

# 巨大生体分子の光応答機能 に関する理論的解析

- (代表者) 中村 振一郎 (株) 地球快適化インスティテュート  
東京工業大学大学院生命理工学研究科連携教授  
(株) 三菱化学科学技術研究センター
- 横島 智 (株) 地球快適化インスティテュート
- 高 玘 (株) 三菱化学科学技術研究センター
- 篠田 恵子 (株) 三菱化学科学技術研究センター
- 新井達郎 筑波大学大学院数理物質科学研究科

# 民間で計算科学に奮闘する立場からの提案です。 三菱化学 計算科学室

Organization: ~20人, PhD、学生

Mission: 1.三菱化学グループの課題を解決する。

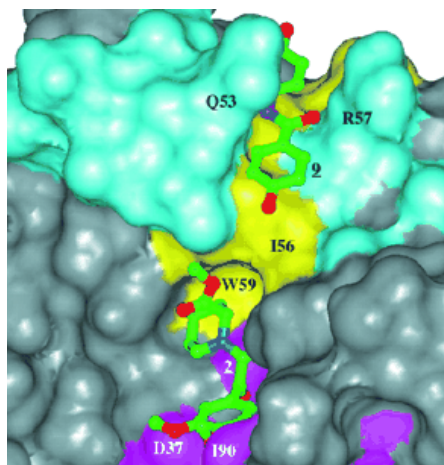
2. 先端技術を三菱化学グループ(150社)に提供する。



# 重点戦略分野

## 創薬支援

- ・ NMRによりタンパク質の構造を実験と協力して解析
- ・ NMRやCE MSにより代謝物を解析してDB化により創薬研究を支援し国際創薬企業を目指す



NMRによる構造解析例

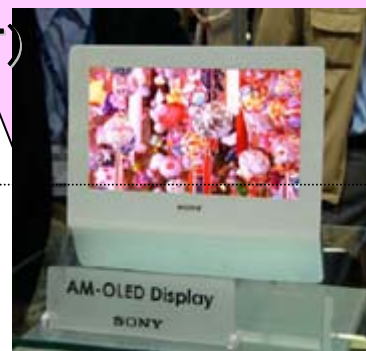
# 光機能材料 重点分野

Advanced communication capability



フレキシDisplay  
(有機EL+有機TFT)

