

近年、様々な材料(構造材料・ハードマテリアル・ソフトマテリアル)での、データを活用した研究開発(マテリアルズインフォマティクス)の高度化や、材料の研究開発現場のデジタル化やスマート化といったデジタルトランスフォーメーション(DX)が盛んに議論されてきている。このような流れの中で、材料設計・研究におけるデータ活用の根幹をなす理論とシミュレーション技術の知識は必要不可欠なものとなっている。さらに、計算物質科学やマテリアルズインフォマティクスのみならず、材料工学手法に実験及び理論計算に基づいたデータ科学を活用して、計算機上でプロセス・組織・特性・性能をつないで材料開発を加速する統合型材料開発システムであるマテリアルズインテグレーション(Materials Integration)システム*による基礎研究から実用化・事業化までの研究・開発の加速が目ざされている。

本セミナーシリーズでは、特に、計算物質科学の観点から、シミュレーションや数値計算の理論的背景や手法、マテリアルズインテグレーション、マテリアルDXなどによる多様な材料研究の基盤となる内容について、具体的な事例をもとにオムニバスで学ぶ。

[*注: マテリアルズインテグレーションは、戦略的イノベーション創造プログラム(SIP)の課題の一つ「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」で推進されている計算材料科学の手法。]

計算物質科学と
マテリアルデジタルトランスフォーメーション
DX

参加無料
Japanese only

第3テーマ 「材料開発と機械学習」-その2-

開催日時

2023年 1月17日(火) 13:30-15:00

オンライン開催

講師

福島 鉄也

東京大学 物性研究所 データ統合型材料物性研究部門

(兼) 附属計算物質科学研究センター 特任准教授(PCoMS次世代研究者終了者)

応用編: 「第一原理計算を用いた不規則系磁性材料の探索」

【主な対象】DC、PD、若手研究者以上

【申込】2023年1月16日(月)10:00迄 【定員】50名

第4テーマ 「マルチスケール」

開催日時

2023年 2月24日(金) 10:00-16:00

ハイブリット開催

講師

毛利 哲夫

北海道大学 名誉教授/JST(科学技術振興機構) シニアフェロー

(PCoMS元コンソーシアム長)

基礎編: 「離散格子から連続体へ」

応用編: 「材料開発の順問題・逆問題」

【主な対象】基礎編: 材料専門外の理工系のMCLレベル以上

応用編: DC、PD、若手研究者以上

【申込】2023年2月22日(水)10:00迄

【定員】オンライン: 50名/オンサイト: 25名

<事前登録制>

<http://pcoms.imr.tohoku.ac.jp/R04/PCoMS-CMS-seminars-2022/>

<共催> 計算物質科学人材育成コンソーシアム <PCoMS>

極限環境対応構造材料研究拠点 (RISME)

<協賛> 東北大学金属材料研究所 計算材料学センター (CCMS)



第3テーマ「材料開発と機械学習」—その2—

福島 鉄也 東京大学 物性研究所 データ統合型材料物性研究部門
(兼) 附属計算物質科学研究センター 特任准教授
(PCoMS次世代研究者終了者)

2023年1月17日 (火) 13:30-15:00 (オンライン開催)

<事前登録制> <http://pcoms.imr.tohoku.ac.jp/R04/PCoMS-CMS-seminars-2022/>

開会挨拶：久保 百司

PCoMSコンソーシアム長 兼 次世代研究者育成委員会委員長 教授[東北大学]

「第一原理計算を用いた不規則系磁性材料の探索」

物質設計 (マテリアルデザイン) は物質が与えられ物理現象を解明する研究 (順問題) とは異なる。膨大な自由度の中から、目的とする機能を発現する最適なマテリアルの構成原子・組成・構造配置を見つける逆問題である。試行錯誤的にこのような逆問題を解くのは困難なため、計算機上で (近似は含まれるが) 経験的パラメーターを用いず電子状態やマテリアル特性を定量的に評価可能な第一原理計算は、低コストでマテリアルデザインを実施するツールとして期待されてきた。しかし、試料合成技術の発展に伴い、高・多機能性実現のため対象となるマテリアルは単純な化学量論的化合物だけでなく、複雑な多元・複合・準安定材料へ広がっている。そのため、汎用の第一原理計算コードをやみくもに走らすだけでは、この果てしなく広がる材料空間を探索することはできない。

