

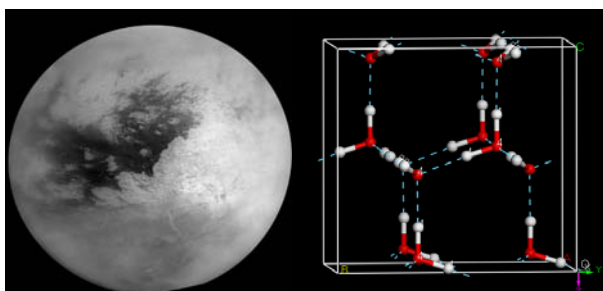
# 宇宙の氷、地球のマントル、量子のビット

飯高敏晃  
戒崎計算宇宙物理研究室  
<http://www.iitaka.org/>

## 1. はじめに

私たちはこの宇宙で起こる様々な現象を計算機の力を借りて研究しています。計算手法としては第一原理分子動力学法と多体シュレディンガー方程式の数値解法を主に用いていますが、これらの手法は並列化やベクトル化による大規模計算に適しています。そこで2004年3月にスーパー・コンバインド・クラスタ(RSCC)が理研情報基盤センターに導入されると、その高度な並列およびベクトル計算能力の恩恵を受けて私たちの研究の質と幅はこれまでになく大きく発展いたしました。本講演ではRSCCのPCクラスタやベクトル計算機を利用した私たちの研究を中心に「宇宙の氷」、「地球のマントル」、「量子のビット」と題してご紹介いたします。

## 2. 宇宙の氷



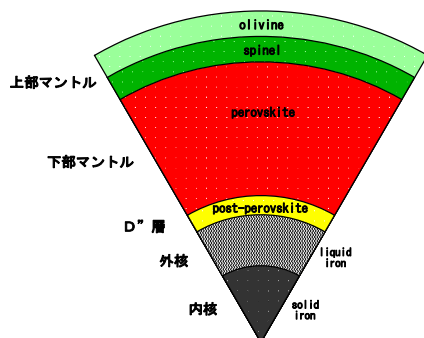
左：宇宙探査船 Cassini から撮影した土星最大の衛星、タイタンの表面 (Courtesy NASA/JPL-Caltech)

右：Ice XI の結晶構造

水、氷、メタンハイドレートは地球の生命の歴史に大きく関わってきた重要物質です。水は太古から地球の生命を育み続けてきたし、その生命は宇宙空間からアモルファス氷に包まれて運ばれてきたとも言われています。また、「燃える氷」メタンハイドレート[1-6]は、気候変動の原因となり[7]生命の大量絶滅を招いた[8]こともあるそうです。深海底や地下に眠るメタンハイドレートは、人類のエネルギー問題や衛星タイタンの大気謎などを解く鍵とも考えられています。

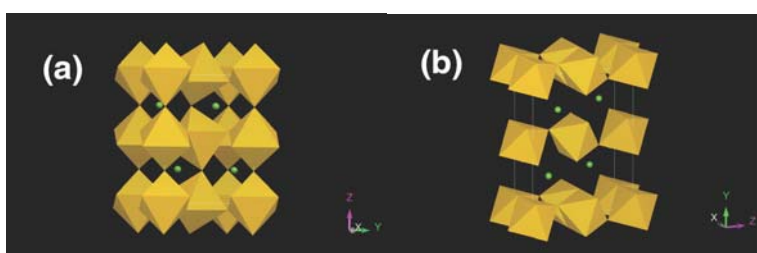
す。ところで、氷には水分子の並び方によりいろいろな種類があることが知られています[9]。私たちが日常見たり触ったりする氷は、Ice Ih と呼ばれる氷です。Ice Ih は水分子の酸素原子が規則的に並んでいるという意味では結晶と言えますが、水素原子の位置（水分子の向き）に不規則性があるという意味では完全な結晶とは言えません。熱力学の第三法則によれば、Ice Ih を冷やしていけば72 K 位で水分子の向きも揃って規則的な氷 Ice XI になる[10]と考えられていますが、温度を下げると分子の動きも鈍くなるので Ice Ih が Ice XI に変化するために必要な時間は何万年という長さになってしまいます。実験室で Ice XI を作るときにはそんなに長く待ってられないので氷に不純物を加えて分子を動き易くするという方法を使います[11]。宇宙では氷が何十万年もの間低温に保たれているので天然の純粋 Ice XI が出来ているかも知れません。そこで私たちは「宇宙氷」Ice XI を観測する方法を第一原理分子動力学計算により研究しています。

