

数理モデリングで未来を創る ～次世代の電気材料へ～

Daniel Packwood (パックウッド・ダニエル)

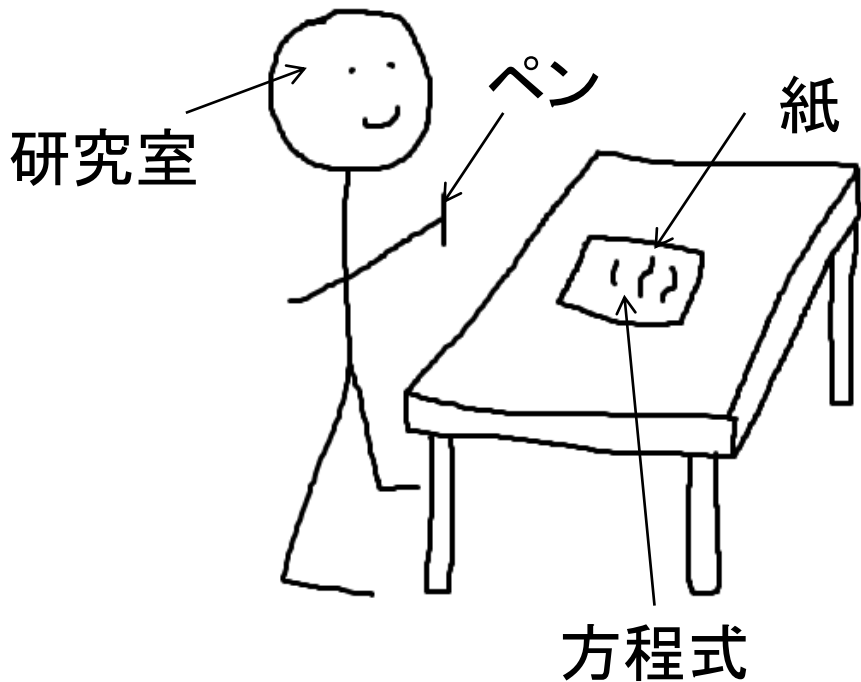
東北大学 原子分子材料科学高等研究機構

科学技術振興機構 さきがけ



東北大学



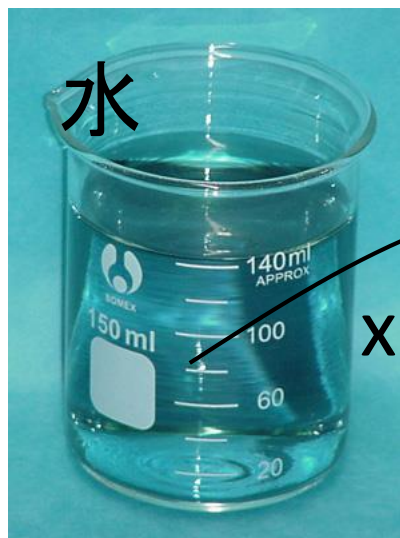


私は化学者・応用数学者です。

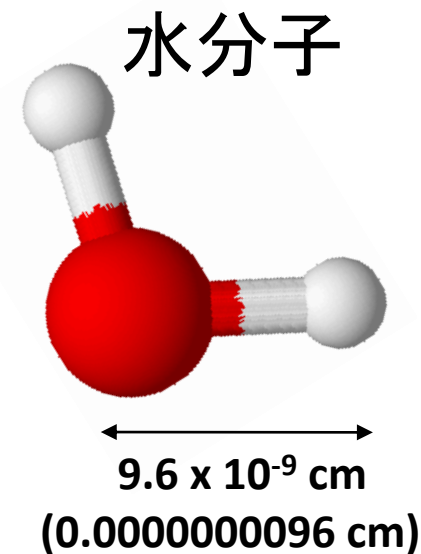
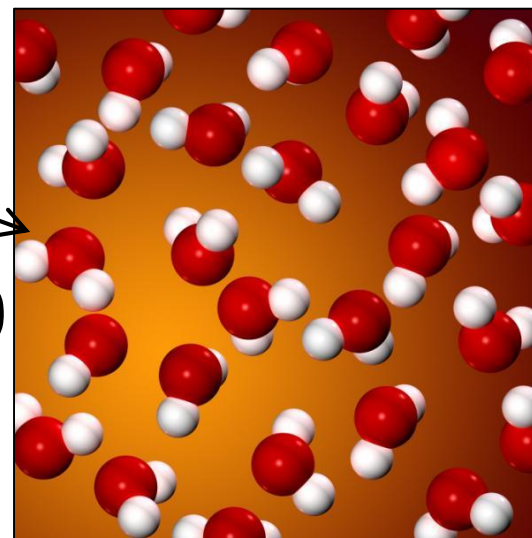
化学＝分子による新しい材料を作ること。

応用数学＝自然の現象を抽象化すること。

分子は、物質
を構成する
小さい物です

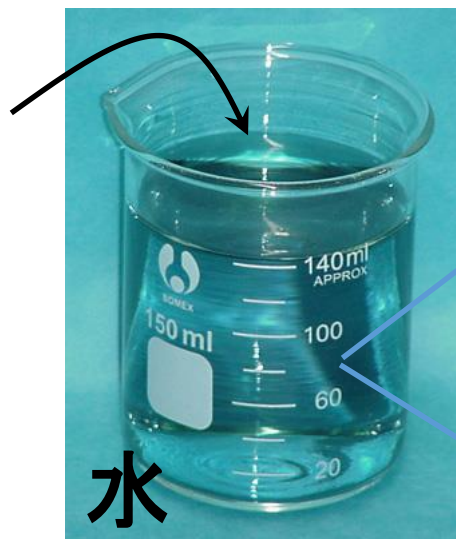
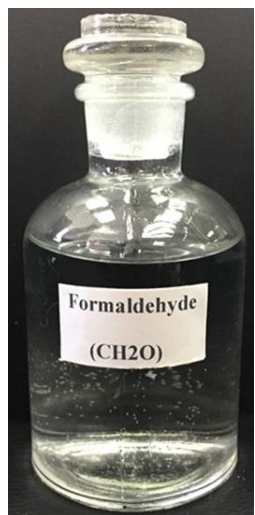


$\times 1000000000000$

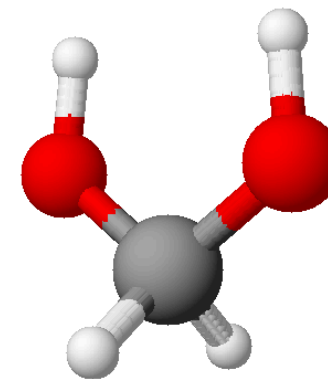
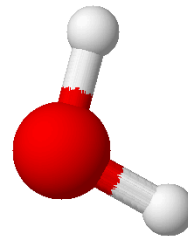
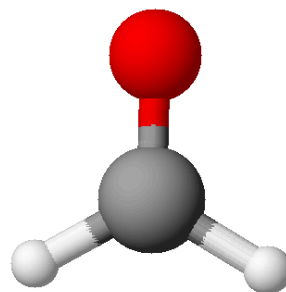


分子を組み合わせてどうやって新しい材料を作る？

1. 化学者は分子を混ぜ合わせる



2. 分子は互いに相互作用する



3. この相互作用による新しい分子が生成する(たまに！)

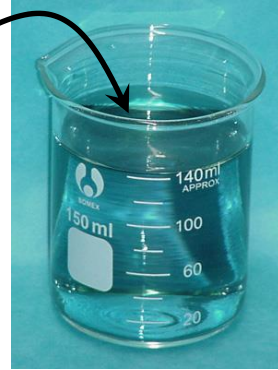
このステップは制御できる

このステップは制御できない！

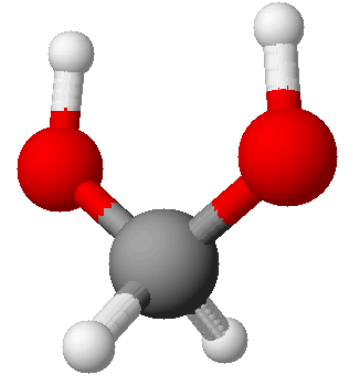
大事なポイント: 分子を混ぜ合わせる前に、分子と分子の相互作用に関わるルールを理解することが必要です！

