

平成14～16年度 先端化学技術部会
コンピュータケミストリー分科会

次世代 CC ワークショップ第 期
活動報告書

平成16年7月

社団法人 新化学発展協会

ASPRONC

The Association for the Progress of New Chemistry

目次

目次.....	0-01
まえがき.....	0-02
第1章:「量子化学計算の工学的応用」・顧問 堀 憲次.....	1-01
第2章:活動報告	
(1)「ONIOM 法のゼオライト構造解析への適用可能性検討」・後口 隆	2-01-01
(2)「フッ素化学に関する量子化学的計算」・入澤 潤	2-02-01
(3)「高効率の光反応開始重合を目指した増感剤、開始剤の選択に関する量子化学的計算」・臼井 信志	2-03-01
(4)「セルロースエステルにおける脱アセチル化反応の位置依存性の分子論的解釈」・奥山 直人	2-04-01
(5)「気相 W a c k e r 酸化反応の解析」・鷺 一雄	2-05-01
(6)「常温エステル交換スズ触媒の反応機構解明」・鈴田 哲也	2-06-01
(7)「マクロサイクル金属錯体の構造と電子状態」・立川 豊	2-07-01
(8)「CGC を用いた Et/St 共重合反応におけるポリマーの一次構造形成のシミュレーション」・田中 健夫	2-08-01
(9)「企業における計算化学の成果評価」・寺石 和夫	2-09-01
(10)「スチレン立体特異性重合の活性点」・鞆津 典夫	2-10-01
(11)「アリルフェノールのパラジウムによる不斉環化反応の解析」・山口 能弘	2-11-01

本報告は、山口大学工学部応用化学工学科分子反応システム工学研究室の堀 憲次教授をアドバイザーに迎え、2002年8月から2004年7月まで行った「次世代CC ワークショップ第2期」の活動をまとめたものである。堀教授は量子化学と情報化学の境界領域で研究を続けられており、Journal of Computer Aided Chemistryには「遷移状態探索システムの構築」1, 89-97 (2000)と「計算化学と情報化学を統合した合成経路開発システム - 遷移状態データベース - 」2, 37-44 (2001)を公表されており、後者の投稿は栄えある日本化学会情報化学部会の論文賞の対象となっている。本ワークショップの開催に到る経緯は、1994年から1999年にわたって継続してきた「触媒ワークショップ」活動をひとまず終了して、あらゆる「化学」を計算するための次世代技術の習得に主眼を置いたワークショップに発展させようと考えたことから始まる。次世代CCワークショップ第1期(1999年～2002年)では「新規高機能材料の設計および反応のリアル系解析を目指した量子化学計算技術の確立」を掲げ、Gaussian98に導入されたONIOM 法を選んで、基盤技術としての可能性、適用可能な分野、および技術修得について議論を重ねてきた。第2期ではこれをさらに発展させONIOM法にこだわらず、さまざまな計算手法の技術習得を目的とした。本会の副題は「遷移状態探索法を活用した、化学反応制御法の開拓

(TSサーチの習得、金属を含む系のシミュレーション、溶媒効果の導入、高選択反応の設計、反応動力学(量子MD))」とし、高度な計算化学的手法の技術習得を目指した。その一環として堀教授が開発中である、遷移状態探索システムVer. 1.0の利用法講習会を堀教授にお願いし開催した。本プログラムは堀教授のホームページ(<http://rdesign.chem.yamaguchi-u.ac.jp/pds.html>)よりダウンロード可能である。誰でも簡単に遷移状態を探索することが可能なプログラムであり、ご興味あるかたは、上記URLよりダウンロードいただきたい。また本ソフトの利用法だけでなく、堀教授の有用なアドバイスにより、今回さまざまな計算化学的手法の活用が可能であった。ここに感謝の意を表したい。

この活動報告が、今後の化学研究の計算化学による支援の方向を指し示し、パイオニア的な試みであったと将来振り返られる事を期待したい。

次世代CC ワークショップ第2期 メンバー

世話役	臼井 信志	JSR株式会社
CC 幹事	後口 隆	宇部興産株式会社
CC 幹事	山下 修	花王株式会社
	田中 健夫	旭化成株式会社
	入澤 潤	旭硝子株式会社
	鞆津 典夫	出光石油化学株式会社
	藤田 俊雄	昭和電工株式会社
	山口 能弘	新日鐵化学株式会社
	松岡 登行	新日鐵化学株式会社
	奥山 直人	ダイセル化学工業株式会社
	立川 豊	大日本インキ化学工業株式会社
	松下 武司	チッソ株式会社
	上本 裕一	チッソ株式会社
	鈴田 哲也	東亜合成株式会社
	鷲 一雄	株式会社日本触媒
	寺石 和夫	日本ゼオン株式会社
	柿ヶ野 武明	三井化学株式会社
	鮫島 圭一郎	富士通株式会社

以上