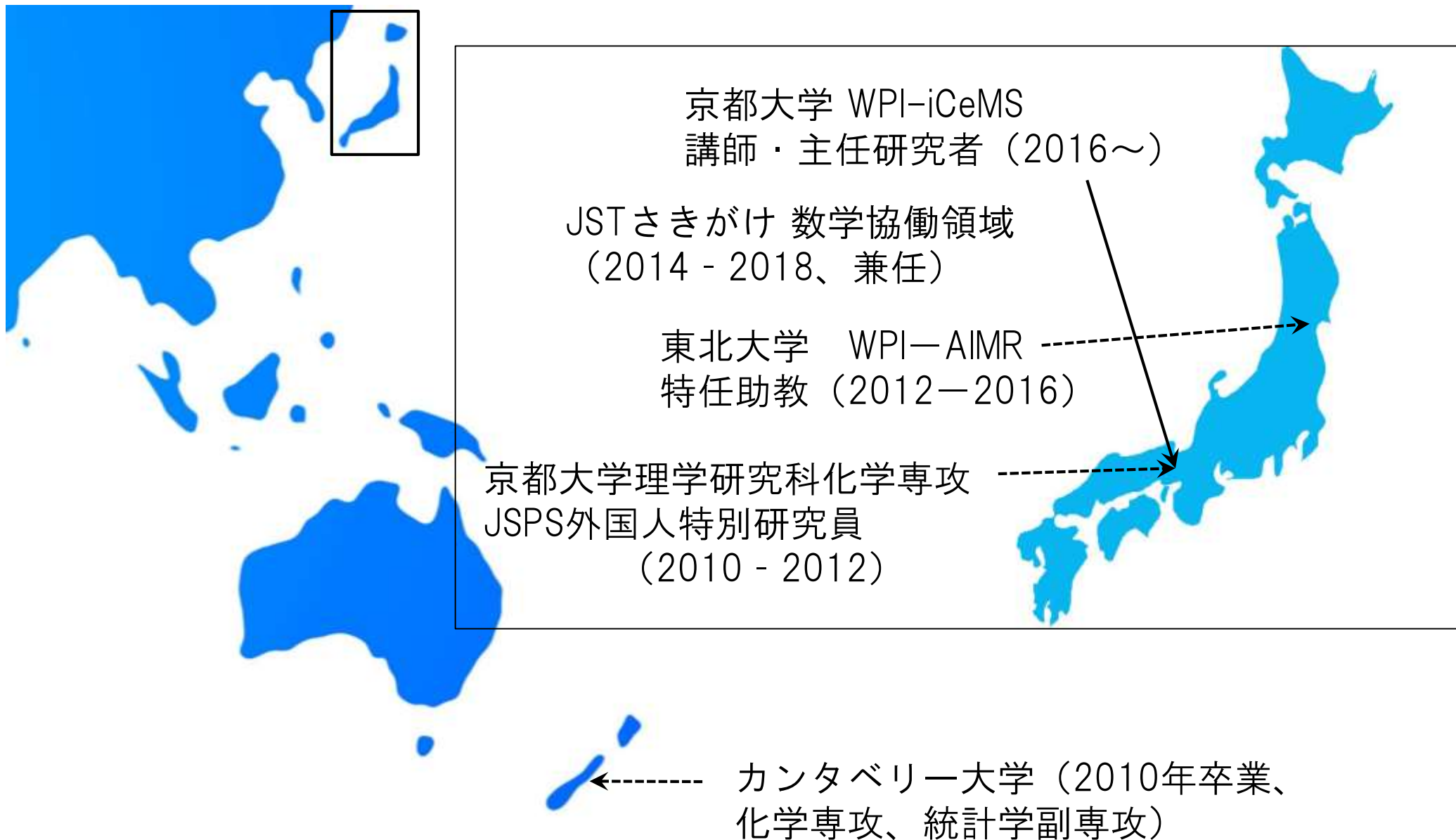


# 数理学と計算科学の融合 によるナノ構造体の設計技術

京都大学 高等研究院 物質-細胞統合システム拠点  
講師 パックウッド・ダニエル (Daniel Packwood)

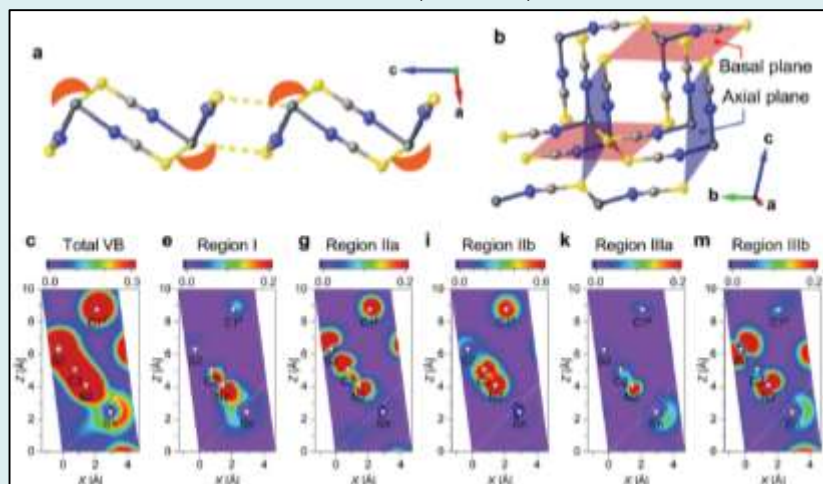
2019年9月20日

# 自己紹介



# 自己紹介

*J. Mater. Chem. C.* **7**, 2019, 3452



理論化学  
(第一原理計算)

*SIAM J. Appl. Math.* **74**, 2014, 1298

and  $W_t^k$  is independent of  $Y$  and  $X, X^1, \dots, X^N$  for  $t \geq T_\epsilon^{k-1}$ . The inequality in (4.26) is equivalent to the assertion

$$(4.27) \quad T_\epsilon^k \leq V_\epsilon^k,$$

where  $V_\epsilon^k = \min(t : \max_{n \in S_k} |P(W_t^k = n) - \pi_n^k| < \epsilon)$ . Now, we have that

$$(4.28) \quad \lim_{\epsilon \rightarrow 0} P(W_{T_\epsilon^{k-1}}^k = W_0) = 1.$$

Moreover, for  $n \in S_k$  we can write

$$(4.29) \quad P(X_t^k = n) = P(X_t^k = n | M_k \leq t) P(M_k \leq t),$$

where  $M_k = \min(t : X_t \in S_k)$ . Because the graph  $G$  is connected,  $P(M_k \leq t) \rightarrow 1$  as  $t \rightarrow \infty$ , and hence

$$(4.30) \quad \lim_{t \rightarrow \infty} P(X_t^k = n) = \pi_n^k,$$

where  $\pi_n^k$  is the stationary distribution of  $X^k$ . Equations (4.28) and (4.30) show that there exists an  $\epsilon^* < \epsilon_0$  such that for all  $\epsilon < \epsilon^*$ ,

応用数学  
(確率論、統計学)

