

## 兵庫県立大学大学院物質理学研究科「マテリアルズインフォマティクス研究会」

日時：令和3年3月22日（月） 15時～17時30分

オンライン開催：[https://hyougo-u.webex.com/meet/syos\\_k159](https://hyougo-u.webex.com/meet/syos_k159)

### 【プログラム】

- 15：00～15：05 田島裕之（兵庫県立大学大学院物質理学研究科長）  
「研究科長挨拶」
- 15：05～15：10 坂井徹（兵庫県立大学大学院物質理学研究科）  
「はじめに」
- 15：10～16：10 草部浩一（大阪大学大学院基礎工学研究科）  
「情報理論に駆動されたマテリアルズインフォマティクスの展開」
- 16：30～17：30 上田宏（大阪大学先導的学際研究機構 量子情報・量子生命研究センター）  
「量子多体計算×量子情報処理から眺める量子マテリアルズインフォマティクス」

**【概要】** マテリアルの創生に基づくイノベーションから、革新的技術の創発と社会変革に至り得る産業への強いインパクトを発生させる、マテリアル革新力が求められています。そのコア技術として期待される研究が、計算機科学と材料物性・機能化学にまたがる、マテリアルズインフォマティクス(MI)の展開です。この研究会では、データ駆動型材料開発が諸外国において急展開することを想定し、国内の主要機関における開発状況をサーベイしながら、実験科学との連携及び産学連携による開発事例を紹介します。さらに、今後の展開を予測する、量子マテリアルズインフォマティクスの未来展望を討議します。

### 【講演1】草部浩一「情報理論に駆動されたマテリアルズインフォマティクスの展開」

**概要：**物質特性を量子力学に基づいて理論的に評価する電子状態計算理論によると、半導体、誘電体、磁性体、超伝導体に加えてトポロジカル物質など多様な物質系の機能予測が可能になるばかりか、弾性特性、触媒特性などについて実証実験との直接比較を可能とした例も多数報告されてきています。機械学習や進化論アルゴリズムなどを応用した加速化が、物質構造予測を超えて、エネルギー関連材料の実時間ダイナミクス特性についても評価を可能としています。国内を先導する機関の評価事例、関西圏における産学連携の試みの紹介を行い、情報理論が指し示すMIの今後を展望します。

### 【講演2】上田宏「量子多体計算×量子情報処理から眺める量子マテリアルズインフォマティクス」

**概要：**現代の高速電子計算機・スーパーコンピュータを活用して量子優位性を見込める量子計算・アルゴリズムを選定・高度化することは、今日急速な展開を見せる量子計算機の産業利用を促進するために必要不可欠です。「京」から「富岳」へと展開している我が国のフラッグシップ計算技術に直接関わってきている経験も踏まえて、大規模量子多体計算と Sprint-8 等の大規模実験施設が連携することで可能にしてきた近年の強相関系の動的性質解析事例を紹介しつつ、量子情報理論と絡み合う現代の量子多体系計算技術に基づくデータ駆動型イノベーション発生 of 今後を展望します。

**【備考】** どなたでも参加可。マイクとカメラをミュートにして、所属・氏名をお示し下さい。

**【世話人】** 坂井徹（兵庫県立大学大学院物質理学研究科） **【連絡先】** [sakai@spring8.or.jp](mailto:sakai@spring8.or.jp)