



IMR NEWS

KINKEN Plus

For Society 5.0



2026
SPECIAL

Vol. 04

材料探究、
世界発信。



IMR NEWS

KINKEN

IMR ニュース KINKEN Plus
2026 SPECIAL vol.04

東北大学金属材料研究所
<http://www.imr.tohoku.ac.jp>

【発行日】令和8年2月発行
【編集】東北大学金属材料研究所 情報企画室広報担当
〒980-8577 仙台市青葉区片平2-1-1
TEL: 022-215-2144 E-mail: pro-adm.imr@grp.tohoku.ac.jp



TARGETmap KINKEN

未来社会を革新するマテリアルサイエンス。

■ 構造材料

■ 機能材料

■ 量子物性

<p>耐環境材料</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 腐食 ■ 水素脆化 	<p>急冷材料・多孔質材料</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ アモルファス・金属ガラス ■ ナノ構造・複合材料 ■ デアロイング 	<p>電極材料</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 蓄電池 ■ リチウム ■ マグネシウム 	<p>結晶成長</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ その場観察 ■ 固液界面 ■ 新物質 	<p>物性理論</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 量子物性 ■ 機械学習 ■ 物質設計 	<p>有機量子物性</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 分子性導体 ■ パイ電子 ■ 有機エレクトロニクス
<p>材料加工・プロセス</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ コバルトクロム合金 ■ 積層造形 	<p>金属組織制御</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 鉄鋼材料 ■ 相変態 ■ 表面硬化材料 	<p>水素化物</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 水素貯蔵材料 ■ 高速イオン伝導材料 	<p>単結晶材料</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ シンチレータ結晶 ■ 酸化ガリウム ■ 融液成長法 	<p>金属錯体</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 電荷移動錯体 ■ 分子磁石 ■ 分子吸着材料 	<p>強相関スピン物性</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ スピン超構造 ■ 創発現象
<p>格子欠陥分析・原子力材料</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 3次元原子プローブ ■ 陽電子消滅 ■ 透過電子顕微鏡 	<p>核融合</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 核融合炉材料 ■ 粉末冶金 ■ ナノインデンテーション 	<p>先端エネルギー材料</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ スピン環境発電 ■ 全固体二次電池 ■ 高効率太陽電池 	<p>磁性材料</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ ナノ磁性 ■ スピントロニクス ■ スピнкаロリトロニクス 	<p>強磁場物性</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 磁性 ■ 極端条件 ■ 相制御 	<p>超伝導物性</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 液体ヘリウム ■ 電場誘起超伝導 ■ 2次元超伝導
<p>超大規模計算</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ スーパーコンピュータ ■ マルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション 	<p>新素材</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 新材料の創製 ■ 材料評価と分析 	<p>セラミック材料設計</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 第一原理計算 ■ マテリアルズインフォマティクス 	<p>超伝導材料</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 無冷媒マグネット ■ ハイブリッドマグネット 	<p>放射性・核燃料物質</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 放射性同位元素 ■ ホットラボ ■ 中性子照射 	<p>強相関アクチノイド物性</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ f電子系 ■ 超伝導 ■ 量子振動
<p>産学官連携</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 大学シーズ技術移転 ■ 企業との共同研究 ■ 人材育成 	<p>材料分析支援</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 元素分析 ■ TEM解析 	<p>構造解析</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ シンクロトロン放射光 ■ 原子配列 ■ 非晶質・結晶質 	<p>量子ビーム計測</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 中性子散乱 ■ X線散乱 ■ ミュオンスピン回転 	<p>トポロジー物性</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 相対論的準粒子 ■ 量子伝導 ■ 新物質開発 	
<p>■ 分析・実験技術、装置共用</p>					

CONTENTS

材料探究、世界発信。

計算材料学が目指す
情報と実世界の融合。

01 SPECIAL INTERVIEW

計算材料学新時代

—理論で目指す未踏のマテリアルサイエンス

金属物性論研究部門

野村 悠祐 教授

複合機能材料科学研究部門

熊谷 悠 教授

02 SPECIAL FEATURE

Toward Society 5.0

仙台から世界へ

MASAMUNE-式が切り拓く材料科学の未来

計算材料学研究部門・計算材料学センター センター長

久保 百司 教授

MASAMUNE-式 User's Voice

金属組織制御学研究部門

宮本 吾郎 教授

東北大学大学院理学研究科

是常 隆 教授

東京大学大学院工学系研究科

中山 哲 教授

構造制御機能材料科学研究部門

李 弘毅 助教

データで見るMASAMUNE USER

最先端計算材料学研究プロジェクト in KINKEN

材料探 究、 世界発 信。

計算材料学を目指す 情報と実世界の融合。

Society 5.0が掲げる「デジタルと現実の融合による社会課題解決」。原子・分子モデルをコンピュータ上で構築し現実の材料開発につなぐ計算材料学は、その先駆的实践例といえる。

