

人工知能を用いて量子化学計算の高速化を実現！ — 計算化学を用いた機能性材料創製に新たな道 —

1. 発表者：

湯村 尚史 (京都工芸繊維大学 材料化学系 教授)

福浦 秀太 (京都工芸繊維大学大学院 工芸科学研究科物質・材料化学専攻 博士後期課程3年)

西舘 陽平 (会津大学 コンピュータ理工学部 准教授)

2. 発表のポイント：

- ◆人工知能の一種、粒子群最適化を用いて量子化学計算^{*1}を用いたホスト-ゲスト構造の最適化の高速化を実現
- ◆粒子群最適化を用いて最安定構造を予測し、その結果を用いて量子化学計算を行う点で従来の方法と異なり、新たな技術となる。
- ◆本発見は、低次元ホストとゲストからなるハイブリッド材料を用いた機能性材料創製の発展に寄与する。

3. 発表概要：

京都工芸繊維大学材料化学系 湯村尚史教授、同大学大学院工芸科学研究科物質・材料化学専攻 博士後期課程3年 福浦秀太、および会津大学コンピュータ理工学部 西舘陽平准教授は共同で、人工知能を用いて量子化学計算を用いたホスト-ゲスト構造の最適化の高速化に成功した。これは、京都工芸繊維大学と会津大学の包括協定による共同研究の成果である。

現在、材料創製において量子化学計算は材料のスクリーニングや物性予測のための不可欠なツールになっている。例えば、カーボンナノチューブなどの低次元ホスト材料の空間に様々なゲスト分子を取り込むことにより構築されるホスト-ゲスト材料は、新規機能が発現する可能性を秘めている。低次元ホスト材料やゲスト分子の組み合わせは多様であるため、多数の新規機能性材料が構築される可能性があるが、これをすべてスクリーニングしようとするとう時間や計算コストが膨大になり、量子化学計算が不可能となる。本研究では、粒子群最適化を用いホスト-ゲストの最安定構造を予測することに成功し、それを用いた量子化学計算を行うことにより高速スクリーニングが可能となった。この高速化は、ホスト-ゲスト材料を用いた機能性材料の新規創製に向けた作業効率を大幅に向上させるものであり、社会的インパクトは高い。

本成果は、国際学術誌 *The Journal of Physical Chemistry A* にオンライン掲載された。

4. 発表内容：

研究の背景

現在、材料創製において量子化学計算は材料のスクリーニングや物性予測のための不可欠なツールになっている。実際、量子化学計算の一種である密度汎関数法計算^{*2}を行うことにより、ナノメートルサイズの材料の構造と機能の相関性が明らかになり、その知見を用いた材料設計の指針が示されている。例えば、カーボンナノチューブなどの低次元ホスト材料の空間に様々なゲスト分子を取り込むことによ

り構築されるホスト-ゲスト材料は、ゲストの機能がホストに付与されることが密度汎関数法計算により明らかになっている。実際、このホスト-ゲスト材料において、ゲスト分子のホスト内部の配向および分子同士の配列はファン・デル・ワールス力などの分散力により決まり、その配列に依存した機能が発現する。また、ホスト-ゲスト材料は、低次元ホスト材料やゲスト分子の組み合わせで多種多様であるため、変幻自在に機能を変化させることが期待される。従って、ホスト-ゲスト材料を用いて望みの機能を発現可能である。しかしながら、量子化学計算を用いてホスト-ゲスト材料の機能予測を行おうとすると、その多種多様性、またゲスト分子配向および配列の複雑さに由来して、計算コストが膨大となり、スクリーニングが不可能であるのが現状である。

研究内容

本研究では、人工知能の一種、群知能 (Swarm Intelligence (SI))^{※3}を用いて量子化学計算の高速化に成功した。量子化学計算では、材料の構造最適化を行うことで、エネルギー的に安定した原子配置を得るが、これを行うためには適切な初期構造を構築する必要がある。現在、初期構造は、研究者の経験や勘に基づいて構築されており、もし、初期構造が最安定構造と大幅に違うのであれば計算時間は長くなる。本研究では、トリヨードベンゼンをカーボンナノチューブに内包したホスト-ゲスト構造において、群知能の一種、粒子群最適化法 (Particle Swarm Optimization (PSO))^{※4}を用いて、エネルギー的に安定したゲスト分子配向を見出した。PSO を行う場合、ホスト-ゲスト構造の安定化エネルギーをオブジェクト関数とし、そのエネルギーを算出するためにレナード・ジョーンズ・ポテンシャルを用いた。この PSO は計算コストが低いため、分子配向に対応した 4000 個の粒子を探索空間上に生成することが可能であり、個々の粒子を規則に従って動かし最安定構造を探索した。その後、PSO で得られた最安定構造と密度汎関数法計算 (Density functional theory (DFT) calculations) で得られた安定構造と比較した結果、良好な一致を示すことが明らかとなった。さらに、PSO で得られた最安定構造を DFT 計算の初期構造として用いた場合、DFT 計算による構造最適化のプロセス時間の大幅な低減が可能となった。

