

# 研究拠点形成事業 平成26年度 実施計画書

A. 先端拠点形成型

## 1. 拠点機関

日本側拠点機関：	国立大学法人大阪大学
(ドイツ)拠点機関：	ユーリッヒ研究所
(スウェーデン)拠点機関：	ウプサラ大学
(フィンランド)拠点機関：	アールト大学
(米国)拠点機関：	エネルギー省再生可能エネルギー研究所

## 2. 研究交流課題名

(和文)：グリーンエネルギー計算機ナノマテリアルデザイン

(交流分野：計算機マテリアルデザイン)

(英文)：Computational Materials Design on Green Energy

(交流分野：Computational Materials Design)

研究交流課題に係るホームページ：

[http://www.yoshidalab.mp.es.osaka-u.ac.jp/core\\_to\\_core/index.html](http://www.yoshidalab.mp.es.osaka-u.ac.jp/core_to_core/index.html)

## 3. 採用期間

平成24年4月1日 ～ 平成29年3月31日

(3年度目)

## 4. 実施体制

### 日本側実施組織

拠点機関：国立大学法人大阪大学

実施組織代表者(所属部局・職・氏名)：大阪大学・学長・平野俊夫

コーディネーター(所属部局・職・氏名)：大学院基礎工学研究科・教授・吉田博

協力機関：東北大学、東京理科大学、鳥取大学、東京大学

事務組織：大阪大学国際交流オフィス国際交流課

**相手国側実施組織** (拠点機関名・協力機関名は、和英併記願います。)

(1) 国名：ドイツ

拠点機関：(英文) Forschungszentrum Jülich

(和文) ユーリッヒ研究所

コーディネーター (所属部局・職・氏名)：(英文)

Peter Gruenberg Institute, Director, Stefan BLUEGEL

協力機関：(英文) Ludwig Maximilians University of Munich

(和文) ルードウィヒ・マクシミリアン大学ミュンヘン

協力機関：(英文) Augsburg University of Applied Sciences

(和文) アウグスブルグ応用科学大学

協力機関：(英文) University of Duisburg-Essen

(和文) デュイスブルグ大学

協力機関：(英文) Technical University of Munich

(和文) ミュンヘン工科大学

協力機関：(英文) Martin-Luther University of Halle-Wittenberg

(和文) マルチン・ルター大学ハレ・ヴィッテンベルグ

経費負担区分 (A型)：パターン1

(2) 国名：スウェーデン

拠点機関：(英文) Uppsala University

(和文) ウプサラ大学

コーディネーター (所属部局・職・氏名)：(英文)

Department of Physics and Astronomy, Professor, Olle ERIKSSON

経費負担区分 (A型)：パターン1

(3) 国名：フィンランド

拠点機関：(英文) Aalto University

(和文) アールト大学

コーディネーター (所属部局・職・氏名)：(英文)

Faculty of Information and Natural Sciences, Professor, Risto NIEMINEN

経費負担区分 (A型)：パターン1

(3) 国名：米国

拠点機関：(英文) National Renewable Energy Laboratory

(和文) エネルギー省再生可能エネルギー研究所 (NREL)

コーディネーター (所属部局・職・氏名)：(英文)

Center for Basic Sciences, Team Leader, Su-Huai WEI

協力機関：(英文) Stanford University

## 5. 全期間を通じた研究交流目標

大阪大学を中心とした計算機ナノマテリアルデザイングループ (CMD<sup>®</sup>) と欧米の機関が連携し、CMD 手法開発・応用・普及・実証実験(外注)と CMD による新グリーンエネルギーを目指した研究を行うとともに、共同研究、ワークショップ開催、デザイン手法チュートリアル開催を実施し、これによって先端研究拠点構築とネットワーク型人材育成を推進する。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はナノサイエンス教育研究と CMD 教育研究を実施するために、大阪大学の部局横断連携から生まれた学内センターである。基礎工学研究科は CMD 研究の観点からその設立と運営に深くかかわり、日本側コーディネーターは同センターの運営委員会委員をつとめている。本事業では

- (1) 先端研究教育拠点としてグリーンエネルギーデザインコアをナノサイエンスデザイン教育研究センターに設置する。
- (2) グリーンエネルギーのための計算機ナノマテリアルデザインに関する共同研究を組織するとともに、共同ワークショップ、デザイン手法開発と現実物質のデザインを行うための国際チュートリアルを実施する。
- (3) これらの国際ネットワークを通じてグリーンエネルギーデザイン研究・人材育成・手法開発を促進する。
- (4) 若手研究者による共同研究、ワークショップおよびチュートリアルコースを日米欧で継続することによってグリーンエネルギーデザイナー、シミュレーションソフトウェア開発者などの高度専門教育研究者および高度専門産業人を養成し、それによって工業化社会から知識社会への産業構造の転換にマッチした人材育成と先端研究を将来にわたって発展させる。
- (5) 実証実験グループや企業に対してデザイン手法やデザイン情報を提供するための CMD ファウンダリーや量子シミュレーション・ファウンダリーによる研産学連携の事業化と自立的運営を長期的に可能にする。

## 6. 前年度までの研究交流活動による目標達成状況

目標達成状況

「研究協力体制の構築」

- ・ Core-to-Core Groningen Workshop 2012 (平成 24 年 11 月 18 日-21 日) をグローニンゲン (オランダ) で開催し、スピントロニクス、モルトロニクス、高温超伝導体、巨大物性応答、自己組織化に関して計算機マテリアルデザインと実証実験との緊密な協力関係を築くための集中的な議論を行うとともにゼルニケ先端物質研究所 (グローニンゲン大学) との研究協力の可能性を探った。【平成 24 年度】
- ・ 平成 24 年度、欧州と日本の研究協力体制の構築のため、代表者の吉田博 (阪大基礎工)

