

ナノテクノロジー・材料分野の重点課題等の評価結果

平成 21 年 1 月

ナノテクノロジー・材料委員会

ナノテクノロジー・材料委員会 構成員一覧

	井上 明久	東北大学総長
	魚崎 浩平	北海道大学大学院理学研究院教授
	潮田 浩作	新日本製鐵株式会社技術開発本部フェロー
	遠藤 守信	信州大学工学部教授
	大泊 巖	早稲田大学理工学部教授
	岡野 光夫	東京女子医科大学先端生命医科学研究所長・教授
	長我部信行	株式会社日立製作所基礎研究所長
	片岡 一則	東京大学大学院工学系研究科教授
	川合 知二	大阪大学産業科学研究所長
	岸 輝雄	独立行政法人物質・材料研究機構理事長
	北澤 宏一	独立行政法人科学技術振興機構理事長
	栗原 和枝	東北大学多元物質科学研究所教授
	小長井 誠	東京工業大学大学院理工学研究科教授
主査	榊 裕之	豊田工業大学副学長
	竹山 春子	早稲田大学先進理工学部生命医科学科教授
	田島 節子	大阪大学大学院理学研究科教授
	田中 一宜	独立行政法人科学技術振興機構研究開発戦略センター 上席フェロー／独立行政法人産業技術総合研究所フェロー
	玉尾 皓平	独立行政法人理化学研究所フロンティア研究システム長
	樽茶 清悟	東京大学大学院工学系研究科教授
	横山 直樹	株式会社富士通研究所ナノテクノロジー研究センター長

(五十音順)

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発 — 豊かな未来社会に貢献するナノ分野グランドチャレンジ —

目的

ペタスケールのシミュレーション技術により、ナノスケールの領域で初めて発現する 特有の現象・特性を解明し、予測することのできる計算科学理論・方法論を確立し、ソフトウェアの開発を行う。これにより、ナノテクノロジー・材料分野はもとより、ライフサイエンス分野やエネルギー分野等との融合領域において、飛躍知の発見・発明にとどまらず、産業力の強化につなげることを目的とする。

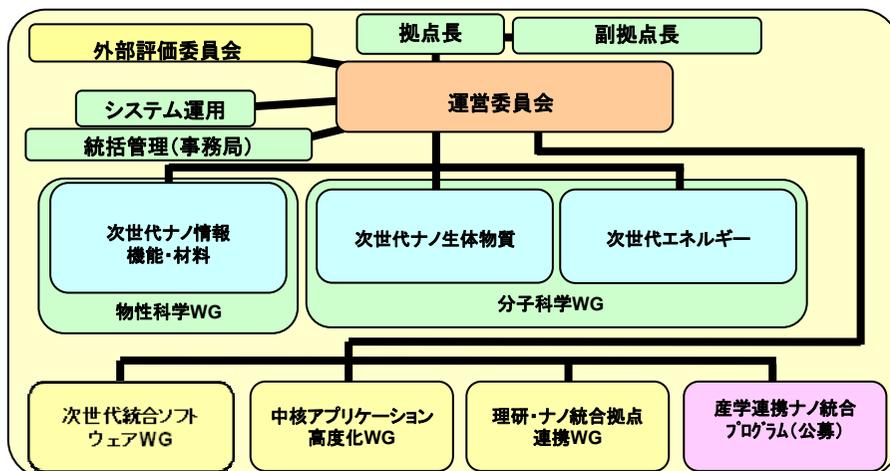
- ☆次世代ナノ情報機能・材料 ⇒ ナノ物質内の電子制御
- ☆次世代ナノ生体物質 ⇒ ナノスケールの生体物質
- ☆次世代エネルギー ⇒ 高効率の触媒・酵素の設計

産業への貢献、豊かな未来社会へ

以下の実現に役立つ計算の実現:

