

(様式2)

議事録番号

提出 28年 3月 25日

## 会合議事録

研究会名：第3回放射光・中性子によるセラミックス原子相関解析研究会

「ガラス・セラミックスのマテリアルズインフォマティクス

－二体相関の裏に潜む“秩序”と材料の“機能”の相関解明にむけて」

日 時：2016年3月14日（月）10:00－12:00

場 所：早稲田大学（西早稲田キャンパス）

出席者：（議事録記載者に下線）

津田宏治（東京大）、安藤康伸（東京大）、北村尚斗（東京理大）、紅野安彦（岡山大）、臼杵毅（山形大）、脇原徹（東京大）、小野寺陽平(京大)、他 計34名

議題：第3回放射光・中性子によるセラミックス原子相関解析研究会「ガラス・セラミックスのマテリアルズインフォマティクス－二体相関の裏に潜む“秩序”と材料の“機能”の相関解明にむけて」における講演と議論

議事内容：

物質や材料の構造解析においては、計算化学や計算材料科学を活用したシミュレーションの手法だけでなく、新しい情報科学の分野を活用した材料研究にも大きな期待が持たれている。SPRUC「機能性材料ナノスケール原子相関研究会」は、放射光・中性子を利用した実験と理論計算を併用したガラス・セラミックスの構造解析手法の普及および利用促進を行うために、日本セラミックス協会「放射光・中性子によるセラミックス原子相関解析研究会」と協力して講演会講習会等の活動を行ってきた。今回、第3回となる放射光・中性子によるセラミックス原子相関解析研究会においては、材料科学と情報科学の統合による新規材料探索の手法として近年注目されているマテリアルズインフォマティクスに注目し、「ガラス・セラミックスのマテリアルズインフォマティクス－二体相関の裏に潜む“秩序”と材料の“機能”の相関解明にむけて」と題して日本セラミックス協会2016年年会においてサテライト研究会を開催した。3名の講演者の方々による情報科学と融合した材料の新しい構造解析手法に関する講演を通して、セラミックス材料の構造・物性研究の更なる発展にむけた議

論が行われた。

講演①：

「物質・材料開発のための機械学習：仮想スクリーニングとベイズ最適化」

(東京大学 津田 宏治氏)

-- 新しい物質および材料の設計・開発を行うための機械学習として、仮想スクリーニングおよびベイズ最適化に関する研究結果が報告された。仮想スクリーニングについては無機結晶構造データベースからの超低熱伝導材料の高効率な発見に関する結果、ベイズ最適化については二元化合物の融点データを用いた計算実験（最高融点物質の発見）と粒界構造決定の高速化に関する結果が紹介された。パラメータが多い複雑な系で効力を発揮する機械学習を第一原理計算と組み合わせることで、新規物質・材料の開発を大幅に効率化できる可能性が示された。

講演②：

「機械学習による原子間力ポテンシャルモデリング：

アモルファス内イオン拡散経路探索への応用」

(東京大学 安藤 康伸氏)

-- アモルファス  $\text{Ta}_2\text{O}_5$  中の Cu の拡散について、アモルファス構造中で Cu が感じる原子間力ポテンシャルをニューラルネットワーク(NN)と密度汎関数法(DFT)を併用して計算し、イオン拡散経路を探索した結果が報告された。高精度である反面高い計算コストを要する DFT 計算において、DFT 計算結果を機械学習させた NN モデルを作成・使用することで、全体の計算コストが大幅に削減することが示された。また得られたモデルから計算された Cu イオンの伝導の活性障壁の値は実験データと良い対応を見せており、今後のアモルファス材料の構造と機能に関する解析へむけて、実験系の研究者との活発な議論が行われた。

講演③：

「無機酸化物結晶に潜む非周期的な原子配列の秩序とイオン伝導性の関係」

(東京理科大学 北村 尚斗氏)

-- 周期的な原子配列を持つ結晶の構造に潜む非周期性は材料の機能発現と密接に関わっており、それを解析する手法としての二体分布関数解析、逆モンテカルロ(RMC)法と第一原理（分子動力学）計算の相補利用の有用性について、プロトン伝導性酸化物結晶の研究成果とともに解説がなされた。特に、計算科学を

併用した RMC 法によって結晶材料の 3 次元ナノスケール解析, 何もない空間(空孔)の解析, 原子間の結合を考慮した解析等が可能になることが大きな利点として挙げられ, 元来ガラスなどのランダム系に用いられてきた本手法が今後はガラス・結晶を問わず広くセラミックス材料の構造解析に威力を発揮する可能性を秘めていることが示された。

添付資料：

第 3 回放射光・中性子によるセラミックス原子相関解析研究会 配布資料

1. プログラム