

**日本学術振興会研究拠点形成事業（A. 先端拠点形成型）
事後評価（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	国立大学法人大阪大学		
研究代表者 （職・氏名）	教授・吉田 博		
相手国側	国名	拠点機関名	研究代表者所属・職名・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	National Center for Photovoltaics ・ Group Manager ・ Mowafak AL-JASSIM

総合的評価（書面評価）

評 価

- A 想定以上の成果をあげており、当初の目標は達成された。
- B 想定どおりの成果をあげており、当初の目標は達成された。
- C** ある程度成果があがり、当初の目標もある程度達成された。
- D 成果が十分にあるとは言えず、当初の目標はほとんど達成されなかった。

コメント

ユーリッヒ研究所をはじめとした研究機関と共同研究が進んでおり、学術的な成果があがっていることは評価できる。また、若手研究者の派遣を積極的に実施した。さらに、研究成果の産業界への普及に関する展開は今後の発展が注目される。一方、5年間の論文数が少ない等、研究成果としては十分とは言い切れないこともあった。また、中間評価で指摘された日本側に比べ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できているかの懸念については解消されていないのが残念である。

研究面では、ドイツでKKR法を開発しているBluegelグループと日本でKKR法を開発している拠点メンバーとの間で共同研究を進めることにより、手法の発展、および相転移メモリ、スピントロニクス材料などへの応用研究で成果をあげたことが高く評価できる。また、数値計算によるマテリアルデザイン研究の研究成果の産業界への普及に関する展開は、本課題の成果の1つであるが、企業と大学の共同研究開発のモデルとして興味深く、今後どのような発展が見られるのか注目される。一方、最終年度報告書において、「グリーンエネルギー」の具体的なデバイス開発や物質開発につながる成果についての記述が乏しいため、「グリーンエネルギー」に対する貢献はこれからの課題という印象を受ける。

相手国側拠点機関との交流として、ユーリッヒ研究所とは盛んに派遣および共同研究が行われており、拠点機関以外にも、スタンフォード大学、ヨハネスケプラー大学と共同研究が進んでいるのは評価できる。また、本事業での交流をもとに、ウプサラ大学とヨハネスケプラー大学との国際共同プロジェクトが新たにスタートしており、今後の資金的サポートがなされている。一方、中間評価で指摘された日本側に比べ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できているかの懸念については解消されていないのが残念である。また、フィンランド、スウェーデンの拠点機関とは派遣、受け入れともに少なく、共同研究の成果も上がっていない。今後、同様の国際共同研究事業を行うには海外からの研究者の受け入れを積極的に行ってもらいたい。

以上のことから、総合的に判断し、C評価とする。

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」「若手研究者の育成」「国際研究交流拠点の構築」の観点から成果があったか。 ・ 研究交流活動の成果として優れた研究業績が発表されたか。 ・ 本事業により得られた成果の社会への還元があったか。 ・ 当初予期していなかった活動成果があったか。
-----	------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

