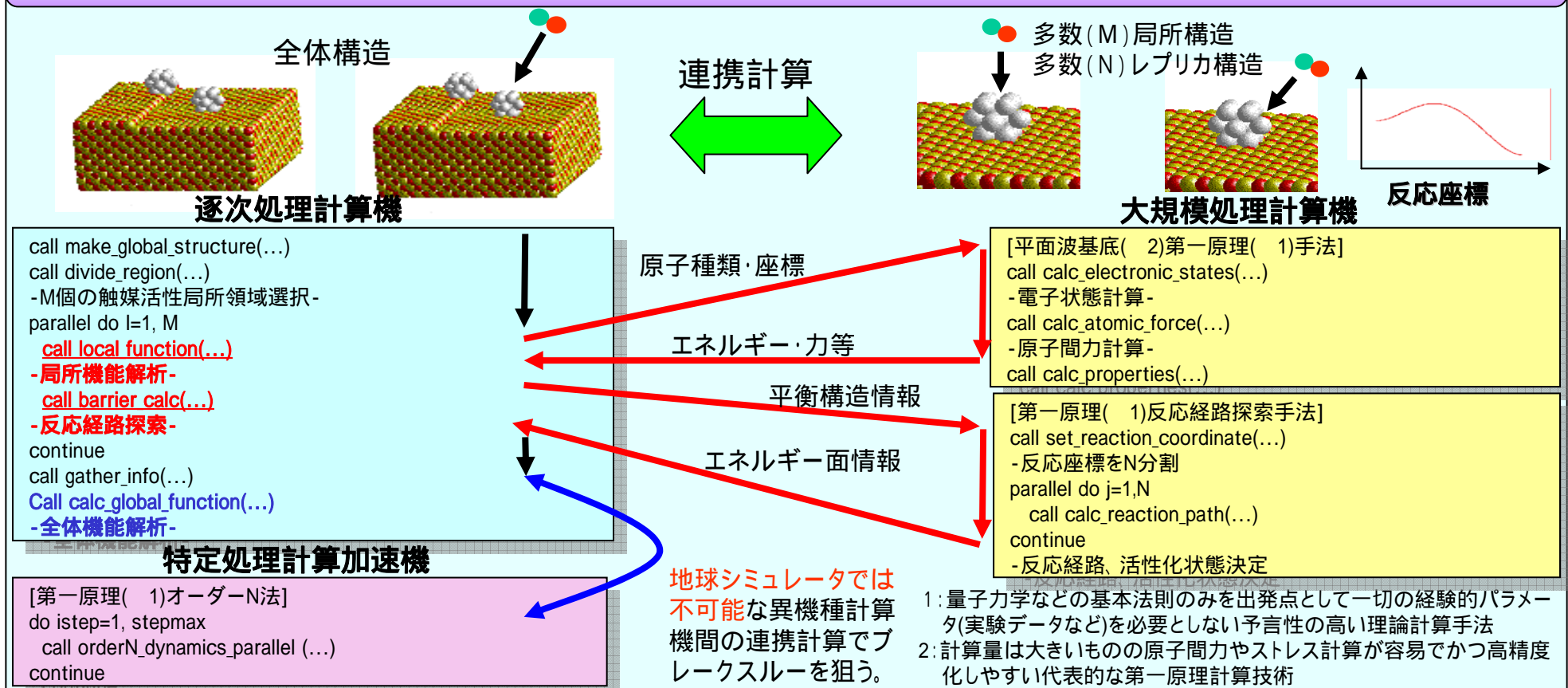


科学界からの期待：ナノテクノロジー（1）

触媒設計シミュレーション



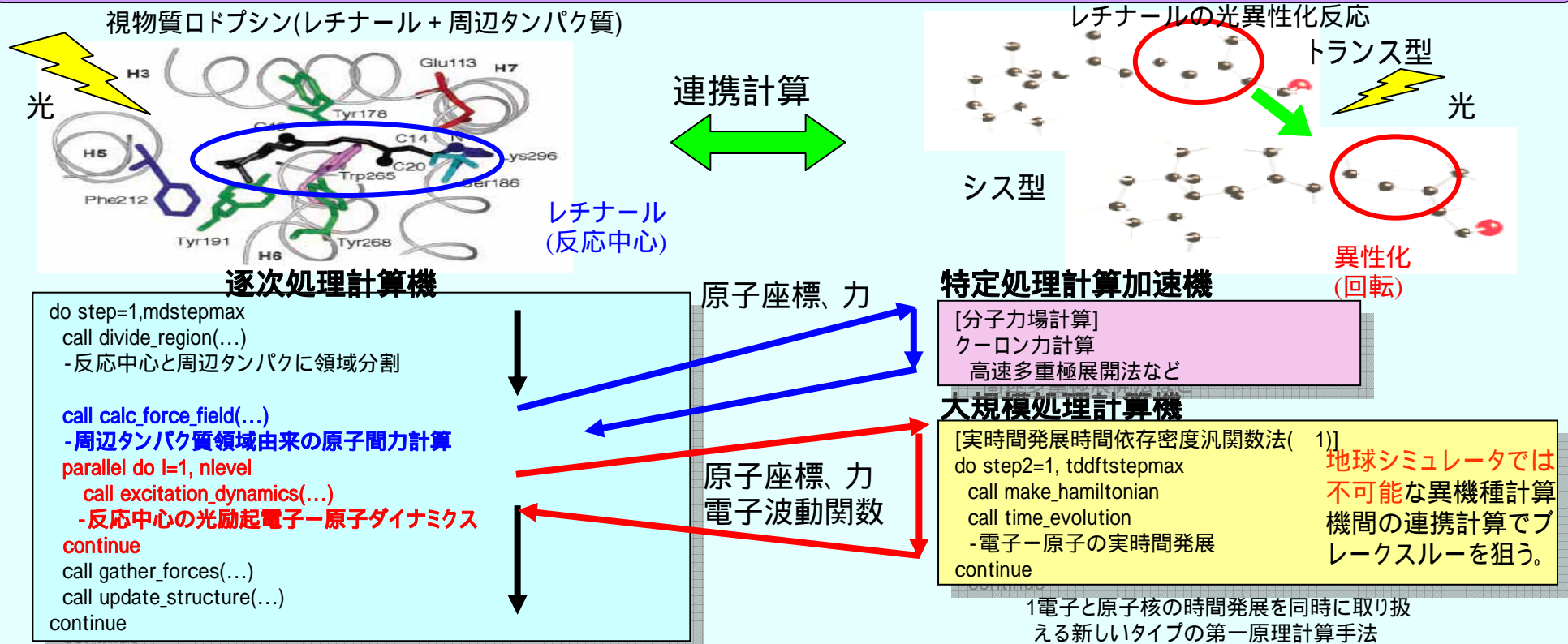
3種類の計算機による連携計算によって、従来の約100倍³の精度の解析が可能に

期待される成果

- 高性能触媒(自動車用燃料電池、家電用燃料電池、太陽電池など)の開発により、低公害を実現しつつエネルギー問題を解決する。
- 生体触媒(酵素、人工酵素)、生体機能の解明により、従来は合成が難しかった薬品の設計が可能となり、難病治療に貢献する。

科学界からの期待：ナノテクノロジー（2）

超高速光スイッチ設計等（光励起反応シミュレーション）



3種類の計算機による連携計算によって、従来全く不可能だった**10兆分の1秒スケール**で材料の解析が**約2カ月**で行うことができる。

期待される成果

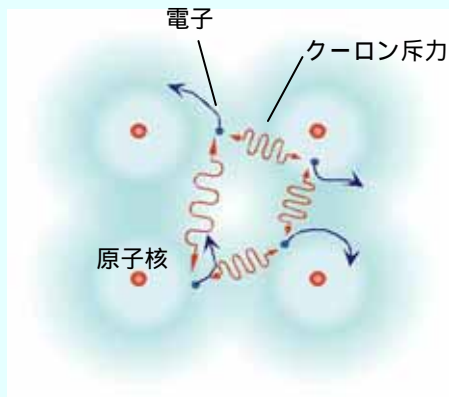
