

研究拠点形成事業 平成27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

3. 採用期間

平成24年4月1日 ～ 平成29年3月31日

(4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

(4) 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標と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や CMD ワークショップを実施する。
- (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 ファウンドリーや量子シミュレーション・ファウンド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・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】
- 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、クロスアポイント契約により平成 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資することとした。また、熱電材料のデザイン研究のため JSPS の海外博士研究員を 2 年計画で大阪大学基礎工学研究科に招聘した。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。【平成 26 年度】
- 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(NREL)とCIGS、CZTSSeなどの太陽電池材料について、具体的な大阪大学グループのデザインとNRELにおける実証実験共同研究を行った。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行い、H27年度に相変化メモリにスピン自由度を導入するための共同論文を出版した。

- ・ 創省エネルギー材料のための低コスト／高効率エネルギー変換を可能にする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行い、実証実験のための共同研究体制の強化をNRELとの間で行った。さらには、デザイン主導による実証を含めた成功例を構築するための研究協力体制の強化を行うためスピントロニクス研究では、ドイツと日本との共同研究でデザインと実証による大きな成果が得られつつある。【平成26年度】
- ・ 本プロジェクトで開発公開・ソフトウェアを更新し、CMDワークショップや国際ワークショップで公開し、講習会、応用、権利化法などの指導を行っている新しい量子シミュレーション手法には、下記のものがある。
 - OSAKA-2010-nano (第一原理分子動力学法、開発者：白井光雲)
 - MACHIKANEYAMA-2010 (AKAI-KKR、開発者：赤井久純)
 - TSPACE (群論シミュレータ、開発者：柳瀬章／船島洋紀)
 - ABCAP (FLAPW法、開発者：浜田典昭)
 - NANIWA-2010 (量子シミュレーション、開発者：笠井秀明／中西寛)
 - HiLAPW-2010 (相対論的FLAPW法：小口多美夫)
 - STATE-senri-2010 (ウルトラソフト擬ポテンシャル法、開発者：森川良忠)
 - PSIC-Machi-2010 (自己相互作用補正KKR法、開発者：豊田雅之)
 - RSPACE (実空間差分法、開発者：小野倫也)
- ・ ● QSGW (準粒子セルフコンシステントGW法、開発者：小谷岳生)
【平成26年度】

- ・ 10年以上にわたり、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)。HP参照

http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/gijyutu/gijyutu4/toushin/1351171.htm 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に採択下記HP参照)では、東京大学、東北大学、大阪大学、慶応大学が全国の大学を連ねる中心拠点となるが、特に大阪大学は本プロジェクトが中心となり省エネルギー

デバイスとしてのスピントロニクスに関する「スピントロニクス材料デザイン・素子設計」を担当し、長期的研究活動の拠点とする。

http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/gijyutu/gijyutu4/toushin/_icsFiles/afielddfile/2014/08/26/1351171_1.pdf

- 平成 27 年 2 月 28 日～3 月 6 日、米国テキサス州サンアントニオにおいて、Core-to-Core プログラムの H27 年度企画立案会議およびその研究成果の発表を行い、下記の H27 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 26 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、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、これらが高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した。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。

- 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イ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ナノ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。
- 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、 $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})(\text{S}, \text{Se})_2$ 、 $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S}, \text{Se})_4$ などの次世代太陽電池材料における欠陥の自己修復機構やスピノーダル・ナノ分解による自己組織化ナノ超構造の創製法およびスピノーダル・ナノ分解によるタイプ 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のデザインを行い、また、国際共同研究によりこれらを実証する実験を行い、自己修復機構や自己組織化を利用した高効率化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。【平成 26 年度】
- 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、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。【平成 26 年度】

- 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 (2年間) による共同研究開発をおこなった。また、韓国 KAIST の研究者もこれらの開発に参加した。【平成 26 年度】
- 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。【平成 26 年度】
- 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、分子を機能エレクトロデバイスとして支障がある。そこで、分子末端をデザインし、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。【平成 26 年度】
- 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 $(\text{FeCr})\text{Se}_2$ 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。【平成 26 年度】
- スピネル障壁トンネル磁気抵抗素子の伝導特性：スピネル障壁 $\text{Fe}/\text{MgAl}_2\text{O}_4/\text{Fe}$ 接合では、 MgAl_2O_4 と Fe の格子定数の違いにより、 Fe の伝導バンドが折りたたまれて少数スピン状態に新たな Δ_1 伝導チャネルが出現するため、トンネル磁気抵抗比は $\text{Fe}/\text{MgO}/\text{Fe}$ 接合と比較して 1 桁程度小さくなると理論予測された。一方、陽イオンの配列が不規則化したスピネル障壁では伝導バンドの折りたたみ効果が抑制され、トンネル磁気抵抗比が向上することが実験的に検証されている。【平成 26 年度】
- 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。これらはスピントロニクス材料への応用が可能となる【平成 26 年度】

