

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 23 年 11 月 28 日現在

機関番号：17701

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2008 ～ 2010

課題番号：20500053

研究課題名（和文）：光化学反応を用いた並列演算装置の開発

研究課題名（英文）：Development of parallel calculator by photoreaction

研究代表者：大橋 勝文（OHASHI MASAFUMI）

鹿児島大学・理工学研究科・准教授

研究者番号：00381153

研究成果の概要（和文）：

光応答性分子を利用した分子コンピュータのアーキテクチャを構築すべく、新しいアルゴリズムを提案し、理論検討、簡単な実験による検証を進めた。本研究から次に示す新規のアーキテクチャを考案し検討した。電流による発熱体とある温度で急激に電気抵抗が小さくなる機能性材料、赤外線領域の光により変色する光応答性分子の組み合わせにより経路探索するもので、機能性材料の組み合わせた回路を電子回路シミュレータにより回路網の各所の発熱量を算出した結果、経路探索が可能であることを明らかにした。また、分子コンピュータを小型化するために必要な要素技術の一つである 2 種類の光に対して照射領域を波長よりも狭い領域に照射できる構造を作製した。

研究成果の概要（英文）：

Due to build the molecular computer architecture using photoresponsive molecules, we proposed the innovative algorithm, investigated theoretically, and verified by simple experiments. We proposed a hybrid device of functional material decreases rapidly resistance at a certain temperature and photoresponsive discolors by infrared light and verified by a circuit simulator. We produced the structure that can be selectively irradiated with two kinds of lights to the smaller region than the wavelength, and is one of the component technologies required to reduce the size of a computer.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	1,900,000	570,000	2,470,000
2009年度	1,000,000	300,000	1,300,000
2010年度	700,000	210,000	910,000
年度			
年度			
総計	3,600,000	1,080,000	4,680,000

研究分野：総合領域

科研費の分科・細目：情報学・計算機システム・ネットワーク

キーワード：計算機システム、応用光学、量子光工学、光スイッチ、マイクロ・ナノデバイス、マイクロマシン

1. 研究開始当初の背景

情報化社会の急速な発展に伴い、膨大なアナログ情報を高速に処理する並列計算システムが待望されている。そこで、(1)演算には光応答性物質の分子構造および電子状態の操作を、(2)並列演算時の情報の受け渡しには分子間の電子やエネルギー操作を、(3)並列演算には二次元配列した光応答性物質を用いた情報の画像化による並列処理を採用した新構想の分子コンピュータ（並列アナログ演算装置）の開発を進める。

分子コンピュータの研究の多くは、構成素子の微細化と集積化のために、シリコン素子と配線を分子に置き換える分子ナノテクノロジー研究の主導で行われている。その一方で、1994年に Adleman 氏が DNA 分子による計算機のアーキテクチャモデルを提唱し、日本では萩谷教授らのグループにより DNA コンピュータの研究が進められている。他にも、新奇な機能分子の創成と、その機能素子の集積化・それを生かしたコンピュータシステムの研究が活発に行われている。我々は、最先端の半導体加工技術により作られた光学マルチセル・マイクロミラーアレイ・CCD などの最先端の光学部品と光応答性分子とを組み合わせた新しいアーキテクチャを持つ分子コンピュータを提案し、開発を進めている。

本研究代表者は、光応答性分子の分子計算および実験、分子化学反応の研究、赤外線撮像装置の画像処理技術開発を過去に行い、現在、巡回セールスマン問題に代表されるオペレーションリサーチに関する研究を進めている。「複数の配送場所全てに配送し、配送距離が最短の配送経路は？」の巡回セールスマン問題は、配送経路の数が配送数の階乗であるため、従来の計算機では計算時間が掛かりすぎるなどの問題を抱えている。この問題を解くアルゴリズムの一つに、蟻がフェロモンを用いて餌と巣穴の間の最適経路を検索する手法（Ant Colony Optimization (ACO)）がある。

この手法では、蟻が移動した軌跡であるフェロモン濃度分布を表わすフェロモンマップをメモリ上に作製するが、従来のコンピュータではフェロモンマップの計算に膨大な時間を掛けてしまう。そこで、フェロモンの濃度を光応答性分子の濃淡に置き換え、光照射によって変化する濃淡分布をフェロモンマップとして計算を行う分子コンピュータとその演算手法を考案した。すなわち、研究代表者が提案する分子コンピュータの部品作製に必要な半導体加工の研究開発と情報工学に関する研究から得られた知識と経験の融合により、情報工学の諸問題を解決する革新的な演算装置である本分子コンピュータの着想に至った。

我々は、ある波長の光を照射することで分子の色が変化する光応答性分子を用い、この分子を入れた数万個の微小な光学セルを二次元状に配置した光応答性分子二次元配置素子を演算素子とする新しいアーキテクチャの分子コンピュータを提案した。青色の光で色が付き、赤色の光で色が消える特性を持つジアリールエテン（光応答性分子）を用いた場合の分子コンピュータの動作を簡単に述べる。

