

研究拠点形成事業 平成 27 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

(4 年度目)

4. 実施体制

日本側実施組織

拠点機関：国立大学法人大阪大学

実施組織代表者（所属部局・職・氏名）：大阪大学・学長・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

(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)

Dr. Mowafak Al-Jassim

(National Renewable Energy Laboratory、主任研究員)

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. 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、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務めている。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国際チュートリアルの実施。

(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、ワークショップ及びチュートリアルコースを日米欧で継続することで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等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継続的に発展させる。

(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。

5-2. 平成27年度研究交流目標

<研究協力体制の構築>

・ 本プロジェクトで開発公開・ソフトウェアを更新し、CMD ワークショップや国際ワークショップで公開、講習会、応用、権利化法等の指導を行っている新しい量子シミュレーション手法について下記を公開し、その使用法やデザイン手法、産業応用、知財化の講習会を CMD ワークショップとして実施。以下、使用する計算機ナノマテリアルデザインである。

- 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)

- ・ 若手人材育成の研究協力体制構築のため、マッチングファンドにより、2年程度、相手側の将来有望な若手研究者を長期間雇用するため創省エネルギー材料の計算機ナノマテリアルデザインと実証に関する基金取得に努めこれらを実行する。また、JSPSなどの海外からの博士研究員を導入する。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共同研究に若手研究者を参加させ、雇用することで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プロジェクト研究と共同研究の実施。
- ・ デザイン主導による実証研究を推進するため、各国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、共同研究資金獲得のプロジェクトに申請し研究資金獲得を目指す。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、NRELとCuInGa(S,Se)₂、Cu₂ZnSn(S,Se)₄、およびペロブスカイトCsSn(I,Cl)₃などの塗布法による低コスト・高効率の次世代太陽電池材料について、デザインと実証実験に関する共同研究を行う。また、省エネルギーデバイスでは、相変化メモリ、Re-RAM、スピントロニクスや有機分子エレクトロニクス材料について、ユーリッヒ研究所、デュイスブルグ大学、ミュンヘン大学、スタンフォード大学との若手研究者や大学院生の派遣により、デザインと実証を目的とした共同研究を行う。
- ・ 具体的なナノ超構造の自己組織化デザインと物性予測に基づいた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、デザインと実証実験に関する共同研究体制の強化を図る。更に、デザイン主導による実証を含めたサクセス・ストーリーを構築する研究協力体制強化を行う。平成27年度にはスピントロニクス研究でドイツ、スウェーデン、フィンランド、日本との共同研究で大きな成果が得られつつある。
- ・ スタンフォード大学の触媒研究と大阪大学の森川グループの共同研究を推進し、スタンフォード大学を独立したコアとする研究体制を構築する準備を推進する。
- ・ 大型予算新規事業・文部科学省大型プロジェクト「スピントロニクス学術研究基盤と連携ネットワーク拠点」(ロードマップ2014に227件のなかから10件の中に最終的に採択された)の拠点整備を目指した概算要求を東京大学、東北大学、慶応大学と共同で行う(10年間：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 上記4大学が全国の大学を連ねる中心拠点となるが、大阪大学では本プロジェクトグループが中心となり企画立案し、省エネルギー革新デバイスであるスピントロニクスデバイスに関する「スピントロニクス材料デザイン・素子設計」を担当し、長期的研究活動の拠点とする。そのため、海外との連携拠点としてユーリッヒ研究所、ウプサラ大学との「スピントロニクス材料デザイン・素子設計」に関する連携を強化する。

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

<学術的観点>

- ・ 低コスト・超効率エネルギー変換を可能にする太陽電池や赤外線電池などの開発のための環境調和型のペロブスカイト型太陽電池材料において、①自己修復機構のデザイン(人工的な同時ドーピング法による欠陥の修復機構)、②スピノーダル・ナノ分解による非平衡状態における自己組織化ナノ超構造のデザイン、③自己組織化ナノ超構造とタイプ2のバン

ド構造による電子正孔高速分離法のデザインを行い、これらを NREL の理論・実験グループおよび日本の実証実験グループ (NIMS、東京理科大、東工大、および企業) との共同研究によりデザイン結果を実証し、低コスト・超高効率次世代太陽電池材料のデザイン則を確立する。

- ・ 室温 (300K) で安定に作動する超伝導体には、短いクーパー対による強い超伝導揺らぎのため、少なくとも超伝導転移温度 (T_c) は $T_c > 1000K$ 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。その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、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、などについて具体的な新物質のデザインを行う。また、上記のチャレンジなデザイン結果を実証するための実験グループとの共同研究を開始する。
- ・ 自己組織化ナノ超構造等のシミュレーションのため多階層連結計算の手法開発と応用が進み、太陽電池材料におけるスピノーダル・ナノ分解による自己組織化ナノ超構造の創製法やタイプ II ナノ半導体構造による電子と正孔の高速分離による高効率化や多重励起子創成の可能性、また、結果の自己修復機構などについての計算機ナノマテリアルデザインと実証研究を国際共同研究により大きく進展させる。
- ・ 新規オーダーN法 (KKR-nano) などの大規模原子系をシミュレーションする計算手法を共同開発し、新規ナノ超構造スピンエレクトロニクス材料や相転移メモリなどへの応用とデザイン・実証を可能にする。日本人研究者 (小倉昌子氏) をユーリッヒ研究所に1年間常駐させ日独での共同研究を行う。
- ・ 現時点までの研究の主流は局所密度近似 (LDA) であるが、一般に、興味深い物性やデバイス機能を実現するような物質では、多くの場合 LDA が破綻していることがよく知られている。これらを克服するための新しい量子シミュレーション手法の開発は、個別のグループ毎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、各国研究拠点で連携したネットワークを形成し、若手研究者の長期派遣、滞在による息の長い研究開発が不可欠である。これらの実現のため人的な交流を年単位で長期に行い、長期滞在による共同研究により共通する問題点を明確化、克服する必要があり、また KKR 法による動的平均場近似法 (DMFA : Dynamical Mean Field Approximation) を開発し公開・普及活動及び、応用を各拠点間の共同研究により平成 27 年度も継続実施する。
- ・ 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、小谷岳生氏 (鳥取大学工学部) の開発した準粒子スペクトルを定量的に予言するための新規計算手法 (QSGW)、大規模計算に不可欠のオーダーN法 (福島鉄也氏)、階層を越えたレベルの結

