5-6　最先端・高性能スーパーコンピュータの開発利用
次世代ナノ統合シミュレーションソフトウエアの研究開発
（文部科学省）

分子科学研究所は2006年4月より表記の「最先端・高性能スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクトにおける「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウエアの研究開発」拠点としてナノ分野の「グランドチャレンジアプリケーション研究」を推進している。並行して行って来たNAREGIプロジェクトは2007年度を最終年度としており，グリッドミドルウエアの実証研究が最終段階に入っている。本項では「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウエアの研究開発」拠点の概要，研究体制，研究開発スケジュール，進捗状況，今後の課題について以下に述べる。

5-6-1　概要

次世代スパコンプロジェクトは我が国がIT分野における国際的なリーダーシップを確保ために「旗艦」的コンピュータを構築し，それを下方展開することによって我が国に強固なITインフラを整備することを目指す国家プロジェクトである。また，このプロジェクトの目的は単に「巨大なマシン」を構築することにとどまらず，同時に，我が国の計算科学における新しいパラダイムの創出を目指すものである。

計算科学はこれまでも物質設計や地球環境などの分野で重要な役割を果たし，社会の技術基盤のひとつとして確固たる基盤を築きつつある。とりわけ，物質や生体分子の様々な機能が発現するナノスケールの現象をターゲットとする計算科学は21世紀における産業を担うべき「知的ものづくり」や個人の遺伝情報に基づく「テーラーメード医療」にとっての技術基盤として大きな期待を集めている。他方，ナノスケールの現象は伝統的な理論化学物理の視点からも極めて挑戦的な課題である。特に, 量子力学, 統計力学, 分子シミュレーションなどの理論･計算科学的方法論にとって，これまでの枠組みを大幅に越えること無くして決して達成しえない研究課題である。

以上の観点から我々は本プロジェクトのナノ分野におけるグランドチャレンジ研究課題として，下記の３つの課題を設定した。

(1)　次世代ナノ情報・機能材料

超高密度実装，高速応答，省エネルギーなどを目指す電子デバイス設計の計算科学的方法論を構築。

(2)　次世代ナノ生体物質

生命体を構成するナノ物質のシミュレーションを可能とする方法論を確立することにより，テーラーメード医療を目指した次世代生命体シミュレーションのナノ基盤を構築。

(3)　次世代エネルギー

化石燃料に代わる恒久的エネルギー源として太陽エネルギーの固定，利用，貯蔵技術，特に，セルロースから酵素反応によりエタノールを生成する技術における計算科学的方法論の確立に貢献。

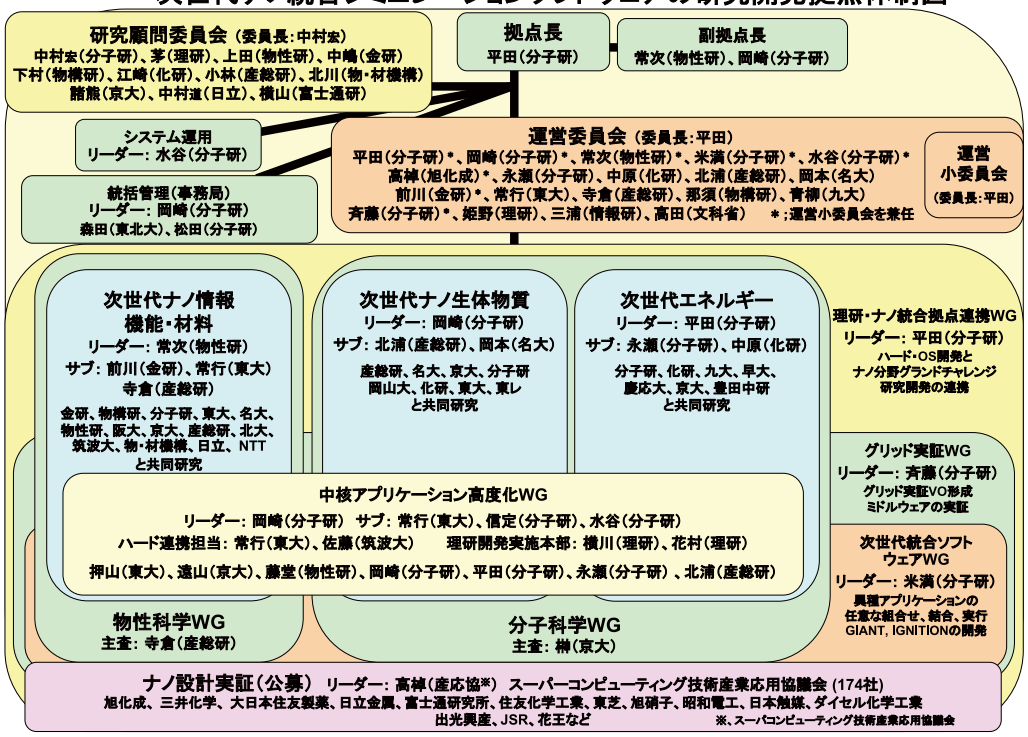
これらの研究課題は国の「重点推進４分野」の中において重要な技術・課題として位置付けられていることからも明らかなように，21世紀の「知的ものづくり」や個人の遺伝情報に基づく「テーラーメード医療」，化石燃料に代わる恒久的エネルギー源の確立，など産業・医療の技術基盤を確立する上で本質的であるばかりでなく，人類の存立基盤そのものにも関わる重要課題であり，「グランドチャレンジ課題」と呼ぶにふさわしいターゲットであると考えている。