は3ヶ月ユーリッヒ研究所の費用（航空運賃のみ Core-to-Core で手当）で滞在し、研究協力体制の構築を行った。その結果、フンボルト財団とドイツ学振の費用により、2人の日本人若手研究者（助教クラスと博士研究員クラス）を2年間にわたり、ユーリッヒ研究所とミュンヘン工科大学に滞在させて、新しい量子シミュレーション手法の開発を共同で行う研究協力体制の構築を行った。【平成24年度】

- 平成24年度に、日米欧で独立に開発された量子シミュレーション手法が互いに利用できるための計算手法に関するスクール（ユーリッヒ研究所）、有機分子エレクトロニクスやその制御法に関するワークショップ（ドイツ・ボン）、および、マルテンサイト変態のエルゴート性を利用した新機能物質のマテリアルデザインに関する国際ワークショップ（デュイスブルグ）を共同で開催した。【平成24年度】
- 平成25年3月、米国メリーランド州ボルチモアにおいて、Core-to-Core プログラムのH25年度企画立案会議を実施し、下記のH25年度の研究実施計画を日米欧からの参加者により策定した。【平成24年度】
- 日米欧からの代表的な参加者により、グリーンエネルギーにおける計算機ナノマテリアルデザインを実現するための目標設定、研究実施計画の策定、研究交流計画の策定、および、共同研究を推進するためのキック・オフ国際ワークショップを平成24年度、および、平成24年度の成果報告と平成25年度の協力体制と将来計画【共同研プロジェクトの申請】を議論するワークショップを平成25年度大阪大学基礎工学研究科で開催し、大きな方向性と5年間のロードマップと実行計画を策定した。【平成24年度、および、平成25年度】
- スタンフォード大学で有機分子エレクトロニクスに関する国際スクールを開催し、阪大工学研究科森川グループを中心多くの若手研究者や大学院生が参加し、平成26年度以降の有機分子エレクトロニクスや触媒デザインに関する共同研究に向けた実行計画を策定した。【平成25年度】
- 平成25年度、スピントロニクス、マルチフェロイック材料、熱電材料、有機分子エレクトロニクス材料、超伝導材料、太陽電池材料に関するマテリアルデザインなどの省エネルギー・創エネルギー、および、低コスト・高効率のグリーンエネルギーに関連する国際ワークショップをユーリッヒ研究所（ドイツ）で開催した。低コスト化と高効率エネルギー変換を可能にするための、新元素戦略および自己組織化ナノ超構造、自己修復機構のデザインなどにむけた研究と新規物質や新規ナノ超構造の創製法について、日米欧の新しい共同研究を行うことを決定した。今後の共同研究の方策をと実行計画の策定をおこなった。これらをもとに平成26年度の共同研究の実行計画を策定し、また、共同での研究プロジェクトの策定と、日・独・米国・スウェーデンでの共同申請により、革新的研究開発推進プログラムへの共同研究費予算申請の計画を策定した。【平成25年度】
- 平成26年3月、米国エネルギー省再生可能エネルギー研究所（NREL）において、低コスト・高効率太陽電池材料に関する共同研究と実証実験との比較による計算機ナノマテリアルデザインと実証に関する集中討論をおこなった。その結果、デザインされた自己

修復機構による太陽電池創製法の低コスト化、スピノーダル・ナノ分解による自己組織化ナノ超構造の創製と、自己組織化ナノ超構造による電子とホール的高速分離による高効率化、ナノ超構造による多重励起創成による高効率化とキャリア寿命の長寿化、に関する計算機ナノマテリアルデザインと実証実験の比較検討を行い、現実物質でのデザイン主導による実証実験から、これが生じている多くの証拠を共同確認した。これらをもとに、次のステップでのデザインと実証によるグリーンエネルギーや新元素戦略に関する革新的研究開発推進プログラムに共同申請し、実質的な共同研究の実行計画を確定し、平成 26 年度に内閣府総合科学技術会議に対して、共同申請することを決定した。【平成 25 年度】

- ドイツ・ユーリッヒ研究所において、平成 26 年 3 月、2 週間の固体の中の電子状の計算とシミュレーション手法の開発に関する国際チュートリアル・スクール『Computing Solids』を開催し、世界から 250 人以上が参加し、本グループからも多くの大学院生や博士研究員、助教クラスが参加し、新しい量子シミュレーション手法の開発、第一原理計算手法の開発、計算機ナノマテリアルデザインへの応用、について集中講義によるチュートリアルと講義実習を行った。【平成 25 年度】
- 平成 25 年 9 月、5 日間【第 23 回計算機マテリアルデザインワークショップ】、および、26 年 2 月、5 日間【第 24 回計算機マテリアルデザインワークショップ】にわたり、大阪大学基礎工学研究科において、計算機マテリアルデザインワークショップを 2 回実施した【本プロジェクトによる共同開催】。国内企業の研究開発者、国内他大学の研究員、大学院生、教員を含め 45 名が参加し、ビギナーズ・コース、エキスパート・コース、アドバンスト・コース、スーパーコンピュータ・コースの 4 コースに分かれてチュートリアルと実習、および、集中講義をおこなった。チューターのはほとんどは本プロジェクトの構成員が講師を務め、海外からの受講者を含め、産官学からの若手研究者からは極めて好評であった。すでに、12 年の歴史があり、24 回を重ね、1,100 名以上が過去に受講修了している。本ワークショップは平成 26 年度からは、概算要求により、特別運営費交付金による大阪大学ナノサイエンスデザイン教育センターの 5 年間のプロジェクトが採択され、特別運営費交付金により、CMD ワークショップの運営が継続されることとなった。【平成 25 年度】
- スピンと電場の強い相互作用によるスピントロニクスを実現するための高い強磁性転移温度を実現するための計算機ナノマテリアルデザインと自己組織化ナノ超構造の創製法に関する共同研究を若手研究者の短期滞在により実現した。【平成 25 年度】
- 平成 25 年度、省エネルギーの相転移メモリに関する計算機ナノマテリアルデザインの共同研究をドイツ・日本間で実施し、大阪大学の若手研究者がドイツ・ユーリッヒ研究所（別経費）、および、ミュンヘン大学に長期滞在し、共同研究をおこなった。これらは平成 26 年度も継続して実施する実行計画を策定した。【平成 25 年度】
- 平成 25 年度、日欧において、スピントロニクスに応用可能なマルチフェロイック材料、また、抵抗変化ランダムアクセスメモリなどの省エネルギー・デバイスのための計算機ナノマテリアルデザインを目標とした新しい共同研究プロジェクトを立ち上げ、それら