評 価	
<input type="checkbox"/> 想定以上の成果があった。 <input type="checkbox"/> 概ね成果があった。 <input checked="" type="checkbox"/> ある程度成果があった。 <input type="checkbox"/> 成果があったとは言えない。	
コ メ ン ト	
<p>・ 研究交流活動を通じて「学術的側面」「若手研究者の育成」「国際研究交流拠点の構築」の観点から成果があったか。</p> <p>学術的側面について、第一原理ソフトウェアの開発とそれらを用いた物性研究が多く遂行されており、論文も順調に出ていることから、全体としては評価できる。特にKKR-nanoを用いた相転移メモリなどの計算や、RSPACEにスピン軌道相互作用を組み込むことによる改良はユーリッヒ研究所との共同研究による成果として挙げられる。しかしながら、理論系の論文が中心であり、拠点の課題として掲げられている「グリーンエネルギー」との関連がよくわからない。最終年度報告書においても、「グリーンエネルギー」、特に具体的なデバイス開発、物質開発につながる成果についての具体的な記述に乏しい。</p> <p>若手研究者の育成については、若手研究者を多数海外へ派遣しており、またCMD (Computational Materials Design) ワークショップを年2回行うとともに多くのセミナーを企画実行し国内での教育活動も積極的に行っているため、高く評価できる。しかしながら、日本から海外への若手派遣が大阪大学の院生に偏っていることが気にかかる。</p> <p>国際研究交流拠点の構築については、ユーリッヒ研究所とは活発に共同研究が行われているので、今後も継続的な交流が期待できる。一方で、海外の参加研究者の割合が少ないことから、国際交流がやや一方的である印象を受ける。</p> <p>・ 研究交流活動の成果として優れた研究業績が発表されたか。</p> <p>論文数が5年で56報であることについては、50人以上の参加者がいたことを考えると、若手育成という側面があるとしても、論文数が少ない印象が拭えない。全体としては、様々なソフト開発が研究成果であると思われ、その有効性、特に、「グリーンエネルギー」に対する貢献はこれからの課題という印象を受ける。</p> <p>また、研究発表については、ユーリッヒ研究所以外の拠点は来日時もしくは本課題主催の研究会における発表であり、共同研究に関するものが見受けられない。</p> <p>・ 本事業により得られた成果の社会への還元があったか。</p>	

本事業に関連して多数のソフトウェアの整備、発展が行われており、大阪大学で年2回開催している CMD ワークショップなどを通して、普及活動が行われている。今後も持続的に普及活動が行われることが期待できる。また、企業との共同研究講座の開設に至ったことは社会への基礎科学の還元という観点から高く評価できる。ナノマテリアルデバイスデザイン学の講義発信についてもすばらしいことだと思うが、実際に視聴者がどのくらいいたのかデータを掲載してほしかった。

・当初予期していなかった活動成果があったか。

若手人材育成のための計算物質科学人材育成コンソーシアムの立ち上げや大阪大学基礎工学研究科でのスピントロニクス学術連携研究教育センターの設置は、本事業終了後の国際共同研究の発展のための研究活動の拠点となりえ、評価できる。

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、実施したか。 ・ 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ったか。 ・ 研究交流活動の実施にあたり、適切に経費が執行されたか。 ・ 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たか。 ・ 中間評価における指摘事項等について適切に対応されたか。
----	--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

評価
<input type="checkbox"/> 想定以上に効果的に実施された。 <input type="checkbox"/> 概ね効果的に実施された。 <input checked="" type="checkbox"/> ある程度効果的に実施された。 <input type="checkbox"/> 効果的に実施されたとは言えない。
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、実施したか。</p> <p>共同研究については、論文数として現れている数字が物足りないなど、現時点における研究成果の評価としては難しい点があるものの、今後の協力関係の構築がなされていることから、概ね適切に行われていたと考えられる。特に、ドイツのユーリッヒ研究所とは若手の派遣も行われ、活発な共同研究が行われているので高く評価できる。また、アメリカの協力機関であるスタンフォード大学と共同研究に発展しており、第三国であるオーストリアのヨハネスケプラー大学との共同研究もスタートしていることから、この事業が拠点以外の共同研究に寄与していることは評価できる。</p> <p>セミナーについては、平成26年度は1回のみであるが、他の年度は毎年3～4回のセミナーが国内外で行われており、概ね適切に実施されていると思われるものの、最終年度のセミナー（S-3、S-4）は参加人数がそれぞれ13人、14人と人数が少なく、研究打ち合わせのような印象を受ける。</p> <p>研究者交流については、セミナー等を通じて、着実に行われていたと考えられるものの、全体として、相手先がドイツ、アメリカに偏っており、フィンランド、スウェーデンとは交流も少ない。</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ったか。</p> <p>ヨーロッパの3拠点間は Psi-k ネットワークを通じて報告書に記述されていない交流があったのかもしれないが、フィンランド、スウェーデンから日本も含めた他の国への派遣、受け入れともに全期間を通じて少ない。特にフィンランドとの交流については、初年度の平成24年度以降は日本および他国との交流が極端に少ない。</p> <p>・ 研究交流活動の実施にあたり、適切に経費が執行されたか。</p>