ルールとは？

ルールが分かると、実験を行わずに何が起きるかを予想することが可能です。



ルール



ルールをどうやって推論する？

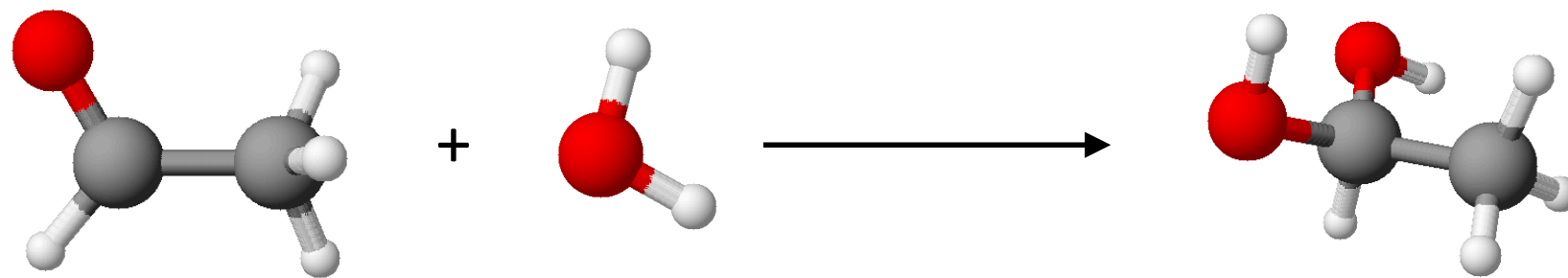
かなり難しいことです

数多くの実験を行われなければならないのです

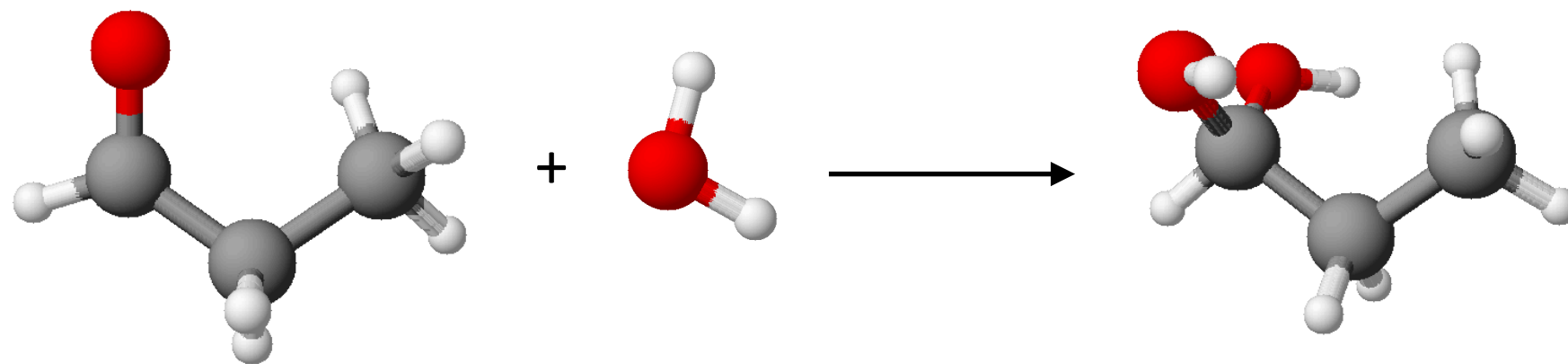


例：ルールを推論しよう！

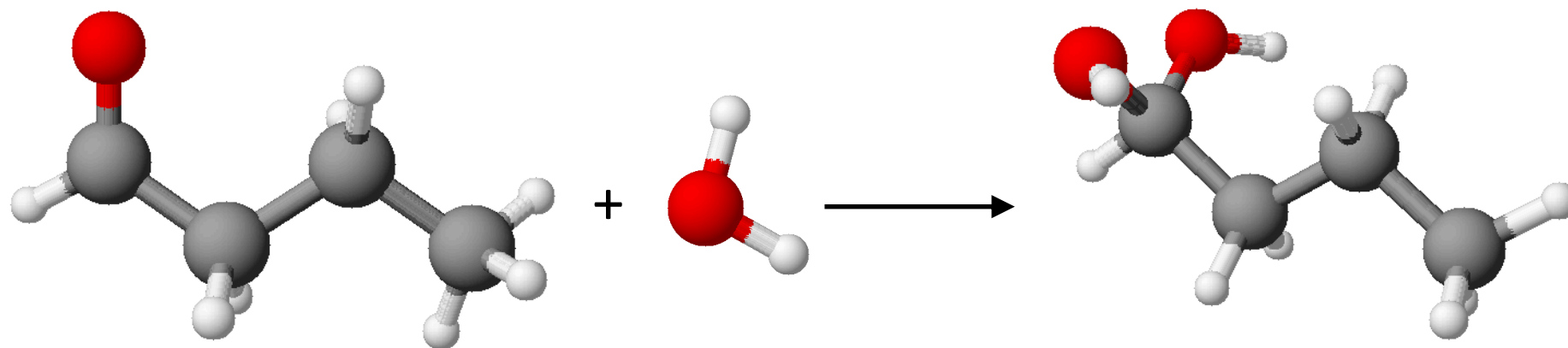
実験 # 1



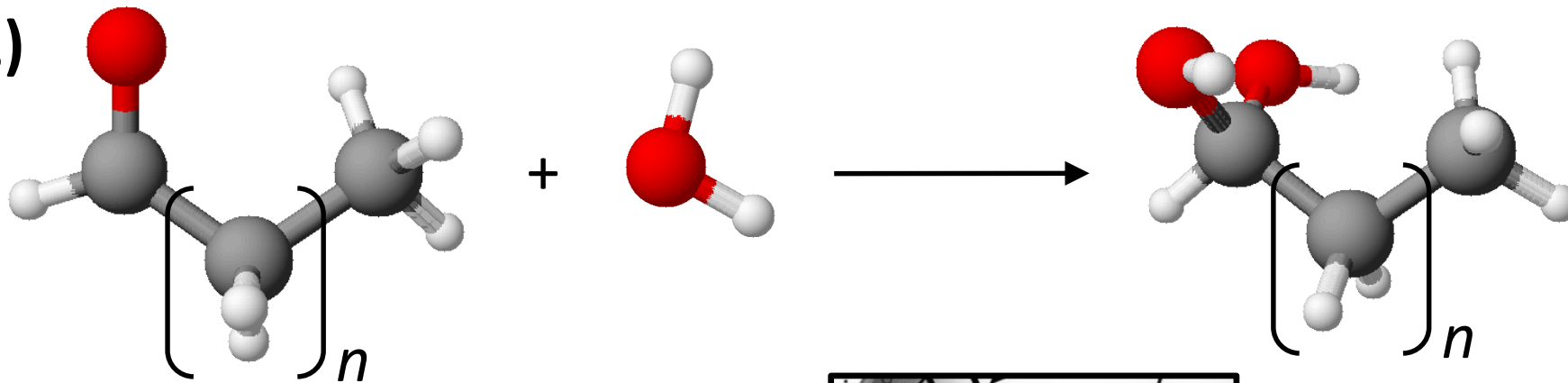
実験 # 2



実験 # 3



ルール ($n \geq 1$)



ルールを推論するのがなぜ難しい？

数多くの実験を行う必要がある。

実験は長い時間が掛かる

実験は危ない

実験はかなりの予算が掛かる



一方で実験と別のやり方でルールを導くことができる... 数理モデリング！

数理モデリングの過程

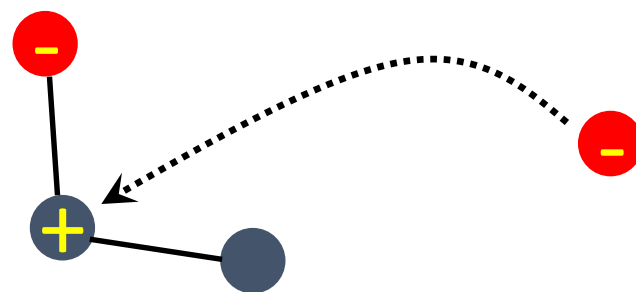
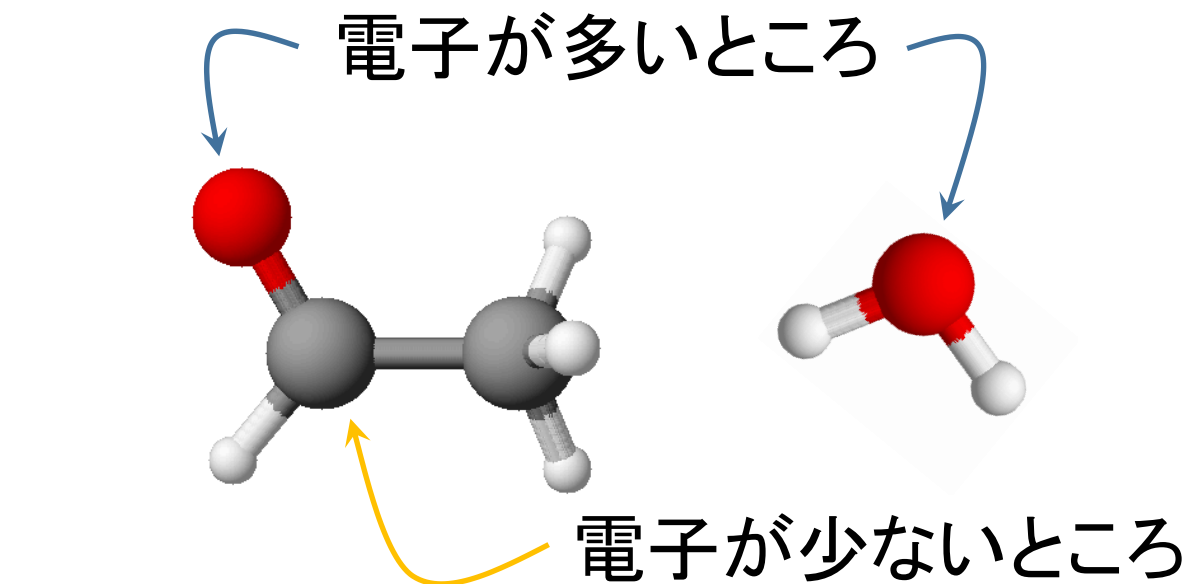
1. 実際の化学反応の状況の本質を把握すること

2. 実際の化学反応の状況を抽象化すること

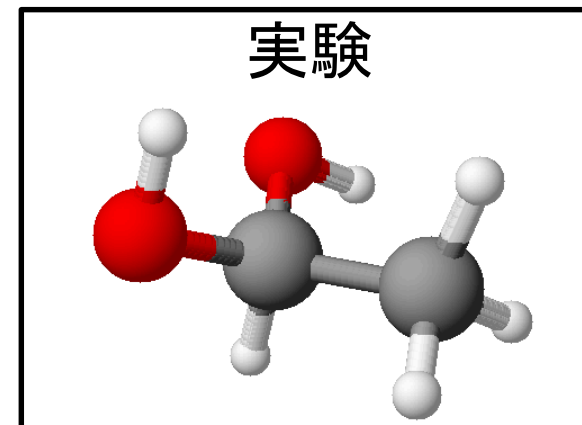
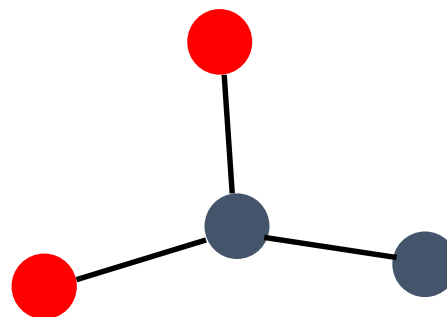
3. 物理の法則を適用すること
→ ルールが出てくる

4. 実験と比較すること

実験結果と似た結果になる
→ 良さそうなルール



物理: 正電化は負電荷を引き付ける。



数理モデリングの主なステップ

1. 実際の化学反応の状況の本質を把握すること

2. 実際の化学反応の状況を抽象化すること

3. 物理を法則を適用すること

4. 実験と比較すること

実際の状況を深く分かる必要がある！

数学をよく理解する必要がある！

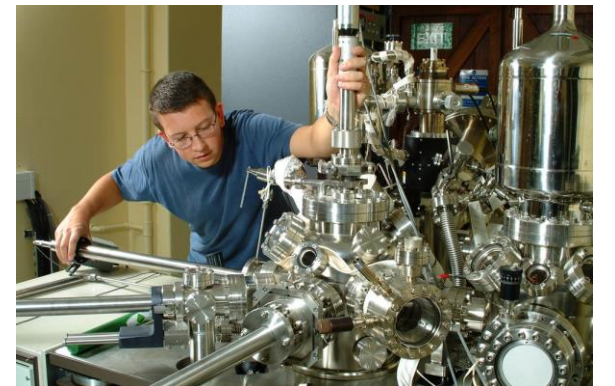
実験ができる協働研究者がいる必要がある！

Periodic Table of the Elements

Legend:

- Alkali Metal
- Alkaline Earth
- Transition Metal
- Basic Metal
- Semimetal
- Nonmetal
- Halogen
- Noble Gas
- Lanthanide
- Actinide

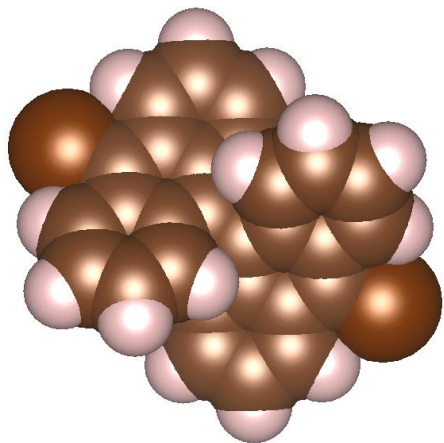
$$\frac{dX_t}{dt} = f(X_t) + b \frac{dW_t}{dt}$$



