

2.6.3 物質・材料シミュレーション

(1) 研究開発領域の定義

量子力学や統計力学の諸知見を元に、物質の構造、物性、材料組織、化学反応機構などを高精度に解析・予測する技術の確立をめざす研究開発領域であるが、近年では、データ科学の応用による手法の高度化もなされている。化学反応や電子移動などの原子・電子レベルの現象の解明に加えて、それらがミクロな組織や物性に与える影響、メソスコピックレベルの非線形現象とマクロな性能・機能との関係性など、マルチスケールの階層構造、さらには異なったスケールにおける多様な物理・化学現象が絡みあうマルチフィジックスプロセスを明らかにすることで諸現象の制御方法を見出し、新材料の設計指針を提供する。

また、実験的手段による解析が困難な極限環境下の現象予測などにおいても、非経験的で予測精度の高いシミュレーション技術が大きな役割を果たしている。近年盛んになってきた、マテリアルズ・インフォマティクス等のデータ駆動型材料創生にも、大きな関わりを持っている。

(2) キーワード

量子力学、統計力学、第一原理電子状態計算、分子動力学法、モンテカルロ法、分子シミュレーション、フェーズフィールド法、粒子法、連続体力学、流体力学、マルチスケールシミュレーション、マテリアルズ・インフォマティクス、ケモインフォマティクス、プロセスインフォマティクス、計測インフォマティクス、データベース、ハイスループットスクリーニング、データの高品質化、データ同化

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

物質・材料の性質の大部分はその電子状態によって決まっているため、ナノスケールの原子配列の中で電子の電荷、スピンの分布や運動状態を知ることが、材料物性の根源的理解や、新規機能性物質の開発にとって重要である。また、人間の肉眼で見えるスケールでは一様に見える材料においても、多くの場合メゾスケール（数十nmから数百nm）では不均一であり、そのスケールでの材料組織が、マクロな材料の電氣的、磁氣的、機械的特性や機能発現に大きな影響を及ぼしている。

我が国の得意とする材料研究・材料開発分野において、資源、資金、労働力が豊富な他国に比して、我が国が世界を先導するためには、物質・材料シミュレーションの発展による、より高度かつ高速な材料設計の実現が強く求められている。材料の持つ機械的・熱的・電氣的・磁氣的特性とそれが導き出す機能の発現に対して、ナノ、メゾ、マクロの階層構造が生み出すマルチスケール現象、さらには異なったスケールにおける多様な物理・化学現象が絡みあうマルチフィジックス現象を明らかにし、それらをいかに制御するか設計指針を構築することで、新たな材料開発に結び付けることが、物質・材料シミュレーションに期待されている。

具体的に、物質・材料シミュレーションを活用した材料設計の目的としては、

- 1) 多様な元素の組み合わせから、最適な元素の設計（特に多成分から構成される材料）
- 2) 界面、粒界、組織、形状、多孔質構造などの制御による、元素に頼らない材料設計
- 3) メカニズムの解明による、新たな材料設計指針の導出

などがあげられる。

近年では、機械学習などのデータ科学の手法が、計算機の計算能力の爆発的な向上とアクセス可能なデータ量の増加によって、新物質探索と合成において欠かせない基本ツールとして定着しつつある。特にまだ作られていない物質、実験による解析が困難な極限環境下にある物質の解析において、しばしば決定的な役割を演じている。

[研究開発の動向]

• 論文・特許の動向

領域全体の論文数は2012年から2021年までの間で2.5倍に増加している。国別では、中国が2019年以降に論文数首位となっている。論文数シェアは、中国のシェア増大に伴い、欧州、米国は減少している。インドは、2021年で論文数シェア4位になっており、論文数増加率も目立って高い。韓国、イランも論文数増加率が高い。Top1%論文数・Top10%論文数は、2021年には中国が群を抜く1位となっている。インドも増加が続いている。特許ファミリー件数は、領域全体では10年間で2倍の割合で増加しており、国別シェアで見ると中国が2022年時点で他国を圧倒し、首位となっている。Patent Asset Indexのシェアにおいても中国が米国を急追している。(詳細は「研究開発の俯瞰報告書 論文・特許データからみる研究開発動向(2024年)」を参照)

• 主な計算プログラム

計算物質科学では様々なプログラムが開発され、それらを用いた応用計算が数多く行われている。以下では個々の分野において広く使われるプログラム、および特に顕著な進展を示す。なお、この分野における日本の研究者の貢献度は高く、以下では、日本の研究者によるものには、人名、所属を明記する。

