

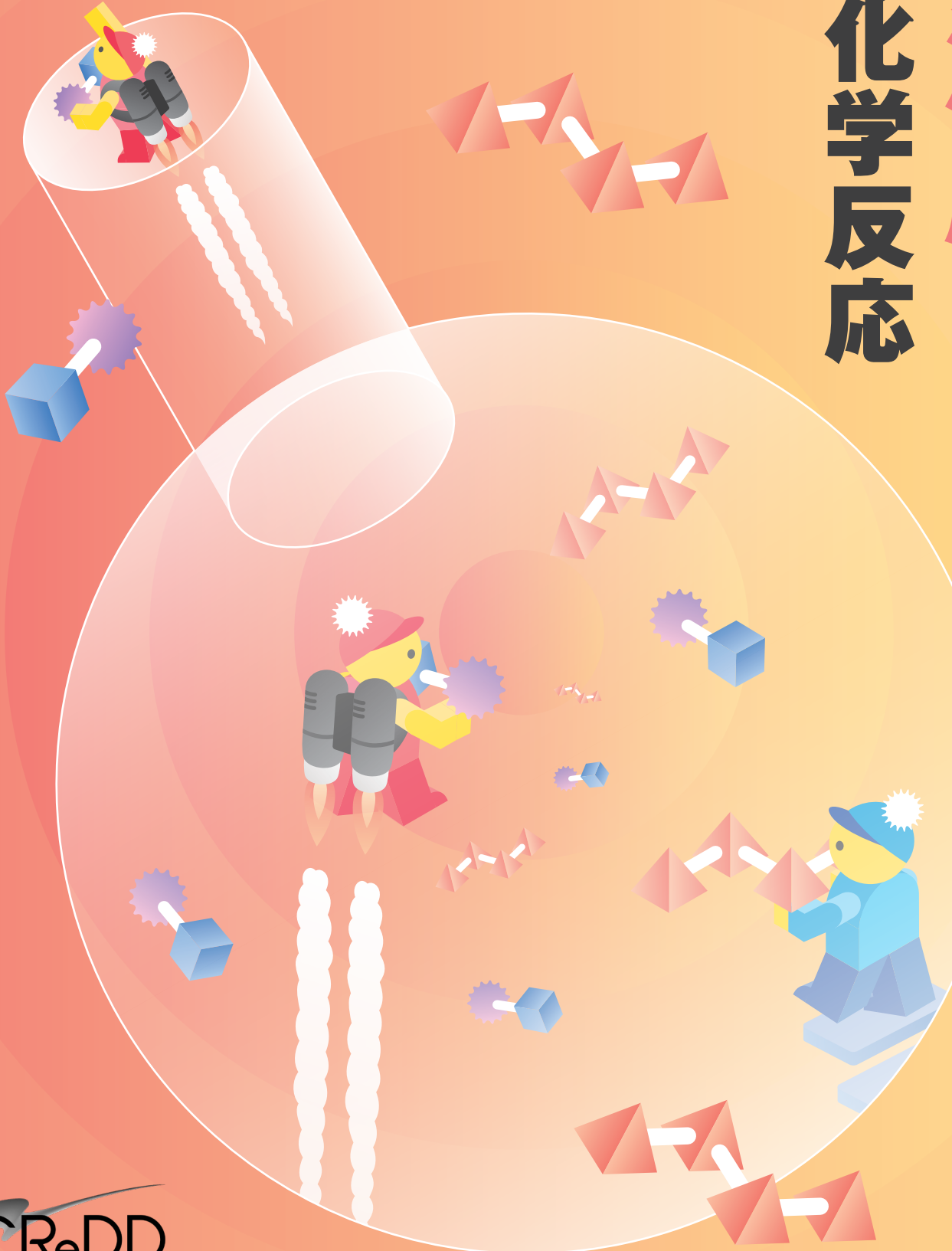
第11号

2023年3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

温度で変わる?!  
化学反応



# 温度で変わる?! 化学反応

化学反応の開発には温度を考慮することがとても大事です。反応を進行させる温度により、反応の速さだけではなく生成物が変わってしまうこともあります!

