

物性研究と計算物理

慶大・理工 久保亮五

昭和55年から57年度にわたって文部省科学研究費補助金（特定研究）による学術研究動向の調査研究が行なわれ、その一部として物性物理学が取上げられた。この物性物理学班は筆者を代表者、阪大理学部伊達教授を幹事とし、多数の物性研究者の協力を得てかなり広汎な問題について資料を蒐集し、討論を行った。その成果の概要は、「物性物理学の動向 調査報告書第1部」として本年3月に公表されている。

この調査研究ではいくつかの問題について協力者の方々によってシンポジウム形式による討論が行なわれた。これらは研究者諸賢の御参考に供するに足る貴重な資料であるが、報告書第1部にこれらを収録することはできなかつたので報告書第2部として近くまとめる予定である。この「物性研究と計算物理」は元来この第2部に属する。

しかしこの主題には「物性研究」の読者の多くが関心をもたれるものと思われるので、まずこの形で報告をまとめ、追って他の記録と共に報告書第2部にも収録することにした。「物性研究」編集部の御協力に深く感謝する。

ここに収められたものは昭和57年7月25日「コンピューター物性」と題し、鈴木増雄氏をオーガナイザーとして行なわれた研究会の記録である。

筆者自身は未だにコンピューターを自ら駆使した経験はないが、それでも自分の仕事にコンピューターが入りこんでからもう20年にもなる。その頃と今日の比較は今さら言うのも野暮な話で、天地雲泥というも愚かである。しかしこれでも不足で、いまの1000倍の能力が要求されているし、数年のうちには本当にそうなるであろう。

そうなった暁、いやそこまでゆかない今日の状況でも、われわれは計算機を使って物理をどうやるのか。計算機に使われているのでは、という声もあるが、そんな大雑把な批判はともかく、計算機物理とは何か、これは大へんむつかしい問題である。

物性物理の中の計算物理は何か。物性物理の前進のためにそれをどう構築するか。この研究会における報告はそれぞれに貴重な体験をふまえ、それぞれに重要な示唆に満ちている。しかし、実践の体験もない筆者がいうのは僭越であるが、物性物理における計算機物理も何かあるブレイクスルーが必要な時期にきているのではないか、という感がした。能力が1000倍になるとすれば、何か定性的な変化を期待したいと思う。MDもモンテカルロも結構だが、ただその延長だけではどうも面白くない気もする。能力の飛躍とともに哲学も変わってもいい。自然に

答えてもらう実験とはちがって、コンピューターからはインプットにないものが出てくる筈はない。一方、まさにそこに計算機実験の強味もあるわけである。

いささか筆が迂った気味がある。しかし物性物理における計算機物理は重要な研究分野であり、わが国でも、諸外国でも大きな発展が予想される。20年前とはちがって、今日ではわが国における計算機のファシリティは世界一流だということである。とすれば、世界一流の仕事をするのは研究者の責任であろう。物性物理における計算物理の発展のために、この報告が一つの一里塚となることを期待したい。

古典粒子系の計算機実験

—— 計算機の発達とともに ——

京大・工 上 田 顕

§ 1 まえおき

物性理論分野での計算機実験（以下では断らぬ限り「計算機実験」は物性理論分野に限定する）として、筆者はこれまで主に粒子系の分子力学法（MD法）によるシミュレーションを行ってきた。計算機実験は文字通り「実験」であって、実験機器コンピューターの発達とともに、実験の質も量も変化する。実際ここ10年ばかりの間にわれわれの利用できる計算機の能力は著しく増大してきた。

この小論では、(1)国内で行われてきた計算機実験と計算機の発達状況を簡単に振り返り、(2)われわれの計算機実験と計算機とのかかわりを通じて、実験の質的量的変化を例示する。ついで(3)現在行いつつある超イオン導電体のMD法による研究をやや詳しく述べる。最後に(4)並列処理機構をもつ高速計算機がここ2,3年のうちに大型計算機センターなどに設置されるであろうが、その暁に(3)の問題についてどの程度の計算が期待できるか、私見を述べることにする。

§ 2 国内での計算機実験と計算機の発達情況

計算機実験が国内で行われるようになったのは、早大グループの非線形格子の問題と¹⁾秩序無秩序現象のシミュレーション²⁾を除けば、70年代に入ってからである。図1に70年から82年までの、物理学会統計力学・物性基礎論分科での計算機実験に関する、毎年の学会発表件数を示す。82年度は春の年会までの件数である。図では粒子系とその他に分けているが、その他