

東大理学部化学科卒業50周年企画講演会 & パネルディスカッション

「化学がひらく未来の社会：生命・もの・環境・エネルギー」

2018.10.20

未来社会への化学の貢献

量子化学計算で拓く未知の化学

量子化学探索研究所長・東北大学名誉教授

大野 公一

# すべての物質は 原子からなる！



物質の根源は何か？  
(古代原子論)  
紀元前～400年  
Democritus  
古代ギリシャ。

近代原子説 (元素記号)	原子(元素)の分類 (周期律)
1803年	1869年
Dalton	Mendeleev
イギリス	ロシア



Atomから、  
何ができるか？

# 20世紀 … → … 21世紀 理論化学(量子化学)の発展

## 量子化学 の予言性

$$H\Psi = E\Psi$$

### 量子力学の誕生

ポール・ディラック  
(1929)

化学を支配する基本法則はわかったが、複雑すぎて、解けない。



福井謙一(1958)  
化学反応の理論・  
フロンティア軌道論



ジョン・ポープル、ウォルター・コーン  
(1998)

量子化学計算・第一原理計算の進歩



### 21世紀 これからの化学

$H\Psi = E\Psi$  を解き

量子化学の予言性

を用い、コンピュータで

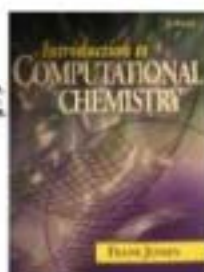
未知の化学を切り拓く!

Computer Chemistry

## 未知の化学の理論探索！ 個々の化学式に可能な化学の自動探索

$$H\Psi = E\Psi$$


F. Jensen著 計算化学  
の国際的教科書 1999年



4原子を超えると  
不可能！

- <4個の原子>  
 $10^6$  秒 = 11.6日 かかる。
  - <5個の原子>  
 $10^9$  秒 = 31.7年 かかる。
  - 
  - <10個の原子>  
 $10^{24}$  秒 =  $3 \times 10^{16}$  年 かかる。
- 宇宙の年齢 (Big-Bangから現在までの時間) =  $1.38 \times 10^{10}$  (138億) 年の  
200万倍。

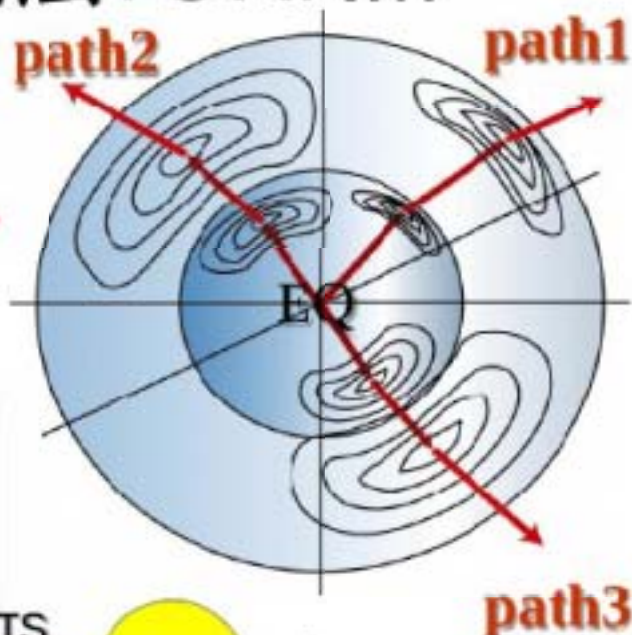
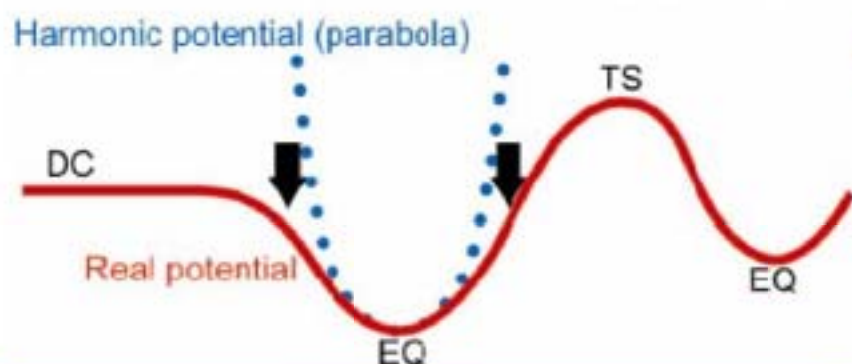
### 化学空間の理論探索の むずかしさ

