

計算化学による 機能性材料の 理解の深化と効率的設計

シミュレーション



AI



量子コンピュータ



IBM Quantum

慶應義塾大学理工学部化学科

畑中美穂

自己紹介

学部4年 慶應義塾大学工学部化学科

触媒開発(実験)

修士・博士 慶應義塾大学大学院理工学研究科
博士(理学)

理論化学

博士研究員 京都大学福井謙一記念研究センター

計算化学
シミュレーション

助教 近畿大学工学部理学科化学コース

(兼任) JSTさきがけ研究員

化学×AI

特任准教授 奈良先端科学技術大学院大学

准教授 慶應義塾大学工学部化学科

量子
コンピュータ

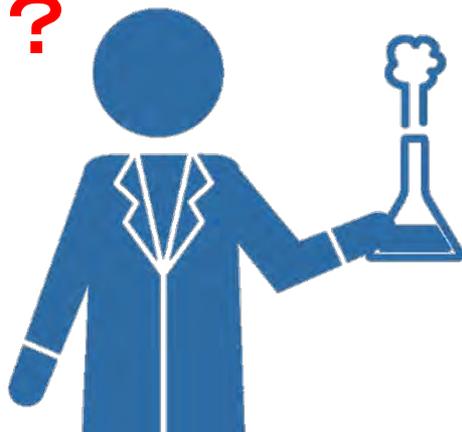
私の目指すこと

化学現象を理解したい
より良い材料を設計したい



コンピュータを駆使しよう

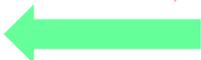
??



実験結果



解析結果



材料の合成
科学現象の発見



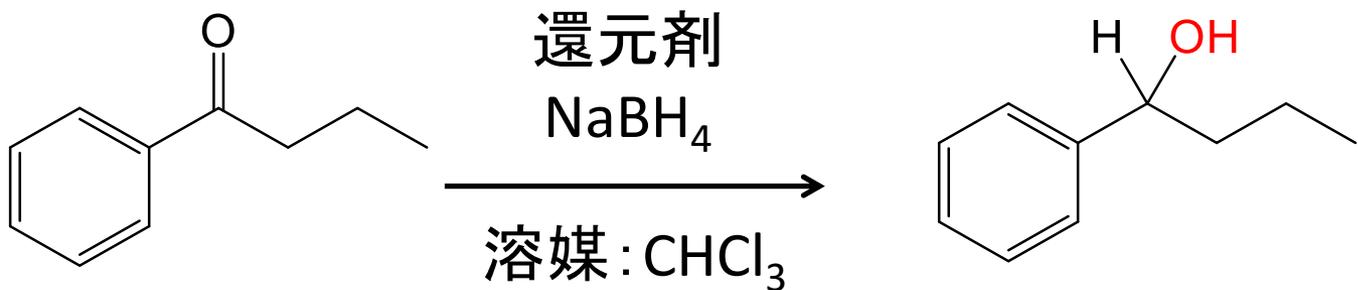
!!

