

## 表紙の図について

### 「金属錯体によるナノワイヤー構造のスピンの分布」

金属ときけば、鉄くぎや硬貨などのぴかぴかする物質が思い浮かぶ。しかし、鉄くぎが空気中で錆びてしまうことからわかるように、自然界では金属のもとになる金属元素がいわゆる金属として存在することは滅多にない。むしろ、金属元素が他の元素と結びついた物質ばかりで、組み合わせ次第で性質が大きく変わるので、金属元素が入っていることなぞ気がつかないのが普通である。サプリメントの鉄やカルシウムでも、金属の粉が入っているわけではなく、知らなければ鉛玉と区別がつかない。

私たち化学者は、日夜元素をさまざまな方法で組み合わせ、建築家そのものの構造を創ったり壊したりしながら、いままで見たこともないような新しい物質を発見しようとしている。炭素を基本骨格に利用する有機化学は、水素、酸素、窒素といった10に満たない元素の組み合わせだけで、生命の生み出すさまざまな物質に啓発されながら発展してきた。一方、金属元素は90あまりもある天然元素の大半を占めているが、未開拓の分野が多く、将来の発展が期待されている。

このような物質の探索を、コンピュータを利用して方向付けしたら便利だろうと誰しも思う。色や安定性といった物質のあらゆる性質は中にある電子の状態决定着。電子の状態について方程式は、小さな分子ならパソコンで、少し大きな分子なら計算機センターで解ける。電子状態がわかれば、電子密度やエネルギーなどを計算して、化学反応の起こりやすさや方向、色などを予想できる。

たくさんの金属錯体ユニットをつないで次元にならべたナノワイヤーは組み立て作業を実感できる。錯体ユニットは中心の金属イオンと金属イオンに結合した有機分子の配位子からなっている。ユニットは配位子を介して連結する。金属イオンには磁気モーメントのもとになる不対電子があるので、ユニットをうまく並べると配位子のさまざまな性質を併せ持つ磁性体ができる。ビグアニダト錯体は連結部に三箇所の結合部位がある。錯体中心の銅(II)やコバルト(II)イオンの磁気モーメントを並べるために、酢酸イオンがロジウム(II)イオン間に架橋した二核のランタン型酢酸ロジウム(II)を組み合わせた。この構造の一部について磁気的相互作用のもとになる不対電子の分布をセンターのmovieで描画した。赤が $\alpha$ スピン、青が $\beta$ スピンの分布をあらわしている。下の図の銅(II)イオンの不対電子がビグアニダトの面内に留まっているのに対し、上の図のコバルト(II)イオンでは面外に分布し、ロジウム(II)イオンに向かっている。コバルト錯体では、ロジウム(II)イオン間の金属-金属間相互作用を介して錯体ユニット間に磁気相互作用があるが、銅錯体にはないことがわかった。この磁気相互作用の差異は磁化率を測定すると確認できる。

(名古屋市立大学システム自然科学研究科：和佐田(筒井)祐子)

(名古屋工業大学：川島義弘 船橋靖博 増田秀樹)