- 高い Tc を持つボロンカーバイト超伝導の価電子制御法のデザイン：ボロンカーバイトは高い Tc 超伝導として期待されているが、これまで電子的性質は DFT 計算を行っても実験と全く合わなかった。エネルギーギャップ、欠陥構造、光学的性質、いずれも理論と実験が著しい違いをみせ、この 30 年間未解決の問題として残っていた。それら不一致の全てが、フラストレーションという新しい構造概念で一気に解決された。これによりこの系の価電子制御の方向性が示された。K. Shirai, K. Sakuma, and N. Uemura, "Theoretical study of the structure of boron carbide B₁₂C₂", Phys. Rev. B **90**, 064109 (2014). 【平成 26 年度】
- チタン酸ストロンチウム表面構造の予測と実証：チタン酸ストロンチウム (001) ($\sqrt{13} \times \sqrt{13}$) は幅広い酸素分圧において安定な再構成表面であるが、その表面構造を第一原理電子状態により予測し、その構造は独立した他の研究グループの Transmission electron diffractin 実験により実証された。また得られた構造を用いることで、得られた走査型トンネル顕微鏡の像も定性的に再現できるだけでなく、走査型トンネル分光像を理解することも可能にし、実験において観測された像の大きな電圧依存は、異なるチタンの d 軌道に由来している。<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ja509231w> 【平成 26 年度】
- 銅/酸化亜鉛を用いたメタノール合成の触媒表面構造の予測と実証：銅/酸化亜鉛を用いたメタノール合成の触媒において、平坦な Cu 表面は活性ではなく、Cu 表面上にアドアトムのように突出した Zn が反応の活性サイトで、そこに結合して大きく傾いたフォーメートが重要な反応中間体であると理論的に予測していた。最近、実験とより詳細な計算により、ステップに吸着した Zn が活性サイトである可能性が高いことが示された。【平成 26 年度】
- スピノーダルナノ分解による高いブロッキング温度の予測と実証：磁性半導体をベースとするナノスピントロニクス材料において、スピノーダルナノ分解を積極的に利用して次元性を制御した昆布相 (2D) や大理石相 (3D) による超常磁性状態を実現し、高いブロッキング温度を可能にするマテリアルデザインが行われ、フランス、東京、筑波、オーストリア、ポーランドのグループが Ge, GaN, GaAs をベースとして実証された。これらは現在、Review of Modern Physics に投稿中である。"Spinodal nanodecomposition in magnetically doped semiconductors", T. Dietl, K. Sato, T. Fukushima, A. Bonanni, M. Jamet, A. Barski, S. Kuroda, M. Tanaka, Pham Nam Hai, and H. Katayama-Yoshida.
- 本プロジェクトを構成する各研究グループは、第一原理計算手法の開発、それらを用いた現実物質のデザインや現実的なデバイスのデザインを専門としている研究者から構成されているが、各研究者は物質創成やデバイス創成の第一級の研究者と共同研究を実施し大きな成果が得られている (例えば、下記を参照。)

http://scholar.google.co.jp/citations?hl=en&user=VaJrvsAAAAAJ&view_op=list_works
【平成26年度】

- ・ 高い超伝導転移温度を持つ新高温超伝導体の多階層連結計算によるデザイン手法 (①電子格子相互作用による超伝導体のデザイン、②純粋に電子論的機構による電子間引力相互作用 (負の有効電子間相互作用) の一般則と第一原理計算による負の有効電子間相互作用デザイン、③負の有効電子間相互作用をもつハバードモデルによる量子モンテカルロ法による相図と T_c のデザイン) を開発し CuAlO_2 、 CuFeS_2 に適用し、超高温超伝導体のデザインを行った。
【平成26年度】

「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ニエレク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 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。
- ・ 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・応用を可能にした。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行った。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した。【平成26年度】

- ・ H26年6月に、大阪大学基礎工学研究科で国際ワークショップを開催し、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年度の共同研究計画や国際交流計画を自ら主体的に企画立案し、議論した。平成27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ワークショップ、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た。

<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25年度および平成26年度、9月および2月、一回5日間、年二回開催）や欧州において平成26年3月に開催した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、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ワークショップ（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。

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

http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/CMD/CMD25/index_CMD25.html

http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/CMD/CMD24/index_CMD24.html

http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/CMD/CMD23/index_CMD23.html

http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/CMD/CMD22/index_CMD22.html

7. 平成27年度研究交流目標

<研究協力体制の構築>

- ・ 本プロジェクトで開発公開・ソフトウェアを更新し、CMDワークショップや国際ワークシ

ヨップで公開し、講習会、応用、権利化法などの指導を行っている新しい量子シミュレーション手法について下記のを公開し、その使用法やデザイン手法、産業応用、知財化のための講習会をCMDワークショップとして実施する。使用する計算機ナノマテリアルデザインは以下のものである。

