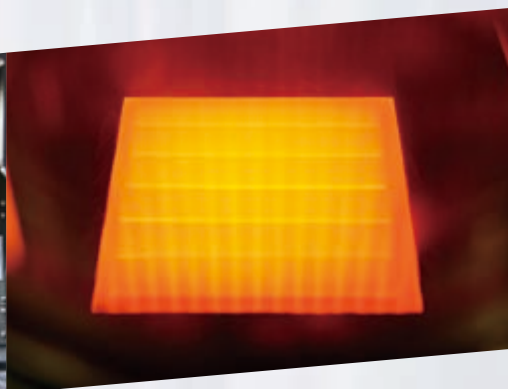


Creation of Materials by Super-Thermal Field

www.mat.eng.osaka-u.ac.jp/super3dp/



超温度場材料創成学

文部科学省 科学研究費補助金 学術変革領域研究 (A) 令和3~7年



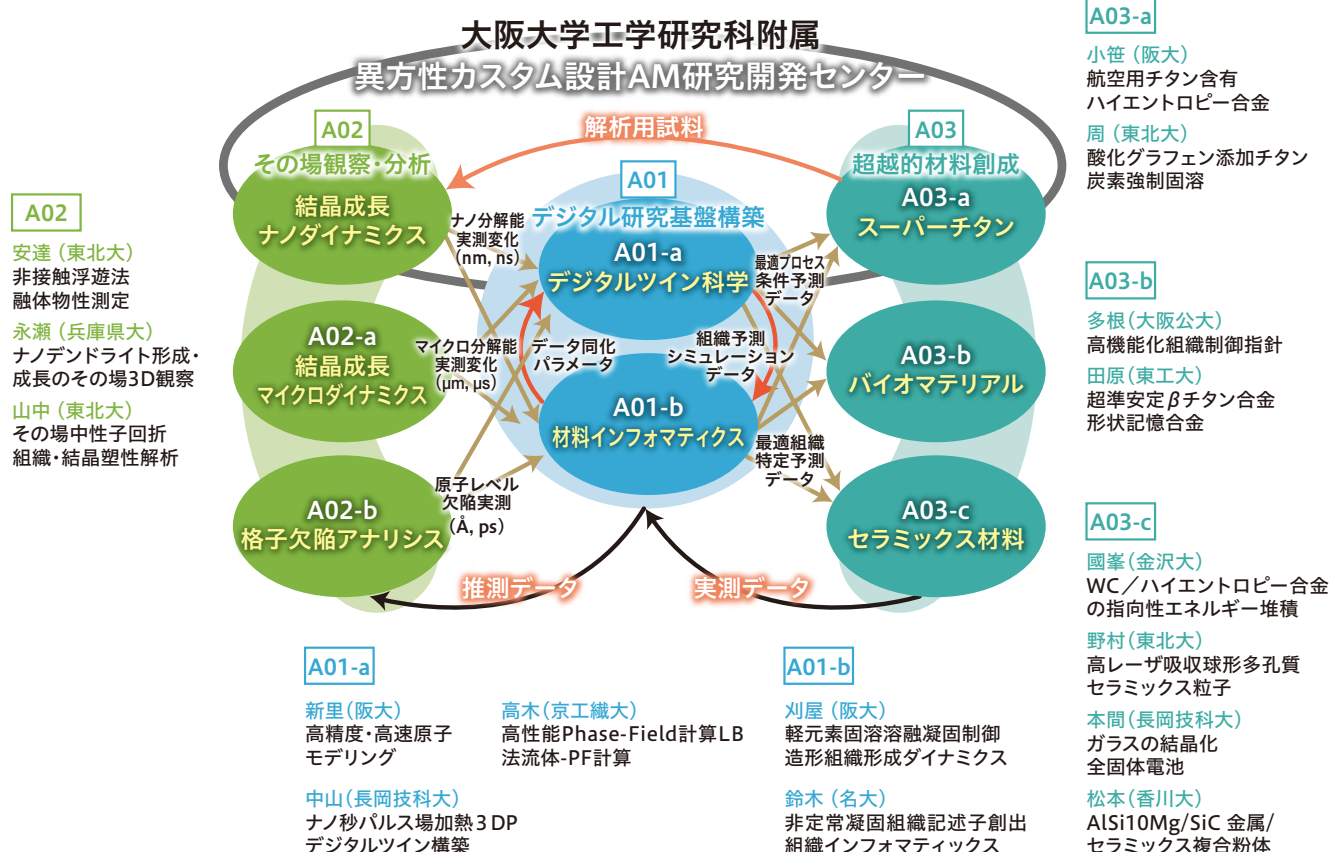
ごあいさつ

本領域「超温度場材料創成学」が研究活動を開始して1年が経ちました。初年度には、キックオフミーティング、隔週の定期ミーティング、公募研究説明会、産学連携異分野シンポジウム、年度末報告会などすべてのイベントをオンラインで開催しておりました。令和4年度になり、新型コロナウイルス感染拡大防止対策を講じて対面でのイベントが多く開催されるようになり、本領域では8月10日に公募研究キックオフミーティングを大阪大学銀杏会館にてハイブリッド形式で開催しました。昨年11月24日から今年の1月28日の間に応募された公募研究から、デジタル研究基盤(A01)関係5名、その場観察・精密分析(A02)関係3名、超越的材料創成(A03)関係8名、総勢16名の公募研究者が6月16日に内定を受け、7月1日から各公募研究を開始いたしました。学位取得後3年の若手から、20年以上の経験豊

