

「H P C I 戦略プログラム」
分野 2 新物質・エネルギー創成

成果報告書（平成 25 年度）

平成 2 6 年 5 月 2 9 日

東京大学 物性研究所 計算物質科学研究センター



計算物質科学イニシアティブ 統括責任者

常行真司

【目次】
「HPCI 戦略プログラム」 分野 2 新物質・エネルギー創成 (25年度)
成果報告書

項目	頁
1. 業務の目的	1
2. 平成 25 年度(報告年度)の実施内容	1
2. 1 当該年度(平成 25 年度)の事業実施計画	1
2. 1. 1 戦略プログラムの総合的推進	1
2. 1. 2 戦略課題研究の本格実施	2
2. 1. 3 計算物質科学技術推進体制の構築	5
2. 2 実施内容(成果)	8
戦略目標	9
戦略目標についての説明	9
2. 2. 1 当該年度(平成 25 年度)における研究成果	13
2. 2. 1. 1 研究開発課題(成果)	13
研究開発課題の成果概要	13
(1) 新量子相・新物質の基礎科学	15
(2) 次世代先端デバイス科学	24
(3) 分子機能と物質変換	34
(4) エネルギー変換	44
(5) マルチスケール材料科学	51
2. 2. 1. 2 計算科学技術推進体制構築(成果)	57
計算科学技術推進体制構築の成果概要	57
(1) 計算機資源の効率的マネジメント	61
(2) 人材育成	68
(3) 人的ネットワークの形成(研究会、セミナーの開催)	75
(4) 研究成果の普及	85
(5) 分野を超えた取り組みの推進	99
(6) 戦略分野の研究者を支える研究支援	101
2. 2. 1. 3 研究開発課題・計算科学推進体制構築の評価	108
(1) CMSI 研究課題の見直し	108
(2) 分野 2 作業部会による中間評価	109
(3) 中間評価委員会による中間評価	122
(4) 分野 2 作業部会による平成 26 年度活動内容の決定	122
(5) 平成 26 年度 CMSI 研究員・教員の配置	122
2. 2. 2 本格実施(平成 26 年度～27 年度)における実施計画	124
2. 2. 2. 1 研究開発課題(計画)	124
(1) 新量子相・新物質の基礎科学	124
(2) 次世代先端デバイス科学	135
(3) 分子機能と物質変換	142

(4) エネルギー変換	153
(5) マルチスケール材料科学	162
2. 2. 2. 2 計算科学技術推進体制構築(計画)	170
(1) 計算機資源の効率的マネジメント	172
(2) 人材育成	174
(3) 人的ネットワークの形成(研究会、セミナーの開催)	180
(4) 研究成果の普及	183
(5) 分野を超えた取り組みの推進	185
(6) 戦略分野の研究者を支える研究支援	186
2. 3 活動(運営委員会等の活動等)	189
2. 4 実施体制	192
別表 1 平成25年度に於ける実施体制	200
別添 1 研究開発の年次計画	212
別添 2 計算科学技術推進体制構築の年次計画	218
別添 3 所要経費の見込額	222

添付資料1 平成 25 年度イベント報告書(報告書 1～61)

1. 業務の目的

【委託業務の題目】

「HPCI 戦略プログラム」 分野2 新物質・エネルギー創成

【戦略目標】

計算物質科学：基礎科学の源流から物質機能とエネルギー変換を操る奔流へ

特定高速電子計算機施設の性能を最大限発揮させ、戦略目標である「基礎科学の源流から物質機能とエネルギー変換を操る奔流へ」の実現に向け、世界最高水準の研究成果を創出するとともに、本分野における計算科学技術推進体制を構築することを目的とする。

2. 平成25年度(報告年度)の実施内容

2.1 当該年度(平成25年度)の事業実施計画

2.1.1 戦略プログラムの総合的推進

本事業は、戦略機関である東京大学物性研究所(代表機関)、自然科学研究機構分子科学研究所、東北大学金属材料研究所を中核とした、計算物質科学、計算分子科学、計算材料科学の各分野の代表者により運営するネットワーク型組織「計算物質科学イニシアティブ(英文名 Computational Materials Science Initiative, 略称 CMSI)」により推進する。

平成25年度の本事業は、平成21年度に実施したフィージビリティスタディ、平成22年度に実施した準備研究、および、平成23年度から24年度までに実施した研究成果に基づいて実施する。CMSIは以下の小委員会、および、委員会を設け、活動を推進する。「戦略課題小委員会(第1～5部会;第5部会は平成25年度より新設される)」は、各研究開発課題の推進を実際に担当する研究者、および課題の具体的内容に即したアドバイスをを行うことのできる専門家から構成され、課題推進のための計画立案、実行、連絡、および、調整にあたる。「スパコン連携小委員会」では、特定高速電子計算機施設、および、各戦略機関の保有するスパコンなどを含む各種計算資源の、研究課題推進メンバーによる効率的・効果的な利用を支援するとともに、計算物質科学分野で広く用いられる共通ソフトの開発、共有、公開を推進する。「人材育成・教員小委員会」では、特定高速電子計算機施設を中核とするHPCIを戦略的に活用していくための人材育成や教育を目指した各種教育プログラムの立案・推進を担当する。「産官学連携小委員会」では、戦略目標である源流(基礎研究)から奔流(応用)へとつながる成果の有機的な連携を促進する。「広報小委員会」では、開発成果や分野共通ソフトを実験家、企業内研究開発担当者、非専門家、さらには一般の方々に対して広く公表・公開することを通じて、本分野に対する理解と成果の一層の有効活用を促進する。統括責任者の諮問機関である「企画室会議」では、各小委員会での課題を含めた議案を立案、整理し、運営委員会で議案を検討後、運営協議会にて議案の承認を受け、事業を推進していく。

なお CMSI の運営には、戦略機関に加え、教育拠点として東北大学、東京大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、金沢大学、神戸大学、総合研究大学院大学、豊橋技術科学大学、産官学連携拠点として物質・材料研究機構、産業技術総合研究所の各協力機関が主として参加する。

2.1.2 戦略課題研究の本格実施

平成 24 年度に本格実施研究にて、平成 24 年 10 月 8 日に実施した「研究課題見直し検討会議」、平成 24 年 12 月 5 日に開催した「課題評価会議」、平成 25 年 1 月 15 日に開催した「課題見直し会議」で検討した結果、および、HPCI 戦略プログラム分野 2 作業部会委員からのコメントを反映し、平成 25 年度は以下の重点研究を推進する。これらの研究課題には、特定高速電子計算機施設の計算資源を優先的に割り当てる。また、文科省が平成 23 年度まで推進していた「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトにおいて開発された中核アプリケーションソフトウェアは、平成 25 年度も引き続き活用して研究開発を推進し、世界最高水準の研究開発成果創出を目指す。

平成 25 年度に推進する「重点研究課題」、ポスト重点課題として支援を受ける「特別支援課題」、次の特別支援課題候補として支援を受ける「支援課題」は、平成 25 年 10 月の開催を予定している、平成 26 年度からの重点課題検討会議、平成 25 年度 12 月を予定している研究会での成果報告書とその後に行われる評価会議の結果、および、HPCI 戦略プログラム推進委員会が主導する作業部会会議からのコメントを反映させ、平成 26 年度に推進すべき研究課題を選定する。

以下、HPCI 戦略プログラム分野 2 作業部会の承認を経て平成 24 年度重点課題として選定された課題の概要と、平成 25 年度の活動計画を示す。なお、平成 25 年度から新設される第 5 部会「マルチスケール材料科学」は、重点課題 7 とその課題に関連する 3 つの特別支援課題で構成されている。この部会の新設に関しては、課題見直し検討会議、および、作業部会からのコメントを踏まえた 3 回の厳密な審査会を開いて承認された。

1) 新量子相・新物質の基礎科学

重点課題 1 「相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミクスの解明」

第一原理に立脚する強相関量子多体系の高精度な予測・解明と、本質と原理を抽出するための理論模型による大規模計算に基づき、電子相関の強い現実物質の新機構解明と制御法開拓に関する研究、強相関電子系の励起ダイナミクスの研究、新しい量子相・量子臨界現象に関する研究を推進する。

平成 25 年度においては、以下の 3 課題の研究を推進する。

①新しい量子相の解明

1. 今まで知られていない量子液体の一つとして 40 年来の基礎科学の難問となっている「量子スピン液体」の発生メカニズムを、実験的な候補となっている有機導体(dmit 塩)の第一原理模型を多変数変分モンテカルロ法で解くことにより解明する。
2. 従来の相転移の教科書を書き換えることが提唱されている「脱閉じ込め現象」という新概念の妥当性を判断するために、この新量子相転移が生じる候補となる理論模型である、正方格子系、およびハチの巣格子系の量子スピン模型である「SU(N)JQ ハイゼンベルクモデル」について、大規模計算を実施し、脱閉じ込めの概念の有効性を明らかにする。
3. 多数の原子をレーザーで閉じ込めた新しい系である「冷却原子系」では新量子相の出現が期待されている。新量子相探索のために、回転する冷却原子系に関するシミュレーションを行い、新量子相候補を抽出する。
4. 量子多体系に対する新しい数値計算法である projected entangled pair states (PEPS) 法と呼ばれる方法が最近提唱され、量子的絡み合いを正確に取り扱う、画期的な統計力学的状態和の計算法になり得ると注目されている。この手法に基づくシリアル版コードをチューンアップし、同時に並列化コードを完成させる。この手法が使えるようになる場合に、従来困難の多かった量子多体系の計算の可能性が大きく広がる。

以上、物性物理の最先端で提唱されている新概念を探索し、複数の系で新量子相候補を抽出する。

②強励起ダイナミクスの解明

光による高励起に伴う非平衡状態を利用した物性解明法(ポンププローブ法と呼ばれる)、光励起による相転移や緩和、励起子励起による電子・ホールの高効率分離輸送によって可能になる高効率太陽電池、温度差に

よる非線形非平衡状態を利用した高効率熱電効果などの追究のために、強相関電子系での強い非平衡状態を利用した新たな物性解析法(時間分解光電子分解などのナノ秒、アト秒超高速現象の実験解析法)を開発する。

③スピン軌道相互作用とトポロジカル現象の物理

スピン軌道相互作用の大きな理論模型について、トポロジカル新量子相を含む相図を探索する。まずスピン軌道相互作用系の有効模型として提唱されているキタエフ・ハイゼンベルグ模型の相図を比較的小さな系で求める。またテンソルネットワーク法のコードを開発する。

重点課題2「電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開」

電子状態・動力学・熱揺らぎの取り扱いをコアエレメントとして革新的な発展を図り、それらの融和的な理解と練成に基づいた新しい分子理論の展開によって、超高精度電子状態計算による分子の微細量子構造予測、分子における電子の動的過程と多体量子動力学、凝縮分子科学系における揺らぎと遅いダイナミクスの解明を目指す。

平成25年度においては、以下に示す成果を目指して研究を推進する。

① 超高精度電子状態計算による分子の微細量子構造予測

前年度までに超並列実装を行った分子求積 MP2 法と MP2-F12 法による、ナノ炭素材料の大規模なプロダクションランを継続して行う。特に IDipp や ICatcher などのかさ高い炭素性ルイス塩基とフラーレンの相互作用を中心に計算を進める。又、F12 法の高次電子相関と結合クラスター理論の超並列実装を行う。

凝縮重系の高精度な励起状態を計算する事が可能なモンテカルロ法のテスト計算が前年度までに終了しており、平成25年度は、この並列実装を進めると同時に、多核金属錯体、重元素系の材料設計や、モデルメタルクラスターの計算による希土類の代替合金の探索を行う。

更に、多参照摂動理論を用いた励起状態の構造緩和と非断熱結合行列要素の計算手法を可能にし、他部会との連携として、有機 EL、人工光合成の取り扱いに必要な技術基盤を構築する。

② 分子における電子の動的過程と多体量子動力学

平成25年度は、前年度に引き続き、「強い超短電磁場中に置かれた分子の非断熱電子波束動力学」の超並列プログラムを京にて超並列の実装と具体的なシミュレーションを行う。分子と電子状態設計とそれに基づく反応制御の理論とアルゴリズムを完成させ、10 原子程度からなる分子系のリアリスティックな反応の設計指針を具体化する。また、超多体量子ダイナミクスでは、タンパクの動力学に関する量子効果の検討を行う。

③ 凝縮分子科学系における揺らぎとダイナミクス

平成25年度は上記目標を達成するため、前年度に引き続き、高次非線形分光法・多時間相関関数による揺らぎ・エネルギー緩和機構の解析、MC-MOZ 法について周辺理論との統合を進めて計算対象を拡大、カメレオンモデルによる分子モーター、酵素、分子輸送における化学反応への適用を行う。

なお、自然科学研究機構分子科学研究所、神戸大学大学院システム情報学研究科とは、委託契約を結んで推進する。

2)次世代先端デバイス科学

重点課題3「密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究」

10nm スケールのナノ構造体に対する、密度汎関数理論による第一原理計算を、特定高速電子計算機施設で実行可能にする高速計算技法を確立し、ナノ構造体の原子・電子構造とデバイス特性、構造体生成の機構を明らかにする。さらに輸送現象、過渡現象を扱うシミュレーション技法を確立し、ナノ接合系での電子、熱、原子の輸送特性を明らかにし、次々世代デバイスシミュレータ技術の基盤を構築する。

平成 25 年度は上記目標を達成するため、以下の4点の研究開発課題を遂行する。①2011 年 Gordon BellPrize を獲得した RSDFT コードを高機能化する。とくに電場下でのワイヤーの電子状態計算を可能にし、デバイス動作化でのチャンネル分布を明らかにする。また非平衡グリーン関数 (NEGF) 法と統合し、デバイス丸ごと輸送シミュレーションの実現を目指す。またスピン自由度への高機能化により、新たな材料探索研究を開始する。②大規模量子論的ダイナミクス計算を目指して、Car-Parrinello 分子動力学法と RSDFT を結合させたプログラムを開発し、マルチコア・超並列アーキテクチャーの高度チューニングを行う。③ オーダーN 手法である CONQUEST コードの高度チューニングにより、「京」の数十万コアでの並列計算を実行し、界面系での原子・電子構造、界面形成過程を探索する。④京コンピュータ上で高度にチューニングされた RSDFT、CONQUEST、RSPACE コードを活用し、次世代デバイス材料としての酸化物界面の特性解明に着手する。

なお、大阪大学大学院工学研究科とは、委託契約を結んで推進する。

3) 分子機能と物質変換

重点課題 4 「全原子シミュレーションによるウィルスの分子科学の展開」

ウィルスの全原子シミュレーションやウィルスタンパク質の全電子計算等を実行することにより、感染機構や免疫機構、また抗ウィルス剤との相互作用などを自由エネルギーレベルで明らかにし、計算科学によるウィルスの分子科学を世界に先駆けて確立する。

平成 25 年度は上記目標を達成するため、平成 24 年度に開始した京コンピュータを用いた小児マヒウィルスカプシドの丸ごとシミュレーションを継続実施し、ウィルスが実現している安定でかつ柔軟な構造の実際の姿について、pH や温度などの環境がもたらす不安定化についての研究を開始する。また、ウィルスの感染初期過程を明らかにするために、レセプターとウィルスとの特異な相互作用を定量的に記述する自由エネルギー計算を引き続き行い、同時にこれを阻害する分子の検討を開始する。

なお、名古屋大学大学院工学研究科、神戸大学大学院システム情報学研究科とは、委託契約を結んで推進する。

4) エネルギー変換

重点課題 5 「エネルギー変換の界面科学」

燃料電池やリチウム二次電池の基礎過程を大規模シミュレーションから解明し、化学電池の学理を構築する。理想的な化学結合・電気エネルギー変換をもたらす物質構造や界面構造の探求、さらに、エネルギー変換の界面科学の構築を目指し、同時に、本課題で構築したシミュレーション技法を外部プロジェクトで活用する事を積極的な促し、電池材料開発等に貢献することを目指す。

平成 25 年度は従来の燃料電池重点課題とリチウム二次電池課題を融合して化学電池課題を設立し、第一原理シミュレーション技法の飛躍的高度化のため、他課題メンバー数名を向かい入れて本課題に従事してもらう。上記目標を達成するため、(1)第一原理分子動力学計算プログラム (STATE, RS-CPMD, OpenMX) の開発、(2)電気化学シミュレーション技法の高度化、を行い燃料電池反応過程やリチウム二次電池充放電過程の定量的計算を行う。なお、大阪大学大学院工学研究科、東北大学原子分子材料科学高等研究機構とは、委託契約を結んで推進する。

なお、大阪大学大学院工学研究科、東北大学原子分子材料科学高等研究機構、産業技術総合研究所とは、委託契約を結んで推進する。

重点課題 6 「水素・メタンハイドレート生成・融解機構と熱力学的安定性」

ハイドレートの有効利用を実現するために、熱と物質の移動を取り入れたシミュレーションを行い、生成解離過程や熱力学的安定性を明らかにし、ハイドレートの制御可能性に関する科学的知見を確立する。

25 年度には大規模な計算を実施して、通常の条件下における融解機構についての基礎理論の確立を目指す。メタンハイドレートの温度、圧力、組成に対する相挙動の解明、生成解離の熱力学量の予測。メタンハイドレートの中・大規模分子動力学シミュレーション実施による融解速度の外部条件依存性の検討を行う。

エネルギー創生と貯蔵のために、メタンハイドレートのシミュレーションにより、熱力学的安定性と融解のダイナミクスを調べ、実用に対する理論面からの支援を行う。ハイドレートの有効利用を実現するために、MODYLAS を用いたシミュレーションから、ハイドレートの制御可能性に関する科学的知見を確立する。

なお、岡山大学自然科学研究科とは、委託契約を結んで推進する。

重点課題 7 「金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発」

飛躍的に優れた構造材料や耐熱材料等の開発は、エネルギー変換機器の効率の飛躍的向上、輸送機器の超軽量化による省エネ化など、エネルギーの有効利用のために不可欠の課題である。こうした実用材料は多結晶体であり、種々の析出相や欠陥で構成される内部組織を持ち、それらが機能を支配している。こうした材料の高精度設計のために、ミクロの電子・原子の振る舞いからメゾの内部組織の構造や特性を理解し、マクロの機械的性質や機能を予測するマルチスケール組織設計・評価技術の開発が必要である。そのために、各結晶相のみならず、異相界面・粒界・転位等の大規模複雑構造の第一原理計算を行い、合金成分・不純物との相互作用を明らかにするとともに、それらを Phase Field 法に繋げる手法を確立する。

異相界面・粒界・転位など、微細構造が機能を支配する金属系構造材料の高精度設計のために、ミクロの電子・原子の振る舞いからメゾスケールの微細組織の構造や特性を理解し、マクロの機械的性質や機能を予測するマルチスケール組織設計・評価技術の開発を行う。そのために、

- (1) 結晶相のみならず、異相界面・粒界・転位等の大規模複雑構造の第一原理計算を行い、微視的な原子間結合の様子や原子・電子の機械的挙動、合金成分・不純物との相互作用等を明らかにする。
- (2) それらを Phase Field 法に繋げ、微細組織を設計する手法を確立する。

平成 25 年度は、前年度に引き続き、鉄鋼材料中の Fe/析出相界面の構造モデルの大規模第一原理計算を OpenMX コードを用いて進めるとともに、QMAS コードを用いて、界面近傍の応力やエネルギー分布の精密解析を試みる。さらに、鉄鋼材料中の転位芯構造のモデルを構築し、OpenMX による大規模第一原理計算を適用する。

また、第一原理計算とフェースフィールド法の連携について、理論的・計算技術的な検討を進めることで、CMSI 第 5 部会マルチスケール材料科学の研究活動推進に貢献する。

また、平成 25 年度より新設された 5 部会マルチスケール材料科学の研究活動推進として、以下の業務を行う。

- ① 「京」を用いた重点課題の実行計画の立案を行う。
- ② 重点課題と特別支援課題の協調的・相補的な発展を図るため課題担当者に特化した研究会を実施する。
- ③ 他の 4 つの部会との協調的・相補的な発展を図るため、シンポジウムや研究会を実施する。

なお、産業技術総合研究所関西センター、および、東北大学金属材料研究所とは、委託契約を結んで推進する。

2.1.3 計算科学技術推進体制の構築

1) 計算機資源の効率的マネジメント

研究の進展に合わせ柔軟な計算資源配分を行うため、重点課題、特別支援課題、支援課題の見直しを毎年行う。新規テーマを発掘する方策の一つとして、参加研究所の共同利用スパコンの運営委員会と連携し、共同利用スパコン利用者の課題より、特定高速電子計算機施設に適した課題を発掘して CMSI が開催する研究会へ投稿し、新たな支援課題として評価を受けることを促す。平成 24 年度の本格実施研究においては、物性研究所、分子研究所、および、金属材料研究所に関して共同利用スパコンの一部を活用して、大規模並列実行の試験的運用を行った。平成 25 年度についてもこれを継続するとともに、不足する計算資源の補填をするため、大学情報基盤センターの計算資源を借用し、重点課題の実施、および、次の重点課題として準備している特別支援課題、および支援課題に用いられるプログラム開発や性能評価を推進する。また、平成 24 年中に共用が開始された特定高速電子計算機施設の戦略利用として、重点課題の研究を推進するとともに、一部をアプリケーション高度化支援のために利用し、特定高速電子計算機施設利用の一般課題として利用申請する研究課題の支援を行う。また、特定高速電子計算機施設で計算された結果を処理加工するために平成 24 年度に CMSI 神戸拠点に導入したポスト処理システムの活用を促進し、成果に結び付ける。さらに、物性研に導入したハイブリッド並列計算用 PC クラスシステム(psi)を、並列化の初心者から高度化プログラムの動作確認、また、企業の方のトライアル利用等、幅広い用途で利用可能なように運用を行い、並列化計算の分野振興を図る。さらに、計算物質科学で得られた結果を一般社会にアピールする際に重要となる、可視化技術を強化するため、物性研に可視化アプリケーションを設置して利用促進を図る。

なお、自然科学研究機構分子科学研究所、東北大学金属材料研究所とは、委託契約を結んで推進する。

2) 人材育成

計算物質科学の振興を図るとともに、特定高速電子計算機施設を中核とする HPCI を利用して国家的重要課題に取り組むことができる人材を育成する。

平成 25 年度は、CMSI 特任教員として採用したメンバーを中核とし、大学院講義、サマースクール、集中実習、ワークショップ、チュートリアルコースを国内外で実施するとともに、拠点大学方式にもとづいた、科目提供制度、単位互換制度、連携大学院制度の本格検討を具体的にスタートさせる。また、講義や講習会をビデオサーバによる配信システムを活用し、特に若手研究者や学生、社会人、海外研究者への計算物質科学の振興を図る。さらに、実験研究者や企業研究者にも開かれた各種研究集会、産業利用スクール等の充実と拡充を図る。

計算物質科学の人材育成を推進するために、計算物質科学とその数理に関する教育プログラムを企画し、東京大学の理工連携での平成 24 年 4 月より「物質科学のための計算数理 I」および「物質科学のための計算数理 II」を開講した。平成 25 年度はこれを引き続き継続し、また大阪大学等の教育プログラムの受信も開始する。さらに平成 26 年度以降の他大学への配信の準備も進める。

なお、自然科学研究機構分子科学研究所、東北大学金属材料研究所、名古屋大学大学院工学研究科、大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センター、神戸大学大学院システム情報学研究科とは、委託契約を結んで推進する。

3) 人的ネットワークの形成(研究会、セミナーの開催)

i) 産官学連携

分野振興の一環として、計算物質科学シミュレーションの産業分野への普及活動を行う。

平成 25 年度は以下の活動を実施する：

- ① 計算シミュレーションを中核としたオープンイノベーションに関する認識を共有する為の産官学連続研究会や合同ワークショップの継続的開催。

- ②CMSI で開発しているアプリケーションソフトの産業界への情報発信・紹介。また、アプリケーションソフトポータルサイトの立ち上げとプログラム講習会開催を実施する。
- ③産官学連携協力機関を通じた産学連携活動の支援、特に、コンソーシアムの立ち上げなど準備活動を行う。

ii) 計算物質科学の分野振興と国際連携

平成 25 年度は、CMSI 研究会を引き続き開催するとともに、各課題グループ(部会)や他の戦略分野で共有した計算コードについて集中討論する研究会を開催する。また、滞在型国際ワークショップ、国際会議との連携会議を開催する。また、平成 25 年 10 日には CMSI 国際会議を開催し、「京」の成果をアピールするとともに、海外から招聘した若い研究者とコミュニケーションを取り、国際的な人脈を若手が持つ機会を提供する。

海外の計算物質科学研究拠点とは、共同研究プロジェクトや国際会議の共催企画、若手研究者の派遣等を通じて連携を図り、国際的な研究ネットワークを構築する。

また、各戦略機関では、それぞれの専門領域の分野と関連の深い実験、計測研究者や企業の研究者を交えたシンポジウム等を開催し、計算物質科学の活用を促進する。とくに、平成 24 年度から開始した文部科学省元素戦略プロジェクトとは連携を模索し、CMSI のアプリケーションソフトを紹介する等して、具体的な共同研究に繋げる努力を図る。

なお、自然科学研究機構分子科学研究所、東北大学金属材料研究所、産業技術総合研究所とは、委託契約を結んで推進する。

4) 研究成果の普及

平成 25 年度は、企業、高校生、大学学部生を含む一般の読者を想定した広報誌を定期発行する。従来の CMSI 内若手メンバーとともに、計算物質科学に関連する外部の方にも焦点をあてた内容とする。また、ホームページをより充実し、ニュース、研究成果、公開ソフトウェア情報、人材紹介、人材公募などの情報を発信することにより、企業、他分野との人材交流を図り、ソフトウェアの開発・公開をサポートする。ユーザーの視点に立ってアプリケーションの紹介や利用を促進するために平成 24 年度に開発をスタートした「アプリ cafe」を整備し、閲覧を開始するとともに、アプリケーションの効率的な開発に関したシステムの立ち上げを目指す。

なお、自然科学研究機構分子科学研究所、東北大学金属材料研究所とは、委託契約を結んで推進する。

5) 分野を超えた取組の推進

企画室の下に機動的な連携ワーキンググループを設けた活動を推進する。平成 23 年度に発足したアプリケーション作業部会は、平成 24 年度は文科省からの委託研究として「将来の HPCI のあり方の調査」がスタートした。その調査研究を継続し、将来必要となるスパコンのアーキテクチャーに対して、アプリ側からの要望をぶつけ、サイエンスオリエンテッドで将来必要となるスパコンの姿を探る。

平成 23 年度より開始した元素戦略 WG 活動は、平成 24 年度は新規に発足する新元素戦略プロジェクトからの委託研究に発展した。平成 25 年度は、磁石、電池・触媒、電子材料、構造材料の個々の拠点と課題を包括して検討し、計算物質科学に必要とされる共通手法の開発をスタートさせる。実験や計測のグループとのコミュニケーションを密にし、真に必要とされているシミュレーション技術の先行開発を試みる。

戦略プログラムの他分野との交流研究会、5分野交流研究会等も適宜開催し、それらを通じて、特定高速電子計算機施設の運営主体である計算科学研究機構との連携機能も強化し、共通言語となる高並列化計算手法での連携開発成果のそれぞれの分野への活用、応用を図る。

なお、自然科学研究機構分子科学研究所、東北大学金属材料研究所とは、委託契約を結んで推進する。

6) 戦略分野の研究者を支える研究支援

大規模並列計算を戦略分野の研究者に普及発展させるためには、計算資源を有する機関がその計算機の特性や特定高速電子計算機施設の特性を考慮しながらアプリケーションの高度化を推進することが望ましい。そこで、共同利用の計算資源を有する、物性研、分子研、金研、および、神戸拠点に拠点研究員を配置する。拠点研究員は、ある特定の研究課題に取り組むのではなく、戦略課題研究や分野振興に広く役立つアプリの高度化と、そのアプリの利用環境を整備することが主たる役割である。

拠点研究員は、年に2回、技術交流会の合宿等を自らの企画で推進する。CMSI 外の若手も含めて計算物質科学研究者の輪を広げること、講師を招いた勉強会、進捗状況報告会、情報交換ミーティングを開催して、広い知見を得て、分野振興に役立てる。全体の取りまとめは、神戸拠点に配置予定の教員が担当する。

平成 23 年度より、AICS 内に CMSI の神戸拠点として東大物性研究所の分室を設置し、特定高速電子計算機施設を試験利用する、物性、分子、材料計算科学研究者の支援活動をスタートしている。平成 23 年度中に 2 名の特任教員が神戸計算科学研究機構内に常駐しており、平成 24 年度には拠点研究員が 1 名着任した。これらの常駐スタッフが、特定高速電子計算機施設の試験利用、および、共用開始後の利用の支援を行う。常駐スタッフは、特定高速電子計算機施設の運営主体である計算科学研究機構の共通基盤研究や分野融合研究等と積極的に連携していく。トータルとして、AICS 内の CMSI 神戸拠点には、東大物性研常勤スタッフが教員 1 名、研究員 1 名、事務補佐員 2、神戸大常勤スタッフが教員 1 名の、合計 5 名が常駐している。これに加え、特定高速電子計算機施設の利用に関するコンサルティングや課題打ち合わせ等の用途により、CMSI 神戸拠点を利用できるサービスを展開している。常勤スタッフは、滞在中の研究者との間で特定高速電子計算機施設の利用ノウハウに関する情報交換を行い、ノウハウを蓄積して新たな利用者に継承していく役割を持つ。

なお、自然科学研究機構分子科学研究所、東北大学金属材料研究所、産業技術総合研究所とは、委託契約を結んで推進する。

2.2 実施内容(成果)

戦略目標	計算物質科学:基礎科学の源流からデバイス機能とエネルギー変換を操る奔流へ			
研究開発課題の概要	基礎科学が生む新しい原理や、想像を超える概念から発する源流を実証・応用研究の海に繋る大河へと導いてはじめて、新時代のナノテクノロジーは真に次世代の産業構造を革新する力を持つ。そこで本課題では、物性科学分野、分子科学分野、材料科学分野にまたがる計算科学技術推進体制を構築する。この体制に基づき、デバイス機能制御、物質創成と物質変換、材料開発、エネルギー変換を通して、基礎科学の深化された概念が生む新量子相・新物質探索のアイデアや物質機能の深い理解を人類の課題解決へと導く道を、次世代スパコンシミュレーションによって切り拓く。			
計算科学技術推進体制構築の概要	参画各機関が保有する共同利用スーパーコンピュータと連携して計算機資源の効率的利用を図る。計算科学研究機構や大学情報基盤センター群等と連携しながら拠点大学方式により大学院教育を、講習会、ワークショップ等により社会人教育を実施する。研究会、国際会議、国際ワークショップ等により、国内外の人的ネットワークを形成する。神戸に数グループを派遣し、計算科学研究機構の計算機科学者や異分野の計算科学者との連携を推進する。			
代表機関・組織名	国立大学法人東京大学物性研究所 大学共同利用機関法人自然科学研究機構分子科学研究所、国立大学法人東北大学金属材料研究所			
提案者名	東京大学・物性研究所・教授(元所長) 家 泰弘			
統括責任者	ふりがな 氏名	つねゆき しんじ 常行 真司	生年月日	西暦 1961 年 5 月 16 日 (52 歳) ※2014 年 1 月 1 日現在
	所属部署	大学院理学系研究科／物性研究所	役職	教授
	ふりがな 所在地	〒113-0033 とうきょうとぶんきょうくほんごう 東京都文京区本郷7-3-1		
	Tel	03-5841-4127	FAX	03-5841-4127
	E-mail	stsune@phys.s.u-tokyo.ac.jp		
	所属機関・組織の産学官	「学」		
	エフオート	20%		
事務連絡担当者 ※	ふりがな 氏名	かわしま なおき 川島 直輝	役職	教授
	所属部署	物性研究所		
	ふりがな 所在地	〒277-8581 ちばけんかしわしかわ は 千葉県柏市柏の葉5-1-5		
	Tel	04-7136-3260	FAX	04-7136-3264
	E-mail	kawashima@issp.u-tokyo.ac.jp		
経費見込・実績額(概算)	本年度 493.674 百万円 (平成25 年度実績) 総額 2,525 百万円 (平成22年度から27年度の計6ヵ年)			

【戦略目標】

戦略目標： 計算物質科学:基礎科学の源流から物質機能とエネルギー変換を操る奔流へ

戦略目標についての説明：

半導体材料や高分子材料など、20世紀の科学技術研究の中で生まれた物質群は、100種類ほどの元素の無限ともいえる組み合わせの中から見出され、特異な機能や新しい現象の発現を通して、現代社会の産業基盤を形成してきた。これらの物質や材料をミクロな視点に立って研究する物質科学は、物性科学、分子科学、材料科学という3つの学問分野にまたがり、基礎研究と応用研究を繋ぐ役割をも担う、広大な学問分野である。第2分野戦略機関は、これら3分野で独立にコミュニティを形成してきた計算物質科学研究者を結集し、新物質創成の一層の進展を図るとともに、新規エネルギー創成のための基盤的技術開発と持続可能社会の構築につながる研究開発を目指すものである。

物性科学は 10^{23} ほどの膨大な数の原子、分子多体系から成る自然を理解する営みを通じて、相転移に伴う自発的対称性の破れ、集団運動励起やトポロジ励起、マクロ量子現象といった基礎科学を一新する普遍概念をもたらし、素粒子物理学から経済学まで広がる様々な学問分野に大きな影響を与えてきた。一方分子科学は、化学反応の理解とそれに基づく新しい分子・分子集合体の創製を通じて、物質科学研究に大きな展開をもたらしてきた。また材料科学は、金属組織や粒界、複合材料など、材料としての利用に係る諸問題の解決を目指してきた。これらの成果は、20世紀以降の産業・先端技術革新を生み出す基盤となった。トランジスタ、トンネルダイオード、半導体レーザー、集積回路、巨大磁気抵抗素子、CCD(電荷結合素子)、有機ELなどの革新デバイス、合成樹脂や導電性高分子などの新材料は、ノーベル賞の受賞対象ともなった物質科学の基礎研究が生んだ例である。同じく物質科学の精華である超伝導は、最先端の医療用MRI の超伝導マグネットに使われ、さらに超伝導リニアモーターやエネルギー損失の無い電力線として実用化されようとしている。高効率の太陽電池や高効率熱電素子など、地球規模のエネルギー問題解決に向けた新しい概念に基づくデバイスも、物質科学の基礎研究に基づいて提案され始めている。

20 世紀の要素解明から21 世紀には集団・階層解明と機能制御の時代に入ったと言われる現代科学の中核として、物質科学における基礎研究のフロンティアでは、量子ホール効果、トポロジ絶縁体、スピン液体、量子臨界や脱閉じ込めといった新概念が次々に発見され、自然の新機構解明への挑戦が続けられている。概念の革新は次世代、次々世代の最先端技術と応用へ展開する研究をますます活性化させているが、この基礎から応用への多段階リレーは、高度な蓄積を持つわが国を含む極めて限られた国でのみ追求し得る。大規模数値シミュレーションは、古くFermi-Pasta-Ulam の非線形励起・再起現象、剛体球のアルダー転移などの概念革新への寄与に始まり、現代量子多体系では、分数量子ホール効果の数値検証、相転移と臨界現象の解明、高温超伝導の機構提案など、物質科学の基礎研究に欠かせぬものとなった。一方応用へのリレーに、第一原理計算の定量的物性予測は今や無くてはならない。

そこで第2分野戦略機関では、物性科学、分子科学、材料科学の第一線で活躍する計算物質科学研究者を結集し、世界一、二を争うわが国の基礎研究を源流として次世代の産業革新へと至る物質科学の流れを、次世代スーパーコンピュータを駆使することで奔流に変えることを目標とする。これは国家の趨勢さえ決め得る未来の最先端技術のための価値ある投資である。この信念に基づき、異分野間の連携による相乗効果が最大限に発揮されるように配慮して、源流から奔流を経て大河へと導くように、5つの戦略課題を設定し、国家的・社会的見地から重要な基礎研究を推進する。

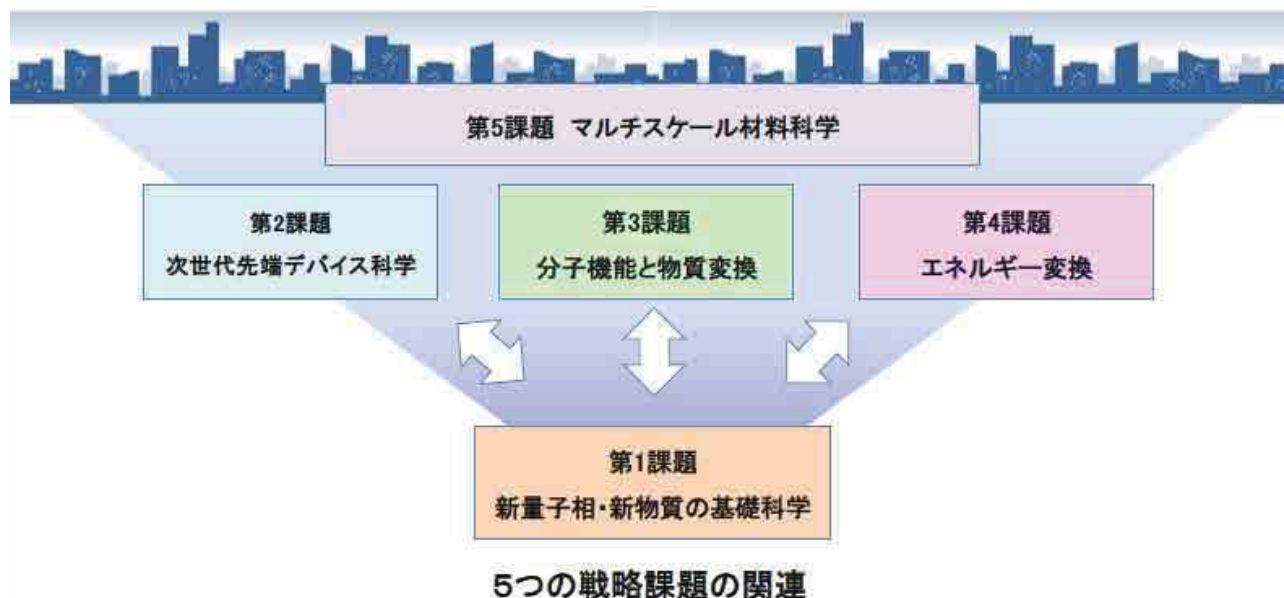


図2.2-1 5つの戦略課題の関連

第1課題「新量子相・新物質の基礎科学」では源流探索のために、研究分野の枠を超えて、粒子間の相互作用効果の強い分子系や凝縮物質（強相関量子多体系）を取り扱う強相関多体量子科学、計算科学の汎用手法を確立発展させるとともに、多体集団の励起状態や非平衡ダイナミクスの理解を飛躍させる。それにより、新奇的な量子多体现象の発見、革新的な量子機能をもつ新物質の機構解明や新物質探索、化学反応や分子集団ダイナミクス制御、エネルギー変換や発光制御などの制御法の基礎の解明をめざす。次世代スーパーコンピュータによって初めて明らかにできる、未踏の強相関効果、階層性と量子性が生む新量子相・励起現象の理解・発見と、基礎物質科学の解明が目標である。

第2課題「次世代先端デバイス科学」では、第1課題の成果を取り入れながら大規模多機能量子シミュレーション手法を確立し、物質機能の予測、新機能を有する新材料、新ナノ構造の探索と提唱を行い、次世代先端デバイス科学研究を推進する。国際半導体技術ロードマップ(ITRS)が指摘するように、線幅22nmを切る次世代先端デバイス開発では、裏打ちする科学的成果が枯渇し、大きな困難に直面している。密度汎関数法に基づく第一原理計算手法を極限まで大規模高速化し、次世代先端デバイスの特性を定量的に予測・解明し、その開発に寄与する。これにより、経験と蓄積のテクノロジーを演繹と予測のそれに進化させる。さらに第1題で得られた新量子相、量子機能についての知見を取り入れ、新概念に基づくデバイス開発への道を拓く。

第3課題「分子機能と物質変換」では、第1課題の電子状態計算に基づいた分子間相互作用の高精度評価、多体性に起因する動的過程と凝縮系におけるゆらぎの理解等を源流とし、これをナノスケール分子や分子集団系における構造形成と機能発現の奔流へと展開する。比較的小さな分子単体からナノスケールの分子・分子集団系機能への飛躍を最も重要な要素として位置付け、その中でも特に社会的な要請が高い、自己組織化により形成されたナノスケールの分子や分子集団の構造に基づいて創生される機能、すなわち分子認識、物質分離、分子輸送等の分子機能や、環境との変化に富んだ相互作用下において分子の電子状態が創る豊かな分子機能を明らかにし、新分子機能の開発・制御へと展開する。

第4課題「エネルギー変換」では、21世紀の最重要課題としてエネルギー・環境問題を取り上げる。現在地球規模で進んでいる技術革新の鍵を握るのは、化学・電気・熱などのあらゆる形態のエネルギーの相互変換や効

率的な貯蓄・利用であり、その技術を支えるのは物質科学的な総合的知識基盤である。物性・分子・材料科学として個別に発展した分野の結集の下、超大規模シミュレーション技術を開発してそれを最大活用することにより、種々の電池(燃料、太陽、リチウム)やエネルギー資源(ハイドレート、バイオマス)の既存技術に内在する問題の根本原因を明確にし、さらに次世代革新技術の創生につながる原理を探る。

第5課題「マルチスケール材料科学」では、鉄鋼材料をはじめとする構造材料や、誘電体材料などの機能性材料の特性の発現が、ミクロスケールの電子や原子の挙動に端を発し、メソスケールにおける内部組織によって変調を受けながらマクロ特性に反映されていくことに鑑み、マルチスケールにわたるシームレスなシミュレーションを行うことを目的としている。又、凝固過程のような材料の製造プロセスが製品の特性に大きな影響を及ぼすことから、プロセスと特性の相関の解明も課題としている。信頼し得る構造材料の製造は、これまで我が国の基幹技術として世界に優位を誇ってきた。今後もこのような地位をゆるぎないものにする為に、材料の設計に資するシミュレーション技術の確立につなげていく。

2. 2. 1 当該年度(平成 25 年度)における研究成果

2. 2. 1. 1 研究開発課題(成果)

【研究開発課題の成果概要】

平成 25 年度は、平成 24 年度に実施した研究課題の評価会議において選定された、重点課題 7 件と、特別支援課題 14 の研究課題を推進した。また、分野振興として選定した支援課題 6 件も実施した。表 2.2.1.1 に、平成 25 年度に推進した研究課題の一覧と、査読付き論文の発表数、および、プレスリリース等により、新聞、雑誌等に取り上げられた件数を示す。査読付き論文数は 164 件であり、その中で「京」を利用した論文は 20 件あった。マスコミに取り上げられた件数は 20 件であった。特に、ウイルス、リチウムイオン電池、メタンハイドレートは成果の内容がわかりやすく、一般紙にも掲載された。平成 25 年度に、「京」、HPCI、および、各戦略プログラムで提供している計算資源を利用した、HPCI 戦略プログラム全体の成果を登録するデータベースシステムが、RIST により構築され、HPCI 戦略プログラム、および、「京」の一般利用の全体で運用されている。このシステムを利用すれば、論文(査読有無)、講演、広報やプログラム公開、特許等の件数を迅速に検索することが可能である。成果の詳細はこのサイト(下記参照)をご参照いただきたい。

成果登録データベース <https://www.hpci-office.jp/hpcidatabase/publications/search.html>

CMSI で実施している研究課題の成果は、平成 25 年 12 月 10～13 日(火～金)に東京大学物性研究所で実施された「第 4 回 CMSI 研究会」で詳細に報告された。この報告会では、第 1 部会から 8 件、第 2 部会から 8 件、第 3 部会から 8 件、第 4 部会から 8 件、第 5 部会から 6 件の優れた成果が口頭発表されている。また、それらの成果を支える研究課題、計算物質科学分野の振興に関する課題等 49 件がポスターで発表され、参加者間で活発な議論が行われた。発表された各課題の概要集は、下記 HP からダウンロード可能である。

CMSI 研究会概要集 <http://www.cms-initiative.jp/ja/events/20131210godo>

表 2.2.1.1 平成 25 年度 CMSI 重点課題・特別支援課題・支援課題と論文・広報数

部会	種別	課題番号	研究代表者	課題名	成果	広報
					学術論文(査読付き)	新聞・雑誌掲載
第一部会	重点1	i	今田正俊	相関の強い量子系の新量子相探索とダイナミックスの解明		
		①	今田正俊	電子相関の強い実物質の新機構解明と制御法開拓に関する研究	18	2
		②	遠山貴巳	強相関電子系の励起ダイナミックスの研究	5	
		③	川島直輝	量子モンテカルロ法による新しい量子相・量子臨界現象に関する研究	12	
	重点2	ii	天能 精一郎	電子状態・動力学・熱揺らぎの緩和と物質理論の新展開		
		①	天能 精一郎	超高精度電子状態計算による分子の微細量子構造予測	2	
		②	高塚和夫	分子における電子の動的過程と多体量子動力学	5	
		③	斉藤真司	凝縮分子科学系における揺らぎとダイナミクス	1	
第二部会	重点3	i	押山淳	密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究	5	
	特別支援	ii	尾形修司	ナノ構造の電子状態から機械的性質までのマルチスケールシミュレーション	2	
		iii	信定克幸	ナノ構造体における光誘起電子ダイナミクスと光・電子機能性量子デバイスの開発	3	
		iv	斎藤峯雄	スピントロニクス／マルチフェロイクスの応用へ指向した材料探索	5	
		v	常行真司	新材料探索	10	
第三部会	重点4	i	岡崎 進	全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開	1	5
	特別支援	ii	岡本祐幸	拡張アンサンブル法による生体分子の高次構造と機能の解明	3	
		iii	松林伸幸	ポリモルフから生起する分子集団機能	9	
		iv	中井浩巳	ナノ・生態系の反応制御と化学反応ダイナミクス	11	
		v	江原正博	機能性分子設計－光機能分子と非線形外場応答分子の光物性	21	
第四部会	重点5	i	杉野修	エネルギー変換の界面科学	4	9
	重点6	ii	田中秀樹	水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性	3	3
	特別支援	iii	山下晃一	太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算	5	
		iv	吉田紀生	バイオマス利用に向けた酵素反応解析	4	
		v	浅井美博	ナノ構造体材料における高効率非平衡エネルギー変換過程とナノ構造創製の理論シミュレーション	14	
第五部会	重点7	i	香山正憲	金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発	5	
	特別支援課題	ii	大野宗一	合金凝固組織の高精度制御を目指したデンドライト組織の大規模数値計算	1	
		iii	西松毅	超高速分子動力学計算による強誘電体薄膜キャパシタの高性能化	2	
		iv	大野かおる	ナノクラスターから結晶までの機能性材料の全電子スペクトルとダイナミクス	5	
推進体制構築			藤堂真治	計算科学推進体制構築	－	1
支援課題	i	中野 博生	フラストレート磁性体の計算科学的研究	4		
	ii	芝 隼人	界面活性剤系のマルチラメラ高次構造形成の大規模粗視化分子動力学計算	1		
	iii	大久保 毅	フラストレート磁性体におけるトポロジカル励起の秩序化	2		
	iv	土居 抄太郎	Screened KKR 法による永久磁石材料の第一原理電子状態計算	0		
	v	石村 和也	ナノサイズ分子の新規構造及び機能の探索	1		
	vi	今井 英人	HPCを用いた次世代電池の反応機構の解明	0		
					164	20

2. 2. 1 当該年度(平成25年度)における研究成果

2. 2. 1. 1 研究開発課題概要

2. 2. 1. 1(1) 新量子相・新物質の基礎科学

第1部会 代表者：天能精一郎(神戸大)、今田正俊(東京大)

1) 部会全体の取り組み

【研究成果の概要】

第1部会は新量子相、新物質を基礎科学的に解明するために、京による大規模数値計算を活用して、基礎科学的な成果を挙げ、さらにこれによって実験研究、応用研究へと展開する道筋を考えることを目標としている。また、物理学と化学の分野が協力して、新量子相・新物質の基礎科学解明に資する計算手法を発展させることも目標としている。京の本格運用によって、各研究課題から多彩な成果が出ている。スピン軌道相互作用の大きな物質に生じるトポロジカルな相の物性と機能探索、超伝導機構の解明、強相関電子系に特有な非平衡・励起ダイナミクスの探索と解明、脱閉じ込め現象の存在に関するより大規模な検証、F12 理論を用いた N-ヘテロ環状カルベンによるフラーレンの外部修飾計算、モデル空間量子モンテカルロ法のハイブリッド並列実装と高電子励起状態の計算、水やタンパク質の動力学研究などで広範な成果を挙げた。

【部会活動】

第一部会は物理と化学の分野の研究者が一堂に会する基礎研究プロジェクトであり、分野横断での交流が続けられた。2013 年 8 月 19 日(月)～23 日(土)の期間、第一部会の夏の学校を蔵王で開催し、エネルギー問題に焦点を当て、第4部会のメンバーとの議論を深めた。

第一部会の活動はそれぞれ3つの項目を束ねて、合わせて 2 つの重点課題として実施し、旧項目間の共同研究が発展した。また個々に実験家との交流が進んだ。

2) 研究開発課題

i) 重点課題1: 相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミクスの解明

[代表者] 今田正俊(東京大)

[担当者] 今田正俊(東京大)、求幸年(東京大)、有田亮太郎(東京大)、中村和磨(東京大)、
三宅隆(産総研)、青木秀夫(東京大)、高田康民(東京大)、黒木和彦(電通大)
遠山貴巳(京都大)、町田昌彦(原子力機構)、前川禎通(原子力機構)、米満賢治(中央大)
川島直輝(東京大)、藤堂眞治(東京大)、宮下精二(東京大)、岡部豊(首都大)、
鈴木隆史(兵庫県立大)、原田健自(京都大)、渡辺宙志(東京大)

第一原理に立脚する強相関量子多体系の高精度な予測・解明と、本質と原理を抽出するための理論模型による大規模計算に基づき、電子相関の強い現実物質の新機構解明と制御法開拓に関する研究、強相関電子系の励起ダイナミクスの研究、新しい量子相・量子臨界現象に関する研究を推進した。

平成 25 年度からは 3 つの研究項目を廃止し、共同研究プロジェクトを開始した。

[研究の背景と目的]

第一原理的な電子状態計算法は、物質の性質を理解し応用する上で基礎的な重要性を持っている。特に電子相関の強い系—強相関電子系—は近年多くの基礎物理学的に意義の高い現象の発見が続き、基礎原理の解明による、新機能や新原理を用いた応用展開へ向けた期待と合わせて、電子状態解明法確立への期待は大きい。このような現象や物性の例として高温超伝導、スピン液体などの新奇量子液体、分数量子ホール効果やトポロジカル絶縁体のようなトポロジ効果などがある。最近ようやく、強相関電子系の持つ特徴的エネルギー階層構造を利用し、電子相関の強い系を第一原理的に解明するための計算が MACE(階層的強相関電子状態計算スキーム)によって可能になった。本プロジェクトの目的の一つはMACEを方法論的に整備し、汎用的手法として確立して、「京」を活用して強相関電子系の物性解明、予測に役立てることである。

励起ダイナミクスの研究によって得られる外場への応答の理論や量子ビームを用いたスペクトロスコーピーなどの実験に対する情報は、強相関基礎科学の深化に貢献し、また強相関電子系特有の電子内部自由度による量子効果を最大限活用した次世代新機能デバイスの設計指針構築は応用へとつながる。本研究では、強相関電子系・量子スピン系の電荷・スピン励起などの計算を通じて強相関電子系に特有な非平衡・励起ダイナミクスの探索と解明を進め、実験に対する情報を提供するとともに、スピン軌道相互作用系の有効スピン模型の基底状態の解明と励起ダイナミクス探索の基盤構築を目的とした。

低次元量子系は自由度間の相関効果が非自明な形で現れる系の典型であり、銅酸化物超伝導体や近年盛んに研究されている鉄系超伝導体でも、その2次元性と超伝導発現機構の間の関連が議論されている。このような学術的な流れに触発されて、従来知られていなかったカテゴリの量子相転移、とくに、対称性の破れという範疇にはいない臨界現象についてもその可能性が指摘されてきている。一方で、レーザートラップ中での極低温原子系の凝縮が成功して以来、理想的な実験場としての光格子系が脚光を浴び、量子コンピュータへの期待が高まっているが、これについても、実際にどのような系が実現されているかの同定を初めとして、計算物理との協調が不可欠なフェーズにある。本課題項目では、このような背景を念頭におき、多体問題のなかで自発的に生じる位相欠陥などの特異点・特異線や、外部的に付加されるランダムネスに関連する物性の基礎を明らかにすることによって、これら課題の解決に寄与する新しい知見を得ることを目的とする。

[実施内容(計算モデル)]

京も含むスーパーコンピュータの駆使により、本格計算を進めた。鉄系超伝導体の超伝導機構の解明、理論模型であるハバード模型の超伝導機構の解明、基本的な模型である三角格子ハバード模型、フラストレートした

量子スピン系のスピン液体発生機構の研究を進めた。第一原理強相関有効モデルの導出においては昨年に引き続き MACE の手続きを採用し、低エネルギーソルバーとして、変分モンテカルロ法、クラスター動的平均場近似と合わせて厳密対角化なども利用している。また MACE の適用範囲を拡大するために、電子格子相互作用も取り入れるための手法開発を進め、電子格子相互作用があるときの変分モンテカルロ法のアルゴリズムを開発した。また動的密度行列繰り込み群法(動的DMRG)を用いて、フォノンと結合したモット絶縁体の3次元非線形光学応答スペクトル、プラズマ共振を持つ一次元鎖からなる梯子型量子スピン系のスピン励起ダイナミクスを計算した。また、厳密対角化法(ランチョス法)を用いて、二次元 t - J 模型のスピン励起・電荷励起ダイナミクスを計算し、銅酸化物高温超伝導体の共鳴非弾性 X 線散乱実験に対する情報提供を行った。さらに、4 体スピン相互作用まで考慮した二次元三角格子ハイゼンベルグ模型の磁気ラマン散乱スペクトルを計算し、実験との比較を行った。時間依存ランチョス法を用いた非平衡ダイナミクス計算では、二重パルス光の量子干渉効果による光励起抑制シミュレーションを行った。このほか、2次元密度行列繰り込み群法(2D-DMRG)を用いて、ハニカム格子を有するイリジウム酸化物の有効スピン模型(拡張キターエフ・ハイゼンベルグ模型)の基底状態を「京」を用いて計算した。さらに種々の量子スピン系、ボーズ系に対する「京」および全国共同利用研究所のスーパーコンピュータ等を利用した大規模並列計算実施を通じて、低次元磁性体や光格子系におけるスピン液体相、脱閉じ込め臨界現象など、新奇な臨界特性の数値検証を行った。月に1度の頻度で、メンバーが集まり集中的に討論する会合を開催した。この結果、研究の進展に伴って、物理的な課題内容が深化するとともに整理され、その解明に必要な技術的な問題点の明確化に役立った。特に、前年度に予備的な結果が得られていた脱閉じ込め転移の解明に向けた計算をほぼ区切りのよいところまで実施することができた。この転移については解析的な近似理論から、スピン自由度をとらなう渦欠陥の乖離であるという描像が立てられており、ここから通常の自発的対称性の破れとは異なるタイプの臨界現象が予想されている。一方、これを弱い1次相転移であるとする見解もあり、より確度の高い結論を得るには、予想される転移点での相関長よりも大きな系に関する計算を行う必要があった。このため、京コンピュータを利用して前年度までの結果に加えて、対称性の異なる蜂の巣格子の計算を実施し、より多角的にデータを収集した。

〔並列計算の方法と効果(性能)〕

OPENMP, MPI を併用した高い並列効率の多変数変分モンテカルロ法のコードでは、ピーク性能比で 10% から最大で 40% を記録している。また DMRG コードでは、計算の中核となる行列・ベクトル積が効率よく並列化されている。さらに、動的 DMRG ではエネルギー領域に関する並列化も実装されており、高い並列化効率を示している。平成 25 年度には、2D-DMRG における並列化効率の大幅な改善を行うため、DMRG 中のスウィーピングと呼ばれるプロセスを分割することで並列化を促進する手法を開発した。その手法をプログラムに組み込んだ結果、高い並列化効率を示すことが示された。本課題ではグランドチャレンジ(ナノ統合)プロジェクトから引き続き開発を続けてきた ALPS/Looper をベースとして、一部本プロジェクト用に改変して利用している。ALPS/Looper については、すでに K コンピュータ上で約全ノードを利用した性能試験を実施し、成績を上げている。一例としては、ストロングスケーリングで、システムサイズ 321,064 の 1 次元量子スピンモデルのシミュレーションを 15,360 スレッド並列で実施した場合と、30,720 スレッド並列で実施した場合の比較から 53.8 % の並列化効率であることが立証された。ウィークスケーリングに関しては、スレッド数 16 と、196,608 の場合の比較から、並列化効率 46.9 % が得られている。

〔研究成果〕

1. 新しい量子相と量子相転移の解明

1-1. 新量子相として研究が進んでいる高温超伝導のメカニズムを解明するために、ハバード模型で超伝導が生じる条件と超伝導が生じる機構をさらに詳細に明らかにした。また、鉄系超伝導体の第一原理有効モデルを用

- いて、超伝導機構を追究し、実験結果と一致する相図を得た。超伝導機構はハバード模型と共通点があり、電荷の不安定性に由来することが明らかとなった。その結果は、超伝導機構の普遍性を示唆する。
- 1-2. 今まで知られていない量子液体の一つとして 40 年来の基礎科学の難問となっている「量子スピン液体」の発生メカニズムを、実験的な候補となっている有機導体(dmit 塩)の第一原理模型を出発点に多変数変分モンテカルロ法で解くことにより解明することをめざした。実際に三角格子上のハバード模型やハイゼンベルク模型が、次近接の相互作用(ホッピング)を含む場合にスピン液体相が安定化されることを見出した。
- 1-3. 電子格子相互作用も含めた第一原理有効模型を解くための多変数変分モンテカルロ法を開発した。電子格子相関因子を組み込むというアルゴリズムにより、厳密解と比較して高精度の計算手法であることが実証できた。このアルゴリズムに基づくコードを実装した。
- 1-4. 前述の共同研究であるスピン軌道相互作用の物理に加えて、パイロクロア構造を持つイリジウム酸化物でもトポロジカルな効果が問題になっている。特に現実物質は磁気秩序を持ち、低温ではトポロジカルには興味深い性質は示さずバルクも表面も単純な絶縁体であると考えられてきたが、実際には磁気秩序相に生じる磁壁が保護された金属的伝導を示し、磁化とカップルすることにより今まで見られなかった新しい機能を示すことがわかった。
- 1-5. 従来の相転移の教科書を書き換えることが提唱されている「脱閉じ込め現象」という新概念の妥当性を判断するために、この新量子相転移が生じる候補となる理論模型である、正方格子上、およびハチの巣格子上の量子スピン模型である「SU(N)JQハイゼンベルクモデル」について、大規模計算を実施し、脱閉じ込めの概念の有効性を明らかにする研究を行なった。その結果、固定したシステムサイズでは、理論的に予言されている脱閉じ込め臨界現象のシナリオによく適合すると解釈できる2次転移を示唆する結果が得られた一方で、今まで見出されていなかった規模の大きな系の計算ほど 1 次転移への傾向が大きくなることを見出し、新たな知見を得た。
- 1-6. 量子多体系に対する標準的解法の一つであり、光格子中の極低温原子系や、グラファイト上の吸着ヘリウム系など、近年注目されているボーズ粒子系のモデルなどを扱う最有力の方法でありながら、従来は並列化することができないとされていたワーム法による量子モンテカルロシミュレーションの新しいアルゴリズムを開発した。性能を実証するために、一辺が 10,240 の正方格子上のボーズハバードモデルの低温領域のシミュレーションを行い、十分に平衡に達した状態での超流動相の計算を行うことが可能であることを立証した。
- 以上、物性物理の最先端で提唱されている新概念を探索し、複数の系で新量子相候補を抽出し、新しいタイプの相転移の研究が進んだ。また階層的な第一原理強相関電子状態計算法(MACE)の適用範囲を拡大し、低エネルギーソルバーの高精度化や適用範囲拡大、新しいアルゴリズムの開発も進んだ。
- ## 2. 励起ダイナミクスの解明
- 2-1. 最近発見された二本足梯子量子スピン系 $\text{CuBiCu}_2\text{PO}_6$ のスピンダイナミクスの予測するため、フラストレーションを持つ一次元鎖からなる梯子型ハイゼンベルグ模型のスピン励起ダイナミクスを動的 DMRG により計算した。この結果は、今後 J-PARC で実施されるであろう実験に対する有用な情報となる。
- 2-2. 銅酸化物高温超伝導体に対する L 吸収端共鳴非弾性 X 線散乱実験が最近急速に進展している。散乱スペクトルのホールドーブ型と電子ドーブ型の違いを理論的に解明するため、ランチョス法に基づく厳密対角化法により、二次元拡張 t -J 模型のスピン励起・電荷励起スペクトルを計算した。その結果、3サイトが関わるプロセスにより、電子ドーブ側ではスペクトルのエネルギー位置がドーピングとともに上昇することを見いだした。この成果はスタンフォード大学の理論グループとの共同研究として発表された。また電荷励起が散乱スペクトルに現れる運動量・エネルギー領域を予測したが、実際、電子ドーブ型に対する実験で観測された。これも実験との共同研究として発表された。

2-3. 異方的な三角格子を持つ有機物質の磁気ラマン散乱スペクトルを、4 体スピン相互作用まで考慮した三角格子ハイゼンベルグ模型に対して厳密対角化法で計算し、実験とのよい対応を得た。三角格子有機物質のスピン液体状態に対する有用な情報を提供している。

2-4. 強相関電子系での光励起ダイナミクスの量子干渉効果を明らかにするため、拡張ハバード模型に二重パルス照射した際のダイナミクスについて、時間依存ランチョス法で時間依存性を計算した。その結果、第一パルスによって励起された状態が第二パルスによって基底状態に近づく条件が明らかとなった。

2-5. 「京」上で2D-DMRG を用いて、ハニカム格子上の拡張キターエフ・ハイゼンベルグ模型の基底状態やエンタングルメント・エントロピーなどの物理量の高精度計算が可能となった。その結果、イリジウム酸化物で観測されているジグザグスピン構造の出現だけでなく、そのパラメータ近傍でスピン液体状態が出現する可能性を議論できるようになった。

2-6. H24 年度に引き続き、電子相関とともに電子・格子相互作用の効果を取り入れた一次元モット絶縁体の模型(一次元ハバード・ホルシュタイン模型)の、3 次の非線形光学応答スペクトルを「京」で計算して、スペクトル強度・スペクトル形状に対する模型のパラメータ依存性を明らかにした。

3. スピン軌道相互作用とトポロジカル現象の物理

スピン軌道相互作用の物理の研究を推進し、定期的に全体ミーティングを開催しながら、最初の共同研究としてイリジウム化合物 Na_2IrO_3 の研究を進めた。この化合物は理論的な予言で、量子計算候補としても注目されるキターエフ模型による量子スピン液体状態が実現しやすいことが指摘されている。しかし現実の物質は磁性秩序が生じ、磁性発生のメカニズムが謎となっている。またスピン液体の実現にはどうすればよいかが大きな課題となっている。第一原理有効模型の導出を行ない、厳密対角化、密度行列繰り込み群、変分モンテカルロ計算、テンソルネットワークによる計算という多角的な手法でこの有効模型を解き、磁性の発現、キターエフスピン液体の発生条件の研究が進んでいる。平成 25 年度には第一原理有効模型の導出とその強結合極限での研究が厳密対角化とスピン波近似で行われ、第一原理模型で生じる磁気秩序が実験結果を再現することが示された。

ii) 重点課題2: 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開

【代表者】 天能精一郎(神戸大)

本重点課題の目的は、電子状態・動力学・熱揺らぎの取り扱いをコアエレメントとして革新的な発展を図り、これらの融和的な理解と練成に基づいた新しい分子理論を推進する事である。超並列計算環境を高度に活用する事により、これまで取り扱いが困難であった複数の物理原理が絡み合う実在系の分子科学を発展し、物質設計・生命・エネルギー問題を基礎原理から解決する役割を担う。

H24年度までは、「超高精度電子状態計算による分子の微細量子構造予測」「分子における電子の動的過程と多体量子動力学」「凝縮分子科学系における揺らぎとダイナミクス」の3項目に対する研究を進めて来たが、課題研究の後半は分野融合による成果を目指すために研究項目の廃止を行い、1課題に集約した。H25年度は、以下の研究を推進した。

【担当者】 天能精一郎(神戸大)、柳井毅(分子研)、江原正博(分子研)、安田耕二(名古屋大)、波田雅彦(首都大)、大塚勇起(神戸大)、高塚和夫(東大)、河野裕彦(東北大)、斉藤真司(分子研)、佐藤啓文(京都大)、笹井理生(名古屋大)、中島晴之(九大)、永瀬茂(京大)

【研究の背景と目的】

露わに電子相関を考慮した F12 法を始めとするポストハートリー・フォック電子状態理論の超並列計算を「京」コンピュータで実行し、ナノスケールの分子系で完全基底関数極限に近い高精度計算を達成する。炭素材料や含金属ナノ材料の構造やエナジェティクス、電子物性に関する知見を飛躍的に発展させ、デバイス材料の物質設計につなげる。更に、エネルギーやレアアース等、我が国が直面している問題を計算科学の立場から物質の基本性質である電子状態を調べる事によりアプローチする。相対論的電子状態理論や強い電子相関含む励起状態の取り扱いを可能にする量子モンテカルロ法を発展させる事により、重元素を含む分子設計や、モデルメタルクラスターの計算による希土類の代替合金探索を、京速計算機を用いて実現することを目指す。更に、溶液やタンパク質などの凝縮分子系では、分子運動の複雑な絡み合いにより様々な時間・空間スケールの構造揺らぎ・化学反応が誘起され、多様な物性や機能を生み出す。とくに、タンパク質は水中で安定した構造をとるようにデザインされており、また、絶えず揺らいでいる水溶液の中で構造揺らぎ・化学反応が誘起され機能の発現へとつながっている。水和や溶液の動的揺らぎや緩和の分子論的機構やタンパク質複合体のダイナミクスを研究し、タンパク質の動的揺らぎと化学反応のカップリングが分子モーター動作の本質にどのように関わるかを理解し、ナノマシン設計の指針を得ると共に、延いては光合成反応活性中心の電子状態と反応場、ダイナミクスの解明を目指す。

【実施内容(計算モデル)】

電子状態計算に関しては、超並列版の MP2-F12 法を用いて「京」コンピュータ上で、N-ヘテロ環状カルベンによるフラーレンの外部修飾に関する計算を進めた。又、モデル空間量子モンテカルロ(MSQMC)法の超並列実装を行い、複雑な励起状態の完全 CI 計算を実現化した。水の分子内・分子間の揺らぎ・緩和の解析に関しては、分子内電荷移動、分極効果が考慮されているパラメータを用い、平衡およびパルス状電場を印加した非平衡分子シミュレーションを用いて計算を行った。得られた平衡非平衡トラジェクトリから、電場照射後の振動状態密度の変化を解析し、エネルギー緩和の詳細を解析した。また、過冷却水の動力学の解析に関しては、OpenMP 化されている独自の専用プログラムを用い、様々な温度での長時間シミュレーションを計算し、構造および揺らぎに関する種々の解析を行った。さらに 3D-SSSV 方程式理論を用いて、水分子近傍やナトリウムイオン近傍の水分子および種々のイオンの拡散過程について調べた。これらいずれも一次元の SSSV 理論や分子動力学法で van Hove 関数が得られており、比較的良い一致を示している。また、リチウムイオン二次電池で広く用いられるエチレンカーボネート溶媒中のリチウムイオンの拡散過程についても計算を行った。タンパク質の動作原理の解明に関しては、動的エネルギーランドスケープ理論を整備し、1 万アミノ酸残基以上の巨大な蛋白質複合体の運動を制御する自由エネルギー面とその面上での運動を計算した。

【並列計算の方法と効果(性能)】

MP2-F12 法は実空間の求積法を用いることにより、分子積分の並列性能を高めている。又、MSQMC 法はサンプリングがモデル空間の状態に対して独立であるため、超並列計算に適した計算手法である。粗視化シミュレーションでは、自由エネルギー面計算のための OpenMP 計算により、1 万アミノ酸残基以上の巨大な系についての WHAM 収束を可能にした。

【研究成果】

1. 高精度電子状態計算によるフラーレン誘導体の計算

露わに相関した二次の摂動論(MP2-F12 法)と分子求積 MP2 法に関して、前年度までに超並列実装を行っていた GELLAN プログラムでは、大きな分子で大きな基底関数を用いた場合にメモリが不足する場合があったが、この問題を解決するためにプログラムの改良を行い、より大きな分子の計算が行えるようにした。この

GELLAN プログラムを用いて、有機伝導体として有望な種々の炭素材料の計算を行った。有機伝導体は一般に大きな π 共役系をもっており、側鎖に長いアルキル基を含む場合も多い。有機電子デバイスの性能は局所的な分子配向によって大きく左右されることが知られているために、これらの分子の分子間相互作用を正確に計算することは非常に意義深い。分子間相互作用を計算する際に、MP2 法は π 共役系の引力的な相互作用を過大評価することが知られており、しばしば SCS 法と呼ばれる補正が適用される。しかしながら、本研究で計算を行った大きな π 共役系では、SCS 法でも過大評価を十分に補正できないことが明らかとなった。また、アルカン分子同士などの分子間相互作用では SCS 法は適していないことも知られている。そこで、H25 年度は本研究で対象とする有機伝導体の分子間相互作用を適切に計算することができる補正法の開発を行った。本手法を用いることによって、従来法では正確に計算することができなかったグラフェンのような多環芳香族炭化水素と、SCS 法では過剰に補正されていたアルカン分子間の分子間相互作用をどちらもよい精度で求められるようになった。本手法を用いれば側鎖にアルキル基をもつポリチオフェンなどの π 共役系が大きく広がった分子同士の相互作用を正確に算出することができと期待できる。また、H24 年度に引き続き N-ヘテロ環状カルベンによるフラーレンの外部修飾に関する計算も進め、一つのフラーレン分子に二つの N-ヘテロ環状カルベンが十分に結合しうることが計算によって示唆された。二つのカルベンが結合したフラーレン分子は、フラーレン単体や一分子のカルベンが結合した分子とは電子的な性質が異なるため、本結果は、合成環境を少し変えるだけで多様な電子的な性質をもつフラーレン誘導体が合成できる可能性を示したと言える。

2. モデル空間量子モンテカルロ法による励起状態の計算

強い電子相関を持つ系の電子状態計算を目的として、前年度に提案したモデル空間量子モンテカルロ (MSQMC) 法に関しては、平成 25 年度には MPI/OpenMP hybrid 並列実装を行った。今回開発されたアルゴリズムでは、MPI を使用してモデル空間 (P-空間) に含まれる電子配置を各ノードに分散し、さらにモンテカルロステップにおける各ウォーカーの遷移や複製と消滅の計算は、MPI/OpenMP を使用して並列に行う。実用的な計算のために、自動的にモデル空間を選択できるアルゴリズムの実装も行った。P-空間以外の空間である Q-空間の中で、ウォーカー数がしきい値を超えた電子配置を P-空間へ移動させることによって、重要な電子配置を自動的に選択することが可能である。また、計算労力の削減のために、同じ配置空間のモンテカルロ法である FCIQMC 法で使用されているイニシエーター近似の妥当性の検討も行った。寄与の小さい電子配置を効率的に消去することによって、精度を保ったまま計算時間を劇的に削減することに成功し、MSQMC 法においてもイニシエーター近似を利用できることを確認した。開発されたプログラムは汎用的であり、全ての空間対称性とスピン対称性の組合せで計算することが可能である。京コンピュータを利用して、小分子の基底状態と励起状態のポテンシャル曲線の計算を行った。C₂ 分子を使用した Full-CI 計算との比較では、平衡核間距離から結合解離領域にわたって、基底状態と 2 つの励起状態における誤差は全て 1mHartree 未満であった。実験によって提案された N₂ 分子や O₂ 分子のポテンシャル曲線との比較では、低いエネルギー領域においては実験と MSQMC 法による結果は良い一致を示したが、高いエネルギーの領域においては、MSQMC 法では、実験には見られない Avoided crossing の形状が得られた。クロム 2 量体の計算では、P-空間として静的電子相関の表現に重要な d 軌道の結合性軌道から反結合性軌道への励起が自動的に選択された。MSQMC 法による結果は、FCIQMC や DMRG による最善値と比較して 2mHartree 程高く計算されたが、これはウォーカー数が、まだ不十分であるためであり、ノード数や計算時間を増加させることによって系統的に改善することが可能である。

3. 水のエネルギー緩和と過冷却

水溶液中で化学反応が起こると、それに伴い反応エネルギーの散逸が生じる。そのため水のエネルギー緩和機構の理解は、水溶液中における化学反応の理解に不可欠であり、水の揺らぎや緩和の解析を進めてきた。実験的にはポンプ-プローブ分光法によりエネルギー緩和を調べることができるが、詳細な緩和の分子機構を明

らかにすることは容易ではない。そこで、我々は系に振動電場を照射する非平衡分子動力学計算のプログラムを作成し、水の分子内運動から分子間運動へのエネルギー緩和の解析を行った。余剰エネルギーの低振動運動への緩和機構について解析した結果、OH 伸縮運動の余剰エネルギーは主に HOH 変角振動と高振動平衡振運動に伝わる事が明らかになった。また、OH 伸縮振動と高振動平衡振運動が非調和的に強くカップルしていることも明らかにした。さらに、OH 伸縮振動の余剰エネルギーのほとんどが隣接する分子へと素早く散逸していくのに対し、HOH 変角振動の励起エネルギーは主に高振動平衡振運動に緩和し、その後低振動平衡振運動、高振動並進運動、低振動並進運動へと緩和していくこと等も明らかにした。

また、温度の低下に伴って、水は等圧比熱の増加をはじめとする様々な熱力学的異常性を示すことが知られている。この異常性は、異なる2種類の過冷却液体状態間の動的転移と考えられている。過冷却水のシミュレーションもこれまで行われているが、その多くは静的量の解析が多く、揺らぎの詳細、とくに熱力学的性質を生み出す動的揺らぎの解析は殆ど行われていなかった。そこで、我々は室温からこの動的転移が起こる温度領域における過冷却水の動力学を解析し、等圧・等積比熱に関わる揺らぎの時間・空間スケールを明らかにした。また、等圧・等積条件の違いによる緩和時間の温度依存性やエネルギーランドスケープの違いなどの解析を行った。

4. 分子性液体の拡散

溶液内分子を扱う種々の統計力学理論について重点的に整備を行い、とりわけ分子の拡散過程を扱う新規理論の開発に重点を置いた。拡散は溶液中における最も基本的な過程であり、その取り扱いについては古くから検討されて来ているが、内部自由度を持つ多原子分子からなる溶液に対する統計力学理論は極めて限定されており、SSSV (Site-site Smoluchowski-Vlasov) 方程式がその数少ない例である。液体構造の時空間変化はこの方程式で追跡することができるが、動径方向に射影した溶媒和構造しか取り扱うことが出来ないために、直感的な理解が得にくいのみならず、電極界面近傍などの異方性のある系に適用することは困難であった。そこで、SSSV 方程式の枠組みを活用しつつ、MC-MOZ 法や3D-RISM 法で得られる三次元溶媒和構造の時空間変化を記述できる新しい拡散方程式理論(3D-SSSV 法)を開発し、電解質溶液へ展開した。また MC-MOZ 法を量子化学計算と融合する MC-MOZ-SCF 法についても概ね完成の段階に到達している。

5. アクチン-ミオシン II 複合体計算

タンパク質は、人工の機械の及ばない高い効率のエネルギー変換・情報変換を行うシステムである。しかも、真空中で機能するものではなく、その構造も水中で安定化されるようにデザインされている。さらに、周囲にある水は単なる静的な環境ではなく、その揺らぎの中で効率的なエネルギーの集中と散逸のもと構造変化・反応が引き起こされ機能を生み出す。このような人間の想像を超えたナノバイオマシンの設計原理を理解することは、凝縮化学系における反応とは何かという学術的な問題であり、未来の新技术を展望する技術的な問題にも繋がるものである。本研究項目では、水とおよび動的な揺らぎ・緩和の解析とともにタンパク質の動作機構の解明に向けた研究を進めた。

タンパク質の動作機構の解明に関して、アクチン-ミオシン II 複合体の計算を行った。ミオシン II はアクチンと弱く相互作用し始めて後、強い結合を形成して安定化されるまでの間に、一方向に偏ったブラウン運動を必然的に生じること、ループ2の構造柔軟性を減らすと、ブラウン運動の偏りは消失することなど、実験では予測がつかなかったミオシン分子モーターの動作の基本原則に関する発見が得られた。

6. 自在回転部位を有するナノ複合分子の構造と動力学

分子内の回転部位の運動によってその光学的・誘電的特性を変化させることができる結晶性分子ジャイロスコープは、外部骨格(固定子)によって保護された回転子を持つ。我々はフェニレン環回転子が頑強な3つのシラアルカン鎖で囲まれた、結晶中でも回転子の周囲に広い空間を保持している結晶性分子ジャイロスコープを

対象に研究を進めた。とくに、双極子モーメントを持つため将来的には電場による回転制御も期待されているフッ素置換のフェニレン回転子を有する系を扱った。

まず、周期境界条件を考慮した密度汎関数強束縛(DFTB)法を用いて、構造最適化計算により、X線結晶構造解析の結果に対応する2つの安定構造を得た。次に、固定子と回転子をつなぐ Si-C 結合周りの二面角に対するポテンシャル曲線を計算した。2つの安定構造間の2つの回転障壁の値は 5.6 kcal/mol、4.5 kcal/mol であった。加えて、300 K から 600 K の温度範囲で DFTB/MD に基づいた古典トラジェクトリ計算を行い、そのアレニウスプロットから、室温では安定構造間の回転障壁を約 3 ns に 1 回の頻度で越えるという回転の時間スケールの算出に成功した。実際、X線結晶構造解析実験においても、298 K で安定構造の間をマイクロ秒より短い時間スケールで回転することが確認されている。

また、ナノマシンのベアリングとして期待されるフラーレン内包の有限ナノチューブの構造とダイナミクスに関する研究も行った。M06-2X/6-311G(d)レベルの電子状態計算により、6 つの会合異性体構造が得られた。この構造から、会合の駆動力は π - π スタッキングに加えて、フラーレンに軸部位として付加されているピロリジニウムカチオンとナノチューブの π 平面との相互作用であることがわかった。さらに、室温で観測されたフラーレンの回転運動の経路を GRRM 法を使って探索した結果、フラーレンのピロリジニウム軸がナノチューブ内部を旋回する歳差運動と軸周りに回る自転運動の2種類の回転機構が存在することがわかった。この経路探索の電子状態計算には DFTB を使った。DFTB/MD シミュレーションも行い、速度の違う2種類の回転運動が存在することも確認した。アレニウスプロットから得られた歳差運動の活性化エネルギーが約 4kcal/mol、自転運動の活性化エネルギーが約 5kcal/mol という結果は、それぞれ遷移状態から見積もられた障壁の高さにほぼ一致しており、この分子ベアリングの静的構造と動的性質の関係を包括的に明らかにすることができた。

2.2.1.1(2) 次世代先端デバイス科学

第2部会 代表者：押山淳(東京大)

1) 部会全体の取り組み

【研究成果の概要】

第2部会においては、次世代のテクノロジーを支えると目される材料、構造体に対して、量子論の第一原理に立脚した先端的計算を行い、その電子物性・機能を解明・予測することを目的としている。密度汎関数理論における既存の近似法計算を、マルチコア・超並列アーキテクチャのコンピュータ上で最適化、高速化することに加え、新たな近似法の開拓および密度汎関数理論を超えて電子相関を扱い得る手法の開拓、従来古典論でしか扱えなかった現象への量子論的手法の開拓が手法開発におけるターゲットである。それらは大規模電子構造計算(空間軸)、長時間ダイナミクス計算(時間軸)、高精度電子相関計算(精度軸)、さらには量子論のターゲットを拡大する(展開軸)という四つの軸に沿った研究開発である。平成25年度においては、以下の成果が得られた。

- 1) 重点課題においては、密度汎関数法計算を実空間で実行する複数の手法が開発され、マルチコア超並列アーキテクチャのコンピュータ上で、高速化、高度化が行われている。それらは、実空間密度汎関数法計算コード(RSDFT)、実空間電子状態輸送計算コード(RSPACE)、オーダーN密度汎関数法計算コード(CONQUEST)、実空間Car-Parrinello分子動力学計算コード(RS-CPMD)であり、京コンピュータ上で高い実行効率と実行時間の良好なスケーリングを示している。これらの手法により、パワーエレクトロニクス材料であるSiC表面・界面の物性、とくにエピタキシャル成長中の自己組織化によるナノ構造生成の機構が明らかとなった。また複数層グラフェンの新奇物性、積層ねじれによる電子物性制御の可能性、などが明らかになってきた。
- 2) 電子状態とそのダイナミクスが機械的性質や機能に重要な役割を果たすナノ・メゾスケールデバイスでは、量子論と古典論を統合したマルチスケールシミュレーションが不可欠である。特別支援課題1においては、DC-RGDFTコードを量子論的計算に用いたハイブリッド量子古典コードを超並列アーキテクチャ上で高度化している。そのコードにより、今年度、Liイオン二次電池の固体電解質皮膜(SEI)と電解質液界面においてLiPF₆分子がLiイオンの界面透過率を倍増させることの発見、グラファイト中のLiイオン群の熱拡散の機構と振舞いの解明、アルミナとエポキシ樹脂との界面での高分子注入による熱輸送効率増大の発見、などの成果が得られた。
- 3) ナノスケール光デバイスにおいては、電子ダイナミクスと光あるいは電磁場ダイナミクスの結合を量子論の第一原理に立脚して解明予測することが、デバイス開発において不可欠である。特別支援課題2においては、時間依存密度汎関数理論(TDDFT: Time Dependent Density Functional Theory)とMaxwell方程式を自己無撞着に解く新たな方法を開発し、京コンピュータなどのマルチコア超並列アーキテクチャコンピュータ上で高度化してきた。今年度、京コンピュータの全資源を活用した高効率ハイブリッド並列計算にも成功し、先端デバイスシミュレーションの準備が整った。
- 4) ポストシリコン・テクノロジーにおいて、持続する省エネルギー社会を支える可能性のあるスピントロニクス技術に期待が高まっている。特別支援課題3においては、スピントロニクス材料探索に適した、擬原子局在基底プログラム(コード名: OpenMX)、Car-Parrinello分子動力学法プログラム(コード名: CPVO)、全電子FLAPW法プログラム(コード名: HiLAPW)の開発を行っており、OpenMX、CPVOは京コンピュータ上でのチューニングも進んでいる。これらコードの活用により、今年度、ZnO伝導帯でのRashba効果が基板選択によって制御可能であること、鉄、コバルトを用いた磁気トンネル接合系における磁気異方性エネルギーとそ

の電界依存性の解明、Sb₂TeにおけるBiドーピングによるトポロジカル絶縁性の発現解明、などの成果が得られた。

- 5) 特別支援課題 4 においては、平面波基底あるいは有限要素法を用いた密度汎関数法計算コード(QMAS、xTAPP、FEMTECK)高度化、多機能化が進んでいる。とくに xTAPP は本 CMSI ポータルサイトである MateriApps 上で公開された。また多体波動関数を直接取り扱うトランスコリレイティッド法(TC++コード)、量子モンテカルロ法(CASINO コード)の高度化も進んでいる。これら多彩なアプリケーションによる新奇物質群探索の例として、Nd系磁性体、L10合金、パイロクロア酸化物M₂Mo₂O₇の磁気物性解明、分子性固体の多型予測、有機半導体のSi表面への吸着形態の同定、などの成果が得られている。

【部会活動】

第2部会の重点課題、特別支援課題の研究進捗状況、今後の研究計画については、第二部会委員会において、議論と検討が行われた。研究進捗状況に関しては、「京」におけるコードの高度化の技術的問題を共有すること、ターゲットとしての物質科学的重要性の吟味、について議論された。また今後の研究計画に関しては、重点課題の再編成をも含む将来計画が議論され、平成26年度からは、従来の重点課題と特別支援課題2を統合した新たな重点課題「密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現」をスタートさせることとした。

2) 研究開発課題

i) 重点課題 3: 密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究

[代表者] 押山淳(東京大)

[担当者] 押山淳、岩田潤一、渡邊聡(以上東京大)、重田育照、小野倫也(以上大阪大)、
宮崎剛(物質材料研究機構)、Boero Mauro(レイパスツール大)、Bowler David(ロンドン大)、
赤井久純(東京大)

[研究の背景と目的]

テクノロジーはポストスケーリング時代を迎え、既存の CMOS 技術のさらなる高度化・微細化に加えて、beyond-CMOS 技術の探求が必要となっている。そこでは、それらテクノロジーを支えるナノドット、ナノワイヤー、新材料などの電子機能の解明と予測が重要なターゲットとなっている。本研究課題においては、密度汎関数理論(DFT: Density Functional Theory)に基礎をおき、その理論的発展を目指すと同時に、「京」コンピュータに代表されるマルチコア・超並列アーキテクチャ上での、密度汎関数法計算のハイ・パフォーマンス・コンピューティング(HPC)技術を確立し、ナノ構造体の構造的安定性と電子機能についての高精度の解明・予測を行うことが目的である。

[実施内容(計算モデル)]

数千から数万原子さらには数十万原子から構成されるナノデバイス構造体の構造と電子機能の解明予測のためには、量子論に基づく大規模高精度シミュレーションが必要となる。本重点課題においては、実空間手法を軸とする DFT 計算手法の開発と高度化を行ってきた。これは、マルチコアあるいは次世代メニーコアの超並列アーキテクチャコンピュータにおいては、実空間手法が通信付加の低減という観点から、原理的に有利であることに基づいている。具体的には、RSDFT コード(Real-Space DFT: 2011 年度ゴードンベル賞最高性能賞受賞)、RSPACE コード(Real Space 電子状態コンダクタンス計算コード)、CONQUEST コード(Concurrent O(N) QUantum Electronic Simulation Technique)、RS-CPMD コード(Real Space Car-Parrinello Molecular Dynamics)の開発と京コンピュータ上での先端的チューニングを行ってきた。今年度はさらなる高速化、高機能化を行うと同時に、これら実空間手法を用いて、パワーデバイス材料として有力な SiC、次世代材料グラフェン等のナノ表面・界面での電子機能解明を実施している。

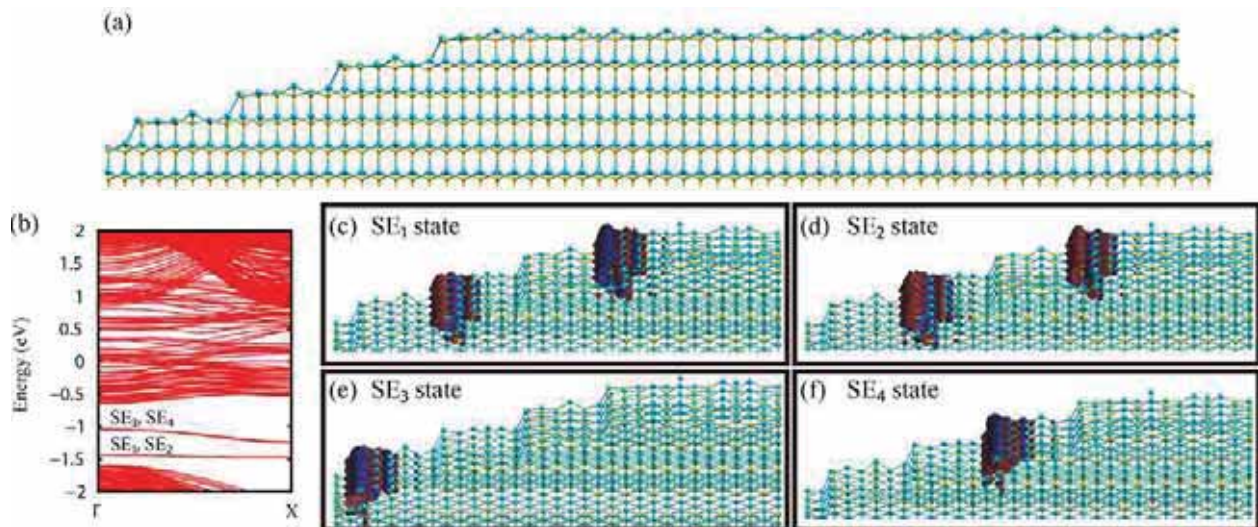
[並列計算の方法と効果(性能)]

