

# 研究拠点形成事業 平成24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：

作成中

### 3. 採用期間

平成24年4月1日 ～ 平成29年3月31日

(1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

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) 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  
(和文) スタンフォード大学

経費負担区分 (A 型)：パターン 1

## 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

平成 24 年度から開始

## 7. 平成 24 年度研究交流目標

※本事業の目的である「研究協力体制の構築」「学術的観点」「若手研究者育成」に対する今年度の目標を設定してください。また社会への貢献や、その他課題独自の今年度の目的があれば設定してください。

1) グリーンエネルギー計算機ナノマテリアルデザイン手法に関する国際研究体制を強固

なものにする。

- 2) 本事業におけるグリーンエネルギーに関する研究をすすめる上で必要となる共通基盤手法を国際協力のもとに開発していく。
- 3) 分子エレクトロニクス、ナノ自己組織化太陽電池、燃料電池触媒に関する研究をテーマに若手研究者交流を実施し、研究者育成と研究の推進を図る。
- 4) 得られた成果を計算機マテリアルデザインワークショップ・チュートリアルコースを通じて国内・国外において公開・普及を推進する。

## 8. 平成24年度研究交流計画状況

### 8-1 共同研究

—研究課題ごとに作成してください。—

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 <u>Su-Huai WEI</u> , Theoretical Materials Science Group , National Renewable Energy Laboratory, Team Leader						
交流予定人数 (※日本側予算によ らない交流につい ても、カッコ書きで記 入のこと。)	① 相手国との交流						
	派遣先	日本	ドイツ	スウェー デン	フィンラ ンド	米国	計
	派遣元	<人/人日>	<人/人日>	<人/人日>	<人/人日>	<人/人日>	<人/人日>
	日本		5/150	2/60	1/30	2/60	10/300
	<人/人日>						
	ドイツ	(5/100)		(0/0)	(0/0)	(0/0)	0/0
	<人/人日>						(5/100)
	スウェー デン	(2/60)	(0/0)		(0/0)	(0/0)	0/0
	<人/人日>						(2/60)

	フィンランド <人/人日>	(2/60)	(0/0)	(0/0)		(0/0)	0/0 (2/60)
	米国 <人/人日>	(3/60)	(0/0)	(0/0)	(0/0)		0/0 (3/60)
	合計 <人/人日>	0/0 (12/280)	5/150 (0/0)	2/60 (0/0)	1/30 (0/0)	2/60 (0/0)	10/300 (12/280)
	② 国内での交流 20人/40人日						
日本側参加者数							
35名	(12-1 日本側参加研究者リストを参照)						
(ドイツ)側参加者数							
12名	(12-2 相手国(ドイツ)側参加研究者リストを参照)						
(スウェーデン)側参加者数							
4名	(12-3 相手国(スウェーデン)側参加研究者リストを参照)						
(フィンランド)側参加者数							
3名	(12-3 相手国(フィンランド)側参加研究者リストを参照)						
(米国)側参加者数							
5名	(12-3 相手国(米国)側参加研究者リストを参照)						
24年度の 研究交流活動 計画	1) 分子エレクトロニクスに関する研究者交流(森川、小口、白井、ユーリッヒグループ)(2人派遣、3人受入) 2) ナノ自己組織化太陽電池開発に関する研究者交流(吉田、佐藤、赤井、NRELグループ)(2人派遣、3人受入) 3) グリーンエネルギー計算機ナノマテリアルデザイン手法に関する研究者交流(赤井、草部、小野、小倉、ユーリッヒグループ、ミュンヘングループ、ウプサラグループ、ヘルシンキグループ)(3人派遣、3人受入) 4) 燃料電池触媒に関する研究者交流(笠井、ディーニョ、中西、アウグスブルクグループ)(3人派遣、3人受入)						

<p>24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) 日本、ユーリッヒ（ドイツ）、ウプサラ（スウェーデン）、アールト（フィンランド）、NREL（米国）でこれまでに推進してきた省エネルギーで環境調和性の高い新エレクトロニクス材料、およびスピントロニクス材料の開発を目指した研究の成果を持ち寄り、国際共同研究の方向性を定める。その方向性にそった研究を、計算機マテリアルデザイン方法論を共通基盤として推進するために、分子エレクトロニクス、ナノ自己組織化太陽電池、燃料電池触媒に関する個々の研究について問題点を明らかにするとともにロードマップを作成する。</p> <p>2) 計算機マテリアルデザイン手法について、非平衡定常系を取り扱うために非平衡グリーン関数の手法をKKR法に組み込むための基礎理論の構築と、非平衡グリーン関数をすべての電子状態計算コードに導入するための枠組みを確立する。</p>
--	--

