

相溶性・分散性を予測できる シミュレーション技術

名古屋工業大学 生命・応用化学類
生命・物質化学プログラム
准教授 南雲 亮

保有技術の紹介

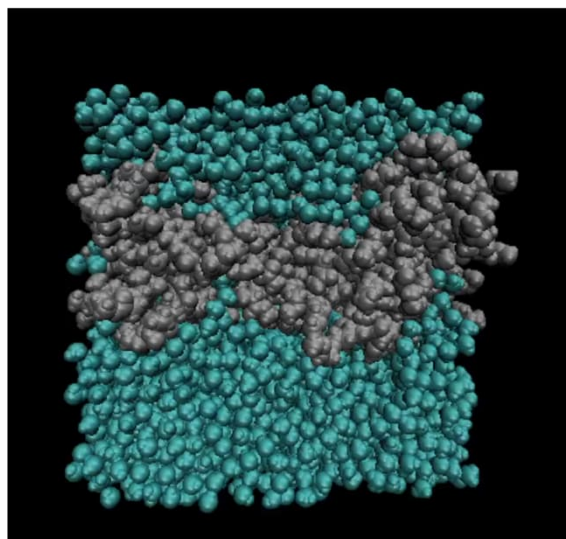
異なる複数種類の成分をブレンドしたときに、

- ・ **相溶・分散するのだろうか？**
- ・ **なぜ、相溶・分散するのか（しないのか）？**

を、材料合成前にシミュレーションで解析できる技術

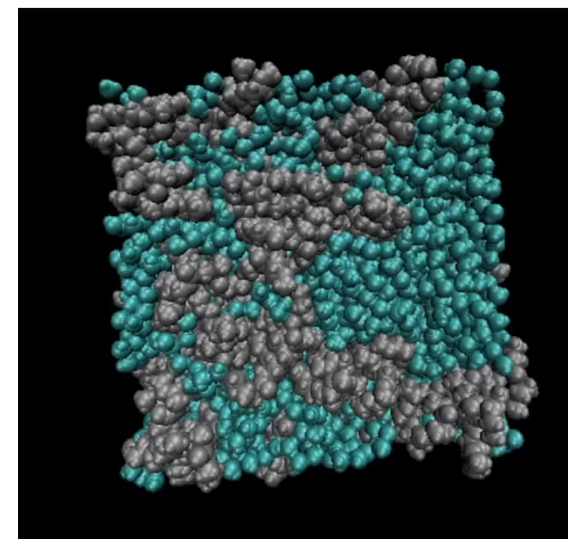
保有技術の紹介

水と材料Aを混ぜると...？



凝集して相分離

水と材料Bを混ぜると...？



分散して相溶

異種成分間の相溶性・分散性を予測できる!!!

社会背景と技術的課題

①異種成分の相溶性・分散性を，材料合成前に予測する方法論に対する産業的なニーズは高い。

(例) 分散剤・凝集剤，ブレンド材料，
コンポジット材料

・水処理分野
(浄水膜，凝集剤，...)
・CO₂分離膜
などへの応用展開

②上記①を実装するには，

(ア) 異種成分間の化学的相互作用の理論計算

(イ) 相溶性・分散性の定量評価

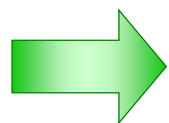
が必須。

➡ どのような打開策を講じ得るのか？

本技術の特徴

(ア) 異種成分間の化学的相互作用の理論計算
を、全原子分子動力学計算によって実践.

(イ) 相溶性・分散性の定量評価
を、高分子物理における諸物性を導入して実現.



異種成分間の相溶性・分散性の
・定量評価 ・要因究明
をミクロな視点から実現可能!!!

従来技術との比較

	従来の実験的手法	本技術 (シミュレーション手法)
特徴	トップダウン型 (結果を得ることを重視)	ボトムアップ型 (要因究明を重視)
工数・手数	試行錯誤的な 材料合成を要する	材料合成前の 絞り込みが可能
コスト	所望の性能を得る までの手数次第	実験的手法との 協働は不可欠

具体的な取り組み

①海水淡水化や排水処理で利用される

浄水膜の材料設計への応用

- ・ 汚れ物質が吸着しない膜材料とは？
- ・ ブレンド性の高いコンポジット膜材料とは？

文献 1 : *ACS Biomater. Sci. Eng.*, 2021, 7, 8, 3709–3717

文献 2 : *ACS Biomater. Sci. Eng.*, 2023, 9, 7, 4269–4279

②分離膜や吸収液など，社会実装を実現し得る

CO₂分離材料の分子設計への応用

- ・ 成形加工性と大量生産性を両立できるポリマー分離膜とは？
- ・ 高性能と所要エネルギー削減を両立できるCO₂吸収液とは？

求める連携先・メッセージ

連携を希望する業種等

分散剤・凝集剤や、**ブレンド材料/コンポジット材料**を開発中で、ミクロな視点からの科学的知見を取り入れたいメーカーなど

他にも、**CO₂分離材料**や**浄水膜/水処理フィルター**に関する分子レベルの要因究明に取り組んでいる研究室ですので、お気軽にお問合せください。

本技術に関する情報

試作品の状況

未定

※提供の際は諸手続が必要となるため、下記問合せ先までご連絡願います。

研究フェーズ



文献・特許の情報

文献 1 : *ACS Biomater. Sci. Eng.*, 2021, 7, 8, 3709–3717

文献 2 : *ACS Biomater. Sci. Eng.*, 2023, 9, 7, 4269–4279

【お問合せ】

名古屋工業大学 産学官金連携機構

〒466-8555 名古屋市昭和区御器所町字木市29番

TEL:052-735-5627

E-mail: nitfair@adm.nitech.ac.jp

URL: <https://technofair.web.nitech.ac.jp/>