

二国間交流事業 セミナー報告書

令和5年2月24日

独立行政法人日本学術振興会理事長 殿

[日本側代表者所属機関・部局]
北陸先端科学技術大学院大学
・情報社会基盤研究センター
[職・氏名]
准教授・本郷 研太
[課題番号]
JPJSBP220218802

1. 事業名 相手国: 韓国 (振興会対応機関: NRF) とのセミナー

2. セミナー名

(和文) 統合型マテリアルズ・インフォマティクスを用いた材料設計

(英文) Materials Design using Integrated Materials Informatics

3. 開催期間 2022年 12月 15日 ～ 2022年 12月 16日 (2日間)

4. 開催地(都市名)

能美市

5. 相手国側代表者(所属機関名・職名・氏名【全て英文】)

Korea Institute of Science and Technology, Principal Researcher, Hiroshi MIZUSEKI6. 委託費総額(返還額を除く) 592,000 円

7. セミナー参加者数(代表者を含む)

	参加者数	うち、本委託費で渡航費または 日本滞在費を負担した場合*
日本側参加者等	18名	-名
相手国側参加者等	10名	3名

参加者リスト(様式B2)の合計人数を記入してください。該当がない箇所は「0」または「-」を記入してください。

* 日本開催の場合は相手国側参加者等の日本での滞在費等を負担した場合、相手国開催の場合は日本側参加者等の渡航費を委託費で負担した場合に記入してください。

8. セミナーの概要・成果等

- (1) セミナー概要(セミナーの目的・実施状況。第三国からの参加者(基調・招待講演者等)が含まれる場合はその役割とセミナーへの効果を記載してください。関連行事(レセプション、見学(エクスカーション)その他会合(別経費の場合はその旨を明記。))などがあれば、それも記載してください。各費目における増減が委託費総額の50%に相当する額を超える変更があった場合には、その変更理由と費目の内訳を変更しても計画の遂行に支障がないと考えた理由を記載してください。)

セミナーの目的

本セミナーは、「ハイレントロピー合金系」を対象系に据え、その固体触媒への応用を出口課題とし、マテリアルズ・インフォマティクスによる新規ハイレントロピー合金触媒の探索・開発を行う国際共同研究体制を確立する。ハイレントロピー合金は、多元素由来の大きなエントロピーを持ち、新規準安定相の発現が期待される。構造-物性相関の観点から、候補材料の多様性から新奇触媒活性を持つ可能性が高く、革新的触媒の発見に繋がる可能性が大いに期待される。しかしながら、多元素系の取り扱いでは、候補物質数が指数関数的に増大し、従前の経験的物質探索では太刀打ちできない。本研究は、計算科学とデータ科学を統合したマテリアルズ・インフォマティクス研究アプローチによって、そのような困難を解決し、バーチャル空間での新奇触媒用途のハイレントロピー合金候補を探索する。更に、ハイスループット実験による実空間での実証検証を行うことで、計算科学・データ科学・実験科学の融合した、統合型マテリアルズ・インフォマティクスを用いたハイレントロピー合金研究を展開する。また、その実現のための国際的な統合型マテリアルズ・インフォマティクス研究プラットフォームの開発に取り組む。

セミナーの実施状況

本セミナーは、令和3年6月14日～15日の2日間の予定で開催する予定であったが、当初の想定に反し、新型コロナウイルス感染症の拡大が収まらない状況であった。そのような状況を鑑み、令和3年5月に相手国代表者と調整の結果、令和3年9月(申請時第2希望案)での実施を計画したが状況は好転せず、令和3年10月の段階で相手国代表者との調整の結果、令和4年6月13日～令和4年6月14日に延期することにした。しかしながら、この段階でも新型コロナウイルス感染症の影響から開催が困難であると判断し、新型コロナウイルス感染症が落ち着いてきた、令和4年12月15日～16日の2日間で“JASIT-KIST Joint Seminar”を実施し、翌令和5年1月30日～31日の2日間で整理会を実施した。セミナー講演者は7名(日本側4名/韓国側3名)で、参加者は本学教職員・学生で14名であった。整理会は、日本側2名、韓国側2名のコアメンバーだけが参加して、非公開で実施した。なお、本セミナーは、共同研究内容として本学設備装置に関連する研究計画立案を含むため、Webでの開催では代替できず、対面式での開催が不可欠であった。

- (2) 学術的価値(セミナーにより得られた新たな知見や概念の展開等、学術的成果)

本セミナーの実施により得られた知見としては、マテリアルズ・インフォマティクス研究基盤となるハイレントロピー合金の構造生成手法、それらを用いたハイスループット計算、触媒反応や酸化に関連する第一原理計算による理論解析の枠組み、触媒活性の機械学習モデル構築のための記述子開発、ハイレントロピー合金のハイスループット合成実験とその触媒活性の実験的解析、といった、統合型マテリアルズ・インフォマティクス研究を展開するための要素技術に関する知見を確認できた。また、それらを実施するためのハード・ソフト両面での研究設備について確認することができた。以下に、講演者毎の発表内容について述べる。

本郷研太 (JAIST)

本学研究設備、特に、超並列計算機群などの計算機環境は、本国際共同研究体制を展開する上での研究基盤となるため、その共通理解を目的として、それらを概説した後、そこで得られたデータ駆動型材料開発研究を包括的に紹介した。特に、膨大な原子配置自由度をもつ HEA 合金の構造を自動生成する独自開発のプログラム SHRY について紹介した。

水関博志 (KIST)

原子が完全にランダムに配列していると考えられているハイレントロピー合金には、元素の種類によっては、一部のサブ格子は規則構造を持ち、残りのサブ格子はランダムに配列しているという規則不規則共存構造が実現している系があることを第一原理計算を用いて示した。なお、この発表内容については、2月3日に本学(JAIST)よりプレスリリースを行っている。

