



あるシリセンの同定にも成功しました。計算手法・ソフトウェアの実用性が高まるにつれて企業研究者の方々との協同研究もこの間にスタートし、現在に引き継がれています。また「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用プロジェクト(NAREGI)」、「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」、「計算物質科学イニシアティブ(CMSI)」に参画し、計算物質科学において超並列計算がいかに重要であるのか再認識し、超並列化第一原理電子状態計算の適用限界を大きく拡張してきました。しかし計算手法・ソフトウェア開発は一筋縄でいくものではなく、定式化のやり直しやそれに伴う数十万行に及ぶプログラムの再構築、周期表に亘る擬ポテンシャルデータベースの再三に亘る再構築等、時間も労力も掛かる厄介なものであることは事実です。

さて今後、計算物質科学はどの様に発展していくのでしょうか？ 超大規模並列計算機による第一原理電子状態計算はどこか「バベルの塔」の試みに似ているように感じますが、計算の予測能力は今後、増大していくことは間違いありません。予測能力の高まりに伴い、実験に先立ち物質設計を行う事例も増えると思われれます。実際に最近、常識を覆す新しい結晶構造が第一原理電子状態計算から予言され、その後実験により確認された事例がいくつも報告されています。予測能力の高まりにより役に立つという意味で物質科学における計算物質科学の重要性は疑いのないものになると考えられます。しかし数値計算が出来て予測能が高まったからといって、我々がその現象を理解したわけではありませんので、そのことに不安を感じる正統的な物理学者もおられると思います。しかし実験に先立ちシミュレーションによって新しい結晶構造や物理現象が見出されたならば、それは喜ばしいことで、その後には逆に従来の物理の立場からいかにその現象が理解できるのか模索する研究が始まる契機を与えることになります。新しい物質科学のフロンティアを拓くための頼もしい相棒が増えたことになり、計算物質科学は独り立ちしたことを意味するのではないかと思います。スーパーコンピュータ「京」のプロジェクトに続く、ポスト「京」プロジェクトが始まろうとしておりますが、その様な計算物質科学の未来に向けて今後、研究を進めていく所存です。

