

**産業分野における
計算科学技術を駆使した酸化物材料の機能物性の理解, 予測, 設計
Comprehension, Forecast and Design for Functional Properties of Oxide Materials
by Utilizing Computational Scientific Techniques in Industrial Fields**

村田製作所¹, CAMM フォーラム², AIMaP³, ADMAT⁴ °檜貝 信一¹⁻⁴

Murata Mfg.¹, CAMM Forum², AIMaP³, ADMAT⁴ °Shin'ichi Higai¹⁻⁴

E-mail: s_higai@murata.com

高精度な計算科学技術を、我々は、材料研究開発を強力に牽引・底上するために不可欠なものとして、主力材料である酸化物誘電体をはじめ、多種多様な材料の機能物性の理解, 予測, 設計に、日夜駆使している。産業分野において計算科学は、現実の系の不規則, 不均質, 高次, 人工的構造, さらに外的条件を可能な限りモデルに取り込むことを求められるため、ただちに様々な困難や限界に直面することとなり、そこは常に計算科学技術の最前線でもある。本講演では、我々が先進的な計算科学を、ものづくりの現場で実活用している事例として、極微細化による新規な物性発現が期待されるナノセラミックス [1-4], 次世代のエネルギーデバイスとして注目されるシュールドキャパシタの電極材料表面 [5,6], そして Li イオン全固体電池材料 [7] の三つの材料系について取り上げる。さらに、産業分野と関わりが深い、次の二つのアクティビティも紹介したい。一つは、計算科学分野で、様々な枠を超えた交流の場として貴重な役割を果たし、独自の活動も注目されている「コンピュータによる材料開発・物質設計を考える会 (Computer Aided Materials and Molecular design Forum: CAMM フォーラム)」[2,3,8], もう一つは、数学と産業分野との本格的な連携推進を図る国家プロジェクト「数理アドバンストイノベーションプラットフォーム (Advanced Innovation powered by Mathematics Platform: AIMaP)」[2,3,9] である。近年、計算科学分野、および材料科学分野を取り巻く諸々の状況は、データ科学の席卷も含め、大きな変動の時節にある。本講演では、将来に向けた多くの課題についても、是非多くの参加者の方々と議論したい。

参考文献

- [1] 檜貝, 鷹木, セラミックス 特集「ナノクリスタルセラミックス技術の深化」, **51**, 241 (2016).
- [2] 檜貝, 日本化学会 情報化学部会誌 特集「使える計算科学」, **35**, 229 (2017).
- [3] 檜貝, 日本化学会 化学と工業 特集「マテリアルズ・インフォマティクス」, **71**, 659 (2018).
- [4] S. Higai, Springer Book, ed. T. Onishi, “Theoretical Chemistry for Advanced Nanomaterials: Functional Analysis by Computation and Experiment”, to be published.
- [5] N. Keilbart, Y. Okada, A. Feehan, S. Higai and I. Dabo, Phys. Rev. B, **95**, 115423 (2017).
- [6] Y. Okada, N. Keilbart, J. Goff, S. Higai, K. Shiratsuyu and I. Dabo, to be presented in Mat. Res. Soc., 2019 Spring Meeting, Phoenix, Arizona, USA, 22-26 Apr., 2019.
- [7] H. Chen, S. Higai, R. Takano, M. Yoshioka and K. Shiratsuyu, presented in Computational Sciences Workshop 2019, Ryogoku, Tokyo, Japan, 16-18 Jan., 2019.
- [8] CAMMフォーラム, webサイト, <https://www.bri.or.jp/camm/>.
- [9] AIMaP, webサイト, <https://aimap.imi.kyushu-u.ac.jp/wp/>.