事後評価報告書(日フィンランド研究交流)

1. 研究課題名:「大規模分子動力学シミュレーションと放射光X線を用いた高速相変化材料の構造解析および新規材料設計」

2. 研究代表者名:

- 2-1. 日本側研究代表者: 公益財団法人 高輝度光科学研究センター 利用研究促進部門 主幹研究員 小原 真司
- 2-2. フィンランド側研究代表者:タンペレエ科大学 特任教授 Jaakko Akola
- 3. 総合評価:(A)

4. 事後評価結果

(1)研究成果の評価について

SPring-8 の先端計測技術、材料開発で先端を行くフィンランド側の大規模計算機シミュレーションが融合して遂行された光記憶材料の機構解明は、実用上でもより優れた材料の設計指針となり、高い評価が与えられるべきである。新しく特許を獲得するべきデータが存在するのか、高速相変化の動的過程などの報告が記載されていないのが残念である。

(2)交流成果の評価について

実験とシミュレーションが国を越えて、円滑に行われ、一方のみでは不可能であった、機構解明の深 部に到達できたことに、交流の重要さが浮き彫りにされた。

プロジェクト期間中に代表者のみの直接交流が行われていたのは、予算の問題であるのか。若手の直接交流が見えないのが残念である。

(3)その他(研究体制、成果の発表、成果の展開等)

DVD材料のメモリー生成、消去の機構は、すでにある程度の知見があったが、本プロジェクトで日本側の精密な実験と、フィンライド側の大規模計算機シミュレーションが共同研究の場で遂行された結果、これらの機構に関し定量的な解明が進捗した。この成果は、今後の光記憶材料開発にむけての指針を構築したという意味で大きな波及効果があり、高く評価できる。

極めて適切な研究者の組み合わせによる国際共同研究であり、特に計算機シミュレーションの材料科学における重要性を示したことは、今後の材料科学にとっても見逃せない成果である。