

分子環境まで考慮した電子状態インフォマティクスによる高精度酸性度予測

(中央大理工¹・JST ACT-X²・分子研³) ○鈴木 里麻¹・黒木 菜保子^{1,2}・森 寛敏^{1,3}
Accurate acidity prediction in solvent environments by electronic structure informatics
(¹*Department of Applied Chemistry, Faculty of Science and Engineering, Chuo University, JST ACT-X, Department of Theoretical and Computational Molecular Science, Institute for Molecular Science*) ○Rima Suzuki,¹ Nahoko Kuroki,^{1,2} Hirotohi Mori^{1,3}

For precise semiconductor process developments, on-demand superacids with the desired pK_a are mandatory. In the field, superacids containing fluorine have been developed based on the empirical rule that acidity increases with electron-withdrawing groups. However, the high environmental load is a problem. Prior to synthesizing superacids, there is a need for new molecular design guidelines for safe, fast, and precise design.

In this context, we have been investigating the acidity of cyclopentadiene molecules. It is known from the previous studies¹ that cyclopentadiene is a strong acid due to aromatic stabilization by conjugated anions. In the gas phase, the pK_a can be reduced by the CN group. The problem is that the pK_a change in the solvent is difficult to predict. This talk will introduce a machine learning model for fast and accurate prediction of acidity of CN-substituted cyclopentadiene compounds in solvent-based on semi-empirical molecular orbital calculations.

Keywords : Acidity; Electronic Structure; Solvation; Materials Informatics

半導体分野では、場面に応じ、所望の物性を持つ超強酸を設計せねばならない。当該分野では、「電子吸引性置換基を導入すると性能が向上する」という経験則に基づき、フッ素化合物を主とした超強酸が開発されてきた。だが環境負荷の高さは問題である。危険な作業を伴う超強酸合成に先立ち、安全・高速・精密に設計するための新たな分子設計指針が求められている。

この背景下、我々は、シクロペンタジエン系分子の酸性度を調査してきた。シクロペンタジエンの共役アニオンは、 π 電子の共鳴安定化を生じ強い酸となることが先行研究¹にて知られている。また気相中では、CN 基の導入により pK_a を単調減少させることもできる。問題は、超強酸設計の現場を志向した溶媒環境中では、 pK_a が気相中と異なり、単調な振る舞いをしないことである。即ち、酸性度の設計は溶媒環境に合わせて行わねばならない。本講演では、溶媒中での CN 置換シクロペンタジエン化合物の酸性度を、半経験分子軌道計算を基に高速かつ高精度に予測する機械学習モデルについて紹介する。

1) Equilibrium Acidities of Superacids. A. Kütt *et al.*, *J. Org. Chem.* **2011**, 76, 391.