

# プロジェクト中間評価報告書

評価委員会開催日：平成20年12月4日

評価委員：（敬称略、五十音順）

熊谷 寛 大阪市立大学大学院工学研究科 教授

末宗幾夫 北海道大学電子科学研究所附属ナノテクノロジー研究センター 教授

松宮 徹 新日本製鐵株式会社技術開発本部 フェロー

確定年月日：平成21年1月5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	計算科学センター センター長 大野隆央
実施期間	平成18年度～平成22年度
研究全体の目的、目標、概要	<p>研究目的及び具体的な研究目標：</p> <p>（研究目的）</p> <p>革新的機能デバイス実現等のナノテクノロジーの進展には、ナノ構造で発現する物性の量子論的な解析・予測と、新規な機能を実現するナノ構造及びその創製・制御法の提案が不可欠である。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、フェイズ・フィールド法、有限要素法等を駆使して、ナノスケール領域で新しい機能を有する次世代材料を実現するための理論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・材料を創成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。</p> <p>（研究目標）</p> <p>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・材料の構造と機能を量子論的に解析・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。ナノ物質・バイオ物質を主な対象として、(1)ナノ触媒、燃料電池等の新規な高効率触媒機能の探索、(2)分子デバイス、人工光合成等の革新的な量子機能の提案、(3)ナノ磁性、ナノ超伝導量子デバイス設計等の強相関系の新規応用の提案、(4)磁気記録材料、強誘電体材料等の現実の材料・部品設計を目指す。</p> <p>研究計画概要：</p> <p>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。</p>

<p>平成18年度～平成20年度中間評価時までの成果等</p>	<p>研究成果（アウトプット）、成果から生み出された効果・効用（アウトカム）、波及効果（インパクト）：</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・ 計算量が原子数 N に線形比例する第一原理計算手法（オーダーN 法）を開発し、Ge 量子ドット系に対する大規模計算（2 万原子）を実現した（10 万原子規模の大規模計算が可能、ナノ物質・バイオ物質の大規模解析に道を拓く）。</li> <li>・ ナノ構造における伝導特性の第一原理解析手法を開発し、分子ダイオード、スイッチ、センサー等の新機能を提案した（新機能デバイス、分子・スピンエレクトロニクス等の機能解析・設計に繋がる）。</li> <li>・ 溶液中の酸化還元反応、及び電子移動を伴う化学反応を高精度に解析する手法を開発した（燃料電池、太陽電池、生体機能等における溶液反応解析に有用）。</li> <li>・ 遷移金属酸化物 BiMnO<sub>3</sub> のマルチフェロイック特性の起源を解明した（メモリや磁気ヘッド等の電気・磁気材料開発への理論指針）。</li> <li>・ 銅酸化物系における電荷・軌道・スピン間の強い相関を利用した新規ハーフメタル反強磁性体の創製方法を理論的に提案した（スピントロニクス用新規材料探索に新しい指針を提示）。</li> <li>・ 高温超伝導固有ジョセフソン接合系の新しい動的状態を理論的に解明した（テラヘルツ電磁波の強力かつ周波数可変な発振源の開発に繋がる）。</li> <li>・ 誘電体における分極ドメイン・ダイナミクスシミュレーションシステムを製作した（誘電体の機能設計が可能、用途探索に有用）。</li> <li>・ 合金のガラス形成能を計算で予測する手法を確立した（新金属ガラス探索に有用）。</li> <li>・ 金属ガラス中の相分離挙動を計算により予測した（2 相ガラスなど機能性材料開発に有用）。</li> </ul>
<p>【評価項目】</p>	<p>コメントおよび評価点</p>
<p>①研究開発の目的・目標管理・マネジメント</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 新規な機能を実現するナノ構造を利用する革新的機能デバイスの開発にとって、新機能探索のナノシミュレーション手法の開発は必要不可欠であり、本プロジェクト研究がまさにそれにあたる。</li> <li>・ 第一原理計算を中心として、大規模シミュレーション、物性評価、マルチスケール化などの広範囲の目標達成を目指しているが、それぞれに関して概ね達成可能な設定となっている。またそれぞれの分野をカバーする適切なサブテーマが設定されている。</li> <li>・ 具体的な目標は、ナノ触媒、燃料電池などの新しい高効率触媒機能の探索、分子デバイス、人工光合成などの量子機能の提案、ナノ磁性、ナノ超伝導量子デバイス設計など、磁気記録材料、強誘電体材料等の材料、部品設計など、物理現象の理解にとどまらず、デバイス応用に貢献するところまで多岐にわたる。実験系とのやりとりも密に行われて、計画は順調に進捗していて、着実に目標達成に向かっている。</li> <li>・ 実験をベースにナノ技術を開発するプロジェクトとの連携で、それを加速するのに有効な知見を計算で出すこと、また計算の観点から有望なナノ技術を提案することの双方をターゲットにしてナノシミュレーション手法を開発していくマネジメントは評価される。</li> <li>・ 目的・目標の見直しは特に必要ない。マネジメントは正しく行われていたと判断できる。</li> </ul>
<p>評価基準</p>	<p>評価点（1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10の10点満点）を、下記評価基準を参考に記入してください。：</p> <p>9：よく練られており、全く問題ない。</p> <p>7：優れている。</p> <p>5：概ね問題はない。</p> <p>3：修正が必要である。</p>

