

# 科学技術の潮流

JST 研究開発戦略センター

178

## パラダイム変化

科学のパラダイム変  
化を表す際に、実験、  
理論、計算、データに  
基づく科学を、それぞ  
れ、「第一の科学」、「第  
二の科学」、「第三の科  
学」、「第四の科学」な  
どと呼ぶことがある。

物質科学は、天然の  
素材に人為的処理を加  
えて、人間にとって有  
用な物質に変化させる  
行為から始まった。こ  
の中で、長い年月をか  
けた膨大な種類の処理  
・操作の試みが第一の  
科学にあたり、その中  
で蓄積された知識から  
より根源的な原理を発  
見し、それらを体系化

してきた営みが第二の  
科学にあたる。

第三の科学である計  
算科学は、時代ととも  
に理論や実験の内容が  
複雑・精緻になり、実  
験結果の解釈や理論か  
ら予測が、人力によ  
る算術では扱えなくな  
ってきた頃に生まれ  
た。物質科学における  
には、基礎となる原理

計算物質科学の対象  
には、基礎となる原理  
理想に使うことはできな  
たり、量子力学と電磁

## 理論科学進展

計算物質科学の対象  
には、基礎となる原理  
理想に使うことはできな  
たり、量子力学と電磁

計算科学（計算物質科  
学）は、20世紀初頭に  
物質の基本原理となる  
容量などの制限から、  
量子力学が誕生したこ  
とと、その後、電子計  
算機が発達したこと  
で、その有用性が向上  
し、近年では、第四の  
科学とも密接にリンク  
しながら、物質科学の  
電子の状態を精密に表  
す方程式であるが、そ  
れをそのまま、膨大な  
数の電子を含む大きな  
固体や液体の性質の予  
想に使うことはできな  
り、量子力学と電磁

が分かっていても、計  
算時間や計算機の記憶  
容量などの制限から、  
適切なモデル化や数学  
的工夫を行った新たな  
計算手法の開発によ  
り、それ以前はできな  
かった計算を可能にし  
た例も現れている。例  
えば、原子・分子を取  
り扱う量子力学と、物  
質を連続した媒質とし  
て取り扱う連続体のモ  
デルとをうまくつなぐ  
ことで電池の電極反応  
をシミュレーションし  
たり、量子力学と電磁

気学の方程式を連成し  
て解くことで強い光の  
分子の動きを追えるよ  
うにもなっている。こ  
うした問題が解かれる  
ことで、物質に関する  
理論科学の進展や重要  
な材料の開発につながる  
ことが期待される。  
（金曜日に掲載）

また、機械学習など  
のデータ科学的手法を  
取り入れることで、非

# 計算物質科学の手法開拓



科学技術振興機構（JST）研究開発戦略センター  
フェロー（ナノテクノロジー・材料ユニット） 眞子隆志

東京大学大学院工学系研究科修士課程修了。NECにお  
いて酸化物材料、携帯燃料電池、半導体実装などの研究開  
発に従事。19年より現職。ナノテクノロジー・材料分野の  
研究開発戦略立案を担当。博士（工学）、技術士（応用理学）。

