

戦略的国際科学技術協力推進事業（日本－ドイツ研究交流）

1. 研究課題名：「計算科学手法によるスピントロニクス材料の設計と機能予測」
2. 研究期間：平成21年8月～平成25年3月
3. 支援額： 総額 14,445,600 円
4. 主な参加研究者名：

日本側（研究代表者を含め6名までを記載）

	氏名	所属	役職
研究代表者	小野 倫也	大阪大学・大学院工学研究科	助教
研究者	佐藤 和則	大阪大学・大学院基礎工学研究科	特任准教授
研究者	吉田 博	大阪大学・大学院基礎工学研究科	教授
研究者	江上 喜幸	北海道大学・大学院工学研究科	助教
研究者	Marcus Heide	大阪大学・大学院工学研究科	特任研究員
研究者	福島 鉄也	大阪大学・大学院基礎工学研究科	助教
参加研究者 のべ			9名

相手側（研究代表者を含め6名までを記載）

	氏名	所属	役職
研究代表者	Daniel Wortmann	IFF, FZ Jülich	研究員
研究者	Stefan Blügel	IFF, FZ Jülich	教授
研究者	Nicolae Atodiresei	IFF, FZ Jülich	研究員
研究者	Peter H. Dederichs	IFF, FZ Jülich	教授
研究者	Phivos Mavropoulos	IFF, FZ Jülich	研究員
研究者	塚本 茂	IFF, FZ Jülich	研究員
参加研究者 のべ			8名

5. 研究・交流の目的

本研究交流は、大規模第一原理計算により、IV族半導体を用いた希薄磁性半導体材料や遷移金属酸化物等による次世代スピントロニクスデバイス用高機能材料と磁気接合構造をデザインすることを目的とする。

ドイツ側では、ドイツ側の所有するスーパーコンピュータ Blue Gene を使い、RSPACEコードとドイツ側が開発した輸送特性計算コード(JÜTRA)を併用して、日本側が設計した材料を用いた磁気接合の輸送特性計算を行う。

日独が研究交流を通じて相互的に取り組むことで、第一原理計算による次世代スピントロニクスデバイス用高機能材料の発見と、これらの知見を利用した材料の具現化が期待される。

6. 研究・交流の成果

6-1 研究の成果

スピントロニクスデバイス用の材料デザインと機能評価を大規模な計算モデルで行うべく、これまで日独共同研究グループで独自に開発を続けてきた密度汎関数理論に基づく第一原理計算コード **RSPACE** の開発・改良を行った。日本側の持つ実空間差分法に基づく第一原理計算法の開発経験と世界最速クラスのスーパーコンピュータ **JUGENE**、**JUQUEEN** を所有するドイツ側の大規模並列計算に関する知見を融合し、双方の持つ超並列型スーパーコンピュータで優れた実行性能を引き出した。そして、多階層連結法によるマテリアル生成プロセスシミュレーションに強みを持つ日本側と磁性半導体の大規模第一原理電子状態計算を得意とするドイツ側の研究者が協力して、グラフェン、**MgO** ベース磁性半導体、**IV** 族および **IV-VI** 族ベース磁性半導体のデザインを行い、スピンに依存した輸送特性の解析、キュリー温度の予測や材料合成のガイドラインの提示を行った。また、開発した第一原理計算コードは、引き続きスーパーコンピュータを用いた新奇デバイスデザインに展開されている。さらに、計算機シミュレーションによりデザインされた材料は、日独共同研究を前提とした実験グループとの実証実験に発展している。

6-2 人的交流の成果

日本側からのべ 21 回、ドイツ側からのべ 15 回お互いの研究機関を訪問し、計 4 回の研究交流ワークショップを開催した。この交流では、開発中の第一原理計算コードの問題点の洗い出しと解決法、磁性半導体のマテリアルデザインシミュレーションの方向性に関する議論を行った。これらの研究交流を通じて、日本側からは 3 人、ドイツ側からは 2 人の学生が博士の学位を取得した。特に、本研究課題で渡独・来日した博士後期課程学生が、相手国の同じフィールドで研究する外部研究者の前で研究成果を発表するなど、研究アクティビティの発信にも貢献した。また、本研究課題の成果をもとに、日独間の新たな共同研究の開始や博士研究員の長期派遣に発展している。さらに、本研究課題で培った人的交流関係を礎に、人材交流を前提とした新たな研究予算を獲得した。

7. 主な論文発表・特許等（5 件以内）

相手側との共著論文については、その旨を備考欄にご記載ください。

論文 or 特許	・論文の場合： 著者名、タイトル、掲載誌名、巻、号、ページ、発行年 ・特許の場合： 知的財産権の種類、発明等の名称、出願国、出願日、 出願番号、出願人、発明者等	備考
論文	K. Sato, L. Bergqvist, J. Kudnovsky, P. H. Dederichs, O. Eriksson, I. Turek, B. Sanyal, G. Bouzerar, H. Katayama-Yoshida, V. A. Dinh, T. Fukushima, H. Kizaki, R. Zeller, First principle theory of dilute magnetic semiconductors, <i>Reviews of Modern Physics</i> , 82, 1633 (2010).	共著 論文
論文	T. Ono, M. Heide, N. Atodiresei, P. Baumeister, S. Tsukamoto, and S. Blügel, Real-space electronic-structure calculations with full-potential all-electron precision for transition-metals, <i>Phys. Rev. B</i> 82(20), 205115 (2010).	共著 論文
論文	L. Bergqvist, K. Sato, P. H. Dederichs and H. Katayama-Yoshida, Computational materials design for high-Tc (Ga, Mn)As by Li co-doping, <i>Phys. Rev. B</i> 83(16), 165201 (2011).	共著 論文
論文	S. Tsukamoto, Y. Egami, K. Hirose, and S. Blügel, Stabilized scattering wave-function calculations using the Lippmann-Schwinger equation for long conductor systems, <i>Phys. Rev. B</i> 84(11), 115443 (2011).	共著 論文
論文	T. Ono, Y. Fujimoto, and S. Tsukamoto, First-principles calculation methods for obtaining scattering waves to investigate transport properties of nanostructures, <i>Quantum Matter</i> 1(1) 4-19 (2012).	共著 論文