

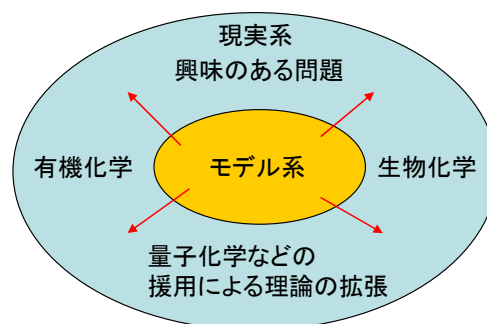
ディビジョン番号	3
ディビジョン名	理論化学・情報化学・計算化学

大項目	1. 理論化学
中項目	1-3. 化学反応
小項目	1-3-7. 溶液反応

概要（200字以内）

溶液内における物理・化学現象の解析においては一定オーダーの分子数とそれに伴う自由度数を考慮する必要があり、シミュレーションによる計算の際には平衡統計平均のために長時間の計算が不可欠となる。これらの課題の中には理論・計算方法論の発展と近年の計算機能力の向上により克服の端緒が見られてきた問題も出てきている。しかし、本来の興味ある有機、生物化学分野の問題への挑戦にはさらなる理論的取り組みが必要である。

Table of Contents



現状と最前線

溶液内における化学現象で最も精力的に研究が行われてきた問題の一つが水中におけるタンパク質の折りたたみ問題である。これらの問題に取り組むための理論・計算手法は数々のシミュレーション技法の発展を促し、分子モデルに立脚した力場の構築の方法論とその発展からさまざまなタイプの力場が提案されてきており、現在では汎用性に対する整備も進んできた。また分子の持つ自由度の多さに伴って生じる膨大な配置空間内の探索の効率化や、局所構造への拘束を避けながら大域的な最安定構造を探し出す方法論、および計算アルゴリズムの改良が行われてきており（1）、気相中におけるモデルタンパク質では直鎖上に伸ばした構造から折りたたまれた最安定構造を見出すことが可能なレベルにまで現状では到達している。

上で述べたのは従来の手法や計算機能力では克服が困難であった問題について、その問題解決への可能性への手がかりが見えてきた一例であるが、さらなるこれからの課題は実際の系がそうであるように、水中のような多くの溶媒が存在するケースである。これは、なにもタンパク質の折りたたみの問題に限ったことではない。溶媒を水に限定しなければ、多種多様な種類の溶媒、たとえば、アセトニトリルやアルコール類などの有機溶媒が媒体として関与しているような化学反応は無数にある。これらの問題を考えてみたとき、その溶媒効果を

考えるにあたり必要な理論的戦略と、対象系となる溶質分子の巨大化・複雑化に応じて問題となる計算効率の改善というものは現在もなお研究対象として未発展の部分が多いと思われる。また、光合成プロセスなどの光励起による過程を記述する際の量子化学的手法との融合などに見られる、数々の分光学的手法による実験結果に分子論的立場からの解釈を与えることを念頭においた理論化学・計算化学研究の発展もこれからの一つの方向性を示しているものと考えられる。

参考文献

- (1) 岡崎 進、 岡本祐幸 編、<化学フロンティア⑧>
「生体系のコンピュータ・シミュレーション」、化学同人 (2002)

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

(1) 汎用性力場の統一基準の設定 (2) 大規模系に適用可能な非経験的分子軌道法との融合によるシミュレーションに関する新たな方法論の開発

・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

(1) 理論化学・計算化学による分子生物学・免疫学への分子レベルからのアプローチのさらなる展開 (2) 実時間オーダーレベルでのシミュレーション

キーワード

汎用性力場の統一基準、非経験的分子軌道法、励起状態過程

(執筆者： 石田 干城)