

会員・非会員の皆様へ：会員限定の Zoom での光機能材料研究会第 106 回ウェブ講演会のご案内
「データサイエンス・マテリアルズインフォマティクスの最新技術・応用展開」 **会員でない方は登録・入室できません**
2026 年 1 月 20 日（火）11:00～16:55（入室 10:45）◆配布資料はございません。
◆会報光触媒 78 号の特集が参考になります。◆本案内は非会員に方にもお送りしています、非会員の方は、この機会に
HP（pfma.jp）掲載の入会のご案内をご覧ください、ご入会をご検討いただければ幸いです。
◆主催：光機能材料研究会事務局 〒278-8510 千葉県野田市山崎 2 6 4 1

東京理科大学スペースシステム創造研究センター光触媒国際ユニット内 <http://pfma.jp/>
「プログラム」（ご講演 30 分、質疑応答 5 分） 座長 山下晃一（1 講～3 講） 片山建二（4 講～6 講） 畑中美穂（7 講・8 講）
11:00 開会にあたって 光機能材研究会会長 藤嶋 昭

1 講 11:05～11:40 「固体触媒の設計を目指した理論・データ科学研究」 北海道大学 清水研一
本講演は、理論データの系統的な取得、理論データの機械学習による設計指針提案、実験データの機械学習による新触媒開発のための方法論と実施例を解説する。

2 講 11:40～12:15 「自動実験技術とデータサイエンスを活用した蓄電池材料開発」物質・材料研究機構 松田翔一
近年の自動実験技術とデータサイエンスの進展により、蓄電池性能を最大化する材料組成を効率的に発見するための方法論が確立されつつある。本講演では、自動実験技術を活用した電解液探索手法の概要について紹介する。

3 講 13:15～13:50 「機械学習と分析化学データを組み合わせた光電気化学水分解材料開発」
—Operational SHAP 法による実験操作法の革新— 中央大学 片山建二
機械学習と分析化学データを融合し、限られた実験データから光電極性能を高精度に予測する手法を開発した。新たに提案した Operational SHAP 法により、各実験操作が材料特性や性能に与える影響を可視化し、合理的な材料最適化指針を提示する。

4 講 13:55～14:30 「ランタノイド発光材料の機構解明とデータベース構築による材料探索の加速」
慶應義塾大学理工学部化学科・分子科学研究所 畑中美穂
ランタノイド(Ln)錯体は遷移金属錯体よりも構造が多様であり、新材料の設計は容易ではない。
本講演では、我々が開発した Ln 錯体の量子化学計算データのデータベースとそれを用いた材料設計について紹介する。

5 講 14:30～15:05 「ダブルペロブスカイト太陽電池材料の非鉛化に向けてのマテリアルズ・インフォマティクス」
横浜市立大学 山下晃一
ペロブスカイト太陽電池材料の非鉛化という喫緊の課題に対し、第一原理計算と機械学習を融合したマテリアルズ・インフォマティクス研究の例を紹介する。

6 講 15:05～15:40 「機械学習とシミュレーションを援用した有機半導体分子のフロー光有機合成と実デバイス評価」
大阪公立大学 池田 浩
有機光化学が専門である講演者が、学内協力者と科研費の支援で行った有機半導体のマテリアルズ・インフォマティクスに関する研究例を紹介します。データサイエンスの初心者であっても、面白く価値ある研究が展開できます！

7 講 15:45～16:20 「化粧品分野におけるデータサイエンスの応用展開—量子コンピュータを用いた処方生成アルゴリズムの開発—」
（株）コーセー 帯金 駿
化粧品の処方開発は、原料とその配合量の膨大な組合せからの選択の繰り返しである。本講演では、このプロセスを計算課題に置き換え、さらに量子コンピュータを組合わせた全く新しい化粧品開発の事例について紹介する。

8 講 16:20～16:55 「医学領域における機械学習・LLM の実装と課題」 横浜市立大学 清水沙友里
医学領域においても、機械学習や大規模言語モデルなどを用いた研究が本格化してきました。
本講演では、センシティブなデータを含む医学系研究において、いかにこのような技術を取り入れるか、また Local LLM の環境構築に向けた今後の展望についてみなさんと議論を深めたいと思います。

「参加申込書」完全事前予約制：申込締切 1 月 14 日（水） **※会員でない方は登録・入室できません。**
「会員限定の 106 回ウェブ講演会：データサイエンス・マテリアルズインフォマティクスの最新技術・応用展開」定員になり次第締め切り

資格	<input type="checkbox"/> 法人会員 3 名まで無料 <input type="checkbox"/> 個人会員（学会会員）ご本人様無料 <input type="checkbox"/> 学会会員・本講演会講師の研究室所属の学生無料・研究室ごとの登録厳守		
社名・所属・氏名	「社名・所属」 「氏名（ふりがな）」		
住所	〒		
FAX		TEL	
e-mail			

申込先：FAX：03-5913-8549（受付確認のご返信はいたしませんのでご了承ください。）
※お申込みいただいた皆様には開催日が近くなりましたらアクセス用 URL を通知いたします。
なお、アクセス用 URL はご登録者以外に絶対に知らせないでください。 **※会員でない方は登録・入室できません。**