



談話室

分析化学と計算科学の融合

近年の数理科学や計算化学の発展は著しい。筆者が学生時代には、今のように時間依存密度汎関数理論や巨大分子を含む生体内で起こる様々な生命現象などが幅広い分野の研究者によって緻密に計算されるような時代が来るとは想像できなかった。現在では、実験系の研究室でも密度汎関数法による電子状態の計算が実験結果を支持する重要なデータの一つとして不可欠となっている。

筆者の分野では、マクスウェルの方程式を基にした時間領域差分法 (finite difference time domain (FDTD) 法) による電磁解析が行われ、あるナノ物質に光が照射されたときに、局所的な電場や磁場がどのように時間発展していくかについて、ナノ空間を直接見に行っているかのようにシミュレーションすることができる。まさにコンピューター上で実験を行っているという表現が正しいかもしれない。したがって、物理の研究者には、コンピューターシミュレーションで計算できてしまうものはもはや実験を行う必要がないと断言する人もいる。

一方、物理分野では、マルチフィジックス体系が注目され、あらゆる物理が混在する複雑系の計算ができるようになってきた。分析化学分野でも馴染み深い流体、拡散、伝熱などに加えて電極反応や波動光学なども組み込むことができる。一例として、2018 年のノーベル物理学賞にもなった Ashkin 博士が発明したレーザーピンセット技術においてもマルチフィジックス解析が有効である。レーザービームを集光照射すると焦点に光の放射圧が働き微小物質が捕捉される。この技術により生体材料の自在な操作が可能となり、集光レーザーは光ピンセットと

して働く。最近では、ビーム成型・光制御に関する技術が発展し、分子レベルのサイズのナノ物質の捕捉なども明らかになっている。しかし、光の放射圧である勾配力や散乱力だけではなく、放射圧における共鳴の効果（吸収力）や熱対流・熱泳動などが同時に働き、系が複雑である。温度の効果は、切っても切り離せられない関係であることから、実験ではなるべく温度の影響が出ないような条件を見つけたり、対照実験を行って温度の効果が影響しないことを証明したりする。大阪市立大学の坪井らは、様々な物理が混在する系を積極的に利用して光ピンセット技術における種々の化学的応用を明らかにした。また、大阪府立大学の飯田・床波らは、分析化学分野に光物性物理を組み込んだマルチフィジックス解析を取り入れて精力的に研究を展開している。

最先端の分析化学・計測化学の分野でも、計算化学との融合が不可欠である。理化学研究所の今田・早澤・金らは、走査型トンネル顕微鏡 (STM) の探針を利用した局在光電場により Ag(111) 面上の NaCl に吸着した銅ナフタロシアニン単一分子のラマンイメージングをプラズモン増強効果により測定することに成功し、3 種類の振動対称性を持つ振動モードの明瞭な画像を取得した。本研究において、北海道大学の岩佐・武次らは探針形状、NaCl, Ag(111) の空間配置や共鳴条件を考慮した電磁解析、および密度汎関数法によるスペクトルの帰属などを行い、共鳴ラマン散乱を支配している選択則を明らかにするとともに、サブ分子分解能のラマン顕微鏡の開発に貢献した [*Nat. Nanotechnol.*, **15**, 105 (2020)]。また、ルーヴェン・カトリック大学の Hofkens らとナイメーヘン・ラドバウド大学の Blank らは北海道大学の Li・小松崎とともに単一分子蛍光による内因性および外因性ノイズに埋もれたデータについて、従来の解析法とは異なる情報理論に基づく変化点解析を適用して酵素反応の触媒イベントの時系列を追跡し、多くの一分子酵素反応は構造多型性に由来する dynamic disorder を示すというこれまで考えられてきたことが正しくないことを示唆する解析結果を得た [*ACS Nano*, **6**, 346 (2012)]。

分析化学では、昔からデータ解析には重点が置かれてきた。一方、計測技術が発展し、サブ分子レベルの分解能や複雑系を取り扱う極限計測を達成するためには、従来の分析化学に用いられてきた解析技術だけではなく、最先端の情報科学、数理科学や計算化学などを取り入れる必要性が出てきた。計算科学は、今後さらに発展していくと予想されるが、分析化学研究の進化にも大きく影響を及ぼすことが期待される。

〔北海道大学大学院理学研究院化学部門 上野貢生〕