温度はエネルギーと密に関係しており、原子や分子の振動や運動の速さに影響を与えます。

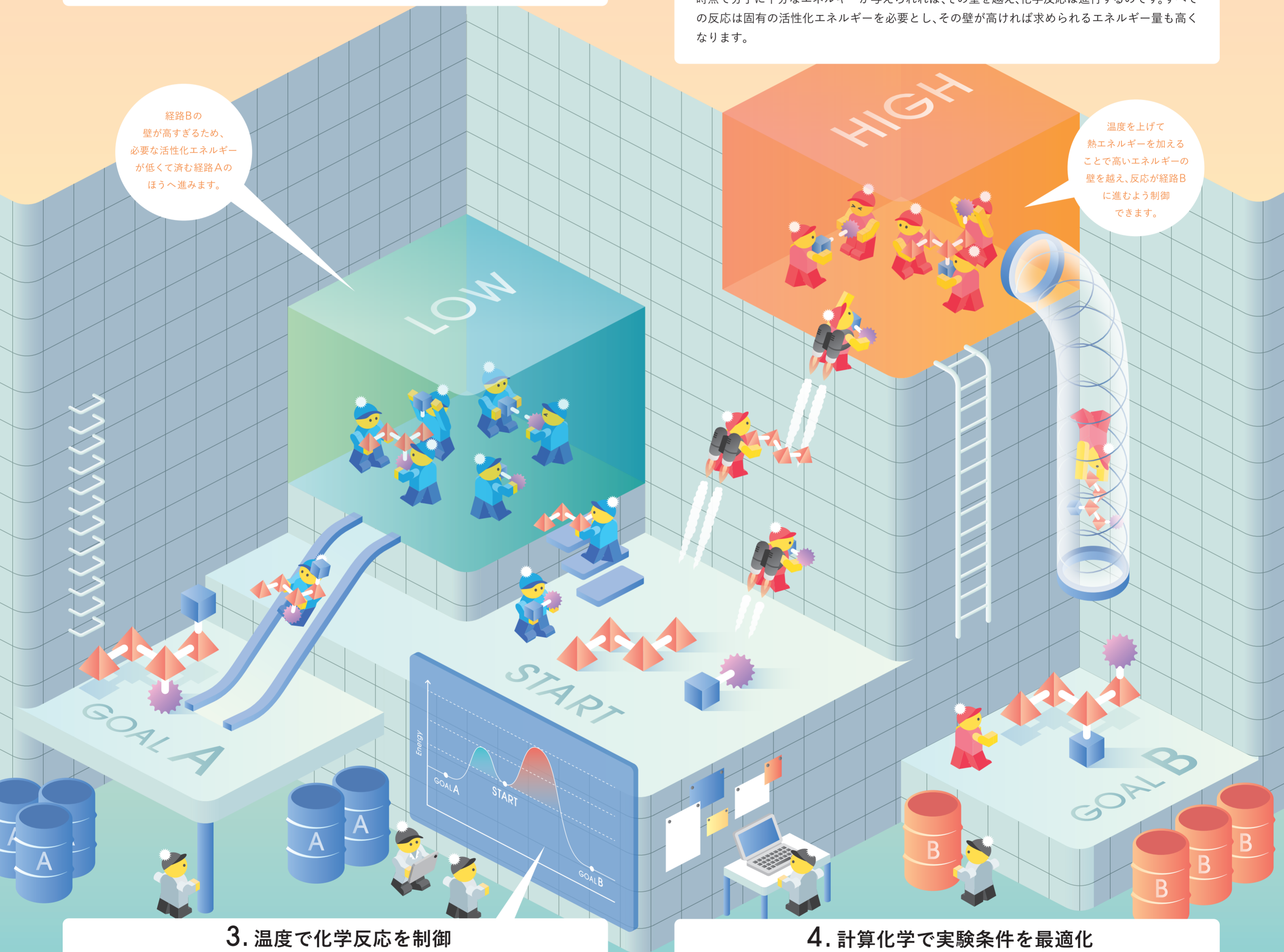
また、分子のエネルギーを計算することで、予測した化学反応が実際に起こるかどうかが、どの化合物を生成するかをより正確に予測することができます。

## 1. 熱と温度

日常生活の中で熱さや冷たさを感じることはよくありますが、私たちの身の回りにある物と同じように、分子に熱を加えると分子の温度は上がります。熱はエネルギーの一種であり、分子が熱を吸収すると、その分子が持つエネルギーは高くなり、動くスピードも速くなります。動きの速い分子は互いにぶつかり合い、それにより化学反応が起こる機会が増え、全体の反応率が上がります。

## 2. エネルギーの壁

基本的に化学反応は自発的に始まるものではありません。例えば、燃焼反応の始まりにはまず火花が必要のように、全ての化学反応の始まりとその進行には外部から一定量のエネルギーを必要とします。この必要なエネルギーのことを活性化エネルギーと呼びます。活性化エネルギーは、まるで化学反応が自発的に始まるのを防ぐ障壁のように反応の前に立ちはだかりますが、もしスタート時点で分子に十分なエネルギーが与えられれば、その壁を越え、化学反応は進行するのです。すべての反応は固有の活性化エネルギーを必要とし、その壁が高ければ求められるエネルギー量も高くなります。



