

**研究拠点形成事業 (A. 先端拠点形成型)**  
**最終年度 実施報告書 (平成 24 年度採択課題)**

(※本報告書は、前年度までの実施報告書とともに事後評価資料として使用します。)

### 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%20to%20core/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. 研究交流目標

### 5-1. 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>

- 計算機ナノ材料デザインでは、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材料・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材料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材料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材料デザインを行い、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とも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/>）

## 5-2. 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<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。

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<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。
- (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。

#### 目標に対する達成度とその理由

■研究交流目標は十分に達成された

□研究交流目標は概ね達成された

□研究交流目標はある程度達成された

□研究交流目標はほとんど達成されなかった

#### 【理由】

基本的には、目標を達成するために、下記の事業を成功裏に実施し、将来の継続的な研究交流の拠点形成に繋がった。

- ・ 文部科学省概算要求により、平成28年度より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（センター長：吉田博教授）を新設した。
- ・ 大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センターを平成29年度から、恒常的なセンターとして改組し、CMDワークショップの継続的な運用が可能になった。
- ・ 大阪大学にデータ駆動型のマテリアルデザインを指向したデータビリティ・フロンティア研究機構を新設した。
- ・ オーダーN法による大規模計算ソフトウェア開発(KKR-nano)をおこない、応用と公開をおこなった。
- ・ ウプサラ大学、ヨハネスケプラー大学との10年間の国際共同研究プロジェクトを開始した（大阪大学運営費交付金による）。
- ・ 拠点以外にも省エネルギーマテリアルやデバイスのデザイン研究対象を広げて行くためスタンフォード大学との触媒や有機デバイスのデザインを目的とした新規デザイン手法の開発とその応用研究をスタートした。
- ・ 高精度の予測を可能にするため新規計算手法の開発は不可欠であり、拠点以外にも対象を広げて行くため、ローレンス・リバモア研究所およびシカゴ大学との共同研究により、新規ソフトウェア（WEST）を開発・公開した。
- ・ 平成28年度セミナー(S-1)をドイツにおいて開催し、本研究プロジェクトの終了後も計算機ナノマテリアルデザイン研究の継続と拠点以外にもその対象を広げて行くことを目的として、ドイツ、日本、スウェーデン、フィンランド、などの多数の参加者により、2週間にわたる長期で長時間の議論を可能にする共同研究プロジェクトおよび継続的な共同研究に関する企画立案のワークショップを実施した。各セッションリーダーがその成果をまとめてHPに公開し、本プロジェクト終了後の新企画を作製した。
- ・ JSPS 脳循環プロジェクトを産業科学研究所で平成28年度にスタートし、創省エネルギーマテリアルやデバイスデザインを研究する若手研究者を2年間の予定でユースリッヒ研究所に派遣した。
- ・ 若手研究者育成ための人材育成コンソーシアムによる人材育成を行った。
- ・ CMDワークショップ（平成28年度、第29回、および、第30回）を開催した。
- ・ 平成28年度にスピントロニクス学術連携研究教育センターでスピントロニクスマテリア

ルデバイスデザインコースを新設した。

- ・ 企業との共同研究講座の開設（平成29年度5月）が決定した。

## 6. 研究交流成果

### 6-1. 平成28年度研究交流成果

#### 研究協力体制の構築状況

- ・ 平成28年4月から、文部科学省概算要求により（東京大学、東北大学、慶應義塾大学とのネットワーク型共同研究）、スピントロニクス材料およびデバイスの実現を行うため大阪大学のミッションである省エネルギー材料やデバイスのデザインを目的として、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（センター長：吉田博教授）を新設し、本プロジェクト終了後の継続的な研究拠点を設置し、継続的な研究協力体制の基盤を整備した。
- ・ 大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センター（INS D）を平成29年度から、恒常的なセンターとして継続的に運営できるように学内改組し、CMDワークショップや社会人教育の継続的な運用が可能になった。
- ・ 大阪大学にデータ駆動型のマテリアルデザインを指向したデータビリティー・フロンティア研究機構を大阪大学本部主導で新設し、本プロジェクトの小口多美夫教授（産研）、佐藤和則准教授（工学部）、福島鉄也特任准教授（INS D）が中心的に参画し、本プロジェクト終了後もデータ駆動型のマテリアルデザインを進展させる研究協力体制を構築した。

#### 学術面の成果

- ・ ユーリッヒ研究所とのオーダーN法による大規模計算ソフトウェア開発(KKR-nano)をおこない、相変化スピンメモリ、新規磁性体材料、新規超省エネルギー・ナノデバイスへの応用を行い、その優れた有効性が確かめられた。
- ・ ウプサラ大学（代表：小口多美夫産研教授）、ヨハネスケプラー大学（代表：佐藤和則准教授（工学部））などとの10年間の国際共同研究プロジェクト（大阪大学運営費交付金）の2件が採択され、スピントロニクスなどのマテリアルデザインに関する共同研究を開始した。
- ・ スタンフォード大学との触媒や有機デバイスのデザインを目的とした新規デザイン手法の開発とその応用研究について、森川良忠教授（工学部）を中心して、新にスタートした。
- ・ 濱田幾太郎（NIMS研究員、H29年度より大阪大学准教授）がローレンス・リバモア研究所およびシカゴ大学との共同研究により、触媒や有機分子の表面化学反応を高精度で予測する新規ソフトウェア（WEST）を開発・公開し、その有効性を明らかにした。

