

## 第73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。

今回は「マテリアルズインフォマティクス」をテーマとして下記の通り開催いたします。多くの方々のご参加をお待ちしております。

日時:2019年8月30日(金)15:00~17:10

場所:産総研第5事業所第2本館 第4会議室(5-2-6603室)

講演概要:

### ◆スパースモデリングの基礎とマテリアルズインフォマティクスへの展開

＜講師＞東京大学大学院新領域創成科学研究科

科学技術振興機構 さきがけ(兼任) 五十嵐康彦 助教

本講演では、マテリアルズインフォマティクスの有効なアプローチの一つであるスパースモデリングの基礎について紹介する。スパースモデリングは、大量の高次元データから恣意性なしにそのデータの背後にある仮説(モデル)を系統的に導くデータ解析を可能にし、2000年代より爆発的に応用が進んでいる統計学/機械学習の枠組みである。マテリアルズインフォマティクスにおけるスパースモデリングの応用例として、計算科学と情報科学の融合によるリチウムイオン電池の電解液探索に向けた応用や、効率的な材料探索によるナノシートの高効率収集への応用について講演する。

### ◆機械学習を活用した難結晶性新規金属有機構造体(MOF)の合成

＜講師＞関西学院大学理工学部化学科

科学技術振興機構 さきがけ(兼任) 田中大輔 准教授

一般に、金属-有機構造体(MOF)の節は複核金属クラスターから構成されており、その構造はドット(0D)、ナノワイヤー(1D)、ナノレイヤー(2D)など多岐にわたっている。MOF結晶を無機ナノクラスター集積構造と見做せば、単なる無機構造の凝集では実現困難な高度な自己組織化構造が達成可能であるため、優れた光物性やキャリア移動度の実現が期待できる。本発表では、我々のグループが合成に成功した高次元クラスター構造を骨格中に持つMOFの電子物性を報告し、従来合成が困難であった高次元クラスターを節に持つ難結晶性MOFの合成条件探索を、機械学習によって効率化する手法について提案する。