佐原亮二 (NIMS)

第一原理計算と機械学習による Ti 及び Ti 系合金の酸化機構解明と酸化定数予測に関する研究紹介を行った。酸化機構は大きく分けて 2 つのステージから構成されること、シリコン添加により酸化が抑制されることが示された。また、表面酸化速度定数を予測する機械学習モデルを構築し、その妥当性が確認された。

谷池俊明 (JAIST)

谷池教授が拠点長を務め、本郷も参画している、本学エクセレントコア拠点の一つであるマテリアルズ・インフォマティクス国際研究拠点について概説した後、谷池研究室で開発しているハイスループット実験に関する研究展開について包括的に紹介した。

Le Dinh Son (JAIST)

谷池研ポスドクとして、ハイレントロピー合金を対象とするハイスループット実験を紹介した。対象元素に関して制限はあるものの、主要な金属元素(遷移金属や貴金属)を組み合わせた膨大な組成のハイレントロピー合金ナノ粒子を作製することができ、その触媒応用について紹介した。

Sang Soo Han (KIST)

主成分分析(PCA)と crystal graph convolutional neural network (CGCNN)を用いた 2 元系ナノ粒子の電子状態密度(DOS)予測に関する機械学習研究とその適用例を紹介した。

Byungju Lee (KIST)

自然言語処理(Natural language processing)を用いた触媒研究論文や各国の材料研究の研究課題動向を俯瞰した上で、自然言語処理を用いた材料研究への将来展望について議論した。

(3) 相手国との交流(両国の研究者が協力してセミナーを開催することによって得られた成果)

新型コロナウイルス感染症の拡大によって、1年以上の延期を余儀なくされたが、開催に至るまで、定期的に連絡を取り合い、講演者の選定やセミナー開催・運営についての手続きを共同で進めるとともに、オンラインでも対応可能な研究課題については、セミナー開催を待たずに、共同研究を開始・実施した。ハイレントロピー合金のハイスループット計算に基づく規則・不規則共存構造の存在予見に関する研究では、研究が順調に進み、原著論文1報が採択され、本学プレスリリース、地元新聞掲載と研究成果の広報にも努めた。それ以外の研究課題については、対面での打ち合わせを要するため、セミナー開催を待たなければならな

ったが、統合型マテリアルズ・インフォマティクスという、実験科学、計算科学、データ科学という異分野の融合展開を要する学際的研究を推進するために、実際の設備などの見学を行った上で、両機関の専門家が顔を突き合わせて、議論するという経験は、両機関の連携を更に強化し、今後の共同研究を展開する上で極めて貴重な機会になったと考えられる。

- (4) 社会的貢献(社会の基盤となる文化の継承と発展、社会生活の質の改善、現代的諸問題の克服と解決に資する等の社会的貢献はどのようにあったか)

本セミナーで主題としたハイエントロピー合金は、材料科学における一研究分野に過ぎないが、本セミナーで計画している統合型マテリアルズ・インフォマティクス研究プラットフォームは、材料研究の効率化、迅速化のための汎用的な枠組みを提供する。そのため、ハイエントロピー合金に限らず、その他の材料系への応用展開も可能であり、当該プラットフォームを拡充することで、材料研究における国際的共同研究の立場から、エネルギー問題や環境問題の解決に貢献し得る可能性を秘めており、本セミナーはその嚆矢となる。

- (5) 若手研究者養成への貢献(若手研究者養成への取組、成果)

本セミナーでは、シニアの研究者による講演のみならず、両機関で優れた研究を行っている2名の若手研究者(Le Dinh Son@JAIST/Byungju Lee@KIST)に、招待講演の機会を与えることで、キャリア形成に繋がる支援を行なった。その人選でも、異分野交流を促進するように、Son 博士と Lee 博士という実験研究者とインフォマティクス研究者を選定した。今後も、このような若手研究者レベルでの異分野交流の種を蒔いていくことで、将来的な学際的共同研究の展開が期待される。

- (6) 将来発展可能性(本事業を実施したことにより、今後どのような発展の可能性が認められるか)

本セミナーを通じて、両機関の研究者が、本研究課題の遂行に必要な要素技術を明らかにし、互いに必要となる要素技術を提供できることが確認できた。この共通認識の下で、本研究課題の目標である「統合型マテリアルズ・インフォマティクス研究基盤」の開発と、そのハイエントロピー合金における新奇触媒能探索に関して、より具体的な研究計画を練り、令和6年度の二国間交流事業 共同研究への申請を計画している。特に、セミナー終了後の議論と整理会での打ち合わせで、若手研究者として招聘した Lee 博士の専門である自然言語処理技術を活用した新規ハイエントロピー合金の探索に関する共同研究が具体的に立ち上がっている。このような課題を複数立案し、それらを統合することで、マテリアルズ・インフォマティクスにおける統合型研究を展開できるものと期待している。

- (7) その他(上記(2)～(6) 以外に得られた成果(論文発表等含む)があれば記載してください)

原著論文:

Hiroshi Mizuseki, Ryoji Sahara, Kenta Hongo, "Order-disorder competition in equiatomic 3d-transition-metal quaternary alloys: Phase stability and electronic structure",
Science and Technology of Advanced Materials: Methods 3(1), 2153632 (2023).

プレスリリース:

令和5年2月3日付 北陸先端科学技術大学院大学プレスリリース「ハイエントロピー合金中の「隠れた規則構造」をスーパーコンピュータを用いたシミュレーションによって発見」

新聞発表:

令和5年2月9日付 北國新聞26面 「合金中の原子配列 スパコンで予測」