

## 01

## 第4回文部科学省「最先端の光の創成を目指したネットワーク研究拠点プログラム」シンポジウム報告

報告：光分子科学研究領域 教授 大島 康裕

文部科学省が推進する「最先端の光の創成を目指したネットワーク研究拠点プログラム（以下PFNと略す）」には、「先端光量子アライアンス（APSA）」と「融合光新創生ネットワーク（C-PhoST）」の2つの拠点が参画している。分子研は、日本原子力研究開発機構、大阪大学、京都大学とともに通称「西の拠点」と呼ばれるC-PhoSTの構成機関である<sup>[1]</sup>。この2つの拠点は年に1回のペースで、合同でシンポジウムを開催してきた。本年度は分子研が世話役となって11月14日に名古屋駅近くのキャッスルプラザホテルにて、第4回目の合同シンポジウムが開催された。前2回はレーザー学会の場を借りて実施されてきたので、実質的には今回が初の単独開催となる。そこで、当PFN事業と関連の深いCRESTならびにさきがけの研究者の方々にもお声をかけて、積極的に参加して頂くことにした。

当シンポジウムのプログラムのうち、何といても目玉であったのはパネルディスカッションであろう。まずAPSA、C-PhoSTの両拠点責任者より、各拠点の概要を交えつつ、超高精度に制御された光および超強力な光を利用することにより、基礎科学や応用分野で今後どのようなブレークスルー

が期待されるか、という話題提供があった。1960年代のレーザーの創成期に続いて現在が第2の劇的発展期にあることが時代的背景とともに語られ、また、唯一人為的に操作できる「力」である電磁相互作用の究極的な利用がレーザーであると指摘されるなど、科学論としても示唆に富む内容であった。引き続いて、元廣友美氏より豊田中研における光科学技術への取り組みに関してのご紹介があった。「石油に替わる新エネルギーがどのように変化していくかは自動車ビジネスそのものを左右する、自らが研究開発を行い創エネルギーに関する知見をもっておく必要がある」との考えのもと、核融合から太陽光発電・光合成までを含む広範な領域で研究開発を展開しているとのことであった。現在の事業にとらわれずに網羅的にサーチして将来を見据えた企業戦略を構築していることに、深い感銘を受けた研究者が多かったことと思う。立花隆氏は、現在の光科学の進展によって全サイエンスが精緻化し、パラダイムシフトが引き起こされつつあると指摘し、光科学はとてつもない広さと深さを有する故、全ての分野で大きな発展可能性があるが、それだけ迷子になりやすくなる、研究者は「見

当識」を常に失わない（自分だけ、今何をしており、どこに向かっているのかを「識る」）ことが重要だと締めくくられた。以上の話題提供に引き続いた自由討論では、企業における基礎研究の意義、人材育成の重要性、光科学技術施策の方向性など、多岐の問題について意見交換が行われた。特に印象的であったのは、「研究者は毎日オリンピックを戦っているに等しい」「一般人たちがアスリートのように研究者を応援する社会の実現が必要だ」という立花氏の言葉である。登壇者全てが深く同感され、「研究のワクワク感」を広く社会と共有するための具体策について様々な提言がなされた。

午後のポスターセッションでは、APSA、C-PhoST、CREST、さきがけの研究者により合計123件の発表が行われた。光源開発から基礎物理学、さらにはバイオサイエンスまで、極めてバラエティに富む研究内容であり、光科学がまさに科学全般の「根幹」であることを端的に示すセッションであった。引き続いての口頭講演では、拠点内で活発な研究活動を進めている若手・中堅の研究者を中心にホットな研究成果が紹介された。