## 8-2 セミナー

—実施するセミナーごとに作成してください。—

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「ナノスピントロニクス国際ワークショップ」
	(英文) JSPS Core-to-Core Program “International Workshop on Nano-Spintroics”
開催期間	平成 24 年 6 月 29 日 ~ 平成 24 年 7 月 1 日 (3 日間)
開催地 (国名、都市名、会場名)	(和文) 大阪
	(英文) Osaka
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 (※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 )	
	A.	B.
日本 <人/人日>	A.	35/105
	B.	0/0
	C.	0/0
ドイツ <人/人日>	A.	0/0
	B.	0/0
	C.	5/25
スウェーデン <人/人日>	A.	0/0
	B.	0/0
	C.	3/15
フィンランド <人/人日>	A.	0/0
	B.	0/0
	C.	2/10
米国 <人/人日>	A.	0/0
	B.	0/0
	C.	2/10

合計 <人/人日>	A.	35/105
	B.	0/0
	C.	12/60

- A. セミナー経費から旅費を負担  
 B. 共同研究・研究者交流から旅費を負担  
 C. 本事業経費から旅費を負担しない（参加研究者リストに記載されていない研究者は集計しないでください。）

セミナー開催の目的	本事業のキックオフミーティングを兼ねて、ナノスピントロニクスに関するクローズな国際ワークショップを開催する。国際研究協力を進めるにあたって、現状の認識と各研究グループの研究分担の確認を行う。ワークショップにおける情報を集約することによってグリーンエネルギー計算機名のマテリアルデザインの方向性と明らかにするとともに、ナノスピントロニクスに関する最先端の研究について各グループの持つ情報を交換する。また、若手研究者、大学院博士課程学生が本事業に対する全体像をつかみ、本事業に積極的に参画していくための機会をつくる。
期待される成果	各拠点を持つ強み（大阪の計算機ナノマテリアルデザイン手法、ユーリッヒのスピントロニクス、ウプサラのシミュレーション技術、アールトの触媒理論、NREL のエネルギー）にもとづいた情報がワークショップの場においてオープンに提供され、これによって今後の国際協力による研究へ向けたスタートを切ることができる。
セミナーの運営組織	大阪大学吉田博教授（日本側コーディネータ）を運営委員長に日本の計算機マテリアルデザイン幹事会（CMD 幹事会）が運営を行う。また、日本側コーディネータとドイツ、スウェーデン、フィンランド、米国の拠点代表者で国際運営委員会を組織する。



開催経費 分担内容 と概算額	日本側	内容	国内旅費	金額	280千円
			謝金		80千円
			消耗費等		60千円
			その他経費		496千円
			消費税		4千円
			合計		920千円
	(ドイツ)側	内容	外国旅費		
	(スウェーデン)側	内容	外国旅費		
	(フィンランド)側	内容	外国旅費		
	(米国)側	内容	外国旅費		

整理番号	S-2
セミナー名	(和文) 日本学術振興会研究拠点形成事業「表面における機能性分子：ナノスピントロニクス of 新しい構成要素」
	(英文) JSPS Core-to-Core Program “Functional Molecule on Surfaces: New Building Blocks for Nano-Spintronics”
開催期間	平成24年10月2日 ~ 平成24年10月4日 (3日間)
開催地(国名、都市名、会場名)	(和文) ドイツ、ボン
	(英文) Germany, Jülich (or Bonn)
日本側開催責任者 氏名・所属・職	(和文) 森川良忠・大阪大学・大学院工学研究科・教授
	(英文) Yoshitada MORIKAWA, Graduate School of Engineering, Osaka University, Professor
相手国側開催責任者 氏名・所属・職 (※本以外での開催の場合)	(英文) Stefan BLUEGEL, Forschungszentrum, Jülich, Germany, Director

