

次世代スーパーコンピュータに向けて

寺倉清之

北大 創成科学共同研究機構

産総研 研究顧問

筑波大シンポジウム

2006/04/04

ナノバイオ分野

- これを解けばよいというような究極の問題がある訳ではない。
- それでも、どうしても大規模計算を必用とする基盤的課題はある。例えば、電子相関、核の量子効果、大規模系の位相空間探索
- それらの基盤的課題の上に、いくつかの山とその広い裾野からなる全体を視野に入れたプロジェクト運営が必要。

究極的課題はない。→ やることはいくらでもある。

プロジェクトの階層的構成

出口

グランドチャレンジ
多重スケール、多重物理

融合・連成

1

単一スケール
単一物理

2

単一スケール
単一物理

...

N

単一スケール
単一物理

新原理・新概念の探索
要素技術の開発・改良
基盤ライブラリーの性能向上

第一原理分子動力学法

- 効率的計算
- 全エネルギーと力の計算に基づく、理論による構造決定
- 分子動力学計算による有限温度、動的計算

Total energy and force workshop (ICTP, Trieste)

密度汎関数法
擬ポテンシャル法
Car-Parrinello法

第一原理MDにおける要素技術向上： 限界を広げる

サイズ

オーダーN法
計算負荷がシステム
サイズに比例
ハイブリッド
本質的な部分だけを
量子力学的に
超並列計算

粗視化

マルチスケール

時間

位相空間探索
拡張アンサンブル
Blue moon
metadynamics

最適化 逆問題 設計

精度

電子相関
強相関電子
遷移金属酸化物
van der Waals
有機分子間
有機分子と金属
電子励起
光学応答
反応制御

軽い核の量子効果

オーダーN法

- 計算量が扱う系のサイズに比例するような計算手法（従来は、系のサイズの3乗に比例）

CONQUEST (UK London, 物・材機構)

SIESTA (Spain)

ONETEP (UK Cavendish)

FMO (産総研)

OpenMX (産総研)

星氏(東大工学部)

FEMTECK(産総研): 開発中

など

第一原理計算としては10万原子くらいが扱えれば十分:

$(10 \text{ nm})^3 \rightarrow 30^3 \approx 3 \text{ 万原子}$, $(100 \text{ nm})^2 \rightarrow (300)^2 \approx 9 \text{ 万原子}$

強相関電子系の第一原理計算

- 強相関の理論は伝統的に日本が強い分野
- 従来はモデル(Hubbard model, Anderson model など)を用いた理論が主流
- 最近、強相関物質の第一原理計算手法の開発が盛ん

経路積分繰込み群法: 今田(東大工)

trans-correlated method: 常行(東大理)

DMFT+GW: Aryasetiawan(産総研)

電子ガスの理論の拡張: 高田(東大物性研)

量子モンテカルロ: 前園(物・材機構)

磁性・軌道秩序・格子歪・伝導の強い相関

→ 全エネルギーと力の計算まで可能に

構造を決める計算は数十倍以上の計算時間が必要

電子状態計算の要素技術

- 大規模計算は種々の手法が開発され、実用に耐えるようになってきた。
 - 今後の重要課題としては
 - 強相関電子系:「全エネルギーと力」を可能にする
 - 弱い相互作用(van der Waals)
 - 基板まで含めて扱うには、現在の量子化学的手法だけでは不十分
 - 電子励起:特に励起状態でのダイナミクス
- 今後の課題
物理量の計算

軽原子の量子効果

- 熱平衡

経路積分分子動力学

- 多体系での動力学

経路積分セントロイド分子動力学

量子効果の例

SrTiO_3 は常誘電体。これは酸素の量子効果による。さもないと、強誘電体になる。

Hの量子効果？

生物はHをDで置換しては生きられない。

通常のMDの数十倍の計算量

新原理・概念の開拓

スピントロニクス、センサー

ベリー位相エンジニアリング(永長)

