

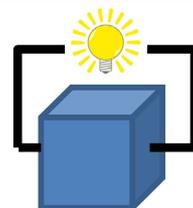
量子化学計算による スペクトルシミュレーションや反応経路の推定

量子化学計算により、様々な分光スペクトルの予測や化学反応経路の推定が可能となる。ここでは、ベンゼンジオールの異性体による紫外・可視スペクトル変化のシミュレーションと、エポキシとイソシアネートの反応経路推定並びに触媒効果の検証を行った事例を紹介する。

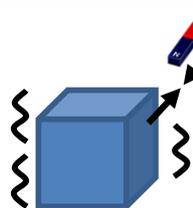
量子化学計算とは

量子力学の波動方程式を、経験パラメータや近似を出来る限り用いずに解く事により、物質の様々な特性を正確に予測する。

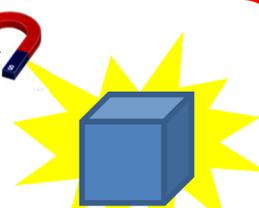
$$\hat{H}\Psi = E\Psi \rightarrow \Psi$$



電気伝導性



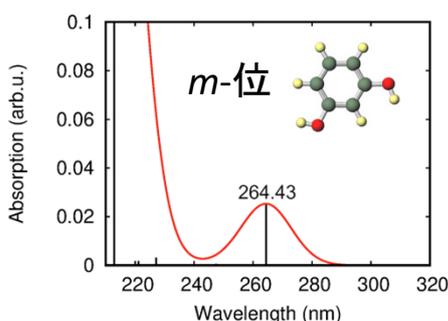
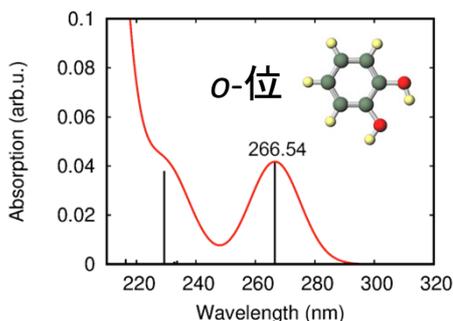
磁気特性



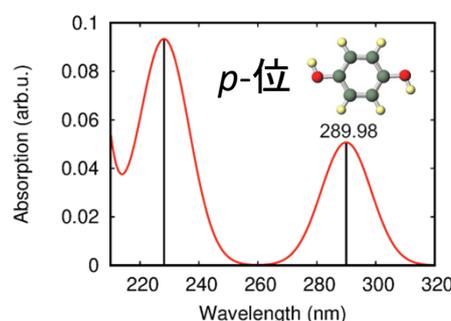
光学特性

ベンゼンジオールの紫外・可視スペクトルシミュレーション

3種類のベンゼンジオール異性体(o-, m-, p-位)の紫外・可視スペクトルを予測し、異性体間での比較を行った。



計算ソルバ: GAMESS
計算レベル: BP86/6-31+G*

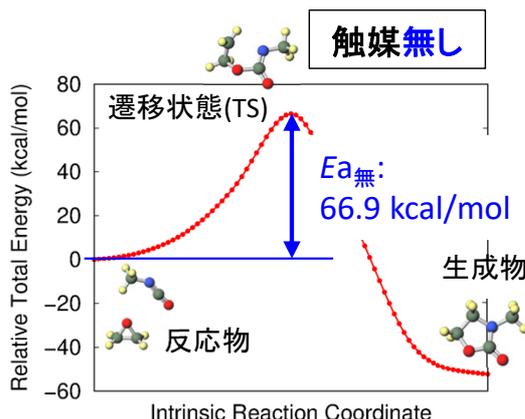


-OH基がp-位にくると、第1ピークが長波長側にシフトする。→ **実験での再現を確認済み。**

エポキシとイソシアネートの反応経路推定と触媒効果の検証

塩素イオン触媒の有無による「オキサゾリドン生成反応経路」、「最大活性化エネルギー(E_a)」の違いを比較した。

(参考文献) 奥本佐登志, 山邊信一,
ネットワークポリマー 21, 197 (2000).



$E_{a\text{無}} > E_{a\text{有}}$

触媒効果により反応経路が変化し、最大活性化エネルギーが大幅に低減。→ **実験の傾向と一致。**

