

計算化学とマテリアルインフォマティクスによる機能性材料の物性予測と設計

高羽 洋充 先進工学部 環境化学科 教授

キーワード:分離材料、酸化物蛍光体、電池材料、分子設計、シミュレーション、機器分析

概要

機能性材料の分析や設計に、計算化学、データマイニング、人工知能(AI)などのコンピュータシミュレーションを利用したアプローチが関心を集めている。コンピュータ化学では、仮想的な材料の物性や機能を予測して、実験開発を効率化する。また人工知能の利用では、画像解析やスペクトル解析など、これまでは経験と知識に依存していた作業を自動化し、材料開発を効率化することが可能である。

当研究グループでは、分子シミュレーションや量子化学などをベースとして、機能性材料の開発を目的とした実践的なコンピュータ化学のアプローチの開発と応用研究をおこなっている。

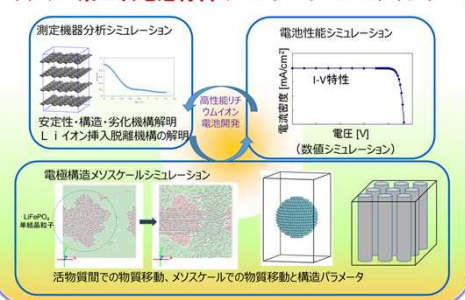
アピールポイント

- 複数のシミュレーション方法に精通したマルチスケールシミュレーションを実施。
- 情報科学と計算化学を融合させたマテリアルインフォマティクスを実施。
- 機器分析の理論シミュレーションと分子構造シミュレーションの連携による材料探索。
- 計算化学スクリーニングによる新規材料の迅速設計。
- AIと解析シミュレーションの連携による材料設計。

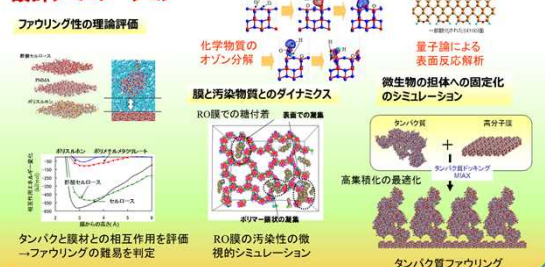
利用・用途 応用分野

- 酸化物蛍光体 ● 触媒反応解析 ● ペロブスカイト太陽電池 ● 潤滑油
- ファウリング抑制材料 ● ガス分離膜 ● 水処理膜 ● テラヘルツスペクトル
- リチウムイオン電池材料 ● 電子顕微鏡の画像解析

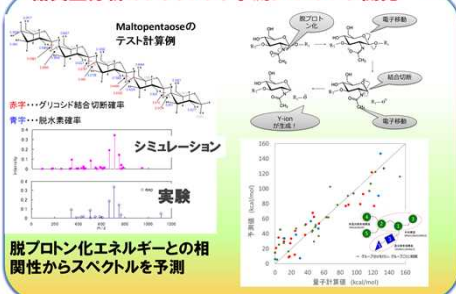
リチウム系二次電池材料のマルチスケールモデリング



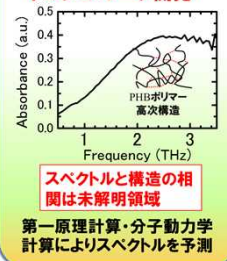
分離膜材料の解析と設計シミュレーション



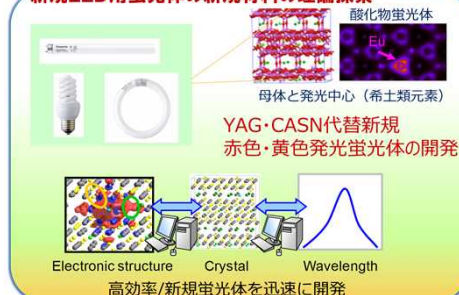
糖質量分析のフラグメント予測シミュレータ開発



テラヘルツ波のスペクトルシミュレータ開発



新規LED用蛍光体の新規材料の理論探索



関連情報

- 関連論文 = 高羽洋充, "計算化学融合型マテリアルズ・インフォマティクス", 日本化学会, 34(4) (2016) 105-108.
高羽洋充, "マテリアルインフォマティクスを応用した計算化学的材料研究", 触媒, 59(4) (2017).
高羽 洋充他, "逆浸透膜のファウリングシミュレーション", 膜 (MEMBRANE), 39(6) (2014) 366-371.
- 関連 URL = 高羽研究室 <http://www.ns.kogakuin.ac.jp/~bt13452/>