以上、当シンポジウムは、当初の予想をはるかに上回る数の方々にご参加頂き、



パネルディスカッションの様子



ポスターセッションでの一コマ

盛会裏に終了することができた。参加者の皆様に主催者として篤く御礼申し上げたい。また、ご多忙にも関わらずパネリストをお引き受け頂き稠密なご準備を頂

いた立花先生、元廣先生には、心より感謝致します。さらに、企画・運営に携わったAPSAならびにC-PhoSTの関係者の方々にも感謝申し上げます。

[1] 当拠点プログラムの詳細に関しては、分子研レターズ、59号、12-13頁を参照されたい。

## 事業報告

# 02 計算分子科学研究拠点 (TCCI) 活動報告

報告：拠点長 高塚和夫 (東京大学, 分子研)

分子研は他の2つの戦略機関(東大物性研、東北大金研)とともに神戸にあるスーパーコンピュータ「京」を中心とする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(HPCI)の戦略的研究分野のひとつ「新物質・エネルギー創成」を担っている。これら3機関は戦略計算物質科学イニシアティブ(CMSI)を構成している。戦略機関における分子科学分野の本部が分子科学研究所(実験棟5階)に置かれており、計算分子科学研究拠点TCCIとしての活動をまとめている。詳しくは分子研レターズ64で説明したところであるが、ここでは具体的に始まった活動状況と方針について報告したい。

### 1) TCCI研究会 (全体シンポジウム)

8月11日、12日に、TCCIの全体シンポジウムである第2回研究会を理研・計算科学研究機構(神戸市)で開催した。100名を超える研究者(民間研究者15名)が集り、「京」用プログラム開発の状況や研究の進捗についての発表・議論を行った。今後も、毎年1回は公開の全体シンポジウムの開催を予定しており、「京」に関心のある方々の参加をお願いしたい。

### 2) 実験化学との交流シンポジウム

11月10、11日に京大福井謙一記念研究センター(京都市)において、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。80名程度(1割が民間)の参加があった。優れた講演者の参加によって、非常に興味深く有意義なシンポジウムとなった。今後は、TCCIにおける実験研究者との交流の進捗に合わせて公開シンポジウムを開催していく予定である。今後も実験研究者の方々の参加をお願いしたい。

### 3) 産学連携シンポジウム

11月24日に野村コンファレンスプラザ日本橋(東京)において、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・意見交換を通じた産学連携を目的に産学連携シンポジウムを開催した。70名程度の参加のうち、半数以上が民間からの参加であり、この分野における産学連携への期待の高さが垣間見られる。TCCIでは、今回のシンポジウムを切っ掛けに産学連携のより具体的な活動を継続的に実施していく予定である。

### 4) 新・元素戦略に関する実験計算連携検討会

文科省からCMSIへ元素戦略に関する支援要請を受け、TCCIでもその対応を進めている。そこで、「電池材料」および「触媒」に関する実験および理論計算研究の研究紹介を11月9日(東大小柴ホール)および11月12日(京大福井謙一記念研究センター)にて行った。参加者はそれぞれ90名弱(半数が

民間)、約60名(2割が民間)であった。今年度まとまる予定の新元素戦略に計算化学の立場から積極的に関与していく予定である。

### 5) 夏の学校、冬の学校など

大学院生レベルの教育をかねて、夏の学校や冬の学校の企画している。夏の学校としては、第15回分子シミュレーション夏の学校を共催で企画協力した。また、分子研とTCCIの主催のもと、TCCIウインターカレッジとして分子シミュレーション冬の学校を12月12日~15日に、量子化学分野冬の学校を12月19、20日に岡崎コンファレンスセンターで開催した。参加者はそれぞれ約90名、約50名であった。

### 6) 国際ワークショップ

超並列計算は国際的にも進んでおり、量子化学等に関する超並列プログラミングに関する公開ワークショップを2月28日に東大駒場ファカルティハウスで開催する。超並列計算に興味のある方は是非参加して頂きたい。

### 7) その他

CMSIは分子科学、物性科学、材料科学分野の理論計算科学に関する全国的な組織であり、適宜、情報交換し「京」の有効活用、分野振興のための公開シンポジウムや研究会を3分野で企画している。3分野の積極的な連携で、今後も分野の振興に努めていく。