

プロジェクト事後評価報告書

評価委員会開催日：平成28年12月13日

評価委員：（敬称略、五十音順）

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
 水木純一郎 関西学院大学理工学部 先進エネルギーナノ工学科 教授
 山口浩一 電気通信大学 大学院情報理工学研究科 教授

確定年月日：平成29年2月10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
研究責任者の所属・役職・氏名	佐々木泰造 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点 MANA 主任研究者
実施期間	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"> ・ 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 ・ 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 ・ 大規模系（10万原子程度）に対する第一原理分子動力学の実現 ・ 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 ・ 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 <p>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</p>

<p>平成23年度～平成27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)</p>	<p>1) 主な研究成果(アウトプット) 大規模第一原理計算のための手法開発とプログラム実装として、純国産としての高効率な第一原理コード(PHASE)の開発・実装とオーダーN法第一原理手法の開発とプログラム実装(CONQUEST)が行われ、それぞれ、金属表面でのグラフエン成長やナノ構造物質(Si/Geのハットクラスタ及びコアシェルナノワイヤ)への応用が進められ、手法・コードの有効性が示された。併せて成長機構の解明や電子状態の導出が行われた。また、現理論を更に広範囲に組み合わせる試みとして構造安定性理論への有限温度効果・外部環境効果の導入法を検討し、摂動論や分子動力学によるエントロピーの寄与の計算に成功し、土壌物質中のイオン安定性の検討において有効性が確認された。また、現理論に基づき、新規の2次元物質(MXene)の多様な材料特性の理論予測により物質提案を行った。量子効果に根差した特性として、光誘起トポロジカル絶縁体相の予測や磁性体におけるトポロジカル相の同定を新しい概念として提案、一部は実験的に検証された。構造材料分野では、Phase-field法の改良を行い、それによる軽量樁材料として注目されているMg合金系の凝固組織形成予測に成功した。また、合金状態図の予測法の改良により、を進める第一原理計算とCALPHAD法を組み合わせた化合物の安定性領域と格子定数の組成依存性の理論予測に成功した。さらに機械加工によるTiNi合金の非晶質/ナノ結晶組織の生成予測を分子動力学シミュレーションにより行うことに成功した。</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) 100万原子系の様々な特性の計算が世界に先駆けて可能となり、精密な動力学計算・熱力学量の導出までも可能となり、当面不可能と思われていた複合デバイスなどの系へと計算対象を広げることとなった。また、通常計算手法でも、開発・強化されたPHASEにより、完全日本語によるユーザーとの対応が行われ、計算非専門家による利用が進んでいる。その他、通常計算法の有限温度効果など新たな試みによる適用範囲の拡大やフェーズフィールド法の改良など計算技術上の格段の進歩があった。加えて、物性の起源に関わる新しい概念の提案と、全く新しいナノ物質群の広範囲な特性予測・材料提案を行うことができた。</p>
<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>	<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 既存の理論手法による実験結果再現にとどまることなく、国内技術者が使用可能な高精度第一原理計算プログラムや現実系への応用が可能なオーダーN法の開発・実装とその検証が行うことができた。これらは、特にユニークな成果であり、今後応用例の拡大蓄積による発展が重要と考えている。また、有限温度物性の第一原理計算や、新規2次元物質群の提案、新しいトポロジカル相の創出法や理論的予測、などは、当初の目論見を大きく超える成果と考えている。また、合金の凝固シミュレーションの成功や合金状態図の理論予測の寄与なども材料プロセスに貢献する意義ある成果と考えている。今後各手法の発展研究とともに、近年開始されたデータ科学・情報科学との連携も重要であろう。</p>
<p>評価項目</p>	<p>コメント</p>
<p>①研究計画、実施体制、マネージメント、連携 (事前・中間評価の結果を受けて、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</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・ 現在の世界の計算科学のレベルで十分競争できる体制(計算機資源、人員・人材)を維持していると思われる。 ・ 物質科学研究で、これだけの理論グループを作っているのは、日本の財産である。 ・ ナノ材料の物性解析、物質・材料間相互作用の解析、ナノ複合体の機能解明のための計算科学手法の開発に向けた課題設定は適切であり、そのロードマ

