

「マテリアルズ・触媒インフォマティクスと機能材料・触媒開発」

日時：2019年5月24日(金) 12:45~17:00 (受付12:30)

会場：東京理科大学森戸記念館 地図：<http://www.tus.ac.jp/facility/morito/>

〒162-0825 東京都新宿区神楽坂4-2-2 (JR線「飯田橋」駅西口、東京メトロ有楽町線・南北線・東西線「飯田橋」駅)

参加費：非会員8,000円(当日現金払い)、光機能材料研究会会員無料(3名まで) 学生無料(予稿集別途有料)

予稿集：受付にて配布

申込先：光機能材料研究会事務局 〒278-8510 千葉県野田市山崎2641

東京理科大学光触媒国際研究センター内 FAX：04-7122-1742

「開催にあたって」

マテリアルズインフォマティクスとキャタリストインフォマティクスの根本のアイデアは材料・触媒データより材料・触媒設計につなげるところにある。その重要な3つの概念は①データベース②機械学習を導入しデータから材料・触媒設計につなげること③データベースからデータ科学を使った材料・触媒設計を一括で行える環境(プラットフォーム)の整備である。この3点が相乗的に融合されることが分野発展の基盤となる。

マテリアルズインフォマティクスの適用例の1つに物性値の高速算出化がある。もう1つのマテリアルズインフォマティクスの適用例としては特定の物性値を満たす材料予測がある。

こうしたマテリアルズ・触媒インフォマティクスと太陽電池・2次電池・機能材料・触媒の研究開発について、第一線でご活躍の研究・技術者の方々にご講演いただく。

「プログラム」

12:45 開会にあたって

光機能材料研究会会長 藤嶋 昭

12:50-13:35 「マテリアルズ・インフォマティクス：機能無機材料探索に於けるコンピュータ・サイエンティストの展望」

物質・材料研究機構、アルバータ大学 田中 譲

機能無機材料探索のためのマテリアルズ・インフォマティクスでは、対象データ集合が不均質で、回帰分析の前に適切に分割を行う必要がある。分割後の集合は小さく、系統的に定義できるような記述子はない。これらの課題をいかに解決すべきかを展望する。

13:35-14:20 「材料インフォマティクスによる蓄電池材料の探索・解析」名古屋工業大学 中山将伸
材料計算とインフォマティクスを連携させることにより、新材料の発見や見落とししていた材料設計指針につながる情報の獲得に結びつくことがある。蓄電池用イオン導電性セラミックスの研究を題材に、インフォマティクス活用事例を紹介する。

14:30-15:15 「高分子太陽電池のマテリアルズ・インフォマティクス」 大阪大学 佐伯昭紀

P型高分子とn型分子からなる高分子太陽電池の変換効率は、化学構造に加え、プロセス条件や薄膜微細構造によって大きく左右される。本講演では機械学習と実験的スクリーニング法を用いた素子評価と材料開発について紹介する。

15:15-16:00 「消光経路のデータベースと機械学習を用いるランタノイド発光材料の理解・分子設計」

奈良先端科学技術大学院大学 畑中美穂

量子化学計算による材料の機能予測は、効率的な材料設計に不可欠であるが、複雑系への適用は困難であるのが現状である。本講演ではデータ駆動型の方法によって発光強度を予測する試みについて概説する。

16:05-16:50 「キャタリストインフォマティクスと触媒開発」

(株)日本触媒 右田敬哉

日本触媒において、機械学習技術を触媒開発に適用し成分定量や性能の要因推定、また最適化を行った事例を紹介する。開発効率を上げるためには種々の実験データや背景情報も含めた多面的な解析が有効であることを一例として提供したい。

16:50 閉会にあたって 光機能材料研究会事務局

「参加申込書」(準備の都合上、5/20(月)までにお申し込みください。定員になり次第締め切り。当日受付不可)

資格	<input type="checkbox"/> 非会員：8,000円 <input type="checkbox"/> 会員(法人会員3名まで無料、個人会員本人様無料) <input type="checkbox"/> 学生：無料(予稿集別途有料) <input type="checkbox"/> 要 <input type="checkbox"/> 不要：チェックを入れてください	
社名		
所属		
氏名(ふりがな)		
住所	〒	
FAX	「TEL」	
e-mail		

FAX 04-7122-1742

(受付確認のご返信はいたしませんのでご了承ください。直接会場にお越しいただければ幸いです。)