

結晶構造自動予測を目指して

(和歌山大学システム工学部) 山門 英雄

E-mail: yamakado@sys.wakayama-u.ac.jp

原子や分子が多数集まった際、固体としてどのような結晶構造(同素体や結晶多形)をとりうるかということは、原理的には量子力学的に決まるはずのことであるので、予測可能だと考えられる。しかし、今のところ現実には、

1. 化学結合が組み代わる可能性があること
2. 分子間相互作用ポテンシャルの正確・高速な見積りの難しさ
3. 原子や分子の相対配置の違いに基づく多数のローカルミニマムが存在しうること

のため、どのような原子、分子でも一般的に結晶構造を予測することは未解決問題となっている。

そこで筆者らは、2004年以來大野、前田らにより開発されてきている超球面探索法/GRRM法を結晶構造予測に適用し、この問題を解決することを目指してきている。上記1.の問題については、炭素結晶やBN結晶について、化学結合が切り替わった種々の多形を予測できることを確認しており、GRRM法により、本質的に問題解決できていると考えている。2.の問題については、*ab initio*法にしても、経験的ポテンシャルにしても、今後の計算機ハードウェアの進歩(マルチコア化、クロックの向上等)と相まって、計算精度、計算速度ともに進歩していくことが期待される。そして上記3.の問題については、多数のありうる分子間配置を、GRRMの探索で芋蔓式に追うことが原理的には可能であることをこれまでに、計算の速いモデルポテンシャル等に適用して確認してきており、あと残る問題としては、ある程度大きな分子(例えばベンゼン分子)が単位格子に複数存在する場合に、自由度(探索する変数の数)が多くなり、GRRMでの計算時間が長くなっていくことを、どのように抑えたら良いかという問題に現在取り組んでいる。

この問題への解決策としては、これまでに分子集合体(例えばホルムアルデヒド2量体、3量体など)について、分子形状を一時的に固定し自由度を下げる方法や、分子変形に対してペナルティ関数を課す方法、GRRMでの探索時に種々の制限(例えば化学結合の組換え、探索する隣接安定点数への制限)をかける方法などを検討してきており、近い将来、この問題は解決できると考えている。