

**研究拠点形成事業**  
**平成 28 年度 実施計画書**  
**(平成 24～27 年度採択課題用)**

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

(5 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・西尾章治郎

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：大阪大学国際部国際企画課

#### 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)

National Center for Photovoltaics, Group Manager, Mowafak AL-JASSIM

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材料デザイングループ（CMD<sup>®</sup>）と欧米の機関が連携し、CMD<sup>®</sup>手法開発・応用・普及・実証実験（外注）とCMD<sup>®</sup>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。また、最終年度にはデザインをベースに省エネルギー材料・デバイスの実現を目標にデザイン主導による研究を推進するためのネットワーク型の共同研究拠点としての「スピントロニクス学術連携研究教育センター」などのセンターを設置し、本事業の終了後も継続した先端研究拠点を担うための中心拠点を概算要求により設置し、長期的な事業継続を可能にする。

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、もしくは、大阪大学基礎工学研究科に附属センターとして設置する。
- (2) グリーンエネルギーのための計算機ナノ材料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<sup>®</sup>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デザイン主導による実証実験を牽引できる材料デザイナーの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<sup>®</sup>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」

- ・ スピントロニクスに関するデザイン研究を拡大継続するためのネットワーク型研究拠点として、大阪大学、東京大学、東北大学、慶応大学を4中心拠点とする「スピントロニクス学術連携研究教育センター」の概算要求を共同申請し、平成28年度概算要求として文部科学省から認められ、4センターの設置準備を行った。【平成27年度】
- ・ 計算機ナノマテリアルデザインのための若手研究者のパーマネントポジションの不足を解消し、流動的で、恒常的な研究ポジションの確保のため、大阪大学、東北大学、東京大学、分子科学研究所と共同で、文部科学省の計算物質科学人材育成コンソーシアムに応募し、5年間の予定で採択され、本プロジェクトが終了後も、継続するためのマッチングファンド型の若手人材育成コンソーシアムを構築した。【平成27年度】
- ・ 平成27年5月にウプサラ大学オングストローム研究所（コーディネーター：Olle Eriksson 教授）を訪問し、スピントロニクス、太陽電池、環境調和永久磁石、マルチフェロイクス、有機分子エレクトロニクスのマテリアルデザインに関するワークショップを行った。これまでの共同研究やその成果に立脚して、本プロジェクト終了後の共同研究プロジェクト申請と若手人材育成に関する将来計画の企画立案を行った。【平成27年度】
- ・ 平成27年6月に米国エネルギー省再生可能エネルギー研究所（コーディネーター：Shu-wei Wei 博士）およびコロラド大学ボルダー校の持続可能エネルギー研究所（Alex Zunger 博士）を訪問し、太陽電池、スピントロニクス、超室温超伝導体の計算機ナノマテリアルデザインと実証実験に関するセミナーと共同研究成果の検討を行った。【平成27年度】
- ・ 平成27年度9月、欧州第一原理計算ネットワーク Psi-k 国際会議を5日間スペインで開催し、多数の研究者が参加し、共同研究成果を発表した。引き続き、ドイツ・ユーリッヒ研究所でワークショップを行い、スピントロニクス、熱電材料、超伝導体、二次電池などの創エネルギー・省エネルギー材料の計算機マテリアルデザインに関する発表と討論を行い、平成28年度の共同研究プロジェクトの企画立案を行った。【平成27年度】
- ・ 平成28年度3月、2日間の日程で、高温超伝導、スピントロニクス、バッテリー、太陽電池、など創省エネルギー材料の計算機ナノマテリアルデザインに関する共同研究成果の発表と平成28年度以降（本プロジェクトの最終年度）の共同研究計画、スピントロニクス学術連携研究教育センターの発足の為の企画立案を兼ねた国際ワークショップを開催した。【平成27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、平成26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、平成26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24-26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26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24年度から平成27年度まで、計算機マテリアルデザインワークショップ（年2回、一回5日間の集中実習と講義）を、毎年9月と3月に、大阪大学基礎工学研究科、産業科学研究所、工学研究科において合計8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、教員を含め毎回345～65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、14年の歴史があり、28回を重ね、1,200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、特別運営費交付金と本事業の共催により、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24～27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した。【平成25～26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した。【平成25～26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。【平成25～27年度】