「理論駆動材料科学」というパラダイムを目指す

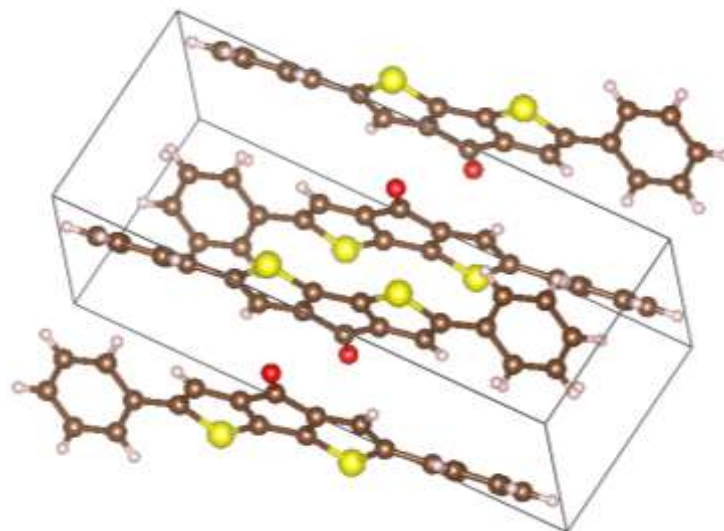
# 研究概念

## 課題

構造の予測・制御

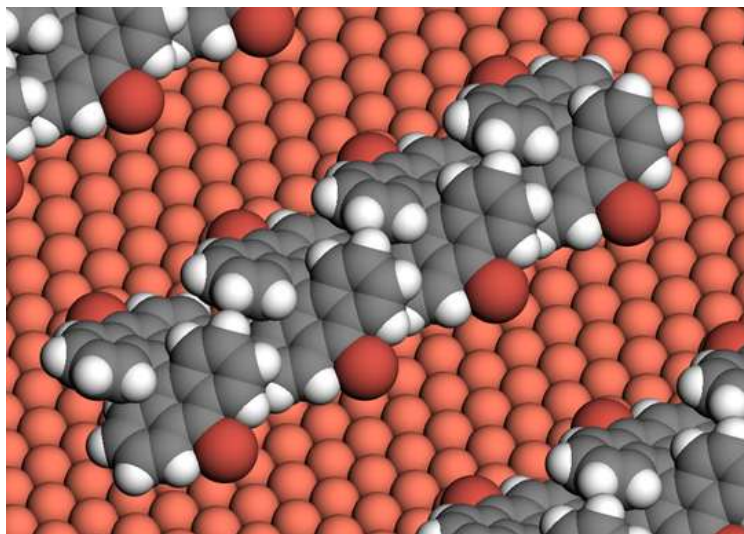
機能のデザイン・制御

## 近い未来のための材料



有機半導体

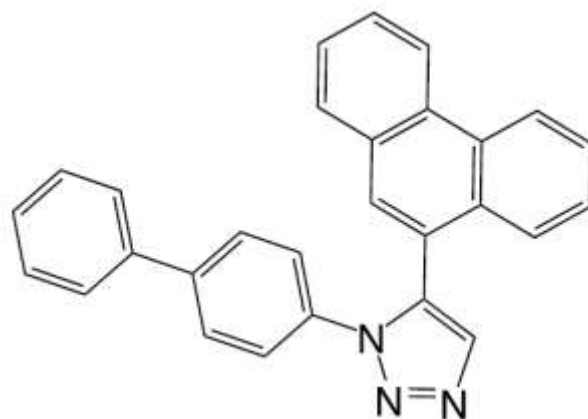
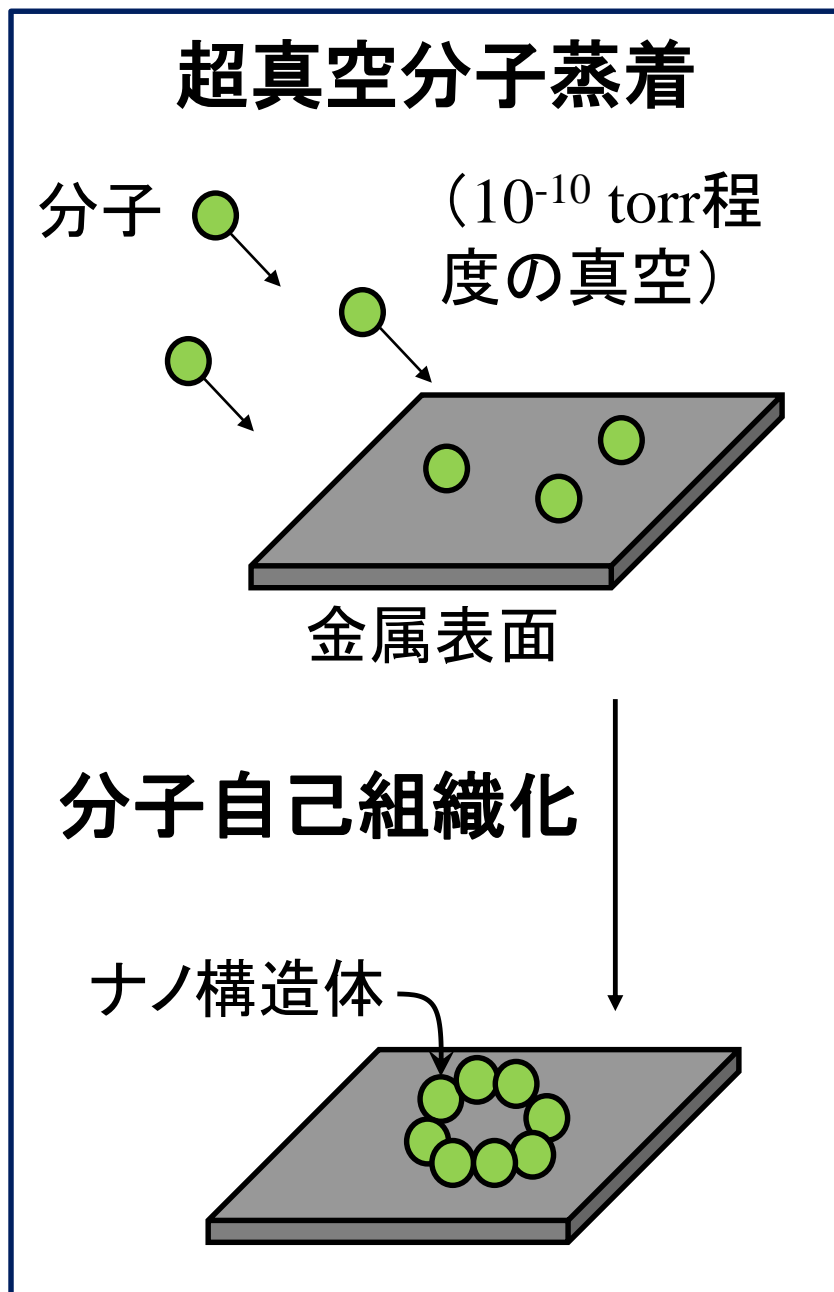
## 遠い未来のための材料



表面上のナノ構造体(超分子構造)

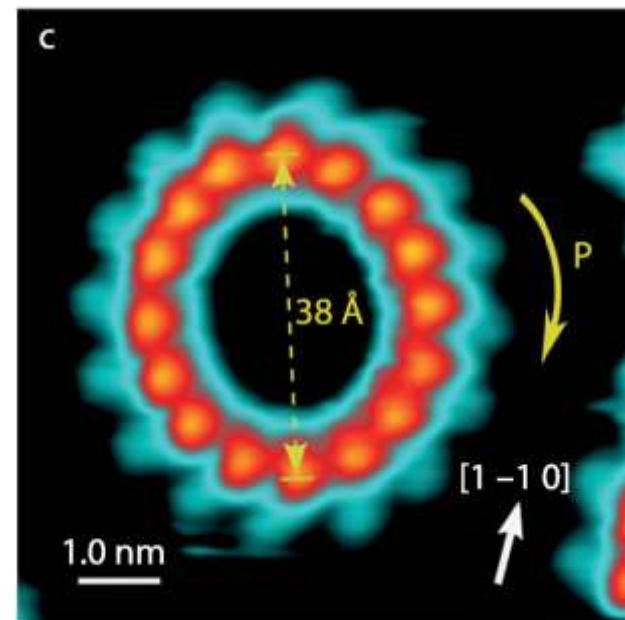
# 表面上のナノ構造体

# 例1



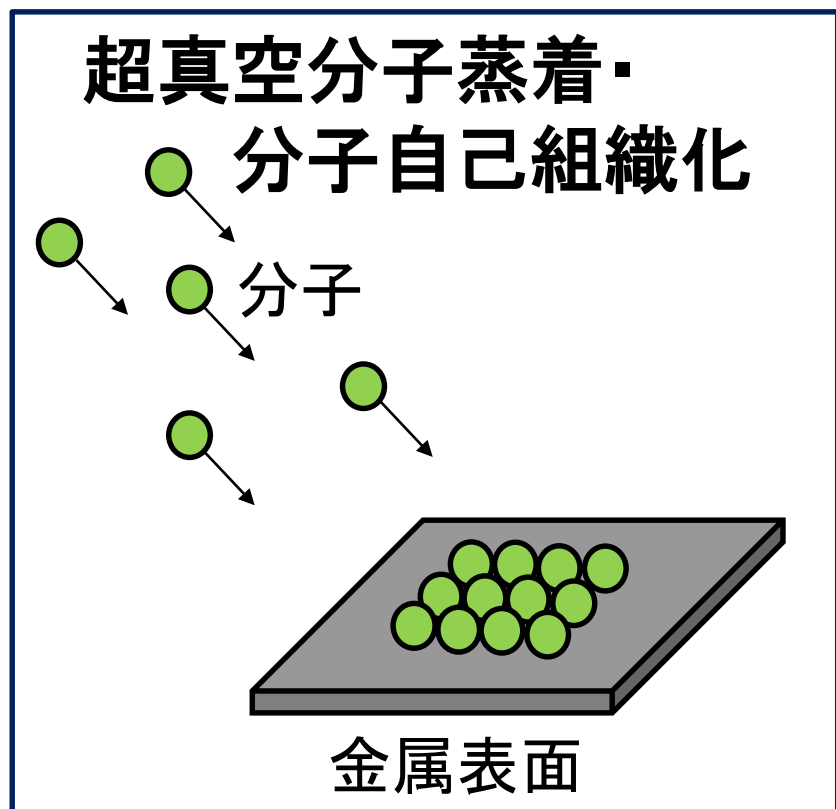
分子

ナノ構造体  
(円)

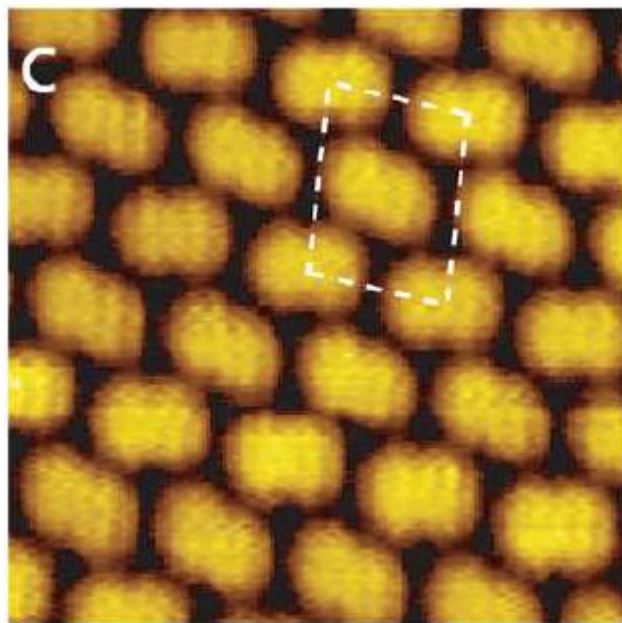
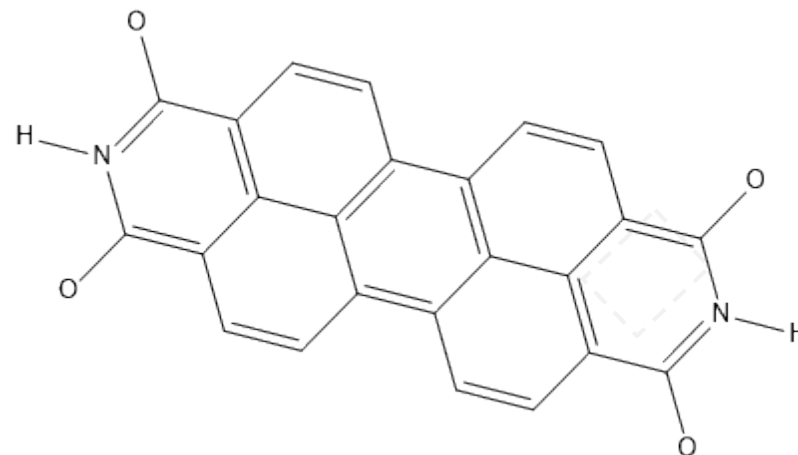