・ 分子系電子状態計算分野

海外製の有償ソフトウェアである Gaussian が最も広く使われており、海外製の有償ソフトウェアとしては、Jaguar、Q-Chem、TURBOMOLE、ADF、Spartan などが、海外製の無償のソフトウェアとして Gamess、NWChem などが使用されている。国内では、NTChem (中嶋:理化学研究所)、SMASH (石村:クロスアビリティ)、GELLAN (天能:神戸大学)、DC-DFTB-MD (中井:早稲田大学)、ABINIT-MP (望月:立教大学)、PAICS (石川:鹿児島大学) などがある。

・ 固体系電子状態計算分野

海外製のソフトウェアである VASP が最もよく使われており、海外製の無償ソフトウェアである Quantum Espresso、CPMD、CP2K などにも広く使用されている。国内では、RSDFT (岩田:Advance Soft)、OpenMX (尾崎:東京大学)、RSPACE (小野:神戸大学)、STATE (森川:大阪大学)、QMAS (石橋:産業技術総合研究所)、Conquest (宮崎:物質・材料研究機構)、Salmon (矢花:筑波大学)、PHASE/0 (物質・材料研究機構) などの開発が積極的に進められている。最近、汎用グラフィカルボード (General purpose graphical processing unit; GPGPU) 向けの開発も進められている。

・ 分子シミュレーション分野

固体、ソフトマター系のシミュレーションには、海外製の無償ソフトウェアである LAMMPS が、生体分子系のシミュレーションには、海外製の無償ソフトウェアである GROMACS が最も広く使用されている。国内では、MODYLAS (岡崎:東京大学)、GENESIS (杉田:理化学研究所)、Laich (久保:東北大学)、OCTA (土井、中国科学院大学温州研究所) などの開発が進められている。GPGPU 向けの開発も進んでいる。

• データ駆動科学

データ駆動科学による革新材料の探索に関わる研究としては、ICSD、Materials Project、AFLOW、AtomWork、NOMAD、Bilbao Crystallographic Server などのデータベースが日々、目覚ましい勢いで拡張されていることが注目される。競争力のあるデータベースはアメリカ、欧州を中心に開発されているが、日本でも物質・材料研究機構によるものが有名である。

現在のところ、蓄積される計算データとしては密度汎関数理論、スピン密度汎関数理論によるものがほとんどであるが、量子物質として異常な振る舞いを見せる物質の多くは標準的な LDA/GGA を用いた第一原理計

算を越えた計算が必要になることが多い。従来手法を超えつつ、かつハイスループット計算を行うことが可能な程度に計算コストが抑えられた理論の開発も必要となっている。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

• ニューラルネットワークポテンシャルを活用した分子動力学計算

数式を用いたポテンシャルを活用した分子動力学計算に代わって、ニューラルネットワークに第一原理計算結果を学習させることで得られた相互作用に基づき原子のダイナミクスを計算する、ニューラルネットワークポテンシャルを活用した分子動力学計算が急速に注目されている。第一原理分子動力学法に比較して10,000倍以上の高速化が期待でき、第一原理分子動力学法に匹敵する計算精度が得られる可能性があるとして、期待が高まっている。また、本手法を活用して1億原子系に対して1日当たり1ナノ秒の計算を実現したアメリカと中国のグループによる大規模シミュレーションの成果が、2020年のゴードン・ベル賞に輝いている。現状、高温、高圧、高せん断場、高応力場での計算など、学習が十分できていない系に対して難があるとされるが、今後、解決されていくものと思われる。

この手法を用いた商用サービスも始まっており、Preferred NetworksとENEOSの合併会社Preferred Computational Chemistry (PFCC) は、材料開発者向けに、共同開発した汎用原子レベルシミュレータMatlantisを用いたサービスの提供を開始している。

• マルチスケールの発展形

ナノの情報をメゾに、メゾの情報をマクロにパラメータを介して転送する積み上げ式のマルチスケールシミュレーションでは、現実の現象を十分説明できない例が数多く報告される中、近年、マルチスケールの発展形と言える新しいコンセプトが提案されている。

