

グランドチャレンジ課題の研究内容

本プロジェクトが目指すグランドチャレンジ課題(平成18年度～23年度)

次世代ナノ情報機能・材料

①次世代ナノ複合材料

ナノチューブ等に代表される新規ナノ構造体の設計とそれらナノ構造体の複合による超高集積デバイス開発、材料におけるナノスケール内部組織構造の制御による、高強度の実現と高性能誘電・磁性特性の探索・設計を目指し、その開発基盤となるシミュレーションソフトウェアの研究開発を行う。



東大院理／物性研教授
常行 真司

②次世代ナノ電子材料

量子現象をマクロな世界に引き出すことを目的に、物質やナノ構造での電子物性の研究を行っている。右図に示すように、銅酸化物絶縁体における素励起、スピノン及びホロンの検証とそれらを用いたデバイスの提案、超伝導／強磁性ナノハイブリッド構造による量子現象の解明とそのデバイス機能の構築等が研究課題である。



京大基研教授
遠山 貴己

③次世代ナノ磁性材料

自己組織化を用いた磁性ナノ粒子の作成およびその磁気デバイスとしての応用を目指し、自己組織化の機構と制御法、磁性ナノ微粒子の静的・動的性質の研究を行う。そのために超大規模第一原理計算、弾性論モデル、量子モンテカルロ法、拡張アンサンブル法、厳密対角化法、量子マスター方程式などのソフトウェア開発を行っている。



物性研教授
川島 直輝

次世代ナノ生体物質

ナノスケールの生体物質に対して、自由エネルギーレベルでの相互作用、自己組織化や動的なふるまいをシミュレートできる方法論を確立する。これに基づいて、たとえば水中のウイルスカプシド（ウイルスの殻）など、1,000 万原子オーダーの全原子大規模分子動力学シミュレーションを実現する。また一方で、たんぱく質の分子認識やドラッグデリバリーのナノプロセスといった精緻なシミュレーション方法の確立も目指していく。



分子研／名大院工教授
岡崎 進

次世代エネルギー

光エネルギーの化学エネルギーへの固定、貯蔵、電気エネルギーへの変換など太陽エネルギーの有効利用に関わる計算科学的理論・方法論およびソフトウェアを開発する。特に、地球上に普遍的に存在する「セルロース」から「エタノール」を生成するための最も有力な方法である「酵素反応」に関わる計算科学的方法論を確立する。



分子研教授
平田 文男