

ディビジョン番号	3
ディビジョン名	理論化学・情報化学・計算化学

大項目	3. 計算化学
中項目	3-3. 反応設計
小項目	3-3-2. 触媒反応解析

#### 概要（200字以内）

触媒反応や有機反応の反応機構解析は、計算環境（手法および計算機）の向上により実サイズモデルでの解析が可能となってきた。しかしながら実際の反応では、溶媒やカウンターイオンの違いにより、反応性や選択性等が変化する場面が多々あるが、現状ではこれらに対応した解析は困難である。

溶媒やカウンターイオン、助触媒、担体などを考慮したより現実に近い系での解析手法の確立が望まれている。

#### 反応に影響する外部因子

- ・溶媒
- ・助触媒
- ・触媒担体
- ・カウンターイオン
- ・圧力

#### 現状と最前線

反応解析・触媒設計の分野では、密度汎関数法の進展やQM/MM法などの計算手法の開発および近年の計算機自体の進歩により、以前では困難であった実モデルでの触媒反応解析が可能となり、反応機構の理解や活性要因の解析が可能となり、種々の触媒反応に適用されている。

メタロセンやポストメタロセン触媒を用いた $\alpha$ -オレフィンの重合反応については、多くの研究者が計算による反応機構および活性と立体制御についての解析を試みており、触媒そのものの構造を用いた計算により、立体制御機構の解明およびタクティシティの予測が報告されている。このように多くの均一系触媒の反応機構解析は、今日の計算資源をもってすれば十分可能なターゲットとなっている。

しかしながら、実際の反応においては、その活性や選択性などは、溶媒、助触媒、触媒担体などの影響を受けることが知られているが、現在の反応解析においては、その多くが孤立系として取り扱われており、溶媒、助触媒、触媒担体の効果をあらわに取り扱う手法は確立されていない。

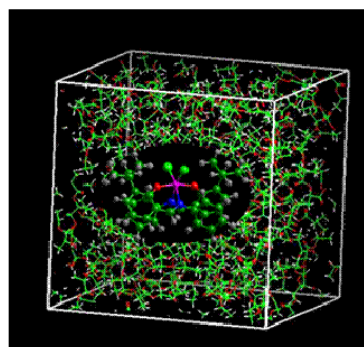
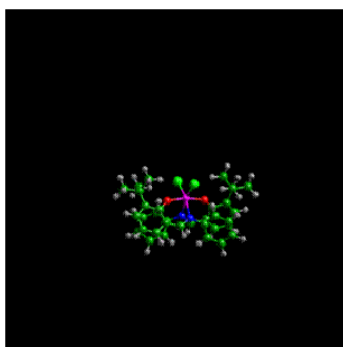


図-1 孤立系モデルおよびポリマー中モデル

溶媒効果に関しては SCRF や RISM 法のように、溶媒を誘電体あるいは電荷との相互作用として計算に取り入れる方法が主に水溶媒を中心に適用され、成果を上げつつあるが、有機溶媒の効果を解明するにはいたっていない。溶媒部分を力場で取り扱い、反応中心は分子軌道法や密度汎関数法を適用する QM/MD や ab-initioMD 法が溶媒効果の記述方法として試みられ始めているが、計算負荷の問題からより高速なアルゴリズムおよび高速計算機の開発が待たれる。

またカウンターイオンにより反応の選択性や活性が異なることは SN2 反応などでも知られているが、メタロセン触媒における助触媒に例では、助触媒をカウンターイオンとして計算モデルにあらわに取り組むことでその効果を解明することが試みられており、今後の進展が期待される分野である。

#### 将来予測と方向性

- ・ 5 年後までに解決・実現が望まれる課題
  - カウンターイオンの取り扱い
  - 助触媒の取り扱い
  - 溶媒効果の取り扱い
- ・ 10 年後までに解決・実現が望まれる課題
  - 媒体（ポリマーや担体）の取り扱い
  - 副反応の網羅的予測
  - 最適反応条件の予測

#### キーワード

有機反応、触媒、溶媒効果、副反応、反応設計

(執筆者：田中英司 )