

触媒懇談会ニュース

触媒学会シニア懇談会

コミュニケーションツールとしての計算化学

松山で開催された 120 回触媒討論会をゆ
っくり興味に任せて聴講しながら考えた。

「燃料電池関連触媒」セッション, 「光触媒」
セッションは云うに及ばずいずれのセッシ
ョンでも専門の異なる異分野間の交流, 連
携が活発化している様子が明白に見られた。
昨年続き「コンピュータ利用」セッション
への参加者が急に増えだした事も実感した。
心強いことである。

専門分野は化学物質から材料, 部材, 部
品, さらに製品までにも及んでいる。
空間スケールはオングストローム(0.1nm)
からメートルまで, 時間スケールはヘムト
秒? ピコ秒から秒, 時間, 年に及んでいる。
研究者はこの広汎なランドスケープの前に
立ち高性能ズーム双眼鏡で鳥瞰して自他の
立ち位置を確かめる。個々の研究者は最終
製品を目指すのではないが研究対象の繋が
りが意識されるか, あるいは意識しないま
でも暗黙の視野に入っているか, が肝要で
ある。

ランドスケープに行方という光を当てて
みる。すると合成, 活性, 物性, 機構, 解析,
理論, 計算, ……理解, 予測, ……設計, そ
してまた始めに戻って合成と云うサイクル
が見えてくる。

時間の経過につれてランドスケープに見

ルモックス技研 志賀昭信

える個々の専門分野は益々深まってゆく。
専門分野が深まれば深まるほど多くの新し
い課題が現れ, 異分野間の距離は益々遠く
なる。絶えざる連携の努力が求められる。

連携にはディスカッション(議論)を円滑
に進めることが必須である。

議論には言葉(専門用語)を使う, そのとき
頭の中にイメージが浮かんでいる。互いの
イメージを互いに正しく取り込んで理解す
ることで議論が成立する。ところが互いの
イメージが一致していないと論点がすれ違
ったまま進み, 困ったことにお互いにその
すれ違いに気付かないでいる状況に陥る。
少なくとも互いのイメージを絵(ポンチ絵,
模式図)にして議論を進めればこのすれ違
いをなくすことができるだろう。例えば,
我々化学者がよく使う化学結合や化学反応
の反応性を表す言葉; イオン性, 共有結合
性, 電子供与性, 電子受容性, 酸-塩基,
donor - acceptor 相互作用, 軌道相互作用,
電子的な影響, 立体反発, 等々もすれ違いを
起こしやすい言葉である。絵を使って議論
するのが良いだろう。

金属触媒を用いる水素による還元反応
を考えてみよう。

金属粒子のサイズ, 結晶形, 結晶面, 反応分
子の吸着方向, 場所, 水素の吸着場所, 担体

の種類, 結晶形, 結晶面, 金属粒子との接合, 等々の基本的な条件から不純物は? 溶媒は? 反応条件は? と次々に論点とすべき問題が出てくる. これらをシンプルなものから始めて次第に複雑なものを取り込んで模式図に仕上げて行く. 種々の要素が多階層に入り組んだ実験と計算をつなぐ水路のランドスケープが展望される.

模式図の最も正確なものは計算化学のモデルである. 最もシンプルな模式図でも全構成原子の位置が与えられていないと計算ができない. 計算化学のモデルを作ることによって実験屋と計算屋は共通の認識に立って議論ができる. 計算化学が異分野研究者間を取り持つコミュニケーションツールとなるに違いない.

討論会講演から例を一つ示す. 注: 120 討論会講演 A 予稿集 2F10

2F10 「触媒反応は計算化学でどこまで明らかにできるか」 塩田淑仁

エノール合成) の触媒サイクル決定に発展させた.

次にメタンモノオキシゲナーゼ (p-MMO) のメタンからメタノールへの反応活性種の決定を取り上げた. 活性種は monocopper-oxo 種: $(\text{Cu}^{3+}\text{-oxo})$ よりも, bis(μ -oxo)dicopper 種: $(\text{bis}(\mu\text{-oxo})\text{Cu}^{2+}\text{Cu}^{3+})$ の生成が容易でかつ $(\text{bis}(\mu\text{-oxo})\text{Cu}^{3+}\text{Cu}^{3+})$ より活性大である. $(\text{bis}(\mu\text{-oxo})\text{Cu}^{2+}\text{Cu}^{3+})$ はチロシン残基からの H 移動を受けて $(\mu\text{-oxo})(\mu\text{-hydroxo})\text{Cu}^{2+}\text{Cu}^{3+}$ 種となってメタンをメタノールに酸化する.

簡単な事象から次第に複雑な事象へと段階的に論点を広げながら計算可能なモデルに大胆に落とし込む研究の進め方が示されている. このモデル化の過程で研究者間の緊密な議論がなされるであろう.

実験と計算をつなぐ複雑な水路を進むにはパイロットが必要である. 実験の経験豊富なシニアは実験と計算を結ぶパイロットの有力な適任者ではなかろうか.

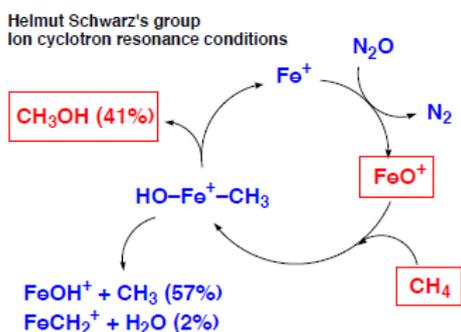


Fig. 1 Methane hydroxylation by the bare iron-oxo complex in the gas phase.

彼らは Fig. 1 に示す最もシンプルな鉄オキソ種と N_2O によるメタンのメタノールへの気相酸化反応から始め, DFT 計算でこの触媒サイクルを決定し, さらに鉄オキソ種を ZSM-5 に組み込みベンゼンの水酸化 (フ