

量子物質シミュレーションの将来像



山地 洋平

物質・材料研究機構

ナノアークテクトニクス材料研究センター

謝辞:

新物質・エネルギーサブグループ

福島鉄也博士 (AIST)

山田俊介博士 (QST)

乙部智仁博士 (QST)

矢花一浩教授 (筑波大学)

Dr. William Dawson (理研R-CCS)

協力: Jean-Baptiste Morée (理研CEMS), Rico Pohle (東北大金研),

Ruqing Xu (東大→NVIDIA), 河村光晶 (理研CMES), 福田将大 (東大物性研),

川嶋英佑 (理研R-CCS), 三上 和徳 (理研R-CCS), 中嶋隆人 (理研R-CCS)

目次

1. 新物質・エネルギーサブグループ概要

2. 量子物質シミュレーション

2-1. 第一原理計算の展開

2-2. 量子もつれを捉える機械学習波動関数

2-3. 結晶構造における多体・温度効果

3. 将来像: 2030年「ポスト富岳」で目指す課題

1. 新物質・エネルギーサブグループ概要

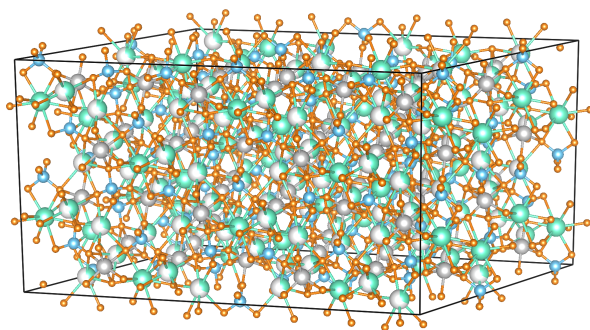
多数の電子やイオンの量子力学的な振る舞い

- ・ 有効的な 1 電子問題に還元する
- ・ 電子状態から得られた力場に従う
原子/イオン集団の時間発展に還元する
- ・ 多体電子・イオンを陽に扱う

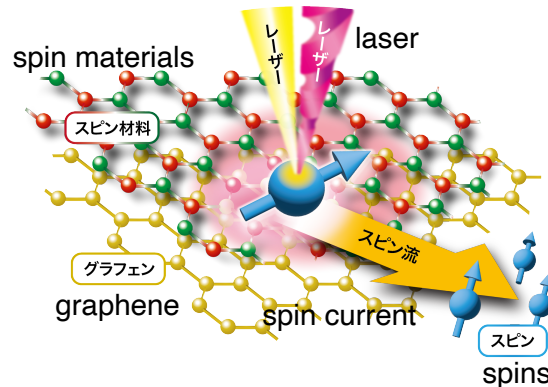


原子・分子、
結晶・非晶質固体、
界面の性質を予測

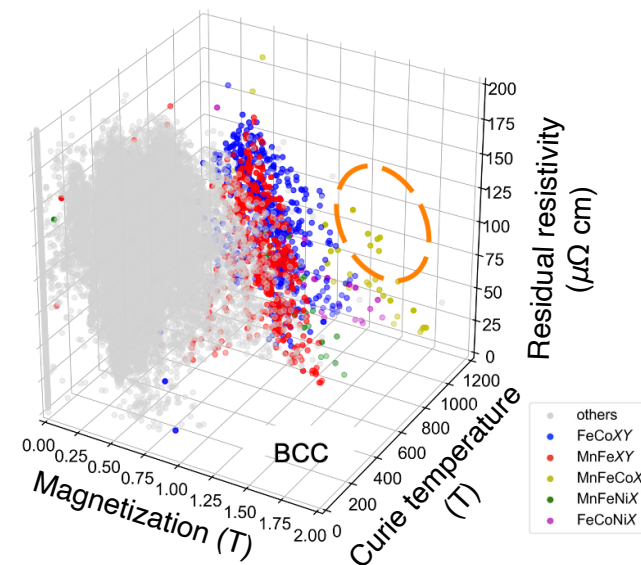
固体電解質
シミュレーションによる
全固体電池の性能劣化予測



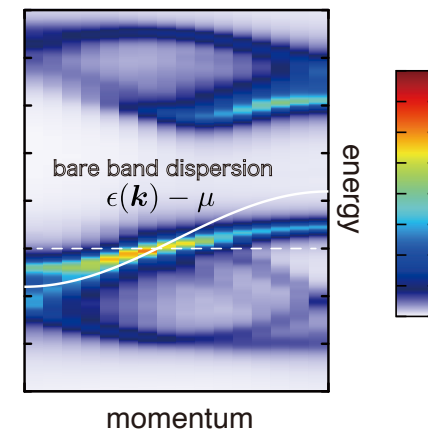
トポロジカル物質
シミュレーションによる
新量子デバイス設計



不規則系磁性材料の
大規模データベースによる
新永久磁石材料探索



量子物質の分光学
シミュレーションによる
量子もつれ構造解析



2. 量子物質シミュレーション

何を知りたいのか？

