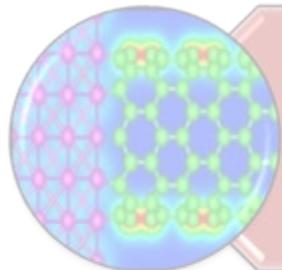
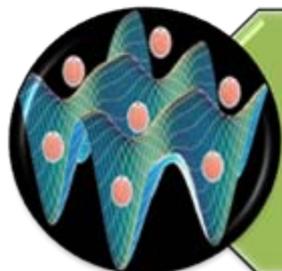


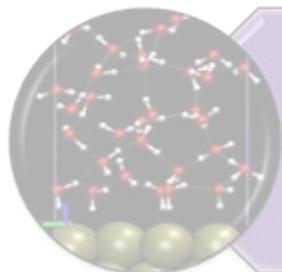
次世代スパコンで推進すべきテーマ



「ナノ」から「サブミクロン」までの
デバイス物性

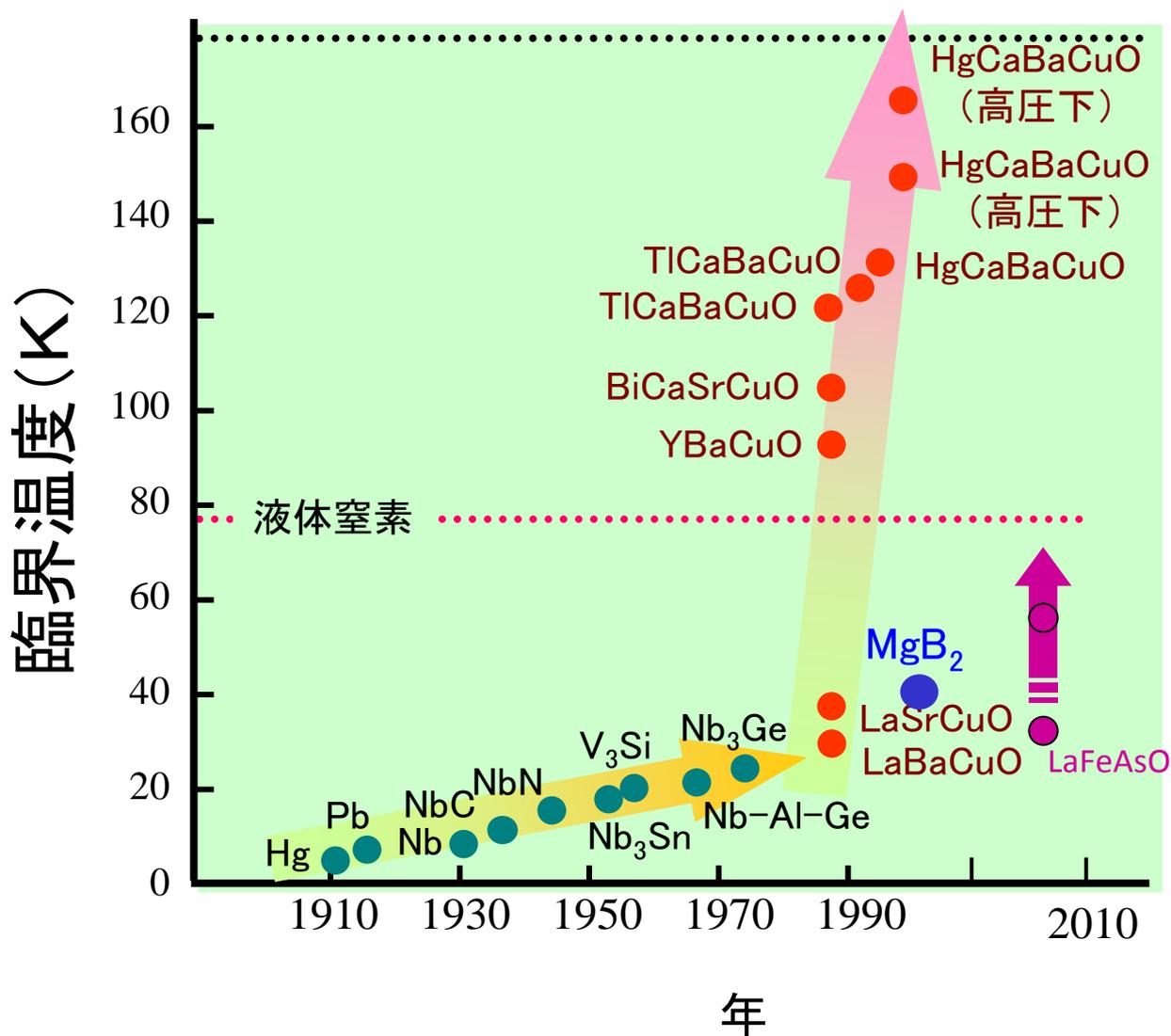


新量子状態・新規物質探索



エネルギー・環境物質科学

超伝導臨界温度の変遷

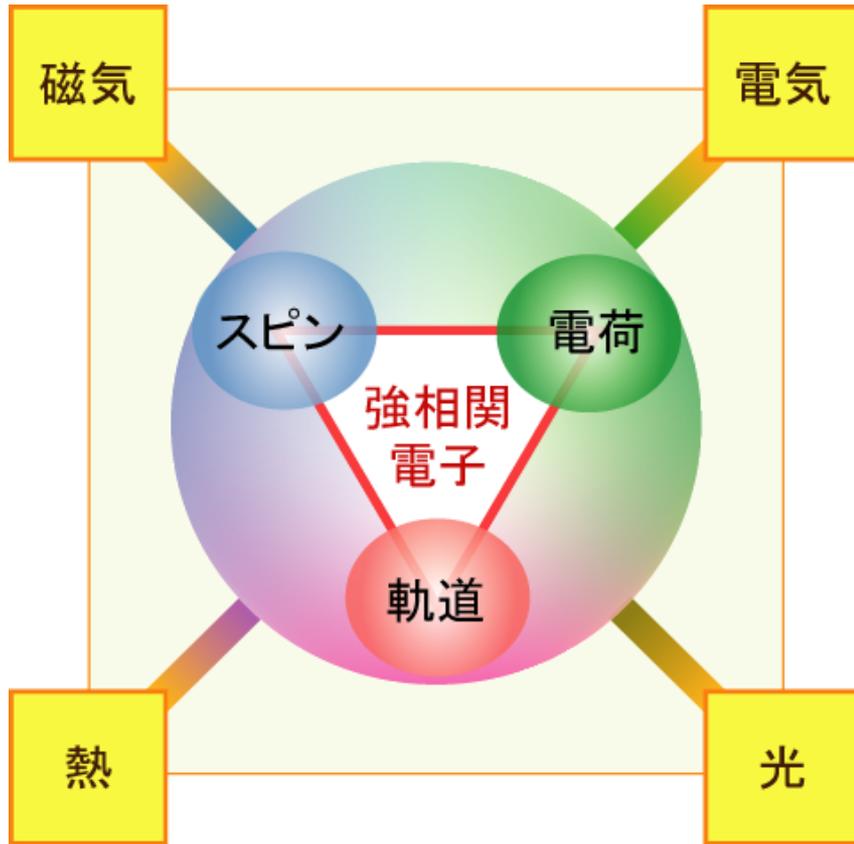


細野秀雄

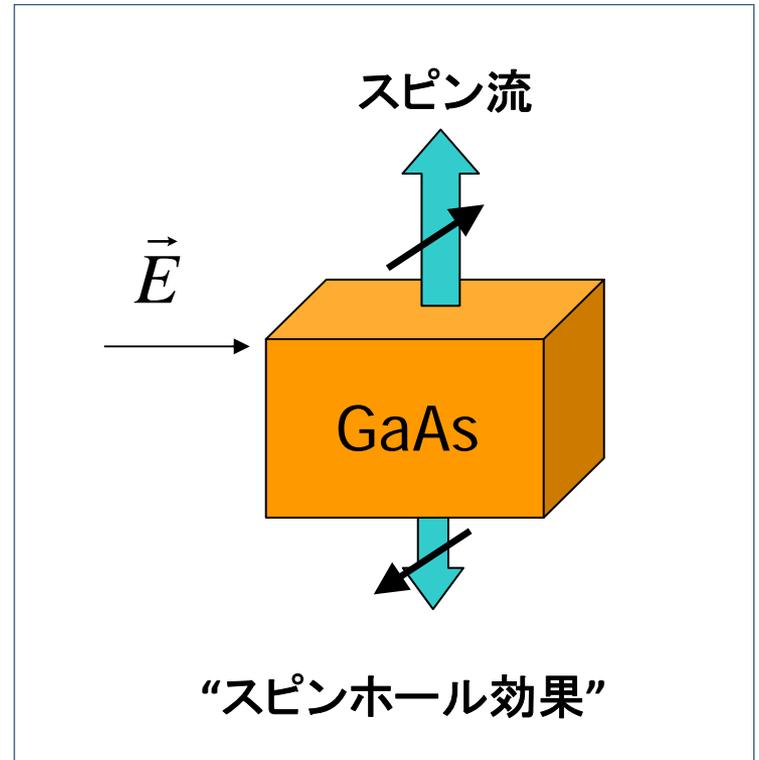


