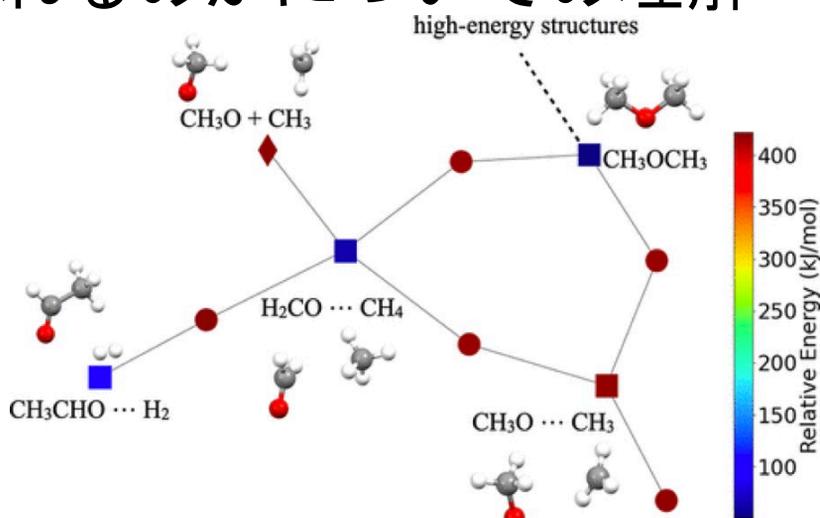


# 見えない分子の世界を数値シミュレーションで読み解く

実験では調べるのが難しい化学反応などを、原子分子の電子状態を扱うコンピューターシミュレーションを使って調べます。極低温や高圧下などの極限環境においてどのような状態が実現されるのかについての理解を深化させます。

新しい計算手法の開発や、人工知能を使って賢く計算を進める方法論の模索にも取り組んでいます。



推定した化学反応の例  
(Komatsu and Furuya, 2023)

キーワード

量子化学、プログラミング、機械学習

分

野

計算化学、分子シミュレーション