

有機光機能材料の設計、民間企業における計算科学の実践

(株) 三菱化学科学技術研究センター 計算科学研究所 中村振一郎

はじめに 人は見ようとしたものしか見えない生き物です。また、人の脳は“夢”と現実をそれ自体として区別できないと言われていています。計算科学の仕事は、錚錚たる研究開発陣の中で紛れも無く“黒子的存在”です。しかし、製品化を目指して昼夜を問わず奮闘している実験研究者仲間と伴走しながら、絶対的シグナルの集合である実験結果が“語りかけ、意味しているもの”を、理論とシミュレーションを駆使して、従来とは違った目で物事を見ようとさせてくれるものです。私たちはそこに想いを凝らして日々研究を行っています。それは脳のなかの“夢”を現実化していく試みといえるかもしれません。

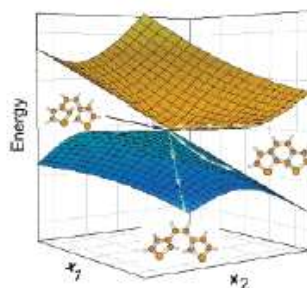
弊社の計算科学は、石油化学分野の触媒設計の一環として、非経験的分子軌道法を用いて、実験的には得難いか、不可能であるかもしれないが、計算科学ならば得られる情報、例えば遷移状態の構造と電子分布等を提供することから始まりました。今日この分野は更に要求が高度になっています。研究対象は、エネルギー材料、医薬、農薬、有機無機の光物性、炭素材料、色素、高分子材料と広範になりました。計算手法は、電子状態の理論計算、即ち量子化学計算や第一原理計算という原子分子レベルの計算だけでなく、ナノ領域、メソスコピックレベルの新しい手法、そして、ニューラルネット、カオス・フラクタルという非線形現象の数理科学という多様な手法を駆使しています。また 2004 年度から CREST-JST「分子の特性を最大に引き出すナノサイズ構造体がつくる場の研究」という機会を活用して企業的研究の補完を試みています。

民間企業の研究開発においてオムニ実験装置としてのコンピューターを使う計算科学の潜在能力は、いま全面開花の途上です。コンピューターは 20 世紀に発明された実験装置や機械のなかで最も顕著なパフォーマンスの相転移的發展を遂げました。1980 年代初頭のスーパーコンピューターは自動車一台の価格と比べて数百倍から数千倍でしたが、2006 年の現在、パソコンは中古車一台かそれ以下の価格で誰にでも購入できる安価で簡便な装置になり、今日のパソコンは遙かに当時のスーパーコンピューターの性能さえ凌駕しています。自動車や他のマシンの進歩と比べて、その性能・価格の比がこれほど劇的に変化したものは他に類を見ないでしょう。これは何を意味しているのでしょうか？ それはこれまで人類が手にするどころか、夢見ることすらできなかったひとつの大きな可能性が実現したことを意味します。しかし、その潜在的ポテンシャルは、やっと顕在化し始めたに過ぎません。筆者の話題提供はこれに対する焦りに似た想いから、次世代マシンに期待を表明して成されるものです。

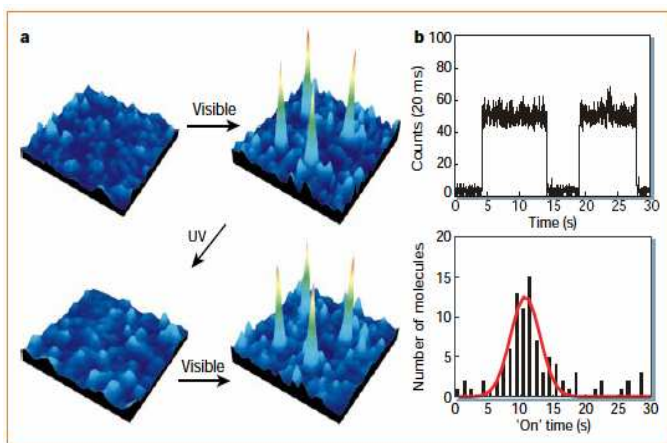
有機光機能材料

具体例として有機光機能材料、分子スイッチの代表であるフォトクロミックジアリルエテンを紹介しよう。この分子の特徴は第一に、結晶状態において光異性化反応の量子収率 100%という他では例のない特性を示していること、第二は、ポリマー媒体という場でなされた単一分子計測でこの分子の量子収率が“ゆらぎ”を示していることである。そこでこの系を対象として、投入されたエネルギーと機能性分子材料が行う仕事の効率を決める新しい原理に迫る研究を遂行している。その解析を以下要約する。

(1) 励起状態の円錐交差 (右図) と波束ダイナミクス：分子の形状と光応答特性、とくに量子収率の決定原理を考察した[1]。CASPT2//CASSCF 法にて実験的に得られている量子収率が如何に決まるか解析しそれを用いると、量子収率の絶対値という大段なチャレンジに取り組み始めた。準備として、1,3,5-ヘキサトリエンがフェムト秒レーザーにより、200ps という観測初期過程を半古典量子ダイナミクスで再現できるかどうかの検討を行った。



(2) 単一分子量子収率のゆらぎ：近年入江らによって報告された単一分子計測(下図)[2]によると、量子収率は置かれた場によっては、特異なゆらぎを示すことがある。これは生物物理の大問題への新しい攻略の可能性を示唆している。そのメカニズム解明が焦点である。まず巨大分子の励起状態ダビドフ効果(遷移モーメントの相互作用)の解析から、分子そのものでなく、この秘密は、場にあることが示唆された。その場の効果を古典 MD とマクロなゆら



ぎ解析から迫り、メモリー効果 (過去の刺激の記憶を持つ) の源はみかけの励起状態の反応障壁が変化することに起因するという結果に導かれた。

参考文献

- [1] Y.Asano, A.Murakami, T.Kobayshi, A.Goldberg, D.Guillaumont, S.Yabushita, M.Irie, S.Nakamura, J.Am.Chem.Soc., **126**,12117 (2004)
- [2] M.Irie, T.Fukaminato, T.Sasaki, N.Tamai, T.Kawai, Nature, **420**,759 (2002)