秋光 純

新しい物理現象



「交差相関物性」(十倉G)



「ベリー位相エンジニアリング」(永長G)

電気-磁気-光-熱の各物性・機能を相互に結びつける物質相

固体の高精度第一原理電子状態計算

今後5年間で飛躍的な展開が期待される手法

電子相関効果の精密な取り扱い

- 格子模型との組み合わせによる多段階スキーム
- 波動関数理論 (TC法, DMC法など)

今田G、常行G (東大) 他

複雑な系の高精度な物理量計算

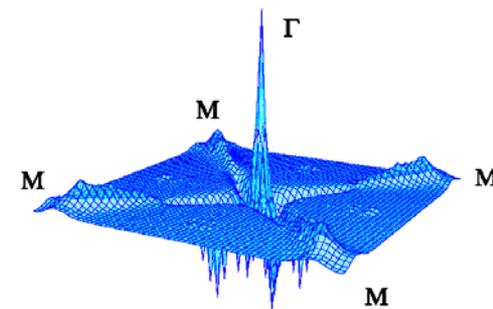
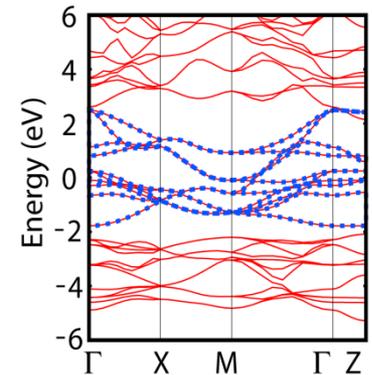
- 超伝導, 異常ホール効果, 磁気抵抗, 熱電効果など