- ・ 計算機ナノ材料デザイン・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。スピントロニクスの計算機ナノ材料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26～27年度】
- ・ 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材料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)との教育研究協力を開始した。【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材料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27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H28年度企画立案会議を実施し、下記のH28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27年度】

#### 「学術的観点」

- ・ 相転移を利用したメモリー材料にスピン自由度を付与導入し、多値メモリーなどへ応用するための計算機ナノ材料デザイン研究をドイツ・ユーリッヒ研究所と共同で行

った。その結果、強磁性状態を実現するマテリアルデザインを行い、また、ゲート電圧により化学ポテンシャルを変化させ、強磁性状態や反強磁性状態を安定化させてスピンを制御するための手法のデザインを行った。デザイン主導による実証実験について企業との共同研究を検討している。【平成27年度】

- 多元系からなる強磁性合金のエントロピーによる自由エネルギーの低下と高いキュリー温度を持つ強磁性体のデザイン研究を行った。日欧共同研究として2つの論文にして、投稿中である。【平成27年度】
- ペリブスカイト、チャルコパイライト、ケーステライトなどをベースに、自己修復機構とスピノーダル・ナノ分解を積極的に利用した、低コスト・高効率太陽電池材料に関する計算機マテリアルデザインを行い、米国エネルギー省再生可能エネルギー研究所（NREL）のグループとの実証実験の共同研究により、阪大グループの計算機ナノマテリアル研究の実証を行った。その結果、エネルギー変換効率とスピノーダル・ナノ分解による不均質性に強い相関が生じることがデザインと良く一致した。【平成27年度】
- 二次電池やナノエレクトロニクス材料のデザインと量子細線、および、昆布相と呼ばれるスピノーダル・ナノ分解による自己組織化ナノ超構造の輸送現象に関する量子シミュレーションの共同研究を行い、定量的に物性予測を可能にするための有限要素法による超並列計算手法の開発を共同で行った。【平成27年度】
- KKRnano法による遮蔽グリーン関数法のソフトウェアの開発を共同で行い、オーダーN法による超並列計算手法を開発し、具体的な系に適用し、その効力を検証した。【平成27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との共同研究により、Ge、GaN、GaAsをベースとして実証された。これらは平成27年度、インパクトファクターが50以上のReview of Modern Physicsに掲載された。“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. 【平成27年度】
- 室温強磁性半導体のデザインと実証に関する欧文単行本を日本、米国との共同執筆により、出版した。【平成27年度】



- ・ 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](http://scholar.google.co.jp/citations?hl=en&user=VaJrvsAAAAAJ&view_op=list_works)

【平成27年度】

- ・ 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。多くの興味深い成果が得られ、数個の論文として出版した。【平成26年度】
- ・ 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

ジョン手法、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。【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 (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。【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 Fe/MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/Fe 接合では、MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>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 $\Delta_1$ 伝導チャネルが出現するため、トンネル磁気抵抗比はFe/MgO/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 B<sub>12</sub>C<sub>2</sub>", 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> (アブストラクトのみ閲覧可) 【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】
- 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へいした。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行い、H26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。【平成26年度】
- 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](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/1351171.htm](http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/gijyutu/gijyutu4/toushin/1351171.htm)

- ・ 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】
- ・ 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<sub>c</sub>のデザイン)を開発しCuAlO<sub>2</sub>、CuFeS<sub>2</sub>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】

- 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。【平成25年度】
- デザイン主導による半導体ナノスピントロニクス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、これらを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。【平成25年度】
- 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ナノマテリアルデザインに関する共同研究を策定した。【平成25年度】
- 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。【平成25年度】