我々は本プロジェクトにおいてこれらの課題に挑戦する上で必要な新しい理論や計算科学的方法論あるいは計算プログラムを構築し，そのことを通じて次世代スパコンプロジェクトの成功に貢献したいと考えている。

5-6-2　研究体制

ナノ統合拠点の研究体制を下図に示す。

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発拠点体制図



5-6-3　研究課題（個人）

ナノ統合拠点の研究課題を下表に示す。

1　次世代ナノ情報機能材料

①　次世代ナノ複合材料

課題名	氏名	所属
(1) ナノ複合電子・強度材料		
材料における界面とナノスケール格子欠陥の構造と特性	石橋　章司	産業技術総合研究所
合金材料の内部組織形成と材料特性に関するマルチスケール解析	毛利　哲夫	北海道大学大学院工学研究科
(2) ナノ構造構成要素とその複合系による次世代電子デバイス設計		
ナノ構造構成要素と複合系の機能	押山　　淳	東京大学大学院工学系研究科
第一原理ナノ構造探査	常行　真司	東京大学大学院理学系研究科
(3) 電子励起によるナノ複合電子材料の機能制御		
可視光で誘起されるグラファイト－ダイヤモンド非平衡相転移	那須奎一郎	高エネルギー加速器研究機構
ナノ物質および固体表面での光励起キャリアーダイナミクスと高速化学反応	杉野　　修	東京大学物性研究所
(4) 大規模電子状態計算と精密計算によるナノ複合材料設計		
高効率大規模電子状態計算手法の開発	寺倉　清之	産業技術総合研究所
拡散量子モンテカルロ法による分子の安定性の厳密計算	川添　良幸	東北大学金属材料研究所

② 次世代ナノ電子材料

課題名	氏名	所属
(1) 次世代ナノ非線形光学素子開発		
強相関電子系におけるナノ非線形光学デバイスの理論	遠山　貴己	京都大学基礎物理学研究所
非マルコフ・非負定値経路積分法によるナノ・サイズ多電子系の光励起シミレーション	那須奎一郎	高エネルギー加速器研究機構
光誘起集団電荷移動と伝導の制御	米満　賢治	自然科学研究機構分子科学研究所
(2) 新機能ナノ量子デバイス開発		
ナノスケール電子状態を用いた新規機能設計	永長　直人	東京大学大学院工学系研究科
低次元電子系の特異な状態の探索	小形　正男	東京大学大学院理学系研究科
量子ドット列におけるバンドエンジニアリングと電子物性制御	田村　浩之	ＮＴＴ・物性科学基礎研究所
(3) スピン注入ナノスピンエレクトロニクス素子開発		
ナノスピンエレクトロニクス理論の構築	前川　禎通	東北大学金属材料研究所
複合系の量子伝導シミュレーションとナノスケールデバイス設計	井上順一郎	名古屋大学大学院工学研究科
スピン注入型ナノ電子デバイス	市村　雅彦	日立製作所基礎研究所

③ 次世代ナノ磁性材料

課題名	氏名	所属
(1) 超高記録密度磁気デバイス材料の構造制御		
自己組織化を用いたナノ磁性材料	常行　真司	東京大学大学院理学系研究科
(2) 新しい磁性発現機構をもつナノ磁気素子の開発		
分子磁性体での局所磁気構造	宮下　精二	東京大学大学院理学系研究科
ナノ磁性の第一原理計算	赤井　久純	大阪大学大学院理学研究科
(3) 新しい動作原理による超高記録密度磁気デバイスの開発		
格子変形の自由度のもとでの磁気相転移	藤堂　眞治	東京大学大学院工学系研究科
強相関電子系における新奇量子相	常次　宏一	東京大学物性研究所
量子磁性体における自発的空間対称性のやぶれ ――ダイマー・ストライプ・量子液体――	川島　直輝	東京大学物性研究所

2　次世代ナノ生体物質

課題名	氏名	所属
(1) タンパク質高度シミュレーション新規方法論の開発		
量子化学計算によるタンパク質 - リガ ンド相互作用の解析と結合エネルギーの高精度予測――高精度 FMO 法――	北浦　和夫	産業技術総合研究所
拡張アンサンブルシミュレーションによるナノサイエンス研究	岡本　祐幸	名古屋大学大学院理学研究科
タンパク質フォールディングおよび高次構造形成のメカニズムの分子論的解明	木下　正弘	京都大学エネルギー理工学研究所
生体分子系のプロトン輸送に関する基礎過程	三浦　伸一	金沢大学大学院自然科学研究科
(2) イオンチャネルの分子過程		
イオンチャネルの選択性 ――蛋白質によるイオンの選択的認識――	平田　文男	自然科学研究機構分子科学研究所
(3) ウイルスの分子科学		
ウイルスの全原子シミュレーション	岡崎　　進	自然科学研究機構分子科学研究所
ナノチューブ中の水、水溶液：制約空間がもたらす新規な物性と相転移ダイナミクス	田中　秀樹	岡山大学大学院理学研究科