赤井G (阪大)、永長G (東大) 他

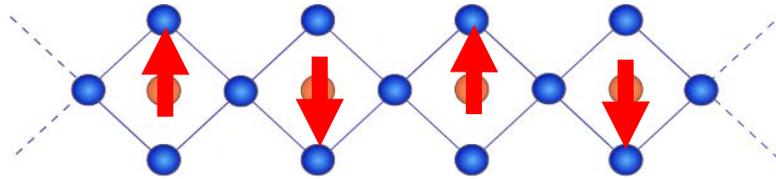
固体の電子励起状態の精密計算

- Bethe-Salpeter eq., GW Γ 法など

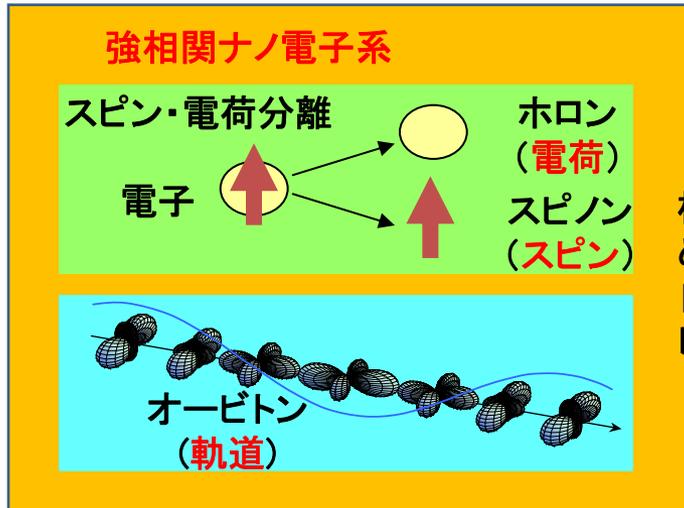
高田G (東大)、三宅 (産総研) 他



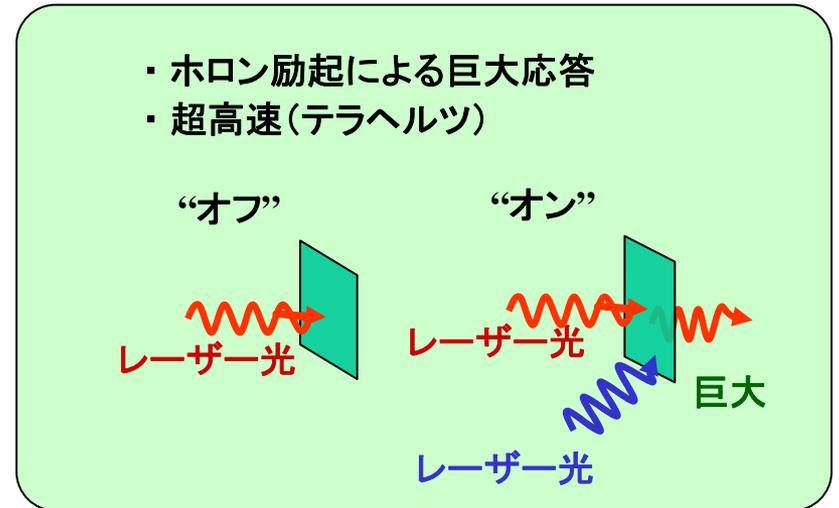
強相関電子系を用いた巨大・超高速応答光学材料



遠山G(京大)、前川G(東北大)



