

物性，材料，分子研

常行 真司

東京大学大学院理学系研究科 教授

分子研には昔から何かと縁が深い。私の大学院での恩師も、お世話になった研究室助手の先生も分子研OBだったし、学生時代に分子軌道法の手ほどきをして下さった師匠は、分子研の（実験系の）現役教授である。以来、分子研の研究会には、それこそ数えきれないほど出席させていただいた。

とくに足しげく岡崎に通うようになったのは、スーパーコンピュータ「京」の開発が始まってからである。「京」のアプリ開発を行う文科省プロジェクト「グランドチャレンジアプリケーションの開発」の中で、分子研を代表機関とする「次世代ナノ統合拠点」（平成18~23年）がナノサイエンス分野のアプリ開発を担当した。私はこの大所帯の拠点に参加して、たくさんの分子科学研究者と知り合い、それに触発されて新しい研究を開始することができた。

平成22年、「京」による成果創出とハイパフォーマンスコンピューティングの分野振興を目指す「HPCI戦略プログラム」が始まってからは、物性研（代表）、分子研、東北大金研を中心に、「計算物質科学イニシアティブ（CMSI）」というネットワーク型組織を作って活動してきた。CMSIは参加研究者約170名（学生除く）、コミュニティ会員約1,100名を擁し、「京」を使った研究推進に加え、研究会、講習会、若手合宿など年間70件以上のイベントを主催・共催し、計算科学技術に関する配信講義等も行っている。また計算物質科学

のポータルサイト MateriApps を立ち上げ、アカデミアで開発されたフリーウェアを中心に様々なアプリを紹介しており、ユーザが増加中である（詳しくは「CMSI」、「MateriApps」でwebを検索）。

CMSIは物性、分子、材料という近くて遠い三分野の寄り合い所帯なので、さぞ運営が大変でしょうと言われることが多い。実際、組織立ち上げ当時の企画立案・資源配分に関する会議では、司会進行をしても肌を刺すような張り詰めた空気が感じられ、決して定時に終わらない会議が終了すると新たな問題山積で、脱力感に襲われたものである。今でも緊張感がなくなったわけではないが、会議参加者が言いたいことを言い合って前向きな結論が出せるようになったのだから、当初の苦労は無駄ではなかったように思う。もっと良かったのは、CMSIに参加する若手研究者が、分野の壁を越えて気軽に会話するようになったことだ。次の世代の計算物質科学が、そういった会話から生まれることを大いに期待したい。

HPCI戦略プログラムは今年度末で終了する。CMSIが行ってきた活動の多くは、ポスト「京」プロジェクトや、金研を代表機関として今年度採択された「科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業」など、形を変えながら継続されるだろう。しかし結局のところ、分野振興活動を支えるのは参加研究者のやる気、かけられる時間と手間、少額であれ使いやすい運用経費、事務の



方々の協力、機関の執行部や身近な研究者の理解と協力といった、有形無形の「自主財源」であり、コミュニティのためにそれが提供できる機関は限られていると思う。分子研には、分子科学分野の拠点としてのみならず、分子、物性、材料、そして生命科学をつなぐ計算科学のハブ拠点として、引き続きご支援をお願いする次第である。

つねゆき しんじ

1986年東京大学大学院理学系研究科修士課程修了。東京大学理学部物理学科・助手、物性研究所・助教授を経て、2002年東京大学大学院理学系研究科助教授、2007年同 教授（物性研究所・教授を兼務）。HPCI戦略プログラム分野2「新物質・エネルギー創成」戦略機関統括責任者、物性研究所・計算物質科学研究センター長、ポスト「京」重点課題（7）課題責任者。2001年日本IBM科学賞。