

畑中 美穂（准教授（クロスアポイントメント*））（2024 年 6 月 1 日着任）

増田 道子（事務支援員）

千葉 史朱香（事務支援員）

*慶應義塾大学理工学部

A-1) 専門領域：理論化学，マテリアルズインフォマティクス

A-2) 研究課題：

- a) 触媒および高分子材料の反応経路のデータベース化と機械学習への応用
- b) ベイズ最適化を活用した円錐交差点の探索手法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 近年，データ駆動科学を触媒や高分子材料に応用する試みが注目を集めている。しかし，限られたデータセットで予測精度の高い機械学習モデルを構築するには，材料に対する適切な特徴量の開発が不可欠である。我々は，二元共重合体の特徴量として，モノマーペアの重合初期段階における素過程の反応エネルギーや活性化障壁を含む DFT 計算値が有用であることを示した。また，この考え方を触媒にも拡張し，遷移金属錯体触媒の素反応のエネルギーを特徴量に用いるべく，DFT 法による計算結果の収集を実施している。現在，1648 種のホスフィン配位子を持つパラジウム錯体の構造と素反応の中間体データの収集まで完了している。
- b) 従来，ポテンシャルエネルギー曲面（PES）上における分子構造の探索には，量子化学計算によって求めたエネルギーとエネルギー勾配が使われてきた。だが，エネルギー計算を量子コンピュータ上での測定に置き換えた場合，エネルギー値には測定誤差が含まれるので滑らかな PES が描けない，つまり，従来のエネルギー勾配を用いる構造探索法が適用できないという問題が出てきた。この問題に対処するために，我々は，機械学習的手法の一つであるベイズ最適化（BO）を用いて光機能発現の鍵となる最安定円錐交差点を探索する手法の開発を行い，エチレンやホルムアルデヒド，ベンゼンなどの小分子の最安定円錐交差点構造を精度良く求めることに成功した。

B-1) 学術論文

T. YOSHIMURA, H. KATO, S. OIKAWA, T. INAGAKI, S. ASANO, T. SUGAWARA, T. MIYAO, T. MATSUBARA, H. AJIRO, M. FUJII, Y. OHNISHI and M. HATANAKA, “CopDDB: A Descriptor Database for Copolymers and Its Applications to Machine Learning,” *Digital Discovery* **4**, 195–203 (2025). DOI: 10.1039/D4DD00266K

R. SOMAKI, T. INAGAKI and M. HATANAKA, “Exploration of the Global Minimum and Conical Intersection with Bayesian Optimization,” *Mol. Inf.* **44**(2), e202400041 (2025). DOI: 10.1002/minf.202400041

R. OHNO, K. OTA, N. NISHIMURA, K. TANIGUCHI, S. KUROKAWA, T. WAKABAYASHI, M. HATANAKA, A. ROSAS-SÁNCHEZ, D. HASHIZUME and T. MATSUO, “Silicon Analogues of Cyclopropyl Radical Derived from a Highly Stable Cyclic Disilene Compound Featuring a Si–Br Bond,” *J. Am. Chem. Soc.* **146**(36), 24911–24924 (2024). DOI: 10.1021/jacs.4c06111

- K. MUTO, M. HATANAKA, F. KAKIUCHI and T. KOCHI**, “Theoretical Studies on Relative Stability of Cationic 1,10-Phenanthroline Palladium Complexes Bearing Alkyl Groups by Using Designed Alkane Templates,” *Organometallics* **43**(14), 1528–1535 (2024). DOI: 10.1021/acs.organomet.4c00097
- S. KANNO, H. NAKAMURA, T. KOBAYASHI, S. GOCHO, M. HATANAKA, N. YAMAMOTO and Q. GAO**, “Quantum Computing Quantum Monte Carlo with Hybrid Tensor Network for Electronic Structure Calculations,” *npj Quantum Inf.* **10**, 56 (2024). DOI: 10.1038/s41534-024-00851-8
- A. WAKIUCHI, S. JASIAL, S. ASANO, R. HASHIZUME, M. HATANAKA, Y. OHNISHI, T. MATSUBARA, H. AJIRO, T. SUGAWARA, M. FUJII and T. MIYAO**, “Multiple Comonomer Concentrations Prediction from FTIR Spectra with Quantum Chemistry-Based Interpretation,” *MRS Commun.* **14**, 439–444 (2024). DOI: 10.1557/s43579-024-00568-x

B-4) 招待講演

- M. HATANAKA**, “A descriptor database for metal-phosphorus complexes to evaluate the catalytic abilities using machine learning,” The 8th Japan-Czech-Slovakia (JCS) International Symposium on Theoretical Chemistry, Sapporo (Japan), June 2024.
- M. HATANAKA**, “Understanding and Designing Lanthanide Photofunctional Materials,” The 8th ICRDD International Symposium + Rising Star Program, Sapporo (Japan), October 2024.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

理論化学会幹事 (2022–).

日本化学会関東支部幹事 (2023–).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業 ACT-X アドバイザー (2023–).

文部科学省量子科学技術委員 (2023–).

文部科学省 科学技術・学術政策研究所 (NISTEP) 専門調査員 (2019–).

理科教育活動

総合学習, 横浜雙葉高等学校 (2024).

B-8) 大学等での講義, 客員

慶應義塾大学理工学部, 「化学A」, 2024年4月–7月.

慶應義塾大学理工学部化学科, 「量子化学基礎」, 2024年10月–2025年1月.

慶應義塾大学理工学部化学科, 「分子量子化学」, 2024年4月–7月.

慶應義塾大学理工学部化学科, 「電子状態理論」, 2024年10月–2025年1月.

慶應義塾大学理工学部化学科, 「物理化学演習第1」, 2024年4月–7月.

慶應義塾大学理工学部化学科, 「物理化学演習第2」, 2024年10月–2025年1月.

慶應義塾大学理工学部化学科, 「化学実験第1」, 2024年4月–7月.

B-10) 競争的資金

科研費学術変革領域研究(A),「金属錯体触媒データベースの構築による触媒開発の加速」, 畑中美穂 (2024年度–2025年度).

科研費基盤研究(A),「電解発生活性化学種の利用による新物質変換系の構築」(代表: 栄長泰明), 畑中美穂 (研究分担者) (2023年度–2025年度).

B-11) 産学連携

共同研究, ダイキン工業(株),「自動反応経路探索 GRRM プログラムに基づく計算化学と機械学習を活用した触媒配位子を提案するシステムの開発」, 畑中美穂 (2020年度–2024年度).

共同研究, DIC (株),「マテリアルズインフォマティクス(MI)活用によるアルキド樹脂用非コバルトドライヤの開発」, 畑中美穂 (2018年度–2024年度).

C) 研究活動の課題と展望

遷移金属錯体触媒の特徴量として、錯体構造とモデル分子との素反応で得られる生成物のデータ収集を完了したため、次は、遷移状態のデータ収集に取り掛かる。触媒の作用は遷移状態を安定化することであるため、遷移状態の安定性が、触媒に対する最も良い特徴量となると期待している。遷移状態を含む特徴量データベースの構築が完了し次第、触媒反応の実験結果の予測ができるか検証すべく、実験グループとの共同研究を開始する予定である。