- 1) 「トランススケール」これまで取り扱いが困難であったナノスケールにおける非平衡・散逸・非定常状態も含めた現象メカニズムの解析結果を起点とし、ナノスケールで起こっている現象が、メソスケール、マクロスケールにどのように繋がっているのかをスケール間の壁を越えて一気通貫に解析するアプローチ。
- 2) 「クロススケール」マイクロとメソスケールの手法、またはメゾとマクロスケールの手法を同一スケールでシミュレーションすることで融合するクロススケールアプローチ。北大の大野、東大の澁田、京都工繊大の高木らにより開発が進められている。分子動力学法とフェーズフィールド法で全く同一スケールの計算を行うことで、両者の結果の直接比較や分子動力学計算で得た組織構造をフェーズフィールド・モデルの計算の初期組織にすることも可能である。
- 3) 「スケール協奏現象」ナノ、メゾ、マクロの異なるスケールが協奏しながら、お互いに助けあうことで、全体が卓越した機能・性能を創出する現象をシミュレーションする技術。東北大の久保らにより原子数可変の超大規模分子動力学ソフトウェアLaichをベースに開発が進められている。

• 量子物質データベース

Bilbao Crystallographic Serverに、与えられた物質の電子状態がトポロジカルに自明か非自明かを判定する機能がつけられた。トポロジカルに自明/非自明の問題は、構造相転移の温度の高低といった問題に比べると曖昧さなしに判定できることもあり、大規模な物質探索のスクリーニングには適したものである。より最近では磁気秩序が存在する状況での判定機能も付加された。これらの判定の基礎になる電子状態については局所密度近似、あるいは局所スピン密度近似およびその拡張を用いて計算することが想定されている。入力データとしてはVASPなどの第一原理電子状態計算のパッケージの出力が使われる。Materials Projectに掲載されている計算結果もVASPによるものであるが、データ駆動物質科学においてデータベースとの結合が弱いコードが淘汰され、強いコードの独占状態になる危険性もあり、計算結果の比較が難しくなるといった観

点から注意が必要である。

• 材料探索のための新たなAIシステム

2023年に、GoogleのAI研究部門であるDeepMindとローレンスバークレー国立研究所のチームは、彼らが開発した「GNoME (Graph Networks for Materials Exploration)」という名のAIシステムにより、17日間で、二次電池、太陽電池、先端LSIなどの用いられる可能性のある200万種の結晶構造を新たに発見したと発表した。この数は、これまでに知られている安定した無機化合物の数の40倍以上に相当する。GNoMEにおいては、グラフニューラルネットワーク (GNN) を用いて、新結晶構造の探索を行っている。GNNで予測した構造に対するDFT (Density Functional Theory) の結果を利用して、アクティブラーニングによりGNNのトレーニングを行い精度を高めている。また、GNoMEが予測した構造をMaterials Projectを主導したG.Ceder率いるバークレー研究所の研究チームが自律型ロボットシステムを用いて検証し、17日間の自動化実験により、予測された58種の化合物のうち41種を合成することに成功した。物質・材料開発の方法を根本から変える可能性があるものとして注目されている。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

【日本】

・「富岳」成果創出加速プログラム (文科省)

2020年4月からスタートした「富岳」成果創出加速プログラムにおいては、

1. より精密・広域・長時間のシミュレーションによるブレークスルー
2. 膨大な組み合わせや多様・複雑な条件下でのシミュレーションによる新たな知見の獲得
3. 大量データ処理・ビッグデータ解析による新たな研究・開発の展開

など、フラッグシップスーパーコンピュータ「富岳」により初めて可能となる超大規模計算・データ解析の実行が期待されている。物質科学に関連するテーマとしては、強相関電子系、生体分子、半導体デバイス、二次電池、永久磁石などに関するものが採択されている。

・マテリアルDXプラットフォーム構想 (文科省)

マテリアル革新力強化戦略の元で実行されているマテリアルDXプラットフォーム構想において、マテリアルイノベーション創出を加速するとともに、データを有効に活用して迅速に社会実装に繋げることができる手法の確立とその全国の産学への展開を目指すプロジェクトとしてデータ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト事業が令和3年度にFS (フィージビリティスタディ) が実施され、令和4年7月に本格実施機関が決定し、9年間の長期プロジェクトがスタートした。

また、同構想のもとで、データ創出基盤の役割を担うものとして整備されたマテリアル先端リサーチインフラでは、全国各地の先端共用設備からの高品質なデータを構造化し、それを同構想のデータ中核拠点であるNIMSに蓄積し利活用することも計画されている。

・トランスフォーマティブリサーチイノベーションプラットフォーム (理研)

令和5年度より理化学研究所において科学分野向け生成AI基盤の開発事業が開始された。ここでは先進的な計算基盤を整備して、良質のデータを収集し、先進的な機械学習モデルを開発し、共用に資することを目的としており、具体的な分野として生命科学と物性科学を対象として行うことになっている。本事業では従来の学問分野ごとのアプローチを横断・融合する生成AI技術によって変革するAI for Scienceの確立を目指しており、国内外の研究機関との連携が検討されている。

