

研究交流計画の目標・概要

【研究交流目標】 交流期間（最長3年間）を通じての目標を記入してください。実施計画の基本となります。（自立的で継続的な国際研究交流拠点の構築と次世代の中核を担う若手研究者の育成の観点からご記入ください。）

大阪大学の計算機マテリアルデザイン (CMD) グループでは、量子力学に基づく多階層連結シミュレーションを用い、実験グループと連携して固体表面や界面での構造や電子状態・化学反応過程に関する世界最先端の研究を行ってきている。このシミュレーション技術は、触媒や燃料電池、太陽電池、省・創エネルギー半導体デバイスなど、今後の社会の発展を左右する産業やエネルギー・環境を支える応用分野で重要となり、企業などからも注目されている。

一方、本研究拠点形成事業における相手国は、産出する天然ガス、鉱物資源や森林資源を有効に活用することが重要な課題であるとともに、近年の著しい経済発展に伴うエネルギーの需要増大、環境問題や自然災害等の社会的課題を抱えている。さらに、課題解決型研究推進の基盤となる大学での教育とナノテクノロジーなど基礎的研究に力を入れつつあり、量子シミュレーションと実証実験による高いレベルの研究を社会的課題解決に結びつける意義がある。

本研究拠点形成事業では、大阪大学の CMD グループと最先端ものづくりに欠かせない材料・加工・計測を行う実験連携グループ、さらに東京大学（計測）、筑波大学（触媒・材料）からなる国内組織と、相手国研究拠点グループとが連携して、ワークショップやチュートリアルコースを開催して CMD 手法の普及活動を行い、若手・学生の短中期滞在研究、ダブルデGREEプログラムなどを通じて、CMD 手法開発や応用研究、実証実験に関する共同研究を行い、界面での基礎的な過程の解明と、それから得られた知見を元に、新たな環境・エネルギーデバイス材料を設計する指針を与えることを目指す強力な研究ネットワークを構築することを目標とする。

【研究交流計画の概要】 我が国と交流相手国の拠点同士の協力関係に基づく多国間交流として、どのように①共同研究、②セミナー、③研究者交流を効果的に組み合わせて実施するか、研究交流計画の概要を記入してください。

① 共同研究

- 1) 若手研究者や大学院生の短期～中期間の派遣・招聘によって CMD や実証実験による界面研究に関する共同研究の立ち上げを行う。
- 2) 大学院生を大阪大学と連携大学で共同運営するダブルデGREEプログラムで受け入れ、大学院生の共同指導を通じた長期的な共同研究を実行する。
- 3) 教授・シニア研究者レベルの短期間の派遣・招聘による CMD や実証実験に関する情報交換、共同研究プロジェクトの討論、および、共同研究成果の論文執筆

② セミナー/ワークショップ

- 1) 日本国内、および、相手国において、CMD や実証実験に関するワークショップ(CMD-WS)を行い、最新の研究成果の情報交換を行うとともに、共同研究の設定、および、推進を行う。
- 2) 日本国内、および、相手国研究拠点でCMDワークショップを開催し、若手研究者、および、大学院生に対してCMD手法の原理の講義とプログラムを実際に使用してのチュートリアルを行い、CMD手法の普及を目指す。

③ 研究者交流

- 1) 助教クラスの若手研究者、および、大学院生の短期～中期(3ヶ月程度)の派遣・招聘をおこなってCMD や実証実験に関する共同研究を推進する。
- 2) 教授・シニア研究者の短期(1～2週間程度)の派遣・招聘により、共同研究の立案・推進を行う。

[実施体制概念図] 本事業による経費支給期間（最長3年間）終了時までには構築する国際研究協力ネットワークの概念図を描いてください。