晶成長やナノ超構造をシミュレートするための多階層連結計算手法(佐藤和則氏(阪大工))について、更なる共同研究により、新しい量子シミュレーション手法の開発・公開・普及・応用が複数の研究拠点で、具体的な新機能物質がデザインでき、そのナノ超構造の創製法などについても共同研究が実施できるように平成 27 年度も継続して共同研究を実施し、開発したソフトウェアを公開する。

- ・ デザイン主導による実証は成功例がまだ少なく、これらを可能にするため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、その応用結果の普及活動を行う。また、更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伴う国際共同研究を企画立案、実質的な共同研究の加速を平成 27 年度も継続し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、助教クラスと博士研究員クラスの研究者を 3 年間にわたり、海外拠点に派遣し、新しい研究手法の開発と公開を共同で行い、人材育成とシミュレーション手法の開発・公開・普及・応用を可能にする。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行う。また、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、及びそれらを使った応用を行うための人材育成、更にこれらを積極的に利用したデザイン応用を行うことが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、平成 27 年度も継続して新しい計算手法の開発に関する共同研究を実施する。

上記以外にも国際会議や国際ワークショップにおいて、若手研究者が H27 年度の研究成果を発表しこれらに立脚して、H28 年度以降の研究計画や国際交流計画を自ら主体的に企画立案し共同研究を促進する。H27 年度も引き続き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した。共同研究や人材育成を目指したワークショップへの若手研究者や大学院生の積極的な参加を可能にするため、多くの若手研究者を Psi-k ワークショップ、国際スクールや国際共同研究に企画立案段階から参画させる。

<その他(社会貢献や独自の目的等)>

計算機ナノマテリアルデザインワークショップ(平成 27 年度、9 月および 3 月、一回 5 日間、年二回開催)や欧州での Psi-k ネットワークのワークショップ、国際会議、国際スクール等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、及び教職員がチューターとして参加し、手法開発・デザイン・実証について国際的な雰囲気のもと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、他研究機関の研究員や教員に対する社会貢献を行う。

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

6. 平成27年度研究交流成果

6-1 研究協力体制の構築状況

- ・ H27年7月にアールト大学（フィンランド）で半導体欠陥に関する国際会議と研究計画会議を開催し、グリーンエネルギー材料の欠陥制御と物理を目的としたマテリアルデザイン手法の開発、マテリアルデザイン、共同実証研究を目指した国際会議と研究発表を実施した。
- ・ スタンフォード大学との触媒やエネルギー材料のデザインに関する連携を強化するため、平成27年度同じEFRCネットワークのNRELおよびコロラド大学における会合とセミナーで今後の方針を議論し、触媒研究や表面のデザインを主導している森川教授とスタンフォード大学のノルシコフ教授の間でH28年度の将来計画の企画立案を行った。
- ・ H27年9月（ユーリッヒ研究所）及びH28年3月（大阪大学）において、研究成果発表とH28年度共同研究の企画立案を兼ねた国際ワークショップを開催し、若手研究者に加え、ドイツ、フランス、ポーランド、スウェーデン、オーストリア、米国、中国の研究者が参加し、計算機ナノマテリアルデザインのグリーンエネルギー材料への応用に関する共同研究と手法開発に関する討論を行った。また、スピンと電場の強い相互作用によるスピントロニクス実現のため高い強磁性転移温度実現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創製法に関する共同研究を若手研究者のユーリッヒ研究所滞在で実現した。
- ・ 大阪大学未来研究プロジェクト『計算機ナノマテリアルデザインによる新元素戦略』に採択、将来の大型研究外部資金獲得の先端拠点とし、国際共同研究を継続的に推進する予算申請の企画立案とスピントロニクス、超伝導、太陽電池材料に特化した2日間ワークショップ(H27年9月)を国際高等研究所で開催した。本プロジェクト終了後の研究拠点形成の企画立案を行った。計算機ナノマテリアルデザイン・グループが中心となり、『スピントロニクス学術研究基盤と連携ネットワーク』拠点の整備に応募、採択され、本プロジェクトもスピントロニクスの計算機ナノマテリアルデザインに関する人材育成とデザイン主導による実証研究を担う http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/gijyutu/gijyutu4/toushin/1351171.html これを受けて、H28年度概算要求により計算機ナノマテリアルデザインの手法開発と応用／普及を可能にする大阪大学「スピントロニクス学術連携研究教育センター」の設置が決まり（H28年4月発足）本拠点形成プロジェクト終了後の拠点にすることを決定した。
- ・ 熱電材料のデザイン研究のためJSPS 外国人特別研究員事業で海外博士研究員を2年計画でオーストラリアから招聘し、大きな成果が得られ、NIMS 研究員として採用された。また、若手研究者が東工大助教、および、日越大学に採用されネットワークを強化した。

6-2 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、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の現実的応用を目指した研究を行った。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、スピノードルナノ分解を積極的に利用し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、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で、Ge、GaN、GaAsをベースとして実証され、平成27年度インパクトファクター50以上のReview of Modern Physics (DOI: [10.1103/RevModPhys.87.1311](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.87.1311)) に掲載された。
- ・ 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、多値メモリー等へ応用する研

- 究をユーリッヒ研究所と共同で行い、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手法のデザインを開発、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、また、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い、日欧共同研究として論文2報を投稿中。
- ・ ペリブスカイト、チャルコパイライト、ケーステライト等をベースに、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、NREL グループとの実証実験により、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一致した。
 - ・ 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、及び昆布相の輸送現象に関する量子シミュレーションを行い、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。
 - ・ KKR nano 法による遮蔽グリーン関数法のソフトウェア開発を共同で行い、オーダーN法による超並列計算手法を開発、具体的な系に適用し効力を検証した。
 - ・ 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米の共同執筆で出版した。
 - ・ 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す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成果を得ている(http://scholar.google.co.jp/citations?hl=en&user=VaJrvsAAAAAJ&view_op=list_works参照)。
 - ・ 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、創製法に関する3つの基本法則が演繹され、これらを現実物質に適用するための共同研究を H25 年度から継続し、H27 年度も自己修復機構とスピノーダルナノ分解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と実証実験に関する多くの興味深い成果が得られ、数本の論文、単行本として出版中である (H28 年 6 月出版)。
 - ・ 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、強磁性や反強磁性及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。
 - ・ 現在の主流研究は局所密度近似 (LDA) であるが、一般に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知られおり、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、個別のグループ毎に孤立しているため、各国の研究拠点を連携したネットワークを形成し、3人を2ヶ月、1人を1ヶ月、また、1人を1年間ユーリッヒ研究所で雇用してもらい、若手研究者の長期派遣による共同研究開発を行った。韓国 KAIST の研究者も参画した。
 - ・ 局所密度近似(LDA)を越えるための自己相互作用補正を導入した新しい量子シミュレーション手法、準粒子スペクトルを定量的に予言する新規計算手法 (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、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、具体的な新物質でデザインできるように、共同研究を継続実施した。
 - ・ スピネル障壁 $\text{Fe/MgAl}_2\text{O}_4/\text{Fe}$ 接合では、トンネル磁気抵抗比は $\text{Fe/MgO}/\text{Fe}$ 接合と比較して1桁程度小さくなると理論予測された。一方、陽イオンの配列が不規則化したスピネル障壁で