富な研究者まで、3Dプリントに初めて関わる研究者から、すでに3DPの研究で多くの業績を挙げている研究者まで、多様な背景をもつ公募研究者が参画しました。各々の研究者が得意とする手法を取り入れ、1000万K/m以上の温度勾配と定義した「超温度場」における結晶成長に着目した学術の変革と新材料創成の可能性について議論して、計画研究と連携することにより、「超温度場材料創成学」の構築という共通の目標に向けた新しい研究が始まりました。本ニュースレターでは、公募研究者および公募研究を紹介するとともに、関係学生を含む若手研究者のスキルアップと交流を目的として対面およびハイブリッドで開催した夏の学校など本領域の最近の活動ならびに、今後の活動について紹介いたします。

超温度場材料創成学
領域代表者
小泉 雄一郎

研究体制



A01 超温度場3D プリント解析のための 高精度・高速原子モデリング手法の構築

a班

新里 秀平

大阪大学・基礎工学研究科・助教



超温度場における合金材料の溶融・凝固プロセスと、それに伴う凝固組織形成プロセスを原子スケールから解析するために、加速分子動力学法による原子拡散過程解析、モンテカルロ法による平衡状態の予測、動的モンテカルロ法による拡散プロセス解析を組み合わせた加速原子モデリングのフレームワークを構築し、絶対安定における結晶成長プロセスやナノ固体材料表面におけるマランゴ

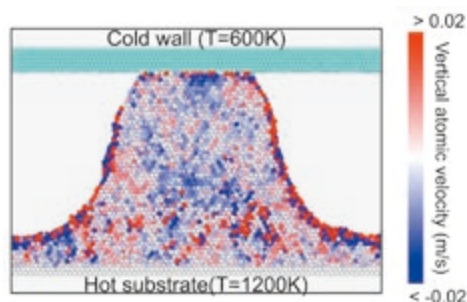
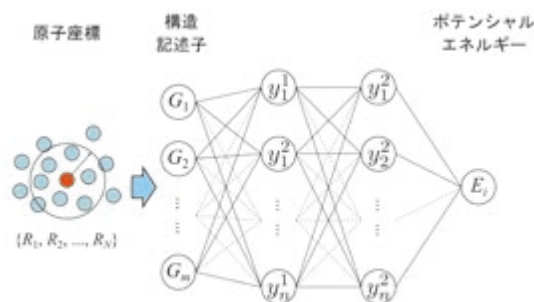


図1 超温度場下の固体マランゴニ対流に関する原子シミュレーション

ニ対流など、超温度場下での界面・表面での原子拡散を予測するモデルの構築を目指します。これに加えて、機械学習を援用して第一原理電子状態計算の精度と計算コストを両立した原子間相互作用場を構築することで、実材料の超温度場における結晶・組織成長プロセスを高精度に解析することを可能とします。



第一原理計算の原子座標とエネルギーの対応関係を学習させることにより高精度かつ低コストな原子間相互作用場を構築

図2 機械学習によるニューラルネットワーク原子間相互作用場

A01 AM 組織制御のための 高性能 phase-field 計算法の構築

a班

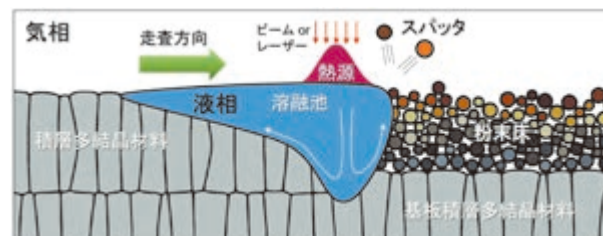
高木 知弘

京都工芸繊維大学・機械工学系・教授



付加製造 (additive manufacturing, AM) における材料組織制御のためのデジタルツイン構築に向けて数値計算法の構築が急務である。多くの数値計算による研究が行われているが、AM プロセスの現象一つ一つを再現したものも多く、全現象を統一して表現した研究は行われていない。本研究では、金属 AM の粉末床溶融結合方式を対象とし、粉末床形成、粉末溶融、粉末運動、溶融池内液相流動、多結晶凝固、凝固後の粒成長を一貫して表現可能な phase-field モデルと、GPU スパコンによる高性能計算法を構築し、金属 AM の組織予測計算技術を世界最高水準に押し上げることを目的とする。ただし、デンドライトやセルなどの凝固形態は取り扱わず結晶粒スケールを対象とし、AM プロセスのフレームワーク構築をターゲットとする。この研究によって、当該研究領域の実験観察と数

値計算にデータサイエンスを融合し、AM のデジタルツイン構築を後押しし、日本の AM 技術向上に貢献したいと考えている。



本研究で表現しようとする金属 AM のイメージ

A01 ナノ秒パルス場加熱型3次元プリンターによるデジタルツイン科学の開拓

a班

中山 忠親

長岡技術科学大学・工学研究科・教授



SiC や GaN の半導体デバイスが実用化することにより、ナノ秒オーダーで駆動する高電圧・高電流対応のスイッチングデバイスが開発されている。本研究グループでは独自の回路設計に基づき、ナノ秒パルス場の創出とそれを用いた応用研究を行っている。本研究においては、大電流ナノ秒パルス電源を用いることで金属に大電流を導入し、そのジュール熱による自己発熱現象を活用することで超温度場を実現する。このような手法を用いることで、電気制御により多様な加熱プロファイルの実現が可能となることから、冷却後に得られる金属内部の構造や組織制御をより精緻に行うことが期待できる。これらのプロセスデータ、材料データを融合させることにより、材料科学の分野におけるデジタルツイン科学を開拓し、その優位性を検証していく。