格子系まで含めた電子内部自由度シミュレーション



動的密度行列繰り込み群法・厳密対角化法

現状

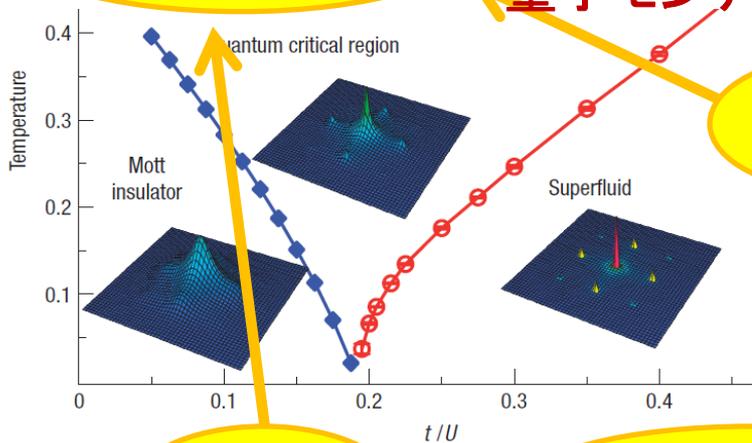
巨大応答の起源と格子振動を含めたナノ強相関電子系の線形光学応答解明の端緒。

今後5年

格子振動を含めたナノ強相関電子系の非線形光学応答と緩和過程ダイナミクスの大規模数値シミュレーションから、次世代巨大・超高速応答光学材料の設計指針を構築。

量子多体問題の新展開

新量子現象・
ナノ物質設計



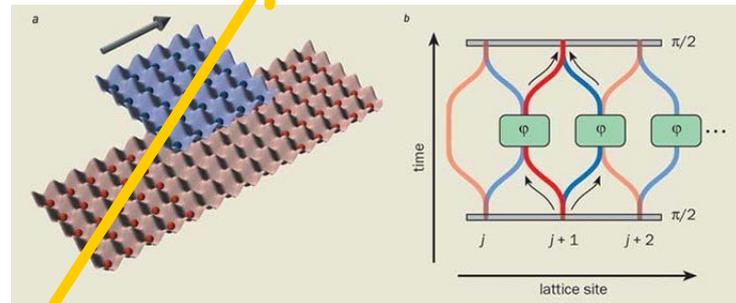
量子モンテカルロ法

超伝導

量子情報処理

実時間発展シミュレーション

量子デバイス



超流動

ハバード模型

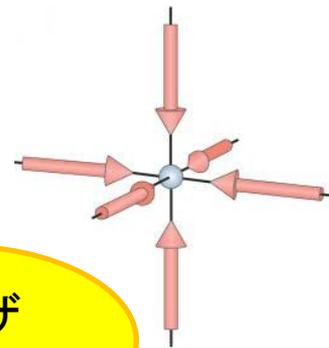
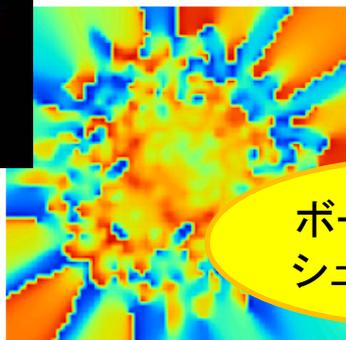
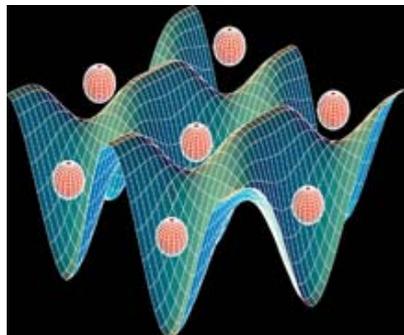
光格子

