

プロジェクト事後評価報告書

評価委員会開催日：平成23年12月27日

評価委員：（敬称略、五十音順）

高橋浩之 東京大学大学院 工学系研究科 教授

平山 司 （財）ファインセラミックスセンター ナノ構造研究所 主幹研究員・所長代理

松宮 徹 新日本製鐵（株） 顧問

確定年月日：平成24年3月28日

プロジェクト名	新機能探索ナノシミュレーション手法の開発
研究責任者の所属・役職・氏名	先端的共通技術部門 理論計算科学ユニット長 （元計算科学センター長） 大野隆央
実施期間	平成18年度～平成22年度
研究目的と意義	革新的機能ナノデバイスの実現等、ナノテクノロジー分野におけるブレークスルーを創出するためには、ナノスケール構造で発現する物質・材料の新規な物性を量子論的に高精度に解析・予測し、新規な機能を実現するナノ構造及びその創製・制御法を提案することが不可欠である。本研究においては、第一原理計算、強相関モデリング、分子動力学法、Phase-field法、有限要素法等の解析手法を駆使して、ナノスケール領域で新しい機能を有する次世代物質・材料を実現するための理論的基盤を確立するとともに、デザインルールを探索し、新規な物性・機能の提案を目指す。これにより、構造形態のデザインにより革新的機能を有するナノ物質・材料を創製する新しいものづくりパラダイムの構築に資することを目的とする。
研究内容	ナノ物質・材料及びナノ複合体を対象に、構造形態、電子状態、物性・機能の相関を統合的に解析する新機能探索ナノシミュレーション手法を開発する。具体的には、第一原理解析、超大規模解析、多物性・機能解析、ナノ電子物性解析、強相関モデリング、ナノ組織・特性解析等の計算手法を開発し、(1)ナノ物質が様々な環境下で発現する構造変化・反応過程の超大規模解析、(2)光応答・電子移動等の多物性・多機能が関与するナノ物質の機能と構造の相関の解析、(3)量子多体効果、熱揺らぎ効果等によるナノ量子輸送現象の解析、(4)相変態等の組織・特性に関するマルチスケール解析を可能とする。
ミッションステートメント（具体的な達成目標）	ナノ物質・バイオ物質等を対象とする10万～100万原子を含む系に対する超大規模第一原理計算を可能とし、それを基礎にナノ物質・材料の構造と物性・機能を量子論的に高精度に解析・予測する新機能探索シミュレーション技術を開発する。開発した手法を用いて、ナノ物質・材料の構造と物性の相関を解明することにより、デザインルールを探索し、その新規な物性・機能のデバイス応用に貢献する。
平成18年度～平成22年度までの主な研究成果（アウトプット）及び研究成果から生み出された（生み出される）効果・効用（アウトカム）、波及効果（インパクト）	1) 主な研究成果（アウトプット）： <ul style="list-style-type: none"> 第一原理に基づいた誘電関数、光学応答、実験解析等に関する多機能・高精度解析を可能とするナノ物質のための高度なシミュレーション手法を開発した。 第一原理オーダーN法を開発し、数万原子を含む超大規模系に対する第一原理解析を世界で初めて実施し、更にプログラムの並列化効率を向上させ、数百万原子系に関する第一原理計算の実現可能性を示した。 ナノ接合系の量子伝導特性を第一原理的に解析・予測する手法を開発し、有機分子接合系における伝導機構を解明し、ダイオード機能、センサー機能等の分子エレクトロニクスに有用な新規機能を提案した。 遷移金属酸化物における強い電子相関に起因する磁気的特性を、第一原理に基礎を置く非経験的理論により解析し、BiMnO₃等の磁性強誘電体の新規なマルチフェロイック現象を解析・予測した。 Phase-field法によるナノ組織・特性解析法を開発し、強誘電材料の分極ドメイン構造変化と分極ヒステリシス、電池材料の負極におけるデンドライト形成

