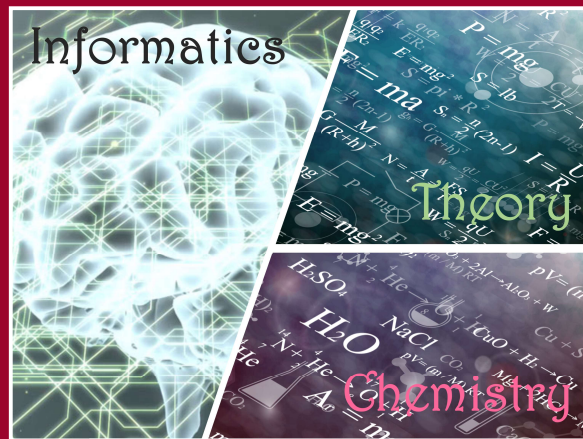


# 化学・生命化学科/専攻 重点領域「ケム・インフォマティクス」

化学の観点からインフォマティクスを学び  
新たな化学・物理法則や知識体系を獲得できる  
化学者を育てます



## 概要

第3次人工知能(AI)ブームは、経済活動やライフスタイルなどに影響を与え、現在の第4次産業革命を牽引しています。本重点領域において、AI技術を化学研究に活用し、化学の基礎となる化学/物理法則や知識体系の構築、応用としての革新的な材料の探索や合成指針の獲得など、化学研究を深化・進化するための基礎および応用技術を探求します。

## 教員紹介



清野 淳司 准教授

**経歴**  
2010 首都大学東京 修了(博士(理学))  
2010 早稲田大学 助手  
2012 日本学術振興会 特別研究員(PD)  
2015 早稲田大学 WISE 次席研究員  
2017 科学技術振興機構 さきがけ研究者(兼任)  
2020 東京都立大学 特任准教授

## 授業

### ケム・インフォマティクスの基礎・応用力の習得

化学者の知識や経験を活かした従来の化学研究をAIが代用し、膨大なデータから複雑な規則・法則を読み解くための、AI技術に関する基礎を学びます。また実際の化学データを利用した種々の演習を通して、化学とインフォマティクスの両方の視点から研究を遂行できる人材を育成します。

授業では、ケム・インフォマティクスの現状と将来性を理解するとともに、AI技術の根幹となる機械学習などの諸手法の概要と理論を学びます。また実際の化学データと、多くの機械学習ライブラリを含むPython言語を利用した演習を通して、化学データの解析や種々の化学研究への活用の仕方について学びます。

### 担当授業

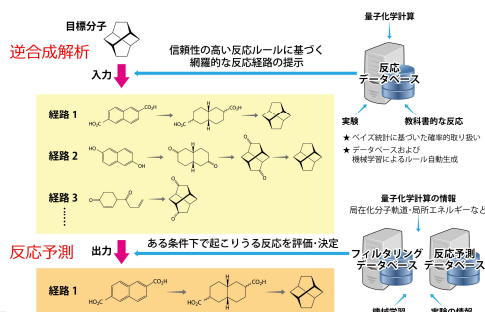
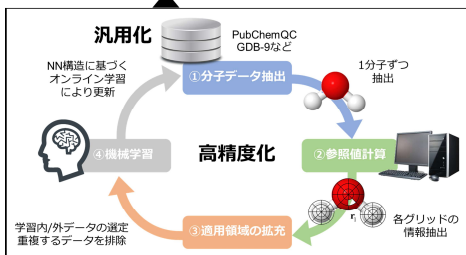
- ケム・インフォマティクス概論
- ケム・インフォマティクス特論
- ケム・インフォマティクス研究
- ケム・インフォマティクス演習
- 化学・生命化学特別実験
- 化学・生命化学海外特別演習
- 理工学基礎実験
- 卒業論文

## 研究

### インフォマティクスを利用して化学の諸問題に挑む

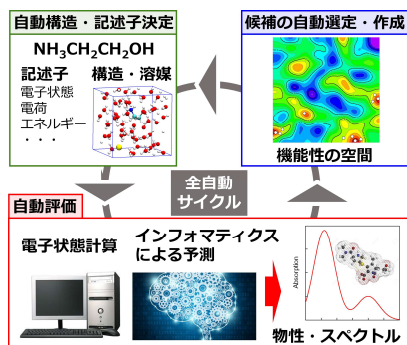
データとインフォマティクスから電子状態計算の高機能化や新規の化学/物理法則・知識体系を獲得します

$$\frac{\delta}{\delta \rho} U[\rho] = \frac{\delta}{\delta \rho} (E[\rho] - \mu (\int \rho d\mathbf{r} - N_{\text{elec}})) = 0 \quad \text{高速化}$$



実験/計算とインフォマティクスから化学反応が起こるか、化合物をどのように作るかの指針を与えます

実験/計算による物性・スペクトルとインフォマティクスから革新的な化合物を探索します



## スキル

### 学部

機械学習の理論や化学データの性質に関する基礎知識を身に付けます。演習を通してデータの活用術も習得します。

### 大学院

化学に関する実課題を発見し、AI技術を用いて解決する課題解決型化学×AI人材を育成します。

