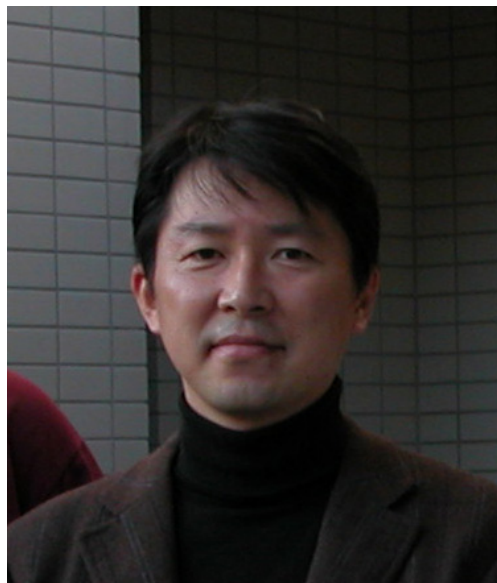


プロフィール



天能 精一郎(てんのう せいいちろう)

【現職】

神戸大学 大学院工学研究科 教授

【略歴】

平成6年 京都大学理学研究科博士後期課程修了

同年 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所助手

平成11年 名古屋大学情報文化学部・大学院人間情報学研究科 助教授

同 大学院情報科学研究科助教授・准教授を経て、平成21年より現職

平成17年より JST-CREST「マルチスケール・マルチフィジックス現象の統合シミュレーション」領域「生体系の高精度計算に適した階層的量子化学計算システムの構築」研究代表者