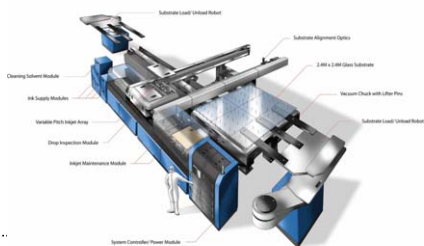
有機EL照明



有機EL-TV

2段ロケット戦略  
LCD材料→  
塗布型有機  
デバイス材料

LCD生産革命用材料



液晶用材料

CF用材料

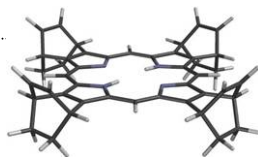


LCD-TV

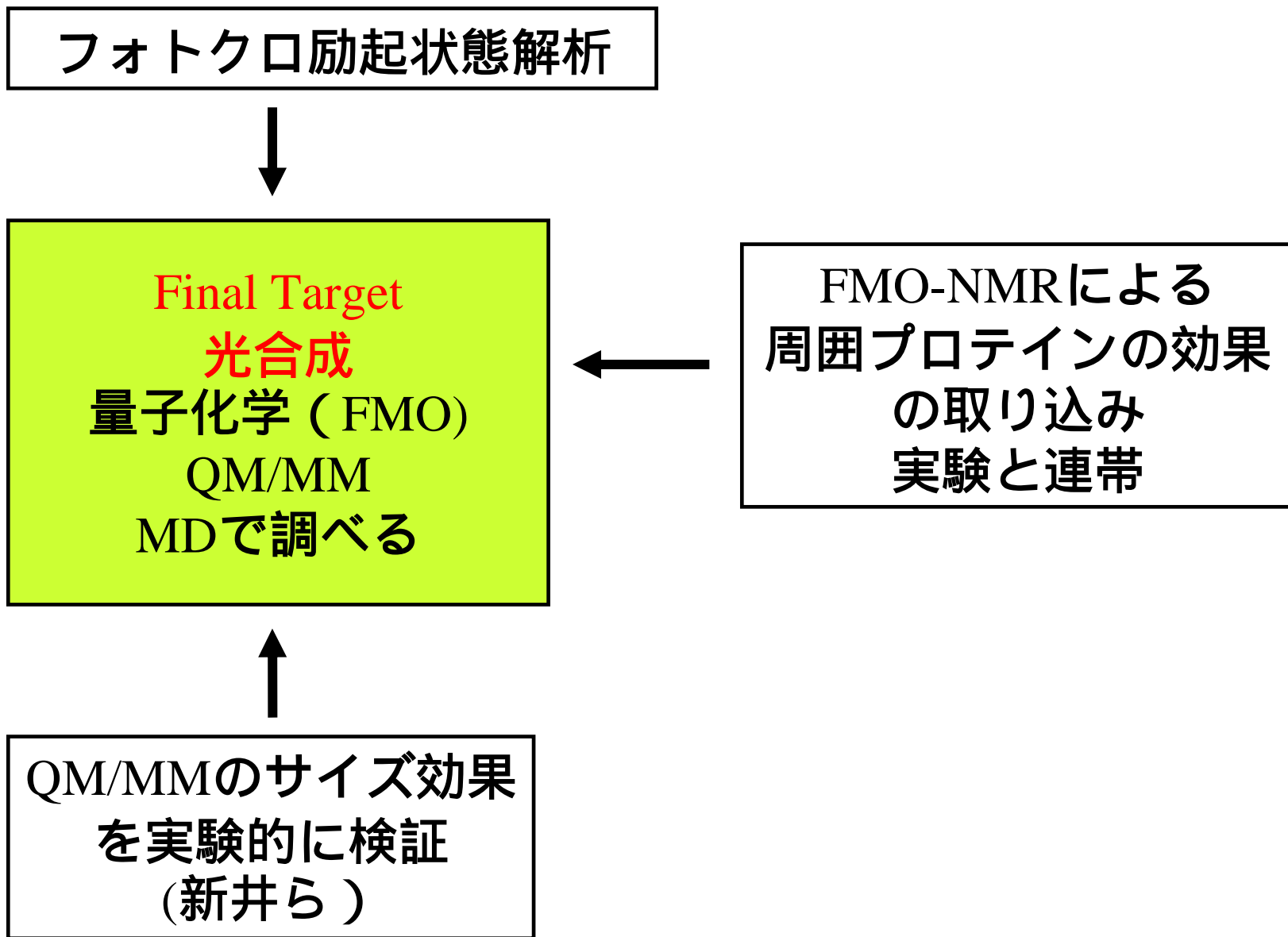
フトリソグラフィ

機能性色素

π共役系



光と色の技術





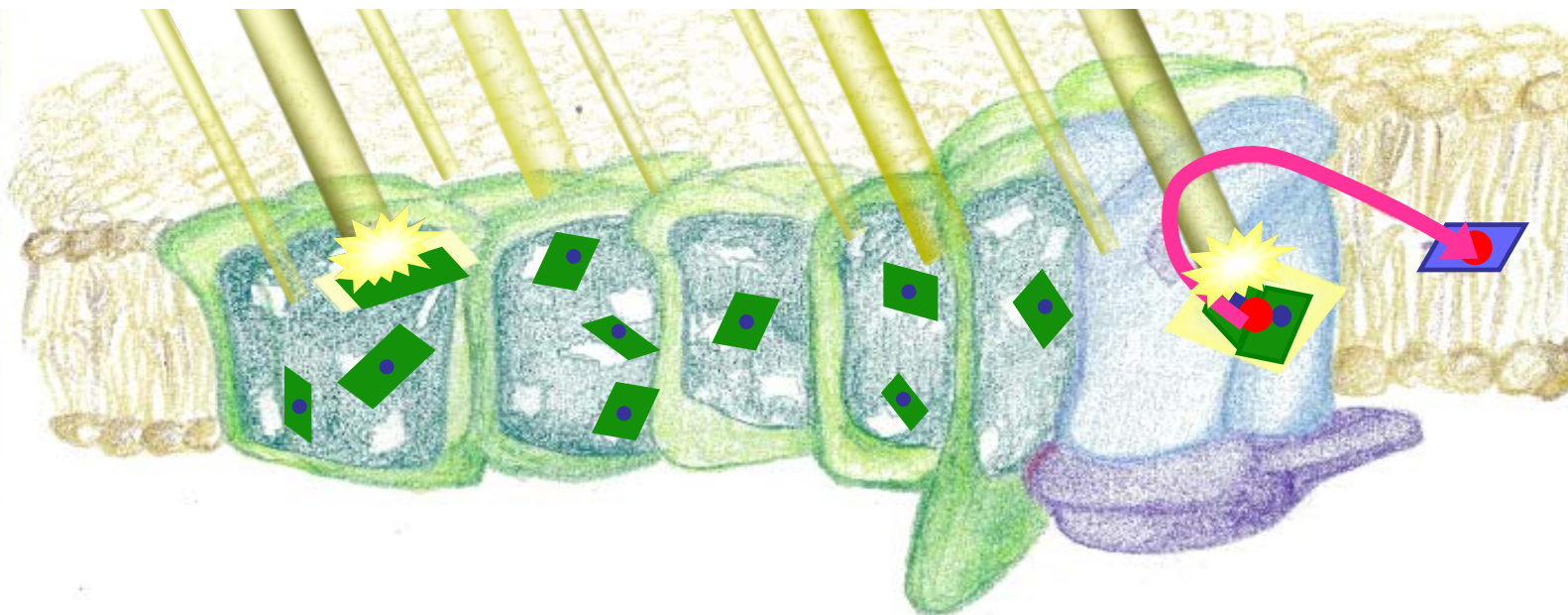
