

IPC 計算機の研究活用例

～ワークステーション利用を中心に～

産業技術科学科 伊藤 伸一

情報処理センター (IPC) を利用した研究活動例として、特にワークステーションを利用した計算機利用について報告する。利用は数値計算が主であるが、データの整理などにも IPC のワークステーション (ews, wsunix) は有効な戦力である。以下、当研究室で行っている利用例を挙げる。

1. 研究対象の背景

当研究室では、固体物理関係の計算や古典統計力学の粒子シミュレーション、それらの表示プログラミングの作成などを研究テーマとしている。これらはいずれも計算機を必要とする。IPC のワークステーション ews や wsunix を利用している。まず、当研究室にて研究題材としていることについて書く。

固体物理のなかでも磁性に関する問題について計算等を行っている。鉄はなぜ磁石になるか、などみじかであるが複雑な説明を必要とする問題である。量子力学からの結果であるが、磁性の起源は電子のもつスピンである Fig1。固体中に電子は、 1cm^3 あたり 10^{23} 個のオーダーで存在しているが、そのうちの一部の電子がある条件のもとで磁性を引き起こす。

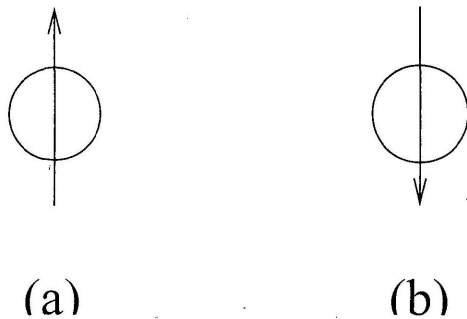


Figure 1. 電子スピンの概念図。丸印が1個の電子を表わす。電子スピンは2つの自由度をもち、上向き (a) と下向き (b) と書き表される。

同じ方向を向いたスピが集まれば、強磁性体となる。スピが同じ方向を向いたり、ばらばらな方向を向いたりするその条件を知るために多くの研究者が問題に取り組んでいる。近年記録媒体として発達している光磁気ディスク (CD) は、記録材料は希土類と遷移金属の合金である。結晶をきれいにしきも薄くつくる技術の進歩により大容

量で安定した書き込みや保存を可能にした。一方基礎研究としては、電子相関と呼ばれる電子の磁性を説明するための基本法則の研究である。

2. 計算例

スピンの担い手は電子であるので、電子の運動を調べなくてはならない。電子の運動は量子力学を用いて考えられる。電子は電荷をもっており、電子と電子の間にはクーロン相互作用が働く。また上述のスピンの間にスピン間相互作用が働く。

2.1. シュレーディンガー方程式を近似して数值的に解く

量子力学の基本方程式はシュレーディンガー方程式である。電子のエネルギーとその存在位置の確率を求める式である。電子1個のエネルギーは、

$$\text{運動エネルギー (KE)} + \text{その電子の感じるポテンシャルエネルギー (PE)} \quad (1)$$

だが、PEには多数個の電子間のクーロン相互作用が含まれているため、種々の近似によってクーロンエネルギーを解く。また、シュレーディンガー方程式の KE には微分が含まれているため、数値微分を行う必要がある。ここで、理論的な面での近似、と数値計算による近似と2つの面で近似が現れる。当研究室で行っている DVX α 分子軌道計算では、この数値微分の方程式を解いて、化合物の磁性の電子状態を調べている。この方法の特徴は、電子の存在を表わす波動関数を数値関数として表わすことである。例えば、Fig2のような電子の存在確率があるとするときそれを (r, P) の組で数值的に表わす。これは、数値計算上は計算量が増えるというデメリットがあるが、考えるうえで扱いやすい。また良く知られた磁性物質である SmCo のエネルギー図を Fig3 に示す。磁性を担う 4f 電子をみると、上向きスピンをもった電子と下向きスピンを持って電子はエネルギーが異なっている。この差が磁性になって現れる。(1) には数値微分だけでなく、数値積分も含まれている。Fig2 に示したような波動関数による期待値として、KE、PE を数値積分する。その際に、波動関数を一度ディスク上のファイルに保存しておく。(Fig4) 計算以外の時間をとられることになり、計算効率としては