いずれの計算コードも MPI と OpenMP によるハイブリッド並列化が終了している。RSDFT コードの京コンピュータ上での高速化はすでに世界トップレベルであり、現在は高機能化を行っている。今年度には、周期表第一列元素を扱うための Ultrasoft Pseudopotential の導入、励起エネルギーの定量的計算のための交換相関エネルギー汎関数に対する Hybrid 近似の導入が終了した。RSPACE コードは高速高精度電子状態計算とコンダクタンス計算に特徴があるが、一万原子規模の計算において実行効率 30%超を達成している。CONQUEST コードでは、密度行列の導入とその実空間での局所化により、サイズ N に対するオーダー N の計算コストが実現されている。現在では 1,000,000 原子規模の計算が可能となっている。電子とイオンのダイナミクスを解明するための RS-CPMD コードは、今年度高速化に取り組み、従来に比べて数倍程度の高速化が達成された。京コンピュータ上での 1,000 ノード程度を用いた 2,000-3,000 原子系のシミュレーションがターゲットであり、現在 1 タイムステップ数秒の elapsed time となっている。この RS-CPMD は第 4 部会との共同により、電池シミュレーションにも活用される。

【研究成果】

上述の実空間シミュレーション手法により、(i) SiC 表面での自己組織化によるナノファセットの出現機構とそのナノ形状決定の物理的因子の解明、(ii) 2 層グラフェンにおける捩れの導入によるディラック電子の劇的な局在化の理論的発見、(iii) SiC と酸化膜界面における重要構造欠陥の同定とそのリーク電流への影響、(iv) Si ナノワイヤー・トランジスタにおける酸化絶縁膜界面での構造の可能性探索、が行われた。

以下、(i)について少し詳しく述べる。図は SiC ナノファセットの形状である。半導体エピタキシャル薄膜成長中ではしばしば予期せぬナノ構造が自己組織化され、興味深い機能を発現する。SiC ナノファセットはその典型であり、そのナノ形状は特徴的である。今回の RSDFT 計算により、このナノファセットは単原子層ステップのバンチングにより生成され、ステップの生成エネルギーとステップ間の斥力エネルギーの競合により特定のファセット角（魔法角）が生み出され、SiC に特有な原子積層の効果によりファセット高さが量子化されること、が明らかになった。



図説明：(a) RSDFT 計算による 4H-SiC(0001)面上に形成された安定な(112N)ナノファセット構造。魔法ファセット角は15.3度と決定された。薄青色、黄色のボールがSiとC原子の位置を示す。(b)安定ナノファセット構造でのエネルギー帯。4つの電子状態 SE1、SE2、SE3、SE4 がフェルミ準位（エネルギーの原点にとってある）の近傍に存在し、それらはファセットエッジに沿った方向に分布しており[図(c)]、特異な平坦バンドを形成している。[澤田、岩田、押山: Applied Physics Letters, 104, 051605 (2014) および未発表データ]

さらにフェルミ準位付近に平坦な分散をもつエネルギー帯が出現し、この状態は、ファセットのエッジに分布していることがわかった。水素原子などの表面修飾技術により、フェルミ準位をこの平坦バンドに移動させれば、半導体ナノ構造での磁性発現などの新機能が期待される。

ii) 特別支援課題 1: ナノ構造の電子状態から機械的性質までのマルチスケールシミュレーション

【担当者】 尾形修司(名古屋工業大)、大庭伸子(豊田中央研究所)、田中宏一(デンソー)

【研究の背景と目的】

産業界で有用なデバイスや材料では、ナノ・メゾスケールのユニークな微細構造に応じた電子状態とダイナミックスが、その機械的性質や機能を大きく支配している。このような必然的に大規模な系のシミュレーションを直接行うことが期待されている。本課題では、化学反応が顕著な比較的小さな領域だけに高計算コストの電子状

態計算(量子計算)を適用し、その他の領域には経験的な古典的原子間ポテンシャルあるいは粗視化手法を適用することで、大規模系の化学反応を含めたイオンダイナミクスをシミュレート可能とするハイブリッド量子古典コードを、超並列計算環境に合わせて高度化し、実際に運用することを目指している。

平成25年度の目的は以下である: (i) 電荷状態や境界条件が自由にとれるためハイブリッド量子古典法に適している実空間密度汎関数法をオーダーN化したDC-RGDFTコードを用いた第一原理MDシミュレーションを大規模に行い、Liイオン二次電池の負極近傍に生成される固体電解質皮膜(SEI)と電解質液との界面モデルにおける、SEI側から電解質側へのLiイオンの溶媒和過程等を明らかにすること。(ii) DC-RGDFTコードを量子領域の計算法としたハイブリッド量子古典シミュレーションを、Liイオン電池の負極グラファイト中における複数のLiイオン群の拡散ダイナミクスを調べるために行うこと。(iii) 分子内の原子を粗視化した系を、時間反転対称性があり高速に取り扱う動力学アルゴリズムにより扱い、固体表面の融解過程に適用すること。(iv) 益々集積度が上がりつつあるIC機器の高効率な冷却技術が必須となっている。このことを踏まえ、エポキシ樹脂とセラミックスとの界面のモデル化、界面を通じた熱輸送に関するシミュレーションを行うこと。

[実施内容(計算モデル)]

上記4項目に対応して以下を実施した: (i) 我々が前年度にアルゴリズムを提案しコード化したDC-RGDFTコードを用いた第一原理MDシミュレーションを、Liイオン二次電池のSEI-電解質液界面モデル(約2,400原子)に対してrun毎に5ps程度の長さで行い、塩として溶媒(エチレンカーボネート分子)にしばしば添加されている LiPF_6 分子による、Liイオンの界面透過率への効果を調べた。(ii) DC-RGDFTコードを用いたハイブリッド量子古典シミュレーションを、グラファイト中に挿入した7個のLiイオン群の熱拡散に関して大規模に実行した。その際、複数の量子領域はLiイオンの位置に応じて動的に選択した。(iii) 分子を剛体として扱うことは大規模系のシミュレーションを長時間行う際に有用である。前年度に我々は剛体分子の回転を含めた動力学アルゴリズムとして、時間反転対称を持ち、既存のアルゴリズムに比べて計算負荷が最も軽いアルゴリズム(FT法)を提案した。本年度は、クーロン力計算用の高速多重極展開法をFT法に取り入れたコードを用いて、百万を越えた個数の水分子からなるサブ μm 規模の氷について、融点以下で表面に生じる擬似液体層に関する大規模シミュレーションを行った。(iv) 高熱を発する微小な電子機器には、冷却のためにエポキシ樹脂を塗布し、樹脂内にはアルミナ等の微小粒子を、実効的に熱伝導を良くするために充填することが良くある。本年度は、アルミナとエポキシ樹脂との界面をモデル化した。特に、既存の汎用型の高分子系ポテンシャルとアルミナ系のポテンシャルに加え、密度汎関数計算により新たに定めた高分子-アルミナ間のポテンシャルを構築した。さらにこのモデルに対して非平衡古典MDシミュレーションを行い、界面を通じた熱輸送効率を調べた。

[並列計算の方法と効果(性能)]

上記4項目の並列計算の方法と効率は以下である: (i)および(ii)においては、電子状態を計算するDC-RGDFTコード部分に要する時間が、全計算時間の中で支配的である。DC-RGDFTコードの並列化は、対象系全体の分割統治によるドメイン分割、分割ドメイン毎の空間分割、多数の電子レベルの分割並列計算、OpenMPによるDo-loop分割の計4レベルで並列化している。そのストロングスケーリングによるテストを、スパコン京を1024ノード、2048ノード用いた場合で比較した。計算に要した時間は、それぞれ411.3秒、232.1秒であり、実行並列化率は99.998%である。また実行効率は5.9%である。(iii)においては、対象系の空間分割による並列化を行っている。ウィークスケーリングのテストでは、99.998%の実行並列化率である。(iv)においては、対象系はテスト段階であるため規模が小さく、コード運用時の並列数も8ノード程度と小さいため、並列化効率の計測はしていない。

【研究成果】

上記4項目に対応して以下に成果を得た：(i) DC-RGDFT コードを用いた大規模な第一原理 MD シミュレーションを、Li イオン二次電池の SEI-電解質液界面モデル(約 2, 400 原子)に対して run 毎に 5ps 程度の長さで行い、塩として溶媒(エチレンカーボネート分子)にしばしば 1mol/l 程度の濃度で添加されている LiPF₆ 分子が、Li イオンの界面透過率を2倍程度増大させる働きを持つこと等を初めて見いだした(図1参照)。(ii) DC-RGDFT コードを用いたハイブリッド量子古典シミュレーションを、グラファイト中に挿入した7個のLiイオン群の熱拡散に関して大規模に実行した。その結果、Liイオン群を取り囲むように上下層のグラファイトが変形して cage が形成されること。その cage の中で、Li イオン同士は互いに影響をおよぼしあいつつ拡散すること。Li イオンの平均密度に依存して cage 自身の移動度も変化すること。それらの結果、Li イオンの拡散係数が、Li イオンの平均密度に依存して大きく変化すること等を見いだした。(iii) 高速多重展開法を FT 法に取り入れたコードを用いたサブ μ m 規模の氷のシミュレーションでは、融点以下で表面に生じる擬似液体層が、温度上昇と共に分子 bilayer 単位で増大すること。また熱揺らぎにより表面では局所的に融解と再結晶化を時間経過と共に繰り返すこと等を発見した。(iv) アルミナとエポキシ樹脂との界面をモデル化した系に関する非平衡古典 MD シミュレーションの結果、界面を通じた熱輸送効率が、界面を結合する働きをする高分子(結合剤)を少量加える事で増大すること、さらに大量の結合剤を界面に加えると樹脂をアルミナから遠ざけることになるため熱輸送効率の増大は飽和すること等を確認した。

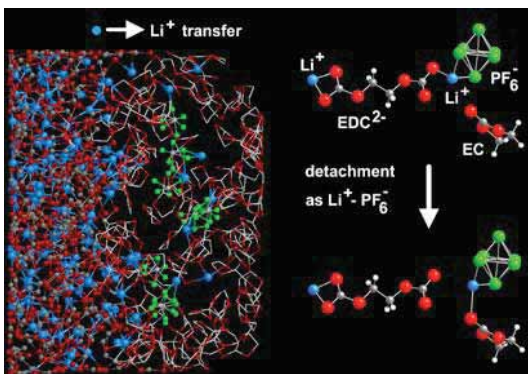


図 1: (左) Li イオン電池内の SEI-電解液界面を通過する Li イオン群に関する DC-RGDFT コードを用いたシミュレーションの様子。(右) 塩(LiPF₆)の溶媒への添加により、Li イオンの界面通過レートが増大するメカニズムの概要。

iii) 特別支援課題 2: ナノ構造体における光誘起電子ダイナミクスと光・電子機能性量子デバイスの開発」

【担当者】 信定克幸(分子研)、矢花一浩(筑波大)、渡辺一之(東京理科大)

【研究の背景と目的】

シリコンをベースとするデバイスのみならず、多種多様な物質から構成される多くの有用かつ機能性の高いデバイスが日々開発されている。しかし、その開発においては、異種物質ドーピングによる既存デバイスの機能改善や材料探索に依拠する新規デバイス発見など、物質の組み合わせ数え上げ的な試行錯誤的アプローチが非常に多い。物質の多様性やそこから生み出される相乗効果が予想もしない物性や機能を生み出すことは十分に期待でき、今後もそのようなアプローチが重要であることには疑う余地は無い。しかしこのようなアプローチの大きな欠点は、組み合わせの可能性が膨大に有る一方で、容易に実行し得る組み合わせは頭打ちの状態にあるジレンマに陥っていることである。つまりこれらのデバイス設計における根本的な問題は、デバイス設計を進める上での「指導原理」が確立していないことと考える。本研究課題ではこの問題を解決するために、過度に単純化した理論モデル系を対象とするのではなく、数～数十ナノメートル程度の大きさを持つ実在系ナノ構造体における実時間・実空間光誘起電子ダイナミクスの第一原理計算を行い、ナノ構造体における機能性発現のメカニズムを根源から理解するとともに、デバイス設計のための計算科学的指導原理を見出し、光エネルギー伝

播、波長変換素子、量子データ転送、光触媒作用等の光・電子機能を持つ量子デバイスを計算により提案し設計することを最終目的とする。

[実施内容(計算モデル)]

上記目的を達成するためには、第一に電子と電磁場の露なカップリングを取り扱う為のナノ光応答理論の開発、第二にその理論に基づく超並列大規模電子・電磁場ダイナミクス法プログラムの開発、第三にこのプログラムに基づく実在系ナノ構造体量子デバイスの計算科学的開発を進めなければならない。電子ダイナミクスは時間依存コーンシャム方程式、電磁場ダイナミクスはマクスウェル方程式によって記述し、両方程式を結合した方程式を自己無撞着に解くことによって、光と電子の露な相互作用を取り込むことができる。本年度は昨年度に引き続き、第二課題の大規模プログラム開発を行った。

[並列計算の方法と効果(性能)]

電子ダイナミクス、電磁場ダイナミクス共に3次元計算空間を多数個のグリッド点で区切り、そのグリッド点において偏微分方程式を差分法に基づいて直接的に解く方法を採用している。対角化やFFTが一切存在せず、超並列に非常に適したプログラム開発が可能である。並列化はMPI及びOpenMPを用いたハイブリッド並列を行っている。京の全資源(約66万コア)を使った実機稼働にも成功し、10万から20万コア程度規模の計算を複数回行った。我々のプログラムの基本アルゴリズムは差分法であるが、一般的な差分法アルゴリズムに話を限定すれば、京のアーキテクチャを考慮に入れると、その実行性能理論限界値はおおよそ15%前後と見積もることができる。我々のプログラムは、現状で10%程度の実行性能が出ており、相応のスペックが出ていると考える。

[研究成果]

超並列化プログラム開発をまとめた論文を投稿した。本年度はプログラム開発に特化して研究を進めてきたため、現状では超並列計算に関連するプロダクトランの成果はまだ得られていないが、その準備となる小・中規模の光励起ダイナミクスプロダクトランの成果は既に複数得られている。双極子近似とは根本的に異なる近接場光励起ダイナミクスの解明、電子ダイナミクス法の表面増強ラマン散乱及び1分子イメージングへの展開、実時間・実空間電子ダイナミクス法を界面光励起ダイナミクスへと展開する際の基礎となる研究、高強度パルス光と物質の相互作用に関しては、光絶縁破壊メカニズム、コヒーレントフォノン生成メカニズム、極限的な非線形に起因する誘電体表面の電流生成など、今後の京における超並列プロダクトランに直結する成果が得られている。また、我々の超並列プログラムの独自性とそのプログラムによって得られるサイエンスの新奇性の期待もあり、多くの国内外における招待講演を受けた。本研究課題に強く関係する論文を以下に2件列举する。

- [1] M. Noda, K. Ishimura, K. Nobusada, K. Yabana and T. Boku, "Massively-Parallel Electron Dynamics Calculations in Real-time and Real-Space: Toward Applications to Nanostructures of more than Ten-Nanometers in Size", *J. Comp. Phys.*, 265, 145 (2014)
- [2] K.M. Lee, C.M. Kim, S.A. Sato, T. Otobe, Y. Shinohara, K. Yabana, T.M. Jeong, First-principles simulation of the optical response of bulk and thin-film alpha-quartz irradiated with an ultrashort intense laser pulse *Journal of Applied Physics* 115, 053519 (2014).

iv) 特別支援課題 3: スピントロニクス／マルチフェロイクスの応用へ指向した材料探索

[担当者] 斎藤峯雄(金沢大)、小田竜樹(金沢大)、小口多美夫(阪大)、尾崎泰助(北陸先端大)

[研究の背景と目的]

シリコン半導体デバイスの微細化が、やがて限界を迎えるであろうと予想され、新しい動作原理に基づくデバイスの開発が求められている。本研究では、スピントロニクス・マルチフェロイクスに基づく新デバイス実現に向けて、これらに適した材料探索を行う。ラシュバ効果、磁気異方性、トポロジカル絶縁体の電子状態、スピンホール効果の起源を解析するコードを開発し、将来のデバイス応用に貢献できる基礎研究を行う。この目的のため、カー・パリネロ分子動力学法プログラム[CPVO]、全電子 FLAPW コード[HiLAPW]及び擬原子局在基底コード[OpenMX]を整備する。とくに、OpenMX と CPVO に関しては、「京」向けのチューニングを行い、大規模な計算を可能とする。

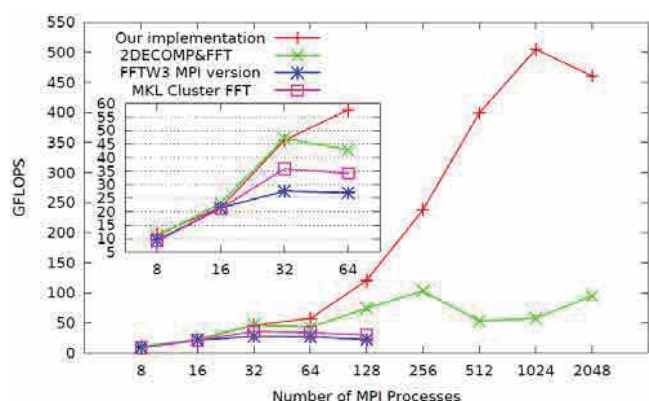
[実施内容(計算モデル)]

OpenMX のコード開発においては、高次元 FFT の超並列化を実現するために、Row-Wise 型の領域分割法に基づく新しい並列化手法を開発した[1]。多次元の FFT グリッドは Row-Wise 型のマッピングによって次元化された後、計算量が均等化されるように各プロセスに分割される。このマッピングの方法は一意ではなく、M 次元の FFT において、 $(M-1)!^M$ 通りが考えられる。3、4、5 次元の FFT において全ての場合の通信量を詳細に調べ、それぞれ 4、4、96 通りの等価な最小通信量を持つマッピング方法を見出した。さらに 3 次元 FFT の場合に、これまでに提案された 1、1.5、2、3 次元領域分割法の通信量と比較した。その結果、本手法は他の並列化手法と比較しても、任意の並列数において最小の通信量を持っていることが明らかとなった。本手法を実装し、OpenFFT と名付けたライブラリパッケージを開発し、GNU-GPL の規約の下で一般公開した。

また、物理量をもとめる応用計算としては、反転対称性のあるトポロジカル絶縁体における Z2 トポロジカル不変量の計算プログラムの開発をおこなった。

[並列計算の方法と効果(性能)]

OpenMX では C もしくは Fortran から利用可能であり、1 次元の FFT を実行するために FFTW3 を使用している。北陸先端大の Cray-XC30 を使用し、経過時間に基づき GFLOP 値を見積もり、性能評価を実施した(データ点数は $128 \times 128 \times 128$)。他の並列化 FFT パッケージ (2 次元領域分割に基づく 2DECOMP、並列化版 FFTW3、MKL Cluster FFT) との比較結果を右図に示す。OpenFFT は他のパッケージと比較しても、高い並列数まで良くスケールしている。Row-Wise 型のマッピングによる領域分割法を用いた OpenFFT は数千並列までスケールと考えるが、通信グループの局所化が困難なデータ構造を持っており、数万コアでのスケールは低下すると推定される。



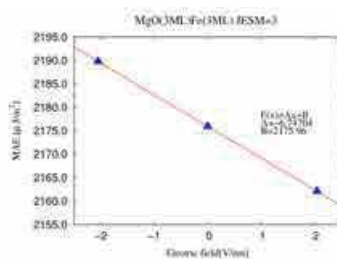
CPVO では、昨年度に並列計算の実行効率の改善を受けて、物性研システム C を用いた計算枠や「京」の支援枠により、磁気トンネル接合系に現れる界面における大規模計算を実行した。

【研究成果】

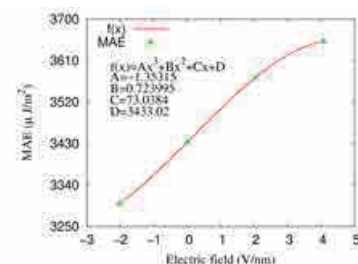
酸化物エレクトロニクス材料として応用が期待されている ZnO 膜について、電気分極が生じている膜の電子状態計算を CPVO の使用により行い、膜の内部では電界が印加された状態で半導体バンドギャップが維持され、一方、表面では金属的になっていることが分かった。

さらに、OpenMX の応用計算を行い、ZnO の基板選択（エピタキシャル歪み）による構造の変化と電子状態の変化を明らかにした。特に、基板選択によって、ラッシュバ係数の符号変化が起こりうる事が明らかになり、運動量空間の渦型スピン構造が反転することが示された。ベリー位相法の電気分極計算によって、Rashba 係数の符号反転が電気分極の符号反転と関係していることが明らかになり、伝導帯の Rashba 効果が基板選択によって制御可能であることが示された。この事により、ZnO の新しいスピントロニクス応用の可能性が示された。

また、CPVO においては、磁気トンネル接合系に現れる界面として、MgO/Fe, MgO/FeCo, MgO/Fe/Au, MgO/Fe/MgO 等の磁気異方性エネルギーおよびその電界依存性を評価した。期待された面直磁気異方性が得られたが、MgO/Fe に類似した界面の電界依存性については、系依存性が現れることが確認された。下に示す二つの図の比較から、電界による磁気異方性エネルギーの増減の向きが異なっている事が分かる。このような効果は、MgO/Fe 界面の誘電分極の違いに由来することが想定され、界面の原子構造や電子状態の詳細な解析が必要であることが分かった。また「京」のような超並列計算機を使いこなすために、さらなる並列化が必要であることも分かった。



MgO/Feスラブの磁気異方性エネルギーの電界変調



MgO/Fe/MgOスラブの磁気異方性エネルギーの電界変調。

HiLAPW においては、一次元 Rashba 効果及びトポロジカル絶縁体の探索を進めた。一次元 Rashba 効果に関しては、Bi(111)表面で角度分解能光電子分光により観測された一次元 Rashba バンドは、Bi 表面上に薄膜合成の際に現れる三角状島構造 Bi 二重層の端に局在した一次元状態に起因することを第一原理計算により明らかにした。また、トポロジカル絶縁体の探索では、半金属 Sb₂Te の Sb サイトを Bi 原子に置き換えることでギャップが現れ、トポロジカル絶縁相となることをトポロジカル不変量の計算から示した。

v) 特別支援課題 4: 新材料探索

【担当者】 常行真司(東京大)、吉本芳英(鳥取大)、田中 功(京都大)、石橋章司(産総研)、土田英二(産総研)、前園 涼(北陸先端大)、三宅隆(産総研)

【研究の背景と目的】

密度汎関数法およびそれを超える高精度物質機能シミュレーション技法を確立し、次世代電子デバイスのブレークスルーを引き起こす新奇物質群を探索する。またデバイスとしての実現可能性を念頭に置き、化合物の自由エネルギー計算を実現することで、ものづくりプロセスにも踏み込んだ研究を目指す。

【実施内容(計算モデル)】

平面波基底関数を用いた密度汎関数法(DFT)コードQMAS、xTAPP、有限要素法によるDFTコードFEMTECK、第一原理量子モンテカルロ法コードCASINO、波動関数理論トランスコリレイティッド法コードTC++の高度化とそれを用いた応用計算を進めた。xTAPPは擬ポテンシャルデータベースおよびGUIを整備し、GPLライセンスによりポータルサイトMateriApps上で公開した。また神戸拠点で講習会を実施した。QMASは、特に磁

石材料研究のための計算機能を整備した。CASINOはプロダクトランでの運用が進み、分子性固体の大規模な並列計算を行った。FEMTECK を用いて、ベリー位相に基づく電気的な物理量の計算アルゴリズムを開発し、実際の系で検証を行った。TC++には光吸収スペクトルの計算機能を追加した。

〔並列計算の方法と効果(性能)〕〔研究成果〕

手法開発:

- (1) トランスコリレイティッド法コードであるTC++のジャストロウ関数最適化の手法改良を行った。またTC法に一電子励起を組み合わせることで、光吸収スペクトルを計算するプログラムを開発した。
- (2) 第一原理分子動力学法を利用して非調和格子ポテンシャルモデルを作り、ボルツマン熱輸送方程式もしくは非平衡分子動力学法により格子熱伝導度を計算するプログラム群(コード名 ALAMODE)の高度化を行い、公開準備を進めた。
- (3) フォノンや超伝導転移温度の第一原理計算に必要な応答関数計算ブリュアンゾーン積分の収束を早める新手法として、拡張テトラヘドロン法を開発した。
- (4) QMASのハイブリッド並列化およびk点/バンド/G点について並列化を進め、「京」上で満足できるパフォーマンスを得た。また、結晶場係数の計算機能を付加した。
- (5) xTAPPを用いた電子状態計算を簡易に行なうために必要な、擬ポテンシャルデータベースを整備した。また大谷・杉野による有効遮蔽体法のコードの組み込み、constant current mode的なSTMシミュレーション像の生成ツールの追加、force inversion法とhyper plane constraint法によるエネルギー障壁計算コードの組み込み、軌道をnon-localとする擬ポテンシャルへの対応、開発者用テスト例集でのテスト結果の相互比較の改良、などを実施した。
- (6) xTAPPの入力支援および出力解析支援のため、GUIアプリ(コード名TAPIOCA)を整備した。
- (7) ベリー位相に基づき、イオン伝導による電気伝導率やボルン電荷の計算手法の開発を進め、FEMTECKに実装した。

応用計算:

- (1) NdFe_{12} , $\text{NdFe}_{11}\text{Ti}$, $\text{NdFe}_{11}\text{TiN}$ の電子状態計算およびNdサイトの結晶場係数評価を行ない、飽和磁化・結晶磁気異方性にTi置換、窒化が及ぼす影響について調べた。
- (2) L10合金の結晶磁気異方性について、スピン軌道相互作用を考慮した第一原理計算と二次摂動に基づく定式化により、系統的に調べた。
- (3) パイロクロア酸化物 $\text{A}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ の電子的および磁氣的性質について、2成分スピノル形式の波動関数の記述による電子状態計算とモデル解析により調べた。
- (4) 実験系の研究者と協力し、リチウムやマグネシウムを含む種々の系において大規模・長時間の第一原理分子動力学計算を行った。
- (5) 大規模な計算資源を必要とする分子性固体の多形予見に関する研究を、CASINOを用いて進めた。
- (6) 有機半導体の素材であるPTCDA分子をSi(100)表面に吸着させたときに観察される様々なSTM像のシミュレーションを行い、実験結果の新たな解釈を与えた。

2. 2. 1. 1(3) 分子機能と物質変換

第3部会 代表者：岡崎進(名古屋大)

1) 部会全体の取り組み

【研究成果の概要】

本部会においては、分子や分子集団系における構造形成と機能発現・機能制御の分子科学の確立を目指して、自己組織化により形成されたナノスケールの分子や分子集団の構造に基づいて創生される機能、また環境との相互作用下での分子の電子状態とそれに基づく機能発現を解明することを目的としている。

その中で、「全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開」においては、小児マヒウイルスに対する全原子シミュレーションを昨年度に引き続いて継続実施し、熱平衡状態におけるカプシド内外の水の交換移動やこの移動と関連した半透膜としての機能、また、空のカプシド内部の負の圧力の生成による不安定性とRNA収容時の浸透圧による安定化などを明らかにした。また、ウイルスの圧力耐性や乾燥による不活化についてもその分子論的な起源について研究の見通しを得た。一方で、感染の第一過程であるCD155レセプターと小児マヒウイルスの結合に関して、中距離においてはレセプターとウイルスが同符号の電荷を持っているにもかかわらず、これらの間に引力相互作用が存在し得ることを明らかにした。また、induced fit機構に基づく結合の可能性の研究についても、研究に不可欠な効率の高い有効なサンプリング法の開発を行い、有望な方法論を提案し、小規模系を用いた検証を行った。ソフト開発としては、MODYLASの最適化をさらに進め、直方体セルへの対応を可能とした。また、IMOMM-ONIOM法によるFMOとMODYLASの連携、またREMとMODYLASの連携のための基盤の開発を行った。MODYLASは京上での実行形式の公開により常時利用可能とし、またソースを含めてMATERIAPPS上で公開した。MODYLASは第4部会におけるメタンハイドレートのシミュレーション研究に提供し、また京の産業利用3課題に対しても提供した。また、理研と連携してMODYLASミニアプリを作成し、ポスト京システムFS活動のため、東大ならびに筑波大に提供した。

「拡張アンサンブル法による生体分子構造・機能の解明」では、以前開発した、レプリカ交換傘サンプリング法(Replica-Exchange Umbrella Sampling: REUS)に基づく、薬剤候補分子のタンパク質へのドッキングシミュレーション手法に、レプリカ交換溶質焼き戻し法(Replica-Exchange Solute Tempering: REST)を合わせた2次元レプリカ交換法に基づく新手法(REUS/REST)の開発に成功した。これによって、以前、REUS に基づいた手法では、薬剤候補分子が一度ドッキングポケットに入ると、そこから脱出するのが困難であったが、新手法では、薬剤候補分子がドッキングポケットから出たり入ったりできるようになり、自由エネルギー計算の精度が格段に上がった。

「ポリモルフから生起する分子集団機能」では、エネルギー表示法による全原子自由エネルギー計算をタンパク質-脂質膜系に適用し、膜/水界面領域でのタンパク質の結合に対する水の役割を明らかにした。また、非イオン性ミセルを対象として、その安定性に対する親水基の寄与を全原子レベルで調べるとともに、有機分子の高分子への溶解自由エネルギーを計算し、全原子モデルを用いた有機分子の選択的透過膜設計に踏み出した。タンパク質構造については、尿素添加の効果を全原子自由エネルギー計算で検討して、変性をもたらす相互作用成分を同定した。さらに、粗視化モデルを用いることで、脂質膜の大規模変形とそこでの剪断流の効果、および、紐状ミセル溶液の絡み合い挙動を解析した。

「ナノ・生体系の反応制御と化学反応ダイナミクス」では、超巨大系の反応ダイナミクスを「京」で取り扱うことを可能とするため、昨年度までに 手法開発を行った分割統治密度汎関数強束縛(DC-DFTB)法の計算プログラム「DC-DFTB-K」の高効率化と超高並列化を進めた。また、本プログラムをアミン分子を用いた二酸化炭素吸収・放出反応(CCS)やリチウムイオンデバイスにおける極板表面の反応に適用した。特に、「DC-DFTB-K」の超高並列化のボトルネックが、Brent 法によるフェルミ準位の決定であることがわかり、サンプリング点による補

間法を新たに開発し、計算時間の削減が確かめられた。

「機能性分子設計－光機能分子と非線形外場応答分子の光物性」では、フェナレニル分子を積層したの π スタック構造の分子集合系を検討した。また点電荷モデルに基づいて、完全開殻に近い母骨格へ大きな対称電荷移動を導入するという新奇な高効率 NLO 分子の設計指針を提案した。一重項分裂の研究では、開殻性の制御に関する窒素原子置換の効果を縮環分子の芳香族性と関連付けて明らかにした。光機能分子の研究で重要となる励起状態の溶媒効果の研究では、摂動理論に基づいて、多数の励起状態の溶媒効果を一挙に計算する方法を PCM SAC-CI 理論で実装し、様々な系に応用してその有用性を示した。

【部会活動】

平成 25 年 8 月 8 日に第1回、8 月 19 日に第2回の第3部会課題代表者会議を TV 会議にて開き、各課題の進捗報告を行い、今後の研究の方向性等について検討した。さらに、平成 25 年 12 月 13 日、物性研において部会小委員会を開き、26 年度に向けて重点課題、特別支援課題等について議論した。重点課題「全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開」においては、実験研究者との検討会を阪大ならびに微生物化学研究所において年度中に計 6 回開催し、計算、解析の方向等について綿密な議論を行いながら研究を進めた。

第3部会が共催ないしは協力して開催した公開型の研究会としては、平成 25 年 10 月 17 日から 19 日にかけて、CMSI 国際会議に先立って名古屋 Urban Institute において 19 名の参加の下、サテライトミーティングを開催した。また、分野1と連携しながら 11 月 18 日から 20 日には、神戸国際会議場において 16 か国 268 名の参加の下、分子シミュレーション国際会議を開催した。また、これに先立って、11 月 16 日には名古屋大学 ES 会議室において 35 名の参加の下、プレシンポジウムを開催した。平成 26 年 1 月 20 日には、CMSI 神戸拠点に協力し、FOCUS において MODYLAS 講習会を実施した。参加者は 26 名であった。

3 月 20 日には、第 3 部会が主催して、東京ウイズビジネスセンターにおいて、大学、企業から 50 名の参加を得て、水資源、ゼロエネルギー分離に関する第 3 部会研究会を開催した。

2) 研究開発課題

i) 重点課題4:全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開

【代表者】 岡崎進(名古屋大)

【担当者】 岡崎進(名古屋大)、北浦和夫(神戸大)、北尾彰朗(東京大)、長尾秀実(金沢大)、
泰岡顕治(慶応大)、入佐正幸(九州工大)

【研究の背景と目的】

本課題においては、小児マヒウイルスカプシド(約 1,000 万原子)の全原子分子動力学シミュレーションならびにインフルエンザウイルスタンパク質(約 24,000 原子)の全電子量子化学計算を行い、物質と生命の境界領域にあるウイルスを計算科学の俎上に乗せ、物質科学としてのウイルスの分子論を確立する。

前者では特に、カプシドとレセプターとの特異な相互作用、分子認識を自由エネルギーレベルで明らかにし、また結合後のカプシド構造の変化など感染初期過程の分子機構の解明を図る。また、カプシドの構造安定性について、構成タンパク質間の接合構造と熱ゆらぎや温度、pH、溶媒など環境に依存した構造の特徴などカプシドの物理的、化学的性質を明らかにする。一方、後者では大規模精密量子化学計算に基づいて、ウイルスの膜タンパク質の阻害剤など、治療薬の候補となる医薬品分子の設計研究を行う。

【実施内容(計算モデル)】

平成25年度は上記目標を達成するため、京コンピュータ上でのMODYLASの最適化、機能強化を引き続き実施すると共に、京コンピュータを用いてウイルスの丸ごと全原子分子動力学シミュレーションを前年度に引き続き継続実施し、同時に、ウイルスの感染初期過程を明らかにするために、レセプターとウイルスとの特異な相互作用を定量的に記述する自由エネルギー計算も引き続き行った。

また、インフルエンザウイルスの新規阻害剤の分子設計に向けて、タンパク質とリガンドの複合体構造の構造計算に有用なFMO法の解析的エネルギー微分を開発した。これにより、従来の近似的エネルギー微分より少ないステップ数で安定構造を計算することが可能になり、設計化合物とタンパク質との複合体構造の計算が高速化できるようになった。また、FMO法の解析的2次微分を開発した。これにより調和振動子近似による結合自由エネルギーの計算が可能となった。

【並列計算の方法と効果(性能)】

高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト MODYLAS は、京コンピュータにおける超並列計算に対応するために、並列化効率を大幅に低下させる FFT を回避し、周期境界条件下にある分子集合体における長距離力に対して FMM を用いて高精度に計算できるペタフロップス級の MD 計算を目指した汎用プログラムである。MODYLAS の性能評価結果として、京のフルノードの約 80%を使用した 65,536 ノード並列において、8,000 万原子系に対し理論ピーク性能比 41.1%、3.45 Pflops を達成した。65,536 ノードにおいても 64 ノードと比較して 81% の並列化効率を維持しており、十分な性能を達成することができた。また、研究課題実施に必要な 1,000 万原子系規模の計算においては、全 MD 計算 1 ステップに対して約 5 ms の性能を達成し、実用面においても十分に高い性能を備えていることを実証した。これは、大規模系に対する MD 計算においては、世界最速クラスである。

FMO 法計算プログラムは、CPU コアをグループ分けし、フラグメントやフラグメントペアをグループに割り当て、グループ内では通常の ab initio MO 計算とほぼ同じ並列計算を行う(2 段階並列化)。2012 年時点で、京コンピュータの 12,888 ノードまでは実行性能が 4.4%であったが、24,576 ノードでは 3.7%まで低下した。その後、石村氏開発の 2 電子積分ルーチンを組み込んだ結果、実行性能は 1.66 倍(7.3%)に改善した。一方、24,576 での性能低下は、ロードインバランスが原因であることが判明している。この問題を克服するために、対象分子系のフ

ラグメントの数とサイズに基づいて、最適な CPU コアのグループ分けを予測する方法を検討中である。

【研究成果】

小児マヒウイルスカプシドは、VP1 から VP4 までの 4 種類各 60 個、合わせて 240 個のカプシドタンパク質からなる 2。ここでは、電解質水溶液中のウイルスカプシド 1 個に対してシミュレーションを行った。生理学的条件 pH7.4 においては、カプシドは合わせて 4,860 個の正電荷と 5,100 個の負電荷にイオン解離しており、240 個の過剰の負電荷を持つ。溶媒としての水分子は 1,884,218 個、電解質は、Na⁺、K⁺、Cl⁻ がそれぞれ 5,310 個、136 個、5,206 個で、全系は 6,480,236 原子で構成される。初期構造には X 線結晶構造解析 PDB 1HXS3 を用いたが、RNA は X 線で観測されず構造情報がないため、本研究においては RNA を含めていない。つまり、empty capsid に対するシミュレーションとなっている。

【カプシドの構造安定性】 平衡状態において、単位時間当たりのカプシド内から外へ、またカプシド外から内への水分子の移動数は同数であり、水の交換平衡が成立している。水の移動速度はいずれの方向も 1 ns あたり約 8 個であり、速い。つまり、約 25 マイクロ秒でカプシド内のすべての水分子を自発的に交換する。このことは、小児マヒウイルスは数千気圧にもものぼる圧力耐性を有する一方で、乾燥に対して容易に不活化するといったことをよく説明している。一方で、電解質は透過させない。つまり、カプシドは浸透膜として機能する。生理的条件下での電解質濃度において浸透圧はさほど高くはなく、カプシドの安定性に影響するほどではないだろう。事実、真水中でウイルスは長時間活性を保つ。

カプシド内外の電解液の状態はさらに興味深い。カプシド内部と外部の電解液の圧力を密度－圧力検量線から評価すると、カプシド内の電解液圧力は負の値を示す。ビリアル定理から求めた圧力も負であり、密度の結果と定量的に良い対応を示した。負圧はバルクにおいては存在し得ないが、小さな空間であるカプシド内は負圧に保たれる。負の圧力は不均一な系、例えば植物の維管束やナノスケールの毛細管において現実生成成されることはよく知られているが、ウイルスにおいてもそれが見られることは興味深い。この圧力差によりカプシドは収縮し、これに拮抗する復元力を発生させ力学的釣り合いを保つ。小児マヒウイルスや口蹄疫ウイルスなどピコルナ科のウイルスにおいては、自然界でも多く empty capsid が生成されるが、RNA を含む完全なウイルスと比べ不安定である。負の圧力は熱力学的には不安定であることを意味しており、empty capsid の不安定性の一因となっていると考えられる。

さらには、カプシドの安定性を検討するために、高圧印加ならびに乾燥条件下におけるシミュレーションを実施し、ウイルスの変形や電解液の保持等についての検討を行い、今後の研究方向に対する見通しを得た。

【感染初期過程】 一方で、感染の初期過程であるレセプターとウイルスの結合において、両者の相互作用を自由エネルギーレベルで解析しつつある。その際のスナップショットを図に示す。生理条件下において、小児マヒウイルスカプシドならびに CD155 レセプターはいずれも負の正味の電荷を持っており、何ものなければ静電相互作用は斥力となるはずである。しかしながら、現実にはウイルスはレセプターに接近し、結合する。本計算においては、溶媒である電解質水溶液内において、この引力相互作用を見出した。これは、従来のモデル計算では不可能な観察であり、溶媒も含めた全原子シミュレーションにおいて初めて可能となった。現在、引力の起源について詳細な解析を進めているところである。また、induced fit 機構の解析のため、十分に効率的なサンプリング方法の開発を行った。これまでに、有望であると考えられる方法の提案を行い、小規模系に対して計算の正しいことを確認した上で有効性の検証を行った。

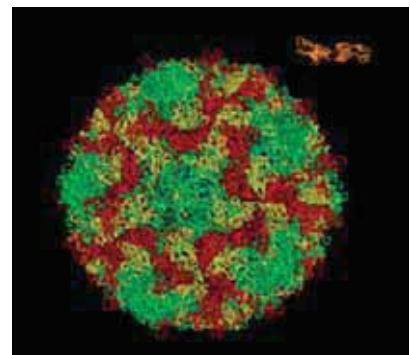


図 小児マヒウイルスと CD155 レセプターのスナップショット。図中、水の描画は省略している。

【インフルエンザウイルス】インフルエンザウイルスの新規阻害剤の分子設計の研究は、FMO 法と古典力学の融合法(FMO/MM 法)による溶媒分子をあからさまに考慮したモデル系で結合自由エネルギー計算を行うことを目指して、プログラムの開発を始めた。また、FMO 法の創薬研究への応用を容易にするために、FMO 計算の入力データの作成と結果をグラフ化するための GUI プログラムを開発した。今後、FMO 計算支援ソフトウェアにより効率的に研究を進める予定である。

【ソフトの開発、公開等】 ソフト開発としては、MODYLAS の最適化をさらに進めた。直方体セルへの対応を可能とし、 2^n のセル分割に加えて $2^n \times 3^m$ のセル分割も可能とした。これにより、これまで京を用いた並列計算が最大 65,536 ($=2^{16}$) ノードであったのに対して、新たに 82,944 ($=2^{10} \times 3^4$) のフルノード利用を可能とした。また、IMOMM-ONIOM 法による FMO と MODYLAS の連携、また REM と MODYLAS の連携のための基盤の開発を行った。MODYLAS は京上での実行形式の公開により常時利用可能とし、またソースを含めて MATERIAPPS 上で公開した。MODYLAS は第4部会におけるメタンハイドレートのシミュレーション研究に提供し、また京の産業利用3課題に対しても提供した。さらには、理研と連携して MODYLAS ミニアプリを作成し、ポスト京システム FS 活動のため、東大ならびに筑波大に提供した。

ii) 特別支援課題1:拡張アンサンブル法による生体分子構造・機能の解明

【担当者】 岡本祐幸(名古屋大)、奥村久士(分子研)、志賀基之(原研)、高橋英明(東北大)

【研究の背景と目的】

多自由度複雑系では、系にエネルギー極小状態が無数に存在するために、従来のモンテカルロ法や分子動力学法に基づくシミュレーションでは、それらエネルギー極小状態に留まってしまう困難がある。この困難を克服するために、我々は、拡張アンサンブル法 (generalized-ensemble algorithm) と総称される手法を適用することを主張してきた。本研究は、強力な拡張アンサンブル法を開発して、生体分子系に適用して、生体分子構造・機能の解明を目指すものである。更には、ab initio 経路積分法、real-space grid DFT による QM/MM 法や他の量子効果を取り入れる手法と拡張アンサンブル法を合体することも目指す。

【実施内容(計算モデル)】

今年度は、国民の健康保全のために重要な問題である、創薬設計に適した拡張アンサンブル法の開発に特に力を入れた。具体的には、タンパク質分子と薬剤候補分子の結合状態を効率良く探索できる新手法の開発を行った。

【並列計算の方法と効果(性能)】

本研究グループでは、拡張アンサンブル法として、レプリカ交換法やマルチカノニカル法を改良・一般化した手法を使っているが、特に、レプリカ交換法は、100%に近い、非常に高い並列化ができる手法であり、多くの計算機でもそれは確認されているが、MODYLAS と合体することによって、「京」上でも最大 24576 ノードにおいて、99.3%の高い並列化効率を実現している。

【研究成果】

平成 25年度に本グループから得られた最も重要な研究成果は、タンパク質への薬剤候補のドッキングシミュレーション法として、新手法の開発に成功したことである。具体的には、以前開発した、レプリカ交換傘サンプリング法 (Replica-Exchange Umbrella Sampling: REUS) に基づく、薬剤候補分子のタンパク質へのドッキングシミュレーション手法に、レプリカ交換溶質焼き戻し法 (Replica-Exchange Solute Tempering: REST) を合わせた2次元レブ

リカ交換法に基づく新手法(REUS/REST)の開発に成功した。これによって、以前、REUS に基づいた手法では、薬剤候補分子が一度ドッキングポケットに入ると、そこから脱出するのが困難であったが、新手法では、薬剤候補分子がドッキングポケットから出たり入ったりできるようになり、自由エネルギー計算の精度が格段に上がった。これは、我が国から世界に発信すべき新手法であると言える。

iii) 特別支援課題 2: ポリモルフから生起する分子集団機能

【担当者】 松林伸幸(阪大)、篠田渉(名古屋大)、茂本勇(東レ)、吉井範行(名古屋大/CMSI 教員)、野口博司(東京大)、川勝年洋(東北大)、水口朋子(分子研/CMSI 研究員)

【研究の背景と目的】

脂質や界面活性剤、高分子のような分子は、外部変数の設定によって多様な自己組織化状態を示し(ポリモルフ)、生体模倣材料、ドラッグデリバリーシステム(DDS)、海水淡水化、食品・コスメティックといった広範な社会的ニーズに直結する分子集団機能を発現する。本課題の目的は、熱ゆらぎ程度の強さの相互作用・相関によって生成されるソフトな自己組織化構造や分子集団の機能を、単一分子の性質や分子間相互作用から計算科学的に予測することである。分子集団機能の中で、特に、溶液・脂質膜・ミセル・高分子のようなソフト分子集団系への物質結合に焦点を当て、結合強度と結合サイトを規定する自由エネルギーの計算を、全原子モデルに立脚して行う。a) タンパク質-脂質膜相互作用の全原子解析、b) 非イオン性ミセルの界面張力の評価、および、c) 高分子非晶に対する有機分子の溶解性能を解析することを、平成 25 年度の目的としている。さらに、全原子モデルの知見に基づいた粗視化モデルを構築し、d) 膜の弾性変形及びモルフォロジー変化における自由エネルギー変化の評価、e) 紐状ミセルの絡み合い挙動、f) 脂質膜のメゾ構造に対する剪断流の影響の解析を行う。

【実施内容(計算モデル)】

全原子モデルによる自由エネルギー計算のために、エネルギー表示法ソフトウェア ermod を高度化している。modylas のような大規模 MD ソフトとの連携によって、ソフト分子集合系の自由エネルギー解析を行った。タンパク質-脂質膜相互作用に対する水の効果を、全原子モデルを用いた自由エネルギー計算によって解析した。ミセル系の計算では、非イオン性界面活性剤からなるミセルの界面張力を検討し、高分子系の自由エネルギー計算では、典型的な高分子材料について有機分子の溶解性を調べた。また、粗視化モデルを用いた分子動力学計算を用いて、混合脂質ベシクル間の相互作用を自由エネルギー解析によって検討した。粒子-連続場ハイブリッドモデルを用いてゲル化点近傍の紐状ミセルのシミュレーションを実施し、メッシュレス膜模型に基づいて脂質膜構造に対する剪断流の効果を調べた。

【並列計算の方法と効果(性能)】

全原子モデルによる並列自由エネルギー計算を、ermod を用いて行う。1000 程度の並列度を、95%以上の効率で達成しており、タンパク質-脂質膜複合体の計算に適したソフトになっている。また、大規模系の全原子 MD 計算のために MODYLAS を開発し、例えば、約 50 万コアを用いると 1000 万原子系の計算が 1 ステップ当たり約 5ms で実行可能となっている。

【研究成果】

DMPC リン脂質二重膜への glycophorin A の膜貫通ドメインの結合様式に対する水の効果を検討した。溶質をタンパク質、(混合)溶媒を DMPC と水と見なして、ermod を用いた結合自由エネルギーから、膜の界面領域を

通過する flip-flop 経路が水との相互作用によって安定化されることを見出し、安定化機構が疎水性小分子の場合と共通であることを明らかにした。ミセル系では、非イオン性の $C_{12}E_8$ を対象とし、局所圧力テンソルおよび界面張力の評価から、親水基付近の界面張力への負の寄与がミセルの安定性に大きく影響していることを明らかにした。高分子系では、有機分子の溶解自由エネルギーを解析し、全原子モデルを用いた有機分子の選択的透過膜設計に踏み出した。また、粗視化モデルを用いることで、脂質種による膜間相互作用の違いとベシクル変形による脂質分子のソーティングの2つの因子によって、ベシクル間相互作用が決まることが分かった。さらに、紐状ミセル溶液のゲル化点近傍の挙動を粒子-連続場ハイブリッドモデルで解析し、シアシックニング挙動を示す領域ではミセルが弱く絡み合った状態にあることを明らかにし、メッシュレス膜モデルを用いた解析によって、高い剪断強度で平面ラメラ構造が不安定化し、ロール状のラメラ構造が形成されることを示した。

iv) 特別支援課題3:ナノ・生体系の反応制御と化学反応ダイナミクス

[担当者] 中井浩巳(早稲田大)、IRLE Stephan(名古屋大)、吉澤一成(九州大)、武次徹也(北大)、小林正人(早稲田大)、西澤宏晃(早稲田大)

[研究の背景と目的]

本研究の目的はナノスケールの分子や分子集合体などの大規模系に対して、量子化学計算を用いてさまざまな角度から反応制御を検討することである。これらの大規模系を取り扱うためには、高精度な大規模電子状態理論が鍵となる。そこで中井らが開発を進めてきた分割統治(DC)理論を用いた量子化学計算により、これを実現する。本研究は1)高精度な理論を用いた分子構造や電子構造などの静的なプロパティ解析と2)分子動力学(MD)計算を用いた化学反応や生成プロセスなどの動的なプロパティ解析の2つの戦略により遂行する。

平成25年度は、特に超巨大系の反応ダイナミクスを「京」で取り扱うことを可能とするため、昨年度までに手法開発を行った分割統治密度汎関数強束縛(DC-DFTB)法の計算プログラム「DC-DFTB-K」の高効率化と超高並列化を進めた。また、本プログラムをアミン分子を用いた二酸化炭素吸収・放出反応(CCS)やリチウムイオンデバイスにおける極板表面の反応に適用した。

[実施内容(計算モデル)]

平成25年度は主に、DC-DFTB-Kプログラムの改良を行った。また、本プログラムを用いて、1)リチウムイオンデバイスにおける固体電解質界面(SEI)膜生成メカニズムの解明と、2)二酸化炭素分離回収で用いられるアミン溶液の反応解析を行った。

1)では、アームチェア端及びジグザグ端のグラフェン電極とカーボネート溶媒を含む計算モデルをDFTB計算で扱い、界面に生成するSEI膜の生成機構の解明を行った。

2)では、計算セル中にアミン3分子、水33分子、二酸化炭素4分子を含む計算モデルをDFTB計算で扱った。このサイズは、研究室の計算機を用いて数psの計算をルーチンで実行する目的で設定したものであり、本系のダイナミクスを扱うための最小サイズである。また、本系を大規模化して「京」で計算することを視野に入れ、本プログラムの性能を評価するテストデータとして、計算セルに水40,000分子を含む計算モデルを構築した。

[並列計算の方法と効果(性能)]

「DC-DFTB-K」プログラムのプロファイルを取得した結果、高並列計算のボトルネックとなっていたのは、フェルミ準位を決定するために、Brent法を用いて非線形方程式を解く部分であることがわかった。Brent法を用いる場合、この部分は並列計算が出来なかったが、並列度が低い場合には計算時間が十分に小さく問題とされて

いなかった。Brent 法に代わり、サンプリング点を多数用いた補間法を利用することにより、京を 500 ノード以上利用した時の計算時間が削減された。また、本アルゴリズムの採用により、ピークに対して 16%を超える高い演算性能を実現することができた。並列化効率も、京 5000 ノード (40,000 コア) 利用時に 79%を達成している。

〔研究成果〕

- 1) の計算では、SEI 膜生成反応のファーストステップとして以下の機構が支配的であることが判明した。まず、カーボネートが水素を極板に向けて接近する。グラファイト上に水素が移動した後、溶媒とグラファイトが結合する。この計算では、実際に実験で観測されている化学種が生成されることを確認出来ている。
- 2) の計算では、溶媒である水の水素結合ネットワークにより、反応物の遠方にある水酸化物イオンが反応に直接関与することが確かめられた。この事実は、大規模系をダイレクトに量子化学で扱うことによってしか本反応を高い信頼性で扱うことが出来ないことを意味している。

v) 特別支援課題 4:機能性分子設計－光機能分子と非線形外場応答分子の光物性

〔担当者〕江原正博(分子研)、中野雅由(阪大)、太田浩二(京大)、藪下聡(慶應大)、小関史朗(大阪府大)

〔研究の背景と目的〕

非線形外場応答分子は、超高速光スイッチや大容量光メモリー、超微細加工技術、フォトダイナミックセラピー等の応用が期待されており、これらの実現のためには高効率な特性をもつ分子の設計が不可欠である。また、光機能分子の開発では、理論の精密な情報が不可欠であるが、その光物性は周囲の環境場に依存する。本課題では、これら非線形外場応答分子や光機能分子の光物性と分子設計に関する研究を行った。

〔実施内容(計算モデル)〕

非線形光学分子の設計に関しては、最小の三角形グラフェンナノフレイクであるフェナレニル分子を積層したの π スタック構造の分子集合系について、分子間距離と開殻性との関係をスピン分極密度汎関数法により検討した(図1)。さらに有限場法により、積層方向の第二超分極率 γ の計算を行い、分子間距離－開殻性－第二超分極率の関係を明らかにした。また、従来の閉殻 NLO 物質設計指針の一つである対称電荷移動と我々の提案する設計指針の一重項開殻性の相関を明らかにするため、点電荷パラキノジメタンモデルを設計し、検討を行った(図2)。一重項分裂(SF)に関しては、種々の分子の高精度電子状態(励起状態)計算を行い、当研究グループの提案したジラジカル因子に基づく候補分子のスクリーニング法と合わせて、複数の新規 SF 分子の理論設計および提案を行った(図3)。励起状態の溶媒効果の理論開発では、摂動理論に基づいて、多数の励起状態の溶媒効果を一挙に計算できる方法を PCM SAC-CI 理論で実装し、様々な系に応用した(図4)。

〔並列計算の方法と効果(性能)〕

SAC-CI 法の OpenMP による高並列化を進めており、従来計算が不可能であった大規模共役分子系の理論計算が実現されている。さらなる高並列計算アルゴリズムの開発を推進している。

〔研究成果〕

フェナレニル分子集合系は平衡分子間距離付近で中間ジラジカル性を示し、 γ が最大値をとる系(ダイマーでのモノマー当たりの γ はモノマーに比べて約30倍増大)であることが判明し、開殻分子系の集合系が非線形光学物質のモデルとして極めて有望であることが予測された。対称系として閉殻分子のコロネンの積層系を同様に検討したが、分子間距離の変化に伴う γ の増大は殆ど見られず、フェナレニル分子集合系に見られる顕著

な γ の増大は、反平行スピン間の共有結合的な強い分子間相互作用が中間ジラジカル性を発現することがその原因であることを明らかにした(図1)。今後、さらに広範囲の開殻分子集合系を検討していく予定である。

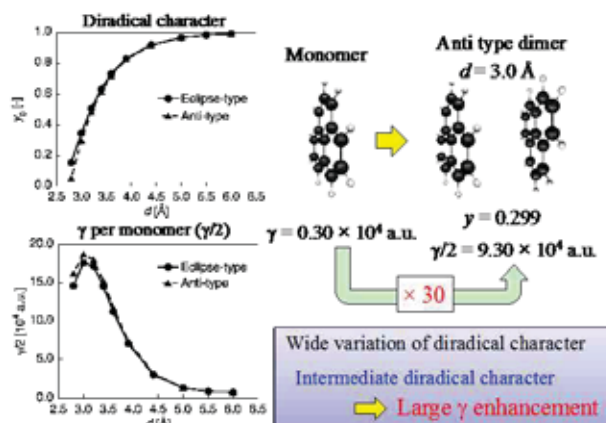


図1. フェナレニル分子集合系の積層方向の開殻性と第二超分極率 γ

点電荷パラキノジメタンモデルでは、強い対称電荷移動を持つ中間開殻系の第二超分極率 γ (分子レベルでの三次非線形光学効果)が電荷移動を持たない場合に比べて著しく増大し、最大値が約2倍に達することが明らかになった。これに基づき、完全開殻に近い母骨格へ大きな対称電荷移動を導入するという新奇な高効率NLO分子の設計指針を提案した(図2)。

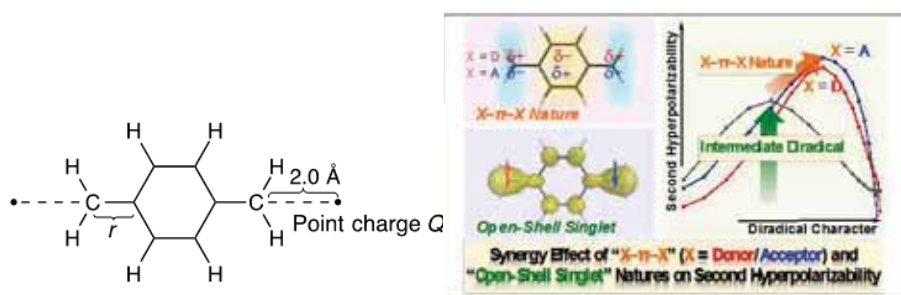


図2. 点電荷モデルによる開殻一重項性と対称電荷移動の三次非線形光学物性に及ぼす効果の解明

一重項分裂(SF)の研究では、効率の良いSFを起こす可能性のある分子は、比較的小さな開殻性を持つことが重要となるが、このような領域での開殻性の制御に関する窒素原子置換の効果を縮環分子の芳香族性と関連付けて明らかにした(図3)。

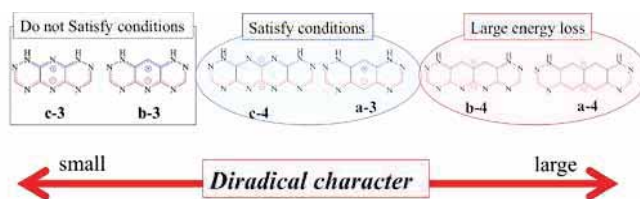


図3. 窒素原子を含む新規SF分子系の提案

励起状態の溶媒効果の研究では、多数の励起状態を一挙に計算するPCM SAC-CI法を開発し、様々な分子系に適用し、その有用性を示した。一例として、単核及び複核タングステンのピリジルーカルボニル化合物のスペクトルと溶媒効果をPCM SAC-CI法により計算した結果を示す(図4)。有機金属色素では、配位子場型や電子移動型等の様々な励起状態が多数存在し、それぞれ、溶媒効果の方向や大きさが異なる。PCM SAC-CI法は、非極性及び極性溶媒中の励起状態を精度よく記述した。

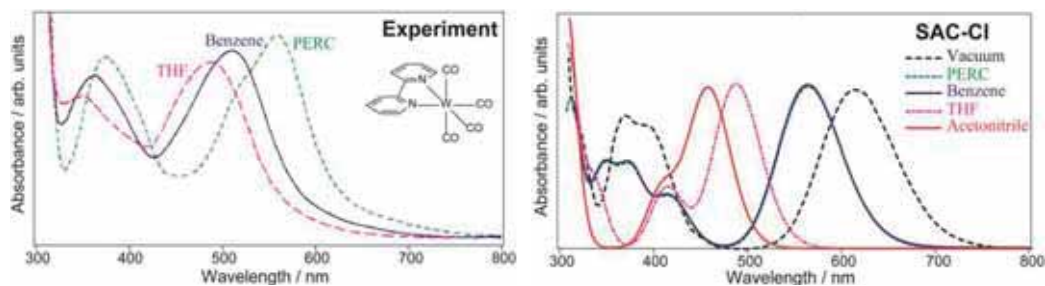


図 4. PCM SAC-CI 理論による励起状態の溶媒効果:タングステン錯体への応用

また、励起状態ダイナミクスの基礎研究として、 $\text{ICl} + h\nu \rightarrow \text{I} + \text{Cl}$ の反応について複数の電子状態の計算と波束及び半古典論に基づいて量子干渉効果を分析し、その結果を実験グループにフィードバックした。

関連論文リスト

1. K. Fukuda, M. Nakano, *J. Phys. Chem. A*, (2014) DOI: 10.1021/jp412634q.
2. M. Wergifosse, F. Wautelet, B. Champagne, R. Kishi, K. Fukuda, H. Matsui, M. Nakano, *J. Phys. Chem. A*, **117**, 4709–4715 (2013).
3. M. Nakano, B. Champagne, *J. Chem. Phys.*, **138**, 244306–1–13 (2014).
4. T. Minami, S. Ito, M. Nakano, *J. Phys. Chem. Lett.*, **4**, 2133–2137 (2013).
5. K. Yoneda, M. Nakano, K. Fukuda, H. Matsui, S. Takamuku, Y. Hirosaki, T. Kubo, K. Kamada, B. Champagne, *Chem. Eur. J.* (2014). DOI: 10.1002/chem.201402197
6. R. Fukuda, M. Ehara, R. Cammi, *J. Chem. Phys.* **140**, 064114–1–15 (2014).
7. M. Ehara, R. Fukuda, C. Adamo, I. Ciofini, *J. Comput. Chem.* **34**, 2498–2501 (2013).
8. T. Matsuoka, S. Yabushita, *Chem. Phys. Lett.*, **504** (4–6), 193–198 (2013).

2. 2. 1. 1(4) エネルギー変換

第4部会 代表者： 山下晃一(東京大)、杉野修(東京大)

1) 部会全体の取り組み

【研究成果の概要】

太陽光や熱、水素やハイドレート、バイオマスといった一次エネルギーを二次エネルギーに変換する仕組み、あるいは二次エネルギーを貯蔵して再利用する仕組み(二次電池等)を原子・分子スケールで物質科学的に解明する。また、そのための計算手法やアプリの開発や、研究成果を用いたエネルギー変換デバイス用物質開発への指針獲得を行う。これらの活動を通じてエネルギー研究の人材育成、コミュニティ形成、外部コミュニティとの連携などを押し進める。

エネルギー変換過程を次に示すような様々なレベルから捉え、それぞれシミュレーションを行った。

- (1) 電子(および原子核)の動的過程として太陽光発電の光励起・電荷分離・散逸を捉え、それぞれの過程の詳細を探る。また、ナノ構造を有しフォノン伝導が制限された系における熱電変換機構を調べ、変換効率に関する知見を得る。
- (2) ボルン・オッペンハイマー近似の下での電子とイオンの動力学として燃料電池やリチウムイオン二次電池の界面触媒反応を捉え、電極物質や溶液あるいはその構造と機能性の関連を調べる。酵素反応に関しても類似のアプローチで機構を探る。
- (3) 電子とイオンを別々ではなく原子というユニットで扱うアプローチを用い、ハイドレートの動力学過程を調べることによりその熱力学的性質を解明する。これら(1-3)の研究から物質の構造や電子状態とエネルギー変換効率や耐性との関連を明確にし、物質設計指針等を探る。

【部会活動】

それぞれの研究課題遂行のための種々の会合は定期的に行われているが、それに加えて部会内での課題横断的な進捗報告会を行った。

2) 研究開発課題

i) 重点課題 5: エネルギー変換の界面科学

【代表者】 杉野修(東京大)

【担当者】 杉野修(東京大)、赤木和人(東北大)、森川良忠(大阪大)、池庄司民夫(産総研)
牛山浩(東京大)、兵頭志明(兵庫県立大)、尾形修司(名工大)
館山佳尚(物材)、大谷実(産総研)、大脇創(日産自動車)、山下晃一(東京大)
長岡正隆(名古屋大)、麻田俊雄(大阪府大)

【研究の背景と目的】

燃料電池反応は古くから知られている重要な触媒過程であるが、活性機構や活性点など微視的な描像が得られていない。リチウムイオン二次電池は最近特に注目されている蓄電池であるが、その安全性や耐性に関する理解が進んでいない。電極界面膜(SEI 膜)がうまく形成されて初めて安定な電池として機能するが、膜の構造や性質、それを制御するための原理といった重要な理解が欠けている。これらは応用上の重要性和電気化学、界面科学上の重要性を併せ持っている。化学的には、界面においてイオンの流れと電子の流れが如何に互いに影響を及ぼしながらエネルギーが変換されるのか、その知見を獲得することの意義は大きい。これらの知見を獲得するためのシミュレーション手法やアプリを開発し、それを用いてエネルギー変換過程を原子・分子のレベルから明らかにするのが目的であり、同時にそれを制御するための設計指針の獲得も目指す。

【実施内容(計算モデル)】【研究成果】

研究は第一原理分子動力学計算を用いて界面域での原子や電子の動力学を表現するというものであり、界面には電位差を与え、電位差一定の下で計算を行う。さらに、反応経路に沿って 10-20 程度のシミュレーションを行うことにより自由エネルギー曲面を求めて、有限温度での反応をとらえる。この計算のための手法開発やアプリ開発を継続して行った。

燃料電池に関しては、燃料電池動作温度における白金水溶液界面の構造や反応を調べるためのシミュレーションを行った。この系では酸素分子の4電子還元過程($O_2 + 4H^+ + 4e^- \Rightarrow 2H_2O$ 、及びその逆反応)が如何に速やかに起こるかが鍵となるが、その活性点や活性化機構に関する微視的解明は行われておらず、それが活性化向上を妨げている要因になっている。白金のステップのすぐ近くに特異な水素結合ネットワークが形成され、それが反応の活性化エネルギーを下げているという可能性が高いと考え、それを裏付けるためのシミュレーションを行った。いくつかの高面指数表面に対して計算を行ったところ、ステップ近傍で水分子が容易に分解する箇所があることを強く示唆する結果が得られた。

この酸素還元のシミュレーション結果や以前に行ったシミュレーション、さらに、最近の実験結果を総合的に解析することにより、反応経路に関する新たな知見を得ることができた。その解析によると、酸素分子の還元過程として有力視されている association mechanism(OOH の形成を経る機構)と dissociation mechanisms(O_2 の解離吸着を経る機構)が主要経路として競合し、高電位では前者(低電位では後者)が優勢となることなどが解ってきた。

また、界面電気二重層に関する研究も進められ、水分子が熱的に揺らぐことにより反応が促進される機構に関する知見を得ることができた。熱揺らぎはナノ界面において特に大きくなり、ナノスケールの微粒子に対しては反応係数を 10 倍程度大きくする効果があることが示唆された。これはコアシェル技術などの現在知られている最も有効な方法による効果と同様の高い数値であり、界面をナノスケールで修飾することにより活性を制御することができると見えてきた。

リチウムイオン二次電池に関しては、動作中の電池においてどのように電解液が分解するのか、その結果どのように SEI 膜が形成されるのか、が大きな問題である。しかしその機構に関する研究はあまり進んでいない。今

回行った大規模シミュレーションはその機構解明に向けた重要な知見をもたらした。また、その結果は論文だけでなく新聞発表等を通じて報告され、大きな反響を得た。その知見はまず電解液分解に関する知見であり、(1) 界面付近にてエチレンカーボネート溶媒が分解し、それが添加剤と化学反応を起こして融合するのが主な反応であるという知見である。従来は別の説がとねえられていたが、今回の計算はそれを否定するものである。融合してできた生成物は SEI 膜を形成するものと考えられ、この結果は溶媒材料探索に新たな指針につながる。次の知見は新たな電解液の設計に関するものであり、(2) 電解液として高濃度のものを用いると、従来の予想に反してリチウムイオンの輸送をあまり妨げることがないというものである。これは電解液のネットワークを通じてイオンが高速に電導できることによるものであり、その結果、高濃度の電解液を用いれば充電速度を3倍程度高速化できる可能性があると期待できる。

〔並列計算の方法と効果(性能)〕

本課題は重点課題に選定されている。通期で 15.5 百万ノード時間の 99.7%を使用し、しかも平均実行効率 14%(12,228 ノードのプロダクトランでは 28%、SIMD 化率 73%)を記録し、重点アプリのトップクラスの利用率・計算効率を達成した。並列計算には MPI と OPEN-MP をフルに活用している。

ii) 重点課題6:水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性

〔代表者〕 田中秀樹(岡山大)

〔担当者〕 田中秀樹(岡山大)、甲賀研一郎(岡山大)、水関博志(東北大)、三浦伸一(金沢大)

〔研究の背景と目的〕

エネルギー資源として、またメタンや水素の貯蔵手段として、水素・メタンハイドレートが注目されている。本課題は、分子シミュレーションによりこれらのハイドレートの融解と生成の過程を解明して、実用に対する指針を得ることを目的とする。水中のメタンハイドレートの分解過程を京コンピュータによる大規模な分子動力学計算により解析する。様々な温度条件におけるハイドレートの熱力学的安定性と融解のダイナミクスを明らかにし、ハイドレートの制御可能性に関する科学的知見を確立する。

〔実施内容(計算モデル)〕

分子動力学計算には MODYLAS パッケージを用いた。水で満たされた立方体セルの中に、 $9 \times 9 \times 9$ のユニットセルからなるメタンハイドレートを置いた状態を初期構造とした。系はメタン 5832 分子、水 118678 分子で構成される。これは従来の典型的なハイドレート分解の計算と比べ約 10 倍の大きさである。水分子には TIP4P/2005 モデル、メタン分子には OPLS モデルを採用した。

〔並列計算の方法と効果(性能)〕

本研究課題は、高並列計算プログラムの独自開発を目的としていない。京におけるすべての計算は、名古屋大学、岡崎グループにより開発された MODYLAS パッケージを用いて行った。多くの分子動力学パッケージでは、長距離クーロン力を Particle Mesh Ewald 法で扱う。これに対し、MODYLAS は Fast Multipole Method を用いることで通信に時間のかかるフーリエ変換を避け、高並列における高効率を実現している。計算のほとんどは 512 ノード並列で行った。実行効率は約 24 %である。

【研究成果】

水中のメタンハイドレートの分解過程を大規模分子動力学シミュレーションにより解析した。温度を融点以上にする事でハイドレートは分解を始め、それによりメタン分子が周囲の液相に放出される。分解が進むと液相はメタン過飽和状態になる。我々はこのメタン濃度上昇に伴いケージ構造の再構成が起りやすくなり、ハイドレートの分解が遅くなることを見出した。さらに分解が進行すると過飽和の限界を超え、メタンの泡が生じる。ひとたびメタンの泡が生じると、その泡が周囲の液相中のメタン分子を吸収し、液相のメタン濃度が大きく減少する。我々は、この泡の生成によるメタン濃度減少がハイドレートの分解を促進することを明らかにした。生成した泡は急激に大きくなるため、巨大系でなければこの過程を扱えない。すなわち、本結果は京コンピュータあってこそのものである。京の計算能力を活用して、広い温度範囲で分解機構の解析を行った。これにより、ケージ再構成よりもケージ分解の温度依存性が大きく、そのために低温で前者の寄与が顕著となること、その帰結としてハイドレートが準安定な過熱状態として安定に存在しうることを示した。本研究で明らかとなった分解機構は、ハイドレートの産業利用において、分解の制御に役立つ可能性がある。

この成果を J. Phys. Chem. B 118, 1900 (2014) に公表した。また、朝日新聞などいくつかの一般のメディアでも取り上げられた。

iii) 特別支援課題 1: 太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算

【担当者】 山下晃一(東京大)、杉野修(東京大)、宮本良之(産総研)、館山佳尚(物材機構)、長谷川淳也(京都大)、河津励(CMSI 研究員)

【研究の背景と目的】

有機系太陽電池は、無機系太陽電池と比べ製造が簡易で原料も安価であることから次世代のクリーンエネルギー源として期待されている。しかし電子供与分子/電子受容分子の異種界面を利用した有機薄膜太陽電池のエネルギー変換効率は10%程度と未だ低く、また色素増感型太陽電池は変換効率12%を達成しているが、これら有機系太陽電池の普及には変換効率や耐久性の更なる向上が必須である。そのためには異種界面での電荷分離過程、TiO₂ 電極と色素分子・電解質溶液界面における界面電子移動過程の微視的理解が不可欠である。これらの基礎過程は遷移金属酸化物/有機溶媒界面やTiO₂ 表面上の励起電子ダイナミクスや遷移金属錯体吸着といった、第一原理計算の観点からは電子励起状態や電子相関が絡む大規模系であり、その解析計算の実行は応用的観点のみならず計算科学的にも重要である。

【実施内容(計算モデル)】

次世代太陽電池として実用化が期待されている有機薄膜太陽電池と色素増感太陽電池の更なる変換効率・耐久性の向上を目指して、その微視的メカニズムの理論的解明に取り組んだ。具体的には(1)電子供与分子/電子受容分子の異種界面でのエキシトン・ダイナミクス、また最近 15%の変換効率を達成した、(2)有機無機ペロブスカイトの電子物性と光電荷移動の機構に関しての理論的解析を行った。

【並列計算の方法と効果(性能)】

DFT 法を用いた計算を行うためにプログラムパッケージ CP2K を京コンピュータへ移植した。スーパーコンピュータシステム「京」へ移植・チューニングを行うことにより1万コアを超える計算ができるようになり、最終的に 3456 コアを使った計算で 23004 軌道 6479 電子分子系の計算において 653.6 GFLOPS, 実行効率で 1.3 %までの性能を引き出すことに成功している。

[研究成果]

(1) 電子供与分子/電子受容分子の異種界面でのエキシトン・ダイナミクス

種々の有機薄膜太陽電池の異種有機分子界面について電子状態計算、マーカス理論、量子マスター方程式法を用いてドナー励起状態から電荷移動状態への電子緩和ダイナミクスの理論的手法を用いて検討を進めた。有機薄膜太陽電池については、PCBM/P3HT 系において側鎖長や PCBM の分散濃度を変更した際に電荷移動状態が如何に変化するか解析し、界面における分子配向の同定と効率に与える影響を考察した。特に、エネルギー変換効率が低い要因となる電荷再結合速度の PCBM の分散濃度依存性が明らかになり、アクセプターである PCBM の凝集度により複数の PCBM にわたる LUMO の非局在化を調整することで電荷移動状態を変化させることが、高効率化への指針になると考えられる。さらに複数の Diketopyrrolopyrrole (DPP) 誘導体ドナーについての電子双極子解析から、ドナーからアクセプターへの電荷移動型励起状態が存在すると、この励起状態が界面における光吸収による励起子生成と直接的な電荷移動を可能にし、ドナー凝縮層で生成した励起子が界面で解離する中間状態としても機能するため、短絡電流密度が大きくなると考えられる。

(2) 有機無機ペロブスカイトの電子物性と光電荷移動機構

高光変換効率ペロブスカイト太陽電池において、ヨウ化鉛メチルアンモニウムペロブスカイトが、光吸収、電荷移動で重要な役割を持つことが予測されるが、その光生成電子、正孔の物性が高変換効率へ与える影響を明らかにすることを目的とし、第一原理計算により、光生成電子、正孔の有効質量が、各々、電子質量の 0.32 倍、0.36 倍であることを見出し、このことは、ペロブスカイトにおける長距離同時二極性輸送特性、また正孔に比べて電子の拡散定数が大きいことと一致することがわかった。

iv) 特別支援課題 2: バイオマス利用のための酵素反応解析

[担当者] 吉田紀生(九大)、平田文男(立命館大)、森田明弘(東北大)

[研究の背景と目的]

バイオマス利用に向けた酵素反応解析のための方法論・プログラムの開発を目的とする。一つはセルロース分解酵素による酵素反応の解析で、もう一つはバイオマス表面での反応解析である。これらを理解するには、水溶液とバイオマス関連物質(セルロース、酵素、バイオマス表面等)を統合的に扱える方法・プログラムが必要である。申請者らは溶液界面を捉える分光実験を解析する計算手法を開発や、液体の統計力学理論による酵素の分子認識過程を解析する手法を開発しており、次世代スパコンでの利用をめざした高度化を行う。

[実施内容(計算モデル)]

1) 3D-RISM プログラムの「京」コンピュータ上での超高並列化

前年度に引き続き、3D-RISM プログラムの「京」コンピュータ上での超高並列化作業を行った。3D-RISM では計算の反復過程において正逆一対の 3 次元 FFT(3D-FFT)の実行を含む。通常の並列版 3D-FFT では 1 軸でデータの分割を行うために上限ノード数が 1 軸上の格子点数に制限される。この問題を回避するために、筑波大学高橋大介准教授が作成した 2 軸分割 3D-FFT を 3D-RISM プログラムを組み込み、合わせて最適化を行ってきた。本年度は、プログラムの更なるチューニングとベンチマークテストを行った。

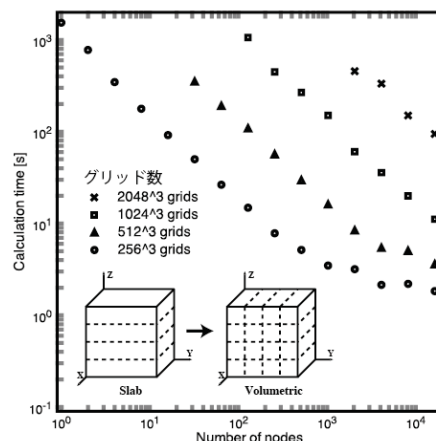
2) セルロースの分子認識/分解反応解析に向けた理論手法の開発

セルロース分解酵素は carbohydrate binding domain (CBM) とよばれる部位で セルロースを選択的に認識し、その後分解反応を行う事が知られている。したがって、CBM の動作原理・選択性の分子論を理解することは高効率酵素のデザインに寄与すると期待できる。CBM-セルロースの結合には、タンパク-リガンド間相互作用の精密な記述と、分子認識に伴う脱水和の自由エネルギー変化の両方を扱える理論が必要である。そこで、本年度は、タンパク質-リガンド相互作用の全電子状態計算を可能にするフラグメント分子軌道法と、生体分子の溶媒和理論である 3D-RISM 法を組み合わせた手法(FMO/3D-RISM)の定式化、変分的導出と高効率プログラムの開発を行う。

[並列計算の方法と効果(性能)]

1) 上述の通り、3D-RISM の並列化には 3D-FFT の高並列化が必要である。そこで、Volumetric 3D-FFT を実装した。右図に並列性能を示す。

2) FMO/3D-RISM の開発に当たっては、FMO 部は GAMESS パッケージを、3D-RISM は完全にオリジナルのコードを用いた。GAMESS は DDI により並列化されている。一方、3D-RISM は OpenMP により並列化されたものを用いた。(まだ、(1)で開発したものは実装していない。)並列性能の詳細な評価はまだ行っていない。



[研究成果]

1) 3D-RISM の高並列化・高速化に関して手法・ベンチマークテスト結果をまとめ Journal of Computational Chemistry 誌に投稿、受理された。

2) FMO/3D-RISM の定式化・変分的導出を行い理論的な裏付けを行った。また、高速・高精度な数値計算スキームを開発し、プログラム実装を行った。開発したプログラムを用い、CBM の一種(vCBM60)の水和構造および全電子状態計算をおこなった。結果は論文としてまとめられ、現在投稿中である。

v) 特別支援課題3: ナノ構造体材料における高効率非平衡エネルギー変換過程とナノ構造創製の理論シミュレーション

[担当者] 浅井美博(産総研)、中村恒夫(産総研)、吉田博(大阪大)、佐藤和則(大阪大)

[研究の背景と目的]

この数年の間に、有機物質の中から高い熱電変換効率 ZT を示す材料が相次いで見つかった。例えばカーボン・ナノチューブと高分子の混合材料、PEDOT:PSSなどの導電性高分子は、既に室温で $ZT \approx 0.2-0.3$ を示している。最も有用な熱電材料とされているビスマス・テルルが室温でも高々0.9程度の ZT しか示さない事を考慮に入れると、大変良い出発点である。今後更なる探索で高い性能を持つ有機熱電材料の開発も不可能ではないと思われる。最もポピュラーなビスマス・テルル系無機・合金熱電材料で問題となる毒性は有機材料には無く(一般的に)、プリンタブル技術を用いる事によりフレキシブル化も容易であり技術応用展開も拡大出来る。この様な最近の進展を鑑み、有機熱電材料の基礎機構解明にフォーカスを当てた研究を行った。なお、昨年秋に経産省・未来開拓プロジェクト「未利用熱エネルギー革新的利用技術開発」が始動し、本課題担当者の内、産総研メンバー2名はそちらにも参加する事になった。この状況変更により、今後、本課題で実施する研究内容は、第一原理計算プログラムの基幹部分の作成とその並列化による数値計算高速化とし、経産省プロジェクトに

においては計算プログラムに更なる機能追加と、それを用いた高性能熱電材料の探索スクリーニング研究の実施とする。

【実施内容(計算モデル)】

有機薄膜材料、ブレークジャンクション法で計測される単一有機分子の熱電変換効率 ZT ($ZT = G^2 S T / (\kappa_e + \kappa_p)$, G は電気伝導度, S はゼーベック係数, κ_e は電子熱伝導度, κ_p はフォノン熱伝導度, T は温度) を第一原理計算により見積もる。これらの計算の内、フォノン熱伝導度 κ_p は我々のシミュレーション基礎理論に基づき、今回初めて(電極への接合効果も含めて)第一原理的に計算した。 ZT の完全第一原理計算は我々が初めてである。

※既往の研究ではフォノン伝導に対する電極効果を某かの方法で回避していた。

【並列計算の方法と効果(性能)】

今後、フォノン熱伝導度 κ_p の計算部分を中心に並列化作業を進めていく。基礎理論から起こした計算プログラムの作成が終了したところであるので並列化は未了である。

【研究成果】

幾つかの有機薄膜材料及び、ブレークジャンクション法で計測される単一有機分子の熱電変換効率 $ZT = G^2 S T / (\kappa_e + \kappa_p)$ (G は電気伝導度, S はゼーベック係数, κ_e は電子熱伝導度, κ_p はフォノン熱伝導度, T は温度) を第一原理計算により見積った。【H. Nakamura, T. Ohto, T. Ishida, and Y. Asai, J. Am. Chem. Soc. 135, 16545–16552 (2013), M.E. Buerkle and Y. Asai, in preparation、他】ブレークジャンクション法を用いた実験との比較の結果、イメージポテンシャル補正を施す事により G や S の計算値が実験と非常に良く一致する事を見出した。この補正を行う事で、多くの有機材料に対して ZT の定量的な予測が可能になった。フォノン熱伝導度は第一原理計算で決定した力場を用いて行った。その結果、 κ_p への寄与は電極フォノンのエネルギーで規定されるエネルギー窓の範囲内にスペクトルを持つ分子振動に限られる事を見出した。にも関わらず、低エネルギー分子振動の存在の為に、 κ_p は電子熱伝導度と比して非常に大きく、 ZT を強く抑制する働きをしてしまう。一方、フォノン・フォノン散乱を κ_p の計算に考慮にいれる事により、その値が高温において減少し、 ZT も若干改善する事を理論モデル計算の範囲で確認した。

2. 2. 1. 1(5) マルチスケール材料科学

第5部会 代表者：香山正憲(産総研)

1) 部会全体の取り組み

【研究成果の概要】

第5部会では、様々な構造材料、機能材料を対象に、その構造や機能を高精度にシミュレートする大規模計算技術を「京」の活用を通じて開発・整備する。特に、材料の有するマルチスケール性が顕在化される諸課題（重点課題と3つの特別支援課題）を介して、その構造や機能を、ミクロからメソ、マクロまでをつなぐマルチスケール計算で解明し設計するための計算技術の開発、検討を行う。25年度は、重点課題、特別支援課題ごとに計算技術や実行計画を掘り下げて検討するとともに、マルチスケール計算科学の見地から、共同で研究会を行い、またCMRIのシンポジウムに結集して議論を行った。研究会では、特に、大規模第一原理計算をPhase Field法にマッピングする理論、手法についての議論、検討を詳細に行い、方向性を明らかにした。

【部会活動】

平成25年度は各課題を深く掘り下げて検討することを目標とし、小規模な研究会を多数回開催することとした。このため、CMRI 全体の研究会は一回に限定(例年は二回)されたが、これを国際シンポジウムとして数カ国から講演者を招聘した。以下に、重点課題と特別支援課題の研究会、国際シンポジウムの概要を記載する。

マルチスケール材料科学と重点課題に関する研究会を以下の通り行った：

- ①平成25年7月17日、第5部会「マルチスケール材料科学」重点課題研究会「材料中の複雑構造・組織の第一原理解析」、産業技術総合研究所関西センター、参加者9名
- ②平成25年11月25日、第5部会研究会、産業技術総合研究所関西センター、参加者10名
- ③平成26年1月10日、第5部会研究会、東北大学金研、参加者10名

各特別支援課題の主催の研究会として以下を行った：

- ①平成25年7月30日、「合金凝固組織の高精度制御を目指したデンドライト組織の大規模数値計算」に関する研究会、東北大学金研、参加者31名
- ②平成25年8月22日、「ナノクラスターから結晶までの機能性材料の全電子スペクトルとダイナミクス」に関する研究会(兼20th Anniversary of TOMBOのロシアとの合同国際会議)、東北大学北門会館、参加者50名
- ③平成26年1月6-7日、「超高速分子動力学計算による強誘電体薄膜キャパシタの高性能化」に関する研究会(兼プログラム feram 講習会)、東北大学金研、参加者8名

CMRI 主催の国際シンポジウムとして、以下に参加し、各課題についての発表を行うとともに議論を進めた：

- ①平成26年1月8-10日、CMRI International Symposium 2014、東北大学金研、参加者57名

2) 研究開発課題

i) 重点課題7:「金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発」

[代表者] 香山正憲(産総研)

[担当者] 香山正憲(産総研)、澤田英明、川上和人(新日鉄)、尾崎泰助(北陸先端大)、
尾方成信(阪大)、田中真悟、Vikas Sharma(産総研)

[研究の背景と目的]

飛躍的に優れた構造材料の開発は、エネルギー変換機器効率の飛躍的向上、輸送機器の超軽量化による省エネ化、長寿命・高信頼性の大型構造物など、社会基盤を支え、持続可能社会実現のための不可欠の課題である。こうした構造材料は多結晶体であり、種々の析出相や粒界・欠陥・添加元素等で構成される微細組織が機能を支配している。高精度設計のために、ミクロの電子・原子の振る舞いからメゾの微細組織の構造や特性を理解し、マクロの機械的性質や機能を予測するマルチスケール組織設計・評価技術の開発が必要である。そのために、各結晶相のみならず、異相界面・粒界・転位等の大規模複雑構造の第一原理計算を行い、合金成分・不純物との相互作用を明らかにするとともに、それらを Phase Field 法に繋げる手法を確立する。

[実施内容(計算モデル)]

鉄鋼材料中の典型的な析出相である TiC と Fe 母相の間の異相界面の大規模第一原理計算を前年度に引き続き行った。実験で観察される TiC(100)/Fe(100)の整合界面と部分整合界面を OpenMX コードによるオーダー N 法第一原理計算で扱った。析出粒子が小さい場合は整合界面であるが、格子 misfit のために周囲の歪エネルギーが大きい。析出粒子が成長すると部分整合界面に遷移して歪エネルギーを減らすと考えられる。各界面のエネルギーを第一原理計算で求めた後に、周囲の Fe 側の歪エネルギーを見積もり、全体のエネルギーから、整合界面が部分整合界面に遷移する析出粒子サイズの見積もりを試みた。

また、界面の歪エネルギーの重要性にかんがみて、整合界面について、局所応力・局所エネルギーの第一原理計算を QMAS コードで行い、界面の応力や安定性についての詳細分析を行った。

一方、鉄鋼材料の微細組織を構成し、且つ機械的性質を支配する要素として、転位に着目し、Fe 中の転位芯の大規模第一原理計算を開始した。bcc 金属中では、特にらせん転位が機械的特性を支配する。らせん転位の安定構造と共に、その移動障壁や Si など添加元素との相互作用を明らかにし、合金成分・添加元素が機械的性質に及ぼす効果を検討する。本年度は、基本的ならせん転位芯構造を OpenMX コードによるオーダー N 法第一原理計算で扱い、基本的な構造や性質の再現性を検討した。

[並列計算の方法と効果(性能)]

「京」において、オーダー N 法第一原理計算を OpenMX コードで行う。本コードは、OpenMP と MPI のハイブリッド並列(8 コアのノード内で OpenMP 並列、ノード間で MPI 並列)である。金属系で OpenMX プログラムを利用する場合、1 コア当たりの原子数が 1 個以上の時に高い並列化効率が可能であった。例えば、TiC/Fe 部分整合界面の 4319 原子セルについては、540 ノードで計算を実施した。

[研究成果]

TiC/Fe 界面の第一原理計算では、各種整合界面、部分整合界面のエネルギーに歪エネルギーを加えることで、約 2.3nm 付近で部分整合界面への遷移が起きることが見積もられた。従来の NbC/Fe 界面での解析値より少し大きく、格子 misfit 値が NbC/Fe 界面より小さいためである。TiC 粒子サイズが 2nm を超えた付近で界面の機械的性質が変化することを示す実験があり、合致している。一方、QMAS コードによる界面近傍の局所応力計算では、界面で Fe 側に大きな引張応力が生じることが電子挙動に基づいて初めて示された。Fe のらせん転位

芯の第一原理計算では、転位の長範囲の応力を打ち消す quadrupolar な並びになるスーパーセルで OpenMX を実行し、基本的な原子・電子構造が再現できることを確認した。

Phase Field 法に関してはいくつかのアプローチの仕方について議論したが、その一つの、転位を field variable とする手法を用いると、転位と析出物の相互作用を取り扱うことができる。既に学会でも報告しており有望なアプローチであるが、電子状態の計算との整合性をどのように取るかなどの課題が残っている。

ii) 特別支援課題 1: 合金凝固組織の高精度制御を目指したデンドライト組織の大規模数値計算

[担当者] 大野宗一(北海道大)、高木知宏(京都工芸繊維大)、澁田靖(東京大)

[研究の背景と目的]

多くの実用合金は casting・凝固プロセスを用いて製造されている。製造プロセスの歩留り向上や低コスト化、さらには材料の高機能化・高品質化を達成するために、casting・凝固プロセスにおいて形成する材料組織、すなわち凝固組織を高精度に制御することが昨今益々求められている。凝固組織の中でもデンドライト組織は多くの合金系で形成する典型的な凝固組織であり、その形成機構やサイズ・形態の制御因子を解明する必要がある。フェーズフィールド・モデルはデンドライト組織の形成過程を記述する強力な計算モデルとして発展してきた。しかし、このモデルの計算コストは高く、対象とできるシステムサイズがデンドライト数本程度に限られてきた。また、インプットパラメーターである高温物性値(固液界面エネルギーや動力学係数等)の実測値や計算値が欠如していることから、実用材料の凝固現象を定量的にシミュレートすることに困難が伴ってきた。

そこで、本特別支援課題では、1)分子動力学法(MD)による凝固現象の高温物性値の算出、2)デンドライトの高精度計算を可能にする定量的フェーズフィールド・モデリングを行い、それらの物性値とモデルを用いて、3)大規模フェーズフィールド・シミュレーションによるデンドライト集団組織の解析を実施する。平成25年度においては、大規模 MD による固液界面物性の異方性の解析と定量的フェーズフィールド・シミュレーションの大規模化を目的とした。

[実施内容(計算モデル)]

大規模 MD においては、Finnis-Sinclair ポテンシャルを用いた古典 MD によって Fe 数百万原子のシステムにおいて凝固現象をシミュレートし、界面物性の異方性が発現するか否かを検証した。この大規模計算は GPU 並列化計算により高速化した。

定量的フェーズフィールド・シミュレーションの大規模化は、ステンシル計算コードの MPI 並列化を試み、自然科学研究機構の京用開発サーバ (PRIMEHPC FX10)によってその性能を検証した。

[並列計算の方法と効果(性能)]

FX10 を用いた定量的フェーズフィールド・シミュレーションの性能評価においては、二元系モデル合金を対象とした等温デンドライト成長の計算を実施した。この性能評価における最大コア数は 1024 である。1コアあたり 128x128x128 格子点、全時間ステップを 800 とし、コア数を増加させたところ、performance はコア数に対して線形に増加し、弱スケーリングが示された。また、全格子点数を 1024x1024x1024、全時間ステップを 400 とした際のテストにおいても、performance がコア数に対して線形に増加し、本計算規模の範囲では、強スケーリングが成立することが示された。1024 コア使用時の performance は約 1.26TFLOPS であり、また並列化効率の概算値は 0.999 以上であった。

〔研究成果〕

定量的フェーズフィールド・シミュレーションに関する本年度の実施項目は、コードの並列化であり、その成果は上述の通りである。大規模 MD による凝固現象の計算においては、初期にほぼ球形であった固体粒子が、その結晶の〈100〉に優先的に成長し、立方晶系に特徴的な四回対称の異方的形態が形成することが示された。これは比較的高過冷度の凝固プロセスをシミュレートしたものであるため、動力学係数の異方性を反映した形態が現れたことになる。すなわち、デンドライト成長の異方性に関わる情報を得る新たな方向性が示された。

iii) 特別支援課題2: 超高速分子動力学計算による強誘電体薄膜キャパシタの高性能化

〔担当者〕 西松毅 (東北大)、森分博紀 (ファインセラミックスセンター)、Scott Beckman (アイオワ州立大)

〔研究の背景と目的〕

近年、強誘電体ベースの積層セラミックスキャパシタの薄膜化と多層化と技術の発達により、焦電効果を電気エネルギーとして取り出せる可能性が見えてきた。また、気相成長技術の発達により、均質で膜中の欠陥の少ない強誘電体薄膜が作られるようになりつつある。欠陥の少ない薄膜には今までは不可能であった強い電場をかけることができ、その ON/OFF により大きな電気熱量効果が期待できる。

われわれが開発している強誘電体薄膜キャパシタのための超高速分子動力学シミュレーションプログラム feram を改良し、強誘電体薄膜キャパシタのドメイン構造のダイナミクスとその温度および電極依存性、焦電効果と電気熱量効果を直接的にシミュレートできるようにし、強誘電体薄膜キャパシタの高性能化の知見を得ることを今年度の本課題の目的としていた。

〔実施内容(計算モデル)〕

研究担当者らは強誘電体薄膜キャパシタに特化した高速分子動力学計算のプログラム feram を独自に開発し、現有し、すでに多くの成果をあげている。本プログラム feram は、第一原理計算により得られた有効ハミルトニアンに基づく分子動力学計算を行う。薄膜キャパシタの高速なシミュレーションは電極(金属板)が電荷に対して静電的な鏡とみなせることを巧妙に利用している。ユニットセル1つにつき1つの電気双極子を定義するという粗視化、逆空間での長距離力の計算、高速フーリエ変換、OpenMP と MPI による並列化など様々な物理的数学的手法と計算機的手法とにより高速化が図られている。また、Linux クラスタやスーパーコンピュータ上で高速に動作する。誘電率や外部電場に対する応答など様々な物性の評価が可能で、従前のモンテカルロ法と違い、分子動力学計算は真の時間発展計算が可能であるので、昇温/降温過程やヒステリシスループなどの履歴現象がシミュレート可能である。われわれはこのプログラムをフリーソフトウェアとして <http://loto.sourceforge.net/feram/> から公開している。また、CMSI のアプリポータルサイト <http://ma.cms-initiative.jp/> から情報発信をしている。すでにのべ 1600 を越えるダウンロードがあり、国内の数社のメーカーや国内外の研究機関に複数のユーザーを有している。ドメイン構造のダイナミクスとその温度および電極構造依存性のシミュレーションのためにはすでに BaTiO₃ と PbTiO₃ の第一原理有効ハミルトニアンのパラメータを決定している。

〔並列計算の方法と効果(性能)〕

OpenMP で並列化され基本的にノード内で動作する。高速フーリエ変換には高度に高速化された FFTW ライブラリを用いている。MPI (feram_mpi) によりアレイジョブを MPI プロセスとして実行することも可能である。

〔研究成果〕

25年度は、直接的に電気熱量効果を見積もる方法を開発した。具体的には、定温のカノニカルアンサンブル分子動力学計算により、外部電場下の系の平衡状態を得る。その後、外部電場を切ってミクロカノニカルアンサンブル分子動力学計算(外部の熱浴と接触させない、全エネルギー一定の計算)をすることによって、系の温度がどの程度下がるかを見ることができるようになった。本 feram プログラムを使ってチタン酸バリウムという強誘電体の電気熱量効果を予言した論文を発表した。本件に関して海外の招待講演1、国内の依頼講演1、招待講演1を含む多数の対外発表も行った。

今年度、feram は上記改造やユーザーの要望などから計6個のバージョンを更新しリリースした。利用講習会も2回開催した。また、1月6日に関連するワークショップ CMSI/CMRI Workshop for Ferroelectrics and Related Materials <http://sourceforge.net/p/loto/wiki/Workshop/>を開催した。

〔出版論文〕

Takeshi Nishimatsu, Jordan A. Barr and S. P. Beckman:

"Direct molecular dynamics simulation of electrocaloric effect in BaTiO₃", J. Phys. Soc. Jpn. 82, 114605 (2013), doi:10.7566/JPSJ.82.114605.