は、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た。

- ・ 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 NREL と CIGS、CZTSSe 等の太陽電池材料については大阪大学グループと NREL における実証実験を行った。創省エネルギー材料のための低コスト／高効率エネルギー変換を可能にするナノ超構造の自己組織化デザインと物性予測に基づいた、物質の計算機ナノマテリアルデザインを行い、実証実験体制の強化を NREL との間で行い、更にデザイン主導による実証を含めた成功例を構築する研究協力体制の強化を行った。スピントロニクス研究ではドイツと日本の共同研究でデザインと実証による成果が得られた。
- ・ スピンの自由度を積極的に利用した高効率・低コスト・環境調和型スピントロニクス太陽電池のデザインと実証に関する共同研究を開始、基本的な三つのデザイン則を明らかにし、光励起された電子と正孔の高速分離エネルギー変換効率を高効率化するデザイン結果の実証が行われた。
- ・ 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や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、国際共同研究によりこれらの実証実験を組織する段階に到達した。特にゼーベック係数の増大を利用した熱電材料の高効率化を目指した計算機ナノマテリアルデザインに関する一般則が得られ、数編の論文として発表した。
- ・ 高い超伝導転移温度を有する純粋に電子的な引力機構を持つ系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及び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、現実物質への応用、超伝導転移温度の次元性依存性等についての研究成果を発表し（H28 年 3 月）、実証実験に関する共同研究を開始した。

6-3 若手研究者育成

- ・ 国内における計算機ナノマテリアルデザインワークショップ（H27 年 9 月及び H28 年 3 月、一回 5 日間）に、大学院生や博士研究員、及び若手教員が講師およびチューターとして参加し、手法開発・デザイン・実証について、世界と競争するための気概や新規計算手法の開発、計算機ナノマテリアルデザインと実証について学んだ。参加者は国際水準のチュートリアルや講義、討論により大きく成長している。
- ・ 本研究プロジェクトの資金には限りがあるため、助教クラスの研究者を 1 人を H27 年度 1 年間にわたり雇用していただき、P.H.Dederichs 教授との共同研究を行い、独立した若手研究者の人材育成に寄与した。今後も継続する予定である。
- ・ 若手研究者が長期間、新規計算手法の開発に専念できるシステム構築を行い、若手研究者の積極的参加により現在 2 年計画でフンボルト奨学生としてミュンヘン大学及びユーリッヒ研究所に滞在し手法開発に関する共同研究が継続されている。また、若手研究者 2 人が 2 ヶ月滞在し、輸送現象を定量的に予測する新規ソフトウェアの共同開発を来ない、また、1 人はユーリッヒ研究所に雇用され 1 年間滞在し、KKR-nano 法と呼ばれるオーダー N 法によるスーパーコン用ソフトウェアの開発と、スピントロニクス材料に関する共同開発を行った。
- ・ スピントロニクスに関するデザイン研究を拡大、継続するネットワーク型研究拠点として、阪大、東大、東北大、慶応大を 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 4 月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研究教育センター」として発足し、本拠点形成の中心機関となる。

- ・ 若手研究者のパーマネントポジション不足を解消し、流動的かつ恒常的な研究ポジション確保のため、大阪大学、東北大学、東京大学、分子科学研究所と共同で、文部科学省計算物質科学人材育成コンソーシアムに応募、採択され、本プロジェクト終了後も、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。
- ・ 本プログラム参加の若手研究者が、さきがけ研究 21 等のプロジェクトに 2 人採択され、独立したプロジェクトを組織し、積極的な国際共同研究を行い、新しい研究拠点形成を可能にするポジションに採用され、新研究拠点の構築と人材の育成が可能になった。

6-4 その他（社会貢献や独自の目的等）

CMD ワークショップ（H27 年 9 月及び H28 年 3 月開催）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、及び教職員がチューターとして多数参加し、社会人、他大学研究者、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、国際水準のチュートリアルや講義を行い社会貢献した。（<http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/CMD/>）年 2 回（1 回 5 日間）開催している CMD ワークショップの受講修了者は平成 27 年度現在 1,100 名以上となった。現在の 4 コースに加え、5 コースとして、スピントロニクス・デザインコースを企画した。

6-5 今後の課題・問題点

- （1） 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／普及を可能にするため、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』拠点に採択され、H28 年度から概算要求によりスタートした。若手教員のポジション確保が不可欠でそれらを実現する努力が今後必要である。
- （2） ソフトウェア開発やデザイン手法の開発は長い開発機関と高いスキルを持つ若手研究者が不可欠で、雇用を長期的に行う必要があり、拠点形成プログラム中で、これらを長期的視野でどのように企画立案、財政措置をするか、学術的国際競争力確保の上で最重要課題かつ最も困難な問題であり、良い解決策が見いだせていない。
- （3） 若手研究者のパーマネントポジション不足を解消し、本プロジェクト終了後の人材育成継続のコンソーシアムを構築し、流動的かつ恒常的な研究ポジション確保のため、文部科学省計算物質科学人材育成コンソーシアムに採択され、若手研究者と博士研究員を雇用したが、年毎に人件費負担が増大し、5 年後のキャリア・パス形成が最重要課題である。