ファインマンの
「量子シミュレータ」

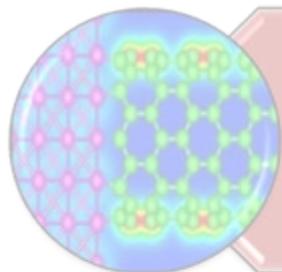
超低温原子

ボーズ・アイン
シュタイン凝縮

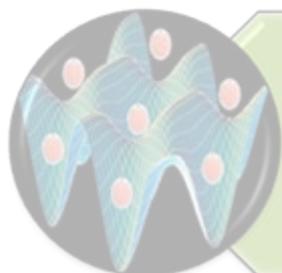
レーザ
冷却技術



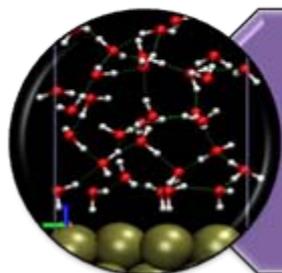
次世代スパコンで推進すべきテーマ



「ナノ」から「サブミクロン」までの
デバイス物性



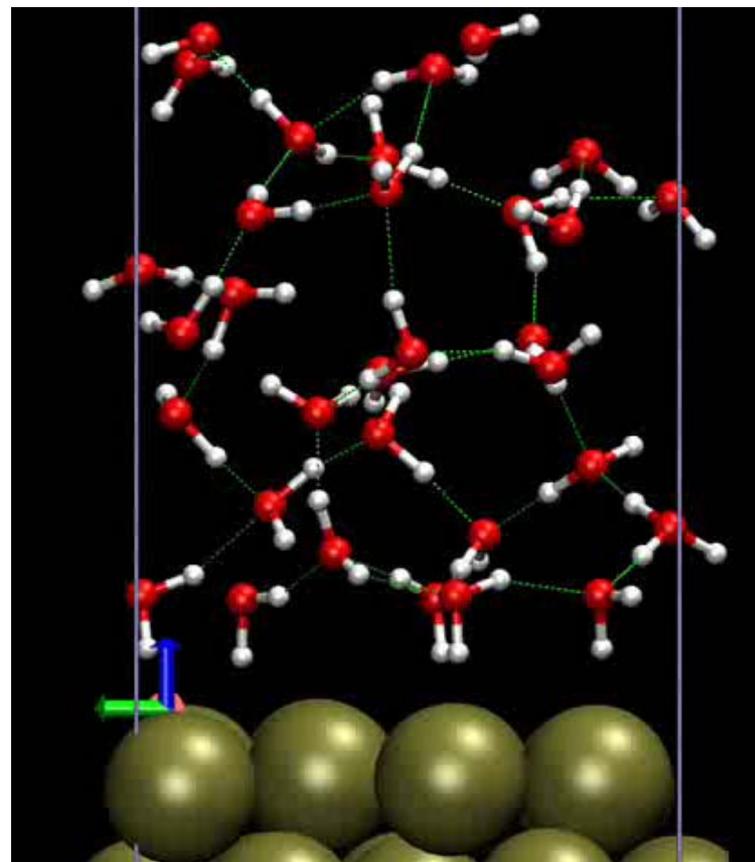