- ・ 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。【平成25年度】

#### 「若手研究者育成」

- ・ 平成27年度は、大阪大学の女性若手研究者（助教）をユーリッヒ研究所の研究者として1年間にわたり派遣し、多元系の高エントロピー・高強磁性転移温度をもつ高濃度強磁性体合金のデザインに関する共同研究を行った。【平成27年度】
- ・ 若手研究者育成のため、下記のコンソーシアムを構築し、若手研究者2名（准教授および助教）とこれらを補助するための博士研究員2名を大阪大学ナノサイエンス教育研究センターで5年間の任期付きで、2年分のスタートアップ付きで雇用した。計算機ナノマテリアルデザインのための若手研究者のパーマネントポジションの不足を解消し、流動的で、恒常的な研究ポジションの確保のため、大阪大学、東北大学、東京大学、分子科学研究所と共同で、文部科学省の計算物質科学人材育成コンソーシアムに応募し、5年間の予定で採択され、本プロジェクトが終了後も、継続するための人材育成コンソーシアムを構築した。また、本拠点形成の相手国の研究者にメンターに就任してもらい、若手研究者育成を了承していただいた。【平成27年度】
- ・ 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、平成26年度、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。【平成25年度～平成27年度】
- ・ 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、出版された。【平成26～27年度】

- ・ 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、毎年、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。【平成24～27年度】
- ・ 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。【平成24年度～平成27年度】
- ・ 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。【平成26年度～平成27年度】

<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9月および平成28年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27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/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/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/CMD23/index_CMD23.html)

[http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/CMD/CMD22/index\\_CMD22.html](http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/CMD/CMD22/index_CMD22.html)



## 7. 平成28年度研究交流目標

## ＜研究協力体制の構築＞

- ・ H27年度までは、国内でも160人以上に上る多くの研究者として国際交流、共同研究、および、人材育成において協力していただいたが、H28年度は最終年度のため、これまでの成果をまとめるとともに、これまで培ってきたものを大学としての長期的な研究拠点を形成し、次のプロジェクトへ移行するための企画立案のため、今までの主要メンバーとこれらを引き継ぐ次世代の若手研究者にメンバーを絞り込み、海外サイトとの研究計画や人材育成に関する打ち合わせを綿密に行う必要が出てきた。具体的には、JSPS Core-to-Core Program で大きな成果が得られた、超省エネルギーデバイスとして期待されるスピントロニクスマテリアル・デバイスのデザインと実証にフォーカスし、平成28年度、大阪大学基礎工学研究科附属「スピントロニクス学術連携研究教育センター」を設置し、東京大学（マテリアル創製）、東北大学（デバイス創製）、大阪大学（マテリアルデバイスデザイン）、慶應義塾大学（量子スピントロニクス創製）の4大学を中心とするネットワーク型共同研究と人材育成を実施する。これにより、JSPS Core-to-Core Program のミッションを引く次ぐことになるため、160人から50人程度にメンバーを絞り込み、海外サイト、国内共同研究、および、その拠点として長期的な共同研究の企画立案、人材育成システムの開発、および、国際的なネットワークの構築とノードの高度化を推進する。
- ・ 本プロジェクトで開発し、公開しているソフトウェアを平成27年度の成果を基に最新のものに更新し、CMD ワークショップ（平成28年9月および平成29年3月開催予定）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う。新しい量子シミュレーション手法について、下記のことを公開し、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）
  - feram （強誘電体デザイン法、開発者：西松毅）
- ・ CMD ワークショップ（平成28年9月および平成29年3月開催予定）は現在、4コースを

開講しているが、新たに本プロジェクトが中心となり、スピントロニクスデザインコースを新設する。毎回、5日間の実習（3日間）とチュートリアル（2日間、90分のチュートリアルを8回実施する予定）を実施する。ここでは、本 Core-to-Core Program により開発したスピントロニクス・マテリアル・デバイスデザインに関するハンズオン・チュートリアルとスピントロニクスのデザイン基礎および応用に関する講習会を実施する。

