

## 先端研究拠点事業 - 拠点形成促進型 -

### 平成 17 年度 実施計画書

採用年度	平成 17 年度	採用番号	17006	系	数物系科学	分科	物理学
------	----------	------	-------	---	-------	----	-----

研究交流課題名 (和文) 計算機ナノマテリアルデザイン

(英文) Computational Nano-Materials Design

研究交流課題に係るホームページ : <http://www.sanken.osaka-u.ac.jp/Projects/CNMD>

経費支給期間 平成 17 年 4 月 1 日 ~ 平成 19 年 3 月 31 日 ( 24 ヶ月 )

#### 先端研究拠点事業としての全期間 (経費支援終了後 5 年間を含む) を通じた交流目標

計算機ナノマテリアルデザインに関して、大阪大学・広島大学・東北大学をコアとし、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を我が国に形成し、ドイツ・フランス・英国を中心とした欧州連合ネットワークと連携する。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を形成する。目標は、( 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。( 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は可能にする。

#### 前年度までの交流活動による目標達成状況

昨年まで 5 回にわたり阪大の吉田、赤井らが、計算機ナノマテリアルデザインに関する欧州連合人材育成ネットワークのワークショップに講師として招聘され、その際、Research Training Network を日本欧州共同で立ち上げる合意が行われた。その後、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 / 博士研究員を含む研究者の継続的交換を行っている。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、共同研究による実績を上げてきた。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、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を実施した。昨年度、交流相手機関のワークショップに 8 人が招待され、20 人を日本側が招聘し、すでに多くの交流経験を積んでいる。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 ( ICNDR-2004 ) を国際高等研究所で本ネットワークが中心になり、2004 年 6 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 120 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交流会議を行った。

## 本年度の交流計画の概要

### (共同研究)

(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の度に派遣し、第一原理計算に基づいたスピントロニクス材料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。

(2) 高い強磁性転移温度のデザイン、透明強磁性半導体、新規強磁性および反強磁性ハーフメタル、マルチフェロイック材料やナノ超構造を持つ新機能物質に関する具体的な半導体スピントロニクス材料デザインの共同研究を行うため、これらの若手研究者を相手先機関に派遣し共同研究を行う。

(2) 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材料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行う。

### (セミナー)

(1) Wide Band Gap Ferromagnetic Semiconductor Workshop, Edinburgh, Scotland, 5/15-5/19, 2005 半導体スピントロニクスを現実的なものにするためには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材料デザインと実証が不可欠であり、本研究グループおよび欧州のグループが参加し、デザインと実証について最新の研究データを持ち寄り、議論する。

(2) 平成17年7月には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兵庫県で開催する( ICDS-23 (23rd International Conference on Defects in Semiconductors, July 14-July 29, 2005) )。

(3) 平成17年8月には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兵庫県で開催する( Spintech III (3rd International Conference & School on Spintronics and Quantum Information Technology, August 1-5, 2005) )

(4) 平成17年9月に第一原理計算による計算機ナノ材料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する。( Psi-k Network Conference 2005 on Towards Atomistic Materials Design (September 17-21, 2005 in Schwabisch Gmund, Germany) ) .

(5) 第一原理計算手法の普及と計算機ナノ材料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と共同開催で行う。

(6) 計算機ナノ材料デザイン基盤ソフトウェア開発者養成会議をドイツで開催する(2006年2月)

### (研究者交流)

(1) ナノ材料の輸送現象のシミュレーションソフトを開発しているドイツ・ユーリッヒ研究所より教授二名を各年度について定期的に特任教授・客員教授として招聘し人材養成に従事させる。また、客員教授としてハーフメタリック・強磁性半導体や超伝導研体の材料デザインに実績のある我が国の教授・助教授を派遣する。

(2) 2006年度 EU-Japan-RTN(Research Training Network)の事業計画の企画立案会議および策定会議をフランスで開催する。(2005年12月)

## 実施組織

### 日本側実施組織

拠点機関	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 所属部局・職・氏名	産業科学研究所・教授・吉田博
協力機関数	5
協力機関名	東北大学・広島大学・東京大学・神戸大学・筑波大学

### 相手国側実施組織 1

国名	ドイツ
拠点機関	ユーリッヒ研究所
コーディネーター 所属部局・職・氏名	固体物理学研究所・教授・Peter H. Dederichs
協力機関数	5
協力機関名	IFF, FZ-Jülich, U Munich, MLU Halle, MPI-MSP Halle

### 相手国側実施組織 2

国名	英国
拠点機関	ダレスベリー研究所
コーディネーター 所属部局・職・氏名	物理部・教授・Walter Temmerman
協力機関数	5
協力機関名	Daresbury Lab., Keele Univ., Lancaster Univ., Warwick Univ., Sheffield Univ.

### 相手国側実施組織 3

国名	フランス
拠点機関	国立科学研究センター(CNRS)
コーディネーター 所属部局・職・氏名	物理部・教授・Frédéric Petroff
協力機関数	4
協力機関名	CNRS, Orsay, ULP, Strasbourg, CNRS, Strasbourg, Clausthal Univ.