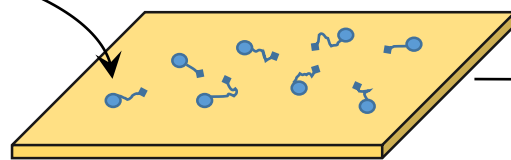
次世代の電気材料を創るための 数理モデリング

東北大のハン助教、東京工業大の一杉教授が行った実験

Di-bromo bi-anthryl (DBBA)
分子

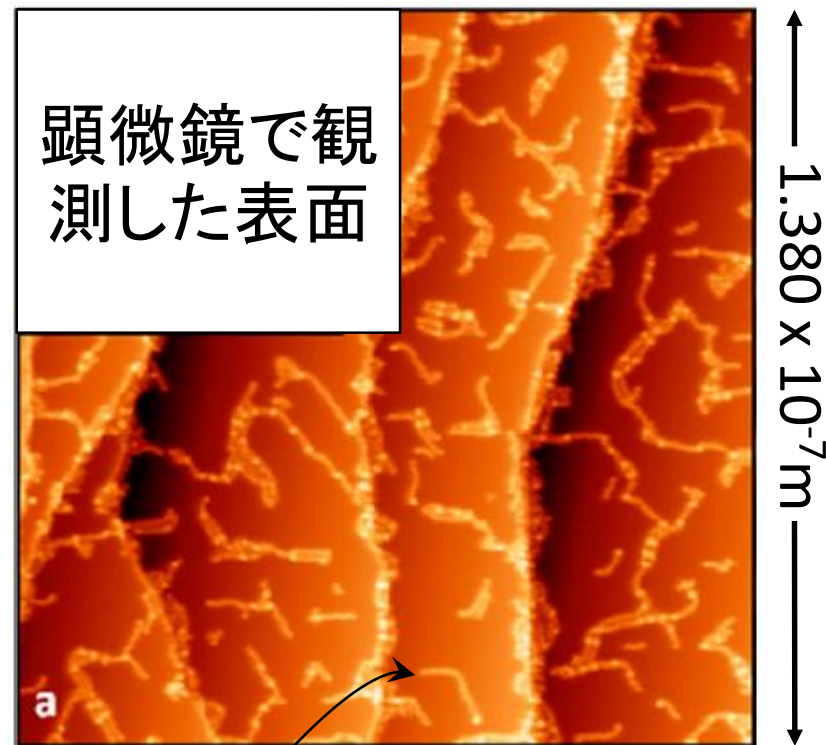


金属銅の表面
に吸着する



分子が表面で拡散する

← 1.380 x 10⁻⁷m →



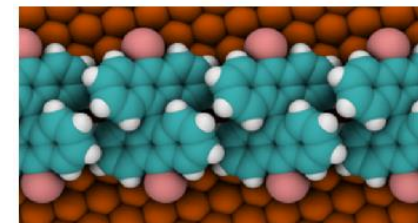
この過程で何が起きたか？

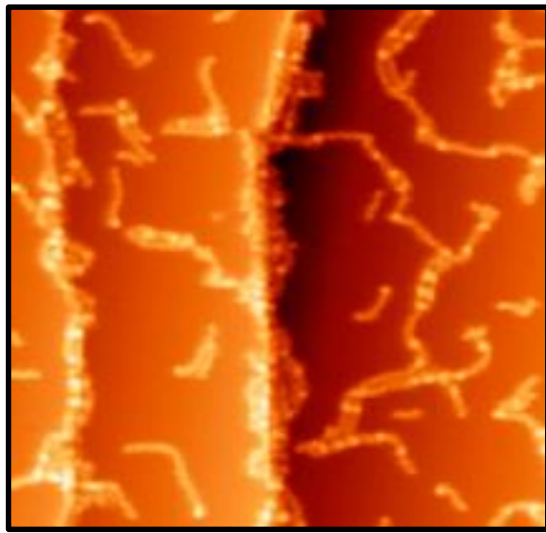
分子は集まり、‘島’という構造を形成した。

この現象は分子自己組織化と呼ばれる。

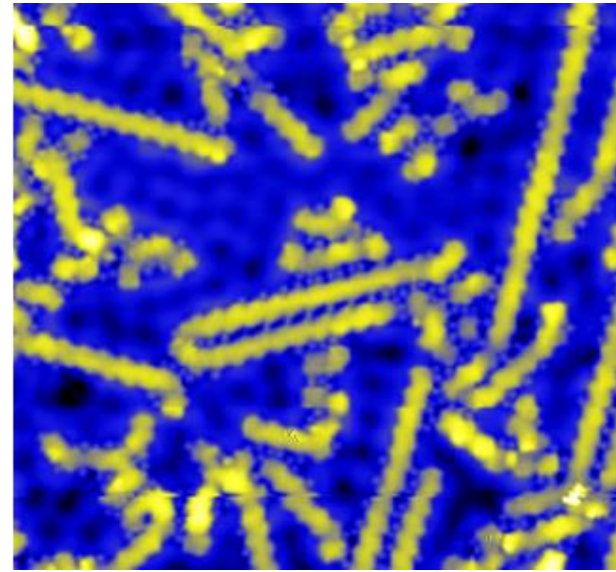
分子自己組織化はかなりの役に立つと思われる。

‘島’

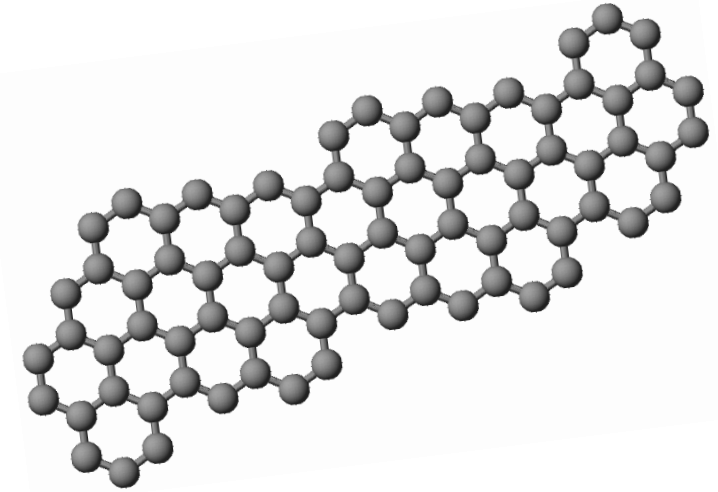




熱処理
(800 °C)



島はグラフェンになった



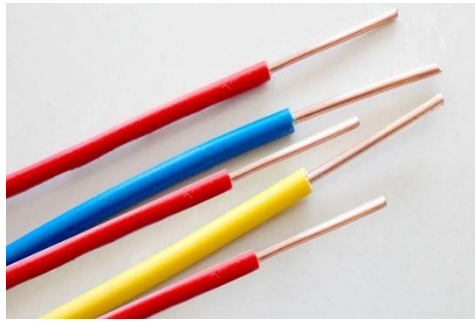
グラフェンはかなりスペシャルな材料です！

グラフェンの伝導性は極めて高い (シリコンの2千倍以上)

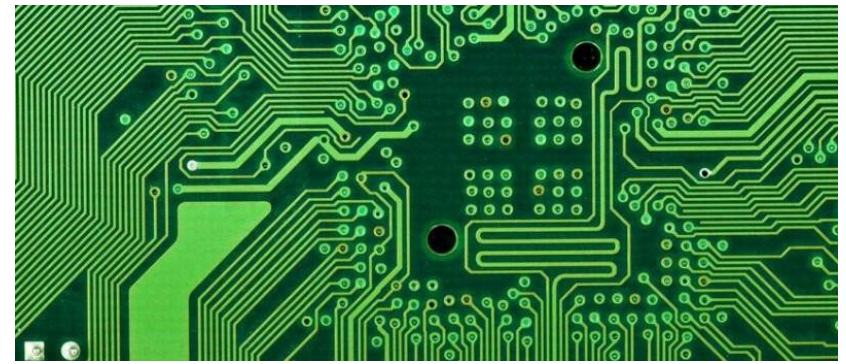
将来の夢: グラフェンによる実際のエレクトロニクスを開発すること
(例: すごく計算の速いパソコン)

グラフェンでエレクトロニクスをどうやって開発するか？

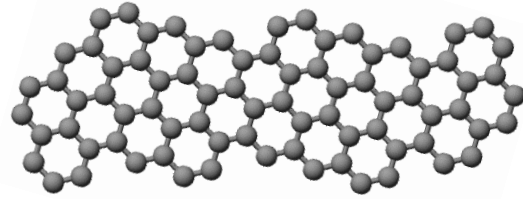
電線:



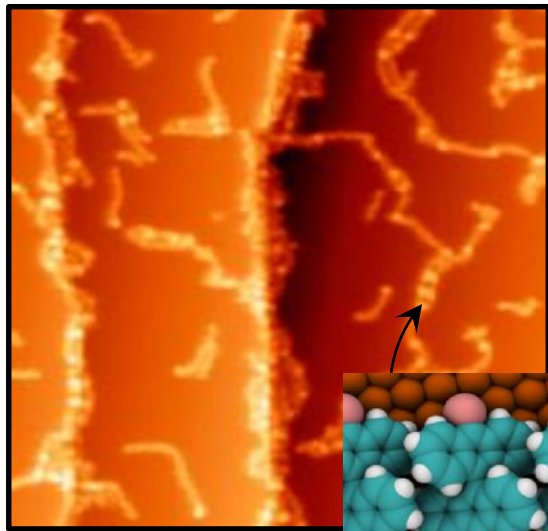
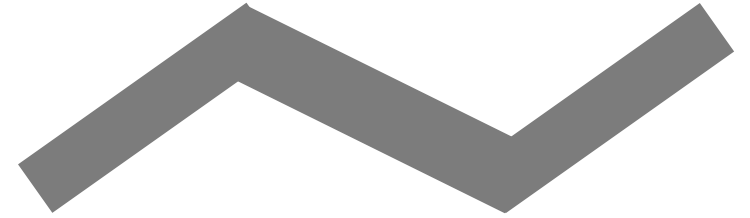
電気回路:



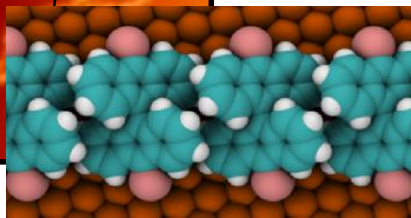
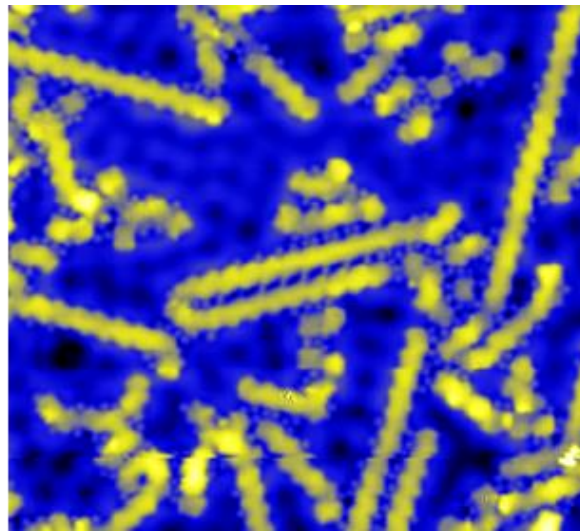
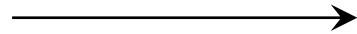
電線のような形を有するグラフェン



直線でない形状のグラフェン



熱処理
800 °C



電線のような島

電線のようなグラフェン

どうやって作る？

島の構造を制御すると、グラフェンの構造を制御するようになる

しかし、島の形成過程に関わるルールが分からない！

では、数理モデリングをやってみよう

島の形成のための数理モデリング

1. 実際の化学反応の状況の本質を把握すること

2. 実際の化学反応の状況を抽象化すること

3. 物理の法則を適用すること

4. 実験と比較すること

Periodic Table of the Elements

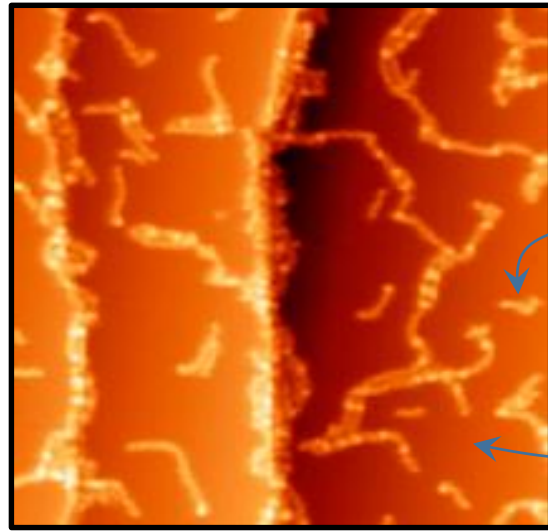
Legend:

