

第4号

2021年6月発行

カタリスト

北海道大学化学反応創成研究拠点(ICReDD)が発行する、化学反応を楽しく学べるニュースポスター

化学反応を
見積もるとは？



化学反応を見積もるとは？

これまで、化学反応とは何か、身の回りにある化学反応、情報科学の利用について学んできました。
ICReDDでは、計算科学により化学反応に必要なエネルギーを見積もって、新しい化学反応の仕組みを設計・開発しています。
今回、化学反応を見積もるとは、何か学んでみましょう。

化学反応とは

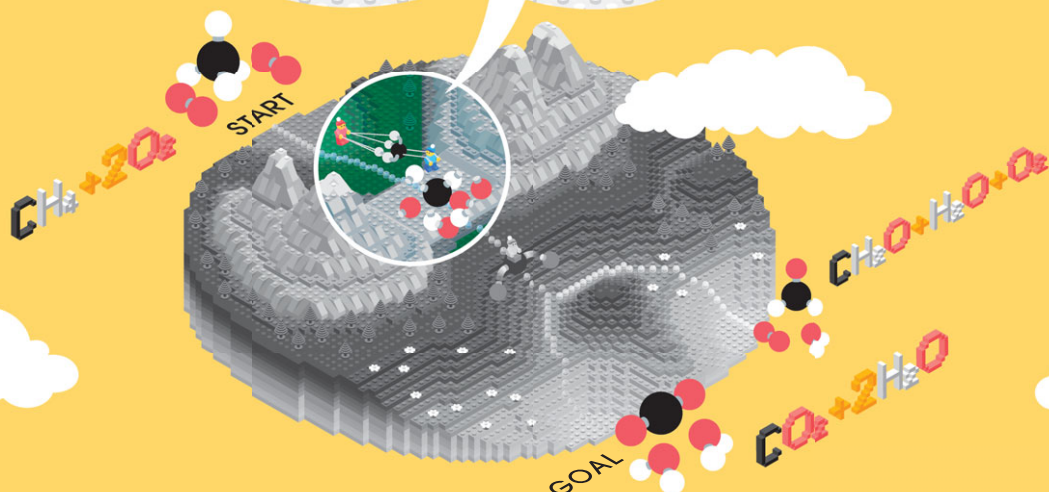
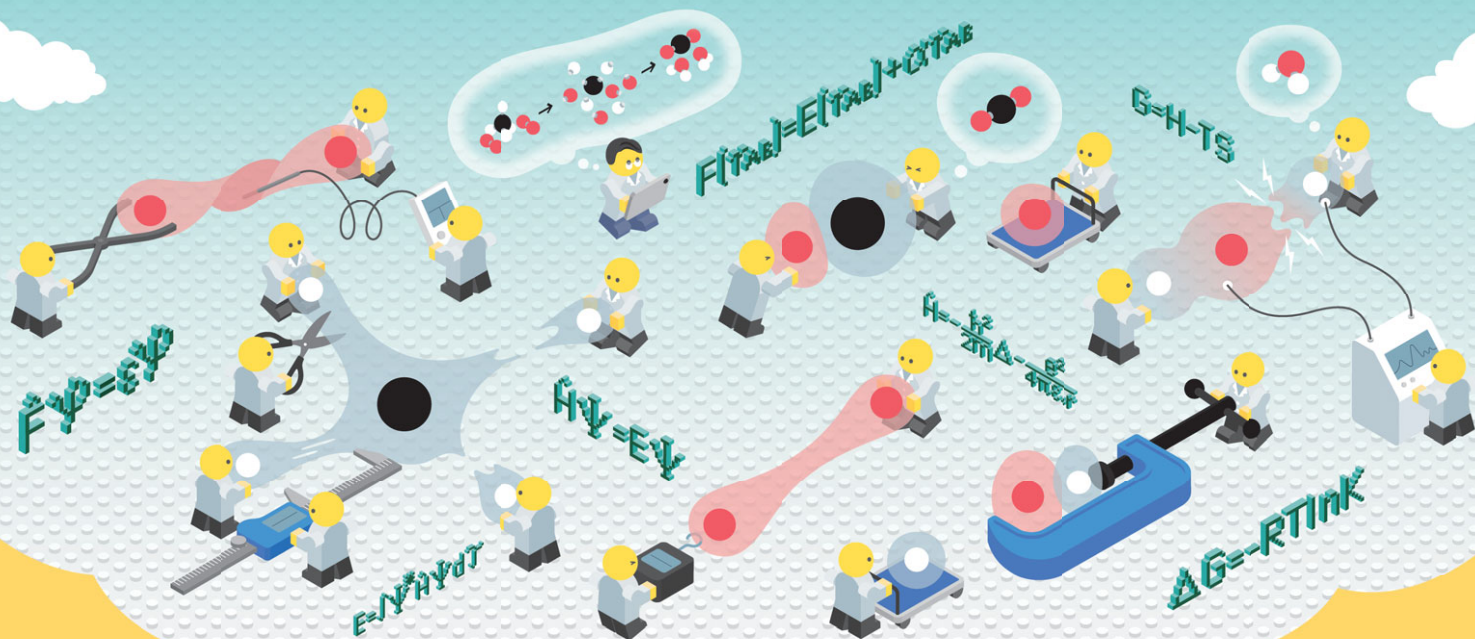
レベル
1