#### 若手研究者育成

- ・ 継続的な若手研究者の育成と共同研究を目的として、ドイツ・ユーリッヒ研究所において、2週間にわたる共同研究プロジェクトおよび継続的な共同研究に関する企画立案のワークシ

ヨップを実施し、若手研究者が将来的に継続できる創省エネルギー材料やデバイスデザインに関する若手研究者育成の仕組みを企画デザインした。

- ・ ウプサラ大学（代表：小口多美夫産研教授）、ヨハネスケプラー大学（代表：佐藤和則准教授（工学部））などとの10年間の国際共同研究プロジェクト（大阪大学運営費交付金）の2件が採択され、スピントロニクスなどの材料デザインに関する共同研究を開始した。
- ・ 頭脳循環プロジェクトに産研小口教授が参画し、H28年度には若手研究者を2年間の予定でユーリッヒ研究所に派遣した。
- ・ 若手研究者のパーマネント・ポジションの継続的な確保のため、平成27年度に立ち上げた人材育成コンソーシアム（東北大学、東京大学、分子化研究所、大阪大学）を中心に、若手研究者の人材育成プログラムを4大学共同で継続的に行った。
- ・ 若手研究者への計算機材料デザイン手法と応用のための技術普及と教育を目的としたCMDワークショップ（平成28年度、第29回、および、第30回）を継続的に開催した。

### 社会貢献や独自の目的等

- ・ 平成28年度に国内（大学間ネットワークおよび社会人教育）および国外との共同研究拠点となるスピントロニクス学術連携研究教育センターを設置し、従来からのCMDワークショップ（平成28年度第29回、および、第30回）、および、省エネルギーのスピンをを用いた新しいクラスのエレクトロニクスであるスピントロニクスの材料やデバイスをデザインするチュートリアル・コースを新規に開始した。
- ・ 大阪大学内に企業（住友電工）との共同研究講座の開設を森川教授、小口教授、吉田教授、福島特任准教授が中心となり企画立案し、平成29年度5月に新規開設することが決定した。若手研究者が大阪大学内の共同研究講座に参画し、継続的な社会への材料デザイン手法の普及と材料デバイスデザイン成果のフィードバックを行う拠点となる。

- (1) 平成28年度に学術雑誌等に発表した論文・著書 12 本  
うち、相手国参加研究者との共著 1 本
- (2) 平成28年度の国際会議における発表 17 件  
うち、相手国参加研究者との共同発表 1 件
- (3) 平成28年度の国内学会・シンポジウム等における発表 35 件  
うち、相手国参加者との共同発表 5 件
- (※ 「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。)

### 6-2 全期間にわたる研究交流成果

#### (1) 研究協力体制の構築状況

- ① 日本側拠点機関の実施体制（拠点機関としての役割・国内の協力機関との協力体制等）
- ・ 国内は大阪大学を中核拠点としてCMDネットワーク（大阪大学、東北大学、東京大学、NIMS、など）を本プロジェクトの中核拠点として、事業計画の企画立案、新プロジェクトや恒常

的な組織のための概算要求の企画立案と実行、など本プロジェクト終了後の大学の運営費交付金による継続的な国内および国際共同研究や人材育成のための協力機関の設立を行った。

・文部科学省概算要求により、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（東京大学、東北大学、大阪大学、慶応義塾大学によるネットワーク型共同研究センター）を新設し、大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センターとともに恒常的なセンターとして、本プロジェクト終了後も継続的な運用を可能にし、国内のネットワークだけでなく、国際共同研究拠点の中核となった。これらの2つのセンターを中心に全国の研究者が参画できる共同研究のフレームワークを構築した。現在国内外で84件の共同研究プロジェクトが進行している。

## ② 相手国拠点機関との協力体制（各国の役割分担・ネットワーク構築状況等）

・ユーリッヒ研究所は主として、磁性体材料やスピントロニクスのデザイン、アールト大学は次世代ナノデバイスのデザイン、米国再生可能エネルギー研究所（NREL）は太陽電池や熱電材料などの創エネルギー関連材料のデザイン、スタンフォード大学は触媒や有機デバイスなどのデザイン、ウプサラ大学は環境調和強力永久磁石材料のデザインなどで本プログラムとの共同研究と若手人材育成を推進した。

・欧州は $\Psi_k$ （プサイ・ケイ）ネットワークを構築し、第一原理計算手法の開発・公開とその普及活動をユーリッヒ研究所、アールト大学、ウプサラ大学が中心となり実施し、本プロジェクト期間内には、これらを用いたマテリアルデザイン研究や、新規なデータ駆動型のマテリアルデザイン研究のネットワークの中核拠点として機能している。

・米国NRELとスタンフォード大学は、全米49の研究機関の参加するネットワーク型の研究組織である米国エネルギー省のEnergy Frontier Research Center (EFRC)の中心拠点として、Inverse Designと呼ばれる新機能を入力として、新物質をデザインするネットワークの中核拠点として本プロジェクトでは機能している。本プロジェクト中には、データ駆動型のデザイン研究の拠点となった。

・ウプサラ大学（スウェーデン）、ヨハネスケプラー大学（オーストリア）との10年間の省エネルギー・スピントロニクス材料やデバイス開発のためのマテリアル・デバイスデザインを行う国際共同研究プロジェクトを平成28年度から大阪大学運営費交付金で開始した。

