

# プロジェクト中間評価報告書

評価委員会開催日：平成25年12月5日

評価委員：（敬称略、五十音順）

石原 一 大阪府立大学大学院工学研究科 教授

齋藤良行 早稲田大学大学院基幹理工学研究科 教授

平山 司 （一財）ファインセラミックスセンター ナノ構造研究所 副所長・主幹研究員

確定年月日：平成26年2月15日

プロジェクト名	新物質設計シミュレーション手法の研究開発
研究責任者の氏名・所属・役職	大野隆央 理論計算科学ユニット長
実施予定期間	平成23年度～平成27年度
研究目的と意義	<p>次世代情報通信、環境・エネルギー、医療などの社会的に重要な分野におけるブレークスルーを創出するためには、実システムを構成する異種の物質・材料から成るナノ機能界面やナノ複合体において発現する物性・機能を理解することが必須である。本プロジェクトでは、第一原理計算手法、量子モデリング手法、古典・統計熱力学手法などを基礎として、単一の物質・材料の高精度な解析・予測と、複合的な物質・材料の示す特性・機能の解析・予測のための高度な計算科学手法を研究開発することを目的とする。</p> <p>高度情報化社会、持続可能な社会、安全・安心な社会の構築という社会的要請を実現するためには、それら社会を支えるナノテクノロジー、環境・エネルギー、ナノバイオロジーなどの重要分野における技術的ブレークスルーが不可欠であり、広範な物質・材料分野において、新物質・材料、新物性・機能の創製が模索されている。計算科学技術による高精度な解析・予測能力は物質・材料研究の競争力に直結しており、本プロジェクトが目指す高度な計算科学技術の構築は、物質・材料研究における強い競争力の獲得に大きく貢献するものである。</p>
研究内容	<p>第一原理計算手法、大規模解析手法、量子モデリング手法、古典動力学手法、統計熱力学手法、Phase-field手法などの解析手法を基礎として、様々な実システムを構成する無機物、有機物、生体物質、溶液などの要素材料の物性を高精度に解析・予測するとともに、それら物質・材料間の相互作用を解析・予測し、ナノ複合体の機能を解明するための計算科学手法を開発し、実験と緊密に連携することにより、特に、ナノテクノロジー、環境・エネルギー、ナノバイオロジーなどの実用に向けたシステム化が進む分野に注目して、革新的なナノ物質・材料の設計、新奇な物性・機能の解明、新物質創製の提案を目指す。</p>
ミッションステートメント （具体的な達成目標）	<p>要素ナノ材料から、ナノ界面などの物質・材料間の相互作用、ナノ複合体の機能まで、幅広く物質・材料相関を取り扱う理論・計算科学手法の構築</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・ 実用に向けたシステム化が進む分野に注目した新奇な物性・機能の解明、革新的な物質・材料の設計思想の確立</li> <li>・ 物質・材料の電子・原子ダイナミクス（電子移動、エネルギー移動、イオン拡散など）を高精度に大規模に解析する計算手法の開発</li> <li>・ 大規模系（十万原子程度）に対する第一原理分子動力学の実現</li> <li>・ 複合酸化物のマルチフェロイック物性、熱電材料の外場応答等の解析予測</li> <li>・ 量子効果の強い物質に特有な機能の理論予測と発現物質の特定</li> <li>・ 構造材料、電池材料、金属ガラスなどの実用材料の物性理解と材料探索</li> </ul>

