

KGRI 先端技術セミナー



『先端計測とデータ化学で加速する材料開発』

慶應理工に新しく誕生したオープンイノベーションのための施設 YIL にて、気鋭の研究者が取り組む先端研究についてご紹介します。講演会のあとは、施設見学と研究者との個別相談会も実施します。材料研究・開発での新しい発想や課題解決のヒントが見つかるかもしれません。学知を活用した研究開発の次の一步を考えるきっかけとして、奮ってご参加ください。

**無料**

要事前登録

10/30 (Thu.) 13:00~17:00

場所：慶應義塾大学理工学部（矢上キャンパス）36 棟
YIL (Yagami Innovation Laboratory) 1 階
開催形式：対面＜先着 30 名まで＞ もしくは オンライン
対象：企業の研究企画・研究開発担当の方



YIL アクセス



13:00 開会あいさつ

【第 1 部】表面・界面解析

13:10 ~ 13:35 放射光オパランド観測による触媒機構解析

13:35 ~ 14:00 水晶振動子電極法を用いた電極反応の“その場”解析

14:00 ~ 14:25 表面 / 界面のナノスケールでの解析・分析

14:25 ~ 14:35 休憩

【第 2 部】計算化学

14:35 ~ 15:00 小規模・実験データへのマテリアルズインフォマティクスの適用

15:00 ~ 15:25 理論・情報化学による機能性材料の理解の深化と設計

15:25 ~ 15:50 「ソフトマター」×「分子シミュレーション」による
ソフトマター材料の設計

15:50 ~ 16:00 連絡事項

【第 3 部】見学会と相談会

16:00 ~ 17:00 施設見学 / 個別相談会

お申込みはこちら
(10/24 締切)

見学会ならびに相談会は現地参加の方を
対象とし、事前申込制といたします。

※受付枠に空きがある場合に限り当日でも受け付ける場合がございます。

主催：慶應義塾大学グローバルリサーチインスティテュート（KGRI）

慶應義塾
Keio University

慶應義塾大学 KGRI 事務局

e-mail : kgri-office@adst.keio.ac.jp

表面・界面解析

01



研究室 HP

放射光オペランド観測による触媒機構解析

理工学部 化学科 教授 近藤 寛



- 新規オペランド観測手法の開発: 準大気圧XPS、軟X線吸収分光法、偏光変調高感度反射法
- 各種触媒の機構解明: 触媒(排ガス浄化、化学品合成)、固体電解質型燃料電池、光触媒

技術適用イメージ: 触媒高性能化、新規触媒開発

キーワード: 表面化学 / 触媒化学 / 放射光科学

表面・界面解析

02



研究室 HP

水晶振動子電極法を用いた電極反応の“その場”解析

理工学部 応用化学科 准教授 芹澤 信幸



- 水晶振動子電極の共振現象を利用したナノグラムオーダーの電極質量変化のその場解析
- 電極近傍の局所物性変化の測定による電解液中の濃度分布、溶液構造の解析

技術適用イメージ: リチウム二次電池電極材料の反応解析・劣化解析、電解液設計

キーワード: 電気化学 / エネルギー変換・貯蔵 / イオン液体 / めっき / 電池

表面・界面解析

03



研究室 HP

表面 / 界面のナノスケールでの解析・分析

理工学部 物理情報工学科 准教授 清水 智子



- 原子間力顕微鏡(AFM)とナノスケール赤外分光(nano-FTIR)による化学構造解析
- 超高真空走査型トンネル顕微鏡(STM)での原子分解能構造と電子状態解析
- 各種分光法などとの組み合わせによる表面/界面の解析(XPS, Raman分光等)

技術適用イメージ: 触媒表面解析、ガスセンサ表面解析

キーワード: 表面科学 / 走査型プローブ顕微鏡 / 分子界面

計算化学

01



研究室 HP

小規模・実験データへのマテリアルズインフォマティクスの適用

理工学部 応用化学科 教授 緒明 佑哉



- 小規模な実験および文献データを活用した機械学習による材料開発(スパースモデリング)
- 上記手法を用いた高効率な新規物質探索・性能予測・プロセス最適化
- 上記手法を用いたエネルギー関連高分子材料の創製

技術適用イメージ: 小規模データからの MI、MI による新規物質 / プロセス探索、性能改善 / 向上

キーワード: 共役高分子材料 / 層状物質 / ナノシート材料 / マテリアルズインフォマティクス

計算化学

02



研究室 HP

理論・情報化学による機能性材料の理解の深化と設計

理工学部 化学科 教授 畑中 美穂



- 反応経路自動探索と機械学習を用いる化学反応・触媒反応の機構解明
- 独自開発手法(エネルギーシフト法)による有機分子・金属錯体の発光・消光過程の解明と新規光材料設計
- 材料の特徴量開発による機械学習モデル構築の支援

技術適用イメージ: 触媒、発光材料での機能発現メカニズム解明、材料性能向上

キーワード: 理論化学 / 計算化学 / マテリアルズインフォマティクス / 反応経路自動探索

計算化学

03



研究室 HP

「ソフトマター」×「分子シミュレーション」によるソフトマター材料の設計

理工学部 機械工学科 教授 荒井 規允



- 分子シミュレーションで機能発現を可視化し設計指針に落とし込み
- 全原子×粗視化を適材適所に使い分け、現象に合ったモデル化を実現
- 分子シミュレーション×機械学習で性能予測と逆設計

技術適用イメージ: 機能に効く分子要因の特定、材料内の集合構造の可視化

キーワード: 分子シミュレーション / ソフトマター / 自己集合 / 相変化 / ナノ空間