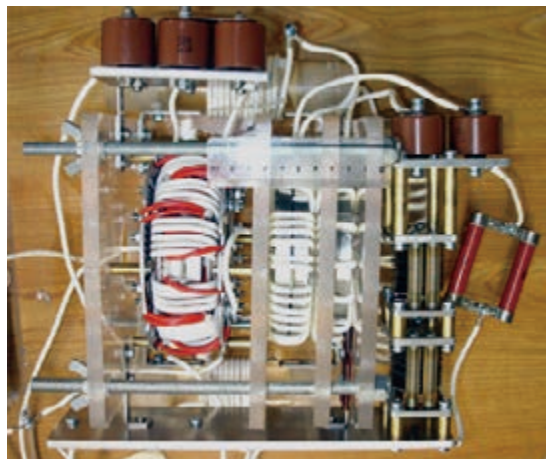


図 試作中のナノ秒パルス電源のイメージ

A01 軽元素固溶による粉末の溶融・凝固特性制御と造形組織形成ダイナミクス の解明

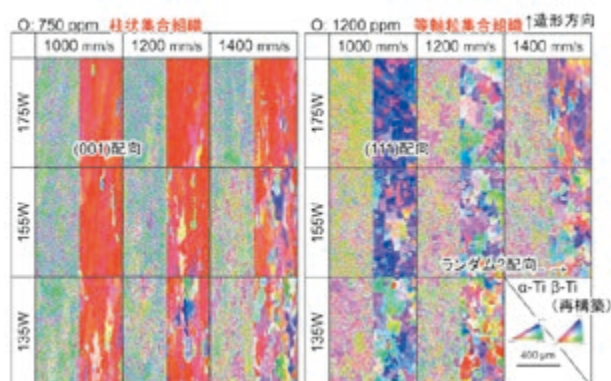
b班

刈屋 翔太

大阪大学・接合科学研究所・助教



付加製造においては原料に比表面積の大きい粉末を使用するため、酸化被膜由来の酸素成分の混入は不可避である。この酸素成分が積層造形体の組織形成に及ぼす影響を調査したところ、酸素成分の増加に伴って連続的な単結晶状柱状集合組織から不連続な集合組織へと変化する他、高エネルギー密度領域においては、 $\langle 001 \rangle$ 配向集合組織から $\langle 111 \rangle$ 配向集合組織へと変化することを明らかにした。この要因として固液共存相の安定化やレーザー吸収率変化等による溶融池形状の変化、拡散速度の大きい侵入固溶元素の増加に伴う凝固の不安定化等、複数の要素が考えられる。そこで、人工ニューラルネットワークに代表される機械学習を取り入れた相関解析や敵対生成ネットワークやシリアルセクショニング EBSD を用いた三次元組織解析により、酸素成分がこのような組織変化をもたらすメカニズムを明らかにする。



酸素量と Ti64 積層造形合金の組織の関係

A01 超温度場の非定常凝固が生み出す不均一組織記述子の創出

b班

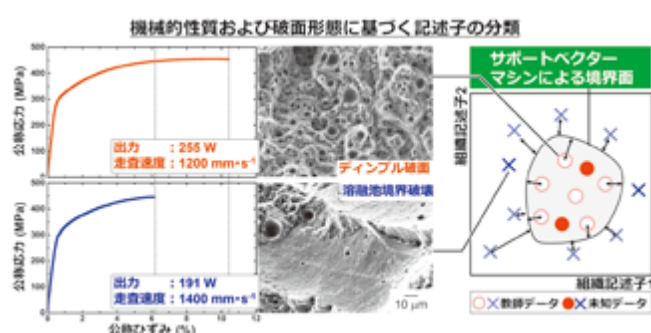
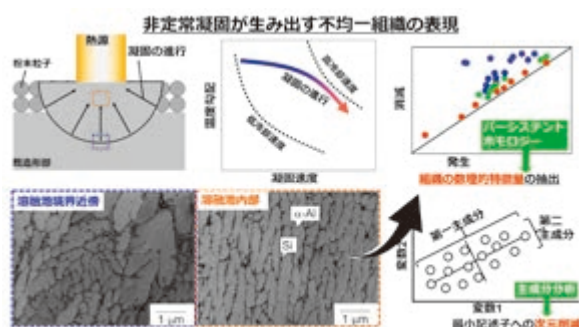
鈴木 飛鳥

名古屋大学・工学研究科・助教



粉末床溶融結合法による 3D プリントでは、造形中のレーザや電子ビームを熱源とする局所加熱により、超温度場を有する半円柱状の溶融池が形成され、その中で時々刻々と凝固条件（温度勾配・凝固速度）が変化しながら、急速な凝固が進行する。この非定常凝固は、溶融池内部に不均一な組織を生み出し、造形体の機械的性質に影響を与えることが知られている。本研究では、この不均一な

組織の記述子を数理表現とデータ科学を用いて創出する。具体的には、Al-Si 合金積層造形体の不均一組織をパーシステントホモロジーと主成分分析により解析し、組織の記述子を得る。この組織の記述子を機械的性質および破面形態をもとにサポートベクターマシンにより分類し、機械的性質に影響を及ぼす不均一組織の記述子を創出する。



超温度場下の結晶成長のその場観察・精密分析

A02 非接触浮遊法を用いた広温度範囲での高精度融液熱物性測定

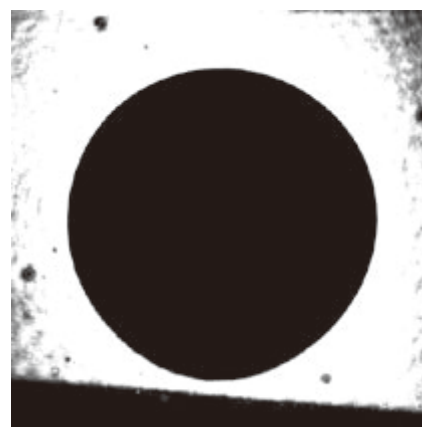
安達 正芳

東北大学・多元物質科学研究所・講師



超温度場 3DP 研究領域では、局所加熱で発生する超温度場での溶融・凝固における特異な結晶成長メカニズムをその場観察およびシミュレーションによって解明することを目的としている。超温度場では、大きい温度分布が存在し、早い速度で結晶が融解・成長を繰り返すため、超温度場の現象の理解のためには、正確かつ幅広い温度領域での融液の熱物性値が必要である。接触法による従来の熱物性測定法では、試料の汚染および不均一核生成により熱物性測定の温度範囲が制限される。そこで、本研究では、試料の汚染・不均一核生成が抑制できる非接触浮遊法を用いて、3D プリント材料の融液の熱物性測定を行う。特に、融液内の自然対流およびマランゴニ対流は密度、および表面張力の温度依存性が支配しており、幅広い温度領域で測定することで信頼性の高い温度依存性を取得する必要がある。非接触浮遊法を用いることで、幅広い温度領域で融液の熱物性値を測定し、その場観察の結果の解釈およびシミュレーションの精度のサポートと

