

石 田 干 城 (助教) (2004 年 11 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：理論化学，計算化学

A-2) 研究課題：

- a) 溶液内化学反応およびエネルギー移動過程に関する理論的研究
- b) 分子動力学法によるイオン液体中の液体構造と動的挙動に関する理論的研究
- c) 量子化学計算と分子動力学法を用いたイオン液体による高分子セルロースの溶解・分解過程に関する理論的研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) これまで提案，及び改良を進めてきた時間依存形式による溶質分子の電子状態の時間依存変化を記述する理論的方法を色素分子中の光励起による電子移動反応プロセスの研究に応用した。この研究により，励起状態での超高速電子移動反応プロセスと溶媒和過程を光励起後フェムト秒オーダーで解析することを可能にした。今年度はこの方法論を光励起によって引き起こされる電子移動とエネルギー移動が重要となるバタイン色素の問題へと適用し，計算・研究を行った。現在，研究成果を学術論文として投稿準備中である。
- b) イオン液体中の構造解析から出発し，イオン液体の特有の挙動の一つである構造の不均一性や室温付近でのガラス性挙動に注目して研究を進めている。分子動力学法を用いて数万原子オーダーでの大きな系の長時間シミュレーションを行った。得られた結果より，イオン液体は陽・陰イオンの構造の違いによって各イオン種が非一様な分布をしていることが示され，このことが構造の不均一性の原因となっていることが明らかになってきた。さらに，通常液体では過冷却状態において現れる動的不均一性と類似の挙動を，室温において示すことを明らかにした。現在，イオン液体中の構造不均一性とイオン分子の動きとの関係や，動的不均一性の分子論的起源について研究を進めている。
- c) 生体内の細胞壁の基本骨格部分である高分子セルロースを炭水化物に分解する際にイオン液体が有効であることに注目した研究を計画，実行した。量子化学計算を用いた研究から，高分子セルロース間に働くセルロース間水素結合強度は水中に較べてイオン液体中では弱められることがわかった。また，分子動力学シミュレーションの結果より，高分子セルロース内の疎水性領域と親水性領域ではセルロース鎖間相互作用エネルギーの弱められ方に大きな違いがあって，セルロースの溶解過程に大きく影響を及ぼしていることも明らかになった。さらに，陰イオンによる分子内水素結合の分断によりセルロース鎖の剛性が弱くなることで陰イオンの高分子セルロース中への侵入が起こり，続いて分子間水素結合の分断が陰イオンにより促進されることが明らかになった。また，陽イオンはセルロース鎖中のグルコース環上周辺に存在し，ファンデルワールス力によるグルコース環との相互作用によってセルロース鎖の溶解に寄与していることも明らかにした。これらの研究成果は学術論文としてまとめられ，学術雑誌，*The Journal of Physical Chemistry*，に現在投稿中である。

B-10) 競争的資金

科研費特定領域研究(公募研究),「溶液内光励起反応プロセスと溶媒和ダイナミクス」,石田干城(2008年–2009年).

科研費特定領域研究(公募研究),「分子動力学法によるイオン液体の理論的研究」,石田干城(2008年–2009年).

科研費基盤研究(C),「分子内及び分子間エネルギー移動を起源とする光機能発現の理論的解明」,石田干城(2011年–2013年).