

**研究拠点形成事業**  
**平成26年度 実施報告書**  
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材料デザイン

(交流分野：計算機材料デザイン)

(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：大阪大学総務企画部国際交流課

**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. 研究交流目標

## 5-1. 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継続的に発展させる。
- (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。

## 5-2. 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ざす。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。スピネ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/>)

## 6. 平成26年度研究交流成果

(交流を通じての相手国からの貢献及び相手国への貢献を含めてください。)

### 6-1 研究協力体制の構築状況

- ・ 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。
- ・ 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デザインによる新元素戦略』に本グループが3年計画で採択され、将来の大規模研究外部資金を得るための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と2日間のワークショップを国際高等研究所で行った。
- ・ 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採択された。日米欧の本プロジェクトも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。継続的に計算機ナノマテリアルデザインの手法開発と応用/普及を可能にするセンターの設立をめざし2年間にわたる努力の結果、大型予算新規事業・文部科学省大型プロジェクト「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」(ロードマップ2014に227件のなかから10件の中に最終的に採択された。10年間50億円：予算はH28年度概算要求) H P 参照  
[http://www.mext.go.jp/b\\_menu/shingi/gijyutu/gijyutu4/toushin/1351171.htm](http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/gijyutu/gijyutu4/toushin/1351171.htm) 文部科
- ・ 若手人材育成のための研究協力体制を構築するため、大阪大学とユーリッヒ研究所の間でクロス・アポイントメント制度により平成27年1月1日から3月31日まで、P. H. Dederichs 教授を大阪大学で雇用し、若手研究者の教育および研究に従事した。また、熱電材料のデザイン研究のため JSPS 外国人特別研究員事業により海外の博士研究員を2年計画で大阪大学基礎工学研究科に招聘した。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、また、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した。

### 6-2 学術面の成果

- ・ 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、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。

- ・ 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年度も共同研究として継続した。
- ・ 高い超伝導転移温度を有する純粹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】、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 $T_c$ の計算である。策定した研究案に基づき、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。
- ・ オーダーN法などの大規模原子系をシミュレートする計算手法を共同開発し、ユーリッヒ研究所の超並列スーパーコンピュータを用いた計算機ナノマテリアルデザインにより、相転移メモリにスピン自由度を導入し、強磁性や反強磁性および電場による磁性制御法をデザインし、共同研究論文として発表した。
- ・ 局所密度近似(LDA)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、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共同研究を実施した。
- ・ 通常有機分子と金属表面の間には障壁があり電子はホッピング伝導となり、分子は機能エレクトロデバイスとして支障がある。そこで、分子終端をデザインし、それに適合する金属表面元素を第一原理計算で見つけ好適な接合界面を見出した。これは、有機分子を電子デバイスに応用するもの：有機太陽電池、有機ELディスプレイ、単分子エレクトロニクス、カーボンナノチューブの電子デバイス利用などに有用であることを明らかにした。

反強磁性ハーフメタル；一連の反強磁性ハーフメタル金属間化合物をデザインした。そのうちの一つであるニッケルヒ素型 (FeCr)Se<sub>2</sub> 多結晶焼結体が東京大学工学研究科田畑教授の研究室で合成され、反強磁性体であることが示された。

- ・ 時間反転のないラシュバ効果の物予測と実証実験による観測：ある特定の対称性をもつ表面系では時間反転対称性が不変でないk点でもラシュバ効果が起こり得ることを第一原理計算から示し、Bi/Si(111)表面において実際に観測された。これはスピントロニクス材料への応用が可能となることを示すものである。

### 6-3 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26年度、9月および2月、一回5日間、年二回開催）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学んだ。参加者は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。
- ・ 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2人採択され、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。

### 6-4 その他（社会貢献や独自の目的等）

計算機ナノマテリアルデザインワークショップ（平成26年度、9月および2月、一回5日間、年二回開催）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、社会人や他大学研究者および外国人研究者にデザイン手法開発・デザイン応用・実証手法について、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、社会貢献を行った。

(<http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/CMD/>) 年2回（1回5日間）開催しているCMDワー

