

分子ナノサイエンス戦略拠点において担うべき研究開発

グランドチャレンジ研究

次世代エネルギー

バイオマス、光触媒、太陽電池、燃料電池、
リチウム電池・二次電池、LED、水素貯蔵

次世代ナノ生体物質・ソフトナノマテリアル

DDSナノキャリアー、ウイルス、タンパク質制御、
界面活性剤・コロイド、高分子膜

次世代ナノ機能性材料

光機能分子、スイッチング機能分子、分子強誘電体、
スピン機能分子、集積分子機能、有機EL

次世代ナノ物質変換

反応設計、反応制御、ナノ触媒、ナノ物質化学反応、
元素戦略反応、界面・表面、電極反応

学術基盤研究

量子化学

高精度理論、密度汎関数理論

分子シミュレーション

分子動力学法、モンテカルロ法

化学統計力学

RISM理論、分布関数理論

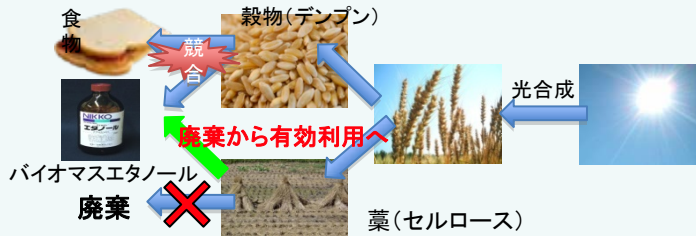
反応動力学

非断熱動力学、励起状態動力学

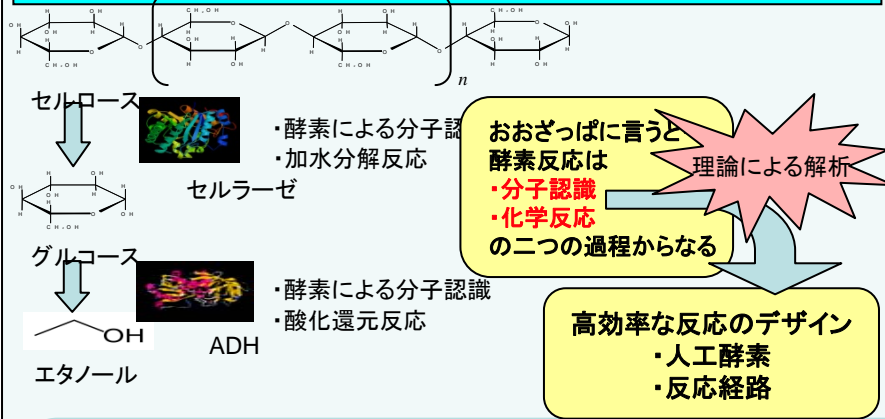
次世代エネルギー

酵素反応のまるごと解析 — バイオマス・エタノール製造

セルロースからのバイオマスエネルギー：食物と競合しないエネルギー源



セルロースからのアルコール生成：理論による高効率反応のデザイン



これまでのアプローチ

タンパク質の構造は固定
・実験やMDなどで決定

古典力学

平衡状態

1度の3D-RISM
計算で可能

計算時間：従来型のスパコンで5～10時間程度

中核アプリ：3D-RISM+FMO(高速量子化学計算ソフト)
付加機能ソフト：MD等

☆次世代スパコン☆

酵素反応のまるごと解析

タンパク質の構造揺らぎ
・MCやMDと連成

化学反応
・量子化学と連成

・3D-RISMを繰り返し解く
・より大きなタンパク質
・より高精度に

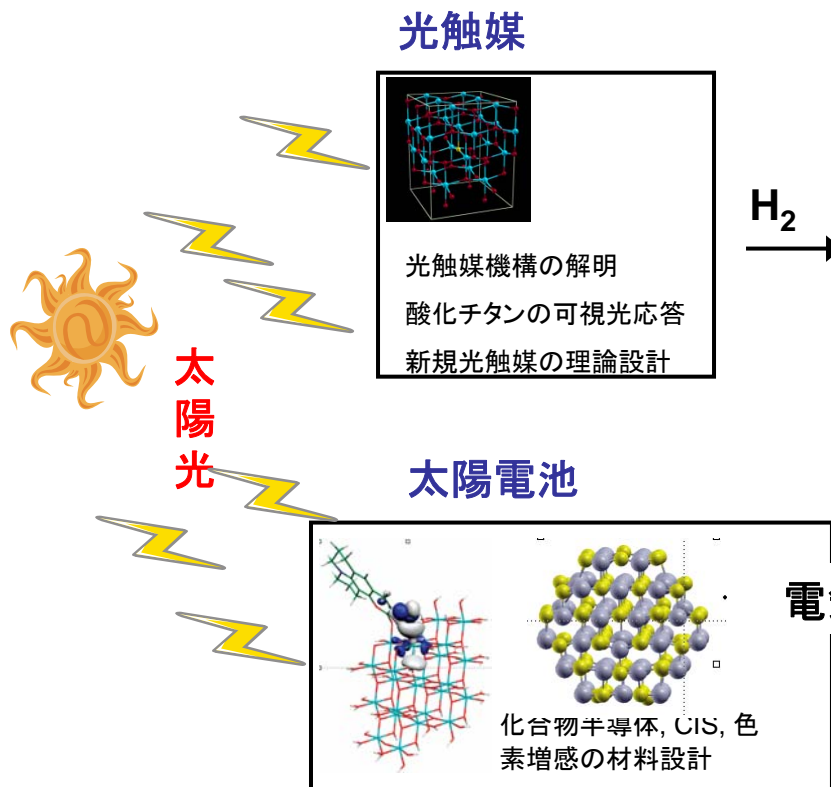
従来の数千～数万倍の計算量
→ 従来型スパコンでは不可能
1度の3D-RISM計算が数秒で可能
全体でも1日～十数日で計算出来る！

