

第26回 未来科学オープンセミナー

未来科学オープンセミナーでは、東北大学未来科学技術共同研究センターで行っている研究の成果や独創的な開発研究を、分かりやすくご紹介いたします。今回は通常より開始時間を30分繰り上げ、講演後に展示説明も開催します。先着20名様限定となりますので、お早めのお申込みをお待ちしております。

新たなマテリアルズ・インフォマテックスを展開する 基盤としての全電子混合基底法とは — 新有用材料設計開発の抜本的改善 —

未来科学技術共同研究センター
シニアリサーチフェロー 川添 良幸

【プログラム】

15:00 講演(講演の合間と終了後に質疑応答)

16:30 展示説明

17:00 終了

先着20名様
講演&展示説明
開催

川添シニアリサーチフェローの研究と講演の内容

新たな材料設計手法としてマテリアルズ・インフォマテックス(MI)が注目されている。しかし、現在のMIの基盤は基底状態にしか適用できない密度汎関数理論DFTであり、予言能力に欠け、現象論的である。講演者らは、DFTに代わり、励起状態も精密に取り扱え、実験からの知識を一切使わずに化学反応を扱える材料設計法として、全電子混合基底第一原理計算パッケージTOMBO(TOhoku Mixed Basis ab initio Simulation Package)を開発している。本講演では、TOMBOの概要と、水素発生や燃焼過程等、従来は第一原理計算と言いながら現象論的に取り扱われていた環境・エネルギー材料生成時の動的挙動を明らかにする。また、講演者が主宰する伊達な大学院、アジア計算材料学コンソーシアムACCMS等についても紹介する。

<展示内容>

- ・ペンタグラフェンとその派生物の模型
- ・独自に開発した三角形の穴を開けられるドリル (実演)
- ・伊達な大学院の講義内容

開催：令和6年9月6日(金) **参加無料**

時間：15:00~17:00

参加方式：オンライン視聴(講演のみ) または 現地出席(先着20名様)

申込方法：裏面をご確認ください

主催と会場：東北大学 未来科学技術共同研究センター(NICHe)

協賛：日本工学アカデミー東北支部・北海道支部

東北大学未来科学技術共同研究センターは、産学連携を通して、新しい技術の開発と、その実用化を目指して活動しています。

未来科学オープンセミナー 申し込み方法

1. E-mailによる申し込み

参加ご希望の方は下記情報をご記入の上、下記宛先までE-mailでお申込ください。

- ・団体名(会社名・学校名)
- ・ご所属・学年
- ・ご芳名
- ・Eメールアドレス
- ・ご参加方法
- ・その他連絡事項

(ご所属先より複数名ご参加の場合は、上記情報を全員分記載下さい。)

E-mail

mirai@ml.niche.tohoku.ac.jp

申込先

東北大学未来科学技術共同研究センター
未来科学オープンセミナー 事務局 宛

2. webからの申し込み

参加ご希望の方は下記ページのフォームに入力してお申込ください。

アドレス

<https://www.niche.tohoku.ac.jp/opseminar.html>

オンライン視聴をお申込みいただいた方には、
9月5日(木)(講演前日)に視聴用アドレスを送信いたします

※ 質疑応答につきまして
当日のご質問につきましては、配信ソフトのチャット機能にお書込み、
または、事前に事務局までメールをご送信ください。

〔締切〕 9月4日(水)