経路Bの壁が高すぎるため、必要な活性化エネルギーが低くて済む経路Aのほうへ進みます。

温度を上げて熱エネルギーを加えることで高いエネルギーの壁を越え、反応が経路Bに進むよう制御できます。

## 3. 温度で化学反応を制御

化学反応において、同じ出発物質でも反応時の温度を変えると二種類の生成物ができることがあります。化学では、分子の持つエネルギーが低いほど分子は安定した状態であるため、自然界では低エネルギーの生成物ができる反応(図のGOAL AよりもGOAL B)の方が好まれます。しかし、その前に一旦通らなければならない活性化エネルギーの壁が高かった場合、出発物質にエネルギーが足りなければ、壁が低いほうの経路へ反応が進行し、生成物Aができることがあります。そこで、熱エネルギーを与えることで高い壁を越えさせ、経路Bへ進むように反応を制御することができるのです。

## 4. 計算化学で実験条件を最適化

ICReDDでは、計算化学者が数学と量子化学を用いて活性化エネルギーの高さや生成物のエネルギーを計算しています。ICReDDで開発した「人工力誘起反応(AFIR)法」で、起こり得る全ての反応経路を自動的に探索、計算することができます。その結果を見て複数の化合物が生成する可能性があるかがわかります。各経路の活性化エネルギーと化合物のエネルギーを参考にし、目的の化合物だけを生成するように、温度をはじめ実験条件を最適化します。このように計算は適切な実験条件をより早く見つけることを可能とし、新しい化学反応の発見を加速させます!

### CHALLENGE!

カタリストを読んで  
チャレンジしてみよう!

### クイズに チャレンジ

Q 分子に熱を加えると\_\_\_\_\_。

A 振動が止まる

B 動きが速くなる

C 反応率が低くなる

D エネルギーが低くなる



クイズの答えはInstagramのハイライト  
で公開しています。ぜひチャレンジして  
みてください。 #ReactWithUs

@ICReDDconnect



ICREDDCONNECT

## ◎新たに着任した研究者



チャンドウ・ゴバラクリシュナン

研究テーマ

光応答性不斉触媒とラジカル反応

# ニュース

ICReDD News

March 2023

## ◎代表的な論文 (2022年12月から2023年2月まで)

- ・固体状態で光スイッチ機能を有するインディゴ誘導体 (ファン)

<https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja/research/8687>



- ・量子化学計算で、有機化合物の出発原料をゼロから予測 (美多、林、高野、原測、前田)

<https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja/research/8491>



- ・グラフニューラルネットワーク(GNN)に基づくAFIR法の加速を実現 (原測、前田)

<https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja/research/8594>



- ・機械学習による不斉有機触媒の予測手法の開発  
(辻、シドロフ、長田、ギマディエフ、ヴァーネック、リスト)

<https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja/research/8645>



- ・二つの触媒の協働作用により光エネルギーから医薬品骨格を構築

(マンガオンカル、林、高野、前田、美多) <https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja/research/8676>



## ◎アウトリーチ

- ・駐日英国大使館よりHelen Smith 首席公使らが来訪
- ・マンスリー ニュースポストカード
- ・クォーターリー ニュースポスター カタリスト 第10号



マンスリーニュースポストカード



カタリスト 第10号

## ◎シンポジウム

- ・第2回鈴木章賞授賞式 & 第5回ICReDD国際シンポジウム



駐日英国大使館よりHelen Smith 首席公使らが来訪

## ◎受賞

- ・第17回 HPC Innovation賞 (リヤリン)
- ・第72日本化学会賞進歩賞 (久保田)
- ・2023年Thieme Chemistry Journals賞 (辻)