## 三菱化学の基礎研究 大事な焦点のひとつ

### 光合成メカニズムの 解明から光機能材料へ (太陽電池)



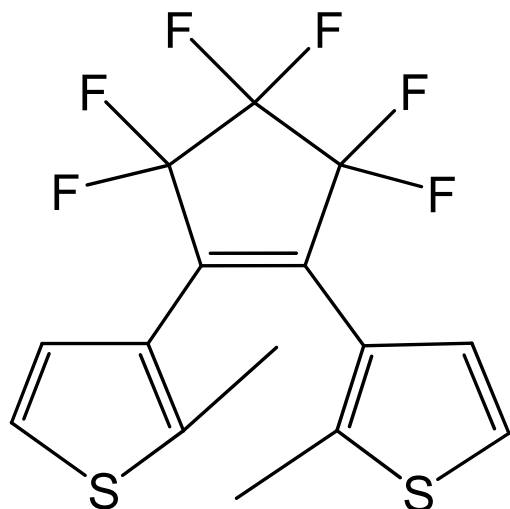
植物は、水と太陽光そしてCO<sub>2</sub>(二酸化炭素)でデンプン(炭水化物)をつくる。その知恵を見ならって、CO<sub>2</sub>を化学の原料にしていく——と小林氏は決意を語る。

小林社長の  
「財界」への  
インタビューか  
ら

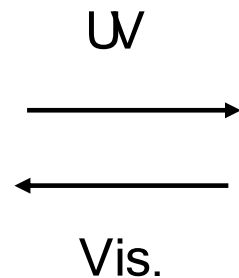
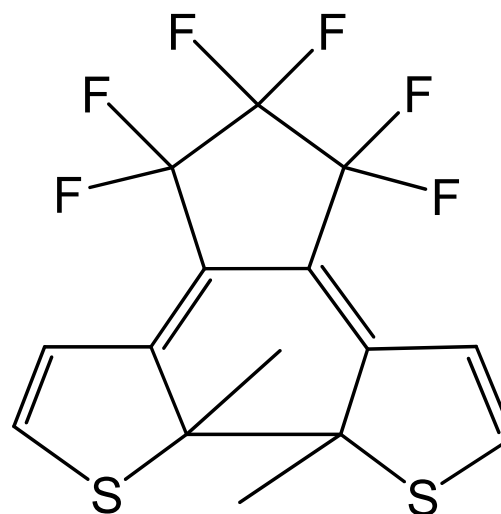