物質@絶対零度: 電子とイオンが量子力学に従ってとる低エネルギー配置を出発点に
(古典クーロン相互作用だけでは記述できない)

原子イオンの運動

-分子動力学

古典 $O(10^7)$ 原子
第一原理 $O(10^3)$ 原子

電子の運動

-密度汎関数理論(DFT)に基づく
近似理論・多体摂動論

半導体ナノスケール構造
 $O(10^5)$ 原子
分子系 $O(10^6)$ 原子

結晶構造予測

イオン伝導

熱伝導

BCS超伝導転移温度

スピン伝導

半導体バンドギャップ・界面電子状態

太陽光発電効率

高温超伝導

量子もつれ

-変分波動関数理論

高温超伝導体
 $O(10^3)$ 電子系

固体結晶向け

VASP, Wien2k, QuantumEspressoなど
(国内でもOpenMX, SALMON, RSDFTなど多数)

2-1. 第一原理計算の展開

標準的な密度汎関数理論に基づく第一原理計算

Hohenberg-Kohn, Kohn-Sham

$$E = K + V_{\text{ion}}[\rho] + V_{\text{H}}[\rho] + E_{\text{xc}}[\rho]$$

$K \leftarrow$ 1電子の固有値問題 計算コスト $O(N^3)$

$E_{\text{xc}}[\rho] \leftarrow E = E(r_s)$ 一様電子ガスQMC 密度 $n = \left(\frac{4\pi}{3} r_s^3 a_B^3 \right)^{-1}$

局所/準局所密度近似 Perdew and Zunger, Phys. Rev. B 23, 5048 (1981)

機械学習力場

$O(10^2)$ 原子系の第一原理計算で
学習した力場による分子動力学・構造最適化計算

第一原理計算の高速化・大規模化

機械学習運動エネルギー密度汎関数 $K[\rho]$

訓練データ: 標準的なDFT計算結果

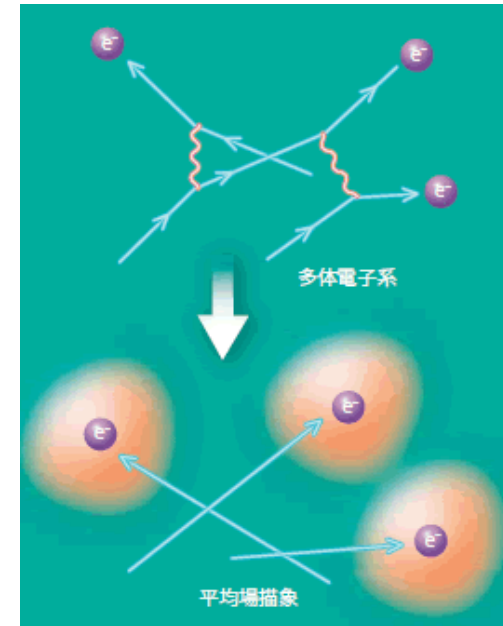
F. Imoto, M. Imada, and A. Oshiyama,
Phys. Rev. Research 3, 033198 (2021)