- ・ **高性能触媒** (自動車用燃料電池、家電用燃料電池、太陽電池など) の**開発**により、低公害を実現しつつエネルギー問題を解決する。
- ・ **生体触媒** (酵素、人工酵素)、**生体機能の解明**により、従来は合成が難しかった薬品の設計が可能となり、難病治療に貢献する。

提供:(独)物質・材料研究機構

科学界からの期待：ナノテクノロジー（3）

電子相互作用を考慮したデバイスシミュレーション

現状

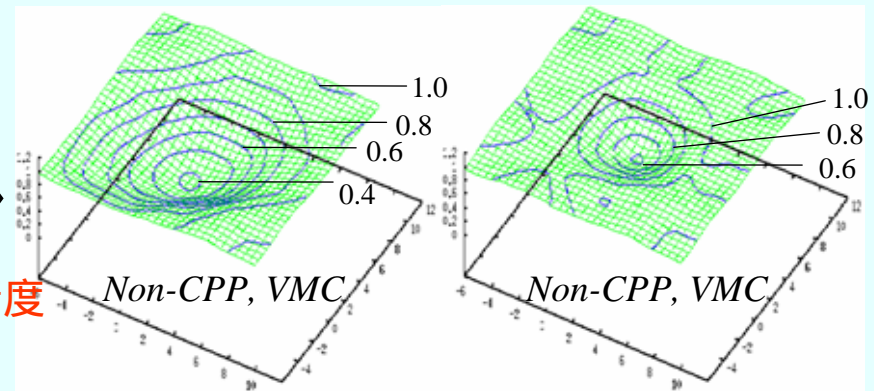


± 500度の低精度なシミュレーション
1ヶ月(逐次処理計算機: 0.1テラFLOPS)

今後

電子間相互作用の微弱なゆらぎの制御

約1万倍の精度



± 数度の高精度なシミュレーション
1ヶ月(逐次処理計算機: 4ペタFLOPS)

従来不可能であった高精度シミュレーションの実現により、磁性や超伝導などのナノレベル機能理論の予見ができ、新材料の開発が可能となる。

期待される成果

- ・強相関電子系の新規な物性・機能を活用した全く新しい材料・デバイスの開発を加速する。
- ・ナノ磁性体、新規超伝導体の実現に貢献。