Summayya Kouser, Takeshi Nishimatsu and Umesh V. Waghmare:

"Ferroelectric domains and diffuse transitions in ultrathin films of PbTiO₃: Effects of strain and electrodes", Phys. Rev. B 88, 064102 (2013), doi:10.1103/PhysRevB.88.064102.

iv) 特別支援課題3: ナノクラスターから結晶までの機能性材料の全電子スペクトルとダイナミクス

〔担当者〕 大野かおる(横国大)、小野頌太(横国大)、佐原亮二(物材機構)、野口良史(東大物性研)、水関博志(東北大金研)、桑原理一(アクセルリス(株))

〔研究の背景と目的〕

平成 25 年度は、TOMBO を用いた材料および物質・エネルギー分野の応用研究として、全電子の枠組みで DFT や TDDFT に基づくダイナミクス計算を行い、化学反応や電子励起反応を調べるとともに、バンドギャップやバンド構造を正しく再現できる GW 近似に基づく XPS, UPS スペクトル計算を行い、Bethe-Salpeter 方程式を解く精密な光吸収スペクトル計算を行う。

〔実施内容(計算モデル)〕

平成 25 年度は、まず、大野と野口が中心に開発してきた LDA/TDLDA ダイナミクス計算と結晶の GW 計算が可能な TOMBO 最新バージョンに、Sluiter が中心に開発してきたバージョンの Broyden 法などを移植して、LDA 自己無撞着計算やそれを用いた構造最適化を高速に行えるようにした。この目的のために CMSI の補正予算の補助を受けて企業委託による移植作業を行った。平成 25 年度中に、種々の機能を簡便に使いやすくした。アカデミックに向けて TOMBO の LDA 部分のソースを近々公開予定である。

平成 25 年 7 月に第 1 回 TOMBO セミナーを開催して、東京にて最新バージョン(β 版)の講習を行った。また、同月にタイで開催された The 7th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science, ACCMS7 の最初の 2 日間に TOMBO Workshop を行った:<http://accms7.sut.ac.th/> さらに、11 月に仙台で開催された国際会議 ACCMS-VO8 でも TOMBO の普及活動を行った。

さらに、TOMBO の DFT(LDA)を越えた GW 自己無撞着計算においては、全エネルギーの計算を可能とするとともに、交換項にも分極にもバーテックス補正を取り入れた世界最高水準の GW Γ 法の計算ができるような改

良を行った。

平成 25 年度は、以上の TOMBO のプログラム改良と普及活動と並行して、材料やエネルギー分野における重要な計算課題に対して TOMBO を用いた応用計算を行った。特に、鉄の酸化腐食(水酸化鉄 II の生成プロセスの要素シミュレーション)などの化学反応素過程を調べるとともに、バンドギャップやバンド構造を正しく再現できる GW 近似に基づいて、種々金属・半導体クラスターから酸素欠陥や Nb 不純物を含む TiO_2 結晶のスペクトル計算を行い、実験から得ることが難しい材料の電子特性を精密に予測・解析した。

〔並列計算の方法と効果(性能)〕

TOMBO のベンチマークテストとして Na90 量体の GW 計算を物性研の FX10 で実行した。ノード数 48 と 96 の 2 通りで計算したところ、前者では 120204 秒、後者では 64552 秒で計算が終了した。このことから、実行並列化率 $\alpha = 99.9896\%$ 、並列化効率 $E_n = 86.2216\%$ であることが測定された。

〔研究成果〕

平成 25 年 7 月にタイで開催された The 7th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science, ACCMS7 と平成 25 年 11 月にベトナムで開催された The 4th International Workshop on Nanotechnology and Application (IWNA 2013) で TOMBO に関する招待講演を行い、平成 25 年 11 月に仙台で開催された ACCMS-VO8 で TOMBO に関する基調講演を行った(大野かおる)。平成 25 年 12 月 11 日と 13 日に CMSI 研究会で研究成果のポスター発表と口頭発表を行った(小野頌太)。また、平成 26 年 3 月 11 日に新学術領域研究会(領域代表:押山淳)にて自己無撞着 GW 全エネルギー計算に関する研究成果の口頭発表を行った(桑原理一)。

2. 2. 1. 2 計算科学技術推進体制構築（成果）

【計算科学技術推進体制構築の成果概要】

HPCI 戦略プログラム分野 2 を推進する計算物質科学イニシアティブ (CMSI) は、HPCI 戦略プログラム戦略拠点としての責務を担う組織として立ち上げた、東京大学物性研究所「計算物質科学研究センター (CCMS)」、自然科学研究機構分子科学研究所「計算分子科学研究拠点 (TCCI)」、東北大学金属材料研究所「計算材料科学研究拠点 (CMRI)」、教育拠点である、東北大学、東京大学、金沢大学、豊橋技術科学大学、名古屋大学、総合研究大学院大学、京都大学、大阪大学、神戸大学の 9 大学、および、産官学連携拠点である産業技術総合研究所、物質・材料研究機構の連携活動により運営されている。CMSI は、物性科学、分子科学、材料科学という異なる学問分野でそれぞれ独立に形成されてきたコミュニティを束ね、国家的課題である新物質・新エネルギー創成に資する計算科学技術推進体制を構築することを目標として活動を行っている。また、理化学研究所計算科学研究機構 (AICS) 内に CMSI 神戸 (CCMS 分室) を設置し、「京」の利用をサポートする体制を整えている。

平成 25 年度は、「京」が運用開始されて半年以上経過する。それにともない、計算はテストからプロダクタンに移行し、研究成果が複数出始める時期であった。そこで、「京」や HPCI を利用して創出された成果の発表、超並列化計算手法に関する情報交換やその普及に関する講習会等の、イベントや支援活動を重視して実施した。物性、分子、材料の各分野の振興活動は、それぞれの戦略拠点、分野共通課題は CMSI 神戸、「京」をはじめとする計算機資源の効率的なマネジメントに関してはスパコン連携小委員会、学術と社会のニーズに合わせた人材育成、教育活動は人材育成・教育小委員会、産官学連携活動は産官学連携小委員会がそれぞれ担当した。また、広報やソフトウェア公開を通じて、計算物質科学の普及を図る活動に関しては広報小委員会が担当した。

平成 24 年度に実施したエネルギー WG は、第 4 部会「エネルギー変換」の再編を促し、平成 25 年度から化学電池関連の課題を「エネルギー変換の界面科学」として発展させた。また、平成 24 年度に実施したマテリアルズインフォマティクス検討会は、平成 25 年度は JST 主催の全国的な会合に発展し、本格的な国家 Pj 化の検討が実施された。平成 25 年度は、HPCI 戦略プログラムの中間評価の時期のため、重点課題の見直しのための WG 会合を、分野 2 の作業部会の先生方を交えて実施し、平成 26 年度以降に分野 2 として実施すべき重点課題を検討した。

平成 25 年に CMSI が開催したイベントの一覧を表 2.2.1.2-1、表 2.2.1.2-2 に示す。また、各イベントの報告書を添付資料 3 に示す。CMSI、および、各戦略機関が主体的に企画し、運営したイベントは 53 回、共催、協賛を合わせて 62 回の公開イベントを開催した。参加人数を把握しているイベントの、のべ参加者数は 2,460 名、産官(独)学の参加者区分を把握している主催イベントの、のべ参加者数は 2,332 名であった。その人数の産官(独)学の内訳と比率、主要な参加機関名とその参加内訳人数を図 2.2.1.2-1 に示す。産業界からは、電気・電子関連、材料・素材・化学関連、自動車・運輸・機械関連として、日本の主要なメーカーの方が参加されている。

平成 25 年度は、広報誌「Torrent」No. 8,9 を発刊した。また、AICS の一般公開や SC13 への展示会等への出展にも協力し、SC13 に関しては東大情報基盤センターと CCMS の共同での出展も行い、計算物質科学コミュニティ内外に向けた情報発信を積極的に行った。

ここでは、平成 25 年度に実施した計算科学技術推進体制構築に関連する活動の結果報告を行う。

表 2.2.1.2-1 平成 25 年度 CMSI イベント一覧-1

CMSI主催、共催行事													
月	詳細日程	曜日	場所	主催者	行事名	分類	カテゴリ	参加人数	産	官	学	報告書	
人材育成													
	4月18日～7月25日	木	9拠点	CMSI／人材育成	[配信講義] CMSI計算科学技術特論A	主催	人材育成・教育	184	11	9	164	報告書1	
5月	5月28日～30日	火～金	Institute of Technology Bandung (インドネシア)	人材育成	アジアCMDワークショップ	協力・協賛	人材育成・教育	36	0	0	36	—	
7月	7月5日	金	東京駅八重洲北口サピアタワー10階 東北大学オフィス	CMSI／人材育成	第1回 TOMBOセミナー	主催	人材育成・教育	45	20	3	22	報告書2	
9月	9月2日～6日	月～金	大阪大学大学院基礎工学研究科	人材育成	第23回CMDワークショップ	共催	人材育成・教育	58	15	0	43	報告書3	
	9月2日～4日	月～水	湯沢ニューオータニ(新潟県)	TCCI／人材育成	第17回 分子シミュレーション夏の学校	協力・協賛	人材育成・教育	42	6	0	36	報告書4	
10月	10月23日～25日	水～金	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター	TCCI／人材育成	「第7回分子シミュレーションスクール～基礎から応用まで～」 「TCCIウィンターカレッジ-分子シミュレーション-」	共催	人材育成・教育	101	22	3	76	報告書5	
12月	12月2日	月	配信元: 阪大基礎工G217 配信先: 9大学11拠点	人材育成	第2回CMSI人材育成シンポジウム(配信Ⅱ)	主催	人材育成・教育	38	2	6	30	報告書6	
	12月5日～7日	木～土	ベトナム	人材育成	アジアCMDワークショップ	協力・協賛	人材育成・教育	25	0	0	25	—	
	12月16日～17日	月・火	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター	TCCI／人材育成	第3回量子化学ウインタースクール～基礎理論と分子物性の理論～ TCCIウインタースクール: 量子化学	共催	人材育成・教育	39	7	1	31	報告書7	
	12月25日	水	名古屋工業大学3号館2階 0322(M4)教室名古屋工大	CMRI／人材育成	CMRI-MPIプログラミング講習会	主催	人材育成・教育	51	2	0	49	報告書8	
2月	2月4日	火	東大本郷山上会館	TCCI／人材育成	第3回超並列化技術国際ワークショップ	主催	人材育成・教育	44	5	13	26	報告書9	
	2月11日～13日	火～水	フィリピン	人材育成	アジアCMDワークショップ	協力・協賛	人材育成・教育	40	0	0	40	—	
	2月24日～28日	月～金	大阪大学大学院基礎工学研究科	人材育成	第24回CMDワークショップ	共催	人材育成・教育	38	17	2	19	報告書10	
3月	3月5日	水	配信(11ヶ所)	人材育成/CMRI	配信セミナー: 教育・人材育成「マルチスケールの計算材料科学」	主催	人材育成・教育	52	3	1	48	報告書11	
	3月18日	火	産総研 臨界副都心センター	人材育成	OCTA 講習会&トレーニング	共催	人材育成・教育	27	18	1	8	報告書12	
人的ネットワークの形成													
CMSI・各拠点活動													
6月	6月3日～21日	火～土	東京大学物性研究所	CCMS/ISSP	ISSP国際ワークショップEQPCM2013	共催	研究	102	0	25	77	—	
7月	7月17日	水	産総研 関西センター	CMRI/第5部会	第5部会「マルチスケール材料科学」重点課題研究会 「材料中の複雑構造・組織の第一原理解析」	主催	研究	9	3	3	3	報告書13	
	7月26日	金	東京大学物性研究所	CCMS	第1回CCMSハンズオン(ソフトウェア講習会: Machikaneyama2002チュートリアル(固体電子状態計算 初級版))	主催	人材育成・教育	10	0	0	10	報告書14	
	7月30日	火	東北大学金属材料研究所	CMRI	CMRI(東北大学計算材料科学研究拠点)研究会	主催	研究	31	5	4	22	報告書15	
8月	8月12日～16日	月～金	ホテル樹林(厳王)	第1部会	第1部会 夏の学校2013「エネルギー課題を考えるサマースクール」	主催	研究	32	0	5	27	報告書16	
	9月10日～11日	火・水	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター	TCCI	計算分子科学研究拠点(TCCI) 第4回研究会	主催	研究	68	8	10	50	報告書17	
10月	10月16日～18日	水～金	計科学研究機構	CMSI	CMSI International Satellite Meeting 2013 in CMSI kobe ～Recent Progress in Tensor Network Algorithms～	主催	研究	40	0	6	34	報告書18	
	10月18日～19日	木・金	東京大学(本郷)	CMSI	CMSI International Satellite Meeting 2013 in Tokyo ～Novel Electronic Structure Method～	主催	研究	23	0	4	19	報告書19	
	10月17日～19日	木～土	名古屋大学	CMSI	CMSI International Satellite Meeting 2013 in Nagoya ～Large-Scale Molecular Simulation for Understanding Molecular Mechanism～	主催	研究	20	0	3	17	報告書20	
	10月21日～22日	月・火	伊藤国際学術研究センター	CMSI	CMSI International Symposium 2013 超並列計算が拓く新しい物質科学	主催	研究	163	14	23	126	報告書21	
11月	11月19日～20日	火・水	東京大学物性研究所	CCMS	物性研究所 計算物質科学研究センター 第3回シンポジウム 「スピン・軌道相互作用の物理における実験・理論・計算」	主催	研究	94	10	8	76	報告書22	
12月	12月10日～13日	水～金	東京大学物性研究所	CMSI	物性研スハコン共同利用・CMSI 合同研究会(第4回 CMSI 研究会) ～計算物質科学の課題と展望～	主催	研究	183	13	14	156	報告書23	
1月	1月6日～7日	月・火	東北大学金属材料研究所	CMRI	CMSI/CMRI Workshop for Ferroelectrics and Related Materials	主催	研究	8	0	2	6	報告書24	
	1月8日～10日	水～金	東北大学金属材料研究所	CMRI	CMRI International Symposium 2014	主催	研究	40	2	3	35	報告書25	
	1月14日	火	東京大学物性研究所	CCMS	第2回CCMSハンズオン: Xeon Phi チュートリアル	主催	人材育成・教育	12	0	1	11	報告書26	
2月	2月26日	水	東京大学物性研究所	CCMS	第3回CCMSハンズオン: xTAPP チュートリアル	主催	人材育成・教育	10	1	0	9	報告書27	
3月	3月11日	火	東京大学物性研究所	CCMS	第4回CCMSハンズオン: rokko チュートリアル	主催	人材育成・教育	5	0	0	5	報告書28	
	3月20日	木	ウイズビジネスセンター	TCCI/第3部会	第3部会 分子集合系における先端分析と大規模計算	主催	研究	50	19	9	22	報告書29	
国際連携													
8月	8月21日～22日	水・木	東北大学片平キャンパス	CMRI	The 20th Anniversary of TOMBO and Russian Megagrant Opening International Conference ※22日: 特別支援課題に関する研究会	協力・協賛	研究	50	6	11	33	報告書30	
9月	9月16日～20日	月～金	同志社大学		2013 JSAP-MRS Joint Symposia	共催	研究	-				—	
10月	10月27日～30日	日～水	北京(中国)		16th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-16)	協力・協賛	研究					—	
11月	11月7日～9日	木～土	東北大学片平キャンパスさくらホール	CMRI	The 8th General Meeting of ACCMS-VO	協力・協賛	研究	88	14	16	58	報告書31	
	11月18日～20日	月～水	神戸コンベンションセンター	TCCI	3rd International Conference on Molecular Simulation (ICMS2013)	協力・協賛	研究	-				—	
産官学連携													
11月	11月5日～6日	火・水	京大福井棟一記念研究センター	TCCI	TCCI第3回実験化学との交流シンポジウム 京都大学福井棟一記念研究センター	主催	産官学連携	38	1	2	35	報告書32	
	11月21日	木	秋葉原ダイビル	産官学連携	第7回・産官学連携研究会 電気化学系の第一原理シミュレーションからわかったこと・わかること ～高性能電池開発にむけて～	主催	産官学連携	92	48	19	25	報告書33	
1月	1月31日	金	名大 野依記念学術交流館	TCCI	TCCI第3回産学連携シンポジウム	主催	産官学連携	68	16	7	45	報告書34	
2月	2月5日	水	秋葉原	産官学連携	第8回・産官学連携研究会	主催	産官学連携	52	15	21	16	報告書35	

表 2.2.1.2-2 平成 25 年度 CMSI イベント一覧-2

CMSI主催、共催行事												
月	詳細日程	曜日	場所	主催者	行事名	分類	カテゴリ	参加人数	産	官	学	報告書
研究成果の普及												
広報												
5月	5月13日	月	東京 イノカンファレンスセンター	AICS／5分野	京コンピュータ・シンポジウム2013	協力・協賛	研究	-				—
10月	10月19日	土	計算科学研究機構	AICS／5分野	AICS 一般公開	共催	広報	-				—
	10月25～26日	金・土	東京大学物性研究所	CCMS／ISSP	東大柏キャンパス一般公開	共催	広報	-				—
11月	11月17～22日	月～木	Denver, Colorado, USA	東大情報基盤セ CMSI, AICS	Supercomputing Conference (SC13)	出展	広報	-				—
3月	3月8日	土	秋葉原UDXシアター	CMSI／人材育成	第2回CMSI見える化シンポジウム	主催	広報	90	12	18	60	報告書36
	3月17日～20日	月～木	青山学院大学 相模原キャンパス	CMSI	応用物理学会 春季講演会	出展	広報	80	-	-	-	—
	3月27日～30日	木～日	東海大学 湘南キャンパス	CMSI	日本物理学会 第69回年次大会	出展	広報	89	-	-	-	—
分野を超えた取り組み												
計算科学研究機構との連携												
6月	6月16日～20日	日～木	Leipzig, Germany	AICS	2013 International Supercomputing Conference (ISC'13)	出展	広報	-				—
11月	11月17～22日	月～木	Denver, Colorado, USA	東大情報基盤セ CMSI, AICS	Supercomputing Conference (SC13)	出展	広報	-				—
12月	12月2日～3日	月・火	計算科学研究機構	AICS／5分野	第4回AICS国際シンポジウム	協力・協賛	研究	-				—
他の戦略分野との連携												
11月	11月13日～14日	水・木	分子科学研究所	TCCI	HPCI 分野2×5分野の異分野交流研究会(第3回) 「量子多体系のダイナミクス計算 ―原子核から物質科学まで―」	主催	研究	35	1	6	28	報告書37
12月	12月17日	火	名大IB電子情報館大講義室	CMSI／分野1	分野1-分野2シンポジウムin名大 ～生体分子複合システムを計算する～	主催	研究					報告書38
2/3月	2月28日～3月1日	金・土	東大物性研 6階大講義室	CMSI	元素戦略プロジェクト・大型研究施設・物性研究所・CMSI 連携シンポジウム2014 「大型研究施設を利用した材料研究の課題共有と共創」	主催	産官学連携	197	13	82	102	報告書39
戦略分野の研究者を交える研究支援(「東」利用に關しての研究支援)												
4月	4月11日	木	計算科学研究機構 1F R104-2会議室	CCMS	平成25年度 第1回「京」物性セミナー 『フラストレート量子磁性体におけるマルチフェロイクス』	主催	研究	13	0	0	13	報告書40
	4月23日	火	CMSI 神戸拠点(理研AICS5階501号室)	CMSI	第3回CMSI神戸ハンズオン:XTAPPチュートリアル	主催	人材育成・教育	13	0	1	12	報告書41
5月	5月8日	水	計算科学研究機構 6階講義室	CMSI	「京」一般利用情報交換会	主催	研究	26	2	7	17	報告書42
	5月17日	金	CMSI 神戸拠点(理研AICS5階501号室)	CMSI	第4回CMSI神戸ハンズオン:FMO 講習会	主催	人材育成・教育	10	4	2	4	報告書43
	5月27日	月	計算科学研究機構 1F R104-2会議室	CCMS	平成25年度 第2回「京」物性セミナー 『電子ドープ系銅酸化物高温超伝導体の動的帯磁率』	主催	研究	9	0	0	9	報告書44
6月	6月3日～5日	月～水	CMSI 神戸拠点(理研AICS5階501号室)	CMSI	CMSIアプリ高度化合宿「TOKKUN 1(実行性能向上)」	主催	人材育成・教育	13	2	1	10	報告書45
	6月10日	月	CMSI 神戸拠点(理研AICS5階501号室)	CMSI	第5回CMSI神戸ハンズオン:ALPSチュートリアル	主催	人材育成・教育	15	0	2	13	報告書46
7月	7月1日～3日	月～水	東レ総合研修所(三島市)	CMSI	第8回若手技術交流会合宿	主催	人材育成・教育	36	5	1	30	報告書47
	7月16日	火	計算科学研究機構 1F R104-2会議室	CCMS	平成25年度 第3回「京」物性セミナー 『シミュレーション実行管理ソフトウェア「CASSIA Manager」』	主催	研究	9	0	0	9	報告書48
	7月30日	火	CMSI 神戸拠点(理研AICS5階501号室)	CMSI	第6回CMSI神戸ハンズオン:XTAPPチュートリアル	主催	人材育成・教育	9	2	0	7	報告書49
8月	8月5日～7日	月～水	CMSI 神戸拠点(理研AICS5階501号室)	CMSI	CMSIアプリ高度化合宿「TOKKUN 2(並列性能向上)」	主催	人材育成・教育	14	3	1	10	報告書50
	8月20日	火	計算科学研究機構 1F R104-2会議室	CCMS	平成25年度 第4回「京」物性セミナー 『Phase Transition and Cooperative Phenomena in Cavity Systems』	主催	研究	12	0	0	12	報告書51
	8月22日	木	CMSI 神戸拠点(理研AICS5階501号室)	CMSI	第7回CMSI神戸ハンズオン:バージョン管理システムチュートリアル	主催	人材育成・教育	15	0	1	14	報告書52
9月	9月3日～5日	火～木	CMSI 神戸拠点(理研AICS5階501号室)	CMSI	CMSIアプリ高度化合宿「TOKKUN 3(実行・並列性能向上)」	主催	人材育成・教育	11	1	1	9	報告書53
	9月27日	金	CMSI 神戸拠点(理研AICS5階501号室)	CMSI	第8回CMSI神戸ハンズオン:FMOチュートリアル	主催	人材育成・教育	10	0	1	9	報告書54
11月	11月6日	水	CMSI 神戸拠点(理研AICS5階501号室)	CMSI	第9回CMSI 神戸ハンズオン:ALPSチュートリアル	主催	人材育成・教育	10	0	5	5	報告書55
	11月14日	木	CMSI神戸拠点(理研AICS5階501号室)	CMSI	第10回CMSI神戸ハンズオン:feram講習会	主催	人材育成・教育	9	3	0	6	報告書56
12月	12月17日	火	CMSI 神戸拠点(理研AICS5階501号室)	CMSI	第11回CMSI神戸ハンズオン:FMO講習会	主催	人材育成・教育	6	4	1	1	報告書57
1月	1月20日	月	CMSI 神戸拠点(理研AICS5階501号室)	CMSI	第12回CMSI神戸ハンズオン:Modylas チュートリアル	主催	人材育成・教育	27	7	2	18	報告書58
	1月21日	火	計算科学研究機構 1F R104-1会議室	CCMS	平成25年度 第5回「京」物性セミナー 『有次元スピンガラス模型のレプリカ対称性の破れ』	主催	研究	20	0	0	20	報告書59
	1月28日～30日	火～木	熱海	CMSI	第9回若手技術交流会合宿	主催	人材育成・教育	48	9	7	32	報告書60
2月	2月25日	火	CMSI 神戸拠点(理研AICS5階501号室)	CMSI	第13回CMSI神戸ハンズオン:ALPS チュートリアル	主催	人材育成・教育	7	0	2	5	報告書61

H25 開催イベント Review



H25年度イベント総数(主催・共催)	62	
参加合計人数を把握しているイベント数	58	2,460名
産官学の詳細分類を把握しているイベント数	51	2,332名



産官(独)学のべ参加者人数と比率

図 2.2.1.2-1 平成 25 年度 CMSI 主催イベントへの産官(独)学からの参加者人数とその比率、内訳。
データは、産官学人数比を把握しているイベントからのみ抽出してグラフにした。

2.2.1 当該年度(平成 25 年度)における研究成果

2. 2. 1. 2(1) 計算機資源の効率的マネジメント

研究の進展に合わせたより効率的な計算資源配分を行うため、重点課題、特別支援課題、支援課題の見直しを行った。(詳細については 2. 2. 1. 3 項参照) また、それに応じた京コンピュータを含む計算資源の配分を行った。特に、特定高速電子計算機施設の戦略利用により、重点課題の研究を推進した。また、3 戦略機関の分野拠点などと連携し、共同利用スパコン利用者の CMSI が開催する研究会への参加を促し、そのような参加者のなかから大規模並列計算に基づく新たな研究課題提案へとつなげた。それらのうち幾つかは、その後、支援課題として採択された。(詳細は 2. 2. 1. 2(1) (5) 参照)

平成 24 年度までの活動に引き続き、物性研究所、分子研究所、および、金属材料研究所に関して共同利用スパコンの一部を活用して、大規模並列計算による研究の実施、および、京コンピュータ利用課題への発展を前提とした課題実行を行った。不足する計算資源の補填をするため、大学情報基盤センターの計算資源を借用し、重点課題の実施、および、次の重点課題として準備している特別支援課題、および支援課題に用いられるプログラム開発や性能評価を推進した。

1) 計算資源のマネジメント

特定高速電子計算機施設「京」の戦略分野2の枠については、各重点課題から提出された計画書とプログラム性能に関するデータに基づき、CMSI 企画委員会および CMSI 運営委員会において、各々の課題の進捗状況と重要性に照らして議論し、資源配分を決定した。戦略分野2枠の一部をアプリケーション高度化支援のために利用し、特定高速電子計算機施設利用の一般課題として利用申請する研究課題の支援を行った。更に、特定高速電子計算機施設で計算された結果を処理加工するために、平成 24 年度に CMSI 神戸拠点に導入したポスト処理システムの活用を促進し、成果に結び付けた。また、このシステムをアプリケーション講習会などにも利用した。また、物性研究所、分子研究所、および、金属材料研究所の保有する全国共同利用スパコンの一部の戦略分野枠の活用に関しては、各スパコン保有機関の定める運用ルールに従い、CMSI 内より課題提案を募り、スパコン連携小委員会、および、各部会代表者からなる資源配分委員会が審査を行った。この結果に基づき、各研究所保有スパコンの計算資源が、重点課題、特別支援課題、支援課題に配分された。また、物性研に導入したハイブリッド並列計算用 PC クラスタシステム(psi)を、並列化の初心者から高度化プログラムの動作確認、また、企業所属ユーザのトライアル利用等、幅広い用途で利用可能なように運用を行い、並列化計算の分野振興を図った。また、課題推進や分野振興活動において、計算資源に不足が生じた場合は、PC クラスタやサーバー等のシステムを各戦略拠点で増強してこれを補った。さらに、計算物質科学で得られた結果を一般社会にアピールする際に重要となる、可視化技術を強化するため、物性研に可視化アプリケーションを設置して利用促進を図った。

2) 各戦略機関スパコン資源、CMSI 計算資源の活用

[物性研スパコンと PSI]

①東京大学物性研究所システム B

i) システム利用について

CMSI では、東京大学物性研究所システム C の全計算資源の約 60% (東京大学物性研究所の計算資源全体の約 20%)を 戦略利用枠として、各課題代表者に配分し、利用した。

ii) 大規模キューについて

平成25 年度は、並列化テストなどのために大規模な計算が必要な場合は、他の計算資源の利用を推進したため、大規模キューの運用は行わなかった。

iii) 計算機のスペック

名称: FUJITSU 製 PRIMEHPC FX10

CPU: SPARC64™ IXfx 1.848GHz

構成: 16 コア/CPU, 1 CPU/ノード, 96 ノード/ラック, 4 ラック

メモリ: 2GByte/コア (32GByte/ノード)

iv) 利用ルール

CMSI の各課題代表者が研究課題を申請し、CMSI 内部での審査の後、東京大学物性研究所の共同利用委員会で審査を受けたうえで利用を認めるという利用形態をとっている。利用申請できるのは課題代表者のみであり、各課題に含まれる他の利用者のアカウントの発行に関してはすべて課題代表者の責任で行っている。課題ごとにポイントが割り振られ、ユーザーは所属する課題グループのポイントないで計算資源を利用することができる。研究課題の募集は年に 1 度であり、課題代表者は成果報告書を提出する義務がある。以下に平成 25 年度の研究課題一覧を示す。

高塚 和夫	分子における電子の動的過程と多体量子力学
今田 正俊	一般化多変数変分モンテカルロ法の高度並列化の推進
遠山 貴己	強相関電子系の励起ダイナミクスの研究
川島 直輝	量子モンテカルロ法による新しい量子相・量子臨界現象に関する研究
尾形 修司	ハイブリッド量子古典法によるマルチスケールシミュレーション
押山 淳	密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究
常行 真司	新材料探索のための第一原理計算手法開発
斎藤 肇雄	スピントロニクス/マルチフェロイクスの応用へ指向した材料探索
岡崎 進	全原子シミュレーションによるウィルスの分子科学の展開
浅井 美博	有機コンポジット材料とナノ構造材料の熱電変換効率 ZT の理論シミュレーション
山下 晃一	太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算
大谷 実	高性能蓄電デバイス開発へ向けた理論的基盤研究
杉野 修	燃料電池の基礎過程に関する大規模計算
吉田 紀生	バイオマス利用のための酵素反応解析
大野 かおる	ナノクラスターから結晶までの機能性材料の全電子スペクトルとダイナミクス
四松 毅	超高速分子力学計算による強誘電体薄膜キャパシタの高性能化
芝 隼人	剪断流下の脂質膜系の構造形成
中野 博生	フラストレート磁性体の計算科学研究
土居 抄太郎	Screened KKR 法による永久磁石材料の第一原理電子状態計算
大久保 毅	フラストレート磁性体におけるトポロジカル励起の秩序化
石村 和也	ナノサイズ分子の新規構造及び機能の探索

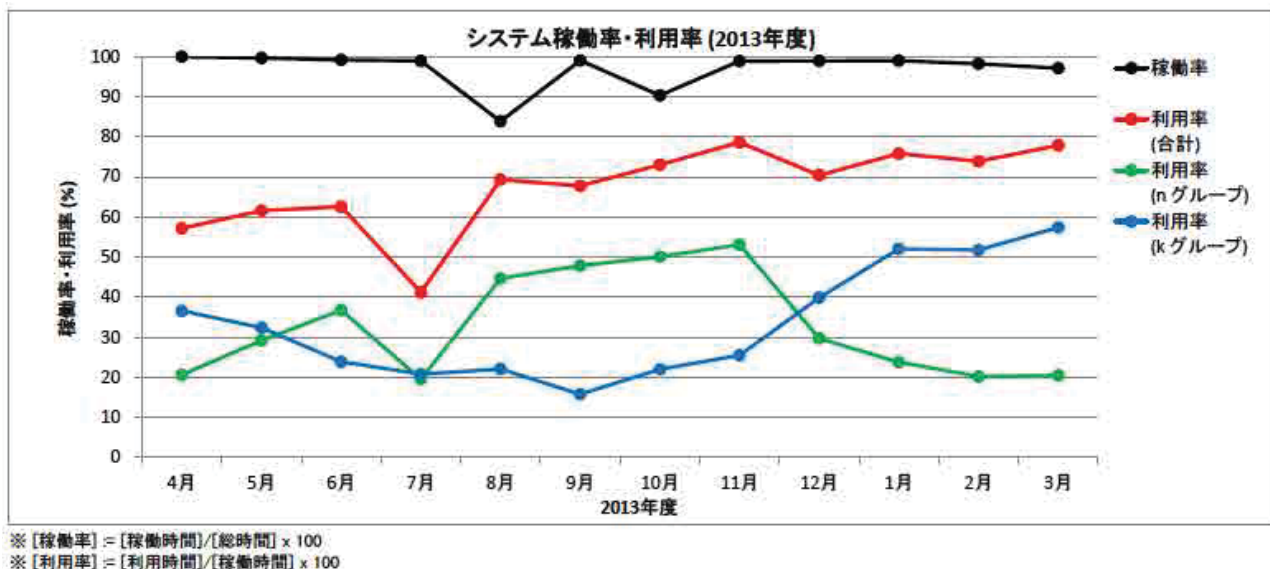
v) 利用状況

最大で 96 ノード(1536 コア)までのキューを利用した。消費したポイント合計は、約 32,000 ポイントである。

vi) 月別推移

東京大学物性研究所システム C の稼働率および戦略ユーザー(n グループ)の利用した CPU 時間の月次推

移を示す。



②PC クラスタ Psi

i) PC クラスタ Psi のスペック

CPU: Intel Xeon E5649 2.53GHz (6 コア/CPU, 10.1GFLOPS/コア)

構成: 2CPU/ノード, 40 ノード

メモリ: 2GB/コア (24GB/ノード)

ノード内通信: 23.4GByte/s/リンク (QPI, 2リンク)

ノード間通信: 128MByte/s (ギガビットイーサネット)

総演算性能: 480 コア, 40 ノード, 4.8TFLOPS

ii) 利用ルール

「京」の利用を目指すプログラムの開発を促進するために、OpenMP+MPI のハイブリッド並列をテストできるシステムとして、TORQUE バッチシステムで、最大 4 ノードのキューを用意して運用した。ユーザーからの要望により、キュー制限を緩和し、利用率の向上をはかった。

iii) 利用状況

- ・利用ルール: CMSI メンバーであれば誰でも申請可能。
- ・利用状況: 現在 44 名がアカウント登録している。平成 25 年度は年間を通して全ノードの 60%~70%の使用率を維持していた。

iv) 月別推移

バッチシステムの機能の制限等があり、稼働率の詳しい統計はとっていないため、正確な稼働率は不明。

[物性研神戸拠点 Phi]

①PC クラスタ Phi

i) PC クラスタ Phi のスペック

計算サーバは 16 ノードある。1 ノードあたりの構成は以下の通りである。

- ・CPU : 合計 16core / Intel SandyBridge E5-2670 (8core/2.6GHz) x 2
- ・Memory : 合計 64GB / 8GB DIMM x 8
- ・内蔵 Disk : 合計 300GB (300GB SAS x 1)

ii) 利用ルール

利用者は以下の通りである。

- ・CMSI 関係者で、「京」のアカウント保持者。（「京」のアカウントを持っていないと、AICS 外から Phi にアクセスできないため。）
- ・神戸ハンズオン受講者

iii) 利用状況

用途は以下の通りである。

- ・「京」ポストデータ処理。「京」からの出力ファイルをバックアップするためのストレージの接続先としての用途も含む。
- ・神戸ハンズオンの実習
- ・作成したアプリのベンチマーク採取等

iv) 月別推移

利用率は高い。現在、ジョブ管理システム未導入のため、詳細は不明。

[分子科学研究所スパコン]

平成 25 年度の CMSI 研究課題に提供する計算資源として、全計算資源 (PRIMERGY RX300、CX400、SGI UV2000 および PRIMEHPC FX10 (合計 326TF)) の 20% を上限とし、平成 24 年度末の施設利用の募集と同時に CMSI 利用枠の募集を行った。重点課題および特別支援課題から合計 10 課題の申請があった。スパコン連携委員および各部会代表者からなる審査委員会を設け、審査を行った。その後、計算科学研究センター運営委員会での審議を経て、これらの課題について利用が許可された。なお、許可された計算時間は、計算科学研究センターの約 13% であった。

課題名	課題責任者(部会)
分子における電子の動的過程と多体量子動力学	高塚和夫(第 1 部会)
凝縮分子科学系の揺らぎとダイナミクス	斉藤真司(第 1 部会)
密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究	押山 淳(第 2 部会)
ナノ構造の電子状態から機械的性質までのマルチスケールシミュレーション	尾形修司(第 2 部会)
全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開	岡崎 進(第 3 部会)
拡張アンサンブル法による生体分子構造・機能の解明	岡本祐幸(第 3 部会)
太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算	山下晃一(第 4 部会)
バイオマス利用のための酵素反応解析	吉田紀生(第 4 部会)
合金凝固組織の高精度制御を目指したデンドライト組織の大規模数値計算	大野 宗一(第 4 部会)
超高速分子動力学計算による強誘電体薄膜キャパシタの高性能化	西松 毅(第 4 部会)

[金属材料研究所スパコン]

平成 24 年度後半から、HITACHI スーパーテクニカルサーバ SR16000 モデル M1 の 20%を上限として、CMSI 研究課題に計算機資源を提供している。平成 25 年度も CMSI 利用枠の募集を行った。重点課題、特別支援課題、支援課題からの申請に対して、スパ コン連携委員および各部会代表者からなる審査委員会を設け、審査を行い、その審査結果に基づき、以下の課題について利用を許可した。

平成 25 年度 CMSI 枠課題一覧

課題代表者	課題名
前園 涼	新素材探索
尾形 修司	ナノ構造の電子状態から機械的性質までのマルチスケールシミュレーション
中野 博生	フラストレート磁性体の計算科学的研究
宮本 良之	太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算
森川 良忠	化学電池関連物質における基礎過程の大規模計算による研究
川島 直輝	相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明(2次元量子系の新しい臨界現象・量子相)
香山 正憲	金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発
大野 かおる	ナノクラスターから結晶までの機能性材料の全電子スペクトルとダイナミックス
水関 博志	水素・メタンハイドレードの生成、融解機構と熱力学的安定性

3) 大学情報基盤センターとの連携とスパコン利用

① 東京大学情報基盤センター

CMSI では東京大学情報基盤センターが提供する FX10 の計算資源サービスを 264 ノード契約し、CMSI メンバーに対し利用提供した。

i) スペック

名称: FUJITSU 製 PRIMEHPC FX10

CPU: SPARC64™ IXfx 1.848GHz

構成: 16 コア/CPU, 1 CPU/ノード, 96 ノード/ラック, 50 ラック

メモリ: 2GByte/コア (32GByte/ノード)

ii) 利用ルール

CMSI の重点課題、特別支援課題、支援課題を実施する担当者、および、協力者であれば、利用申請が可能とした。東大情報基盤センターはプリペイド方式であり、平成 24 年度は 2,177,280 ノード時間のトークンを CMSI 全体で使用する事が出来る。契約ノード 264 ノード内のキューであれば、トークン消費率は 1.0 である。しかし、264 ノードより多いノード数のキューの場合、投入可能ではあるがトークン消費率が 2.0 となる。そのため、264 ノード以上のキュー投入希望者は事前に CMSI 事務局への通知を必要とするルールとした。

iii) 利用状況

平成 24 年度に CMSI で提供した「京」を除く計算資源の中で、最大利用コア数が最大の計算資源であり、また「京」をベースにしたシステムで同じコンパイラやプロファイラが利用できることもあり、非常にユーザーの利便性が高く、84 名のユーザーが利用し、平成 25 年 12 月までに予定した資源量を使いきった。

② 九州大学情報基盤センター

i) スペック

東京大学情報基盤センターの計算資源を平成 25 年 11 月に使いきることになったため、追加の FX10 の計算資源を利用するため、1 月から最大 96 ノードの利用を開始した。

ii) 利用ルール

CMSI の重点課題、特別支援課題、支援課題を実施する担当者、および、協力者であれば、利用申請が可能とした。申請グループごとに最大 96 ノードまでの並列実行が可能であった

iii) 利用状況

短い期間ではあったが、10 名から申請があり、活発な利用が行われた。

4) アプリケーションのマネジメント

① 研究用ソフトウェア (MateriApps)

i) スペック

計算物質科学の web ポータルサイトであり、平成 25 年度の開発の結果、登録アプリ数は 111 まで増やし、利用者の増加を目指した。また、国内だけでなく、全世界でのポータルを目指しているため、日本語版と英語版の双方を開発した。

ii) 利用ルール

計算物質科学の専門家だけでなく、広く実験家、企業ユーザーにも利用してもらえるように年間を通じて継続的に開発、運用を行った。

iii) 利用状況

平成 25 年度末現在、月間約 900 名ほどのアクセスがある。

② 視覚化ソフトウェア

研究成果をより分かりやすく伝えるために視覚化ソフトウェアが必要と考え、サイバネットシステム社の視覚化ソフトウェア AVS/Express 8 を購入し、CMSI メンバーに提供している。平成 25 年度は AVS/Express を最大同時利用者数 2 で利用できるようにしている。

i) スペック

- ・ 対応 OS: Windows, MacOSX, Linux
- ・ バージョン: 7.3, 8.0, 8.1
- ・ ライセンス: 同時利用が 2 人までのフローティングライセンス。

ii) 利用ルール

CMSI メンバーであれば、誰でも利用申請が可能で、ソフトウェアを東京大学物性研究所のサーバーからダウンロードできる。東京大学物性研究所内にライセンスサーバーを設置している。また、利用者はライセンスサーバーにブラウザでアクセスすることで、他の利用者による利用状況を確認することが出来る。

iii) 利用状況

5 名のユーザーがいる。平成 26 年度には、研究成果の視覚化のさらなる推進を図るために、AVS/Express の講習会の開催も計画されている。

5) 各戦略機関コミュニティとの連携による支援課題

平成25年度の支援課題として、平成25年12月に物性研において開催された第4回CMSI研究会において、一般投稿された論文の内、あらかじめ発表者から希望のあった研究発表に関して、書面で提出されたアプリケーション性能情報とあわせて、企画室会議メンバーによる評価を行い、支援課題6件を選定した。選定された研究者と課題名は、以下の通りである。

《CMSI 支援課題》

名前	所属	課題名
中野 博生	兵庫県立大学	「フラストレート磁性体の計算科学的研究— スピン空間に異方性のない系でのスピントロポ現象—」
芝 隼人	東京大学	「界面活性剤系のマルチラメラ高次構造形成の 大規模粗視化分子動力学計算」
大久保 毅	東京大学	「フラストレート磁性体におけるトポロジカル励起の秩序化」
石村 和也	分子科学研究所	「ナノサイズ分子の新規構造及び機能の探索 —大規模並列計算プログラムの効率的な開発—」
土居 抄太郎	東京大学	「Screened KKR 法による永久磁石材料の第一原理電子状態計算」
茂木 昌都	日産アーク	「HPC を用いた次世代電池の反応機構の解明」

2. 2. 1. 2(2) 人材育成

特定高速電子計算機施設を中核とする HPCI の高度利用を軸に計算物質科学の振興を図るとともに、国家的重要課題に取り組むことができる人材を育成することが目的であり、さらにアジア地区における研究と人材育成のための研究人材ネットワークの充実をめざす。平成 25 年度は、前年度に引き続き大学院講義、夏の学校、ウインターカレッジ、超並列化教育、集中実習、ワークショップ、チュートリアルコースを国内外で実施した。それとともに、平成 24 年度に策定した講義配信に向けたカリキュラムである計算科学技術特論 A の全国オンライン講義配信を開始した。講義配信のための体制として、理研神戸 AICS に設置された、多地点配信システムを利用し、阪大学豊中キャンパスを配信元に全国 9 大学 11カ所に双方向オンライン配信できる体制を構築した。

1) 計算物質科学の教育

i) CMD ワークショップ

①CMD ワークショップ (報告書3、10)

9 月 2-6 日 第 23 回 CMD ワークショップ 大阪大学大学院基礎工学研究科 G 棟

2 月 24-28 日 第 24 回 CMD ワークショップ 大阪大学大学院基礎工学研究科 G 棟

2013 年 9 月 2 日(月)～9 月 6 日(金)に、大阪大学基礎工学研究科 G 棟において、第 23 回 CMD ワークショップを開催した。受講生は、ビギナーコース 37 名、アドバンスコース 15 名、エキスパートコース 1 名、スーパーコンピューターコース 5 名、合計 58 名を受け入れて行った。これら受講生を、講師 25 名、チューター 12 名が講義、実習及びそのサポートを行い、第一原理計算を用いた物質設計を目指した教育を行った。

2013 年 2 月 24 日(月)～2 月 28 日(金)の日程で、同じく大阪大学基礎工学研究科 G 棟において、第 24 回 CMD ワークショップを開催した。受講生は、ビギナーコース 19 名、アドバンスコース 16 名、エキスパートコース 1 名、スーパーコンピューターコース 2 名、合計 38 名を受け入れて行った。これら受講生を講師 25 名、チューター 11 名が講義、実習及びそのサポートを行い、第一原理計算を用いた物質設計を目指した教育を行った。

第 23 回と第 24 回のスーパーコンピューターコースは、共に東京大学物性研究所のシステム C の FUJITSU FX10 の 96 ノード(1ラック)を専有して実施した。

先端研究事例や特別講演では、物質設計の手法が期待されている元素戦略プロジェクト関係者に依頼し、本ワークショップの目指すものが、国の目指す科学技術開発の方向と強い結びつきがあることを印象付けた。

②ASIA CMD ワークショップ

5 月 28-30 日 CMD Asia at Institute of Technology Bandung, Indonesia

12 月 5-7 日 CMD Asia at University of Technology, Hanoi, Vietnam

2 月 11-13 日 CMD Asia at De La Salle University, Manila, Philippines

2013 年度はインドネシア、ベトナム、フィリピン の 3カ所で開催した。

1. Indonesia, Bandung, Institute of Technology Bandung, 28-30 May, 2013

<http://cmd.tf.itb.ac.id/>

2. Vietnam, Hanoi, Hanoi University of Science, 5-7 December, 2013

<http://hus.vnu.edu.vn/en/ann/49243>

3. Phillipines, Manila, De La Salle University, 13-15 February, 2014

<http://cmdasiaphilippines.wix.com/cmd-asia#!cmd6/c136u>

3 回のワークショップともに、日本国内で開催されている CMD ワークショップのビギナーコースに準じた、講義と実習を含む形で構成され、それぞれの参加者人数は 25～40 名規模であった。講師は大阪大学からの派遣に加えて、現地大学の関連教員も講義を提供した。大阪大学からの講師派遣にあたっては CMSI が支援し、ワークショップ会場の準備については現地大学からのサポートを受けた。長年の開催による経験が現地にも根付いており、多くの部分を現地スタッフでオーガナイズ出来るようになってきている。

ii) 計算分子科学の教育活動

図2. 2. 1. 2(2). 1に示すように、CMSI 人材育成・教育活動の一環として企画・開催・共催等を行った。

行事名	開催日程	場所
第17回分子シミュレーション夏の学校	2013年9月2日(月)～4日(水)	湯沢ニューオータニホテル(新潟県)
	講師3名、参加者42名(内、民間企業6名)	
TCCIウィンターカレッジ (分子シミュレーション)	2013年10月23日(水)～25日(金)	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター(岡崎市)
	講師15名、参加者83名(内、民間企業22名)	
TCCIウィンターカレッジ (量子化学)	2013年12月16日(月)～17日(火)	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター(岡崎市)
	講師5名、参加者46名(内、民間企業7名)	
第3回超並列化技術 国際ワークショップ	2014年2月4日(火)	東京大学山上会館(東京都文京区)
	参加者数: 44名(内、民間企業3名)	

図2. 2. 1. 2(2). 1 TCCI 企画・開催・共催した教育活動

①第 17 回分子シミュレーション夏の学校 (報告書4)

9 月 2-4 日 湯沢ニューオータニホテル(新潟県)にて開催

分子動力学シミュレーションを中心とした計算科学分野の若手育成のために分子シミュレーション研究会が主催するイベントで、H27 年で 17 回目を迎えた。幹事校は新潟大学で、院生 3 名が企画・推進し、全国から 42 名が参加した。分子動力学法の基礎、拡張系の分子動力学シミュレーション(温度圧力制御から第一原理 MD)、最後に、応用例として生体系の分子動力学シミュレーションについて、3 名の講師から講義があり、活発な質疑応答が行われた。また、ポスターセッションにおいても 13 件の発表があり、相互の研究を理解する良い機会となった。

②第 7 回分子シミュレーションスクールー基礎から応用まで

TCCI ウィンターカレッジー分子シミュレーション (報告書5)

10 月 23-25 日 自然科学研究機構 分子科学研究所 岡崎コンファレンスセンター にて開催

H22 年度まで、分子研と分子シミュレーション研究会が開催してきたもので、今回が7回目。H23 年度より「TCCI ウィンターカレッジ」の一環として自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンターにて開催している。今年は、会場の都合で 10 月開催となり、また期間も1日短縮し 3 日間となったため、第1日目の朝から第 3 日目の晩までの時間割となった。民間企業からの参加者も含めて83名が参加。15名の講師により、「シミュレーションの全体像・概論」から「第一原理分子動力学」、「材料のシミュレーション」についての講義が行われた。3 日間完修した受講生に、例年通り、修了証書が手渡された。

③第3回量子化学ウインタースクール～基礎理論と分子物性の理論～

TCCI ウインターカレッジ-量子化学（報告書7）

12月16-17日 自然科学研究機構 分子科学研究所 岡崎コンファレンスセンター

第3回目の開催であり、分子研、計算科学研究機構、計算科学研究センターとの共催で開催した。2日間で、「Dirac-Hartree-Fock 法を中心として相対論的量子化学法」から始まって、「電子励起状態の量子力学-近赤外外光の利用と溶媒効果」など最新の話題も含めた講義が行われた。46名が参加した。受講者からのポスター発表10件も行われ、研究課題についての情報交換も行われた。

iii) 計算材料科学の教育活動

①TOMBO セミナー - 高精度全電子第一原理計算プログラム TOMBO プログラム講習会（報告書2）

7月5日(金) 東京駅八重洲北口サピアタワー10階 東北大学東京分室にて開催した。参加者は講師を含んで41名(内訳:企業17名、大学教員11名、学生10名、独立行政法人・公益財団法人3名)であった。13:30から17:00までの3時間半にわたり、「計算科学の実態と将来像」に関する一般的な議論から、TOMBOに関する開発と応用、新バージョンの紹介、高速化、さらに実習など密な内容であった。受講者のバックグラウンドとしては、材料・応用物理・物理などの基礎が中心で、企業および公益財団からの参加者を除き、計算科学系の人の受講は少なかった。そのため、応用よりも基礎に興味のある受講生が多かったと考えられる。セミナーの後、アンケート調査を行ったが、①実習形式については、今後のTOMBOセミナーについてもそれ以外に講習会を開催する際にも、講義+実習タイプのセミナーの希望が多く、今回のプログラムが好評であったこと、②説明と実習の時間配分については実習の時間を増やして欲しいとの要望が多かったこと、③説明については、高速化や計算事例などの応用面までカバーされよかったとの意見と初学者には難しかったとの意見等があり、これらを把握できたことは、今後、TOMBO以外のセミナーを行う際に参考になる。

これに加えて、計算物質科学全般について、④企業では、応用についても興味をもたれているが、幅広い分野の基礎理論についての素養を持つ人材が求められていること、⑤アカデミアでも、より基礎理論を理解した人材が求められているが、その上で、実際の材料や実験にも興味を持って研究を行える人材の育成が期待されていることがわかった。そのため、計算物質科学のセミナーについては、内容に関する希望は、基礎よりの理論から、応用まで、広く意見が分かれた。

②CMRI・MPI プログラミング講習会（報告書8）

12月25日(水) 名古屋工業大学3号館2階 0322(M4)教室において、平成25年度CMRI「MPIプログラミング講習会」を開催した。今回は既に5回目を数えるが、これまでの開催地区(仙台、京都、大阪、九州)でカバーされていなかった名古屋・中部地区を対象にした。講師は、これまでと同じく青山幸也氏(高度情報科学研究機構(RIST)神戸センター)に依頼した。参加者は約50名で、中部地区以外からの参加者も多く盛況であった。特に、学生・院生(名古屋工業大、金沢大、静岡大、東北大等)が大半を占め、若年層に対して並列計算の普及を行うことが出来た。

iv) 高並列化教育

第3回超並列化技術国際ワークショップ（報告書9）

International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Molecular Science

2月4日 東京大学大本郷山上会館にて開催

TCCIで企画し、CMSI人材育成予算及びTCCI東京拠点予算により開催した。以下の3名を海外から招聘した。米国Stony Brook大Dr. Robert Harrison、米国Florida大Dr. Beverly Sanders、仏国INAC研Dr. Laura

Ratcliff。いずれもこの分野のプログラム開発の関係者である。国内からは、山崎隆浩博士(物材機構)、曾田繁利博士(理研 AICS)、野田真史博士(分子研)、西澤宏晃博士(分子研/早大)を講師として招聘した。44名が参加し、超並列プログラミングの現状について日米欧間の情報交換を行い、議論を行った。また、海外からの招聘者には、東大、豊橋技術科学大学、京大、理研 AICS にてのミニセミナーのご講演もお願いした。

v) International HPC Summer School 2013

2013 年 6 月 23 日～28 日 にニューヨーク大学にて開催され、物質科学分野から安藤(名大)、石村(分子研)、笠松(東大)の 3 名が参加した。午前は講義、午後は実習を中心としたスケジュールで、参加人数はアメリカから 34 人、ヨーロッパから 30 人、日本から 11 人の計 75 人で、半数以上が学生であった。内容は、スーパーコンピュータを用いた計算科学分野の研究紹介、並列プログラミング、アクセラレータ利用、プログラムの解析ツールと最適化手法、可視化、数値ライブラリと多岐にわたり、計算科学及び計算機科学の最新情報を幅広く得ることができた。実習では参加者のレベルに応じた内容を学べるように、初心者向けと経験者向けのコースが用意されていた。ポスターセッションや、テーマごとに分かれて食事をしながらディスカッションをする時間もあり、参加者間のコミュニケーションを図ることもできた。特にアクセラレータ(GPGPU、Xeon Phi)利用の実習では、様々な機能が追加され実用的になった開発環境を用いて、CPU とは異なる点を実際にプログラミングを行いながら学ぶことができ、今後のエクサスケール計算機利用を考えるうえで、非常に重要な知見を得た。

学んだことを第 8 回 CMSI 若手技術交流会、第 4 回 TCCI 研究会、第 4 回 CMSI 研究会で報告し、CMSI 全体で情報共有を行った。

2) 社会人教育

OCTA 講習会・トレーニング (報告書 12)

3 月 18 日 産業技術総合研究所臨海副都心センターにて開催

2014 年 3 月 18 日(火)10:00-17:00 に、(独)産業技術総合研究所 臨海副都心センター バイオ・IT 融合研究棟会議室にて、「OCTA 講習会&トレーニング」を、計算物質科学イニシアティブ(CMSI)と(独)産業技術総合研究所の共催として開催した。出席者は、受講生として大学関係者 7 名および企業関係者 17 名の計 24 名と、講師 3 名および世話人 2 名(産総研 森田氏、東北大 川勝)の総計 29 名であった。

講習会の内容は、午前に OCTA の概要(JSOL 小沢氏)、分子動力学エンジン COGNAC の概要(旭化成 青柳氏)および自己無撞着場エンジン SUSHI の概要(日本ゼオン 本田氏)に関する講義を行い、午後には、各参加者が各自持ち込んだノート PC に OCTA をインストールし、それを用いて OCTA の使用法に関する実習を行った(指導員は JSOL 小沢氏、講師と世話人)。今回は本講習会に密接に関連する教科書「高分子材料シミュレーション ―OCTA 活用事例集―」(化学工業日報社)が発行されたばかりだったので、その内容を取り入れて講義の内容を更新した。

参加者数は昨年度の 43 名から 29 名へと減少しているが、教科書の発行に講習会の日程を合わせるために準備が多少遅れてしまい、関係者(特に大学関係者)への周知が充分でなかった可能性が考えられる。企業研究者の参加は昨年と同程度で、OCTA が企業の現場で関心を持たれていることが解る。今後は大学関係者への浸透を図りたい。

3) 大学院教育

i) 各教育拠点の活動状況

(1) 大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センター

①CMSI 教育コンテンツ配信講義 - CMSI 計算科学技術特論 A (報告書1)

4月18日～7月25日

配信元:大阪大学大学院基礎工学研究科 G 棟

配信先:9 大学 11 拠点(東北大、金沢大、豊橋技術科学大、総合研究大学院大学(分子研)、名古屋大、京都大、大阪大吹田・豊中、神戸大(CMSI 神戸拠点)、東大本郷・柏)

人材育成カリキュラムの具体的な講義として、計算科学技術特論 A を実施した。本講義は、大阪大学豊中キャンパスを配信元として、理研 AICS の MCU を利用して全国 9 大学 11 ヵ所(東北大金研、金沢大、東大物性研、東大本郷、豊橋技科大、分子研、名大、京大福井センター、阪大吹田、神戸大(CMSI 神戸拠点))に配信し、双方向のオンラインシステムで実施した。全講義の動画とテキストは CMSI の HP で一般公開されている。多いものでは 700 回近く再生されている講義もあり、当日受講した人以外にも広く本講義の内容を提供出来ている。

大阪大学では、本講義を基礎工学研究科から正式な講義として立ち上げ、ナノサイエンスデザイン教育研究センターで実施している大学院生向けの副専攻・副プログラムの認定科目としても登録している。出席とレポートによって判定し、今年度は 3 名が単位取得した。

本講義の内容としては、開発者養成のための基礎知識という位置づけにし、初心者ではなく京コンピュータなどのスパコンでの開発に向けて、ある程度の開発経験者を対象としている。そのため、MPI や OpenMP の初歩ではなく、それを超並列プログラミングにつなげることを意識している。一方、それを実施する上でアプリ開発側では意外と十分に学ぶ機会が少ない内容として、数値計算ライブラリの詳細、バージョン管理も含めた高速化チューニングの関連技術、数値計算アルゴリズムの基礎などを取り上げた。また、他分野のアプリの内容も知っておくと役立つ可能性があるので、古典 MD の高速化、量子化学計算の大規模化についても取り上げた。

講義後のアンケートでは、おおむね好評であったと考えられる。HP で動画とテキストを公開していることも、多くの人に知識を提供できるようになっているので、今後も公開を続ける限りはこの分野に貢献できると思われる。アンケート以外で個別に学生にとっては難しすぎたという話はいくつか聞いている。当初の対象から初心者の学生は対象としていないので、それは当然のことであるが、今後計算科学の底上げを考え、初心者を引き上げるための講義群を検討する必要があるかもしれない。

②人材育成シンポジウム (報告書6)

12月2日 第2回人材育成シンポジウム(配信Ⅱ)「大規模計算に伴う数値誤差及び可視化」

配信元:大阪大学大学院基礎工学研究科 G 棟

配信先:9 大学 11 拠点(東北大、金沢大、豊橋技術科学大、総合研究大学院大学(分子研)、名古屋大、京都大、大阪大吹田・豊中、神戸大(CMSI 神戸拠点)、東大本郷・柏)

昨年に引き続き、大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センターで第2回人材育成シンポジウムを12月2日に開催した。今回は「大規模計算に伴う数値誤差及び可視化」をテーマにして、CMSI で購入した MCU を初めて使用して、全国 9 大学 11 ヵ所(東北大金研、金沢大、東大物性研、東大本郷、豊橋技科大、分子研、名大、京大福井センター、阪大吹田、神戸大(CMSI 神戸拠点))に配信して行った。参加者は、全国で 39 名であった。

内容は、大規模計算を実施する上で意外盲点となる計算精度と、大規模計算の結果吐き出された巨大なデータを如何にして可視化していくかという問題を取り上げた。前半の計算精度については、精度保証付き数値計算の第一人者である早稲田大学の石進一教授に、OpenMP による精度保証の問題の明らかになった事例の紹介を東京大学の片桐孝洋准教授に、アルゴリズム的に計算精度を保証できる事例を電気通信大学の山本有作教授に講演をお願いした。後半の可視化については、計算物質科学における可視化による物理的解析の

事例や今後の可視化技術についての提言を防衛大学校の萩田克美講師に、生物学者のワークフローにフィットさせた可視化解析ソフトの開発についてユタ大学の大綱英生教授に、京コンピュータをはじめとする大規模計算機での結果の可視化をものづくり開発と連携させる事例などを含めたアプローチについて理化学研究所の小野謙二研究員に講演をお願いした。

これらのテーマは計算機の速度の向上や、その他分かりやすい指標に比べて地味な扱いで、表立って大きな議論になることはほとんどないが、MPI や OpeMP に精度保証の措置が全くなされていないことはあまり知られておらず、その対策としてすべきことも知られていないことが多い。京コンピュータのコンパイラのオプションにも関連するものがあるが、実際ほとんどの人が知らない。誤った計算結果は無意味であるので、確かな精度を保証した計算を実行することを、これを機会に少しでも認識してもらえればと思う。また、可視化についてはどのように利用するかでいろいろな場合が考えられるが、可視化もかなり専門の技術が必要で、その方面の専門家との連携が重要である。計算結果を可視化して解析し、それを開発現場での結果と比較して、それをまた計算にフィードバックをかけるフレームワークを作ることが、実際にものづくりや物質開発を進める上で重要であり、それを構築するためにいくつかの段階で問題があることが明らかになった。

(2) 東北大学金属材料研究所 計算材料科学研究拠点

①配信セミナー（報告書 11）

3月5日(水)に、以下の要領で「マルチスケールの計算材料科学」の配信セミナーを実施した。

配信元：東北大学青葉山キャンパス 理学合同 B 棟 7 階 721 室(大会議室)

配信先：11 機関 14 拠点(東北大片平、金沢大、豊橋技科大学、総合研究大学院大学(分子研)、名古屋大、京都大、大阪大学豊中・吹田、神戸大(CMSI 神戸拠点)、産総研つくば、福井高専、東大本郷・駒場・柏)

内部組織の形成過程の代表例であるデンドライト成長(ハードマター)と液晶のパターン形成(ソフトマター)を対象とし、計算材料科学の第一線で研究を行っている 2 名の講師(大学および独法・研究所)による基礎から応用までの講演がなされた。企業からの 2 名を含む幅広い分野の 52 名の受講があった。

②その他

iii①にも記したように、TOMBO セミナー(7月5日 東北大学東京分室)にて、セミナー修了後に受講者に対する計算材料科学についての教育・人材育成に関するアンケートを実施し、大学関係、および、産業界での現状把握と今後のニーズを調査した。その結果を踏まえ、「マルチスケール計算材料科学の現状と今後」セミナー全 8 回(11月19日-12月17日 東北大学理学研究科物理教室)を開催した。このセミナーでは、東北大学(4名)、および 新日鐵住金(2名)で計算材料科学に関わる研究者を講師とし、工学研究科マテリアル系と理学研究科物理学専攻の院生をメインターゲットとした。参加者の内訳は学部 4 年生から博士課程 4 年生、博士研究員など幅広く、各回の参加者は 20 名前後であった。質疑応答も盛んに行われ、大きな教育効果があった。また、上記①配信セミナーのような TV 会議システムを用いた東北大学からの教育コンテンツの配信事業を円滑に行うため、セミナーに先駆け、片平キャンパス金属材料研究所に加え、工学研究科と理学研究科の大学院生の多くが在籍する青葉山キャンパス理学部に新たに TV 会議システムを設置した。

(3) 神戸大学大学院システム情報学研究科

第 4、第 8、第 11 回 CMSI 神戸ハンズオンにおいて、FMO 講習会を実施した。また、CBI 学会 2013 年大会(2013 年 10 月、東京)において FMO 計算実習講習会を実施した。これらの講習会では、新規開発した FMO 計算支援ソフトウェア(FU)を使用し、参加者に提供した(本ソフトウェアは 25 年度中に一般に公開)。

(4) 名古屋大学大学院工学研究科

名古屋大学では、前年度に引き続き大学院生を対象としたオムニバスの講義として、並列計算環境におけるプログラミング技術に関する講義「大規模並列数値計算特論」2コマ、および最新の計算科学の発展を紹介する「計算科学フロンティア連続講義」1コマを担当した。また、阪大で開講される「CMSI 計算科学技術特論 A」に講師として参加し、分子シミュレーションの並列化技術に関する講義を2コマ担当した。さらに東大での開講の大学院講義「物質科学のための計算数理Ⅱ」においても、特別講師としてMD計算における並列化について1コマ講義を担当した。これについては本課題で導入のテレビ会議システムを用いて実施した。単位互換に関しては、総合研究大学院大学にて平成25年度開講の分子科学関連の講義「生体分子シミュレーション入門」について名古屋大学の学生が履修できるよう調整し、名古屋大学大学院工学研究科化学生物工学専攻の大学院生が履修した。なお、24年度開講の講義「分子物理化学特論」は隔年のものであり25年度は開講されていない。

(5) 東京大学大学院工学系研究科

2012年より工学系研究科・理学系研究科共通科目として開講している「物質科学のための計算数理Ⅰ、Ⅱ」を今年度も開講した。前期(計算数理Ⅰ)は東大情報基盤センター大演習室1(端末70台)で講義を行い、計算機やFortranプログラムの基礎的な事項から、OpenMPを用いた並列計算、MPIを用いた並列計算の簡単なプログラムが作れるようになるまでを、演習も交えながら講義した。後期(計算数理Ⅱ)では、より実用的な物質科学のアプリケーションの中身を知るという目的で、量子モンテカルロ法および平面波基底による第一原理電子状態計算のプログラムの開発を行った。講義の途中で2名のゲスト講師をお招きし、高速フーリエ変換の講義(筑波大、高橋大介先生)、古典分子動力学法の講義(名大、吉井先生)を行っていただいた。このうち吉井先生の講義はインターネットを介したTV会議システムの利用を試みた。名大での吉井先生の話とスライドを本郷で受信し、適宜質疑応答も行うという形式で行い、講義自体は滞り無く進んだが、講義資料のやりとりで少しトラブルがあった(後に名大側のLAN接続の問題と判明)。最終的に前期40名程度、後期20名程度の学生が単位を取得した。

正規の授業とは別に、阪大で配信されている計算科学技術特論Aをセミナーという形式で本郷でも開講した。毎回10名程度の参加者があり、東大の学生のみならず、企業からの参加者もあった。場所は東京大学情報基盤センター遠隔講義室を利用し、接続等で問題が起こる事はほとんどなかった。

(6) 東京大学 物性研究所 神戸拠点

計算機科学と計算科学の連携促進を目的として、平成25年夏学期に東京大学大学院情報理工学系の大学院集中講義「コンピュータ科学特別講義Ⅲ」の一部を担当(担当:藤堂眞治、3コマ分)し、情報科学、計算機科学を専攻する学生を対象として計算物質科学において用いられているモンテカルロ法の基礎と応用事例を紹介した。神戸大学大学院システム情報学研究科の大学院講義「大規模シミュレーション総論Ⅱ」の一部を担当(担当:藤堂眞治、1コマ分)し、情報科学、計算機科学を専攻する学生を対象として物質科学における代表的なアルゴリズムとその応用例を紹介した。東京大学大学院工学系研究科の大学院講義「物理工学実験技法(A)」の一部(担当:藤堂眞治、1コマ分)し、物理工学を専攻する学生を対象として計算機実験の技術に関して講義を行った。

2. 2. 1. 2(3) 人的ネットワークの形成(研究会、セミナーの開催)

1) 計算物質科学の分野振興

i) CMSI 全体行事

①第4回 CMSI 研究会 - 物性研スパコン共同利用・CMSI 合同研究会 (報告書 23)

ー計算物質科学の課題と展望ー

12 月 10-13 日 東京大学物性研究所にて開催

物性研スーパーコンピュータ(物性研スパコン)の共同利用成果報告会と合同で、第4回 CMSI 研究会を行った。計算物質科学のための大規模計算手法の開発やその応用から得られた成果について、物性研スパコン共同利用研究者による9件の口頭講演と、CMSI 研究課題についての44件の口頭講演、物性研共同利用・CMSI 関係者による49件のポスター発表があり、活発な議論・情報交換がなされた。以上に加えて、計算物質科学と、計算機科学ならびに実験科学とのさらなる協働を模索するため、2件の特別講演、3件の招待講演を企画した。エクサスケールコンピューティング、データ駆動科学、物質・材料設計などをキーワードとして、今後の展開に向けた分野横断的かつ刺激的な議論を行うことができた。また、当該年度のスパコンの世界会議 SC13 や、ハイパフォーマンスコンピューティングに関するアメリカ・ヨーロッパ・日本合同サマースクールの参加報告を通して、世界の計算機科学・計算科学の趨勢についても情報交換を行った。さらに、「計算物質科学のためのコンピュータアーキテクチャーとは？」と題した討論会を行い、様々な立場から、今後進むべき方向性について議論がなされた。

また同じくCMSI研究会では、35 才以下の若手研究者を対象に、優れた研究に贈られる「ポスター賞」を今年も実施し、若手研究者はそれぞれ工夫を凝らして発表を行った。前回から、受賞対象をポスターだけではなく講演まで広げ、「若手奨励賞」と「ビジュアル賞」も審査された。ポスター賞他受賞者は、以下の通りである。

第4回 CMSI ポスター賞、若手奨励賞、ビジュアル賞受賞者と課題内容:

氏名	所属	課題名
・CMSI ポスター賞		
渡辺宙志	東京大学物性研究所	「気泡の可視化 ～「無い」ものを可視化する～」
・CMSI 若手奨励賞		
石村和也	分子科学研究所	「ナノサイズ分子の新規構造及び機能の探索 ー大規模並列計算プログラムの効率的な開発ー」
・CMSI ビジュアル賞		
矢ヶ崎琢磨	岡山大学	「メタンハイドレート分解過程の分子動力学計算」

②CMSI International Symposium 2013(報告書 21)

– Extending the power of computational materials sciences with K-computer –

10 月 21,22 日 東京大学伊藤国際学術研究センターにて開催

本国際シンポジウムは、京コンピュータの共用が開始されて約 1 年が経過したことを踏まえ、下記の 3 つのサテライトワークショップと一体として企画されたものである。初日は諸熊氏(京大)による「Global Reaction Route Mapping Strategy: Automatic Exploration of Chemical Reaction Mechanisms」と題した基調講演に続き、CMSI の部会代表者による成果発表が行われた。また、酒井氏(東大)からシミュレーションと実験のコラボレーション研究に関する招待講演があった。2 日目は海外からの 5 件の招待講演とサテライトワークショップで取り上げたテーマの課題と成果を共有・深化するための 3 つの平行セッションが設けられ、超並列計算機が切り開く物質科学の新時代を展望する議論が行われた。

③CMSI International Satellite Meeting 2013 in Kobe (報告書 18)

–CMSI Kobe International Workshop 2013: Recent Progress in Tensor Network Algorithms–

10 月 16-18 日 計算科学研究機構 AICS にて開催

本サテライトミーティングは、物性物理や他の分野で近年注目をあつめている「テンソルネットワーク」をテーマとして、海外から 10 名、国内から 30 名以上の研究者が集まり、神戸の計算科学研究機構で開催された。ワークショップでは、多体量子系の基底状態におけるエンタングルメント(量子的な相関)、行列積状態、密度行列繰り込み群、PEPS (Projected Entangled Pair State)、MERA (Multi-scale Entanglement Renormalization)など、テンソルネットワークの基礎理論から、量子化学計算、強相関量子系、相転移と臨界現象、光誘起相転移、ブラックホールとテンソルネットワーク繰り込み群との関連、機械学習、データマイニング、ウェーブレットにいたるまで、幅広い分野への応用が紹介された。さらに、シミュレーションにおける演算量の最適化、テンソルネットワークの精度の詳細な解析、京における大規模並列化、テンソルネットワークライブラリの開発など、計算機科学的な観点からの興味深い講演も数多くなされ、若手を中心として活発な議論が展開された。

④CMSI International Satellite Meeting 2013 in Tokyo (報告書 19)

– Novel Electronic Structure Method –

10 月 18,19 日 東京大学本郷キャンパスセミナールームにて開催

本サテライトミーティングは、国内から 6 名、海外から 3 名の研究者に講演を依頼し、実空間差分法、有限要素法、ウェーブレット基底法による第一原理電子状態計算について、それぞれの特徴を議論し、理解を深め、活かせる技術を交換するという趣旨で開催された。実空間差分法については、日本からは岩田(東大、CMSI)と、小野倫也(阪大)、野田真史(分子研、CMSI)、佐藤駿丞(筑波大)、が講演を行い、海外からは GPAW パッケージの開発者の一人である Jussi Enkovaara (CSC) が講演を行った。有限要素法については日本から土田英二(産総研)、海外からは Volker Schauer (Univ. of Stuttgart) の講演があった。またウェーブレットについては日本から関野秀男(豊橋技科大、CMSI)、海外からは BigDFT の開発者の一人である Luigi Genovese (CEA) の講演があった。

いずれの手法も平面波やガウス基底を用いた従来法に比べ、近年になって導入されものであり、境界条件の柔軟性や並列化効率という点で大きな利点を持つ事が共通している。また Adaptivity という、原子核近傍のような変化の激しい領域にメッシュ点を集中させるような技法も従来法では実現が難しい、上記の新手法に特徴的な技法の一つとして認識された。また大規模なプログラム開発という観点では、たとえば GPAW では Python を導入することによって開発時間を大幅に短縮するという事例が紹介され、今後のプログラムの開発の進め方を検討する重要な機会となった。

⑤CMSI International Satellite Meeting 2013 in Nagoya (報告書 20)

- Large-Scale Molecular Simulation for Understanding Molecular Mechanism -

10 月 17-19 日名古屋都市センターにて開催

本サテライト・ミーティングでは、超並列コンピュータを用いた分子動力学(MD)や QM/MM 計算によるタンパク質、脂質膜などの生体分子についての最新の研究成果を、国内外の新進気鋭の若手研究者に講演いただいた。また、これらの大規模系の計算を実行するために必要不可欠となるソフトウェアの国内外での開発動向についても紹介いただいた。海外から QM/MM 計算を用いて生体分子の化学反応について精力的に研究を進めている Qiang Cui 氏(University of Wisconsin, USA)、pH を考慮に入れた独自の粗視化モデルを用いてタンパク質分子の混合状態についての大規模シミュレーションを実施している Mikael Lund 氏(Lund University, Sweden)、著名な並列計算用の汎用分子動力学計算ソフト LAMMPS の開発メンバーである Tzu Ray Shan 氏(Sandia National Laboratories, USA)の 3 名を招待した。また国内からは、タンパク質を中心とした生体関連分子について非常に精力的に研究を展開されている池口満徳氏(横浜市大)、松林伸幸氏(京大)、高橋英明氏(東北大)、山下雄史氏(東大)、粗視化モデルの開発を進めておられる篠田渉氏(名大)、界面系について幅広く研究されている石山達也氏(東北大)、藤本和士氏(立命館大)に講演いただいた。いずれも超並列マシンによる自由度の広がりを生かし、研究の地平を広げつつある先鋭的な研究ばかりであり、大変議論が盛り上がった。特に本ミーティングの主題のひとつである MD 計算の高速・超並列化に関しては、理研で開発されている GENESIS については Jaewoon Jung 氏、米国 Sandia 国立研究所にて開発された LAMMPS については Shan 氏、そして名大岡崎研究室を中心に開発された MODYLAS については安藤嘉倫氏に講演いただき、超並列対応の最新 MD 計算ソフトについて、性能等の現状を知るうえで大変良い機会となった。さらに専用計算機による MD 計算の高速化に関しては、泰岡顕治氏から開発の歴史も含めた興味深い講演を伺えた。

⑥CMSI 第 1 部会「新物質新量子相の基礎科学」 夏の学校 (報告書16)

-エネルギーを創造する新物質の基礎科学的課題を徹底議論!!-

8 月 12-16 日 蔵王ホテル樹林にて開催

CMSI 第 1 部会では、部会の枠を越えて共通する科学的興味と課題を共有し、課題解決へ向けた議論を継続的に行うため、毎年中心課題を選定してサマースクールを行っている。専門家を講師として、また若手研究者を話題提供者として招き、参加者全員が参加し課題解決に向けた活発で濃密な議論を行うことを目指している。平成 25 年度は、次世代太陽電池や新奇熱電素材など、エネルギー問題への貢献をめざすデバイスの候補に現れる現実の非平衡現象と応用上解決すべき課題や、そこから抽出される基礎科学的課題をテーマに設定した。本サマースクールは下記のプログラムの通りに開催され、招待講演者、若手研究者および大学院生を含む 32 名が参加した。

招待講師のよる講義(基調講演と short lecture、実験家による講演を含む計 8 件)と第 1 部会の研究者を始めとする若手による講演(6 件)を中心に、活発な意見交換が行われた。テーマは多岐にわたり、光合成、トポロジカル絶縁体や強相関電子系における非平衡現象など、将来のデバイスへの応用が期待される物理・化学現象の理論から始まり、分子デバイスの電気・熱伝導、燃料電池・蓄電池における物理的・電気化学的過程、分子系の励起状態の観測などの第一原理の数値計算手法およびその結果が講義され、活発な議論が行われた。とくに、光合成と蓄電池などにおける電荷移動との共通点、光合成の背後に潜む機構のデバイス設計への応用可能性が注目を集めた。また、有機分子系による太陽電池の実験的研究についても講師を招待し、実験家からの理論・数値計算への期待や注文について活発な議論が行われた。

<プログラム>

	8月12日(月)	8月13日(火)	8月14日(水)	8月15日(木)	8月16日(木)
9:30～10:30		Lecture 2 野村健太郎先生 (東北大学)	Lecture 3 浅井 美博先生 (産業総合研究)	Lecture 4 館山 佳尚先生 (物質・材料研究機構)	Lecture 5 森田 明弘先生 (東北大学)
11:00～12:00		Lecture 3 浅井 美博先生 (産業総合研究)	Lecture 4 館山 佳尚先生 (物質・材料研究機構)	Lecture 5 森田 明弘先生 (東北大学)	Short Talk (5) (6) 大越 幸洋 (東京大学) 山地 洋平 (東京大学)
13:30～14:30	Lecture 1 石崎 章仁先生 (分子科学研究所)	Short Lecture 辻 直人先生 (東京大学)	実験 但馬 康介先生 (理化学研究所)		Closing
14:30～15:00	Break	Break	Short Talk (2) 「有機薄膜太陽電池の 分子界面における 電荷移動ダイナミクス」 藤井 幹也 (東京大学)		
15:00～16:00	Lecture 1 石崎 章仁先生 (分子科学研究所)	基調講演 杉野 修先生 (東京大学)		Free Discussion	
16:00～17:00	Free Discussion	討論: エネルギー変換	Free Discussion		
17:00～18:00	Lecture 2 野村健太郎先生 (東北大学)				
20:00～20:30	Short Talk (1) 「散逸系における多次元 量子波束動力学の 半古典近似」 中田 信一 (東京大学)	Barquet	Short Talk (3) 只野 央将 (東京大学)	Short Talk (4) 大谷 優介 (物質・材料研究機構)	
20:30～	Free Discussion		Free Discussion	Free Discussion	

ii) 計算物性科学研究センター (CCMS)

①ISSP 国際シンポジウム・ワークショップ EQPCM2013

6 月 3-21 日 東京大学物性研究所にて開催、シンポジウム 6 月 12-14 日

滞在型国際ワークショップ・シンポジウム Emergent Quantum Phases in Condensed Matter from topological to first principles approaches が 2013 年 6 月 3 日～21 日の 3 週間の期間で開催された。運営資金は物性研 (所長裁量経費・短期研究会経費) のほか、計算物質科学イニシアチブ、元素戦略、ICAM-I2CAM などから提供を受けた。ワークショップでの講義数は物性研談話会や理論セミナーも含めて全部で 14、ワークショップとシンポジウムを併せて 30 分。講演数は 53、シンポジウムでのポスター発表数は 47 であった。参加者は 160 名で、そのうち外国人は 35 名であった。国内外の遠くからの参加者と共に、物性研の多くの所員が出席し、討論にも活発に参加していた。本ワークショップ・シンポジウムでは、表題の通り、近年急速に展開しているトポロジカル絶縁体をはじめとする新奇な量子相について、トポロジックなどの数学的概念に立脚した抽象的理論と、物質の微視的構造に基づいた第一原理計算の二つのアプローチの橋渡しと融合が主要な目的であった。

②物性研究所計算物質科学研究センター 第3回シンポジウム (報告書 22)

「スピン・軌道相互作用の物理における実験・理論・計算」

11 月 19-20 日 東京大学物性研究所にて開催

物性研究所計算物質科学研究センター (CCMS) は K-computer の利用を念頭に、大規模並列計算による物質科学研究の推進を目的として 2011 年 4 月に発足した。とくに第1回 (2011 年 9 月)、第2回 (2012 年 10 月) のシンポジウムでは、共用法大規模実験施設 (J-PARC, SPring-8, SACLA, K-computer) の連携をキーワードとして、実験家も交えた討論を行った。CCMS では、今年度より、元素戦略磁石拠点との連携も深まり、永久磁石の設計に関する研究にも重点をおいている。今回は前2回と比べてよりテーマを絞り、「スピン軌道相互作用」とくに「磁気異方性」に関連したトピックスを中心として、実験・理論・計算にまたがる問題について討論した。

③CCMS ハンズオン講習会

第1回7月26日 CCMS ハンズオン(ソフトウェア講習会) (報告書 14)

Machikaneyama2002 チュートリアル (固体電子状態計算 初級)