- ☆超高密実装を実現するナノ電子デバイス、光スイッチ、磁気記憶
- ☆ウィルスの克服、ドラッグデリバリーシステム(DDS)、たんぱく質制御へ
- ☆バイオマスからエタノールを生成へ (クリーンエネルギー)

オールジャパンによる推進体制



研究スケジュール(年次計画)

平成18年度 (2006)	平成19年度 (2007)	平成20年度 (2008)	平成21年度 (2009)	平成22年度 (2010)	平成23年度 (2011)	平成24年度 (2012)
		次世代スパコン		稼働▲	完成▲	
				評価・実証		
				高度化		
ソフト開発、基盤						

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発

ナノサイエンス
グランドチャレンジ研究

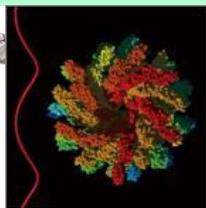
次世代ナノ統合シミュレーションソフトの開発

実験、産業との連携
人材育成

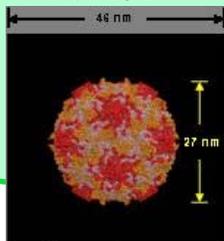
次世代ナノ生体物質

医療・創薬・DDSナノ基盤

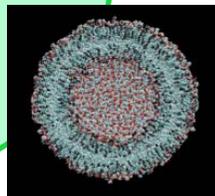
- ・ウイルス
- ・細胞膜
- ・DDSナノキャリアー
- ・タンパク質制御



べん毛繊維



ポリオウイルス



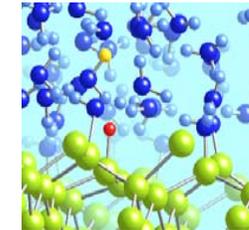
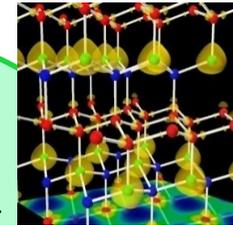
リボソーム



- ・非線形光学素子
- ・ナノ量子デバイス
- ・スピントロニクス
- ・超高密度記録デバイス
- ・複合電子デバイス

高速、高性能、省エネルギー電子デバイス

次世代情報機能・材料



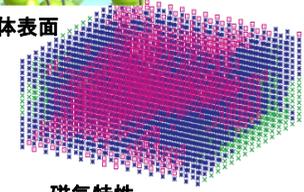
$h\nu$

新材料

固体表面



光誘起相転移



磁気特性

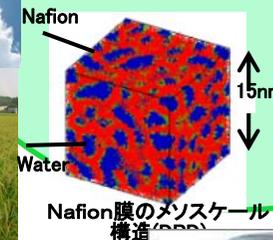


次世代スーパーコンピュータ
建屋イメージ図
(提供: 理化学研究所)

