

期待される成果および効果

● 最適な治療を実現する 画期的な新薬開発

【現状】

特定の標的タンパク質 (病気の原因物質) に対するシミュレーションにより、新薬候補物質の絞り込みを効率化。

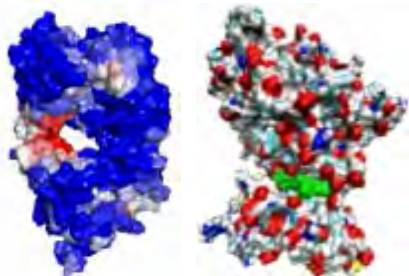


新薬候補物質の標的タンパク質への高精度結合シミュレーション



【将来】

複数タンパク質 (病気の原因物質と必須機能物質) に対する新薬候補物質の影響解析を、**複雑な細胞環境下**で行い、**副作用の少ない画期的な新薬の早期発見**に貢献。



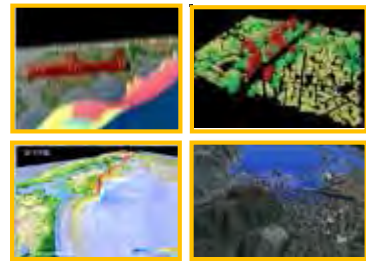
必須機能タンパク質への新薬候補物質の作用も解析

● 広域複合災害に対する 総合防災・減災対策

【現状】

地震・津波の発生や伝播、建物の振動、津波遡上などの広域かつ高精度な**計算をそれぞれ実施**。

地震発生 都市の震動

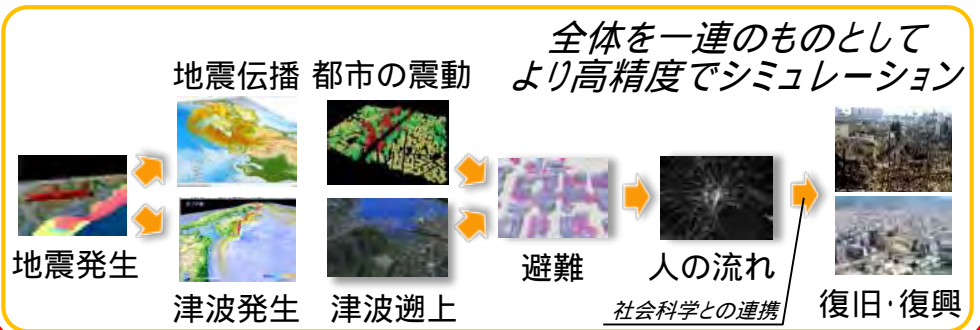


津波発生 津波遡上



【将来】

地震発生から避難予測までを統合した**広域複合災害の被害予測**によるきめ細やかな防災・減災対策、さらには社会科学との連携により復興対策に貢献。



期待される成果および効果

● 安全性の高い自動車開発

【現状】

様々な衝突条件に対して、**車体の衝突変形**の定量的評価を実現。



【将来】

車への影響だけでなく、**乗員の体への影響**(骨や内臓等の損傷)も評価し、**より安全性の高い車体の開発**に貢献。

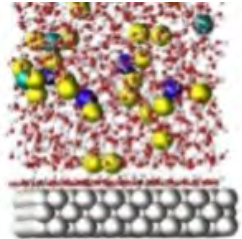


黒い部分が損傷部位

● 安全性・耐性に優れた高性能電池の開発

【現状】

燃料電池等の電極とその周りの電解質との反応を、**簡略化されたモデル**で計算し、電極材料や電解質の電池性能への影響を**定性的に**評価。

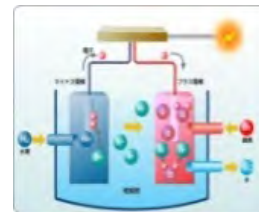


白金電極上の電子状態シミュレーション



【将来】

複雑な電子の挙動を、**現実の電極構造のもとで定量的に**評価し、最適な電極材料や電解質の組合せを実現。**安全性・耐性に優れた高性能電池開発**に貢献。



燃料電池等の活性や安定性を高精度計算で精緻に予測

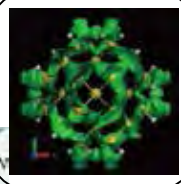
期待される成果および効果

● ナノの世界を操る 次世代デバイス科学

【現状】

次世代半導体として期待されているシリコンナノワイヤの10万原子レベルの電子状態計算で、今まで見えなかった電子分布を世界で初めて提示。

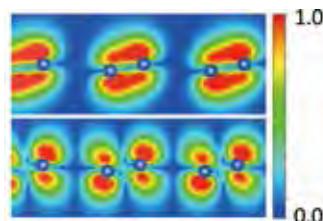
10nmワイヤ断面の電子密度分布



ナノワイヤデバイス適用例

【将来】

100万原子レベルの精緻なシミュレーションにより、ナノ形状がもたらす複合材料や化合物半導体の特異な物性を予測・解明し、画期的な次世代ナノデバイスの開発に貢献。



複合材料における特異な電子状態を解明

● 宇宙の起源と進化の探求

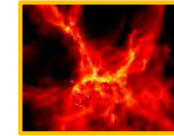
【現状】

宇宙の大規模構造形成、銀河形成、星形成、惑星形成のシミュレーションをそれぞれ実施。

宇宙の大規模構造形成シミュレーション



銀河形成シミュレーション



星形成シミュレーション



惑星形成シミュレーション

【将来】

宇宙の大規模構造形成から惑星形成にいたる宇宙全体のシミュレーションにより、銀河系や惑星系の多様性の起源や進化を解明し、天文学・宇宙物理学の発展に貢献。

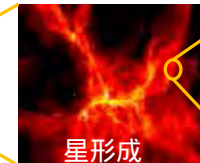
宇宙の大規模構造形成、銀河形成、星形成、惑星形成にいたる宇宙全体を一連のものとしたシミュレーション



宇宙の大規模構造形成



銀河形成



星形成



惑星形成

Matthew Baw
(イェール大学)

