

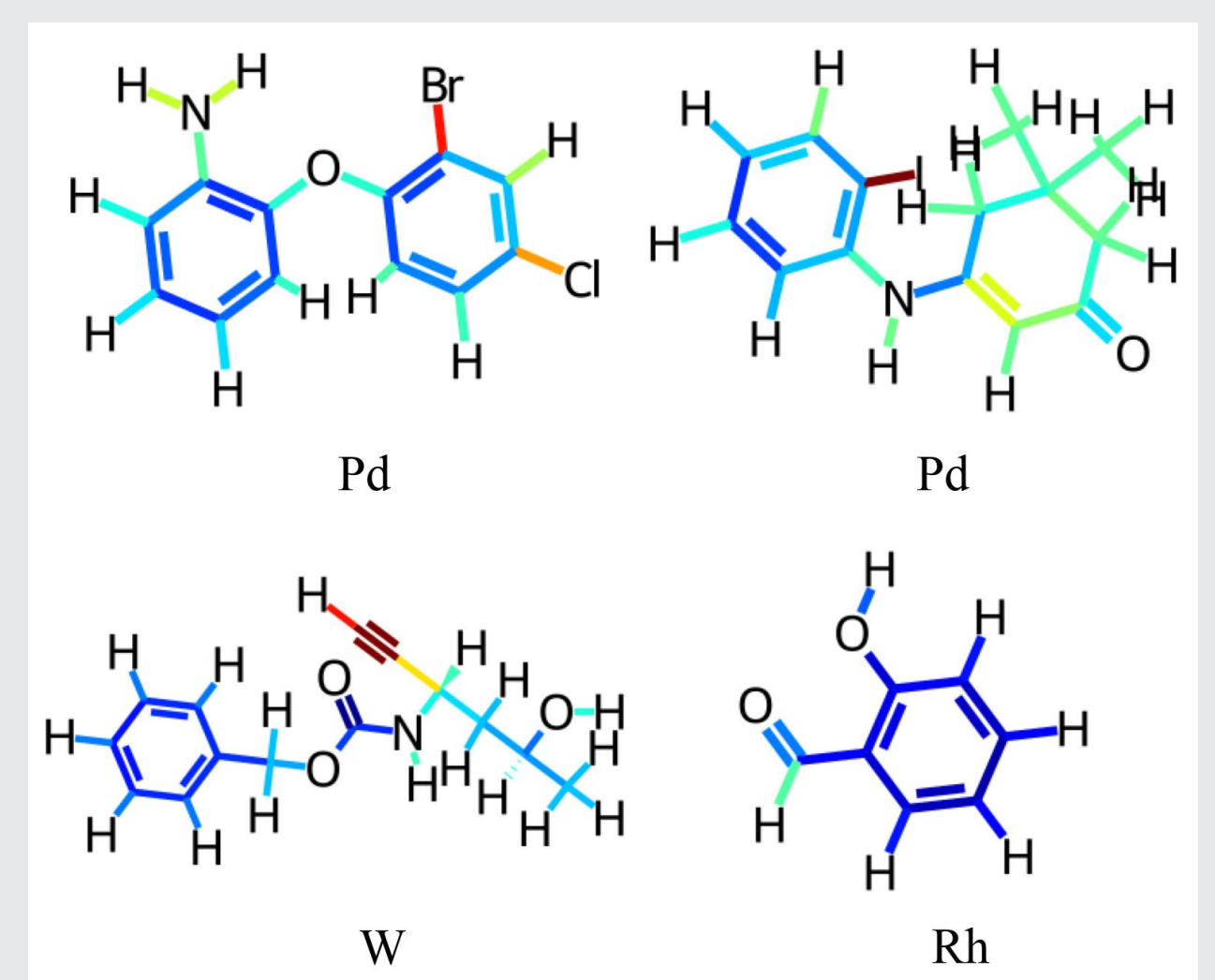
化学の「背後」を理解したい。 Towards Rational Material Design

材料創製部門 理論化学研究室
井内哲 安田耕二
DM Theoretical Chemistry

【私達の目指すところ】 物質を支配する量子力学理論が発見されてから一世紀。計算機内で物質を再現する量子化学や分子動力学は発展を続けています。私達は、物質の振る舞いを理解し、面白い物質の創製につなげたい。そのための理論や技術を開発しています。また、実験やシミュレーションで蓄積された知識を計算機に教え、法則を見つけます。そのための機械学習の技術も研究しています。