6-6 本研究交流事業により発表された論文

- | | | |
|-------------------------------|----|---|
| （1）平成 27 年度に学術雑誌等に発表した論文・著書 | 13 | 本 |
| うち、相手国参加研究者との共著 | 0 | 本 |
| （2）平成 27 年度の国際会議における発表 | 31 | 件 |
| うち、相手国参加研究者との共同発表 | 3 | 件 |
| （3）平成 27 年度の国内学会・シポジウム等における発表 | 22 | 件 |
| うち、相手国参加研究者との共同発表 | 4 | 件 |

7. 平成27年度研究交流実績状況

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材料デザイン (英文) Computational Materials Design on Green Energy				
日本側代表者 氏名・所属・職	(和文) 吉田博・大阪大学・大学院基礎工学研究科・教授 (英文) Hiroshi YOSHIDA, Graduate School of Engineering Science Osaka University, Professor				
相手国側代表者 氏名・所属・職	(英文) <u>Stefan BLUEGEL</u> , Peter Grünberg Institute, Institute for Advanced Simulation, Forschungszentrum Jülich, Director <u>Olle ERIKSSON</u> , Department of Physics and Astronomy, Uppsala University, Professor <u>Risto NIEMINEN</u> , Department of Applied Physics, Aalto University, Professor <u>Su-Huai WEI</u> , Theoretical Materials Science Group, National Renewable Energy Laboratory, Team Leader				
参加者数	日本側参加者数	151 名			
	(ドイツ) 側参加者数	30 名			
	(スウェーデン) 側参加者数	6 名			
	(フィンランド) 側参加者数	6 名			
	(米国) 側参加者数	10 名			
27年度の研究 交流活動	H27年度は、 (1) H27年5月、ウプサラ大学に於いて、スピントロニクス、太陽電池、有機分子エレクトロニクス材料などのデザインと実証に関するワークショップと共同研究プロジェクトの企画立案をおこなった。 (2) H27年7月、米国エネルギー省再生可能エネルギー研究所において、低コスト・高効率太陽電池材料のデザインと実証に関する共同研究および成果発表、また、コロラド大学ボルダー校に於いて、超高温超伝導体とスピントロニクス材料に関するワークショップを行い、将来計画を策定した。 (3) H27年7月にアールト大学で半導体欠陥に関する国際会議と研究計画会議を開催した。グリーンエネルギー(創エネルギー【太陽電池材料、熱電材料】および、省エネルギー材料【スピンエレクトロニクス材料、超伝導材料】)のための欠陥の制御と物理を目的とした材料デザイン手法の開発、材料デザイン、共同研究をめざした国際会議と研究連絡会議を実施した。 (4) H27年9月、多くの研究者が Psi-k 国際会議(スペイン)で研究成果の発表を行い、そのあと、ユーリッヒ研究センターにおいて、磁性体				

	<p>材料としての合金や太陽電池材料としての半導体混晶における規則合金や不均一なナノ超構造の自己組織化創製法やその特殊な物性機能を積極的に利用するための、シミュレーション手法の開発とその応用を目指したワークショップをドイツで開催した。また、オーダーN法、QSGW法、多階層連シミュレーション手法などを用いた、スピントロニクスや次世代エレクトロニクスのための省エネルギー材料や熱電材料、低コスト・高効率太陽電池ナノ材料など、デバイスを指向した量子シミュレーション手法の開発とそのグリーン・エネルギー材料への応用を議論した。</p> <p>(5) スタンフォード大学に若手研究者を派遣、国際共同研究を開始するための企画立案を森川教授とノリシコフ教授の間で開始した。</p> <p>(6) 大規模科学計算を可能にする KKR-nano 手法の開発と KKR 法に基礎をおいた動的平均場近似法による KKR 法を開発する目的で、若手研究者を1年間の予定でユーリッヒ研究所とミュンヘン工科大学に派遣した。</p> <p>(7) 計算法の開発、デザイン手法の開発、および、共同研究を目的として、若手研究者、助教、准教授クラスの短期滞在によるインタラクティブな共同研究の加速と促進を行った。</p> <p>上記により生じた具体的な物質におけるデザイン結果を実証実験するための実験家を含む共同研究の推進をおこなう会合を米国エネルギー省再生可能エネルギー研究所 (NREL) および欧州 (ドイツ) で実施した。</p>
<p>27年度の研究交流活動から得られた成果</p>	<p>(1)大阪大学基礎工学研究科で H28 年 3 月に開催したグリーンエネルギー、および省エネルギー材料のためのマテリアルデザイン手法の開発、マテリアルデザイン応用、共同研究を目指した国際ワークショップでは、平成 27 年度の各グループの研究成果を発表し、これらを基に、新規デザイン手法の開発とそれを用いたデザインと実証実験提案が可能になった。これにより、高効率太陽電池材料、熱電材料、マルチフェロイック材料、および省エネルギーのためのスピントロニクス材料、触媒、二次電池、高い Tc をもつ超伝導材料、環境調和強磁性体磁石などをデザイン手法により実証する研究手法を確立することができた。</p> <p>(2) H27 年 9 月のユーリッヒ研究センターでのワークショップでは、希土類元素を用いない磁性体合金材料や自己組織化ナノ超構造を積極的に利用した太陽電池材料、スピントロニクス材料、熱電材料などの自己組織化ナノ超構造創製法やその特殊な物性機能を積極的に利用する手法の開発とその応用が可能になった。</p> <p>(3)スタンフォード大学と大阪大学が中心となっていく国際共同研究では、シミュレーション手法とナノ構造による特異な物性を利用した新しいエレクトロニクスや触媒反応開発に関するデザインと実証が可能になった。</p> <p>(4) ユーリッヒ研究所で H27 年 9 月開催したスピントロニクスや次世代エレクトロニクスのための省エネルギー材料やデバイスを指向した量子シミュレ</p>

