

物質科学と情報科学の交差点: 計算物質科学

Crossover between materials and information sciences



尾崎 泰助 (Taisuke Ozaki)

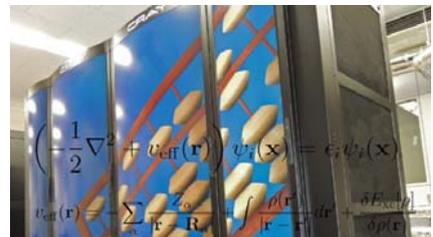
シミュレーション科学研究センター

2013 10/25(金) 12:40 – 13:20

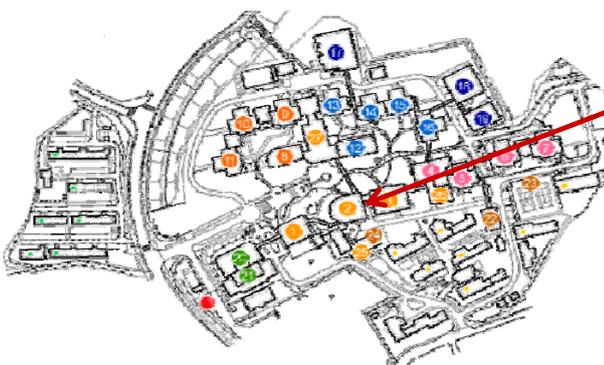
会場：ラーニング・コモンズ 「J-BEANS」

量子力学の基本方程式であるDirac方程式を導出したDiracは、「大部分の物理と、化学の全ての基本原理はこの方程式の中にある。ただし現実問題に対して方程式を厳密に解くことはあまりに困難な課題である」と述べています。この言葉の前半部に関しては、現在の物理学者は原理的には正しいと考えています。つまり、もしDirac方程式を任意の系に対して厳密に解くことが出来たならば、原理的には実際の実験を行う前に物質の化学的・物理的性質を予言できるはずで、これは物質科学における夢の一つです。一方でその言葉の後半部も、ある意味で正しいと考えられています。電子数 N の系に対してDirac方程式を厳密に解くための計算量は $O(e^N)$ として増大することが知られています。しかし、この計算困難を乗り越えるために20世紀の半ばより様々な計算手法が提案され、現在では産業界で議論されるような複雑な物質の計算も可能になりつつあります。ここではスーパーコンピュータ「京」に代表される超並列計算が鍵となっており、物質科学と情報科学の緊密な連携が必要となっています。

セミナーでは量子力学の基本方程式に基づく第一原理計算の現状と展望を紹介します。



The slides are written in English. Foreign audience is welcome!



ラーニング・コモンズJ-BEANSは、大学会館1階(旧・交流ホール)です。
J-BEANS is located on the 1F, Institute Hall (former 'Community Hall').

J-BEANSセミナーは、JAISTで行われている研究の知識共有を目指しています。専門家以外も楽しめるセミナーを行いますので、ぜひ講師以外の研究科の方もご来聴下さい。

担当教員：マテリアルサイエンス研究科 准教授 小矢野幹夫