計算結果を元に
メカニズム解明・材料設計

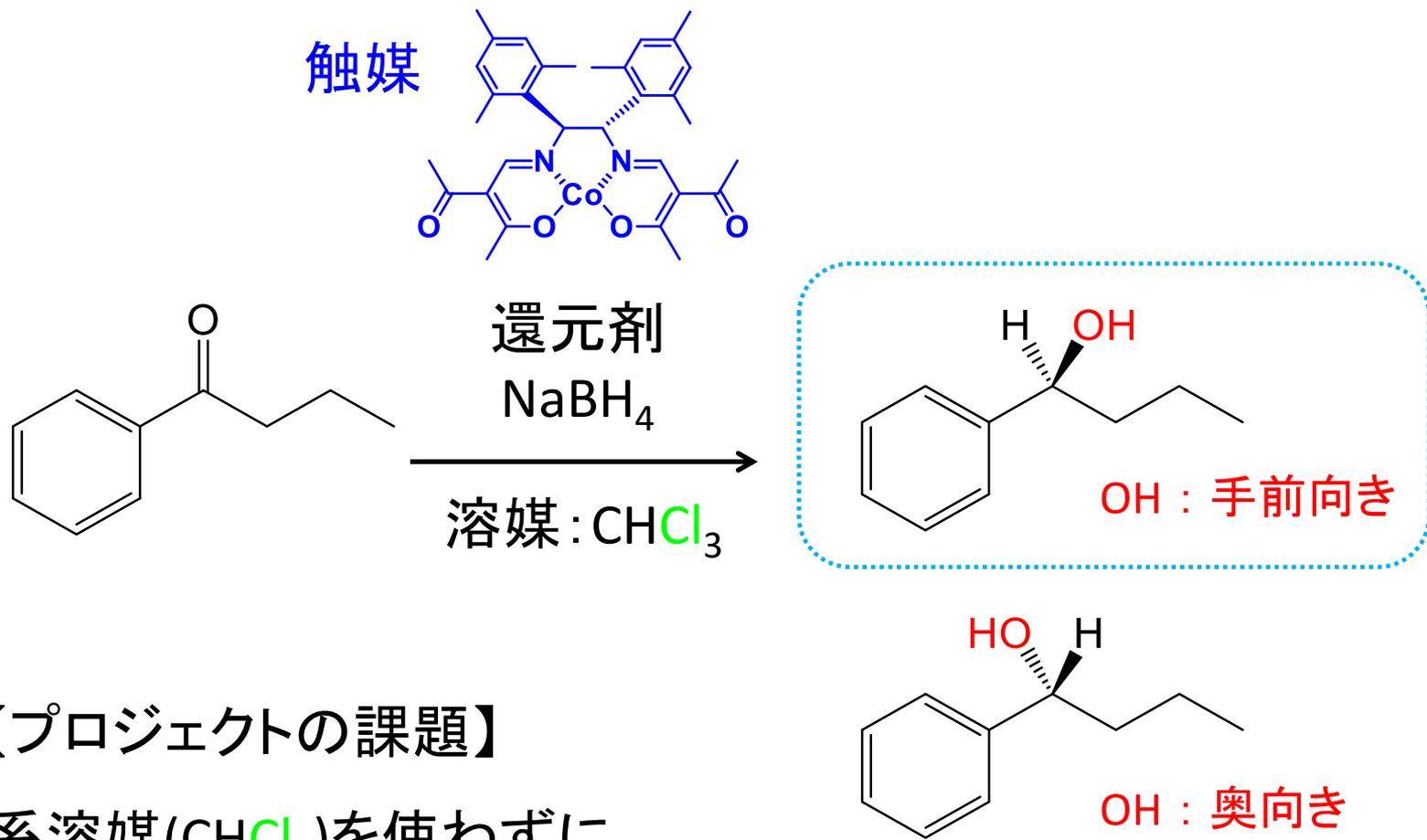
私の原点

材料化学屋さんの立場になってみましょう

はじめての研究テーマ@卒業研究



はじめての研究テーマ@卒業研究



【プロジェクトの課題】

塩素系溶媒(CHCl_3)を使わずに

同じ反応を実現する

私の最初の印象

溶媒 = 試薬を溶かすための液体
通常は化学反応に関与しない

溶媒を変えるだけのプロジェクトなんて
簡単簡単♪



色々と条件を変えて実験したけれど...

