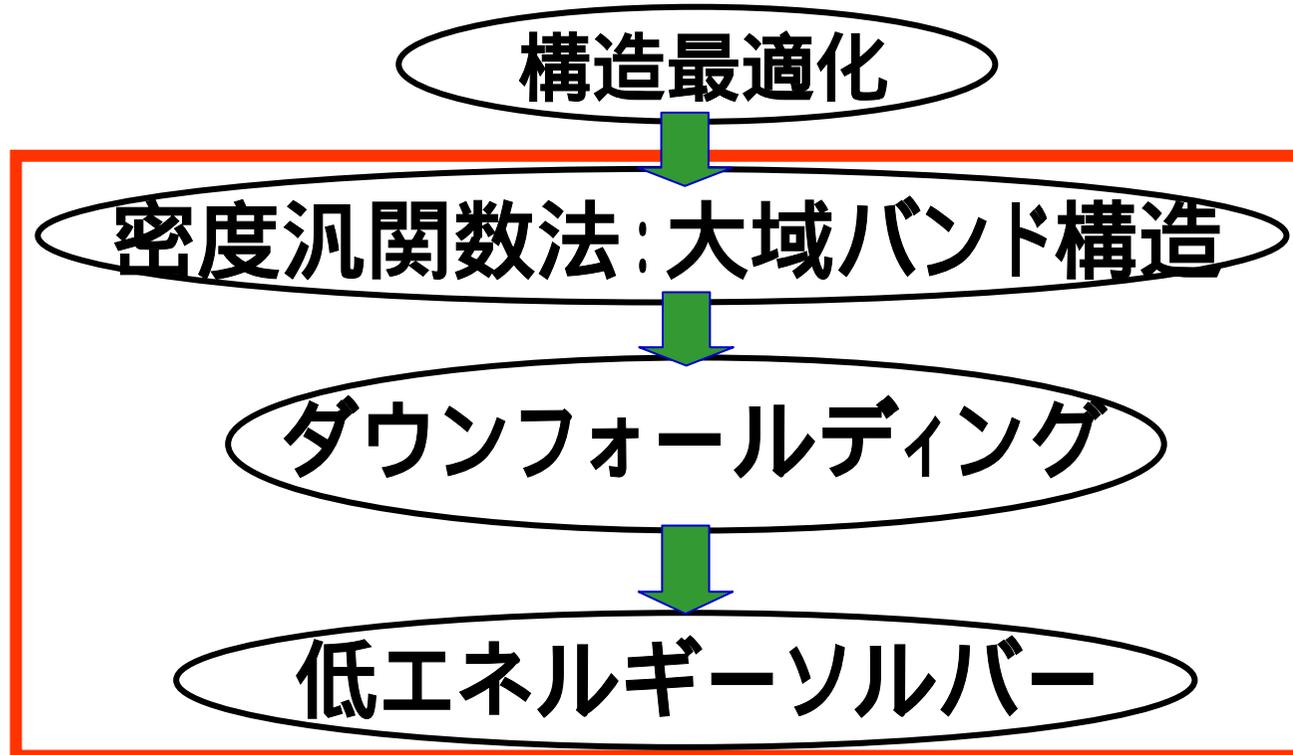
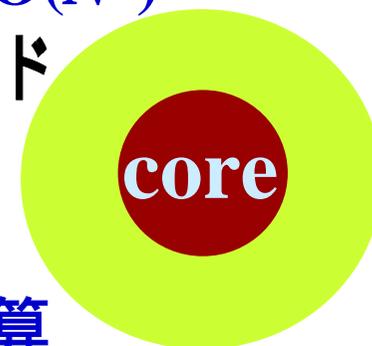
急速な進展？

戦略は何か？ II

強相関効果の取込みそのものは、見通しが見えつつある
計算速度、 $O(N)$ の見通しはまだ見えない； $O(N^3)$
 $O(N)$ とのハイブリッド

(3) 強相関計算科学のゴール：

強相関効果の取り込みと**構造最適化**
構造最適化を行ないながら、電子相関効果の計算



京速

まとめ：展望と期待

ダウンフォールディングにより有効模型へ
有効模型の高精度での解法開発は
より複雑な系の解法の開発最前線、牽引車の役割

汎用性の高い京速

戦国

強相関物質の計算科学:

遷移金属化合物、有機化合物、ナノ物質
構造最適化を含む平衡状態

多相の競合、階層性の高精度計算、新物質相予測
未知現象機構解明、「デザイン」

実時間シミュレーション、ダイナミクス
励起、非平衡

大規模系、より複雑な系