

先端化学・材料技術部会

産業技術総合研究所
中国センター 兼 機能化学研究部門
水門 潤治

先端化学・材料技術部会

主題：「先端領域の化学技術革新への挑戦」

反応、材料、計算化学（化学企業の根幹を支えるシーズ、ものづくりの力を強化する）を切り口にして集まった以下の3つの分科会から構成。

① 高選択性反応分科会

- ・循環型社会の構築に資する触媒反応技術に関する最先端研究の技術調査
- ・新規触媒反応・触媒材料」や「先端材料・反応技術」などの技術領域。例えば、二酸化炭素を化学原料とする変換技術やクリーンエネルギー製造に資する反応技術や触媒技術、今後の発展に期待される機械学習など
- ・化学工学技術セミナーの開催

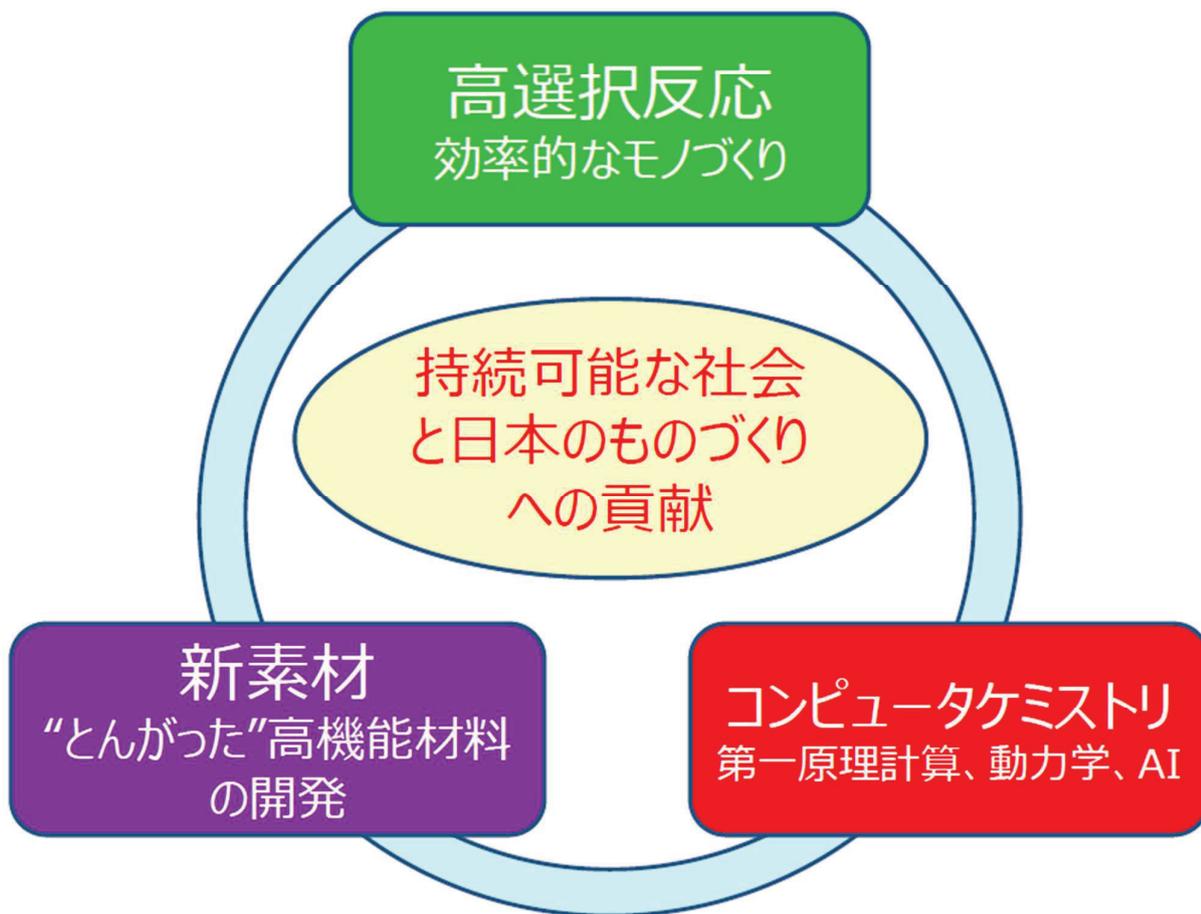
② 新素材分科会

- ・ナノ材料・高分子材料など、新たな機能を発現する「素材」に焦点
- ・「ナノ材料」「エネルギー」「エレクトロニクス」「環境調和・CO₂削減」等をキーワードとした新素材に関する先端研究
- ・先端研究テーマや研究者等のデータをデータベース化して情報共有

③ コンピュータケミストリ分科会

- ・計算化学・情報科学担当者の技術水準を向上し、研究開発を促進
- ・高分子ワーキンググループ、次世代CCワーキンググループ、情報科学ワーキンググループ
- ・外部委託調査「化学産業における生成AIの活用」を実施

