

戦略的国際科学技術協力推進事業（日本－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. 研究期間：平成 22 年 9 月～平成 26 年 3 月
3. 支援額： 総額 15,000,000 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	笠井 秀明	大阪大学、工学研究科	教授
研究者	上羽 弘	富山大学、理工学教育部	教授
研究者	松本 吉泰	京都大学、理学研究科	教授
研究者	福谷 克之	東京大学、生産技術研究所	教授
研究者	宗像 利明	大阪大学 理学研究科	教授
研究者	赤井 久純	東京大学、物性研究所	特任教授
参加研究者 のべ 32 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	BrankoGumhalter	Institute of Physics	主任研究員
研究者	Radovan Brako	R. Bošković Institute	主任研究員
研究者	Nada Došlić	R. Bošković Institute	主任研究員
研究者	PredragLazićR.	R. Bošković Institute	研究員
研究者	Milorad Milun	Institute of Physics	上級研究員
研究者	Petar Pervan	Institute of Physics	上級研究員
参加研究者 のべ 17 名			

5. 研究・交流の目的

表面上の分子・ナノ粒子・クラスター・薄膜を含む先進的なナノ構造物質の構造的・動的・光学的特性や伝導特性のモデリング・シミュレーション・解釈に関して、特にフェムト秒の超高速ダイナミクスや分子間力をもたらす非局所相互作用に注目した新規理論手法開発やそれに基づくソフトウェア開発を行うこと、及び理論を実証するための実験手法の開発を行うことを目的としている。

6. 研究・交流の成果

6-1 研究の成果

表面超高速ダイナミクスの理論解析に関して世界的に有名なクロアチア研究者と議論を行うことができ、共著論文を含む多くの成果を上げることができた。また、従来のシミュレーション技法では取扱いの難しい分子間力に関して、より第一原理に法った非局所相互作用補正の理論手法とそのプログラム実装手法について理解を深め、クロアチア側研究者と共同で開発を進めることができた。

実験分野においてもクロアチア側が強みを持つグラフェン吸着イリジウム表面の作成手法及び・角度分解紫外光電子分光による分析手法と日本側が強みを持つ水素吸蔵固体表面の作製手法及び高エネルギー分解能・時間分解光学測定手法を組み合わせることができ、共同研究の強みを発揮することができた。

6-2 人的交流の成果

クロアチア側から優秀な学生・若手研究者が日本を訪問し、日本の学生・若手研究者と議論したことで、特に学部及び大学院の学生にとって良い刺激となった。また、日本からも学生・若手研究者をクロアチアへ派遣したことにより、クロアチアおよび他の欧州諸国の若手研究者とネットワークを構築することに成功した。

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	Kuniyuki Miwa, Mamoru Sakaue, Branko Gumhalter, Hideaki Kasai, Effects of plasmon energetics on light emission induced by scanning tunneling microscopy, Journal of Physics: Condensed Matter, in press.	共著論文
論文	Kuniyuki Miwa, Mamoru Sakaue, Hideaki Kasai, Effects of interference between energy absorption processes of molecule and surface plasmons on light emission induced by scanning tunneling , Journal of the Physical Society of Japan, Vol.82, pp.124707 (2013).	
論文	Mary Clare Sison Escano, Ryan Lacdao Arevalo, Elod Gyenge, Hideaki Kasai, First-principles study of borohydride adsorption properties on osmium nanoparticles and surfaces: understanding the effects of facets, size and local sites, Catalysis Science & Technology, Vol.4 pp. 1301-1312 (2014)	
論文	Febdian Rusydi, Mohammad Kemal Agusta, Adhitya Gandaryus Saputro, Hideaki Kasai, A theoretical study of ligand effects on the electronic structures of ligated zinc porphyrin using density functional theory, Journal of the Vacuum Society of Japan, Vol.57(3), pp.102-110 (2014)	
論文	Adhitya Gandaryus Saputro, Hideaki Kasai, Density functional theory study on the interaction of O ₂ and H ₂ O ₂ molecules with the active sites of cobalt-polypyrrole catalyst, Journal of the Physical Society of Japan, Vol.83, pp.24707-1 (2014)	