

第7回

THE INVERSE PROBLEM IN MATERIALS THEORY:

FIND THE SYSTEM THAT HAS A GIVEN A TARGET PROPERTY

講師: Prof. Alex Zunger

(University of Colorado, Boulder, Colorado)

日時: 2014年12月17日(水) 13:30 – 15:00

場所: 千現地区 第一会議室

主催: (独)物質・材料研究機構

※ 講演は英語で行われます



マテリアルズ・インフォマティクスの勉強会の第7回目は、米国より、Zunger教授をお迎えし、独自のアプローチに基づく新材料開発の最新動向についてご講演頂きます。教授の提唱するアプローチ「Inverse Design」とは、我々が求める「特性」をまず定義し、最新の電子構造理論と遺伝的アルゴリズムを駆使して、天文学的な数の候補材料の中から、その特性を満たす材料および構造を計算的に見つけ出すものです。これにより、実際に合成すべきターゲット材料が絞り込まれ、より効率的な材料開発・物質探索が期待されます。

皆様の積極的なご参加をお待ちしております。



理事長 潮田資勝

世話人

門平卓也
寺倉清之

調査分析室 (ex.2125)
リサーチアドバイザー