先端化学・材料技術部会の目指す協働イメージ



JACI技術部会活動 交流会

先端化学・材料技術部会 高選択性反応分科会

2025年 7月4日

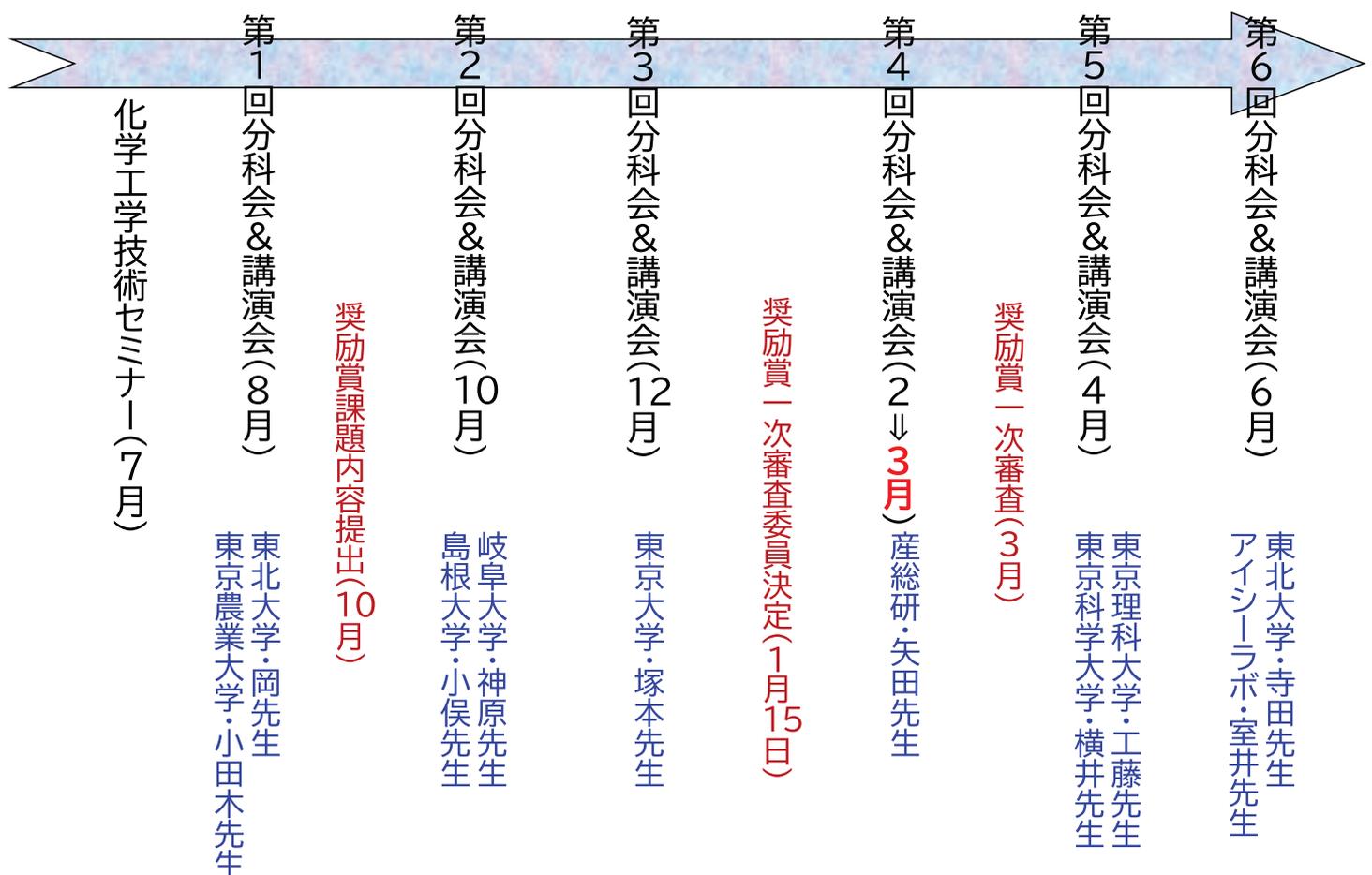
主査 河村智志
副主査 相田 冬樹

具体的な活動の概要

- ◆分科会 : 6～7回/年
講演会、現地分科会、技術セミナー、外部委託調査等の企画
- ◆講演会 : 6回/年(1回/2ヶ月)、通常2件/回の講演を企画
メンバーが注目する研究分野、研究者を選定
※対面+web会議形式で実施中
- ◆現地分科会: 1回/年、企業、大学、公的研究機関等を訪問(全て新素材と共催)
2017年度: 産総研中国センター
2018年度: 花王和歌山事業場
2023年度: 大崎クールジェン、CR実証拠点
2024年度: Nano Terasu、東北大学
- ◆技術セミナー: 1回(3講義を3日間で開催)/年
企業の研究員を対象とし、化学工学に関する基礎的な講義を大学の先生にお願いしている。
- ◆研究奨励賞 : 1回/年
化学産業に革新をもたらす画期的な触媒(技術)研究を奨励している。テーマ設定、一次審査を担当。

高選択性反応分科会 R06(2024)年度の活動

活動期間:2024年7月～2025年6月



①講演会について(1回/2か月)

- ・講演者、講演内容などは、メンバーからの希望を重視して選定
- ・その分野の最新の研究成果を含めた講演

様々なテーマで実施、聴講者が100名を超えることも！

R06～07年講演一覧

2024/8	岡先生 東北大学「クリーンエネルギー製造を担う有機材料の開発」 小田木先生 東京農業大学「官能基複合型鎖状グアニジン触媒による環境調和型物質変換反応の開発」
2024/10	神原先生 岐阜大学「放電プラズマによるCO ₂ 分解とアンモニアによるCO ₂ 固定・リサイクルプロセス」 小俣先生 島根大学「メタノール合成プロセス開発における機械学習の利用」
2024/12	塚本先生 東京大学「高効率メタンドライリフォーミングに向けた量子サイズクラスター触媒の設計」
2025/3	矢田先生 産総研「機能性化学品の連続生産・インフォマティクス」
2025/4	横井先生 東京科学大学「化学産業の脱化石資源化に資するゼオライト触媒プロセス」 工藤先生 東京理科大学「水を電子源とした二酸化炭素還元活性な粉末光触媒の開発」
2025/5	室井先生 アイシーラボ「CO ₂ 削減触媒反応」 寺田先生 東北大学「キラルリン酸を有機分子触媒とする不斉合成」

事前アンケートなど分科会メンバーの意向を尊重、現地では直接講師とも対話可能

9

②現地分科会(1回/年)

◆2024年度:Nano Terasu、東北大学 2025/5/13開催



高選択性反応分科会:7名
新素材分科会:12名
JACI:2名



Nano Terasuで行われている、先進研究のご紹介を頂き見学。
東北大学では、岡先生の新規素材/触媒のご研究、メニコン(株)伊藤様ナノテラス活用事例、東北大学 小田様の産学連携体制のご講演を頂き、充実した現地分科会となりました。
懇親会も大変盛り上がりしました。

最先端の重要研究拠点の活動情報、同業他社の方々との交流の機会を提供

10

③技術セミナー(1回/年)

フラスコからプラントへの橋渡しをサポートすべく、企業の研究員を対象とし、化学工学に関する初歩的な講義を実施。

R06年度実施 ※対面+Web形式、3日間で開催

申込人数

日程	講義	講師	申込人数
7/17 10:00~17:00	6時間でわかる化学工学の基礎 TOICHE 48	早稲田大 斎藤 先生	89名
7/19 10:00~14:00	伝熱	静岡大 木村 先生	71名
7/26 10:00~17:00	触媒反応工学	静岡大 福原 先生	81名

今年度の開催日: **2025/7/25, 29, 30**

協会HPで
受講者募集中

④研究奨励賞(1回/年)

社会的ニーズを踏まえ化学産業に革新をもたらすと思われる画期的な反応に関わる研究を課題に設定

R06年度「サステイナブルな社会の実現に向けた革新的反応技術に関する研究」

受賞者: 京都大学 田部 博康先生「耐熱性とイオン伝導性を併せもつ配位高分子を用いた革新的酸化還元反応系の開発」

11

高選択性分科会

☆メンバーのアイデアを基に様々な活動を行っております。

☆当分科会の活動内容は、様々な技術や分野と関わりがあるため、他分科会、他技術部会とも技術交流を図り、活発に活動して行きたいと考えております。

☆情報収集のみならず、活動を通じた人脈形成、人材育成の場としても有用です。

☆年齢、専門分野など問いません。興味がある方の参加をお待ちしております。

どうぞよろしく願いいたします。

新素材分科会では、エネルギー・環境・資源などの諸問題を解決するため、ナノ材料、高分子材料をはじめとする新しい「素材」に焦点を当て、講演会、技術セミナー、現地分科会等の企画を通して、産官学の連携・交流を推進しています。

活動を通じて、独自性あふれる「とんがった材料」を紹介することにより、わが国の「ものづくり」を一層強化し、新たな産業を創出するための一助になればと考えています。

<活動の概要> (詳細は次ページ以降で紹介します)

- ★ 分科会を1～2か月毎、JACI会議室またはオンラインで開催します。今後の具体的活動内容をメンバーで議論し、講演会・現地分科会・技術セミナーなどを企画します。
- ★ 講演会を年6回程度、JACI会議室またはオンラインで開催します。
- ★ 新素材の基礎的な技術から最近のトピックスまで講義する技術セミナーを開催します。
- ★ 新素材に関する外部委託調査を適宜行なっています。
- ★ 年1回、公的研究機関や企業等を訪問する現地分科会を開催します（再始動）。
- ★ 新化学技術研究奨励賞では、「新素材」についての募集を実施しています。