# ジアリールエテン (DAE)

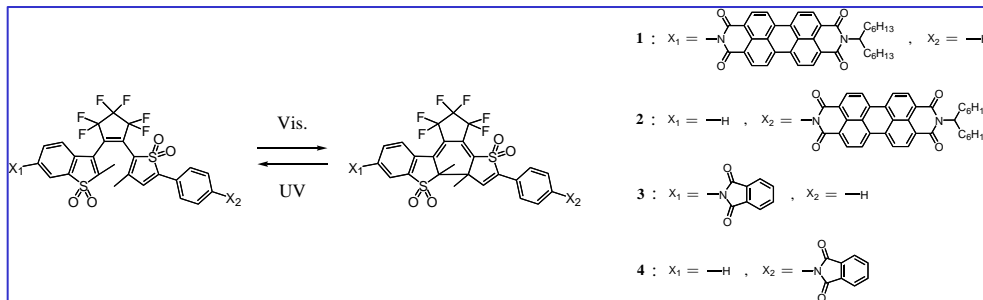
開環体



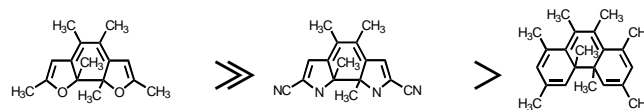
閉環体



# フォトクロミック分子 ジアリールエテン(DAE)

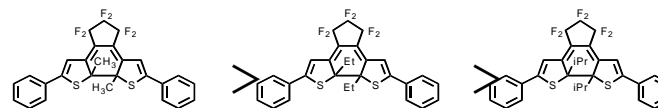


## アリール基



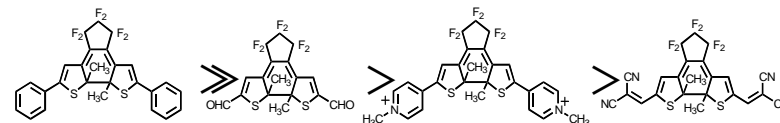
Stable

## 反応点置換基

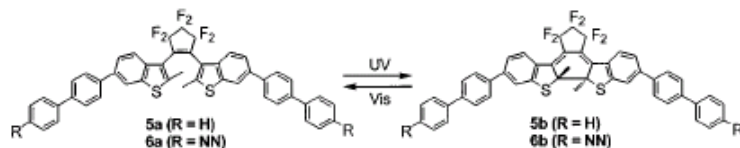
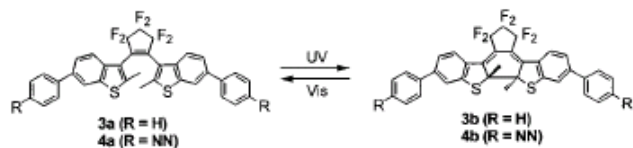
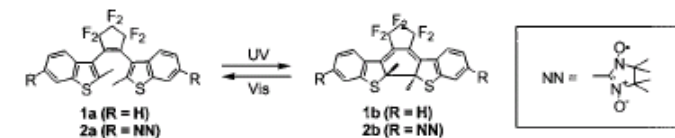


Stable

## 置換基



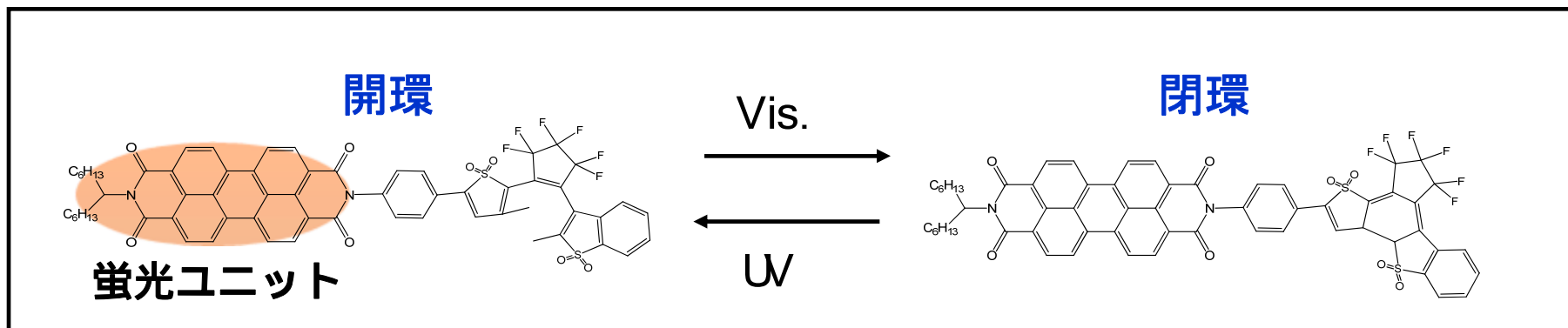
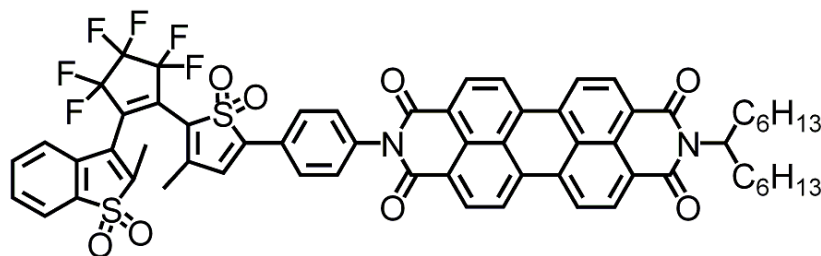
Stable



Scheme 1. Photochromic diarylethenes with two nitronyl nitroxides.

