

# ナノサイエンス戦略分野

— その重要性、特徴と、望まれる姿 —

2009年1月9日

名古屋大学・分子科学研究所

岡崎 進

# ナノ分野グランドチャレンジの構造化 ～応用分野～

## ナノテクノロジー・材料分野

□ 次世代ナノ統合シミュレーションの重点対象領域

ナノテクノロジー・材料分野  
推進基盤領域

### 材料領域【エネルギー問題の克服】

光触媒  
(太陽電池)

燃料電池

高機能イオン  
バッテリー

水素吸蔵

### 環境分野

#### バイオマス利活用領域

エタノール燃料  
(バイオマス利用)

高感度有害物質センサー

### ナノエレクトロニクス領域

単電子  
デバイス

スーパー  
キャパシタ

分子エレクトロ  
ニクス

ナノコンポジット  
素子

量子コン  
ピュータ

ナノワイヤー

半導体レーザー

フォトニック  
結晶

光通信  
材料

有機半導体

フレキシブル  
ディスプレイ

電界電子放出  
ディスプレイ

### 材料領域【産業競争力の維持強化】

金属触媒

ナノメタル・  
ナノ合金

ナノセラ  
ミックス

ナノ  
ガラス

機能調和人工格子

### ナノバイオテクノロジー・ 生体材料領域

タンパク質阻害剤

バイオ  
センサー

イメージング

無副作用  
抗がん剤

DDS

創薬

生体分子  
分析チップ

再生医療

ナノバーコード

### ナノサイエンス・物質科学領域

超高密度記憶  
- メモリ  
- ディスク

光スイッチ

次世代LSI

新規炭素系材料(フラーレン、  
カーボンナノチューブ等)

バイオ・  
マテリアル

ナノ複合材料

タンパク質機能

細胞膜

ウイルス

DNAコンピュータ

「総合科学技術会議 第3期科学技術基本計画 分野別推進戦略」とナノ統合拠点のテーマ設定の関連。

# ナノ分野グランドチャレンジの構造化 ～応用分野～

## ナノテクノロジー・材料分野

□ 次世代ナノ統合シミュレーションの重点対象領域

ナノテクノロジー・材料分野  
推進基盤領域

### 材料領域【エネルギー問題の克服】

光触媒  
(太陽電池)

燃料電池

高機能イオン  
バッテリー

### 環境分野

#### バイオマス利活用領域

エタノール燃料  
(バイオマス利用)

### ナノエレクトロニクス領域

水素吸蔵

ナノスケールの領域で初めて発現する  
特有の現象・特性

ナノコンポジット素子

量子コンピュータ

フォトニック結晶

光通信材料

ナノセラミックス

ナノガラス

機能調和人工格子

ナノセンサー

無副作用抗がん剤

生体分子分析チップ

イメージング

DDS

創薬

再生医療

ナノバーコード

フレキシブルディスプレイ

電界電子放出ディスプレイ

他分野の基盤技術  
物質科学

超高密度記憶  
- メモリ  
- ディスク

光スイッチ

次世代LSI

カーボンナノチューブ等)

ナノ複合材料

ナノ材料

タンパク質機能

細胞膜

ウイルス

DNAコンピュータ

# 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(俯瞰図)

## 次世代ナノ情報機能・材料

非線形光学素子  
ナノ量子デバイス  
スピントロニクス  
超高密度記録デバイス  
複合電子デバイス

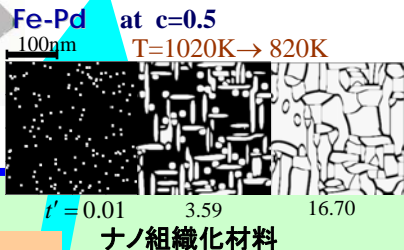


医療・創薬・DDS

## 次世代ナノ生体物質

ウイルス  
細胞膜  
タンパク質制御  
DDSナノキャリアー

## 複合系



## フェースフィールド法

## 固体

自己組織化磁性ナノドット

5nm

## 量子モンテカルロ DFT

## ドメイン

オービトン  
(軌道波)