高効率の触媒・酵素の
設計が可能に。

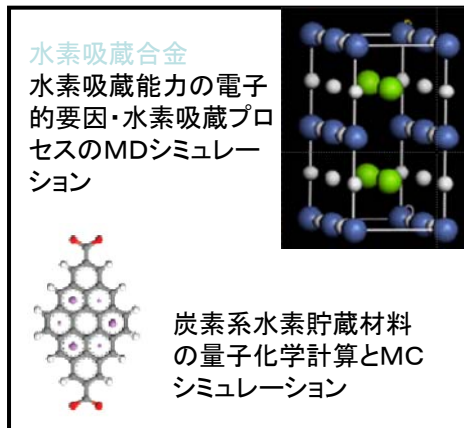
環境・エネルギー問題に挑戦する計算化学

再生可能エネルギーのための材料開発

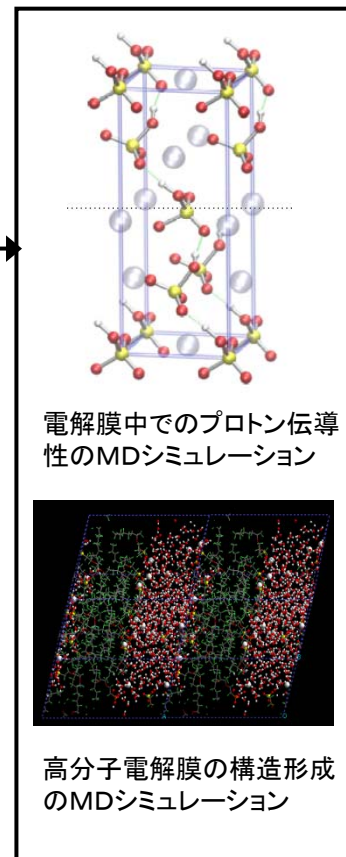
太陽光エネルギー変換



水素貯蔵

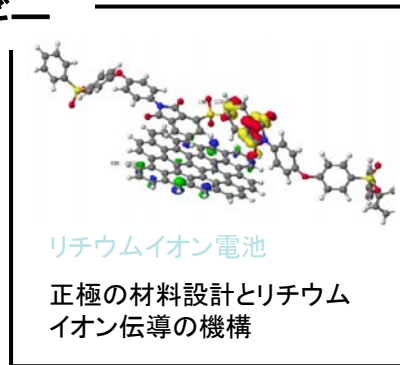


燃料電池



電気エネルギー

2次電池

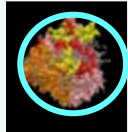


ウイルス全原子シミュレーション

現状の研究

断片のひとつ

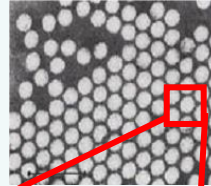
100,000原子



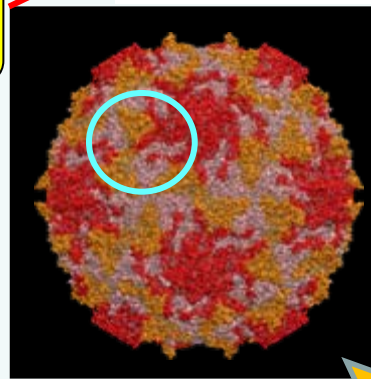
断片のタンパク質が
60個集まって1個の
ウイルスを構成

小児マヒ
ウイルス

"Medical Virology",
edited by D. O. White and
F. Fenner, Academic Press

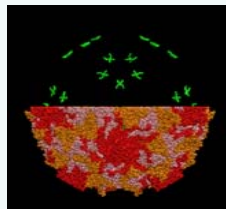


10,000,000原子



ウイルス全体1000万原子系の
分子動力学計算が必要

小児マヒウイルスのカプシド
(タンパク質でできたウイルスの殻)



ウイルスカプシドに吸収さ
れた抗ウイルス剤
(カプシド上部は透明にして表示)

PDF database

現状

1マイクロ秒の原子の動きをシミュ
レーションする:500年(解析不可能)
(実効性能 0.5テラフロップス)

☆次世代スパコン☆

ウイルスと抗ウイルス剤の結合
による不活性化、抗体との特異
な相互作用の解析を実現。

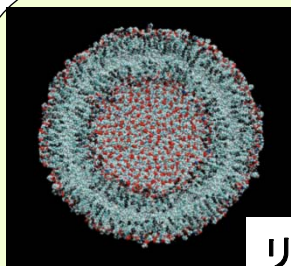
1マイクロ秒の原子の動きを
シミュレーションする:3ヶ月
(実効性能:1ペタフロップス)

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

中核アプリ:高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト
付加機能ソフト:熱力学的積分法、拡張アンサンブル法等

次世代ナノ生体物質・ソフトナノマテリアル

ドラッグデリバリー(DDS)のナノキャリアー材料 細胞膜、リポソーム、高分子ミセルと薬剤の全原子シミュレーション



リポソーム

リポソームや高分子ミセルを構成する**300万個**にも及ぶ原子や分子の運動方程式を解き、構造安定性や細胞膜との相互作用について解明する。

300万原子系の分子動力学計算

現状 実効性能で0.5テラフロップス

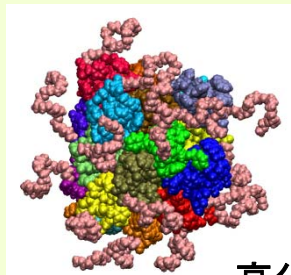
小規模なモデル系での計算(10万原子程度)