<p>平成23年度～平成25年度中間評価時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）</p>	<p>1) 主な研究成果（アウトプット）：</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・ 第一原理計算手法の超並列計算環境への最適化研究を実施し、ナノ構造形成過程の実成長温度での第一原理ダイナミクス解析を可能とした。</li> <li>・ オーダーN法により数十万～百万原子系に対する構造最適化を含む第一原理計算の可能性を示し、表面ナノ構造、生体系に対する応用計算を実現した。</li> <li>・ 有限温度及び外部環境の効果を取り入れた動的特性の第一原理計算手法を構築し、また元素置換と原子拡散に関する理論モデルを構築した。</li> <li>・ 磁性と強誘電性が共存する特異な物性であるマルチフェロイック現象を第一原理理論により解析し、種々の物質の物性の説明に成功した。</li> <li>・ トポロジカル絶縁体を通常の絶縁体と識別する簡易な方法を提案した。</li> <li>・ トポロジカル絶縁体結晶内の結晶欠陥が乱れに強い伝導チャンネルとなる機構、レーザー照射下で通常絶縁体がトポロジカル絶縁体に変換される機構を提示した。</li> <li>・ 光メモリのスイッチング速度の新規な制御法を提出した。</li> <li>・ 高温超伝導体の擬ギャップ相の未解明な物性の理解を進展させた。</li> <li>・ 第一原理計算と組み合わせた複雑な化合物相の状態図計算手法を確立した。</li> <li>・ Phase-field法による液相を含めた組織予測手法の確立及びGPGPUを用いた計算の高速化を実施した。</li> <li>・ 金属ガラスの液相におけるクラスター構造及び物性との関連を解明した。</li> </ul> <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）：</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・ 第一原理理論による実成長温度での解析や丸ごと解析が可能となり、次世代デバイス材料のプロセス・構造の最適化指針の構築に貢献できる。</li> <li>・ 複雑な構造を持つ物質での、熱物性など理論モデル構築の考え方・手段を提供し、今後材料選択や開発のための指針として応用できる。また、定量的理論に基づく新しい物質提案から、今後、実験実証と新材料の開発が期待される。</li> <li>・ トポロジカル絶縁体物質の簡易なスクリーニングや、通常型絶縁体の光制御によるトポロジカル絶縁体創生の道を拓いた。</li> <li>・ 実験データの乏しい系の状態図予測や実験的解析が困難な微細組織形成予測を可能にする手法を確立し、新奇材料設計にインパクトを与えている。</li> </ul>
<p>中間評価時の進捗状況及び自己点検・評価</p>	<p>中間評価時の進捗状況： 予定通りの進捗で目標を達成できる。</p> <p>自己点検・評価： 新物質設計のための理論・計算手法の開発を進めた。トポロジカル絶縁体に関する理論研究を進展させ、新機能や物質探索指針の提示、通常の絶縁体との簡易な識別法の提案等を行った。提案したトポロジカル絶縁体判定法は、試料の光学的反射スペクトルのみを用い、大型装置を要した判定を飛躍的に効率化する可能性があり意義が大きい。また、第一原理理論による実成長温度での解析や丸ごと解析が可能となってきたことにより、実材料・実デバイスに対する応用研究の実現が視野に入り、今後の研究開発に弾みがつく進展が得られた。</p>
<p>【評価項目】</p>	<p>コメント</p>

<p><u>①研究計画、実施体制、マネジメント、連携</u>  (研究開発の方向性・目的・目標の見直し、計画・ロードマップの問題点、実施体制・マネジメントの改善、連携のあり方、ほか)</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・本プロジェクトは新物質設計に関して第一原理計算手法から古典統計熱力学手法まで、マルチスケールな材料設計シミュレーション技術の開発を研究対象としている。シミュレーションの対象は多岐にわたっているが、サブテーマの設定も適切に行い、テーマ管理も合理的である。</li> <li>・現在の重要なテーマを的確にとらえ、時代の先端を行く確実な研究を実施していると感じる。</li> <li>・サブテーマ毎のロードマップの設定、実施体制、マネジメント、プロジェクト間の連携、NIMS 内外、国内外の研究機関との連携も適切である。</li> <li>・計画・ロードマップは適切と考えられるが、期間後半ではチーム全体の総合力を目に見える形にするためのマネジメントや実施体制のあり方に、より工夫があると期待が持てる。</li> <li>・実システムに必要な物質系の機能解明に向けた解決課題が適切に設定されており、技術目標達成への計画も良く練られている。ただし、達成目標における「手法の構築」や「設計思想の確立」などが、具体的に何が出来れば達成されたとするのか、実験との協力も組み入れながら、もう少し分かりやすい表現にすれば、課題もより浮き立つと思われる。</li> <li>・サブテーマ間の連携や実験との連携があつて初めて可能になるターゲットがうまく設定できるとアピール度が上がると思われる。</li> <li>・実験グループとの連携を強め、計算で設計した材料やデバイスを作製し優れた特性を実証する例を示せるとすばらしいと思う（必ずしも計算通りの結果でなくてもいいと思う）。</li> </ul>
<p><u>②研究開発の進捗状況及び進め方</u>  (進捗状況の把握、研究責任者の自己点検・評価の妥当性、進め方の見直し(継続・変更・中止等)、研究資源(資金・人材)の再配分、ほか)</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・研究責任者の進捗状況の把握は適切であり、自己評価も妥当と判断できる。研究資源の配置も適切である。今後も同じような進め方をするのがいいと判断できる。</li> <li>・個々のサブテーマではインパクトある成果が得られており、目標達成もなされていると見えるが、それぞれのサブテーマが全体の計画の中でどのように有機的に関連しているのか、分かりにくい部分もある。特にサブテーマ3、4が、サブテーマ1、2と有機的に強め合う部分をアピールできるような進め方を工夫し、総合力が発揮されているかの視点からも評価するのが良いと思われる。</li> <li>・計画通りに順調に進行していると感じるが、できれば評価項目①のようにさらに実験研究者との連携によって、計算で予測された材料やデバイスを作製し、よい特性が出たという例を積み重ねると、実験研究者との関係をより強くすることができ、結果的にいい方向に向かうと思う。</li> </ul>
<p><u>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)</u>  (研究成果の質は世界レベルか、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どうか、セレンディピティー、ほか)</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・計算技術的に大変競争力のある成果が得られ、取り扱える原子数の拡大や有限温度系の適用など手法の高度化も良く進んでいる。手法の開発研究という視点からのアウトプットは高く評価でき、学術的にもインパクトのある成果が得られている。引き続き世界トップクラスの成果を追求されたい。</li> <li>・論文はインパクトファクターの高い雑誌に掲載され、この分野におけるNIMSの力を国内外に示すものとなっている。</li> <li>・論文等については積極的にアピール度の高い形での発表が狙えるような戦略を持って良いと思われる。</li> <li>・得られた成果は世界レベルであると判断できる。具体的な材料設計への適用例もある。</li> <li>・本プロジェクトは基礎研究であり、特許と直接結びつきにくいですが、本プロジェクトの影響を受けた材料設計技術が、新しい知的所有権の獲得に結びついた例もみられる。</li> <li>・評価者の個人的な評価として本プロジェクトの評価は、方法論の開発にあると言えるので、論文の価値のみで判断すれば非常に高い評価となる。</li> </ul>