計算材料学の始まりは、1950-1960年代の量子力学による電子状態理論と計算手法の発展に遡る。1970年代にはアルゴリズムの発展と計算機能の向上により、確立されてきた理論が計算手法として普及。当初は主に理論研究者が扱う分野とされてきたが、多原子系や欠陥、表面・界面などへ応用範囲が広がり、「計算による材料物性予測」が確立する。

1990年代にはマイクロからマクロまで異なるスケールの情報を連携して計算するマルチスケール解析が進展し、世界で“computational materials science”が定着した。金研は1994年に初代スーパーコンピュータ(スパコン)を導入し、材料設計シミュレーションを本格化。アジアを中心とした計算材料学の国際連携の枠組みを構築し、国内初の国際ネットワーク経由でのスパコン利用を実現するなど、日本の計算材料学の拠点として貢献してきた。

2000年代以降は膨大なデータ解析による材料開発を効率化するマテリアルズ・インフォマティクスが台頭。計算が実験と理論の橋渡しをするツールとして位置づけられるようになり、これまで計算を取り入れてこなかった分野にも効率的な研究を促進する重要なツールとして定着し始める。

2025年に金研で稼働を始めた6代目スパコンMASAMUNE-弐では、計算材料学に特化した大規模計算と機械学習との連携を強化し、材料探索のさらなる進展を図る。

Society 5.0実現に向けた材料科学の中核的手法として一層重要度を増す計算材料学。材料科学の最先端を走る金研の動向を紹介する。



材料探究、 世界発信。

SPECIAL
INTERVIEW

01



計算材料学新時代

—理論で目指す未踏のマテリアルサイエンス

野村 悠祐 教授
金属物性論研究部門

熊谷 悠 教授
複合機能材料学研究部門

研究の力点

電子の複雑な相互作用の解明に挑戦(野村)
セラミックスを中心とした新材料探索(熊谷)

熊谷:野村先生は物性物理、私は材料工学と分野は異なりますが、どちらも実験ではなく計算機を使う理論・計算を軸に研究を進めています。

野村:物性理論の中でも「量子多体系」を主な研究テーマとしています。物質中の原子や電子などのミクロな粒子は量子力学の法則に従って運動します。理論計算では単独の粒子の動きは比較的予測しやすい。しかし現実の物質は「量子多体系」と呼ばれる相互作用するミクロな粒子の集団で構成されており、そのふるまいを厳密に予測するのは困難です。この複雑な現象を理論計算によって解き明かそうとするのが「量子多体問題」で、常識を超える新奇現象の理解に挑戦しています。

熊谷:機能性セラミックスを中心とした新材料探索を行っています。セラミックスは理論計算と相性がよく、高い精度での予測が可能な場合が多い物質です。この理論計算を基に数千～数万件の物質を対象に行い、その結果をAIに学ばせて新材料を探索します。膨大な解析から「良い材料がなぜ良いのか」という規則性を見つけ、科学的発見にもつなげたいと考えています。私の研究では汎用的なプログラムを活用することが多いですが、野村先生は新たなプログラム開発も行っていますね。

野村:汎用的なプログラムの場合、一般的な性質を示す物質はある程度精度よく解析できます。一方、電子間の相互作用で絶縁化するモット絶縁体や、通常の物質よりも高い温度で電気抵抗



がゼロになる高温超伝導体のように、特異な性質を持つ物質では精度が悪い。近似の精度を上げるためには、新たにプログラム開発を行う必要があります。事例が少ないため難問といわれる分野ですが、説明できない現象をどう説明するかに面白みを感じています。

熊谷:私は理論で予測したことを実験で検証することに関心があります。計算材料学に興味を持ったのも、理論を使えばより効率的に材料探索ができると思ったからです。理論と実験を組み合わせ、社会的に有用な材料を理論主導で提案できる分野と考えています。

