

年代 課題	2012 ～	2014 ～	2016 ～	2018 ～	2020 ～	2022 ～
半導体電子 デバイス	<div> <div>100万原子系の第一原理計算(<math>O(N)</math>法)</div> <div>1000万原子系</div> <div>1億原子系</div> <div>1万原子系の第一原理計算(<math>O(N^3)</math>法)</div> <div>10万原子系</div> </div>					
光・電子材料	<div> <div>10数nmのナノ構造体の電子・電磁場ダイナミクス</div> <div>数10nmの実在系ナノ構造体</div> </div>					
生体分子機能・創薬	<div> <div>1000万原子系の古典分子動力学計算</div> <div>1億原子系</div> <div>10億原子系</div> </div>					
分子構造・分子機能	<div> <div>ナノスケール分子系の高精度計算</div> <div>分光学的精度での分子構造の予測</div> </div>					
ソフト分子	<div> <div>量子化学計算と分子シミュレーションの大規模化</div> <div>マルチスケール手法の開発、統計力学理論の高度化</div> </div>					