

MASAMUNE-IMR

Materials science Supercomputing system for Advanced Materials simulation towards Next-generation frontiers for Materials Research

# スパコンプロフェッショナル Supercomputer Professional

No. 20

平成31年 **2月14日** (木)  
14:00~15:30

日時

金属材料研究所  
2号館 1階ラウンジ

場所

※ お申込みは不要です。当日はお気軽にご参加ください。

## 「正しい計算材料学のあり方 —間違った理論でも実験は説明出来る—」

東北大学未来科学技術共同研究センター シニアリサーチ・フェロー

川添 良幸 先生



25年程前、数個の原子を含む単位胞でのみ可能だったバンド計算を実用材料として意味のある系にまで拡張することは極めてチャレンジングな研究対象でした。幸い、本所への材料設計専用スパコン導入に成功し、フラーレンへの原子挿入の第一原理分子動力学シミュレーションを実行し、「計算材料学」という用語を作りました。我々は、他では出来ないレベルでの基礎理論自体の抜本的進展を目指し、系のエネルギー絶対値算定法を開発しました。さらに、多体問題の困難性、特にハイトラー・ロンドン模型やハーバード模型の様な2準位模型の本質的誤りを明らかにしました。例えば、磁性基底状態実現には、電子交換相互作用ではなく空間波動関数の違いが最も効いていることを証明しました。京の最初の目的や概念仕様策定に関わった経験も含め、将来のスパコンプロフェッショナル育成を目指した話題を提供します。

■ 主催 CCMS 東北大学 金属材料研究所 計算材料学センター 東北大学 金属材料研究所 計算材料学センター

■ 協賛 計算物質科学 人材育成コンソーシアム

ポスト「京」萌芽的課題 「基礎科学の挑戦」

■ 「MASAMUNE-IMR」は国立大学法人東北大学の登録商標です