クシヨップ（実習チュートリアル）の受講修了者は、平成 26 年度現在、1,100 名以上である。

#### 6-5 今後の課題・問題点

- (1) 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採択され、大阪大学グループは中心拠点として日米欧の本拠点形成プロジェクトの中心となり、スピントロニクス（省消費電力の革新的デバイス）の計算機ナノマテリアルデザインに関する研究と人材育成、デザイン主導による実証研究を担当する。継続的に計算機ナノマテリアルデザインの手法開発と応用／普及を可能にするセンターの設立をめざし 2 年間にわたる努力の結果、大型予算新規事業・文部科学省大型プロジェクト「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」（ロードマップ 2014 に 227 件のなかから 10 件の中に最終的に採択された。10 年間 50 億円：予算は H28 年度概算要求）これらは、ロードマップ 2014 には、10 件の内に採択はされたが、予算的措置が現時点ではなく、H28 年度の東北大学、東京大学、慶応義塾大学、大阪大学の 4 大学からなる概算要求により実現する必要がある。また、教授：1 と准教授：1 のポジションは確保したが、若手教員のポジション（3～4）が不可欠であり、それらを確保する努力が不可欠である。
- (2) 計算機ナノマテリアルデザインに関するソフトウェア開発やデザイン手法の開発は長期時間と高いスキルを持つ若手研究者の参加が不可欠であるが、若手研究者のキャリアパスのデザインと実行を長期的に行う必要があり、拠点形成プログラムの中で、これらを長期的視野（10～20 年）に立ってどのように企画立案し、財政措置してゆくかが、学術研究の国際競争力を確保する上で最重要課題であり、また、最も困難な問題であり、良い解決策が見いだせない。

#### 6-6 本研究交流事業により発表された論文

平成 26 年度論文総数	28 本
相手国参加研究者との共著	4 本

(※ 「本事業名が明記されているもの」を計上・記入してください。)

(※ 詳細は別紙「論文リスト」に記入してください。)

## 7. 平成26年度研究交流実績状況

### 7-1 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 <u>Su-Huai WEI</u> , 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	30 名			
	(スウェーデン) 側参加者数	6 名			
	(フィンランド) 側参加者数	6 名			
	(米国) 側参加者数	7 名			
26年度の研究 交流活動	H26年度は、 (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【スピンエレクトロニクス材料、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した。 (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目指したワークショップをドイツで開催した。 (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した。 (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				

	<p>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目指したワークショップをユーリッヒ研究所で開催した。</p> <p>(5) 前年度同様、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した。</p> <p>(6) 前年度同様、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った。</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、) で実施した。</p>
<p>26 年度の研究交流活動から得られた成果</p>	<p>(1) 大阪大学基礎工学研究科で開催した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、共同研究を目指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を用いたデザインと実証実験提案が可能になった。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った。</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った。</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目指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) が可能になった。</p> <p>(5) 前年度同様、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可能になった。</p>

	<p>(6) 前年度同様、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った。</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 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>
--	--

## 7-2 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 (※日本以外で開催の場合)	(英文)

### 参加者数

派遣先 派遣		セミナー開催国 (日本)
日本 〈人／人日〉	A.	56/ 164
	B.	11
ドイツ 〈人／人日〉	A.	6/ 29
	B.	1
スウェーデン 〈人／人日〉	A.	2/ 11
	B.	
英国 〈人／人日〉	A.	
	B.	1
韓国 〈人／人日〉	A.	
	B.	1
合計 〈人／人日〉	A.	64/ 204
	B.	14

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>セミナーの成果</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った。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 Tc 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 Tc 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った。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た。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なった。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した。</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</p>

		<p>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）、中西寛（阪大院工）、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)</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、プログラム内容をとりまとめた。日本側は大阪大学・吉田がとりまとめを行った。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の補助をうけた。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 と金額	日本側	内容	金額
		物品	4,962 円
		会議費	715,650 円
		国内旅費	715,782 円
		外国旅費（招聘）	675,212 円
		税金	40,028 円
		合計	2,151,634 円
	ドイツ側	内容	
		旅費	マッチングファンド
	スウェーデン側	内容	
		旅費	マッチングファンド

7-3 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)	派遣期間	用務・目的等
大阪大学・教授 笠井 秀明	ドイツ ・ドレスデン	H26. 5. 6-H26. 5. 10	IEEE International Magnetics Conference に参加・研究交流と情報収 集
広島大学・助教 獅子堂 達也	フランス・グ ルノーブル	H26. 7. 6 -H26. 7. 11	SCES2014 に参加・研究交流と情報収集
大阪大学・博士 (前期) 課程 山口 貴士	スペイン・ビ ルバオ	H26. 7. 5-H26. 7. 12	ICOMAT2014 参加・研究交流と情報収集
大阪大学・准教 授 佐藤 和則	スペイン・ビ ルバオ	H26. 7. 5-H26. 7. 12	ICOMAT2014 参加・研究交流と情報収集
大阪大学・教授 掛下 知行	スペイン・ビ ルバオ	H26. 7. 5-H26. 7. 12	ICOMAT2014 参加・研究交流と情報収集
大阪大学・講師 寺井 智之	スペイン・ビ ルバオ	H26. 7. 5-H26. 7. 13	ICOMAT2014 参加・研究交流と情報収集
大阪大学・特任 研究員 船島 洋紀	アメリカ・サ ンアントニ オ	H27. 2. 28-H27. 3. 8	APS March Meeting 参加・研究交流と 情報収集
大阪大学・博士 (後期) 課程 新屋 ひかり	アメリカ・サ ンアントニ オ	H27. 2. 28-H27. 3. 8	APS March Meeting 参加・研究交流と 情報収集
大阪大学・特任 研究員 植本 光治	アメリカ・サ ンアントニ オ	H27. 2. 28-H27. 3. 8	APS March Meeting 参加・研究交流と 情報収集

