

## 事後評価報告書(日本ードイツ研究交流)

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. 研究代表者名:

2-1. 日本側研究代表者:大阪大学大学院 工学研究科 助教 小野 倫也

2-2. ドイツ側研究代表者:ユーリッヒ研究センター 研究員 Daniel Wortmann

3. 総合評価:( A )

4. 事後評価結果

### (1)研究成果の評価について

第一原理計算によるマテリアルデザインをスピントロニクス材料に関する様々な系で実施し、有用な知見と興味深い理論予測を行った点は評価できる。大規模第一原理計算を、日独の長所を結集し、また非常に緊密な協力体制のもとで大きく躍進させることに成功した。その結果、ドイツ側の支援を受けて、日本側が大規模計算法に関する独自のコードを確立することができた。MTJなどの接合型における電気伝導に関する研究の進展に関しては不明である。

### (2)交流成果の評価について

以前から交流の深かったグループ間ということもあり、非常に高レベルな協力体制が構築された。多数の渡航実績を積み重ね、日独合わせて5名の博士学位取得者を出したことは、人材育成という観点から高く評価される。ワークショップも計4回行われ、共著論文の発表など成果の発信についても十分に協調体制をアピールするものであった。日独とも若手研究者をリーダーに据え、リーダー自身が機動的に渡航して交流を盛り立てたことは評価できる。

### (3)その他(研究体制、成果の発表、成果の展開等)

本プロジェクトの成果を元に学振研究拠点形成事業Aに採択され、より大規模な国際研究協力体制へと発展した。さらに、筑波大実験グループとの共同研究も推進中とのことである。今後の実験サイドとの協力による研究の加速が期待される。また、ここで構築された計算コードはスーパーコンピュータの発展とともにますます有効活用されると期待され、本プロジェクトが有効に機能していることを示している。