- Alkali Metal
- Alkaline Earth
- Transition Metal
- Basic Metal
- Semimetal
- Nonmetal
- Halogen
- Noble Gas
- Lanthanide
- Actinide

$$\frac{dX_t}{dt} = f(X_t) + b \frac{dW_t}{dt}$$

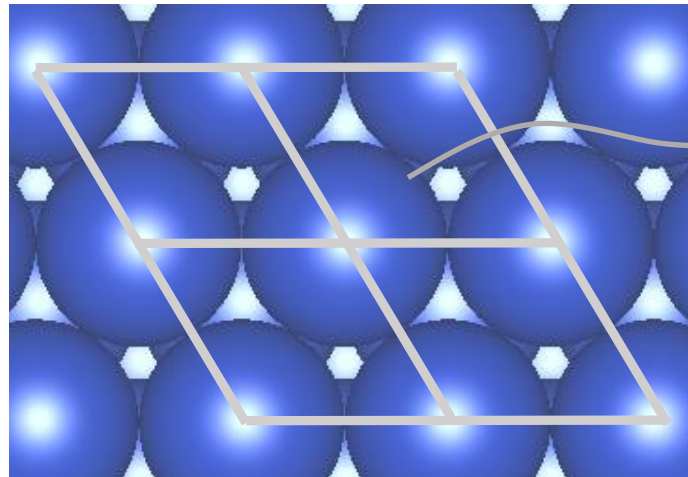
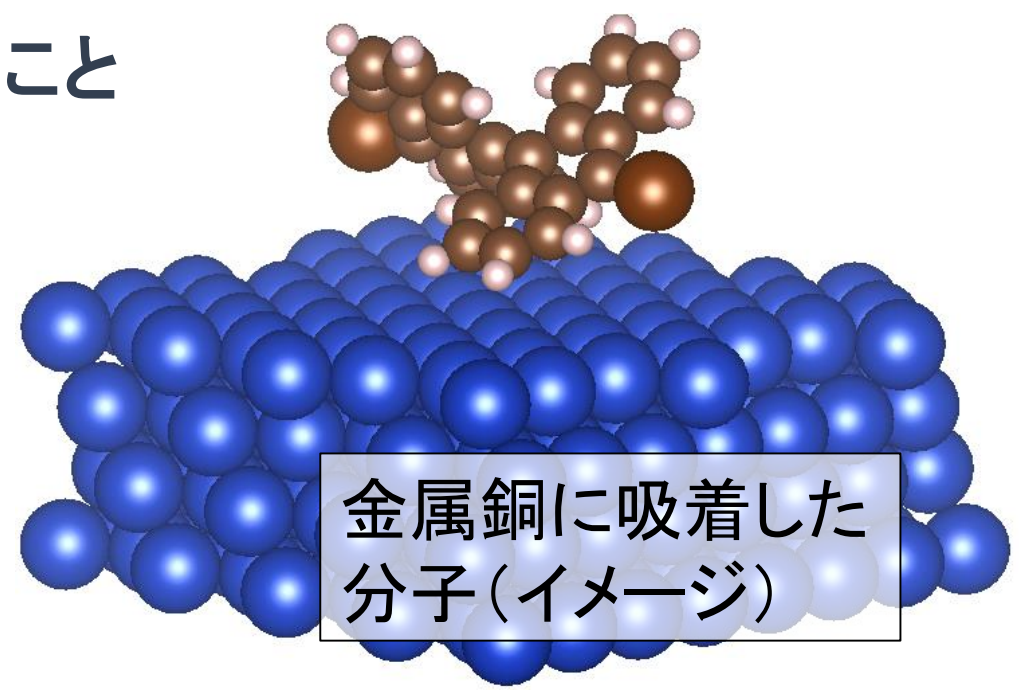


1. 実際の化学反応の状況の本質を把握すること

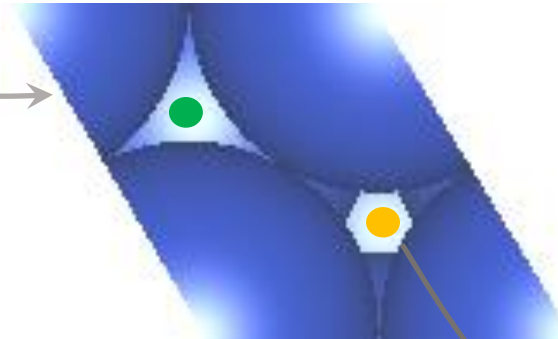


分子から作られる島

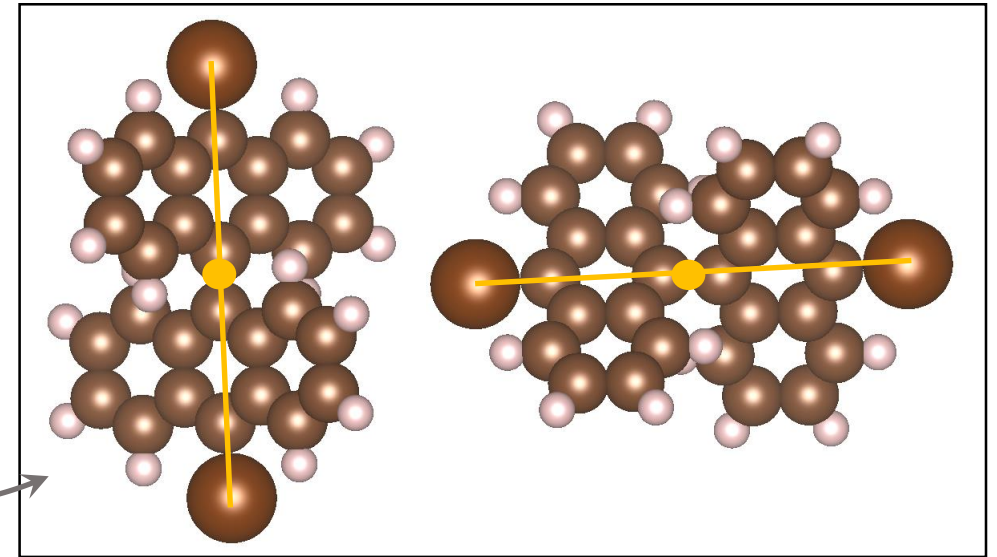
金属銅の表面



金属銅の表面の単位胞



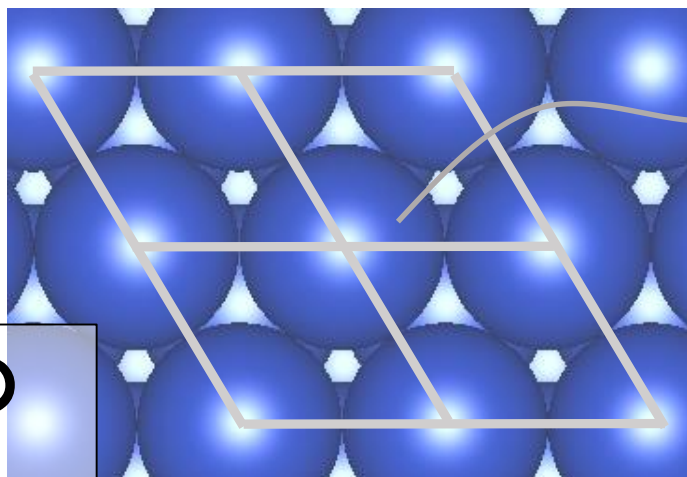
吸着点



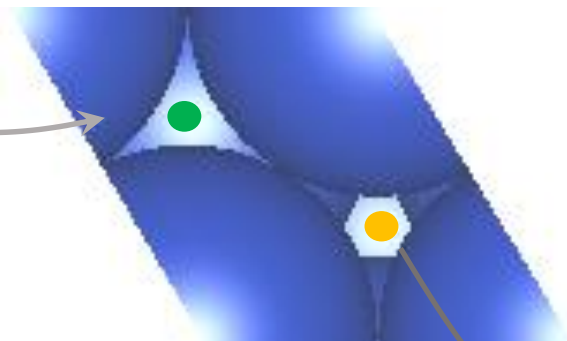
吸着した分子の向き

2. 実際の化学反応の状況を抽象化する

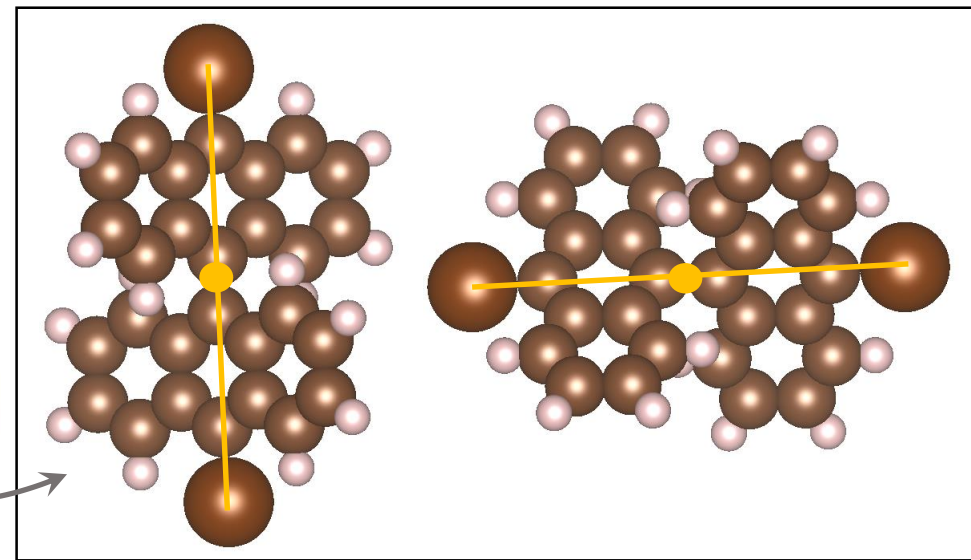
実際の
状況



金属銅の表面の単位胞

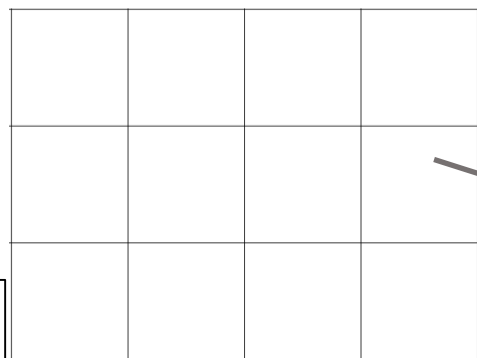


吸着点



吸着した分子の向き

抽象化

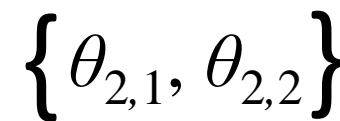


網の目 C_1, C_2, \dots, C_M



網の目の色

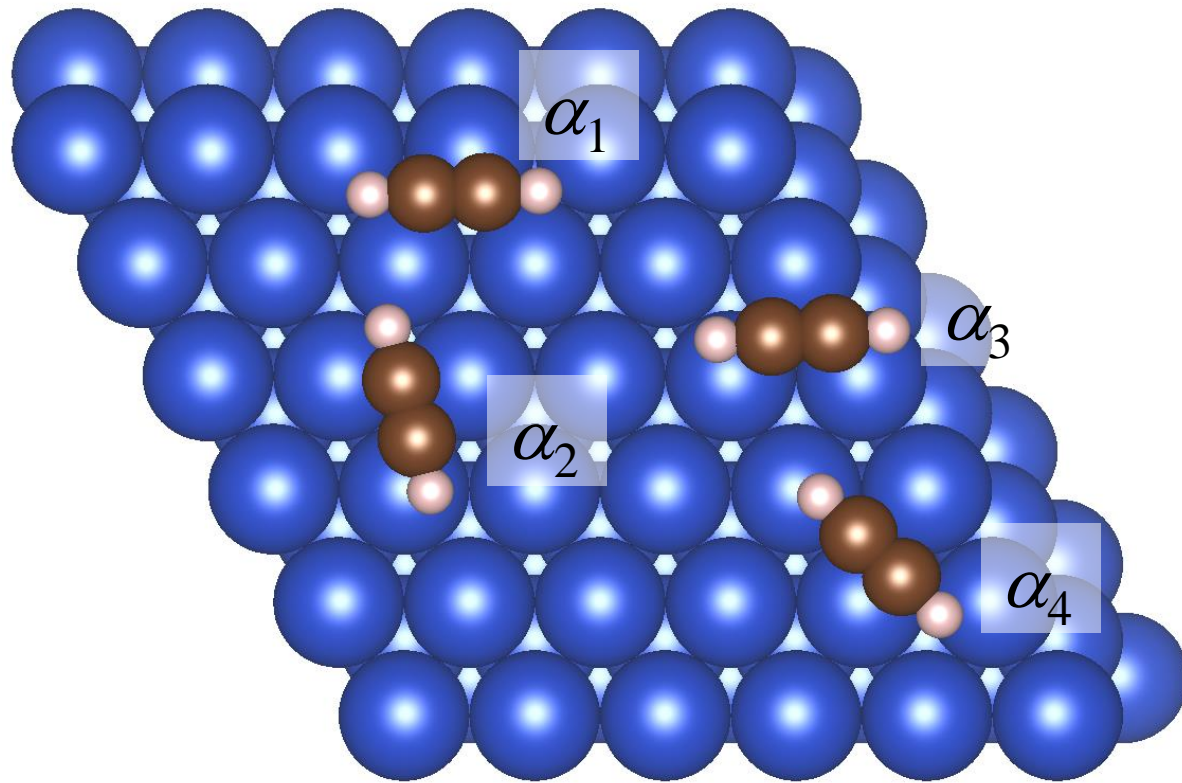
$\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_k$



