

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・改良し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。現在はこの方法論を光励起によって引き起こされる生体分子や遷移金属錯体内でのエネルギー移動の問題へと適用し，計算段階へと取りかかっているところである。
- b) イオン液体中の構造解析をもとにして，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実行した。結果からイオン液体は，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が示された。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) 生体内における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。まず量子化学計算による結果から，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結果が得られた。このことはイオン液体中でセルロースの分解が促進されやすい原因の1つであることがわかった。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。このような溶解過程にはイオン液体の陰イオンによるセルロース間水素結合の分断力と陰イオンの動きが水中と比べて大きな役割を果たしていることが示された。

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ックス」, 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).