複合系電子伝導

強磁性ハーフメタル

光スイッチ

## 電子

## 固体電子論

フラーレンやカーボンナノチューブのドーピング

## 分子動力学

脂質膜

タンパク質の折れ畳み構造

## 量子化学

## 次世代エネルギー

太陽エネルギー固定  
アルコール燃料  
燃料電池  
電気エネルギー保存



DPD  
FEM

## 準巨視系

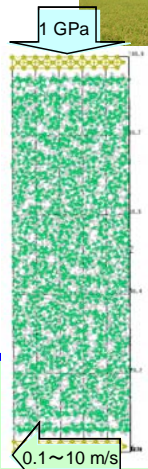
RISM

MD

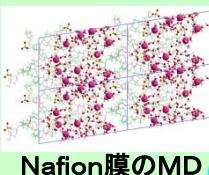
## 分子集合体

MO

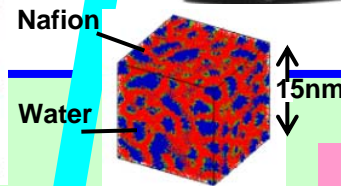
## 電子・分子



サブミクロンスケールのトラクションのMD



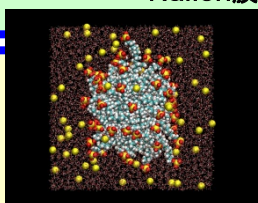
Nafion膜のMD



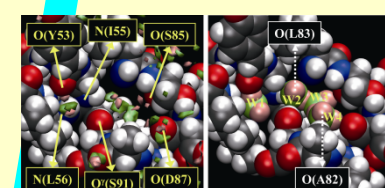
Nafion膜のメソスケール構造(DPD)



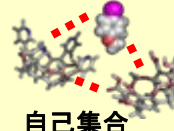
セルラーゼ



ミセル



リゾチームの空洞内の水分子



自己集合

カプセル化

# 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(俯瞰図)

次世代ナノ情報機能・材料

非線形光学素子  
ナノ量子デバイス  
スピントロニクス  
超高密度記録デバイス  
複合電子デバイス

次世代エネルギー

太陽エネルギー固定  
レコール燃料  
燃料電池  
エネルギー保存

微視的基礎方程式から  
出発しなければならないこと

複合系

フェーズフィールド法

固体

量子モンテカルロ  
DFT

ドメイン

電子

DPD  
FEM

準巨視系

RISM

MD

分子集合体

MO

電子・分子

巨大であること

多様であること

Fe-Pd  
100nm

$t^* = 0.01, 3.59, 16.70$   
ナノ組織化材料

医療・創薬・DDS

DDSナノキャリア

Water

サブミクロンスケール

Nafion膜のメソ  
スケール構造(DPD)

自己組織化磁性ナドット

オービトン  
(軌道波)

複合系電子伝導

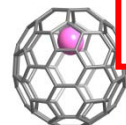
脂質膜

Nafion膜のMD

セルラーゼ

強磁性ハーフメタル

“off” light “on” light  
光スイッチ



フラーレンやカーボンナノ  
チューブのドーピング

タンパク質の  
折れ畳み構造

自己集合

カプセル化

リゾチームの空洞内の水分子

固体電子論

分子動力学

量子化学

# ナノサイエンスへのアプローチ

ミクロからのアプローチ

ミクロ

ナノ

マクロ

Å

fs, ps, ns

nm

ns, μs, ms

μm, mm, m

ms, sec, min, hr

シュレディンガー方程式  
ニュートン運動方程式



??



