

「光機能材料研究会会員の皆様へ：会員限定の Zoom でのウェブ講演会のご連絡」

光機能材料研究会第 87 回講演会

「データサイエンス・デジタル技術と触媒・機能材料研究開発」

日時：2022 年 6 月 8 日（水）13 時～16 時 25 分（入室：12 時 40 分）

（会員限定の ZOOM によるオンラインセミナーのご案内）

※本講演会は、新型コロナウイルスの状況に鑑みまして、会員限定の Zoom でのウェブ講演会とさせていただきます。この案内は会員でない方にもお送りしています。会員でない方は、この機会に HP (pfma.jp) 掲載の入会のご案内をご覧ください、入会をご検討いただければ幸いです。お申込みいただいた参加登録者の皆様にアクセス用 URL 等をお知らせいたします。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。

◆予稿：会報光触媒67号を使用

◆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 <http://pfma.jp/>
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 FAX：04-7122-1742

◆プログラム（講演概要）

13:00 開会にあたって

13:05-13:55 「データサイエンスの基礎と触媒・機能材料創製」 北海道大学 高橋啓介

材料・触媒データを活用したマテリアルズインフォマティクスが材料・触媒開発に活発になっている。本講演では、マテリアルズインフォマティクスに必要なデータ解析環境・データベース・データ解析・材料設計までの道筋について紹介する。また触媒開発・設計の応用事例も含めて講演する。

13:55-14:30 「データサイエンス・デジタル技術の進展と固体触媒開発」 北海道大学 鳥屋尾隆

理論・実験材料科学とデータ科学の融合領域が注目されているが、触媒作用（複合化学的現象）への展開は萌芽的段階にある。講演では、触媒化学とデータ科学の境界領域に関する文献と我々の取り組みを例に本分野の現状を紹介する。

14:35-15:10 「データサイエンスを利用した全固体電池材料の効率的探索」

名古屋工業大学 中山将伸

無固体電解質を用いた全固体電池が新しい安全なエネルギー貯蔵デバイスとして上市され注目されている。今後の材料研究開発の加速が国際競争を勝ち抜くために必要でありマテリアルズ・インフォマティクスなどの技術が注目されている。本講演では、データベース未登録材料の探索、あるいは実験との連携に注目したマテリアルズ・インフォマティクスに関する成果を紹介する。

15:10-15:45 「データサイエンスを活用した次世代太陽電池の研究開発」 大阪大学 佐伯昭紀

次世代太陽電池としてペロブスカイト太陽電池や有機薄膜太陽電池の研究開発が進められている。特に有機半導体は多くの化学構造や素子化におけるプロセス因子が存在し、従来の開発手法では探索範囲に限界がある。そこで、機械学習を用いた分子設計に注目が集まっており、本講演では筆者らの最近の成果について紹介する。特にデータ数、カテゴリ、分子記述子と実験との比較を議論する。

15:50-16:25 「機械学習を用いる光機能材料の設計と理解」

慶應義塾大学 畑中美穂

従来の機械学習を用いない機能性材料設計では、化合物をカテゴリーに分けて、各カテゴリー内で機能に関わる因子を議論していた。この考え方に沿った機械学習（分類と回帰を同時の実施）を行えば、機能の予測に加え、機能の理解の一助になると考えられる。本講演では、セリウム錯体の励起状態に着目し、基底状態の情報から励起エネルギーを予測する機械学習モデルを構築することで、同時に励起の性質に関する情報を引き出す試みについて紹介する。

「参加申込書」申し込み締め切りは6月1日（水）です。なお、定員になり次第締め切ります。

資格	<input type="checkbox"/> 法人会員 3 名まで無料 <input type="checkbox"/> 個人会員（学術）ご本人様無料		<input type="checkbox"/> 学生無料 （予稿集なし：研究室単位で参加者名をご登録ください）
社名			
所属			
氏名（ふりがな）			
住所	〒		
FAX		TEL	
e-mail			

お申し込み先：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。）
録音・録画およびそれに類する行為は禁止事項です。