

787th ASRC Seminar

Date: 7月14日 (火) 10:00~11:30

Location: Zoomによるオンライン会議

Speaker: 常行 真司 氏

(東京大学大学院 理学系研究科)

Title: 不完全な粉末回折実験データを用いた
データ同化結晶構造探索

(Crystal Structure Prediction by Assimilating
Incomplete Powder Diffraction Data)

Abstract:

計算機シミュレーションによる結晶構造予測手法は長年進歩してきたが、単位胞の原子数が多いときには、いまだに大変困難である。ここでは、ベイズの定理に基づく粉末回折実験のデータ同化によって、第一原理に基づく結晶構造シミュレーションが効果的に加速されること、すなわち構造決定には不十分な粉末回折データであっても、結晶構造予測に役立つことを示す[1,2]。この方法は回折データが限られている高圧下での材料研究に有用であるだけでなく、コンビナトリアル合成や測定と組み合わせることで、材料探索を加速できるかもしれない。

[1] N. Tsujimoto, D. Adachi, R. Akashi, S. Todo, and S. Tsuneyuki, Phys. Rev. Materials 2, 053801 (2018).

[2] D. Adachi, N. Tsujimoto, R. Akashi, S. Todo, S. Tsuneyuki, Comput. Phys. Commun. 241, 92 (2019).

<Contact>

髭本 亘 (81-3873)

ZoomのURLにつきましては、
髭本(higemoto.wataru@jaea.go.jp) まで
ご連絡ください。

(数日中にこちらから回答ない場合は再度連絡ください。)