熱力学  
流体力学

多体系の物理・化学

数値解

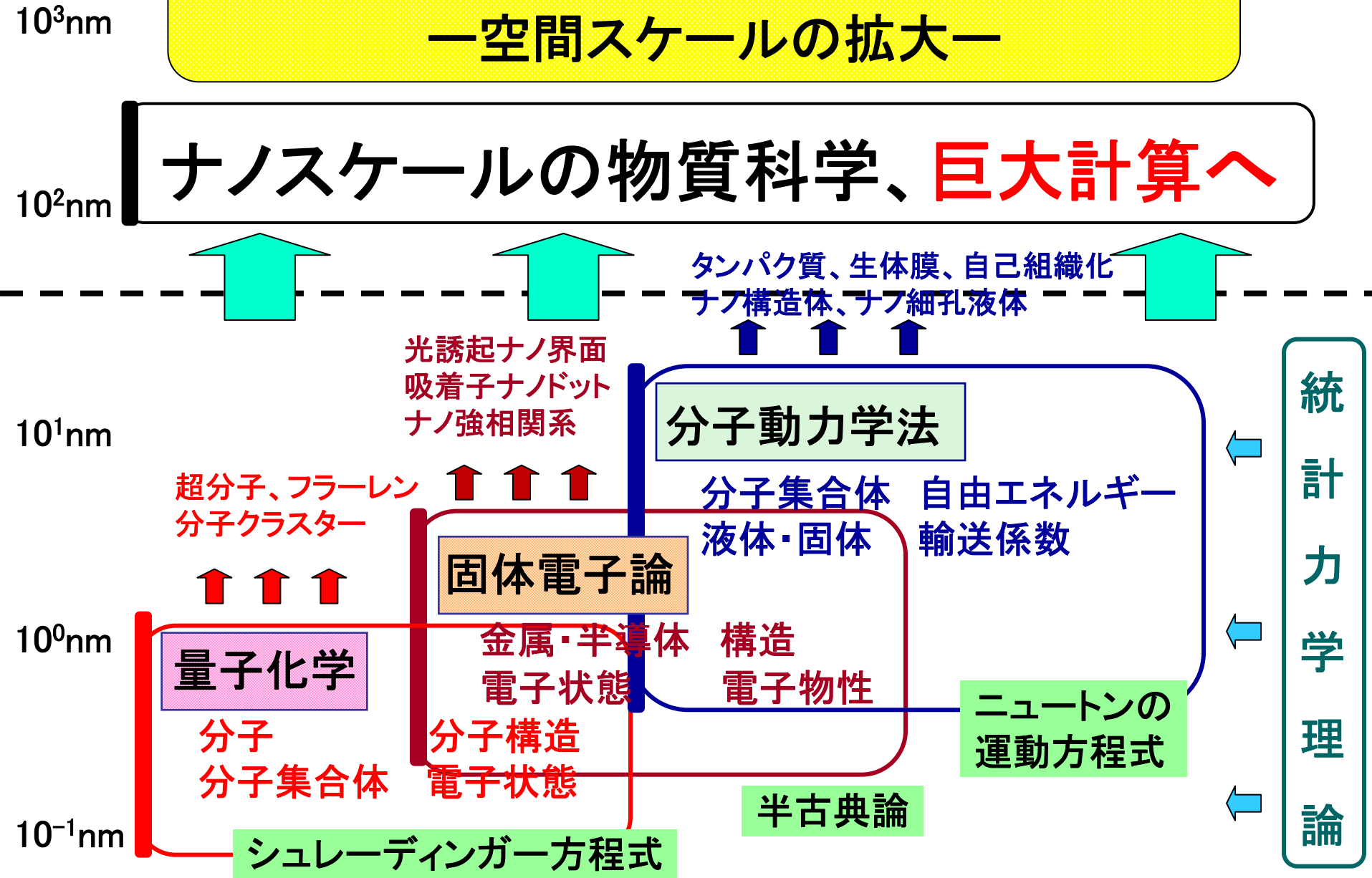
シミュレーション

近似理論

# 計算科学のナノ物質への展開

—空間スケールの拡大—

## ナノスケールの物質科学、巨大計算へ



# 計算科学のナノ物質への展開

—空間スケールの拡大—

ナノスケールの物質科学、**巨大計算へ**

高性能スーパーコンピュータの利用

- ・新規方法論
- ・新規アルゴリズム
- ・高並列化、高速化

超分

量子化学

分子  
分子集合体

電子状態

分子構造  
電子状態

電子物性

半古典論

ニュートンの  
運動方程式

シュレーディンガー方程式

タンパク質、自己組織化

統計力学理論



# 計算科学のナノ物質への展開

## — 時間スケールの拡大 —

1 step		1 day		100 days
1 s	→	100 ps	→	10 ns
10 ms	→	10 ns	→	1 μs
10 μs	→	10 μs	→	1 ms

時定数の長い動力学、**演算の高速化へ**

- 1 GFlops      1 ns
- 通信の遅延      ~ μs

# 計算科学のナノ物質への展開

## — 物質の多様性の拡大 —

基礎方程式からの出発と近似  
複雑多体系

定常状態の電子を取り扱う

$$H\Psi = E\Psi$$



HF, DFT, MP2, DC-MP2, CC, CI, SAC-CI, CAS-SCF, MC-SCF, full CI, MRCI, QM/MM, ONIOM, FMO, TD-HF, relativistic HF, 長距離HF交換相互作用、非断熱トンネル反応動力学、gradient, population, frequency、エネルギー密度解析、相対論的CI

量子化された電子、核のダイナミクスを取り扱う

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E\Psi$$



RSDFT, DDMR、量子モンテカルロ法、オーダーN法、OpenMX、DMFT、FEMTECK、RESTED、FPSEID、第一原理量子輸送計算、量子伝導シミュレーション、非平衡グリーン関数、スピン流解析、量子マスター方程式、厳密対角化、磁気応答関数、動的平均場法、ループアルゴリズム、電子格子時間発展計算、乱雑速度場法、

古典的な原子・分子の運動、統計力学を取り扱う

$$F = m\ddot{r}$$



MD, CMD, MC, hybrid MC, MCMD, レプリカ交換 MD, path integral, MQCMD, NEMD, SLLD, 熱流、熱力学的積分法、摂動法、Ewald, PME, CIME, RISM, HNC, PY, DFT, MD-MO, RISM-MC、自由エネルギー関数、挿入法、階層シミュレーション、量子古典混合系近似、影響汎関数



## 多様な方法論が必要となる