大量のアナログ入力情報の各情報の大きさに応じた強度の光を二次元状に展開して画像を作成する。その画像を演算に応じた2種類の波長（青色と赤色）に使い分け、その光画像を演算素子に照射する。この時、青色の画像を照射された演算素子には光の強度に応じた色が付き、また、赤色の映像を照射される色が薄くなる。この動作を繰り返すと、2種類の照射光の強度・時間に応じた色の濃淡画像が演算素子上に現れる。この画像を CCD など読み取り、演算結果として出力する。

この動作を実現すべく、光応答性分子を入れる光学マルチセルの製造プロセスを検討し、光学マルチセルを作製した。その後、本提案のアーキテクチャを持つ分子コンピュータを組み立て、光応答性分子を入れた光学マルチセルに対して多種多様な映像パターンを用いた演算により、この分子コンピュータの基本

動作を確認した。この分子コンピュータのハードウェア開発と並行して、複雑な演算手法の開発を進めている。特に、光照射パターンに対する光応答性分子二次元配置素子の動作をシミュレーションすることで、新しい計算アルゴリズムを考案した。

2. 研究の目的

分子コンピュータの実現には、独特な性質・機能を持った分子とその機能を生かした演算手法・アルゴリズムを巧みに組み合わせることが鍵となる。昆虫のフェロモンによる集団行動の制御や、伝達物質による神経細胞間の情報伝達など、自然界には問題解決へのアプローチが従来のコンピュータアルゴリズムによるものとは全く異なる現象が数多く存在する。そこで、これらの現象をモデルとした演算アルゴリズムと、それを実行するために多種多様な機能性分子の性質を生かした演算手法の創造を目的とした。

蟻は、巣穴と餌の間の場所にフェロモンという化学物質を地面に塗り付ける行為により他の蟻を引き寄せて、巣穴と餌の間の最適なルートにフェロモンが塗られた道を作る行動を採る。この蟻がフェロモンによりフェロモンマップを作り出す索餌行動を参考にした分子コンピューティングを実現させることを目的に、蟻の集団行動を参考にしたアルゴリズムを参考にして、巡回セールスマン問題のような経路探索問題や、組合せ探索問題などの解法に対する分子コンピュータの応用を検討した。

最適解を自動的に導き出せるような分子コンピュータアーキテクチャを見出すために、光応答性分子と機能性材料を組み合わせたシステムの検討を行った。具体的には、実際の地図上の道路網の形に機能性材料で作られた回路網を作製することで、機能性材料を用いた経路探索機能を持つ分子コンピュータを開発する糸口を求めた。ある温度から急激に抵抗値を下げる物性を持つ機能性材料を利用することで、入力情報をスタートとゴールを指

示するだけで回路網自らが最短ルートを導き出す知的処理が可能な分子コンピュータの実現を目指す。この研究遂行時に、発熱体の発熱量と上昇する温度の大きさが理論値と異なる問題が生じた場合には、回路網に負荷する電流・電圧等の動作条件や分子コンピュータの最適構造等を検討した。

分子コンピュータをより小型化するために必要となる構造として、光を照射する領域を回折限界未満のサイズにできるかを理論的に検討した。光を照射する領域は通常の方法では光の回折限界から理論的には無理だが、近接場光学を利用することで実現可能かを探るために、照射する光の波長で発生するプラズモンを共鳴させることで電磁波の強度を増幅させる特別な構造の検討を行った。

3. 研究の方法

研究は、分子コンピュータを実現するために必要なアルゴリズム・分子コンピュータをより小型化するために必要となる構造をコンピュータシミュレーションにより理論検討を進め、協力研究先である（独）物質・材料研究機構による試作を行う方針で研究を行った。

以前から研究を進めている紫外線・可視光領域の光で反応する光応答性分子を用いた分子コンピュータでは、光応答性分子の色変化に対する光応答性分子への光の照射量依存性を計測したデータを元にある道路網の車の動きに合わせて光を照射して光応答性分子の変色量と信号機の動作とのフィードバックを組み入れたシミュレーションにより本提案の分子コンピュータアーキテクチャを検討した。

光応答性分子に照射する位置をコンピュータにより操作して、その色変化量から演算結果を導き出すアルゴリズムを主体に行っていたが、光応答性分子などの機能性材料を組み合わせることで、エネルギー移動とその制御法を工夫することで、既存の演算アルゴリズムとは異なったアーキテクチャを考案し、その理論検討を進めた。このアーキテクチャは、電流による発熱体とある温度で急激に電気抵

抗が小さくなる機能性材料、赤外線領域の光により変色する光応答性分子の組み合わせにより経路探索するもので、機能性材料の組み合わせた回路を電子回路シミュレータにより回路網の各所の発熱量を算出することで、提案するアーキテクチャ検討した。

