

量子化学・コンピュータプログラミング初心者も歓迎します！

理論化学グループ

青木研究室

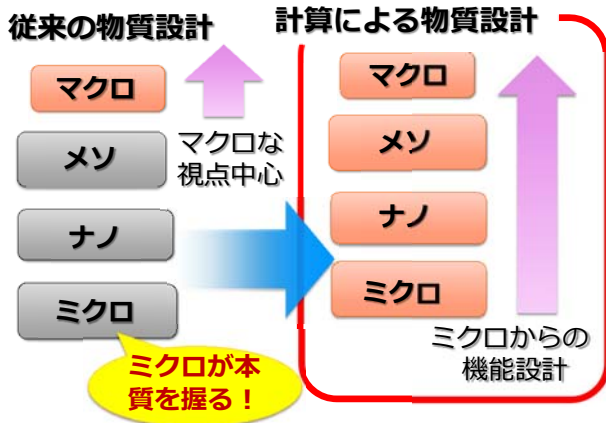
研究の概要

量子化学の分野で発展した分子軌道論は、1981年に福井謙一先生がノーベル化学賞を受賞して以来、分子の世界において市民権を得ました。今後は材料設計に役立てていくことにより実験家に合成の指針を提供することが、合成のコスト削減・環境面からも重要になります。

当研究グループでは、独自の量子化学計算法を開発しており、作ったソフトウェアを用いて、実際に高分子・ナノ・生体系等の機能（電気的・磁氣的性質、非線形光学現象、協同現象など）を解明・予測し、新機能物質の設計をおこない、物質合成の指針となる情報を提供することを目指しています。

原子・分子レベルからの物質設計

物質の多くの物性は電子の挙動が密接に関係しています。原子・分子、電子状態といったミクロな視点から物性の本質を理解することこそ、物質の機能を自由自在に制御するための最短の道筋と考えています。



グループ所有のPCクラスシステム



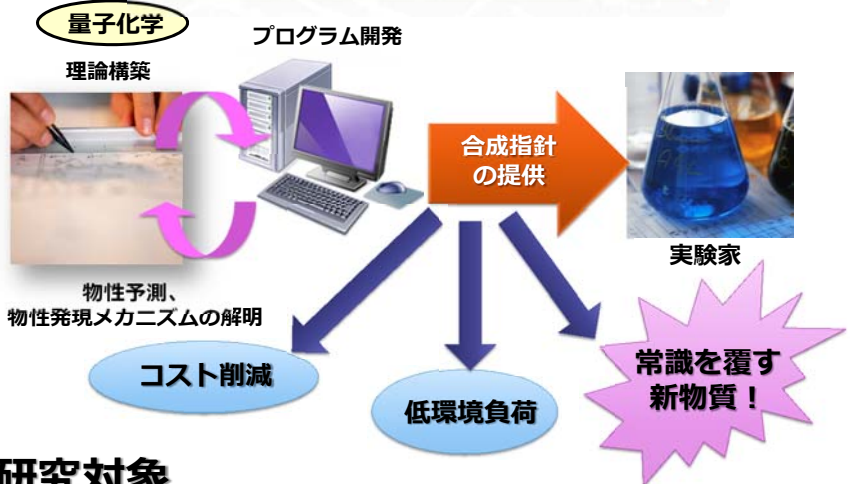
Workstation × 26台
 (Xeon X5500番台 メモリ:24GB HD:500GB)



Server × 12台
 (Xeon X7500番台 メモリ:128GB HD:1.2T × 4台)
 (Xeon X5600番台 メモリ:96GB HD:1T × 8台)

