

2E13

正確なシュレーディンガー解に基づく理論合成化学法—正確な化学理論として

(量子化学研究協会研究所) 中辻 博、中嶋 浩之、黒川 悠索、宮原友夫

Theoretical synthetic chemistry method as chemical theory of Schroedinger accuracy

(Quantum Chemistry Research Institute)

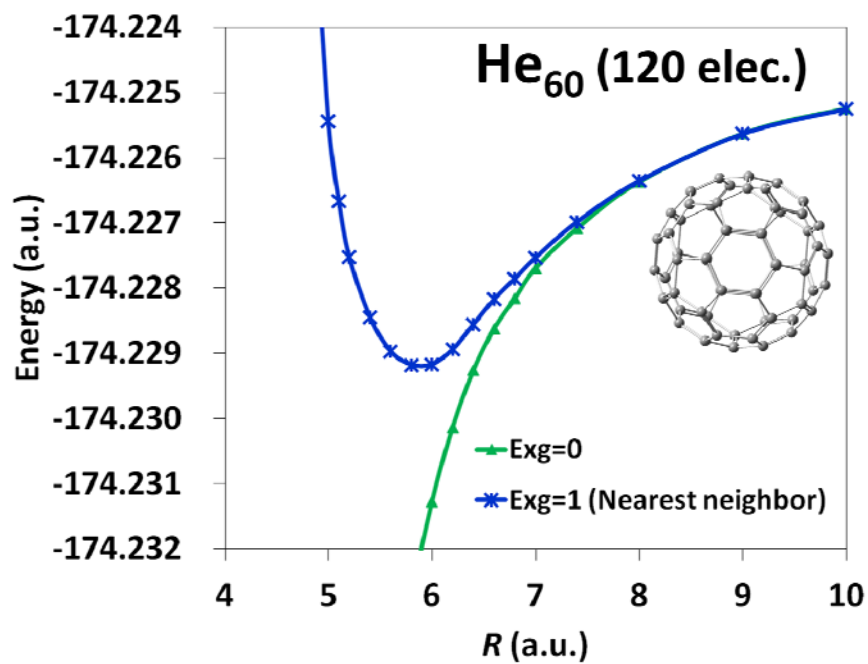
Hiroshi Nakatsuji, Hiroyuki Nakashima, Yusaku I. Kurokawa, Tomoo Miyahara

【緒言】私たちが分子の本性や新しい化合物の合成をデザインするときまず考えるのは分子構造式であり、化学反応式である。これらは化学を支える最も大切な化学理論であり、しかもその単純さにもかかわらず、私達はいつもこれらの式がいかに正しい概念であるかに、驚かされます。この式によって、化学者はあたかも分子を見たかのごとく考え、あたかも化学反応を目の当たりにしたかのごとく、反応を設計します。実際には、そのようなことは全くあり得ない事でありながらです。これらの化学理論の基礎は Dalton 以来の原子概念と、その transferability にあります。ここで提案する理論合成化学法 (Theoretical Synthetic Chemistry Method (TSCM)) は、このような分子構造式や化学反応式に基礎を置き、その上に Schroedinger 精度の波動関数とエネルギーを付与して、単純でありながらより強固な化学理論を創り上げることにあります。つまり理論合成化学法では分子構造式や化学反応式ひとこまひとこまに正確な波動関数とエネルギーを付与して、各状態のエネルギーと性質をシュレーディンガー方程式の解の精度で計算できるようにしようとするもので、私たちの理論的背景があって始めてできるもので、大きな可能性を秘めていると思います。ここでは、この新しい化学理論について述べたいと思います。

【理論合成化学法】理論合成化学法では、これらの化学式の原子やフラグメントの位置に、それらの原子の正確な波動関数を置きそれを relax して分子を構成します。その方法には、TSCM(orthodox) 法と TSCM(reorganization) 法があります。前者は、正確な原子の波動関数の積を出発関数として、自由完員関数法の常法に基づき正確な系の波動関数を計算するものです。これに対して、TSCM(reorg) 法では、正確な原子の波動関数の積から出発して、それを系のハミルトニアンの中かで相互作用させ reorganize させることによって、系の正確な波動関数を得るものです。その背景には、正確な原子の波動関数は全系の波動関数を構築するためのあらゆる数学的自由度を兼ね備えているとの認識があります。

【応用】図は helium fullerene He_{60} の構造を理論合成化学法で研究した例です。図中に示したフラーレンの各原子の位置にヘリウム原子を置き、TSCM(orthodox) 法によ

ってこの最安定な構造を求めたものです。これによって、平衡核間距離は $R=5.8$ au (3.1 Å)、結合エネルギーは 3.8kcal/mol と計算されます。



helium fullerene He₆₀ の構造