の実行計画を確定した。平成 26 年度も引き続き、これらのプロジェクトを共同推進することを決定した。【平成 25 年度】

- 大阪大学未来研究プロジェクトとして、『計算機ナノマテリアルでアインによる新元素戦略』に本グループが採択され、将来の大規模研究資金を得るためのファンドに採択され、先端研究拠点として、国際共同研究を継続的に推進するための共同研究予算申請に関する企画立案を行った。
- 計算機ナノマテリアルデザイン・グループが中心となり、科学技術・学術審議会 学術研究の大型プロジェクトについて、東北大学、東京大学、慶応義塾大学、大阪大学を 4 拠点とする『スピントロニクス学術研究基盤と連携ネットワーク』拠点の整備(総額 50 億円、10 年間)に応募し、文部科学省のヒヤリングを受けた。採択されれば、スピントロニクスの計算機ナノマテリアルデザインに関する人材育成と、デザイン主導による実証研究を担当する。【平成 25 年度】

#### 「学術的観点」

- デザイン主導による半導体ナノスピントロニクスの構築のためのデザインが国際共同研究により実施され、将来の実証実験を可能にするレベルのデザイン結果が得られた。同時ドーピング法と呼ばれアクセプターとドナーを人工的に同時ドーピングして、磁性イオンの濃度を高濃度にドーピングしたり、また、スピノーダル・ナノ分解を用いて、自己組織化ナノ超構造を形成させ、これらがもつ高いブロッキング温度を積極的に利用して、高温で作動する省エネルギーの半導体スピントロニクスデバイスとしての現実的な応用をめざした実証実験を行うための実験グループとの打ち合わせや実験条件に関する打ち合わせを行った。平成 25 年 11 月に蔵王で開催した特別セミナー(国際スクール)において、デザイングループと実証実験グループが一堂に会して、集中的な討論を行った。
- 計算機ナノマテリアルデザインと実証実験を組み合わせた低コスト・高効率・環境調和型太陽電池材料の共同研究から、材料創製時に構成する原子自身による自己修復機構、スピノーダル・ナノ分解による自己組織化ナノ超構造の創成とこれらを用いた電子正孔分離や多重励起子創成の可能性が、高分解能電子顕微鏡やラマン散乱などの実証実験から、確認され、これらをもとに、低コスト・高効率・環境調和型太陽電池の創製法に関する 3 つの基本法則が演繹された。これらを現実物質に適用するための共同研究を H25 年度から開始し、H26 も共同研究として継続する。すでに、多くの興味深い成果が得られつつある。
- 平成 25 年度、スピンの自由度を積極的に利用した高効率・低コスト・環境調和型スピントロニクス太陽電池のデザインと実証に関する共同研究を開始し、基本的な三つのデザイン則を明らかにした。第一則は、自己修復機構を促進するための結晶成長法のデザインからなり、第二則は、スピノーダル・ナノ分解による自己組織化ナノ超構造の創製法と、第三則は、これらのスピノーダル・ナノ分解したナノ超構造を利用したタイプ II のバンド構造により、光励起された電子と正孔を高速分離し、エネルギー変換効率を高効率化する

る。

- 高効率熱電材料や高効率太陽電池材料のデザインを可能にするためのランドデザイン手法が確立し、自己組織化ナノ超構造の創成と原子空孔の大量導入によるナノ機能の制御法デザインが確立した。国際共同研究により、これらを実証するための、実証実験を組織する段階までに到達した。とくに、原子空孔が大量に導入でき、補償効果により、結晶成長時に自己修復する機構とスピノーダル・ナノ分解による自己組織化ナノ超構造を組み合わせ、熱伝導率を下げ、しかも、原子空孔の秩序化による低次元性が生み出すゼーベック係数の増大を積極的に利用した熱電材料の高効率化をめざした計算機なおマテリアルデザインに関する共同研究を策定した。
- 高い超伝導転移温度を有する純粋に電子的な引力機構を持つ系【負の有効電子間相互作用を持つ系】を探索するための一般則を明らかにし、新超伝導物質の探索とデザインおよびそれらの実証を目指した三つのステップから成る共同研究案を策定した。第一ステップは、電子格子相互作用による超伝導転移温度の定量的予測、第二ステップは、電子的機構による負の有効電子間相互作用の探索【交換相関相互作用による負の有効電子間相互作用、および、電荷の揺らぎによる負の有効電子間相互作用】、および、第三ステップは、負の有効電子間相互作用によるモデル・ハミルトニアンを用いた多階層連結シミュレーションによるモンテ・カルロ法を用いた超伝導相の相図や  $T_c$  の計算により、現実物質への応用、超伝導転移温度の次元性依存性、などについての共同研究を開始した。
- 局所密度近似を越えるための自己相互作用補正を導入した新しい量子シミュレーション手法、準粒子スペクトルを定量的に予言するための新規計算手法、大規模計算に不可欠のオーダー法、階層を越えたレベルの結晶成長やナノ超構造をシミュレートするための多階層連結計算手法について、国際ワークショップや共同研究により、大きく進展し、新しい量子シミュレーション手法の開発・公開・普及・応用が可能になった。