(4) 細胞膜の分子科学		
がん細胞膜の構造ゆらぎと膜融合 ——RISM 法からのアプローチ——	平田　文男	自然科学研究機構分子科学研究所
細胞膜の構造ゆらぎと膜間相互作用——分子動力学法からのアプローチ——	岡崎　　進	自然科学研究機構分子科学研究所
がん発現にかかわる分子スイッチの分子動力学計算	斉藤　真司	自然科学研究機構分子科学研究所
(5) ナノ生体物質輸送		
生体モデル膜への物質結合——結合量と結合位置の自由エネルギー解析——	中原　　勝	京都大学化学研究所
ミセル生成とミセルによる物質の取り込み、輸送	岡崎　　進	自然科学研究機構分子科学研究所
細胞膜（脂質二重膜）における低分子の透過機構の研究	三上　益弘	産業技術総合研究所
高分子ゲルのダイナミクスと物質輸送	茂本　　勇	東レ（株）機能材料研究所
(6) 新規ナノ生体物質の創生と利用		
既知ナノ生体物質の機能メカニズム解明	北尾　彰朗	東京大学分子細胞生物学研究所

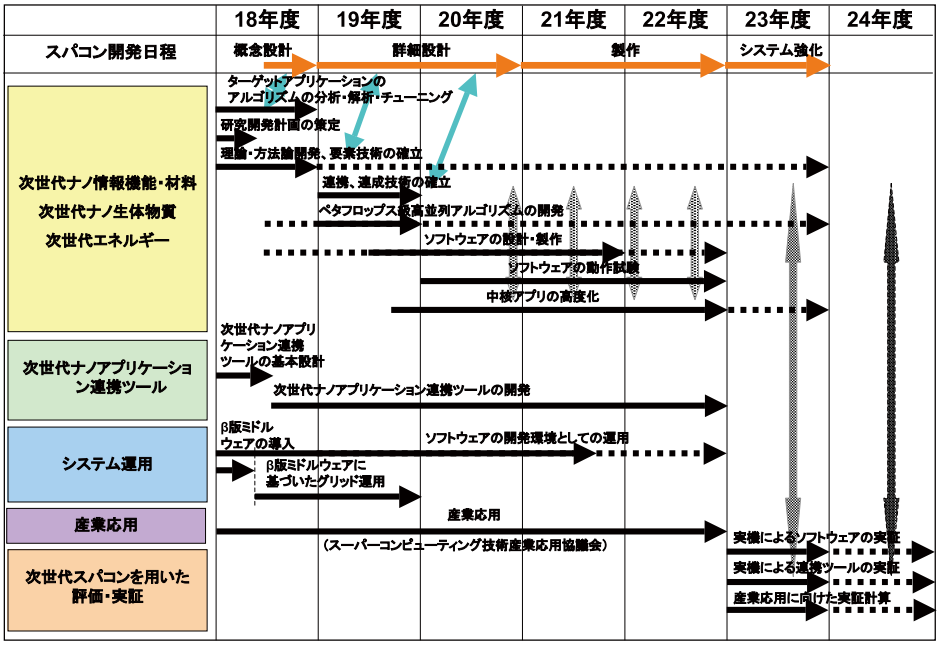
3　次世代エネルギー

課題名	氏名	所属
(1) 光触媒による太陽エネルギーの固定		
固体触媒の励起過程を取り扱う理論的手法の開発と酸化チタン系への応用	中井　浩巳	早稲田大学理工学術院
(2) 光合成による太陽エネルギーの固定		
励起エネルギーおよび電子移動速度の定量的予測のための理論手法の開発	藪下　　聡	慶應義塾大学理工学部
ナノスケール分子における光誘起量子多体系ダイナミクスの理論的解明	信定　克幸	自然科学研究機構分子科学研究所
光エネルギー変換共役分子の先進的電子状態モデリング	柳井　　毅	自然科学研究機構分子科学研究所
(3) 化石燃料からの脱却を目指すアルコール燃料サイクルの確立		
酵素反応によるセルロース分解とアルコール生成の計算科学	平田　文男	自然科学研究機構分子科学研究所
新規無触媒化学サイクルの創成	中原　　勝	京都大学化学研究所
(4) 燃料電池の作動原理における分子過程の解明		
ナノ分子系の精度高い大規模量子化学計算の開発と応用	永瀬　　茂	自然科学研究機構分子科学研究所
界面和周波発生分光の計算科学と液体　高分子界面の微視的構造解析への応用	森田　明弘	東北大学大学院理学研究科
非断熱現象を利用した分子設計	南部　伸孝	九州大学情報基盤センター
ナノスケール構造に基づくマクロ特性解析のための階層シミュレーション法の実現	兵頭　志明	豊田中央研究所計算物理研究室
(5) 高効率物質変換		
ナノスケール複合遷移金属錯体による省エネルギー高効率物質変換反応の理論開発	榊　　茂好	京都大学大学院工学研究科
溶液内及びタンパク質場における励起分子のエネルギー移動と緩和過程	加藤　重樹	京都大学大学院理学研究科
(6) 電極反応の解明		
高度連成シミュレーションによる凝縮系界面の電子構造とダイナミックス	青柳　　睦	九州大学情報基盤センター

5-6-4　研究・開発スケジュール

ナノ統合拠点の研究・開発スケジュールを下図に示す。

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究計画



5-6-5　研究の進捗状況と課題

(1)　グランドチャレンジ中核アプリの選定

昨年度の後半から本年度の前半にかけて，上記グランドチャレンジ３課題を解決するための中核となる６本のアプリケーションプログラムを選定した。それらは固体や分子の電子状態計算，液体･溶液系の統計力学および分子シミュレションなどナノ分野の計算科学にとって不可欠の理論・方法論であり，物性科学（固体電子論）から３本，分子科学領域から３本のプログラムを選定した（下表参照）。