- ・ 若手人材育成のための研究協力体制を構築するため、計算物質科学人材育成コンソーシアムにより、若手研究者2名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外部資金の取得に努め、これらを実行する。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ため平成28年3月に国際ワークショップを大阪大学で開催したが、この中で明らかになってきた問題点を解決し新規な共同研究に拡大するため、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  $\text{CuInGa}(\text{SSe})_2$ 、 $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S}, \text{Se})_4$ 、およびペロブスカイト  $\text{CsSn}(\text{I}, \text{Cl})_3$  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、デザインと実証を目的とした共同研究とワークショップをユーリッヒ研究所（平成28年9月）と大阪大学（平成29年3月）で開催する。
- ・ 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を継続する。さらには、デザイン主導による実証を強化・推進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たため、平成28年度は新たに設立する大阪大学基礎工学研究科附属スピントロニクス学術連携研究教育センターを中核拠点として、これらを継続する。平成28年9月には、2週間の予定でユーリッヒ研究所において国際ワークショップを開催し、現時点までの共同研究成果の発表および本プロジェクト終了後の共同研究の継続計画および共同のファンディングについて企画立案する。また、平成29年3月には、大阪大学に於いて本プロジェクトの最終年度の総括を兼ねた国際ワークショップを開催する。

- ・ 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の構築を推進する。
- ・ 概算要求により平成28年度に、大阪大学基礎工学研究科附属「スピントロニクス学術連携教育研究センター（H28～H32年度）」を設置し、東京大学、東北大学、慶応大学と連携ネットワーク型共同研究拠点を構築し、Core-to-Core Programの超省エネルギーデバイスとしてのスピントロニクスデザイン研究に関する中心拠点とする。大阪大学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、本拠点形成プロジェクトが終了した後も長期的研究活動の拠点とする。これらを中心拠点として、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」に関する連携を延長し、デザイン研究と人材育成を強化する。

#### <学術的観点>

- ・ 計算機ナノマテリアルデザインでは、第一原理計算と多階層量子シミュレーションにより、原子レベルからナノスケールサイズ、メゾスコピックサイズまで階層を越えた領域でのシミュレーション手法の開発とデータベースに基づいたマテリアル・インフォマティクスにより、デザインのための経験則と一般則を演繹し、デザイン主導によるマテリアルデザインをおこなうが、国際共同研究により、阪大オリジナルで、日本から世界に情報発信する第一級の研究成果を手法の共同開発と、具体的な系への応用の両方でのネットワーク型共同研究により、デザイン主導による実証実験を行い、精度の高い計算機ナノマテリアルデザイン手法を確立する。
- ・ 低コスト・超効率エネルギー変換を可能にする自己修復機能とスピノーダル・ナノ分解によるフォノン散乱による低い熱伝導率を利用した熱電材料、電子・正孔分離を利用した太陽電池や赤外線電池などの開発のためには、ペロブスカイト、チャルコパイライト、ケーステライトなどをベースとした、熱電材料、太陽電池材料、触媒において、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計算機ナノマテリアルデザインを行い、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、および日本企業）との共同研究によりデザイン結果を実証し、低コスト・超高効率次世代太陽電池材料のデザイン則を確立し、企業との実証研究に根ざした産学の共同研究をする。
- ・ 室温（300K）で安定に作動する超高温超伝導体には、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研究を国際共同研究により行う。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継続する。