・ERATO 前田化学反応創成知能プロジェクト (JST)

2019年10月からERATO前田化学反応創成知能プロジェクトがスタートしている。このプロジェクトでは、北大の前田らにより世界に先駆けて開発された反応経路自動探索技術 (AFIR法) と組み合わせ最適化技術を基盤として、量子化学計算、情報科学、さらにはマテリアルズ・インフォマティクスの技術を組み合わせることで、化学反応における原子の動きを予測し、未知の化学反応を提案する技術の開発を推進している。具体的には、反応経路を過程して量子化学計算を行う従来の理論計算手法の枠組みを取り払い、未知の反応過程を系統的に自動探索するという新たな計算手法の確立を目指している。

- ・実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新 (JST)

平成29年度よりCRESTが進行中である。国内のトップ研究者によって、高分子材料、触媒、スピントロニクス材料、マルチフェロイクス材料、電池材料といった多岐にわたる物質群に対し、実験とデータ科学の融合研究が進められている。公募の段階で企業との連携、社会実装を特に重視することが強調されたプロジェクトで、その成果に注目が集まっている。関連して、さきがけとして「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズ・インフォマティクスのための基盤技術の構築」が令和元年度まで進められ、新進気鋭の研究者によって多岐に渡る研究がなされた。

- ・計算物質科学人材育成コンソーシアム (JST)

物質科学分野向けのスーパーコンピュータ共同利用・共同研究拠点である、東北大学金属材料研究所 (以下 金研)、東京大学物性研究所 (以下 物性研)、自然科学研究機構分子科学研究所 (以下 分子研) と、教育拠点である大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センターの4機関は、2015年8月に「文部科学省 科学技術人材育成費補助事業 科学技術振興機構『科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業 (次世代研究者プログラム)』」の採択を受け、計算物質科学人材育成コンソーシアム (Professional development Consortium for Computational Materials Scientists: PCoMS) を設立した (2015年8月~2023年3月)。上記コンソーシアムでは、ハイパフォーマンスコンピューティング技術を駆使して物質科学分野の課題発見と解決ができる人材育成の環境を整備し、同時に若手研究者の安定雇用につながる仕組みを構築することによって若手研究者を支援している。

- ・燃料電池等の飛躍的拡大に向けた共通課題解決型産学官連携研究開発事業 / 共同課題解決型基盤技術開発 / 評価解析プラットフォーム (NEDO)

2030年以降の固体高分子形燃料電池の自立的普及拡大に資する高効率・高耐久・低コストの燃料電池システムを実現するための共通基盤技術となる評価・解析プラットフォーム (FC・Platform) の構築を目的としたプロジェクトであり、シミュレーショングループ、マテリアルズインフォマティクスグループ、電気化学的特性測定グループ、材料分析/解析グループ、マネジメントグループの5グループから構成されている。特にシミュレーショングループでは、固体高分子形燃料電池の化学・機械劣化連成シミュレータ、製造プロセスから触媒層構造を予測するシミュレータ、発電性能を予測するマルチスケールシミュレータなどの原子レベルからマクロまでの多様なマルチスケールシミュレータの開発が進行中である。

- ・マテリアル革新技術先導研究プログラム、マテリアル・バイオ革新技術先導研究プログラム (NEDO)

2021年度から開始されたマテリアル革新技術先導研究プログラムにおいて、「データを活用した革新的マテリアル製造プロセスインフォマティクス技術の開発」、さらに2022年度から開始されたマテリアル・バイオ革新技術先導研究プログラムにおいて、「マテリアル開発手法のDX革新に資する基盤技術の開発」に関するプロジェクトが進行している。

- ・コンソーシアムの構築

ソフトウェアの開発や継続的発展の枠組みとしての産官学コンソーシアム構築が注目されている。代表的な例として、「電気化学界面シミュレーションコンソーシアム」、「RadonPy データベース共同開発事業コンソーシアム」、「FMO 創薬コンソーシアム」などがある。

これらの他に、スーパーコンピューターセンターが主導する組織やプロジェクトも存在する。代表的なものとして、金研、物性研、分子研、大阪大学エマージングサイエンスデザイン R3 センターの4機関を運営機関する「計算物質科学協議会」、金研、物性研、分子研の間の「計算物質科学スーパーコンピューター共用事業」、金研、物性研の行う「ソフトウェアの高度化事業」、物性研が運営する MateriApps などがある。

