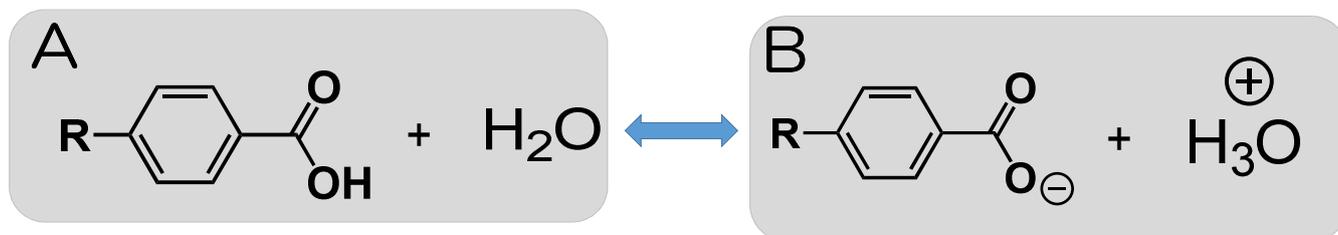


利用事例紹介 5

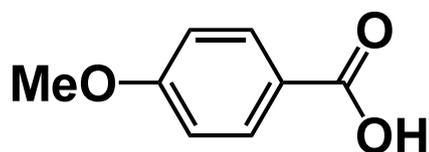
酸性度について

芳香族カルボン酸類の構造と酸性度の関係について、シミュレーションでの比較検討を行いました。

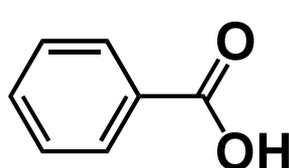
① エネルギー差を比較



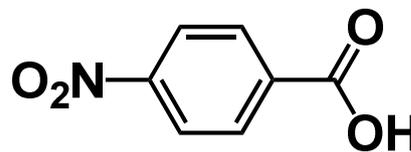
両者 (A, B) のエネルギー差を比較



安息香酸と比べてAの方が
6kcal/mol 安定



安息香酸



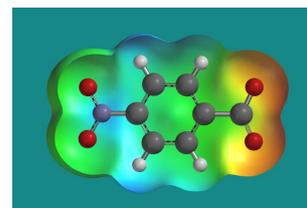
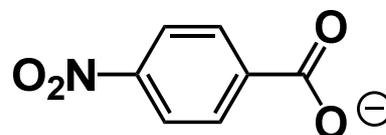
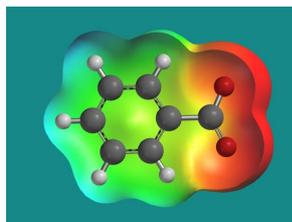
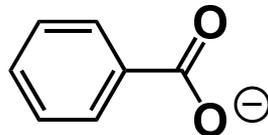
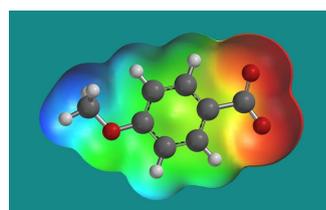
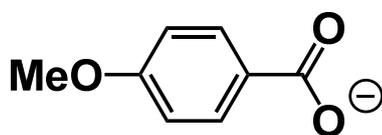
安息香酸と比べてBの方が
12.5kcal/mol 安定

Bの方が安定 → プロトンを放出しやすい → 酸性度が高い

② 電荷分布を比較

カルボキシレートアニオンの電荷分布の様子

(赤色：負電荷、青色：正電荷)



分子全体に電荷が非局在化 → カルボキシレートアニオンが比較的安定 → 酸性度が高い

エネルギーの比較や電荷分布の様子を比較することにより、化合物の酸性度を推測することができます。