

製品開発における熱力学平衡物性の理論予測

特任准教授・沈 君偉

大学院先導機構 フロンティアデータサイエンス化血研寄付講座

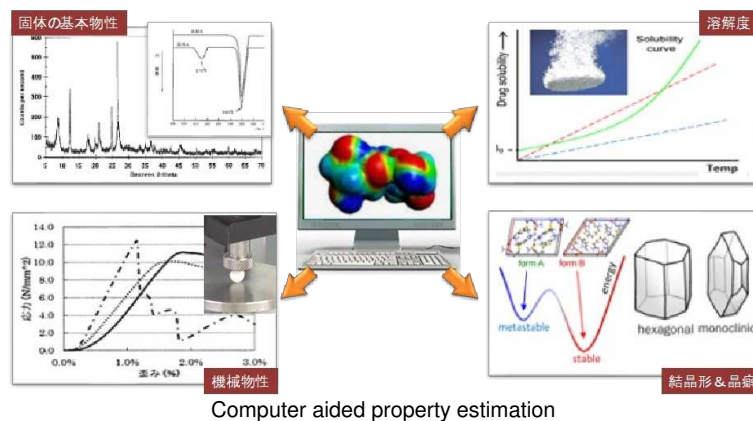
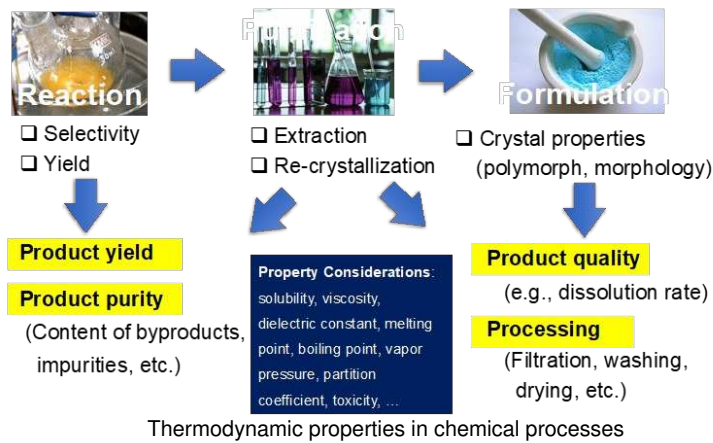
▶ 研究内容

【背景・目的】

持続可能な物質・材料の設計および製造プロセスの開発を実現するため、物質・材料の示す様々な性質を正確に評価し、その特性をマクロ・ミクロの視点から解明することが必要である。本研究では、最先端の計算科学技術を駆使し、新しい物質・材料の構造・機能の探索や製造プロセスの設計・開発に欠かせない物理化学特性および熱力学的安定性をin silico予測することを目的とする。

【研究概要】

近年計算アルゴリズムの改良や飛躍的なコンピューターの処理能力の向上により、新製品、新材料の開発の初期段階で、構造や機能、製造条件など商品およびプロセス設計に必要な基本特性の評価に計算科学技術を利用することが多くなってきた。



【応用例】

- 実験現象やメカニズムの解明、理論的裏付けの提供
- 化学反応、分離精製、晶析プロセス最適化における溶媒効果および溶剤選定
- 混合溶媒、添加物などのパーチャル、高速スクリーニング
- 気-液、液-液、固-液相平衡物性 蒸気圧、分配係数、溶解度... の予測
- 結晶構造の安定性評価および結晶成長 晶析モルフォロジー の制御

▶ アピールポイント

- 最先端の計算科学技術を活かし、物質・材料の特性を高速かつ高精度で評価する。
- 実験や観測では解釈できない複雑な現象をミクロの視点から解明する。
- パーチャル・インシリコ技術による今までの認識や経験の限界を超える新規物質の創出。

▶ 参考資料

Solvent Selection for Pharmaceuticals, Fluid Phase
Equilibria, 194-197, 771-782, 2002.

▶ キーワード

計算科学手法 量子化学 分子動力学 機械学習 熱力学平衡物性 computational scientific method quantum chemistry
Molecular Dynamics machine learning thermodynamic equilibrium properties

《ご連絡先》 コーディネータ 有田 健一 TEL 096-342-3247 FAX:096-342-3247 mail:ke-arita@jimu.kumamoto-u.ac.jp