講師: 赤井久純 (東大物性研)、土居抄太郎 (東大物性研)

第2回1月14日 CCMS(柏)ハンズオン:バージョン管理システムチュートリアル (報告書 26)

講師: 五十嵐亮 (東大物性研)、松尾春彦 (RIST)、安田真也 (東大院工)

第3回2月26日 CCMS(柏)ハンズオン:xTAPP 講習会 (報告書 27)

講師: 吉本芳英 (鳥取大学)、吉澤香奈子 (東大物性研)

第4回3月11日 CCMS(柏)ハンズオン: Rokko チュートリアル (報告書 28)

講師: 藤堂眞治 (東大理、東大物性研)、五十嵐亮 (東大物性研)、本山裕一 (東大工)

iii) 計算分子科学研究拠点 (TCCI)

分野振興のため、図2. 2. 1. 2(3). 1 に示す研究会・シンポジウム等を開催した。

行事名	開催日程	場所
TCCI第4回研究会	2013年9月10日(火)、11日(水)	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター(岡崎市)
	参加者数: 68名(内、民間企業8名)	
TCCI第3回 実験化学との交流シン ポジウム	2013年11月5日(火)、6日(水)	京都大学 福井謙一記念研究セン ター (京都市)
	参加者数: 61名(内、民間企業3名)	
TCCI第3回 産学連携シンポジウム 「HPCの利用と成果と人 材」	2014年1月31日(金)午後	名古屋大学 野依記念学術交流館 (名古屋市)
	参加者数: 68名(内、民間企業15名)	
CMSI第3部会研究会 (TCCI共催) 「分子集合系における先 端分析と大規模計算」	2014年3月20日(木)午後	ウィズビジネスセンター(東京都中央 区)
	参加者数: 50名(内、民間企業19名)	

図2. 2. 1. 2(3). 1 TCCI 開催・共催した研究会・シンポジウム

①計算分子科学研究拠点 第4回研究会 (報告書 17)

TCCI の全体シンポジウムである第4回研究会を9月10-11日 自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンターにて開催。今年度は、重点課題、特別支援課題について成果を報告する会とし、併せて次世代のエクサスケールに向けた議論を始めるべく、エクサスケールについてシステムを検討しているシステムFSの3グループにもご講演をお願いし議論を開始した。(講演資料集 有)

②TCCI 第3回実験化学との交流シンポジウム (報告書 32)

11月5-6日 京都大学 福井謙一記念研究センターにて開催。TCCIの関わる有機化学、物理化学、生命科学の実験サイドから計算科学への期待・要望等に関する交流シンポジウムを開催した。今年度も優れた実験化学者による招待講演10件、TCCIからの報告6件を行った。情報交換、議論を通して興味深く有意義なシンポジウムとなった。

③TCCI 第3回産学連携シンポジウム「HPCの利用と成果と人材」 (報告書 34)

1月31日名古屋大学野依記念学術交流館にて開催。企業における計算科学の利用と学術研究への期待、TCCIにおける研究状況等の紹介・意見交換を通して産学連携を目的としている。今回、民間企業の京利用のご講演、TCCIからは産業利用に向けた基盤ソフトに関する報告とポスター展示を行った。また、特別講演では橋本昌隆氏より「理工系ポスドクのキャリアパスにおける現状と課題」が行われ、鋭い分析結果の報告と提案が行われた。今年度は、民間企業からの参加者は減っているが、半数以上の質問は民間企業の参加者から行われており、産学連携への期待が継続していることが感じられた。(講演資料集 有)

④CMSI 第3部会研究会:分子集合系における先端分析と大規模計算 (報告書 29)

～高度水利用に資するスマート分離技術の基盤構築を目指して～ (TCCI 共催)

3月20日 ウィズビジネスセンター(東京駅)にて開催。物質の分離技術は、化学・材料の産業界全体に共通の基礎的な重要性をもち、その高度化と省エネルギー化は国家的な課題である。たとえば我が国の高度な水処理技術にも関わる問題で、水資源の有効活用は国家として戦略的な課題でもある。本研究会では、分離や水処理技術と計算化学との融合を目指す展望について、実験化学者、企業研究者も含めて議論を行った。当日の雨にも関わらず会場は満員となり、このテーマに対する関心高さが感じられた。

iv) 計算材料科学研究拠点(CMRI)

平成25年度は大規模な会議よりも、小規模な研究会を多数積み重ねることで、課題についての問題を深く認識し、課題遂行の具体化を図ることを目的とした。開催した研究集会について以下に報告する。

①CMRI(東北大学計算材料科学研究拠点)研究会 (報告書 15)

～合金凝固組織の高精度制御を目指したデンドライト組織の大規模数値計算～

平成25年7月30日(火)に 東北大学金属材料研究所にて開催した。これは特別支援課題に関する研究会であり、31人の参加があり、特別支援課題に関して3件の成果の発表を行うとともに、海外からの招聘者による基調講演1件、さらに招待講演2件を行った。今後の当該の課題の遂行を具体化する上で極めて有用な機会となった。

②第5部会「マルチスケール材料科学」重点課題研究会 (報告書 13)

「材料中の複雑構造・組織の第一原理解析」

平成25年7月17(水) -18日(木)に 産業技術総合研究所 関西センターにて開催した。これは重点課題「金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発」についての課題遂行者を中心とした研究会であり、参加者は9人、析出粒子の抵抗力の実験との関係、転位挙動のモデルの成否、化合物内の局所エネルギーの意味等について議論した。後半は、第5部会の核となる、マルチスケール手法やPhase Field手法について話し合い、情報交換を行った。特に、第一原理計算とPhase Field法の具体的なカップリングをどのように進めていくかが焦点であり、議論を継続するとともに、新規の拠点研究員の協力も仰ぐこととした。又、本重点課題には第5部会全体の共通の方法論を含んであり、他の課題の遂行者にも議論に加わってもらうこと、平成26年1月のCMRIの国際会議の開催中にもミーティングを開いて議論すること等を確認した。

③CMSI/CMRI Workshop for Ferroelectrics and Related Material (報告書 24)

平成26年1月6(月) -7日(火)に 東北大学金属材料研究所にて開催した。これは特別支援課題「超高速分子動力学計算による強誘電体薄膜キャパシタの高性能化」に特化した課題遂行者を中心とした研究会であったが、参加者は8人で、海外からの参加者も加わり活発な議論ができた。特に、実験家から最新の研究報告があり、本プロジェクトの計算に対しても有用なコメントがあった。又、研究担当者の進捗報告や打ち合わせを行い、翌日7日には本課題の主要なアプリケーションであるferamについてユーザとの意見交換や利用講習会も行った。これにはCMSIの支援により購入した材料アプリトライアル用サーバーを用いた。

④CMRI International Symposium 2014 (報告書 25)

平成26年1月8(水)-10日(金)に東北大学金属材料研究所にて開催した。本年度のCMRIの全体研究会であり、又、初の国際シンポジウムとして開催した。加えて、CMSIに属する他の4つの部会との協調的・相補的な発展を図るため、物性科学、分子科学の代表者に招待講演を依頼し、第1部会～第4部会までの

現状について理解を深めた。参加者は 57 名であり、重点課題（2 件）と特別支援課題（6 件）に関して成果の発表を行うと共に、関連する外国人研究者 6 人や国内の研究者 6 人を招聘し、意見やアドバイスを得た。招待講演や、物性科学、分子科学の代表者の招待講演を介して、それぞれの研究内容について理解を深め、今後の計算科学技術体制の構築の推進に資する機会となった。

2) 国際連携

CMSI 全体と CCMS:

i) 16th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-16)

10 月 27-30 日中国北京 Jiuhua Resort & Convention Center にて開催された。世界恰好から、第一原理計算の専門家が集い、アジアのアクティビティーが世界から着目されていることが伺えた。

ii) JSAP-MRS Joint symposia

9 月 16-20 日 に同志社大学にて開催された。応用物理学会 (JSAP) と米国の Materials Research Society (MRS) との合同シンポジウムであり、CMSI は「物質探査のための電子状態計算」のセッションに協力し、重点課題代表者が「京」で得られた成果を紹介した。

TCCI:

i) 3rd International Conference on Molecular Simulation (ICMS 2013、第3回分子シミュレーション国際会議)

11 月 18-20 日 神戸コンベンションセンターにて開催。国内から 240 名、海外から 28 名の研究者や学生が参加した。参加国数は、日本も含めて 16 개국。招待講演として口頭発表 31 件とポスター講演として 175 件の発表が 3 日間にわたり展開され、分子シミュレーションの基礎から応用へ幅広く活気ある議論が行われた。

CMRI:

i) TOMBO 20th Anniversary and Russian Megagrant Opening Conference (報告書 30)

平成 25 年 8 月 21(水)-22 日(木) 東北大学片平キャンパスにて開催したが、2 日目の 22 日は上の iv) に記載した計算材料科学の分野振興に関わる研究会の一環として、特別支援課題「ナノクラスターから結晶までの機能性材料の全電子スペクトルとダイナミクス」に特化した討論会を行った。参加者は 50 人で、基調講演 1 件、招待講演 9 件、一般講演 7 件と、極めて盛会であった。

ii) The 8th General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization) (報告書 31)

平成 25 年 11 月 7(木)-9 日(土) に仙台松島にて開催された上記の国際集会を共催した。場所は、東北大学さくらホールおよび、ホテル松島大観荘であり、出席者総数は 88 人を数えた。基調講演 2 件、招待講演 14 件、一般講演 20 件、ポスター発表 31 件を数え盛会であった。この分野に活躍する外国人研究者、特にアジア地域の研究者との交流に実をあげた。ACCMS は CMRI の運営委員の一人である川添名誉教授の研究室が中心となって開催をしているものであり、CMRI がこれまでから公式なサポート体制をとってきた。アジアの計算材料科学の振興に対して着実に大きな貢献をしていると思われる。

3) 産官学連携の促進

本年度は経産省プロジェクトや文科省プロジェクトでナショナル・プロジェクトとして取り上げられている研究テーマの中から、二次電池や高性能磁石の話題を取り上げ、企業・研究機関・大学でこれらの研究テーマに関した実験開発研究を行っておられる方々、計算シミュレーション研究を行っておられる方々にお話しいただいた。あまり企業テーマに偏りすぎると、本研究会への大学からの参加者が少なくなってしまう事も懸念され、今回のテーマ選定にはそれも考慮し、また講演者の選定にはその事をご配慮願うように、各々の会の世話人方々にお願いした。企業⇄大学・研究機関の間で良いキャチボールが出来る雰囲気を醸成する事を目指して、今後 CMSI 産官学連続研究会を継続して開催して行く予定である。

i) 第7回産官学連続研究会 (報告書 33)

「電気化学系の第一原理シミュレーションからわかったこと・わかること ～高性能電池開発にむけて～」

(11月 21 日 秋葉原ダイビルにて開催)

計算科学シミュレーションの大規模化、高度化にともない、従来扱うことが難しかった電池材料のシミュレーションも可能になってきたが、最先端のシミュレーション研究のシーズと開発現場のニーズに少なからずギャップがあることも同時に明らかになってきた。開発現場での課題設定とそれに合うシミュレーションモデルの構築、人材育成やノウハウの伝承の難しさから、電池材料開発において計算科学シミュレーションは広く普及している訳ではない。そこで、これらの問題に直面している企業の開発現場の研究者と理論・シミュレーション研究を行っている大学・研究機関の研究者の対話を促し、計算科学シミュレーションによる電池材料開発の展望を議論するために、産官学からそれぞれ 5 名、1 名、2 名の研究者を招き、最新の研究成果の発表とともに活発な議論を行った。特に、企業内の材料開発者が何を計算科学シミュレーションに期待し、どのような結果を必要としているかに関して詳細に議論された。大学、研究機関、企業内の計算シミュレーション研究者及び実験開発研究者等、幅広い分野から 87 名が参加し、大盛況のうちに終了した。

ii) 第8回産官学連続研究会 (報告書 35)

「永久磁石研究の最前線: 計算科学的アプローチの課題と展望」

(2 月 5 日 秋葉原ダイビルにて開催)

低消費電力社会実現の基盤技術として、磁石研究がクローズアップされている。過去30年間、最強磁石の座にあるネオジム磁石は、大きな磁化を持つ一方で高温での保磁力が弱点で、ハイブリッド車や電気自動車で使用可能な希少元素フリー高性能磁石の開発が大きな課題になっている。この問題には元素戦略、マルチスケール、複雑界面、強電子相関など他の研究テーマと共通する課題も多く含まれ、基礎科学の観点からも注目を集めている。研究会は、ネオジム磁石の発明者である佐川真人(インターメタリックス)の特別講演ではじまった。保磁力機構の理解、新磁石化合物の提案など磁石研究の大きな課題と計算科学に対する期待が述べられた。続いて三宅隆(産業技術総合研究所)が理論研究を整理し、希土類の 4f 電子に対する高精度計算や界面を扱う大規模計算技術の現状が紹介された。石橋章司(産業技術総合研究所)は LDA+U+SO 法による希土類磁石の軌道磁気モーメントとスピン磁気モーメントの第一原理計算を報告した。佐久間昭正(東北大)は、結晶場理論に基づいた希土類磁石の磁気異方性の説明と、希土類磁石表面に対する適用例を紹介した。古屋篤史(富士通研究所)は Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) 方程式に基づいた連続体モデルの磁化反転シミュレーションの方法論と永久磁石材料への適用計算を発表した。最後に高尾正敏(大阪大学)と広沢哲(物質・材料研究機構)から有識者としてのコメントがよせられた。産官学、理論、実験を含む 53 名が参加し、近年再び注目を集めている磁石研究の全体像を知る入門的研究会、交流の場として好評を博した。

iii)産官学研究拠点としての活動

CMSI において製作、運営しているアプリケーションのポータルサイト「MateriApps」においてコンテンツの作成を担当し、アプリケーションの紹介文などのコンテンツを作成した。また、物性研と協力して、平成 27 年度の CMSI 配信講義「計算科学技術特論 A」の資料、動画をまとめて CMSI Web サイト上に「Web 講習会」として掲載した。さらに、普及活動の一貫としてともに平成 26 年 3 月に開催された応用物理学会、日本物理学会における CMSI ブース展示に協力し、「MateriApps」をメインとして CMSI の活動について産官学を対象とした広報活動を行うとともに、開発者と利用者双方の要望の抽出のためにアンケート収集を行った。それに加え、新たにテレビ会議システムを産総研に導入し、CMSI 関連の講義や講習会等の配信を行うための環境構築を行った。これは、計算物質科学の産業界を含めた普及、発展に向け、つくば地区における配信拠点のニーズを踏まえた上で、社会人教育等を含めた教育目的で導入したものである。今年度は東北大学で開催された配信セミナー「マルチスケールの計算材料科学」(2014 年 3 月 5 日)の配信を行った。

2. 2. 1. 2(4) 研究成果の普及

平成 25 年度は、企業、高校生、大学学部生を含む一般の読者を想定した広報誌 TORRENT を 2 冊発行した。CMSI 内若手メンバーに加え、計算物質科学に関連する外部の方にも焦点をあてた内容を盛り込んだ。また、ホームページをより充実させ、イベント、ニュース、研究成果、人材紹介、人材公募などの情報をわかりやすく発信することで、企業、他分野との人材交流を図った。また、ユーザーの視点に立ってアプリケーションの紹介や利用を促進し、また、ソフトウェアの開発・公開をサポートするための計算物質科学アプリケーションのポータルサイト「MateriApps」の運用を開始し、アプリケーションの効率的な開発と利用を促進するために、学会展示会への出展等を行った。また、PC に簡単に導入可能なアプリを USB に収めた「MateriApps LIVE!」を開発し、サンプルを配布してアプリニーズの調査を開始した。また、計算物質科学を一般社会にアピールしていくため、見える化シンポジウムを開催した。その活動の一環として、3D プリンターを購入し、分子構造の計算結果をリアルな 3D の分子模型として示す研究を開始した。

1) 広報誌の発行

①Torrent No.8 (2013 年 7 月発行) (日本語版 別冊 9、英語版 別冊 10)

<http://torrent.cms-initiative.jp/backnumber/torrent8> (バックナンバー参照)

日本語版 1500 部、英語版 500 部を発行。計算物質科学の「見える化」と題して、2013 年 3 月に開催した第 1 回「見える化」シンポジウムの開催報告を特集した。この中で、ネット配信講義および MateriApps の紹介を行った。その他、「ERmod」のアプリケーション開発者へのインタビュー記事、東大大学院で物理化学・量子化学を専攻し、卒業後武田薬品工業にて創薬に取り組む卒業生への拠点研究員によるインタビュー記事など。さらに、CMSI の拠点紹介として東北大学金属材料研究所にスポットを当てた。

②Torrent No.9 (2014 年 3 月発行) (日本語版 別冊 11、英語版 別冊 12)

<http://torrent.cms-initiative.jp/> (最新号参照)

日本語版 1500 部、英語版 500 部を発行。2013 年 10 月に開催した CMSI international Satellite Meeting および International Symposium を特集し、CMSI の国際交流活動を紹介。また、戦略分野間の連携をテーマに、分野 1 との連携シンポジウム、および分野 5 との異分野交流研究会を紹介した。その他は、京都工芸繊維大学大学院にて機械システム工学を専攻し、卒業後神戸製鋼所の解析技術研究室の研究者として活躍する卒業生へのインタビュー記事、また CMSI の拠点紹介として自然科学研究機構分子科学研究所を取り上げた。

③Torrent Web

<http://torrent.cms-initiative.jp/>

Web サイトの改訂に伴い、CMSI の三本柱の一つとして、Torrent Web を独立させた。CMSI Web のトップページに最新号の表紙を掲載し、そこからリンクを張ることでアクセスしやすくした。記事検索を簡単に行えるよう各記事にタグ付けをし、「目的から記事を探す」タブにすべての記事が、シリーズごとあるいはテーマごとに分類されるようにした。また「バックナンバー」タブを作り、発行年ごとに過去の Torrent をまとめ見やすくした。

2) ソフトウェア開発・公開のサポート

物質科学シミュレーションのポータルサイト「MateriApps」を立ち上げ、運用を開始した。MateriApps では、物質科学における主要なアプリケーションを 100 本以上収集し、その情報を掲載している。加えて、開発者の生の声も紹介することで、アプリだけでなく開発者自身の「見える化」も進めた。アプリは研究対象やアルゴリズムなどから柔軟に検索が行えるようになっている。アプリごとに、インストール方法や使い方、機能拡張などをオープン

に議論する場としての「フォーラム」機能を備えており、計算科学の専門家だけでなく、理論家や実験家などへの、計算物質科学シミュレーションの普及を図っている。また、講習会を開催しているアプリについては、その資料を MateriApps に掲載し、オンラインでアプリの使い方について学べるような環境を整備した。ソフトウェアの開発・公開をサポートする環境として、ソフトウェアのソースコード管理システムに関する情報を CMSI web に掲載した。さらに、MateriApps で紹介されているアプリのうち、オープンソースかつ PC に導入可能なアプリを収めた「MateriApps LIVE!」を開発・公開した。MateriApps LIVE! USB には、OS (Debian GNU/Linux), エディタ, 解析ツールなど 使い始めるのに必要な環境は全て収められており、ノート PC などで手軽にシミュレーションを開始することができる。物理学会、応用物理学会のブース展示において MateriApps LIVE! USB のサンプルを配布するなど、アプリニーズの調査を開始した。

3) ホームページにおける情報発信

Web サイトの大幅改訂を行い、CMSI Web, MateriApps, Torrent Web の三本柱サイトを独立させた。ここでは CMSI Web について報告する。平成 24 年度に引き続き、ニュース・公募情報、イベント情報(主催・共催・協賛)をタイムリーに掲載し、不定期に発行するメールマガジンと連動させることで、Web へのさらなる誘導を図った。ニュースについては受賞記事をできる限り掲載し、研究員の活躍を広く知らせる努力を行った。各イベントにはタグ付けをして、イベントの種類から検索できるようにし、HP 訪問者がどのイベントに参加すればよいのか理解しやすくした。

4) シミュレーション結果の公開

計算物質科学の普及を促進する活動として、結果の可視化がある。可視化とは、計算した原子や分子の位置情報を3次元的、もしくは、時間変化も含めて立体映像化、動画化することである。可視化の効果のひとつは、結果を感覚的にも理解しやすくすること、また、他人に結果を伝えるための手段としても有効に活用できる。もうひとつの目的は、新たなサイエンスの可能性の探索がある。3月8日(土)、秋葉原 UDX シアターにて開催した**第2回 CMSI 見える化シンポジウム**では、「電子を魅せる」をテーマとして、電子における量子力学的効果の面白さや計算物質科学の成果をどのように伝えていくかについて議論を行った。また、CMSI 神戸拠点、京都工芸繊維大学、岡山大学の3拠点に3Dプリンターを導入し、シミュレーションで得られた分子構造の計算結果をリアルな3Dの分子模型として示す研究を開始した。

5) プレスリリース

次のプレスリリースを行った。

(1) 平成 25 年 8 月 1 日

「京」を用いてリチウムイオン電池電解液の還元反応機構を解明

-電池電極と電解液の材料・素材開発に関する実験と計算の連携による発表

-「京」の計算資源は産業利用課題(研究代表: 富士フィルム・奥野幸洋)にて実施

(2) 平成 25 年 8 月 22 日

高温超電導の舞台で従来の理解を覆す電子構造を理論(スパコンによる計算)と実験の協力で発見

-銅酸化物が超電導になる直前の電子状態を、従来の予想を覆して、超電導になってからの電子状態と全く異なることを世界で初めて理論予測と実験実証で示した

(3) 平成 25 年 10 月 11 日

「京」が拓く計算物質科学”国際シンポジウム開催のお知らせ

～CMSI International Symposium 2013～”

(4)平成 26 年 3 月 6 日

メタンハイドレートからメタンを回収するメカニズムをスパコン「京」で解明

(5)平成 25 年 3 月 17 日

PC で簡単に物質科学シミュレーションが可能となる、“MateriApps LIVE!”を開発

～「京」でも利用している複数のアプリケーションソフトとオペレーションシステムを USB に集約！～”

(6)平成 26 年 3 月 24 日

濃い液体が秘める新機能を発見、新世代の電解液へ -電池の充電時間が1/3以下に-

5) 広報イベント・会議

①第2回 CMSI 見える化シンポジウム（報告書 36）

3 月 8 日（土）、秋葉原 UDX シアターにて、「電子を魅せる」をテーマとして開催。参加者は 90 名。昨年に続き、オープニングは「電子が活躍するナノの世界へようこそ」と題して、分子、原子の 3D 映像とコントラバス&シンセサイザー生演奏のシンクロで、ナノの世界を参加者に体感してもらった。

今回は、「電子」の軌道や密度、電子に関連した物質の機能や反応に関して、どのように見せて、魅せるのか、現状の課題を整理し、講演者の方々からいただく講演内容を参考に、参加者間で今後の取り組みや課題を共有し、目標実現に向けた具体的活動は何かをパネルディスカッションの場で議論した。パネリストと会場の境なく議論が行われ盛り上がりを見せた。

シアターの外では併設展示会を行い、以下のブースが出展した。

- ・「電子のイメージを創る」(埼玉大)
- ・「3D プリンターで分子を創る」(日本バイナリー)
- ・「3D 眼鏡型ディスプレイによる物質探検」(岡山大)
- ・「MateriApps」(CMSI 東大)
- ・「次世代シミュレーション技術者教育推進室」(豊橋技術科学大)
- ・「“芸術と科学の融合”映像」(九工大、名大)

6) 展示会への出展

① 計算科学研究機構(AICS)一般公開

10 月 19 日（土）、計算科学研究機構(AICS)にて行われ、全体で 2,150 名の一般参加があった。例年通り「科学の広場」において、5 分野がブース展示を行い、CMSI は以下を展示した。拠点研究員 3 名と研究者 1 名が説明要員としてブースに立った。

- ・スパコンによるナンプレ(数独)の難問読解 (スパコンで作成したナンプレを来場者に配布して解いてもらう)
- ・スパコンによるナンプレ(数独)の難問作成に関するブースプレゼン
- ・CMSI の紹介と成果の紹介(ポスター4枚)(図 2.2.1.2(4)-1)
- ・Torrent の紹介
- ・RSDFT の動画

ナンプレでブース来訪者を多く集め、CMSI の活動および成果を一般市民にもわかりやすく説明した。

② 東大柏キャンパス一般公開

10 月 25 日(金)、東京大学物性研究所にて行われた(台風により 26 日(土)は中止) 東大柏キャンパス一般公開にてポスター展示を行った。これまでにない機能を持つ物質を設計し、新しい機能性物質を創るために、CMSI の研究者が京などのスーパーコンピュータ上で、素材となる原子の役割を計算していることなどを一般市民にわかりやすく紹介した。(図 2.2.1.2(4)-1)

③ Supercomputing Conference 2013 (SC13)

11 月 17-22 日米国コロラド州デンバーにて開催された SC13 にてブース展示を行った。東京大学情報基盤センターと物性研計算科学研究センターの共同出展ブース Oakleaf/Kashiwa Allliance と、AICS ブースの両方にて、ポスター展示、ブースプレゼンを行った。

Oakleaf/Kashiwa Allliance ブースで、CMSI は Lead to new materials and energy creation という題名で計算科学研究センター(CCMS)を紹介し、そこでの CMSI の役割を説明した。(図 2.2.1.2(4)-2) また、以下のようにブースプレゼンを行い、CMSI の活動をアピールした。

- Exact diagonalization package using our integrated interface for parallel eigensolvers (拠点研究員 坂下達哉)
- MateriApps: Portal Site for Materials Science Simulation (拠点研究員 五十嵐亮)
- Supercomputing at the Institute for Solid State Physics, the University of Tokyo (CCMS 笠松秀輔)

AICS ブースでは、CMSI の活動紹介のポスター展示およびモニターで 5 分間スライドを流した。またブースプレゼンでは、拠点研究員の五十嵐亮が MateriApps: Portal Site for Materials Science Simulation というタイトルで発表を行った。

④ 日本物理学会、応用物理学会への MateriApps の出展

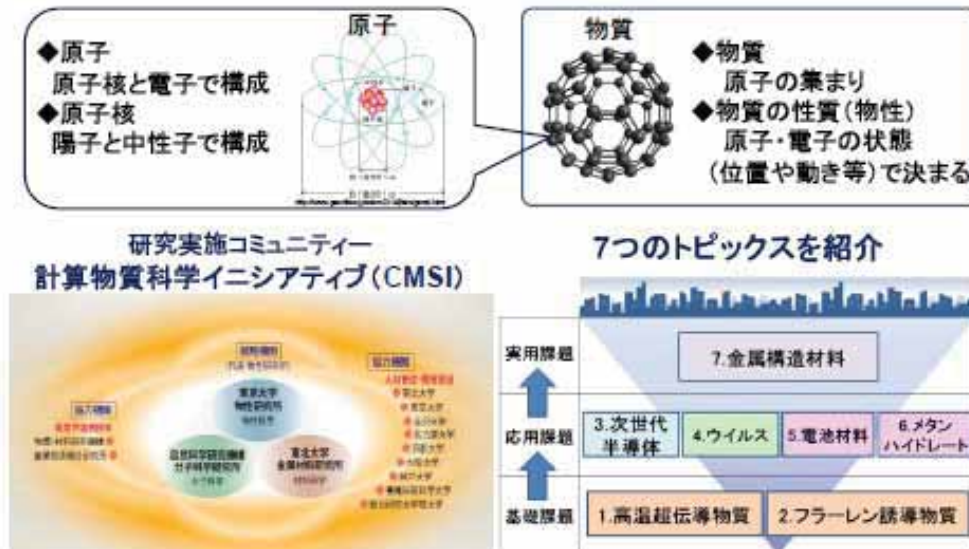
MateriApps の普及のために、次の 2 つの展示会に出展した。

3 月 17 -20 日 第 61 回応用物理学会春季学術講演会展示会「The 61st JSAP Spring Meeting 2014」(場所: 青山学院大学相模原キャンパス)、3 月 27 -30 日 日本物理学会第 69 回年次大会 (場所: 東海大学湘南キャンパス)。

ブースでは、最先端のアプリをパッケージにした MateriApps LIVE! インストール済みの USB メモリを先着 50 名に配布し、複数のアプリを気軽に試してもらえよう工夫した。その他、ディスプレイ上で、MateriApps サイトの紹介、MateriApps LIVE! の実演を行った。ポスターパネル((図 2.2.1.2(4)-3)を展示した。また、来訪者にアンケート調査を行い、応用物理学会では 80 名、日本物理学会では 89 名から回答を得られた。

「新物質・エネルギー創成」

物質を構成する原子・電子の状態を計算で予測し、
新材料・デバイスを創成する



1. 高温超伝導物質

高温超伝導の仕組みの解明

高温超伝導のニーズ

- ◆低ロスで大電流を送電したいが、僅かな抵抗が熱になりロス発生。
- ⇒抵抗0の高温超伝導材料を利用したい！



超伝導送電線
(東電電工)



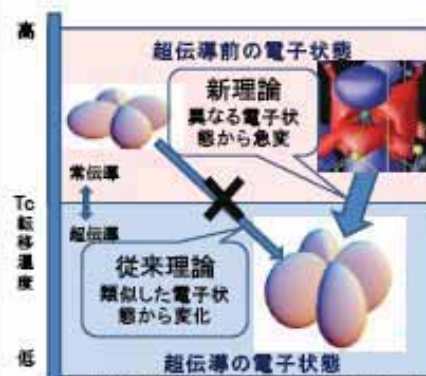
超伝導磁石を利用(JR)

- ・一番高い温度で超伝導を示す銅系酸化物でも -135°C に冷却が必要！

⇒できるだけ高い温度で超伝導を示す物質が欲しい！

電子エネルギー状態を計算

- ◆超伝導前後で電子エネルギー状態を計算。
- ⇒まったく異なる状態であることを発見！



銅系高温超伝導物質の例($\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCuO}_{9-x}$)

より高温で超伝導に変化する物質探査に指針！

図 2.2.1.2(4)-1 (ページ 1/4)

(出展:AICS 一般公開、東大柏キャンパス一般公開)

2. フラーレン誘導物質

フラーレン分子間力による結合機構の解明

フラーレンへの期待

- ◆安定で化学反応性に富み、太陽電池や化粧品等、多用途に利用。
- ⇒分子間力結合の電子状態計算が出来ず新機能分子の特性予測が困難。



- ・分子間力等の弱い結合も考慮した、新規の計算方法開発が必要。

分子間力結合の場所とその特性を予測したい！

電子状態を超高精度計算

- ◆電子状態精密計算新手法を開発。
- ⇒わずかなエネルギー差も計算し、結合部位の特定が可能になった。



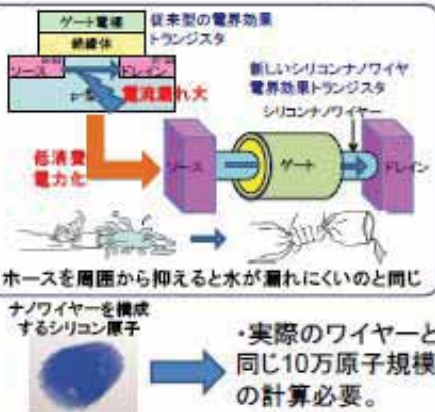
分子間結合力の計算で革新的機能を持つ分子設計へ！

3. 次世代半導体

電子の波動性を考慮した次世代ナノデバイス設計

微細化限界を打破したい

- ◆回路幅が20nm以下で電流漏れ大
- ⇒シリコンナノワイヤ型で漏れ防止。



ナノ構造で生じる電子の波の性質も含めて計算したい！

電子密度を大規模計算

- ◆世界最高速電子密度計算法を開発。
- ⇒電子の波の性質を考慮した電子密度の大規模計算に成功。



ナノサイズの省エネデバイス設計への適用を目指す！

図 2.2.1.2(4)-1 (ページ 2/4)

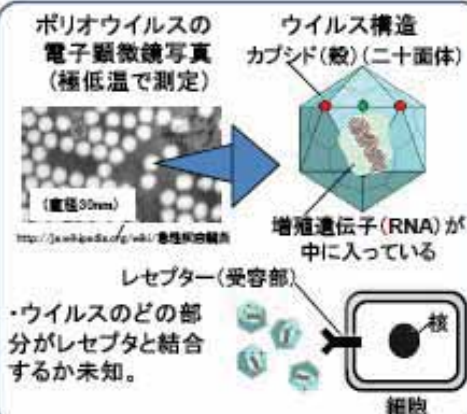
(出展:AICS 一般公開、東大柏キャンパス一般公開)

4. ウイルス

ウイルスの振る舞いを解明し感染予防へ

ウイルス感染を防ぎたい

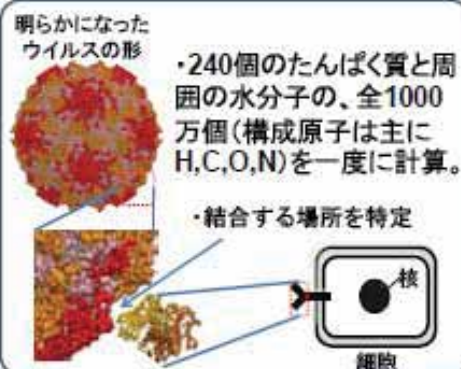
- ◆ウイルスの感染過程を調べたい。
⇒常温で観察することができない。



ウイルス丸ごと1個を計算して、感染までの振る舞いを計算！

大規模分子の動きを計算

- ◆ウイルス全1000万個の原子の動きを計算する手法を新開発！
⇒レセプターとの結合場所を特定。



結合を阻害する薬の開発に有用な情報を与える！

5. 電池材料

電池寿命・安全性向上に向けた電極反応計算

リチウムイオン電池の課題

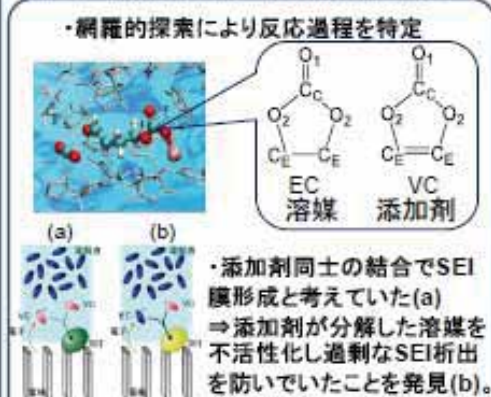
- ◆充放電を繰り返しても特性が劣化しない電池が要望
⇒電極界面の化学反応の改善が必要



電解液中の化学反応の仕組みを解明したい！

電解液中の化学反応を計算

- ◆電子状態計算、分子動力学計算、自由エネルギー計算を融合⇒反応過程を特定



電極上SEI膜の長期安定に必要な電極・電解液開発に指針！

図 2.2.1.2(4)-1 (ページ 3/4)

(出展:AICS 一般公開、東大柏キャンパス一般公開)

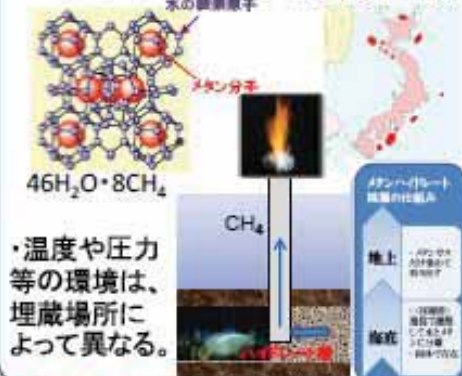
6.メタンハイドレート

メタンハイドレートの効率的採掘に向けて

日本の資源開発を加速

◆ハイドレートの分解過程の理解不足。
⇒効率的な採掘が困難。

メタンハイドレート構造
水の籠内にメタン
水の酸素原子
メタン分子
46H₂O・8CH₄



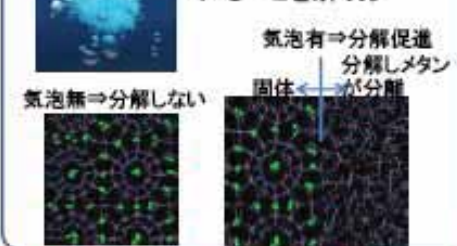
温度・圧力に対して水・メタンへ
の分解の仕組みを調べる！

水とメタンへの分解過程計算

◆原子100万個レベルの結晶の温度・
圧力を変化させて分解過程を計算。
⇒各環境下における分解機構を解明。

メタンガス気泡生成
過程を可視化

・メタンの気泡ができ
ると急激に分解が促進さ
れることを解明。



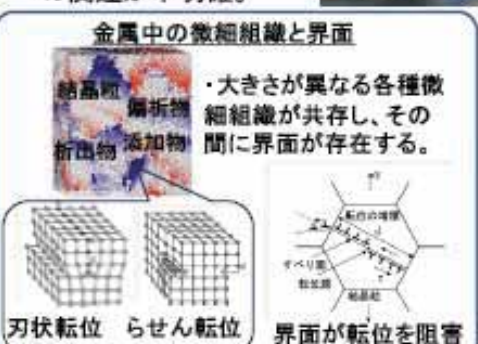
気泡生成の制御でメタンの効
率的採掘が可能に！

7.金属構造材料

強くてしなやかな金属材料の開発

微細組織と特性の関係が未知

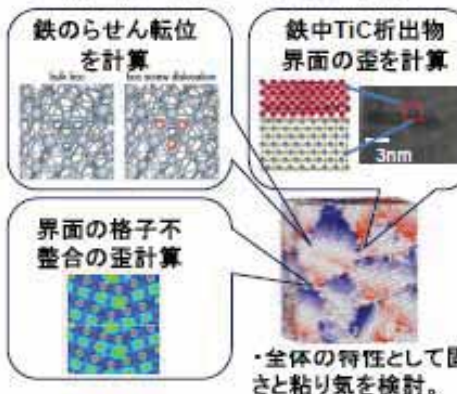
◆構造材料として必要な特性である、
固さと粘り気の両方を満たしたい！
⇒複雑な微細組織と特性
の関連が不明確。



微細組織・界面の制御と欠陥
の転位の制御が鍵！

微細組織の厳密連携計算

◆各微細組織の電子状態を計算し、
結果を連携させ全体構造特性を計算。
⇒金属全体の特性の推測が可能。



電子状態計算を出発点とする
材料設計で高性能長寿命化！

図 2.2.1.2(4)-1 (ページ 4/4)

(出展:AICS 一般公開、東大柏キャンパス一般公開)

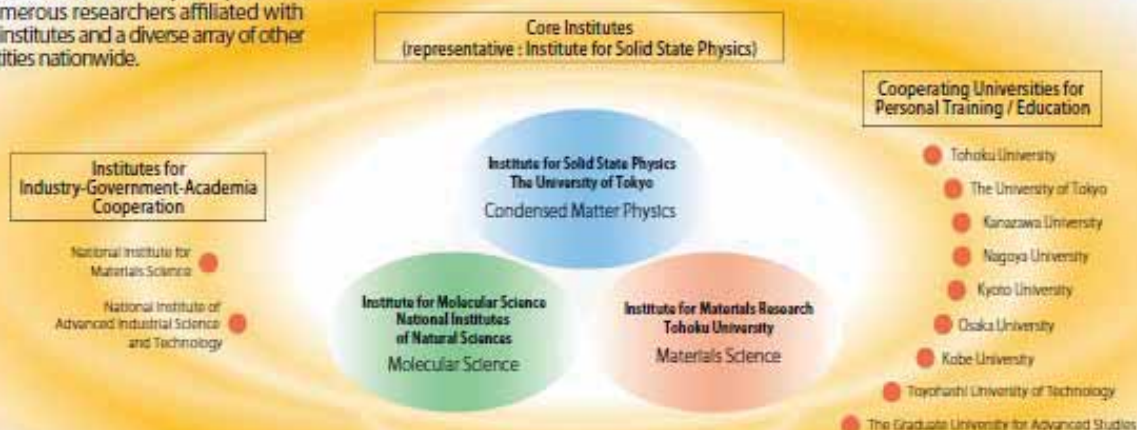
Strategic Programs for Innovative Research (SPIRE) Field 2 New Materials and Energy Creation Next Generation of Nanoscience Integrating Three Fields

Towards reality beyond the imagination

■ CMSI Network

CMSI is an open research community that benefits from the participation of numerous researchers affiliated with 14 institutes and a diverse array of other entities nationwide.

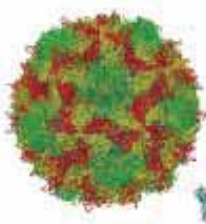
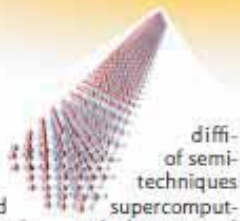
CMSI is a research network promoting Field 2 "New Materials and Energy Creation" within HPCI Strategy Program (SPIRE) of the MEXT, Japan.



■ CMSI Research Topics

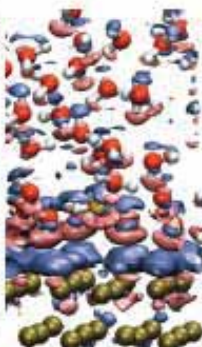
■ Next-generation advanced device science

As semiconductor devices become smaller and smaller, it will become difficult to design or predict the operation of semiconductor devices using the existing techniques. The advanced supercomputers will enable us to achieve simulations of whole practical nanoscale devices, based on electronic theory, and to develop guidelines for designing new devices that incorporate the quantum effects that control nano-level phenomena.



■ Molecular function and chemical conversion

Electronic states as well as structure and dynamics of nano-scale molecular assembly are investigated based on quantum chemical and molecular dynamics calculations. An example is virus in water. Very large-scale all-atom molecular dynamics simulations of virus using the advanced supercomputers enable investigations of infection and immunity at a molecular level, leading to control of virus and infectious diseases.



■ Energy conversion

Finding new materials that will revolutionize the ways in which we convert and store energy is one of the most urgent issues of the day. Simulations on a scale never before seen will identify the basic processes of fuel cells, methane hydrate and so on and locate promising materials. In this way, the computational materials science will build the foundation for next-generation energy technologies.

■ Basic science of novel quantum states / new materials

Achievements in basic research on material diversity and hierarchies, such as the discovery, elucidation, prediction of new concepts in physics and new quantum functionalities, are the intellectual property of humanity. At the same time, they are also an important source of future applied research. CMSI is pursuing state-of-the-art basic research into condensed matter physics and quantum chemistry, in areas such as the search for novel quantum states in strongly correlated quantum systems, elucidation of the dynamics of electron systems, prediction of the quantum finestructure of molecules, and emergence of new functionalities through fluctuations and dynamics.



■ Multiscale materials science

To develop novel materials with excellent performance, it is crucial to understand the multiscale features of materials from atoms and electrons to macroscopic behavior. We develop novel strategy and computational techniques to simulate the structure and properties of various metallic alloys via the multiscale behaviors with high accuracy and reliability through the large-scale computations by the K computer.

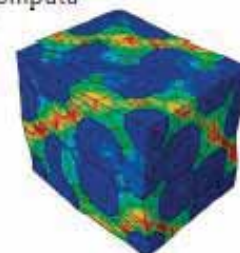


図 2.2.1.2(4)-2 (ページ 1/2)
(出展: SC13 AICS 展示ブース)

Center of Computational Materials Science (CCMS)

The University of Tokyo, Institution of solid state physics

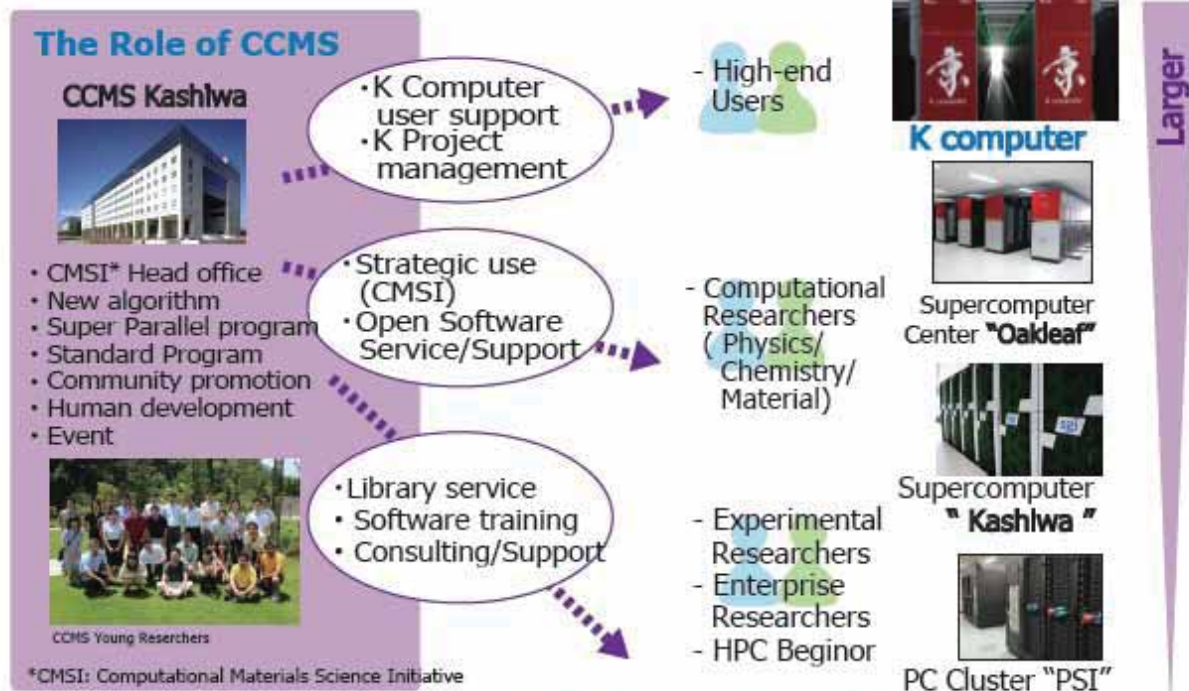
Lead to new materials and energy creation



Oakleaf/Kashiwa Alliance

Information Technology Center The Institute for Solid State Physics

CCMS encourage the cutting edge Material Sciences by HPC



CCMS Kobe Branch

- Located in the same building with K Computer
- Forum among researchers with K computer.
- Technical Consulting on Massively Parallelized Computation
- Live-in Meeting
- Software Usage Workshop
- Meeting to share "Know how"



Collaboration with Experimenters

- Bridge between Physics Experimenter Researcher and Computational Materials Scientist Researcher.
- With large experiment facility like SPring-8, SACLA, J-PARC
- With Important National Strategic Project like Substitution of Critical Metal.



図 2.2.1.2(4)-2 (ページ 2/2)
(出展: SC13 Oakleaf/Kashiwa 展示ブース)

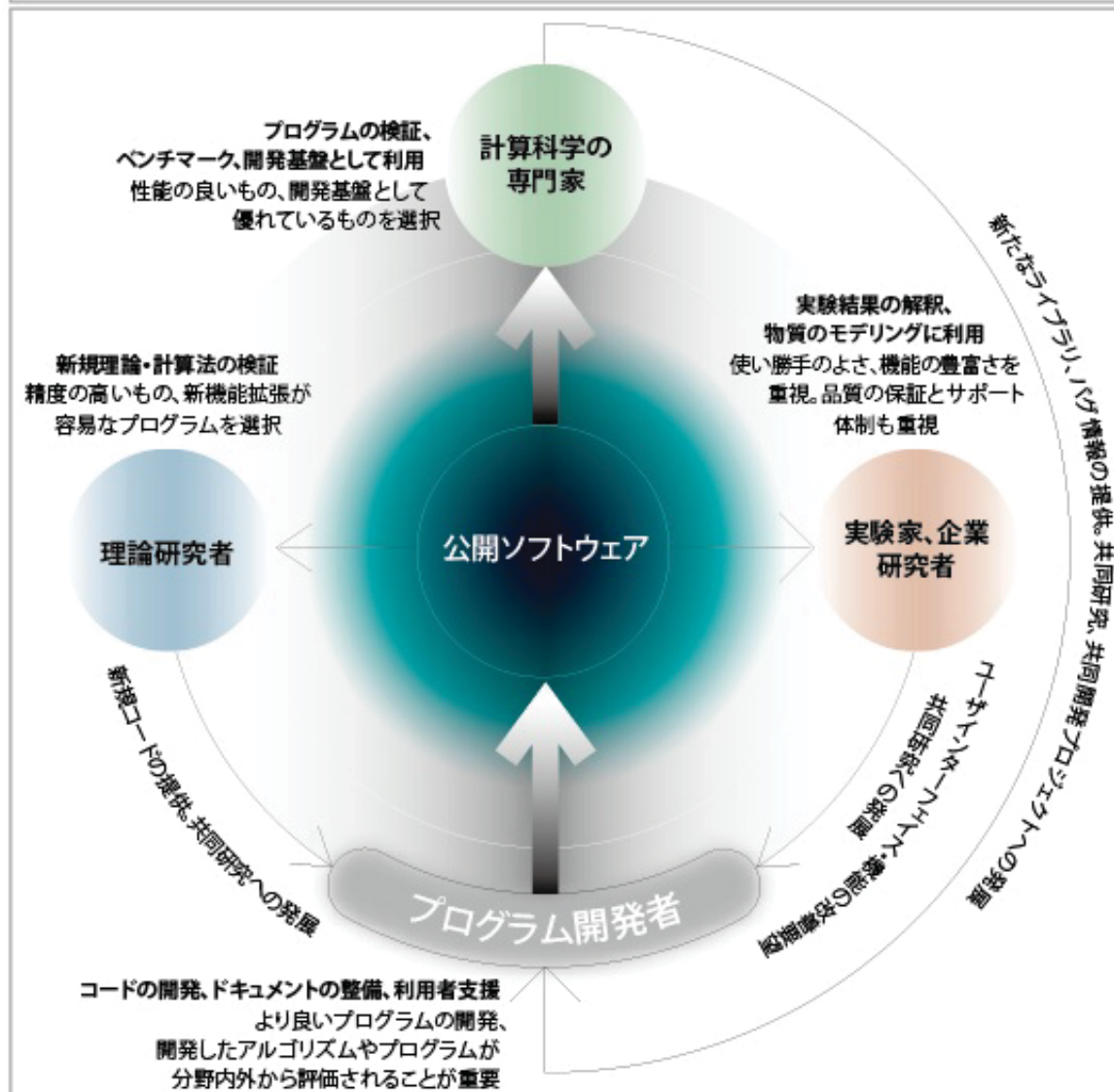
MateriApps

<http://ma.cms-initiative.jp/>

物質科学シミュレーションの ポータルサイト

物質科学における実験・計算・理論の協働を目指して

計算物質科学イニシアティブ (CMSI) では、物質科学シミュレーションのポータルサイト MateriApps を運営し、ユーザの視点に立ったコミュニティーコードの育成などを通じて、アプリケーション利用者と開発者の両者にとって役立つコミュニティーを創出します。



CMSI

掲載ソフトウェア募集中! <http://ma.cms-initiative.jp/>



図 2.2.1.2(4)-3 (ページ 1/4)

(出展: 応用物理学会、日本物理学会 展示ブース)



<http://ma.cms-initiative.jp/>

物質科学シミュレーションの ポータルサイト

MateriApps (マテリアップス) とは？

Q. MateriApps って何？

物質科学ソフトウェア(アプリ)のポータルサイトです。アプリの紹介及び開発者との交流を助け、計算物質科学コミュニティの形成を目指しています。

Q. 興味のあるソフトウェアを探すには？

「アプリ検索」を利用して「計算手法」や「対象となる物質」などから逆引きできます。

Q. 開発者と交流するには？

フォーラムで開発者に直接質問できます。

物質科学研究者のための MateriApps

Q. アプリは何の役にたつの？

MateriApps で紹介されているアプリを利用することで、候補物質のスクリーニングや、実験結果の解釈が素早くできるようになります。

Q. アプリを簡単に試したい！

MateriApps LIVE! を利用して、インストール作業なしでアプリを試用できます。

Q. アプリの使い方がわからないのですが...

CMSI では毎月アプリの講習会を開催しています。開催情報は MateriApps に掲載しています。



MateriApps で紹介しているソフトウェア

Q. MateriApps にはどのくらいアプリがあるの？

100 を超えるアプリが登録されています。

Q. どんなアプリがあるの？

第一原理計算、分子動力学法などのアプリがあります。例えば、第一原理計算アプリでは、バンド計算、構造予測、物性評価ができます。また、分子動力学法アプリを使うと、溶液中の高分子の安定構造、動的性質などを調べることができます。



掲載ソフトウェア募集中！ <http://ma.cms-initiative.jp/>



図 2.2.1.2(4)-3 (ページ 2/4)
(出展: SC13 Oakleaf/Kashiwa 展示ブース)

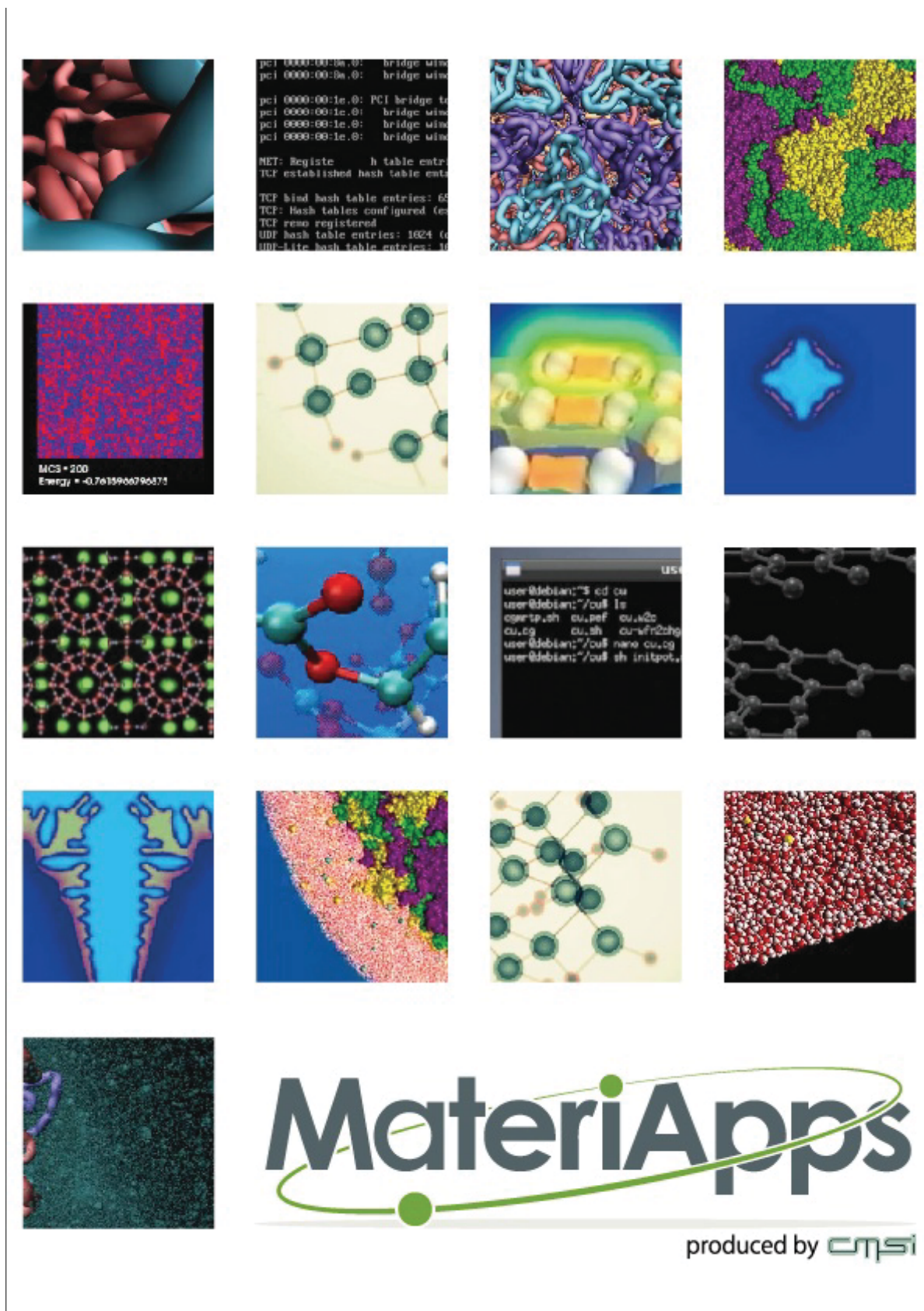


図 2.2.1.2(4)-3 (ページ 3/4)
(出展: SC13 Oakleaf/Kashiwa 展示ブース)

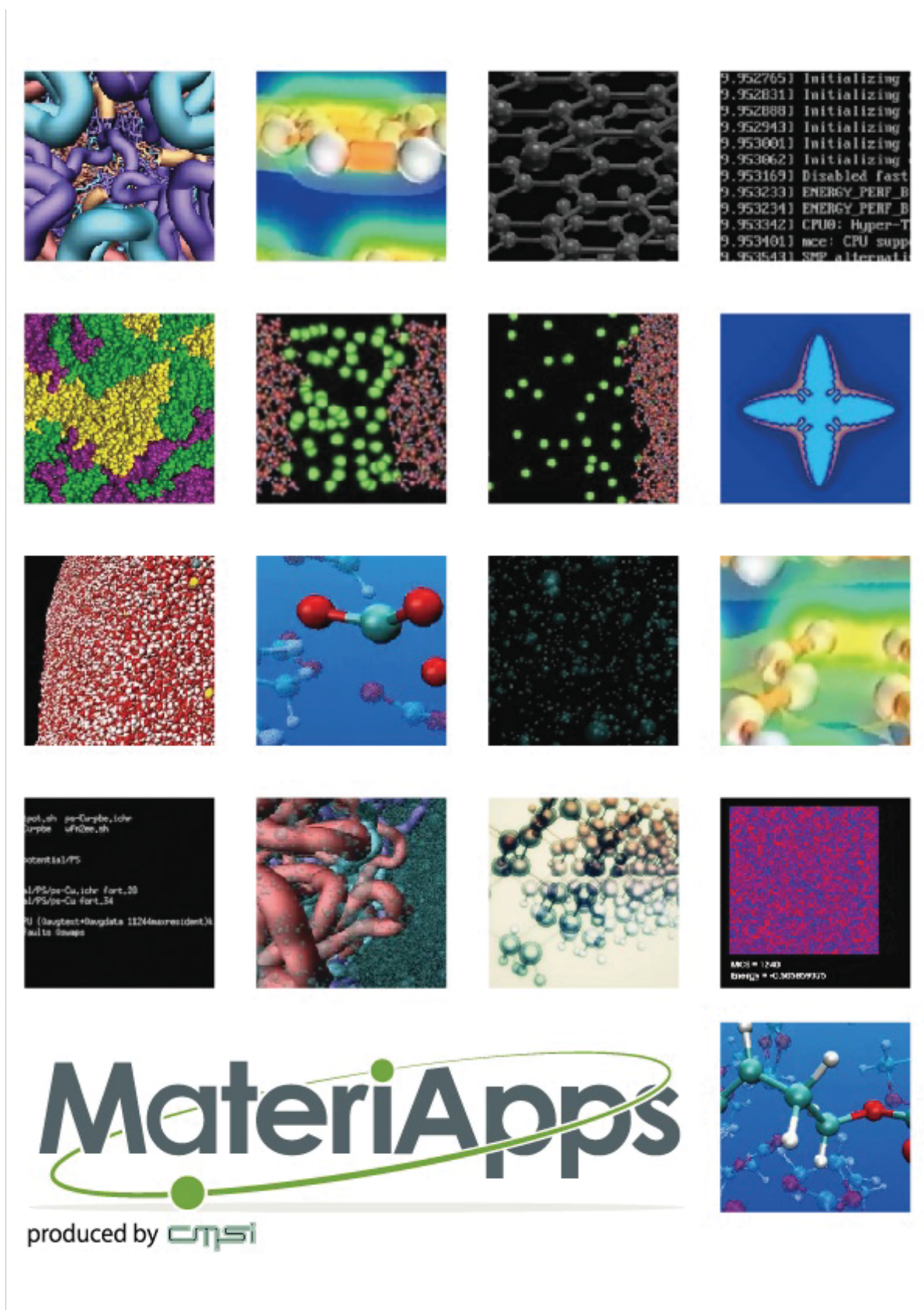


図 2.2.1.2(4)-3 (ページ 4/4)
(出展: SC13 Oakleaf/Kashiwa 展示ブース)

2. 2. 1. 2(5) 分野を超えた取り組みの推進

1) 計算科学研究機構(AICS)との連携 (AICS ブースでの展示協力)

①2013 International Supercomputing Conference (ISC'13)

6月16-20日 Leipzig, Germany にて開催された ISC13 の AICS ブースにて展示を行った。CMSI の概要と活動、字通空間密度汎関数法 RSDFT、大規模並列分子動力学ソフト MODYLAS に関するポスターを掲示し展示し、ブースで説明を行った。

②Supercomputing Conference 2013 (SC13)

11月17-22日 Denver, Colorado, USA にて開催された SC13 の AICS ブースにて展示、ブースプレゼンを行った。CMSI の活動紹介のポスター展示およびモニターで5分間スライドを流すとともに、MateriApps に関するブースプレゼンを行った。

③第4回AICS国際シンポジウム

計算科学研究機構と戦略5分野の共催で、12月2-3日に計算科学研究機構(AICS)において**第4回AICS国際シンポジウム**を開催した。計算科学と計算機科学の融合による新しい科学の創造を目指し、国内外の著名な研究者を集め、最先端の研究に関する情報交換をするとともに、「京」を用いた国際連携のあり方や将来のハイパフォーマンス・コンピューティングのあり方に関して議論を行った。

2) 他の戦略機関との連携

①第3回 HPCI 戦略プログラム分野2×分野5 異分野交流研究会(報告書37)

2013年11月13日(水)から14日(木)まで、自然科学研究機構分子科学研究所において第3回異分野交流会を開催した。第3回を迎えた今回の研究会は、「量子多体系のダイナミクス計算ー原子核から物質科学までー」を主題に掲げ、量子多体系の励起・応答・反応といったダイナミクスに対する計算をテーマに取り上げ、サブアトムな原子核分野からは光応答や衝突現象に対する量子ダイナミクス計算、分子科学・物質科学の分野からは光電子ダイナミクスの計算を中心として議論を行った。16組の招待講演と約40名の参加者と共に非常に有意義かつ活発な討論が行われた。実際、質疑応答時間中はもちろんのこと、発表途中にもひっきりなしに質問が飛び交い、タイムスケジュール通りには全く進行せず、大幅に時間を超過した研究会であった。しかし、これは非常に密度の濃い議論が出来た事を意味しており、研究会は成功裏に終わった。

②HPCI 戦略プログラム分野1×分野2シンポジウム in 名大(報告書38)

「生体分子複合システムを計算する」-相互作用は何をもたらすのか-

大規模な分子系に関する計算は、生命科学と物質科学の双方にとってのフロンティアである。「生体分子複合システムを計算する-相互作用は何をもたらすのか-」というタイトルにより、分野1×分野2のシンポジウムを12月17日に名古屋大にて開催した。参加者は約60名。分野1から4名、分野2から4名、HPCI 以外から2名の講演者により、リガンド結合、生体膜、膜タンパク質、ヌクレオソーム、分子モーターなど、相互作用が誘起する分子機能発現メカニズムに焦点をあてた講演が行われた。生命と物質の両側面から、分野を超えて生体分子複合システムのシミュレーションについて討論が行われ、参加者アンケートで回収された意見には、企業の参加者からも積極的な感想が寄せられた。

3) 実験研究者との連携

①元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>・大型研究施設(CMSI・SPring-8・J-PARC・KEK)連携シンポジウ

ム 2014～大型研究施設を利用した物質・材料研究の課題共有と共創～（報告書 39）

H26 年 2/28(金)～3/1(土)の 2 日間、東京大学柏キャンパス物性研究所にて掲題シンポジウムを開催した。今回は元素戦略 4 拠点が合同で開催する初めての公開シンポジウムであり、大型施設関係、および、各元素戦略拠点に関心のある物質科学研究者が一堂に会した。参加者数は 2/28(金)は 169 名、3/1(土)は 137 名、のべ 204 名であった。また、2/28(金)午前中に行われた物性研の見学には 28 名が参加し、強磁場とコヒーレントレーザの施設を見学した。2/28(金)に実施した懇親会には 88 名の参加があった。

初日は 4 つの元素戦略拠点代表研究者と 4 つの大型施設の代表者の講演、および、パネル討論を開催し、サマリーとして 1)基礎科学と社会をつなぐ元素戦略拠点であること、2)重要ニーズがあれば大型研究施設をフレキシブルに活用できる仕組み構築、3)計測データの共有化と大規模実験施設の大量データ解析や結果予測に向けた材料インフォマティクス等の新たな取り組み化の必要性、4)広い視野をもって物質・材料研究に取り組める人材育成、が得られた。2日目は、8 件の口頭発表と 58 件のポスターセッションを実施した。サマリーとして、1)課題解決には基礎的な研究の積み重ねが大切であること、2)論文とともに特許取得も重要施策であること、3)課題解決のために元素戦略拠点外からの協力も得られる仕組みの構築、4)プロジェクト継続のための成果創出の重要性、5)大型研究施設を核とした拠点間連携促進、が得られた。CMSI としては開発しているアプリケーションの紹介、および、「京」で実施している研究の紹介を行って、元素戦略の課題解決のためにどのような手法を開発していくべきかを議論することができた。

2. 2. 1. 2(6) 戦略分野の研究者を支える研究支援

1) 研究支援拠点の整備

平成 23 年度より、AICS 内に CMSI の神戸拠点として東大物性研究所の分室を設置し、物性、分子、材料計算科学研究者の京利用のための支援活動を行っている。平成 23 年度中から 2 名の特任教員が神戸計算科学研究機構内に常駐しており、平成 24 年度からは 1 名の拠点研究員、平成 25 年度からさらに 1 名を追加配置し、計算科学研究機構の共通基盤研究や分野融合研究等と積極的に連携を推進した。トータルとして、AICS 内の CMSI 神戸拠点には、東大物性研常勤スタッフが教員 1 名、研究員 1 名、事務補佐員 2、神戸大常勤スタッフが教員 1 名、研究員 1 名の、合計 6 名が常駐する。(内 1 名は平成 26 年 1 月に退職) 常勤スタッフは、滞在中の研究者との間で京の利用ノウハウに関する情報交換を行い、ノウハウを蓄積して新たな利用者に継承していく役割を担った。また、ミーティングのためのスペースを活用し、以下に記す高度化サポートや CMSI 神戸ハンズオン、個別の情報交換などに役立てた。平成 23 年度末に神戸拠点に導入した高速なネットワークとストレージを備えた「データポスト処理システム」についても、京で大規模なシミュレーションを行う際に必要となる、データの预处理、後処理、あるいは計算結果の可視化をより効率的に行えるよう、アプリケーション導入などの環境整備を行い、また神戸拠点におけるアプリケーション講習会(CMSI 神戸ハンズオン)にも積極的に活用した。また、平成 25 年度には 3D プリンターを導入し、シミュレーションで得られた分子構造の計算結果をリアルな 3D の分子模型として示す研究を開始した。

2) 「京」・HPCI 利用者の支援

戦略プログラム利用枠のうち一般配分枠は、優先課題外の重点課題による利用が主となるが、その一部を「計算各推進体制の構築」のための枠として確保し、特別支援課題・支援課題のアプリケーションの高度化、一般利用枠への申請のための準備、あるいは拠点研究員による新しいアルゴリズムの開発に利用した。利用者支援としては、平成 24 年度からの CMSI 神戸拠点を利用した「高度化コンサルティング」を平成 25 年度も継続して行った。これは、個別のアプリについて、CMSI 神戸拠点内で京あるいは東大情報基盤センターの FX10 を使いながら、富士通 SE から高度化についてのコンサルティングを受けるものである。また、CMSI 神戸拠点 Wiki の内容の充実、拠点内への TV 会議システムの設置など、神戸拠点滞在者のための研究・情報交換環境の整備を行った。

3) 拠点研究員による支援

i) 拠点研究員についての総括・配置状況

大規模並列計算は、計算機の特性を把握しながらアプリケーションを高度化する必要があるため、個人や個々の研究グループだけで対応するのは困難を伴う。大規模並列計算を戦略分野の研究者に普及発展させるためには、計算資源を有する機関がその計算機の特性を考慮しながらアプリケーションの高度化に対する支援活動を行うことが望ましい。そこで、各分野の拠点となる機関に拠点研究員を配置した。表 2.2.1.2(6)-1 に配置部門と、拠点研究員の各カテゴリ A～D 別の配置人数を示す。表の下には A～D のカテゴリの役割を示している。物性研に 7 名、分子研に 6 名、分子サブ拠点である東大総合文科に 2 名、金研に 1 名、東大院工に 0.5 名、また、産官学連携拠点である産総研に 1 名の合計 17.5 名を配置した。カテゴリ A の拠点研究員は神戸拠点、物性研にそれぞれ 1 名ずつ配置され、分野共通に利用できる先端的な要素技術の開発を行っている。また、カテゴリ B、C の拠点研究員は、重点課題の次点に位置する特別支援課題を中心に支援活動を行った。支援活動の結果は、添付資料 1 の中で示されている。また、表 2.2.1.2(6)-1 には、CMSI 教員の配置機関も示している。神戸に配置された教員は拠点研究員の活動を指導、統括する役割も担っており、次に示す若手技術交流会の企画、実施に関して、アドバイスをを行った。

表 2.2.1.2(6)-1 CMSI 教員、CMSI 拠点研究員雇用実績(平成 25 年度)

雇用機関	CMSI 特 任教員	CMSI 拠点研究員 *				合計
		A	B	C	D	
物性研(神戸拠点)	1	1				2
神戸大(神戸拠点)	1					1
物性研		1	3	1	1	6
分子研			5			6
				1		
東大・総合文化 (分子地域拠点)			2			2
金研	1		1			2
産総研 (産官学連携拠点)				1		1
東大院・工(教育拠点)	1.5		0.5			2.0
名大院・工(教育拠点)	1					1
阪大院・工(教育拠点)	1					1
合計	6.5	2	7.5	6.5	1.5	24

* 2つのカテゴリにまたがる場合は、各カテゴリを 0.5 人としてカウント

* カテゴリ (A) 分野共通に利用できる先端的な要素技術の開発

(B) 分野共通に利用できるアプリケーションの公開

(C) 複数の重点課題・支援課題におけるアプリケーション開発・実行支援

(D) アプリケーション公開・普及支援



計算物質科学イニシアティブ神戸拠点

<http://www.cms-initiative.jp/ja/research-support/about-kobe-support>



スーパーコンピュータ「京」が設置されている神戸ポートアイランドの理化学研究所計算科学研究機構 (AICS) 内に東京大学物性研究所計算物質科学研究センターの神戸分室が開設されています。この分室は「CMSI 神戸拠点」としての機能を持ち、「京」を利用する物性物理、分子科学、材料科学全ての分野の研究者の拠点となっています。CMSI 神戸拠点には 6 名のスタッフが常駐して、最新の大規模並列計算に関する情報の収集と展開に加え、神戸拠点を利用する CMSI 研究者の技術的・事務的なサポートを行っています。

アプリ高度化コンサルティング

CMSI 神戸拠点にて、コードの詳細情報を富士通 SE 他と共有し、実際にその場でコードやプロファイラの結果を見ながら、コンサルティングを行います。コンサルティングの例

- ・ソフトウェアの移植・実行
- ・性能・ボトルネック解析・アルゴリズムの改良
- ・ハイブリッド並列化

神戸ハンズオン

分野共通アプリケーション、ソフトウェア開発に有用なツールなどに関する講習会を毎月開催しています。講習会では、データポスト処理システム phi などを用い、実際にプログラムを実行しながら、講習を進めます。

- ・アプリケーションの例: FMO, ALPS, XTAPP, feram, Modylas
- ・ツールの例: バージョン管理システム

セミナー・研究会

計算科学研究機構では、異分野交流・融合の促進を目指し、さまざまなセミナー・研究会が定期的に開催されています。

- ・アプリ高度化合宿 TOKKUNI (CMSI 主催)
- ・「京」物性セミナー (CMSI 主催)
- ・オンライン配信講座・セミナー (CMSI 主催)
- ・共通基盤ワークショップ (AICS 主催)
- ・AICS Cafe (AICS 主催)

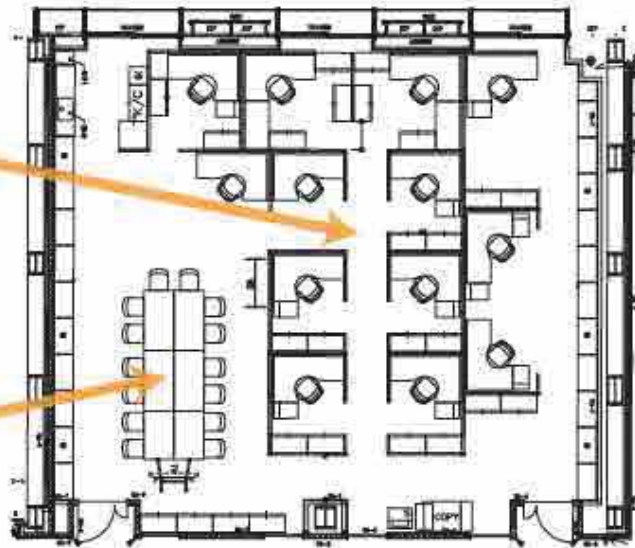
Work Space

神戸拠点には計 7 席のビジター用スペースが用意されています。(モニター・有線/無線 LAN 完備) CMSI 神戸拠点滞在中は自由に利用することができます。



Meeting Space

14 名で利用可能な会議スペースです。大型モニター、TV 会議システム、ホワイトボード、ネットワーク、電源が用意されています。研究打ち合せ、小規模なセミナー、講習会等に利用可能です。



データポスト処理システム phi

京コンピュータ利用者あるいは CMSI 神戸拠点利用者のためのクラスワークステーションです。京コンピュータとは 10GbE のネットワークで接続されています。シミュレーションデータのプレ/ポスト処理、可視化等に活用ください。

phi の仕様: Sandy Bridge Z56 コア・1TB メモリ 3TB HD

CMSI 神戸拠点スタッフ



藤堂真治



Pavel V. Avramov



坂下達哉



山下 葵・松下八重



北浦和夫

お問い合わせ CMSI 神戸拠点事務局 adm-kobe@cms-initiative.jp

表 2.2.1.2(6)-2 CMS 神戸拠点における支援活動

ii) カテゴリ A 拠点研究員の活動

固有値ソルバの統一的インターフェース Rokko の開発を継続して行った。その結果、密行列向け逐次・並列版の固有値ソルバのインターフェースはほぼ完成した。Rokko を用いるパッケージとして、量子格子模型の汎用な厳密対角化パッケージ Barista の開発に着手した。Barista では、ALPS (Algorithms and Libraries for Physics Simulations) と連携することにより、XML によりモデル・格子を指定する方法を使って、固有値計算を行うハミルトニアン行列を生成できるようになった。AICS 今村チームと月1回の打ち合わせを行い、上記インターフェースの開発の進捗報告、疎行列向け固有値解法の勉強会を実施した。神戸ハンズオンにおいて、実習のサポートを行った。(坂下拠点研究員)

昨年度に開発した大規模並列モンテカルロシミュレーションを行うプログラムのチューニングと、それを用いた古典スピン模型の研究を進め、数千から数万コアでの並列計算が実際の研究レベルで行えることを確認した。また、新たに、二次元以上の様々な量子系に適用可能なテンソルネットワーク変分法のプログラム開発を進め、基本的な量子スピン模型に対してその計算性能を確かめると共に、スピン軌道相互作用を含む異方的な相互作用が存在する系の未解決問題にも適用して、最先端の研究への適用可能性も検討した。さらに、今年度は、CMSI 若手技術交流会の幹事を務め、計算物質科学分野の若手間での、アプリケーション公開および、演算加速機構に関する技術交流を積極に進めた。(大久保拠点研究員)

4) 講習会、交流会等の開催

i) 若手技術交流会合宿

分野 2 内の研究者の相互交流を行い、アプリケーションの最適化・高度化や公開・普及に関する議論、技術や知識の共有を進めるため、CMSI の拠点研究員により運営される計算物質科学若手交流会を継続的に開催した。平成 25 年度は、大久保、Truong Vinh Truong Duy(東大)、水口、榮(分子研)の 4 名が、幹事として自主的に若手技術交流会を企画し、計2回開催した。各回の概要は以下の通りである。

①第8回 CMSI 若手技術交流会(2013 年 7 月 1-3 日 三島) (報告書 47)

「アプリケーションの開発と展開のための情報共有」をテーマに、アプリケーション公開に対する意識向上を目指して、計算物質科学アプリのポータルサイト“MateriApps”で公開されているアプリの使用を体験し、公開方法、使用感、バグ等をレポートする実習を行った。また、各自のアプリケーションや研究を様々な価値観で眺めてみる機会を提供するために、知的財産の一般的知識やソフトウェアの特許についての講義、および東レの研究者の方による、企業での計算科学研究の活用に関する講演を実施した。1 日目の夜には、チューニングに関する座談会を実施し、高並列化や実効性能のチューニングの際の体験談を3名の参加者に紹介してもらい、知識を共有すると共に、失敗を繰り返さない秘訣を語り合った。2 日目の夜には、結果の可視化に関する座談会を実施し、3名の参加者に可視化の成功例・失敗例について話してもらい、研究の成果を分かりやすく伝えるためのより良い表現方法を議論した。さらに、最終日には、大型計算機を使って得られた最新の研究成果について参加者に講演してもらい、計算科学によるサイエンスの広がりを共有した。

②第9回 CMSI 若手技術交流会(2014 年 1 月 28-30 日 熱海) (報告書 60)

近年、計算科学での重要性が増している演算加速機構について学び、基本的な使い方を習得することを目的に、NVIDIA、エクセルソフト、インテルから GPGPU と XeonPhi についての専門家を招いて講義を行った後、実際に参加者のアプリケーションに演算加速機構を適用する実習を行った。また、これまでと同様に、wiki 上で情報共有を行い、コンパイル時に生じる問題や、チューニングの工夫等についてのノウハウを参加者間で提供

し合った。今回初めて戦略分野5からも参加を募ったことから、1日目の夜には、分野5と分野2の参加者間の交流を目指して、それぞれの分野での取り組みを紹介する「異分野交流を目指して」を開いた。この企画内では、研究だけでなく、研究支援・分野振興についてもお互いの取り組みを紹介しあうことで、異分野間での情報共有を行った。

ii) 第2回 CMSI「京」一般利用情報交換会 5月8日（報告書 42）

平成 26 年度「京」一般利用申請へ向けた情報交換、共有を目的として、5月8日に理研 AICS において、「第 2 回 CMSI「京」一般利用情報交換会」を開催した。情報交換会では、これまでの「京」一般利用枠審査基準と採択率等に関して、RIST から説明がなされた。また、すでに「京」の一般利用を進めているユーザ2名から、京利用に関するノウハウの紹介、理研 AICS から対角化、数値計算等のライブラリの紹介がなされた。その後 CMSI コンサルティング、CMSI 若手技術交流会などの CMSI の HPCI 利用促進支援活動が紹介を行った。H24 年度「京」一般利用申請に関するアンケート結果をもとに、申請書記載アドバイスや高度化支援に関する要望調査やディスカッションを行い、一般利用に向けた情報の共有が促進された。

iii)「京」物性セミナー

神戸理研 AICS 内外での分野間交流、連携を進めるために、平成 24 年度から CMSI 神戸拠点が主体となって「京」物性セミナーを企画・開催している。平成 25 年度は計 5 回のセミナーを開催した。計算物性物理の研究者だけでなく、幅広い分野から様々なテーマでの講演が行われた。聴衆も、CMSI 神戸拠点内だけでなく、理研 AICS、神戸大、兵庫県立大、大阪大、Spring-8 など、広く関西方面からのべ 63 名の研究者が参加し、活発な質疑応答がなされた。

第 1 回 4 月 11 日 フラストレート量子磁性体におけるマルチフェロイクス（報告書 40）

講師：紙屋佳知（ロスアラモス国立研）

第 2 回 5 月 27 日 電子ドーピング系銅酸化物高温超伝導体の動的帯磁率（報告書 44）

講師：武藤哲也（島根大）

第 3 回 7 月 16 日 シミュレーション実行管理ソフトウェア “CASSIA Manager”（報告書 48）

講師：村瀬洋介（理化学研究所 計算科学研究機構）

第 4 回 8 月 20 日 Phase Transition and Cooperative Phenomena in Cavity Systems（報告書 51）

講師：宮下精二（東京大学理学系研究科）

第 5 回 1 月 21 日 有限次元スピングラス模型のレプリカ対称性の破れ（報告書 59）

講師：福島孝治（東大）

iv) CMSI 神戸ハンズオン

分野 2 で開発されている分野共通アプリケーション、ツールの普及を図り、多層的なユーザを育てていくことを目指し、平成 24 年度より CMSI 神戸拠点において定期的なアプリケーション講習会「CMSI 神戸ハンズオン」を開始している。講習会では CMSI 神戸拠点内のミーティングスペースを用い、8 名程度の少人数形式で、アプリケーションの概要についての講義の後、データポスト処理システム phi を用いてプログラムの実行、計算結果の可視化などの実習を行っている。平成 25 年度は合計で 11 回の講習会を開催し、産官学からのべ 107 名の参加があった。

第 3 回 4 月 23 日 xTAPP チュートリアル（報告書 41）

講師：吉本芳英（鳥取大学）、吉澤香奈子（東大物性研）

第 4 回 5 月 17 日 FMO 講習会（報告書 43）

講師：北浦和夫（神戸大学）、Dmitri G. Fedorov（産業技術総合研究所）

第 5 回 6 月 10 日 ALPS チュートリアル (報告書 46)

講師: 藤堂眞治 (東大物性研)、松尾春彦 (RIST)、五十嵐 亮 (東大物性研)

第 6 回 7 月 30 日 xTAPP チュートリアル (報告書 49)

講師: 吉本芳英 (鳥取大学)、吉澤香奈子 (東大物性研)

第 7 回 8 月 22 日 バージョン管理システムチュートリアル (報告書 52)

講師: 藤堂眞治 (東大物性研)、松尾春彦 (RIST)、五十嵐 亮 (東大物性研)、本山裕一 (東大院工)

第 8 回 9 月 27 日 FMO チュートリアル (報告書 54)

講師: Dmitri G. Fedorov (産業技術総合研究所)、北浦和夫 (神戸大学)

第 9 回 11 月 6 日 ALPS チュートリアル (報告書 55)

講師: 藤堂眞治 (東大物性研)、松尾春彦 (RIST)、五十嵐 亮 (東大物性研)

第 10 回 11 月 14 日 feram チュートリアル (報告書 56)

講師: 西松毅 (東北大金研)

第 11 回 12 月 17 日 FMO チュートリアル (報告書 57)

講師: Dmitri G. Fedorov (産業技術総合研究所)、北浦和夫 (神戸大学)

第 12 回 1 月 20 日 MODYLAS 講習会 (報告書 58)

講師: 安藤 嘉倫 (名古屋大学大学院)

第 13 回 2 月 25 日 ALPS チュートリアル (報告書 61)

講師: 藤堂眞治 (東大院理/物性研)、松尾春彦 (RIST)、本山裕一 (東大院工)

v) CMSI アプリ高度化合宿

参加対象者: CMSI 研究課題推進者 (重点/特別支援/支援) もしくは上記課題推進者から紹介を受けた計算物質科学分野で「京」一般利用枠の申請を行う方で、「京」もしくは FX10 のアカウント保持者

6 月 3-5 日 “TOKKUN! 1 (実行性能向上)” (報告書 45)

「京」一般利用枠採択を目指して、実行性能向上をテーマにアプリの高度化合宿を理化学研究所計算科学研究機構で 3 日間開催し、13 名が参加した。すでに「京」で大規模計算を実施している研究者と富士通のエンジニアが支援を行い、「京」もしくは FX10 のプロファイラを用いてアプリの解析と実行性能の低い問題箇所の特特定、その解決方法の議論とプログラミングを行った。プログラムコードの改良だけではなく、計算式やアルゴリズムなど根本部分から考え直すため長時間の議論を複数の参加者で行い、様々な意見を出し合った。wiki を立ち上げ重要なノウハウを書き込み、他の TOKKUN! でも情報を共有した。計算アルゴリズムから見直してプログラミングし直した結果、計算時間を約 1 割削減できたアプリもあり、多くの参加者が実行性能の向上に成功した。最終日には、神戸大学の 3 次元可視化装置 π -CAVE の体験も行い、「京」の計算結果の可視化方法についても議論した。

8 月 5-7 日 “TOKKUN! 2 (並列性能向上)” (報告書 50)

「京」一般利用枠採択を目指して、並列性能向上をテーマにアプリの高度化合宿を理化学研究所計算科学研究機構で 3 日間開催し、14 名が参加した。すでに「京」で大規模計算を実施している研究者と富士通のエンジニアが支援を行い、「京」もしくは FX10 のプロファイラを用いてアプリの解析、計算負荷分散が均等になっていないもしくは通信時間がかかっている箇所の特特定、その解決方法の議論とプログラミングを行った。計算式やアルゴリズムから見直して、通信データ量や回数の削減、通信と計算のオーバーラップ、負荷分散の均等化に多くの参加者が取り組んだ。コピーを含めたデータ送受信に関連する時間を約 1/4 に削減、通信時の待ち時間を 2 割弱削減などの成果を得ることができた。この合宿でのアドバイスを基に 2 か月ほどかけてプログラムコードを大幅に書き変えた参加者は、最終的に実行性能を 3% から 16% まで向上させ 2014 年度「京」一般利用枠に採択さ

れた。

9 月 3-5 日“TOKKUN! 3(実行・並列性能向上)”(報告書 53)

「京」一般利用枠採択を目指して、実行・並列性能向上をテーマにアプリの高度化合宿を理化学研究所計算科学研究機構で 3 日間開催し、11 名が参加した。すでに「京」で大規模計算を実施している研究者と富士通のエンジニアが支援を行い、「京」もしくは FX10 の詳細プロファイラを用いてキャッシュミス率や命令タイプの割合調査などアプリの細かな解析も行い、計算機の性能を引き出すための高度化に取り組んだり、以前の TOKKUN! で解決できなかった問題に再挑戦する参加者が多くいた。富士通コンパイラの指示行を追加して SIMD 化や software pipelining の制御をすることで実行性能を 3 割向上させるなど、高度なプログラミング技術を用いたチューニングでも成果が得られた。最終日、大型スクリーンに各参加者のソースコードを出して全員で議論した際、様々な意見やアドバイスが出た。そのアドバイスを参考に TOKKUN!3 終了後に改良を行った参加者は、問題箇所の計算時間を 3 割以上削減することができた。

2. 2. 1. 3. 研究開発課題・計算科学推進体制構築の評価

平成 25 年度は、HPCI 戦略プログラムの中間評価が実施された。その実施前に、CMSI 企画室メンバーと分野 2 作業部会メンバーにより、平成 24 年度までに推進した CMSI 重点課題の見直しを実施した。その見直した課題に対して作業部会、および、中間評価の評価委員会で評価を受け、いただいた指摘事項を参照して、平成 26 年度に推進する研究開発課題とそれに利用する「京」計算資源、および、計算科学推進体制構築の実施計画を策定し、分野 2 作業部会にて決定した。さらに、同作業部会にて、平成 26 年度に、「京」を重点的に利用可能となる「優先課題」が選定された。それらの計画を実施するために必要となる、平成 26 年度に雇用する CMSI 研究員、および、CMSI 教員・拠点研究員の配置機関と採用（継続を含む）予定人数を示す。

(1) CMSI 研究課題の見直し

①第1部会分子課題見直し意見交換会

平成 25 年 7 月 16 日(火)15:00～19:00 に東大本郷キャンパス理学部1号館338号室にて企画室会議メンバー9名により実施された。平成 25 年度は HPCI 戦略プログラムの折り返し地点で中間評価も実施される。今回の意見交換会は、第 1 部会の分子課題に関する目標や重点課題の見直しを行う機会として実施し、これまで「京」で得られた重点課題の成果の説明後、分子課題の目標と今後の課題の進め方に関して意見交換を実施した。その結果、以下が決定された。

<決定事項>

1. 平成 25 年度から 3 つの項目を1つの課題に変更して、それまでと何が変わったのかを明確にするとともに、「物質の励起状態」をキーワードとし、平成 26 年度以降も現状の体制で研究課題を推進していく予定で計画を立てる。
2. 第1部会分子課題と、他の部会、もしくは外部との連携体制、取組計画等を明確にして示す。
3. 第1部会分子課題に関連する若手間の領域を超えた情報共有や意見交換の活動を実施し、若手の知見を広げ新たなサイエンスの創造につなげる。