・スタンフォード大学との触媒や有機デバイスのデザインを目的とした新規デザイン手法の開発とその応用研究を平成28年度からスタートした。

・本ネットワークの構築により、本プロジェクト代表者が2016年ヘルムホルツ国際賞（ドイツ・ベルリン、ヘルムホルツ協会）を受賞した。

## ③ 日本側拠点機関の事務支援体制（拠点機関全体としての事務運営・支援体制）

・具体的なプログラムの実施計画は、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（東京大学、東北大学、大阪大学、慶応義塾大学によるネットワーク型共同研究センター）、および、大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センターのCMD幹事会を毎月一回開催し、そこで企画立案をおこない、2人の事務職員補佐の事務運営支援のもと、基礎工学研究科事務部、および、大阪大学本部国際交流課の支援のもとにプロジェクトを実施した。他大学

の分担者や国際交流における調整についても、基本的にはこのような仕組みで実施した。2つのセンターが本プロジェクト終了後も恒常的なセンターとして、継続的な運用が可能になることが平成28年度に決定し、国内のネットワークだけでなく、国際共同研究拠点の中核として事務支援体制が構築できた。これらの2つのセンターを中心に全国の研究者が参画できる共同研究のフレームワークを構築し、現在国内外で84件の共同研究プロジェクトが進行し、その事務を2つのセンター（教育と研究を分担）が担当する事務運営・支援体制となっている。

## （2）学術面の成果

・スピントロニクスのマテリアル・デバイスデザインに関するユーリッヒ研究所、ウプサラ大学、アールト大学、ヨハネスケプラー大学、米国NREL、などとの国際共同研究により自己組織化ナノ超構造のデザインや新規ナノマテリアルのデザインと実証において、大きな成果が得られ、その結果は *Reviews of Modern Physics* などの総説として発表され、原著論文も高い被引用数を記録している。

・新規太陽電池材料のデザインと実証、熱電材料のデザインでは、米国NRELとのデザインと実証による国際共同研究が進展し、現実物質を用いたデザイン研究の有用性が明らかになった。

・上記の研究により、本プロジェクト代表者が2016年ヘルムホルツ国際賞（ドイツ・ベルリン、ヘルムホルツ協会）を受賞した。

・次世代ナノエレクトロニクスのためのナノ超構造における輸送現象を予測するシミュレーション手法を開発公開し、具体的な高パワーエレクトロニクスデバイスやナノデバイスの物性予測に応用し、その有効性が明らかになった。

・環境調和性を持つ超強永久磁石などの社会からの要請を満足するための新規デザイン手法の開発をおこない、公開した。これらの手法は元素プロジェクトなどでも利用され大きな成果が得られている。

・原子レベルやナノスケールサイズの第一原理計算と巨視的なレベルの階層を繋げる多階層連結シミュレーション手法を開発・公開し、自己組織化ナノ超構造、スピノーダルナノ分解、磁気相転移、などのデザイン研究に応用され、その有用性が実証実験に於いて確認されてきた。

・オーダーN法による大規模計算ソフトウェア開発(KKR-nano)をおこない、相転移メモリ、スピントロニクス材料、新機能超高濃度合金、などへの応用をおこない、開発したソフトウェアの公開をおこなった。

・新規触媒のデザインや有機エレクトロニクスデバイスのデザインに不可欠な高精度シミュレーションプログラムを開発するために、ローレンス・リバモア研究所およびシカゴ大学との共同研究により、新規ソフトウェア(WEST)を開発し、公開した。

・第一原理に立脚した基本要素還元型のデザイン手法に加えて、データ駆動型の計算機ナノマテリアルデザイン手法の有用性が確認され、新しいマテリアルデザイン研究のチャレンジが可能になった。

## （3）若手研究者育成

・共同研究プロジェクトおよび継続的な共同研究に関する成果発表と企画立案のワークショップ

を実施した。このような共同ワークショップは本プロジェクト期間中、毎年実施した。

- ・平成28年度JSPS頭脳循環プロジェクトを産業科学研究所でスタートし、マテリアル・デバイスデザインに関する若手研究者を2年間の予定（平成28年3月から）でユーリッヒ研究所に派遣した。

- ・若手研究者育成のためのパーマネント・ポジションの確保を目指した、傾斜型マッチングファンドによる人材育成コンソーシアム（東北大、東大、阪大、分子研）による人材育成を行った。

- ・CMDワークショップ（毎年2回、一回5日間の講義と実習）を開催した。

- ・スピントロニクス学術連携研究教育センターにおいてスピントロニクスマテリアルデバイスデザインコースを新規開設した。

- ・若手研究者の海外派遣（長期：2年、短期：1ヶ月程度）を積極的に行い、ユーリッヒ研究所、シカゴ大学、ローレンス・リバモア研究所、スタンフォード大学、アールト大学などに大阪大学運営費交付金、他の競争的研究資金、および、相手先の経費などの種々の財源を確保し派遣した。

#### （4）国際研究交流拠点の構築

- ・本プロジェクト終了後にも継続的で世界的レベルの国際研究交流拠点の構築を目標として、当初から、文部科学省概算要求により、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（東京大学、東北大学、大阪大学、慶応義塾大学によるネットワーク型共同研究センター）を新設し、また、大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センターを時限から、運営費交付金による恒常的なセンターとする構築を行った。その結果、本プロジェクト終了後も継続的な運用が可能になり、国内のネットワークだけでなく、国際共同研究拠点の中核となって、欧州や米国だけでなく、アジアにおける人材育成と共同研究拠点を構築できた。これらの2つのセンターを中心に全国の研究者が参画できる共同研究のフレームワークが構築された。現在国内外で84件の共同研究プロジェクトが進行している。また、企業との具体的なテーマによるマテリアル・デバイスデザインの大学キャンパス内での産学共同研究とイノベーション人材育成を目的とした企業との共同研究講座の設置に到達できた。

