

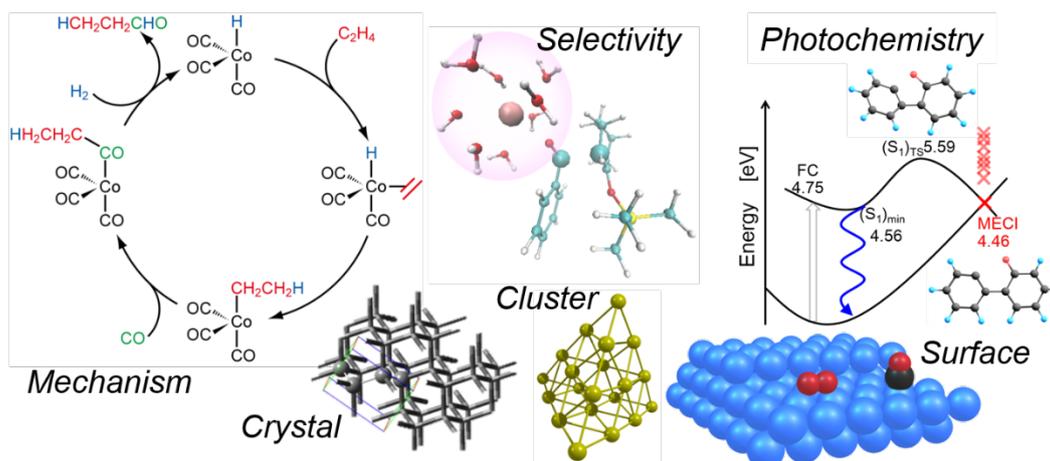
人工力誘起反応法：最近の応用例と今後の可能性

(北大院理) 前田 理

電子メール (smaeda@mail.sci.hokudai.ac.jp)

理論計算は、化学において重要な分野の一つへと発展した。その適用は、電子状態、構造、反応性、ダイナミクスなど多岐に及ぶ。反応性に関する研究は、近年特に盛んに行われるようになってきている。これは、化学反応のエネルギープロファイルを計算し、実験結果を定性的または半定量的に説明できるようになったからである。その際に用いられる技術が構造最適化である。構造最適化によって遷移状態の構造を求め、反応障壁から反応性を議論する。また、複数の生成物に対する遷移状態を求め、各生成物へと至る反応障壁を比較し選択性についても解析する。さらに、遷移状態の構造から障壁の高さに寄与する相互作用を解析し、選択性の起源を解明することも可能である。

一方、構造最適化には重大な欠点がある。すなわち、遷移状態や重要な中間体などに関する予想構造が必要となる。このため、多段階の複雑な反応機構を扱うことは難しい。また、経路の見落としによる間違いも発生しかねない。この問題を解決するには、反応経路を系統的に探索する反応経路自動探索法が不可欠である。そこで本研究では、反応経路自動探索法の一つである人工力誘起反応法[1]の開発を進めている。元々、人工力誘起反応法は多成分連結反応の解析のために開発された手法であった。一方、分子内反応、有機金属触媒、有機触媒、酵素反応、光反応、クラスター触媒、表面反応、結晶構造予測など、多様な化学反応へと、その適用範囲が拡張されてきた。また、技術が確立された適用範囲に対して、実験グループとの共同研究も含め、盛んに応用が成されている。講演では、人工力誘起反応法とその拡張、および、最近の応用について概説する。



図、人工力誘起反応法の適用性

[1] Maeda, S.; Harabuchi, Y.; Takagi, M.; Taketsugu, T.; Morokuma, K. *Chem. Rec.* **2016**, *16*, 2232.