

# 第18回 日本写真学会光機能性材料 **Online** セミナー DX,MI グリーンイノベーションに向けた新たな取り組み Ver.2

社会の持続的な発展を目指したグリーンイノベーションには、新たな機能性材料の開発が極めて重要です。同時に、新たな材料開発の手段として、デジタル・トランスフォーメーション (DX) とマテリアルズ・インフォマティクス (MI) が大きな注目を集め、現在活発に研究されています。そこで、第18回セミナーでは、「DX,MI グリーンイノベーションに向けた新たな取り組み」と題して、DX、MIを活用した機能性材料の開発に関して、基礎から応用展開までを俯瞰的に理解することを目的とした国内第一線の先生方によるオンラインセミナーを企画しました。機能性材料に関連する研究者の良い情報交換の場として貢献いたしたく、多数の方々のご参加をお願いいたします。

## セミナー主題「DX,MI グリーンイノベーションに向けた新たな取り組み」

**【日 時】**：2022年12月8日(木) 10時00分～16時10分

**【会 場】**：オンライン開催

**【主 催】**：(一社)日本写真学会 光機能性材料研究会

**【協 賛】**：日本化学会、応用物理学会、高分子学会、光化学協会、電気化学会、日本表面科学会  
有機合成化学協会、日本光学会、照明学会、日本色彩学会、電気学会、色材協会、  
電子情報通信学会、映像情報メディア学会、画像電子学会、日本画像学会、日本印刷学会(予定)

### — セミナープログラム —

9:55-10:00 開会あいさつ

セミナー実行委員

10:00-11:00 基調講演 データ駆動型化学が導く研究・開発のパラダイム変革

奈良先端科学技術大学院大学 : 船津 公人

データ駆動型化学とはデータに語らせる手段である。データ駆動型化学のポテンシャルに世界的に注目が集まるとともに、それにもとづく様々な新しい研究の方法論の提案と成果が随所で報告されている。データ駆動型化学を通して我々はデータに語らせる術を得つつある。しかし、データに語らせるには我々研究者の学術的および社会的な視点からの価値観、つまり何のために何をしたいのかという思想性も同時に求められている。研究・開発のやり方のサイクルが変わる中で、データおよび手法を操る人の見識のパラダイムシフトも大切になってくることを報告したい。

11:00-12:00 講演1 実験化学者が挑む小規模データに対する MI～熟練の経験と勘は不要になるのか?～

慶應義塾大学 : 緒明 佑哉

実験化学者である我々の研究グループで行った、MIと小規模データの効果的活用に関する研究について紹介する。具体的には、層状物質のはく離によって得られるナノシート材料の収率や構造制御、有機リチウムイオン二次電池電極の物質探索と性能向上についての事例を中心に紹介し、実験を主体とした研究へのMIの活用方法について議論したい。

12:00-13:00 (昼休み)

13:00-14:00 講演2 マテリアルズ・インフォマティクスを用いた富士フィルムにおける光吸収材料の開発

富士フィルム株式会社 : 井野 雄介

光吸収材料の開発においては、用途に合わせた屈折率やバンドギャップを示す物質を選択することが重要である。これらの材料探索におけるマテリアルズ・インフォマティクス(MI)技術について、当社での取り組みを交えて紹介したい。

14:00-15:00 講演3 機械学習を活用した新規金属有機構造体(MOF)の合成条件探索

関西学院大学 : 田中 大輔

金属イオンと架橋配位子がフレームワークを形成する金属有機構造体(MOF)は次世代の多孔性材料として高い注目を集めている。しかしながら、全く新規のMOFの結晶構造をデザインして、目的とするフレームワークを合成するには、依然として地道な結晶化条件の探索が必要となるのが現状である。本発表では新規MOFの合成条件探索にMIの手法を活用することで、効率的な新材料の開発を行う手法について報告する。

15:00-15:10 (休憩)

15:10-16:10 講演4 マルチスケール光学応答計算と機械学習を用いたナノ粒子分散材料開発の加速

コニカミノルタ株式会社 : 大澤 耕

ナノ粒子分散材料は冷暖房の省エネルギー化を実現する遮熱フィルム、高効率太陽電池、オンデマンド加飾が可能で廃棄の少ない色材などへの応用が期待されているが、所望の光学応答を実現するまでに多くの開発期間を要する問題があった。本講演では、NEDO超先端材料超高速開発基盤プロジェクト(P16010)における、計算科学・機械学習・高速試作プロセスを活用した、ナノ粒子分散材料開発の加速事例について説明する。

16:10 閉会あいさつ

セミナー実行委員