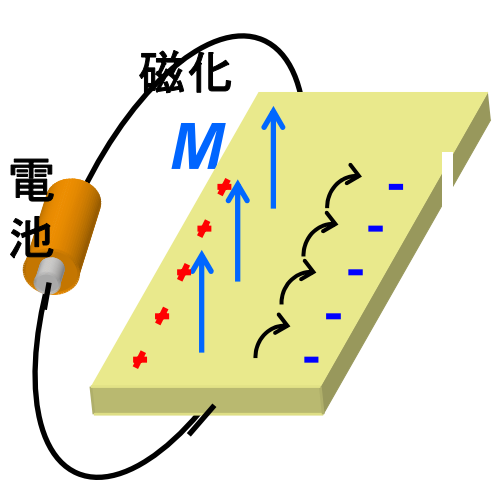
トポロジカル電流

交差相関(十倉)

multiferroics

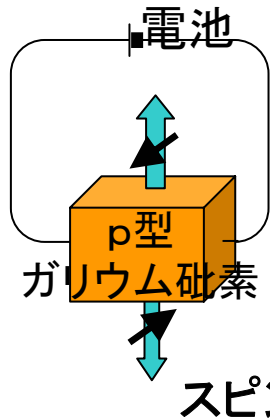
magnetoelectric effect

永長

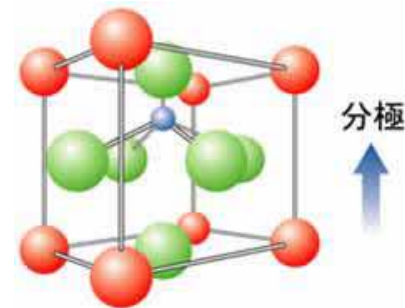


磁気伝導
 異常ホール効果

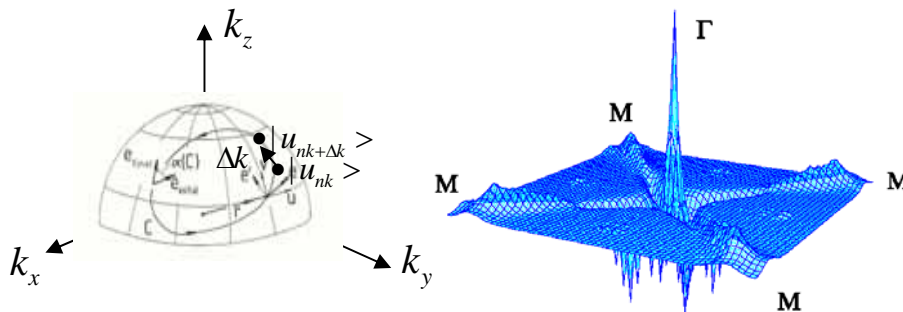
Z. Fang et al.
 Science 302, 92 (2003)



スピントロニクス
 スピンホール効果



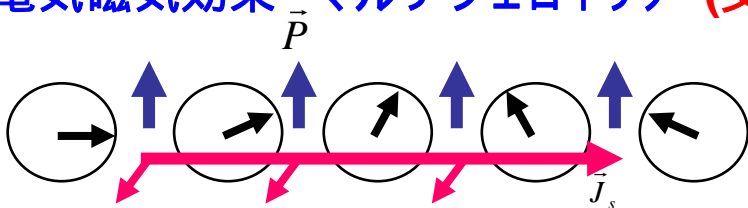
強誘電性 FRAM



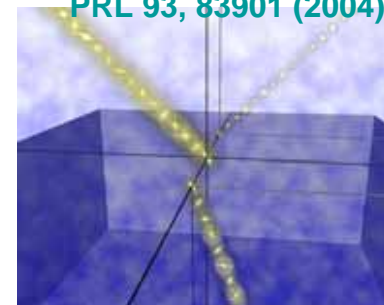
バンド状態の微分幾何学的構造

H. Katsura, N. Nagaosa and A. V. Balatsky
 PRL 95, 57205 (2005)

電気磁気効果 マルチフェロイック (交差相関)



