

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	1-2. ダイナミックス
小項目	1-2-7. 密度汎関数計算

概要（200字以内）	
<p>密度汎関数法による分子系や固体の電子状態計算はほぼ確立され、分子設計や材料設計への有用性は疑いの余地はない。密度汎関数法の展開応用は多岐にわたり、化学反応ダイナミックス、電子物性発現などバイオサイエンス、ナノサイエンスに貢献している。生体系機能においてプロトンは重要な役割を担う。プロトンなどの軽質量原子は核の量子効果が現れる。そのような核の量子効果を含む密度汎関数計算や量子ダイナミックスの基礎および応用研究展開は新しい量子機能研究に大きく貢献すると予想される。</p>	<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin-bottom: 10px;">ダイナミックス研究領域</div> <p>(1) 第一原理分子動力学計算 タンパク質とプロトン運動など</p> <p>(2) 量子ダイナミックス 強光子場中の分子運動など</p> <p>図 電子状態計算とダイナミックス研究概念図</p>
現状と最前線	
<p>密度汎関数法による分子系や固体中の電子状態の計算はほぼ確立されてきている。分子磁性、高分子や磁性高分子、強相関電子系、超伝導物質、表面やクラスター触媒、遷移金属酵素やタンパク質、光物性や非線形分子材料、磁場などの外場誘起物性材料など多岐にわたる研究領域で密度汎関数計算が貢献している。一方、密度汎関数法によるダイナミックス計算も順当に発展してきている。第一原理分子動力学計算などによる分子構造転移、化学反応、固体構造相転移などダイナミックスの解析や予測に貢献している。</p> <p>近年、強光子場レーザー技術の発展に伴い新しい化学領域が開拓されてきている。そのような強光子場下での分子は光子場とともに、光と原子および分子の混合状態が形成される。このような高エネルギー状態では核の量子効果が現れる。また、バイオ系機能発現においてプロトンは重要な役割を担う。プロトンのような軽い質量の粒子は核の量子効果が現れる。このような核と電子を等価に扱う密度汎関数法の展開や量子ダイナミックスの研究展開が現在行われてきている。</p> <p>以下に密度汎関数法によるダイナミックス研究に関して項目別に現状と最前線、将来予測と方向性を述べる。</p> <p>(1) 第一原理分子動力学計算とダイナミックス研究</p> <p>密度汎関数法と分子動力学法を組み合わせた第一原理分子動力学計算手法技術はほぼ確立</p>	

している。第一原理分子動力学計算では通常の分子動力学計算ではできない化学反応の追跡が可能となる。タンパク質振動を含むタンパク質活性部位での化学反応シミュレーションなどがあげられる。第一原理分子動力学計算は計算コストが高いため分子動力学法(MM)と第一原理分子動力学法(QM)とのハイブリッド手法を用いた研究がある。

(2) 量子ダイナミクス法と量子ダイナミクス研究

核の量子効果が現れる軽質量の粒子系や高エネルギー状態のダイナミクスを研究する手法として、核波束法や電子と核を等価に扱う量子ダイナミクス法などがある。また核と電子を等価に扱う方法としてシュレーディンガー方程式を厳密に解く方法や電子と核に対する多成分密度汎関数法などがある。第一原理分子動力学法では核は質点として取り扱われ、核の量子効果は含まれていないが、これらの方法では核波動関数の干渉現象などの核の量子効果の研究が可能となる。強光子場中での水素分子のクーロン爆発シミュレーションなどがあげられる。大きな分子をそのまま取り扱うには計算コストがかかる。

(3) 経路積分セントロイド分子動力学法とダイナミクス

核の量子効果を経路積分法を用いた統計平均して取り扱う分子動力学法であり、核の量子性が強い系が取り扱える。量子固体である水素集団運動や相転移現象の量子動力学シミュレーションや超流動研究が可能になる。第一原理経路積分セントロイド分子動力学法などの展開研究がある。統計平均の取り扱いに工夫が必要である。

以上の項目の通り、ダイナミクス研究および量子ダイナミクス研究において計算手法の開発や計算技術開発が進展している。またメタダイナミックなどのような系の局所エネルギー地形探索のための手法との組み合わせ展開が今後必要と考えられる。これらの理論化学の発展とともに今後の次世代スーパーコンピュータを用いた計算により生体膜とタンパク質の機能発現、化学反応とプロトンダイナミクスなどバイオサイエンス領域での貢献が予想される。また強光子場中での分子量子ダイナミクスや新規量子機能発現などのナノサイエンス領域での貢献も予想される。より現実系を取り扱うことにより新しい見地が得られると予想される。

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

局所エネルギー地形探索手法と量子ダイナミクス手法

タンパク質振動やプロトン運動を含めた巨大系電子状態計算

・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

次世代スーパーコンピュータに向けた計算コード開発

現実系タンパク質内化学反応シミュレーション

キーワード

密度汎関数法・第一原理分子動力学シミュレーション・量子ダイナミクス

(執筆者: 長尾 秀実)