下がるが、このような大量のデータはメモリ保存ができない。これを解決するには専用計算機をつくることがあげられる。メーカの研究所などではすでに試みられている。

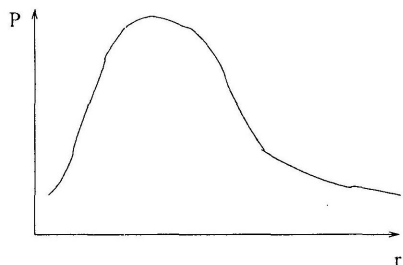


Figure 2. 電子の存在確率を表す数値データ。縦軸が存在確率を横軸が原子核からの距離を表す。ある物質について分子軌道方程式を解いた結果、このような波動関数が得られ電子の分布、エネルギーなどが数値データとして得られる。

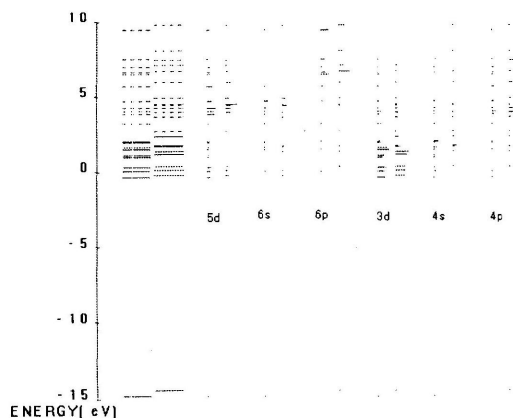


Figure 3. SmCo の電子エネルギー図。左から3、4番目の4f と呼ばれる電子が磁性を担っている。

2.2. 強いクーロン相互作用の計算

前節のシュレーディンガー方程式を数値積分して波動関数を求める方法は、クーロン相互作用に近似(平均場近似)をした。しかし、磁性では強いクーロン相互作用が本質的である場合が多い。アンダーソン(P.W.Anderson)が提案したアンダーソンモデルは、強相関電子系の基本をあらわした。

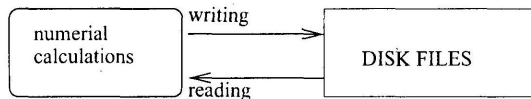


Figure 4. 数値微分、積分とディスク上のファイルへの読み書き。

電子系のエネルギー = ある原子に局在している電子の運動エネルギー(LK) + ある原子に局在している電子のクーロンエネルギー(LC) + 固体中を動き回っている電子の運動エネルギー(CK) + 固体中を動き回っている電子のクーロンエネルギー(CC) + 局在電子と動き回っている電子間の移り変わりのエネルギー(CL) (2)

これらは図で表わすと Fig5 のようになる。

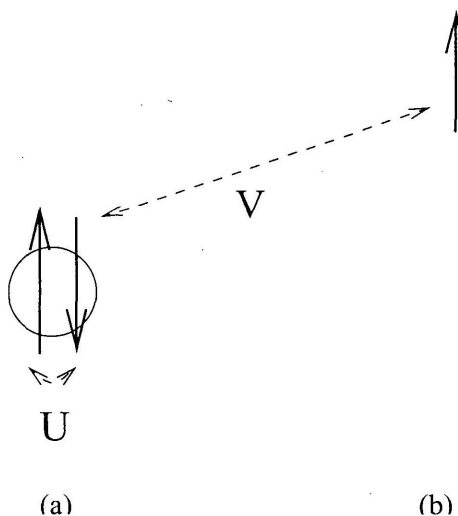


Figure 5. アンダーソンモデルの電子間相互作用。(a) は原子上の2電子間にクーロン斥力Uがはたらき、(b)は動いている電子が局在電子と相互作用Vを感じている様子。

(2) による電子のエネルギーとその状態を調べることで磁性を明らかにしようとする。摂動法とよばれる方法では、UにくらべてVは非常に小さいとして扱う。この方法では Fig5 の (a) 電子と (b) 電子の相互作用過程でのエネルギーを計算し、強磁性が安定であるか否かなどを求める。(b) の↑(上向きスピンを持った)電子が(a)と相互作用して、(b)の↓(下向きスピンを持った)電子となる、など複数の過程がありえる。始状態をたて終状態をよこにとるとそれらは行列要素であたえられる。(Fig6)

