



# 計算化学による分子構造 および化学反応の予測と理論設計

■ 教授 **松原 世明** ■ 理学部 ■ 化学科



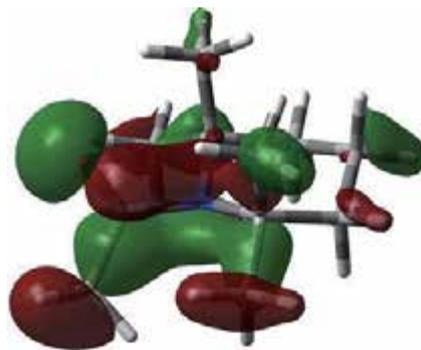
キーワード

分子構造・化学反応・計算化学・理論化学

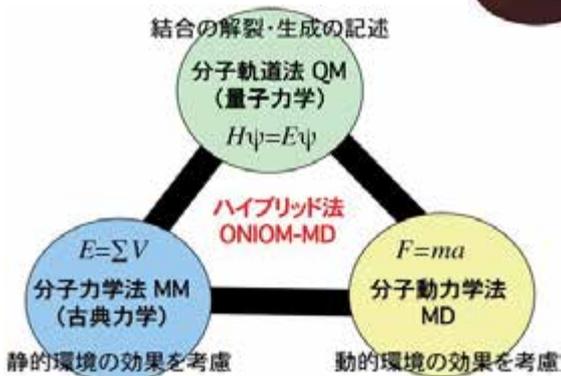


研究概要

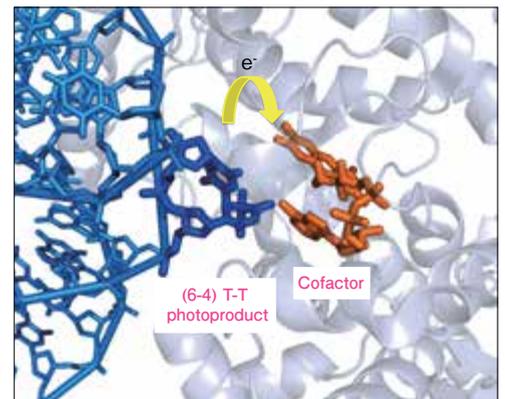
従来の量子化学計算はもとより量子力学的手法と分子力学法を組み合わせた多重スケールモデルやさらにそれを発展させた独自の的方法論を使用し、小分子から巨大分子、気相から液相まで、分子の構造と機能、性質と反応を、計算化学、理論化学の側面から研究を行っています。具体的には、温和な条件下で反応を制御でき特異な反応性や選択性を発現する触媒反応、新規化合物の合成や効率よい有機合成のための新しい反応機構や反応経路の探索、たんぱく質の機能や酵素の反応の理論解析と理論設計を行っています。また、貴金属触媒に代わる環境調和型触媒による有機合成反応の反応機構の解明と理論設計も行っています。



強固なアミド結合を開裂する過程の分子軌道



熱振動を考慮した多重スケールモデル、ONIOM-MD法



損傷したDNA修復過程の電子移動



研究の特徴・比較・優位性

近年の目覚ましい方法論の発展とコンピュータの著しい発達により計算化学の需要は一気に高まり確固たる地位を確立しています。フロンティア電子理論、密度汎関数理論、多重スケールモデルと各時代のノーベル化学賞にもそのことが明確に示されています。実験では困難であっても、計算化学を用いればフラスコの中で何が起こったのか分子レベルで再現できますし、分子の振る舞いを支配している電子の広がりや分子の動きを実際にみることができます。さらに、未知の事象を予測することができます。コンピュータの中では、自由自在に実験することができ、コストパフォーマンスがよく危険もありません。

# （ 今後の展望 ）

分子の熱運動を考慮し多重スケールモデルの一つであるONIOM法をさらに発展させたONIOM-MD法を開発し、その反応解析に基づいた新規分子理論の開発を行っています。これまで、酵素反応における熱揺らぎの効果を解析してきましたし、現在、有機反応における溶媒効果を動力的観点から研究しています。大規模な分子や複雑な分子では、既存の法則では説明が難しいものがまだまだたくさんあります。分子の世界を支配している我々が知らない法則がまだまだあるのではないかと考えています。それらを明らかにしない限り正確な化学事象の予測はできません。分子の未知の世界への挑戦を続けていきます。

## MESSAGE

実験結果を分子レベルで理論的に考察することは次のステップに進む上で必要ですが、これまでは経験に頼らざるを得ませんでした。分子レベルで正確な数値を計算できる計算化学は、今や化学の発展にはなくてはならない分野といえるでしょう。計算化学の基礎を成す理論化学とともに今後新たな分野を開拓していくと考えられます。計算化学を用いれば、フラスコの中で何が起きたのかはもとより何が起こるのかを予測することができます。分子を視覚化してみることで次へのひらめきにつながります。

## I N F O R M A T I O N

所属学会：日本化学会、触媒学会、アメリカ化学会、日本コンピュータ化学会、理論化学研究会、分子科学会

### 論文：

1) T. Matsubara et al., "Computational Study of the Effects of the Steric Hindrance on the Amide Bond Cleavage", *J. Phys. Chem. A*, **118**, 8664-8675 (2014). 2) T. Matsubara et al., "Computational Study on the Mechanism of the Electron-Transfer Induced Repair of the (6-4) T-T Photoproduct of DNA by Photolyase: Possibility of a Radical Cation Pathway", *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **87**, 390-399 (2014). 3) T. Matsubara et al., "Ab Initio ONIOM-Molecular Dynamics (MD) Study on the Deamination Reaction by Cytidine Deaminase", *J. Phys. Chem. B*, **111**, 9965-9974 (2007).