

AI 活用で挑む学問の革新と創成
2020 年度採択研究者

2020 年度 年次報告書

黒木 菜保子

中央大学 理工学部
助教

時空精細化 AI で挑む化学反応場の量子化学

§ 1. 研究成果の概要

化学は、物質の性質や変化を調査する学問であり、その自在な制御は化学者の夢である。我々が興味を持つ化学現象、すなわち、化学反応の多くは溶媒中で行われる。反応するターゲット分子(溶質)周辺に配位(溶媒和)する溶媒分子は、分子間相互作用を通じて溶質の反応性を支配する。したがって、新規な化学反応場の自在な理論設計を可能にするには、①溶媒中で働く分子間相互作用に関する物理化学的知見を得ることに加え、②溶媒和が溶質の電子状態に与える影響を、第一原理分子シミュレーションを用いて分子レベルで解明せねばならない。本研究の目的は、分子動力学・量子化学と AI 技術の融合により、溶媒分子が化学反応に与えるミクロな電子状態変化を追跡することである。

2020 年度(下半期)は、溶質の電子状態に影響を及ぼし得る「溶媒和の範囲」を解明することを目標として、「生体イオンに配位する水和動力学解明のための分子動力学・量子化学計算」および「イオン/分子性液体混合物中で働く相互作用精密評価のための統計熱力学・量子化学計算」を推進した。フラグメント化の手法に基づく分子動力学・統計熱力学計算と量子化学計算を組合せることで、溶質の電子状態に影響を及ぼし得る溶媒和圏が明らかになりつつある。