

海岸漂着レジンペレットを使った地球規模 モニタリング

高田 秀重

1 International Pellet Watch (IPW) とは？

International Pellet Watch (IPW) とは、海岸に漂着しているレジンペレットというプラスチック小粒 (図1) を分析することから、沿岸海域の疎水性有機汚染物質の汚染をモニタリングするプロジェクトである。対象としている汚染物質は、ポリ塩化ビフェニル (PCBs) や有機塩素系農薬の DDTs や HCHs 等、ストックホルム条約で残留性有機汚染物質 (POPs) として規制されている物質である。レジンペレットは円盤状、円柱状、あるいは球状の直径数 mm のプラスチック粒である。このプラスチック小粒はプラスチック製品の中間原料である。化学工場で石油からプラスチックが合成される際に、このレジンペレットの形で合成される。レジンペレットは袋詰めされ成型工場へ運ばれ、そこで型に入れられ加熱成型され様々なプラスチック製品となる。しかし、工場間での輸送や取り扱いの過程や加工の過程で、一部のレジンペレットが環境中に漏出している。プラスチックの中で量的に主要なポリエチレン (PE)、ポリプロピレン (PP) は水よりも軽いため、これらのレジンペレットは雨で洗い流され、水路、河川を経て最終的に海洋へ運ばれる。レジンペレットはコンテナ船で海上輸送される場合もあり、コンテナの脱落事故等により、レジンペレットが直接海洋へ負荷される場合もある。海洋を漂流しているレジンペレットの一部は海岸に漂着する。海洋環境中のレジンペレットの存在は 1972 年にサルガッソー海で初めて報告された。プラスチックの生産量の増加とプラスチックの安定性のため、世界の海洋中のプラスチック漂流量は増加し、レジンペレットは世界中の海岸に漂着している。IPW では、2014 年現在、世界 5 大陸 50 か国約 400 の海岸へのレジンペレットの漂着を確認している。

プラスチックは炭化水素を構成単位とするポリマーである。POPs の多くは親油性の高い化合物であるので、プラスチックと高い親和性がある。そのため、海

水中の POPs はペレットへ吸着する。吸着係数は、海岸で採取したペレットとその海域の海水中の PCBs 濃度の比較から、百万程度と計算されている。レジンペレット一粒 (約 0.02 g) で 20 L の海水、5 粒で 100 L の海水に対応することになる。100 L の海水の輸送には多大な労力がかかり、それを国際的に行うのは大変困難である。しかし、ペレットは輸送の際に冷凍する必要もなく、採取者はペレットをアルミホイルで包み、分析機関に郵送するだけでよい。試料輸送の手間がかからず、極めてローコストなモニタリングである。

筆者らの研究室では 2005 年から海岸漂着レジンペレットを使った地球規模モニタリング、すなわち International Pellet Watch を開始した。海洋汚染関係の国際学術雑誌への呼びかけ記事¹⁾の掲載、ホームページ (<http://www.pelletwatch.org/>) での呼びかけ、国際学会での講演、海外の知り合いの研究者への依頼等により、世界の市民・研究者に海岸でレジンペレットを拾い、エアメールで東京農工大学の研究室に送ってもらうことを呼びかけた。送られてきたレジンペレット中の POPs を分析し、全球的な POPs 汚染マップを作成し、ホームページにアップし、モニタリング結果を公開している。

2 ペレットの分析法と分析結果の例

PE 製で、無着色、一定以上の黄変 (黄度 40 以上) の現れたペレットのみを選別し、分析する。ペレットの材質の判別・分類には近赤外分光光度計 (PlasScan-W, オプト技研・システムズエンジニアリング) を用いている。1 地点について 25 粒の黄変 PE ペレットを分析する。5 粒ずつを一組にして 5 組分析する。ペレットをヘキサンで浸漬抽出し、抽出物を活性化シリカゲルカラムクロマトグラフで精製・分画後、PCBs 等の POPs を GC-MS および GC-ECD で分析する。得られた 5 組の POPs 濃度の中央値を取り、その地点の POPs 濃度として表現する²⁾。

図2に分析結果の一例として PCBs の結果を示す。PCBs 濃度は米国の東西海岸と五大湖周辺、日本、西ヨーロッパなど先進工業化国とブラジル、オーストラ

Backstory of International Pellet Watch.