大砂漠の中に埋もれた  
 を探すに等しい





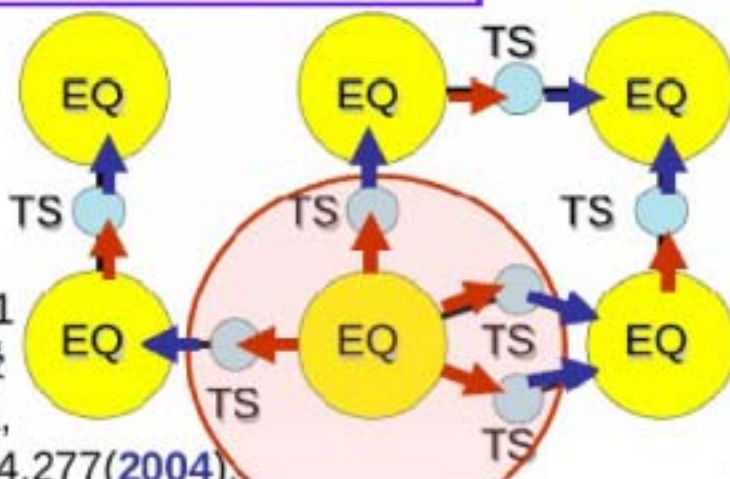
# 反応経路自動探索法: GRRM



ポテンシャルの非調和下方歪み  
 (↓ Anharmonic Downward Distortion, ADD  
 が、反応経路の方向を指し示す「羅針盤」となる!

**GRRM**

@東北大学  
 with 前田理 当時M1  
 現在 北大教授  
 K. Ohno & S. Maeda,  
*Chem. Phys. Lett.* 384, 277 (2004).

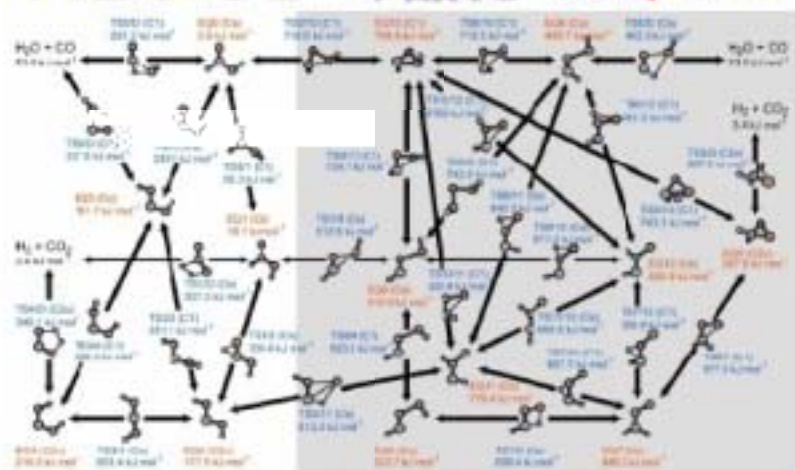


・朝日新聞  
 2015年10月18日  
 ・化学と工業  
 2017年1月号  
 ・現代化学  
 2018年2月号

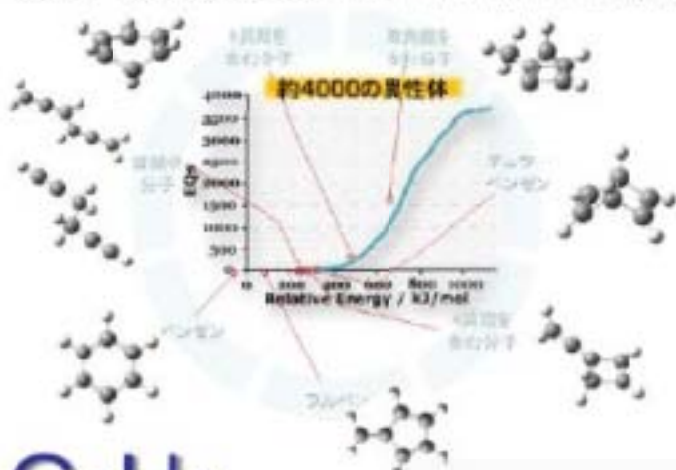
K. Ohno, *Chem. Rec.*  
 16, 2198 (2016).

