

分野2「新物質・エネルギー創成」

平成25年12月4日(火)

分野2 統括責任者 東京大学 常行真司

分野2推進研究コミュニティー 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)



全関係者数: 130名(研究実施・各種委員)

参加機関数: 28大学・4独法・7企業

(1)分野2 戦略目標-1

社会が求めるグリーンエネルギーと健康な暮らしに貢献

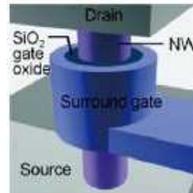
次世代“省エネ”デバイス・構造材料の開発先行に必要な物質機能設計技術

◆“省エネ”デバイス

- ・半導体微細化限界を打破
- ・高温超伝導や微小磁区(スピン)活用

◆“省資源”構造・機能材料

- ・レアメタルフリー新物質・材料
- ・インフラを支える金属構造材料



シリコンナノワイヤ

“創エネ”“蓄エネ”の飛躍的効率向上に繋がる物質・材料設計技術

◆“創エネ”物質・材料

- ・燃料電池エネルギー変換効率向上
- ・メタンハイドレートやバイオマス

◆“蓄エネ”物質・材料

- ・リチウムイオン電池長寿命高信頼化
- ・エネルギーハーベスティング

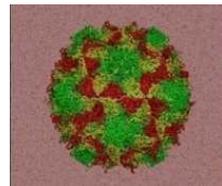


メタン
ハイドレート