②CMSI 課題見直し意見交換会

平成 25 年 8 月 21 日(水)11:00～17:30 に、東京大学本郷キャンパス理学部 4 号館 1320 号室にて、CMSI 企画室メンバー、分野マネージャーである寺倉清之先生(産総研)、分野 2 作業部会委員である、福山秀敏先生(東京理科大)、栗野祐二先生(慶応大)、魚崎浩平先生(NIMS)、中村信一郎先生(理研)、高梨弘毅先生(東北大)、加藤雅治先生(東工大)、幾原雄一先生(東大)の計35名で実施した。各部会での研究課題の取り組み状況と今後の計画を述べた後に、議論を行った。その結果、下記の意見が得られた。

<主な討議内容>

1)第1部会:新量子相・新物質

- ・部会間や分野間の連携で、その複合体として新たに提案される課題があってもよい。
- ・強相関と熱伝導は関連があるので、多体効果の点で協力する予定。

2)第2部会:次世代デバイス

- ・ナノスケールの熱の解析は常行先生の熱伝導計算で取り組む。どのデバイスも発熱の問題はあり、今後重要
- ・重点課題の数を増やすことは難しいが、光の課題も重点化したい。リソースを融通しあう。一般課題への申請とは、かち合わないような課題で検討したい。
- ・ナノデバイス界面を利用してデバイスにする場合、表面フェルミレベルのスキミングやコンタクトがどうやったら作成できるかが鍵。表面状態が変わったときの状態も計算で解ける。
- ・コンケストで構造を決めて、電子状態を RSDFT でやるというシナリオも検討する。

3)第3部会:分子機能と物質変換

- ・色素は実験と共同で安価な色素を開発している。また、新色素の開発のための分子設計はラジカル性を含めて実施中。ドナーは理論が先行した例。実験に合わせるのではなく、計算でしか言えない貢献をして欲しい。
- ・第3部の重点課題は変えない。特別支援課題は一般枠での「京」、HPCI インフラを利用中(予定)。

4) 第4部会:エネルギー変換

- ・分野2は、気象・気候や自動車衝突の成果と勝負しなければならない。SEI 膜の改良が電池性能にものすごく影響があるということを、うまく見せないといけない。
- ・将来の大きなインパクトを持った課題が欲しい。現状はその大きな課題に取り組むステップであるという位置づけ。アピーリングな進め方をして欲しい。
- ・電池開発のロードマップを設け、大きな目標をたてて、それに従って開発するスタンスは必要。

5) 第5部会:マルチスケール材料

- ・鉄中の転位とシリコン等の固溶原子のカップリングの問題として、ソリトンペアや欠陥とのつながりに関し、高温だと摩擦力が働き軟化と強化にはたらく。
- ・析出物、界面、歪は、界面状態によって成長速度が違う。成長の問題と析出物との問題をはっきりさせて両方うまく説明すると面白い。温度を上げるとディフュージョンの問題も関連する。期待している。
- ・鉄のバルク、腐食の問題も部会の課題の中に入れられないか考えている。

(2) 分野2 作業部会による中間評価

平成 25 年 10 月 8 日(火)に、文部科学省にて HPCI 戦略プログラム分野2中間評価会議が実施された。参加者は、分野マネージャー、分野2作業部会と CMSI 重点課題実施者、拠点代表者である。文科省には、自己点検結果報告書(中間評価用)を会議日前に提出するとともに、会議では各重点課題代表者より、研究開発課題の進捗と計画、常行統括より計算科学推進体制構築の進捗と計画を説明後、作業部会より改善に関するご指摘をいただいた。表 2.2.1.3-1~9 に、分野2全体、および、各課題と推進体制構築に対する指摘事項とそれに対する対応案を示す。

表 2.2.1.3-1 作業部会による中間評価での指摘事項とそれに対する回答

中間評価指摘事項への対応案一覧(分野2)	
●分野全体	
指摘事項	対応案
【必要性】 本プログラムの事前評価では、「京」を中核として、我が国の研究開発そのものに革新をもたらすシミュレーションへの取組と我が国の計算科学技術に関する研究ポテンシャルの結集を関係機関の強力な連携の下で実現するために必要があると評価された。 本分野では、物性物理、分子科学、材料科学の三分野が連携し、物質・エネルギーに関連する新しい計算手法が開発され、「京」を最大限に活用できる世界最高性能の計算効率を達成しており、引き続き必要性は高いと評価できる。今後さらに、三分野の密接な情報交換を行い、三分野の研究者が合同で推進する重要課題を検討していくことが必要である。	研究課題を推進する5つの部会は、分野ではなく戦略課題単位の部会で構成しており、各分野の研究者がそれぞれの部会に参加し情報の共有は進んでいる。「京」が稼働して1.5年を経過し、「京」で動作するプログラム開発は順調に進んでいる。プロジェクト後半は、分野や部会を越えて、物質・エネルギー関連課題を加速、推進していく。平成26年度は、第1部会の天能グループと、第3部会の岡崎グループ内北浦課題との計算手法連携、第2部会内の押山物理課題と信定分子課題の連携課題の提案が行われている。
【有効性】 本プログラムの事前評価では、研究開発の成果そのものが科学的・社会的なブレークスルーをもたらすとともに、様々な分野で計算科学技術が定着し我が国の研究開発そのものに革新をもたらすこと、及び、養成された人材が今後の我が国の計算科学技術の担い手になることが期待されると評価された。 本分野の研究開発では、基礎物理、基礎化学から、半導体デバイス関連、ウイルスカプシドの機能、リチウムイオン二次電池、メタンハイドレートの溶解過程、材料強度などの課題で「京」でなければ実現できない最先端の成果が得られつつあり、引き続き有効性は高いと評価できる。一方、成果が最終的にどのように国民に還元されるのかといった成果目標の位置付けが分かりにくい面もあり、今後は、専門外の人間にも理解されるような説明の努力が必要である。 本分野の計算科学技術推進体制の構築では、物質科学が絡む前述の三分野の連携が強化されつつあり、物質科学の将来にとって極めて有意義である。また若手育成については、計算物質科学に関する講義を教育機関にビデオ配信する取組や、広報誌においてCMSIの活動に関わる若手研究者の活動紹介を行い、コミュニティの内外に若手研究者の活動が見えるように努めており、引き続き有効性は高いと評価できる。今後、若手研究者のキャリアパスの可能性を広げる努力が一層必要である。	平成25年度は成果の社外発表に注力し、ウイルス、電池、超伝導や国際会議開催にかんじた記事が掲載された。引き続き社会発表を強化促進していく。 研究成果を社会に理解していただくためにどうすればよいかを検討する、見える化シンポジウムを開催し、専門家を交えて議論している。平成26年度も継続して実施する。 コミュニティ誌のTORRENTを平成26年度も継続して出版し、若手研究者を主体で記事として取り上げ、活動を広く紹介する。TCCIでは、第3回産学連携シンポジウム「HPCの利用と成果と人材」を開催し、若手が活躍できる場を産官学の広い視野で検討した。平成26年度も若手が培った研究開発成果を社会貢献につなげるための、セミナー等を実施予定である。 AICSや物性研の一般公開、SCI3会議に参画し、「京」で行っている成果を紹介している。また、AICSの広報活動にはとくにリチウムイオン電池関連の成果としてNIMS館山氏に協力いただき、一般国民を対象とした「京の集いでの講演」、「「京」成果ビデオ制作」を実施中である。平成26年度もAICS広報とは積極的に連携していく。 さらに、平成25年春の応用物理学会、物理学会の展示会にMateriAppsを出展し、CMSIアプリの利用促進普及をめざしている。この活動は平成26年度も継続する。
【効率性】 本プログラムの事前評価では、各分野における様々な目的を持った利用者がより効果的・効率的に適切なシミュレーションを行うことが可能となるとともに、計算科学技術全体の裾野が拡大されることにより、研究開発や企業活動における効率化が期待されると評価された。 本分野では、開発したアプリケーションを核としたアプリケーションポータルサイトを立ち上げ、物質・エネルギーに関連するアプリケーションを効率よく利用できるようにする取組や、研究成果を積極的にプレス発表する取組、産官学連続研究会などの実施を通じた企業への情報発信や企業からの要望を受ける機会を設ける取組がなされており、引き続き効率性は高いと評価できる。今後は、実験グループや産業界との連携を更に深め、実験グループや産業界から吸い上げたニーズを研究開発課題に取り込むための仕組み作りが必要である。	平成23年度に実験、計測の研究者との連携を目的として実施した元素戦略WGは、平成24年度からの元素戦略＜拠点形成型＞事業発足に繋がり、この拠点に多くの計算物質科学研究者が参加して、企業を含めた連携を可能としている。平成25年度はエネルギーWGを実施し、物質とエネルギーの関係において計算物質科学が成すべき課題を、各種の国家プロジェクトと連携して検討し、電池の根本的な課題である界面のエネルギー科学に産官学の連携体制で取り組んでいる。CMSIやTCCI、CMRIでは、産業界を交えたシンポジウムを開催し、課題を共有する産官学研究者が席を交えて議論している。 平成26年度は既存の活動や共同研究の継続に加え、MateriApps登録アプリの利用講習会や普及活動から得られるアプリケーションニーズより、共同研究への発展や社会ニーズの課題への取り組み等を、具体的に実施していきたい。
(3) その他 ○ 本分野においては、個別の研究開発課題はおおむね着実に進捗しており、その点では統括責任者等のマネジメントも含めて順調と言えるが、分野全体としての成果を考えた場合、各課題の成果が統合されて分野としての成果に昇華していく構図が見えにくいことや、各課題が内向き傾向にあることが懸念点である。本プログラムも後半に入り、戦略目標の達成に向けて研究開発の加速が求められる一方で、各課題で大規模計算が増えて今以上に計算時間が確保しづらくなることが想定される中では、「京」以外の計算機の活用も進めるとともに、分野として戦略目標を達成するという観点で全体を見通し、トップダウンで、課題間連携を重点的取組とすること、課題間の進捗に優先順位を付けて実計算時間を有効利用することなども検討する必要がある。	プロジェクト当初にスタートした重点6課題に関し、第1部会の2課題とも、3つの項目を束ねて1つの課題に集約し、方向性を絞った。第2部会は次世代のデバイスとして、実験科学の方からのフィードバックを基にし、パワー系の半導体など、今後日本が勝てる領域で貢献していく方向性に舵をきっている。ウイルスは順調に開発したアプリケーションが多く企業で活用されており、MODYLAS、FMOを中核としたコミュニティが形成されている。エネルギーは電池課題を統合した取り組みは上記に述べた。メタンハイドレートは実社会での開発への貢献を模索中である。あらたに設けた材料科学の重点課題は、元素戦略PJとタイトに連携しながら推進しており、計算物質科学の次の世代をマテリアルズインフォマティクスも含めて発展させる。計算物質科学は幅が広く、どれも「京」を必要とする重要課題に発展している。戦略課題内で優先順位をつけるとともに、分野2内で提供している計算資源w含めた計算リソースの効果的活用を強化する。

表 2.2.1.3-2(1/4) 作業部会による中間評価での指摘事項とそれに対する回答

●研究開発課題	
指摘事項	対応案
課題1:「関連の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明」(今田)	
数値計算手法が整備され、信頼度の高い成果が得られつつある。モデルと現実の関係を明確にして、追及する課題や得られた成果の意義を正確に、かつ分かり易く非専門の人にも伝えることが必要である。 本分野のキャッチフレーズには、「源流から奔流へ」という文言が入っていて、本課題は源流の一つである。他の課題への波及効果にも意を尽くしてもらいたい。	成果が非専門の人にも伝わっていくよう、努力を続ける。最終項目にもあるように、国際会議での成果発表など専門家への情報発信はもとより、より啓蒙的な解説誌での紹介執筆、さらには分野外の研究者との交流、記者発表などを通じての一般への情報発信はこれからも一層進める。この基礎課題で得られた成果に注目してさらなる発展を生み出していただくよう、他部会への働きかけを続ける。これは開発された計算手法と解明された物理を展開していくという2つの面で両方必要であると考えている。 計算手法については、高精度の計算を追求する一方で、多くの人が簡便に使える手法、汎用性の高いパッケージの開発も進められるよう、プロジェクト提案を行なう。プロジェクトのスタートによって、階層的な第一原理強相関電子状態計算法(MACE)の普及を計画する。MACEの基本理念は研究代表者らが10年程前に提唱し、電子相関の強い系の第一原理的な研究という物性科学の世界的な潮流を生み出した。この手法には計算負荷がまだ重いという課題があるので、簡便にも使えるバージョンの開発を行ない、より広範な普及と汎用的に使えるようにすることによって、この分野の発展に資するところは大きい。また電子だけでなく、格子(原子)も同時に第一原理的に扱うことの意義は大きく、手法の開発を進めており、開発を加速する。これらが他課題への波及効果を増やすと考えている。 テンソルネットワーク(密度行列繰り込み群を特殊な場合として含む)は物性基礎論研究と量子情報理論研究の接点から生まれ、量子系の物性に対して量子エンタングルメントという新しい視点を提示しただけでなく、基底状態計算として実用に耐えることが近年になって示され、従来計算が困難であった多くの物理系に対するブレイクスルーとなる期待がもたれている。この方法は、最近では分子科学計算にも用いられ成果を挙げつつある。FMOなど他部会で利用されている方法に対して、量子エンタングルメント効果の系統的な取り込みが可能な発展形を示唆している。第一部会では、現在十分にはその特性が理解されていないこの新しい方法論に対して、分子科学計算などへの展開も視野にいれつつ、スピン軌道相互作用系に対する応用などを通じて精度検証などを進め、波及効果の大きな成果を挙げることができると期待している。成果の共有化・深化を促進するための、分子科学計算分野などとの合同研究会・合宿などにも従来以上に力を注ぐ。 また今までも行っているが、量子多体計算の手法は素粒子、原子核、量子化学と共通の課題があり相互に方法論の交流は役に立つことも多い。既に原子核分野との国際ワークショップを開催するなど、交流に努めているが、今後も続ける。 解明された物理の展開については、超伝導、磁性など実験研究者との議論交流(各種散乱実験、光電子分光、物質開発など多岐にわたる)をさらに積極的に進める。源流としてエネルギー課題への取り組みを始める。他項目も参照。

表 2.2.1.3-2(2/4) 作業部会による中間評価での指摘事項とそれに対する回答

●研究開発課題	
指摘事項	対応案
課題1:「関連の強い量子系の新量子相探求とダイナミクスの解明」(今田)	
テーマの位置づけ(「源流」としての)についての説明が足りない。	源流と奔流の関係は多様であるが、引き続き、機会のあるごとに基礎科学としての意義と、手法のより汎用的な応用および解明される物理から期待される波及効果の説明に意を尽くす。より密な研究交流やレクチャーが必要で、他部会にも向けてそのような企画を検討する。他項目も参照。
本課題は京でなければ計算できない課題であり、超電導材料への応用などレベルの高い成果が得られている。一方、本課題と他分野との連携が見えにくい。本成果のさらなる波及効果を期待する。	超伝導やスピン液体、量子相転移、光の引き起こす非平衡現象、励起ダイナミクスの問題は基礎科学の課題として意義のある重要な課題である。CMSIの中でこの課題に取り組んでいる他の研究者は少ないが、これは意義が低いことを意味するものではなく、基礎においても応用においても物質科学の重要な課題であると認識している。これらの分野の実験研究者との議論は今までも活発に行っている。これをさらに展開し、理論からの実験提案や国際共同研究をさらに一層進めていくことによってCMSIの枠は超えて、波及効果の増大に努める。またCMSIの他部会に対しては量子伝導に関して連携を進め、トポロジカル相やその物理の意義や強い非平衡に生じる原理的な新しさ、超伝導研究の重要性などを提示していくことによって、源流で生じている我々の研究も含めた世界的潮流を受けた研究に加わり、展開する研究者がCMSI内にも増えるよう理解に努める。またエネルギー課題への基礎科学の立場からの取り組みをこれから本格的に進め、第4部会とも連携を図る。次々項も参照。
この研究課題で取り上げている課題が「京」の計算によってどれほど大きく進展し、基礎科学あるいは応用の観点でどれだけのインパクトがあるのかが分からなかった。	機会を増やして、時間をかけて意義とインパクトについて説明を続ける。京の本格運用から1年余りを経て得られた成果も蓄積してきている。脱閉じ込め臨界現象の有無は、基礎的・統計力学的観点から強い関心をもたれているが、これについて従来はシステムサイズ効果に関する系統的な調査がされていなかった。京を使ってそれがはじめて可能になり、従来の計算が系の大きさに関して変化の途上を見ているにすぎないことが明確となり、驚きをもって迎えられている。それ以外の課題について次項を含む他項目を参照。

表 2.2.1.3-2(3/4) 作業部会による中間評価での指摘事項とそれに対する回答

●研究開発課題	
指摘事項	対応案
課題1:「関連の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明」(今田)	
京を使うことによってどんな新しい物理が開拓されるのか、それに向かつて現在の進捗状況はどのような位置にあるのか、専門外の人間にも理解できるように明確に示して欲しい。新量子相、新しいタイプの相転移、新原理、新現象と「新」の字が並んでも、何が新しいのか、どんな新しい物理を目指そうとしているのかが見えない。また、全体的にスコープが狭いと感じる。例えば、一口にスピン軌道相互作用と言っても、さまざまな切り口があるが、そのごく一部のみしか研究対象にされていない。せっかく京を使う以上、もっと他分野の研究者とも交流し、全分野の源流として、幅広い分野に影響を与えるような研究スタンスが欲しい。	このプロジェクトは、電子相関の効果がもたらす、今まで知られていなかった物理を解明することを目指している。未知の相や現象を見つけるわけであるから予め何を解明するかを予告することは難しいが、既に成果として出てきている例から目指すものは見えていてと考えている。今までにこの課題で得られた成果を例示する。超伝導の機構において銅酸化物、鉄系超伝導の両方に共通して、相分離への不安定性とそれに伴う電荷ゆらぎが超伝導相安定化を駆動しているという全く新しい見方を、今までにない系統研究で解明し、両者の超伝導に共通する理解に到達した。これは世界的に見ても京のような計算資源を使った大きなサイズの系統研究なしにはできない到達点である。最近の実験結果と照らし合わせ銅酸化物超伝導、鉄系超伝導の機構解明に新たな方向を与えた。また銅酸化物の超伝導機構に本質的にかかわる擬ギャップについて、実験との国際共同研究およびそれに関する記者発表については既に申し上げている。この成果は最近、雑誌「工業材料」の中で、「次代を拓く工業材料キーワード32」の筆頭としても紹介された。量子スピン液体については、中間評価ののち、京を用いた計算でスピン液体を示す理論模型を2つ発見し、その性質が従来理論的に予想されていたものと大きく異なることを示した。これも新量子相の例である。以上により今年度の主たる目標をやや前倒しで達成している。 スピン軌道相互作用について、本プロジェクトでの課題はスピン軌道相互作用と電子相関の協奏、相乗作用の解明である。これは今後の基礎科学の重要な課題であるとともに、将来的な応用の芽についても世界的な研究潮流が形成されつつある。電子相関とスピン軌道相互作用の絡み合いは、現在何と言ってもイリジウム酸化物が世界的にも最も中心的な研究対象である。本プロジェクトは、その中でも、ペロブスカイト型層状化合物で従来のモット絶縁体としての見方を覆して反響を呼び、バイロクロア化合物においては磁壁が伝導を担う特異な性質を示し、トポロジカルな性質を持つことを理論的に初めて解明して、応用上の可能性を指摘し、蜂の巣格子型化合物では実験を理解すべき第一原理模型を初めて提示して、理論的に強い興味を持たれているスピン液体実現の指針を示した。これらは現在のスピン軌道相互作用と電子相関効果の絡み合いの研究の最前線をかなり網羅するものであり、決して狭いスコープであるとは考えていない。しかしながらより一層、スピン軌道相互作用の物理の幅広い展開に尽力すべく、この研究プロジェクトの3つのグループが共同で研究を進める。 もう少し新量子相とイリジウム化合物の研究プロジェクトについて補足を加える。近年物性基礎科学において非常に盛んに議論されている「新」量子相の多くは、磁化や超伝導秩序変数などの示量的量として定義可能な秩序変数ではなく、局所的な変形によって変化しないトポロジカル数によって特徴づけられる「トポロジカル相」である。(残念ながらトポロジカル数がどのように定義されるかを専門知識を全く抜きにして説明することは困難だが、全体が絶縁体であるにもかかわらず、表面に乱れに対して強固な高い流動性を示す状態が出現するなどの特徴的な現象が知られている。)そのようなトポロジカル相の典型例であり、かつ厳密な取り扱いも可能な例がKitaefモデルとよばれる数理モデルである。フラストレート磁性体で議論される量子液体相や、グラフェンのディラック電子状態なども含めて、多くのトポロジカル相がKitaefモデルの示す量子相に対応している。このKitaefモデルをもっとも端的に現実化していると期待されているのが、本課題でターゲットとしているIr化合物であり、Ir化合物はスピン軌道相互作用も電子相関もともに無視できない典型物質として、近年の物性基礎科学研究の1つの焦点に位置する。このプロジェクトだけをとりもて目指すところは普遍的かつ波及効果の大きなものであると考えている。 滞在型研究会や合宿など、若手中心で他分野の研究者とのより深い交流の場を従来以上に設けてゆく。これについて他項目も参照。 エネルギー問題について：非平衡相特有の原理により効率の高い太陽エネルギー変換機構や熱電機構を見つけ、その実験指針を提示することも、目指す研究の一つである。今後も電子相関効果を起源とし、基礎科学の進展に資する新量子相とその機構解明に尽力していく。

表 2.2.1.3-2(4/4) 作業部会による中間評価での指摘事項とそれに対する回答

●研究開発課題	
指摘事項	対応案
課題1:「関連の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明」(今田)	
今後の優れた若手がここに集まってくるような、解りやすい説明が課題である。今田先生ご自身がそれを為さなくとも良い。若手の翻訳家的人材の育成(必要と感じます)も兼ねて時々発表させてはどうか。	若手研究者が機会あるごとに成果を説明していくことは大事なことである。この部会では毎夏サマースクールを開催して、若手研究者が交流するとともに、リアルタイムで出ている若手研究者の成果を発表し交流する場を設けている。来年度も継続する予定であり、シニアな研究者との交流の場ともなっている。昨年同様アナウンスするので、ぜひ参加して若手の輪の中に入り活発な議論をご覧いただきたい。 http://www.cms-initiative.jp/ja/events/130812_dai1bukai http://www.cms-initiative.jp/ja/events/120820_dai1bukai http://torrent.cms-initiative.jp/backnumber/2012/torrent006j/bukai1-summerschool 若手の発信の場も種々用意されている。例えば下記web参照 http://torrent.cms-initiative.jp/backnumber/2012/torrent005j/torrent5-hyo4a http://torrent.cms-initiative.jp/backnumber/2013/torrent007j/torrent7-morita http://torrent.cms-initiative.jp/backnumber/2013/torrent007j/torrent7-juten1 また、日本物理学会、アメリカ物理学会など、学会での発表はもちろんのこと、その他のトピカルな分野研究会で若手の成果発信は常に奨励しており、実際に多くの若手研究者が参加、講演している。2013年10月のCMSI国際会議においても本課題に参加する若手研究者が招待講演を行なった。 2013年8月の記者発表に際しては、若手研究者が発表をリードし、雑誌取材にも中心となって応じ、一般向け情報発信を行なった。 CMSIの中で本研究課題の若手参加者はCMSI第1回最優秀ポスター賞(受賞者:三澤貴宏(課題名:第一原理ダウンフォールディング法を用いた鉄系新超伝導体の磁気的性質の解明)第1回優秀ポスター賞(受賞者:諏訪秀磨(課題名:詳細つりあいを満たさないマルコフ連鎖モンテカルロ法)第3回若手奨励賞(受賞者:森田悟史(課題名:多変数変分モンテカルロ法の最適化)、第3回ポスター賞(受賞者:金子隆威(課題名:多変数変分モンテカルロ法を用いたJ1-J2 ハイゼンベルグ模型の解析)、第2回、第4回ポスター賞(受賞者:渡辺宙志)、物理学会で若手奨励賞(受賞者:大久保毅)、さらに文部科学大臣表彰若手科学者賞(受賞者:有田亮太郎)を受賞しており、学生、PD、助教、准教授を問わず活躍している。 引き続き、若手研究者が成果を情報発信する場を増やしていく。滞在型研究会や合宿など、若手を中心とした交流の場を引き続き設け、必ずしも最新の研究発表だけでなく、そのバックグラウンドまで含めて他分野の研究者にも理解しやすいレクチャーを用意する場を増やす。その活動を通じてレクチャーをも育てる。
難しい課題設定であるが特定の「計算技術」での発展があるようであるが、具体的な研究成果に結びついていない。	計算手法が発展していると同時に具体的な研究成果も出ている。またその成果発信も、このプロジェクトにかかわる研究成果に基づき、研究代表者だけでここ1年半の間に招待講演ないし基調講演を500人程度以上が参加する大規模な国際会議だけでなく4件(超伝導、磁性、計算物理、強相関電子系の多岐な分野に亘る)、その他の国際会議で6件行なっていることにも現れている。本課題参加者の講演も多数にのぼり、国際会議での本課題成果に基づく招待講演と基調講演をすべて合わせると20件になる。上記項目にも述べたように、超伝導については銅酸化物、鉄系超伝導体の機構解明が理論模型での考察から始まり、第一原理模型を用いて大きく進んでいる。またスピン液体の機構解明も成果が出始めた。脱閉じ込め現象の有無の判断や、励起ダイナミックスの解明についても成果がある。 CMSIプロジェクトとしての成果発表原著論文36件を見渡して、「成果に結びついていない」というのが何を意味しているのかよくわからないが、誤解であろう。より具体的な指摘もあるならばお願いする。他項目も参照。引き続きより波及効果の大きな成果をめざし、また成果の発信と理解を得ることに努力していきたい。

表 2.2.1.3-3 作業部会による中間評価での指摘事項とそれに対する回答

●研究開発課題	
指摘事項	対応案
課題2:「電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開」(天能)	
量子化学の計算手法開発、プログラム開発において顕著な進展が見られる。一方、それらと現実の課題との間の繋がりが希薄であることが問題である。また、量子化学で開発された手法を、物性物理に拡張するとか、あるいはその逆の過程があれば、大変好ましい。	今後、課題との間の連携についての努力が必要である。部会内連携については、相関の強い電子状態の取り扱いが共通の関心であり、第一部会での研究会等の活動を一層を活性化することにより、F12電子状態理論やモデル空間量子モンテカルロ法を物性物理の問題に応用したり、その逆の効果が期待出来る。部会間連携については、第3部会の機能性分子設計やFMOの課題、第4部会の太陽電池の課題との連携の構築につとめる。
種々の分子について、新たに開発されたポスト・ハートリーフォック計算を応用した研究成果は高く評価できる。これより特定分子の電子状態や熱揺らぎの本質が明らかになった。一方、本手法を基盤技術として、現実的に問題になっている一般的な分子へ展開、ならびに分野横断への展開を期待する。また、今回開発した計算手法を用いて新しい機能を有する分子設計への展開も期待したい。	分子設計という観点では、フラールンールイス塩基アダクトに関して、ルイス塩基と原子種を換えた網羅的な研究を行い、生成効率に優れたデバイス材料の予測を行う予定である。第4部会との連携も重要である。更に、植物を模した人工光合成系やルテニウム触媒系での酸素発生の機構を密度行列繰り込み群とモデル空間量子モンテカルロ法を用いて研究を行いたいと考えている。それに伴う実験グループとの連携も進めたい。
計算手法の開発のレベルは高いことはわかるが、個別の計算対象が「分子理論の新展開」にどのようにつながるのかが分からない。Bits and piecesの寄せ集めのようにみえるが、そうではなく「分子理論の新展開」につながると言うことをきちっと示すべきである。	超並列計算を行う事で対象と計算レベルは着実に発展している。一般的な励起状態を計算可能なモデル空間量子モンテカルロ法も分子科学の新しい発展に大きな寄与をするものと考えられる。今後は「分子理論の新展開」が更にビジブルになるように努めたい。
物理化学の理論は知っているが、計算の詳細テクニックは知らない(必要もない)優れた実験家が「それを聞いて新しい実験系の構築を考える」ことを誘発できるような事実に触っておられるのかも知れない。20年後、あの時代の精度でしたから仕方のない過大評価です、とされる結果とそうでない結果との弁別が欲しい。	システムや概念を伴わない数値計算は実験との比較を行わなければ意味を持たないので、結果の弁別には実験研究との連携を強化し、客観性のある定量化に努めたい。

表 2.2.1.3-4 作業部会による中間評価での指摘事項とそれに対する回答

●研究開発課題	
指摘事項	対応案
課題3:「密度汎関数理論によるナノ構造の電子機能予測に関する研究」(押山)	
相補性を持ついくつかのソフトウェアが整備されてきている。それぞれの実行効率もかなり高いものとなっている。それらが、相補的に連携して具体的な課題に適用されることにより、一層挑戦的な課題の実行が可能ではないかと思われる。総じていえば、半導体テクノロジーに密接な関係を持ちうる活動になっているので、関連の企業活動への情報発信、逆にそちらからの要望を引き出し、社会的にもインパクトの強い課題の遂行が望まれる。	複数ソフトウェアの連携については、一例として、IV族ナノワイヤーのゲート酸化膜に対する10万原子規模のCONQUESTによる構造決定とその安定構造に対するRSDFT電子状態計算が計画されている。デバイス構造丸ごと計算の例である。関連企業活動との相互作用については、複数チャネル(東京大学産学連携本部、つくばイノベーションアリーナ、第二分野作業部会等)を活用した情報収集・発信に努めたい。
□ 新手法の適用先としてのテーマ選びにさらに力を入れてほしい。国内産業界ニーズを基に的確にインパクトのあるデバイステーマ設定することが肝要。 □ Real-Space法の強みを生かし、「京」でなければ扱えない原子数を必要とする「ナノデバイス」解析をフラグにしているかどうか？ナノコンタクトやエッジなど □ グラフェン解析では、バンドギャップ創製に「京」しかできないアプローチを。 □ パワーエレクトロニクス分野との交流は評価できる。実験とのコラボレーションを成功させるには、企業マネージャークラスとのヒアリングが有効。 □ ロジックよりむしろメモリ・配線・実装に多く国内ニーズがある。Beyond CMOS分野も、スイッチングデバイス以外に10以上のテーマ選択肢がある。	・テーマ選びについては、各種チャネルを活用して、情報収集に努めたい。 ・Real-Space法により、デバイス丸ごとシミュレーションを目指す。そこでは界面構造の同定と電子物性の解明が鍵となると思われる。 ・グラフェン解析については、振じれた数層グラフェン、端が重要な有限サイズグラフェンなど、10000原子を超える系をターゲットにした計算が進行中である。 ・パワーエレクトロニクス分野では、つくばイノベーションアリーナにおいて、企業関係者とコンタクトする予定である。 ・10以上のテーマ選択肢、ご教示をお願いしたい。
計算手法の開発において、RSDFTを高度化し京における新アルゴリズムを開発した成果、RS-CPMDを高度化した成果など本プロジェクトで有用なソフトウェアが開発されていることは高く評価できる。今後は、本課題で開発したソフトウェアの横展開を大いに期待したい。一方、応用計算がシリコンナノワイヤーやグラフェンなどナノデバイス系に重きを置いているが、さらなる実験グループとの連携を積極的に進めることを期待する。また、半導体産業が必要とする要望も勘案しつつ、本課題を発展的に広げていくことも期待する。	ソフトウェアの普及、展開についての努力は不足している。CMSIのMateriAppsでの普及活動に加え、東京大学産学連携本部ウェブサイトも活用し、情報発信に努めていく。 実験グループ、関連企業活動との連携については、複数チャネル(元素戦略プロジェクト、東京大学産学連携本部、つくばイノベーションアリーナ)を活用した情報収集・発信に努めたい。 また、現在の日本の半導体産業の現状を考えたとき、パワーエレクトロニクス関連材料・構造に重点をシフトしていくことも計画している。
計算手法のレベルの高さは認識できるが、この課題の成果として特定の電子機能をもつナノ構造(実験家がつくってみたいと思う)が提案できるのか、また、求められる電子機能をどのように想定するのがはっきりしない。	厳しいご指摘をありがとうございます。 現時点では、次世代電界効果トランジスターのワイヤー型チャネルに最適な直径、方位依存性についての情報が得られているだけである。 一層の検討を進めたい。 ただし、ニーズの要請からの電子機能デザインを計算科学だけでやるのは難しい。実験家とのコラボレーションを通じて、シーズの提案と云う側面も強化したい。
第一部会同様、第二部会もスコープが狭いと感じる。Beyond CMOSのために何が必要かを、民間研究者等との交流を通じて明確にし、グラフェンやシリコンナノワイヤなどのIV族系に限らず、スピン、強相関(第一部会と関連)、超伝導、ワイドギャップなども含め、さらにそれらの枠組みをも超えた幅広い取り組みを行って欲しい。	スピン、強相関(第一部会と関連)に関しては、金沢大学を中心とする特別支援課題において、研究活動が進められている。一層の進展をはかる。 ワイドギャップについては、パワーエレクトロニクスがらみで、SiCを皮切りに、研究を進めていく。 超伝導については手つかずである。第一原理理論手法の改良から始める必要がある。 民間研究者との交流は、上記複数チャネルを通じて努力したい。
半導体産業が10年後、もう日本でやっていける産業ではない、となってしまうことが心配である。このテーマで、その心配を払拭するメッセージが生まれることに期待する。	その心配を共有している。なんらかの貢献をしたい。

表 2.2.1.3-5 作業部会による中間評価での指摘事項とそれに対する回答

●研究開発課題	
指摘事項	対応案
課題4:「全原子シミュレーションによるウィルスの分子科学の展開」(岡崎)	
実行効率の高い、MODYLASとFMOの2つのソフトが関わっている。研究は順調に進行している。第一分野との連携を強くして、相補的でレベルの高い成果が得られることを期待する。	これまでも分野1の分子に関わる課題と分野2の生体物質に関わる課題間では、国際会議サテライトミーティングや国内研究会等において共催等一定の連携の下でプロジェクトの推進を行って来ている。今後はさらに積極的に働きかけ、プログラム開発や研究等においてもより深く協力しながら研究を推進する。連携については分野1の該当する課題との間ですでに共通認識となつてはいるが、具体化について早急に協議を始めたい。
本プロジェクト内での横の連携が見えにくい。他分野、特に第一分野との連携を積極的に進めることを期待する。	
研究結果は可視化もされ、色んな意味でわかりやすい。ただし、第3部会:分子機能と物質変換の重点課題としてこの課題があるのか、他の課題との関係も含めて説明が不足しているように思える。	第3部会においては、生体物質に関連した特別支援課題として「拡張アンサンブル法による生体分子の高次構造と機能の解明」、「ポリモルフから生起する分子集団機能」、「ナノ・生体系の反応制御と触媒、化学反応ダイナミクス」の3課題があり、それぞれタンパク質、生体膜、また酵素反応などの研究を行っている。これら生体物質は、本部会において研究目標としている分子集団系の分子機能である自己組織化、分子認識、分子輸送等を生体内において実現している最も興味深い研究対象であるが、本重点課題におけるウィルス系はタンパク質複合体として、これらに基づいてさらに高度な機能を発現している系である。重点課題と特別支援課題間においては解決すべき共通の課題が多くあり、部会内の連携は不可欠なものであると考えている。また、ソフトや方法論的にも共通の課題が多く、現にMODYLASやFMOは部会内でも使用されつつある。今後は、重点課題と特別支援課題の横の連携も明示し、外に向かって発信しながらより一層研究を推進していく。
MODYLASとFMOの融合してこそなる成果に期待する。	すでにFMOとMODYLASに基づいたONIOM/IMOMM法によるQM/MM計算プログラムの開発に着手した。今年度中には、両者の特徴を活かした大規模系に対するQM/MM計算が可能となる予定である。

表 2.2.1.3-6 作業部会による中間評価での指摘事項とそれに対する回答

●研究開発課題	
指摘事項	対応案
課題5:「エネルギー変換の界面科学」(杉野)	
具体的な計算が進みだしたことは好ましい。一方、エネルギー創成という大きい課題の下での活動としては、現在の課題のスコープが限定的過ぎる。いくつかのレベルの活動が相補的に行われるような体制を作ることは後半の重要な課題である。	第四部会での課題設定はご指摘のように限定的です。エネルギー創生に関連した研究が他部会でも始動しており、これらを総合的な活動に束ねていくことを考えています。これにはエネルギーWG等と連携して体制を作り、その下での第四部会の役割を拡張するようなことが必要になります。その方向での活動が後半の課題です。
本研究課題のプロジェクト全体における位置づけがやや不明確である。燃料電池の基礎過程やリチウムイオン二次電池の計算を行っていることには一定の評価はできるが、さらに枠を広げて現在必要とされている技術課題の検討も期待したい。たとえば、リチウムイオン二次電池は全固体電との方向に進んでいるし、エネルギー変換という視点からして再考して、タイムリーで喫緊に必要とされている系の選定が望まれる。	現状では燃料電池やリチウムイオン二次電池という比較的良く解っている系に対して課題を設定していますが、同時に現在の技術動向を踏まえながら、より探索的な技術課題に対する取り組みをこれから行っていきます。具体的には、全固体電池の問題などに取り組んでいる専門家(計算)と議論し、大規模シミュレーションにより飛躍可能な課題がないか調査して、それを具体的に展開するという方向の活動を行います。
今回発表されたSEIに関する成果は、実際には界面を取り扱っておらず、このような場ではプレス発表とは異なりより正確な内容を伝え、今後の課題をきちっと議論すべきである。エネルギー問題という大きな社会的課題の中で「エネルギー変換の界面科学」という切り口はそれで良いと思うが、その中で具体的な研究課題は何ができる、と言う観点ではなく、何をすべきか、と言う観点で選ぶべきである。	前半では、京を用いて何ができるかにやや重心を置いた研究が行われました。京を用いた計算基盤が整ってきましたので、後半はそれをどう生かすか、それを用いて何をすべきかという両面から最適な課題を選定して、必要な軌道修正を行います。
電極反応、電気2重相が関与する実験は膨大で、いたるところに遍在して、なおかつ電池も多様である、折角できつつある良いソフトの全面展開を期してほしい。	電位という概念をどのように具体化して計算に載せるか、それを用いて電極反応をどこまでの確に理解できるかが電気化学系の大問題であり、それを念頭にこれまでソフト開発を行ってきました。それが将来的には、他の電池系、腐食やメッキといった古典的な問題、さらに、関連する最新の実験の理解につながっていくものと思います。その際乗り越えるべき課題をクリアしながら、これらの問題に総合的に取り組んでいきたいと思います。

表 2.2.1.3-7 作業部会による中間評価での指摘事項とそれに対する回答

●研究開発課題	
指摘事項	対応案
課題6:「水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性」(田中)	
本課題で行われている研究が、メタンハイドレードの社会における位置づけとどう関係するのかが明確でない。あるいは、メタンハイドレードのエネルギー・環境問題での位置づけをもう一度徹底して行い、そのことを念頭においた研究の展開ができることが望ましい。	メタンハイドレートは、将来の主要なエネルギー資源の候補であり、試掘も開始されている。シミュレーションが関与していくことは、エネルギー・環境問題の解決につながると考えられる。日本で試掘を行なっているグループとの情報交換等のために、シンポジウムなどを計画している。
水素・メタンハイドレードの本プロジェクト全体における位置付けが明確ではない。本研究を遂行するにあたって、熱力学的な計算手法では不十分である点を明確にして、京による計算が必要であることを示すべきである。また、メタンハイドレードの融解機構や熱力学的安定性が分かれば、エネルギー・資源問題にどのように役に立つのかの視点も考慮した取り組みが必要である。	生成・融解過程は、準安定状態も深く関与して、熱や物質の移動やその他の境界条件に、大きく依存している。そのために、より実在に近い大規模なシミュレーションを実施する必要がある。メタン貯蔵に関して、生成の機構を解明することは重要であり、自由エネルギーのみでは異状な安定性の解明は不可能である。特に、準安定状態と温度さらにはメタンの泡や塩などの濃度勾配の関係を明らかにすることは、ミクロな観点からのシミュレーションに拠らなければならないため、実験や化学工学的なシミュレーションと相補的な関係にある。そのために、試掘グループとの情報交換を密接に行なう。
エネルギー関連課題として選ばれている以上、このようなナノクラスターの計算結果が実際のメタンハイドレート実用化にどのように寄与するのかを明確に示す必要がある。	ハイドレートの実用化にはその熱的な安定性や生成・融解の速度論の知識が不可欠であり、分子シミュレーションによる解析はそのための強力な手段である。とくに、メタン貯蔵に関しては、生成の機構と熱力学的予測を超えた異状な安定性の解明が極めて重要である。例えば我々の2013年度の計算結果は、メタンハイドレートの分解速度を気泡の生成しやすさによりコントロールできる可能性を示唆している。
メタンハイドレードMDと量子化学計算との融合的解釈で今一度、メタンハイドレードの物理化学を学部生にわかるようなあたらしい教育資料とすれば、大きな成果と呼べる。分子レベルと化学工学的シミュレーションとの融合によって課題解決した実例を大々的に示されることに期待したい。	融解や生成過程についての、機構解明とその過程の視覚化を一部実施している。 上記の対応に加えて、教材としてもデータを提供できるように努める。

表 2.2.1.3-8 (1/2) 作業部会による中間評価での指摘事項とそれに対する回答

●研究開発課題	
指摘事項	対応案
課題7:「金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発」(香山)	
具体的な課題が動き出したことは好ましい。しかしまだ、マルチスケールというキーワードは生きていない。キャッチフレーズに終わることなく、実際に材料科学でのマルチスケール解析が実行されることを期待している。 また、鉄鋼材料の重要性に鑑み、有限温度の磁性への関わりをもっと真剣に検討することが必要である。	・第一原理計算をPhase Field法に繋げることでマルチスケールの計算技術を構築していく方策について、第5部会のPhase Field法の専門家を含めたメンバーで、11月25日、1月10日に2回の勉強会を行った。継続して、第5部会全体の主要課題として、検討を行っていく。 ・鉄鋼材料のfcc高温相の磁性の取扱い等について、現在、元素戦略構造材料拠点(京大)においても検討をスタートしており、連携して議論を進める。なお、本重点課題に含めるよりも、可能ならば第5部会の新規の特別支援課題として推進する方向で議論している。
材料中の非整合界面や半整合界面について京を用いて大きなセルで計算できることは、構造材料分野において非常に有用であるので、さらに本課題を進めてほしい。一方、最初想定していた転位の計算についても早めに進めるべきである。また、第一原理計算で得られて結果を材料のマクロな特性と結びつけることは本課題の最終目標として位置づけられるので、その足がかりになる計算手法の開発にも着手してもらいたい。	・転位芯の第一原理計算を本年度に開始している。同時に古典分子動力学計算法で転位の予備計算も行っており、転位-合金成分相互作用による強度変化・温度依存性などの結果も得られている。 ・第一原理計算結果をマクロ特性の予測・設計に活かすアプローチについてはコメント1に回答したように、第一原理計算をPhase Field法に繋げる手法、方策について、検討を始めている。引き続き、第5部会全体の重要問題として検討を進めていく。
社会的にも意味があり、エネルギー変換や生体関連の解析にもつながる重要な試みである。成果を期待したい。	・鉄の析出物界面や転位挙動の第一原理計算から、材料中で生じている微視的な現象の機構を明らかにし、一般的な知見に繋げるとともに、さらに第一原理計算をPhase Field法に繋げることでメゾ・マクロ特性をシミュレートする技術を開発していきたい。
・構造金属材料に関する基礎研究の発展を期待したい。と同時に、次世代の人材育成にも注力いただきたい ・ここでの成果をphase field法に繋げる計画は良いが、目標としての力学特性を扱うまでには、更なるステップアップが必要である。他の構造材料プログラムとの連携を密にしつつ、計算材料科学の存在感向上のために尽力いただきたい。 ・たとえば整合・非整合界面の定義そのものや、それぞれの界面の特質について、あるいは、析出物や第二相の形状については、古典的かもしれないが先人達による素晴らしい仕事の蓄積が既にある。たとえば、整合界面、非整合界面共に、第二相内外の応力状態は、第二相の形状に強く依存することが知られている。さらに、第二相の大きさや形によって、形状を決める因子も変化する。本研究の新規性、独創性および成果については、常に今までの理解を十分に意識し、それらと比較しながら検討いただきたい。 ・8日には、腐食にまで手を広げるのは得策ではないと申し上げた。寺倉先生は、分野2の他の研究者との異分野交流・相互乗り入れを意識されて腐食をテーマの1つとして加えることを示唆されたのであり、その主旨は理解するが、香山課題は、興味深い結果を得つつあるのが現状で、まだ(かなり異質の)腐食にまで研究対象を広げることは得策ではないように思える。もちろん、腐食に造詣が深く有能な研究者が新たに参加するのなら、話は別である。	・次世代の人材育成は、CMRIの連続講義やシンポジウム、セミナーを通じて行っている。但し、一朝一夕に成果が出るものではなく地道な活動が重要と認識している。 ・まず、Phase Field法の専門家も加わっている第5部会において、マクロ特性の予測、設計に繋げる方策を検討する。さらに、元素戦略構造材料研究拠点などのプロジェクトと連携して、議論を深めていく。 ・先人によってなされた成果の重要性は十分に認識している。連続体力学に基づく美しい数理に基づいており、又、現実の析出挙動を非常によく説明する。しかし、一方において、連続体力学に基づくが故に、原子レベルの機構について議論はするのは困難があると思う。格子の離散性や電子状態といった通常の連続体力学が扱い得ない部分の知見が得られるのが本研究の特長であり、先人によってなされた成果に相補的な結果を加えるように努力する。 ・従来の材料科学・工学におけるモデルや理論、各種の実験観察等とも比較検討をしながら進める。 ・腐食について言及したのは、一つの部会が一つのコミュニティで閉じないようにとの考えから、材料が物性や分子と第5部会で共働できる課題として腐食の問題を提議した。この課題については、本重点課題ではなく、第5部会内の新規特別支援課題の候補として、第5部会やCMRIで検討する。

表 2.2.1.3-8(2/2) 作業部会による中間評価での指摘事項とそれに対する回答

●研究開発課題	
指摘事項	対応案
課題7:「金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発」(香山)	
高強度・高靱性材料の設計を目指して、一步一步着実に進めようとする研究スタンスは評価できる。まずは不純物異相界面での電子状態が第一原理計算で明らかにされ、次にディスロケーションでの電子状態を明らかにしようとしている。それからさらにディスロケーションと不純物異相界面との相互作用を明らかにし、ディスロケーションのダイナミクス、そして強度や靱性の評価につながってくるわけであるが、そこでは古典的な分子動力学やフェーズフィールド法が登場する。第一原理計算からの接続は、決して容易ではなからうが、今後どのように展開していくかが、大変楽しみに感じる。ここでも、各々の役割分担を負った研究者の連携が重要な鍵であり、代表者のリーダーシップにも期待したい。	・鉄の析出物界面や転位挙動の第一原理計算から、材料中で生じている微視的な現象の機構を明らかにし、一般的な知見に繋げるとともに、さらに第一原理計算をPhase Field法に繋げることでメゾ・マクロ特性をシミュレートする技術を開発していきたい。
分子レベルでの磁性(スピンの量子化学)と、マクロな磁性を結びつけて学部生にもわかるマルチスケール学を示されることに期待したい。	bcc Feの界面や転位の磁性については、今回の第一原理計算で扱えると考えている。fcc高温相の磁性については、簡単な問題ではないが、元素戦略構造材料研究拠点(京大)やドイツのNeugebergerらのグループが取り組みを行っており、情報交換や連携して進めていきたい。なお、磁性自体を掘り下げたアプローチは、第5部会やCMRIで、別途、新規課題として取り上げることが検討する。マルチスケール学については、既にCMRIの連続講義で東北大学で6回にわたって講じた。理学部、工学部の院生を中心に毎回30名近い参加者を得た。3月にもシンポジウムを開催予定であるが、次年度も地道な活動を続けていきたい。

表 2.2.1.3-9 作業部会による中間評価での指摘事項とそれに対する回答

●計算科学技術推進体制の構築	
指摘事項	対応案
・最先端の実験活動との連携体制の構築を目指し、元素戦略プロジェクトへの貢献、大型実験施設との合同研究会などが行われている。	元素戦略PJに加わっているCMSIメンバーは、「京」やHPCIで得られた研究成果を迅速に実験、計測研究者にフィードバックできる環境を活かし、成果を創出する。
・各拠点機関を中心に成果報告会や研究会が精力的に行われている。一方、本分野全体としてイベント開催回数が多すぎるようにも見受けられ、イベント開催の有効性を検証するとともに、開催するイベントの絞り込みも併せて必要である。	イベントが多いことによる研究推進の遅れがないよう、イベントの目的と効果を吟味しながら実施していく。平成26年度予算が10%削減されたことに伴い、国際会議や協賛関連イベントの回数は減る。
・他の戦略機関との連携については、分野5「物質と宇宙の起源と構造」と複数回の合同研究会を開催し、特に研究手法に関してのノウハウの交換を図るなど、適切に進められている。	分野5とは一般からのQ & Aサイトの共同運用、合同研究会を実施。また、分野2主催の若手技術交流会、配信講義に分野5の若手が参加しており、H26年度も継続する。分野1とは記者勉強会や合同研究会も開催しており、H26年度も継続する予定。

(3) 中間評価委員会による中間評価

平成 25 年 12 月 4 日(火)に文科省にて、文科省が選出した評価委員会による中間評価が実施された。CMSI 常行統括責任者から、分野 2 の全体の活動を報告した。分野2に関しては、個別に以下のコメントをいただいた。「十万原子規模のシリコンナノワイヤーの電子状態シミュレーション(2011年にゴードン・ベル賞(※)を受賞)によるナノワイヤー中の電子密度分布の解析に成功するなど、新物質・エネルギー創成に関わる社会的・科学的に重要かつ広範囲な物質科学の基礎研究とその応用において、「京」の性能を最大限に活用した多様な成果が得られている。今後は、本質的かつインパクトの大きな成果を目指すとともに、成果の社会還元に向けて産業界とさらに連携することを期待する。」

(4) 分野 2 作業部会による平成 26 年度活動内容の決定

平成 26 年 2 月 13 日(木)に文科省にて分野 2 作業部会を開催し、分野 2 全体、および、各部会で実施する研究開発課題、計算科学推進体制構築に関する進捗と今後の予定の案を報告し、議論の末、平成 26 年度の活動内容が決定された。第 2 部会で推進されていた重点課題「密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究」を、これまで特別支援課題で実施してきた「ナノ構造体における光誘起電子ダイナミクスと光・電子機能性量子デバイスの開発」と統合させ、「密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現」というタイトルで実施することとなった。それ以外の課題は平成 25 年度と同等である。また、この作業部会にて、「京」を優先的に利用できる課題を「超高精度電子状態計算による分子の微細量子構造予測」、「密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現」、「エネルギー変換の界面科学」の3つを選定した。その後、3月の HPCI 戦略委員会にて、「京」の追加資源を受けられる課題は「超高精度電子状態計算による分子の微細量子構造予測」、「エネルギー変換の界面科学」に決定された。

(5) 平成 26 年度 CMSI 研究員・教員の配置

平成 25 年 12 月 13 日の運営委員会にて、研究課題の検討と同時に、平成 26 年度の CMSI 重点研究員、および、CMSI 拠点研究員の配置が検討された。表 2.2.1.3-10 と表 2.2.1.3-11 に雇用する予定の人数を示す。重点研究員は 16 名、拠点研究員は 20.5 名、CMSI 教員は 7 名(1 名が教員 0.5 と拠点研究員 0.5、もう 1 名が教員 0.5)、総勢 43.5 名の CMSI 教員、および、研究員を雇用する計画である。

表 2.2.1.3-10 CMSI 重点研究員の配置予定(平成 26 年度)

所属機関	第1部会		第2部会	第3部会	第4部会		第5部会	合計
	重点1	重点2	重点3	重点4	重点5	重点6	重点7	
神戸大		2		1				3
東北大院理		1						1
東大院・工	2		2					4
物性研(院理)					1.5			1.5
阪大院・工			1		1			2
名大院・工				2				2
岡山大院・自然						1		1
東北大・AIMR					0.5			0.5
産総研関西							1	1
合計	2	3	3	3	3	1	1	16.0

表 2.2.1.3-11 CMSI 教員、CMSI 拠点研究員雇用計画(平成 26 年度)

雇用機関	CMSI 特任教員	CMSI 拠点研究員＊				合計
		A	B	C	D	
物性研(神戸拠点)	1	1				2
神戸大(神戸拠点)	1					1
物性研(院理)	0.5	1	3	1	1	6.5
分子研			5			7
				2		
東大・総合文化 (分子地域拠点)			3			3
金研	1		1			2
横浜国大 (材料地域拠点)			1			1
産総研 (産官学連携拠点)				1		1
東大院・工(教育拠点)	1.5		0.5			2
名大院・工(教育拠点)	1					1
阪大院・工(教育拠点)	1					1
合計	7.0	2	17.0		1.5	27.5
		(拠点研究員合計 20.5)				

*カテゴリ

(A) 分野共通に利用できる先端的な要素技術の開発

(B) 分野共通に利用できるアプリケーションの公開

(C) 複数の重点課題・支援課題におけるアプリケーション開発・実行支援

(D) アプリケーション公開・普及支援

2. 2. 2 本格実施(平成26年度～27年度)における実施計画

2. 2. 2. 1 研究開発課題(計画)

2. 2. 2. 1(1) 新量子相・新物質の基礎科学

第1部会 代表者：天能精一郎(神戸大)、今田正俊(東京大)

1) 部会全体の取り組み

[研究課題概要]

原子核や電子などの構成粒子の属性と量子力学や統計力学を通じた基本法則を出発点として、原子、分子の集合体、ナノ構造から、さらにはマクロな凝縮物質に至るまでの、現実物質の性質を理解し予測する学問として分子科学および物性物理学は発展してきた。計算機の飛躍的な発展はこの学問領域を革新し、両分野を統合する物質科学に強力な解析能力と予測可能性を付与しつつある。ニュートンやフーリエ以来、数学を基本的な道具とし、数学の構造と一体となって影響を与え合い発展してきた従来の基礎物理学と基礎化学は、前世紀末からのスーパーコンピュータの発展を契機として、スーパーコンピュータの大規模計算アルゴリズムと適合しあい、影響しあう学問体系へと発展し始めた。次世代スーパーコンピュータを含む超並列コンピュータとこれに適合する数値手法はこの流れを一気に加速する可能性を持つ。特に第一原理的な計算手法の発展は高精度の実験検証や設計に耐える予測と、実験に先立つ未知の物質相や概念の発見を可能にしつつある。

量子化学の分野においても、最近半世紀の間に電子状態計算の精度が飛躍的に高まり、物質設計や反応機構の理解、創薬といった様々な分野で活発な応用が行われてきた。特に、高速計算機と多電子理論・基底関数の発展により、理論計算は実験研究に先駆けて化学反応や機能発現、エネルギー変換、生体内での酵素反応に踏み込む威力を示している。更に、相対論的電子状態理論は重元素を含む材料設計や物性の定量的予測を可能とし、分子シミュレーションの分野で行われている溶液や蛋白質の自由エネルギー計算を用いることにより、多くの生命現象が計算機の上で解かれようとしている。

一方、多体量子系の示す多様性や階層性の理解は今世紀凝縮系物理学の中心課題であり、人類の自然探索と理解の最前線でもある。とりわけ強相関多体量子系は新しい現象と概念の宝庫であり、高温超伝導、巨大応答、トポロジで分類される量子ホール相やトポロジカル絶縁体などの物理を生み出し、遷移金属酸化物、希土類化合物、有機導体などの強相関電子物質群やナノチューブなどのクラスター化合物、量子ドットなどの微細加工構造、冷却中性原子などの新しい系の探索と理解へと導いた。この流れは基礎科学の革新を生み出すだけでなく、将来の新しい応用や技術革新の芽にもつながり得る。摂動論や平均場近似の手の届かない強相関系でスーパーコンピュータを駆使した新しいアルゴリズムが新しい物質相を予言・実証するなど高速計算機は大きな威力を発揮し始めている。

以上の背景のもと、第1部会は物質科学の中核と基礎科学を担い、物理と化学の枠を超えて、粒子間の相互作用効果の強い分子系や凝縮物質(強相関量子多体系)を取り扱う強相関多体量子科学、計算科学の汎用手法を確立発展させるとともに、多体集団の励起状態や非平衡ダイナミクスの理解を飛躍させることが主要なミッションである。

まず分子軌道法や種々の量子モンテカルロ法、数値繰り込み群法などを出発点とする強相関量子多体系の汎用的大規模計算の基盤技術を超並列環境に適合するように発展させ、次世代スーパーコンピュータへ開発応用する。この応用によって、新奇な量子多体現象の発見、革新的な量子機能をもつ新物質の機構解明や新物質探索と、化学反応や分子集団ダイナミクス制御、エネルギー変換や発光制御などの制御法の基礎の解明をめざす。次世代スーパーコンピュータによって初めて明らかにできる、未踏の強相関効果、階層性と量子性が生む新量子相・励起現象の理解・発見と、基礎物質科学の解明が目標である。さらに計算物性物理学と量子化学の分野を橋渡しし、第一原理計算とその応用に関して共通する課題を明らかにして、ふたつのコミュニティの間の相互交流の中から新たな計算基礎物質科学の進む道を探る。このためには物性物理学と量子化学の最

先端基礎課題を推進するとともに、両者のバランスのとれた発展を図って、次世代スーパーコンピュータによる新たな地平を切り開く。

[社会的意義]

電子相関の強い系の第一原理電子状態解明の汎用手法の確立には次のような社会的なインパクトがある。

1. 長年の懸案である強相関量子系の一貫手法として広範な応用

現実物質の新量子相解明・検証の武器により新しい量子相(新超伝導、新絶縁体、新量子液体)＝未だ人類の知らない物質の新たな存在形態の発見を可能にする。

超並列化によりパラメタサーチによる物質探索などが可能になり、基礎物理学の革新につながる。

2. 新物質群の多くが、電子相関の大きな系に属し、次世代の応用や産業基盤開拓の基礎として期待される。

期待される現象、機能には高温超伝導、高効率熱電素子、マルチフェロイクスなどがあり、全く新しい原理による新機能応用の研究提案へと橋渡しし、基礎物理学の源流を応用に展開するための手法を提供する。高度な波及性・有用性は、如何にして、より基本的・普遍的な物理を解明するかにかかっており、意義は高い。

電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開の社会的意義は以下である。

電子状態理論は物質科学の基礎であり、エネルギー問題や希少金属の代替物探索等、我が国が直面している問題の解決の糸口を計算科学の分野から探索するのに不可欠な研究手段である。ポストハートリー・フォックの高精度理論を「京」コンピュータで実行する事により、シリアルで半世紀かかる計算が数時間で実現可能となり、実在系に近い材料設計がナノスケールの分子で実用化が可能となる。又、稀少金属元素に対する代替合金の広範な予測が可能となり、社会的に意義の大きい成果につながると期待される。更に、溶媒やタンパク質環境からの熱揺らぎとダイナミックスを考慮する事により、生命現象の解明や人工光合成系の開発のボトムアップな発展が可能となる。

2) 研究開発課題内容

[平成 26～27 年度の実施計画と成果目標]

物性物理学の課題については、作業部会からの指摘事項として「本分野のキャッチフレーズには、「源流から奔流へ」という文言が入っていて、本課題は源流の一つである。他の課題への波及効果にも意を尽くしてもらいたい。」という指摘および類似する指摘があった。平成 25 年度に引き続き、基礎学理の観点から、太陽電池などエネルギー変換課題の基礎付けを展開していく。また 25 年度にスピン軌道相互作用の大きな系の現象について、新量子相を見出すなどの発展があったが、さらに他部会および実験研究に刺激を与える展開をめざす。また、「強相関を結晶構造の問題やフォノン励起と繋げて考える必要がある場合がある。鉄系超伝導等は電子相関が重要であるが、結晶対称性の変化や格子ゆらぎの役割を指摘する考え方もある。格子ダイナミックスやフォノンの役割の検討も加えて理解してほしい。」との指摘が以前あったが、平成 25 年度は、その検討を開始した。今年度はさらに推進し、特に電子格子相互作用のある系を取り扱う手法の適用範囲を広げ、第一原理模型から低エネルギーソルバーで解くまでを一貫して行える枠組みを作る。

分子科学の研究課題については、作業部会の中間評価指摘事項として、「開発された計算手法とプログラムを分野横断的な形で現実の問題へ展開することが望まれる」という趣旨のコメントがあった。分子設計という観点では、平成 26 年度以降、フラーレン・ルイス塩基アダクトに関して、ルイス塩基と原子種を換えた網羅的な研究を行い、生成効率に優れたデバイス材料の予測を行う。更に、植物の光合成反応中心の電子状態と酸素発生の機構の研究を FMO 法とモデル空間量子モンテカルロ法を用いて、部会内連携および第3部会との部会間連携の形で進める。計算手法そのものの発展についても、物性物理分野とは相関の強い電子状態の取り扱いが共通の関心であり、第一部会での研究会等の活動を一層活性化する事により、F12 電子状態理論やモデル空間

量子モンテカルロ法を物性物理の問題に応用したり、その逆の効果が期待出来る。

他部会と連携して、励起状態、非平衡に関する夏の学校を開催し、協同して解決しうる課題を明らかにし、共同研究を進める。

26～27 年度においては、「京」を用いた強相関第一原理シミュレーション法(MACE)の確立により、従来の数十年の CPU 時間を要していた計算が数十時間で行なえるなどの革新が可能になる。この手法を用いて新しい量子状態や量子相転移を1つ以上解明する。

(候補)

- ・量子スピン液体、非フェルミ金属、強相関トポロジカル絶縁体、トポロジカル転移
- ・強相関超伝導体の機構解明
- ・非平衡・励起ダイナミクス手法と高励起実験解析手法の確立
- ・最先端の実験と歩調を合わせながら、強相関電子系特有の励起ダイナミクスの探索と理解をすすめる、強相関基礎科学および非平衡科学の深化に貢献する。
- ・強相関電子系特有の電子内部自由度による量子効果を最大限活用した次世代光学素子の設計指針を構築する。
- ・脱閉じ込め臨界現象、長距離相互作用系における超流動固体、ランダムネスによる新奇な臨界特性など物性物理と統計力学の教科書を書き換えるような新概念の数値検証、提案をめざす。
- ・光格子中の冷却原子系のような新奇構造などを用いて、新概念を実験検証する実験を提案し、高精度の予言を行うとともに、新概念を具現化する新機能系の設計指針を明らかにする。

以上の解明は以下の点で基礎科学の発展に貢献する。

1. 長年の懸案である強相関量子系の一貫手法として広範な応用

現実物質の新量子相解明・検証の武器により新しい量子相(新超伝導、新絶縁体、新量子液体)の発見を可能にする。

超並列化によりパラメタサーチによる物質探索などが可能になり、基礎物理学そのものの革新につながる。

2. 新物質群の多くが、電子相関の大きな系に属し、次世代の応用や産業基盤開拓の基礎として期待される。

高温超伝導、高効率熱電素子、マルチフェロイクスなどがあり、全く新しい原理による新機能応用の研究提案へと橋渡しし、基礎物理学の源流を応用に展開するための手法を提供する。高度な波及性・有用性は、如何にして、より基本的・普遍的な物理を解明するかにかかっており、このための基盤的な手法が準備される。

分子理論では、GELLAN を用いた電子状態理論が「京」コンピュータ利用の中核であり、旧動力学および凝縮系の研究項目との練成を図る。熱揺らぎを中心とした研究項目では、これまでに開発してきた MC-MOZ 法により、生体分子など大型分子の溶媒和構造を高効率に求めることに成功したが、分子構造の揺らぎ、柔軟性も重要な役割を果たすことから、揺らぎを扱う理論手法の構築を推進する。分子そのものの揺らぎとともに分子の周囲の環境による揺らぎが、分子のダイナミクス、緩和を決定しており、実験的には高次非線形分光法で測定されるので、その理論解析を進める。研究概要は以下である。

1. ナノスケールでの完全基底関数極限でのポストハートリー・フォック計算。有機デバイス材料としての金属内包フラーレン、外部収束フラーレンの構造と物性計算。
2. モデル空間量子モンテカルロ法によるメタルクラスターの計算。
3. フラグメント分子軌道法とモデル空間量子モンテカルロ法を用いた光システム II の構造と電子状態の研究
4. 3DSSSV や原子レベルと粗視化モデルシミュレーションを用いた溶液・タンパク質の揺らぎとダイナミクス

3) 平成 26 年度の具体的な実施計画

[部会活動]

8 月末に滞在型研究会(サマースクール)を若手中心で他部会と連携しながら開催し、第一部会に共通する方法論的な課題を広く深く議論する場と、励起状態、エネルギー変換に関する CMSI 共通の課題を抽出する。

[連携活動]

(部会連携)

第一部会の重点課題「相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明」の追究する研究課題は、

1. 新しい強相関量子相の発見・同定・解明・提案

量子液体(有機導体の量子スピン液体、遷移金属酸化物の非フェルミ液体など)

絶縁体(トポロジカル絶縁体の強相関効果)

電子相関が引き起こす超伝導

2. 新しい相転移機構

ランダウの自発的対称性の破れの枠を超えた転移

脱閉じ込め転移の解明やトポロジカル転移の解明

3. ダイナミックス・非平衡

非平衡量子現象、高励起実験手段の理論解析法の展開

JPARC での中性子非弾性散乱、SPRING-8 での共鳴非弾性 X 線散乱、時間分解光電子分光

4. 第一原理による強相関現実物質解明法(MACE)の確立と展開

という 4 つの主要なテーマからなるが、これらは、複雑系汎用手法である多変数変分モンテカルロ、経路積分繰り込み群、クラスター拡張・動的平均場法を用いた任意構造のフェルミ多体問題、競合する秩序とゆらぎの解明、大規模系・高精度・高効率解法である量子モンテカルロ法を用いた統計力学(量子スピン問題)の基礎課題の解明、非平衡系・励起ダイナミックス手法である動的密度行列繰り込み群法を用いた高励起実験手法の理論的基礎の解明という異なる計算手法と研究対象を有機的に関連付けている。特にイリジウム酸化物のようなスピン軌道相互作用の大きな系での新量子相の探究において、異なる計算手法を用いて、総合的な観点から共同研究を 25 年度に引き続き展開する。

一方、重点課題「電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開」では、電子状態理論、動力学、統計力学的な見地から、これらが錬成・融合された新しい分子理論の展開を行い、超並列計算環境を高度に活用した分子論の新機軸を展開している。

今後も継続して部会内(新量子相・新物質の基礎科学)の重点課題間での緊密な連絡を図る。第三部会の北浦と協力して、フラグメント分子軌道法を用いた光システム II の全原子計算を行い、タンパク質反応場が酸素発生中心の電子状態に与える影響を調べる。

(CMSI 連携)

第 2 部会へ電子状態計算法、物質パラメタの提供は大きなテーマであり、

サブ課題 2:「ナノ構造体における光誘起電子ダイナミクスと光・電子機能性量子デバイスの開発」(信定)

サブ課題 3:「スピントロニクス/マルチフェロイクスの応用へ志向した材料探索」(齋藤)

サブ課題 4:「新材料探索」xTAPP、QMC(常行)

は特に強く関連する。また

第 3 部会:

サブ課題 4:「機能性分子設計ー光機能分子と非線形外場応答分子の光物性」(江原)

とも励起状態の計算手法の提供を通じて貢献できる。

その他の課題／部会に対しても成果を提供していくとともに、第3部会で開発していく MD 計算や量子化学計算のプログラムを第1部会でも活用する。

第4部会

サブ課題1:「太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算」(山下)では、ヘテロジャンクションにおける励起状態の構造緩和やエキシトンダイナミクス、チャージキャリアモビリティの見積もりが必要であり、基礎理論では第一部会の重点課題1および2と強く関係している。

サブ課題4:ナノ構造体材料における高効率非平衡エネルギー変換過程とナノ構造創製の理論シミュレーション(浅井)と量子輸送現象、非平衡ダイナミクスの課題について基礎理論から応用をつなぐ連携を図る。

(外部連携)

2月中旬に量子多体問題の方法論開発に関する国際ワークショップを物性科学、分子科学、原子核物理学、素粒子物理学の分野横断で開催する。

強相関電子系分野の実験研究者と連携して研究を推進する。特に新物質探索、中性子、X線散乱、光電子分光、透過型トンネル顕微鏡などの手段を用いる実験研究者と物性解明を進める。有機伝導体、遷移金属化合物、鉄系超伝導体、スピン軌道相互作用の大きな物質などを対象とする。更に、戦略分野1とは従来から GELLAN を用いた QM/MM 計算に基づく反応経路最適化法の開発を進めており、電子状態と動力学が協働する生命現象の解明を目的に、連携を深める。

[研究開発課題の実施]

i) 重点課題1: 相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミクスの解明

[代表者] 今田正俊(東京大)

第一原理に立脚する強相関量子多体系の高精度な予測・解明と、本質と原理を抽出するための理論模型による大規模計算に基づき、電子相関の強い現実物質の新機構解明と制御法開拓に関する研究、強相関電子系の励起ダイナミクスの研究、新しい量子相・量子臨界現象に関する研究を推進する。

[研究開発体制]

[担当者] ①今田正俊(東京大)、求幸年(東京大)、有田亮太郎(東京大)、中村和磨(東京大)、三宅隆(産総研)、青木秀夫(東京大)、高田康民(東京大)、黒木和彦(電通大)

②遠山貴巳(東京理科大)、町田昌彦(原子力機構)、前川禎通(原子力機構)、米満賢治(中央大)

③川島直輝(東京大)、藤堂眞治(東京大)、宮下精二(東京大)、岡部豊(首都大)、鈴木隆史(兵庫県立大)、原田健自(京都大)、渡辺宙志(東京大)

3つのグループが定期的にミーティングを行ないつつ、特にスピン軌道相互作用の大きな系の研究については第一原理模型の導出から解明まで共同して研究を進める。

[研究開発課題概要]

第一原理に立脚する強相関量子多体系の高精度な予測・解明と、本質と原理を抽出するための理論模型による大規模計算に基づき、電子相関の強い現実物質の新機構解明と制御法開拓に関する研究、強相関電子系の励起ダイナミクスの研究、新しい量子相・量子臨界現象に関する研究を推進する。

平成26年度においては、以下の3課題の研究を推進する。

①新しい量子相の解明

②強励起ダイナミクスの解明

③スピン軌道相互作用とトポロジカル現象の物理

[成果目標とその科学的・学術的意義]

① 新しい量子相の解明

MACEを用いた得た強相関第一原理模型をもとに、京を用いて高精度ソルバーで計算を行ない、新しい量子相の第一原理的な解明を行なう。これにより高温超伝導相やスピン液体相という高度な量子多体状態の再現が可能になる。特に鉄系高温超伝導体と銅酸化物高温超伝導体を中心に高温超伝導体の第一原理模型を用いて、大自由度で初めて得られる、超伝導機構について第一原理的に解明する。同じ手法を有機伝導体の第一原理模型に適用してMACEの低エネルギーソルバーで解き、実験結果と模型による相図を比較検証し、量子スピン液体の発生機構を明らかにする。上記の目標に対して、平成26年度には単純化された理論模型の高精度計算により、超伝導および量子スピン液体の機構を明らかにする。現実物質での機構が実際に解明されることで、新しい物質相の全貌が明らかになり、物理的基礎が解明されるとともに、高温超伝導や量子スピン液体相を実現するための指針も得られると期待される。

以上の総合的な展開により、第一原理手法に立脚し、新概念や新原理の提案・検証から応用可能性と機能設計指針までを必要に応じ高精度で取り扱える一貫手法が確立し、現実物質へ応用できる汎用手法の本格応用が始まることを意味する。個々の強相関現象の基礎科学的解明や設計提案はもとより、この一貫スキームの確立によって、強相関電子系計算手法に知られていた困難を克服し、応用研究への汎用的で役に立つ手法を基礎・応用に跨って物性科学研究者に提供し、今世紀の課題である強相関電子系、強相関量子系を「京」を用いて計算科学的に解明することができるようになる。

また、平均場近似など、一体問題に帰着する手法では本質をとらえることができない強相関量子多体系は大規模計算によってのみ、予測や設計が可能である。このような多体問題解決の1つの展望として、近年進展の著しい冷却原子系実験技術によって、「光格子系量子シミュレータによるシミュレーション」も現実味を帯びてきているが、これを実現する上でも、冷却原子系で起こっている現象の定量的な理解を通常型の計算機を利用して実行できる環境が不可欠である。一方、強相関系の未解決問題のなかでも、高性能永久磁石材料、高強度材料、超伝導材料などの設計は社会的な要請も高い重要な課題であるが、そこでは欠陥・界面などトポロジカルな性質が物質としての特性に大きく関わっている。本課題項目では、このような背景を念頭におき、多体問題のなかで、自発的に生じる特異点(欠陥)や、更には、トポロジカル数によってのみ特徴づけられる新しい量子相に関連する物性の基礎を明らかにする。

② 強励起ダイナミクスの解明

光による高励起に伴う非平衡状態を利用した物性解明法(ポンププローブ法と呼ばれる)、光励起による相転移や緩和、励起子励起による電子・ホールの高効率分離輸送によって可能になる高効率太陽電池、温度差による非線形非平衡状態を利用した高効率熱電効果などの追究のために、強相関電子系での強い非平衡状態を利用した新たな物性解析法(時間分解光電子分解などのナノ秒、アト秒超高速現象の実験解析法)を開発する。

動的密度行列繰り込み群法、厳密対角化法などを用いて、低次元強相関電子系の外場誘起相変化にともなう過渡ダイナミクス、低次元量子スピン系の不純物誘起や磁場誘起スピンダイナミクスなどの計算を推進し、量子ビームや超高速分光の実験グループとの情報交換を行いながら、低次元強相関電子系の励起ダイナミクスの解明をめざす。その結果得られる、外場への応答理論や量子ビームなどを用いたスペクトロスコーピー実験に対する情報は、強相関基礎科学の深化に貢献すると期待される。また、低次元強相関電子系の光励起非平衡ダイナミクスから得られる緩和に関する知見を得ることで、強相関効果を用いた光素子材料の探索に貢献する。

③ スピン軌道相互作用とトポロジカル現象の物理

イリジウム化合物の第一原理有効模型をもとに、実験のより完全な理解と、キタエフスピン液体を実現する道筋を追求する。スピン軌道相互作用の大きな理論模型について、トポロジカル新量子相を含む相図を探索する。まずスピン軌道相互作用系の有効模型として提唱されているキタエフ・ハイゼンベルク模型の相図を比較的小さな系で求める。またテンソルネットワーク法のコードを開発する。基礎科学的に量子スピン液体の発生機構と性質がより深く理解されるだけでなく、この系が生み出すマヨラナフェルミオンとそれを用いた量子計算などの応用の可能性に対して、基礎学理が解明される。

【「京」利用状況】

MACE による現実物質の電子状態解明のための制限 RPA 法および多変数変分モンテカルロ(mVMC)法が「京」のアプリケーション課題として活用されており、いずれも 24576 ノードまでの実証試験を行い、並列化高度化が行なわれている。制限 RPA 法で 24300 ノードでの測定値は flops/peak = 19%, mips/peak = 26%である。また低エネルギーソルバーである多変数変分モンテカルロ法は最大実行効率がピーク性能比 10%から最大 40%以上に達している。これを用いて超伝導、および量子スピン液体の解明のために大規模計算が進行した。

動的密度行列繰り込み群法(開発責任者:遠山)は、「京」12288 ノードでの理論ピーク性能比 52%(FLOPS/PEAK)を記録している。ストロングスケーリングによる並列化効率は 6144 ノードを基準として 12288 ノードで 90%である。また、二次元電子系・スピン系に有効な並列化技法を開発して実装しており、「京」での高並列化に対応する二次元密度行列繰り込み群法も開発済みである。

本課題で利用するコードはグラントチャレンジ(ナノ統合)プロジェクトで開発を続けてきた ALPS に本課題に

必要な改変を加えたものである。ALPS については、すでにKコンピュータ上で十分な性能試験を実施し、H24年度の本格的利用においても、高い性能を発揮している。H25年度以降もH24年度に明らかになったいくつかの課題を解決するためALPSコードの高度化を行う予定である。科学的側面も含めた準備活動としては、物理的な関心の焦点を整理し、その解明に必要な京利用上の技術的な問題点を明確にするため、月に1度メンバが集まり集中的に討議する会合を開催してきたが、これについては今後も継続する。

【研究実施内容】

第一原理に立脚する強相関量子多体系の高精度な予測・解明と、本質と原理を抽出するための理論模型による大規模計算に基づき、電子相関の強い現実物質の新機構解明と制御法開拓に関する研究、強相関電子系の励起ダイナミクスの研究、新しい量子相・量子臨界現象に関する研究を推進する。

平成 26 年度においては、以下の 3 課題の研究を推進する。

①新しい量子相の解明

1. 銅酸化物高温超伝導体の第一原理模型を用いて超伝導メカニズムを解明する。単バンドの第一原理格子模型での一辺十サイト以上の計算を推進継続することによって、熱力学的極限への外挿が行なえる。多バンド模型の計算と比較することによって、超伝導機構をピンポイントで理解できるようになる。また網羅探索により今後の高温超伝導への指針追究を推進できる。
 2. 強相関電子系群の基底状態や電流・熱相関関数を対角化法、マスター方程式の方法、密度行列繰り込み群法により計算し、特異なエネルギー輸送および効率的なエネルギー変換を解明する。これを用いて効率的な太陽電池での電荷分離機構の解明を進める。
 3. 従来の相転移の教科書を書き換えることが提唱されている「脱閉じ込め現象」という新概念の妥当性を判断するために、この新量子相転移が生じる候補となる理論模型である、正方格子上、およびハチの巣格子上の量子スピン模型である「SU(N)JQハイゼンベルクモデル」について、さらに大規模計算を継続し、脱閉じ込めの概念の有効性と特異な1次転移的なふるまいの原因を明らかにする。さらに、その発展形として、ランダム系、長距離相互作用系、スピン・フォノン結合系などにおける課題の解決を目指し、特にスピン液体状態の実現の可能性のある実験系に即した計算を方法論の開発とともに行う。
 4. 多数の原子をレーザーで閉じ込めた新しい系である「冷却原子系」では新量子相の出現が期待されている。新量子相探索のために、回転する冷却原子系に関するシミュレーションを行い、新量子相候補を抽出する。
 5. 量子多体系に対する新しい数値計算法である projected entangled pair states (PEPS)法と呼ばれる方法が最近提唱され、量子的絡み合いを正確に取り扱う、画期的な統計力学的状態和の計算法になり得ると注目されている。この手法に基づくシリアル版コードをチューンアップし、同時に並列化コードを完成させる。この手法が使えるようになる場合に、従来困難の多かった量子多体系の計算の可能性が大きく広がる。
- 以上、新量子相や量子相転移の候補を抽出し、テンソルネットワーク法などの新しい手法の開発と実装を行なう。

②強励起ダイナミクスの解明

1. ポンププローブ分光でサブマイクロ秒での電子励起の緩和を見ることによって、非占有側の励起スペクトルを解明しようという時間分解光電子分光法の理論を提案することを目標に、強励起した強相関電子系の模型の時間発展、緩和を計算する。
2. 太陽電池や熱電素子に生じるダイナミクスを解明するために、多励起子の生成緩和過程を明らかにするための計算手法を開発し、基礎的な知見を得る。
3. J-PARC との連携を目指した研究を推進し、動的密度行列繰り込み群法を用いて、フラストレート梯子型量子

スピン系 $\text{CuBiCu}_2\text{PO}_6$ のスピンダイナミクスに対する不純物効果、磁場効果の予測を行う。

4. 低次元強相関電子系の光励起非平衡ダイナミクスを明らかにするため、時間依存密度行列繰り込み群法・厳密対角化法を用いて、低次元モット絶縁体のポンプ・プローブ分光で観測される光学伝導度の時間依存性の計算を行い、ポンプ直後の初期緩和に関する知見を得る。

5. 二次元密度行列繰り込み群法を用いて、スピン・軌道相互作用系を記述する拡張キターエフ・ハイゼンベルグモデルの基底状態、エンタングル・エントロピーやスピン励起ダイナミクスを計算する。特にスピン液体状態の出現可能性と、スピン液体状態でのスピンダイナミクスの特徴に焦点を当てる。

③スピン軌道相互作用とトポロジカル現象の物理

1. スピン軌道相互作用の大きな理論模型について、トポロジカル新量子相を含む相図を探索する。まずスピン軌道相互作用系の有効模型として提唱されているキターエフ・ハイゼンベルグモデルの相図を比較的小さな系で求める。また変分モンテカルロ法、密度行列繰り込み群法、テンソルネットワーク法を応用して計算を進める。

2. スピン軌道相互作用の強いイリジウム化合物の第一原理模型に対して実験で明らかとなっている物性をパラメタなしに説明する。スピン液体を実現する方策を検討する。

ii) 重点課題2: 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開

[代表者] 天能精一郎(神戸大)

本重点課題の目的は、電子状態・動力学・熱揺らぎの取り扱いをコアエレメントとして革新的な発展を図り、それらの融和的な理解と練成に基づいた新しい分子理論の展開によって、超高精度電子状態計算による分子の微細量子構造予測、分子における電子の動的過程と多体量子動力学、凝縮分子科学系における揺らぎと遅いダイナミクスの解明を目指す。

[研究開発体制]

[担当者] 天能精一郎(神戸大)、柳井毅(分子研)、江原正博(分子研)、安田耕二(名古屋大)、波田雅彦(首都大)、大塚勇起(神戸大)、高塚和夫(東大)、河野裕彦(東北大)、齊藤真司(分子研)、佐藤啓文(京都大)、笹井理生(名古屋大)、中野晴之(九大)、永瀬茂(京大福井センター)

[研究開発課題概要]

溶液やタンパク質環境の中で生じる化学反応や励起状態の失活過程を説明する分子科学では、様々な力学が絡み合う現象を取り扱う必要がある。しかしながら、広範な化学現象の源となる基礎原理を、エネルギーやレアアースといった現実の問題に利用するには幾つかのブレークスルーが必要である。本研究課題では、斬新な計算手法の発展と超並列計算環境の援用により、ポストハートリー・フォック計算によるナノスケールの材料設計やメタルクラスターによる代替物探索を高信頼度で行う。更に、電子状態・動力学・熱揺らぎが協働する、多体量子動力学や凝縮分子科学系における揺らぎ・ダイナミクスの計算を行い、有機太陽電池でのエキシトン移動やタンパク質の構造相転移の解明へと発展させる。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

タンパク質などを対象にする局所電子相関法の発達により大規模計算が可能になっている一方で、炭素材料分子を含む共役系分子系では、相関を取り扱いたい占有軌道が局所的でなく、ナノスケールの分子設計や相互作用の計算をポストハートリー・フォック法によって実行する事が困難である。超並列計算環境に特化した

電子状態理論を発展させることにより、この問題を克服し、局所電子相関法やフラグメントによる多体展開が使えない多くの物質の理論研究を可能とする意義がある。モデル空間量子モンテカルロ法では電子相関の強い物質の凝縮重電子状態や多電子励起状態の計算が可能であり、京速計算機を効果的に用いる事により、多核金属錯体等で従来予測が困難であった分子理論が大幅に進歩すると考えられる。

更に、電子動力学、非断熱化学動力学、超多体量子動力学を発展させた独創的な分子理論に基づく、新しい化学反応理論で分子の未開拓の性質を明らかにし、「京」コンピュータの援用で、電子状態制御を通じた化学反応制御や、新物質の創成を行うための原理と実験指針を提供する。これによって、新しい化学の基礎分野を創出し、それは物質設計や新しい物質創成を通じて一般社会の福利に寄与する。

凝縮系に関しては、界面や電場などの異方性の影響を考慮できるように、三次元空間分布関数に基づく MC-MOZ 法、3D-RISM 法の整備を進める。又、多くの熱力学的異常性を示す水とくに過冷却状態における動力学、揺らぎを解析し、液-液転移およびガラス化に至る変化を解析し、水の多様性・熱力学の裏に潜む分子機構を解明する。この研究により四面体構造を形成する水を始めとする物質の物性、動力学の理解を深化させることができ、大きな科学的意義が期待される。更に、タンパク質の構造スイッチングダイナミクスの計算法を開発し、分子モーターを例にとり、実験では想像できないタンパク質の動作機構原理を解明する。

「京」利用状況

SCF 法、分子求積 MP2 法、MP2-F12 法、SCS-MP2-F12 法では「京」コンピュータでのハイブリッド並列実装が完了しており、24,576 ノード(196,608 コア)の計算では、実効性能は 28.2%、12,288 ノードから 24,576 ノードのストロングスケーリングの並列化効率は 79.6%を示している。モデル空間量子モンテカルロ法についてもハイブリッド並列実装が完了し、モデル空間の次元数に対してほぼ完全に線形なスケーリングが得られている。

研究実施内容

平成 26 年度は、以下研究を実施する。

1) 有機伝導分子の高精度分子設計

前年度に引き続き、MP2-F12 法を用いて有機伝導体分子の計算を行う。特に、デバイスとしてすでに広く用いられているものの、その微視的な分子配向が明らかでないポリチオフェン分子の分子間相互作用の計算を行う。P3HT と呼ばれる側鎖にヘキシル基をもつポリチオフェンは、広がった π 系と側鎖の長いアルキル基が共に引力的な分子間相互作用に寄与すると考えられるが、それらが複雑に相互作用するために、どのような分子配向が最も安定なのかは高精度な計算を行わないと判断できない。また、P3HT は大きな分子であるために超並列計算環境を用いなければ高精度計算を行うことは不可能であり、京コンピュータを用いた研究に適したテーマである。また、P3HT の計算と同時に H25 年度におこなった多環芳香族炭化水素の計算の延長として、グラフェン間の分子間相互作用の高精度計算にも着手する。グラフェンはそのデバイスとしての重要性のために比較的実験値の多い系であるので分子薄膜における高精度計算手法の有効性を示す良い系である。これら二つの分子薄膜の計算に加え、H25 年度に引き続きフラーレンの外部修飾の計算では、更に多様な外部修飾基を検討し、実験分野とも共同して新しい電子的な性質をもつフラーレン誘導体の創出を目指す。

2) 量子モンテカルロ法の高度化とメタルクラスターへの応用

MSQMC 法のプログラム整備に関しては、新しいウォーカーの遷移アルゴリズムの開発を行う。既存のアルゴリズムでは、全ての遷移の候補を生成し、そこから乱数によって1つの配置を選択しているが、系が大きくなると遷移の候補の生成に多くの時間が必要となるので、遷移の候補も乱数を使用して確率的に生成する効率的なアルゴリズムの開発を行う。また、P-空間における係数の情報や、Q-空間から P-空間に移動させるしきい値等の最適化を行い、励起状態計算にも適した計算手法とする。応用面では、銅酸化物やクロム二量体の励起状態を出発点として、最終的には、モデルメタルクラスターの計算による代替合金の探索へと展開する。

3) 光システム II の構造と電子状態の研究

高分解能 X 線回折(XRD)構造を基に約 12 万原子からなる光システム II(PS II)の全電子計算と部分構造最適を行う。活性中心(OEC)および近接のアミノ酸残基を含む数百原子を FMO-DFT 法、その他の全タンパク質複合体の電子状態は経験的分散力を融合させた FMO-DFT-D 法を用いる。OEC は高いスピン状態を有するために Broken-Symmetry(BS)法を適用する。周辺タンパク質には 6-31G(d)基底関数系、OEC に対しては 6-311G(3df)を適用し、さらに部分構造最適化により PS II の構造を精密に求める。全電子計算により得られた PS II の分子軌道をタンパク質および OEC の FMO を解析することでタンパク質が OEC に及ぼす電子的環境効果を調べる。すなわち、周辺タンパク質の中で OEC に影響を与えるアミノ基を FMO 相互作用解析によって選択し、それらの周辺タンパク質が作り出す静電ポテンシャルを有効場にモデル化する。その有効場を用いて OEC の精密な電子状態を MSQMC 法によって解明し、これまでの DFT 法や密度行列繰り込み法を用いた先行研究との比較を行う。更に、DFT ベースの FMO 法を新規に GELLAN に実装することにより、光システムの計算で「京」コンピュータでのパフォーマンスを最大限に引き出す。

