

AI 活用で挑む学問の革新と創成
2020 年度採択研究者

2021 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。

2021年度(上半期)は、溶質が溶媒の電子状態に影響を及ぼす兆しを捉え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」を推進した。ナノ秒オーダーのシミュレーション結果から、分子間相互作用解析を実施し、凝集系における溶媒の双極子モーメントの時間発展を追跡した。この時、溶媒-溶質間距離が近づくにつれ、双極子モーメントが大きくなる様子が見られ、反応の兆しを溶媒の電子状態変化の観点から捉えることができた。