

制約充足問題と分子コンピューティングアーキテクチャ： デンドリマー分子の光励起時空間ダイナミクス

Molecular-Based Computing Architecture for Constraint Satisfaction Problem: Photoexcited Spatiotemporal Dynamics in Dendrimer Molecule

分子研¹, 情通機構², 東工大³, 物材機構⁴

○信定 克幸¹, 野田 真史¹, 成瀬 誠², 青野 真士³, 金 成主⁴

IMS¹, NICT², Tokyo Tech.³, NIMS⁴, ○K. Nobusada¹, M. Noda¹, M. Naruse², M. Aono³, S.-J. Kim⁴

E-mail: nobusada@ims.ac.jp

複数の制約条件の下でシステムの厳密解もしくは最適解を求めるような制約充足問題は、あらゆる所で散見される普遍的な問題であるが、解くべきシステムの要素や変数の数が僅か増えただけで、現状の世界最速コンピュータを使ってもその解を見出す事は事実上不可能になってしまう。これはノイマン型方式に基づく通常のコンピュータアーキテクチャが制約充足問題の解探索には不向きであるためである。このような状況を踏まえ、通常の電子計算機とは異なるアーキテクチャを持つ DNA コンピュータ、分子コンピュータ、ニューロコンピュータ等の開発が進められている。青野らは真性粘菌アメーバの嫌光性に基づく光回避応答を利用した粘菌ニューロコンピュータアーキテクチャを提案し、NOR 演算が可能であることを示した[1]。成瀬らは近接場相互作用で結びつく量子ドット系において、励起光と制御光を用いることで同様のアーキテクチャを持つ非ノイマン型計算システムを構築できることを提案している[2]。今回我々は同様のコンピュータアーキテクチャが実在分子系においても実現可能であるか否かを検証することにした。

アメーバとの幾何学的類似性にヒントを得て、図 1 に示す様な第一世代ポリフェニレンデンドリマーのコア部分を実在分子系として採用した。便宜的に中心のベンゼン環から放射状に伸びている 6 本の“分枝”に対応するフェニル基を 1～6 の領域に分割する。分子全体に入射レーザー光を照射すると、その偏光方向に依存して各々の分枝の電子密度分布が変化する。電子密度分布が増大した分枝には、それを打ち消す様に対応する 1～6 の領域のみに近接場光で局所的に励起を行う。これは青野らが光回避応答を利用してアメーバの分枝の伸縮を制御したことに対応する。この様なデンドリマー分子の光励起時空間ダイナミクスに対して近接場制御光を使ったフィードバック機構を設定し、 $x_i = NOR(x_{i-1}, x_{i+1})$ を満足するような制約充足問題の解を探索できるか否かの検証を行い、アメーバや量子ドット同様に解探索が可能であることを確認した。今回のデンドリマー分子の光励起時空間ダイナミクスは厳密な第一原理計算に基づいており、実在分子系を使った分子コンピューティングアーキテクチャが原理的に実現可能であることを示すことができた。

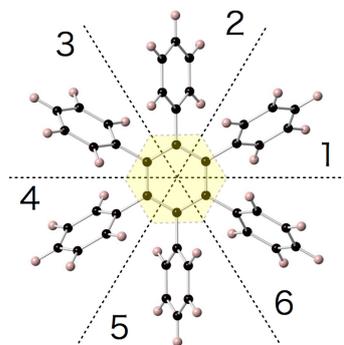


Fig.1: Core structure of a dendrimer molecule.

【参考文献】 [1] M. Aono, M. Hara, and K. Aihara, *Commun. ACM* **50**, 69 (2007). [2] M. Naruse, *et. al.*, *Phys. Rev. B*, **86**, 125407 (2012).

【謝辞】本研究の計算の一部は京コンピュータ（課題：hp120035）を使って得られたものである。