• 米国

物質・材料シミュレーションを活用した Materials Informatics のプロジェクトとして有名なものに下記がある。

• Materials Project

物質材料のスーパーコンピューターの第一原理計算結果のデータベースの開発プロジェクト。結晶構造、バンド構造、熱力学特性、電池特性、化学反応などの計算結果を提供している。マサチューセッツ工科大学の Ceder が中心となって進めている。

• AFLOW (Automatic Flow for Materials Discovery)

Duke 大学が中心となって進めている物質材料の第一原理計算結果のデータベース。結晶構造、バンド構造、電子密度、機械特性、熱特性などを提供する。300 万を越える構造と 7 億を越える計算結果が含まれている。

• Open Catalysis Project

Meta AI とカーネギーメロン大学が進めている再生可能エネルギー貯蔵に使用する新しい触媒のモデル化および発見を目的としたプロジェクトで、データベースには 130 万を越える構造、2 億 6000 万以上の第一原理計算結果が含まれている。

• OQMD (The Open Quantum Materials Database)

Northwestern 大学の Chris Wolverton が中心となって進めている、第一原理計算結果によって得られた熱力学特性と構造に関するデータベース。

• Clean Energy Project

Harvard 大学が中心となって、次世代の太陽電池やさらにはエネルギー貯蔵装置の新素材を見つけるために、分子力学計算と第一原理計算を併用して、有機材料の探索を行っている。

• Polymer Genome

コネチカット大学の Rampi Ramprasad が中心となって進められている、実験と第一原理計算から得られたポリマーの構造と物性値に関する構造データベース。

また、Materials Informatics を推進する機関として有名なものに、Materials Genome Initiative の時に設立された NIST、ノースウェスタン大学、CHiMaD (Center for Hierarchical Materials and Design) を中心として進めているシカゴ大学がある。

Materials Genome Initiative 後には、Designing Materials to Revolutionize and Engineer our Future (DMREF) というプロジェクトが立ち上がった。DMREF の興味深い取り組みとして、物質

の合成に焦点を当てた The Synthesis Genome で、既存の合成方法から新規物質の合成法を予測するという試みがある。

• 欧州

EU 全体での研究・イノベーションのプログラムである 2014 年～2020 年に実施された Horizon2020 の後継プロジェクトとして、Horizon Europe が 2021 年～2027 年の予定で進行しており、7 年間で 955 億ユーロの予算が予定されている。Horizon Europe の中の Digital Europe という枠組みの中で、2023 年までに世界トップレベルのエクサスケールコンピュータを完成させることが計画されているなど、スーパーコンピューティング、AI 技術、量子コンピューティングの利用拡大が推進されている。

- Fair-DI (Fair Data Infrastructure for Physics, Chemistry, Materials Science, and Astronomy e.V.)

2015～2018 年に EU で行われた NOMAD (Novel Materials Discovery) プロジェクトの成果がドイツやオランダを中心とする研究機関コンソーシアム Fair-DI に引き継がれ、継続的な運営が進められている。

- Materials' Revolution Computational Design and Discovery of Novel Materials (MARVEL)

Swiss National Science Foundation による 12 年に渡る長期プロジェクトで、第一原理計算を活用した材料インフォマティクスによって新材料の発見することを目的とした、EPFL 中核のプロジェクト。AiiDA (Automated Interactive Infrastructure and Database for Computational Science) と呼ばれるプラットフォームをベースとして進められている。

- QM9

スイスのベルン大学の Jean-Louis Reymond のグループによって進められている第一原理計算によって得られた低分子化合物のデータベース。13 万分子以上の最適化構造とそのエネルギー以外に双極子モーメントなども掲載されている。

• 中国

北京科技大学に Beijing Advanced Innovation Center for Materials Genome Engineering が、上海大学に Materials Genome Institute が、上海交通大学に Materials Genome Initiative Center が設立されている。

• 韓国

韓国科学技術院が中心となって Creative Materials Discovery Project (2015–2024) が進められている。

(5) 科学技術的課題

• 計算物質科学全体の課題

計算物質科学において、手法の開発が望まれている領域としては、1) 強い電子相関をもつ電子系、2) 光、有限温度などによる励起状態、3) 多数の原子・分子、長い時間のダイナミクス、4) 複数のサイズや時間スケールにまたがる現象を追うマルチスケール、などがある。これらの課題は、近年、現実の系との比較や予測を行えるように、計算対象が大規模化・複雑化していることから、ますます重要な意味を持つようになってきている。

