

先端研究拠点事業
平成17年度 事業実績報告書

採用年度	平成 17年度
種別	拠点形成促進型
分科細目	物理学
採用番号	17006

領域・分野	数物系科学
分科細目(分科細目コード)	物理学
採用番号	17006
研究交流課題名(和文)	計算機ナノマテリアルデザイン
研究交流課題名(英文)	Computational Nano-Materials Design
採用期間	平成17年4月1日～平成19年3月31日

《実施組織体制》

日本側

拠点機関名	大阪大学
実施組織代表者(職・氏名)	総長・宮原秀夫
コーディネーター(職・氏名)	教授・吉田博
協力機関数	5
参加者数	43

相手国1

国名	ドイツ
拠点機関名	ユーリッヒ研究所
実施組織代表者(職・氏名)	Director of IFF・Prof. Dr. Stefan Blügel
コーディネーター(職・氏名)	教授・P. H. Dederichs
協力機関数	4
参加者数	17

相手国2

国名	イギリス
拠点機関名	ダレスベリー研究所
実施組織代表者(職・氏名)	Prof Sir Graeme Davies, Chairman CCLRC
コーディネーター(職・氏名)	教授・Temmerman Walter
協力機関数	4
参加者数	10

相手国3

国名	フランス
拠点機関名	CNRS
実施組織代表者（職・氏名）	Présidente・Catherine Bréchnac
コーディネーター（職・氏名）	教授・PETROFF Frédéric
協力機関数	1
参加者数	16

交流目標の達成（見込）状況

平成17年度事業計画における達成目標

A 学術的な成果

若手研究者を相手国研究拠点に派遣し、マテリアルデザイン方法論開発や基盤ソフトウェア開発の共同研究をおこなう。ナノ超構造を持つ新機能物質に関する具体的な計算機ナノマテリアルデザインの共同研究を行う。教授・研究者レベルでの短期滞在による第一原理計算によるマテリアルデザイン手法とスピントロニクスデザイン手法に関する情報交換および共同研究をおこない、国際的先端研究拠点の形成をすすめる。

B 若手研究者養成における成果

若手研究者中心の希薄磁性半導体の欠陥制御に関するチュートリアルと国際会議を国内で開催し、研究者人材育成を行う。また、若手研究者中心の半導体スピントロニクスと量子情報処理に関するスクールと国際会議を国内で開催し、人材育成を行う。第一原理計算手法の普及と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た国内チュートリアルを開催し、若手研究者養成を行う。

C 国際的学術情報の収集整備

ネットワーク形成による第一原理計算手法に関する国際会議を欧州で開催し、国際的デザイン情報収集と交換を行う。高い強磁性転移温度を持つワイドバンドギャップ半導体ベースのマテリアルデザインと実証について最新の研究データを持ち寄り議論し、情報収集・交換を行う。計算機ナノマテリアルデザイン手法開発、デザインと実証、および、新しい研究教育トレーニングネットワークや国際的学術情報収集整備のためのセミナーと将来計画を議論する会合を欧州で開催する。

D 事業の波及効果

若手研究者・大学院生などの短期的滞在による共同研究や人材育成事業を基に、長期的な共同研究と人材育成を可能にするための方策を探り、新しいマッチングファンドへの可能性を探索する。デザイン手法やソフトウェアの共有を進め、普及するための国際共同研究システムを確立し、国際的先端研究拠点形成につなげる。

平成17年度事業計画の達成状況

A 学術的な成果

(1) 大学院生および助手クラスの若手研究者を相手国研究拠点に派遣し、第一原理計算に基づいたスピントロニクスマテリアルデザイン方法論開発や基盤ソフトウェア開発の共同研究を行った。

(2) 高い強磁性転移温度のデザイン、透明強磁性半導体、新規強磁性体、反強磁性ハーフメタル、マルチフェロイックマテリアルやナノ超構造を持つ新機能物質に関するマテリアルデザインの共同研究を行った。

(3) 教授・研究者レベルでの短期滞在による第一原理計算によるマテリアルデザイン手法とスピントロニクスデザイン手法に関する情報交換および共同研究をおこなった。

B 若手研究者養成における成果

(1) 若手研究者中心の希薄磁性半導体の欠陥制御に関するチュートリアルと国際会議を開催した (ICDS-23, July 24-July 29, 2005)。

(2) 若手研究者中心の半導体スピントロニクスと量子情報処理に関するスクールと国際会議を開催した (Spintech III, August 1-5, 2005)。