感染症の克服に向けたウイルスの振る舞いの理解と創薬への応用

◆ウイルスの構造安定性とダイナミクス

- ・構造が安定する仕組み
- ・構造の環境対応生
- ・感染直後の構造変化
- ・感染阻害分子



小児マヒウイルス

◆ウイルスの感染機構の解明

- ・感染の際の分子間電子分布
- ・新しい作用機構の解明
- ・人工ワクチン、抗ウイルス剤
- ・高活性化化合物の分子設計

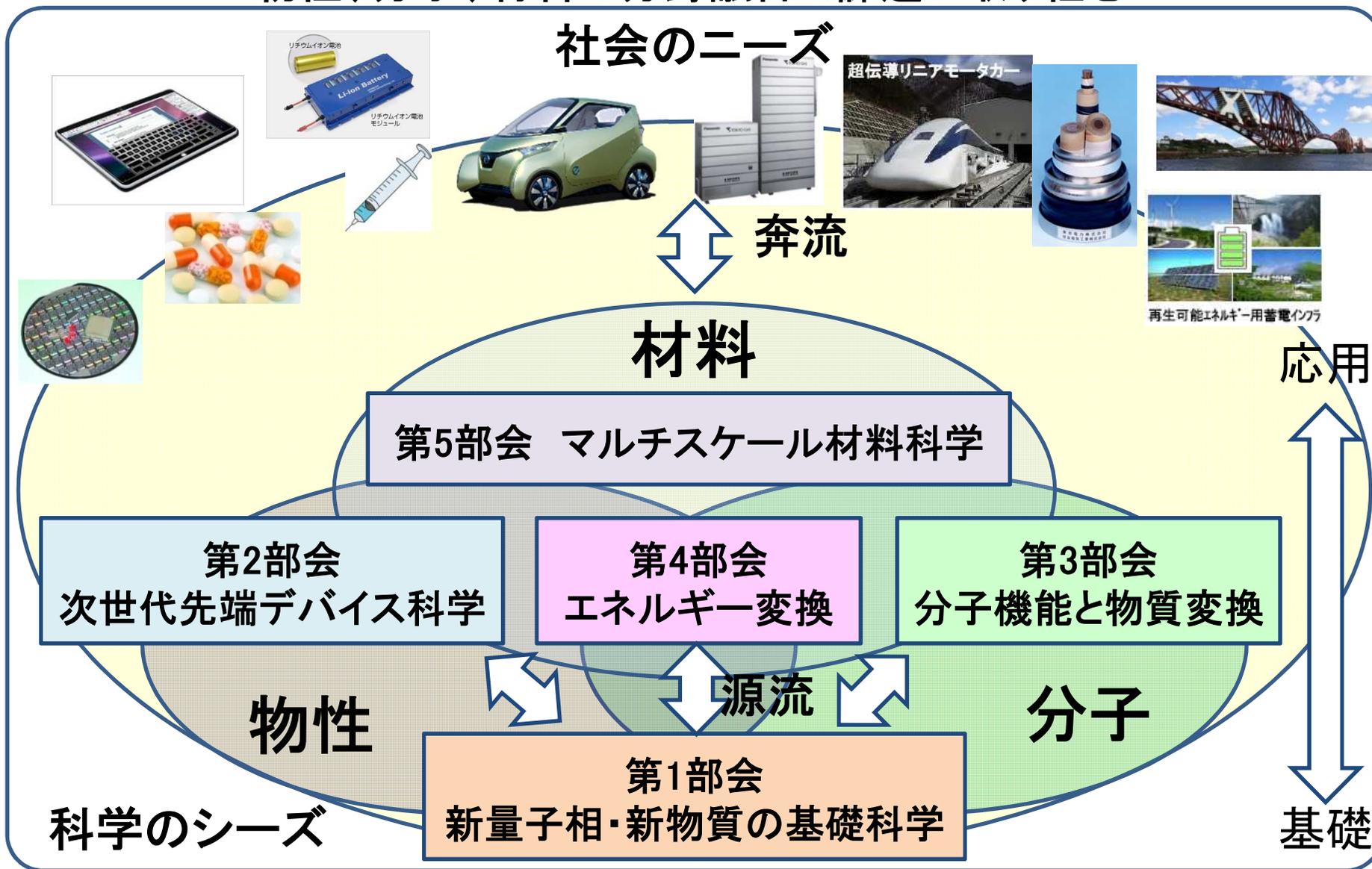


インフルエンザ
ウイルスのレセプタ

元素戦略Pj, 大型研究施設, 産業界との連携で競争力強化

(1)分野2 戦略目標-2 ~5つの戦略課題~

戦略目標:基礎科学の源流から物質機能とエネルギー変換を操る奔流へ
 ~物性、分子、材料の分野融合で課題に取り組む~



(2)研究開発課題概要

5戦略課題を「京」利用7重点課題と特別支援課題*で構成

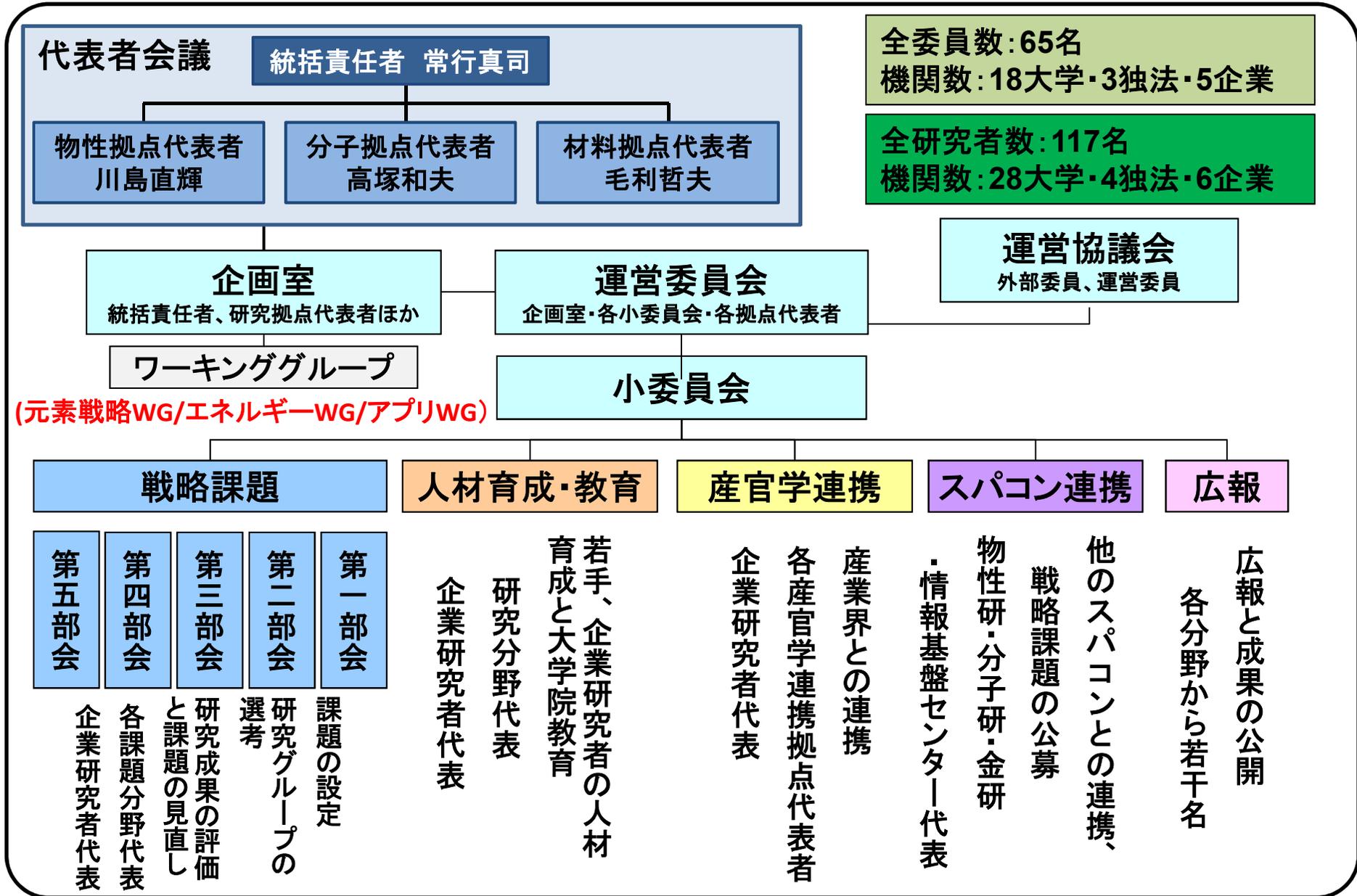


* 特別支援課題は添付資料参照

各部会で戦略課題を多角的な視野で効果的に推進

(3)分野全体の推進体制

分野融合体制で研究と分野振興を機動的に推進



(4)分野全体としての研究開発課題-1

<実施計画と最終目標>

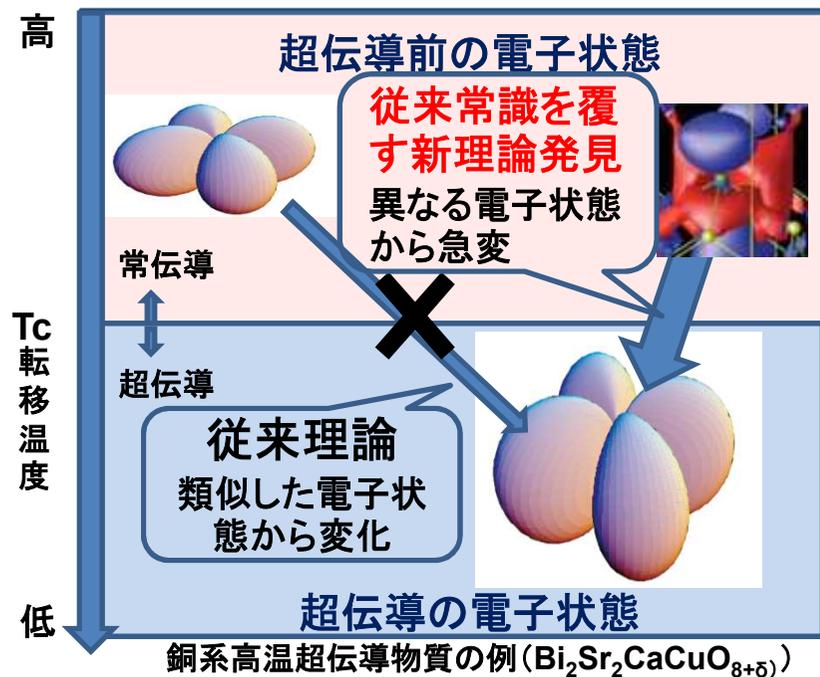
