

**日本学術振興会研究拠点形成事業（A. 先端拠点形成型）
中間評価（24年度採用課題）書面評価結果**

領域・分科（細目）	数物系科学・物理学（数理物理・物性基礎（理論））		
研究交流課題名	グリーンエネルギー計算機ナノマテリアルデザイン		
日本側拠点機関名	大阪大学		
研究代表者 所属 職 氏名	大学院基礎工学研究科・教授・吉田博		
相手国側	国名	拠点機関名	研究代表者 所属 職 氏名
	ドイツ	ユーリッヒ研究所	Peter Gruenberg Institute, Director, Stefan BLUEGEL
	スウェーデン	ウプサラ大学	Department of Physics and Astronomy, Professor, Olle ERIKSSON
	フィンランド	アールト大学	Faculty of Information and Natural Sciences, Professor, Risto NIEMINEN
	米国	エネルギー省再生可能エネルギー研究所（NREL）	Center for Basic Sciences, Team Leader, Su-Huai WEI

総合的評価（書面評価）

評 価

- A 想定以上の成果をあげつつあり、当初の目標の達成が大いに期待できる。
- B 想定どおりの成果をあげつつあり、現行の努力を継続することによって目標の達成が概ね期待できる。
- C** ある程度の成果をあげつつあるが、目標達成のためには一層の努力が必要である。
- D 成果が十分にあるとは言えず、目標の達成が期待できないため、経費の減額または中止が適当であると判断される。

コメント

このプロジェクトの現在までの最も大きな成果は、若手人材の育成である。すなわち、若手研究者を共同研究やセミナーに積極的に参加させて各個人のレベルアップが図られている点、若手研究者が主体となったスクールを企画・運営させた点、などはある程度評価できる。このプロジェクトを推進している中心的な研究者グループは、10年以上前から、学部4年生、大学院生、企業研究者を対象としたCMDワークショップを開催してきていて、その受講生は1000名を超えており、それらの努力の結果が国際的ネットワークを通じて、さらに発展していると見受けられる。

ただ、「若手研究者が長期間にわたり、新規計算手法の開発に専念できるシステムの構築を行い」とあるが、具体的にどのようなシステムが構築されたのかは評価資料からは不明である等、どこからどこまでが本事業として行われ、本事業の成果であるか不透明である。また、人材育成という観点からも、本事業による派遣と科研費などの個人研究資金による派遣との違いが明確ではない。海外セミナーや研究室派遣の実績は評価できるものの、単なる研究者派遣にとどまらず、人的ネットワークの構築に向けた系統的な仕組みや工夫が必要である。

研究面では、KKR手法を用いた新しい量子シミュレーション手法の開発で成果をあげており、ある程度評価できる。世界的にもっともよく用いられている第一原理計算シミュレーションのパッケージはほとんどが外国製であり、そのなかで、KKR手法については日本が高いオリジナリティをもっており、世界に通用する手法が開発されていくことを期待するものである。また、グリーンエネルギーに関連した材料に関する様々なデザインが提案されていて、それはそれで評価できるが、最終的にはそれが実証されて初めて本当の成果が得られたということになる。今後の計画では、各国の実証実験グループとも連携を図って実証に力を入れていくということなので、デザイン→実証実験→デザインのサイクルが機能して、本当の果実が得られることを期待するものである。

課題としては、参加研究者の専門分野は物性理論が中心で偏りが大きく、グリーンエネルギー応用に向けた理論（モデリング）研究で求められる様々な研究者や世界的拠点が適切に組織されているとは言い難い点がある。加えて、「燃料電池、太陽電池、新機能デバイスなどへの応用」を視野に入れるのであれば、これらの応用分野の専門家の参加も不可欠である。

物性物理および物性理論の研究者が中心の現メンバーでは、研究が内向き志向になりがちでデバイス応用に寄与する研究は期待できない可能性も考えられ、「グリーンエネルギー計算機ナノマテリアルデザイン」という申請課題テーマを真に遂行するためには、構成メンバーの見直しも必要なのではないか。