- OSAKA-2010-nano (第一原理分子動力学法、開発者：白井光雲)
- MACHIKANEYAMA-2010 (AKAI-KKR、開発者：赤井久純)
- TSPACE (群論シミュレータ、開発者：柳瀬章／船島洋紀)
- ABCAP (FLAPW 法：開発者：浜田典昭)
- NANIWA-2010 (量子シミュレーション、開発者：笠井秀明／中西寛)
- HiLAPW-2010 (相対論的 FLAPW 法：小口多美夫)
- STATE-senri-2010 (ウルトラソフト擬ポテンシャル法、開発者：森川良忠)
- PSIC-Machi-2010 (自己相互作用補正 KKR 法、開発者：豊田雅之／赤井久純)
- RSPACE (実空間差分法、開発者：小野倫也)
- QSGW (準粒子セルフコンシステント GW 法、開発者：小谷岳生)

- ・ 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、具体的なデザインと実証によるステージ・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、雇用することにより、世界と戦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 $\text{CuInGa}(\text{SSe})_2$ 、 $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S, Se})_4$ 、およびペロブスカイト $\text{CsSn}(\text{I, Cl})_3$ などの塗布法による低コスト・高効率の次世代太陽電池材料について、デザインと実証実験に関する共同研究を行う。また、省エネルギーデバイスでは、相変化メモリ、Re-RAM、スピネ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、デザインと実証を目的とした共同研究を行う。
- ・ 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、デザインと実証実験に関する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 27 年度には、ドイツ、スウェーデン、フィンランド、日本との共同研究で大きな成果が得られつつある。

- ・ スタンフォード大学の触媒研究と大阪大学の森川グループの共同研究を推進し、スタンフォード大学を独立したコアとする研究体制を構築する準備を推進する。
- ・ 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)の拠点整備をめざした概算要求を東京大学、東北大学、慶応大学と共同で行う(10 年間 50 億円：予算は H28 年度概算要求)。HP 参照

http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/gijyutu/gijyutu4/toushin/1351171.htm 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 に採択下記HP参照)では、東京大学、東北大学、大阪大学、慶応大学が全国の大学を連ねる中心拠点となるが、大阪大学では本プロジェクトグループが中心となり企画立案し、省エネルギー革新デバイスであるスピントロニクスデバイスに関する「スピントロニクス材料デザイン・素子設計」を担当し、長期的研究活動の拠点とする。そのため、海外との連携拠点としてユーリッヒ研究所、ウプサラ大学との「スピントロニクス材料デザイン・素子設計」に関する連携を強化する。

http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/gijyutu/gijyutu4/toushin/_icsFiles/afielddfile/2014/08/26/1351171_1.pdf

<学術的観点>

- ・ 低コスト・超効率エネルギー変換を可能にする太陽電池や赤外線電池などの開発のための環境調和型のペロブスカイト型太陽電池材料において、①自己修復機構のデザイン(人工的な同時ドーピング法による欠陥の修復機構)、②スピノーダル・ナノ分解による非平衡状態における自己組織化ナノ超構造のデザイン、③自己組織化ナノ超構造とタイプ 2 のバンド構造による電子正孔高速分離法のデザインを行い、これらを NREL の理論・実験グループおよび日本の実証実験グループ(NIMS、東京理科大、東工大、および企業)との共同研究によりデザイン結果を実証し、低コスト・超効率次世代太陽電池材料のデザイン則を確立する。
- ・ 室温(300 K)で安定に作動する超伝導体には、短いクーパー対による強い超伝導揺らぎのため、少なくとも超伝導転移温度(T_c)は $T_c > 1000\text{ K}$ が要求される。これらを可能にするためには電子間の引力が純粋に電子的な機構で電子ボルトレベルの引力を持つフェルミ液体系のデザインが不可欠である。これらを可能にするための多階層連結シミュレーション手法を開発し、具体的な物質系に応用する。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(①交換相関相互作用による負の有効電子間相互作用、

②電子励起による負の有効電子間相互作用)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デザイン戦略を明らかにする。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、などについての具体的な新物質のデザインを行う。また、上記のチャレンジングなデザイン結果を実証するための実験グループとの共同研究を開始する。

- 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を国際共同研究により大きく進展させる。
- 新規オーダーN法 (KKR-nano) 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、新規ナノ超構造スピエレクトロニクス材料や相転移メモリなどへの応用とデザイン・実証を可能にする。日本人研究者 (小倉昌子氏) をユーリッヒ研究所に1年間常駐させ、日独での共同研究を行う。
- 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27年度も継続して実施する。
- 赤井久純氏 (東大物性研) および豊田雅之氏 (阪大) の開発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、小谷岳生氏 (鳥取大学工学部) の開発した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N法 (福島鉄也氏)、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 (佐藤和則

氏（阪大工））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、具体的な新機能物質がデザインでき、そのナノ超構造の創製法などについても共同研究が実施できるように平成27年度も引き続き継続して共同研究を実施し、開発したソフトウェアを公開する。