		1：大きな問題がある。プロジェクトを中止すべきである。
	各委員の 評価点	8、8、9（順不同）
	平均評価 点	8.3（小数第二位以下四捨五入）
②研究開発の進捗状 況及び進め方		<ul style="list-style-type: none"> <li>・人や資金等の研究資源は妥当であり、研究計画にある項目は順調に進捗している。</li> <li>・各サブテーマにおいても計画通り順調に進捗している。第一原理大規模解析手法に関しては、オーダーN手法の開発が進み、2万原子以上の大規模系に対する高精度な第一原理計算を実現している。また、電子伝導、電子移動、誘電応答、磁気応答、超伝導に関する第一原理解析手法の開発も順調に進展し、ナノ物質の示す物性・機能の高精度な解析、微視的機能の解明を進めるとともに、新規な物質・機能の予測、提案を行い、実験系へフィードバックをかけ、相乗効果を引き出している。このまま継続して目標を達成されたい。</li> <li>・超大規模系における計算等、開発されたオーダーN法の威力が発揮されている。今後さらに扱える原子数の増大が期待できる。また計算と実験との比較検討も進められており、その有効性が広がりつつあり、評価できる。</li> </ul>
	評価基準	<p>評価点（1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10の10点満点）を、下記評価基準を参考に記入してください。：</p> <p>9：極めて順調であり、研究資源の再配分を増やすべきである。</p> <p>7：優れており、このまま継続すべきである。</p> <p>5：進み具合は妥当である。</p> <p>3：進み具合が遅れており、計画の見直しが必要である。</p> <p>1：大幅に遅れており、研究を中止すべきである。</p>
	各委員の 評価点	9、8、8（順不同）
	平均評価 点	8.3（小数第二位以下四捨五入）
③論文、特許等の直接 の成果、効果・効用、 波及効果		<ul style="list-style-type: none"> <li>・論文数及び招待講演数など、研究成果発表の量も多く、質も優れている。運営交付金が減額される中、研究における費用対効果が極めて高い。</li> <li>・特許出願数やプレス発表などは、やや数が少ない。積極的な特許出願が望まれる。特許が狙えるように研究ターゲットを選ぶのも良いのではないか。</li> <li>・他の実験をベースとしたナノ技術開発プロジェクトの進捗を加速するような成果もあがっており、また招待講演数も多いことから、波及効果は大きい。</li> <li>・計算結果からナノ技術を自信をもって提案できるように、シミュレーション機能の充足、完成度を上げることも重要である。</li> </ul>
	評価基準	<p>評価点（1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10の10点満点）を、下記評価基準を参考に記入してください。：</p> <p>9：質・量共に世界的水準である。</p> <p>7：優れた成果・効果が出ている（見込まれる）。</p> <p>5：平均的水準である。</p> <p>3：平均より少なく、対応策を練る必要がある。</p> <p>1：質・量共に大いに問題があり、プロジェクトは中止すべきである。</p>
	各委員の 評価点	8、9、9（順不同）

	平均評価点	8.7 (小数第二位以下四捨五入)
④総合評価		<ul style="list-style-type: none"> <li>・他の研究プロジェクトに頼られるナノシミュレーション手法の開発プロジェクトになっており、これは評価される。</li> <li>・新規な機能を実現するナノ構造を利用する革新的機能デバイスの開発には、新機能探索のナノシミュレーション手法が不可欠であり、本プロジェクトが積極的に推進している。</li> <li>・目標は、ナノ触媒、燃料電池材料などの新しい高効率触媒機能の探索、分子デバイス、人工光合成などの量子機能の提案、ナノ磁性、ナノ超伝導量子デバイス設計など、磁気記録材料、強誘電体材料等の材料、部品設計など、物理現象の解明にとどまらず、デバイス応用まで多岐にわたっていて、実験系との相互連携を重視し、また実験系への貢献を強く意識している。研究は、順調に進捗している。</li> <li>・第一原理計算による機能予測、設計手法の確立は今後ますます重要性を増すとされるが、確立した計算手法そのものを外部に公表するなど、この分野への寄与は大きい。</li> </ul>
	評価基準	<p>総合評価点（1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10の10点満点）を、下記評価基準を参考に記入してください。：</p> <p>9：すべての点において模範的に優れている。</p> <p>7：総合的に優れている。</p> <p>5：平均的なプロジェクトである。</p> <p>3：期待されたほどではない。計画の見直しが必要である。</p> <p>1：上記評価項目①～③の評価結果に大きな問題があり、研究を中止すべきである。</p>
	各委員の評価点	9、8、8 (順不同)
	平均評価点	8.3 (小数第二位以下四捨五入)
<p>その他 (気になる点、ヒアリングの第一印象など、なんでも) 特になし。</p>		

なお平均評価点は、公表時一般にもわかり易いように、以下のようにS, A, B, Cを併記する。  
 評価委員の点数の平均点（小数点第二位以下四捨五入）をXとすると、S:  $X=10$ , S-:  $9 \leq X < 10$ , A+:  $8 \leq X < 9$ , A:  $7 \leq X < 8$ , A-:  $6 \leq X < 7$ , B+:  $5 \leq X < 6$ , (以下同じ考え方)・・・とする。

平均評価点まとめ

研究開発の目的・目標管理、マネージメント	研究開発の進捗状況及び進め方	論文、特許等の直接の成果、効果・効用、波及効果	総合評価
A+	A+	A+	A+