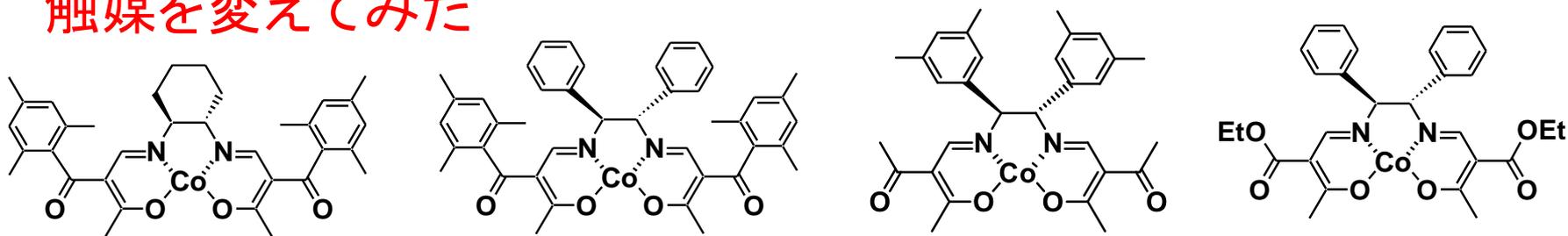
溶媒を変えてみた

ベンゼン トルエン THF 酢酸エチル アセトン ジエチルエーテル

還元剤を変えてみた

NaBH_4 LiBH_4 KBH_4 LiAlH_4 DIBAH

触媒を変えてみた



塩素系溶媒なしの反応をいくら検討しても
OHの向きは.....**手前 : 奥 = 50% : 50%**

なぜ研究がうまくいかないのか？

中身が見えれば・・・



どこに問題があるか
分かる！

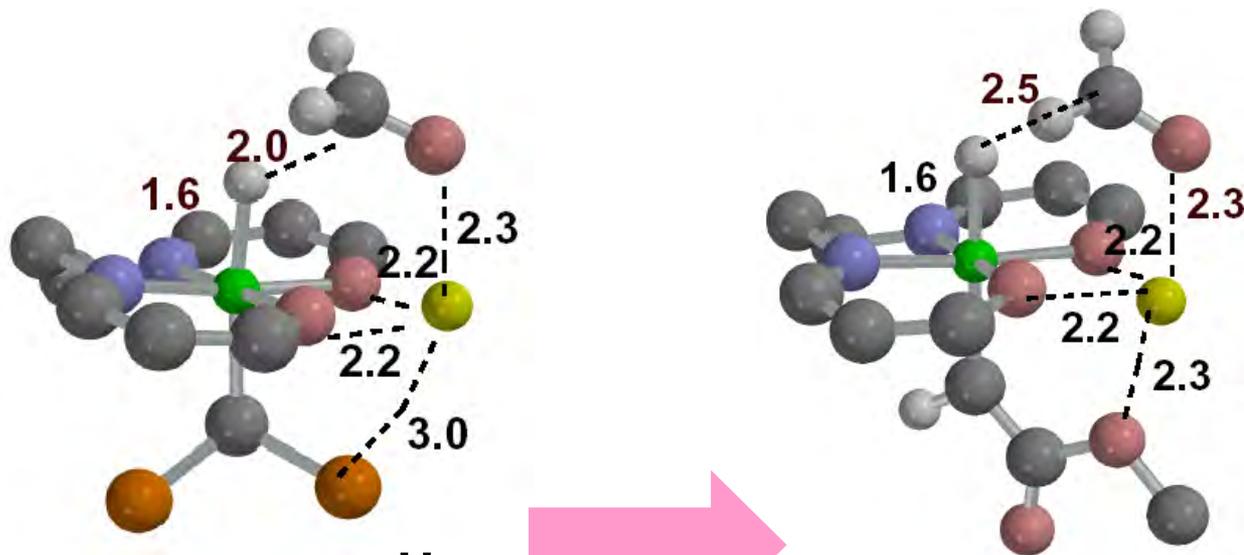
化学反応の場合は
見えない！



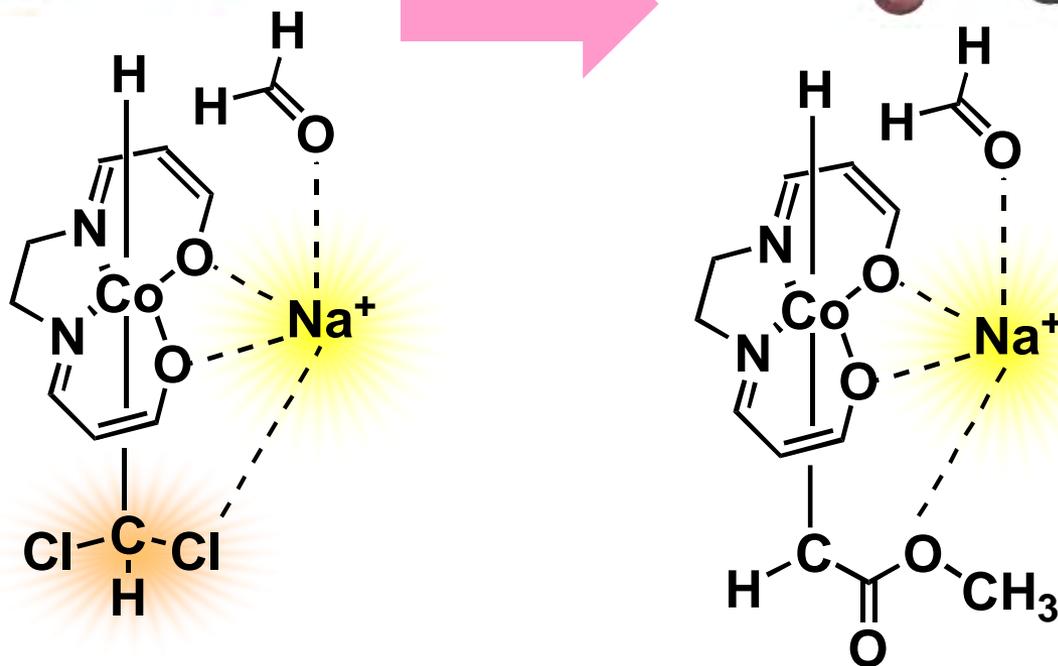
全ての可能性を
風潰しに調べなければ・・・

触媒が反応にどのように関わっているか分かれば
手の打ちようがあるのに……………

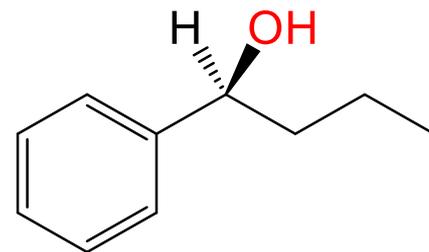
コンピュータを駆使する先輩が登場



塩素系でなくても
似た構造を取れる！



塩素系溶媒フリーで
OH手前構造の
選択的合成を
達成！



× 闇雲に試薬を選ぶ（人海戦術）



○ メカニズムに基づいた設計をする



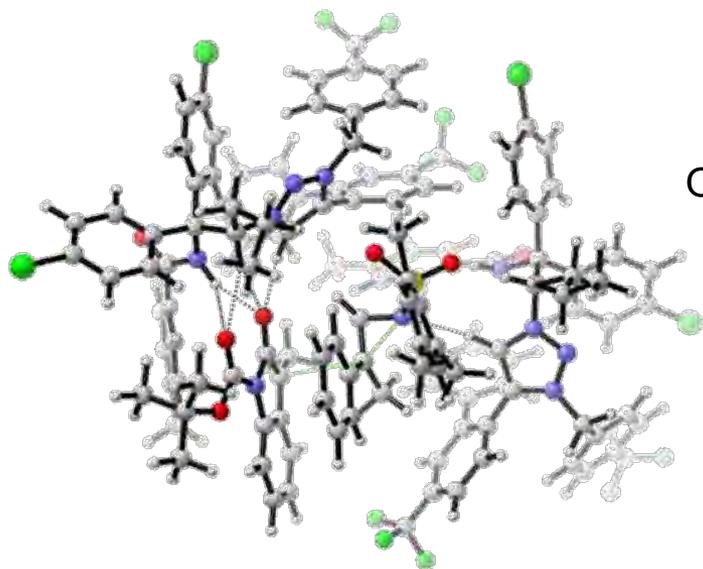
理論化学・計算化学の道へ

何でも計算できるようになったのか？

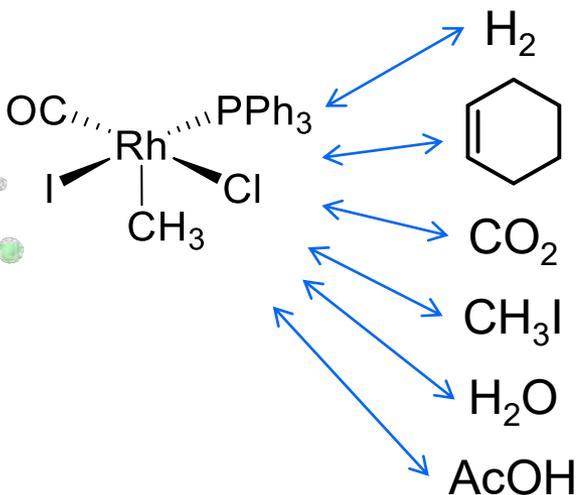
NO !