<p>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)</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・ツプの策定にも特段の問題は見受けられない。 ・中間評価でも求められた実験グループとの連携では、NIMS 内では活発に展開され、成果も認められるが、NIMS 外の実験グループとの連携による具体的な成果は明確ではない。 ・理論と実験との連携は十分か、開発された計算手法を応用する魅力あるターゲットがなんであるかがクリアでなかったのが残念である。 ・理論の組み合わせ、データ・情報科学との融合、計算手法間の融合を図る連携体制の強化は今後の課題である。
<p>②プロジェクトの具体的な達成度 (目標は達成されたか、学術的価値、社会的価値、経済的価値の創造につながったか、技術レベルの向上につながったか)</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・プロジェクトの目標は達成していると考えられる。 ・物質設計、物性・機能の解明、新物質創製に関する優れた成果が得られており、当初目標は達成されている。 ・計算結果が直ちに社会的価値や経済的価値を生む可能性は少ないかもしれないが、実験グループとコラボレートしながら研究を進めているということなので、成果はそのような価値を生み出すことができるような道筋をすでにもって活動している。 ・理論で予測したものが実験で確認された例があり、これらが多くあると新しい新規物質創成につながることで期待されるので評価される。 ・オーダーN法第一原理計算手法の開発とその実装における計算の高精度化および高効率化は、今後の複合デバイス、高分子、複雑な反応系への拡張にも期待が持たれ、学術的価値も高い。 ・本プロジェクトで開発された PHASE は、国内の第一原理計算の技術開発に貢献する社会的価値が認められる。 ・物質・材料の階層や物性に応じた計算手法の開発により、技術レベルの向上にもつながっている。
<p>③研究開発の進捗状況 (研究により得られた成果は、世界レベルで比較して高いか、予算に見合った成果が得られたか、将来の新しい研究の芽が得られたか)</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・「PHASE」や「オーダーN法」などオリジナリティーの高い計算手法の開発を行い、創意工夫を凝らした研究手法の開発によって計算科学の新しい可能性と希望を生んでいる。 ・オーダーN法第一原理計算手法の開発により、様々な材料特性の計算が高精度化・高効率化で可能となった成果は世界的にも高いレベルである。 ・オーダーN法が開発され、実際の物質の実験との比較がされるようになり期待される。 ・光誘起トポロジカル絶縁体相の発現の理論的同定および磁性体におけるトポロジカル相の同定の成果は、世界的にも優れたものであり、スピントロニクス分野における応用展開にも期待が持たれる。 ・2次元物質の材料特性の理論予測、核形成機構の解明など多くの新規知見も得られている。 ・実験グループとの連携がなされていることは理解できるが、その量が十分であるとは見えなかった。 ・今後のターゲット物質、物性、機能 etc. を具体的に設定することを勧める。 ・全体的な研究開発の成果は、本プロジェクトの予算に十分見合うものと評価される。
<p>④見込まれる直接の成果(アウトプット)、効果・効用(アウトカム)や波及効果(インパクト) (質の高い論文・特許が多く出たか、新技術や実用材料につながるか、思いがけない成果があったか、他分野への波及効果はあるか)</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・オーダーN法第一原理計算手法による 100 万原子の大規模な材料系に対する第一原理計算が可能になったことで、様々な材料系や反応系におけるシミュレーションに期待がもたれる。 ・完全日本語対応のソフトウェアはこの分野の専門家以外の参入を飛躍的に増加させる起爆剤になる可能性があると思うので、今後の展開に期待する。 ・本プロジェクト期間内に質の高い論文が安定して多く掲載されている。 ・国際レベルで引用される良質の論文を出している。 ・成果が IF の高い論文に多く発表されており、間違いなく世界的に評価される成果が得られている。 ・新規2次元物質の可能性が理論的に示されたことで、論文の引用数も 100 を超えるなどの効果が現れている。

総合評価点平均 (10点満点)	8.0 (小数第二位四捨五入)
<p>その他 研究全体に対する総合的な所見、①～④に入らない所見、問題点、あるいはプロジェクトに対する印象など自由にご記入ください</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・大変重要で注目されている分野だけに、世界中に競争相手が多く存在すると思われる。 ・本プロジェクトでは、ナノ材料の物性や物質・材料間の相互作用の解析と予測およびナノ複合体の機能解明に向けた計算科学手法の開発において、全体的に優れた世界水準の成果が得られている。 ・勝負する方向を定めて特徴のある成果を創出しておられるが、選択と集中の判断がこのグループの今後を決定すると思われる。 ・難しいことだが、正しい判断でますますの特徴ある成果を出されることを願う。 ・実験グループとの密接な連携についてはややNIMS内部に偏った印象が残るが、NIMS外の有力な実験グループとも連携強化を図り、さらなる世界トップの成果の輩出を期待する。 ・実験研究者とのコラボもさらに進めてほしい。 ・質疑応答で分かったことであるが、研究場所的に実験グループと理論グループが近くにあり、日常的に議論できる環境を作ることを勧める。(お互いの居住する建物が違うということであった) ・より現実的で複雑な材料系の解析に向け、データ・情報科学との融合も今後の課題になると思われる。

第3期中長期計画プロジェクトの事後評価基準

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た。
9		多くの点において模範的に優れていた。
8	A	総合的に優れていた。
7		顕著な成果が出た優れたプロジェクトであった。
6		
5	B	平均的なプロジェクトであった。
4		一部の計画の見直しが必要であった。
3		
2	C	期待されたほどではなかった。
1		計画を大幅に見直して実施すべきであった。