#### （5）社会貢献や独自の目的等

- ・社会人に対して、計算機ナノマテリアルデザイン手法の普及と応用を目的として、毎年2回（3月と9月に開催し、一回5日間）CMDワークショップを開催し、産業界への計算機マテリアルデザインの産業応用の活動をおこなった。

- ・守秘契約のもと個別のテーマについては、大学内に企業の研究開発者が常駐し、大学の職員や学生が参画できる仕組みを構築し、企業との共同研究講座の開設に至った。

- ・社会人講義の年間を通じた教育を実施するため、5年間の期間中全国へのナノマテリアルデバイスデザイン学の講義配信（毎週月曜日、夕方6時から9時まで、年間30回）を行った。

#### （6）予期しなかった成果

- ・大阪大学にデータ駆動型のマテリアルデザインを指向したデータビリティ・フロンティア研究機構を新設した。

・本プロジェクトを通じた活動が企業からも高く評価され、企業（住友電工）との共同研究講座の開設（平成29年度5月）が決定した。このような企業からの問い合わせが最近になり急増しており、自立した大学経営に為のひとつのモデルとなり得る可能性が出てきている。

#### （7）今後の課題・問題点及び展望

・大学の運営費交付金が減少する中で、卓越大学院や指定国立大学における自立的な学術経営と運営のためには、研究資金と研究開発人材を提供できる企業の参画が不可欠であり、大学キャンパス内に設置し、学生や教員が参画できる協働研究講座の創設が1つのソリューションになり得るという展望が本研究プロジェクトから得られた。計測機マテリアルデザインのような大学独自のオリジナルでパワフルな研究手法開発と企業の開発研究ニーズをマッチングさせることにより、現産業の強化や効率的なイノベーションを中核とする新産業の創成につなげるための課題を解決することが可能になる。

・本プロジェクトのような外部資金に頼るシステムでは、どうしても教員の研究時間が学術経営や運営のために割かれてしまう傾向があり、大学本部としてもプロとしての有能な学術経営者や運営経営者の人材育成とその集積が大学の世界的レベルでの国際競争力の確保には不可欠である。

#### （8）本研究交流事業により全期間中に発表された論文等

①全期間中に学術雑誌等に発表した論文・著書 56 本

うち、相手国参加研究者との共著 8 本

②全期間中の国際会議における発表 91 件

うち、相手国参加研究者との共同発表 7 件

③全期間中の国内発表・シンポジウム等における発表 110 件

うち、相手国参加研究者との共同発表 15 件

（※ 「本事業名が明記されているもの」を計上・記入してください。）

（※ 詳細は別紙「論文リスト」に記入してください。）

## 7. 平成 28 年度及び全期間にわたる研究交流実績状況

## 7-1 共同研究

整理番号	R-1	研究開始年度	平成 24 年度	研究終了年度	平成 28 年度
研究課題名	(和文) グリーンエネルギー計算機ナノマテリアルデザイン				
	(英文) Computational Materials Design on Green Energy				
日本側代表者 氏名・所属・職	(和文) 吉田博・大阪大学・大学院基礎工学研究科・教授				
	(英文) Hiroshi YOSHIDA, 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 交流活動及び得 られた成果	<p>1. 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）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した。 URL: <a href="http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/CMD/index.html">http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/CMD/index.html</a></p> <p>2. 若手人材育成のための研究協力体制を構築するため、東北大学、東京大学、分子科学研究所、大阪大学で平成 27 年発足した J S T 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した。URL: <a href="http://aquarius.mp.es.osaka-u.ac.jp/pcoms/">http://aquarius.mp.es.osaka-u.ac.jp/pcoms/</a></p> <p>3. 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 18 日～30 日）と千里阪急ホテル（平成 29 年 3 月 20 日～22 日）で開催した。 URL: <a href="http://www.fz-juelich.de/pgi/EN/Leistungen/ConferencesAndWorkshops/EU-JAPAN-Workshop/Programme/_node.html">http://www.fz-juelich.de/pgi/EN/Leistungen/ConferencesAndWorkshops/EU-JAPAN-Workshop/Programme/_node.html</a> URL: <a href="http://aquarius.mp.es.osaka-u.ac.jp/spintronics/hp/core2core2017/index.html">http://aquarius.mp.es.osaka-u.ac.jp/spintronics/hp/core2core2017/index.html</a></p> <p>4. 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</p>				



	<p>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した。概算要求により、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～H35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システムを構築した。</p> <p>URL: <a href="http://aquarius.mp.es.osaka-u.ac.jp/spintronics/">http://aquarius.mp.es.osaka-u.ac.jp/spintronics/</a></p> <p>5. 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した。</p>
<p>全期間にわたる研究交流活動及び得られた成果の概要</p>	<p>恒常的な活動のため、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新設した。また、大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センターを平成29年度から、恒常的なセンターとして改組し、CMDワークショップの継続的な運用が可能になった。研究の進展により、大阪大学にデータ駆動型のマテリアルデザインを指向したデータビリティー・フロンティア研究機構を新設した。多くのソフトウェア開発をおこない、応用・公開・普及活動をおこなった。ウプサラ大学、ヨハネスケプラー大学との10年間の国際共同研究プロジェクトを開始した。スタンフォード大学との触媒や有機デバイスのデザインを目的とした新規デザイン手法の開発とその応用研究をスタートした。共同研究プロジェクトおよび継続的な共同研究に関する企画立案のワークショップを実施した。フンボルト財団や頭脳循環プロジェクトをスタートし、若手研究者を長期に派遣した。若手研究者育成ための人材育成コンソーシアムによる人材育成を行った。CMDワークショップを期間中継続的に開催した（年2回、1回5日間）。平成28年度にスピントロニクス学術連携研究教育センターでスピントロニクスマテリアルデバイスデザインコースを新規に開設した。企業との共同研究講座の開設（平成29年度5月）が決定した。</p>

