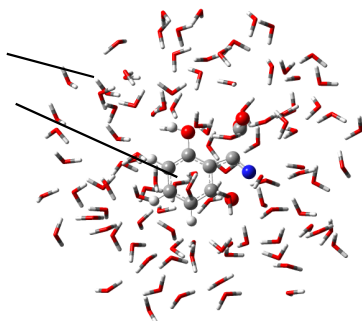


QM/MC法

QM/MC法の特徴

- 量子化学計算(QM)とモンテカルロ法(MC)を組み合わせた新しい方法。
- 系全体をQMレベルで計算するため、溶媒効果を高精度で計算可能。
- 溶媒モデルを必要とせず、あらゆる溶媒へ適用可能。
- 溶質-溶媒間相互作用の分子論的解析が可能。

溶媒
溶質



アンサンブル

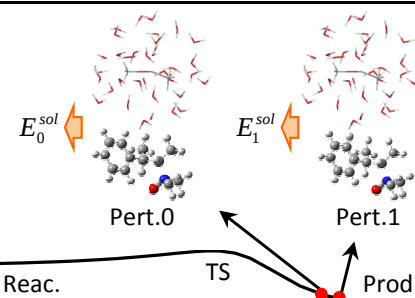
- NPT・液相モデルにより溶媒和エンタルピーを計算。
- 配置溶媒数は密度により決定、井戸型球状ポテンシャル。

QM/MC/FEP法

QM/MC/FEP法の特徴

- QM/MC法にFEP(自由エネルギー摂動)法を適用した方法。
- 反応に関する溶媒和Gibbs自由エネルギー(ΔG_{sol})を計算することが可能。
- 反応に関するIRCもしくは、補間構造を利用して摂動構造を発生。

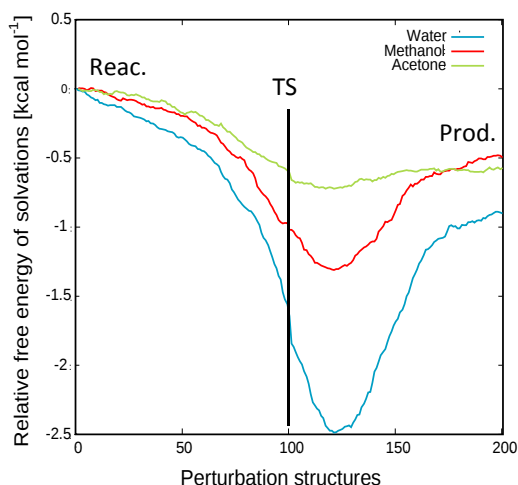
$$\Delta G^{sol} = \int \Delta \Delta G^{sol} \quad \Delta \Delta G_{1-0}^{sol} = \Delta G_1^{sol} - \Delta G_0^{sol} = -k_B T \ln \left\langle \exp \left(-\frac{E_1^{sol} - E_0^{sol}}{k_B T} \right) \right\rangle_0$$



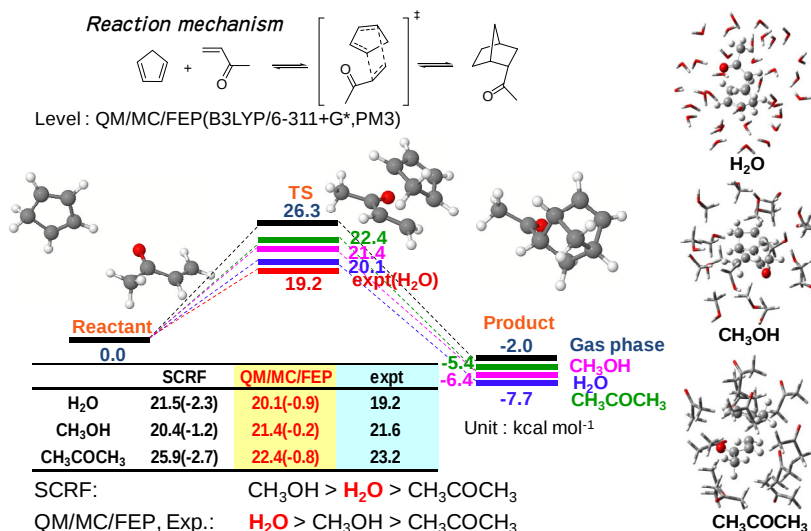
計算適用例

メチルビニルケトンとシクロペンタジエンのDiels-Alder反応

- QM/MC/FEP法を用いて「水」「メタノール」「アセトン」に対する溶媒効果を評価。
- 従来法(SCRF/CPCM)では正しく記述できなかった効果を、精密かつ正しく記述。



反応における溶媒和自由エネルギーの変化



Contact Information

株式会社Transition State Technology

URL <http://www.tstcl.jp>

〒755-8611 山口県宇部市常盤台二丁目16番1号 TEL/FAX 0836-35-9228 EMAIL info@tstcl.jp