

見えない「分子の分かれ道」を計算する

松谷 叡

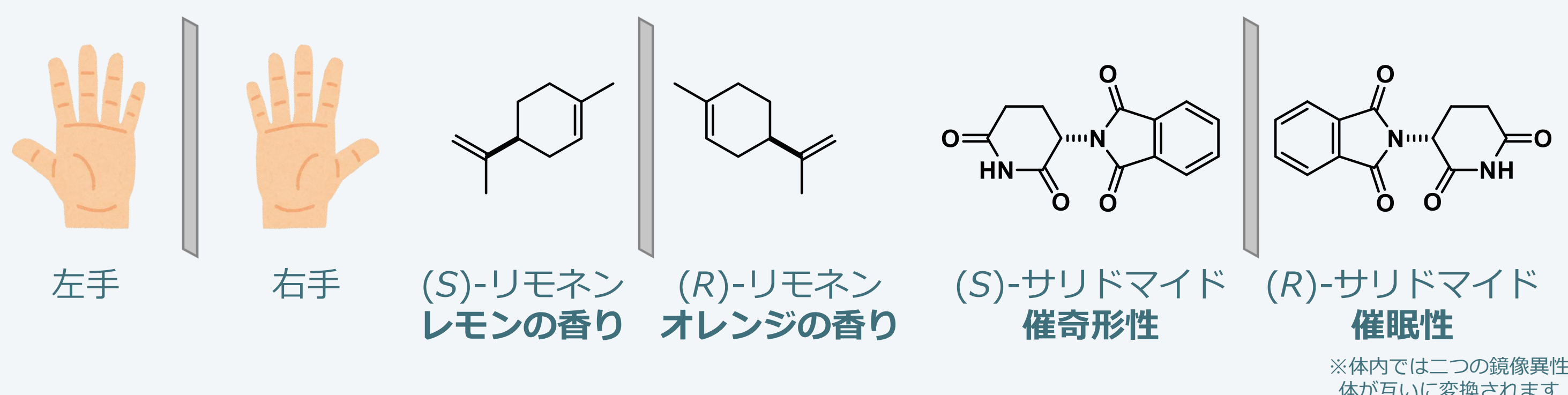
北海道大学 大学院総合化学院
理論化学研究室

未来社会のあるべきかたち

◆コンピューターによる化学反応の予測を活用して、医薬品や機能性材料など、私たちの生活を支える物質を、より少ない資源とエネルギーで生み出せる社会を目指す。

● 鏡像異性体とは？

- 互いに鏡映しの関係にありながら重ね合わせることのできない分子で、生体への作用が異なる場合がある



- 一方だけを選択的に合成したいが、実験だけで最適な条件を探すには、多くの時間と資源が必要となる。
- 反応の選択性を決める「遷移状態」は一瞬しか存在せず、実験で直接観察することが難しい

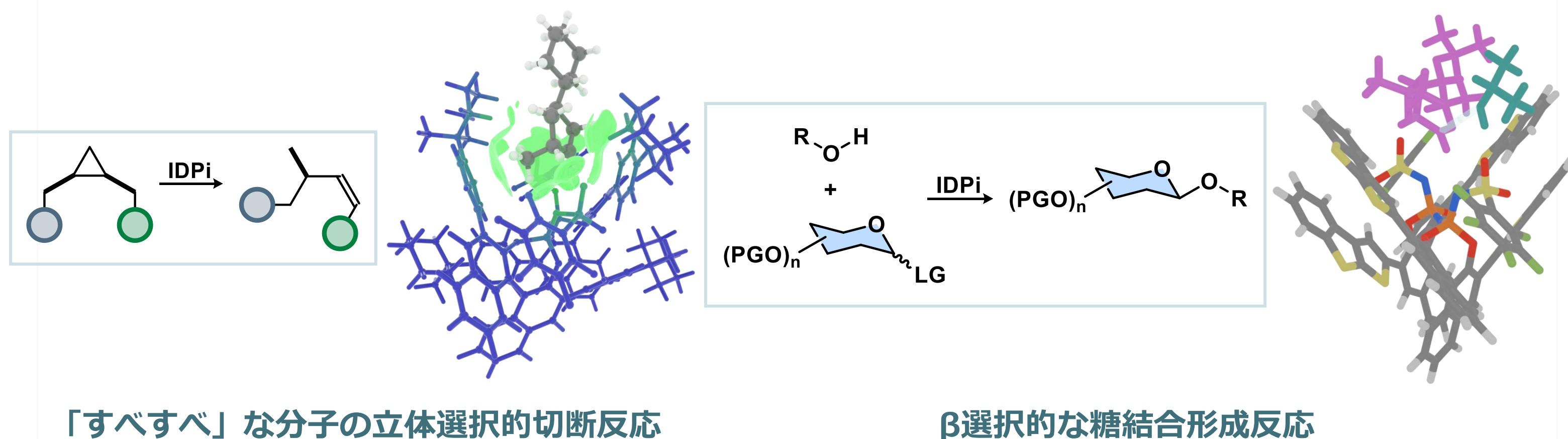
● 遷移状態とは？

- 化学反応が進むときに越える「エネルギーの山」の頂上にあたる構造

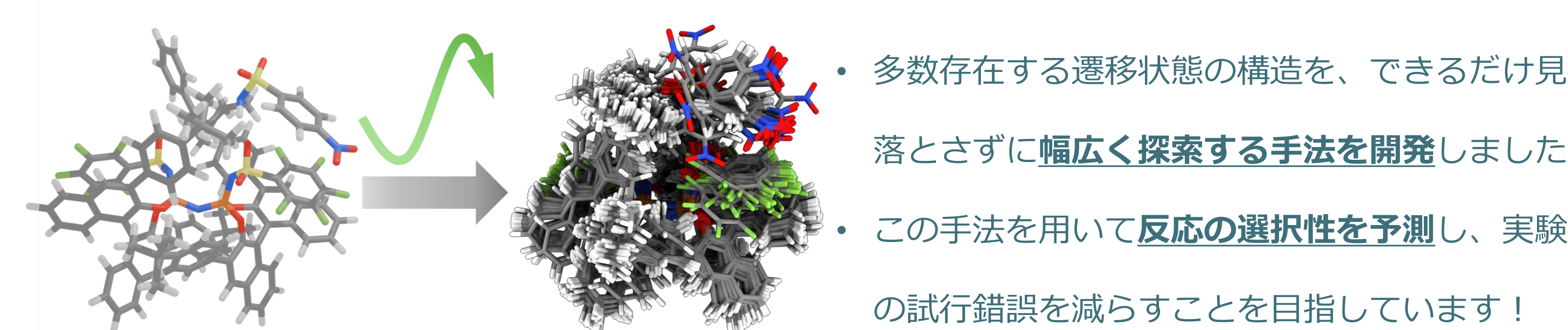


コンピューターによる遷移状態の解析が重要！

遷移状態を「解析」する



遷移状態を「探索」する



計算によって有望な触媒や条件を絞り込み、医薬品や材料を、より速く、より選択的に、より少ない資源でつくる未来を目指します