

研究拠点形成事業
平成 24 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

(1 年度目)

4. 実施体制

日本側実施組織

拠点機関：国立大学法人大阪大学

実施組織代表者（所属部局・職・氏名）：大阪大学・学長・平野俊夫

コーディネーター（所属部局・職・氏名）：大学院基礎工学研究科・教授・吉田博

協力機関：東北大学、東京理科大学、鳥取大学

事務組織：大阪大学国際交流オフィス国際交流課

相手国側実施組織（拠点機関名・協力機関名は、和英併記願います。）

(1) 国名：ドイツ

拠点機関：(英文) Forschungszentrum Jülich

(和文) ユーリッヒ研究所

コーディネーター（所属部局・職・氏名）：

(英文) Peter Gruenberg Institute, Director, Stefan BLUEGEL

協力機関：(英文) Ludwig Maximilians University of Munich

(和文) ルードウィヒ・マクシミリアン大学ミュンヘン

協力機関：(英文) University of Applied Sciences

(和文) アウグスブルグ応用科学大学

協力機関：(英文) University of Duisburg-Essen

(和文) デュイスブルグ大学

協力機関：(英文) Technical University of Munich

(和文) ミュンヘン工科大学

協力機関：(英文) Martin-Luther University of Halle-Wittenberg

(和文) マルチン・ルター大学ハレ・ヴィッテンベルグ

経費負担区分 (A 型)：パターン 1

(2) 国名：スウェーデン

拠点機関：(英文) Uppsala University

(和文) ウプサラ大学

コーディネーター（所属部局・職・氏名）：

(英文) Department of Physics and Astronomy, Professor, Olle ERIKSSON

経費負担区分 (A 型)：パターン 1

(3) 国名：フィンランド

拠点機関：(英文) Aalto University

(和文) アールト大学

コーディネーター（所属部局・職・氏名）：

(英文) Faculty of Information and Natural Sciences, Professor, Risto NIEMINEN

経費負担区分 (A 型)：パターン 1

(3) 国名：米国

拠点機関：(英文) National Renewable Energy Laboratory

(和文) エネルギー省再生可能エネルギー研究所 (NREL)

コーディネーター（所属部局・職・氏名）：

(英文) Center for Basic Sciences, Team Leader, Su-Huai WEI

協力機関：(英文) Stanford University

5. 全期間を通じた研究交流目標

大阪大学を中心とした計算機ナノマテリアルデザイングループ (CMD®) と欧米の機関が連携し、CMD 手法開発・応用・普及・実証実験(外注)と CMD による新グリーンエネルギーを目指した研究を行うとともに、共同研究、ワークショップ開催、デザイン手法チュートリアル開催を実施し、これによって先端研究拠点構築とネットワーク型人材育成を推進する。コアとなる大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センターはナノサイエンス教育研究と CMD 教育研究を実施するために、大阪大学の部局横断連携から生まれた学内センターである。基礎工学研究科は CMD 研究の観点からその設立と運営に深くかかわり、日本側コーディネーターは同センターの運営委員会委員をつとめている。本事業では (1) 先端研究教育拠点としてグリーンエネルギーデザインコアをナノサイエンスデザイン教育研究センターに設置する。(2) グリーンエネルギーのための計算機ナノマテリアルデザインに関する共同研究を組織するとともに、共同ワークショップ、デザイン手法開発と現実物質のデザインを行うための国際チュートリアルを実施する。(3) これらの国際ネットワークを通じてグリーンエネルギーデザイン研究・人材育成・手法開発を促進する。(4) 若手研究者による共同研究、ワークショップおよびチュートリアルコースを日米欧で継続することによってグリーンエネルギーデザイナー、シミュレーションソフトウェア開発者などの高度専門教育研究者および高度専門産業人を養成し、それによって工業化社会から知識社会への産業構造の転換にマッチした人材育成と先端研究を将来にわたって発展させる。(5) 実証実験グループや企業に対してデザイン手法やデザイン情報を提供するための CMD ファウン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. 平成 24 年度研究交流目標

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

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

7. 平成24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。)

