

計算物質科学分野における 数学・数理科学の必要性

常行真司

東京大学・大学院理学系研究科／物性研究所

4/24/2015 数学イノベーション委員会

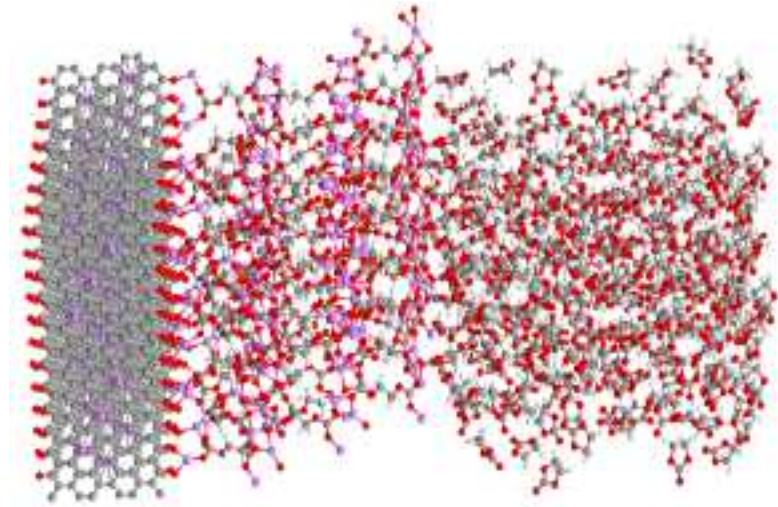
1. 物質構造探索

➤ 必要とされる分野

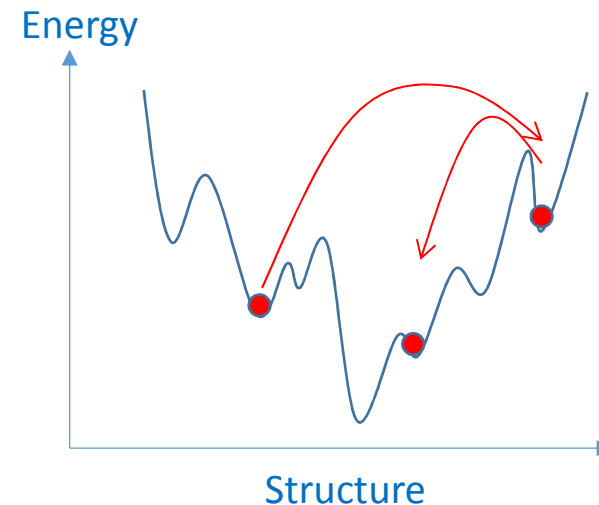
- 新物質, 新材料
- 半導体と酸化膜の界面
- 固体・液体の界面(電池, 触媒)
- 磁石材料の粒界
- 構造材料(金属, セラミックス, ポリマー)

➤ 数学・数理科学の課題

- 計算機による探索
(多自由度最適化問題)
- 回折実験など, 実験データの解釈
(逆問題)
- 両者の組み合わせ
(データ同化)



二次電池電極界面モデル(NIMS 館山グループ提供)



2. 物質合成, 材料創製

➤ 必要とされる分野

- 新結晶, 新物質
- 材料組織制御

➤ 数学・数理科学の課題

- 非平衡プロセスの数理モデル
例: MOVPE (Metal-Organic Vapor Phase Epitaxy)
- **マテリアルズ・インフォマティクス**



単結晶引上炉

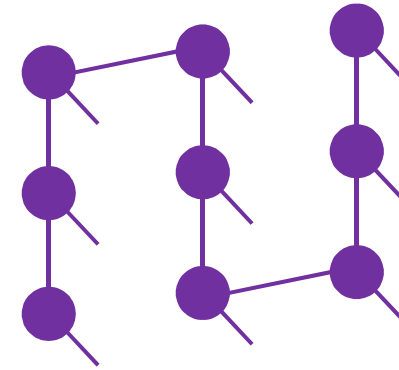
3. 量子多体問題

➤ 必要とされる分野

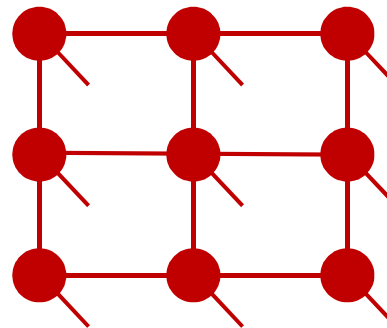
- 相関の強い電子系の高精度計算

➤ 数学・数理学の課題

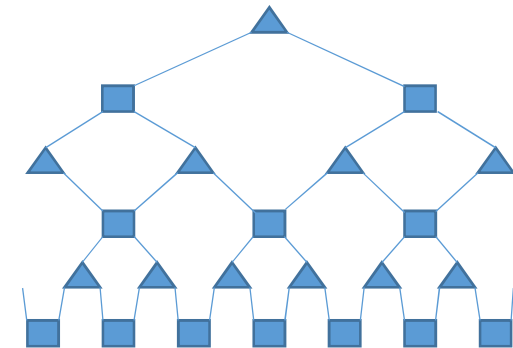
- 多体波動関数理論
「テンソルネットワーク」
汎用性
数値的安定性



Matrix product states



Projected entangled-pair states



The multiscale entanglement renormalization ansatz