野村:私は逆に説明できると物足りないと感じてしまうんです。これまで説明できなかった現象について、予測可能な精度の高いプログラムが開発できたら世界に公開し、他の人たちに使ってもらおう。自分は次の課題や興味に進みますが、開発したプログラムが新しい発見や社会に貢献するなら嬉しいですね。

熊谷:計算材料学で重要性が増しているのは、計算データを後処理するプログラミングです。計算後に出てくる大量の生データは、次の計算や機械学習で使える形に整える必要があります。私たちはそうしたプログラム開発に対してもアクティブに取り組んでいます。

金研のポテンシャル

理論と実験の融合を支える金研の
研究環境とマテリアルサイエンス
における計算材料学の今



熊谷:金研の強みの一つは研究室体制が大きいことです。学生の頃から金研を知っていますが、多くの研究者を率いる教授はその分野を第一線で牽引している印象でした。自身が教授として着任してからは運営の大変さも感じていますが、第一線で



研究を続けることが金研の教授としての使命だと思っています。

野村: 理学系にも金研にゆかりのある著名な研究者が多く、一級の研究をする場所というイメージでした。実験系の研究室が多いのも大きなアドバンテージです。最新の実験情報を共有してもらったり、共同研究をしたり、研究環境はとても恵まれています。今後は熊谷先生と同様、准教授、助教がいる体制を活かし、いい仕事ができるよう努めていきたいです。

熊谷: 立地もいいですね。仙台駅が最寄りで住環境も整っているの、人材を集める際のPRポイントになります。

野村: 交通の便が良く、食事の場所にも困らないので国内外のゲストも招きやすいです。一方で、金研に研究拠点を移す場合、家族の都合で移住が難しい人もいます。理論研究はリモートも可能なので、課題はありますが柔軟な働き方を提案したいです。

熊谷: 研究設備の面では、金研には物質材料研究に特化したスーパーコンピューティングシステム(スパコン)MASAMUNE-式があり、自分たちも含め多様な分野の人が活用しているのが特徴です。

野村: 物性理論において計算機は一般的なツールです。数式を立て、コンピュータに入力して数値計算します。簡単な計算なら自分のパソコンや研究室の計算機クラスターで済みますが、電子間の相互作用が生み出す現象を高精度に解析しようとするとスパコンが必須です。アルゴリズムの開発、またはその応用のいずれかに特化して研究することが多い中、私は開発と応用の両方に取り組み、複雑な物理現象の理解にMASAMUNE-式を活用しています。

熊谷: 計算材料学の文脈でいうと、計算機はここ数十年で重要なツールとして普及しました。背景には、野村先生が取り組まれている物理学分野が培ってきた理論や計算技術が成熟してきたこと、そして計算機能力の向上です。特に材料開発の場合、例えば多数の物質を網羅的に計算するために大規模な計算が

求められるので、計算機のパワー向上は必須でした。両者がそろい始めた2000年代中盤以降、計算材料学分野は指数関数的に成長しています。MASAMUNE-式が多様な分野で活用されているのはその象徴ともいえます。

課題と展望

境界を越えた連携の時代、
理論主導で新たな発見を
成し遂げるために

熊谷: 日本の材料科学は実験系が強く、理論は理学系ほどの地位が得られていないのが残念に思います。さらに懸念しているのは海外の台頭で、計算科学に大型の予算が付く中国や欧米に、日本は差をつけられています。

野村: 物性分野の理論計算のプログラムも多くが海外で開発されています。私の研究の一部で使うイタリアのプログラムは計算機の精度が上がってきた1990年代くらいから開発が進み、30年以上改良が続けられています。1からプログラムを作り、日の目を見るまでには10年はかかります。しかし日本は短期プロジェクトが多く、プログラムを作る専門職もほとんどないので基盤技術の蓄積が難しい。国内の計算科学の基盤構築には、長期的なプロジェクトや人材支援が必要です。



熊谷: 一方で応用分野では企業との連携が増えています。企業は積極的に計算を取り入れ、高価な計算資源も保有できます。ただ資源だけでは不十分で、それを活用できる人材が不可欠です。我々も共同で計算する以外に、指導しながら実験を検証することもあります。

野村: 企業にアカデミアの人材が多く流れているのもそうした背景が影響しています。企業でもアカデミックに近い研究が増え、大学との境界を再考する時代になってきている。海外が積極的に対策を進める中で、日本の計算科学の発展には、大学と企業が連携してコミュニティを形成する仕組みを考える必要があるかもしれません。