新量子状態・新規物質探索



エネルギー・環境物質科学

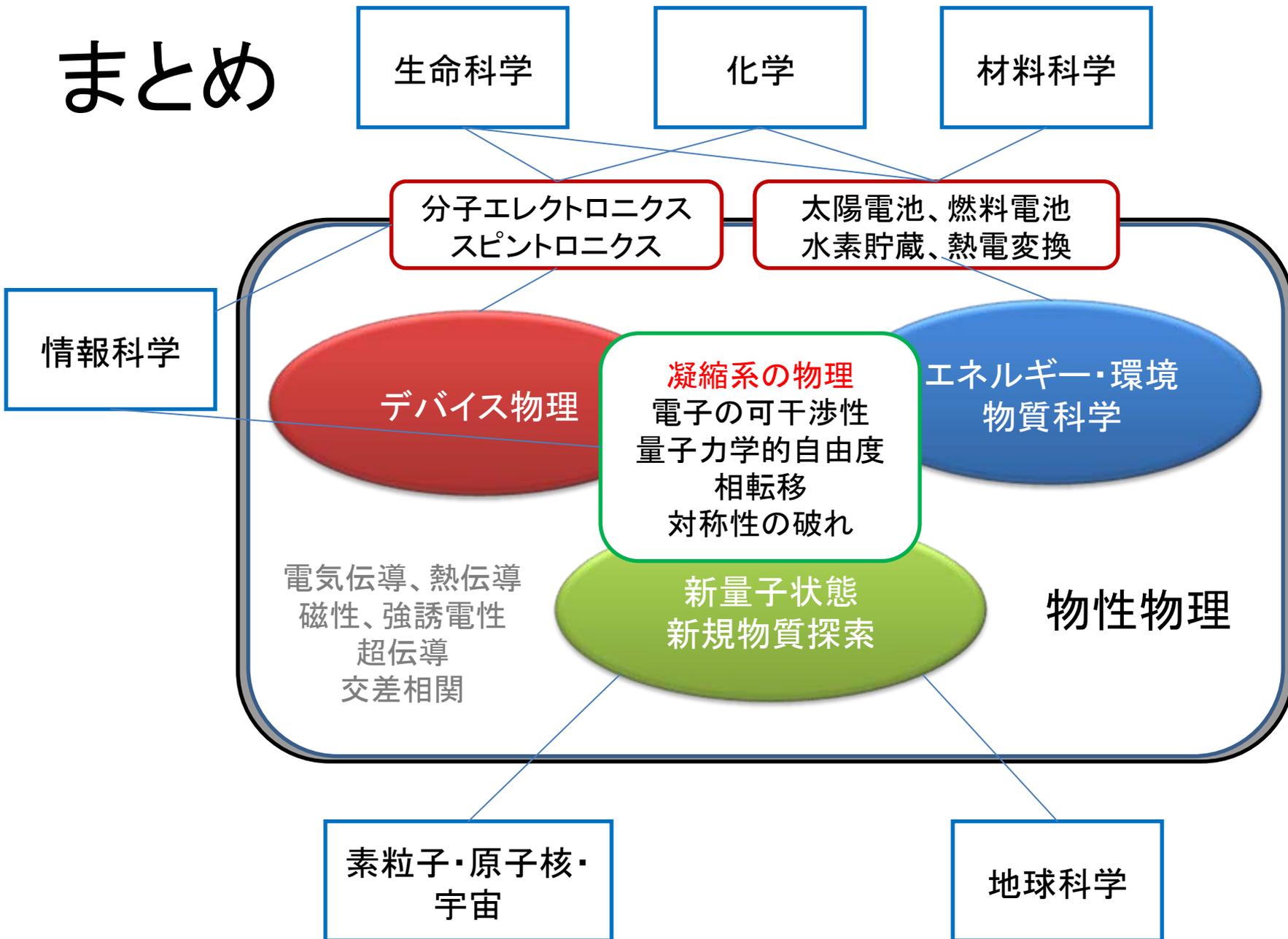
固体・水溶液界面の物理と化学

- ターゲット
 - 電極反応、燃料電池反応
 - 錆の発生
 - 超親水・疎水表面
- 現状
 - 電極を扱う基礎理論の開発
 - 電位差の印加と電気二重層形成
- 将来
 - 複雑界面(複合ナノ構造、合金等)での反応効率向上の可能性を探索
 - 関連する現象への応用: 錆発生、生体膜



