

## 2P05

レプリカ交換傘サンプリング法を用いた密度汎関数強結合近似計算による

フタロシアニン鉄錯体の形成メカニズムの解明

○伊東 真吾<sup>1</sup>, Stephan Irle<sup>1,2</sup>, 岡本 祐幸<sup>1</sup>

<sup>1</sup>名大理学, <sup>2</sup>名大 WPI-ITbM

sito@tb.phys.nagoya-u.ac.jp

20世紀初頭に発見され、現在に至るまで顔料や有機材料として幅広く用いられてきたフタロシアニンという分子が存在する。この分子はポルフィリン分子とよく似た特異な平面環状構造を持つ分子である。20世紀初頭に発見されながら、この特異な形状の分子はどのような中間状態を経て、反応物から生成物であるフタロシアニン分子が形成されるのかということについて、未だによく理解されていない。また、この分子の形成過程を解明しようと量子化学 (Quantum Mechanics: QM) 計算を用いて、フタロニトリル分子よりこの分子の形成過程のシミュレーションが行われたが、フタロシアニンの形成に至らなかったという報告がなされている。

今回我々は、分子動力学 (Molecular Dynamics: MD) 計算において、幅広い自由エネルギー地形を探索するために用いられる手法の1つである、レプリカ交換傘サンプリング法 (Replica-Exchange Umbrella Sampling: REUS<sup>[2]</sup>) と呼ばれる拡張アンサンブル法を用いた強結合近似密度汎関数法 (Density Functional Tight-Binding: DFTB<sup>[3]</sup>) による量子分子動力学 (QM-MD) 計算を行い、4つのフタロニトリル分子と1つの鉄原子から1つのフタロシアニン鉄錯体を形成するシミュレーションを行った。結果として、フタロシアニン鉄錯体の形成に成功しただけでなく、フタロシアニン鉄錯体と同程度の安定性を持つ準安定な構造を発見した。また、フタロニトリル分子と鉄原子からフタロシアニン鉄錯体が形成される過程には、3つの段階があると示唆することができた (図1参照)<sup>[3,4]</sup>。

[1] Y. Sugita, A. Kitao, Y. Okamoto, J. Chem. Phys. 113 (2000) 6042.

[2] M. Elstner, D. Porezag, G. Jungnickel, J. Elsner, M. Haugk, Th. Frauenheim, S. Suhai, G. Seifert, Phys. Rev. 58 (1998) 7260.

[3] S. Ito, S. Irle, Y. Okamoto, Compt. Phys. Commun. in press.

[4] S. Ito, Y. Wang, S. Irle, Y. Okamoto, manuscript in preparation.

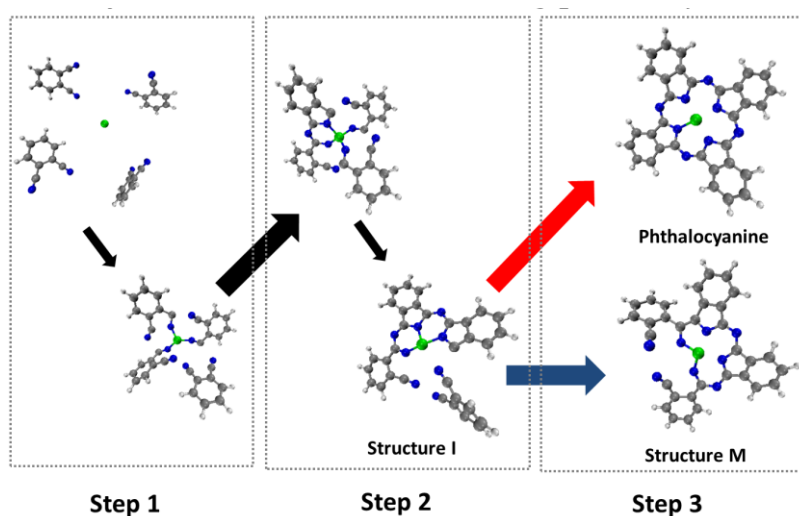


図1. フタロシアニン鉄錯体の形成過程の予測: 計算結果としてフタロシアニン鉄錯体と準安定な構造 (Structure M) の2種類の構造が安定構造として現れた。