7-1 研究協力体制の構築状況

- ・ 日米欧からの代表的な参加者により、グリーンエネルギーにおける計算機ナノマテリアルデザインを実現するための目標設定、研究実施計画の策定、研究交流計画の策定、および、共同研究を推進するためのキック・オフ国際ワークショップを大阪大学で開催し、大きな方向性と5年間のロードマップと実行計画を策定した。
- ・ Core-to-Core Groningen Workshop 2012 (平成24年11月18日-21日)をグローニンゲン(オランダ)で開催し、スピントロニクス、モルトロニクス、高温超伝導体、巨大物性応答、自己組織化に関して計算機マテリアルデザインと実証実験との緊密な協力関係を築くための集中的な議論を行うとともにゼルニケ先端物質研究所(グローニンゲン大学)との研究協力の可能性を探った。
- ・ 日米欧で独立に開発された量子シミュレーション手法が互いに利用できるための計算手法に関するスクール(ユーリッヒ研究所)、有機分子エレクトロニクスやその制御法に関するワークショップ(ドイツ・ボン)、および、マルテンサイト変態のエルゴード性を利用した新機能物質のマテリアルデザインに関する国際ワークショップ(デュイスブルグ)を共同で開催した。
- ・ 欧州と日本の研究協力体制の構築のため、代表者の吉田博(阪大基礎工)は3ヶ月ユーリッヒ研究所の費用(航空運賃のみCore-to-Coreで手当)で滞在し、研究協力体制の構築を行った。その結果、フンボルト財団とドイツ学振の費用により、2人の日本人若手研究者(助教クラスと博士研究員クラス)を2年間にわたり、ユーリッヒ研究所とミュンヘン工科大学に滞在させて、新しい量子シミュレーション手法の開発を共同で行う研究協力体制の構築を行った。
- ・ 平成25年3月、米国メリーランド州ボルチモアにおいて、Core-to-CoreプログラムのH25年度企画立案会議を実施し、下記のH25年度の研究実施計画を日米欧からの参加者により策定した。また、NRELおよびコロラド大学ボルダー校において、高効率太陽電池材料、熱電材料、太陽光水分解、および、人工光合成(人工葉)に関する研究セミナーと実証実験をも含む将来の共同研究のための事前打ち合わせをおこない、基本的な合意を得た。
- ・ スピンと電場の強い相互作用によるスピントロニクスを実現するための高い強磁性転移温度を実現するための計算機ナノマテリアルデザインと自己組織化ナノ超構造の創製法に関する共同研究を若手研究者の短期滞在により実現した。

7-2 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構築のためのデザインが国際共同研究により実施され、将来の実証実験を可能にするレベルのデザイン結果が得られた。
- ・ 高効率熱電材料や高効率太陽電池材料のデザインを可能にするためのランドデザイン手法が確立し、自己組織化ナノ超構造の創成と原子空孔の大量導入によるナノ機能の制御法デザインが確立した。国際共同研究により、これらを実証するための、実証実験を組織する段階までに到達した。
- ・ 局所密度近似を越えるための自己相互作用補正を導入した新しい量子シミュレーション手法、準粒子スペクトルを定量的に予言するための新規計算手法、大規模計算に不可欠のオーダー法、階層を越えたレベルの結晶成長やナノ超構造をシミュレートするための多階層連結計算手法について、国際ワークショップや共同研究により、大きく進展し、新しい量子シミュレーション手法の開発・公開・普及・応用が可能になった。

7-3 若手研究者育成

- ・ スピントロニクス分野では、これらを実現するためには同時ドーピング法による高濃度ドーピング、自己組織化ナノ超構造による高いブロッキング温度を積極的に利用したナノスピントロニクスの可能性を若手研究者の共同研究により明らかにした。また、もともと高い遷移金属原子の固溶度をもつ、IV-VI系半導体ベースの強磁性半導体や、磁性イオンを含まない新しい強磁性体とデバイス応用がデザインされ、実証された。
- ・ 若手研究者が長期間にわたり、新規計算手法の開発に専念できるシステムの構築を行い、これらに参加する若手研究者の積極的な参加が可能になった。
- ・ 本プログラムに参加する若手研究者が、さきがけ研究21などのプロジェクトにも採択されるとともに、新しい研究拠点形成を可能にするポジション（将来的には教授）に採用され、さらに、新しい研究拠点の構築が可能になった。

7-4 その他（社会貢献や独自の目的等）

- ・ 本研究 Core-to-Core プロジェクトで開発した計算機ナノマテリアルデザイン関連のソフトウェアは公開し、その使用方法、計算機ナノマテリアルデザインへの応用方法について、本研究拠点形成プロジェクトメンバーが主体となった、チュートリアルを主体とした『計算機マテリアルデザインワークショップ』をH24年度は二回実施した（一回あたり、5日間、H24年9月3日～9月7日、第21回CMDワークショップ（http://ann.phys.sci.osaka-u.ac.jp/CMD/CMD21/index_CMD21.html）、および、H25年3月4日～3月8日、第22回CMDワークショップ（<http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/CMD/>）。合計、産官学からなる約100名が受講した。

7-5 今後の課題・問題点

- 今後の問題として、新規計算手法や新物質のデザインと実証等について、共同研究を進めていった場合に知財等の権利の分配等についてある程度の合意を得ておく必要がある。
- 新規手法の開発や共同研究のため、若手研究者（博士研究員や助教、准教授クラス）が2年程度の長期の海外出張、および、相手方ファンドによる雇用による制度化についても、連動した支援制度との連携が必要である。
- 本研究拠点形成プロジェクトは主として、グリーンエネルギーに関連するマテリアルの計算機ナノマテリアルデザインに関する研究拠点形成が主たる目的であるが、デザイン結果の実証実験が不可欠となってきた。これらを、実行するためには、短期的に実証実験グループとの共同研究が不可欠となり、研究の進み具合に連動して、臨機応変に実証実験グループと3ヶ月～1年程度の短期での実証実験に関する共同研究や連携研究を可能にする柔軟な制度が必要である。このときも、将来生じる知財に関する分配とについて、問題が生じる前段階での、デザイングループと実証実験グループとの事前の合意形成が不可欠である。

7-6 本研究交流事業により発表された論文

平成24年度論文総数 0本

相手国参加研究者との共著 0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。)

