

## 理論と実験の協力体制

### Collaboration between Theory and Experiments

理論研究会

Theory Research Group

馬越健次, 兵庫県立大学

坂井 徹, 日本原子力研究開発機構

Kenji Makoshi, University of Hyogo

Toru Sakai, Japan Atomic Energy Agency

#### これまでの取り組み

理論研究会は、物性理論を中心として、強相関電子系・表面物性・低次元物性・分子性導体・量子スピン系・磁性・ナノサイエンスなどさまざまな分野にまたがるメンバーから構成され、これまでは主に各分野の実験研究グループの研究会などに参加して、個々にコミュニケーションをとって共同研究を進めてきた。いずれの分野においても、未解明の実験結果を高度な数値シミュレーション技術を駆使して解析し、理論的解釈を与えたり、新現象を予言して新しい検証実験を提案するなど、実験と密接に協力する理論研究グループは、SPring-8においても重要な役割を果たしてきた。たとえば、約 20 年前に発見された銅酸化物高温超伝導体の研究においては、共鳴非弾性 X 線散乱実験と強相関電子系の理論研究が協力して、超伝導の機構解明を強力に推進してきた。この研究に限って言えば、高温超伝導の発現機構が何であるか、最終的結論を得るためには、電子系の集団励起としての準粒子のダイナミクスを明確にしなければならないが、銅酸化物には乱れ（ランダムネス）も多く、本質的な準粒子のシグナルを精度よく検出できるコヒーレンスと分解能の高度化が重要となることなどを指摘した。しかし、このような SPring-8 の光源や実験装置の高度化については、各分野によって事情が異なるので、その提言は個々の実験研究会に譲ることにして、本稿では、今後の理論と実験のより強力な連携協力体制を確立するための、組織運営や取り組みの高度化について、理論研究会の立場からいくつかの提言及び要望を述べたい。

#### 提言・要望

まず理論研究会独自の取り組みとして、今後は分野の枠を超えたコミュニケーションを目的とする包括的なワークショップを頻繁に開催していくべきである。近年では、実験データの理論解析にも、非常に高度化した大規模数値シミュレーション技術が導入されることが多く、神戸に導入されることが決定した次世代スーパーコンピュータに象徴されるように、理論研究もビッグサイエンスの一角を担うようになってきており、その計算資源の共有という意味でも、またアイデアの交換の場としても、分野を超えたワークショップの開催が重要である。最近では、ひとつの物質の性質を解明するためにも、第一原理電子状態シミュレーションによりモデルパラメータの決定と、量子モンテカルロシミュレーションによるダイナミクスの計算などを組み合わせた、

ハイブリッドシミュレーション技術が動員されることも多く、理論計算グループ間の協力も頻繁に行われている。このような背景もあり、今後は理論研究会にさらに多くのメンバーに参入していただき、分野間交流のできるワークショップを開催して、意見交換・情報交換を活発にしたい。もちろんその場には、より多くの実験グループのメンバーにも出席していただき、新しい共同研究や、新しい研究領域の形成につなげることが望ましい。そのためには、**SPring-8** シンポジウムなどの前後に、理論研究会が主催し、より多くの実験研究者にも立ち寄っていただけるようなワークショップを開催できる、時間とスペースがいただけるとありがたい。

実験と理論の協力、および分野を超えたワークショップの重要性を強調したが、最近の研究のグローバル化・情報伝達の高速化により、年に一度や二度のワークショップによるコミュニケーションだけではとても足りないことは明らかである。そこで、必要に応じて緊急に講師を招聘してレクチャーをお願いしたり、ミニワークショップを開催したりするような制度を導入していただきたい。一方、このような直接的なコミュニケーションに頼るだけでは、**SPring-8** が都市部から離れているという地理的条件から非常に不利である。そこで、実験と理論、あるいは分野間交流が随時高速で出来るような、インターネット・ウェブページやメーリングリストなどの整備を要望したい。必要があれば、現在の理論研究会の世話人である、兵庫県立大と原子力機構の理論グループが、そのためのハード・ソフトの構築に協力するつもりである。