

## 研究拠点形成事業 平成25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(2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) 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

(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®) 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」

- ・ 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大阪大学で開催し、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。
- ・ 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。
- ・ 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ド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。
- ・ 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。
- ・ 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。

#### 「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。
- ・ 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グランドデザイ

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。

- ・ 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」

- ・ 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、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。
- ・ 本プログラムに参加する若手研究者が、さきがけ研究21などのプロジェクトにも採択されるとともに、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が可能になった。

## 7. 平成25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。

#### 今年度の目標

##### 「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基金の取得に努め、これらを実行する。
- ・ 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つよめる。
- ・ 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。

#### 「学術的観点」

- 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、人的な交流を年単位で長期に行い、共同研究により問題点を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で実施する。
- 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、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 CMD ワークショップを開催し、デザイン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国際共同研究を加速して、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。

- 上記以外にも、共同研究や人材育成をめざしたワークショップへの参加を可能にするため、多くの若手研究者を Psi-k ワークショップ、国際スクールや国際共同研究に参画させる。

## 8. 平成25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) <b>グリーンエネルギー計算機ナノマテリアルデザイン</b> (英文) <b>Computational Materials Design on Green Energy</b>				
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 <b>Osaka University, Professor</b>				
相手国側代表 者 氏名・所属・ 職	(英文) <b>Stefan BLUEGEL</b> , Peter Grünberg Institute, Institute for Advanced Simulation, Forschungszentrum Jülich, Director <b>Olle ERIKSSON</b> , Department of Physics and Astronomy, Uppsala University, Professor <b>Risto NIEMINEN</b> , Department of Applied Physics, Aalto University, Professor <b>Su-Huai WEI</b> , Theoretical Materials Science Group , National Renewable Energy Laboratory, Team Leader				
参加者数	日本側参加者数	90 名			
	(ドイツ)側参加者数	26 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			
25年度の 研究交流活動 計画	<p>H25年度は、(1)6月に淡路島国際会議場で、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。(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、KKR法に特化したワークショップを英国で開催する。(3)スタンフォード大学が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スクールを開催する。(4)さらに、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、ワークショップをユーリッヒ研究所で開催する。</p> <p>上記に加えて、(5)大規模科学計算を可能にするKKR-nano手法の開発と</p>				



	<p>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、(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。(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実施する。</p>
<p>25 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) 淡路島国際会議場で、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、H24 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う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、および、省エネルギーのためのスピントロニクス材料、二次電池、高い Tc 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) KKR 法に特化して英国で開催する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。(3) スタンフォード大学が中心となって行う有機分子エレクトロニクスや触媒に関する国際スクールでは、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。(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 Tc と巨大物性応答の開発）が可能になる。(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。(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>

## 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「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 25 年 6 月 16 日 ～ 平成 25 年 6 月 19 日 (4 日間)
開催地 (国名、都市名、会場名)	(和文) 兵庫県、淡路市、兵庫県立淡路夢舞台国際会議場 (英文) Hyogo, Awaji City, Awaji Yumebutai International Conference Center
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)

派遣先 派遣元		セミナー開催国 (日本)	
		A.	B.
日本 <人/人日>	A.	68 / 272	
	B.		
ドイツ <人/人日>	A.	11 / 44	
	B.		
スウェーデン <人/人日>	A.	1 / 4	
	B.		
カナダ (日本 側参加者) <人/人日>	A.	1 / 4	
	B.		
合計 <人/人日>	A.	81 / 324	
	B.		

### 参加者数

- 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)

<p>セミナー開催の目的</p>	<p>本セミナーの目的は、H24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、H25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模索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い、これらに立脚して、デザイン主導による実証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。</p>
<p>期待される成果</p>	<p>創エネルギーとしての太陽電池材料、および、熱電材料では、自己組織化ナノ超構造による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、マルチフェロイックによる強磁性と強誘電性の結合、二次電池の高機能化、高い<math>T_c</math>をもつ超伝導材料、希土類を用いない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と実証が可能になる。これらに立脚し、実証実験の提案を行うことができる。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る。これらに立脚して、デザイン主導による実証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が明らかになる。</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（阪大特任教授）、笠井秀明（阪大院工）、森川良忠（阪大院工）、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</p>