問題① 計算できない材料が山積み

複雑な触媒反応

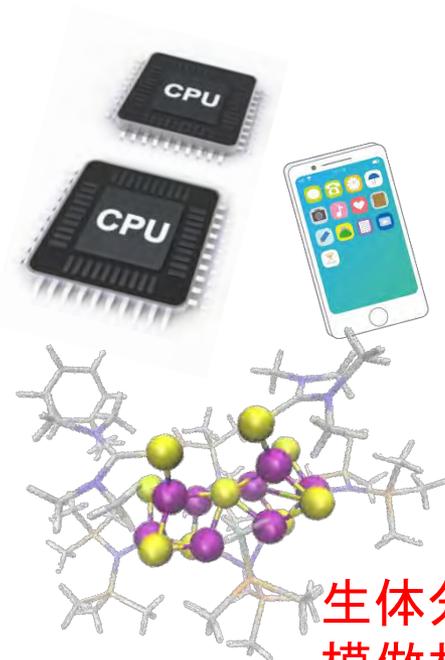


有機触媒



多成分反応

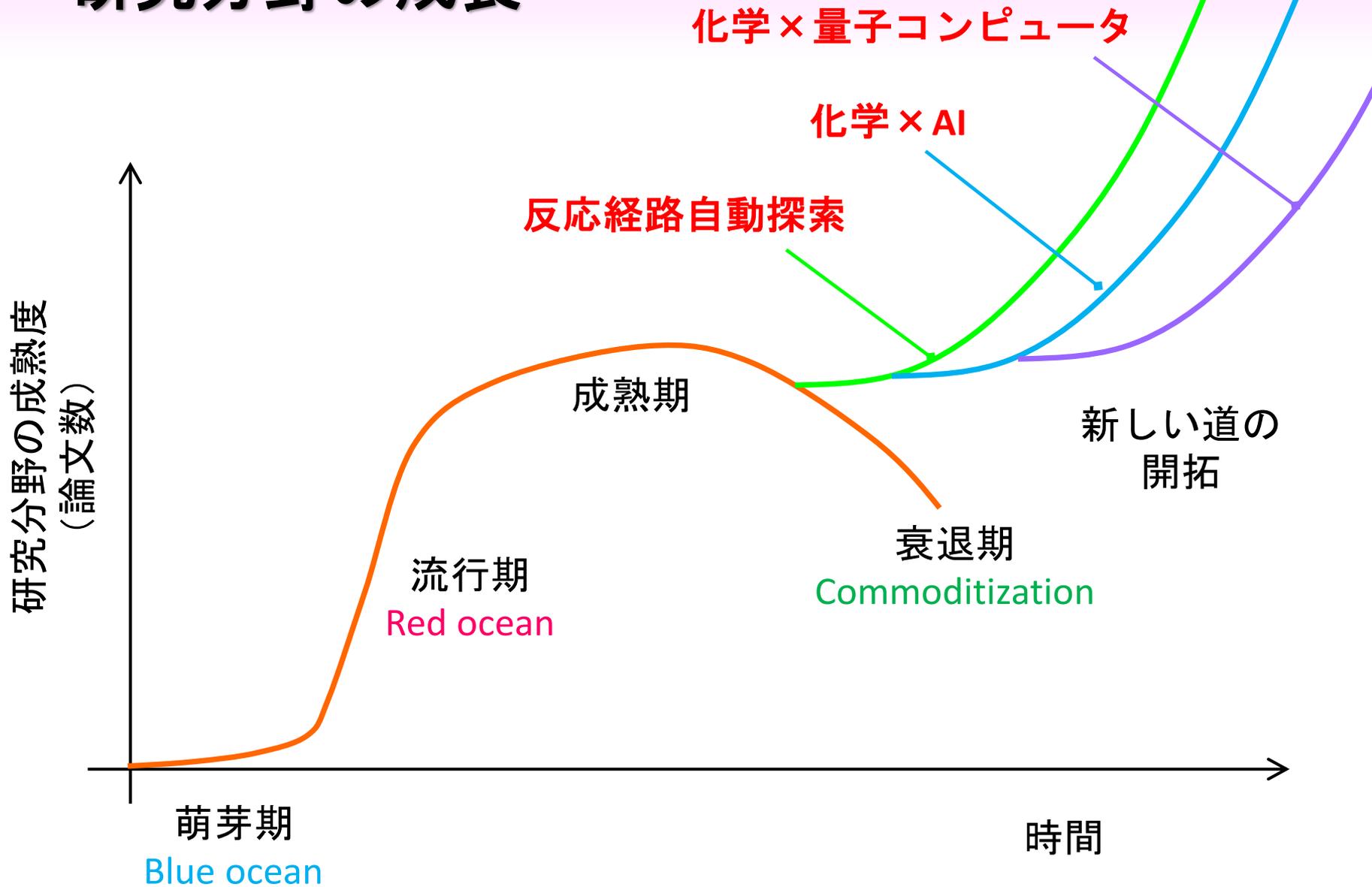
レアメタル材料



生体分子
模倣材料

問題② 計算に時間がかかり過ぎ

研究分野の成長

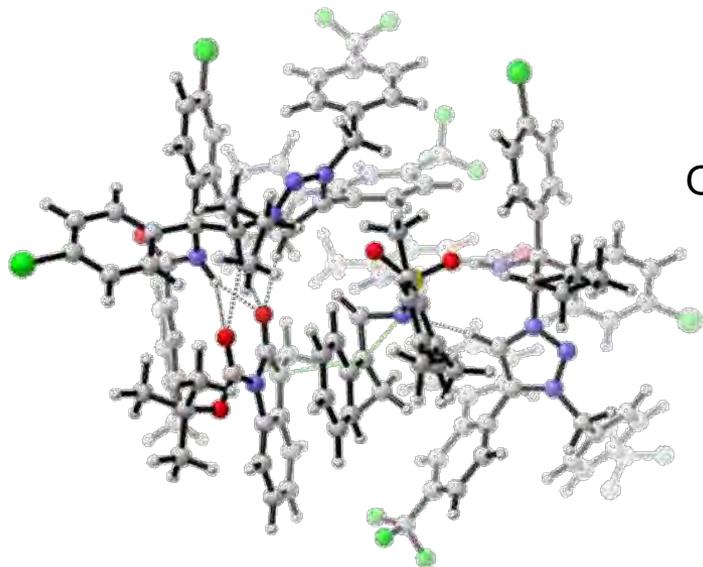


何でも計算できるようになったのか？

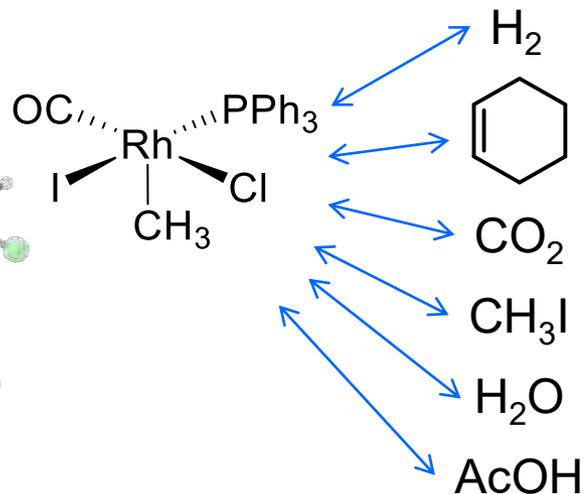
NO

問題① 計算できない材料が山積み

複雑な触媒反応

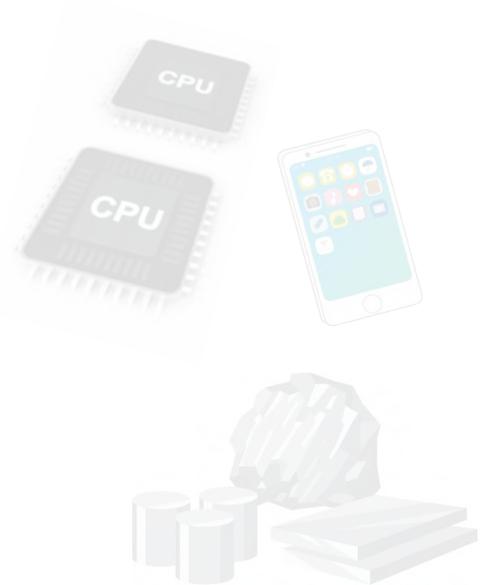


