

化学反応における対称性の破れの理論

(財)豊田理化学研究所
フェロー 山口 兆

目的

化学反応、特に酸素化反応の反応機構を軌道、スピンおよび電荷の自由度(図1参照)をあらわに考慮した量子化学理論を用いて理論的に解明する。この為、これら自由度に関する「対称性の保存」のみならず「対称性の破れ」の可能性(図2参照)を検討し、反応機構の反応場による動的変換および制御の可能性を明らかにする。

方法

スピン分極型分子軌道法およびハイブリッド密度汎関数法(これらの手法はBroken Symmetry「BS:対称性の破れ」の方法と総称される)を用いて、反応の遷移状態、不安定中間体の分子構造決定と分子振動解析を実行し、図2に示した反応機構の同定を行う。また、溶媒効果などの反応場の効果を検討し、反応機構の相互変換の可能性を解明する。

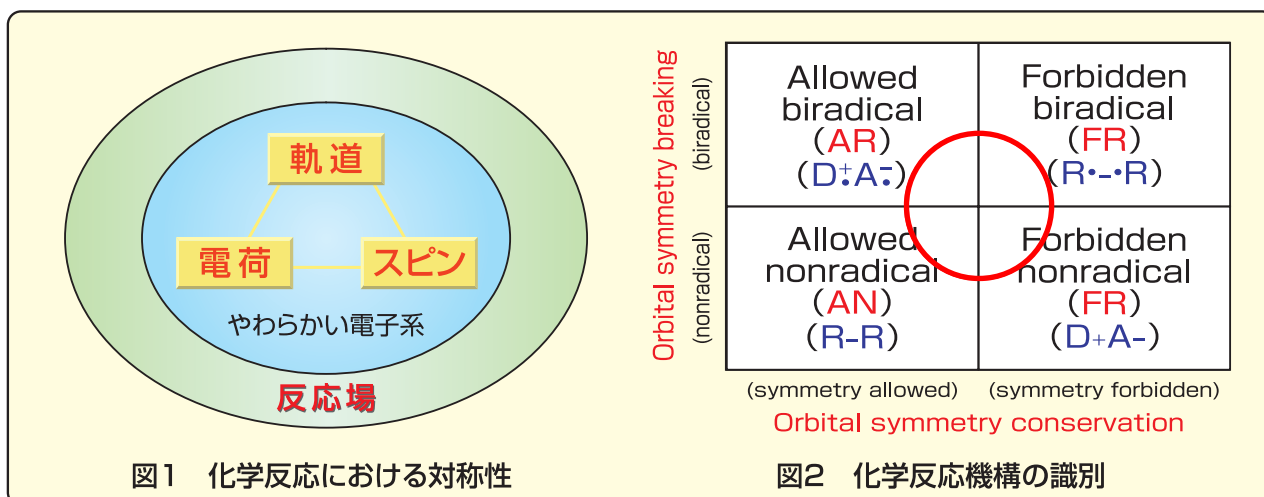


図1 化学反応における対称性

図2 化学反応機構の識別

期待される成果

本研究で遷移金属酵素などの持つ柔らかい電子状態系の巧妙な反応機構が解明されれば図2の分類での中間的領域(丸の部分)に属する反応系(この領域では少ないエネルギーで大きな変化を誘起出来る)に関する理論的知見が得られる。その成果はそれ自体の学問的意義のみならず人工的高選択的反応触媒の開発などにも資することが期待される。