第一原理計算の高精度化

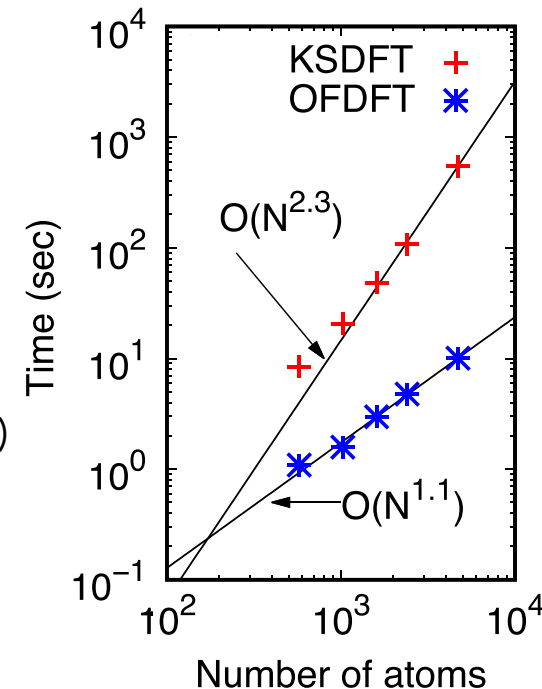
機械学習交換相関エネルギー密度汎関数 $E_{\text{xc}}[\rho]$

訓練データ: 非一様多体電子系の計算結果

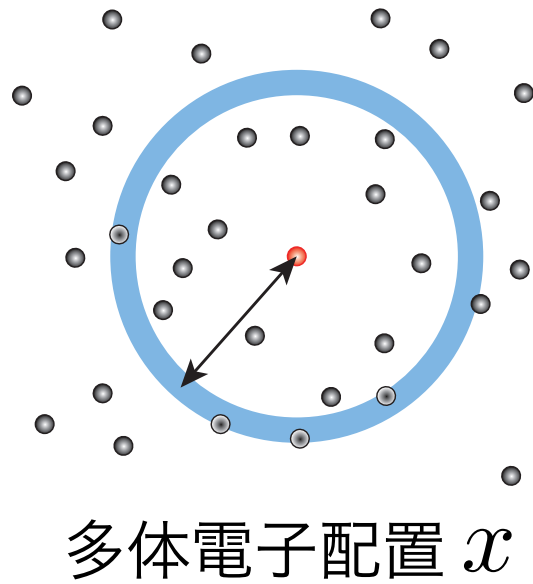
cf.) データベース



1粒子描像



2-2. 量子もつれを捉える機械学習波動関数



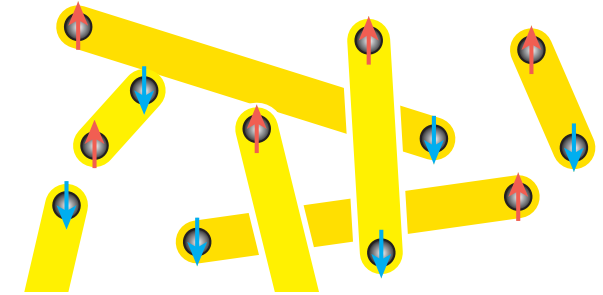
波動関数 $\Phi(x) = |\Phi(x)|e^{+i\varphi(x)}$
 $\leftarrow \mathcal{N}_{\theta_{\text{NN}}}(x) \times \phi_{\theta_{\text{Pf}}}(x)$

機械学習波動関数 × 対積波動関数

コスト関数: エネルギー期待値

[$O(10^3)$ 電子系、変分パラメータ数 $O(10^5)$]

