

2-14 最先端・高性能スーパーコンピュータの開発利用 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発

分子科学研究所は昨年度まで「超高速コンピュータ網形成 (NAREGI) プロジェクト」のナノ分野におけるグリッド実証拠点として、過去3年間、研究活動を行ってきたが、昨年4月より表記の「最先端・高性能スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクトにおける「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」拠点としてナノ分野の「グランドチャレンジアプリケーション研究」を担当することになった。同時に、NAREGI プロジェクトは2007年度を最終年度としており、2006年度は引き続き「グリッド実証研究」を行ってきた。本項では「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」拠点の概要、研究体制、研究開発スケジュールについて以下に述べる。

2-14-1 「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発 (ナノ統合)」拠点の概要

次世代スパコンプロジェクトは我が国がIT分野における国際的なリーダーシップを確保ために「旗艦」的コンピュータを構築し、それを下方展開することによって我が国に強固なITインフラを整備することを目指す国家プロジェクトである。また、このプロジェクトの目的は単に「巨大なマシン」を構築することにとどまらず、同時に、我が国の計算科学における新しいパラダイムの創出を目指すものである。

計算科学はこれまで物質設計や地球環境などの分野で重要な役割を果たし、社会の技術基盤のひとつとして確固たる基盤を築きつつある。とりわけ、物質や生体分子の様々な機能が発現するナノスケールの現象をターゲットとする計算科学は21世紀における産業を担うべき「知的ものづくり」や個人の遺伝情報に基づく「テーラーメイド医療」にとっての技術基盤としておおきな期待を集めている。他方、ナノスケールの現象は伝統的な理論化学物理の視点からも極めて挑戦的な課題である。特に、量子力学、統計力学、分子シミュレーションなどの理論・計算科学的方法論にとって、これまでの枠組みを大幅に越えること無くして決して達成しえない研究課題である。

以上の観点から我々は本プロジェクトのナノ分野におけるグランドチャレンジ研究課題として、下記の3つの課題を設定した。

(1) 次世代ナノ情報・機能材料

超高密度実装、高速応答、省エネルギーなどを目指す電子デバイス設計の計算科学的方法論を構築。

(2) 次世代ナノ生体物質

生命体を構成するナノ物質のシミュレーションを可能とする方法論を確立することにより、テーラーメイド医療を目指した次世代生命体シミュレーションのナノ基盤を構築。

(3) 次世代エネルギー

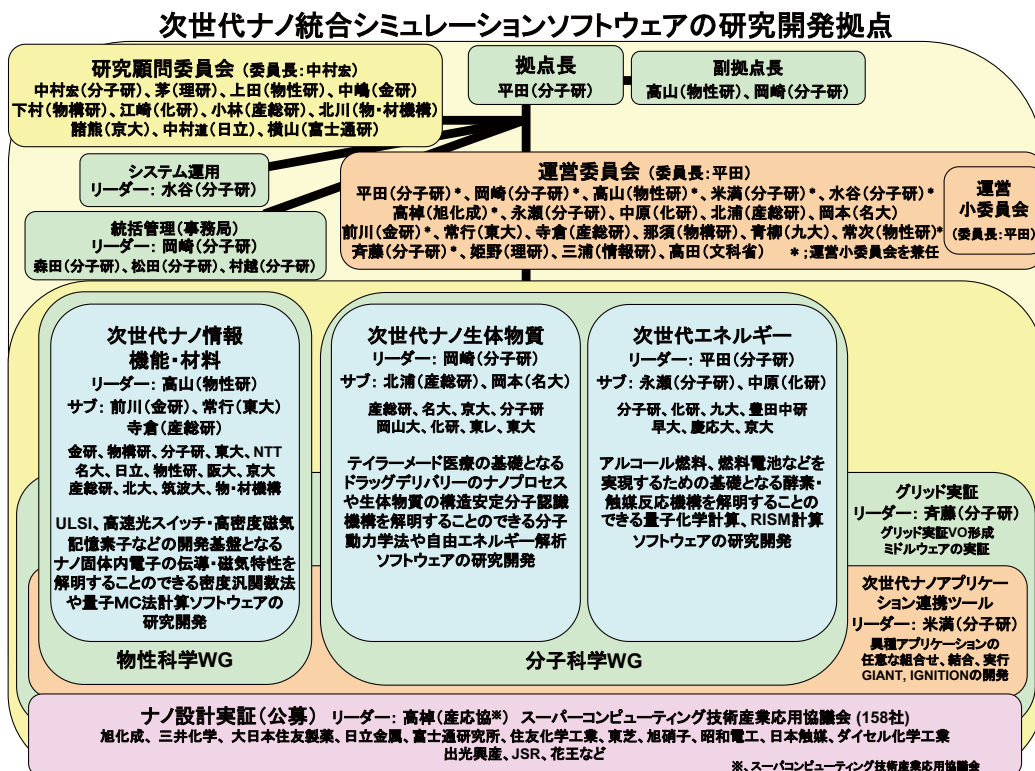
化石燃料に代わる恒久的エネルギー源として太陽エネルギーの固定、利用、貯蔵技術、特に、セルロースから酵素反応によりエタノールを生成する技術における計算科学的方法論の確立に貢献。

