

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	1-4. シミュレーション
小項目	1-4-4. 溶液・液体の統計力学

<p>概要（200字以内）</p> <p>金属製品は金属を溶解した“液体金属”を鋳型に流し込んで形成する。ゴムやプラスチック製品は、高分子を高温の“高分子溶融体”にした後、それらを混合するなどして製品化される。蛋白質や核酸等の生体高分子の生理的活性条件は“水溶液中”で実現される。この様に、溶液・液体は我々の生活と密接に関わっており、これらの物性を統計力学に基づいたシミュレーションにより理解する事は、工学的な応用の立場においても、重要な知見を与える。</p>	
<p>現状と最前線</p> <p>【水溶液中での生体高分子の物性】</p> <p>人の体の約6割が水で占められており、残りの4割が蛋白質、脂質、糖質、核酸等の生体高分子によって構成されている。従って、生命を物理的または化学的立場で理解するための第一歩は、水溶液中で繰り広げられる生体高分子の多種多様な振る舞いを解き明かす事であると言える。その上で、溶液・液体の統計力学に基づく理論的研究は、現在重要な役割を担っている。</p> <p>生体高分子周りの水の分布(水和構造)がその振る舞いに直接影響を及ぼす事は疑う余地もない。これを解析する統計力学的手法の一つとして、Reference interaction site model (RISM) 理論があげられる。この手法は水分子の配向に対してある近似を導入する事により、巨大分子への適用を可能としている。さらに高精度な水和構造の記述を目指して、分子間の配向相関を露に考慮した密度汎関数理論(DFT)に基づく新たな手法の開発も進められている。</p> <p>単なる高分子鎖と生体高分子との最大の違いは、生理的機能を発現するために、水溶液中においてユニークな三次元構造を保持する事にある。そのため、なぜその構造が水溶液中で安定なのかを知る事は重要である。生体高分子の安定性の指標と成るのが溶媒和自由エネルギーであり、これを高速にかつ正確に計算する手法が近年提案された。その一つがエネルギー表示に基づくDFTであり、もう一つが生体高分子の幾何学構造と水溶液の性質のみからこれを算出する形態熱力学法である。いずれの手法も将来有望であり、更なる発展が望まれている。</p>	

【高分子・ゲルの物性】

ゴム、インク、整髪料、保水性または高吸水性樹脂によるコンタクトレンズや紙オムツ等、高分子ゲルを用いた製品は我々の生活に今や欠かす事の出来ない存在と成った。このように応用面での拡大は目に見張るものがあるが、これらの開発では、未だに 1940 年代に発表された Flory-Stockmayer 理論を頼りにしており、ゲル化過程の制御に関する理論的研究の必要性は大きい。現在、反応開始剤や連鎖移動剤による架橋反応の制御機構を調べるための粗視化モデルの構築や、それに基づくシミュレーションが着々と進められている。

高分子溶液の物性は高分子ゲルの物性を理解する上での基礎であり、非常に重要である。高分子は溶媒の効果により多種多様な挙動を示す。最近、溶媒効果を理論的に考慮した DFT に基づく高分子鎖の有効ハミルトニアン法が提案された。この方法を用いる事により、無数に存在する溶媒を露に考慮する事なく、溶媒中での高分子の振る舞いを容易に解析出来るようになった。これにより、これまでに報告のない超臨界流体中での高分子鎖の膨張現象を理論的に予測するとともに、実験と連携した新たな研究が展開されている。

【液体金属・合金の物性】

木星の構成要素の約 9 割は水素であり、その巨大な磁気(地球の 1200 倍)の原因として、金属化流体水素による自由電子の存在があげられている。また、アルカリ金属液体は、高速増殖炉での最も有効な冷却媒体と考えられており、その基礎物性の研究は急務である。

計算機コストの高い第一原理分子動力学法を行う事なく、液体金属・合金の物性を解析するために開発された手法が、電子-核混合系の DFT に基づく積分方程式理論である。これにより、第一原理に基づく液体金属の微視的構造、熱力学量、および電気伝導特性の解析が容易に行えるようになった。現在、高圧下での水素の金属化や金属から非金属への相転移メカニズムの解明等、成果をあげつつある。

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】

1. 分子の配向相関を考慮した液体論の開発と生体系への適用
2. 揺らぎが存在する超臨界溶媒中での高分子溶液論の確立
3. 物理ゲル・化学ゲルの基本的モデルの構築とゲル化の制御
4. 極限条件(高温・高圧)下の液体金属の基礎物性の統一的描像の解明

【10年後までに解決・実現が望まれる課題】

1. 溶媒和自由エネルギー地形に基づく蛋白質の折り畳み機構の解明
2. 液体の統計力学と構造活性相関とを組み合わせた薬理活性予測とドラッグデザイン
3. 新たな機能性高分子ゲル(例えば、フォログラムによる大容量記憶媒体用ゲル)の理論設計
4. 異方的な液晶相をターゲットにした液体論の確立と液晶相転移の分子論的解明

キーワード

統計力学, 液体論, 密度汎関数理論(DFT), ソフトマター, 生命現象

(執筆: 墨 智 成)