(3) 第一原理計算手法の普及と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た国内チュートリアル (9月と3月に各々5日間) を国際高等研究所および関西原子力研究所で開催した。

C 国際的学術情報の収集整備

(1) Wide Band Gap Ferromagnetic Semiconductor Workshop, Edinburgh, Scotland, 5/15-5/19, 2005 高い強磁性転移温度を持つワイドバンドギャップ半導体ベースのマテリアルデザインと実証について最新の研究データを持ち寄り、国際的学術情報の交換を行った。

(2) 第一原理計算による計算機ナノマテリアルデザインを目標とした Psi-k ネットワークによる第一原理計算手法に関する国際会議をドイツで開催した。(Psi-k Network Conference 2005 on Towards Atomistic Materials Design (September 17-21, 2005 in Schwabisch Gmund, Germany). また、リヨン (ESN) およびパリ (CNRS) で研究連絡会議を開催した。

D 事業の波及効果

若手研究者・大学院生などの短期的滞在による共同研究や人材育成事業を基に、長期的な共同研究と人材育成を可能にするための方策を明らかにし、新しいマッチングファンドへの将来計画を作った。デザイン手法やソフトウェアの共有を進め、普及するための国際共同研究システムを確立し、国際的先端研究拠点形成につなげることができた。

実施状況

研究交流計画実施にあたる実施体制

計算機ナノマテリアルデザインに関して、国内では先端的研究拠点である大阪大学・広島大学・東北大学をコアとし、東京大学・筑波大学などの他大学・企業・国立研究所を連携する人材育成ネットワーク【Computational Nano-materials Design Research Training Network (Ogata-Koan RTN)】を形成し、ドイツ(Juelich Resrach Center)・フランス(CNRS)・英国(Daresbury Labs.)をコアとした欧州ネットワークと連携する実施体制をとっている。これにより、第一原理計算によるマテリアルデザイン手法開発とナノマテリアル・デバイスデザインに関する共同研究、ワークショップ共同開催、及びチュートリアル共同開催によるネットワーク型人材育成と先端研究拠点を形成する体制で研究交流計画を実施している。

日本側拠点機関における研究交流課題への取り組み(事務支援体制等の観点より)

交流相手機関とは、部局間(阪大産研+ユーリッヒ研究所)学術交流協定を締結・継続し、また、フランス CNRS とは大学間学術交流協定を締結し、教授/助教授/助手/博士研究員/大学院生を含む研究者の継続的交流を支援する体制を確立している。また、フランス CNRS には産研-CNRS ブランチ事務室を開設し、2006年2月には開所国際ワークショップ開催、また、3月には本研究拠点形成のための2006年度実施計画を議論策定する会議を産研 CNRS ブランチの支援により開催することができた。計算機ナノマテリアルデザイン分野において、国際的に指導的・先駆的な研究を進め、自ら開発した第一原理計算プログラムの公開や講習会等による普及、共同研究において、相手交流機関と大阪大学との間での計算機ナノマテリアルデザインに関する先端拠点形成のネットワーク構築が可能になりつつある。

共同研究

計算機ナノマテリアルデザインに関する人材育成ネットワークを日本欧州共同で立ち上げた。交流相手機関であるドイツ・ユーリッヒ研究所とは、部局間(阪大産研+ユーリッヒ研究所)学術交流協定、また、フランス CNRS とは大学間学術交流協定を締結し、研究者の継続的交流交換を行った。計算機ナノマテリアルデザイン分野において、国際的に指導的・先駆的な研究を進め、自ら開発した第一原理計算プログラムの公開や講習会等による普及、共同研究によるデザイン手法の共有化の実績が得られた。相手交流機関と大阪大学との間での1年あたりの研究者交流はのべ10人以上に達し、大学院生、博士研究員、教員が長期・短期にわたり継続的に滞在し、共同研究や国際交流・先端拠点形成のネットワーク構築の実質的研究成果をあげ、共同研究に基づいた論文出版や共同著作を行った。本年度、計算機ナノマテリアルデザインに関する共同のワークショップを3回、国際会議・スクールを3回開催し、多くの国際交流や共同研究をおこなった。また、半導体スピエレクトロニクスのマテリアルデザインと創製に関する国際会議(Spintech-III)を本ネットワークが中心になり、2005年8月に5日間開催し、ドイツ、フランス、英国の交流相手国のほとんどのメンバーを含む、日米欧から250人が出席し、計算機ナノマテリアルデザインに関する活発な討論会議を行った。また、将来計画を議論する会議を開催し、欧州と我が国の代表的研究者による将来計画の企画立案を行った。これらにはほとんどすべての国内外の拠点機関が連携し、第一原理計算によるマテリアルデザイン手法開発と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共同研究、ワークショップ共同開催、及びチュートリアル共同開催によるネットワーク型人材育成と先端研究拠点が形成されつつある。