前半(H23～H25上)	後半(H25下～27)	最終目標
<p>(当初計画)</p> <p>課題1:高温超伝導機構提案 課題2:ナノ炭素分子大規模応用計算 課題3:RSDFTと輸送シミュレータ統合 課題4:温度、pH等の環境とカプシド安定構造への影響明確化 課題5:電池電極界面構造と性能の関連性を明確化 課題6:マンハイトリート乖離過程計算で最適融解条件探索 課題7:鉄中Fe/炭化物界面応力計算</p>	<p>(当初計画)</p> <p>課題1:強相関超伝導体物性解明 課題2:高価値材料の高度設計実現 課題3:実空間法デバイスシミュレータ開発 課題4:カプシドを用いた新タイプの抗ウイルス剤の開発指針取得 課題5:電極の白金の役割解明と代替のための条件を提示 課題6:マンハイトリートの化学的制御可能とする物理化学的知見を確立 課題7:微細構造が金属特性に及ぼす影響解明と省資源材料の設計</p>	<p>物性科学分野、分子科学分野、材料科学分野にまたがる連携により、デバイス機能制御、物質創成と物質変換、材料開発、エネルギー変換を通して、基礎科学の深化された概念が生む新量子相・新物質探索のアイデアや物質機能の深い理解を人類の課題解決へと導く道を、計算物質科学によって切り拓く。</p>
