第138回触媒化学研究センター談話会

演　題：計算化学と情報化学を融合した合成経路開発システム
　　－その有用性の検討－

講演者：堀　憲次　教授
　　山口大学　工学部

日　時：２００２年１２月２０日（金）
　　１６：００－１７：３０

会　場：北大ファカルティハウスエンレイソウ
　　第一会議室（２階）

要　旨：目的化合物の新規合成経路を創生する手段として、合成経路設計システムが既に実用化されている。このようなシステムは、一般的に複数の合成経路を提案するが、多段階で反応を考えた場合、その合成経路の数は級数的に増加し、経験豊かな合成化学者でもその選択に迷う場合がありえる。一方、提案された合成経路の存在の有無は、理論計算を用いた反応解析により、実験を行うことなしに判断することができる。さらに溶媒効果や置換基効果を慮した計算を行えば、提案された合成経路の容易さも評価できると考えられる。これは、情報化学的に得られた合成経路の容易さのランクづけを、計算化学を用いることにより行うことができることを示している。しかしながら、反応解析を行うには長い時間が必要なため、両者を融合した合成経路開発は、その有用性にもかかわらず、ほとんど行われていない。本研究では、実験化学者が有効に利用することを可能とする遷移状態データベースの開発ついて述べるとともに、その有用性を検討した結果を述べる。

連絡先》北大触媒化学研究センター　分子集合体化学分野
　　辻　康之 (011-706-2914 ・ tsuji@cat.hokudai.ac.jp)