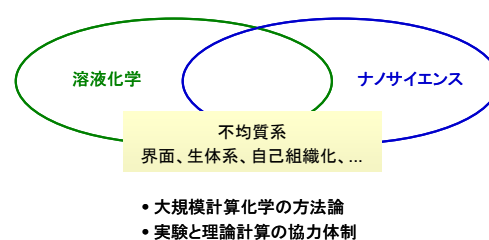


ディビジョン番号	3
ディビジョン名	理論化学・情報化学・計算化学

大項目	1. 理論化学
中項目	1-4. シミュレーション
小項目	1-4-3. 分光理論

#### 概要（200字以内）

溶液内の分子科学は理論と実験の協力のもとに解明が進み、今後の発展としてはナノスケールでの界面・不均質系の研究が大きなフロンティアである。理論化学としては、次世代スパコンの大規模計算を駆使して分子レベルからの解明を行う手法を開発するとともに、界面構造解析の実験手法との密接な協力関係を築くことが現在の重要な課題である。自己組織化の理解や生体膜、有機薄膜の構造解析などのナノサイエンスに対して今後大きな貢献が期待される。



#### 現状と最前線

多くの化学反応が起こる場として古くから多くの研究がなされてきた溶液化学において、近年時間分解分光の実験や分子動力学シミュレーションによって分子レベルでのダイナミックスの解明が進み、実験と理論が密接な協力関係をもって進む研究体制が大きな成功を収めてきた。分子をベースとする化学・分子科学の発展の方向として、今後大きく複雑な系を対象とする研究への進展は大きな潮流であり、生体系やナノ物質の研究も重要なターゲットとして捉えられる。その中で溶液化学における今後の研究の重要なフロンティアは、分子スケールを超えたナノメートルオーダーでの構造の関わる領域にあると考えられ、広く不均質系や界面の問題が大きな注目を集めている。

不均質系における自己組織化構造や界面現象は、実験的にも理論的にも非常にチャレンジングな対象である。実験的には分子レベルの構造やダイナミックスの情報を詳細に得る手段が極めて乏しく、また分子をベースにして理論計算を行うには計算コスト上もしばしば非現実的なほど大きい。理論化学の立場としては、(1)次世代スパコンプロジェクトに代表されるような計算機資源をフルに活用して、従来の理論化学の枠を超えた大規模計算を進めること、(2)限られた実験手法との協力を築き、不均質系で得られる実験情報を理論計算によって最大限に引き出す手法を確立すること、の2つが求められている。

(1)の課題において大規模計算を進めるには、単にハードウェア上での演算性能の向上だけ

でなく、理論化学上の新たな理論・計算方法の開発が不可欠である。今後の大規模計算は明らかに超並列計算になっていくが、従来の理論化学で用いられている分子軌道計算や分子シミュレーションは一般に並列計算に向かないものが多く、今後アルゴリズム上のブレークスルーが必要である。これは従来のソフトウェアのチューニングに留まらず、新しい理論の開発につながっていく可能性が高い。

(2)においては、実験手法の進展と密接に関わった課題である。溶液界面や埋もれた界面などをプローブする手法の開発は表面科学としても最前線の課題であり、非線形分光が最も期待されている領域である。しかし得られた結果を分子レベルで解釈するのはしばしば容易でなく、理論計算のサポートが強く求められている。

#### 将来予測と方向性

・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題

\* 並列度が 10,000 を超えるような並列計算環境で、電子状態計算や分子シミュレーションの大規模計算を可能とすること。

\* 溶液・高分子などの界面・不均質系の構造解析として、非線形分光と理論計算が直接的な比較を可能とする協力体制を築くこと。

・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

\* 10ペタフロップス級の計算機を用いて、ナノスケールの不均質系の構造や自己組織化の機構などを分子レベルの計算化学で解明すること。

\* 理論計算に基づく界面解析手法を生体膜、有機薄膜やデバイス界面などの局所構造の解明に応用し、広く実用化を進めること。

#### キーワード

超並列計算、界面、不均質系、非線形分光、