

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名: 超精密予測と巨大分子設計を実現する革新的量子化学と計算科学基盤技術の構築

2. 研究代表者: 中辻 博 (特定非営利活動法人量子化学研究協会 理事長・研究所長)

3. 研究概要

物質科学の世界は、Schrödinger 方程式によって代表される量子的科学原理によって支配されている。従って、これらの基礎方程式を正確に解く方法の開発は、正確な予言を可能にするため、極めて重要である。我々は既に Schrödinger 方程式を正確に解く方法を発表してきたが、本研究では、その方法論・アルゴリズムのさらなる開発を行い、一般の原子・分子系の極めて精密な Schrödinger 解を得る方法を開発する。これにより、化学研究に予言的な理論の新風を吹き込み、その飛躍的な発展を計りたい。また、同時に、我々が作り上げた信頼度の高い基底・励起状態理論である SAC/SAC-CI 法の計算精度と効率を高めるとともに、その応用分野を巨大系にまで広め、SAC/SAC-CI 科学の拡大を進める。特にこの方法を結晶や蛋白質・DNA などに応用し、その光・電子過程を研究する。これによって、現代物質科学の興味ある現象を、小分子から巨大分子系までシームレスに精度良く同じ方法論で研究することが可能になる。

本研究課題では、上記の基本構想の下に、次の三つの研究項目を実施した。

1. 正確な予言学としての量子化学の確立
2. SAC/SAC-CI 科学の拡大
3. 巨大分子系の量子化学

正確な予言学としての量子化学の確立では、一般の原子・分子系への適用を可能とする Local Schrödinger Equation(LSE)法に基礎を置き、6 電子系までの原子・分子系の非常に精密な解や、分子の結合解離ポテンシャル曲線を正確に求めた。さらにこの方法を、有機化学などで普通に見られる分子系に応用することが出来るよう、新しい計算アルゴリズムを開発した。From Atom To Molecule (FATM)法、ローカルサンプリング法、高速反対称化アルゴリズムがそれである。これにより、計算の実行が従来法に比べて極めて容易になることが分かっており、その完成が急がれる。

SAC/SAC-CI 科学の拡大では、まずダイレクトアルゴリズム SAC-CI SD 法のプログラム開発を完了し、高効率化されていることを確認した。次にこの方法を SAC-CI general-R 法に拡張するための基礎研究を行った。また、SAC-CI 理論に基づく磁気円二色性スペクトルの計算プログラムの開発も行った。生体分子の研究に重要な円二色性(CD)スペクトルの理論では、DNA の螺旋構造とCDスペクトルの関連を明らかにし、DNA 螺旋構造を理論と CD スペクトルから予測する方法への道筋をつけた。また、ホモキラリティの起源の解析のためアミノ酸の短波長領域吸収について系統的な帰属を行った。また、内殻電子励起・イオン化スペクトルの高精度研究を行い、スペクトルの振動構造を解明した。さらに、有機 EL 分子の発光過程や視物質であるレチナール蛋白質における励起エネルギーの制御機構を明らかにした。

巨大分子系の量子化学では、巨大なシステムを効率良く、高精度に計算できる SAC/SAC-CI プログラムの開発や、その並列計算法の開発を行っている。また、光誘起相転移のメカニズムを解明するため、TTF-TCNE をモデル物質として巨大系の SAC/SAC-CI 計算を行い、その初期過程がドミノ的ではなく協奏的に起こる可能性を示唆する結果を得た。

4. 中間評価結果

4-1. 研究の進捗状況及び研究成果の現状

本研究は、①Schrödinger 方程式の厳密解を求めること、②SAC/SAC-CI により、その適用範囲を拡大し、巨大分子系の量子化学へ応用することにある。

当初の研究計画から見た進捗状況や達成度等に関しては、いずれのテーマもチャレンジングなテーマであり、独創性の高い優れた研究である。研究目標が予定通り達成できれば、画期的な成果が得られると考える。中間評価段階では、一定の成果が得られており、研究の進捗状況は優秀と判断される。今後が大いに期待できる。代表者がもともと研究してきた基本的な手法を、ペタコンにまで適用できるようにしていることは、評価できる。本研究で代表者が最も力を入れている課題「正確な予言学としての量子化学の確立」について評価を述べる。評価する上で、二つの視点が必要である。ひとつは純粋に基礎学術に対する貢献という側面であり、他は「マルチスケール・マルチフィジックス」という本領域の目的に合うかどうかという視点である。そこで、第一の視点で見た場合、本研究はおそらく本領域の中でも傑出した内容をもっていると言えよう。なぜなら、原子、分子レベルの法則を支配する最も基本的な方程式である Schrödinger 方程式の解法に関する全く新しい方法論を提案しているからである。それは従来の分子軌道法に特有の基底関数による展開を一切用いず、ある漸化式に基づく一種の「再規格化」あるいは「繰り込み」によって、限り無く厳密に近い解を求める方法であり、実際、研究代表者は原子あるいは小さな分子で、まさに限り無く厳密に近い解を得ることに成功している。一方、「マルチスケール・マルチフィジックス」という視点からは、この方法が例えば水中の蛋白質の問題に適用できるようになるかどうかは、現在のところ全く見通しが立っていないように思われる。