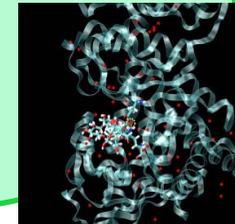
次世代エネルギー

クリーンエネルギー

- ・太陽エネルギー固定
- ・アルコール燃料
- ・燃料電池
- ・電気エネルギー保存



Nafion膜のメソスケール構造



セルロース分解酵素



「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」

中間評価 総合所見

項 目	要 約
1. 全体評価	<ul style="list-style-type: none"> 研究開発計画は概ね適切であり、順調に進捗している。ただし、いくつかの課題については改善が必要であり、適切な方策を効率的に推進すべきである。
2. 課題	<p>1. 開発された統合ソフトで可能になるグランドチャレンジ課題の明確化</p> <ul style="list-style-type: none"> 一般の研究者および国民にも分かる挑戦的・象徴的課題の具体例を提示すべき。 早期に社会的な活用が期待できる今日的課題にも配慮しながら進めるべき。 <p>2. 統合ソフト開発の一層の推進</p> <ul style="list-style-type: none"> 3年後の統合ソフトの完成への道筋を明示しつつ、計画的に強力に推進すべき。 <p>3. 統合ソフトの将来的な運用体制の整備</p> <ul style="list-style-type: none"> プロジェクト終了後に成果をパッケージ化して維持、管理、改訂、公開していく仕組みの整備が必要。 <p>4. 実験研究者、企業研究者との連携</p> <ul style="list-style-type: none"> プロジェクトの実験研究者への周知、実験家のデータの利用等、実験研究者との連携の仕組みの強化が必要。 成果の将来の企業研究への展開を視野に、産業とのより一層の連携、協力体制の強化が必要。 <p>5. 人材育成の推進</p> <ul style="list-style-type: none"> 特に重要な若手の育成を大学と協力しつつより一層推進していくべき。 計算科学研究者・実験研究者等をも含めたナノサイエンス分野全体の研究者のレベルアップに貢献すべき。 ポスドクのキャリアパス確立に対する取組みをさらに強化すべき。 <p>6. 広報活動の強化</p> <ul style="list-style-type: none"> 拠点に広報組織を確立し、人材育成や成果の普及と周知に重点的に進めるべき。 <p>7. 開かれた視点に立った取組み</p> <ul style="list-style-type: none"> 国内外他機関との連携や海外人材招聘等により世界をリードする成果を目指すべき。
3. 具体的な対応方策	<p>上記指摘事項に対し、拠点として以下の取組みを中心に推進中。</p> <p>1. 今日的な課題への対応</p> <ul style="list-style-type: none"> 分子素子、燃料電池、元素戦略など具体的な課題設定を開始。 <p>2. 統合ソフトの高度化</p> <ul style="list-style-type: none"> 特にライブラリの充実を中心に推進。 <p>3. 実験研究者、企業研究者との連携</p> <ul style="list-style-type: none"> 統合ソフト講習会・連続研究会を今年度後半より順次開催。 平成21年度からの統合ソフトの実証研究に向けた先行研究を開始。 企業での普及・利用を図るためナノ統合産学連携プログラムを推進。 <p>4. 人材育成について</p> <ul style="list-style-type: none"> 計算科学と 計算機科学(計算機活用の基礎理論)の学際連携と人材育成を中核アプリ高度化を通じて推進。 計算科学を自身の研究に活用できる実験研究者の育成を研究会、講習会、統合ソフトの実証を通じて推進。 <p>5. 総合的推進</p> <ul style="list-style-type: none"> 運営委員会・外部評価委員会を通じてこの取組みの実効的推進を図る。
<p>評価責任者氏名： 榊 裕之</p>	

「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」
中間評価の実施方法について

平成20年12月25日
科学技術・学術審議会
研究計画・評価分科会
ナノテクノロジー・材料委員会

1. 評価の基本的考え方

中間評価においては、実施プロジェクトに関し、計画の進捗度、中間的な成果の価値等についての検討を行うとともに、これらを踏まえ、次年度以降の継続の可否、研究内容の見直しの要否等についての検討を行うものとする。

2. 評価項目

評価項目は「中間評価項目及び評価シート」の通りとする。

3. 評価の実施方法

- (1) 研究実施者は、外部委員からなる外部評価委員会を組織する。
- (2) 研究代表者は、平成19年度までの目標、成果等、および残期間の研究開発推進方針等をまとめた外部評価報告書を、外部評価委員会に対して作成する。
- (3) 外部評価委員会は、外部評価報告書の提出と研究実施者のヒアリング評価を実施し、評価結果報告書を取りまとめ、委員長よりナノテクノロジー・材料委員会に報告する。
- (4) 研究実施者は、評価結果報告書に対し、対応方針および該対応の進捗状況をナノテクノロジー・材料委員会に報告する。
- (5) ナノテクノロジー・材料委員会は、評価結果報告書、対応方針と対応の進捗状況の提出を受け、研究実施者より該対応にかかるヒアリング評価を実施し、評価結果所見を取りまとめ、主査が研究計画・評価分科会に報告する。
- (6) 研究計画・評価分科会は、ナノテクノロジー・材料委員会からの報告を受け、評価結果を決定する。

