

講義題目	マテリアルズ・インフォマティクスの基礎と応用		
担当講師	第1, 2回 田村亮 第3, 4回 福島鉄也 第5, 6回 熊谷悠 第7, 8回 南谷英美	教室	Zoom を利用したオンライン講義
定員	120 名程度	言語	日本語
単位数	なし	授業の形式	講義および議論
開講日時 2022 年 9 月開講 (90 分 × 8 回)	9 月 9 日(金) : 第 1 回 14:00-15:30、第 2 回 15:45-17:15 9 月 16 日(金) : 第 3 回 14:00-15:30、第 4 回 15:45-17:15 9 月 22 日(木) : 第 5 回 14:00-15:30、第 6 回 15:45-17:15 9 月 30 日(金) : 第 7 回 14:00-15:30、第 8 回 15:45-17:15		
講義概要	<p>第一原理計算やマテリアルズ・インフォマティクスを活用し、有用な性質を持つ新規材料を実験に先立ってデザインする研究が盛んである。本講義では実践的に物質デザインに活用できる高度な第一原理計算やマテリアルズ・インフォマティクスの基礎と応用を体系的に学ぶ機会を提供する。</p> <p>第一回と第二回ではベイズ最適化を代表とするブラックボックス最適化の基礎・応用と機械学習によるシミュレーションの高度化を解説する。また第三回から第八回の講義では磁性材料、半導体材料、熱物性に焦点をあてて適切な第一原理手法とマテリアルズ・インフォマティクスと連携した高度な活用事例を解説する。</p>		
講義内容	<p>【第1回】ブラックボックス最適化: 機械学習の力を使って、次に行うべき実験・シミュレーションを適切に提案できる手法が、ベイズ最適化を代表としたブラックボックス最適化であり、ブラックボックス最適化の基礎・応用事例を解説する。</p> <p>【第2回】シミュレーション技術と機械学習: 物性科学・材料科学におけるシミュレーションの高度化を機械学習により実現した事例を紹介する。具体的には、有効ハミルトニアン推定、MD シミュレーション解析を題材とする。</p> <p>【第3回】第一原理電子状態計算: 密度汎関数理論、KKR グリーン関数法、不規則系材料、シングルサイト近似</p> <p>【第4回】磁性材料の探索: 磁性の基礎、電子状態と磁性、計算物性データベース、スパコンを用いた物性データ創出</p> <p>【第5回】第一原理計算の材料科学への応用 I: 表面、光吸収係数、点欠陥特性などの半導体特性への応用</p> <p>【第6回】第一原理計算の材料科学への応用 II: ハイスループット計算と計算材料データベースの構築、全自動計算の試みと課題</p> <p>【第7回】格子物性の第一原理計算: フォノンの物理、電子フォノン相互作用、密度汎関数摂動理論、物性予測への応用</p> <p>【第8回】熱物性と第一原理計算: 格子熱伝導率と非調和効果、ボルツマン方程式に基づいた第一原理計算、機械学習ポテンシャルの応用、乱れた系での格子熱伝導率</p>		
受講対象	1)「高度人材育成事業」にご入会の企業(=連携機関)に所属の方(有料) 2)学部学生、修士・博士課程学生、大学・国立研究機関等に所属する研究者等(無料)		
履修にあたり必要な知識	学部 4 年生程度の量子力学及び固体物理学の知識		
履修上の注意	受講生が定員を大幅に上回る場合は、1)連携機関としてお申込みの企業の方、2)博士課程学生、3)修士課程学生および学部生、4)大学・国立研究機関等に所属する研究者等の優先順位とする。		
講義資料	指定の URL からダウンロード		
参考書	物質の電子状態 上・下, R.M. マーチン(著), 寺倉清之 (編集), 寺倉郁子 (編集), 善甫康成 (編集)		