

RISMセミナー第63回

データ駆動型AIセミナー（第16回）

15:00 - 16:00

ニューラルネットワークポテンシャルの固体材料科学における応用事例

清水 康司 助教（東京大学）

概要：データ駆動型材料研究において原子間ポテンシャルを機械学習する取り組みが近年活発化している。我々はこれまで、第一原理計算では計算コストが高く解析が困難である欠陥系やアモルファス構造の材料等を対象として、ニューラルネットワークポテンシャル（NNP）の応用と開発を進めてきた。本講演では、NNPを用いた荷電欠陥を含む窒化ガリウムの諸特性の解析や、電場下でのリン酸リチウム中のイオン伝導計算等、最近の取り組みについて紹介する。

16:00 - 17:00

新規ナノ物質合成手法の開発と触媒への応用

草田 康平 准教授（京都大学）

概要：金属イオンからナノ粒子をつくる化学的合成手法を用いることによって、バルク物質を単純にナノサイズ化しただけではない、新規物質を得ることが可能である。本講演では多元素化や結晶構造制御による新規ナノ物質開発を例に、それらの触媒用途としての可能性を議論する。