

1. コンピュータ化学演習とは

現在、おそらくすべての仕事にコンピュータの利用は欠かせなくなっている。化学の分野もそうであり、皆さんがこれからの卒業研究や修士研究に取り組む上でも、将来化学技術者・研究者として活躍するためにもコンピュータの扱いに慣れ、まるでひとつの文房具のように使いこなせる必要がある。そのため、物質工学科では一年次の「情報科学演習」と2年次のこの演習を通して皆さんにコンピュータリテラシーと「コンピュータ化学」の基礎を学んでもらい、コンピュータを学習や研究に役立ててほしいと考えている。

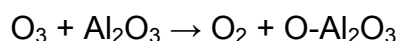
これからその基礎を学ぶ「コンピュータ化学」とはどんな学問なのだろうか。あいにく手元の本や資料にはその定義が見あたらないが、おそらく化学現象のコンピュータシミュレーション、すなわち、原子や分子の基本的な性質に基づいて理論計算を行い、物質の化学的性質や化学反応経路を推定することであろう。現在日本のこの分野の研究者は「日本コンピュータ化学会」を組織して、年2回の研究発表会を開き、隔月刊の論文誌を発行している。

化学の理論計算に欠かせないのが「分子軌道理論」と「分子動力学」の計算ソフトであるが、それらのここ数十年の進歩はめざましいものがある。かつてはそれを自分で作るか、あるいは開発者に頼んで使わせてもらうしかすべはなかったが、今では高度の計算が可能な計算ソフトが使用法の詳細な解説書付きで市販され、Winmostarのような優れた機能を備えたものがフリーソフトとして入手できる。また、パソコンは大学や企業の現場に広く普及し、その性能は十年前と比較しても信じられないほどに向上した。そのため、かつては大型コンピュータを用いて行った計算が安価な市販のパソコンで可能になり、化学現象の詳細な仕組みを理論的に推定し、それに基づいて実験を進めるといった新しい研究手法が実行可能になってきた。

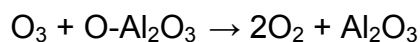
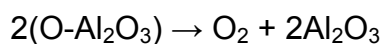
計算化学の利用が材料開発の研究上有用である理由の一つは、化合物分子の化学的物理的性質を支配する電子状態を可視化できるところにある。それにより実際に見ることができない現象、たとえば化学反応における遷移状態や原子の組換えの詳細が容易に理解でき、研究者の直感が強められる。すでに企業では、特に材料開発を効率化するために、計算化学的手法が広く取り入れられている。大学はこのような研究・開発環境の変化をよく理解し、これに対応した教育改善を行っていく必要があり、コンピュータ化学演習の開講もそうした考えに沿っている。

ここで、計算化学が有用であることの実例を我々の研究の中から一つ示そう。

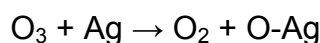
それは、オゾンの分解機構の推定である。有機ハロゲン化物による土壌及び地下水の汚染が問題になって久しい。その解決のためには地中の汚染物質をその場で除去できることが望ましいが、我々は酸化力が強く、比較的安いコストで製造できるオゾン在地中に吹き込み、汚染物質を酸化分解することを考えた。これを10℃前後の地中温度で行うためには適当な触媒の併用が必要であるが、さまざまな化合物の中で触媒として働く可能性のある物質は金属化合物である。しかし、意外にもそれらとオゾンとの相互作用の詳細については未だ不明なことが多い。それでも、オゾンはアルミナの上で解離吸着することが知られている。



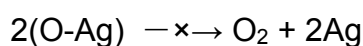
アルミナ表面に吸着した酸素(O-Al₂O₃)はそれ同士で再結合するか、別のオゾンと反応することが考えられる。



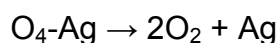
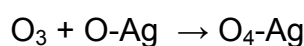
それでは氧化物ではなく金属の表面ではどうであろうか。そこで、銀触媒について反応の過程を計算してみると、オゾンの解離吸着は速やかに起こることがわかった。



しかし、吸着酸素(O-Ag)同士の再結合は、反応の活性化エネルギーを計算してみると高すぎて起こりそうもない。



一方、吸着酸素(O-Ag)とオゾンとの反応は活性化エネルギーの計算値が低く、起こりやすい反応であると推定された。さらに、この反応は吸着したO₄を経由することがわかった。



これまでO₄の存在は実験的に知られていないばかりか、予想もされていなかった。O₄は触媒によるオゾンの大量生産に重要な役割を果たす可能性があり、実験的な確認を期待しているところである(現在、オゾンは酸素をコロナ放電の中を通して製造されている。しかし、その効率は低く、投入する電気エネルギーの約15%しか利用できず、残りの85%は熱として捨てられている。オゾンの効率的な合成は化学者の夢のひとつであるが、おそらくそれは触媒を用いたプロセスになるだろう)。

計算化学が有用であることの例を我々の研究の中からも一つ挙げよう。近年大気汚染物質の分解除去に無尽蔵の太陽エネルギーを利用する試みが広く行われ、高活性な触媒として酸化チタンが知られている。ただ、酸化チタンは太陽光に3~4%程度含まれるλ < 380 nmの紫外光しか吸収できない。ところが、近

年、酸化チタンに加速した遷移金属イオンを打ち込む(イオン注入する)と吸収が可視光領域に広がり、反応活性が増大することが見いだされた。残念ながらイオン注入はコストが高くて実用的でない。そこで我々は酸化チタンのモデルを作り理論計算したところ、酸化チタンのチタン原子を他の金属原子で一部置換すると光吸収が可視光領域に広がることが明らかになった。この結果は、イオン注入によらない可視光吸収性酸化チタンの安価な調製法が開発できる可能性を示している。

このように、コンピュータ化学は実験科学である化学の研究に役立つものである。パソコンの性能はさらに向上しつつあり、計算の実行はますます容易になってくる。皆さんは是非この演習を通して計算化学的手法を学び、化学者なら誰でも身につけている技術、たとえば生成物の蒸留分離やガスクロ分析の技術などのように、それを自在に使いこなせるようになってほしい。