<p>(実施内容)</p> <p>課題1:超伝導前後の電子状態計算 課題2:フラーレン分子間力結合計算 課題3:10万原子NW電子状態計算 課題4:1000万原子ウイルスカプシド丸ごと計算 課題5:燃料電池白金活性点推測、リウムイオン電池SEI膜形成推測 課題6:マンハイトリートの気泡が分解促進につながることを可視化 課題7:炭化物サイズと界面構造の関連の計算</p>	<p>(見直した計画)平成25年10月作業部会での中間評価の際、下記の意見が出たので、今後見直しを検討する。</p> <p>課題1:擬ギャップ確認実験手段検討 課題2:材料設計に指針を与えること 課題3:実デバイス開発Gと連携検討 課題4:計算と疫学的検証比較で妥当性を評価 課題5:実状と理想のギャップを理解して計算モデルを立てる必要がある。 課題6:採掘Gとの連携検討 課題7:フェーズフィールド法を介して内部組織の計算を行うのが課題</p>	

(4)分野全体としての研究開発課題-2(トピックス)

課題1:超伝導物質の電子状態計算 今田正俊(東京大)

<成果> 超伝導前後で電子状態が全く異なることを発見し実験でも検証に成功

<独創性・優位性>



<活用>

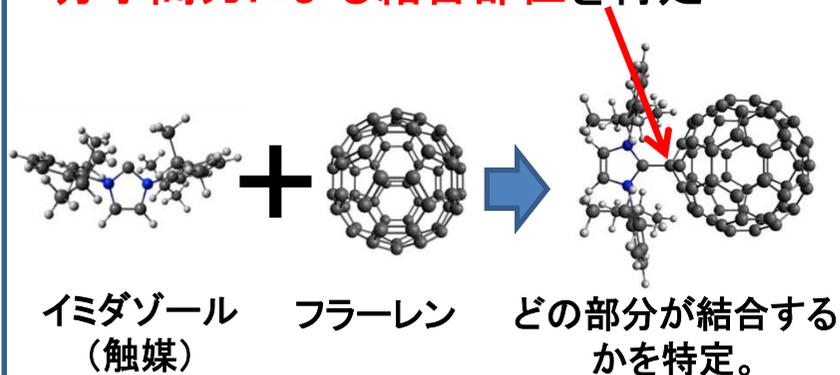
より高温で超伝導に変化する物質探査方法に新理論を適用している。

課題2:フラーレンの超高精度計算 天能精一郎(神戸大)

