

宇宙の氷、地球のマントル、
量子のビット



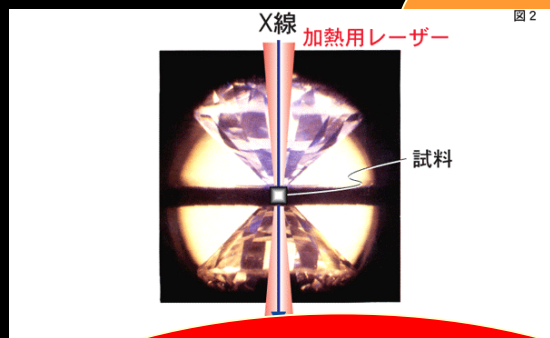
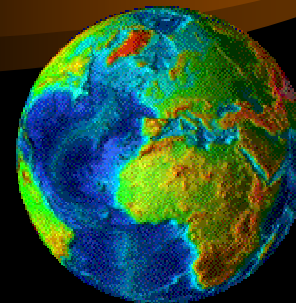
飯高敏晃

<http://www.iitaka.org/>

(戎崎計算宇宙物理研究室)

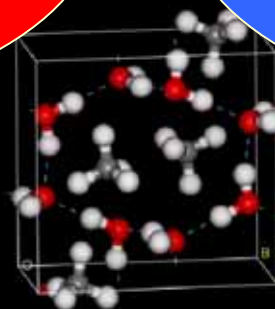
宇宙と惑星の研究手法

測定：
天体観測、
地震波、地磁気



実験：
高温高压実験
SPring8

理論：
第一原理分子動力学
RSCC



研究対象

- 宇宙の氷
 - 燃える氷メタンハイドレート、(秩序氷Ice XI)
- 地球のマントル
 - マントル構成物質ポストペロブスカイト
- 量子のビット
 - 量子スピンモデル、(シリコンクラスレート)

研究方法

- 多体シュレーディンガー方程式
直接解くには複雑すぎる。

$$\Psi(r_1, r_2, r_3, \dots, r_N)$$

- 近似

- 密度汎関数法 (第一原理電子状態計算)

- の一体近似 (LDA, GGA)

$$\psi_1(r_1)\psi_2(r_2)\psi_3(r_3)\cdots\psi_N(r_N)$$

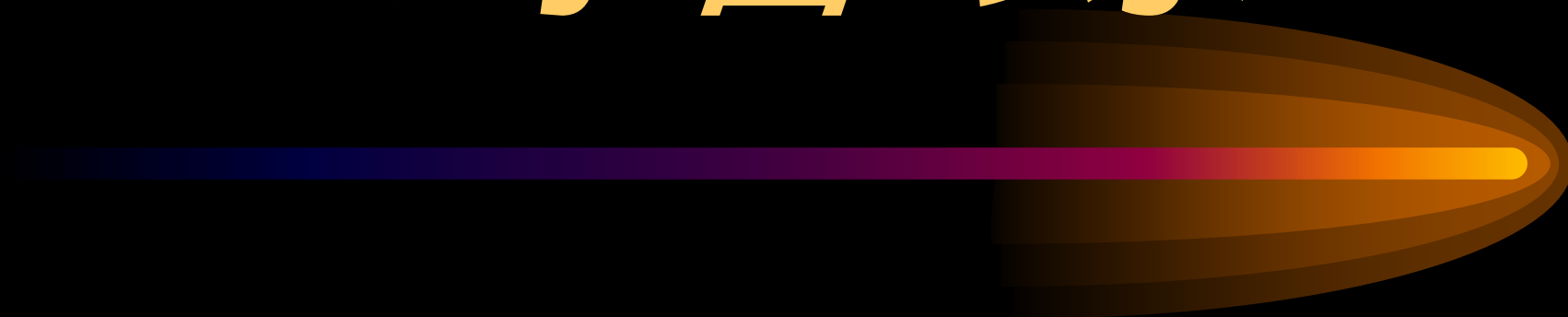
- 量子スピン ハミルトニアン の直接解法

- (ハイゼンベルクモデルのチェビシェフ多項式展開法)

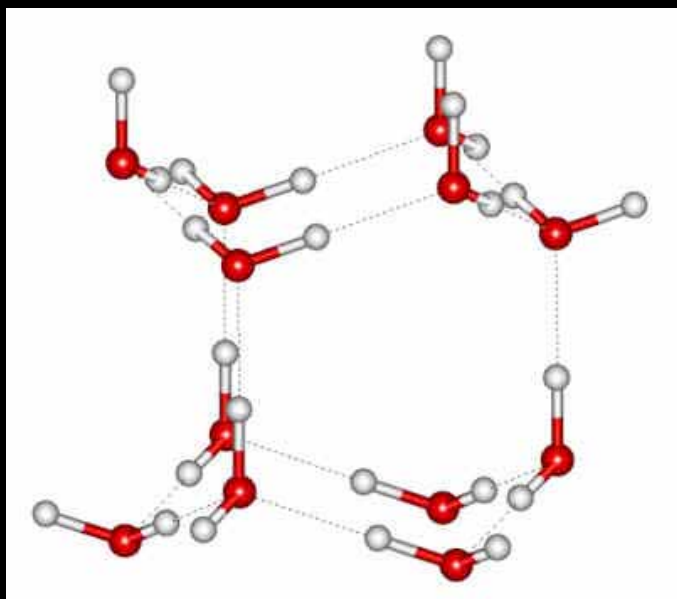
- スピン自由度だけを考える

$$\Psi(m_1, m_2, m_3, \dots, m_N), m = \pm \frac{1}{2}$$

I. 宇宙の氷



氷(水の結晶)



- 普通の氷(Ice Ih)
水分子の向きが不規則
- 秩序氷(Ice XI)
水分子の向きが規則的
- 低温 秩序氷に転移
ただし転移時間は何万年??
- 宇宙なら観測できるかも。
特徴的な分子振動の第一原理計算