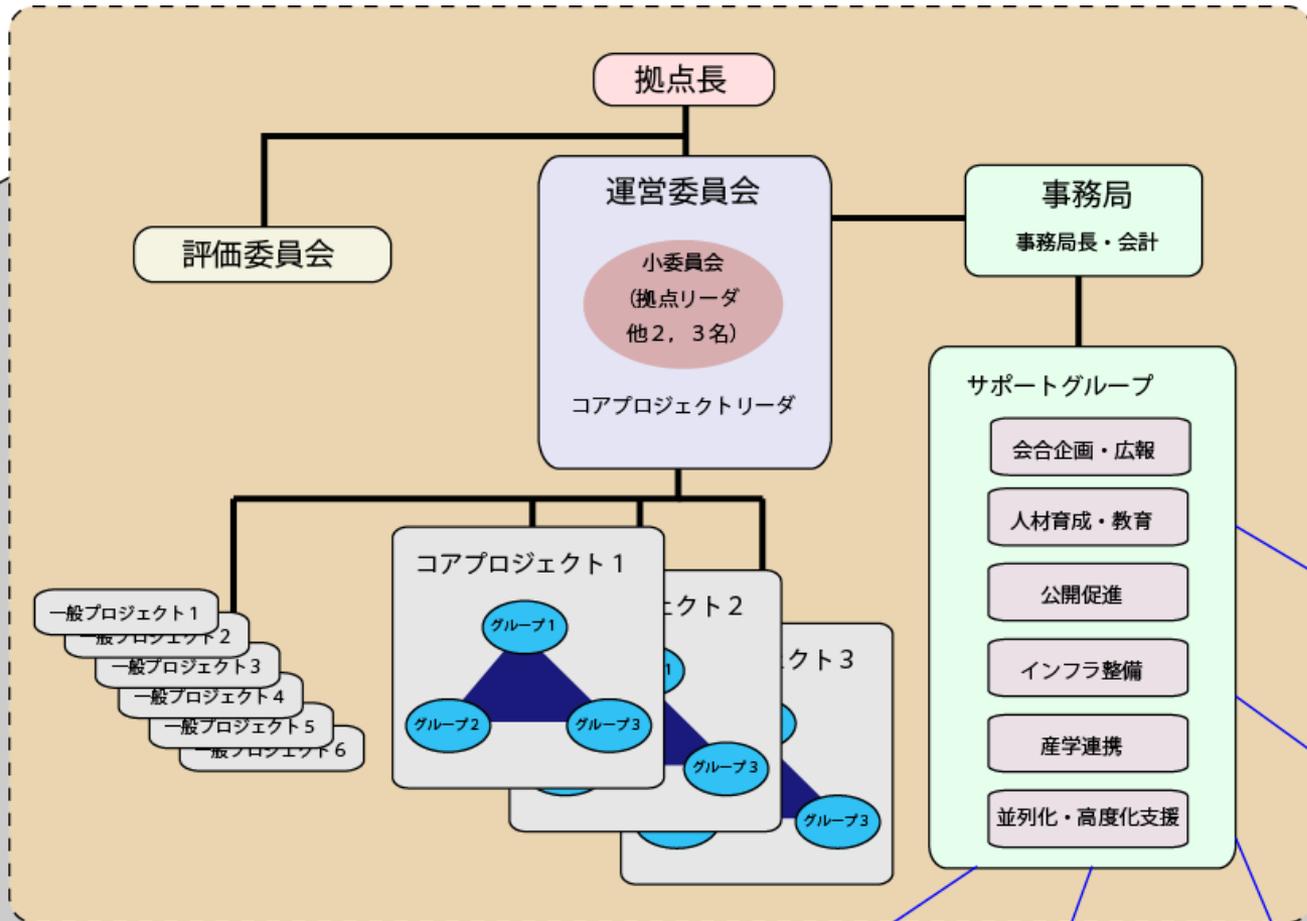
杉野G(東大)、森川G(阪大)、池庄司G(産総研)