化学反応とは、メタンと酸素が反応して二酸化炭素と水ができるように、分子が分解したり、結合したりして構造を変えること学びました。しかし、実際の化学反応は非常に複雑で、常温や常圧で安定に存在する分子同士を反応させて、構造を変えるには、熱や圧力、光など、外からのエネルギーや触媒が必要となります。さらに、最初に分子のどこの部分が分解して、どの原子や分子とどのように結合するのかといった詳細な反応経路を調べることは容易ではありません。

分子のエネルギー

レベル
2

安定な分子の中で原子同士は、ある決まった原子間距離を保っています。その距離より長くと、再び結合しようと引力がはたります。また、その距離より短くすると反発しあう斥力がはたります。安定な分子の中では、原子同士にかかる力は、つり合っています。分子の構造を変えるには、一度分子を分解する必要があります。つまりエネルギーの高い状態を通る必要があるのです。



反応のエネルギーを見積もる

レベル
3

原子・分子の挙動を、原子の電子分布や座標をもとに方程式で理解しようとするのが量子化学です。コンピュータの急速な発展により複雑な方程式を計算できるようになると、分子の電子分布を計算し、分子の構造や物性を解析、予測することができるようになりました。出発物質からゴールとなる生成物まで最も少ないエネルギーでたどり着くルートを探せば、多くの場合それが実際の反応経路になります。

人工力誘起反応法

レベル
4

人工力誘起反応(Artificial Force Induced Reaction; AFIR)法は、分子の中の結合を引っ張って分解したり、原子や分子を押し付けて結合させたりして、反応に必要なエネルギーを見積もります。こうすると、出発の構造から多くの新たな安定構造を見積もることができます。そこからさらに反応を次々に行っていくと、出発物質から可能な全ての反応経路を見積もることができるのです。ICReDDでは、この方法を使って新しい化学反応を設計・開発しています。

チャレンジ してみよう!

クイズ

原子・分子の挙動を _____ で理解するのが量子化学です。
空欄に入る答えはどれでしょうか? 答えを送ってください!
1) 直観 2) 方程式 3) 模型 4) 実験

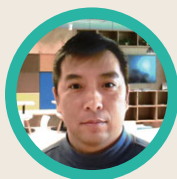
挑戦

化学結合を理解する方程式を見つけたら教えてください。

チャレンジしたらぜひSNSでシェアしてください。
皆さんの反応をお待ちしています!

#ReactWithUs @ICReDDconnect

◎新たに着任した研究者



ワン レイ

研究テーマ

パイオマテリアルによる新規がん幹細胞治療法と再生医療の研究



アマトウナドゥ
スダカル アムルタ

研究テーマ

人工力誘起反応法とコンピナトリアル最適化による化学反応の予測



シバクマール
キリンガル イシュワラ

研究テーマ

脂肪族ポリケトン
の構造・物理・機能特性
の解明

ニュース

◎代表的な論文 (2021年2月から2021年4月までの論文29報中)

