

背景と動機

機械学習・量子化学・遺伝的アルゴリズムを活用し、目的の特性を持つ分子を自動的に設計・最適化。

応用分野：有機化学、半導体材料・有機エレクトロニクス、分子機械、形状記憶合金、化学反応プロセスの最適化。

現状

半導体・有機半導体・分子機械は、現代の産業と技術を支える重要な基盤技術である。従来の試行錯誤型材料探索から脱却し、最適特性を持つ先端材料の開発が求められている。数値・データ駆動手法により、広大な化学空間を探索し、材料の設計・最適化が可能となる。

設定と記号

複雑な量子化学現象を近似するサロゲートモデルを構築。

分子フィンガープリントと対応する物性から学習データを生成。

機械学習モデルにより目的物性を高速予測。候補分子を反復最適化し、目標特性に到達。

研究紹介

有機分子の開環反応の逆設計・最適化のための数値プラットフォームを開発。

ソフトウェアの一部は日本の大手化学企業の計算クラスターに導入済み。

現在は分子機械の最適化・逆設計に注力し、ナノスイッチへの応用を想定。

応用可能性：創薬、ナノエレクトロニクス、ナノロボット、有機半導体、先端機能材料。

展開

