

量子化学探索で拓く未知の化学

(量子化学探索研究所) 大野 公一

ohnok@m.tohoku.ac.jp

量子力学に基づく量子化学には、本来、予言性がある。計算精度の向上と適用領域の拡大に伴い、未知の化学を量子化学に基づいて切り拓くことが、大いに期待される時代が到来した。[GRRM プログラム](#)[1]は、量子化学の予言性を利用して、未知の化学を探索する「量子化学探索」のツールとして発展を続けており、未知物質・未知反応の発掘や予測に役立っている。

平衡構造の周囲の反応経路をポテンシャルの非調和下方歪み (ADD) を利用して自動探索する ADDF 法 (スケールした超球面を利用するので SHS 法ともよばれる) を用いると、その平衡構造に相当する化合物を過不足なく (副生成物なしに) 合成する反応経路 (Synthon) を、それと逆向きの分解反応経路 (Dissociation Channel, DC) としして調べることができる。GRRM14 以降に搭載された人工力誘起反応 (AFIR) 法を用いると、複数の物質を指定して、それらで合成される反応の経路を調べることができるので、AFIR 法を用いて Synthon を求めることも可能である。

合成目標物質の Synthon を求めようとするとき、出発物質の組み合わせが予めわかれば (予測する資質や知識があれば)、AFIR を使うとよい。予測できない想定外のものまで調べたいときは、ADDF を用いて DC を調べる方法が役立つ。図 1 はメタンとアセトラクトンからプロピオン酸 (右上) または酢酸メチル (右下) が生じる synthon を ADDF 法で得た例であり、中央に各反応過程の遷移状態が示されている。

未知の化学の可能性は、1 種類の元素だけからなる単体にすらあり得る。図 2 に炭化水素の構造探索をきっかけとして最近みつかった新型炭素構造の例を示す。

[CAS Registry](#) [2]によると物質の種類は 1 億 3 千万種類に達しているが、これは 12 種の原子を並べてできる鎖の数より少ない。原子を組み合わせることができる物質は、無限にあり得るはずであり、その存在と反応過程を量子化学で発掘する楽しみは尽きないであろう。

[1] GRRM プログラム Home Page, <http://iqce.jp/GRRM/>

[2] <http://www.cas.org/content/chemical-substances>

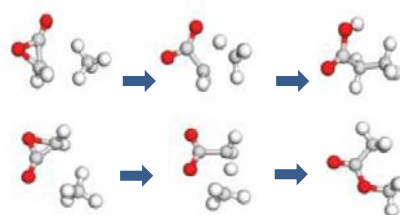


図1 メタンを利用した合成反応

(上) プロピオン酸合成 (下) 酢酸メチル合成

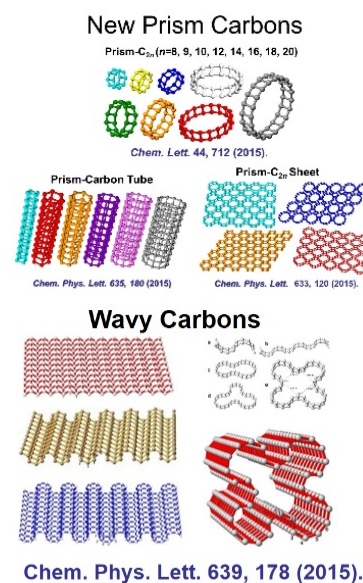


図2 新型炭素構造

(上) 多角柱型炭素 (下) 波打型炭素