課題の全体的方向性については、計算物質科学協議会が 2020 年、2022 年にまとめた提言書に詳しく述べられている。

計算物質科学協議会において、2020 年 8 月に「計算科学技術関連の科学技術政策に対する提言書」がま

とめられている。「HPCI関連事業、マテリアル革新力強化戦略事業の実施課題」に関する提言書1と「計算物質科学分野の動向と今後のありかた」に関する提言書2の2部構成になっている。提言書1では、国家事業として、1) 計算データのリポジトリと利活用促進事業、2) 戦略的データ利活用のためのソフトウェア開発事業、3) 実験研究者のスパコン利活用促進事業を促進する必要性が述べられている。提言書2では、計算物質科学分野の今後のありかたとして、1) 基礎・基盤科学技術としての計算物質科学、2) 合成・計測・計算の連携、3) マテリアルズ・インフォマティクス、4) 計算物質科学の産業応用・展開、5) コミュニティソフトウェアの開発・普及、6) 若手人材の育成、7) 計算物質科学の裾野を広げる計算機環境の観点から、それらの重要性について提言がなされている。

また、2022年3月には、計算物質科学協議会は、「マテリアルDXにおける計算データリポジトリに関する提言書」もまとめている。この中では、1) 計算物質科学界におけるデータリポジトリの世界および日本の情勢、2) 「富岳」成果創出加速プログラムでの研究データマネジメント状況、3) 計算、合成、計測のデータ融合と利活用を考慮したデータ同化技術、4) 産学官で活用される計算物質科学データリポジトリの在り方、5) 国産ソフトウェアパッケージ開発の重要性、6) 「富岳」を頂点とする大規模計算機に立脚した材料データの自動創出、7) 計算物質科学コンソーシアムの育成とそれを基盤とするデータリポジトリの創出、の7項目の観点から、それらの重要性について提言がなされている。

・データ科学利用に関連した課題

実験データに関しても、計算データに関しても、取得しやすいものは大規模なデータベースが出来上がっている。実験データとしては結晶構造、計算データとしては、一体の量（エネルギー分散やバンドギャップ）についてのデータベース化は十分に進んでいるといえる。ところが、実験による決定に手間がかかる物性値、たとえば、（非共線）磁気構造、構造相転移温度、磁気転移温度、超伝導転移温度などや、計算しにくい電気伝導度やスピン感受率、誘電率といった二体の量、低エネルギー物性を正確に記述する有効モデルのパラメータ、計算コストがかかるフォノンに関わる物理量についてはあまりデータが蓄積されておらず、今後も規模拡大を継続していくことが強く望まれている。また、論文として出版されないものの、人工知能による解析によって意味を持つことが期待される実験データをコミュニティで共有できるような体制作りも望まれる。

密度汎関数理論、スピン密度汎関数理論に基づく局所密度近似、局所スピン密度近似による計算は多くの物質で比較的信頼性の高い結果を与えてきたが、異常物性を示す量子物質の中には標準的な手法が適用できない例も多い。精度の面で従来手法を超えつつ、かつハイスループット計算を行うことが可能な程度に計算コストが抑えられた手法の開発も重要課題といえる。

機械学習による物質探索を進める上でよい記述子の発見は重要な鍵である。非自明な記述子を人工知能に探索させるという戦略はデータ科学ならではの考え方であるが、よい記述子の発見に物性物理学の理解の進歩も本質的な役割を果たしうることは忘れられるべきではない。例えば、近年、異常ホール効果を示す反強磁性体の研究が盛んに行われているが、異常ホール効果を磁化の大きさで整理していると強磁性体しか探索の網にかからない。強磁性体、反強磁性体を同じ土俵で探索するためには磁化という概念を一般化した量を記述子として導入する必要がある。その際、磁性体の電子状態や磁気構造の分類に関する理解を深めることで非自明な記述子に到達でき、かつ物性物理学のあらたな展開に結びつけられることがある。このような物性物理学とデータ科学の間の正の循環を起こすためには幅広い分野の人材交流が有効である。

(6) その他の課題

この分野に求められる人材として、1) 基礎理論やソフトウェアの開発を実施する人材、2) 様々な階層の手法を連結し、系全体を丸ごと扱うマルチスケールシミュレーションが実施できる人材、3) 既存のシミュレーションと機械学習・データサイエンスの手法を高度に組み合わせ、隠れた相関を発見し、さらに物質のデザインが自在にできる人材、4) 実験グループと密に連携を取りながら、新しいサイエンスを開拓できる人材、5)

計算の専門家と実験グループのマッチングを先導し、新しい共同研究を生み出す研究コーディネータ などがあると考えられるが、いずれの人材に関しても、物理、化学、材料工学等と、計算科学に関連した体系的な教育の両方を受けている必要がある。こうした教育カリキュラムを充実させていくとともに、若手人材のキャリアパスの多様化を実現していくことが、慢性的に人材不足が叫ばれるこの分野には強く望まれている。

