

第3回放射光・中性子によるセラミックス原子相関解析研究会  
「ガラス・セラミックスのマテリアルズインフォマティクス  
— 二体相関の裏に潜む”秩序”と材料の”機能”の相関解明にむけて」

物質や材料の構造解析には、計算化学や計算材料科学を活用したシミュレーションの手法だけでなく、新しい情報科学の分野を活用した材料研究にも大きな期待が持たれています。第3回となる放射光・中性子によるセラミックス原子相関解析研究会では、「ガラス・セラミックスのマテリアルズインフォマティクス—二体相関の裏に潜む”秩序”と材料の”機能”の相関解明にむけて」をテーマとし、3名の先生方による講演会を企画しました。情報科学と融合した新しい解析手法を通して、セラミックス材料の構造や物性研究の更なる発展の一助となることを期待します。

日時： 平成28年3月14日（月）10:00～12:00

（日本セラミックス協会2016年年会サテライトプログラムとして開催します。）

場所： 早稲田大学（西早稲田キャンパス）F会場

主催： 放射光・中性子によるセラミックス原子相関解析研究会

共催： SPring-8 ユーザー協同体（SPRUC）機能性材料ナノスケール原子相関研究会

プログラム：

10:00～10:05 開会挨拶

講演①： 10:05～10:40 津田宏治先生（東京大学）

「物質・材料開発のための機械学習：仮想スクリーニングとベイズ最適化」

講演②： 10:40～11:15 安藤康伸先生（東京大学）

「機械学習による原子間力ポテンシャルモデリング：

アモルファス内イオン拡散経路探索への応用」

11:15～11:20 （休憩）

講演③： 11:20～11:55 北村尚斗先生（東京理科大学）

「無機酸化物結晶に潜む非周期的な原子配列の秩序とイオン伝導性の関係」

（講演時間には質疑を含みます。）

18:00～ 懇親会

放射光・中性子によるセラミックス原子相関解析研究会とは・・・

ガラス・セラミックスの材料科学、特に、ナノスケールの原子相関と深く関係した機能発現を主な研究対象とし、放射光や中性子施設を利用した構造解析手法の普及や利用促進を進めることを目的として、日本セラミックス協会に設置が承認された研究会です。この目的のために、セラミックス分野における放射光・中性子を利用した実験、関連技術の高度化、新しい解析手法の開発および理論計算の導入、さらにそれらの普及に向けた研究活動、情報交流の場を提供します。