#### 「若手研究者育成」

- 国内における計算機ナノマテリアルデザインワークショップ（平成 25 年度、9 月および 2 月、一回 5 日間、年二回開催）や欧州における平成 26 年 3 月開催の固体中の電子の第一原理計算に関する国際スクール（平成 26 年 3 月、2 週間）などに、大学院生や博士研究員、および、若手教員が受講者およびチューターとして多数参加し、手法開発・デザイン・実証について、国際的な雰囲気の中で、世界と競争するための気概や新規計算手法の開発、また、計算機ナノマテリアルデザインと実証について、国際水準のチュートリアルや講義により、討論を通して大きく成長している。
- スピントロニクス分野では、これらを実現するためには同時ドーピング法による高濃度ドーピング、自己組織化ナノ超構造による高いブロッキング温度を積極的に利用したナノスピントロニクスの可能性を若手研究者の共同研究により明らかにした。また、もともと高い遷移金属原子の固溶度をもつ、IV-VI 系半導体ベースの強磁性半導体や、磁性イオンを含まない新しい強磁性体とデバイス応用がデザインされ、多くの実証実験

が企画され実証された。

- ・ 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、これらに参加する若手研究者の積極的な参加が可能になった。現在、2年間の計画で、大阪大学の女性若手研究者が、フンボルト奨学生として採用され、ミュンヘン大学に滞在し、手法開発に関する共同研究を継続して行っている。また、1年間の予定で、若手研究者がユーリッヒ研究所に滞在し、KKR-nano法と呼ばれる大規模な原子数から成る系を取り扱うためのオーダーN法についてのソフトウェアの共同開発をおこなった。
- ・ 本プログラムに参加する若手研究者が、新たにさきがけ研究21などのプロジェクトにも採択され、独立したプロジェクトを自ら組織すると共に、積極的な国際共同研究を行った。独立したポジションと研究資金を得て、新しい研究拠点形成を可能にするポジション(将来的には教授)に採用され、さらに、新しい研究拠点の構築と人材の育成が可能になった。

## 7. 平成26年度研究交流目標

### <研究協力体制の構築>

- ・ 若手人材育成のための研究協力体制を構築するため、マッチングファンドにより、2年程度にわたり、相手側の将来有望な若手研究者を長期間にわたり雇用するための創省エネルギー材料の計算機ナノマテリアルデザインと実証に関する基金の取得に努め、これらを実行する。また、JSPSなどの海外からの博士研究員を導入する。また、具体的なステージ・ゲートを設定するようなプロジェクト型の共同研究に若手研究者を参加させ、まや、雇用することにより、世界とたたかうための気概と研究者としてのプロ意識を身につけてもらうためのプロジェクト研究と共同研究を実施する。
- ・ デザイン主導による実証研究を推進するために、各国の拠点と連携している実証実験グループにデザイン情報を提供するための連携を強化するとともに、共同研究資金を得るための共同プロジェクトを申請し、研究資金の獲得をもめぎす。低コスト・高効率・環境調和太陽電池材料のデザインと実証については、米国エネルギー省代替エネルギー研究所と CIGS, CZTSSe などの太陽電池材料について、具体的な共同研究を開始した。また、省エネルギーデバイスでは、相変化メモリ、Re-RAM, スピンエレクトロニクスや有機分子エレクトロニクス材料について、ユーリッヒ研究所、デュイスブルグ大学、ミュンヘン大学、スタンフォード大学との若手研究者や大学院生の派遣により、実質的な共同研究を開始した。
- ・ 具体的なナノ超構造の自己組織化デザインと物性予測に基づいた、具体的な物質の計算機ナノマテリアルデザインを可能にするための、共同研究体制の強化を行う。さらには、デザイン主導による実証を含めたサクセス・ストーリーを構築するための研究協力体制の強化を行う。スピンエレクトロニクス研究では、平成25年度には、ドイツと日本との共同研究で大きな成果が得られつつある。

### <学術的観点>

- ・ 自己組織化ナノ超構造などのシミュレーションのため多階層連結計算の手法開発と



応用が進み、太陽電池材料におけるスピノーダル・ナノ分解による自己組織化ナノ超構造の創製法やタイプ II ナノ半導体構造による電子と正孔の高速分離による高効率化や多重励起子創成の可能性、また、結果の自己修復機構などについての計算機ナノマテリアルデザインと実証研究に大きな進展があった。

- ・ オーダーN法などの大規模原子系をシミュレーションする計算手法を共同開発し、相転移メモリなどへの応用とデザイン・実証が可能になってきた。これらは日独での共同研究論文として発表予定である。
- ・ 現時点までの研究の主流は局所密度近似 (LDA) であるが、一般に、興味深い物性やデバイス機能を実現するような物質では、多くの場合 LDA が破綻していることがよく知られている。これらを、克服するための新しい量子シミュレーション手法の開発は、現時点までは、個別のグループごとに孤立して行われているのが現状である。これらを克服するためには、各国の研究拠点を連携したネットワークを形成し、若手研究者の長期派遣や長期滞在による息の長い研究開発が不可欠である。これを実現するため、人的な交流を年単位で長期に行い、長期滞在による共同研究により共通する問題点を明確化し、克服する必要がある。これらを実現するために、KKR法による動的平均場近似法 (DMFA: Dynamical Mean Field Approximation) を開発し公開・普及活動および、応用を各拠点間の共同研究により、平成 26 年度も継続して実施する。
- ・ 局所密度近似を越えるための自己相互作用補正を導入した新しい量子シミュレーション手法、準粒子スペクトルを定量的に予言するための新規計算手法 (QSGW)、大規模計算に不可欠のオーダー法、階層を越えたレベルの結晶成長やナノ超構造をシミュレートするための多階層連結計算手法について、更なる共同研究により、新しい量子シミュレーション手法の開発・公開・普及・応用が複数の研究拠点で、しかも、具体的な新物質でデザインが実施できるように、平成 26 年度も引き続き、継続して共同研究を実施する。
- ・ デザイン主導による実証は成功例がまだ少なく、これらを可能にするための社会人を含む計算機ナノマテリアルデザイン (CMD) ワークショップを開催し、デザインと実証を狙った具体的な成功例やデザイン手法やその応用結果の普及活動を行う。また、さらにはネットワークによって連携している日米欧のネットワーク内のデザイナーと実証研究者を連携させるためのデザイナーと実証実験家の密なる交流を推進する国際スクールやファンディングをとまなう国際共同研究を企画立案し、実質的な共同研究を加速し、平成 26 年度も引き続き、継続して共同研究を実施する。