リアの都市域で高濃度となり、東南アジアとアフリカでは低濃度となる傾向が見られた。PCBsは先進工業化国で1970年代前半まで様々な工業用途で使用され、1970年代後半以降開放系での使用は禁止となったが、それまでに使用・放出されたPCBsは工業地帯の水域堆積物中に高濃度で蓄積している。それらの堆積物中のPCBsが堆積物の再移動と再懸濁、堆積物からの溶出により海水中に回帰して、依然として水域を汚染していると考えられる²⁾。堆積物が二次的な負荷源となっている、すなわち legacy pollution が原因と考えられる。これらの legacy pollution により汚染されている水域よりは低濃度であるが、南大西洋の St. Helens 島、インド洋のココス島など、大陸から離れた離島からも

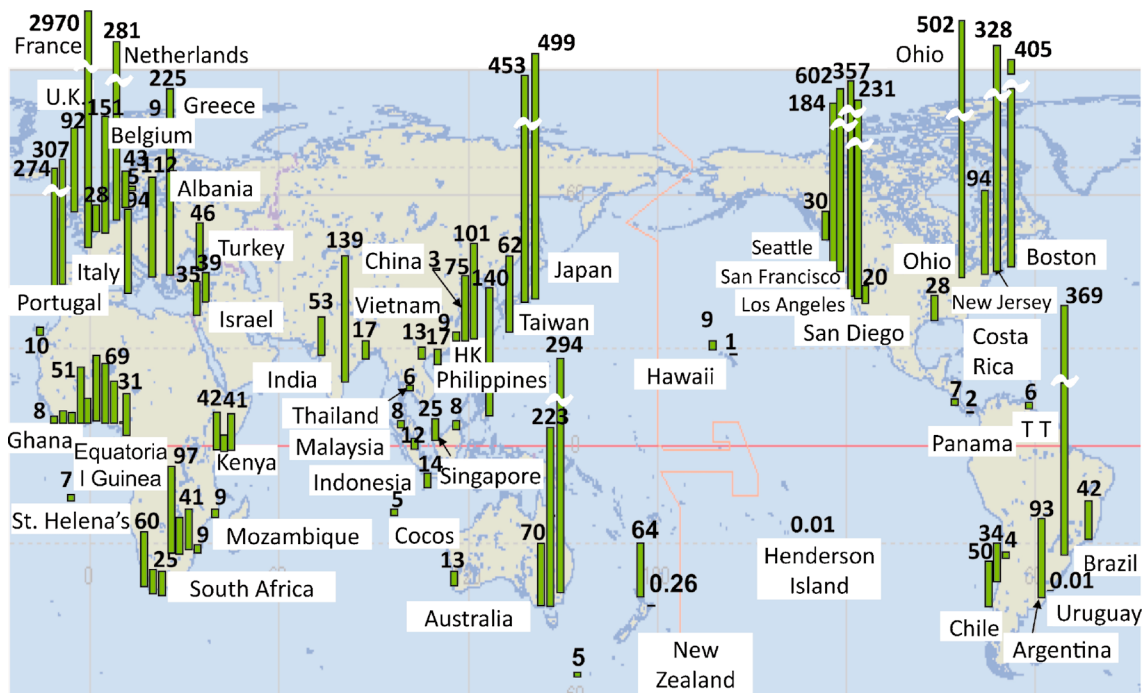
有意な濃度の PCBs が検出された。これらの離島では PCBs の使用や直接の負荷は考えられないことから、工業化された地域で使用・放出された PCBs が大気経路で長距離輸送されたものと考えられる。大陸から 100 km 以上離れた六つの離島で採取されたペレットの分析に基づき、グローバルバックグラウンドレベルを算出した³⁾。Σ13PCBs (13の主要な PCBs 同族異性体濃度の合計値) のグローバルバックグラウンドレベルは 10 ng/g-pellet と推定された。このグローバルバックグラウンドレベル 10 ng/g-pellet を超える濃度の POPs が検出される場合には、ローカルな発生源の存在が示唆される。これまでに、PCBs 等の POPs について地域的な特徴や汚染の経年的傾向を明らかにしてきた^{4)~7)}。