# Global Reaction Route Mapping

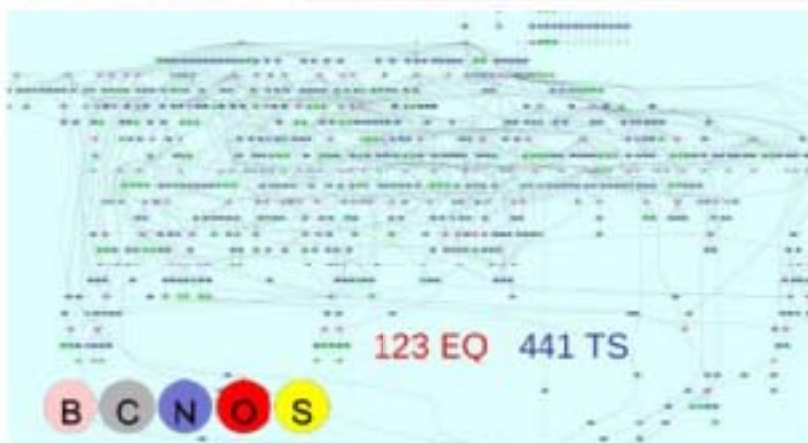
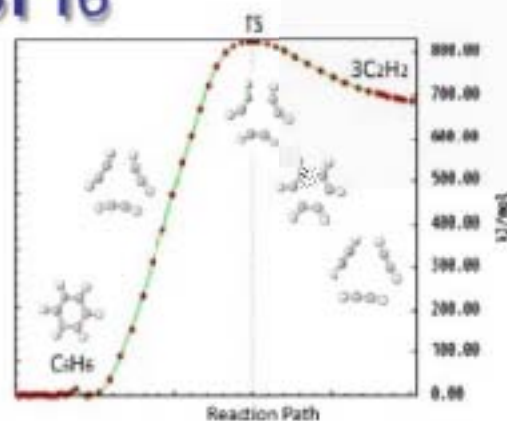
$H_2CO_2$  ギ酸など 13 EQ 30 TS



$C_6H_6$  探索: SCC-DFTB エネルギー最適化: MP2-6-311G(d, p)

