平成９年度開始未来開拓学術研究推進事業研究プロジェクト
理工領域「計算科学」研究推進委員会

Material Simulation for Future Electronics

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

プロジェクトリーダー　今　田　正　俊
東京大学　物性研究所　教授

図１　計算科学セミナーの風景

１．研究の目的

物質科学におけるシミュレーションは、10の23乗というような巨大な数の原子､電子が互いに相互作用して生まれる多彩な相や現象を解き明かすことをめざしている。原子や電子の多体問題の量子力学に基づくシミュレーションは､計算科学におけるグランドチャレンジの一つである。このプロジェクトでは､多体相互作用と量子力学の織りなす多様な現象のための効率的な計算手法の開発と応用を行ない､大規模量子シミュレーションを実施する。特に電子間の強いクーロン相互作用による多体効果､極限条件下の物性､また結晶格子の歪みや電荷､スピン､軌道などが絡まったり､乱雑さがあるような複雑な系など､従来の理論手法では困難の大きい問題の効率的なシミュレーション法の開発と応用に多角的に取り組む。第一原理電子状態計算法と呼ばれる手法と理論模型での多体相関効果を正面から取り扱う量子シミュレーション法を出発点として､より複雑な物質のより正確でより深いレベルでの物性予測に役立つ手法開発と大規模応用を進める。物質科学シミュレーション法の研究開発と応用によって､強相関電子系を含む物性物理学上の困難な基礎的問題の解明と､新たなエレクトロニクス産業基盤へとつながり得る物質開発､応用の推進という､二つの問題に貢献することを目指している。

図２　研究討論風景

2．研究の内容

大別すると以下のプロジェクトの下に研究を進めている。

（1）強相関電子系の大規模量子シミュレーション
（2）強相関電子系の量子モンテカルロ法開発
（3）第一原理計算法の強相関電子系への拡張
（4）強相関電子系におけるランダムネス

電子の強相関効果に対する研究開発は中心課題の一つである。最近、物質科学における興味深い新現象の多くが、電子系の強相関領域で見い出されている。銅酸化物高温超伝導、量子ホール現象、巨大磁気抵抗、有機・分子磁性、超伝導など、次世代のエレクトロニクスを担う可能性のある現象では電子の多体相関が本質的な役割を果たしている。単純な理論模型に対して強相関効果を正面から取り入れる計算手法が少しずつ進展してきていることを踏まえ、このプロジェクトで、より系統的な応用と強力な手法の開発を進めている。特に電子の励起状態に強い運動量依存性とゆらぎが生み出されるプロセスは従来の理論での取り扱いが難しいが、これを扱う計算を発展させ、大規模シミュレーションを進めている。

また遷移金属酸化物などの現実の強相関電子系や、自由度が複雑に絡んだ系に適した大規模計算手法の開発、応用も行なっている。まず第一原理電子状態計算法を拡張して電子相関効果を取り入れるアルゴリズムの開発に力を注いでおり、従来広く使われてきた局所密度近似と呼ばれる近似の枠を超えて、短距離相関やゆらぎを取り入れうる手法の開発を多角的に進めている。具体的にはGW法と呼ばれる自己エネルギー補正法の拡張や、最近有効性の明らかとなってきた最適化された交換ポテンシャル法の拡張などを進めている。これらの開発を通じて、与えられた物質の相図や一電子励起とバンド構造を予測、再現しうるアルゴリズムを目指している。一方多体相関を正面から取り扱う研究では、簡単化された理論模型から出発することが多いため、現実の定量的物性予測を可能にすることが課題となっている。現実の複雑な要素を取り込んでゆくために、まず、電荷、スピン、軌道、格子自由度が複雑に絡みあったときの計算アルゴリズムの開発応用を進めている。また最終的には第一原理電子状態計算法の拡張と理論模型計算の拡張という、2つのアプローチを融合しうる方向も探っている。この目的のために種々の量子モンテカルロ法の開発に着手している。より信頼性の高い変分モンテカルロ法の開発や、連続空間での拡散モンテカルロ法の拡張などが課題として挙げられる。

現実の物性予測や応用開発のためには、物質のもつ実に多様な側面をシミュレートする必要がある。今までの手法開発のなかで遅れているものとして、系の乱れ、乱雑さの効果の数値解析法の開発がある。特に量子効果と乱雑さが絡んでいるような困難な問題を取り扱う数値アルゴリズムの開発は物性予測にとっても重要であり、スピン自由度のランダムネスに焦点を当てて開発応用を進めている。量子スピン系において最近開発されたクラスターアルゴリズムなどの大規模数値計算手法を応用して、典型例での手法の有効性の検証を進めている。また電子だけでなく軽い原子などの量子効果を取り入れられる第一原理計算手法の開発なども今までほとんど手のつけられていない課題でありこれに取り組んでいる。

このような総合的なアルゴリズム開発と大規模な応用を通じて物質の結晶構造や歪み、磁気的電気的励起の構造の再現などの物性予測をめざす研究を推進している。

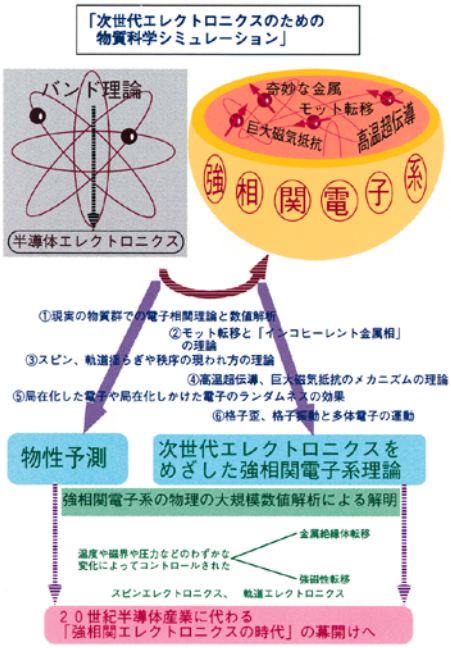

図３　研究のねらいと流れのイメージ

図４　クラスターワークステーションの前で

3．研究の体制

期　　間：1997 年 8 月～ 2002 年 3 月
構　　成：プロジェクトリーダー：今田正俊（東京大学物性研究所教授）
コアメンバー：3 名、研究協力者：18 名（内ポスドク 4 名）
実施場所：東京大学物性研究所　港区六本木 7ー 22ー 1