さらに、日本側の参加者数と比較して、相手国側の参加者が極端に少なく、互いに対等な事業として意志形成ができていないのか懸念される。国外への派遣は活発であるが、日本への国外研究者の受け入れについては、人数、日数ともに少ないという印象を受ける。事業終了後も大阪大学が国際拠点としてより継続的に活動を持続するためには、派遣以上に、国外からの受け入れに力を入れる必要もあると考えられる。

経費支給期間終了後の継続性については、プロジェクトを推進するコアとなる大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センターが、文部科学省の特別運営費交付金事業（平成26年～平成30年）に採択されたこと、外部資金獲得や自立的運営に積極的に取り組む姿勢がみられること、また、海外拠点との連携をさらに発展させることが期待されることなどから、経費支給期間終了後も、継続的な活動を行うネットワーク構築が期待できる。

以上、総合的な判断から、C評価と判定する。

1. これまでの交流を通じて得られた成果

観 点	<ul style="list-style-type: none"> ・ 研究交流活動を通じて「学術的側面」「若手研究者の養成」「研究教育拠点の構築」の観点から成果があがっているか。 ・ 研究交流活動の成果として優れた研究業績が発表されているか。 ・ 研究交流活動の成果から発生した波及効果はあるか。
--------	---

評 価
<input type="checkbox"/> 想定以上の成果があがっている。 <input type="checkbox"/> 概ね成果があがっている。 <input checked="" type="checkbox"/> ある程度成果があがっている。 <input type="checkbox"/> 成果があがっているとは言えない。
コ メ ン ト
<p>・ 研究交流活動を通じて「学術的側面」「若手研究者の養成」「研究教育拠点の構築」の観点から成果があがっているか。</p> <p>論文としての成果は乏しいが、国際ワークショップや共同研究を通して、新しい量子シミュレーション手法の開発が進展するとともに、高効率太陽電池材料、高効率熱電材料などに対するデザインが提案されるなど学術的な成果は徐々に上がりつつあるといえる(ただし、実証実験による確認はまだである)。</p> <p>大学院生まで含めた若手研究者を共同研究やセミナーに積極的に参加させるとともに、若手研究者が主体となったスクールを企画・運営させるなど、若手人材育成には積極的に取り組んでいると判断される。また、若手研究者が長期間にわたり、新規計算手法開発に専念できるシステムの構築を行い、二人の若手研究者がフンボルト財団とユーリッヒ研究所経費により長期にわたる共同研究に従事することになったのは評価できる。さらに、本プログラムに参加する若手研究者がさきがけ21のプロジェクトに採択されるとともに、新しい研究拠点形成を将来可能にするポジションに採用されたことも評価される。</p> <p>しかし、海外拠点への若手研究者の1か月程度の派遣では人材育成としての効果が見えにくい。単なる海外派遣にとどまらず、人的ネットワークを構築するための工夫が必要と思う。</p> <p>日本側コーディネーターは、欧州および米国との研究協力体制構築に積極的に取り組んでおり、欧州のPsi-kネットワークや米国のEFRCネットワークも活用した研究教育拠点の形成が進展していると判断される。ただし、日本からの派遣が主体となっており、海外拠点との交流が一時的な側面も否定できず、対等で持続的な協力関係の構築が課題であろう。</p> <p>なお、セミナー等は国内外で活発に開催されているが、成果があがっているかについては、現時点では判断が難しい。また、進捗状況報告書、2. 研究交流目標に記されている「目標に対する達成度とその理由」で理由として挙げられているうち、(1), (2), (3),</p>

(4) については、本事業の直接の成果とは言いがたいのではないかと感じられる。

・ 研究交流活動の成果として優れた研究業績が発表されているか。

共同研究まで含めた研究交流は非常に活発になされ、それに伴って重要な研究成果も数多く生み出されているが、残念ながら、このプロジェクトに対する謝辞を記載した原著論文として発表された業績はわずかに3件である。参加研究者に本事業の主旨が徹底されておらず、また本事業からサポートされているという意識が希薄なのではないかと懸念される。中間報告書全体に通じて言えることだが、どこからどこまでが本事業として行われ、本事業の成果であるかが不透明である。参加研究者だけでなく、コーディネーターを含む運営側の意識の問題と思われる。また、当該3件についても掲載雑誌は一流とは言い難く、さらに、海外との交流の指標となる共著論文が極めて少ないことも残念である。今後研究成果の発表は増えていくものと思われるが、現段階では不十分と言わざるを得ない。