		<p>Physics and Astronomy, Uppsala University), Risto NIEMINEN (Department of Applied Physics, Aalto University), Su-Huai WEI (Theoretical Materials Science Group, National Renewable Energy Laboratory)</p> <p>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>												
開催経費 分担内容 と概算額	日本側	<table border="1"> <thead> <tr> <th>内容</th> <th>金額</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>国内旅費</td> <td>700,000 円</td> </tr> <tr> <td>外国旅費（日本側参加者 Elod GYENGE の旅費：福井-淡路-大阪-カナダ間）</td> <td>130,000 円</td> </tr> <tr> <td>謝金（学生アルバイト料）</td> <td>76,000 円</td> </tr> <tr> <td>消耗品</td> <td>60,000 円</td> </tr> <tr> <td>その他経費（会議開催費用）</td> <td>1,700,000 円</td> </tr> </tbody> </table>	内容	金額	国内旅費	700,000 円	外国旅費（日本側参加者 Elod GYENGE の旅費：福井-淡路-大阪-カナダ間）	130,000 円	謝金（学生アルバイト料）	76,000 円	消耗品	60,000 円	その他経費（会議開催費用）	1,700,000 円
	内容	金額												
	国内旅費	700,000 円												
	外国旅費（日本側参加者 Elod GYENGE の旅費：福井-淡路-大阪-カナダ間）	130,000 円												
謝金（学生アルバイト料）	76,000 円													
消耗品	60,000 円													
その他経費（会議開催費用）	1,700,000 円													
(ドイツ) 側	内容 旅費													
(スウェーデン) 側	内容 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「電子スペクトル・輸送および磁性計算のための KKR グリーン関数法」
	(英文) JSPS Core-to-Core Program “KKR Green functions for calculations of spectroscopic, transport and magnetic properties”
開催期間	平成 25 年 7 月 8 日 ~ 平成 25 年 7 月 12 日 (5 日間)
開催地 (国名、都市名、会場名)	(和文) 英国、ワーウィック、ワーウィック大学
	(英文) UK, Warwick, Warwick University
日本側開催責任者 氏名・所属・職	(和文) 赤井久純、大阪大学、特任教授
	(英文) Hisazumi Akai, 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) 1) Dr. Jan Minar, Dept. Chemie, Phys. Chemie, Ludwig Maximilians University, Munich, Germany, PD Researcher 2) Dr. Martin Lueders, Daresbury Laboratory, United Kingdom, Researcher 3) Dr. Julie Staunton, University of Warwick, United Kingdom, Professor

派遣先 派遣元		セミナー開催国 (英国)	
		A.	B.
日本 〈人／人日〉	A.	10 / 50	
	B.		
ドイツ 〈人／人日〉	A.	12 / 60	
	B.		
スウェーデン 〈人／人日〉	A.	1 / 5	
	B.		
フィンランド 〈人／人日〉	A.	2 / 10	
	B.		
米国 〈人／人日〉	A.	1 / 5	
	B.		
合計 〈人／人日〉	A.	26 / 130	
	B.	0	

参加者数

- 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)

<p>セミナー開催の目的</p>	<p><b>KKR</b> グリーン関数法は直接一電子グリーン関数を計算手法であり、他の電子状態計算では取扱いの難しい不純物問題や不規則系、半導体ドーピング、輸送現象や電子スペクトルの直接計算ができる手法である。この手法の新しい発展に関して電子状態計算コミュニティで情報を共有すること、およびこの手法を用いた最新の研究成果について情報を得るためにセミナーを開催する。<b>KKR</b> コミュニティーには日本、ドイツの研究者が多いが、ヨーロッパでは歴史的に英国を中心に <b>KKR</b> 法が発展した。特に英国のワーウィック、ブリストル、ダースベリーには研究活動の一つの中心があり、ワーウィックでセミナー開催することには研究協力の推進および情報収集の有利性の観点から大きなメリットがある。</p>		
<p>期待される成果</p>	<p><b>KKR</b> グリーン関数法はスピントロニクス材料やエネルギー変換材料などの、ドーピングや混晶化・合金化が基本的に重要な系、あるいはデバイスの基本構造である多層膜等に適用され、次々に新しい成果がでており、このような系に対してより最適化された手法の発展も著しい。さらに、局所密度近似を超えるための多体電子論への応用も急激に進んでいる。これらの進展に関する情報を交換するとともに、共同研究を促進することによって、グリーンエネルギー材料へ向けた計算機マテリアルデザイン能力が格段に向上し、新しい展開が期待される。</p>		
<p>セミナーの運営組織</p>	<p>ヨーロッパ側でワーリック大学、ダースベリー研究所、ミュンヘン大学（本プログラム研究拠点）の <b>KKR</b> 研究者が基本的に運営する。日本側は大阪大学・赤井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 <b>CECAM</b> 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</p> <p>外国旅費 10 人×280,000</p> <p>その他経費（参加費）10 人×30,000</p> <p>消費税</p>	<p>金額</p> <p>2,800,000 円</p> <p>300,000 円</p> <p>140,000 円</p>
	<p>（ドイツ）側</p>	<p>内容 参加費 旅費</p>	
	<p>（スウェーデン）側</p>	<p>内容 参加費 旅費</p>	
	<p>（フィンランド）側</p>	<p>内容 参加費 旅費</p>	
	<p>（米国）側</p>	<p>内容 参加費 旅費</p>	

