



## 第6回放射光産業利用支援講座・計算科学連携セミナー

# マテリアルインフォマティクスのための 放射光科学と計算科学の融合技術 ご案内

本講座も今回を持ちまして第6回目を数えるに至りました。受講者ならびに関係者の皆様の温かい御支援に対しまして、心から篤く御礼申し上げます。  
今回は、従来の放射光科学と計算科学との連携解析に加え、最近のホットな話題として注目を浴びているデータ駆動科学とマテリアルインフォマティクスに関する特別講演を企画いたしました。皆様の積極的なご参加をお待ちしております。  
(講演の概要については裏面をご覧ください。)

**開催日時** ▶ 平成30年 3月16日 (金)  
13:00~17:50 (交流会 17:55~19:30)

**開催場所** ▶ 兵庫県立大学神戸情報科学キャンパス  
7階 大講義室  
(〒650-0047  
兵庫県神戸市中央区港島南町7丁目1-28)

**参加費** ▶ 無料 (但し交流会は別途3,000円徴収)

**定員** ▶ 100名

主催

兵庫県立大学 産学連携・研究推進機構  
兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科  
兵庫県企画県民部科学振興課

後援

(公社)兵庫工業会



参加希望の方は下の欄にご記入の上、郵送、FAXまたはE-mailにて  
お申し込みをお願い致します。(3月10日締切)

セミナー参加申込書	氏名	組織名
	連絡先住所 〒	所属・職位
	連絡先TEL	連絡先E-mail
	交流会(会費3,000円)  参加・不参加 (いずれかに○)	その他連絡事項

申込先

- E-mail / haruhiro\_ibata@hq.u-hyogo.ac.jp (お問合せはこちらへ)
- FAX / 079-283-4561
- 郵送 / 〒670-0962 姫路市南駅前町123 じばさんびる3F  
兵庫県立大学産学連携・研究推進機構事務局

# プログラム

司会: 兵庫県立大学 産学連携・研究推進機構 井端 治廣 CD

開会挨拶 13:00~13:05

兵庫県立大学 産学連携・研究推進機構 機構長  
山崎 徹

講演 I 13:05~14:05

熊本大学 パルスパワー科学研究所  
赤井 一郎 教授

## 「先端物性計測におけるデータ駆動科学」

機能性材料の電子状態や構造を解明し物理的本質を探る物性研究では、放射光や可視光を用いて分光計測が行われる。一方現象のダイナミクス研究のために、コヒーレントな放射光やフェムト秒レーザー光を用いた時系列計測が行われる。このような先端計測において、データ駆動科学は重要な役割を担う。講演では、光物性計測や放射光計測で得られる実データに、ベイズ分光やスパースモデリングを適用して、従来解析法の限界を突破する例を紹介する。

講演 II 14:05~14:55

大阪大学大学院 工学研究科  
高橋 幸生 准教授

## 「X線タイコグラフィによるナノ構造可視化の最前線」

X線タイコグラフィは、コヒーレントX線を利用した走査型イメージング技術であり、“拡がった試料”のナノ組織構造の観察を得意とする。2007年に位相回復計算に基づくX線タイコグラフィが実証されて以来、その計測・解析技術は著しく進展している。特に、コンピュータ断層撮影による三次元イメージングや分光との融合による磁気・化学イメージングの展開が目覚ましい。本講演では、放射光を用いたX線タイコグラフィについて、近年の技術的な進展と応用研究について紹介する。

## — 休憩 —

司会: 兵庫県立大学大学院 シミュレーション学研究科 鷲津 仁志 教授

講演 III 15:05~15:55

理化学研究所 放射光科学総合研究センターXFEL研究開発部門  
ビームライン研究開発グループ イメージング開発チーム  
南後 恵理子 研究員

## 「X線自由電子レーザーで捉えたタンパク質リアルタイム動画」

タンパク質が機能に伴い素早く構造変化を起こす瞬間を、原子の動きまで詳細に捉えることは長い間挑戦的な課題であった。最近になって、X線自由電子レーザー(XFEL)が利用できるようになり、10フェムト秒よりも短い超高輝度X線パルスによりタンパク質が構造変化する過程をリアルタイムで測定することが可能となった。本講演では、XFEL施設SACLAで捉えたタンパク質が反応する様子のリアルタイム動画とその技術開発についてご紹介する。

講演 IV 15:55~16:45

住友ベークライト株式会社 コーポレートエンジニアリングセンター  
課長代理 首藤 靖幸 様

## 「X線・中性子散乱とMDシミュレーションを用いたフェノール樹脂の構造—物性相関解析」

フェノール樹脂に代表される熱硬化性樹脂は、共有結合を介した緻密な三次元網目構造を形成し、高い熱・機械特性、耐薬品性、耐電気絶縁性を示す。一方で硬化後の樹脂は溶剤不溶・不融であるために構造分析手段が限定され、その架橋構造と物性発現メカニズムは未だに不明瞭の点が多い。本報告ではX線・中性子を用いた散乱実験による架橋網目の構造分析と、MDシミュレーションによる構造・物性相関解析の事例について紹介する。

講演 V 16:45~17:45

物質・材料研究機構 情報統合型物質・材料研究拠点  
拠点長 伊藤 聡 様

## 「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (MI<sup>2</sup>I) の概要」

近年、従来の物性科学とは異なるアプローチとしてデータ駆動型の材料科学が注目されている。マテリアルズインフォマティクスと呼ばれるこの分野では物性科学、情報工学双方のアプローチが必要であり、また、多くの材料・プロセスデータが必要である。この分野を切り開くために、2015年からNIMSをハブ拠点として「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (MI<sup>2</sup>I)」というJST事業が進められている。本講演ではその概要と今後について紹介する。

閉会挨拶 17:45~17:50

兵庫県立大学 産学連携・研究推進機構副機構長  
秋吉 一郎

交流会 17:55~19:30

計算科学センタービル1階 レストラン・売店 FOCUS