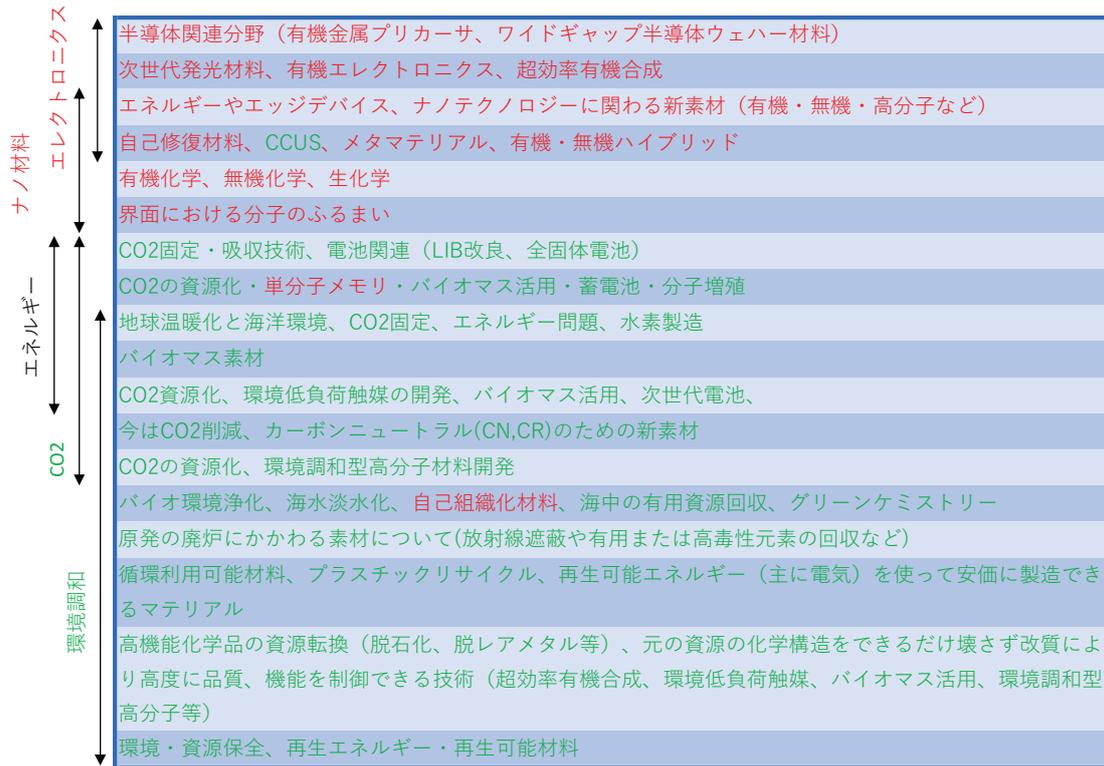
13

<分科会について> 所属メンバー：43名（2025年6月現在）

- ★ 1～2か月に1回のペースで、JACI会議室またはオンラインで開催しています。
- ★ 分科会活動方針・講演会・セミナー等について意見・希望を募り、これを集約して企画と運営を進めています。
- ★ メンバーの興味は有機、無機、複合材料、天然材料など多岐にわたっており、用途別・産業別への適用も含めると極めて多様な話題を取り扱っています。
- ★ 様々な技術分野・産業分野を支える「素材」に焦点を当てるところが特徴です。

14

<分科会について> 所属分科会員のコメント集約に見る関心分野



★ 新素材分科会では、必ずしも出口製品にこだわらず、日本発のオリジナリティーの高い新素材研究を求め、今後も活動を実施していきます。

<講演会/勉強会・技術セミナーについて>

★ 講演会/勉強会を年6回程度、JACI会議室またはオンラインで開催しています。

★ 講演会/勉強会 : 年6回程度、気鋭の先生方による最新のトピックスの講演

★ 技術セミナー : 年1~2回、分野の第一人者による基礎から直近の話題まで

★ 分科会で最新情報を共有し、議論しながら持ち回りで企画しています。

★ 想定材料の出口に応じて、適宜他の分科会との共同開催や、その効果の共有化を図りながら進めていきます。

<最近の開催実績>

講演会/勉強会

開催年月	講師	分野	演題
2025年5月	東北大学 伊藤恵利 教授	放射光 × コンタクト	放射光の光で解き明かすコンタクトレンズの謎
2025年5月	東北大学 岡弘樹 准教授	エネルギー × 全有機材料	社会問題解決に貢献できる機能性有機材料の創製
2025年3月	名古屋工業大学 石井大佑 准教授	生物模倣 × 液体制御	バイオミメティックアプローチによる微細マイクロ構造が創る液体動的制御技術
2025年3月	京都大学 沼田圭司 教授	生物模倣 × 蛋白質解析	クモ糸の階層構造を模倣した人工シルクの創出に向けて
2024年6月	東北大学 長尾大輔 教授	ナノ粒子 × 規則配列	単分散微粒子の合成と集積の融合によって発現する機能創出
2023年10月	東京大学 江島広貴 准教授	生物模倣 × 接着剤	ポリフェノールの付着性からヒントを得た界面被覆手法と高強度水中接着剤
2023年10月	東京大学 山田鉄兵 教授	分子技術 × 熱化学電池	分子科学的熱電変換素子の構築と相転移材料や電気化学ペルチェ効果への展開
2023年8月	信州大学 佐野航季 助教	ナノ粒子 × 自己集合	静電斥力制御に基づく異方性ナノ粒子の集合構造デザイン

技術セミナー

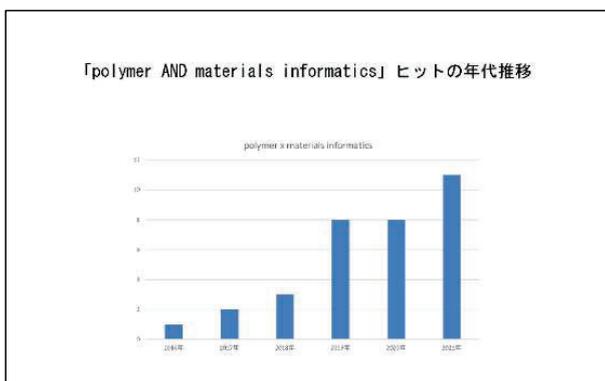
2023年5月	東京都立大 金村聖志 名誉教授	蓄電デバイスと今後の展望
2022年7月	東京理科大 堀洋一 教授	100年後のクルマとエネルギー ～モーター/キャパシタ/ワイヤレスへのパラダイムシフト～
2022年6月	電力中研 根本孝七 副本部長	次世代の電力・エネルギーネットワーク

★ 現地開催/オンライン開催 それぞれの利点を活用した企画を議論しています

<外部委託調査> 2021年度

「高分子材料分野におけるマテリアルズ・インフォマティクスの適用事例」

株式会社旭リサーチセンター



本調査は、近年急速に活用を広げているマテリアルズ・インフォマティクス（MI）に関して、高分子材料分野における先進事例を包括的に調査し、開発現場へのMI導入加速の手掛かりとすることを目的として実施した。調査の結果、高分子材料分野のMIは直近数年で報告例が急増しており、古くから行われてきたソフトセンサー研究と合流することで発展期を迎えていることが明らかになった。本報告会では、収集した事例を例示しながら、現時点での高分子MI研究をとりまく状況について報告した。

高分子のソフトセンサーの研究はピークを過ぎて、現場実装の段階にあるが、高分子MIの研究は、現在、急速に増加している段階で、新たな専門誌も発刊されており、まだまだ論文は増え続けると考えられる。従って、今後、高分子MI研究の参考とする事例に困ることはないと考えられる。今回の調査研究は、多数の事例を収集した以上に、そういった高分子MI研究の現時点でのスナップショットを捉えたことに一番の価値があると思う。

★ 次回調査案件の選定を進めています。

<現地分科会について>

★年1回程度、公的研究機関や企業等を訪問する現地分科会を開催します。

(新型コロナウイルス感染症対策による自粛からの再始動)