#### <若手研究者育成>

- ・ 若手研究者育成という目的からは、助教クラスと博士研究員クラスの研究者 2 人を 2 年間にわたり、海外拠点に派遣し、新しい研究手法の開発と公開を共同で行い、人材育成とシミュレーション手法の開発・公開・普及・応用を可能にする。具体的には、大規模なナノ超構造の自己組織化形成法やナノ超構造の物性予測とデザインを可能にするためのオーダーN法による KKR-Nano 法のソフトウェアの開発と公開をおこなう。もう一つは、電子の持つクーロン相互作用による強い電子相関を取り扱うための

局所密度近似法を越えた Beyond-LDA 法の一つである動的平均場近似法を KKR 法に組み込んだ計算手法の開発と公開、および、それらを使った応用を行うための人材育成、および、これらを積極的に利用したデザイン応用をおこなうことのできる人材を育成する。平成 26 年度も引き続き、継続して共同研究や新しい計算手法の開発に関する共同研究を実施する。

- ・ 上記以外にも、H26 年 6 月に、大阪大学基礎工学研究科で開催する国際ワークショップにおいて、若手研究者が H25 年度の研究成果を発表し、これらに立脚して、H26 年度の研究計画や国際交流計画を自ら主体的に企画立案し、共同研究を促進する。平成 26 年度も引き続き、継続して若手研究者により共同研究や新しい計算手法の開発に関するワークショップを実施する。共同研究や人材育成をめざしたワークショップへの若手研究者や大学院生の積極的な参加を可能にするため、多くの若手研究者を Psi-k ワorkshop、国際スクールや国際共同研究に企画立案段階から参画させる。

#### <その他（社会貢献や独自の目的等）>

国内における計算機ナノマテリアルデザインワークショップ（平成 25 年度、9 月および 2 月、一回 5 日間、年二回開催）や欧州における平成 26 年 3 月開催の固体中の電子の第一原理計算に関する国際スクール（平成 26 年 3 月、2 週間）などに、本プロジェクトを構成する大学院生や博士研究員、若手教員、および、教職員がチューターとして多数参加し、手法開発・デザイン・実証について、国際的な雰囲気の中で、世界と競争するための気概や新規計算手法の開発、また、計算機ナノマテリアルデザインと実証について、国際水準のチュートリアルや講義により、社会貢献を行っている。

(<http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/CMD/>)

## 8. 平成 26 年度研究交流計画状況

### 8-1 共同研究

整理番号	R-1	研究開始年度	平成 24 年度	研究終了年度	平成 28 年度
研究課題名	(和文) グリーンエネルギー計算機ナノマテリアルデザイン (英文) Computational Materials Design on Green Energy				
日本側代表者 氏名・所属・職	(和文) 吉田博・大阪大学・大学院基礎工学研究科・教授 (英文) Hiroshi YOSHIDA, Graduate School of Engineering Science Osaka University, Professor				
相手国側代表者 氏名・所属・職	(英文) <u>Stefan BLUEGEL</u> , Peter Grünberg Institute, Institute for Advanced Simulation, Forschungszentrum Jülich, Director <u>Olle ERIKSSON</u> , Department of Physics and Astronomy, Uppsala University, Professor <u>Risto NIEMINEN</u> , Department of Applied Physics, Aalto University, Professor				

	Su-Huai WEL, Theoretical Materials Science Group , National Renewable Energy Laboratory, Team Leader	
参加者数	日本側参加者数	134 名
	(ドイツ) 側参加者数	28 名
	(スウェーデン) 側参加者数	4 名
	(フィンランド) 側参加者数	6 名
	(米国) 側参加者数	6 名
26年度の 研究交流活動 計画	<p>H26年度は、</p> <p>(1)6月に基礎工学研究科で、グリーンエネルギー（創エネルギー【太陽電池材料、熱電材料】、および、省エネルギー材料【スピントロニクス材料、二次電池、超伝導材料、環境調和強磁性体磁石】）のためのマテリアルデザイン手法の開発、マテリアルデザイン、共同研究をめざした国際ワークショップを実施する。</p> <p>(2)磁性体材料としての合金や太陽電池材料としての半導体混晶における規則合金や不均一なナノ超構造の自己組織化創製法やその特殊な物性機能を積極的に利用するための、シミュレーション手法の開発とその応用をめざした、ワークショップをドイツで開催する。</p> <p>(3)スタンフォード大学に若手研究者を派遣し、森川良忠教授を中心となって有機分子エレクトロニクスや触媒に関する国際共同研究を開始する。</p> <p>(4)オーダーN法、QSGW法、多階層連シミュレーション手法などを用いた、スピントロニクスや次世代エレクトロニクスのための省エネルギー材料や熱電材料、低コスト・高効率太陽電池ナノ材料など、デバイスを指向した量子シミュレーション手法の開発とそのグリーン・エネルギー材料への応用をめざした、ワークショップをユーリッヒ研究所で開催する。</p> <p>上記に加えて、</p> <p>(5)大規模科学計算を可能にするKKR-nano手法の開発とKKR法に基礎をおいた動的平均場近似法によるKKR法を開発する目的で、二人の若手研究者を2年間の予定でドイツ・ユーリッヒ研究所とミュンヘン工科大学に派遣する。これらに加えて、</p> <p>(6)計算手法の開発、デザイン手法の開発、および、共同研究を目的として、若手研究者、助教、准教授クラスの短期滞在によるインタラクティブな共同研究の加速と促進を行う。</p> <p>(7)上記により生じた具体的な物質におけるデザイン結果を実証実験するための実験家を含む共同研究の推進をおこなう会合を米国エネルギー省再生可能エネルギー研究所(NREL)および欧州(ドイツ、フィンランド、スウェーデン)で実施する。</p>	

