

第85回触媒化学融合研究センター講演(WEB)

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「ドイツ文学・化学・人工知能の融合」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:2021年9月21日(火)14:00~16:55

場所:TeamsによるWEB講演会 ※事前登録制 締切:9/17(金)12時

申込先:mari-shirakawa@aist.go.jp

14:00~15:25

◆ゲーテと化学——アルケミア、親和力、ホムンクルス

<講師>神戸大学大学院人文学研究科

久山雄甫 准教授



文学者として知られるゲーテは自然科学研究にも熱心に取り組んだ人物でした。有名なのは形態学と色彩論ですが、さまざまな資料を読み解けば、生涯を通じて化学にも大きな関心を寄せていたことが分かります。本講演では、まず若きゲーテのアルケミア研究を振り返り、そのうえで彼の後年の文学作品に化学的な知見がどのように取り入れられていったのか、ご紹介したいと思います。具体的には『親和力』(1809)と『ファウスト第二部』(1831/32)を取り上げます。文学と科学の同根性をかたく信じつづけたゲーテが、文理の区分をこえた立場から豊かな世界観をつくりあげていった様子を、すこしでも味わっていただければ幸いです。

15:30~16:55

◆汎用なNeural Network Potentialを使った新素材探索と

「Matlantis」の紹介

<講師>株式会社Preferred Computational Chemistry

浅野裕介 シニアマネージャー



近年、触媒やバッテリー材料、半導体材料などの設計において量子化学計算の重要性が高まっています。その量子化学計算を高速化する技術としてNeural Network Potential (NNP)がありますが、これまでは特定の領域での利用にとどまっていた。様々な領域でNNPを利用して材料探索を実施できるようにするため、Preferred NetworksとENEOSは55元素に対応したNNPを開発し、それ用いたクラウドサービスとして「Matlantis」を展開しています。本講演ではMatlantisの技術紹介と、Matlantisを使った材料設計事例を紹介します。