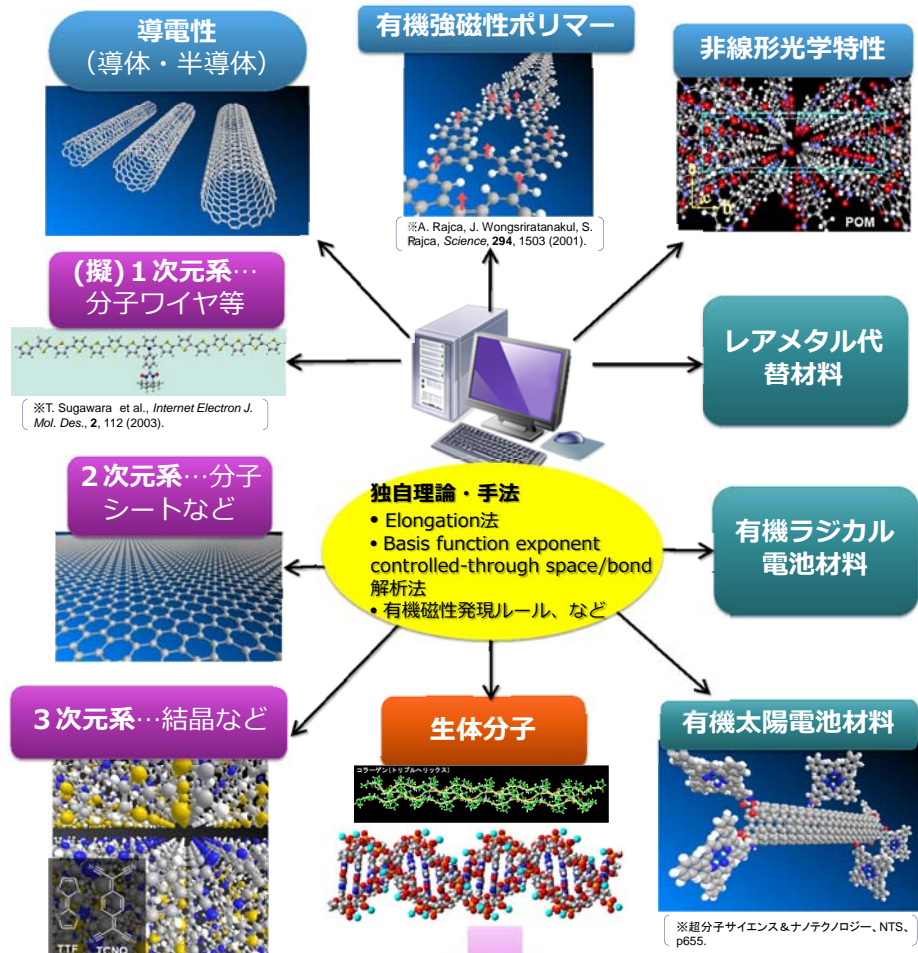
実験のみで探索する時代

科学技術計算で設計する時代



研究対象

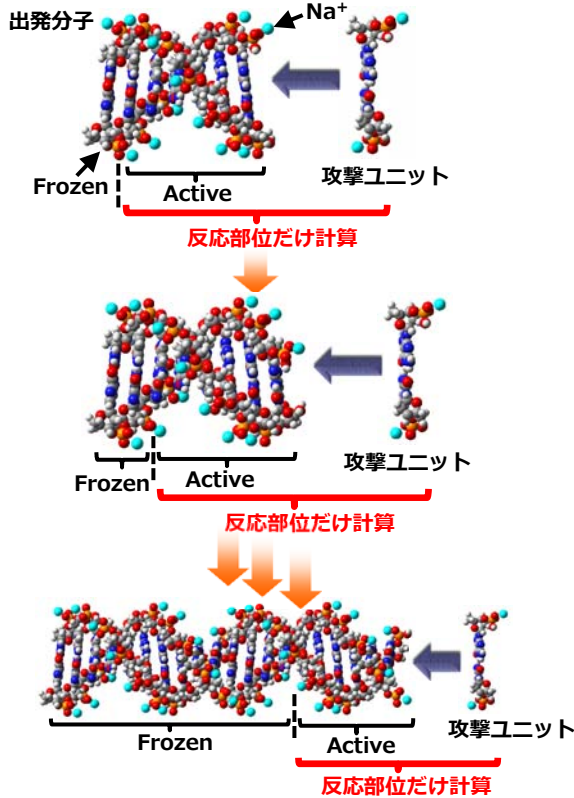
巨大系の高精度・高効率計算や特定の分子内相互作用を定量解析する手法など、従来法では不可能な世界で唯一の独自理論・手法の開発を行い、以下のような多岐にわたる対象に応用を行っています。
 ミクロな視点からの新材料・新物質設計を通して、グリーン&ライフイノベーション、レアメタル代替問題、ナノテクノロジー等への貢献を目指します。