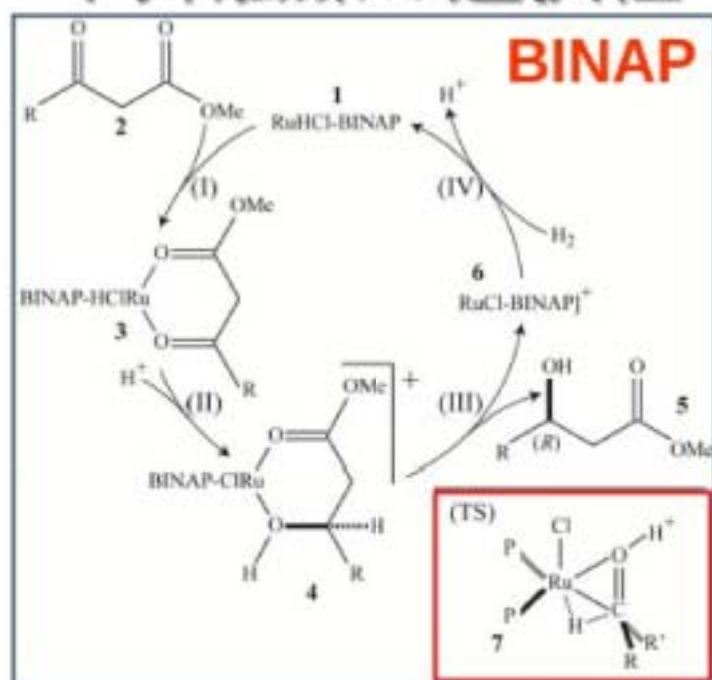


$C_6H_6$



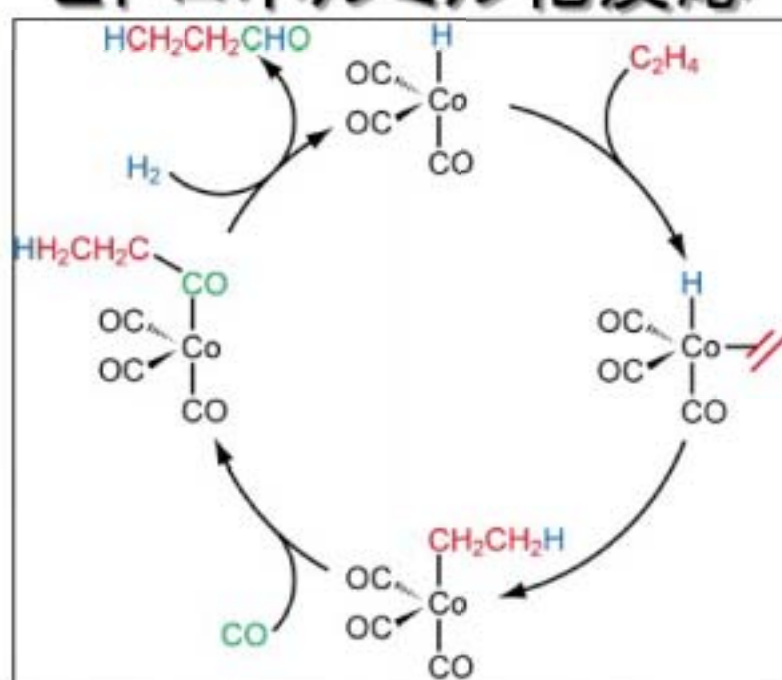
# 反応経路自動探索法GRRMの応用： 触媒サイクルの自動探索

## 不斉触媒の選択性



K. Ohno & S. Maeda, *J. Mol. Cat. A Chem.* **324**, 133 (2010).

## ヒドロホルミル化反応



S. Maeda, K. Ohno, & K. Morokuma, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15**, 3683 (2013).



# 炭素 C から何ができるか？

## Cの単体(同素体)

### ■ 黒鉛(グラファイト)



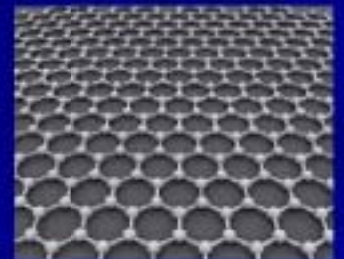
### ■ ダイヤモンド



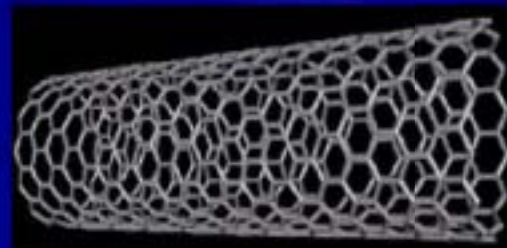
### フラーレン



### グラフェン



### カーボンナノチューブ







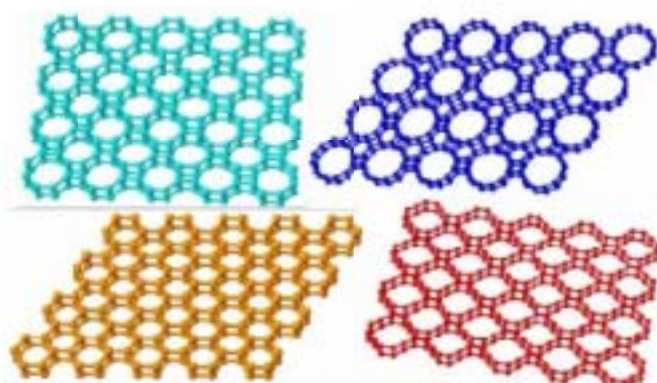
# 探索された 新型炭素構造

Prism- $C_{2n}$  ( $n=8, 9, 10, 12, 14, 16, 18, 20$ )



