

SPring-8 利用推進協議会

「SPring-8 材料構造の解析に役立つ計算科学研究会」趣意書

1. 目 的

放射光科学の発展により齎された数々の放射光利用分析評価技術は、それらの汎用化と先端化により広く深く普及し、民間企業の研究開発業務において重要なツールとなっている。一方、多自由度系の物理および化学モデルや非線形応答に基づく現象を数値的に解明する研究分野である計算科学は、スーパーコンピュータ（スパコン）を用いる高性能計算（high-performance computing, HPC）技術の進歩により、電池や触媒、高分子材料など、実用可能な材料設計に用いられるようになってきた。放射光利用実験で得られる計測データに対し、計算科学の手法を用いた高度なデータ解析を行うことにより、放射光利用成果の深化が期待される。また、材料開発への最新の計算物質科学の適用にも期待が高まっている。

そこで本研究会では、

- 材料構造解析に計算科学を積極的に応用している材料開発研究者らや、計算物質科学の基礎研究に携わる第一人者らを講師としてお招きする講演会、および
- 企業研究者にとって使いやすいアプリケーションの実習（基礎／応用、テーマ別等）を行う。本研究会で紹介する予定の計算科学の手法は、例えば、第一原理計算、逆モンテカルロ解析、分子動力学、有限要素法など、ミクロな電子状態からマクロな材料特性に至るマルチスケールの諸問題に適用できるものである。また、卓上の PC からスパコンに至る様々な規模の計算資源で実施された事例を広く紹介したい。

これらの活動を通して、企業の材料開発研究者らが計算科学の様々な手法をより身近なツールとして活用できるよう後押しし、延いては放射光とスパコンの連携利用を促し、企業の研究開発の深化や加速に貢献することを目指す。また、放射光実験研究者と計算物質科学研究者の交流を通して、企業の材料研究開発の新展開を図る。

2. 活動内容

- 1) 活動方針： 放射光企業利用者らに役立つ計算科学の手法を紹介し利用を推進することにより、放射光産業利用成果の深化を図るとともに、放射光利用実験研究者と計算科学研究者の交流を通して計算物質科学の材料開発への高度な適用を図り、産業技術の発展に資する。

- 2) 対 象： 放射光利用分析評価および計算科学的現象解明の対象となる物質や材料全般

- 3) 活動期間・開催頻度

期間：平成 29 年度 ～ 平成 30 年度（2 事業年度）

頻度：3 回程度／2 年間

4) メンバー

研究会主査：横山 和司 兵庫県立大学 放射光ナノテクセンター
副センター長

幹事：佐野 則道 JASRI 産業利用推進室 コーディネータ

会員：SPring-8 利用推進協議会会員企業、その他の産官学からの希望者。
関連する学、協会からの協賛を得て広く募集する。