これらの研究課題は国の「重点推進4分野」の中において重要な技術・課題として位置付けられていることから明らかなように、21世紀の「知的ものづくり」や個人の遺伝情報に基づく「テーラーメイド医療」、化石燃料に代わる恒久的エネルギー源の確立、など産業・医療の技術基盤を確立する上で本質的であるばかりでなく、人類の存立基盤そのものにも関わる重要課題であり、「グランドチャレンジ課題」と呼ぶにふさわしいターゲットであると考えている。

我々は本プロジェクトにおいてこれらの課題に挑戦する上で必要な新しい理論や計算科学的方法論あるいは計算プログラムを構築し、そのことを通じて次世代スパコンプロジェクトの成功に貢献したいと考えている。

2-14-2 「ナノ統合拠点」の研究体制

ナノ統合拠点の研究体制を下図に示す。



2-14-3 「ナノ統合拠点」の研究課題 (個人)

ナノ統合拠点の研究課題を下表に示す。

最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発
 ——グランドチャレンジ課題・課題小項目・各研究課題——

(1) 次世代ナノ情報機能・材料

1① 次世代ナノ複合材料

1①-1 ナノ複合電子・強度材料の構造と特性制御

石橋 章司	産業技術総合研究所	計算科学研究部門	グループ長	材料における界面とナノスケール格子欠陥の構造と特性
毛利 哲夫	北海道大学	大学院工学研究科	教授	合金材料の内部組織形成と材料特性に関するマルチスケール解析

1①-2 ナノ構造構成要素とその複合系による次世代電子デバイス設計

押山 淳	筑波大学	数理物質科学研究科	教授	ナノ構造構成要素と複合系の機能
常行 真司	東京大学	大学院理学系研究科	助教授	第一原理ナノ構造探索

1 - 3 電子励起によるナノ複合電子材料の機能制御

那須奎一郎	高エネルギー加速器 研究機構	物質構造科学研究所	教授	可視光で誘起されるグラファイト-ダイヤモンド非平衡相転移
杉野 修	東京大学	物性研究所	助教授	ナノ物質および固体表面での光励起キャリアダイナミクスと高速化学反応

1 - 4 大規模電子状態計算と精密計算によるナノ複合材料設計

寺倉 清之	産業技術総合研究所	計算科学研究部門	研究顧問	高効率大規模電子状態計算手法の開発
川添 良幸	東北大学	金属材料研究所	教授	拡散量子モンテカルロ法による分子の安定性の厳密計算

(1) 次世代ナノ情報機能・材料

1 次世代ナノ電子材料

1 - 1 次世代ナノ非線形光学素子開発

遠山 貴己	京都大学	基礎物理学研究所	教授	強相関電子系におけるナノ非線形光学デバイスの理論
那須奎一郎	高エネルギー加速器 研究機構	物質構造科学研究所	教授	非マルコフ・非負経路積分法によるナノ・サイズ多電子系の光励起シミュレーション
米満 賢治	自然科学研究機構	分子科学研究所	助教授	光誘起集団電荷移動と伝導の制御

1 - 2 新機能ナノ量子デバイス開発

永長 直人	東京大学	大学院工学系研究科	教授	ナノスケール電子状態を用いた新規機能設計
小形 正男	東京大学	大学院理学系研究科	助教授	低次元強相関電子系における超伝導および磁性、電荷秩序の理論的研究
田村 浩之	NTT	物性科学基礎研究所	主任研究員	量子ドット列デバイスにおける電子相関効果の制御

1 - 3 スピン注入ナノスピントロニクス素子開発

前川 禎通	東北大学	金属材料研究所	教授	ナノスピントロニクス理論の構築
井上順一郎	名古屋大学	大学院工学研究科	教授	接合系の量子伝導シミュレーションとナノスケールデバイス設計
市村 雅彦	日立製作所	基礎研究所	主任研究員	スピン注入型ナノ電子デバイス

(1) 次世代ナノ情報機能・材料

1 次世代ナノ磁性材料

1 - 1 超高記録密度磁気デバイス材料の構造制御

常行 真司	東京大学	大学院理学系研究科	助教授	自己組織化を用いたナノ磁性材料
-------	------	-----------	-----	-----------------

1 - 2 新しい磁性発現機構をもつナノ磁気素子の開発

宮下 精二	東京大学	大学院理学系研究科	教授	分子磁性体での局所磁気構造
赤井 久純	大阪大学	大学院理学研究科	教授	ナノ磁性の第一原理計算

1 - 3 新しい動作原理による超高記録密度磁気デバイスの開発

高山 一	東京大学	物性研究所	教授	ナノ磁性粒子配列の静的・動的性質
藤堂 眞治	東京大学	大学院工学系研究科	講師	格子変形の自由度のもとでの磁気相転移
常次 宏一	東京大学	物性研究所	教授	強相関電子系における新奇量子相
川島 直輝	東京大学	物性研究所	助教授	量子磁性体における自発的空間対称性のやぶれ——ダイマー・ストライプ・量子液体——