2013年3月6日 産総研ナノシステム研究部門

- ・グリーンテクノロジー研究グループ
- ・スマートマテリアルグループ
- ・環境化学技術研究部門 化学材料評価基盤グループ

2015年5月8日 島津製作所三条工場※

- ・講演：「島津の最新分析技術の紹介とその応用」 MS イメージングによる材料評価
- ・ショールームの見学
- ・島津製作所 創業記念資料館の見学

2018年1月12日 産総研中国センター※

- ・講演：「セルロースナノファイバーの橋渡し研究」 伊藤弘和主任研究員
- ・産総研中国センター見学
- ・酒類総合研究所見学

2019年5月28日花王株式会社 和歌山事業所※

- ・講演「花王の研究活動について」「界面活性剤原料製造用触媒の開発」
- ・花王エコラボミュージアム、和歌山工場見学

※高選択性反応分科会と合同開催

19

<現地分科会について>

★年1回程度、公的研究機関や企業等を訪問する現地分科会を開催します。

(新型コロナウイルス感染症対策による自粛からの再始動)

2024年1月26日 大崎クールジェン/カーボンリサイクル実証研究拠点※

- ・大崎クールジェンプロジェクト (CO₂分離・回収型IGCC/IGFC実証実験)
- ・カーボンリサイクル実証研究拠点 (実証研究エリア/藻類研究エリア/基礎研究エリア)

2025年5月13日 東北大学※

- ・東北大学NanoTerasu (3GeV高輝度放射光施設)
- ・東北大学未来科学技術共同研究センター (NICHe)
- ・講演会・説明会 計3件

※高選択性反応分科会と合同開催

20

<現地分科会について>

★ 年1回程度、公的研究機関や企業等を訪問する現地分科会を開催します。



2019/05/28 花王（株）和歌山事業所



2024/01/26 大崎クールジェン



2025/05/13 東北大学NanoTerasu



<新化学技術研究奨励賞について>

第14回（課題11）

世界に先駆けた新産業創出に資する「新素材」実現のための基盤的研究

- ★ 差別性が高く産業に対するインパクトの大きな「新素材」と、これを実現するための基礎的・基盤的研究について募集しています。
- ★ 必ずしも具体的用途分野への適用に限定せず、独創性が高く特異なファンクションを有する「とんがった材料」であることを求めています。
- ★ 他の課題との重複を避けるため、専ら「新素材」の製法・解析・機能・原理解明などの基礎的・基盤的研究を選考しています。



有機/無機/バイオマテリアル/分析/理論… 毎回幅広い応募をいただいています
分科会有志で協力して一次審査を実施しています

<今後の活動について>

- ★ 新素材分科会では、メンバーの意見を集約しながら幅広い「新素材」の紹介に向けて取り組んでいます。

メンバーのみなさんとともに、

夢 のある、**とんがった** 新素材を見つけ出し、
紹介していきます。

2025年7月4日 JACI技術部会交流会

コンピュータケミストリ分科会活動の これまでの実績、現状、今後

先端化学・材料技術部会
コンピュータケミストリ分科会 主査
樹神 弘也 (三菱ケミカル)
高分子WG リーダー
臼井 宏太 (三菱ケミカル)
次世代CCWG
牛島 知彦 (日本ゼオン)
情報科学WG リーダー
牛島 知彦 (日本ゼオン)

コンピュータケミストリ分科会の活動理念

新化学発展協会設立時趣旨を具現化するために1989年に分科会発足（※）

先端技術分野において必要とされる「物質を分子・原子レベルで精密に制御し、かつ、組み立てる技術等の確立」
「計算機実験」は「実験」、「理論」に次ぐ第三の手法として新化協内でいち早く認識された結果、他分野に先駆けて分科会が設立された

産・学・官の連携

ワークショップを通じてアドバイザーの先生方との緊密な連携関係強化、講演会招聘をきっかけに200名を超える学とのネットワーク構築、国プロ立ち上げとその後のフォローアップによる官からの高い評価

異業種間の交流

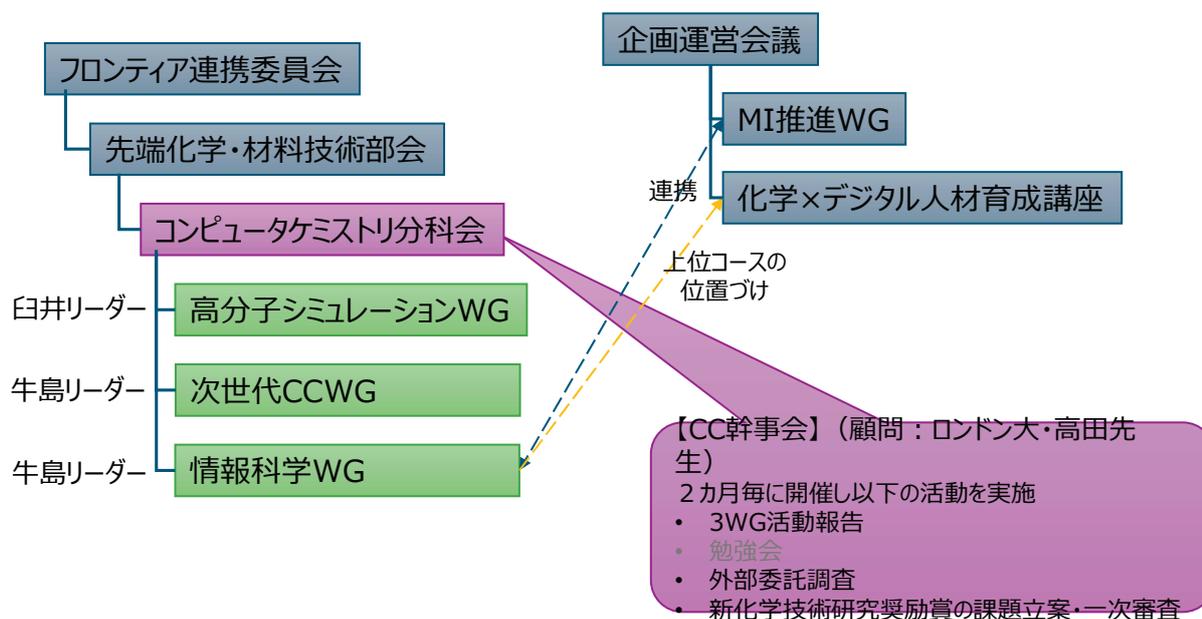
ソフトウェア企業の参画促進

分科会の活動精神：メンバー全員が会社の壁を越えて協力することにより、アカデミアとの繋がりを大切にしながら長期的な活動を継続する

※ 土井正男 著「夭折した情報化学研究者 - 吉田元二 -」日本化学会
情報化学部会誌 24 巻 (2006) 1 号



CC分科会の活動体制



CC幹事会メンバー

顧問：ロンドン大学 高田章先生

会社名	氏名 (敬称略)
旭化成 株式会社	諸星 圭
旭化成 株式会社	岩間 立洋
出光興産 株式会社	高嶋 明人
AGC 株式会社	浦田 新吾
株式会社 カネカ	齋藤 健
株式会社 JSOL	小沢 拓
住友化学 株式会社	栗田 靖之
株式会社 ダイセル	兼子 祐
ダッソー・システムズ 株式会社	アビジット チャタジー
ダッソー・システムズ 株式会社	可児 大始
東ソー株式会社	内田 雅人

