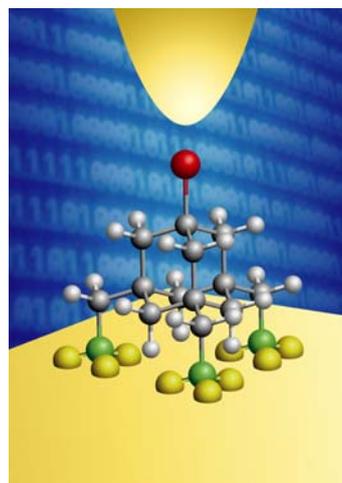


ディビジョン番号	3
ディビジョン名	理論化学・情報化学・計算化学

大項目	3. 計算化学
中項目	3-4. 材料設計
小項目	3-4-1. シミュレーション基礎理論

概要（200字以内）

実環境下に置かれた分子や物質の理論シミュレーションを行う事により実験で捕らえきる事が容易では無い、極微領域での過渡的現象を“見る”事が可能になりつつある。この事により計算化学はその重要性を飛躍的に増すであろう。こういった進展を可能にする為には、シミュレーション基礎理論を重視し、それに先導された大規模・高精度計算と、その結果を普遍化する為のモデル理論構築を併せて力強く推進して行く事が重要である。



現状と最前線

電子材料研究は化学産業において意外な程大きな比重を占めている。近年の有機半導体研究や有機EL材料研究において化学の果たしてきた主導的な役割には目を見張るものがある。デバイスの微細化に対する更なる要求の中で期待が高まっている分子エレクトロニクス研究を含む分子ナノテクノロジー（1）において、化学の果たすべき役割は一段と大きい。

分子材料の電子物性をデバイスとして利用する為には、原子・分子・クラスターの電子・スピン状態を巨視的なプローブで操作する必要がある。非平衡環境下で巨視系と相互作用する原子・分子・クラスター中の電子系については、基礎科学面でも未解明の部分が多くその理解と技術応用が相互協力的に進展する事が重要である。

この様なナノ構造電子系の理解を深める為には計算シミュレーションが有用である。原子・分子スケールの“見えないものを見る為の顕微鏡”として、空間・時間分解能の双方に利点がある。しかしながら、現在の理論化学・計算化学は実験が実際に行なわれている非平衡開放環境下の物質の記述が不得手である。この現状を是非打開する必要がある。（2）

実は、単一分子電気伝導の理論研究において、こういった研究が既に進展している。有限電圧が印加された巨視的な電極と接合した原子・分子・クラスターを介しての電気伝導の第一原理電子状態計算が、電極・分子架橋系に対して行われているのみならず、伝導に伴うジュール熱発生などの複雑な物理過程まで理論シミュレーションで予測出来る様になりつつある。こう

いった理論シミュレーションが可能になったのは、高度な理論物理的数値手法に基づくシミュレーション基礎理論の進展による所が大きい。シミュレーション基礎理論の更なる発展により、より多くの現象“そのもの”の理論シミュレーション予測、即ち実環境材料シミュレーション予測が可能になると期待できる。シミュレーション基礎理論に先導された大規模シミュレーション研究とその理解を深めるモデル理論構築の加速的進展が強く望まれる。

文献)

(1) *Nanotechnology: Next Big Idea*, Mark Ratner and Daniel Ratner, (Prentice Hall, New Jersey, 2003)

(2) 多体問題に重心が置かれている等、力点の置き方が少し異なるが、類似点があるユーロプロジェクトとして Ψ_K ネットワーク <http://psi-k.dl.ac.uk/> がある。

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

ナノテクノロジー問題では物性理論分野と理論化学・計算化学分野の間に明瞭な境界は存在しない。物質科学に相応しい理論基盤を構築する為に、両者を融合的に発展させる環境を整備する事が急がれる。

・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

ナノテクノロジー推進に必須である、もう一つの重要な研究分野に局所計測実験がある。両者のより緊密な連携を構築すると共に、その成果を生体分子系や溶液・電気化学系などのより広い問題に波及させ、これらの複雑分子系における我々の理解をより微視的なレベルに引き上げる事が必要である。

キーワード

実環境下の材料シミュレーション、非平衡開放系、シミュレーション基礎理論、“見えないものをみる” 計算科学、分子ナノテクノロジー

(執筆: 浅井 美博)