<p>26年度の 研究交流活動 から得られる ことが期待さ れる成果</p>	<p>(1) 大阪大学基礎工学研究所で、グリーンエネルギー、および、省エネルギー材料のためのマテリアルデザイン手法の開発、マテリアルデザイン応用、共同研究をめざした国際ワークショップでは、平成25年度の各グループの研究成果を発表し、これらを基に、新規デザイン手法の開発とそれを用いたデザインと実証実験提案が可能になる。これにより、高効率太陽電池材料、熱電材料、マルチフェロイック材料、および、省エネルギーのためのスピントロニクス材料、触媒、二次電池、高い<math>T_c</math>をもつ超伝導材料、環境調和強磁性体磁石をデザイン手法により実証する研究手法を確立することができる。</p> <p>2) ユーリッヒワークショップでは、希土類元素を用いない磁性体合金材料や自己組織化ナノ超構造を積極的に利用した太陽電池材料、熱電材料、などの自己組織化ナノ超構造創製法やその特殊な物性機能を積極的に利用する手法の開発とその応用が可能になる。</p> <p>(3) スタンフォード大学と大阪大学が中心となっていく有機分子エレクトロニクスや触媒に関する国際共同研究では、シミュレーション手法とナノ構造による特異な物性を利用した新しいエレクトロニクスや触媒反応開発に関するデザインと実証が可能になる。</p> <p>(4) ユーリッヒ研究所で開催するスピントロニクスや次世代エレクトロニクスのための省エネルギー材料やデバイスを指向した量子シミュレーション手法の開発とその応用をめざした、ワークショップでは、次世代創・省エネルギーデバイスやスピントロニクス材料に関するデザイン（高い<math>T_c</math>と巨大物性応答の開発）が可能になる。</p> <p>(5) 二人の若手研究者を2年間の予定でドイツ・ユーリッヒ研究所とミュンヘン工科大学に派遣することにより、2年間で大規模科学計算を可能にするKKR-nano手法の開発とKKR法に基礎をおいた動的平均場近似法によるKKR法を開発することができる。</p> <p>(6) 計算手法の開発、デザイン手法の開発、および、共同研究を目的として、若手研究者、助教、准教授クラスのインタラクティブな共同研究を加速し、グリーンエネルギーに関する新しい分野（人工光合成や可視光による水分解）のデザイン手法開発とこれらを可能にする具体的な物質とその応用が可能になる。</p> <p>(7) 米国エネルギー省再生可能エネルギー研究所（NREL）と共同で行う計算機ナノマテリアルデザインと実証実験を組み合わせた低コスト・高効率・環境調和型太陽電池材料の共同研究から、材料創製時に構成する原子自身による自己修復機構、スピノーダル・ナノ分解による自己組織化ナノ超構造の創成とこれらを用いた電子正孔の高速分離や多重励起子創成により、低コスト・高効率・環境調和型太陽電池の創製法に関する3つの基本法則が演繹されたので、これらを現実物質に適用するための共同研究を</p>
--	--

	<p>H25 年度から開始し、多くの成果が得られつつある。これらは、2016 年にエネルギー変換効率 25%、2030 年に 50%を目標とする高いステージ・ゲートを設定しているが、デザイン手法でクリアできる可能性が大きくなってきた。</p>
--	---

## 8-2 セミナー

整理番号	S-1
セミナー名	(和文) 日本学術振興会研究拠点形成事業「グリーンエネルギーのための計算機ナノマテリアルデザイン」 (英文) JSPS Core-to-Core Program “Computational Nano-Materials Design on Green Energy”
開催期間	平成 26 年 6 月 1 日 ~ 平成 26 年 6 月 3 日 (3 日間)
開催地(国名、都市名、会場名)	(和文) 日本、大阪、大阪大学 (英文) Japan, Osaka, Osaka University
日本側開催責任者 氏名・所属・職	(和文) 吉田博・大阪大学・大学院基礎工学研究科・教授 (英文) Hiroshi YOSHIDA, Graduate School of Engineering Science Osaka University, Professor
相手国側開催責任者 氏名・所属・職 (※日本以外での開催の場合)	(英文)

### 参加者数

派遣先 派遣元		セミナー開催国 (日本)
日本 <人/人日>	A.	60/ 180
	B.	
ドイツ <人/人日>	A.	8/ 40
	B.	
スウェーデン <人/人日>	A.	2/ 10
	B.	
英国(第三国) <人/人日>	A.	1/ 5
	B.	
韓国(第三国) <人/人日>	A.	1/ 5
	B.	
合計 <人/人日>	A.	72/ 240
	B.	0

- A. 本事業参加者(参加研究者リストの研究者等)  
B. 一般参加者(参加研究者リスト以外の研究者等)

