

第36期 CAMM

Computer Aided Materials and Molecular Design Forum

コンピュータによる材料開発・物質設計を考える会

2022年10月7日(金) スタート
新規メンバー募集・体験参加受付中

産・官・学の枠を越え、異業種・異分野が集う 『使える計算科学』実現のための横断的共同研究組織

コンピュータを使って物質を予測・設計する「計算科学」は、「理論」「実験」に次ぐ第三の科学技術として更なる重要性を増していますが、現実の材料開発・物質設計に結実させるには、「モノづくり」に発展させる研究者としてのセンスも問われています。CAMMフォーラムは国内の計算科学の歴史と歩みを共にするべく1987年に発足、産・官・学の第一線研究者の協力支援のもとに共同研究・情報交換・人材育成の場として発展して参りました。学問領域や組織を越えての多彩な人材による知恵・情報・意見の交流は、『使える計算科学』実現のためのアイデアとノウハウを掴む貴重なきっかけになります。計算科学や材料開発・材料設計に興味をお持ちの、熱意ある研究者のご参加をお待ちしております。

*計算科学初心者も歓迎です。

第1回例会 オープンフォーラム

日時:2022年10月7日(金) / 開催方法:オンライン(Zoom)

* 入会検討中の方は、無料にて体験参加を承ります *

10:00-12:00 【分科会】今年期間研究テーマの設定 ※参加自由、新メンバーのご提案も大歓迎
13:15-17:30 【本例会】基調講演・オリエンテーション

《基調講演》

「現代の錬金術:多元素ナノ合金の開発と応用展開」

京都大学 大学院理学研究科 化学専攻 固体物性化学分科 教授 北川 宏 氏

固溶型合金は電子状態の連続制御が可能であるが二元系合金の3割弱であり、7割強は分離型合金である。あらゆる元素を自在に原子混合して操る技術を達成できれば、任意の元素の性能を他の元素の組み合わせで凌駕することが可能となる。

独自に開発した連続フロー型ソルボサーマル非平衡ナノ合金プロセスにより、任意の元素を任意の割合で混ぜる多元素ナノ合金の開発が実現化されようとしている。

材料創製インフォマティクスとハイスループットスクリーニングにより、未踏探索空間における革新的物質の開発について紹介する。

●開催概要

◆期間： 2022年10月7日(金)～2023年9月4日(金) 全12回(通常例会10回、合宿研究会2回)

10月	2022/10/7(金)	2月	2023/2/3(金)	6月	2023/6/2(金)
11月	2022/11/11(金)	3月	2023/3/3(金)	7月	2023/7/6(木)～7(金)あるいは7/7(金)のみ
12月	2022/12/2(金)	4月	2023/4/7(金)	8月	2023/8/4(金)
1月	2023/1/6(金)	5月	2022/5/12(金)	9月	2023/9/1(金)

8月、9月は日程変更の可能性もあります

◆例会会場： 都内会議室あるいはオンライン(Zoom)開催

◆参加対象： 計算科学・材料開発に携わる研究開発担当者・マネージャー ※役職、計算科学の経験は問いません

●例会の構成

《分科会 2時間 (10:00～12:00)》

※参加自由、 計算科学初心者歓迎

メンバー自主運営による分科会を毎例会の午前中に開催。成果は出版や学会などで積極的に公開しています。

前期分科会研究テーマ

■計算物理分科会■

参加メンバー

電力中央研究所、太陽誘電、京セラリタケカンパニーリミテド、産総研、東ソーモルシス、日本大学、住友金属鉱山計算科学振興財団、住友化学、ダイキン

・物性計算(電子状態、分子動力学)

Shining MD Project
FPSEID21 公開準備進捗報告

・MMI (みんなでマテリアルズ・インフォマティクス)

Python の便利なツールの紹介
第一原理計算 DB を用いた機械特性の予測
画像を使った物性予測、画像の前処理の方法
パーシステントホモロジー

・計算インフォマティクス

・コンピュータ技術
富岳、GPU、VPU、TPU Google Colabo
・量子コンピュータ
量子化学コードプロジェクト

■計算化学応用分科会■

参加メンバー

クレハ、DIC、コンプレックス産総研、東芝、ブリヂストンリコー、住友ゴム、ADEKA大阪ガスケミカル

・続・続・DMRG-CASSCF のお話し計算

・GAMESS と Gaussian の比較

・AlphaFold

・転移学習

・機械学習ポテンシャル

■計算化学機能比較分科会 ■

参加メンバー

関西ペイント、ブリヂストン、東ソークロスアビリティ、ナミックス、東レシステム計画研究所、横浜ゴムクレハ ※期中まで三井化学、ADEKA

・機械学習

強化学習 graphINVENT
評価関数の最適化、moflow
PHYSBO

・反応予測(継続)