- 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、熱電材料、触媒、スピントロニクスなどの広範囲な系に適用し、一般的なデザイン則として、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ン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継続する。
- 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。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。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。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。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28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（東工大）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（KKR-CPS-SIC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法）、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28年度も引き続き継続して、超伝導体、熱電材料、太陽電池材料、スピントロニクス材料に応用する共同研究を若手研究者を中心に実施し、共同開発したソフトウェアを一般公開する。
- 新たに設立するスピントロニクス学術連携研究教育センターとナノサイエンスデザイン教育研究センターと共同して、高度人材育成に努める。具体的には、スピントロニクスを中心に、デザイン主導による実証は成功例が増えており、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。これらに追加して、スピントロニクス・デザインコースを追加し、社会人や大学院生、研究者を対象にチュートリアルを実施しデザイン手法の普及と応用に努力する。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28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、パーマネントポジションの確保を目指して、東北大学金研、東大物性研、分子科学研究所と大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センターが共同で、計算物質科学人材育成コンソーシアムを立ち上げ、永続的な人材育成のプロジェクトを開始する。准教授、助教クラス2名と博士研究員1名を雇用し、研究者を5年間にわたり、企業、海外研究機関、コンソーシアムの機関拠点に1年以上長期間派遣し、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QSGW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28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H28年度の研究成果を発表しこれらに立脚して、本プロジェクト終了後も平成29年度以降に継続して本プロジェクトを維持継続するための企画立案と共同研究計画や国際交流計画を企画立案し、共同研究を継続して促進し、人材育成を行う。平成28年度は最終年度であるが、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平成29年3月に実施する。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28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。平成28年度からは、新にスピントロニクス・デザインコースを新設し、現時点での計算機マテリアルデザインの4つのコースに付け加えて、新規なスピントロニクス・デザインコースを創設し、平成28年9月から実施する。（<http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/CMD/>）

## 8. 平成28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 KATAYAMA-YOSHIDA, 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>Mowafak Al-Jassim</u> , National Renewable Energy Laboratory, Group Manager				
28年度の 研究交流活動 計画	(1) 本プロジェクトで共同開発し、公開しているソフトウェアを平成27年度の成果を基に最新のものに更新し、CMDワークショップ(平成28年9月および平成29年3月、一回5日間、2回開催予定)や国際ワークショップで公開し、講習会、応用、権利化法などの若手研究者に対する普及・応用・人材育成を行う。 (2) CMDワークショップ(平成28年9月および平成29年3月開催予定)は現在、4コースを開講しているが、新たに本プロジェクトが中心となり、スピントロニクス・デザインコースを新設する。 (3) 若手人材育成のための研究協力体制を構築するため、計算物質科学人材育成コンソーシアムにより、若手研究者2名を長期間(5年間)にわたり雇用し、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。 (4) 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ためデザインと実証を目的とした共同研究とワークショップをユーリッヒ研究所(平成28年9月、2週間)と大阪大学(平成29年3月、2~3日)で開催する。 (5) 平成28年度、新たに設立する大阪大学基礎工学研究科附属スピントロニクス学術連携研究教育センターを中核拠点として、現時点までの共同研究成果の発表および本プロジェクト終了後の共同研究の継続計画および共同のファンディングについて企画立案する。				

	<p>(6) スタンフォード大学の触媒研究と熱電材料、超伝導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の構築を推進する。</p> <p>(7) 概算要求により平成28年度に、大阪大学基礎工学研究科附属「スピントロニクス学術連携教育研究センター（H28～H32年度）」を設置し、東京大学、東北大学、慶応大学と連携ネットワーク型共同研究拠点を構築し、Core-to-Core Programの超省エネルギーデバイスとしてのスピントロニクスデザイン研究に関する中心拠点として、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」に関する連携を延長し、デザイン研究と人材育成を強化する。</p>
<p>28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) ナノサイエンスデザイン教育研究センター、もしくは、大阪大学基礎工学研究科に附属センターに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設置することが可能になる。</p> <p>(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し、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®ワークショップによる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・手法開発が大きく前進する。</p> <p>(3) 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デザイン主導による実証実験を牽引できるマテリアルデザイナーの人材育成と先端研究を将来にわたって発展させる。</p> <p>(4) 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産学連携の事業化と自立的運営を長期的に可能にする。</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計算機ナノマテリアルデザイン」
	(英文) JSPS Core-to-Core Program “Computational Materials Design on Green Energy “
開催期間	平成28年9月19日 ～ 平成28年9月30日 (12日間)
開催地(国名、都市名、会場名)	(和文) ドイツ、ユーリッヒ、ユーリッヒ研究センター
	(英文) Germany, Juelich, Juelich Research Center
日本側開催責任者 氏名・所属・職	(和文) 吉田博・大阪大学基礎工学研究科・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) Prof. Dr. Stefan Bluegel, Juelich Research Center, Director

