

## 「計算機による材料設計」と「とき」 —我々は“タイムマシン”を手にいれた??—

"Computer Aided Material Design" and "Time"  
—Have We Get a "Time Machine"??—

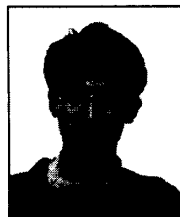
長嶋 雲兵・田島 暢夫

Umpei NAGASHIMA・Nobuo TAJIMA



長嶋雲兵

- 1955年2月生まれ
- 1983年北海道大学大学院博士課程修了。岡崎国立共同研究機構分子科学研究所助手を経て1992年よりお茶の水女子大学理学部助教授
- お茶の水女子大学理学部 (〒122 東京都文京区大塚 2-1-1)



田島暢夫

- 1966年12月生まれ
- 1990年東京大学工学部卒業。1992年同大学院工学系研究科修士課程修了
- お茶の水女子大学理学部 (〒122 東京都文京区大塚 2-1-1)

量子力学の発達による分子の性質のミクロな理解と合成・分析・解析手段の急激な発展に支えられ、材料設計は従来の「自然の恵みを抽出し、それを加工する」という受け身の戦略から、積極的に材料に期待されるさまざまな機能、物性を限定し自然界には存在しない新たな材料の生成を目指す能動的なものに代わってきている。また求められる材料としても単一原子・分子による均質なものをから原子・分子レベルでの複合材料、インテリジェント材料、ハイブリッド材料、エコマテリアル等といった高次組織構造を持つ材料に大きな期待が寄せられている。

新材料探査は従来より経験に基づく直感や試行錯誤によって発展してきたが、近年のエレクトロニクスの発達に伴う電子計算機の爆発的な性能向上により、計算機の中に自然を再構築し、さまざまな実験（シミュレーション）を行うことで新物質探査に要する「時間」を大幅に短縮しようとしている。それは従来の実験的な方法論の研究開発と共に、計算機を用いて理論的に化学的な現象を原子や分子のレベルで再現し、分子の性質や化学

反応経路等に関する基本的な理解とそれによる指針、さらには実験によって得られるマクロな情報と合わせることで新物質の設計を行おうというものである。そういった営みの具体的な例としては1991年木下らによって発見された有機物ラジカル結晶の強磁性発現<sup>(1)</sup>があるが、これは1986年に山口ら<sup>(2)</sup>によって理論的に示唆されていたものである。

目下材料設計の分野では、分子の化学構造式を計算機に入力し、精密な分子構造やスペクトル、酸化還元電位等の物性を理論的に計算し、求める性質を持つ分子を探索する「分子設計」をはじめ、化合物の合成経路を探索する「合成経路設計」、また合成によって得られた化合物の構造をさまざまな物性データと大規模データベースを基にした人工知能の助けによって確定する「分子構造自動推定」、さらには分子構造からさまざまな物性を予測する「構造活性相関」といった計算機を用いた化学技術の研究開発が精力的に行われている。これらは材料設計探査における「時」を大幅に稼ぐばかりでなく、材料設計の現場における $10^{-16}$ 秒から $10^{10}$ 秒に渡る広範囲な「時」を持つさまざまな現象を、我々の持つ「時間」スケールになおしてくれ、現象の理解を助けてくれる。

計算機を用いた材料設計において計算機上で直接「時」を取り扱う方法の代表はMD（分子動力学）法である。さまざまなレベルのMDが存在するが、現在広く行われているMDは、実在の系から粒子を切り出し、その粒子間に働く力を量子力学的に求め、それを用いて古典的運動方程式を立て、その運動方程式を解くことで微小時間ごとの粒子の動きを調べる。更に得られた結果を用

いて実在の系のマクロな量を計算することができる。計算機的能力によって制限されるが、ざっとしたところ取り扱える粒子数として $10^4$ 個程度、時間的には $10^{-9}$ 秒程度が現在実行可能である。古典力学を用いるため電子論的な情報を得ることは出来ないが、固体、液体、気体の構造的、熱力学的、統計力学的情報に加え、系の動的な情報さらには表面の微細な情報等を得ることができる。