なる基礎データを提供することで、超温度場 3DP 領域の研究の推進に貢献する。



電磁浮遊法により浮遊した Ti-Nb 合金融体

超温度場下の結晶成長のその場観察・精密分析

A02 超高压電子顕微鏡法によるナノスケールデンドライト形成・成長のその場3D観察

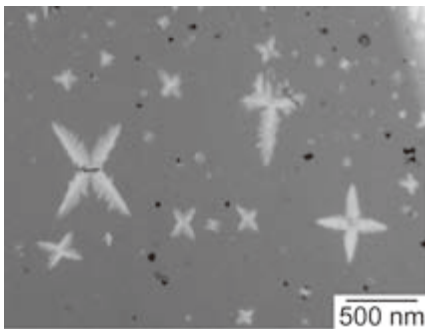
永瀬 丈嗣

兵庫県立大学・工学研究科・教授

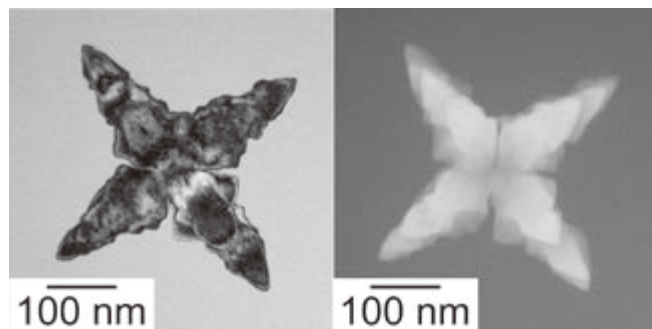


金属 3DP が実現する超温度場では、絶対界面安定条件に到達する凝固・結晶化やナノスケールデンドライトの形成といった、超温度場ならではの特異な凝固組織が形成される可能性があります。金属 3DP で想定される局所的な溶解・結晶化に対応する現象を、超高压電子顕微鏡法を駆使して、ナノスケールの空間分解能観察と高速カメラを利用した超高時間分解能観察にて捉えます。超高压電

子顕微鏡が得意とする極厚膜観察法・その場観察法・トモグラフィーに加え、先端のデジタル・通信技術を用いた Network tele-microscopy を駆使して、研究者間の相互連携を推進して研究を進めます。電子顕微鏡法により得られる超高空間分解能情報をインフォマティクスの基礎データとして提供することで、超温度場における結晶成長現象の解明を目指します。



ナノスケール BCC-Fe デンドライト



同一デンドライトを異なる入射方位から観察した明視野像

超温度場下の結晶成長のその場観察・精密分析

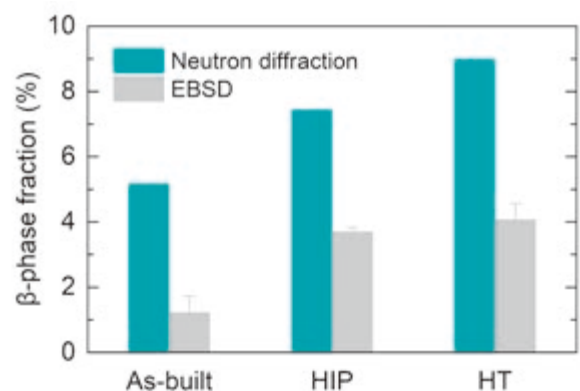
A02 非平衡組織を有するAM チタン合金の その場中性子回折を用いた組織・結晶塑性解析

山中 謙太

東北大学・金属材料研究所・准教授



チタン合金の Additive Manufacturing (AM) では、超温度場における非平衡凝固に加えてマルテンサイト変態や β 相の析出が起り、「階層的なバルク非平衡組織」が形成します。したがって、温度や応力・ひずみに対する組織学的・力学的応答に関する理解が力学特性の最適化や耐熱部材としての応用において重要です。中性子回折はバルク平均としての組織情報が得られること、EBSD では正確な検出が困難な高転位密度組織や微細な β 相の解析が可能であることが大きな特徴です。本研究では、その場中性子回折測定により得られた回折データから転位密度、相分率、結晶方位分布を決定し、定量的な組織情報を基に高温環境や塑性変形における転位組織のダイナミクスと相変態挙動を明らかにします。以上を通して AM チタン合金のプロセス-組織-力学特性の関係を物理モデルやデータ科学的な手法を駆使して体系化することで、強化機構や塑性変形に関する学理構築と造形プロセスの最適化によりスーパーチタンの創出を目指します。



中性子回折により求めた EB-PBF を用いて作製した Ti-6Al-4V 合金の β 相分率の解析例。As-built 材に加えて、熱間等方圧加圧法 (HIP) および無加圧にて行った熱処理 (HT) の結果も示した。いずれの場合も EBSD では β 相分率が低く見積もられている。

Mori, Yamanaka et al., Addit. Manuf. Lett., 3 (2022) 100053.