3 IPW のはじまりは環境ホルモン研究

筆者らがペレット中の PCBs をはじめて分析したのは 1998 年である。大学院時代の研究室（東京都立大学分析化学研究室）の先輩の研究者（大竹千代子研究員：国立医薬品食品衛生研究所）からレジンペレットを紹介され、その中のノニルフェノールを測ってみたいかとお提案をうけたのが、きっかけである。当時は環境ホルモンに関する社会的な関心が急激に高まった時期であり、プラスチックの添加剤に由来するノニルフェノールで内分泌攪乱^{かくらん}が起こることが指摘されはじめた時期である。レジンペレットからも添加剤由来のノニルフェノールが検出されないか考えた。筆者らは当時の日本で環境試料中のノニルフェノールの分析を行っていた数少ない研究室の一つだったので、大竹研



図1 プラスチックレジンペレット



単位は Σ13PCB-ng/g-pellet ; Σ13PCB : CB#66, 101, 110, 149, 118, 105, 153, 138, 187, 180, 170, 206 の合計値

図2 海岸漂着レジンペレット中の PCBs 濃度

究員から声がかかった。神奈川県湘南の鵠沼海岸で採取されたペレットを分析してみると、高濃度のノニルフェノールが検出された。酸化防止剤として加えられているトリスノニルフェノールフォスファイトが分解して生成したノニルフェノールがレジンペレット中に含まれていると考えられた。筆者らの研究室では疎水性の化合物から比較的極性の高い化合物を同一の抽出物から包括的に分析する方法⁸⁾を使っている。そこで、同じレジンペレット抽出物の微極性の画分も試しに分析してみた。海岸に漂着しているプラスチックから高濃度でPCBsが検出されるとは誰も予想しなかったもので、かなり濃縮倍率を上げて（最終的な定容体積を小さくして）GC-ECDへ注入した。その結果は筆者らの予想を超えて、大きなピークが何本もクロマトグラム上に現れた。余りに濃度が高すぎて、保持時間はPCBs標準物質よりも後にずれていたが、ピークのパターンはPCBsの存在を強く示唆していた。数十倍に希釈してその試料を再度分析すると、保持時間もピッタリと標準物質と一致し、PCBsがペレットに高濃度で含まれていることが確認された。1998年5月のことであった。その年の12月に、卒論でレジンペレット中の有機汚染物質の分析にとり組んでいた間藤ゆき枝さんが、フィールドでの吸着実験を行った。バージンペレットをステンレス製の籠に入れて川崎港に浮かべ、数日おきに回収し、ペレット中のPCBsを測定し、実験開始時点にはバージンペレットから検出されなかったPCBsが時間の経過とともに増加していくことを確認した⁹⁾。また、国内4か所で採取したペレット中のPCBsの分析も行い、ペレット中のPCBs濃度が周辺海域の汚染状況を反映していることも示唆された。これらの結果をまとめて、2000年にアメリカ化学会の *Environmental Science & Technology (ES&T)* へ投稿した。1998年にペレットからPCBsが検出された直後に、ノニルフェノールの検出も合わせて *Nature* に投稿したが、あっけなく reject されていた。今回は慎重に準備した。アメリカ留学時の同業者に英文校閲をお願いした。同業者なので、内容面まで丁寧なアドバイスをいただき、それも踏まえて投稿した。編集長と査読者から好意的なコメントが寄せられた。コメントに応えるために、追加の分析を行い、再投稿期限を延長してもらった。追加実験の結果も盛り込んだ改訂稿を投稿し、受理され、2001年の1月15日号に掲載された。掲載号の表紙を飾り、科学ジャーナリスト等からの問い合わせもあった。この論文ではペレットのモニタリング媒体としての有用性にも言及しているが、有害化学物質の輸送媒体として役割を強調していた。現在世界的に問題になっているマイクロプラスチックの問題であり、その後の論文では常に引用されている。