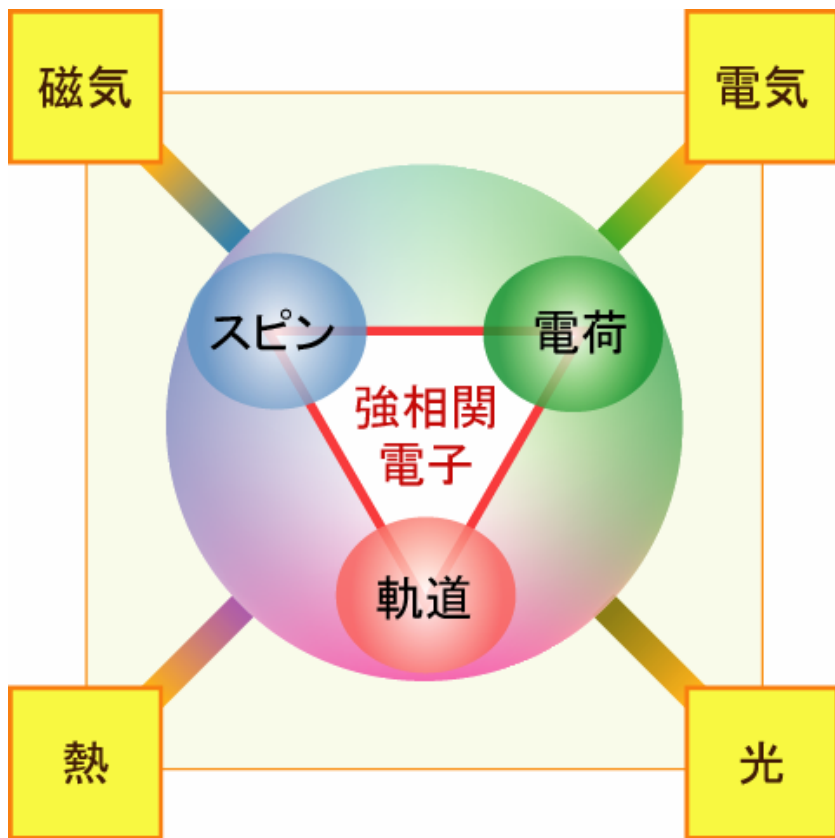
M. Onoda, S. Murakami and N. Nagaosa
 PRL 93, 83901 (2004)



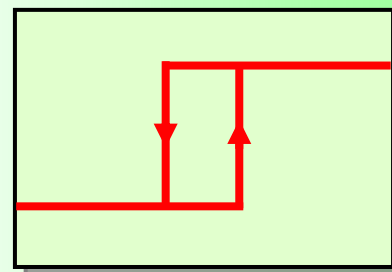
フォトニック結晶 光のホール効果

電気－磁気－光－熱の各物性・機能を相互に結びつける物質相を開拓し、革新的・統合的な電子技術を創出する。

交差相関の例

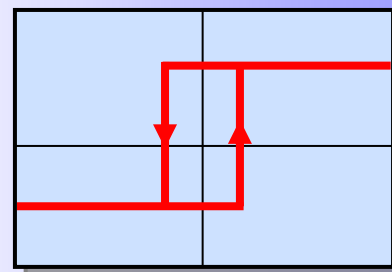


伝導・分極



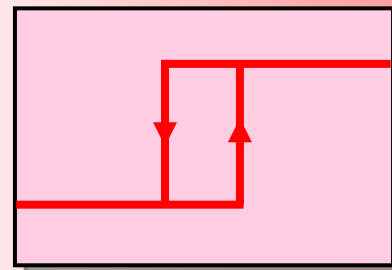
磁場, 光

磁化



電場, 電流

光応答



熱, 磁場

強相関電子の多自由度が交差相関の担体

新原理からデバイスへ

- 新しい物理現象は、今のところ主としてバルクの物質について調べられている。
- 薄膜化はデバイス化に必須であり、研究が進行中。
膜とバルクが違う可能性（例： BiFeO_3 ）