次世代エネルギー資源 「燃える氷」メタンハイドレート

- 大陸棚など常温高圧下で安定に存在
MH-I



©2002 AIST

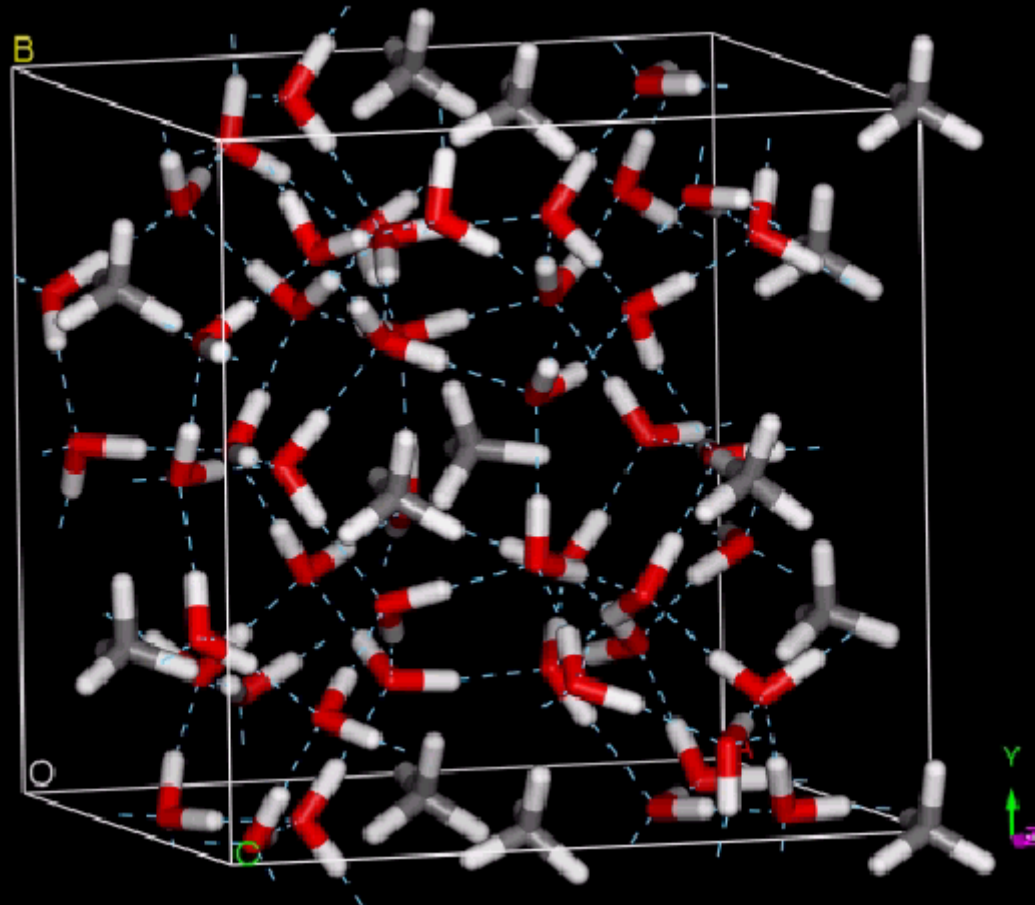
MH-I: 結晶構造

MH-I相のモデル

対称性 $Pm\bar{3}n$

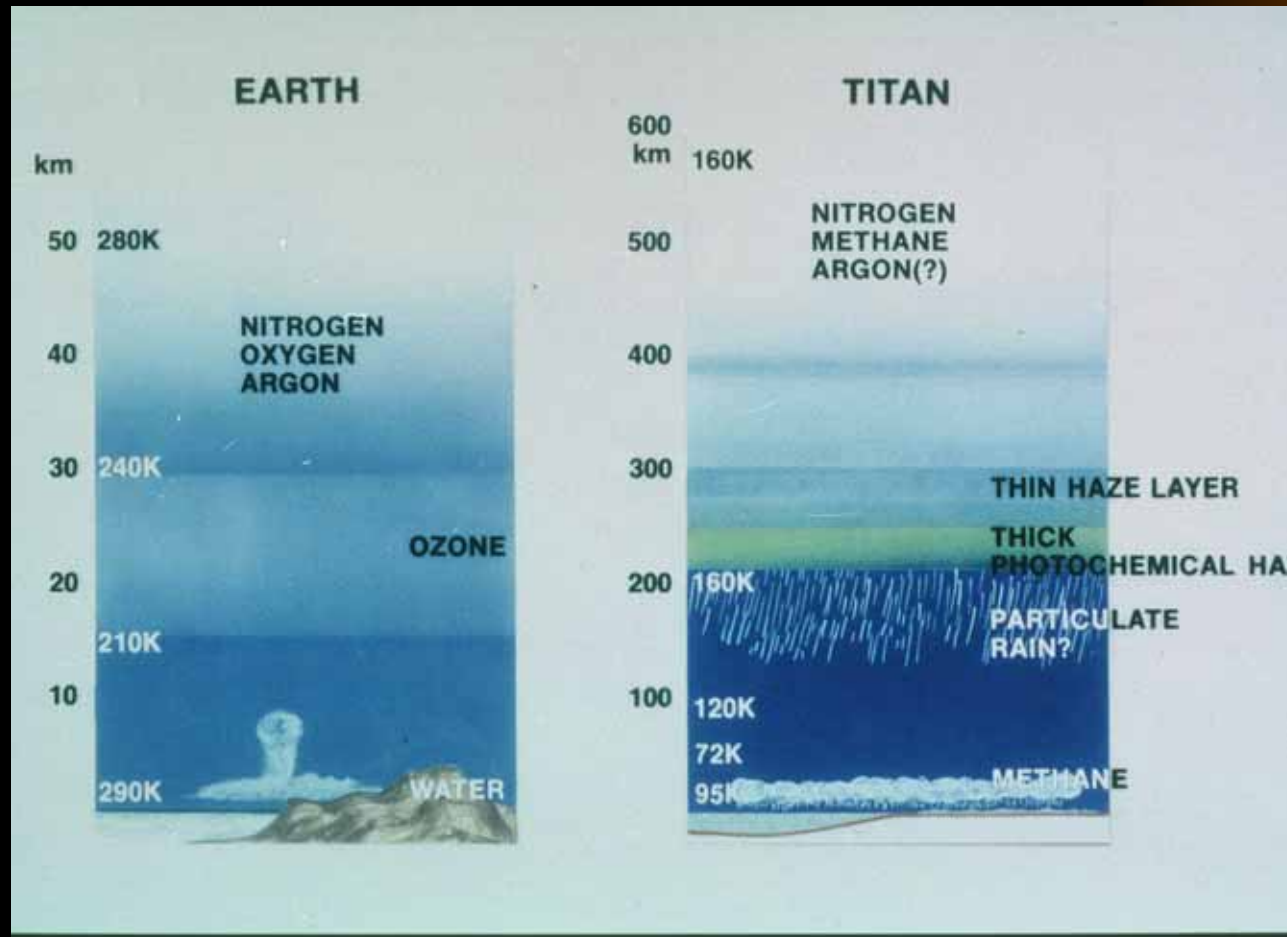
$a=12$

$46\text{H}_2\text{O}+8\text{CH}_4$





土星最大の衛星タイタン 大気之谜

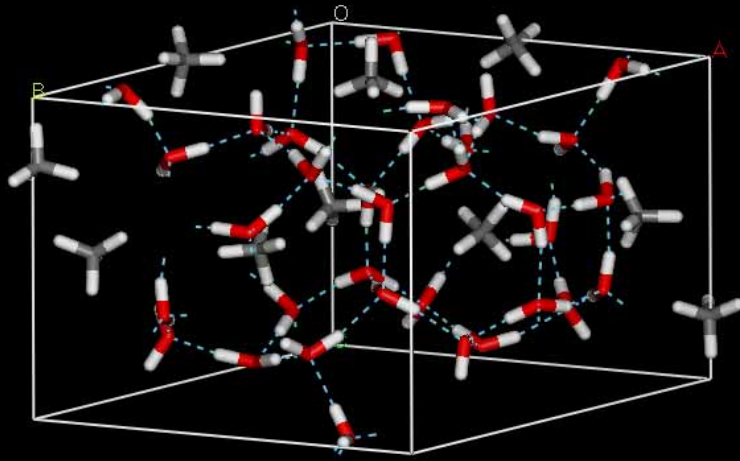


- Titanの大気は地球の大気より10倍宇宙へ広がっている。

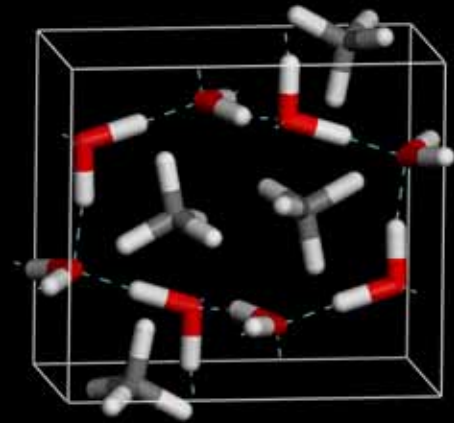
Courtesy NASA/JPL-Caltech

J.S.Loveday et al.
Nature 410,661(2001).

MH - II相、III相



MH-II



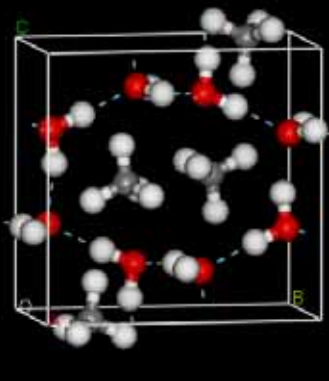
MH-III



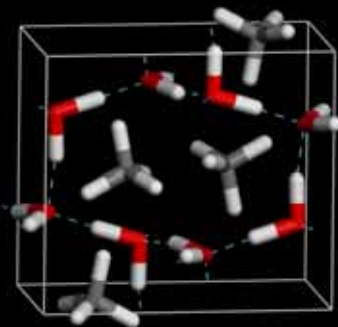
第一原理分子動力学

T.Iitaka and T.Ebisuzaki, Filled ice structure of gas hydrates;
a density functional study, J. Phys.: Condens. Matter. 16, S1171 (2004).