会社名	氏名 (敬称略)
株式会社 日本触媒	北村 守啓
株式会社 日本触媒	岡田 雅希
日本ゼオン 株式会社	牛島 知彦
三井化学 株式会社	中野 隆志
三菱ケミカル株式会社	臼井 宏太
三菱ケミカル株式会社	樹神 弘也
株式会社 モルシス	佐藤 史一
UBE 株式会社	廣木 鉄郎
株式会社 レゾナック	奥野 好成
国立研究開発法人 産業技術総合研究所	森田 裕史
国立研究開発法人 産業技術総合研究所	水門 潤治

コンピュータケミストリ分科会の活動の歩みと主な成果

(1) 座学だけでなく実際に手を動かし頭で考える取り組み

計算化学、情報科学を企業の研究開発で役立てることを目的としたワーキンググループ活動の継続的実施

(2) 次世代の若手研究者育成を目指した取り組み

要望に応じて初学者のための基礎講座を開講

高分子シミュレーションWG

次世代CCWG

情報科学WG

(3) 産学官の交流促進

大規模計算に対する国の計算リソース活用 (東工大TSUBAME、富岳)

理研・計算科学センターを代表とする「富岳」産業課題への参画 (2022年10月~2023年9月)

産学からの計算化学に関する講演をしていただく勉強会を通じた交流促進 (2023年5月より現地開催)

(4) 産業界・社会への貢献、アウトリーチ活動

① OCTAコミュニティにおける機能拡張へのソフト利用者のフィードバック

② 学会等でのWG成果の発表

③ WG成果の出版

・「Gaussianプログラムによる量子化学計算マニュアル 計算入力法から実験値との比較まで」(2009年)

・「高分子材料シミュレーション-OCTA活用事例集-」(2014年)

・上記英語版出版 (2016年)

(5) CC関連分野における外部委託調査

「材料・触媒開発における新手法の開発状況」(2016年)

「化学分野における情報科学活用のためのデータベースおよび先行事例に関する調査」(2019年)

「ベンチャー/スタートアップによるマテリアルDXソリューション動向調査」(2021年)

「欧米の化学系シミュレーションの最新動向」(2023年)

「化学産業における生成AIの活用」(2024年)



2024年度 外部委託調査「化学産業における生成AIの活用」の概要

調査委託先：アドバンスソフト株式会社

作業項目		7月	8月	9月	10月	11月	12月
①生成AI活用のためのソリューション・サービスの調査	a.Web調査	■					
	b.ヒアリング等			■			
②生成AIの活用事例の調査	a.文献検索等	■					
	b.文献詳細			■			
③生成AIの活用法整理					■		
報告書の作成					■		

「化学産業における生成AIの活用」最終報告書目次

- 1. はじめに 1
- 1.1. 調査目的 1
- 1.2. 調査の背景 1
- 1.3. 調査項目 2
- 1.4. 調査方法 2
- 1.5. 本書の構成 2
- 2. 生成AI 活用のためのソリューション・サービスの調査 (Web 調査) 3
- 2.1. 調査項目 3
- 2.2. 海外の生成AI サービス企業 3
- 2.2.1. 現状 3
- 2.2.2. 代表的な海外の生成AI サービス一覧 4
- 2.2.3. 代表的な海外の生成AI サービスの内容 6
- 2.3. 化学産業向けに生成AI サービスを提供している国内の企業 26
- 2.4. 国内の生成AI サービス企業 28
- 2.5. オープンソース 32
- 2.5.1. 概要 32
- 2.5.2. オープンソース一覧 37
- 2.5.3. 代表的なプロジェクト 51
- 3. 生成AI 活用のためのソリューション・サービスの調査 (ヒアリング) 57
- 3.1. ヒアリングによる調査実施 57
- 3.2. ヒアリング項目 57
- 3.3. ヒアリング対象 58
- 3.4. ヒアリング内容 59
- 3.4.1. Ridgelinez 株式会社 59
- 3.4.2. 株式会社Kiei 63
- 3.4.3. E社 (社名公表を希望しない) 65
- 4. 生成AI 活用のためのソリューション・サービスの調査 (アンケート) 68
- 4.1. アンケートによる調査実施 68
- 4.2. アンケート項目 68
- 4.3. アンケート実施先 70
- 4.4. アンケート実施 (郵送) 72
- 4.5. アンケート実施 (Web) 73

- 4.6. アンケート結果 74
- 4.7. 意見 75
- 5. 生成AI の活用事例の調査 (文献検索) 76
- 5.1. 論文検索と抽出 76
- 5.2. 文献の絞り込み (step0) 77
- 5.3. 文献の絞り込み (step1) 77
- 5.4. 文献の絞り込み (step2) 85
- 5.5. 文献の絞り込み (step3) 89
- 6. 生成AI の活用事例の調査 (文献詳細) 92
- 6.1. 調査する文献一覧 92
- 6.2. 文献詳細 92
- 6.2.1. 文献2: 実験の自動化 92
- 6.2.2. 文献4: LLM のベンチマーク 95
- 6.2.3. 文献5: 超伝導特性の予測 98
- 6.2.4. 文献11: 創薬への適用 102
- 6.2.5. 文献13: 有機物への適用 104
- 6.2.6. 文献16: ニューラルネットワークポテンシャルの可能性 106
- 6.2.7. 文献19: 最先端のLLM 技術サーベイ 109
- 6.2.8. 文献24: 酸化電位の予測 114
- 6.2.9. 文献26: MOF への適用 118
- 6.2.10. 文献41: アンモニア合成触媒への適用 121
- 6.2.11. 文献57: バッテリーへの適用 124
- 6.3. 詳細調査のまとめ 129
- 6.3.1. 調査した文献の分類 129
- 6.3.2. 文献の利用可能なデータおよびソースコード 132
- 6.3.3. 各論文で用いられた計算機環境 132
- 6.3.4. AI が論文全文を学習に利用する際の法的状況 135
- 7. 生成AI の活用法整理 138
- 7.1. 現状のまとめ 138
- 7.2. 有効な活用方法 139
- 7.3. 今後の可能性 143
- 8. 結論 145

生成AIの活用法整理（最終報告書より）

生成AIを活用できる分野

分類	活用方法	内容
研究開発	知識発見と文献解析	文献レビューや特許解析を自動化し、研究者が最新の知識を効率的に発見することを支援する。
	データ解析とモデリング	大量データを解析し、複雑なパターンや関係を見つけ出し、正確な予測やモデルの構築を行う。
	新規分子設計・材料設計	材料科学や医薬品開発で特定の特性を持つ分子を設計し、迅速に新素材を開発する。
	化学反応予測と最適化	合成経路の最適化や副産物の低減を支援し、効率的な化学反応設計を可能にする。
製造プロセス	安全性評価と環境配慮	毒性予測や環境影響評価に生成AIを利用し、化学物質の安全性評価や環境への影響評価にも活用する。
	製造プロセスの自動化	生成AIは工程最適化や予知保全を支援し、効率的かつ高品質な生産を実現する。
化学産業に特化しない利用方法	規制対応・法令順守	規制要件を学習し、製品設計やプロセスが基準を満たしているかを確認する。
	カスタマーサポート	チャットボットとして生成AIを活用し、顧客対応をリアルタイムで迅速に行う。
	コンサルティング支援	顧客へのコンサルティング業務において、いくつかの案を示す場合に生成AIが支援することができる。
	教育・トレーニング	化学実験をシミュレーションし、教育やトレーニングに活用、および化学装置やプロセスの操作マニュアルを生成する。