中核アプリケーションの概要

中核アプリケーション名	責任者 氏名	概要
実空間第一原理ナノ物質シミュレータ	押山　淳（筑波大）	10nm 以下の素子を利用した次世代エレクトロニクスのデバイス開発。10万原子系を扱える電子状態計算と効率的位相空間探索プログラム。
動的密度行列繰り込み群法	遠山　貴巳（京大基研）	電子の強い相関効果に起因する光照射量子現象の解明。動的に拡張された密度行列繰り込み群法。
大規模並列量子モンテカルロ法	藤堂　眞治（東大物性研）	ナノ磁性体や電子系などの量子格子模型のシミュレーション。並列化された量子モンテカルロ法、厳密対角化法などのプログラム。
高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト	岡崎　進（分子研）	1000万原子系の巨大システムや自由エネルギーの計算。長距離力を考慮した高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト。
RISM/3D-RISM	平田　文男（分子研）	蛋白質などナノ分子の水和構造や水和自由エネルギーの計算。分子の分布関数に関する積分方程式理論。
高速量子化学計算ソフト	永瀬　茂（分子研） 北浦　和夫（産総研）	電子相関を取り組んだ超巨大分子の電子状態計算。FMO法に基づいた高精度高速大規模量子化学並列計算。

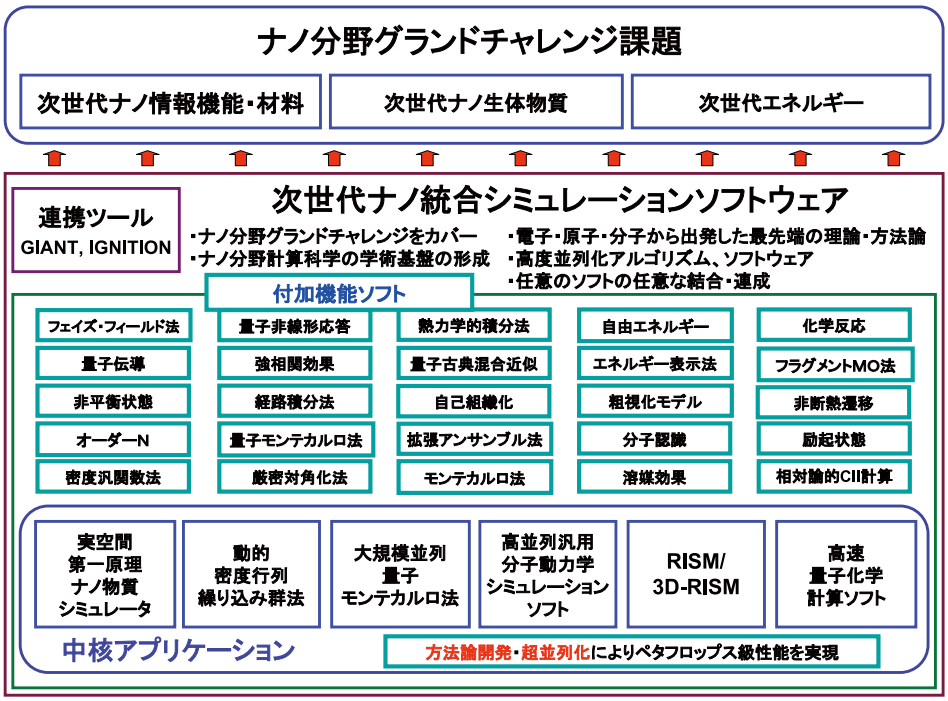
方法論開発･超並列化によりペタフロップス級性能を実現

これらの内５本は理研に設置されたターゲットアプリ検討委員会において次世代スパコンの概念・基本設計用のターゲットアプリとして選定され，概念・基本設計に貢献した。また，これらのうち分子動力学シミュレーションプログラムおよび実空間密度汎関数（RSDFT）プログラムに関しては次世代スパコンに向けた高度化（超並列化など）の作業をすでに開始している。

(2) ナノ統合シミュレーションプログラム

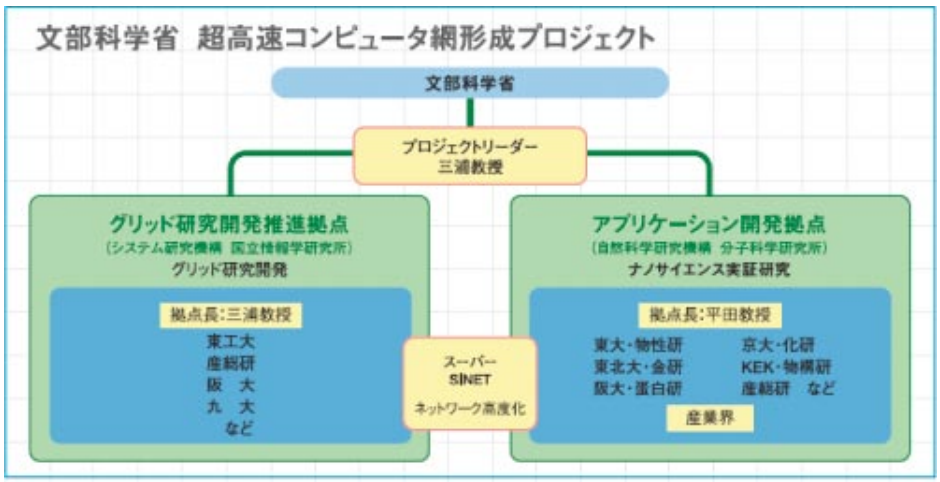
ナノスケールの諸現象は無限の広がりをもつ均一系と不均一な少数多体系が複雑にからみあったマルチスケール・マルチフィジックス現象であり，単一の理論や物理では対応できないものがほとんどである。上記６本の中核アプリは単一の物理現象（例えば，分子の電子状態）を解明する上では強力な武器であるが，それだけではナノ現象に太刀打できない。ナノ現象を解明するためにはこれらの理論・方法論およびプログラムを様々に組み合わせた方法論を開発する必要がある。しかしながら，全く異なる「物理」を組み合わせる場合「竹に木を継ぐ」ようなやり方では両方の方法論が死んでしまう。異なる階層の「物理」を整合的に結合する新しい理論・方法論の開発が必要である。（液体の統計力学（RISM 理論）と分子の電子状態計算法（SCF）を結びつけて，溶液内の電子状態計算を可能にしたRISM-SCF はその例である。）さらに，従来，各階層の物理に対応するプログラムは異なる研究者によって開発されたているため，それらのデータ構造もまちまちであるという事情も考慮する必要がある。これらの要請を考慮し，ナノ現象の多様性に対応するアプリケーションソフトとして開発を進めているのが「ナノ統合シミュレーションプログラム」である。その構造，機能および特徴は次のとおりである（下図参照）。

