

目 次

まえがき i

I. 分子設計における基本的な考え方

1. 新素材開発のための分子設計	田辺和俊	3
1. 新素材発見の契機	3	
2. コンピュータ利用の必要性	3	
3. コンピュータ利用の目的—その1	5	
4. コンピュータ利用の目的—その2	5	
5. コンピュータ利用の目的—その3	6	
6. コンピュータ活用の分野—その1	7	
7. コンピュータ活用の分野—その2	7	
8. コンピュータ活用の分野—その3	8	
9. コンピュータ活用の分野—その4	10	
文献	11	
2. 分子軌道法(MO法)の基本的考え方	西本吉助	12
1. MO法と化学	12	
2. 誰でもできるMO計算	12	
3. 原子・分子の世界を記述する方程式 —Schrödinger方程式	13	
4. 原子—不思議なミラクル粒子	14	
5. 分子の波動方程式—電子の運動と原子 核の運動の分離	15	
6. MO法のあらまし	16	
7. 単純MO法のすすめ	20	
7.1. LCAO-MO法で得られるMOの数	20	
7.2. 二中心MOと化学構造式	20	
7.3. 三中心MOと化学結合	21	
7.4. 多中心多電子結合	21	
7.5. HOMO-LUMO理論と分子の反応性 —特に立体選択反応	22	
7.6. 基底状態と励起状態で化学結合はどのよ うに変わるか	22	
8. 分子の電子スペクトルを計算するための 単純MO法	23	
9. いろいろなMOの特徴と使い方	23	
10. 今後のMO計算	26	
[付録] MO法を理解するために必要な量子力 学の公理と、いくつかの有用な定義	27	
3. フロンティア軌道論について.....	山邊信一	31
1. メチルビニルエーテルへのプロトン化	31	
2. フランのプロトン化	32	
3. Diels-Alder反応とフロンティア電子論	34	
4. Diels-Alder以外の環化付加反応とフロ ンティア軌道論—トロポンとトロポチオ ンについて	41	
5. ケテンとオレフィンの[2+2]環化付加 反応とフロンティア軌道	46	
6. ケテンとジエンの[2+2]付加とフロ ンティア軌道	48	

4. 分子のトポロジーと分子設計 細矢治夫...52
- | | |
|----------------------------|------------------|
| 1. HMO 法と FEM の現代的意義 52 | 5. エネルギーの状態密度 58 |
| 2. 直鎖のポリエンの自由電子模型 53 | 6. トポロジー的対称性 60 |
| 3. HMO 法の定式 54 | 文献 61 |
| 4. 電子配置と全 π 電子エネルギー 57 | |

II. 種々の計算化学的手法

1. 経験的および半経験的分子軌道法 時田澄男, 榊 茂好...65
- | | |
|---------------------------------------|-----------------------------------|
| 1. PPP 分子軌道法 65 | 4. ZDO 近似と CNDO-MO 法, INDO/S 法 73 |
| 2. 拡張 Hückel 分子軌道法 67 | |
| 3. 拡張 Hückel 法の発展—相対論効果の考慮と核間反発の補正 71 | 5. MNDO, AM1, MNDO-PM3, SAM1 法 77 |
| | 文献 82 |
2. *ab initio* 分子軌道法 永瀬 茂...88
- | | |
|-------------------------------|------------------------|
| 1. <i>ab initio</i> 分子軌道とは 88 | 4. ポテンシャルエネルギーの微分計算 94 |
| 2. 基底関数について 90 | 文献 95 |
| 3. 電子相関について 92 | |
3. 密度汎関数法の特徴と実際の応用 小林久芳...97
- | | |
|----------------------------|----------------------|
| 1. 密度汎関数法の発展とプログラム開発の歴史 97 | 4. HF 法と DF 法の違い 101 |
| 2. DF 法の概要 98 | 5. ハイブリッド法について 101 |
| 3. 第 3 世代の密度汎関数法の改良点 99 | 6. まとめ—DF 法の今後 102 |
| | 文献 103 |
4. SAC-CI 法の理論と応用 波田雅彦, 中辻 博...104
- | | |
|------------------------------|----------------------------|
| 1. 励起状態の理論 104 | 3.2. 高スピン状態への拡張 109 |
| 2. SAC/SAC-CI 法 105 | 3.3. MR-SAC 法 109 |
| 2.1. SAC 法 105 | 4. 励起状態の化学への応用 111 |
| 2.2. SAC-CI 法 106 | 4.1. ポルフィリン化合物の励起状態 112 |
| 2.3. 実際的な解法 107 | 4.2. ニッケルカルボニル錯体の光解離反応 118 |
| 2.4. SAC-CI SD 法の計算例 108 | 文献 120 |
| 3. 理論の発展 108 | |
| 3.1. SAC-CI(general-R) 法 108 | |
5. 分子力学法 小川桂一郎, 大澤映二...121
- | | |
|------------------|-----------------------------------------------|
| 1. 原理 121 | 3. 分子力学法を利用した研究から—結晶中の有機分子に見られる異常な結合長について 125 |
| 2. ソフトウェアの選択 124 | |

