

先端研究拠点事業
事業実績報告書

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

平成19年3月31日

独立行政法人 日本学術振興会理事長 殿

機関代表者・氏名 総長 宮原 秀夫 職印

コーディネーター職・氏名 教授・吉田博

領域・分野	数物系科学
分科細目名(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	60

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・Peter H. Dederichs
協力機関数	6
参加者数	22

相手国 2

国名	英国
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・Walter Temmerman
協力機関数	7
参加者数	14

相手国 3

国名	フランス
拠点機関名	国立科学研究センター (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・Frederic Petroff
協力機関数	3
参加者数	18

交流目標の達成（見込）状況

全交流期間を通じての達成目標（申請書で示された内容と同一のもの）

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。

交流目標の達成状況

A 学術的な成果

(1) 博士課程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。特に、局所密度近似を超えて、自己相互作用を取り入れた新しい方法論の開発で大きな成果が得られ、高精度の物性予測とデザインが可能になった。

(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スケール・スピノーダル分解や自己組織化によるナノ超構造をもつ新機能物質のマテリアルデザインの共同研究を行った。特に、博士課程大学院生が予言したナノスケール・スピノーダル分解による新しいナノ超構造が実験的にも GeMn , GaCrN , AlCrN , ZnCrTe などで発見され、自己組織化による新しいナノ超構造の予言が可能になった。

(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、次期の計算機ナノマテリアルデザインに関する教育研究トレーニングネットワークの将来構想を策定し、また、強磁性転移温度の定量的予測やボトムアップやトップダウンのナノテクノロジーお組み合わせた新しい自己組織化の予測法に関する共同研究をおこなった。

B 持続的な協力関係の基盤構築

大阪大学産業科学研究所とユーリッヒ研究所との学術交流協定を更新し、さらに5年間の延長に関する協定を調印した。また、計算機ナノマテリアルデザインに関する強力基盤を更に広げるため、ウプサラ大学（スウェーデン）、ヘルシンキ工科大学、コペンハーゲン大学との新しいネットワークを付け加え、拡張することを日欧での企画立案会議で決定した。

C 若手研究者養成における成果

(1) 若手研究者中心のチュートリアルと国際会議を平成17年度に2件（ICDSおよびSpintech）行った。

(2) 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計算機マテリアルデザイン国内チュートリアル（各年度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。2年間での受講者は180人であり、計算機ナノマテリアルデザイン手法の開発とこれを用いたデザインの実習で大きな成果が得られた。アジアからの受講生も受け入れた。

(3) 若手研究者の短期的滞在および長期的滞在による共同研究に、積極的に参加し、欧州のネットワークとの共同研究を通して人材育成に大きな成果があった。

D 国際的学術情報の収集整備

(1) 欧州のPsi-kネットワーク主催で開催される国際会議の情報をチェックし、国内ネットワークにおいて紹介する事により、参加可能なメンバーには学術情報の収集を行ってもらった。

E 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

計算機ナノ材料デザインに関して、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材料デザイン手法開発とナノ材料・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た。

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。平成17年度3月の本研究拠点形成策定会議は産研 CNRS ブランチの支援により開催することができた。計算機ナノ材料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材料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

計算機ナノ材料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。計算機ナノ材料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。

具体的な成果として、

(1) 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行った。特に、局所密度近似を超えて、自己相互作用を取り入れた新しい方法論の開発で大きな成果が得られ、高精度の物性予測とデザインが可能になった。

(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材料やナノスケール・スピノーダル分解や自己組織化によるナノ超構造をもつ新機能物質の材料デザインの共同研究を行った。特に、博士課程大学院生が予言したナノスケール・スピノーダル分解による新しいナノ超構造が実験的にも GeMn, GaCrN, AlCrN, ZnCrTe などで見られ、自己組織化による新しいナノ超構造の予言が可能になった。これにより、強磁性転移温度が1000 Kにおよぶナノ超構造磁性半導体のデザインが可能になり、国内外の実証実験グループとの共同研究に進展した。

(3) 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、次期の計算機ナノ材料デザインに関する教育研究トレーニングネットワークの将来構想を策定し、また、強磁性転移温度の定量的予測やボトムアップやトップダウンのナノテクノロジーを組み合わせた新しい自己組織化の予測法に関する共同研究をおこなった。

国内外の拠点機関が連携し、第一原理計算による材料デザイン手法開発とスピントロニクス材料・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、計算機ナノ材料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（リヨン）、2006年3月（パリ）、2007年3月（ユーリッヒ）に行われ、計算機ナノ材料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。また、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材料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材料・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材料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）計算機ナノ材料デザイン・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。大阪大学産業科学研究所とユーリッヒ研究所との学术交流協定を更新し、さらに5年間の延長に関する協定を調印した。また、計算機ナノ材料デザインに関する強力基盤を更に広げるため、ウプサラ大学（スウェーデン）、ヘルシンキ工科大学、コペンハーゲン大学との新しいネットワークを付け加え、拡張することを日欧での企画立案会議で決定した。

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。計算機ナノ材料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1ヶ月以上の滞在）・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材料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）計算機ナノ材料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。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行い、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。