

量子化学計算ソフトを使ってみませんか

実験や経験に基づくやり方ではなく、波動方程式を解くことにより新化合物や異性体の存在を予測することが可能になってきました。

近年のコンピュータの急速な発展や波動方程式を解く計算アルゴリズムの発達によりこれまではスーパーコンピュータでなければ不可能であった計算が普通のコンピュータで行えるようになってきました。

千葉大学には Gaussian という波動方程式を数値的に解くソフトが導入されています。1998年には、Gaussian 開発責任者の J.A.Pople はその功績により、ノーベル化学賞を受賞しています。

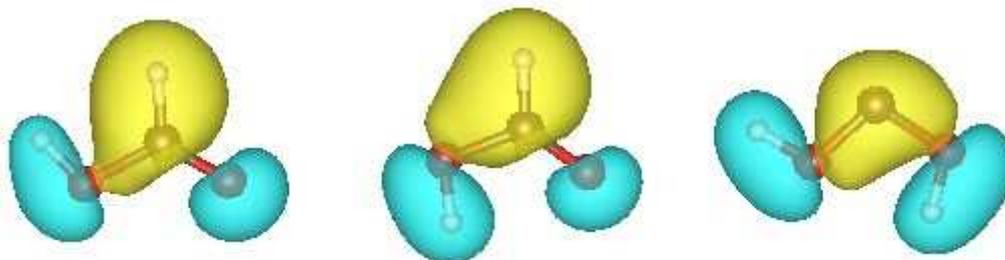
下図は、水素原子 2 個、炭素原子 1 個、酸素原子 2 個を適当な初期位置に設定し、自動的にエネルギー極小値になるような原子配置を探させた結果です。また、水素分子のポテンシャル曲線は、水素原子 2 個を遠方から少しずつ近づけていった時の全エネルギーを求めてグラフ化したものです。

原子の初期位置を少し変化させただけで沢山の異性体が見つかります。まるでコンピュータの中で化学反応が起こっているようです。

このソフトは、千葉大学の構内だけで使用できますので是非千葉大に来てこのソフトを使ってみませんか。

[参考文献](#)

http://ccweb.cc.sophia.ac.jp/documents/?action=cabinet_action_main_download&block_id=679&room_id=104&cabinet_id=14&file_id=98&upload_id=540



ギ酸の異性体 MO=6

水素分子のポテンシャル曲線

原子間距離	エネルギー(ハートリー単位)
10	-0.57232
5	-0.59902
4	-0.61487
3	-0.65605
2	-0.78379
1.9	-0.80533
1.1	-1.03654
0.6	-1.10113
0.711962	-1.11751
0.5	-1.043
0.4	-0.90436
0.2	0.164175
0.1	2.715887

