

Very Heavy Metal 2000 国際会議(アクチノイド量子化学会議)参加報告

津島 悟*

筆者は Very Heavy Metal 2000 国際会議に参加したのでその報告を行いたい。会議はフランスの Menton で開催された第 10 回・国際量子化学会議 (ICQC) のサテライトシンポジウムとして 2000 年 5 月 30 日から 6 月 3 日までの間、同国の Giens 半島で開かれた。アクチノイド元素や超アクチノイド元素の量子化学がテーマの会議で、参加者は 50 人程度であった。Giens 半島はニースとマルセイユのほぼ中間に位置し、典型的な“コートダジュール”(紺碧海岸)ののどかな保養地である。しかし、会議の開催直前に南フランス一帯で鉄道のスライキが起きたために、会場へのアクセスに深刻な障害が生じ、会議への参加を断念した発表者も続出した。筆者は Giens 半島から約 200 キロ離れた Grenoble からの参加であったが、11 時間かけてようやく到着することができた。

会議がフランスで開催されたこともあって、参加者の殆どはヨーロッパからの参加者であったが、中でも北欧からの参加が多く、DIRAC コードの開発に見られるこの分野での北欧グループの強さを感じさせられた。また、相対論や重元素の量子化学といったテーマでのヨーロッパでの情報交換網は相当進んでおり、ヨーロッパからの参加者の多くは普段から密接に情報交換しているようであった。情報収拾という点に関して言えば、日本とアメリカは大きく立ち遅れているように感じた。

本会議の大きな特色のひとつは、理論化学が中心の会議であるにも関わらず、実験研究者を招待し、その発表を招待講演の中心に持ってきたことであろう。たとえば、KTH (ストックホルム王立工科大学)の I.Grenthe によるアクチノイド錯化学や酸化還元反応に関する講演、CEA (フランス原子力庁)の C.Madic による群分離・消滅処理に関する講演などがあったが、理論研究者の多くが熱心に聞き入り、実験化学者にとって重要な現象や興味の対象となる核種についてメモを取っていたのが印象的であった。計算化学においてはしばしば実験化学者の興味の対象と、理論化学者が興味を持っている系の対象に大きなずれが見られるが、今回の会議で双方がお互いについて知り合ったのは非常に大きな前進であったと筆者は思う。

今回の会議での議論の多くは「電子相関をいかに正確に取り込むか」「ハミルトニアンをいかに正確にするか」「スピン軌道相互作用をいかに正確に取り込むか」「基底関数

をいかにうまく作るか」という話に終始していたように感じた。密度汎関数 (DFT) 法に関する発表や議論が多く、主催者が「DFT についての詳細な議論は Menton の本会議の方で・・・」とクギを刺すほどであった。とはいえ、ウラニルイオンなどの軽アクチノイド元素に関しては DFT 法で扱うのが計算コストなどとの絡みでもベストであるというのが一致した見解であったように思う。その一方で、超アクチノイド元素などについては DFT や MP2 計算では不十分で、より高いレベルで電子相関を扱わなければいけないというのが、今回の会議での一致した見解であったように感じられた。たとえば、スウェーデンの化学研究所の Ross は $UO_2(CO_3)_3^{4-}$ の MP2 レベルでの構造についての発表を行い、U とジオキソ酸素の結合距離が理論計算では実験に較べて長く求められるという結果を報告したが、Ross らはその理由として MP2 レベルでは電子相関の扱いが不十分で、より高次の相関を取り込む必要があることを示唆した。ところが、これに対してヘルシンキ大学の Pyykko は「結合距離が長く出ているのは、基底関数が不適切で、その結果 4 個の価電子が行き場を失っているからだ。もっと cheap な基底関数で計算しなければいけない。」と主張して、Ross と激しい議論を展開した。多くの参加者は Pyykko の意見に賛同していたように筆者には感じられた。しかし、cheap な基底関数で計算すれば、basis set superposition error (BSSE) が問題となるのは必至で、この計算結果は、難しい問題を提起しているように思われる。

今回筆者が残念に感じたのは、日本からの参加者が筆者一人であったことであった。日本でも、重元素の相対論に関する計算は理論サイドや実験サイドでも高いレベルの研究が行われているが、特に後者は組織として取り組んでいるというより個人レベルで行っているとの感が否めない。計算化学を用いたアクチノイドや超アクチノイドについての研究が今後わが国でも幅広く行われ、諸外国に多くの情報を発信していくことを願ってやまない。

Report on Very Heavy Metal 2000, by Satoru Tsushima (tsu@qs.t.u-tokyo.ac.jp)
* 東京大学大学院工学系研究科システム量子工学専攻 Department of
Quantum Engineering and Systems Science The University of Tokyo
〒113-8656 東京都文京区本郷 7-3-1