色の濃淡

$\theta_{i,1}, \theta_{i,2}, \dots, \theta_{i,n(i)}$

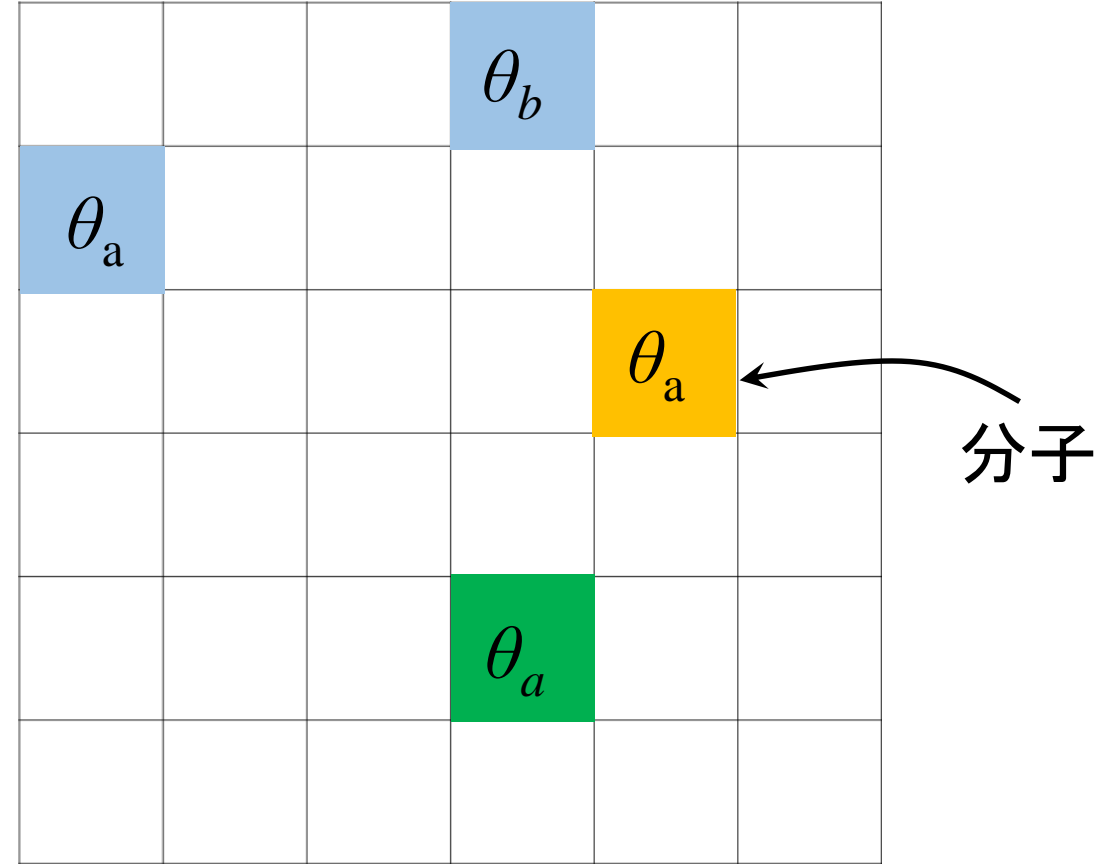
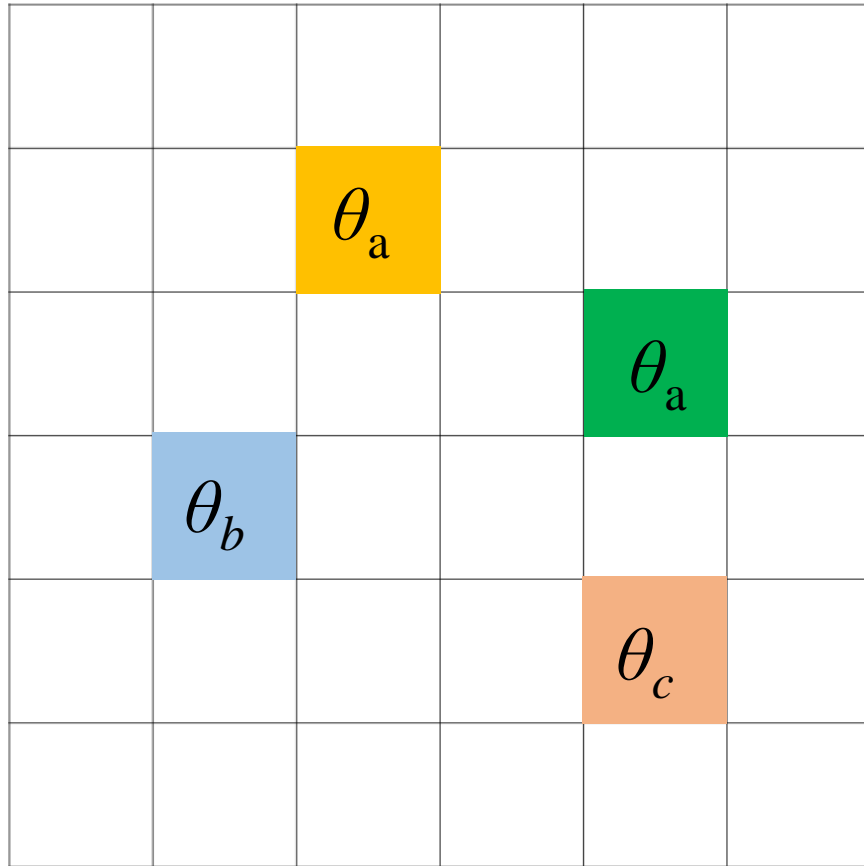
実際の状況と抽象化の対応



		θ_a	α_1		
				θ_a	α_3
	θ_b	α_2			
				θ_c	α_4



(N 個の分子の)配置は、 N 個の(網の目、色、その濃淡)の組み合わせの一つとして表される



二種の配置($N = 4$, 4個の色 ● ● ● ●, 3個の濃淡 $\theta_a, \theta_b, \theta_c$)

島の形成のための数理モデリング

1. 実際の化学反応の状況の本質を把握すること

2. 実際の化学反応の状況を抽象化すること

3. 物理の法則を適用すること

4. 実験と比較すること

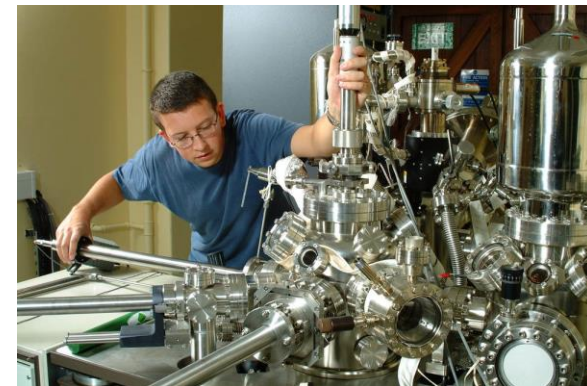
Periodic Table of the Elements

Legend:

- Alkali Metal
- Alkaline Earth
- Transition Metal
- Basic Metal
- Semimetal
- Nonmetal
- Halogen
- Noble Gas
- Lanthanide
- Actinide

© 2015 Todd Helmenstein

$$\frac{dX_t}{dt} = f(X_t) + b \frac{dW_t}{dt}$$



ある分子の配置を c としよう

ボルツマン分布

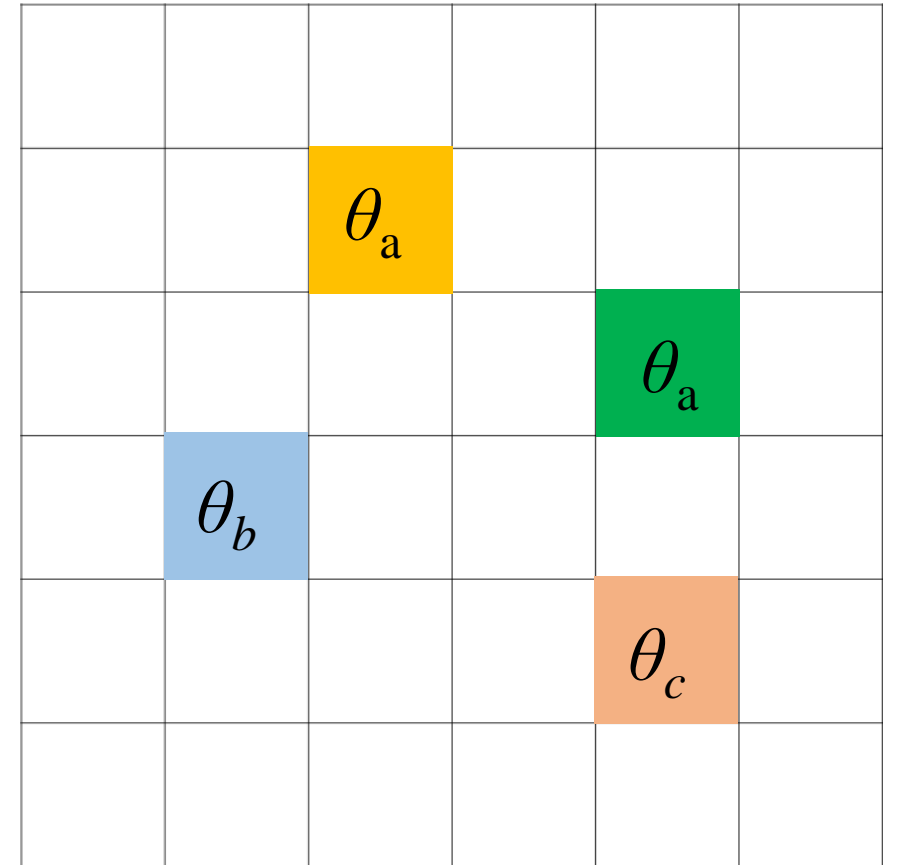
→ 配置が c となる確率

$$p(c) \propto \exp(-\varepsilon(c)/k_B T)$$

$\varepsilon(c)$ = c のエネルギー (計算できる)

k_B = ボルツマン定数 (1.38×10^{-23} J K⁻¹)