専門分野: 高精度電子状態理論、高速量子化学計算法、各種ハイブリッド計算手法の開発

次世代スパコン・シンポジウム2009

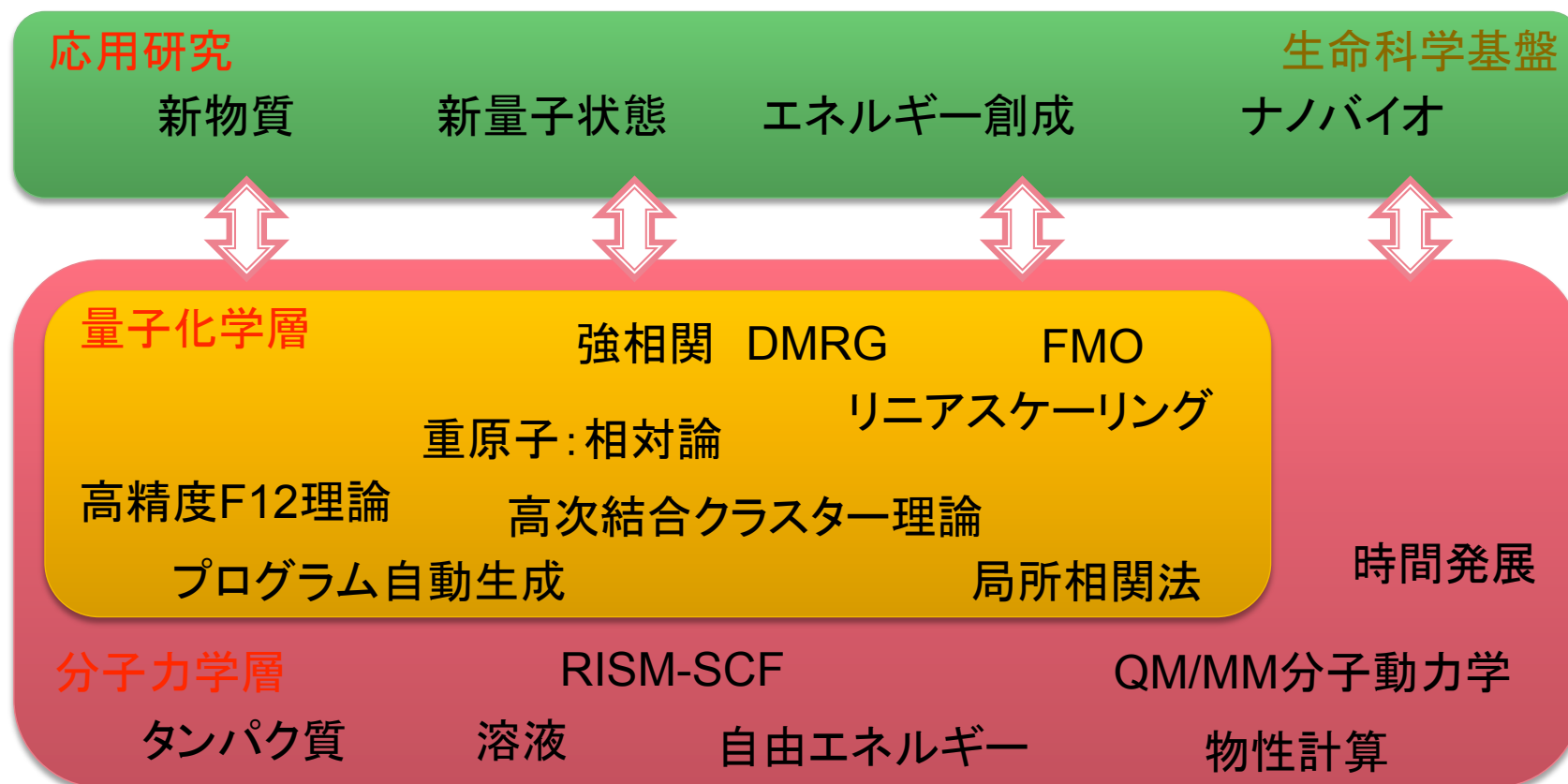
分科会A: 新物質・エネルギー創成

量子化学分野としての意見

天能 精一郎

神戸大学大学院工学研究科情報知能学専攻
tenno@cs.kobe-u.ac.jp

新物質・エネルギー創成 量子化学分野としての挑戦



- 分子ナノ領域の基盤技術の中核であり、我が国は基礎から応用に至まで世界のトップクラスの実績を有する。
- 基盤研究と応用研究の両輪が恒常的に噛み合って大きな成果となる。

既存の手法で可能なこと 新しいブレークスルーが必要な課題

既存の手法のスケールアップで実現可能 分野連携が必要 本質的なブレークスルーが必要

新量子状態
新超伝導物質(高温超伝導、界面超伝導)
ナノサイエンス・テクノロジー 機能性分子・分子集積化による物質開発
エネルギー・環境に関する物質・材料開発
新規物質探索 スピントロニクス
物質変換 2次電池 燃料電池
新規ナノ物質の探索 高効率光触媒
ドラッグデザイン・DDSナノキャリアー材料開発
高効率エネルギー変換
新規触媒設計 超低エネルギー消費エレクトロニクスの開発
酵素反応 ナノバイオ
分子素子 環境調和型の高効率なエネルギー収集・変換・貯蔵
強相関とフラストレーションの共存 ウイルス制御の全原子シミュレーション
次世代電子技術
マルチフェロイック物質(交差相関)
ナノ化学反応場の創成 太陽電池・熱電変換・バイオマス

量子化学分野での課題

高精度計算と分子スケール

- 仮想系ではなく実在系の現象が対象である。
- 計算結果の妥当性を保証するには、極めて高い計算精度が要求される。
- 化学的精度（数kcal/mol=ミリ E_h ）と分光学的精度（ 1cm^{-1} =数マイクロ E_h ）
- 高精度電子相関理論に加え、分子振動や相対論的な効果を考慮する必要が有る。
- 精度を保ちつつ現象に合わせた分子スケールが要求される。