次世代スパコン 実効性能で1ペタフロップス

実物に対する計算(300万原子系)

中核アプリ:高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト
付加機能ソフト:熱力学的積分法
連携ツール:
IGNITION

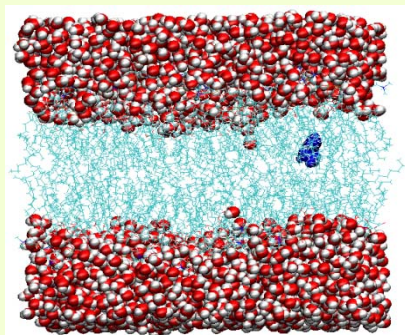


高分子ミセル

薬剤を担持し輸送するリポソームや高分子ミセルと薬剤との相互作用を原子レベルで理解し、さらには、これら担持体と薬剤との複合体が細胞膜とどのように相互作用しているかについての解析が分子レベルで可能となる。

期待されるアウトカム

DDSに用いられるリポソームや高分子ミセルの設計が可能となり、DDS開発のための基盤が構築され、**ガンなどの有効な治療法、新薬の開発に貢献**できる。



脂質膜と薬剤

小規模な脂質膜と薬剤を構成する**1~3万個**程度の原子の運動方程式を解き、これらの間の相互作用を解析する。**何千、何万ものスクリーニング。**

大規模スクリーニング

現状 実効性能で0.5テラフロップス

1種類の条件のテスト(自由エネルギー曲線1本)に**2日**



次世代スパコン 実効性能で1ペタフロップス

1日で**1,000種類**のテスト、スクリーニング

中核アプリ:高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト
付加機能ソフト:エネルギー表示法、粒子挿入法、熱力学的積分法