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, Peter Grünberg Institute, Institute for Advanced Simulation, Forschungszentrum Jülich, Director				
28年度の研究 交流活動及び得 られた成果	H27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った。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し、その成果を H28 年 3 月に報告した。 <a href="http://aquarius.mp.es.osaka-u.ac.jp/spintronics/hp/core2core2017/index.html">http://aquarius.mp.es.osaka-u.ac.jp/spintronics/hp/core2core2017/index.html</a>				
全期間にわたる 研究交流活動及 び得られた成果 の概要	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 を開発した。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ため、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実現を目指した。本共同研究のため、岩瀬がユーリッヒ研究所に約2ヶ月滞在し、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を導入し計算精度の評価を行った。この結果、今後の計算コードの改良方針を得る事ができ、その成果を H28 年 3 月に報告した。 <a href="http://aquarius.mp.es.osaka-u.ac.jp/spintronics/hp/core2core2017/index.html">http://aquarius.mp.es.osaka-u.ac.jp/spintronics/hp/core2core2017/index.html</a>				

**7-2 セミナー**

(1) 全期間において実施したセミナー件数

	平成 24 年度	平成 25 年度	平成 26 年度	平成 27 年度	平成 28 年度
国内開催	1 回	1 回	1 回	0 回	1 回
海外開催	2 回	3 回	0 回	3 回	3 回
合計	3 回	4 回	1 回	3 回	4 回

(2) 平成 28 年度セミナー実施状況

整理番号	S-1
セミナー名	(和文) 日本学術振興会研究教育拠点事業「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 18 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 YOSHIDA, Osaka University, Professor
相手国側開催責任者 氏名・所属・職 (※日本以外で開催の場合)	(英文) Prof. Dr. Stefan BLUEGEL, Juelich Research Center, Director

参加者数

派遣先□ 派遣元□		セミナー開催国 (ドイツ)
日本 〈人／人日〉	A.	17/ 145
	B.	13
ドイツ 〈人／人日〉	A.	
	B.	12
(ドイツ側参加者) オーストリア 〈人／人日〉	A.	
	B.	1
スウェーデン 〈人／人日〉	A.	
	B.	6
フィンランド 〈人／人日〉	A.	
	B.	1
合計 〈人／人日〉	A.	17/ 145
	B.	33

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。

セミナー開催の目的		<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、に関する講演およびインフォーマルな討論集会から構成される。</p> <p>URL:<a href="http://www.fz-juelich.de/pgi/EN/Leistungen/ConferencesAndWorkshops/EU-JAPAN-Workshop/Programme/_node.html">http://www.fz-juelich.de/pgi/EN/Leistungen/ConferencesAndWorkshops/EU-JAPAN-Workshop/Programme/_node.html</a></p>	
セミナーの成果		<p>(1) 現時点までの共同研究成果の報告とサマリーを行い、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を行った。</p> <p>(2) 本プロジェクト最終年度である平成 28 年度から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）ネットワーク型研究拠点として設置し、本拠点形成プログラム終了後も国際連携の長期的研究活動の中心拠点として、海外の連携拠点、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強化を図る新規な共同研究プロジェクトを推進できた。</p>	
セミナーの運営組織		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	
開催経費 分担内容 と金額	日本側	内容	金額
		国内旅費	102,180 円
		外国旅費	6,503,513 円
		税金	520,276 円
	(ドイツ)側 (オーストリア含)	内容 会議費 マッチングファンド 出張旅費 マッチングファンド	
	(スウェーデン)側	内容 外国旅費 マッチングファンド	
	(フィンランド)側	内容 外国旅費 マッチングファンド	

整理番号	S-2
セミナー名	(和文) 日本学術振興会研究教育拠点事業「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20日～平成29年3月22日(3日間)
開催地(国名、都市名、会場名)	(和文) 千里阪急ホテル、大阪府 (英文) Senri Hanlyu Hotel, Osaka
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 YOSHIDA, Osaka University, Professor
相手国側開催責任者 氏名・所属・職 (※日本以外で開催の場合)	(英文)

参加者数

派遣先 派遣元		セミナー開催国 (日本)	
		A.	B.
日本 〈人／人日〉	A.	5 / 16	
	B.	43	
ドイツ(オーストリア含) 〈人／人日〉	A.	0 / 0	
	B.	3	
スウェーデン 〈人／人日〉	A.	0 / 0	
	B.	2	
米国 〈人／人日〉	A.	0 / 0	
	B.	2	
中国 〈人／人日〉	A.	1 / 6	
	B.		
韓国 〈人／人日〉	A.	1 / 5	
	B.	1	
合計 〈人／人日〉	A.	8 / 27	
	B.	51	

