

事後評価報告書(日-クロアチア研究交流)

1. 研究課題名:「材料科学研究における表面の構造的・電子的・動的特性の理論的モデリング及びシミュレーション」

2. 研究代表者名:

2-1. 日本側研究代表者:国立大学法人大阪大学大学院工学研究科 教授 笠井 秀明

2-2. 相手側研究代表者:クロアチア物理学研究所 表面科学 教授 Branko Gumhalter

3. 総合評価:(S)

4. 事後評価結果

(1)研究成果の評価について

超高速ダイナミクスの理論手法に関し、クロアチア側の開発した動的な電子状態形成に関する理論計算プログラムを日本サイドの計算機システムに導入し、本格的な光電子スペクトル計算のためのアルゴリズム開発を行った。その結果、光電子スペクトル計算に向けた基礎理論を発展させることが出来た。また、従来説明できなかったプラズモン・分子励起子モード結合や量子干渉が発光スペクトルに与える効果について、量子論的な多種多体効果に基づき解明したことは大いに評価される。一方、当初計画にある複合系の伝導特性解析や、それに基づく巨大系に対する伝導計算の研究が実施されていないと思われる。今後、日本側の実験結果をサポートするための理論検討をより強力にできるとよい。

(2)交流成果の評価について

日本側と相手国側の研究者がそれぞれ相手国の研究室を訪問し、共同で計算ソフトウェアの開発・実装や理論構築に携わっており、お互いが刺激を受ける好ましい研究環境が構築されている。その結果の一つとして、クロアチア側の試料作製、日本側の時間分解非線形分光測定により、Ir(111)表面上のグラフェンにインターカレートしたアルカリ金属のコヒーレント振動制御に成功した。大勢の参加人数のプロジェクトであるので全員参加のワークショップの開催は難しいかもしれないが、プロジェクト全体での交流という意味でもう少し頻繁に開催されてもよかったのではないかと考える。

(3)その他(研究体制、成果の発表、成果の展開等)

大勢のプロジェクト参加者が登録されているが、それぞれの実際の役割がもう少し明確になっておれば良かった。また、数多い交流を行っているが共著の論文が少ないのが悔やまれる。近い将来共著論文が数多く出てくることを期待したい。しかし、素晴らしい成果を上げているので、是非企業と共同で実用化を達成してもらいたい。また、この交流を継続することにより、一層の成果を期待したい。