新たな方向性や方針変更等、当初計画では想定されていなかった新たな展開が生じたかに関しては、正確な予言学としての量子化学の研究項目に関して、FATM 法およびローカルサンプリング法が、化学の原点に立ち返った深い考察により提案され、確実に実装されており、望ましい展開となっている。

成果の科学的・技術的インパクト、国内外からの類似研究と比較したレベルや重要度という点に関しては、低分子の超高精度シミュレーションの実現は、高く評価できる。本研究の目的は、物質量子科学の基礎分野である量子化学・計算化学を真に予言的・革新的な学問として再構築するということであり、これまでの量子化学理論とは全く異なるアイデアから成る極めて独創的な内容である。本研究課題が達成できれば、一般原子・分子系の Schrödinger 方程式の精密解が得られるため、これまでの量子化学計算のような近似の妥当性の議論等は一切必要なく、まさに予言的な解を与えそのインパクトは極めて大きいと予想できる。国際誌への投稿、国際学会での発表、受賞の状況から高いレベルにあると推測する。

研究実施体制については、元部下も巻き込んで緊密な連携を行っており、研究代表者があくまで中心の強力なリーダーシップが感じられ、問題はない。

研究費の執行については、研究代表者がほぼ総ての研究費を使っていると言っても過言ではないが、そのやり方で成果が出せるのであれば差し支えないと思われる。

4-2. 今後の研究に向けて

今後の研究の進め方については、Schrödinger 方程式を正確に解くことによる予測量子化学の展開を主張する高質な研究であり、研究代表者が強力に主導している様子が伺え、望ましい。今までに多くの科学的な成果は得られているが、現在の計算機環境で、今後この研究で得られた成果を、応用分野にどのように還元していくか、その道筋を明らかにしてほしい。並列計算機への実装については、情報系のポストドクの採用を含め、専門家の導入に力を入れる必要があると感じられる。報告書に記載されている数十までの並列化効率では、まったく不十分である。次世代のスーパーコンピュータの計算能力を十分発揮させ、系の拡大を図るためには、数十万以上の並列度は必須であり、今後更なる改良に努める必要がある。その上でペタフロップスコンピュータによる歴史に残る記念碑的計算に期待したい。極めてすぐれた成果をより迅速に広めるよう、海外の強力集

団とのより強固な関係構築を期待したい。マルチスケール視点での研究を行っている部分が一層広がることを期待したい。

今後見込まれる成果、戦略目標に向けての貢献、成果の社会的なインパクトの見通しについては、小規模系においては世界最高精度を実現し、相対論的効果、QED 効果を見出しており、この点でも今後の発展が期待される。大規模系においても SAC-CI 法が大規模に適用され、様々な系に適用され、着実に成果を挙げている。精度の検証が主になっている部分があるので、予言学としての本来のインパクトある成果に期待したい。スーパーコンピューティングなど情報系の専門家が加われば戦略目標への貢献も大いに期待できる。基礎研究を深めることで画期的アプリケーションに繋がることを期待したい。また、若手研究者の手本となるような確固たる学問的信念に基づく成果を期待したい。

4-3. 総合的評価

本研究は、①Schrödinger 方程式の厳密解を求めること、②SAC/SAC-CI により、その適用範囲を拡大し、巨大分子系の量子化学へ応用することにある。いずれもチャレンジングなテーマであり、独創性の高い非常に優れた研究である。研究目標が予定通り達成できれば、画期的な成果が得られると考えられる。中間評価段階では、一定の成果が得られており、今後が大いに期待できる。

特記すべき成果としては、原子、分子レベルの法則を支配する最も基本的な方程式である Schrödinger 方程式の解法に関する全く新しい方法論を提案していることが挙げられる。それは従来の分子軌道法に特有の基底関数による展開を一切用いず、ある漸化式に基づく一種の「再規格化」あるいは「繰り込み」によって、限り無く厳密に近い解を求める方法であり、実際、研究代表者は原子あるいは小さな分子で、まさに限りなく厳密に近い解を得ることに成功している。純粹に基礎学術に対する貢献という側面で見した場合、この研究はおそらく本領域の中でも傑出した内容をもっていると言えよう。

このプロジェクトの残された期間を、彼らの解法の重要性を個々の事象に対して積み重ね的に示していくことに加えて、何か一つの量子化学における計算科学の大変革をもたらすような課題へ挑戦してほしい。