### 3. 地球のマントル



図：地球の内部構造

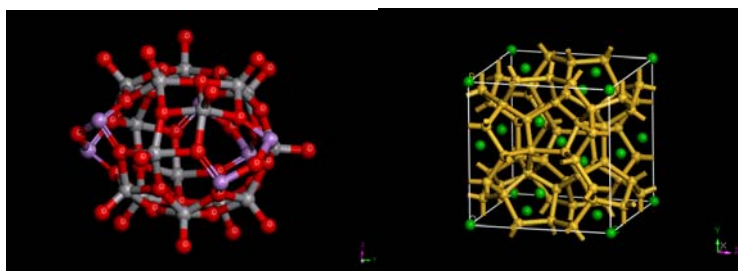
惑星の内部構造を研究する難しさは、惑星内部を直接「見る」方法が無いことです。太陽系外惑星は言うに及ばず、最も身近な惑星「地球」ですら中心部を見た人はいません。科学者たちは地球内部と同じ温度・圧力を実験装置内に作り出して、高温高压下の物質の性質を研究してきました。物理法則は実験装置内でも惑星内部でも同一なはずなので、実験結果を解析すれば観測不可能な惑星内部を推測できるのです。観測を第一の研究方法、実験を第二の研究方法とすると、第三の研究方法として最近急速に注目されているのが第一原理分子動力学法です。第一原理分子動力学法では、全宇宙に普遍的な法則である量子力学に基づいて原子・分子・結晶の計算を行い、惑星内部構造を探ることができます。



- a) ペロブスカイト
- b) ポストペロブスカイト

地球の内部構造は主に地震波解析によって調べられてきました。表面から順に地殻、マントル、核という構造をしています。マントルは上部マントル、遷移層、下部マントル、D”層に分かれます。下部マントルとD”層は $\text{MgSiO}_3$ ペロブスカイトと呼ばれる鉱物（図a）だろうと考えられてきました。しかしD”層が $\text{MgSiO}_3$ ペロブスカイトで出来ていると考えたと、D”層での地震波速度の不連続性・異方性などの観測結果をうまく説明できず、D”層がどんな物質からできているのかは大きな謎でした。ところが、2004年に東工大のグループが最先端放射光施設 SPring8 を利用した高温高压実験により、D”層が $\text{MgSiO}_3$ ポストペロブスカイトという新発見の鉱物（図b）で出来ていることを発見しました[12]。そこで私たちは第一原理分子動力学を使って $\text{MgSiO}_3$ ペロブスカイトと $\text{MgSiO}_3$ ポストペロブスカイトの弾性テンソルを計算し各結晶中の地震波の伝わり方を詳細に調べました[13]。弾性テンソルとは結晶を歪ませたときに生じる応力の大きさを表す比例定数で、鉱物の硬さを表し地震波速度を決める量です。その結果、D”層が $\text{MgSiO}_3$ ポストペロブスカイトで出来ていると考えたと、地震波速度の不連続性・異方性など種々の観測結果を矛盾無く説明し得ることが明らかになり、地球科学の最も重要な謎の一つに光が当てられました。

#### 4. 量子のビット



左：ナノ分子磁石 V15  
右：シリコンクラスレート  
 $\text{Ba}_8\text{Si}_{46}$

電子が持つスピンの自由度は、上向き $\uparrow$ と下向き $\downarrow$ の二つの値をとることができるので、これを0と1に見立てれば1ビットの情報を表すことができるはずです。しかし、電子は量子力学的粒子なので一個の電子は上向き $|\uparrow\rangle$ と下向き $|\downarrow\rangle$ の状態の他にそれらの重ね合わせの状態  $c_1|\uparrow\rangle + c_2|\downarrow\rangle$  をとれるので、はるかに多くの情報すなわち無限ビットを表せることとなります（量子ビット、qubit）。この性質や複数の電子間のエンタングルメント（もつれあい）と呼ばれる性質を利用すると現在のコンピュータより圧倒的に高速なコンピュータ「量子計算機」を作ることができると考えられています[14]。量子計算機の実現方法としてはイオントラップ、NMR、ジョセフソン接合などの方法が研