8. 平成24年度研究交流実績状況

8-1 共同研究

—研究課題ごとに作成してください。—

整理番号	R-1	研究開始年度	平成24年度	研究終了年度		平成28年度		
研究課題名		(和文) グリーンエネルギー計算機ナノマテリアルデザイン						
		(英文) Computational Materials Design on Green Energy						
日本側代表者 氏名・所属・職		(和文) 吉田博・大阪大学・大学院基礎工学研究科・教授						
		(英文) Hiroshi YOSHIDA, Graduate School of Engineering Science Osaka University, Professor						
相手国側代表者 氏名・所属・職		(英文) Stefan BLUEGEL, Peter Grünberg Institute, Institute for Advanced Simulation, Forschungszentrum Jülich, Director Olle ERIKSSON, Department of Physics and Astronomy, Uppsala University, Professor Risto NIEMINEN, Department of Applied Physics, Aalto University, Professor Su-Huai WEI, Theoretical Materials Science Group, National Renewable Energy Laboratory, Team Leader						
交流人数 (※日本側予算によらない交流についても、カッコ書きで記入のこと。)		① 相手国との交流						
	派遣先	日本	ドイツ	スウェーデン	フィンランド	米国	オランダ	計
	派遣元	<人/人日>	<人/人日>	<人/人日>	<人/人日>	<人/人日>	<人/人日>	<人/人日>
	日本	実施計画	5/150	2/60	1/30	2/60		10/300
	<人/人日>	実績	9/96 (4/98)		1/48 (0/0)	2/15 (1/9)	15/91 (2/16)	27/250 (7/123)
	ドイツ	実施計画	(5/100)	(0/0)	(0/0)	(0/0)		(5/100)
	<人/人日>	実績				0/0 (2/14)	0/0 (7/28)	0/0 (9/42)
	スウェーデン	実施計画	(2/60)	(0/0)	(0/0)	(0/0)		(2/60)
	<人/人日>	実績					0/0 (1/4)	0/0 (1/4)
	フィンランド	実施計画	(2/60)	(0/0)	(0/0)	(0/0)		(2/60)
	<人/人日>	実績					0/0 (3/12)	0/0 (3/12)
	米国	実施計画	(3/60)	(0/0)	(0/0)	(0/0)		(3/60)
	<人/人日>	実績					0/0 (0/0)	0/0 (0/0)
	合計	実施計画	0/0(12/280)	5/150(0/0)	2/60(0/0)	1/30(0/0)	2/60(0/0)	10/300(12/280)
	<人/人日>	実績	0/0(0/0)	9/96(4/98)	0/0(0/0)	1/48(0/0)	2/15(3/23)	27/250 (20/181)
		② 国内での交流					2 人/9 日	
日本側参加者数	46 名	(13-1 日本側参加研究者リストを参照)						
(ドイツ) 側参加者数	20 名	(13-2 相手国(ドイツ)側参加研究者リストを参照)						
(スウェーデン) 側参加者数	4 名	(13-2 相手国(スウェーデン)側参加研究者リストを参照)						

(フィンランド) 側参加者数	
6名	(13-2 相手国(フィンランド)側参加研究者リストを参照)
(米国) 側参加者数	
6名	(13-3 相手国(米国)側参加研究者リストを参照)
24年度の研究交流活動	<ul style="list-style-type: none"> ・ 日米欧からの代表的な参加者により、グリーンエネルギーにおける計算機ナノマテリアルデザインを実現するための目標設定、研究実施計画の策定、研究交流計画の策定、および、共同研究を推進するためのキック・オフ国際ワークショップを大阪大学で開催した。 ・ Core-to-Core Groningen Workshop 2012 (平成24年11月18日-21日) をグローニンゲン(オランダ)で開催し、スピントロニクス、モルトロニクス、高温超伝導体、巨大物性応答、自己組織化に関して計算機マテリアルデザインと実証実験との緊密な協力関係を築くための集中的な議論おこなった。 ・ 日米欧で独立に開発された量子シミュレーション手法が互いに利用できるための計算手法に関するスクール(ユーリッヒ研究所)、有機分子エレクトロニクス、触媒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。 ・ 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。 ・ 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た。 ・ 平成25年3月、米国エネルギー省NRELおよびコロラド大学ボールダー校において、高効率エネルギー変換材料に関する共同研究、実証研究の将来計画会議を行った。 ・ スピンと電場の強い相互作用によるスピントロニクスを実現するための高い強磁性転移温度を実現するための計算機ナノマテリアルデザインと自己組織化ナノ超構造の創製法に関する共同研究を若手研究者の短期滞在により実現した。

	<ul style="list-style-type: none"> • 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を実施した。 • 高効率熱電材料や高効率太陽電池材料のデザインを可能にするためのグラインドデザイン手法を確立するため、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の国際共同研究をおこなった。 • 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をおこなった。 • スピントロニクス分野では、これらを実現するためには同時ドーピング法による高濃度ドーピング、自己組織化ナノ超構造による高いブロッキング温度を積極的に利用したナノスピントロニクスの可能性を若手研究者間で共同研究した。 • 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と議論を行った。 • 本研究 Core-to-Core プロジェクトで開発した計算機ナノマテリアルデザイン関連のソフトウェアは公開し、その使用方法、計算機ナノマテリアルデザインへの応用方法について、本研究拠点形成プロジェクトメンバーが主体となった、チュートリアルを主体とした『計算機マテリアルデザインワークショップ』を実施した。
--	--