		<ul style="list-style-type: none"> <li>・スーパーコンピュータ「京」の後継機種を判断する基準としても、本プロジェクトの成果が生かされるものと判断する。</li> <li>・人数と論文数を考えると、順調に成果を出していると思う。費用対効果は良好と思われる。</li> <li>・実験と違って、計算自体にセレンディピティーはめったにないと思うが、実験との連携によって将来生まれるかもしれない。</li> </ul>
<p>④総合評価  (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、問題点等があれば追加してコメント)</p>		<ul style="list-style-type: none"> <li>・世界的に競争力のあるシミュレーション手法が順調に開発されている。</li> <li>・総合評価として本プロジェクトは素晴らしい成果を得ている。実際の材料設計への応用はなされつつあるが、これを進めていけば大きな成果が期待できる。</li> <li>・各サブテーマで得られている成果は学術的にも興味深いものが多く、グループの強みが活かされている。今後、実材料を素材にした実験グループとの協力で、実証的な成果を挙げられれば、材料開発分野に大きなインパクトを与えられると期待される。</li> <li>・本プロジェクトの成果の一つであるオーダーN法計算の適用範囲を拡げていけば、ナノ材料など実用材料への応用も目に見えてくる。本プロジェクトは第一原理計算手法とPhase-field法や計算状態図に代表されるマクロなモデルを組み合わせようという難しい試みに挑戦しているが、研究者らの狙いはある程度は成功していると言える。</li> <li>・期間前半において手法的には特色のある成果の蓄積が行われてきたので、期間後半では個々の技術の高度化だけでなく、実験研究を巻き込んだ総合力発露の分かりやすいアピールがあれば素晴らしい成果になると期待される。特にトポロジカル絶縁体に関連する理論予測については早期の実験検証の働きかけを期待したい。</li> <li>・サブテーマ間の連携や総合力の発揮という点ではさらにマネジメントや目標設定の仕方の工夫があっても良いと思われる。</li> <li>・計算がこれからの材料研究やデバイス開発に非常に重要であることはもはや議論の余地はなく、国内国外の多くの先進的研究機関は必ず計算グループを持っている時代である。そのため、「NIMSの計算グループの強み」を計画の中に鮮明に打ち出し、他機関との違いを素人にも分かるように示すことが戦略上有効なのではないかと思う。</li> <li>・本プロジェクトは非常に大きな系の第一原理計算手法に挑戦しているが、計算の高速化と並んで注目すべきは精度保証付き数値計算に代表される高精度計算手法の導入である。高精度化は、高速化とは相補的な関係であり当然検討されているものと考え。トータルな計算コストを少なくすることも可能であるかもしれない。そういった観点での議論ができれば、さらにすばらしい成果となるであろう。</li> </ul>
各委員の総合評価点 (10点満点)		8、8、8
総合評価点平均 (10点満点)		8.0
評価点	評価	評価基準
10	S	全ての点において模範的に優れている。 計画を変更することなく継続すべきである。
9		
8	A	総合的に優れている。 一部計画を見直し継続すればS評価になる可能性がある 平均的なプロジェクトである。
7		
6		

5	B	継続は認めるが、継続する時に、一部計画を見直した方が良い点がある。
4		期待されたほどではない。
3		計画を見直して継続すべきである。
2	C	プロジェクトの見直し、計画の抜本的な変更が必要である。
1		大きな問題があり、継続を中止すべきである。