## 第 29 回 格子欠陥フォーラム 「格子欠陥とマテリアルズ・インフォマティクス」

主 催:日本物理学会領域10格子欠陥ナノ構造分科

日 程:2019年9月14日,15日の2日間

会 場:豊田工業大学

[アクセス]https://www.toyota-ti.ac.jp/access.html

趣 旨:情報工学および計算機技術の発展により物性分野においてもインフォマティクスは日々重要性を増しています。特に材料科学とインフォマティクスを融合したマテリアルズ・インフォマティクスは最先端の機能材料・構造材料の開発および解析に欠くことの出来ないツールとなりつつあります。このような状況のなか、今回、マテリアルズ・インフォマティクスのこれまでの展開とこれからの物性分野の関わりを格子欠陥を切り口に俯瞰するべく「格子欠陥とマテリアルズ・インフォマティクス」と題して本フォーラムを開催する運びとなりました。物性物理分野のみならず、マテリアルズ・インフォマティクスの応用が盛んに行われている化学・材料科学分野も含め多彩な講演者を招き、マテリアルズ・インフォマティクスを活用した実験・計算による多面的・多階層的アプローチを概観できる場を提供することを目指します。本研究会がこれからのマテリアルズ・インフォマティクスを通した科学技術の発展を議論するための一助となれば幸甚です。

定員:50 名程度(申込先着順)

参加費:無料

懇親会費(希望者のみ): 6,500 円

申込締切日: 2019年9月11日(延長しました,懇親会は締切)

申込方法:表題を「格子欠陥フォーラム申込」とし、本文に 「1:お名前、2:ご所属、3:一般または学生の別、4:連絡用 E-mail アドレス、5:懇親会ご参加の有無」を明記して、下記連絡先(morih@cit.sangitan.ac.jp)宛に E-mail によりお申込みください.

連絡先: 〒661-0047 兵庫県尼崎市西昆陽 1-27-1

産業技術短期大学 機械工学科 森英喜

TEL: 06-6431-7175 E-MAIL: morih@cit.sangitan.ac.jp

企画・運営:日本物理学会・領域 10「格子欠陥・ナノ構造」分科 運営委員 森英喜 (産業技術短期大学), 吉田健太 (東北大学)

http://www.r10.div.jps.or.jp/LatticeDefect/

### プログラム (講演者の敬称略)

### 9月14日(土)

9 /1 14 H (T)	
10:30 - 10:40	開会挨拶
10:40 - 11:25	[招待講演] 三輪誠(豊田工業大学)
	「医薬文献からの知識抽出とその活用に向けて」
11:25 - 12:10	[招待講演] 浮田宗伯(豊田工業大学)
	「画像の超解像による微小構造解析の可能性」
12:10 - 13:30	休憩 (80分)
13:30 - 14:15	[招待講演] 田村亮(物質材料研究機構)
	「機械学習による物質・材料研究の具体事例紹介」
14:15 - 15:00	[招待講演] 林智広(東京工業大学)
	「実験と情報科学の融合による材料設計: 生体材料分野における現状と
	我々の挑戦」
15:00 - 15:10	休憩 (10 分)
15:10 - 15:55	[招待講演] Zhi-Lei Wang(名古屋大学)
	Data-driven properties-to-microstructure-to-processing inverse
	analysis for use in materials design
15:55 - 16:40	[招待講演] 佐伯昭紀(大阪大学)
	「機械学習と実験スクリーニング法による次世代エネルギー変換材料の
	開発」

懇親会 (17:30~予定)

# 9月15日(日)

9:30 - 10:15	[招待講演] 塚田祐貴(名古屋大学)
	「鉄鋼の無拡散変態によって導入される転位密度の温度・組成依存性」
	*この講演は科学技術振興機構の支援における成果となります.
10:15 - 11:00	[招待講演] 溝口照康(東京大学)
	「結晶界面インフォマティクスの最近の進展」
11:00 - 11:45	[招待講演] 清野淳司(早稲田大学)*
	「インフォマティクスを導入した密度汎関数理論の開発」
	*この講演は科学技術振興機構さきがけにおける成果となります.
11:45 - 12:00	休憩 (75分)

13:00 - 13:45 [招待講演] 横井達矢 (名古屋大学)

「一般粒界の物性解析に向けたニューラルネットワーク駆動型分子シミュレーション」

\*この講演はJST-CRESTにおける成果となります.

13:45 - 14:30 [招待講演] 高本聡 (東京大学)

「電荷移動型原子間ポテンシャルの開発と SiC 結晶の界面・表面反応への適用」

14:30 - 14:40 休憩 (10 分)

14:40 - 15:25 [招待講演] Ivan Lobzenko (豊田工業大学)

「Local stress calculations in the framework of machine learning potential」

15:25 - 16:10 [招待講演] 久保淳(東京大学)

「機械学習アプローチに基づく原子構造体の機能性評価」

\*この講演は科研費における成果となります.

16:10-16:55 [招待講演] 渡邉聡(東京大学,物質材料研究機構)

「固体中の原子ダイナミクス解析のためのニューラルネットワーク原子

間ポテンシャル」

17:55 - 17:00 閉会挨拶

#### 備考:

- ・宿泊、食事等につきましては参加者様自身にてお手配頂きますようお願い致します.
- ・やむを得ない事情によりプログラムが変更となる場合もございます. あらかじめご了承願います.

以上