有機触媒



多成分反応

レアメタル材料



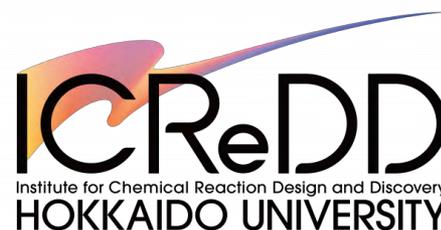
問題② 計算に時間がかかり過ぎ

解決策①

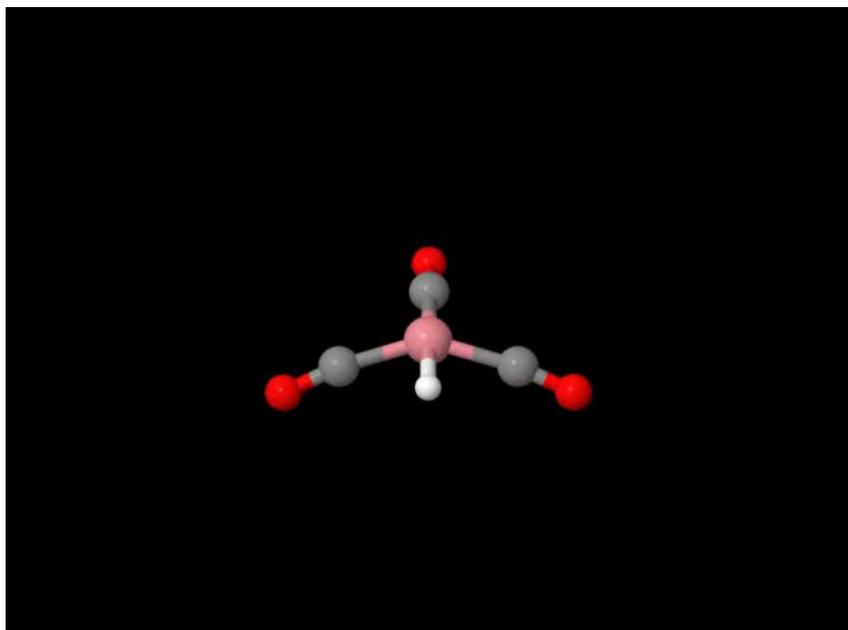
反応経路自動探索



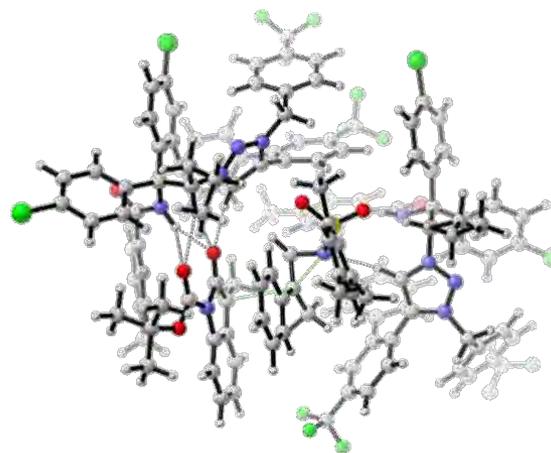
開発



複雑な化学反応の過程の可視化を**自動化**



化学反応のシミュレーション
技術は日本がTOP



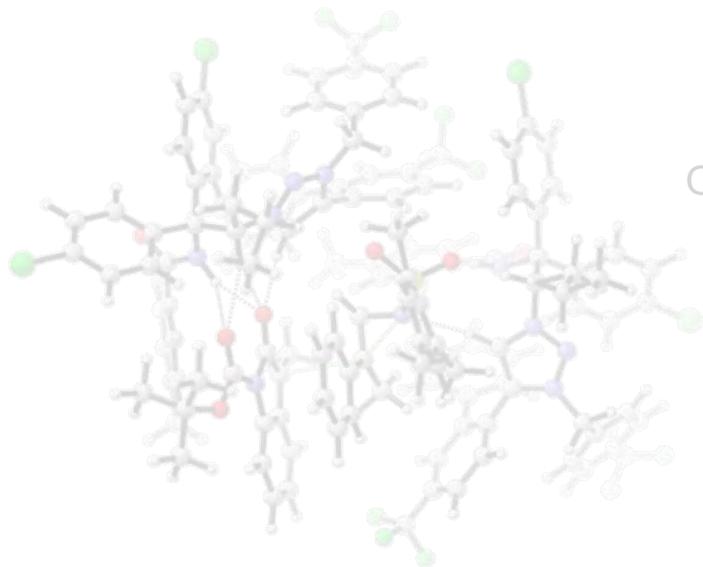
複雑な
触媒系にも
適用可

何でも計算できるようになったのか？

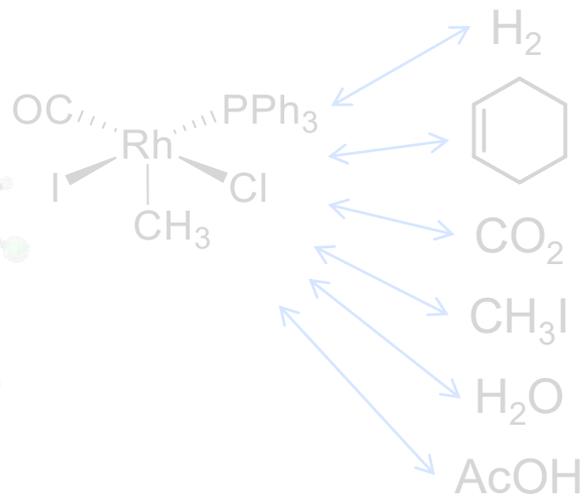