(7) 国際比較

| 国・地域 | フェーズ | 現状 | トレンド | 各国の状況、評価の際に参考にした根拠など |
|------|---------|----|------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 日本 | 基礎研究 | ◎ | → | 分子系電子状態計算、固体系電子状態計算、分子シミュレーションの全てにおいて、ソフトウェア開発が精力的に行われている。特に2014年度から2020年3月までに実施されたポスト「京」重点課題・萌芽的課題において、「富岳」での活用を目的としたソフトウェアの開発・発展が行われ、さらに2020年4月から開始された「富岳」成果創出加速プログラムに引き継がれている。 文科省のデータ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト事業、マテリアル先端リサーチインフラ、学術変革領域研究 (A)「データ記述科学の創出と諸分野への横断的展開」および「学習物理学の創成」など多くのプロジェクトが走っている。物質材料研究機構を中心とした安定した研究基盤が存在する。富岳を中心とした計算資源もある。 |
| | 応用研究・開発 | ◎ | ↗ | 国の大型プロジェクトに牽引される形で、物質・材料シミュレーションの応用研究が活発化している。計算、実験、計測、さらにはデータ科学の合同プロジェクトが増え、また産官学の連携プロジェクトも増える中で、応用研究が急速に広がっている。また、電気化学界面シミュレーションコンソーシアムに代表されるように多数の企業が参加するコンソーシアムやプロジェクトも拡大している。 機械学習ポテンシャルを使った分子動力学シミュレーションに取り組むベンチャー企業が設立されるなど、民間でも動きが激しい。 |
| 米国 | 基礎研究 | ◎ | ↗ | 世界で最も多く活用されている分子動力学ソフトウェアLAMMPSの開発と無償配布、世界で最も多く活用されている分子系電子状態計算ソフトウェアGaussianの開発と販売に代表されるように、無償、有償のソフトウェアの開発が盛んに行われている。 Materials Genome Initiative以来の伝統が脈々と続く。Designing Materials to Revolutionize and Engineer our Futureが進行中。 |
| | 応用研究・開発 | ◎ | ↗ | Materials Project、AFLOWに代表されるように、第一原理計算結果のデータベースの開発に加えて、データベースとMaterials Informatics技術を活用した材料探索など活発に応用研究・材料設計を推進している。新物質の探索だけでなく、合成方法についての研究も盛ん。特許申請も多い。 巨大な計算基盤を持つGAFAMなどのビッグテックが、材料探索などに相次いで参画し、大学等と連携して大きな成果を挙げ始めている。 |
| 欧州 | 基礎研究 | ◎ | ↗ | 世界で最も多く活用されている固体系電子状態計算ソフトウェアVASPの開発に代表されるように、無償、有償のソフトウェアの開発が盛んに行われている。 Materials' Revolution: Computational Design and Discovery of Novel Materials (MARVEL) やThe Novel Materials Discovery (NOMAD) Laboratoryなど、大型かつ長期のプロジェクトが進行中。 |
| | 応用研究・開発 | ◎ | ↗ | Horizon Europeの中でのDigital Europeという枠組みの中で、エクサスケールのスーパーコンピュータのシステム開発、ソフトウェア開発とあいまって、欧州で開発されたソフトウェアの活用による応用研究が精力的に推進されている。 |

2.6 俯瞰区分と研究開発領域
共通基盤科学技術

| | | | | |
|----|---------|---|---|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 中国 | 基礎研究 | ○ | ↗ | 中国ではマクロなスケールのシミュレーションが中心であり、ナノ・メゾを扱う物質・材料シミュレーションに関しては、中国発の方法論およびソフトウェアは多くは無い。日欧米へ留学していた研究者が中国に帰国して活躍を始めており、今後、方法論、ソフトウェア開発が活発化する可能性が高い。 経済安全保障上鍵となる「核心的部材」と定義される材料に関する研究は盛んである。ただ、真に価値のある高品質なデータを世界と共有して科学の発展に資する姿勢があるか、と言う点で政治的な難しさがある。 |
| | 応用研究・開発 | ○ | ↗ | 現状、中国ではマクロスケールのシミュレーション手法を活用した応用研究が中心的であるが、今後、ナノ・メゾを扱う物質・材料シミュレーションに関しても、日欧米から中国に帰国した研究者により活発に応用研究が進む可能性が高い。 データ科学は透明性が肝心である。欧米など中国以外で公開しているデータやコードを中国が利用することはありえても、中国が独自にもつ高品質なデータを中国以外の国が無制限に利用して研究をすることがありえるか、の見通しは応用研究のレベルになると必ずしも明るくないと考える。個人のレベルの研究交流と組織のレベルの研究交流の慎重な切り分けが難しい。 |
| 韓国 | 基礎研究 | △ | → | 韓国発の方法論およびソフトウェアは多くは無く、現状では今後、活性化して行く兆候は見られない。 |
| | 応用研究・開発 | △ | → | 研究分野としては、エレクトロニクス関係の論文は多いが、今後さらに応用研究が活発化する兆候は見られない。 |

