

「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズ  
インフォマティクスのための基盤技術の構築」

2016年度採択研究者

2018年度 実績報告書
-----------------

原 潤 祐

北海道大学大学院理学研究院化学部門

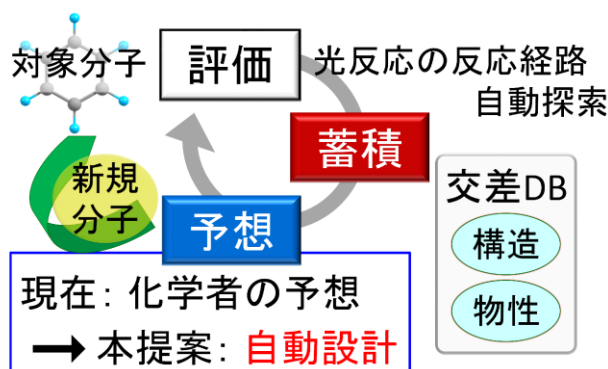
助教

円錐交差データベースに基づく蛍光分子自動設計法の開発

## § 1. 研究成果の概要

分子設計サイクルは、実験・計算による機能の評価、得られた情報の蓄積、新規分子の予想の3段階からなる。近年、計算機性能の向上と手法の発展に伴い対象分子の理論解析が簡便に行えるようになってきた。一方で、新規分子の予想については、現在も多くの場合、熟練の研究者が行っている。そこで、より効率的かつ先入観を排した分子設計を行うために、新規分子の予想を自動化し、人の手を介さずに分子設計を行う手法が求められる。本提案では、分子の蛍光機能に注目し、蛍光分子の理論設計技術の構築を目指し研究を進めている。

ある未知の分子が蛍光を発するか、光らずに失活するかは、励起状態と基底状態が交差する円錐交差構造を網羅的に調べることで定性的に議論できる。本提案では、分子の交差構造を蓄積したデータベースの構築と、それに基づく新規有力分子予想手法の開発に取り組んでいる。



2018年度は、新規に80以上の分子に交差探索を適用し、円錐交差データベースを拡張した。同時に、円錐交差データベースに登録された分子の光反応機構の解析を行い、データベースと情報学を組み合わせた手法開発も進めた。また、より効率的なデータベース構築を行うために、交差探索手法の拡張にも取り組み、これまでスピントリッパー時間依存密度汎関数理論(SF-TDDFT)を用いなければ出来なかった交差探索を通常のTDDFTでも行えるように拡張した。

## § 2. 研究実施体制

①研究者:原 祐 (北海道大学大学院理学研究院化学部門 助教)

②研究項目

- ・蛍光分子自動設計手法の開発
- ・円錐交差データベースの構築
- ・円錐交差自動探索法の拡張