

1. 研究領域名：(2203) 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
2. 研究期間：平成22年度～平成26年度
3. 領域代表者：押山 淳（東京大学・大学院工学系研究科・教授）

#### 4. 領域代表者からの報告

##### (1) 研究領域の目的及び意義

ナノテクノロジーが未来の社会を牽引すると目されている現在、物質科学は新たなチャレンジを要求されている。それは量子論に立脚した、新しいものづくりの提示である。様々な物質創成技術により、人類は所望の元素を所望の構造に作りこむ技術を得つつある。問題は、どの元素をどのように並べれば所望の物性機能が達成できるか、さらには、その新奇構造体は作成可能であるかである。量子論に立脚した計算科学的アプローチは、その科学的土台の深遠さと付随する定量性の故に、この物質デザインの課題に対する本質的貢献を成し得る。ナノ構造体においては、共有結合性、イオン性、電子相関等の競合する因子がナノ形状と絡み合い、豊かな複合相関現象を示す。また、物質生成・加工のプロセスは非平衡ダイナミクスの賜物である。本新学術領域では、計算科学と計算機科学の融合により、従来の計算物理学の枠を打ち破ったコンピューティクス（Computics）という新しい学問領域を確立し、量子論に立脚したアプローチの革新的な飛躍を達成し、さらには実験研究者との有機的連携により、物質デザインの根幹である複合相関と非平衡ダイナミクスの解明・予測を行うことを目的とする。これにより、経験的ものづくりを演繹的なそれへと進化させるパラダイム変換を目指す。これは、超並列化、多重階層化という変革が始まろうとしているコンピュータ環境の中で、従来からの計算科学のアプローチの困難を解決するものであり、一方、ナノテクノロジーの根幹を支える物質デザインの創出を目指すものである。

##### (2) 研究の進展状況及び成果の概要

物質を舞台とする複合相関と非平衡ダイナミクスの解明・予測のためには、「空間」、「時間」、「精度」の3つの軸での先端的物質科学計算、すなわち、大規模、長時間、高精度シミュレーションが重要である。本新学術領域では、この先端的計算をコンピューティクスの確立によって達成しようとしている。実際、物質科学とコンピュータ科学という異分野間での緊密な議論により、A01 研究項目「計算機アーキテクチャと高速計算アルゴリズム」で展開されているHPCにおける先端手法が物質側に伝授され、A02 研究項目「密度汎関数理論の新展開」、A03 研究項目「密度汎関数理論を超えて」の多くのアプリケーションは格段に高度化されてきた。その先陣がRSDFT (Real Space Density Functional Theory) コードである。「京」コンピュータ上でのSi ナノワイヤーの密度汎関数法電子状態計算は、その規模の大きさと実行効率の高さで世界中を驚かせ、2011年度のACM/IEEEのGordon Bell賞を獲得した。

こうした計算手法の開発に裏打ちされ、物質科学の側面では、(1)次世代デバイスを担うと目されているSi ナノ構造、炭素ナノ構造の電子状態解明とデバイス機能予測、及び基板との相互作用解明と選択的配列の機構解明、(2)原子拡散、酸化などの物質内原子反応の機構解明と自由エネルギー俯瞰図の計算、(3)電池電極反応での電気二重層の形成機構解明、(4)ナノ電気伝導での交流周波数と原子欠陥の影響解明、(5)鉄ヒ素超伝導体などの強相関物質の電子状態解明、(6)タンパク質中のガス分子移動機構解明、(7)新奇超伝導体の理論探索手法開発、などの成果が得られた。これらは331篇の学術論文および国内外での170件の招待講演として発表されている。

#### 5. 審査部会における所見

A (研究領域の設定目的に照らして、期待どおりの進展が認められる)

##### 1. 総合所見

本研究領域は、計算科学と計算機科学の融合により、従来の枠を打ち破った「コンピューティクス」という新しい学問領域を確立し、物質デザインの根幹にある複合相関と非平衡ダイナミクスの解明・予測を行うことを目指している。高性能コンピュータ技術の進展に呼応した時宜を得た領域設定であり、計算機能力の向上を物質科学の進展に結びつけて大きな展開を図りつつある。物性研究のための計算科学研究手法の開発、その共有化、応用に対して多数の重要な成果が得られており、「コンピューティクス」という新規な分野の確立に向けて順調に推進している。領域内の共同研究も有機的で、実験との連携も必要に応じて検討されているが、今後は領域内にとらわれず、実験研究グループとの共同研究を積極的に推進することも、他領域への波及効果を高める上でも必要と思われる。若手の人材育成と新しい方向性の取組も含め、今後の更なる拡がりに期待する。

## 2. 評価の着目点毎の所見

### (1) 研究の進展状況

「異なる学問分野の研究者が連携して行う共同研究等の推進により、当該研究領域の発展を目指すもの」としては、計算機技術と計算科学及び物性科学の連携が重視され、先端的なコンピューター活用による物性科学の進展でいくつかの目覚ましい成果が得られており、明快な戦略の中で順調に進展している。また「当該領域の研究の発展が他の研究領域の研究の発展に大きな波及効果をもたらすもの」としては、「京」を用いたRSDFT法のデモで大きな賞を獲得するなど、「京」の活用により他領域及び一般への大きな波及効果が期待される成果も上げており、当初掲げた計算機科学と計算物質科学の共同による研究が実を結びつつあると判断できる。

### (2) 研究成果

「異なる学問分野の研究者が連携して行う共同研究等の推進により、当該研究領域の発展を目指すもの」としては、計算機技術と計算科学及び物性科学の連携による共同研究が進展しつつあり、物質科学に大きく寄与する高水準の成果が出ている。特に「京」を用いた成果など、大きな成果が一部現れ始めており、「当該領域の研究の発展が他の研究領域の研究の発展に大きな波及効果をもたらすもの」としても物性科学のみならず一般への大きな波及効果をもたらしており、高く評価できる。今後、更に広い分野連携を通じて、本研究領域の活動の真価を示すことを期待する。

### (3) 研究組織

計算科学分野と計算機科学分野の連携、異分野間の融合をする上でまず重要となるのが「言語の共有」であるが、本研究領域では領域代表者のリーダーシップのもと、この点に十分な注意を払って連携が行われていることは評価できる。また、研究会、異分野間勉強会等を頻繁に開いており、若手の人材育成にも十分な努力が認められる。

### (4) 研究費の使用

特に問題点はなかった。

### (5) 今後の研究領域の推進方策

本研究領域では、これまでも計算だけでなく実験を取り入れる努力はなされてきているが、まだ十分にその成果が現れていないと思われる。引き続き共同研究、連携研究を推進するとともに、今後、計算新手法など他の計算科学分野の発展にも資するように、他研究領域への成果の発信及び交流も望まれる。「京」の戦略分野を含めた様々な計算科学への波及、他分野（地球、宇宙、生命等）との連携、協力など、更に広い分野連携を視野に入れた取組が行われることを期待したい。