具体的には、ある道路網内の交差点間の道路の距離の長さに比例した抵抗値の抵抗をつなぎ、その抵抗と平行に温度により抵抗値が変化する機能性材料をつなげた電子回路網を構築する。もとにした道路網の出発点と到着点に対応した電子回路網の場所間に電流を流した時に各抵抗の発熱量を回路シミュレータにより算出して、その最も温度の高い順に抵抗を選び出すことで、その部分をつなぐと最短経路が選ばれるかを検討した。

分子コンピュータをより小型化するために必要となる構造として、光を照射する領域を回折限界未満のサイズにできるかを理論的に検討した。光を照射する領域は通常の方法では光の回折限界から理論的には無理だが、近接場光学を利用することで実現可能かを探るために、照射する光の波長で発生するプラズモンを共鳴させることで電磁波の強度を増幅させる特別な構造を Finite-difference time-domain (FDTD) 計算によるシミュレーションにより検討を進め、提案する微細構造を協力研究先である (独) 物質・材料研究機構で試作した。

4. 研究成果

我々は社会システムの一つである道路交通に注目し、本提案書の分子コンピュータを用いた道路交通分析システムの開発を行う。例えば、道路状況の画像情報から移動する車のみを抽出した画像を本提案書の分子コンピュータに入力する。この時、道路に見立てた演算素子に車の動きに合わせて光を照射すると、車が渋滞する部分には光が当たり続けるので、渋滞個所の光応答性分子の色が濃くなっていく。その結果、演算素子上に色の付いた渋滞マップが表示される。この渋滞マップ

の変色した量を総計することで、通常的手法では数値化が難しい渋滞度を容易に数値させることをシミュレーションした。このアルゴリズムを提案の分子コンピュータに適用させた。

本研究では、単に光応答性分子を2種類の光を照射して光応答性分子の変化をフィードバックして演算を行う方法ではなく、エネルギーを効率的に利用する自然界の現状をうまく利用する方法を取り入れたアルゴリズムを考案した。

当初、ある道路が2本の経路に分かれ、また一つの道に戻る簡単な道路網を抵抗値に置き換えた回路網では、一本道の部分のみに温度が上昇する。道路がつながる部分を節として、節同士に平行に温度により抵抗値が変化する電子部品を配置して、再度、回路シミュレータで計算したところ、経路が短い部分に相当する抵抗値の温度が最も高いことを見出した。そこで、実際の地図の道路網に対して、温度により抵抗値が変化する電子部品と道路の長さに比例した抵抗とをつなげた回路網により個々の抵抗値がどの程度温度が上昇するかをシミュレートした。その結果、温度が高い抵抗値を結んだ回路網の経路に対応した道路網の経路が最短経路であることを検証した。

これらの理論検討結果を基に、道路網の各交差点間の道の長さに比例した抵抗と平行に接続した機能性材料でできた温度で抵抗値が変化する部品でできた回路とその上に温度により色が変わる光応答性分子の薄膜を乗せた構造をした経路探索デバイスを考案した。現在、複数の道路網に対して、本研究で導き出した手法を適用させ、道路の長さを抵抗値にどのように対応させる方法の検討している。

分子コンピュータのハードウェアである演算装置を小型化するために必要な要素技術の開発を進めた。

分子コンピュータの究極のサイズは分子サイズであるため、如何にして分子サイズに近いサイズで選択的に分子の状態を制御できるかが問題となる。そこで、照射する光の波長よりも光の回折限界以下のサイズで電磁波を

制御する技術の開発を行った。

照射させる波長と同じ周期の溝を同心円状に表裏に作られた構造の中心部に波長よりも小さいサイズの穴の開いた構造を用いることで、1種類の波長を波長以下の領域に照射することができることが報告されている。この論文の構造を参考にして、2種類の波長の光を両波長のサイズよりも小さいサイズの穴に通す要望に対して、2種類の光の近接場光を増強させる構造を提案した。その構造に対して、FDTD計算によるシミュレーションを行うことで構造の細かい部分を修正して高効率で2種類の波長の光を透過させる構造を見出した。この構造を（独）物質・材料研究機構が持つ半導体プロセスで試作品を作成した。この構造に顕微鏡の光源を組み込んだ計測装置により光学特性を調べたところ、2種類の光の波長よりも小さいサイズの穴を2種類の光が透過していることを確認できた。このことより、希望する構造を試作することができた。

5. 主な発表論文等

〔産業財産権〕

○出願状況（計1件）

名称：光並列演算素子

発明者：三木一司、大橋勝文

権利者：独立行政法人物質・材料研究機構、
鹿兒島大学

種類：特許出願

番号：2010-31863

出願年月日：2010年2月16日

国内外の別：国内

6. 研究組織

(1) 研究代表者

大橋 勝文（OHASHI MASAFUMI）

鹿兒島大学・理工学研究科・准教授

研究者番号：00381153