4 一粒分析と日本での Pellet Watch

ペレットをモニタリングに使うための基礎的な検討を2001年より行った。卒論でペレットをテーマに選んだ遠藤智司君が地道な検討を行った。東京湾の葛西海岸で約100粒のペレットを採取し、一粒一粒PCBsの分析を行った¹⁰⁾。同時にFTIRでスペクトルをとり、材質判別を行い、カルボニルインデックスなども測定した。粒間で3桁PCBs濃度は変動した。材質間での差も認められ、PEのほうがPPよりもPCBs濃度が高いことも分かった。しかし、PEペレット間だけでもPCBs濃度は2桁変動した。特に、他のペレットよりも極端に高濃度のPCBsを含むペレットが存在した。ペレットへのPOPsの吸着平衡に要する時間が数か月から1年程度と長時間であることがこのような変動の背景にある。ペレットへの汚染物質の吸脱着は可逆的で、漂着海岸周辺を漂っている間に平衡に向かってPOPsの吸脱着が進み、ペレット中のPOPs濃度はその海岸周辺の濃度を反映するようになると考えられる。しかし、ペレットは一粒一粒別々な経路で様々な漂流時間を経て採取された海岸に漂着しているため、中には漂着海域とは離れた海域で高濃度（あるいは低濃度）のPOPsに曝露され、漂着海域で平衡に達するための十分な時間がなく、漂着しているため、他のペレットよりも極端に高濃度（あるいは低濃度）をとるペレットが存在する、と考えられる。漂流時間が鍵になるので、プラスチックの劣化の指標になるカルボニルインデックスとPCBs濃度の変動を検討したが、有意な関係は認められなかった。一方、黄変度との間には関係が認められ、黄変したペレットのほうが黄変していない白いペレットよりもPCBs濃度が高い傾向が確認された¹⁰⁾。プラスチックの黄変は主にフェノール系添加剤の酸化により起こるため、黄変度はペレットの海洋環境中の滞留時間を反映していると考えられる。そこで一定以上の黄変度（黄度40以上50以下）のPEペレットを分析することをペレットの分析法とした。また、ペレットからのPCBsの抽出法についても検討を行い、ヘキサンの^{しんせき}浸漬抽出を採用した。検討の過程でジクロロメタンによる超音波抽出やソックスレー抽出なども検討したが、有機塩素系の夾雑物による妨害や使用するガラス器具が多くなるなどの問題から、ヘキサンによる浸漬抽出を採用した。PEペレットへのPOPsの吸着に時間がかかる背景には、ポリマーマトリクスの中へのPOPsの浸透（migration）に時間がかかることが一つのメカニズムと考えられている。ヘキサンによる浸漬抽出で十分に抽出されているのか、という疑問も生じた。これについてはヘキサン浸漬抽出後のペレットをジクロロメタンでソックスレー抽出したが、POPsはほとんど検出されなかったことから、ヘキ