4) 溶液・タンパク質の揺らぎとダイナミクス

3次元空間における分子の拡散過程を記述する統計力学理論(3D-SSSV 法)の開発により、電解質を含めたあらゆる溶液系で溶媒和分布の時間変化を追跡することが可能となった。今後、並列化効率向上の可能性について検討していく。また電極界面および近傍での拡散過程や化学反応を視野に入れながら、界面や電場などの異方性の影響を考慮できるように三次元空間分布関数に基づく MC-MOZ 法もしくは 3D-RISM 法の整備を引き続き進める。また周期的境界条件を扱う量子化学計算との結合を目指して予備的検討を行う。過冷却水に関しては長時間分子シミュレーションを行い、時空間不均一動力学を様々な温度で解析し、特異的熱力学的性質およびその温度依存性を生み出す揺らぎを解明するとともに、どのようにガラス化するかを明らかにする。更に、ミオシン系のシミュレーションをミオシン II からミオシン VI およびミオシン V に拡大し、動的エネルギーランドスケープ理論により、ミオシンによる物質輸送機構におけるタンパク質動的構造揺らぎの効果を解明する。

5) 自在回転部位を有するナノ複合分子の構造と動力学

分子の回転運動が結晶全体の物性を支配する分子ジャイロスコープの構造と動力学の定量化を進め、光を使った回転運動の積極的な制御法を提案していく。具体的には、密度汎関数強束縛(DFTB)法に振動電場との相互作用を組み込み、テラヘルツから赤外領域の光によって回転子の回転がどのように誘起されるかを調べる。とくに、双極子モーメントを有する回転子とその周囲の固定子どちらが光エネルギーの吸収に関して支配的な役割を演じているかを明らかにし、エネルギー吸収部位の設計指針を示していく。また、高精度電子状態計算プログラム GELLAN を用いて、分子ジャイロスコープ単分子の回転子と固定子間の分子間力を評価し、その結果を使って DFTB の分子間力パラメーターを再構築する。このようなパラメーターを使って、X 線結晶構造の全原子位置の再現を目指し、機能評価や分子設計に必要な信頼性を高めていく。フラーレン内包有限ナノチューブの安定構造と遷移状態に関しても、GELLAN プログラムを用いて、フラーレンと有限ナノチューブ間の高精度ポテンシャルを構築する。その結果を動力学計算に用いる DFTB の分子間力パラメーターにも反映させ、統計的に信頼できる時系列データを集める。また、QM/MM 法などを使って、溶媒の効果まで取り込む。このような精度を高めた包括的な取り扱いによって、フラーレンの回転によってブロードニングと先鋭化を起こしている実測の NMR スペクトルを再現できるレベルを達成し、分子ベアリングの機能評価法の確立を目指す。

2. 2. 2. 1(2) 次世代先端デバイス科学

第2部会 代表者：押山淳(東京大)

1) 部会全体の取り組み

[研究課題概要]

第2部会においては、「基礎科学の源流から物質機能とエネルギー変換を操る奔流へ」という戦略目標達成のために、基礎科学の成果を積極的に取り入れた大規模多機能量子シミュレーション手法を確立し、物質機能の予測、新機能を有する新材料、新ナノ構造の探索と提唱を行う、次世代先端デバイス科学研究を推進する。国際半導体技術ロードマップ(ITRS)が指摘するように、線幅 22nm を切る次世代先端デバイス開発では、裏打ちする科学的成果が枯渇し、大きな困難に直面している。また従来からの CMOS テクノロジーを凌駕する新たな技術的展開も期待されている。密度汎関数法に基づく第一原理計算手法を極限まで大規模化、高精度化および高速化すること、および密度汎関数理論を超える電子相関効果の記述のための新手法を開拓すること、また超伝導などの量子相の定量的記述の手法を開拓することにより、次世代先端デバイスの特性を定量的に予測・解明し、その開発に寄与する。これにより、経験と蓄積のテクノロジーを演繹と予測のそれに進化させる。

[社会的意義]

年間 30 兆円の売上高を生み、人類の生活を支えてきた半導体テクノロジーは、微細化・高集積化を基盤に発展してきたが、それを支えるスケーリング則は破綻し、ポスト・スケーリング時代のテクノロジーに突入している。そこでは量子論に基づく深い科学的知見に基づいた、新たな材料探索、ナノ構造探索、デバイスシミュレーション、材料創成・ナノ加工技術開発が不可欠である。本研究課題においては、量子力学の最新理論手法を駆使し、それを未来のコンピュータ・アーキテクチャ上でのシミュレーションに発展させる高速コンピューティング技法を確立し、科学とテクノロジーの最重要課題にチャレンジするものであり、その社会的意義は大きい。

2) 研究開発課題内容

[平成 26～27 年度の実施計画と成果目標]

第2部会においては、電子相互作用の記述に関しては密度汎関数理論を軸として、それを越える理論も取り入れ、さまざまな物質群に対する高精度シミュレーションが実行されてきた。重点課題では実空間手法を軸とする京コンピュータ上での先端的大規模計算が実行され、半導体、炭素ナノ物質等の電子機能が解明されてきた。また4つの特別支援課題においては、機械的性質と電子状態を結びつけるマルチシミュレーション、スピントロニクス材料の探索シミュレーション、またナノ構造における電磁場と電子の結合を考慮した光応答シミュレーション、各種アプリケーションを活用した新物質探索などが実行されてきた。平成 26～27 年度においては、これまでマルチコア超並列アーキテクチャのコンピュータ上で培ってきた HPC(High Performance Computing)技術を活用し、先端デバイス材料、ナノ構造に関する高精度・大規模計算を行っていく。「社会的にインパクトの強い課題の遂行が望まれる」、「パワエレ、メモリに関してはまだ、日本に頑張っているメーカーがある。量子効果まで考慮したデバイス設計ツールを一番早く、一番良いところに適用したい。」等の作業部会からのコメントに呼応し、またわが国におけるテクノロジーが Si を中心とするロジックデバイスから、省エネルギー社会を支える新たなパワーデバイスへとシフトしていることに鑑み、新たな材料系をターゲットとして取り込んでいく。

26～27 年度におけるより具体的なテーマとして、「ナノ界面科学の構築とデバイスへの応用」を中心に据える。デバイス機能の発現は界面がその成否を握っている。従ってナノメートルスケールでの界面の構造的同定と電子物性の解明は、次世代先端デバイス科学の要諦である。Si、Ge 系にとどまらず、パワーエレクトロニクスの基幹材料である SiC、GaN、さらには emerging material と目されているグラフェン、ナノチューブなどの軽元素系ナ

ノ構造、マルチフェロイクス・デバイスを担う酸化物等に対して、その界面での原子構造、電子物性、電子および熱の流れを量子論に基づく先端的計算により解明し、デバイス設計の指針を与えることを目指す。

時間依存密度汎関数理論による時間依存 Kohn-Sham 方程式と Maxwell 方程式を結合させた理論スキームが本部会で発展してきている。これはナノ構造における電子系と光・電磁場とのカップリングとそれによる新たな電子機能、光機能の解明・予測に重要な役割を果たす理論スキームである。太陽電池などの光関連省エネデバイスの探索などの広範な応用が期待される。そこで平成 26 年度からは、この課題を重点課題の一部として遂行する。

また具体的個別の問題における共同研究を促進するために、以下に記述するような CMSI 外部との連携を計画している。

3) 平成 26 年度の具体的な実施計画

〔部会活動〕

平成 26 年度の研究進捗状況報告、平成 27 年度の研究計画を議論する部会内委員会を随時開催予定である。重点課題、特別支援課題の再構築を含む今年度および次年度以降の研究計画が議論される。

〔連携活動〕

(部会連携)

平成 26 年度の第2部会の研究課題はひとつの重点課題と 3 つの特別支援課題から構成されている。用いるアプリケーションは比較的多岐にわたっており、独自に高度化、高速化が行われている。これらの複数のアプリケーションの機能と特徴を整理し、物質科学計算のターゲットに最適なアプリケーションが選べるような体制を作る。また、電子状態計算、分子動力学法計算、輸送係数計算、キャパシタンス計算、電子ダイナミクス計算などの、異なる機能を有するアプリケーションを統合化し、より高度な物質科学計算に対応したい。HPC 技術開発については、先行する RSDFT だけでなく、RSPACE、CONQUEST、RS-CPMD、GCEED などのソフトウェアが京コンピュータ上でチューンされてきた。このノウハウを他のアプリケーション群にも活用することを考える。「ナノ界面科学の構築とデバイスへの応用」という共通テーマにできるだけ沿った研究テーマを進めるための議論を進める。

(CMSI 連携)

第2部会での主たる理論手法は、多岐にわたる物質群・現象の全てに対して万能ではない。第1部会で得られると期待される革新的理論手法を活用し、それを階層的超並列アーキテクチャ・スーパーコンピュータ上での、高性能コンピューティング技法にマップし、計算物質科学がターゲットとする自然現象の境界を押し広げる。また第3部会、第4部会における物質科学問題への強力な計算ツールを提供する。25年度から始まった連携として、RS-CPMD を二次電池の電極反応のダイナミクスと自由エネルギー障壁解明に適用することが始まった。より一層の推進を目指す。

(外部連携)

各々の研究課題では、ターゲットとする実際の物質群に対する、CMSI 外の実験研究グループとの連携・共同研究をすでに行っている。またコンピュータ・サイエンス分野との、高速コンピューティング技術に関する連携も進んでいる。これら有機的連携・共同は、文部科学省科学研究費補助金新学術領域研究「コンピューティクスによる物質デザイン：複合相関と非平衡ダイナミクス(領域代表＝押山淳)」を通じても行われる。実験的研究との共同も計画されており、Si ナノワイヤーデバイスについては、東京工業大学岩井洋研究室、物質材料研究機構深田直樹グループとの共同研究が進行中である。さらにパワーエレクトロニクスを例として、実験研究との組織的

な共同を行うために、産総研および企業16社から構成される「つくばパワーエレクトロニクスコンステレーション (Tsukuba Power Electronics Constellations: TPEC)」に参加することを計画している。

[研究開発課題の実施]

i) 重点課題3: 密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現

[代表者] 押山淳 (東京大)

[研究開発体制]

[担当者] 押山淳、岩田潤一、渡邊聡 (以上東京大)、重田育照、小野倫也 (以上大阪大)、
宮崎剛 (物質材料研究機構)、Boero Mauro (レイパスツール大)、Bowler David (ロンドン大)、
赤井久純 (東京大)
信定克幸 (分子研)、矢花一浩、朴泰祐 (筑波大)、渡辺一之 (東京理科大)

[研究開発課題概要]

ナノメートルスケールの構造体、新物質に対する、密度汎関数理論における標準近似 (LDA、GGA) およびそれを越えるハイブリッド近似、さらには摂動論的アプローチも併用した大規模高速計算技法を確立し、ナノ構造体の原子構造と電子状態さらにはデバイス特性および構造体生成の機構を解明・予測する。さらに輸送現象、過渡現象、光応答を扱うシミュレーション技法を確立し、ナノ接合系での電子、熱の輸送特性と光励起物性を明らかにすることにより、次世代デバイス・プロセス・シミュレーション技術の基盤を構築する。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

計算手法の開発・高度化の側面では、実空間差分法に基づく RSDFT、密度行列の最適化に基づく CONQUEST、実空間電子状態・輸送特性計算法 RSPACE、実空間 Car-Parrinello 分子動力学計算法 RS-CPMD を主要コードと位置付け、マルチコア・超並列アーキテクチャ・コンピュータ上で、極限までそのパフォーマンスおよび精度を追求する。それに加えて、ハイブリッド汎関数などの高機能化をはかることにより、広範な物質群での高精度計算スキームを確立する。また RSDFT と非平衡グリーン関数法 (NEGF) の統合を行い、大規模電子状態・輸送係数計算を可能にする。さらに今年度より、時間依存密度汎関数理論 (TDDFT) と電磁場を記述する Maxwell 方程式を結合させた新たな手法[コード名: GCEED(Grid-based Coupled Electron and Electromagnetic field Dynamics)、ARTED (Ab-initio Real-Time Electron Dynamics simulator)]の開発高度化を本重点課題において遂行し、時間軸を加えたナノ構造時空場での電子機能予測をターゲットとする。こうした手法開発の成果を、物質科学の諸問題、とくにデバイス構造の根幹であるナノ界面構造に適用し、物性科学、デバイス科学の進展に資する。これら物質科学の諸問題は、現在の産業を支える電子デバイスの開発における喫緊の課題であり、量子論に基づくその解明が待たれている。一方、高性能コンピュータを用いた量子論に基づく現象解明・予測は、理論物理学とコンピュータ科学の地平を広げることであり、学術的意義は高い。

[「京」利用状況]

RSDFT は「京」における 100,000 原子 Si ナノワイヤーの電子状態計算で 2011 年ゴードンベル賞を獲得したコードであり、その実行性能は世界一といって過言ではない。CONQUEST、RSPACE、RS-CPMD、GCEED の各コードもハイブリッド並列による高性能化が京コンピュータを使用して検証されている。ARTED は次世代コンピュータ技術動向を見据えた GP-GPU 活用も検討されている。

[研究実施内容]

超並列アーキテクチャのコンピュータにおいては、通信負荷の軽減の観点から実空間手法が原理的に有利

である。本重点課題で研究開発の軸にすえている6個のプログラムコードはいずれも実空間手法であり、前年度から引き続いて、その高速化、高度化を遂行する。物質計算のターゲットとしては、わが国における期待されるテクノロジーがロジックデバイス系から、省エネルギーパワーエレクトロニクス系にシフトしていることに鑑み、Si、Ge等のナノ構造に加え、SiCなどの広ギャップ半導体、酸化膜界面、金属酸化物のナノ構造体等も重要な課題とする。具体的には、

- パワーエレクトロニクスの基幹材料であるSiCの基礎物性、とくに固有欠陥、ドーパント原子と固有欠陥の複合欠陥、酸化膜界面での欠陥の物性解明、およびデバイス特性向上に欠かせない、ギャップ中深い準位(deep level)のミクロな同定と輸送特性解明
- 次世代材料である炭素ナノ物質および軽元素ナノ物質、とくにグラフェン、チューブさらには異種元素ハイブリッドナノ構造の電子物性、輸送特性、光応答の解明
- ナノ構造中電子状態と光・電磁場との結合による新たな光応答機能の増強効果解明と光ナノ加工の可能性探索
- エピタキシャル成長、酸化、エッチング等の物質創成技術の量子論的シミュレーションによる反応機構の解明と自由エネルギー面の決定

を中心的課題とする。

ii) 特別支援課題1: ナノ構造の電子状態から機械的性質までのマルチスケールシミュレーション

[研究開発体制]

[担当者] 尾形修司(名古屋工業大)、大庭伸子(豊田中央研究所)、田中宏一(デンソー)

[研究開発課題概要]

実際のデバイスや材料では、結晶構造に加えて多様な界面・欠陥など、ナノ・メゾスケールの微細構造に応じてユニークに実現される電子状態とダイナミクスが、その機械的性質や機能を大きく支配している。例えば産業界で重要なリチウム二次電池等では、電場印可環境での様々な表面・界面でのナノやメゾスケールの反応や物質移動機構の解明が、性能向上の鍵となっている。このような周期的ではない大規模系を丸ごと扱うコンピューターシミュレーションを、電子に関する物理精度を高く保ちつつ実現することへの期待が、スパコンの発展に伴って近年益々高まっている。本課題は、化学反応が顕著な比較的小さな領域だけに高計算コストの電子状態計算を適用し、その他の領域には経験的な古典的原子間ポテンシャルを適用することでダイナミクスを高速にシミュレートするハイブリッド量子古典コードを、超並列計算環境に合わせて高度化することを目指している。平成26年度は特に、オーダーN化した実空間密度汎関数コード(DC-RGDFT)を量子領域計算に用いたハイブリッド量子古典コードを用いてLiイオン二次電池の負極近傍の固液界面に適用したシミュレーション、電子デバイスの放熱等に関連したアルミナ結晶と高分子固体との界面の強度、さらに界面を通じた熱輸送に関するシミュレーション、応力下にあるシリカガラスと水分子とのクラック生成反応に関するシミュレーションを実施する。また、粗視化した分子系の取り扱いに関連して、氷表面に生じる擬似液体層に関する大規模なシミュレーションを行う。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

対象系を構成する原子群のダイナミクスをシミュレートするには、全イオンに働く力を、分のオーダーで計算できることが必要である。このため、オーダー N^3 型の密度汎関数法を使った過去のハイブリッド量子古典シミュレーションにおいては、1つの量子領域を構成する原子数は百程度に過ぎなかった。このことは、ハイブリッド量子古典法を、産業界で重要な様々な対象に適用する際に、強い制限となっていた。本課題では、メニーコアを特

微とする新しいスパコンに合わせて実空間密度汎関数コードを最適化し、さらに計算手法をオーダーN化することで、ハイブリッド量子古典法において1つの量子領域を構成する原子数を千オーダーへと、桁違いに大きくすることを目標としている。その実現のあかつきには、これまで不可能であった様々な対象系について、その丸ごとシミュレーションが始めて可能となり、我が国の産業界の新しいシミュレーション基盤技術の一つとなると自負している。

【「京」利用状況】

現在、スパコン京に関しては、我々の課題独自のアカウントを保持していない。

【研究実施内容】

平成25年度までに、独自のアイデアで作成したオーダーN型の実空間密度汎関数コード(DC-RGDFT)の並列化作業をほぼ終えている。スパコン京以外のスパコン(Fujitsu FX10等)を利用して、DC-RGDFTを量子領域計算に用いるハイブリッド量子古典コードによる、Liイオン二次電池の負極近傍に関連したシミュレーションや、電子デバイスの冷却に関連した結晶固体と高分子固体との界面強度に関するシミュレーション等を、複数の企業研究者と共同して行う予定である。また大規模系の長時間シミュレーションを目指し、剛体分子系の大規模なシミュレーションについても実施する予定である。

iii) 特別支援課題2: スピントロニクス／マルチフェロイクスの応用へ指向した材料探索

【研究開発体制】

【担当者】 斎藤峯雄(金沢大)、小田竜樹(金沢大)、小口多美夫(阪大)、尾崎泰助(北陸先端大)

【研究開発課題概要】

シリコン半導体デバイスの微細化が、やがて限界を迎えるであろうと予想され、新しいデバイス動作原理に基づくテクノロジーが期待されている。スピントロニクス/マルチフェロイクスに基づくデバイス実現に向けて、最適な材料の探索を行うことのできるプログラム開発を行う。近年スピン軌道相互作用由来の現象が基礎科学において注目されている。このような基礎科学の研究と応用を結びつける第1原理シミュレーションを行うのが、本課題でのテーマである。

【成果目標とその科学的・学術的意義】

OpenMXコード、及びCPVOコードにおいて、高度平並列化作業を進め、OpenMXにおいては、1万6千ノードで13万原子程度の電子状態計算を可能とし、1000ノードを使用して5000原子程度の高速分子動力学計算の実現を目指す。開発したコードを用いて、スピン軌道相互作用を考慮した計算を行い、磁気異方性、表面系におけるラシュバ効果、トポロジカル絶縁体等に関する機構解明を、具体的物質系(Si表面上Bi薄膜、磁気トンネル接合系など)に対して行う。新しい動作原理発見や電界駆動型磁気デバイス設計につながる基礎研究を行う。

【「京」利用状況】

これまでに、「京」やFX10等を使用して並列プログラムの開発を行ってきた。今後もFX10等の資源を有効に活かし、大規模並列化向けプログラムの開発を続ける。さらに、スラブ系等の大規模系に対するスピン軌道相互作用を考慮した応用計算を「京」で実行する事を目指す。

[研究実施内容]

OpenMX を用いた研究においては、鉄基及びコバルト基金属間化合物の構造予測を目指し、Behler 等によって提案されたニューラルネットワーク (NN) に基づく高精度ポテンシャル関数の開発を実施する。新奇な本手法は第一原理電子状態計算の一連の結果を NN に学習させることで、高精度ポテンシャル関数を作成する手法であり、これまでに Si や Na などの単体から、3 元系(Cu-Zn-O) までの高精度ポテンシャル関数が作成可能であることが報告されている。まず本研究では本手法を実装し、Fe の NN ポテンシャル関数を作成し、その精度を評価する。使用する NN は Feedforward 型であり、各原子に対して二層構造の中間層(各層には 10 ノード)を割り当てる。その際、原子毎に 9 つの動径対称性関数と 90 個の角度対称性関数を計算し、計 99 個の関数値を NN への入力値とし、また原子毎のエネルギーを NN の出力値とする。OpenMX を用いて一般勾配近似(GGA)による密度汎関数計算を体心立方格子 (BCC)、面心立方格子 (FCC)、六方最密充填格子 (HCP)、立方格子 (SC)、蜂の巣格子 (HNC) に対して実行し、これを NN ワークポテンシャルの学習データとする。NN の学習にはミニバッチ確率的勾配法と Softmax 法を使用する。まず Fe 単体の NN ポテンシャル関数の精度を検証し、その後多元素への拡張を目指す。

CPVO においては、接合薄膜(強磁性金属層/誘電体層)界面における構造緩和効果と磁性電界効果についての研究を行うと同時に、類似の第一原理計算を同時に実行できる並列プログラムを実装して、使用できる並列度数の飛躍的向上を目指す。また、OpenMX および CPVO を使い、酸化物エレクトロニクスとしての応用が期待されている(Zn,Mg)O/ZnO の界面の構造の研究を推進する。さらに、ZnO 表面・界面および水素化された表面におけるスピン構造を明らかにし、スピントロニクス応用の可能性を明らかにする。さらに、第一原理経路積分法の高度並列化計算を実現し、水素やミュオンの量子効果を解明する。

物質や現象を扱う第一原理計算の場合には特異な電子状態に基づいて議論を進める必要があり、数値計算上の近似や仮定の有効性や限界を知ることが重要である。この意味から、第一原理電子状態計算法の中でも計算精度の高い全電子 FLAPW を用いた HiLAPW コードを併用する。

v) 特別支援課題 4: 新材料探索

[研究開発体制]

(担当者) 常行真司(東京大)、吉本芳英(鳥取大)、田中 功(京都大)、石橋章司(産総研)、
土田英二(産総研)、前園 涼(北陸先端大)、三宅隆(産総研)

(協力者) 合田義弘(東工大)、吉澤加奈子(東京大)

[研究開発課題概要]

2020年代前半にシリコンCMOS技術の限界が予測される中、新しい機能や優れた特性を持つポストシリコン材料が求められている。量子現象に関する基礎研究から生まれた数々の知見を生かし、新しい半導体特性、磁気特性、超伝導特性を持つ物質・材料を、計算科学的手法を用いて探索すること、またその方法論の開発は、革新的な次世代先端デバイスにむけた重要課題である。本課題では第1部会の研究グループや元素戦略拠点と連携して、密度汎関数法およびそれを超える高精度物質機能シミュレーション技法を確立し、次世代電子デバイスのブレークスルーを引き起こす新奇物質群を探索する。またデバイスとしての実現可能性を念頭に置き、化合物の自由エネルギー計算を実現することで、ものづくりプロセスにも踏み込んだ研究を目指す。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

短期的には分子性半導体、磁性体・磁石材料の電子物性と構造計算、酸化物系の欠陥制御、化合物の界面構造と電子・格子系の物性計算、典型的な化合物相図の理論決定を目指し、シミュレーション手法開発と応

用計算を進める。長期的には電子相関の強い遷移金属酸化物や生体物質由来のデバイス材料など、新しい物理現象、動作原理を生かした材料探索を視野に入れる。

〔「京」利用状況〕

平面波基底関数を用いた密度汎関数法(DFT)コード QMAS は第 5 部会の重点課題で構造材料の計算に利用されている。第一原理量子モンテカルロ法コード CASINO は、京の一般利用枠を使い、分子性固体の大規模な並列計算を行っている。波動関数理論トランスコリレイティッド(TC)法コード TC++は随時新機能を追加しており、引き続き京でテスト計算を行っている。

〔研究実施内容〕

- ・ QMAS、xTAPP、CASINO、FEMTECK、TC++の最適化、高度化を進める。
- ・ xTAPPに、自発電気分極および最局在ワニエ関数の計算コード、分散力を取り込むためのDFT-Dを実装する。また擬ポテンシャルライブラリを拡充する。
- ・ xTAPPのGUIを、複数のDFTコードに対応するよう、順次拡張整備する。
- ・ xTAPPを利用した分割統治法と、その結果を利用した大規模系の一電子エネルギースペクトル計算手法を開発する。
- ・ 第一原理非調和格子モデルの作成と熱伝導度計算を行うパッケージALAMODEの高度化を行い、公開する。
- ・ ブリリュアンゾーン積分の収束を早める拡張テトラヘドロン法をライブラリとして公開する。
- ・ TC++の高度化を進める。とくに原子に働く力を用いた構造最適化機能を追加する。
- ・ 材料の粒界物性解明に向け、電子状態計算と組み合わせた構造探索手法の開発を継続・推進する。
- ・ 超伝導DFTコードの開発を継続・推進する。
- ・ QMASにおいて、既存のスピン磁気モーメント制御機能に加えて、軌道磁気モーメント制御機能を付与する。
- ・ FEMTECKにおいて、第一原理分子動力学法に適した時間積分法の開発を行う。
- ・ TC++とCASINOとの連携を進め、トランスコリレイティッド法による量子モンテカルロ法のプリプロセス研究を推進する。
- ・ 磁性材料粒界の電子状態、誘電体材料の欠陥と不純物効果、特異な物性を示す遷移金属酸化物、有機導体、強誘電体について応用計算を進める。

2.2.2.1(3) 分子機能と物質変換

第3部会 代表者：岡崎進(名古屋大)

1) 部会全体の取り組み

[研究課題概要]

本部会においては、第1部会における電子状態の高精度計算に基づいた分子間相互作用の評価、多体性に起因する動的過程の理解、そして凝縮系におけるゆらぎの理解等を源流とし、これをナノスケール分子や分子集団系における構造形成と機能発現・機能制御の奔流へと展開する。

この流れに沿って、従来の比較的小さな分子単体からナノスケールの分子・分子集団系の機能の理論・計算化学研究への飛躍を最も重要な要素として位置付け、自己組織化により形成されたナノスケールの分子や分子集団の構造に基づいて創生される機能、つまり分子や分子集団による分子認識、物質分離、分子輸送等の分子機能を対象に課題 i)、ii)、iii)を、また環境との変化に富んだ相互作用下での分子の電子状態とそれに基づく機能発現を研究対象として課題 iv)、v)を設定している。そして、これらの中でも特に社会的な要請が高く、問題の解決が強く望まれている計算科学によるウイルスの分子科学の展開を重点課題とした。

- i) 重点課題 1: 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開
- ii) 特別支援課題 1: 拡張アンサンブル法による生体分子の高次構造と機能の解明
- iii) 特別支援課題 2: ポリモルフから生起する分子集団機能
- iv) 特別支援課題 3: ナノ・生体系の反応制御と化学反応ダイナミクス
- v) 特別支援課題 4: 機能性分子設計-光機能分子と非線形外場応答分子の光物性

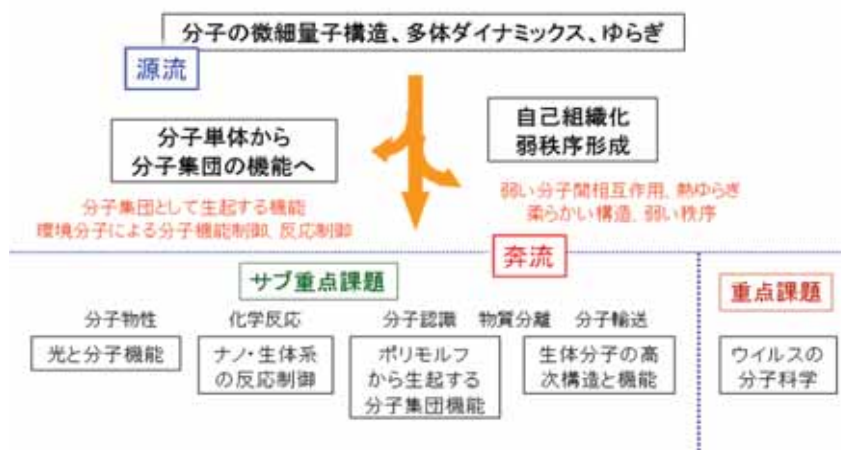


図 2.2.1.1(3)-1 分子および分子集団の創るナノ構造と分子機能・物質変換

[社会的意義]

ウイルスがもたらす感染症は、今や国家の責任で対策を講ずべき重要な課題となっている。感染症の克服において本質的に重要な役割を果たす抗ウイルス剤は、分子を用いてウイルスの営みを阻害することであり、ウイルスの成り立ちとその営みを複雑な分子の動きとして理解しようとする本研究は、その基礎的知見として不可欠なものである。

この意味で、従来の表面タンパク質の阻害剤に加えて、ウイルスカプシドそのものに注目した全く新しいタイプの阻害剤の可能性へと繋がる本課題の社会的意義は、極めて大きいものであると考えている。さらに、ウイルスの分子論を確立し、ウイルスの物理化学的安定性に対する温度の影響や溶媒である水の役割等を理解し、ま

た酸やアルコールなどの化学物質によるカプシドの構造不安定化などウイルスカプシドの物理化学的性質を解明していくことは、予防法の確立においても重要な基礎をなすものである。

一方で、エンベロープを有するインフルエンザウイルスや HIV ウイルスなどについては、表面タンパク質に関わる治療薬に対して耐性を獲得するため、新しい薬を継続的に開発しなければならない。従来から、創薬研究では力場によるタンパク質-リガンドの結合シミュレーションが行われてきたが、信頼性が不十分なために限定的な役割にとどまっている。しかしながら、本重点課題研究において、もし量子化学計算を用いることにより結合シミュレーションの精度向上が達成できることが実証できれば、医薬品開発の短期化・効率化において産業的意義は極めて大きい。

さらに、高精度大規模量子化学計算による高効率で環境に優しい物質変換を目指した新規な触媒設計や酵素設計、新しい反応経路の探索、太陽電池、また分子動力学シミュレーションも合わせたナトリウム電池やリチウムイオン電池などの電解液の性能予測、また高分子固体電解質、さらには電解液-電極界面の物理化学、さらには海水の淡水化、化学物質のゼロエネルギー分離などのエネルギーならびに環境に関わる基盤技術の確立は、我が国の将来を考えた時、不可欠なものである。これらに加えて、特に石油に代わるメタンの分離、貯蔵、輸送、そして化学原料としての利用技術の基盤確立、また広範な産業利用が見込まれる高機能高分子開発のための基礎の確立は、国民的視点からも強く望まれるものである。

2) 研究開発課題内容

[平成 26～27 年度の実施計画と成果目標]

重点課題「全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開」においては、前年度に引き続き、ウイルス学、構造生物学等の実験研究者との密接な連携の下に、これらの分野で強く求められているウイルスの分子論を明らかにする。このため、主として小児マヒウイルスのウイルスカプシドとインフルエンザに関連したタンパク質に注目し、1. 特にウイルスカプシドの構造とその安定性、2. 感染初期過程として重要なカプシドとレセプターの特異的な結合、そして3. これらに基づいたウイルスカプシドに注目した新しいタイプの抗ウイルス剤の検討、さらには4. 大規模量子化学計算に基づいたウイルスタンパク質と阻害剤との高精度結合シミュレーションの研究を継続実施し、一方で、特に社会的要請の高いB型肝炎の克服のために、5. 臨床研究者と連携して抗ウイルス剤のB型肝炎ウイルスカプシド内への輸送に関する研究を新たに開始し、その送達機構を明らかにする。

「拡張アンサンブル法による生体分子構造・機能の解明」では、昨年開発に成功した、レプリカ交換傘サンプリング法 (Replica-Exchange Umbrella Sampling: REUS) とレプリカ交換溶質焼き戻し法 (Replica-Exchange Solute Tempering: REST) を合わせた2次元レプリカ交換法に基づくドッキング手法 (REUS/REST) をいよいよ、最も広く薬剤開発のターゲットにされている蛋白質の一つである、G 蛋白質共役受容体 (GPCR) の系に適用して、その有効性を調べる。

「ポリモルフから生起する分子集団機能」では、脂質膜やミセルの構造のソフト性が物質分配に及ぼす影響を、全原子自由エネルギー解析によって明らかにする。さらに、高分子を用いた小分子分離の選択性向上の指針を探索するとともに、タンパク質の構造変化パスウェイの網羅的検討を行う。また、粗視化モデルによって、脂質膜および紐状ミセル溶液の大域構造を検討する。

「ナノ・生体系の反応制御と化学反応ダイナミクス」では、昨年度開発した DC-DFTB 計算プログラム「DC-DFTB-K」を用いた応用研究を主に進める。具体的テーマとしては、1) リチウムイオンデバイスにおける固体電解質界面 (SEI) 膜の反応解析と、2) 二酸化炭素分離回収 (CCS) のためのアミン溶液の探索、の2つを行う。

「機能性分子設計—光機能分子と非線形外場応答分子の光物性」では、開殻 $X-\pi-X$ 系という新しい NLO 物質の設計指針を種々の実在系へと適用する。また一重項分裂 (SF) については、その動的な機構の検討を開始する。さらに光機能分子については、生体プローブ分子等の光機能分子の光物性について実験と協力して研究を行う。

中間評価においては、「実行効率の高い、MODYLAS と FMO の2つのソフトが関わっている。研究は順調に進行している。第一分野との連携を強くして、相補的でレベルの高い成果が得られることを期待する。」「本プロジェクト内での横の連携が見えにくい。他分野、特に第一分野との連携を積極的に進めることを期待する。」という指摘があった。これまでも分野1の分子に関わる課題と分野2の生体物質に関わる課題間では、国際会議サテライトミーティングや国内研究会等において共催等一定の連携の下でプロジェクトの推進を行って来ているが、平成 26 年度はこの指摘を踏まえ、分野1にさらに積極的に働きかけ、プログラム開発や研究等においてもより深く協力しながら研究を推進する。連携については分野1の該当する課題との間ですでに共通認識となつてはいるが、具体化について早急に協議を始める。また、「研究結果は可視化もされ、色んな意味でわかりやすい。ただし、第3部会：分子機能と物質変換の重点課題としてこの課題があるのか、他の課題との関係も含めて説明が不足しているように思える。」とも指摘された。この点についても、第3部会においては、生体物質に関連した特別支援課題として「拡張アンサンブル法による生体分子の高次構造と機能の解明」、「ポリモルフから生起する分子集団機能」、「ナノ・生体系の反応制御と触媒、化学反応ダイナミクス」の3課題があり、それぞれタンパク質、生体膜、また酵素反応などの研究を行っている。これら生体物質は、本部会において研究目標としている分子集団系の分子機能である自己組織化、分子認識、分子輸送等を生体内において実現している最も興味深い研究対象であるが、本重点課題におけるウイルス系はタンパク質複合体として、これらに基づいてさらに高度な機能を発現している系である。重点課題と特別支援課題間においては解決すべき共通の課題が多くあり、部会内の連携は不可欠なものであると考えている。また、ソフトや方法論的にも共通の課題が多く、現に MODYLAS や FMO は部会内でも使用されつつある。平成 26 年度は、特にソフト面について重点課題と特別支援課題、また他分野との横の連携を強化し、外に向かって発信しながらより一層研究を推進していく。

3) 平成 26 年度の具体的な実施計画

〔部会活動〕

昨年度末、高分子機能、物質分離、水資源等をキーワードにクリーンなエネルギーや環境問題等に対し計算科学的にどのように貢献できるのか、第3部会において研究会を開催し検討を開始した。今年度は議論をさらに深め、上述のものに加えて光合成、触媒、酵素、電池等についても検討を進め、提案をより具体的なものにする。また、感染症とウイルス、細胞膜、DDS等についても、物質科学サイドからの貢献について可能性の検討を進める。これらの検討に際しては部会研究会等を開催する予定であるが、CMSI 内では第4部会、また分野間では分野1等とも連携しながら活動していく。

〔連携活動〕

（部会連携）

特別支援課題において必要な大規模MD計算、量子化学計算の実行に際しては、本重点課題で開発する MODYLAS、FMO/MP2 を提供する。一方で、本重点課題においてMD計算により発生させた軌跡に対する解析の中で、カプシドタンパク質の水和の自由エネルギーを求める際には特別支援課題で開発しているエネルギー表示法による分布関数理論ソフト ermod を用いる。また、自由エネルギー計算においてしばしば問題となるサンプリングについては、レプリカ交換法のソフト rem と MODYLAS を連携させてサンプリング効率の向上を図る。今年度は特に、昨年度開発を行った FMO-MODYLAS による IMOMM 等のソフト連携を充実させる。

（CMSI 連携）

第1部会の重点課題2「電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開」の成果を、本重点課題に応用する。一方で、上述の重点課題2、また第4部会の「水素・メタンハイドレート」などのエネルギー重点課題に対して、本部会で開発しているMD計算、量子化学計算に用いる MODYLAS ならびに FMO/MP2を提供する。ま

た、光合成、触媒、酵素、電池、高分子、メタン、水資源等について、第4部会、第1部会と共同で検討を進める。

(外部連携)

本課題の推進において、ウイルス学や構造生物学などの実験研究者との連携は不可欠であり、これまですでに以下に示すウイルス学、薬学、生物物理学などの専門家と課題参加者とが、課題設定の段階から密接に連携しながら研究を進めており、さらには共同研究も含めた協力体制の推進をはかりつつある。

(微生物化学研)野本明男	(阪大蛋白研)中村春木
(中部大生命)鈴木康夫	(阪大蛋白研)中川敦史
(京大院薬)大石真也	(東工大院生命)有坂文雄
(名古屋市大院医)田中靖人	(名古屋大院医)石川哲也

なお、平成26年度からは、名古屋市立大医学部、名古屋大医学部と連携して、B型肝炎ウイルスにおける抗ウイルス剤のDDSに関する研究を開始する。

一方で、本課題はウイルスカプシドや表面タンパク質の物質的理解を目指すものであり、生命現象や生命システムの理解と予測そして創薬を目指す分野1とは相補的な関係にあり、理研の「細胞内分子ダイナミクス」などのグループと相互に協力し、密接に連携しながら研究を推進する。

さらには、「元素戦略」における触媒・二次電池研究に対して、本部会の特別支援課題「ポリモルフから生起する分子集団機能」、「ナノ・生体系の反応制御と化学反応ダイナミクス」、「機能性分子設計－光機能分子と非線形外場応答分子の光物性」の参加メンバーが連携し、支援する。

[研究開発課題の実施]

i) 重点課題 4: 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開

[代表者] 岡崎進(名古屋大学)

[研究開発体制]

[担当者] 岡崎進(名古屋大)、北浦和夫(神戸大)、北尾彰朗(東京大)、長尾秀実(金沢大)、
泰岡顕治(慶応大)、入佐正幸(九州工大)

[研究開発課題概要]

本研究においては、ウイルスの全原子シミュレーションやウイルスタンパク質の全電子計算等を実行することにより、感染機構や免疫機構、また抗ウイルス剤との相互作用などを自由エネルギーレベルで明らかにし、計算科学によるウイルスの分子科学を世界に先駆けて確立する。特に小児マヒウイルスカプシド(約 1,000 万原子)の全原子分子動力学シミュレーションならびにインフルエンザウイルスタンパク質(約 24,000 原子)の全電子量子化学計算を行い、物質と生命の境界領域にあるウイルスを計算科学の俎上に乗せ、物質科学としてのウイルスの分子論を確立する。

感染の最初のプロセスはウイルスとレセプターの結合である。本課題では、このウイルスとレセプターの特異な相互作用を電子レベルで、また自由エネルギーレベルで明らかにし、感染初期過程の分子機構を解明する。この中で、FMO 計算を創薬に応用し、論理的な医薬品分子設計を進展させ創薬研究の効率化に貢献する。また、ウイルスの構造体であるカプシドの構造安定性実現の仕組みを、分子動力学計算によって明らかにし、RNA を持たない理想的な人工ワクチンの可能性について検討する。

このため、高並列汎用分子動力学シミュレーションソフトMODYLASを用いて水中の小児マヒウイルスカプシド(約 1000 万原子)の全原子シミュレーションを実施し、物質と生命の境界領域にあるウイルスを計算科学の俎上に乗せ、物質科学としてのウイルスの分子論を確立する。特に、カプシドとレセプターとの特異な相互作用、分子認識を自由エネルギーレベルで明らかにし、また結合後のカプシド構造の変化など感染初期過程の分子機構の解明を図る。また、カプシドの構造安定性について、構成タンパク質間の接合構造と熱ゆらぎや温度、pH、溶媒など環境に依存した構造の特徴などカプシドの物理的、化学的性質を明らかにする。

このように、これまで全く不明であったカプシドの分子論を理解することは微生物学の新たな展開を可能にするものであり、学術的に極めて重要な意味を持つ。それ以上に、カプシドは感染や免疫に直接関係しているものであり、カプシドのふるまいを理解し、それを阻害する分子機構を考えて行くことにより、新しい作用機構を持つ抗ウイルス剤の提案が可能となる。これは、感染症克服の新たな第一歩となる。一方で、理想的なワクチンとなるRNAを持たない人工カプシドの開発も防疫上極めて重要であり、その開発には殻内にRNAを持たなくても十分な安定性を示すカプシドの構造設計指針が不可欠である。さらには、薬剤の選択的な体内輸送にカプシドを用いる研究も盛んに行われている。本研究は、これら感染症の克服を目指した重要な研究の学術的基盤となるものである。

一方で、高速量子化学計算ソフトMP2-FMOを活用して、インフルエンザウイルスの膜タンパク質の阻害剤など、治療薬の候補となる医薬品分子の設計研究を行う。特に、タンパク質ーリガンド複合体と水和水分子を含めて約10万原子系のFMO計算を行い、結合に伴うタンパク質の分極応答など、縮小モデル系では捉えられない効果を見出し、創薬研究に活かす。

より具体的には、ウイルス学、薬学、構造生物学等の実験研究者との密接な連携の下に、以下の5項目に絞ってMD計算や量子化学計算に基づいた研究を推進し、ウイルス分子科学の端緒を開く。

1. ウイルスカプシドの構造とその安定性について、カプシドタンパク質間の接合構造とその熱ゆらぎなど、カプシドの実際の生体環境における実像を明らかにする。さらには、温度、pH、化学物質、乾燥等のウイルスが置かれた環境が、カプシドの構造安定性に及ぼす影響について明らかにする。

2. 感染初期過程として重要なカプシドとレセプターの特異な結合に対し、両者の相互作用を自由エネルギーレベルで定量的に解明する。特に、分子認識の特異性について定量的に実証する。さらに、レセプター、カプシドの構造変化について、いわゆる induced fit 機構について分子レベルでの検討を行い、またレセプターの結合に伴うカプシド側の変化についても可能な限り追跡を行う。
3. ウイルスカプシドに注目した新しい作用機構を持つ抗ウイルス剤、つまりカプシドとレセプターの結合を阻害する分子の探索を行い、その可能性について検討する。
4. インフルエンザウイルスの新規阻害化合物を理論設計する。本研究の推進により FMO 法を活用した量子計算創薬手法を確立し医薬品開発の効率化に貢献する。
5. 社会的要請の高いB型肝炎の克服のために、臨床研究者と連携して抗ウイルス剤のB型肝炎ウイルスカプシド内への薬剤送達機構を解明する。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

小児マヒウイルスや口蹄疫ウイルスは、RNAとそれを収納する球状の殻であるカプシドで構成されている。これまで全く不明であったこのカプシドの分子論を理解することは微生物学の新たな展開を可能にするものであり、学術的に極めて重要な意味を持つ。

それ以上に、カプシドは感染や免疫に直接関係しているものであり、カプシドのふるまいを理解し、それを阻害する分子機構を考えて行くことにより、カプシドに注目した新しい作用機構を持つ抗ウイルス剤の提案が可能となる。これは、感染症克服の新たな第一歩となる。一方で、理想的なワクチンとなるRNAを持たない人工カプシドの開発も防疫上極めて重要であり、その開発には殻内にRNAを持たなくても十分な安定性を示すカプシドの構造設計指針が不可欠である。さらには、薬剤の選択的な体内輸送にカプシドを用いる研究も盛んに行われている。本研究は、これら感染症の克服を目指した重要な研究の学術的基盤となるものである。

一方で、中部大・鈴木教授グループで発見されたインフルエンザ表面タンパク質ヘマグルチニンの阻害剤を基に、抗ウイルス剤となるより活性の高い化合物の創成を目指す。

[「京」利用状況]

MODYLAS については、FMM による FFT フリーな長距離力の厳密計算、メタデータ法による並べ替えの除去、演算のブロック化による L1 の 100%近いオンキャッシュ化等により、1000 万原子系で 5ms/step を実現した。これは、MD 計算の分野においては世界最高性能に相当する。

京コンピュータによる MP2-FMO 計算は、約 2 万 4 千原子からなるヘマグルチニンの電子相関を考慮したレベルの計算 (FMO-RI-MP2/6-31G*レベル) が 24,576 ノードを用いて 582 約 10 分で終了する性能を達成していたが、石村氏開発の 2 電子積分ルーチンを組み込むことで実効性能が 1.66 倍向上した。より高速に FMO 計算ができるようになったことから、医薬品分子設計においての実用性が向上した。

[研究実施内容]

平成 25 年度までに、小児マヒウイルスカプシドに対する丸ごと分子動力学計算を実施し、ウイルスが実現している安定でかつ柔軟な構造の実際の姿を解明した。平成26年度はさらに、小児マヒウイルスが有している圧力耐性や、逆に乾燥による不活化の分子論的描像を明らかにする。また、今年度見出したカプシドが半透膜として機能する可能性について、平成26年度は水と電解質の透過の自由エネルギープロフィールより、時定数を含めてその機能をより詳細に検討する。

感染初期過程に関しては、平成25年度は熱力学的積分法によるMD計算を実施し、ウイルスと CD155 レセプターの間に実際に引力が作用していることを自由エネルギーレベルで明らかにした。平成26年度にはさらに引力の起源について明らかにし、結合を阻害する分子、つまり新しい作用原理の抗ウイルス剤の可能性について

て検討する。一方で、B型肝炎ウイルスカプシドの薬剤透過に関し、名古屋市大と共同で準備研究を開始する。また、成果を分かりやすく説明するために、3Dディスプレイによるウイルスの動的可視化等を引き続き行う。

インフルエンザウイルス阻害剤の分子設計研究については、H25 年度に引き続き、FMO 計算により HA との複合体合構造を予測し、さらに FMO-MP2 計算により HA の分子認識様式の解明と FMO/PCM 計算により結合に及ぼす溶媒効果を明らかにする。一方、FMO 計算のための入力データ作成と計算結果のグラフ化を行う支援プログラムを開発したので、これを用いて研究を加速化し、当初計画通り本年度に新規阻害剤分子の設計研究を開始する。

ii) 特別支援課題 1: 拡張アンサンブル法による生体分子構造・機能の解明

[研究開発体制]

[担当者] 岡本祐幸(名古屋大)、奥村久士(分子研)、志賀基之(原研)、高橋英明(東北大)

[研究開発課題概要]

生体分子の機能はその立体構造により決まっている。よって、形が決まって初めて、その生体分子系の機能が原子分子の詳細を含めて議論できることになる。しかし、計算機能力の絶望的な不足により、これまで、構造予測は不可能とされ、おもに、X 線回折実験や NMR 実験により構造決定がされてきた。本課題では、生体高分子の立体構造予測を計算機シミュレーションによって可能にすることを目指す。また、様々な生体高分子系における精度の高い自由エネルギー計算法を確立することを目指す。生体分子のような多自由度複雑系では、系に無数にエネルギー極小状態が存在し、従来の手法によると、シミュレーションがそれら極小状態に留まって、誤った答えを出してしまうという困難が存在した。本研究課題では、この困難を拡張アンサンブル法 (generalized-ensemble algorithm) と総称されるシミュレーション手法を導入することによって克服する。そして、これまで古典力学を元に拡張アンサンブル法を開発してきたが、量子効果を取り入れた拡張アンサンブル法の開発にも力を入れる。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

大規模拡張アンサンブル分子動力学シミュレーションにより、膜蛋白質や水溶性蛋白質の立体構造予測を目標とする。これにより、X 線などの実験により構造決定を必要要件としないドラッグデザインや蛋白質の機能解析が可能となる。さらに、このようにして得られた立体構造に基づいて、電子状態や核の量子効果も含めた精度の高い計算手法を適用することにより、酵素反応の本質やプロトンチャンネルをはじめとした生体内量子過程等を分子論的に解明する。拡張アンサンブル法の生体分子系への適用は、基礎研究に大きな発展をもたらす「基盤技術」を提供するものである。そして、これらの基盤技術により、酵素反応の発現原理やイオンチャンネルの機能解明、医薬品の開発、間違った折り畳みに起因する病気の発現原理の解明などへと幅広い発展性がある。

[[京]利用状況]

時間配分を得られず、利用予定なし。

[研究実施内容]

アミノ酸数 100 程度の球状蛋白質数個 (all α 、all β 、 α/β などの典型的な二次構造要素を持つもの) やアミノ酸数 300 余の膜蛋白質 (例えば、バクテリオロドプシン) などの立体構造の予測法を確立するための努力を続ける。特に、前者においては、昨年開発のめどをつけた、遺伝的アルゴリズムと合体させたレプリカ交換法の適用が有望である。また、昨年開発に成功した、レプリカ交換傘サンブル法 (Replica-Exchange Umbrella

Sampling: REUS)とレプリカ交換溶質焼き戻し法(Replica-Exchange Solute Tempering: REST)を合わせた2次元レプリカ交換法に基づくドッキング手法(REUS/REST)をいよいよ、最も広く薬剤開発のターゲットにされている蛋白質の一つである、G 蛋白質共役受容体(GPCR)の系に適用して、その有効性を調べる。これは、タンパク質分子と薬剤候補分子と、多くの水分子、脂質分子などが含まれる非常に複雑な系であり、困難を極めるものと予測されるが、成功すれば、計算機シミュレーションによる創薬設計にとって大きな一歩となる。更に、ab initio 経路積分法や real-space grid DFT による QM/MM 法など、量子効果を取り入れた分子シミュレーション手法にも拡張アンサンブル法を導入して、小分子系において何らかの成功例を見い出す。

iii) 特別支援課題 2: ポリモルフから生起する分子集団機能

[研究開発体制]

[担当者] 松林伸幸(阪大)、篠田渉(名古屋大)、茂本勇(東レ)、吉井範行(名古屋大)、野口博司(東京大)、川勝年洋(東北大)、北尾彰朗(東京大)、森下徹也(産総研)、西原泰孝(東京大/CMSI 研究員)

[研究開発課題概要]

界面活性剤や脂質、高分子のような多官能性の分子は、温度や塩・共溶媒濃度のような外部変数によって多様な自己組織化構造を形成し(ポリモルフ)、生体模倣材料、ドラッグデリバリーシステム(DDS)、海水淡水化、食品・コスメティックといった広範な社会的ニーズに直結する機能を集団として発揮する。本課題の目的は、熱ゆらぎ程度の強さの相互作用・相関によって生成されるソフトな自己組織化構造や分子集団としての機能を、単一分子の性質や分子間相互作用から計算科学的に予測することである。ソフト分子集団系における物質結合の定量的な評価手法を開発し、機能性分子集合体の立体構造予測と機能シミュレーションを可能にする。マルチスケールの物理・化学に立脚して全原子レベルからメソレベルまでをつなぎ、熱運動によりナノスケールの集団構造がダイナミックに変化するあるがままの姿をシミュレートし、解析することを目指す。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

溶液・脂質膜・ミセル・高分子のようなソフト分子集団系への物質結合は、上記概要で述べた機能の鍵となる過程である。この過程を支配する物理量が自由エネルギーであり、本課題では、自由エネルギーを軸として、ソフト分子集団系の機能解析を行う。本課題で取り扱う脂質膜系やミセル系・生体分子系は、多成分系であり、様々な種類の分子間相互作用が混在する。構造探索を加速する高度サンプリング手法と自由エネルギーの分割手法の開発によって、多数の自由度で張られる広い配置空間の探索を可能としつつ、鍵となる成分・相互作用因子を同定し、ソフト分子集団系の機能制御に資する。熱エネルギーと同程度の大きさの相互作用を駆使する物質設計は、様々な相関を精度良く取り扱う必要があるという意味で理論・計算科学の最先端課題であると同時に、前項の概要に挙げた実用的課題に直結し、意義深い。

['京']利用状況

エネルギー表示法に基づく自由エネルギー計算ソフト ermod は、これまでに、数十万原子からなる系を対象として、1000 強の並列度を、95%以上の効率で達成している。大規模 MD シミュレーションは MODYLAS によって高効率で遂行可能であり、1000 万原子系において 65536 ノード利用時に実行効率 40%超、並列化効率 80%超を達成している。また、分子複合系の立体構造探索にはカスケード型超並列シミュレーションを用いる。この手法により、320 万原子からなる大規模複合系の大きな構造変化をナノ秒程度の短時間でサンプリングすることに成功している。

【研究実施内容】

脂質膜やミセルの構造のソフト性が物質分配に及ぼす影響を明らかにする。膜やミセル界面の柔らかさを規定するパラメータを導入し、分子集団のソフト性と小分子やペプチドの結合能の関係を、全原子自由エネルギー解析によって明らかにする。特に、ミセルへの可溶化の場合、親水基の種類を系統的に変えて、柔らかさの効果を可溶化自由エネルギーから評価する。高分子系では、水や有機小分子の選択的透過性を対象として、全原子 MD を用いて自由エネルギー計算および拡散係数の解析を実行し、高分子サイドから見た分離選択性の指針を探索する。生体分子関連系では、カスケード型超並列シミュレーションによって、タンパク質などの構造変化パスウェイを探索し、LogMFD 法による自由エネルギー解析との連携を図る。さらに、粗視化分子モデルによる膜系の計算では、膜のモルフォロジー及びトポロジー変化の解析を実施し、膜結合型ペプチドの影響を検討する。また、粒子-連続場ハイブリッドモデルを流体シミュレーションに埋め込んだマルチスケールシミュレーションによって、紐状ミセル溶液のシアバンド流動挙動を明らかにし、剪断流の存在下における平面ラメラ構造の欠陥が膜構造に及ぼす影響を、メッシュレス膜モデルに基づいて検討する。

iv) 特別支援課題 3: ナノ・生体系の反応制御と化学反応ダイナミクス

【担当者】 中井浩巳(早稲田大)、IRLE Stephan(名古屋大)、吉澤一成(九州大)、武次徹也(北大)、小林正人(北大)、西村好史(CMSI 研究員)

【研究開発課題概要】

これまでに理論化学によりさまざまな化学反応が解明され、それに基づいて設計が行われてきたが、ナノスケール(ナノ・生体系)の反応系を精密に解析し、その制御を行うことは現在においても容易ではない。反応制御はさまざまな分野で必要とされている。たとえば、ナノサイズ分子では反応条件の最適制御が求められており、産業界でも有用とされている触媒反応では金属表面における反応制御が求められる。さらに生体酵素反応は常温常圧で反応を高選択的に触媒する究極のグリーンケミストリーを実現するものであり、反応の解明によりエネルギー問題や環境問題を解決するための糸口となる。本課題では次世代スパコン「京」を使用し、電子状態理論計算により現実的な反応モデルを化学的精度で取り扱うことで、反応経路の探索と反応制御を行い、新しい化学反応を可能とする反応場設計の学術的基盤を確立する。

【成果目標とその科学的・学術的意義】

大規模分子計算手法である分割統治(DC)法及び密度汎関数強束縛(DFTB)法の高度並列化と融合により、ナノスケール分子の反応制御に対して、電子状態理論計算からの解析を行うことを目標とする。また、従来の分子動力学(MD)計算では長時間のシミュレーションを行っても、高い活性障壁を超えることが困難である。そこで、並列レプリカ法などの理論実装も併せて行う。上記概要で示した反応は産業・学術を問わず重要なものであるが、これまでの量子化学計算での評価は、その計算コストの大きさから、系の一部を抜き出したモデルに対して行われてきた。本研究により、これらの系を現実的なモデルで取り扱うことが可能となり、より詳細な解析を行うことで反応制御を行うための知見を得ることができる。

【「京」利用状況】

本課題は 1) 高精度な量子化学計算手法である DC-MP2 法と、2) MD 計算を行うための DC-DFTB 法の 2 つの理論構築により遂行される。

DC-MP2 法は平成 23 年度より MPI/OpenMP ハイブリッド並列化を進めてきた。小分子の計算でも「京」576 ノードに対して 1,152 ノードで 76%の並列化効率を達成している。

DC-DFTB 法は平成 24 年度より MPI と OpenMP を用いたハイブリッド並列を実装した。平成 25 年度に「京」でのチューニングを行うことにより、「京」40,000 コア利用時の並列化効率が 79%超、実行効率もピーク演算性能に対して 16%を超えるプログラムの開発に成功した。本年度は、本プログラムを利用した「京」一般利用課題が採択されている。

【研究実施内容】

平成 26 年度は、昨年度開発した DC-DFTB 計算プログラム「DC-DFTB-K」を用いた応用研究を主に進める。具体的テーマとしては、1) リチウムイオンデバイスにおける固体電解質界面(SEI)膜の反応解析と、2) 二酸化炭素分離回収(CCS)のためのアミン溶液の探索、の 2 つを行う。

1) について、今年度は充放電時のリチウムイオンの挿入・脱離について検討する。特に Li や F 等の原子に対しては、本検討で適切な DFTB パラメータの最適化から行い、リチウムイオンの脱溶媒和反応に与える SEI 膜の影響を考慮するためのモデルを構築する。

2) については、すでに昨年度までに適切な DFTB パラメータを得ている。本年度は「京」を用いて、以下の目的の計算を行う。A) 単一アミン溶液における CO₂ 吸収・放散反応経路の解析。B) 混合アミン溶液における反応メカニズム解明と配合比の最適化。C) 反応メカニズムを考慮した新規アミンの提案と計算による効率の検討。本検討では、アミンの種類、配合比、温度、pK_a 値など多くのパラメータが複雑に反応に関与し、また溶媒である水が遠隔から直接的に反応に関与する場合があることも昨年度までにわかっているため、この反応解析と探索は「京」の大規模計算リソースを用いてはじめて実行できるものである。

v) 特別支援課題 4: 機能性分子設計－光機能分子と非線形外場応答分子の光物性

【研究開発体制】

【担当者】 江原正博(分子研)、中野雅由(阪大)、太田浩二(京大)、藪下聡(慶應大)、小関史朗(大阪府大)

【研究開発課題概要】

光機能性分子では、分子の光学的性質とともに分子集合体における励起ダイナミクスが重要であり、優れた機能創出にはナノスケールの現象の理解とそれに基づく分子設計が必須である。光機能材料の開発は、これまで実験的なスクリーニングや工学的技術に基づいていたが、これまでにない機能分子の開拓には、より論理的な手法が不可欠である。本課題では光機能を示す有機 EL やバイオセンサー、非線形光学分子の光電子過程を明らかにし、分子設計の指針を示すことによって、技術革新を行うことを目的とする。これらの光機能では、分子の励起状態の性質が重要であり、励起緩和、電子移動、エネルギー移動なども検討する必要がある。第 1 部会の研究課題との連携を行い、電子状態理論と動力学理論に基づく技術革新を実現する。新たな技術革新を達成し、それらを応用することによって、産業や社会への貢献を目指す。

【成果目標とその科学的・学術的意義】

光機能性分子では、分子の光学的性質とともに分子集合体における励起ダイナミクスが重要であり、優れた機能創出にはナノスケールの現象の理解とそれに基づく分子設計が必須である。光機能材料の開発は、これまで実験的なスクリーニングや工学的技術に基づいていたが、これまでにない機能分子の開拓には、より論理的な手法が不可欠である。本課題では光機能を示す有機 EL やバイオセンサー、非線形光学分子の光電子過程を明らかにし、分子設計の指針を示すことによって、技術革新を行うことを目的とする。これらの光機能では、分子の励起状態の性質が重要であり、励起緩和、電子移動、エネルギー移動なども検討する必要がある。第 1 部会の研究課題との連携を行い、電子状態理論と動力学理論に基づく技術革新を実現する。新たな技術革新を

達成し、それらを応用することによって、産業や社会への貢献を目指す。

【「京」利用状況】

本課題では、励起する分子が大規模な共役系である系をターゲットとしており、並列化が困難な状況であるが、SAC-CI 法では OpenMP による並列化を進めた。さらなる高並列化の手法やアルゴリズムの導入を行う。

【研究実施内容】

非線形外場応答分子については、H25 年度モデル系による研究で明らかになった開殻 $X-\pi-X$ 系という新しい NLO 物質の設計指針を種々の実在系へと適用する。具体的には、これまで我々が探索してきた開殻一重項分子系の骨格を典型元素で置換、または置換基の導入によって分子内の電荷移動を発現させ、従来系を凌駕する優れた NLO 分子の設計を行う。さらに開殻分子集合系に関しては、実在系の検討を開始し、さらに積層数や分子配置、スピンや電荷状態による効果も検討する。

一重項分裂(SF)については、その動的な機構の検討を開始する。一般に SF が効率的に起きるためには、その始状態から遷移状態への遷移確率、速度が特に重要であると考えられている。またその時間スケールは 0.1ps から数 100ps 程度と、非常に速く、原子核の運動が関与している可能性がある。そこで代表的な SF 分子であるテトラセンとペンタセンについて、分子振動がこれらの状態のエネルギー準位や遷移確率に及ぼす効果を検討する。同時に、完全に向き合った配向と実験的に知られている結晶構造における違いについても検討し、それらの違いが上記の諸量に及ぼす効果を解析する。

光機能分子に関しては、H25 年度には励起状態の溶媒効果を効率的かつ定量的に記述する理論の開発を行った。また励起状態における電子移動を記述する化学指標の定量化を行った。本年度は、これらの成果に基づいて、生体プローブ分子等の光機能分子の光物性について研究を行う。さらに第一部会との研究課題の連携を行い、光機能分子の光電子過程の精密な理論研究、励起ダイナミクスに関する研究を実施する。

希土類元素を含む分子やクラスターの電子状態を評価するための計算手法の開発とその応用を行う。 LnX_3 ($X=\text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) の f-f 遷移機構の解明や Ln サンドイッチクラスターの 4f 軌道と配位子の結合様式を分析する。

2.2.2.1(4) エネルギー変換

第4部会 代表者： 山下晃一(東京大)、杉野修(東京大)

1) 部会全体の取り組み

[研究課題概要]

太陽光や熱、水素やハイドレート、バイオマスといった一次エネルギーを二次エネルギーに変換する仕組み、あるいは二次エネルギーを貯蔵して再利用する仕組み(二次電池等)を原子・分子スケールで物質科学的に解明する。また、そのための計算手法やアプリの開発や、研究成果を用いたエネルギー変換デバイス用物質開発への指針獲得を行う。これらの活動を通じてエネルギー研究の人材育成、コミュニティ形成、外部コミュニティとの連携などを押し進める。

[社会的意義]

エネルギー変換に関連する様々な物質科学上の研究を、個々に行うのではなく、お互いに連携させながら総合的に行うことにより、包括的な成果の創出をめざす。昨今のエネルギー事情により、エネルギー変換のための研究基盤、知識基盤はこれまで以上に求められており、それに応えられるような結果を出すことの意義はかつてない重要性を持つ。

2) 開発課題内容

[平成 26～27 年度の実施計画と成果目標]

エネルギー変換過程を次に示すような様々なレベルから捉え、それぞれシミュレーションを行う。(1)電子(および原子核)の動的過程として太陽光発電の光励起・電荷分離・散逸を捉え、それぞれの過程の詳細を探る。また、ナノ構造を有しフォノン伝導が制限された系における熱電変換機構を調べ、変換効率に関する知見を得る。(2)ボルン・オッペンハイマー近似の下での電子とイオンの動力学として燃料電池やリチウムイオン二次電池の界面触媒反応を捉え、電極物質や溶液あるいはその構造と機能性の関連を調べる。酵素反応に関しても類似のアプローチで機構を探る。(3)電子とイオンを別々ではなく原子というユニットで扱うアプローチを用い、ハイドレートの動力学過程を調べることによりその熱力学的性質を解明する。これら(1-3)の研究から物質の構造や電子状態とエネルギー変換効率や耐性との関連を明確にし、物質設計指針等を探る。

3) 平成 26 年度の具体的な実施計画

(1)に関しては Donor/Acceptor 異種接合界面の量子化学計算と量子マスター方程式に基づくシミュレーションを行う。また酸化チタンと吸着分子の複合系、有機鉛ペロブスカイトに対しても計算を行う。(2)に関しては白金水溶液界面での第一原理分子動力学計算を行い、燃料電池反応の活性点を解明する。また、リチウムイオン二次電池の負極側の電極・電解液界面における SEI 膜の生成過程に関する第一原理分子動力学計算を行う。今年度からは次世代型蓄電池の研究を含めて計算対象の拡大を狙う。さらに、バイオマスの分解における選択的セルロース認識機構を解明するための CBM による解析を行い、同時に FMO/3D-RISM プログラムの高並列化のためのプログラム開発を行う。(3)に関しては、NaCl 水溶液中のメタンハイドレートのシミュレーションを行う。また水素と水からなる 2 成分系や、THF やシクロヘキサノンなどを加えた 3 成分系の結晶成長や分解などの微視的機構を解明するためのシミュレーションを行う。さらなる具体的な記述は以下の項目でそれぞれ示した通りである。

〔部会活動〕

それぞれの研究課題遂行のための種々の会合を定期的に行う。それに加えて部会内での課題横断的な進捗報告会を年に二度ほど行う。

〔連携活動〕

（外部連携）

本部会の研究は、CREST や元素戦略等の国のプロジェクトとの連携の下推進されるという特徴を持つ。特に、燃料電池やリチウムイオン二次電池、太陽電池の課題は密接に連携した研究を行う。またいくつかの課題では、企業の研究者と共同で（あるいは連携して）研究を行っている。これらの研究から生まれた成果は、プレスリリース等も含め幅広く広報を行ってきた。今後は、アプリ開発や予備研究が完了して、プロダクトランがさらに精力的に行われる予定である。これまで広報した成果がいくつかの企業あるいは実験グループの目にとまり、共同研究につながった経緯があり、それが今後はさらに増えていくものと考えている。

[研究開発課題の実施]

i) 重点課題5: エネルギー変換の界面科学

[代表者] 杉野修(東京大)

[研究開発体制]

(担当者) 杉野修(東京大)、赤木和人(東北大)、森川良忠(大阪大)、池庄司民夫(産総研)
牛山浩(東京大)、兵頭志明(兵庫県立大)、尾形修司(名工大)
館山佳尚(物材)、大谷実(産総研)、大脇創(日産自動車)、山下晃一(東京大)
長岡正隆(名古屋大)、麻田俊雄(大阪府大)

[研究開発課題概要]

(燃料電池やリチウムイオン二次電池に代表されるような)異相界面で起こるエネルギー変換過程を解明し、化学電池の変換効率や耐久性に関する物質科学的な原理や知見を得る。また、得られた知見等に基づき物質設計への指針を探る。エネルギー変換過程を、化学反応を伴う原子・分子の動的現象としてとらえ、それをシミュレーションするための革新的手法とアプリの開発を行い、それら手法・アプリを用いて電極・電解質界面に対する物質科学の探求を行う。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

燃料電池反応のシミュレーションから、これまで微視的な描像が得られていないような情報(活性機構や活性点など)を引き出す。また、リチウムイオン二次電池においては、その最も注目される問題、すなわち電極界面膜(SEI 膜)の形成、安定性、機能性などに関する情報を引き出す。これらの結果から、効率化・耐性を向上させるための原理の獲得を行う。

これらは電気化学、界面科学の主要問題でもある。界面においてイオンの流れと電子の流れが如何に互いに影響を及ぼしながらエネルギーが変換されるのか、その知見を獲得することの科学的意義は大きい。

['京']利用状況

本課題は重点課題に選定されている。通期で 15.5 百万ノード時間の 99.7%を使用し、しかも平均実行効率 14%(12,228 ノードのプロダクトランでは 28%、SIMD 化率 73%)を記録し、重点アプリのトップクラスの利用率・計算効率を達成した。

[研究実施内容]

電極界面に電位差を与え、電位差一定の下で計算を行う手法を確立し、第一原理分子動力学計算アプリに適用した。さらに、反応経路に沿って 10-20 程度のシミュレーションを行うことにより自由エネルギー曲面を求めるためのアルゴリズムを導入し、有限温度での反応をとらえるためのアプリを完成させた。これらのアプリを用いることにより以下に示すような様々な研究を実施した。平成26年度には、これらのアプリのさらなる効率化や数値的安定性に取り組む。

燃料電池に関しては、燃料電池動作温度における白金水溶液界面の構造や反応を調べるためのシミュレーションを行った。この系では酸素分子の4電子還元過程($O_2 + 4H^+ + 4e^- \Rightarrow 2H_2O$ 、及びその逆反応)が如何に速やかに起こるかが鍵となるが、その活性点や活性化機構に関する微視的解明は行われておらず、それが活性化向上を妨げている要因になっている。白金のステップのすぐ近くに特異な水素結合ネットワークが形成され、それが反応の活性化エネルギーを下げているという可能性が高いと考え、それを裏付けるためのシミュレーションを行った。いくつかの高面指数表面に対して計算を行ったところ、ステップ近傍で水分子が容易に分解する箇所があることを強く示唆する結果が得られた。その要因やこの結果が電極材料設計に対して意味することを明ら

かにする必要がある。これらの研究は平成26年度の主要課題である。

この酸素還元シミュレーション結果や以前に行ったシミュレーション、さらに、最近の実験結果を総合的に解析することにより、反応経路に関する新たな知見を得ることができた。その解析によると、酸素分子の還元過程として有力視されている association mechanism(OOH の形成を経る機構)と dissociation mechanisms(O_2 の解離吸着を経る機構)が主要経路として競合し、高電位では前者(低電位では後者)が優勢となることなどが解ってきた。これはこれまでの知見をさらに進める重要な結果であり、これまで積み上げた研究の総合的成果だと言える。今回用いたアプローチには汎用性があり、白金電極以外にも適用可能である。それを用いて、これまで謎であった種々の界面での活性機構を解明できるものと期待される。平成26年度はこのアプローチに基づきさらに解析を進め、より定量性を増した形で反応経路に関する結論を得ていく予定である。

また、界面電気二重層に関する研究も進められ、水分子が熱的に揺らぐことにより反応が促進される機構に関する知見を得ることができた。熱揺らぎはナノ界面において特に大きくなり、ナノスケールの微粒子に対しては反応係数を10倍程度大きくする効果があることが示唆された。これはコアシェル技術などの現在知られている最も有効な方法による効果と同様の高い数値であり、界面をナノスケールで修飾することにより活性を制御することができると見えてきた。なお、揺らぎの効果に関しては、ごく最近になって様々な研究者により注目され始めており、本研究はその先駆け的なものといえることができる。

リチウムイオン二次電池に関しては、動作中の電池においてどのように電解液が分解するのか、その結果どのようにSEI膜が形成されるのか、が大きな問題である。しかしその機構に関する研究はあまり進んでいない。今回行った大規模シミュレーションはその機構解明に向けた重要な知見をもたらした。また、その結果は論文だけでなく新聞発表等を通じて報告され、大きな反響を得た。その知見はまず電解液分解に関する知見であり、(1)界面付近にてエチレンカーボネート溶媒が分解し、それが添加剤と化学反応を起こして融合するのが主な反応であるという知見である。従来は別の説がとなえられていたが、今回の計算はそれを否定するものである。融合してできた生成物はSEI膜を形成するものと考えられ、この結果は溶媒材料探索に新たな指針につながる。次の知見は新たな電解液の設計に関するものであり、(2)電解液として高濃度のものを用いると、従来の予想に反してリチウムイオンの輸送をあまり妨げることがないというものである。これは電解液のネットワークを通じてイオンが高速に電導できることによるものであり、その結果、高濃度の電解液を用いれば充電速度を3倍程度高速化できる可能性があるという期待できる。この研究は実験との共同研究から生まれたものであり、そこでシミュレーションの結果が重要な役割を果たした。また、今回開発されたアプリを用いると、これまで数カ月要していた計算が2週間程度で済むため、実験と歩調を合わせて開発ができるようになる。実験と共同で開発できる体制が整いつつある。

平成26年度は融合した生成物が如何に界面膜を形成するのかに関する研究を行う。また、高濃度電解液という条件の下電解液探索を行い、充電速度を高めるための条件を理論的に示す計画である。

ii) 重点課題6: 水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性

【代表者】 田中秀樹(岡山大)

【研究開発体制】

【担当者】 田中秀樹(岡山大)、甲賀研一郎(岡山大)、三浦伸一(金沢大)

担当者のうち、田中、甲賀がメタンハイドレートの融解過程を担当し、担当者全員が水素を含む多様なハイドレートの熱力学的安定性の理論・計算に従事する。また、協力者は融解過程について、一部協力してシミュレーションを行う。

[研究開発課題概要]

日本近海の海底に多量に存在するメタンハイドレートは新しいエネルギー資源として注目を集めている。また、海底のハイドレートの安定性や分解過程は地球温暖化と密接な関係がある可能性が指摘されている。さらには、メタンや水素のハイドレートは、これらの可燃性ガスを安全に輸送・貯蔵する手段としても期待されている。本研究課題は分子シミュレーションを駆使してこれらの物質の産業利用の基礎となる化学的・物理的機構の解明を目指している。

平成 25 年度は純水中のメタンハイドレートの分解機構を解析した。ハイドレートの分解に伴いメタンの泡が生成する。我々は、この泡生成過程が分解の速度論に大きな影響を与えていることを明らかにした。しかしながら、現実的な応用の場ではハイドレートが純水中にあるとは限らない。海底では NaCl など様々な物質が溶解した状態で分解が進むと考えられる。また、輸送・貯蔵を目的とした場合ならば、コストと安全性が許す限り、必要に応じてどのような物質でも添加することができる。溶質効果の解明は多くの産業利用につながる事が期待される。平成 26 年度はその第一歩として NaCl 水溶液中におけるメタンハイドレートの分解過程の研究を行う。京コンピュータの計算資源を活用し、NaCl 濃度や温度などを変えた様々な条件のシミュレーションを行い、分解の速度論的な機構を明らかにする。

本課題ではまた、来るべき脱炭素化社会におけるエネルギー源である水素の安全で安価な貯蔵法としての水素ハイドレートの可能性を探る。ハイドレートを利用した低圧での水素貯蔵を目指し、実験に対する的確な指針を供する。このために、水素ハイドレート、THF と H_2 の二つをゲストとして含むハイドレート、 C_2 filled ice などのシミュレーションを行う。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

実験研究によりハイドレートの巨視的な物性に関する知見は日々蓄積されている。これらの背景になる微視的な機構を理解するために、分子動力学法は強力な道具となる。これまで、分子動力学法は、構造、熱力学的安定性、結晶成長、分解などハイドレートの多くの物性の解析に役立ってきた。しかしながら、従来の研究のほとんどすべてが水とゲストの二成分系を対象としている。実験的には、水相への溶質の添加がハイドレートの物性に大きな影響を与えることはよく知られている。たとえば、天然ガスのパイプライン中でメタンハイドレートが生成し詰まってしまうという問題があるが、これを阻害する代表的な方法がメタノールの添加である。また、NaCl を添加することでハイドレートの生成温度が下がることも知られている。これら溶質効果に対する微視的な知見は未だほとんど得られていない。

産業利用の面で溶質効果の解明は重要である。たとえば、何らかの物質を添加することでハイドレートの熱力学的安定性や分解・生成速度をコントロールする新たな機構を見つければ、それは広範な応用につながる可能性がある。本課題で目指すメタンハイドレートの分解速度に対する NaCl 添加の機構解明はその端緒となりうる研究である。

本課題ではメタンに加え、水素ハイドレートの解析も行う。水素とメタンの大きな違いはそのサイズである。小さな水素の場合はケージ間のゲスト移動が起こる。これはメタンハイドレートでは起こらない現象である。また、THF などと binary hydrate を作ることでその安定性が大きく変わることが知られている。他にも、水素と水の二成分系は通常の籠状のハイドレート以外に多様な結晶構造を取ることが知られている。たとえば氷 II の空隙に水素を含む C_1 filled ice や氷 VII の副格子の一つが水素と置き換わった C_2 filled ice がその例である。我々のこれまで研究により、これらの物質の熱的な物性の多くは明らかになっている。しかしながら、動的な機構については未だ不明な点が多い。分子動力学計算を行い、結晶成長や分解の機構解明を目指す。

[[京]利用状況]

平成 25 年度と同様に、MODYLAS パッケージを用いて大規模並列計算を実施する。また、状況に応じて他

のソフトウェアも使用し、京の巨大な計算資源を十分に活用する。

[研究実施内容]

NaCl 水溶液中のメタンハイドレートのシミュレーションについては、前年度に実施した純水についての計算と同様の規模(120000~130000 分子)で行う。前年度の結果から、純水中の分解の場合、融点に近い温度で分解する場合と高い温度で急激に分解する場合では、分解速度だけでなく機構も異なることが明らかになっている。これを踏まえ、NaCl 水溶液の計算についても広い温度範囲でシミュレーションを実行する。また、濃度についても、海水に近い 0.6 mol kg^{-1} から過飽和に近い高濃度まで何種類かの計算を行い、比較を行う。

水素と水からなる 2 成分系の結晶構造は、II 型ハイドレート、 C_2 filled ice など多岐にわたる。また、THF やシクロヘキサノンなどを加えた 3 成分系もハイドレートとなる。さらには、TBAB と水からなるセミクラスレートにも水素分子が包接されることが知られている。いずれについても、結晶成長や分解などの微視的機構については未だ明らかでない。最初に、代表的な構造である II 型の水素ハイドレートの分解過程を明らかにする。続いて、II 型ハイドレートの大ケージに THF を包接した構造の解析を行う。実験、シミュレーションの両面から、THF によりハイドレートの熱力学的安定性が大きく増加することが知られている。本研究はこれに対し、THF の速度論的な効果を明らかにすることを目指す。

分子動力学シミュレーションでは、すべての粒子の時間発展が結果として得られる。これを用いて、現象の直感的な理解に役立つ動画を作ることが可能である。専門家だけでなく、一般の方にもアピールできる動画の作成を積極的に行う。

iii) 特別支援課題 1: 太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算

[研究開発体制]

[担当者] 山下晃一(東京大)、杉野修(東京大)、宮本良之(産総研)、館山佳尚(物材機構)、
長谷川淳也(京都大)、河津励(CMSI 研究員)

[研究開発課題概要]

太陽光エネルギーを有効に活用する技術は、二酸化炭素排出量を削減し、現代文明のサステナビリティを実現するうえでの懸案課題である。既存の半導体太陽電池の高効率化、新規の有機太陽電池の超寿命化を達成する技術が模索されている。光エネルギー変換の基礎過程は (i)電子正孔対形成(集光)、(ii)電子正孔対分離(電荷分離)、(iii)エネルギー移動・緩和と散逸、の3点から構成されておりそれらの効率を向上させる必要がある。電子の基底状態理論と比べると未開拓な領域であり、物質科学の分野では最も高度な計算科学的課題として挑戦的な研究が必要とされ、大規模計算機を用いたブレークスルーが期待されている。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

有機系太陽電池は、無機系太陽電池と比べ製造が簡易で原料も安価であることから次世代のクリーンエネルギー源として期待されている。しかし電子供与分子/電子受容分子の異種界面を利用した有機薄膜太陽電池のエネルギー変換効率は 10%程度と未だ低く、また色素増感型太陽電池は変換効率 12%を達成しているが、これら有機系太陽電池の普及には変換効率や耐久性の更なる向上が必須である。そのためには異種界面での電荷分離過程、 TiO_2 電極と色素分子・電解質溶液界面における界面電子移動過程の微視的理解が不可欠である。これらの基礎過程は遷移金属酸化物/有機溶媒界面 TiO_2 表面上の励起電子ダイナミクスや遷移金属錯体吸着といった、第一原理計算の観点からは電子励起状態や電子相関が絡む大規模系であり、その解析計算

の実行は応用的観点のみならず計算科学的にも重要である。

【「京」利用状況】

平成 24 年度、25 年度 HPCI システム利用研究課題として、第一原理計算プログラム NWChem および第一原理分子動力学計算プログラム CP2K の「京」および FX10 向けの高高速化を行った。今後は汎用的な高高速化コードを導入、最適な計算条件を探索し、実際の計算対象で実行する。

【研究実施内容】

以下の研究課題に関して研究を実施する。

(1) 電子供与分子/電子受容分子の異種界面での電子ダイナミクスと励起エネルギー移動

平成25年度に引き続き、Donor/Acceptor 異種接合界面について大規模系でのエキシトン・ダイナミクスの計算手法の開発を継続し、界面 nm スケール・分子スケールでの界面設計による高効率化の理論的設計を目指す。また光エネルギー変換効率を Donor/Acceptor 異種接合界面での電荷移動状態から電荷分離状態の励起状態への遷移と関連付け、詳細な電子状態計算を行い、有機薄膜太陽電池の効率が上がらない大きな原因である、界面における電荷再結合過程の要因を明らかにする。種々の有機ヘテロ界面についての系統的な量子化学計算、量子マスター方程式法により Donor 励起状態から電荷移動状態への電子緩和ダイナミクスを解析し、最適な Donor 分子を理論的に設計する。

(2) 有機・無機ハイブリッド型太陽電池における電子ダイナミクス

これまで色素増感型太陽電池における界面錯体型遷移にともなう直接電子注入に関して、酸化チタンと吸着分子の複合系について変換効率向上へ向けた材料設計を行ってきたが、そこでの計算手法を有機素材と組合せた有機無機ハイブリッド構造体の計算へ展開する。有機・無機ハイブリッド系は有機高分子系に比較して閉回路電圧の低下が抑えられ、光エネルギー変換の高効率化が期待されている。励起子物性(励起子拡散や励起子解離)と光誘起電荷分離過程を中心に理論的検討を行う。また第3の有機系太陽電池として期待されている有機鉛ペロブスカイトの電子的物性に関して大規模計算を行う。

iv) 特別支援課題 2: バイオマス利用のための酵素反応解析

【研究開発体制】

【担当者】 吉田紀生(九大)、平田文男(立命館大)、森田明弘(東北大)

【研究開発課題概要】

バイオマス利用に向けた酵素反応解析のための方法論・プログラムの開発を目的とする。一つはセルロース分解酵素による酵素反応の解析で、もう一つはバイオマス表面での反応解析である。これらを理解するには、水溶液とバイオマス関連物質(セルロース、酵素、バイオマス表面等)を統合的に扱える方法・プログラムが必要である。申請者らは溶液界面を捉える分光実験を解析する計算手法を開発や、液体の統計力学理論による酵素の分子認識過程を解析する手法を開発しており、次世代スパコンでの利用をめざした高度化を行う。

【成果目標とその科学的・学術的意義】

成果目標の一つは、3D-RISM 理論を軸とした酵素反応解析技術を確立することにある。分子認識過程において溶媒は極めて重要な役割を果たしているが、従来の分子認識解析手法では溶媒を統計的に扱ってこなかった。これは、溶媒というものはほぼ無限個存在し、その自由度が膨大であることに起因する。このため、統計力学理論に基づいて定式化されている 3D-RISM 理論を用いることで、この溶媒の自由度に関する配置積分を解

析的に行い、言わば、無限個の溶媒、無限時間のサンプリングを行ったのと同等の結果を得ることができる。理論・計算による分子認識解析技術を確立することは科学的・学術的意義の高いことは言うまでも無く、産業レベルでもエネルギー分野のみならず創薬分野などへの波及効果も大いに期待できる。

「京」利用状況

本研究課題遂行上、中心となる 3D-RISM は最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用プロジェクト・次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発において特に高度化を施す中核アプリケーションの一つとして開発が行われてきた。本研究課題代表者はこのプロジェクトにおいて 3D-RISM 開発グループの一員としてプログラムの高並列化・高度化に取り組んできており、本プロジェクトにおいても引き続き開発を行ってきた。現在、3D-RISM は 8192 ノード(6 万コア超)でのスケーラビリティを「京」コンピュータ上で達成している。結果は論文としてまとめられ、Journal of Computational Chemistry 誌に受理された。

研究実施内容

セルロース分解酵素は carbohydrate binding domain (CBM) とよばれる部位で セルロースを選択的に認識し、その後分解反応を行う事が知られている。したがって、CBM の動作原理・選択性の分子論を理解することは高効率酵素のデザインに寄与すると期待できる。CBM-セルロースの結合には、タンパク-リガンド間相互作用の精密な記述と、分子認識に伴う脱水和の自由エネルギー変化の両方を扱える理論が必要である。そこで、本年度は、タンパク質-リガンド相互作用の全電子状態計算を可能にするフラグメント分子軌道法と、生体分子の溶媒和理論である 3D-RISM 法を組み合わせた手法(FMO/3D-RISM)の定式化、変分的導出と高効率プログラムの開発を行ってきた。

本年度は、FMO/3D-RISMプログラムの高並列化のためのプログラム開発およびCBMによる選択的セルロース認識機構の解析を行う。

v) 特別支援課題3: ナノ構造体材料における高効率非平衡エネルギー変換過程とナノ構造創製の理論シミュレーション

研究開発体制

【担当者】 浅井美博(産総研)、中村恒夫(産総研)、吉田博(大阪大)、佐藤和則(大阪大)

研究開発課題概要

カーボン・ナノチューブと高分子の混合材料や導電性高分子 PEDOT:PSS の様に、室温で $ZT \approx 0.2-0.3$ 程度の高い熱電変換効率を持っている有機熱電材料が最近開発されている。最も有用な熱電材料とされているビスマス・テルルでさえ、室温では高々 0.9 程度の ZT しか示さない事を考慮に入れると、大変良い出発点である。ビスマス・テルル系の場合、その毒性は大きな問題であるが、有機材料にはその問題は無く、軽量かつ安価であり、フレキシブル化も容易であるので発熱体との接触面積を大きくとる事が容易等、多くの利点がある。低温排熱回収、特にエネルギー・ハーヴェスティング材料として有望である。この様な最近の進展を鑑み、熱電変換効率の最大化機構の解明に資する理論及び計算シミュレーション・コードの作成を進めているが、ここではその数値計算プログラム作成と、数値計算高速化(計算プログラムの並列化)の研究を行う。

成果目標とその科学的・学術的意義

熱電特性(電気伝導度 G , ゼーベック係数 S , 電子熱伝導度 κ_e , フォノン熱伝導度 κ_{ph})を、実験と比較し得るほどの精度で第一原理的に計算し、熱電変換効率 $ZT = G^2 S T / (\kappa_e + \kappa_{ph})$ や出力因子($G^2 S$)を最大にする材料の探

探索スクリーニングを行う事を(他の研究プロジェクトで実施分も含めて)私の研究グループの最終目的としている。探索スクリーニングを行う為には、【並列化】により高速化されたプログラムを用いて多くの試行計算を行う必要がある。これが出来れば、新たな材料探索が容易になり、その意義は大変大きい。数値計算プログラムの作成と、【並列化】の部分を実験・推進する。DFT の範囲で数十 nm 厚、DFTB の範囲で $\square$ m 角のミニチュア化したモデル材料の熱電輸送係数の計算を短時間に実施可能とする事を、長期的な達成目標に設定している。高速化された計算プログラムは、更なる機能追加の後、経産省・未来開拓プロジェクト「未利用熱エネルギー革新的利用技術開発」で参画企業等に更新公開され、高性能熱電材料の探索スクリーニング用途に使われる予定である。

【「京」利用状況】

当面、もっとも計算時間の要しているフォノン熱伝導度 $\square$ の計算部分を中心に並列化作業を進めていく。基礎理論から起こした第一原理計算プログラムの作成が終了したところであるので、並列化とそれを用いた「京」の利用は今後の課題である。

【研究実施内容】

熱伝導、電気伝導を理論的に取り扱う為の非平衡伝導理論の研究から始め(フォノン熱伝導度の理論や散乱効果理論)、その成果を第一原理計算プログラム化し、その計算精度を精密計測実験との比較を通じて検証して来た。今後、開発された第一原理計算プログラムの並列化を本研究課題で行い、それを用いた材料探索スクリーニング研究を経産省・未来開拓プロジェクト「未利用熱エネルギー革新的利用技術開発」において実施する。

2. 2. 2. 1(5) マルチスケール材料科学

第5部会 代表者：香山正憲(産総研)

1) 部会全体の取り組み

[研究課題概要]

様々な構造材料、機能材料を対象に、その構造や機能を高精度にシミュレートする計算技術を「京」の活用を通じて開発・整備する。特に、材料の有するマルチスケール性が顕在化される諸課題を介して、ミクロからメソ、マクロまでをつなぐマルチスケール計算技術の開発、検討を行っていく。実際の材料は、多結晶体であり、析出相や合金・添加元素を含む微細組織など、複雑構造が材料機能の発現を支配している。従って、材料の構造や機能を正しく扱うには、原子・電子の挙動から、粒界、異相界面、各種欠陥・添加元素、さらにメゾスケールの微細組織など、マルチスケールでの取り扱いが不可欠である。また、微細組織の形成過程や安定性を理解するには、内部エネルギーのみならず、有限温度や各種成分の化学ポテンシャルを含めた自由エネルギーの取り扱いが必要となる。

