

シミュレーションでものづくりDX

計算機シミュレーションを用いた有機材料の物性予測

- 事前に物性を予測して化成品開発をスピードアップ
- 多数の分子構造・多様な条件での物性を一度に自動計算
- 自動化技術により迅速で低コストな分子設計支援を実施

研究目的・内容

計算機シミュレーションによって分子の物性を予測することで、実験を行わずに候補化合物を絞り込むことができ、製品開発の効率化につながります。しかし、シミュレーションを利用するには計算機やソフトウェアの使い方を専門的に学ぶ必要があり、計算結果を得るのにも時間がかかるのが実情です。

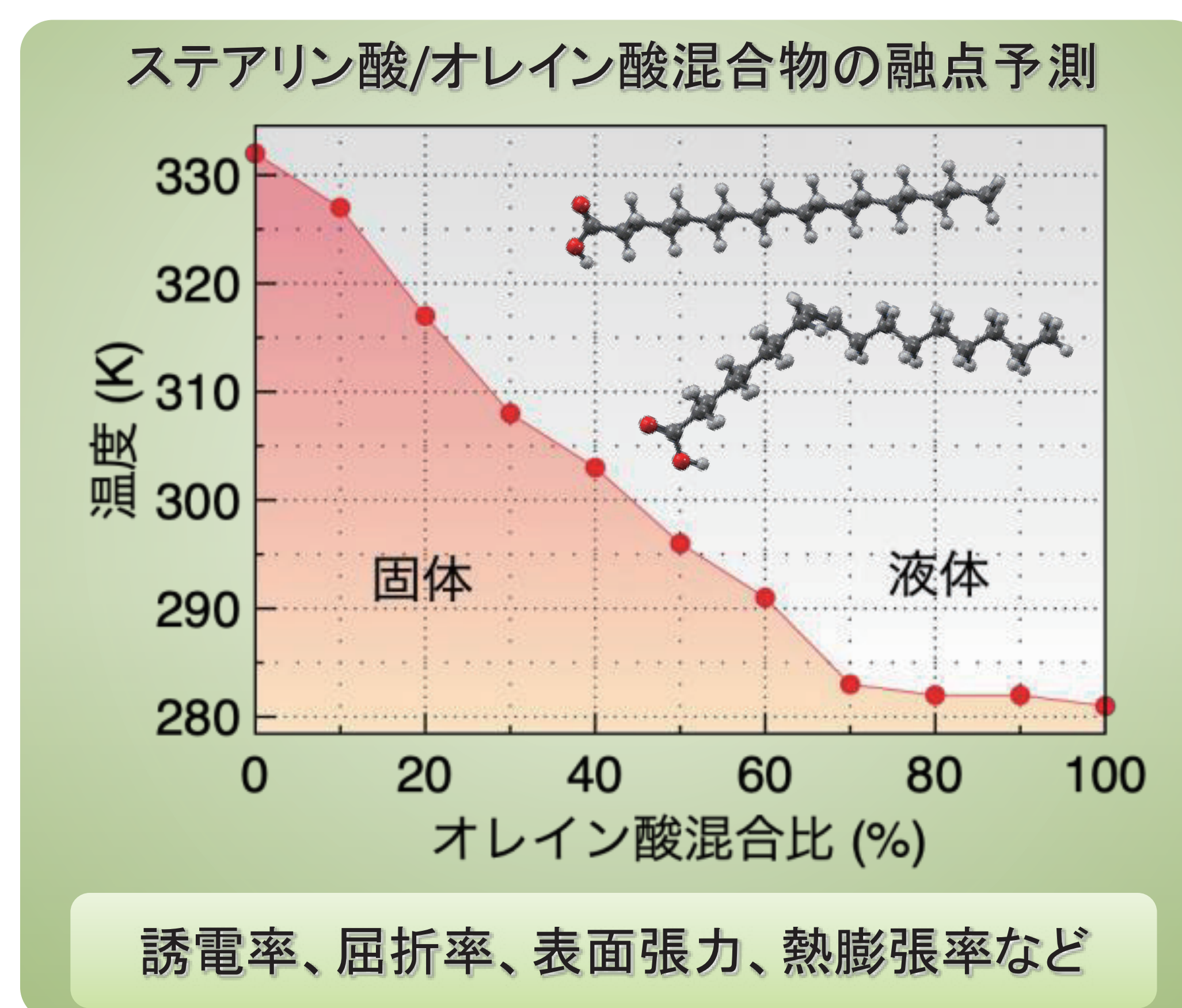
そこで本支援メニューでは、プログラミング技術によって煩雑な計算プロセスを自動化し、オペレーターが逐次操作せずとも、多くの分子や様々な条件での物性を自動的に計算するシステムを開発しました。これにより、従来よりも速く、低コストでシミュレーションによる製品開発支援が可能になりました(左図)。

期待される用途

実験を計算機シミュレーションで代替することで、使用する溶媒やエネルギーの削減につながります。また、高温、高圧など実験が困難な条件や、配合比による物性の違いなど、手間のかかる実験の予測も一度に実施することができます(右図)。多数の候補化合物の網羅的な物性評価にも有効です。



迅速で低コストな分子設計支援



シミュレーションによる物性予測の例

キーワード

自動化技術、計算化学、物性予測、分子設計支援

大阪産業技術研究所

有機材料研究部（森之宮センター）

松元 深

連絡先：機能性材料合成研究室 06-6963-8057

9 産業と技術革新の
基盤をつくろう



12 つくる責任
つかう責任