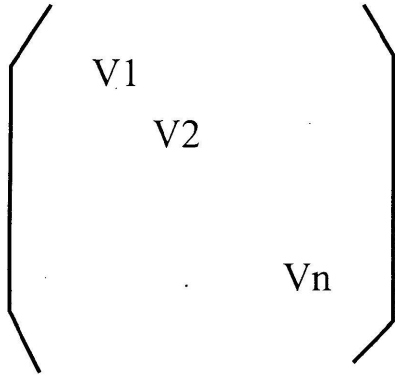


Figure 6. 電子間の相互作用を計算し行列要素の形にする。

解析的計算をすすめると行列要素がえられるので、それを対角化して固有値を求める。ワークステーション EWS には、数値計算ライブラリー (SSLII) が搭載されている。行列の固有値、固有ベクトルも計算できる。詳しくは

man ssl2

と入力してオンラインマニュアルを見ることができる。これは FUJITSU フォートランの関数ライブラリであるので、フォートラン言語でコンパイルする。コンパイラはディレクトリ

/opt/FSUNf90/bin/frt

に存在する。ついでに、GNU フォートラン g77 は

/opt/NSUG/bin/g77

に存在する。各自のホームディレクトリの .cshrc というファイルに

set path=(/opt/FSUNf90/bin /opt/NSUG/bin) と設定して使用できる。このようにして、得られた結果は非磁性元素に少量の磁性元素を混ぜた合金で (Mn 添加 Cu) での磁性を説明することができる。現在考察しているのは、磁性元素が少量でない場合である。この場合でもアンダーソンモデルのような伝導電子と局在電子の相互作用は有効であろうが、それ以外の磁性原子どうしの相互作用がでてくると考えられる。

このように計算が複雑になると計算機の性能も重要な問題である。高速かつ大容量メモリーはありがたい。最後に

$$\Delta = \pi \langle |V_{kd}|^2 \rangle \rho(\epsilon), \quad (1)$$

$$\rho_{d\sigma}(\epsilon) = \frac{1}{\pi} \frac{\Delta}{(\epsilon - E_d - U \langle n_{d-\sigma} \rangle)^2 + \Delta^2} \quad (2)$$

を使って、

$$\frac{U}{\Delta} \geq \frac{\pi}{\sin^2 \pi \langle n_d \rangle} \quad (3)$$

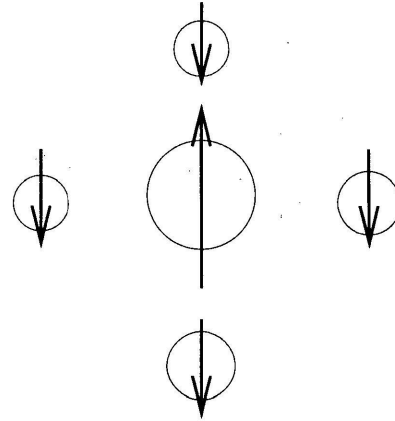
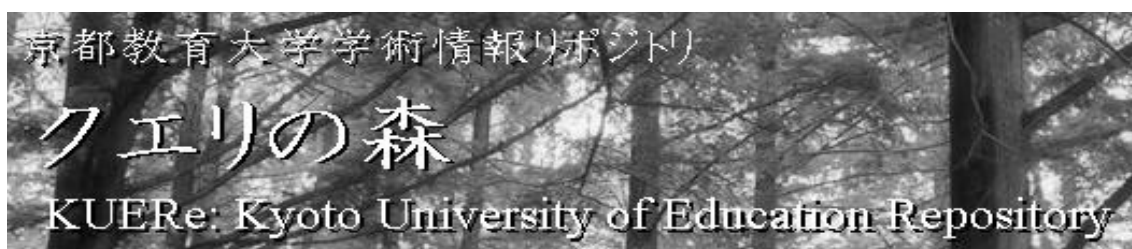


Figure 7. 磁性材料の原子スピンの概念図。例えば大きい丸は希土類、小さい丸は遷移元素を表わす。原子どうしの相互作用も無視できないと考えられる。

のような評価式を調べてみると、遷移金属を含む希土類合金で強磁性がでる、磁性材料になるという結果を得ている。このように、数値計算と解析計算を組み合わせながら調べることで、電子物性について特徴を理解することができると考えている。

REFERENCES

1. P.W.Anderson, Phys. Rev. 124 (1961) 41.
2. Yosida, Phys. Rev. 106 (1957) 893.
3. K.Kobayashi, J. of Magn. Magn. Matr., 247 , (2002) 42.
4. “強磁性”、草部、青木、東大出版会.
5. “数値計算”、戸川、岩波書店.
6. “量子力学”、シッフ、吉岡書店.
7. A.L.Fetter and J.D.Walecka, “Quantum Theory of Many Particle Systems”, McGraw-Hill.



この文献は、国立情報学研究所において電子化されたものを、本学でテキスト加工したものです。