超温度場を活用した超越的材料創成

A03 積層造形法を活用した炭素強制固溶による高力学機能スーパーチタンの創製

a班

周 偉偉

東北大学・工学研究科・助教



チタン合金は高比強度や高耐食性等の優れた性質を有することから、航空宇宙、化学工業及び医療分野で利用されている。新規合金の開発に加え、セラミックス系強化材を導入したTi基複合材料(TMC)の開発も行われており、高機能チタン材料の開発競争が世界各国で繰り広げられている。しかし、TMCの製造に使われる鋳造や粉末冶金など従来の加工法では、組織の不均一性や強化相の粗大化、母相-強化相間の界面結合の低さ等が課題となっている。本研究ではヘテロ凝集法により均一な酸化グラ

フェン(GO)/ β -Ti混合粉末を作製し、レーザ3次元粉末積層造形法(L-PBF)プロセス中の急速凝固を活用してマトリックスに大量の炭素を固溶させる。最適処理により超微細炭化物粒子の析出を制御し、力学的高機能化を実現させる(図1)。L-PBFをプロセスの核として、炭素の強制固溶・析出挙動の制御によって実現する、室温・高温強度・靱性の特性バランスを飛躍的に向上させるスーパーチタン材料の開発に斬新なアイデアを提供する。

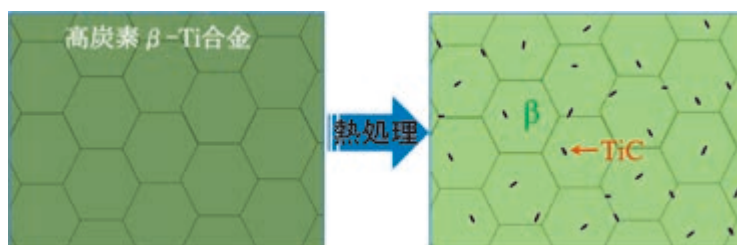


図1 L-PBF および熱処理によるスーパーチタンの作製の概念図

超温度場を活用した超越的材料創成

A03 レーザ粉末床溶融結合による航空用チタン含有ハイレントロピー合金の創製と高機能化

a班

小笹 良輔

大阪大学・工学研究科・助教



高温での優れた特性を示す耐熱ハイレントロピー合金(High Entropy Alloys: HEAs)は、主にTiおよびTi族元素を中心とする元素群により構成され、新たな航空用材料として近年注目を集めている。現在HEAsの作製法として主に鋳造法が利用されているものの、鋳造では金属材料の高機能性発現に不可欠な組織の制御が困難であり、作製されたHEAsでは元素偏析に由来する機能性低下が懸念されている(図1)。本研究では、軽量性/耐熱性を考慮した新たなHEA設計手法とレーザ粉末床溶融結合(Laser-powder Bed Fusion: L-PBF)による超急

冷・指向性温度場制御を重畳することで、実験・計算の融合的技術を駆使して、従来材料の機能を超えるスーパーチタン材料としてのTi含有HEA固溶体材料を創製する(図2)。

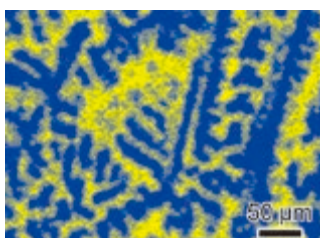


図1 SEM-EDSによる構成元素のマッピング像。鋳造により作製された従来のHEAsは元素偏析を生じやすく、機能性が低下する。



図2 本研究における高機能性Ti含有HEA創製のコンセプト

A03 超温度場・3D プリントによるバイオマテリアルの高機能化のための組織制御指針の構築

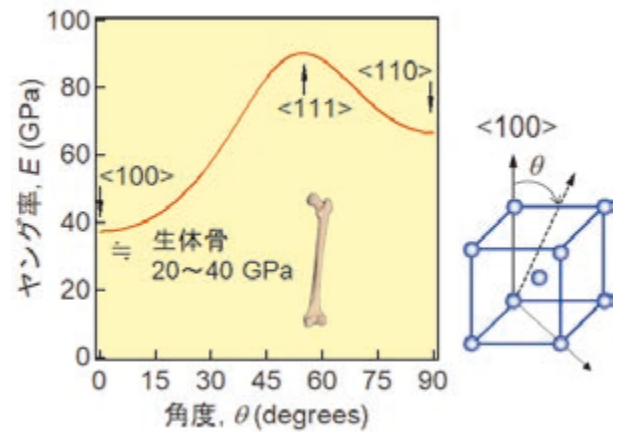
b班

多根 正和

大阪公立大学・工学研究科・教授



A03 班・超温度場バイオマテリアル創成科学が目指す生体用 Ti 合金の高機能化（低弾性率化）の実現には、超温度場・3D プリントで創成される「異方的な微細組織」および「特異な相安定性」に依存する弾性特性を解明し、その制御指針を確立することが不可欠である。しかし、引張試験等の汎用的な弾性率評価手法では、超温度場で創成される「異方的な微細組織」および「特異な相安定性」を反映した特異な弾性特性を解明することは極めて困難である。本研究では、A03 班内での緊密な連携を実施することにより、超温度場で創成される生体用 Ti 合金の特異な微細組織および相安定性を反映した弾性特性を世界に先駆けて解明する。さらに、独自のマイクロメカニクス理論である Effective-mean-field 理論等を基軸として、超温度場で創成される Ti 合金の組織および熱力学的な支配因子を解明することで、生体用 Ti 合金の高機能化のための微細組織および相安定性制御指針を確立し、超温度場材料創成学に貢献する。