・個々の物理現象を高速に計算する６本の中核ソフト。
・それらの中核ソフトを多様な仕方で組み合わせてナノ現象に対応するための付加機能ソフト（物理変換･結合機能）
・中核ソフト間のデータ変換と共有を可能にする機能（GIANT）
・ユーザーの負担を最小限にして初期データ生成機能（IGNITION）



(3) NAREGI ナノ実証研究

NAREGI プロジェクトからの継続として，量子化学計算，分子動力学法，固体電子論，統計力学，物性物理等の方法論に基づき，ナノ物質の構造とその機能発現の解明に対し，NAREGI 環境の有用性の実証を進めている。



6 月中旬から分子研グリッドコンピューティングシステムにグリッドミドルウェア β2 版のインストール作業を開始し，インストールが完了した機能から確認テストを進め，9 月末に DetaGrid を除くインストールが完了した。その後，グリッドミドルウェア β2 版でのメタコンピューティングおよびハイスループット計算などに関する実証として，アプリケーション（下記アプリケーション一覧の 1 から 9）を用いたテストを実施してきた。これらの確認テスト，実運用に向けた実証研究用アプリケーションを通して約 70 件の問題点を見出し，情報研および関係機関の協力のもと問題解決を進めている。平成 19 年度は NAREGI プロジェクトの最終年度にあたる。そのため，これまでの実証研究用アプリに加え，下記一覧の 10 から 22 の新たに 13 本のアプリケーションを追加募集し，これらの 22 本のアプリを用いた実証を進めている。

また，分子研グリッドコンピューティングシステムと物性研をはじめとするユーザーサイドクラスタとの間でのナノサイエンス VO 形成を進め，PSE 機能を用いたアプリケーションの配信，VO 内の利用可能計算サーバを有効活用などの実証を行う。

さらに，統合的グリッド環境での一般利用をめざし，1 月末にはプロジェクト参加者への講習会を岡崎および東京で開催し，2 月からは分子研グリッドコンピューティングシステムを中心とする VO において，グリッド環境の一般利用を開始する。

最終評価のために用いるアプリケーション一覧

1	MP2（GridMPI）	永瀬（分子研）
2	非断熱遷移（GridMPI）	那須（物構研）、石田（東芝）
3	熱力学的積分（GridRPC）	岡崎（分子研）
4	密度行列繰り込み群（GridRPC）	遠山（京大）
5	双極子系の Ewald 和（GridRPC）	富田（物性研）
6	RISM-Replica 交換 MC（連成計算）	平田（分子研）、岡本（名大）
7	MD-MO（連成計算）	岡崎（分子研）、森田（東北大）
8	Gaussian 1000 本（ハイスループット）	高棹（旭化成）
9	大規模 MD 可視化（可視化）	岡崎（分子研）
10	レプリカ交換 MC（GridMPI）	岡本（名大）

11	大規模 MD（GridMPI）	兵頭（豊田中研）
12	有限要素法（GridMPI）	市村（日立）
13	不規則系コンダクタンス（GridMPI）	伊藤、井上（名大）
14	トランスコリレイティッド法電子状態計算（GridMPI）	常行（東大）
15	ALPS/parpack+looper（GridMPI）	藤堂（東大）
16	スピン系のツリー近似計算（GridMPI）	川島（物性研）
17	積分方程式を用いた第一原理量子輸送計算（GridMPI）	小林（筑波大）
18	QMAS（GridMPI）	石橋（産総研）
19	rtdft（GridMPI）	矢花（筑波大）
20	FPSEID（GridMPI）	宮本（NEC）
21	有限要素基底の電子状態計算法（GridMPI）	土田（産総研）
22	3D-RISM-FMO（連成計算）	高見（九大）