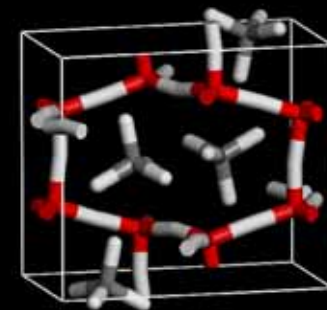
MH-III at 3GPa
Molecular State



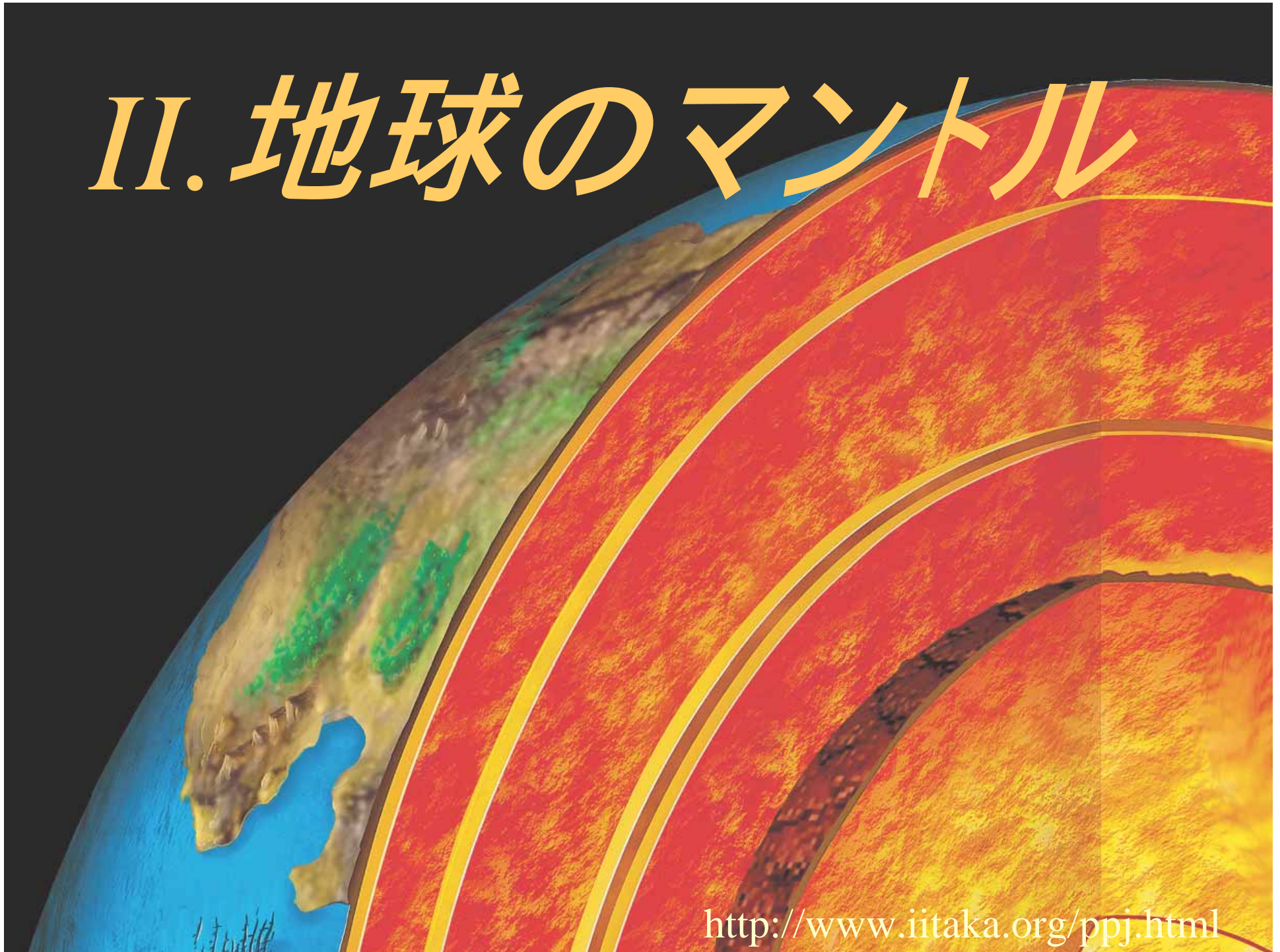
MH-III at 40GPa
Ionized State



MH-III at 80GPa
Centered State

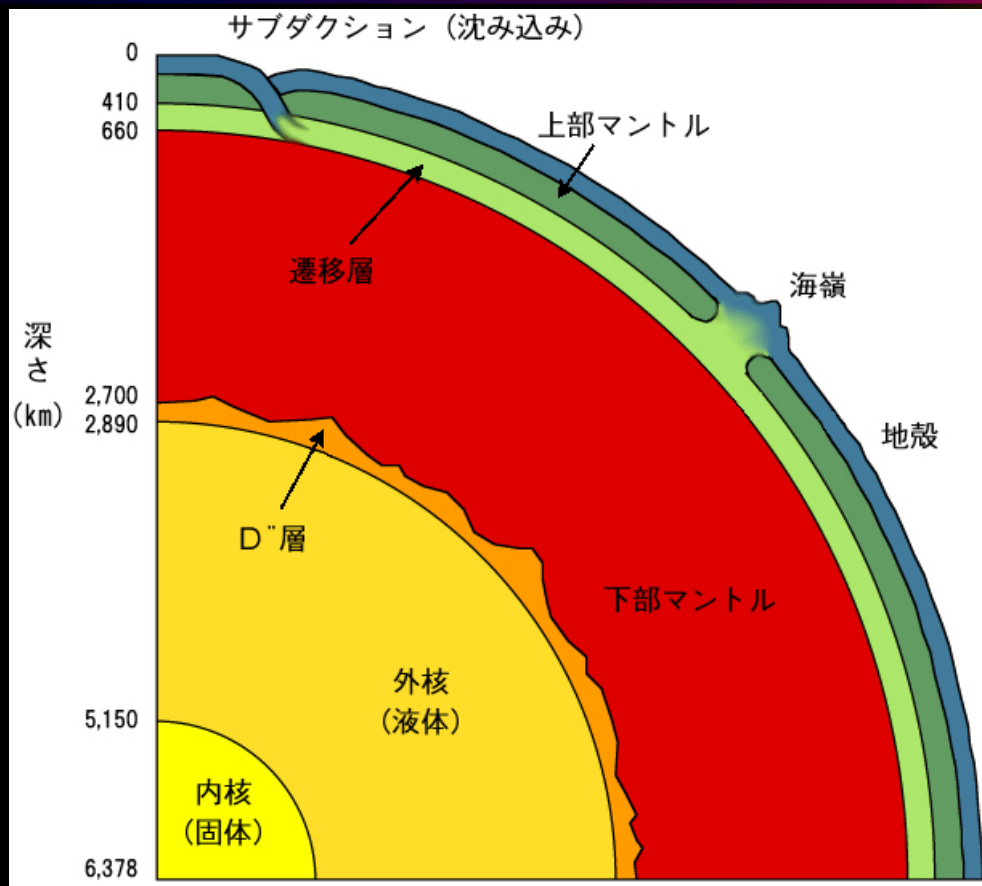


