

RISMセミナーシリーズ第14回 データ駆動型AIセミナー (第6回)

15:05~

デジタル分子媒体による溶液物性・結晶形成の予測

東京工業大学物質理工学院応用化学系 下山裕介教授

化学プロセス・システムの設計においては、対象とする溶媒系の相挙動・相平衡や、固体成分による結晶形成を把握することが不可欠である。分子形状や分子表面電荷といった分子データに基づく「デジタル分子媒体」と機械学習を融合した溶液物性の予測と、医薬品に関する共結晶の予測について紹介する。

16:05~

大規模第一原理計算手法の開発と複雑、不規則材料への応用

物質・材料研究機構国際ナノアーキテクトニクス研究拠点 中田彩子主幹研究員

材料における表面・界面や非晶系などの複雑な構造と物性との関連を理論的に解析するには、ナノスケールでの高精度な計算が重要となる。本発表では、我々の開発している大規模第一原理計算手法と、複雑構造を持つ材料への応用例について紹介する。



Research
Initiative for
Supra-Materials