(4) 各チームの研究進捗状況

本年度のグランドチャレンジ３課題の進捗状況は次のとおりである。（運営委員会資料、2007 年 8 月 31 日（金）時点）

１①. 次世代ナノ情報機能・材料　次世代ナノ複合材料研究進捗報告

1) 研究内容の進捗

- 平面波基底 PAW 法に基づく第一原理材料シミュレータ QMAS をプラットフォームとて，各種物性パラメータの微視的分布を得る計算ツールを開発・整備し，界面・点欠陥を含 む様々な物質で適用研究を行なった。（石橋、田村、田中、香山、寺倉）
- 絶縁膜中の欠陥への電子のトラップ準位について，クラスターモデルを用いた解析法を検討し，計算方法による準位の違いを調べた。（加賀爪、佐々木）
- カーボンナノチューブの曲げに関する形状記憶効果のメカニズムを明らかにした。（尾方）
- アルミニウムの粒界構造と粒界特性の関係を明らかにすべく，幾つかの粒界について第一原理計算が可能なように構造モデルを準備した。（上杉）
- 組織形成のマルチスケール・シミュレーションにおける空間スケールの定量化のため，スピン系を対象として提案されていた経路確率法の自然逐次法を空孔媒介型拡散機構の取り扱いへ拡張した。（大野、毛利）
- Pd-H 系の規則相の全エネルギーを種々の空孔濃度を含む場合に対して FLAPW 法により算出した。（陳、毛利）
- Fe-Ni 系 Invar 合金の熱膨張特性と相安定性に及ぼす弾性エネルギーの効果の計算を行った。（陳、毛利）
- 正方格子を対象に，クラスター変分法とフェーズフィールド法を組み合わせた規則－不規則逆位相境界の時間発展挙動の計算を行った。（毛利）
- 炭素ナノ物質内のナノ空間への異種物質の挿入可能性と新奇物性の発現，またシトクローム酸化酵素中でのプロトン移動機構の解明について，密度汎関数理論に基づく計算を行った。（押山）
- 超高圧下のシリケイト構造変化について新しい知見を得た。（土屋）
- Wang-Landau のアルゴリズムに基づくマルチカノニカル法で，圧力一定のシミュレーションを安定動作させるアルゴリズムを得た。（常行、吉本）

・TDDFT に基づく電子の励起ダイナミクス計算。方法論開発（励起の散逸・非断熱過程），コード開発（並列化），応用（吸収率の異常、表面散乱）など。（杉野、宮本）
・可視光誘起グラファイト－ダイヤモンド構造相転移に関連し，4000 個程の炭素原子系に半経験的ポテンシャル法を適応し，両相間のエネルギー障壁を算出したところ，1.5 eV 程度である事が判明した。これは，チタン･サファイヤ・レーザー数発で十分である事を示す。（那須）
・有限要素基底を用いたオーダー N 法の応用計算を進め，1000 原子超から成る液体エタノール系の第一原理分子動力学シミュレーションを行い，十分な精度が出ていることを確認した。（土田）
・グラフェンの電子デバイス応用に向け, オーダー N プログラム（OpenMX）を用いて電界下の第一原理計算を行い，２層の場合だけ電界に比例したバンドギャップが生じるという知見を得た。また，金属と接することにより電子状態は１層少ない場合の特徴を示すことを明らかにした。（大淵）
・DNA 塩基対の DFT 計算を CONQUEST で行い，PBE を用いることによって，塩基間の水素結合が精度良く再現されることが分かった。さらに，DNA^{+} 水の系に適用し，密度行列にもとづくオーダー N 法が精度良く行えることが分かった。（宮崎）
・密度行列を用いたオーダー N 法のプログラム CONQUEST の beta 版の公開（５月）を行った。（宮崎）
・バナジウム（V）とベンゼン（Bz）からなる multiple-dekker クラスター V_nBz_{n+1} の強磁性安定性機構を明らかにした。（Weng、尾崎、寺倉）
・分子のフント則を精密な配置間相互作用を取り込んだ分子軌道法計算によって算定し，従来発表されていた CH_2 などの解釈の誤りの確認と正しい解釈に成功した。また，鉄原子に対する拡散量子モンテカルロ法計算は相関相互作用を 50% 以上の精度で算定できるレベルを達成した。（川添）

2) 次世代スパコンに関する進捗
・RSDFT プログラムの PACS-CS 上でのチューニングを進め, 現時点での実効性能は, 256 ノードを使用した計算で, 理論ピーク性能の約 10–20% である。

4) 学術論文（省略）

5) 受賞・表彰など
・尾方成信（大阪大学基礎工） 日本機械学会計算力学講演会優秀講演賞　2007.3
・尾方成信（大阪大学基礎工） 日本機械学会賞（論文）2007.4
・尾方成信（大阪大学基礎工） 2006–2007 大阪大学年間論文 100 選　2007.7
・重田育照（筑波大学） 日本化学会および Royal Society of Chemistry PCCP（Physical Chemistry Chemical Physics）Prize

6) 昇進（就職）など
・尾方成信（大阪大学大学院基礎工学研究科機能創成専攻）：同工学研究科助教授より基礎工学研究科教授へ昇任
・邱宇（Qiu Yu）博士（総研大物質構造科学専攻（2006.9.31 卒業））：浙江師範大学教授（中国、金華市）に採用

１②．次世代ナノ情報機能・材料　次世代ナノ電子材料研究進捗報告

1)　研究内容の進捗

・低濃度硼素注入ダイヤモンドの常伝導状態に関する光電子スペクトルを量子モンテカルロ法により計算し，この物質では常伝導体でも，フォノン過程による多重散乱構造がスペクトルに明瞭現れる等，強い電子格子相互作用が存在する事を理論的に立証した。（那須）

・転送行列法によるグリーン関数の計算により，新しい電子状態クラスである量子スピンホール系における局在問題を調べ，トポロジーにより保護された非局在状態の存在および，新しい普遍クラスの存在を見出した。（永長）

・埋め込み型から横結合型へデバイス構造を変化させるシミュレーションを行ったところ，ポイントコンタクト（一番狭くなっているところ）のエネルギーの（フェルミ面に対する）高さによってファノ・パラメータの大きさや符号を変化させることができ，それによって遷移の様子が大きく変化することが分かった。（田村）