II. 地球のマントル



<http://www.iitaka.org/ppj.html>

地球の断面図



地球の内部構造
(見えない！)

測定方法：
地震波
地磁気

地球マントル新発見鉱物の研究



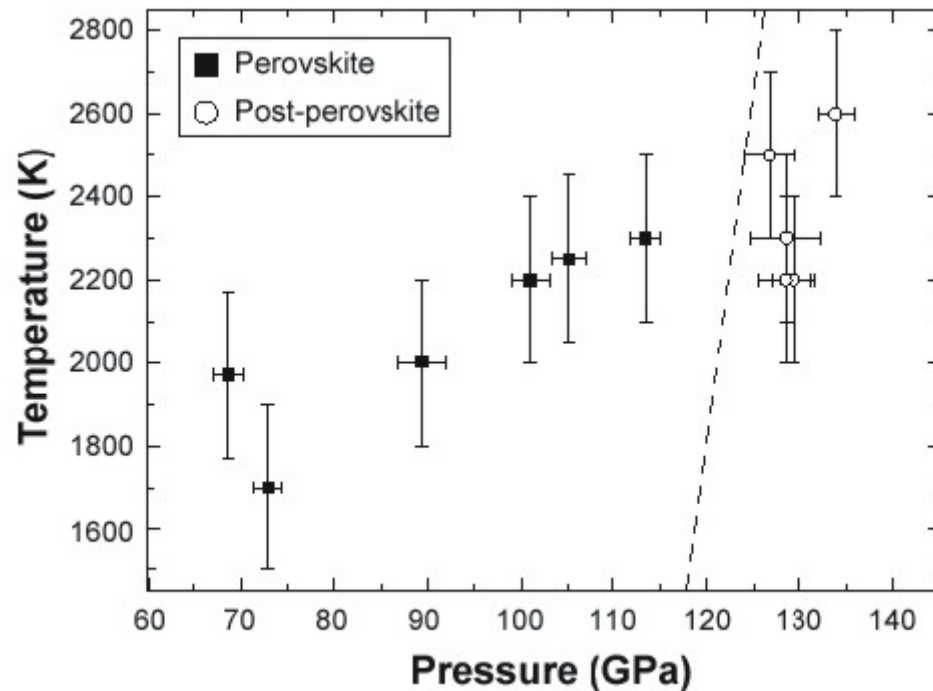
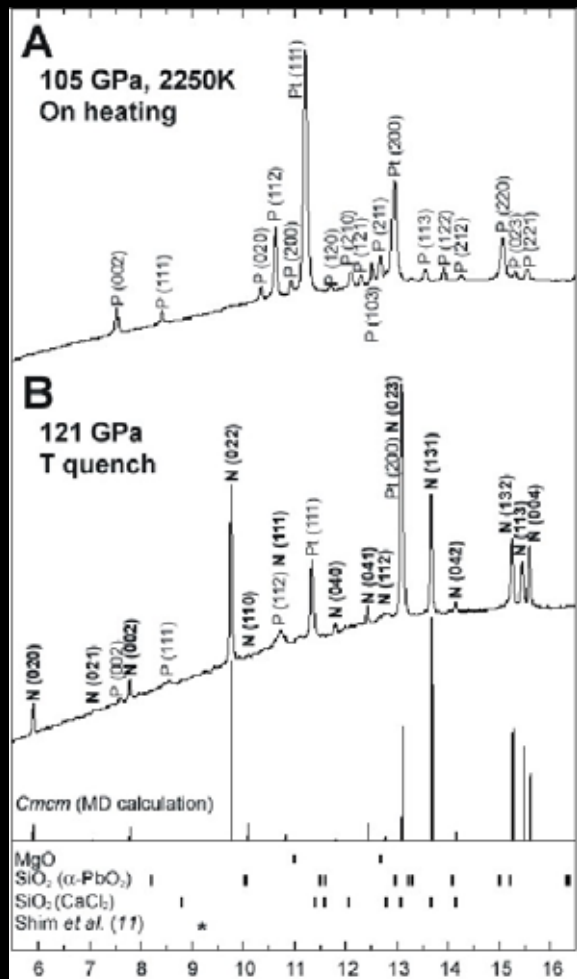
最先端放射光施設SPring8



