

成果の概要 / 市川和秀

2010 環太平洋国際化学会議(Pacificchem2010)はアメリカ合衆国ハワイ州ホノルルで2010年12月15日—20日に開かれ、7カ国の化学会によって主催された。これは5年に一度開催される会議シリーズの6回目にあたり、化学、技術、地球環境をテーマに開かれ、環太平洋地域の研究者間の共同研究を促進し、世界全体の生活の質の向上を目的とするための最新の成果が発表された。会議は13の領域に分かれて237のシンポジウムから構成されており、全体では13,000を超える口頭・ポスター発表が行われた。

私が発表を行ったのは、物理 / 理論 / 計算化学領域のなかの、「実在系と化学反応の分子理論 (Molecular Theory for Real Systems and Chemical Reactions)」というシンポジウムである。このシンポジウムは、榊茂好教授らにより組織され、分子理論とその実在系への応用についての近年の進展が話題とされた。実在系が理論化学にとって重要であるのは次の様な理由である。最近の電子状態理論によって気相中の中規模の分子については正しく明確な計算ができるようになってきたが、結晶、凝集物、溶液といった実在系における分子についての理論はまだ完全ではない。このような系は周囲の環境から多大な影響を受けており、多くの場合可変的で動き回っている。さらに、励起状態にある分子も実験と理論の双方において興味深い研究目標の一つである。数多くの実験家が遷移金属、ランタノイド元素、アクチノイド元素といった重たい元素を含む様々な化合物を調べている。このようなことをふまえて、このシンポジウムでは電子状態理論(ポストハートリーフォック理論と密度汎関数法のいずれも)の最近の進展と上に述べたような実在系への応用が強調された。具体的には「電子相関が大きい重元素系の理論の進展」、「励起状態理論の進展」、「溶媒効果を入れた電子状態理論」、「複雑な系における化学結合の性質、機能、電子状態」、「反応動力学と電子動力学の分子理論」、「複雑系の化学反応」の話題が議論された。

私の発表は、化学結合の新しい理論に関するもので、`Electronic stress tensor analysis of inverted sandwich type dinuclear transition metal`

complexes”(「逆サンドイッチ型 2 核遷移金属錯体の電子ストレステンソル解析」というタイトルで行った。内容としては次のようなものである。遷移金属錯体は、無機物質と有機物質の優れた特徴を併せ持っており、次世代の触媒や電子材料として注目を集めている。近年逆サンドイッチ型錯体が Tsai et al (J. Am. Chem. Soc., 129, 8066, 2007) によって合成され、またそのモデルの電子状態及びスピン状態について黒川らによって理論的研究が行われ(J. Phys. Chem. A 2010, 114, 1191)、興味深い電子状態や結合性が明らかとなった。本研究では逆サンドイッチ型錯体の化学的性質について新たな知見を得るために、第一原理計算で得られた電子状態から構成される電子のストレステンソルを用いて、逆サンドイッチ型錯体における結合の性質を解析した。特にベンゼン環と金属原子(V, Cr, Mn, Fe)との結合の強さを電子ストレステンソルに基づく、近年われわれのグループによって提案された結合次数を用いて評価した。遷移金属錯体のような複雑な電子状態についてもわれわれの方法は有効であり、従来からの分子軌道の方法と一致した金属の種類による傾向が示された。これは今後の電子ストレステンソルに基づく化学結合理論の進展のための重要なステップになったと考えている。また、ストレステンソルという量に注目して分子系を研究している研究者は非常にマイノリティで、特に国内では他に見られない状況である。今回の会議では、電子ストレステンソルに関する研究を行っている、マックマスター大学の Paul Ayers 教授とお会いすることができた。お互いに論文を引用するだけで知っていた相手と顔を合わせて議論ができたことはとても貴重な機会であった。

最後に、このような発表の機会と海外の研究者との交流の機会を提供して頂いた京都大学教育研究振興財団に感謝の意を表したい。