

## (テニューア・トラック) マテリアルズ・インフォマティクス研究室

<http://mswebs.naist.jp/LABs/hatanaka/index-j.html>

特任准教授：畑中 美穂 hatanaka@ms.naist.jp

## 化学・物理・情報科学を融合した科学現象の解明と新規材料設計

## 研究を始めるのに必要な知識・能力

化学・物理・情報科学の融合領域研究を行っているため、これらのうち1つ以上の基礎を修得していることが必要です。様々な分野の知識が必要になるため、専門を広げていく積極性・好奇心旺盛さを持つ学生さんを歓迎します。

## 研究室の指導方針

当研究室では、「自分で調べて、自分で考えられる人材」の育成を目指しています。そのため、研究の対象となる科学現象や材料の知識と、計算の方法論の知識の両方を積極的に学ぶことを奨励しており、週1~2回の勉強会を行っています。また、研究報告会では、参加者が自由に発言、質問できるような配慮し、各々のアイデアを可能な限り尊重することで、自分自身で考える能力を養える環境作りを行っています。研究報告会、勉強会以外のコアタイムは設けていませんが、限られた時間を効率よく使うために、研究以外の時間（勉強時間や休憩時間）に計算機が適切に稼働するよう、スケジュール管理する指導も行います。

## この研究で身につく能力

融合領域の研究には、一つの分野の考え方に固執せず、幅広い分野の考え方を吸収し、自分なりに咀嚼・昇華していく力が不可欠です。研究テーマに関わる様々な分野の知識を自ら調べ、それらの妥当性や関係性について論理的に考え、議論するという作業を繰り返すことで、新しい分野に対する自学習能力や、問題発見能力、問題解決能力が身に付くものと期待しています。

また、様々な分野の研究者に対する研究報告会や学会発表を通じて、プレゼンテーション能力やディスカッション能力を高めると同時に、我々の研究結果を、実際に材料や反応の開発を行っている実験系研究者の開発指針にできるよう、情報を昇華させる能力を鍛えることを重視しています。

## 修了生の活躍の場

製造業（化学系全般、製薬等）、教員

## 研究内容

新しい機能性材料を効率良く設計するためには、そのメカニズムの情報が不可欠です。本研究室では、量子化学計算を用いた様々な現象のメカニズムの解明を行うと共に、量子化学計算の結果をデータベース化し、機械学習やデータマイニングの技術を駆使した解析を行うことで、新規材料設計の指針を構築することを目指します。研究の対象は、触媒、発光材料、磁性材料など、学生一人ひとりの興味と適性に合わせて設定します。

## 「自動反応経路探索を用いる反応機構の解明」

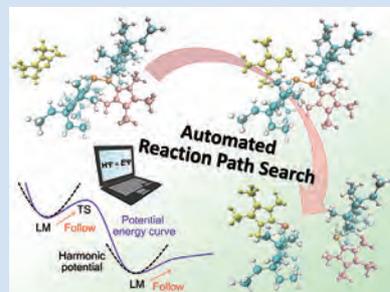
従来の計算化学における反応機構の研究では、反応中のエネルギー変化を、研究者が予想した経路に沿って調べるといった方法が用いられてきました。本研究室では、自動反応経路探索の一つである人工力誘起反応法を駆使することで、中間体や遷移状態を含む反応経路全体を自動的に探索させ、様々な化学反応のメカニズムを明らかにします。

## 「発光材料の機構解明と分子設計指針の構築」

発光材料の中でも、ランタノイドを含む化合物は、ディスプレイから生体内センサーまで、幅広い分野で応用されています。このようなランタノイド材料の発光特性を近似的に見積もる方法を独自に開発し、様々な発光材料の機構解明や分子設計に応用します。

## 「インフォマティクス技術の活用による新規材料設計」

既知の化合物だけでなく、未知の化合物に対して反応経路や物性値の量子化学計算を行い、その計算結果をデータベース化することで、新しい反応系や機能性材料を発掘することを目指します。更に、機械学習やデータマイニング等のインフォマティクスの技術を駆使することで、材料設計の「鍵」となる因子を抽出し、新しい材料設計指針を構築することを目指します。



## 研究設備

スーパーコンピュータ（研究室専用機の他に、京都大学・分子科学研究所等の全国共同利用コンピュータも利用）

## 研究業績・共同研究・社会活動・外部資金など

◆原著論文については研究室HP参照。

- [1] M. Hatanaka, A. Osawa, T. Wakabayashi, K. Morokuma, M. Hasegawa, "Computational study on the luminescence quantum yields of terbium complexes with 2,2'-bipyridine derivative ligands", *Phys. Chem. Chem. Phys.* 20, 3328(2018).
- [2] N. Hayakawa, K. Sadamori, S. Tsujimoto, M. Hatanaka, T. Wakabayashi, T. Matsuo, "Cleavage of a P=P Double Bond Mediated by N-Heterocyclic Carbenes", *Angew. Chem. Int. Ed.* 56, 5765(2017).
- [3] M. Hatanaka, Y. Hirai, Y. Kitagawa, T. Nakanishi, Y. Hasegawa, K. Morokuma, "Organic linkers control the thermosensitivity of the emission intensities from Tb(III) and Eu(III) in a chameleon polymer", *Chem. Sci.* 8, 423(2017).

◆実験グループとの共同研究を積極的に実施

北海道大学・東京大学・東京工業大学・東京理科大学・青山学院大学・名古屋大学・近畿大学等

企業との共同研究・技術指導も実施

◆外部資金

科学研究費補助金・NEDO 等