# 表面上のナノ構造体

## 例2



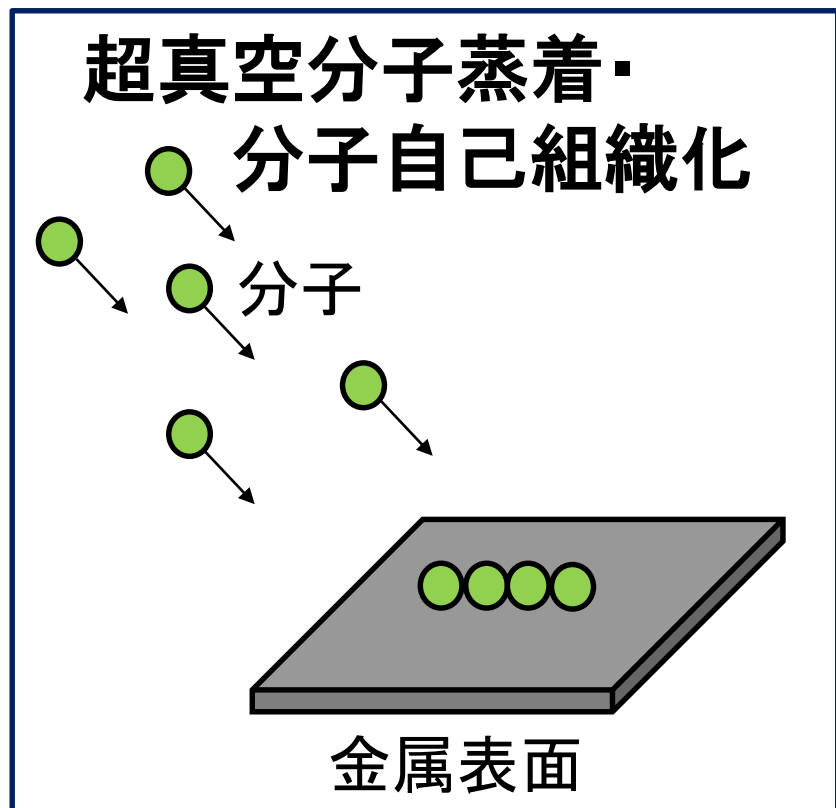
分子



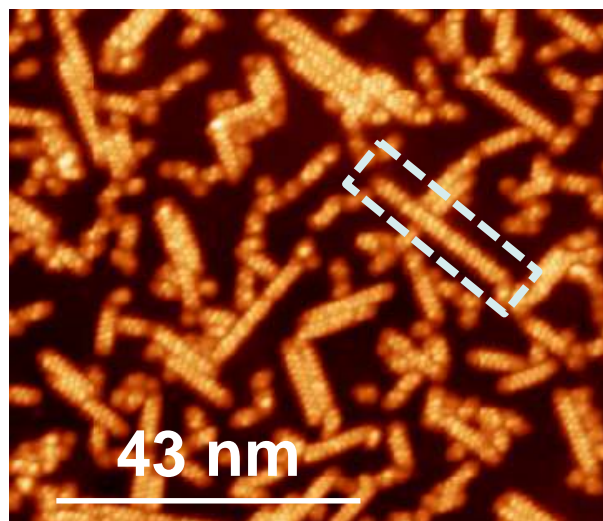
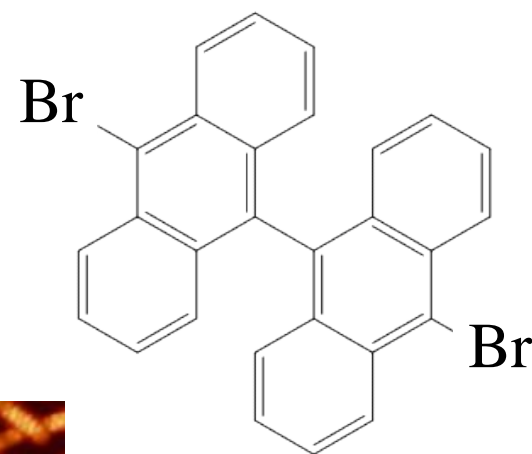
ナノ構造体  
(単一層)

# 表面上のナノ構造体

## 例3



分子



ナノ構造体  
(鎖)

