

# 化学反応の全貌を追う：コンピュータケミストリーが開く未来

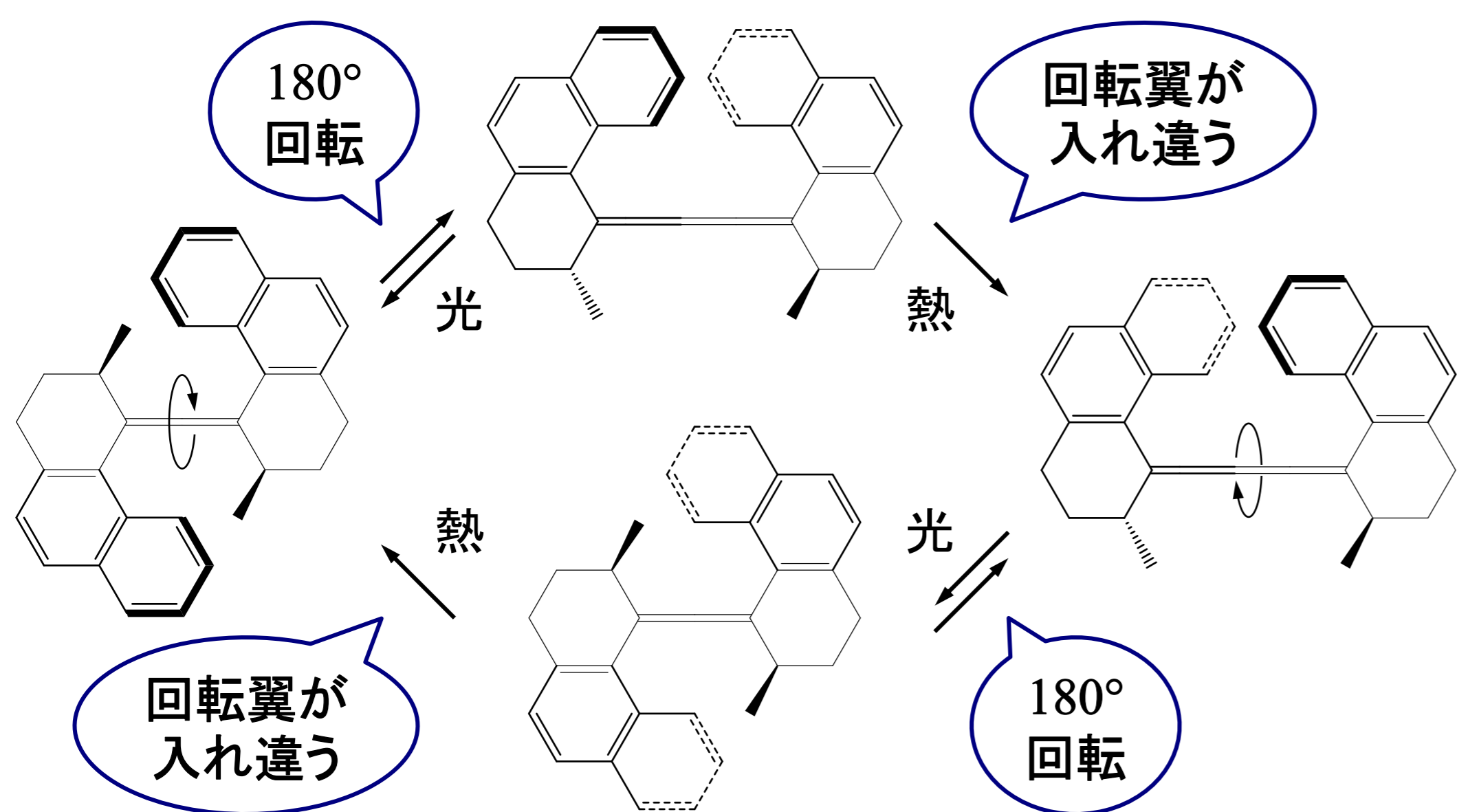
東北大学大学院理学研究科 化学専攻数理化学研究室 菅野 学

## 分子マシン的高速運動を追う！ 「分子モーター」の光による回転駆動

2016年ノーベル化学賞「分子マシンの設計と合成」  