- ・ 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応用・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27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を3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スピントロニクスへの応用を行い、シミュレーション手法とそのデザイン結果の公開をおこなう。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（SIC法およびQS GW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。ソフトウェアの開発・公開には長期の継続的な研究開発時間を必要としており、平成27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。

上記以外にも国際会議や国際ワークショップにおいて、若手研究者がH27年度の研究成果を発表しこれらに立脚して、H28年度以降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27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ワークショップ、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）>

計算機ナノマテリアルデザインワークショップ（平成27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Psi-kネットワークのワークショップ、国際会議、国際

スクール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や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アジアの研究者、社会人、他の研究機関の研究員や教員に対する社会貢献を行う。

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

8. 平成27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 <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	151 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	10 名			
27年度の 研究交流活動 計画	<p>(1) 5月上旬にウプサラ大学で、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研究連絡企画会議を実施する。</p> <p>(2) 5月下旬に、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のデザインと実証を目指した計算機ナノマテリアルデザイン結果と実証実験の結果、および、計測分光による自己組織化ナノ超構造や自己修復機構について、ワークショップと討論を行う。これにより、次世代太陽電池材料（環境調和ペロブスカイト型、カルコパイライト型、ケーストライト型）のデザインと実証研究を促進する。また、新しいデザイン手法開発に関する共同研究や、エネルギーロスなく電気を蓄えたり送電するための純粋に</p>				

	<p>電子論的機構による高い超伝導転移温度を持つ超伝導材料の一般的なデザイン則や具体的なデザイン手法についても議論する。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ための企画立案を行う。</p> <p>(3) 7月の下旬に、フィンランドのアールト大学において、創エネルギーに不可欠な熱電材料や太陽電池、また、超省電力の革新的デバイスであるスピントロニクス材料である半導体、酸化物、磁性半導体などの欠陥の電子状態やそれらを積極的に利用した電氣的・磁氣的・光学的な機能や物性の制御法に関する研究成果を日米欧からの研究者が発表し、これらをもとに共同研究の企画立案や実証実験のための議論と共同研究を実施する。</p> <p>(4) H27年9月（大阪大学基礎工学研究科）とH28年2月（大阪大学産業科学研究所）には、CMDワークショップを日本国内で開催し、グリーンエネルギーに関する計算機ナノマテリアルデザイン手法の開発・公開・応用・普及を目的としたワークショップ（講習会やスクールが主体）を開催する。講師の一部を欧米から招へいする。</p> <p>(5) 9月には、スペインでデザイン手法の開発と第一原理計算手法の開発を目的としたPsi-k国際会議を開催し、そのあと、ドイツのユーリッヒ研究所において、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スピノードル・ナノ分解を利用した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共同研究とワークショップを開催する。</p> <p>(6) 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行う。</p> <p>(7) 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共同研究を行う。</p> <p>(8) 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、若手研究者</p>
--	--

	<p>を3年間（今年度が最終年度）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。</p> <p>(9) 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>(10) 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をおこなう会合を、米国ボルチモアにおいて、米国エネルギー省再生可能エネルギー研究所（NREL）、欧州（ドイツ、フィンランド、スウェーデン）、および日本からの参加者で実施する。</p>
<p>27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) ウプサラ大学において、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を開催する。その場で平成26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ニエレクトロニクス材料、触媒、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) 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のデザインと実証を目指した計算機ナノマテリアルデザイン結果と実証実験のワークショップを開催する。これにより計測分光による自己組織化ナノ超構造や自己修復機構について、デザイン主導による新機能ナノ物質太陽電池材料の開発指針が確立でき、次世代太陽電池材料（環境調和ペロブスカイト型、カルコパイライト型、ケーストライト型）のデザインと実証研究が促進される。また、新しいデザイン手法開発に関する共同研究や、エネルギーロスなく電気を蓄えたり送電するための純粋に電子論的機構による高い超伝導転移温度を持つ超伝導材料の一般的なデザイン則や具体的なデザイン手法を開発することが出来る。具体的な物質におけるデザイン結果を実証実験し、低コスト・高効率を可能にする次世代太陽電池材料に関する共同研究が推進される。</p>

	<p>(3) フィンランドのアールト大学において、創エネルギーに不可欠な熱電材料や太陽電池、また、超省電力の革新的デバイスであるスピントロニクス材料である半導体、酸化物、磁性半導体などの欠陥の電子状態やそれらを積極的に利用した電氣的・磁氣的・光学的な機能や物性の制御法を開発することが可能となり、これらをもとにデザイン主導による物質開発に関する共同研究が大きく進展する。</p> <p>(4) 年2回開催するCMDワークショップ（1回5日間）を日本国内で開催し、グリーンエネルギーに関する計算機ナノマテリアルデザイン手法の開発・公開・応用・普及を目的としたワークショップ（講習会やスクールが主体）により、新規デザイン手法やシミュレーション手法の普及とデザイン手法の社会への普及に貢献できる。</p> <p>(5) スペインでデザイン手法の開発と第一原理計算手法の開発を目的としたPsi-k国際会議を開催し、引き続きドイツのユーリッヒ研究所において、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スピノーダル・ナノ分解を利用した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共同研究を実施することが出来る。</p> <p>(6) スタンフォード大学に若手研究者を派遣し、人材育成に加えて、森川良忠教授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共同研究開発を行うことができる。</p> <p>(7) 日米欧との共同研究により、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、創エネルギー・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が可能になる。</p> <p>(8) 次世代スパコンを含む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、若手研究者を3年間にわたり派遣し、人材育成に加えて新規シミュレーション手法の開発が可能になる。</p> <p>(9) 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</p>
--	---