第2回鈴木章賞授賞式

## 研究者紹介

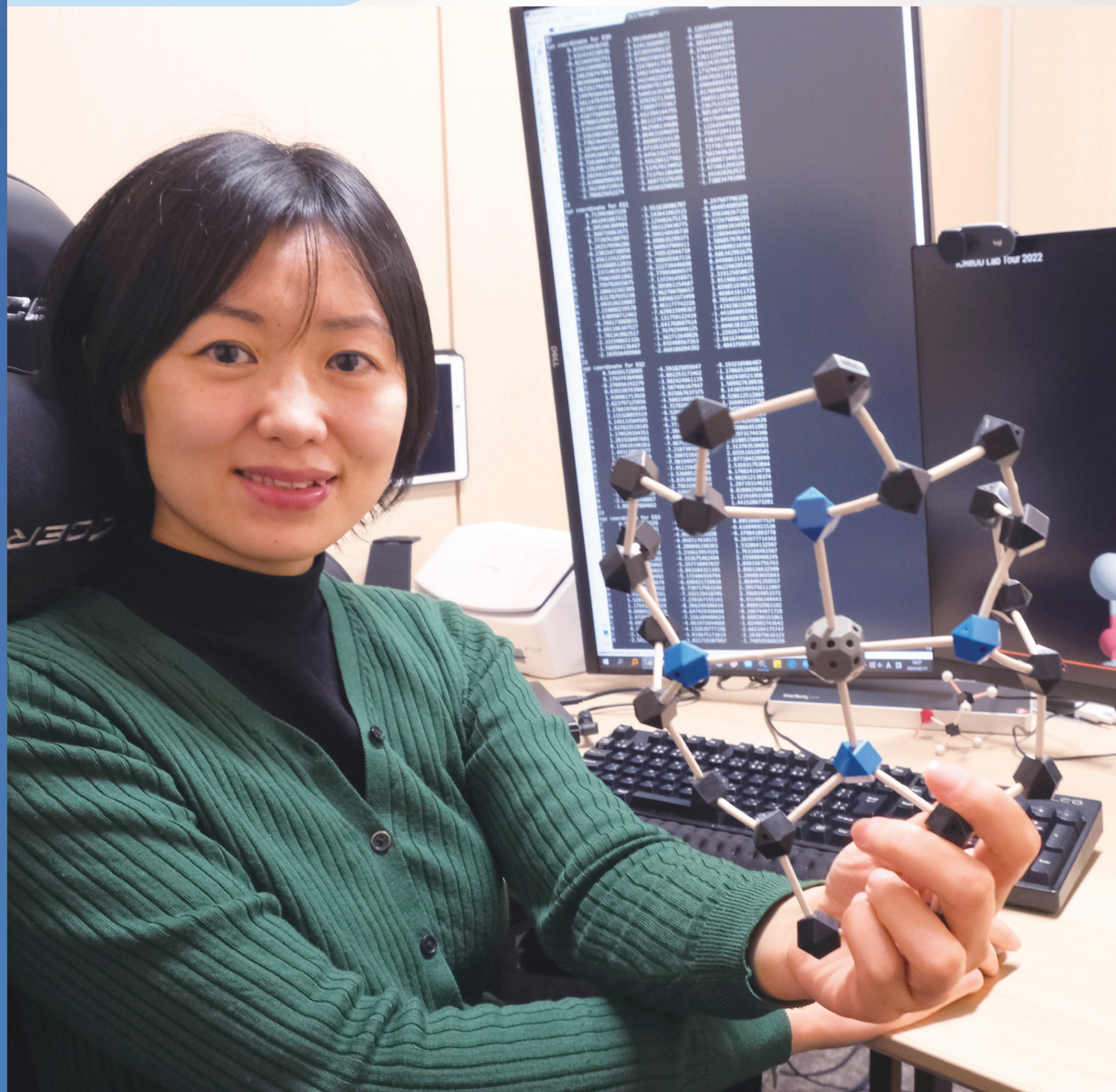
vol.11

# ミン・ガオ

Min Gao

## 略歴

ICReDDジュニアPIおよび准教授。2012年北海道大学理学研究院にて博士号取得。同院で博士研究員として研究を継続したのち、2018年北海道大学触媒科学研究所助教を経て、2022年8月より現職。



ガオ准教授は計算化学による触媒理論の研究を行っています。コンピューターを使って原子レベルで触媒反応を理解、開発することに重点を置き、最近では、自身の理論的な計算結果に基づいた実験にも自ら取り組んでいます。

代表的な論文

J. Phys. Chem. C, 2021, 125, 19219-19228. J. Phys. Chem. C, 2021, 125, 1334-1344.  
J. Chem. Theo. Comp., 2014, 10, 1623-1630.



## 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。

🕒 2023年1月11日に第2回鈴木章賞授賞式&第5回ICReDD国際シンポジウムを開催しました。アキラ・スズキ・アワードはカリフォルニア大学バークレー校のJohn F. Hartwigヘンリー・ラボポート化学教授、アイクレッド・アワードはカリフォルニア大学ロサンゼルス校のKendall N. Houkディステイングイッシュト・プロフェッサーにそれぞれ授与されました。

## 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)を築ききっかけ(触媒)を提供できればと思っています。#ReactWithUs

## 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



## カタリスト 第11号 2023年3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

☎ 011-706-9646 (広報担当)  
✉ public\_relations@icredd.hokudai.ac.jp  
WEB <https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja/>