熊谷: 今後、大学や企業の実験グループとどう連携していくかも鍵になります。例えば、理論予測した物質を実際に作り、予測と実物のずれを機械学習で学ばせるには、実験の人に多くのサンプルを作ってもらする必要があります。サンプル作製には時間や労力がかかるので、双方がWin-Winでなければ継続が難しい。企業だとある程度利益が見通せれば連携は可能かもしれませんが、また金研の研究者が作る実験試料は精度が非常に高く、コラボレーションできれば実験と理論とのギャップを埋める成果が期待でき、日本の大きな強みになると考えています。

野村: 計算機性能や近似精度の向上で、研究のスピードは上がってきましたが、量子多体現象のような極めて特異な物理現象の解明は、数十年単位の取り組みになります。その点でじっくり研究に取り組める金研の研究環境は非常にありが



たい。理論的に説明が難しい物質ほど、通常の物質と異なった世界トップレベルの性能を示す可能性があり、だからこそ「説明できない」難解な現象をいかに説明するかが研究の醍醐味です。今後もライフワークとして続けていきたいテーマです。

熊谷: 材料探索の方法には、理論に基づくものから、機械学習による理由が明確ではないブラックボックス的な探索まで、多様なアプローチがあります。そこが自分にはとても魅力的で、研究を続けるモチベーションになっています。今後はサイエンスとエンジニアリングの両輪を目指して実験系との連携を強め、社会的に使われる材料を理論主導で見つけたいです。

野村: 分野は違えど二人に共通しているのは、理論を基に新しい物質や例外的な発見をしたいという思いです。今までにない突出した性能を持つ物質を理論で予測し、それを実験で実現する。世間を驚かすような発見を、我々は理論から成し遂げていきたいですね。



野村 悠祐 教授

<https://www.nomura-lab.imr.tohoku.ac.jp>

2015年博士(工学)(東京大学)。2015年エコール・ポリテクニーク博士研究員、2016年東京大学大学院工学系研究科助教、2019年理化学研究所研究員、2022年慶應義塾大学理工学部准教授を経て、2024年より現職。2025年文部科学大臣若手科学者賞受賞。



熊谷 悠 教授

<https://kumagailab.imr.tohoku.ac.jp>

2010年博士(工学)(京都大学)。2010年京都大学特定研究員、2011年日本学術振興会海外特別研究員、2012年東京工業大学特任助教、2016年特任准教授、2018年京都大学大学院工学研究科特定准教授、2019年東京工業大学准教授を経て、2022年より現職。2025年度第22回日本学術振興会賞受賞。



02

SPECIAL
FEATURE
Toward Society 5.0

仙台から世界へ

MASAMUNE-式が切り拓く材料科学の未来

材料研究に特化した日本唯一のスーパーコンピューティングシステム

「MASAMUNE-式」。計算材料学センターが運営・管理する

6代目の大型計算機として2025年6月に運用を開始した。

わずか半年ほどで先代機の年間課題数を超える80件以上の

課題を受け入れ、その期待の高さがうかがえる。

筐体には仙台藩主・伊達政宗公がダイナミックに描かれる。

—仙台から世界を目指した政宗公と同じく、世界の材料研究拠点として、

最先端の成果を仙台から発信する—そう意思を込めたと語る

センター長に、計算材料学の現在と今後の展望を聞いた。

久保 百司 教授

計算材料学研究部門・計算材料学センター センター長

研究の力点

Society 5.0を支える
材料革新の新基盤
計算材料学の躍進

Society 5.0の柱となる持続可能な社会の実現において、材料革新は重要基盤に位置づけられる。その中でも、計算材料学は材料開発の高速化・広域探索を飛躍的に促進する分野として大きな期待を集める。「特にSociety 5.0の重要課題である安全・安心な社会インフラ対策、エネルギーの安定供給において、材料科学の果たすべき役割は大きく、高速化・効率化を担う計算材料学の重要性は益々高まっています」とセンター長久保教授は語る。さらに「蓄積された大量の計算データに機械学習などのAI技術を応用した“マテリアルズ・インフォマティクス”を飛躍的に発展させることで、実験的には未踏かつ非常に広域な探

索空間からの高速な材料探索に貢献することが求められています」と続ける。一般的に材料開発は10年以上の長期スパンを要する。しかし、エネルギー・環境問題や国際競争への対応には迅速化が不可欠。実際、計算材料学の導入により、数年かかっていた材料探索が1年以内に短縮された事例も数多く報告されている。

