

プロジェクト事前評価報告書

評価委員会開催日：平成22年3月31日

評価委員：（敬称略、五十音順）

河本邦仁 名古屋大学大学院 工学研究科 教授

齋藤良行 早稲田大学大学院 理工学研究科 教授

長谷川修司 東京大学大学院 理学系研究科 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 部長・所長代理

確定年月日：平成22年6月21日

プロジェクト名	計算科学による新物質材料設計と理論予測（「新物質設計シミュレーション手法の研究開発」に改題）
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）	<ul style="list-style-type: none"> ・ 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 ・ 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などの解析予測 ・ 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 ・ 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

この事前評価は課題提案の最初の段階で行ったものです。特に事前評価は厳しく評価をしてもらっています。この結果を基に研究内容・計画等をブラッシュアップして、プロジェクトは実施されます。

【評価項目】	コメント
<p>①プロジェクトの目的、ミッションステートメント</p> <p>{優れている点、内容が不足している点、目的や目標を絞る必要はないか、達成目標が高すぎる（低すぎる）か、既存プロジェクトとの重複（差別化）、など}</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・ 計算材料科学の拠点として、世界レベルの研究が進められている。 ・ 実験的な研究開発と同様に、本プロジェクトが進める理論的な研究は、材料研究開発にとって今や不可欠のアプローチと認識されており、本プロジェクトの目的、体制、手法は、それに見合ったレベルの高いものである。次世代スーパーコンピュータによる物質・材料研究へ繋がるプロジェクトとして極めて重要である。サブグループのテーマもタイムリーで適切である。 ・ 現代の材料科学において、創製、解析、計算は欠くことのできない重要な要素であり、本プロジェクトは時代の要求に合ったものである。計算の可能性と社会の要求の交点に研究目的を見出しており、きわめて妥当な目的設定がなされている。 ・ 新機能を有するナノ材料を開発するためには実験的研究のみならず、ナノシミュレーション技術の開発が不可欠である。本プロジェクトの目的はまさにそれにあたり、実現可能な目的を的確に設定している。 ・ サブテーマの設定も適切であり、第一原理計算からマクロスケールまで、マルチスケールシミュレーションをシームレスに行うことを目指しているが、ハードウェア・ソフトウェア技術の進歩を考慮して、的確な目標が設定されている。 ・ 研究目的を「理論・計算科学手法の構築」「新奇物性・機能の解明」「革新的物質・材料の設計」としていて、バランスの良いプロジェクトである。ただし、理論・計算サブテーマでは具体的な物質・材料が見えないため、対象を絞ってインパクトの大きい仕事をして欲しい。また、物性・機能解明と物質・材料設計のサブテーマでは、既存の物質・材料について計算シミュレーション等を適用する計画が主になっているが、そこから革新的機能の探索をどうするのか、材料設計手法をどう編み出していくかという戦略が見えない。 ・ 本研究の成果を次世代のペタフロップスコンピュータなどに活かすことを望む。
<p>②プロジェクトの意義</p> <p>{学術的レベル、技術的レベル、社会的価値、経済的価値、将来新しい研究開発分野となるか、実用材料につながるか、産業界にとって重要か、重要特許になりうるか、など}</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・ 理論計算による材料研究の意義は、実験手法に勝るとも劣らず重要である。本プロジェクトと実験技術を相補的に組み合わせることにより、新しいナノテクノロジー、環境・エネルギー、ナノデバイス等の重要な分野におけるブレークスルーとなりうる。 ・ 理論・計算科学が材料科学の基盤の一つとして重要なのは言を俟たない。本プロジェクトグループは日本の計算材料科学を牽引するという意味で、社会的、また将来の経済的価値は大変高いといえる。本プロジェクトを推進し、材料研究者との密な連携の中から真に有用な材料を是非生み出してほしい。 ・ 本プロジェクトが目指すところは、高度情報化社会、持続可能な社会、安全・安心な社会の構築等々、社会的な要請に応えるもので、これらの基盤のナノテクノロジーの中心となるシミュレーション技術の開発を目指している。 ・ 高度な計算手法の開発と同時に、実用材料への適用とフィードバックも同時に行えれば、プロジェクトの意義は非常に大きい。その点に留意して、外部の実験グループだけでなく、外部の理論グループとの連携を深めて研究を進めることを期待する。 ・ 本プロジェクトは基盤研究であるため、サブテーマによっては特許に結びつきにくいとも考えられるが、実験的な研究をサポートすることにより、重要特許も生まれる可能性もある。 ・ 特許の件に関しては、研究者（所）の利益というよりも、社会の利益の点から、どうあるべきかをぜひ探してほしい。

この事前評価は課題提案の最初の段階で行ったものです。特に事前評価は厳しく評価をしてもらっています。この結果を基に研究内容・計画等をブラッシュアップして、プロジェクトは実施されます。