多数のセミナー、研究会の開催、また、研究者の海外派遣に使用されており、おおむね適切に執行されているといえる。しかしながら、日本から相手国への派遣が22人であるのに対し、相手国からの受入が9名である平成28年度交流実績等を見ると、もう少し海外からの受入を増やした方が良かっただろう。

- ・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たか。

セミナーにかかる相手方の費用は、マッチングファンドでまかなわれており、共同研究が円滑に行われるのに必要なファンドが確保されていたと判断できる。

- ・中間評価における指摘事項等について適切に対応されたか。

中間評価において、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は少なく、国外からの受け入れに力をいれる必要があるとコメントがあった。この点については、あまり改善されていないようである。資金の性質上仕方がないのかもしれないが、もう少し、海外からの受入が多くてもよかっただろう。また、「若手育成のための継続的なシステムの構築」という指摘事項に関しては、成果の中に強調されているような様々なセンターの構築という形で対応がなされていると評価できる。

3. 今後の研究交流活動計画

観 点	・事業終了後も世界的水準の国際研究交流拠点として、継続的な研究交流活動の実施が期待できるか。
-----	------------------------------------------------

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>・事業終了後も世界的水準の国際研究交流拠点として、継続的な研究交流活動の実施が期待できるか。</p> <p>相手国との交流については、ユーリッヒ研究所とは活発な人材交流が行われ、共同研究の成果も上がっているため、今後の継続的な研究交流が期待できる。スタンフォード大学およびヨハネスケプラー大学との関係においては、共同研究や国際プロジェクトとして発展しているため、今後の発展に期待したい。フィンランド、スウェーデンとは交流も少なく、共同研究も十分に行われたとは言えないものの、スウェーデンの拠点であるウプサラ大学とは10年間の国際共同プロジェクトを新しく開始しているため、今後論文など目に見える成果が上がることを期待したい。一方、本課題においては日本人が海外に行くケースが多く、海外からの受入が少ないことを考えると、国際研究交流拠点として発展していくかは、未知数である部分もある。中間評価で指摘があったように、本格的に人的交流を行い、共同研究の幅を広げていく必要があると考えられるため、もう少し博士研究員の年単位の交流などを増やし、ソフトウェアの統合や共同研究への発展に向けて、国際的な研究拠点としての存在感を発揮することが期待される。</p> <p>人材育成については、本事業は大きな意義があったと思われる。計算手法の開発においては、既存の手法や技術の共有とともに、人材育成も重要である。本課題の参加者は日本の第一原理計算に関わる第一線の研究者、特に、物性物理学分野の理論物理学者であり、今後も、こうした数値計算手法の開発や普及において、中心的な役割を果たすことは間違いないと思われる。今後、国際的な拠点として成長するためには、大阪大学だけでなく、国内における多くの人材を育てていく役割を果たす必要があるだろう。</p> <p>大阪大学では、スピントロニクス学術連携研究教育センターとナノサイエンスデザイン教育研究センターの2つのセンターが設立されるとともに、住友電工との共同研究講座の新規開設など、計算物質科学の関係する組織や講座の改変、開設が積極的に行われている。また、計算手法のコードを公開し、講習会などを開いて学術的な研究者のみならず、産業界への普及に努め、成果を得ていることは、高く評価できる。物理学分野の中でも、この分野はプログラムの公開や普及の進んだ分野であり、今後もますます、社会への還元が期待されている。</p> <p>一方で、課題名の「グリーンエネルギー計算機ナノマテリアルデザイン」については、</p>

どのような進展が期待できるかは不透明であったといえる。最終年度報告書では、スピントロニクスに1つの活路を見出しているようであるが、そのキーとなるような成果や論文が具体的に書かれていないために、どの程度の具体的な目標設定を考えているのか不明確である。