究されていますが、実用的な計算に必要な数百万量子ビットを実現するには集積化などの点から電子スピンを利用した固体素子が有利と考えられます。

私たちは、このような量子スピンのダイナミクス[15]を高速に計算する方法（チェビシェフ多項式展開法）[16,17]を開発し、ナノ分子磁石の電子スピン共鳴[18,19]や Thermal Entanglement の研究に応用しています。この計算法は並列化やベクトル化による大規模計算に適していて RSCC において大変効率よく実行することができます。また、スピンを利用した固体ベースの量子計算機用素子の候補として、シリコンクラスレート[20]や量子ドット[21]の第一原理計算の研究を進めています。時間が許せば、画像処理専用加速ハードウェア[22]を応用してチェビシェフ多項式展開法を高速に計算する量子スピン系用計算機「ハイゼンベルク・マシン」[23]の開発にも触れたいと思います。

## 5. おわりに

このシンポジウムのもう一つのテーマにもなっていますように、RSCC の 100 倍から 1000 倍の計算能力を持つ「次世代スーパーコンピュータ」の開発が最近議論されています。このような高度の計算能力を持った計算機を使って、私たちが RSCC で得た研究成果をどのように活かせるかについて考えてみたいと思います。より厳密で正確な第一原理計算やより多くの原子を含んだ系の第一原理計算を目指すことは確かに研究の一つの重要な方向です。そのための理論研究、計算技術研究は欠かすことができません。その一方で、現在あるプログラムをそのまま使って新しい研究の方向を切り開くことも可能です。そのような有望な例として「新規機能物質の高圧合成」を挙げたいと思います。先に述べたシリコンクラスレート[24]やポストペロブスカイト[12]は高圧合成の例です。今までの研究では、結晶の大体の形や原子数を仮定してその結晶の物性を計算するという研究方法でした。しかし、RSCC の 100 倍から 1000 倍の計算能力があれば、結晶形の候補を大量に自動生成して新規機能物質を自動探索することが可能になります。このような計算は各候補に対しては現在のプログラムがそのまま使えるという利点があります。常圧での分子性結晶の結晶多形の問題についても同様の計算ができるはずですが、その場合にはファンデルワールス力の評価という克服すべき難問があります。高圧下ではたとえ分子性結晶であってもファンデルワールス力が無視できる[25]のでこの問題は生じないのです。それやこれやも含めてこれからも RSCC（そして次世代スーパーコンピュータ）を利用させていただき、宇宙や地球における分子や結晶の役割

