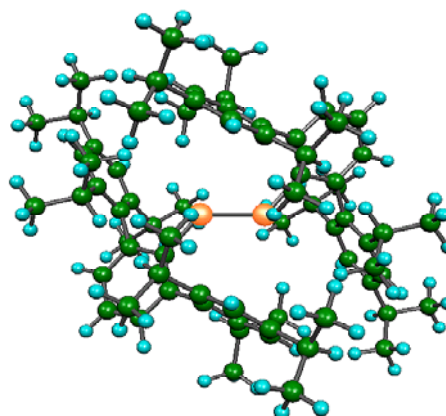


ディビジョン番号	3
ディビジョン名	理論化学・情報化学・計算化学

大項目	1. 理論化学
中項目	1-1. 電子状態
小項目	1-1-7. 大規模計算 (1)

概要 (200字以内)

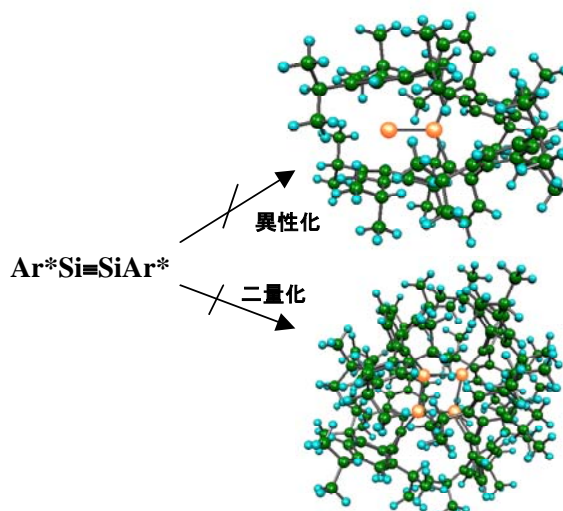
分子理論と計算方法の目覚ましい進展とコンピュータ性能の向上により、これまでとは比較にならないほど大きい分子の精度の高い量子化学計算が可能になってきている。また、簡略化したモデル計算ではなく、実験の標的となる現実の系をそのまま扱えるようになってきている。このために、ナノサイズの分子でも「理論と計算に先導された合理的な分子設計と合成」が現実のものになろうとしている。



$\text{Ar}^*\text{Si}\equiv\text{SiAr}^*$
 $\text{Ar}^* = \text{C}_6\text{H}_3\text{-}2,6\text{-(C}_6\text{H}_2\text{-}2,4,6\text{-iPr}_3)_2$

現状と最前線

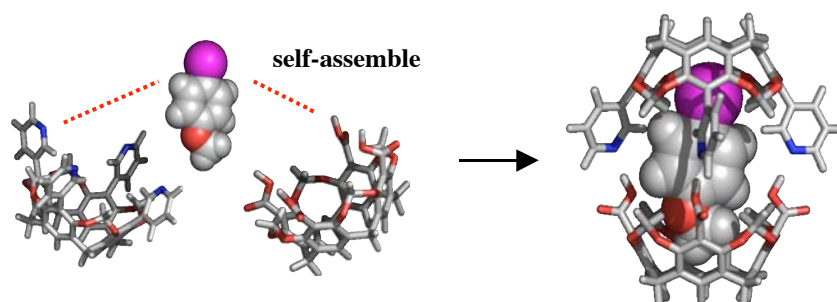
理論計算が得意とするところは、合成標的の分子を実験に先立って予測できることである。たとえば、アセチレン($\text{RC}\equiv\text{CR}$)の骨格炭素を同族の高周期元素($\text{M} = \text{Si, Ge, Sn, Pb}$)で置換した $\text{RM}\equiv\text{MR}$ は典型元素化学では長年の間夢の合成標的となっていた。 $\text{RM}\equiv\text{MR}$ はエネルギーの極小点に対応するが異性化反応や二量化反応を容易に起こしてしまう。そこで、これらの反応を阻止するのに有用な置換基候補をコンピュータシミュレーションで予測した。ケイ素-ケイ素三重結合をもつ $\text{Ar}^*\text{Si}\equiv\text{SiAr}^*$ ($\text{Ar}^* = \text{C}_6\text{H}_3\text{-}2,6\text{-(C}_6\text{H}_2\text{-}2,4,6\text{-iPr}_3)_2$)では、 Ar^* 基の *iPr* を H で置換するだけで三重結合の回りに 80° もねじれて、Si-Si 結合距離は 0.25\AA も伸張する。したがって、 $\text{Ar}^*\text{Si}\equiv\text{SiAr}^*$ の三重結合構造保持は、 Ar^* 基の適切で微妙な立体的広がりサイズ



安定なケイ素-ケイ素三重結合

のなせる業の集約である。Ar*基の嵩高さは Ar*Si=SiAr*の異性化ばかりでなく二量化を見事に阻止する。どのような立体的広がりやサイズの置換基が適切かを実験で検証を繰り返すのは多大な手間と時間がかかるが、理論計算の強みはこれらを容易にスクリーニングできることである。このためにも、サイズの大きい分子の精度の高い量子化学計算の汎用化が求められている。

現在、密度汎関数法は相当に大きい分子の大規模計算を可能にしている。しかしこれまでに開発されている密度汎関数法の多くは、超分子、ゲスト-ホスト相互作用、分子認識、自己集合、生理活性、タンパク質の構造をきわめて重要な非共有結合相互作用等をうまく取り扱えないという致命的な欠点がある。他方、電子相関を取り込んだ分子軌道法はこれらをうまく取り扱えるが、分子が大きくなると計算負荷が急激に増大してしまうという問題がある。現在（あるいはこれから）のコンピュータでは、多数のCPUを用いて並列化計算することにより高速化が実現できる。このために、新しい電子状態理論と効率の高い並列アルゴリズムの開発が求められている。それと同時に、ユーザが並列化をあまり意識しなくても高速計算ができるコンピュータの開発が求められている。



非共有相互作用が重要なカプセル化

将来予測と方向性

- ・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題

ナノサイズ分子や集合体の基底状態と励起状態の正確で信頼できる量子化学計算

- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

分子力場計算などに頼らない高精度量子化学計算によるナノ分子や酵素反応の動力学計算

機能性ナノ分子の自由自在な設計と応用

キーワード

量子化学計算、高精度化、高速化、汎用化