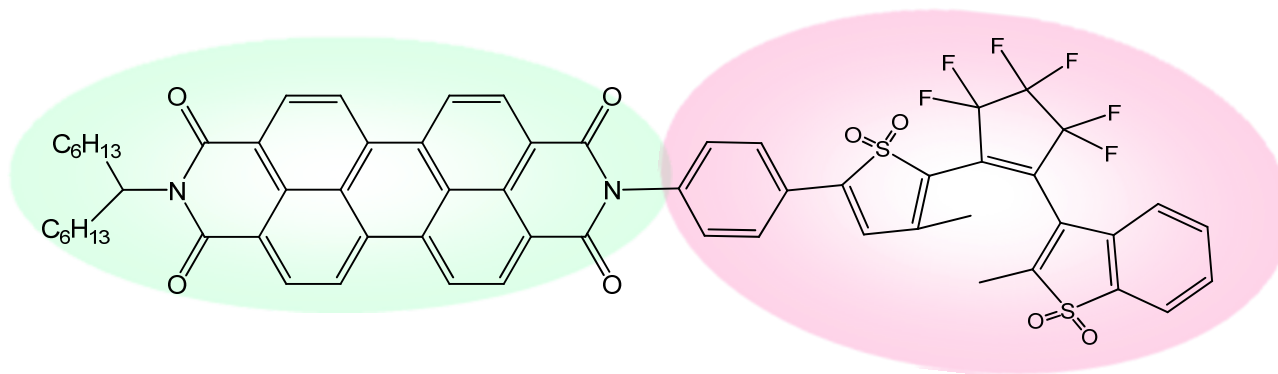


# 可視光で閉環反応するジアリールエテン



Y. Odo, T. Fukaminato, M. Irie *Chem. Lett.* **36** 240 (2007)  
T. Fukaminato et.al., (in press)

# フォトクロミック分子 DAE-PTB



蛍光ユニット (PTB)  
ペリレンビスイミド

フォトクロミックユニット (DAE)  
S,S-ジオキシドジアリールエテン

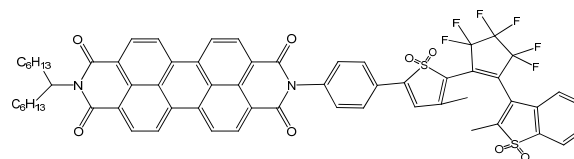
# 計算 Gaussian03

使用CPU数：1node(16cpu)

メモリ：20GB

## 計算対象

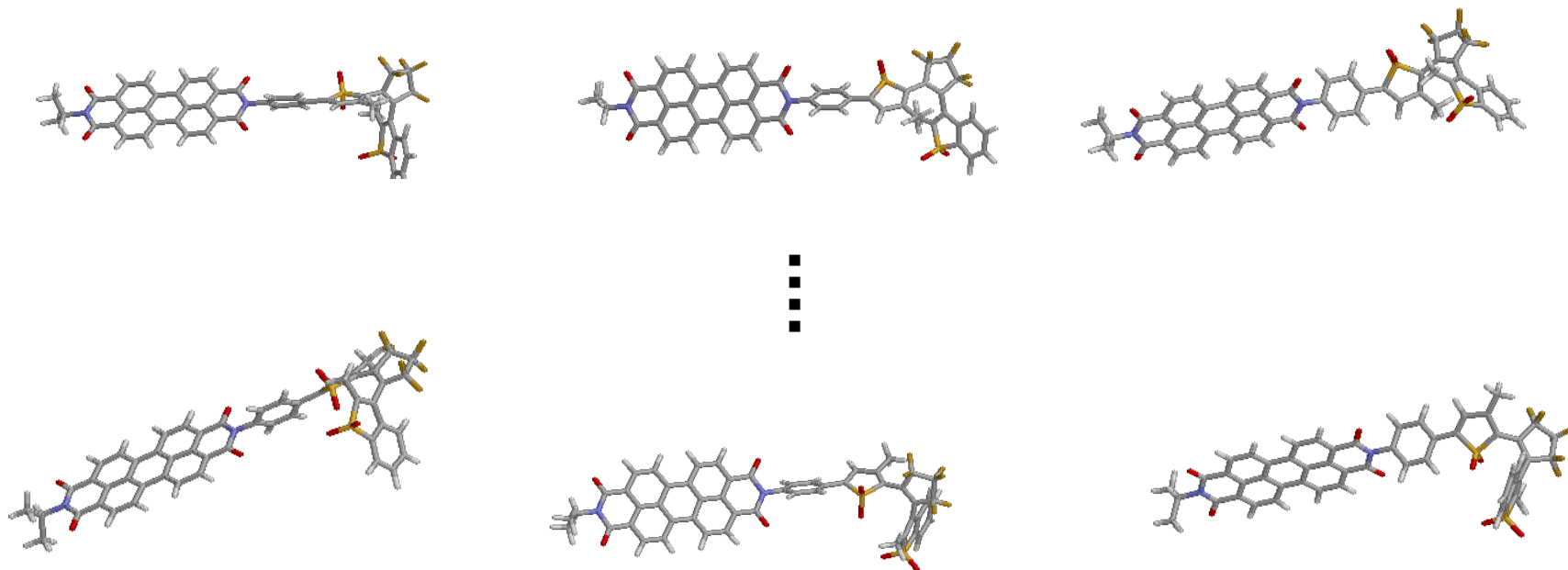
DAE-PTB分子 (100原子)