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>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>セミナーの成果</p>	<p>(1) 5 年間の共同研究成果の報告と本プログラムのサマリーを行い、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した。</p> <p>(2) 平成 28 年度から設置された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、海外との連携を延長して本拠点形成プログラム終了後も国際連携の長期的共同研究活動やデザイン研究と若手人材育成を強化する。そのための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た。</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 と金額</p>	<p>日本側</p>	<p>内容</p> <p>会議費</p> <p>物品</p> <p>国内旅費</p> <p>外国旅費</p> <p>税金</p>	<p>金額</p> <p>1,995,399 円</p> <p>85,330 円</p> <p>313,202 円</p> <p>438,410 円</p> <p>(第三国・中国・韓国から招へい)</p> <p>35,072 円</p>
	<p>(ドイツ) 側</p>	<p>内容</p> <p>出張旅費 マッチングファンド</p>	
	<p>(スウェーデン) 側</p>	<p>内容</p> <p>出張旅費 マッチングファンド</p>	
	<p>(米国) 側</p>	<p>内容</p> <p>出張旅費 マッチングファンド</p>	

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「不均一触媒反応の第一原理シミュレーションによる予測」 (英文) JSPS Core-to-Core Program “First-principles predictions of chemical reactions in heterogeneous catalysts“
開催期間	平成 28 年 11 月 7 日 ～ 平成 28 年 11 月 8 日 (2 日間)
開催地 (国名、都市名、会場名)	(和文) アメリカ、スタンフォード、スタンフォード大学 (英文) United States of America、Stanford、Stanford 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・Osaka University・Professor
相手国側開催責任者 氏名・所属・職 (※日本以外で開催の場合)	(英文) Jens K. NORSKOV, Stanford University, Professor Thomas BLIGAARD, SLAC National Accelerator Laboratory, Deputy Director,

参加者数

派遣先 派遣元	セミナー開催国 (米国)	
	A.	B.
日本 〈人／人日〉	3 / 21	
米国 〈人／人日〉		
	10	
合計 〈人／人日〉	3 / 21	
	10	

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



セミナー開催の目的	第一原理シミュレーションによる不均一触媒反応の予測と、より機能の高い触媒の設計に向けて、大阪大学とスタンフォード大学における研究の現状と今後の共同研究に関して討論を行う。		
セミナーの成果	不均一触媒は固体と気体、あるいは、固体と液体などの界面での化学反応過程が関与しており、その反応過程は複雑で実験的に反応機構を解明することは困難な場合が多い。そのような中で第一原理電子状態計算による精度の高いシミュレーションは重要な役割を果たす。第一原理シミュレーションにより、不均一触媒反応過程を解明し、その反応性を支配する要因を明らかにした。その知見を元に、新たな触媒を設計する指針を与えることを目指とした将来計画を企画立案した。具体的には燃料電池電極触媒反応、および、それらに应用するデザイン手法開発に関する研究に関して深い議論を行い、共同研究プロジェクトの企画立案を行った。		
セミナーの運営組織	大阪大学とスタンフォード大学、スタンフォード線形加速器センターのメンバーで行った。		
開催経費 分担内容 と金額	日本側	内容	金額
		国内旅費	17,370 円
		外国旅費	864,860 円
		税金	69,188 円
	(米国) 側	内容	
		会議費	マッチングファンド

整理番号	S-4
セミナー名	(和文) 日本学術振興会研究拠点形成事業「有機界面の第一原理シミュレーションによる予測」 (英文) JSPS Core-to-Core Program “First-principles prediction of electronic properties at organic interfaces“
開催期間	平成28年11月9日 ～ 平成28年11月10日 (2日間)
開催地(国名、都市名、会場名)	(和文) アメリカ、バークレー、カリフォルニア大学バークレー校 (英文) United States of America、Berkeley、University of California, Berkeley
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・Osaka University・Professor
相手国側開催責任者 氏名・所属・職 (※日本以外で開催の場合)	(英文) Jeffry NEATON, University of California, Berkeley, Profesor

参加者数

派遣先 派遣元	セミナー開催国 (米国)	
	A.	B.
日本 〈人／人日〉	3 / 21	
米国 〈人／人日〉	1 / 2	
	10	
合計 〈人／人日〉	4 / 23	
	10	

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

セミナー開催の目的	第一原理電子状態計算による有機界面での構造と電子状態、および、電子機能の予測に関する共同研究を進めるために、大阪大学とカリフォルニア大学バークレー校における研究の現状を紹介し、さらに、今後必要となる研究手法や今後の研究の方向性に関して討論を行った。	
セミナーの成果	有機半導体材料における界面の電子状態、すなわち、有機/金属電極界面や有機/有機界面における界面準位や電子準位接続は有機デバイスの性能を大きく左右することが知られている。しかしながら、これらを支配する要因を明らかにするには精度の高い第一原理電子状態計算による理論的な研究が重要である。有機界面の精密な構造予測や電子状態予測には、最新の電子状態計算手法や新たな電子状態計算手法が必要であり、これらに関する新たな共同研究に関して討論を行い、恒常的な共同研究を推進するためのネットワークの構築を行った。	
セミナーの運営組織	大阪大学とスタンフォード大学、スタンフォード線形加速器センターのメンバーで行った。	
開催経費 分担内容 と金額	日本側	内容 金額 S-3 と継続して行われたため、経費は S-3 に含まれる
	(米国) 側	内容 会議費      マッチングファンド