経路予測の検証
アニオン、カチオンでの動作確認

・Julia 勉強会

・富岳利用
高分子MD

※研究テーマは新メンバーの意見も取り入れながら、毎年10月に新たに決定します。

受賞

計算物理分科会での10年間の成果、2001年度 日本化学プログラム交換機構(JCPE)優秀プログラム賞受賞

第一原理分子動力学汎用プログラム「CAMP-Atami」

14社15名による企業や組織の枠を越えての横断的研究組織は、基礎研究のプログラム開発において非常にユニークである点も評価されました。

出版

計算化学応用分科会21社22名による3年間の成果

「分子軌道法で見る有機反応—MOPAC演習」を丸善より出版(1997年) 監修: 堀 憲次氏・田辺和俊氏

大学の参考書などに活用され、現在までに1,000冊以上販売されています。

発表

2014年10月16日(木) / 於: 東京・タワーホール船堀

日本化学会秋季事業 第4回CSJ化学フェスタ「フェスタ企画—使える理論・情報・計算化学」にて

『CAMMフォーラムの取り組み ～ 所属の枠を超えた課題解決ネットワーク ～』を発表

《本例会 3時間 (13:15～16:30)》

計算物理、計算化学、計算バイオ各分野から多彩なゲストを毎回招聘し、また各参加企業の計算科学の実情を紹介しあい「シミュレーション」だけに終わらぬ、モノづくり直結した計算科学を実践するヒントを掴みます。 ※前期ゲストは右頁ご参照 →

《合宿例会 一泊二日 年1回(7月)》 ※新型コロナ感染症の状況によって変更があります

・分科会の時間を通常例会より多くとり(約10時間)、研究のより一層の推進を図る

・パネルディスカッションや特別講演で幅広い知識や情報を吸収し、メンバー相互の本音に基づいた意見交換を行い、交流と親睦を深める

(1)メンバー各人には、プログラム・マニュアルなど情報を提供、共有の財産として利用することができます。

(2)活動報告、トピックス、会員情報などを機関誌「CAMM NEWS」として編集・発行しています。

(3)専用ウェブサイト: <http://www.camm.bri.or.jp/camm/>より、例会情報や配布資料のダウンロードができます。

●研究指導協力体制

幹事	高田 章 氏	元 AGC(株)	中央研究所共通基盤センター 主席研究員	
	小口 多美夫 氏	大阪大学	スピントロニクス学術連携研究教育センター デザイン系部門長/特任教授	
	伊藤 聡 氏	科学科学振興財団	技術顧問	
	長嶋 雲兵 氏	横浜市立大学大学院	ナノバイオサイエンス科学研究科 客員教授	
	松宮 徹 氏	大阪電気通信大学	監事(元 新日本製鐵(株) フェロー)	
	石田 雅也 氏	住友化学(株)	先端材料開発研究所 技術室 兼 デジタル革新部	
	大沼 敏治 氏	電力中央研究所	材料科学研究所 構造材料領域 上席研究員	
	研究企画協力委員	田子 精男 氏	元 金沢大学 大学院	自然科学研究科 教授
	田辺 和俊 氏	元(独)産業技術総合研究所	計算科学研究部門 総括研究員	
	北村 一泰 氏	摂南大学	薬学部 客員教授 (元 大正製薬 取締役医薬研究開発担当)	
中馬 寛 氏	徳島大学	名誉教授		
本田 隆 氏	日本ゼオン(株)	総合開発センター 基盤技術研究室		
大西 楷平 氏	元 日本電気(株)	基礎・環境研究所 フェロー		
善甫 康成 氏	法政大学	情報科学部 デジタルメディア学科情報科学研究科 教授		
中村 振一郎 氏	熊本大学	大学院先端機構 特任教授		
菊池 真美 氏	(株)クレハ	CSR 部長(前・医薬品事業開発部長)		
研究会顧問	堂山 昌男 氏	東京大学	名誉教授	