参加者数

日本 〈人／人日〉	A.	22/ 308
	B.	
ドイツ 〈人／人日〉	A.	10/ 70
	B.	22
スウェーデン 〈人／人日〉	A.	3/ 21
	B.	2
フィンランド 〈人／人日〉	A.	3/ 21
	B.	
米国 〈人／人日〉	A.	2/ 14
	B.	
合計 〈人／人日〉	A.	40/ 434
	B.	24

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。

**平成24～27年度採択課題**

<p>セミナー開催の目的</p>	<p>日、米、欧の本事業の参加者により、創省エネルギー材料に関する計算機ナノマテリアルデザインと実証に関する討論と新規研究計画、人材育成を目的とした長期の滞在型国際ワークショップ・セミナーを開催する。内容は、本プロジェクトの主題である、スピントロニクス、熱電材料、触媒、太陽電池、強力永久磁石、バッテリー、高温超伝導体、次世代デバイス、デザイン手法開発、に関する講演（30分講演＋30分討論）およびインフォーマルな討論集会から構成される。</p>	
<p>期待される成果</p>	<p>（1）現時点までの共同研究成果の報告と5年間の本プログラムのサマリーを行い、現時点で抱える問題点（スピントロニクス、熱電材料、触媒、太陽電池、強力永久磁石、バッテリー、高温超伝導体、次世代デバイス、デザイン手法開発）を明らかにし、今後の共同研究や人材育成のプログラムを共同で企画立案する。</p> <p>（2）本プロジェクトの5年目の最終年度に当たり、概算要求により平成28年度に、大阪大学基礎工学研究科附属「スピントロニクス学術連携教育研究センター（H28～H32年度）」を4大学（阪大、東大、慶応大、東北大）のネットワーク型研究拠点として設置するが、本拠点形成プログラムが終了した後も国際連携の長期的研究活動の国際的中心拠点として、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」に関する連携を延長し、デザイン研究と人材育成を強化するための企画立案と共同研究の発展段階として、新規な共同研究プロジェクトを推進することができる。</p>	
<p>セミナーの運営組織</p>	<p>日本学術振興会研究拠点形成事業「グリーンエネルギー計算機ナノマテリアルデザイン」、ユーリッヒ研究センター、ウプサラ大学、Psi-k ネットワーク</p>	
<p>開催経費 分担内容</p>	<p>日本側</p>	<p>内容 外国旅費 税金</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)側</p>	<p>内容 外国旅費</p>
	<p>(フィンランド)側</p>	<p>内容 外国旅費</p>
	<p>(米国)側</p>	<p>内容 外国旅費</p>

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「グリーンエネルギー計算機ナノマテリアルデザイン」総括国際シンポジウム (英文) JSPS Core-to-Core Program “Computational Materials Design on Green Energy”, Summary International Symposium
開催期間	平成29年3月21日～平成29年3月22日(2日間)
開催地(国名、都市名、会場名)	(和文) 大阪大学基礎工学研究科 (英文) Graduate School of Engineering Science, Osaka University
日本側開催責任者 氏名・所属・職	(和文) 吉田博・大阪大学基礎工学研究科・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)

参加者数

派遣先 派遣		セミナー開催国 (日本)
日本 〈人/人日〉	A.	10/20
	B.	60
ドイツ 〈人/人日〉	A.	10/20
	B.	
スウェーデン 〈人/人日〉	A.	1/2
	B.	
フィンランド 〈人/人日〉	A.	1/2
	B.	
米国 〈人/人日〉	A.	2/4
	B.	
合計 〈人/人日〉	A.	24/48
	B.	60