計算材料学に欠かせないのはスーパーコンピューティングシステム(スパコン)の活用だ。材料開発でスパコンに求められる役割は大きく3つある。数億~数百億以上の原子を対象としたシミュレーションを実行する「大規模計算」、腐食や摩耗さらには構造形成・破壊のように長時間かけて大きな構造変化が進行する現象を追う「長時間計算」、原子・組成・構造などの膨大な組み合わせを機械学習と併せて高速スクリーニングする「大量計算」だ。これらを実現するため、計算材料学センターのスパコン「MASAMUNE-式」は異なる特性を持つ3つのシステムを組み合わせ、目的に応じて計算を最適化できるのが特徴だ。「世界最大規模の100億原子大規模シミュレーションをはじめ、電力消費の大きいAI処理もシステムの最適化

で省電力化しています」。新材料・新素材の研究に特化したスパコンならではの性能を引き出すため、過去の利用実績と最新の研究ニーズを当センターで分析し実現しました」。先代機で得られた腐食・摩耗シミュレーションや、触媒反応の原子レベルでの再現といった幅広い成果を土台に、より現実に即した複雑な反応場と多様な環境場を考慮した現象理解に対する取り組みが進む。

金研のポテンシャル

MASAMUNE-式がかなえる
“協奏”と“共創”

材料の高機能化・高性能化には、ナノスケールでの元素制御、メゾスケールでの構造制御と、材料が受ける摩擦や熱などの

外的環境も考慮した設計が必要となる。従来のシミュレーションでは、ナノスケールの化学反応や元素機能を計算してから、メゾスケールの組織構造や異種界面構造、そしてマクロスケールの環境場の影響へと、一方向に積み上げて計算するマルチスケール手法が活用されてきた。しかし実際の材料には、あるスケールでの現象が他のスケールの構造や性能に影響を及ぼすように、異なるスケール間で複雑な相互作用が生じる。「燃料電池の触媒を例にとると、ナノスケールでは良好な化学反応を示しても、水素などの反応物質が十分に化学反応サイトに流れてこないと燃料電池としては機能しません。計算では優秀な触媒でも、実験ではちゃんと機能しない要因になるわけです」。機能を最大限に発揮する材料設計の実現には、ナノ-メゾ-マクロすべてのスケールを同時に計算し、スケール間の相互作用を解明する計算技術の開発が必須、と久保センター長は強調する。「我々をこれを“マルチスケール協奏現象”と呼び、MASAMUNE-式ではこのような複雑な協奏現象の解明を目指します」。

加えて、MASAMUNE-式は国内外の研究者が集まる“共創”



場としても重要な役割を担う。「金研はGIMRT(国際共同利用・共同研究拠点)として多くのユーザーを受け入れているため、多様な分野による研究チームを構築しやすい環境です。共同研究の成果は著名な学術誌に多数掲載されています。また、日本のノーベル賞受賞者の研究にも活用されてきました」。他所では数十万～数百万円単位の利用料がかかるスパコンも、金研ではGIMRTに申請すればMASAMUNE-式を無償で利用可能だ。「予算の少ない若手研究者や、スパコンを所有していない大学・高専にとっては貴重なシステムですし、分野の裾野を広げる重要な取り組みです」。

課題と展望

人材育成とソフト開発は
国策としての対応が必須。
加速する世界の計算材料学に
日本の強みを生かした戦略を

機能性材料への社会的ニーズが高まる中、欧米では第一原理計算の結果に基づく材料構造・材料物性・電子状態などの大規模なデータベースが構築され、さらに自動計算によって日々データが拡充されている。日本は計算科学を基盤とするデータ科学分野で遅れをとるが、「日本にも強みを生かすチャンスはある」と久保センター長。「欧米のデータベースは、研究室が所有するサーバクラスの計算機で手軽に計算できる分子または固体の結晶構造に限られています。材料機能の高度な制御に不可欠な、欠陥構造や粒界、異種界面、不規則構造などの“イレギュラー”なデータは含みません。こうしたデータベースに欠けている材料科学の観点を、日本は取り入れていくべき」と

続ける。予測の難しい“イレギュラー”な材料情報を集約しデータベース化する試みは、「富岳」成果創出加速プログラム(文部科学省)の一環として進められ、日本のマテリアルズ・インフォマティクス的重要基盤として整備が期待される。

