

# 化学製品設計と物性推算の 最近の進歩

共 催：分離技術会、化学工学会基礎物性部会  
協 賛：日本化学会  
日 時：平成 26 年 6 月 5 日（木）10:00~17:10  
場 所：日本大学理工学部 5 号館 524 会議室（御茶ノ水）  
定 員：50 名

最近物性推算法を利用した化学製品設計(reverse design)が注目を集めている。物性推算の技術に関する世界的に著名なケビン・ジョバック氏は Molecular Knowledge Systems 社を興し、良い化学製品の設計を支援するソフトウェア・ツール SYNAPSE を作成している。

本講習会では、まずジョバック氏に SYNAPSE の概念、基礎となる物性推算を丁寧に説明していただく。次に、拡張 Joback 法とハンセン溶解度パラメータを用いた気液平衡の推算法と reverse design を山本博志氏に、ASOG、UNIFAC による相平衡推算と抽出蒸留・液液抽出の溶剤選定例を栃木勝己氏に話していただく。また、欧米で広く研究されている PC-SAFT を用いる方法を大場茂夫氏に講演していただき、さらに佐々木正和氏によるグループ寄与法の簡単なレビューとパネルディスカッションおよび Q&A を通して、物性推算と化学製品設計の最近の進歩と課題について話し合っただく。最後に、SYNAPSE の紹介と名刺交換を行います。

皆様方のご参加をお待ちいたしております。

## プログラム

### (1) 化学製品設計 (Reverse design) と物性推算法の最近の進歩 (10:00~12:00)

Reverse design の有用性と実例、および最近の物性推算法を紹介する。

(Molecular Knowledge Systems, Inc.) ケビン・ジョバック 氏

<昼食(12:00~13:00)>

### (2) 拡張 Joback 法とハンセン溶解度パラメータを用いた気液平衡の推算 (13:00~13:50)

グループ寄与法の問題点は、推算式に自分の使いたいグループが定義されているかどうかにかき尽きる。計算機科学の専門家でなくても拡張できるグループ寄与法について紹介する。

(旭硝子) 山本 博志 氏

### (3) グループ寄与法による物性推算と抽出蒸留・液液抽出の溶剤選定-イオン液体を対象として- (13:50~14:40)

ASOG、UNIFAC、修正 UNIFAC による物性推算の最新情報と抽出蒸留・液液抽出の溶剤としてのイオン液体の効果を紹介する。

(日本大学) 栃木 勝己 氏

<休憩(14:40~15:00)>

(4) PC-SAFT とその利用 (15:00~15:50)

Segment 法で分子構造を記述し PC-SAFT 状態式で物性推算を行う方法で、CCS における CO<sub>2</sub> 物理吸収プロセス開発での吸収溶剤開発について考察する。

(応用物性研究所) 大場 茂夫 氏

(5) パネルディスカッション-グループ寄与法の動向と Reverse Design への適用- (15:50~16:40)

佐々木正和 氏、ケビン・ジョバック 氏、大場 茂夫 氏、 栃木 勝己 氏、 山本 博志 氏

(6) 化学製品設計ソフトウェア SYNAPSE の紹介と名刺交換 (16:40~17:10)

ケビン・ジョバック 氏

参加費：維持・特別・正会員・協賛会員 17,000 円、会員外 27,000 円、同時入会 23,000 円 (テキストおよび書籍 分離技術シリーズ「実用製造プロセス物性集覧」を含む)

学生 5,000 円 (※ただし学生参加費には書籍「実用製造プロセス物性集覧」は含みません)

参加費は郵便振替または下記銀行に前納にてお振込みください。

郵便振替：00100-9-21052 口座名 分離技術会

みずほ銀行：神田支店 普通預金 1010899 口座名 分離技術会

申込先：参加ご希望の方は必要事項をご記入のうえ、下記事務局まで FAX または e-mail にてお申込ください。申し込み締切日 2014 年 6 月 2 日 (月)、ただし締切日前に定員に達した場合はその時点で締め切らせて頂きますので、お早めのお申込みをお願い致します。

〒214-0034 神奈川県川崎市多摩区三田 1-12-5-135 分離技術会 事務局

TEL: 044-935-2578 FAX: 044-935-2571 e-mail: [jimu@sspej.gr.jp](mailto:jimu@sspej.gr.jp)

化学製品設計と物性推算法の最近の進歩 参加申込書

氏 名			
勤務先			
所属			
所在地	〒  TEL _____ FAX _____ e-mail _____		
送金内訳	郵便振替 ・ 銀行振込	請求書	要 ・ 不要
会員資格	(正・維持・特別会員) ・ 学生 ・ 協賛団体会員 ・ 同時入会 ・ 会員外		