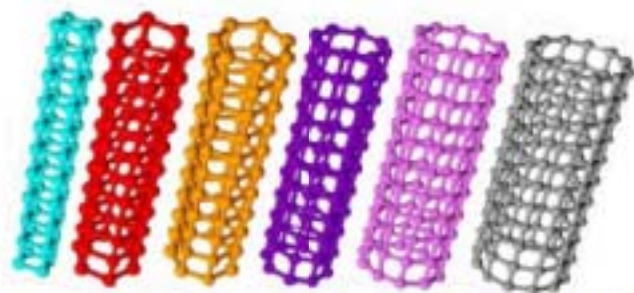
Chem. Lett. 44, 712 (2015).

Prism-Carbon Sheet



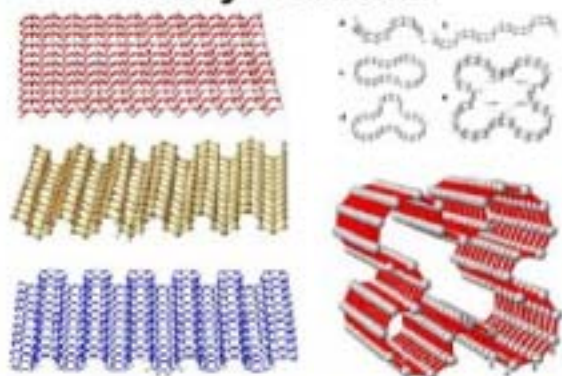
Chem. Phys. Lett. 633, 120 (2015).

Prism-Carbon Tube



Chem. Phys. Lett. 635, 180 (2015).

Wavy Carbons



Chem. Phys. Lett. 639, 178 (2015).

