

固体の性質を知る強力な方法の1つは、固体中の電子のシュレーディンガー方程式を直接数値的に解くことである。このような計算は第一原理計算とよばれ、1960年代に密度汎関数法とよばれる基礎理論が整備されて以降、コンピュータの性能向上と相まって急速に進展した。いまでは公開されているソフトウェアを入手すれば、誰でも手持ちのパソコンで簡単な電子状態計算（バンド計算）が実行できる。この計算によって、固体中の電子の密度分布やバンド構造がわかり、固体の重要な性質（格子定数、光学応答、磁性、誘電性、表面状態など）を評価することができる。

このような計算手法の進展を背景に、物質の機能（たとえば触媒反応性や磁石性能など）が最適となる物質（構成元素および組成比）の探索が行われつつある。しかし、「元素とその組成が与えられたとき、実験データを用いずに最も安定な結晶構造を決定する」という基本的な問題ですら、最新のスーパーコンピュータをもってしても一般には解けない。さらに実際の物質合成では、温度・圧力・元素組成に関する状態相図が重要になるが、その予測には多数回のより高精度な数値計算が要求される。また、液体中の表面化学反応やメソスケールの構造をもつ系では、取り扱うべ

き原子の数は莫大になるが、応用上重要な材料（電極材料、表面触媒、鉄鋼、永久磁石など）はそのような大規模系であることが多い。

これらの困難を解決すべく、現在さまざまな研究が行われている。第一原理分子動力学法と効率的な探索アルゴリズムを組み合わせた物質探索が一定の成果をおさめつつあるほか、より高精度・高速の計算手法や大規模系の超並列計算手法が活発に研究されている。得られる莫大な量の計算結果（ビッグデータ！）の整理も重要な課題であり、データベース整備とその活用も進められている。化学や材料工学での物質設計と共通する課題も多く、将来はその境界領域に新しい分野が生まれるかもしれない。

ところで、計算機シミュレーションは機械学習や人工知能（AI）ととても相性がよい。物質機能のよさが簡単に数値化できるときは、力まかせの物質探索は強力な方法となり、その能力はいつか人間を凌駕するかもしれない（いま現在、将棋や囲碁でコンピュータが人間を打ち負かしつつあるように）。そのとき、人間は物質設計についてなにを考えるべきだろうか？ 30年後の世界が楽しみでもあるし、怖くもある。

会誌編集委員会