整理番号	S-3
セミナー名	(和文) 日本学術振興会研究拠点形成事業「SLAC/スタンフォード サマーセミナー2013 “不均一触媒”」 (英文) JSPS Core-to-Core Program “SLAC / Stanford Summer School 2013: Heterogenous Catalysis for Energy Transformations“
開催期間	平成 25 年 8 月 24 日 ～ 平成 25 年 8 月 31 日 (8 日間)
開催地 (国名、都市名、会場名)	(和文) 米国, カリフォルニア, スタンフォード大学 (英文) USA ,CA, Stanford SLAC/Stanford University
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 (※日本以外での開催の場合)	(英文) Frank Abild-Pederse Jens S. Hummelshøj Associate Staff Scientist, SUNCAT Center for Interface Science and Catalysis, Photon Science, SLAC Aleksandra Vojvodic, Felix Studt, Thomas Bligaard, Jens K. Nørskov

#### 参加者数

派遣先 派遣元		セミナー開催国 (米国)
日本 〈人/人日〉	A.	6/ 48
	B.	
〈人/人日〉	A.	
	B.	
〈人/人日〉	A.	
	B.	
合計 〈人/人日〉	A.	6/ 48
	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)

<p>セミナー開催の目的</p>	<p>このサマースクールでは、大学院生や若い研究者を対象として、今後益々重要となる太陽エネルギーの高効率利用を可能にするデバイスの設計・構築を研究する基礎的素養を身につけることを目的として、燃料電池や太陽電池、光触媒等、エネルギー変換デバイスで重要となる界面での化学反応過程や電子移動過程を理解するための表面での分子吸着や化学反応過程の基礎理論と、いくつかの重要な系に対する最新の適用研究についてセミナーを行う。</p>		
<p>期待される成果</p>	<p>燃料電池や太陽電池、光触媒、二次電池等の研究は、今後の太陽エネルギーの高効率利用に向けた非常に重要な研究課題である。これらのデバイスでは、界面での分子の吸着や反応、さらには、電子移動過程が重要となる。このサマースクールではこれらの過程での基礎的理論や実験結果に関する講義と演習があり、受講した大学院生や若手の研究者が、今後これらの分野の研究者として活躍する際の重要な知識を身につけることが期待される。また、同分野の世界中の大学院生と知り合いになることも重要である。</p>		
<p>セミナーの運営組織</p>	<p>このサマースクールはスタンフォード線形加速器国立研究所のプロジェクトによってサポートされている。日本側からの参加者は森川が取りまとめ、Core-to-core プログラムからサポートを行う。</p>		
<p>開催経費 分担内容 と概算額</p>	<p>日本側</p>	<p>内容</p> <p>外国旅費 6名×250,000</p> <p>その他経費（参加登録費） 30,000×6名</p> <p>消費税</p>	<p>金額</p> <p>1,500,000 円</p> <p>180,000 円</p> <p>84,000 円</p>



整理番号	S-4
セミナー名	(和文) 日本学術振興会研究拠点形成事業「高効率エネルギー変換と省エネルギーナノエレクトロニクスのための計算機マテリアルデザイン」
	(英文) JSPS Core-to-Core Program “Computational materials design and realization for energy harvesting and saving “
開催期間	平成 25 年 11 月 11 日 ～ 平成 25 年 11 月 12 日 (2 日間)
開催地 (国名、都市名、会場名)	(和文) ドイツ、ユーリッヒ、ユーリッヒ研究所
	(英文) Research center Juelich, Germany
日本側開催責任者 氏名・所属・職	(和文) 佐藤和則、大阪大学、准教授 小野倫也、大阪大学、助教
	(英文) Kazunori Sato, Osaka Univ., Associate Professor Tomoya Ono, Osaka Univ., Assistant 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) Dr. Gustav Bihlmayer, FZ-Juelich, Germany, Researcher Dr. Daniel Wortmann, FZ-Juelich, Germany, Researcher

