

データ駆動型化学の開拓

(東大院工・奈良先端大) 船津 公人

Development of Data-Driven Chemistry (*Graduate School of Engineering, The University of Tokyo, Nara Institute of Science and Technology*) Kimito Funatsu

Chemoinformatics has been applied to various kind of area of chemistry, molecular design, materials design, organic synthesis design, structure elucidation and process control. In this lecture, I will present overview of these applications.

Keywords : Data-Driven Chemistry, Chemoinformatics, Proses Informatics, Materials Informatics

データ駆動型化学(ケモインフォマティクス)は化学の様々な分野に応用されてきている。例えば分子・材料設計、有機合成経路設計、構造推定、そして化学プラントなどプロセス監視と制御などである。本講演ではこれらについて概観するとともにデータ駆動型化学の将来を展望する。