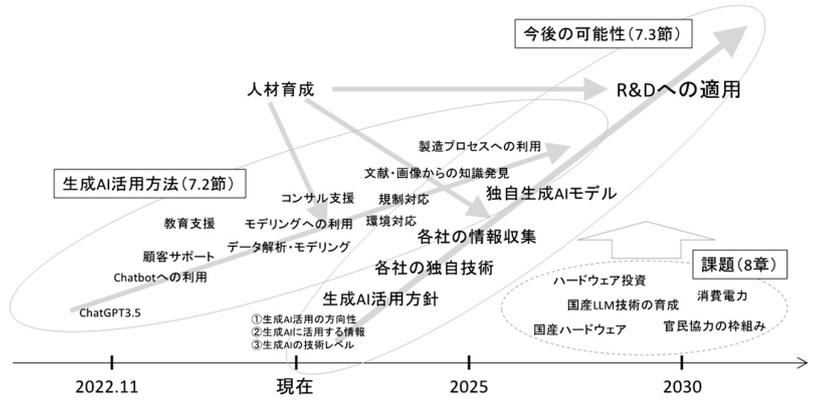
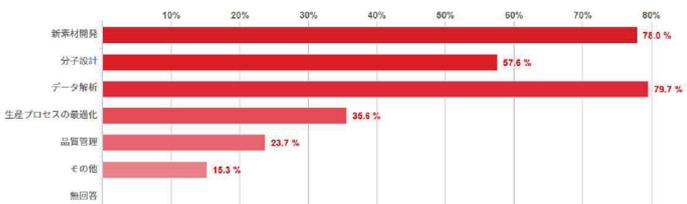


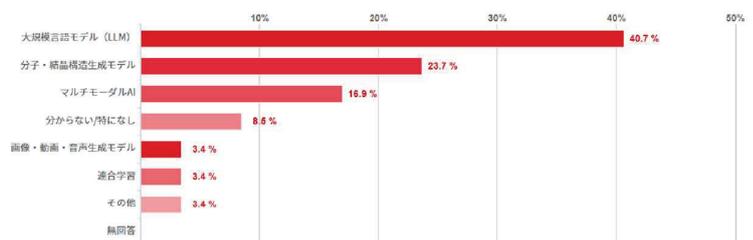
図 7.2 今後の方向性（2030年頃まで）

最終報告会アンケート結果

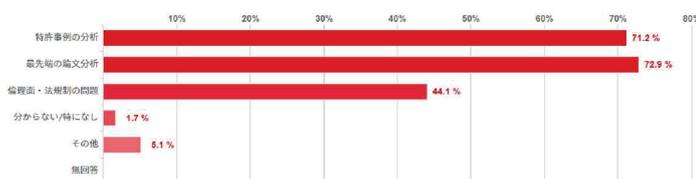
Q5. 生成AIの具体的な活用方法について、どの分野に最も関心がありますか？（複数選択可）
 (回答数: 59)



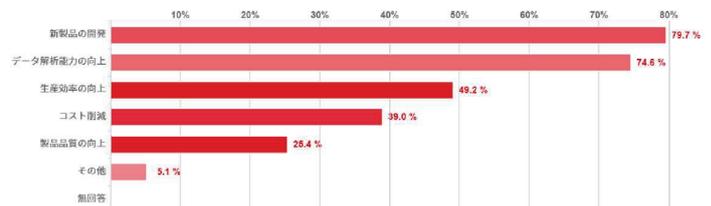
Q6. 生成AIに関連する技術の中で、どの技術に最も関心がありますか？（複数選択可）
 (回答数: 59)



Q7. 生成AIに関連する話題で、どのような情報に関心がありますか？（複数選択可）
 (回答数: 59)



Q9. 生成AIの導入によって、どのような効果を期待していますか？（複数選択可）
 (回答数: 59)



第14回新化学技術研究奨励賞

課題 1 0「持続可能な開発目標に資する材料設計・プロセス設計のための計算科学・計算工学・データ科学の研究」

東京大学 大学院工学系研究科 樋口 諒 先生

『熱可塑性樹脂および繊維強化熱可塑性樹脂複合材料の資源循環設計解析技術の構築』



【研究概要】

熱可塑性樹脂およびCFRTPのサーキュラーエコノミーの実現を目指し、①整形家庭における結晶組織形成、②形成された結晶組織の損傷親展過程、③損傷発生後の修復・リサイクル過程という樹脂のライフサイクル全体をシームレスに評価可能な解析手法を確立することを目指す。

高分子WG

高分子シミュレーション技術セミナー

OCTAの習得と活用研究がおもな目的

- 高分子シミュレーションの理論背景の学習や解析結果の議論をおこなう。
- OCTAのCOGNAC(MD法)やSUSHI(SCF法)の活用のための議論が中心。
- 最近ではLAMMPSを使って計算している参加者もいる。

技術顧問

- 畝山先生 (名古屋大 准教授)
- コラボレーションメンバー (山形大 滝本先生ほか)

毎月定例会を開催

- 2024年度から対面+オンラインのハイブリッド開催に変更。

活動内容

- 全体討論：OCTA等を使って取り組んでいる各自のテーマに関する議論
- OCTA演習：高分子に関する基礎的なテーマについて全員で取り組む。
- 基礎講座：COGNACやSUSHIの基礎的な事柄について先生方から説明。
- 講演会：シミュレーション・実験を問わず、外部の先生を招いて講演会を開く。

活動内容の一覧

2024年度

月	全体討論	基礎講座	OCTA演習	講演会
7	毎月実施	畝山先生		
8		SUSHI、畝山先生		
9		COGNAC、畝山先生		
10		畝山先生		
11				金沢大学 佐藤健助教
12				ブロックコポリマーの相分離構造 (SUSHI)
1				ブロックコポリマーの相分離構造 (DPD)
2				鎖の形態や緩和挙動 (DPD)
3				金沢大学 比江嶋祐介教授
4				絡み合い高分子の緩和挙動 (PASTA)
5				
6				東北大学 村島隆浩助教

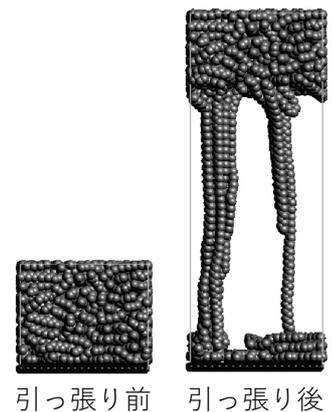
全体討論

構造

- 高分子の絡み合いの計算 (Z1+パッケージの挙動)
- ペンタンの液体状態のシミュレーション
- SCF法とDPD法のパラメータの比較
- リバースマッピングで全原子分子動力学法の構造を作る方法
- DPDによる接触角のシミュレーション

機械特性

- 粗視化MD (Kremer-Grestモデル) による剥離のシミュレーション
- 粗視化MD (Kremer-Grestモデル) による動的粘弾性のシミュレーション
- 粗視化モデル (ユナイテッドアトムモデル) による接着のシミュレーション
- タッキファイヤのシミュレーション
- 破壊と絡み合い密度の関係

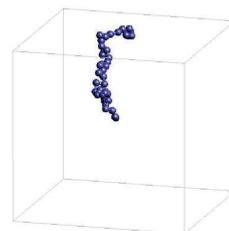


誘電特性

- 誘電率のシミュレーション
- 高周波誘電関数の計算

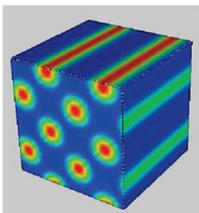
OCTA演習

- ブロックコポリマーの相分離構造 (SUSHI)
- ブロックコポリマーの相分離構造 (DPD)
- 鎖の形態や緩和挙動 (DPD)
- 絡み合い高分子の緩和挙動 (PASTA)