	<p>して、若手研究者、助教、准教授クラスの短期滞在(1～3ヶ月)によるインタラクティブな共同研究の加速と促進が可能になり、新機能物質のデザインや新規手法の開発が可能になる。</p> <p>(10) 具体的なグリーンエネルギー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をおこなう会合を、米国ボルチモアにおいて、米国エネルギー省再生可能エネルギー研究所 (NREL)、欧州 (ドイツ、フィンランド、スウェーデン)、および日本からの参加者で実施することにより、H28年度の共同研究や人材育成のための企画立案と基本方針を合議により決定することができる。</p> <p>(11) 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、これらを現実物質に適用するための共同研究をH25年度から継続して開始しているが、多くの成果が得られつつある。これらは、2016年度までにエネルギー変換効率25%(2015年はじめで、公式には20.1%、24%が非公式に得られているため)、2030年度までに50%を目標とする高いステージ・ゲートを設定しているが、新規デザイン手法の開発と実証実験により、これらがクリアできる可能性が大きい。</p>
--	--

8-1 共同研究

整理番号	R-2	研究開始年度	平成 27 年度	研究終了年度	平成 28 年度
研究課題名	(和文) 実空間差分法を用いた第一原理電子状態・伝導特性計算コードの開発				
	(英文) Development of real-space first-principles calculation code				
日本側代表者 氏名・所属・職	(和文) 小野倫也・筑波大学計算科学研究センター・准教授				
	(英文) Tomoya Ono・Center for Computational Sciences, University of Tsukuba, Associate Professor				
相手国側代表者 氏名・所属・職	(英文) Stefan Bluegel, Institute of Advanced Simulation, Forschungszentrum Juelich, Director				
参加者数	日本側参加者数	4 名			
	(ドイツ) 側参加者数	4 名			
27年度の 研究交流活動 計画	平成 27 年 9 月に、筑波大学計算科学研究センター准教授小野倫也と大阪大学大学院工学研究科博士前期課程学生岩瀬滋がユーリッヒ研究所を訪問し、Stefan Bluegel 教授、Daniel Wortmann 研究員、塚本茂研究員、Paul Baumeister 研究員と、超並列計算機での実行に適した実空間差分法を用いた第一原理電子状態・電気伝導計算法のアルゴリズム開発ならびにスピン軌道相互作用の強い材料や電子相関の大きい材料に対する伝導計算手法開発について議論を行う。その後、平成 27 年 9 月～11 月の間、岩瀬がユーリッヒ研究所に滞在し、日本側、ドイツ側双方の持つ利点を融合するための共同研究を開始する。				
27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	日本側は、大規模超並列計算が可能な実空間差分法を用いた第一原理計算法とこれに基づく計算コード RSPACE を開発してきた。一方、ドイツ側は、スピン軌道相互作用や電子相関の大きい材料に対する第一原理計算手法に精通している。これらを組み合わせると、これまで計算量が多く実現が困難であった計算科学手法によるスピントロニクスデバイスや超伝導デバイスのデザインが可能になる。平成 27 年度の共同研究では、日本側が開発している RSPACE の伝導計算部分に、スピン軌道相互作用を組み込んだ計算法導入の検討を行い、計算コード開発の指針を得る。				

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実現にむけた高効率エネルギー変換材料の計算機マテリアルデザイン」 (英文) JSPS Core-to-Core Program “Computational materials design of effective energy conversion towards sustainable society “
開催期間	平成 27 年 5 月 4 日 ~ 平成 27 年 5 月 4 日 (1 日間)
開催地 (国名、都市名、会場名)	(和文) スウェーデン、ウプサラ、ウプサラ大学 (英文) Sweden, Uppsala, Uppsala University
日本側開催責任者 氏名・所属・職	(和文) 吉田博・阪大基礎工・教授、佐藤和則・阪大工・准教授 (英文) Hiroshi Katayama・Yoshida・Osaka University・Professor, Kazunori Sato・Osaka University・Associate 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) Olle Eriksson・Uppsala University・Professor, Biplab Sanyal・Uppsala University・Academic staff

