

次世代スーパーコンピュータ本体が完成された際に、シミュレートが可能となるグランドチャレンジ課題の一例

次世代ナノ複合材料

ナノスケール電子デバイス

ボトムアップ技術による次世代ナノ電子デバイスの模式図。個々の部品の特性に関する理論研究を統合して、部品を組み上げたシステムとしての性能の研究を可能にする。

次世代ナノ電子材料

(上) 強相関電子を利用した次世代光スイッチ。銅酸化物絶縁体における素励起、スピノン及びホロンの模型図。
 (下) 超伝導 / 強磁性ナノハイブリッド構造を持つ量子コンピュータ素子。

次世代ナノ磁性材料

自己組織化によって形成されるナノ粒子を用いた次世代のナノ磁気デバイスの模式図。ナノ粒子形成とその磁気特性を調べるシミュレーションを目指している。

次世代ナノ生物物質

次世代エネルギー

バイオマス-化学エネルギー転換技術によるバイオエタノール（「セルロース」から「エタノール」）：3D-RISM 理論による蛋白質の選択的イオン認識の計算。酵素反応におけるもっとも本質的なプロセスである「分子認識」問題を解決する見通しを与えた。

(左) T4 ファージ先端の脂質膜貫通の分子動力学シミュレーション。ファージが細菌に感染する最初期に、タンパク質3量体 gp5 が細胞膜を貫通する。
 (右) ドラッグデリバリーのナノプロセスを担うリポソーム。脂質二重層膜で球状の一枚膜を形成し、もっとも単純な細胞モデルでもある。いずれも、自由エネルギーレベルでの全原子分子動力学シミュレーションを目指している。