NO

問題① 計算できない材料が山積み

複雑な触媒反応

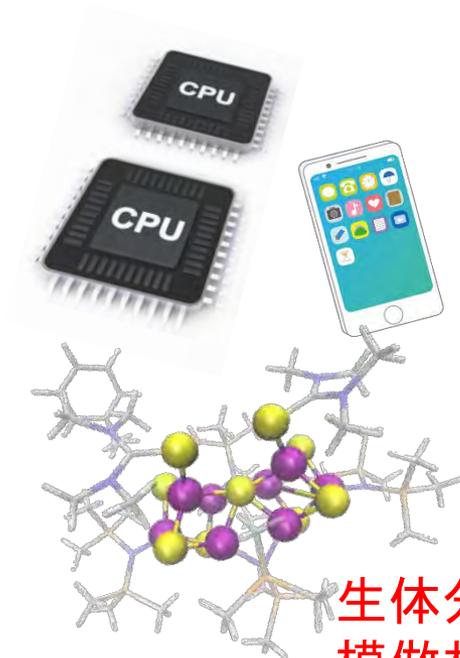


有機触媒



多成分反応

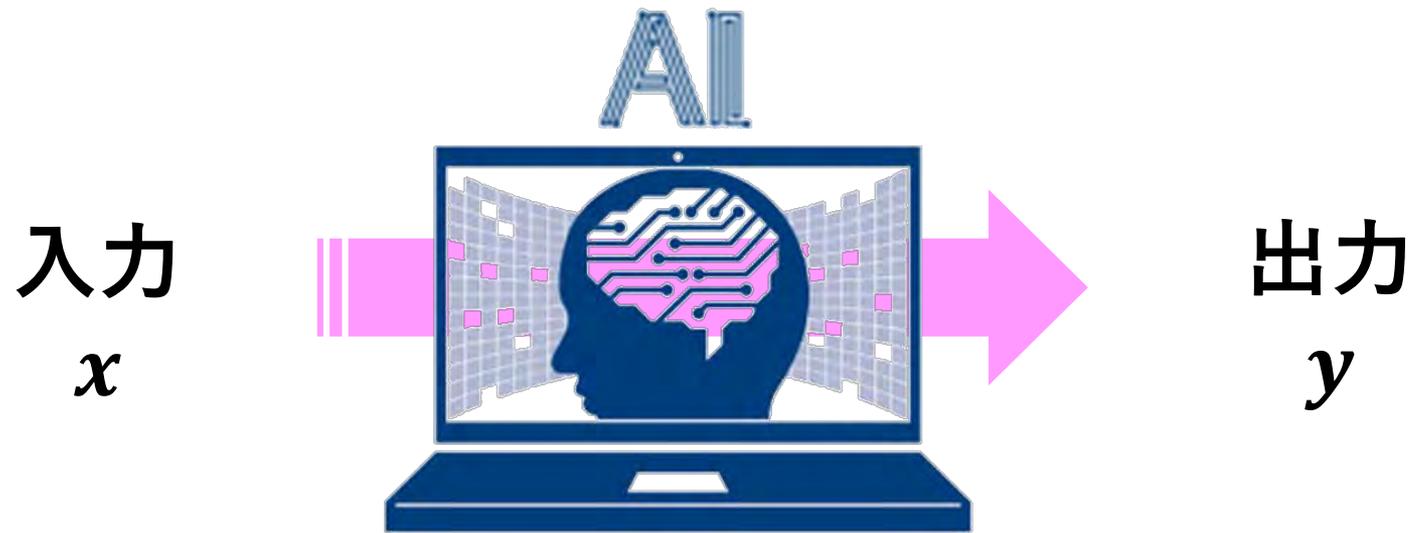
レアメタル材料



生体分子
模倣材料

問題② 計算に時間がかかり過ぎ

AI活用による予測と材料探索



$$y = f(x)$$

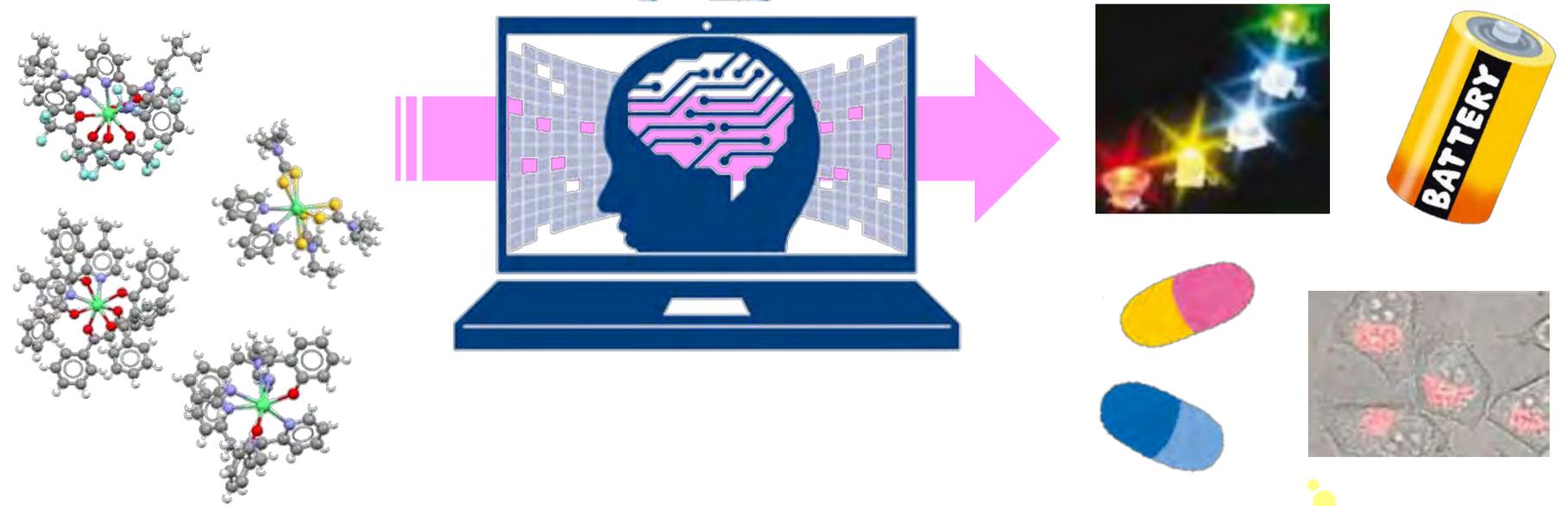
入力・出力のデータセットが
大量にあれば
AIによる予測システムを構築できる

AI活用による予測と材料探索

材料・作り方

AI

材料の性質・性能



材料やプロセスのデータセットが
大量にあれば

