

## 4E09 グリッド環境における計算ナノ科学の方法論

(自然科学研究機構・分子科学研究所) 平田文男

昨年4月より「超高速コンピュータ網形成プロジェクト (NAREGI)」と呼ばれる国家プロジェクトが国立情報学研究所を中核としてスタートした。「グリッド」計算は日本(世界)各地に散在するコンピュータを超高速ネットワーク(10ギガバイト/秒)で繋いであたかもひとつのコンピュータであるかのように使うというもので、いわば、「広域分散ヘテロ環境下の超並列計算」であると考えてもよい。このNAREGIの拠点のひとつとして分子研は「グリッド計算機環境の有効性を「ナノサイエンス」の分野で実証することを目的として研究を進めている。本講演ではNAREGIプロジェクトにおける分子研のミッションについて概説する。

「今、何故、計算ナノ科学」が重要なのか?この疑問に対する答えは二つの側面から与えることができる。ひとつは「学問的」動機である。ナノサイエンスが対象にする問題の空間的スケールは文字どおり $10^{-9}\text{m}$ から $10^{-6}\text{m}$ 程度で、それに応じて時間スケールも決まっている。この空間・時間スケールの問題に対する理論的アプローチとしてふたつの方向が考えられる。ひとつはボトムアップ、すなわち、分子科学的( $10^{-7}\text{m}$ – $10^{-9}\text{m}$ )アプローチであり、他はアップダウン、すなわち、物性論(無限系)的アプローチである。分子科学的アプローチはこれまで主として量子化学や分子シミュレーションに基礎を置き、小さな分子の電子状態や小さな多体系の物性(集合体としての性質)に関しては大きな成果をおさめてきた。しかし、このようなアプローチをナノスケールの問題に適用しようとすると忽ちに大きな困難にぶつかってしまう。すなわち、問題とする系のサイズや性質に対して計算機的能力が数桁から時として数十桁も下回ってしまうからである。一方、物性科学的アプローチは熱力学、流体力学、固体電子論、統計力学などに基礎を置き、分子サイズから見ると無限に大きな系に対して成功をおさめてきた。しかし、この方向からナノスケールの問題にアプローチすると別の困難にぶつかってしまう。このような方法では原子レベルでの性質を極度に単純化しているため、化学的な個性を犠牲にしてしまうからである。もし、ナノスケールの化学がナノサイズで初めて発現する機能を問題にするとすれば、これは致命的な欠陥である。金属はよく化学反応の触媒として使われているが、その場合、触媒作用に本質的な役割を果たしているのは特異な電子構造で、非局在化した電子がバンド構造をとっているところに特徴がある。そのような問題には先に述べた固体電子論(あるいはバンド理論)が有効である。一方、金属を構成している個々の原子はそれがバラバラに存在する時には、当然、電子状態は局在化しており、期待される機能を示さない。それでは、一体、金属集合体のサイズがどのくらいになった時に、どのような機能を示すのかという疑問が生じるが、このような疑問に理論的解答を与えることは計算ナノ科学の典型的な課題のひとつである。

「計算ナノ科学」のもうひとつの重要な対象と考えられるのは溶液内のいわゆる「自己組織化」の問題である。例えば、生体内における化学反応は「酵素」というナノサイズの分子を触媒として起きており、酵素機能が発現するためには蛋白質が「自己組織化(フォールディング)」して特異な構造をとらなければならない。金属が「触媒」としての機能(電子物性

)を示すためには金属原子が溶液中で集合してあるサイズになる必要がある。また、界面活性剤などの両親媒性分子が化学反応の反応場として有効であるためにはそれらが集まってミセルやベシクルなどのナノスケールの分子集合体を形成しなければならない。これらの例に見られるように、自然界にはナノスケールで初めて機能が発現する現象が数多くあり、これらの集合体ができるためには、まず、バラバラの分子や原子がエントロピーの障壁を越えて集まる必要がある。しかも、原子や分子がただ集まれば良いのではなく、例えば、「化学反応」という「機能」が発現するためには、「ナノ集合体」の化学的性質が原子レベルで制御されていなければならない。ナノ集合体を特徴づけるさらに重要な性質はそれら全部が同じサイズではなく、ある平均値の周りに分布していることである。自然界の化学過程はこのナノ集合体の「構造安定性」と「揺らぎ」を巧みに使ってコントロールされているのである。そして、ナノ粒子の構造安定性、揺らぎ、および機能はその置かれている溶媒環境によって支配されている。このような「溶液内分子の自己組織化」はある意味では非常に古い問題で、おそらく、前前世紀から数多くの理論的研究が行われてきた。しかしながら、それらの研究はほとんどが現象論（熱力学、流体力学、電磁気学）のレベルであり、原子・分子レベルの化学的な性質を問題にするナノサイエンスに対してはほとんど無力であると言わざるを得ない。

以上、二つの例で説明したようにナノスケールの問題に対しては従来の伝統的な理論はほとんど無力であり、ナノスケールの問題を解明するためには新しい理論を開発するか、あるいは従来の理論や方法をいくつか組み合わせた新しい方法論を構築することが本質的要請となる。本プロジェクトの「学問的な」意義はまさに従来の理論や方法論の枠組みを越えた新しい方法論をナノサイエンスの分野で構築することである。

ところで、ナノ計算科学にはもうひとつの重要な意義がある。それはナノレベルで発現する様々な機能の解明が産業や医療などの技術基盤の確立に大きな影響を与える可能性である。ナノ科学のもつこの側面はすでに電子工業への応用の可能性が「分子素子」や「量子ドット」などの言葉を通じて華々しく報じられているが、もし、これらの試みが現実のものになった場合、測りしれない影響を産業や医療に与えることはもちろんのこと、「トランジスタ」や「ナイロン」の発明が「固体物理」や「高分子」という大きな科学の分野を作り出したのと同様の効果を学問にフィードバックすることは疑いない。本講演ではナノサイエンスが医療に大きな影響を与えるかもしれない例として最近のトピックスをひとつ紹介する。