	<p>等、実用材料の組織・特性予測を可能とした。</p> <p>2) 研究成果から生み出された（生み出される）効果・効用（アウトカム）、波及効果（インパクト）： 物質・材料のシミュレーションは、構造や電子状態の解析が主であったが、本研究では、多様なナノ物質（半導体ナノ構造、誘電体ナノ組織、有機分子、溶液系等）の構造や電子状態だけでなく、その物性を高精度に大規模に解析する手法を開発した。これにより、「ナノテクノロジー・材料」だけでなく、バイオ・ナノ物質で「ライフサイエンス」、電池材料等で「環境」など、重要な研究分野において、シミュレーションにより構造形態をデザインし、革新的機能を有するナノ物質・材料を創製する新しいものづくりパラダイムの構築に寄与するものと考えられる。</p>
プロジェクトの目標の達成度合い及び自己点検・評価	<p>プロジェクトの目標の達成度合い： 順調に進展し目標を若干上回った。</p> <p>自己点検・評価： 新機能探索シミュレーション手法を開発し、誘電体材料の設計、分子機能の設計、電池材料の解析等によりその有用性を実証し、所期の目標を達成することが出来た。加えて、大規模解析に関して、実ナノシステムに匹敵する数百万原子系に対する第一原理計算が実現可能であるとの見通しを得た。これにより、新規な機能を有する次世代ナノ物質・材料を実現するための理論基盤を構築した。</p>
【評価項目】	コメント
①研究計画、実施体制、マネージメント、連携 （計画はきめ細かったか、ロードマップに問題はなかったか、実施体制は十分だったか、マネージメントの是非、連携の範囲や連携課題、連携の成果はどうだったか、どこが問題なのか、ほか）	<ul style="list-style-type: none"> ・研究計画は詳細で、実施体制も十分であった。 ・具体的な実施内容を定めた計画に基づき、適当な体制を構築しつつ、妥当な運営がなされている。 ・実験的アプローチによる物質、材料、デバイスの研究開発者と連携して、計算科学による知見で、諸機構を解明する、あるいは、さらに機能を高める方法や新物質系を計算科学側から提案するということを旨として進めるマネージメントは評価される。 ・計算と実験の比較を行い、実験系へフィードバックをかけるなど連携を進めているほか、UCLAとの連携で第一原理計算の適用範囲を大きく拡大するオーダーN法を開発するなど、国際連携による重要な計算技術開発の成果も十分に得られている。 ・プロジェクト参加職員の年齢が比較的高く、NIMSにおいて本分野の次世代を担う若手研究者の参加あるいは採用がもっとあってよかったと思われる。
②研究開発の進捗状況及び具体的目標の達成度 （研究責任者の自己点検・評価を踏まえて、進み具合はどうだったか、目標は達成されたか、目標は具体的であったか、世界レベルで見て目標は高かったか・低かったか、問題点は何か、ほか）	<ul style="list-style-type: none"> ・研究開発は概ね順調に進捗したと考えられる。 ・100万原子を含む系に対する第一原理計算を可能にし、それをもとに、ナノ物質・材料の構造と物性の間の相関を明らかにするという具体的な目標を掲げ達成したことは、高く評価できる。新機能ナノ材料デバイスの提案やナノ超伝導現象の研究、強誘電体、磁性材料の物性予測などの目標設定は適切であったと判断される。 ・ターゲットの選び方についても、NIMS内の、あるいは、世界の、プライオリティの最も高いものに挑む傾向にあることは評価される。 ・サブテーマ1では数万原子を扱えるオーダーN法の第一原理計算を達成し、新機能ナノ材料・デバイスの提案も行え、その他のサブテーマでも目標は達成されている。世界的レベルでも高いと考える。 ・数10万原子の計算など、この分野としては驚くべき規模の計算が実現しており、世界レベルで誇れる結果が出ている。 ・“計算手法の開発”が目標であるようなので、難しいかもしれないが、具体的な新機能探索の例として、新機能を持つ物質などが見つかり、非常にインパクトの強い成果になると思うので、今後期待したい。