・TMR 素子の磁化反転層における電流誘起磁化反転シミュレーション技術を確立した。（市村）

・LDA 第１原理電子状態計算プログラムと量子モンテカルロ計算プログラムを組み合わせることにより，種々の磁性半導体物質探索のための大規模計算プログラムを完成させた。（前川）

2)　次世代スパコンに関する進捗

・動的密度行列繰り込み群法のプログラムの高速化を図るとともに並列化を高めた。

3)　グリッド実証に関する進捗

・特になし

4)　学術論文（省略）

5)　受賞・表彰など

・村上修一　第１回日本物理学会若手奨励賞「スピンホール効果の理論」

6)　昇進（就職）など

・松枝宏明（東北大学理学研究科助手）：仙台電波工業専門高等学校助教（4 月）

・筒井健二（東北大学金属材料研究所助手）：独立行政法人日本原子力研究開発機構量子ビーム応用研究部門研究員（4 月）

・邱宇（Qiu Yu）博士（総研大物質構造科学専攻（2006.9.31 卒業））：浙江師範大学教授（中国、金華市）に採用

・伊藤博介：関西大学システム理工学部准教授（2007 年 4 月 1 日）

１③．次世代ナノ情報機能・材料　次世代ナノ磁性材料研究進捗報告

1)　研究内容の進捗

・N/Cu(100) 自己組織化表面構造に対する不純物吸着酸素の効果について実験・理論の両面から検討し，論文にまとめた。（常行）（物性研小森グループとの共同研究）

・量子系の粒子操作に関するプログラム，外場の変化による状態変化に関するプログラム弾性相互作用による相転移に関するプログラムを完成し，論文を発表した。（宮下）

・オーダ N・KKR 法を用いたナノ構造体を取り扱うための手法の開発が新たに進展した。これまでは物理的直感に基づいて，有効な参照系を設定することによってオーダ N を実現するという方法を用いてきたが，参照系という考えを捨て，純粋にアルゴリズムの問題として取り扱うことによって大幅な単純化が得られた。これにより計算時間の大きな短縮と計算の安定性が達成される可能性がでてきた。（赤井）
・長距離相互作用スピン系に対する O(N) モンテカルロ法をフラストレーションのある系に拡張した。また O(N) レプリカ交換法を開発した。（藤堂）
・磁気４重極相やスピンギャップ相などの新しいタイプの磁性相を高精度に計算するための新しい量子モンテカルロ法に基づくプログラム群を開発した。（川島）
・フラストレートした２次元と３次元スピン系の飽和磁場近傍の静的特性について詳細に研究を行い，有限温度での磁気転移の性質を調べた。（常次）

2) 次世代スパコンに関する進捗
・弾性格子グリーン関数のサブルーチンを組み込んだ，表面自己組織化シミュレーションのための分子動力学法コードを作成した。（常行）
・大規模量子ダイナミックスアルゴリズムを作成中。（宮下）
・超並列を視野にいれたコード開発を行っている。（赤井）
・超並列計算機用多重並列スケジューラ ALPS/parapack を整備し，レプリカ交換法用モジュールを作成した。GUI による格子エディタを開発した。（藤堂）
・スピン系のモンテカルロ法のさらなる高速化に向けて作業中。（常次）

5) 受賞・表彰など
・所　裕子（東京大学大学院理学系研究科宮下研究室） 日本化学会第 87 春季大会優秀講演賞　2007.4

6) 昇進（就職）など
・常行真司（東京大学大学院理学系研究科）：准教授より教授（2007.8.16 付）

２．次世代ナノ生体物質研究進捗報告
1) 研究内容の進捗
・脂質膜やミセルなどのナノ生体物質，分子集合体への分子の付加，コンホメーション変化等様々なプロセスに対する自由エネルギー変化の計算に着手した。（岡崎）
・フラグメント分子軌道法をベースとした TDDFT 法（FMO-TDDFT）法を開発し，巨大分子系の励起状態計算を可能にした。（北浦）
・最近，新しく開発したマルチカノニカル・マルチオーバーラップ法をアルツハイマー病の原因ペプチドのフラグメントである Aβ(29-42) の２分子系に適用して，２つのペプチドが近づく時に，β シート構造ができることを示した。（岡本）
・蛋白質立体構造予測用の斬新な方法を開発した。10 種類の蛋白質に対して，600–700 通りの構造セットの中から天然構造を射当てることに成功した。（木下）

・癌の発現にかかわるタンパク質 Ras に関して分子動力学計算，電子状態計算（QM/MM 計算）を行った。Ras に結合することにより GTP 加水分解を促進するタンパク質 GAP が Ras に与える影響を明らかにした。（斉藤）
・球状ミセルと平面状二分子膜を比較し，頭部の親水性の強さと膜内物質分布の局在性の関連を明らかにした。超臨界水反応の QM/MM －自由エネルギー解析によって，溶媒水分子の触媒能を定量的に示した。（中原）
・脂質二重膜における低分子の透過機構を解明するために，脂質二重膜を低分子が透過する時の自由エネルギーの高速高精度計算法を開発した。（三上）
・ポリマー材料中に存在する低分子の自由エネルギーを評価する技術を開 発した。（茂本）
・T4 ファージ先端の脂質 2 重膜貫通シミュレーションの初期試行を行い，本格的なシミュレーションに必要な膜変形の概要を観察することに成功した。（北尾）

