

状態密度AI高速計算

京大ナノ粒子不均一性反映

水素触媒に応用

京都大学の難波優輔特定准教授らは、電子状態密度の計算を5万5000倍高速化するAI（人工知能）技術を開発した。ナノ粒子（ナノは10億分の1）のエッジ（縁）などの不均一性を反映した予測が可能になる。従来は計算時間が長くなるため不均一性が考慮されていなかった。水素製造触媒などの開発に用いて脱炭素に貢献していく。

55-405個の原子	精度が低かった。状態
できたナノ粒子の状態	密度の重心が第一原理
状態密度を第一原理計算	密度をAIで推定し、
で求めてAIに学習させた。	予測精度を検証した。
ナノ粒子24個	物質内部（バルク）
分、5103原子の状態	にある原子の状態密度
密度を計算してデータ	を学習させた従来のAI
セットとして用い	Iはエッジ部分の予測
	状態密度を学習させたA

Iはエッジ部分の原子の状態密度を正しく計

算できた。ナノ粒子に延びにくく、有利にはバルクと平面表面に。原子数をさらに20倍にしたら条件では計算速度は5万5000倍となった。

AIで第一原理計算を代替すると計算速度が向上する。9142原子の場合は3300倍になった。規模を大きくしても計算時間が提案する。

ナノ粒子触媒の形状や元素配置などの膨大な組み合わせを解析できる。脱炭素や排ガス浄化などの触媒探索に提案する。