

# 課題名：計算材料科学が主導する データ駆動型研究手法の開発とマテリアル革新

久保 百司  
(東北大学 金属材料研究所・  
計算材料学センター センター長・教授)



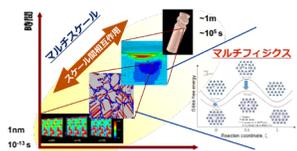
## 概要・目標

2022年7月に文部科学省「データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト」に採択された5拠点が共同で、「富岳」によってのみ達成可能な超大規模計算、超長時間計算、超大量計算を実現する材料シミュレーション技術の開発をベースに、新たなデータ駆動型研究手法を創出する。

## 実施体制・関係機関・研究内容

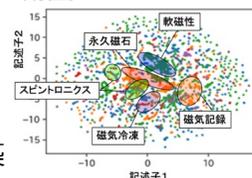
### 構造材料 (東北大拠点)

- ◆ 反応分子動力学法により構造材料の腐食、摩耗、破壊現象のメカニズムをメソスケールで解析
- ◆ データベース駆動型大正準モンテカルロ法を活用した転位や粒界など複数の欠陥を含む構造材料の偏析解析



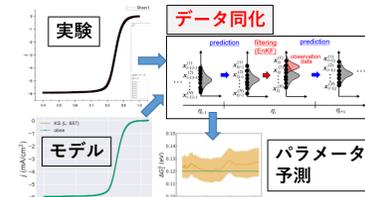
### 磁性材料 (物材機構拠点)

- ◆ 磁性材料のフォノン関連物性(熱力学的安定性、輸送)の計算データベースの創出
- ◆ 磁性材料マップの拡充と材料探索への応用
- ◆ 結晶記述子からフォノンの熱力学量を予測する予測器をデータベースから構築



### 電気化学材料 (東大拠点)

- ◆ 水電解電極の表面・界面構造の大量データ創出
- ◆ 蓄電池と水電解装置の電解質内イオン輸送物性の大量データ創出
- ◆ 電極反応解析におけるデータ同化手法開発



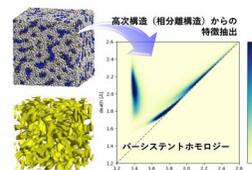
### エレクトロニクス材料 (東工大拠点)

- ◆ 原子レベルのモデルのまま巨視的な時空間スケールにおける誘電体ドメインダイナミクス解析
- ◆ 強誘電体ドメインダイナミクス制御によるデバイス性能予測
- ◆ 第一原理計算からの機械学習モデルに基づく大規模計算



### バイオ・高分子材料 (京大拠点)

- ◆ 高分子材料の相分離現象や凝集等のマルチスケール分子シミュレーション解析
- ◆ 広大な探索空間の中で計測困難なバイオ・高分子の溶解性の効率的な計算
- ◆ CO<sub>2</sub>分離膜の高次構造の再現と特徴量の算出



### 実施体制

#### 【分野間連携】

- ◆ データの創出、管理、利活用方法の共同開発
- ◆ 高次構造の記述子、データ縮約法の共同開発

文部科学省「データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト」における連携	(A) 構造材料 【NIMSデータ中核拠点】 代表 神谷孝典 実務 青島孝彰 実務 安藤 実	(B) 磁性材料 【NIMS拠点】 代表 久保百司 実務 藤田 大 実務 藤田 大 実務 藤田 大	(C) 電気化学材料 【NIMS拠点】 代表 杉山正和 実務 杉山正和 実務 杉山正和	(D) エレクトロニクス材料 【東大拠点】 代表 杉山正和 実務 杉山正和 実務 杉山正和	(E) バイオ・高分子材料 【京大拠点】 代表 杉山正和 実務 杉山正和 実務 杉山正和	計算材料学 【東大拠点】 代表 久保百司 実務 久保百司 実務 久保百司
データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト	データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト	データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト	データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト	データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト	データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト	データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト
データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト	データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト	データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト	データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト	データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト	データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト	データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト

## 想定される具体的成果

- ◆ 構造材料において、最大100億原子系の反応分子動力学計算による腐食・摩耗現象の解析、転位や粒界など複数の欠陥を含む1000万原子系での偏析現象の解析
- ◆ ハイスループットフォノン計算による磁性材料のフォノン物性データベースの創出、フォノンエントロピーなどの熱力学量を定める少数の変数抽出と有限温度安定性予測器の構築
- ◆ 水電解電極材料、蓄電池材料において、それぞれ1000件オーダーの第一原理計算データを創出し、水電解電極材料、高イオン伝導度材料の設計指針を構築
- ◆ 誘電体材料のドメインダイナミクスをμメートル長モデルにおいてμ秒からm秒スケールで解析可能とし、強誘電体ドメイン計測画像と大規模計算を用いたドメイン解析法を開発
- ◆ バイオポリマーの自由エネルギー解析、異なる相間の相対安定性を規定する分子間相互作用の同定、溶媒和理論による溶媒和構造・熱力学量の解析