これまで重点課題と3つの特別支援課題を通じて、構造材料、機能材料、製造プロセスに関わる材料科学の典型的な課題を対象にマルチスケール計算を進めてきたが、今後も鋭意、この方向で計算の進展・深化を図る。特に、これまでの成果を踏まえると、電子状態の計算の大規模化に加えて、Phase Field 法を中心にしたメソスケールの取り扱いへ重心をシフトしていく必要がある。重点課題では電子状態の計算と整合する Phase Field モデリング手法の開発に重点を置く。一方、特別支援課題の一つの凝固シミュレーションでは、Phase Field モデリングは相応のレベルに達しており、固液界面エネルギーの異方性の高精度計算等、ミクロスケールの計算にも重点的に取り組む。加えて、他の特別支援課題では、プログラムの改良開発により、マルチスケールな機能特性の計算対象の拡大を図る。例えば、TOMBO を用いた計算では、化学反応や電子励起反応を調べるとともにバンドギャップやバンド構造を正しく再現できる GW 近似に基づく XPS, UPS スペクトル計算を行い、Bethe-Salpeter 方程式を解く精密な光吸収スペクトル計算を行う。又、feram では強誘電体やその薄膜キャパシタの弾性熱量効果 (elastocaloric effect) を直接的にシミュレートできるようにする。

[社会的意義]

材料のマルチスケール性の特徴、問題点は、以下の諸点に集約しうる。第一に、多くの実用材料は、単結晶ではなく多結晶で、微細組織を有する構造である。それらを丸ごと第一原理計算で扱うことは困難である。第二に、微細組織は、内部エネルギーのみではなく、有限温度の効果や合金・添加成分の化学ポテンシャルを含めた自由エネルギーに支配される。また、必ずしも熱平衡状態でない場合も多い。従って、電子・原子スケールの自由エネルギーを基にして、微細組織の自由エネルギーを効果的に記述する必要がある。第三に、材料の性質や機能も、マルチスケールに渡る現象である場合が多い。例えば、機械的特性を支配する転位やクラックの挙動は、原子・電子レベルからメゾスケールに渡る現象である。

こうした材料のマルチスケールの構造や現象、さらには帰結される機能や特性を効果的に扱う手法の開発は未踏の状態にある。本課題の遂行により、材料科学分野での高精度シミュレーション技術が確立されれば、優れた強度と靱性、耐熱性を併せ持つ金属材料の開発が飛躍的に進展すると考えられる。これは、高効率のエネルギー変換技術、輸送機器の省エネ化、大型構造物の耐震性向上等に繋がり、持続発展社会のために不可欠である。重点課題で対象とする構造材料に加えて、特別支援課題で取り上げる機能材料も、様々なエネルギー・環境技術や通信・電子技術、輸送技術、機械技術・製造技術、ロボット技術、社会インフラから生活・医療・介護等に至るまで、我々の社会を支える基盤材料として重要な役割を果たしており、本課題の遂行は機能特性

の効果的な開発や評価、さらには凝固工学のような製造プロセスの最適化に対しても大きな貢献をし得る。

2) 研究開発課題内容

[平成 26～27 年度の実施計画と成果目標]

第 5 部会の平成 26～27 年度の実施計画・成果目標は、以下のとおりである。

第一に、重点課題や特別支援課題で、具体的な研究計画を深め、「京」や関連資源を用いた計算の実行を進める。各課題毎に独自に研究会等を行うとともに、部会全体の研究会や CMRI 研究会などを活用して、部会内の議論や情報交換、関連する実験家や各種プロジェクトとの議論や連携を進める。

第二に、重点課題と特別支援課題の全体に共通する計算手法・技術として、マルチスケール計算科学の取り組みを連携して進める。特に大規模第一原理計算を Phase Field 法等に有効につなげる手法、技術の開発を推進する。引き続き、集中した勉強会、研究会を組織して進める。

第三に、材料科学分野での大規模計算やマルチスケール計算科学の普及・振興を進めるとともに、材料インフォマティクス手法等を用いた新規材料探索や鉄の有限温度磁性の問題、腐食防止の計算科学の問題等、新規課題の展開について、引き続き、調査、検討を行う。他の部会との共同、連携も重視する。

なお、作業部会の指摘事項は、主として、次の 2 点に要約できる：第一に、まだ、マルチスケールというキーワードは生きていない。キャッチフレーズに終わることなく、実際に材料科学でのマルチスケール解析が実行されることが重要。第二に、鉄鋼材料の重要性に鑑み、有限温度の磁性への関わりを真剣に検討することが必要。

これらの指摘に対して、第一に、Phase Field 法の専門家も加わっている第 5 部会において、メゾ・マクロの構造や特性の予測、設計に繋げるマルチスケール計算の方策の具体的な検討を開始している。26 年度の部会の最重要課題としてマルチスケール計算技術の開発を推進する計画である。第二に、鉄の fcc 高温相の磁性の問題等、現在、元素戦略構造材料拠点(京大)においても検討をスタートしており、連携して議論を進める計画である。また、材料科学のコミュニティだけでは完全には扱えない現象であるため、物性のコミュニティとも連携して検討する。

3) 平成 26 年度具体的な実施計画

[部会活動]

第一に、前年度に引き続き、各重点課題と特別支援課題の各々で研究内容の具体化、計算技術の検討、「京」や各種計算資源の活用を進める。第二に、マルチスケール計算手法の開発について、第一原理計算と Phase Field 法の具体的な連携法など、集中した研究会、会合等を通じて議論、検討、試行を進める。第三に、各種実験や開発を中心とした材料関係プロジェクトとの連携、共同を進めるとともに、磁性や腐食の課題へのアプローチや informatics を用いた材料設計など、新たな課題や方向について議論を進める。これには、CMSI の物性や分子のグループとの交流による斬新なアプローチも検討する。

[連携活動]

(部会連携)

重点課題と特別支援課題の間で、研究内容や遂行状況を交流し、情報交換、議論を進める。共通の課題であるマルチスケール計算手法の開発について、前年度に引き続き、集中的な議論を行い、それぞれの課題遂行に反映させる。そのための研究会を頻繁に開催し、手法の具体化、各種の試行を行う。

(CMSI 連携)

他の 4 つの部会との協調的・相補的な発展を図るため、前年度までと同じように CMRI シンポジウムを開催し、他部会からの参加者との討議、意見交換、情報交換を進める。また、CMSI 研究会やシンポジウムへの積極的な

参加を行う。鉄鋼材料の有限温度磁性や材料の腐食防食、或いはinformaticsなど、新規のテーマに関して、物性や分子との協同も検討する。

(外部連携)

前年度に引き続き、CMRI のシンポジウムなどの場を利用して、各種実験や開発を中心とした材料関係プロジェクトとの情報交換、連携、共同を進める。材料科学の研究の出口が工学や製造にあることを考えると、使途や生産過程を考慮した研究が大切である。鉄鋼業や各種素材産業の研究者との情報交換、連携を重視する。

[研究開発課題の実施]

i) 重点課題7: 金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発

[代表者] 香山正憲(産総研)

[研究開発体制]

[担当者] 香山正憲(産総研)、澤田英明、川上和人(新日鉄)、尾崎泰助(北陸先端大)、尾方成信、譯田真人(阪大)、田中真悟、Vikas Sharma(産総研)、板倉充洋、山口正剛(原研)

[研究開発課題概要]

飛躍的に優れた構造材料の開発は、エネルギー変換機器効率の飛躍的向上、輸送機器の超軽量化による省エネ化、長寿命・高信頼性の大型構造物など、社会基盤を支え、持続可能社会実現のための不可欠の課題である。こうした構造材料は多結晶体であり、種々の析出相や粒界・欠陥・添加元素等で構成される微細組織が機能を支配している。高精度設計のために、ミクロの電子・原子の振る舞いからメゾの微細組織の構造や特性を理解し、マクロの機械的性質や機能を予測するマルチスケール組織設計・評価技術の開発が必要である。そのために、各結晶相のみならず、異相界面・粒界・転位等の大規模複雑構造の第一原理計算を行い、合金成分・不純物との相互作用を明らかにするとともに、それらを Phase Field 法に繋げる手法を確立する。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

金属系構造材料では、転位の動きを抑えて強度を上げ、クラックの進展を防いで靱性(粘り強さ)を向上させるため、粒界や転位を導入し、化合物相、変態相を析出させ、強度と靱性を併せ持つ微細組織を形成させる。微細組織は、合金成分・添加元素(レアメタルなど)を入れ、各種高温・加工プロセス処理により形成される。飛躍的に高性能の材料を開発するためには、こうした微細組織の構造と機能、形成プロセスを解明し、設計することが求められる。このためには、欠陥・粒界・界面、各相内の原子間結合から、微細組織のメゾ、マクロスケールまで、マルチスケールの構造や機能の理解が必要となる。また、強度・変形の担い手である転位・クラックの挙動自体が、転位芯・クラックのミクロの原子間結合からメゾ・マクロの応力分布が関わるマルチスケール現象である。

本研究課題では、飛躍的に高性能の金属系構造材料の開発のために、微細組織の構造や機能を高精度に解明し、さらに設計するための手法を開発する。鉄鋼材料を対象に、まず、析出相/母相界面、転位、粒界など、微細組織の構成要素の大規模第一原理計算を行い、そこでの原子間結合の様子や合金成分・添加元素との相互作用を電子挙動に基づいて高精度に明らかにする。さらに、こうした第一原理計算の結果をPhase Field法に繋げる手法を確立し、構造材料のためのマルチスケール計算技術を開発する。

具体的には、まず、鉄鋼材料中の典型的な析出物として、TiC相と母相Feとの異相界面の高精度第一原理計算をオーダーN法プログラム(Open MXコード)で行う。格子misfitのため、界面エネルギーと歪エネルギーが重要で、析出粒子サイズが小さい場合は界面エネルギーの低い整合界面が、サイズが大きくなると歪エネルギーを減らすため部分整合界面に遷移する。実験で観察される方位関係のTiC(001)/Fe(001)界面について、整合界面と部分整合界面の大規模第一原理計算を「京」で実行し、歪エネルギーの見積もりを加えて、遷移の臨界粒子サイズを見積もる。また、整合界面、部分整合界面での水素などの挙動を解明し、バルクの水素脆化を防ぐための水素捕獲能について検討する。また、Fe中の転位芯の安定構造と移動障壁、添加元素との相互作用の大規模第一原理計算も行い、転位挙動を明らかにする。なお、異相界面、転位、粒界について、QMASコードによる局所エネルギー、局所応力の精密解析も行い、異相界面、転位、粒界での原子・電子挙動の支配因子を検討する。そして、こうした第一原理計算の結果をPhase Field法に繋げる手法を確立し、構造材料のためのマルチスケール計算技術を開発する。

本課題には、以下の科学的・学術的意義がある: 材料強度は因果関係がミクロ(電子、原子レベル)からメゾ(微細組織)を介してマクロ(実材料)に及ぶ典型的なマルチスケール現象である。従って非線形性が強い為に、

個々のスケール域における強度の解析は行われてきたものの、全スケール領域を整合的に繋ぐような解析手法、予測手法の開発が遅れている。このことが材料強度の高精度の定量的予測・評価を拒む大きな理由である。本課題の遂行により、合金の材料強度学に高い精度の定量性をもたらすことが可能と思われる。これはひいては工学的にも材料設計手法の確立に貢献することを可能にする。又、レアメタルを添加することで優れた強度や靱性、耐熱性を持つ材料が開発されている。しかし、レアメタルの析出物がどのように形成されるのか、あるいは、粒界や転位とどのように相互作用を行うのか等の微視的機構は未解明の状態である。このようにレアメタル元素を始めとする元素の役割が解明されれば、合金元素代替の方策が明らかとなり、代替材料開発が飛躍的に進むなど、元素戦略上の意義は極めて大きい。

なお、関連するプロジェクトとして、科研費新学術領域「バルクナノメタル」、元素戦略プロジェクト「構造材料研究拠点」等がある。これらは、実験も含めたプロジェクトである。メンバーも一部共通しており、本重点課題と問題意識が共通し、連携しながら進める。

【「京」利用状況】

オーダーN法第一原理計算プログラムOpenMXを用いて、TiC(100)/Fe(100)界面の整合界面、部分整合界面の大規模構造計算(4319原子)を実行してきた。H25年度より、Fe中のらせん転位芯構造の大規模構造計算も同様に実行している。プログラム開発者の尾崎泰助ら(当課題メンバー)を中心に「京」でのOpenMXの調整、テスト、最適化を行っている。

【研究実施内容】

平成26年度は、第一に、前年度に引き続き、鉄鋼材料中のFe/析出相界面の部分整合界面の大規模第一原理計算をOpenMXコードを用いて進め、さらに界面の水素捕獲についても検討する。併せて、QMASコードを用いて界面近傍の応力やエネルギー分布の精密解析を行う。第二に、前年度に引き続き、鉄鋼材料中の転位芯構造のOpenMXによる大規模第一原理計算を推進する。Siはじめ合金元素との相互作用を明らかにする。また、結晶粒界の計算にも着手する。第三に、第一原理計算とPhase Field法の連携について、理論的・計算技術的な検討をさらに進める。CMSI第5部会マルチスケール材料科学全体の活動とも連携しながら進める。

ii) 特別支援課題1: 合金凝固組織の高精度制御を目指したデンドライト組織の大規模数値計算

【研究開発体制】

【担当者】 大野宗一(北海道大)、高木知宏(京都工芸繊維大)、澁田靖(東京大)

【研究開発課題概要】

合金材料の更なる高機能化・高品質化を達成するために、合金凝固中のデンドライト組織形成過程の大規模フェーズフィールド・シミュレーションを行う。本研究課題では、1)分子動力学法(MD)による凝固現象の高温物性値の算出、2)デンドライトの高精度計算を可能にする定量的フェーズフィールド・モデルの構築、そして3)フェーズフィールド・シミュレーションの大規模化によるデンドライト集団組織の解析、の三つの課題を遂行し、凝固工学における喫緊の課題であるデンドライト集団の競合過程の解明を試み、合金の凝固組織に対する高精度制御法の発展を目指す。平成26年度においては、合金系における動力学係数をMDから算出する方法について検証するとともに、フェーズフィールド・シミュレーションによってデンドライト組織形態の定量的なキャラクター化法の検討とマイクロ偏析との関連性について調査する。

【成果目標とその科学的・学術的意義】

一方向凝固や連続鋳造など異なる鋳造・凝固プロセスにおいて、歩留まり向上や鋳片の高品質化の観点から、デンドライト組織のサイズと形態を高精度に制御することが求められており、その要求は今後益々高まることが予想されている。したがって、デンドライト組織を高精度にシミュレートする手法の発展が望まれている。本課題で開発する定量的フェーズフィールド・モデルは、デンドライト組織形成の高精度計算を可能にするものであり、実機条件下における組織形成過程の予測やデンドライト組織形成メカニズムの解明において極めて有用であると考えられる。そして、本課題で構築するモデルは、デンドライト成長のみに限らず、一般の拡散相変態に適用可能であるため、固相変態における組織制御の分野にも展開可能である。加えて、原子レベルの手法に基づく高温物性値の算出とその物性値を用いた定量的フェーズフィールド・シミュレーションの取り組みは、原子レベルと組織レベルの手法の相補的アプローチに相当し、この取り組みはより高度なマルチスケール・モデリングへの足掛かりになることが期待される。これらの点に本課題の科学的・学術的意義がある。

【「京」利用状況】

自然科学研究機構の京用開発サーバ（PRIMEHPC FX10）を活用し、定量的フェーズフィールド・シミュレーションの並列化コードを開発済みであり、今後、「京」による大規模計算に着手する予定である。

【研究実施内容】

本研究課題では、1)原子レベルの手法による凝固現象の高温物性値の算出、2)デンドライトの高精度計算を可能にする定量的フェーズフィールド・モデリング、そして 3)フェーズフィールド・シミュレーションの大規模化によるデンドライト集団組織の解析を実施する。1)は湊田、2)は大野、3)は高木が主な担当者であり、鉄基合金やAl 合金を主な対象として進める。

まず、1)の課題では、固液二相共存状態及び凝固・融解現象を古典 MD シミュレーションにより原子レベルで解析し、凝固組織の計算に必要な固液界面エネルギー及び動力学係数を算出する。固相の結晶面の方によってこれらの物性値に異方性が生じ、その異方性を高精度に算出することが組織形成を適切に計算するための鍵となる。平成 26 年度は特に動力学係数を対象とした高精度計算を実施する。2)の課題では、与えられた物性値のもとで固液界面移動を定量的に再現する定量的フェーズフィールド・モデルを構築する。3)では定量的フェーズフィールド・シミュレーションの大規模化を行い、本課題の目的であるデンドライト集団的成長挙動の解析を行う。平成 26 年度においては、二元系合金の一方向凝固の解析を実施する。

iii) 特別支援課題2: 超高速分子動力学計算による強誘電体薄膜キャパシタの高性能化

【研究開発体制】

【担当者】 西松毅（東北大）、森分博紀（ファインセラミックスセンター）、Scott Beckman（アイオワ州立大）

【研究開発課題概要】

われわれが開発している強誘電体薄膜キャパシタのための超高速分子動力学シミュレーションプログラム feram をさらに改良し、強誘電体やその薄膜キャパシタの弾性熱量効果（elastocaloric effect）を直接的にシミュレートできるようにし、強誘電体薄膜キャパシタの高性能化の知見を得る。また、欠陥の物性への影響をシミュレートできるようにする。

【成果目標とその科学的・学術的意義】

上記の課題概要のとおり、強誘電体とその薄膜キャパシタのダイナミクスや熱的性質を直接的にシミュレート

できるようにすることを目標とする。組成や欠陥、強誘電体薄膜キャパシタの構造がその性質に与える影響を解明して予測できるようにし、組成や欠陥や構造の最適化の方針を編み出して、強誘電体メモリ (FeRAM) の高性能化や焦電エネルギーハーベスティングや電気および弾性熱量効果による固体冷却の高効率化に資する。実験的手法では直接観察することの難しい電場下の強誘電体のバルクや薄膜のドメインのダイナミクス等を直接的にシミュレートできるようになれば、その理解が大きく前進し、本研究が他にはまだ例のない最初のものとなる。

また、昨年度に続き第一原理計算を用いて、強誘電体メモリや焦電効果と電気熱量効果とに最適な新しい材料を探索する。特に強誘電体の組成や強誘電体-金属電極界面の影響を分子動力学シミュレーションの結果と比較しながら行う。担当者らには半導体および絶縁体の第一原理計算に豊富な経験がある。近年、環境保護の観点から毒性のある鉛を使用しない工業製品(Pb-free)の実用化が求められている。しかしながら、数多くの試作実験がなされてきたにもかかわらず応用上必要な特性(室温前後での使用を想定した場合に必要な転移温度等)をもった Pb-free な強誘電体材料は現在のところ合成が困難である。強誘電体メモリや焦電デバイスもその例外ではなく、 $\text{Pb}(\text{Zr}_x\text{Ti}_{1-x})\text{O}_3$ (PZT) ベースのものがよく用いられている。

物性シミュレーションの究極の目標のひとつは、このような応用上必要とされる特性を持った物質をコンピュータにより物質設計 (Material Design) できるようにすることであるが、本研究は強誘電体のシミュレーションにおいてそのマイルストーンとなりうる。計算科学の分野から第一原理計算とそれに基づいた分子動力学計算を通して学術的にも工業的にも社会に貢献しうる。

【「京」利用状況】

feram は「京」および FX10 や SR16000 で並列化と最適化が済んでおり、これらのスーパーコンピュータでいつでもアレイジョブとして実行可能である。ただし、「京」そのものは一般利用に応募したが不採択。

【研究実施内容】

上記の feram の改造の他に、シミュレーションの可視化の手法を確立する。結果をアニメーションにより可視化することで電場下の強誘電体のドメイン挙動を明らかにする。われわれには論文の Supplemental Material として強誘電体ドメイン構造の可視化アニメーションの作成経験がある

(<http://prb.aps.org/supplemental/PRB/v78/i10/e104104>)。

これらの計算結果は様々な強誘電体の実験と照らし合わせて、検証も行ってゆく。現在も符徳勝(合成、電気特性; 静岡大学)、松浦直人(中性子回折; CROSS 東海)、大和田謙二(中性子回折; 日本原子力研究開発機構)、木口賢紀(高解像度電子顕微鏡像; 東北大学金属材料研究所)、津田健治(収束電子線回折; 東北大学多元物質科学研究所)、岩田真(合成、電気特性、ドメイン構造; 名古屋工業大学)らの実験家と共同研究を行っている。

iv) 特別支援課題3: ナノクラスターから結晶までの機能性材料の全電子スペクトルとダイナミクス

【研究開発体制】

【担当者】 大野かおる (横国大)、小野頌太 (横国大)、佐原亮二 (物材機構)、野口良史 (東大物性研)、桑原理一 (アクセルリス (株))

【研究開発課題概要】

ナノクラスターから結晶までの機能性材料の実験との対応において原子/電子レベルでの特性予測・性能評価に必要な全電子スペクトルとダイナミクスを調べることを目的にして、既存の第一原理計算手法の欠点

を補う汎用性の高い全電子混合基底法プログラム TOMBO の開発を進め、それを実用機能性材料研究に応用する。この全電子混合基底法は、1 電子軌道を数値原子軌道関数(AO)と平面波(PW)の線形結合として表す方法であり、孤立系から結晶系までの芯電子から自由電子までの全軌道を 1 電子ハミルトニアン の完全固有状態として記述できる、我が国が世界に誇ることでできる純国産の第一原理計算手法であり、GW 近似や Bethe-Salpeter 方程式などを用いた精密な電子励起スペクトル計算も可能である。コードは高度にハイブリッド並列化されており、どの計算機でも実行可能である。

平成 26 年度は、TOMBO を用いた材料および物質・エネルギー分野の応用研究として、全電子の枠組みで DFT や TDDFT に基づくダイナミクス計算を行い、化学反応や電子励起反応を調べるとともに、バンドギャップやバンド構造を正しく再現できる GW 近似に基づく XPS, UPS スペクトル計算を行い、Bethe-Salpeter 方程式を解く精密な光吸収スペクトル計算を行う。

また、重点課題との関係で、第一原理計算からの Phase Field 法へのマッピングの方法を考案し、そのテスト計算を行う。計算材料科学研究サブ拠点として、横浜国立大学に拠点研究員 1 名を配置する予定であり、本研究課題の担当者および採用予定の研究員とともに、これらの研究課題に取り組んでいく予定である。

【成果目標とその科学的・学術的意義】

バンドギャップやバンド構造を正しく再現できる GW 近似に基づく純粋な SrTiO_3 や ZnO の結晶や不純物を含む系、およびナノクラスターの全電子スペクトル計算を行い、Bethe-Salpeter 方程式を解く精密な XANES スペクトル計算を分子に対して行う。これまで全電子 GW 計算で半導体中の深い不純物準位に対する精密な計算が行われた例は少なく、本研究が成功すれば、その意義は大きい。また、全電子 GW + Bethe-Salpeter 計算で精密な XANES スペクトル計算が行われた例はなく、これを行うことは学術的に重要である。さらに、第一原理計算からの Phase Field 法へのマッピングが可能になれば、マルチスケール・シミュレーションの分野のブレークスルーに繋がる可能性がある。

【「京」利用状況】

一般利用に応募したが不採用であったため、平成 26 年度内に京は利用する予定はない。

【研究実施内容】

平成 26 年度は早期に TOMBO の LDA 部分のソース公開を行う予定であるが、このためにまず、横浜国大に TOMBO 公開サポートWEBシステムを導入する。TOMBO の開発、サポート、公開にあたっては、計算材料科学研究サブ拠点(横浜国立大学)で採用する拠点研究員と協力してこの作業を行う。また、第5部会の重点課題「金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発」と協力して、第一原理計算を Phase Field 法にマッピングする方法に関する研究に具体的に取り組む。まずは粗視化を考えず、第1段階の近似手法として、Fourier 空間での Phase Field Crystal へのマッピングを試みる。さらに、TOMBO の開発、応用研究として、バンドギャップやバンド構造を正しく再現できる GW 近似に基づく純粋な SrTiO_3 や ZnO の結晶や不純物を含む系、およびナノクラスターの全電子スペクトル計算を行い、Bethe-Salpeter 方程式を解く精密な XANES スペクトル計算を分子に対して行う。また、全電子の枠組みで LDA や TDLDA に基づくダイナミクス計算を行い、二酸化炭素から酸素とメタンの生成(CO_2 と 4H の反応を中心にして)、鉄の酸化腐食(水酸化鉄 II の生成プロセスに関するさらに詳細なシミュレーションを行う)などの化学反応素過程を調べる。

2. 2. 2. 2 計算科学技術推進体制構築(計画)

我々の目的は、「京」を中核とする大規模並列計算資源「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(以下、HPCI)」を用いて、これまでの計算環境では成しえなかった画期的な研究成果を上げることである。また、計算物質科学分野の HPCI システムを構築し、希少金属代替材料やエネルギー創成の問題など、科学的・社会的に重要喫緊である課題を解決していくための取り組みを継続することにある。そのため、「京」をはじめとする計算機資源の効率的なマネジメント、学術と社会のニーズに合わせた人材育成、計算物質科学の質的变化のシーズを育てる分野振興、産官学連携、海外連携を推進する。また広報やソフトウェア公開を通じて、研究成果の普及を図り、若手研究者のキャリアパス形成を進める。また、各拠点において、大規模計算をサポートする機能も構築する。計算科学研究機構、他の戦略機関、計算機科学コミュニティとは、研究と人材育成の両面で連携を図る。このような活動を通じ、世界有数にして東アジアでは群を抜く最大規模のネットワーク型拠点として、東アジアおよび国際社会における計算物質科学研究教育の中核となることを目指す。



図 2. 2. 2. 2-1 CMSI における計算科学技術推進活動

2. 2. 2 本格実施(平成26 年度～27年度)における実施計画

2. 2. 2. 2(1) 計算機資源の効率的マネジメント

1)平成 26～27 年度の実施計画と目標

引き続き、重点課題、特別支援課題のアプリケーション並列化・高度化のための体制を充実するとともに、参加研究所の共同利用スパコン運営委員会と連携して、新たな支援課題を設定して、計算科学のすそ野を広げること努める。また、並列計算に関わる研究者の技術レベルや計算規模が非常に広範囲にわたることを考え、人材育成・教育小委員会との連携に基づく講習会などを通じて、広い範囲の研究者が計算科学的手法によって研究を進めることのできる環境を維持・整備する。そのために、参画機関、および、大学情報基盤センターの計算資源を戦略機関の目的のために利用する仕組みを継続し、次世代スパコンにおける超大規模計算へのスムーズな移行を図る。更に、並列計算の簡便な利用法の開拓を通じて、利用者層を拡大し、分野振興へと繋げるため、重点課題や特別支援課題で用いられるソフトウェアを中心に、並列計算用アプリケーションを中心として、その内容や特性を紹介し、利用方法が簡単に分かるウェブサイトを構築する。このうち、特に、重要なものについては、必要に応じて、その開発者と連携して、ユーザが利用しやすいライブラリとして整備し、京コンピュータや全国共同利用スーパーコンピュータセンターなどでも利用できるような環境を整備するなど、重点的に公開・普及を促進する。これらのアプリケーションソフトウェアに関しては、実際の利用に即した実習付きの講習会を実施する。

2)平成 26 年度の具体的な実施計画

i)計算資源のマネジメント

特定高速電子計算機施設の戦略利用枠に関しては、重点課題、特別支援課題に対して引き続き柔軟かつ機動的に資源配分を調整する。大きな配分のある重点課題については、学術的・社会的意義、その目的の明確性・具体性に応じて企画室会議・運営委員会などの議論に基づいて配分を決定すると同時に、各課題において利用される予定のアプリケーションの高度化準備状況に応じて計算実施時期を調整する。この調整の技術的な側面については、神戸分室で情報集約と整理を行う。

また、戦略利用枠の一部を特別推進課題などのアプリケーション高度化支援のために利用し、特定高速電子計算機施設利用の一般課題として利用申請する研究課題の支援を行う。

ii)各戦略機関の共同利用スパコン資源、CMSI 計算資源の活用

特別支援課題、支援課題など、重点課題以外を含めた計算科学全体の分野振興の観点から、戦略機関で保有するスパコンや、CMSIの費用で確保するそのほかの計算資源を引き続きバランスよく配分する。平成 25 年度においては、物性研究所、分子研究所、東北大学金属材料研究所の3研究所で、歩調をそろえて、戦略分野2のコミュニティに対して計算資源を提供する仕組みが整ったが、この体制を維持し、更なる大規模計算への開発環境として利用するとともに、中規模並列計算による研究推進を図る。また、大学情報基盤センターの計算資源の借用も引き続き行う予定である。重点課題の実施、および、次の重点課題として準備している特別支援課題、および支援課題に用いられるプログラム開発や性能評価を推進する。更に、特定高速電子計算機施設で計算された結果を処理加工するために、平成 23 年度、CMSI 神戸拠点に導入されたポスト処理システムの活用を促進する。一方、物性研に導入され、GPGPU の追加導入もはかられた PC クラスタシステム (psi) を、並列化の初心者から高度化プログラムの動作確認、企業内研究者のトライアル利用など従来からの利用に加えて、新しい計算機アーキテクチャへ対応するためのソフトウェア技術開発にも役立つよう、幅広い用途で利用可能なように運用を行い、これらによって分野における並列化計算の振興を図る。さらに、計算物質科学で得られた結果を一般社会にアピールする際に重要となる可視化技術を強化するために導入された可視化アプリケーションを利用した研究およびアウトリーチ活動にも注力する。

・物性研スパコン&Psi の戦略枠利用の予定

東京大学物性研究所では、富士通 PRIMEHPC FX10 を導入し、平成 25 年度からシステム C として運用を開始した(約 90TFLOPS)。CMSI ではこのうちの 60%(物性研全計算資源の 20%に相当)の利用ができるが、CMSI に申請のあった研究課題に対して、東京大学物性研究所の審査のうえでポイントを配分している。「京」に近い環境での大規模計算が通常時から行える環境であり、平成 24 年度までのシステム B と比較して大規模計算がより高い頻度で実行できるような運用体制となっている。平成 25 年度の実績を踏まえ、ポイント配分を調整し拡大した上で、平成 26 年度も、この体制を維持する。

・物性研神戸拠点 Phi の戦略枠利用の予定

引き続き、神戸ハンズオン、「京」ポストデータ処理としての使用を推進する。可視化の利用実績がまだないので、若手技術交流会の可視化実習等を通じて、この方面での利用法を検討する。利用者が増加してきたため、ジョブ管理システム Torque を導入し、効率的で公平な運用を行う。

・分子研スパコンの戦略枠利用の予定

平成 26 年度の利用申請に関しても、これまで同様、分子研の全計算資源の 20%を上限に CMSI 利用枠での募集を行った。CMSI として、合計で 7 課題(15 グループ)からの申請があり、その利用希望は全計算資源の 12.5%に相当している。申請書類をもとにスパコン連携委員および各部会代表者からなる審査委員会での審査、その審査に基づく計算科学研究センター運営委員会における審議を経て、これらの課題について利用が許可された。

- 高塚和夫(第 1 部会) 分子における電子の動的過程と多体量子力学
- 押山 淳(第 2 部会) 密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究
- 尾形修司(第 2 部会) ナノ構造の電子状態から機械的性質までのマルチスケールシミュレーション
- 岡崎 進(第 3 部会) 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開
- 岡本祐幸(第 3 部会) 拡張アンサンブル法による生体分子構造・機能の解明
- 山下晃一(第 4 部会) 太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化
にむけた大規模数値計算
- 吉田紀生(第 4 部会) バイオマス利用のための酵素反応解析

・金研スパコンの戦略利用の予定

平成 26 年度の CMSI 枠は 4 月上旬に採択者を決定したが、採択者の合計は 22 名(共通の課題に複数のユーザーが属するケースがある為に、課題数では 9 課題)で、割り当てたノード時間積は 487500、これは金研スパコンの総ノード時間積の 19.8%に相当する。また、平成 26 年度に本センターのスパコン利用の課題として採択したのは、研究部共同研究が 7 件、本センター共同利用が 27 件であり、従って、CMSI 枠の課題数 9 件も全課題数 43 件の約 21%に相当する。CMSI 枠でのアクセスは SR16000(いわゆるスパコン)のみに限定しており、アプリケーションサーバーの利用は認めていない。異なったコミュニティのユーザーは従来のユーザーとは異なったプログラミング技術を有しており、金研・計算材料科学センターでは彼らの質問やリクエストに適切に対応できるような体制整備に取り組んでいる。

・その他の戦略利用の予定

平成 25 年度には「京」で計算された結果を処理加工するために平成 24 年度に CMSI 神戸拠点に導入したポスト処理システム(phi)や、物性研に導入したハイブリッド並列計算用 PC クラスタシステム(psi)の一部を、CMSI 主催の理論家・実験家に向けたアプリケーション講習会や並列化実習時の実習環境としても利用したが、平成 26 年度もこれを推進する。また、CMSI ではコプロセッサ型のメニーコアアーキテクチャへの習熟をはかるために物性研に導入した Intel Xeon Phi(psimic)や NVIDIA Tesla(psitesla)を活用し、CMSI メンバーのメニーコアの習熟をはかる。PC クラスタ psi に関してはさらに、並列化の初心者から高度化プログラムの動作確認、また、企業の方のトライアル利用等、幅広い用途で利用可能なように運用を広げ、並列化計算の分野振興を図る。さらに、計算物質科学で得られた結果を一般社会にアピールする際に重要となる、可視化技術を強化するために導入した、可視化アプリケーションに関しては、より一層の利用促進を図る。

iii) 大学情報基盤センターとの連携 とスパコン利用

並列化技術に関する共同研究の実施に向けた環境づくりとして、計算機科学の専門家との連携を進める。そのために、東京大学情報基盤センターなどと協力し、研究会・ワークショップなどの共同企画を行う。さらに、産業界からの参加者に関しては、「京」および情報基盤センターの利用を支援する。具体的には、東京大学情報基盤センターの保有する FX10 の利用に関する相談や SC14 などの国際研究集会などでの共同出展などの合同企画などを検討・実施する。

iv) アプリケーションのマネジメント(MateriApps)

CMSI では、平成 25 年度にソフトウェアの公開・普及活動を、計算環境のもっとも基本的な要素の一つと位置付け、開発者と利用者の交流を深めるべく、計算物質科学のポータルサイト「MateriApps」の本格的な運営を行った。MateriApps では、重要なアプリケーションを選定し、原開発者と協力しながら、可用性の向上も含めた高度化を進め、コミュニティソフトウェアとして整備するために、公開ソフトウェアの共同開発のためのプラットフォーム Github の利用支援なども行う。また、産官学連携小委員会および各戦略機関コミュニティと連携して、学術的・社会的ニーズに適合したソフトウェア利用環境を構築するため、アプリ試用のための環境である「MateriApps LIVE!」の開発・普及や各地でのソフトウェア利用講習会などの企画のほか、使い勝手のよい計算資源の確保・運用を進める。

v) 各戦略機関コミュニティとの連携

CMSI では、各分野の研究者のすそ野を広げると同時に、研究の進展に合わせ柔軟な計算資源配分を行うため、平成 26 年度も引き続き支援課題の選定を行う。各研究者の推進する研究課題を、「京」を含む HPCI 計算資源の一般利用研究課題に適した課題として応募を促進するため、HPCI 研究課題への申請と CMSI 支援課題への申請をシームレスに行えるよう支援する。また、広く各戦略機関のコミュニティに対し CMSI 主催の各種研究会や講習会だけでなく、若手技術交流会や TOKKUN(アプリ高度化合宿)などへの参加を呼びかけ、大規模並列計算手法や計算機利用法に関する情報展開を行い、同時に各研究者の課題についての討論・評価の機会を設定する。また、分野に特化した重要なアプリケーションについて、その高度化・普及を支援する。

2. 2. 2. 2(2) 人材育成

25 年度から双方向オンライン配信システムを用いて、全国オンライン配信を開始した全国配信大学院教育科目である計算科学技術特論 A、B 運用をさらに充実する。現在のところこのカリキュラムは研究者あるいは開発者養成のためのコースと位置づけられる。今後の方向性としてはユーザーとして HPCI を利用できる人材を養成するためのコースを充実していくことが考えられる。新たな特論を設けるか、あるいは計算科学技術特論 A、B にそのような視点も組み込んでいくか、その場合一連の講義の流れでどのような切り分けを行っていくか等の議論を進める。このような教育システムに不可欠な単位互換制度やそれと同等の効果が期待できる新制度に関しては、拠点大学での個別の取り組みに期待するところが大きい。各拠点から提案に対しては積極的に議論を進めて、全拠点大学の協力のもとに、単位認定に関してより柔軟性と可能性の高い方式を確立していく。

国際協力に関しては、欧米との研究および人材交流を促進するとともに、25 年度まで実施してきた活動により築かれてきた人的基盤と、確立されてきた方法論をもとに、計算物質科学イニシアティブがアジア最大の計算物質科学コミュニティであることを生かした活動を行い、HPC および計算物質科学に関する教育をタイ、ベトナム、フィリピン、インドネシア等で引き続き展開する。また、優秀な人材をアジアから呼び込むことによって、計算科学技術の発展を目指す。

計算物質科学を推進していく上で、若手研究者を育てていく重要性が認識されているが、長期的な視野にもとづいてこれを行う必要がある。その観点から、今後はエクサマシンも念頭に置くべきである。ダイナミックに発展する計算機アーキテクチャを先取りする先進性をもって物質科学に供する新しい大規模コードを開発していく能力をもった人材を育てるためのフレームワークやプログラムを構築する。このような計画に計算物質科学コミュニティからの若手研究者の参加を促すための企画を行っていく。

これらの計画には HPC を利用できる広いユーザー層の存在が前提である。その意味で最も幅広いユーザー層を抱える産業会への適切な情報と技術の伝達が重要であるが、これを有効的に行うための社会人教育が必須である。社会人をターゲットとした各種チュートリアルコース、ワークショップの開催、場合に応じてコンサルティングの機会を設けることを計画している。

尚、平成 24～25 年度にかけて整備した各教育拠点の講義配信設備をより高度に活用していくため、これまで AICS に借用していた多地点接続装置(MCU)を物性研究所に導入する。また、どこの拠点からも講義の配信が可能となるよう設備の充実とそれを運用できる人員の養成を行う。

1) 平成 26～27 年度の実施計画と目標

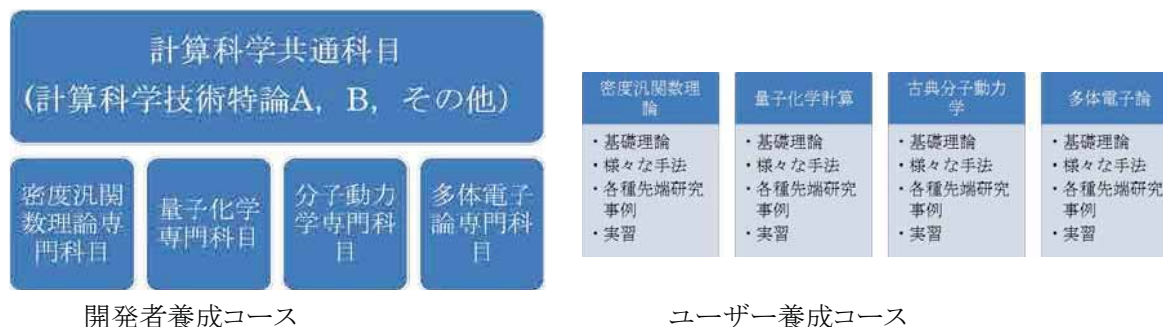
i) 大学院教育

計算科学技術特論 A、B の充実をはかる。それとともに、あらたなカリキュラムの策定しその実施へ向けた活動を実施する。カリキュラムの策定はすでに実施中の大学院科目である計算科学技術特論 A、B の実施と整合性が保たれるようにこれらと総合して考える。基本的には(1)開発者養成コースと(2)ユーザー養成コースで構成する。計算科学の研究では、ソフトウェアを開発するのに必要な知識や技術と、ソフトウェアを使うだけで研究を進めるのに必要な知識や技術では、現在において大きな開きがあり、両方の研究者を一様に育成することは両者にとって不満足とならざるを得ない。研究者のニーズにあったカリキュラムを作るには、この二つに分けるのが良いと考えられる。この大枠のもとに、それぞれの分野に特化した知識や技術を提供するように構成する。

(1)開発者養成コースでは、並列化などの分野にかかわらず一般的な High Performance Computing(HPC)の知識や技術に関する内容を用意する。この HPC の“一般教養”的な内容の下にそれぞれの分野に特化した内容を提供する。講義数は、分野によって必要な知識や技術が異なるため全体の枠の中で必要に応じて決められる。

(2) ユーザー養成コースでは、ソフトウェアが使える研究に利用出来るのに必要最低限の知識と技術を提供する。これも分野によって内容が異なるため、講義数などは必要に応じて決められるが、実習による具体的なトレーニングは必ず実施する。

(1) (2) はテレビ会議システムを用いてオンライン配信で実施される。実習は、それぞれの分野ごとに一箇所ですべて集中的に実施する。単位認定をするかどうかは、現時点で単位認定制度では各大学の個別の判断である。しかし、大学院生のみならず日本全体の若手研究者の育成に貢献できる内容とし、講義は可能な限り一般公開として自由な聴講を許す。



ii) 国際協力

計算物質科学イニシアティブの主催・共催するシンポジウム、ワークショップ・チュートリアルコース等に国外からの参加を促すとともに、コミュニティーの若手研究者、大学院学生に国際交流の機会を積極的に設けていく。また、アジアをターゲットとした計算機マテリアルデザイン(CMD)ワークショップをアジア各地で年会3ないし4回開催しチュートリアルコースを含めた人材育成・教育プログラムを実施してきたが、これらをさらに充実させ、計算物質科学イニシアティブで提供できるプログラムコードに関してレパトリリーを広げて実施していく。東京都の大学が中心となって行っている21世紀東アジア青少年大交流計画などと連携して、若手研究者にとどまらず、博士課程学生も短期間受け入れ、短期実習を行い、理論・計算化学研究の教育にも貢献する。東北大学金属材料研究所ではACCMS (Asian Consortium on Computational Materials Science) の短期講習を通じて計算材料科学の教育に取り組んできたが、このプログラムを継続発展させる。以上の計画と連携して、アジアなどの若手研究者(我が国の研究者も参加)を対象とするチュートリアルコースやサマースクールを拠点大学が中心になり開催する計画を推進する。東京大学物性研究所や京都大学基礎物理学研究所の滞在型プログラムを含む国際集会のシステムを利用することも想定している。

iii) 若手研究者・若手リーダーの育成

戦略的なプログラムのもとに若手研究者育成を実施してきたが、今後、これをさらに発展させる。京コンピュータ上で実行実績をのこしているソフトウェアの開発者を中心とした連携チームを2年かけて形成していく。チームは、そのソフトウェアの開発を推進するメンバーとユーザーと実験家を含めたソフトウェアを活用するメンバーから構成する。これによって、ソフトウェアが理論計算の研究者から実験家も含めた広いユーザーに使われ、最終的に具体的な問題の解決につながるまでの各段階で、役割を担える人材を育成しつつ、ソフトウェアを育てていくことを目指す。メンバーは大学院生を含めた若手で構成する。

各拠点教員および研究員が中心となりソフトウェアを選び出し、その開発者を中心に1個以上のチームを形成する。平成26年度後期より、それぞれのチームでスケジュールを決めて、研究を実施する。これらは京コンピュータの若手人材育成課題などに申請して、人材の育成と重要テーマの研究推進を同時に実施する。

iv) 社会人教育

拠点大学を中心に、計算物質科学に関する社会人教育を引き続き企画、実施する。また、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会(以下、産応協)、計算科学振興財団と協力して産業界向け人材育成教育プログラムの充実をはかる。これらの実施のために各教育拠点大学における教員のみならず、他大学、産業界に対しても講師の派遣等の協力を要請する。

大学で社会人教育を(大学院社会人枠ではなく)正規の授業として行う場合に生じる制度上の問題を解決していく。例えば、HPCに関する教育を実施するための産学コンソーシアムを立ち上げる等の方策を考えていく。産応協の提供するHPC産業利用スクール等のように産業界が組織した人材育成のためのコースにおいては、大学側は講師を派遣するだけであり、制度上の問題は生じないが、このような場合も計算物質科学イニシアティブで企画していく社会人教育プログラムと整合性を保ち全体として効率の良いプログラムが構成できるよう調整を行っていく。

大阪大学では「大阪大学ナノ理工学人材育成産学コンソーシアム」を通じて社会人教育プログラムを実施しているが、これらと産応協HPC産業利用スクール、計算科学振興財団提供プログラム等を連携させることも視野にいれて、さらに充実を行う。これらのプログラムに各拠点大学の教員の非常勤講師としての参加を拡充することにより、より広い俯瞰に基づく社会人教育カリキュラムを構成していく。また東京大学、総合研究大学院大学、豊橋技術科学大学、名古屋大学、京都大学、神戸大学の6 大学からなる「分子科学社会人教育コンソーシアム」を立ち上げ「分子ナノサイエンス計算科学社会人教育プログラム」を実施することを検討する。実施する内容については、特に、産業界が要求する「人材」の意味を明確にし、それらに対応した社会人教育プログラムを策定する。

2) 平成 26 年度の具体的な実施計画

i) 計算物質科学の教育

(1) CMD ワークショップ

① CMD ワークショップ

今年度は、第25回を平成 26 年9月 1 日(月)－9月 5 日(金)の日程で、国際高等研究所で開催する。第26回は平成 26 年 2 月 23 日(月)－2 月 27 日(金)の日程で、大阪大学大学院基礎工学研究科G棟で開催する。これまで同様に、基礎となる第一原理計算手法の訓練と共に、どのようなアイデアで新物質を設計するのかといったデザインのための考え方を、ワークショップ全体を通して訓練できるようにする。特に、先端研究事例ではエクサコンピュータや物質開発の新しいアイデアにつながるアプローチの事例を中心にする。

② ASIA CMD ワークショップ

今年度はインドネシア(日程未定)、12月にベトナム、2 月にフィリピンの3カ国において開催する。第一原理計算手法の技術的な訓練と、理論計算主導で物質開発をする事例を紹介し、アジア諸国の人材の育成に貢献する。

(2) 計算分子科学の教育活動

① 第 18 回分子シミュレーション夏の学校

H26 年度もサポートする予定。京大の院生が幹事となって、日程・場所を調整中。

② 第 8 回 TCCI シミュレーション分子 - TCCI ウインターカレッジ分子シミュレーション

10 月 14 日(火)から 17 日(金)まで分子研にて、昨年度と同様、開催する予定。内容については調整中。

③ 第4回量子化学ウインタースクール TCCI ウインターカレッジ量子化学

12 月 15 日(月)、16 日(火)に分子研にて、昨年度と同様、開催する予定。内容については調整中。

(3) 計算材料科学の教育活動

計算材料科学の教育活動として、①配信講義の受講の促進、②配信講義の企画と実施、③チュートリアルなセミナーやシンポジウムの実施、④海外研修、という 4 点を中心に進めていく。①に関しては、東北大学片平キャンパスのみならず青葉山キャンパスでも受講が可能となったため、ポスドク、企業の研究者に加えて、マテリアルや物理を専攻する院生に対して積極的に受講を勧めていく。②については、昨年度の配信講義で 50 数名の受講者があり、今年度もこれを継続する。但し、③とも関与するが、今年度はセミナーシリーズの一部を配信講義とし、2 回程度のものを企画する。昨年度実施した「マルチスケール材料科学」に関するセミナーシリーズは好評であった。今年度も、これを発展させていき、上述のように、一部を配信講義とする。加えて、これまでに 5 回実施してきた MPI プログラミングの講習会を企画する。これまでは、東北、関西(2 回)、九州、中部で開催しており、平成 26 年度はこれらの地区以外の可能性も考える。④については、CMRI では毎年、若手研究者と院生を対象に、2 名ずつ1か月程度、海外の大学、研究機関に派遣して研修を行っている。今年度もこのプログラムの予算措置をしており、次世代を担う若手に対して啓蒙活動の一助とする。

(4) 高並列化教育

① 第 4 回超並列化技術国際ワークショップ

より実践的なワークショップも含めて企画を検討中。

(5) International HPC Summer School

理化学研究所では、欧州・米国・カナダのハイ・パフォーマンス・コンピューティング(HPC)分野の組織と共同で、日欧米カナダの学生及びポスドク研究員などを対象に、HPC における国際的な人材育成を目的とした“5th International Summer School on HPC Challenges in Computational Sciences”を、ハンガリー・ブダペストで開催する。(6月1～6日、Budapest University of Technology and Economics(BME), Hungary)

分野2からは4名が採択され、東大物性研 CMSI 拠点研究員 五十嵐、慶應大 泰岡研 野村昂太郎(M2)、筑波大 矢花研 佐藤駿丞(M2)、京都大 田中功研 高橋亮(M2)の参加予定。

ii) 社会人教育

①OCTA 講習会・トレーニング

OCTA 講習会&トレーニングをH26年度以降も継続して実施し、内容のさらなる充実とユーザーの裾野(特に大学関係者)を広げる活動を推進する。

iii) 大学院教育

i) 各教育拠点の活動状況

(1) 大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センター

・CMSI教育コンテンツ配信講義 - CMSI計算科学技術特論B

昨年度に引き続き、計算科学技術特論Bとして、4月から木曜3限(13:00-14:30)の時間で開講する。大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センター(豊中キャンパス)を配信元として、14ヵ所(東北大物理、東北大金研、産総研、筑波大、東大柏、東大本郷、東大駒場、金沢大、豊橋技科大、分子研、名大、京大、阪大吹田、CMSI 神戸)に配信する。4月10日を第1回として7月24日まで15回行う。講師は南(理研)、高橋(筑波大)、尾崎(北陸先端大)、安藤(名大)、小林(北大)、成瀬(NVIDIA)、黒澤、菅原(エクセルソフト)で実施する。

今年度は分野5との連携として、本講義を筑波大学にも配信し、分野を超えても役立つと思われる計算科学技術の提供を行う。

・人材育成シンポジウム

CMSI 人材育成シンポジウムを11月に企画して実施する。これまでのように、重要でありながら焦点を当てられていないトピックスを選び、数値解析、計算科学の連携、物質開発、デザインといったキーワードを中心にした講演を企画する。

(2) 東北大学金属材料研究所 計算材料科学研究拠点

一昨年度、東北大学での教育の方向性として、材料科学と物性科学におけるマルチスケールシミュレーションをキーワードに教育拠点活動を進めることとして検討を開始した。そして、昨年度はこれを具体化する形で、学内セミナー「マルチスケール計算材料科学の現状と今後」(全8回)、および、多拠点への配信セミナー「マルチスケールの計算材料科学」(1回)を行った。平成26年度においても、これを継続・発展させていく。特に、両セミナーを踏まえ、学内セミナーの一部について幅広い分野の院生や若手研究者に公開可能な配信セミナーへの移行を検討する。合わせて、片平キャンパス(金属材料研究所)のみならず、工学研究科と理学研究科の院生の多くが在籍する青葉山キャンパス(理学研究科物理教室)におけるテレビ会議システムによる配信講義・セミナーの受講体制、および、配信体制の整備を進める。

(3) 神戸大学大学院システム情報学研究科

CMSI 人材育成・教育小委員会と連携した計算物質科学の人材育成活動を行う。CMSI 神戸分室において、FMO チュートリアルを実施する。

(4) 名古屋大学大学院工学研究科

名古屋大学では、隔年で開講している大学院工学研究科化学生物工学専攻における講義「分子物理化学特論」(全15コマ)を本年度前期に開講する。また、前年度に引き続き大学院生を対象としたオムニバスの講義「大規模並列数値計算特論」および「計算科学フロンティア連続講義」を担当する。この他、総合研究大学院大学にて平成26年度開講予定の分子科学関連の講義「生体分子シミュレーション入門」について名古屋大学の学生が履修できるよう調整する。

(5) 東京大学大学院工学系研究科

26～27 年度も工学系研究科・理学系研究科共通講義として「物質科学のための計算数理Ⅰ，Ⅱ」を開講する。また阪大で開講される配信講義「計算科学技術特論 B」も昨年度に引き続き、セミナー形式で誰でも自由に参加できるように受信開講する。さらに 26 年度から「新学術領域コンピューティクスによる物質デザイン:複合相関と非平衡ダイナミクス」と連携し、本郷で行われる新学術領域勉強会の模様を CMSI の拠点を利用して TV 会議システムで配信する予定である。

(6) 東京大学大学院理学系研究科

東京大学大学院理学系研究科では、平成 26 年度には「物理学実験Ⅰ」の計算機実験の授業を通じ、ネットワーク上での作業やプログラミング基礎の教育を行う。平成 27 年度には、計算機に関する独立した授業を本専攻にて開講予定で、その講義内容と資料を作成する。講義内容は、座学と実習の両形式で行い、理論・実験の両研究現場において必要となる計算機の素養の習得を目標とする。より具体的には、計算機の基本的知識、プログラミング基礎、バージョン管理、ネットワーク上での共同作業について教育する。

また本専攻の諏訪・藤堂らが参加している、強相関量子格子模型シミュレーションのためのオープンソースソフトウェア開発プロジェクト---ALPS プロジェクト(<http://alps.comp-phys.org/>)--- に関するハンズオンを計画している。ALPS アプリケーション(古典モンテカルロ法、量子モンテカルロ法、厳密対角化法、密度行列くりこみ群法、動的平均場近似法等)や ALPS ライブラリの使用法を自習形式で学習させることを目的とする。

(7) 東京大学物性研究所 神戸拠点

CMSI 教育機関、および、他大学とも連携し、計算物質科学の人材育成活動を行う。また、CMSI 神戸分室において、「京」で活用するオープンソフトウェアの開発者会議及びチュートリアルを実施する。

2. 2. 2. 2(3) 人的ネットワークの形成(研究会、セミナーの開催)

1. 計算物質科学の分野振興

1) 平成 26～27 年度の実施計画と目標

「京」の運用開始から 1.5 年以上が経過し、CMSI 重点課題ではプロダクトランが実施されて成果が創出されてきている。平成 26 年度以降は、これらの成果を実験科学や産業界へ幅広く活用していただくため、これまで声が届かなかったコミュニティに対しても成果をアピールするとともに、共同研究やアプリケーションの利活用につながるイベントを実施していく。CMSI 研究課題の大きなターゲットとなる元素戦略プロジェクトは平成 26 年度で開始 2 年目を迎え、「京」も含めた HPCI を利用した計算と実験、計測の連携で研究が進展している。その連携で効果的に成果を出していけるよう、計算物質科学関連のアプリケーションの利用を促進するためのセミナー等を企画する。

3) 平成 26 年度の具体的な実施計画

① CMSI 全体行事

国際的な若手の計算物質科学コミュニティ創成を目的とし、特定の計算手法を専門とする第一線の若手研究者を海外から 3～4 名招聘し、国内研究者十数名と議論する、国際ワークショップを 4 回開催する。「京」で培った計算技術を世界に発信し、国際共同研究等への発展を期待している。

CMSI 研究課題実施者が一堂に会する第 5 回 CMSI 研究課題は、12 月に東北大学で実施する。実際に「京」を利用している研究者間で成果や計算手法の情報交換を行い、さらなる成果創出を目指す。また、ポスト「京」として検討すべき課題に関しての議論も実施する予定である。

本年は、HPCI をマネジメントする RIST との共催による行事として、「「京」と大型実験施設との連携利用ワークショップ」を 9 月に開催予定である。これまで、元素戦略プロジェクトを中心に大型研究施設間の連携シンポジウムを開催してきたが、RIST との共催で実施することで HPCI 利用者全体に対してのアプローチが可能となり、参加者の広がりを期待している。

② 計算物性科学研究センター(CCMS)

CCMS では、3 年連続で大規模実験施設 (SPring-8, J-PARC, K-computer) の連携ということで秋にシンポジウムを開催している。平成 26 年度もさらなる連携を期待して、シンポジウムを実施する予定である。

③ 計算分子科学研究拠点(TCCI)

全体シンポジウムとしての研究会は、成果報告を中心として、従来通り 10 月 17 日、18 に分子研で行う予定。その他については、予算削減への対応のため、実験化学との交流シンポジウムに代わりに、テーマを絞った研究会を実施する予定。また、産学連携シンポジウムの代わりに、産応協スパコンセミナー(1 回分)の共催を行う予定である。

④ 計算材料科学研究拠点(CMRI)

26 年度の分野振興策として、①研究活動の推進の為に企画・支援、②教育活動・人材育成活動・啓蒙活動の立案・遂行、という 2 本の柱を中心に活動を行う。23 年度～25 年度は① CMRI シンポジウムの実施、② MPI 講習会の開催、③ 若手の海外派遣、の 3 つを柱を標榜していたが、これらをより大きな括りにしたものが上の 2 つの柱である。平成 25 年度より第 5 部会が発足したが、核は CMRI のメンバーにより構成されている。重点課題と特別支援課題をさらに促進し、加えて新たな特別支援課題のテーマを計画・実施することが第 5 部会の重要なミッションであるが、CMRI はこれを全面的に援助するような具体案を立案し、実行する。分野振興の諸々の計画は、

このような第 5 部会の課題遂行のための支援と不可分、あるいは、その延長線上にある。

具体的には、上述の①に関しては、各種のシンポジウムや研究会の開催を通じて、課題の進捗状況を確認しながら、計算の具体化・深化を図る。昨年と同じく、11 月に国際シンポジウムを企画しており、これを従来の CMRI シンポジウムとして大きな研究集会を開催する。②に関しては、各種のセミナー・講習会の開催、講義の実施や配信、若手の海外派遣など、前年度までに行ってきたことをさらに効果的に実施する。特に第 5 部会の課題は「マルチスケール材料科学」であり、講義の実施や配信にあたっては鋭意、このテーマを中心にしたものとする。これに加えて、コミュニティの底辺の実力強化のため、MPI 講習会を開催する。これまでに東北、関西、九州、そして中部で開催しており、今年度は他の地区に開催の場を広げる。また、若手教員と院生を対象にした 1 か月程度の海外研修を実施する。過去 3 年間に院生が 4 名 (23 年度 2 名、24 年度 1 名、25 年度 1 名)、若手教員が 2 名 (24 年度、25 年度各 1 名)、この制度のもとで欧米の大学や研究所に短期留学しており、いずれもその後の研究の遂行に大きな駆動力を得て帰国した。平成 26 年度も引き続きこの制度を実施し、若手研究者の啓蒙に努める。

これらに加えて、材料科学分野で進行中の大型プロジェクト (CREST、JST、科研費学術新領域、新元素戦略など) や大型実験施設とも連携を取りながら共通テーマに対して協働していく。また、今年度も ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials science-Virtual Organization) の開催に協力 (共催) し、アジアを始めとする近隣諸国との連携を図る。最後に、本年度は CMSI シンポジウムのホストを CMRI が務めることになっており、滞りなく実施できるように全面的な協力する。

⑤CMSI 国際会議協力

国際会議連携として、17th Asian Workshop、ICMS2014 への協賛を行う。また、国際的なスパコンの研究会と展示会である。ISC14、および、SC14 にも参加し、ブース出展も行う予定である。

・Extended Molecular Dynamics for Enhanced Sampling: Nosé Dynamics 30 Years

～分子シミュレーションの最前線～ (仮称)

11 月 10-11 日慶応義塾大学日吉キャンパスにて開催予定。分子動力学シミュレーションにおける温度制御手法が、故・能勢修一教授 (慶応大) によって発表されて 30 年となるが、“能勢の方法”は、分子シミュレーションを統計力学に結びつけたばかりでなく、拡張系の方法という新たなジャンルを確立し、当該分野で重大な影響をもたらしている。この節目の年を記念し、最新の分子シミュレーション手法に関する会議を内外の研究者を集めて、TCCI と CCMS が共同し、第三部会が取りまとめ部会となつて第一部会、第二部会、第四部会とも連携して開催する。CMSI 外では分子シミュレーション研究会ほかと共催する予定である。

2. 産官学連携の促進

産業界においても計算シミュレーションを活用しようという動きも小さくはないが、大学等のアカデミックな分野での計算シミュレーションとのすれ違いがないとは言いきれない。本来、各々異なった目的の為に活動しているセクターなので、すれ違いがあるのは当然とは言えるが、両方の間で理解・意思疎通を改善していく不断の努力が必要であろう。この数年、経産省の研究開発プロジェクトが多く立ち上がっているが、その中でも、未利用熟活技術、エネルギーキャリア、構造部材、3D プリンタなど、非常に重視されている問題でありながら、大学人には広く認識されていない問題が少なくない。今後の CMSI 産官学連携活動においては、こういった産業界と大学の間の認識のギャップが大きく残っている問題に着目して、連携促進を深堀して行く。

1) 平成 26～27 年度の実施計画と目標

上記のような問題を CMSI 産官学連続研究会で取り上げると同時に、企業側から提案を募ってテーマを定める研究会も同数回程度開催したい。これらのテーマ設定だと、自ずと、大学側からの参加者が少なくなる傾向が心配されるが、これは CMSI の基幹行事の一つであるので、CMSI 執行部の強い指導で課題代表者には参加を義務づける等の措置があってもしかるべきかと考えている。

2) 平成 26 年度の具体的な実施計画

i) 産官学連続研究会

企業側から企画の連続研究会1～2回と、アカデミアが企画の連続研究会1～2回程度開催したいと考えている。これらの研究会の後、その内容、講演と質疑の様子を広報誌トレントで紹介すると同時に、研究会後に講演者へのインタビューを行い、インタビュー記事もトレントに掲載する。これにより、より広範な読者に計算シミュレーションの産業普及活動の現状とその問題について認識共有をはかる。

ii) 産官学連携環境整備・コンソーシアム検討

個別の応用テーマに限れば、計算シミュレーションに関するコンソーシアムの立ち上げ例は幾つかあるが、CMSI 全体が関わられるようなコンソーシアムは実現が容易ではない。その中で CMSI がコンソーシアム形成にどう関わって行くかという観点から、計算シミュレーションが関わっている幾つかのコンソーシアム等の事例に関して、調査する。その結果を、広報誌トレントへの掲載などを通じて CMSI コミュニティで共有する。

iii) 産官学研究拠点としての活動

CMSI において製作、運営しているアプリケーションのポータルサイト「MateriApps」におけるコンテンツ作成を担当する。これまでのアプリケーションの紹介に加えて、計算手法ごとの特集記事、アプリケーション講習会に関する記事等をさらに充実させていく。平成 25 年度から始めた CMSI のブース出展は計算物質科学アプリケーションの開発者、利用者双方の要望を集めるとともに、産官学にわたるアプリケーション普及活動の貴重な機会となっており、平成 26 年度においても応用物理学会、日本物理学会におけるブース出展およびアンケート収集を物性研究所と協力して行う予定である。社会人教育を念頭に置き、平成 25 年度に構築したテレビ会議システムを利用して、産総研でも配信講義「CMSI 計算科学技術特論」の配信を予定している。この配信講義については物性研と協力して CMSI の Web サイト上に、資料および動画を「Web 講習会」としてまとめる予定である。

2. 2. 2. 2(4) 研究成果の普及

1) 平成 26～27 年度の実施計画と目標

科学技術の振興、および国際競争力の向上のためには、従来から行なわれてきた学術的な研究成果の普及だけでなく、開発されたソフトウェアや蓄積されたノウハウを公開し、企業・実験研究者へ普及することが不可欠である。計算物質科学は、その基礎理論自体が多層構造をなしており、それぞれのレベルにおける方法論が非常に多岐にわたり、かつそれぞれが相補的に発展してきたことが大きな特徴の一つである。このような計算物質科学の特性、歴史的経緯をふまえると、単なる共通シミュレーションソフトウェアの整備・公開だけではなく、ソフトウェア公開を促す環境づくりなど、より総合的な普及活動が必要であると考えられる。平成26年度以降は平成25年度までの議論を踏まえ、以下の広報活動をすすめていく。

2) 平成 26 年度の具体的な実施計画

i) 広報誌の発行

広報誌 TORRENT は、これまで 1～9 号まで発刊した。平成 25 年度は 10、11 号を、平成 26 年 9 月および平成 27 年 1 月に刊行する予定である。「アプリケーション開発の最前線から」をシリーズとして継続し、MateriApps の利用にもつなげる。「卒業生を訪ねて」もシリーズとして続け、計算物質科学の社会への浸透や貢献等をアピールする。また、CMSI の拠点紹介は最終回となるが、東大物性研の紹介を行う予定。イベントの開催報告、分野を超えた取り組みや国際交流など、時節に合った特集を組む予定。より幅広い方々に手に取って読んでいただける内容としていく。

ii) ソフトウェア開発・公開のサポート

物質科学シミュレーションのポータルサイトMateriAppsを中心に、計算物質科学コミュニティ向けに、ソフトウェアの開発・公開をサポートする環境として、スーパーコンピュータシステム、コンパイラ、ライブラリ、並列化、チューニング、講習会、ソフトウェアのソースコード管理システム、ドキュメント作成ツールなどに関する情報提供と、整備の支援を行う。また、MateriApps、MateriApps LIVE!を利用して、元素戦略プロジェクトや大規模実験施設などの実験家への計算物質科学アプリケーションの普及にも努めていく。

平成26年度も引き続き、物質科学シミュレーションのポータルサイトMateriAppsの整備を行う。収録するアプリの件数を増す同時に、個々のアプリの情報の充実する。MateriApps LIVE! USBへの収録アプリを増やし、主要学会における展示会やアプリ講習会などにおけるUSBの配布、主要スパコンへのMateriAppsアプリのインストールなどを通じ、MateriAppsアプリの使用環境のさらなる充実を図る。さらに、ソフトウェアの開発・公開をサポートする環境として、MateriAppsあるいはCMSI web上で、ドキュメント作成ツール、ライセンスなどに関する情報提供の提供を行う。

iii) ホームページにおける情報発信

平成 25 年度にリニューアルした CMSI Web および Torrent Web 内のリンク切れ、タグ付けなどを細部にわたり確認し完成度を高める。情報発信をタイムリーに行い、来訪者が迅速にかつ迷いなく目的のコンテンツに辿り着けるようにする。メールマガジン“CMSI 週刊ニュース”や Facebook とも連動させ、訪問者数を増やすよう努める。終了したイベントの開催報告を掲載し、イベントに参加しなかった方たちの参加意欲を高めるよう工夫をする。研究成果ページでは常に最新の成果を掲載し、プレスリリース情報などをリアルタイムで掲載し、研究の推進をアピールする。受賞に関するニュースを漏れなく取り上げ、研究者個人にもスポットライトを当てる。

iv) シミュレーション結果の公開

学術論文や国際学会における最終的な学術的成果の発表だけでなく、シミュレーションの結果(一次データ)の保存・共有・公開する仕組みについて検討を行い、個々の研究者によるデータ公開をサポート・促進する。また、公開ソフトウェアを利用して行った研究の実例(スーパーコンピュータにおけるソフトウェア実行例から、データ解析、論文発表まで)をホームページ上で積極的に紹介する。これにより上記「MateriApps」の機能が補完され、CMSI発のソフトウェアの企業・実験研究者へのより一層の普及が期待される。また、シミュレーション結果の可視化技術の強化を進めるため、講習会、研究会を開催する。また、平成25年度に導入した3Dプリンタの活用を進め、シミュレーションにより得られた分子構造や、電子状態などの可視化の可能性を検討する。

v) 広報イベント・会議

8月23～24日にAICS・RIST主催の「未来をひらくスーパーコンピュータ ～「京」からその先へ 限りなき挑戦～」に出展予定。講演会では、メタンハイドレードに関する発表を行い、ブースでは講演内容と連動させて3D映像などを活用する予定。その他、10月にAICS一般公開および東大柏キャンパス一般公開においてブースを出す予定。

vi) 展示会への出展

CMSI活動を海外にもアピールするため、6月22日～26日(展示は、23日～25日)に開催されるISC14(開催地:ドイツ ライプチヒ)のAICSブースにてポスター展示を行う。同様に、11月16日～21日(展示は、17日～21日)のSC14(開催地:米国ルイジアナ州ニューオーリンズ)にて、東京大学情報基盤センターと共同出展する予定。また、平成27年3月に第3回見える化シンポジウムを開催予定。その他の学会関連の展示会なども、MateriAppsの普及など必要に応じて積極的に出展を検討する。

2. 2. 2. 2(5) 分野を超えた取り組みの推進

1) 平成 26～27 年度の実施計画と目標

これまでは、他の戦略分野、および、元素戦略プロジェクトや大型研究施設との連携シンポジウムを実施してきた。プロジェクトも後半となり、今年度からは、成果の普及として一般の実験研究者および、産業界への計算物質科学アプリケーションソフトウェアの普及を目的とし、単にイベント開催やアプリ講習会の実施だけでなく、アプリ利用者のニーズに対してアドバイスやコンサルティング等で応えられる仕組みの構築を目指す。

2) 平成 26 年度の具体的な実施計画

i) 計算科学研究機構との連携 (AICS ブースでの展示協力)

理研計算科学研究機構で開催されている共通基盤研究ワークショップ、AICS Café などへの参加、あるいは CMSI が神戸拠点で開催している「京」物性セミナーへの計算科学研究機構研究チームからの参加などを通じて、研究チームとの研究交流・連携を図る。また、2014年6月にドイツ・ライプツィヒで開催される iSC14、11月に USA・ニューオーリンズで開催される SC14における計算科学機構のブース出展に協力し、CMSI の研究活動・分野振興活動に関するブース展示、京を用いた最先端の研究成果や MateriApps などに関するブースプレゼンを行う。

ii) 他の戦略機関との連携

①第4回 HPCI 戦略プログラム分野 2×分野 5 異分野交流研究会

第3回に引き続き、東京近郊又は神戸近郊にて、平成26年10月以降に開催予定。主題は未定。

ii) 実験研究者との連携

学界においても、産業界においても、実験研究者はリアルな物質、材料を用いて研究を実施している。計算科学は実験の結果に理論を付加し、かつ、次の実験に対する指針や予測の情報を与えるツールとして必ず活用しうるものである。PC で動作する計算物質科学アプリケーションパッケージである“MateriApps LIVE!”を用いた普及イベントを実施し、広く一般の実験家にアプローチする。また、元素戦略プロジェクトや大型研究施設との連携活動は引き続き継続し、連携による具体的な成果創出とともに、新たなニーズを引き出して次の開発につなげる。

2. 2. 2. 2(6) 戦略分野の研究者を支える研究支援

1) 平成 26～27 年度の実施計画と目標

大規模並列計算は、計算機の特性を把握しながらアプリケーションを高度化する必要があるため、個人や個々の研究グループだけで対応するのは困難を伴う。大規模並列計算を戦略分野の研究者に普及発展させるためには、計算資源を有する機関がその計算機の特性を考慮しながらアプリケーションの高度化に対する支援活動を行うことが望ましい。平成23年度より、神戸計算科学研究機構内にCMSIの神戸拠点として東大物性研究所の分室を設置した。CMSI神戸拠点には、合計6名のスタッフが常駐し、滞在中の研究者との間で京に関する情報交換を行い、それを蓄積し継承していく。また、CMSI共同利用の計算資源を有する、物性研、分子研、金研、および、神戸拠点に支援のための要員である拠点研究員を配置し戦略課題に広く役立つ並列計算アプリの高度化と、そのアプリの利用環境を整備する。

2) 平成 26 年度の具体的な実施計画

i) 研究支援拠点の整備

平成 23 年度より、神戸計算科学研究機構内に CMSI の神戸拠点として東大物性研究所の分室を設置し、京の利用に関する、物性、分子、材料計算科学研究者の支援活動をスタートしている。平成 23 年度中に 2 名の特任教員、平成 24 年度中に 1 名、更に平成 25 年度中に 1 名の特任研究員が神戸計算科学研究機構内を勤務地として雇用され、平成 26 年度も継続して常駐し、京の利用の支援、あるいは計算科学研究機構の共通基盤研究や分野融合研究等の連携を進める。平成 26 年度の研究支援は、神戸計算科学研究機構内の CMSI 神戸拠点に、東大物性研常勤スタッフとして教員 1 名(平成 26 年雇用予定)、研究員 1 名、事務補佐員 2、神戸大常勤スタッフとして教員 1 名、研究員 1 名の、合計 6 名が常駐する体制となる。また、京や HPCI における高度化のスキルを持つ RIST と協力し、神戸教員による「高度化コンサルティング」、神戸教員あるいは計算科学研究機構の研究チームとの共同研究、情報交換会、アプリケーション利用者講習会などを通じて、研究者のための研究・開発環境、情報交換・交流環境の整備を進める。

ii) 「京」・HPCI 利用者の支援

京の利用は、戦略プログラム利用枠の中の重点配分枠、一般配分枠、あるいは一般利用枠を通じた利用となる。この内、重点配分枠については、CMSI の重点課題の中から、「京」の能力を最大限利用しなければできない大規模計算であって、早期に画期的な科学的成果又は社会的課題の解決に資する成果が上げられると特に期待されるもの選出し、優先課題候補とする。また、戦略プログラム利用枠のうち一般配分枠は、優先課題外の重点課題による利用が主となるが、その一部を「計算各推進体制の構築」のための枠として確保し、特別支援課題・支援課題のアプリケーションの高度化、一般利用枠への申請のための準備、あるいは拠点研究員による新しいアルゴリズムの開発に役立てる。

アプリケーションの高度化の支援については、高度化のスキルを RIST と協力し、オンサイトの支援体制を継続すると同時に、メールベースでの Q&A 対応、「京」以外の HPC システムにおけるアプリケーション導入、利用、高度化支援も行う。

iii) 拠点研究員による支援

[拠点研究員についての総括・予定]

拠点研究員の必要人数は、その分野のコミュニティで大規模化を目指す研究者やグループが扱うアプリケーションの数にほぼ比例する。平成26年度については、物性分野7名、分子化学分野10名、材料科学分野1名の配置を予定している。物性分野は主として物性研と神戸拠点、分子化学分野は主として分子研、材料科学分野

は主として金研に配置予定である。

拠点研究員は、ある特定の研究課題に取り組む研究員とは異なり、戦略課題に広く役立つ並列計算アプリの高度化と、そのアプリの利用環境を整備することが主たる役割であるが、特に重点を置くミッションによって、以下の4つのカテゴリに分類する。

- (A) 分野共通に利用できる先端的な要素技術の開発
- (B) 分野共通に利用できるアプリケーションの公開(アプリ開発、マニュアル・GUI整備)
- (C) 複数の重点支援課題(サブ課題)におけるアプリケーション開発・実行支援
- (D) アプリケーション公開・普及支援(ポータルサイト開発・運営、ライセンス管理)

(A)は次々世代スパコンのためのアプリ開発技術にもつながるような先端的並列化アルゴリズム、技法の開発に関するもので、分野の並列計算技術開発の牽引力となることが期待される。(B)はプロジェクトにおけるアプリ開発を支援するとともに、開発されたアプリを多くの研究者・開発者が利用できるような形式に整備するもので、計算物質科学分野の並列計算テクニックをより広い範囲の研究者や開発者に向けて展開することを目指す。(C)はアプリ開発(高度化)に関するもので、研究を推進する研究者、および、研究グループの利用する具体的なアプリケーションに対する支援が主となる。異なるアプリを支援する要員間のコミュニケーションや、複数のアプリ高度化の経験によりノウハウを蓄積していくことで、支援のレベルをアップすることが可能となる。(D)はアプリの利用環境の整備に関するもので、複数のユーザが利用している、もしくは利用しうるアプリケーションの開発強化、および、公開が、その業務となる。戦略分野への普及を促進するために、アプリ開発者と連携してマニュアルの整備や使い勝手の向上、利用環境の整備、付加機能ソフトの追加、ポータルサイトMateriAppsの開発・整備等を担う。実験研究者からのシミュレーション依頼への対応等も視野にいれ、計算物質科学アプリケーションのユーザ数増加を目指す。

[カテゴリ A の拠点研究員活動]

固有値ソルバの統一インターフェース Rokko, 量子格子模型の汎用な厳密対角化パッケージ Barista を必要に応じて改良し、マニュアル作成、論文発表、MateriApps 等による広報を行う。テンソルネットワーク法に対する、大規模並列化実装、量子情報理論からの貢献を模索する。疎行列向け固有値解法の数理的原理、並列化実装について文献調査を行う。調査結果は、AICS 今村チームとの打ち合わせを通じて共有し、理解を深める。神戸ハンズオンにおいては、実習のサポートを継続するほか、バージョン管理システム、Rokko をテーマとする回の講師を勤める。若手技術交流会の幹事として、可視化、演算加速器の実習の企画、サポートを行う。
(坂下拠点研究員)

25年度に引き続き、様々な量子系の基底状態を効率的に計算できるテンソルネットワーク法の開発を進める。26年度は特に、大規模並列化に向けたアルゴリズムの改良を進めると共に、開発したプログラムを用いた最先端の物性研究にも注力する。また、大規模並列化とチューニングをほぼ終えた、古典スピン模型のモンテカルロ法のプログラムを用いた、二次元スピン系におけるトポロジカル欠陥が引き起こす相転移の可能性についても、さらなる研究を進める予定である。(大久保拠点研究員)

iv) 講習会、交流会等の開催

①若手技術交流会合宿

拠点研究員は、CMSI 若手技術交流会を自ら企画・実施する。平成 25 年度は 2 回の実施を計画している。技術交流会では、講師を招いた勉強会・実習、進捗状況報告、並列化・高度化に関する情報交換を通じ、CMSI 外の若手も含め計算物質科学研究者の技術の向上・共有、分野共通アプリケーションの育成と普及を図り、分野振興を進める。全体の取りまとめは、神戸拠点の教員が担当する。今年度の予定を以下に示す。

・第10回 CMSI 若手技術交流会

(2014 年 7 月 7 日～9 日 CMSI 神戸拠点 (計算科学研究機構内))

計算科学分野における研究成果の社会還元に対する社会的要求に対応する人材を育成するため、計算結果の可視化技術に重点を置いた講習および実習を行う。可視化の並列化技術に関する講義および、フリーの汎用可視化プログラムである ParaView を使用する実習などを行う。また、人材育成と企業連携に関連し、未来ものづくり研究所の宮野氏および、フューチャーラボラトリの橋本氏に講演して頂く。

・第11回 CMSI 若手技術交流会(2015 年 2 月頃 未定)

これまで「京」のために培ってきた技術や経験、プログラム資産を、後に続く次世代ハイパフォーマンスコンピュータ(HPC)へスムーズな移行を可能にするため、次世代 HPC アーキテクチャの仕様に関する講習を企画している。また、新たな参加者も増えてきたこともあり、次世代機の理解の前提となる「京」に代表される既存コンピュータのアーキテクチャに関する復習を合わせて行う。実習では、昨年に引き続き、次世代 HPC で重要になることが予測されている並列演算加速機を用いるプログラミングを中心に行う。

②「京」一般利用情報交換会

平成 27 年度「京」一般利用申請へ向けた情報交換、共有を目的として、「京」一般利用情報交換会を6月に開催する。情報交換会では、これまでの「京」一般利用採審査基準と採択率等に関する統計情報、すでに「京」の一般利用を進めているユーザからの京利用に関するノウハウの紹介、CMSI の HPCI 利用促進支援活動が紹介など、高度化支援に関する要望調査やディスカッションを通じて、一般利用に向けた情報の共有が促進を図る。

③平成 26 年度「京」物性セミナー

神戸理研 AICS 内外での分野間交流、連携を進めるために、平成 24 年度から CMSI 神戸拠点が主体となって「京」物性セミナーを企画・開催している。平成 26 年度も計 6 回のセミナーを予定している。計算物性物理の研究者だけでなく、幅広い分野から様々なテーマでの講演を通じて、より一層の分野間の交流・連携を図る。

④ CMSI 神戸ハンズオン(アプリケーション講習会)

分野 2 で開発されている分野共通アプリケーション、ツールの普及を図り、多層的なユーザを育てていくことを目指し、平成 24 年度より CMSI 神戸拠点において定期的なアプリケーション講習会「CMSI 神戸ハンズオン」を開始している。平成 26 年度も合計で10回程度の講習会を開催する。

⑤ CMSI アプリ高度化合宿 “TOKKUN!”

