

高分子の分子構造・電子構造の超効率的計算プログラム—MolCAD—の開発

広島大学大学院 理学研究科 ○青木 百合子

高分子の研究は、現段階では、その対象とする系があまりに巨大である上に複雑であるので、量子化学を用いた高分子の電子論に基づく理論的研究は、実験家に必要欠くべからざる情報を提供できるまでには至っていない。しかしながら、比較的小さい分子に対して近年分子軌道法が、非常に信頼性の高い計算データを与えていることを考えると、近い将来、分子軌道法が高分子に対しても大きな威力を発揮することは間違いないと思われる。特に、高分子の示す特色のある機能の多くは、その高分子が包含する非周期性の部分に負っている。たとえば、酵素タンパク質の持っている高効率で高選択性の触媒機能は、まさにその非周期性の部分によってコントロールされている。こういった高分子の機能を、基礎的なところから電子論の立場にたつて解明し、それを分子設計に結びつけるには、その非周期性高分子の電子状態を計算する方法を確立しなければならない。

本プロジェクトにおいては、従来の方法とは全く異なる観点にたつて、この非周期性を一般的に取り扱える方法を発展させてきた。本方法は、ある適当な大きさのオリゴマーを考え、それにモノマーを一つづつ付加させながら、電子状態を求めていく。この方法を、図1のような高分子の重合反応の道筋を模したことで、理論的重合法とよんでいる。この方法を図2に模式的に示しているが、セグメントを付加させるたびに分子軌道の局在化と行列の対角化を繰り返すことによって任意の長さの非周期性高分子の電子状態を次々計算していく。本手法の特徴は、いくら高分子鎖が長くなっても固有値問題の次元は一定のままに保たれているので、計算時間は鎖の長さに比例するという点である。図3には全系をまとめて解く従来の方法との計算時間の比較を示したが、理論的重合法の優位性は明らかである。

本方法を、実験家が合成の指針として手軽に使えるよう、inputとOutputの処理を容易にするインターフェースを組み込み、高分子鎖を本方法に適合した形でコンピュータ上で構築できるソフトウェアMolCADを開発した。これによって3次元分子構造の様々なモデルでの表示、構造最適化計算に必要な初期座標の作成を容易に行い、分子設計を対話的に行うこと、分子計算実行後の計算結果の検討を容易に行うことが可能になった。さらに、局在化分子軌道や局所状態密度の表示の他、一方で発展させてきた伝導性や強磁性等の物性を示すインデックスも表示できるよう開発している。

図1 高分子の重合反応

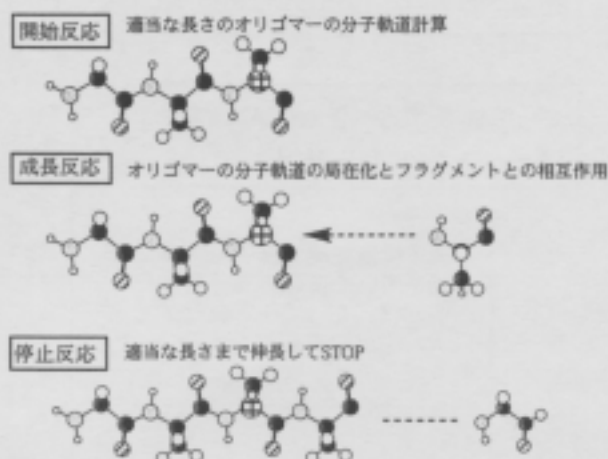


図2 ランダム高分子の理論的重合(Elongation)法

適当な大きさのクラスターにフラグメントを順次付加して伸長する

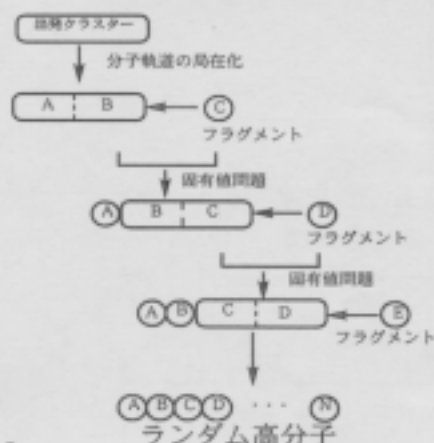
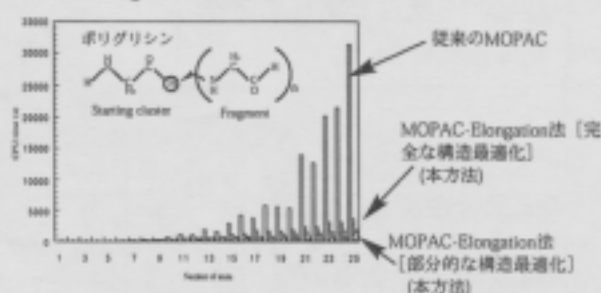


図3

MOPAC-Elongation-構造最適化法による計算



MolCADの流れ

