

# 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

### 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)

水素吸蔵

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

バイオ  
センサー

タンパク質阻害剤

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  
マテリアル

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。

# 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

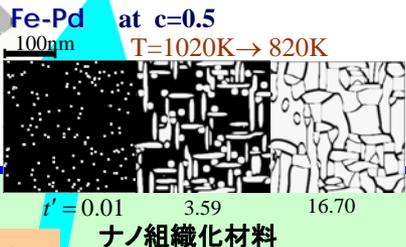


医療・創薬・DDS

## 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

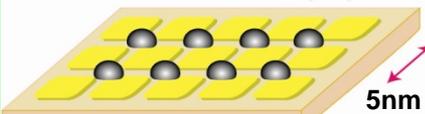
## 複合系



## フェースフィールド法

## 固体

自己組織化磁性ナノドット



## 量子モンテカルロ DFT

## ドメイン



## 電子

## 固体電子論

フラレンやカーボンナノチューブのドーピング

## 分子動力学

タンパク質の折れ畳み構造  
RMSD 4.3 Å (all C $\alpha$ )

## 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

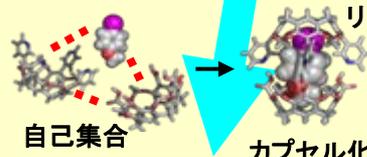
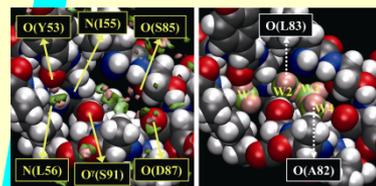
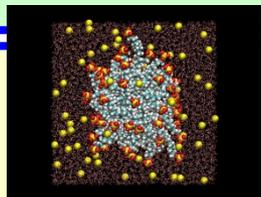
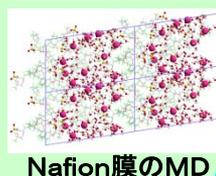
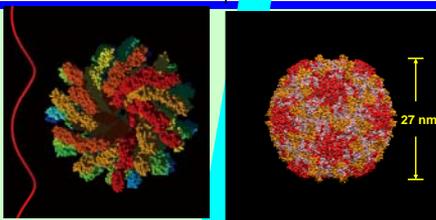
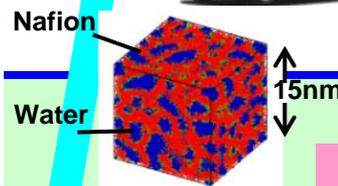
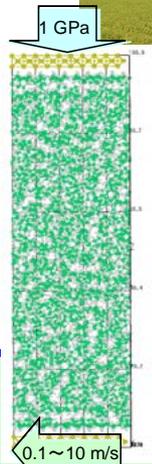
RISM

MD

## 分子集合体

MO

## 電子・分子



# 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-Pc  
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

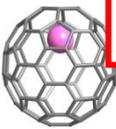
脂質膜

Nafion膜のMD

セルラーゼ

強磁性ハーフメタル

“off” “on”  
light light light  
光スイッチ

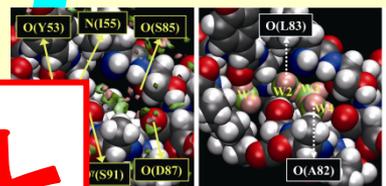


フラーレンやカーボンナノチューブのドーピング

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

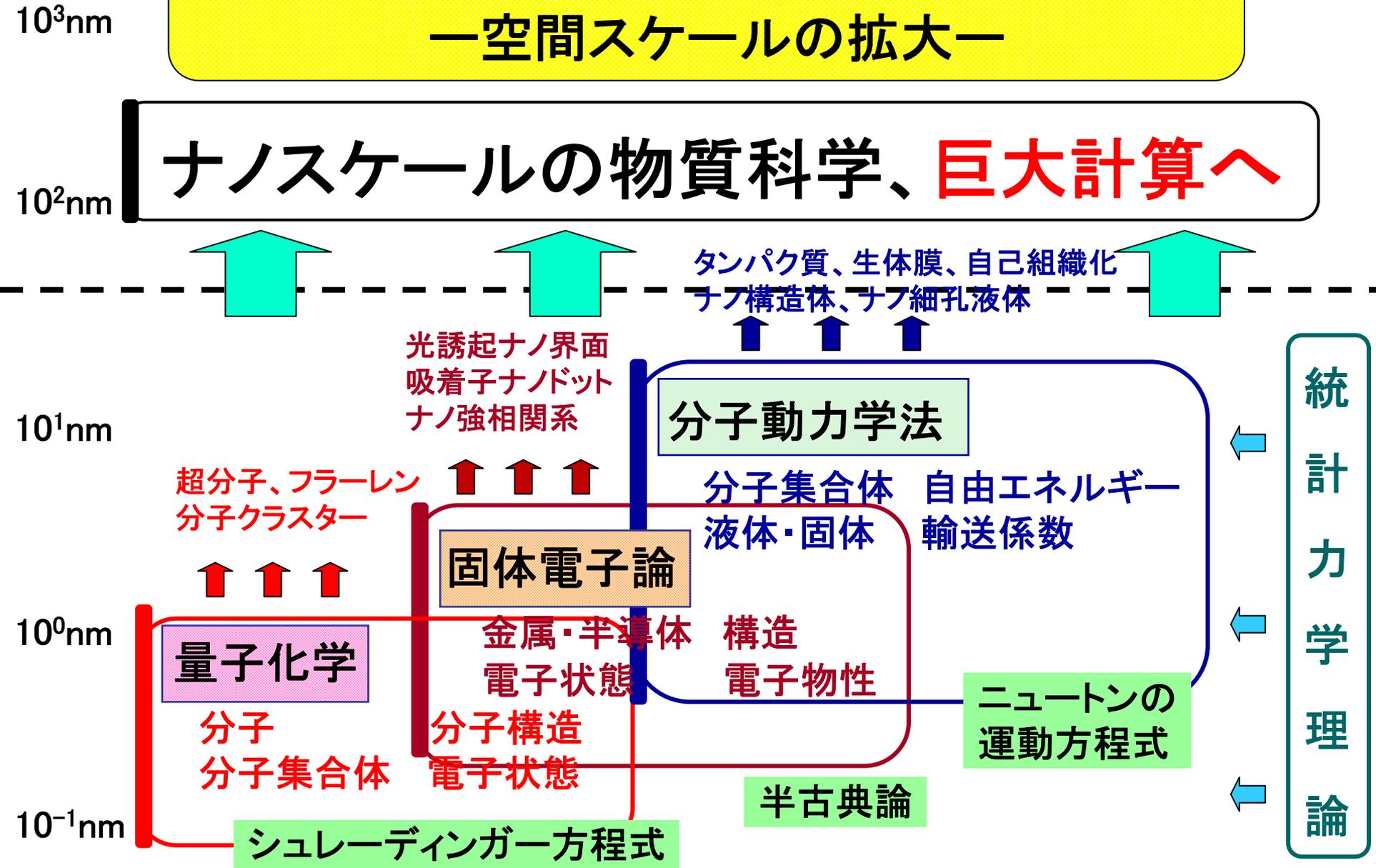
シミュレーション

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