一方で、分野を支える人材不足は深刻だ。スパコンの運営・管理を行う技術職員は高度専門職であるため、内部育成に依存。計算科学者も需要に比べて著しく不足し、国家プロジェクトでは引く手あまたな一方、「ものづくりがゴールになる大型課題ではどうしても実験系が主導になり、次世代を牽引する計算科学のリーダーが育ちにくい。実際、計算科学を専門とする研究室は減少しています」と語る。

分野の発展に関わる国内ソフトウェア開発の低迷も人材不足と連動する課題だ。欧米は国家的インフラとしてソフトウェア開発に長期投資が行われるのに対し、日本では短期プロジェクトにとどまり、雇用された教員の人材流出が続く。「最先端の研究を維持するには国内でのソフトウェア開発は不可欠。さらに開発にはAI処理と科学計算を同時に最適化するプログラム設計、多様化するスパコンのアーキテクチャへの対応など、一段と複雑化しています。計算科学・AI・ハードウェアを横断して理解できる人材育成が急務です」。2030年稼働予定の“ポスト富岳”への橋渡しに向け、MASAMUNE-式ではAIと相性のいいGPUを活用したソフトウェア開発を進める。「GPUプログラミング講習会の開催にも積極的に取り組み、ソフトウェアの開発と人材育成の促進に努めていくことはセンターの大きな使命です」。

大規模計算が目指すもの―それは現実世界の正確な再現だ。「材料研究においてはマイクロメートルレベル、原子数でいえば1兆。これが実現できれば、光学顕微鏡で見たものと直接比較できるようになります」。この実現のため、次世代放射光Nano Terasuで得られるナノスケールの原子構造とMASAMUNE-式によるシミュレーション結果を直接比較し、よりリアルなモデル化を推進する。「スパコンによる大規模計算は、今後の材料研究に不可欠なツールとして一層発展していくでしょう。金研を中心とした世界を牽引する計算材料学の旗振り役として、多様な研究者とともに最先端の成果を発信し続けていきます」。

久保 百司 教授

<https://www.simulation.imr.tohoku.ac.jp>



京都大学大学院工学研究科修士課程を修了後、1999年博士(工学)取得(東北大学)。2001年東北大学大学院工学研究科助教授、2008年同教授を経て、2015年より金属材料研究所計算材料学研究部門教授。2017年より計算材料学センター長を務める。



金属・合金(工学) 実験系



低炭素社会を支える
効率的な鉄鋼材料の設計

宮本 吾郎 | 金研 金属組織制御学研究部門・教授

利用年 2025年

CO₂排出量の少ない電炉法の拡大により、スクラップ由来の不純物が粒界に偏析し、鉄鋼材料の機械特性を低下させる課題が顕在化しています。計算材料科学は、原子レベルの解析を通じて、この粒界偏析と強度との関係を明らかにできる強力な手法です。これにより、試行錯誤に頼らない効率的な材料探索が可能となります。しかし、実用鋼で問題となる対称性の悪い粒界や多元系での現象解明には、従来の計算機では非現実的な大規模計算能力が不可欠です。「MASAMUNE-式」の卓越した演算能力は、この課題を克服する鍵です。MASAMUNE-式を活用することで、複雑な粒界現象を精度高く予測し、先端解析実験結果と組み合わせることで、不純物耐性の高い革新的な鉄鋼材料の設計を加速できます。これにより、低炭素社会の実現に不可欠な、持続可能な材料開発に直結する成果が得られると考えています。

磁性、磁性材料(物性理論) 理論・計算系



磁性体の物性データベース構築
と高機能磁性体の物質探索

是常 隆 | 東北大学大学院理学研究科・教授

利用年 2018年～

第一原理計算と呼ばれる手法を用いて、さまざまな物質の性質を明らかにする研究を行っています。第一原理計算では、原子の配置のみを入力として量子力学の方程式を直接数値的に解くことで電子状態を明らかにできるため、スーパーコンピュータを用いて多数の物質を計算することで、効率的な物質探索や新物質設計が可能になると考えています。現在は、MASAMUNE-式の計算資源を活用し、物質の磁気構造、磁気異方性、磁氣的輸送特性といった性質を網羅的に評価することで、磁性体の物性データベース構築していく予定です。さらに、原子組成を連続的に変化させた不規則合金系に対する計算手法を開発し、物質探索の範囲を拡大することで、高機能磁性体の候補物質を理論主導で探索することを目指しています。