量子もつれ対の重ね合わせ



制限ボルツマン機械

G. Carleo and M. Troyer, Science 355, 602 (2017)

Y. Nomura, *et al.*, Phys. Rev. B 83, 205152 (2017)

Vision Transformer

L. L. Viteritti, R. Rende, and F. Becca,
Phys. Rev. Lett. 130, 236401 (2023)

R. Rende, L. L. Viteritti, L. Bardone, F. Becca, and S. Goldt,
Commun. Phys. 7, 260 (2024)

加速部への適応

-AIライブラリ(PyTorchなど)による実装 (Ruqing Xu, 博士論文, 東京大学)

-Ozaki schemeによる対積波動関数(パフィアン)計算・CG自然勾配法計算

2-3. 結晶構造における多体効果

結晶構造最適化

ダイヤモンド構造Si	DFT計算	実験値
格子定数(Å)	5.37	5.41

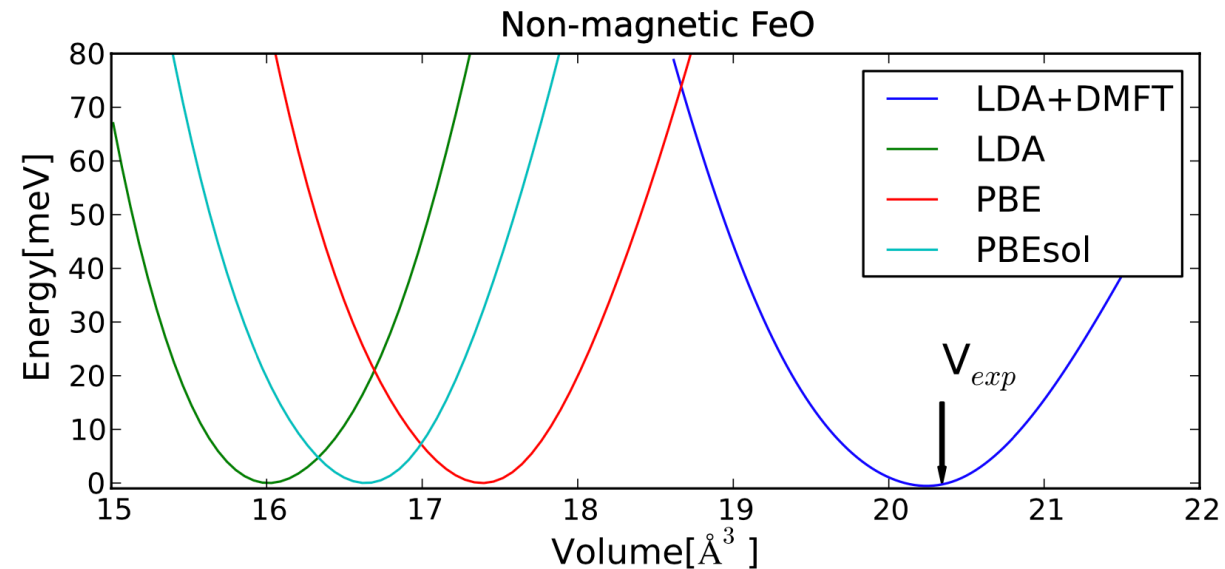
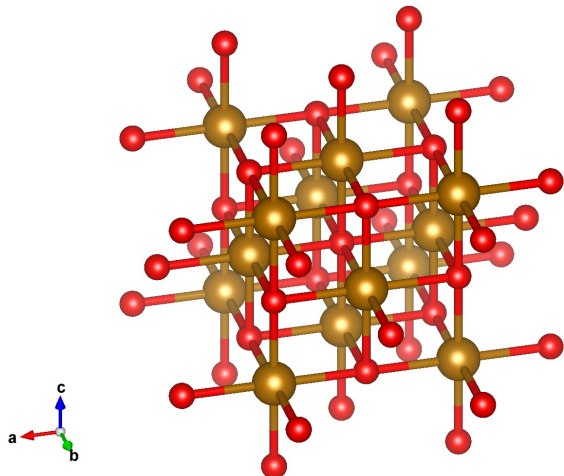
B. Busemeyer, *et al.*, Phys. Rev. B 94, 035108 (2016)