●前期(第35期 2021年10月~2022年9月)本例会 研究経過

10月	■計算化学を使って有用な天然物を探索する~電子状態インフォマティクスによる挑戦 杉本 学 氏 [熊本大学大学院 先端科学研究部 准教授] ◆オリエンテーション
11月	■「計算化学を用いた生体機能解析と創薬への展開」 重田 育照 氏 [筑波大学 計算科学研究センター 教授] ■「分子シミュレーションを用いたフッ素ポリマーの界面自由エネルギー予測技術の開発」 北畑 雅弘 氏 [東レ株式会社 先端材料研究所 研究員]
12月	■「最近の研究から:地球物質工学と量子熱力学」 飯高 敏晃 氏 [理化学研究所 計算科学研究センター和光分室 離散事象シミュレーション研究チーム 専任研究員]
1月	■「金属結晶材料の格子欠陥と機械的性質に関する原子シミュレーション」 下川 智嗣 氏 [金沢大学 理工研究域 機械工学系 教授] ■「有機無機界面のシミュレーション:水分による接着力の低下,プロトン移動による劣化,極圧添加剤の高圧化での分解」 尾形 修司 氏 [名古屋工業大学 大学院工学研究科 物理工学専攻 教授]
2月	■「窒化物半導体エピタキシーにおける不純物混入機構の理論解析」 寒川 義裕 氏 [九州大学 応用力学研究所 新エネルギー力学部門部門長/教授] ■「欠陥ダイナミクスに基づく力学機能評価:複雑な合金系への応用」 都留 智仁 氏 [日本原子力研究開発機構 原子力基礎工学研究センター 燃料・材料工学ディビジョン 照射材料工学研究グループ]
3月	■「低精度スーパーコンピューティング~AI計算の実用化によって変貌するHPC」 伊藤 智義 氏 [千葉大学 大学院工学研究院 教授]
4月	■「液液界面の構造ゆらぎとその機能の分子科学」 森田 明弘 氏 [東北大学 大学院 理学研究科 化学専攻 計算分子科学研究室 教授] ■「実時間時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理計算」 矢花 一浩 氏 [筑波大学 計算科学研究センター 教授]
5月	■「光関係(蛍光体,太陽電池)の材料開発における第一原理計算の適用」 山本 知之 氏 [早稲田大学 理工学術院 基幹理工学部 基幹理工学研究科 材料科学専攻 教授] ■「量子論に基づくデバイスシミュレータの進展」 森 伸也 氏 [大阪大学大学院 工学研究科電気電子情報通信工学専攻 教授]
6月	■「材料計算手法開発の最前線 - マテリアルズ・ドックと量子コンピュータの展開」 松下 雄一郎 氏 [東京工業大学 科学技術創成研究院 フロンティア材料研究所 特任准教授] ■「区分的に滑らかな可展面のガウス曲率と体積最大ピロー型ボックスへの応用」 小磯 深幸 氏 [九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所 名誉教授]
7月	■「電子状態計算の小技いろいろ」 小口 多美夫 氏 [大阪大学 基礎工学研究科 附属スピントロニクスセンター学術連携研究教育センター 特任教授]
8月	■「機械学習を用いたスピントロニクス材料の理論設計」 三浦 良雄 氏 [京都工芸繊維大学 電気電子工学系 准教授] ■「計算化学の話題~科学コミュニケーション, AlphaFold など」 本間 善夫 氏 [Web サイト「生活環境化学の部屋(ecosci)主宰]
9月	■分科会年間活動報告会

