

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 量子化学と情報学との融合による次世代密度汎関数理論と均一系触媒における反応予測システムの開発

2. 個人研究者名

清野 淳司（東京都立大学理学部 特任准教授）

3. 事後評価結果

電子状態計算手法として広く用いられてきた密度汎関数理論（DFT）の最大の難題である厳密なエネルギー汎関数の機械学習による構築と、触媒を考慮して化学反応予測するシステムの開発に取り組んだ。前者についてはオービタルフリーDFT (OF-DFT) への応用を想定して、量子化学計算データをもとに、ニューラルネットワークによる高精度な運動エネルギー汎関数と相関エネルギー汎関数を作成し、任意の元素を含む精密計算への適用可能性を示した。高精度な OF-DFT 計算が実現できれば、通常の DFT 計算に比べてはるかに高速にエネルギーが計算できるため、非常に幅広い応用が可能である。後者については、量子化学計算の情報を記述子として有機化合物の反応予測を行うシステムを作成した。また化学反応の強弱を表す原子間の結合エネルギーと、均一系触媒内の中心金属における電荷情報を量子化学計算に基づき役割の異なる三つの独立成分に分割する手法を開発し、予測性能が高く解釈の容易な記述子となることを提案した。そのほか、反応条件の最適化に機械学習を取り入れ、その効果を実証している。

これらは、いずれも量子化学計算を基盤技術として利用しつつ、さらに機械学習を取り入れることによって、量子化学計算だけでは困難な問題を解決できることを示すものである。応用範囲が広く、大きな波及効果が期待される優れた成果である。