

- 人材養成ユニット名 「日本再生のためのコンビナトリアル計算化学」  
 ○代表者名 「宮本 明」  
 ○提案機関名 「東北大学未来科学技術共同研究センター」

#### 計画の目標・概要

##### 1. 目標

###### 人材養成開始後3年目の目標

- ・ 現在、企業等に在籍している研究者30人程度を、「コンビナトリアル計算化学」による研究開発を遂行できるように養成する。養成後研究者は在籍していた企業に戻り、その企業において「コンビナトリアル計算化学」を活用した日本独自の付加価値材料の研究開発における中核として活躍してもらう。

###### 人材養成開始後5年目の目標

- ・ 最終年度までに企業等からの研究者を50人養成する。養成した人材には企業において「コンビナトリアル計算化学」を活用した高性能、高機能、高付加価値材料の開発と世界を先導する全く新しい市場の創出に活躍してもらうほか、本課題終了後の人材養成を担う中心的指導者となってもらう。

##### 2. 内容

- ・ 企業において最先端の研究開発に従事してきた多数の研究者を対象として、「実践的に役に立つ材料設計」を実現させるために我々が独自に開発してきた「コンビナトリアル計算化学」手法を教育する。特に、触媒、半導体、セラミックス、ポリマー、有機材料、機械材料、医薬品などの多様な応用分野において、「コンビナトリアル計算化学」を実践させることで、各企業において世界を圧倒的にリードできる全く新しい製品開発・研究開発を行なえ、さらには日本から世界に発信できる全く新たな市場・産業を開拓することが可能な人材を強力に養成する。

#### 諸外国の現状等

##### 1. 現状

海外の化学企業、自動車会社など、世界的な優良企業のほとんどが、計算化学に基づく製品開発・研究開発を行っている。これらの企業は数百人という単位で計算化学を用いた研究開発を行なう研究者を有しており、強い国際競争力の源となっている。

##### 2. 我が国の状況

現在、企業では計算化学を用いた研究開発はほとんど行われておらず、試行錯誤に基づく製品開発が行なわれている。従って独創性の高い製品の開発ができず、付加価値の低い大量生産品の開発にとどまり、このままでは日本経済の衰退を加速するばかりである。この問題を解決するために本計画では、従来の「単なる計算化学」とは全く異なる「コンビナトリアル計算化学」により、世界を圧倒的にリードする開発力を養成する。

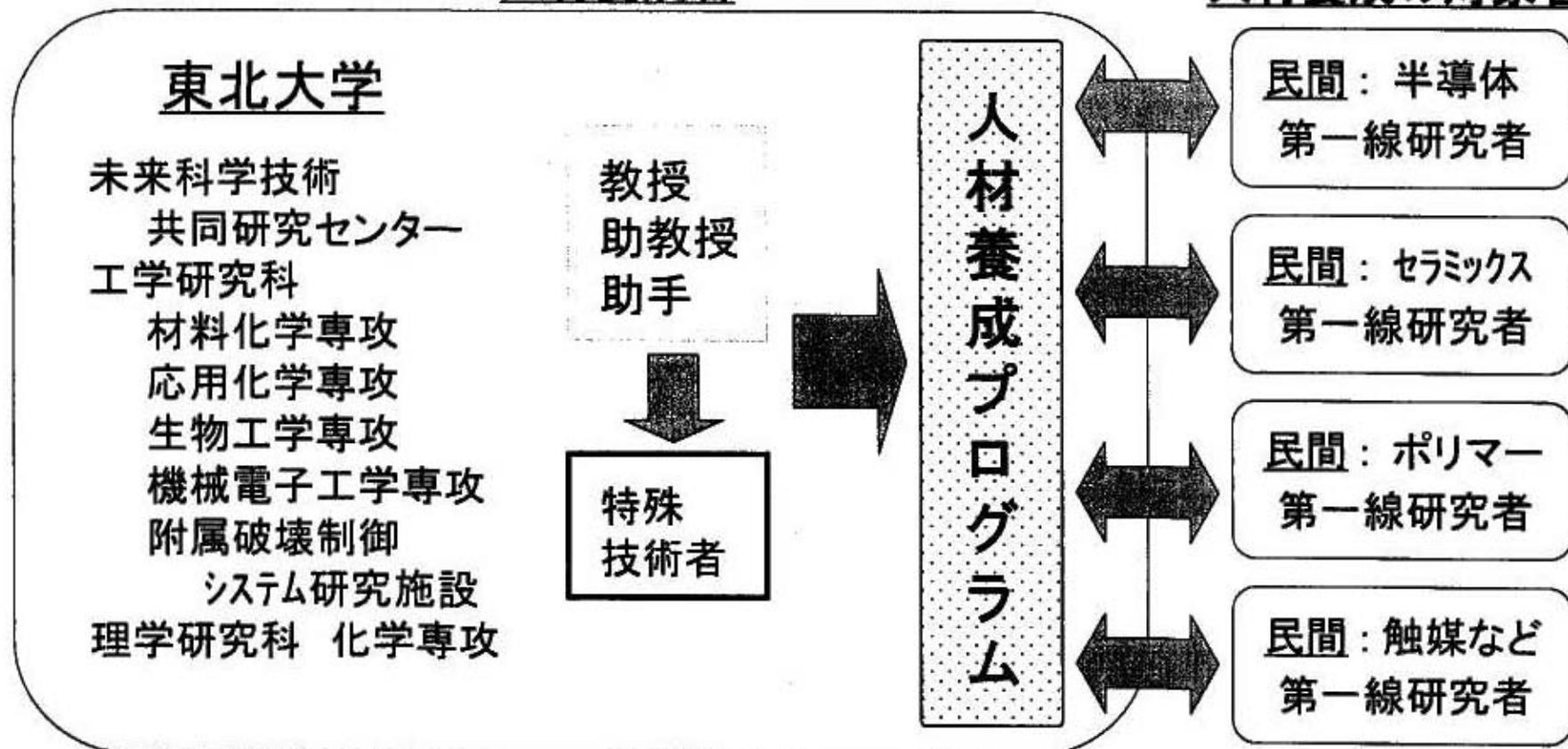
#### 計画進展・成果がもたらす利点

本計画終了後は、養成した研究者が企業にて独自の研究開発を進めるとともに、各企業で計算化学者を加速度的に養成することが期待できるため、我々の提案する「コンビナトリアル計算化学」を活用した製品開発・研究開発を行なう企業が飛躍的に増加する。これにより日本独自の付加価値の高い商品の開発力が強化され、日本から欧米に発信できる新たな市場の創出、さらには日本経済の大きな飛躍をもたらすことは間違いない。

# 具体的な人材養成プログラム

## 人材養成者

## 人材養成の対象者



## 人材養成プログラム内容