・ 研究交流活動の成果から発生した波及効果はあるか。

若手研究者の単なる海外派遣では現地の若手研究者あるいは大学院生と親しくなることはできても、世界的な研究リーダーとの直接的な人的つながりが生まれるとは限らない。交流も、日本側からの派遣が主体となっていては、波及効果はあまり期待できないため、海外研究リーダーとの継続的交流が可能となるための工夫が必要である。

一方で、興味ある国際ワークショップやセミナーの開催を通して、計画書に記載された海外拠点以外に、オランダのグローニンゲン大学や米国のスタンフォード大学などにもネットワークが広がっていることは評価される。

2. 研究交流活動の実施状況

観点	<ul style="list-style-type: none">・ 研究交流目標達成に向けて、「共同研究」「セミナー」「研究者交流」を適切に計画し、実施しているか。・ 国内外の拠点機関及び協力機関間の実施体制・協力体制等は適切であるか。・ 研究交流活動の実施にあたり、適切に経費が執行されているか。・ 相手国において交流を行うに十分なマッチングファンドが確保されているか。
----	---

評 価
<ul style="list-style-type: none"><input type="checkbox"/> 想定以上に効果的に実施されている。<input checked="" type="checkbox"/> 概ね効果的に実施されている。<input type="checkbox"/> ある程度効果的に実施されている。<input type="checkbox"/> 効果的に実施されているとは言えない。
コメント
<p>・ 研究交流目標達成に向けて、「共同研究」「セミナー」「研究者交流」を適切に計画し、実施しているか。</p> <p>共同研究、セミナー、研究者交流は計画にそって活発に行われている。特に、セミナーや若手研究者派遣が多数回にわたって実施されていることは高く評価できる。具体的には、セミナーに関しては、キックオフミーティングを兼ねた国際ワークショップを皮切りに、ここ2年間に国内で2回、海外で5回開催され、グリーンエネルギー計算機ナノマテリアルデザインにかかわる様々な分野—スピントロニクス、モロトロニクス、エネルギー変換材料デザイン、新規量子シミュレーション手法開発、などなど—において深化した議論がなされている。</p> <p>共同研究では、若手研究者を積極的に海外に派遣して共同研究に従事させ、特に KKR 手法を用いた新しい量子シミュレーション手法の開発で成果をあげつつある。</p> <p>研究者交流では、有益な討議、情報収集が行われていると同時に、拠点整備の調整や共同研究・交流計画の策定がなされている。</p> <p>しかし一方、これらの交流が日本からの派遣が主体となっており、しかも共同研究としての実績も乏しいことから、対等な研究交流という観点ではさらに努力が必要である。</p> <p>・ 国内外の拠点機関及び協力機関間の実施体制・協力体制等は適切であるか。</p> <p>基本的には、コーディネーターが中心となって、国内協力機関と適切な連携が取られており、また、海外各拠点のコーディネーターとも密な連携が取られていると判断される。特に、Psi-k などの欧米の共同研究体との連携は野心的な試みといえる。</p> <p>しかし、日本側の参加者数と比較して、相手国側の参加者が極端に少ないため、互いに対等な事業として意志形成ができていないのか懸念される。また、若手研究者の武者修行的な派遣が主体となっていると見受けられるこの2年間の交流実績からすると、欧米</p>

の各組織の真のリーダーと組織間の協力体制が十分に詰められているかは疑問もある。例えば、モデリング分野の COE が存在するイタリアの研究機関やデンマーク工科大学、ETH 等の研究グループが含まれていないのは疑問である。