従来、この3例のような金属表面への蒸着に利用される分子の選択は経験に基づいていた。

# 超真空分子蒸着実験の流れ（早い場合）

1. 真空を破壊して、蒸着物となる化合物を入れること・760 torrから $10^{-10}$  torrの真空を回復すること

> 4日間

2. 金属表面を準備すること

> 2日間

3. 化合物の昇華温度を見つけること

> 1日間

4. 化合物を蒸着して、走査トンネル顕微鏡でナノ構造体を観測すること

> 2日間



超真空容器・走査トンネル顕微鏡  
@京都大学iCeMS

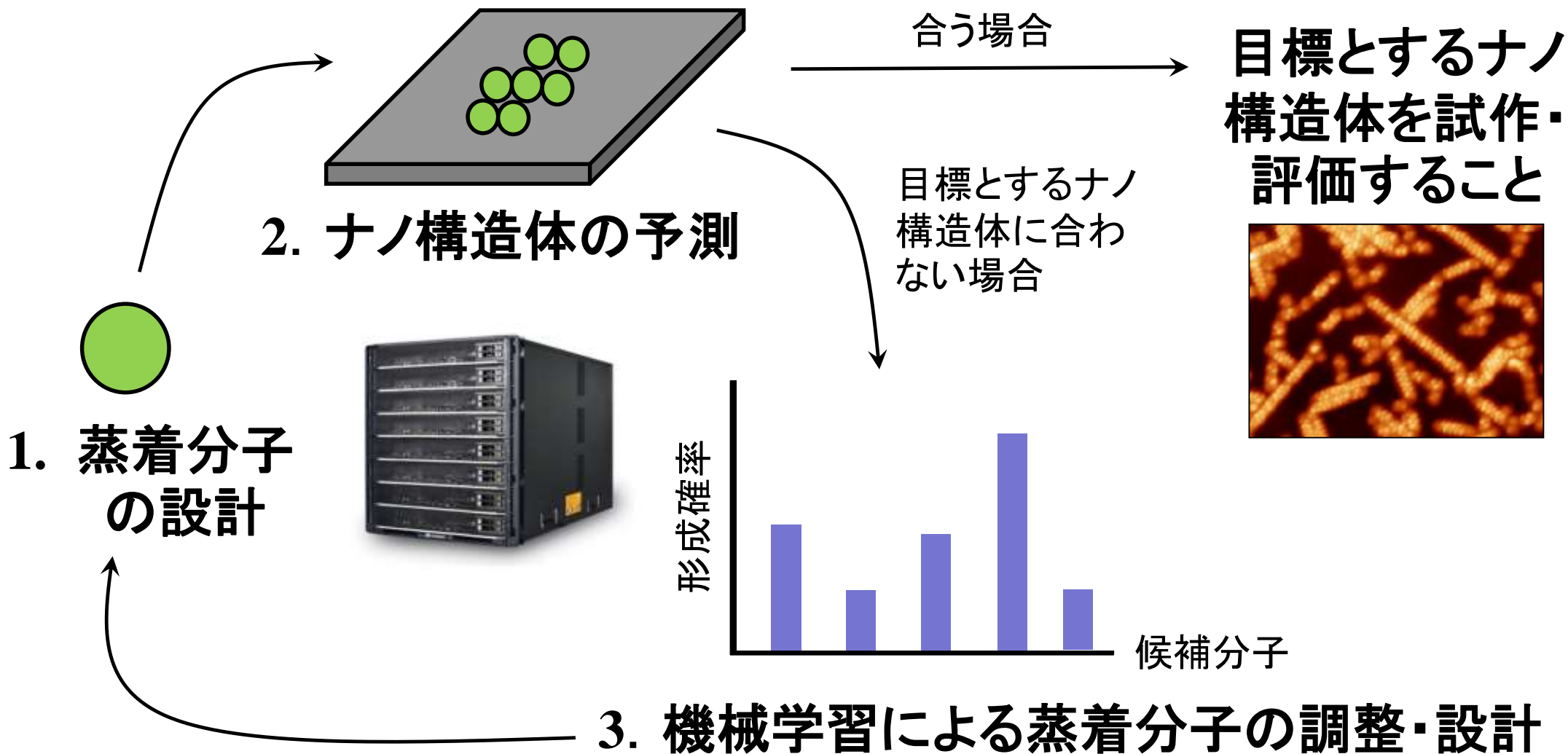
**一週間以上が掛かる！**

蒸着物をうまく選ばないと目標とするナノ構造体が形成しない。

→ 実験のやり直しが必要



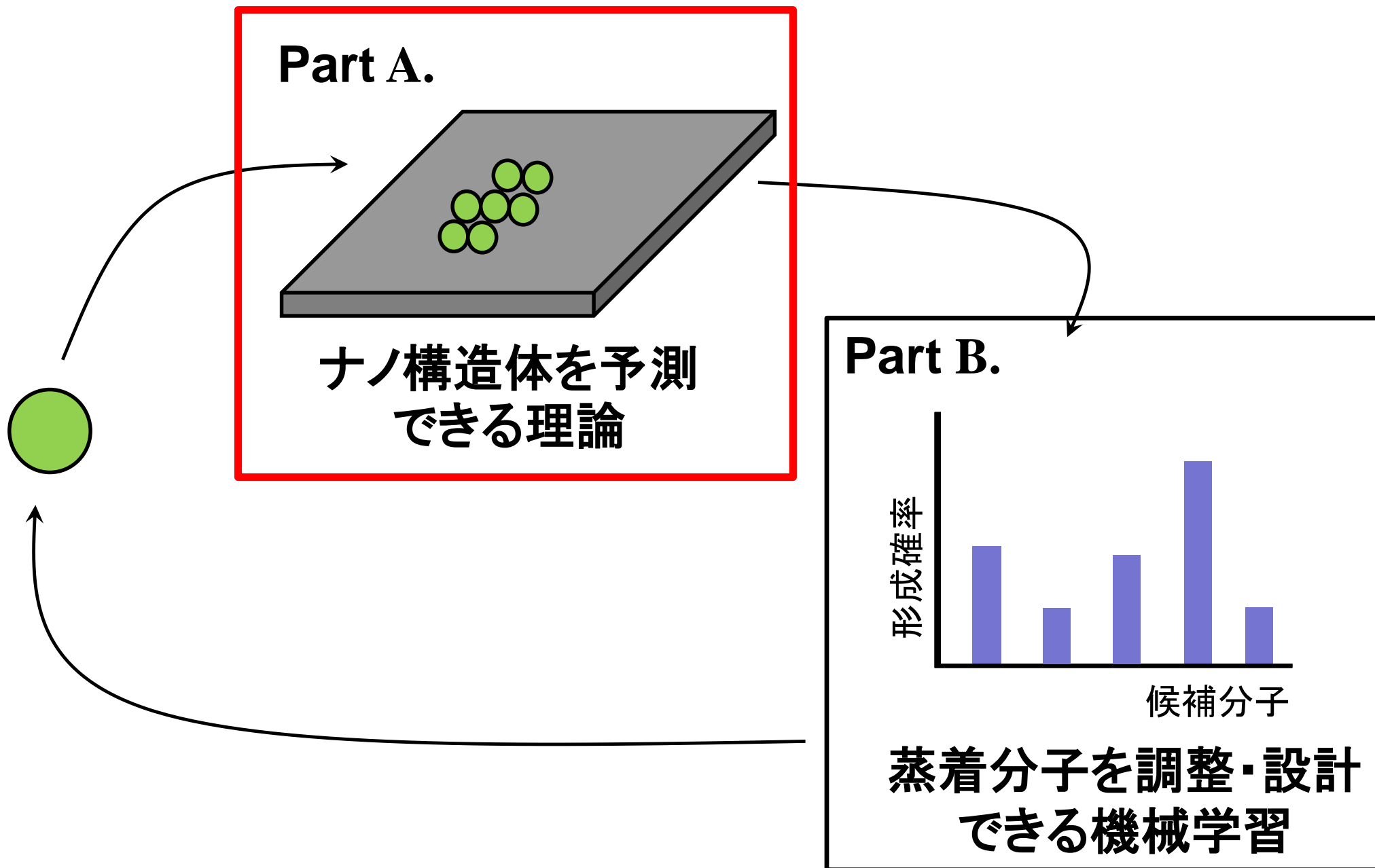
# 未来像 計算機上のナノ構造体設計



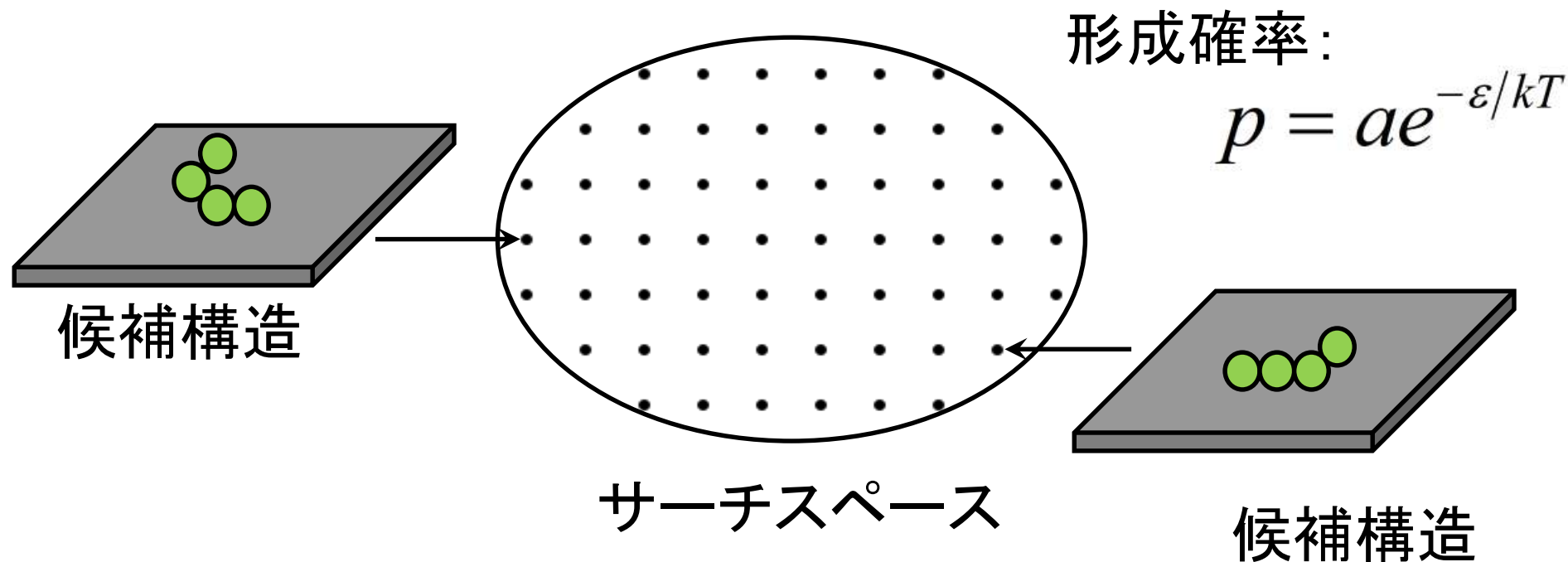
新技術に  
至る展開

A: ナノ構造体とその形成確率を予測できる理論  
B: 蒸着分子を調整・設計できる機械学習

# 新技術の説明(A)



# ナノ構造体の予測とは



## 最適な構造

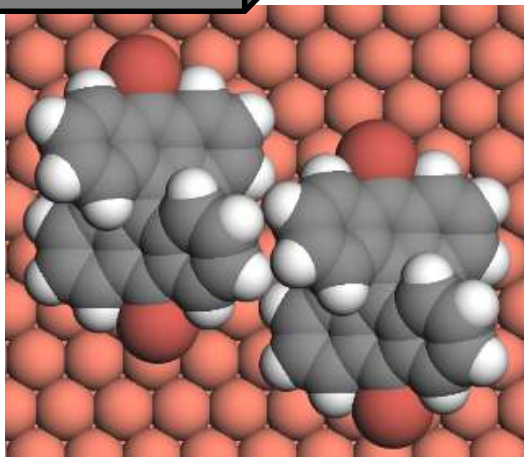
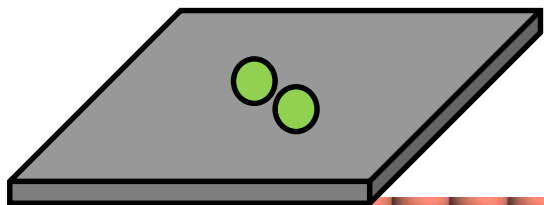
= 形成確率を最大にする候補構造

## ナノ構造体の予測とは、

サーチスペースを探索して、最適な構造を見つけること

# 従来技術とその問題点

## どこが難しい？ 簡単な例



候補構造  
(分子2個の場合)



良い  
コンピューター

物理の基礎的  
方程式を解くこと

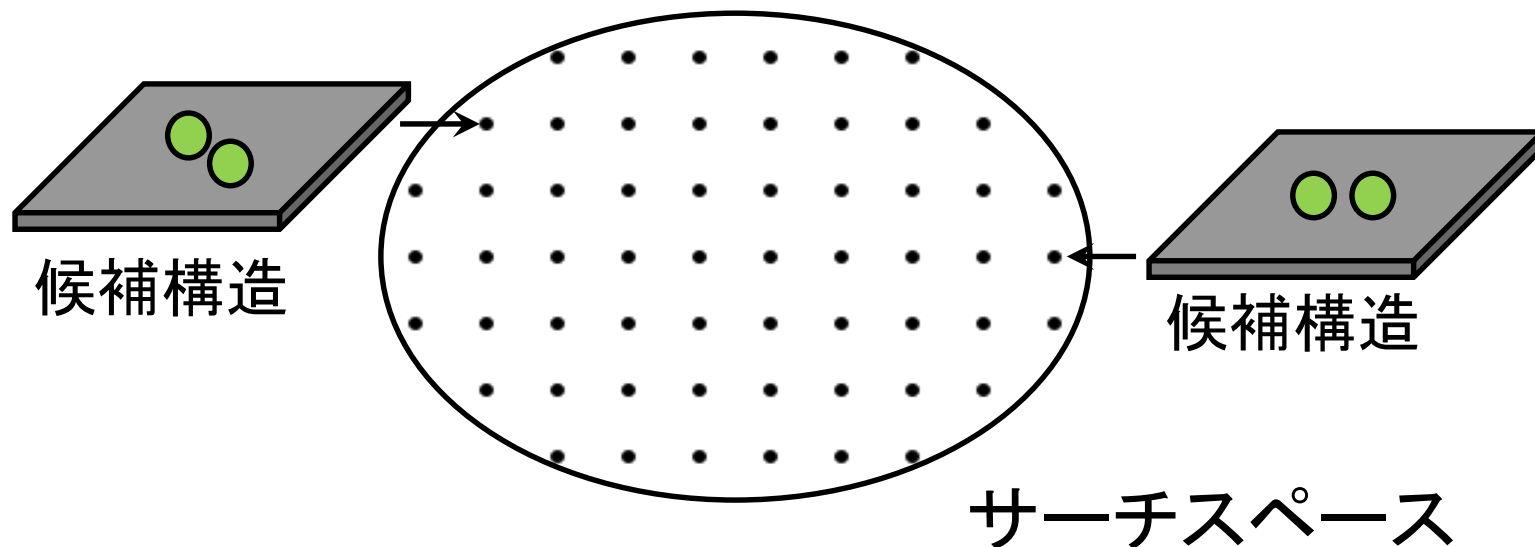


$p = 3\%$

分子の2個の場合では、

- 形成確率の計算はほぼ12時間が掛かる。
- 色々な近似を導入すると、ほぼ480個の候補構造がサーチスペースに入っていると分かる。

# ナノ構造体予測は どのぐらいの時間が掛かる？

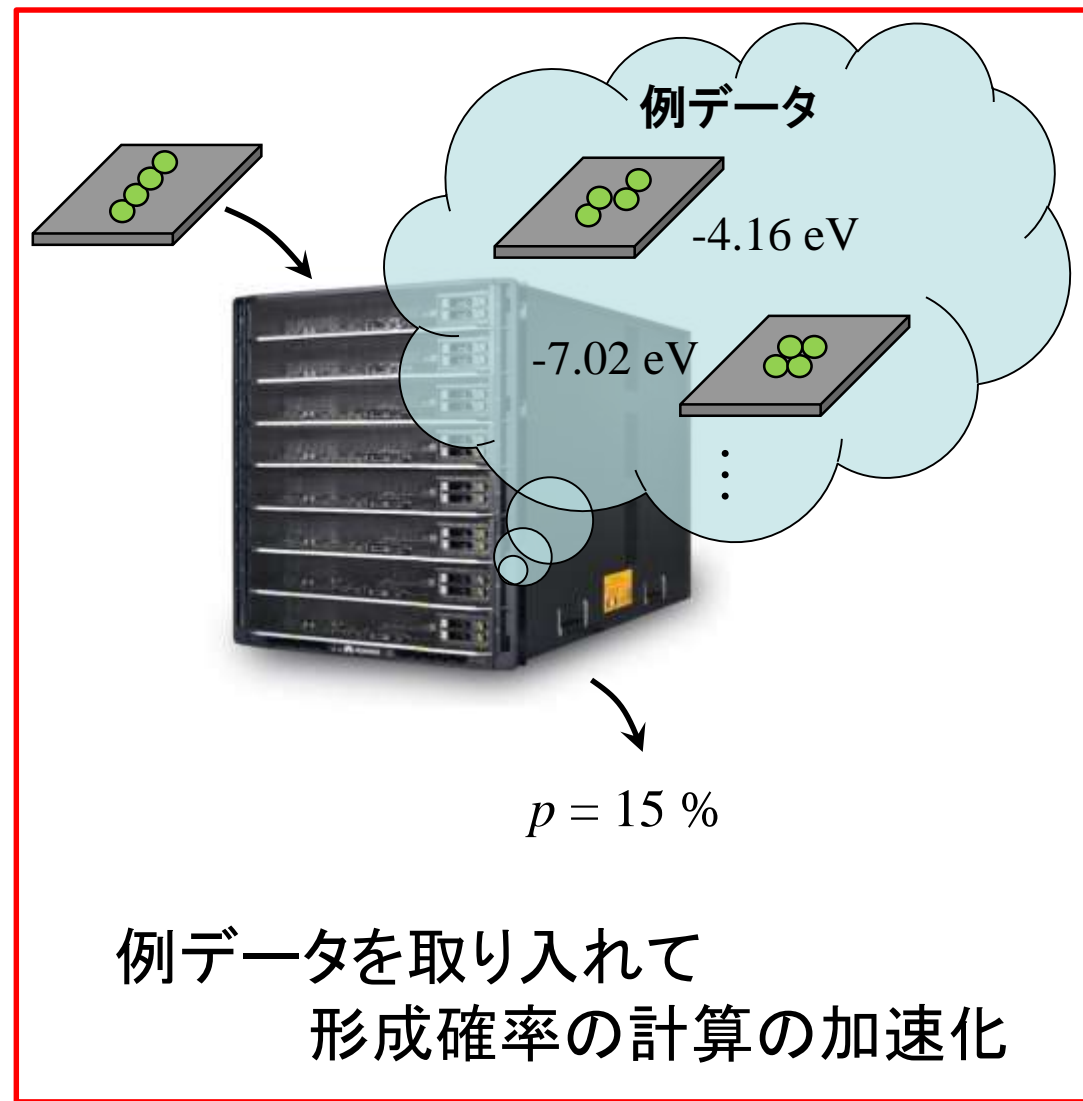
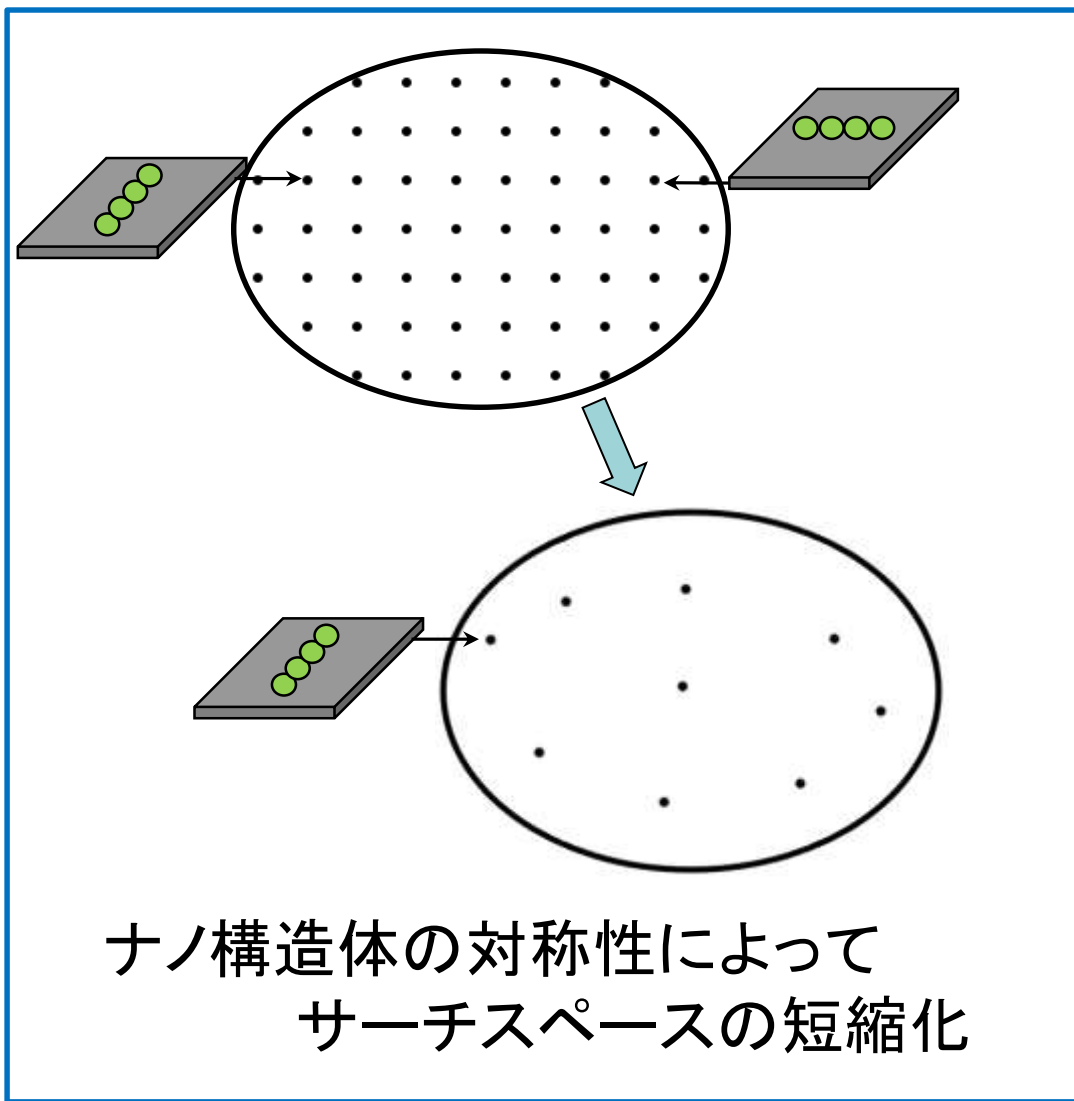