理研Linuxクラスター RSCC

ポストペロブスカイトの発見

@SPring-8



Murakami et al. Science (2004)

下部マントル構成鉱物

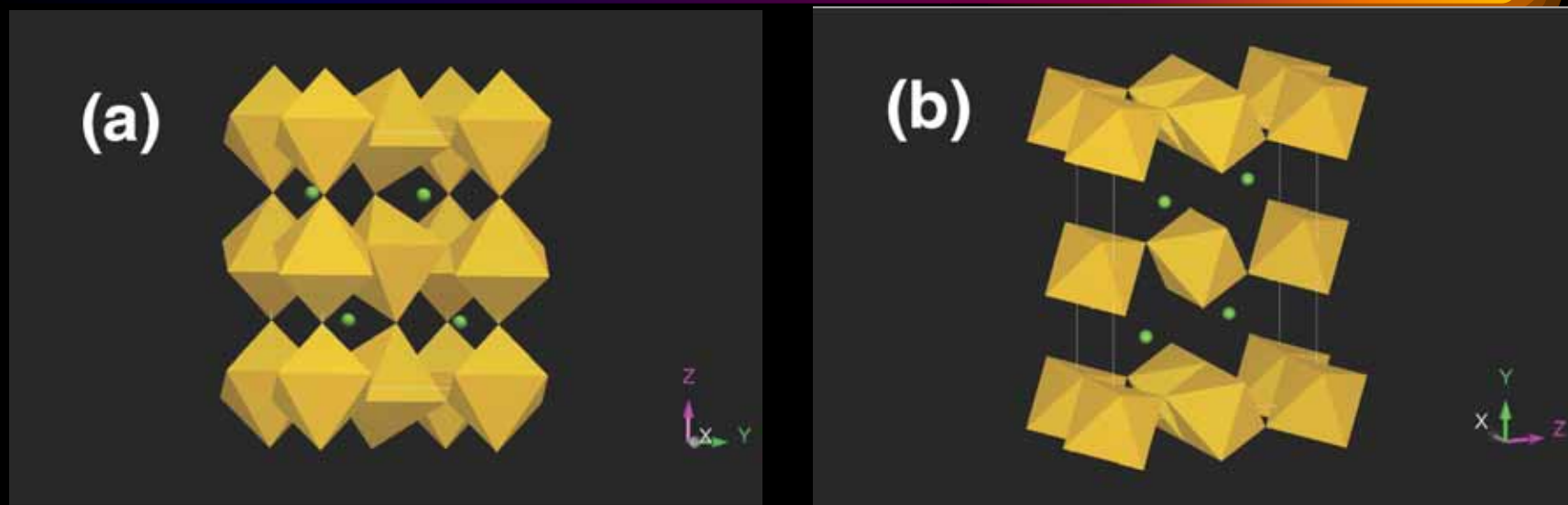


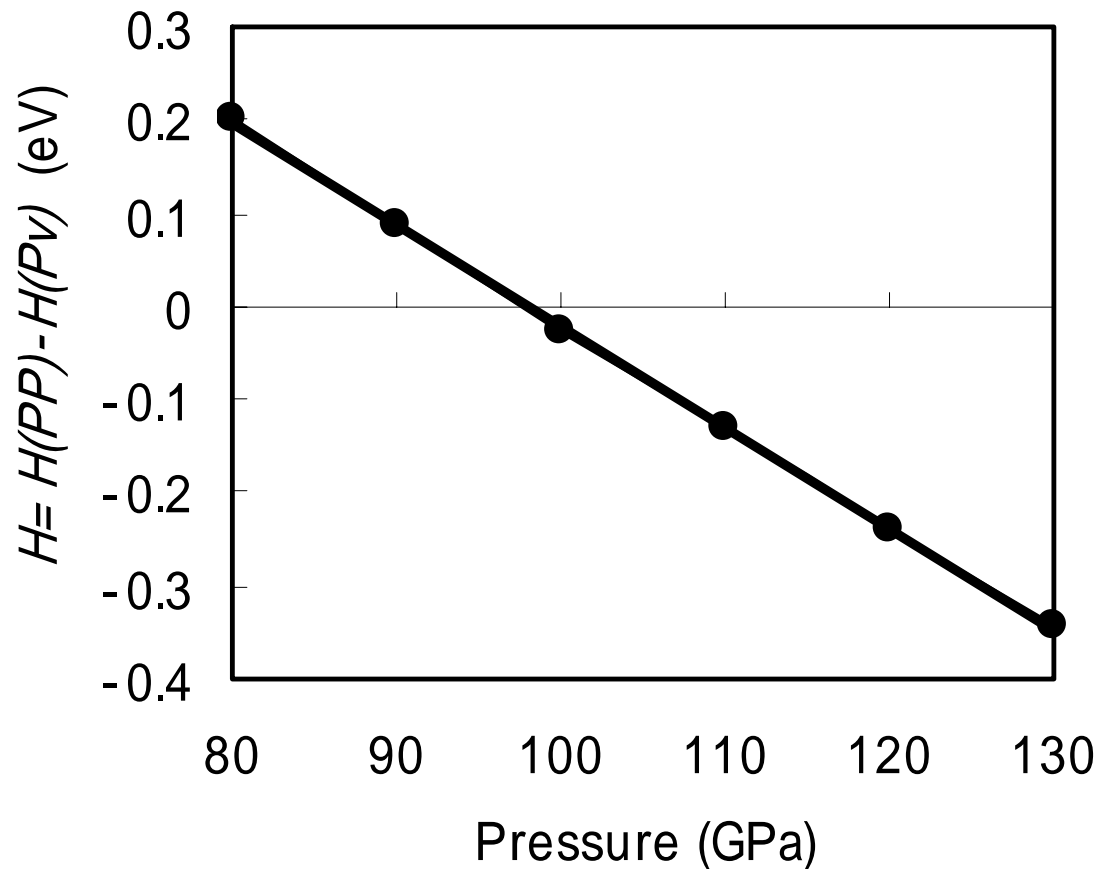
図2 MgSiO₃ペロブスカイト(a)とMgSiO₃ポストペロブスカイト(b) :

緑色の球はMg²⁺イオンを表し、八面体は中心にシリコン原子、各頂点に酸素原子があることを示す。

Post-perovskite 相の安定性計算

- $H = E - PV$

The enthalpy difference between the perovskite phase and post-perovskite phase as a function of pressure. The post-perovskite (PP) phase is favored over the perovskite (Pv) phase at pressures above 98 GPa.



