

# 機能性分子材料設計のための高精度かつ高効率な相対論的分子論の展開

森 寛敏 / MORI, Hirotooshi

理学部化学科

■専門分野 理論化学, 計算化学, 量子化学  
■キーワード 電子状態, 相対論効果, 分子揺らぎ, 機能物質化学, 生物物理化学

連絡先 mori.hirotooshi@ocha.ac.jp  
https://sites.google.com/site/qmsforest/

## 研究内容

### ■概要（背景・目的・内容）

- ・機能性物質の電子状態設計（有機 EL・スピントロニクス・レアメタル回収剤・水素吸蔵材料）
- ・生体微量元素の物理化学
- ・上記テーマ遂行に必要な新奇電子状態理論の開拓

### ■応用・将来展望

物質の性質は価電子の振る舞いによって決まります。その振る舞いは、物質中に含まれる電子間の相互作用＝電子相関と、重原子系で特に重要となる相対論効果により決まることが知られています。電子相関と相対論効果を同時に考慮し、電子の振る舞いを予言するには Dirac 方程式と呼ばれる相対論的量子力学の方程式を解かねばなりません。しかし、Dirac 方程式は、その複雑さ故、ごく小さな分子についてののみしか解くことができません。我々はこの困難を解決する新しい理論として相対論的モデル内殻ポテンシャル法（MCP）を提唱し、その拡張と応用により重元素に関連した機能性物質の創成や生命現象の解明に取り組んでいます。

機能性材料ではしばしばレアメタルとよばれる安定供給の難しい重元素が使われます。レアメタルから脱却し、新たな材料を創成するためには、電子相関と相対論効果を同時に取り扱った精度良い電子状態シミュレーションを実用的な時間以内に実施することが肝要です。我々は、電子相関と相対論効果の精密見積もりを短い CPU 時間で実施できる MCP 理論を基盤に、新しい有機 EL 発光材料・水素吸蔵材料などの探索と、それに関連する生体微量元素の化学に挑戦中です。重元素を含む機能性分子材料の電子状態を精査することで、レアメタルフリー材料の創成に取り組んでいきます。

### ■活動実績

## 主要研究成果

- ・ Tanaka M., Mori H.,  
Electronic Structures of Platinum(II) Complexes with 2-Arylpyridine and 1,3-Diketone Ligands: A Relativistic Density Functional Study on Photo Excitation and Phosphorescent Properties,  
J. Phys. Chem. C, in press (2014) .  
DOI: 10.1021/jp500484a
- ・ Matsuda A., Mori H.,  
Theoretical study on hydration structure of divalent radium ion using fragment molecular orbital-molecular dynamics (FMO-MD) simulation,  
J. Solution Chem., in press (2014) .
- ・ Matsuda A., Mori H.,  
A quantum chemical study on hydration of Ra(II): Comparison with the other hydrated divalent alkaline earth metal ions,  
J. Comp. Chem. Jpn, 13, 105-113 (2014).
- ・ Mori H., Kojima R., Mochizuki Y., Uenohara W., Umezawa I., Matsushita N.,  
Importance of spin-orbit coupling effect and solvent effect in electronic transition assignments of PtII complexes: in the case of cis/trans-[PtCl2(NH3)2],  
J. Mol. Struct., 1035, 218–223 (2013).