

平成 22 年 3 月 31 日現在

研究種目：特定領域研究  
 研究期間：平成 17 年度～平成 20 年度  
 課題番号：17064010  
 研究課題名（和文） 計算機マテリアルデザイン手法を用いた現実物質のデザインの調整班  
 研究課題名（英文） Coordinate Group for Computational Real Materials Design

## 研究代表者

笠井 秀明 (KASAI HIDEAKI)  
 大阪大学大学院工学研究科・教授  
 研究者番号：00177354

## 研究成果の概要：

本研究組織は調整班であるため研究実績はない。  
 特定領域研究「磁性制御による動的量子反応デザイン手法の開発・公開」に携わる各機関の  
 連絡・調整を行ってきた。

## 交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
17 年度	2,300,000	0	2,300,000
18 年度	2,300,000	0	2,300,000
19 年度	2,300,000	0	2,300,000
20 年度	2,300,000	0	2,300,000
年度			
総計	9,200,000	0	9,200,000

## 研究分野：工学

科研費の分科・細目：応用物理学・薄膜、表面界面物性

キーワード：計算機マテリアルデザイン・物質反応デザイン・第一原理計算  
 量子シミュレーション

## 1. 研究開始当初の背景

特定領域研究「磁性制御による動的量子反応デザイン手法の開発・公開」

研究期間：2005 年度～2008 年度

研究を円滑に進めるため各研究機関の連絡・調整を行う。

## 2. 研究の目的

A03 班は、開発された量子シミュレーション手法を現実物質の各種系に応用し、マテリアルデザインを実践することを目指している。「A01 班：多体相関や励起状態を正しく

扱う第一原理計算手法の開発・公開と普及」による従来 LDA 計算法より精度の高い「物質の次世代電子状態計算法」および「計算確度のリファレンス」、また、「A02 班：サブミクロンサイズ量子シミュレータの開発・公開と普及」による大規模な系が扱える大規模シミュレータのプログラムコードなど、研究開発にともない上がってくる成果を、順次取り込みつつ、現在使用可能な計算法を駆使して、以下の「計算機マテリアルデザイン手法を用いた現実物質のデザイン」を A03 班は遂行する。

「磁性制御による動的量子反応デザイン手法の開発・公開」

「高圧極限環境を活用した物質合成シミュレーション手法の開発・応用」

「ナノ構造の電子輸送機能デザイン手法の開発・応用」

「スピン機能材料のデザイン及びスピン偏極電流解析手法の開発・応用」

「計算機ナノマテリアルデザインエンジンの開発・応用」

「ナノ・バイオ物質における形状と機能の量子デザイン」

さらに現実物質にシミュレータを適用した際に明らかとなってくる計算手法やシミュレータプログラムコードの弱点、どのようなリファレンスが必要ななどの情報、個々の応用に際して必要なコア技術の開発要求を、A01 および A02 班に還元することも必要になる。このような作業を伴う全体の研究開発を円滑に行うため、A03 班の協調作業、情報収集・集約、情報伝達の主体を担うことが当調整班の役割であり、これらを通じて領域全体の目的である次世代量子シミュレータ・量子デザイン手法の開発に貢献する。

また、現実物質と密接に関連したターゲットを扱うため、ここでは、産業応用上有効な知的所有権が生まれる可能性がある。産業上有用な知財の発掘、知的所有権の確保等も積極的に推進する母体として当調整班が活動する。

### 3. 研究の方法

各班の活動を円滑に行なうための調整費のため、実質的な研究は行なっていない。

### 4. 研究成果

研究領域の活性化、啓蒙活動、各グループが開発してきた量子シミュレーションコードの公開・開発の観点から以下の活動を行なった。

#### 関連国際会議開催の支援

本特定領域で開催する国際会議「International Conference on Quantum Simulators and Design (ICQSD2006) <広島>」および「International Conference

on Quantum Simulators and Design (ICQSD2008) <東京>」の開催運営に参加支援した。

#### 研究支援会議の開催

A03 班の研究推進を円滑に行なうため以下の A03 班代表者会議・成果報告会を開催した。

・平成 18 年 12 月 6 日「平成 18 年度 A03 班代表者会議」

・平成 19 年 2 月 8-9 日「平成 18 年度 A03 班成果報告会」

<計画班及び公募班の 10 班が成果を発表した。>

・平成 19 年 6 月 8 日「平成 19 年度顔合わせ会議」

・平成 20 年 2 月 8-9 日「平成 19 年度 A03 班成果報告会」

<平成 19 年度より加わった公募班を含めた 13 班が成果を発表した。>

・平成 21 年 2 月 12-13 日「平成 20 年度成果報告会」

<計画班及び公募班の 11 班が成果を発表した。またシンガポール国立大学より Prof Loh Kian Ping を招聘し、特別講演を行なった。>

#### 知的所有権確保の支援

磁性制御により各種反応に有効な量子反応プロセスをデザインすることを目的として、鉄表面上の白金薄膜における酸素分子の解離吸着反応が促進されていることを見出した。これに関する成果として「スピン分極された白金を用いて反応を促進させる方法およびその利用」の発明を行い、特許出願を行った(特開 2008-007422 号)。