4. 結合経由軌道相互作用による C-C 結合伸長はない——計算化学の盲点 128
- 4.1. 理論は思い込みである 128
- 4.2. C-C 結合長を制御できるか? 128
- 4.3. 理想的なテスト— C_{60} 2 量体 130
- 4.4. C-C 結合を支配する要因は s 性である 131
- 文献 133
6. 分子動力学法中西浩一郎, 岡崎 進, 中川節子...135
1. MD 計算法 135
- 1.1. 運動方程式の数値解法 135
- 1.2. 力計算の効率化 137
- 1.3. アンサンブルの多様化 137
- 1.4. 非平衡系の MD 138
- 1.5. 生体高分子の MD 138
2. 分子間相互作用 139
- 2.1. 二体ポテンシャル 139
- 2.2. 多体ポテンシャル 141
- 2.3. 生体高分子のポテンシャル 141
3. 汎用プログラム 142
4. MD 法の応用例(1)超臨界流体 142
5. MD 法の応用例(2)生体膜 144
- 文献 146
7. モンテカルロ法北浦和夫, 三上益弘...148
1. モンテカルロ法 148
2. ポテンシャル関数 149
3. マルチミニマム問題 151
4. マルチカノニカルモンテカルロ法 152
- 文献 153

III. 分子設計から材料設計へ

1. 材料設計における基本的な考え方吉田元二, 川添良幸...157
1. 基本的な考え方 157
- 1.1. 構造物性相関 157
- 1.2. 計算化学的アプローチ 158
2. シミュレーションによる新素材設計の可能性 161
- 2.1. フラーレンを使った新素材 161
- 2.2. 欠陥のある結晶のシミュレーション 163
- 2.3. 現状の近似の限界とその改善 164
3. サイエнтиフィックビジュアライゼーション 165
- 文献 166
2. 分子性結晶の構造予測——MDCP の開発とその応用平野恒夫, 田島暢夫, 古庄 勝...167
1. MDCP(分子性結晶の構造予測プログラムの開発) 168
2. テスト計算 168
3. 非線形光学材料の結晶構造予測 169
- 3.1. 初期構造の発生に関する工夫 170
- 3.2. 実用的な SHG 材料への適用 171
- 3.3. テトラチアベンゾキノンの自己集積 172
4. その他の応用 174
5. 非経験的ポテンシャル関数を用いた結晶構造予測— CO_2 分子性結晶の例 174
- 5.1. ポテンシャル関数のテスト 174
- 5.2. CO_2 の圧力誘起相転移 175
6. まとめ 176
- 文献 177

3. 高次機能色素材料の設計松岡 賢...178
1. 分子レベルから材料レベルへ 178
 2. 高次機能色素材料 179
 3. 色素分子の自己集積化と物性 179
 4. ジシアノピラジン系機能性色素材料 183
 5. 将来展望 185
 - 文献 185
4. 液晶の分子シミュレーション鳥海弥和, 吉田真史...186
1. 実在液晶分子のシミュレーション解析 186
 - 1.1. 実在分子集合系の MD, MC 186
 - 1.2. 界面配向の MD シミュレーション 188
 2. 実在液晶分子の MO と MM—液晶分子の形を探る 189
 - 2.1. 液晶分子の MO, MM 計算 189
 - 2.2. 反強誘電性スメクチック液晶分子の MO 解析 189
 3. モデル液晶分子の MD, MC—秩序形成の起源を求めて 191
 - 3.1. 剛体モデル 191
 - 3.2. Maier-Saupe モデル 192
 - 3.3. Gay-Berne モデル 193
 - 3.4. 遺伝的アルゴリズムによる Gay-Berne モデルの一般化 194
 - 3.5. ビーズモデル 195
 - 3.6. 長時間ダイナミクスのシミュレーション 195
 - 文献 196
5. 高分子材料の設計—高分子の電子状態の計算.....今村 詮...198
1. 非周期性高分子の電子状態の計算 198
 2. Elongation 法とは 199
 3. Elongation 法の応用例 202
 4. 今後の発展 202
 - 文献 203
6. 触媒の設計高羽洋充, 久保百司, 宮本 明...204
1. NO_x還元反応の反応機構 204
 2. 触媒燃焼の反応機構 205
 3. ゼオライト中における有機分子の分離過程ダイナミクス 206
 4. 擬似生体触媒の分子設計 207
 5. フロンの吸着・回収技術の分子シミュレーション 208
 6. ゼオライトの結晶成長過程 209
 7. バーチャルリアリティ触媒設計支援システムの開発 210
 - 文献 211
7. フラーレンの理論設計渋谷泰一, 相原惇一...212
1. フラーレンの電子状態と理論計算 212
 - 2.1. フラーレンの熱力学的安定性 215
 - 2.2. フラーレンの速度論的安定性 215
 - 2.3. カーボンナノチューブの安定性 218
 2. フラーレンの分子設計 215
 - 2.1. フラーレンの熱力学的安定性 215
 - 文献 219
8. 並列コンピュータの発達と計算化学—バーチャルマイクロスコープの開発を目指して.....長嶋雲兵, 高田俊和...221
1. 並列コンピュータの現状と課題 222
 2. 分子軌道計算プログラムの並列化 225
 3. バーチャルマイクロスコープの開発を目指して 228
 - 文献 230

索 引235

著者紹介231