

# サイ・テク 知と技の発信

【419】

## 埼玉大学・理工学研究の現場

物質の性質を計算機シミュレーションから予測したい。前世紀から多くの研究者が実現に向けて取り組んでいる夢である。ほんの一期の物質には、いわゆるアボガドロ数(約 $10^{23}$ )個以上の膨大な原子が含まれている。原子は、時に周期的な結晶構造を組んでいる。原子は、原子核と電子から成っている。電子は原子の間を飛び移ることもできる。それら電子の状態が、その物質が半導体であるか、金属であるか、もしくは超伝導など互いに相互し合う状況において

では、それらの電子の運動を計算機シミュレーションで予測できるだろうか。膨大な電子の個数から容易に想像できるように、現在の計算機をもって困難を極める。実は、それぞれの電子が従う基礎方程式は、シュレディンガー方程式と呼ばれ、その形自体は量子力学の創始期からよく知られている。ただし、膨大な数の電子が互いに相互し合う状況において

は、その厳密な解を求めるのは不可能である。物理学や化学の分野において、「第一原理計算」と呼ばれる一大研究分野がある。第一原理計算とは、シュレディンガー方程式という、電子が従う最も基礎的な方程式(第一原理)に立脚し、電子の状態を決めることで、物質の性質を予測するという指導原理である。先述述べたように、実行は非常に困難なので、ある種の近似や簡

# 計算機による物性予測

## 品岡 寛 助教



品岡 寛(ひろし) 1982年生まれ。2009年、東京大学大学院修士課程(工学)博士。博士研究員として、東京大学物性研究所、産業技術総合研究所、スイス連邦工科大学チューリッヒ校で勤務した後、16年から現職。専門は、計算機を使った物性物理学の研究。

単化を行う必要がある。最も成功した理論的な枠組みが、密度汎関数理論である。密度汎関数理論は、物質が半導体か、金属かを区別するなど、多くの物性の評価を可能にし、凝縮系(結晶)や分子などに、さまざまな物質に適用されている。実際、その研究で主導的な役割を果たしたウォルター・コーン は、1998年にノーベル化学賞を受賞した。密度汎関数理論に基づき計算ソフトウェアは、市販のものから、誰でも開発に参加できる。一方、密度汎関数理論では取り扱ったことができない現象も数多く残されている。専門的になるが、例えば、ある種の遷移金属酸化物が示す高温超伝導はその一例である。これらの物質では、電子間の相互作用の影響が殊に強く、それを扱える理論を作る試みが数十年にわたって行われている。現在、人類の水準はその目標には至っていないが、もし可能になれば、基礎化学だけではなく応用まで含めたインパクトが期待される。