薬剤が細胞膜を直接透過する際の通りやすさ、吸収のされやすさを分子レベルで解析する。

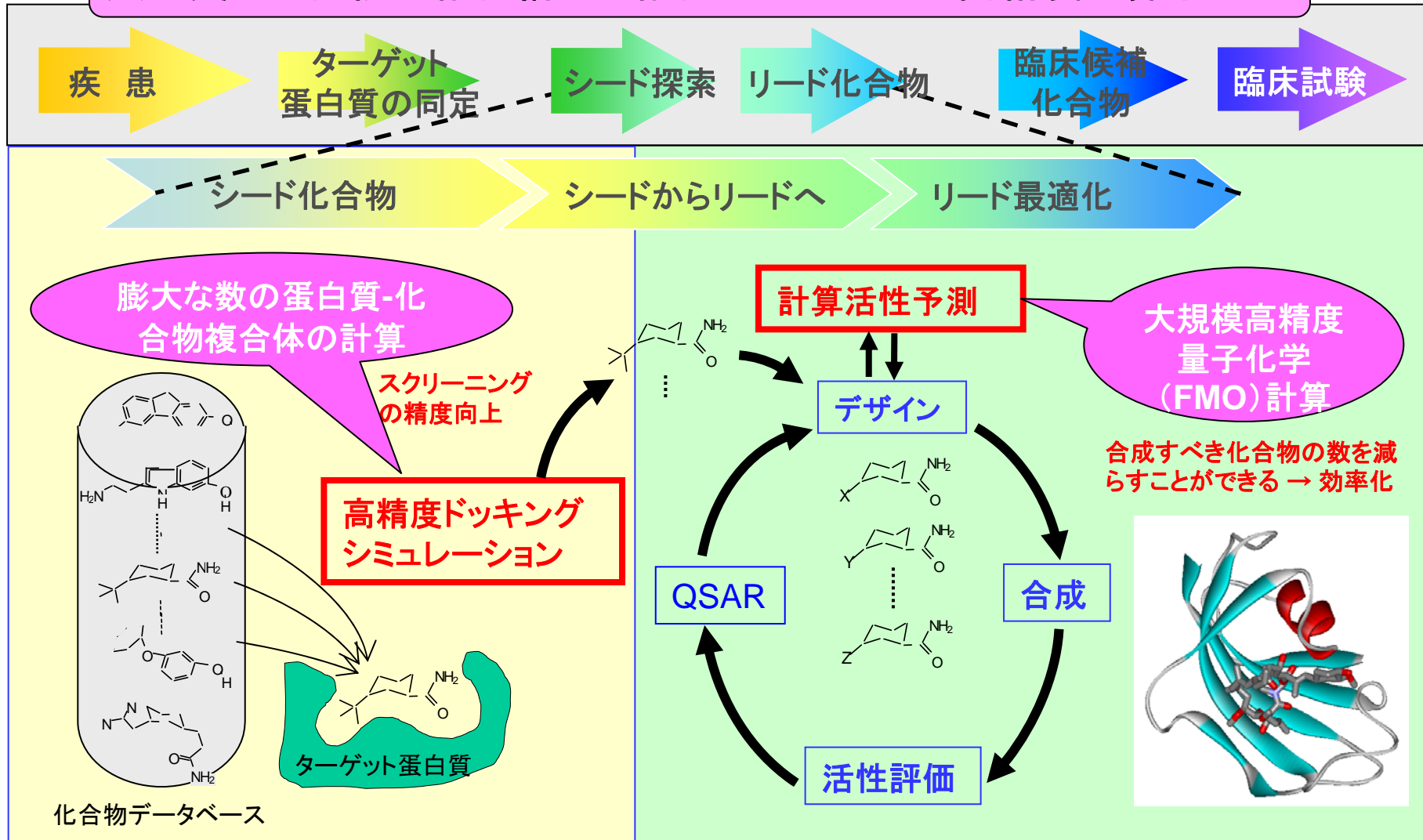
期待されるアウトカム

経皮吸収する薬剤の設計や、吸収促進剤の開発など新薬の開発に貢献できる。

次世代ナノ生体物質・ソフトナノマテリアル

論理的かつ効率的な創薬を目指して

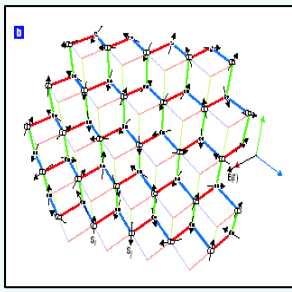
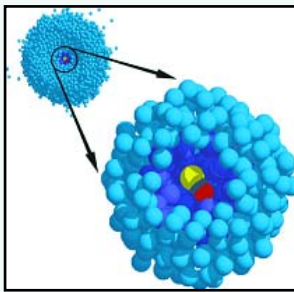
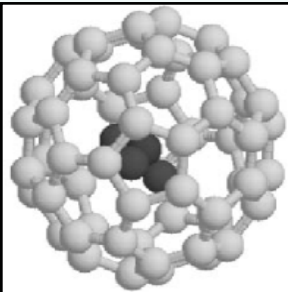
蛋白質と化合物の結合構造と結合エネルギーの高精度計算予測



分子量子情報と量子演算

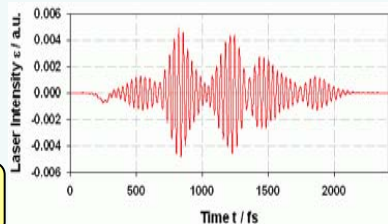
分子量子ビットによる量子計算シミュレーション

分子系を捕捉し振動・回転・電子状態で量子ビットを形成



・フラーレンC₆₀ ・超流動ヘリウム液滴中 ・光学格子

最適制御理論による最適パルスレーザーで量子論理ゲート



$$|x\rangle \xrightarrow{H} (-1)^x |x\rangle + |1-x\rangle$$

$$\begin{matrix} |x\rangle \\ |y\rangle \end{matrix} \xrightarrow{C} \begin{matrix} |x\rangle \\ |x \oplus y\rangle \end{matrix}$$

現状

- 数分子程度の孤立系とパルスレーザー場の計算が可能。
- フラーレンC₆₀ ・超流動ヘリウム液滴中 ・光学格子に捕捉された数十分子によるマルチ量子ビットの量子演算シミュレーションは不可能

☆次世代スパコン☆

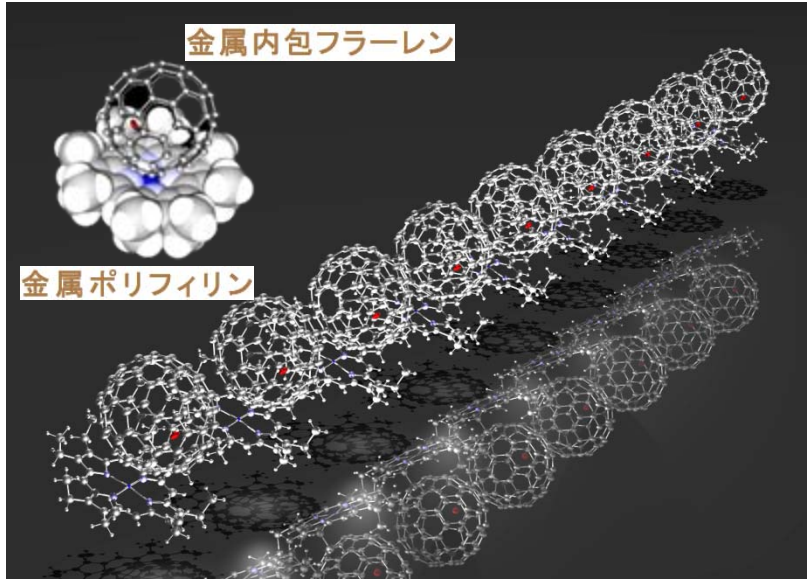
フラーレンC₆₀, 超流動ヘリウム液滴中、光学格子に捕捉された数十分子によるマルチ量子ビット系の量子演算シミュレーションを実現

↓
分子量子情報
(保存、通信、量子暗号)
量子コンピュータ設計に寄与

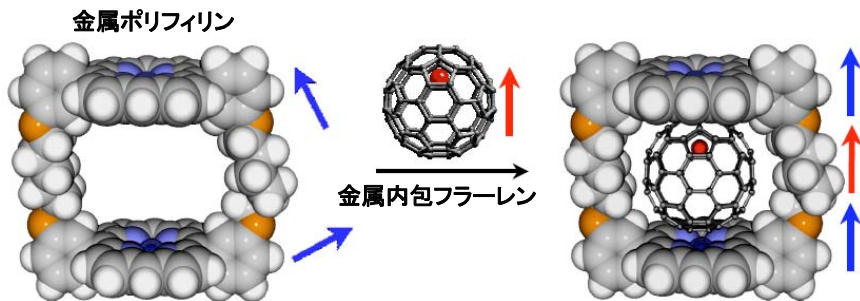
中核アプリ: 高速量子化学計算、分子動力学シミュレーション
付加機能ソフト: 密度行列マスター方程式

