

小松 勇 (Yu Komatsu)

所属 (Domain) 物質科学工学領域 (Domain of Materials Science and Engineering)

●研究テーマ (Research theme)

①極限環境における化学反応の理論推定

(Theoretical Prediction of Chemical Reactions under Extreme Conditions)

②計算化学と機械学習の融合

(Integration of Computational Chemistry and Machine Learning)

①計算化学的手法を用いて、極低温や高圧下などの極限環境における化学反応や物性の理論的な推定を行っている。反応経路を明らかにするために、遷移状態理論に基づく化学反応経路探索手法を活用し、反応のメカニズムを解析している。例えば、極低温環境下での有機分子の生成過程の推定を行っており(図1)、反応設計へのさらなる応用が期待される。

We use computational chemistry to theoretically predict chemical reactions and material properties under extreme conditions, such as ultralow temperatures and high pressures. By employing automated reaction path search techniques based on transition state theory, we can systematically identify reaction pathways and quantitatively evaluate reaction mechanisms. For example, we have simulated the formation pathways of organic molecules under low-temperature conditions, revealing key steps in their reaction mechanisms (Fig. 1). This methodology is applicable to reaction design in experimentally challenging systems.

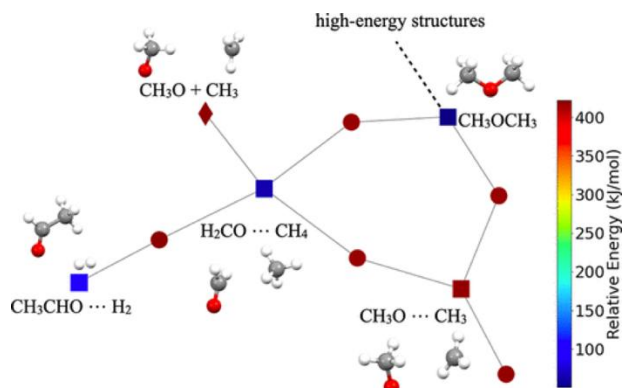


Fig. 1 Chemical reaction network for the formation of organic molecules under cryogenic conditions (Komatsu and Furuya, 2023).

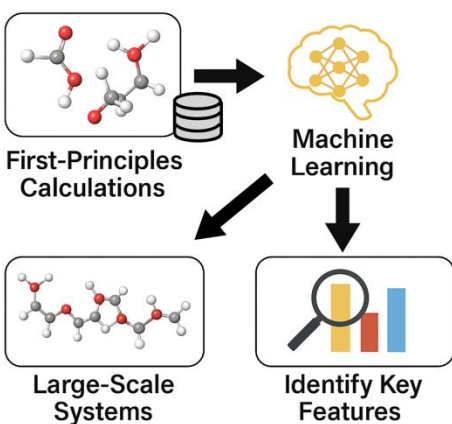


Fig. 2 An Image to combine computational chemistry and machine learning.

②計算化学と機械学習を組み合わせ、計算効率の向上による大規模系への応用や、重要な特徴を特定するための方法論の構築に取り組んでいる(図2)。例えば、第一原理分子動力学法のデータを用いて深層学習モデルに原子間相互作用を学習させ、それを古典分子動力学に組み込むことで、大規模系の効率的な時間発展の追跡を可能にしている。このようなアプローチは触媒設計や材料開発などに応用できる。

We are developing a methodology that combines computational chemistry and machine learning for improving computational efficiency to enable applications to large-scale systems, and identifying key features (Fig. 2). For example, by training deep learning models on first-principles molecular dynamics data, we reproduce interatomic potentials for use in classical molecular dynamics, enabling efficient simulations of large systems. This approach supports catalyst design, and materials development.

キーワード (Keyword)

専門分野 (Specialized Field)

共同研究可能技術 (Possible Technology of Cooperative research)

関連論文・特許情報 website
(Related articles・patent information)

研究設備 (Research Facility)

研究室URL (Lab. URL)

E-mail

量子化学 (Quantum Chemistry), プログラミング (Programming), 機械学習 (Machine Learning)

計算化学 (Computational Chemistry), 分子シミュレーション (Molecular Simulation)

[小松 勇\(工学部 物質科学工学科\) | 茨城大学研究者情報総覧](#)

計算サーバ

yu.komatsu.za71@vc.ibaraki.ac.jp