

# 第一原理計算と機械学習を用いた自律的材料探索および材料設計指針の構築

対象者：ハイスループット計算を用いた材料データベースの構築および機械学習手法の活用に興味のある方

講師

高橋 亮

東京科学大学総合研究院  
フロンティア材料研究所 助教



2025. 2. 12 [Wed]

14:00-15:00

オンライン開催 (Zoom事前登録制)

材料用途に応じた所望の特性を持つ物質を探索することや、その特性を実現するための鍵となる構成元素・原子配列の特徴を見出すことは材料開発において重要である。本講演では、講師らが取り組んでいる半導体・誘電体のマテリアルズ・インフォマティクスの研究に基づき、並列計算環境上のハイスループット自動第一原理計算を用いた材料データベースの構築・機械学習予測に基づいて所望の物性を持つ材料を優先的に計算する自律的材料探索システム・機械学習を用いた材料分類および有望物質群の特徴抽出手法を紹介する。

開催方法：Zoomを利用したオンライン形式による開催

※ご参加には事前登録が必要です。

右のQRコードもしくは下記のリンクからご登録ください。

[https://us02web.zoom.us/webinar/register/WN\\_z9rpw571Txi7d9dxuPskRQ](https://us02web.zoom.us/webinar/register/WN_z9rpw571Txi7d9dxuPskRQ)

