

先端研究拠点事業 - 拠点形成型 -

平成18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
------	--------	------	-------	---	-------	----	-----

1. 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>

2. 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)

3. 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。

4. 前年度までの交流活動による目標達成状況

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、教授/助教授/助手/博士研究員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、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。昨年度、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、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。

5. 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に派遣し、第一原理計算に基づいた計算機ナノ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) 現実的なスピントロニクスに不可欠の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持つ新機能物質の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。

(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、将来計画の企画立案および共同研究を行う。

(セミナー)

(1) 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ナノ超構造による高い強磁性転移温度を持つ材料デザインと実証、及びスピン、電荷、原子のナノダイナミクスに関する共同研究が不可欠であり、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18年8月には若手研究者中心の希薄磁性半導体のスピンに関する物理と応用に関するチュートリアルと国際会議を仙台市で開催する(PASPS-IV)。

(3) 平成18年12月に第一原理計算の方法論の開発と応用に関する国際会議を広島で開催する。

(4) 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・国際チュートリアル(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。

(5) 計算機ナノ材料デザイン基盤ソフトウェア開発者養成と応用に関するワークショップやチュートリアルを欧州で開催し、我が国の若手研究者や大学院生を参加させる。

(研究者交流)

(1) ナノダイナミクスや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先端研究拠点に若手研究者や大学院生を派遣し、共同研究に基づいた人材養成を行う。客員教授としてスピンエレクトロニクスやナノエレクトロニクス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) 2008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。

(3) 平成18年7月にオーストリアで第28回半導体物理国際会議が開催される。半導体物理に関する世界最大級の国際会議であり、計算機ナノ材料デザインの最新研究の調査、研究者との交流、若手研究者の自己研鑽の機会とする。

(4) 平成18年8月に京都で半導体スピントロニクスを主要テーマとする第17回磁性国際会議が行われる。磁性に関する基礎から応用までの世界最大級の国際会議であり、計算機ナノ材料デザインの最新研究の調査、研究者との交流の機会とする。

6. 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
拠点機関事務組織： 事務総括責任者	研究推進・国際部国際交流課長・塚本 政雄
事務総括担当者	研究推進・国際部国際交流課国際交流推進係長・杉谷 あかね
経理管理責任者	産業科学研究所・事務部長・田部 信重
経理管理担当者	産業科学研究所・経理課経理係長・白井 政行

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	4
協力機関名	U Munich, MLU Halle, MPI-MSP Halle, Clausthal Univ. of Technology

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	4
協力機関名	Keele Univ., Lancaster Univ., Univ. of Warwick., 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	1
協力機関名	ULP-Strasbourg