



「量子化学計算とデータ科学によるGX研究加速」

小林 正人 理学院化学部門・量子化学研究室

email: k-masato(at)sci.hokudai.ac.jp

研究室HP <https://wwwchem.sci.hokudai.ac.jp/~qc/>

関連キーワード「理論計算化学／DX／水素製造／触媒」

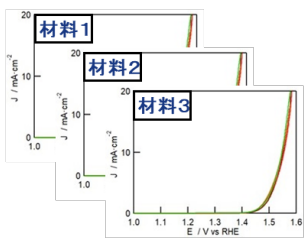
○キャッチコピー

計算化学とデータ科学が加速する未来のGX

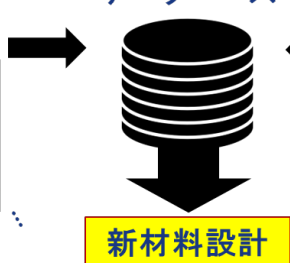
○研究の内容紹介

量子化学計算は、コンピュータを利用して物質機能の解明・設計や化学反応の理解・予測を行うものであり、化学反応・物質や材料物理の研究に欠かすことのできないツールとなっています。私たちは特に、量子化学計算の結果を大量に取得してデータ科学に活かすハイスループット計算データベース構築を得意としています。この技術を利用して、複雑な組成を持つ触媒や水電解電極反応の原理解明を進め、実験データなどと統合して解析し、材料の最適化などにも利用しています。

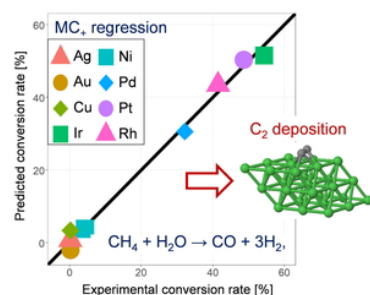
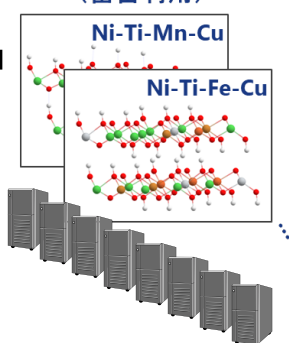
電気化学測定データ



水電解材料データベース



ハイスループット量子化学計算 (富岳利用)

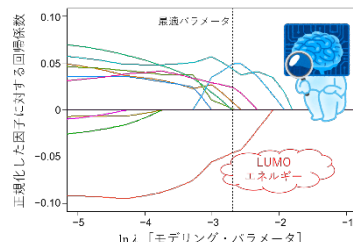


○社会実装への可能性

- ・水電解電極等の複合材料の最適化のアシスト
- ・触媒開発の加速

○産業界や自治体等へのアピールポイント

- ・新しい計算法や解析法の開発にも取り組んでいるため、既存の量子化学計算プログラムを利用するだけではないこともご相談ください。
- ・大規模系の量子化学計算も得意としています。



個人Web



Researchmap