試行錯誤による平均時間

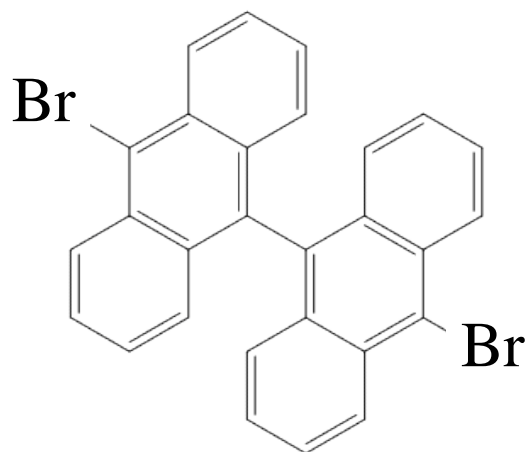
~  $0.5 \times 480$ 個の候補構造  $\times$  12時間/候補構造 = 120 days

分子3個の場合は7500 days (~20 years)!

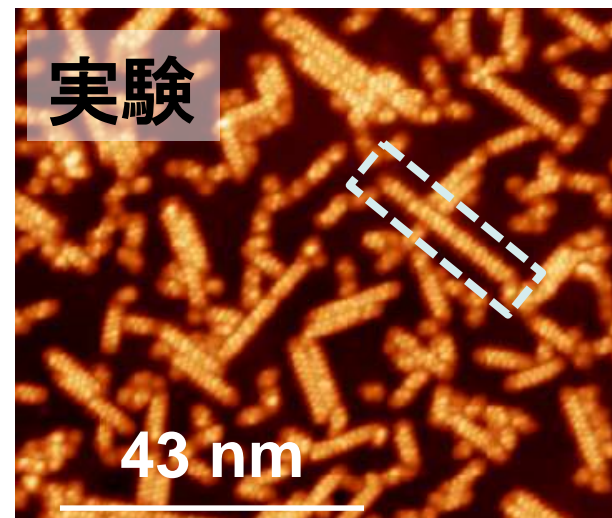
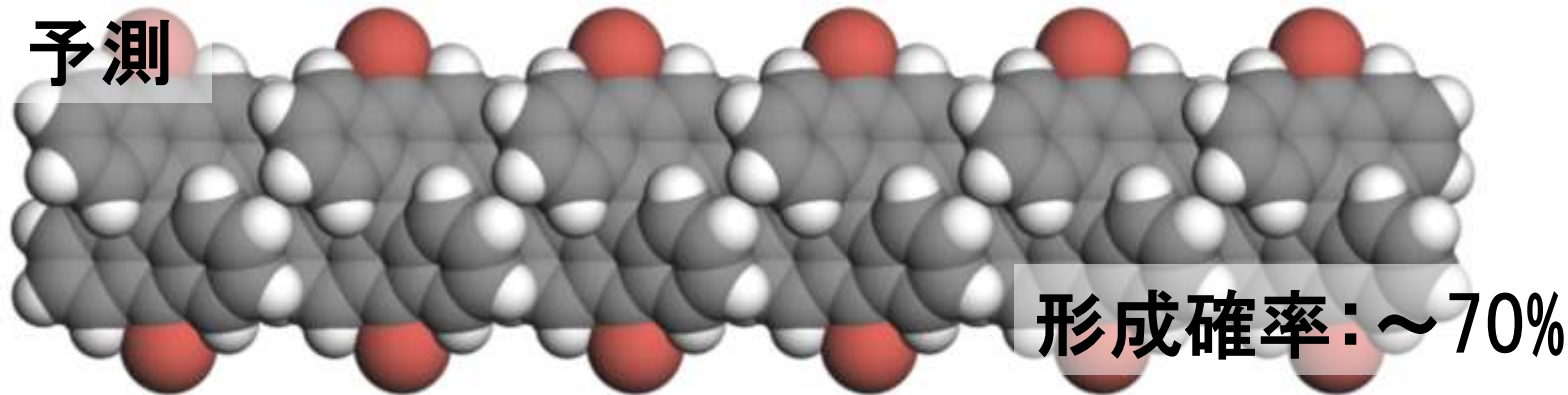
**形成確率計算の加速化・試行錯誤より賢い探索方法が必要！**



# GAMMAモデルによる予測

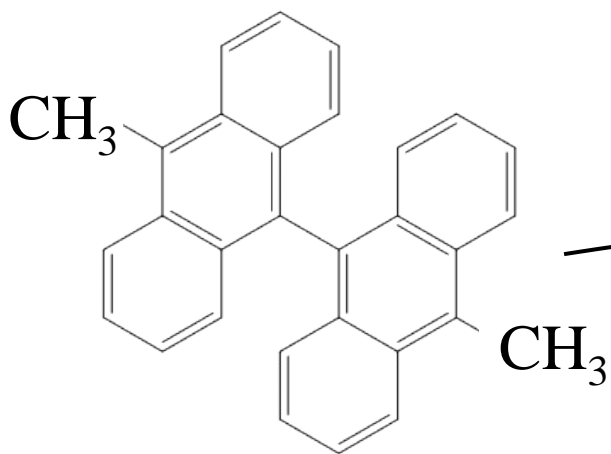


金属銅に蒸着



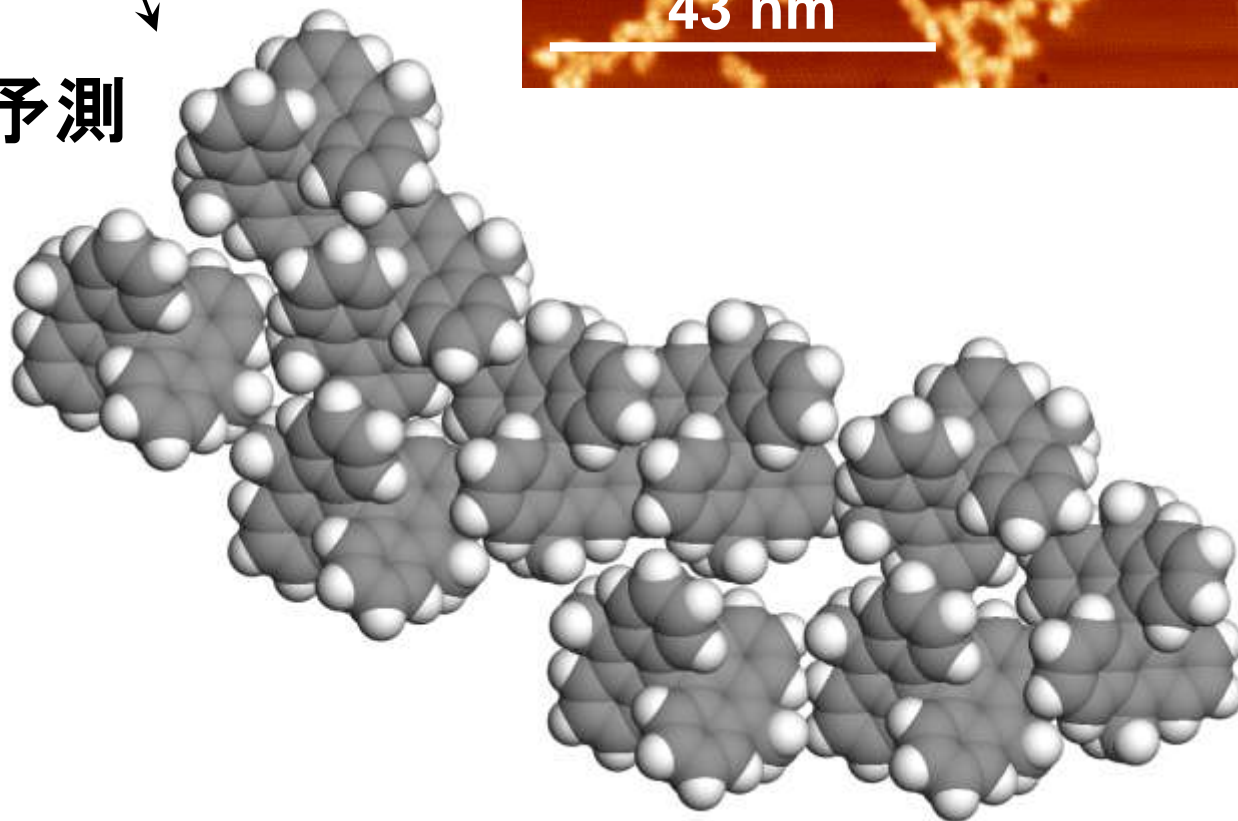
10個の分子なら、予測が最大2か月間ぐらいがかかる  
(年間スケールより遥かに早い)

