

准教授・杉本 学

大学院先端科学研究部 工学系 材料・応用化学科

▶ 研究内容

技術開発の動機・目的

物質に関する情報から、できるだけ簡単に

- (1) 物質の機能を予測したい。
- (2) 有望な物質を具体的に絞り込みたい。
- (3) どんな因子が重要か、知りたい。

ブレークスルー(本技術)

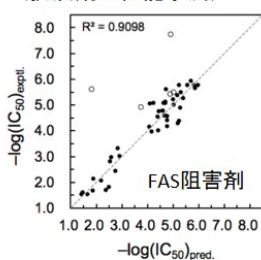
- (1) 電子状態に関する情報を物質の記述子(説明変数)として利用
- (2) 機械学習(AI技術の一種)を駆使
- (3) 実験、理論、数値計算全ての情報を活用

[鍵技術] 過去の計算シミュレーションで培った解析のノウハウ、化学理論+物性理論を活用して、汎用性高い記述子を考案。(実施例: 固体触媒、錯体触媒、有機EL材料、太陽電池材料、in-vivo蛍光プローブ、機能性色素、など)

医薬品開発

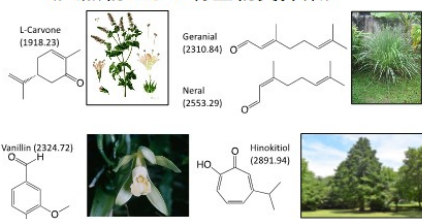
[活性予測]

(抗癌剤の性能予測)



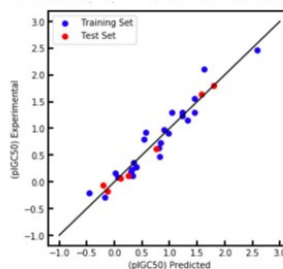
[探索]

(天然物からの有望物質探索)



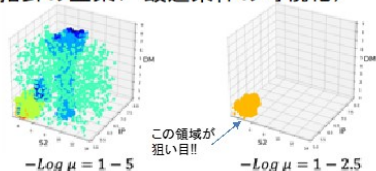
毒性予測

(有機分子の環境毒性予測)



電子材料探索

(ペロブスカイト太陽電池用ホール輸送材料の設計指針の立案: 最適条件の可視化)



テーラメード新技術開発

本技術の汎用性は高いが、応用対象によっては、カスタマイズを要する可能性あり。



クライアントと情報交換しながら、ニーズに応じた専用の物質インフォマティクス技術を構築。

▶ 提供できる技術

機械学習技術 計算化学/計算物理シミュレーション技術 第一原理計算、分子動力学計算 物質インフォマティクス、量子コンピューティングに関するコンサルティング 講演手法、研究動向 関連情報の提供 技術支援

▶ キーワード

物質インフォマティクス 機械学習 人工知能 AI 計算化学/計算物理シミュレーション技術 医薬品 毒性 天然物 電子材料 触媒