

CAMSE '90 に参加して



東京工業大学工学部 矢野 哲司

1990年8月28日より31日までの4日間にわたり、堂山昌男教授をチェアマンに、日刊工業新聞の協賛で、CAMSE'90(Computer Applications to Materials Science and Engineering: Computer Aided Innovation of New Materials)国際会議が、東京池袋のサンシャインビルにおいて開かれた。近年、コンピューターの進歩は目ざましく、特にスーパーコンピューターは、並列処理技術などの面で大きく進歩し、非常に高速な計算処理能力を持つようになってきた。このような技術の進歩は、従来まで不可能であった複雑で、膨大な時間を要した計算を可能にしている。この種の要望は、材料の世界でも非常に強く、最近では新しい材料に対するアプローチの1手段として、コンピューターの応用が注目されている。この会議は、その副題にも示されているように材料の開発・設計や材料科学に対するコンピューターの応用に重点を置いた、日本で開かれた初めての国際会議であろう。

本会議は、以下に示すような20程のセッションに分かれており、発表件数は口頭発表が約130件(うち招待講演が約85件)、ポスターが約80件だった。

- OVERVIEW & PERSPECTIVE
- MATERIALS DATA SYSTEM
- CERAMICS & GLASS
- ELECTROMAGNETIC PROCESS
- FLUID MECHANICS PROCESS
- CHEMISTRY
- IMAGE SIMULATION
- INTERIGENT METHODOLOGY FOR ENGINEERING

- ARTIFICIAL INTELLIGENCE
- ALLOY PHASE DIAGRAM & ALLOY DESIGN
- METAL FORMING
- PROCESS SIMULATION IN PLASTIC WORKING
- SOLID MECHANICS
- SEMICONDUCTOR PROCESS SIMULATION
- DESIGN OF NEW SEMICONDUCTORS
- MOLECULAR DYNAMICS
- LATTICE DEFECTS
- SEMICONDUCTOR DEVICE SIMULATION
- COMPOSITE MATERIALS
- SOLIDIFICATION & CASTING

《ガラスに関連した発表から》

ガラスに関するセッションはCeramics & Glassとして設けられており、ガラスに関する発表は他のセッションでの発表や、ポスターでの発表も含めて9件であった。ガラスの材料設計のデータベースシステムに関するものと、分子動力学法によるガラスの構造のシミュレーションに関するものが多かった。タイトルをプログラム順に掲げると以下ようになる。

- “DESIGN OF NEW GLASS STRUCTURE AND PROPERTIES BY MOLECULAR DYNAMICS METHOD”, K. Hirao Kyoto University
- “MATERIALS DESIGN OF GLASS AND DEVELOPMENT OF IMPROVED EXPERT SYSTEM”, A. Makishima, University of

ニューガラス 国内の動き



Tokyo, M. Mitono and H. Monma, National Institute for Research in Inorganic Materials, N. Mizutani, Tokyo Institute of Technology, I. Yasui, University of Tokyo

- "MATERIAL DESIGN OF CERAMICS AND GLASSES. GLASS DATA BASE AND CERAMIC DESIGN SYSTEM" I. Yasui, University of Tokyo

(以上、招待講演)

- "NUMERICAL SIMULATION OF FLOAT GLASS FORMING PROCESS", M. Iga and H. Mase, Asahi Glass Co., Ltd
- "A NUMERICAL ANALYSIS OF IMPULSIVE STRESS IN A GLASS PLATE WITH FINITE ELEMENT METHOD", H. Katoh, Nippon Sheet Glass Co., Ltd
- "STRUCTURE OF FLUOROPHOSPHATE GLASSES", H. Inoue and A. Makishima, University of Tokyo
- "NON-EQUILIBRIUM MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF VISCOSITIES OF FLUORIDE GLASS MELTS", T. Yano and M. Yamane, Tokyo Institute of Technology, S. Inoue, National Institute for Research in Inorganic Materials
- "MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF MIXED ALKALI HALIDE GLASS", K. Kinugawa, K. Kadono and H. Tanaka, Government Industrial Research Institute, Osaka
- "A X-RAY DIFFRACTION AND MOLECULAR DYNAMICS INVESTIGATION OF SOME ALKALI FLUOROBERYLLATE

GLASSES AND MELTS", N. Umesaki, Osaka University, H. Ohno, Japan Atomic Research Institute, N. Iwamoto, Osaka University

タイトルよりわかるように、ガラスの分野では、招待講演の京都大学の平尾氏の研究をはじめとして、分子動力学法を用いたシミュレーションがコンピューターの応用の中心となっている。最近では大型計算機の計算能力が向上したことにより、この方法で $10^3 \sim 10^4$ 個程度の粒子数で計算が容易になっている。ガラス形成系の予測や物性の予測などの材料開発のアプローチの方法としての有効性が示され、今後の展開が期待される。

〈他の分野から〉

この会議では、セッションのバリエーションからもわかるように、いろいろな分野の研究者の発表があり、ガラス以外の分野の研究に接することが出来た。全ての発表を聞いたわけではないが、材料のデザインという観点では、データベースなどの設計システムの開発から、分子動力学法や量子化学計算などによる原子・電子レベルの状態のシミュレーションまで、非常に幅の広い利用法が見られた。特に目を引いたのは半導体分野を中心とした薄膜材料の成膜プロセスの機構の原子レベルでのシミュレーションや、固体材料の電子状態の計算方法に関する研究、種々の物性と電子構造との関係を明らかにする研究などが精力的に行われていることであった。これらは、エレクトロニクス、オプトエレクトロニクスの分野での材料開発の必要性が強いことが一因となっているようである。この種の応用は、大学関係機関だけでなく、

ニューガラス 国内の動き



コンピューターメーカーが精力的に行っているようである。また、有機材料の分野でも電気伝導性高分子薄膜などの機能性分子の電子状態の計算などの発表が数多くみられた。

《終わりに》

様々な分野の研究者が参加しているのをみて、スーパーコンピューターやワークステーションなどの発達とともに、計算時間を容易に得られるようになり、コンピューターの材料科学への応用分野が大きく広がっていると感じた。また、理論の進歩も着々と進んでいるようで、より材料に即した計算が可能な領域に入ってきているようである。今後も、計算機的能力は日進月歩のスピードで高められ、それに伴い、材料科学の分野における、現象の解明や材料の開発に対する、計算機の果たす役割はさらに広がるものと思われ、今後の展開が大きく期待される。

【筆者紹介】

矢野 哲司 (やの てつじ)

昭和 62 年 東京工業大学工学部無機材料工学科卒業。
平成元年 同校大学院無機材料工学専攻修士課程修了
博士課程中退、同校工学部助手。

[連絡先]

〒 152 東京都目黒区大岡山 2-12-1
東京工業大学工学部無機材料工学科
TEL 03-3726-1111