# GAMMAモデルによる予測

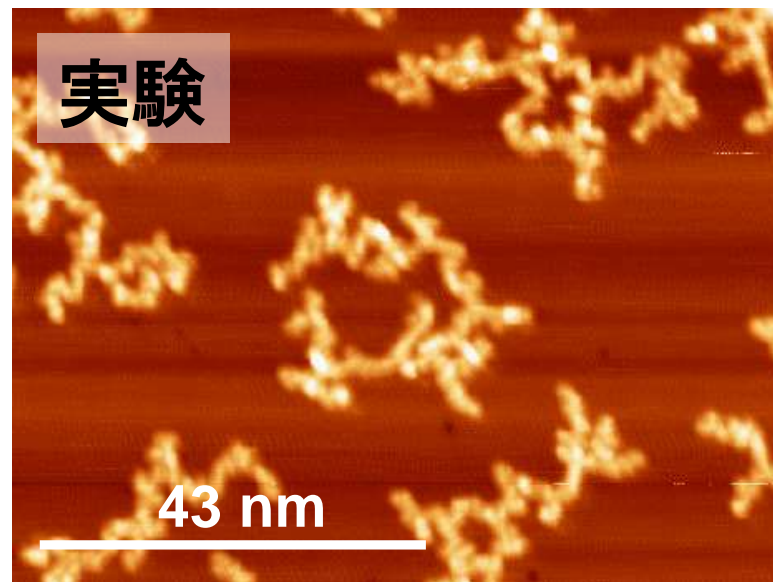


金属銅に蒸着

予測



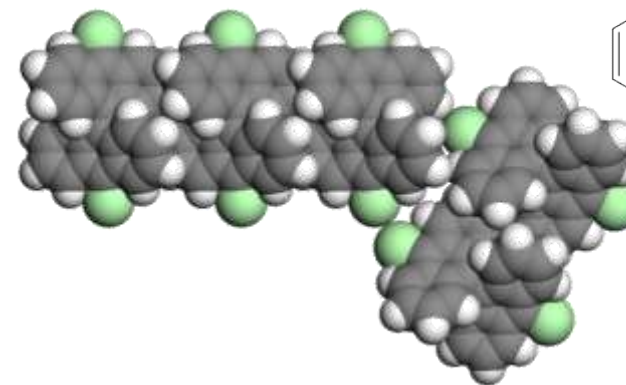
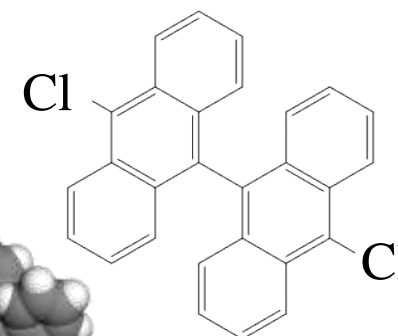
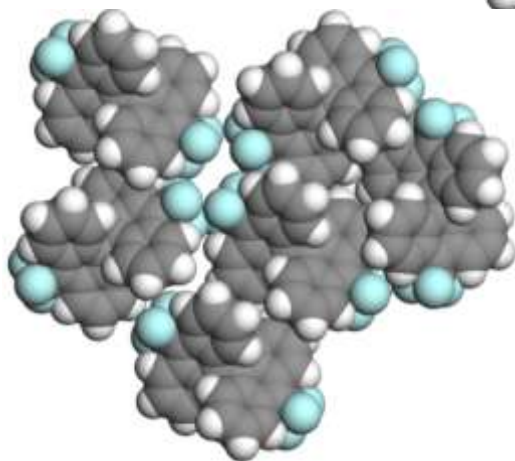
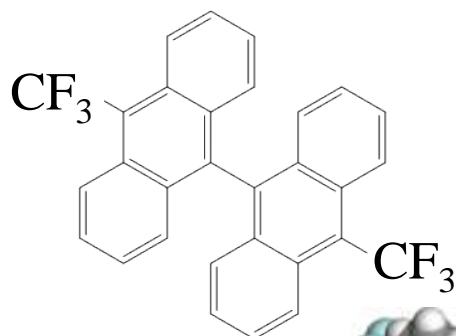
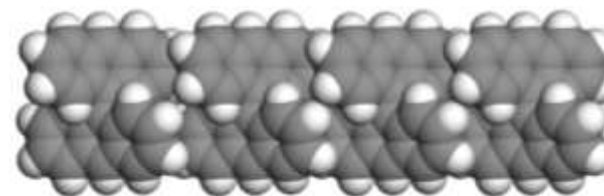
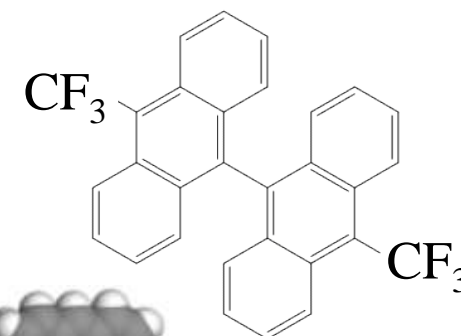
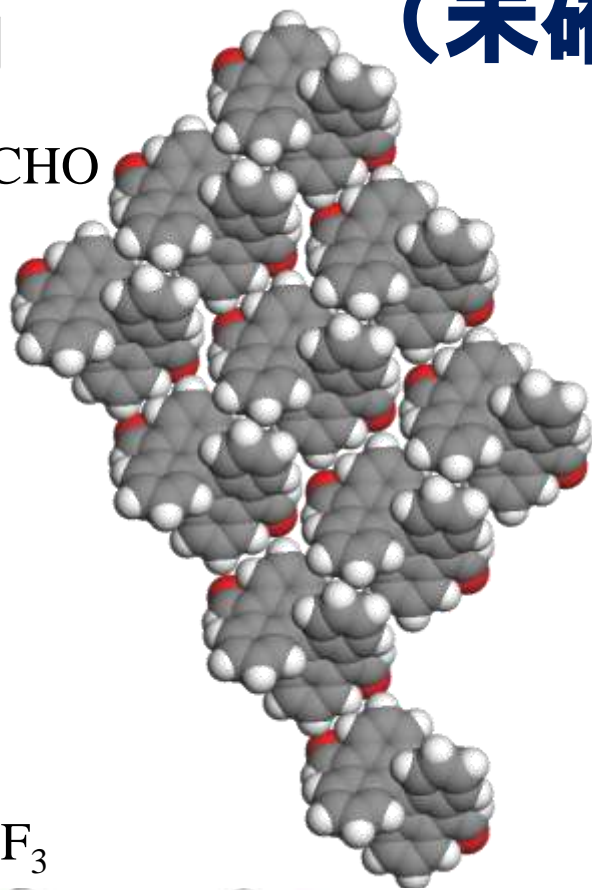
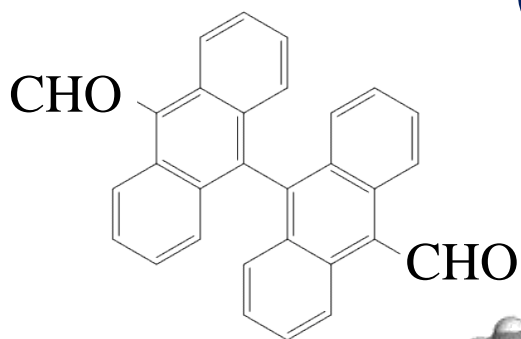
実験