具体的に例を示そう。図1にベンゼンの分子性結晶のc軸投影図<sup>9)</sup>とその一部を示した(水素原子は省略されている)。この系のMDを10フェムト秒ごとに1ピコ秒まで実行して系のポテンシャルエネルギーの変化(○)を見たものが図2である。ここには1ピコ秒のMDの後、時間刻みの符号を変えることで0秒まで戻っている結果(△)も同時に示されているが、両者は全く区別がつかない。ここに示すように、MDでは我々は

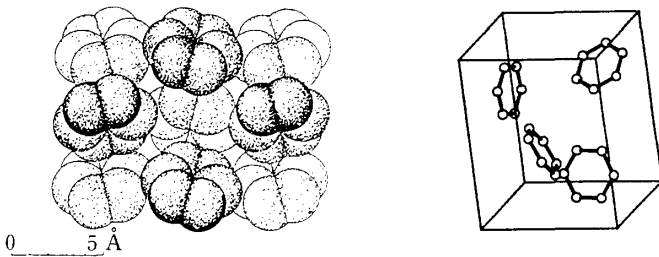


図1 ベンゼンの分子性結晶のc軸投影図とMDに用いた部分。この結晶は斜方晶系で $-3^{\circ}\text{C}$ における格子定数は $a=746.0\text{ pm}$ ,  $b=966.6\text{ pm}$ ,  $c=703.4\text{ pm}$ である。

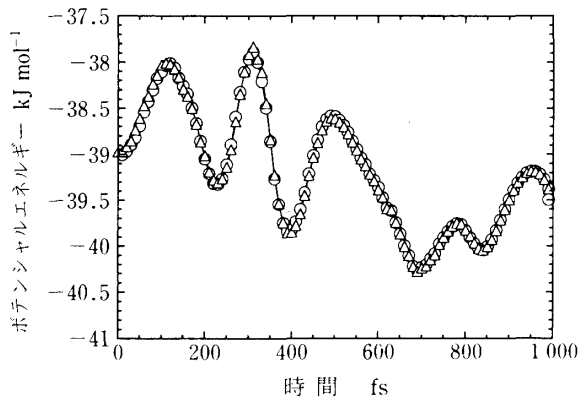


図2 ベンゼンのMDにおけるポテンシャルエネルギー変化。○： $t=0.0$ から1ピコ秒まで，△： $t=1$ ピコ秒から0.0まで，刻み幅0.01ピコ秒。

簡単に過去に戻ることができる。原理的にはいかなる過去にも戻ることが出来るのだが、実際には計算機の精度が不十分なので、長い時間のシミュレーションの後の遠い昔に戻ることは難しい。むしろ異なった過去に戻ってしまう(それも実は結構面白い)。

また図3と4は、1ピコ秒までのシミュレーションを行った後、さらにそれぞれ時間刻みの幅を変えて1ピコ秒から2ピコ秒までのMDを行った結果である。図3のように刻み幅が小さければ系の微細構造を見ることが出来、大きい刻み幅でも大まかな構造を見ることができる(図4)。もっと長い時間経過の現象にはMC(モンテカルロ)法が有効であるが、特定時間周辺での微細な構造の変化を見るためには、もっと刻み幅を大きくして目的の時間までの積分を実行しておき、その周辺の系の微細な振る舞いを、刻み幅を小さく

