



# 新材料を逆設計する リバースデザイン技術

高羽 洋充 工学院大学先進工学部環境化学科 教授

キーワード: マテリアルズインフォマティクス、機械学習、分離材料、酸化物質光体、電池材料、画像解析

## 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行なっている。

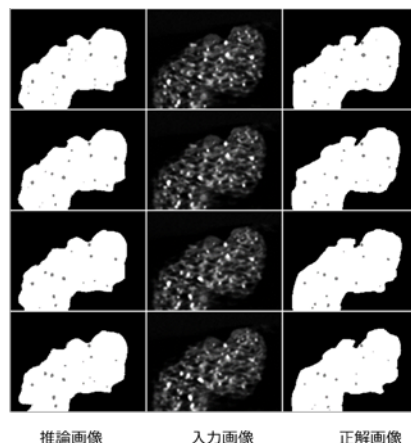
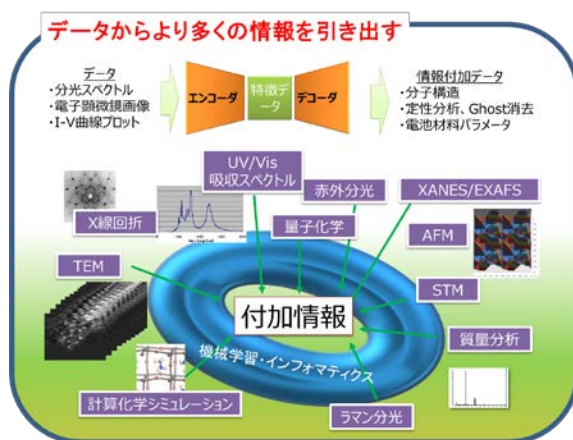


## アピール ポイント

- 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ズ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

- 酸化物質光体 ● 触媒反応解析 ● ペロブスカイト太陽電池 ● トライボロジー
- 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



## 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, "マテリアルズ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/>



環境計算化学工学研究室

## 工学院大学 研究推進室

〒163-8677 東京都新宿区西新宿一丁目24番2号 〒192-0015 東京都八王子市中野町2665-1  
TEL:03-3340-3440 FAX:03-3342-5304 TEL:042-628-4940 FAX:042-626-6726  
E-Mail: sangaku@sc.kogakuin.ac.jp URL: <https://www.kogakuin.ac.jp>