セミナー

我が国及び欧州の指導的な立場にある主要な研究者が出席して、計算機ナノマテリアルデザインに関する研究交流計画のためのセミナーをリヨン（ENS）およびパリ（CNRS）で開催した。2005年12月に行われたリヨンのワークショップでは計算機ナノマテリアルデザインの手法開発・応用・普及活動に対する各コアグループからの研究現状・人材育成・手法開発・普及活動に関する報告と今後の方針について議論した。2006年3月パリ（CNRS）におけるセミナーでは、2005年12月の教育研究人材育成に関する現状理解に基づいて、2006年度および長期的な将来計画について議論しその方向性を明らかにした。その結果、以下の将来計画を策定した。（1）先端研究拠点として計算機ナノマテリアルデザイン教育研究センターを大阪大学に設置する。（2）ナノスピントロニクスのための計算機ナノマテリアル・デバイスデザインに関する共同研究、共同ワークショップ、国際チュートリアルを継続することによって実践的デザイナー、基盤ソフトウェア開発者などの高度研究者および高度産業人を養成する。（3）ポスドク、学生と共に計算機ナノマテリアルデザインシステムの構築を行うことによって、人材育成と先端研究を将来にわたって発展させる。（4）工業化社会から知識基盤社会への産業構造の変化に対応するデザイン主導とプロパテント化による新産業創成を可能にする人材育成システムと国際的ネットワークを継続・発展させるための日米欧マッチングファンド立ち上げを財政当局（JSPS, JST, EC, ESF, NSF, DOE）に互いに働きかける。（5）計算機ナノマテリアルデザイン・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研究開発をベースとした産学連携の事業化と自立運営を長期的に可能にする。以上を実現するための短期的および長期的なロードマップ策定と実施施策および活動方針を議論し、米国・韓国からも議論に参加し、将来計画を策定した。

研究者交流

研究者交流においては学术交流協定を締結し、教授/助教授/助手/博士研究員/大学院生を含む研究者の継続的交流交換を行った。計算機ナノマテリアルデザイン分野において、国際的に指導的・先駆的な共同研究を進め、自ら開発した第一原理計算プログラムの公開や講習会等による普及、共同研究によるデザイン手法の共有化のための研究者交流を行った。相手交流機関と大阪大学との間での1年あたりの研究者交流はのべ10人以上に達し、大学院生、博士研究員、教員が長期（1ヶ月もしくは他の財団からの援助による3ヶ月滞在）・短期（1週間）にわたり継続的に滞在し、共同研究や国際交流・先端拠点形成のネットワーク構築の実質的研究成果をあげ、共同研究に基づいた計算機ナノマテリアルデザイン手法の開発とデザインに関する論文出版、ソフトウェア開発や共同研究を行った。

研究者交流は、（1）共同研究を目的とした1ヶ月から3ヶ月程度の滞在型共同研究と共著論文の執筆、および、（2）計算機ナノマテリアルデザインに関するセミナーや討論を中心とした学術情報の提供・交換・収集を目的とした短期的（1週間程度）なものに分類される。前者は、助手・博士研究員・大学院生などの若手研究者人材育成と実質的な共同研究を目的とし、後者の（2）は教授・助教授が中心となった情報交換と将来計画策定およびネットワークの形成を目的とした。2005年度は、計算機ナノマテリアルデザインに関する共同のワークショップを3回、国際会議を3回開催し、すでに多くの国際交流や共同研究をおこなった。また、半導体スピエレクトロニクスのマテリアルデザインと創製に関する国際会議（Spintech-III）を本ネットワークが中心になり、2005年8月に5日間開催し、ドイツ、フランス、英国の交流相手国のほとんどのメンバーを含む、日米欧から250人が出席し、計算機ナノマテリアルデザインに関する活発な討論会議を行った。また、研究現状の把握、将来計画の策定、ネットワークと先端研究拠点形成を議論するための研究者交流を開催し、欧州と我が国の代表的研究者による将来計画の企画立案を行った。