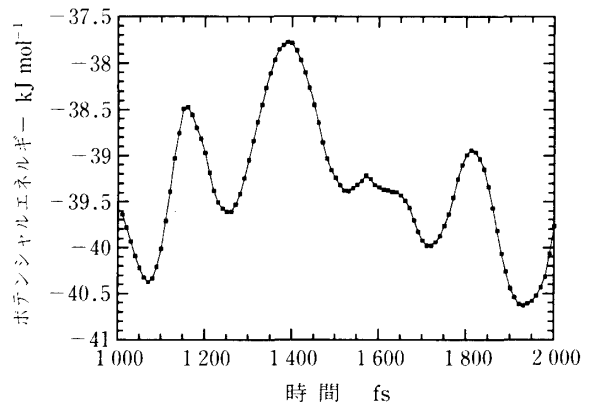


図3 ベンゼンのMDにおけるポテンシャルエネルギー変化。 $t=1$ ピコ秒から2ピコ秒まで，刻み幅0.01ピコ秒。

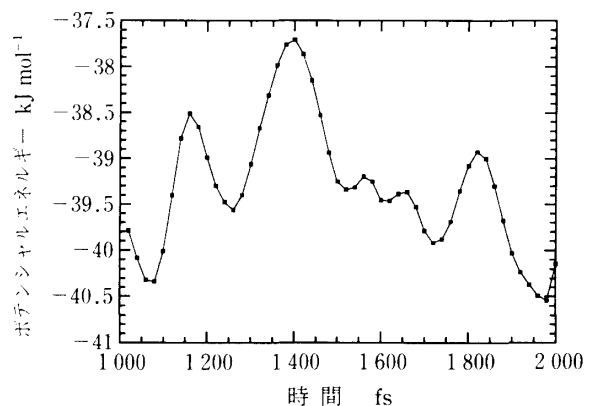


図4 ベンゼンのMDにおけるポテンシャルエネルギー変化。 $t=1$ ピコ秒から2ピコ秒まで，刻み幅0.02ピコ秒。

したり、符号を変えたりすることで自在にみることができ、大げさにいえばビデオやフィルムを前後させるように、自由に時間の流れを抑制することができるのである。

現実の世界では、時間の流れの中を自在に行き来することのできる「タイムマシン」は夢のまた夢であるが、計算機の中に構築された世界では、我々は時間の流れの中を自在に行き来することができるのである。

材料設計に限らず計算機を用いたシミュレーションがさまざまな分野で利用されている。高性能な計算機の中に構築された自然は、もちろん疑似

的なものであるとはいえ、全く新しい「時」を越えた自然観を我々に与えてくれよう。

## 文 献

- (1) Kinoshita, M., Turek, P., Tamura, M., Nozawa, K., Shiomi, D., Nakazawa, Y., Ishikawa, M., Takahashi, M., Awaga, K., Inabe, T., and Maruyama, Y., *Chem. Lett.*, (1991), 1225.
- (2) Yamaguchi, K., Fueno, T., Nakasuji, K. and Murata, I., *Chem. Lett.*, (1986), 629.
- (3) Wykoff, R.W.G., *Cryst. Struct.*, 6 (1969), 2.

(原稿受付 1992年7月27日)

## 時間

に関する  
トピック

## Time is Money

日本クレイ(株) 加藤 毅彦

“Time is Money/時は金なり”とは、言い古された格言ではあるが、現在の高度に発達した社会において、時間と経済性との依存関係は、これまで以上に強いものとなりつつある。

社会システムの複雑化、大規模化に伴い、当然チームワークによりなされるものであるが1人の営業担当者が年間10億円のシステムを受注するようなケースは、日常茶飯事化している。さて、この営業担当者が現在の推奨される労働時間をはるかに越える年間2500時間の労働を行っているとした場合でも単純計算では、1時間あたり40万円、すなわち1秒100円以上の効率で業務を遂行していることになる。

超音速旅客機コンコルドを使用すれば、大西洋(ロンドンとニューヨークの間)を3時間50分で横断でき、これはDC10による場合に比べ4時間10分の短縮となるが航空運賃は、約50万円と29万円ほど高くなり、1時間あたり約7万円となるわけである。またパリとニューヨークの間は同様に約4時間15分の短縮となり航空運賃はジャンボ使用時に比べ23万円高い約43万円であり、

1時間あたり約5万4千円となる。これに比べ新幹線で東京から大阪へ向かう場合、最新のぞみでは2時間30分、ひかりでは2時間52分であり、22分の時間短縮に対し運賃は950円高くなるだけ、1時間あたり約2600円の効率となる。忙しい現代人にとって、2600円による1時間の節約は、“多少の乗り心地劣化”等を気にしなければ極めて割り安と言えるかもしれない。

技術的観点では、フォード自動車が最近のベストセラー車であったトールスを設計するさいに、数値シミュレーションの強化により、従来に比べ6倍の代替え案が従来の時間内に検討可能となり、300万ドルの節約とより最適化された設計が可能であったと報告されている。高速コンピュータと数値シミュレーションによる研究、開発、設計期間の大幅な短縮化が、市場競争力を強化し、より大きな収益性をあげることが実証されている。

まさに“Time is Money/時は金なり”である。

(原稿受付 1992年11月6日)