- ・DNゲルによるがん幹細胞へのリプログラミング誘導
(津田真寿美、ワン レイ、龔剣萍、田中伸哉) DOI: 10.1038/s41551-021-00692-2
- ・反応経路計算データを解析するデータベースシステム
(ギマディエフ ティムール、前田理、シドロフ パベル、ヴァーネック アレクサンドル) DOI: 10.1021/acs.jcim.0c01280
- ・有機合成における溶解性問題の解決に向けて:不溶性ハロゲン化アールの固体クロスカップリング反応
(久保田浩司、伊藤肇) DOI: 10.1021/jacs.1c00906



◎シンポジウム (招待講演・その他)

- ・第3回ICReDD国際シンポジウム (前田理、伊藤肇、武次徹也、龔剣萍、ヴァーネック アレクサンドル)
- ・北海道がんプロ・北大医・市民公開講座 (田中伸哉)
- ・北海道大学工学・情報・ICReDD合同シンポジウム (美多剛、久保田浩司、瀧川一学、リャリン アンドレイ)
- ・第19回次世代を担う有機化学シンポジウム (清水洋平)
- ・第23回理論化学討論会 (原測祐)
- ・ケミカルレコード・レクチャー 2021 (リスト ベンジャミン)

◎受賞

- ・第33回日本ゴム協会賞 (龔剣萍)
- ・日本希土類学会賞 (塩川賞) (長谷川靖哉)
- ・科学技術分野の文部科学大臣表彰 科学技術賞 (研究部門) (澤村正也)
- ・科学技術分野の文部科学大臣表彰 若手科学者賞 (中島祐)

◎アウトリーチ

- ・マンスリー ニュースポストカード
- ・クオータリー ニュースポスター カタリスト第3号

React With Us!