T = 温度

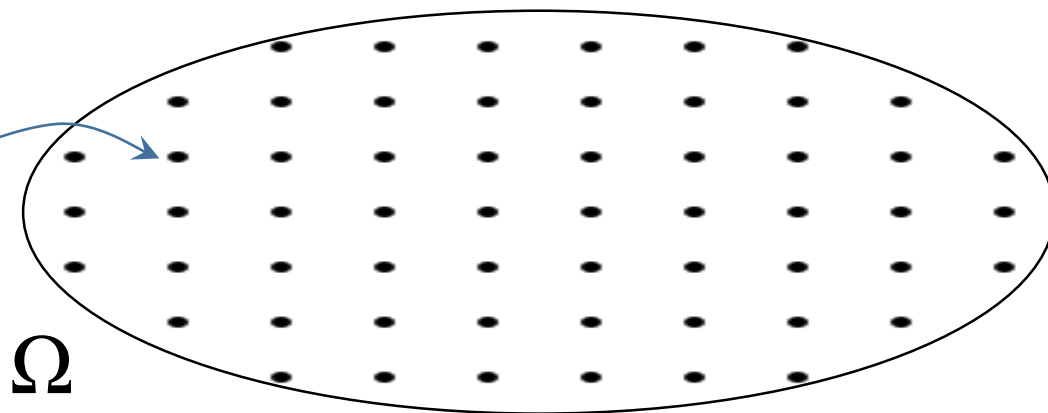
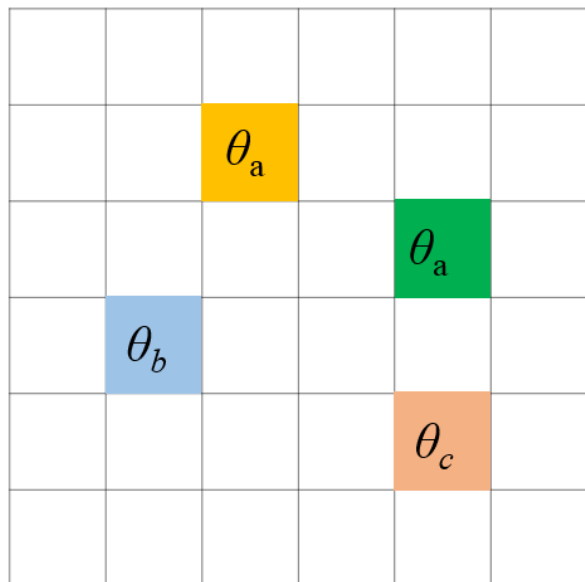


ある一つの配置 (c)

数学的なチャレンジ

起こる確率の高い配置を特定すること

起こる確率の高い配置を見つける方法



$\Omega =$ 配置空間

膨大な空間！

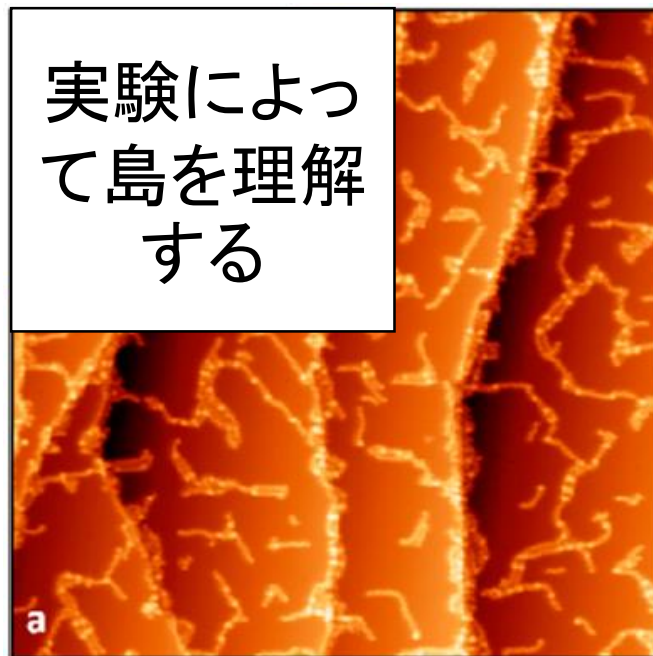
およそ 10^{23} 種類の組み合わせの配置が入っている
(1000個の網の目、10個の分子の場合)！

一種類の配置のエネルギーを計算するのが 10^{-6} 秒かかると想定しよう。

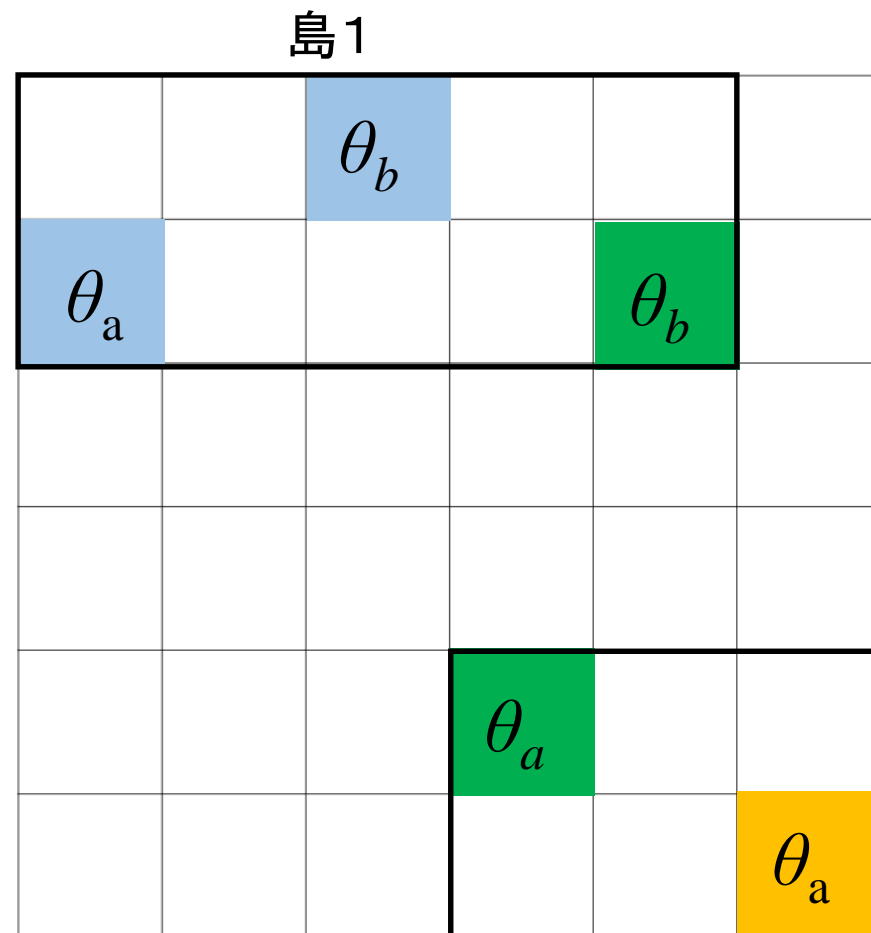
全ての配置の確率を計算するのに $10^{23} \times 10^{-6}$ 秒 $\approx 10^{10}$ 年間ぐらい掛かる！

数学的に考えれば、もっと早く計算できる方法を作れる。。。

← $1.380 \times 10^{-7} \text{m}$ →

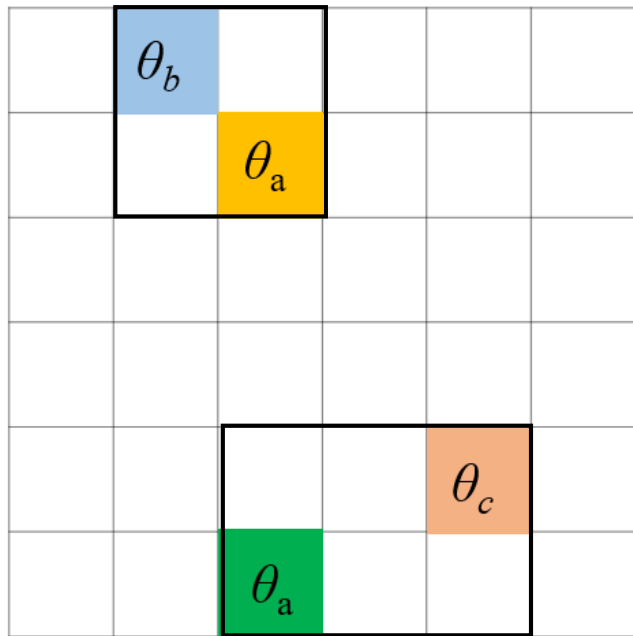


↑ $1.380 \times 10^{-7} \text{m}$ ↓

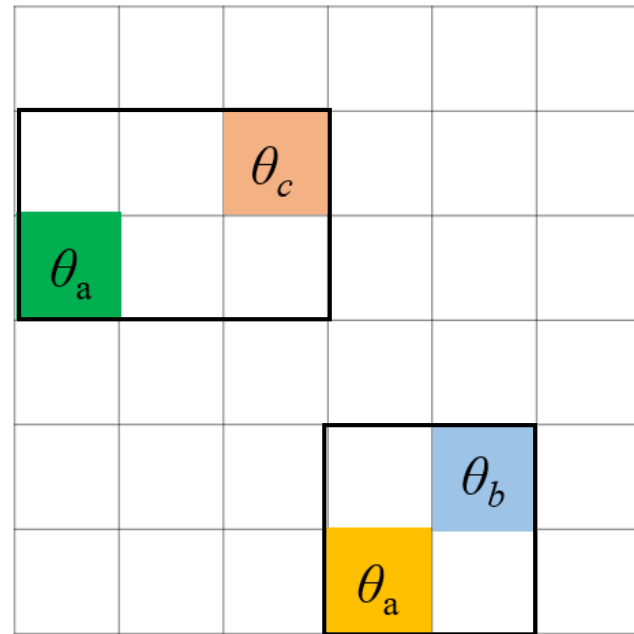
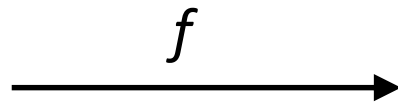


島の数学的な定義は？

互いに d マス以下しか離れていない分子の集合は島と呼ばれる。
(上の図では $d = 3$)



配置a



配置b

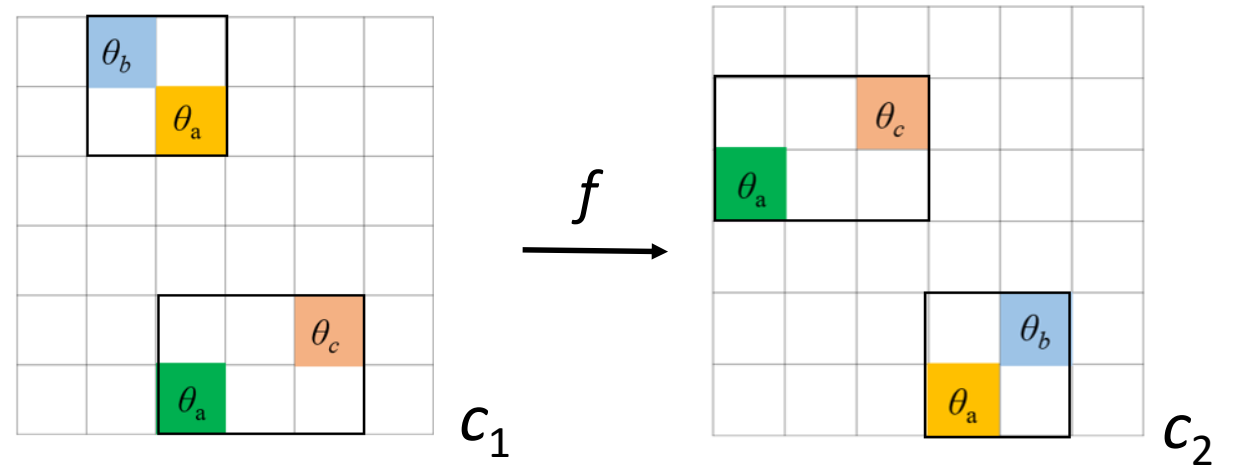
配置aは配置bと違う。一方で、次の変換を考えよう。

- i. 配置aの島を回転する
 - ii. 配置aの島を平行移動する
- } f

そうしたら配置aは配置bになる。配置aと配置bは同じ島を持つことがわかる。

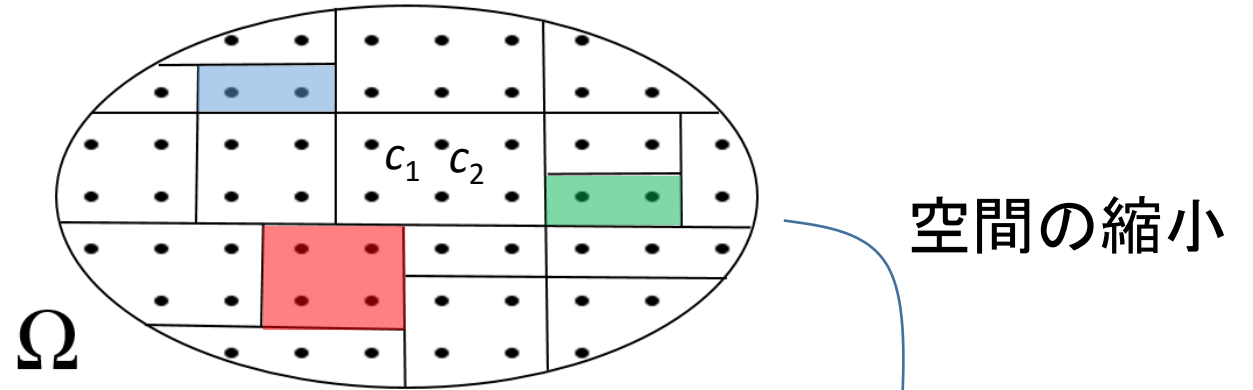
空間のサイズ縮小(グループ分け)