## 8. 平成26年度研究交流実績総人数・人日数

### 8-1 相手国との交流実績

派遣先 派遣元	四半期	日本	ドイツ	スウェーデン	フィンランド	米国	スペイン(第3国)	フランス(第3国)	合計
日本	1		3/ 80 ( )	( )	( )	( )	( )	1/ 6 ( )	4/ 86 ( 0/ 0 )
	2		( )	( )	( )	2/ 96 ( )	4/ 33 ( )	( )	6/ 129 ( 0/ 0 )
	3		( )	( )	( )	1/ 86 ( )	( )	( )	1/ 86 ( 0/ 0 )
	4		( )	( )	( )	4/ 89 ( 4/ 36 )	( )	( )	4/ 89 ( 4/ 36 )
	計		3/ 80 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	7/ 271 ( 4/ 36 )	4/ 33 ( 0/ 0 )	1/ 6 ( 0/ 0 )	15/ 390 ( 4/ 36 )
ドイツ	1	1/ 5 ( 6/ 29 )		( )	( )	( )	( )	( )	1/ 5 ( 6/ 29 )
	2	( )		( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	3	( 1/ 6 )		( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 1/ 6 )
	4	( 1/ 18 )		( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 1/ 18 )
	計	1/ 5 ( 8/ 53 )		0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	1/ 5 ( 8/ 53 )
スウェーデン	1	( 2/ 11 )	( )		( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 2/ 11 )
	2	( )	( )		( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	3	( )	( )		( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	4	( )	( )		( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	計	0/ 0 ( 2/ 11 )	0/ 0 ( 0/ 0 )		0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 2/ 11 )
フィンランド	1	( )	( )	( )		( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	2	( )	( )	( )		( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	3	( )	( )	( )		( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	4	( )	( )	( )		( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	計	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )		0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )
米国	1	( )	( )	( )	( )		( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	2	( )	( )	( )	( )		( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	3	( 1/ 6 )	( )	( )	( )		( )	( )	0/ 0 ( 1/ 6 )
	4	( )	( )	( )	( )		( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	計	0/ 0 ( 1/ 6 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )		0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 1/ 6 )
英国(第3国)	1	1/ 9 ( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	1/ 9 ( 0/ 0 )
	2	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	3	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	4	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	計	1/ 9 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	1/ 9 ( 0/ 0 )
韓国(第3国)	1	1/ 4 ( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	1/ 4 ( 0/ 0 )
	2	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	3	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	4	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	計	1/ 4 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	1/ 4 ( 0/ 0 )
スペイン(第3国)	1	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	2	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	3	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	4	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	計	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )
フランス(第3国)	1	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	2	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	3	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	4	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	計	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )
合計	1	3/ 18 ( 8/ 40 )	3/ 80 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	1/ 6 ( 0/ 0 )	7/ 104 ( 8/ 40 )
	2	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	2/ 96 ( 0/ 0 )	4/ 33 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	6/ 129 ( 0/ 0 )
	3	0/ 0 ( 2/ 12 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	1/ 86 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	1/ 86 ( 2/ 12 )
	4	0/ 0 ( 1/ 18 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	4/ 89 ( 4/ 36 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	4/ 89 ( 5/ 54 )
	計	3/ 18 ( 11/ 70 )	3/ 80 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	7/ 271 ( 4/ 36 )	4/ 33 ( 0/ 0 )	1/ 6 ( 0/ 0 )	15/ 408 ( 15/ 106 )

※各国別に、研究者交流・共同研究・セミナーにて交流した人数・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。

8-2 国内での交流実績

1	2	3	4	合計
15/ 46 ( 53/ 137 )	1/ 3 ( )	0/ 0 ( 6/ 24 )	0/ 0 ( 44/ 76 )	<b>16/ 49</b> ( 103/ 237 )

## 9. 平成26年度経費使用総額

(単位 円)

	経費内訳	金額	備考
研究交流経費	国内旅費	774,900	
	外国旅費	8,915,910	
	謝金	0	
	備品・消耗品 購入費	4,962	
	その他の経費	1,508,954	
	外国旅費・謝 金等に係る消 費税	735,274	
	計	11,940,000	
業務委託手数料		1,194,000	
合 計		13,134,000	

## 10. 平成26年度相手国マッチングファンド使用額

相手国名	平成26年度使用額	
	現地通貨額[現地通貨単位]	日本円換算額
ドイツ	39.200 [ユーロ]	4,000,000 円相当
スウェーデン	355.000 [クローネ]	4,000,000 円相当
フィンランド	39.200 [ユーロ]	4,000,000 円相当
米国	52.000 [米ドル]	4,000,000 円相当

※交流実施期間中に、相手国が本事業のために使用したマッチングファンドの金額について、現地通貨での金額、及び日本円換算額を記入してください。