

# 分子の構造と反応の量子化学研究

(東北大院理) 岸本 直樹

kishimoto@tohoku.ac.jp

【序】シュレディンガー方程式の近似解を得ることができる量子化学計算は、分子の構造や反応を、信頼できるエネルギーで解明しうる優れた研究手法である。巨大分子系を対象とする場合には、モデル化によってサイズを落とした分子として扱うことで、量子化学計算の利点を活かすことができる場合がある。我々は量子化学計算プログラム Gaussian ならびに化学反応経路探索プログラム GRRM による量子化学計算法を用いて、超分子や高分子の構造化学ならびに、複合材料の硬化反応経路や小分子イオンの解離反応経路などについて研究を展開してきたため、本講演会で報告する。

【結果と考察】アミロースは $\alpha$ グルコースの高分子で、米に含まれる。グルコース分子8個をアミロースのモデル分子として直線構造から DFT 法 (B3LYP/3-21G) で最適化することで螺旋構造を得て、図1に示すように実測に近いラマンスペクトルを計算することが出来た。図2は複合材料の硬化反応に関わる反応過程で、活性化エネルギーが水分子の触媒作用で半分程度まで下がることを示している。水分子やアルコール分子の触媒作用がない場合には、実測に比べて活性化エネルギーがかなり高くなってしまいが、GRRM プログラムを用いることでエネルギーが低い反応経路を得ることが出来た。

【謝辞】本研究は、量子化学探索研究所, JST ならびに JSPS からの研究助成を受けて実施されました。

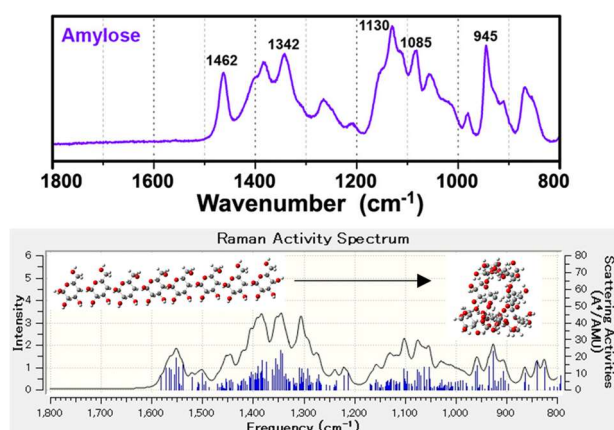


図1. アミロースの実測ラマン散乱スペクトル[1]とグルコース8個でモデル化した螺旋構造体の理論ラマンスペクトル

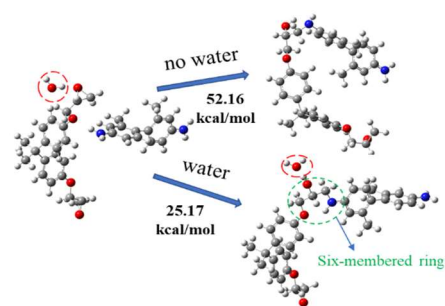


図2. エポキシ分子とアミンの反応における、水分子の有無による活性化エネルギーの違い

## Reference

[1] Bağcıoğlu M, Zimmermann B, Kohler A (2015) *A Multiscale Vibrational Spectroscopic Approach for Identification and Biochemical Characterization of Pollen*. PLOS ONE 10(9): e0137899.