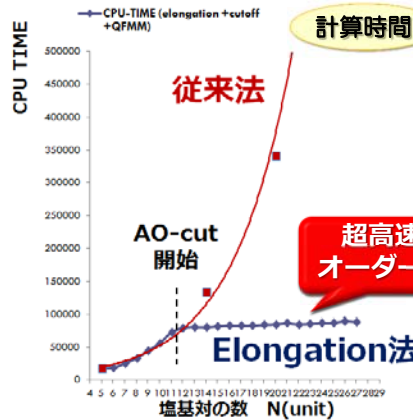
新材料・新物質設計

巨大系の高精度・高効率電子状態計算法
3D-Elongation法

巨大系の電子状態計算では、膨大な計算コストに加え、系が大きすぎて計算そのものが不可能となる点が大きな課題です。当グループで開発したElongation法は、高分子の重合反応のようにユニットを逐次的につないでいき、毎回、反応部位だけを計算することで効率計算を可能としています。



計算時間と精度

DNAへの適用 (Na⁺なし)

塩基対数 N	全エネルギー誤差 ΔE/per atom (hartree)
5	-3.00E-13
6	5.67E-10
7	9.52E-10
8	1.30E-09
9	1.51E-09
10	1.70E-09
11	1.84E-09
12	1.92E-09
13	2.02E-09
14	2.07E-09
15	2.15E-09
16	2.20E-09
17	2.24E-09
18	2.53E-09
19	2.54E-09
20	2.59E-09

計算誤差

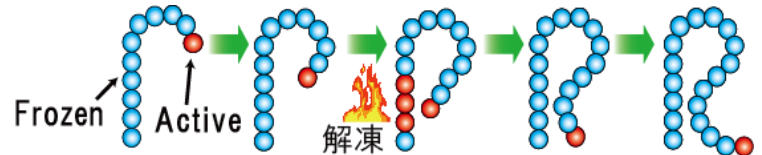
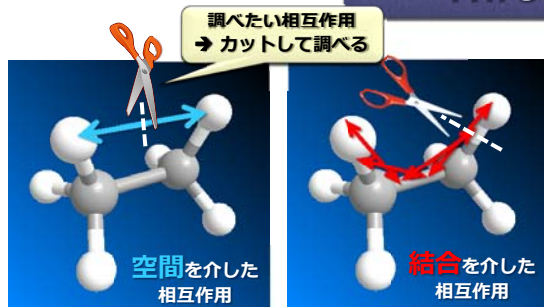
超高精度

計算速度は、系の大きさの一次に比例しており、超高速です(オーダーN法)。それにもかかわらず、計算精度は従来法とのエネルギー誤差が 10^{-8} hartree/atom ($\sim 10^{-5\sim 6}$ kcal/mol/atom) 以下と超高精度を誇り、 10^5 原子からなる巨大系(例えばシャペロンタンパク質...約120,000原子)を考へても Chemical Accuracy以内の誤差しか生じません。

また、反応部位だけ計算するため、必要なメモリやディスク容量も少なく、従来の方法では計算不可能な大きさの系も効率的に計算できます。

1次元～3次元系に対応

反応末端のみ計算する1次元の伸長の概念を保持しつつ、最接近してくるActive領域に応じてFrozen領域を解凍することで、あらゆる次元の系を計算することができます。

定量的分子内
相互作用解析法Basis function exponent controlled
Through Space/Bond 解析法

従来の電子状態計算では、系全体の情報は得られますが分子内の個々の相互作用について詳細を知ることはできません。本解析法では、調べたい相互作用をカットすることでその寄与を定量的に見積もることができます。

電子移動の自由度を人為的になくすことで相互作用をカットしますが、同時に原子核が関与する相互作用も自動的にカットされるのが本方法の特長です。

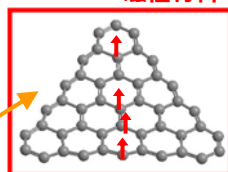
相互作用
定量解析巨大系
高効率・
高精度計算新物質設計のための
統合手法

実装

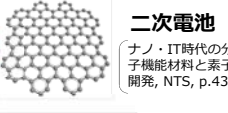
有機磁性発現ルール

強磁性発現の可能性は、0-*結合則によって目の子で予測することができます(当グループが数学的に証明)。また、Lij値という独自の評価法により、非常に簡単な計算から高スピン安定性を確認できます。

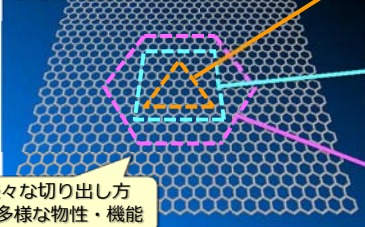
磁性材料



二次電池



グラフェンシート

様々な切り出し方
→ 多様な物性・機能

次世代スーパーコンピュータ

富士通WEBより (<http://jp.fujitsu.com>)