分子単位で制御された機械的運動を実現する

### 光駆動分子モーター

B. Feringa 教授(ノーベル賞受賞)と本学の原田宣之名誉教授らが開発

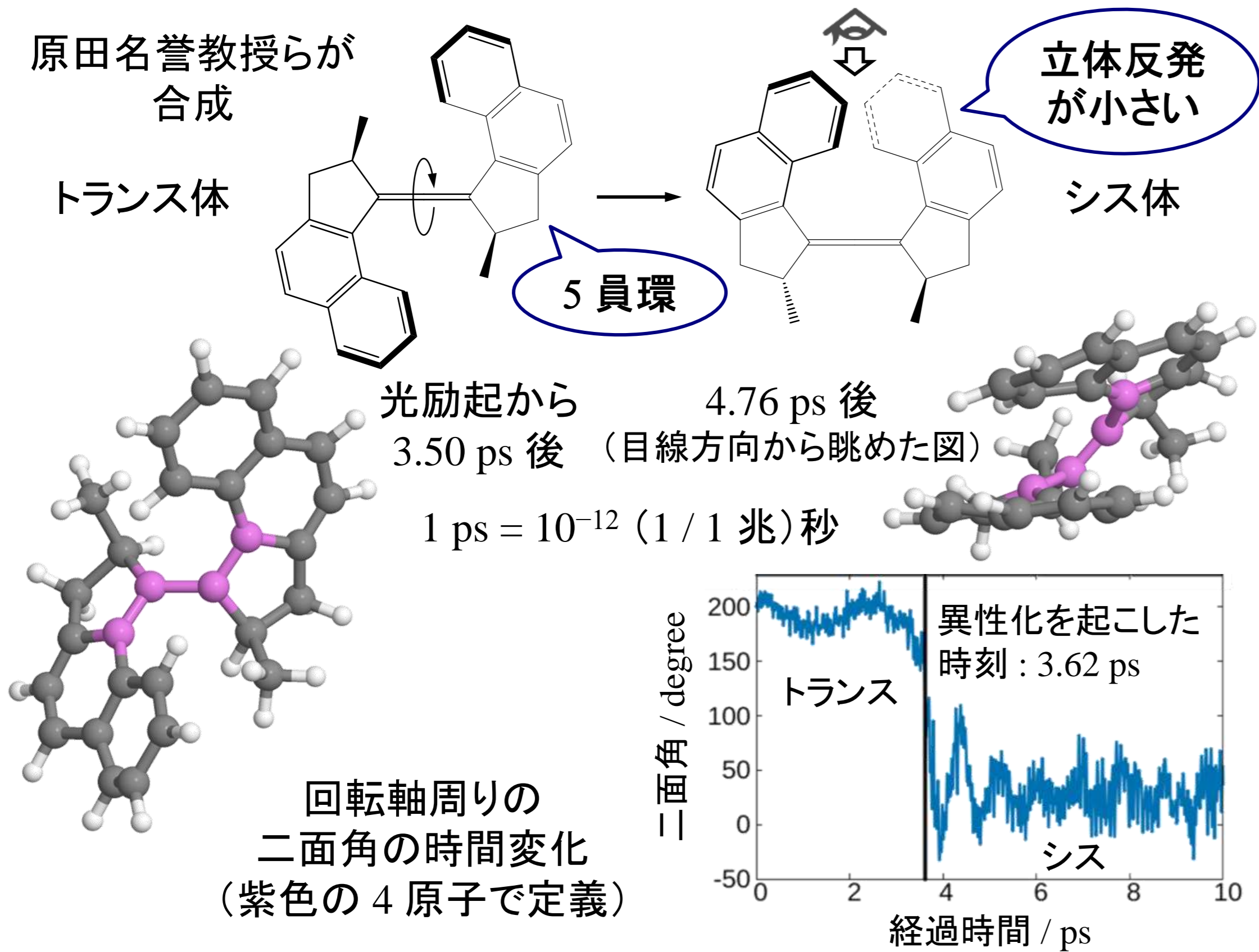


一方向回転による機能発現の可能性 → 詳細な回転機構は未解明

### 回転の第一段階(光異性化反応)の機構を探る！