## 共同研究による交流計画

### 【研究課題・テーマ別の内容】

整理番号	
研究課題・テーマ名	(和文) 計算機ナノマテリアルデザイン
	(英文) Computational Nano-materials Design
代表者 国名	吉田 博 日本
氏名・所属・職	(和文) 吉田 博
	(英文) Hiroshi Katayama-Yoshida
17年度の研究計画の予定(特徴及び期待される成果)	計算機ナノマテリアルデザインに関して、大阪大学・広島大学・東北大学をコアとした人材育成ネットワークを形成し、ドイツ・フランス・英国を中心とした欧州連合ネットワークと連携する。これにより、若手研究者を欧州ノードに派遣して、(1)第一原理マテリアルデザイン手法開発と(2)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によるネットワーク型人材育成と先端研究拠点形成を促進する。これにより、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と国際的中核研究拠点形成が加速される。

## セミナー開催予定

セミナー名	(和文)	ワイドバンドギャップ強磁性半導体ワークショップ
	(英文)	Wide Band Gap Ferromagnetic Semiconductor Workshop
開催予定期間		2005年5月15日～5月19日
開催国・場所(和文)		英国・エジンバラ
開催国・場所(英文)		Edinburgh, Scotland
日本側開催責任者(所属・職・氏名)		大阪大学産業科学研究所・教授・吉田博、東北大学・教授・大野英男
相手国側開催責任者(所属・職・氏名)		Prof. Tomasz Dietl, Institute of Physics, Polish Academy of Sciences, Poland
参加者数		22人

セミナー名	(和文)	ZnOと関連物質に関するシンポジウム
	(英文)	Symposium on ZnO and Related Materials
開催予定期間		2005年5月31日～6月3日
開催国・場所(和文)		フランス・ストラズブルグ
開催国・場所(英文)		France・Strasbourg
日本側開催責任者(所属・職・氏名)		大阪大学産業科学研究所・教授・吉田博
相手国側開催責任者(所属・職・氏名)		Prof. Bernard GIL University Montpellier, France
参加者数		61人

セミナー名 (和文)	第23回半導体中の欠陥に関する国際会議とチュートリアル
(英文)	23rd International Conference and Tutorial on Defects in Semiconducto
開催予定期間	2005年7月24日～7月29日
開催国・場所(和文)	日本:兵庫県津名郡(淡路夢舞台国際会議場)
開催国・場所(英文)	Japan, Hyogo
日本側開催責任者 (所属・職・氏名)	大阪大学産業科学研究所・教授・吉田博
相手国側開催責任者 (所属・職・氏名)	なし
参加者数	129 人

セミナー名 (和文)	第3回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
(英文)	3rd International Conference & School on Spintronics and Quantum Information Technology (Spintech III)
開催予定期間	2005年8月1日～8月5日
開催国・場所(和文)	日本:兵庫県津名郡(淡路夢舞台国際会議場)
開催国・場所(英文)	Japan, Hyogo
日本側開催責任者 (所属・職・氏名)	大阪大学産業科学研究所・教授・吉田博
相手国側開催責任者 (所属・職・氏名)	
参加者数	118 人

セミナー名 (和文)	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
(英文)	Psi-k Network Conference 2005 on Towards Atomistic Materials Design
開催予定期間	2005年9月17日～9月21日
開催国・場所(和文)	ドイツ
開催国・場所(英文)	Schwabisch Gmund, Germany
日本側開催責任者 (所属・職・氏名)	大阪大学産業科学研究所・教授・吉田博
相手国側開催責任者 (所属・職・氏名)	ユーリッヒ研究所・教授・P. H. Dederichs
参加者数	125 人

セミナー名 (和文)	コンピューテーショナル・マテリアルズ・デザイン・ワークショップ
(英文)	Computational Materials Design Workshop
開催予定期間	2005年9月6日～10日および2006年3月(詳細日時未定、期間5日間)
開催国・場所(和文)	日本・京都(国際高等研究所および日本原子力研究所)
開催国・場所(英文)	Japan, Kyoto (IIAS, JAERI-Kansai)
日本側開催責任者 (所属・職・氏名)	大阪大学理学研究科・教授・赤井久純
相手国側開催責任者 (所属・職・氏名)	なし
参加者数	47人

セミナー名 (和文)	計算機ナノマテリアルデザイン基盤ソフトウェア開発者養成会議
(英文)	Conference on CMD Software Development
開催予定期間	2006年2月27日～3月1日(予定)
開催国・場所(和文)	ドイツ・ユーリッヒ
開催国・場所(英文)	Germany, Juelich
日本側開催責任者 (所属・職・氏名)	大阪大学産業科学研究所・教授・吉田博
相手国側開催責任者 (所属・職・氏名)	ユーリッヒ研究所・教授・P.H. Dederichs
参加者数	26人