膜厚依存性、表面、界面の研究が重要。
不整合磁気秩序によるME効果の増大。



大規模な計算が必要

- グランドチャレンジ: マルチフィジックス、
マルチスケール

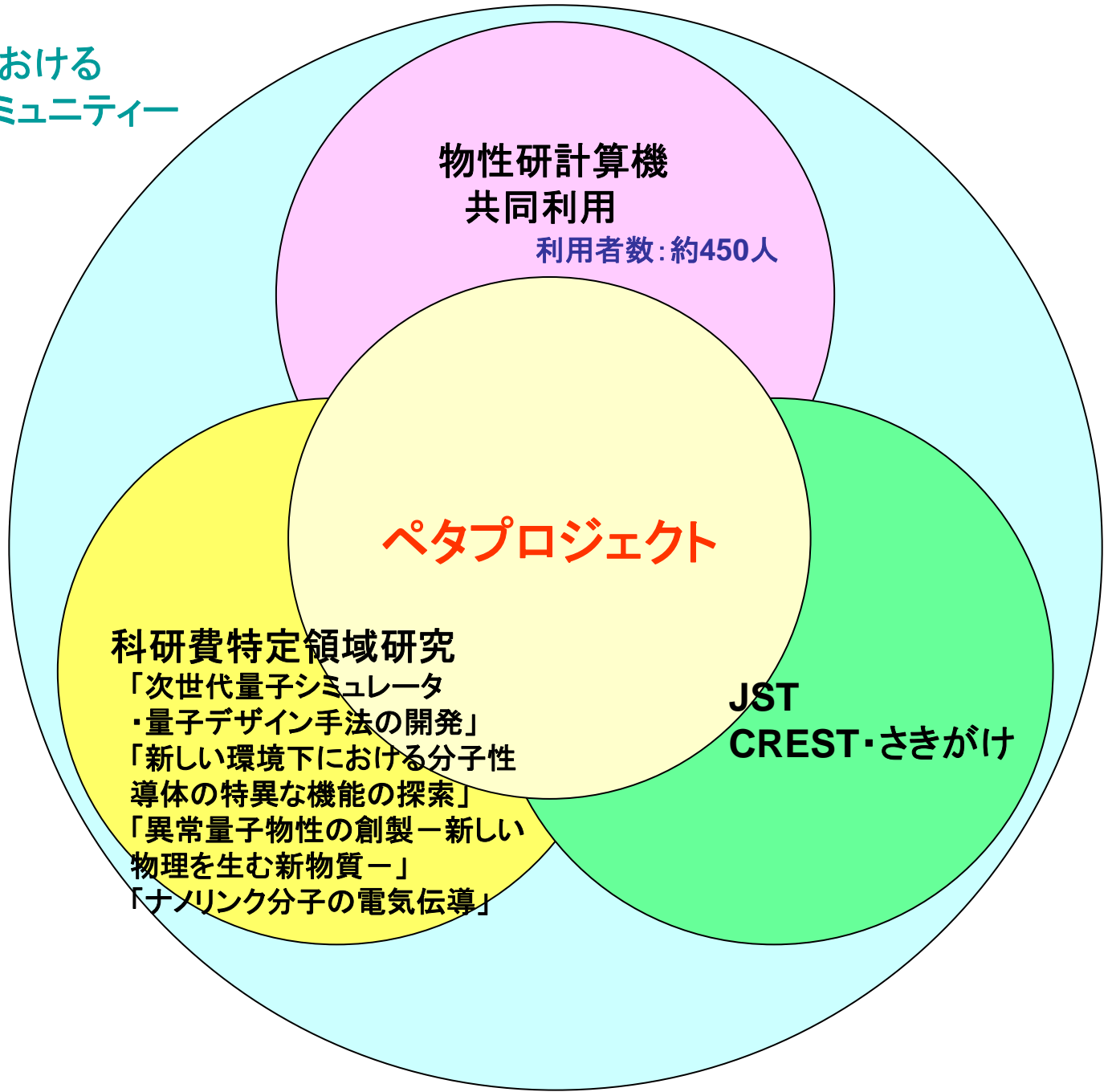
高度な要素技術
要素技術の接続

- 新原理、新現象
次のグランドチャレンジの芽
芽の成長を促進させることが重要

オープンなコミュニティの形成

- グランドチャレンジを継続的に遂行するには、それを支える基盤的研究成果を継続的に注ぎ込まなければならない。
- このためには、オープンなコミュニティとプロジェクトの連携が保障されていることが必要。
- オープンでありかつ組織的なコミュニティの形成。

物性科学における
計算科学コミュニティ



例：イギリスでの組織

Collaborative Computational Projects : <http://www.ccp.ac.uk/>

The Collaborative Computational Projects (CCPs), assist universities in developing, maintaining and distributing computer programs and promoting the best computational methods. They are funded by the UK's EPSRC, PPARC and BBSRC Research Councils. Each focuses on a specific area of research.

