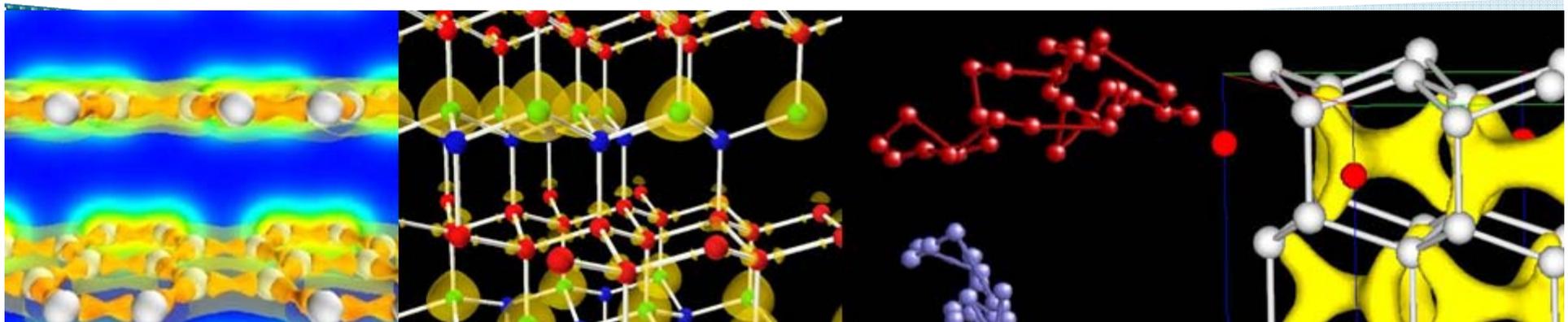


# 物質科学における学際融合

常行真司（東大院理）



# 物質科学のシミュレーション

## ▶ モデル計算

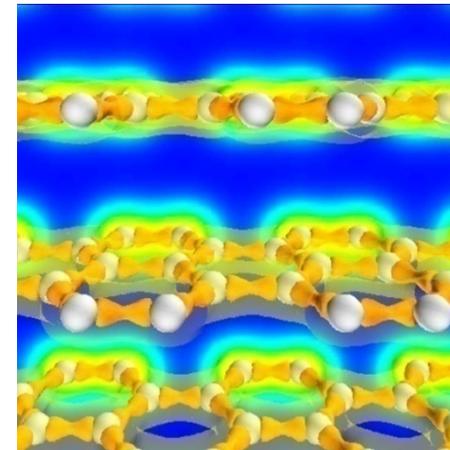
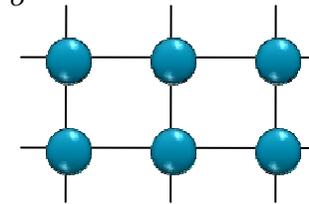
- 最初から大胆なモデル化を行うことによって、多体問題の物理に直接切り込む。

## ▶ 第一原理計算

- できるかぎり現実に忠実なシミュレーションを目指し、自然を計算機の中に再現することによって、虚心坦懐に自然の理解を試みる。  
(実験情報が足りない時に特に有用)

## ▶ 半経験的な手法

$$H = \sum_{\substack{i>j, \\ \sigma}} t_{ij} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$



# 物質科学と計算機科学の協力がこれまであまり進まなかった理由

- ▶ 多数の理論と基礎方程式が存在するが、いずれも不完全で発展途上。
- ▶ 特定の理論に基づくプログラムを高速化するよりも、理論自体の改良のほうが効果が大きい(ことが多い)。
- ▶ 高速化よりもプログラムの多機能化が評価される傾向にある。
- ▶ 一発計算ではブレークスルーにならない。通常は初期構造や、温度、圧力、組成などの物理パラメータを変えた計算を多数回行う必要があるため、1点計算は無理なく実行できる計算量に限られる。
- ▶ 物質科学研究者のメンタリティ？



# いま学際融合による高度なプログラム開発が望まれるのは...

- ▶ 「定番」というべき(いくつかの) **方法論**の**確立**と、**物質開発**への期待
  - 多数の計算対象、応用分野で潜在的ニーズ。
  - 計算機シミュレーションを使ったコンビナトリアルな物質開発・物質探査が視野に。
- ▶ **新しい方法論**への期待
  - 質的な飛躍には、ムーアの法則によるコンピュータ性能の向上では不十分。
  - 新しい理論に基づくシミュレーションの実用化とシミュレーションに適した新しい理論の開発に期待。



# いくつかの動き

- ▶ ナノ統合シミュレーション(拠点:分子研)
  - 中核アプリ高度化に向けた理研、筑波大学計算科学研究センターとの共同研究
  - HP-RSDFT(押山グループ)、RISM(平田グループ、FFT)ほか
- ▶ 計算物性科学WG(事務局:物性研、主査:寺倉清之氏)
  - 研究者の組織化と研究教育における連携推進
  - 物質科学シミュレーション基礎講座(仮)
- ▶ 東京大学 計算物理・化学研究連絡会
  - 物理G-COE採択を機に結成
  - 学内の理工連携による教育と研究推進
- ▶ 東京大学 学際計算科学・工学人材育成プログラム
  - (詳細は中島研吾氏の講演で)

