

理論化学の新展開

中井 浩巳^{1,2,3}¹早稲田大学先進理工学部化学・生命化学科 (〒169-8555 東京都新宿区大久保 3-4-1)²早稲田大学理工学研究所 (〒169-8555 東京都新宿区大久保 3-4-1)³JST-CREST (〒102-0075 東京都千代田区三番町 5)

量子力学に基づいて化学を理論的な立場から研究しようとする学問、すなわち理論化学が誕生したのは 1927 年である。80 年以上の歴史において、理論化学は化学分野全体に様々な役割を果たしてきた。今後もその役割が拡大することは疑う余地もない。本講演では、講演者の独自の視点から理論化学の歴史を振り返り、新たな展開として何が求められているかを議論する。特に、最近の理論化学の発展に関しては、講演者の研究成果なども紹介する。

まず量子化学を中心とした理論化学の歴史を、1927 年から 1950 年代の第 1 期、1960 年代から 1980 年代の第 2 期、そして、1990 年代から 2010 年までの第 3 期の 3 つに分類する。第 1 期は理論化学の創成期で、電子の波動性という概念が導入され、経験的に見出されていた化学原理に対して理論的な裏付けがなされた。同時に新しい化学原理も多数発見された。しかし、大胆な近似のため本質を表せる化学現象に限られていた。第 2 期は理論化学の確立期ともいべき時期で、量子化学理論の基盤が確立され、コンピュータを用いた計算化学も産声を上げた。高精度な励起状態計算である SAC-CI 法(1978 年)や今日 gold standard と評される CCSD(T)法(1989 年)もすでにこの時期に開発されている。第 3 期はまさに発展期で、コンピュータの飛躍的な発達も伴って、実用性の高い量子化学計算法の開発が行われた。この時期のトレンドは、大規模化・高精度化・長時間化であり、大ブレークしたのが密度汎関数理論(DFT)である[1]。講演者の研究経歴のほとんどがこの時期に属し、これらのトレンドに沿った研究を行ってきた(表 1)。

これらの発展により理論化学が数値的に予言できる領域が広がったのは疑う余地もない。実際、分子構造・熱力学量・分光学的定数・物性値は、時には実験以上の精度で計算できる。しかし、高度化した計算結果をもとに、普遍的な化学原理を導くことが困難になったのも事実である。2011 年以降は理論化学にとって充実期となるのか、また、変革期となるのか、化学原理の発見という観点から考えてみたい。

表 1. 講演者らの開発した理論・方法論

方向性	理論・方法論	略称	概要
大規模化	分割統治法	DC-HF, DC-DFT, DC-DM MP2, DC-MP2, DC-CCSD, DC-CCSD(T)	線形スケーリング法
高精度化	核・電子軌道理論	NOMO/HF, NOMO/MP, NOMO/CI, NOMO/CC, TF-NOMO, TRF-NOMO ECG-NOMO/HF	非断熱分子理論
	内殻励起汎関数	CV-B3LYP, CVR-B3LYP, BmLBLYP, OS	高精度な内殻励起状態計算法
	局所応答分散力法	LRD	第一原理的な分散力計算法
長時間化	分子軌道内挿法	LIMO, LSMO	AIMD シミュレーションにおける SCF 収束性改良法
	実時間発展法	RT-TDHF, RT-TDDFT	電子状態の実時間発展法

[1] 「理論化学における理論の革新」、中井(分担)、別冊化学『化学のブレークスルー【理論化学編】』(化学同人、2010 年)。