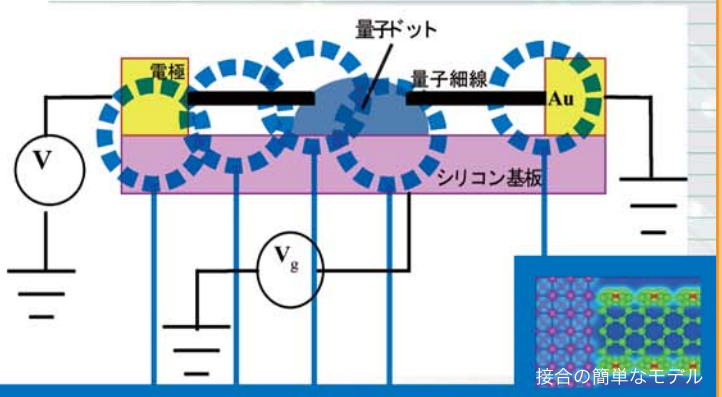
未来社会へ向けたナノ分野グランドチャレンジ課題

①高速、高機能、省エネルギー電子デバイスの開発へ…複合的ナノ電子デバイスシミュレーション

部品間の接合の解析が重要な課題。
ナノ電子デバイス全体、10 万原子系の電子状態計算が必要。



現在のスパコンでは……２千原子程度の複合系（量子細線と電極）の計算が可能

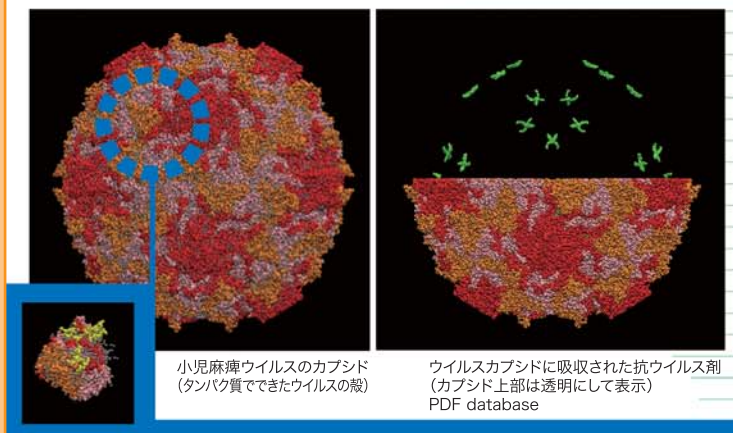
次世代スパコンでは……

ナノ電子デバイス全体 10 万原子系の計算が２ヶ月程度で可能（実効性能1ペタフロップス）

電子デバイスの高速応答・高機能、省エネルギー、環境負荷の低減を可能に。新たなデバイス創製に寄与する。

②感染症の克服に向けて …… ウィルス全原子シミュレーション

ウィルス全体１０００万原子系の分子動力学計算が必要



現在のスパコンでは…… ウィルスの１断片（10 万原子程度）の計算が可能

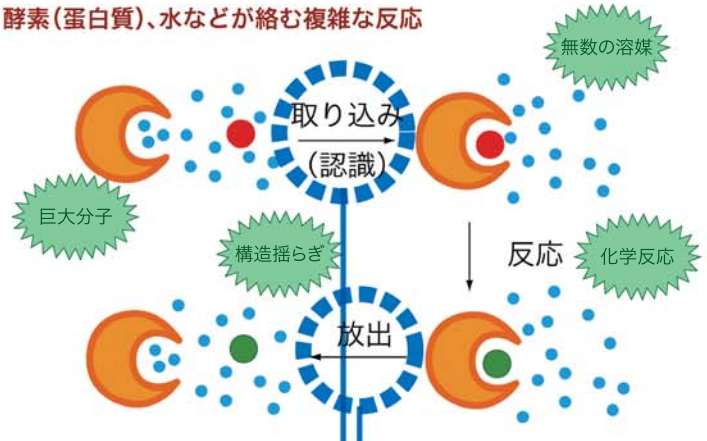
次世代スパコンでは……

ウイルスと抗ウィルス剤の結合による不活性化、抗体との特異な相互作用の解析を実現。1マイクロ秒の原子の動きをシミュレーションする：3ヶ月（実効性能1ペタフロップス）

未克服のウイルスに対する予防法と治療法の開発、ひいては創薬の効率化に寄与

③セルロースからバイオマスエタノール生成へ …… 酵素反応のまるごと解析

酵素（蛋白質）、水などが絡む複雑な反応



現在のスパコンでは…… 単純なモデルの一部でも計算時間は 5〜10 時間必要

次世代スパコンでは……

より大きなタンパク質の構造揺らぎや化学反応を、より高精度に解析。1度の 3D-RISM 計算が数秒で可能となり、全体でも1日〜十数日で計算出来る。

高効率の触媒・酵素の設計が可能に。