表面、界面(理論化学・計算分子工学) 理論・計算系



金属酸化物界面の
ダイナミクス解析

中山 哲 | 東京大学大学院工学系研究科・教授

利用年 2019年～

本研究では、金属酸化物表面・固体-液体界面における触媒反応や物質輸送現象を、第一原理計算と機械学習ポテンシャルを組み合わせた原子論的シミュレーションにより解析しています。吸着、表面構造変化、拡散、反応といった多様な動的過程を記述するには、大規模かつ長時間の計算が不可欠です。MASAMUNE-式は、CPUノードとGPUアクセラレータを備えた計算環境を有しており、CPUを用いた高精度な電子状態計算および訓練データ生成と、GPUを活用した機械学習ポテンシャルの構築および分子動力学計算を効率的に実行できる点が大きな利点です。これにより、従来は困難であったナノ秒スケールでの界面ダイナミクス解析が可能となりました。今後もMASAMUNE-式が、最先端の計算材料科学研究を支える中核的な計算基盤として、材料設計や反応機構解明をより一層加速させることを期待しています。

材料工学、電気化学(工学) 実験系



次世代蓄電池の負極材料に
起こる界面現象の理解

李 弘毅 | 金研 構造制御機能材料学研究部門・助教

利用年 2017年～

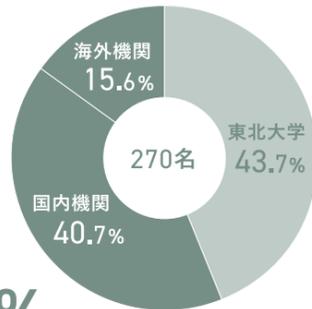
次世代蓄電池の高エネルギー密度化には、LiやNa、Mgなど金属負極材料の活用が期待されていますが、その実用化を阻む最大の要因は、充放電過程で形成される電極-電解質界面の不均一性と不安定性にあります。計算材料学は、電解液中の溶媒和構造、電極表面での脱溶媒和、還元分解反応を経た界面被膜形成に至る一連の過程を、電子状態に基づいて統一的に理解するための有力な手段です。第一原理計算や分子動力学計算などのシミュレーション手法と実験結果を照合することで、直接観測が困難な界面形成の起点や安定化因子を定量的に捉えることが可能となります。スーパーコンピュータ「MASAMUNE-式」の大規模計算資源により、電極近傍を含む現実的な系サイズと時間スケールでの解析が進み、金属負極蓄電池に共通する界面設計指針の深化を期待しています。



データで見る MASAMUNE USER

2018年から2024年9月まで稼働した「MASAMUNE-IMR」と
2025年6月から稼働している「MASAMUNE-式」のユーザー層を数字であらわしました。
(2025年度ユーザー数は2026年1月9日時点のもの)

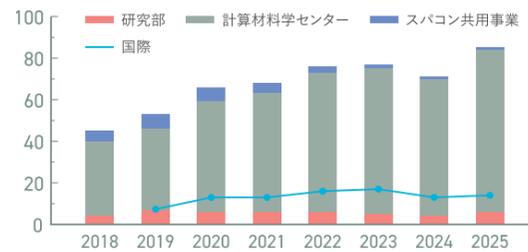
2025年度所属別
ユーザー数割合



約**56%**

全ユーザーのうち、半数以上が
東北大以外の機関に所属しています

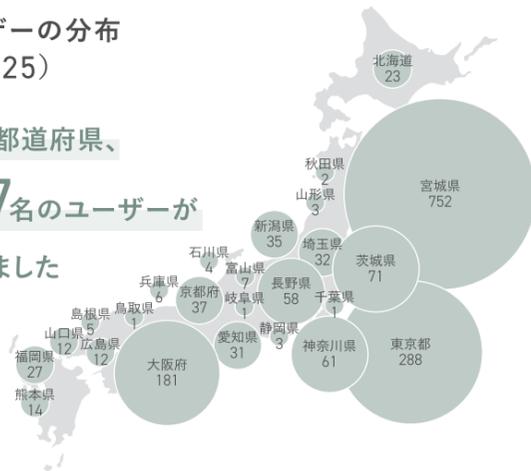
申請課題件数
の推移 **2025年度 85件**



MASAMUNE-式導入後、
年間申請課題件数は過去最大となっています

国内ユーザーの分布
(2018-2025)

のべ**25**都道府県、
1,667名のユーザーが
活用してきました



海外ユーザーのべ数
(2018-2025)

全**17**カ国
357ユーザー

研究成果数
(2018-2025)