最先端の電子状態理論で実現可能な計算精度

非相対論的な厳密解（フッ化水素）

高精度計算 $-100,4571 E_h$

実験値 $-100,459 E_h$

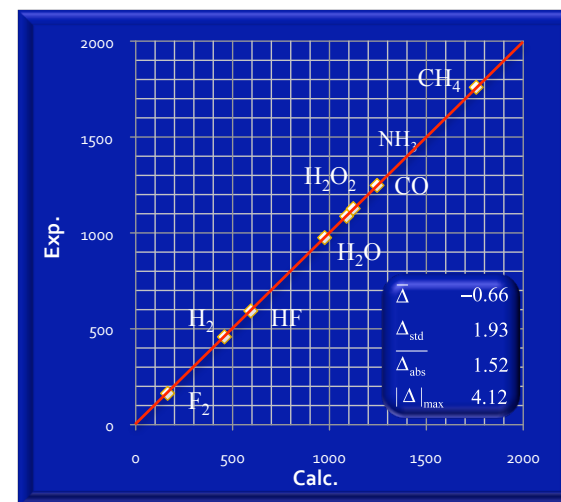
全エネルギーで5桁以上正しい化学的精度が可能。

最も正確なベンゼンの二次摂動エネルギー

高精度計算 $-231.8535(8) E_h$

全エネルギーで7桁の精度。

次世代スパコンでは、相対論的な効果も入れて実験に
匹敵する分光学的精度の計算が可能？



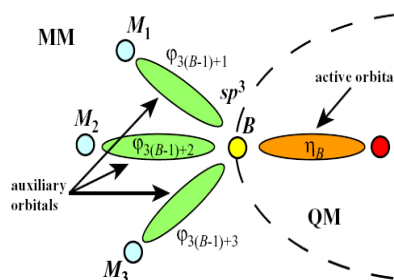
高精度理論計算で得られた
原子化エネルギーの実験との比較 / kJ/mol

$$\Psi^{(1)} = \left[\frac{r_{12}}{2(1+s)} + O(r_{12}^2) \right] \Psi^{(0)}$$

分野融合・分野連携 マルチスケール計算

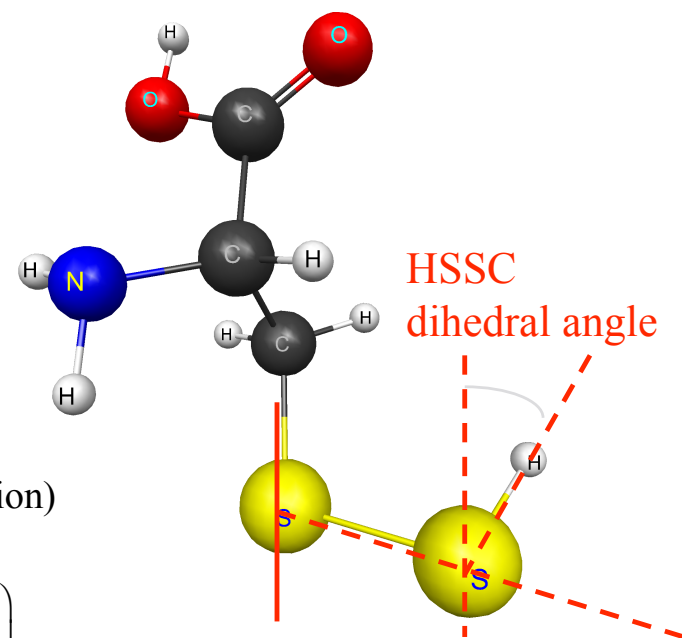
- 膜タンパク、電極界面、溶液、或はそれらの時間発展を考慮するための、異なる力学モデルを繋いだマルチスケール計算法で、必要な精度を保ちつつ様々な応用研究への発展が可能となる。
- 他分野との連携も活性化。
(生命科学、医療、創薬、ものづくり)

GHO QM/MM法による
酵素反応の取り扱い



$$R_k = \text{Im} \langle 0 | \hat{\mu} | k \rangle \cdot \langle k | \hat{m} | 0 \rangle \quad (\text{Length expression})$$

$$\left(\begin{array}{l} \hat{\mu} = -e \sum_{i=1}^N \hat{r}_i \quad (\text{electric dipole moment}) \\ \hat{m} = -\frac{e}{2m} \sum_{i=1}^N \hat{r}_i \times \hat{p}_i \quad (\text{magnetic dipole moment}) \end{array} \right)$$



CDスペクトルをプローブとした
タンパク質の構造解析

分野融合・分野連携 計算機科学

- 従来の数値計算手法には、超並列環境での使用が容易でないケースが多々ある。
(高速フーリエ変換や全対角化、全直交化など)
- 例えば、自己無撞着場(SCF)の計算では N^3 の全対角化を避けるための、手法が重要な課題。
(密度行列最小化法や二次収束SCFの方法)
- 多くの電子相関理論はフォック演算子を対角化して得られる正準軌道を用いられるのが一般的だが、非正準軌道ベースの汎用プログラムが必要。
- 計算機科学分野との連携でどのような問題が解決可能か検討することが必要。
- 神戸中核拠点が分野融合・分野連携を推進。