2) 次世代スパコンに関する進捗
・前年度までに開発した大規模系に対する長距離力を含む MD 計算のアルゴリズムに従って modylas の完全領域分割化の作業に着手し，これまでに 7 〜 8 割がたの作業を終えた。（岡崎）
・フラグメント分子軌道法をベースとした TDDFT 法（FMO-TDDFT）法のプログラムを開発し，GAMESS に組み込んだ。（北浦）

3) グリッド実証に関する進捗
・ナノ初期情報生成ツールである IGNITION の機能付加作業を終了し，bug fix 作業を継続して行っている。今年度にはいってからもすでに 30 件程度の修正を行ってきているが，問題となる bug は終息しつつあり，現在，暫定的な公開へ向けての最終段階に入りつつある。なお，これらの作業と並行して，マニュアルの整備も行ってきている。（岡崎）

4) 学術論文（省略）

5) 受賞・表彰など

6) 昇進（就職）など
・北浦和夫（産総研）：京都大学大学院薬学研究科教授に異動（2007.4.1）
・吉井範之（分子研）：ポスドクから姫路獨協大学薬学部准教授に採用（2007.4.1）
・山田篤志（分子研）：ポスドクから同助教に採用（2007.7.1）
・梶本真司（分子研）：ポスドクから東北大学大学院理学研究科助教に採用（2007.8.1）
・篠田恵子（分子研）：ポスドクから（株）三菱科学技術研究センター研究員に採用（2007.4.1）

３．次世代エネルギー研究進捗報告
1) 研究内容の進捗
・電気二重層キャパシタ（スーパーキャパシタ）の設計に不可欠な炭素細孔内の電気二重層の構造を REPLICA-RISM 理論により解明した。（平田）

・酵素反応やイオンチャネルの解析に不可欠な蛋白質による選択的イオン結合を 3D-RISM 理論により解明した。（平田）
・蛋白質の圧力変性の初期過程における水の役割を解明した。（平田）3D-RISM 理論により求めた自由エネルギー曲面上での溶質のダイナミクスを記述する新しいシミュレーション手法を提案した。（平田）
・DC MP2 法を開発し，MP2 計算の O(N) が達成された。（中井）
・周期系に対する新しい解析方法（PBC-EDA）を開発し，固体中の不純物・欠陥などの定量的な解析が可能となった。（中井）
・比較的大きな分子の，二量体，三量体の励起状態における励起子モデルの検証を行っている。その他，複素基底関数法による共鳴状態からの緩和速度の定量的計算法を開発中である。（藪下）
・表面への電子エネルギー散逸の効果を取り込んだ表面吸着系電子状態理論の開発を行った。また，金チオラートクラスターの幾何学的構造と電子物性の詳細を明らかにし，金チオラートクラスターにおいては Au–S 結合が強固な籠状のネットワーク構造を作り，その籠の中に金コアクラスターを閉じ込める構造（Core-in-Cage Cluster）が安定化の原因であることを見出した。（信定）
・大規模多参照量子化学計算に向けた，多参照正準変換電子相関理論を開発し，多重化学結合の解離を定量的に記述できることを数値的に検証した。（柳井）
・球状ミセルと平面状二分子膜を比較し，頭部の親水性の強さと膜内物質分布の局在性の関連を明らかにした。超臨界水反応の QM/MM －自由エネルギー解析によって，溶媒水分子の触媒能を定量的に示した。（中原）
・SCS(Spin Component Scale)-MP2 法のエネルギー微分計算の高速化を行った。 また，MP2 法よる周期境界条件計算の並列プログラムの作成と電子配置を用い た量子モンテカルロ法の確立を行っている。（永瀬）
・酸水溶液界面においてヒドロニウムイオンが特異的に表面配列する構造と和周波スペクトルとの関係を明確に同定した。（森田）
・フッ素置換においても水素原子透過の可能性を見出した。また，新たに，ボロン繊維での可能性を探索し始めた。一方，水素分子を用いる方法はかなり困難であることがいろいろ調べ判明してきている。具体的には，非断熱遷移を起こすことは可能だが，ランダウ－ツェーナー型の擬交差であったり，透過障壁がかなり高いということが上げられる。Mg 等の埋め込む方法も考えたが，あまり芳しくなかった。一方，生体内で利用が可能と思われる新たな蛍光指示薬の理論および実験合成に成功した。（南部）
・射影演算子によって導いた粗視化動力学方程式にあらわれる遥動力の項に基づき，ランダム力の“振幅”を分子動力学計算から見積もった。ブラウン粒子の拡散係数が良く一致することを確認した。（兵頭）
・前年度に引き続き全原子モデルによる厚さ 0.4 μm の油膜のせん断シミュレーションを行い，部分粘性モデルによる界面すべり発生機構を提示した。（兵頭）
・高効率物質変換反応で重要なアルカンの C–H 結合活性化反応の理論的研究を行い，反応 機構と支配因子，重要な軌道相互作用を明らかにした。（榊）
・RISM-3D，PHASE，FMO の３連成計算による凝縮系界面の計算および流体力学＋音波電波の連成解析について，プログラムを開発中。（青柳）

2) 次世代スパコンに関する進捗
・FMO の疎結合部分を含めた超並列化を遂行中。（青柳）

3) グリッド実証に関する進捗

・東工大・阪大・九大・国情を結ぶ NAREGIβII 環境を準備中。（青柳）

4) 学術論文（省略）

5) 受賞・表彰など

・松林伸幸　溶液化学研究会学術賞　2007.7.31

6) 昇進（就職）など

・森田明弘：東北大学大学院理学研究科教授（4 月）