- 構造最適化 (B3LYP,RHF /6-31G\*)
- CIS /6-31G\* (S1)
- TDDFT (B3LYP/6-31G\*)

# 様々な構造異性体

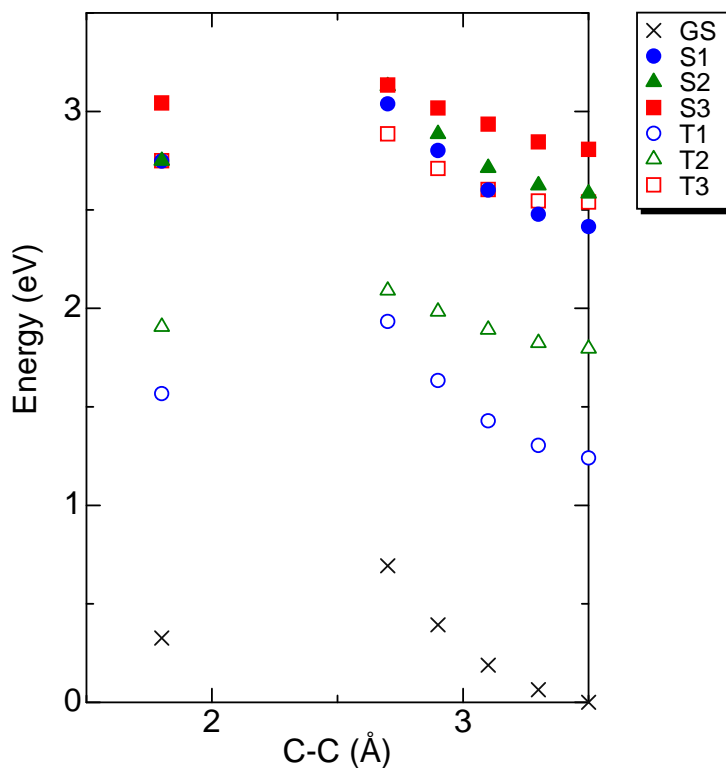
エネルギーの低いものでも10種類以上



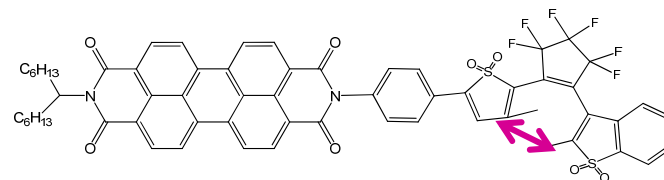
多量の計算が必要

最安定構造を用いた時の励起状態計算：実験の吸収波長を再現

# 固定したC-C bondでの基底状態と励起状態(S0からの垂直遷移)のエネルギー



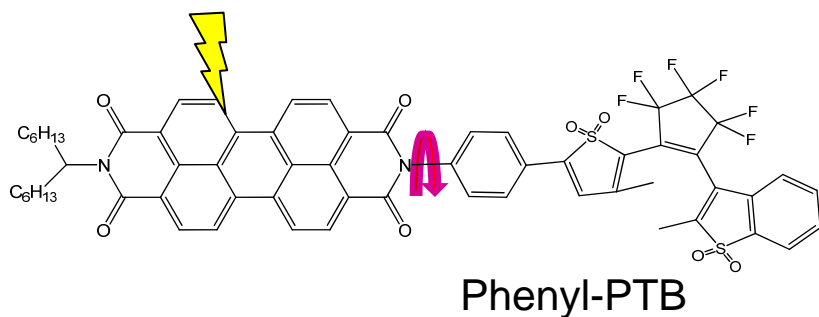
TDDFT(B3LYP/6-31gd)