<成果> 電子状態超精密計算手法を開発し、分子間力結合部位を特定

<独創性・優位性>

これまで厳密に計算できなかった
分子間力による結合部位を特定



<活用>

高性能触媒や薬品等の新しい炭素材料の開発に本手法を応用する予定。

(4)分野全体としての研究開発課題-3 (トピックス)

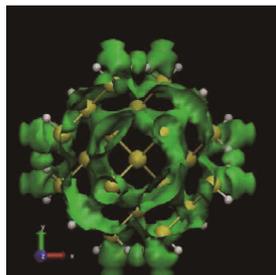
課題3: 次世代デバイス設計 押山淳(東京大)

<成果> 世界最高速電子密度計算法を開発し(ゴードンベル受賞)、電子の波の性質を考慮した電子密度分布計算に成功。

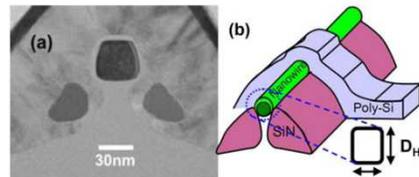
<独創性・優位性>

次世代半導体ナノワイヤー中に流れる電子密度分布を世界で初めて提示

- ・電圧で万華鏡のように変化
- ・分布パターンはワイヤー外形に依存



ワイヤ断面の電子密度分布



(a)試作されたデバイス
(b)デバイスイメージ

<活用>

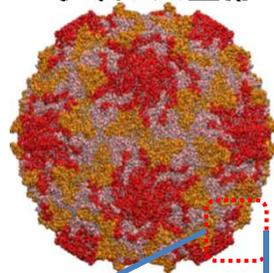
新手法(RSDFT)はナノデバイス、シリセン等の新材料デバイス設計に活用中

課題4: ウイルス分子動力学計算 岡崎進(名古屋大)

<成果> ウイルスの殻を構成する全原子の動きを計算する手法を開発し、レセプタとの結合部位を計算で特定。

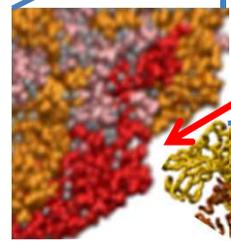
<独創性・優位性>

ウイルス全形



・240個のたんぱく質と周囲の水分子を構成する、全1000万原子の動きを3ヶ月で解析(従来10年)

・結合部位を計算で詳細に特定



細胞

<活用>

新手法(MODYLAS)は製薬・素材4社との共同研究に発展し、「京」一般利用で活用中。ウイルスは実験を本格検討中

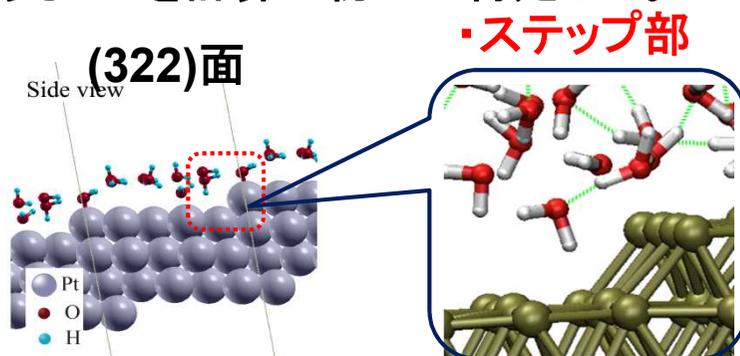
(4)分野全体としての研究開発課題-4 (トピックス)

課題5-1: 白金代替燃料電池 杉野修(東京大)