時間分解とスペクトル測定を分光装置において同時に行なう課題に対して、励起光と複数波長を含むプローブ光を形成し、プローブ光と励起光を、プローブ光が少なくとも試料面上で光遅延時間を有し重ねて試料に照射し、励起光による反応生成物の情報をプローブ光の照射によって光情

報の形態で読み出し、この光を光遅延時間の時間軸及び波長軸の二次元に分光し、光遅延時間の時間幅の実時間で分光することによって、時間分解とスペクトル測定を同時に行うことができることを見出し、「実時間イメージング分光方法及び実時間イメージング分光装置」の発明を行い、特許出願を行った（特許 3962777 号）

### 成果発表・広報活動

平成 18 年 9 月 5-9 日 第 9 回コンピュータショナルマテリアルデザイン (CMD) ワークショップ

<参加者：学生 33 名、一般 25 名>

平成 19 年 3 月 6-10 日 第 10 回コンピュータショナルマテリアルデザイン (CMD) ワークショップ

<参加者：学生 26 名、一般 25 名>

平成 19 年 9 月 11-15 日 第 11 回コンピュータショナルマテリアルデザイン (CMD) ワークショップ

<参加者：学生 25 名、一般 22 名>

平成 20 年 3 月 4-8 日 第 12 回コンピュータショナルマテリアルデザイン (CMD) ワークショップ

<参加者：学生 11 名、一般 17 名>

平成 20 年 9 月 6-10 日 第 13 回コンピュータショナルマテリアルデザイン (CMD) ワークショップ

<参加者：学生 16 名、一般 25 名>

平成 21 年 3 月 2-6 日 第 14 回コンピュータショナルマテリアルデザイン (CMD) ワークショップ

<参加者：学生 33 名、一般 12 名>

上記ワークショップには、大学関係者以外に企業の研究者も多数参加しており、量子シミュレーション手法を広く応用研究現場の研究者に公開するよい機会となっている。

### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[産業財産権]

○出願状況 (計 1 件)

スピン分極された白金を用いて反応を促進させる方法およびその利用

発明者：笠井秀明，中西寛，津田宗幸

権利者：国立大学法人大阪大学

種類：特許

出願番号：2006-176888

出願年月日：平成 18 年 6 月 27 日

国内外の別：国内

○取得状況 (計 1 件)

実時間イメージング分光方法及び実時間イメージング分光装置

発明者：武田淳

権利者：よこはまティールオー株式会社

種類：特許

特許番号：特許 3962777 号

取得年月日：平成 19 年 6 月 1 日

国内外の別：国内

### 6. 研究組織

#### (1) 研究代表者

笠井 秀明 (KASAI HIDEAKI)

大阪大学大学院工学研究科・教授

研究者番号：00177354

#### (2) 研究分担者

広瀬 喜久治 (HIROSE KIKUJI)

大阪大学大学院工学研究科・教授

研究者番号：10073892

長柄 一誠 (NAGAE HITOSE)

大阪大学大学院基礎工学研究科・助教

研究者番号：10135676

佐藤 和則 (SATOU KAZUNORI)

大阪大学基礎工学研究科・特任准教授

研究者番号：60379097

阿部 和多加 (ABE KAZUTAKA)

東北大学電気通信研究所・助教

研究者番号：00361197

押山 淳 (OSHIYAMA ATSUSHI)

東京大学大学院工学系研究科・教授

研究者番号：80143361

#### (3) 連携研究者

(4)公募班

**平成 18 年度**

舘野 賢(TATENO MASARU)

筑波大学数理物質科学研究科・准教授

研究者番号：40291926

播磨 弘(HARIMA HIROSHI)

京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科・教授

研究者番号：00107351

渡部 平司(WATANABE HEIJI)

大阪大学大学院工学研究科・教授

研究者番号：90379115

保田 英洋(YASUDA HIDEHIRO)

神戸大学工学部・教授

研究者番号：60210259

**平成 19 年度～20 年度**

舘野 賢(TATENO MASARU)

筑波大学数理物質科学研究科・准教授

研究者番号：40291926

播磨 弘(HARIMA HIROSHI)

京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科・教授

研究者番号：00107351

渡部 平司(WATANABE HEIJI)

大阪大学大学院工学研究科・教授

研究者番号：90379115

村上 修一(MURAKAMI SYUICHI)

東京工業大学大学院理工学研究科・准教授

研究者番号：30282685

武田 淳(TAKEDA JUN)

横浜国立大学大学院工学研究科・教授

研究者番号：60202165

周 逸凱(ZHOU YIKAI)

大阪大学産業科学研究所・助教

研究者番号：60346179

河野 浩(KOHNO HIROSHI)

大阪大学大学院基礎工学研究科・准教授

研究者番号：10234709