それぞれのナノ構造体について形成確率も計算できる



# GAMMAモデルによる予測 (未確認のケース)

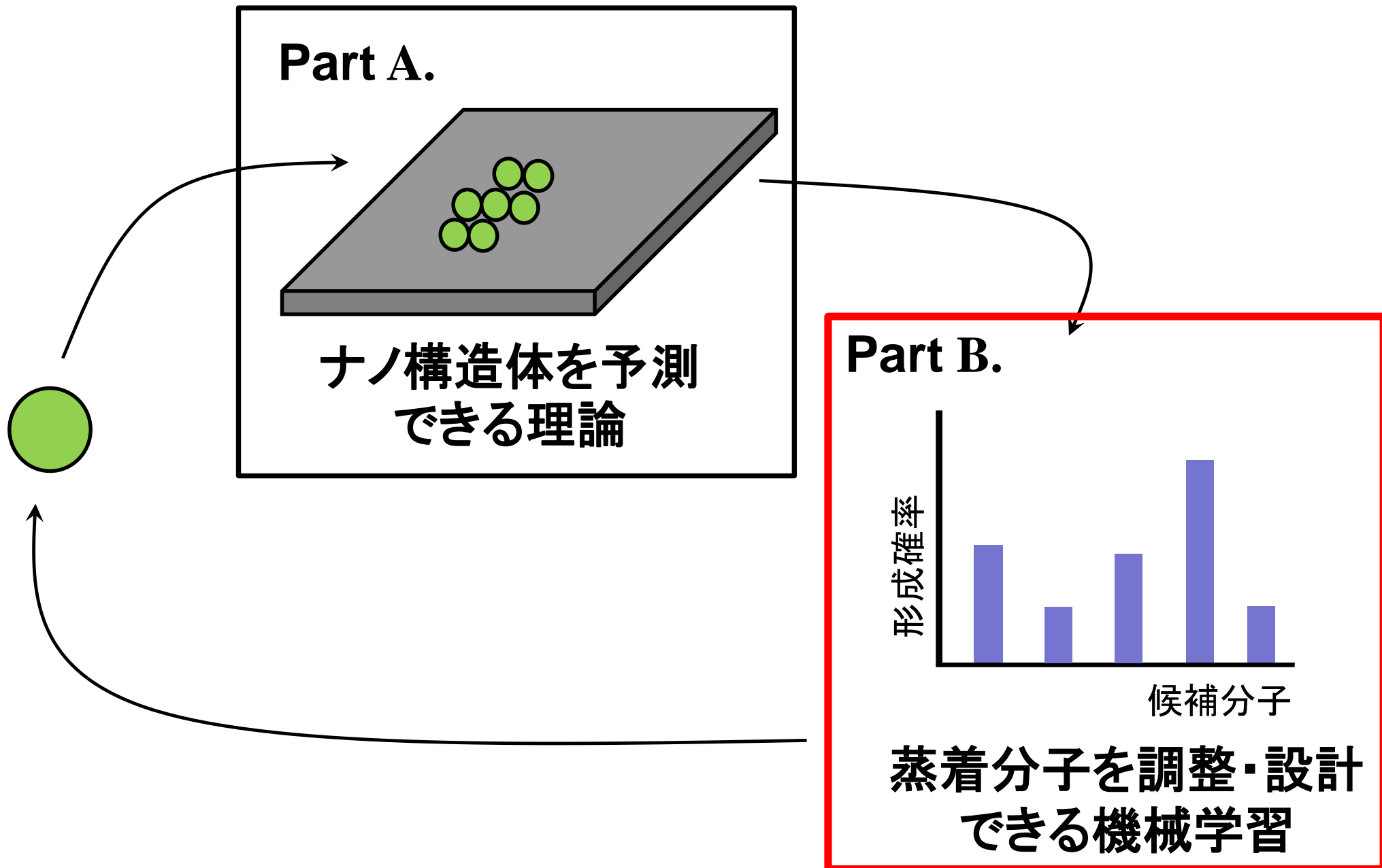


ナノ構造体を予測できる理論に成功

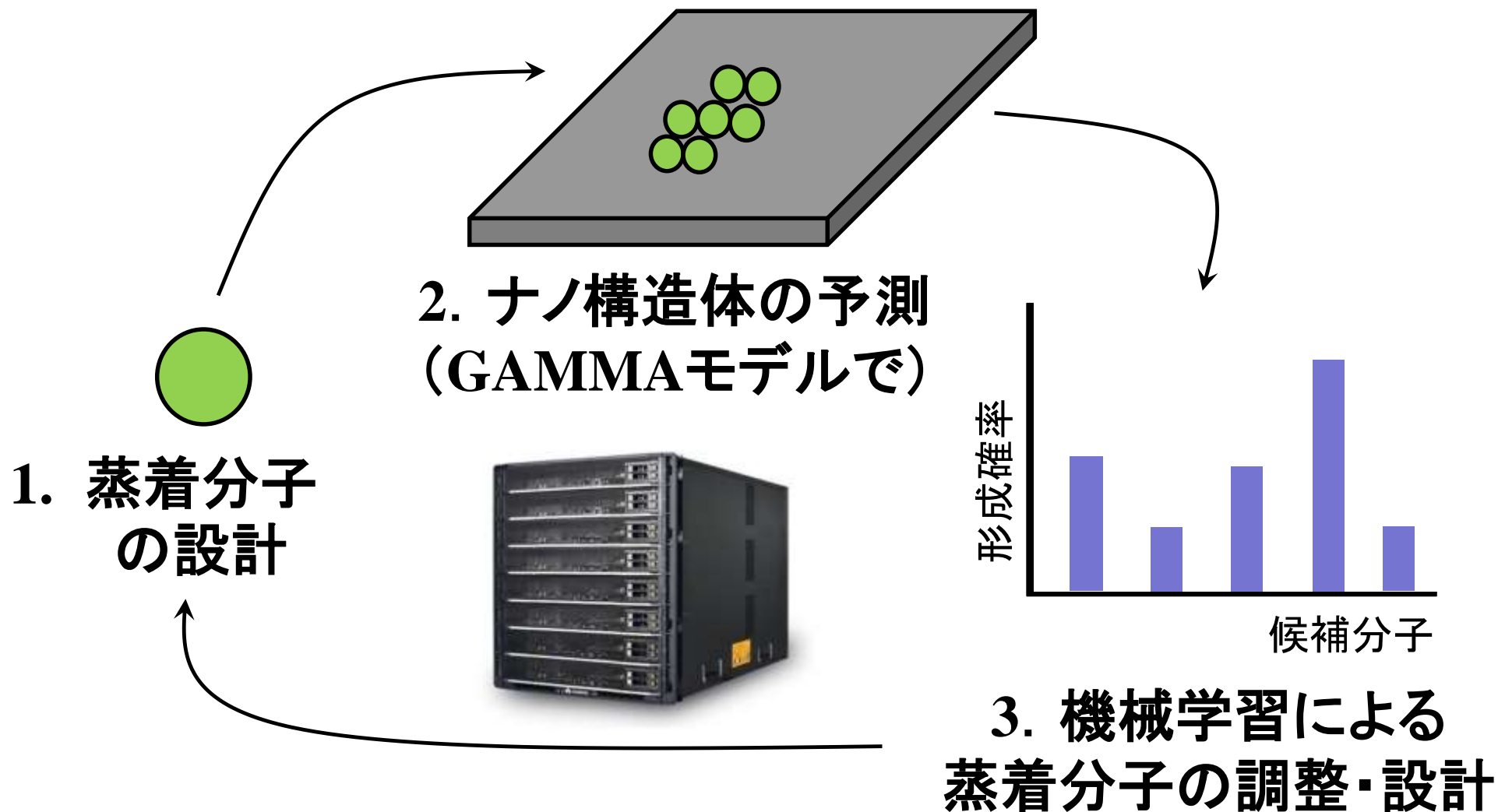
Packwood *et al.* *Nature Communications* **8**, 2017, 14463

Packwood *et al.* *Nature Communications* **9**, 2018, 2469

# 新技術の説明(B)

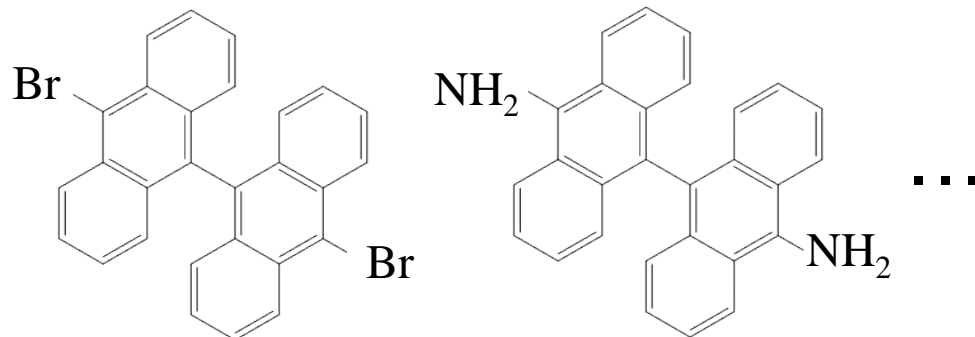
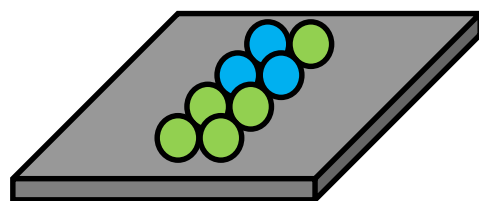
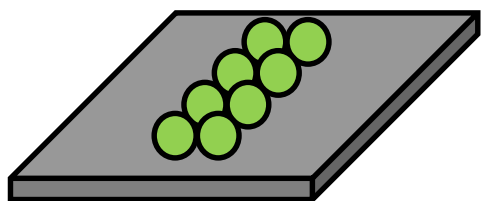


# 計算機上のナノ構造体設計



望ましいナノ構造体が形成できる蒸着分子を導出するまで反復する。

# 蒸着分子を予測するための機械学習

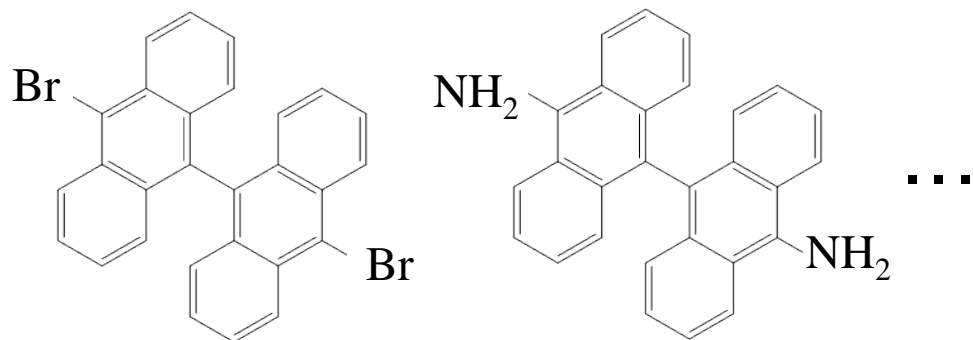


望ましいナノ構造

必要なパーツ

必要なパーツを形成できる蒸着分子

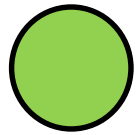
**【まず】** 望ましいナノ構造体にとって必要なパーツを  
形成できる蒸着分子を特定すること



電気陰性度が重要  
とみられる

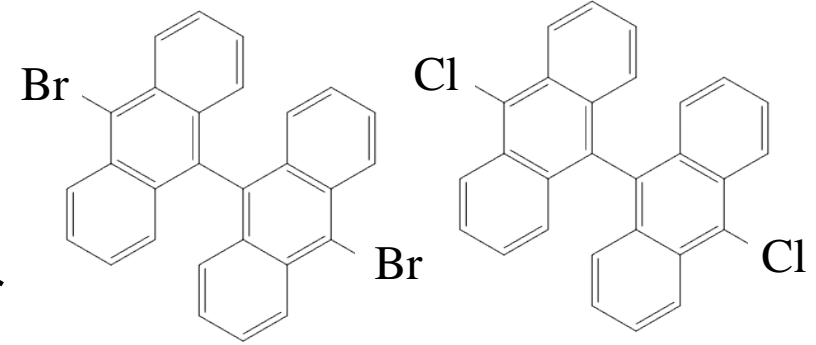
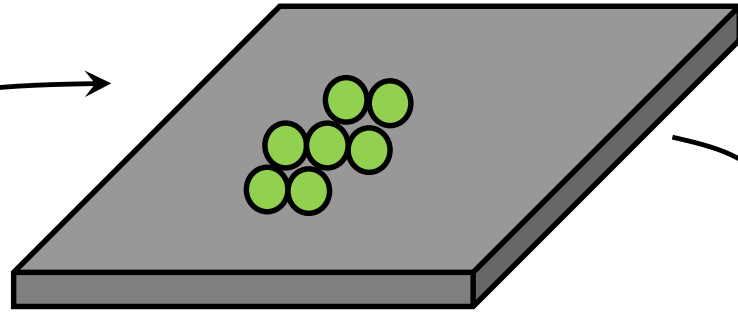
**【そして】** 必要なパーツにとって重要そうな化学的特性を  
抽出して蒸着分子を新たに提案すること