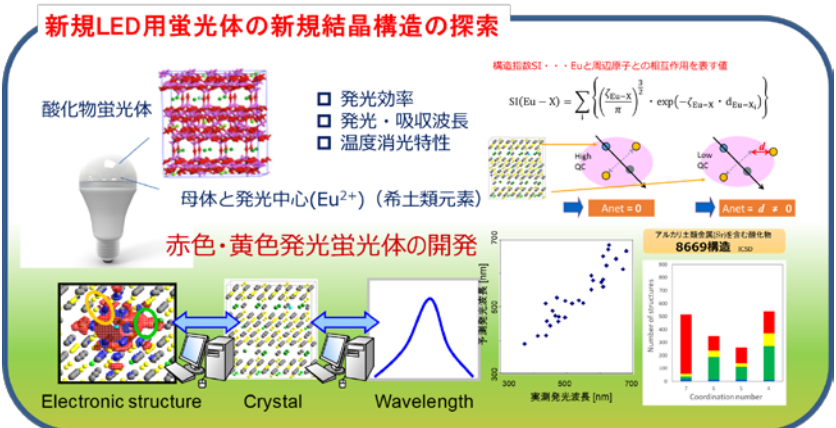
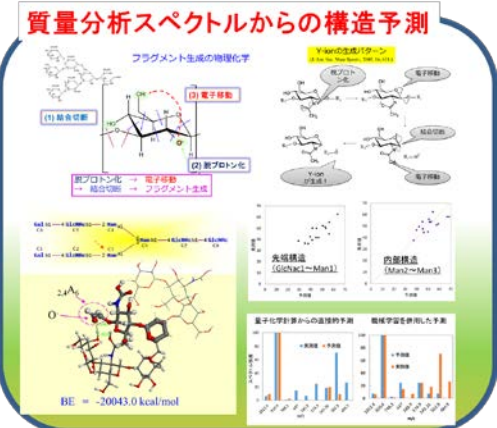
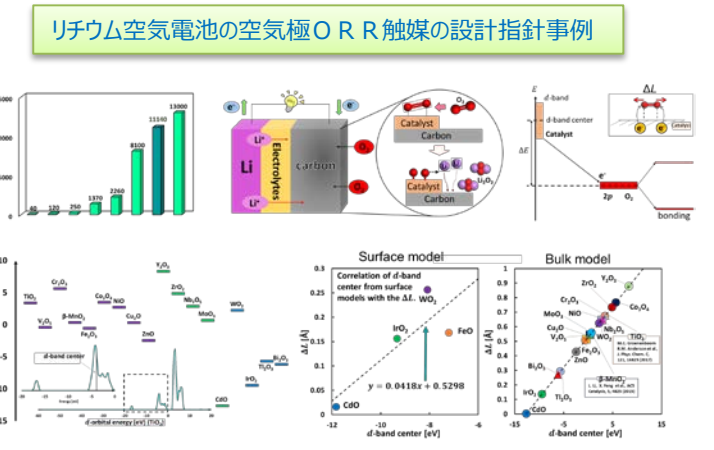
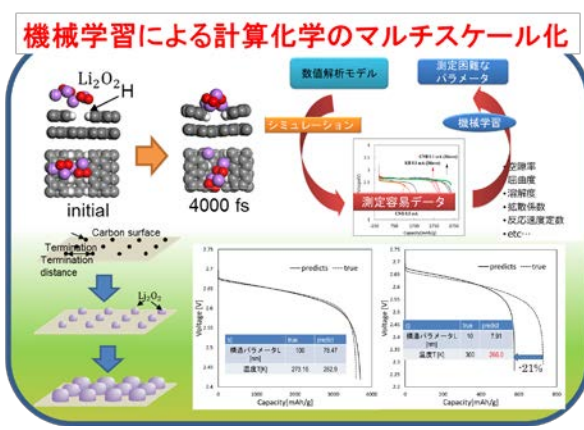
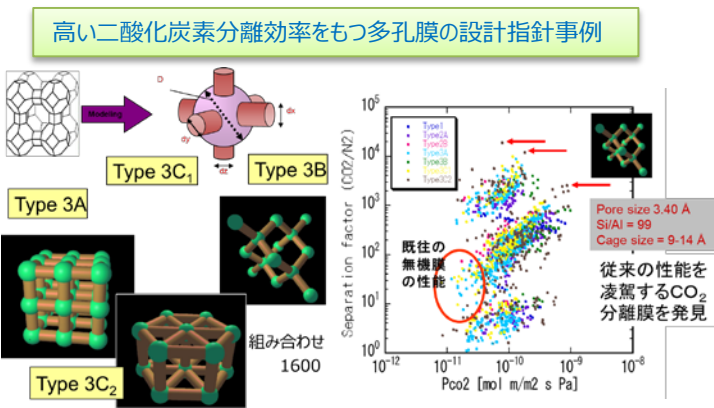
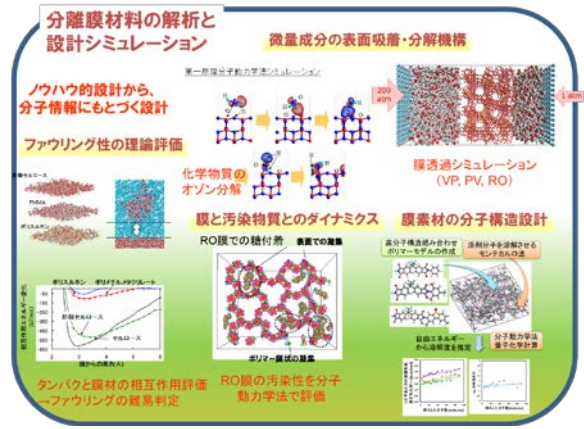


# 新材料を逆設計する リバースデザイン技術 (応用例)

高羽 洋充 工学院大学先進工学部環境化学科 教授

キーワード: マテリアルズインフォマティクス、機械学習、分離材料、酸化物質蛍光体、電池材料、画像解析

## 概要



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/>