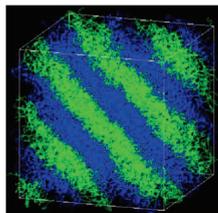


高分子鎖の形態
(1本だけ表示)

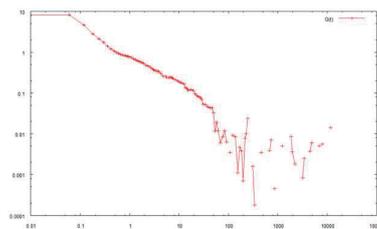
相分離構造 (SUSHI)



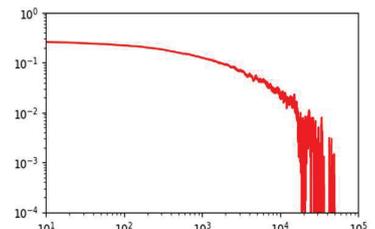
相分離構造 (DPD)



絡み合いなしの
緩和弾性率 (DPD)



絡み合い高分子の
緩和弾性率 (PASTA)



基礎的な話が中心だが、DPDのパラメータがどうやって決められているか等、発展的な議論もおこなわれた。

講演会

金沢大学 佐藤健助教

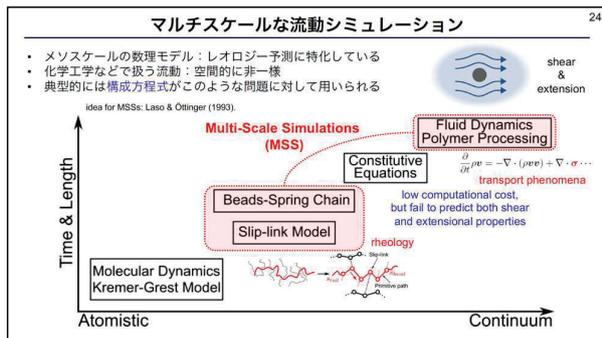
「高分子流体のメソスケールモデリングを基盤とした新しい展開」

東北大学 比江嶋祐介教授

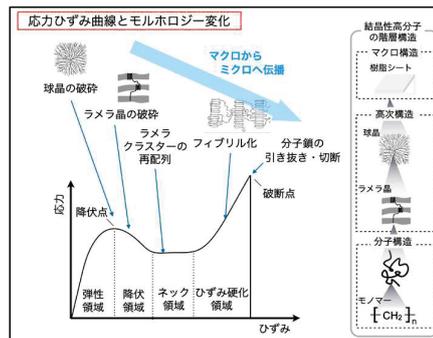
「高分子固体における劣化と破損」

東北大学 村島隆浩助教

「粗視化分子動力学シミュレーションを用いた高分子レオロジー研究」



佐藤先生の資料より



比江嶋先生の資料より

次世代CCWG

■ 毎月 第2金曜日 午後開催 ※ 会場の都合などにより、第2金曜日以外に開催することもあります

■ 3人の技術顧問の先生方に質問、相談できるWG (先生方の順番は順不同)

- 太田 浩二 先生 (大阪大学 大学院基礎工学研究科 招へい教授)
- 山下 晃一 先生 (横浜市立大学 生命ナノシステム科学研究科 招へい教授)
- 森 寛敏 先生 (中央大学 理工学部応用化学科 理論化学研究室 教授)

■ 主な活動内容

- 量子化学計算、第一原理計算に関する 技術討議、Q & Aライクな技術相談
 - 計算手法の理論背景、計算結果の理解・考察の仕方
 - ソフトウェアの使い方(インプットの書き方、アウトプットの読み方)
 - 企業実課題の計算法や重要文献手法のトレース計算等の技術共有
 - 企業研究開発で有用な計算手法の情報共有
- 技術顧問の先生による基礎講座
 - Gaussianプログラムによる量子化学計算 (森先生)
 - Quantum ESPRESSOプログラムによる第一原理計算計算 (山下先生)

4
1

■ 2024年度 活動実績

回	開催日	参加者数 (内: 現地)	基礎講座/講演会等
1	7/12(金)	18 (7)	XAFSスペクトルの計算法講習
2	8/9(金)	17 (6)	フォノン(音子)スペクトル計算法(FP/DFPT)講習
3	9/13(金)	21 (10)	励起状態計算法(SAC-CI/EOM-CCSD)講習
4	10/11(金)	16 (5)	第一原理分子動力場法 & ab-initio分子動力場法講習
5	11/8(金)	19 (9)	NMRスペクトル&EFG(電磁勾配)計算講習
6	12/13(金)	17 (8)	印加電圧時の計算(ESM) & 溶媒中の計算(RISM)講習
7	1/10(金)	17 (6)	
8	2/14(金)	16 (7)	
9	3/14(金)	13 (6)	
10	4/11(金)	10 (7)	
11	5/13(金)	14 (8)	東京科学大 セルゲイ・マンゾス准教授 講演会
12	6/13(金) -14(土)	32 (8)	情報科学WG合同合宿(カネカ箱根山荘)

技術討議、Q & Aライクな技術相談は毎月実施

■ 技術討議、Q&Aライクな技術相談で取り扱った内容 (その一部を紹介)

UV/Visスペクトル計算(TD-DFT,CIS,EOM-CCSD,SAC-CI,etc.)

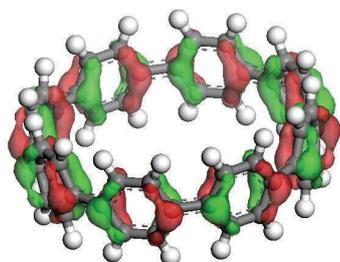
蛍光/りん光, 電子移動計算(Frank-Condon計算法,etc.)

イオン化エネルギー, 電子状態計算等(CAS-SCF,CASPT2,etc.)

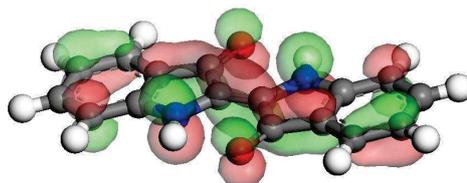
各種反応計算,熱力学計算等(CCSO, CBS-QB3, G4,etc.)

低スピン/高スピン金属錯体計算法, IR,NMR,XAFS等のスペクトル計算

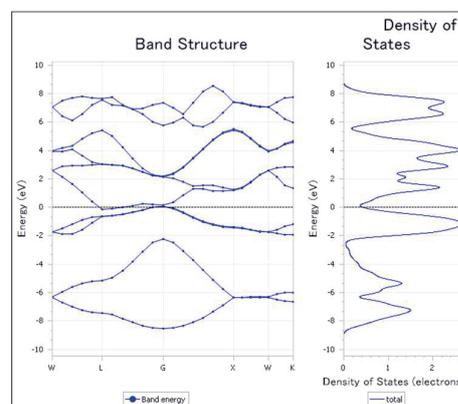
界面/固体表面の物性や反応, 分子/結晶の色, 溶解性, 平衡/反応速度定数等



環状芳香族の電子状態



有色/蛍光材料の解析



バンド構造の解析

量子化学計算や第一原理計算の背景理論から ソフトウェア・プログラムのエラーの対処方法まで 参加者の課題解決に役立つ技術討議・技術相談を行っています。

43

情報科学WG

＜情報科学技術セミナー＞

－MI, 情報科学の実務への適用を目的とし、産官学の情報交換や実習を行う－

講義/実習 奈良先端大学/金谷重彦 教授

毎回、金谷先生にトピックスを講義/実習頂いている

講義を通して各自自身で諸計算法などのプログラミングの実習学習を行う

技術顧問: 金谷重彦先生 (奈良先端大)
高田 章 先生 (ロンドン大)
'25年度メンバー 約50名

- 方針:
- ・各個人検討テーマの進捗状況報告を行い、その討議や技術指導を行う
 - ・技術顧問や高い技術を有するメンバーを中心に問題解決を行う
 - ・必要に応じ各分野の先生方に講演・指導を依頼、より高い技術を習得する

- テーマ例:
- ・ベイズ最適化法, 各種ベイズ統計学, 最尤推定法, 各種有意検定法等の理論対応,
 - ・線形/非線形次元圧縮手法, 自然言語処理(コーパスやワードクラウド等の作成),
 - ・自動分子構造設計計算, 分子官能基の置換, QSAR/QSPR, 目的物性が良い分子の推定(逆解析)
 - ・生成AI(ChatGPTなどのLLM, 化学用LLM, 画像生成, 音楽生成, 動画生成, etc),
 - ・合成音声作成(text-to-speech), 音声文字変換(speech-to-text), etc.