### 7-3 研究者交流（共同研究、セミナー以外の交流）

共同研究、セミナー以外でどのような交流（日本国内の交流を含む）を行ったか記入してください。

#### （1）平成28年度実施状況

平成28年度は実施しなかった。

#### （2）全期間にわたる実施状況概要

- Aspera Susan Menez（大阪大学・博士課程学生）、Wungu Triati Dewi Kencana（大阪大学・博士課程学生）を英国・Hull 大学に派遣し、ECOSS-29 に参加、および University of Hull にて情報収集を行った。
- 濱田幾太郎（東北大学・助教）を Takashi Kumagai（ドイツ・ベルリン・Fritz-Haber Institute of the Max Planck Society）に派遣し、Theory of induced spin polarization at molecule-metal interfaces と題する講演及び討議、情報収集を行った。
- 笠井 秀明（大阪大学・教授）を英国・ロンドンで開催の JPCM Biard Meeting に派遣し、情報収集を行っていただいた。
- 真砂 啓（大阪大学・特任研究員）、船島 洋紀（大阪大学・特任研究員）、植本 光治（大阪大学・博士（後期）課程学生）、新屋 ひかり（大阪大学・博士（前期）課程学生）、佐藤 和則（大阪大学・准教授）を米国・デンバーで開催の APS March Meeting 2014 に派遣し、研究成果の発表を行い、世界中からきている研究者らと討議、議論を深め、情報収集も含め交流した。
- 真砂 啓（大阪大学・特任研究員）、船島 洋紀（大阪大学・特任研究員）、植本 光治（大阪大学・博士（後期）課程学生）、新屋 ひかり（大阪大学・博士（前期）課程学生）、高成柱（大阪大学・博士（後期）課程学生）をドイツ、ミュンヘンに派遣し、ミュンヘン大学のエバート教授グループ、および、長期派遣中の小倉昌子博士とともに、計算機ナノマテリアルデザイン手法に関する研究連絡および意見交換と情報収集を行った。
- 笠井 秀明（大阪大学・教授）をドイツ、ドレスデンで開催された IEEE International Magnetism Conference に派遣し、研究交流と情報収集を行った。
- 獅子堂 達也（広島大学・助教）をフランス、グルノーブルで開催の SCES2014 に派遣し、研究交流と情報収集を行った。
- 山口 貴士（大阪大学・博士（前期）課程）、佐藤 和則（大阪大学・准教授）、掛下 知行（大阪大学・教授）、寺井 智之（大阪大学・講師）をスペイン、ビルバオで開催の ICOMAT2014 に派遣し、研究交流と情報収集を行った。
- 船島 洋紀（大阪大学・特任研究員）、新屋 ひかり（大阪大学・博士（後期）課程）、植本 光治（大阪大学・特任研究員）、を米国、サンアントニオで開催の APS March Meeting に派遣し、研究成果の発表および研究交流と情報交換を行った。
- 中西 寛（工学研究科・助教）をドイツ、ミュンヘンで開催の DSL2015 国際会議に派遣し、成果発表及び情報収集を行った。
- 獅子堂達也（広島大学・助教）をスペイン、バルセロナで開催の ICM 国際会議に派遣し、成

果発表及び情報収集を行った。

- ・ 佐藤和則（工学研究科・准教授）、出口大幹（工学研究科・博士前期課程）、吉田 博（基礎工学研究科・教授）、福島鉄也（基礎工学研究科・助教）、真砂啓（基礎工学研究科・特任研究員）、新屋ひかり（基礎工学研究科・博士後期課程）をフィンランド・ヘルシンキ、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)に派遣し、成果発表および情報収集を行った。
- ・ 上村 直樹（産業科学研究所・博士後期課程）、佐藤和則（工学研究科・准教授）、山内邦彦（産業科学研究所・助教）、小鷹浩毅（産業科学研究所・特任研究員）、山下智樹（京都大学・特例研究員）、靱田浩義（産業科学研究所・助教）、小口多美夫（産業科学研究所・教授）をスペイン、ドノスティア/サンセバスチャンで開催の PSI-K 2015 Conference に派遣し、成果発表及び情報収集を行った。

#### 7-4 中間評価の指摘事項等を踏まえた対応

- (1) 指摘事項：長期滞在による実質的な共同研究と人材育成の推進の具体化。

デザイン→実証→デザインのサイクルの確立。

対応：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) 指摘事項：継続的な若手人材育成システムの確立。

本プロジェクト終了後の継続性。

対応：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) 指摘事項：継続的な若手人材育成システムの確立。

本プロジェクト終了後の継続性。

対応：「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った。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した。

(4) 指摘事項：相手国側参加者の受け入れ数の増大に関する計画。

対応：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ことが可能になった。

- OSAKA-2010-nano （第一原理分子動力学法、開発者：白井光雲）
- MACHIKANNEYAMA-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）

