



**研究領域名** コンピューティクスによる物質デザイン：複合相関と非平衡ダイナミクス

**研究期間** 平成22年度～平成26年度（5年間）

東京大学・大学院工学系研究科・教授

おし やま あつし  
押 山 淳

### 【本領域の目的】

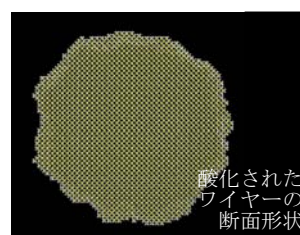
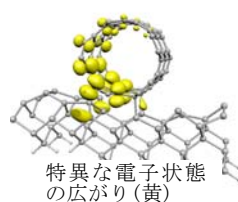
ナノテクノロジーが未来の社会を牽引すると目されている現在、物性科学は新たなチャレンジを要求されている。それは量子論に立脚した、新しいものづくりのパラダイムの提示である。様々な物質創成技術により、人類は所望の元素を所望の構造に作りこむ技術を得つつある。問題は、どの元素をどのように並べるかである。量子論に立脚した計算科学的アプローチは、その科学的土台の深遠さと付随する定量性の故に、この物質デザインの課題に対する本質的貢献を成し得る。

本領域では、計算科学と計算機科学の学融合による、従来の計算物理学の枠を打ち破ったコンピューティクス (Computics) という新しい学問領域の確立、量子論に立脚したアプローチの革新的飛躍、さらには実験研究者との有機的連携により、物質デザインの根幹である複合相関と非平衡ダイナミクスの解明・予測を行うことを目的とする。これにより、経験的ものづくりを演繹的なそれへと進化させるパラダイム変換を目指す。これは、超並列化、多重階層化という変革が始まろうとしているコンピュータ・アーキテクチャ環境の中で、従来からの計算科学のアプローチの困難を解決するものであり、一方、ナノテクノロジーの根幹を支える物質デザインの創出を目指すものである。

### 【本領域の内容】

3つの研究項目、A01 計算機アーキテクチャと高速アルゴリズム、A02 密度汎関数法の新展開、A03 密度汎関数法を超えて、を設定し、11 の計画研究と 23 年度以降の公募研究の推進により、目的達成を目指す。A01 においては、次世代アーキテクチャに対応した高性能コンピューティング原理・技法と大規模線型方程式の高速解法にフォーカスし、A02、A03 での具体的な諸問題に適用して、各種プラットフォーム上での高速コンピューティングを現実のものとする。A02 では、物質計算において大きな成功をおさめてきた密度汎関数理論、時間依存密度汎関数理論を深化・発展させ、非平衡グリーン関数法、様々な動的計算手法との結合により、物質生成・輸送ダイナミクス、バイオダイナミクスの解明・予測のための方法論を構築する。ナノ・デバイス、バイオ物質等における機能発現での、複合相関と非平衡動的効果の役割を明らかにする。A03 では、密度汎関数理論を越える計算手法により、強相関物質での電子物性・スピン輸送、光励起における強相関効果解明

などを通じ、強相関系における静的・動的現象の特異性を明らかにする。さらに超伝導発現機構を、第一原理に基づく理論により明らかにし、新超伝導物質の探索を行う。



図：計算で明らかにされた、Si(100)面原子ステップでの炭素ナノチューブ(左)と、直径 10nm の Si ナノワイヤ(右)での電子密度分布。

### 【期待される成果】

次世代、次々世代の発展するコンピュータ環境の中で、コンピュータのハードウェアをも視野にいた、先端的量子科学計算が可能になり、今までは解明不可能であった、現実の物質における複合相関現象と非平衡ダイナミクスが明らかになる。実験研究との連携により、演繹的な物質デザインの方法論が構築されることが期待される。これにより、次世代テクノロジーを担う新物質、新構造が提唱され、新たな産業のシーズが見出されることが期待される。

一方、量子科学計算のフロンティアを広げることに伴い、基礎科学の方法論が発展・深化し、新たな量子相、新現象が、コンピューティクスというアプローチにより、見出されることが予想され、基礎科学への貢献も期待される。

### 【キーワード】

**コンピューティクス**：コンピュータのハードウェアの知識を活用した先端的計算科学手法の開拓と新たな計算原理の構築を目指す融合学術分野  
**第一原理**：量子力学の基本原則  
**複合相関**：電子相関、ナノ形状等が織りなす多重的な相関

### 【ホームページ】

<http://computics-material.jp/>