原著論文 **750**本
学会発表 **1,126**件

MASAMUNE-式の活用分野

低温
照射、原子力(材料) 薄膜、超微粒子 **金属・合金**
非晶質・ガラス、液体状態、準結晶
生体材料 **計算材料学**
結晶成長、欠陥 超伝導、超伝導材料
電氣的、光学的材料
磁性、磁性材料 表面、界面 セラミックス
電気化学、腐食、触媒 半導体 複合材料

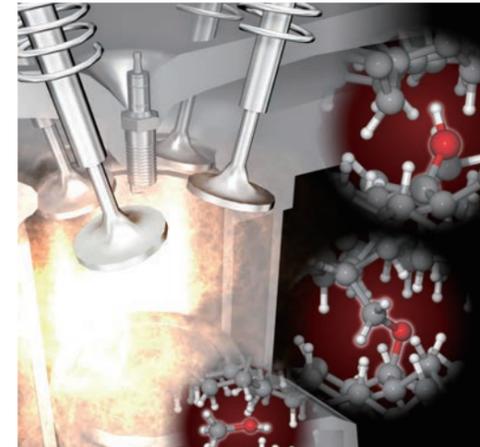
16分野

計算材料学以外にも多様な分野で
MASAMUNE-式が活用されはじめています

最先端計算材料学研究プロジェクト in KINKEN

計算材料学が主導するデータ駆動型研究手法の開発とマテリアル革新(DDCoMS)

代表者 久保 百司 事業名 | スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム



本プロジェクトは日本のフラッグシップスーパーコンピュータ「富岳」によってのみ達成可能な超大規模・超長時間・超大量計算を実現する材料設計シミュレーション技術を開発・発展させることで、新たなデータ駆動型研究手法を創成することを目的としています。

本プロジェクトは、文部科学省「データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト」に採択された5拠点の計算科学グループが連携してプロジェクト立案を行った課題です。そのため5つのサブ課題、総計120名から構成され、【A】東北大拠点(構造材料)は社会インフラの高度化と超寿命化、【B】物材機構拠点(磁性材料)は多種多様なエネルギー変換マテリアルの創出、【C】東大拠点(電気化学材料)は再生可能エネルギーの最大導入、【D】科学大拠点(エレクトロニクス材料)は情報処理技術のさらなる発展、【E】京大拠点(バイオ・高分子材料)は完全循環社会の実現に貢献することを目的とし、さらに分野間連携によりデータの創出・活用方法の共同開発を推進しています。

計算科学を用いた 次世代材料探索のための データベース創製

代表者 熊谷 悠 事業名 | 創発的研究支援事業



量子力学計算を系統的に実行

現代社会はエレクトロニクスや蓄電池、触媒など多様な材料によって支えられており、今後のテクノロジー社会やSDGs・カーボンニュートラルの実現には、必要な特性を備えた物質を効率的に発見し、迅速に社会実装へ結びつける仕組みが不可欠です。従来の材料研究は実験中心で多くの資源と時間を要しましたが、計算科学とハードウェアの進展により量子力学計算を日常的に活

用できるようになり、物質特性の高精度予測が可能となりました。本研究では、セラミック材料における点欠陥特性や拡散性能を対象に大規模な量子力学計算を行い、得られた結果をデータベース化します。さらに、そのデータに機械学習を適用して高速・体系的な材料探索基盤を構築し、モデル分析を通じて新規理論の創出にも取り組み、未踏の材料科学の開拓に貢献します。

機械学習手法を用いた量子多体ソルバーの開発と応用

代表者 野村 悠祐 事業名 | 学術変革領域研究(A)

磁性や超伝導に代表される物質の機能は、物質中の電子が相互作用しながら量子力学の法則に従って運動することで発現します。このように量子力学的粒子が相互作用する系を量子多体系といいます。中でも、電子間相互作用の効果が強く働く物質では、高温超伝導や巨大磁気抵抗に代表される非自明な相や特異な外場応答など、通常とは異なる性質を示すため、新たな機能を探求する舞台として重要です。しかし、このような強く相互作用する量子多体系の性質の解明や予測は、理論的取り扱いが格段に難しく、物理学における挑戦的課題として残されています。本研究では、その課題に立ち向かう新たな武器として機械学習技術を導入し、物理の最先端計算科学手法と融合させることで、量子多体系の性質を解析する手法(ソルバー)の開発を行います。新手法の応用を通じて、より高温で発現する超伝導の探索など、新機能材料の理論設計に挑みます。