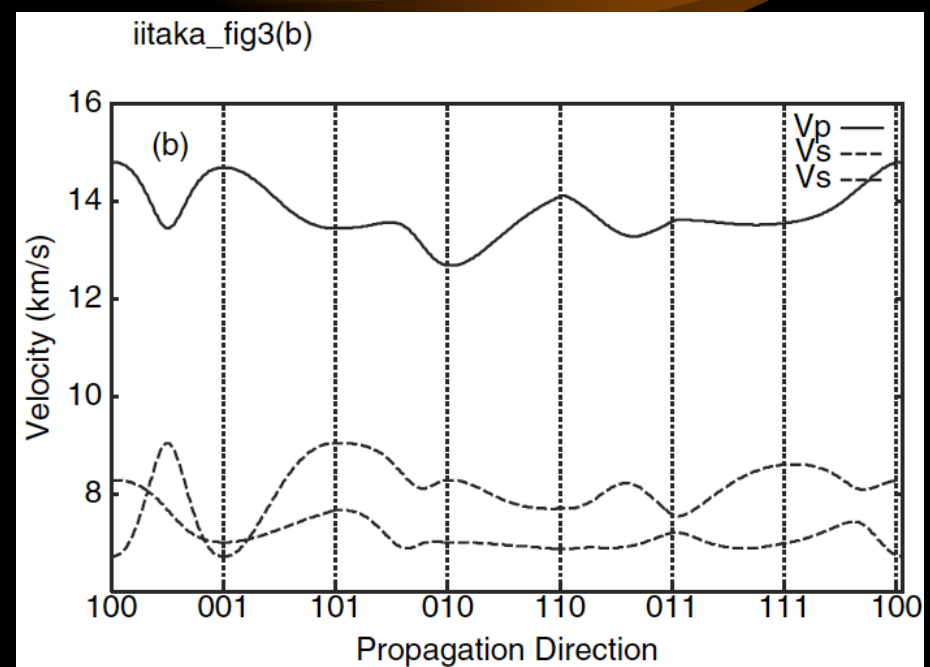
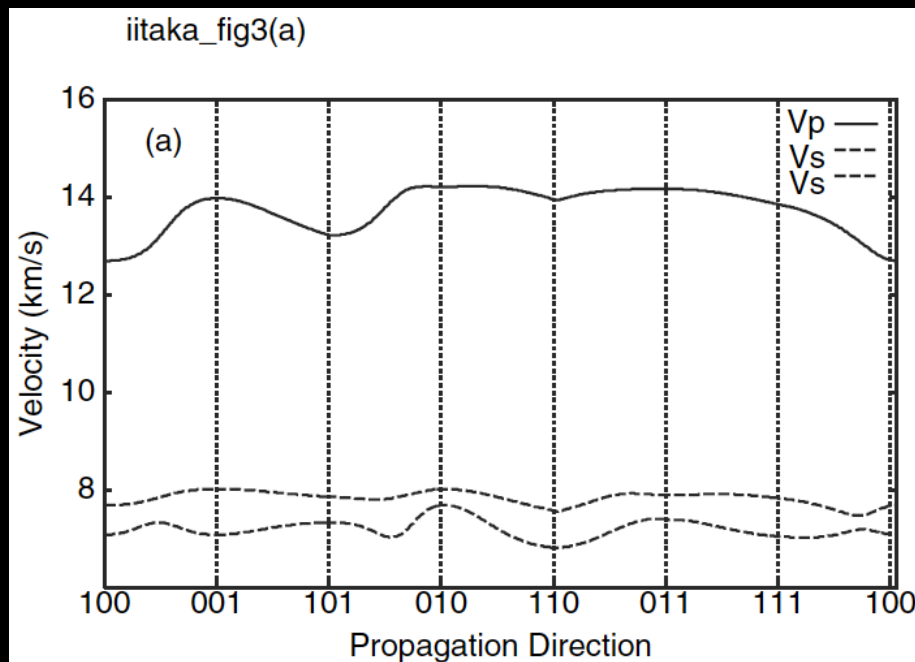
T. Iitaka et al., Nature 430, 442-445 (2004).

弾性スティッフネステンソル

Hooke's law

$$\sigma_{ij} = \sum_{kl} c_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad i, j, k, l = 1, 2, 3$$
$$\sigma_I = \sum_J c_{IJ} \varepsilon_J \quad I, J = 1, 2, 3, 4, 5, 6$$

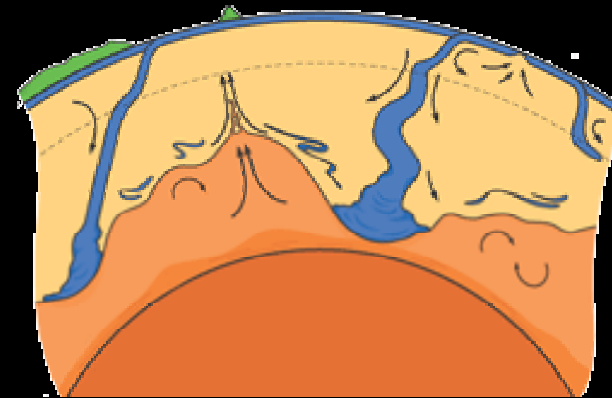
地震波速度の異方性



T. Iitaka et al., Nature 430, 442-445 (2004).

D''層とマントルプルーム

- マントルと核の境界層であるD''層を正確に知ることは、マントルの対流、地球史の理解に不可欠である。



L.H. Kellogg *et al.*, *Science* **283**, 1881 (1999)

III. 量子のビット

ハイゼンベルク・モデル

- 量子スピン系のハイゼンベルクモデルの有限温度における動的性質を計算

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{D}_{ij} \cdot (\vec{S}_i \times \vec{S}_j) - g\mu_B \vec{H} \sum_i \vec{S}_i.$$

