

## 事前評価報告書

研究課題名：仮想実験技術を活用した材料設計統合システムの開発

評価委員会委員長名： 堂山昌男 帝京科学大学環境マテリアル学科教授（委員長）  
 齋藤良行 早稲田大学理工学部教授  
 矢川元基 東京大学大学院工学系研究科・工学部 教授

記入年月日：平成 13 年 11 月 20 日

| 評価の視点   | 評 価 結 果  |
|---|--|
| [課題の設定]<br>新規性・独創性<br>学問・材料技術の進歩<br>発展<br>国家的・社会的・産業<br>界的要請<br>新しい学問分野開拓<br>緊急性、波及効果 | 近年の計算機支援による材料設計は、著しい進展があり、特に個々の目的に応じた計算手法、例えば第一原理計算、モンテカルロシミュレーションなど各手法の開発は、多くの成果が得られている。しかし、材料の特性を原子レベルからマクロレベルまで総合的にシミュレーションを行うためには個々の計算手法を共有化する必要があり、本研究は ITBL を利用した計算材料科学のプラットフォームを構築することを目的としている。このような研究は従来殆どなく、今後その重要性は益々増すと考えられるので、先導的研究の一面も有している。研究成果を多くの人に使っていただくという本課題の意義は極めて大である。公開されたならば産業界への寄与も大きいと判断できる。 |
| [課題の解決方法]<br>研究手法・実験方法の<br>新規性・独創性<br>研究方法の精密・緻密<br>さ、研究手法・実験方<br>法の妥当性               | 計算材料科学のプラットフォームの構成、開発方法ともオーソドックスなものであり、妥当であると判断できる。計算材料科学のプラットフォームを構成する各要素に関しての新規性はあまり大きいとは思えないが、統合システムとしては他に例がない独創的なものであり、高く評価できる。本課題の成否はユーザ会の活用にかかっているといっても過言ではない。早急に立ち上げることを望む。   |
| [研究実行計画]<br>年次計画<br>予算規模<br>購入設備計画  | 計算材料科学のプラットフォームを構築し、それをもとに実際の材料設計を行える具体的なプロトタイプを完成させこのシステムの利点をアピールすることが重要であると思われる。プラットフォームの完成が予定される3年後に行われる中間評価を積極的に活用し、柔軟に再スケジューリングすることを望む。産学官、学協会との連携を早急に立ち上げて、世の中のニーズを吸い上げる必要がある。   |
| [その他]   | 極めて有意義なプロジェクトであり、このシステムによって研究者の意識も変革される可能性がある。各種材料の設計モジュールを開発する点については、これまでの実績もあり、大きな成果が得られると思うが、実用材料シミュレーション手法の開発も念頭に入れて欲しい。   |
| [総合評価]  | A : 新規課題として実行すべきである<br>B : 新規課題として一部修正して実行すべきである<br>C : 新規課題として不適切である  |
| コメント：   | 計算機を活用した材料設計をより効率良く、総合的に行うために、本研究課題は重要であり、その成果に期待する。多くのユーザがこのシステムを利用出来る様にユーザーサイドからみた設計配慮も重要である。  |