変換 f は isomorphism と呼ばれる



f によって同じ島を持つ配置をグループ分けすることができる

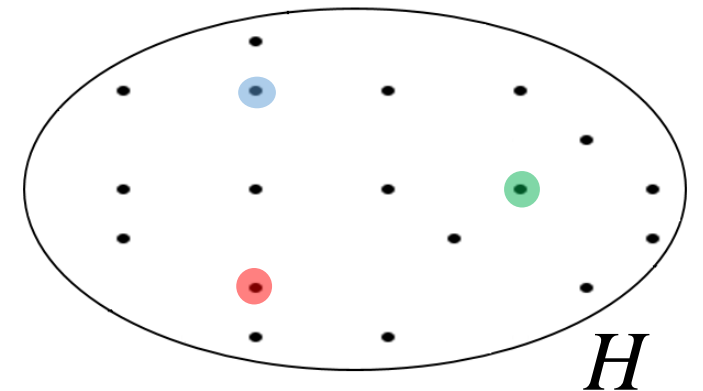
縮小された空間 H
= 同じ島を持つ配置のグループからなる集合



H はおよそ 10^5 個の同値類を持つ(10個の分子の場合)

グループそれぞれの確率を計算する時間

$$\approx 10^5 \times 10^{-6} \text{ 秒} \approx 0.1 \text{ 秒}$$



島の形成のための数理モデリング

1. 実際の化学反応の状況の本質を把握すること

2. 実際の化学反応の状況を抽象化すること

3. 物理の法則を適用すること

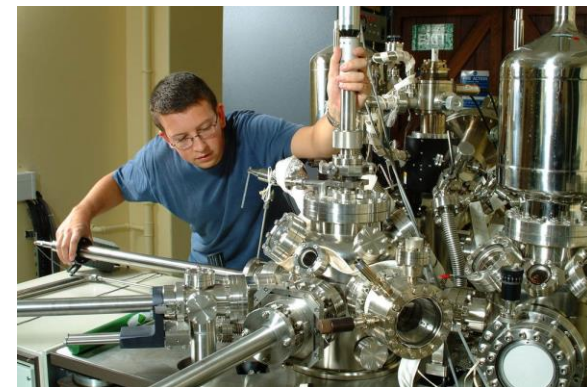
4. 実験と比較すること

Periodic Table of the Elements

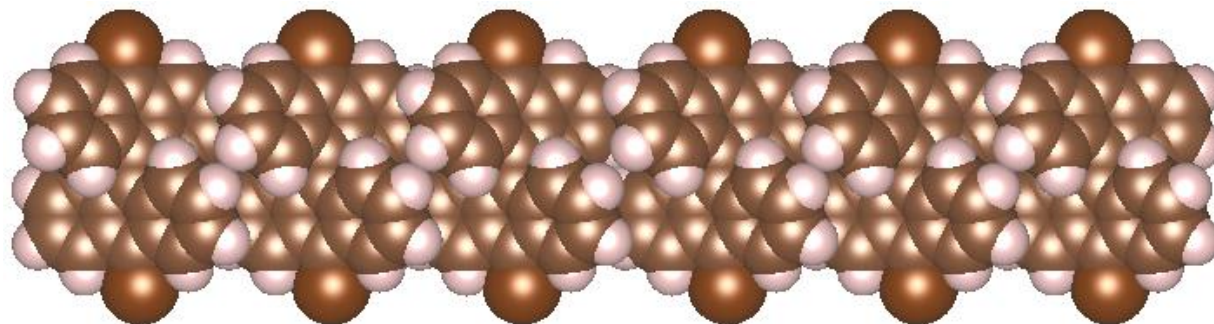
Legend:

- Alkali Metal
- Alkaline Earth
- Transition Metal
- Basic Metal
- Semimetal
- Nonmetal
- Halogen
- Noble Gas
- Lanthanide
- Actinide

$$\frac{dX_t}{dt} = f(X_t) + b \frac{dW_t}{dt}$$

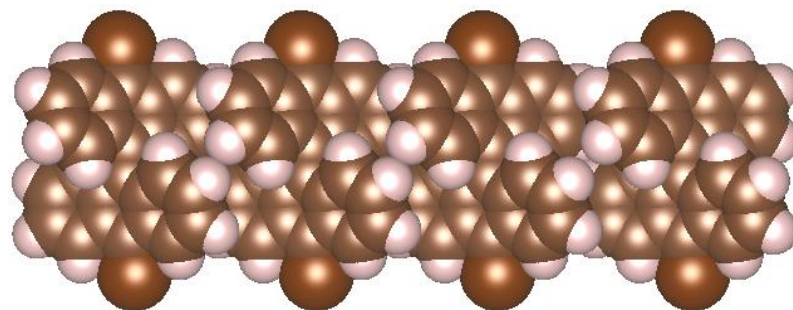


数理モデリング
(-123°C)



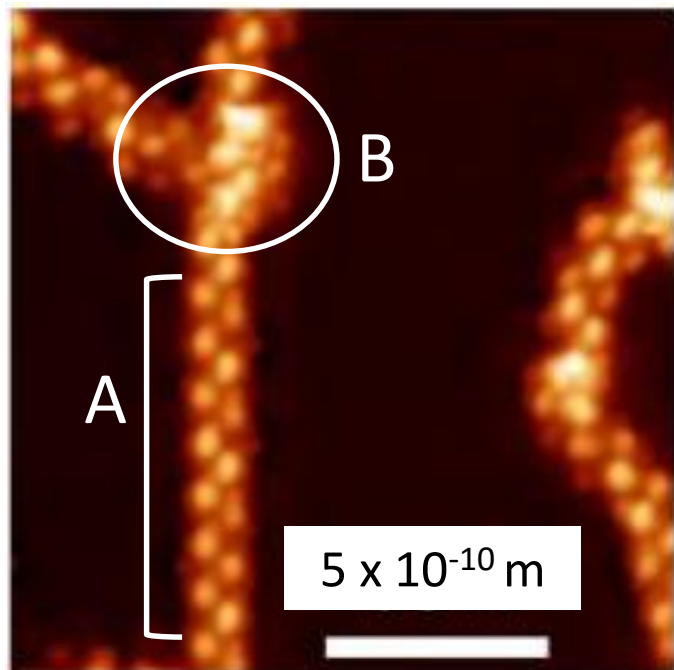
島1

+



島2

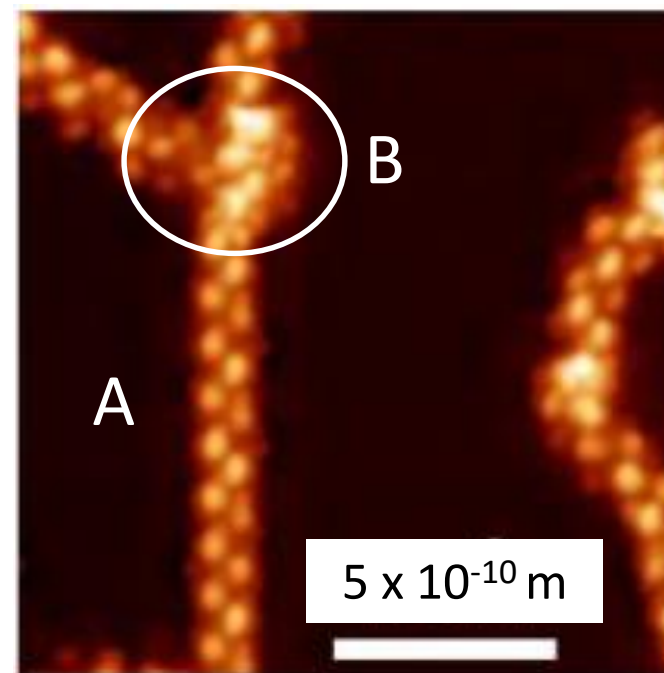
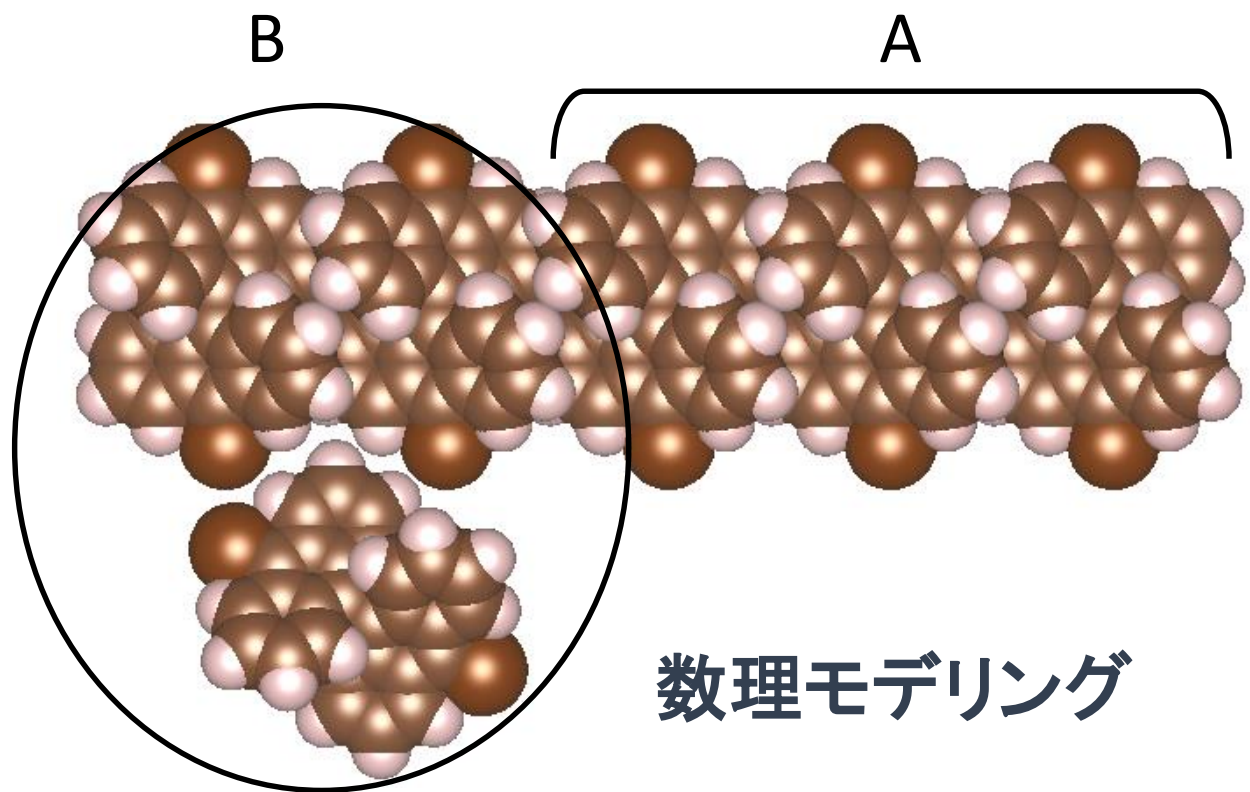
実験 (30°C)



Good: 電線のような形を持つ島が実験で観測された (A).

