

平成17～18年度 先端化学技術部会

コンピュータケミストリー分科会

次世代 CC ワークショップ第Ⅲ期
活動報告書

平成18年11月

社団法人 新化学発展協会

ASPRONG

The Association for the Progress of New Chemistry

目次

目次	0-02
まえがき	0-05
第1章:「コンピュータを用いた合成経路開発」(顧問 堀 憲次)	1-01
第2章: GAUSSIAN 手順書	
1.Counterpoise 法計算手法	
(1)「Gaussian03によるCounterpoise法を用いた分子相互作用エネルギー計算」・入澤 潤	
.....	2-01-01
(2)「Counterpoise 法による基底関数重なり誤差(BSSE)の補正」・福島 和明	
.....	2-02-01
2.NMR ケミカルシフト計算手法	
(1)「Gaussian03 を用いた ³¹ P-NMR 化学シフトの計算」・阿部 孝俊	
.....	2-03-01
(2)「WinGAMESS を用いた NMR ケミカルシフトの計算」・高岩 聖悟	
.....	2-04-01
(3)「GaussView及びGaussian03を用いた溶媒効果を含めたNMRケミカルシフトの計算」・田中 健夫	
.....	2-05-01
3.励起状態計算手法	
(1)「Gaussian03 の SAC/SAC-CI プログラムを用いたベンゼンの励起エネルギー計算」・太田 浩二	

.....2-06-01

(2)「Gaussian98W を用いたベンゼンの励起エネルギー計算」・小松 徳太郎

.....2-07-01

(3)「Gaussian98W と Chem3D Ultra Ver.7.0 による吸収スペクトルの予測」・立木 秀康

.....2-08-01

4.遷移状態探索手法

(1)「QST2,QST3を用いたDiels-Alder反応の遷移状態探索マニュアル」・大野 英俊

.....2-09-01

(2)「GaussView03及びGaussian03を用いたQST2による遷移状態探索」・堀江 道任

.....2-10-01

5.ONIOM 計算手法

(1)「GaussView03 を用いた ONIOM 計算(C-H 結合解離エネルギー)」・立川 豊

.....2-11-01

6.PBC(周期境界条件)計算法

(1)「Gaussian03 を用いた周期境界条件(PBC)計算」・吉村 和明

.....2-12-01

7.フラグメント MO-MD 法計算手法

(1)「GAMESS/FMO を用いた FMO-MD 計算手順」・奥山 直人

.....2-13-01

8.分配係数計算法

(1)「溶媒和を考慮した溶質の配座解析と分配係数の推算」・山下 修

.....2-14-01

本報告は、山口大学大学院理工学研究科物質工学系専攻反応設計化学研究室の堀 憲次教授をアドバイザーに迎え、2004年12月～2006年11月まで行った次世代CCワークショップ第Ⅲ期の活動をまとめたものである。

量子化学の化学産業への応用は、過去 20 年以上行なわれてきているが、化学産業の技術課題に対して十分に応えてこれたかと問えば、それに対する意見は分かれるところだと思われる。80 年代後半からの“黎明期“では、実験結果の解釈には役立つが、実験に先んじて結果を予測したり、新たな実験の提案は出来ず、実験の後追いしか出来ないのではないか、という意見が大勢を占めていたと思われる。しかし、近年、主にコンピュータハードウェアと量子化学計算ソフトウェアの向上によって、研究開発の対象となる化合物を小さな分子で”近似”することなくそのまま計算出来るようになり、また、短い研究開発期間内に予測結果を算出することが出来るようになり、さらに溶媒効果や溶液中のタンパク質の計算までもが出来るようになってきている。新化学発展協会・先導調査研究・平成 12 年度の計算化学ロードマップによれば、ここ数年オーダーで計算化学に基づいた複数の物性を満足する分子設計が、可能になると言われている。

実際、公開されている多くの量子化学計算ソフトに、近年種々の新規計算手法の追加がなされ、現実系、大規模系の高精度、高速度計算が可能となってきている。また、適用対象も化学系のみならず、バイオ、電子材料、光学材料などさまざまな分野に広がっているが、高精度電子スペクトル計算法、溶媒効果導入手法、周期境界条件計算手法、第一原理分子動力学法などの手法は、まだ実装されてから時間を経っていないこともあり、適用例や適用上の注意点などの情報が不足している状態である。そこで本ワークショップでは、量子化学計算ソフト「GAUSSIAN」の新規計算手法を中心として、メンバーが計算結果を持ち寄ることにより、計算実施におけるノウハウを共有化し計算手法をより精密化することを目的として活動した。さらに、議論を通して得た計算化学の活用のノウハウを、参加企業の共通財産として利用できるように、誰にでもわかる手順書としてまとめたのが本報告書である。

本ワークショップのような産官学の計算化学屋が計算化学技術情報の交換を活発に行なう活動を続けていけば、徐々にではあるが、計算化学自身が実験化学に追い着き追い越す日が必ずややって来るはずである。その日に向かった第一歩に、本報告書がなればと祈念する。

今期も、多くのご指導、有用なアドバイスをしていただいた堀先生に、この場をお借りして感謝の意を表したい。

次世代CC ワorkshop第Ⅲ期 メンバー(敬称略)

阿部 孝俊	三井化学株式会社	マテリアルサイエンス研究所	計算科学室
入澤 潤	旭硝子株式会社	中央研究所	数理科学グループ
太田 浩二	独立行政法人産業総合技術研究所	光技術総合研究所	
大野 英俊	出光興産株式会社	総合開発センター	材料研究所
世話役 奥山 直人	ダイセル化学工業株式会社	総合研究所	評価・解析センター
蒲地 宏典	三井化学株式会社	マテリアルサイエンス研究所	計算科学室
小島 隆二	MOK株式会社	藤沢事業所	技術本部 材料技術部 材料試験課
小松 徳太郎	日立化成工業株式会社	総合研究所	フォトニクス材料開発センター
佐古 恵理香	東京大学大学院理学系研究科化学専攻		
高岩 聖悟	株式会社日本触媒	基盤技術研究所	第2研究グループ

	高羽 洋充	東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻
	立川 豊	大日本インキ化学工業株式会社 総合研究所 基盤技術研究センター計算科学研究室
	田中 健夫	旭化成株式会社 基盤技術研究所
	立木 秀康	日立化成工業株式会社 総合研究所 分析センター
CC幹事	寺石 和夫	日本ゼオン株式会社 総合開発センター インキュベーションセンター 基盤技術研究所
	藤部 康弘	新日本製鐵株式会社 先端技術研究所
	福島 和明	和歌山県立医科大学 医学部 教養・医学教育大講座
	藤山 亮治	高知大学 理学部 物質科学科
	堀江 道任	日本ゼオン株式会社 総合開発センター インキュベーションセンター 基盤技術研究所
	山沢 雄	東京工業大学大学院 理工学研究科
CC幹事	山下 修	花王株式会社 構造解析センター
	吉村 和明	新日鐵化学株式会社 総合研究所
	吉本 敬太郎	独立行政法人理化学研究所 中央研究所 バイオ工学研究所

以上