

第45回触媒化学融合研究センター講演会

産総研触媒化学融合研究センターでは、様々な分野で活躍している大学、公的研究機関、企業等の方々をお招きして講演会を開催することで分野の垣根を越えた連携の実現を目指しています。多くの方々のご参加をお待ちしております。

「固体重合触媒の構造性能相関」

<講師>

北陸先端科学技術大学
マテリアルサイエンス研究科

谷池 俊明 准教授



日時:2017年 5月 19日(金)16:00~17:00

場所:産総研第5事業所 第2本館

第4会議室(5-2 6603室)

<講演概要>

固体触媒の利点の一つは、異なる触媒成分の集積や階層構造の設計を通じた多機能化にあるが、構造の複雑化とその結果生じる多変量性によって構造性能相関の解明は著しく困難となる。我々は、計算化学・データ科学的な方法論を駆使し、固体オレフィン重合触媒の構造性能相関解明に長年取り組んできた。当日は、高精度な分子モデルに基づく活性表面の記述、及び、触媒分析に基づく担体構造の記述を中心として、系統的な固体触媒設計のための研究アプローチについて発表する。