## 8. 研究交流実績総人数・人日数

## 8-1 平成 28 年度の相手国との交流実績

派遣先 派遣元	日本	ドイツ	スウェーデン	フィンランド	米国	オーストリア (ドイツ側参加研究者)	中国(第三国)	韓国(第三国)	合計
日本	1	( 1/ 53 )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 1/ 53 )
	2	17/ 145 ( 13/ 92 )	( )	2/ 37 ( )	( )	( )	( )	( )	19/ 182 ( 13/ 92 )
	3	( 1/ 7 )	( )	( )	3/ 21 ( 3/ 21 )	( )	( )	( )	3/ 21 ( 4/ 28 )
	4	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	計	17/ 145 ( 15/ 152 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	2/ 37 ( 0/ 0 )	3/ 21 ( 3/ 21 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	22/ 203 ( 18/ 173 )
ドイツ	1	( 2/ 10 )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 2/ 10 )
	2	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	3	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	4	( 2/ 11 )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 2/ 11 )
	計	0/ 0 ( 4/ 21 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 4/ 21 )
スウェーデン	1	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	2	( )	( 6/ 42 )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 6/ 42 )
	3	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	4	( 2/ 13 )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 2/ 13 )
	計	0/ 0 ( 2/ 13 )	0/ 0 ( 6/ 42 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 8/ 55 )
フィンランド	1	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	2	( )	( 1/ 4 )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 1/ 4 )
	3	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	4	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	計	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 1/ 4 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 1/ 4 )
米国	1	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	2	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	3	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	4	( 2/ 12 )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 2/ 12 )
	計	0/ 0 ( 2/ 12 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 2/ 12 )
オーストリア (ドイツ側参加研究者)	1	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	2	( )	( 1/ 3 )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 1/ 3 )
	3	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	4	( 1/ 4 )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 1/ 4 )
	計	0/ 0 ( 1/ 4 )	0/ 0 ( 1/ 3 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 2/ 7 )
中国 (第三国)	1	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	2	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	3	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	4	1/ 6 ( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	1/ 6 ( 0/ 0 )
	計	1/ 6 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	1/ 6 ( 0/ 0 )
韓国(第三国)	1	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	2	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	3	( )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	4	1/ 5 ( 1/ 3 )	( )	( )	( )	( )	( )	( )	1/ 5 ( 1/ 3 )
	計	1/ 5 ( 1/ 3 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	1/ 5 ( 1/ 3 )
合計	1	0/ 0 ( 2/ 10 )	0/ 0 ( 1/ 53 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 3/ 63 )
	2	0/ 0 ( 0/ 0 )	17/ 145 ( 21/ 141 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	2/ 37 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	19/ 182 ( 21/ 141 )
	3	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 1/ 7 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	3/ 21 ( 3/ 21 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	3/ 21 ( 4/ 28 )
	4	2/ 11 ( 8/ 43 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	2/ 11 ( 8/ 43 )
	計	2/ 11 ( 10/ 53 )	17/ 145 ( 23/ 201 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	2/ 37 ( 0/ 0 )	3/ 21 ( 3/ 21 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	24/ 214 ( 36/ 275 )

※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。)

## 8-2 平成 2 8 年度の国内での交流実績

1	2	3	4	合計
( 87/ 112 )	( 7/ 21 )	( 2/ 6 )	5/ 16 ( 43/ 108 )	<b>5/ 16</b> ( 139/ 247 )

## 8-3 全期間にわたる派遣・受入人数

年度	平成 24 年度	平成 25 年度	平成 26 年度	平成 27 年度	平成 28 年度
派遣人数 (人)	32/294 (18/335)	28/262 (8/86)	15/390 (4/36)	36/404 (15/93)	22/203 (18/173)
受入人数 (人)	0/0 (11/128)	1/9 (15/127)	3/18 (11/70)	0/0 (4/14)	2/11 (10/53)

※各年度の実施報告書の「相手国との交流実績」に記載の人数を転記してください。相手国側マッチングファンド等日本側予算によらない交流については（ ）で記載してください。



**9. 経費使用総額**

**9—1 平成28年度経費使用額**

(単位 円)

	経費内訳	金額	備考
研究交流経費	国内旅費	197,254	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	8,289,910	
	謝金	0	
	備品・消耗品購入費	0	
	その他の経費	2,310,729	
	不課税取引・非課税取引に係る消費税	645,107	
	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	

**9—2 全期間にわたる経費使用額**

(単位 千円)

	平成24年度	平成25年度	平成26年度	平成27年度	平成28年度
国内旅費	466	1,940	775	0	197
外国旅費	9,488	8,896	8,916	9,471	8,290
謝金	57	0	0	0	0
備品・消耗品購入費	97	0	5	0	0
その他の経費	1,411	648	1,509	1,152	2,311
不課税取引・非課税取引に係る消費税	481	456	735	819	645
合計	12,000	11,940	11,940	11,442	11,443

※各年度の実施報告書の「経費使用額」を千円単位にして転記してください。

## 10. 相手国マッチングファンド使用額

## 10-1 平成28年度使用額

相手国名	経費負担区分	平成28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	パターン1	39.200 [ユーロ]	4,000,000 円相当
スウェーデン	パターン1	355.000 [クローネ]	4,000,000 円相当
フィンランド	パターン1	39.200 [ユーロ]	4,000,000 円相当
米国	パターン1	52.000 [米ドル]	4,000,000 円相当

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

## ※経費負担区分

パターン1：日本側研究者の経費は振興会が、相手国側研究者の経費は相手国側学術振興機関等が負担。

パターン2：派遣国が派遣にかかる費用を負担し、受入国が受入にかかる滞在費等を負担。

## 10-2 全期間にわたる相手国のマッチングファンドの状況概要

本プロジェクト推進中の5年間における相手国のマッチングファンドは、各拠点共に運営費および研究プロジェクトのオーバーヘッドの中から、恒常的に当初プロジェクトをスタートしたときの合意額を優先的に確保し、ネットワーク型の共同研究の推進が円滑に行われた。

相手国名	経費負担区分	全期間使用額	
		現地通貨額[現地通貨単位]	日本円換算額
ドイツ	パターン1	196.000 [ユーロ]	20,000,000 円相当
スウェーデン	パターン1	1775.000 [クローネ]	20,000,000 円相当
フィンランド	パターン1	196.000 [ユーロ]	20,000,000 円相当
米国	パターン1	260.000 [米ドル]	20,000,000 円相当