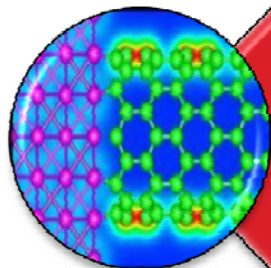


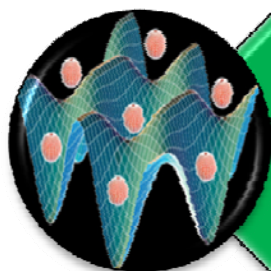
# 物性科学の立場から

東大・理／物性研 常行真司

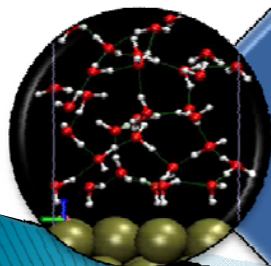
## テーマ



「ナノ」から「サブミクロン」までの  
デバイス物性



新量子状態  
新規物質探索



エネルギー・環境  
物質科学

## 背景

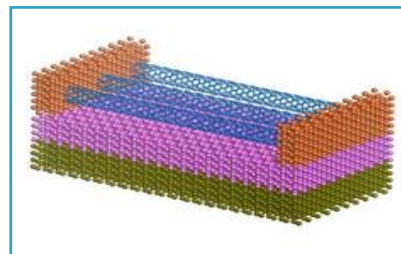
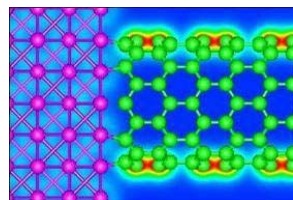
半導体微細加工と量子効果の顕在化  
疲労と破壊  
CMOSの限界 その先にあるものは？

スピントロニクス、マルチフェロイクス  
多体問題と相転移現象  
物性物理学に基づくイノベーション

電極反応(燃料電池)  
光励起(太陽電池)  
熱電材料

# 現状と将来の見通し

## デバイス物性



0.1 nm

1 nm

10 nm

sub  $\mu$ m

Quantum  
Theory

100 atoms

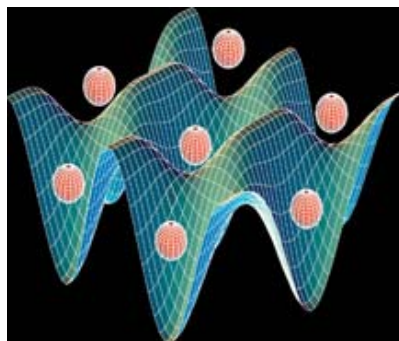
10,000 atoms

100,000 atoms

Experiment

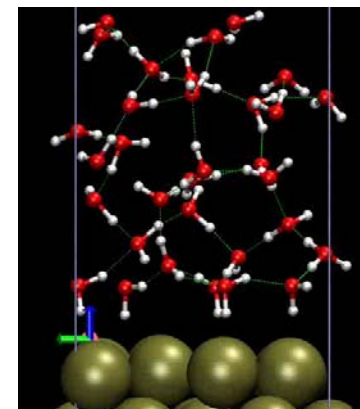
## 新量子状態 新規物質探索

強相関係の第一原理計算  
革新的な量子機能  
新量子相……



## エネルギー・環境 物質科学

燃料電池電極反応、  
過電圧  
Ptを超える正極……



# 人材育成

## ソフトウェア開発者育成の観点から

- ▶ 大学院教育、若手研究者教育、社会人教育
  - 単独の大学、研究機関では困難？
- ▶ 優秀な若手を惹きつけ、計算科学分野に引きとめるには何をすべきか？
  - ある程度継続性のあるポスト
  - 開発者個人が評価される仕組み
  - ソフトウェア公開が評価される仕組み



キャリアパス形成を意識した広報活動

# 産業界との連携とキャリアパス形成

## ▶ 大学・国研から企業へ

- 大学・国研と企業の共同研究
- 複数企業を巻き込んだ基礎研究
- 企業研究者向け講習会



## ▶ 企業から大学・国研へ

- 社会的ニーズに根差した基礎研究
- ソフトウェア技術者の研究参加
- 社会評価と宣伝効果



# 計算機科学者と計算科学者の連携例： RSDFT (実空間密度汎関数法) 開発

## 計算物性グループ

押山 淳(東大)  
白石 賢二  
岡田 晋  
岩田 潤一  
藤本 義孝(Ge表面物性)  
五十嵐 真之(Si表面物性)  
重田 育照(兵庫県立大、MD化)  
古家 真之介(LSDA化、グラフェン物性)

## その他物理屋

宇川 彰(前センター長、格子QCD)  
矢花 一浩(実空間DFT、実時間DFT)

筑波大学計算科学研究センター

## 計算科学・計算機科学屋

高橋 大介(数値アルゴリズム他)  
朴 泰祐(超並列、クラスター)  
佐藤 三久(現センター長、クラスター)  
櫻井 鉄也(数値計算、対角化)  
辻 美和子(スレッド並列化)

## 企業・研究所

日立、富士通、NEC、理研

Gram-Schmidt直交化  
Scalapack 固有値ソルバの応用  
通信最適化  
大規模系での数値精度  
机上性能評価  
SCF収束加速  
固有値問題の高速解法  
前処理  
スレッド並列化対応



# 計算科学研究機構(神戸)への期待

- ▶ 「共鳴の場」として計算科学にイノベーションをもたらすことができるか？
  - かつてのATT Bell研究所、IBM研究所
  - 高エネルギー物理学におけるCERN(欧州原子核研究機構)

滞在したい場所にするには？

CERN 在籍者3400人  
visitor 5500人  
(2001年のデータ)



Restaurant 1 at CERN © COPYRIGHT CERN