サンによる浸漬抽出で十分抽出されていることが確認された。ヘキサンがPEを膨潤させることによりマトリックス内のPOPsも抽出されていると考えられる。

2002年～2003年に、環境NGOのJEANの協力を得て、日本全国47地点を対象としたPellet Watchを行った¹⁰⁾。各地点のPCBs汚染を代表する値をとるために、5粒～10粒を1組として2組以上のペレットを各地点について分析し、中央値をとり、各地点のPCBs濃度とした。PCBs濃度は都市域で高く、遠隔地で低いという地域的な傾向が認められた。そこでPellet Watchのモニタリングとしての妥当性をMussel Watchと比較することから検討した。Mussel Watchとは沿岸の潮間帯に棲息する二枚貝の一種のムール貝(イガイ, mussel)を用いた環境モニタリングである¹¹⁾。ムール貝が海水を濾過摂食する際に、海水中の汚染物質がムール貝の体内に濃縮されることを利用し、ムール貝のむき身を分析することから、その棲息海域の汚染状況を推定する。Mussel Watchは1970年代に提唱されて以来、沿岸海域のモニタリングとして世界中で用いられている。ペレット中のPCB濃度を同じ水域で採取したムール貝中のPCBs濃度と比較した。ペレット採取地点のいくつかの地点でムール貝を採取してもらい、それを分析した。しかし、ペレット中のPCBs濃度の中央値とムール貝中のPCBs濃度の相関は弱く、統計的に有意ではなかった($r^2=0.37, n=12$)。有意な相関が得られなかったことから、この時点ではPellet Watchをこれ以上展開することは難しいかと考えた。しかし、あとからこの時のデータを見ると、1地点について2組か3組の分析しかしておらず、現在IPWで採用している5組の中央値を採る方法と違い、極端な高濃度ペレットの影響を排除できていなかったため、Pellet WatchとMussel Watchの相関が低かったものと考えられる。

5 IPWの開始

2005年はInternational Pellet Watchの開始の年である。しかし、前年度までのMussel Watchとの有意な相関が得られなかったことから、世界的な展開は正直、躊躇していた。しかし、この年の科学研究費助成事業(科研費)の採否結果が届くと、萌芽的研究に申請したIPWが採択されていた。前年度、上記の解析結果を見る前に申請したものである。またこの年4月から北海道大学の博士課程の大学院生の山下 麗さん(現在本研究室産官学連携研究員)が海鳥のプラスチック摂食と有害化学物質汚染の研究のために本研究室で分析するようになった。彼女がオプト技研のプラスチック分別装置(プラスキャン)を持って来てくれた。ペレットの分析には不可欠な機械である。科研費採択、プラスキャンと条件が整った。しかし、前年度の解析結果

もあり、Pellet Watchをテーマとして選んだ卒論の学生さんはいなかった。この年9月にはカリフォルニアでNOAA主催の海洋プラスチック汚染の国際シンポジウムがあり、招待されて講演した。2001年のES&Tの論文に目をつけての招待講演であった。ここで、International Pellet Watchを初めて世界に向けて提案した。帰国後、研究室のホームページの中に、IPWのコーナーを作った。11月にはアメリカ留学時の恩師の退官記念シンポジウムが米東海岸ウッズホール海洋研究所で行われ、ここでの講演の中でもIPWを提案した。世界的なモニタリングにはGC-ECDよりもGC-MSでのPCBsの分析が必要と考え、GC-イオントラップ(IT)-MSの導入の可能性を探った。しかし、科研費萌芽研究で手が届く機械でない。思い切って、十数年おつき合いさせていただいているサーモエレクトロン株式会社(当時)の松本 普社長(当時)にIPWの構想をお話して、援助をお願いしてみたところ、ありがたいことにご理解いただき、共同研究の一環で貸与していただけることになった。さらに12月には海洋汚染の国際学術雑誌*Marine Pollution Bulletin*のEditorial(論説)にIPWの呼びかけ(Call for pellets¹¹⁾)を寄稿する機会を得た。実は、1997年からこの雑誌の編集委員を務めており、本来は年に1回程度はEditorialを書かなければいけなかったのだが、10年間一度も書いておらず働きの悪さから、編集長(Dr. Charles Sheppard)から首の通告があったのが、きっかけだ。首の通告のメールいただき、すぐにお詫びをするとともに最後にははじめのEditorialとしてIPWの呼びかけを書かせてくれ、とお願いした。すぐにO.K.の返事をいただき、その日のうちに数時間でCall for pellets!を書いて、編集長に送った。そんなわけで、*Marine Pollution Bulletin*には大変恩義がある。2009年にIPWの結果をはじめてまとめて投稿した先はもちろん*Marine Pollution Bulletin*である。ペレットも世界数地点から集まりはじめたが、IPWをテーマにしている卒論の学生さんもないので、試料は冷凍庫に保存される状態で、お膳立てばかりが先行して2005年が暮れた。