### 改良型分子モーターの光異性化シミュレーション

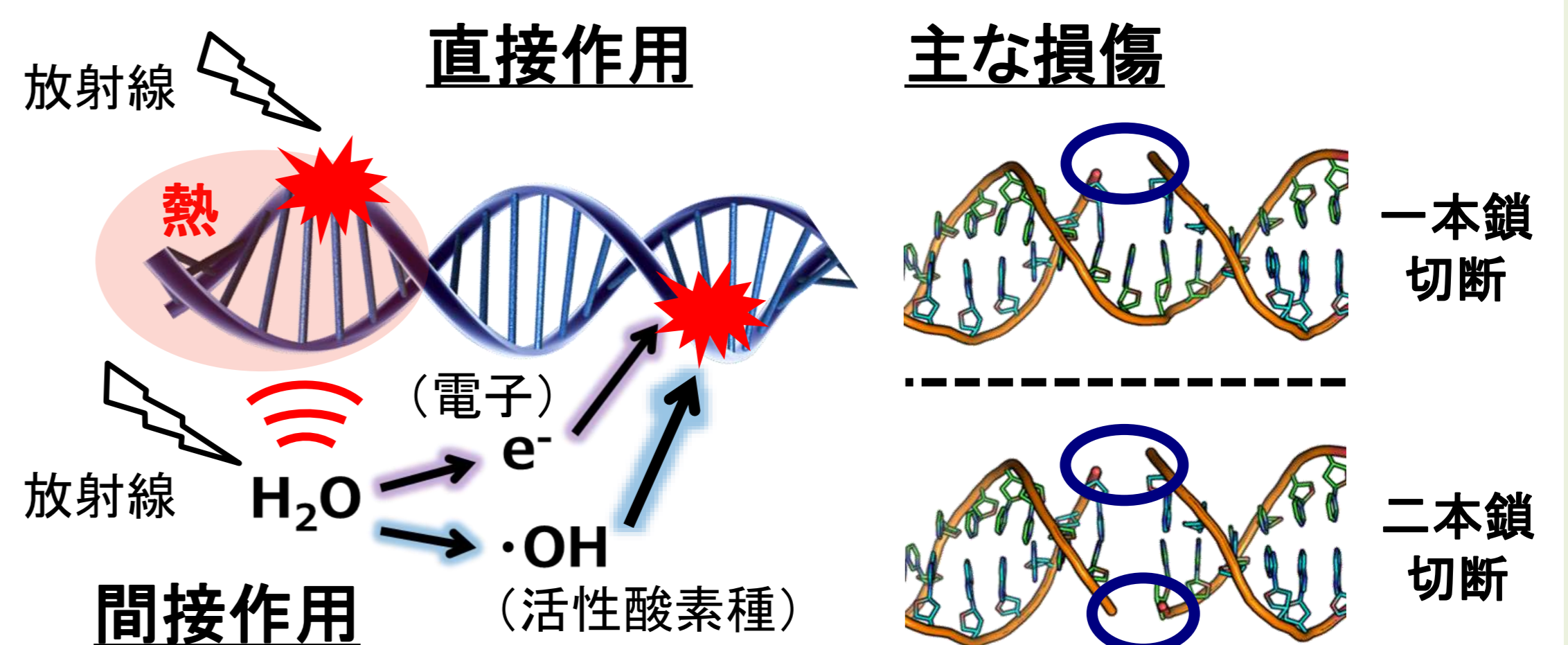
原田名誉教授らが合成



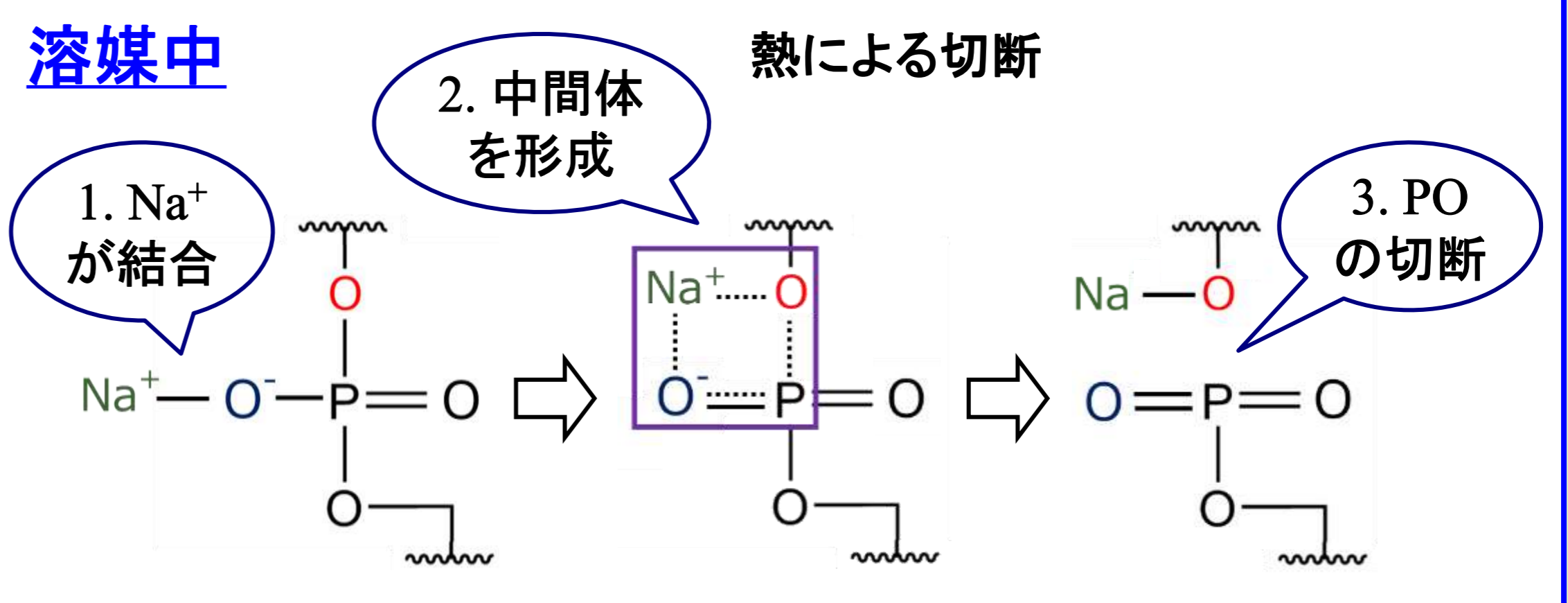
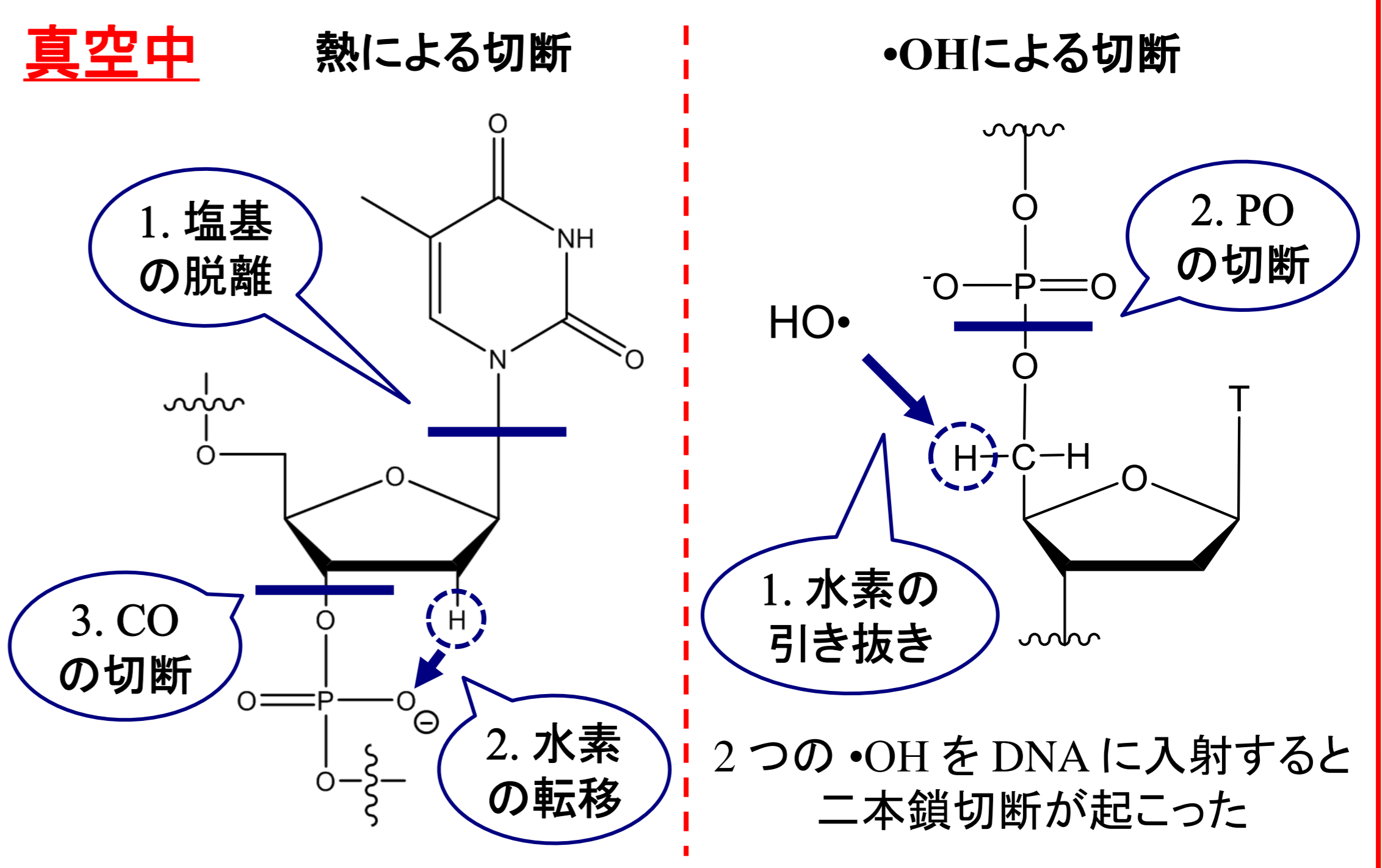
極めて短い時間(数 ps)で異性化を起こす経路を発見

## 放射線が生体に及ぼす影響を追う！ DNA 二重らせんの切断機構を予測

放射線は遺伝情報を担う DNA の損傷を引き起こす  
→ 生体に発がんなどの悪影響



### DNA 二重らせんの切断過程をシミュレーション！



放射線が発生させる因子(熱 / ·OHラジカル)や環境によって異なる DNA 二重らせんの切断機構を発見

## 将来の展望：計算機の高性能化によって期待できる成果

化学反応の最初から最後までを実験室時間スケールで完全予測  
新規反応や分子機能の発見 光化学反応の収率を最大にするレーザーパルス設計

大規模シミュレーションによるナノテクノロジーやケミカルバイオロジーの推進  
光駆動分子マシンの開発と応用 未知の人工 DNA の安定性・機能性の評価

