

ある性質を極大化する物質を探索する場合には、通常ある構造を持ったモデル物質から出発して、それを少しずつ変化させて性質を少しずつ大きくするという探索手法が取られる。ここでは、その性質を極大化する物質の構成要素と構造を直接決める手法を紹介する。

§1. 序論

「ある性質について、既存のモノに比べ格段に優れている物質があったら」という要求は常に発生する。癌を退治する特効薬を例に持ち出すまでもなく、大きな光非線形を持つ物質¹⁾やスイッチのもっと速い特性を持つ物質が望まれている。前者は、光で駆動するコンピュータや光通信の新たな飛躍に繋り、後者は、固体素子のデバイスなどの新たな飛躍に繋る。

通常、このような要求に対して、注目している性質をある程度大きくしているモデル物質から出発して、それを変化させて性質を少しずつ大きくするという探索手法が取られる。モデル物質から出発するというメリットは、その物質を(やれば実際に)合成できる(だろう)ということにある。一方、この方法は、モデル物質を変形することで到達される性質は、モデル物質に強く依存するというデメリットも持っている。ここでは、モデル物質のような物質から出発するのではなく、ある性質を極大化する物質を直接構成する方法を紹介する²⁾。

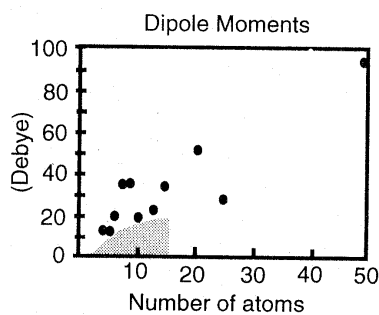
§2. 新物質デザインの方法

物質の性質は

- (1) 物質を構成する(原子などの)要素の種類と
- (2) それら要素の配置

から一般的に定まるので、ある性質を極大化する物質の探索する問題は、(1)と(2)を変数とする最適化問題を解くことに帰着する。正確には、“(注目している)性質を(1)(2)を変数とするモノ(関数)を、最適化問題での目的関数と見做し、目的関数を最大化する変数を求める”という最適化問題に帰着する。目的関数は、変数の簡単な関数の形になる場合もあるし、(計算可能であるが)明示的に書き下だせない場合もある。この方法は、ある性質を極大化する物質を直接的に得られるが、一方合成する方法を新たに考え出さないといけないという、既存の方法に比べてデメリットを持つ。

§3. 計算結果: ダイポールモーメントを例に



上記の考えを具体的に展開した例を紹介する。ある性質を、ここでは物質(分子、巨大分子)のダイポールモーメントとした。変数に対する最適化方法として高次元アルゴリズム³⁾を使った。この問題では、分子を構成する原子の種類が決まる。種類に応じて電子状態と原子配置(位置)が決まる⁴⁾。原子配置は、電子状態に依存して安定な配置が求まる。電子状態は分子軌道法を用い、原子位置は原子に働く力をゼロにするように決めた。

計算されたダイポールモーメントの値は、左図に示されている。ダイポールモーメントは、分子サイズに陽に依存するので横軸を使った分子の数とした。現存する分子のダイポールモーメントは、(手に入る文献では)ほぼ斜線で示した領域に点在する。一方、ここで計算された値は、それらに比べかなり大きな値を持つ分子が新たに得られたことを示す。

この方法は、物質の性質がダイポールモーメントに限らず、広範囲な性質に対してこの考え方を展開することが可能である。

¹⁾ Ohtawara K. and Shinjo K., "Theory of material design for third order optical nonlinearity: centrosymmetric and asymmetric cases", Jp. J. Appl. Phys., 9, 19(1994).

²⁾ 同様の戦略が、システムの制御アルゴリズムを得る問題で展開された。Shinjo *et al.*, "A Strategy of designing routing algorithms, based on ideal routings", International Journal of Modern Physics C10, Vol. 1, 63-94 (1999).

³⁾ 新上 和正, "高次元アルゴリズム", bit Vol. 31, No. 7, 2-8 (1999).

⁴⁾ 大田原 一成、下川信祐, "新物質の安定構造の探索", 今大会講演, 6H-04.

¹質問やコメントなどは electronic address "mdeg@acr.atr.co.jp" へ.