次世代ナノ機能性材料

集積化による強誘電体と強磁性体の創製



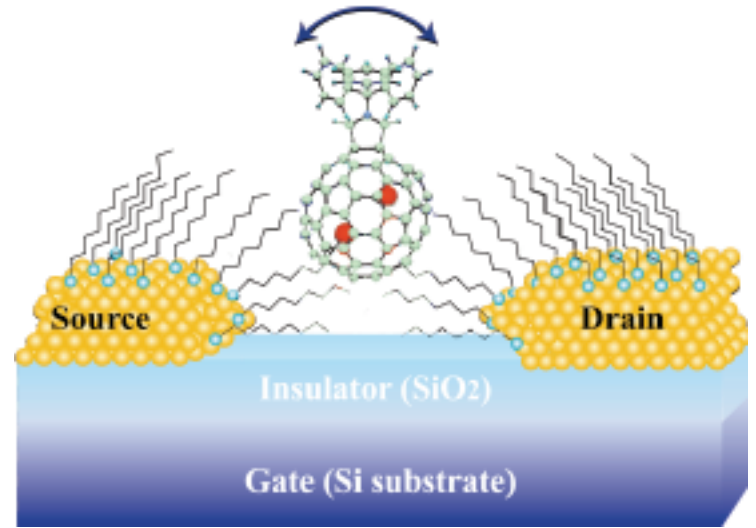
分子間の距離と配向の制御



層間相互によるスピン配向の制御

ナノ分子の集積化による機能の創発

電場制御と分子配向スイッチ



これらの丸ごとの量子化学計算は不可能



次世代コンピュータで実現

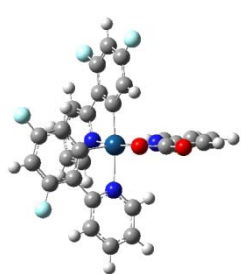


革新的な機能分子の開拓
が実験に先立って可能

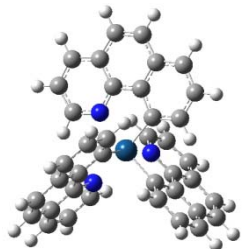
次世代ナノ機能性材料

有機ELの励起ダイナミクス

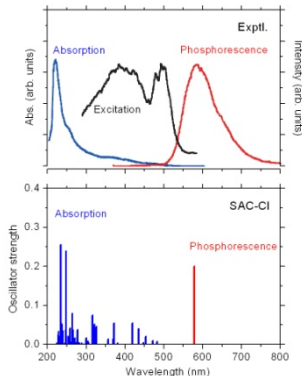
◆ Ir錯体・・・りん光材料



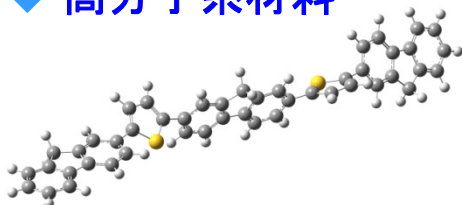
Flrpic



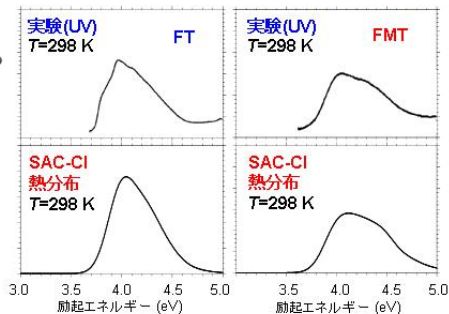
Ir(bzq)₃



◆ 高分子系材料



Fluorene-Thiophene

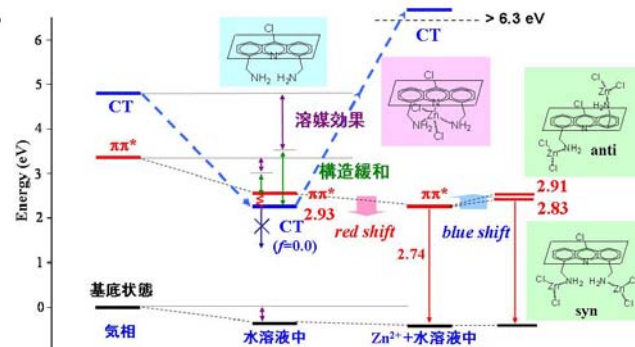
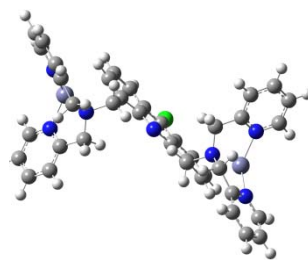
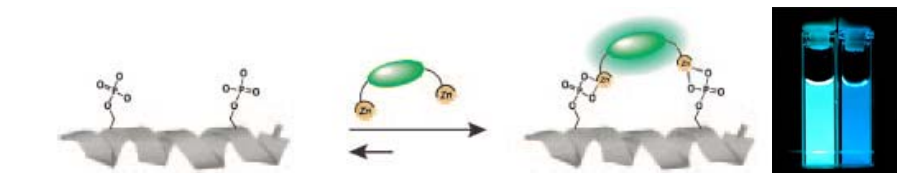


