

物性研究所談話会

標題：機械学習入門　－科学者が機械学習に目覚めるとき－

日時：2017年2月23日(木) 午後4時～

場所：物性研究所本館6階 大講義室 (A632)

講師：大関 真之

所属：東北大学大学院情報科学研究科

要旨：

世界中で隆盛を極める人工知能、機械学習の発展、特に有名な、深層学習に興味を素朴に持っている人々も多いだろう。その中身は大量のデータから法則を抽出することにある。そう聞くと例えば物理学者はこれまでやってきた実験と理論の両輪による科学的営みそのものではないかと感じるだろう。物理学に限らず自然科学の多くはそうやって進めてきたはずだ。その意味で機械学習に興味を抱くのは自然なのだ。うまく扱うことでこれまで以上のスピードで研究を進めることができるはずだ。データから本質的な部分を見える形で取り出せる技術として重要視されるスパースモデリングを中心に、少ない情報から本質的な部分を明らかにすることで、大きな情報利得を得る圧縮センシングなど、今後のデータ駆動科学において重要なキーテクノロジーを紹介する。

備考：【講師紹介】大関先生は、有限次元スピングラス理論など統計力学を軸とした理論物性研究に加えて、機械学習・データ駆動科学・ビッグデータといった分野への研究活動を積極的に展開されている若手研究者です。また、「機械学習入門」「量子コンピュータ」「人工知能」等に関する一般向けの本も執筆されており、その解り易い解説にも定評があります。今回の談話会では、まずは「機械学習」とは何か、そして、この技術が物性研究へいかに展開されて行くか、その展望について語っていただきます。当該分野の動向を探る上での絶好の機会と言えるでしょう。

標題：物性研談話会&森野レクチャー「Molecular Surface Science: Uncovering Reaction Mechanisms in Electronics and Catalysis」

日時：2017年3月13日(月) 午前11時～午後0時

場所：東京大学 柏図書館メディアホール

講師：ステイシー・ベント教授

所属：スタンフォード大学化学工学科

要旨：

Surface and interface science serves as the foundation for numerous applications, ranging from microelectronics to bio-sensing to heterogeneous catalysis. Surface chemistry thus informs important technologies of today that drive multibillion dollar industries, and understanding the fundamental chemistry at a molecular level is key to future advances. This talk will examine my group's studies of molecular surface science in two key areas: electronics and catalysis.

On the topic of electronic materials, I will describe our work on the adsorption of organic molecules at semiconductor surfaces, aimed at the ultimate goal of controlling the chemical and electrical properties of these hybrid systems. The presentation will examine model systems of molecular adsorption on the Ge(100)-2×1 surface using a combination of experimental and theoretical methods. The reactivity of different functional groups will be described, with particular focus on reactions of bi- and trifunctional molecules. The results help elucidate the way in which the molecular structure as well as the identity of the reactive moieties affects the product distribution of the molecules upon adsorption.



On the topic of heterogeneous catalysis, I will describe recent studies on supported metal catalysts for the conversion of synthesis gas ($\text{CO} + \text{H}_2$) to synthetic liquid fuels and high-value chemicals. The interactions between the metal, the support and promoters, and adsorbed reaction intermediates are of particular interest. Experimental and theoretical studies provide strong evidence of structure sensitivity in syngas conversion on Rh catalysts. Further, atomic layer deposition is applied as a method to achieve atomic scale catalyst design, allowing study of the important effects of promoters and supports, which strongly influence the performance of Rh catalysts. Our results show that the activity and selectivity is highly sensitive to the identity as well as the placement of the promoters, and in situ spectroscopy combined with theoretical calculation helps provide a mechanistic understanding of the relationship between surface reaction intermediates and the desired products.