生体用 β 型 Ti 合金単結晶のヤング率の結晶方位依存性

A03 超温度場 3DP による超準安定 β チタン合金の創出と基礎物性解明による機能性の開発

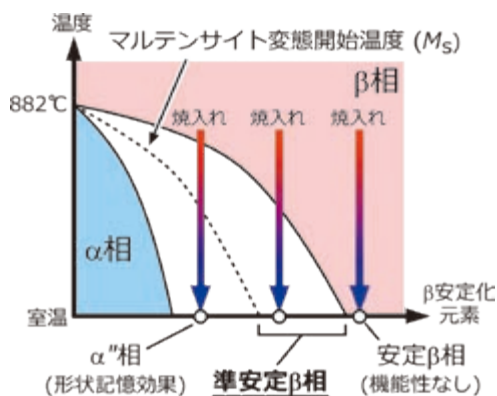
b班

田原 正樹

東京工業大学・科学技術創成研究院・准教授



本研究では、金属積層造形による超温度場を用いて、従来よりもさらに不安定な準安定 β チタン合金の創出を目指します。準安定 β チタン合金は形状記憶効果や超弾性をはじめとした様々な機能性を有しています。これらの機能性は準安定 β 相がより不安定であるほど向上することがわ

Fig. 1 準安定 β チタン合金

かっています。そこで本研究では、超温度場を用いた添加元素の強制固溶を利用し、従来法で得られる合金以上に極めて安定性が低い（＝「超」準安定な） β チタン合金の創出を試みます。「超」準安定な β 相を有するチタン合金では、従来法で作製した合金に比べて（1）形状回復歪みが大きい超弾性、（2）低弾性率化、（3）等温 α'' 相変態現象の発現が期待されます。本研究ではこれらの現象を利用して更なる機能性の開拓に取り組みます。

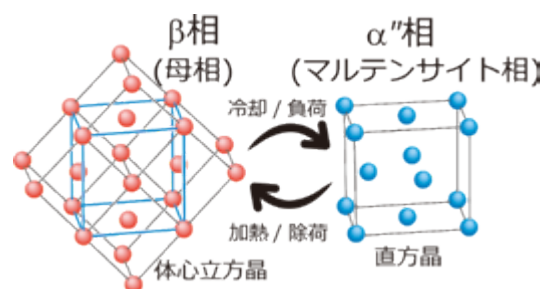


Fig. 2 チタン合金のマルテンサイト変態

超温度場を活用した超越的材料創成

A03 レーザ指向性エネルギー堆積法による WC-HEA 超硬合金の超温度場材料開発

c班

國峯 崇裕

金沢大学・機械工学系・准教授



3次元積層造形法の一つであるレーザ指向性エネルギー堆積法 (LDED) によって、タングステンカーバイド (WC) とコバルト (Co) ボンド相からなる、WC-Co 超硬合金中の Co ボンド相をハイエントロピー合金 (HEA) に代替した WC-HEA 超硬合金を超温度場条件で材料開発します。HEA として CrMnFeCoNi 合金等を選択し、硬度や高温材料特性の優れた超硬合金の開発を目指します。LDED プロセスにはマルチレーザ式 LDED 装置を用い (図 1)、6本のマルチレーザの集光位置を変えることで溶融池型積層造形と溶射型積層造形を制御し、これらの造形モードの違いが積層造形材の微細組織や機械的性質に及ぼす影響を調査します。特にマルチレーザ式 LDED 装置で実現される溶融池型積層造形と溶射型積層造形の超温度場溶融・凝固プロセス結晶成長メカニズムの差異や特徴を明らかにし、この2種類の造形モードが形成する超温度場に関する理解の深化を目指します。これらの未

開拓分野であるセラミックスと金属からなる WC-HEA 複合材料の新規材料開発を通じて有用な材料を探索しながら、超温度場材料創製学の研究領域に基礎的な新しい知見を見出すことを目指します。

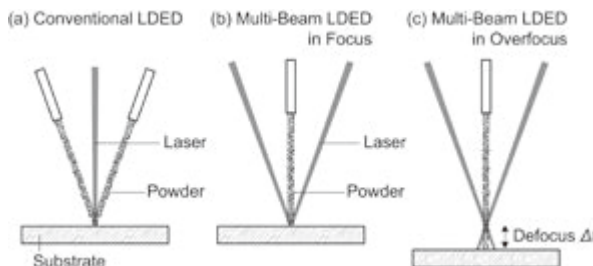


図1 LDED装置における粉末供給位置とレーザ照射方向を示す概念図。(a) 通常の装置, (b) 本研究で使用するマルチレーザ式 LDED 装置【レーザ焦点位置 0 mm: 溶融池型積層造形】, (c) 【デフォーカスモード: 溶射型積層造形】。

超温度場を活用した超越的材料創成

A03 超温度場環境を実現する高レーザ吸収球形多孔質セラミックス粒子の創成と積層造形

c班

野村 直之

東北大学・工学研究科・教授



本研究では、独自に開発した凍結乾燥パルス圧力印加オリフィス噴射法 (Freeze-Dry Pulsated Orifice Ejection Method; FD-POEM) により気孔を積極的に導入した積層造形用球形セラミックス粉末を創製し、高いレーザ吸収性と高い断熱性を両立させ、緻密なセラミックス積層造形体を作製することを目的とする。積層造形用粉末には気孔をできるだけ排除して造形物中の気孔形成の要因を減らすことが一般的に要求される。しかし、FD-POEM 粒子の表面には微細なメッシュ状の気孔を配置可能であり、その凹凸と空間を利用することで造形時に入射するレーザを乱反射させ、粒子内部に取り込むことが出来る。粒子内部に存在する多量の気孔は熱伝導を阻害して断熱性に寄与するため、レーザ吸収により上昇する温度を局所的に最大限に高めることが出来る。FD-POEM 粒子に含有する気孔率とレーザ吸収率、熱伝導率の関係を調べ、セラミックス積層造形への関連を明らかにする。以上より、超温度場を利用する積層造形用高性能セラミックス粉末の作製とその積層造形に関する学術基盤を創出する。