<p>③論文・特許等の直接の成果（アウトプット）、効果・効用（アウトカム）、波及効果（インパクト）</p> <p>（世界レベルの質の成果が出たか、どのような効果・効用あるいは波及効果が出たか（期待されるか）、研究タイプを考慮した費用対効果は、問題点は何か、ほか）</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・ ナノ物質で発現される新たな物性・機能の研究成果は、新規現象・原理の発見、ナノデバイスの創製につながる多くの波及効果を有するものである。 ・ 大規模構造を計算することのできる第一原理計算手法の開発を始め、ナノ構造と物性の関連の解明についての多くの研究を展開し、NatureやPhys. Rev. Lett. などで論文発表、また特許出願などを行い、成果を得た。 ・ 研究職約20名×5年間に論文200件超、招待講演も200件超、解説記事依頼も50件を超えており、成果は評価できるし、波及効果もあると考える。 ・ 毎年40件論文、50件招待講演という数は十分評価できる。また、計算という分野でありながら、特許出願が少なからずあるということもすばらしい。 ・ 特許数が17件、1件も出していない研究者がいるのは、多少少ないように思える。その原因は実験的に実際に材料、デバイスを開発しているチームとの連携がもう一步深くなかった為ではないかと思われる。 	
<p>④総合評価</p> <p>（研究全体に対する総合的所見、及び上記評価項目①～③に含まれない、その他の評価ポイントがあれば追加してコメント）</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・ 研究成果は第一原理計算のオーダーN法を始めとして、十分高いものが得られ、所期の目標以上のものを達成していると評価できる。 ・ 材料科学に不連続な発展をもたらす起爆剤と期待される計算科学分野を強力に引っ張っている様子がよくわかる。今後はナノ計測や材料プロセスの分野の人々との協力体制が、この分野のさらなる発展となり、社会貢献にもなる。 ・ 実験系との連携については、現在個別の研究者レベルでの対応が主体となっているようであるが、ユーザーグループのようなものを特にオーダーN法などの新規計算技術についてはNIMS内に設定して、そこを中心に活動すれば、計算精度の実質的な向上も得られ、情報も新規テーマも集めることができ、世界の中心として確固たる基盤となるのではないかと。 ・ 材料、デバイス開発と連携して、その課題をクリアするための計算科学の適用を意識し、計算科学上のボトルネックを解決して、計算科学技術の観点からも、材料、デバイス開発からも、成果を挙げるスタンスでプロジェクトを遂行したものと考えられ、まずまずの成果も挙がっている。しかし、特許の出願数からみて、このリンクが多少弱かったのではないかと考えられる。今後の研究展開にあたっては、課題をブレークスルーして、知的財産を獲得する強い意志を持った進め方も是非強化してほしい。 	
<p>各委員の総合評価点 （10点満点）</p>	<p>9、8、8（順不同）</p>	
<p>総合評価点平均 （10点満点）</p>	<p>8.3（小数第二位以下四捨五入）</p>	
<p>総合評価点</p>	<p>評価</p>	<p>評価基準</p>
<p>10</p>	<p>S</p>	<p>全ての点において模範的に優れていた。</p>
<p>9</p>	<p>S</p>	<p>多くの点において非常に優れていた。</p>
<p>8</p>	<p>A</p>	<p>総合的に優れていた。</p>
<p>7</p>	<p>A</p>	<p>優れたプロジェクトであった。</p>
<p>6</p>	<p>A</p>	<p>平均的なプロジェクトであった。</p>
<p>5</p>	<p>A</p>	<p>一部の計画の見直しが必要であった。</p>
<p>4</p>	<p>B</p>	<p>期待されたほどではなかった。</p>
<p>3</p>	<p>B</p>	<p>計画を見直して継続すべきであった。</p>
<p>2</p>	<p>C</p>	<p>プロジェクトの見直し、計画の抜本的な変更が必要であった。</p>
<p>1</p>	<p>C</p>	<p>大きな問題があり、プロジェクトを中止すべきであった。</p>