

計算科学アライアンス海外派遣 報告書

工学系研究科 化学システム工学専攻 八日市屋 朋子

今回、計算科学アライアンスの海外派遣プログラムを利用し、①ブラチスラバ（スロバキア）で開催された 17th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC) 及び、②グラーツ（オーストリア）で開催された the satellite meeting “Intermolecular Interactions and Properties of Gases, Liquids and Solids” of the International Congress of Quantum Chemistry (ICQC) 2023 に参加した。ICQC は、3年に1度開催される、量子化学の伝統的な学会であり、量子化学・計算化学の研究者による最新の研究内容が発表される場である。ICQC は非常に規模の大きい学会であるため、より細かいトピックにフォーカスした様々な会議が ICQC の会期前後に開催された。②は、筆者の研究トピックである分子間相互作用に関するサテライトミーティングである。

筆者は、固体触媒表面上の相互作用を解析するため、ニューラルネットワークポテンシャルを用いたシミュレーションを行っており、その研究成果についてポスター発表を行った。近年の AI 技術の発展に伴い、量子化学の分野でも機械学習を用いた研究が盛んに行われている。ニューラルネットワークポテンシャルは、DFT などの第一原理計算の結果を学習させて構築されるポテンシャルであり、分子系のエネルギーや力を非常に高速に計算することが可能である。本研究では、ニューラルネットワークポテンシャルを用いて系のエネルギーを評価することで、従来は近似モデルで扱っていた触媒表面上の吸着種間の相互作用を明示的に考慮した触媒反応のシミュレーションを行い、相互作用が触媒特性に及ぼす影響について詳細に解析を行っている。発表にあたっては、どちらの会議においても、非常に多くの研究者に興味を持ってもらい、様々な議論を交わすことができた。これまでの国内学会発表の時とは違った質問・コメントを多く頂き、今後の研究を進める上での参考にもなった。そして、ICQC では、博士課程の学生 200 人以上の中から 6 人に贈られる “ICQC Poster Prize” を受賞することができた。このような伝統ある国際学会で受賞できた事を大変光栄に思っている。

今回の学会参加で得られた経験は、今後の研究者人生にとって非常に価値のあるものであった。ポスター賞の受賞をはじめとして、多くの研究者と知り合って交流できた事や、いくつもの刺激的な研究を学んだ事など、どれ一つをとっても、計算科学アライアンスからの海外渡航支援がなければ実現できなかった経験である。改めてここに深い感謝の意を表す。今回得た経験を今後の研究人生の糧とし、ますます計算科学研究に勤しんでいきたい。



ICQC Poster Prize の賞状