参加者数

派遣先 派遣		セミナー開催国 (スウェーデン)
日本 〈人／人日〉	A.	4/ 9
	B.	
スウェーデン 〈人／人日〉	A.	2/ 2
	B.	12
〈人／人日〉	A.	
	B.	
合計 〈人／人日〉	A.	6/ 11
	B.	12

- 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>エネルギー問題の解決の為に、太陽光発電、熱電変換、スピントロニクス、省エネルギー発光材料等の研究が進められているが、革新的な機能を備えた材料開発の為に第一原理電子状態計算に基づく材料設計が不可欠である。本セミナーでは太陽電池材料、熱電材料、スピントロニクス材料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情報交換を行い、実証実験を参照しつつ、グリーンイノベーションにむけた研究の方向性について議論することを目的とする。</p>	
<p>期待される成果</p>	<p>上記の材料系についてはすでに多くの研究があるが、本セミナーでは特に元素戦略の観点からのブレークスルーをめざす。両グループともに材料シミュレーションの研究実績は高く、最新のデザイン情報の交換により新しいグリーンエネルギー材料の提案が期待される。とくに、当該研究グループは材料組織のシミュレーションで独自の成果を挙げており、ありふれた元素の組み合わせを提案するだけでなくナノスケールでの材料組織制御により高機能化を図るといった、材料設計の新しい方向性を生み出す可能性がある。</p>	
<p>セミナーの運営組織</p>	<p>セミナーはウプサラ大学理論物質学グループ（本プログラム研究拠点）において開催する。現地での運営はウプサラ大学理論物質学グループの Olle Eriksson 教授と Biplab Sanyal 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吉田博教授と佐藤和則がおこなう。ヨーロッパ側参加者としては、おもにウプサラ大学の研究者を想定しているが、その他のヨーロッパからはマッチングファンドによる参加となる。</p>	
<p>開催経費 分担内容</p>	<p>日本側</p>	<p>内容 外国旅費 消費税</p>
	<p>スウェーデン側</p>	<p>内容 会議費 国内旅費 消耗品</p>

8-2 セミナー

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「低コスト・高効率太陽電池材料の計算機ナノマテリアルデザインと実証」 (英文) JSPS Core-to-Core Program “Computational nano-materials design and realization of low-cost and high-efficiency photovoltaic-solar-cells materials“
開催期間	平成 27 年 7 月 11 日 ~ 平成 27 年 7 月 18 日 (8 日間)
開催地 (国名、都市名、会場名)	(和文) 米国、ゴールデン、コロラド州、米国エネルギー省再生可能エネルギー研究所およびボルダー, コロラド大学 (英文) USA, Golden, Colorado, National Renewable Energy Laboratory, and University of Colorado, Boulder
日本側開催責任者 氏名・所属・職	(和文) 吉田博・阪大基礎工・教授 (英文) Hiroshi Katayama-Yoshida・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) Suhuai Wei・National Renewable Energy Laboratory・Research Fellow Alex Zunger・University of Colorado・Professor

参加者数

派遣先 派遣	セミナー開催国 (USA)	
	A.	B.
日本 〈人／人日〉	4/ 32	
USA 〈人／人日〉	3/ 6	12
〈人／人日〉		
合計 〈人／人日〉	7/ 38	12

- 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>エネルギー問題の解決の為に低コスト・高効率の太陽電池材料のデザインと実証研究が不可欠である。革新的な機能を備えた材料開発の為に第一原理電子状態計算に基づく材料設計が不可欠である。本セミナーでは、自己組織化と自己修復機構に着目して太陽電池材料に関する最新の計算機ナノマテリアルデザインについて情報交換を行い、実証実験や分光評価実験を参照しつつ、低コスト・高効率の太陽電池材料にむけた研究の方向性について議論し、実証実験を含む共同研究を企画立案することを目的とする。</p>	
<p>期待される成果</p>	<p>上記のカルコパイライト系、ケーステライト系、およびペロブスカイト系太陽電池材料系についてはすでに多くの研究があるが、自己組織化および自己修復機構およびスピノードル・ナノ分解およびそれらの創製法に着目した重点的な議論を行う。両グループともに材料シミュレーションの研究実績は高く、最新のデザイン情報の交換により新しい低コスト・高効率の太陽電池材料の提案が期待される。特に当該研究グループは材料組織のシミュレーションで独自の成果を挙げており、ナノスケールでの材料組織制御により高機能化を図るとともに、自己組織化を利用した低コスト化といった、材料設計の新しい方向性を生み出す可能性がある。</p>	
<p>セミナーの運営組織</p>	<p>セミナーはNRELマテリアルデザイングループ（本プログラム研究拠点）において開催する。現地での運営はNRELグループの Suhuai Wei 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吉田博教授がおこなう。米国側参加者としては、おもにNRELの理論および実験研究者を想定している。</p>	
<p>開催経費 分担内容</p>	<p>日本側</p>	<p>内容 外国旅費 消費税</p>
	<p>米国側</p>	<p>内容 会議費 国内旅費 消耗品</p>