(註1) フェーズ

基礎研究：大学・国研などでの基礎研究の範囲

応用研究・開発：技術開発（プロトタイプの開発含む）の範囲

(註2) 現状 ※日本の現状を基準にした評価ではなく、CRDSの調査・見解による評価

◎：特に顕著な活動・成果が見えている

○：顕著な活動・成果が見えている

△：顕著な活動・成果が見えていない

×：特筆すべき活動・成果が見えていない

(註3) トレンド ※ここ1～2年の研究開発水準の変化

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

参考・引用文献

- 1) Claudia Draxl and Matthias Scheffler, "NOMAD: The FAIR concept for big data-driven materials science," *MRS Bulletin* 43 (2018) : 676-682., <https://doi.org/10.1557/mrs.2018.208>.
- 2) Camilo E. Calderon, et al., "The AFLOW standard for high-throughput materials science calculations," *Computational Materials Science* 108, Part A (2015) : 233-238., <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2015.07.019>.
- 3) Stefano Curtarolo, et al., "AFLOWLIB.ORG: A distributed materials properties repository from high-throughput ab initio calculations," *Computational Materials Science* 58 (2012) : 227-235., <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2012.02.002>.
- 4) Anubhav Jain, et al., "Commentary: The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation," *APL Materials* 1 (2013) : 011002., <https://doi.org/10.1063/1.4812323>
- 5) Leopold Talirz, et al., "Materials Cloud, a platform for open computational science," *Scientific Data* 7 (2020) : 299., <https://doi.org/10.1038/s41597-020-00637-5>.
- 6) Sten Haastруп, et al., "The Computational 2D Materials Database: high-throughput

modeling and discovery of atomically thin crystals,” *2D Materials* 5, no. 4 (2018) : 042002., <https://doi.org/10.1088/2053-1583/aacfc1>.

- 7) Giovanni Pizzi, et al., “AiiDA: automated interactive infrastructure and database for computational science,” *Computational Materials Science* 111 (2016) : 218-230., <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2015.09.013>.
- 8) Mois Ilia Aroyo, et al., “Bilbao Crystallographic Server: I. Databases and crystallographic computing programs,” *Zeitschrift für Kristallographie - Crystalline Materials* 221, no. 1 (2006) : 15-27., <https://doi.org/10.1524/zkri.2006.221.1.15>.
- 9) Mois Ilia Aroyo, et al., “Bilbao Crystallographic Server. II. Representations of crystallographic point groups and space groups,” *Acta Crystallographica A* 62 (2006) : 115-128., <https://doi.org/10.1107/S0108767305040286>.
- 10) Shyue Ping Ong, et al., “Python Materials Genomics (pymatgen) : A robust, open-source python library for materials analysis,” *Computational Materials Science* 68 (2013) : 314-319., <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2012.10.028>.
- 11) Jörg Behler and Michele Parrinello, “Generalized Neural-Network Representation of High-Dimensional Potential-Energy Surfaces,” *Physical Review Letters* 98, no. 14 (2007) : 146401., <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.146401>.
- 12) So Takamoto, et al., “Towards universal neural network potential for material discovery applicable to arbitrary combination of 45 elements,” *Nature Communications* 13 (2022) : 2991, <https://doi.org/10.1038/s41467-022-30687-9>.
- 13) 尾崎泰助「計算物質科学関連の科学技術政策に関する提言」計算物質科学協議会 (CMSF) , <http://cms-forum.jp/wp/wp-content/uploads/2022/05/teigensyo-CMSF202008-public-file.pdf>, (2023年1月6日アクセス) .
- 14) 計算物質科学協議会・提言書作成ワーキンググループ「マテリアルDXにおける計算データリポジトリに関する提言書」計算物質科学協議会 (CMSF) , http://cms-forum.jp/wp/wp-content/uploads/2022/05/teigensyo-CMSF202203-public_file.pdf, (2023年1月6日アクセス) .

2.6