<p>24年度の研究交流活動から得られた成果</p>	<p><u>交流活動の成果</u></p> <ul style="list-style-type: none"> ・ 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高効率化、省エネルギー化を可能にするための数値目標設定、研究実施計画プログラムの策定、長期的研究交流計画の策定、および、スピントロニクス、モルトロニクス、自己組織化ナノ超構造太陽電池、自己組織化ナノ超構造熱電材料、自己組織化ナノ超構造環境調和磁石、自己組織化ナノ触媒などのデザインと実証や、新しいデザイン手法の開発をめざした共同研究を推進するためのキック・オフ国際ワークショップを大阪大学で開催し、大きな方向性と5年間のロードマップと実行計画を策定した。 ・ Core-to-Core Groningen Workshop 2012（平成24年11月18日-21日）をグローニンゲン（オランダ）で開催し、スピントロニクス、モルトロニクス、高温超伝導体、巨大物性応答、自己組織化に関して計算機マテリアルデザインと実証実験との緊密な協力関係を築くための集中的な議論を行い、高濃度同時ドーピング法や自己組織化ナノ超構造創製によるナノマグネットによる高いキュリー温度を可能にするスピントロニクス材料のデザイン指針や、スピン注入、スピンの電界制御法などの開拓をめざした共同研究の探索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明らかにした。 ・ 日米欧で独立に開発された量子シミュレーション手法が互いに利用できるための計算手法に関するスクール（ユーリッヒ研究所）により、ナノ超構造の電子状態計算（オーダーN法）に関する手法普及を行った。また、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）により、有機分子へのスピン注入やデバイス応用への可能性を明らかにした。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、マルテンサイト変態を利用した形状記憶合金の機構やデザイン・ガイドラインが明らかになってきた。 ・ 欧州と日本の研究協力体制の構築のため、代表者の吉田博（阪大基礎工）は3ヶ月ユーリッヒ研究所の費用（航空運賃のみCore-to-Coreで手当）で滞在し、研究協力体制の構築を行った。その結果、フンボルト財団とドイツ学振の費
----------------------------	--

用により、2人の日本人若手研究者（助教クラスと博士研究員クラス）を2年間にわたり、ユーリッヒ研究所とミュンヘン工科大学に滞在させて、新しい量子シミュレーション手法（オーダーN法によるKKR-nano法と動的平均場近似法によるKKR法）の開発を共同で行う研究協力体制の構築を行った。それにより、平成25年度には共同研究を開始する計画確立した。

- 平成25年3月、米国メリーランド州ボルチモアにおいて、Core-to-CoreプログラムのH25年度企画立案会議を実施し、下記のH25年度の研究実施計画を日米欧からの参加者により策定した。その結果、H25年度6月に、淡路夢舞台国際会議場において、H24年度の成果発表に加えて、グリーンエネルギーに関する国際ワークショップの企画立案を行った。
- スピンと電場の強い相互作用によるスピントロニクスを実現するための高い強磁性転移温度を実現するための同時ドーピング法による遷移金属不純物の高濃度ドーピング、固溶度を劇的に増加させるための計算機ナノマテリアルデザイン、および、自己組織化ナノ超構造による高いブロッキング温度を可能にするためのスピノーダルナノ分解の計算機ナノマテリアルデザインと自己組織化ナノ超構造の創製法に関する共同研究を若手研究者の短期滞在により実現した。

学術面の成果

- 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同時ドーピング法、超高固溶度法デザイン、スピノーダルナノ分解による量子細線や量子ドットの創製法のデザインと実証実験を可能にするレベルのデザイン結果が得られた。
- 高効率熱電材料や高効率太陽電池材料のデザインを可能にするためのスピノーダル・ナノ分解による自己組織化ナノ超構造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フォノンの伝搬制御と低次元系による特異な電子状態密度を反映した巨大ゼーベック係数の実現による高効率熱電材料のためのナノ機能の制御法デザインが確立した。国際共同研究により、

これらを実証するための、実証実験を組織する段階までに到達した。

- ・ 局所密度近似を越えるための自己相互作用補正を導入した新しい量子シミュレーション手法、準粒子スペクトルを定量的に予言するための新規計算手法、大規模計算に不可欠のオーダーN法、階層を越えたレベルの結晶成長やナノ超構造をシミュレートするための多階層連結計算手法について、国際ワークショップや共同研究により、大きく進展し、新しい量子シミュレーション手法の開発・公開・普及・応用が可能になった。

