

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 時空精細化 AI で挑む化学反応場の量子化学

2. 個人研究者名

黒木 菜保子（中央大学理工学部 助教）

3. 事後評価結果

本研究課題の目的は、分子動力学・量子化学に AI 技術を組み合わせることにより、溶媒分子が化学現象に与える電子状態変化を高精度かつ高速にシミュレーションし、機能性溶媒設計を先導する技術を開発することである。量子化学と AI を組み合わせることによって構成原子の結合特性から分子物性を評価する手法を開発するなど、複数の成果が得られており、当初の目的を達成したといえる。

筆頭著者としての 4 報を含む、7 報の原著論文を発表するなど、成果の公開状況も良好である。ライフイベントによる中断を挟みつつも、自身の専門性を足場に着実かつ高レベルな成果をあげたと評価できる。

今後は、本研究で開発した手法をさらに発展させるとともに、現実の機能性溶媒設計への応用へとつないでいくことで、さらに大きなインパクトが期待できる。