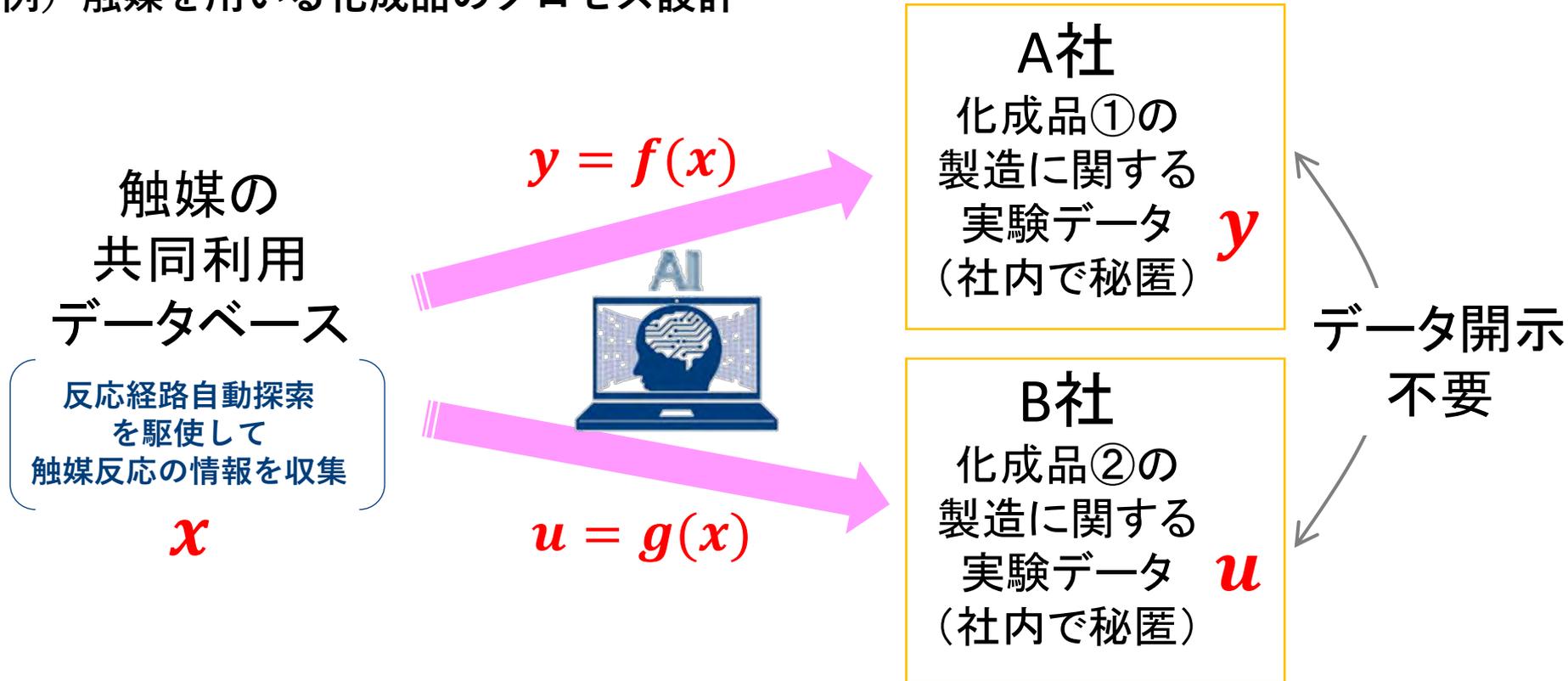
AIによる材料の性能予測システムを構築できる

公開
させる？
無理！

要戦略

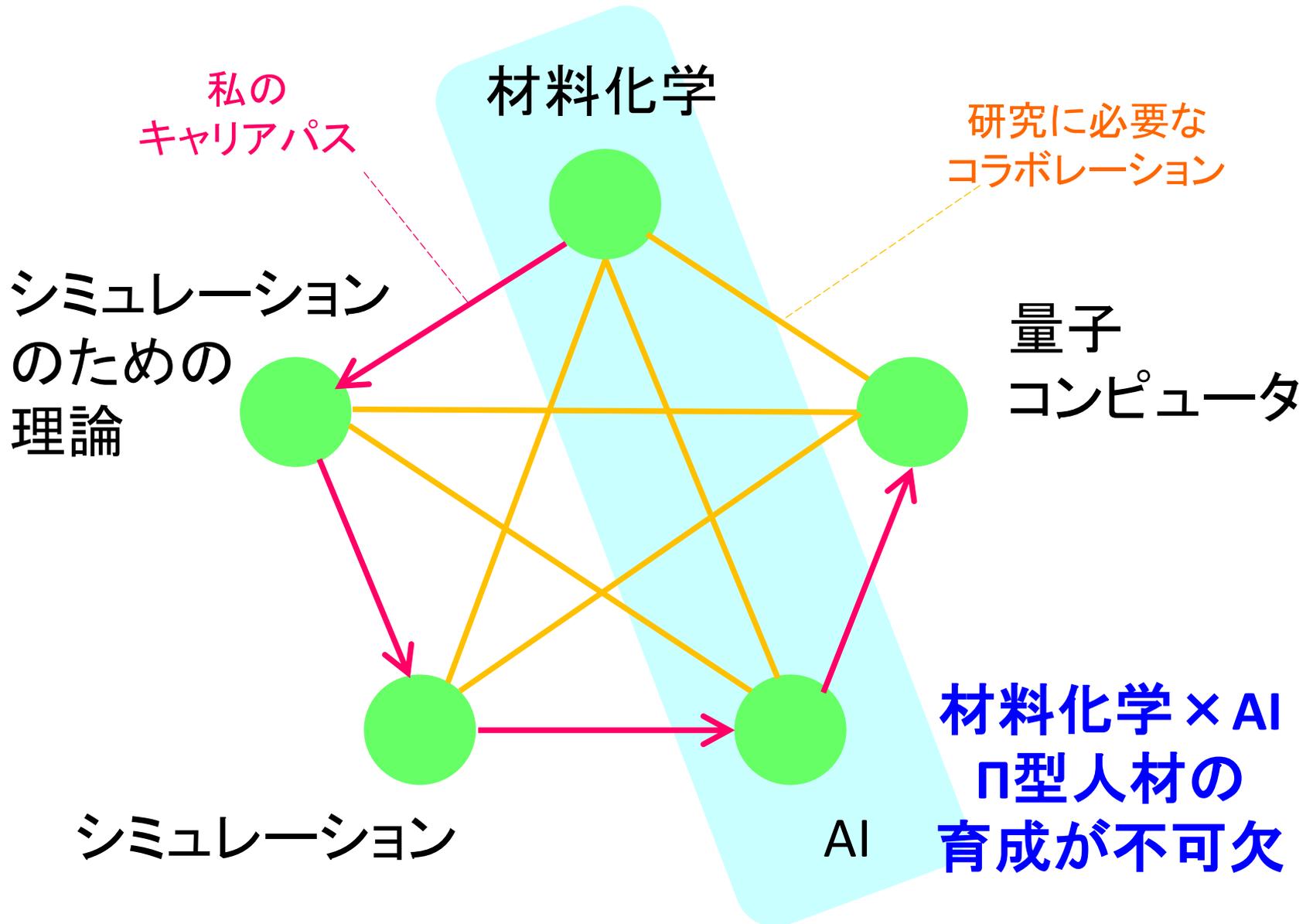
共同利用データベースの構築により 業界全体の開発加速に貢献

(例) 触媒を用いる化成品のプロセス設計



- ・ A社、B社共に、社内データ(y, u)を隠したままAI(f, g)を構築
- ・ AIがデータベース x の中から適切な触媒を発掘

育成すべき人材



研究と学部教育のギャップ

学部4年生が(私のラボで)卒業研究を始めるために必要な項目

3年生までの習熟度

- 化学一般・材料の性質 ★★☆☆☆☆
- 量子化学・量子力学 ★★☆☆☆☆
- 統計・数学・物理 etc... ★☆☆☆☆☆
- プログラミング ☆☆☆☆☆☆
- 機械学習 ☆☆☆☆☆☆
- 量子コンピュータ ☆☆☆☆☆☆

- ★ 一般的なカリキュラム
- ☆ (私の)講義にねじ込んだ内容

一人ですべてを教える → 限界あり



要戦略

他学部/学科の講義のオンデマンド配信の利用
ダブルメジャー制の導入

まとめ

- 計算化学の技術を駆使することで
化学現象を可視化できる
 - メカニズムを理解できる
 - 材料の高効率な設計が可能に
- まだ計算が困難な材料も多数
 - ハード&ソフトの双方の開発が不可欠
- 化学系人材にもAI・シミュレーション・量子コンピュータの素養が不可欠
 - 人材育成のために教育システムの再考を

実験自動化
技術も！