

「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」

平成16年度採択研究代表者

藤原 毅夫

(東京大学大学院工学系研究科 教授)

「複合手法を用いた電子構造計算技術の開発」

1. 研究実施の概要

第一原理電子構造シミュレーション分野で現在最も重要な課題は、より大きな系についての計算、基底状態だけでなく広く励起状態の取り扱い、強い電子間相互作用により生じる電荷およびスピンの揺らぎの取り扱い、の3つである。本研究プロジェクトでは、(a) 10^6 原子あるいはそれ以上の原子からなるナノ・モデル系に適用できる第一原理分子動力学シミュレーション技術の開発、(b) 強相関電子系に対する第一原理電子構造計算手法の開発、を行い、上記の課題に答える。

(a)に関しては以下のことを行った。(a-1) 複数の数的手法(ワニエ表示密度行列法、クリロフ部分空間対角化法、シフトCOCG法)およびそれらを同時に用いる複合化(ハイブリッド)手法の構築と、それらを用いた超大型 $10^4 \sim 10^7$ 原子系量子力学分子動力学シミュレーションのテスト、(a-2) (a-1)の手法を用いた半導体Siの亀裂伝播、表面再構成、(a-3) 非平衡グリーン関数を用いた有限電位差での電気伝導度の計算プログラム作成、(a-4) 生体高分子の大規模な密度汎関数法を実現するために少ない基底関数で高い収束特性を持った新しい変分最適化基底を開発、(a-5) コア領域サイズを最適化した一般化分割統治法を新たに開発、(a-6) 高精度・高効率数値積分のためのプロジェクト展開法の開発、(a-7) 単分子磁性体Mn₄, Mn₁₂の電子構造と磁気構造。

(b)に関しては以下のことを行った。(b-1) 軌道縮退した系でのDMFT-IPTの開発、(b-2) (b-1)を用いた単純立方格子と体心立方格子における e_g および t_{2g} 軌道の振る舞いの比較、(b-3) LDA+U法で求めた波動関数から出発したGW近似の計算とV₂O₃への応用、(b-4) 並列化GW近似プログラムの作成と反強磁性絶縁体LaMnO₃系のGW近似計算と遮蔽されたクーロン相互作用の計算、(b-5) エントロピー起動によるCeの α - γ 転移、(b-6) 多体ハミルトニアンからモデルハミルトニアンへのマッピング。

今後は(a)については、(a-1)の手法を金属系に応用するとともに、(a-4)の生体高分子系への応用を進める。(b)に関しては、一般的系でのDMFT-ITP、GW近似などを中心に研究を進め、遷移金属化合物に対する道筋を開いていく。

2. 研究実施体制

東大グループ

- ① 研究分担グループ長：藤原毅夫（東京大学大学院工学系研究科教授）
- ② 研究項目：②-1. 超大規模系（ $10^4 \sim 10^7$ 原子系）の量子力学シミュレーション
②-2. 動的平均場近似を用いた第一原理電子構造計算手法の開発

産総研グループ

- ① 研究分担グループ長：ARYASETIAWAN Ferdi（産業技術総合研究所、計算科学部門 研究員）
- ② 研究項目：②-1. LDAに基づく大規模系（ $10^2 \sim 10^4$ 原子系）の量子力学シミュレーション
②-2. DMFT+GW法の開発と応用

3. 主な研究成果の発表

(1) 論文発表

- Aryasetiawan F, Imada M, Georges A, Kotliar G, Biermann, S, Lichtenstein AI,, "Frequency-dependent local interactions and low-energy effective models from electronic structure calculations", Phys. Rev. B vol.70, 195104 (2004).
- M. J. Han, T. Ozaki, and J. Yu, "Electronic structure, magnetic interactions, and the role of ligands in Mn_n (n = 4, 12) single-molecule magnets", Phys. Rev. B vol.70, 184421 (2004).
- T. Ozaki and H. Kino, "Variational optimized basis orbitals for biological molecules", J. Chem. Phys. Vol.121, 10879 (2004).
- 小谷岳生, Aryasetiawan F, "第一原理計算におけるGW近似の適用とQPscGW理論", 固体物理<計算機ナノマテリアルデザイン>特集号vol. 39, 731-741 (2004).
- 藤原毅夫, "第一原理計算における動的平均場近似 (DMFT) の展開と応用", 固体物理<計算機ナノマテリアルデザイン>特集号vol. 39, 715-721 (2004).
- 藤原毅夫, "多体電子論に基づくLDAを超える第一原理電子構造計算方法の基礎と開発", 固体物理<計算機ナノマテリアルデザイン>特集号vol. 39, 707-708 (2004).
- Y. Endoh, H. Hiraka, Y. Tomioka, Y. Tokura, N. Nagaosa, and T. Fujiwara, "Orbital Nature of Ferromagnetic Magnons in Manganites", Phys. Rev. Lett. vol.94, 017206 (2005).
- Y. Ishii and T. Fujiwara, "Ab initio studies on chemical bonding in Cd- and Zn-quasicrystals", J. Non-Cryst. Solids, vol.334, 336-341 (2004).
- R. Takayama, T. Hoshi, T. Fujiwara, "Krylov subspace method for molecular dynamics simulation based on large-scale electronic structure theory", J. Phys. Soc. Jpn, vol.73, pp.1519-1524 (2004).