	<p>ーション手法の開発とその応用を目指したワークショップでは、次世代創・省エネルギーデバイスやスピントロニクス材料に関するデザイン（高い Tc と巨大物性応答の開発）が可能になった。</p> <p>(5) 前年度に引き続き、若手研究者を2年間の予定でドイツ・ユーリッヒ研究所とミュンヘン工科大学に派遣することにより、2年間で大規模科学計算を可能にする KKR-nano 手法の開発と KKR 法に基礎をおいた動的平均場近似法による KKR 法を開発することが可能になった。</p> <p>(6) 前年度同様、計算手法の開発、デザイン手法の開発、および共同研究を目的として、若手研究者、助教、准教授クラスのインタラクティブな共同研究を加速し、グリーンエネルギーに関する新しい分野（人工光合成や可視光による水分解）のデザイン手法開発とこれらを可能にする具体的な物質とその応用が可能になった。</p> <p>(7) H27年7月米国エネルギー省再生可能エネルギー研究所（NREL）と共同で行う計算機ナノマテリアルデザインと実証実験を組み合わせた低コスト・高効率・環境調和型太陽電池材料の共同研究から、材料創製時に構成する原子自身による自己修復機構、スピノーダル・ナノ分解による自己組織化ナノ超構造の創成とこれらを用いた電子正孔の高速分離や多重励起子創成により、低コスト・高効率・環境調和型太陽電池の創製法に関する3つの基本法則が演繹されたので、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、多くの成果が得られつつある。これらは、2016年にエネルギー変換効率 25%（現在 22.3%を実現）、2030年に50%を目標とする高いステージ・ゲートを設定しているが、デザイン手法でクリアできる可能性が大きくなってきた。</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) <u>Stefan BLUEGEL</u> , Peter Grünberg Institute, Institute for Advanced Simulation, Forschungszentrum Jülich, Director				
参加者数	日本側参加者数	4 名			
	(ドイツ) 側参加者数	4 名			
27年度の研 究交流活動	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 た。				
27年度の研 究交流活動から得 られた成果	日本側は、大規模超並列計算が可能な実空間差分法を用いた第一原理計算法 とこれに基づく計算コード RSPACE を開発し、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 ロクスデバイスや超伝導デバイスのデザインを実現すべく、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い、今後の計算コードの 改良方針を得る事ができた。				

7-2 セミナー

整理番号	S-1
セミナー名	(和文) 日本学術振興会研究拠点形成事業「グリーンエネルギー実現にむけた高効率エネルギー変換材料の計算機マテリアルデザイン」 (英文) JSPS Core-to-Core Program “Computational materials design of effective energy conversion towards sustainable society “
開催期間	平成 27 年 5 月 4 日 ～ 平成 27 年 5 月 4 日 (1 日間)
開催地 (国名、都市名、会場名)	(和文) スウェーデン、ウプサラ、ウプサラ大学 (英文) Sweden, Uppsala, Uppsala University
日本側開催責任者 氏名・所属・職	(和文) 吉田博・阪大基礎工・教授、佐藤和則・阪大工・准教授 (英文) Hiroshi Katayama-Yoshida・Osaka University・Professor, Kazunori Sato・Osaka University・Associate Professor
相手国側開催責任者 氏名・所属・職 (※日本以外で開催の場合)	(英文) Olle Eriksson・Uppsala University・Professor, Biplab Sanyal・Uppsala University・Academic staff

参加者数

派遣先 派遣		セミナー開催国 (スウェーデン)
日本 〈人／人日〉	A.	4 / 20
	B.	
スウェーデン 〈人／人日〉	A.	2 / 4
	B.	12
〈人／人日〉	A.	
	B.	
合計 〈人／人日〉	A.	6 / 24
	B.	12

A. 本事業参加者 (参加研究者リストの研究者等)

B. 一般参加者 (参加研究者リスト以外の研究者等)

※日数は、出張期間 (渡航日、帰国日を含めた期間) としてください。これによりがたい場合は、備考欄を設け、注意書きを付してください。

セミナー開催の目的	エネルギー問題の解決の為に、太陽光発電、熱電変換、スピントロニクス、省エネルギー発光材料等の研究が進められているが、革新的な機能を備えた材料開発の為に第一原理電子状態計算に基づく材料設計が不可欠である。本セミナーでは太陽電池材料、熱電材料、スピントロニクス材料に注目し最新の計算機ナノマテリアルデザインについて情報交換を行い、実証実験を参照しつつ、グリーンイノベーションにむけた研究の方向性について議論することを目的とする。		
セミナーの成果	本セミナーでは元素戦略の観点からブレークスルーを目指し、材料シミュレーションの研究実績が高い両グループの最新デザイン情報の交換により http://www.yoshidalab.mp.es.osaka-u.ac.jp/core_to_core/houkoku/uppsala.pdf 新しいグリーンエネルギー材料の提案が行われた。特に、当該研究グループは材料組織のシミュレーションで独自の成果を挙げているため、ありふれた元素の組み合わせを提案するだけでなくナノスケールでの材料組織制御により高機能化を図るといった、材料設計の新しい方向性を生み出す可能性を見出すことができた。		
セミナーの運営組織	セミナーはウプサラ大学理論物質学グループ（本プログラム研究拠点）において開催した。現地での運営はウプサラ大学理論物質学グループの Olle Eriksson 教授と Biplab Sanyal 博士が取りまとめた。セミナーの企画立案およびプログラムの構成は日本側が受け持ち大阪大学の吉田博教授と佐藤和則准教授がおこなった。ヨーロッパ側参加者としては、おもにウプサラ大学の研究者であり、その他のヨーロッパからはマッチングファンドによる参加となった。		
開催経費 分担内容 と金額	日本側	内容	金額
		国内旅費	21,330 円
		外国旅費	899,910 円
		税金	71,992 円
		合計	993,232 円
	スウェーデン側	内容	
		旅費・会議費	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拠点形成事業「低コスト・高効率太陽電池材料の計算機ナノマテリアルデザインと実証」
	(英文) JSPS Core-to-Core Program “Computational nano-materials design and realization of low-cost and high-efficiency photovoltaic-solar-cells materials“
開催期間	平成 27 年 7 月 12 日 ~ 平成 27 年 7 月 18 日 (7 日間)
開催地 (国名、都市名、会場名)	(和文) 米国、ゴールデン、コロラド州、米国エネルギー省再生可能エネルギー研究所およびボルダー、コロラド大学
	(英文) USA, Golden, Colorado, National Renewable Energy Laboratory, and University of Colorado, Boulder
日本側開催責任者 氏名・所属・職	(和文) 吉田博・阪大基礎工・教授
	(英文) Hiroshi Katayama-Yoshida・Osaka University・Professor
相手国側開催責任者 氏名・所属・職 (※日本以外で開催の場合)	(英文) Suhuai Wei・National Renewable Energy Laboratory・Research Fellow
	Alex Zunger・University of Colorado・Professor

参加者数

派遣先 派遣	セミナー開催国 (米国)	
	A.	B.
日本 〈人／人日〉	2 / 14	
米国 〈人／人日〉	3 / 6	
	12	
〈人／人日〉		
合計 〈人／人日〉	5 / 20	
	12	