若手研究者育成

- ・ スピントロニクス分野では、これらを実現するためには同時ドーピング法による高濃度ドーピング、自己組織化ナノ超構造による高いブロッキング温度を積極的に利用したナノスピントロニクスの可能性を若手研究者の共同研究により明らかにした。また、もともと高い遷移金属原子の固溶度をもつ、IV-VI系半導体ベースの強磁性半導体や、磁性イオンを含まない新しい強磁性体とデバイス応用がデザインされ、実証された。
- ・ 若手研究者が長期間にわたり、新規計算手法の開発に専念できるシステムの構築を行い、これらに参加する若手研究者の積極的な参加が可能になった。
- ・ 本プログラムに参加する若手研究者が、さきがけ研究21などのプロジェクトにも採択されるとともに、新しい研究拠点形成を可能にするポジション（将来的には教授）に採用され、さらに、新しい研究拠点の構築が可能になった。

社会貢献

- ・ 本研究Core-to-Coreプロジェクトで開発した計算機ナノマテリアルデザイン関連のソフトウェアは公開し、その使用方法、計算機ナノマテリアルデザインへの応用方法について、本研究拠点形成プロジェクトメンバーが主体となった、チュートリアルを主体とした『計算機マテリアルデザインワークショップ』をH24年度は二回実施した（一回あたり、5日間、H24年9月3日～9月7日、第21回CMDワークショップ (http://ann.phys.sci.osaka-u.ac.jp/CMD/CMD21/index_CMD21.html)、および、H25年3月4日～3月8

	<p>日、第 22 回CMDワークショップ (http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/CMD/)。合計、産官学からなる約 100 名が受講した。</p>
--	---

8-2 セミナー

—実施したセミナーごとに作成してください。—

整理番号	S-1
セミナー名	(和文) 日本学術振興会研究拠点形成事業「ナノスピントロニクス国際ワークショップ」
	(英文) JSPS Core-to-Core Program “International Workshop on Nano-Spintronics” and “JSPS Core-to-Core Program Kick-Off Meeting”
開催期間	平成 24 年 6 月 29 日 ～ 平成 24 年 7 月 1 日 (3 日間)
開催地 (国名、都市名、会場名)	(和文) 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 KATAYAMA-YOSHIDA, Osaka University, Graduate School of Engineering Science
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 派遣元	セミナー開催国 (日本)	
	A.	
日本 <人/人日>	A.	6/18
	B.	
	C.	25/75
ドイツ <人/人日>	A.	
	B.	
	C.	4/22
フィンランド <人/人日>	A.	
	B.	
	C.	1/6
合計 <人/人日>	A.	6/18
	B.	
	C.	30/103

A. セミナー経費から旅費を負担

B. 共同研究・研究者交流から旅費を負担

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

セミナー開催の目的	<p>本事業のキックオフミーティングを兼ねて、ナノスピントロニクスに関するクローズな国際ワークショップを開催する。国際研究協力を進めるにあたって、現状の認識と各研究グループの研究分担の確認を行う。ワークショップにおける情報を集約することによってグリーンエネルギー計算機名のマテリアルデザインの方向性と明らかにするとともに、ナノスピントロニクスに関する最先端の研究について各グループの持つ情報を交換する。また、若手研究者、大学院博士課程学生が本事業に対する全体像をつかみ、本事業に積極的に参画していくための機会をつくる。</p>			
セミナーの成果	<p>スピントロニクスに関しては、高い Tc を可能にすることが最重要課題で有り、同時ドーピング法とスピノーダル・ナノ分解に関するデザインと実証が報告された。また、電場でスピンを制御するためのキャリア制御と磁気異方性の制御法が提案された。マルチフェロイック材料の基礎的制御法や触媒の機構やデザイン手法について基礎的な手法や新しいデザイン手法が提案され、大きなインパクトがあった。ナノ構造としての分子を用いたナノエレクトロニクスやスピントロニクスは、省エネルギー消費デバイスや低コストでの創製が可能で有り、次回、10月にドイツのボンで開催するセミナーで集中的に議論することになった。半導体、金属、酸化物、窒化物、有機分子、金属間化合物などをベースとした、新規なマテリアルが次々にデザインされつつあり、実証実験を通して大きな研究の進展が期待される。若手研究者のポスター発表や本ワークショップ中の議論から、上記に関する多くの共同研究や研究交流の新しい種が生まれた。具体的なデザインと実証における問題を実験かをも交えて、周知委討論するため、11月か12月に大阪大学の海外拠点(グローニンゲン教育教育センター)、オランダ・グローニンゲン大学でワークショップ(Computational Nano-Materials Design on Green Energy: Design vs. Realization)を開始することを決定した。</p>			
セミナーの運営組織				
開催経費 分担内容 と金額	日本側	内容	アルバイト謝金	金額 57,000 円
			会議費	656,374 円
			国内出張旅費	368,520 円
	(ドイツ)側	内容	外国出張費	
(フィンランド)側	内容	外国出張費		

8-2 セミナー

—実施したセミナーごとに作成してください。—

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

参加者数

派遣先 派遣元	セミナー開催国 (ドイツ)	
	A.	B.
日本 <人/人日>	A.	5/22※
	B.	
	C.	
ドイツ <人/人日>	A.	
	B.	
	C.	2/6
フィンランド <人/人日>	A.	
	B.	
	C.	
合計 <人/人日>	A.	5/22
	B.	
	C.	2/6