# 高エネルギー炭素

C 原子 1個当たり

200-350 kJ/mol 程度の  
エネルギーを貯蔵

→ 可能性

夢のエネルギー貯蔵物質

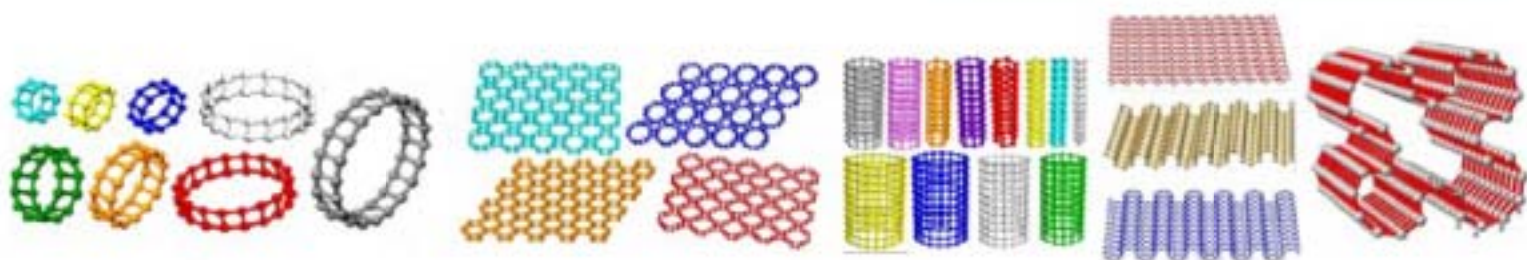
高エネルギー炭素



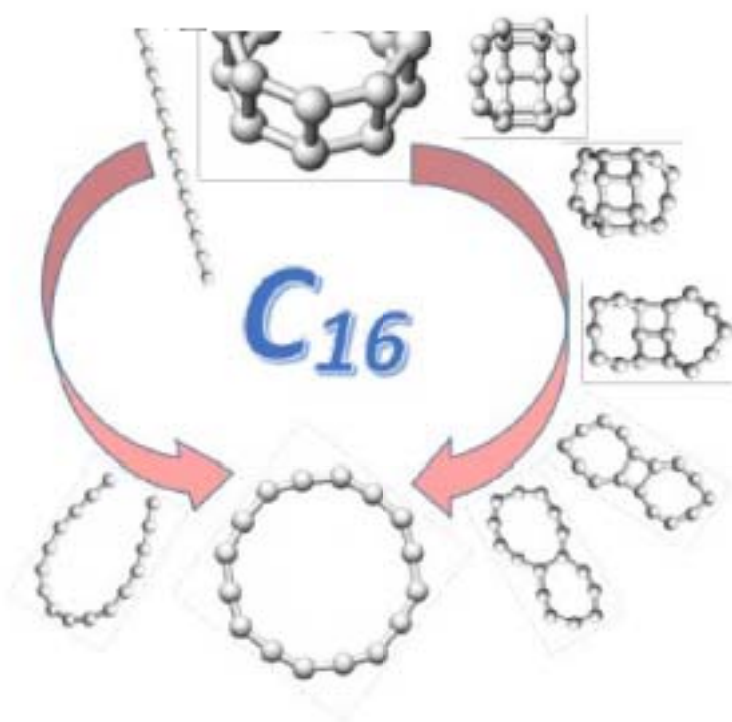
低エネルギー炭素

ゼロ原料補給  
ゼロ廃棄物質

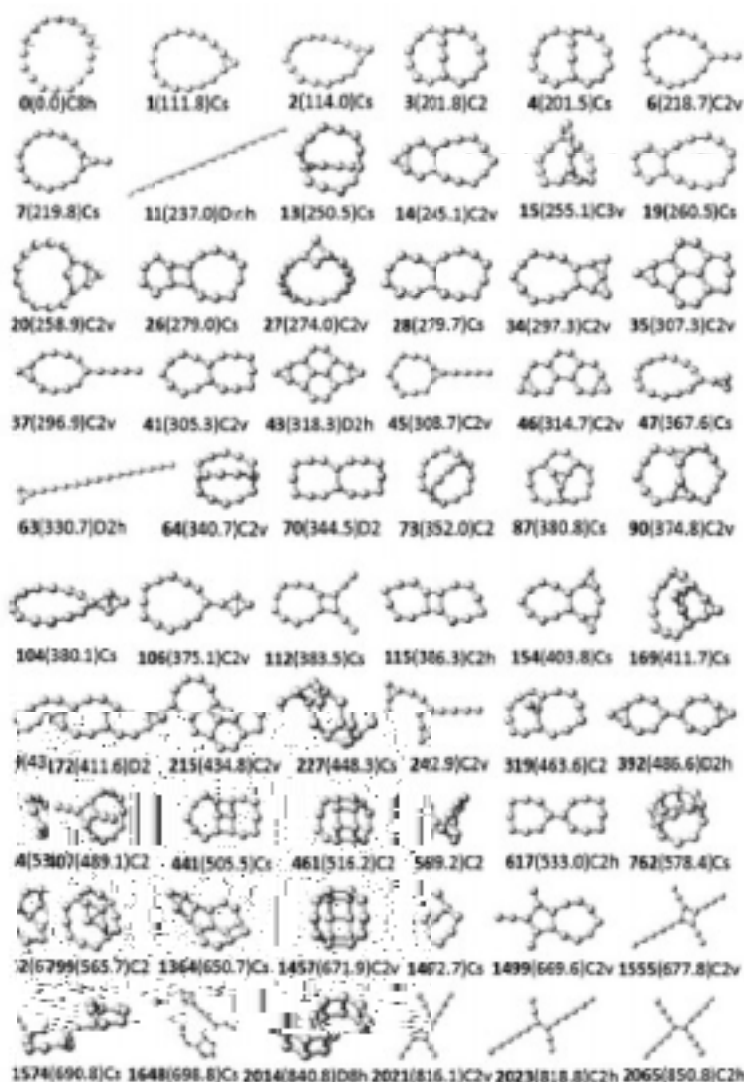
時・所・回数 無制限



# C<sub>16</sub>分子



Chem. Phys. Lett. 711, 60 (2018).





**量子化学計算で未知の化学が拓ける！**

*Using  
new computational methods*

*Let us open  
uncultivated worlds of Chemistry*



*Please visit* <http://iqce.jp/>

*Thank you!*