But: (B)の部分は予想されなかった。

より高温の設定で計算を行いましょう。。。

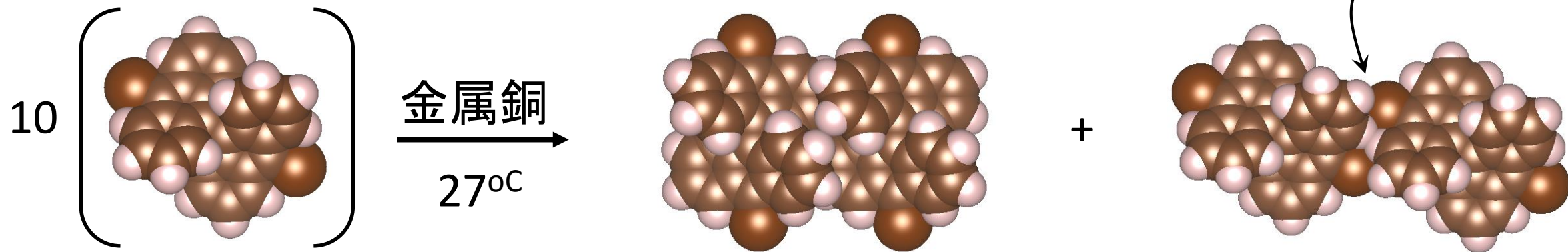


実験

より高い温度では(B)のような枝分かれを持つ島が起こる確率が高い

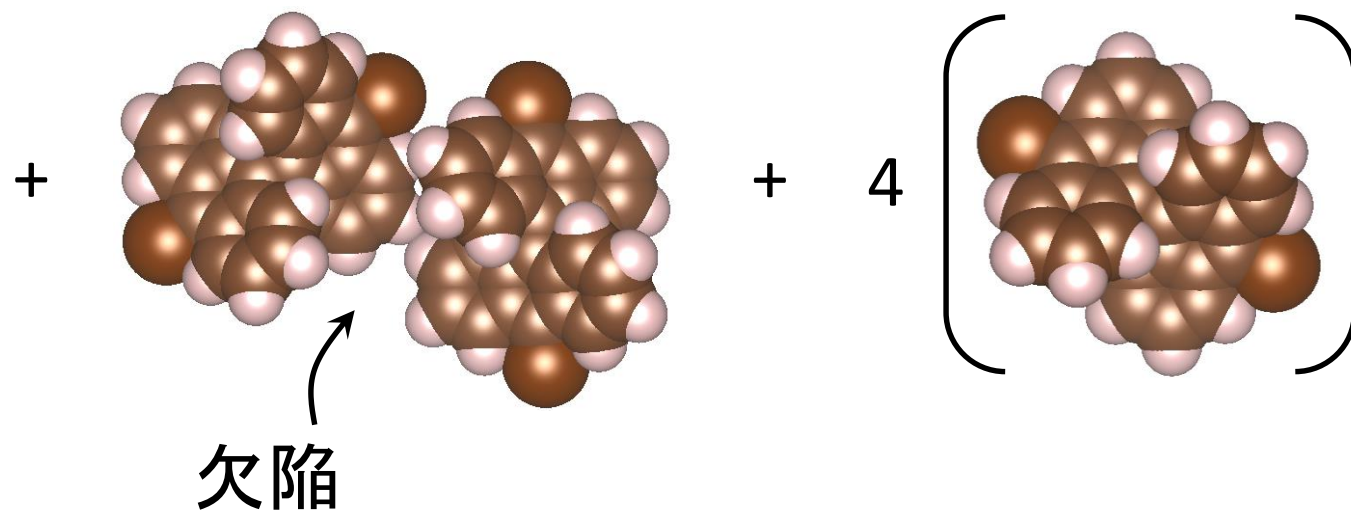
さらに高温の設定で計算したら何が起きる？

高い確率で形成すると予想される島



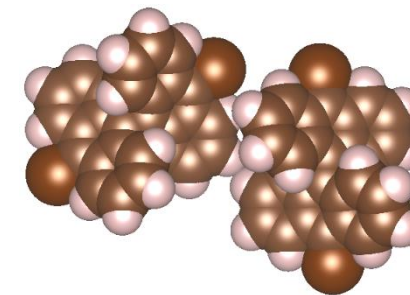
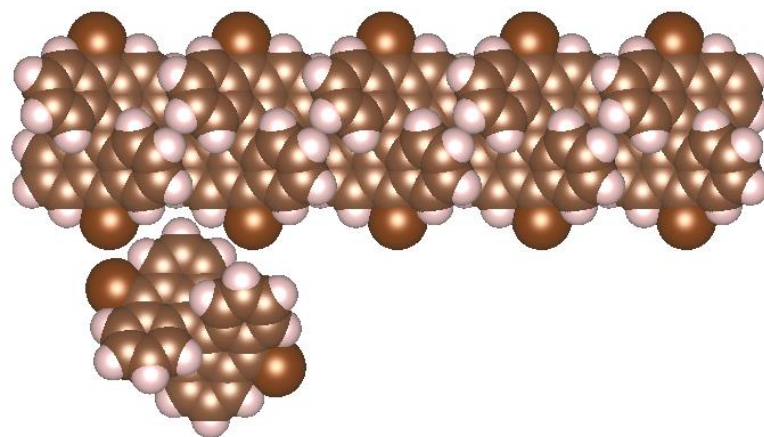
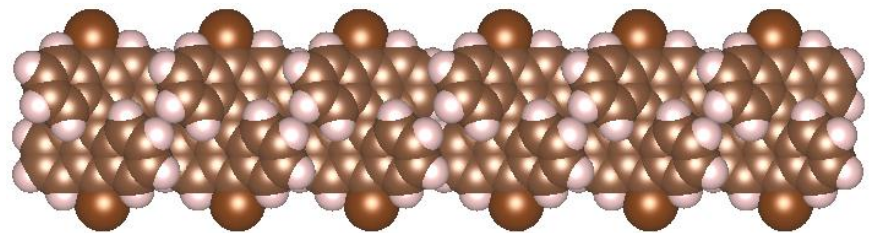
島はあまり形成されない

形成した島は短くて、
欠陥が存在する。



島の形成過程に関するルールが見えてきた。。。

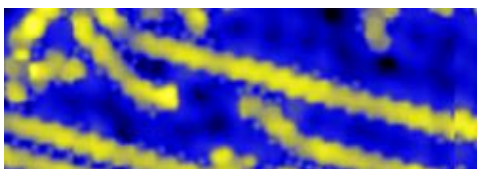
島形成・グラフェン合成に 対するルール



熱



10^{-8} m



グラフェンの電線

熱



10^{-8} m



直線状でない電線のグラフェン

熱




品質が低いグラフェン

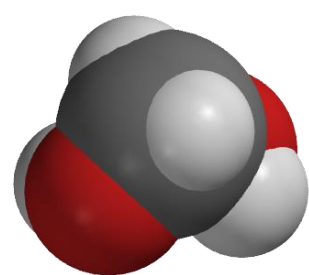
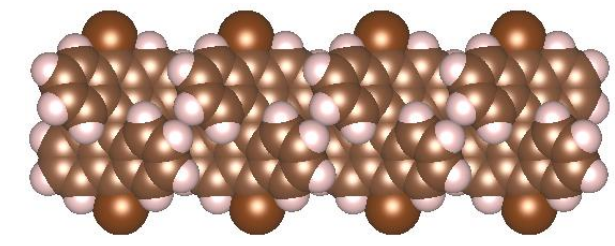
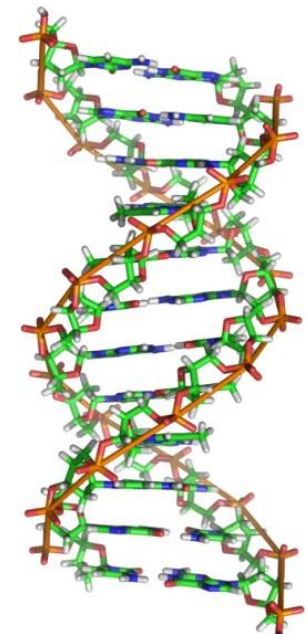
化学の進歩

1900年

原子



Hydrogen 1 H																	Helium 2 He																	
Lithium 3 Li	Boron 5 B	Carbon 6 C	Nitrogen 7 N	Oxygen 8 O	Fluorine 9 F	Neon 10 Ne																												
Sodium 11 Na	Magnesium 12 Mg	Aluminum 13 Al	Silicon 14 Si	Phosphorus 15 P	Sulfur 16 S	Chlorine 17 Cl	Argon 18 Ar																											
Potassium 19 K	Calcium 20 Ca	Scandium 21 Sc	Titanium 22 Ti	Vanadium 23 V	Chromium 24 Cr	Manganese 25 Mn	Iron 26 Fe	Cobalt 27 Co	Nickel 28 Ni	Copper 29 Cu	Zinc 30 Zn	Gallium 31 Ga	Germanium 32 Ge	Arsenic 33 As	Selenium 34 Se	Bromine 35 Br	Krypton 36 Kr																	
Rubidium 37 Rb	Sr 38	Yttrium 39 Y	Zirconium 40 Zr	Niobium 41 Nb	Molybdenum 42 Mo	Technetium 43 Tc	Ruthenium 44 Ru	Rhodium 45 Rh	Palladium 46 Pd	Silver 47 Ag	Cadmium 48 Cd	Indium 49 In	Tin 50 Sn	Antimony 51 Sb	Tellurium 52 Te	Iodine 53 I	Xenon 54 Xe																	
Cesium 55 Cs	Ba 56	* 57-70	Lanthanum 57 La	Hafnium 72 Hf	Tantalum 73 Ta	Tungsten 74 W	Rhenium 75 Re	Osmium 76 Os	Iridium 77 Ir	Platinum 78 Pt	Aurum 79 Au	Mercury 80 Hg	Thallium 81 Tl	Lead 82 Pb	Bismuth 83 Bi	Po 84	Astatine 85 At	Rn 86																
Francium 87 Fr	Ra 88	** 89-102	Actinide series 89-102	Rutherfordium 104 Rf	Dubnium 105 Db	Seaborgium 106 Sg	Berkelium 107 Bk	Hassium 108 Hs	Mt 109	Ununium 110 Uun	Unnilium 111 Uun	Unbibium 112 Uub	Uuq 114																					
																		<small>* Lanthanide series</small> <small>** Actinide series</small>																



原子や単一分子に関するルールはよく理解されている

分子と分子の相互作用に関するルールはあまり理解されていない

科学の発展のためには数理モデリングが不可欠です。

次世代の科学に貢献できるか。高校と**大学**で数学と科学を勉強してください。

一生懸命に勉強し！

慎重かつ批判的に勉強し！

情熱が高くて勉強しましょう！

謝辞

顕微鏡データの提供

ハン・パトリック 助教（東北大学、カリフォルニア大学 ロサンゼルス校）

一杉太郎 教授（東京工業大学）

研究費助成

国立研究開発法人 科学技術振興機構（さきがけ）