[CCP1](#) - The electronic structure of molecules

[CCP2](#) - Continuum states of atoms and molecules

[CCP3](#) - Simulation of physical and electronic properties of surfaces and interfaces

[CCP4](#) - Protein crystallography

[CCP5](#) - Computer simulation of condensed phases

[CCP6](#) - Molecular quantum dynamics

[CCP9](#) - Computational studies of the electronic structure of solids

[CCP11](#) - Biosequence and structure analysis

[CCP12](#) - High Performance Computing in Engineering

[CCP13](#) - Fibre and polymer diffraction

[CCP14](#) - Powder and small molecule single crystal diffraction

[CCPN](#) - A collaborative computing project for the NMR community

最近の身の回りの研究活動から

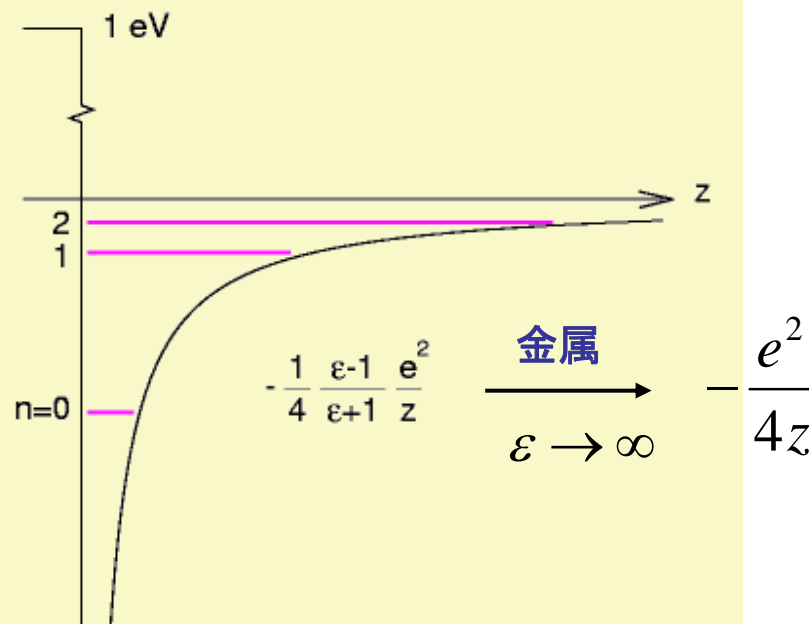
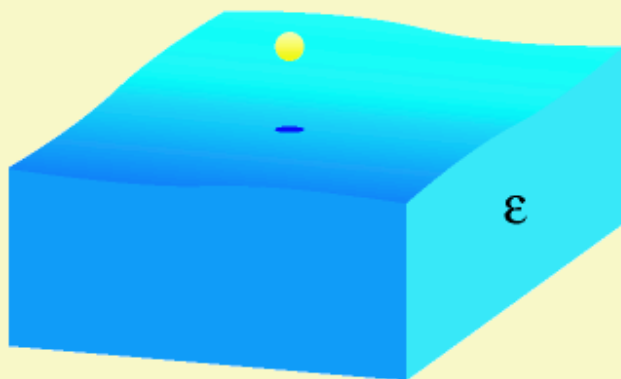
- **遷移金属酸化物における磁性・軌道・格子歪**
(Fang, Solovyev, 永長、十倉ら)
軌道の自由度、スピンの自由度
multiferroic
トポロジカルカレント
強相関電子
新原理開拓
- **有機固体** (石橋、石井ら)
単一成分金属
有機強誘電体: 水素結合
強相関電子・強電子格子結合
van der Waals
構造的複雑さ
- **Si(001)面上のGeの量子ドット** (橋本、森川、藤川、桜井ら)
理論的構造決定:
位相空間探索
大規模計算
- **溶液中での化学反応**
超臨界水での ϵ -カプロラクタム
(ナイロンの原料)の生成
(Boero, Parrinello, 池庄司ら)
RNAの自己切断機能
(Boero, 舘野、押山ら)
反応経路探索(位相空間探索)
空間軸、時間軸の拡大
プロトンの量子効果

金属表面

鏡像ポテンシャル

河野公俊氏による

He の表面の電子



LDA, GGAでは鏡像ポテンシャル
が記述できない。