※日数は、出張期間（渡航日、帰国日を含めた期間）としてください。これによりがたい場合は、備考欄を設け、注意書きを付してください。

<p>セミナー開催の目的</p>	<p>本セミナーの目的は、平成 25 年度の成果報告、および、その中で生じた問題点を明らかにし、全体で討論することにより、平成 26 年度の研究計画とその実施計画、および、研究の新しい方向性を企画立案し、確定することを大きな目的としている。具体的には、創エネルギーとしての太陽電池材料、熱電材料、および、省エネルギー材料としてのスピントロニクス材料、二次電池、超伝導材料、環境調和強磁性体磁石などに関する具体的な計算機ナノマテリアルデザイン研究成果の発表と、極限条件下での新物質層のデザインと実証をめざした新しいシミュレーションおよびデザイン手法の開発に関する研究発表を行う。これらに立脚して、デザイン主導による実証実験をめざした研究を推進するための新しい計算手法の共有と新しい研究の方向性を明らかにすることを目的としている。また、デザインと実証による現実物質への適用を目指した、サクセスストーリーの成功事例を明らかにする。</p>
<p>期待される成果</p>	<p>創エネルギーとしての低コスト・高効率太陽電池材料、および、環境調和・高効率熱電材料では、スピノーダルナノ分解や原子空孔秩序相形成による自己組織化ナノ超構造を利用した低次元ナノ超構造の創製法をデザインし、これらによるエネルギー変換の高効率化がデザインされ、実証実験の提案と実施につながる。スピントロニクス材料では同時ドーピング法による磁性不純物の高濃度化による高い <math>T_c</math> のデザイン、自己組織化ナノ超構造による高いブロッキング温度のデザイン、遷移金属磁性イオンを用いない新規物質、マルチ・フェロイックによる強磁性と強誘電性の強い結合による磁化の電場制御法の確立、環境調和型・二次電池の高機能化と低コスト化、高い <math>T_c</math> をもつ新超伝導材料の探索と発見、希土類を用いない環境調和型強磁性永久磁石などに関する具体的な計算機ナノマテリアルデザインと実証が可能になる。これらに立脚し、実証実験の提案と具体的な実証実験を実施することができ、新元素戦略に寄与することができる。また、極限条件下で創成する新物質層のデザインと実証をめざした新しいシミュレーションおよびデザイン手法の開発が可能になり、極限条件下での新物質相の発見が可能にある。デザイン主導による実証実験と、これらに立脚した新機能物質の開発をめざした研究を推進することができる。また、そのための新しい計算手法の開発・共有・応用・普及を可能にし、新しい研究の方向性を明らかにする。</p>

<p>セミナーの運営組織</p>	<p>JSPS Core-to-Core Program “Computational Nano-Materials Design on Green Energy “国際ワークショップ運営委員会  国際ワークショップ運営委員長：吉田博（阪大基礎工）  国際ワークショップ運営委員：赤井久純（東大特任教授）、笠井秀明（阪大院工）、森川良忠（阪大院工）、黒木和彦（阪大院理）、小口多美夫（阪大産研）、白井正文（東北大通研）、浜田典昭（東京理科大）、佐藤和則（阪大院工）、小谷岳生（鳥取大院工）、Stefan BLUEGEL(Peter Grünberg Institute, Institute for Advanced Simulation, Forschungszentrum Jülich), Olle ERIKSSON (Department of Physics and Astronomy, Uppsala University), Risto NIEMINEN (Department of Applied Physics, Aalto University), Su-Huai WEI (Theoretical Materials Science Group, National Renewable Energy Laboratory)  国際ワークショップ運営委員会委員、および、各国のグループリーダーに基調講演者、招待講演者、および、ワークショップで取り扱うトピックスについて諮問し、委員長が中心になり、プログラム内容を取りまとめる。日本側は大阪大学・吉田がとりまとめを行う。ヨーロッパ側参加者のうち本プログラムに参加していないものはPsi-kの補助をうける。それ以外の参加者はマッチングファンドによる参加である。</p>		
<p>開催経費  分担内容  と概算額</p>	<p>日本側</p>	<p>内容 国内旅費 14人  招聘外国人渡航費* 4人  消耗品（名札用紙）  その他経費（弁当代等）  税金等</p>	<p>金額 600,000 円  850,000 円  10,000 円  62,000 円  68,000 円  （*招聘、及び謝金に関しては、招待講演者、日程等交渉中のため、今後変更になる可能性があります）</p>
	<p>（ドイツ）側</p>	<p>内容 渡航旅費</p>	
	<p>（スウェーデン）側</p>	<p>内容 渡航旅費</p>	



