

AI利用化学研究者の叡智が集結！

化学における 情報・AIの活用

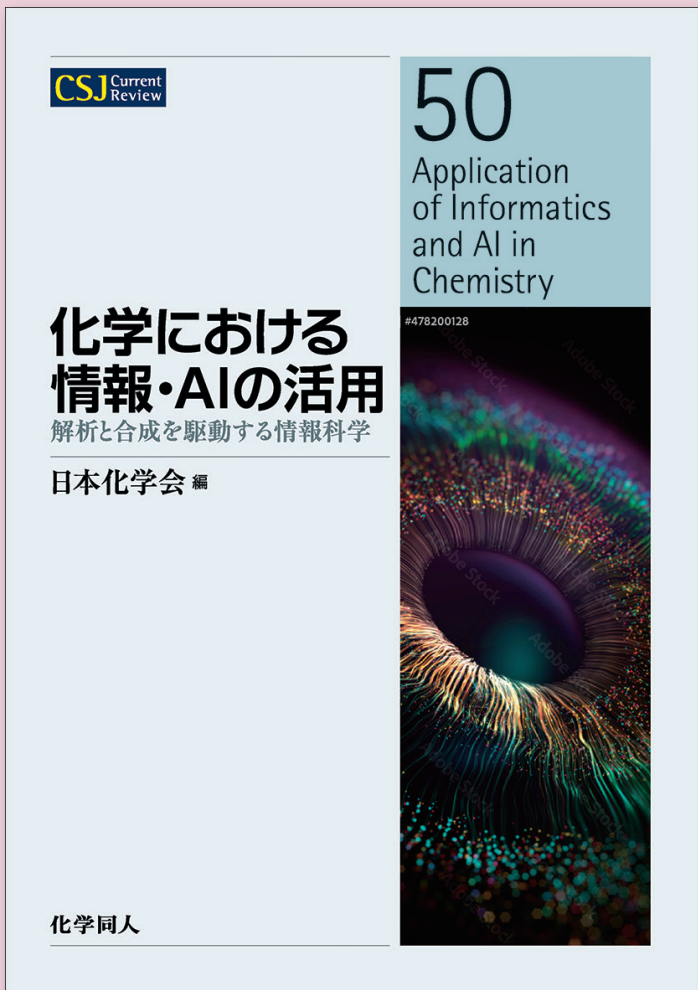
解析と合成を駆動する
情報科学

日本化学会 編

編集ワーキンググループ

阿尻 雅文(東北大学), 岩澤 伸治(東京工業大学), 栗原 和枝(東北大学),
寺山 慧(横浜市立大学), 松原 誠二郎(京都大学), 榎山 儀恵(分子科学研究所)

これまで化学は、解析と合成を両輪とし理論・実験を行き来しつつ発展し、さまざまな物質を提供してきた。しかし近年、解析と合成に加えて情報という三つの視点で駆動する手法が注目を集め、化学を大きく変えようとしている。この新しい手法の革新性は、化学の研究力、化学産業の生産力に大きな変革をもたらすものと期待される。解析・合成の両輪の融合、化学とプロセスとの連動に向けた研究事例を、広い分野のAI利用化学研究者が紹介する。



定価 4,620円 (本体4,200円) ⑩ B5判 / 約200頁 / 部分2色刷

ISBN978-4-7598-1410-1

目次

第I部 基礎概念と研究現場

- 1章 フロントランナーに聞く (座談会)
奥野 恭史, 出村 雅彦, 船津 公人, 松原 誠二郎 聞き手: 栗原 和枝
- 2章 (1) History: データ駆動型化学の歴史 船津 公人
(2) Basic concept: データ駆動型化学を牽引する新しいコンセプト 吉田 亮
- 3章 (1) 創薬のための構造化DB 上村 みどり
(2) 有機合成と情報 大嶋 孝志
(3) 精密構造解析と情報科学/データの構造化 杉本 邦久
(4) マテリアルズインテグレーションシステム, Mint 出村 雅彦
(5) 化学・材料分野におけるデータ活用プラットフォーム 小椋 智

第II部 研究最前線

- 1章 研究室におけるAI自動有機合成とクラスターDB構想 竹邊 日和・松原 誠二郎
- 2章 無機機能薄膜合成 一杉 太郎
- 3章 大規模系の記述子 (ペトロリオミクス) 田中 隆三
- 4章 データ活用型化学研究の基盤としての手法開発 瀧川一学
- 5章 シミュレーションへの応用 (MD GAN) 泰岡 顕治

- 6章 AIビックデータと創薬 奥野 恭史
- 7章 機械学習と自動合成装置による医薬品探索 石原 司
- 8章 生体・超分子の構造解析とAI 中川 敦史
- 9章 人工知能 (AI) を用いる機能性有機分子の設計 緒明 佑哉
- 10章 AI支援の有機太陽電池 佐伯 昭紀
- 11章 ハイスループット電池電解液探索システム 松田 翔一
- 12章 ペプチドのスクリーニング 澤田 敏樹
- 13章 AIによる新有機合成化学 矢田 陽・佐藤 一彦
- 14章 生産とAI化学プラントのAI IoTによる安全操業と人材育成 山下 善之
- 15章 物理モデル構築によるAIプラント異常制御 長谷部 伸治
- トピックス① 有機合成: 逆合成解析, 機械学習 (アメリカのIBMの活動) 岸本 章宏
- トピックス② マテリアルインフォマティクスの利用 庄司 哲也
- トピックス③ ルールベース重合反応モデルによる高分子仮想ライブラリの構築と評価 大野 充
- トピックス④ 錬金術師は人工知能で極みのその先を目指す 柳原 直人
- トピックス⑤ 旭化成の研究開発におけるDXの取り組み-マテリアルズ・インフォマティクスの活用- 青木 拓実

本書のお買い求めは、最寄りの書店・生協、または化学同人ホームページへ!