A. セミナー経費から旅費を負担

B. 共同研究・研究者交流から旅費を負担

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

※日本側参加者の内 3 名は共同研究 R-1 の人数に含まれる (ただし人日数は外数)。

<p>セミナー開催の目的</p>	<p>表面に吸着した機能性磁性分子を密度汎関数法に基づいて理論的に研究する研究者が集まって、分子磁性と分子スピントロニクスに関する最新の情報を交換することを目的としたワークショップである。理論が中心であるが、新しい機能性磁性分子の合成や、走査プローブ顕微鏡やシンクロトロン放射を用いた表面-吸着分子系の先導的研究を行っている少数の実験家の参加も予定している。</p> <p>ドイツ側は CECAM (Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire)と Ψ-k ネットワークへの支援のもとに開催を予定している。若手研究者3名とドイツ側拠点の代表者であるブリューゲル教授が運営委員である。日本側は工学研究科森川教授がとりまとめを行い、ドイツ側と協力してセミナーに参加する。</p>			
<p>セミナーの成果</p>	<p>有機分子と金属界面での磁性に関して、理論、および、実験研究の最新の成果が発表され、本文やの現状と今後の課題について討論を行った。特に、理論的取り扱いについては、空間的に局在している分子軌道や遷移金属の d 軌道と、広がった基板金属の両者を精度よく記述する手法に大きな課題があることが示された。計算精度を高くし、さらに、計算効率を良くする手法の開発が望まれる。また、有機/金属界面での弱い相互作用の記述についても、著しく進展しつつあるが、まだ、常に信頼性が高く、効率的な手法開発が望まれることも明らかとなった。そして、有機/金属界面でのスピンに関する物性は、今後、まだまだ課題が多く、研究分野として非常に発展が期待されるということも会議参加者の一致した認識であった。</p>			
<p>セミナーの運営組織</p>	<p>Organizers:</p> <p>Dr. Valerio Bellini (<i>Institute of Nanoscience - S3 - CNR, Modena, Italy</i>)</p> <p>Dr. Nicolae Atodiresei (<i>Peter Grünberg Institute (PGI-1) and Quantum Theory of Materials (IAS-1), Forschungszentrum Jülich, Jülich, Germany</i>)</p> <p>Dr. Paolo Ferriani (<i>Institute of Theoretical Physics and Astrophysics University of Kiel, Kiel, Germany, Germany</i>)</p> <p>Prof. Stefan Blügel (<i>Peter Grünberg Institute (PGI-1) and Quantum Theory of Materials (IAS-1), Forschungszentrum Jülich, Jülich, Germany</i>)</p>			
<p>開催経費 分担内容 と金額</p>	<p>日本側</p>	<p>内容 外国旅費</p>	<p>金額</p>	<p>2,274,410 円</p>
		<p>合計</p>		<p>2,274,410 円</p>
	<p>(ドイツ) 側</p>	<p>内容 会議開催費</p>		

8-2 セミナー

—実施したセミナーごとに作成してください。—

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「グリーンエネルギー計算機ナノマテリアルデザインとグローニンゲン大学ゼルニケ研究所ジョイント国際ワークショップ」 (英文) JSPS Core-to-Core Program “Computational Materials Design on Green Energy” and Zernike Institute, University of Groningen, Joint International Workshop”
開催期間	平成 24 年 11 月 18 日 ～ 平成 24 年 11 月 21 日 (4 日間)
開催地(国名、都市名、会場名)	(和文) グローニンゲン、オランダ (英文) Groningen, The Netherlands
日本側開催責任者 氏名・所属・職	(和文) 赤井 久純・大阪大学・特任教授(グローニンゲン教育研究センター長) (英文) Hisazumi Akai, Osaka university, Groningen Centre for Education and Research, 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) Prof. Ria Broer, Zernike Institute for Advanced Materials, University of Groningen

参加者数

派遣先 派遣元	セミナー開催国 (オランダ)	
	A.	B.
日本 <人/人日>		15/91
		2/16
ドイツ <人/人日>		7/28
スウェーデン <人/人日>		1/4
フィンランド <人/人日>		3/12
合計 <人/人日>		15/91
		13/60

A.セミナー経費から旅費を負担

B.共同研究・研究者交流から旅費を負担

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

セミナー開催の目的	拠点形成事業 Core-to-Core プログラムとグローニンゲン大学ゼルニケ研究所との共催により、日、欧、米の Core-to-Core プログラムの計算機マテリアルデザイン研究者とゼルニケ研究所の実験研究者がグローニンゲンに会して、スピントロニクスとモルトロニクスに関する集中的なワークショップを開催し、理論と実験における最先端を概観するとともに方向性を見定める。	
セミナーの成果	スピントロニクスとモルトロニクスの分野における最先端研究を実施する理論と実験の研究者が集まる集中的な議論を行うことによって、デザインと実証の協力が実現し、それによって新奇な概念を生み出すとともに、新物質、新材料、新デバイスの創出を実現するためのフレームワークと教育研究ネットワークが構築された。	
セミナーの運営組織	core-to-core プログラム、大阪大学グローニンゲンセンター、Groningen 大学 Zernike Institute の共催で執り行い、日本側は、大阪大学グローニンゲン教育研究センターの支援のもとセンター長である赤井教授がとりまとめを行いオランダ側グローニンゲン大学 Ria Broer 教授と協議してワークショップの会議運営を行う。	
開催経費 分担内容 と金額	日本側	内容 外国旅費 金額 4,723,743 円 参加費 302,850 円 合計 5,026,593 円
	(ドイツ) 側	内容 外国旅費 参加費
	(スウェーデン) 側	内容 外国旅費 参加費
	(フィンランド) 側	内容 外国旅費 参加費
	(オランダ) 側	内容 会議開催費 参加費

