

AI 活用で挑む学問の革新と創成
2020 年度採択研究代表者

2022 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

研究成果の概要

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。

2022 年度は、「水和動力学解明のための分子動力学・量子化学計算と機械学習」および「機械学習でデザインした CO₂ 物理吸収性液体中に生じる分子間相互作用解明のための量子化学計算」を推進した。ナノ秒オーダーのシミュレーション結果に対して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第一原理で追跡した。この時、溶質(浸透圧制御物質)に配位した溶媒の双極子モーメントは、最大で 1.5 倍増大することが分かった。この成果に関連し、得られた短時間の軌跡から、溶液の動的物性を機械学習予測するスキームも開拓した。

【代表的な原著論文情報】

- 1) “Electronic Fluctuation Difference between Trimethylamine *N*-oxide and *Tert*-butyl Alcohol in Water”, *Sci. Rep.*, **12**, 19417, 2022.
- 2) “Machine Learning-Boosted Design of Ionic Liquids for CO₂ Absorption and Experimental Verification”, *J. Phys. Chem. B*, **127**(9), 2022–2027 (2023).
- 3) “フラグメント理論に基づく計算化学・機械学習による機能性液体の研究”, 理論化学会誌 フロントティア, **5**(1), 35–41 (2023).