

ナノ・新物質・新材料開発における機能シミュレーション

総合情報学部コンピュータシミュレーション学科

矢城陽一郎, 直島好伸

Keyword : シミュレーション, ナノ, 新物質, 生命科学

1. 研究目的

先端科学技術の目覚ましい発展に伴い, 理論科学, 実験科学に続く第三の科学といわれるコンピュータシミュレーションが大きく注目されている. そして, その分野は, 半導体などのナノテクノロジーだけでなく, 医療, 生命, 食品, 自動車, 建築, 気象, 宇宙, エネルギー産業など多岐に渡っている. 我々の研究グループでは, コンピュータシミュレーションを用いて, 生体分子の立体構造や, 生命機能の解明, また半導体や金属などの固体表面の様々な物性を理論的に解明することを目的としている.

2. 研究内容

従来からあるモンテカルロ法や, 分子動力学計算に加えて, 並列計算機を使った第一原理計算や, フラグメント分子軌道法を用いて, 次のテーマの研究を進めている.

- 1) 金属表面や金属原子が吸着した半導体表面の原子構造の解析
- 2) 固体表面における電子構造の解明と物性の究明
- 3) タンパク質と有機分子の相互作用を求めるシミュレーション
- 4) 酵素リパーゼ触媒のキラリティー認識の解明と鏡像体選択性の予測に関する生体分子化学計算

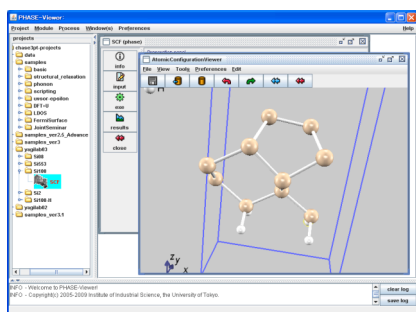


図1 第一原理計算システム



図2 並列計算機

PHASE System の GUI 画面

3. 応用の可能性

ナノテクノロジー分野では, 有機分子を吸着させた有機デバイスや, 超伝導材料の開発への応用, また, 生命科学分野では, 新薬の開発, 食品産業などへの応用が考えられる