

坂田 逸志

東京大学大学院理学系研究科
大学院生(博士課程)

スパース動的モード分解による効率的な触媒設計手法の開発

§ 1. 研究成果の概要

今年度は動的モード分解(DMD)を用いて、分子運動の記述子の抽出法の確立を目指して、分子動力学(MD)シミュレーションの時系列データを行った。まずは、DMDによって抽出される基底が分子運動の基準運動との対応関係を明らかにするために、反応しない系を扱った。具体的にはエチレン分子を対象にした(図1)。エチレン分子は分子の特徴となる基準運動がよく知られている。動的モード分解をエチレン分子のMDデータに適用したところ、基準モードとして想定されるモード数より多くのモードが抽出された。DMDがデータを振動でフィッティングするため過学習しやすいことと由来しており、特に高振動数成分に残った大きな成分が抽出に悪影響を与えていた。この成分は基準運動モードに振動数が近く分類が難しい。この問題を解決するため、分子運動解析の先行研究で用いられていた速度自己相関関数のフーリエスペクトルのピーク位置との比較を行い、ピーク位置に対応するモードを選んだ。ピーク位置は基準運動に過不足なく対応していた。選んだモードをDMDによって再構成したところ、その運動の対称性が基準運動と一致していることが確認された。これまでの速度相関関数を用いた解析では、分子の振動数がわかっていてもその運動の様子は不明であったが、今回の方法によって基準運動を過不足なく抽出しその構造までも抽出可能となった。

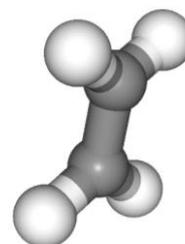


図 1 エチレン分子