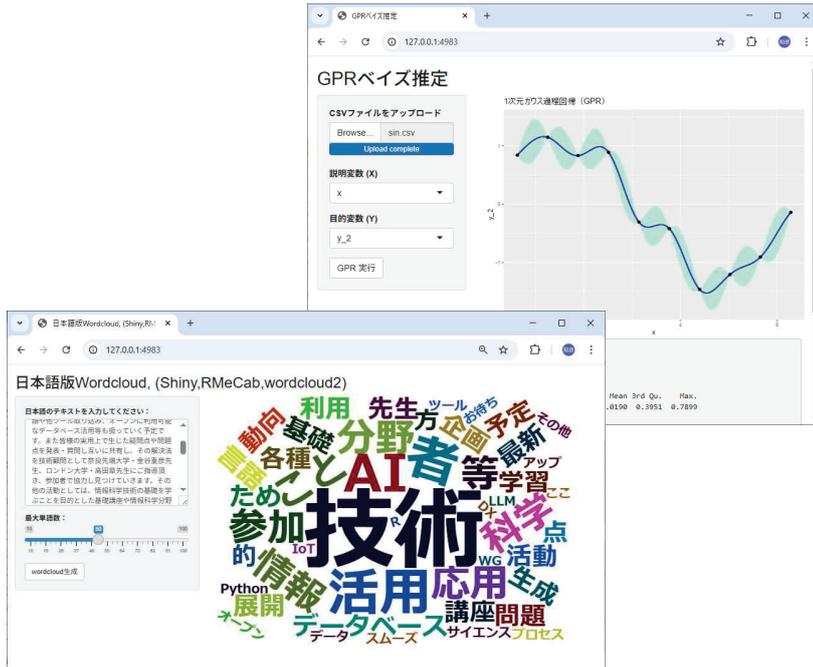
- 特徴:
- ・一般的な情報科学技術を使える方が、さらにそのノウハウ取得を行える
 - ・初心者向けセミナー等では判らない技術情報を互いに高めていける
 - ・'25年度はより化学企業業務に活用できる幅広い最新技術の導入を進めて行く
- 『化学xデジタル』人材育成講座卒業生にお勧め

- 2024年度活動内容 初級：奈良先端科学技術大学院大学 金谷教授の講義
中級：日本ゼオン(株) 牛島リーダーによる実践的内容解説

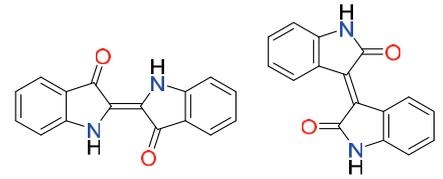
No.	開催日	テーマ	開催形式	参加者数
第1回	7/17 (水)	初級：2024年カリキュラム：何が飛び出すか、予告とちょっと統計検定 中級：現状課題とベイズ法など今期課題の概要	HB形式	21
第2回	8/31 (木)	初級：ベイズ最適化シリーズ1: カーネル回帰の復習 中級：現在の化学分野における情報科学や生成AIの状況、ベイズ推定の基礎の学習等	HB形式	22
第3回	9/30 (月)	初級：多面的発想で発展問題を解こう！ 中級：産業用途向けのガウス過程回帰を用いたベイズ最適化の学習や最急降下法等	HB形式	19
第4回	10/21 (月)	初級：カーネル回帰をもとにベイズ最適化法を理解しよう 中級：多腕バンディット手法を取り入れたベイズ最適化法等	HB形式	21
第5回	11/11 (月)	初級：カーネル回帰モデルとPLS回帰モデルを比較討論会！等 中級：ベイズ統計学入門	HB形式	19
第6回	12/20 (金)	初級：薄膜太陽電池データDataMDSimp.csvを例に、squared Exponentialカーネル Matern 3/2、Matern 5/2の3種のカーネルの違いを検討しよう。 中級：多次元でのベイズ最適化法/最近の生成系AI	HB形式	20
第7回	1/29 (水)	初級：分割表(クロス集計)の統計解析基礎から実践メタアナリシスまで徹底討論！ マーケティングも 中級：多次元のGPRベイズ最適化の実装/生成AIの状況(主に動画生成系の動向について)	HB形式	17
第8回	2/12 (水)	初級：ベイズ統計学の基礎！でもややこしい。MCMC(マルコフ連鎖モンテカルロ法)を活用し 重回帰分析プログラムを実装しよう。動かしてから考えよう！ 中級：Stacking/Blending/Votingによる各種回帰法の併用計算方法 LLM/生成AIのオフライン実装法や機器選定について	HB形式	17
第9回	3/13 (木)	初級：MCMCってなに？と思いながらひたすらプログラミングしよう！ 中級：多次元 GPR ベイズ最適化実装の応用、生成 AI の各種ベンチマーク等について	HB形式	17
第10回	4/23 (水)	初級：MCMCってなに？と思いながらひたすらプログラミングしよう！(続編) 中級：多次元 GPR ベイズ最適化実装の応用、生成 AI の各種ベンチマーク情報に関する学習	HB形式	17
第11回	5/22 (木)	初級：ひたすらPLS (PLS, OPLS, mcmcPLS) 、どうやって使い分けようか？実践解析のもとに検討します。 中級：分子自動設計計算(その1)その仕組みとSMILES自動生成/生成AI, 特に動画生成の現状と活用について	HB形式	16
第12回	6/13 (金) -14 (土)	初級：機械学習を活用した情報化学の新たな潮流 その他：一般的な手法を超える洞察力のある機械学習 (セルゲイ・マンゾス准教授)	現地合宿 /HB形式	32

計画内容(仮) ※皆さんの要望に合わせてこれらを開催していく予定

インタラクティブに操作/解析可能な各種Web GUIアプリケーションの実装評価法などを予定



新期物質を含む化合物自動設計計算や構造異性体や官能基変換等の実装評価



- GMM(混合ガウスモデル)などの手法実装/解説
- 大規模言語モデル(LLM)によるプレゼン資料生成
- 画像生成によるプレゼン資料用背景等の生成
- ワードクラウド等の自然言語処理(NLP)
- 各種統計的な取扱いの実装評価
- インタラクティブでカラフルなグラフ等の実装評価

• これら以外にも、状況に合わせて皆さんの役に立つ課題を行っていく(数ヶ月後もすれば技術状況が変わるので)

• 『ケミ×デジ人材育成講座』とこのWGの中間領域辺りの技術についても、適時フォローしながら行っていく予定です。この機会に新規参加頂けると良いかと思えます