

計算分子科学統合研究拠点

報告：理論・計算分子科学研究領域 教授 斉藤 真司

現在、計算分子科学に関する3つのプロジェクトが分子科学研究所で展開されています。一つは、平成27年度から始まったポスト京のプロジェクトです。国は、神戸にある京コンピュータの後継として「ポスト京」マシンの作製を進めており、京コンピュータからの発展として世界を先導する成果の創出が期待できる課題として、健康長寿命社会の実現、防災・環境問題、エネルギー問題、産業協力の強化、基礎科学の発展の5つの課題を設定しました。5課題の中のエネルギー問題の一課題として、「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」が進められています。この課題は岡崎進教授（分子研／名大）を代表とし、新エネルギー源の創出・確保 太陽光エネルギー、エネルギーの変換・貯蔵 電気エネルギーおよびエネルギー・資源の有効利用 化学エネルギーの3つのサブ課題から構成され、太陽電池や人工光合成、燃料電池や二次電池、メタンや二酸化炭素の分離回収、貯蔵、高効率触媒に関する計算科学研究が進められています。

二つ目のプロジェクトは平成24年度に開始された文部科学省国家課題対

応型研究開発推進事業における「元素戦略プロジェクト」<研究拠点形成型>です。このプロジェクトは磁石材料、触媒・電池材料、電子材料、構造材料の4領域から構成され、その中で触媒・電池材料領域は京都大学に研究拠点を置き、触媒、電池、理論のグループにより構成されています。理論グループの代表機関は分子研であり、江原教授をグループリーダーとし汎用元素を利用した高性能な触媒と二次電池の開発が推進されています。

三つ目は、平成27年度から始まったJSTの科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業による計算物質科学人材育成コンソーシアムです。このプロジェクトは、これまで次世代スパコンプロジェクト等で共に活動してきた東北大金属材料研究所（代表機関、毛利哲夫教授）、東京大学物性研究所、大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センターとの連携により、HPC (high performance computing) 技術を駆使し最先端の物質科学研究を遂行できる次世代研究者および産業界に計算物質科学研究の成果や技術の汎用化を行う人材の育成を目指したものです。とくに、分子研を勤務地とする次世代研究者と

して、岡崎圭一氏および藤田貴敏氏の2名が今年度から若手独立フェロー（特任准教授）として理論・計算分子科学研究領域の新しいメンバーとして加わりました。

このように、分子研では計算分子科学に関連する3つのプロジェクトが推進されています。これらのプロジェクト相互の円滑な連携・運営、理論計算分子科学分野の人材育成、アプリケーションの普及活動などのために計算分子科学統合研究拠点を設置しました。また、以上に掲げた理論計算分子科学分野における分野振興活動には3つのプロジェクトに留まらず、理論・計算分子科学研究領域および計算科学研究センターを含めて推進していくものもあります。今後の活動・展開などに関して、ご支援・ご協力さらにはご提案いただけますようよろしくお願いいたします。