6 やっと好循環が

2006年、この年度の卒論の学生の岩佐悟君がIPWをテーマとして選んでくれた。2002年～2003年の日本国内モニタリングでの低い相関は1地点での分析組数が少なかったため、という一抹の仮説にかけて、2006年からのIPWの分析では1地点について必ず5組の分析をした。卒論もまとめにはいり、8地点のペレットの分析結果をまとめた。リモートな地点でも5組中1組は高濃度PCBsの組があった。しかし、5組の中央値をとるとそれらの高濃度PCBsの組は排除できた。PCBs

濃度の中央値を Mussel Watch の結果（イガイ中の PCBs 濃度）と相関をとると、 $r^2=0.87$ という環境試料にしては高い相関が認められた。まだ、8 地点での相関であったが、この相関により、地球規模モニタリングとしての確信を得た。Mussel Watch と Pellet Watch の相関はその後、地点数と地域を増やしても認められた（図 3、 $r^2=0.77$ 、 $n=25$ ）。海岸に漂着するペレットは確かにいろいろなところから流れ着いたものであり、それに起因する汚染物質濃度の変動は存在する。しかし、材質と黄変度を揃えること、さらに常に 5 組の分析を行い、その中央値を取ることで、その地点の汚染状況を反映したモニタリング結果を得ることが可能である。もちろん、粒間での滞留時間と滞留経路の変動に起因する不確かさは常に存在する。しかし、一次スクリーニング的（sentinel）モニタリングと位置づけて、Pellet Watch で汚染が示唆された場合には、水、堆積物、生物などを使ったより本格的なモニタリングや調査を行えばよい。実際にそのような手法でアフリカのガーナでは電子廃棄物に由来する PCBs 汚染を捉えることができた⁶⁾。何よりも、マイクロプラスチックの一種のペレットは残念ながら世界中に拡散してしまっている。これを利用しない手はないだろう。

これ以降は、IPW は順調に展開した。岩佐君の卒論は PCBs の分析を ECD で行っていたが、2007 年には修士課程の学生の水川薫子さん（現：本研究室助教）が貸与してくれている GC-IT-MS での PCBs 分析メソッドを開発してくれて、2007 年度以降は GC-IT-MS での分析を行えるようになった。試料の送付・分析では、Call for Pellets を読んだ研究者やホームペー

