

Color Gallery

ヘッドライン

ビッグデータ・人工知能を利用する新しい化学

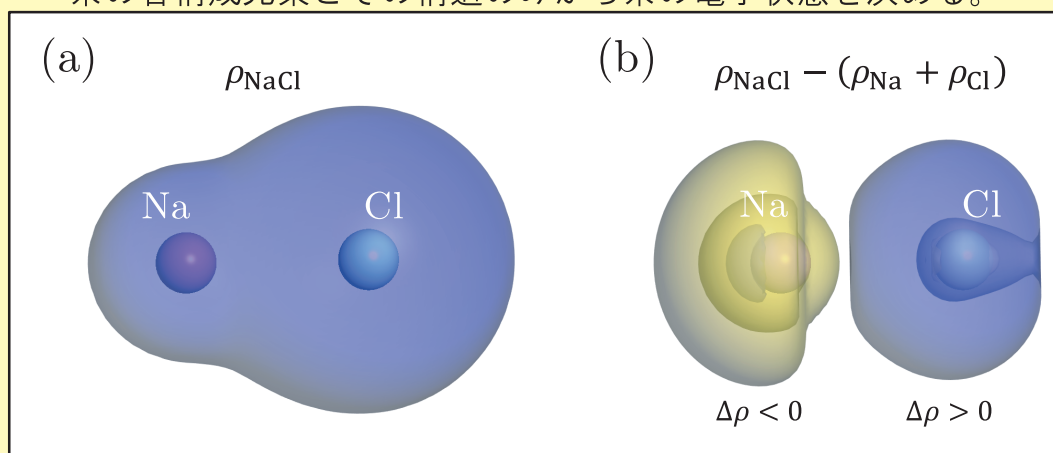
第一原理計算とデータ科学的アプローチ

ダム ヒョウ チ, 水上 卓

第一原理計算

P62

系の各構成元素とその構造のみから系の電子状態を決める。



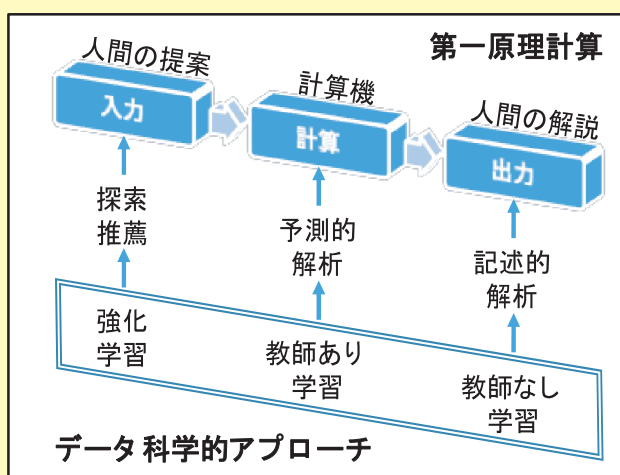
(a) NaCl全体の電子分布

(b) 中性原子の電子分布との差。それぞれ3s 軌道, 3p 軌道の寄与によって確率分布に構造が生じている。

図1 第一原理計算による NaCl の電子確率分布

データ科学的アプローチ

P63



データ科学の発達は、より効率的・システマティックな知識へのアプローチを可能にし、それを第一原理計算に活用することによって新しい方法が提案されている。

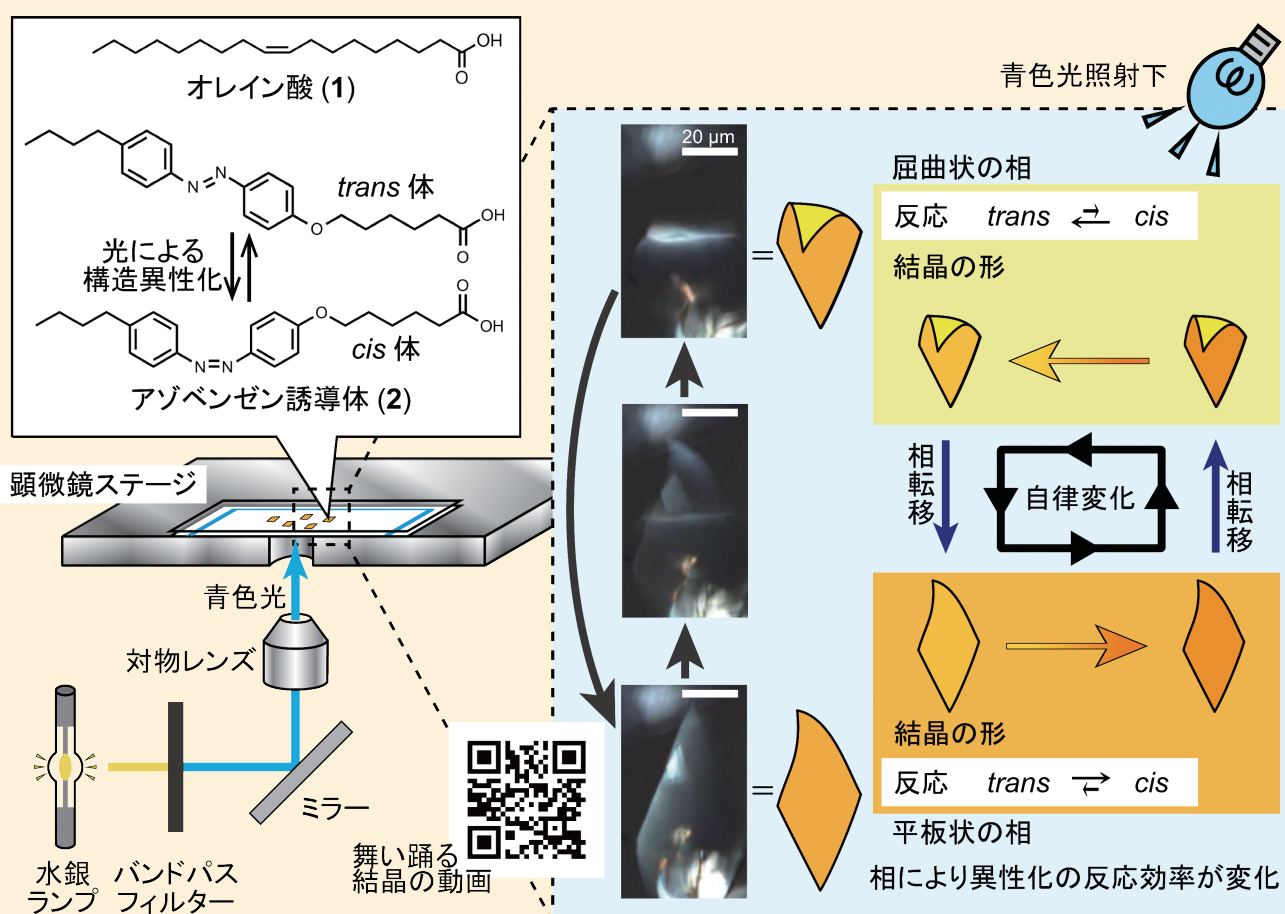
図2 データ科学的アプローチと第一原理計算との融合

Color Gallery

レーター

光を浴びて舞い踊る結晶

小原一馬, 景山義之



(P74, ストーリー図より)

…オレイン酸(1)とアゾベンゼン誘導体(2)が混合した薄い結晶が、青色の光を受けて、まるで生き物のようにパタパタと振動する…
これは、アゾベンゼンが青色光照射下で、*trans-cis* 異性化と *cis-trans* 異性化を繰り返すことに由来している。(P74)