そこで、データ科学を活用した、いわゆるマテリアルズインフォマティクスが注目を集めている。要するに、蓄積されたマテリアルデータに、データ科学を適用して、新たな知識を獲得し、物性支配因子の推定、または材料探索を加速させようというのである。しかし、マテリアルズインフォマティクスにより革新的な無機材料が見つかるまでは至っていないのが現状である。その主たる原因は、高品質の無機材料のデータ数が少ないため、効率よくデータ科学の手法を適用できていない点が挙げられる。我々は、KKRグリーン関数法に立脚したソフトウェア「AkaiKKR」を用いて、新規磁性・スピントロニクス材料のデザイン、そして利用価値が高く高品質のマテリアルデータの創出を実施してきた。本講演では、KKRグリーン関数法の特徴を説明し、スーパーコンピュータ「富岳」を利用することで、約15万個の磁性多元合金から成る広大な材料空間を自動網羅的に探索し物性データベースを構築した研究例について紹介する。

閉会挨拶：川勝 年洋

PCoMSイノベーション創出人材育成委員会委員長 教授[東北大学]

※PCoMSIPD対象者の方は、「計算物質科学セミナー」の半日*2回を受講され、受講後に所定の報告書を提出された場合に、IPDプログラム選択科目カテゴリー A&B 1単位として認定されます。

なお、IPD対象者 (フェロー：インターンシップ実施済み) は報告書の提出は不要です。

第4テーマ 「マルチスケール」

毛利 哲夫 北海道大学 名誉教授/JST(科学技術振興機構) シニアフェロー

(PCoMS前コンソーシアム長)

2023年2月24日 (金) (ハイブリッド開催)

<事前登録制>

<http://pcoms.imr.tohoku.ac.jp/R04/PCoMS-CMS-seminars-2022/>

会場：東北大学 金属材料研究所 2号館 講堂 (片平キャンパス)

キャンパスマップ：<http://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/about/location.html#campus>



開会挨拶：久保 百司

PCoMSコンソーシアム長 兼 次世代研究者育成委員会委員長 教授[東北大学]

<会場アクセスマップ>

10:00-12:00

【基礎編】「離散格子から連続体へ」

温度や圧力の変化によって系は平衡状態から別の平衡状態へと遷移する。このとき、離散格子では、原子の拡散が起こり新たな原子配列が形成され、スケールの大きな領域では特徴的な内部組織・微細組織が発達する。このような一連の過程は相変態・相転移として知られているが、結晶格子の離散性を考慮した議論と、連続体を仮定した議論は個別に行われる機会が多く、両者の整合的な議論が必要である。離散格子から連続体への移行に関して重要になるのは粗視化(coarse graining)である。本「計算物質科学セミナー2022」において講じられた話題を振り返りながら、計算材料科学における粗視化の重要性を考える。又、一例として、離散格子上の自由エネルギーの高精度の記述手法として知られるクラスター変分法と、連続媒体を対象にしたフェーズフィールド法を取り上げ、シームレスな粗視化の可能性について論じる。

13:30-16:00

【応用編】「材料開発の順問題・逆問題」

講演者はこの数年間にわたってSIP(内閣府・戦略的イノベーション創造プログラム)の「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」のプロジェクトにかかわってきた。材料開発の4要素と言われるP (processing) → S(structure) → P(properties) → P(performance)の効果的な連携には、矢印の方向に向かう原理・学理の集積による順解析と、欲しいperformanceやpropertiesを実現する為のprocessing やstructureを予測・同定する逆解析(矢印の逆方向)の双方の手法の確立が必要である。本講演では、上記のプロジェクトで取り扱った事例を紹介し、離散格子と連続体をつなぐ順解析・逆解析、さらには粗視化・微視化(*)について考える。

(*) 微視化は汎用されている用語ではない。粗視化の反対語として用いた。

閉会挨拶：川勝 年洋

PCoMSイノベーション創出人材育成委員会委員長 教授[東北大学]

※PCoMSIPD対象者の方は、「計算物質科学セミナー」の半日*2回を受講され、受講後に所定の報告書を提出された場合に、IPDプログラム選択科目カテゴリー A&B 1単位として認定されます。

なお、IPD対象者(フェロー：インターンシップ実施済み)は報告書の提出は不要です。