量子化学計算から分かること

量子化学計算

概要

量子化学計算は材料の開発・設計の指針となる分子論的な知見(分子構造、電荷分布や分子軌道、化学反応のメカニズムなど)を得ることやUV-VisやNMRなどの各種応答スペクトルを高い精度でシミュレートすることが可能です。得られた結果は機能性材料・創薬分野などの研究開発において直面する様々な課題の克服に繋がります。本資料では量子化学計算から分かることとして、解析対象、得られる物性情報及び解析事例を紹介します。

量子化学計算を用いた解析

●解析対象　(計算の実施にあたっては、組成・分子構造などの情報が必要となります)

・主な解析対象は、真空中の孤立分子(単分子や、C_{60}などのクラスター系など)

・溶媒の効果を取り入れた計算も可能

・固体表面や結晶など、周期性を持つ分子系の取り扱いは困難　※第一原理計算が適しています

●得られる物性情報

・分子の安定構造(平衡状態)及びエネルギー

・遷移状態の構造とエネルギー

・平衡状態と遷移状態をつなぐ反応経路(固有反応座標)

・赤外吸収、ラマン散乱による分子振動の解析

・UV-VisスペクトルやNMRスペクトルなど各種応答スペクトル

・分子軌道のエネルギーや、HOMO-LUMOギャップの大きさ、軌道の形状(分布)

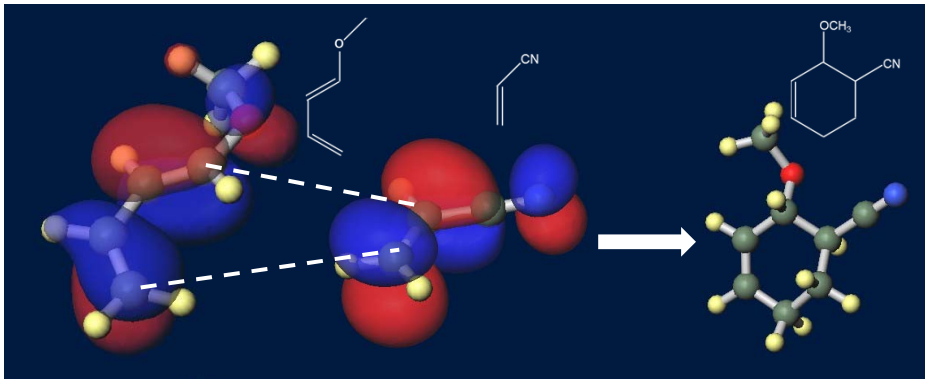
・各原子の電荷、分子の双極子モーメント、分極率

●量子化学計算の解析事例

・インディゴなど染料分子のUV-Visスペクトル計算

・ラマンスペクトル計算によるコカインの識別

・Diels-Alder反応の位置選択性の考察



Diels-Alder反応前の分子の分子軌道(左)及び反応生成物(右)
分子軌道は、反応時の分子の向きや反応サイトの予測に役立ちます

分析サービスで、あなたの研究開発を強力サポート！

MST 一般財団法人 材料科学技術振興財団

TEL ： 03-3749-2525　E-mail ： info@mst.or.jp
URL ： https://www.mst.or.jp/