

有機分子性結晶における分子間相互作用の解析

大阪大学大学院基礎工学研究科 桶谷 龍成

目的 有機分子の間に働く弱い分子間相互作用を理論計算によって定量化すること

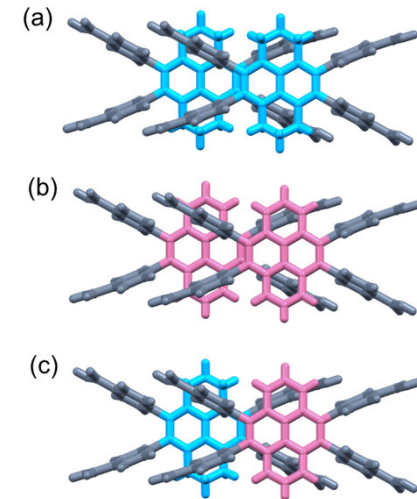
内容 量子化学計算ソフトウェアGaussianを用いて、有機分子性結晶の構造データに基づき、分子間相互作用エネルギーを解析した。

結果 水素結合性有機フレームワークにおいて水素結合による分子間相互作用の他に、 π 共役構造の骨格間における分散力を評価した。複数の構成成分が不定比で混ざった結晶構造を与える系において、成分間の分子間相互作用が非常に似ていることを明らかにした。

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群

ノード時間 2000 時間

使用メモリ 200 GB



Pair	Molecules	Interaction energy
a	CP-Hp/CP-Hp	-24.57 kcal/mol
b	CP-Py/CP-Py	-24.63 kcal/mol
c	CP-Hp/CP-Py	-24.02 kcal/mol