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。

**平成24～27年度採択課題**

<p>セミナー開催の目的</p>	<p>日、米、欧の本事業の参加者により、創省エネルギー材料に関する計算機ナノマテリアルデザインと実証に関する総括を行い、新規研究計画、新規人材育成を目的とした国際シンポジウムを開催する。内容は、本プロジェクトの主題である、スピントロニクス、熱電材料、触媒、太陽電池、強力永久磁石、バッテリー、高温超伝導体、次世代デバイス、デザイン手法開発、に関する各拠点の代表者による5年間の成果報告、サマリー、本プロジェクト終了後の新規計画の企画立案から構成される。</p>	
<p>期待される成果</p>	<p>(1) 現時点までの共同研究成果の報告と5年間の本プログラムのサマリーを行い、現時点で抱える問題点（スピントロニクス、熱電材料、触媒、太陽電池、強力永久磁石、バッテリー、高温超伝導体、次世代デバイス、デザイン手法開発）を明らかにし、今後の共同研究や人材育成のプログラムを共同で企画立案する。</p> <p>(2) 本プロジェクトの5年目の最終年度に当たるため、平成28年度に設置する大阪大学基礎工学研究科附属「スピントロニクス学術連携教育研究センター（H28～H32年度）」を4大学（阪大、東大、慶応大、東北大）のネットワーク型研究拠点として設置するが、本拠点形成プログラムが終了した後も国際連携の長期的共同研究活動や若手人材育成の国際的中心拠点として、海外との連携を延長し、デザイン研究と人材育成を強化するための企画立案と共同研究の発展段階として、新規な共同研究プロジェクトを企画立案し、推進することができる。</p>	
<p>セミナーの運営組織</p>	<p>日本学術振興会研究拠点形成事業「グリーンエネルギー計算機ナノマテリアルデザイン」</p>	
<p>開催経費 分担内容</p>	<p>日本側</p>	<p>内容 国内旅費 (経費不足に付き共催等お願い予定)</p>
	<p>(ドイツ)側</p>	<p>内容 外国旅費</p>
	<p>(スウェーデン)側</p>	<p>内容 外国旅費</p>
	<p>(フィンランド)側</p>	<p>内容 外国旅費</p>
	<p>(米国)側</p>	<p>内容 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）

共同研究、セミナー以外の交流（日本国内の交流を含む）計画を記入してください。

平成28年度は実施しない。

## 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）における現在4コースの実習・講義をおこなっているが、平成28年度、第29回CMDワークショップからは、スピントロニクス・マテリアルデザインコースを新設し、追加する。さらには、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/>

[http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/CMD/CMD25/index\\_CMD25.html](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/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/CMD23/index_CMD23.html)

[http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/CMD/CMD22/index\\_CMD22.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。具体的には、平成28年度に設置する大阪大学基礎工学研究科附属「スピントロニクス学術連携教育研究センター（H28～H32年度）」を4大学（阪大、東大、慶応大、東北大）のネットワーク型研究拠点として設置するが、本拠点形成プログラムが終了した後も国際連携の長期的共同研究活動や若手人材育成の国際的中心拠点として、海外との連携を延長し、デザイン研究と人材育成を強化するための企画立案と共同研究を推進する。

(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）
- 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)
- feram (強誘電体デザイン法、開発者：西松毅)

9. 平成28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〉		22/308 ( 1/45 )	( )	( )	1/45 ( )	23/353 ( 1/45 )
ドイツ 〈人/人日〉	( 10/20 )		( )	( )	( )	0/0 ( 10/20 )
スウェーデン 〈人/人日〉	( 1/2 )	( 3/21 )		( )	( )	0/0 ( 4/23 )
フィンランド 〈人/人日〉	( 1/2 )	( 3/21 )	( )		( )	0/0 ( 4/23 )
米国 〈人/人日〉	( 2/4 )	( 2/14 )	( )	( )		0/0 ( 4/18 )
合計 〈人/人日〉	0/0 ( 14/28 )	22/308 ( 9/101 )	0/0 ( 0/0 )	0/0 ( 0/0 )	1/45 ( 0/0 )	23/353 ( 23/129 )

※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

70/140〈人/人日〉

## 10. 平成28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	243,000	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	10,373,000	
	謝金	0	
	備品・消耗品購入費	0	
	その他の経費	0	
	不課税取引・非課税取引に係る消費税	827,000	
	計	11,443,000	研究交流経費配分額以内であること。
業務委託手数料		1,144,300	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		12,587,300	