

第110回触媒化学融合研究センター講演会

産総研触媒化学融合研究センターでは、様々な分野で活躍している大学、公的研究機関、企業等の方々をお招きして、講演会を開催することで分野の垣根を越えた連携の実現を目指しています。

多くの方々のご参加をお待ちしております。

日時:2024年5月31日(金)15:00~16:30

場所:つくば中央事業所5群 第4会議室(6603室)

講演概要:

15:00~16:30

◆デジタル技術によるクローズドループを用いた材料設計とプロセス開発

＜講師＞ 奈良先端科学技術大学院大学

藤井幹也 教授



本講演では、AIやシミュレーションを活用した材料開発の最新研究を2つ紹介します。第一の研究は、コポリマーのプロセス最適化に関するもので、フローリアクターを用いたラジカル重合を通じて、様々な合成条件のもとで成るポリマーの特性を解析しました。この過程で、モノマー転化率や組成比を測定し、機械学習と量子化学計算を用いて高精度な予測モデルを構築しました。また、ベイズ最適化を応用して、目的のポリマー合成を最適化する技術についても解説します。第二の研究では、物理的記述子を活用した条件付きGAN(Generative adversarial network)を開発し、無機材料の逆設計を行いました。この生成モデルを用いて、所望の特性を持つ材料候補を創出し、物理シミュレーションとのクローズドループを形成して、既存データが少ない領域においても新たな材料の探索に成功しています。これらの研究は、材料科学の進展において重要な役割を果たす可能性があります。

【問い合わせ先】 触媒化学融合研究センター 担当:白川

E-mail:mari-shirakawa@aist.go.jp

HP: <https://irc3.aist.go.jp/>