

## 原子・分子のシュレーディンガー解データベースの構築： Exact chemical informaticsの開発に向けて

<sup>1</sup>量子化学研究協会研究所

○中嶋 浩之<sup>1</sup>, 中辻 博<sup>1</sup>

### Constricting exact Schrödinger database of atoms and molecules : Toward exact chemical informatics

○Hiroyuki Nakashima<sup>1</sup>, Hiroshi Nakatsuji<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Quantum Chemistry Research Institute, Kyoto, Japan

**【Abstract】** All of chemical phenomena are governed by a quantum mechanical principle represented by the Schrödinger equations. The free complement (FC) theory was proposed for exactly solving the Schrödinger equations and has been applied to various atoms and molecules. In the present study, based on these exact and reliable solutions, we construct an exact Schrödinger database for various molecules and develop a predictive “exact chemical informatics” useful for doing general chemistry and molecular design. As a component of the database, exact one- and two-electron density matrices are formulated to evaluate expectation values of physical observables. Our exact wave function is constructed based on the chemical formula and, using informatics techniques, we develop an AI technique for automatic design of the initial wave function for the FC calculations and to analyze the exact wave functions to extract chemical laws therefrom. The present exact database, therefore, should be valuable for molecular design not only in their exactness but also for its understandable nature.

**【序】** 化学を基礎とするあらゆる物質科学現象は、シュレーディンガー方程式をはじめとする量子力学原理に支配されており、これを正確に解き、目的に応じて速やかに結果を引き出すことのできる基盤技術の構築は、物性予測と物質設計の最も正確な近道である。昨今、計算機能力の飛躍的向上により、様々な近似レベルで大量のデータが短時間で得られるようになったが、ことに意外性に満ちた量子力学原理に従う物質科学研究においては、不確実で経験的な大量情報よりも、1つ1つが決定論的性質を持つ信頼のおける「精鋭データの集合」こそ、有用な予言能を持つ。

**【目的】** 私たちの研究所では、「シュレーディンガー方程式を正確に解く理論」として自由完員関数理論を開発し、これまで様々な原子・分子に応用してきた。本研究では、これらの正確なシュレーディンガー解の蓄積とともにそれらのデータベースを作成し、そこから実際の化学研究に有用な情報を引き出し、それらを一体化し有機的に連携して活用するための Chemical Informatics Storage を作成し、これを元に正確な予言的情報と共に、その意味や知識を引き出すインフォマティクス技術の開発を目指す。

**【方法】** 本研究の具体的な開発内容を以下に示す。

1. 正確な波動関数の密度行列と物理量・プロパティの計算: 化学におけるオペレータは1電子, 2電子演算子に限られるため、波動関数から正確な1次, 2次密度行列

$$\Gamma(1'|1) = \frac{2}{N-1} \int \Gamma(1', 2|1, 2) \cdot d\tau_2$$

$$\Gamma(1', 2'|1, 2) = {}_N C_2 \int \psi^*(1', 2', 3, \dots, N) \psi(1, 2, 3, \dots, N) \cdot d\tau_3 \cdots d\tau_N$$
(1)

を作成し、それ自身をデータベース化することで、ユーザーの求めに応じて必要な物

理量や期待値を計算することができる。

**2. 化学的理解に繋がる情報のデータベース化:** 目的に応じて、低次の近似計算や従来の量子化学計算も行い、ユーザーが直観的に系の本質を理解することのできる定量的・定性的解釈もデータベース化し、Exact 解の理解に繋げる。例えば、電子励起状態の研究では、SAC-CI 法の波動関数との比較を自動化して理解の一助とする。また、基底・励起状態間の差電子密度分布の解析も行う。

**3. Exact 解データベースの体系化:** データベースの進化と共に、個々の分子情報だけでなく、目的に応じて、関連する分子同士の物理的・化学的性質をクラスタリングし情報を体系化する。その結果、分子同士の比較によって見えてくる特徴を解析することができ、その法則を分子設計に活用することができる。

**4. Chemical Formula と直結する波動関数の自動設計と、波動関数を理解し「化学的法則及び解釈」を見つける AI 技術の開発:** 私たちの Exact 波動関数は、化学構造式・反応式(Chemical Formula)を反映する構造を持ち、波動関数自身が有用な化学情報を表現している。そのため、化学的視点: Chemical Formula と量子力学的視点: Exact 波動関数は、互いに対応する構造を持っている。本研究では、データベースの進化と共に、インフォマティクス技術で経験を積み、これらを互いに結び付ける AI 技術を開発したい(図 1)。現代のマテリアルズインフォマティクスで、波動関数自身を記述子にする方法はほとんどなく、我々のオリジナリティの 1 つである。

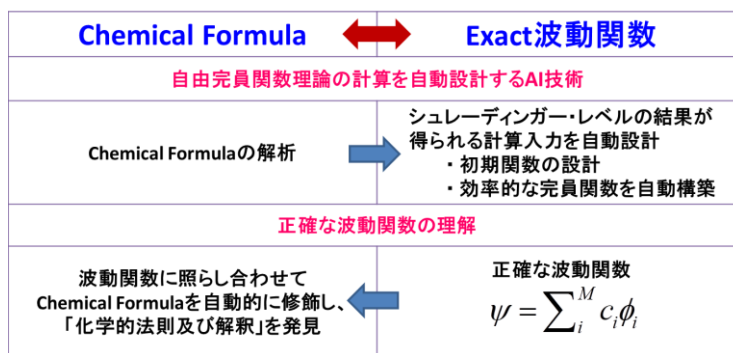


図 1. Chemical Formula と Exact 波動関数の関係とそれを結びつける AI 技術

**5. Exact Chemical Informatics による分子設計:** 上述の Exact 解データベースに基づく分子設計の手順を以下に述べる。まず、① 物性値と共に波動関数を記述子に、目的の化学的性質に合う波動関数の構造とそれを持つ分子の候補をスクリーニングする。② ①の標的分子に対し、自由完員関数理論の計算を自動設計しその正確な波動関数を計算する。③ 物理量・プロパティを計算し目的に合う分子が設計できたかどうかを判断する。成功した場合は④へ。失敗した場合は、波動関数レベルでその原因を解析し、新たな情報(なぜ失敗したか)と共に①に戻り、候補を選択し直す。ここで、重要な点は、必ず②のステップを踏み、候補物質のシュレーディンガー方程式の正確な波動関数を計算し、「経験」に基づくインフォマティクスにすべて依存するのではなく、本来の量子力学原理に基づく「非経験的」・「第一原理」からアウトプットを創出し、信頼性を高めることである。

1~5 を実現するため、特に密度行列や波動関数データの理解・体系化・検索ができるように、独自のインフォマティクスに関するプログラムを開発していくことが必要である。これらの Exact Chemical Informatics のプログラムで用いる色々な言語・アルゴリズムを学習し、それをプログラムの改良に用いるなどの、自己発展的な流れをチェックする機構も組み込んで作成していきたい。

#### 【参考文献】

[1] 中辻, 本討論会, 神戸, 2016. 中辻, 中嶋, 黒川, 本討論会, 仙台, 2017.