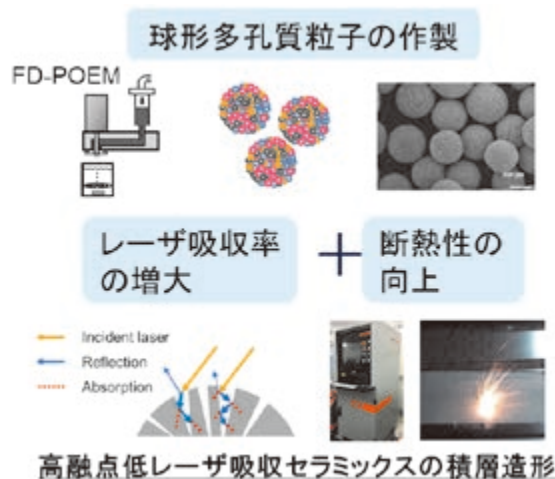


図 高断熱・レーザ吸収能を有する FD-POEM 粒子を用いたセラミックス積層造形体作製の概念図

超温度場を活用した超越的材料創成

A03

c班

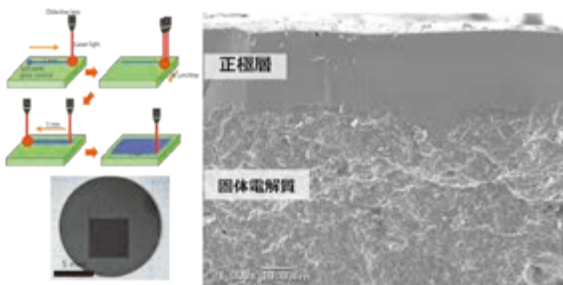
レーザー局所加熱によるガラスセラミックス系 全固体電池の無加圧界面構築

本間 剛

長岡技術科学大学・工学研究科・准教授

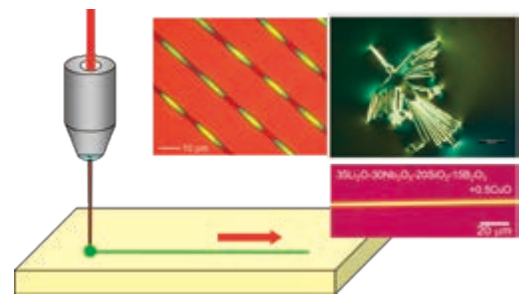


次世代の蓄電池開発においては、レアメタルの使用抑制、エネルギー密度向上と高い安全性能など数多くの難題を解決する必要があります。全固体電池はその課題解決の1つですが、電池を構成する部材間に堅牢な接合界面を構築するのが困難で、これが解決すると電池の高出力化につながります。本研究ではガラスへのレーザー照射による超温度場を利用したオールセラミック電池の創出を目的として、局所温度勾配における基礎科学の理解を進めます。



ガラスへのレーザー照射により作製した全固体ナトリウム電池の接合界面

ガラスへレーザー照射することで無輻射緩和による過冷却液体の形成と温度勾配がもたらす結晶配向に注目します。結晶化の前駆段階で過冷却液体の形成により固体電解質との接合界面が形成されることで、電気化学的な評価を可能にします。結晶配向を制御することで性能向上が期待できます。固体イオニクス分野における超温度場セラミックスプロセスの展開を進めます。



レーザー照射によりガラスに形成した配向を示す結晶

超温度場を活用した超越的材料創成

A03

c班

金属/セラミックス複合粉体を起点とした 超温度場と SiC/Al₄SiC₄ 相の創成

松本 洋明

香川大学・創造工学部・教授



金属/セラミックス (AlSi10Mg/SiC) 複合体をモデル材料として、複合粉体 (出発) において SiC の粒度および体積率を変化させレーザ積層造形 (L-PBF (or SLM)) を実施致します。ここでは金属粉体 (Al) とセラミックス粉体 (SiC) でのレーザ吸収率 (Fiber-laser) の大きな差異 (AlSi10Mg:0.07 ~ 0.1 SiC:0.78) を起点とした異常過昇温化 (超温度場の可能性 ($G \geq 10^7$ K/m)) のための L-PBF スキャンストラテジーと複合粒子間における界面反応を律速した非平衡組織形成 (SiC/Al₄SiC₄ ハイブリッド相) (従来の溶製・焼結では形成しない) とそれを軸とした新展開を図ります。この研究過程では、この複合粒子のレーザ照射での“超温度場生成”の可能性を指向した SiC/Al₄SiC₄ ハイブリッド相の形成機構を明らかにします。また、Al 基合金をベースとしながらも SiC 量を増加させ (max:40vol%), セラミックス多量含有材における緻密化する L-PBF の基盤原理を構築します (セラミックスベ

スを目指し、Al 合金は緻密化するための媒介としての役割)。本研究では実験研究のみならず、有限要素解析 (計算)・機械学習 (データ科学) も援用して温度解析およびプロセスと組織形成をリンクする作用機構を解明します。