分子の機械学習

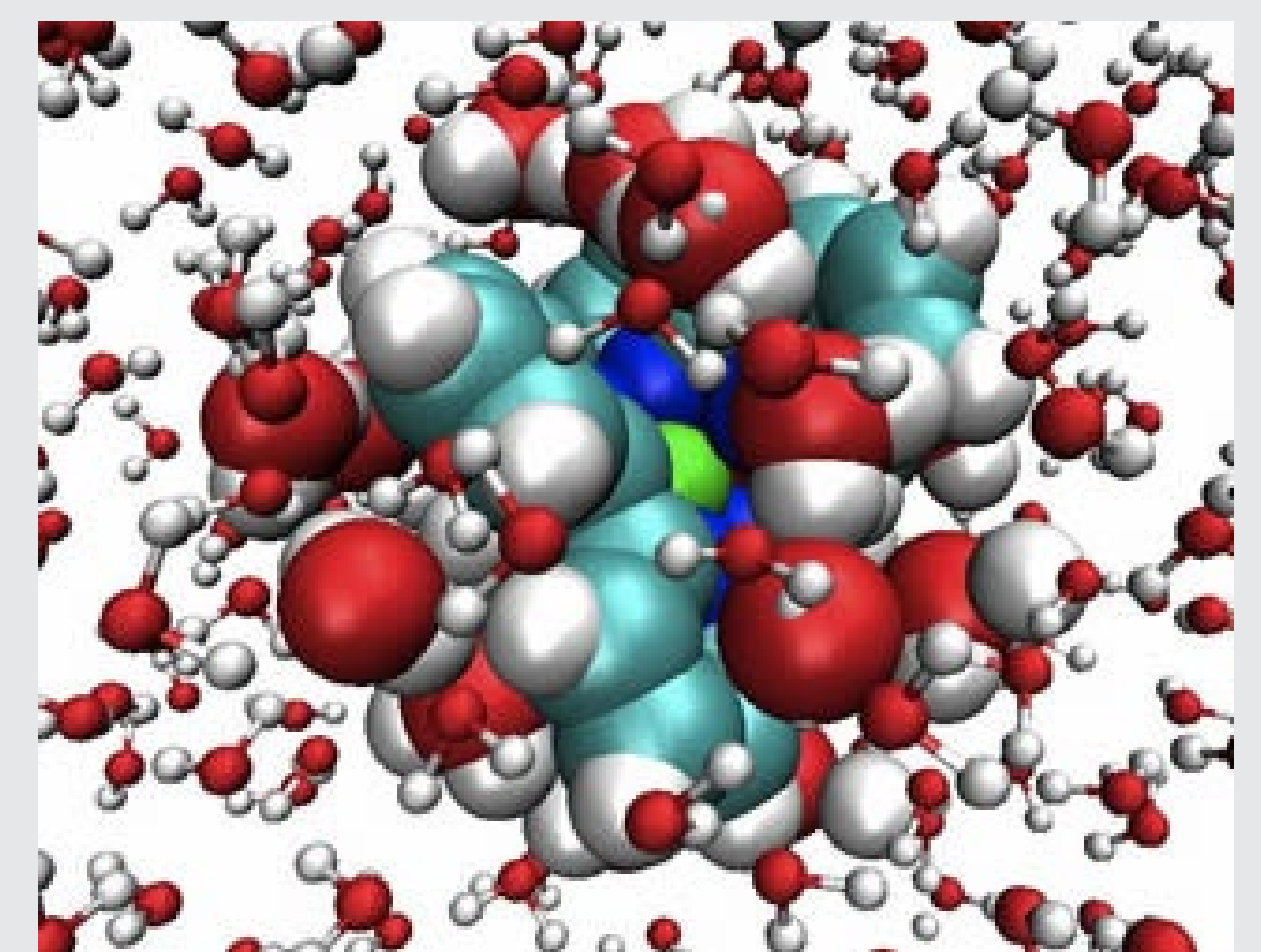
多くの実験事実から共通パターンを見つけ、それが成り立つ仕組みを解き明かすことで、自然科学は発展してきました。計算機の急速な発展も手伝って「パターンの発見」のような知的な営みを機械がする時代になってきました。機械学習は、画像や文書を分類したり、新しい画像や文書を生成する能力を持ちつつあります。私達は、化学に関する知識をプログラムに「理解」させ、人の思考を手助けすることを目指しています。例えば機械学習で、遷移金属錯体が触媒する多種類の化学反応を予測しています。また化学のデータは、量子力学で本来予測できるものです。この背景知識を機械学習に組み込んだり、量子化学シミュレーションで学習データを生成したり、論文などから役立つ化学データを抽出するなど、化学に適した機械学習の方法を研究しています。



機械学習が予測した反応位置

遷移金属錯体の励起状態ダイナミクス

状態密度が高く、複数のスピン多重度がある遷移金属錯体の励起状態では、スピン多重度や錯体構造等の変化を伴う特徴的な緩和が起こります。励起状態や構造の変化に関する詳細は、光科学技術の基礎知見として注目されています。例えば、光エネルギー変換で重要となる状態を長寿命化させるための指針や、記録材料で必要な状態を制御するための指針につながる可能性を秘めます。私達は、計算化学に基づくコンピュータシミュレーションを用いて、遷移金属錯体の励起状態で起こる緩和ダイナミクスの解明に取り組んでいます。



水中での鉄(II)錯体の分子動力学シミュレーション

Machine learning for molecules

Natural science has developed by finding common patterns from a large number of experimental facts and unraveling the mechanisms by which these patterns are formed. With the help of the rapid development of computers, we are now in an era in which machines can perform such intellectual activities as pattern discovery. Machine learning is capable of classifying images and documents and generating new images and documents. Our goal is to help people think by having programs "understand" chemical knowledge. For example, machine learning predicts various kinds of chemical reactions catalyzed by transition metal complexes. In addition, chemical data is predictable by quantum mechanics in principle. We study ways to incorporate this background knowledge into machine learning, generate training data from quantum chemical simulations, and extract useful chemical data from papers and other sources.

Excited state dynamics of transition metal complexes

In transition metal complexes, electronic relaxation occurs with the changes of spin multiplicity and complex structure after photoexcitation, because of high density of states and multiple spin multiplicities in excited states. Revealing the electronic and structural changes has been attracting attention in optical science and technology. For example, it may lead to guidelines for extending the lifetime of key states in energy conversion and for controlling the important states in recording materials. We have been studied electronic relaxation dynamics of transition metal complexes by using quantum chemical calculations and molecular dynamics simulations.