8-3 研究者交流（共同研究、セミナー以外の交流）

① 相手国との交流

派遣元		日本 <人/人日>	ドイツ <人/人日>	スウェーデン <人/人日>	フィンランド <人/人日>	米国 <人/人日>	英国 <人/人日>	オランダ <人/人日>	計 <人/人日>
日本 <人/人日>	実施計画								
	実績		1/4 (3/153)	0/0 (0/0)	0/0 (0/0)	0/0 (8/60)	3/18(0/0)		4/22(11/213)
ドイツ <人/人日>	実施計画								
	実績	0/0 (6/102)				0/0 (4/28)			0/0(10/130)
スウェーデン <人/人日>	実施計画								
	実績								
フィンランド <人/人日>	実施計画								
	実績								
米国 <人/人日>	実施計画								
	実績								
英国 <人/人日>	実施計画								
	実績								
オランダ <人/人日>	実施計画								
	実績								
合計 <人/人日>	実施計画								
	実績	0/0(6/102)	1/4 (3/153)	0/0 (0/0)	0/0 (0/0)	0/0(12/88)	3/18(0/0)		4/22(21/343)

② 国内での交流 (3人/18人日)

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
Ludwig-Maximilians-Universität München・Professor Hubert Ebert	小口 多美夫 (日本・大阪・大阪大学)	H24.4.3-H24.6.2	マルチフェロイック材料の計算機ナノマテリアルデザインおよび新規量子シミュレーション手法の開発
Universität Duisburg-Essen・Professor Peter Entel	小倉 昌子 (日本・大阪・大阪大学)	H24.4.28-H24.5.6	環境調和強磁性磁石の計算機ナノ間テリアデザイン
Forschungszentrum Jülich・Director Stefan Blügel	小倉 昌子 (日本・大阪・大阪大学)	H24.5.1-H24.5.5	研究計画と拠点整備の調整および共同研究計画の策定、および、環境調和強磁性磁石の計算機ナノ間テリアデザイン
Forschungszentrum Jülich・Researcher Nguyen Hoang Long	小倉 昌子 (日本・大阪・大阪大学)	H24.4.26-H24.5.5	環境調和強磁性磁石の計算機ナノ間テリアデザイン
Halle, Max-Planck Institute・Professor Ingrid MERTIG	白井 正文 三浦 良雄 (日本・宮城・東北大学)	H24.5.31-H24.6.5	4th International Workshop on Spincaloritronics (東北大学金属材料研究所) 9th RIEC International Workshop on Spintronics (電気通信研究所) に参加、講演及び討議、情報収集
大阪大学・教授 吉田 博	白井 正文 三浦 良雄 (日本・宮城・東北大学)	H24.5.31-H24.6.5	4th International Workshop on Spincaloritronics (東北大学金属材料研究所) 9th RIEC International Workshop on Spintronics (電気通信研究所) に参加、講演

			及び討議、情報収集
Forschungszentrum Jülich・Researcher Paul Baumeister	小野 倫也 (日本・大阪・大阪大学)	H24.6.5-H24.6.15	環境調和強磁性磁石の計算機ナノ間テリアデザイン
大阪大学・博士課程学生 Aspera Susan Menez	英国・Hull 大学	H24.9.2-H24.9.9	ECOSS-29に参加、および University of Hullにて情報収集
大阪大学・博士課程学生 Wungu Triati Dewi Kencana	英国・Hull 大学	H24.9.2-H24.9.9	ECOSS-29に参加、および University of Hullにて情報収集
東北大学・助教 濱田幾太郎	Takashi Kumagai (ドイツ・ベルリン・Fritz-Haber Institute of the Max Planck Society)	H24.10.5-H24.10.8	Theory of induced spin polarization at molecule-metal interfaces と題する講演及び討議、情報収集
大阪大学・教授 笠井 秀明	英国・ロンドン	H24.11.18-H24.11.19	JPCM Biard Meeting 参加、情報収集
大阪大学・准教授 佐藤 和則	Peter ENTEL ドイツ・デュイスブルグ・University of Duisburg-Essen)	H25.1.27-H25.2.1	International Symposium on Non-ergodic behavior I martensites に参加、講演及び討議、情報収集
大阪大学・教授 吉田 博	米国・ボルチモア	H24.3.17-H25.3.23	APS March Meeting に参加、講演及び討議、情報収集
大阪大学・博士課程学生 植本 光治	Gang Bao (米国・ミシガン・Michigan State University)	H24.3.17-H25.3.31	APS March Meeting に参加、講演及び討議、情報収集 Michigan State Universityにて共同研究打合せ
大阪大学・特任研究員 藤井 将	米国・ボルチモア	H24.3.17-H25.3.24	APS March Meeting に参加、講演及び討議、情報収集
大阪大学・招聘研究員 清家 聖嘉	米国・ボルチモア	H24.3.17-H25.3.24	APS March Meeting に参加、講演及び討議、情報収集
大阪大学・助教 福島 鉄也	米国・ボルチモア	H24.3.17-H25.3.24	APS March Meeting に参加、講演及び討議、情報収集
大阪大学・特任研究員 舩島 洋紀	米国・ボルチモア	H24.3.17-H25.3.24	APS March Meeting に参加、講演及び討議、情報収集
大阪大学・准教授 佐藤 和則	米国・ボルチモア	H24.3.17-H25.3.24	APS March Meeting に参加、講演及び討議、情報収集
Anna Grünebohm	米国・ボルチモア	H24.3.17-H25.3.23	APS March Meeting に参加、講演及び討議、情報収集
Hoang Long Nguyen	米国・ボルチモア	H24.3.17-H25.3.23	APS March Meeting に参加、講演及び討議、情報収集
Martin Schlipf	米国・ボルチモア	H24.3.17-H25.3.23	APS March Meeting に参加、講演及び討議、情報収集
Pengxiang Xu	米国・ボルチモア	H24.3.17-H25.3.23	APS March Meeting に参加、講演及び討議、情報収集