8-2 セミナー

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「希少元素課題のための計算マテリアルズデザイン」 (英文) JSPS Core-to-Core Program “Computational Materials Design for Critical Element Issues“
開催期間	平成 27 年 9 月 14 日 ~ 平成 27 年 9 月 15 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, Juelich, Germany
日本側開催責任者 氏名・所属・職	(和文) 小口多美夫、大阪大学、教授 佐藤和則、大阪大学、准教授 福島鉄也、大阪大学、助教 (英文) Tamio Oguchi, Osaka University, Professor Kazunori Sato, Osaka University, Assoc. Professor Tetsuya Fukushima, Osaka University, Assis. 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) Stefan Bluegel, FZ-Juelich, Germany, Inst. Head Peter Dederichs, FZ-Juelich, Germany, Professor Gustav Bihlmayer, FZ-Juelich, Germany, Sci. Staff Daniel Wortmann, FZ-Juelich, Germany, Sci. Staff

参加者数

	セミナー開催国 (ドイツ)	
	A.	B.
日本 〈人/人日〉	10/ 40	
ドイツ 〈人/人日〉	10/ 120	20
スウェーデン 〈人/人日〉	3/ 36	
フィンランド 〈人/人日〉	3/ 36	
合計 〈人/人日〉	26/ 232	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)

※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>持続的社会的な実現のためには資源・環境・エネルギー問題の解決が喫緊の課題であり、物質・材料・デバイスの研究分野においては希少元素に依存しない機能性材料・デバイスの研究開発が強く求められている。ここでは、特に、太陽電池材料、熱電材料、二次電池材料、触媒材料、電子デバイス等に注目し最新の計算マテリアルズデザインに基づく希少元素課題に関わる研究について議論を行い、情報交換するとともに、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>	
<p>期待される成果</p>	<p>元素戦略は希少元素を用いないというだけでなく、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、計算マテリアルズデザインは実験との連携を経て初めて意味のあるものとなり、実験的に観測された現象を詳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>	
<p>セミナーの運営組織</p>	<p>ワークショップ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 S. Bluegel 教授、G. Bihlmayer 博士、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小口多美夫、佐藤和則、福島鉄也がおこなう。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>	
<p>開催経費 分担内容</p>	<p>日本側</p>	<p>内容 外国旅費 消費税</p>
	<p>(ドイツ) 側</p>	<p>内容 会議費 国内旅費 消耗品</p>
	<p>(スウェーデン・フィンランド) 側</p>	<p>外国旅費</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
広島大学・助教・獅子堂達也	スペイン バルセロナ	平成 27 年 7 月 5 日-11 日	ICM 国際会議において成果発表及び情報収集を行う
工学研究科・准教授・佐藤和則	フィンランド・ヘルシンキ・アールト大学	平成 27 年 7 月 27 日-30 日	アールト大学（本プログラム研究拠点）で行われる半導体格子欠陥国際会議 (ICDS2015)において成果発表および情報収集を行う。
工学研究科・准教授・佐藤和則	フィンランド・ヘルシンキ・アールト大学	平成 27 年 7 月 27 日-30 日	アールト大学（本プログラム研究拠点）で行われる半導体格子欠陥国際会議 (ICDS2015)において成果発表および情報収集を行う。
工学研究科・博士前期課程・出口大幹	フィンランド・ヘルシンキ・アールト大学	平成 27 年 7 月 27 日-30 日	アールト大学（本プログラム研究拠点）で行われる半導体格子欠陥国際会議 (ICDS2015)において成果発表および情報収集を行う。
基礎工学研究科・教授・吉田博	フィンランド・ヘルシンキ・アールト大学	平成 27 年 7 月 27 日-30 日	アールト大学（本プログラム研究拠点）で行われる半導体格子欠陥国際会議 (ICDS2015)において成果発表および情報収集を行う。
基礎工学研究科・助教・福島鉄也	フィンランド・ヘルシンキ・アールト大学	平成 27 年 7 月 27 日-30 日	アールト大学（本プログラム研究拠点）で行われる半導体格子欠陥国際会議 (ICDS2015)において成果発表および情報収集を行う。
基礎工学研究科・特任研究員・真砂啓	フィンランド・ヘルシンキ・アールト大学	平成 27 年 7 月 27 日-30 日	アールト大学（本プログラム研究拠点）で行われる半導体格子欠陥国際会議 (ICDS2015)において成果発表および情報収集を行う。
基礎工学研究科・博士後期課程・新屋ひかり	フィンランド・ヘルシンキ・アールト大学	平成 27 年 7 月 27 日-30 日	アールト大学（本プログラム研究拠点）で行われる半導体格子欠陥国際会議 (ICDS2015)において成果発表および情報収集を行う。
産業化学研究所・博士後期課程・上村直樹	アメリカ オハイオ州コロンバス	平成 27 年 10 月 4 日-8 日	MS & T 15, 4th Symposium on Boron, Boron Compounds, and Boron Nanomaterials において成果発表及び情報収集を行う