の研究、ポスト次世代スーパーコンピュータ「量子計算機」のための基礎研究等を進めて参りたいと考えております。

最後になりましたが、共同研究者の皆様、戎崎俊一 主任研究員、姫野龍太郎 情報基盤センター センター長に謝意を表します。

## 参考文献

1. 高圧力の科学と技術, **12**, No.1, (2002). <ガスハイドレート>特集号
2. 飯高敏晃、「燃える氷」メタンハイドレートの謎に迫る！、高圧力の科学と技術、**13**, No.3, 244 (2003)。
3. J.S. Loveday, R.J. Nelmes, M. Guthrie, S.A. Belmonte, D.R. Allan, D.D. Klug, J.S. Tse, Y.P. Handa, Stable methane hydrate above 2 GPa and the source of Titan's atmospheric methane, *Nature* **410**, 661 (2001).
4. H. Shimizu, T. Kumazaki, T. Kume, S. Sasaki, In situ observations of high-pressure phase transformations in a synthetic methane hydrate, *J. Phys. Chem. B* **106**, 30 (2002).
5. H. Hirai, T. Tanaka, T. Kawamura, Y. Yamamoto, and T. Yagi, Retention of filled ice structure of methane hydrate up to 42 GPa, *Phys. Rev. B* **68**, 172102 (2003).
6. T. Iitaka and T. Ebisuzaki, Methane hydrate under high pressure, *Phys. Rev. B* **68**, 172105 (2003).
7. H. Svensen, S. Planke, A. Malthe-sorensen, B. Jamtveit, R. Myklebust, T.R. Eidem, S. S. Rey, Release of methane from a volcanic basin as a mechanism for initial Eocene global warming, *Nature* **429**, 542 (2004).
8. C. H. Lo, S. L. Chung, T. Y. Lee, G. Y. Wu, Age of the Emeishan flood magmatism and relations to Permian-Triassic boundary events, *Earth and Planetary Science Letters* **198**, 449 (2002).
9. V.F. Petrenko, R.W. Whitworth, *Physics of Ice*, Oxford University Press, 1999.
10. S.T. Bramwell, Ferroelectric ice, *Nature* **397**, 212 (1999).
11. Y. Tajima, T. Matsuo, and H. Suga, Phase transition in KOH-doped hexagonal ice, *Nature* **299**, 810 (1982).
12. M. Murakami, K. Hirose, K. Kawamura, N. Sata, Y. Ohishi, Post-perovskite phase transition in MgSiO<sub>3</sub>, *Science* **304**, 855 (2004).
13. T. Iitaka, K. Hirose, K. Kawamura, M. Murakami, The elasticity of the MgSiO<sub>3</sub> post-perovskite phase in the Earth's lowermost mantle, *Nature* **430**, 442 (2004).

14. C.H. Bennett, D.P. DiVincenzo, Quantum information and computation, *Nature* **404**, 247 (2000).
15. 飯高敏晃、「量子ダイナミクス入門」、(丸善、1994)。
16. T. Iitaka, S. Nomura, H. Hirayama, XW. Zhao, Y. Aoyagi, T. Sugano, Calculating the linear response functions of noninteracting electrons with a time-dependent Schrodinger equation, *Phys. Rev. E* **56**, 1222-1229 (1997).
17. S. Nomura, T. Iitaka, XW. Zhao, T. Sugano, Y. Aoyagi, Linear scaling calculation for optical-absorption spectra of large hydrogenated silicon nanocrystallites, *Phys. Rev. B* **56**, R4348-R4350 (1997).
18. T. Iitaka, T. Ebisuzaki, Algorithm for linear response functions at finite temperatures, Application to ESR spectrum of  $s=1/2$  antiferromagnet Cu benzoate. *Phys. Rev. Lett.* **90**, 047203 (2003).
19. M. Machida, T. Iitaka and S. Miyashita, Temperature dependence of ESR intensity for the nanoscale molecular magnet V15, *J. Phys. Soc. Jpn. Suppl.* **74**, 107-110 (2005).
20. J.S. Tse, T. Iitaka, T. Kume, H. Shimizu, K. Parlinski, H. Fukuoka, S. Yamanaka, The Electronic Structure and Vibrational Properties of Ba<sub>8</sub>Si<sub>46</sub>, Ba<sub>8</sub>AgnSi<sub>46-n</sub> and Ba<sub>8</sub>AunSi<sub>46-n</sub>, *Phys. Rev. B* **72**, 155441 (2005).
21. S. Nomura and T. Iitaka, Chebyshev polynomial expansion method for calculating electronic states in n-type GaAs quantum dots, Feb. 27, 2006, International Symposium on Mesoscopic Superconductivity and Spintronics 2006, NTT R&D Center, Atsugi, Kanagawa, Japan.
22. 高橋徹、飯高敏晃、真瀬洋、戎崎俊一、「GPU を用いた分子動力学法と境界要素法の加速」、日本物理学会大 61 回年次大会(2006)。
23. 飯高敏晃、「ハイゼンベルク・マシーン (量子スピンの系用計算機)」、日本物理学会大 61 回年次大会(2006)。
24. S. Yamanaka, E. Enishi, H. Fukuoka, M. Yasukawa, High-pressure synthesis of a new silicon clathrate superconductor, Ba<sub>8</sub>Si<sub>46</sub>, *Inorg. Chem.* **39**, 56 (2000).
25. T. Iitaka and T. Ebisuzaki, First-principles calculation of elastic properties of solid argon at high pressures. *Phys. Rev. B* **65**, 012103(2002).