前期(第35期)参加メンバー

※順不同・敬称略

元 AGC(株)	(中央研究所主幹研究員)	高田 章	計算科学振興財団	共用専門員兼 研究部門 主任研究員	西川 武志
大阪大学	スピントロニクス学術連携研究教育センター デザイン系部門長/特任教授	小口多美夫	コンフレックス(株)	代表取締役社長	大田 一男
(株)クレハ	CSR 副部長 (前・医薬品事業開発部長)	菊池 真美	(独)産業技術総合研究所	機能材料コンピュータショナルデザイン研究センター 上級主任研究員	宮本 良之
横浜市立大学大学院	ナノバイオサイエンス科学研究科 客員教授	長嶋 雲兵	(独)産業技術総合研究所	機能材料コンピュータショナルデザイン研究センター	石田 豊和
元 新日本製鐵(株)	(技術開発本部フェロー)	松宮 徹	(株)システム計画研究所	事業本部第2セグメント エキスパート	山本 真司
住友化学(株)	先端材料開発研究所 技術室 兼 デジタル革新部	石田 雅也	住友金属鉱山(株)	技術本部数理解析技術部 CAE グループ	吉本 有輝
電力中央研究所	材料科学研究所 構造材料領域 上席研究員	大沼 敏治	住友ゴム工業(株)	研究開発本部分析センター	竹内 宗孝
計算科学振興財団	技術顧問	伊藤 聡	ダイキン工業(株)	テクノロジー・イノベーションセンター	大森 遼
元 金沢大学	(大学院自然科学科学研究科教授)	田子 精男	太陽誘電(株)	R&D センター-材料開発部	岩崎誉志紀
元 (独)産業技術総合研究所	(計算科学研究部門総括研究員)	田辺 和俊	DIC(株)	総合研究所基盤技術研究センター 計算科学研究室	立川 豊
摂南大学	薬学部 客員教授 (元 大正製薬 取締役医薬研究開発担当)	北村 一泰	電力中央研究所	材料科学研究所材料モデリンググループ	別役 潔
徳島大学	名誉教授	中馬 寛	(株)東芝	研究開発センター有機材料ラボラトリー 研究主務	吉田 孝史
日本ゼオン(株)	総合開発センター基盤技術研究室	本田 隆	東ソー(株)	アドバンストマテリアル研究所 主任研究員	秋池 良
元 日本電気(株)	(基礎・環境研究所フェロー)	大西 檜平	東ソー(株)	アドバンストマテリアル研究所 主任研究員	服部 一希
法政大学	情報科学部デジタルメディア学科 情報科学研究科教授	善甫 康成	東レ(株)	先端材料研究所 主席研究員	茂本 勇
熊本大学	大学院先端機構 特任教授	中村振一郎	ナミックス(株)	技術開発本部 開発グループ 要素技術チーム	新井 史紀
東京大学	工学部名誉教授	堂山 昌男	日本大学	医学部一般教育系化学分野 准教授	小松徳太郎
ADEKA(株)	研究企画部 研究企画室	遠山 薫樹	(株)リタケカンパニーリミテド	開発・技術本部研究開発センター 粉体デザイングループ 参事	鈴木 毅裕
ADEKA(株)	研究企画部 研究企画室	横田 謙介	(株)ブリヂストン	デジタルエンジニアリング本部シミュレーション技術研究部 材料シミュレーション技術研究ユニット	佐藤 弘一
大阪ガスケミカル(株)	フロンティア マテリアル研究所 執行役員 所長	長嶋 太一	(株)ブリヂストン	デジタルエンジニアリング本部シミュレーション技術研究部 材料シミュレーション技術研究ユニット	大熊 孝広
関西ペイント(株)	R&D 本部基礎研究所第2研究部	長野 千尋	三井化学(株)	研究開発本部生産技術研究所 先端解析グループ 研究員	中野 隆志
京セラ(株)	先進マテリアルデバイス研究所 基盤技術研究部	田中 政博	(株)モルシス	マテリアルサイエンス部	藤原 敦志
(株)クレハ	デジタル化推進プロジェクト 技術・製造グループ	稲葉 祐策	横浜ゴム(株)	研究本部 小石研究室	古渡 直哉
(株)クロスアピリティ	リサーチフェロー	石村 和也	(株)リコー	先端技術研究所共通基盤センター 第二解析技術室材料特性解析グループ	左部 顕芳

参加要領

※事業コード220029

<体験参加について> 第1回例会(10/7)は、入会を検討中の方にも無料でご参加いただけます。

- ◆参加料 : 1名につき 正会員 297,000円(本体価格 270,000円) 一般 330,000円(本体価格 300,000円)
 - ・合宿参加費(1回につき3万円~3万5千円程度)や特別懇親会費などは別途実費を申し受けます。
 - ・分割払いなども承ります。お気軽にご相談ください。
 - ・「正会員」とは、一般社団法人 企業研究会に法人会員として登録いただいている企業です。

◆お申込方法 : 以下 当会ホームページのお申込フォームより入力ください。体験参加も同様です。

- * ご記入いただいた個人情報、CAMMに関する事務連絡および弊会主催事業のご案内に利用させていただきます。ご了承ください。
- * 著しく本フォーラムの趣旨に外れる言動をされる方については、幹事会の判断で退会いただく場合がございます。

◆担当 : 一般社団法人 企業研究会 CAMM担当 薄井玲子 e-mail: usui@bri. or. jp

〒110-0015 東京都台東区東上野1-13-7 ハナサザビル phone:080-1393-5599 / 03-5834-3920