

□ OPEN SEMINAR SERIES (2)

第3回
統合型材料開発・情報基盤研究交流会

新規無機化合物組成予測のための の推薦システム

2017 **6.6** TUES.
Open 10:30-11:30

北陸先端科学技術大学院大学東京サテライト
東京都港区港南2丁目15番1号 品川インターシティA棟19階



京都大学 材料工学専攻
世古 敦人 准教授

Abstract

これまで多くの研究者により新規無機化合物の合成が行われてきた結果として、無機結晶データベースに多くのデータが蓄積されている。存在する化合物との定性的な類似性から合成可能な無機化合物を予想することは一般的であるものの、機械学習手法を応用することで、新規化合物の発見が大幅に加速されると期待される。本講演では、無機結晶データベースと機械学習手法を用いて、合成可能な新規無機化合物を効率的に予測する方法について紹介する。

◎世話人：木野日織

◎連絡先：運営室 (mii-i@ml.nims.go.jp)



"Materials research by Information Integration" Initiative

情報統合型物質・材料開発イニシアティブ