

ナノサイエンス(分子科学)分野拠点における 研究体制と人材育成

—理論・計算分子科学コミュニティからの提言—

名古屋大学大学院工学研究科

岡崎 進

理論・計算分子科学コミュニティ

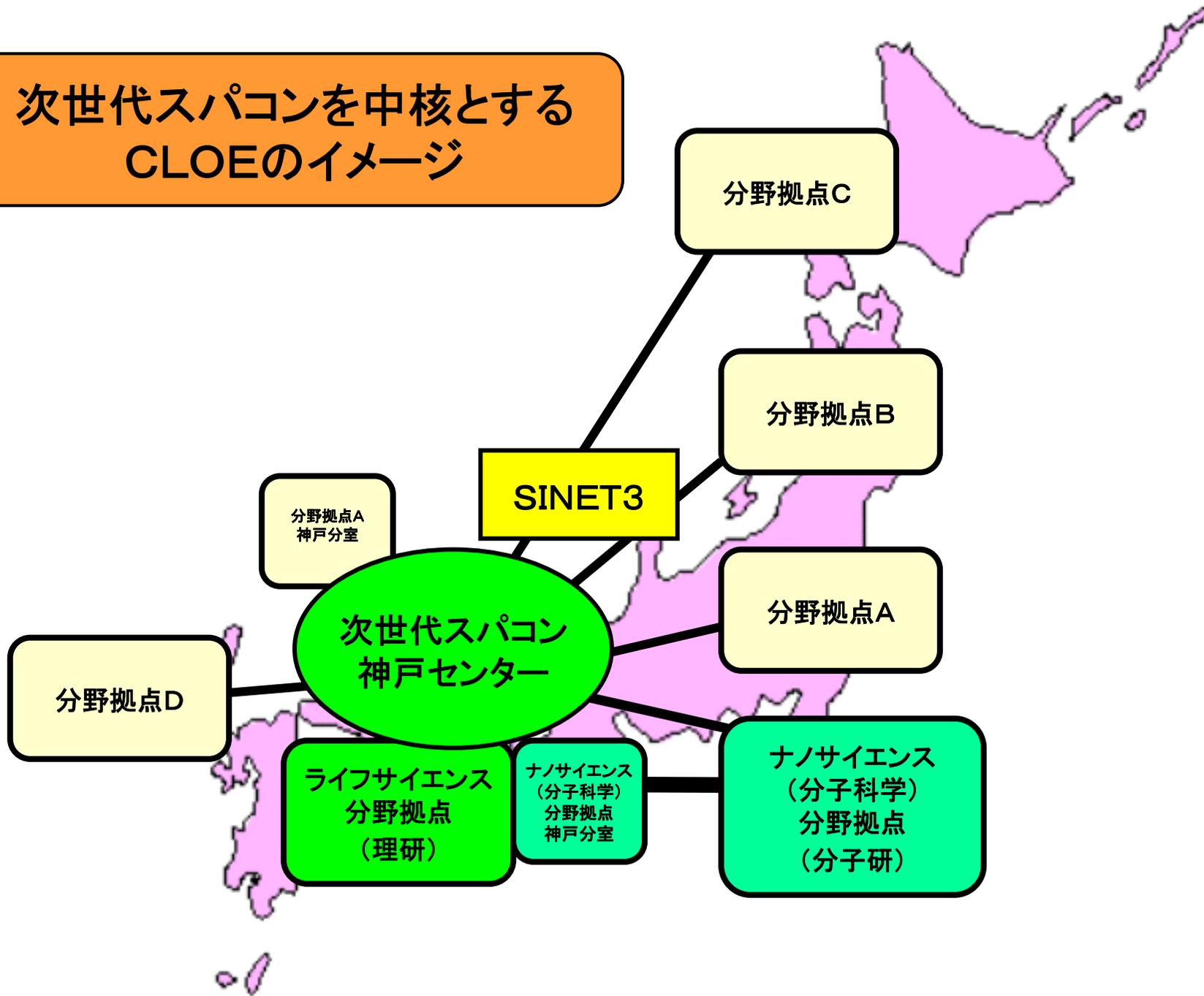
— 30年を超える活動の歴史と1000名規模の研究者 —

- ・計算科学研究センター共同利用
30年以上の歴史、利用者数は約150グループ、550名
- ・日本化学会理論化学・情報化学・計算化学ディビジョン
登録者数は約500名
- ・理論化学研究会
主催する理論化学討論会は第10回を数え、参加者数約200名
- ・分子シミュレーション研究会
主催する分子シミュレーション討論会は第20回を数え、参加者数約200名
- ・分子科学会
主催する分子科学討論会は分子構造総合討論会を経て40年以上の歴史、
参加者数は約1200名。(4セッションのうち1セッションが理論、計算)
- ・溶液化学研究会
主催する溶液化学シンポジウムは第30回を数え、参加者数約200名
- ・化学反応討論会
第23回を数え、参加者数約150名
- ・日本コンピュータ化学会
会員数約650名
- ・生物物理学会
主催する年会は第50回を数え、参加者数約2000名、
うち理論、計算科学分野で約100名



- ・次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの開発
- ・科研費特定領域研究 「実在系の分子理論」
- ・CREST 「マルチスケール・マルチフィジックス」

次世代スパコンを中核とする
CLOEのイメージ



ナノサイエンス(分子科学)拠点の研究体制と人材育成

戦略機関の一つとして活動

分子科学コミュニティ

理論・計算ナノサイエンス特別研究センター(仮称)を分子研に設置
全国の大学・研究機関と連携

研究・開発機能

- ナノ統合ソフトの整備と運用
 - ・神戸センターとの連携
 - ・共同利用サービスとの連携
 - ・大規模計算需要の発掘
- ナノ分野の利用研究の推進
 - ・次世代エネルギー
 - ・次世代ナノ生体物質
 - ・基礎基盤研究
 - ・ナノサイエンス緊急課題等
- ソフトウェアの高度化
 - ・超並列化
 - ・高速化
 - ・新規機能

人材育成機能

- 若手研究者の育成
 - ・独立研究グループの形成
 - ・ポスドク、大学院生等の研究参加による実践的育成
- 計算工学技術者の育成
 - ・計算科学研究者とシステムの間
 - ・アプリケーションに近い計算工学、情報工学技術者
- 実験研究者・企業研究者の育成
 - ・共同研究体制
 - ・研究会、講習会、集中セミナー
- 大学との連携

ナノサイエンス(分子科学)分野拠点体制(案)

理論・計算ナノサイエンス特別研究センター(仮称)

研究開発部門*

*コミュニティのメンバーならびに分子研専任教員、また公募により採用する特任教授、特任准教授に相当する教員で構成。

次世代ナノ生体物質

次世代エネルギー

ナノ触媒

反応制御

分子エレクトロニクス

ナノ表面・界面

ナノ機能性材料

ドラッグデザイン

量子化学

分子シミュレーション

溶液・液体論

反応動力学

技術開発部門

ソフトウェア連携

ソフトウェア高度利用

ソフトウェア開発支援

利用者支援部門

人材育成部門

萌芽的若手研究開発プログラム***

産学連携プログラム

集中セミナー・講習会

コーディネーション部門

神戸分室**

** 研究開発部門から、利用研究の実施、ソフトの高度化等のプロジェクトを効率的に推進するために配置。

*** 公募により、若手研究者が主体となって組織したグループが、独立して研究開発を進める。