まとめ

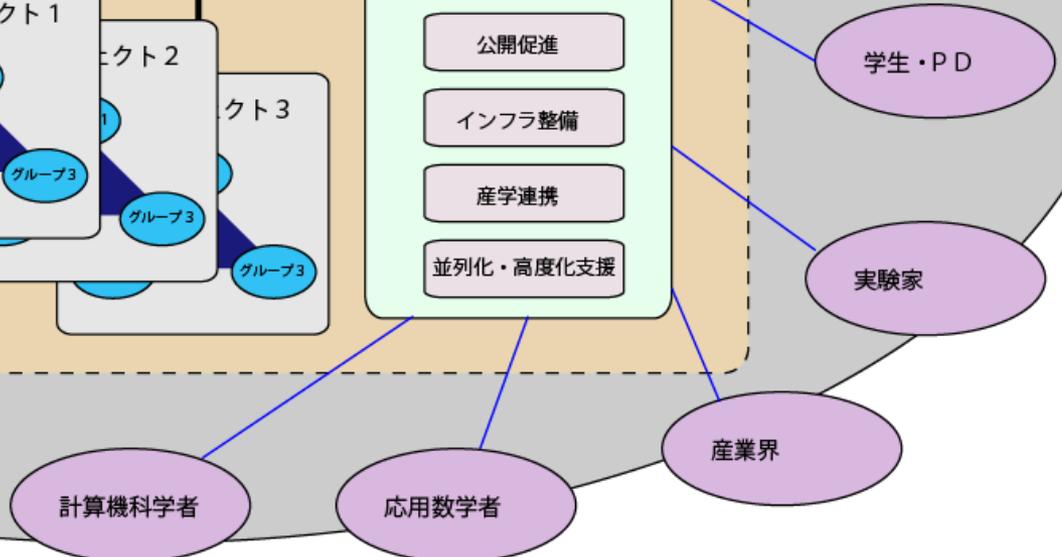


ナノ物性物理学分野における 戦略機関のイメージ

参考 (H20年度):
物性研スパコン登録
プロジェクト数 178
登録者数 462



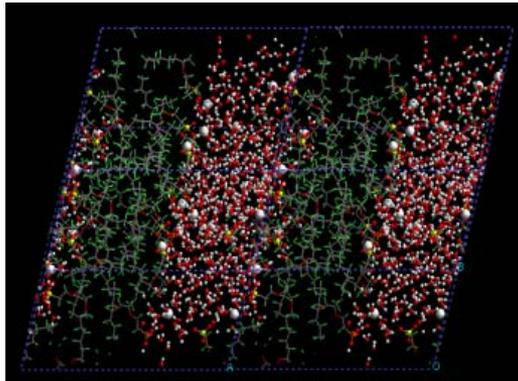
計算物性物理
コミュニティ



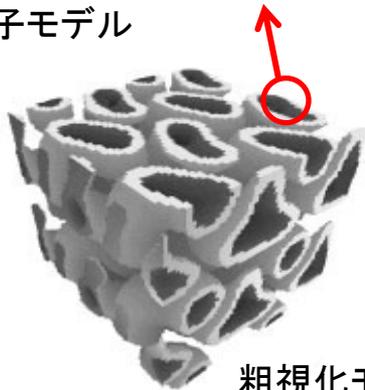
「分子ナノサイエンス」と「ナノ物性物理学」 の連携の可能性

例：燃料電池

高分子電解質膜／ソフトマター

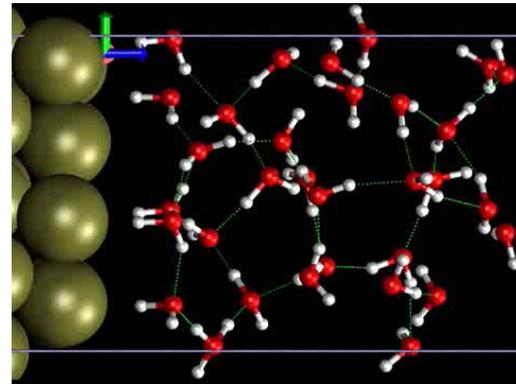


分子モデル

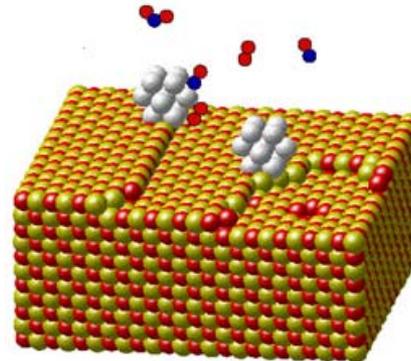


粗視化モデル

電極反応



触媒



プロトン伝導