最新情報を入手するには、
ICReDDのSNSをフォローしてください。
@ICReDDconnect



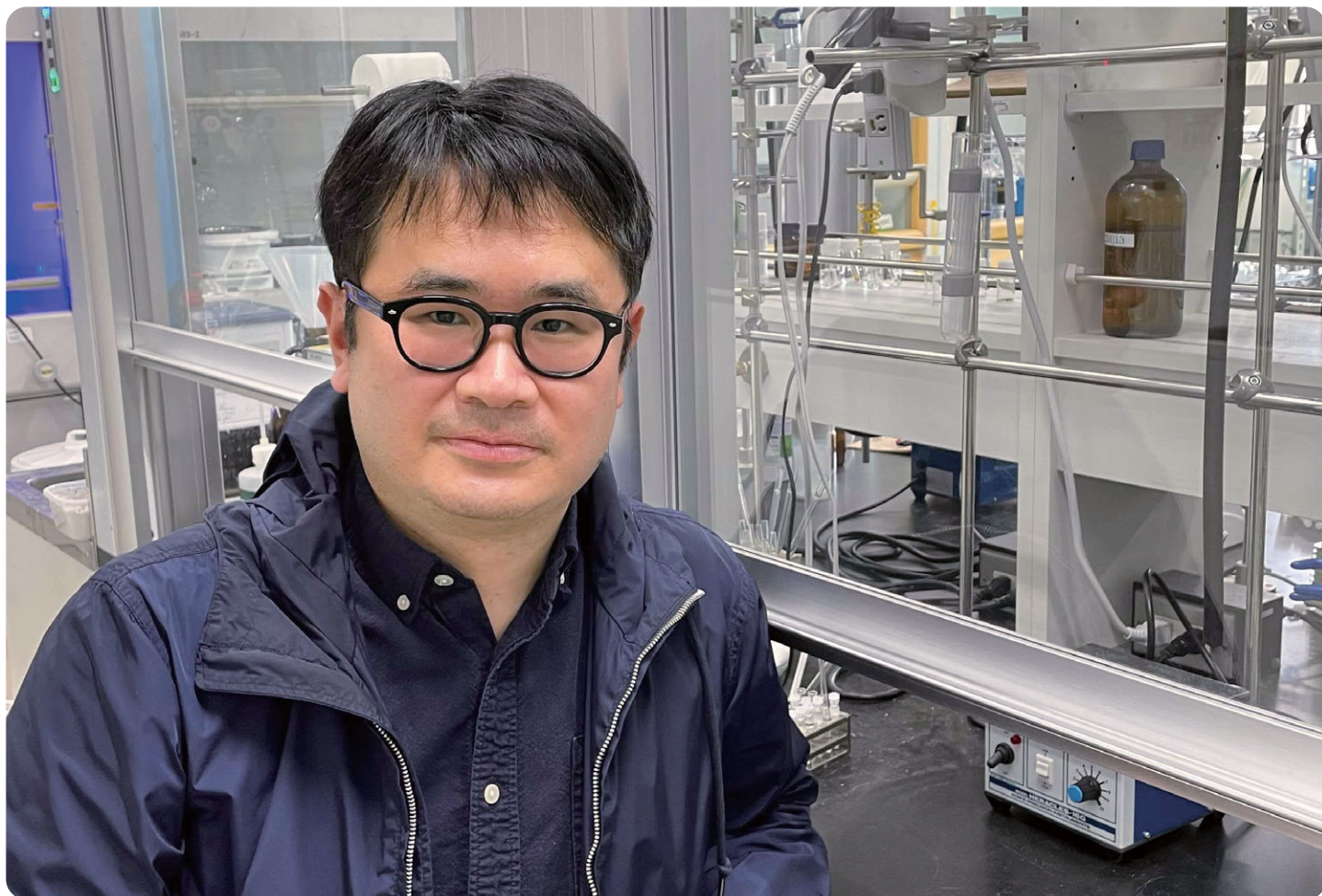
研究者紹介

美多 剛

Tsuyoshi Mita

略歴

ICReDD特任准教授。2007年東京大学大学院薬学系研究科で博士(薬学)を取得後、2007-2009年米国ハーバード大学化学・化学生物学科で博士研究員。2009-2019年北海道大学大学院薬学研究院助教を経て、2019年4月より現職。2019年10月よりJST, ERATO「前田化学反応創成知能プロジェクト」有機合成グループリーダーを兼任。専門は有機合成化学、有機金属化学、創薬化学、計算科学。



美多剛特任准教授は、量子化学計算から導きだされた新反応を
実験科学で具現化すべく研究を行っています。

最近、人工力誘起反応(AFIR)法を利用した α, α -ジフルオログリシン誘導体の化学合成と
その利用法の開発に成功しました。

(Chem. Sci. 2020, 11, 7569 & Chem. Eur. J. 2021, DOI: 10.1002/chem.202100812).



ICReDDについて

新しい化学反応の開発は、人類の繁栄や環境問題と密接に関わっています。その代表的な例は、2010年にノーベル化学賞を受賞したクロスカップリング反応です。この反応は医薬品の約20%、液晶や有機EL材料のほぼ全ての生産に利用されており、年間約60兆円規模の産業に関わっています。これは、新しい化学反応の開発が社会にいかにか大きな影響をもたらすかを示すわかりやすい例です。

北海道大学に設置された化学反応創成研究拠点(ICReDD)は、その名の通り化学反応開発を専門とする、WPIの拠点です。化学反応を自在に設計することを目標に、異なる分野の研究者がそれぞれの強みを活かし、協力し合いながら分野融合型の研究を行っていることが大きな特徴の1つです。化学反応の自在設計には、あらゆる段階における横断的な異分野連携が必要となりますが、この新たな融合研究を推進するために誕生したのがICReDDです。化学反応という自然界の基本的なプロセスを研究するためには、量子化学計算、情報技術、最新の実験技術、先端材料の開発など分野ごとに分かれて研究するのではなく、真に融合された新たな研究技術が必要不可欠なのです。

カタリストとは

「カタリスト」とは触媒のことです。化学で使用される触媒とは、反応をより速く起こさせるために使われます(例:分子を結合させる、反応の障壁を減らす、分子を活性化させる、など)。このポスターを通して、読者の方々が日常に無数に存在する化学反応と私たちの生活を結び付け、化学反応や化学といったものが私たちの世界と実際にはどのように関わっているのかを、新しい視点で気づくためのお手伝いができればと考えています。そして、「カタリスト」で私たちのことをもっと知ってもらい、読者の皆さんと私たちの間に新たな関係(化学反応)を築くきっかけ(触媒)を提供できればと思っています。#ReactWithUs

カタリスト 第4号 2021年6月発行

発行所

北海道大学 化学反応創成研究拠点 (WPI-ICReDD/アイクレッド)

〒001-0021 北海道札幌市北区北21条西10丁目

☎ 011-706-9645(広報担当)

✉ public_relations@icredd.hokudai.ac.jp

SNS @ICReDDconnect [f](#) [t](#) [i](#) [y](#) [in](#)

WEB <https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja/>