(2) 次世代ナノ生体物質

2-1 タンパク質高度シミュレーション新規方法論の開発

北浦 和夫	産業技術総合研究所	計算科学研究部門	総括研究員	量子化学計算によるタンパク質-リガンド相互作用の解析と結合エネルギーの高精度予測——高精度FMO法——
岡本 祐幸	名古屋大学	大学院理学研究科	教授	拡張アンサンブルシミュレーションによる創薬設計——拡張アンサンブル法——
木下 正弘	京都大学	エネルギー理工学研究所	助教授	タンパク質フォールディングおよび高次構造形成のメカニズムの分子論的解明——RISM法——

2-2 イオンチャネルの分子過程

平田 文男	自然科学研究機構	分子科学研究所	教授	チャネルのイオン選択性
-------	----------	---------	----	-------------

2-3 ウイルスの分子科学

岡崎 進	自然科学研究機構	分子科学研究所	教授	ウイルスの全原子シミュレーション
田中 秀樹	岡山大学	大学院自然科学研究科	教授	ナノスケールの空間中での水和構造とダイナミクス

2-4 がん細胞膜の分子科学と膜融合

平田 文男	自然科学研究機構	分子科学研究所	教授	がん細胞膜の構造ゆらぎと膜融合——RISM法からのアプローチ——
岡崎 進	自然科学研究機構	分子科学研究所	教授	細胞膜の構造ゆらぎと膜間相互作用——分子動力学法からのアプローチ——
斉藤 真司	自然科学研究機構	分子科学研究所	教授	がん発現にかかわる分子スイッチの分子動力学計算

2-5 ナノ生体物質輸送

中原 勝	京都大学	化学研究所	教授	生体モデル膜への物質結合——結合量と結合位置の自由エネルギー解析——
岡崎 進	自然科学研究機構	分子科学研究所	教授	ミセル生成とミセルによる物質の取り込み、輸送
三上 益弘	産業技術総合研究所	計算科学研究部門	副部門長	細胞膜(脂質二重膜)における有機分子の透過機構の研究
茂本 勇	東レ(株)	機能材料研究所	研究員	高分子ゲルのダイナミクスと物質輸送

2-6 新規ナノ生体物質の創生と利用

北尾 彰朗	東京大学	分子細胞生物学研究所	助教授	既知ナノ生体物質の機能メカニズム解明
-------	------	------------	-----	--------------------

(3) 次世代エネルギー

3-1 光触媒による太陽エネルギーの固定

中井 浩巳	早稲田大学	理工学術院	教授	固体触媒の励起過程を取り扱う理論的手法の開発と酸化チタン系への応用
-------	-------	-------	----	-----------------------------------

3-2 光合成による太陽エネルギーの固定

藪下 聡	慶應義塾大学	理工学部	教授	励起エネルギーおよび電子移動速度の定量的予測のための理論的手法の開発
信定 克幸	自然科学研究機構	分子科学研究所	助教授	ナノスケール分子における光誘起量子多体系ダイナミクスの理論的解明

3-3 化石燃料からの脱却を目指すアルコール燃料サイクルの確立

平田 文男	自然科学研究機構	分子科学研究所	教授	酵素反応によるセルロース分解とアルコール生成の計算科学
中原 勝	京都大学	化学研究所	教授	超臨界を用いた新規無触媒化学サイクルの創成

3-4 燃料電池の作動原理における分子過程の解明

永瀬 茂	自然科学研究機構	分子科学研究所	教授	ナノ分子系の精度高い大規模量子化学計算の開発と応用
森田 明弘	自然科学研究機構	分子科学研究所	助教授	界面和周波発生分光の計算科学と液体・高分子界面の微視的構造解析への応用
南部 伸孝	九州大学	情報基盤センター	助教授	非断熱現象を利用した分子設計
兵頭 志明	(株)豊田中央研究所	計算物理研究室	室長・首席 研究員	ナノスケール構造に基づくマクロ特性解析のための階層シミュレーション法の実現

3-5 エネルギー保存技術

平田 文男	自然科学研究機構	分子科学研究所	教授	スーパーキャパシタの開発
-------	----------	---------	----	--------------

3-6 高効率物質変換

榊 茂好	京都大学	大学院工学研究科	教授	ナノスケール複合遷移金属錯体による省エネルギー高効率物質変換反応の理論開発
加藤 重樹	京都大学	大学院理学研究科	教授	溶液内およびタンパク質場における励起分子のエネルギー移動と緩和過程

3-7 電極反応の解明

青柳 睦	九州大学	情報基盤センター	教授	高度連成シミュレーションによる凝縮系界面の電子構造とダイナミクス
------	------	----------	----	----------------------------------

2-14-4 「ナノ統合拠点」の研究・開発スケジュール

ナノ統合拠点の研究・開発スケジュールを下図に示す。