第一原理モンテカルロ法: FeSe

FeSe	DFT-PBE	QMC	実験値@7K
c軸長(Å)	6.1663	5.49(1)	5.479

turboRVB K. Nakano, M. Casula, S. Sorella

DFT+DMFT: FeO



K. Haule and T. Birol, Phys. Rev. Lett. 115, 256402 (2015)

A. Paul and T. Birol, Annu. Rev. Mater. Res. 49, 31 (2019)

2-3. 結晶構造における多体・電子温度効果

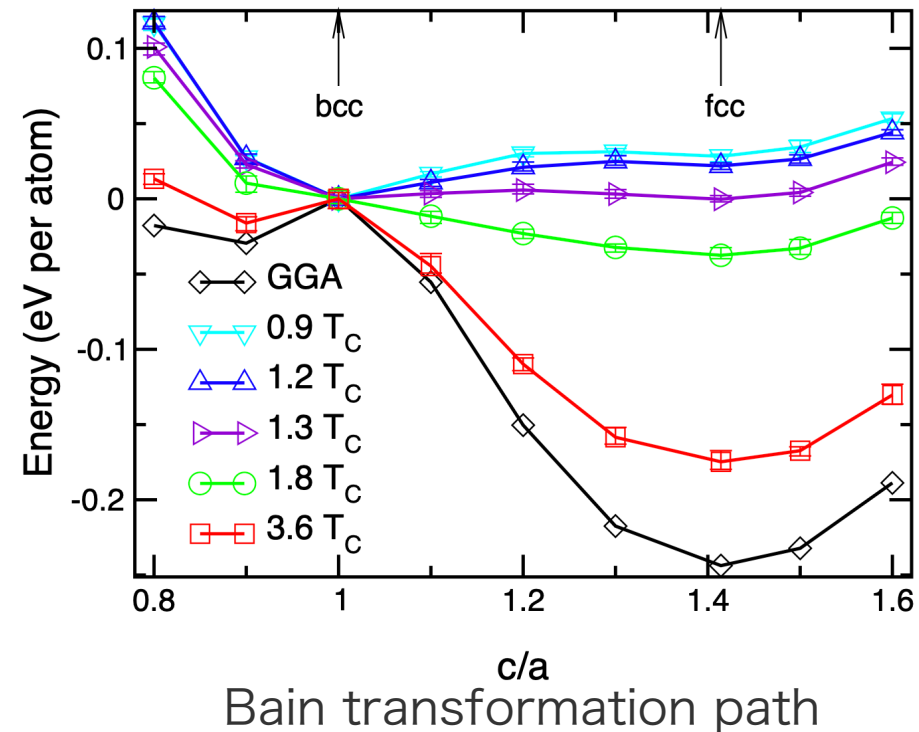
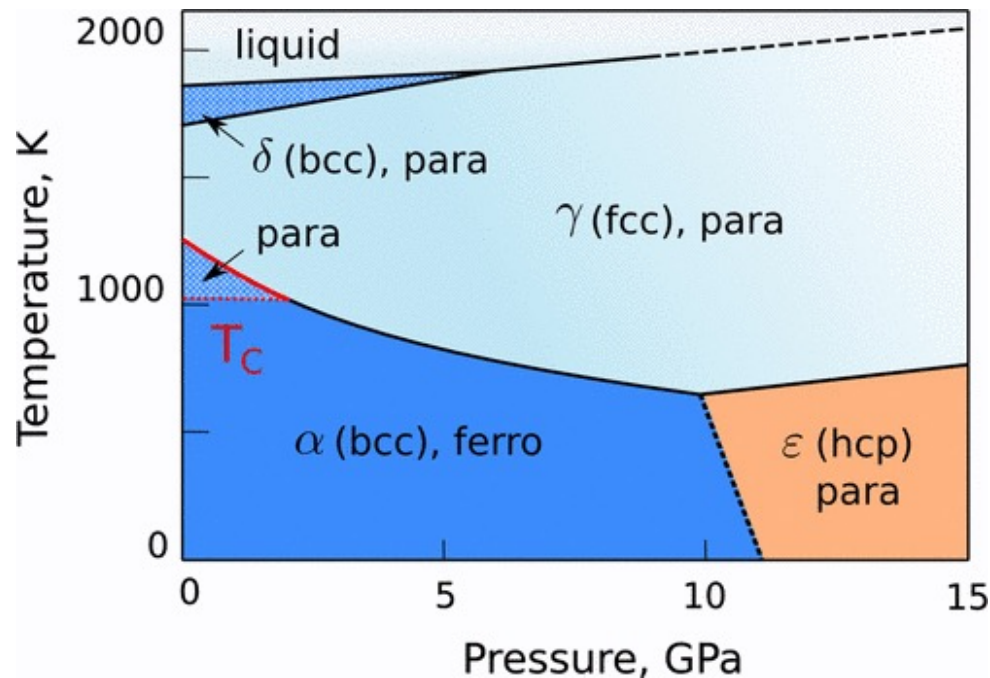
DFT+DMFT

