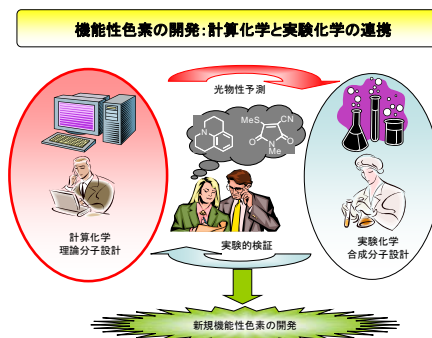


ディビジョン番号	3
ディビジョン名	理論化学・情報化学・計算化学

大項目	3. 計算化学
中項目	3-2. 分子設計
小項目	3-2-3. 機能性色素

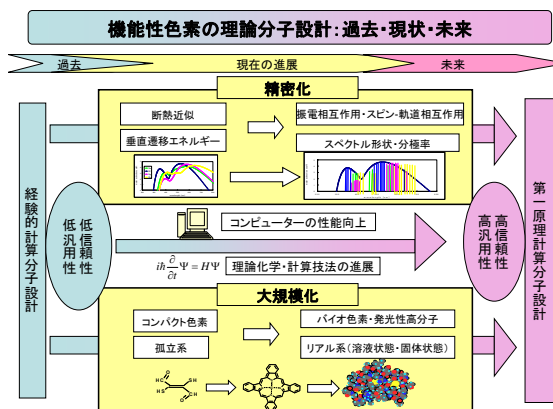
概要（200字以内）

歴史的・工学的視点から、色素の理論分子設計は計算化学の代表的な活躍舞台である。染色用色素から電子情報材料など多様な用途を有する機能性色素へと、色素の用途が変貌を遂げる中で、その分子設計に計算化学が果たす役割も重要性を増しつつある。今後、計算化学は**精密化・大規模化**という2つの軸に沿って発展を続け、単分子色素の光物性予測から種々の環境下で発現するリアル系下の光物性予測へと進化する事が期待される。



現状と最前線

色素の理論分子設計は、経験パラメータに依存した「経験的計算分子設計」から徐々に脱皮し、「純粹第一原理分子設計」へ向かう潮流上にある。コンピューター性能の飛躍的向上という追い風を享受しつつ、**精密化・大規模化**という2つの軸に沿って発展を続けている。



(1) **精密化**: 振電相互作用・スピン軌道相互作用を考慮した高精度計算

色素設計分野で独自の発展を遂げた ZINDO 法、電子相関を考慮した CC 法や MP 法、近年急速に発展した TD-DFT 法などが現在広く用いられている。孤立系に対する断熱近似下の遷移エネルギー計算理論はほぼ成熟し、コンパクトサイズ色素の遷移エネルギー予測値は、実験値と 0.1eV 以内の一致が期待できる化学的精度を実現しつつある。遷移エネルギー計算精度は理論手法のベンチマークとして汎用され今日まで主たる計算対象であったが、トータルのスペクトル形状・分極率テンソルなど多様な光物性が計算対象となっている。

(2) **大規模化**: リアル系（溶液状態・分子性結晶・不均一系）の光物性予測

大規模系を計算対象とした新しい手法 (QM/MM 法、ONIOM 法、FMO 法など) が 1990 年代から急速に発展し、幾つかの代表的なバイオ分子の定量的計算が試みられている。また、近赤外生体蛍光ラベル化試薬の分子設計などは、小さい感受領域エネルギーギャップを再現する大規模励起状態計算が必要であり、最前線例の一つである。

さらに、統計力学的因子を考慮した MO/MC 法、MO/MD 法、RISM-SCF 法などの発展により、周辺との相互作用を考慮した溶液状態・分子性結晶・液晶・不均一系といった工学的に重要なリア

ル系での光物性予測が試みられている。溶液中のみで発現する双性イオン型発光色素の分子設計においては、大きな自由度下の統計平均として発現するマクロ光物性を記述するために、このような計算が不可欠である。

将来予測と方向性

21世紀の主産業と期待される生命工学やナノテクノロジーといった分野では、孤立系の理想状態よりも様々なモルフォロジー下で発現する光物性の予測が重要であり、今後10年に、精密化・大規模化の両基軸のバランスのとれた発展が期待される。高精度化に関しては、振電相互作用・スピン軌道相互作用を取り込んだ高度な電子相関計算手法が整備されつつあるが、実用サイズの機能性色素や複雑な錯体に対するこれら先端的手法の適用は今後本格化する。一方、大規模化に関しては、計算機性能向上の単純外挿のみでは、リアル系における実用サイズの機能性色素の高精度計算は難しく、大規模系を高効率かつ高精度に扱う手法とTD-DFT法との融合など、理論・計算手法の一層のブレークスルーが望まれている。コンピューター性能の持続的向上の追い風を受けつつ、複雑なリアル系での理論分子設計の実現が期待される。

参考文献：「先端科学シリーズ4：理論・計算化学 クラスタースペースケミストリー（日本化学会編、丸善（2003）」

- 5年後までに解決・実現が望まれる課題
赤外・近赤外感受性蛍光色素の分子設計
振電相互作用・スピン軌道相互作用を考慮した複核錯体の光学物性予測
- 10年後までに解決・実現が望まれる課題
分子性結晶・アモルファス状態のみで発光する機能性色素の分子設計
溶液中のみで発現するバイオ色素の分子設計

キーワード

機能性色素、電子状態計算、精密化、大規模化

(執筆者： 重光 保博)