



平田 文男 (教授)

1969年北海道大学理学部卒業 1974年北海道大学大学院理学研究科博士課程退学 日本学術振興会奨励研究員、米国ニューヨーク州立大学博士研究員、米国テキサス大学博士研究員、米国ラトガーズ大学助教授、京都大学理学部助教授を経て1995年分子科学研究所教授
TEL: 0564-55-7314 FAX: 0564-53-4660
電子メール: hirata@ims.ac.jp
ホームページ: <http://daisy.ims.ac.jp/indexj.html>

化学は原子・分子とその集合体の諸々の性質やその変化に関する学問であるが、その多くは溶液内で起きる過程を対象としている。しかしながら、比較的最近に至るまで理論的解析の対象としてはもっぱら孤立した分子が選ばれ、溶液内の化学過程は理論的解析の対象の外におかれていた。そもそも分子の化学的個性はその電子状態に集約されているがその古典的な表現は幾何学的形状と原子上の部分電荷である。「化学における液体論」もそのような分子の個性を反映するものでなければならない。その意味で1970年代初頭に始まる分子性液体体系に対する積分方程式理論 (RISM 理論) の発展は溶液内化学過程の分子論的解明にとって巨大な意義をもつ。当グループの貢献のひとつはこの RISM 理論を部分電荷を持った体系に拡張したことであり、この拡張によって、分子の先に述べた二つの個性を反映した液体論が完成した。

当研究グループは主としてこの拡張 RISM 理論に基づき、溶液内化学過程を分子レベルで解明するための理論的方法論の構築を目指している。それは次の四つの課題に集約される。

- (1) 溶液内分子の電子状態と化学反応の理論
 - (2) 生体高分子の水和構造の安定性と立体構造予測
 - (3) 溶液の微視的構造とその緩和過程の理論
 - (4) 電極 - 溶液界面の構造と電極反応の統計力学
- (1)の課題はいうまでもなく化学の中心問題のひとつである。液相中における多くの化学反応は気相中と全く異なることが知られている。その理由は液相中では溶媒からの場の影響で電子状態が大きく

変化するからであり、この問題を解明するために当グループはこれまで拡張 RISM 理論と非経験的電子状態理論を結合した新しい方法論を開発してきた。今後はこの方法を使って、SN2 反応やプロトン移動反応など溶液内化学反応の自由エネルギー - 曲面や反応経路の解明を目指す。

(2)の課題においては生命現象を担う物質である生体高分子の構造とその安定性を支配する要因を物理化学的視点から追及する。生体高分子は水の中で生まれ、機能を獲得し、進化を遂げてきた。従って、水は生体高分子の安定性に本質的関わりをもっている。拡張 RISM 理論を使って生体高分子の構造安定性の問題に取り組む。さらにこの方法を使って、蛋白質のフォールディングの問題に挑戦する (岡本グループと共同)。

(3)の課題はいわば(1)(2)の前提となる問題であり、溶液論の中心課題である。当グループはこれまでの研究において溶液の平衡理論である拡張 RISM 理論と非平衡統計力学の一般化ランジェヴァン方程式を結合して分子性液体のダイナミクス理論を発展させてきた。今後はこの理論を(1)の電子状態理論と結合し、溶液内化学反応の速度論に挑戦する。

(4)STM, AFM, SEIRAなど界面測定技術における最近の目覚ましい発展によって、電極 - 溶液界面の知見が原子レベルの分解能で得られつつある。一方、それに対応する理論は未だに古い連続体や熱力学のレベルに留まっている。この状況を脱却し、電極 - 溶液界面の分子論を構築することがこの課題の主旨である。

参考文献

- 1) 平田文男, 「液体・溶液の理論 相互作用点モデルに基づく溶媒和の取扱い」, 季刊化学総説 No.25『溶液の分子論的描像』12章, 1995年, 日本化学会編, 学会出版センター.
- 2) F. Hirata, "Chemical Processes in Solution Studied by an Integral Equation Theory of Molecular Liquids," *Bull. Chem. Soc. Jpn. (account)* **71**, 1483 (1998).