結晶構造最適化 + 電子温度

cf.) 格子振動・格子温度
例えば、Phonon3py, ALAMODE, ...

*Electronic Correlations at
the α (bcc)– γ (fcc) Structural Phase Transition
in Paramagnetic Iron*

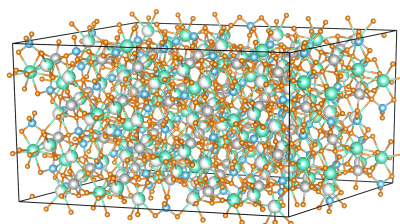
I. Leonov, A. Poteryaev, V. Anisimov, and D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett 106, 106405 (2011).



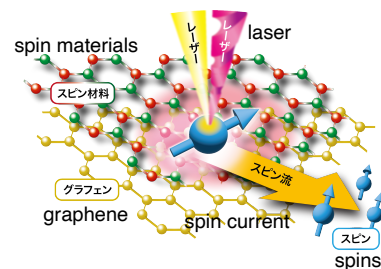
将来像: 2030年「ポスト富岳」で目指す課題

- ・ nmスケールの半導体デバイス・生体分子系の電子物性解明および固体電解質の性能予測
 $O(10^4) - O(10^6)$ 原子系におよぶ規模の第一原理構造最適化・分子動力学
- ・ トポロジカル材料の第一原理非線形電磁応答による新量子デバイス設計
 $O(10^3)$ 原子系を超える規模での電磁場応答ダイナミクス
- ・ 新永久磁石・スピントロニクス材料探索
 $O(10^4) - O(10^6)$ 配置におよぶ不規則系のハイスループット計算・データベース構築
- ・ 高温超伝導体・量子スピン液体の分光スペクトル計算による量子もつれ解析
 $O(10^3)$ におよぶ多体電子系の光電子・中性子散乱・x線散乱スペクトル計算

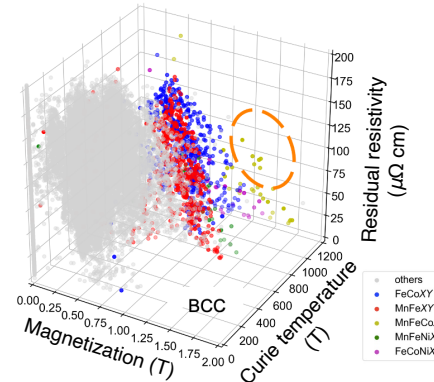
固体電解質
シミュレーションによる
全固体電池の性能劣化予測



トポロジカル物質
シミュレーションによる
新量子デバイス設計



不規則系磁性材料の
大規模データベースによる
新永久磁石材料探索



量子物質の分光学
シミュレーションによる
量子もつれ構造解析

