

社会連携研究部門

Social Cooperation Research Department

本学の制度である社会連携研究部門は、公益性の高い共通の課題について、東京大学と共同研究を実施しようとする民間機関等から受け入れる経費等を活用して設置される。本研究部門では、教育研究内容における物性研究所の自主性の確保に十分配慮しながら、教育研究の進展や人材育成の活性化により、学術の推進及び社会の発展に寄与することを目的としている。

物性研究所では、2019年4月に最初の社会連携研究部門「データ統合型材料物性研究部門」が開設された。

Social Cooperation Research Department (SCRD) is a joint research framework between the University of Tokyo and its corporate or other external partners in order to collaborate in research projects that contribute to the public interest. Although SCRCD is funded by external partners, its research and education activities aiming for academic advancement and social development are conducted in such a way that secures the University's autonomy and independence. ISSP established its first SCRCD unit, the Division of Data-Integrated Materials Science, in April 2019.

データ統合型材料物性研究部門 Division of Data-Integrated Materials Science

昨今、機械学習が社会的にも大きな注目を集めている。機械学習の物質科学研究への応用の可能性も盛んに研究されており、多くの有望な結果が報告されている。背景には、この考え方が、基礎科学の産業応用を加速させるうえでのカギとなるという期待感がある。当部門では、実験と数値計算をデータ科学的手法によって統合し、電子相関の理解に基づいて、革新的な機能を持つ材料の物性予測・探索手法を開発することを目的としている。実験結果と数値計算結果の単純な比較や実験の理論計算による解釈にとどまらず、両者を同時に用いることによって、実験、数値計算それぞれ単独ではなしえない成果を挙げることを目指している。これによって、永久磁石や超伝導などの材料探索を進めている。

Recently, machine learning has attracted social attention. The possibility of applying machine learning to material-science research is also actively studied, and many promising results have been reported. The expectation is that this idea will be the key to accelerating the industrial application of basic science. The division aims at developing methods for prediction of physical properties of materials, based on the understanding of electron correlation, by integrating experiments and numerical calculations through data-scientific approaches. While conventionally we have been comparing experimental results with numerical ones, interpreting the former by the latter, the new goal is to achieve something that cannot be done by experiment or numerical calculation alone, by using both of them simultaneously. In this way, we are searching for new materials that supports permanent magnetization, superconductivity, etc.

教授*	川島 直輝
Professor	KAWASHIMA, Naoki
特任准教授	福島 鉄也
Project Associate Professor	FUKUSHIMA, Tetsuya
特任研究員	平山 尚美
Project Researcher	HIRAYAMA, Naomi

* 所内兼務。本務は物質設計評価施設。/concurrent with Materials Design and Characterization Laboratory

福島研究室

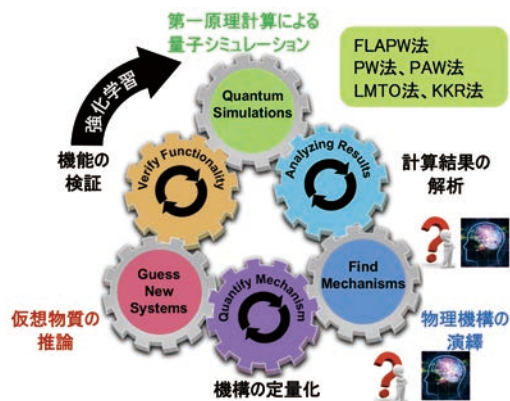
Fukushima Group



福島 鉄也
FUKUSHIMA, Tetsuya
特任准教授
Project Associate Professor

高速・大規模電子状態計算手法とデータ科学による仮想スクリーニングを組み合わせた独自のデータ駆動型マテリアルデザイン環境を開発し、次世代エレクトロニクスに資する新機能材料の探索を行っている。

マテリアルデザインは物質構造が与えられ物性機能を解明する一般的なシミュレーションの逆問題である。無限ともいえる広範囲の物質空間での系統的材料探索はほぼ不可能であり、この状況を打破するには大量の物性データの迅速な解析と効果的な利用により有用な情報や知識を取り出すデータ駆動型マテリアルデザイン（マテリアルズ・インフォマティクス）によるデザイン主導の物質開発が必要不可欠である。本研究室ではKKRグリーン関数法に基づいた第一原理電子状態計算プログラムパッケージの開発、またデータ駆動型マテリアルデザインを積極的に利用することで「機能」→「材料」へと至る逆問題を効率よく解き新機能材料（磁性材料やスピントロニクス材料）のデザインを推進している。

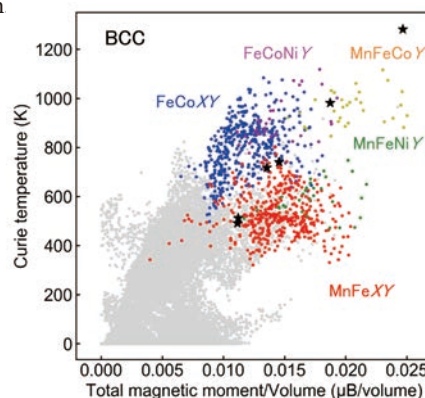


計算機マテリアルデザインエンジン (CMD[®])。CMD[®] は「量子シミュレーション」、「物理機構の演繹」、「仮想物質の推論」から成る。

Computational materials design engine (CMD[®]), which consists of “quantum simulation”, “deduction of physical mechanism”, and “guess of hypothetical materials”.

We develop and use data-driven materials design (materials informatics) which is a fusion of data science and material science to explore new functional materials realizing next-generation electronics to replace the present Si-CMOS technology.

Materials design is an inverse problem of general simulation and is actually very difficult task. Due to the developments of computer performances and numerical algorithms, nowadays one can not only analyze physical properties in real systems but also design hypothetical systems with novel functionalities, based on quantum mechanical electronic structure calculations. However, it is almost impossible to perform systematic exploration in an infinitely wide range of materials space. In order to overcome such problem, we need to perform materials exploration by materials informatics which can extract useful knowledges quickly from large-scale materials database. Our main purpose is to efficiently solve the inverse problem from “functionality” to “material” by the data-driven material design method. We are also developing the large-scale DFT calculation package “KKRnano”, where the full potential screened Korringa-Kohn-Rostoker (KKR) Green’s function method is optimized by a massively parallel linear scaling (order-N) all electron algorithm



AkaiKKR コードを利用した 4 元磁性高エントロピー合金のハイスループット自動計算。
Automatic high throughput screening of quaternary magnetic high entropy alloys by AkaiKKR code.

研究テーマ Research Subjects

1. オーダー N 遮蔽 KKR グリーン関数法に基づく大規模電子状態計算
Large-scale DFT calculations by order-N screened KKR Green’s function method
2. マテリアルズインフォマティクスによる新機能物質探索
Design of new functional materials by materials informatics
3. 計算機マテリアルデザイン
Computational materials design
4. 不規則系ナノ構造物質の電子状態と磁気特性
Electronic structure and magnetism in substitutional and structural disordered nano-materials