A. 本事業参加者 (参加研究者リストの研究者等)

B. 一般参加者 (参加研究者リスト以外の研究者等)

※日数は、出張期間 (渡航日、帰国日を含めた期間) としてください。これによりがたい場合は、備考欄を設け、注意書きを付してください。

セミナー開催の目的	エネルギー問題の解決の為に低コスト・高効率の太陽電池材料のデザインと実証研究が不可欠である。革新的な機能を備えた材料開発の
-----------	---

	<p>為には第一原理電子状態計算に基づく材料設計が不可欠である。本セミナーでは、自己組織化と自己修復機構に着目して太陽電池材料に関する最新の計算機ナノマテリアルデザインについて情報交換を行い、実証実験や分光評価実験を参照しつつ、低コスト・高効率の太陽電池材料にむけた研究の方向性について議論し、実証実験を含む共同研究を企画立案することを目的とする。</p>											
セミナーの成果	<p>カルコパイライト系、ケーステライト系、およびペロブスカイト系太陽電池材料系については多くの研究があるが、自己組織化および自己修復機構およびスピノーダル・ナノ分解およびそれらの創製法に着目した重点的な議論を行い、最新のデザイン情報の交換により新しい低コスト・高効率の太陽電池材料の提案がされた。特に当該研究グループは材料組織のシミュレーションで独自の成果を挙げており、ナノスケールでの材料組織制御により高機能化を図るとともに、自己組織化を利用した低コスト化といった、材料設計の新しい方向性を生み出す可能性が明らかになった。</p> <p>NREL は、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、大阪大学グループは CIGS、CZTSSe 等の太陽電池材料について NREL において実証実験を行った。創省エネルギー材料の低コスト／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、物質の計算機ナノマテリアルデザインを行い、実証実験体制の強化、更にデザイン主導による実証を含めた成功例を構築する研究協力体制の強化を図ることが出来た。</p>											
セミナーの運営組織	<p>セミナーは NREL マテリアルデザイングループ（本プログラム研究拠点）において開催した。現地での運営は NREL グループの Suhuai Wei 博士が取りまとめた。セミナーの企画立案およびプログラムの構成は日本側が受け持ち大阪大学の吉田博教授がおこなった。米国側参加者としては、おもに NREL の理論および実験研究者が参加した。</p>											
開催経費 分担内容 と金額	日本側	<table border="1"> <thead> <tr> <th>内容</th> <th>金額</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>国内旅費</td> <td>16,380 円</td> </tr> <tr> <td>外国旅費</td> <td>664,069 円</td> </tr> <tr> <td>税金</td> <td>53,124 円</td> </tr> <tr> <td>合計</td> <td>733,573 円</td> </tr> </tbody> </table>	内容	金額	国内旅費	16,380 円	外国旅費	664,069 円	税金	53,124 円	合計	733,573 円
	内容	金額										
国内旅費	16,380 円											
外国旅費	664,069 円											
税金	53,124 円											
合計	733,573 円											
米国側	<p>内容 旅費・会議費 マッチングファンド</p>											

8-2 セミナー

整理番号	S-3
セミナー名	(和文) 日本学術振興会研究拠点形成事業「希少元素課題のための計算マテリアルズデザイン」 (英文) JSPS Core-to-Core Program “Computational Materials Design for Critical Element Issues“ Juelich–Osaka discussion meeting on Computational Materials Design (http://www.yoshidalab.mp.es.osaka-u.ac.jp/core_to_core/houkoku.html)
開催期間	平成 27 年 9 月 14 日 ~ 平成 27 年 9 月 15 日 (2 日間) (Psi-k Conference より、9 月 11~12 日移動日、9 月 16 日出発、帰国 9 月 17 日)
開催地 (国名、都市名、会場名)	(和文) ドイツ、ユーリッヒ、ユーリッヒ研究所 (英文) Research Center Juelich, Juelich, Germany
日本側開催責任者 氏名・所属・職	(和文) 小口多美夫、大阪大学、教授 佐藤和則、大阪大学、准教授 福島鉄也、大阪大学、助教 (英文) Tamio Oguchi, Osaka University, Professor Kazunori Sato, Osaka University, Assoc. Professor Tetsuya Fukushima, Osaka University, Assis. Professor
相手国側開催責任者 氏名・所属・職 (※日本以外での開催の場合)	(英文) Stefan Bluegel, FZ-Juelich, Germany, Inst. Head Peter Dederichs, FZ-Juelich, Germany, Professor Gustav Bihlmayer, FZ-Juelich, Germany, Sci. Staff Daniel Wortmann, FZ-Juelich, Germany, Sci. Staff

参加者数

派遣先 派遣		セミナー開催国 (ドイツ)
日本 〈人／人日〉	A.	10/ 60
	B.	
ドイツ 〈人／人日〉	A.	10/ 20
	B.	20
スウェーデン 〈人／人日〉	A.	
	B.	
フィンランド 〈人／人日〉	A.	
	B.	
合計 〈人／人日〉	A.	20/ 80
	B.	20

A. 本事業参加者（参加研究者リストの研究者等）

B. 一般参加者（参加研究者リスト以外の研究者等）

※日数は、出張期間（渡航日、帰国日を含めた期間）としてください。これによりがたい場合は、備考欄を設け、注意書きを付してください。

セミナー開催の目的	持続的社会的な実現のためには資源・環境・エネルギー問題の解決が喫緊の課題であり、物質・材料・デバイスの研究分野においては希少元素に依存しない機能性材料・デバイスの研究開発が強く求められている。本セミナーは、特に、太陽電池材料、熱電材料、二次電池材料、触媒材料、電子デバイス等に注目し最新の計算マテリアルズデザインに基づく希少元素課題に関わる研究について議論を行い、共同研究を目的とした情報交換するとともに、グリーンイノベーションに資するアイデアの創出を目指す最新の研究発表と議論を行った。
期待される成果	元素戦略は希少元素を用いないというだけでなく、ありふれた元素の組み合わせをナノスケールで制御することにより、希少元素と同様な電子状態を通常の元素によるナノ超構造によりデザインし、有用な機能を発現させることで元素戦略を実現することができる。そのため同様なアプローチが異なる新機能材料の設計に適応可能な場合があり、最新の日欧のデザイン情報の交換は新しいグリーンエネルギー材料の提案につながることを期待される。また、計算マテリアルズデザインは実験との連携を経て初めて意味のあるものとなり、実験的に観測された現象を詳細に調べることでデザイン主導による新しいアイデアと発想法の開拓が期待され、デザイン主導による実証実験との協働により計算機ナノマテリアルデザインを実現できる。

