

研究室紹介

工学院大学先進工学部環境化学科
環境計算化学工学研究室
高羽洋充

1. 研究室の概要

当研究室では、化学および工学全般の課題に対して計算化学を用いた基礎的研究と、設計ツールとしての計算化学の活用方法の確立を研究目的としている。実験を全くおこなっていない研究室であるが理論系の研究室というわけではなく、あくまで工学に軸足を置いて、実験と同じような複雑系を対象とした応用研究に重点をおいている。実験をおこなっていないことは時として弱みとなることもあるが、その分研究のリソースをすべて計算化学につぎ込むことができ、実験系の研究者との協同により新しい発見に繋がる楽しみがある。学内外の研究機関や産業界とも積極的に連携しながら研究をおこなっている。また、計算化学にはミクロからマクロまで多くの方法論があるが、当研究室では一つの方法論に拘らず、複数の方法論を活用することで研究目的を達成することを目指している。複雑系の研究に有用であることもあるが、教育の立場からも複数の方法論に通じた研究者を育成することが重要だと考え、それを実現できるようなプログラムやコンピュータなどの環境整備に力を入れている。異なる基礎理論とプログラムに精通することは、学生にとっては大変なことだが、それにチャレンジすることが研究室に入る条件でもある。研究テーマは1人1テーマを原則とし、その対象は無機から有機まで材料的にもプロセス的にも幅広いテーマを扱っている。計算化学の身軽さを利用し、新しい課題にチャレンジし、計算技術についても限界を設けず新しい方法論に取り組む、新陳代謝の早い研究姿勢を大事にしている。現在の構成員は、高羽洋充教授のほか事務補佐員1名、大学院生4名、学部学生6名であり、徐々に大学院生が増えてきている。

2. 研究内容

2.1 膜分離グループ

ガス精製や水処理などの分離対象として、ゼオライト膜や高分子膜などの従来膜に加え、超分子膜などの新規膜の透過機構を非平衡分子動力学法や動的モンテカルロ法などの分子シミュレーションを用いて研究している。また、膜構造と透過分離特性の相関をインフォマティクス解析することで、与えられた分離系に最適な膜構造の探索をおこなっている。最近のトピックスとしては、有機溶媒廃液分離、天然ガス精製などである。

2.2 機能性高分子グループ

高分子近傍の水溶液の構造変化は、高分子膜のファウリ



研究室メンバー

ング特性、高分子材料の生体適合性を決定づける。そこで主に分子動力学法を用いて高分子をモデル化し水の静的・動的構造を解析することで、液相系で利用される高分子材料の高機能化に関する研究をおこなっている。これまでに、中間水の定量化や、タンパク質ごとのファウリング耐性の評価方法について成果を得ており、それらのアプローチの活用で高性能な高分子材料の理論設計を目指している。

2.3 機械学習グループ

マルチスケール計算化学の一つとして機械学習を活用した研究をおこなっている。学習に必要なデータを計算化学で求めたり、ミクロ計算とプロセススケールの観測データを繋げるために機械学習を利用している。例えば、蛍光体発光特性と結晶構造など分子と機能の関連付けに機械学習を用いている。また、電子顕微鏡画像や分光スペクトル、プロセス測定データを対象として、逆畳み込み法による解析をおこなうことで、直接測定できない因子を推定する研究をおこなっている。計算化学と機械学習の連携は新しい研究分野となっており興味深い成果が得られてきている。

2.4 触媒・電池グループ

二次電池や高分子形燃料電池の電極反応や材料構造劣化を、量子論や分子動力学法を用いて解明している。例えば、燃料電池の電解質中のイオン拡散挙動の解明、アノードナノ粒子触媒の構造劣化などを計算化学で解析している。またリチウム空気電池のカソード触媒の理論的探索、ハライド・ペロブスカイト型太陽電池の電子状態解析や劣化機構などについて研究をおこなっている。

3. 研究室の特色

研究室での生活や時間管理では学生の自主性を尊重している。なるべく自由な雰囲気の中で学生が新しい着想を得ることを期待している。学生にとって、学会発表や共同研究などの負荷は決して小さくないが、制約ある時間の中で成果を出すために、学生同士がお互いに助け教え合うことが必要不可欠な環境となっている。卒業のためには、実は、知識よりもコミュニケーション能力が重要なのが研究室の特色ともなっている。