

Color Gallery

ヘッドライン

ビッグデータ・人工知能を利用する新しい化学

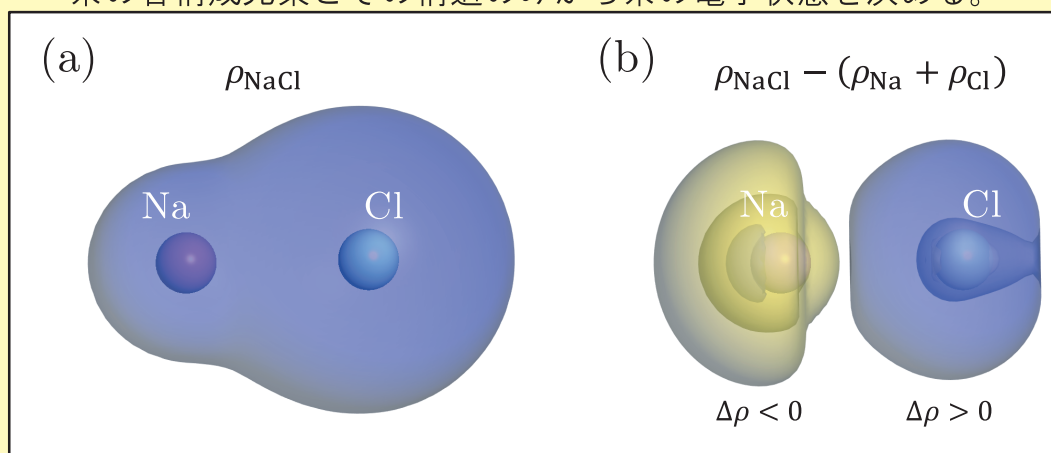
第一原理計算とデータ科学的アプローチ

ダム ヒョウ チ, 水上 卓

第一原理計算

P62

系の各構成元素とその構造のみから系の電子状態を決める。



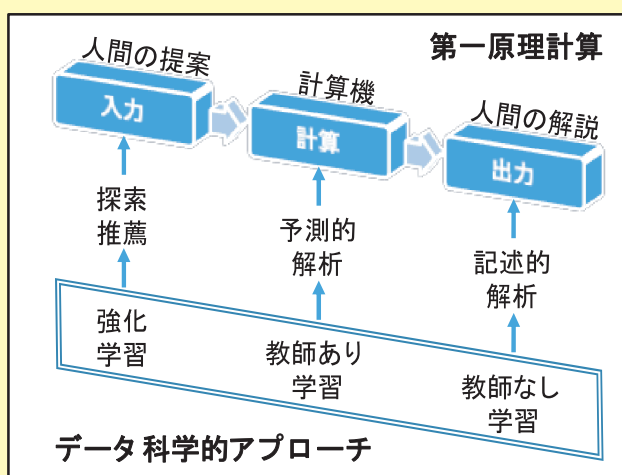
(a) NaCl全体の電子分布

(b) 中性原子の電子分布との差。それぞれ3s軌道, 3p軌道の寄与によって確率分布に構造が生じている。

図1 第一原理計算によるNaClの電子確率分布

データ科学的アプローチ

P63



データ科学の発達は、より効率的・システムティックな知識へのアプローチを可能にし、それを第一原理計算に活用することによって新しい方法が提案されている。

図2 データ科学的アプローチと第一原理計算との融合