ジを見た海外の NGO が試料を送って来てくれて、それを分析した結果をホームページにアップすると、それを見た別な NGO や研究者が試料を送ってくれるという、よい循環ができた。科研費萌芽研究は 2006 年で終了したが、2008 年からは三井物産環境基金が助成してくれている（2008 年～2010 年、2012 年～2014 年）。ウェブデザイン会社 Studio Flex さんにホームページのデザインや独自ドメイン取得を行っていただいた。三井物産環境基金からの助成を受けて、南米やアフリカへペレット送付をお願いする講演にも行った。その他、国際会議や国際学会で機会があれば IPW の結果を講演して、講演の最後は Call for Pellet のスライドで締めてペレットの送付を呼びかけて、ペレットが送られてくるという、よい循環ができた。とはいえ、海外で講演をしてもはじめは聴いてくれる人も少なかった。南カリフォルニアの学会で 2006 年に話した時は 500 人くらい入る大きな会場に関係者以外は 3 人ほどの聴衆だった。2007 年にはハワイ島の田舎の中学校まで出前講義に行ったこともあった。2008 年くらいから欧米でマイクロプラスチック（5 mm 以下のプラスチック）とその環境影響への関心が急激に高まり状況は変わった。ペレットはマイクロプラスチックの代名詞としての扱いを受けて、IPW への関心は高まり、IPW の汚染マップが UNEP の年鑑に引用されるようになったり、国連関係者が IPW のマップを引用するのを国際会議でこちらが聴衆席から見るとな状況になった。現在ではほぼ毎週のように世界のどこかの国から東京農工大学にペレットが届き、世界 50 か国 400 地点から試料が集まっている。世界的なモニタリングプログラムとなったが、きっかけは環境ホルモンの分析の腕を見込んでペレットの分析を依頼されたことにある。きちんとした分析の腕を磨くことが、重要である。

謝辞 ペレットを採取・送付していただいた皆様、本稿中で名前を挙げさせていただきました個人、団体、企業の皆様にこの場をお借りして、感謝いたします。

文 献

- 1) H. Takada : *Mar. Pollut. Bull.*, **52**, 1547 (2006).
- 2) Y. Ogata, H. Takada, K. Mizukawa, H. Hirai, S. Iwasa, S. Endo, Y. Mato, M. Saha, K. Okuda, A. Nakashima, M. Murakami, N. Zurcher, R. Booyatumanondo, M. P. Zakaria, L. Q. Dung, M. Gordon, C. Miguez, S. Suzuki, C. Moore, H. K. Karapanagioti, S. Weerts, T. McClurg, E. Burres, W. Smith, M. Van Velkenburg, J. S. Lang, R. C. Lang, D. Laursen, B. Danner, N. Stewardson, R. C. Thompson : *Mar. Pollut. Bull.*, **58**, 1437 (2009).
- 3) M. Heskett, H. Takada, R. Yamashita, M. Yuyama, M. Ito, Y. B. Geok, Y. Ogata, C. Kwan, A. Heckhausen, H. Taylor, T. Powell, C. Morishige, D. Young, H. Patterson, B. Robertson, E. Bailey, J. Mermoz : *Mar. Pollut. Bull.*, **64**, 445 (2012).