今後の展開

本研究の成果により、量子化学計算を用いた構造最適化において、最安定構造に近い初期構造を作成することが可能となり、その結果、人工知能により加速された計算技術が確立できた。量子化学計算が現在のものづくりに不可欠なツールであることを考えると、本研究成果で確立された技術は、ものづくりの高速化に寄与するものと考えられる。今回は、ホスト-ゲスト材料をターゲットにしたものであるが、化学結合が生成する材料にも転用することを考えており、触媒など環境・エネルギーに不可欠な材料への応用が期待される。

5. 発表雑誌：

雑誌名：The Journal of Physical Chemistry A

論文タイトル：Performance of Particle Swarm Optimization in Predicting the Orientation of π -Conjugated Molecules inside Carbon Nanotubes Compared with Density Functional Theory Calculations

著者：Fukuura, Shuta; Nishidate, Yohei; Yumura, Takashi

DOI 番号：10.1021/acs.jpca.4c01685

アブストラクト URL : <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.4c01685>

6. 用語解説 :

注 1) 量子化学計算 (quantum chemistry calculation)

ある材料の構造における基底状態の波動関数を系のハミルトニアンに作用させるとエネルギーと波動関数が求められるというシュレーディンガー方程式に基づく計算方法。

注 2) 密度汎関数法計算 (DFT calculation)

波動関数の代わりに、基底状態の電子の確率密度 (電子密度) を求めることにより、エネルギーやその他の物理量を計算する手法。理論や計算法も整備され、少ない計算コストで電子相関を取り入れた計算が可能であるため、分子や固体表面の計算に広く応用されている。

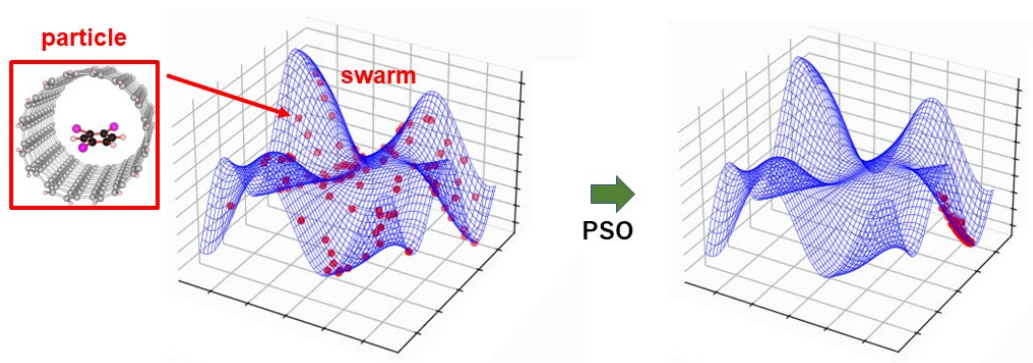
注 3) 群知能 (Swarm Intelligence)

群れが生み出す知能のこと。鳥の群れ、魚の群れ、アリの群れなどのように生物が群れとしてどう動くかを調べ、その群れの動きを計算機上にモデル化したもの。

注 4) 粒子群最適化法 (Particle Swarm Optimization (PSO))

群知能に基づく最適値探索法。1995 年、J. Kennedy と R. Eberhart らにより開発された手法で、“粒子” (particle) という探索点を探索空間にランダムに配置し、ある目的関数に対して、各粒子の最良解と粒子の集まりである群れ (swarm) の最良解に向かうようにして、目的関数の最適な粒子位置を見つけ出す方法。

7. 添付資料 :



本研究の概略図: Particle Swarm Optimization を用いたホスト-ゲスト材料の構造決定