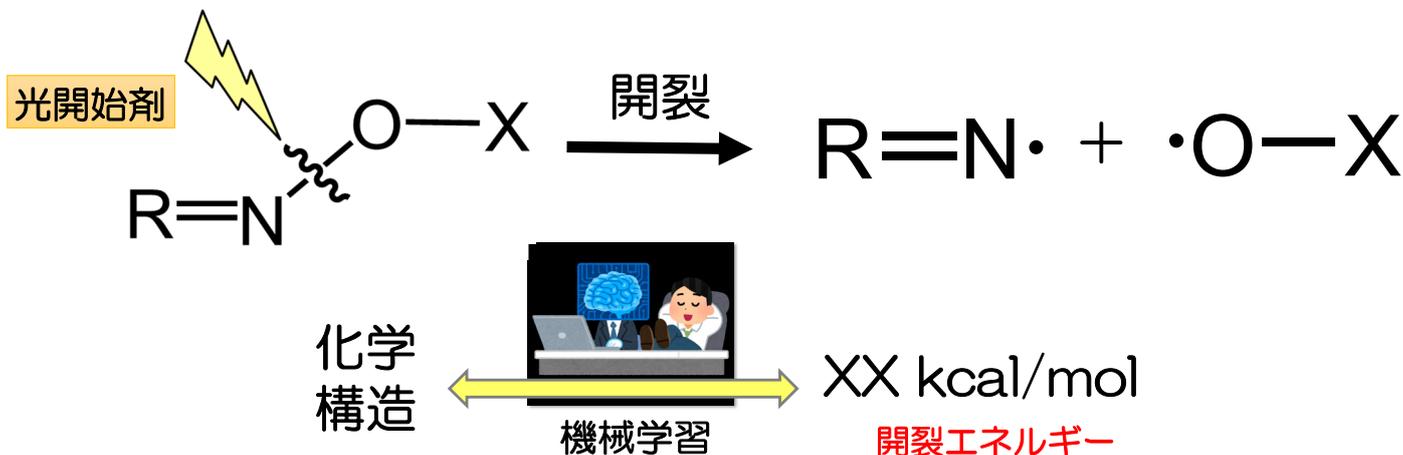


利用事例紹介 21

開始剤の開裂エネルギーの予測

光開始剤は、フォトリソグラフィ、塗料、歯科材料など様々な場面で用いられています。今回はオキシム系光開始剤の反応性の目安となるN-O結合開裂エネルギーの予測モデル作成事例について紹介します。



開裂エネルギーの予測結果

開裂エネルギー (kcal/mol)

化合物の構造

理論計算値
(kcal/mol)

予測値1
(基本文献データ)

予測値2
(文献データ追加)

化合物の構造	理論計算値 (kcal/mol)	予測値1 (基本文献データ)	予測値2 (文献データ追加)
A 	64.6	63.4	60.1
B 	48.9	55.2	49.8
C 	50.6	58.2	52.1

文献データ¹⁾から、N-O結合の開裂エネルギーデータを抽出し、学習モデルを作成しました。3種類の化合物を予測したところ、酸素上に置換基を有するB、Cの化合物は良い結果は得られませんでした（予測値1）。そこで類似構造含む文献データを追加し、学習モデルを再作成したところ、Aは少しズレが大きくなりましたが、B、Cについては良好な一致を示す結果が得られました（予測値2）。データ収集を工夫することで、さらに良好なモデルの作成も期待できます。

¹⁾ *Nature Communications*, 2020, 11, 2328.