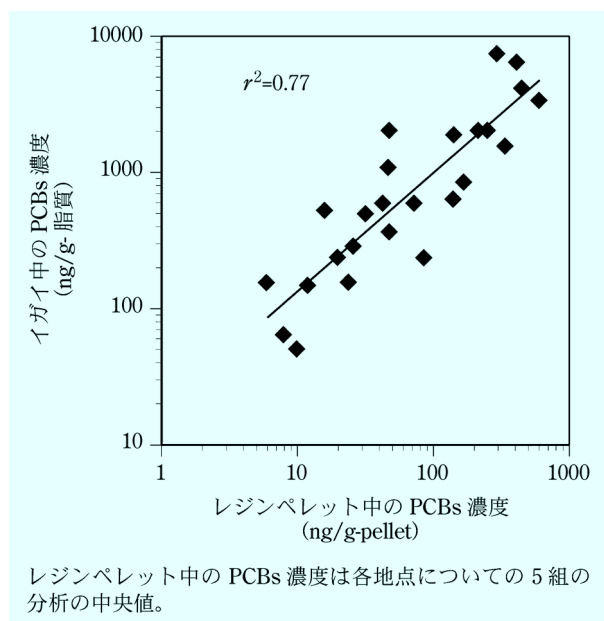


図 3 レジンペレット中の PCBs 濃度と同海域のイガイ中の PCBs 濃度の相関

- 4) H. K. Karapanagioti, S. Endo, Y. Ogata, H. Takada : *Mar. Pollut. Bull.*, **62**, 312 (2011).
- 5) P. G. Ryan, H. Bouwman, C. L. Moloney, M. Yuyama, H. Takada : *Mar. Pollut. Bull.*, **64**, 2756 (2012).
- 6) J. Hosoda, J. Ofosu-Anim, E. B. Sabi, L. G. Akita, S. Onwona-Agyeman, R. Yamashita, H. Takada : *Mar. Pollut. Bull.*, (in press).
- 7) K. Mizukawa, H. Takada, M. Ito, Y. B. Geok, J. Hosoda, R. Yamashita, M. Saha, S. Suzuki, C. Miguez, J. Frias, J. C. Antunes, P. Sobral, I. Santos, C. Micaelo, A. M. Ferreira : *Mar. Pollut. Bull.*, **70**, 296 (2013).
- 8) 中田典秀, 磯部友彦, 西山肇, 奥田啓司, 堤史薫, 山田淳也, 熊田英峰, 高田秀重 : 分析化学, **48**, 535 (1999).
- 9) Y. Mato, T. Isobe, H. Takada, H. Kanehiro, C. Ohtake, T. Kaminuma : *Environ. Sci. Technol.*, **35**, 318 (2001).
- 10) S. Endo, R. Takizawa, K. Okuda, H. Takada, K. Chiba, H. Kanehiro, H. Ogi, R. Yamashita, T. Date : *Mar. Pollut.*

Bull., **50**, 1103 (2005).

- 11) 高田秀重, 秋山賢一郎, 山口友加, 堤史薫, 金井美季, 遠藤智司, 滝澤玲子, 奥田啓司 : “微量人工化学物質の生物モニタリング II. 無脊椎動物. 2. ムラサキイガイ”, 水産学シリーズ no. 140, p. 24 (2004), (恒星社厚生閣).



高田秀重 (Hideshige TAKADA)

東京農工大学 (〒183-8509 府中市幸町3-5-8)。東京都立大学理学部化学科大学院修士課程修了。理学博士。《現在の研究テーマ》環境中の微量有機汚染物質の分布と環境動態の解明。《主な著書》“Accumulation: The Material Politics of Plastic” (分担執筆) (Routledge)。《趣味》BBQ。

E-mail : shige@cc.tuat.ac.jp

新刊紹介

金属錯体の量子・計算化学

—錯体化学会選書⑩—

山口 兆・榊 茂好・増田秀樹 編著

金属錯体は機能の宝庫であるが、d軌道電子の振舞いなどの複雑さのために安易に取り組みにくい物質でもある。錯体もつ機能を理解し、合理的な構造と機能を設計するためには理論が必要であるが、これまでは体系的な解説書がなかった。本書は、過去の膨大な知見を理論化学・計算化学の手法により系統的に整理しており、錯体化学の理論的基盤を読み解くための指南書になっている。まず、多電子系の理論化学の基礎理論から始まり、最新の理論化学の錯体化学への展開、金属錯体の構造

論から導かれる反応性、さらに分子集団構造を基礎にした物性および機能発現への理論化学について解説している。そして最後には、錯体化学により大きく進歩している触媒や生物無機化学、機能材料などの各分野から理論化学・計算化学への課題と期待が語られている。錯体化学にとって、理論化学は実験結果を理論的に理解する考え方を提案するものであり、一方、計算化学は実験結果を詳細に解析して定量的な解釈を与えていくものである。そして、最近のコンピュータの目覚ましい進歩にも後押しされて、理論と計算の両歯車が相互に加速して、今や、遷移金属触媒の遷移状態の構造や複雑系の動的構造までもが明らかになってきている。本書は、実例を豊富に用いることにより、計算化学や理論化学を専門しない人にもわかりやすくなっている。また、錯体の産業応用を常に意識した解説は、錯体化学分野の人だけでなく物体化学に携わる人にも、ぜひ手に取ってほしい一冊である。

(ISBN978-4-7827-0709-8・A5判・529ページ・7,400円+税)

2014年刊・三共出版