<p><u>③プロジェクトの内容、ロードマップ、推進体制、マネジメント、予算計画</u> (研究内容、目的の実現可能性、計画の問題点、推進体制、マネジメント、予算使途の問題点、など)</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・本プロジェクトの研究内容は適切であり、ロードマップ、推進体制も問題ない。マネジメントも適切に行われるだろうと判断できる。 ・本研究では第一原理計算手法、古典分子動力学手法、Phase-field手法とスケールの異なる手法が目的ごとに開発され、マルチスケールシミュレーションを目指している。応用・範囲も界面からバルクまで幅広い。 ・かなり広い範囲の計算原理を含んでいるので、計算の手法と対象の組み合わせが簡単ではない気がするが、成果が非常に楽しみである。 ・計算科学の手法開発、改良研究が具体的に想定する材料物性・現象と有機的につながる体制を取っていて問題ない。 ・このプロジェクトの各サブテーマの目標実現性は高い。 ・個々のサブテーマから個別的に成果を出せると思うが、大学の研究室レベルでは不可能な、このプロジェクトならではの成果および推進体制を期待する。そのためには、リーダーおよびサブリーダーによるリーダーシップが重要である。研究者個人の興味だけでなく、プロジェクトの方向性を意識させながら推進する体制の工夫が必要である。 ・ひとつの物質・材料に関して、複数のアプローチの研究を遂行するような有機的な研究推進を期待する。 ・人件費が40%以上を占めるが、これは妥当である。優秀な人材を世界から集めて研究を強力に推進して欲しい。
<p><u>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)</u> (質の高い成果は期待できるか、論文・特許数は十分出そうか、新技術・デバイスにつながるか、多くの外部資金獲得・共同研究につながるか、他分野への波及効果は、など)</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・社会からの期待が非常に大きい分野でもあり、質の高い結果が期待される。 ・プロジェクト参加者のこれまでの実績から考えて、質の高い論文が期待できるのはもちろんであるが、材料組織分野が多くの特許申請や知的所有権につながると判断できる。 ・理論・計算科学の成果は着実に挙がると期待されるが、これを目的とする新しい材料設計・創製につなげていくためには、研究者自らが材料研究者に積極的にアピールし、成果活用法を示す努力が必要である。論文を発表したら終わりでは駄目である。 ・本プロジェクトは基盤研究であり、基礎的な原理の解明が直接的な成果ではあるが、実用面でもナノデバイスのみならず、燃料電池などの新しい高効率触媒機能の探索、低次元量子物質デザイン研究など多岐に亘る成果が期待できる。 ・高度な理論シミュレーション法の開発や、その有用性を示すことによって、理論シミュレーションの分野ではインパクトのある成果となるだろうが、「計算のための計算」にならずに、実用材料に対して貴重な情報を提供する成果が出せれば、他分野への波及効果は大きくなる。 ・他プロジェクトへの波及効果は大いに期待できる。特にナノ材料計測基盤技術への展開を望む。 ・構築したプログラム等をオープンにし、他機関の研究者も利用できる体制にすれば、研究者コミュニティの中での求心力を得ることができ、このプロジェクトの波及効果がさらに大きなものになる。そのような運営体制を期待する。 ・本プロジェクトの成果を生かした汎用ソフトウェアの開発を望む。

この事前評価は課題提案の最初の段階で行ったものです。特に事前評価は厳しく評価をしてもらっています。この結果を基に研究内容・計画等をブラッシュアップして、プロジェクトは実施されます。

<p>⑤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①～④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"> ・社会の要望が強く、材料科学をさらに強くするためにも重要なプロジェクトである。 ・本プロジェクトは基盤研究であり、次世代ナノデバイス、環境・エネルギー、ナノバイオなどの分野における問題解決、ブレークスルーにつながるものである。高度な計算機環境を最大限に利用活用することにより、ものづくりを支える根幹となることが期待される。 ・理論・計算科学は実験で見出された物性・機能を説明、解釈して理解を助けることは得意だが、新奇物性や機能を予言して材料を特定したり、目的とする物性・機能を発現する物質・材料あるいは表面・界面現象などを予測するのが難しい。本プロジェクトではこのブレークスルーとなって、新たな計算科学を創出するプロジェクトにしてほしい。 ・高いポテンシャルを持つチームであり、多数のレベルの高い学術的成果が期待できるが、実用材料に対してどれだけインパクトのある成果が出せるかがポイントである。そのためにも、実験グループを含む外部との連携・連絡を密にする必要がある。 	
<p>総合評価点 (10点満点)</p>	<p>8.3 (小数第二位以下四捨五入)</p>	
<p>各委員の評価点 (10点満点)</p>	<p>8, 8, 9, 8 (順不同)</p>	
<p>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る。</p>
<p>9</p>		<p>計画を変更することなく推進すべきである。</p>
<p>8</p>		<p>総合的に優れている。</p>
<p>7</p>	<p>A</p>	<p>一部計画を見直し推進すればS評価になる可能性がある</p>
<p>6</p>		<p>平均的なプロジェクトである。</p>
<p>5</p>		<p>プロジェクトの実施は認めるが、一部計画を見直した方が良い点がある。</p>
<p>4</p>	<p>B</p>	<p>期待されたほどではない。</p>
<p>3</p>		<p>計画を見直して推進すべきである。</p>
<p>2</p>		<p>大きな問題があり、プロジェクトを中止すべきである。</p>
<p>1</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なければ実行すべきではない。</p>

この事前評価は課題提案の最初の段階で行ったものです。特に事前評価は厳しく評価をしてもらっています。この結果を基に研究内容・計画等をブラッシュアップして、プロジェクトは実施されます。