セミナーの 運営組織	<p>ワークショップはユーリッヒ研究センター（本プログラム研究拠点）内で開催した。現地での運営は、日本側企画立案者とユーリッヒ研究センターの S. Bluegel 教授、G. Bihlmayer 博士、D. Wortmann 博士が取りまとめた。セミナーの企画立案およびプログラムの構成は日本側が受け持ち大阪大学の小口多美夫、佐藤和則、福島鉄也が中心となり行った。ヨーロッパ側参加者のうち本プログラムに参加していないものは Psi-k の補助をうける。それ以外の参加者はマッチングファンドによる参加である。</p> <p>(http://www.yoshidalab.mp.es.osaka-u.ac.jp/core_to_core/houkoku.html)</p>		
開催 経費 分担 内容	日本側	内容	金額
		国内旅費	61,340 円
		外国旅費	4,597,732 円
		税金	367,813 円
		合計	5,026,885 円
	(ドイツ) 側	旅費・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）

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
工学研究科・助教・中西 寛	ドイツ ミュンヘン	平成 27 年 6 月 21 日-28 日	DSL2015 国際会議において成果発表及び情報収集を行った。
広島大学・助教・獅子堂達也	スペイン バルセロナ	平成 27 年 7 月 5 日-11 日	ICM 国際会議において成果発表及び情報収集を行った。
工学研究科・准教授・佐藤和則	フィンランド・ヘルシンキ・アールト大学	平成 27 年 7 月 27 日-30 日	アールト大学(本プログラム研究拠点)で行われる半導体格子欠陥国際会議(ICDS2015)において成果発表および情報収集を行った。
工学研究科・博士前期課程・出口大幹	フィンランド・ヘルシンキ・アールト大学	平成 27 年 7 月 27 日-30 日	アールト大学(本プログラム研究拠点)で行われる半導体格子欠陥国際会議(ICDS2015)において成果発表および情報収集を行った。
基礎工学研究科・教授・吉田博	フィンランド・ヘルシンキ・アールト大学	平成 27 年 7 月 27 日-30 日	アールト大学(本プログラム研究拠点)で行われる半導体格子欠陥国際会議(ICDS2015)において成果発表および情報収集を行った。
基礎工学研究科・助教・福島鉄也	フィンランド・ヘルシンキ・アールト大学	平成 27 年 7 月 27 日-30 日	アールト大学(本プログラム研究拠点)で行われる半導体格子欠陥国際会議(ICDS2015)において成果発表および情報収集を行った。
基礎工学研究科・特任研究員・真砂啓	フィンランド・ヘルシンキ・アールト大学	平成 27 年 7 月 27 日-30 日	アールト大学(本プログラム研究拠点)で行われる半導体格子欠陥国際会議(ICDS2015)において成果発表および情報収集を行った。
基礎工学研究科・博士後期課程・新屋ひかり	フィンランド・ヘルシンキ・アールト大学	平成 27 年 7 月 27 日-30 日	アールト大学(本プログラム研究拠点)で行われる半導体格子欠陥国際会議(ICDS2015)において成果発表および情報収集を行った。

産業科学研究 所・博士後期課 程・上村 直樹	スペイン、ドノ ステシア/サン セバスチャン	平成 27 年 9 月 6 日-10 日	PSI-K 2015 Conference におい て成果発表及び情報収集を行 った。
工学研究科・准 教授・佐藤和則	スペイン、ドノ ステシア/サン セバスチャン	平成 27 年 9 月 6 日-10 日	PSI-K 2015 Conference におい て成果発表及び情報収集を行 った。
産業科学研究 所・助教・山内 邦彦	スペイン、ドノ ステシア/サン セバスチャン	平成 27 年 9 月 6 日-10 日	PSI-K 2015 Conference におい て成果発表及び情報収集を行 った。
産業科学研究 所・特任研究 員・小鷹浩毅	スペイン、ドノ ステシア/サン セバスチャン	平成 27 年 9 月 6 日-10 日	PSI-K 2015 Conference におい て成果発表及び情報収集を行 った。
京都大学・特例 研究員・山下智 樹	スペイン、ドノ ステシア/サン セバスチャン	平成 27 年 9 月 6 日-10 日	PSI-K 2015 Conference におい て成果発表及び情報収集を行 った。
産業科学研究 所・助教・榎田 浩義	スペイン、ドノ ステシア/サン セバスチャン	平成 27 年 9 月 6 日-10 日	PSI-K 2015 Conference におい て成果発表及び情報収集を行 った。
産業科学研究 所・教授・小口 多美夫	スペイン、ドノ ステシア/サン セバスチャン	平成 27 年 9 月 6 日-10 日	PSI-K 2015 Conference におい て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。

対応：若手研究者の長期派遣のための本プロジェクト予算は限られているために、長期派遣は別のファンドを模索し、派遣相手先からの雇用を可能にするマッチングファンドにより手当し、2年以上の長期滞在を確保した。また、ドイツ・ギーゼン大学物理学科と大阪大学基礎工学研究科とのダブル・ディグリー制度を立ち上げスピントロニクス研究の大学院生一名（H27年秋～H29年度）を受け入れた。

(2) 指摘事項：デザイン→実証→デザインのサイクルの確立。

対応：本研究プロジェクトはデザイン手法の開発と公開、応用がミッションであるが、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、外部の実証実験グループとの共同研究を強化した。デザイン主導による多くの実証実験を行い、H27年度は実証実験を含む研究論文や総説(Reviews of Modern Physics)の出版などデザイン主導による実証実験で多くの成果が出てきた。また、NRELの代表者はデザイン研究と太陽電池材料の評価実験も行っており、阪大グループのスピノーダル・ナノ分解による太陽電池材料の高効率化デザインの実証実験をおこない、デザイン結果を実証した。