O(N)量子計算法

VOLUME 90, NUMBER 4

PHYSICAL REVIEW LETTERS

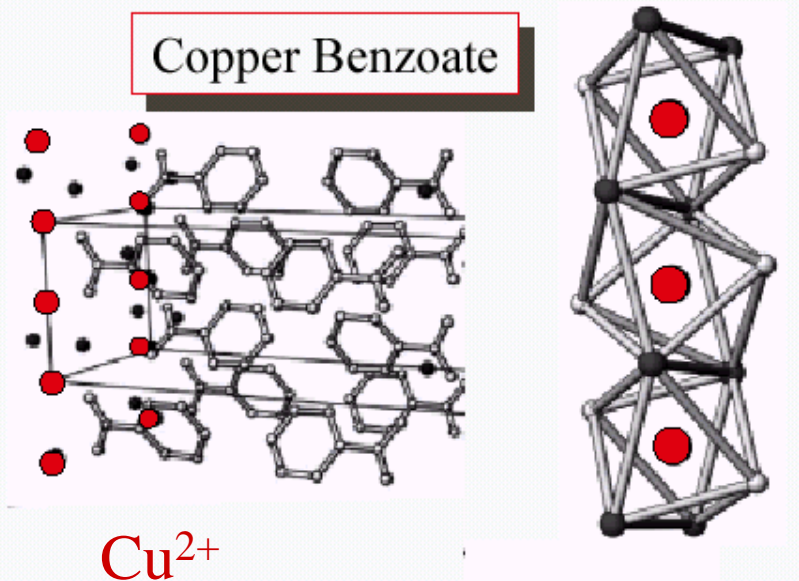
week ending
31 JANUARY 2003

Algorithm for Linear Response Functions at Finite Temperatures: Application to ESR Spectrum of $s = \frac{1}{2}$ Antiferromagnet Cu Benzoate

Toshiaki Iitaka* and Toshikazu Ebisuzaki

Computational Science Division, RIKEN (The Institute of Physical and Chemical Research),
2-1 Hirosawa, Wako, Saitama 351-0198, Japan

(Received 16 October 2002; published 31 January 2003)



le
T
do
s
m

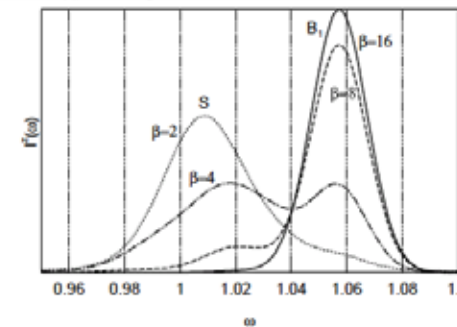


FIG. 1: ESR spectra of normal polarization, $I^z(\omega)$, calculated with $\beta = 2 \sim 16$, $H_x = 1.0$, $N_{spin} = 16$, $\eta = 0.01$ and $N_{rand} = 16$. S and B_1 stand for spinon excitation and first breather excitation, respectively.

$Exp(-iHt)$ の チェビシエフ多項式展開

- 時間発展演算子

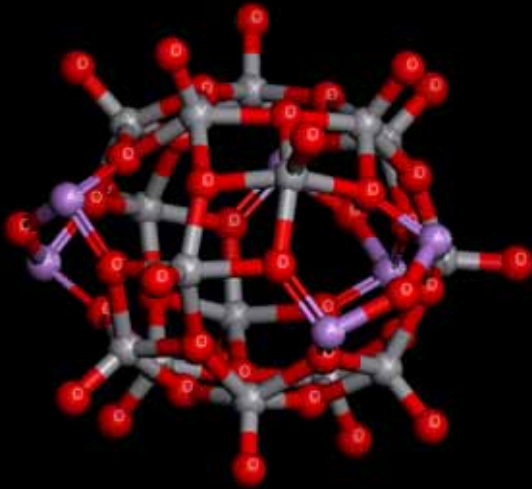
$$e^{-iHt} = J_0(t) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n J_n(t) T_n(H)$$

$$|\phi, t_0 + t\rangle = e^{-iHt} |\phi, t_0\rangle = J_0(t) |\phi, t_0\rangle + 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n J_n(t) T_n(H) |\phi, t_0\rangle$$

チェビシエフ法はRSCCに最適

- 物理量を行列の対角和として計算
大規模並列化が容易
- 行列ベクトル積が主要計算
ベクトル化が容易

ナノ分子磁石



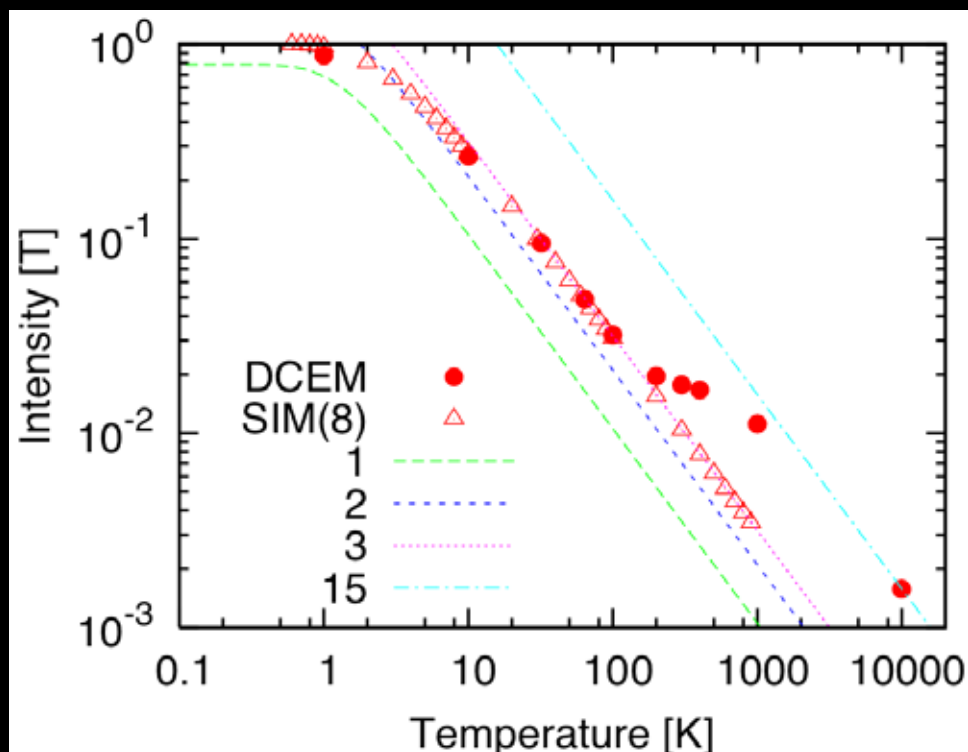
- **実験**: Sakon et al. (2003), Ajiro et al. (2003).
- Line width, Line shape, Intensity and DM/DD interaction.
- **理論**: M. Machida, T. Iitaka and S. Miyashita, J. Phys. Soc. Jpn. Suppl. 74, 107-110 (2005).



