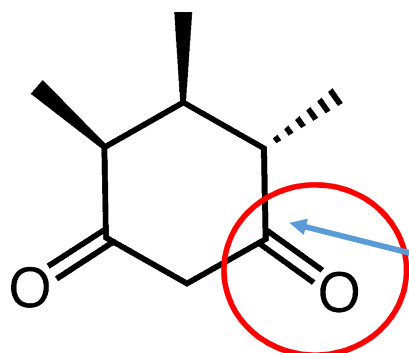


利用事例紹介 1

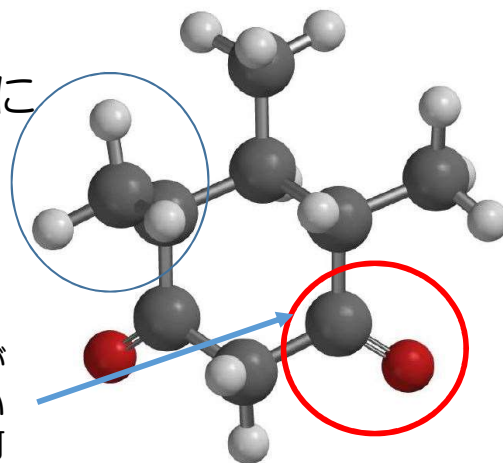
反応性の予測が可能

化成品を合成する際に、あらかじめ化学反応しやすい箇所を予測することができます。化成品の合成ルート的设计などに役立ちます。



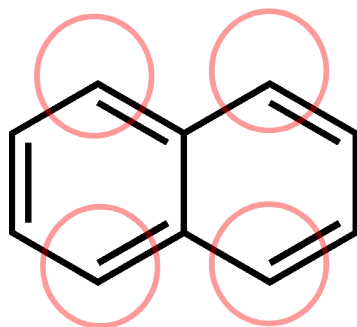
シクロヘキサン類

反応の際に
邪魔！

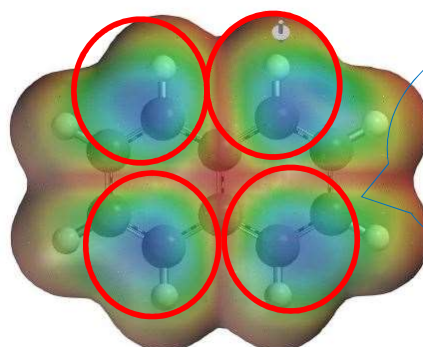


ここで反応が
起こりやすい
ことが予測可

立体構造



ナフタレン

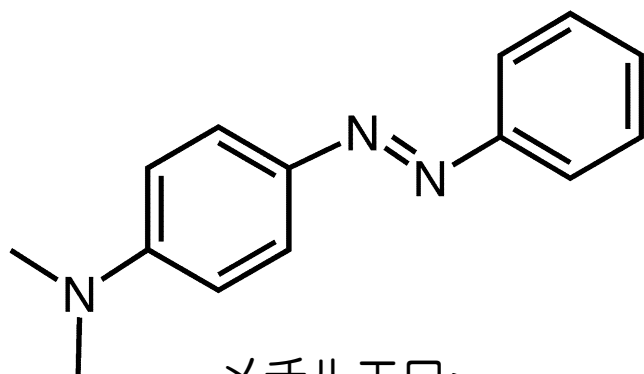


ここ（青色部分）で
反応が起こりやすい
ことを予測可

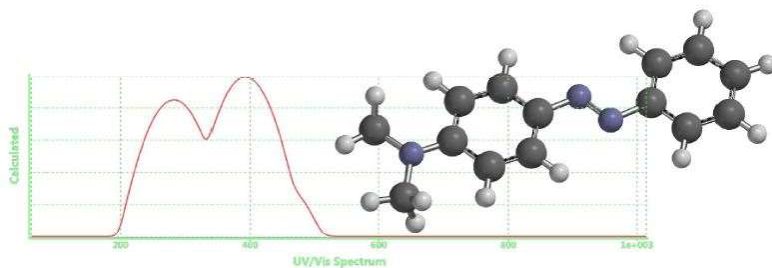
HOMOの軌道の様子

吸収スペクトルの予測が可能

色素開発は、合成、スペクトル測定を繰り返すため時間がかかりますが、計算化学を活用することで、吸収スペクトルを予測でき、開発を加速化できます。