<p>予算の関係上、 現在氏名等明 記することは 出来ない。確定 した状況にな りましたらお 知らせします。 10名程度予定 しています。 (理由書参照)</p>	<p>スペイン、ド ノステア/サ ンセバスチャ ン</p>	<p>平成 27 年 9 月 6 日-10 日</p>	<p>PSI-K 2015 Conference において成果発 表及び情報収集を行う</p>
---	---	---------------------------------	---

8-4 中間評価の指摘事項等を踏まえた対応

- (1) 派遣のための予算等は限られているために、本グループはデザイン手法の開発と公開、応用に集中し、各研究グループは国際的なレベルで実験グループとの共同研究を進めており、外部の実証実験グループとの共同研究を強化する。現時点まででも多くの実証実験を行っており、すでに成果も出てきている。
- (2) 年2回(1回5日間)開催しているCMDワークショップ(実習チュートリアル)における実験研究者は参加者の1/3をしめるので、CMDワークショップでの先端デザイン研究事例でデザイン結果を照会し、実証実験系の社会人や研究者に実証実験を守秘契約のもとで実施し、知財化させる。

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

http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/CMD/CMD25/index_CMD25.html

http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/CMD/CMD24/index_CMD24.html

http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/CMD/CMD23/index_CMD23.html

http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/CMD/CMD22/index_CMD22.html

- (3) 「若手研究者が長時間にわたり、新規計算手法の開発に専念できるシステムの構築」のため、計算機ナノマテリアルデザインセンター以外にも10年以上にわたり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行う。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))。HP参照

http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/gijyutu/gijyutu4/toushin/1351171.htm

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に採択下記HP参照)では東京大学、東北大学、大阪大学、慶応大学が全国の大学を連ねる中心拠点となるが、特に大阪大学は本プロジェクトの中心となり、省エネルギーデバイスとしてのスピントロニクスに関する「スピントロニクス材料デザイン・素子設計」を担当し、長期的研究活動の拠点とする。

http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/gijyutu/gijyutu4/toushin/_icsFiles/afielddfile/2014/08/26/1351171_1.pdf

- (4) 新しい量子シミュレーション手法の開発について本プロジェクトで開発公開し、CMDワークショップや国際ワークショップで公開し、講習会、応用、権利化法などの指導を行っている新しい量子シミュレーション手法には下記のものがあるが、これらを改訂し、さらに強力な計算機ナノマテリアルデザイン手法として強化する。

- OSAKA-2010-nano (第一原理分子動力学法、開発者:白井光雲)
- MACHIKANAYAMA-2010 (AKAI-KKR、開発者:赤井久純)
- TSPACE (群論シミュレータ、開発者:柳瀬章/船島洋紀)

- ABCAP (FLAPW法 : 開発者 : 浜田典昭)
- NANIWA-2010 (量子シミュレーション、開発者 : 笠井秀明 / 中西寛)
- HiLAPW-2010 (相対論的FLAPW法 : 小口多美夫)
- STATE-senri-2010 (ウルトラソフト擬ポテンシャル法、開発者 : 森川良忠)
- PSIC-Machi-2010 (自己相互作用補正KKR法、開発者 : 豊田雅之 / 赤井久純)
- RSPACE (実空間差分法、開発者 : 小野倫也)
- QSGW (準粒子セルフコンシステントGW法、開発者 : 小谷岳生)

9. 平成27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 派遣	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 (第三国) 〈人/人日〉	合計 〈人/人日〉
日本 〈人/人日〉		13/ 191 (5/ 20)	4/ 24 ()	7/ 49 ()	6/ 73 ()	11/ 78 (5/ 35)	41/ 415 (10/ 55)
ドイツ 〈人/人日〉	(1/ 7)		()	()	()	(10/ 70)	0/ 0 (11/ 77)
スウェーデン 〈人/人日〉	()	(3/ 15)		()	()	(3/ 21)	0/ 0 (6/ 36)
フィンランド 〈人/人日〉	()	(3/ 15)	()		()	(3/ 21)	0/ 0 (6/ 36)
米国 〈人/人日〉	()	()	()	()		()	0/ 0 (0/ 0)
スペイン (第三国) 〈人/人日〉	()	()	()	()	()		0/ 0 (0/ 0)
合計 〈人/人日〉	0/ 0/ (1/ 7/)	13/ 191 (11/ 50)	4/ 24 (0/ 0)	7/ 49 (0/ 0)	6/ 73 (0/ 0)	11/ 78 (21/ 147)	41/ 415 (33/ 204)

※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

0 / 0 〈人/人日〉

10. 平成27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	0	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	9,587,000	
	謝金	0	
	備品・消耗品 購入費	0	
	その他の経費	1,008,000	
	外国旅費・謝 金等に係る消 費税	847,000	
	計	11,442,000	研究交流経費配分額以内であること。
業務委託手数料		1,144,200	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		12,586,200	