

第85回RISMセミナー データ駆動型AIセミナー(第24回)

多次元オペランド可視化計測とデータ解析技術の融合に基づく蓄電池電極設計の最適化

木村 勇太 助教 (東北大学 多元物質科学研究所)

近年の材料計測技術の発展により、材料内部の化学状態分布や微細構造などの多次元情報およびその時間変化を、リアルタイムで取得することが可能となっている。このような大規模・高次元の計測データから材料・デバイス開発に有用な知見を抽出するには、高度なデータ解析技術が不可欠である。我々は、コンピュータ断層撮影法とX線吸収端近傍構造法を組み合わせた3次元化学イメージング技術であるCT-XANESを活用して、蓄電池合剤電極内の微細構造およびその内部の充放電反応の空間分布とその経時変化を、3次元かつオペランドで可視化する手法を開発してきた。本講演では、この取り組みを紹介するとともに、多次元オペランド可視化計測とデータ解析をいかに融合させることで、デバイス設計に有用な知見が得られるかについて議論する。

汎用ニューラルネットワークポテンシャルを活用した材料科学

久間 馨 助教 (信州大学 先鋭材料研究所)

汎用ニューラルネットワークポテンシャル(UNNP)は、深層学習を原子間相互作用の計算に応用したものであり、様々な物質に対して第一原理計算による力場を再現することが期待されている。本公演では、UNNPを活用した材料科学をさらに発展させることを目的とした我々の研究について、静電場や電極電荷が与えられた場合に拡張したシミュレーションや、生成モデルと組み合わせた合金触媒の探索の事例を紹介する。