メチルエロー
（黄色色素）



色素の紫外可視吸収スペクトル（計算）

利用事例紹介 2

エポキシ樹脂のガラス転移温度計算

分子動力学計算により原子の充填状態を再現することで、材料の密度を計算することができます。その計算結果を基に、ガラス転移温度や熔融温度などの材料の転移温度を予測できます。

これらの予測結果は、新規化合物の開発や樹脂配合の際の指標に利用することができます。

計算フローチャート

モノマーモデラ

ユナイテッドアトムモデル、力場：dreiding

ビスフェノールF型エポキシ樹脂モノマー数：50

↓

反応モデラ

↓

初期配置作製

緩和後、圧縮

↓

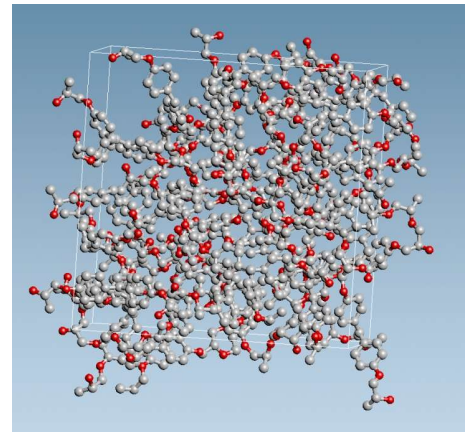
架橋構造作製

(温度：450K)

↓

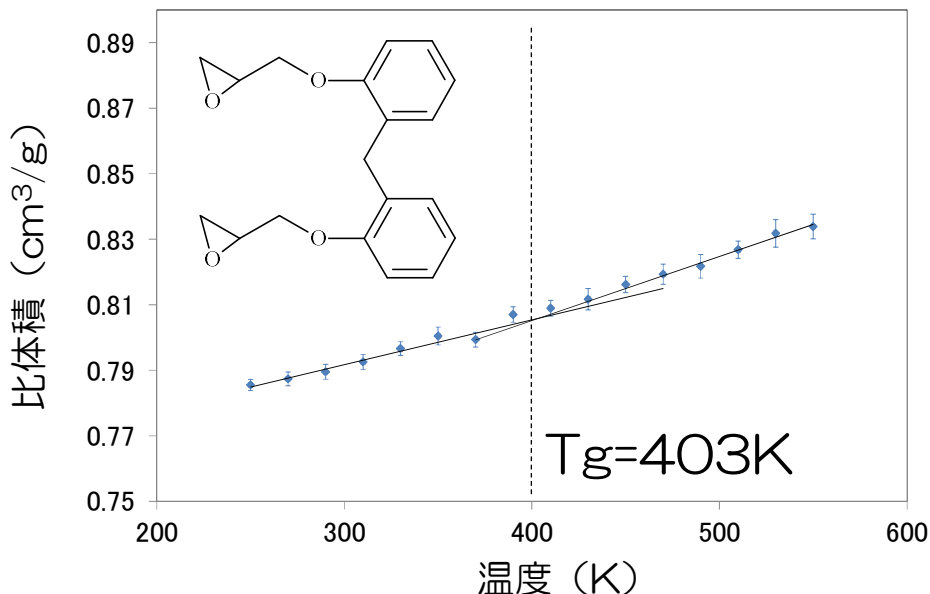
ガラス転移温度計算(密度計算)

(温度範囲：250K~550K)



架橋構造の例

計算結果



実測値($T_g=404K$)に近い値が得られた。