- (3) 指摘事項：継続的な若手人材育成システムの確立。

対応：人材育成コンソーシアム等で、次世代若手研究者を雇用し、パーマネントポジションの確保を準備している。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、若手研究者と博士研究員を雇用了。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。また、年2回（1回5日間）開催しているCMDワークショップ（実習チュートリアル）における実験研究者は参加者の1/3をしめるので、CMDワークショップでの先端デザイン研究事例でデザイン結果を照会し、実証実験系の社会人や研究者に実証実験を守秘契約のもとで実施し、知財化させるためのチュートリアルと実習を行った。（<http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/CMD/>）

- (4) 指摘事項：本プロジェクト終了後の継続性。

対応：計算機ナノマテリアルデザインセンター以外にも10年以上にわたり継続的に計算機ナノマテリアルデザインの手法開発と応用／普及を可能にするセンターの設立を行う。2年間にわたる努力の結果、大型予算新規事業・文部科学省大型プロジェクト「スピントロニクス学術研究基盤と連携ネットワーク拠点」(ロードマップ2014に採択された(予算はH28年度概算要求で採択された)。HP参照

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

文部科学省大型プロジェクト「スピントロニクス学術研究基盤と連携ネットワーク拠点」(ロードマップ2014に採択下記HP参照)では東京大学、東北大学、大阪大学、慶応大学が全国の大学を連ねる中心拠点となるが、特に大阪大学は本プロジェクトの中心となり、省エネルギーデバイスとしてのスピントロニクスに関する「スピントロニクス材料デザイン・素子設計」を担当し、平成28年4月に、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研究教育センター」が概算要求により上記4大学で共同設置され、共同利用や共同研究拠点として長期的研究活動の拠点となり、大阪大学は計算機ナノマテリアルデザインのネットワークの中心拠点としての機能を継続する。

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

- (5) 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し、相手国側に提供するための公開ソフトウェアの整備、共同研究開発、応用普及活動をPsi-k国際会議やワークショップで行った。また、これらのデザイン結果と実証研究を普及させるためCMDワークショップに於いて、下記のソフトウェアの開発、公開、応用、普及、権利化をおこなうためのハンズオン・チュートリアル、デザイン実習の国際共同研究をおこなっ

た。特に、MACHIKANEYAMA, RSPACE, PSIC-MACHI, QSGW, STATE-senriは海外で使用している共同研究者が急速に増大している。

- 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)

8. 平成27年度研究交流実績総人数・人日数

8-1 相手国との交流実績

派遣先 派遣元	四半期	日本	ドイツ	スウェーデン	フィンランド	米国	スペイン(第3国)	合計
		1		2/ 65 (1/ 7)	4/ 20 ()	()	()	
日本	2		13/ 182 (4/ 25)	()	6/ 46 ()	3/ 43 ()	8/ 48 (10/ 61)	30/ 319 (14/ 86)
	3		()	()	()	()	()	0/ 0 (0/ 0)
	4		()	()	()	()	()	0/ 0 (0/ 0)
	計		15/ 247 (5/ 32)	4/ 20 (0/ 0)	6/ 46 (0/ 0)	3/ 43 (0/ 0)	8/ 48 (10/ 61)	36/ 404 (15/ 93)
ドイツ	1	()	()	()	()	()	()	0/ 0 (0/ 0)
	2	()	()	()	()	()	()	0/ 0 (0/ 0)
	3	()	()	()	()	()	()	0/ 0 (0/ 0)
	4	(1/ 3)	()	()	()	()	()	0/ 0 (1/ 3)
計	0/ 0 (1/ 3)		0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (1/ 3)	
スウェーデン	1	()	()	()	()	()	()	0/ 0 (0/ 0)
	2	()	()	()	()	()	()	0/ 0 (0/ 0)
	3	()	()	()	()	()	()	0/ 0 (0/ 0)
	4	(1/ 3)	()	()	()	()	()	0/ 0 (1/ 3)
計	0/ 0 (1/ 3)	0/ 0 (0/ 0)		0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (1/ 3)	
フィンランド	1	()	()	()	()	()	()	0/ 0 (0/ 0)
	2	()	()	()	()	()	()	0/ 0 (0/ 0)
	3	()	()	()	()	()	()	0/ 0 (0/ 0)
	4	()	()	()	()	()	()	0/ 0 (0/ 0)
計	0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)		0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)	
米国	1	()	()	()	()	()	()	0/ 0 (0/ 0)
	2	()	()	()	()	()	()	0/ 0 (0/ 0)
	3	()	()	()	()	()	()	0/ 0 (0/ 0)
	4	(2/ 8)	()	()	()	()	()	0/ 0 (2/ 8)
計	0/ 0 (2/ 8)	0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)		0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (2/ 8)	
スペイン(第3国)	1	()	()	()	()	()	()	0/ 0 (0/ 0)
	2	()	()	()	()	()	()	0/ 0 (0/ 0)
	3	()	()	()	()	()	()	0/ 0 (0/ 0)
	4	()	()	()	()	()	()	0/ 0 (0/ 0)
計	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 (0/ 0)	
合計	1	0/ 0 (0/ 0)	2/ 65 (1/ 7)	4/ 20 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)	6/ 85 (1/ 7)
	2	0/ 0 (0/ 0)	13/ 182 (4/ 25)	0/ 0 (0/ 0)	6/ 46 (0/ 0)	3/ 43 (0/ 0)	8/ 48 (10/ 61)	30/ 319 (14/ 86)
	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)	0/ 0 (0/ 0)
	4	0/ 0 (4/ 14)	0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (4/ 14)
計	0/ 0 (4/ 14)	15/ 247 (5/ 32)	4/ 20 (0/ 0)	6/ 46 (0/ 0)	3/ 43 (0/ 0)	8/ 48 (10/ 61)	36/ 404 (15/ 93)	

※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。)

※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。

8-2 国内での交流実績

1	2	3	4
0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (20/ 38)	0/ 0 (4/ 8)	0/ 0 (51/ 111)

合計	
0/ 0	(75/ 157)

9. 平成27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	0	
	外国旅費	9,471,061	
	謝金	0	
	備品・消耗品 購入費	0	
	その他の経費	1,151,614	
	外国旅費・謝 金等に係る消 費税	819,325	
	計	11,442,000	
業務委託手数料		1,144,200	
合 計		12,586,200	

10. 平成27年度相手国マッチングファンド使用額

相手国名	平成27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	39.200 [ユーロ]	4,000,000 円相当
スウェーデン	355.000 [クローネ]	4,000,000 円相当
フィンランド	39.200 [ユーロ]	4,000,000 円相当
米国	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。