### 8-3 研究者交流（共同研究、セミナー以外の交流）

所属・職名 派遣者名	派遣・受入先 (国・都市・機関)	派遣時期	用務・目的等
大阪大学・准教授・佐藤 和則	スペイン・ビルバオ	2014.7.6-2014.7.11	ICOMAT2014 に参加。研究発表及び交流、情報収集を行う。
大阪大学・准教授・福田 隆	スペイン・ビルバオ	2014.7.6-2014.7.11	ICOMAT2014 に参加。研究発表及び交流、情報収集を行う。
大阪大学・講師・寺井智之	スペイン・ビルバオ	2014.7.6-2014.7.11	ICOMAT2014 に参加。研究発表及び交流、情報収集を行う。
大阪大学・博士(前期)課程・山口 貴士	スペイン・ビルバオ	2014.7.6-2014.7.11	ICOMAT2014 に参加。研究発表及び交流、情報収集を行う。
大阪大学・准教・佐藤和則	米国・オースティン(テキサス)	2014.8.10-2014.8.15	ICPS 2014 に参加。研究発表及び交流、情報収集を行う。
大阪大学・博士(前期)課程・滝口 千尋	米国・オースティン(テキサス)	2014.8.10-2014.8.15	ICPS 2014 に参加。研究発表及び交流、情報収集を行う。
大阪大学・博士(前期)課程・出口 大幹	米国・オースティン(テキサス)	2014.8.10-2014.8.15	ICPS 2014 に参加。研究発表及び交流、情報収集を行う。
大阪大学・助教・中西寛	スウェーデン・Gothenburg	2014.7.23-2014.7.27	Graphene Week 2014 に参加。研究発表及び交流、情報収集を行う。
大阪大学・博士(後期)課程・Joaquin Lorenzo Valmorina Moreno	スウェーデン・Gothenburg	2014.7.23-2014.7.27	Graphene Week 2014 に参加。研究発表及び交流、情報収集を行う。
大阪大学・助教・木崎栄年	米国・Asheville・ノースカロライナ	2014.8.24-2014.8.27	ICEC 2014 に参加。研究発表及び交流、情報収集を行う。
大阪大学・博士(後期)課程・Allan Abraham Bustra Padama	ドイツ・ミュンヘン	2014.7.20-2014.7.25	ミュンヘン工科大において、研究発表、研究者交流、情報収集を行う
大阪大学・教授・笠井秀明	ドイツ・ミュンヘン	2014.9.8-2014.9.15	ミュンヘン工科大において、研究発表、研究者交流、情報収集を行う
大阪大学・助教・中西寛	ドイツ・ミュンヘン	2014.9.8-2014.9.15	ミュンヘン工科大において、研究発表、研究者交流、情報収集を行う
大阪大学・教授・笠井秀明	ドイツ・ミュンヘン	2014.11.17-2014.11.25	ミュンヘン工科大において、研究発表、研究者交流、情報収集を行う
大阪大学・准教授・Dinō Wilson Agerico Tan	ドイツ・ミュンヘン	2014.11.17-2014.11.25	ミュンヘン工科大において、研究発表、研究者交流、情報収集を行う
大阪大学・博士(後期)課程・Ryan Lacdao Arevalo	ドイツ・ミュンヘン	2014.11.17-2014.11.25	ミュンヘン工科大において、研究発表、研究者交流、情報収集を行う
大阪大学・博士(後期)課程・岡 耕平	ドイツ・ミュンヘン	2014.11.17-2014.11.25	ミュンヘン工科大において、研究発表、研究者交流、情報収集を行う

大阪大学・博士(後期) 課程・清水 康司	ドイツ・ミュン ヘン	2014.11.17-2014.11.25	ミュンヘン工科大において、研究発表、研究者交流、情報収集を行う
大阪大学・教授・笠井 秀明	米国・スタンフ ォード	2014.11.30-2014.12.6	スタンフォード大学において、研究発表、研究者交流、情報収集を行う
大阪大学・博士(後期) 課程・岡 耕平	米国・スタンフ ォード	2014.11.30-2014.12.6	スタンフォード大学において、研究発表、研究者交流、情報収集を行う
大阪大学・博士(後期) 課程・小島 一希	米国・スタンフ ォード	2014.11.30-2014.12.6	スタンフォード大学において、研究発表、研究者交流、情報収集を行う

## 9. 平成26年度研究交流計画総人数・人日数

### 9-1 相手国との交流計画

派遣先 派遣元	日本 〈人/人日〉	ドイツ 〈人/人日〉	スウェーデン 〈人/人日〉	フィンランド 〈人/人日〉	米国 〈人/人日〉	スペイン(第3国) 〈人/人日〉	合計 〈人/人日〉
日本 〈人/人日〉		10/114 ( 1/5 )	2/10 ( )	( )	8/139 ( 9/48 )	4/24 ( 1/6 )	24/287 ( 11/59 )
ドイツ 〈人/人日〉	1/5 ( 7/35 )		( )	( )	( )	( 1/6 )	1/5 ( 8/41 )
スウェーデン 〈人/人日〉	1/5 ( 1/5 )	( )		( )	( )	( )	1/5 ( 1/5 )
フィンランド 〈人/人日〉	( )	( )	( )		( )	( )	0/0 ( 0/0 )
米国 〈人/人日〉	( )	( )	( )	( )		( )	0/0 ( 0/0 )
英国(第3国) 〈人/人日〉	1/5 ( )	( )	( )	( )	( )		1/5 ( 0/0 )
韓国(第3国) 〈人/人日〉	1/5 ( )	( )	( )	( )	( )		1/5 ( 0/0 )
スペイン(第3国) 〈人/人日〉	( )	( )	( )	( )	( )		0/0 ( 0/0 )
合計 〈人/人日〉	4/20/ ( 8/40/ )	10/114 ( 1/5 )	2/10 ( 0/0 )	0/0 ( 0/0 )	8/139 ( 9/48 )	4/24 ( 2/12 )	28/307 ( 20/105 )

※各国別に、研究者交流・共同研究・セミナーにて交流する人数・人日数を記載してください。(なお、記入の仕方の詳細については「記入上の注意」を参考にしてください。)

※相手国側マッチングファンドなど、本事業経費によらない交流についても、カッコ書きで記入してください。

### 9-2 国内での交流計画

60/180 〈人/人日〉
---------------

10. 平成26年度経費使用見込み額

(単位 円)

	経費内訳	金額	備考
研究交流経費	国内旅費	600,000	国内旅費、外国旅費の合計は、研究交流経費の50%以上であること。
	外国旅費	10,033,000	
	謝金	0	
	備品・消耗品購入費	10,000	
	その他の経費	462,000	
	外国旅費・謝金等に係る消費税	835,000	
	計	11,940,000	研究交流経費配分額以内であること。
業務委託手数料		1,194,000	研究交流経費の10%を上限とし、必要な額であること。また、消費税額は内額とする。
合 計		13,134,000	