理論はスペクトルの詳細を再現可能

スペクトル(カラー)チューニング、
電子・ホール輸送・再結合、量子収率

バイオセンサーの蛍光発光

- ◆ 細胞レベルでの生理活性物質の検出
- ◆ 酵素反応のリアルタイム測定



発光メカニズムの解明

蛋白質との結合、溶媒効果
発光強度・発光色、酵素反応の解析

次世代スパコン

発光層、輸送層におけるシミュレーション

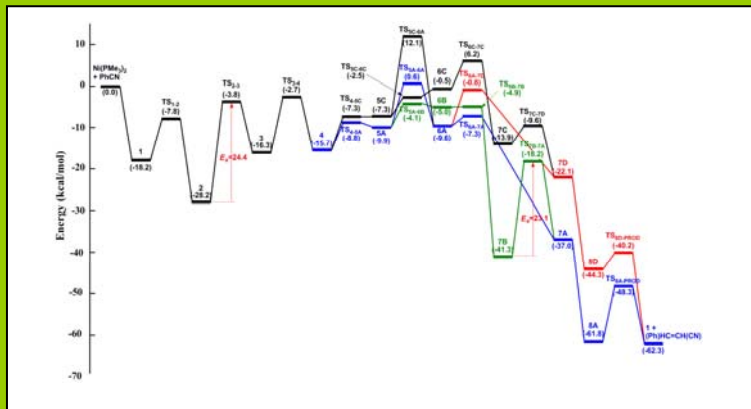
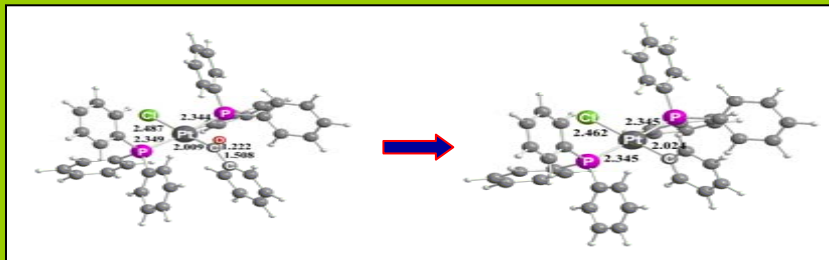
細胞膜、蛋白質中におけるシミュレーション

次世代機能性材料の理論設計

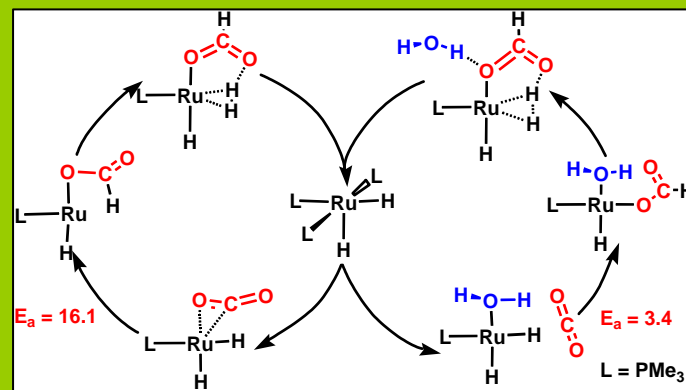
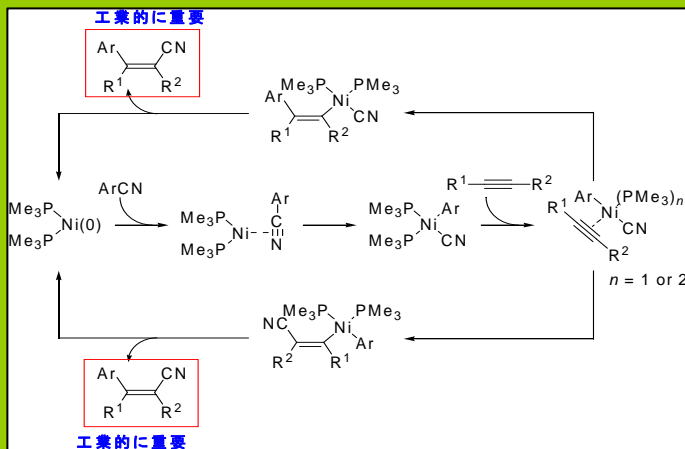
次世代ナノ物質変換

