

# 計算物質科学 イニシアティブ

*Computational Materials Science Initiative*

CMSI

発想をリアルへ

大規模計算で切り拓く  
新物質・エネルギー創成

# 未来社会をうるおす水路を切り拓く

基礎科学の源流を応用研究の奔流へ

科学の世界では長い間、理論と実験の2つを手法としてきました。21世紀の私たちは、これに加えて第3の方法を手に入れています。それは高い処理能力をもつコンピュータをフルに活用した計算です。物質科学においては、シミュレーションや統計処理などの計算をツールにした新しいサイエンス「計算物質科学」が生まれました。扱うのは原子1個から実用的な材料まで。理論と実験をつなげて、科学と技術の次なる扉を開きます。

計算物質科学イニシアティブ（CMSI ; Computational Materials Science Initiative）は、物性科学、分子科学、材料科学を母体とする計算科学研究者で構成されるネットワーク型の研究コミュニティです。文部科学省「HPCI戦略プログラム（SPIRE）」分野2<新物質・エネルギー創成>推進のため、東京大学物性研究所、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の3機関を中核拠点とし、11の協力機関、および計算物質科学に関連する大学・研究機関、企業の人たちとともに運営しています。

CMSIの目標は、スーパーコンピュータ「京」を頂点とする最先端のコンピュータを駆使し、物質科学の新たな世代を築いていくことです。そのための戦略課題として4つの柱を立てています。「次世代先端デバイス科学」、「分子機能と物質変換」、「エネルギー変換」、そして「新量子相・新物質の基礎科学」です。さらに、希少元素を使わない材料の創成を視野に入れて、SPRING-8/SACLAやJ-PARCなどの大型実験施設との連携を強化しています。

CMSIは、これらの研究を通して、基礎科学の源流を応用研究の奔流へと導きます。

CMSI 統括責任者 **常行 真司**

つねゆき しんじ

東京大学 物性研究所 / 大学院理学系研究科 教授

# ナノサイエンスの次世代を、3分野が結集して

めざすのは、想像を超える現実

## ■ CMSIのネットワーク

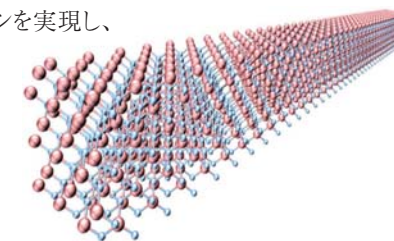
CMSIは開かれたコミュニティです。14の拠点をはじめ、全国のさまざまな機関から多数の研究者が参加しています。



## ■ CMSI の戦略課題

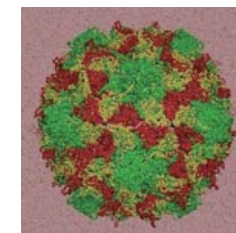
### ■ 次世代先端デバイス科学

半導体デバイスの微細化が進むと、原子1個の役割が増し、既存の手法による半導体デバイスの動作予測や設計が困難になります。最先端のスパコンによって、電子論に基づいた現実的なナノスケールデバイスのまるごとシミュレーションを実現し、ナノの現象を支配する量子効果を正しく取り入れた新しいデバイスの設計指針を探ります。



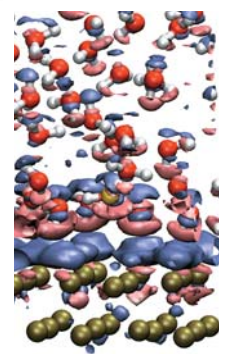
### ■ 分子機能と物質変換

ナノスケールの分子集団の電子状態や構造およびダイナミクスを量子化学計算や分子動力学計算により解明します。その一例として、水の中のウイルスがあげられます。最先端スパコンを利用したウイルスの大規模な全原子分子動力学計算により、感染や免疫の仕組みを分子レベルから解き明かし、ウイルス制御と感染症克服への道を開きます。



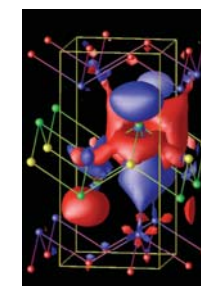
### ■ エネルギー変換

いま求められているのは、エネルギーの変換と貯蔵の方法を一新させる物質群です。これまでにない大規模なシミュレーションによって、燃料電池やメタンハイドレートなどの基礎過程を明らかにし、有望な物質を探ります。そして、次世代エネルギー技術の基礎を築きます。



### ■ 新量子相・新物質の基礎科学

新しい物理概念や量子機能の解明・発見・予測など、物質の多様性や階層性に関する基礎研究の成果は、人類の知的財産であると同時に、将来の応用研究につながる大切な源流です。相関の強い量子系の新量子相探索や、電子系のダイナミクスの解明、分子の微細量子構造予測、揺らぎとダイナミクスによる機能発現など、物性物理学と量子化学の先端的な基礎課題を追及します。



# 人をつなぎ、人を育てる拠点に

スパコンを駆使し、スパコンで究める

CMSIは、計算物質科学の次世代の研究・開発につながる基盤形成を大きな目的のひとつにしています。そのために、研究会、シンポジウム、ワークショップ、実習、そして実験研究者や企業研究者との連携などを通じて、計算物質科学に関心のある人たち、特に若手研究者のネットワークを構築していきます。

また、計算機やプログラムの開発・普及を促進するための組織づくりや、活動の支援もおこなっていきます。さらに、人材育成や教育、広報活動を進めて、計算物質科学の役割を社会に普及させ、理解と興味を促します。



## 河津 励

かわつ つとむ  
CMSI分子科学拠点研究員  
京都大学福井謙一研究センター

精度と速度を両立させながら量子化学的なプロパティを統計的に扱えるようなサンプリングシミュレーション手法を確立することが目標です。



## 志田和人

しだ かずひと  
CMSI材料科学拠点研究員  
東北大学金属材料研究所

金属材料研究所で独自に作成された第一原理電子状態計算プログラムTOMBOなどを最先端スパコン上で最適化し、材料科学の新しい知見を探ります。



## 水口朋子

みずぐち ともこ  
CMSI分子科学拠点研究員  
京都大学化学研究所

分子科学研究とソフト運用高度化を一体化させることによって、分子集団機能の原子・分子レベルの解析法・制御法の確立に寄与したいと思います。



## Truong Vinh Truong Duy

チュオン ヴィン チュオンズイ  
CMSI物性科学拠点研究員  
北陸先端科学技術大学院大学  
先端融合領域研究院

情報科学が専門ですので、計算物質科学に情報処理技術を生かして、両者の境界を越えた融合領域研究のロールモデルになりたいと考えています。



## 吉澤香奈子

よしざわ かなこ  
CMSI物性科学拠点研究員  
東京大学物性研究所

多くの研究者が利用できる、利便性、拡張性の高いパッケージの開発に努め、最先端スパコンを活用した新しい物理の発見につなげたいと考えています。

表紙：CMSIの研究者が思い思いの色で太陽を描く。やがて、その太陽は社会を照らし、豊かな色に染めていく。

「HPCI 戦略プログラム (SPIRE)」分野2<新物質・エネルギー創成>

### 計算物質科学イニシアティブ

事務局：東京大学柏キャンパス 物性研究所内 〒277-8581 千葉県柏市柏の葉 5-1-5  
tel：04-7136-3279 fax：04-7136-3441 <http://cms-initiative.jp>