

分子設計の基礎理論と CAChe システムによる 分子モデリング

田 中 昇

A Theory Aiding Molecular Design and Molecular Modering Examples by CAChe System

Noboru TANAKA

Abstract

The fundamental molecular orbital theory aiding molecular design is introduced. From that theory, most popular MOPAC method and our proposed new semiempirical method (referred to as MT method) are derived. Also, using CAChe system which enable us the molecular design, some example of molecular modering are presented.

1. はじめに

新素材の開発は、有機・無機・高分子・医農薬・ニューバイオテクノロジー等の最先端の研究分野において最も重要な課題の一つである。従来、これら新素材の開発にあたっては、経験や試行錯誤的な実験に頼ることが多く、このために膨大な経費と労力を必要としてきたばかりではなく、経験則以外の研究の遂行はきわめて困難であった。最近の飛躍的なグラフィックコンピュータの発達によって、分子の立体構造や分子過程のモデリングができるようになり、分子レベルからの新素材の設計が可能となりつつある。分子設計に必要な基礎理論と、実用的な側面から開発された MOPAC (半経験的分子軌道法) 法および著者らが開発した MT 法について述べる。また、「分子設計支援装置」CAChe システムによる分子設計の実用例をいくつか紹介する。

2. 基礎理論と半経験的分子軌道法¹⁾⁻³⁾

2-1 基礎理論

分子系のいろいろな物理量は、Schrödinger 方程式、

$$H\Psi = E\Psi \quad (1)$$

を解くことによって求められる。ここで、 H は全電子ハミルトニアンで、電子間の距離を r とし核 K の電荷を Z_K とするとき、

$$H = -\sum_i \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_i \sum_K \frac{Z_K}{r_{iK}} + \sum_i \sum_j \frac{1}{r_{ij}} \quad (2)$$

のように表わされる。また、 Ψ は波動関数で (1) 式を解くことによって与えられる。 Ψ を分子軌道関数で記述し (1) 式を解く方法を分子軌道法という。以下に分子軌道法について論ずる。

i 番目の電子の 1 電子分子軌道 ϕ_i とするとき、 ϕ_i は原子軌道 χ_i (LCAO) によって、

$$\phi_i = \sum_{K=1}^m C_{Ki} \chi_K \quad (3)$$

の様に近似できる。この ϕ_i を用いて、 n 個の電