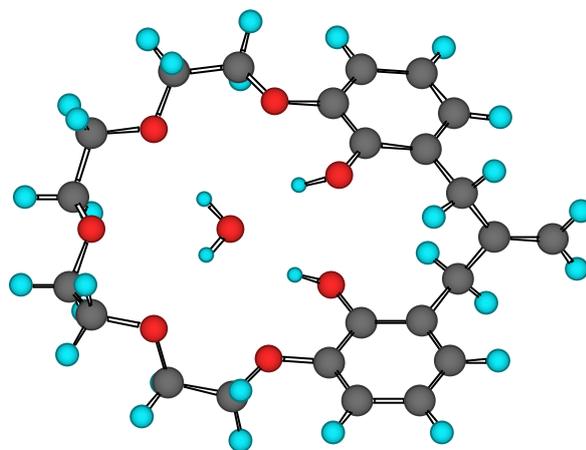


ディビジョン番号	3
ディビジョン名	理論化学・情報化学・計算化学

大項目	3. 計算化学
中項目	3-1. シミュレーション
小項目	3-1-1. 分子間相互作用

概要（200字以内）

分子間相互作用は分子集合体の構造や物性を支配しており、クリスタルエンジニアリング、創薬など多くの研究分野で分子間相互作用の詳細な情報が必要とされている。最近では *ab initio* 分子軌道法による分子間相互作用の計算が盛んに行われている。分散力を高速かつ精密に計算する手法が開発されることで、生体分子、分子結晶などの分子集合体の第一原理分子動力学計算が可能になることが期待されている。



現状と最前線

化学の研究対象は単独分子から分子集合体に広がりつつあり、分子集合体の構造や機能の解明が重要な課題になっている。分子間相互作用（非結合相互作用）は結晶中の分子配列、超分子や生体分子の分子認識、液晶、脂質膜、液体の構造や物性を支配している。分子間相互作用の詳細な情報はこれらの分子集合体の構造や機能の理解に重要なだけでなく、これらの分子集合体の古典分子動力学計算に使われる力場の精密化にも必要である。また最近ではクリスタルエンジニアリング、創薬、有機材料、高分子材料、電池材料などの研究開発でも分子間相互作用に関する情報の重要性が増している。

分子間相互作用は非常に弱く、実験的な手法だけで分子間相互作用の詳細を明らかにすることは容易ではない。分子間相互作用の計算には以前は主に計算負荷の小さい力場計算が使われたが、計算結果がパラメータに依存するという問題があった。このため、最近では *ab initio* 分子軌道法による分子間相互作用の計算が盛んに行われている。

分子間には静電力、誘起力、分散力、交換反発力といった種々の分子間相互作用が働いている。分散力以外の相互作用は、計算負荷の比較的小さい HF 法や密度汎関数法でもほぼ正確に計算できる。だが多くの場合、分散力の寄与は無視できない。十分に大きな基底関数系を使い、MP2 法や CCSD(T) 法で電子相関を補正して分散力を評価すれば、分子間相互作用を正確に（数%程度の誤差で）計算できる。このような計算は計算負荷が非常に大きく、例

例えば10年前には ab initio 分子軌道法で分子間相互作用を正確に計算できるのは水の二量体などの非常に小さな分子集合体に限られていた。最近では計算手法の発展や、計算機の高速度化、大容量化により、大きな分子集合体の相互作用の精密計算が可能になりつつある。また、かつては分子間相互作用の精密計算にはスーパーコンピュータが必要であったが、最近ではパソコンやワークステーションでもかなりの計算が可能になっている。

イオン間の相互作用のように静電力の寄与が非常に大きく、分散力をほとんど無視できる場合は、ワークステーションでも容易に水素以外の原子数が30個程度の分子集合体の分子間相互作用を正確に計算できる。一方、 π/π 相互作用や飽和炭化水素の相互作用のように引力の大部分が分散力の場合は、分子間相互作用の正確な計算には大きな計算機資源が必要となる。水素結合の引力の大部分は静電力だが、分散力の寄与も無視できない。水素結合の相互作用エネルギーの正確な評価には分散力の正確な計算が必要である。大きな基底関数系を使った計算を避けるために、中規模基底関数系を使った計算結果から大きな基底関数系を使った場合に計算される分子間相互作用エネルギーを推定する方法も研究されている。

比較的小さな計算負荷で電子相関を取り込める密度汎関数法で分散力を計算することも試みられているが、現在一般的に使われている functional を使った密度汎関数法では分散力を正確に評価できない。このため密度汎関数法を使った第一原理分子動力学計算では生体分子や分子結晶のような分散力の寄与が大きい系を正確に扱うことができない。分散力の計算のための新しい functional の開発が試みられている。また、密度汎関数法で分子間相互作用エネルギーを計算し、他の方法で分散力の寄与を補正することも検討されている。密度汎関数法で分散力が正確に計算できれば、生体分子などの第一原理分子動力学計算が可能になると期待されている。

一方、MP2 法の高速度計算手法の開発や、FMO 法を使った非常に大きな分子集合体の分子間相互作用の高速度計算も試みられている。この他に量子モンテカルロ法を使った分子間相互作用の計算も試みられている。これらの手法の開発が進むことで実験化学者が研究対象とする大きな分子集合体の分子間相互作用の精密計算が実現することが期待されている。

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

格子エネルギーの精密計算、ab initio 計算に基づく精密な力場の開発、MP2 法の高速度計算法の開発、分散力補正を行った密度汎関数法による分子間相互作用の精密計算手法の開発

- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

生体分子、分子結晶の第一原理分子動力学計算、分子認識機構の解明、結晶構造の予測手法の開発、分散力を直接計算できる密度汎関数法の開発、CCSD(T) 法の高速度計算手法の開発

キーワード

静電力、分散力、電子相関、基底関数系、高速計算手法