参加者数

派遣先 派遣元	セミナー開催国 ( ドイツ )	
日本 <人/人日>	A.	8/48
	B.	0/0
	C.	0/0
ドイツ <人/人日>	A.	0/0
	B.	0/0
	C.	12/38
スウェーデン <人/人日>	A.	0/0
	B.	0/0
	C.	4/12
フィンランド <人/人日>	A.	0/0
	B.	0/0
	C.	3/12
米国 <人/人日>	A.	0/0
	B.	0/0
	C.	3/18
合計 <人/人日>	A.	8/48
	B.	0/0
	C.	22/80

A.セミナー経費から旅費を負担

B.共同研究・研究者交流から旅費を負担

C.本事業経費から旅費を負担しない（参加研究者リストに記載されていない研究者は集計しないでください。）

セミナー開催の目的	<p>表面に吸着した機能性磁性分子を密度汎関数法に基づいて理論的に研究する研究者が集まって、分子磁性と分子スピントロニクスに関する最新の情報を交換することを目的としたワークショップである。理論が中心であるが、新しい機能性磁性分子の合成や、走査プローブ顕微鏡やシンクロトロン放射を用いた表面一吸着分子系の先導的研究を行っている少数の実験家の参加も予定している。</p>											
期待される成果	<p>分子スピントロニクスに関する、第一原理電子状態計算に基づく最先端の研究成果を持ち寄ることによって、今後の省エネルギーデバイス、スピントロニクスデバイスへ向けた研究を促進することができる。</p>											
セミナーの運営組織	<p>ドイツ側はCECAM (Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire)と<math>\Psi</math>-k ネットワークへの支援のもとに開催を予定している。若手研究者3名とドイツ側拠点の代表者であるブリューゲル教授が運営委員である。日本側は工学部森川教授がとりまとめを行い、ドイツ側と協力してセミナーに参加する。</p>											
開催経費 分担内容 と概算額	日本側	内容	<table border="0"> <tr> <td>外国旅費</td> <td>金額</td> <td>2,000千円</td> </tr> <tr> <td>消費税</td> <td></td> <td>100千円</td> </tr> <tr> <td></td> <td>合計</td> <td>2,100千円</td> </tr> </table>	外国旅費	金額	2,000千円	消費税		100千円		合計	2,100千円
	外国旅費	金額	2,000千円									
	消費税		100千円									
	合計	2,100千円										
(ドイツ)側	内容	<table border="0"> <tr> <td>会場費</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>国内旅費</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>消耗品</td> <td></td> <td></td> </tr> </table>	会場費			国内旅費			消耗品			
会場費												
国内旅費												
消耗品												
(スウェーデン)側	内容	<table border="0"> <tr> <td>外国旅費</td> <td></td> <td></td> </tr> </table>	外国旅費									
外国旅費												

	(フィンランド) 側	内容 外国旅費
	(米国) 側	内容 外国旅費

### 8-3 研究者交流（共同研究、セミナー以外の交流）

24年度は実施せず。

## 9. 平成24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>	合計 <人/人日>
日本 <人/人日>		13/198	2/60	1/30	2/60	18/348
ドイツ <人/人日>	(10/125)		(0/0)	(0/0)	(0/0)	0/0 (10/125)
スウェーデン <人/人日>	(5/75)	(4/12)		(0/0)	(0/0)	0/0 (9/87)
フィンランド <人/人日>	(4/70)	(3/12)	(0/0)		(0/0)	0/0 (7/82)
米国 <人/人日>	(5/70)	(3/18)	(0/0)	(0/0)		0/0 (8/88)
合計 <人/人日>	0/0 (24/340)	13/198 (10/42)	2/60	1/30	2/60	18/348 (34/382)

※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。）

※日本側予算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。（合計欄は（ ）をのぞいた人数・人日数としてください。）

### 9-2 国内での交流計画

55/145 <人/人日>
---------------

## 10. 平成24年度経費使用見込み額

(単位千円)

	経費内訳	金額	備考
研究交流経費	国内旅費	800	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	10,000	
	謝金	80	会議開催に関わるアルバイト
	備品・消耗品購入費	120	印刷用消耗費等
	その他経費	496	会議開催に関わる費用
	外国旅費・謝金等に係る消費税	504	
	計	12,000	研究交流経費配分額以内であること
委託手数料		1,200	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		13,200	

## 11. 四半期毎の経費使用見込み額及び交流計画

	経費使用見込み額 (円)	交流計画人数<人/人日>
第1四半期	3,000,000	39/195
第2四半期	3,000,000	12/100
第3四半期	3,000,000	12/100
第4四半期	3,000,000	10/98
合計	12,000,000	73/493