

## 【日本側コーディネーター及び拠点機関名】

日本側拠点機関名	国立大学法人大阪大学
日本側コーディネーター所属・氏名	大阪大学大学院理学研究科・赤井久純
研究交流課題名	グリーンエネルギー計算機ナノマテリアルデザイン
相手国及び拠点機関名	ドイツ（ユーリッヒ研究所） スウェーデン（ウプサラ大学） フィンランド（ヘルシンキ工科大学） 米国（エネルギー省再生可能エネルギー研究所）

### 研究交流計画の目標・概要

#### 【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<sup>®</sup>）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。理学研究科はCMD研究の観点からその設立と運営に深くかかわり、現在同センターのセンター長は日本側コーディネーターがつとめている。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。

#### 【研究交流計画の概要】

- ① 以下の通り共同研究を推進する。
  - 1) 大学院生および助手クラスの若手研究者を相手先研究拠点に派遣し、CMDに基づいたグリーンエネルギーデザイン方法論開発や基盤ソフトウェア開発および新機能ナノマテリアルデザインに関する共同研究をおこなう。
  - 2) (ア) 省エネルギースピントロニクス材料・デバイスデザイン、(イ) 赤外・遠赤外太陽電池を実現するナノ材料・ナノ構造デザイン、(ウ) 自己組織化ナノ超構造による超高効率太陽電池を目指した多重エネルギー変換素子デザイン、(エ) 元素戦略に立脚した高性能燃料電池材料と触媒デザイン、(オ) 希土類金属を用いない新永久磁石およびナノ超構造超強永久磁石のデザイン、(カ) 自己組織化ナノ超構造による高効率熱電材料に、関するデザインに関する共同研究を実施するために若手研究者を相手先機関に派遣し共同研究を行う。
  - 3) 教授・研究者レベルでの短期滞在によるグリーンエネルギーデザインに関する情報交換、デザイン戦略の企画立案およびデザイン結果の実証実験実施に関する共同研究を行う。
- ② 研究の推進と情報交換のため以下のセミナー/ワークショップ/国際会議を主催あるいはパートナーと共催（旅費・滞在費援助）する計画である。
  - 1) ナノスピントロニクスワークショップ（大阪）
  - 2) リニューアブルエネルギーワークショップ（大阪）
  - 3) エネルギーハーベスティングと赤外線電池ワークショップ（大阪）
  - 4) 永久磁石ワークショップ（大阪）
  - 5) ヨーロッパCMDワークショップ・チュートリアルコース（デュイスブルク、ドイツ）
  - 6) 第4回 ICNDR 国際会議（ウプサラ、スウェーデン）
  - 7) 第4回 QSD ワークショップ（ユーリッヒ/ボン、ドイツ）
  - 8) Summer School: Nano Magnetism and Spintronics（ドレスデン、ドイツ）
  - 9) Workshop: Functional Molecules on Surfaces: New Building Blocks for Nano-spintronics（ユーリッヒ/ボン、ドイツ）
  - 10) Conference:  $\Psi$ -k2 conference（サン・セバスチャン、スペイン）
  - 11) Workshop: Spin-Hall and related Effects（ボン、ドイツ）
- ③ 共同研究の推進を行うために以下の通りの研究者交流を行う計画である。
  - 1) 大学院生派遣  
ユーリッヒ研究所、ミュンヘン大学、アウグスブルク大学と1～6ヶ月派遣および招聘（各3名/年）
  - 2) 助教クラスの若手研究者派遣  
ユーリッヒ研究所、ミュンヘン大学、アウグスブルク大学、ウプサラ大学、NREL（米エネルギー省再生可能エネルギー研究所）と3週間～6ヶ月派遣および招聘（各5名程度/年）
  - 3) 教授・研究者レベルでの相互短期滞在  
ユーリッヒ研究所、デュイスブルク大学、ミュンヘン大学、アウグスブルク大学、ウプサラ大学、ヘルシンキ工科大学、NRELと2週間～3ヶ月派遣および招聘（各10名程度/年）

[実施体制概念図]