# ナノ構造体設計 全体のサイクル

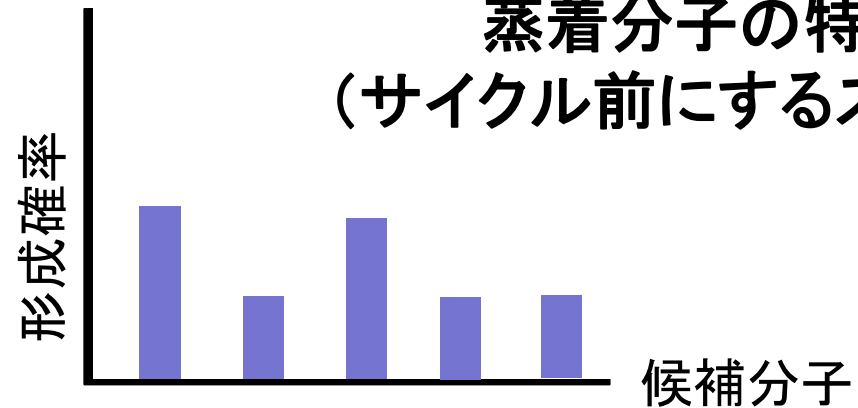


1. 蒸着分子  
の設計

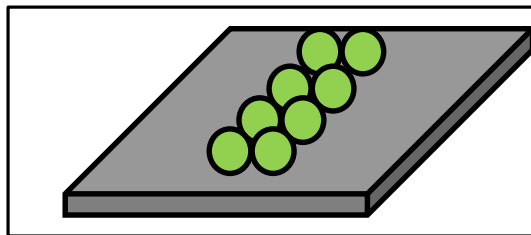
2. GAMMAモデルで  
ナノ構造体予測



0. GAMMAモデルで  
必要なパーツを形成できる  
蒸着分子の特定  
(サイクル前にするステップ)

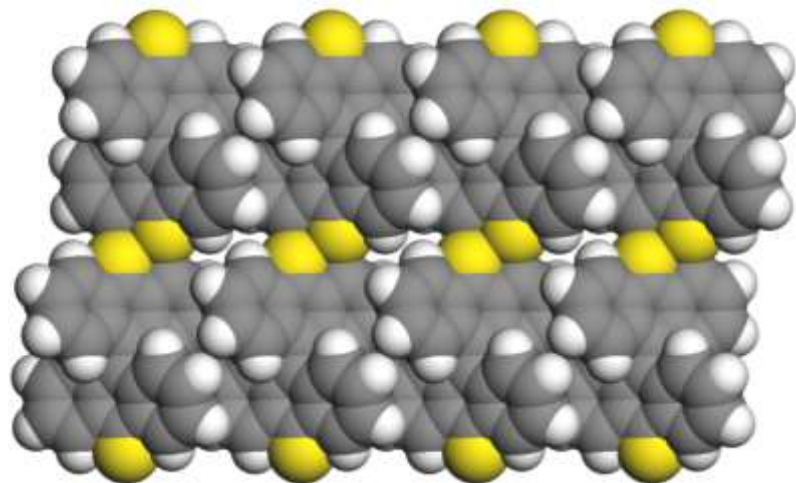


3. 重要そうな化学的特性を抽出  
し、蒸着分子を提案すること



望ましいナノ構造体を高い確率で形成する  
分子を導出するまで反復すること

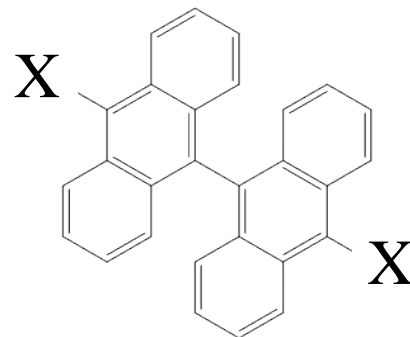
# 例 ナノ構造体の設計



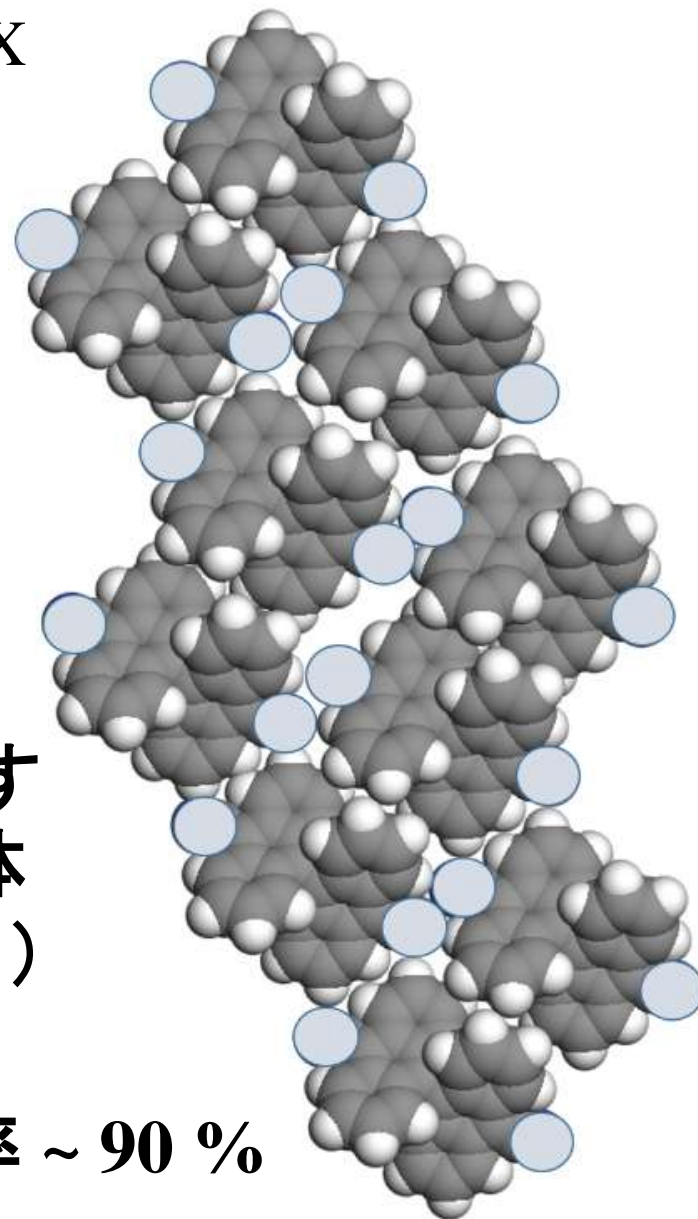
望ましいナノ構造体

望ましいナノ構造体と  
近い物が予測された！

計算時間は  
ほぼ2か月間



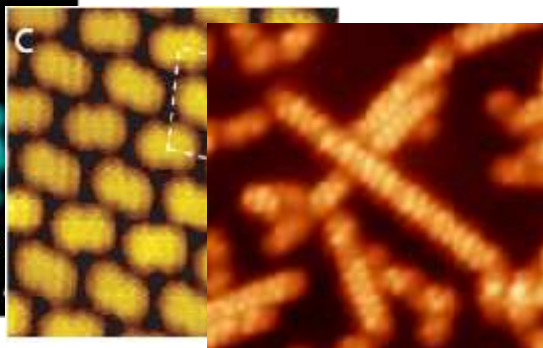
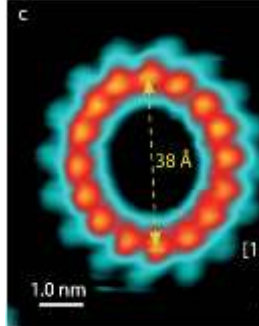
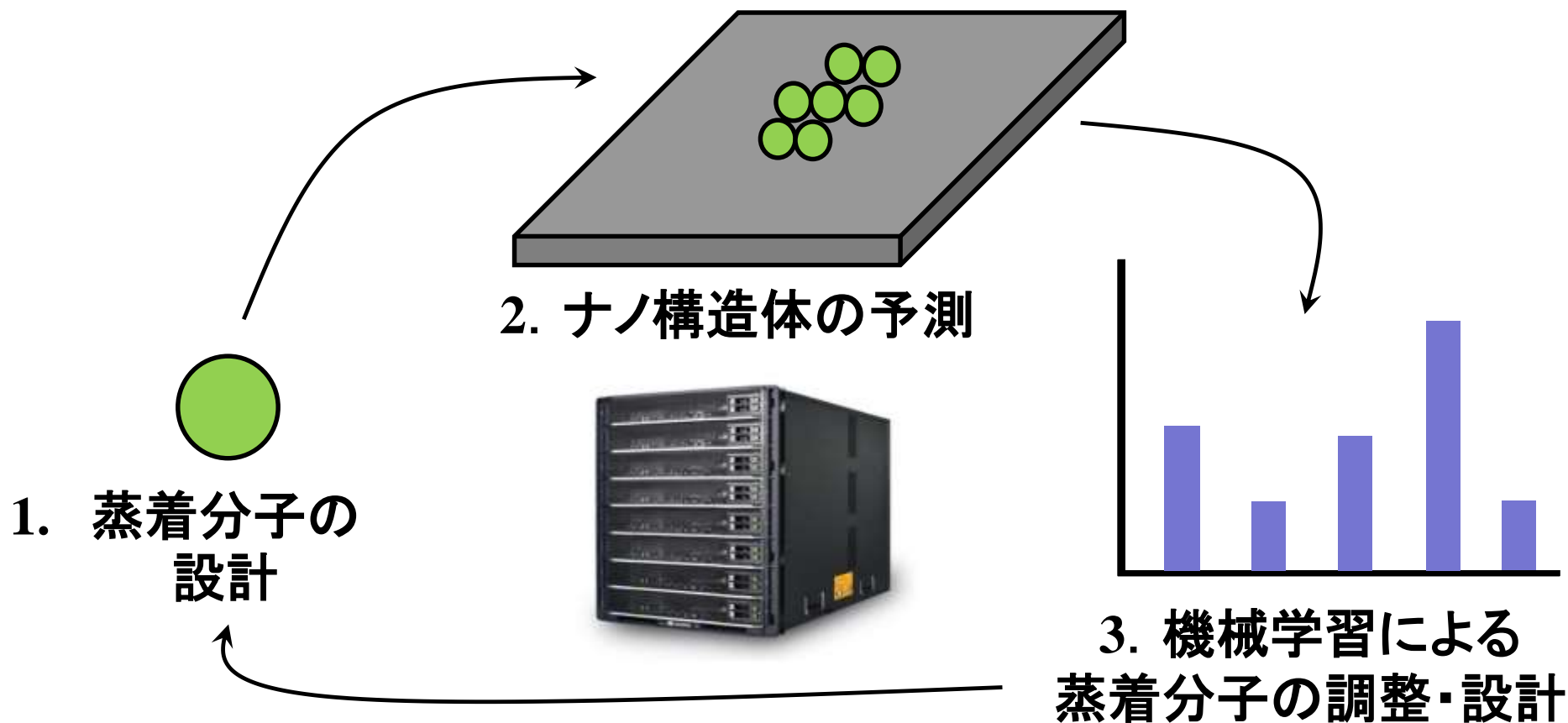
サイクルから  
出られた  
蒸着分子



それが形成す  
るナノ構造体  
(実験検証中)

形成確率 ~ 90 %

# まとめ 計算機上のナノ構造体設計



ナノ構造体予測と機械学習によって「ナノ構造体設計」へ進んでおり、予備的な技術も出てきた。「計算駆動ナノ構造設計」というパラダイムを狙っています。

# 企業への期待

1. 「計算機上のナノ構造体設計」は企業にとって価値があるか？どのように応用できるか？どのようなブレークスルーに繋がっていくか？
2. 今の理論は限られているので、適用範囲をどのように拡大すればよいか教えてください。
3. 実験検証（走査トンネル顕微鏡・超真空蒸着）  
ができる人も探しています。

**産学連携・共同研究は大歓迎なので、アイデアや提案があったらどうぞ遠慮なく教えてください！**



# お問い合わせ先

**京都大学**

**高等研究院・細胞－材料統合システム拠点 (iCeMS)**

**研究支援部 講師 藤井永治**

**TEL 075-753-9753**

**FAX 075-753-9759**

**e-mail [efujii@icems.kyoto-u.ac.jp](mailto:efujii@icems.kyoto-u.ac.jp)**