元素戦略的反応 貴金属触媒から卑金属触媒と汎用元素の利用による高効率物質変換の達成 → 諸外国にない 我が国の革新的基盤技術の確立

ナノスケール分子触媒の理論的理解と予測は現代の精密有機合成で不可欠



PtやPdからNiやFeへ： 新技術の開発



有効ポテンシャル + 並列化 + MDで正しい微視的理解と反応予測へ

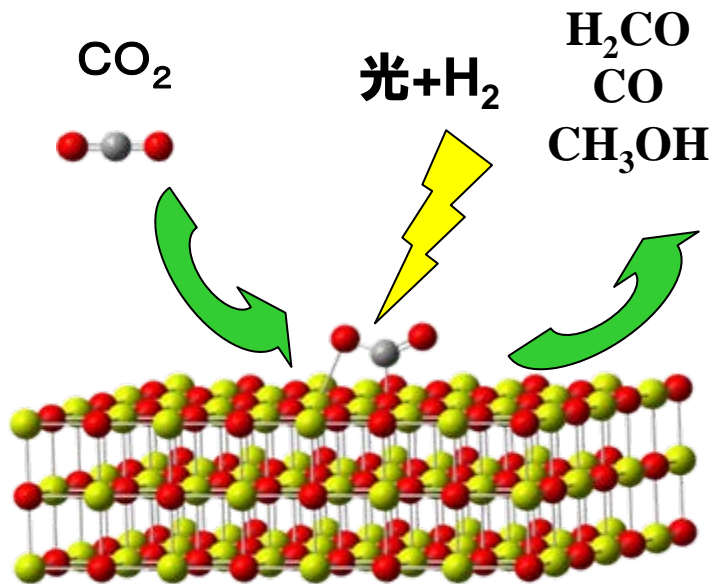
次世代ナノ物質変換

学術的意義 ナノスケールの分子および分子集団の関与する物質変換の微視的理解
サイズ効果、無限系と孤立系の相互作用の新しく正しい理解と展開

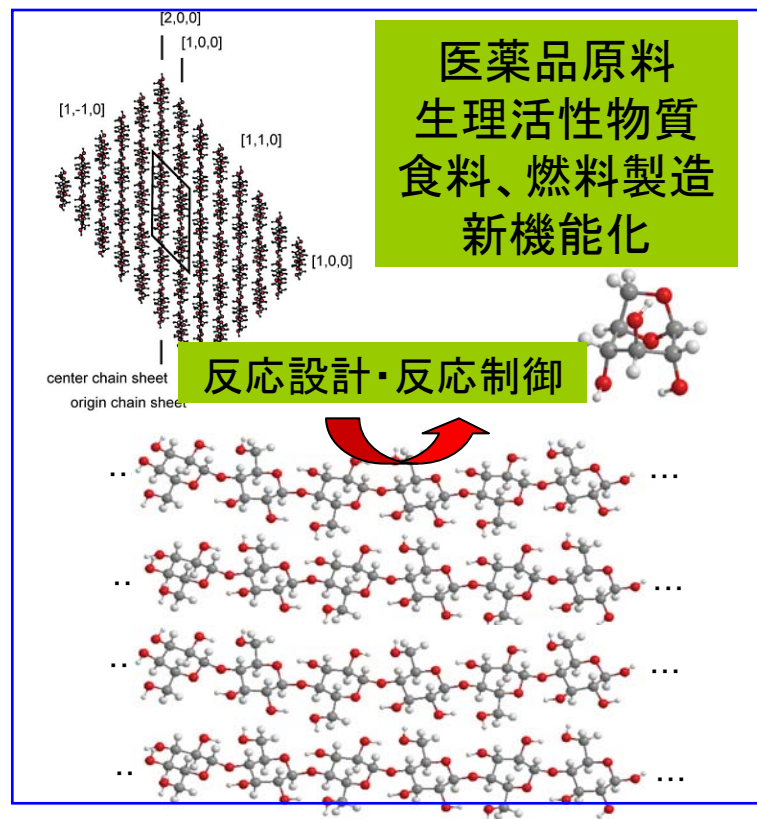
社会的意義 環境、エネルギー、資源問題の解決、基盤技術の革新的確立

有効ポテンシャル+分割-SCF+並列計算による高精度Post-Hartree-Fock法の
確立と反応設計、反応制御、ナノ触媒、元素戦略反応、資源循環反応の達成

資源循環反応の一例



機構解明と新規触媒開発