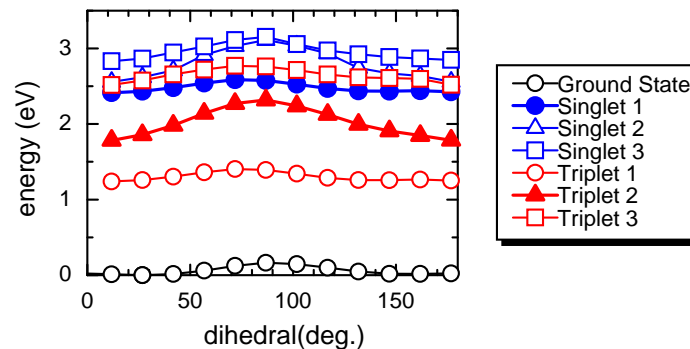
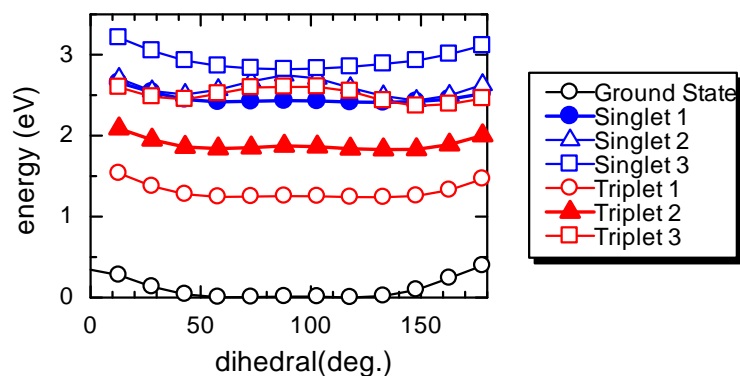
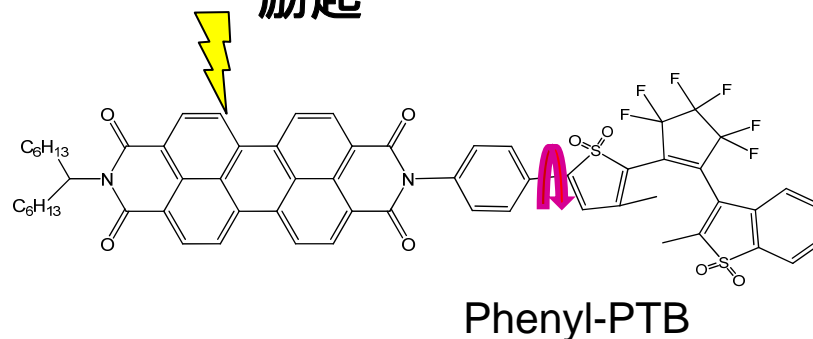


# 垂直遷移での回転に伴うポテンシャルエネルギー面

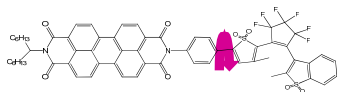
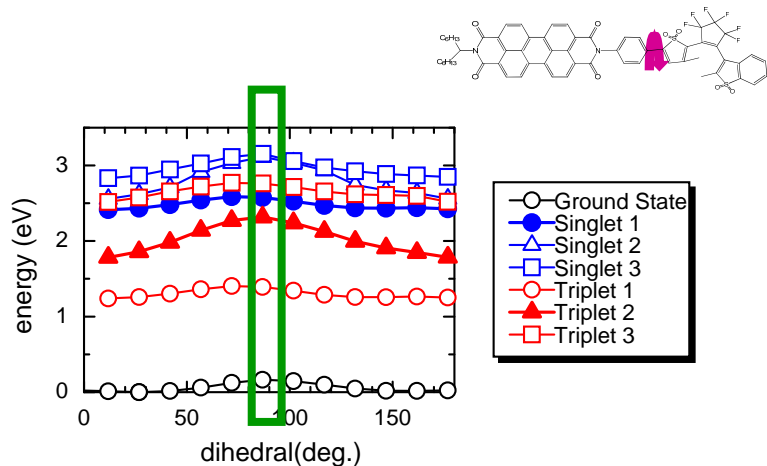
励起



