

## SS03-1 ONIOM法を用いたタンパク質内での化学反応および有機金属触媒反応の理論研究

○諸熊 奎治<sup>1</sup>

<sup>1</sup>京大福井謙一記念研究セ

理論化学・計算化学は理論的方法論の進歩にもとづく高精度の達成と計算機の高速度により大きな進歩を遂げ、比較的簡単な系の化学的問題に対しては高信頼度で理論予測が出来るようになった。最近化学の本流はより複雑な分子系の設計に移りつつあり、より複雑な問題を理論的に高精度に取り扱って新しい物質の理論設計を行う“複雑分子系の高精度シミュレーション”が必要になっている。高化学精度 *ab initio* 法で複雑分子系(数百〜数万原子)の高精度長時間( $10^6$ 回の計算)シミュレーションを行うことは現在でも不可能であり、いくつかの方法を組み合わせさせた複合分子理論の採用が望ましい。本講演では、上述の目標に向けて我々が行っている研究のうち、有機金属化合物による均一系触媒反応機構ならびに ONIOM 法を使ったタンパク質内での化学反応(酵素反応)機構研究に関し、いくつかの例について話す。