従来、不可能であった表面、固体、大規模分子集合系の高精度計算が可能に！

分子ナノサイエンス戦略機関

戦略機関C

SINET3

戦略機関B

戦略機関A
神戸分室

戦略機関A

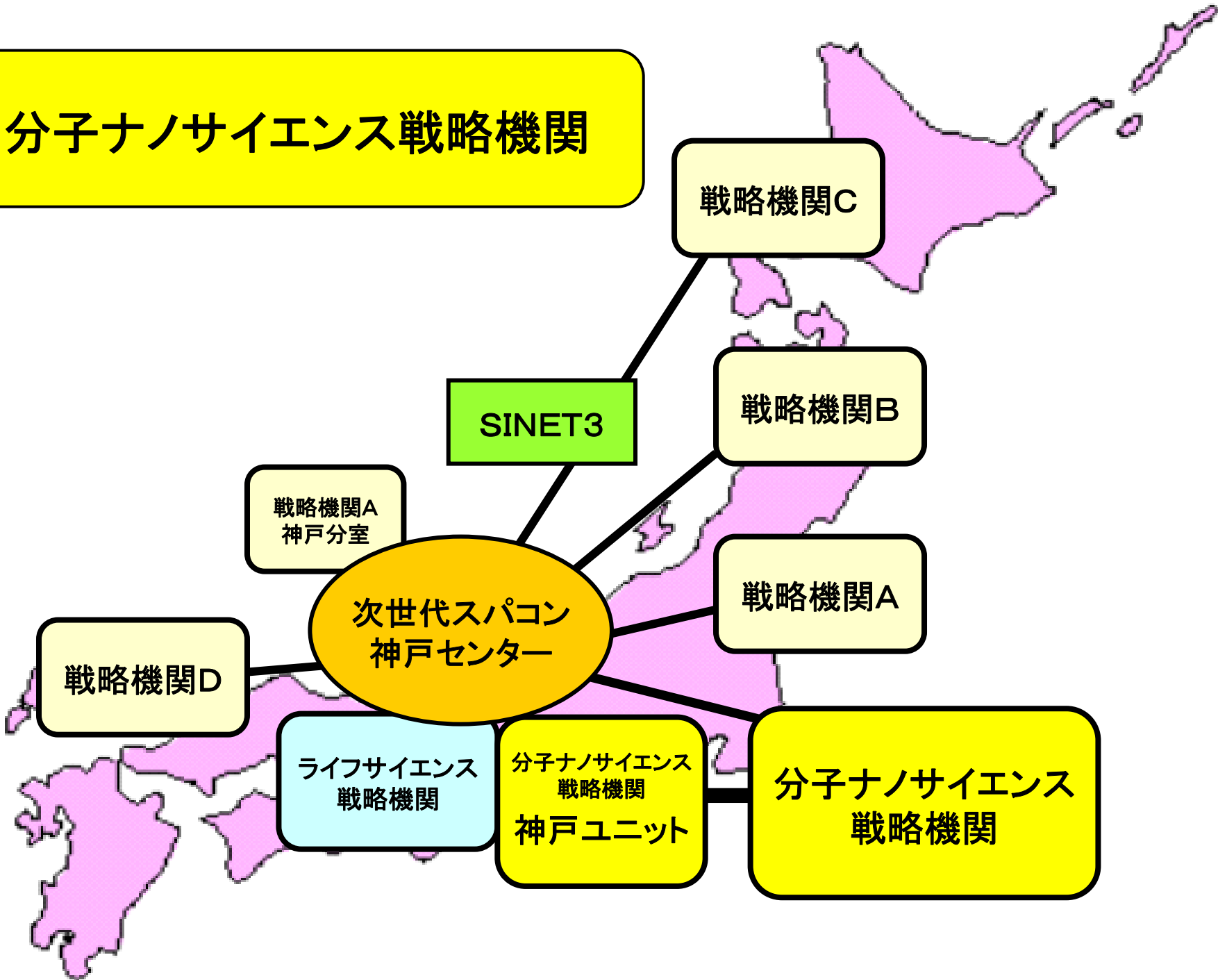
次世代スパコン
神戸センター

戦略機関D

ライフサイエンス
戦略機関

分子ナノサイエンス
戦略機関
神戸ユニット

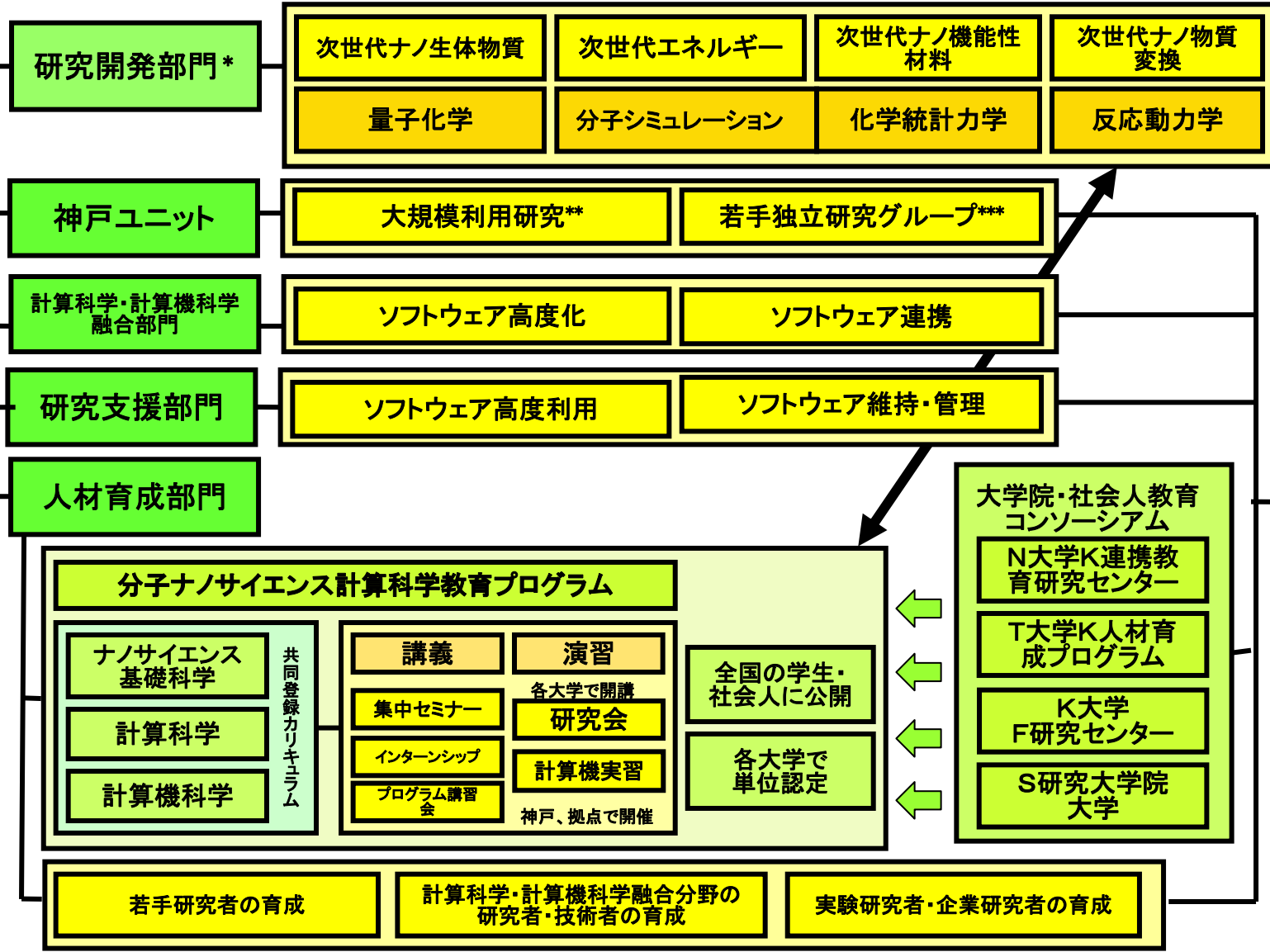
分子ナノサイエンス
戦略機関



分子ナノサイエンス戦略拠点に望まれる体制

戦略機関・分子ナノサイエンス研究センター

神戸センター・登録機関等



コーディネーション部門

*コミュニティのメンバーならびに分子研専任教員、また公募により採用する特任教授、特任准教授に相当する教員で構成。

**研究開発部門から、利用研究の実施、ソフトの高度化等のプロジェクトを効率的に推進するために配置。

***公募により、若手研究者が主体となって組織したグループが、独立して研究開発を進める。