励起

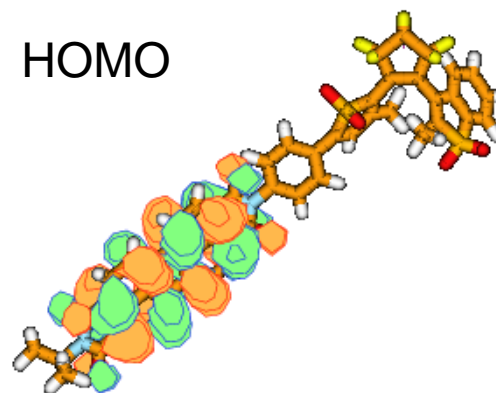


# 緑で示した角度の状態における軌道

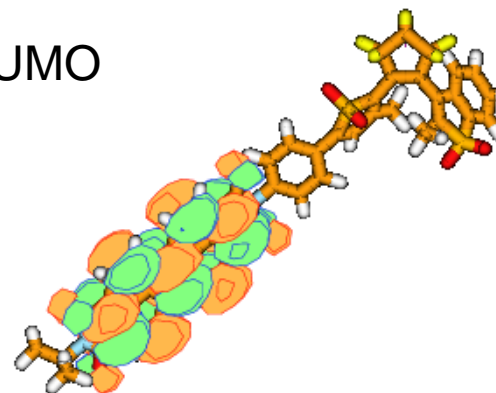


S1

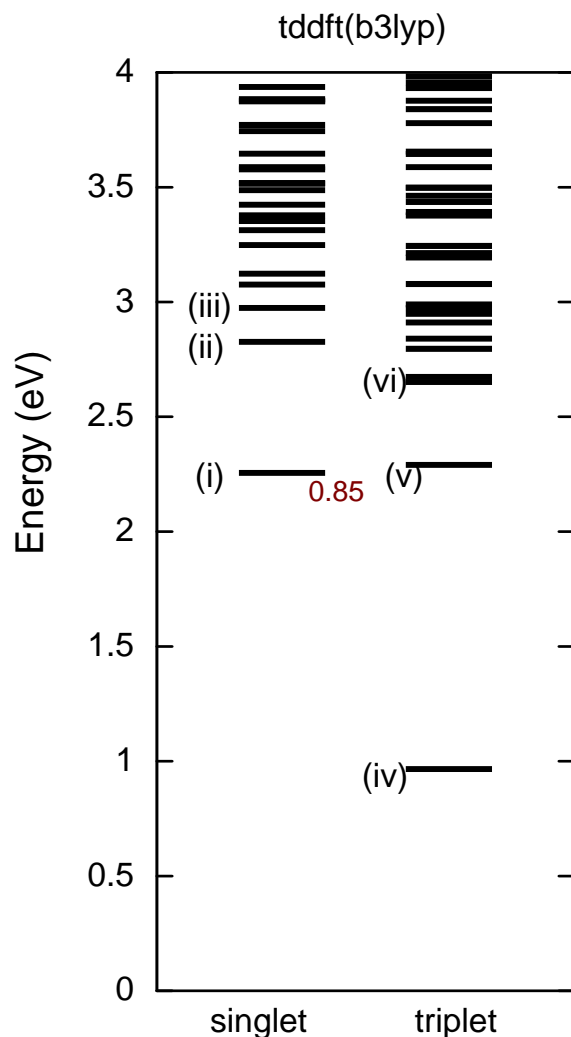
HOMO



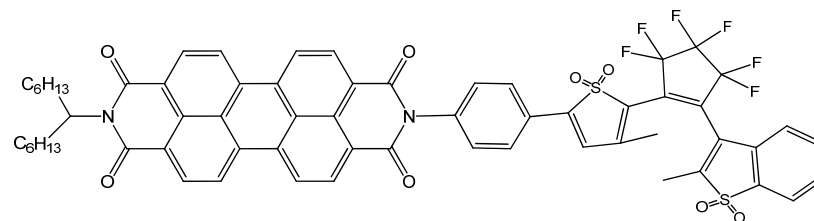
LUMO



# S1上で構造最適化後の励起エネルギー



## TDDFT(B3LYP/6-31gd)



(i) 2.2557 (eV)

(v) 2.2905 (eV)

最安定構造を用いた時の励起状態計算：実験値を再現

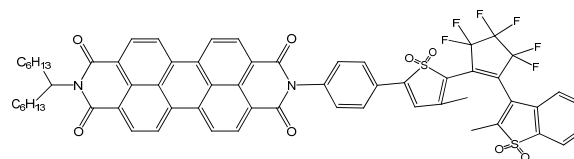
# T2Kでの計算 Gaussian

使用CPU数：1node(16cpu)

メモリ：20GB

## 計算対象

DAE-PTB分子（100原子）



## 計算時間

- 構造最適化 (B3LYP,RHF /6-31G\*) : 約20日
- CIS /6-31G\* : 約10日(S1)
- TDDFT (B3LYP/6-31G\*) : 12時間