<成果> 白金電極上への水和構造の異方性を調べた結果、(322)面のステップ部で特異的な安定性を示すことを発見。

<独創性・優位性>

- ・電位差を与えながら反応機構の自由エネルギー計算を実施する手法を新開発
- ・(322)ステップ面が白金電極の活性点であることを計算で初めて特定した。



<活用>

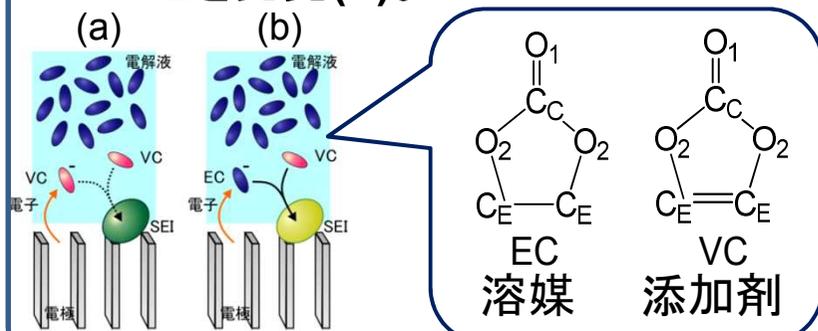
本計算手法は、NEDOのPjで活性点原理説明と白金代替電極物質探索に活用中。

課題5-2: 高信頼リチウムイオン電池 館山佳尚(NIMS)

<成果> 電子状態計算、分子動力学計算、自由エネルギー計算を融合し、SEI膜形成反応過程を特定

<独創性・優位性>

添加剤同士の結合でSEI膜が形成されると考えていた(a)が、添加剤分解物が溶媒を不活性化し、過剰なSEI析出を防いでいたことを発見(b)。



<活用>

本成果はCREST、さきがけで、長期安定に必要な電極・電解液開発に適用中。
富士フィルムで実用化検討中。

(4)分野全体としての研究開発課題-5 (トピックス)

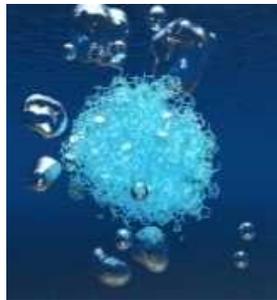
課題6:メタンハイドレート分解過程計算 田中秀樹(岡山大)

<成果> 分解時にメタンの気泡ができると急激に分解が促進されることをはじめて明らかにした。

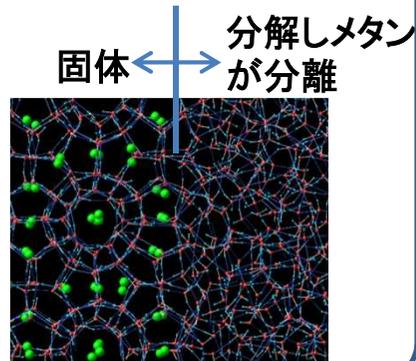
<独創性・優位性>

世界最高性能MODYLASを活用し、ハイドレート100万原子の分解過程を計算。
可視化で気泡分解関与を明確化した。

メタンガス気泡生成過程を可視化



固体と分解後の構造



<活用>

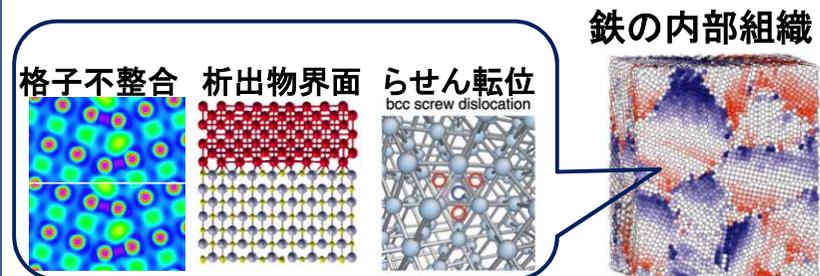
気泡制御等による効率的採掘に向けてAISTメタンハイドレートセンターと協議を開始。

課題7:微細組織の厳密連携計算 香山正憲(AIST)

<成果> 鉄鋼の剛性や靱性にかかわるTiC析出物の大きさとその界面の接合状態の変化を計算で明らかにした。

<独創性・優位性>

金属に第一原理計算を初めて適用し、ミクロな歪や欠陥をマクロな物性と結びつけるマルチスケール計算手法を開発。



<活用>

マルチスケール材料設計手法は、産業界(新日鉄住金と共同推進中)や元素戦略Pjで活用中。