これまで行ってきた TOKKUN!の内容を、「京」一般利用、若手利用採採択に向けたアプリ高度化支援だけではなく産業利用の支援に広げ、平成 26 年度は 2 回開催を予定している。高度化支援では、すでに「京」で大規模並列計算プログラムを開発した研究者と RIST の支援チームが、「京」もしくは FX10 を用いて参加者のアプリの解析と問題点の特定、解決方法の提案をする。毎日夕方に成果発表の時間を設定し、参加者間で高度化に関する情報共有を図り、効率的に作業を行う環境も整える。産業利用支援では、MODYLAS、FMO、OpenMX など「京」で大規模計算が行われている CMSI アプリの開発者が個別相談を受け付ける。

2.3 活動(運営委員会等の活動等)

(1)委員会活動

CMSI の委員会活動の仕組みを説明する。CMSI 全体にかかわる検討を要する事項は、必要に応じて拠点代表者会議で検討して議案を作成し、企画室会議にて審議、検討を行っている。重要事項に関しては、運営委員会、運営協議会で審議し、決定される。また、迅速な判断を要する案件に関しては、必要に応じてローカルな検討会議を行って議案を作成し、運営委員会、および、運営協議会メンバーに対するメール審議を行い、決定している。人事採用関連の審議は、関連した書面を運営委員会、および、運営協議会メンバーに郵送し、郵送投票にて採用の承認を取っている。

平成 25 年度に開催した、CMSI 全体の各種委員会等の一覧を表 2.3-1 に示す。平成 25 年度は中間評価を実施する時期であるため、これまで実施してきた活動を振り返り、研究課題等の見直すための会議を2回実施した。とくに、エネルギー関連の課題に関しては、2 回の WG を設けて議論し、現状の課題や取り組み方を再検討した。また、見直し会議には分野2マネージャーと分野2作業部会のメンバーにも参加いただき、幅広い視点からの意見をいただいた。10 月には分野 2 作業部会、12 月には HPCI 戦略プログラムの中間評価委員会にて、中間評価委員会が実施された。また、戦略課題小委員会各部会活動、および、スパコン連携、人材育成・教育、産官学連携、広報の各小委員会に関しては、必要に応じて小委員会の代表者が会議を開催し、イベント等に関する企画立案、および、実施の打合せを行っている。

各戦略拠点である、CCMS、TCCI、CMRI では、運営委員会をはじめ必要に応じた委員会を開催し、分野振興に努めた。表 2.3-2 に、各拠点で開催した委員会等の一覧を示す。

また、計算物質科学アプリケーションのポータルサイト“MateriApps”は開発チームを形成し、表 2.3-3 に示す通り、精力的に会合を重ね、本サイトを作成した。

表 2.3-1 CMSI 平成25年度委員会活動

CMSI（計算物質科学イニシアティブ）平成25年度委員会活動一覧				
月日	場所	担当	行事名	参加人数
会議・小委員会・WG				
5月2日	東京大学本郷キャンパス理学部	エネルギーWG	H25年度第1回CMSIエネルギーワーキンググループ会議	17
7月11日	TV会議 (東北大・東大・分子研・阪大豊中)	CMSI人材育成・教育 拡大小委員会	第1回CMSI人材育成・教育小委員会	21
7月16日	TV会議 (東大物性研・分子研・CMSI神戸分室)	第1部会	第1部会分子課題見直し意見交換会	9
8月21日	東京大学本郷キャンパス理学部	エネルギーWG	H25年度第2回CMSIエネルギーワーキンググループ会議	29
8月21日	東京大学本郷キャンパス理学部	CMSI委員	CMSI合同委員会	32
8月21日	東京大学本郷キャンパス理学部	CMSI委員	CMSI課題見直し意見交換会	35
10月4日	TV会議 東京大学物性研究所 (神戸分室、本郷キャンパス、 分子研、名大、東北金研)	CMSI人材育成・教育 拡大小委員会	CMSI国際シンポジウム・サテライト打ち合わせ	16
10月8日	文部科学省東館	作業部会（分野2）	第5回HPCI戦略プログラム作業部会（分野2）	13
10月23日	東京大学本郷キャンパス理学部	小委員会連携WG	計算基礎科学研究推進体制構築に関する分野5との意見交換会	13
12月4日	文部科学省東館	HPCI戦略プログラム中 間評価委員会	HPCI戦略プログラム中間評価委員会	2
12月12日	東京大学柏キャンパス物性研究所	運営委員会	CMSI運営委員会	24
12月13日	東京大学柏キャンパス物性研究所	第1部会	CMSI第1部会小委員会	5
12月13日	東京大学柏キャンパス物性研究所	第2部会	CMSI第2部会小委員会	7
12月13日	東京大学柏キャンパス物性研究所	第3部会	CMSI第3部会小委員会	7
12月13日	東京大学柏キャンパス物性研究所	第4部会	CMSI第4部会小委員会	3
12月13日	東京大学柏キャンパス物性研究所	第5部会	CMSI第5部会小委員会	5
12月13日	東京大学柏キャンパス物性研究所	CMSI人材育成・教育 拡大小委員会	第2回CMSI人材育成・教育小委員会	9
1月24日	東京大学本郷キャンパス理学部	企画室	CMSI企画室会議	20
3月1日	東京大学柏キャンパス物性研究所	運営協議会	CMSI運営協議会	11

表 2.3-2 各分野拠点における平成25年度委員会等の活動

各分野拠点における平成25年度委員会活動等一覧				
月日	場所	担当	行事名	参加人数
東京大学物性研究所 計算物質科学センター（CCMS）				
11月19日	東京大学柏キャンパス物性研究所	CCMS	H25年度第1回CCMS運営委員会	8
12月13日	東京大学柏キャンパス物性研究所	CCMS	H25年度第2回CCMS運営委員会	8
自然科学研究機構 分子科学研究所 計算分子科学研究拠点（TCCI）				
4月18日	自然科学研究機構分子実験棟 +TV会議（名大）	TCCI	基盤ソフトの維持管理に関するTV会議	3
6月1日	自然科学研究機構分子実験棟	TCCI	TCCI第8回運営委員会	10
8月8日	TV会議 (分子研・名大・理研AICS・京大化研)	TCCI/CMSI	CMSI第3部会課題代表者TV会議 第1回目	5
8月19日	TV会議 (分子研・名大・早大)	TCCI/CMSI	CMSI第3部会課題代表者TV会議 第2回目	4
9月11日	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター	TCCI	人事検討委員会	3
10月4日	TV会議 (名大・理研AICS・分子研)	TCCI	TCCIソフトウェアライブラリ部門 TV会議	7
10月31日	自然科学研究機構計算センター +TV会議（京大・理研AICS）	TCCI	基盤ソフト維持管理についての説明会	9
12月9日	WEB会議（東大院総合文化・名大・京大・分子研・兵庫県立大）	TCCI	TCCI社会連携委員会	6
1月31日	名古屋大学野依記念学術交流会館	TCCI	TCCI第9回運営委員会	11
東北大学 金属材料研究所 計算材料科学研究拠点（CMRI）				
4月19日	東北大学金属材料研究所	CMRI	第1回運営委員会	9
5月15日	東北大学金属材料研究所	CMRI	教育拠点に関する打合せ	3
10月18日	東北大学青葉山キャンパス合同B棟	CMRI	テレビ会議システム導入に関する打合せ	5
11月29日	東北大学金属材料研究所	CMRI	第2回運営委員会	10
11月29日	東北大学金属材料研究所	CMRI	人事選考委員会	3
1月6日	東北大学金属材料研究所	CMRI	CMRI International Symposium 2014合同打合せ	6

表 2.3-3 MateriApps(物質科学シミュレーションのポータルサイト)関連会議

MateriApps (物質科学シミュレーションのポータルサイト) 運用活動一覧				
月日	場所	担当	行事名	参加人数
5月23日	東京大学柏キャンパス 物性研究所	CMSI	【MateriApps】第1回全体ミーティング	11
6月6日	東京大学柏キャンパス 物性研究所	CMSI	【MateriApps】第2回全体ミーティング	10
6月11日	東京大学柏キャンパス 物性研究所	CMSI	【MateriApps】第3回全体ミーティング	11
6月24日	東京大学柏キャンパス 物性研究所	CMSI	【MateriApps】第4回全体ミーティング	7
7月11日	東京大学柏キャンパス 物性研究所	CMSI	【MateriApps】第5回全体ミーティング	11
7月18日	東京大学柏キャンパス 物性研究所	CMSI	【MateriApps】第6回全体ミーティング	8
7月31日	東京大学柏キャンパス 物性研究所	CMSI	【MateriApps】第1回Webシステムミーティング	6
8月5日	東京大学柏キャンパス 物性研究所	CMSI	【MateriApps】第7回全体ミーティング	8
8月9日	東京大学柏キャンパス 物性研究所	CMSI	【MateriApps】第1回Webコンテンツミーティング	5
8月22日	TV会議 東京大学柏キャンパス 物性研究所 (CMSI神戸分室)	CMSI	【MateriApps】第2回Webシステムミーティング	5
8月23日	TV会議 東京大学柏キャンパス 物性研究所 (本郷キャンパス 工学部)	CMSI	【MateriApps】第2回Webコンテンツミーティング	7
8月29日	TV会議 東京大学柏キャンパス 物性研究所 (本郷キャンパス 工学部)	CMSI	【MateriApps】第8回全体ミーティング	9
9月6日	東京大学柏キャンパス 物性研究所	CMSI	【MateriApps】第3回Webシステムミーティング	5
9月6日	東京大学柏キャンパス 物性研究所	CMSI	【MateriApps】第3回Webコンテンツミーティング	7
9月19日	東京大学柏キャンパス 物性研究所	CMSI	【MateriApps】第9回全体ミーティング	11
10月7日	東京大学柏キャンパス 物性研究所	CMSI	【MateriApps】第4回Webコンテンツミーティング	7
10月15日	東京大学柏キャンパス 物性研究所	CMSI	【MateriApps】第4回Webシステムミーティング	7
10月24日	東京大学柏キャンパス 物性研究所	CMSI	【MateriApps】第10回全体ミーティング	11
10月24日	東京大学柏キャンパス 物性研究所	CMSI	【MateriApps】第5回Webコンテンツミーティング	15
12月17日	TV会議 東京大学柏キャンパス 物性研究所 (CMSI神戸分室、分子研)	CMSI	【MateriApps運用支援】第1回全体ミーティング	11
12月17日	TV会議 東京大学柏キャンパス 物性研究所 (CMSI神戸分室、分子研)	CMSI	【MateriApps運用支援】第1回Webコンテンツ&システムミーティング	12
1月7日	TV会議 東京大学柏キャンパス 物性研究所 (CMSI神戸分室、分子研)	CMSI	【MateriApps運用支援】第2回Webコンテンツミーティング	9
1月10日	東京大学柏キャンパス 物性研究所	CMSI	【MateriApps運用支援】第2回Webシステムミーティング	7
1月21日	TV会議 東京大学柏キャンパス 物性研究所 (CMSI神戸分室、分子研)	CMSI	【MateriApps運用支援】第3回Webコンテンツミーティング	9
1月23日	TV会議 東京大学柏キャンパス 物性研究所 (東北大金研、分子研)	CMSI	【MateriApps運用支援】第2回全体ミーティング	13
1月23日	東京大学柏キャンパス 物性研究所	CMSI	【MateriApps運用支援】第3回Webシステムミーティング	6
2月6日	東京大学柏キャンパス 物性研究所	CMSI	【MateriApps運用支援】第4回Webシステムミーティング	6
2月13日	TV会議 東京大学柏キャンパス 物性研究所 (CMSI神戸分室、東北大金研、分子研)	CMSI	【MateriApps運用支援】第4回Webコンテンツミーティング	10
2月18日	TV会議 東京大学柏キャンパス 物性研究所 (東北大金研、分子研)	CMSI	【MateriApps運用支援】第3回全体ミーティング	13
2月18日	東京大学柏キャンパス 物性研究所	CMSI	【MateriApps運用支援】第5回Webシステムミーティング	6
2月25日	TV会議 東京大学柏キャンパス 物性研究所 (CMSI神戸分室、東北大金研、分子研)	CMSI	【MateriApps運用支援】第5回Webコンテンツミーティング	8
3月12日	TV会議 東京大学柏キャンパス 物性研究所 (東北大金研)	CMSI	【MateriApps運用支援】第6回Webコンテンツミーティング	8
3月12日	東京大学柏キャンパス 物性研究所	CMSI	【MateriApps運用支援】第6回Webシステムミーティング	6

2.4 実施体制

(1)CMSI 組織

HPCI 戦略プログラム分野 2 は、物性科学、分子科学、材料科学の 3 つの計算物質科学分野が融合した組織体制「計算物質科学イニシアティブ (CMSI)」で推進している。CMSI の運営には、3 つの研究機関(東京大学物性研究所／自然科学研究機構分子研究所／東北大学金属材料研究所)、9 つの教育機関(東北大学／東京大学／大阪大学／金沢大学／京都大学／神戸大学／名古屋大学／総合研究大学院大学／豊橋技術科学大学)、2つの産官学連携機関(物質・材料研究機構／産業技術総合研究所)が参画している(図 2.4-1)。代表機関は、東京大学物性研究所である。また、これらの機関に所属しているメンバーだけでなく、これらの機関と関連している機関に所属しているメンバーからCMSIの委員を選出し、図2.4-2の複数の小委員会と委員会より成る運営体制を整えている。平成 25 年度において、選出された委員の人数は、のべ 136 名、実質 99 名である。これらの委員は、組織として参加する 8 機関以外に 19 機関の合計 27 機関(19 大学、3 独立行政法人、5 企業)から選出されている。この CMSI 委員は「物性」「分子」「材料」の 3 分野から、コミュニティの人数比を考慮して選出している。平成 26 年度も基本的には同様の委員で構成する予定である。

研究担当者も含めた CMSI の活動全体とすると、参画機関は全 43 機関(31 大学、4 独立行政法人、8 企業)が関連しており、合計人数はのべ 240 人、実質 167 人となる。

平成 25 年度における実施体制を別表 1 に示す。実施体制-1～6 は、CMSI の運営や企画に関する CMSI の各種委員、実施体制-7～10 は、CMSI の研究課題を推進した研究担当者を記載している。CMSI で基底した運営規則に準じて、運営協議会、運営委員会、企画室、および、小委員会の活動が行われている。

i) CMSI 事務局

CMSI の運営をサポートするため、CCMS 内に CMSI 事務局を設置し、文科省、AICS 等との間で必要となる契約関連業務、本補助事業補助金の経理業務、CMSI 活動の企画、および、実行支援を行っている。また、AICS 内には CMSI 神戸事務局を設置し、CMSI 神戸拠点に関わる運営および事務業務をサポートしている。平成 23 年度の本格実施からは、東京大学が代表機関として文科省より補助金を請け、東京大学以外の機関との間で委託契約を結んで補助事業を実施することになった。そのため、本補助事業で人材を雇用する機関と研究委託契約を締結して事業を推進した。図 2.4-3 には、3 戦略機関、研究に携わる東京大学内の関連部局、委託研究契約を締結する機関、および、その他の補助事業参加機関、および、拠点の関係を示す。各小委員会の予算に関しては、CMSI 事務局に留め置き、必要に応じて請求を受けて利用していく形を取っている。

AICS とは、計算科学研究機構施設で居室を利用するにあたり、物性研、分子研、金研の 3 研究機関と計算科学研究機構の 4 者で覚書を締結している。

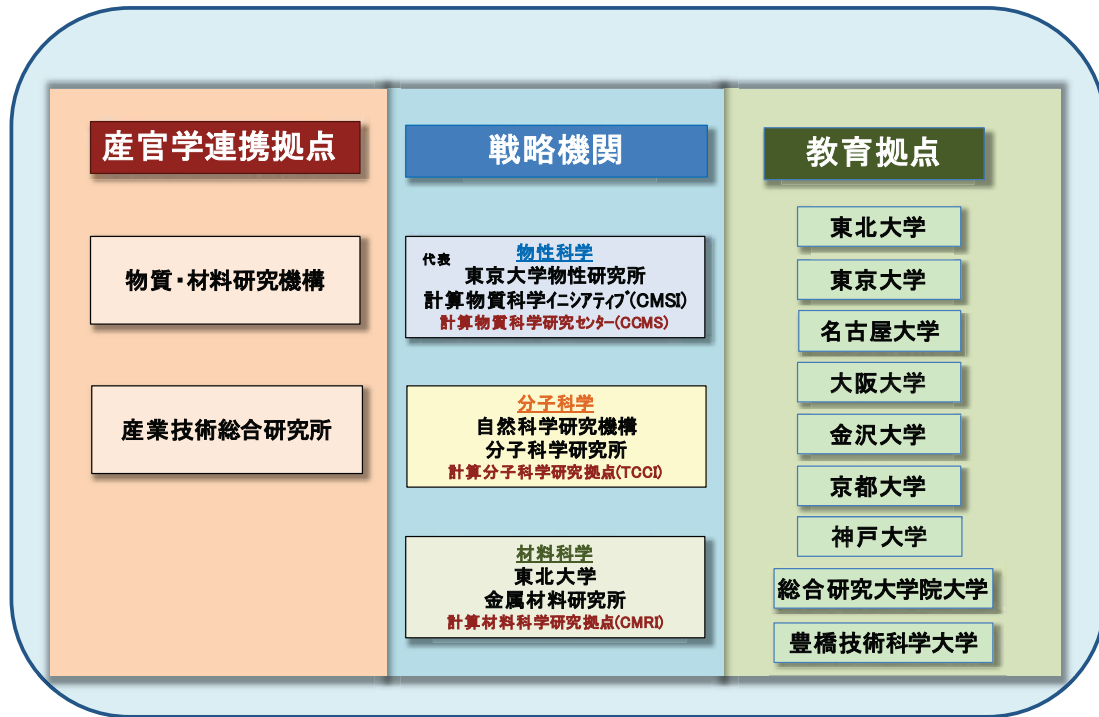


図 2.4-1 CMSI の運営に参加する機関

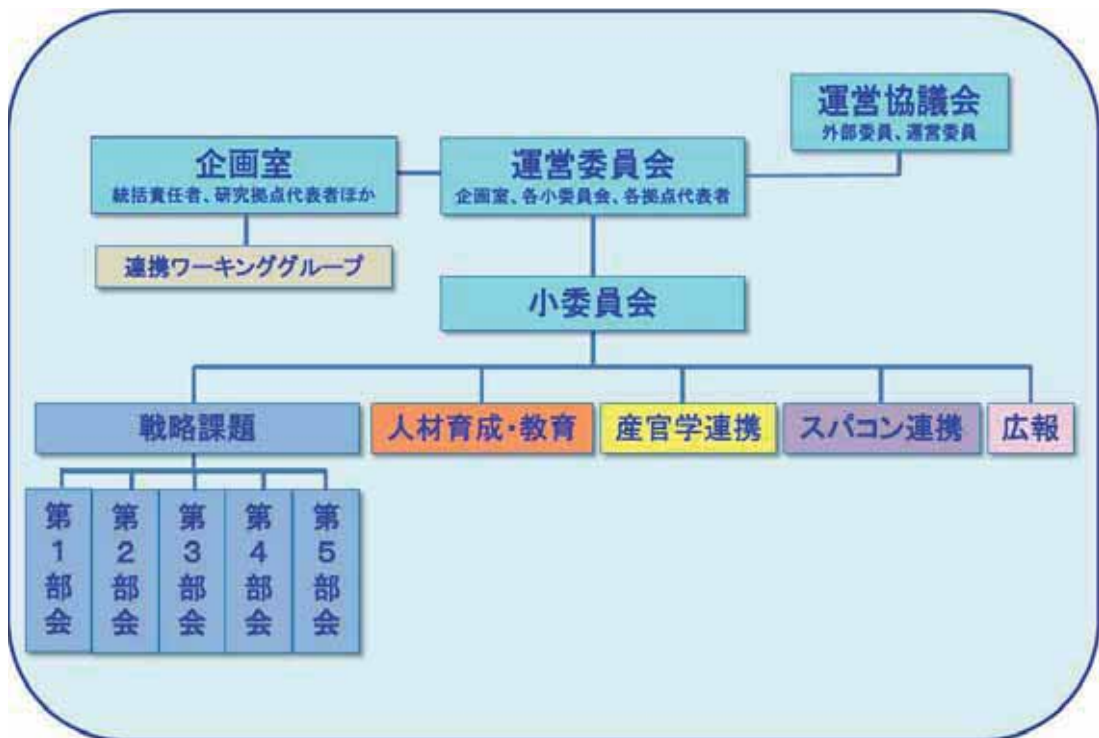


図 2.4-2 CMSI 運営体制

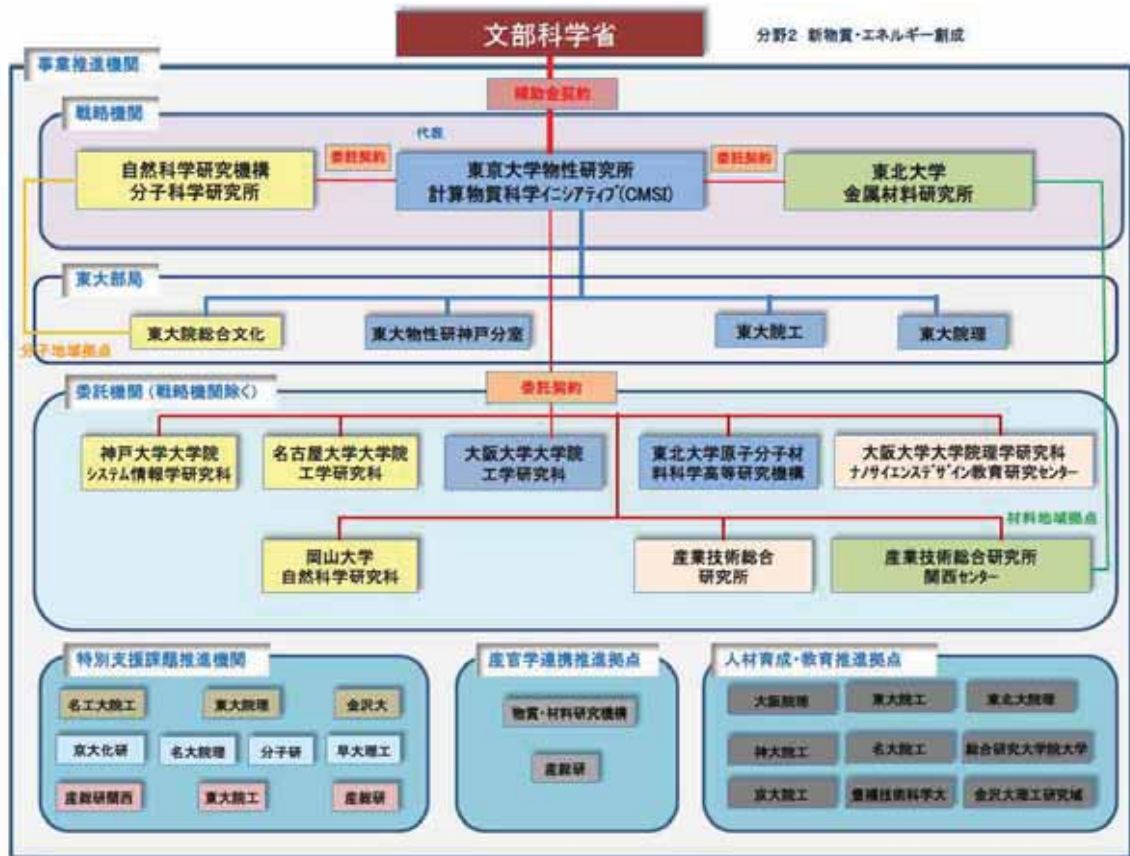


図 2.4-3 東京大学と委託契約を締結する機関、および、補助事業推進機関

ii) 計算物性科学研究センター(CCMS)

本センターは、国家プロジェクトとして開発されている大型汎用スーパーコンピュータ「京」の利活用をも念頭においた先端的計算物質科学の研究を推進するために 2011 年 4 月に設立された。従来からの物性研究所スパコン共同利用と連携し、更に並列度の高い計算を用いた先端的研究の推進、大規模並列ソフトウェア・アルゴリズムの開発とその普及などを通じて、直接的に計算物質科学の進展に寄与するとともに、次世代の計算科学の担い手となる人材の育成を目指す。本センターでは、スーパーコンピュータ「京」の計算物質科学利用枠や、物性研究所共同利用スパコンの大規模実行枠などを始めとする様々な計算資源を活用して、計算物質科学コミュニティの組織である計算物質科学イニシアティブ(CMSI)の活動を支援している。

また、本センターでは、スーパーコンピュータ「京」が設置されている神戸ポートアイランドの理化学研究所計算科学研究機構ビル内に分室を設けて、「京」を利用する物質科学研究者をサポートしている。分室では、利用者に対して、研究スペース、研究会・研修会への参加を通じた分野間交流の場、大規模並列化プログラミングに関する情報などを提供する

CCMSはCMSIの組織構成にならない、運営委員会の下にスパコン連携小委員会、人材育成・教育小委員会、産官学連携小委員会、広報小委員会を設置している。CMSIの運営委員メンバーとそれぞれの委員会の代表者を表2.4-1に示す。

表 2.4-1 CCMS 運営委員会メンバー(平成 25 年度)

役 割	氏 名	所 属
委員長	常行 真司	東京大学物性研究所
スパコン連携	川島 直輝	東京大学物性研究所
委員	高田 康民	東京大学物性研究所
委員	廣井 善二	東京大学物性研究所
委員	杉野 修	東京大学物性研究所
委員	野口 博司	東京大学物性研究所
広報	藤堂 眞治	東京大学物性研究所・大学院理学系研究科
委員	今田 正俊	東京大学大学院工学系研究科
委員	押山 淳	東京大学大学院工学系研究科
委員	高塚 和夫	東京大学大学院総合文化研究科
委員	川勝 年洋	東北大学大学院理学研究科
産官学連携	浅井 美博	産業技術総合研究所
委員	斉藤 峯雄	金沢大学理工研究域数物科学系
人材育成・教育	赤井 久純	東京大学物性研究所
委員	吉田 博	大阪大学大学院基礎工学研究科

iii) 計算分子科学研究拠点(TCCI)

平成 25 年度の推進体制を図 2.4-4 に示す。平成 24 年 10 月に、「元素戦略対応部門」と「ソフトウェア部門」を創設してから、基本的に変更はない。左側は、研究部門であり、特別支援課題、重点課題を支援するための組織である。支援を行う研究員・教員の配置を図 2.4-5 に示す。プロジェクト開始から3年間が経過したため、CMSI 研究員の配置については、平成 26 年度に向けて見直しを行った。

図 2.4-4 の右側が、TCCI としての執行部門であり、各先生にお願いして拠点として必要な活動を分担して頂いている(表 2.4-2)。その多くは、上部組織である CMSI の小委員会の機能に対応するもので、TCCI の責任者は、CMSI の委員も兼務して、CMSI と TCCI で風通しのよい活動をねらっている。特に執行の要となる運営委員会では、これらの執行部門と前記の部会の分子科学の責任者などから構成し、TCCI の運営に必要な審議・決定を行うようにしている。

平成 26 年度も同様な体制で推進する予定であるが、4月に急逝された兵頭志明氏の後任をどうするかについては、これから検討していきたい。

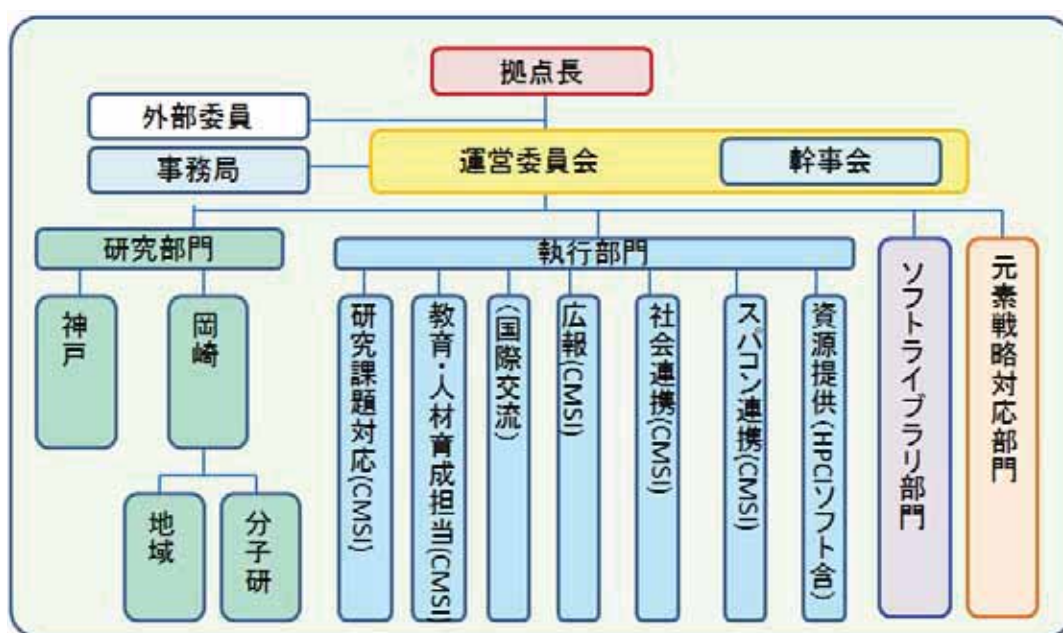
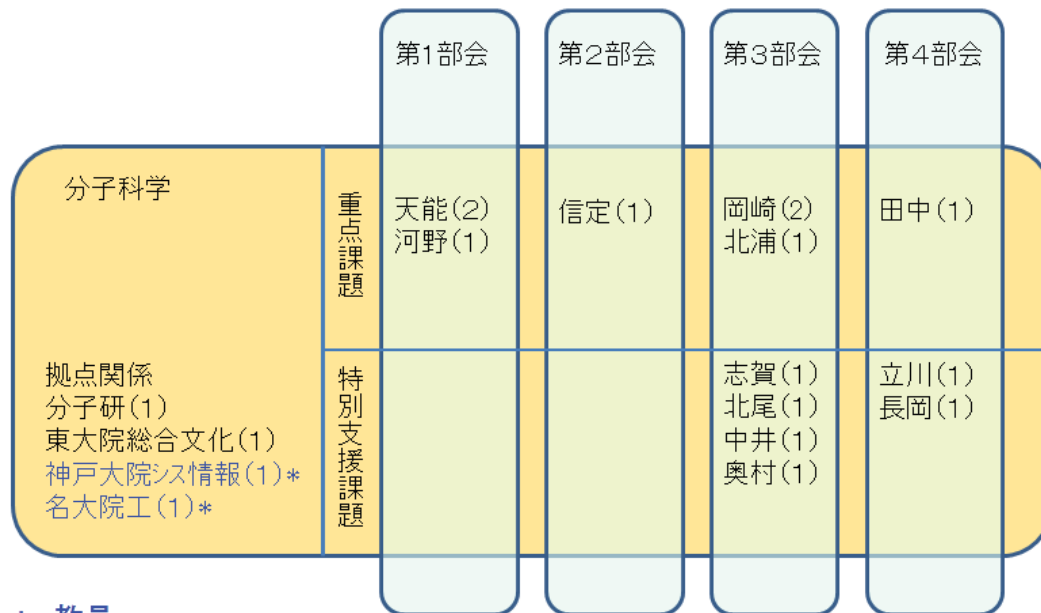


図 2.4-4 計算分子科学研究拠点(TCCI)推進体制



* : 教員

() 内は員数を示す(但し、着任予定を含む)。

図 2.4-5 TCCI における CMSI 研究員・教員の配置

表 2.4-2 TCCI における委員会など

会議体	委員(○委員長または責任者)
運営委員会 (3ヶ月に1回)	○高塚、天能、信定、岡崎、山下、長岡、関野、奥村、柳井、斉藤、江原、榊、佐藤、田中
幹事会(2ヶ月に1回) (運営委員会の一部)	○高塚、斉藤(主幹会議担当)、江原、榊、岡崎
外部委員	(未定)
事務局	榊、岡崎、石谷
人事検討委員会	○高塚、榊、斉藤、佐藤、岡崎、山下
教育・人材育成委員会	○信定、天能、長岡、関野、岡崎
国際交流	(未定)
広報	○柳井、松本
社会連携	高塚、榊、太田、岡崎、江原、佐藤
スパコン連携	○斉藤
資源提供	○江原
ソフトライブラリ部門	○岡崎、北浦、奥村、石村

iv) 計算材料科学研究拠点(CMRI)

計算材料科学研究拠点 CMRI(Computational Materials Research Initiative)は平成 23 年 4 月に東北大学金属材料研究所に設立され、計算材料科学の研究とこの分野の振興を図っている。平成 24 年度以降、物性科学分野の常行真司教授(東大理)、分子科学分野の高塚和夫教授(東大総合文化)に新たに運営委員を委嘱し、他のコミュニティとより緊密な連携を図っている。平成 25 年度は計 13 名の運営委員体制で諸活動の計画立案・運営に臨んだ。下の図 2.4-6 に組織図と表 2.4-3 に運営委員会構成メンバー名を示す。また、産業技術総合研究所関西センターに CMRI の関西拠点を設けている。

計算材料科学の研究の支援のために、拠点研究員 2 名枠があるが、重点課題の拠点研究員は関西拠点に配置したものの、金研の拠点研究員は人選後に本人の個人的な都合により雇用不可能(来日不能)となり、人件費の一部を返上した。また、東北大学は CMSI の教育拠点としての役割も担っており、教育・人材育成担当の特任准教授を平成 25 年 1 月より雇用(寺田弥生氏)、CMRI に常駐して拠点運営や諸々のイベントの企画・立案と実行にも携わっている。

拠点の運営は、年度初めの運営委員会で基本方針を決定し、国際会議参加の支援、計算センターの利用料金の支援、院生や若手研究員の海外派遣等に関してはメンバーの間で公募を行い、運営委員の間でメール審議を行って採択決定を行っている。その他の事業に関しても、運営委員の間でメールを中心に審議を行い、特に、年度途中の運営委員会では予算の執行状況や事業の実施状況などに関してチェックし、適正な執行と運営を図っている。

又、平成 25 年度からは、CMRI が中心となる第 5 部会が発足し、重点課題遂行者の補填、小規模研究会の多数の開催等を通じて、重点課題、特別支援課題の実施体制を強化した。平成 26 年度からは横浜国大に新たな拠点を設ける為、これに向けた拠点研究員の公募の準備を始め、種々の整備を行った。



図 2.4-6 CMRI 運営体制

表 2.4-3 CMRI 運営委員会メンバー(平成 25 年度)

氏 名	所 属	特記事項
毛利 哲夫	東北大学 金属材料研究所	拠点長
新家 光雄	東北大学 金属材料研究所	金研所長
古原 忠	東北大学 金属材料研究所	金研副所長
高梨 弘毅	東北大学 金属材料研究所	金研副所長
丸山 正彦	東北大学 金属材料研究所	金研事務部長
大野 かおる	横浜国立大学 大学院工学研究院	
尾方 成信	大阪大学 大学院基礎工学研究科	
川添 良幸	東北大学 未来科学技術共同研究センター	
香山 正憲	(独)産業技術総合研究所	
高塚 和夫	東京大学 大学院総合文化研究科	計算分子科学拠点 拠点長
田中 功	京都大学 大学院工学研究科	
常行 真司	東京大学 大学院理学研究科	戦略分野 2 統括責任者
松宮 徹	新日鐵住金株式会社	

iii) 計算分子科学研究拠点(TCCI)

平成 25 年度の推進体制を図 2.4-4 に示す。平成 24 年 10 月に、「元素戦略対応部門」と「ソフトウェア部門」を創設してから、基本的に変更はない。左側は、研究部門であり、特別支援課題、重点課題を支援するための組織である。支援を行う研究員・教員の配置を図 2.4-5 に示す。プロジェクト開始から3年間が経過したため、CMSI 研究員の配置については、平成 26 年度に向けて見直しを行った。

図 2.4-4 の右側が、TCCI としての執行部門であり、各先生にお願いして拠点として必要な活動を分担して頂いている(表 2.4-2)。その多くは、上部組織である CMSI の小委員会の機能に対応するもので、TCCI の責任者は、CMSI の委員も兼務して、CMSI と TCCI で風通しのよい活動をねらっている。特に執行の要となる運営委員会では、これらの執行部門と前記の部会の分子科学の責任者などから構成し、TCCI の運営に必要な審議・決定を行うようにしている。

平成 26 年度も同様な体制で推進する予定であるが、4月に急逝された兵頭志明氏の後任をどうするかについては、これから検討していきたい。

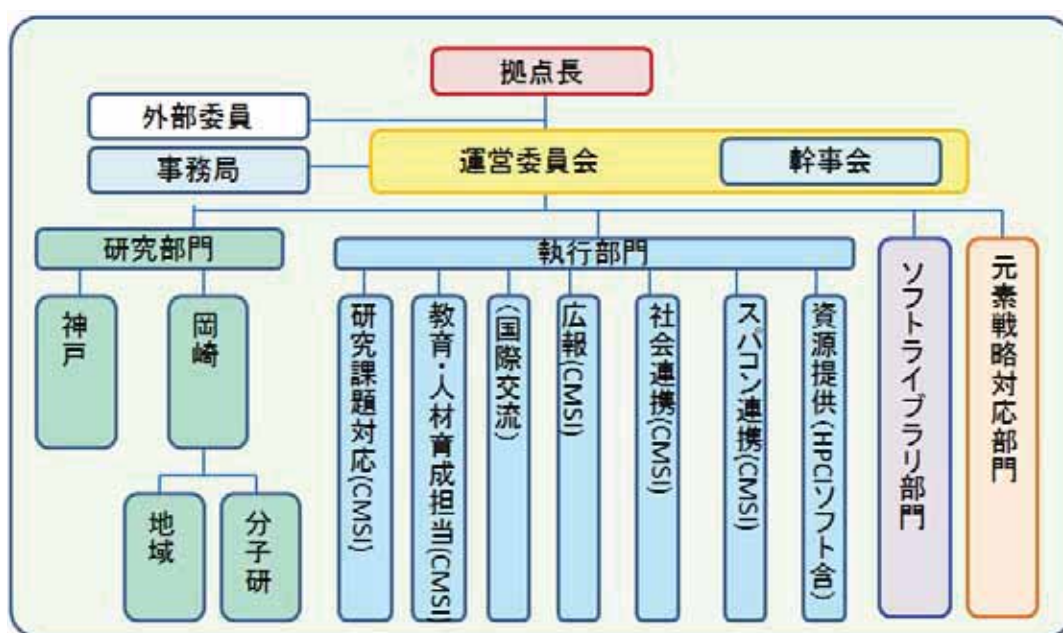
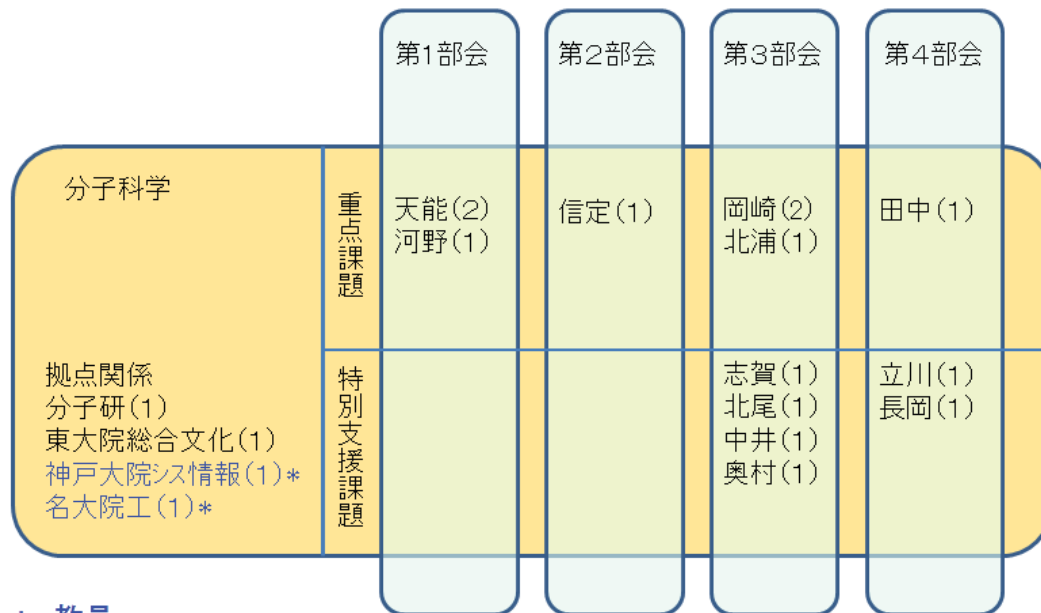


図 2.4-4 計算分子科学研究拠点(TCCI)推進体制



* : 教員

() 内は員数を示す(但し、着任予定を含む)。

図 2.4-5 TCCI における CMSI 研究員・教員の配置

表 2.4-2 TCCI における委員会など

会議体	委員(○委員長または責任者)
運営委員会 (3ヶ月に1回)	○高塚、天能、信定、岡崎、山下、長岡、関野、奥村、柳井、斉藤、江原、榊、佐藤、田中
幹事会(2ヶ月に1回) (運営委員会の一部)	○高塚、斉藤(主幹会議担当)、江原、榊、岡崎
外部委員	(未定)
事務局	榊、岡崎、石谷
人事検討委員会	○高塚、榊、斉藤、佐藤、岡崎、山下
教育・人材育成委員会	○信定、天能、長岡、関野、岡崎
国際交流	(未定)
広報	○柳井、松本
社会連携	高塚、榊、太田、岡崎、江原、佐藤
スパコン連携	○斉藤
資源提供	○江原
ソフトライブラリ部門	○岡崎、北浦、奥村、石村

iv) 計算材料科学研究拠点(CMRI)

計算材料科学研究拠点 CMRI(Computational Materials Research Initiative)は平成 23 年 4 月に東北大学金属材料研究所に設立され、計算材料科学の研究とこの分野の振興を図っている。平成 24 年度以降、物性科学分野の常行真司教授(東大理)、分子科学分野の高塚和夫教授(東大総合文化)に新たに運営委員を委嘱し、他のコミュニティとより緊密な連携を図っている。平成 25 年度は計 13 名の運営委員体制で諸活動の計画立案・運営に臨んだ。下の図 2.4-6 に組織図と表 2.4-3 に運営委員会構成メンバー名を示す。また、産業技術総合研究所関西センターに CMRI の関西拠点を設けている。

計算材料科学の研究の支援のために、拠点研究員 2 名枠があるが、重点課題の拠点研究員は関西拠点に配置したものの、金研の拠点研究員は人選後に本人の個人的な都合により雇用不可能(来日不能)となり、人件費の一部を返上した。また、東北大学は CMSI の教育拠点としての役割も担っており、教育・人材育成担当の特任准教授を平成 25 年 1 月より雇用(寺田弥生氏)、CMRI に常駐して拠点運営や諸々のイベントの企画・立案と実行にも携わっている。

拠点の運営は、年度初めの運営委員会で基本方針を決定し、国際会議参加の支援、計算センターの利用料金の支援、院生や若手研究員の海外派遣等に関してはメンバーの間で公募を行い、運営委員の間でメール審議を行って採択決定を行っている。その他の事業に関しても、運営委員の間でメールを中心に審議を行い、特に、年度途中の運営委員会では予算の執行状況や事業の実施状況などに関してチェックし、適正な執行と運営を図っている。

又、平成 25 年度からは、CMRI が中心となる第 5 部会が発足し、重点課題遂行者の補填、小規模研究会の多数の開催等を通じて、重点課題、特別支援課題の実施体制を強化した。平成 26 年度からは横浜国大に新たな拠点を設ける為、これに向けた拠点研究員の公募の準備を始め、種々の整備を行った。



図 2.4-6 CMRI 運営体制

表 2.4-3 CMRI 運営委員会メンバー(平成 25 年度)

氏 名	所 属	特記事項
毛利 哲夫	東北大学 金属材料研究所	拠点長
新家 光雄	東北大学 金属材料研究所	金研所長
古原 忠	東北大学 金属材料研究所	金研副所長
高梨 弘毅	東北大学 金属材料研究所	金研副所長
丸山 正彦	東北大学 金属材料研究所	金研事務部長
大野 かおる	横浜国立大学 大学院工学研究院	
尾方 成信	大阪大学 大学院基礎工学研究科	
川添 良幸	東北大学 未来科学技術共同研究センター	
香山 正憲	(独)産業技術総合研究所	
高塚 和夫	東京大学 大学院総合文化研究科	計算分子科学拠点 拠点長
田中 功	京都大学 大学院工学研究科	
常行 真司	東京大学 大学院理学研究科	戦略分野 2 統括責任者
松宮 徹	新日鐵住金株式会社	

別表 1 平成 25 年度に於ける実施体制－1

委員会	担当機関等	委員
【統括責任者】 【拠点代表者】 ・ 物性科学分野 ・ 分子科学分野 ・ 材料科学分野	東大院・理／物性研 東大・物性研 東大院・総合文化／分子研 東北大・金研	常行真司 (51) 川島直輝 (49) 高塚和夫 (63) 毛利哲夫 (62)
【運営協議会】 ・ 本事業に関する実施事項の審議、および、決議	東大・物性研 自然科学研究機構・分子研 東北大・金研 産総研 理研・計算科学研究機構 新日鐵住金 物材機構 東レ 東大院・理／物性研 東大・物性研 東大院・総合文化／分子研 東北大・金研	瀧川仁 (57) 大峯巖 (68) 新家光雄 (63) 寺倉清之 (72) 平尾公彦 (70) 松宮徹 (64) 曾根純一 (63) 恒川哲也 (54) 常行真司 (51) 川島直輝 (49) 高塚和夫 (63) 毛利哲夫 (62)

別表 1 平成 25 年度に於ける実施体制－2

委員会	担当機関等	委員
【運営委員会】 ・ 本事業に関する実施事項の審議、決議、および、運営協議会への上申	◎東大院・理／物性研 東大院・工 東大・物性研 神戸大院・システム情報 東大院・工 東大・物性研（阪大・海外拠点本部） 名大院・工／分子研 自然科学研究機構・分子研 東北大・金研 東大・物性研 産総研・ナノシステム 東大院・工 岡山大・自然科学 京大・福井謙一記念研究セ 理化学研究所・計算科学 東芝研究開発センター 物材機構・理論計算科学ユ 東大院・理／物性研 東北大院・理 金沢大院・理工 名大院・情報科学 京大院・工 自然科学研究機構／分子研 豊橋技科大院・知識情報 東大院・総合文化／分子研 横浜国大院・工 産総研・ユビキタスエネ 阪大院・基礎工	◎常行真司（51） 今田正俊（59） 川島直輝（49） 天能精一郎（49） 押山淳（61） 赤井久純（66） 岡崎進（59） 江原正博（48） 毛利哲夫（62） 杉野修（52） 浅井美博（54） 山下晃一（61） 田中秀樹（57） 榊茂好（67） 伊藤聡（57） 石田邦夫（48） 大野隆央（59） 藤堂眞治（44） 川勝年洋（53） 斎藤峯雄（57） 長岡正隆（54） 田中功（54） 信定克幸（45） 関野秀男（61） 高塚和夫（63） 大野かおる（57） 香山正憲（55） 吉田博（63）

注 1. ◎：議長

別表 1 平成 25 年度に於ける実施体制－3

委員会、研究項目	担当機関等	委員
【企画室】 ・本事業に関する実施事項の検討、および、運営委員会にかかる議事の検討 2.2.1. 当該年度における研究成果 2.2.1.1 研究開発課題 (2) 研究課題の評価 2.2.1.2 計算科学推進体制構築 全般	◎東大院・理／物性研 東大院・工 東大・物性研 神戸大院・システム情報 東大院・工 東大・物性研（阪大・海外拠点本部） 名大院・工／分子研 自然科学研究機構・分子研 東北大・金研 東大・物性研 産総研・ナノシステム 東大院・工 岡山大・自然科学 京大・福井謙一記念研究セ 東大院・総合文化／分子研 東大院・理／物性研 横浜国大院・工 産総研・ユビキタスエネ	◎常行真司（51） 今田正俊（59） 川島直輝（49） 天能精一郎（49） 押山淳（61） 赤井久純（66） 岡崎進（59） 江原正博（48） 毛利哲夫（62） 杉野修（52） 浅井美博（54） 山下晃一（61） 田中秀樹（57） 榊茂好（67） 高塚和夫（63） 藤堂眞治（44） 大野かおる（57） 香山正憲（55）

注 1. ◎：議長

別表 1 平成 25 年度に於ける実施体制－4

委員会、研究項目	担当機関等	委員
【戦略課題小委員会】 2.2.2 本格実施における実施計画 2.2.2.1 研究開発課題 [第 1 部会] (1) 新量子相・新物質の基礎科学 [第 2 部会] (2) 次世代先端デバイス科学 [第 3 部会] (3) 分子機能と物質変換	神戸大院・システム情報 東大院・工 東大・物性研 京大・基研 首都大院・理工 東大院・理 東大院・総合文化／分子研 自然科学研究機構・分子研 自然科学研究機構・分子研 京大院・工 横浜国大院・工 東大院・工 金沢大・理工 東大院・工 物材機構・理論計算科学ユ 東大・物性研（阪大・海外 拠点本部） 東大院・理／物性研 阪大院・基礎工 自然科学研究機構・分子研 名工大院・工 京大院・工 名大院・工／分子研 京大・化研 名大院・理 名大院・工（産総研・健 康工学研究部門） 早大・理工 自然科学研究機構・分子研 九大・先導物質化学 神大院・システム情報 阪大院・工 東大・物性研 東北大・金研 阪大院・基礎工	◎天能精一郎（49） ◎今田正俊（59） 川島直輝（49） 遠山貴巳（49） 岡部豊（64） 宮下精二（60） 高塚和夫（63） 柳井毅（40） 斉藤真司（48） 佐藤啓文（45） 大野かおる（57） ◎押山淳（61） 斎藤峯雄（57） 渡邊聡（52） 宮崎剛（47） 赤井久純（66） 常行真司（51） 中野雅由（50） 信定克幸（45） 尾形修司（50） 田中功（54） ◎岡崎進（59） 松林伸幸（45） 岡本祐幸（56） 篠田渉（42） 中井浩巳（49） 江原正博（48） 吉澤一成（55） 北浦和夫（66） 森川良忠（46） 野口博司（40） 毛利哲夫（62） 尾方成信（43）

注 1. ◎：小委員会／部会 代表者

注 2. () 内は H25 年度中の異動前の所属

別表 1 平成 25 年度に於ける実施体制－5

委員会、研究項目	担当機関等	委員
[第 4 部会] (4) エネルギー変換	東大・物性研 東大院・工 産総研・ナノシステム 物材機構・理論計算科学ユ 阪大院・基礎工 岡山大院・自然 名大院・情報 東北大院・理 北大・触媒化学研究セ（京 大・福井謙一記念研究セ） 兵庫県立大院・シミュレーション学 東北大・金研→後期退任 産総研・ユビキタスエネ	◎杉野修（52） ◎山下晃一（61） 浅井美博（54） 大野隆央（59） 吉田博（63） 田中秀樹（57） 長岡正隆（54） 森田明弘（48） 長谷川淳也（43） 兵頭志明（58） 水関博志（45） 香山正憲（55）
[第 5 部会] (4) マルチスケール材料科学	産総研・ユビキタスエネ 横浜国大・工 東北大・金研 阪大院・基礎工 新日鐵住金 北大院・工 東北大・金研 東大・物性研 東大・総合文化／分子研	香山正憲（55） 大野かおる（57） 毛利哲夫（62） 尾方成信（44） 澤田英明（49） 大野宗一（37） 西松毅（41） 常行真司（51） 高塚和夫（63）
【スパコン連携小委員会】 2.2.1.2 計算科学技術推進体制構築 (1) 計算機資源の効率的マネジメント	東大・物性研究所 自然科学研究機構・分子研 東北大・金研→後期退任 東北大・金研→後期就任 東大・情報基盤センター	◎川島直輝（49） 斉藤真司（49） 水関博志（45） 毛利哲夫（62） 中島研吾（51）
【人材育成・教育小委員会】 2.2.1.2 計算科学技術推進体制構築 (2) 人材育成	東大・物性研 （阪大・海外拠点本部） 東大院・工 名大院・情報科学 豊橋技科大院・知識情報工 東北大・金研 理化学研究所・計算科学 東芝研究開発センター 東北大院・理 金沢大・理工 自然科学研究機構・分子研 京大院・工 神戸大院・システム情報 阪大院・基礎工	◎赤井久純（66） 今田正俊（59） 長岡正隆（54） 関野秀男（61） 毛利哲夫（62） 伊藤聡（57） 石田邦夫（48） 川勝年洋（53） 斎藤峯雄（57） 信定克幸（45） 田中功（54） 天能精一郎（49） 吉田博（63）

別表 1 平成 25 年度に於ける実施体制－6

委員会、研究項目	担当機関等	委員
【産官学連携小委員会】 2.2.1.2 計算科学技術推進体制構築 (3) 人的ネットワークの形成 3) 産官学連携の促進	産総研・ナノシステム 物材機構・理論計算科学ユ 富士通研・次世代ものづく り技術研究セ 新日鐵住金 東大・物性研 兵庫県立大院・シミュレーション学 旭化成	◎浅井美博 (54) 大野隆央 (59) 金田千穂子 (57) 松宮徹 (64) 杉野修 (52) 兵頭志明 (58) 青柳岳司 (50)
【広報小委員会】 2.2.1.2 計算科学技術推進体制構築 (4) 研究成果の普及	東大院・理/物性研 東大・物性研 自然科学研究機構・分子研 →後期退任 岡山大院・自然科学 →後期就任 北大院・工 阪大・産業科学研究所 自然科学研究機構・分子研	◎藤堂眞治 (44) 野口博司 (40) 奥村久士 (36) 松本正和 (46) 大野宗一 (36) 小口多美夫 (57) 柳井毅 (39)

注 1. ◎ : 小委員会／部会 代表者

別表 1 平成 25 年度に於ける実施体制ー7

研 究 項 目	担当機関等	研究担当者
2. 2. 1. 1 研究開発課題 (1) アプリケーション並列化調査 (2) 準備状況の報告 (第 1 部会) 新量子相・新物質の基礎科学 <重点課題> i) 相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明	東大院・工 東大院・工 東大院・工 九州工業大院・基礎科学 東大院・理 東大・物性研 産総研・ナノシステム 電通大・電気通信学部 東大院・工 東大院・工 東大院・工 東大院・工 東大院・工 東大院・工 京大・基研 原研・先端基礎研セ 原研・システム計算科学 東大・物性研究所 東大院・理／物性研 東大院・理 首都大院・理工 京大院・情報 兵庫県立大院・工 東大・物性研 東大・物性研	○今田正俊 (59) 求幸年 (42) 有田亮太郎 (40) 中村和磨 (39) 青木秀夫 (62) 高田康民 (62) 三宅隆 (42) 黒木和彦 (47) 森田悟史 (31) 酒井志朗 (33) 大越孝洋 (28) Zhao Huihai (28) 山地洋平 (32) 三澤貴広 (31) 遠山貴巳 (49) 前川禎通 (66) 町田昌彦 (47) 川島直輝 (49) 藤堂眞治 (44) 宮下精二 (60) 岡部豊 (64) 原田健自 (43) 鈴木隆史 (34) 渡辺宙志 (36) 正木晶子 (30)
ii) 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と物質理論の新展開	神戸大院・システム情報 自然科学研究機構・分子研 神戸大院・システム情報 自然科学研究機構・分子研 名大・エコトピア科学研 首都大院・理工学 神戸大院・システム情報 神戸大院・システム情報 九大院・理 京大・福井謙一記念研究セ 東大院・総合文化／分子研 東北大院・理 自然科学研究機構・分子研 京大院・工 名大院・工 自然科学研究機構・分子研 名大院・工 東大院・総合文化 京大院・工	○天能精一郎 (49) 柳井毅 (40) 大塚勇起 (35) 江原正博 (48) 安田耕二 (44) 波田雅彦 (56) 大西裕也 (33) Pavel V. Avramov (53) 中野晴之 (49) 永瀬茂 (49) 高塚和夫 (63) 河野裕彦 (60) 斉藤真司 (48) 佐藤啓文 (45) 笹井理生 (57) Nie QingMiao (34) 寺田智樹 (41) 米原丈博 (41) 中農浩史 (29)

注 1. ○課題代表者

注 2. () 内は H25 年度中の異動前の所属

別表 1 平成 25 年度に於ける実施体制－8

研 究 項 目	担当機関等	研究担当者
(第 2 部会) 次世代先端デバイス科学 ＜重点課題＞		
i) 密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究	東大院・工 東大院・工 阪大院・基礎工学 ルイパスツール大 物材機構・理論計算科学ユ ロンドン大 東大院・工 阪大院・工 東大・物性研（阪大・海外 拠点本部） 東大院・工 東大院・工	○押山淳（61） 岩田潤一（40） 重田育照（41） Boero Mauro（46） 宮崎剛（47） Bowler David（41） 渡邊聡（52） 小野倫也（39） 赤井久純（66） 小泉健一（36） 内田和之（36）
＜特別支援課題＞		
ii) ナノ構造の電子状態から機械的性質までのマルチスケールシミュレーション	名工大院・工 豊田中央研究所 東大・物性研 デンソー	○尾形修司（50） 大庭伸子（44） 河野貴久（34） 田中宏一（33）
iii) ナノ構造体における光誘起電子ダイナミクスと光・電子機能性量子デバイスの開発	自然科学研究機構・分子研 筑波大院・計算科学研究セ 東京理大院・理 自然科学研究機構・分子研	○信定克幸（45） 矢花一浩（53） 渡辺一之（59） 野田真史（33）
iv) スピントロニクス／マルチフェロイックスの応用へ指向した材料探索	金沢大・理工 金沢大・理工 阪大・産業科学研究所 北陸先端大院・シミュレーション科学	○斎藤峯雄（57） 小田竜樹（47） 小口多美夫（58） 尾崎泰助（44）
v) 新材料探索	東大院・理／物性研 鳥取大院・工 京大院・工 産総研・ナノシステム 北陸先端大院・情報科学 産総研・ナノシステム 東大院・理 産総研・ナノシステム	○常行真司（51） 吉本芳英（41） 田中功（54） 石橋章司（50） 前園涼（42） 土田英二（43） 合田義弘（38） 三宅隆（42）

注 1. ○課題代表者

注 2. （ ）内は H25 年度中の異動前の所属

別表 1 平成 25 年度に於ける実施体制－9

研 究 項 目	担当機関等	研究担当者
(第 3 部会) 分子機能と物質変換 <重点課題> i) 全原子シミュレーションによるウィルスの分子科学の展開	名大院・工／分子研 神戸大院・システム情報 東大・分生研 金沢大院・自然科学 慶大・理工 名大院・工 名大院・工 名大院・工 名大院・工 名大院・工 九州工大院・工	○岡崎進 (59) 北浦和夫 (66) 北尾彰朗 (48) 長尾秀美 (50) 泰岡顕治 (46) 安藤嘉倫 (36) 藤本和士 (29) 岡田真紀 (30) 吉井範行 (42) 山田篤志 (38) 入佐正幸 (51)
<特別支援課題> ii) 拡張アンサンブル法による生体分子の高次構造と機能の解明	名大院・理 自然科学研究機構・分子研 原研・システム計算科学セ 東北大院・理 自然科学研究機構・分子研	○岡本祐幸 (56) 奥村久士 (37) 志賀基之 (41) 高橋英明 (44) 榮慶丈 (36)
iii) ポリモルフから生起する分子集団機能	京大・化研 名大院・工 (産総研・健康工学研究部門) 東レ・先端材料研究所 名大院・工 東大・物性研 東北大院・理 自然科学研究機構・分子研	○松林伸幸 (45) 篠田渉 (42) 茂本勇 (40) 吉井範行 (42) 野口博司 (40) 川勝年洋 (53) 水口朋子 (31)
iv) ナノ・生体系の反応制御と化学反応ダイナミクス	早大・理工 九大・先導物質化学研 北大院・理 名大院・トランスフォーマティブ生命分子研 (名大院・理) 早稲田大学	○中井浩巳 (50) 吉澤一成 (55) 武次徹也 (49) IRLE Stephan (47) 小林正人 (33) 西澤宏晃 (30)
v) 機能性分子設計－光機能分子と非線形外場応答分子の光物性	自然科学研究機構・分子研 阪大院・基礎工 京大・学際融合教育研究推進セ 慶大・理工 大阪府大院・理	○江原正博 (48) 中野雅由 (50) 太田浩二 (63) 藪下聡 (59) 小関史朗 (57)

注 1. ○課題代表者

注 2. () 内は H25 年度中の異動前の所属

別表 1 平成 25 年度に於ける実施体制－10

研 究 項 目	担当機関等	研究担当者
(第 4 部会) エネルギー変換 ＜重点課題＞ i) エネルギー変換の界面科学	東大・物性研 兵庫県立大院・シミュレーション学 名工大院・工 東北大・AIMR 東大院・工 阪大院・工 阪大院・工 東大・物性研 産総研・ナノシステム 東大院・工 日産自動車 名大院・情報 大阪府大・理 東大・物性研 産総研・ナノ 技術研究組合・FC-Cubic 東大院・工 (産総研・ナノ) 物材機構 東大・物性研	○杉野修 (52) 兵頭志明 (58) 尾形修司 (50) 赤木和人 (43) 牛山浩 (44) 森川良忠 (46) 木崎栄年 (34) Bonnet Nicephore Arthur Francois (31) 大谷実 (41) 山下晃一 (61) 大脇創 (42) 長岡正隆 (54) 麻田俊雄 (47) 笠松秀輔 (27) 池庄司民夫 (64) 錢玉敏 (31) 安藤康伸 (29) 館山佳尚 (43) 野口良史 (34)
ii) 水素・メタンハイドレート生成、融解 機構と熱力学的安定性	岡山大院・自然 岡山大院・自然 KIST (東北大・金研) 金沢大・理工 岡山大院・自然 岡山大院・自然	○田中秀樹 (57) 甲賀研一郎 (44) 水関博志 (45) 三浦伸一 (47) 矢ヶ崎琢磨 (35) 松本正和 (45)
＜特別支援課題＞ iii) 太陽電池における光電変換の基礎過程の 研究と変換効率最適化・長寿命化にむけ た大規模数値計算	東大院・工 東大・物性研 産総研・ナノシステム 物材機構・MANA 北大・触媒化学研究セ (京 大・福井謙一記念研究セ) 東大院・工 (東大・総合文化) 東大・総合文化 (自然科学研 究機構・分子研) 東大院・工 横浜市立大院・生命ナノ	○山下晃一 (61) 杉野修 (52) 宮本良之 (51) 館山佳尚 (43) 長谷川淳也 (43) 城野亮太 (33) 河津励 (39) 藤井幹也 (33) 立川仁典 (45)
iv) バイオマス利用のための酵素反応解析	九大院・理 立命館大・生命科学 東北大院・理	○吉田紀生 (39) 平田文男 (66) 森田明弘 (48)

注 1. ○課題代表者

注 2. () 内は H25 年度中の異動前の所属

別表 1 平成 25 年度に於ける実施体制－11

研 究 項 目	担当機関等	研究担当者
vii) ナノ構造体材料における高効率非平衡エネルギー変換過程とナノ構造創製の理論シミュレーション (第 5 部会) マルチスケール材料科学 < 重点課題 > i) 金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計 ・ 評価手法の開発 < 特別支援課題 > ii) 合金凝固組織の高精度制御を目指したデンドライト組織の大規模数値計算 iii) 超高速分子動力学計算による強誘電体薄膜キャパシタの高性能化 iv) ナノクラスターから結晶までの機能性材料の全電子スペクトルとダイナミクス	産総研・ナノシステム 産総研・ナノシステム 阪大院・基礎工 阪大院・基礎工 産総研・ユビキタスエネ 産総研・ユビキタスエネ 阪大院・基礎工 新日鐵住金 新日鐵住金 産総研・ユビキタスエネ 北陸先端大院・シミュレーション科学 阪大院・基礎工 北大院・工 京都工芸繊維大・工芸科学 東大院・工 東北大・金研 ファインセラミックスセンター・ナノ構造研究所 アイオワ州立大 横浜国大院・工 横浜国大院・工 物財機構・元素戦略材料セ KIST (東北大・金研) 東大・物性研 横浜国立大院・工	○浅井美博 (54) 中村恒夫 (42) 吉田博 (63) 佐藤和則 (42) ○香山正憲 (55) 田中慎悟 (42) 尾方成信 (44) 澤田英明 (49) 川上和人 (56) Sharma Vikas (32) 尾崎泰助 (43) 譯田真人 (33) ○大野宗一 (36) 高木知宏 (40) 澁田靖 (38) ○西松毅 (41) 森脇博紀 (40) Acott Beckmen (38) 大野かおる (56) 小野頌太 (28) 佐原亮二 (40) 水関博志 (45) 野口良史 (33) 桑原理一 (27)

別表 1 平成 25 年度に於ける実施体制－12

研 究 項 目	担当機関等	研究担当者
＜支援課題＞		
i) カゴメ格子反強磁性体の 厳密体格法による研究	兵庫県立大・物理	○中野博生 (43)
ii) セン断流下の脂質膜系の構造形成	東大・物性研	○芝隼人 (32)
iii) Screened KKR 法による永久磁石材料の 第一原理電子状態計算	東大・物性研	○土居抄太郎 (32)
iv) フラストレート磁性体における トポロジカル励起の秩序化	東大・物性研	○大久保毅 (34)
v) ナノサイズ分子の新規構造及び 機能の探索	自然科学研究機構・分子研	○石村和也 (35)
vi) HPC を用いた次世代電池の反応機構の解明	(株)日産アーク (株)日産アーク (株)日産アーク (株)日産アーク (株)日産アーク	○今井英人 (44) 茂木昌都 (44) 久保渕啓 (38) 荒尾正純 (42) 浅田敏広 (38)
＜アプリ高度化支援に関する研究課題＞	東大院・理／物性研 東大院・工 神戸大院・システム情報学 阪大・ナノ教育研究セ 東北大・金研 東大院・工 名大院・工 自然科学研究機構・分子研 東大・物性研 東大・物性研 東大・総合文化(自然科学研 究機構・分子研) 東大・物性研 東大・物性研 産総研・ナノシステム 自然科学研究機構・分子研 東大・物性研 東大・物性研 自然科学研究機構・分子研 自然科学研究機構・分子研 自然科学研究機構・分子研 東大・物性研 東大院・総合文化	○藤堂眞治 (44) 岩田潤一 (40) 北浦和夫 (66) 下司雅章 (41) 寺田弥生 (43) 山地洋平 (32) 吉井範行 (42) 石村和也 (35) 五十嵐亮 (32) 大久保毅 (34) 河津励 (39) Guo Zhixin (30) 河野貴久 (34) 小西優祐 (32) 榮慶丈 (36) 坂下達哉 (30) Truong Vinh Truong Duy (33) 西澤宏晃 (30) 野田真史 (33) 水口朋子 (31) 吉澤香奈子 (36) 米原丈博 (37)

注 1. ○課題代表者

注 2. () 内は H25 年度中の異動前の所属

研究開発課題の年次計画

研究開発課題及び 責任者名		H26 年度	H27 年度
第1部会 「新量子 相・新物 質の基礎 科学」 (今田・天能)	重点課題1: 相関の強い量子系 の新量子相探求と ダイナミックスの解 明	1. 高機能量子物質、新超伝導体の可能性を網羅探索 2. DMRG による時間依存角度分解光電子分光計算コードの開発・高度化と強相関電子系の時間依存一粒子励起スペクトルの特徴の解明。2次元 DMRG 法による強相関電子系・スピン系の新規量子相の提案。 3. スピン軌道相互作用モデルにおけるスピン液体相の解明。人工格子(光格子など)上の冷却原子系に関して、高精度の予言を行う。 4. 新規トポロジカル相の提案、新量子相のための新規プロジェクト開始	1. 多自由度クラスター動的平均場法や多変数変分モンテカルロ法などの手法を基礎にしたダイナミックス計算法を開発する。これをもとにポンププローブ分光の理論構築を行ない、太陽電池の基礎模型に対する電子相関効果の解明などに応用する。強相関系の高速緩和、光誘起転移などの非平衡現象解明と高機能素子探索。 2. DMRG 共鳴非弾性X線散乱スペクトル計算コードの高度化と10000 ノード以上で並列化効率80%以上、理論ピーク性能比30%以上。内核 K-端や L-端に対する共鳴非弾性X線散乱スペクトル計算によるスピン励起と軌道励起の解明と実験に対する提案。 3. スピン軌道相互作用系や人工格子(光格子など)上の冷却原子系におけるスピン液体相など新量子相の提案を行う。 4. 新量子相、新物質探索のための新規プロジェクト遂行
	重点課題2: 電子状態・動力学・ 熱揺らぎの融和と分 子理論の新展開	1. F12 理論を用いた炭素材料分子の超高精度計算に基づく広範な物質設計を行う。更にレアアースの代替物となる合金の計算の他、モデル空間量子モンテカルロ(MSQMC)法による金属結合を含む励起状態への応用計算を行う。フラグメント分子軌道法とMSQMC 法を用いて、光システム II の構造と電子状態の研究を展開する。 2. 前年に引き続き、分子の電子状態設計とタンパク動力学の量子効果の研究をシミュレーションレベルに引き上げるよう、並列度を上げて大規模化する。特に、分子の電子状態設計については、電子高励起状態や密集電子状態への研究へと展開する。また、超多体半古典ダイナミクスでは、筆者らによる多次元トンネル理論の実装を行い、生体分子のトンネル現象の研究へと展開を図る。 3. 前年度までに開発した理論を基に、固液界面などの不均一系を対象とした計算の実行。動的エネルギーランドスケープ理論の応用による分子モーターの化学反応理論への展開。	1. 前年度までの研究項目である、炭素材料分子、代替合金、メタル結合の励起状態、光システム II の研究を完了する。 2. レーザーによる分子の電子状態設計を、真空中のそれから溶媒ないシクスター中のダイナミクスへと発展させる。第3グループとの強い連携研究を行う。更なる計算の巨大化に向けて、次世代を見据えたアルゴリズムの検討を行いつつ、リアリスティック電子状態設計のシミュレーションを行う。 3. より一般的な化学反応や酵素反応をターゲットに、これまで開発してきた理論の展開。動的エネルギーランドスケープ理論の応用による分子モーターの物質輸送と制御理論の展開と有効性の検証。

次ページに続く

最終成果目標

電子を含む多体量子系の物性を解明する計算手法を開発整備することによって、京を用いなければできない物性基礎科学の進展を図る。特に京を用いた強相関第一原理シミュレーション法(MACE)を整備し、汎用的な電子状態計算法として確立する。この手法を用いて、新しい量子状態や量子相転移を1つ以上解明する。例えば、量子スピン液体、非フェルミ金属、強相関トポロジカル絶縁体、トポロジカル転移などはその候補である。さらに、いくつかの強相関超伝導体の物性を解明する。

また、最先端の実験と歩調を合わせながら、強相関電子系特有の励起ダイナミクスの探索と解明を行なう。

強相関電子系特有の電子内部自由度による量子効果を最大限活用した次世代光学素子の設計指針を構築する。

教科書の書き換えにつながるような基礎概念の革新をめざして、基礎的な理論模型の持つ新しい量子現象、量子概念の検証を行なう。

例えば、脱閉じ込め機構の検証・解明はその重要なターゲットである。

低エネルギーソルバーの整備（京への実装応用）

500-1000 自由度以上のサイズの強相関フェルミ格子

10 万サイト以上の量子スピン格子

100 サイトのダイナミクス

一部 ALPS プロジェクトに基づくソルバーの公開 化学反応への適用。

電子相関と相対論を高精度に扱う電子状態理論を 20 万コア以上、70%以上の並列化性能で実現する事を目標とする。ナノ炭素材料の設計や、レアアースメタル等の稀少金属を用いない磁性材料や水素吸蓄合金の高精度予測を可能とし、工業的に価値の高い材料の高度設計を実現可能とする。

動的な電子状態設計は、新しい時代の「化学」を切り拓く重要な次元の一つである。安定に存在する分子の状態を研究する理論化学から、自然界には存在しない電子状態を創り出し制御する科学へと、「京」の上での実行を通して、パラダイムの転換を図る。

高次非線形分光法に関する計算手法の確立し、最も身近な溶媒でかつ複雑な運動を示す水の分子内・分子間ダイナミクスおよび物性を解明する。また、積分方程式理論に構造揺らぎを取り入れる理論を組み合わせ大規模分子の内部自由度を時間・空間的に分離する手法を開発し、固液界面などの不均一系、化学反応や酵素反応の分子論的解明に取り組む。さらに、蛋白質無撞着ダイナミクス計算法の確立と応用により、広範な生化学反応を理解するための新描像を得る。溶液の性質、アミノ酸置換、巡回置換などのシステム制御により蛋白質反応を制御する方法を提案する。ヘモグロビン、シャペロニン、分子モーターなど蛋白質複合体への応用を展開し、分子科学の立場から生物学的な新しい原理を導く。これらの研究により得られる新しい分子論的知見は、他の部会だけでなく、実験研究に与える影響も大きい

研究開発課題及び 責任者名		H26 年度	H27 年度
第2部会 「次世代 先端デバ イス科学」 (押山)	重点課題3: 密度汎関数法によ るナノ構造時空場 での電子機能予測 とその実現	* RSDFT+輸送シミュレータによるナノワイヤ・FET 特性解明 * ワイドギャップ系 (SiC, GaN) での界面への応用 * 十数万コア以上の並列化計算を駆使して、ポラリトン伝播に基づく光合成プロトタイプ開発。高強度パルス光の振幅・位相情報が電子状態に転写されるメカニズムを解明。パルス光の2次元的な伝播を計算するコードを作成する。 * Li イオン 2 次電池の電極界面や半導体表面のナノ構造形成ダイナミクス解明に向けて、ハイブリッド QM-CL コードのスパコン上での大規模実行 * 粗視化法コードによる、デバイスの実際の形状やサイズでの変形・応力場の取り入れ * 平面波 DFT コード (統合版) とポストプロセスパッケージの高度化 * 磁性材料, マルチフェロイクス材料, 相関の強い電子系 (遷移金属酸化物, 格子欠陥) への応用 * 新奇材料探索 * ノンコリニアスピン輸送シミュレーション	* 数十万コア並列を目指して TDDFT + マクスウェル多階層緊密結合シミュレーションコードで、実在系ナノ構造体光誘起ダイナミクスの計算を行う。また、2次元的な光伝播の計算を行い、2次元ナノ構造とパルス光の非線形相互作用を解明する。 * 実際の形状やサイズでの、デバイス丸ごとハイブリッドシミュレーションの大規模実行 * 平面波 DFT コード (統合版) とポストプロセスパッケージの高度化と公開 * 新奇材料探索 * 化合物相図探索
第3部会 「分子機 能と物質 変換」 (岡崎)	重点課題4: 全原子シミュレーシ ョンによるウイルスの 分子科学の展開	(MODYLAS) 1. 温度、pH、圧力、乾燥等の環境が、カプシドの構造安定性に及ぼす影響について継続的に検討を行う。 2. 前年度までに同符号の正味の電荷を持つ小児マヒウイルスカプシドと CD155 レセプター間に働く中距離での引力の存在を明らかにしてきたが、この引力の分子機構を明らかにする。また、レセプターの結合に伴うカプシド側の変化についても可能な限り追跡を行う。 3. 社会的な要請の高いB型肝炎ウイルスの抗ウイルス剤の開発において、臨床研究者と連携して抗ウイルス剤のウイルスカプシド内への送達機構を明らかにするための自由エネルギー計算を開始する。 (FMO) 1. 前年度に見出した新規活性化化合物を基に、数十個の化合物を分子設計する。これらの結合エネルギーを高精度計算で予測し、大きな結合エネルギーを持つ化合物を 5~10 個見出す。	(MODYLAS) 1. 温度、pH、圧力、乾燥等の環境が、カプシドの構造安定性に及ぼす影響について継続的に検討を行う。 2. レセプターの結合に伴うカプシド側の変化について継続的に追跡を行う。 3. ウイルスカプシドに注目した新しいタイプの抗ウイルス剤の可能性について検討し、カプシドとレセプターの結合を阻害する分子の探索を行い、カプシドに関わる抗ウイルス剤の可能性についての指針を得る。 3. B型肝炎ウイルスの抗ウイルス剤のウイルスカプシド内への送達機構を解明し、実用抗ウイルス剤の開発に寄与する。 (FMO) 1. 前年度に設計した 3~5 個の化合物を選択し、これらの化合物とタンパク質との複合体構造と結合エネルギーを高精度計算で求めて活性を予測し、これらの内で十分な活性を有する化合物を医薬品の候補化合物として提案する。

次ページに続く

最終成果目標

- * 実空間法に基づく電子デバイス、光デバイス性能シミュレータの原型開発
- * ナノ構造体の電子機能発現予測に関するナノ界面科学の確立
- * 計算機を用いた材料探索手法の確立と基盤ソフトウェアの公開
- * 基礎科学の知見に立脚した新奇デバイス材料の提案

ウイルス学、薬学、構造生物学等の実験研究者との密接な連携の下に、これらの分野で強く求められているウイルスの分子論を明らかにする。このため、主として小児マヒウイルスのウイルスカプシドとインフルエンザウイルスのウイルスタンパク質に注目し、特に以下の4項目に絞ってMD計算や量子化学計算に基づいた研究を推進し、ウイルス分子科学の端緒を開く。

1. ウイルスカプシドの構造とその安定性について、カプシドタンパク質間相互作用と正二十面体構造形成の原理を明らかにし、カプシドの実際の生体環境における実像を明らかにする。さらには、温度、pH、化学物質、乾燥等のウイルスが置かれた環境が、カプシドの構造安定性に及ぼす影響について明らかにする。
2. 感染初期過程として重要なカプシドとレセプターの特異な結合に対し、ウイルスへの結合比率も含めて定量的に解明する。特に、ミュータントについても同様の計算を行い、分子認識の特異性について定量的に実証する。さらに、レセプター、カプシドの構造変化について、いわゆる induced fit 機構について分子レベルでの検討を行い、またレセプターの結合に伴うカプシド側の変化についても可能な限り追跡を行う。
3. ウイルスカプシドに注目した新しいタイプの抗ウイルス剤、つまりカプシドとレセプターの結合を阻害する分子の探索を行い、これらの可能性について指針を得る。
4. インフルエンザウイルスの新規阻害化合物を理論設計する。本研究の推進により FMO 法を活用した量子計算創薬手法を確立し医薬品開発の効率化に貢献する。
5. B型肝炎ウイルスの抗ウイルス剤のウイルスカプシド内への送達機構を解明し、実用抗ウイルス剤の開発に寄与する。

研究開発課題及び 責任者名		H26 年度	H27 年度
第4部会 「エネルギー変換」 (杉野・山下)	重点課題5: エネルギー変換の 科学	1.最大ノードでの実効並列度を改善して効率のさらなる改善を果たす。 2.恣意的な反応経路に関する仮定を用いずに反応の自由エネルギーを求めることができる手法を導入する。 3.界面の構造や溶液の組成などと燃料電池活性の関連を明確にする計算を継続して行い、燃料電池の活性を上げ、耐久性を向上させるための因子を探索する。有機溶媒分や添加剤分子による安定性への影響を継続して研究する。 4.課題連絡会を充実させ、企業研究者や実験研究者を迎えて、課題解決のための研究戦略を議論できるような体制を作る。	1. さらに実効効率を上げる。そのために平面波基底による計算から実空間基底あるいは局在基底を用いた計算との効率や精度のチェックを行い、計算効率の飛躍的向上ができないか検討する。 2. 前年まで行ってきた計算を貴金属表面以外の表面に拡張する。貴金属表面の物性の制約を離れた場合にどの程度電池性能が向上できるものかを調べる。その際、遷移金属酸化物などの電子状態のかなり異なる材料を調べる。 3. 各共同研究の具体的課題で理論を実験で検証。燃料電池全体に関わるシミュレーション技術を統括的に検討
	重点課題6: 水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性	1. 使用する主なアプリケーションはMODYLAS である。その開発の主な部分は第三部会と同じである。前年度に行なったチューニングの検討を継続して実施する。 2. メタン・水素ハイドレートの分解・生成過程の大規模分子動力学シミュレーションを行う。特に、実験的、実用的な重要性にかかわらず、従来の理論研究で十分に取り上げられていない溶質の効果を解析する。その第一として様々な濃度の NaCl 水溶液の計算を行う。また、低圧での水素ハイドレートの保存の可能性を探る計算を進める。	1.使用する主なアプリケーションはMODYLAS である。その開発の主な部分は第三部会と同じである。 2. 大規模計算、解析を引き続き実行する一方、研究成果としての取りまとめを行う。
第5部会 「マルチスケール材料科学」 (香山)	重点課題7: 金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発	1. Fe/炭化物界面、Fe の転位芯等について、大規模スーパーセルで OpenMX を用いた大規模第一原理計算を行う。Fe/炭化物界面と水素との相互作用、転位芯と不純物・合金成分との相互作用を詳細に解明する。QMAS による局所応力・局所エネルギー解析も行う。 2. Phase Field 法について、大規模第一原理計算結果からのマッピング法を検討し、鉄鋼材料系での微細組織の形成と機械的特性のシミュレーションを試みる。	1. 引き続き、OpenMX を用いて Fe/炭化物界面や Fe 中の転位・粒界・界面の大規模スーパーセル計算を実行する。異相界面では、水素分子との相互作用から水素捕獲能を明らかにする。転位や粒界と添加元素との相互作用を詳細に検討し、機械的性質への効果を明らかにする。QMAS による局所応力・局所エネルギー解析も行うことで、現象の機構をより掘り下げて解析する。 2. Phase Field 法について、引き続き、異相界面、粒界、転位の第一原理計算からマッピングすることで、鉄鋼材料系での微細組織の形成と機械的特性のシミュレーション法を提案する。

次ページに続く

最終成果目標

白金から他の貴金属さらに遷移金属酸化物までの表面に対して、面方位や欠陥や印加電位依存性を調べ、さらに吸着構造についても考慮した計算をこのように系統的に行うことにより、結局水素酸化と酸素還元から構成される燃料電池反応機構というものかどのような条件の下加速減速されるのかに対する現時点での最終回答を得る。

その結果はなぜ白金が優れているのか、また白金を代替するにはどのような条件を満たさなければならないかについての一応の回答になっているはずである。

計算科学の普及として、燃料電池の表面科学全般に関するシミュレーション技術を確立し、実験研究者を含めて利用しやすい環境を整える。

1. メタンハイドレート、水素ハイドレートの安定性について、コストのかかり高圧で危険である幾つかの実験を理論的予測によりおきかえることを目指す。また、新規な構造をもつハイドレートの存在の予測をおこなう。
2. ゲスト分子以外の物質を含んだ巨大系のシミュレーションを行い、相転移過程の熱力学的な側面だけでなく動力学的な側面を含めて明らかにし、メタンハイドレートの制御可能性に関する科学的知見を確立する。それを基礎として、実験では不明な氷点近傍における融解速度の極端な低下（自己保存性）の解明並びに現在提案されている減圧法、加熱法、インヒビター圧入法、異種ガス圧入法などの優劣の検討を行う。同様の手法で水素ハイドレートに関しても効率的な生成解離過程や安定性を明らかにすることにより、水素の安全で安価な貯蔵法としてのハイドレート利用の可能性を探る。

優れた構造材料・耐熱材料の開発は、エネルギー変換機器の効率向上、輸送機器の軽量化による省エネ化など、エネルギーの有効利用のために不可欠である。こうした実用材料は多結晶体で、合金成分や添加元素（レアメタル）を含み、析出相や界面・粒界・欠陥で構成される「微細組織」が優れた耐熱性や機械的性質を持つ。こうした「微細組織」の構造や性質、合金成分・添加元素の役割を解明し、設計技術を確立するため、以下の二点が必要である：第一に、異相界面・粒界・転位など、微細組織を構成する複雑構造の大規模第一原理計算を行い、異相界面や粒界・欠陥での原子配列や原子間結合の様子やエネルギー、不純物・合金成分の挙動など、原子・電子の振る舞いを高精度に明らかにすること、第二に、相変態や析出、拡散など有限温度の自由エネルギーに支配されたメゾスケール現象を理解し設計するため、Phase-Field 法を第一原理計算と組み合わせて適用すること、である。

鉄鋼材料中では、レアメタル（希少元素）を含む添加元素や合金成分が、析出相を生んだり、粒界・欠陥と相互作用する等、構造や性質を大きく支配する。炭化物や窒化物などの析出相と周りの金属との界面は、格子 misfit のため界面近傍に転位や歪を生み、機械的性質を大きく支配する。こうした異相界面形成や転位・粒界と添加元素・合金成分の相互作用の解明は、微細組織を理解し設計するための最重要課題である。レアメタル代替技術開発に直結し、元素戦略上も大きな意義がある。

「HPCI 戦略プログラム(本格実施)」
計算科学技術推進体制構築の年次計画

分野振興内容	H26 年度	H27 年度
計算機資源の効率的 マネジメント	・重点課題・特別推進課題の評価会(成果報告会)の開催(年1回) ・ハイブリッド並列アプリ開発テスト環境の運用 ・戦略機関保有スパコンの戦略プロジェクト枠の運用 ・戦略アプリ開発・実行環境の運用 ・ソフトウェア資源公開作業(統合化、ライブラリ化など) ・ソフトウェア資源公開サイトの運用	・重点課題・特別推進課題の評価会(成果報告会)の開催(年1回) ・ハイブリッド並列アプリ開発テスト環境の運用 ・戦略機関保有スパコンの戦略プロジェクト枠の運用 ・戦略アプリ開発・実行環境の運用 ・ソフトウェア資源公開作業(統合化、ライブラリ化など) ・ソフトウェア資源公開サイトの運用
人材育成	25 年度で実施した大学院教育、若手研究者育成、社会人教育、ワークショップ(チュートリアルコース)を継続、充実するとともに以下を実施する。 ・全国大学へ配信する講義コンテンツの充実をはかる。 ・単位互換あるいはコンテンツ配信による単位認定制度を利用した全国大学への講義提供を継続する ・連携大学院方式による計算物質科学副専攻プログラム(あるいは副プログラム)実施の検討	26 年度で実施した大学院教育、若手研究者育成、社会人教育、ワークショップ(チュートリアルコース)を継続、充実するとともに以下を実施する。 ・単位互換あるいはコンテンツ配信による単位認定制度を利用した全国大学への講義提供を継続するとともに、新たなコンテンツ配信を開始する。 ・連携大学院方式による計算物質科学副専攻プログラム(あるいは副プログラム)を試験的に実施
人的ネットワークの形成	・CMSI シンポジウムの開催。 ・CMSI 研究会の開催。 ・分野シンポジウム(物性研、分子研、金研)の開催。 ・元素戦略、大型実験施設との連携会議開催 ・神戸拠点インフォーマルセミナーの開催。 ・そのほか小規模研究会。(適宜)	・CMSI 国際シンポジウムの開催。 ・CMSI 研究会の開催。 ・分野シンポジウム(物性研、分子研、金研)の開催。 ・元素戦略、大型実験施設との連携会議開催 ・神戸拠点インフォーマルセミナーの開催。 ・そのほか小規模研究会。(適宜)
産官学連携	・企業と大学・研究機関の計算シミュレーション・コミュニティの協働の場を多く作っていく。国プロやコンソーシアムなどを協働の場として支援していく。 ・産業界と大学・研究機関の計算シミュレーション・コミュニティの間の相互理解を醸成する為に、連続研究会を実施する。年3回程度の開催をめざす。 ・CMSI アプリケーション公開サイト「MateriApps」の企画・立ちあげ・運用作業を広報委員会と協力して行う。	①前年度までに行ってきた事業の総括を行うと同時に、その実施主体をCMSIから主たる参画機関に委譲し、プロジェクト終了後も従来の事業がスムーズに継続される様に努力する。

次ページに続く

最終成果目標
・重点課題の達成のための開発実行環境の完成。 ・新規重点課題の選定と達成のための開発実行環境の完成。 ・高効率ハイブリッド並列プログラミング環境の完成。 ・ソフトウェアライブラリの公開と標準化。
以下の活動を含むリサーチ・トレーニング・ネットワーク(RTN)の構築をめざす。 ・大学院教育、若手研究者育成、社会人教育、ワークショップ(チュートリアルコース)の充実と定常的な実施 ・東アジア地域における計算物質科学における教育 ・計算物質科学大学院教育基本カリキュラムの策定 ・策定した計算物質科学大学院教育基本カリキュラムに従った大学院教育の実施 ・単位互換あるいはコンテンツ配信による単位認定制度を利用した拠点大学から全国大学への講義提供 ・連携大学院方式による計算物質科学副専攻プログラム(あるいは副プログラム)を開始
・分野内ネットワークの形成。とくに交流を通じた新しい研究テーマの開拓。 ・分野間ネットワークの形成。とくに並列計算技法を共通言語とする有機的な他分野コミュニティを形成。 ・国際ネットワークの形成。とくにアジア諸国間の連携を強化。 ・元素戦略プロジェクト、大型実験施設の実験家との連携を強化し、計算科学と実験科学の融合による成果を導く。
「新物質・エネルギー創製」分野の計算シミュレーションを産業界に深く普及させ、この分野のイノベーションに計算シミュレーションを通して CMSI が強く関与する。

分野振興内容	H26 年度	H27 年度
研究成果の普及計画	・広報誌を定期的に発行 ・「MateriApps」の更新・充実 ・パンフレット内容の見直し、改訂版発行 ・ソフトウェア利用事例の更新・充実 ・見える化シンポの企画実行	・広報誌を定期的に発行 ・「MateriApps」の更新・充実 ・パンフレット内容の見直し、改訂版発行 ・ソフトウェア利用事例の更新・充実 ・見える化シンポの企画実行
分野を超えた取組みの推進	・技術交流会(神戸拠点)の開催 ・他分野との交流セミナー(神戸拠点)の開催 ・情報処理学会ハイパフォーマンズコンピューティング研究会との研究会共催 ・実験研究者との討論会 ・高強度材料に関するJSTプロジェクトなどとの連携推進	・技術交流会(神戸拠点)の開催 ・他分野との交流セミナー(神戸拠点)の開催 ・情報処理学会ハイパフォーマンズコンピューティング研究会との研究会共催 ・実験研究者との討論会 ・高強度材料に関するJSTプロジェクトなどとの連携推進
戦略分野の研究者を支える研究支援	・先端的並列計算要素技術の開発。 ・並列化アプリ開発・高度化支援 ・並列化アプリ公開支援 ・アプリ公開環境整備。(ポータルサイト構築など) ・拠点研究員による並列化技術交流会。	・先端的並列計算要素技術の開発。 ・並列化アプリ開発・高度化支援 ・並列化アプリ公開支援 ・アプリ公開環境整備。(ポータルサイト構築など) ・拠点研究員による並列化技術交流会。
実施体制・	・緊急案件の審議にはテレビ会議・メール会議を活用し、迅速に対応する。 ・継続的審議の必要な重要案件が生じた場合は、企画室会議の下にWGを立ち上げ対応する。 ・戦略機関内の交流を図り、CMSI 拠点研究員、重点研究員がアプリケーション高度化に関する共通の課題意識を持ってその解決に取り組める実施体制を整える。	同左
	・各戦略機関で、ハード、ソフト両資源の提供と、計算物質科学分野における問題解決についてのコンサルティングが可能な人材の教育、育成を強化。	・戦略プログラム終了後に向けて、CMSI の主要な分野振興活動の恒常化を検討する。

次ページに続く

最終成果目標

科学技術の振興、および国際競争力の向上のために、「MateriApps」、ホームページ上のデモ、ソフトウェア利用事例を通じて、ソフトウェアの開発を促し、さらに開発されたソフトウェアや蓄積されたノウハウを公開し、企業・実験研究者へ普及させる。最終的な学術的な研究成果の普及だけでなく、シミュレーションの結果の保存・共有・公開する仕組みを整備し、個々の研究者によるデータ公開をサポートする。人材紹介にも重点を置いた広報活動全般を通して、学生・若手研究者のコミュニティへの参加を促すと同時に、企業、他分野との人材交流を加速する。

- ・計算機科学との連携による新しいアルゴリズム・コードの提案。
(エクサスケールコンピューティングへのスムーズなソフトウェア技術の向上。)
- ・実験研究者との連携による新しい課題提案とその解決。
(エクサスケールコンピューティングにむけた挑戦的課題の明確化。)

- ・重点課題の遂行。
- ・エクサスケールコンピューティングにむけた並列化ソフトウェア技術の構築
- ・並列化アプリの公開と普及、標準化。
- ・アプリ公開環境の完成
- ・エクサスケールコンピューティングに対応可能な若手人材の養成。

- ・物性科学、分子科学、材料科学など物質科学諸分野の有機的な連携に基づく計算物質科学コミュニティの強化。
- ・計算機科学(コンピュータ・サイエンス)分野, 他の計算科学分野, ならびに産業界との連携体制構築
- ・計算物質科学分野の人材育成に関するシステム整備(人材の流動化, キャリアパス形成を含む)
- ・CMSI 活動で培う計算物質科学推進実施体制を物性研、分子研、金研の組織内に定常的に取り込み、戦略プログラム終了後も継続させる。
- ・京コンピュータを頂点とする HPCI を活用し、計算物質科学の基礎から応用、産業活用の各フェーズで社会に貢献しうる成果を創出する。
- ・計算資源としてハード、ソフトの提供と、それらの活用のためのコンサルティング機能をそれぞれの戦略機関が持ち、継続した分野の支援展開ができる体制を構築する。
- ・日本の HPC

「HPCI 戦略プログラム(本格実施)」
所要経費の見込額

(単位:百万円)

	26 年度	27 年度	合計
1 研究開発課題			
(1)新量子相・新物質の基礎科学			
人件費			
業務担当	33	33	66
業務実施費			
消耗品費	2	2	4
旅費	2	2	4
その他	14.12	14.12	28.24
小計	51.12	51.12	102.24
(2)次世代デバイス科学			
人件費			
業務担当	45	45	90
業務実施費			
消耗品費	3	3	6
旅費	3	3	6
その他	0.66	0.66	1.32
小計	51.66	51.66	103.32
(3)分子機能と物質変換			
人件費			
業務担当	39	39	78
業務実施費			
消耗品費	3	3	6
旅費	3	3	6
その他	7.38	7.38	14.76
小計	52.38	52.38	104.76
(4)エネルギー変換			
人件費			
業務担当	39	39	78
業務実施費			
消耗品費	3	3	6
旅費	3	3	6
その他	1.71	1.71	3.42
小計	46.71	46.71	93.42
(5)マルチスケール材料科学			
人件費			
業務担当	11	11	22
業務実施費			
消耗品費	1	1	2
旅費	1	1	2
その他	3.56	3.56	7.12
小計	16.56	16.56	33.12

	26 年度	27 年度	合計
2 計算科学技術推進体制構築			
(1) 計算資源の効率的マネジメント 業務実施費 電子計算機諸費	5.5	5.5	11
小計	5.5	5.5	11
(2) 人材育成 人件費 業務担当 補助者 業務実施費 消耗品 旅費 会議費	38 0.9 2 5 2.91	38 0.9 2 5 2.91	76 1.8 4 10 5.82
小計	48.81	48.81	97.62
(3) 人的ネットワーク(産官学連携) 人件費 業務担当 業務実施費 消耗品費 旅費 会議開催費	6 1 2 1.08	6 1 2 1.08	12 2 4 2.16
小計	10.08	10.08	20.16
(4) 研究成果の普及 業務実施費 印刷製本費 雑役務費	2 7.45	2 7.45	4 14.9
小計	9.45	9.45	18.9
(5) 分野を超えた取組 業務実施費 旅費 その他	1.2 1	1.2 1	2.2 2
小計	2.2	2.2	4.4
(6) 戦略分野の研究者を支える研究支援 人件費 業務担当 補助者 業務実施費 消耗品費 旅費 雑役務費 その他	25 2.9 2 5 2 0.17	25 2.9 2 5 2 0.17	50 5.8 4 10 4 0.34
小計	37.07	37.07	74.14

	26 年度	27 年度	合計
(7)物性研 人件費 業務担当 業務実施費 消耗品費 旅費 会議開催費	12.8 1 2 1.3	12.8 1 2 1.3	25.6 2 4 2.6
小計	17.1	17.1	34.2
(8)分子研 人件費 業務担当 補助者 業務実施費 消耗品費 旅費 会議開催費 その他	21 4 1 4 1 1.055	21 4 1 4 1 1.055	42 8 2 8 2 2.11
小計	32.055	32.055	64.11
(9)金研 人件費 業務担当 補助者 業務実施費 消耗品費 旅費 会議開催費 その他	6 2.3 2 5 2 0.055	6 2.3 2 5 2 0.055	12 4.6 4 10 4 0.11
小計	17.355	17.355	34.71
4 実施体制 設備備品費 人件費 業務担当 補助者 業務実施費 消耗品費 旅費 会議開催費 その他	1 19 7.8 3 7 3 3.06	1 19 7.8 3 7 3 3.06	2 38 15.6 6 14 6 6.12
小計	43.86	43.86	87.72
1～4合計(直接経費)	441.91	441.91	883.82

本報告書は、平成 25 年度に、文部科学省の高性能汎用計算機高度利用事業による補助金で推進した「HPCI 戦略プログラム」（代表機関；東京大学物性研究所）の実施に関する成果報告書である。