9. 平成24年度研究交流実績総人数・人日数

9-1 相手国との交流実績

派遣先		日本	ドイツ	スウェーデン	フィンランド	米国	英国 【第三国】	オランダ 【第三国】	計
派遣元		<人/人日>	<人/人日>	<人/人日>	<人/人日>	<人/人日>	<人/人日>	<人/人日>	<人/人日>
日本 <人/人日>	実施計画		13/198	2/60 (0/0)	1/30 (0/0)	2/60 (0/0)	0/0 (0/0)	0/0 (0/0)	18/348 (0/0)
	実績		11/122 (7/251)	0/0 (0/0)	1/48 (0/0)	2/15 (8/68)	3/18 (0/0)	15/91(2/16)	32/294(18/335)
ドイツ <人/人日>	実施計画	0/0 (10/125)		0/0 (0/0)	0/0 (0/0)	0/0 (0/0)	0/0 (0/0)	0/0 (0/0)	0/0 (10/125)
	実績	0/0 (10/122)		0/0 (0/0)	0/0 (0/0)	0/0(6/42)	0/0 (0/0)	0/0 (7/28)	0/0(23/192)
スウェーデン <人/人日>	実施計画	0/0 (5/75)	0/0 (4/12)		0/0 (0/0)	0/0 (0/0)	0/0 (0/0)	0/0 (0/0)	0/0 (9/87)
	実績							0/0 (1/4)	0/0 (1/4)
フィンランド <人/人日>	実施計画	0/0 (4/70)	0/0 (3/12)	0/0 (0/0)		0/0 (0/0)	0/0 (0/0)	0/0 (0/0)	0/0(7/82)
	実績	0/0(1/6)						0/0 (3/12)	0/0(4/18)
米国 <人/人日>	実施計画	0/0 (5/70)	0/0 (3/18)	0/0 (0/0)	0/0 (0/0)		0/0 (0/0)	0/0 (0/0)	0/0(8/88)
	実績								
英国 【第三国】 <人/人日>	実施計画								
	実績								
オランダ 【第三国】 <人/人日>	実施計画								
	実績								
合計 <人/人日>	実施計画	0/0 (24/340)	13/198(10/42)	2/60(0/0)	1/30(0/0)	2/60 (0/0)	0/0 (0/0)	0/0 (0/0)	18/348(34/382)
	実績	0/0 (11/128)	11/122(7/251)	0/0(0/0)	1/48(0/0)	2/15 (14/110)	3/18(0/0)	15/91(13/60)	32/294(45/549)
② 国内での交流		8/27		人/人日					

※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。)

※日本側予算によらない交流についても、カッコ書きで記入してください。(合計欄は()をのぞいた人数・人日数としてください。)

9-2 国内での交流実績

実施計画	実績
55/145 <人/人日>	8/27(49/184) <人/人日>

10. 平成24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	465,620	
	外国旅費	9,487,942	
	謝金	57,000	
	備品・消耗品購入費	97,180	
	その他経費	1,411,367	
	外国旅費・謝金等に係る消費税	480,891	
	計	12,000,000	
委託手数料		1,200,000	
合 計		13,200,000	

11. 四半期毎の経費使用額及び交流実績

	経費使用額 (円)	交流人数<人/人日>
第1四半期	955,674	6/18
第2四半期	2,317,271	12/134
第3四半期	6,071,253	20/152
第4四半期	2,655,802	2/17
計	12,000,000	40/321

12. 平成24年度相手国マッチングファンド使用額 (A型のみ)

相手国名	平成24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	196.000 [ユーロ]	20,000,000 円相当
スウェーデン	1775.000 [クローネ]	20,000,000 円相当
フィンランド	196.000 [ユーロ]	20,000,000 円相当
米国	260.000 [米ドル]	20,000,000 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。