- ・ 研究交流活動の実施にあたり、適切に経費が執行されているか。

経費は共同研究、セミナー、研究者交流などに、本事業の目的に即して適切に執行されている。

- ・ 相手国において交流を行うに十分なマッチングファンドが確保されているか。

相手国拠点における大学（スウェーデンのウプサラ大学、フィンランドのアールト大学）や研究所（ドイツのユーリッヒ研究所、米国のエネルギー省再生可能エネルギー研究所）の通常経費としてマッチングファンドが確保されていると判断される。

ただ、額としては確保されているが、互いに対等な事業として認識され、実行されているかどうかは不明である。

3. 今後の展望

観 点	<ul style="list-style-type: none">・ 目標達成に向けた計画が具体的であり、かつ実現性の高い内容となっているか。・ 今後の課題がある場合には、それを検討し、適切に対応しているか。・ 経費支給期間終了後も、当該分野における国際研究教育拠点として継続的な活動を行うネットワーク構築が期待できるか。
-----	--

評 価
<input type="checkbox"/> 想定以上の成果が期待できる。 <input type="checkbox"/> 概ね成果が期待できる。 <input checked="" type="checkbox"/> ある程度成果が期待できる。 <input type="checkbox"/> 成果が期待できない。
コメント
<p>・ 目標達成に向けた計画が具体的であり、かつ実現性の高い内容となっているか。</p> <p>基本的には、研究は具体的であり、実現性は高い。今までの研究実績に基づいた研究推進計画となっており、また、英国、韓国、スペインへとネットワークを拡げた計画になっている点はある程度評価できる。</p> <p>しかし、主たる構成メンバーが物性物理研究者のみで、グリーンエネルギーにおけるマテリアルデザインに真に寄与できる体制になっていないのではないかと懸念される。報告資料にあるように、燃料電池、太陽電池、新機能デバイスなどへの応用を視野に入れるためには、これらの分野（プロセスおよびデバイスの両分野）の専門家の参加が不可欠である。物性理論関連のプロセス材料研究者も含まれているようであるが、デバイス応用への寄与には不安がある。</p> <p>また、若手研究者の単なる派遣と一方通行的なセミナーでは、当該事業の目指す対等なネットワーク構築にはなかなか結びつかないと考えられるため、特に、若手研究者の育成については、単なるセミナーでの研究発表や研究室派遣ではなく、人材育成に向けた系統的な方策を構築する必要がある。</p> <p>・ 今後の課題がある場合には、それを検討し、適切に対応しているか。</p> <p>このプロジェクトの最も大きな課題は、計算機でデザインされたものを如何にして実証するかという点であるが、この点については、各国の実証実験グループとも連携を図る計画になっている。</p> <p>また、このプロジェクトを長期に継続するために、新たな予算獲得に積極的である点やファウンダリーによる事業化も視野に入れている点もある程度評価できる。</p> <p>しかしながら、本事業では、国外への派遣は活発であるが、日本への国外研究者の受け入れについては、人数、日数ともに少ないという印象を受ける。事業終了後も大阪大学が</p>

国際拠点として継続的に活動をするためには、派遣以上に、国外からの受け入れに力を入れる必要があると考えられる。

・経費支給期間終了後も、当該分野における国際研究教育拠点として継続的な活動を行うネットワーク構築が期待できるか。

このプロジェクトを推進するコアとなる大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センターが、文部科学省の特別運営費交付金事業（平成26年～平成30年）に採択されたことは、長期的な継続的活動を行うための第1歩として高く評価される。さらに、ネットワーク維持のための外部資金獲得や自立的運営に概ね活発に取り組む姿勢がみられ、また、これまでの交流実績から考えて、ドイツ、スウェーデン、フィンランド、米国の拠点とも密な連携を継続することが可能であると判断される。従って、経費支給期間終了後も、国際研究教育拠点として継続的な活動を行うネットワーク構築は期待できる。

しかしながら、交流は日本側からの派遣が主体となっており、対等な国際拠点間ネットワークにつなげるには一層の努力が必要である。構成員の専門分野や海外協力機関の拡張も含めて、拠点間の人的交流を真に可能にする体制について、再考が必要なのではないか。