



永瀬 茂（教授）

1969年大阪大学卒業 1975年同大学院博士課程修了 ロ
チェスター大学博士研究員、オハイオ州立大学博士研究
員、分子科学研究所技官を経て、1980年横浜国立大学助
教授 1991年同教授 1995年東京都立大学教授 1997年
同大学院教授 2001年4月より現職

環境に優しい有用な物質を合理的に設計し反応も高度に制御することは、物質科学の中心課題であるが、これまでは試行錯誤的な方法に頼ることが相当に大きかった。化学の限らない夢は、物質を分子の電子レベルで統一的に理解し、「望む構造、物性、機能をもつ分子やクラスターを自由にデザインして組み立て、思うがままに反応させる」ことである。この実現のための理論設計と計算およびコンピューターシミュレーションを行っている。また、内外の実験グループと密に連携し実際の合成の可能性と予測した特性の実証を行っている。

周期表には利用できる元素は約80種類もあり、これらの複合的な組み合わせは、多様な機能電子系発現の宝庫であり無限の可能性を秘めている。最近の大きな関心は、限られた元素だけではなくすべての元素の特性を上手く利用して、目的とする分子を設計したり反応させたりすることにある。しかし、これまでの結合則と反応則の多くは、第2周期元素を中心に確立されてきたので、高周期の元素にも同じように適用できないことが多い。これらを各元素や分子ごとに個別に議論するのではなく、見かけ上異なる現象をできるだけ統一的な視点から理解し、すべての元素に広く適用できる簡便な設計指針の確立を目指している。

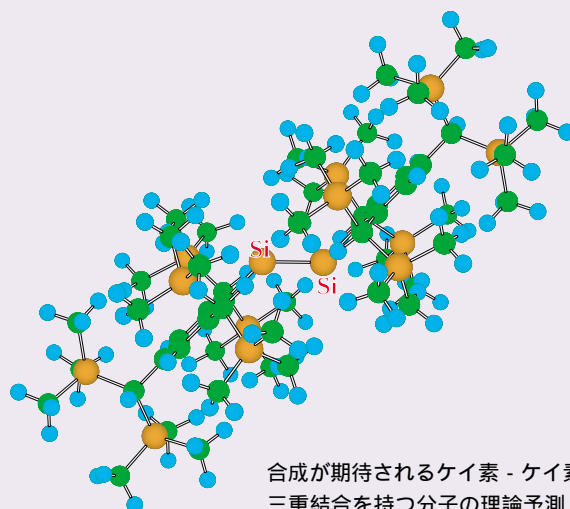
分子の特性は、元素の組み合わせばかりでなく、立体的な形とサイズおよび柔軟さによって大きく変化する。サイズの大きい分子には、新規な構造、物性、機能が数多く隠されている。これらは、構成する原子数が同じでも、さまざまな構造

をとることができるので、電子、光、磁気特性ばかりでなく、ゲスト分子との相互作用と取り込み様式も大きく変化する。これらの骨格に異種の原子を加えると、変化のバリエーションを飛躍的に増大させることもできる。また、形状や空孔のサイズを適度に変えることにより、高い分子認識能をもつ超分子を構築できる。

現在、無数の分子が合成の挑戦を待ち受けている。しかし、組み立てた分子を現実化するには、前駆体や置換基の適切で厳密な選択ばかりでなく、反応経路と反応条件の微妙な設定も要求される。したがって、分子構築から合成実現までを目的としている。このとき、望みの機能をいかに発現させるかは特に重要である。分子単独の設計ばかりでなく、幾つかの分子ユニットが自己集散的に組織化する系の設計と合成も自由にできるようになることを夢みている。

参考文献

- 1) A. Sekiguchi and S. Nagase, "Polyhedral Silicon Compounds," in *The Chemistry of Organosilicon Compounds*, Z. Rappoport and Y. Apeloig, Eds., John Wiley; New York, Chapter 3, 1998.
- 2) (a) 永瀬, 「高周期典型元素化合物の特徴—理論的考察」, *化学総説* **34**, 113–124 (1998). (b) S. Nagase, "Structures and Reactions of Compounds Containing Heavier Main Group Elements," in *The Transition State - A Theoretical Approach*, T. Fueno, Ed., Gordon Science; Amsterdam, Chapter 8, 1999.
- 3) (a) 赤阪、若原、永瀬、小林, 「金属内包フラーレンの反応」, *化学総説* **43**, 172–179 (1999). (b) S. Nagase, K. Kobayashi, T. Akasaka and T. Wakahara, "Endohedral Metallofullerenes: Theory, Electrochemistry, and Chemical Reactions," in *Fullerenes: Chemistry, Physics, and Technology*, K. M. Kadish and R. S. Ruoff, Eds., John Wiley; New York, Chapter 9, 2000.
- 4) (a) 永瀬, 「Ab Initio 分子軌道法」, *化学総説* **46**, 88–96 (2000). (b) 永瀬, 「化学の理論を一段と高いレベルへ」, *化学* **55**, 40–41 (2000).



合成が期待されるケイ素-ケイ素
三重結合を持つ分子の理論予測