Temperature dependence of ESR intensity

$$I_{\text{tot}}(\beta) = \int_0^{\infty} I(\omega, \beta) d\omega$$

Our calculation



Experiment

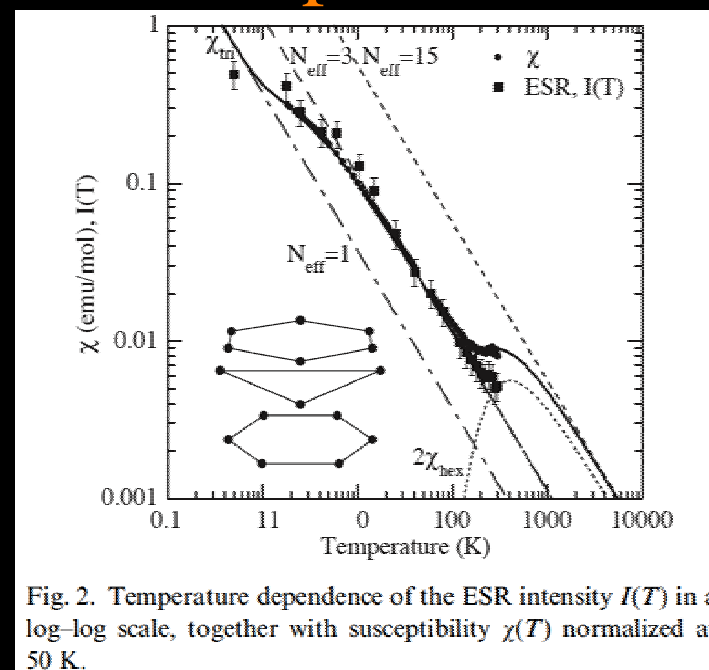
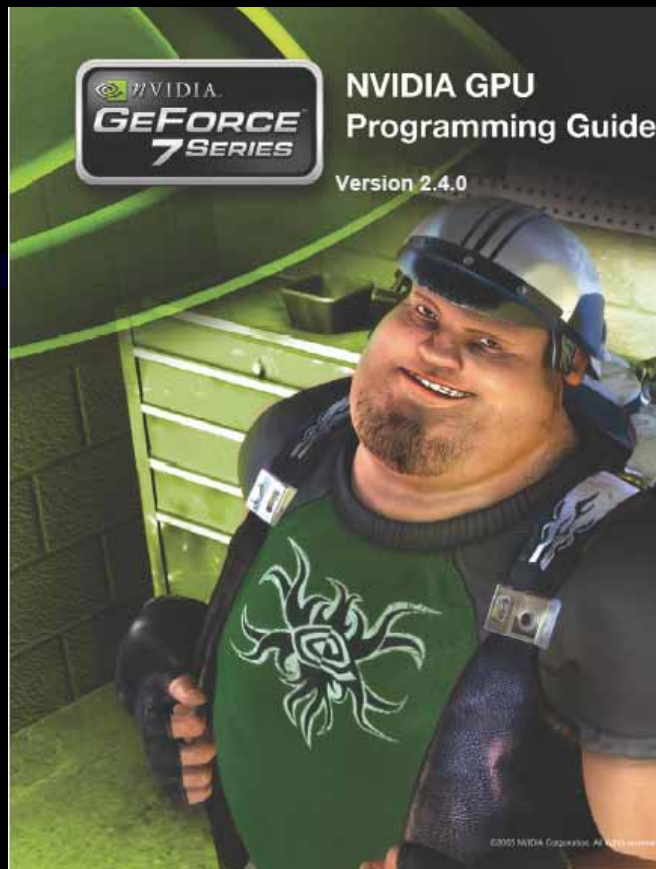


Fig. 2. Temperature dependence of the ESR intensity $I(T)$ in a log-log scale, together with susceptibility $\chi(T)$ normalized at 50 K.

[Y.Ajiro et al. (2003)]

Machida et al. J. Phys. Soc. Jpn. Suppl. 74, 107 (2005).



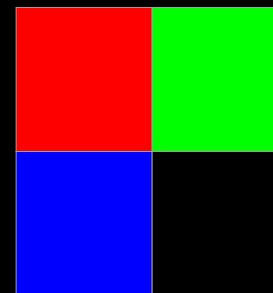
余興:

ゲーム用
画像処理専用チップ
による
量子計算

波動関数から画素への写像例

- 一色が32Bit実数1個に対応

$$|\phi\rangle = \begin{bmatrix} \phi_{\uparrow} \\ \phi_{\downarrow} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_{\uparrow}^R + \phi_{\uparrow}^I \\ \phi_{\downarrow}^R + \phi_{\downarrow}^I \end{bmatrix} =$$

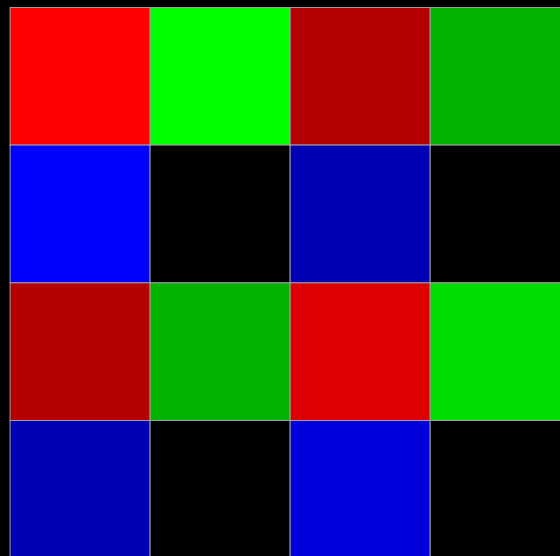


多スピン系の波動関数

スピン 3 個の波動関数

複素数 8 成分 = 実数 16 個

$$|+++> =$$



スピン演算子の作用

昇降演算子 平行移動

$$S_+^{(2)} | \pm \pm \pm \pm \rangle =$$

Red	Green	Red	Green
Blue		Blue	

ハイゼンベルク・マシーン (開発中)



Dell Dimension 9100 + NVIDIA Gforce 7800 GTX

目標：量子計算の加速

既に成功：分子動力学法(約15Gflops)、境界要素法、
流体力学(約6Gflops,RIKEN BMT コンテストに応募！)

価格性能比

- 価格 本体 + GPU = 19万円
GPUボードのみ 7万円
- 性能 ピーク 150 GFLOPS
実効 5 ~ 50 GFLOPS (目標)
- スパコン(SX-7)では?
価格 ? 千万円
ピーク性能 12 GFLOPS

まとめ, RSCCユーザーとして

- 計算物理は面白い。
- RSCCは、その面白さを満喫させてくれる。
- 次世代スパコンができれば、もっと面白くなるだろう。