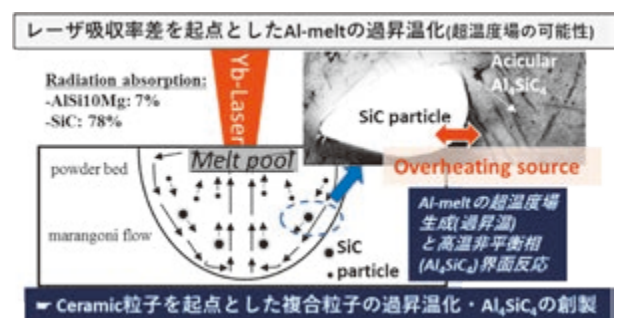


図 AlSi10Mg/SiC 複合粒子を出発原料とした L-PBF と Al₄SiC₄ の反応形成

電子顕微鏡スクール

大阪大学・超高压電子顕微鏡センター 佐藤 和久

2022年8月17日から3日間、大阪大学超高压電子顕微鏡センターにて、「超温度場夏の学校 電子顕微鏡スクール」が開催された。このイベントは、学術変革領域研究（A）「超温度場材料創成学：巨大ポテンシャル勾配による原子配列制御が拓くネオ3DPの運営」（総括班）における若手人材育成の一環として企画されたものである。透過電子顕微鏡法の基礎と実際について集中的に学ぶことを目的として、TEM 基本コースと TEM/STEM 応用コースを設定（定員6名）し、申し込み時に習熟度に応じて受講者にコースを選択頂いた。大学院生2名（長岡技科大）、教員4名（阪大3名、東工大1名）の計6名にお申し込み頂き、初日の講義の後、基本コース4名、応用コース2名に分かれて2日間実習を行った。執筆者（佐藤）は、高分解能 TEM/STEM の講義と応用コースの実習を担当した（写真）。応用コースは当初、申し込みが1件のみ（阪大 O 先生）であり、実習の班分けをどうするか思案していたところ、受講者の一人である阪大 M 先生には電顕の心得があることが判明！そこで、第2希望の応用コースに移って頂いた。実習では収差補正電顕（JEOL ARM200F）を用いた高分解能 TEM/STEM に専念、ついに M 先生はロンチグラムを独力で調整するに至った。一方、O 先生は、あいにく実習中に別用務が入るなど多忙な中での参加となったが、限られた時間で集中して実習に取り組んで頂き、ほどなくロンチグラム調整に成功。昨今の収差補正 STEM ではロンチグラム調整の出来具合が分解能を決定することから、最も注意を払う調整項目となっている（感覚を忘れないため

にも、ぜひ定期的なご利用をお勧めします）。実習中、両先生にはいろいろと鋭い質問を頂き、何かとご興味を持って頂けたのではないかと考えている。もう一方の基本コースでは、担当の市川聡先生のサポートのもと、受講者4名が200kV 汎用電顕（JEOL JEM-2100plus）の操作と電子回折図形解析の実習に取り組んだ。終了後の雑談から、興味をもって集中して実習に取り組めた様子が伺われた。ぜひ継続して電顕観察を積み重ね、より一層の技能向上を図られることを願います。今回の講義・実習が受講者の皆様の今後のご研究に少しでもお役に立ちましたら幸いです。ご多用の中、3日間ご参加頂いた皆様にお礼申し上げます。最後に、本イベント開催にあたり種々お世話頂いた事務局の奥川将行先生、黒田美加さんにこの場をお借りして感謝致します。



データ科学スクール

大阪大学・大学院工学研究科 趙 研

2022年9月5日から3日間にわたって、「超温度場夏の学校 データ科学スクール」が開催された。本スクールは、学術変革領域研究（A）「超温度場材料創成学：巨大ポテンシャル勾配による原子配列制御が拓くネオ3DPの運営」（総括班）における若手人材育成の一環として開催されたものである。講師は、本領域における「3DPのデジタルツイン科学」の要である、データ科学を駆使したマテリアルズ・インフォマティクスをご担当されている名古屋大学 足立吉隆 教授（計画研究班 A01-b 研究代表者）に務めていただいた。昨今の状況から対面での講義と実習をオンラインでも配信するハイブリッド式にて開催され、多くの大学から若手研究者、大学院生ら31名（内10名はオンライン）が参加した。

講義では、データ科学を用いて材料を扱う際に最も基本かつ重要な材料組織の特徴量をいかにして抽出するのかという内容から始まり、ニューラルネットワークやベイズ推定、遺伝的アルゴリズムなど、機械学習に関する様々なキーワードについて、例を交えながら詳細に解説していただいた。さらには、機械学習による材料組織の生成についても、実際の画像を示していただきながら詳しく説明いただいた（写真：講義風景）。

実習では、足立先生が開発された機械学習ソフトウェア『shinyMIPHA』を使用し、事前に準備いただいたデータを用いて講義で習った各種機械学習にチャレンジした。これまで機械学習に触れたことのない参加者からも、「自分で実際に機械学習をやってみることで講義内容をより一層深く理解できた」との感想をいただいた。スクールの最後には、領域代表である小泉雄一郎 教授より受講生に修了書が授与された。

機械学習は、ユーザーフレンドリーな市販・無料ソフトウェアが多く出回っており、誰にでも簡単に始めることができる。そのため、いかにしてデータを扱うのか、具体的にどのような計算が行われて

いるのか、各機械学習の違いはなにか、などを理解していなくても何かしらの解は出てしまう。しかしながら、当然、正確な解析を実施するためには、これら機械学習の本質についての正しい理解が不可欠である。本スクールは、このような素人にとってはブラックボックスであった部分を一つ一つ明確にするものであり、受講生（著者も含め）の知見、知識向上に大いに貢献したと確信している。多くの受講生から、「ぜひ、自分の研究にもデータ科学を取り入れたい」との声が聴けたことを嬉しく思うと同時に、本スクールで学んだ皆さんが、データ科学を駆使することで、今後ますます材料科学分野を大きく発展させることを期待している。

最後に、本スクールを開催するにあたって、大変お忙しい中、ご講義いただいた足立先生に感謝申し上げるとともに、様々ご尽力いただきました小川登志男先生、孫飛先生をはじめとする足立研究室の皆様と本領域事務局にこの場をお借りしてお礼申し上げます。





超温度場材料創成学

「超温度場3DP」領域事務局

大阪大学 大学院工学研究科 マテリアル生産科学専攻

〒565-0871 大阪府吹田市山田丘2-1

E-mail s3dp@mat.eng.osaka-u.ac.jp



<http://www.mat.eng.osaka-u.ac.jp/super3dp/>