

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 て調べる こと が 可 能 だ。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 可 能 だ。AFIR 法 を 用 い て Synthon を 求 め る こと も 可 能 だ。

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 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 て 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>

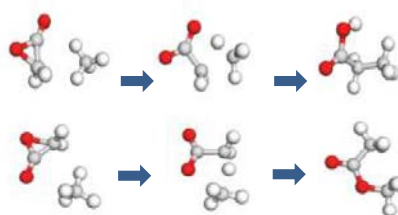


図1 メタンを利用した合成反応

(上) プロピオン酸合成 (下) 酢酸メチル合成

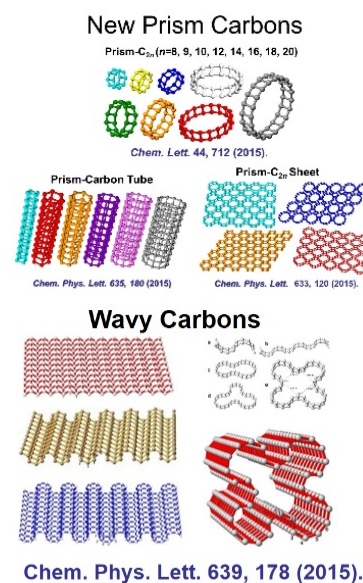


図2 新型炭素構造

(上) 多角柱型炭素 (下) 波打型炭素