#### 参加者数

派遣先 派遣元	セミナー開催国 (ドイツ)	
	A.	B.
日本 〈人/人日〉	A.	15/ 30
	B.	
ドイツ 〈人/人日〉	A.	10/ 20
	B.	20
スウェーデン 〈人/人日〉	A.	3/ 6
	B.	
フィンランド 〈人/人日〉	A.	3/ 6
	B.	
合計 〈人/人日〉	A.	31/ 62
	B.	20

- 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)

セミナー開催の目的	<p>資源・環境・エネルギー問題の解決のために革新的な機能を備えた材料や、それを用いた電子デバイスの設計が第一原理電子状態計算を用いて行われている。本セミナーでは、特に太陽電池材料、熱電材料、省エネルギー電子デバイス等に注目し最新の計算機ナノマテリアルデザインについて議論し情報交換するとともに、対応する実証実験と比較検討し、グリーンイノベーションに資するアイデアの創出を目指す。</p>		
期待される成果	<p>元素戦略は希少元素を用いないというだけではなく、ありふれた元素の組み合わせをナノスケールで制御することにより有用な機能を発現させることで実現される。そのため同様なアプローチが異なる新機能材料の設計に適応可能な場合があり、最新のデザイン情報の交換は新しいグリーンエネルギー材料の提案につながると期待される。また、計算機マテリアルデザインは実証実験を経て初めて意味のあるものとなるため、実証実験との比較はデザインの精度をあげるため必要不可欠である。さらに、実際の実験でおこっている現象を仔細に調べることでデザインの新しい発想法の開拓が期待される。</p>		
セミナーの運営組織	<p>セミナーはユーリッヒ研究センター（本プログラム研究拠点）内で開催する予定で、現地での運営はユーリッヒ研究センターの G. Bihlmayer 博士と D. Wortmann 博士が取りまとめる。セミナーの企画立案およびプログラムの構成は日本側が受け持ち大阪大学の佐藤和則と小野倫也がおこなう。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>		
開催経費 分担内容 と概算額	日本側	<p>内容</p> <p>国内旅費 4人×5万</p> <p>外国旅費 10人×28万</p> <p>消費税</p>	<p>金額</p> <p>200,000円</p> <p>2,800,000円</p> <p>140,000円</p>
	(ドイツ)側	内容 国内旅費	
	(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	

8-3 研究者交流（共同研究、セミナー以外の交流）  
平成25年度は実施しない

## 9. 平成25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〉	英国 (第3国) 〈人/人日〉	カナダ(日本側参 加者) 〈人/人日〉	合計 〈人/人日〉
日本 〈人/人日〉		16/43 ( 1/271 )	( )	( )	7/74 ( )	10/50 ( )	( )	33/167 ( 1/271 )
ドイツ 〈人/人日〉	( 11/44 )		( )	( )	( )	( 12/60 )	( )	0/0 ( 23/104 )
スウェーデン 〈人/人日〉	( 1/4 )	( 3/6 )		( )	( )	( 1/5 )	( )	0/0 ( 5/15 )
フィンランド 〈人/人日〉	( )	( 3/6 )	( )		( )	( 2/10 )	( )	0/0 ( 5/16 )
米国 〈人/人日〉	( )	( )	( )	( )		( 1/5 )	( )	0/0 ( 1/5 )
英国 (第3国) 〈人/人日〉	( )	( )	( )	( )	( )			0/0 ( 0/0 )
カナダ(日 本側参加 者) 〈人/人日〉	1/4 ( )	( )	( )	( )	( )			1/4 ( 0/0 )
合計 〈人/人日〉	1/4 ( 12/48 )	16/43 ( 7/283 )	0/0 ( 0/0 )	0/0 ( 0/0 )	7/74 ( 0/0 )	10/50 ( 16/80 )	0/0 ( 0/0 )	34/171 ( 35/411 )

※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

68/ 272 〈人/人日〉
----------------

10. 平成25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	980,000	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	8,230,000	
	謝金	76,000	
	備品・消耗品購入費	60,000	
	その他の経費	2,180,000	
	外国旅費・謝金等に係る消費税	414,000	
	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	