本プロジェクトの実施により期待される具体的なアウトカム|資料2-22

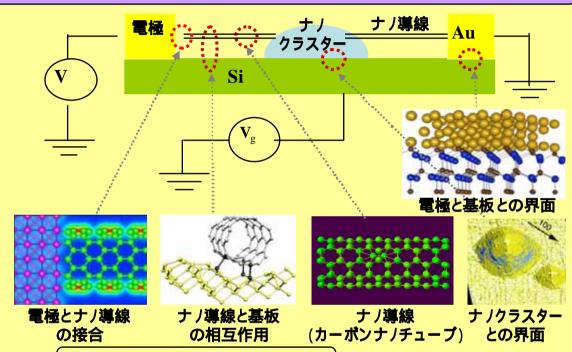
ナノテクノロジー分野

原子・電子レベルのシミュレーションのナノ電子デバイス開発への活用

従来の半導体デバイスの 限界を超える微細かつ 高性能なナノ電子デバイスの 開発の必要性



デバイスを実現する上で、 材料の選択や全体の電気的 特性の制御が重要



現在のコンピュータ

2千原子程度 (デバイスの一部) の計算が可能



次世代スーパーコンピュータ

10万原子程度 (デバイス全体) の計算が可能

デバイスとして最適な 材料や構造の組合せ を探索

期待される具体的 アウトカム

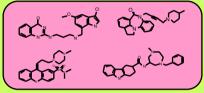
従来にない高速応答、低消費電力デバイスの実現を加速する。

ライフサイエンス分野

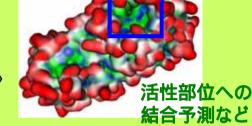
分子シミュレーション等の創薬への活用

薬剤候補物質の絞込みと最適化



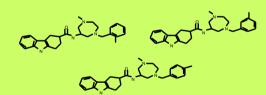


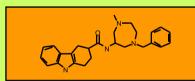




候補物質の作用をより高精度・高速にシミュレーション

最適化(毒性の軽減、水溶性の向上など)





従来は実験手法のみであった新薬候補物質の最適化を シミュレーションで実現 最適化に要する計算時間

現状

150年

次世代スパコン



6ヶ月(アプリケーションの工夫により短縮を検討中)

シミュレーションの適用による効果

実験動物を用いた前臨床研究の 段階まで、コストと時間のかかる 実験の必要性を大幅に縮減。

期待される 具体的アウトカム シミュレーションに基づいて新薬候補物質を高精度かつ高速に探索することにより、新薬開発の期間短縮及びコスト削減を実現して、新薬開発の国際競争力強化に資する。