4. 評価結果の取扱い

評価結果は、研究代表者に通知するとともに、個人情報や知的財産の保護に配慮して公表する。また、中間評価の結果は、実施プロジェクトの改廃、予算配分方針等に反映させる。

5. 利害関係者の範囲

評価対象プロジェクトの利害関係者の範囲は、以下のとおりとする。

- (1) ナノテクノロジー・材料委員会委員が以下のいずれかに該当する場合は、評価対象プロジェクトの評価に加わることができないものとする。
 - ① 評価対象プロジェクトの参画者である場合
 - ② 評価対象プロジェクトの関係者と親族関係にある場合
 - ③ 評価対象プロジェクトの研究運営委員会、評価委員会等の委員である場合
- (2) この他、利害関係者に相当するかが明らかでない場合は、ナノテクノロジー・材料委員会において協議し、判断することとする。

「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」外部評価報告書（概要）

2008年7月23日

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発
外部評価委員会

1. 総論

本プロジェクトは、次世代スパコンにおける計算機能力の飛躍的向上を最大限活用し、計算科学を質的に発展させ、ナノサイエンスのルネッサンスを先導する意義深いプロジェクトである。ナノサイエンスのブレークスルーを通して我が国の国際競争力を強化する正しく時代に適切なものであり、オールジャパン体制で取り組むべき重要な課題である。

このプロジェクトを契機として、実験と理論に次ぐ第三の研究の方法論としてのシミュレーションをはじめとする計算科学をしっかりと確立して行くことが強く期待される。

研究開発計画は概ね適切なものであり、また順調に進捗している。今後とも、分子科学研究所を拠点とした推進体制の下、実験研究者や産業との連携を強化するという観点から委員会体制等の一部改善を図りつつ、また若手育成に注力しながらより一層強力で推進していくことが妥当である。

2. 改善すべき点

(1) 開発された統合ソフトを用いて可能になるグランドチャレンジ課題の明確化について

分野外、専門家以外の人々、つまり一般の研究者ひいては一般の国民にもわかるようにチャレンジングなテーマ、シンボリックなテーマの具体例を提示していくことが必要である。今日的な課題にもある程度目配りしながら進めていく必要がある。

(2) 統合ソフトの開発について

3年後の統合ソフトの完成へと至るマイルストーンを明示しつつ、より計画的に、またより一層強力で開発を推進していく必要がある。特に中核アプリについては、高並列、高性能ライブラリの充実が不可欠である。各中核アプリの高度化においては、計算機科学研究者の協力が必須であり、今後の開発において協力体制の整備が不可欠である。

(3) 統合ソフトの将来的な運用について

プロジェクト終了後には、この議論に基づいて、これらの成果をパッケージ化して維持、管理、改訂、公開していく仕組みを整備していくことが望ましい。

(4) 実験研究者、企業研究者との連携について

このプロジェクトを広く実験研究者に知ってもらうこと、また逆に、実験研究者が持っているデータの利用等、プロジェクトとしての実験研究者との連携の仕組みを強化する必要がある。また、産業との連携も不可欠であり、将来のプロジェクト成果の企業研究への展開も視野に入れつつ、より一層の連携、協力体制の強化が必要である。

(5) 人材育成について

若手の育成は特に重要であり、大学と協力しながらより一層推進していく必要がある。

一方で、計算科学研究者に限らず、実験研究者等の周辺も含めたナノサイエンス分野全体の研究者のレベルアップに貢献できるよう、さらなる努力が必要である。

(6) 広報活動の強化について

若手の育成、産業への普及、また国民への周知という面からも、拠点に広報組織を確立し、強力な支援体制の下に重点的に取り組んでいく必要がある。